

Statisztikus módszerek a diszlokáció dinamikában

Doktori értekezés

Ispánovity Péter Dusán

Témavezető:
Dr. Groma István
egyetemi tanár
az MTA doktora



ELTE TTK Fizika Doktori Iskola
Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán, az MTA rendes tagja

Anyagtudomány és szilárdtestfizika program
Programvezető: Dr. Lendvai János, az MTA doktora

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Anyagfizikai Tanszék

2009.

Tartalomjegyzék

Bevezetés	5
A dolgozatban használt jelölések	8
1. Előzmények	9
1.1. A diszlokáció létra szerkezet és kialakulásának modelljei	9
1.1.1. Állandósult csúszási sávok	9
1.1.2. A PSB szerkezet kialakulásának modelljei	12
1.2. Diszkrét diszlokáció dinamika	13
1.2.1. Két dimenziós modellek	14
1.2.2. Három dimenziós modellek	17
1.2.3. A dolgozatban használt módszer	19
1.3. Sztochasztikus diszlokáció dinamika	20
1.3.1. Hähner modellje	20
1.3.2. Groma modellje	21
1.4. Diszlokáció korrelációk	25
1.5. Diszlokációk kontinuum modellje	31
1.5.1. Fenomenológikus modellek	31
1.5.2. Három dimenziós modellek	32
1.5.3. Groma két dimenziós kontinuum elmélete	33
1.6. Diszlokációk dinamikájának jellegzetességei	44
1.6.1. Diszlokáció lavinák	44
1.6.2. Plasztikus folyás	46
2. Az anharmonicitás hatása a mintázatképződésre [A1]	48
2.1. A különböző eredetű nemlineáris jelenségek összehasonlítása	48

2.2.	Diszlokációk variáción alapuló térelmélete	50
2.3.	Diszlokációk kölcsönhatása anharmonikus közegben	53
2.4.	A diszlokáció sűrűségek evolúciós egyenletei	56
2.5.	Lineáris stabilitás analízis	57
2.6.	Diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációk	58
3.	Nyírófeszültség eloszlása külső feszültség mellett [A2]	61
3.1.	Elméleti megfontolások	61
3.2.	Numerikus eredmények	66
3.2.1.	Monodiszperz dipól eset	66
3.2.2.	Relaxált diszlokáció rendszerek	68
4.	A korrelációs függvények időfejlődése [A3]	73
4.1.	Az evolúciós egyenletek	74
4.2.	Diszlokációk Debye árnyékolása	76
4.3.	A korrelációs függvények és az árnyékolt sűrűségek összehasonlítása	77
4.4.	Numerikus eredmények	78
5.	A kontinuum modell többszörös csúszás esetén	82
5.1.	A szabadenergia két csúszósík esetén	82
5.2.	Dinamikai egyenletek	84
5.3.	Sztatikus eset	85
5.4.	Az izotróp eset megoldása	86
5.5.	Numerikus eredmények	88
6.	Diszlokációk relaxációja és sebességük eloszlása	92
6.1.	Dinamikai mennyiségek viselkedése [A4]	92
6.2.	A diszlokációk helyén mérhető feszültség eloszlása	95
6.2.1.	Elméleti számolások	96
6.2.2.	Numerikus eredmények	97
Összefoglalás		102
Bevezetés		102
A munka célkitűzései		103
Eredmények		104

A. Függelék. Az anharmonikus potenciál meghatározása	106
Irodalomjegyzék	109
A szerző témához kapcsolódó publikációi	115
Köszönetnyilvánítás	116
Magyar nyelvű összefoglaló	117
Angol nyelvű összefoglaló	118

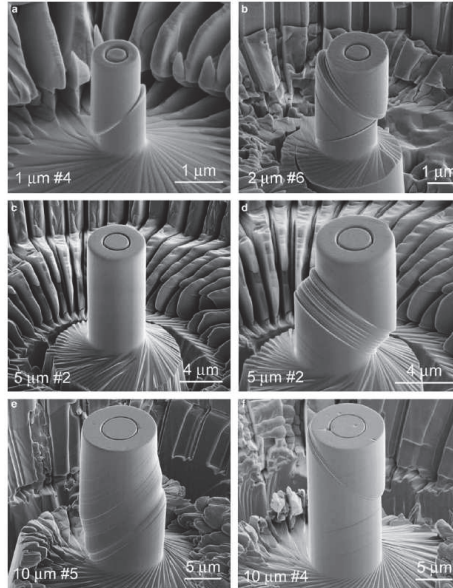
Bevezetés

A kristályos anyagok mechanikai tulajdonságait döntően befolyásolják a bennük elhelyezkedő vonalszerű rács hibák, a diszlokációk. Egy fém maradandó alakváltozása, az esetek túlnyomó többségében, diszlokációk mozgása révén valósul meg. Ezért ezen folyamatok tanulmányozása gyakorlati szempontból is igen nagy jelentőséggel bír. Noha a diszlokációkat Orován, Taylor és Polányi immár 75 éve felfedezte [1, 2, 3], mégis számos velük kapcsolatos kérdés még nyitva áll.

A mérnöki gyakorlatban a plasztikus deformációt fenomenologikus modellekkel írják le, melyek rendszerint a feszültség, a deformáció, a deformációs sebesség és a diszlokáció sűrűség között adnak meg konstitutív összefüggéseket [4, 5, 6, 7]. Ezek a modellek kielégítő eredményt adnak kellően általános feltételek és nagy mintaméret mellett. Kiderült azonban, hogy amint valamely a deformációra vagy az anyagra jellemző méretskála (benyomófej mérete, minta valamely mérete, szemcseméret, kiválás mérete stb.) megközelíti az $1\ \mu\text{m}$ -t, a mért mechanikai tulajdonságok jelentősen eltérnek a klasszikus modellek által jósoltaktól [8, 9]. Ezt a jelenséget a plaszticitás elméletben mérethatásnak nevezik.

A nanotechnológia rohamos fejlődésével éppen a kis méretű minták vizsgálata került az érdeklődés középpontjába. A mérethatások figyelembevételére nemlokális fenomenologikus modelleket dolgoztak ki [8, 10, 11], melyek sok szempontból sikeresnek bizonyultak (pl. képesek leírni a kis méretből fakadó keményedést, ill. a diszlokáció mintázatok néhány típusát). Ezen modellek nagy hátránya, hogy azt a tényt, hogy a plasztikus deformáció egyedi diszlokációk mozgásával valósul meg, nem tartalmazzák. Ehelyett gradiens tagok együttthatóként olyan hosszúság dimenziójú paraméterek jelennek meg, melyek eredete nem tisztázott. Ezért számos olyan diszlokáció mechanizmuson alapuló jelenség van, melyekről ezen modellek nem lehetnek képesek számot adni. Kiderült például, hogy a μm -es átmérőjű egykristály rudak plasztikus deformációja lényegesen különbözik a makroszkopikus mintáknál megszokottól. A deformáció elkülönülő régiókban lavinaszerűen megy végbe (lásd 1. ábra) [12, 13, 14]. Ez többek között meggátolja a mikronos átmérőjű vékony drótok megjósolható alakítását.

A fent említett okok miatt a diszlokációk kollektív tulajdonságainak vizsgálata a plaszticitással foglalkozó kutatások homlokerébe került. Mindezt elősegítette, hogy a számítástechnika immár lehetővé teszi viszonylag sok diszlokációból álló rendsze-



1. ábra. Scanning elektron mikroszkópos felvételek különböző átmérőjű nanoindenterrel deformált Ni egykristály oszlopokról [12]. Látható, hogy a deformáció vékony mintáknál szűk sávokra lokalizálódik, és a méret növekedtével az inhomogenitás csökken. (A (c) ábrán látható minta a (d) minta deformálatlan kezdőállapota.)

rek szimulációját. Ugyanakkor az $1\ \mu\text{m}$ -nél nagyobb minták ily módon történő vizsgálata még ma sem lehetséges és a közeljövőben sem várható. Ezért a cél olyan mezoszkopikus modellek konstruálása, melyek kapcsolatot teremthetnek a mikroszkopikus diszlokációk és a makroszkopikus jelenségek között.

A dolgozat célkitűzése az egyensúlyi diszlokáció rendszerek tulajdonságainak és a diszlokációk dinamikájának mélyebb megértése. Az értekezés hat fejezetre oszlik. Először áttekintjük a kollektív diszlokáció mechanizmusok leírásával kapcsolatos korábbi eredményeket, ill. összefoglaljuk a dolgozat későbbi részeihez nélkülözhetetlen előzményeket.

A második fejezetben diszlokáció mintázatok kialakulásának feltételeivel foglalkozunk. Bemutatjuk, hogy két dimenzió esetén a közegre hagyományosan alkalmaz-

zott harmonikus közelítés kizárja a fárasztás során kialakuló periodikus mintázat létrejöttét. Másodrendű, anharmonikus közelítésben viszont periodikus szerkezet alakul ki.

A harmadik fejezetben relaxált diszlokáció konfigurációk belső feszültségterének valószínűségi eloszlásával foglalkozunk. Korábbi eredmények csak zérus külső feszültség mellett állnak rendelkezésre [15, 16]. A dolgozatban bemutatjuk a külső feszültség hatásának figyelembe vételére kidolgozott analitikus számításokat és a kapott eredmények numerikus ellenőrzését.

Ezt követően a negyedik fejezet a korrelációs függvények dinamikáját tárgyalja. Zárt egyenletrendszerrel vezetünk le ezen függvények időfejlődésére, melynek fizikai helyességét implicit módon, egy a Debye árnyékolás jelenségével való szoros kapcsolat segítségével támasztjuk alá.

Az ötödik fejezetben bemutatjuk a korábban Groma és munkatársai által kidolgozott kontinuum modell általánosítását egyszeres csúszásról többszörös csúszásra. Az értekezés utolsó fejezetében pedig véletlen diszlokáció rendszerek relaxációját vizsgáljuk dinamikai mennyiségeken keresztül, továbbá bemutatjuk az ezzel szoros kapcsolatban álló, a diszlokációk sebességének eloszlásával kapcsolatos eredményeket.

A szerző saját eredményeit az 1.2.3. pont és a 2-6. fejezetek foglalják össze.

A dolgozatban használt jelölések

$\rho_1^+(\mathbf{r}, t), \rho_1^-(\mathbf{r}, t)$	A pozitív ill. negatív előjelű diszlokációk lokális sűrűsége az \mathbf{r} pontban a t időpillanatban
$\rho(\mathbf{r}, t), \kappa(\mathbf{r}, t)$	Teljes és előjeles diszlokáció sűrűség ($\rho = \rho_1^+ + \rho_1^-$ és $\kappa = \rho_1^+ - \rho_1^-$)
ρ_{tot}	Teljes átlagos diszlokáció sűrűség ($\rho_{\text{tot}} = N/A$)
$d_2^{++}(\mathbf{r}, t), d_2^{+-}(\mathbf{r}, t)$	Kétrészeske korrelációs függvények azonos és ellenkező előjelű diszlokációk között
τ	Nyírófeszültség
τ_{ext}	Külső nyírófeszültség
$\tau_{\text{ind}}(\mathbf{r})$	Egy origóba helyezett x tengellyel párhuzamos Burgers vektorú éldiszlokáció nyírófeszültség tere
$\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t)$	A kontinuum elméletben fellépő önkonzisztens tér
$\tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t)$	A kontinuum elméletben fellépő gradiens tag
$\tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t)$	A kontinuum elméletben fellépő folyásfeszültség
$\sigma(\mathbf{r})$	Feszültségtenzor
$\chi(\mathbf{r})$	Airy-féle feszültség függvény vagy feszültség potenciál
$\epsilon(\mathbf{r})$	Rugalmas deformáció tenzor
G	Rugalmas állandó: $G = \mu/[2\pi(1 - \nu)]$
μ, ν	Nyírási modulus és Poisson szám
B	Diszlokáció mobilitás
\mathbf{b}, b	Burgers vektor ill. annak hossza ($b = \mathbf{b} $)
N, N^+, N^-	Az összes, a pozitív és a negatív diszlokációk száma
L	A négyzet alakú szimulációs terület oldalélének hossza
A	A szimulációs cella alapterülete
$f_N^{s_1, \dots, s_N}, f_k^{s_1, \dots, s_k}$	N db. diszlokációból álló rendszer eloszlásfüggvénye, ill. k -részeske eloszlásfüggvénye ($k < N$)

1. fejezet

Előzmények

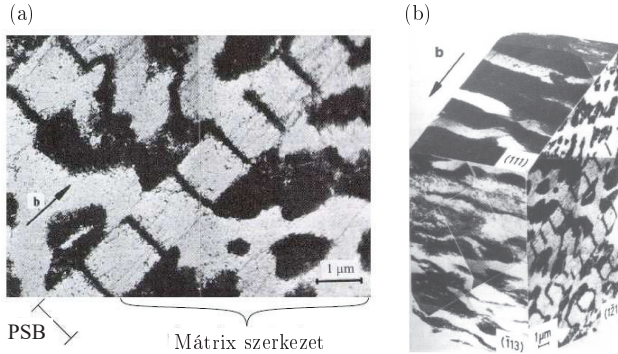
1.1. A diszlokáció létra szerkezet és kialakulásának modelljei

A diszlokációk különböző feltételek mellett különféle mintázatokba rendeződnek. Ezek közül talán a legnagyobb érdeklődés az egykristályok fásasztása során kialakuló mátrix és létra szerkezetet övezi. Kialakulásuk pontos mechanizmusára máig nem született kielégítő magyarázat. Először a szerkezet morfológiáját, majd az eddig javasolt kialakulási modelleket mutatjuk be.

1.1.1. Állandósult csúszási sávok

A fémek fásasztás során végbemenő szerkezetváltozása gyakorlati szempontból különösen jelentős probléma. A terhelési ciklusok során az anyag diszlokáció szerkezete folyamatos változáson megy keresztül, mely gyakran az anyag töréséhez vezet. A fásasztás megkezdése után réz egykristály és néhány ezrelékes ciklusonkénti plasztikus deformáció esetén, néhány száz periódus után megjelenik az ún. mátrix szerkezet (lásd 1.1(a). ábra), melyben diszlokációkban sűrű és ritka tartományok különülnek el. A sűrű csatornák főleg hosszú éldiszlokációkból állnak, melyek merőlegese az 1.1(a). ábra síkjára [17, 18]. A plasztikus deformáció során a diszlokációk csatornától csatornáig haladnak.

Az előbbi feltételek mellett néhány ezer ciklus után alakulnak ki az állandósult csúszási sávok (PSB-k). Az 1.1(a). és 1.1(b). ábrán látható módon a mátrix szerkezetbe a Burgers vektorral párhuzamos, létraszerű sávok ékelődnek. A „létrák”



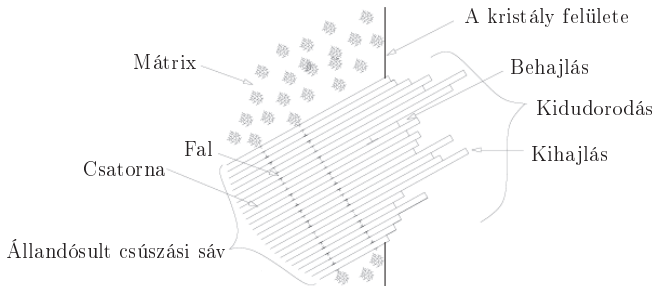
1.1. ábra. Transzmissziós elektronmikroszkópos felvételek fásasztás során kialakuló diszlokáció szerkezetről [17].

fokaiban a diszlokáció sűrűség igen magas, értéke $6 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$ körül mozog [19], azaz az átlagos diszlokáció távolság kb. 10 nm. A falakat főleg a felületre merőleges, szűk dipólókba rendeződött éldiszlokációk alkotják. A fásasztás ezen szakaszában a deformáció már szinte kizárólag ezekre a sávokra korlátozódik, a diszlokációk létrafoktól létrafokig haladnak.

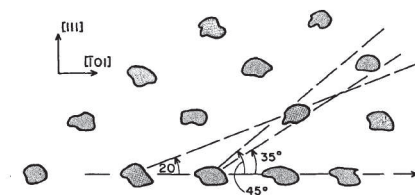
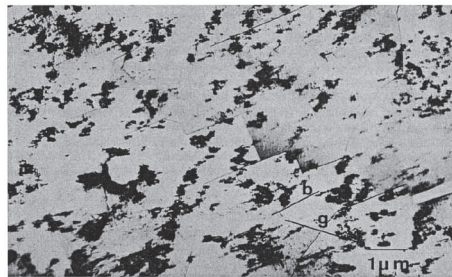
A PSB-k vastagsága és kiterjedése a fásasztás során fokozatosan növekszik. A sáv elérheti a kristály felszínét is. Ebben az esetben az 1.2. ábrán látható szerkezet alakul ki. A sáv végénél a minta felületén egy dudor keletkezik, melyben apró be- és kihajlások láthatóak.

Ha a ciklusonként alkalmazott plasztikus deformáció kisebb az előző esetnél, tipikusan 10^{-5} körüli, akkor nem jelennek meg PSB sávok, hanem megmarad a mátrix struktúra. Ennek vizsgálatával Stanzl és munkatársai foglalkoztak a 80-as években [20, 21]. Ultrahangos fásasztást végeztek réz egykristályokon. Az 1.3. ábrán $1,5 \cdot 10^{-5}$ ciklusonkénti plasztikus deformációnál kb. 10^6 periódus után kialakuló mintázat látható. A diszlokációkban sűrű tartományok elhelyezkedése nem teljesen véletlenszerű, a plasztikus deformáció függvényében különböző relatív irányok preferáltak (lásd 1.3. ábra) [20].

A megfelelően nagy plasztikus deformációval történő fásasztás végső soron az anyag töréséhez vezet. Ennek első lépéseként mikrorepedések jelennek meg az anyagban, többnyire a vékony PSB-knél (lásd 1.4. ábra) [22]. Ez az oka annak, hogy a



1.2. ábra. Állandósult csúszási sáv szerkezete.



1.3. ábra. Alacsony amplitúdójú fárasztás során kialakuló mátrix szerkezet és a mintázat sematikus reprezentációja. A vázlaton a vízszintes nyíl az elsődleges csúszási sík irányába mutat [20].

bemutatott szerkezet vizsgálata és kialakulásának megértése kulcsfontosságú kérdés az anyagtudományban.



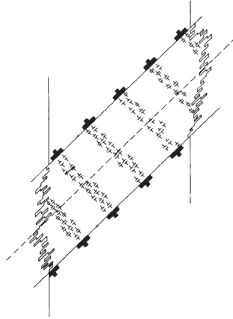
1.4. ábra. Az első mikrorepedések többnyire a vékony PSB-k és a felület határánál alakulnak ki [22].

1.1.2. A PSB szerkezet kialakulásának modelljei

Az állandósult csúszási sávok 50-es évekbeli első megfigyelése óta kialakulására számos fizikai modell született. Az egyik első szerint, melyet Mott 1958-ban publikált, a csúszási sávokban vakanciák képződnek, és ezek klasztereződése vezet a repedések kialakulásához [23]. Erre az enged következtetni, hogy a csúszási sávok széleinél kidudorodik az anyag, melynek belülről hiányoznia kell.

Antonopoulos és munkatársai Mott ötletét egészítették ki, és egy olyan modellt javasoltak, melyben a vakancia típusú diszlokáció dipól képződési energiája alacsonyabb az intersticiális típusúénál [24]. Ezért az előbbiek nagyobb számban keletkeznek a plasztikus deformáció során, és ez vezet a vakanciatöbbletkez. A falakban képződő szűk dipólok pedig egy szuper diszlokációként vehetők figyelembe (1.5. ábra), mely nagy feszültséget hoz létre a PSB határánál, és ez vezet a repedések megjelenéséhez.

Essmann és munkatársai valamint Brown és Ogin elmélete szintén a vakancia típusú dipólok dominanciájára épül [25, 26]. Mindkét esetben, Antonopoulos modelljéhez hasonlóan, a mikroszerkezetet a PSB határán szuper diszlokációkkal vették figyelembe, különbség csupán az ehhez vezető elemi folyamatok meghatározásánál mutatkozik. A különböző típusú dipólok energia különbségének meghatározására Brown és Nabarro tett kísérletet [27]. A nemlineáris rugalmasságtan keretei között az energiakülönbség egzakttul felírható, azonban a kapott integrál integrandusa több ponton is szinguláris. A szerzők numerikus Monte Carlo módszert alkalmaztak a kiértékelésre, és azt kapták, hogy az energiakülönbség, egy logaritmus tagot leszámítva, fordítottan arányos a dipólok momentumával (azaz a dipólt alkotó két



1.5. ábra. Antonopoulos és szerzőtársai modelljében a falakat főként vakancia típusú dipólok alkotják, melyek szuper diszlokációkkal helyettesíthetők [24].

diszlokáció távolságával) [27].

Kratochvíl és munkatársai az eddig bemutatott modellektől teljesen eltérő mechanizmusra építik elméletüket [28, 29, 30]. Az ún. söprő (angolul sweeping) mechanizmus lényege, hogy az éldiszlokációkat a falakból kihajló csavardiszlokációk terelik sűrű tartományokba. A folyamatra kidolgoztak egy kontinuum modellt [29], és számos numerikus szimulációt is végeztek [30]. Egyelőre azonban még nincs meggyőző bizonyíték arra, hogy a PSB képződésben ez a folyamat lenne a meghatározó.

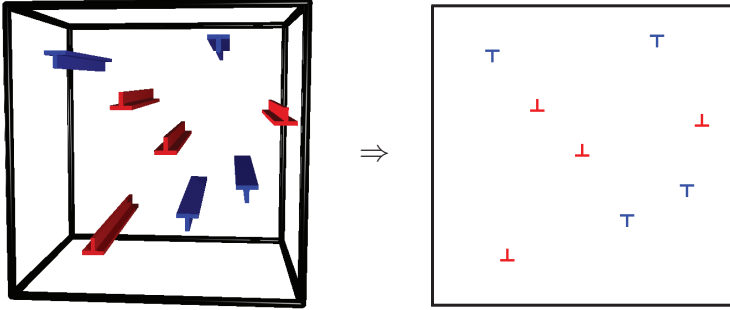
1.2. Diszkrét diszlokáció dinamika

Ebben a fejezetben diszkrét diszlokációk mozgásának szimulációjáról lesz szó. Ez a technika alapvető fontosságú az anyagtudományban, hiszen segítségével beleláthatunk a plasztikus deformáció alapvető folyamataiba, ill. igazolhatóak a megfogalmazott kontinuum modellek.

A diszlokációk hosszú hatótávolságú, $1/r$ típusú feszültségteret generálnak [31]. Ez azt eredményezi, hogy a párkölcsönhatások számításánál bármilyen (a molekuladinamikában megszokott) levágási sugár bevezetése mesterséges nemfizikai effektusokhoz vezet. Azaz N diszlokáció dinamikájának szimulációjánál N^2 nagyságrendű számítást kell végezni. Ennek megvalósítása megfelelően nagy diszlokációs számra a számítástechnika fejlődésével a 90-es évek elejére vált lehetségessé. Az alábbiakban rövid áttekintést adok a két és három dimenziós modellekről.

1.2.1. Két dimenziós modellek

A diszlokációk az anyagban általában bonyolult három dimenziós hálózatot alkotnak. Az 1.1. fejezetben bemutatott diszlokáció szerkezetben viszont a diszlokációk túlyomó többsége egymással párhuzamos éldiszlokáció. Ilyen esetekben lehetséges két dimenzióban kezelni a problémát, amit az 1.6. ábra szemléltet.



1.6. ábra. Párhuzamos egyenes éldiszlokációkból álló rendszer egyszeres csúszás esetén.

Groma és Pawley egyszeres csúszás esetén vizsgálta a plasztikus folyás jelenségét [32]. Modelljükben minden diszlokáció Burgers vektora egyforma hosszúságú, és összegük zérus. A mászás valószínűségét elhanyagolták, a diszlokációk sebessége pedig lineárisan arányos a Peach-Koehler erővel, azaz az ott mérhető csúsztatófehértséssel:

$$\mathbf{v}_i = B \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}^{s_i, s_j} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \mathbf{F}_{\text{ext}}^{s_i} (\mathbf{r}_i) \right) = B s_i \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N s_j \tau_{\text{ind}} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \tau_{\text{ext}} \right) \mathbf{e}, \quad (1.1)$$

ahol N jelöli a teljes diszlokációs számot, \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i és s_i az i -edik diszlokáció helyét, sebességét ill. előjelét jelöli.¹ A j -edik diszlokáció által az i -edikre kifejtett erő \mathbf{F}^{s_i, s_j} , a külső erőt $\mathbf{F}_{\text{ext}}^{s_i}$ jelöli. A diszlokációk mobilitása B , a Burgers vektorok hossza $b := |\mathbf{b}_i|$, \mathbf{e} a csúszás síkba eső egységvektor, τ_{ext} a külső alkalmazott nyírófeszültség,

¹Egyszeres csúszás és éldiszlokációk esetén a Burgers vektornak csupán két lehetséges iránya van. Ezeket különbözteti meg a diszlokáció előjele.

τ_{ind} pedig egy origóba helyezett pozitív előjelű éldiszlokáció generált feszültségterét adja meg. Az egyszerűség kedvéért a csúszósík legyen párhuzamos az x tengellyel. Ekkor a τ_{ind} teret végtelen közegben az alábbi analitikus képlet adja meg [31]:

$$\tau_{\text{ind}}(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} =: Gb \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \sim \frac{1}{r}, \quad (1.2)$$

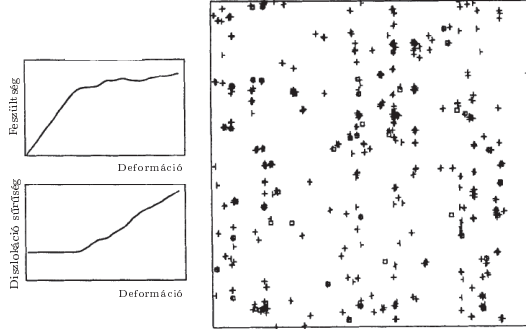
ahol μ a nyírási modulus és ν a Poisson szám. A rugalmas állandókat az egyszerűség kedvéért a G konstansba vontuk össze.

Mivel a szimulációban csak korlátozott számú (kb. 1000 db.) diszlokációt tudtak figyelembe venni, az 1.6. ábrán is látható négyzet alakú tartomány pereménél periodikus határfeltételeket írtak elő, így eredményeik gyakorlatilag végtelen egy-kristály esetére vonatkoznak. A számítások során a határfeltételeket, a tükörtlőtés módszeréhez hasonlóan, képdiszlokációkkal vették figyelembe.

Annak érdekében, hogy minél jobban közelítsék a valódi kristályokban lejátszódó folyamatokat, diszlokáció képződést és diszlokáció akadályokat is beépítettek modelljükbe. Egytengelyű, deformáció vezérelt nyújtás során az 1.7. ábrán látható eredményt kapták. A feszültség-deformáció és diszlokáció sűrűség görbék kvalitatíve jól visszaadják a plasztikus folyásnál megszokott kísérleti eredményeket. A diszlokációk mikroszerkezetét tanulmányozva elmondható, hogy azok többnyire szűk dipólokba rendeződtek [32]. A szerzők kimutatták továbbá, hogy a bevezetett diszlokáció képződési metódus és az akadályok számának növekedési sebessége hatással vannak az alakítási keményedésre.

Nagyon hasonló modellt javasoltak Miguel és munkatársai a kúszás vizsgálatára [33, 34]. Az előzőekhez hasonlóan egyszeres csúszással és az (1.1) mozgásegyenlettel dolgoztak. Vizsgálatuk középpontjába a rendszer konstans, a folyásfeszültségénél nagyobb, külső feszültség hatására adott választ helyezték. Megállapították, hogy a plasztikus deformáció lavinaszerű viselkedést mutat ill. a kúszás kezdeti szakaszában a plasztikus deformáció (γ_{pl}) időfejlődését jól leírja az Andrade által korábban kimért, róla elnevezett $\gamma_{\text{pl}} \sim t^{1/3}$ törvény (lásd még az 1.6. fejezetet). A szimulációkban a diszlokáció keltés mellett megengedték az ellenkező előjelű diszlokációk annihilációját is, amennyiben távolságuk megközelített egy bizonyos értéket.

A két dimenziós szimulációkat gyakran megpróbálják olyan szabályokkal kiegészíteni, melyek segítségével jobban megközelíthető a valódi három dimenziós szerkezet. Ezt a módszert gyakran 2,5 dimenziós diszlokáció dinamikának is nevezik. Ilyen



1.7. ábra. Egy deformáció vezérelt, egyszeres csúszásra orientált nyújtás szimulációjának vég konfigurációja, a mért feszültség-deformáció görbe és a diszlokáció sűrűség változása [32]. Az ábrán a kis körök a diszlokáció akadályokat jelölik.

módszerrel két kutatócsoport is foglalkozik, melyek között sok a hasonlóság [36, 37]. A bevezetett szabályok a következők:

- *Diszlokáció képződés:* Benzerga és munkatársai pontszerű fix nukleációs helyeket alkalmaznak, melyek a Frank–Read forrásokat szimulálják. Ennek megfelelően bevezetnek egy nukleációs feszültséget, mely a képződéshez szükséges (ez forrásról forrásra különböző lehet). Minden forrás egy olyan dipólt emittál, melynek alkotói egymástól az ún. nukleációs távolságra helyezkednek el. Az dipól generálása egy rögzített nukleációs idő alatt történik meg, melynek meghatározása analitikus módszerekkel tehető meg. A források száma dinamikusan változik a deformáció növekedtével [36].

Gómez-García és szerzőtársai ezzel szemben abból indulnak ki, hogy a Frank–Read források nem a vizsgált két dimenziós síkban hanem a környező térben helyezkednek el. Azaz a két dimenzióban megjelenő új diszlokációpárok pozíciója véletlenszerűnek tekinthető. Felteszik továbbá, hogy a ρ_{tot} diszlokáció sűrűség változását egy $d\rho_{\text{tot}}/d\varepsilon = m$ típusú egyenlet írja le, ahol ε a rugalmas deformáció, m pedig konstans. Az időegység alatt újonnan generált diszlokáció párok mennyisége ezért folyamatosan változik, mégpedig a deformációnövekmény függvényében [37].

- *Vonalmenti feszültség*: A görbe diszlokációkban vonalmenti feszültség ébred, ami befolyásolja mozgásukat. Egy két dimenziós modellben természetesen ezt az effektust nem lehet egzaktul figyelembe venni. Benzerga és munkatársai feltételezik, hogy a keletkező dipólok jó közelítéssel kör alakúak, és így egy extra erőt határoznak meg, mely a dipól mindkét tagjára hat [36]. Gómez-García eközben a három dimenziós szimulációk eredményei alapján a hosszú hatótávolságú erők értékét ötödére csökkenti [37].
- *Zárképződés*: Többszörös csúszás esetén a különböző csúszásíkokon fekvő diszlokációk összeakadhatnak. Ez az eset három dimenzióban a Lomer–Cottrell akadálynak, azaz egy immobil diszlokációnak felel meg. Dolgozatunkban egy ilyen két dimenziós konstellációt diszlokáció zárnak fogunk nevezni. Az ilyen záruk képződésének leírására mindkét szimulációs programban egy távolságot definiálnak, mely a diszlokációk annihilációs távolságának nagyságrendjébe esik. Ha két diszlokáció ennél a távolságnál jobban megközelíti egymást, akkor rögzülnek, és egymásra többé nem fejtenek ki erőt [36, 37].
- *Záruk szétszakadása*: Ahogyan a Lomer–Cottrell akadályokat, úgy a diszlokáció zárukat is szét tudja szakítani egy kritikus feszültség. A két bemutatott modell különböző módokon becsüli meg ezt a feszültséget, az egyikben az érték csak a zár tulajdonságaitól [36], a másikban viszont a lokális diszlokáció sűrűségétől is függ [37].

