# Diszlokációk kollektív viselkedése

## Doktori értekezés tézisei

Kocsis Benedek

Témavezető: Groma István Ph.D.
egyetemi docens

ELTE TTK Fizika Doktori Iskola
Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán

Anyagtudomány és szilárdtestfizika program
Programvezető: Dr. Lendvai János

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Anyafizikai Tanszék
Budapest 2007

# Bevezetés

Több mint fél évszázada ismert, hogy a kristályos anyagok plasztikus deformációja diszlokációk mozgásával valósul meg. A transzmissziós mikroszkópia fejlődése lehetővé tette a roncsolás mentes megfigyelést, ezáltal lehetővé vált a plasztikus deformációs folyamatok elemi feltérképezésére. A felismert deformációs mechanizmusok alapján nagyszámú plaszticitási elmélet jött létre, melyek a folyásfeszültség, a plasztikus deformáció és a deformációsebesség között írnak fel összefüggéseket. A diszlokáció mechanizmusok sokfélesége miatt ezek azonban csak fenomenologikus elméletek, melyek a diszlokációknak általában csak azt a tulajdonságát használják ki, hogy a diszlokáció mozgás jól meghatározott (kristályszerkezettől függő) kristálytani irányokba valósul meg. Az utóbbi évtizedben figyelték meg, hogy 10 mikronnál kisebb méreteknél a plasztikus deformáció fizikai tulajdonságai erősen méretfüggővé válnak. A mérethatások leírására használt elméletek közös tulajdonsága, hogy fenomenologikus alapon gradienstagokat vezetnek be. Azonban ezek konkrét fizikai jelentését a modellek nem tudják megadni. Ezen tagok értelmezéséhez a diszlokációk kollektív viselkedését kell tanulmányozni.

Amint azt a kísérletekben is megfigyelték plasztikus deformáció esetén, a diszlokációk elrendeződése inhomogénné válik. A kis és nagy diszlokációsűrűségű tartományok különböző mintázatokba rendeződnek, melyek jellege függ a deformáció módjától, a kristály orientációjától ill. a hőmérsékletétől.

A számítástechnika dinamikus fejlődése lehetővé tette, relatív nagyszámú diszlokáció mozgásegyenletének numerikus kiintegrálását, amit diszkrét diszlokáció dinamikának nevezzük. Ezen módszer segítségével a plasztikus folyás kezdeti szakaszának alaptulajdonságai jól reprodukálhatóak. Nagyobb plasztikus deformációk leírásához azonban több nagyságrenddel nagyobb számú diszlokáció figyelembevételére lenne szükség, melyet a számítástechnika előre látható fejlődése sem fog tudni belátható időn belül megoldani. Ez indokolttá teszi hatékonyabb algoritmusok bevezetését, illetve diszlokáció kontinuum elméletének kidolgozását.

# A munka célkitűzései

PhD munka célkitűzése, a plasztikus deformáció fenomenologikus és empirikusan megfigyelt törvényszerűségeit számítógépes szimulációkkal reprodukálni, azokat mélyebben megérteni és amennyiben lehetséges újabb elméleteteket kidolgozni. Tekintettel a nagy számítási igényre, egyszerűsített rendszerrel dolgozunk, ami kétdimenziós egycsúszósíkú pár száz nagyságrendű diszlokációt tartalmazó rendszert jelent. Feladatunk meghatározni egy ilyen rendszer dinamikai paramétereit, a különböző kiinduló állapotok függvényében, majd a kapott eredményeket értelmezni.

Miután a szimulációs eszközeink és környezet adott volt, lehetővé vált a Groma István által kidolgozott, új variációs elv (kontinuum elmélet) ellenőrzése, nagy számú szimulációk elvégzése révén. A Debye-árnyékolás által jósolt korrelációs függvények helyességét statisztikailag próbáltuk igazolni, melyeket a későbbiekben a hőmérsékletfüggéssel egészítettünk ki.

