

Előterhelés és ponthibák szerepe diszlokációlavinákban

Mendei Barna^{*}

Témavezetők: Ispanovity Péter Dusán[†], Berta Dénes[‡]

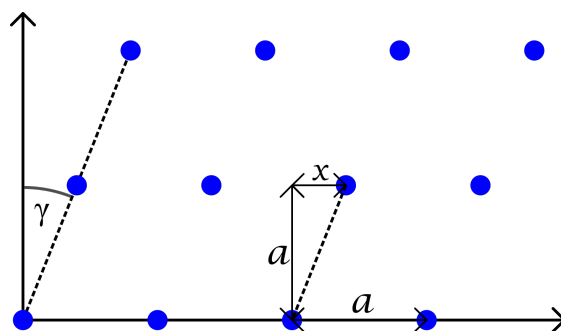


ELTE
EÖTVÖS LORÁND
TUDOMÁNYEGYETEM

^{*}Fizika BSc hallgató, mendeibarna@gmail.com

[†]PhD, egyetemi docens, ispanovity.peter@ttk.elte.hu

[‡]MSc, doktorandusz, denes.bertha@ttk.elte.hu



1. ábra. γ szögű ideális nyírás. A rácsállandó: a , a rögzített fölötti réteg elmozdulása: x

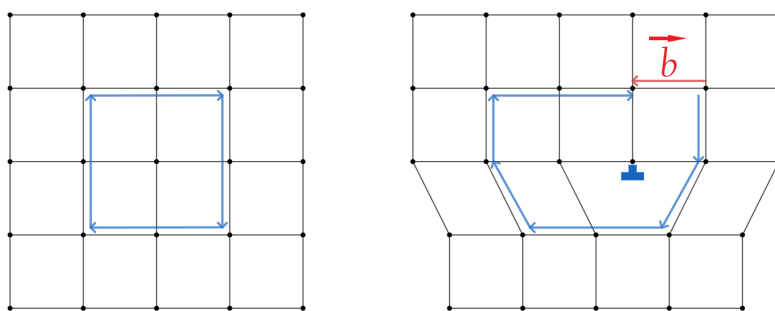
1. Bevezetés

Az emberiség történelme során folyamatosan kihasználta a fémek szívósságát, de ennek okára csak a XX. század elején tudtak választ adni a tudósok a diszlokációk felismerésével. Az utóbbi évtizedben az is ismertté vált, hogy a periodikus szerkezetek ezen vonalhibái külső nyírófeszültség hatására lavinaszerűen képesek elmozdulni, aminek a mikronos mérettartományban drámai hatása van a deformációs folyamatra. Kutatásunkban szimulációs eszközöket használva vizsgáltuk diszlokációrendszerek kollektív dinamikáját és arra a kérdésre kerestük a választ, mekkora méreteket öltenek ezek az események és hogyan változik ezek hatására a lokálisan mérhető folyásfeszültség. Hasonló módszerekkel vizsgáltuk meg továbbá a magas külső nyírófeszültségű előterhelés hatásait is. Meghatároztuk a lokális folyásfeszültségek eloszlását valamint annak megváltozását ponthibák jelenléte esetén. Eredményül azt találtuk, hogy a lokális folyásfeszültség-értékek eloszlása Weibull-eloszlást követ. Míg tiszta diszlokációrendszerekben az egész mintára kiterjedő lavinák teljesen átrendezik annak lokális folyásfeszültség-viszonyait, addig a ponthibákkal szennyezett rendszerekben a kevesebb diszlokációt megmozgató lokális események csak lokálisan eredményeznek nagy változást. Az előterhelt rendszereket vizsgálva azt találtuk, hogy a ponthibák jelenlétének ellenére is egyre gyakoribbá váltak a több diszlokációt megmozgató nagyobb méretű események.

1.1. A diszlokációk

A kristályos szerkezetű anyagok (például a fémek) könnyű deformálhatóságának oka sokáig ismeretlen volt a kutatók számára. Hogy megértsük a problémát ideális nyírást feltételezve hajtsunk végre deformációt egy periodikus rendszeren az 1. ábra szerint. Kis szögű nyírás esetén a γ szög a következőképpen írható fel:

$$\gamma = \frac{x}{a}$$



2. ábra. A Burgers-vektor ($\vec{b}$) szemléletes ábrázolása.

Ugyanez kifejezhető a nyírófeszültség (τ) és a nyírási modulus (μ) hányadosával is:

$$\gamma = \frac{\tau}{\mu}$$

A két egyenletet felhasználva felírhatjuk a feszültséget az x elmozdulás függvényében kis szögekre:

$$\tau = \mu \cdot \frac{x}{a}$$

A periodikus szerkezet miatt ennek x -ben periodikusnak kellene lennie nagyobb nyírószögekre. Ezt a következő szinuszos függvény úgy teljesíti, hogy kis γ szögekre visszaadja az előző lineáris alakot:

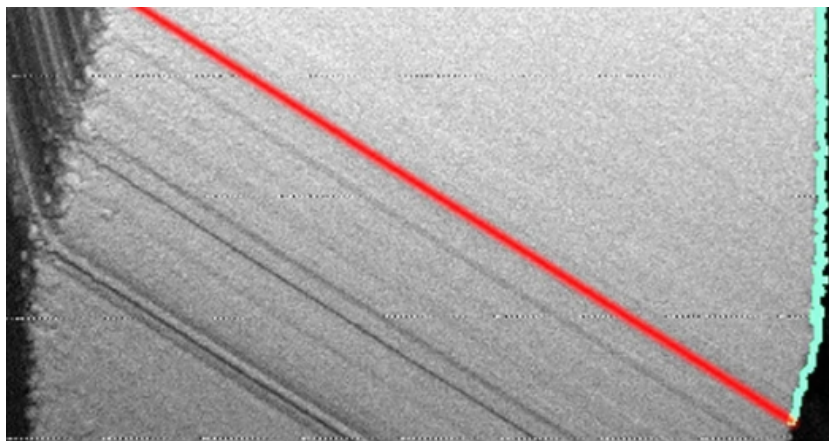
$$\tau(x) = \frac{\mu}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi}{a} \cdot x\right)$$

Ezen modell alapján a nyírófeszültség maximális értéke a GPa-os nagyságrendbe esik, de a kísérletileg mért értékek gyakran csupán néhány MPa-t érnek el. Az eltérés okára 1934-ben jött rá Polányi Mihály, Orován Egon, és Geoffrey Ingram Taylor [1–3]. Elméletük szerint a kristályos anyagok szerkezete nem tökéletes, abban vonalszerű hibák, diszlokációk találhatók, melyek kicsiny nyírófeszültség hatására is képesek elmozdulni. Amikor egy diszlokáció végighalad az anyagban, akkor a felsőbb rétegek a hernyók mozgásához hasonlóan eltolódnak.

A diszlokációk egyik legfőbb jellemzője a Burgers-vektor, melyet a diszlokáció körüljárásával határohatunk meg a 2. ábrán látható módon. A Burgers-vektor és a diszlokációvonal kapcsolata szerint két csoportba oszthatjuk a diszlokációkat:

- *Éldiszlokáció*: A Burgers-vektor merőleges a diszlokációvonalra.
- *Csavadiszlokáció*: A Burgers-vektor párhuzamos a diszlokációvonallal.

Egy éldiszlokációt láthatunk a 2. ábra jobb oldalán a diszlokációvonalra merőleges vetületben. Ekkor a diszlokáció egy pontnak látszik.



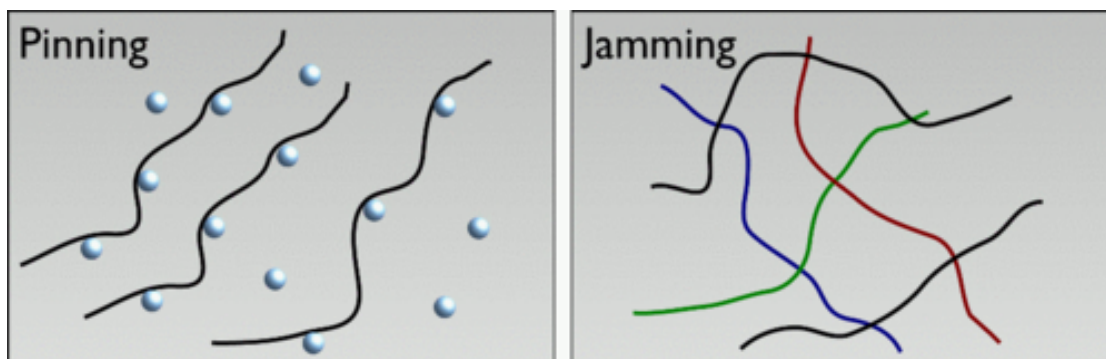
3. ábra. Egy összenyomott magnézium mikrooszlop [6]. Jól látszanak a diszlokációk csúszási síkjai, melyek a világos, és a sötét árnyalatú részek határain helyezkednek el.

1.2. Korábbi kísérletek eredményei

Több kísérleti eredmény is bemutatja a fém mikrooszlopok esetében a diszlokációk mozgását [4, 5]. A mérésekhez sokszor használatosak a mikronos méretskálába eső fémoszlopok, mivel ezekben a kis méretű mintákban kevesebb diszlokáció fordul elő. Azt tapasztaljuk, hogy külső nyírófeszültség hatására a diszlokációk jól meghatározható kristálytani síkok mentén hirtelen elmozdulnak. Erről láthatunk egy pásztázó elektron mikroszkóppal készített felvételt a 3. ábrán.

További mérésekből ismeretes, hogy a diszlokációk hirtelen mozgása a földkéreg földrengéseirehasonlító lavinaszerű tulajdonságokat mutat [6]. Ezt az akusztikus emissziós mérések is alátámasztják. A mikrooszlopok összenyomásakor egy piezoelektromos detektor segítségével figyelhetjük meg ezeket az akusztikus jeleket. Ha ezzel párhuzamosan mérjük a feszültséget, akkor azt látjuk, hogy nagy időskálán egy időben ugrik a feszültség-idő görbe, azaz történik plasztikus deformáció és észlelünk akusztikus jelet a detektorral. Kisebb időtartamot vizsgálva az akusztikus emissziós jel kisebb hullámcsomagokra bontható föl, melyek egy-egy kisebb lavinához köthetők. Az akusztikus jelek és a lavínák további vizsgálatával további hasonlóságokat találhatunk a földrengésekkel, mint például a feszültségugrások hatványfüggvénnyel leírható valószínűsége, vagy a földrengések és utóregések közt eltelt idő eloszlása.