A bevezetett dinamika mindkét esetben a már korábban bemutatott túlcsapított eset (lásd az (1.1) mozgásegyenletet). A modell paramétereinek megfelelő megválasztásával kvantitatíve is jól leírhatóak a plasztikus folyás, az alakítási keményedés [36] és különböző mérethatások is, pl. vékonyrétegek deformációja [38], ill. bizonyos diszlokáció mintázatok kialakulása is modellezhető vele [37].

1.2.2. Három dimenziós modellek

A plasztikus deformáció legpontosabb modellezése három dimenziós szimulációkkal lehetséges. Jelenleg három független program létezik, ezekről adunk rövid ismertetést. A legalapvetőbb különbség a görbe diszlokációk reprezentációjában van. Az ún. él-csavar modellben a diszlokáció rövid, tisztán él vagy tisztán csavar szegmensekből épül fel (lásd 1.8. ábra). Ezt Kubin és munkatársai dolgozták ki [39, 40].

A másik megközelítésben a diszlokáció vonal szintén rövid egyenes szegmensekből épül fel, a szegmensek irányára azonban nincs semmiféle korlátozás (lásd 1.9. ábra). Ebbe a csoportba tartozik a Weygand és munkatársai által jegyzett program [41], ill. a Bulatov vezetésével kifejlesztett ParaDIS kód [42]. Az előbbi módszer könnyebben implementálható, és gyorsabb programot eredményez, azonban természetesen a második reprezentáció a realisabb, ahol külön nehézséget okoz a diszlokáció vonalak folytonosságának megőrzése.



1.8. ábra. Egy Lomer–Cottrell akadály az él-csavar modellben [40].



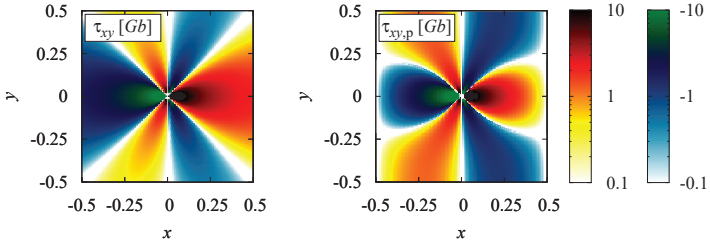
1.9. ábra. A ParaDIS programmal szimulált diszlokáció multi-akadály [42, 43].

Mindegyik esetben a szegmensek közötti erőket a lineáris rugalmasságtan keretei között határozzák meg. A szabad és periodikus peremfeltételek megvalósítása mindegyik programban megoldott, ennek részleteivel most nem foglalkozunk. A módszerek hatékonyságát és pontosságát immár számos eredmény mutatja. Sikeresült például reprodukálni a plasztikus deformáció során lezajló diszlokáció lavinák méretének mérésekből meghatározott eloszlását [14], a diszlokáció multi-akadályok nagyszámú jelenlétét [43] és az oxid szemcsék keményítő hatását [44].

1.2.3. A dolgozatban használt módszer

A 2-6. fejezetek mindegyikében numerikus szimulációk eredményeire támaszkodunk. Ezért most röviden bemutatjuk az általunk készített két dimenziós diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációs programot.

A vizsgált modell megegyezik az 1.2.1. pontban bemutatottal (lásd 1.6. ábra). A periodikus határfeltételek figyelembevételére a Bakó és munkatársai által alkalmazott eljárást követjük [45]. Rugalmas médiumban a χ Airy-féle feszültség függvény egy biharmonikus egyenletet elégít ki. Mivel egy diszlokáció feszültségtere χ -ből deriválásokkal állítható elő (lásd (1.49)), ezért a periodikus megoldás a Fourier-térben könnyen előállítható [45]. Példaként az 1.10. ábrán a feszültségtér xy komponense látható végtelen és periodikus határfeltétel mellett.²



1.10. ábra. Egy éldiszlokáció feszültségtere végtelen és periodikus határfeltétel esetén. (A diszlokáció Burgers vektora párhuzamos az x tengellyel.)

A programmal többszörös csúszás is vizsgálható. Ebben az esetben a diszlokációk által keltett feszültségtenzor mindhárom független komponensét meg kell határozni, hiszen most mindegyik szerepel a diszlokációkra ható

$$\mathbf{F}_{\text{PK}} = \mathbf{l} \times (\sigma \mathbf{b}) \quad (1.3)$$

Peach–Koehler erőben. Itt \mathbf{l} a diszlokáció vonalvektora, azaz a z tengellyel párhuzamos egységvektor. Mivel a mászást elhanyagoljuk, ezért a mozgásegyenletben \mathbf{F}_{PK} csúszósíkba eső vetületét kell venni.

²A végtelen határfeltételhez tartozó megoldást (1.2)-ben már megadtuk.

A mozgásegyenletek integrálására negyedrendű Runge–Kutta módszert használtunk adaptív időlépés választással. E rendkívül precíz módszer hátránya, hogy szűk dipólok keletkezése esetén rendkívül kicsi időlépéseket eredményez. Egy szűk dipól diszlokációi azonban szinte teljesen kioltják egymás feszültségterét, ezért egy bizonyos dipólméret alatt ezeket annihiláltuk.³ Amint az előző pontban láthattuk, ehhez hasonló annihilációs eljárás a legtöbb diszlokáció dinamikai programban megtalálható.

Többszörös csúszás esetén különböző csúszósíkokon található diszlokációk tetszőleges mértékben közelíthetik meg egymást. Ez szintén az előbb bemutatott problémát, azaz rendkívül kicsi időlépéseket idéz elő. Ennek megelőzésére bevezetünk egy zárképződési távolságot, és ha a különböző síkokon fekvő diszlokációk távolsága eléri ezt az értéket, akkor mindkettőt rögzítjük. Az így létrejött immobil párt diszlokáció zárnak nevezzük. Ez a zár a három dimenziós Lomer–Cottrell-akadálynak felel meg. Ha egy zárat megközelít egy harmadik diszlokáció, akkor lehetséges annak annihilációja valamelyik összetevővel. Az így visszamaradó diszlokáció természetesen újra mobillá válik.

1.3. Sztochasztikus diszlokáció dinamika

1.3.1. Hähner modellje

A diszlokációk hosszútávú feszültségteret keltenek, és ezen keresztül hatnak kölcsön. Ez, amint korábban már említettük, azzal jár, hogy nem lehetséges a kölcsönhatások elhanyagolása egy bizonyos levágási sugár felett. Ez számos nehézséget okoz a mozgásegyenleten alapuló analitikus számítások esetén. Hähner ezért a diszlokáció mintázatképződésre egy sztochasztikus modellt javasolt, melyben a mozgóképes diszlokációkra a többi diszlokáció által kifejtett erőt egy sztochasztikus változóval helyettesítette [46, 47].

Ebből a feltételezésből egy sztochasztikus differenciálegyenlet vezethető le a diszlokáció sűrűség időfejlődésére, mely véletlen változóként egy súlyozott fehérzaj komponenset tartalmaz. Belátta, hogy ha a zaj súlya egy bizonyos érték alatt van, akkor egyensúlyban homogén diszlokáció sűrűség alakul ki, míg nagy amplitúdójú zaj ese-

³Az annihiláció során a dipólt alkotó diszlokációk Burgers vektorát az annihilációs idő alatt lineárisan nullára csökkentettük.

tén a diszlokáció sűrűség egy divergens eloszlást követ, ami egy fraktálszerű, skála független diszlokáció eloszlásnak felel meg. A modellből még a kialakuló fraktál dimenziója is becsülhető [46, 47]. A modell legfőbb hátránya, hogy a diszlokáció sűrűség szintjén ír fel evolúciós egyenletet, így a térbeli inhomogenitásokkal kapcsolatos kérdések csak indirekt módon vizsgálhatók. Kérdéses továbbá az evolúciós egyenletben a fehérzaj alkalmazásának fizikai megalapozottsága.

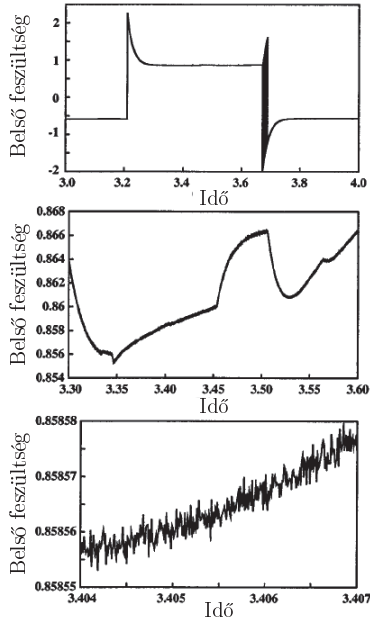
1.3.2. Groma modellje

Groma és Bakó egy másik megközelítést javasolt. Az alapötlet szerint, ha a mozgásegyenletek analitikus integrálása helyett alkalmazható lenne valamilyen Monte Carlo módszer, akkor a megoldás $\mathcal{O}(N^2)$ időbonyolultsága $\mathcal{O}(N)$ nagyságrendűvé egyszerűsödhetne. Diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációkkal egy kiszemelt diszlokációra ható erő időfüggését vizsgálva megállapították, hogy az jól közelíthető egy lassan változó és egy gyorsan fluktuáló komponens összegével (lásd 1.11. ábra) [48]. A gyorsan fluktuáló komponens leválasztásával lehetségessé válik az említett közelítő integrálás.

Az $\mathcal{O}(N)$ -es algoritmus megvalósításához szükség van egy további észrevételre, nevezetesen, hogy a gyorsan fluktuáló komponens a közeli, a lassan változót pedig a távoli diszlokációk okozzák. Ez utóbbi csak az elkent előjeles diszlokáció sűrűségétől függ, így gyorsan, $\mathcal{O}(N)$ időlépéssel meghatározható. Ha a közeli diszlokációk hatását egy sztochasztikus változóval modellezzük, akkor az előálló algoritmus valóban $\mathcal{O}(N)$ időbonyolultságú lesz [49].

Annak érdekében, hogy a közeli diszlokációk hatását sztochasztikus módon vehessük figyelembe, szükség van a kifejtett erő, azaz a közeli diszlokációk által keltett feszültség eredőjének, mint valószínűségi változónak, az eloszlásának a megismerésére. Nem mindegy azonban, hogy ezt az eloszlást milyen pontban határozzuk meg. Groma, Bakó és Csikor ezt elsőként egy diszlokáció rendszerben a médium egy véletlenszerűen választott pontjában számolták ki [50, 16]. A számolások menetét a következő pontban mutatjuk be. Hasonló vizsgálatokat végeztek Beato és munkatársai is, azzal a különbséggel, hogy a diszlokáció elrendeződéseket különböző dimenziójú fraktállal közelítették [51].

Már most megjegyezzük azonban, hogy amint 6. fejezetben látni fogjuk, ez a valószínűségi eloszlás bizonyos esetekben lényegesen különbözhet egy a rendszert



1.11. ábra. Egy kiszemelt diszlokációra ható erő időfüggése egy diszkrét diszlokáció dinamikai szimuláció során különböző nagyítások mellett [48].

alkotó diszlokáció helyén mérhető feszültség eloszlásától. Fontos még megemlíteni, hogy szoros kapcsolat van a véletlen pontban mért eloszlás és a Röntgen diffrakció során kapott Bragg-csúcsok alakja között. Mivel ez utóbbi a rugalmas deformáció eloszlásától függ, a deformáció és a feszültség pedig a Hooke törvény következtében egymással egyenesen arányos, ezért végeredményben a két mennyiség lényegében azonos [52, 53, 54]. Ezért a vonalprofil méréséből a vizsgált eloszlás kísérleti úton is meghatározható.

Egy véletlen pontban mért feszültség eloszlása

Tekintsük az 1.2.1. fejezetben bemutatott egyszerű, két dimenziós diszlokáció modellt egyszeres csúszás esetén. Alkossa a rendszert N darab diszlokáció, az i -edik

koordinátája legyen \mathbf{r}_i , előjele pedig s_i . Ekkor az \mathbf{r} pontban a nyírófeszültség értéke az alábbi módon adható meg:

$$\tau_{\text{str}}^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) := \sum_{i=1}^N s_i \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (1.4)$$

ahol τ_{ind} jelöli az egy diszlokáció által keltett feszültségteret, melynek végtelen határfeltételek melletti alakját korábban, (1.2)-vel már megadtuk. Keressük tehát az így kapott feszültségérték P_{str} eloszlását tetszőleges \mathbf{r} mellett. Bevezetve a

$$\Delta^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \tau, d\tau) := \begin{cases} 1, & \text{ha } \tau - \frac{d\tau}{2} < \tau_{\text{str}}^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) < \tau + \frac{d\tau}{2}, \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases} \quad (1.5)$$

függvényt P_{str} az alábbi zárt alakban adható meg:

$$\begin{aligned} P_{\text{str}}(\tau, \mathbf{r}) d\tau &= \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} d^2 r_1 \dots \int_{\mathbb{R}^2} d^2 r_N \Delta^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \tau, d\tau) \cdot \\ &\cdot f_N^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \end{aligned} \quad (1.6)$$

ahol $f_N^{s_1, \dots, s_N}$ jelöli a rendszer eloszlásfüggvényét (az eloszlásfüggvény definíciójához lásd az 1.5.3. fejezetet). Mint látható a P_{str} sűrűségfüggvény általában függhet az \mathbf{r} koordinátától.

A továbblépéshez felhasználjuk az alábbi Markoff által bizonyított azonosságot [55]:

$$\begin{aligned} \Delta^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \tau, d\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(q d\tau/2)}{q} \cdot \\ &\cdot \exp(iq [\tau_{\text{str}}^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) - \tau]) dq, \end{aligned} \quad (1.7)$$

melynek segítségével a P_{str} sűrűségfüggvény Fourier transzformáltjára ($P_{\text{str}}^F(q, \mathbf{r}) := \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} P_{\text{str}}(\tau, \mathbf{r}) e^{-iq\tau} d\tau$) az alábbi alak adódik:

$$\begin{aligned} \ln(P_{\text{str}}^F(q, \mathbf{r})) &= - \sum_{s_1=\pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1) B^{s_1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, q) d^2 r_1 + \frac{1}{2} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1) \cdot \\ &\cdot \rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2) d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) B^{s_1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, q) B^{s_2}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2, q) d^2 r_1 d^2 r_2 + \dots, \end{aligned} \quad (1.8)$$

ahol bevezettük a

$$B^s(\mathbf{r}, q) := 1 - \exp(iqs\tau_{\text{ind}}(\mathbf{r})), \quad (1.9)$$

jelölést, $d_2^{s_1, s_2}$ -vel jelöltük a rendszer kétrészecske korrelációs függvényeit (lásd az 1.4. és az 1.5.3. fejezetet) és $\rho_1^s(\mathbf{r})$ jelöli az s előjelű diszlokációk sűrűségét az \mathbf{r} pontban (lásd az 1.5.3. fejezetet).

Az (1.8) általános képlet alapján Groma és Bakó meghatározták a sűrűségfüggvény aszimptotikáját a $|\tau| \rightarrow \infty$ esetben [50]. A korlátozott momentumok vizsgálatára épített módszerük segítségével belátták, hogy az eloszlás aszimptotája független a korrelációktól. A kapott eredmény:

$$P_{\text{str}}(\tau, \mathbf{r}) \rightarrow C\rho(\mathbf{r})\frac{1}{|\tau|^3}, \text{ ha } |\tau| \rightarrow \infty, \quad (1.10)$$

ahol éldiszlokációk esetén $C = (\pi/4)(Gb)^2$ [50]. Az aszimptotikus eloszlás tehát kizárólag a lokális teljes diszlokáció sűrűségétől függ. Ennek oka, hogy nagy feszültségek csak a diszlokációk közvetlen közelében mérhetőek, ahol a többi diszlokáció hatása már elhanyagolható.

Bár a fenti eredményhez a korrelációk nem adnak járulékot, hatásuk mégsem hanyagolható el. Mint kiderült, véletlenszerű rendszereknél az eloszlás kristályméret függővé válik, ami ellentmond a Röntgen vonalprofil mérések eredményeivel [50]. A korrelációs függvények figyelembe vétele éppen ezt a méretfüggést szünteti meg.

Az eloszlás teljes alakjának meghatározásával Csikor és Groma foglalkozott [16]. A diszlokáció rendszert úgy közelítették, mintha az korrelálatlan monodiszperz dipólokból állna. Ekkor a feszültségeloszlásra az előbbi levezetés érvényben marad, amennyiben τ_{ind} helyére a dipólok terét helyettesítjük. Így elkerülhető a konkrét korrelációs függvényekkel való számolás.

Most az általuk kapott eredményeket foglaljuk össze. Homogén (azaz eltolás invariáns) monodiszperz dipól rendszerekben az eloszlás aszimptotikái a Fourier térben az alábbi alakban adhatóak meg:

$$\ln(P_{\text{str}}^F(q)) = \begin{cases} C\rho_{\text{tot}}q^2 \ln\left(\frac{|q|}{q_{\text{eff}}}\right), & \text{ha } |q| \rightarrow 0, \\ -\frac{D}{2}\rho_{\text{tot}}|q|, & \text{ha } |q| \rightarrow \infty, \end{cases}, \quad (1.11)$$

ahol D értékét numerikus úton lehet meghatározni (relaxált rendszerekre $D \approx 1,35 \text{ Gb } \rho_{\text{tot}}^{-0,5}$), q_{eff} pedig egy, a rendszert jellemző korrelációs hosszról függő mennyiség [16]. Belátták, hogy a rendszerben található különböző méretű dipólok és falak hatása szintén egy (1.11) alakú egyenletre vezet, csak a D és q_{eff} értékeket kell megfelelően módosítani. Végeredményben a sűrűségfüggvény a $|\tau| \rightarrow 0$ esetben egy Lorentz függvénnyel közelíthető [16].

Numerikus eredmények

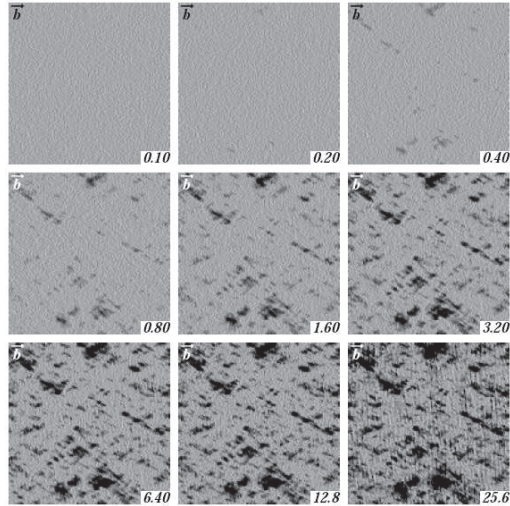
A feszültség eloszlásának ismeretében már lehetséges sztochasztikus diszlokáció dinamikai szimulációkat végezni. Az eredmények csak az erősen hajtott esetben közelíthetők a valódi megoldást, amikor diszlokációk igen nagy számban tartózkodnak korrelálatlan pozíciókban. Ilyen vizsgálatokat Bakó és Groma végzett [48, 49, 56]. Az algoritmus során a szimulációs területet kis cellákra osztották és minden cellára külön-külön határozták meg a teljes és a geometriailag szükséges diszlokáció sűrűségeket. Így a diszlokációra ható erő a cellákból származó hosszú távú erőből és a sztochasztikus komponensből áll össze.

Egyszeres csúszás esetén 2^0 diszlokáció és periodikus külső feszültség mellett a fárasztás során kialakuló mátrix szerkezethez (lásd 1.1. fejezet) nagyon hasonló mintázat kialakulása figyelhető meg (1.12. ábra).

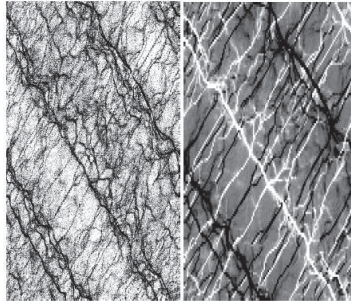
Ideális többszörös csúszás esetén állandó külső feszültség mellett az 1.13. ábrán látható szerkezet alakult ki. A csúszási síkok a téglalap alakú szimulációs terület átlóival párhuzamosan helyezkedtek el. Az előző esettel ellentétben diszlokációkban sűrű tartományok által határolt cellák alakulnak ki. A cellák méret szerinti eloszlását „box counting” módszerrel határozták meg, és arra hatványfüggvénnyel leírható skálafüggetlen eloszlás adódott. Ez a szerkezet fraktál jellegére utal, melynek dimenziójára a szerzők 1,86-ot kaptak [56]. Az eredmény jól egyezik a kísérletileg kapott mintázattal és a fraktáldimenzió mért értékével [53].

1.4. Diszlokáció korrelációk

A diszlokációk által generált feszültségtér $1/r$ típusú távolságfüggéssel rendelkezik. Ebből kifolyólag egy teljesen random diszlokáció elrendezés elasztikus energiája logaritmikusan divergál a kristály méretével [57]. Mivel ilyen durva kristályméret függés nem figyelhető meg, szükségképpen a diszlokációk elhelyezkedése nem lehet



1.12. ábra. A teljes diszlokáció sűrűség időfejlődése egyszeres csúzás, fárasztás és sztochasztikus diszlokáció dinamikai szimuláció során [48].



1.13. ábra. Teljes (bal oldal) és geometriailag szükséges (jobb oldal) diszlokáció sűrűség sztochasztikus diszlokáció dinamika, többszörös csúzás és konstans külső feszültség esetén [56].

véletlenszerű. Ezt a megállapítást Röntgen vonalprofil mérések is alátámasztják, ui. teljesen random esetben a profil alakjának is függenie kellene a kristály méretétől, ami a valóságban nem figyelhető meg [52].

A probléma megoldására Wilkens az ún. korlátozottan véletlen diszlokáció eloszlást vezette be [57]. A teljesen véletlen eloszlástól ez abban tér el, hogy léteznek olyan a diszlokáció vonalakra merőleges rögzített méretű tartományok, melyeket pontosan egy megadott számú diszlokáció vonal metsz át. Ez azt jelenti, hogy a véletlenszerűség csak egy bizonyos méretskála alatt jelentkezhet. A Wilkens által javasolt megoldás erősen mesterséges, mégis ez az eloszlás már kiküszöböli az energia és a vonalprofilok kristályméret függését.

A mai számítógépekkel már lehetőség van szimulált diszlokáció rendszerek térbeli statisztikus tulajdonságainak konkrét vizsgálatára. Az első ilyen átfogó vizsgálatot Zaiser és munkatársai végezték két dimenziós diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációk eredményeire támaszkodva [58]. A két dimenziós modell megegyezett az 1.2.1. fejezetben bemutatott homogén rendszerrel. Kezdetben azonos számú pozitív és negatív, véletlenszerűen elhelyezkedő diszlokációt helyeztek el a szimulációs területen, majd numerikusan megoldották az (1.1) mozgásegyenletet. Mivel a rendszer disszipatív, a diszlokációk előbb-utóbb megállnak. A szerzők az így kialakuló relaxált konfigurációkat tanulmányozták.

A két dimenziós diszlokáció rendszer térbeli eloszlásának eltérését a véletlenszerűtől korrelációs függvénnyel írták le. Az 1.2.1. fejezet jelölései mellett, diszkrét esetben ennek definíciója (feltéve, hogy a pozitív és negatív előjelű diszlokációk száma megegyezik)

$$d_{2,d}^{s,s'}(\mathbf{r}, t) := \left\{ \frac{A}{(N/2)^2} \sum_{\substack{i=1 \\ s_i=s}}^N \sum_{\substack{j=1 \\ s_j=s'}}^N \delta(\mathbf{r} - [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_j(t)]) \right\} - 1, \quad (1.12)$$

ahol $s, s' \in \{-1, 1\}$ és A a szimulációs cella alapterülete. Ez véges rendszerben egy Dirac-deltákból álló nem folytonos függvény. Ennek kisimítása érdekében a korrelációs függvényt úgy érdemes definiálni, mint a diszkrét függvények sok különböző relaxált diszlokáció konfigurációra vett átlagát (ezt a típusú átlagot a $\langle \rangle$ szimbólummal jelöljük):

$$d_2^{s,s'}(\mathbf{r}, t) := \langle d_{2,d}^{s,s'}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (1.13)$$

Mivel különböző előjelű diszlokációk alkotják a rendszert, ezért megkülönböztetünk d_2^{++} , d_2^{+-} , d_2^{-+} és d_2^{--} függvényeket. Ha az átlagolt rendszerek $t = 0$ -ban véletlenszerűek, akkor könnyen látható, hogy $d_2^{++}(\mathbf{r}, 0) = d_2^{--}(\mathbf{r}, 0) = -2/N$ és $d_2^{+-}(\mathbf{r}, 0) =$

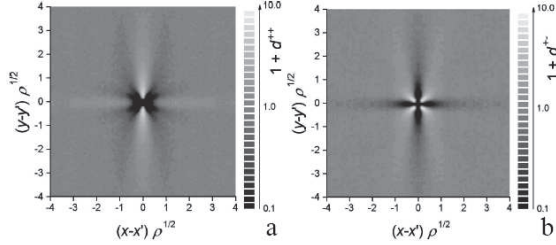
$d_2^+(\mathbf{r}, 0) = 0$ minden \mathbf{r} esetén. További lényeges tulajdonság, hogy szimmetria okok miatt minden \mathbf{r} és t esetén fennáll $d_2^-(\mathbf{r}, t) = d_2^+(-\mathbf{r}, t)$. Homogén rendszerekben azonos számú pozitív és negatív diszlokáció esetén a $d_2^{++}(\mathbf{r}, t) = d_2^{--}(\mathbf{r}, t)$ azonosság is teljesül, szintén szimmetria okokból.

Zaiser és munkatársai a korrelációs függvények tulajdonságaira analitikus jóslatokat is tettek [58]. A diszlokációk különböző rendű sűrűségfüggvényeinek időfejlődését leíró BBGKY hierarchia (lásd 1.5. fejezet) vizsgálatával az alábbi megállapításokat tették homogén diszlokáció rendszerek esetén:

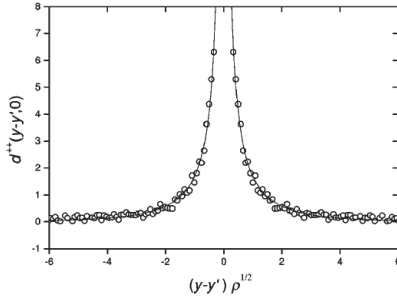
- A korrelációs függvények csak a $\sqrt{\rho_{\text{tot}}}\mathbf{r}$ dimenzió nélküli mennyiségtől függhetnek, ahol ρ_{tot} a teljes diszlokáció sűrűség. Ez az állítás azt az egyszerű fizikai tényt fejezi ki, hogy a rendszerben egyetlen hosszúságskala található, mégpedig az átlagos diszlokáció távolság, melynek értéke $1/\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$.
- Kis r értékeknél a korrelációs függvényeknek $1/r$ típusú szingularitásuk van.
- Nagy r -ek esetén pedig a korrelációs függvényeknek algebrainál gyorsabb lecsengésük van.

A numerikus szimulációkból kapott függvények az 1.14. ábrán láthatóak, ahol csak a két független d_2^{++} és d_2^{+-} függvényt ábráztunk [58]. Az (1.12) és (1.13) definíciók értelmében a korrelációs függvény tulajdonképpen nem mér mást, mint a megfelelő előjelű diszlokációk közötti relatív koordináták gyakoriságát a rendszerben. Ennek alapján megfigyelhető, hogy az azonos előjelű diszlokációk egymás felett helyezkednek el leggyakrabban (lásd d_2^{++} az 1.14(a). ábrán), míg a különböző előjelűeket összekötő vektor a csúszósíkkal legtöbbször 45° -os szöget zár be (lásd d_2^{+-} az 1.14(b). ábrán). Az előbbi esetnek a jól ismert diszlokáció falak, az utóbbinak a diszlokáció dipólok felelnek meg. Látható továbbá, hogy a korrelációk néhány átlagos diszlokáció távolság után lecsengenek.

A függvény alakjára tett analitikus jóslatok ellenőrzésére a szerzők ábrázták a d_2^{++} korrelációs függvény y tengely mentén felvett értékeit. Az 1.15. ábrán ez és az illesztett $\exp(-Ay)/y$ típusú függvény látható [58]. Az illeszkedés jó, bár fontos megjegyezni, hogy későbbi pontosabb numerikus vizsgálatok alapján az ábrázolt függvény mégsem exponenciálisan, hanem $y^{-1.5}$ hatványfüggvény szerint cseng le [59]. Ekkor is érvényben marad azonban az a fontos megállapítás, hogy annak ellenére, hogy a diszlokációk feszültségtére hosszú hatótávolságú, az árnyékolásnak köszönhetően a korrelációk már rövid hatótávolságúak.



1.14. ábra. Relaxált diszlokáció rendszerekben mérhető korrelációs függvények egyszeres csúszás mellett (a) azonos és (b) ellenkező előjeli diszlokációk esetén. A csúszósík párhuzamos az x tengellyel. Megjegyezzük, hogy az ábrákon $1 + d_2^{++}$ ill. $1 + d_2^{+-}$ látható [58].



1.15. ábra. Relaxált diszlokáció rendszerekben mérhető d_2^{++} korrelációs függvény értékei az y tengely mentén. Az adatpontokra az $\exp(-Ay)/y$ függvény lett illesztve [58].

Az utóbbi időben vizsgálni kezdték a korrelációkat három dimenzióban, azonban ez számos nehézséget vet fel. Három dimenziós szimulációk során általában szabad peremfeltételeket szoktak alkalmazni, ez azonban a homogenitás elvesztéséhez vezet. Általános esetben a korrelációs függvények már két dimenzióban is két síkbeli koordinátától függenek. Éppen a homogenitás az, ami miatt az 1.14. ábrán látható módon tudjuk ábrázolni azokat. Három dimenzióban, inhomogén esetben 2 térkoordinátától, azaz hat változótól függenek a korrelációs függvények. Gondt okoz továbbá, hogy az ilyen szimulációkban több csúszósíkon mozoghatnak a diszlokációk, ezért kettőnél jóval több típusú korrelációs függvény jelenik meg. Ezek

szisztematikus leírása rendkívül körülményes.

