

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Fizika TDK dolgozat



Egyszeres csúszásra orientált anyagok vizsgálata 3D diszkrét diszlokációdinamikai szimulációkkal

Bonifert Balázs

ELTE TTK Fizika BSc 2. évfolyam

Témavezetők:

Berta Dénes

dr. Ispánovity Péter Dusán

ELTE, Anyagfizikai Tanszék

Tartalomjegyzék

1. Kísérleti háttér	3
1.1. Akusztikus emisszió	3
1.2. Skálafüggetlenség	4
2. 2D modellek	6
2.1. Diszlokációk	6
2.2. Kétdimenziós szimulációk	7
2.3. Megfigyelt alakzatok	8
3. A ParaDiS program	10
3.1. 3D szimuláció szükségessége	10
3.2. A ParaDiS működése	11
4. A kutatásom célja	13
5. Módszerek	14
6. Eredmények	14
6.1. Azonos konfiguráció relaxációjának méretfüggése	14
6.2. Síkmetszetek	16
6.3. Szögek eloszlása	19
6.4. Párkorreláció	21
6.5. Korrelációs integrál	21
6.6. Dipólok arányának becslése	23
6.7. A GND méretfüggése	24
7. Összefoglalás	24
8. Kitekintés	26
9. Köszönetnyilvánítás	26

Absztrakt

Kristályos anyagok, például fémek esetében bizonyos kristályhibák, az úgynevezett diszlokációk, mozgása az anyagban maradandó alakváltozást okoz, és felelős az anyag számos mechanikai tulajdonságáért, mint pl. mérethatások, plasztikus megfolyás, alakítási keményedés, valamint fárasztás. Az anyagok belső folyamatainak ismerete nagyban hozzájárul ahhoz, hogy a speciális alkalmazásnak megfelelő anyagot készítsünk, melynek nagyobb biztonsággal tudjuk megjósolni a terhelés alatti viselkedését. Korábbi szimulációs vizsgálatokat gyakran 2D rendszereken végeztek, melyekben elhanyagolják a diszlokációk görbületét és a köztük lezajló reakciókat. A kutatásomhoz 3D diszkrét diszlokációdinamikai szimulációkat végeztem, amivel a relaxációs folyamatokat vizsgáltam egyszeres csúszási geometria mellett. A dolgozatban a szimulációk kvantitatív kiértékelését, a relaxáció méret- és sűrűségfüggését tárgyalom. Azt látjuk, hogy az eltérő skálájú és sűrűségű rendszerek hasonlóan viselkednek, szimulációval megerősíthetők az elmélet alapján várt összefüggések. A 3D-s szimulációk eredményei számos tekintetben nagy hasonlóságot mutatnak a két dimenzióban látottakkal, ami megerősíti a 2D-s módszerek használhatóságát, és felhasználhatóvá teszi ezeknek a széleskörűen tárgyalt irodalmát a vizsgált esetben. Mindazonáltal a 3D rendszer 2D metszeteinek vizsgálata számos különbséget is felfed, elsősorban a rendszerek dinamikájának vonatkozásában, melyeket a dolgozatban részletesen bemutatok.

1. Kísérleti háttér

1.1. Akusztikus emisszió

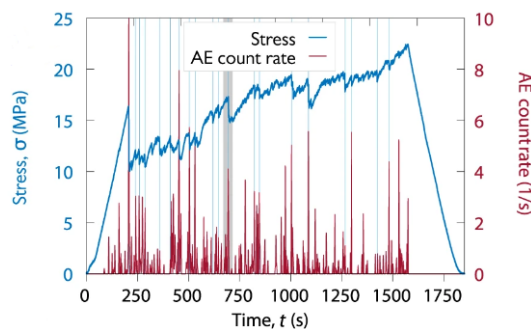
Kristályos anyagok feszültség alatti deformációja kis méretskálán nem követi a folytonos közegek makroszkopikus leírását. Állandóan növelve egy mikrooszlopon a feszültséget azt tapasztaljuk, hogy az első, elasztikus szakasz után a deformáció növelésével a feszültség nem nő lineárisan tovább, hanem gyors események során hirtelen leesik, majd tovább nő a következő ilyen eseményig (1. ábra). Eközben az anyagot elektronmikroszkóppal vizsgálva azt látjuk, hogy az anyag egy sík mentén hirtelen megcsúszott. Több ilyen esemény után ezek a síkok párhuzamosak, ami arra enged következtetni, hogy ezek a síkok az anyag kristályszerkezetéből adódnak (2. ábra).

Ezek a kristályszerkezeti átrendeződések akusztikus emisszióval (AE) is járnak [1]. Ez az anyagon belüli mechanikai hullámokat jelenti, melyek detektálhatóak speciális műszerekkel. Így azoknak a pontos ideje, amplitúdója és frekvenciája mérhető. Az ezekből számolt energia a kísérletek alapján arányos a feszültségesséssel.

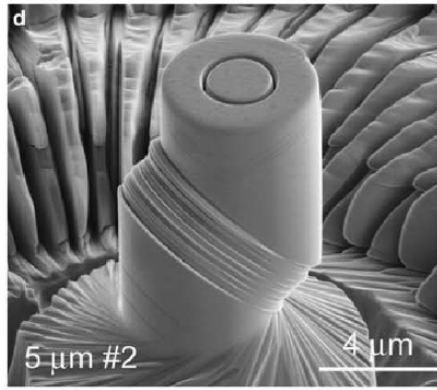
Az események bekövetkezése pusztán a kísérleti tapasztalatok alapján megjósolhatatlanok, csupán statisztikus módszerekkel vizsgálhatók. Egy analógiát is fel tudunk állítani ezeknek a lavinaszerű eseményeknek valamilyen jól ismert makroszkopikus jelenséggel. Bár alapjában véve is más jelenség, statisztikus módszerekkel vizsgálva a földrengések és az anyag belső szerkezetében bekövetkező változások nagyon hasonlóak.

Az AE események anyagon belüli forrásának helye is meghatározható makroszkopikus mintadarabok esetén [3]. Ehhez több detektort kell elhelyezni a minta körül, és mérni a jel beérkezésének pillanatát. A GPS rendszerekhez hasonlóan ugyanannak a jelnek az eltérő beérkezési idejéből kiszámolható az esemény bekövetkezésének helye. A módszer pontossága javítható, ha több detektort használunk.

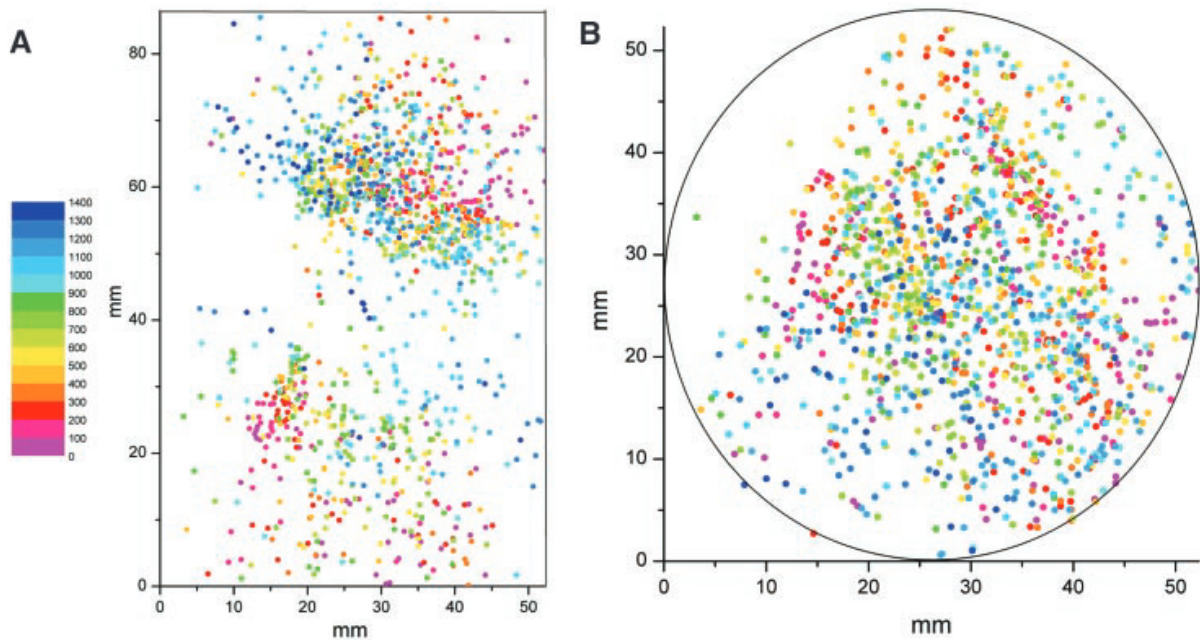
Az AE jelek nagysága függ a kristályszerkezettől. Nagy amplitúdójú jeleket HCP (hexagonal close-packed) kristályszerkezetű anyagokban figyeltek meg, amelyben egy aktív csúszási rendszer van [5]. Ezért sok szimuláció célja, hogy ezeket az AE jeleket reprodukálja, a lavinák kialakulását megértse. Így én is a kutatásomban ilyen egyszeres csúszási rendszerű anyagokat vizsgáltam.



1. ábra. Feszültség és akusztikus emisszió mikrooszlop összenyomásakor [1]. Kéken a feszültség, pirosan az akusztikus emissziós (AE) események beütési rátája látható.



2. ábra. Összenyomott mikrooszlop ele [2].



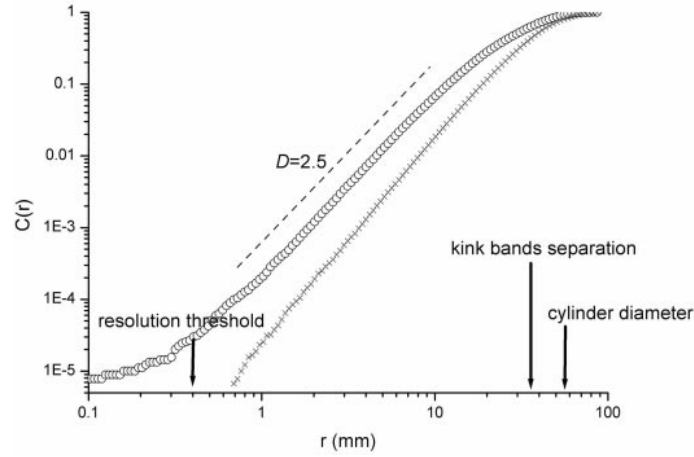
3. ábra. Jég egykristály mintában az AE események hipocentruma, (A) függőleges, (B) vízszintes vetített síkban. A színkód az események időbeli számozását mutatja [3].

1.2. Skálafüggetlenség

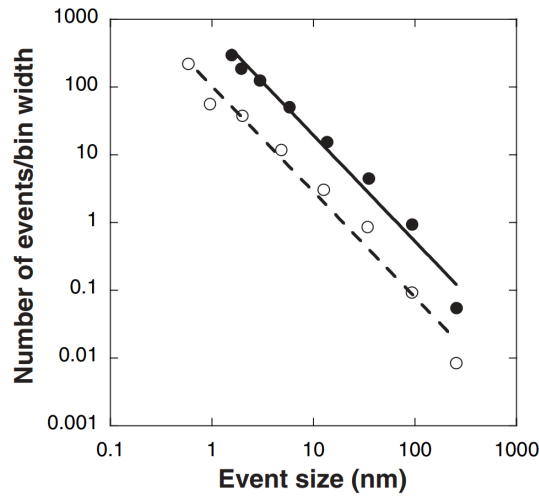
Ha jelek forrásai a mintában véletlenszerűen keletkeznek, akkor azt várnánk, hogy a hipocentrumuk eloszlása homogén. Azonban ez nem így van: ezek rendszerint egymáshoz közel keletkeznek, csomókat alkotva (3. ábra).

Ezt az elrendeződést a fraktáloknál használt módszerekkel vizsgálhatjuk. Az egyik ilyen módszer a korrelációs integrál, melynél a pontok egymástól való távolságeloszlásának hisztogramját ábrázoljuk log-log ábrán. A középső szakaszra egyenest illesztünk, melynek a meredeksége adja a korrelációs dimenziót. Térben homogén elrendezésnél 3, síkban homogén esetben pedig 2 ez a dimenzió.