# Alkalmazott módszerek

Az alábbiakban bemutatom a diszkrét diszlokáció dinamika (DDD) alapjait, és néhány szimulációs módszert. Az itt használt modell egyszerűsített modell ami egyenes párhuzamos éldiszlokációkat jelent. Adott egy $xy$ négyzet alakú szimulációs terület, melyen teljesen véletlenszerűen elhelyezünk $N$ darab egyenes egymással párhuzamos éldiszlokációt, melyek merőlegesek a négyzet síkjára, $\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ helyvektorokkal és $s_1, \ldots, s_N$ előjelekkel. (Azonos csúszósíkkal kétféle diszlokáció rendelkezik, melyek esetén a Burgers-vektor és az irányvektor vektoriális szorzata különböző előjelű. Ilyen értelemben beszélhetünk pozitív ill. negatív előjelű diszlokációkról.)

Egy origóban elhelyezkedő diszlokáció nyírófeszültség tere ekkor az $xy$ síkban az alábbi $\tau^s_{\text{dis}}$ függvénnyel adható meg:

$$\tau^s_{\text{dis}}(x, y) := sbG\frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \tag{1}$$

ahol $G := \frac{\nu}{1-\mu}$, és $s \in \{-1, 1\}$. $\nu$ a nyírási modulusz és $\mu$ a Poisson-szám, míg $s$ a diszlokáció előjelét fejezi ki. A továbbiakban $Gb$-t 1-nek választjuk, ami a hosszúságok átskálázásával mindig megtehető. Feltételezzük, hogy $\frac{N}{2}$ pozitív és ugyanennyi negatív burgers vektorú diszlokációnk van, valamint kikötjük, hogy a rendszer nem lehet forrásos, és az annihiláció sem megengedett, így tehát a diszlokációk száma megmarad. Ez ugyan egy igen leegyszerűsített modellje a valóságnak, de számos fontos következtetés levonására alkalmas. Azért, hogy a diszlokációk ne tudják elhagyni a szimulációs teret periódikus határfeltételeket használunk, azaz a rendszert „végtelenítjük". A relaxációs folyamat hajtóereje nem más, mint a diszlokációk egymás közti hosszú távú kölcsönhatása, amely a diszlokáció mozgásához vezet. A diszlokáció mozgása fononokat gerjeszt a kristályban, ezért ez a dinamika erősen disszipatív folyamat, ezt a csillapítást a sebességgel arányos erőtaggal kezeljük. A túlcsillapított esetben az inerciatagot elhagyjuk, így a mozgásegyenletre

$$\boldsymbol{v}_i = B\left(\sum_{j=1,\ j\neq i}^{N} \boldsymbol{F}_{i,j} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{ext},i}\right) \tag{2}$$

adódik, ahol $B$ a diszlokációk mobilitása, $\boldsymbol{F}_{i,j}$ az $j$-ik diszlokáció által $i$-ik diszlokációra kifejtett erőnek annak csúszósíkjába eső komponense, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{ext},i}$ a külső feszültségből származó erő. Az általunk használt közelítések mellett $\boldsymbol{F}_{i,j} = s_i \tau_{\mathrm{dis}}^{s_j}(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{e}_x$ és $\boldsymbol{F}_{\mathrm{ext},i} = s_i \tau_{\mathrm{ext}} \boldsymbol{e}_x$, ahol $\tau_{\mathrm{ext}}$ a külső nyírófeszültség és $\boldsymbol{e}_x$ az $x$ tengellyel párhuzamos egységvektor. Az általam elvégzett szimulációkban külső feszültséget nem alkalmaztunk, a rendszer relaxációját vizsgáltuk. Megjegyezzük, hogy a bemutatott modell, bár sok egyszerűsítést tartalmaz, igen elterjedt a szakirodalomban.

Ismert a mozgásegyenlet, felhasználva a periódikus határfeltételeket, már csak egy numerikus módszer kell a szimuláció időben és térben diszkrét léptetéséhez. Tekintve a probléma nagy számításigényét, olyan numerikus eljárást kerestünk, ami több gépen akár párhuzamosan futtatható, bárki által programozható, viszonylag gyors legyen. Ily módon esett a választásunk az x86-os (legelterjedtebb) architektúrájú gépekre, Linux operációs rendszerre (gyors, ingyenes) és a C programozási nyelvre. Az elsőfokú differenciál egyenlet kiintegrálására a GNU Scientific Library függvényeit használtuk. A kód a következő képen épül fel:

1. Generálunk egy véletlenszerű diszlokáció-konfigurációt 512 pozitív és 512 negatív diszlokációval
2. Betöltjük a poziciókat, szétosztjuk a gépeknek (node-ok) a munkát és elkezdjük léptetni a rendszert a 4.5-öd rendű, automatikus időlépés szabályzó Runge-Kutta-Fehlberg módszerrel.
3. Pozíciókat mentünk szabályos időközönként, és ellenőrizzük a különböző dinamikai mennyiségeket.
4. Ha elértük a numerikus zajok határát, a programot leállítjuk és elemezzük a kimentett pozíciókat.