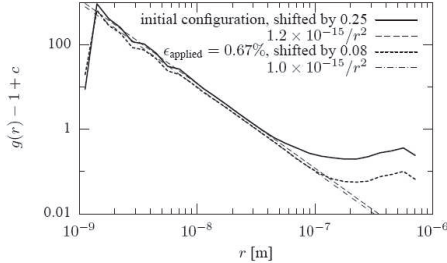
Az első, ebben a témában végzett vizsgálatot Csikor és munkatársai publikálták [60]. Ők $1\ \mu\text{m}$ oldalhosszúságú kocka alakú Al egykristályok deformációja után kialakult diszlokáció hálózatot vizsgálták a Weygand és munkatársai által kifejlesztett három dimenziós diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációs program segítségével (lásd 1.2.2. fejezet). Megállapították, hogy a minta középső $0,5\ \mu\text{m}$ -es oldalhosszúságú kocka alakú részében a szerkezet már homogénnek tekinthető, azaz itt a korrelációs függvények már csak 3 koordinátától függenek. További egyszerűsítésként az alábbi definícióval bevezették a

$$g(r) := \left(\frac{d}{dr} L(r) \right) / (4\pi r^2 \rho_{\text{tot}}) \quad (1.14)$$

radiális párkorrelációs függvényt, ahol ρ_{tot} a diszlokáció sűrűség a homogénnek tekinthető tartományban és $L(r)$ a diszlokáció vonalak teljes hossza a diszlokáció r sugarú környezetében. Megállapították, hogy $r \rightarrow 0$ esetben $g(r)$ aszimptotikáját két komponens határozza meg, a diszlokáció vonalak folytonosságából adódó r^{-2} és az elágazások jelenlétéből adódó r^{-1} típusú járulékok.

Érdekesebb azonban a nagy r -eknél megfigyelhető viselkedés. Ilyenkor definíció szerint $g(r) \rightarrow 1$, a szerzők azonban az találták, hogy $g(r) \rightarrow 1 - c$, ahol $c \ll 1$. Ez egy egyszerű végesméret effektus [60]. Az aszimptotika meghatározásához az 1.16. ábrán $g(r) - 1 + c$ -t ábrázolták és azt találták, hogy $g(r) - 1 + c \sim r^{-2}$. Megfigyelhető, hogy deformált minta esetén a skálázás nagyobb tartományon teljesül, továbbá, hogy a levágás $100\ \text{nm}$ -nél következik be, ami nagyobb mint a legnagyobb egyenes diszlokáció szegmens $66\ \text{nm}$ -es hossza, tehát a jelenséget egyértelműen nem a diszlokációk szakaszonként lineáris reprezentációja eredményezi.

El-Azab és munkatársai is végeztek hasonló vizsgálatokat a ParaDIS program segítségével (lásd 1.2.2. fejezet) [61, 62]. Egyrészt megállapították, hogy a térbeli korrelációk a várakozásoknak megfelelően különböző irányokban igen erős inhomogenitásokat mutatnak (hasonlóan a két dimenziós 1.14. ábrához). Ezen kívül térbeli, kb. μm hosszúságkálájú periodicitásokat fedeztek fel a korrelációkban. Ennek értelmezése azért is nehézkes, mert a deformált minta $4,77\ \mu\text{m}$ oldalhosszúságú kocka volt, tehát nem zárható ki a méreteffektus. Ezen kívül a diszlokáció sűrűség értéke nincs feltüntetve, így nem lehetséges az eredmények összehasonlítása a korábbi adatokkal.



1.16. ábra. Három dimenziós diszkrét diszlokációk szimulációkkal meghatározott g párkorrelációs függvény. Jól megfigyelhető az r^{-2} típusú lecsengés, melynek levágása növekszik a deformációval. [60].

1.5. Diszlokációk kontinuum modellje

Diszlokációk dinamikájának modellezésére az 1.2. fejezetben már bemutattuk a diszkrét diszlokáció dinamikát, amely figyelembe veszi a rendszert alkotó összes egyedi diszlokációt. Gyakorlati szempontból azonban ez a leírás gyakran túlságosan részletes, továbbá a mai számítógépes lehetőségek még mindig elég erős korlátot jelentenek mind a szimulációs térfogat méretére (néhány μm), mind az elérhető legalacsonyabb deformációs sebességre (1 s^{-1}) nézve. A kontinuum modellezés célja a diszlokációk eloszlását térbeli változókkal, azaz elként sűrűségekkel leírni. A diszlokációk mozgásegyenlete helyett a sűrűségek evolúcióját leíró egyenleteket kell megadni. Egy ilyen modellt a mérnöki gyakorlat rendkívül széleskörűen tudna alkalmazni.

Több kutatócsoport is foglalkozik ilyen kontinuum modell kidolgozásával, ezek közül mutatunk be néhányat röviden, ezt követően Groma két dimenziós modelljét nagyobb részletességgel ismertetjük.

1.5.1. Fenomenológikus modellek

Aifantis és munkatársai a feszültség és deformáció között fennálló hagyományos lokális összefüggést gradiens jellegű tagokkal egészítették ki [63, 64]:

$$\tau(\gamma) = f(\gamma, \dot{\gamma}, T) - c\nabla^2\gamma - \bar{c}(\nabla\gamma)^2, \quad (1.15)$$

ahol γ jelöli a tértől függő deformációt, f a hagyományos feszültség-deformáció reláció (mely függhet a $\dot{\gamma}$ deformációs sebességtől és a T hőmérséklettől is), τ a feszültség, c és $\bar{\tau}$ pedig anyagi paraméterek. Látható, hogy dimenzionális okokból ez utóbbi paraméterekkel egy hosszúságskála kerül bevezetésre az egyenletben. Ennek a paraméternek a fizikai eredete nem ismert. Ennek ellenére, a bemutatott elv szerint konstruált modellek számos gyakorlati alkalmazásban igen sikeresnek bizonyultak.

1.5.2. Három dimenziós modellek

Több próbálkozás is született három dimenziós kontinuum modellek megalkotására. A számolás menete minden esetben hasonló. Diszkrét diszlokáció vonalak leírásából indulnak ki, majd egy átlagoló (angolul coarse graining) eljárással származtatják a kontinuum egyenleteket. A különbség többnyire a diszlokációk reprezentációjában van.

Elsőként El-Azab publikált ilyen modellt [65], melyben az alapvető mennyiség a $\Psi^i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \theta, t)$ eloszlásfüggvény. Ennek definíciója szerint $\Psi^i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \theta, t)d^3r d^3v d\theta$ az i -edik csúszási rendszerben a megadott helyen a θ orientációjú diszlokációk teljes hosszát adja meg a $d^3r d^3v d\theta$ elemi térfogatban. Felhasználva, hogy a diszlokáció sűrűség tenzor integrálja állandó, El-Azab kinetikus egyenleteket vezetett le a fenti mennyiségekre. Az egyenletekben figyelembe vette a diszlokáció keletkezést és annihilációt, továbbá a keresztcsúsztást is. A modell tehát elég általános, éppen ezért a gyakorlati alkalmazás igen körülményessé válik. Súlyos hiányossága a modellnek, hogy a diszlokáció korrelációk teljes egészében el vannak benne hanyagolva, ezáltal egy átlagtér közelítésként értelmezhető. A szerző ezért a későbbiekben a három dimenziós diszlokációk korrelációs tulajdonságait kezdte vizsgálni (lásd 1.4. fejezet) [61, 62].

Hochrainer és munkatársai tovább bővítették az El-Azab által javasolt fáziszetret, és változóként a diszlokációk görbületi sugarát is figyelembe vették [66, 67]. Az absztrakt matematikai modelltől ismét kinetikus egyenletek adódnak az eloszlásokra. A korrelációkat félfenomenológikusan, egy gradiens jellegű tag bevezetésével veszik figyelembe [67].

A Sedláček és munkatársai által javasolt kontinuum modell az eddig bemutatott két példa között helyezkedik el [68]. A görbület nincs figyelembe véve, de az evolúciós egyenletek egyébként megegyeznek Hochrainer egyenleteivel. Legfrissebb

publikációjukban ez a csoport is gradienstagok bevezetésével próbálkozik [69].

1.5.3. Groma két dimenziós kontinuum elmélete

Tekintsük az 1.2.1. fejezetben bevezetett két dimenziós diszlokáció modellt egyszerűes csúszás esetén az (1.1) mozgásegyenlettel. Az alábbiakban ennek a rendszernek a statisztikus módszerekkel történő leírását mutatjuk be [71].

Eloszlásfüggvények hierarchiája

A statisztikus fizikában a rendszer állapotát az eloszlásfüggvény írja le. Esetünkben, mivel a mozgásegyenlet elsőrendű, az eloszlásfüggvény csak a diszlokációk helykoordinátáitól függ, azaz

$$f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) d^2 r_1 d^2 r_2 \dots d^2 r_N \quad (1.16)$$

annak a valószínűsége, hogy valamely t időpontban az összesen N darab diszlokáció (melyek előjele rendre s_1, s_2, \dots, s_N) éppen az $\mathbf{r}_1 \in \mathbb{R}^2$, $\mathbf{r}_2 \in \mathbb{R}^2$ stb. pontok valamely piciny $d^2 r_1, d^2 r_2$ stb. környezetében található.

Feltéve, hogy a diszlokációs szám állandó, $f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}$ -re teljesülnie kell az alábbi azonosságoknak:

$$\begin{aligned} & f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) d^2 r_1 d^2 r_2 \dots d^2 r_N = \\ & = f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{v}_1 \Delta t, \mathbf{r}_2 + \mathbf{v}_2 \Delta t, \dots, \mathbf{r}_N + \mathbf{v}_N \Delta t, t + \Delta t) \cdot \\ & \quad \cdot d^2(\mathbf{r}_1 + \mathbf{v}_1 \Delta t) d^2(\mathbf{r}_2 + \mathbf{v}_2 \Delta t) \dots d^2(\mathbf{r}_N + \mathbf{v}_N \Delta t). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Érdeemes kihangsúlyozni, hogy konzervatív rendszereknél a fáziscella térfogata megmarad, így egy szigorúbb állítás is kimondható az eloszlásfüggvényre. A mi esetünkben az (1.17) egyenletből kell kiindulnunk. Egyszerű átalakítással

$$\frac{\partial f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} [f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \mathbf{v}_i] = 0 \quad (1.18)$$

adódik.⁴ Itt \mathbf{v}_i helyébe behelyettesíthető az (1.1) mozgásegyenlet, így egy zárt egyenlet kapható $f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}$ időfejlődésére. Ennek megoldása azonban ugyanolyan nehéz,

⁴Megjegyezzük, hogy itt és a későbbiekben is a $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ divergenciát vagy gradienst jelöl.

mint az eredeti N db. mozgásegyenlet párhuzamos megoldása. Ezen felül általában nincs szükségünk az összes diszlokáció helyének pontos ismeretére, éppen egy egyszerűbb kontinuum leíráshoz használható mennyiséget keresünk. Ennek érdekében a konzervatív rendszerek esetén alkalmazott módszerekhez (lásd pl. [70]) nagyon hasonlóan járunk el. Vezessük be a k -ad rendű eloszlásfüggvényeket az alábbi definícióval:

$$f_k^{s_1, \dots, s_k}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, t) := \sum_{s_{k+1}=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} d^2 r_{k+1} \dots \int_{\mathbb{R}^2} d^2 r_N \cdot f_N^{s_1, s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t). \quad (1.19)$$

Ekkor az (1.17) egyenletet integrálva az $\mathbf{r}_{k+1}, \dots, \mathbf{r}_N$ változók szerint és összegezve az s_{k+1}, \dots, s_N előjelekre, továbbá felhasználva az

$$f_N^{s_1, \dots, s_j, \dots}(\dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, t) = f_N^{\dots s_j, \dots s_1, \dots}(\dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, t) \quad (\forall i, j) \quad (1.20)$$

azonosságot, végeredményben a k -ad rendű eloszlásfüggvényre az alábbi egyenlet adódik:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_k^{s_1, \dots, s_k}}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} [f_k^{s_1, \dots, s_k} \mathbf{F}^{s_i, s_j}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] + \\ + \sum_{i=1}^k \sum_{s_{k+1}=\pm 1} (N_{s_{k+1}} - k_{s_{k+1}}) \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} [f_{k+1}^{s_1, \dots, s_{k+1}} \mathbf{F}^{s_i, s_{k+1}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{k+1})] d^2 r_{k+1} + \\ + \sum_{i=1}^k \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} [f_k^{s_1, \dots, s_k} \mathbf{F}_{\text{ext}}^{s_i}] = 0, \end{aligned} \quad (1.21)$$

ahol bevezettük a pozitív és negatív diszlokációk teljes számát (N_+ ill. N_-) és az s_1, \dots, s_k számokban előforduló pozitív ill. negatív indexek számát (k_+ ill. k_-).

Jól látható, hogy a k -ad rendű eloszlásfüggvényre vonatkozó egyenlet változóként tartalmazza $f_{k+1}^{s_1, \dots, s_{k+1}}$ -et. Az egyenletek ilyen rendszerét Bogoljubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon (BBGKY) hierarchiának nevezzük, és igen gyakran használatosak a hidrodinamikában és plazmafizikában [70].

A későbbiekben használni fogjuk a $k = 1$ és a $k = 2$ -höz tartozó egyenleteket,

ezért célszerű ezeket részletesen leírni. Először vezessük be a k -ad rendű sűrűségfüggvényeket az alábbi definícióval:

$$\rho_k^{s_1, \dots, s_k}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, t) := \frac{N_+! N_-!}{(N_+ - k_+)! (N_- - k_-)!} \int_k^{s_1, \dots, s_k}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, t). \quad (1.22)$$

Könnnyen látható, hogy

$$\int_{\mathbb{R}^2} \rho_1^\pm(\mathbf{r}, t) d^2r = N_\pm, \quad (1.23)$$

és

$$\int_{\mathbb{R}^2} \rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) d^2r = \begin{cases} (N_{s_1} - 1) \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t), & \text{ha } s_1 = s_2, \\ N_{s_1} \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t), & \text{ha } s_1 \neq s_2. \end{cases} \quad (1.24)$$

Ezek a függvények a természetes sűrűségfogalmaknak felelnek meg, azzal a kitételrel, hogy esetünkben kétféle (+ és -) részecske különböztethető meg. Az így bevezetett sűrűségekre (1.21) és (1.1) alapján

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1^+(\mathbf{r}_1, t)}{\partial t} + Bb \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \left\{ \rho_1^+(\mathbf{r}_1, t) \tau_{\text{ext}} + \right. \\ \left. + \int_{\mathbb{R}^2} [\rho_2^{++}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) - \rho_2^{+-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)] \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^2r_2 \right\} = 0, \end{aligned} \quad (1.25)$$

ill.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1^-(\mathbf{r}_1, t)}{\partial t} + Bb \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \left\{ -\rho_1^-(\mathbf{r}_1, t) \tau_{\text{ext}} + \right. \\ \left. + \int_{\mathbb{R}^2} [\rho_2^{-+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) - \rho_2^{--}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)] \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^2r_2 \right\} = 0. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Ezzel megadtuk az egyrészecske sűrűségfüggvények evolúcióját. Célszerű azonban bevezetni a

$$\rho(\mathbf{r}, t) := \rho_1^+(\mathbf{r}, t) + \rho_1^-(\mathbf{r}, t) \quad (1.27)$$

teljes és

$$\kappa(\mathbf{r}, t) := \rho_1^+(\mathbf{r}, t) - \rho_1^-(\mathbf{r}, t) \quad (1.28)$$

előjeles diszlokáció sűrűséget. Az előbbi kísérleti úton meghatározható, míg az

utóbbi kapcsolatba hozható a plasztikus nyírás (γ) gradiensevel:

$$\kappa = -\frac{\mathbf{b}}{b^2} \frac{\partial \gamma}{\partial \mathbf{r}}, \quad (1.29)$$

ezért κ -t geometriailag szükséges diszlokáció sűrűségnek is nevezik. Az ezekre vonatkozó egyenletek (1.25) és (1.26) összeadásával ill. kivonásával állíthatók elő.

A 4. fejezetben használni fogjuk a $k = 2$ -höz tartozó egyenletet is, melynek konkrét alakja:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)}{\partial t} + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \right) [\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \mathbf{F}^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \sum_{s_3 = \pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} \rho_3^{s_1, s_2, s_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t) \mathbf{F}^{s_1, s_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) d^2 r_3 + \\ & + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \sum_{s_3 = \pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} \rho_3^{s_1, s_2, s_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t) \mathbf{F}^{s_2, s_3}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) d^2 r_3 + \\ & + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} [\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \mathbf{F}_{\text{ext}}^{s_1}] + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} [\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \mathbf{F}_{\text{ext}}^{s_2}] = 0. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Önkonzisztens tér közelítés

A levezetett (1.21) hierarchia megoldásához továbbra is N egyenlet párhuzamos megoldására van szükség. Feltételezhető azonban, hogy a rendszer teljes leírásához nincs szükségünk a részletes $f_N^{s_1, \dots, s_N}$ ismeretére, hanem valamely kis k -ra $f_k^{s_1, \dots, s_k}$ már tartalmazza a rendszert jellemző legfontosabb tulajdonságokat. Így ha becslést tudunk adni $f_{k+1}^{s_1, \dots, s_{k+1}}$ -re, akkor egy zárt egyenletrendszerhez jutunk.

A leegyszerűbb lehetőség az, ha egyből $k = 1$ -nél megállunk. Groma és Balogh a kétrészecske sűrűségfüggvényeket az egyrészecske sűrűségfüggvények szorzataként állította elő [72, 73]:

$$\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t) \rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2, t). \quad (1.31)$$

Ez nem más, mint a térbeli korrelációk teljes elhanyagolása.

Az (1.31) közelítést behelyettesítve az (1.25), (1.26) egyenletekbe, a teljes és

előjeles diszlokáció sűrűsége az alábbi egyenletek adódnak:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \kappa(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] \} = 0, \quad (1.32)$$

$$\frac{\partial \kappa(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \rho(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] \} = 0, \quad (1.33)$$

ahol bevezettük a τ_{sc} „önkonzisztens” teret az alábbi definícióval:

$$\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) := \int_{\mathbb{R}^2} \kappa(\mathbf{r}', t) \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r'. \quad (1.34)$$

Ez tulajdonképpen nem más, mint a diszlokáció rendszer által az \mathbf{r} pontban létrehozott feszültség várható értéke. Azaz a megkonstruált kontinuum egyenletekben a diszlokációkra ható kontinuum erő az átlagos feszültség. Ez azt jelenti, hogy az (1.31) közelítés egy átlagtér elméletre vezetett.

Bár a korábbi levezetés során megköveteltük a diszlokációs szám megmaradását, a kapott egyenletek szerkezete lehetőséget ad a diszlokációs szám sokszorozódás beépítésére. Mivel a kristályban minden esetben diszlokáció dipólok keletkeznek, a geometriailag szükséges diszlokáció sűrűség – a teljessel ellentétben – nem változik, azaz (1.32)-hez egy forrástagnó adhatunk:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \kappa(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] \} = f(\rho, \kappa, \dots). \quad (1.35)$$

Groma és Balogh lineáris stabilitás analízist végzett az (1.32), (1.33) egyenleteken [72]. Kiderült, hogy forrástagnó nélkül a triviális megoldás stabil, azaz nem alakul ki diszlokáció mintázat. Egy olyan forrástagnó bevezetésével azonban, melyre $\partial f / \partial \rho > 0$, a megoldás már instabil lesz és periodikus szerkezet jön létre. Ezt a jóságot a szerzők később numerikus szimulációkkal is igazolták [73].

Korrelációs hatások

Az előző fejezetben bemutatott átlagtér közelítésnek két nagy hiányossága van. Egyrészt forrástagnó nélkül nem vezet mintázatképződésre, másrészt, ha a diszlokáció sűrűségekben nagy gradiensek alakulnak ki, a megoldás felrobban. Ez arra utal, hogy az alkalmazott (1.31) közelítés nem elegendő. Az egyetlen lehetséges továbblépés a diszlokáció–diszlokáció korrelációk figyelembe vétele. Ezt Groma és munkatársai az

alábbi módon tették meg [74].

Vezessük be a diszlokációs kétrészecske korrelációs függvényeket az alábbi definícióval:

$$d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) := \frac{\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)}{\rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t)\rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2, t)} - 1. \quad (1.36)$$

Az 1.4. fejezetben már részletesen foglalkoztunk a korrelációs függvényekkel. Fontos megjegyezni, hogy az ott bevezetett (1.13) definíció homogén rendszerek esetén ekvivalens az ittenivel. Korábban már megállapítottuk, hogy a korrelációs függvények rövid hatótávolságúak és néhány átlagos diszlokáció távolságon belül lecsengenek. Az is kiderült, hogy homogén rendszerekben ezek a függvények csak a $\sqrt{\rho_{\text{tot}}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ skálázott koordinátától függenek. Ez azt jelenti, hogy ha a rendszert lokálisan homogénnek vesszük, és feltételezzük, hogy a rendszer lokálisan mindig relaxált⁵, akkor alkalmazhatjuk az alábbi közelítést:

$$\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t)\rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2, t)[1 + d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]. \quad (1.37)$$

Ez azt jelenti, hogy $\rho_2^{s_1, s_2}$ -ben direkt helyfüggés csak az egyrészecske sűrűségek direkt helyfüggésén keresztül jelenik meg. Ez a közelítés lényegében megegyezik az első elvekből történő szerkezetszámolásoknál a kicserélődési energia becslésénél használt ún. „local density approximation”-nel. Ez azt jelenti, hogy (1.37)-ben a $d_2^{s_1, s_2}$ helyére a homogén relaxált rendszerekben numerikus úton meghatározott korrelációs függvényt kell írni, a lokális teljes diszlokáció értékkel megfelelően átskálázva.

Az (1.37) közelítés újabb lehetőséget teremt az (1.21) hierarchia levágására, szintén a $k = 1$ szinten. A részletes számolások mellőzésével az alábbi egyenletek adódnak [74]:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \kappa(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) - \tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] + \rho(\mathbf{r}, t)\tau_{\text{a}}(\mathbf{r}, t) \} = 0, \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial \kappa(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \rho(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) - \tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] + \kappa(\mathbf{r}, t)\tau_{\text{a}}(\mathbf{r}, t) \} = 0, \quad (1.39)$$

⁵Más szóval a lokális relaxációs idő jóval kisebb, mint a globális relaxációs idő.

ahol az újonnan bevezetett τ_{f} és τ_{b} tereket az alábbi módon definiáltuk:

$$\tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) := \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \rho(\mathbf{r}', t) d_{\text{a}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (1.40)$$

$$\tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) := \int_{\mathbb{R}^2} \kappa(\mathbf{r}', t) d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r'. \quad (1.41)$$

Megjegyezzük, hogy τ_{a} definíciója is egy ezekhez nagyon hasonló konvolúciós integrál, azonban egy egyszerű szimmetria elv (nevezetesen, hogy a pozitív és negatív előjelű diszlokációk sebessége éppen ellentétes kell legyen) alapján minden pontban teljesülnie kell a

$$\tau_{\text{a}}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.42)$$

relációnak. A fenti képletekben definiáltuk még a

$$d_{\text{a}}(\mathbf{r}, t) := [d_2^{+-}(\mathbf{r}, t) - d_2^{-+}(\mathbf{r}, t)]/2 \quad (1.43)$$

és a

$$d(\mathbf{r}, t) := [d_2^{++}(\mathbf{r}, t) + d_2^{--}(\mathbf{r}, t) + d_2^{+-}(\mathbf{r}, t) - d_2^{-+}(\mathbf{r}, t)]/4 \quad (1.44)$$

függvényeket is. Az (1.42) képlet segítségével végeredményben a kontinuum egyenletek az alábbi alakot öltik:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \kappa(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) - \tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] \} = 0, \quad (1.45)$$

$$\frac{\partial \kappa(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + B\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{ \rho(\mathbf{r}, t) [\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) - \tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) + \tau_{\text{ext}}] \} = 0. \quad (1.46)$$

Ismerve a korrelációs függvények azon speciális tulajdonságát, hogy rendkívül gyorsan exponenciálisan nullához tartanak, lehetőség van az (1.40), (1.41) definíciók közelítésére. Hely szerint Taylor sorba fejtvé bennük a ρ és κ függvényeket, és megállva az első nem eltűnő tagnál, megállapítható, hogy

$$\tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) = \frac{GC_{\text{d}}}{2} b \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (1.47)$$

és

$$\tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{GD_{\text{d}} \mathbf{b}}{\rho(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial \kappa(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}}, \quad (1.48)$$

ahol C_{d} és D_{d} a korrelációs függvények alakjától függő dimenzió nélküli konstan-

sok [74].

Ezen végső képleteknek a fizikai értelmezése is megadható. Mivel a kristályos anyagokban a folyásfeszültség Taylor képletének értelmében a diszlokáció sűrűség négyzetgyökével arányos, τ_l lokális folyásfeszültségként interpretálható. A másik korrelációk okozta tag (τ_b) pedig lényegében megegyezik az 1.5.1. fejezetben bemutatott fenomenologikus modellekben bevezetett gradiens tagokkal. Ez utóbbi eredmény mutatja a levezetett kontinuum modell erejét: fizikai magyarázatot ad a gradiens tag előtt megjelenő hosszúság paraméter mikroszkopikus eredetére (mely itt a diszlokációk átlagos távolsága). A gradiens tag révén a modell képes számot adni a mérethatásokról, ellentétben az előző fejezetben bemutatott átlagér közelítéssel.

A levezetett egyenleteket több gyakorlati példán is tesztelték. Elsőként Groma és munkatársai egy végtelen lemez nyírását vizsgálták diszkrét és kontinuum dinamikával [74]. A C_d és D_d értékek megfelelő megválasztásával sikerült tökéletes egyezésre jutni a két eset között. Ugyanezt az analízist Yefimov és munkatársai egy jóval általánosabb esetre is elvégezték [75, 76]. Egy fém mátrixú kompozit anyag nyírását vizsgálták a kiválások különböző geometriája mellett. Ismét tökéletes egyezést mutatott a feszültség-deformáció görbe, a diszlokáció sűrűség és a geometriailag szükséges diszlokáció sűrűség is a diszkrét és a kontinuum eset között.

A kontinuum elmélet variációs megfogalmazása és a diszlokációk Debye árnyékolása

A bemutatott kontinuum elmélet egyszeres csúszásra vonatkozik. Gyakorlati szempontból azonban nélkülözhetetlen ennek általánosítása többszörös csúszásra. Mint kiderült ez korántsem triviális feladat, és a fentihez hasonló levezetés nem végezhető el. Az alábbiakban Groma és Györgyi fázistér elméletét mutatjuk be, mely a már megismert egyenletekre vezet [77], viszont lehetőséget teremt általánosításra, így a többszörös csúszás bevezetésére (lásd 5. fejezet). Ezt követően, a módszer első alkalmazásaként a diszlokációk Debye árnyékolásának elméletét mutatjuk be [78].

Tekintsük az 1.2.1. fejezetben bevezetett két dimenziós modellt. Ebben az esetben a feszültségtenzornak csupán a σ_{11} , σ_{22} és σ_{12} komponense különbözik zérustól. Vezessük be a χ Airy-féle feszültségfüggvényt vagy más néven feszültség potenciált az alábbi definícióval:

$$\sigma_{11} = -\frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{22} = -\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}, \quad \sigma_{12} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial y}. \quad (1.49)$$

Ekkor a $\operatorname{div} \sigma = 0$ egyensúlyi feltétel automatikusan teljesül. Tekintsük most az alábbi funkcionált

$$E[\chi, \kappa] := \int_{\mathbb{R}^2} \left[-\frac{1-\nu}{4\mu} (\Delta\chi)^2 + b\chi \frac{\partial \kappa}{\partial y} \right] d^2r. \quad (1.50)$$

Könnyen belátható, hogy az első tag extrémuma éppen egy χ feszültségfüggvénnyel jellemzett állapot rugalmas energiája, míg a második (χ -vel jellemzett) külső feszültségtérbe helyezett diszlokációk kölcsönhatási energiáját adja meg [77]. Mivel a diszlokációk száma megmaradó mennyiség, a rájuk vonatkozó evolúciós egyenletek az alábbi alakban adhatók meg:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\pm}^{\pm} + \operatorname{div} \mathbf{j}_{\pm} = 0, \quad (1.51)$$

ahol \mathbf{j}_+ és \mathbf{j}_- a pozitív és negatív diszlokációk árama, mely párhuzamos a \mathbf{b} Burgers vektorral. Irreverzibilis termodinamikai megfontolások alapján az áramok a kémiai potenciálok lineáris függvényei, azaz

$$\begin{aligned} j_+ &= M_{++} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta E}{\delta \rho_+} + M_{+-} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta E}{\delta \rho_-}, \\ j_- &= M_{--} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta E}{\delta \rho_-} + M_{-+} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta E}{\delta \rho_+}, \end{aligned} \quad (1.52)$$

ahol az M_{ij} mennyiségek mobilitási paraméterek. Válasszuk meg ezeket az alábbi módon:

$$\begin{aligned} j_+ &= \frac{B}{2} \rho_+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta E}{\delta \rho_+} - \frac{\delta E}{\delta \rho_-} \right) = B \rho_+ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta E}{\delta \kappa}, \\ j_- &= \frac{B}{2} \rho_- \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta E}{\delta \rho_-} - \frac{\delta E}{\delta \rho_+} \right) = -B \rho_- \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta E}{\delta \kappa} \end{aligned} \quad (1.53)$$

ekkor ezeket (1.51)-be helyettesítve éppen az önkonzisztens tér elméletből kapott (1.32), (1.33) egyenletekhez jutunk.

A bevezetett (1.50) funkcionálon alapuló elmélet tehát képes reprodukálni a diszlokációk mozgásegyenletéből származtatott kontinuum egyenleteket abban az esetben, amikor a korrelációk teljesen el vannak hanyagolva. A továbblépés érdekében

definiáljuk az alábbi S funkcionált

$$S[\rho_+, \rho_-] := - \int_{\mathbb{R}^2} \left(\rho_+ \ln \frac{\rho_+}{\rho_0} + \rho_- \ln \frac{\rho_-}{\rho_0} \right) d^2r \approx \int_{\mathbb{R}^2} \left(\frac{\kappa^2}{2\rho} + \rho \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right) d^2r = S[\kappa, \rho], \quad (1.54)$$

mely alakjában keveredési entrópiára hasonlít. A κ -val és ρ -val kifejezett alak levezetésénél feltettük, hogy $|\kappa| \ll \rho$. Most tekintsük az

$$F[\chi, \kappa, \rho] := E[\chi, \kappa] - T_{\text{eff}} S[\kappa, \rho] = \int_{\mathbb{R}^2} \left[-\frac{1-\nu}{4\mu} (\Delta\chi)^2 + b\chi \frac{\partial\kappa}{\partial y} + T_{\text{eff}} \frac{\kappa^2}{2\rho} \right] d^2r + F_c[\rho] \quad (1.55)$$

szabadenergia jellegű mennyiséget, ahol F_c csak ρ -tól függő funkcionál. A fenti képletekben ρ_0 és T_{eff} paraméterek, ez utóbbit termodinamikai analógia alapján effektív hőmérsékletnek nevezünk. A bevezetett F funkcionálon ismét elvégezhető a fent bemutatott variáción alapuló eljárás. Kiderült, hogy ha $T_{\text{eff}} = GD_d b^2$ és feltesszük, hogy $|\kappa| \ll \rho$ és $\partial\kappa/\partial x$ a $\partial\rho/\partial x$ nagyságrendjébe esik, akkor a származtatott egyenletekben a τ_{sc} önkonzisztens és τ_{ext} külső tér mellett éppen a τ_b gradienstag (1.48) alakja jelenik meg [77].