A 4. ábrán látható esetben, melyet jég egykristály deformációja során vettek fel, ez $D = 2,5 \pm 0,1$ -nek adódott, ami kvantitatívan is mutatja, hogy nem homogén az eloszlás [3]. A középső szakaszon 1,5 nagyságrenden keresztül jól illeszkedik az egyenesre, ami azt jelenti, hogy skálafüggetlen az elrendeződés. Skálafüggetlenségről akkor beszélünk,



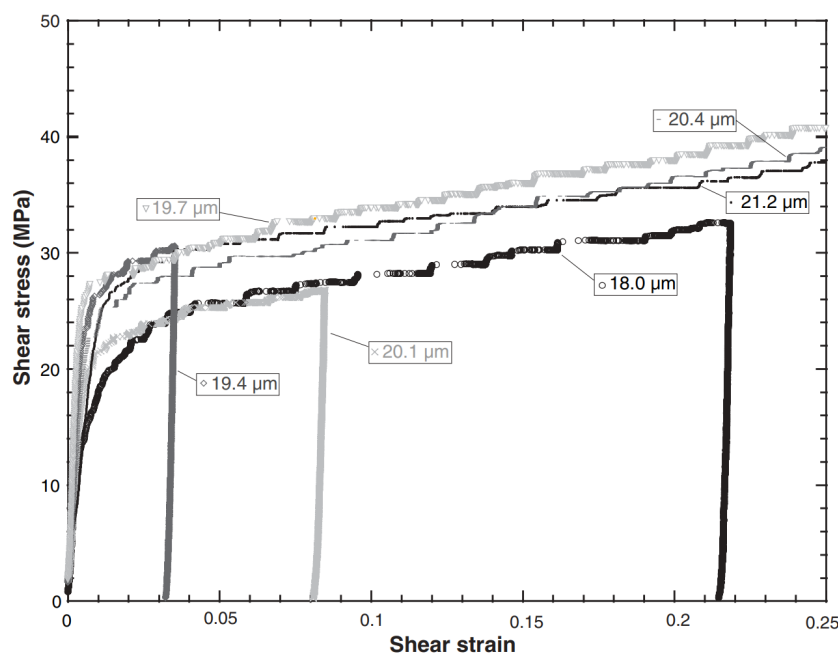
4. ábra. Az epicentrumok korrelációs integrálja [3].



5. ábra. Az események mérete és frekvenciája. A függőleges tengelyen a relatív eseménygyakoriság, a vízszintesen az esemény mérete. A lyukas körökben egy mérés eredménye, a telikben pedig több kísérlet együttes adatai láthatóak, a hozzájuk tartozó illesztett hatványfüggvénnyel [4].

ha azon pontpárok száma, amelyek r távolságon belül vannak, egy hatványfüggvényt követnek, formálisan $C(r) \sim r^D$.

Nem csak a hipocentrumok eloszlása, hanem a megcsúszások méretei is skálafüggetlen tulajdonságokat mutatnak [4]. Nikkel mikrokristályokon végzett mérések azt mutatják, hogy az események frekvenciája és azok mérete hatványfüggvényre illeszkednek (5. ábra). A megcsúszások jól látszanak a feszültség - deformáció grafikonon, ahol lépcsősen nő a feszültség állandóan növekvő deformáció mellett (6. ábra).



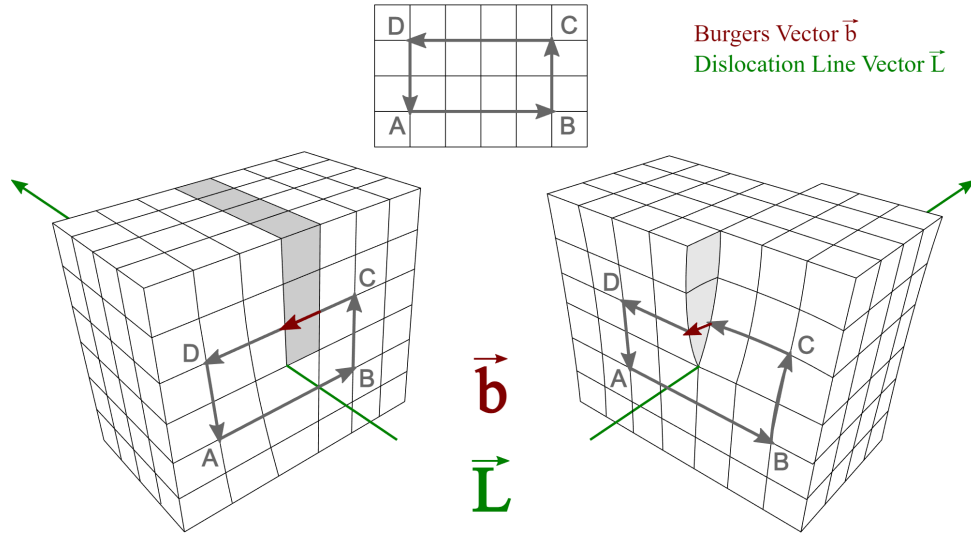
6. ábra. Nikkel minták feszültség - deformáció grafikonja. A lépcsős viselkedés a diszlokációlavinák miatt figyelhetők meg. [4]

2. 2D modellek

2.1. Diszlokációk

A kísérletileg tapasztalt jelenségek elméleti magyarázatát az ún. diszlokációk segítségével tudjuk megadni, melyek a kristályrács hibáiként foghatóak fel [6]. A kristályhibáknak többféle típusa van, a legegyszerűbbek a ponthibák, ezeknél pl. egy szennyező atom miatt torzul a kristályrács egy kicsiny gömbszerű tartományban. Ugyan a ponthibáknak is fontos szerepe lehet a deformáció bizonyos aspektusai esetén, magát a deformációt mégis elsősorban a vonalszerű diszlokációk és azok mozgása okozza. Az éldiszlokációkat egy-egy atomsík szabálytalan lezáródása okozza a kristályrácsban belül. Ezek síkok, tehát a határvonaluk egy vonal, így beszélhetünk diszlokációvonalokról. Ezeknek a dinamikája erősen anyagfüggő. Sok múlik azon, hogy egy adott kristályszerkezetben hány úgynevezett csúszósík van, és azok hogyan helyezkednek el egymáshoz képest.

Az egyik legfontosabb jellemzője egy diszlokációvonalnak a Burgers-vektora (7. ábra). Ezt úgy kapjuk, hogy a vonal mellett keresünk egy kiinduló atomot, és megkerüljük az atomok mentén a diszlokációt úgy, hogy a rács minden irányában ugyanannyi rácsállandót haladjunk. A kiinduló és érkezési hely közötti vektort (ami tökéletes kristály esetén egy nullvektor) nevezzük a diszlokáció Burgers-vektorának. Ez a vektor adja meg, hogy a diszlokáció elmozdulása során milyen irányú maradandó elmozdulást okoz a rácsban és segítségével megadható egy diszlokáció feszültségtere és rugalmas energiája.



7. ábra. Burgers-vektor szabályos kristályban, illetve él- (bal) és csavardiszlokációk (jobb) esetén. [8]

2.2. Kétdimenziós szimulációk

A diszlokációs mikroszerkezet evolúciójának meghatározására az egyik legelfogadottabb szimulációs eljárás a diszkrét diszlokáció dinamika (DDD), mely során az egyedi diszlokációvonalak dinamikájára írunk fel mozgásegyenleteket. Itt az elemi egységek a diszlokációk, nem pedig az egyes atomok.

A kezdeti szimulációs módszerek kétdimenziósak voltak, melyekben feltételezik, hogy a diszlokációk egyenesek és egymással párhuzamosak. Ebben az esetben a diszlokációkat egy-egy ponttal reprezentálunk egy rájuk merőleges a síkon, és ezeknek a pontoknak a koordinátáit, illetve sebességét lépteti időben a program két dimenzióban.

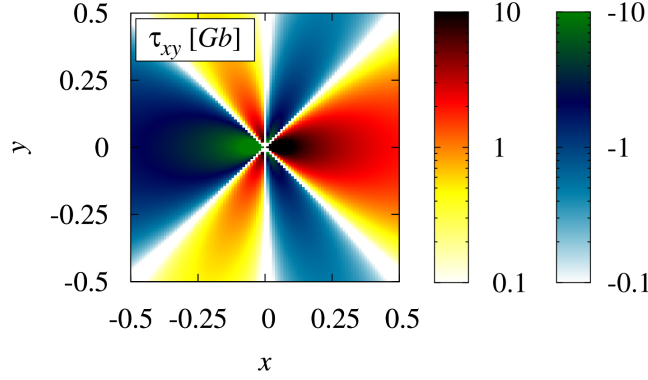
A szimulációt egy négyzet alakú tartományban végezzük és a határfeltételt periodikusnak választjuk (PBC, periodic boundary condition). Az erőket úgy határozzuk meg, hogy több, határon túli virtuális részecskét képzelünk a periodikus határ mögé (tükördiszlokációk), és ezeknek az egyre csökkenő járuléku erőeknek az összegét vesszük.

A legegyszerűbb esetben csupán egyetlen csúszósíkot veszünk figyelembe és éldiszlokációk mozgását vizsgáljuk. Ilyenkor a diszlokációk feszültségterének csak a síkbeli nyírókomponense számít, azaz egy-egy diszlokációnak ugyanúgy definiálhatunk erőte-
ret, mint például egy elektrodinamikai szimulációnál a töltéseknek. Egy éldiszlokáció nyírófeszültség-tere az (x, y) relatív pontban:

$$\tau_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (1)$$

Itt a μ a nyírási modulusz, ν a Poisson-szám, b pedig a Burgers-vektor nagysága. Szokás az egyszerűség kedvéért bevezetni a $G = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)}$ anyagra jellemző állandót. Ezt ábrázolva (8. ábra) látjuk, hogy a feszültség több irányban is zérus: az $x = 0$, és az $x = \pm y$ egyenesek mentén.

A csavardiszlokációk feszültségtere irányfüggetlen, csupán $1/r$ -el csökken az r távolság



8. ábra. Egy éldiszlókáció nyírófeszültségtere a rá merőleges síkban.

növekedésével:

$$\tau_r = \frac{-\mu b}{2\pi r}. \quad (2)$$

2.3. Megfigyelt alakzatok

Két diszlókáció egymáshoz képest több pozícióban is lehet stabil egyensúlyban. Ha azonos az előjelük, akkor az $x = x'$ esetben, ellentétes előjel esetén pedig $(x' - x) = (y' - y)$ helyeken. Az ilyen formációk keletkezéséről megbizonyosodhatunk párkorrelációs függvények vizsgálatával [7]. Ehhez az összes diszlókációpáron végigmegyünk, és a relatív $(x' - x, y' - y)$ koordinátáknak az eloszlását nézzük. Azt várjuk, hogy azonosak esetén az $x' - x = 0$, ellentétes esetben $x' - x = \pm(y' - y)$ egyenes mentén látunk nagy sűrűséget, ezektől eltérve pedig alig.

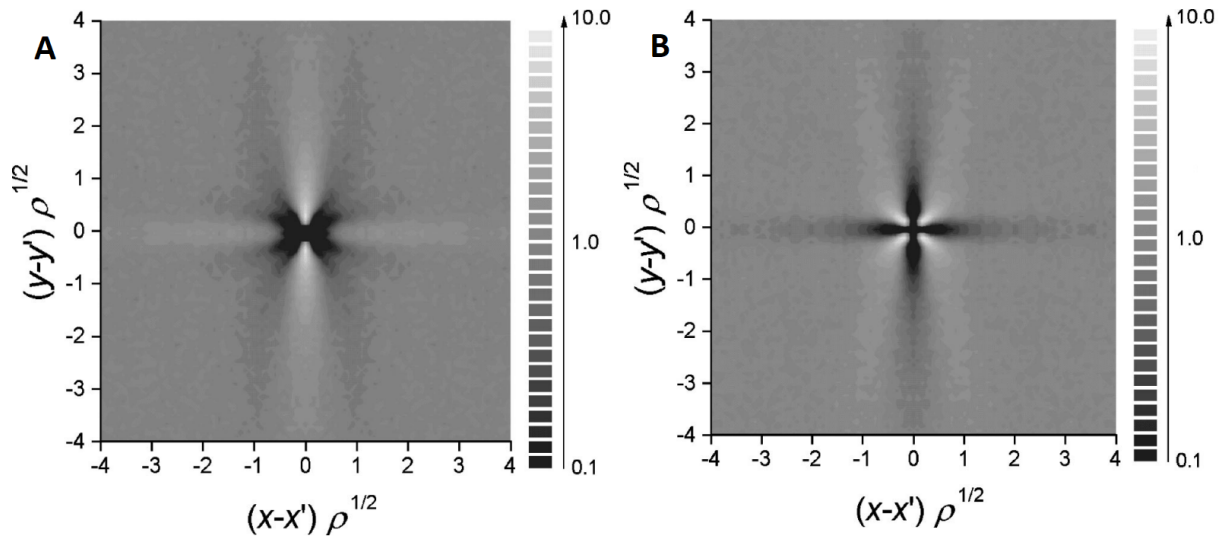
A diszlókációk tere $1/r$ -el csökken, így távoli pontok esetén az egyedi diszlókációk hatása elhanyagolható, a sűrűségük irányfüggetlen. A 9. ábrán 2D szimulációk alapján meghatározott párkorrelációs függvények láthatóak, melyeket a ρ_2 két- és ρ egyrészcseksűrűségek segítségével az alábbi módon definiálhatunk:

$$d(\vec{r}) = \frac{\rho_2(\vec{r})}{\rho^2} - 1, \quad (3)$$

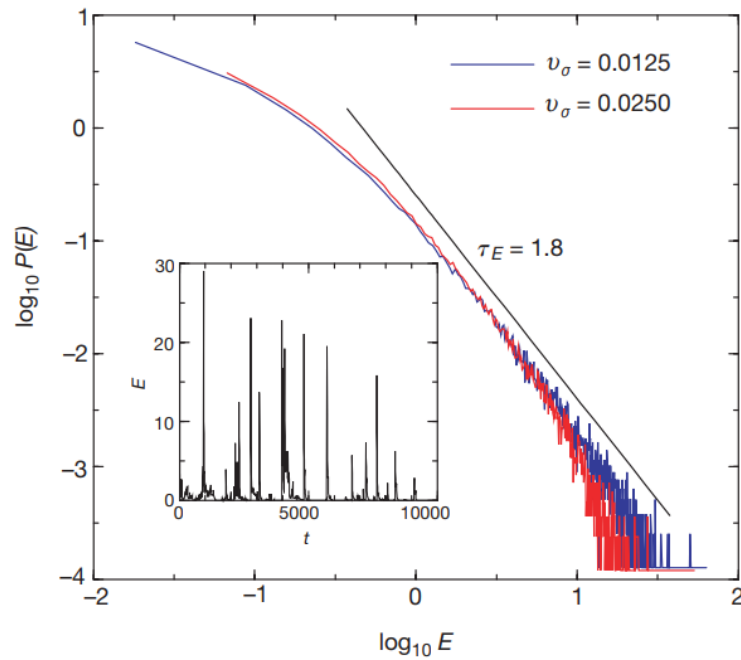
ahol kihasználtuk, hogy a rendszer eltolásinvarianciája miatt az egyrészcseksűrűség konstans, a kétrészcseksűrűség pedig csak a részecskék relatív $\vec{r}$ koordinátájától függ. Megkülönböztethetünk d^{++} és d^{+-} korrelációs függvényeket aszerint, hogy csak azonos vagy különböző előjelű diszlókációkat tekintünk. A 9. ábrán jól látszik az előbb említett két hatásnak az összessége. Távoli pontok esetén homogén a sűrűség, kis távolságra a várt irányokban magas, azokon kívül pedig alacsonyabb, mint a távoli homogén sűrűség.

A kísérletileg tapasztalt lavinák skálafüggetlensége is megjelenik ebben a szimulációs modellben. A diszkrét pontok mozgásából kiszámítható az ehhez tartozó akusztikus jel energiája [10]. Ezekre az eseményekre igaz, hogy az előfordulási valószínűségük az energiával egy hatványfüggvényt követ (10. ábra).

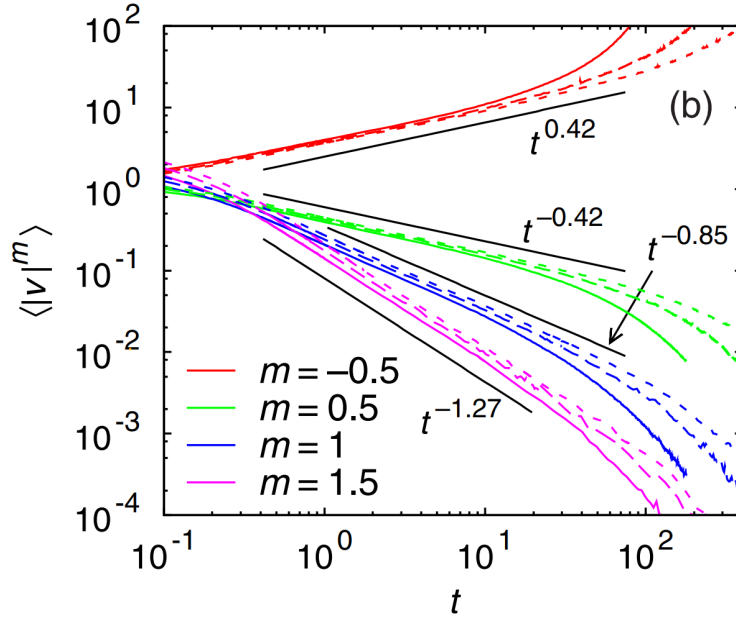
A rendszerek relaxációja során a diszlókációk átlagsebessége várhatóan csökken az időben. A 2D DDD szimulációkkal azt is megtudhatjuk, hogy ez pontosan hogyan zajlik az időben. A sebességek abszolút értékeinek eloszlásának különböző m -edik momentumai



9. ábra. A diszlokációk párkorrelációja. (A) azonos, (B) ellentétes előjelű diszlokációpárok esetén [7].



10. ábra. Az akusztikus emissziók valószínűségének energia szerinti eloszlása logaritmikus skálán, két különböző kezdeti paraméterrel (kék és piros). A kis ábrán az energiák láthatók az idő függvényében. [10].



11. ábra. A sebességek abszolút értékeinek eloszlásának a momentumai. Az azonos színű különböző szaggatott vonalak különböző rendszerméreteket jelölnek. [13].

hatványfüggvénnyel csökkennek [13]. Az $m = 1$ eset pont a várható érték, ez $t^{-0.85}$ -el arányos (11. ábra).

Ezek az eredmények megmutatják a 2D DDD szimulációk relevanciáját. Két nagy előnyük is van, egyrészt gyorsan futnak, így a statisztikai jelenségeket jól tudjuk vizsgálni sok szimuláció együttes eredményeivel. Másrészt impliciten oldják meg a differenciálegyenletet, tehát stabilak, és hatékonyak az időlépés megválasztásában.

3. A ParaDiS program

3.1. 3D szimuláció szükségessége

A kétdimenziós szimulációknak a legnagyobb korlátja, hogy csak olyan rendszereket tudnak kezelni, amiben a diszlokációvonalak egyenesek és egymással párhuzamosak. A valóságban is van olyan anyag, amelyben többnyire egyenesek a diszlokációk de a görbületnek és a rendszer háromdimenziós jellegének természetesen fontos szerepe lehet a deformációs folyamatban.

Emiatt egy új módszerre volt szükség, amivel tetszőleges kristályszerkezet kezelhető. Eddig is léteztek atomi, ún. modelkuladinamikai (MD) szimulációs programok, mellyel nagy pontossággal lehet kristályokat szimulálni. Azonban ennek a módszernek az a hátránya, hogy nagyon számításigényes, így csak rendkívül kis idő- és méretskálát tudnak lefedni.

3.2. A ParaDiS működése

A jelenleg egyik legelfogadottabb ilyen jellegű szimulációs program a Lawrence Livermore National Laboratory által 2001-ben kiadott, és azóta folyamatosan fejlesztett ParaDiS (Parallel Dislocation Simulator) [11]. Ennek a szimulációs módszere a háromdimenziós diszkrét diszlokációdinamika (3D DDD). Itt a 2D-ben is megszokott módon a diszlokációkat diszkrétan kezeljük, azonban nem pontokkal, hanem összefüggő szakaszokkal reprezentáljuk a diszlokációvonalakat. A szimulációs cella a 2D-vel analóg módon egy periodikus határfeltételű (PBC) kocka.

A mozgásegyenleteket a diszkrét szakaszok csúcsaira írjuk fel. Ezek a túlcillapított dinamikát követik, mivel az elemi egységek tehetetlenségéből adódó hatások elhanyagolhatók a csillapító erők hatásához képest. A mozgásegyenletek [12]:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{M}(\vec{f}_i), \quad (4)$$

$$\vec{f}_i = -\nabla E(\{\vec{r}_i\}), \quad (5)$$

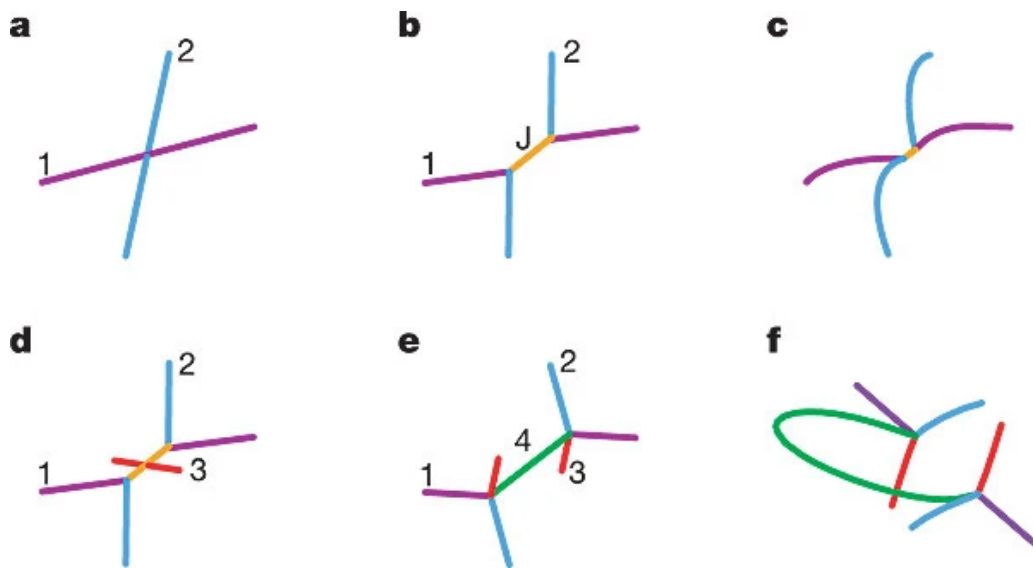
ahol f_i az i -edik csúcsra ható erő, E a rendszer teljes energiája, és $\vec{M}(\vec{f}_i)$ a csúcs mobilitási függvénye, az i -edik csúcs sebességének és a ráható erőnek a függvényében.

Az egyes szakaszok határai a csúcspontok, melyek akár 2-nél több élhez is csatlakozhatnak. Az ilyeneket többszörös elágazásnak („multi-junction”-nek) hívjuk (12. ábra). Ezek a csúcsok általában 3 vagy 4 él találkozásából keletkeznek, és az élek különböző csúszási-ikon vannak. Mivel ez az alakzat energetikailag stabil, és nem tud együttesen elmozdulni a sok csúszási miatt, így egy akadályt képez a többi, szabadon mozgó diszlokáció számára.

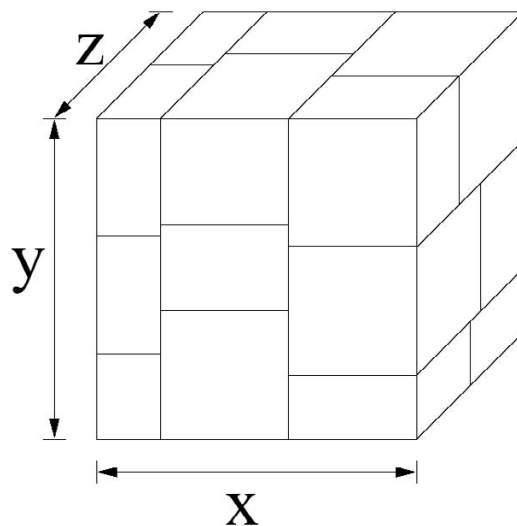
A csúcsok és élek topológiája kulcsfontosságú a valóságot tükröző szimulációs eredményekhez [11]. Az atomi szimulációkban a rendszer kölcsönhatásai viszonylag egyszerűek, csak rengeteg elemi egységre (atomra) van szükség, hogy egy kristályban a diszlokációk viselkedését megfigyelhessük. A 3D DDD algoritmusokban a szimulált egységek sokkal egyszerűbbek, amihez rengeteg egyszerűsítést teszünk. Az elemi kölcsönhatásokat bonyolult hatásokra kell cserélni, hogy hitelesen reprezentálják az atomi kölcsönhatások eredményeképpen létrejövő rugalmas jelenségeket. Ezért a ParaDiS forráskódjának 50%-át ezeknek a topologikus folyamatoknak a leírása teszi ki, pedig futásidőben szinte elhanyagolhatók.

A többszörös elágazások kialakulása a kísérletileg is tapasztalt alakítási keményedésre ad magyarázatot [14]. Az alakítási keményedés a fémek hideg megmunkálásakor figyelhető meg: az anyag alakítási szilárdsága nő az alakváltozás mértékével. Például ez okozza a gemkapocs ismételt hajlítása miatti eltörését. A szimuláció segítségével betekintést nyerhetünk, hogy mi történik pontosan egy anyag belsejében, milyen diszlokációsűrűség jelenik meg, és milyen mikroszerkezet alakul ki.

A ParaDiS nevében is megjelenik a „parallel”, vagyis párhuzamos kifejezés. Ez arra utal, hogy egy jól skálázható, sok processzoron futó, szuperszámítógépekre tervezett szoftverről van szó. Akkor lehet egy algoritmust jól párhuzamosítani, ha a komplex problémát fel tudjuk bontani kisebb, lehetőleg független részfeladatokra. A ParaDiS futásidejének legnagyobb része a csúcsokra ható erők kiszámítása fordítódik [11]. Ezt úgy tudjuk párhuzamosítani, hogy magukat a csúcsokat a térben partícionáljuk.