Továbbiakban bemutatom a szimuláció „motorját" Runge-Kutta-Fehlberg módszer lényegét. Ez egy olyan differenciálegyenlet megoldó algoritmus, ami a hagyományos 4-ed rendű Runge-Kutta módszert használja, de a hibaszámítás 5-d rendű. Ez az algoritmus egy úgynevezett „time adaptive stepsize" nevű eljárással lépteti a rendszert, ez annyit jelent, hogy egy diszlokáció mozgását leíró diszkretizált differenciál egyenlet két szomszédos időpillanata között $n\Delta t \Leftrightarrow (n+1)\Delta t$ elég apró lépéssel lépteti a rendszert ($h$), hogy „ne maradjunk le semmiről", azaz az általunk megadott hibahatár alatt maradjon ($\varepsilon_{max}$) a szimuláció minden pillanatában, amit az algoritmus megbecsül, és ha nagyobb ($\varepsilon_{(h)} > \varepsilon_{max}$), akkor finomítja a lépésközt ($h$-t).

A dolgozat második részében, Groma [S3] által kidolgozott Debye árnyékolási modell helyességét igazolandó, a numerikus módszer kisebb átalakítását eszközöltem. Csökkentettem a diszlokációk számát 128-ra, megengedtem a „kvázi" annihilációt, azaz ha két különböző előjelű diszlokáció egy $r_{min}$ távolságon belül kerül nem mozognak tovább, de minden fontos mennyiség kiszámításnál figyelembe veszem őket. Ezeket alkalmazva a szimulációk kellőképpen felgyorsultak ahhoz, hogy statisztikailag értelmezzem az eredményeiket.

Az utolsó részben tanulmányozom a szimulációs rendszer hőmérséklet függését. A hőmérséklet bevezetése, egy tetszőlegesen megválasztott félértékszélességű gauss véletlenszámgenerátor beiktatásával történik ($\sigma^2 \propto T$). Diszkrét időpillanatokban ismert a diszlokációk pozíciója a szimulációs térben, és ezeket elmozdítom a csúszósíkban egy gauss eloszlású $\sigma$ félértékszélességü véletlen számmal. Ezáltal hőmozgás szerű viselkedést érek el.

# Új tudományos eredmények

1. 1024 párhuzamos éldiszlokációból álló rendszer következő dinamikai paramétereit határoztuk meg: belső rugalmas energia, belső feszültség eloszlás másodrendű momentuma, korreláció hossz, és a sebességek abszolút értékének időbeni változása. Megmutattam, hogy ezen paraméterek aszimptotikusan konvergálnak és időbeli lecsengésük a $f(t) = A+Bt^{-D}$ hatványfüggvénnyel jól fittelhető. A hatvány függvény exponense az energiára $D = 0.6$-nal, a korrelációs hosszra $D = 0.78$-nak míg a deformáció sebességre$D = 0.90$-nak adódott. Az eredmények azt mutatják, hogy itt egy sokkal lassúbb dinamikával van dolgunk, mint az egyszerű exponenciális lecsengés. A lassú dinamika következménye, hogy a diszkrét dinamika módszerével nagyon sok ideig tart egy véletlenszerű kiinduló állapot közel relaxációs állapotba való juttatása. Későbbiekben bevezettük a kvázi annihilációt, ezzel számottevően gyorsult a rendszer. Kijelenthetjük azonban, hogy ezen módszer alkalmazása a jövőben is nagy numerikus kihívás lesz. A diszlokációk kollektív tulajdonságainak leírására jóideig még más módszerek lesznek hatékonyabbak, mint a diszkrét diszlokáció dinamika.

2. Kiszámoltam a belsőfeszültség eloszlás időfüggését. Megmutattam, hogy az elméleti várakozásnak megfelelően az eloszlás az aszimptotikus tartományban független a diszlokációk tényleges elrendeződésétől, csak a diszlokációsűrűség határozza meg. Numerikusan kimutattam, hogy az eloszlásfüggvény másodrendű momentumának változása (a momentum

maga logaritmikusan divergál a felső feszültséghatárral) arányos a korrelációs hossz logaritmusával.