Fontos megemlíteni, hogy a fentiek alapján az egyensúlyi állapototban teljesül, hogy

$$\frac{\delta F}{\delta\chi} = 0, \quad \frac{\delta F}{\delta\kappa} = 0. \quad (1.56)$$

Ez azt jelenti, hogy a szabadenergia nem a globális minimumát veszi fel, hiszen ρ szerint nem kell variálni. Ez azt az egyszerű fizikai tényt fejezi ki, hogy a diszlokációk csak a csúszósíkjukban mozoghatnak, tehát a kezdeti diszlokáció sűrűsége a rendszer nem tudja teljesen „elfelejteni”.

A diszlokáció árnyékolás problémájának kezelésére képzeljük el az alábbi kísérletet. Egy homogén relaxált diszlokáció rendszerbe behelyezünk egy külső, fixen tartott diszlokációt. Ennek hatására a többi diszlokáció elmozdul és egy új egyensúlyi állapot alakul ki. Mint látni fogjuk, az így kialakuló átlagos feszültségtér gyorsabban cseng le, mint egy különálló diszlokáció feszültségtere (mely végtelen közegben $1/r$ -rel arányos, lásd (1.2)).

A hozzáadott pozitív diszlokáció egy $\kappa_{\text{ext}} = \delta(\mathbf{r})$ előjeles diszlokáció sűrűséggel írható le (ahol a külső diszlokációt az origóba helyeztük), ekkor a rendszer teljes

szabadenergiája

$$F_{\text{tot}}[\chi, \kappa] = F[\chi, \kappa] + \int_{\mathbb{R}^2} b\chi \frac{\partial}{\partial y} \delta(\mathbf{r}) d^2r. \quad (1.57)$$

Az egyensúlyi állapotot csak a dinamikai egyenletek megoldásával kaphatjuk meg, hiszen az (1.56) egyensúlyi feltételek csak két egyenletet adnak a három változóra (χ, ρ, κ) . Azonban ha első közelítésként feltesszük, hogy ρ térben állandó $(\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_{\text{tot}})$, akkor az (1.56) egyenletekből

$$\Delta^2 \chi = q \frac{\partial}{\partial y} [\kappa(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r})], \quad (1.58)$$

$$b \frac{\partial \chi}{\partial y} = T_{\text{eff}} \frac{\kappa}{\rho_{\text{tot}}} \quad (1.59)$$

kapható, ahol $q = 4\pi Gb$. A két egyenletből a κ előjeles diszlokáció sűrűsége az alábbi egyenlet adódik:

$$\Delta^2 \kappa = 4k_0^2 \frac{\partial^2 \kappa}{\partial y^2} + 4k_0^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \delta(\mathbf{r}), \quad (1.60)$$

ahol

$$k_0 = \sqrt{\frac{\pi G b^2 \rho_{\text{tot}}}{T_{\text{eff}}}}. \quad (1.61)$$

A fenti (1.60) egyenlet analitikusan megoldható végtelen határfeltételek mellett, a végeredmény:

$$\kappa(\mathbf{r}) = k_0^2 \pi \left[\frac{y \sinh(k_0 y)}{r} K_1(k_0 r) - \cosh(k_0 y) K_0(k_0 r) \right], \quad (1.62)$$

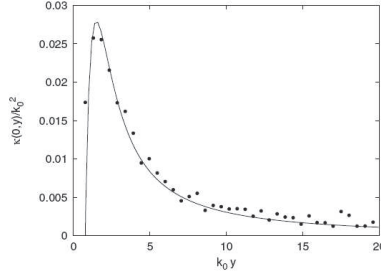
ahol K_0 a nulladik és K_1 az első módosított másodrendű Bessel-függvény.

Fontos megemlíteni, hogy az (1.62) megoldás az y tengely mentén hatványfüggvény szerint cseng le:

$$\kappa(0, y) = \sqrt{\frac{k_0}{32\pi}} \frac{1}{|y|^{3/2}}. \quad (1.63)$$

Ez az eredmény ellentmond a korábbi, 1.4. fejezetben bemutatott megfontolásoknak, melyek mindenütt exponenciális lecsengést jósoltak. Az 1.17. ábrán a diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációkból számolt κ függvény y tengely menti metszete és az illesztett (1.63) görbe látható. Az illesztésből $k_0 \approx 4,2\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ adódott. Fontos megjegyezni, hogy a szerzők az előjeles diszlokáció sűrűségét a korrelációs függvé-

nyekkel közelítették a $\kappa(\mathbf{r}) \sim [d_2^{++}(\mathbf{r}) - d_2^{+-}(\mathbf{r})]$ összefüggéssel. Ennek az intuitív kapcsolatnak az elméleti megalapozásával a 4. fejezetben fogunk foglalkozni.



1.17. ábra. A külső diszlokáció által indukált geometriailag szükséges diszlokáció sűrűség az y tengely mentén. A pontok a szimulációból kapott numerikus adatokat jelölik, míg a folytonos vonal az illesztett (1.63) elméleti megoldás [77].

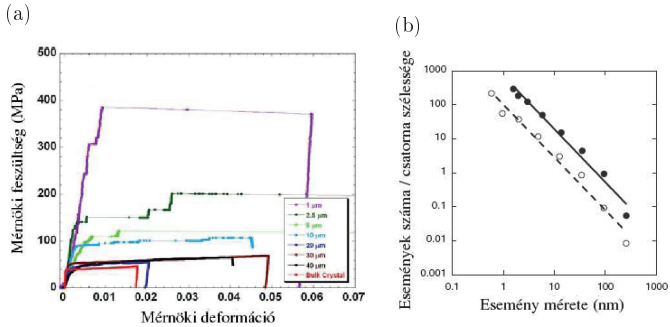
1.6. Diszlokációk dinamikájának jellegzetességei

1.6.1. Diszlokáció lavinák

A plasztikus deformáció makroszkopikus skálán általában homogénnek tekinthető. A mikronos skála környékén azonban a fluktuációk már nem hanyagolhatóak el. A gyakorlati alkalmazások szempontjából igen fontos ezen jelenségek mély megértése. Ebben a fejezetben néhány ilyen aktívan kutatott példát mutatunk be.

Weiss és munkatársai jég egykristályok deformációja során kibocsátott akusztikus jeleket vizsgálták [79]. A vizsgált anyag előnyei közé tartozik, hogy direkt megfigyeléssel kiszűrhetőek a repedésképződésből származó zajok. Kiderült, hogy a diszlokációk időszakosan, lavinaszerűen mozdulnak el, és az ilyen egyedi események során felszabaduló energia eloszlása skála független, azaz nagy értékekre hatványfüggvény szerű viselkedést mutat [79]. Miguel és munkatársai numerikus szimulációval vizsgálták ugyanezt a mechanizmust [33]. Az alkalmazott modell és dinamika lényegében megegyezik az 1.2.1. fejezetben bemutatott két dimenziós rendszerrel. A kapott energiaspektrum ebben az esetben is hatványfüggvény szerint cseng le kb. 1,6 – 1,8-as kitevővel.

A lavinaszerű viselkedést később kis méretű Ni egykristályokon is vizsgálták. A Bevezetőben már megemlített kísérletben Dimidik és kollégái ún. mikropillérek (lásd 1. ábra a Bevezetőben) feszültség deformáció görbéit vették fel [12, 13]. Az 1.18. ábrán jól látható, hogy a görbe kis méreteknél már nem folytonos, azon különböző méretű deformáció ugrások jelentkeznek.



1.18. ábra. (a) Mikropillérek összenyomása során mért feszültség deformációs görbék [12]. A különböző átmérőjű nikkell pilléreket különböző színek jelölik, a piros a tömbi nikkelle vonatkozik. (b) A feszültség deformációs görbéken látható deformáció ugrások eloszlása [13].

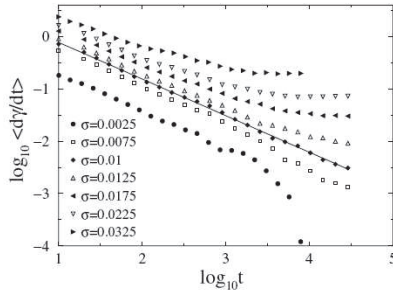
A bemutatott jelenséget Csikor és munkatársai három dimenziós diszlokáció dinamikai szimulációkkal is vizsgálták [14], melynek során a Weygand által kifejlesztett programot (lásd 1.2.2. fejezet) használták. Összenyomást végeztek kocka alakú Al mintákon, egyszeres és többszörös csúszás, feszültség és deformáció vezérlés, keresztcsúszás ill. szemcsehatár jelenléte esetén. Megállapították, hogy a lavinaméret eloszlásra minden esetben ugyanaz adódik, és az pontosan megegyezik a Dimidik által mérésrel meghatározott eloszlással. A jelenség gyakorlati jelentőségére is rávilágítottak, amikor bemutatták, hogy a sztochasztikus jellegű lavinák tulajdonképpen lehetlenné teszik vékony drótok tervezhető alakítását [14].

Ha egy diszlokáció elhagy egy egykristályt, akkor annak felületén egy lépcső keletkezik. A diszlokáció dinamika skála független lavinaszerű viselkedése ezért a fémek felületének tanulmányozásával is vizsgálható. Schwerdtfeger és munkatársai deformált KCl mintákon a lépcsők méretét a lavinák nagyságával megegyezően skálafüggetlennek találták [80]. Ez azt jelenti, hogy a lavinák nem csak méretben,

hanem hely szerint is erősen fluktuálnak.

1.6.2. Plasztikus folyás

Köztudott, hogy diszlokáció rendszerek egy bizonyos feszültségnél megfolynak. Habár plaszticitás már a folyásfeszültség alatt is tapasztalható, ez azonban nem stacionárius módon zajlik le. Ennek a jelenségnek a modellezésére és statisztikus úton történő leírására először Miguel és munkatársai tettek kísérletet [34]. Két dimenziós rendszereket (lásd 1.2.1. fejezet) először zérus külső feszültség mellett relaxáltattak random kezdőállapotból, majd egy konstans külső feszültséget alkalmaztak. Kiderült, hogy minden feszültségértéknél a deformációs sebesség kezdetben az idő kb. $-2/3$ -ik hatványával csökken. Ez a jelenség a 20. század eleje óta ismert Andrade folyás. Ez a kezdeti szakasz előbb utóbb véget ér, és a külső feszültségtől függően a deformációs sebesség vagy egy konstans értékhez, vagy zérushoz tart (lásd 1.19. ábra). Ez különbözteti meg tehát a megfolyt és permanens állapotot.



1.19. ábra. A deformációs sebesség ($d\gamma/dt$) egy konstans külső feszültség (σ) alkalmazása esetén [34]. Jól látható, hogy a folyásfeszültség kb. 0,01 (a feszültség egységeihez lásd [34]).

A plasztikus folyás és a lavinákon keresztül megjelenő fluktuációk tárgyalására Zaiser egy sztochasztikus kontinuum modellt javasolt [81]. Ebben a folyásfeszültséget egy véletlen változó írja le az anyagban. Ennek meghatározása során figyelembe veszik a diszlokációk hosszú hatótávolságú feszültségterét, az alakítási keményedést és egy véletlen zajt. Innen a megfolyás a rugalmas felületek kiszakadására (angolul „elastic manifold depinning”) vonatkozó elmélet keretei között tárgyalható, me-

lyet korábban sikeresen alkalmaztak a lavinaméret eloszlás leírására is [82]. Bár az említett modell visszaadja a plasztikus folyás legfontosabb jellemzőit, mégis annak mélyebb fizikai okairól eredeténél fogva nem képes számot adni.

2. fejezet

Az anharmonicitás hatása a mintázatképződésre [A1]

A diszlokációk létra és mátrix szerkezetét valamint kialakulásuk modelljeit az 1.1. fejezetben mutattuk be. Mint említettük, az állandósult csúszási sávok (PSB-k) a kristály felületén egy dudorban végződnek, ami a vakancia típusú dipólok dominanciájára utal. Erre a hipotézisre több kialakulási modell is épül. Brown és Nabarro megmutatta, hogy ha a diszlokációkat körülvevő közeget a nemlineáris rugalmasságtan keretei között vizsgáljuk, a vakancia és intersticiális típusú dipólok energiája különbözni fog [27]. Ez magyarázatot adhat a vakanciák felhalmozódására.

Ebben a fejezetben a Brown és Nabarro felvetette problémát vizsgáljuk, azaz a diszlokációk viselkedését akkor, ha túllépünk a lineáris rugalmasságtanon. A korábbiakkal ellentétben sikerül egy analitikus képletet levezetni, és a mintázatképződést numerikus szimulációval is vizsgáljuk.

2.1. A különböző eredetű nemlineáris jelenségek összehasonlítása

Mindenek előtt vegyük számba a különböző nemlineáris jelenségeket, amelyek diszlokációk jelenlétében felléphetnek:

- Nagy diszorziók esetén a teljes deformáció az alábbi alakba írható:

$$\epsilon_{ij}^t = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i u_k \partial_j u_k), \quad (2.1)$$

ahol $u_i(\mathbf{r})$ jelöli az elmozdulás teret.

- Általában a teljes disztorzió nem egyszerűen a β_{ij} rugalmas és a β_{ij}^p plasztikus disztorzió összege, hanem általában feltehető, hogy egy alakváltozást szenvedett test végső állapotába két lépésen keresztül jut [83], azaz

$$\partial_i u_j = (\delta_{ik} + \beta_{ik})(\delta_{kj} + \beta_{kj}^p) - \delta_{ij} = \beta_{ij} + \beta_{ij}^p + \beta_{ik}\beta_{kj}^p. \quad (2.2)$$

- A feszültség és a deformáció között általában lineáris összefüggést feltételezünk, ez a Hooke törvény. Általános esetben azonban a lineáris tag mellett figyelembe vehetünk egy kvadratikusát is, azaz

$$\sigma_{ij} = L_{ijkl}\epsilon_{kl} + K_{ijklmn}\epsilon_{kl}\epsilon_{mn}, \quad (2.3)$$

ahol σ_{ij} a rugalmas feszültség tenzor, ϵ_{kl} a rugalmas deformáció tenzor, L_{ijkl} és K_{ijklmn} pedig az első- és másodrendű rugalmas állandók. Ezt a jelenséget rugalmas anharmonicitásnak is szokás nevezni.

Chantasiriwan és Milstein molekula dinamikai szimulációi alapján a másod- és elsőrendű rugalmas állandók aránya $K_{1111}/L_{11} \approx -10$ [84]. Mérések során Sommer és munkatársai ugyanerre a mennyiségre $-9,8$ -at kaptak acél esetén [85]. Mindez azt mutatja, hogy az anharmonicitáshoz tartozó „csatolási paraméter” egy nagyságrenddel nagyobb, mint a másik két nemlineáris jelenségnél, ahol ez az érték $0,5$. Ezért a továbbiakban (Brown és Nabarro korábbi munkájához hasonlóan [27]) a teljes deformációt az

$$\epsilon_{ij}^t = (\partial_i u_j + \partial_j u_i)/2 \quad (2.4)$$

alakban adjuk meg, míg a teljes deformáció a rugalmas és a plasztikus deformáció összege:

$$\epsilon_{ij}^t = \epsilon_{ij} + \epsilon_{ij}^p. \quad (2.5)$$

A feszültség és a rugalmas deformáció közti összefüggést pedig a (2.3) alakban adjuk meg.

2.2. Diszlokációk variáción alapuló térelmélete

A rugalmas közegbe ágyazott diszlokációk térelméletét Kröner és Kosevich már évtizedekkel ezelőtt kidolgozta [86]. Az alábbiakban ennek variáción alapuló elméletté való átfogalmazását mutatjuk be. Az új módszer segítségével az anharmonicitás könnyen figyelembe vehető.

A klasszikus térelmélet alapvető mennyisége az inkompatibilitás, melyet az alábbi összefüggés definiál:

$$\eta_{ij} := -\mathcal{I}_{ijmn}\epsilon_{mn}^p, \quad (2.6)$$

ahol $\mathcal{I}_{ijmn} := -e_{ikm}e_{jln}\partial_k\partial_l$ másodrendű differenciáloperátor. Itt e_{ijk} a Levi-Civita szimbólumot jelöli. Megjegyezzük, hogy az \mathcal{I}_{ijmn} operátort inkompatibilitásnak nevezik és gyakran az inc szimbólummal jelölik. Az α_{ij} diszlokáció sűrűség tenzor és az inkompatibilitás között az alábbi összefüggés áll fenn:

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} (e_{jlm}\partial_l\alpha_{im} + e_{ilm}\partial_l\alpha_{jm}). \quad (2.7)$$

(A diszlokáció sűrűség tenzor definíciójához lásd [86]-t.)

A rugalmas deformáció és a feszültség közötti összefüggést egy konstitutív egyenlettel adhatjuk meg (mely lehet a Hooke törvény vagy az általánosabb (2.3) összefüggés). Általánosan azt írhatjuk, hogy

$$\epsilon_{ij} = -\frac{\delta H[\sigma_{ij}]}{\delta \sigma_{ij}}, \quad (2.8)$$

ahol a H entalpia funkcionál megadásával (mely a feszültség függvénye) éppen a kívánt konstitutív relációt írhatjuk elő (lásd később). Ekkor (2.5) alapján

$$\epsilon_{ij}^t = -\frac{\delta H}{\delta \sigma_{ij}} + \epsilon_{ij}^p \quad (2.9)$$

adódik. Vegyük most (2.9) inkompatibilitását. Ekkor mivel $\mathcal{I}_{ijmn}\epsilon_{mn}^t = 0$ (lásd [86]), ezért

$$\mathcal{I}_{ijmn}\frac{\delta H}{\delta \sigma_{mn}} = -\eta_{ij}. \quad (2.10)$$

Vezessük be a χ_{ij} Airy-féle feszültség potenciált úgy, hogy teljesüljön

$$\mathcal{I}_{ijmn}\chi_{mn} = \sigma_{ij}. \quad (2.11)$$

Ekkor a $\partial_i \sigma_{ij} = 0$ egyensúlyi feltétel automatikusan teljesül, és (2.10) az alábbi alakra hozható:

$$\frac{\delta H}{\delta \chi_{ij}} = -\eta_{ij}, \quad (2.12)$$

ahol az entalpia immár a χ_{ij} feszültségpotenciál függvénye.

Vezessük most be az E funkcionált az alábbi definícióval:

$$E := H + \int dV \eta_{ij} \chi_{ij}, \quad (2.13)$$

Ekkor (2.12) alapján

$$\frac{\delta E}{\delta \chi_{ij}} = 0. \quad (2.14)$$

Másrészt (2.10) és (2.13) alapján

$$E = H - \int dV \frac{\delta H}{\delta \sigma_{ij}} \sigma_{ij}, \quad (2.15)$$

azaz E éppen a rendszer rugalmas energiája. Ez azt jelenti, hogy a (2.12) feltétel éppen annak felel meg, hogy a rugalmas energia extrémális.

A fentiek alapján egy diszlokáció elrendezés által keltett feszültségtér az alábbi módon határozható meg. Először megadjuk az α_{ij} diszlokáció sűrűség tenzort, ahonnan (2.7) alapján az inkompatibilitás meghatározható. Ezt követően megadjuk a rugalmas közeg viselkedését leíró H entalpiát. A feszültségtér innen a (2.12) egyenlet megoldásából kapható.

Izotróp esetben az entalpia funkcionál legáltalánosabb alakja, köbös tagokig, az alábbi:

$$H[\sigma_{ij}] = - \int \left[\frac{1}{2} (S_1^0 \sigma_{ij} \sigma_{ij} + S_2^0 \sigma_{ii}^2) + \frac{1}{3} (S_1^1 \sigma_{ik} \sigma_{kj} \sigma_{ji} + S_2^1 \sigma_{ij} \sigma_{ij} \sigma_{kk} + S_3^1 \sigma_{ii}^3) \right] dV, \quad (2.16)$$

ahol S_1^0 és S_2^0 első valamint S_1^1 , S_2^1 és S_3^1 másodrendű rugalmas együtthatók. Ha csak az elsőrendű tagokat tartjuk meg, könnyen látható, hogy (2.8) éppen a közismert izotróp Hooke törvényre vezet.

Alkalmazzuk most a modellt az 1.2.1. fejezetben bemutatott két dimenziós él-diszlokáció rendszerre egyszerűes csúszás mellett. Ebben az esetben az inkompatibi-

litásnak egyetlen komponense különbözik zérustól, korábbi jelöléseket alkalmazva

$$\eta_{33}(\mathbf{r}) = b\partial_y[\rho_1^+(\mathbf{r}) - \rho_1^-(\mathbf{r})]. \quad (2.17)$$

Igaz továbbá, hogy a feszültségpotenciálnak is csak egyetlen komponense nemzérus, ezért vezessük be a $\chi(\mathbf{r}) := \chi_{33}(\mathbf{r})$ jelölést. Ekkor (2.11) alapján

$$\sigma_{11} = -\partial_y\partial_y\chi, \quad \sigma_{22} = -\partial_x\partial_x\chi, \quad \sigma_{12} = \partial_x\partial_y\chi. \quad (2.18)$$

Fontos még megjegyezni, hogy két dimenzióban H (2.16) képletében szereplő térfigati integrált a z változó szerint nem lehet elvégezni, ezért H -val a továbbiakban a egységnyi hosszra jutó entalpiát fogjuk jelölni.

Minden készen áll tehát a diszlokációk feszültségterének meghatározására. Először nézzük meg a klasszikus lineáris esetet egy \mathbf{r}_1 pontba helyezett pozitív éldiszlokáció esetén ($\rho_1^+(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ és $\rho_1^-(\mathbf{r}) = 0$). Ekkor, amint már említettük, (2.16)-nak csak az első két tagját tekintjük, melyekről (2.18) felhasználásával könnyen belátható, hogy az alábbi alakba írhatók:

$$H_0[\chi] = -\int \frac{D}{2}(\Delta\chi)^2 d^2r = -E_0[\chi], \quad (2.19)$$

ahol $D := S_1^0 + S_2^0$. Most alkalmazzuk a (2.12) feltételt, ahonnan

$$\Delta^2\chi(\mathbf{r}) = \frac{b}{D}\partial_y\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1). \quad (2.20)$$

Végtelen közegben (2.20) megoldása $\chi(\mathbf{r}) = \chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$, ahol

$$\chi_0(\mathbf{r}) = \frac{b}{8\pi D}\partial_y r^2 \ln(r). \quad (2.21)$$

Innen két diszlokáció kölcsönhatási energiája már könnyen meghatározható. Helyezkedjenek el az \mathbf{r}_1 és \mathbf{r}_2 pontokban, Burgers vektoruk pedig legyen \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 . Ekkor

$$\begin{aligned} V_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= E_0[\chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)] - E_0[\chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)] - E_0[\chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)] \\ &= \int D\Delta\chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)\Delta\chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)d^2r = -\frac{b_1b_2}{|b|}\partial_{y_1}\chi_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Az erő innen a $F_{0,i} = -\partial_i V_0$ szabállyal kapható meg, melyre éppen a Peach–Koehler erő adódik, pl.

$$F_{0,x}(\mathbf{r}) = \frac{b_1 b_2}{|b|} \partial_x \partial_y \chi_0(\mathbf{r}) = \frac{b_1 b_2}{4\pi D} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (2.23)$$

ahol $\mathbf{r} := \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Látható, hogy a bevezetett D rugalmas állandóra $D = 1/(4\pi G)$, ahol $G = \mu/[2\pi(1 - \nu)]$.

2.3. Diszlokációk kölcsönhatása anharmonikus közegben

Az anharmonicitás figyelembevételéhez ki kell egészíteni az entalpia funkcionált köbös tagokkal. Az egyszerűség kedvéért a (2.16)-ban szereplő harmadrendű tagok közül csak az utolsót vesszük figyelembe. Könnyen látható, hogy ebben az esetben

$$H[\chi] = \int \left[-\frac{D}{2} (\Delta\chi)^2 + \epsilon_a \frac{D^2}{3} (\Delta\chi)^3 \right] d^2r, \quad (2.24)$$

ahol $\epsilon_a := S_3^1/D^2$ egy dimenziótlan csatolási paraméter. Mivel (2.18) alapján $\Delta\chi = -(\sigma_{11} + \sigma_{22}) = 2p$, ezért az anharmonikus járulék a nyomás harmadik hatványával arányos. Ez azt jelenti, hogy a komprimált és dilatált zónák energiája különbözni fog. Ez éppen az intersticiális és vakancia típusú dipólok energiájának kívánt különbözőségére vezet. A másik két anharmonikus tag hasonlóan kezelhető, de ezekkel a továbbiakban nem foglalkozunk.

Az új entalpia funkcionál ismeretében az előző fejezetben bemutatott levezetés megismételhető. Ismét két \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 Burgers vektorú diszlokációt helyezünk az \mathbf{r}_1 és \mathbf{r}_2 pontokba, ekkor a (2.12) feltételből

$$D\Delta^2\chi - \epsilon_a D^2\Delta [(\Delta\chi)^2] = b_1 \partial_y \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + b_2 \partial_y \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \quad (2.25)$$

adódik. Mivel ϵ_a kis paraméter, ezért a megoldást az alábbi alakban keressük:

$$\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \chi_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \chi_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) + \epsilon_a \xi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.26)$$

ahol χ_i a lineáris esethez tartozó megoldás

$$\chi_i(\mathbf{r}) = \frac{b_i}{b} \chi_0(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (2.27)$$

és ξ kielégíti a

$$\Delta^2 \xi - D \Delta (\Delta \chi_1 + \Delta \chi_2)^2 = 0 \quad (2.28)$$

egyenletet. Végtelen közegben ez utóbbi egyenlet egyszerűsíthető:

$$\Delta \xi = D (\Delta \chi_1 + \Delta \chi_2)^2. \quad (2.29)$$

Térjünk most rá a kölcsönhatási energia meghatározására. A (2.13) definíció alapján könnyen belátható, hogy

$$E[\chi] = \int \left[\frac{D}{2} (\Delta \chi)^2 - \epsilon_a \frac{2D^2}{3} (\Delta \chi)^3 \right] d^2 r. \quad (2.30)$$

Ez ϵ_a -ban első rendig az

$$E = E_0 + \epsilon_a E_1 \quad (2.31)$$

alakba írható, ahol E_0 a (2.22) által megadott harmonikus tag, és

$$E_1 = \int \left\{ D \Delta (\chi_1 + \chi_2) \Delta \xi - \frac{2D^2}{3} [\Delta (\chi_1 + \chi_2)]^3 \right\} d^2 r. \quad (2.32)$$

Felhasználva (2.29)-et, ez az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$E_1 = \int \frac{D^2}{3} [\Delta (\chi_1 + \chi_2)]^3 d^2 r, \quad (2.33)$$

mely átírható az

$$E_1 = D^2 \int [(\Delta \chi_1)(\Delta \chi_2)^2 + (\Delta \chi_2)(\Delta \chi_1)^2] d^2 r + C \quad (2.34)$$

formába. Itt C csak \mathbf{r}_1 -től ill. csak \mathbf{r}_2 -től függő tagokból áll, tehát egy sajátenergia korrekcióként értelmezhető, mely nem ad járulékot a kölcsönhatási erőhöz. Ezzel tulajdonképpen a számolás végéhez értünk, hiszen χ_1 és χ_2 alakja már ismert. A

(2.21) és (2.27) egyenletek alapján

$$\Delta\chi_i = \frac{b_i}{2\pi D} \frac{y - y_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2}, \quad i = 1, 2. \quad (2.35)$$

Ezt behelyettesítve (2.34)-be, a $V_1 := E_1 - C$ anharmonikus kölcsönhatási járuléka

$$V_1(\mathbf{r}) = \frac{(b_1 - b_2)b^2}{(2\pi)^3 D} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{y' - y}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \left(\frac{y'}{|\mathbf{r}'|^2} \right)^2 d^2 r' \quad (2.36)$$

adódik, ahol $\mathbf{r} := \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Foglaljuk össze a V_1 kölcsönhatási energia legfontosabb tulajdonságait:

- Ha a két diszlokáció Burgers vektora megegyezik, akkor V_1 zérus, azaz extra kölcsönhatás csak különböző előjelű diszlokációk között jelentkezik.
- $V_1(x, y) = -V_1(x, -y)$, azaz V_1 az y páratlan függvénye.
- $V_1(x, y) = V_1(-x, y)$, azaz V_1 az x páros függvénye.

A (2.36) egyenlet alapján lehetőség van V_1 zárt, analitikus alakban való kifejezésére. Ennek részleteivel az A. függelékben foglalkozunk. Itt csak a megoldást közöljük:

$$V_1(\mathbf{r}) = \frac{(b_1 - b_2)b^2}{16\pi^2 D} \left[\frac{y(3x^2 + y^2)}{r^4} + 4\frac{y}{r^2} \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \right], \quad (2.37)$$

ahol r_0 a diszlokációra jellemző belső levágási hossz.

Innen a kölcsönhatási erő csúszásirányú komponense

$$\begin{aligned} F_1(x, y) &= -\epsilon_a \partial_x V_1(x, y) = (b_1 - b_2) \epsilon_a \tau_1(x, y) = \\ &= \epsilon_a \frac{(b_1 - b_2)b^2}{8\pi^2 D} \left[\frac{xy(x^2 - 3y^2)}{r^6} + 4\frac{xy}{r^4} \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Itt bevezettük a τ_1 anharmonikus feszültségteret. Látható, hogy V_1 egy $1/r$ -től és $\ln(r/r_0)/r$ -től függő tag összege, ezáltal F_1 is két tagból áll, egy $1/r^2$ és egy $\ln(r/r_0)/r^2$ típusúból. Érdeemes megjegyezni, hogy a klasszikus harmonikus rugalmasságtan esetén a diszlokáció teljes energiájában jelenik meg a belső levágási hossz, de a kölcsönhatási erőben nem. Esetünkben azonban már a kölcsönhatási erő is expliciten tartalmazza ezt a mennyiséget, bár vegyük észre, hogy a logaritmikus függés igen gyengének tekinthető.

A kapott F_1 extra erő, mely az anharmonikus közeg következménye, valóban tartalmazza az összes korábban megfogalmazott fizikai elvárást, azaz különbséget tesz a vakancia és intersticiális dipólok energiája között.