12. ábra. 4-es elágazás képződése [14]. (a) Két diszlokáció közel kerül a középpontjuknál. (b) A középső rész egy közös szakasszá alakul. (c) Feszültség hatására elkezd visszaalakulni. (d) Egy harmadik diszlokáció közel kerül a közös szakaszhoz. (e) kialakul két 4-es elágazás (f) ez az elágazás Frank-Read módon [15] újabb diszlokációkat hoz létre.



13. ábra. Egy példa a ParaDiS $3 \times 3 \times 2$ részre történő térbeli dekompozíciójára [11].

A térbeli dekompozícióhoz a szoftver rekurzívan kettéosztja téglatestekre a periodikus cellát úgy, hogy a részekbe azonos számú csúcs kerüljön. Először x , majd y és z irányra merőleges síkokkal bontja részekre a teret (13. ábra). Egy-egy ilyen rész kerül kiosztásra egy processzornak. Ez azért is előnyös, mert egy processzornak csak a környezetében lévő 26 másikkal kell kommunikálnia, ami jelentősen gyorsabb, mintha az összesnek kéne egymással. Ezt a partícionálást a futás során sokszor megismétli a program, hogy a terhelés egyenletes legyen. Ez a módszer hatásosnak bizonyult, ugyanis akár 132.000 processzoron is skálázható [16].

A programnak sok kimeneti fájlja van, melyek az egyes szimulációknál külön állíthatók. Az egyik az `alleps` fájl, ami általános adatokat tartalmaz, többek között az eltelt időt és a diszlokációsűrűséget írja ki minden időlépés után. A másik gyakran használt kimenet minden előre beállított számú időlépés után készít egy fájlt, amiben az összes diszlokációs szakasz végpontjainak koordinátája található. Ez ábrázolásra és különböző elemzésekre is alkalmas.

A ParaDiS mértékegységrendszere alapvetően az SI-t használja, de a távolságegysége a Burgers-vektor hossza, ami az alapértelmezett anyag esetén $b_0 = 2,875 \cdot 10^{-10}$ m. A későbbiekben használok ezt a b_0 egységet távolságegységként. Ennek a méretnek nincsen fizikai jelentősége, a későbbiekben látjuk majd, hogy a jelenségek kvalitatívan méretfüggetlenek.

4. A kutatásom célja

Ahogy azt bemutattam, hogy a 2D DDD szimulációk bizonyos jelenségeket jól leírnak, azonban jellegükből adódóan sok jelenség leírására (pl. a diszlokáció-görbület hatásának vizsgálatára) nem alkalmasak. A 3D DDD szimulációk jobban modellezik a valóságot, viszont sok hátrányuk van a 2D-hez képest.

Egyrészt nem állnak rendelkezésre a differenciálegyenleteket teljesen implicit módon megoldó módszerek, mint 2D-ben, ami stabilitási problémákhoz és jelentős numerikus zajhoz vezethet. Emiatt csökkenteni kell az időlépést, ami lassítja a szimulációt, és tovább növeli az egyébként is magas számításigényt. Másrészt a keletkezett struktúrákat a rendszer komplexitása miatt nehéz kvantitatívan elemezni.

Az akusztikus emmiszió jelenségét a 2D szimulációk megfelelően megmagyarázzák, azonban olyan feltevéseket tesznek, amik miatt nem lesz egyértelműen helyes a jelenség leírása. Ez a jelenség csak statisztikailag vizsgálható, melyet sok szimuláció kvantitatív összevetésével tudunk csak elérni. A 3D-s szimulációknál nehéz mind a statisztikai sokaság előállítása, mind a releváns kvantitatív jellemzők megalkotása. Ezért csupán 3D-ben nem lehet kielégítő leírást adni. Azonban arra tökéletes a 3D módszer, hogy a 2D alapfeltevéseit és kvalitatív jelenségeit vizsgáljam, ezzel alátámasztva a 2D-vel adott magyarázatot.

A célom, hogy a 2D-ben tapasztalt jelenségeket 3D-s szimulációkban is megfigyeljem, összevegyem a hasonlóságokat és a különbségeket, így megerősítve a 2D-s módszer eredményeinek relevanciáját. Ehhez egyszeres csúszásra orientált véletlenszerű kezdőkonfigurációk időbeli relaxációit vizsgáltam.

Az egyszeres csúszási rendszer két dolog miatt is fontos. Egyrészt a nagyobb AE jeleket egyszeres csúszási rendszerű anyagokban mérték [8], és a lavina-jelenségeket 2D-ben sokat

vizsgálta a szakirodalom, így össze tudom hasonlítani a 3D-s eredményeimmel. Másrészt a kutatócsoportom kísérleti része sokat foglalkozik HCP (hexagonal close-packed) szerkezetű anyagokból (pl. Zn, Mg, stb.) faragott mikrooszlopok vizsgálatával [9]. Ezek a minták gyakorlatilag egy csúszási rendszerrel rendelkeznek, így az általuk megfigyelt jelenségekkel is össze tudom vetni ezekkel a 3D-s eredményekkel.

5. Módszerek

A kutatásom során a ParaDiS programot használtam, amit az ELTE ATLASZ szuperszámítógépén futtattam. A szoftver a készítőktől forráskóddal, dokumentációval és példákkal érkezik. Ezért az első kihívás a program lefordítása volt. Miután megismertem a paraméterek körülbelüli működését, átállítottam a fordítást az ATLASZ-nak megfelelő célpont-ra, a fordítás sikeresen megtörtént. Sajnos nem sikerült azokat a kapcsolókat beállítani, amivel párhuzamosan, több szálon is jól működik, ugyanis a többszálú példaprogram is gyorsabban fut egy szálon, mint az ajánlott 8-on. Ez a hiányosság nem olyan jelentős, mert az általam futtatott szimulációk viszonylag kis rendszerek voltak, amik egy szálon is kis idő alatt lefutottak.

A ParaDiS-hoz a fő programon kívül tartoznak segédprogramok is. Az egyik ilyen a *paradisgen*, ami néhány egyszerűbb alapelemből egy kezdőkonfigurációt készít. Én egy, a PBC kocka élhosszánál sokkal nagyobb hurkot használtam, melynek a középpontja véletlenszerű a kockán belül. A hurkot feldarabolja a PBC kocka falai mentén periodikusan, így ami az egyik oldalon véget ér, a szemben lévőben folytatja. Egy ilyen kezdeti állapot látható a 14. ábrán. Mivel a kör sugara jóval nagyobb a dobozméretnél, így a szakaszok kezdetben közel egyenesek.

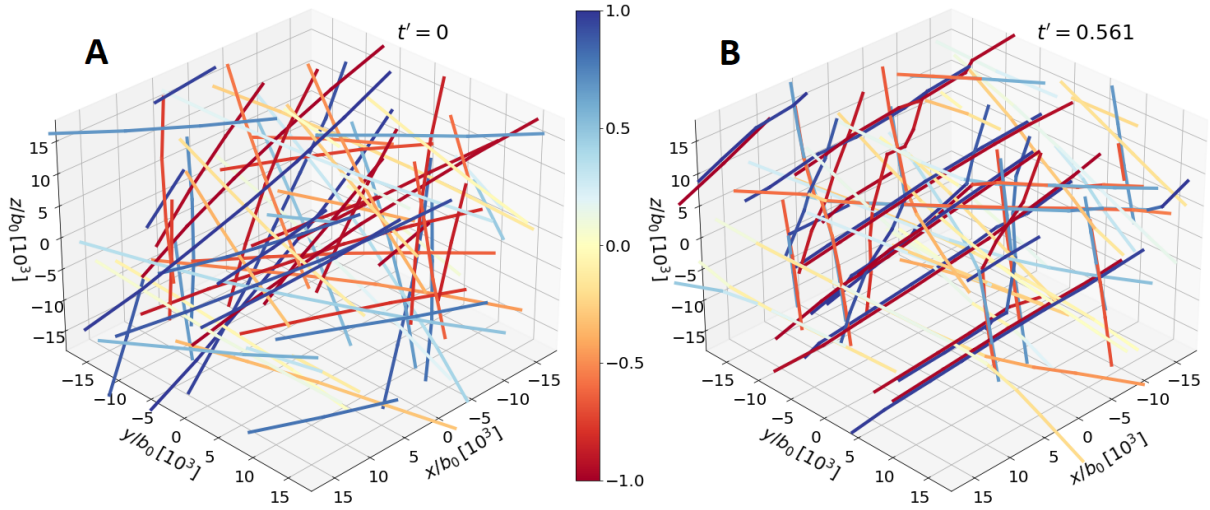
A ParaDiS-ban nincsen külön HCP kristályszerkezet, így az FCC mobilitást használtam - a 2D-hez hasonlóan - egy aktív csúszási rendszerrel. A diszlokációk nincsenek párhuzamosra rögzítve, ami lehetőséget ad a görbült diszlokáció-rendszerek viselkedésének vizsgálatára, és 2D-s eredményekkel való összevetésre.

6. Eredmények

6.1. Azonos konfiguráció relaxációjának méretfüggése

Először azonos konfigurációknak a relaxációját vizsgáltam különböző dobozméretekkel. Itt az azonos topologikusan ekvivalenst jelent, vagyis a méret megváltozása csak a skálát változtatja, a diszlokációk számát és elrendeződését nem. Ilyen konfigurációkat a véletlen állapot generálását szabályozó *seed* paraméter állandó értéken tartásával készítettem. Ez természetesen a diszlokációsűrűség megváltozásával jár, de várakozásaim szerint kvalitáiban ugyanazt az eredményt kapom, csupán más időskálán történnek az események.

Hogy kvantitatívan is össze tudjuk hasonlítani a különböző szimulációkat, át kell skálázni az időt és egyéb mennyiségeket is. A diszlokációk alkotta rendszer skálafüggetlen, tehát egy egyensúlyban lévő rendszert a kétszeresére "felnagyítva" is egyensúlyban lévő kapunk. Ezért célszerű távolságokat úgy mérni, hogy a diszlokációk közötti átlagos



14. ábra. Egy kezdeti (A) konfiguráció és annak a relaxált (B) állapota. A tengelyek a burgers-vektor hosszának b_0 egységében vannak, az idő (t') egy dimenziótlán átskálázott idő, ami a rendszermérettől független.

távolsággal ($1/\sqrt{\rho_0}$) elosztjuk, vagyis $x' = x \cdot \sqrt{\rho_0}$, ahol ρ_0 a szimuláció kezdetén a diszlokációsűrűség b_0^{-2} egységekben. Így x' egy dimenziótlán jellemző lesz.

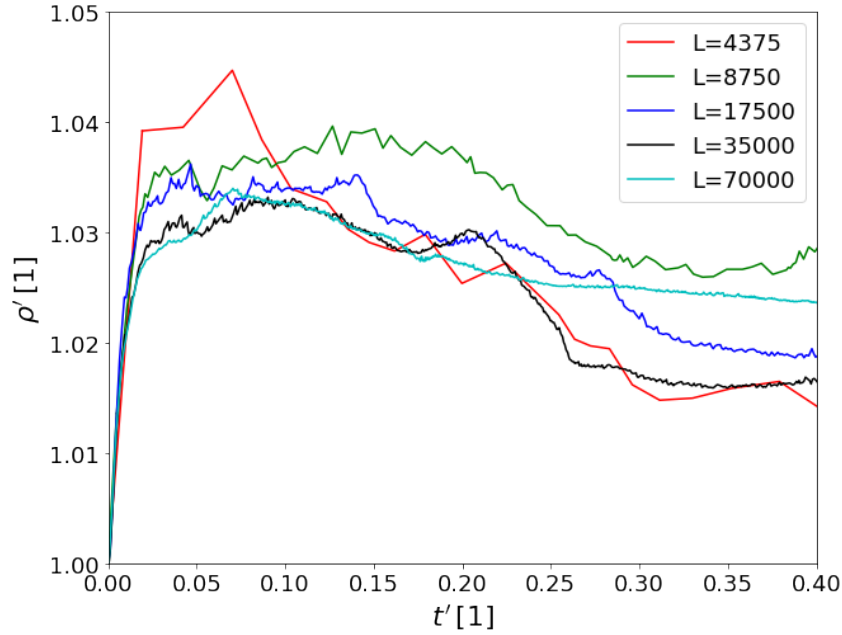
A diszlokációk közötti erők a távolságuk reciprokéval, vagyis $\frac{1}{r}$ -el arányosak, ami túlcsapított rendszerekben a sebességre is igaz. Ahhoz, hogy ugyanaz a jelenség bekövetkezzen, a diszlokációknak r -el arányosan több utat kell megtenniük. Ezekből az adódik, hogy az átskálázott idő $t' = t \cdot M G b_0^2 \rho_0$ lesz, ahol ρ_0 a kezdeti sűrűség, a dimenziótlán-sághoz szükséges konstansok pedig $M = 10 \frac{1}{Pa \cdot s}$ mobilitás, $G = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} = 1.55 \cdot 10^{10} Pa$ a korábban bevezetett állandó, b_0 pedig a Burgers-vektor nagysága.