A kristályos anyagok deformációjának, a plasztikus deformációnak, és a diszlokációk dinamikájának jobb megismerése elengedhetetlen az ipar számára. Az embreiség egész történelme során felhasználta a fémek jó deformálhatóságát és a deformáció utáni keményedését. Ezen anyagok viselkedését vizsgálva képesek



4. ábra. A diszlokációrendszerek különböző kölcsönhatásainak ábrázolása [8]. A pinning esetében a diszlokációvonalak és a ponthibák, míg jamming esetén a diszlokációvonalak közti kölcsönhatás az uralkodó.

lehetünk strapabíróbb és erősebb szerkezetek létrehozására. Kutatásunkban szimulációs eszközök segítségével vizsgáltuk diszlokációrendszerek viselkedését és a külső nyírófeszültség hatására létrejövő lavinák tulajdonságait.

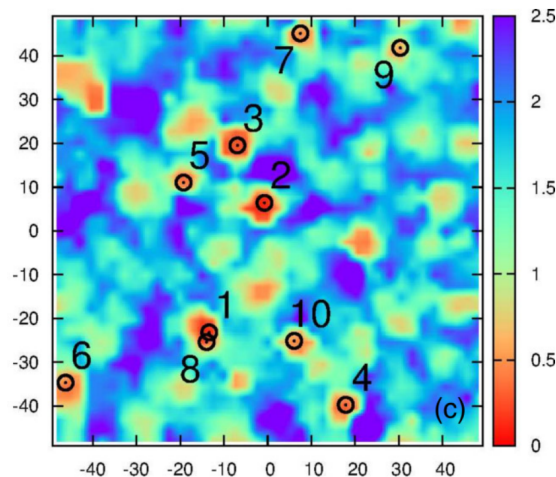
1.3. Korábbi szimulációs munkák

Korábbi kutatások is vizsgálták már számítógépes szimulációk segítségével ezen rendszereket. Eleinte még csak a két dimenziós konfigurációk dinamikáját tudták leutánozni, de később a számítástechnika fejlődésével lehetőség nyílt a három dimenziós rendszerek részletes analízisére is [7].

Több kutató is írt a diszlokációrendszerek kritikus viselkedéséről [8, 9]. Ez alapján két csoportra oszthatjuk ezeket: jamming-re és pinning-re. Előbbiben a hosszú diszlokációvonalak közel kerülnek egymáshoz és egymásba akadnak és a diszlokáció-diszlokáció kölcsönhatás lesz a domináns. A pinning során a diszlokációk a kristályos szerkezet ponthibáin akadnak fenn. Ezen objektumokkal a diszlokációk kölcsönhatása rövidebb hatósugarú. A különböző fajta kölcsönhatásokat a 4. ábrán láthatjuk szemléletesen. A jamming és a pinning egyaránt megfigyelhető viselkedés a kettő-, illetve a három dimenziós rendszerek szimulációja során is.

1.4. Amorf anyagok lokális folyásfeszültsége

Amorf anyagok modellezése során már korábban felmerült a lokális lavinaszerű folyamatok jelentősége. Ismert, hogy erős korreláció van a lokális folyásfeszültségértékek és a terhelés során előforduló átrendeződések [10, 11] között. A lokális folyásfeszültséget a minta egy adott területének terhelésével határozhatjuk meg.



5. ábra. Lokális folyásfeszültségek egy amorf anyagban [11]. Az első tíz lavinaszerű esemény helyét fekete pontok jelölik. Ezek láthatóan a minta legpuhább régióiban történnek.

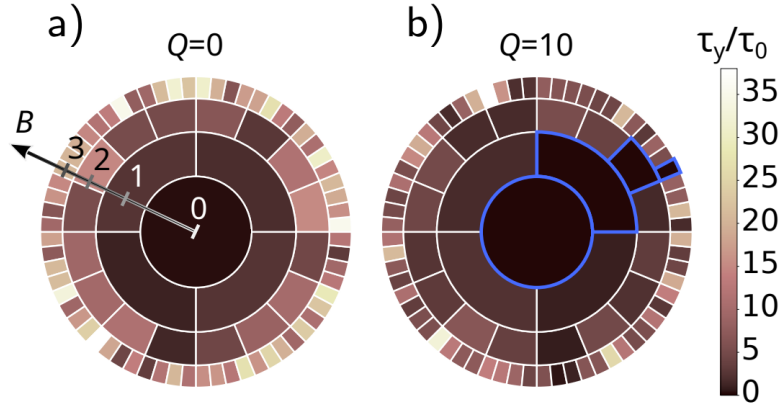
Egy ilyen módon felmért folyásfeszültségtérképet láthatunk az 5. ábrán. Egy ilyen megközelítés lehetőséget ad tehát arra, hogy megjósoljuk az anyag szerkezetének várható plasztikus változásait, azaz a deformációs lavinák várható helyét. Az is megfigyelhető, hogy ezekben a mintákban az alacsony folyásfeszültségű régiókban ez az érték közel változatlan marad több átrendeződés után is. A lavinaszerű jelenségek mélyebb oka az anyag keménységében és annak fluktuációjában keresendő.

1.5. A leggyengébb láncszem elve

A kristályos szerkezetű anyagok deformációja során azt tapasztaljuk, hogy egy adott nyírófeszültséget átlépve a minta maradandóan megváltoztatja az alakját. Ez a plasztikus megfolyás jelensége, és a küszöbfeszültséget folyásfeszültségnek nevezzük. Ha egy anyagot a folyásfeszültségnél nagyobb külső terhelésnek vetjük alá és emiatt maradandó alakváltozást szenved, akkor azt találjuk, hogy ennek következtében az újabb terhelés során a folyásfeszültség értéke nagyobb lesz, tehát a minta megkeményedett.

Ezt a keményedést a plasztikus deformáció, azaz a diszlokációk lavinaszerű mozgása okozza. Értelmezhetjük a lokális folyásfeszültséget úgy, mint az a külső feszültségérték, mellyel a minta egy adott részét terhelve egy diszlokációlavina (azaz maradandó alakváltozás) következik be.

Egy korábbi szimulációs munkában [12] már bemutatták a kristályban előforduló ponthibák szerepét. Ebben a cikkben arról olvashatunk, hogy ha a kristályos szer-



6. ábra. A leggyengébb láncszem elv szemléletes ábrázolása [12]. Itt Q a ponthibák és a diszlokációk számának aránya. Látszik, hogy a jobboldali ponthibákkal terhelt rendszer esetén az egyes régiókra vonatkozó folyásfeszültség megegyezik a legpuhább rész folyásfeszültségével. a csak diszlokációkból álló $Q = 0$ esetben azonban nem figyelhető meg ugyanez.

kezetben előfordulnak ponthibák, akkor a diszlokációlavinák kisebb méretűek, azaz kevesebb diszlokációt mozgatnak meg és lokálisan, a minta egy jól elkülöníthető részében következnek be. Ponthibák nélkül a tisztán diszlokációkból álló rendszerekben azonban sokkal nagyobbak ezek a jelenségek és akár az egész minta szerkezetét képesek átrendezni. A jelenség azzal kapcsolatos, hogy a ponthibák jelenléte bevezet egy hosszskálát, amely korlátot ad a lavinák térbeli kiterjedésére. Emellett megvizsgálták a lokális folyásfeszültségeket is és egy érdekes szabályra lettek figyelmesek a szerzők. Azt tapasztalták, hogy ponthibák jelenléte mellett a minta egy-egy régiója a lokális folyásfeszültségét a legkisebb folyásfeszültségű részétől, azaz a leggyengébb láncszemtől öröklí. Ezt szemlélteti a 6. ábra. Ugyanez nem mondható el feltétlenül a csak diszlokációkból álló rendszerekről, mivel ott az esetenként előforduló nagy méretű lavinák teljesen átrendezik a diszlokációs szerkezetet és ezzel együtt a lokális folyásfeszültségeket. Ez a jelenség ismét az említett hosszskála megjelenésével hozható kapcsolatba.

1.6. Diszlokációdinamika szimulálása

Kutatásunk során egy szimulátorprogramot [13] fejlesztettünk tovább és használtunk fel. Ez egy kétdimenziós DDD (diszkrét diszlokáció dinamikai) szimulátor, ami diszkrét diszlokációk mozgását képes nyomonkövetni. A továbbiakban olyan éldiszlokációkkal dolgozunk, melyek egyenesek és párhuzamosak a z tengellyel, Burgers-vektoruk pedig az x -tengelyel irányába mutat. A diszlokációkat ekkor két csoportba oszthatjuk a Burgers-vektoruk iránya szerint: $+1$ -es és -1 -es Burgers-

vektorúakra.

A program segítségével egy L oldalhosszú négyzet alakú mintát tölthetünk fel diszlokációkkal, illetve ponthibákkal. A rendszer egy téglalap alakú részére külső terhelést is kifejtethetünk és nyomonkövethetjük a diszlokációk mozgását, átlagos sebességét, a deformációt, vagy akár az egész rendszer energiáját is. A szimulációk során periodikus határfeltételek mellett dolgoztunk.

A lineáris rugalmasságtan keretei között minden diszlokáció körül egy

$$\tau_d(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

alakú nyírófeszültségtér alakul ki, ahol b a Burgers-vektor abszolútértéke (azaz a rácsállandó), μ és ν pedig rugalmassági állandók. Túlszabályozott dinamikát feltételezve az egyes diszlokációkra vonatkozó differenciálegyenlet-rendszer:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i(t) &= B^{-1} s_i b \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N s_j \tau_d(x_i(t) - x_j(t), y_i - y_j) + \tau_k \right] \\ \dot{y}_i(t) &= 0. \end{aligned}$$

Itt B a diszlokációk közti húzóerő erősségét leíró állandó, mely jelentése a folyadékok viszkozitásához hasonló, s_i és s_j az egyes diszlokációk Burgers-vektorának irányát megadó állandó, mely értéke $+1$ vagy -1 lehet, N a diszlokációk száma, és τ_k a külső nyírófeszültség. Láthatjuk, hogy szimulációink során a diszlokációk csak az x -tengellyel párhuzamosan mozognak.