2.4. A diszlokáció sűrűségek evolúciós egyenletei

Az alábbiakban egy anharmonikus közegben lévő diszlokáció rendszer dinamikájával foglalkozunk. Az eredeti (1.1) mozgásegyenlet a következőképpen módosul:¹

$$\mathbf{v}_i = B \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N F_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + s_i b \tau_{\text{ext}} \right) \mathbf{e}, \quad (2.39)$$

ahol a kölcsönhatási erő

$$F_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = s_i s_j b \tau_0(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + (b_i - b_j) \epsilon_a \tau_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (2.40)$$

ahol $\tau_0 = \tau_{\text{nd}}$ a lineáris médiumban keltett feszültségtér. A mozgásegyenlet ismeretében az 1.5.3. fejezetben bemutatott módszer teljes egészében megismételhető. A ρ és κ teljes és előjeles diszlokáció sűrűsége az alábbi egyenletrendszer adódik [A1]:

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}) + B b \partial_x [\kappa(\mathbf{r}) \{ \tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}) + \tau_{\text{ext}} - \tau_{\text{f}}(\mathbf{r}) + \tau_{\text{b}}(\mathbf{r}) \} + j_1^\rho(\mathbf{r})] = 0, \quad (2.41)$$

$$\partial_t \kappa(\mathbf{r}) + B b \partial_x [\rho(\mathbf{r}) \{ \tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}) + \tau_{\text{ext}} - \tau_{\text{f}}(\mathbf{r}) + \tau_{\text{b}}(\mathbf{r}) \} + j_1^\kappa(\mathbf{r})] = 0, \quad (2.42)$$

ahol τ_{sc} , τ_{f} és τ_{b} feszültségterekre ismét az (1.34), (1.47) és (1.48) képletek adódnak, továbbá

$$j_1^\rho(\mathbf{r}) = -\epsilon_a \rho(\mathbf{r}) \int \kappa(\mathbf{r}') \tau_1^{\text{eff}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r' \quad (2.43)$$

és

$$j_1^\kappa(\mathbf{r}) = \epsilon_a \rho(\mathbf{r}) \int \rho(\mathbf{r}') \tau_1^{\text{eff}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (2.44)$$

ahol bevezettük a $\tau_1^{\text{eff}}(\mathbf{r}) := \tau_1(\mathbf{r}) [d_2^{+-}(\mathbf{r}) + 1]/2$ jelölést.

A levezetés során természetesen ismét fel kellett tenni, hogy

$$d_2^{ss'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = d_2^{ss'} \left((\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \sqrt{\rho(\mathbf{r}_1)} \right), \quad s, s' \in \{+, -\}, \quad (2.45)$$

¹A jelölések tekintetében lásd az 1. fejezetet.

továbbá hogy $|\kappa| \ll \rho$, de κ és ρ fluktuációja egy nagyságrendbe esik [A1].

Fontos megjegyezni, hogy mint látni fogjuk, a (2.45) feltétel az extra tag mellett már nem feltétlenül teljesül, hiszen ez hosszú távú korrelációkat okozhat. Ezért a (2.41), (2.42) egyenletek valójában abban a pillanatban igazak, amikor egy harmonikus közegben relaxált rendszer esetén hirtelen bekapcsoljuk az anharmonikus járulékot. A későbbiekben ez az eset nekünk éppen elegendőnek bizonyul.

2.5. Lineáris stabilitás analízis

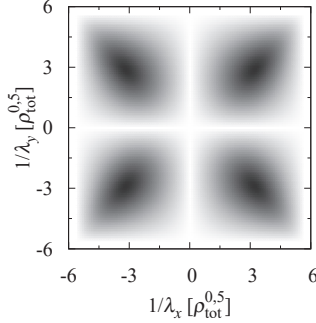
A fenti (2.41), (2.42) egyenleteknek a homogén eloszlás ($\rho(\mathbf{r}) = \rho_{\text{tot}}$ és $\kappa(\mathbf{r}) = 0$) mindig megoldása. Az 1.5.3. fejezetben láttuk, hogy diszlokáció forrástag és az anharmonikus járulék nélkül ez a triviális megoldás mindig stabil, azaz nem alakul ki mintázat.

Az anharmonikus járulék figyelembevételére esetén a stabilitás analízis ismét elvégezhető. Kiderült, hogy egy (q_x, q_y) hullámszámvektorral jellemzett perturbáció instabilitásának feltétele

$$|\tau_{\text{diff}}| < |\epsilon_a| \rho_{\text{tot}} \left| \tau_1^{\text{eff},F}(q_x, q_y) \right|, \quad (2.46)$$

ahol $\tau_{\text{diff}} := \tau_{\text{ext}} - \tau_f(\rho_{\text{tot}})$ és $\tau_1^{\text{eff},F}$ a τ_1^{eff} effektív feszültség Fourier transzformáltja [A1]. Ez utóbbit numerikus úton határoztuk meg. A d_2^{+-} korrelációs függvényt 1000 különböző, de statisztikusan ekvivalens relaxált diszlokáció konfiguráció alapján számoltuk, melyek egyenként 64 pozitív és 64 negatív diszlokációt tartalmaztak. Az $\tau_1^{\text{eff},F}$ -re kapott eredmény a 2.1. ábrán látható.

A (2.46) alapján, ha a külső feszültség megegyezik a τ_f folyásfeszültséggel, akkor az összes perturbáció instabil. Mivel a τ_1 feszültségtér (2.38) szerint függ a távolságtól, és a korrelációs függvények csak a $\sqrt{\rho_{\text{tot}}}\mathbf{r}$ változótól függenek (lásd 1.4. fejezet), ezért $\tau_1^{\text{eff},F}$ csak $|\mathbf{q}/\sqrt{\rho_{\text{tot}}}|$ -től és az $\arctg(q_y/q_x)$ szögtől függhet. Ez azt jelenti, hogy ha $|\tau_1^{\text{eff},F}|$ -nek van maximuma (mely feltétel a 2.1. ábra alapján teljesül), akkor az kiválasztja a leggyorsabban növő perturbációt, melynek hullámhossza ezáltal $1/\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ -al, azaz az átlagos diszlokáció távolsággal lesz arányos. Ezen felül megállapítható, hogy kis ϵ_a -k esetén a növekvő perturbáció hullámhossza független ϵ_a -tól, mely csak a perturbáció növekedési sebességét határozza meg.



2.1. ábra. A $\tau_1^{\text{eff},F}$ függvény numerikus úton meghatározott alakja ($\lambda_x = 1/q_x$ és $\lambda_y = 1/q_y$).

2.6. Diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációk

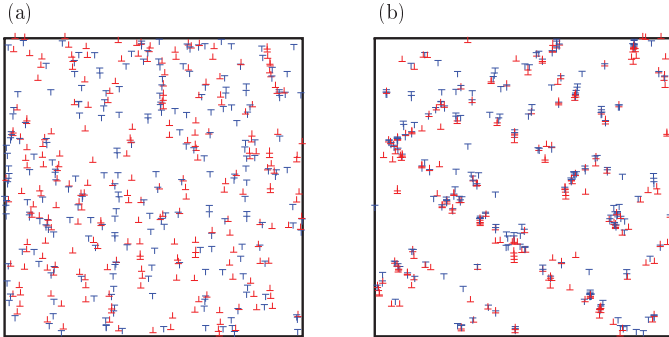
Az előző pontban bemutatott stabilitás analízis a homogén eloszlás instabilitását mutatja. Korábban azonban már utaltunk rá, hogy az elmélet valójában csak az anharmonikus tag „bekapcsolásának” pillanatában érvényes. Az idő múlásával előfordulhat, hogy a (2.46) feltétel helyébe egy másik lép. Ezért diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációkat végeztünk az anharmonikus (2.39) mozgásegyenlettel (a szimulációk részleteiért lásd az 1.2.3. fejezetet), melyek során 256 pozitív és 256 negatív előjelű éldiszlokációt helyeztünk el egy $L \times L$ méretű cellában.

Bevezetve az $\tilde{\mathbf{r}} := \mathbf{r}/L$ and $\tilde{t} := tb^2/(4\pi BDL^2)$ dimenzió nélküli változókat, az anyagi paraméterek kiskálázhatóak a (2.39) mozgásegyenletből. Ekkor az anharmonikus csatolás az $\tilde{\epsilon}_a := b\epsilon_a/(\pi L)$ mennyiséggel mérhető.

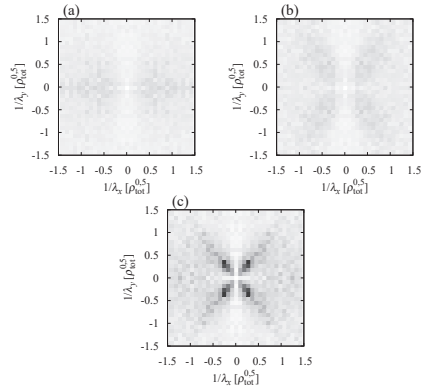
A kezdetben véletlenszerű eloszlásból kialakuló egyensúlyi állapotok a 2.2. ábrán láthatóak különböző $\tilde{\epsilon}_a$ paraméterek esetén. A mintázat megjelenése első ránézésre is szembeötlő. Annak érdekében, hogy a mintázatban megjelenő hosszúságskálát meghatározzuk, tekintsük az $A(\mathbf{r}) := \langle \rho^d(\mathbf{r}')\rho^d(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{r}'}$ definícióval bevezetett autokorrelációs függvény², illetve annak A^F Fourier transzformáltját. A 2.3. ábrán ez

²Ttt ρ^d a diszkrét teljes diszlokáció sűrűséget, $\langle \rangle_{\mathbf{r}'}$ pedig az \mathbf{r}' változó szerinti átlagolást jelöli.

utóbbi látható különböző $\bar{\epsilon}_a$ értékek mellett. Jól látható a domináns karakterisztikus mintázat, melynek hullámhossza $\lambda \approx 6/\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$.³



2.2. ábra. Relaxált diszlokáció konfigurációk (a) harmonikus ($\bar{\epsilon}_a = 0$) és (b) anharmonikus ($\bar{\epsilon}_a = 10^{-2}$) közegben.



2.3. ábra. Relaxált diszlokáció rendszerek autokorrelációs függvényeinek Fourier transzformáltjai (A^F) különböző $\bar{\epsilon}_a$ értékek esetén. Az ábrán 16 különböző szimulációból számolt autokorrelációs függvény átlaga látható. (a) $\bar{\epsilon}_a = 0$, (b) $\bar{\epsilon}_a = 3 \cdot 10^{-3}$, (c) $\bar{\epsilon}_a = 10^{-2}$.

³Megjegyezzük, hogy 512 diszlokáció esetén a rendszerméret $L \approx 23/\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$, azaz a hullámhossz négyszerese.

Megvizsgáltuk az autokorrelációs függvények időfejlődését is. A 2.3. ábrán is látható négy maximum már röviddel a szimulációk kezdete után megjelenik, $\tilde{\epsilon}_a = 10^{-2}$ esetén $\lambda \approx 2/\sqrt{\rho_{tot}}$ -nál, majd idővel egyre hangsúlyosabbá válik és λ értéke növekszik az előbb említett $\lambda \approx 6/\sqrt{\rho_{tot}}$ -ig [A1]. Az alkalmazott külső nyírófeszültség hatását szintén vizsgáltuk. Kiderült, hogy ez az A^F maximumhelyeit lényegében nem befolyásolja, az ott mérhető értékeket azonban növeli [A1]. A külső feszültség tehát csak elősegíti a mintázat kialakulását, de annak szerkezetére nincs hatással.

Összefoglalásként elmondható, hogy sikerült egy variációs modell keretei között szisztematikusan figyelembe venni az anharmonikus rugalmasságtan hatását. Ezt követően analitikus képletet vezetünk le a megváltozott diszlokáció-diszlokáció kölcsönhatásra. Ennek a mozgásegyenletben történő figyelembevételé döntő hatást gyakorol a diszlokáció mintázatképződésre. Ezt numerikus szimulációkkal igazoltuk.

3. fejezet

Nyírófeszültség eloszlása külső feszültség mellett [A2]

Az 1.3.2. fejezetben bemutatott sztochasztikus diszlokáció dinamikában alapvető szerepet játszik a kristály különböző pontjaiban mérhető nyírófeszültség eloszlása. Megemlítettük továbbá ezen mennyiség gyakorlati vonatkozását is, azaz hogy a Röntgen diffrakció során kapott kiszélesedett Bragg-csúcsok alakja lényegében megegyezik vele.

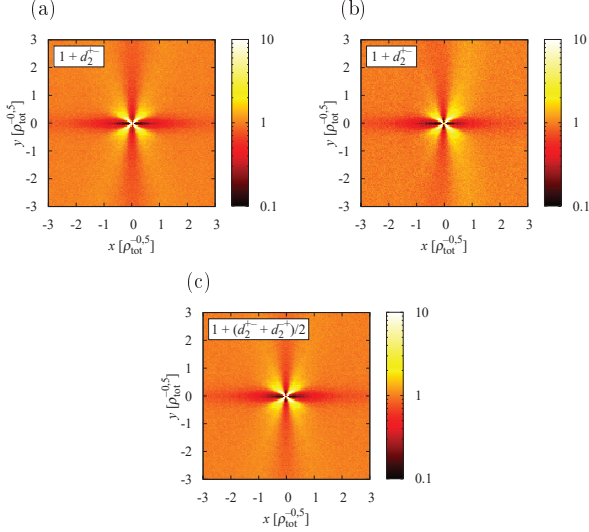
Ebben a fejezetben bemutatjuk, hogy a diszlokáció rendszerre ható külső nyírófeszültség hogyan befolyásolja az eloszlást. Elsőként röviden összefoglaljuk a számolást, majd numerikus úton ellenőrizzük a kapott eredményeket.

3.1. Elméleti megfontolások

Az alábbiakban az 1.3.2. fejezetben megkezdett számolást folytatjuk az ott bevezetett jelölésekkel. Az (1.8) képlet megadja az eloszlásfüggvény Fourier transzformáltjának (P_{str}^F) logaritmusát. Látható, hogy homogén esetben ez csak a korábban bevezetett korrelációs függvényektől függ. Megállapítható továbbá, hogy ennek valós része ($\text{Re}(\ln(P_{\text{str}}^F))$) csak d_2^{+-} -től ill. a $(d_2^{+-} + d_2^{+})/2$ kombinációtól függ. A képzetes rész ($\text{Im}(\ln(P_{\text{str}}^F))$) pedig csak d_2^{+-} függvénye. Ennek megfelelően elsőként a külső feszültség korrelációs függvényekre gyakorolt hatását vizsgáljuk meg.

A d_2^{+-} és a d_2^{+-} függvények meghatározásához kezdetben véletlenszerűen elhelyezkedő 64 pozitív és 64 negatív diszlokációt relaxáltattunk. A kialakuló egyensúlyi konfigurációkból az eredmény az (1.12) definíció alapján kapható. Ezt követően

átlagolást végeztünk 2000 különböző szimulációs eredmény felett. A szimulációkat $\tau_{\text{ext}} = (1/\sqrt{128}) \cdot Gb\sqrt{\rho_{\text{tot}}} \approx 0,09 \cdot Gb\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ külső feszültség alkalmazása mellett is megismételtük. A kapott függvények a 3.1. és a 3.2. ábrán láthatóak.



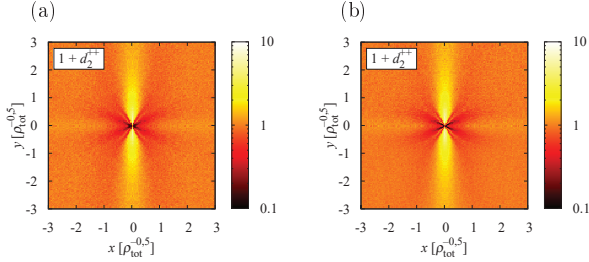
3.1. ábra. Az $1 + d_2^+$ korrelációs függvények (a) zérus külső feszültségnél (b) $\tau_{\text{ext}} = 0,09 \cdot Gb\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ külső feszültség alkalmazása mellett. (c) Az $1 + (d_2^- + d_2^+)/2$ kombinációt, azaz $1 + d_2^+$ szimmetrikus részét is ábráztuk a húzott esetben. Jól látszik, hogy a külső feszültségnek erre csak másodrendű hatása van.

Megállapítható, hogy míg d_2^{+-} megváltozik külső feszültség jelenlétében, addig d_2^{++} és $d_2^{+-} + d_2^{-+}$ gyakorlatilag állandó, azaz csak másodrendben függenek a feszültségtől. Így a fentiek alapján kis külső feszültség esetén csak $\ln(P_{\text{str}}^F)$ képzetes része változik. Erre (1.8) alapján az alábbi összefüggés kapható

$$\text{Im} [\ln (P_{\text{str}}^F(q))] = (\rho_{\text{tot}}/2)^2 \int_{\mathbb{R}^2} d_2^{+-}(\mathbf{d}) T(\mathbf{d}, q) d^2 d, \quad (3.1)$$

ahol

$$T(\mathbf{d}, q) := \int_{\mathbb{R}^2} \sin \left(q \left[\tau_{\text{ind}} \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{d}}{2} \right) - \tau_{\text{ind}} \left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{d}}{2} \right) \right] \right) d^2 r. \quad (3.2)$$



3.2. ábra. Az $1 + d_2^{++}$ korrelációs függvények (a) zérus külső feszültségnél (b) $\tau_{\text{ext}} = 0,09 \cdot Gb \cdot \sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ külső feszültség alkalmazása mellett.

A T függvényt numerikus úton határoztuk meg. Eközben az integrandus erősen nemreguláris tulajdonságait is figyelembe kellett venni. A részletes számolásokat [A2]-ben ismertetjük, itt csak a végeredményt közöljük:

$$T(\mathbf{d}, q) = \begin{cases} (Gb)^3 \cdot \alpha(\mathbf{d})q^3 \ln\left(\frac{q_0(\mathbf{d})}{|q|}\right), & \text{ha } |q| \rightarrow 0, \\ Gb \cdot \beta(\mathbf{d})q, & \text{ha } |q| \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (3.3)$$

ahol az α és β függvényekre az alábbi közelítő alakokat találtuk:

$$\alpha(d_x, d_y) = \frac{d_x}{|d_x| \cdot |d_y|} 0,85 \left[-\exp\left(-0,90 \left(\left|\frac{d_x}{d_y}\right| - 1,0\right)\right) + 1,00 \right], \quad (3.4)$$

$$\beta(d_x, d_y) = \frac{d_x}{|d_x|} (1,58 \cdot |d_x| + 0,38 \cdot |d_y|). \quad (3.5)$$

A q_0 függvény hasonlóan meghatározható, azonban mivel a későbbiekben ez nem játszik szerepet, alakját nem közöljük. Az így meghatározott T -t visszahelyettesítve (3.1)-be

$$\text{Im}(\ln(P_{\text{str}}^F(q))) = \begin{cases} (Gb)^3 \frac{\alpha'(\tau_{\text{ext}})}{2} \rho_{\text{tot}} q^3 \ln\left(\frac{q'_0(\tau_{\text{ext}})}{|q|}\right), & \text{ha } |q| \rightarrow 0, \\ Gb \frac{\beta'(\tau_{\text{ext}})}{2} \rho_{\text{tot}} q, & \text{ha } |q| \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.6)$$

adódik, ahol

$$\alpha'(\tau_{\text{ext}}) := \frac{\rho_{\text{tot}}}{2} \int_{\mathbb{R}^2} d_2^{+-}(\mathbf{d}) \alpha(\mathbf{d}) d^2 d \quad (3.7)$$

és

$$\beta'(\tau_{\text{ext}}) := \frac{\rho_{\text{tot}}}{2} \int_{\mathbb{R}^2} d_2^{+-}(\mathbf{d}) \beta(\mathbf{d}) d^2 d. \quad (3.8)$$

A továbblépéshez a (3.7), (3.8) képletek kiértékelésére van szükség. Mivel d_2^{+-} alakja analitikusan nem ismert, ezért valamilyen közelítést kell alkalmazni. A korábbi vizsgálatokban Csikor és Groma sikeresen alkalmazta a monodiszperz dipól közelítést, melyben a diszlokáció rendszer véletlenszerűen elhelyezkedő, fix momentumú diszlokáció dipólokból épül fel. Ezt a képet az sugallja, hogy a valódi egyensúlyi diszlokáció rendszerek is nagyszámú dipólt tartalmaznak, ill. a d_2^{+-} függvény is az x tengellyel $\pm 45^\circ$ -os szöget bezáró egyenes mentén mutat éles maximumot. Ez a maximum éppen a dipóloknak felel meg.

A hipotetikus monodiszperz dipól rendszer előnye, hogy benne a d_2^{+-} korrelációs függvény egzaktul megadható. A legegyszerűbb közelítésben a külső feszültség hatására mindegyik dipól egymástól függetlenül deformálódik, mintha csak ő lenne a rendszerben. A dipólok magasságát y_0 -al és a dipólok megnyúlását ε^\pm -al jelölve (lásd 3.3. ábra) d_2^{+-} az alábbi alakot ölti¹:

$$d_2^{+-}(\mathbf{r}) = \frac{2}{\rho_{\text{tot}}} \delta(y - y_0) \delta(x - y - \varepsilon^+(\tau_{\text{ext}}, y_0)) - \frac{2}{N}. \quad (3.9)$$

Innen egyszerű számítással (3.7)-ből és (3.8)-ból egyszerűen adódik, hogy a négyféle dipólt egyenlő számban tartalmazó rendszerekre

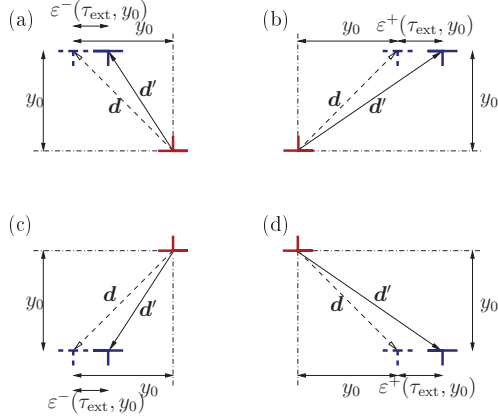
$$\alpha'(\tau_{\text{ext}}) \approx -1,53 \frac{\tau_{\text{ext}}}{Gb}, \quad (3.10)$$

$$\beta'(\tau_{\text{ext}}) \approx -3,16 \frac{\tau_{\text{ext}}}{Gb} y_0^2. \quad (3.11)$$

Vegyük észre, hogy α' értéke független a monodiszperz dipólok y_0 magasságától.

A (3.6), (3.10) és (3.11) összefüggések ismeretében már csak az inverz Fourier transzformáció elvégzése van hátra. Az $\ln(P_{\text{str}}^F(q))$ függvény valós részét az (1.11) képlet adja meg, hiszen mint korábban említettük, ez csak másodrendben függ a

¹A korrelációs függvényt itt abban az esetben adtuk meg, amikor kizárólag 45° -os dipólokból áll a rendszer. Több típusú dipól esetén a (3.9) képlet értelemszerűen kiegészíthető.



3.3. ábra. A négyféle lehetséges ideális dipól deformációja τ_{ext} külső feszültség esetén. Az eredeti \mathbf{d} dipólmomentum \mathbf{d}' -re változik. Az x koordináta megváltozását $\varepsilon^-(\tau_{\text{ext}}, y_0)$ jelöli (a) a 135° -os és (c) a 225° -os, míg $\varepsilon^+(\tau_{\text{ext}}, y_0)$ (b) a 45° -os és (d) 315° -os dipólok esetén, ahol $y_0 = d_y$.

külső feszültségtől. Az inverz transzformáció közvetlen kiszámítása nehézségekbe ütközik, hiszen a függvénynek csak az aszimptotikus alakjai ismertek. Ennek megfelelően a P_{str} függvénynek is csak a határeseteit kaphatjuk meg.

A $|\tau| \rightarrow \infty$ esetben a korlátozott momentumok módszerének [50] általánosítása használható. A

$$v_3(\tau) := \int_{-\tau}^{\tau} (\tau')^3 P_{\text{str}}(\tau') d\tau' \quad (3.12)$$

definicióval bevezetett harmadik korlátozott momentumról megállapítható [A2], hogy

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} v_3(\tau) = 3(Gb)^3 \alpha'(\tau_{\text{ext}}) \rho_{\text{tot}} \ln\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right). \quad (3.13)$$

Innen, a Fourier transzformáció additivitását felhasználva adódik, hogy

$$P_{\text{str}}(\tau) = P_{\text{str},1}(\tau) + P_{\text{str},2}(\tau) = \frac{C \rho_{\text{tot}}}{|\tau|^3} + \frac{U \rho_{\text{tot}}}{\tau |\tau|^3}, \quad \text{ha } |\tau| \rightarrow \infty, \quad (3.14)$$

ahol

$$U = \frac{3}{2} (Gb)^3 \alpha'(\tau_{\text{ext}}). \quad (3.15)$$

Ez azt jelenti, hogy a zérus külső feszültségnél kapott $1/|\tau|^3$ -ös tag mellett megjelent egy $1/(\tau|\tau|^3)$ típusú járulék, melynek együtthatója arányos az alkalmazott külső feszültséggel (lásd (3.11)), amennyiben az kicsi.

A sűrűségfüggvény origó közeli tartományát várhatóan a Fourier transzformált $|q| \rightarrow \infty$ aszimptotája befolyásolja döntően. Az alábbi, tetszőleges f függvényre vonatkozó

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} f(x + x_0) e^{-iqx} dx = f^F(q) e^{iqx_0} \quad (3.16)$$

azonosság és a (3.6) összefüggés alapján megállapítható, hogy

$$P_{\text{str}}(\tau) = P_{\text{str}, \tau_{\text{ext}}=0}(\tau + \Delta\tau), \quad \text{ha } |\tau| \rightarrow 0, \quad (3.17)$$

ahol $P_{\text{str}, \tau_{\text{ext}}=0}$ a zérus külső feszültséghez tartozó sűrűségfüggvényt jelöli, és

$$\Delta\tau \approx Gb \frac{\beta'(\tau_{\text{ext}})}{2} \rho_{\text{tot}}. \quad (3.18)$$

A (3.17) azonosság a teljes q tartományra megköveteli az e^{iqx_0} faktor létezését, míg esetünkben ez csak a $|q| \rightarrow \infty$ határesetben teljesül. Ezért a fenti eredmény csak közelítésnek tekinthető.

Összefoglalva, a (3.14) és (3.18) képletekkel megadtuk az eloszlásfüggvény aszimptotikáinak viselkedését a monodiszperz esetben.

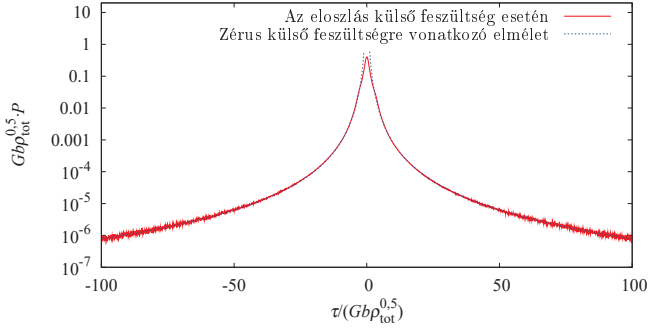
3.2. Numerikus eredmények

Az előző pontban bemutatott számolásokat a hipotetikus monodiszperz dipól esetre végeztük el. Ennek további előnye, hogy ilyen rendszereket valóban elő tudunk állítani, és a feszültség eloszlása ténylegesen meghatározható. Ezzel a bemutatott elmélet ellenőrizhető. Az alábbiakban a monodiszperz eset után valódi, relaxált diszlokáció rendszereken is megvizsgáljuk a P_{str} sűrűségfüggvényt és összehasonlítjuk a közelítő esettel.

3.2.1. Monodiszperz dipól eset

Korábban már említettük, hogy monodiszperz rendszerek egy véletlenszám generátor segítségével könnyedén előállíthatók. A dipólok tömegközéppontjai a vélet-

len változók, a 3.3. ábrán látható négyféle deformált dipólt pedig egyenlő számban helyezzük a rendszerbe. Ezt követően a feszültség eloszlás függvény meghatározásához egy finom rácsot helyezünk a négyzet alakú szimulációs tartományra, és ennek metszéspontjaiban az (1.4) képlet segítségével meghatározzuk az ott mérhető nyírófeszültség értékeket. Ezeknek az értékeknek az eloszlása adja meg a P_{str} függvényt. Annak érdekében, hogy egy sima eloszláshoz jussunk, átlagolást kell végezni több konfiguráció felett. Megjegyezzük, hogy vizsgálataink alapján az, hogy (1.4)-ben a periodikus vagy végtelen határfeltételek mellett meghatározott τ_{ind} függvényt használjuk-e, nem befolyásolja a kapott eredményt.



3.4. ábra. Egy monodiszperz dipól rendszer P_{str} eloszlásfüggvénye $\tau_{\text{ext}} = 0,156 \cdot Gb\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ külső feszültség mellett. Az eredményt 2000 különböző konfiguráció feletti átlagolás után kaptuk. A zérus külső feszültséghez tartozó $|\tau| \rightarrow \infty$ elméleti aszimptotikát is feltüntettük (lásd 1.10. ábra ill. [16]).

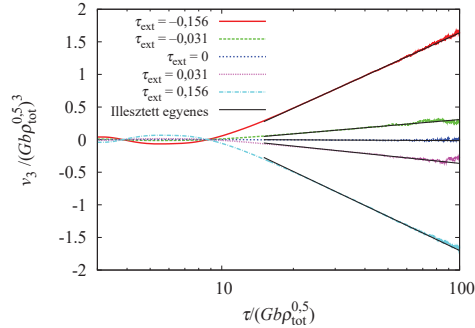
A 3.4. ábrán egy példa eloszlásfüggvény látható. A τ^{-4} -el arányos járuléka alig kivehető a nulla külső feszültséghez tartozó τ^{-3} -os tag mellett. Annak érdekében, hogy ezt leválasszuk, a korábban a levezetés során már bevezetett harmadik korlátozott momentumot vizsgáljuk. Ennek (3.13) szerint $\ln(\tau/\tau_0)$ -al kell arányosnak lennie, és az együttthatójából az \bar{U} mennyiség meghatározható. A 3.5. ábrán a korlátozott momentum viselkedése, míg a 3.6. ábrán az együttthatók láthatóak különböző külső feszültségértékek mellett. Az illesztésből

$$U = -2,36(Gb)^2\tau_{\text{ext}} \quad (3.19)$$

adódik, ahonnan (3.15) alapján

$$\alpha'(\tau_{\text{ext}}) = -1,57 \frac{\tau_{\text{ext}}}{Gb}. \quad (3.20)$$

Ez azt jelenti, hogy csupán 2,5% különbség van az elméleti jóslat és a numerikus eredmény között.



3.5. ábra. A v_3 korlátozott momentumok különböző külső feszültségek mellett meghatározott sűrűségfüggvények esetén. Mivel $v_3(\tau) \ln(\tau)$ függvényében egyenes, a feszültségfüggvényben valóban megjelenik a τ^{-4} típusú tag (lásd (3.13)). A τ_{ext} külső feszültségek $Gb\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ dimenzió nélküli egységekben vannak mérve. Az eredmények 2000 különböző konfiguráció felett lettek átlagolva.