A szimuláció egyik pillanatában lévő diszlokációsűrűséget könnyen dimenziótláníthatjuk: $\rho' = \frac{\rho}{\rho_0}$. Ez nyilvánvalóan meg fog egyezni két topologikusan azonos rendszer esetén, ha azok ugyanúgy fejlődnek. A szimulációim során L oldalú kockába helyezzem R sugarú kört, így a kezdeti sűrűség $\rho_0 = \frac{2\pi R}{L^3}$.

Ha ábrázoljuk a ρ' sűrűséget a t' függvényében, akkor hasonló görbéket kapunk az L rendszermérettől függetlenül (15. ábra). A kisebb rendszerekhez kevesebb adatpont van, mivel a szimulációs időlépések valós ideje nagyjából megegyezik a különböző rendszerek-nél, de sokkal nagyobb x' utakat tesznek meg a diszlokációk lépésenként.

Kvalitatívan arról is megbizonyosodhatunk, hogy ugyanazon t' -nél a rendszer az L értékétől függetlenül hasonló állapotban van. Ehhez a program által készített kimeneti fájlok alapján elkészített pillanatképeket hasonlítottam össze (16. ábra). Bár az ábrák nem tökéletesen ugyanolyanok, a formációk jó része mindkét ábrán megfigyelhető.

Az ábrán csak a diszlokációvonalak fizikai elhelyezkedését látnánk, azonban ennél több információt is hordoznak; a szakaszok Burgers-vektorral bezárt szöge is lényeges. Az él-diszlokációk merőlegesek, a csavardiszlokációk párhuzamosak a Burgers-vektorra. Definiálhatunk egy q tényezőt, ami leírja ezt a kapcsolatot: $q = \vec{b} \cdot \vec{l} = \cos \varphi$, ahol $\vec{b}$ és $\vec{l}$ a Burgers-vektorral illetve a diszlokációs szakasszal egy irányba mutató egységvektor, és φ a két vektor által bezárt szög. Ha irányítást váltunk, mindkét vektor formálisan előjelet vált, de q invariáns marad az iránykonvenció változtatására. Mivel $-1 \leq q \leq 1$, egy



15. ábra. Az átskálázott sűrűség (ρ') az átskálázott idő (t') függvényében.

színskálát tudunk hozzárendelni (16. ábra színskála). Ezen a színskálán éldiszlokációkból álló dipólok egy kék-piros párt alkotnak.

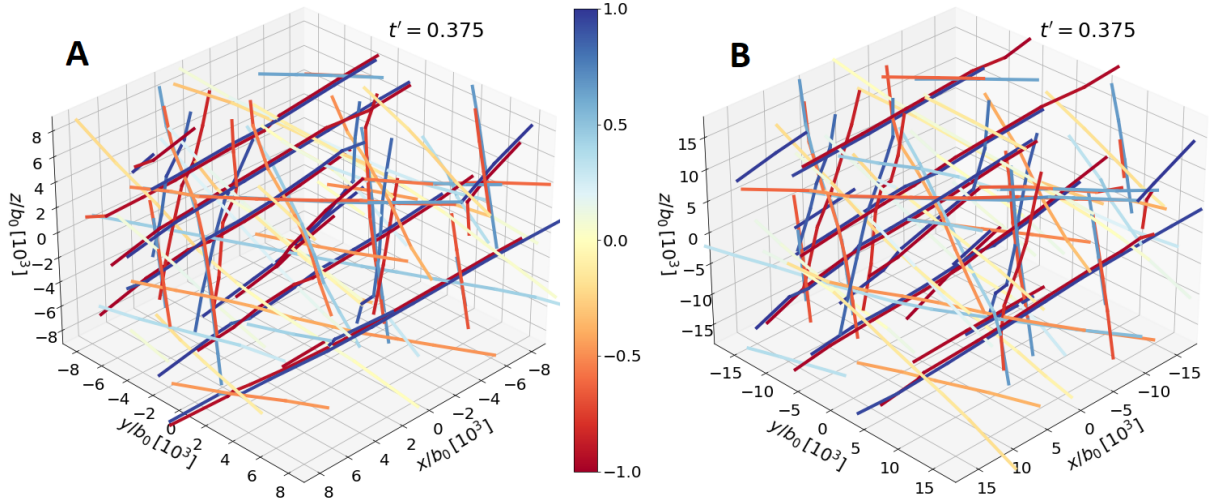
6.2. Síkmetszetek

A fentebbiekben láthattuk a dipólképződés jeleit, de ahhoz, hogy közvetlenül össze lehessen hasonlítani három- és kétdimenziós rendszereket, metszetet kell készíteni. A konfiguráció elkészítésekor ismert a Burgers-vektor irányába mutató ($\vec{B}$), és a körlapra merőleges egységvektor ($\vec{N}$). Ezek merőlegesek egymásra. A korábban bemutatott 2D modellekben a szimulációs sík megegyezik a $\vec{B}$ és $\vec{N}$ által kifeszített síkkal. Ha felvesszük még az $\vec{E} = \vec{N} \times \vec{B}$ vektort, akkor egy új, természetes ortogonális koordináta-rendszert kapunk, amit az anyagszerkezet definiál.

Az új koordináták legyenek s a csavardiszlokációk (screw dislocation), e az éldiszlokációk (edge dislocation), és n a normális vektor irányai. Az egyes koordináták dimenziótlan egységben megkaphatók a vektorokra való vetítéssel: $s = \vec{B} \cdot \vec{r} \sqrt{\rho_0}$, $e = \vec{E} \cdot \vec{r} \sqrt{\rho_0}$, $n = \vec{N} \cdot \vec{r} \sqrt{\rho_0}$.

Ezekkel a koordinátákkal már tudunk metszetet készíteni a periodikus celláról. Mivel a csúszósík meg van döntve a PBC kockához képest, így a metszet nem egyszerűen egy négyzet lesz. Az ábrákat a kétdimenziós konvenciót követve úgy forgattam, hogy a diszlokációk mozgási iránya ($e - s$ sík) vízszintes legyen.

A metszetekhez egy új színskálát is bevezethetünk, ha a szakasz irányvektorát levetítjük az $e - s$ síkra, majd az $\vec{E}$ vektorral bezárt szög szerint színezzük a pontot. Szükség van még egy $\lambda = \vec{b} \cdot \vec{B} = \pm 1$ szorzóra, hogy az adott szakasz irány- és Burgers-vektorának együttes megfordulására invariáns legyen. Tehát az $\vec{l}$ irányvektoru és $\vec{b} = \lambda \vec{B}$ Burgers-vektoru szakasz szöge:



16. ábra. Két különböző méretű (**A**: $L = 17500 b_0$, **B**: $L = 35000 b_0$), de azonos kezdeti topológiájú konfiguráció a szimuláció során megegyező t' időben. A tengelyek itt nem a bevezetett dimenziótlan egységek a méretbeli különbség szemléltetése miatt.

$$\alpha = \text{atan2}(\lambda \vec{l} \cdot \vec{B}, \lambda \vec{l} \cdot \vec{E}) \quad (6)$$

ahol $\text{atan2}(y, x)$ az (x, y) koordinátájú pont x tengellyel bezárt szögét jelenti a $[-180^\circ, 180^\circ]$ intervallumban.

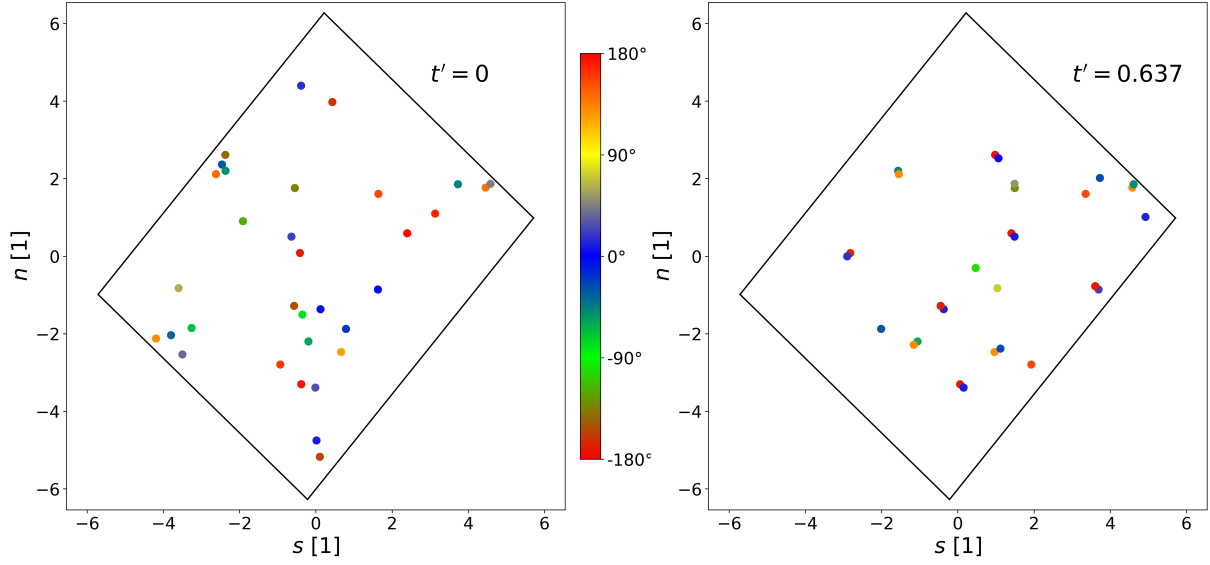
Az éldiszlokációk párhuzamosak a Burgers-vektorral, tehát a szögük 0° és 180° az előjelüktől függően. A csavardiszlokációk párhuzamosak vele, tehát ott $\alpha = \pm 90^\circ$.

Először az éldiszlokációkra merőlegesen (az $s - n$ síkban) metszettem el, a kocka közepén átmenő síkkal (17. ábra). A kezdeti állapoton látszik, hogy minden szín (diszlokáció-orientáció) megjelenik, és a pontok eloszlása véletlenszerű. A végállapotban megjelennek a piros-kék pontpárok, éldiszlokációk dipóljai. A pólusok egymáshoz képest 45° -ban állnak, amit az elmélet a feszültség irányfüggéséből megjósol. A dipólok létrejötte megerősíti a 2D szimulációk eredményeit.

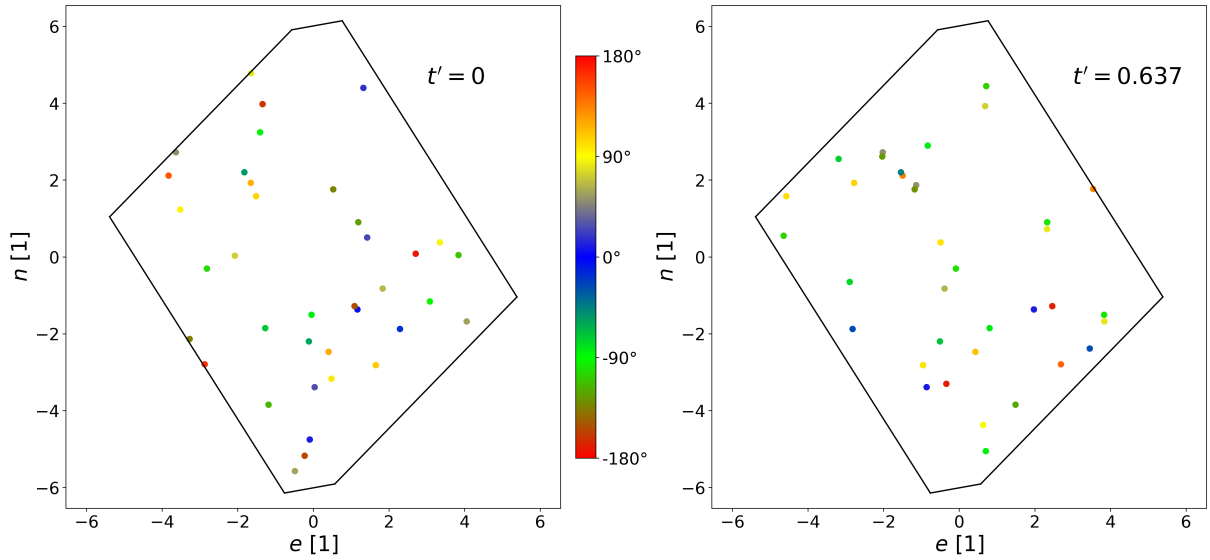
Ha a csavardiszlokációkkal merőlegesen ($e - n$ síkban) nézzük a metszetet, akkor más képet kapunk (18. ábra). A kezdeti véletlenszerűség és a dipólképződés ugyanúgy megjelenik, mint az éldiszlokációk esetén. Ebben az esetben azonban a dipólt alkotó diszlokációk nem 45° -os irányban, hanem egymás felett-alatt helyezkednek el. Ez összhangban van azzal, hogy a csavardiszlokációk tere irányfüggetlen, így a lehető legközelebb igyekeznek beállni egymáshoz, ami az x irányú mozgásuk esetén az egymást fölötti elhelyezkedést jelenti.

A fentiekben bemutatott kétdimenziós modellek nem tartalmaznak csavardiszlokációkat, tehát ez a metszet nem vethető össze közvetlenül az azokból származó korábbi eredményekkel.