A szimulátorprogram segítségével a periodikus szerkezetekben előforduló ponthibák hatását is le tudjuk utánozni. Egy ilyen objektum maga körül egy

$$\tau_{ph}(x, y) = -2Axy \frac{\frac{1 - e^{-K^2(x^2+y^2)}}{x^2 + y^2} - K^2 e^{-K^2(x^2+y^2)}}{x^2 + y^2}$$

alakú feszültségterek hoz létre, ahol A a ponthiba és a diszlokáció közti kölcsönhatás erősségét meghatározó állandó, K pedig a kölcsönhatás levágási távolságát jellemző paraméter. A diszlokációk mozgásegyenleteiben ez egy újabb tagként jelenik meg, amit minden ponthibára összegeznünk kell. A ponthibák minden szimuláció során mozdulatlanok maradnak.

Mivel a számítógépek csak számokat képesek visszaadni számunkra, ezért fontos, hogy tisztázzuk a vizsgált mennyiségek mértékegységét. A diszlokációk $\rho = N/L^2$ sűrűségét bevezetve a következő mértékegységeket használjuk:

- Hosszúság: $\rho^{-1/2}$

- Feszültség: $\frac{\mu b \sqrt{\rho}}{2\pi(1-\nu)}$
- Idő: $\frac{2\pi(1-\nu)B}{\mu b^2 \rho}$

Minden szimuláció esetén a diszlokációk helyzetét meghatározó x -, és y -koordinátákat kezdetben véletlenszerűen adtuk meg. Ezek Burgers-vektorai úgy lettek meghatározva, hogy azok összege 0 legyen, azaz:

$$\sum_{i=1}^N s_i = 0.$$

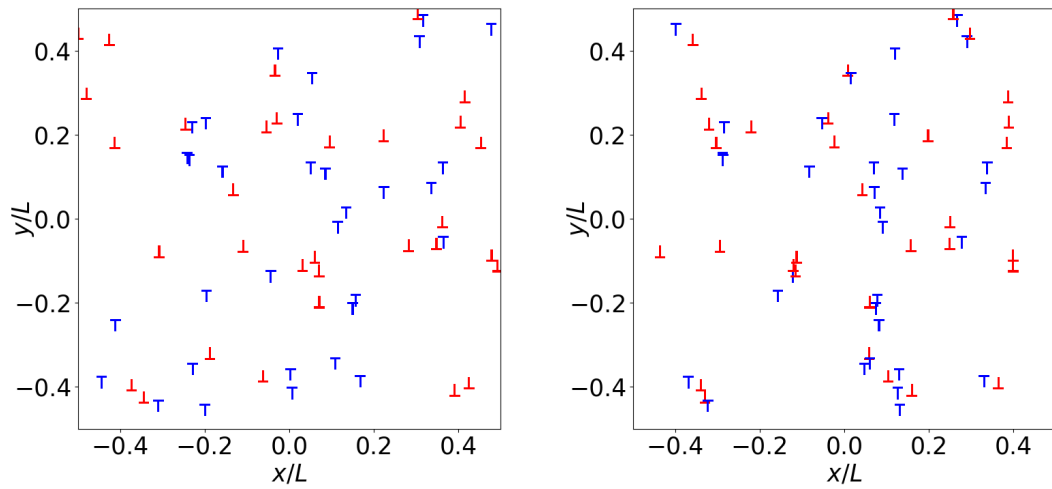
Az így kapott konfigurációkat először egyensúlyi helyzetbe kell hozni, relaxáltatni kell azokat, hiszen a természetben is ilyen állapotban fordulnak elő az anyagok. Ehhez a véletlenszerű diszlokációrendszerrel külső feszültség nélkül futtatjuk a szimulációt addig, amíg a diszlokációk nyugalomba nem kerülnek. Egy véletlenszerűen legyártott konfigurációt láthatunk a relaxálás folyamata előtt-, és után a 7. ábrán. Észrevehetjük, hogy a jobboldali relaxált esetben jellegzetes formák jelennek meg. Ilyenek az átlósan elhelyezkedő ellentétes irányú Burgers-vektorú diszlokációk alkotta diszlokációdipólok, vagy a közel azonos x -koordinátával rendelkező azonos Burgers-vektorú diszlokációkból álló diszlokációfalak. Ezek kialakulása az egyes diszlokációk feszültségterének szerkezetével magyarázható. Ezen relaxáció során tapasztalt átlagos sebesség időfejlődését a 8. ábrán láthatjuk. A grafikon pillanatszerű ugrásai jelzik a diszlokációlavinákat. Ezek bekövetkezte jelzi, hogy a kezdeti véletlenszerű konfigurációban erős belső feszültség volt jelen.

A külső feszültséget a program terhelési protokollok segítségével tudja szimulálni. Eleinte csak terheletlen állapotból egy konstans ütemben tudta növelni a külső nyírófeszültséget (1), de kutatásunk szempontjából fontos volt az is, hogy egy adott kezdeti értéktől tudjuk lineárisan változó feszültséggel terhelni a diszlokációrendszereket (2).

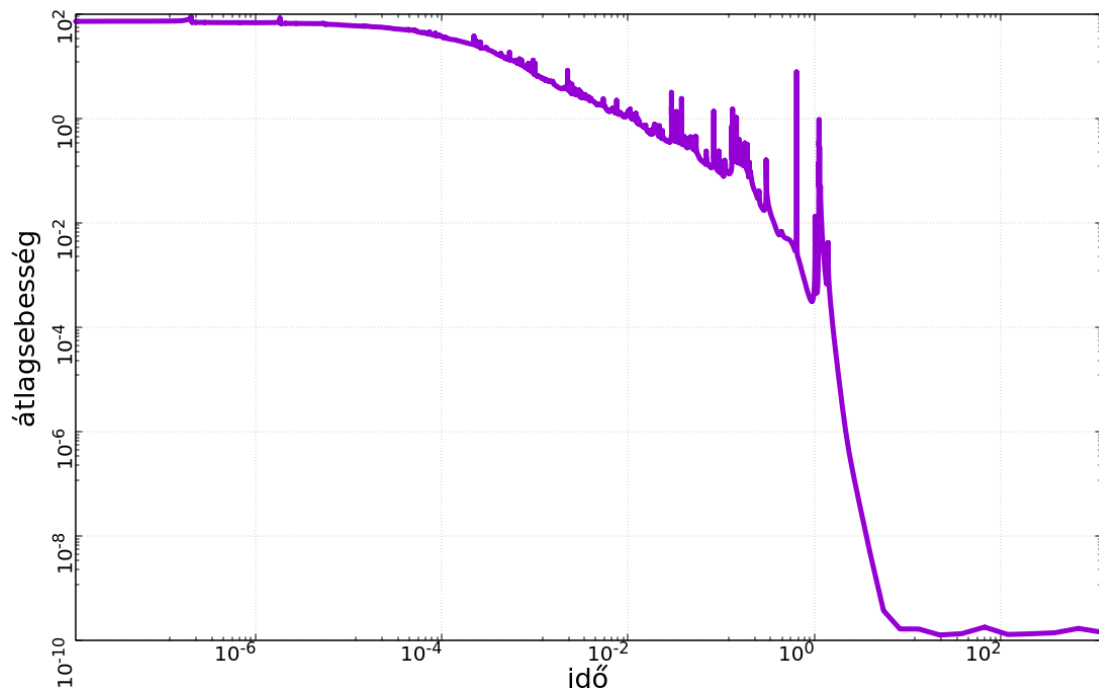
$$\tau_k(t) = a \cdot t \tag{1}$$

$$\tau_k(t) = a \cdot t + \tau_{k,0} \tag{2}$$

Az új protokollt a programkód elemzésével és továbbfejlesztésével hozzáadtuk a szimulátorhoz, mely így már megfelelt céljainknak.



7. ábra. Egy 64 diszlokációból álló véletlenszerűen előállított rendszer a relaxálás előtt (balra)-, és után (jobbra). A kék alakzatok jelölik a $+1$ -es-, pirosak a -1 -es Burgers-vektorú éldiszlokációkat. Látható a jobboldali ábrán, hogy olyan jellegzetes alakzatok alakulnak ki a relaxált rendszerben, mint a diszlokációdipólok, illetve diszlokációfalak.



8. ábra. A 7. ábrán látható relaxálási folyamat sebesség-idő grafikonja.

2. Első és második lavina közti korrelációk

2.1. Lokális folyásfeszültségek eloszlása

Kutatásunk során külön vizsgáltuk a tisztán diszlokációkból álló-, és a pont-hibákkal bővített rendszereket. Ezek megkülönböztetésére vezessük be a Q paramétert, mely a ponthibák-, és a diszlokációk számának arányát adja meg:

$$Q = \frac{N_{\text{ponthibák}}}{N_{\text{diszlokációk}}}$$

Az első diszlokációlavina hatásának vizsgálatához 200 darab $Q = 0$ -s, és 75 darab $Q = 10$ -es rendszert használtunk.

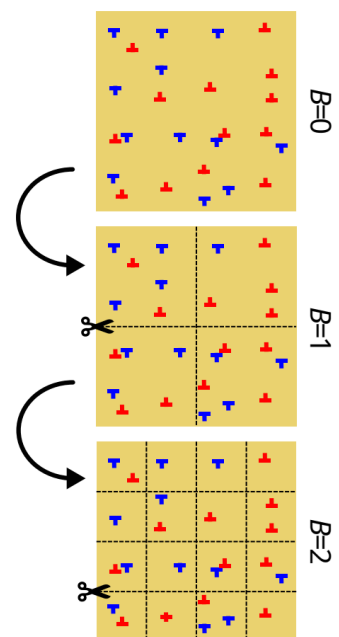
A diszlokációrendszerek lokális folyásfeszültségét több felbontásban is felmértük, melyet a B paraméterrel jellemezhetünk. Ennek szemléletes jelölését a 9. ábrán láthatjuk. Így a mintákat 4^B darab kis négyzet alakú régióra bontottuk. A folyásfeszültség-értékek feltérképezését $B = 0, 1, 2, 3$ értékek mellett végeztük el minden rendszer esetében.

Először a relaxált konfigurációknak mértük fel a folyásfeszültségét, olyan módon, hogy az (1) protokollt használva lassan növeltük a külső nyírófeszültséget az egyes régiókon és figyeltük, mikor következik be az első diszlokációlavina. Amikor ez megtörtént leállt a szimuláció. Az ekkor használt külső feszültség értéke lett az adott dobozhoz tartozó lokális folyásfeszültség. Mikor ezt elvégeztük az összes konfiguráció összes felbontása mellett elkezdtük hasonlóan terhelni az egész mintát ($B = 0$ eset), amíg be nem következett az első lavina, majd újra elvégeztük a lokális folyásfeszültségek felmérését, de most nem $\tau_{k,0} = 0$ kezdeti feszültségről indulva, hanem a $B = 0$ -hoz tartozó globális folyásfeszültségtől kezdve. Ehhez már a (2) alakú terhelési protokollt alkalmaztuk. Ezzel felmértük a $Q = 0$ és $Q = 10$ esetekben a lokális folyásfeszültségek értékeit.