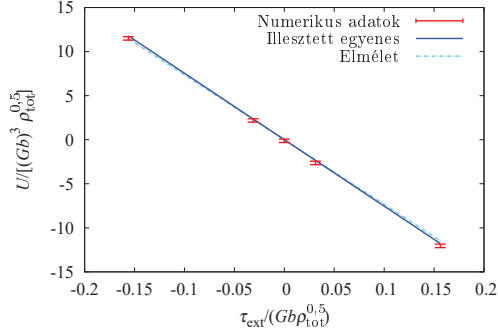
Az eloszlásfüggvények origó közeli részét a 3.7. ábrán tüntettük fel. Jól látható, hogy a (3.17) által jóslott eltolódás valóban teljesül. A különböző külső feszültségekhez tartozó $\Delta\tau$ értékek a 3.8. ábrán láthatók. Ezt összehasonlítva (3.18)-cal

$$\beta'(\tau_{\text{ext}}) = -2,67 \frac{\tau_{\text{ext}}}{Gb} y_0^2 \quad (3.21)$$

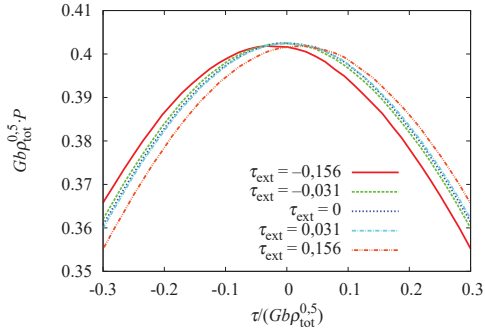
adódik, ami 20%-os eltérést jelent az elméleti számolás (3.11) közelítő eredményéhez képest.

3.2.2. Relaxált diszlokáció rendszerek

Az előző pontban bemutatott számolások valódi relaxált diszlokáció rendszerek esetén is elvégezhetőek. Összesen 2000 különböző szimulációt végeztünk 64 po-

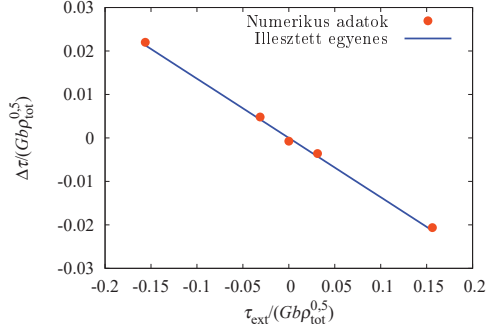


3.6. ábra. A $v_3(\tau)$ görbékre történt illesztésből számolt U értékek különböző τ_{ext} külső feszültségek mellett és az elméletileg jószolt $U(\tau_{\text{ext}})$ függvény.



3.7. ábra. Az eloszlás függvény origó körüli része a monodiszperz dipól esetben. A τ_{ext} külső feszültséget $Gb\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ dimenzió nélküli egységekben mérjük és ismét 2000-es mintán végeztük az átlagolást.

zitiv és 64 negatív előjelű diszlokációra különböző külső feszültségek és rendkívül alacsony, $0,02\rho_{\text{tot}}^{-0,5}$ nagyságú annihilációs távolság mellett. A szimulációk további részleteiért lásd az 1.2.3. fejezetet. Az eloszlásfüggvényben megjelenő $1/(|\tau^3|\tau)$ típusú tag együtthatóját a harmadik korlátozott momentum segítségével határoztuk meg. A 3.9. ábrán láthatóak a kapott eredmények. Az U együttható értéke ismét lineárisan függ a külső feszültségtől, az $U(\tau_{\text{ext}})$ egyenes meredeksége azonban csupán



3.8. ábra. Az eloszlásfüggvények közepét leíró Lorentz görbe $\Delta\tau$ eltolódása különböző külső feszültségek esetén.

nagyjából a fele a monodiszperz dipólokra vonatkozó elmélet által jósolt értéknek²:

$$U = -0,85(Gb)^2\tau_{\text{ext}}, \quad (3.22)$$

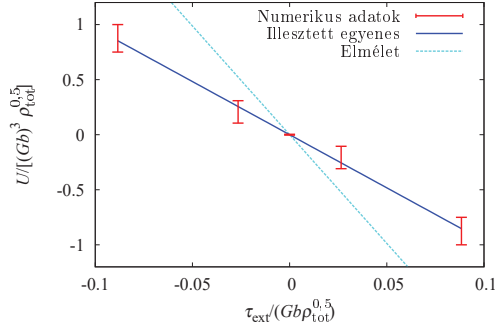
ahonnan (3.15) alapján

$$\alpha'(\tau_{\text{ext}}) = -0,57\frac{\tau_{\text{ext}}}{Gb}. \quad (3.23)$$

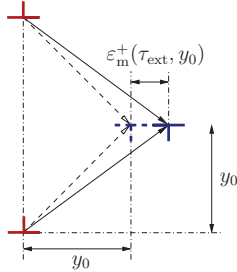
A kapott különbség nyilvánvalóan a dipól közelítés pontatlanságának tulajdonítható. Azaz nem hanyagolható el a diszlokáció multipólok hatása, melyek szintén nagy számban találhatóak a relaxált rendszerekben (lásd 2.2(a). ábra). Egy ilyen multipól minden esetben „keményebb”, mint egy dipól. Ezt a 3.10. ábrán szemléltetjük. Az itt bevezetett jelölésekkel $\varepsilon_{\text{m}}^{\pm}(\tau_{\text{ext}}, y_0) < \varepsilon^{\pm}(\tau_{\text{ext}}, y_0)$, ami a korrelációs függvényekben úgy jelentkezik, mintha kisebb lenne a külső feszültség (lásd (3.9)-t).

A monodiszperz és relaxált esetek közötti különbségre általánosabb magyarázat is adható. A dipólok deformálódnak a külső tér hatására, ezzel egy extra dipól teret keltve, mely nyilvánvalóan leárnyékolja a külső hatást, melyet ezért egy effektív külső térrel helyettesíthetünk. Ez eredményeink alapján éppen fele a külső térnek.

²A feles arány meghatározásánál figyelembe vettük azt a tény is, hogy a relaxált konfigurációkban található diszlokációknak csak egy része található dipólokban a többi falakba rendeződik [16]. A konkrét számítások tekintetében lásd [A2]-t.



3.9. ábra. A harmadik korlátozott momentum módszerével meghatározott U értékek különböző külső feszültség mellett relaxáltatott diszlokáció rendszerek esetén. A kapott egyenes egyezik az elméleti jóslattal, habár a meredeksége kisebb, mint a mono diszperz dipól közelítésből kapott érték.



3.10. ábra. Egy speciális diszlokáció multipól alakváltozása τ_{ext} külső feszültség esetén. A negatív előjelű diszlokáció x koordinátájának megváltozását $\varepsilon_m^+(\tau_{\text{ext}}, y_0)$ -al jelölve teljesül az $\varepsilon_m^+(\tau_{\text{ext}}, y_0) = \varepsilon^+(\tau_{\text{ext}}, y_0)/2$ összefüggés, azaz a deformáció éppen fele akkora, mint egy különálló dipól esetén.

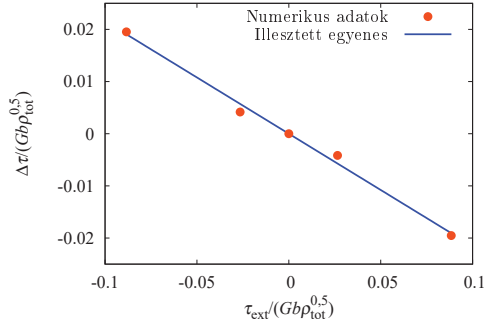
A jelenség teljesen analóg a dielektrikumok elektrostatikájával. Sajnos esetünkben nem lehetséges egy átlagtér elmélet keretei között tárgyalni a jelenséget.

Az eloszlásfüggvény origó közeli részének viselkedését is megvizsgáltuk. A Lorentz görbével leírható rész ismét az alkalmazott feszültséggel arányosan tolódik el.

Az eltolódások a 3.11. ábrán láthatók. Az adatokra való illesztéssel

$$\beta'(\tau_{\text{ext}}) = -\frac{1,22}{\rho_{\text{tot}}} \frac{\tau_{\text{ext}}}{Gb} \quad (3.24)$$

adódik.



3.11. ábra. A feszültség eloszlás középső tartományát leíró Lorentz görbe eltolódása különböző külső feszültségek esetén.

Összefoglalásként elmondható, hogy sikerült meghatározni a belső nyírófeszültség eloszlását külső feszültség alkalmazása esetén. Nagy $|\tau|$ értékek esetén egy külső feszültséggel arányos $1/(|\tau|^3\tau)$ típusú tag adódik az eredeti $1/|\tau|^3$ -ös aszimptotához. A kis $|\tau|$ -k tartományában az eloszlásfüggvény a külső feszültséggel arányosan eltolódik. Eredményeink a dipól közelítés korlátaira is rávilágítottak, ui. a rendszerben a diszlokációk leárnyékolják a külső feszültséget, ezáltal egy, az eredetinel gyengébb effektív teret hozva létre. Más szóval a dipól-dipól kölcsönhatások, azaz a multipólok szerepe nem hanyagolható el teljesen.

4. fejezet

A korrelációs függvények időfejlődése [A3]

Az 1. fejezetben már többször utaltunk arra, hogy a diszlokációk a kristályban korreláltan helyezkednek el, és ezt a modellezésnél figyelembe kell venni. A kontinuum elméletekben általánosan használt gradiens tagok a korrelációk következményei (lásd 1.5. fejezet). Hasonlóan, az előző fejezetben bemutatott feszültség eloszlás is változóként a korrelációs függvényeket tartalmazta, és mint látni fogjuk, a diszlokációk sebességeloszlása is ezen mennyiségtől függ (6. fejezet). A korrelációs tulajdonságokat korábban csak egyensúlyi rendszerekben vizsgálták [58, 60, 62]. Mivel az előbb említett mennyiségek az időtől csak a korrelációs függvényen keresztül függenek, ezért ezek dinamikájának megértéséhez először magának a korrelációs függvénynek az időfejlődését kell leírni.

Elsőként Vinogradov és Willis publikáltak a korrelációs függvény dinamikájára vonatkozó eredményeket [87, 88]. Két dimenziós rendszer esetén a kétrészecske sűrűségfüggvények időfejlődését leíró (1.30) egyenletből indultak ki. Annak érdekében, hogy zárt egyenletet kapjanak a kétrészecske sűrűségfüggvényekre, a háromrészecske korrelációkra kell valamilyen közelítést tenni. Ők a korábban Groma által is javasolt klaszter kifejtést alkalmazták [71]:

$$\begin{aligned} \rho_3^{s_1, s_2, s_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t) &\approx \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t) \rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2, t) \rho_1^{s_3}(\mathbf{r}_3, t) \cdot \\ &\cdot [1 + d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + d_2^{s_2, s_3}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t) + d_2^{s_3, s_1}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1, t)]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

A szerzők azonos Burgers vektorú csavardiszlokációk egy csúszósík mentén megva-

lósuló mozgását vizsgálták, azaz egyenleteik csak a τ_{ind} függvény konkrét alakjában különböztek. A klaszter kifejtés alkalmazása után kapott evolúciós egyenlet egyensúlyi megoldását analitikusan is meg tudták határozni. Abban az esetben azonban, amikor pozitív és negatív előjelű diszlokációk is jelen voltak, ellentmondásra jutottak. Az egyensúlyi korrelációs függvény nagy távolságok esetén egy véges értékhez tartott, ami nyilvánvalóan nem teljesül valódi rendszerekben. Azt is kimutatták, hogy ez az ellentmondás független τ_{ind} konkrét alakjától, azaz éldiszlokációk esetén is jelentkezik. Ez az eredmény számunkra azt sugallja, hogy a klaszter kifejtés diszlokáció rendszerek esetén nem alkalmazható.

4.1. Az evolúciós egyenletek

Az alábbiakban az 1.2.1. fejezetben bemutatott két dimenziós modell keretei között vizsgáljuk az (1.36) definícióval bevezetett korrelációs függvények időfejlődését. Vinogradov és Willis munkájához hasonlóan mi is az (1.30) egyenletből indulunk ki, azonban a háromrészesceke sűrűségfüggvényre a klaszter kifejtés helyett a magasabbrendű Kirkwood közelítést alkalmazzuk [89]:

$$\begin{aligned} \rho_3^{s_1, s_2, s_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t) &\approx \frac{\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \rho_2^{s_2, s_3}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t) \rho_2^{s_3, s_1}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1, t)}{\rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t) \rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2, t) \rho_1^{s_3}(\mathbf{r}_3, t)} = \\ &= \rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t) \rho_1^{s_2}(\mathbf{r}_2, t) \rho_1^{s_3}(\mathbf{r}_3, t) [1 + d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)] [1 + d_2^{s_2, s_3}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, t)] \cdot \\ &\quad \cdot [1 + d_2^{s_3, s_1}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1, t)]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

A bevezetett jelölések tekintetében lásd az 1.5.3. fejezetet. Ezt a közelítést korábban sikeresen alkalmazták pl. folyadékok leírásánál (lásd [70]). Zaiser és munkatársai már diszlokációk kapcsán is használták ezt az összefüggést, azonban segítségével csak néhány rendkívül általános következtetést vontak le [58].

Fontos megjegyezni, hogy a (4.2) approximáció valóban csak egy közelítés, hiszen még a triviális $\int_{\mathbb{R}^2} \rho_3(\cdot, \cdot, \mathbf{r}, t) d^2r = (N - 2)\rho_2$ azonosságot sem teljesíti, ahol N a vizsgált részecskék teljes száma. Ezért várhatóan a kapott eredmények az origó közelében mindenképpen hibásak lesznek, pontos eredmény csak nagy távolságok esetén várható.

Mivel a vizsgált rendszer homogén, ezért direkt \mathbf{r} függése egyik fizikai mennyiségnek sem lehet. Ezért az egyrészesceke sűrűség konstans ($\rho_1^s(\mathbf{r}, t) =: \rho^s$) és a korrelációs

függvények is csak koordinátáik különbségétől függhetnek, azaz

$$d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t) = \frac{\rho_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t)}{\rho^{s_1} \rho^{s_2}} - 1. \quad (4.3)$$

A továbbiakban feltesszük, hogy a pozitív és negatív diszlokációk sűrűsége azonos ($\rho^+ = \rho^- = \rho_{\text{tot}}/2$) és a külső feszültség zérus ($\tau_{\text{ext}} = 0$). Ekkor behelyettesítve a (4.2) közelítést (1.30)-be, néhány algebrai átalakítás után az alábbi egyenletek adódnak [A3]:

$$\partial_t d_2^{++} + 2B\nabla [\mathbf{b}(1 + d_2^{++})(\tau_{\text{ind}} + \tau_{\text{sc}}^{\text{h}} + \tau_{\text{b}}^{\text{h}} + \tau_{\text{a}}^{\text{h}})] = 0, \quad (4.4)$$

$$\partial_t d_2^{+-} + 2B\nabla [\mathbf{b}(1 + d_2^{+-})(-\tau_{\text{ind}} - \tau_{\text{sc}}^{\text{h}} - \tau_{\text{b}}^{\text{h}} + \tau_{\text{a}}^{\text{h}})] = 0, \quad (4.5)$$

ahol bevezettük az alábbi feszültség dimenziójú függvényeket:

$$\tau_{\text{sc}}^{\text{h}}(\mathbf{r}, t) := \rho^+ \int_{\mathbb{R}^2} 2d_{\text{d}}(\mathbf{r}', t) \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (4.6)$$

$$\tau_{\text{b}}^{\text{h}}(\mathbf{r}, t) := \rho^+ \int_{\mathbb{R}^2} 2d_{\text{d}}(\mathbf{r}', t) d_{\text{s}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (4.7)$$

$$\tau_{\text{a}}^{\text{h}}(\mathbf{r}, t) := \rho^+ \int_{\mathbb{R}^2} 2d_{\text{s}}(\mathbf{r}', t) d_{\text{d}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r'. \quad (4.8)$$

A fenti képletekben $d_{\text{s}} := (d_2^{++} + d_2^{+-})/2$ és $d_{\text{d}} := (d_2^{++} - d_2^{+-})/2$.

Az ellenkező előjelű diszlokációk sebessége minden pontban egymás ellentettje kell legyen, amiből a fenti egyenletek szerkezete alapján

$$\tau_{\text{a}}^{\text{h}}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (4.9)$$

következik minden \mathbf{r} és t esetén.

Érdemes bevezetni a korrelációs függvények lineáris kombinációiként előálló ρ^{h} és κ^{h} mennyiségeket az alábbi definícióval:

$$\rho^{\text{h}}(\mathbf{r}, t) := \rho^+ [2 + d_2^{++}(\mathbf{r}, t) + d_2^{+-}(\mathbf{r}, t)] = 2\rho^+ [1 + d_{\text{s}}(\mathbf{r}, t)], \quad (4.10)$$

$$\kappa^{\text{h}}(\mathbf{r}, t) := \rho^+ [d_2^{++}(\mathbf{r}, t) - d_2^{+-}(\mathbf{r}, t)] = 2\rho^+ d_{\text{d}}(\mathbf{r}, t). \quad (4.11)$$

Ekkor az ezekre felírt evolúciós egyenletek (4.4), (4.5) és (4.9) alapján:

$$\partial_t \rho^h + 2B \nabla [\mathbf{b} \kappa^h (\tau_{\text{ind}} + \tau_{\text{sc}}^h + \tau_{\text{b}}^h)] = 0, \quad (4.12)$$

$$\partial_t \kappa^h + 2B \nabla [\mathbf{b} \rho^h (\tau_{\text{ind}} + \tau_{\text{sc}}^h + \tau_{\text{b}}^h)] = 0, \quad (4.13)$$

ahol

$$\tau_{\text{sc}}^h(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^2} \kappa^h(\mathbf{r}', t) \bar{\tau}_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (4.14)$$

$$\tau_{\text{b}}^h(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^2} \kappa^h(\mathbf{r}', t) d_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \bar{\tau}_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r'. \quad (4.15)$$

Ezzel megadtuk a korrelációs függvények evolúciós egyenleteit a Kirkwood közelítés mellett.

4.2. Diszlokációk Debye árnyékolása

Tekintsünk egy egyensúlyi diszlokáció rendszert, majd helyezzünk bele egy extra, fixen tartott diszlokációt. Ekkor a többi diszlokáció a „külső” feszültségtér hatására elmozdul és kialakul egy új egyensúlyi állapot. Ebben az extra diszlokáció körüli átlagos feszültségtér már $1/r$ -nél gyorsabban lecseng. Ezt hívjuk diszlokáció árnyékolásnak, melyről az 1.5.3. fejezetben már részletesen beszéltünk, és bemutattuk a variációs módszert, melynek keretei között az árnyékolt feszültségterek meghatározhatóak. A jelenség azonban az egyrészecske sűrűsége felírt (1.25) és (1.26) evolúciós egyenletek szintjén is tárgyalható. Egyedüli változtatásként a konstans τ_{ext} külső feszültség helyébe a külső diszlokáció által keltett τ_{ind} helytől függő feszültségetert kell írni. Ekkor az 1.5.3. fejezetben bemutatott számolást megismételve az alábbi egyenletekhez juthatunk [A3]:

$$\partial_t \rho + B \nabla [\mathbf{b} \kappa (\tau_{\text{ind}} + \tau_{\text{sc}} - \bar{\pi} + \tau_{\text{b}})] = 0, \quad (4.16)$$

$$\partial_t \kappa + B \nabla [\mathbf{b} \rho (\tau_{\text{ind}} + \tau_{\text{sc}} - \bar{\pi} + \tau_{\text{b}})] = 0, \quad (4.17)$$

ahol

$$\tau_{\text{sc}}(\mathbf{r}, t) := \int_{\mathbb{R}^2} \kappa(\mathbf{r}', t) \bar{\tau}_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (4.18)$$

$$\tau_{\text{b}}(\mathbf{r}, t) := \int_{\mathbb{R}^2} \kappa(\mathbf{r}', t) \tilde{d}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \bar{\tau}_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (4.19)$$

$$\tau_{\text{f}}(\mathbf{r}, t) := \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \rho(\mathbf{r}', t) \tilde{d}_{\text{a}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \bar{\tau}_{\text{ind}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^2 r', \quad (4.20)$$

és $\tilde{d} := (\tilde{d}_2^{++} + \tilde{d}_2^{--} + \tilde{d}_2^{+-} + \tilde{d}_2^{-+})/4$ valamint $\tilde{d}_{\text{a}} := (\tilde{d}_2^{+-} - \tilde{d}_2^{-+})/2$. A $\tilde{}$ jelölést azért vezettük be, hogy megkülönböztessük az itt és az előző pontban kialakuló korrelációs függvényeket. A most tárgyalt rendszer a helyfüggő külső tér miatt inhomogén, ezáltal nem használható egy (4.3) típusú összefüggés.

4.3. A korrelációs függvények és az árnyékolt sűrűségek összehasonlítása

Az előző két pontban evolúciós egyenleteket vezettünk le a korrelációs függvényekből képzett ρ^{h} és κ^{h} mennyiségekre, ill. egy extra fix diszlokáció körül kialakuló ρ és κ teljes és előjeles sűrűségekre. Látható, hogy a (4.12) és (4.13) valamint a (4.16) és (4.17) egyenletek szerkezete nagyon hasonló. Ennél több is elmondható: amennyiben bizonyos feltételek teljesülnek a korrelációs függvényekre, az egyenletek tökéletesen azonosak lesznek. Ezek a feltételek a következők:

(i) Legyen a $+$ és $-$ diszlokációk száma azonos, ekkor $d_2^{+-}(\mathbf{r}, t) = d_2^{-+}(\mathbf{r}, t)$ és $d_2^{++}(\mathbf{r}, t) = d_2^{--}(\mathbf{r}, t)$.

(ii) Ezen kívül tegyük fel, hogy az árnyékolás esetén kialakuló korrelációs függvények megegyeznek a homogén rendszerben kaptottal:

$$\tilde{d}_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = d_2^{s_1, s_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t). \quad (4.21)$$

Ekkor $\tilde{d}_{\text{a}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 0$ és $\tilde{d}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = d_{\text{s}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t)$, ami azt jelenti, hogy a τ_{f} „folyásfeszültség” etűnik a (4.16) és (4.17) egyenletekből, továbbá az ezekben szereplő τ_{sc} és τ_{b} megegyezik a (4.12) és (4.13) egyenletekben szereplő $\tau_{\text{sc}}^{\text{h}}$ -val ill. $\tau_{\text{b}}^{\text{h}}$ -val.

Innen már következik a fejezet fő elméleti eredménye: Amennyiben a (4.12) és

(4.13) egyenletek d_2^{++} és d_2^{--} megoldását (azaz a Kirkwood közelítésben a homogen rendszerekhez tartozó korrelációs függvényt) behelyettesítjük a (4.16) és (4.17) egyenletekbe, akkor a kapott (ρ^h, κ^h) és (ρ, κ) megoldások megegyeznek.

Fizikailag a (4.21) feltétel annak a közelítésnek felel meg, amikor a külső diszlokáció által keltett feszültség hatását elhanyagoljuk a korrelációs függvényekben. Ez azt jelenti, hogy a külső hatást első rendű perturbációnak tekintjük, tökéletes összhangban a termális rendszereknél érvényes lineáris válasz elmélettel.

Nem említettük még a (4.12) és (4.13) egyenletek divergencia tagja előtt különbségment megjelenő kettes faktort, mely az idő átskálázásával eltüntethető. Ennek megjelenése egyébként könnyen megérthető, ha tekintünk két egymás terében mozgó diszlokációt. Ezek ugyanabba az egyensúlyi állapotba relaxálnak akkor is ha az egyiket fixen tartjuk (az árnyékolás esete) és akkor is ha nem (a korrelációs függvények esete). A különbség csupán a folyamat hosszában van, ugyanis az utóbbi fele annyi ideig tart.

Összefoglalva megállapítható, hogy ha a (4.21) közelítés teljesül, akkor mind véletlen állapotból történő relaxáció során, mind relaxált rendszerbe helyezett új fix diszlokáció esetén a kezdőállapotokra teljesül, hogy $\rho^h(\mathbf{r}, 0) = \rho(\mathbf{r}, 0) = \rho^+ + \rho^-$ és $\kappa^h(\mathbf{r}, 0) = \kappa(\mathbf{r}, 0) = 0$, és ezért

$$\rho(\mathbf{r}, 2t) = \rho^h(\mathbf{r}, t) = \rho^+ [2 + d_2^{++}(\mathbf{r}, t) + d_2^{--}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.22)$$

és

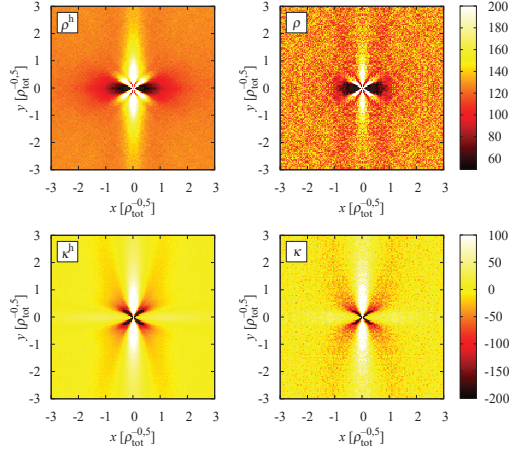
$$\kappa(\mathbf{r}, 2t) = \kappa^h(\mathbf{r}, t) = \rho^+ [d_2^{++}(\mathbf{r}, t) - d_2^{--}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.23)$$

minden \mathbf{r} és t esetén.

4.4. Numerikus eredmények

A levezetett (4.22) és (4.23) összefüggések diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációk segítségével ellenőrizhetők. Több, mint 13 000 véletlen kezdő konfigurációból történő relaxációt végeztünk 64 pozitív és 64 negatív diszlokáció esetén. A relaxált konfigurációkból a ρ^h és κ^h mennyiségek a (4.10) és (4.11) ill. az (1.12) definíciók alapján határozhatóak meg. Ezek a 4.1. ábra első oszlopában láthatók.

Ezt követően egy pozitív előjelű diszlokációt helyeztünk a szimulációs terület közepére. Miközben a rendszer ismét relaxált, az extra diszlokációt fixen tartottuk.



4.1. ábra. A ρ^h , ρ , κ^h és κ függvények egyensúlyban diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációk alapján. A távolságok $\rho_{tot}^{-0.5}$ átlagos diszlokáció távolságban vannak mérve.

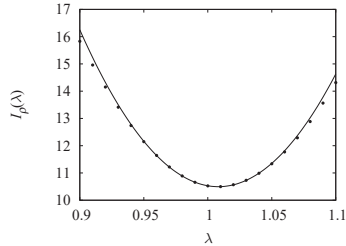
Az egyensúlyi állapotban meghatároztuk a ρ_1^+ és ρ_1^- egyrézecske sűrűségfüggvényeket úgy, hogy leszámoltuk egy 256×256 -os négyzetrács celláiban található pozitív és negatív diszlokációkat. Innen ezek összegeként ill. különbségeként állnak elő a ρ teljes és κ előjeles diszlokáció sűrűségek, melyeket a 4.1. ábra második oszlopában ábráztunk.

Várakozásainknak megfelelően a kapott függvények nagyon hasonlóak. Szemmel látható különbség, hogy a ρ és κ esetén a zaj amplitúdója jóval nagyobb. Ennek oka világos: egy N diszlokációból álló rendszer $N(N-1)$ adatot (a relatív koordinátákat) szolgáltat a korrelációs függvények meghatározásánál, azonban csak N adatot (az abszolút koordinátákat) a sűrűségek meghatározásánál. Annak érdekében, hogy összehasonlítsuk a kapott egyensúlyi ρ^h és ρ függvényeket, az alábbi mennyiséget vezetjük be:

$$I_\rho(\lambda) := \int_A |\rho(\mathbf{r}) - \lambda \rho^h(\mathbf{r})| d^2r. \quad (4.24)$$

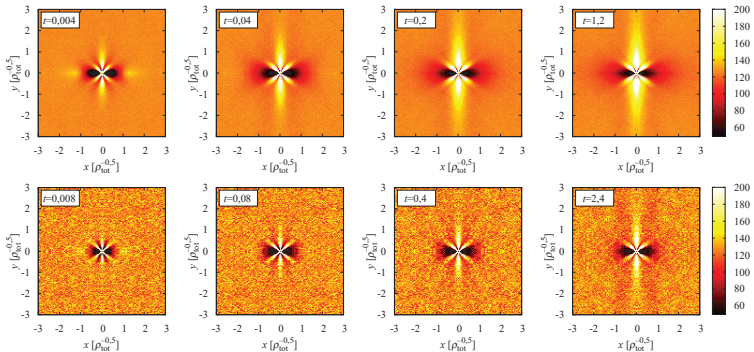
Mivel a zaj integrálja konstansnak tekinthető, ha ρ^h és ρ valóban megegyezik, akkor ennek a mennyiségnek $\lambda = 1$ -nél minimuma kell legyen. Amint korábban említettük

a Kirkwood közelítés várhatóan nem alkalmazható kis távolságok esetén, ezért az A integrálási tartományból kihagytuk az origó körüli, $0,5 \rho_{\text{tot}}^{-0,5}$ sugarú kört. Az eredmény a 4.2. ábrán látható. A minimumhely valóban $\lambda = 1$ körül van. A bemutatott számolás κ^h és κ esetén is elvégezhető, és hasonló eredményre vezet.

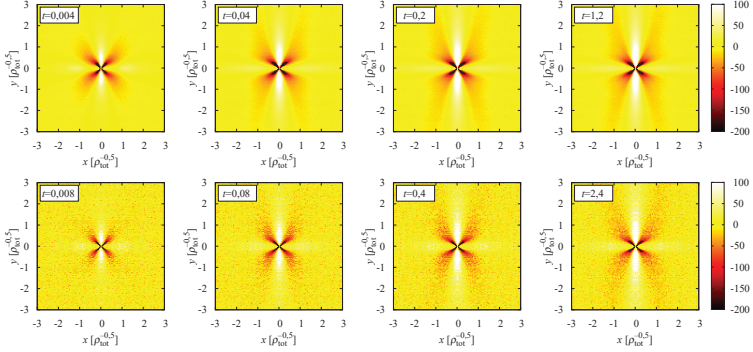


4.2. ábra. $I_\rho(\lambda)$ különböző λ értékek esetén (pontok), valamint az ezekre illesztett másodfokú polinom (folytonos vonal).

A (4.22) és (4.23) összefüggések ellenőrzésére a ρ^h , ρ , κ^h és κ függvényeket különböző időpontokban is ábrázoltuk a 4.3. és a 4.4. ábrán. Jól látható, hogy a függvények időfejlődése is jó közelítéssel megegyezik.



4.3. ábra. A ρ^h (felső sor) és a ρ (alsó sor) időfejlődése. A t időt $\frac{2\pi(1-\nu)L^2}{b^2\mu B}$ dimenzió nélküli mennyiségekben mérjük. A (4.22) összefüggés értelmében $\rho^h(\mathbf{r}, t)$ -t $\rho(\mathbf{r}, 2t)$ -vel hasonlítjuk össze.



4.4. ábra. A κ^h (felső sor) és a κ (alsó sor) időfejlődése. A t időt $\frac{2\pi(1-\nu)L^2}{b^2\mu B}$ dimenzió nélküli mennyiségekben mérjük. A (4.23) összefüggés értelmében $\kappa^h(\mathbf{r}, t)$ -t $\kappa(\mathbf{r}, 2t)$ -vel hasonlítjuk össze.

Összefoglalva, a Kirkwood approximáció segítségével evolúciós egyenleteket vezettünk le a korrelációs függvényekre. Ezek az egyenletek tökéletesen analógak egy árnyékolt diszlokáció körül kialakuló diszlokáció sűrűségeket leíró egyenletekkel. Az analógia bizonyítására numerikus szimulációkat végeztünk, melyek során meghatároztuk a korrelációs függvényeket és az árnyékolt tereket. A megfelelő mennyiségek között tökéletes egyezést találtunk. Ez azt jelenti, hogy a Kirkwood approximáció megfelel a fizikai elvárásoknak, továbbá egy külső diszlokáció által keltett tér korrelációs függvényekre gyakorolt hatása elhanyagolható.