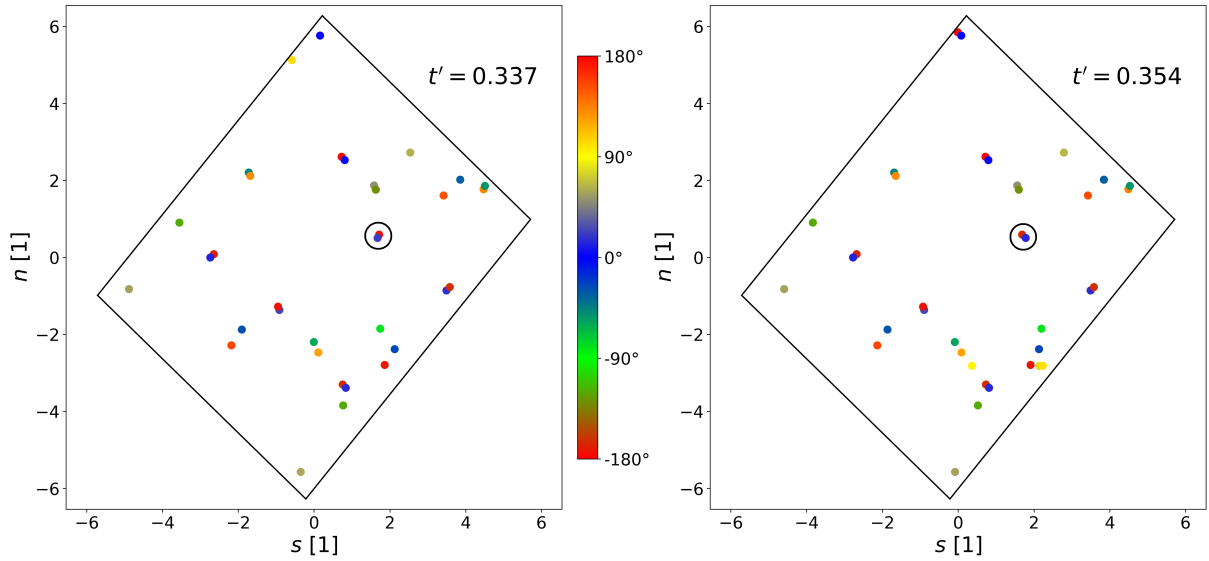
Az éldipólok kialakulása jól megfigyelhető az én 3D-s szimulációmban is. Azonban a másik jellemző alakzat, az ún. fal [17] szinte egyáltalán nem jelenik meg. Falaknak hívjuk az egymás fölött lévő azonos előjelű diszlokációcsoportot. Ez rendszerint terhelés nélküli állapotban is (kettőnél akár jóval) több diszlokációból áll, azonban a 17. ábrán a



17. ábra. A rendszer éldiszlókációkra merőleges metszete a kezdeti (bal, $t' = 0$) és relaxált (jobb, $t' = 0,637$) állapotban. A fekete határvonalak a PBC kocka oldallapjai, a jobb oldalon a kék-piros pontpárok a kialakult éldiszlókáció-dipólok.



18. ábra. A rendszer csavardiszlókációkra merőleges metszete a kezdeti (bal, $t' = 0$) és relaxált (jobb, $t' = 4.79 \cdot 10^7$) állapotban. A fekete határvonalak a PBC kocka oldallapjai.



19. ábra. Éldiszlokációkra merőleges metszetek két közeli köztes pillanatban. A bekarikázott dipól 2D-ben nem látott módon 90° -al elfordul.

relaxált állapotban csupán egyetlen pár figyelhető meg. Ez feltehetően azért van, mert a csavardiszlokációk jelenléte miatt a falak nem stabilak.

Ami viszont megfigyelhető 3D-ben, de 2D-ben nem, az a dipólok gyors megfordulása. 2D-ben a szimulált a diszlokációvonalak teljes hosszukban merőlegesek a szimulált síkra, nem tud csak az egyik része elmozdulni. Éppen ezért ahhoz, hogy két stabil egyensúly (-45° és $+45^\circ$) között átforduljon, hatalmas erőre lenne szükség. 3D-ben az nincs ilyen megkötés, a dipól egyik végén elindulhat ez az átfordulás, ami végigszalad az egész hosszán. Erre látunk egy példát a 19. ábrán.

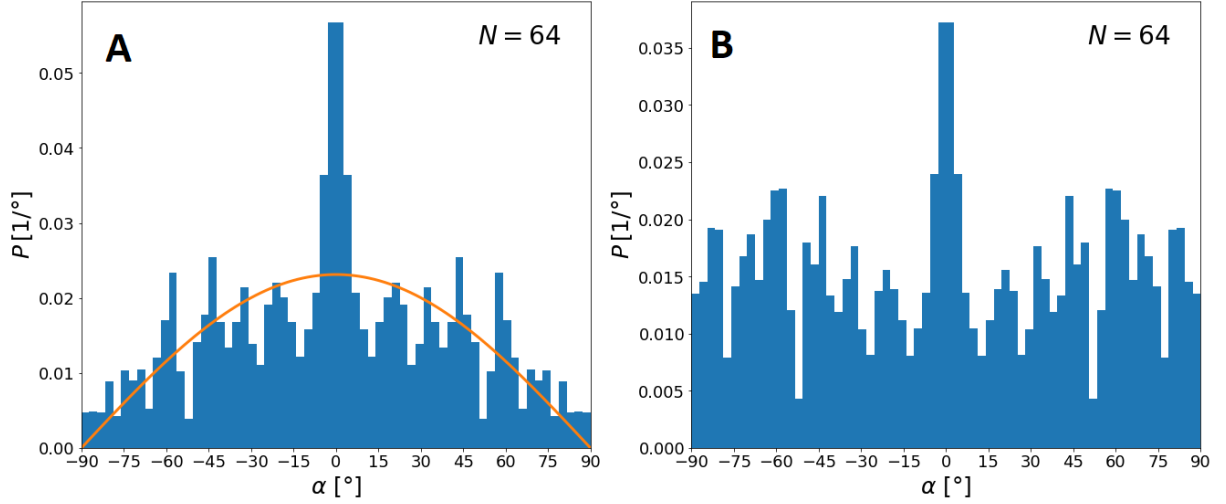
6.3. Szögek eloszlása

A diszlokációk α szögeinek eloszlását is vizsgáltam. Ehhez különböző metszeteket készítettem az éldiszlokációkra merőlegesen, és a metsző szakaszok α szögeinek eloszlását vizsgáltam. Ha csak egyszerűen eltolnánk a síkot, akkor egyre kisebb lenne a metszet. Azonban a szimulációs cella periodikus, ezért a mellette lévő periodikus cellában elmetezett diszlokációk is ekvivalensek a "fő" cellával, így nem jönnek be a PBC cella orientációja miatti hatások az eloszlásokban.

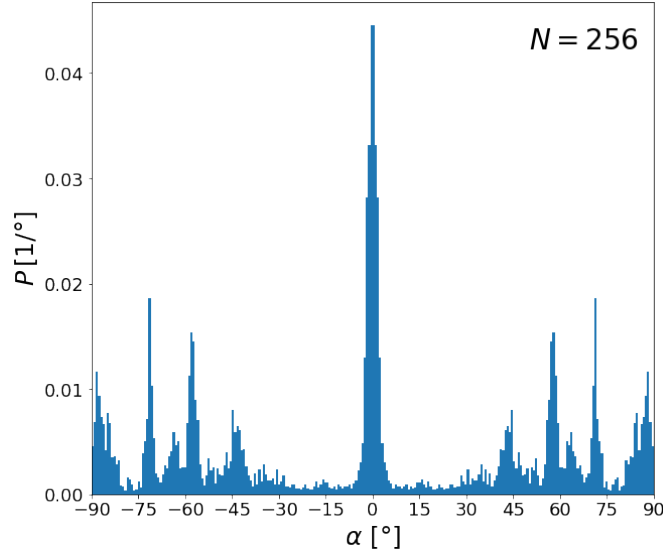
Mivel az eloszlás egy statisztikus jelenség, sok adatpontra volt szükség. Ehhez 64 szimulációt futtattam, amiknél csak a kör középpontjának kezdeti helyét, vagyis a *paradisgen* programban a *seed* értékét változtattam. A sok szimuláció több elolt metszetéből készítettem az eloszlást.

A szögeloszlásban sokféle szimmetria van. Egyrészt, egy szakasz irányvektorát 180° -al elforgatva ugyanazt a szakaszt kapjuk, tehát ez egy eltolási szimmetria. Másrészt, ha a felület normálisára tükrözzük, akkor is lényegében ekvivalens diszlokációt találunk. Ezeket a szimmetriákat kihasználva csökkenthetjük a zajt. A kezdeti konfigurációk szögeloszlásai $t' = 0$ -ban a 20. ábrán láthatóak. Az ábra a 0° körül szimmetrizált zajcsökkentés céljából.

Súlyozás nélkül ábrázolva egyes diszlokációknak nagyobb az esélye metszeni a síkot, így



20. ábra. A diszlokációk α szögének normált eloszlása a szimuláció kezdetén. (A) súlyozatlanul, a legjobban illeszkedő $\cos$ függvénnyel, (B) $1/\cos(\Theta)$ -val súlyozva.

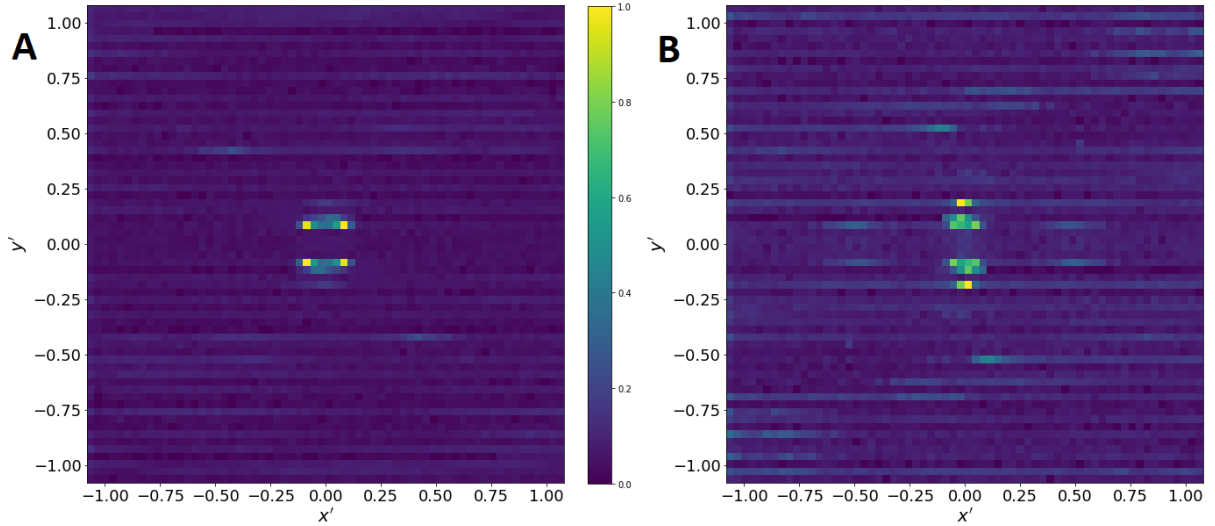


21. ábra. A diszlokációk α szögének normált, súlyozott eloszlása relaxált állapotban.

annak a vonalnak az α szöge gyakrabban jelenik meg a hisztogramon. Ez a P valószínűség a sík normálisával bezárt szögtől (Θ) függ $P \sim |\cos(\Theta)|$ módon. Ha $1/|\cos(\Theta)| = 1/(\lambda \vec{l} \cdot \vec{E})$ -vel súlyozzuk a szakaszokat, akkor akkor ezt a hatást kompenzáltuk. Mivel Θ és α nem független, az egyik komponensük megegyezik, így illeszthetünk a súlyozatlan eloszlásra $\cos$ függvényt.

Látható, hogy még súlyozva is a 0° egy kiemelkedő csúcs. Erre az egyik lehetséges magyarázat, hogy a ParaDiS kimeneti fájl csak az első időlépés után ad, és annyi idő is elég, hogy a 0° körüli diszlokációk egymás felé forduljanak.

Relaxált állapotban máshogy néz ki ez a súlyozott eloszlás (21. ábra). Mivel kisebb a zaj, 64 helyett 256 dobozzal csináltam a hisztogramot. Itt 0° -nál kiemelkedő csúcsot látunk, a dipólok dominanciájának megfelelően. Nagyobb szögek esetén megfigyelhetünk egymástól jól megkülönböztethető csúcsokat. Ez lehet a sík orientációjának hatása, vagy



22. ábra. Az él- (A) és csavardiszlokációk (B) párkorrelációja a dimenziótlan x', y' egységekben. Jól látszanak az éldiszlokációknál a 45° -ban álló dipólok, a csavardiszlokációknál az egymás fölött lévő dipólok.

más, kezdőkonfiguráció okozta jelenség is.