3. Groma István bevezette az effektív szabad energia funkcionálját. Definiálta a relaxált állapot egyensúlyát leíró variációs egyenletrendszert. Felhasználva a Debye árnyékolás analógiáját, a megfelelő Green függvényt felírva, kiszámolta az indukált geometriailag szükséges diszlokációk (GND) sűrűség terét. Majd, ezt felhasználva, definiálta egyetlen virtuális diszlokáció GND terét. Ezt összehasonlítottam nagyszámú 128 diszlokációt tartalmazó rendszer $DDD$ szimulációkból származó relaxált állapotok korrelációs függvényével. Megmutattam, hogy egy az $x$ tengelyhez közeli tartománytól eltekintve jó az egyezés a elméleti és a numerikus eredmények között. Külön érdemes megemlíteni, hogy az eredmények jól mutatják, hogy az $x = 0$ metszetre a indukált GND lecsengés hatványfüggvény szerű 1.5-os kitevővel, míg más irányokban exponenciális.

4. Kibővítettük a rendszert egy újabb paraméterrel a hőmérséklettel. Ezt egy Gauss eloszlású véletlen erő hozzáadásával értem el. A hőmérsékletet a véletlenszámgenerátor félérték szélességével szabályoztam. Nagyszámú szimuláció elvégzésével meghatároztam az árnyékolási hossz hőmérséklet függését. Megállapítottam, hogy relatív magasabb „hőmérsékletnél" (félértékszélesség) az árnyékolási hossz négyzete lineárisan változik, míg alacsony „hőmérsékletre" konstanshoz tart. Ez azt jelenti, hogy ellentétben a plazmában ismert árnyékolással itt nulla „hőmérsékleten" is van árnyékolás. A véges „hőmérséklet" hatásának tanulmányozása azért is fontos mert a mozgásegyenletek numerikus integrálásából adódó hiba tanulmányozására is lehetőséget ad. Azt kaptam, hogy a számolási pontosság csökkentése kisebb látszólagos árnyékolási hosszhoz vezet.

# Köszönetnyilvánítás

Az elmúlt 3-4 év során sok emberrel dolgoztam együtt, doktori iskola és a disszertáció megírása kapcsán. Itt szeretném megragadni az alkalmat, hogy megköszönjem a segítségüket. Sajnos, mindenkit nem tudok név szerint megemlíteni, hiszen ezen személyek száma nem csekély, és ezért előre is elnézést kérek, de feltétlenül megemlíteném Dr. Groma István témavezetőmet, aki mindig nyitott ajtóval várt, és nem csak a fizikai problémákban segített. Olyan volt nekem, mint a második apám, köszönöm. Köszönöm az ELTE Anyagfizika Tanszéknek és annak vezetőjének, Lendvai Jánosnak, hogy biztosította a kutatáshoz szükséges körülményeket. Itt ragadom meg az alkalmat, hogy köszöntetett mondjak az Európai Uniónak, hiszen az V. számú keretprogram és a DEFINO biztosította számomra az anyagi feltételeket.

A következőkben, pedig személy szerint megemlítem a legközelebbi társaimat, akikhez bátran fordulhattam bármilyen segítségért: Bakó Botond, Csikor Ferenc, Deák Róbert, Ispanovity Péter, Néda Zoltán, köszönöm nektek is kedves barátaim.

Végül, de nem utolsó sorban, a családomnak tartozom egy nagy köszönettel, hiszen mindenben mellém álltak, és támogattak.


# A szerző témához kapcsolódó publikációi


[S1] I. Groma, G. Györgyi és B. Kocsis, *Dynamics of coarse grained dislocation densities from an effective free energy*, Phil. Mag **87**, 1185-1199 (2006)

[S2] F.F. Csikor, B. Kocsis, B. Bakó és I. Groma, *Numerical characterization of the relaxation of dislocation systems*, Materials Science and Engineering **400-401** 214-218 (2005)

[S3] I. Groma, G. Györgyi és B. Kocsis, *Debye screening of dislocations*, Phys. Rev. Letters. **96**, 165503 (2006)