Az kapott eredmény, azaz a korrelációs függvények és a külső tér által indukált terek ekvivalenciája, megfelel a termális rendszerekben megszokott lineáris válasz elmélettel. Meglepő, hogy ez a diszlokációk esetén is érvényben marad, hiszen ezek a rendszerek nulla hőmérsékletűek.

Az egyenletek analógiáján túl szükséges az evolúciós egyenletek numerikus megoldása, és az eredmény összevetése a diszkrét szimulációkból kapott adatokkal. Ilyen irányú kutatások folyamatban vannak.

5. fejezet

A kontinuum modell többszörös csúszás esetén

Az 1.5.3. fejezetben bemutattuk az egyszerűs csúszás esetére kidolgozott két dimenziós modellt, és annak variációs átfogalmazását. Ez utóbbi az (1.55) definícióval bevezetett szabadenergia jellegű funkcionálon alapul:

$$F[\chi, \kappa, \rho] = \int_{\mathbb{R}^2} \left[-\frac{1-\nu}{4\mu} (\Delta\chi)^2 + b\chi \frac{\partial\kappa}{\partial y} + T_{\text{eff}} \frac{\kappa^2}{2\rho} \right] d^2r + F_c[\rho]. \quad (5.1)$$

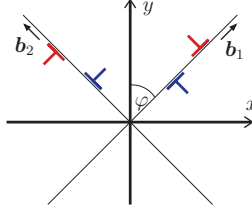
Az egyensúlyi helyzetben teljesülnek a

$$\frac{\delta F}{\delta\chi} = 0, \quad \frac{\delta F}{\delta\kappa} = 0 \quad (5.2)$$

feltételek. Ebben a fejezetben a módszer két csúszósíkra történő általánosításával foglalkozunk. Ezen a téren korábban még nem született értékelhető eredmény az irodalomban.

5.1. A szabadenergia két csúszósík esetén

Az általánosság megszorítása nélkül, helyezkedjék el a két csúszósík a koordinátatengelyekre nézve szimmetrikusan, az 5.1. ábrán látható módon. Itt bevezettük a φ szöveget és a csúszósíkokhoz tartozó \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 Burgers vektorokat ($|\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = b$). A $\varphi = 0$ és $\varphi = \pi/2$ esetek éppen a korábban már tárgyalt egyszerűs csúszásnak felelnek meg.



5.1. ábra. A két csúszósík elhelyezkedése, a \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 Burgers vektorok valamint a φ szög definíciója. Pirossal a pozitív, kékkel a negatív előjelű diszlokációkat jelöltük.

Jelölje $\rho_{(i)}^+$ ill. $\rho_{(i)}^-$ az i -edik csúszósíkon fekvő pozitív és negatív diszlokációk sűrűségét. A teljes és előjeles sűrűségeket most csúszósíkonként értelmezzük: $\rho_{(i)} := \rho_{(i)}^+ + \rho_{(i)}^-$, $\kappa_{(i)} := \rho_{(i)}^+ - \rho_{(i)}^-$. Tekintsük azt az esetet, amikor a két csúszósíkon található diszlokációk száma megegyezik, és térbeli eloszlásuk is csak kis mértékben különbözik, azaz $\rho_{(1)}(\mathbf{r}, t) \approx \rho_{(2)}(\mathbf{r}, t)$. Ez azt jelenti, hogy a rendszerben, az egyszeres csúszáshoz hasonlóan, csak egy hosszúságskála jelenik meg. Vezessük még be a $\rho_a(\mathbf{r}, t) := [\rho_{(1)}(\mathbf{r}, t) + \rho_{(2)}(\mathbf{r}, t)]$ jelölést.

Az F szabadenergia első két tagja a rugalmas energiát és a diszlokációk kölcsönhatási energiáját adja meg (lásd 1.5.3. fejezet). Ezek általánosítása két csúszósíkra egyszerűen megtehető. A harmadik, entrópia jellegű tagban pedig figyelembe kell vennünk kereszttagokat is¹, ekkor az általánosított szabadenergia:

$$F[\chi, \kappa_{(1)}, \kappa_{(2)}, \rho_{(1)}, \rho_{(2)}] = \int_{\mathbb{R}^2} \left\{ -\frac{1-\nu}{4\mu}(\Delta\chi)^2 + b\chi [\sin(\varphi)(\partial_y\kappa_{(1)} - \partial_y\kappa_{(2)}) - \cos(\varphi)(\partial_x\kappa_{(1)} + \partial_x\kappa_{(2)})] + T_{\text{eff}} \frac{\kappa_{(1)}^2 + \kappa_{(2)}^2 + 2A(\varphi)\kappa_{(1)}\kappa_{(2)}}{2\rho_a} \right\} d^2r. \quad (5.3)$$

A fenti képletben a csak a $\rho_{(i)}$ -ktől függő F_c tagot nem írtuk le. A kereszttag együttthatójaként megjelent egy tetszőleges $A(\varphi)$ dimenziótlan csatolási paraméter, melyről egyelőre csupán annyi állapítható meg, hogy $A(0) = 1$ és $A(\pi/2) = -1$, hiszen ezekben az esetekben vissza kell kapnunk az egyszeres csúszás szabadenergiáját. Megjegyezzük, hogy természetesen a T_{eff} paraméter is függhet a φ szögtől.

¹Más szóval a $\kappa_{(i)}$ -k szerinti sorfejtésben most is az első nem eltűnő tagoknál állunk meg.

5.2. Dinamikai egyenletek

Az 1.5.3. fejezetben bemutatottuk a dinamikát leíró kontinuum egyenletek származtatásának módját a szabadenergia funkcionálból. Az irreverzibilis termodinamikából vett módszer szerint fogunk most is eljárni.

A $\rho_{(i)}^+$ ill. $\rho_{(i)}^-$ diszlokáció sűrűségek megmaradó mennyiségek², ezért időfejlődésüket egy

$$\partial_t \rho_{(i)}^\pm + \operatorname{div} \mathbf{j}_{(i)}^\pm = 0 \quad (5.4)$$

típusú egyenlet írja le, ahol $\mathbf{j}_{(i)}^\pm$ jelöli a pozitív ill. negatív diszlokációk áramát. Az egy csúszósíkos esethez hasonlóan [77], ezek az alábbi alakban adhatóak meg:

$$\mathbf{j}_{(i)}^\pm = \mp B \frac{\mathbf{b}_i}{b} \rho_{(i)}^\pm \left(\frac{\mathbf{b}_i}{b_i} \nabla \right) \frac{\delta F}{\delta \kappa_{(i)}}. \quad (5.5)$$

A $\kappa_{(i)}$ -k szerinti variálásokat a következő pontban (5.11) és (5.12) adja meg. Innen az evolúciós egyenletekre

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{(1)}}{\partial t} + B(\mathbf{b}_1 \nabla) \left\{ \kappa_{(1)} \left[\frac{\sin(2\varphi)}{2} (\partial_y^2 - \partial_x^2) \chi - \cos(2\varphi) \partial_x \partial_y \chi - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{T_{\text{eff}}}{b} (\sin(\varphi) \partial_x + \cos(\varphi) \partial_y) \frac{\kappa_{(1)} + A(\varphi) \kappa_{(2)}}{\rho_a} \right] \right\} = 0, \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \kappa_{(1)}}{\partial t} + B(\mathbf{b}_1 \nabla) \left\{ \rho_{(1)} \left[\frac{\sin(2\varphi)}{2} (\partial_y^2 - \partial_x^2) \chi - \cos(2\varphi) \partial_x \partial_y \chi - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{T_{\text{eff}}}{b} (\sin(\varphi) \partial_x + \cos(\varphi) \partial_y) \frac{\kappa_{(1)} + A(\varphi) \kappa_{(2)}}{\rho_a} \right] \right\} = 0, \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{(2)}}{\partial t} + B(\mathbf{b}_2 \nabla) \left\{ \kappa_{(2)} \left[-\frac{\sin(2\varphi)}{2} (\partial_y^2 - \partial_x^2) \chi - \cos(2\varphi) \partial_x \partial_y \chi - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{T_{\text{eff}}}{b} (-\sin(\varphi) \partial_x + \cos(\varphi) \partial_y) \frac{\kappa_{(2)} + A(\varphi) \kappa_{(1)}}{\rho_a} \right] \right\} = 0, \end{aligned} \quad (5.8)$$

²Amennyiben nincs diszlokáció képződés. Ez utóbbi egyébként az (5.4) jobb oldalához adott megfelelő forrástaggal vehető figyelembe.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \kappa_{(2)}}{\partial t} + B(\mathbf{b}_2 \nabla) \left\{ \rho_{(2)} \left[-\frac{\sin(2\varphi)}{2} (\partial_y^2 - \partial_x^2) \chi - \cos(2\varphi) \partial_x \partial_y \chi - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{T_{\text{eff}}}{b} (-\sin(\varphi) \partial_x + \cos(\varphi) \partial_y) \frac{\kappa_{(2)} + A(\varphi) \kappa_{(1)}}{\rho_a} \right] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

adódik. Természetesen ez a módszer is csak akkor alkalmazható, ha $|\kappa_{(i)}| \ll \rho_{(i)}$, és $\kappa_{(i)}$ és $\rho_{(i)}$ fluktuációja egy nagyságrendbe esik.

5.3. Sztatikus eset

Két csúszósík esetén az (5.2) egyensúlyi feltételek nyilvánvalóan úgy módosulnak, hogy a $\kappa_{(1)}$ és $\kappa_{(2)}$ szerinti variációnak is el kell tűnnie. Ekkor az egyensúlyi egyenletek:

$$\frac{\delta F}{\delta \chi} = -\frac{1-\nu}{2\mu} \Delta^2 \chi - b [\sin(\varphi)(\partial_y \kappa_{(1)} - \partial_y \kappa_{(2)}) - \cos(\varphi)(\partial_x \kappa_{(1)} + \partial_x \kappa_{(2)})] = 0, \quad (5.10)$$

$$\frac{\delta F}{\delta \kappa_{(1)}} = b \cos(\varphi) \partial_x \chi - b \sin(\varphi) \partial_y \chi + T_{\text{eff}} \frac{\kappa_{(1)} + A(\varphi) \kappa_{(2)}}{\rho_a} = 0, \quad (5.11)$$

$$\frac{\delta F}{\delta \kappa_{(2)}} = b \cos(\varphi) \partial_x \chi + b \sin(\varphi) \partial_y \chi + T_{\text{eff}} \frac{\kappa_{(2)} + A(\varphi) \kappa_{(1)}}{\rho_a} = 0. \quad (5.12)$$

Az (5.11) és (5.12) egyenletek alapján $\kappa_{(1)}$ és $\kappa_{(2)}$ kifejezhető χ -vel:

$$\kappa_{(1)} = \frac{\rho_a}{T_{\text{eff}}} \left[-\frac{1}{1+A(\varphi)} b \cos(\varphi) \partial_x \chi + \frac{1}{1-A(\varphi)} b \sin(\varphi) \partial_y \chi \right], \quad (5.13)$$

$$\kappa_{(2)} = \frac{\rho_a}{T_{\text{eff}}} \left[-\frac{1}{1+A(\varphi)} b \cos(\varphi) \partial_x \chi - \frac{1}{1-A(\varphi)} b \sin(\varphi) \partial_y \chi \right]. \quad (5.14)$$

A három egyensúlyi egyenlet nem oldható meg, hiszen öt változónk van (χ , $\rho_{(1)}$, $\rho_{(2)}$, $\kappa_{(1)}$ és $\kappa_{(2)}$). Első közelítésként (az egy csúszósíkos esethez hasonlóan) feltesszük, hogy $\rho_{(1)}(\mathbf{r}, t) = \rho_{(2)}(\mathbf{r}, t) = \rho_{\text{tot}}/2$, azaz a sűrűségek térben állandók. Ekkor az utóbbi két egyenletet visszahelyettesítve (5.10)-be, a feszültség függvényre az alábbi zárt egyensúlyi egyenlet adódik:

$$\frac{1-\nu}{2\mu} \Delta^2 \chi - b^2 \frac{\rho_{\text{tot}}}{T_{\text{eff}}} \left[\cos^2(\varphi) \frac{2}{1+A(\varphi)} \partial_x^2 \chi + \sin^2(\varphi) \frac{2}{1-A(\varphi)} \partial_y^2 \chi \right] = 0. \quad (5.15)$$

Korábban megállapítottuk, hogy $A(0) = 1$ és $A(\pi/2) = -1$. A levezetett egyen-

súlyi egyenletek alapján azonban ennél több is elmondható. Egymásra merőleges csúszósíkok, azaz $\varphi = \pi/4$ esetén, az x és y tengelyek ekvivalensek egymással. Ez azt jelenti, hogy (5.15)-ben az x és az y szerinti deriváltak együttthatója meg kell egyezzen egymással, ami csak $A(\pi/4) = 0$ esetén lehetséges.

Természetes választás lehet $A(\varphi) = \cos(\varphi)$, hiszen ez teljesíti az eddig megállapított feltételeket. Tekintsük azonban az (5.15) egyenletet a $\varphi \rightarrow 0$ esetben, amikor a bal oldal utolsó tagjának nullához kell tartania. Az előbbi választással azonban az együtttható φ -függő részére

$$\lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{\sin^2(\varphi)}{\cos(\varphi) - 1} = \frac{\varphi^2}{1 - \varphi^2/2 - 1} = -2, \quad (5.16)$$

ami ellentmondás. $A(\varphi)$ -nek tehát kis φ -k esetén lineárisan kell indulnia. Ez a gondolatmenet természetesen $\varphi \approx \pi/2$ esetén is érvényben marad. Ezen megfontolások alapján az

$$A(\varphi) = \frac{4}{\pi} \left(\frac{\pi}{4} - \varphi \right) \quad (5.17)$$

jóslat tehető.

5.4. Az izotróp eset megoldása

Az előző pontban levezetett (5.15) egyenlet analitikusan is megoldható az izotróp, azaz a $\varphi = \pi/4$ esetben. Tegyük egy rögzített diszlókációt az origóba a \mathbf{b}_1 Burgers vektorú csúszósíkra. Ekkor a feszültség potenciálra vonatkozó egyenlet a

$$\Delta^2 \chi - k_0^2 \Delta \chi = \frac{q}{\sqrt{2}} (\partial_y - \partial_x) \delta \quad (5.18)$$

alakot ölti, ahol

$$k_0' = \sqrt{\frac{4\pi G b^2 \rho_{\text{tot}}}{T_{\text{eff}}}} \quad (5.19)$$

és $q = 4\pi G b$. Az egyenlet megoldása két tag összegeként állítható elő, melyek közül az elsőt a G Green függvény segítségével adjuk meg, melyre

$$\Delta^2 G(\mathbf{r}) - k_0'^2 \Delta G(\mathbf{r}) = \partial_y \delta(\mathbf{r}). \quad (5.20)$$

A jobb oldali forrástagban szereplő y szerinti deriválás elhagyható, ui. a

$$\Delta^2 H(r) - k_0'^2 \Delta H(r) = \delta(\mathbf{r}). \quad (5.21)$$

egyenlet H megoldásából $G(\mathbf{r}) = \partial_y H(r)$. Mivel ez utóbbi egyenlet izotróp, ezért H nyilvánvalóan csak r -től függhet, azaz hengerszimmetrikus. Defináljuk most az

$$F(r) := \Delta H(r) \quad (5.22)$$

függvényt, melyre

$$\Delta F(r) - k_0'^2 F(r) = \delta(\mathbf{r}). \quad (5.23)$$

Ennek végtelenben lecsengő megoldása:

$$F(r) = -\frac{1}{2\pi} K_0(k_0' r), \quad (5.24)$$

ahol K_0 a nulladik módosított másodrendű Bessel-függvény. A Bessel-függvényekre vonatkozó azonosságok és (5.22) alapján

$$\frac{dH(r)}{dr} = \frac{1}{2\pi r k_0'^2} [k_0' r K_1(k_0' r) - 1]. \quad (5.25)$$

Innen a G Green függvényre

$$G(\mathbf{r}) = \partial_y H(r) = \frac{y}{r} \frac{dH(r)}{dr} = \frac{y}{2\pi r k_0'} \left[K_1(k_0' r) - \frac{1}{k_0' r} \right]. \quad (5.26)$$

Az (5.18) jobb oldalán a második forrástaghoz tartozó megoldás (5.26)-ból x és y felcseréléséből állítható elő, azaz

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{q}{\sqrt{2}} \frac{y-x}{2\pi r k_0'} \left[K_1(k_0' r) - \frac{1}{k_0' r} \right]. \quad (5.27)$$

Az indukált polarizációk (5.13) és (5.14) alapján:

$$\kappa_{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{k_0'^2}{4\pi} \left\{ \frac{4xy}{k_0'^3 r^3} \left[K_1(k_0' r) - \frac{1}{k_0' r} \right] - \frac{(y-x)^2}{r^2} K_0(k_0' r) \right\}, \quad (5.28)$$

$$\kappa_{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{k_0'^2}{4\pi} \frac{(y-x)^2}{r^2} \left[K_2(k_0' r) - \frac{2}{(k_0' r)^2} \right]. \quad (5.29)$$

Mivel a Bessel-függvények exponenciálisan lecsengenek, ezért a $\kappa_{(i)}$ -k nagy távolságok esetén $1/r^2$ -tel arányosak. Dimenzionális megfontolások alapján is nyilvánvaló, hogy az elméleti aszimptotika független a k'_0 mennyiségtől.

5.5. Numerikus eredmények

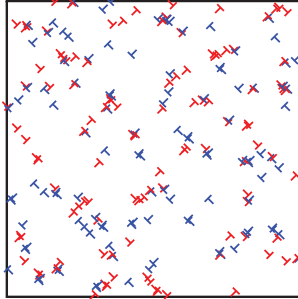
A két szimmetrikus csúszósík melletti Debye árnyékolás numerikus ellenőrzésénél, hasonlóan járunk el, mint korábban Groma, Györgyi és Kocsis (lásd 1.5.3. fejezet ill. [59, 77]). A $\kappa_{(1)}$ és $\kappa_{(2)}$ indukált előjeles sűrűségeket a korrelációs függvényekkel közelítjük.³

Két csúszósík esetén többféle korrelációs függvény is megjelenik. A $d_{2,(ij)}^{s_1, s_2}$ függvény most az i -edik csúszósíkon található s_1 előjelű, valamint a j -edik csúszósíkon fekvő s_2 előjelű diszlokációk közötti korrelációt méri. A rendszer szimmetriája miatt megállapítható, hogy ezek közül csak három független egymástól, nevezetesen $d_{2,(11)}^{++}$ és $d_{2,(11)}^{+-}$, melyek (hasonlóan az egy csúszósíkos esethez) az azonos csúszósíkokon fekvő diszlokációkra vonatkoznak, és $d_{2,(12)}^{++}$, mely a keresztkorrelációkat adja meg. Megállapítható, hogy $d_{2,(12)}^{+-}$ éppen ez utóbbi 90° -os elforgatásával kapható meg.

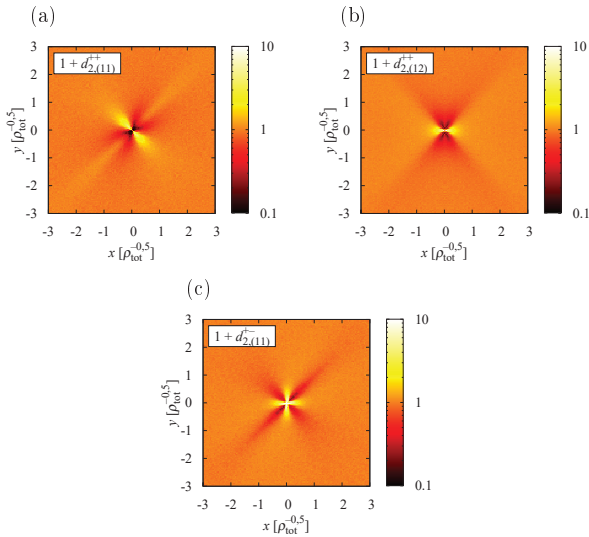
Ezen függvények numerikus meghatározása érdekében véletlenszerűen elhelyezkedő diszlokációkból álló rendszereket relaxáltattunk. Kezdetben mindkét csúszósíkon egyaránt 64 pozitív és 64 negatív diszlokáció volt. A szimulációk részleteit lásd az 1.2.3. fejezetben. Egy így kapott relaxált konfigurációt mutat az 5.2. ábra. Összesen 1500 különböző szimulációt végeztünk, majd az ezekből számolt korrelációs függvényeket átlagoltuk. Az így kapott eredmények az 5.3. ábrán láthatóak.

Az indukált polarizációkat a $\kappa_{(1)} \sim d_{2,(11)}^{++} - d_{2,(11)}^{+-}$ és a $\kappa_{(2)} \sim d_{2,(12)}^{++} - d_{2,(12)}^{+-}$ összefüggésekkel közelítjük (lásd (4.10) és (4.11)). Egyszeres csúszásnál, ha a csúszósík az x tengellyel párhuzamos, akkor jó illeszkedés az y tengely mentén valósul meg, míg az x tengely irányában végesméret effektusok torzítják az eredményt [77]. Ennek megfelelően most is $\kappa_{(1)}$ esetén az $y = -x$ egyenes, míg $\kappa_{(2)}$ esetén az x tengely mentén vizsgáljuk az illeszkedést. Az 5.4. és 5.5. ábrákon a numerikus eredmények mellett az (5.28) és (5.29) elméleti jóslatokat is ábráztuk. Az illeszkedés az origó rendkívül szűk környezetét leszámítva tökéletesnek mondható. Ez azt jelenti, hogy az $1/r^2$ típusú lecsengés valóban teljesül. Meg kell jegyezni azonban, hogy a tökéletes illeszkedés érdekében a $\kappa_{(1)}$ esetén az elméleti függvényt meg kellett szorozni egy

³Ennek elméleti hátterével a 4. fejezetben foglalkoztunk.

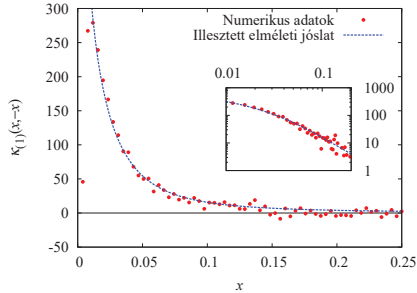


5.2. ábra. Egy 256 diszlokációból álló relaxált konfiguráció szimmetrikus kétszeres csúszás esetén.

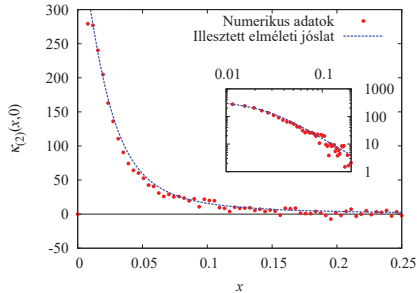


5.3. ábra. A három független korrelációs függvény szimmetrikus kétszeres csúszás esetén. A csúszási síkok elhelyezkedése az 5.1. ábrán látható.

$C \approx 2$ konstanssal, továbbá a két esetben illesztéssel kapott k'_0 értéke is kis mértékben eltér egymástól. A megjelenő C konstans nyilvánvalóan annak, a valóságban az



5.4. ábra. A $\kappa_{(1)}$ indukált előjeles sűrűség a \mathbf{b}_1 Burges vektorú csúszósíkon. Az $y = -x$ egyenes mentén ábrázoltuk a korrelációs függvények megfelelő kombinációját (lásd szöveg) valamint az (5.28) elméleti jöslatot. Az $1/r^2$ -es viselkedés igazolására logaritmikus ábrázolást is készítettünk.



5.5. ábra. A $\kappa_{(2)}$ indukált előjeles sűrűség a \mathbf{b}_2 Burges vektorú csúszósíkon az $y = 0$ egyenes mentén. A további részletek tekintetében lásd az előző ábrát.

origó közelében nem teljesülő feltételnek a következménye, hogy $\rho_{(i)}(\mathbf{r}, t) \approx \rho_{\text{tot}}/2$. Elmondható, hogy az origó környezetében a valóságban nagyobb vagy kisebb (esetünkben kisebb) árnyékolás valósul meg, mint ahogyan az elmélet jösloná. Ezért az origótól távolabb (ahol az említett feltétel már triviálisan teljesül és az elmélet már jól működik) a külső erőteret át kell skálázni. A két k'_0 eltérése feltehetően végesméret hatás, azaz 256 diszlokáció nem elegendő a megfelelő árnyékolás eléréséhez. Ennek ellenére az $1/r^2$ -es viselkedés egyértelműen az elmélet bizonyításaként értelmezhető.

Összefoglalásként elmondható, hogy sikerült megtenni az első lépést az 1.5.3. fejezetben bemutatott kontinuum elmélet több csúszósíkra való általánosítása felé. Evolúciós egyenleteket adtunk meg szimmetrikus kétszeres csúszás esetén a síkonkénti teljes és előjeles sűrűségekre. Ezen felül, a konstans teljes sűrűséget feltételező sztatikus esetben analitikus megoldást adtunk. Ez az indukált polarizáció, és így a korrelációs függvények $1/r^2$ típusú lecsengését jósolta. Numerikus számítások megerősítették ezt a jóslatot, ami azt jelenti, hogy az árnyékolás több csúszósík esetén minőségi különbséget mutat az egyszeres csúszáshoz képest. Ott egy megadott irányban $1/r^{3/2}$ típusú, a többi irányban pedig exponenciális lecsengés tapasztalható (lásd 1.5.3 ill. [59, 77]). Több csúszósíkban is érvényesül tehát az árnyékolás jelensége, azaz az átlagos indukált feszültségtér $1/r$ -nél gyorsabb lecsengése.

Fontos megemlíteni, hogy a korrelációk most kapott $1/r^2$ típusú lecsengése összhangban van az 1.4. fejezetben bemutatott három dimenziós diszlokáció elrendezésekre kapott eredménnyel. Csikor és munkatársai kimutatták, hogy egy ott bevezetett párkorrelációs függvénynek szintén $1/r^2$ típusú távolságfüggése van [60]. Ez azt sugallja, hogy a mostani eredmény általánosabb érvényű, és nem csak a két dimenziós esetben teljesül.

6. fejezet

Diszlokációk relaxációja és sebességük eloszlása

Ebben a fejezetben diszlokáció rendszerek véletlenszerű kezdőállapotból történő relaxációjával foglalkozunk. A probléma látszólag távol áll a gyakorlattól, hiszen teljesen véletlenszerű diszlokáció elrendeződés sosem alakul ki valódi kristályrácsokban (amint az 1.4. fejezetben már említettük, ilyenkor a rendszer energiája logaritmikusan divergálna a kristálymérettel). Diszlokáció lavinák (1.6. fejezet) során azonban sok diszlokáció kiszakad eredeti korrelált helyzetéből. Ez azt jelenti, hogy a relaxációk vizsgálata közelebb vihet a lavinák megértéséhez.

Elsőként dinamikai mennyiségek időfejlődését vizsgáljuk különböző méretű rendszerekben, majd a diszlokációk sebességének eloszlását tárgyaljuk különböző időpontokban.

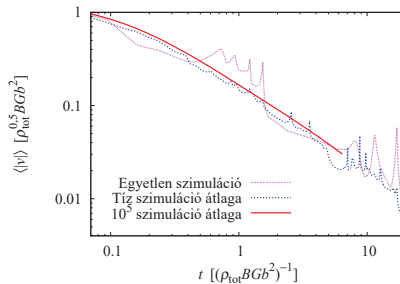
6.1. Dinamikai mennyiségek viselkedése [A4]

Tekintsük ismét az 1.2.1. fejezetben bevezetett modellt periodikus határfeltétellel. Vezessük be az

$$\begin{aligned} x' &:= x/\sqrt{\rho_{\text{tot}}}, & t' &:= t B G b^2 \rho_{\text{tot}} \\ v' &:= x/(B G b^2 \sqrt{\rho_{\text{tot}}}), & \tau' &:= \tau/(G b \sqrt{\rho_{\text{tot}}}) \end{aligned} \tag{6.1}$$

dimenziótlan mennyiségeket. Az L rendszerméret ekkor az új váltózóban $L' = \sqrt{N}$, ahol N a teljes diszlokációs szám.

Az 1.2.3. fejezetben bemutatott numerikus módszerrel szimulációkat végeztünk különböző diszlokációs számokkal. Különböző időpontokban megmértük a diszlokációk sebességének abszolút értékének átlagát ($\langle |v'| \rangle$). A 6.1. ábrán jól látható, hogy egy szimuláció esetén ez a mennyiség időben erősen fluktuál. Ez éppen azt jelenti, hogy a relaxáció szakaszosan, azaz lavinászerűen történik. Az átlagos viselkedés tanulmányozása érdekében átlagolást végeztünk sok különböző szimuláció felett (ezt a típusú átlagot $\langle \rangle$ -vel jelöljük). Megfelelő nagyságú minta esetén $\langle |v'| \rangle$ már az idősima függvénye (6.1. ábra).



6.1. ábra. Az átlagos diszlokáció sebesség időfejlődése különböző mintaszámok esetén.

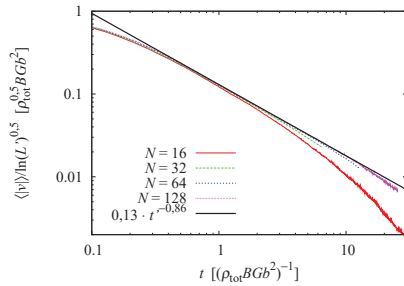
A 6.2. ábrán a $\langle |v'| \rangle$ -ot, míg a 6.3. ábrán $\langle v'^2 \rangle$ -ot ábrázoltuk az idő függvényében. Megállapítható, hogy mindkét mennyiség egy jól definiált időtartományban hatványfüggvényszerű lecsengést mutat. Az intervallum kezdete $t'_1 \approx 0,5$ körül van, a vége pedig rendszerméret függő, vizsgálataink szerint $t'_2 \approx 0,08N$. A hatványfüggvény szerinti viselkedést egyébként már korábban megfigyelték, azonban a levágási időt, és az exponensek pontos értékét, a túl nagy numerikus zaj miatt, nem sikerült kimutatni [90]. A levágási idő rendszerméret függése azt mutatja, hogy végtelen rendszer esetén az algebrai lecsengés a relaxáció teljes időtartama alatt fennállna, azaz a levágás egy végesméret effektus. Ha a különböző N diszlokációs számok esetén mért átlagokat t' függvényében ábrázoljuk, és a sebességeket elosztjuk a rendszerméretfüggő $\ln(L)^{0,5}$ konstanssal, akkor a görbék egybeesnek. Ez utóbbi konstans megjelenése energetikai megfontolásokkal magyarázható [A4]. A sebességek időfej-

lődésére egyébként

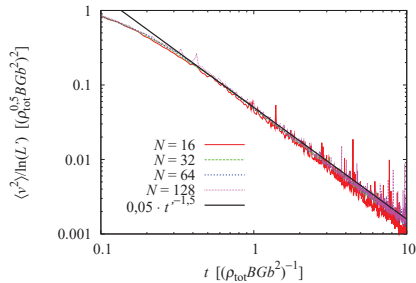
$$\langle |v'| \rangle(t') \sim t'^{-0,86}, \quad (6.2)$$

$$\langle v'^2 \rangle(t') \sim t'^{-1,5} \quad (6.3)$$

adódott.