6.4. Párkorreláció

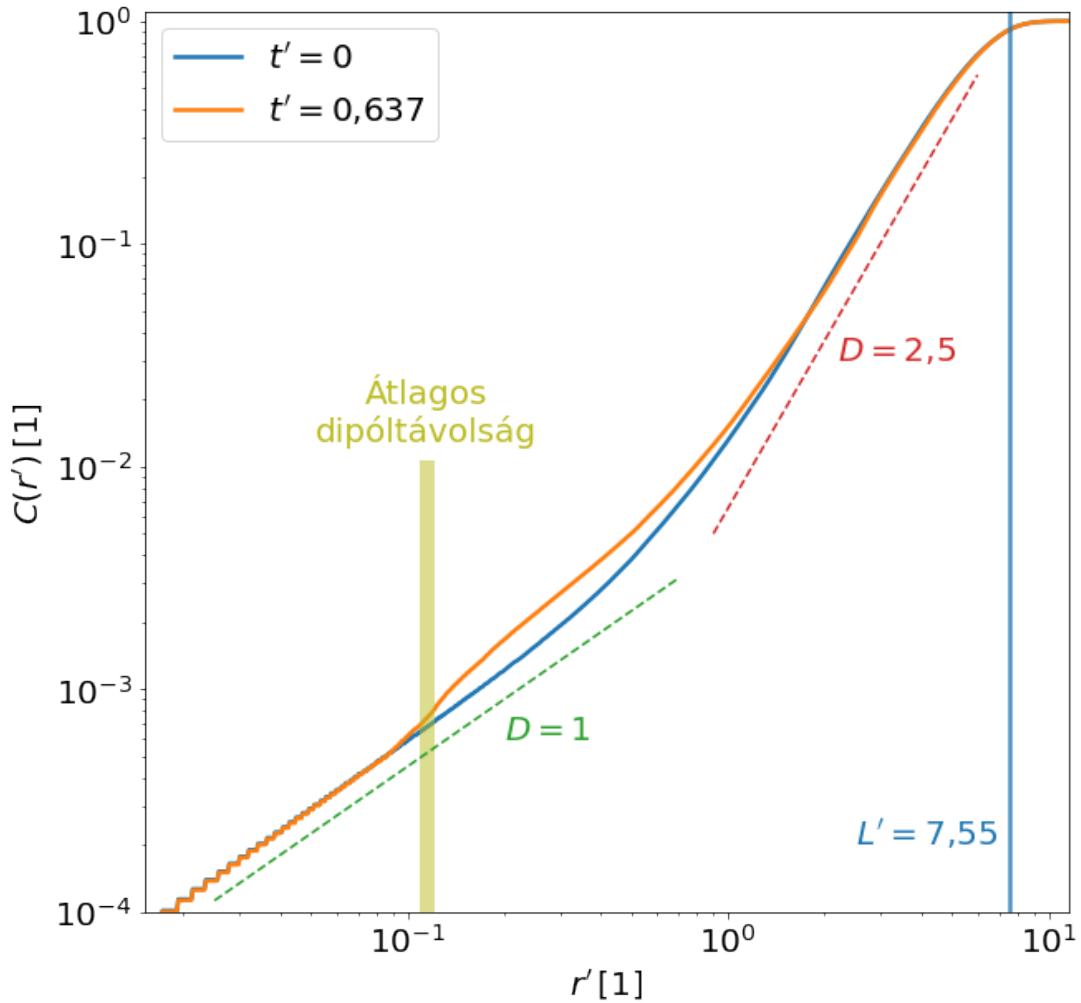
Az elkészült metszetek alapján a 2D-s szimulációkhoz hasonlóan párkorrelációs sűrűséget [18] is néztem. Itt is a 64 szimuláció pontjait vettem, több párhuzamos metsző síkon. A 2D-vel ellentétben a síkválasztás szabadsága adott, én az él-, illetve csavardiszlokációkra merőleges síkokat vettem külön.

Az éldiszlokációk párkorrelációján (22. A ábra) jól láthatóak a 2D-ben is tapasztalt dipólok, az $x = \pm y$ egyeneseken. Érdekes, hogy egy minimum távolságnál közelebb egyáltalán nem találhatók diszlokációk. Ez azért lehet, mert a PBC határfeltétel miatt ennyivel tolódnak el az egymás fölötti síkok, és nem tudnak közelebb kerülni a csúszósík korlátozása miatt. x irányban azonban el tudnak mozdulni, így ott lehetnek közelebb is a többi diszlokáció feszültségterének függvényében. A csavardiszlokációk esetében (22. B ábra) az egymás felett álló falak megfigyelhetők, azonban a metszeteknél tapasztalt módon csupán 2-3 van egymás fölött.

Az éldiszlokációk párkorrelációjából leolvashatjuk az átlagos dipólméretet, ami $d' = 0.114$ -re adódik.

6.5. Korrelációs integrál

A kialakult rendszert vizsgálhatjuk korrelációs integrál segítségével. Ehhez mintavételezzük a szakaszokat kis hosszónként, majd a keletkezett pontpárok távolságának a hisztogramját ábrázoljuk log-log ábrán. A mintavételezés nagyon fontos, mert túl ritkán felvett esetén előfordul, hogy egy diszlokációvonalon két szomszédos pont messzebb van, mint a mellette lévő diszlokációvonal pontjai, így a vonal saját magával vett korrelációja egyáltalán nem jelenik meg. Túl sűrűn sem vehetjük a pontokat, ugyanis a pontpárok $O(n^2)$

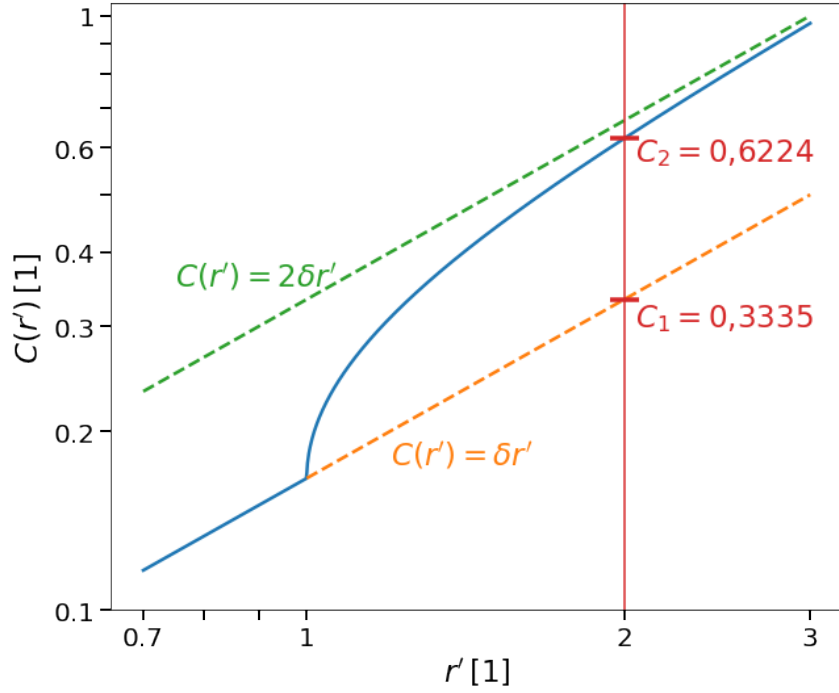


23. ábra. A diszlokációrendszer korrelációs integrálja kezdetben (kék) és relaxált állapotban (narancs). A vízszintes tengelyen a dimenziótlan távolság, a függőlegesen az r' távolságnál kisebb pontpár-távolságok aránya található.

száma miatt a futásidő hatalmas lesz. A mintavételezés nem lehet tökéletesen homogén, mert a diszkrét szakaszok hossza változó, nem lehet mindegyiket ugyanakkora szakaszokra feldarabolni. Ezért a hisztogramban súlyoztam a pontpárokat a hozzájuk tartozó szakasz-hosszok számtani közepével.

A 23. ábrán látható, hogy a kezdeti állapotban kis távolságoknál a korrelációs integrál ($r' < 0,2$) egy $D = 1$ meredekségű egyenes. Ezen a távolságon az egymás melletti diszlokációk távolsága nagyobb mint r' , így egy egyenes saját magával vett korrelációját kapjuk, aminek valóban $D = 1$ a korrelációs dimenziója. Ahogy közelítünk a kocka mérete (L') felé, úgy egyre nagyobb lesz a szomszédos diszlokációk hatása, így a dimenzió $D = 2,5$ lesz. A kocka méretével összemérhető távolságoknál ismét kicsi lesz a meredeksége, de ez csak a határfeltétel következménye.

A relaxált állapotban nagyon kis távolságoknál ugyanúgy egy egyenes saját magával vett korrelációját látjuk. Azonban az átlagos dipólméretet ($d' = 0,114$) elérve elválík a két görbe. Egy tranziens szakasz után párhuzamosan haladnak, ami megegyezik egy dipól két egyenesének korrelációs integráljával, vagyis adott r' távolságon belül kétszer annyi



24. ábra. Egy $d' = 1$ méretű dipól korrelációs integrálja. C_1 egy egyenesnek, C_2 pedig a dipólnak a korrelációs integrálja $r' = 2$ -nél. δ egy normálástól függő konstans.

pont van, ami a log-log ábra miatt egy konstans eltolásként jelentkezik. Amikor elérjük a dipólok egymás közti távolságának skáláját ($r' \approx 1$), a két görbe összeforr és együtt fut tovább.

6.6. Dipólok arányának becslése

A dipólméret utáni párhuzamos szakasz eltolásának segítségével becslést adhatunk a dipólban lévő diszlokációk arányáról az összeshez képest. Ha az összes diszlokáció dipólban lenne, akkor az integrál értéke d' -nél sokkal nagyobb, de a dipólok közötti távolságnál kisebb tartományon pont kétszeres lenne (lásd 24. ábra). Azonban nem vehetünk elég nagy távolságot (pl. $10d'$), mert ott már a szomszédos dipólok hatása is megjelenik.

Ha $r' = 2d'$ -nél nézzük a görbéket, akkor egy dipólnál mindig egy konstans értékkel leszünk az elméleti kétszeres érték alatt. Ezt a konstans szorzót (β) meghatározhatjuk, ha leolvassuk az egyenes (C_1) és a dipól (C_2) elméletileg számított korrelációs integrálját $r' = 2d'$ -nél a 24. ábrán látható módon. Ezek alapján $\beta = \frac{2C_1}{C_2} = 1,0717$, ami nem függ a dipólmérettől és a hisztogram normálási faktorától, tehát tetszőleges rendszerénél használható.

Alkalmazva ezt a módszert $r' = 2d' = 0,228$ -nál az integrálok aránya $1,40 \pm 0,02$, amit β -val felszorozva $1,50 \pm 0,02$ -t kapunk. Ez azt jelenti, hogy a diszlokációk $(50 \pm 2)\%$ -a van dipólban, a többi szabadon a becslés szerint.

A metszeteken (17. és 18. ábra) megszámolhatjuk a dipólokat és diszlokációkat, amiknek az arányából kiszámoljuk a dipólok arányát. Ez nem a pontos érték, ugyanis a síkok megválasztása valamennyire súlyozza a kapott eredményeket, valamint ezt a számolást

csak ezen az egy reprezentatív rendszerben végeztem el. A két képen összesen 65 diszlokáció található, melyek közül 32 van dipólban, vagyis az arányuk 49%. Ez igazolja a becslés helyességét.