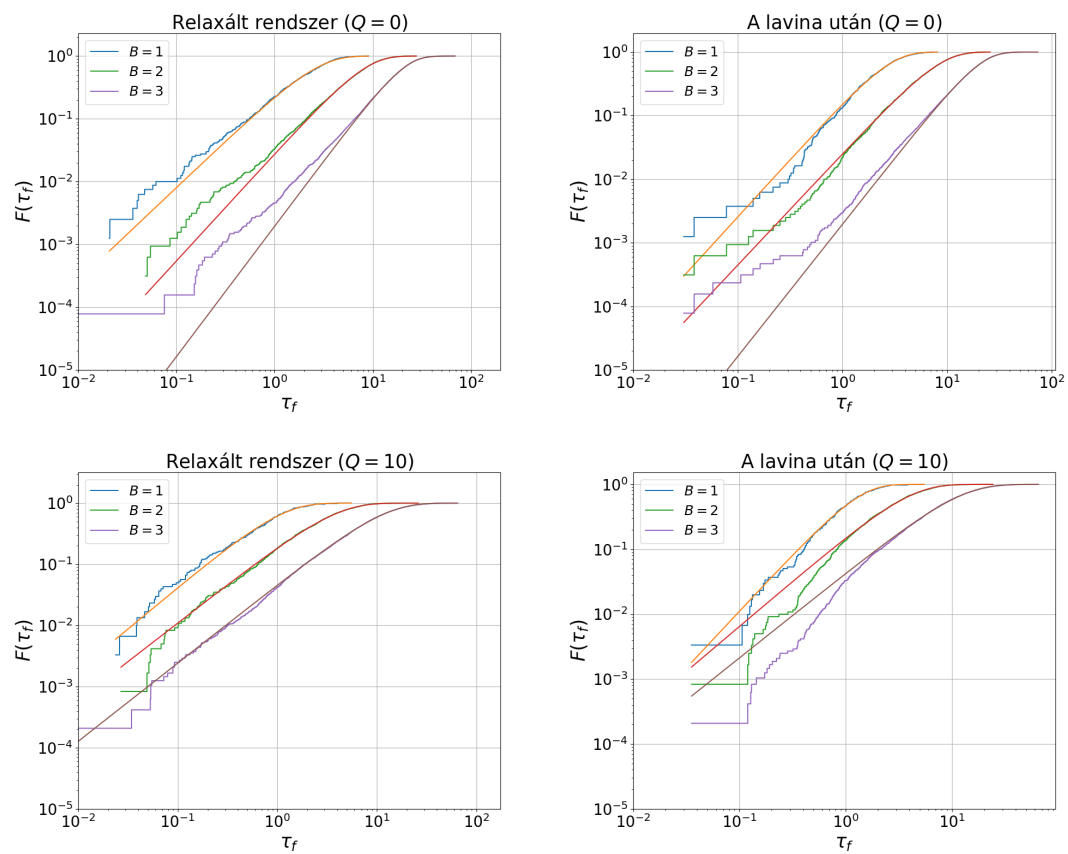
Az így kapott értékek kumulatív eloszlását a 10. ábrán láthatjuk. Ezen adatsorokra

$$F(\tau_f) = 1 - e^{-(\tau_f/\lambda)^k} \quad (3)$$

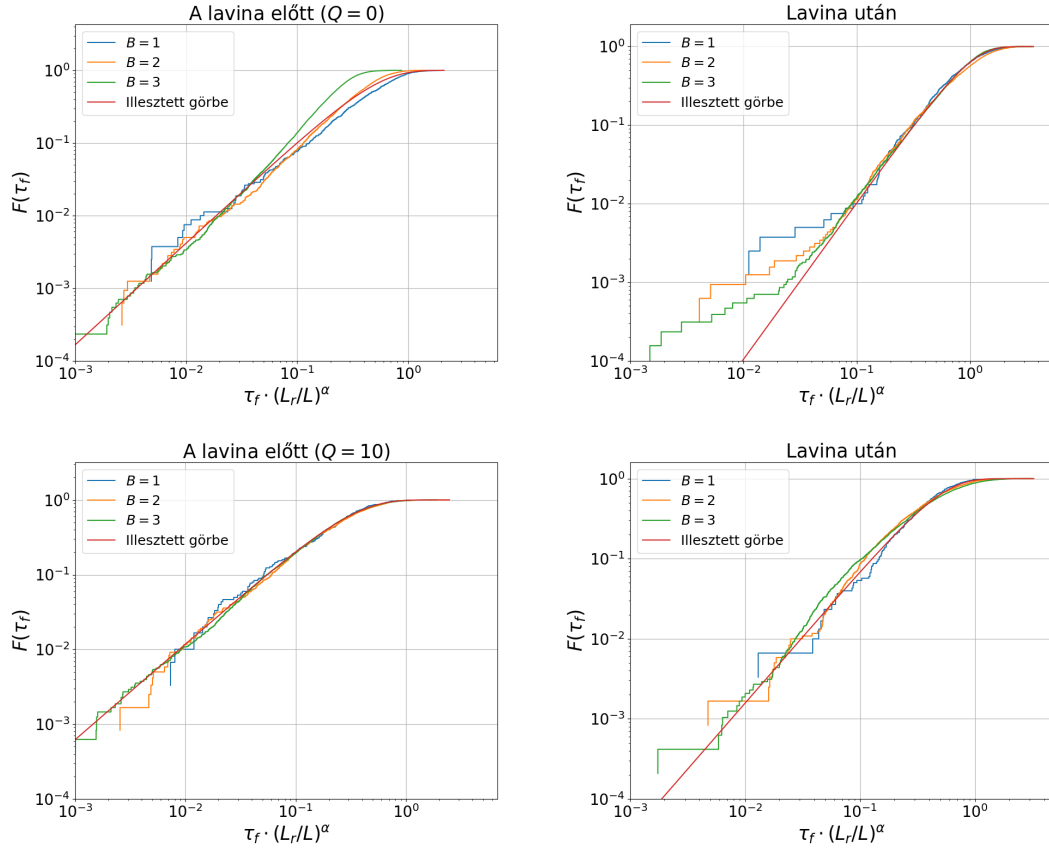
alakú Weibull-eloszlást illesztettünk. Jól látható, hogy a lavina utáni esetekben a nagyobb folyásfeszültségek váltak gyakoribbá, ami egybevágh a fémek keményedésével, miszerint a folyásfeszültséget átlépve és visszaengedve a terhelést az új folyásfeszültség értéke magasabb lesz.



9. ábra. A B paraméter szemléletes ábrázolása [12]



10. ábra. A folyásfeszültségek eloszlása és az illesztett Weibull-eloszlások görbéi



11. ábra. Megfelelő α skálaparaméterekkel (melyekkel a legjobban egymásrötolhatóak a görbék) összetolt eloszlásgörbék és az azokra illesztett Weibull-eloszlás görbéje. Fent: $Q = 0$, lent: $Q = 10$ -es rendszerek esete.

2.2. Skálázás és dimenzió

Ha a folyásfeszültségek helyett a

$$\tau_k \cdot \left(\frac{L_r}{L} \right)^\alpha$$

mennyiség eloszlását ábrázoljuk, akkor azt vesszük észre, hogy egy adott α skálaparaméter mellett a görbék közel egybeesnek, ahol L_r a terhelt négyzet alakú régió oldalhossza, azaz:

$$L_r = 2^{-B} \cdot L.$$

Az ilyen módon egybetolt eloszlásgörbéket a 11. ábrán tekinthetjük meg. Az így kapott görbére is (3) alakú Weibull-eloszlást illesztettünk.

	α	k	λ	D
$Q = 0$ lavina előtt	$2,1 \pm 0,1$	$1,4 \pm 0,1$	$0,5 \pm 0,1$	$2,94 \pm 0,25$
$Q = 0$ lavina után	$1,45 \pm 0,05$	$1,99 \pm 0,05$	$1,0 \pm 0,1$	$2,89 \pm 0,12$
$Q = 10$ lavina előtt	$1,7 \pm 0,1$	$1,28 \pm 0,05$	$0,32 \pm 0,05$	$2,18 \pm 0,15$
$Q = 10$ lavina után	$1,45 \pm 0,05$	$1,65 \pm 0,05$	$0,5 \pm 0,1$	$2,39 \pm 0,11$

1. táblázat. A skálázás és az illesztés paraméterei

	$Q = 0$	$Q = 10$
$B = 1$	0,72	0,86
$B = 2$	0,86	0,95
$B = 3$	0,91	0,99

2. táblázat. A lavina előtt-, és után érvényes lokális folyásfeszültségek közti Pearson korrelációs együttható a különböző felbontások és Q arányok mellett

A paramétereket az 1. táblázatban foglaltuk össze. Itt feltüntettünk egy új mennyiséget: a dimenziót, melyet D -vel jelöltünk. Ennek definíciója:

$$D = \alpha \cdot k$$

Vegyük észre, hogy ennek a mennyiségnek az értéke a lavina előtti, és utáni esetekben mind a $Q = 0$, mind a $Q = 10$ -es rendszerekben hibahatáron belül megegyezik.

2.3. Korrelációk a folyásfeszültségek között

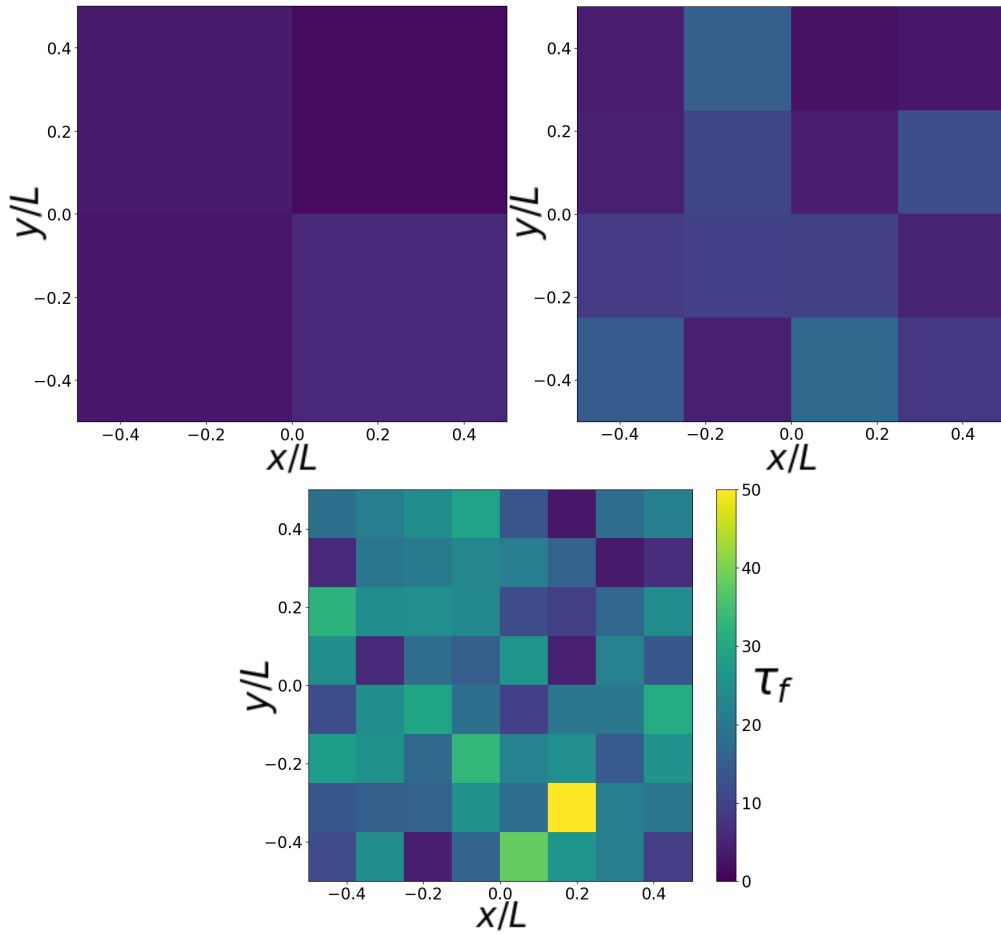
Megvizsgáltuk még a lavina előtt-, és után mérhető lokális folyásfeszültségek közti korrelációs együtthatót is. Ehhez a következő alakú Pearson korrelációt számoltuk ki:

$$C = \frac{\langle \tau_{f,e} \cdot \tau_{f,u} \rangle - \langle \tau_{f,e} \rangle \langle \tau_{f,u} \rangle}{\sqrt{\langle \tau_{f,e}^2 \rangle \langle \tau_{f,e} \rangle^2} \sqrt{\langle \tau_{f,u}^2 \rangle \langle \tau_{f,u} \rangle^2}},$$

ahol $\tau_{f,e}$ és $\tau_{f,u}$ rendre a lavina előtt-, és után felmért folyásfeszültségek. Ennek értékét a különböző felbontások és Q arányok mellett a 2. táblázatban tüntetjük fel. Láthatjuk, hogy a ponthibákkal bővített rendszerek esetében mindig nagyobb ennek az együtthatónak az értéke. Ez a pinning miatt fellépő kisebb, lokális diszlokációlavinák miatt lehet, melyek kevésbé rendezik át a minta szerkezetét.

2.4. A lokális folyásfeszültségek ábrázolása

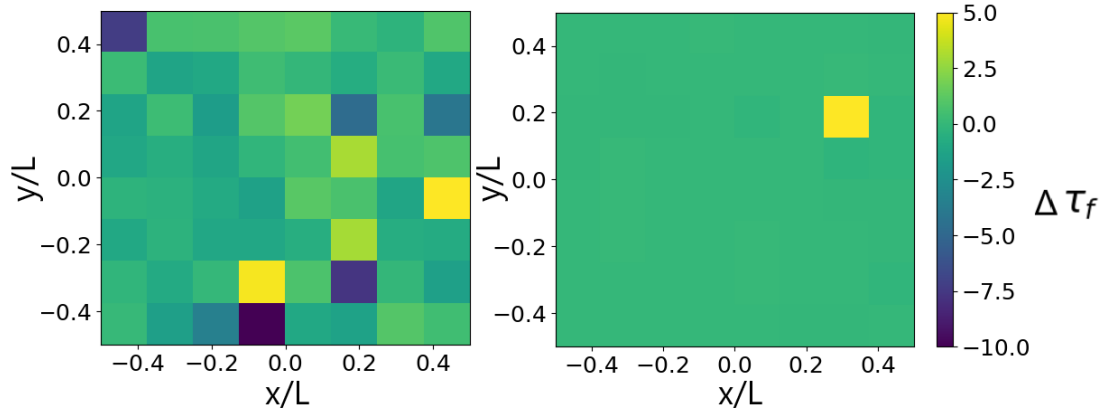
A felmérések után a lokális folyásfeszültségek értékéről hőtérképet készítettünk. Egy ilyen térképet láthatunk az egyik relaxált konfigurációról a 12. ábrán. Érdekes



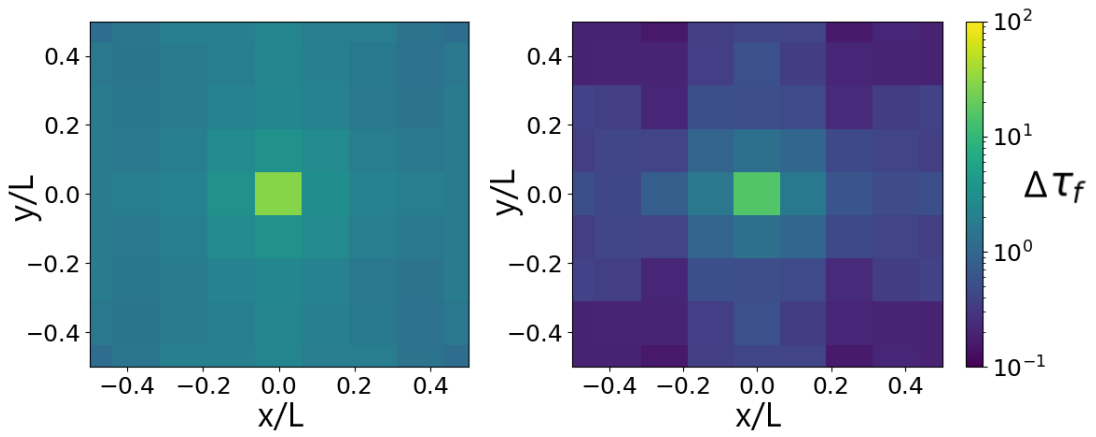
12. ábra. Egy relaxált konfiguráció lokális folyásfeszültségeiről készített hőterkép $B = 1$ (balra), $B = 2$ (középen), és $B = 3$ (jobbra) felbontásokban

megvizsgálni a lavina okozta változást is. Ehhez a lavina utáni folyásfeszültségekből ki kell vonjuk az azelőtti értékeket. Egy ponthibamentes és egy ponthibákkal bővített rendszer esetében láthatjuk a változás hőterképét a 13. ábrán. Ezen jól látszik, hogy míg ponthibák nélkül több helyen is nagy mértékben megváltozik a lokális folyásfeszültség, addig ponthibák jelenlétében csak egy ponton tapasztalunk ekkora változást, máshol szinte változatlan ez az érték.

Hasonlót figyelhetünk meg a 14. ábrán, ahol a $Q = 0$ -s és a $Q = 10$ -es rendszerekre láthatjuk a lokális folyásfeszültségek átlagos megváltozását, úgy hogy a periodikus határfeltételeket kihasználva egy régióba töltük a legnagyobb változást mutató dobozt. Ezen azt vesszük észre, hogy ponthibák nélkül közel ugyanakkora mértékben változik meg a folyásfeszültségek értéke, míg ponthibák mellett sokkal kisebb változások a jellemzők. Utóbbi esetben megfigyelhetjük azt is, hogy a



13. ábra. A lokális folyásfeszültségek megváltozása egy $Q = 0$ -s (balra) és egy $Q = 10$ -es (jobbra) rendszerben. ($B = 3$)



14. ábra. A lokális folyásfeszültségek átlagos megváltozása a $Q = 0$ -s (balra) és $Q = 10$ -es (jobbra).

nagyobb változásokat mutató régiók a legnagyobb mértékben változóhoz képest kereszt alakban helyezkednek el, azok a régiók, ahol pedig kisebb változás lép fel azok X alakban fordulnak elő.

2.5. A változások valószínűsége

Érdekes megvizsgálni még a lokális folyásfeszültségek megváltozásának eloszlását is. Ezen adatokat hisztogramokon ábráztuk a 15. ábrán. A grafikonok x -tengelyén a megváltozások abszolútértékének logaritmusát jelöljük, így téve látványosabbá a $Q = 0$ -ás (kék) és a $Q = 10$ -es (narancs) rendszerek közti különbséget.

Az ábrán jól kivehető, hogy a ponthibákkal bővített rendszerek esetén gyakoribbak a kisebb változások, mint a tisztán diszlokációkból állók esetén.