6.7. A GND méretfüggése

A dipólok kialakulását más kvantitatív módon is vizsgálhatjuk. A diszlokációrendszerek egyik jellemzője a geometriailag szükséges diszlokációk (geometrically necessary dislocations, GND) [19], melyek a diszlokációvektorok előjeles vektori összege. Ez 2D-ben csupán a pontok számának előjeles összegét jelenti, 3D-ben pedig a szakaszokat kell vektorosan összeadni. Egy szakasz ellentétes Burgers-vektora esetén ellentétes irányú vektorként kell tekinteni. Ezt a korábban definiált $\lambda = \vec{b} \cdot \vec{B} = \pm 1$ számmal tudjuk figyelembe venni. Az így kapott vektort elosztva a szakaszok hosszának összegével definiálhatjuk a GND-sűrűséget:

$$\rho_{\text{GND}} = \frac{|\sum \lambda \vec{r}_i|}{\sum |\vec{r}_i|} \quad (7)$$

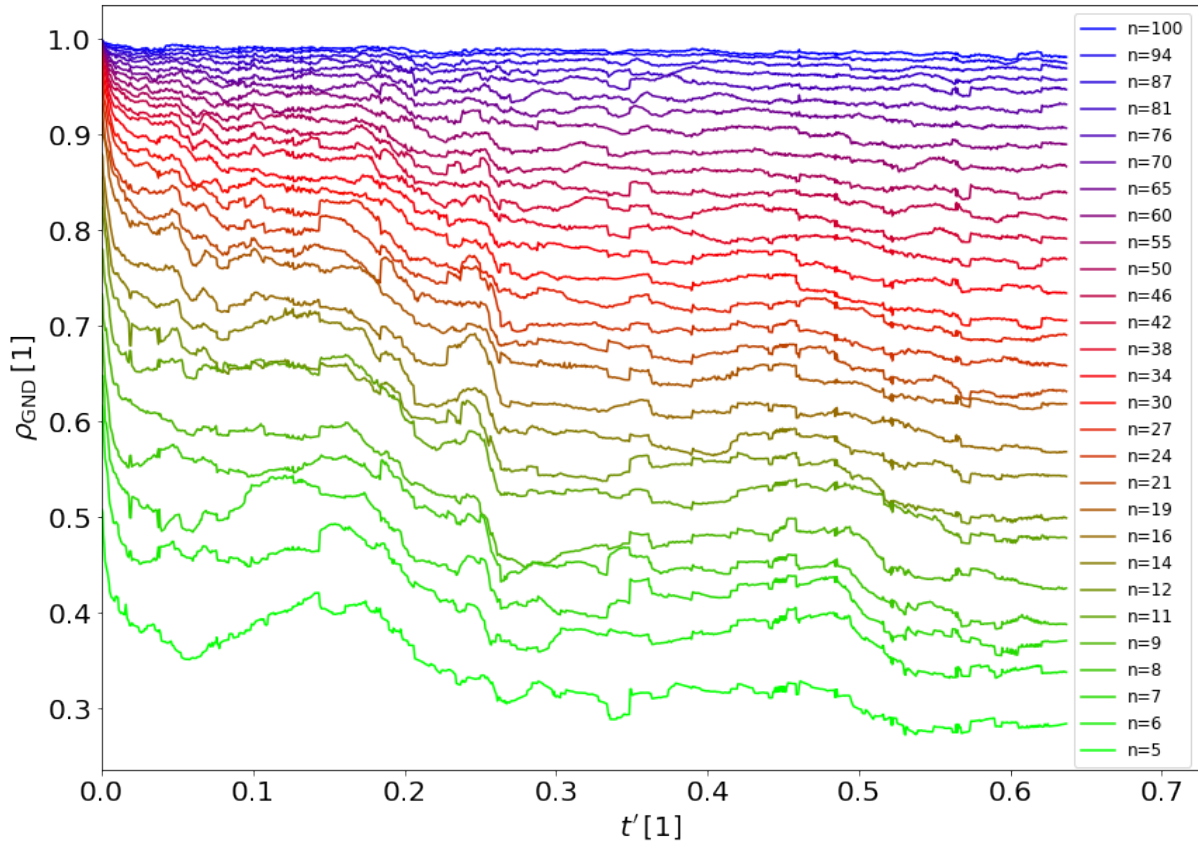
Ez terheletlen esetben, amilyen a vizsgált relaxációs folyamat, az egész szimulációs cellára nézve 0. Ha viszont a PBC kockát feldaraboljuk $n \times n \times n$ kisebb kockára, és ρ_{GND} -t ezekre számoljuk ki, majd a dobozban lévő összes szakaszhosszal ($\sum |\vec{r}_i|$) átlagoljuk, akkor egy n -től függő pozitív számot kapunk ($\rho_{\text{GND}}(n)$). Ez a dipólosságot és az események lokalitását is jellemzi. Egy teljes mértékben dipólokból álló rendszerrel ez az érték 0, mert akármilyen kis dobozokat veszünk, a dipólok miatt a számláló mindig 0 lesz. Egy lavina, amely mérete kisebb az adott dobozméretnél, nem okoz változást a GND-sűrűségben, azonban kisebb dobozméreteknél igen. Így az események méretét is megtudhatjuk.

Ábrázolva különböző n -ek mellett $\rho_{\text{GND}}(n)$ alakulását az időben (25. ábra) azt látjuk, hogy a kis dobozméreteknél ($n \geq 66$) esetén ez az érték közel 1 a teljes relaxáció során. Ez a méret a dipólméret körüli: $L'/66 \approx d'$. Ennél kisebb távolságokon nem látszik semmi a rendszerrel történő eseményekből. Nagyobb méreteknél az elején gyorsan csökken, majd lassan közelít a végső állapothoz. $t' = 0,27$ körül megjelenik egy esemény, ami nagyon nagy dobozméretnél nem látható. Nagyjából az $n = 7$ egyenesnél még látható az esés, $n = 6$ -nál nem, így a becsült mérete a lavinának $L'/6 = 1,26$.

Itt megfigyeltünk egy olyan lavinát, ami akusztikus emisszióval járna. Ez kevés ahhoz, hogy jobban vizsgáljuk 3D-ben az akusztikus emisszió jelenségét, azonban arra elég, hogy lássuk, ilyen rendszerek 3D-s szimulációjában is történnek ezek, tehát a 2D-s mélyreható vizsgálatokat alátámasztja.

7. Összefoglalás

A kutatásom során a szakirodalom által széleskörűen tárgyalt 2 dimenziós diszkrét diszlokációdinamikai szimulációkat (2D DDD) hasonlítottam össze egy csúszási rendszerű 3D DDD szimulációim eredményeivel. Arra kerestem a választ, hogy a 2D-ben tett közelítésekkel látott alakzatok vajon megjelennek-e 3D-ben, és a valóságot jól leírja-e a sokkal



25. ábra. $L' = 7,55$ méretű szimulációban a $\rho_{\text{GND}}(n)$ alakulása különböző n -ek esetén a dimenziótlan t' idő függvényében.

egyszerűbben kezelhető modell.

A szimulációimban egy csúszási síkkal rendelkező anyagban a diszlokációk relaxációját szimuláltam véletlenszerű kezdőkonfigurációból a ParaDiS program segítségével.

Azonos konfigurációknál a bevezetett dimenziótlan mennyiségek valóban méretfüggetlennek bizonyultak, így a 2D-ben megfigyelt skálafüggetlenség 3D-ben is ugyanúgy igaz.

Síkmetszetek segítségével a 3D-s szimuláció kimeteit 2 dimenzióssá tudtam alakítani. Az éldiszlokációkra merőleges metszeten ugyanúgy látszanak éldiszlokáció-dipólok, mint 2D-ben. Azonban az ún. falak nem jelennek meg, csupán egy-egy diszlokációpár figyelhető meg egymás fölött. Ez a 2D-ben elhanyagolt csavardiszlokációk miatt lehet. A csavardiszlokációkra merőleges metszeten található néhány pár egymás fölött, de itt sem látunk falakat. A 2D modellben nagyon nehezen megvalósuló dipól-átfordulásra is láttunk példát az éldiszlokációkra merőleges metszeten.

A 2 dimenziós modellben minden diszlokáció párhuzamos és éldiszlokációkat tartalmaz csak a rendszer, azonban az én 3D szimulációimban ez nem igaz. Látható a relaxált rendszerben a párhuzamos diszlokációk dominanciája, azonban ezek nem csak éldiszlokációk, sokféle diszlokáció-irány megjelenik.

Párkorreláció segítségével az éldiszlokációkra merőleges metszetről az éldipólokot kvantitatívan is vizsgáltam, melyből meghatároztam a dipólméretet. A csavardiszlokációkra merőleges metszetről készített párkorreláción látszottak az egymás fölött álló dipólok, de

falak nem.

A kezdeti és relaxált rendszer korrelációs integráljainak összevetésével megfigyelhető a kialakult alakzatok méretei. A dipólméretig együtt fut a két görbe, majd szétválnak két párhuzamos szakaszra, és az átlagos dipóltávolságot eléggé összeforrnak és együtt futnak az cella méretéig. A jellemző dipólméret ismeretében egy módszert mutattam meg a dipólban lévő diszlokációk arányának becslésére. Ennek a becslésnek a helyességét empirikusan igazoltam a metszeteken lévő pontok megszámlálásával.

A geometriailag szükséges diszlokációk arányának kisebb dobozokra való átlagolásának módszerével láthatóvá tettem a különböző méretskálákon történő eseményeket. Egy lavina méretére is becslést adtam.

Összefoglalásként elmondható, hogy a 2D-ben megfigyelt diszlokáció-dipólok 3D-ben is megjelennek, és a 2D modellek leírása a kísérleti tapasztalatokról helyesek. Azonban különbségek is vannak a két modell között, például falak megjelenését nem tapasztaltam 3D-ben.

8. Kitekintés

A kutatásomban csak terheletlen relaxációkat vizsgáltam. A terhelés alatti viselkedés is jól dokumentált 2D-ben, így azokat is össze lehetne vetni a jövőben a 3D-s eredményekkel. Terhelés alatt 2D-ben jelentősebb a falak mérete, így lehet, hogy már megjelennének 3D-ben is.

A relaxációk méretfüggését csak egy adott konfigurációval végeztem. Sok különböző véletlenszerű konfiguráció relaxációját is meg lehetne nézni, és összevetni a kapott relaxációs idő méretfüggését a 2D-ben kapott összefüggéssel.

Több csúszási rendszerű anyagot nem vizsgáltam a 2D-vel való könnyű összehasonlíthatóság miatt, de a relaxációs idő méretfüggése ilyen rendszerek esetén is érdekes lehet.

9. Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőimnek, Berta Dénesnek és dr. Ispánovity Péter Dusánnak a kutatás során nyújtott segítségükért és támogatásukért.

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-1 kódszámú Új Nemzeti Kiválósági Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Hivatkozások

- [1] Ispánovity, P.D., Ugi, D., Péterffy, G. et al. (2022): *Dislocation avalanches are like earthquakes on the micron scale*; Nat Commun 13, 1975.
- [2] Dimiduk, D. M., Uchic, M. D., és Parthasarathy, T. A. (2005): *Size-affected single-slip behavior of pure nickel microcrystals*; Acta Materialia, 53(15), 4065–4077.
- [3] Jérôme Weiss és David Marsan (2003): *Three-Dimensional Mapping of Dislocation Avalanches: Clustering and Space/Time Coupling*; Science, 299(5603), 89-92.
- [4] Dennis M. Dimiduk, Chris Woodward, Richard LeSar, Michael D. Uchic (2003): *Scale-Free Intermittent Flow in Crystal Plasticity*; Science, 312(5777), 1188-1190.
- [5] Weiss, J., Rhouma, W. B., Richeton, T., Dechanel, S., Louchet, F., és Truskinovsky, L. (2015): *From Mild to Wild Fluctuations in Crystal Plasticity*; Physical Review Letters, 114(10).
- [6] Hirth, J. P. és Lothe, J. (1992): *Theory of Dislocations*; Krieger, Malabar, Florida.
- [7] Zaiser, M., Miguel, M.-C., és Groma, I. (2001): *Statistical dynamics of dislocation systems: The influence of dislocation-dislocation correlations*; Physical Review B, 64(22).
- [8] https://en.wikipedia.org/wiki/Burgers_vector
- [9] Máthis, K., Knapek, M., Šiška, F., Harcuba, P., Ugi, D., Ispánovity, P. D., Shin, K. S. et al. (2021): *On the dynamics of twinning in magnesium micropillars*; Materials and Design, 203, 109563.
- [10] Miguel, M.-C., Vespignani, A., Zapperi, S., Weiss, J., és Grasso, J.-R. (2001): *Intermittent dislocation flow in viscoplastic deformation*; Nature, 410(6829), 667–671.
- [11] Arsenlis, A., Cai, W., Tang, M., Rhee, M., Oppelstrup, T., Hommes, G., Bulatov, V. V., et al. (2007): *Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics*; Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 15. (2007) 553–595.
- [12] Bulatov, V., Wei Cai, Fier, J., Hiratani, M., Hommes, G., Pierce, T., Arsenlis. et al. (2004): *Scalable Line Dynamics in ParaDiS*; Proceedings of the ACM/IEEE SC2004 Conference. doi:10.1109/sc.2004.53
- [13] Ispánovity, P. D., Groma, I., Györgyi, G., Szabó, P., és Hoffelner, W. (2011): *Criticality of Relaxation in Dislocation Systems*; Physical Review Letters, 107(8).
- [14] Bulatov, V. V., Hsiung, L. L., Tang, M., Arsenlis, A., Bartelt, M. C., Cai, W., de la Rubia, T. D., et al. (2006): *Dislocation multi-junctions and strain hardening*; Nature, 440(7088)
- [15] Shimokawa, T., és Kitada, S. (2014): *Dislocation Multiplication from the Frank–Read Source in Atomic Models*; Materials Transactions, 55(1), 58–63.
- [16] <http://paradis.stanford.edu>
- [17] Ispánovity, P. D., Papanikolaou, S., és Groma, I. (2020): *Emergence and role of dipolar dislocation patterns in discrete and continuum formulations of plasticity* Physical Review B, 101(2).
- [18] Limkumnerd, S., és Van der Giessen, E. (2008): *Statistical approach to dislocation dynamics: From dislocation correlations to a multiple-slip continuum theory of plasticity*; Physical Review B, 77(18), 184111.
- [19] Weger, B., Gupta, S., és Hochrainer, T. (2021): *Analysing discrete dislocation data using alignment and curvature tensors*; Comptes Rendus. Physique, 22(S3), 249-266.