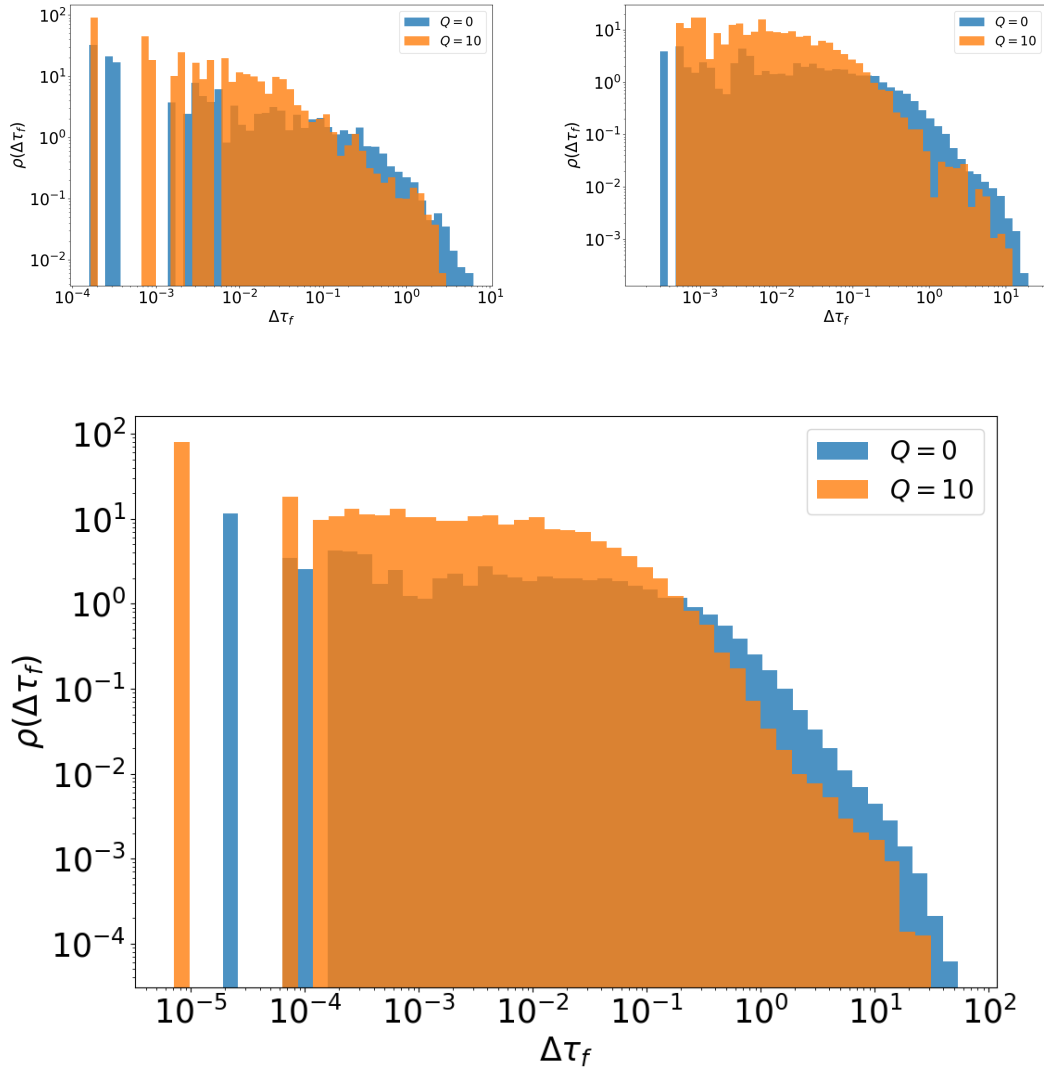
2.6. Összegezve

Ebben a fejezetben a lokális folyásfeszültségeket mértük fel különböző ponthiba-diszlokáció arányú rendszerekben. Megvizsgáltuk ezen értékek eloszlását, illetve megváltozásukat az anyagban előforduló első lavina hatására.

Azt találtuk, hogy a lokális folyásfeszültségek értékei Weibull-eloszlást követnek. Láttuk, hogy egy megfelelő α paraméter bevezetésével az eloszlásgörbék egybeolthatók. Az így kapott görbére Weibull-eloszlást illesztve pedig egy új dimenzió nevű mennyiséget vezethettünk be, ami a lavina során közel állandó maradt.

A mintában előforduló első diszlokációlavina előtt-, és után érvényes lokális folyásfeszültségek közti Pearson korrelációt is megvizsgáltuk. Ezen azt láttuk, hogy a ponthibákkal bővített rendszerek esetén ez az érték minden esetben nagyobb. A rendszereinkben előforduló lokális folyásfeszültség-változásokat hőterképeken ábráztuk, amiken azt láttuk, hogy a $Q = 10$ -es rendszerekben csak egy kicsiny területen, lokálisan változnak meg ezek az értékek, míg a tisztán diszlokációkból állókban az egész mintában nagy változások jelennek meg. Hasonlót tapasztaltunk, mikor hisztogramokon vizsgáltuk a folyásfeszültségek változását.

Ezen eredményeink alapján kijelenthetjük, hogy a ponthibák jelenlétével a diszlokációrendszerekben lokális lavinaszerű események fordulnak elő, melyek kevésbé rendezik át a diszlokációkat, így a lokális folyásfeszültségek is csak lokálisan változnak meg ezekben a rendszerekben. Ennek oka a ponthibák és a diszlokációk között fellépő erős, de rövid hatótávolságú kölcsönhatás.



15. ábra. A lokális folyásfeszültségek megváltozásának valószínűsűrűsége különböző felbontások mellett. Balra fent: $B = 1$, jobbra fent: $B = 2$, lent: $B = 3$. Kékkel a $Q = 0$ -ás, narancssal a $Q = 10$ -es rendszerek adatit ábrázoltuk.

3. Külső feszültség hatása

3.1. Előterhelés

Hasonló vizsgálatokat végeztünk előterhelt rendszerekkel is. Ehhez $N = 256$ diszlokációt tartalmazó mintákkal dolgoztunk. A ponthibák és a diszlokációk aránya $Q = 10$ volt. Első lépésként most is relaxáltattuk rendszereinket. Ezután megvizsgáltuk, hogy mi történik, ha a külső feszültséget sokáig növeljük.

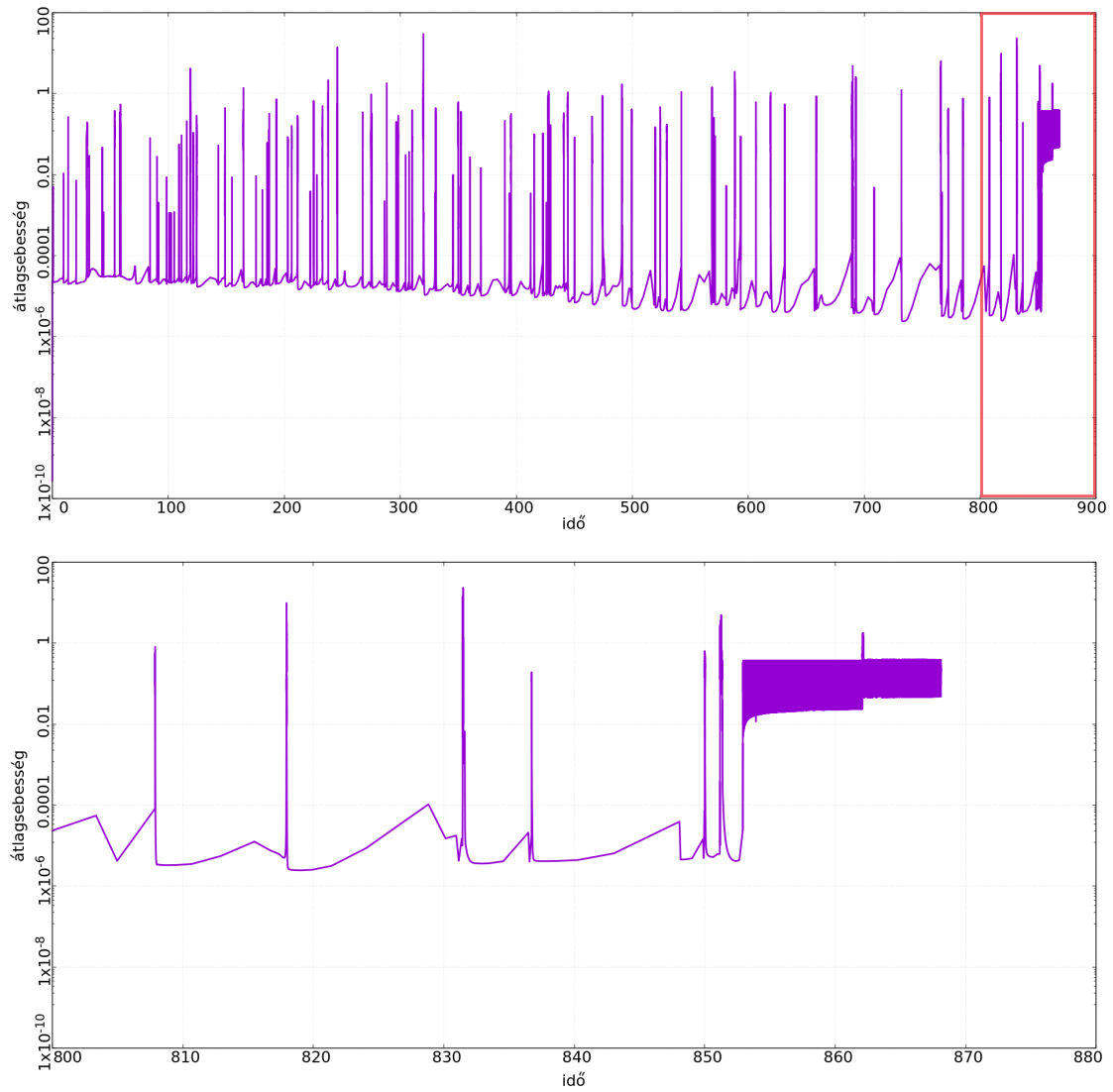
Azt tapasztaltuk, hogy egy bizonyos feszültségérték fölött a minta megfolyik, azaz a periodikus határfeltételeknek köszönhetően a diszlokációk körbe-körbe végigfutnak a rendszeren, mintha egy állandó diszlokációlavina lenne abban. Ezt jól szemlélteti a 16. ábra. Ezen egy $Q = 10$ -es rendszer diszlokációinak átlagsebesség-idő grafikonját láthatjuk, miközben az idővel lineárisan növekvő külső feszültséggel terheljük. Látható, hogy a folyamat végére (nagy feszültség mellett) a diszlokációk sebessége egy állandó nagy érték körül ingadozik. Ekkor értük el ezt a bizonyos kritikus feszültséget.

Ennek a kritikus feszültségnek az ismeretében a relaxált rendszerekre állandó külső feszültséggel hatottunk, mely a kritikusfeszültségnél valamivel kisebb. Ekkor is megvártuk, hogy a diszlokációk egyensúlyba kerüljenek, ne mozogjanak. Ezután felmértük a lokális folyásfeszültségeket. $\tau_{k,0} = 30$ kezdeti feszültséggel addig növeltük lineárisan a külső terhelést $B = 1, 2, 3$ felbontások mellett, amíg be nem következett az első lavina. Ezután hasonlóan jártunk el $B = 0$ esetben is, majd az első $B = 0$ -s lavina után ismét felmértük a folyásfeszültségek értékét.

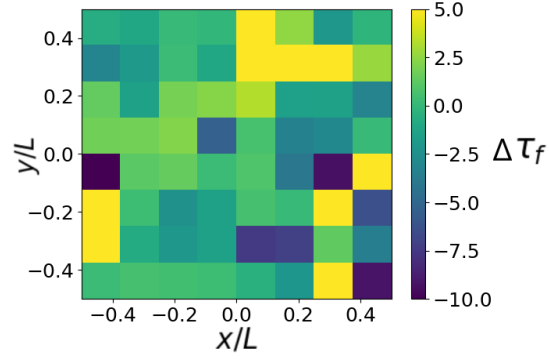
3.2. A folyásfeszültségek megváltozása

Miután felmértük az előterhelt minták lokális folyásfeszültségét is az első lavina előtt és után is elvégeztük azok kivonását, hogy lássuk, hogyan rendezte át a lavina a lokális folyásfeszültségeket. Az eredményt ismét hőtérképen ábrázolhatjuk. Az egyik előterhelt rendszer folyásfeszültségeinek megváltozását láthatjuk a 17. ábrán, illetve az összes rendszerre átlagolt változások értékét a 18. ábrán. A 17. ábrán jól látszik, hogy a relaxált esettel ellentétben előfeszített esetben több helyen is nagy mértékben változik meg a lokális folyásfeszültség, tehát valószínűleg kiterjedtebb lavina indult meg a mintában. Ezt támasztja alá 18. ábra is, ahol az átlagolt képen is ezt tapasztaljuk: a nagyobb mértékű változások váltak gyakoribbá az előfeszítés hatására.

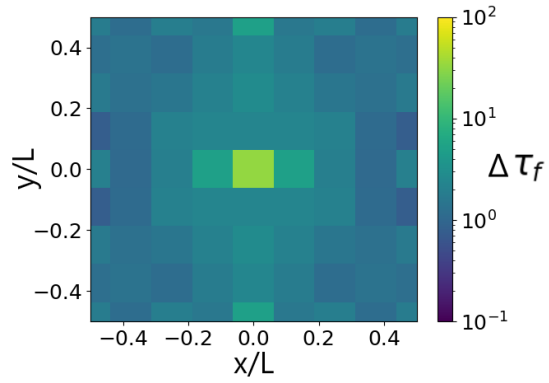
Ugyanezt ábrázolhatjuk hisztogramokon is a relaxált rendszerek esetéhez hasonlóan. Ezt a 19. ábrán láthatjuk. A grafikonon kézzel feltüntetettük az előfeszítés nélküli ponthibáktól mentes rendszerekre vonatkozó valószínűségi sűrűséget is. Ez csupán referenciapont, hogy jobban érzékeltesük a változást. Ugyancsak azt látjuk, hogy az előterhelt $Q = 10$ -es rendszerben gyakoribbá váltak nagyobb



16. ábra. Egy $Q = 10$ -es rendszer diszlokációinak átlagsebesség-idő grafikonja lineárisan növekvő külső nyírófeszültség mellett. Az alsó grafikonon a felsőn pirossal bekeretezett részlet nagyítása látható.



17. ábra. A lokális folyásfeszültségek változásának ábrázolása egy előterhelt $Q = 10$ -es rendszer esetén ($B = 3$). Látható, hogy a lavina hatására több helyen is nagy változások következtek be.



18. ábra. A lokális folyásfeszültségek átlagos megváltozása az előterhelt rendszerek esetében a legnagyobb mértékben megváltozott régió körül ($Q = 10$, $B = 3$)

mértékű változások és egyre jobban hasonlít a kép az előterhelés nélküli kizárólag diszlokációkból álló rendszerek viselkedésére, ahol nagy méretű (akár az egész rendszert magábafooglaló) lavinák az uralkodók.

3.3. A lavinák mérete

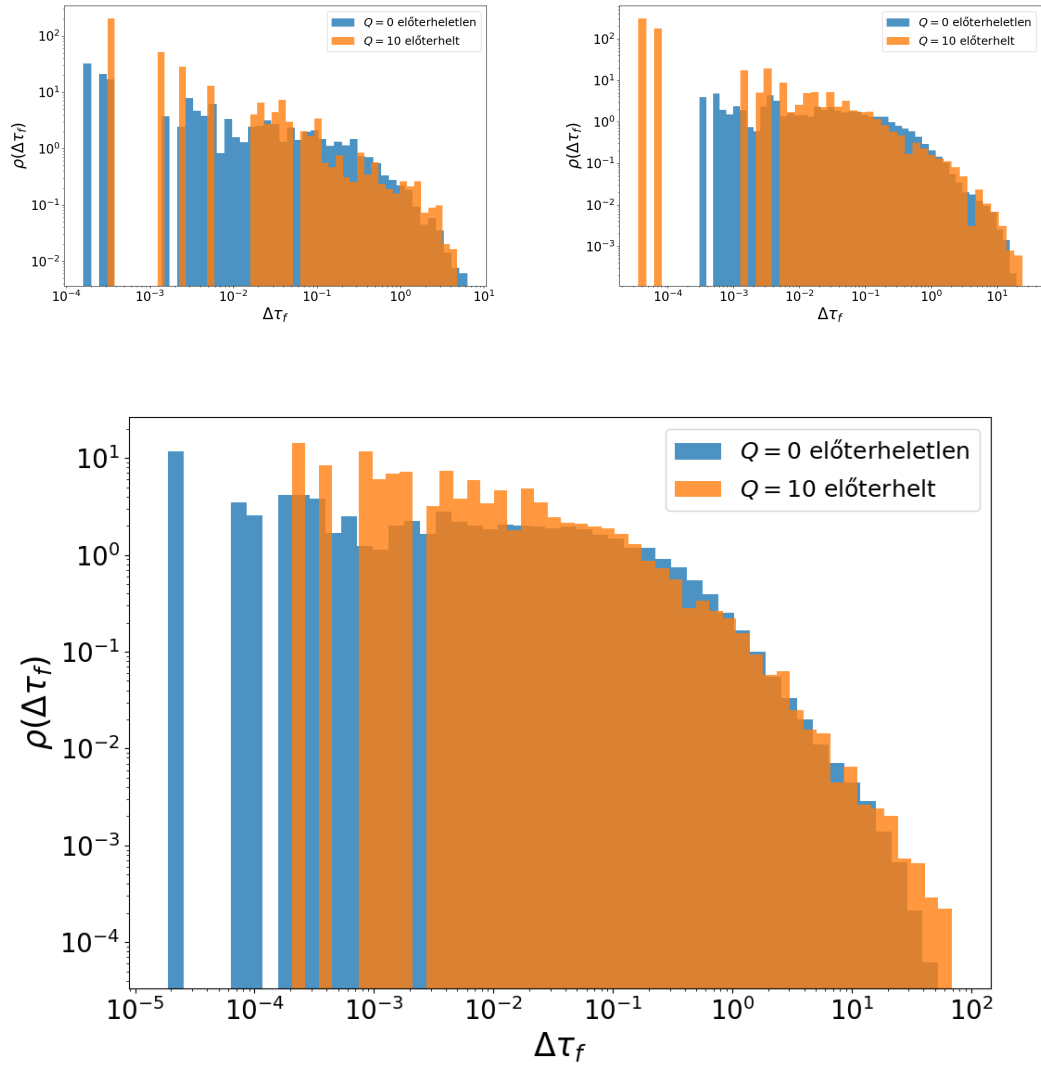
Eddig a lavinák méretére csak a lokális folyásfeszültségek megváltozása alapján következtettünk. Most vizsgáljuk meg a szimulációs lépések közt a köztes állapotokról készített konfigurációkat! Egy korábbi cikkben olvashattuk, hogy a lavinák méretét fel lehet mérni megfelelő ellipszisek illesztésével [12]. Ezt a módszert alkalmaztuk az előterhelt rendszerek esetében is. A 20. ábrán láthatjuk két különböző előterhelt rendszer konfigurációját a terhelés növelése közbeni első lavina előtt. A diszlokációkat a sebességük alapján színeztük a színskála szerint. Jól látható, hogy néhány esetben, mint például a bal oldali ábrán vázoltan csak lokális lavinát észlelünk, ahol csak pár diszlokáció tesz szert nagy sebességre, míg más esetekben a teljes mintában szétszórtan mozdul meg néhány diszlokáció. Utóbbi esetben az ellipszis illesztése se sikerül jól. Ez is azt mutatja, hogy azokban a rendszerekben, melyeket előfeszítettünk egy állandó nagy külső nyírófeszültséggel, azokban a ponthibák ellenére előfordulnak már nagyobb diszlokációlavinák is.

3.4. Helykorreláció

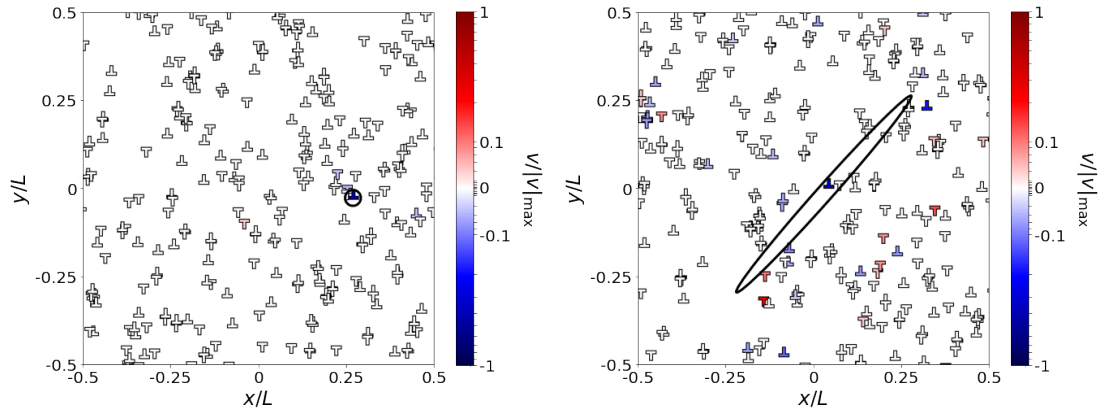
Kutatásunkban kitértünk a diszlokációk egymáshoz képest mért helyzetének vizsgálatára is. Ehhez a relaxált vagy már előterhelt rendszerek összes diszlokációjának koordinátáiból kivontuk mindegyik másikat is. A kapott adathalmazból pedig egy két dimenziós hisztogramokat készítettünk. Ezeket a 21. és a 22. ábrákon láthatjuk. Észrevehető, hogy az azonos Burgers-vektorú diszlokációk gyakran az y -tengellyel párhuzamos falat alkotnak. Ez az előterhelés nélküli ponthibamentes rendszerekben jóval hosszabb, mint a ponthibákkal bővítettekben. Az előterhelt diszlokációrendszerekben azt várjuk, hogy ennek mérete az előzők közé essen. Ez a kevesebb szimulált rendszer és diszlokációszámból adódó zaj miatt kevésbé látszódik jól. Az ellenkező irányú Burgers-vektorú diszlokációkat vizsgálva azt találjuk, hogy a vonalhibák X alakban helyezkednek el leggyakrabban. Ponthibák nélkül ebben az esetben is gyakrabbak a diszlokációk közti nagy távolságok, mint a ponthibákkal terhelt rendszerekben. Az előterhelt rendszerekben ismét a két eset közti állapotot láthatunk.

3.5. Összegezve

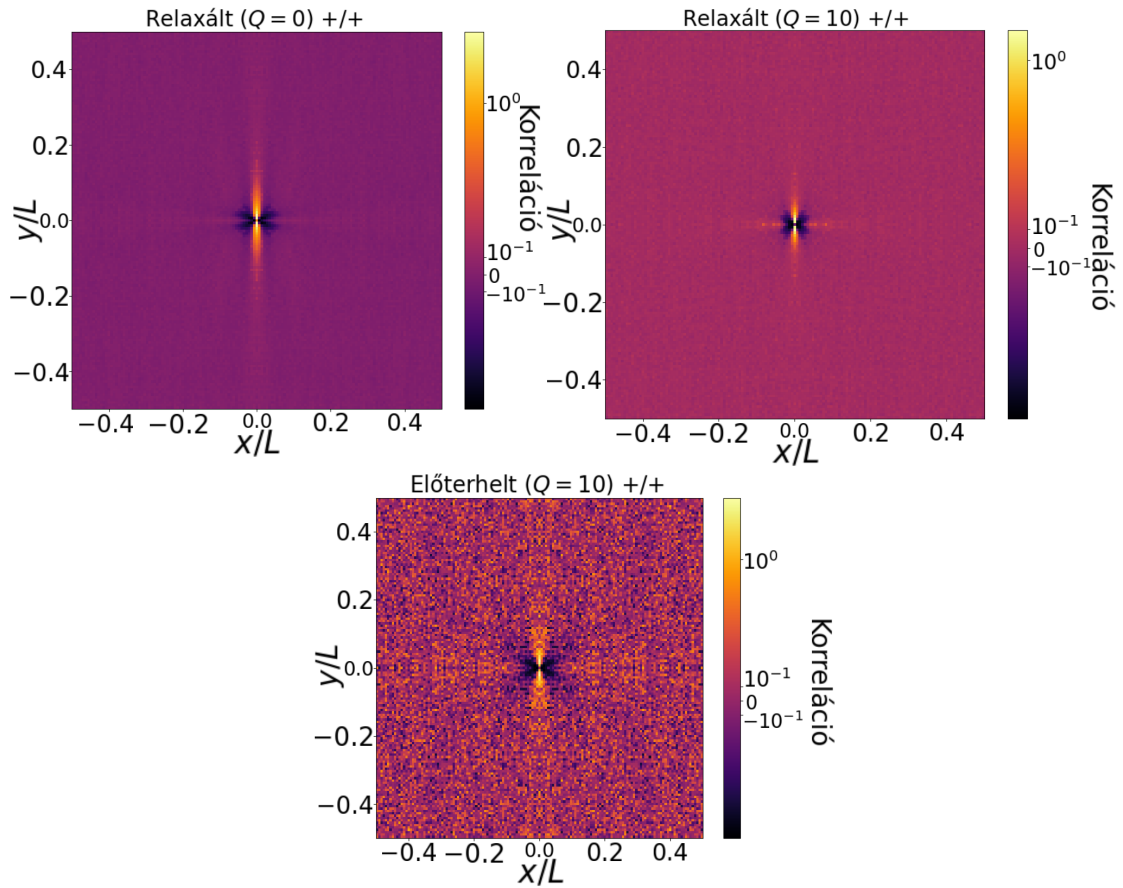
Kutatásunk során megvizsgáltuk a nagy külső nyírófeszültség mellett előterhelt diszlokációrendszerek diszlokációlavina hatására létrejövő változásait is. Hőtérképe-



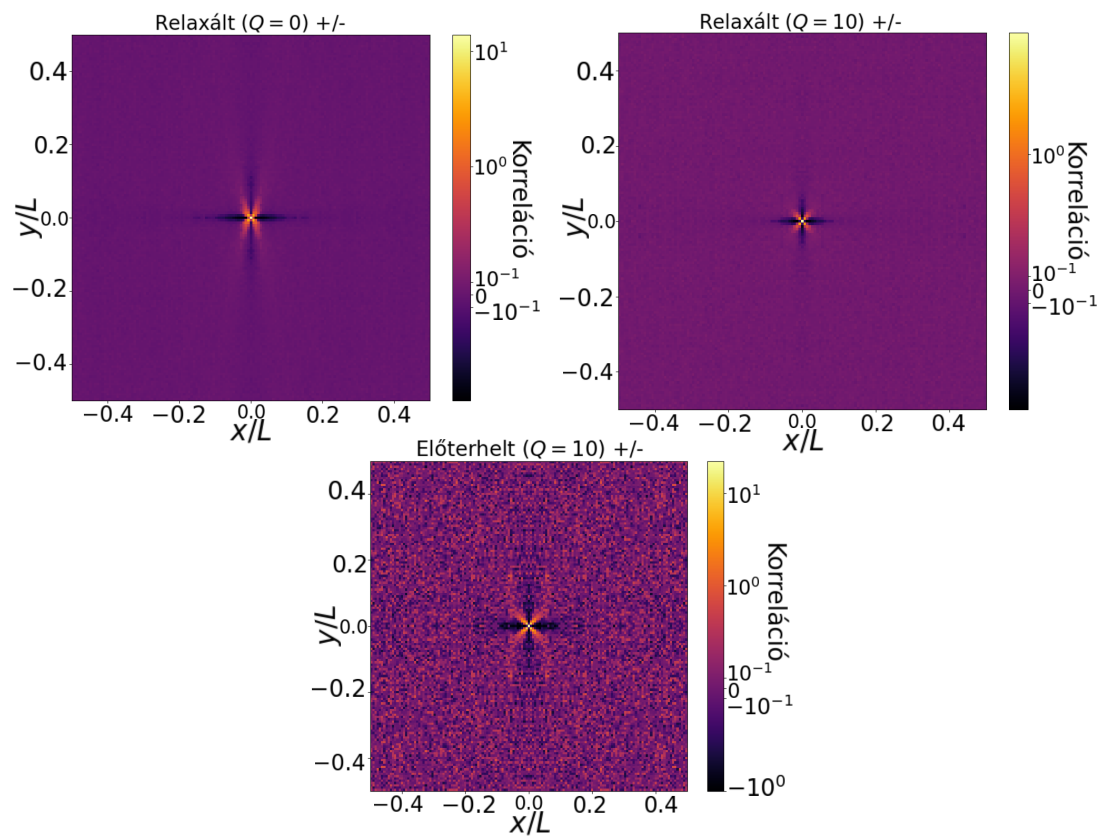
19. ábra. A lokális folyásfeszültségek megváltozásának valószínűsűgssűrűsége az előterhelt ($Q = 10$ -es) rendszerekre. A kék hisztogram az előfeszítés nélküli $Q = 0$ -ás rendszerekre vonatkozik (15. ábra). Balra fent: $B = 1$, jobbra fent: $B = 2$, lent: $B = 3$.



20. ábra. Két előterhelt rendszer diszlokációinak sebessége az első lavina során ($B = 0$ -ás felbontás mellett terheltük)



21. ábra. Helykorrelációs térképek a +1-es Burgers-vektorú diszlokációk közt



22. ábra. Helykorrelációs térképek a +1-es, és a -1-es Burgers-vektorú diszlokációk közt

ken és a változások valószínűségi sűrűségi grafikonján is azt tapasztaltuk, hogy az előfeszítés hatására megjelennek kiterjedtebb lavinák is a ponthibák jelenléte ellenére is. Ezt igazolja a 20. ábra is, ahol jól látszik, hogy néhány esetben nem csak lokális események következnek be.

A helykorrelációs térképeken is láttuk, hogy az előterhelés hatására ponthibák mellett is kialakulhatnak nagyobb diszlokációfalak vagy diszlokációdipólok. Ezek is a nagyobb események bekövetkeztének lehetőségét jelzik.

Hivatkozások

- [1] E Orowan. Zur kristallplastizität. iii. *Zeitschrift für Physik*, 89(9):634–659, 1934.
- [2] Michael Polanyi. Über eine art gitterstörung, die einen kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik*, 89(9):660–664, 1934.
- [3] Geoffrey Ingram Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. part i.—theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855):362–387, 1934.
- [4] Kristián Máthis, Michal Knappek, Filip Šiška, Petr Hrcuba, Dávid Ugi, Péter Dusán Ispánovity, István Groma, and Kwang Seon Shin. On the dynamics of twinning in magnesium micropillars. *Materials & Design*, 203:109563, 2021.
- [5] Szilvia Kalácska, Zoltán Dankházi, Gyula Zilahi, Xavier Maeder, Johann Michler, Péter Dusán Ispánovity, and István Groma. Investigation of geometrically necessary dislocation structures in compressed cu micropillars by 3-dimensional hr-ebd. *Materials Science and Engineering: A*, 770:138499, 2020.
- [6] Péter Dusán Ispánovity, Dávid Ugi, Gábor Péterffy, Michal Knappek, Szilvia Kalácska, Dániel Tüzes, Zoltán Dankházi, Kristián Máthis, František Chmelík, and István Groma. Dislocation avalanches are like earthquakes on the micron scale. *Nature communications*, 13(1):1–10, 2022.
- [7] Arttu Lehtinen, Giulio Costantini, Mikko J Alava, Stefano Zapperi, and Lasse Laurson. Glassy features of crystal plasticity. *Physical Review B*, 94(6):064101, 2016.
- [8] 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. *Physical review letters*, 112(23):235501, 2014.
- [9] Markus Ovaska, Lasse Laurson, and Mikko J Alava. Quenched pinning and collective dislocation dynamics. *Scientific reports*, 5(1):1–8, 2015.
- [10] Sylvain Patinet, Damien Vandembroucq, and Michael L Falk. Connecting local yield stresses with plastic activity in amorphous solids. *Physical review letters*, 117(4):045501, 2016.

- [11] Armand Barbot, Matthias Lerbinger, Anier Hernandez-Garcia, Reinaldo García-García, Michael L Falk, Damien Vandembroucq, and Sylvain Patinet. Local yield stress statistics in model amorphous solids. *Physical Review E*, 97(3):033001, 2018.
- [12] Dénes Berta, Gábor Péterffy, and Péter Dusán Ispánovity. Dynamic length scale and weakest link behavior in crystal plasticity, 2022.
- [13] Gábor Péterffy and Péter Dusán Ispánovity. An efficient implicit time integration method for discrete dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28(3):035013, 2020.