6.2. ábra. Az átlagos diszlokáció sebesség időfejlődése különböző N diszlokációszámok esetén.



6.3. ábra. A diszlokáció sebesség négyzetének átlagos időfejlődése különböző N diszlokációszámok esetén.

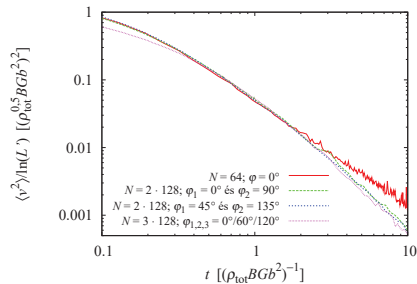
A relaxációs folyamat úgy is elképzelhető, mint a kezdeti, minden hosszúságtartományban jelentkező sűrűség fluktuációk fokozatos kihalása. Ennek alapján egy egyszerű modellt javasoltunk a dinamika leírására [A4]. Ennek részleteivel most nem

foglalkozunk, csupán annyit jegyzünk meg, hogy a sebességek különböző hatványainak időfejlődésére

$$\langle |v'|^n(t') \rangle \sim t'^{-(n+1)/2} \quad (6.4)$$

adódik. Ez $\langle v'^2 \rangle$ esetén tökéletes egyezést ad a numerikus eredményekkel, $\langle |v'| \rangle$ esetében azonban némi eltérés tapasztalható.

Megvizsgáltuk a rendszer rugalmas energiájának és a külső feszültség hatására létrejövő plasztikus deformációnak az időfejlődését is. Az előbbire hatványfüggvény adódott $-0,5$ -ös kitevővel, míg az utóbbi exponenciálisan cseng le [A4]. Kiderült továbbá, hogy az állítások csak pozitív diszlokációkat tartalmazó rendszerek esetén is érvényben maradnak, ill. a csúszósík és a szimulációs térfogat orientációja sem befolyásolja az eredményeket. A többszörös csúszás esetét mutatja a 6.4. ábra. Megfigyelhető, hogy ilyenkor a relaxáció gyorsabb, mint egyszeres csúszás esetén. Ennek oka nyilvánvalóan az, hogy a létrejövő diszlokáció záruk (lásd 1.2.3. fejezet) hosszú hatótávolságú feszültségterükkel akadályozzák a diszlokációk mozgását.



6.4. ábra. Az diszlokáció sebesség négyzetének átlagos időfejlődése különböző csúszási rendszerek esetén. Az ábrán φ_i -vel jelöltük az i . csúszósík és az x tengely által bezárt szöveget.

6.2. A diszlokációk helyén mérhető feszültség eloszlása

Az előző alfejezetben a sebességek átlagainak időfejlődését vizsgáltuk. Most az átlagok helyett a diszlokáció sebességek teljes eloszlásának megismerésével fogunk

foglalkozni. A szimulációkban alkalmazott túlesillapított dinamika (lásd 1.2. fejezet) éppen azt jelenti, hogy az i -edik diszlokáció esetén $\tau'_i = v'_i$, azaz a sebességek eloszlása és a diszlokációk helyén mérhető feszültség eloszlása a skálázott koordinátákban éppen megegyezik. Ezért ezt az eloszlást a továbbiakban egyaránt fogjuk sebesség- és feszültségeloszlásnak is nevezni.

6.2.1. Elméleti számolások

Az alábbiakban az 1.3.2. fejezetben leírt számoláshoz nagyon hasonlóan járunk el. Helyezkedjen el az N db. diszlokáció az $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ pontokban, előjelük legyen s_1, \dots, s_N . Ekkor az első diszlokáció helyén mérhető nyírófeszültség:

$$\tau_{(1)}^{s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) := \sum_{i=2}^N s_i \tau_{\text{ind}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_i). \quad (6.5)$$

Az eloszlásfüggvény zárt alakban történő felírásának érdekében vezessük be a

$$\Delta_{(1)}^{s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \tau, d\tau) := \begin{cases} 1, & \text{ha } \tau - \frac{d\tau}{2} < \tau_{(1)}^{s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) < \tau + \frac{d\tau}{2}, \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases} \quad (6.6)$$

függvényt. Ismét a lehetséges állapotokra kell összegezni, azonban most az első diszlokációról tudjuk, hogy az \mathbf{r}_1 pontban van, azaz az állapotoknál egy feltételes valószínűséget kell alkalmazni. Annak a valószínűsége tehát, hogy a maradék $N - 1$ diszlokáció az $\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ pontok d^2r_2, \dots, d^2r_N környezetében van

$$\frac{\int_N^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) d^2r_1 d^2r_2 \dots d^2r_N}{\int_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t) d^2r_1}. \quad (6.7)$$

Ezzel, és az előbb bevezetett $\Delta_{(1)}^{s_2, \dots, s_N}$ függvénnyel az eloszlásfüggvény zárt alakban fejezhető ki:

$$P_{\text{str},(1)}(\mathbf{r}_1, \tau, t) d\tau = \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \int_{\mathbb{R}^2} \dots \int_{\mathbb{R}^2} \Delta_{(1)}^{s_2, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \tau, d\tau) \cdot \frac{\int_N^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) d^2r_2 \dots d^2r_N}{\int_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t)} \quad (6.8)$$

Az f_N N - és f_1 egyrészecske eloszlásfüggvények definícióját lásd az 1.5.3. fejezetben. Innen (hasonlóan az 1.3.2. fejezetben bemutatott számoláshoz) a Markoff módszert használhatjuk, és végeredményben $P_{\text{str},(1)}$ Fourier transzformáltjára az alábbi alak kapható:

$$P_{\text{str},(1)}^F(\mathbf{r}_1, q, t) = \frac{N_{s_1}}{\rho_1^{s_1}(\mathbf{r}_1, t)} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \int_{\mathbb{R}^{2(N-1)}} d^2r_2 \dots d^2r_N f_N^{s_1, \dots, s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \cdot \prod_{i=2}^N [1 - B^{s_i}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_i, q)], \quad (6.9)$$

ahol bevezettük a

$$B^s(\mathbf{r}, q) := 1 - e^{iqs\tau_{\text{ind}}(\mathbf{r})} \quad (6.10)$$

jelölést, továbbá N_+ és N_- jelöli a pozitív ill. negatív előjelű diszlokációk számát. Kifejtve a fenti produktumot, és megállva a második tagnál, néhány rövid átalakítás után az alábbi egyszerű alakra juthatunk:

$$P_{\text{str},(1)}^F(q, t) = 1 + \rho^+ \int_{\mathbb{R}^2} [d_2^{++}(\mathbf{r}, t) + d_2^{+-}(\mathbf{r}, t) + 2] [1 - e^{-iq\tau_{\text{ind}}(\mathbf{r})}] d^2r + \dots \quad (6.11)$$

Itt már kihasználtuk, hogy a rendszer homogén, ezáltal nem függhet \mathbf{r}_1 -től, és a korrelációs függvények is csak a relatív koordinátáktól függenek.

Korábban, az 1.3.2. fejezetben bemutattuk a számolást véletlen pontban mért feszültség esetén. Összehasonlítva a most kapott eredményt (1.8)-cal megállapítható, hogy a különbség csupán annyi, hogy a $\rho_1(\mathbf{r}, t)$ diszlokáció sűrűséget a korrelációs függvények egy kombinációja váltotta fel.¹

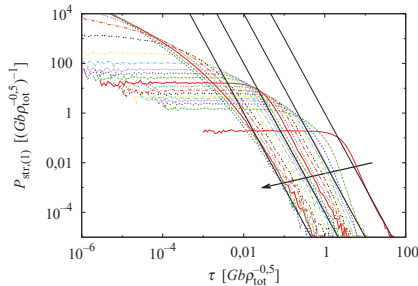
6.2.2. Numerikus eredmények

Az előző pontban megadtuk a sebességeloszlás Fourier transzformáltjának zárt alakját, mely változóként csak a kétrészecske korrelációs függvényeket tartalmazza. A 4. fejezetben egyenleteket adtunk meg a korrelációs függvények evolúciójára, azonban azok analitikus megoldása nem várható. Az alábbiakban numerikus úton hatá-

¹Vegyük észre, hogy (1.8)-ban az eloszlásfüggvény Fourier transzformáltjának logaritmusára szerepel, ezért nem jelenik meg a vezető egyes.

rozzuk meg a sebességeloszlást a relaxáció különböző időpontjaiban.

Összesen több, mint 13 000 relaxációt végeztünk, a kezdő konfigurációk 64 pozitív és 64 negatív véletlenszerűen elhelyezkedő diszlokációból álltak. A különböző időpontokban mért sebességeloszlások a 6.5. ábrán láthatók. Mivel a relaxáció végén minden diszlokáció megáll, ezért az eloszlás a Dirac-delta függvényhez tart. Megfigyelhető, hogy az eloszlás minden t esetén $1/|\tau|^3$ -el cseng le, csakúgy mint a véletlen pontban mérhető feszültség eloszlása (lásd 1.3.2. fejezet).



6.5. ábra. A diszlokációk sebességének eloszlása a relaxáció különböző időpontjaiban. A nyíl az idő múlását jelöli. A behúzott egyenesek τ^{-3} típusú hatványfüggvények.

A 6.6(a). ábrán látható, hogy egy megfelelő β exponenssel összekálázhatóak az előbbi eloszlásfüggvények, azaz egy megfelelően választott P_1 függvényel²

$$P_{\text{str},(1)}(\tau', t') = t'^{\beta} P_1(\tau' t'^{\beta}), \quad (6.12)$$

ahol

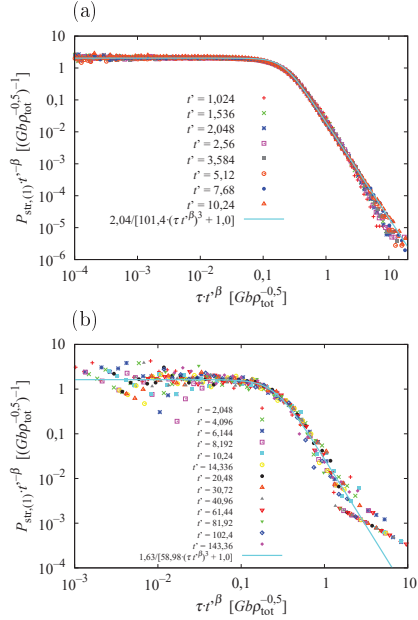
$$\beta \approx 0,86, \quad (6.13)$$

és megfelelő A és B konstansokkal P_1 jó közelítéssel leírható egy

$$P_1(\tau') = \frac{A}{B|\tau'|^3 + 1} \quad (6.14)$$

alakú függvénnyel.

²A (6.12) skálázási egyenletben a P_1 előtt, és annak argumentumában szereplő exponensek meg kell egyezzenek, hiszen csak így kapunk egyre normált valószínűségi eloszlást.



6.6. ábra. A diszlokációk sebességének eloszlása a relaxáció különböző időpontjaiban megfelelően átskálázott tengelyek esetén. A teljes diszlokáció szám: (a) $N = 128$, (b) $N = 2048$.

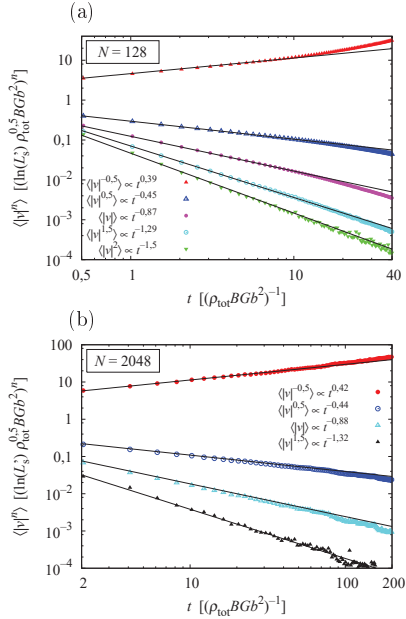
A fenti (6.12) skálázási összefüggés alapján a sebesség n -edik ($n \in \mathbb{R}$) hatványának időfejlődésére

$$\langle |v|^n \rangle(t) = \int_{\mathbb{R}} |v|^n P_{\text{str},(1)}(v, t') dv' = 2 \int_0^{\infty} v^n t'^{\beta} P_1(v' t'^{\beta}) dv' = C t^{-n\beta} \quad (6.15)$$

adódik egy megfelelő C konstanssal. Az utolsó lépésben egy egyszerű változócserét végeztünk az integrálban. Ez azt jelenti, hogy a skálázás megvalósulása felülírja a korábbi modell jóslatát (lásd (6.4)).

A (6.15) összefüggés ellenőrzése végett ábrázoltuk a sebesség $-0,5$ -ik, $0,5$ -ik, első és $1,5$ -ik hatványának átlagát az idő függvényében (6.7. ábra). Látható, hogy (6.15)

nagyon jó közelítéssel teljesül. A $\langle v'^2 \rangle$ esetén tapasztalható $-1,5$ kitevő látszólag ellentmond a jóslatoknak, azonban vegyük észre, hogy az eloszlásfüggvény $|v'|^{-3}$ típusú lecsengése miatt a $\langle v'^2 \rangle$ nem is létezik. Ennél több is mondható: mivel $P_{\text{str},(1)}$ az origó közelében egy véges értékhez tart, ezért a (6.15) összefüggésben szereplő integrál csak $-1 < n < 2$ esetben végezhető el. Ez a numerikus eredményekkel tökéletes összhangban van.



6.7. ábra. A diszlokáció sebességek különböző hatványainak időfüggése különböző diszlokációs számok esetén: (a) $N = 128$, (b) $N = 2048$. Jól látható, hogy mindkét esetben a skálázási tartomány vége $t'_2 \approx 0,08 N$ körül van.

Ahogy a sebességátlagok hatványfüggvényszerű viselkedése, úgy az eloszlásfüggvények skálázhatósága is véget ér egy t'_2 időpontban. Az előző fejezetben láttuk, hogy ez rendszerméret függő. Annak érdekében, hogy ezt a skálázás esetén is ellenőrizni tudjuk, a relaxációkat nagyobb, 2048 diszlokációt tartalmazó rendszerek esetén is elvégeztük. A nagy számításgéni miatt, ezt csak 12 különböző kezdőál-

lapotra tudtuk megtenni. A 6.6(b). ábrán látható, hogy a kapott eloszlások ismét összeskálázhatóak, azonban időben most már csaknem két nagyságrenden keresztül. (A nagyobb zaj a kis mintaszámnak köszönhető.) A sebességek különböző hatványainak átlagos viselkedése a 6.7(b). ábrán látható. A hatványkitevők most még jobban megközelítik a (6.15) összefüggést. Megállapítható, hogy a skálázó szakasz vége

$$t'_2 \approx 0,08 N \quad (6.16)$$

körül van, tökéletes összhangban a 6.1. fejezetben bemutatott eredményekkel.

Összefoglalva elmondható, hogy a diszlokáció rendszerek relaxációja egyszeres csúszás esetén lassú, hatványfüggvényszerű viselkedést mutat. A sebességek eloszlása (egy kezdeti bekapcsolási időtartamtól eltekintve) a különböző időpontokban összeskálázható. Ez a rendszer valamilyen ön hasonlóságára utal. A skálázási tartomány egy ponton véget ér, erről azonban beláttuk, hogy tisztán véges méret hatás. Többszörös csúszás esetén a relaxáció gyorsabb, azaz a skálázási argumentum nem alkalmazható.

Amint láttuk a sebességeloszlás függvény az időtől csak a korrelációs függvényeken keresztül függ (lásd (6.11)). Annak vizsgálata, hogy a korrelációs függvények is rendelkeznek-e valamiféle skálázási tulajdonsággal, ill. hogy kapcsolat teremthető-e az itt bemutatott eredmények és a korrelációs függvény evolúciójára a 4. fejezetben levezetett egyenletek között, jelenleg is kutatás tárgyát képezik.

Összefoglalás

Bevezetés

Kristályos anyagok plasztikus deformációja az esetek túlnyomó többségében diszlokációk kollektív mozgásával valósul meg. A diszlokációk $1/r$ típusú, azaz hosszú hatótávolságú feszültségteret keltenek, és a mozgásuk rendszerint egy csúszósíkhoz van kötve. Ezáltal ezek a rendszerek erősen csatoltak, és dinamikájuk is sok szempontból különleges. Példaként említhetjük a kristályban kialakuló diszlokáció mintázatokat ill. a diszlokáció lavinákat. Mivel ezek a jelenségek szoros kapcsolatban állnak a kristály által adott plasztikus válasszal, megértésük kulcsfontosságú az anyagtudományban.

Diszlokációk modellezése során gyakran alkalmaznak diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációkat, mellyel nyomon követhetjük az egyedi diszlokációk mozgását. Habár a mai számítógépekkel ezt már három dimenzióban is képesek vagyunk megtenni, mégis az ilyen szimulációk hatóköre sok szempontból korlátozott. Ilyen pl. a vizsgálható mintaméret ill. a deformációs sebesség. A módszer másik gyengesége, hogy valójában nem ad magyarázatot a szimulált jelenségekre, azok valódi oka gyakran rejtve marad.

Az utóbbi másfél évtizedben a diszkrét modellezés előretörésével párhuzamosan új lendületet kapott a diszlokációk kollektív tulajdonságainak elméleti vizsgálata. Kiderült, hogy sok, a statisztikus fizikában általánosan alkalmazott módszer nem használható diszlokációk esetén. Az ilyen jellegű kutatások során a diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációk rendkívül hasznos segédeszközt jelentenek, hiszen lehetőség adnak az elméleti jóslatok direkt ellenőrzésére.

A munka célkitűzései

A diszlokációk a kristályos anyagot ért hatások függvényében meglepően sokféle mintázatba rendeződnek. Ezek közül talán a legtöbbet a fázisátalakítás során létrejövő állandósult csúsztatási sávokat vizsgálták. Diszkrét szimulációkkal korábban még a folyamat legelején megjelenő mátrix struktúráját sem sikerült kielégítően modellezni. Mindeközben számos, a sávok kialakulására kidolgozott modell a vakancia és intersticiális típusú dipólok közötti energiakülönbségre épül. A diszkrét szimulációk minden esetben a lineáris rugalmasságtanra épülnek, azonban ebben az esetben az említett energiakülönbség zérus. A megoldás az lehet, ha a szimulációkban túl tudunk lépni a lineáris rugalmasságtanon, ehhez azonban egy zárt alakban kifejezett kölcsönhatási erő levezetésére van szükség. Az ebben a témakörben kapott eredményeket a következő szakasz 1. pontjában ismertetjük.

A diszlokációk hosszú hatótávolságú feszültségtereken keresztül hatnak kölcsön, ami azt jelenti, hogy N diszlokáció esetén a diszkrét dinamikai algoritmus $\mathcal{O}(N^2)$ műveletigényű. A numerikus program gyorsítására ad lehetőséget a Groma István és Bakó Botond által kidolgozott sztochasztikus eljárás, melynek központi mennyisége a feszültség eloszlása a kristály pontjaiban. Ennek alakját korábban már sikerült meghatározni, azonban csak abban az esetben, amikor a rendszerre nem hat külső feszültség. A gyakorlati alkalmazások szempontjából azonban létfontosságú lenne az alkalmazott feszültség figyelembevétele. Az ezzel kapcsolatos eredmények az „Eredmények” szakasz 2. pontjában kerülnek ismertetésre.

Korábbi vizsgálatok alapján egyértelművé vált, hogy a diszlokáció korrelációk nem hanyagolhatók el, és számos más fizikai mennyiségre hatással vannak. A rendszer dinamikájának jobb megértése végett szükséges a korrelációk időfejlődésének pontos leírása. Ezzel a következő rész 3. pontjában foglalkozunk.

Groma István és munkatársai kidolgoztak egy kontinuum modellt egyszerű csúsztatás esetén. A modell rendkívül pontos egyezést mutat a diszkrét szimulációk eredményeivel. Sajnos többszörös csúsztatásra történő általánosítás, mely a gyakorlati alkalmazások szempontjából nélkülözhetetlen, korántsem triviális. Az egyszerű csúsztatásnál megalkotott módszer nem ismételtető meg. Groma Istvánnak és Györgyi Gézáknak sikerült a teljes kontinuum elméletet újrafogalmazni egy variációs elmélet keretei között mely egy szabadenergia jellegű termodinamikai potenciálon alapul. Ez a módszer már elvben lehetőséget ad a többszörös csúsztatás bevezetésére. Az

ezzel kapcsolatos első lépések eredményeit az „Eredmények” szakasz 4. pontjában mutatjuk be.

Diszlokációk véletlen állapotból történő relaxációjával korábban csak érintőlegesen foglalkoztak. A tudományos érdeklődés középpontjában álló diszlokáció lavinák megértéséhez azonban érdemben járulhatnának hozzá a relaxációval kapcsolatos ismeretek. A lavinák során ugyanis, a külső feszültség hatására néhány diszlokáció kiszakad egyensúlyi helyzetéből, és ettől az egész rendszer mozgó állapotba kerül. Innen a folyamat feltehetően jól közelíthető valamiféle relaxációval. Az ebben a témakörben elért eredményekről a következő rész 5. pontjában lesz szó.

Eredmények

1. A nemlineáris rugalmasságtan bevezetése végett, újrafogalmaztuk a Kröner–Kosevich-féle kontinuum modellt egy variációs elméletté. A benne megjelenő entalpia funkcionál megadása lényegében a rugalmas feszültség és a rugalmas deformáció közötti összefüggést rögzíti. Az anharmonikus esethez tartozó entalpia felírása után analitikus alakban fejeztük ki a két diszlokáció közötti erőhatást. A kapott konvolúciós integrált sikerült elvégezni, így a kölcsönhatásra egy egyszerű, zárt képletet kaptam, melyben az anharmonicitás eredménye egy extra erőkomponens a harmonikus tag mellett. Az extra kölcsönhatás $1/r$ -nél gyorsabban cseng le (azaz rövidtávú), és érdekesség, hogy benne, a lineáris esettel ellentétben, paraméterként megjelenik a diszlokációk magjánál fellépő belső levágási sugár.

Kimutattuk, hogy a kapott anharmonikus kölcsönhatási tag esetén a homogén diszlokáció eloszlás instabil, és valóban egy karakterisztikus hosszal jellemezhető mintázat alakul ki. Ez a hosszparaméter az átlagos diszlokáció távolsággal arányos. Diszkrét dinamikai szimulációkat végeztem az új kölcsönhatási taggal és az elméleti jóslatokkal megegyező eredményre jutottam, azaz egy jól definiált karakterisztikus hosszal jellemezhető mintázat alakult ki.

2. Meghatároztam a belső feszültség eloszlását alkalmazott külső feszültség esetén. Az analitikus számolásokat a diszlokáció rendszer hipotetikus monodiszperz dipól közelítésében végeztem el. A kapott eredmény jó egyezést mutatott a numerikus szimulációkkal. Elmondható, hogy nagy feszültségek esetén az

eredeti $1/|\tau|^3$ -ös aszimptotikához egy külső feszültséggel arányos $1/(\tau|\tau|^3)$ -os járulék adódik. A numerikus eredmények alapján kiderült, hogy a rendszerben található dipólok és multipólok leáryékolják a külső feszültséget, és végeredményben egy effektív külső térrel számolhatunk, mely kb. fele a valódi térnek.

3. A különböző rendű diszlokáció sűrűségek időfejlődésére korábban Groma István levezetett egy BBGKY hierarchiát. Ezt a Kirkwood közelítés alkalmazásával a második szinten zártam le, így a korrelációs függvényekre nézve zárt evolúciós egyenletekhez jutottam. Kiderült, hogy a kapott egyenletek nagyon hasonlítanak azokhoz, melyek egy árnyékolt diszlokáció körüli sűrűségeket írják le. Ez azt jelenti, hogy diszlokációk esetén is igaz a lineáris válasz elmélet, azaz a korrelációs függvények és az árnyékolt terek ekvivalenciája. A numerikus szimulációk minden tekintetben alátámasztották az elméleti jóslatokat.
4. Az egyszeres csúszás kontinuum elmélete egy megfelelő szabadenergia jellegű funkcionálból származtatható. A funkcionál szimmetriaelvek alkalmazásával általánosítható többszörös csúszás esetére. Szimmetrikus kétszeres csúszás (azaz egymásra merőleges csúszosíkok) esetén a funkcionálban csak egy ismeretlen paraméter szerepel. Az egyenletek analitikus egyensúlyi megoldása csak egy közelített esetben adható meg, nevezetesen, amikor a diszlokáció sűrűség a térben mindenütt közel konstans. Kiderült, hogy ekkor az indukált előjeles sűrűségek a távolság második hatványával csengenek le, ami azt is jelenti, hogy a korrelációk rövidtávúak. Ez az eredmény az alkalmazott közelítés ellenére nagyon jól illeszkedik a numerikus szimulációkból kapott adatokra.
5. Numerikus vizsgálatok során kiderült, hogy a véletlenszerű állapotból történő relaxáció lassú, abban az értelemben, hogy több dinamikai mennyiség, így a sebességek különböző hatványainak átlaga, hatványfüggvényszerű lecsengést mutat. Ez a skálázó tulajdonság egy „bekapcsolási” idő után teljesül, és egy a rendszermérettel arányos időpontig tart. Megmutattam, hogy a viselkedés hátterében az áll, hogy a sebességek különböző időpontokban mért eloszlása összekálázható. Többszörös csúszás esetén a relaxáció gyorsabb, és a skálázási argumentum nem teljesül.

A. Függelék

Az anharmonikus potenciál meghatározása

Az alábbiakban a

$$V_1(\mathbf{r}) = \frac{(b_1 - b_2)b^2}{(2\pi)^3 D} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{y' - y}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \left(\frac{y'}{|\mathbf{r}'|^2} \right)^2 d^2 r' \quad (\text{A.1})$$

képlettel megadott anharmonikus potenciál analitikus alakjának meghatározását mutatjuk be. Elsőként vegyük észere, hogy tetszőleges $\mathbf{r} \neq 0$ esetén az integrandus kis r' -kre (a polárkoordináták használata esetén megjelenő Jacobi-determinánst is figyelembe véve) $1/r'$ típusú függvény. Nagy r' -k esetén pedig az integrandus $1/r'^2$ -hez tart. Ez azt jelenti, hogy az integrál az origó közeli viselkedés miatt szinguláris, azonban a végtelenben reguláris, azaz integrálható. A V_1 (A.1) definíciójában szereplő konvolvált függvények az Airy-féle feszültségfüggvény deriváltjai (lásd 2.3. fejezet). Mivel a diszlokációk valójában nem egy ideális rugalmas médiumba, hanem egy kristályrácba vannak ágyazva, ezért a feszültségfüggvénynek a diszlokáció néhány atomtávolságnyi környezetében nincs is értelme, ezért ezt a tartományt ki kell hagyni az integrálásból. Ez a megállapítás teszi regulárisrá az (A.1) integrált, és ezt a későbbiekben ki is fogjuk használni.

Mivel

$$\frac{y'^2}{r'^4} = \frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial y'^2} \ln(r') + \frac{1}{r'^2} \right] \quad (\text{A.2})$$

és

$$\frac{y'}{r'^2} = \frac{\partial}{\partial y'} \ln(r'), \quad (\text{A.3})$$

ezért

$$V_1(\mathbf{r}) = \frac{C}{2} \left\{ [\partial_y \ln(r)] \otimes [\partial_y^2 \ln(r)] + \int_{\mathbb{R}^2} \frac{y' - y}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2 r' \right\} =: V_{11}(\mathbf{r}) + V_{12}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.4})$$

ahol bevezettük a $C := (b_1 - b_2)b^2/[(2\pi)^3 D]$ jelölést.

Az (A.4) első tagjára az $\ln(r) \otimes \ln(r) = (\pi/2)r^2 \ln(r)$ azonosság alapján

$$V_{11}(\mathbf{r}) = \frac{C\pi}{4} \partial_y^3 r^2 \ln(r) = \frac{C\pi}{2} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (\text{A.5})$$

A második tag kiszámítása már közel sem ilyen egyszerű. Először tekintsük az alábbi átalakítást:

$$V_{12}(\mathbf{r}) = \frac{C}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{y' - y}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2 r' = -\frac{C}{2} \frac{\partial}{\partial y} \int_{\mathbb{R}^2} \ln(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \frac{1}{r'^2} d^2 r'. \quad (\text{A.6})$$

Az integrál két hengersizmetrikus függvény konvolúciója, mely szükségképpen maga is hengersizmetrikus. Ezért az y szerinti differenciálás átírható r szerinti deriválásra, mely egyszerűen elvégezhető:

$$V_{12}(\mathbf{r}) = -\frac{C}{2} \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} \int_{\mathbb{R}^2} \ln(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \frac{1}{r'^2} d^2 r'. \quad (\text{A.7})$$

Vegyük észre, hogy az integrál továbbra is hengersizmetrikus, tehát ha r szerint deriváljuk, még mindig csak r -től fog függeni. A szögfüggés tehát csupán az y/r szorzóval jelenik meg. Az r szerinti deriválást bevívve az integrál mögé, a konvolúció első tagját kell deriválni:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \ln(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{2} \ln((x' - r \sin \varphi)^2 + (y' - r \cos \varphi)^2) = \\ &= \frac{x' \sin \varphi + y' \cos \varphi - r}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Ezzel (A.7) az alábbi alakba írható:

$$V_{12}(\mathbf{r}) = \frac{C}{2} \frac{y}{r} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{r}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2 r' - \frac{C}{2} \frac{y}{r} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{x' \sin \varphi + y' \cos \varphi}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2 r'. \quad (\text{A.9})$$

Mivel az y/r mögötti integrál hengerszimmetrikus kell legyen, azaz nem függhet φ -tól, ezért a második tagnak mindenképpen el kell tűnnie. Így végeredményben

$$V_{12}(\mathbf{r}) = \frac{C}{2}y \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2r'. \quad (\text{A.10})$$

Tekintsük most a V_{12} -ben szereplő integrált. Amint korábban említettük, a konvolválts függvények origó közeli részét ki kell zárni az integrálásból. Az \mathbf{r} pont körüli ϵ sugarú körlapot $G_\epsilon(\mathbf{r})$ -rel jelölve legyen

$$g(\mathbf{r}) := \int_{\mathbb{R}^2 \setminus [G_\epsilon(0) \cup G_\epsilon(\mathbf{r})]} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2r'. \quad (\text{A.11})$$

Egyszerű helyettesítéssel belátható, hogy tetszőleges k pozitív valós szám esetén

$$\begin{aligned} k^2 g(k\mathbf{r}) - g(\mathbf{r}) &= \int_{G_\epsilon(0) \setminus G_{\epsilon/k}(0)} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2r' + \int_{G_\epsilon(\mathbf{r}) \setminus G_{\epsilon/k}(\mathbf{r})} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \frac{1}{r'^2} d^2r' = \\ &= 2 \frac{2\pi}{r^2} \ln k = \frac{4\pi}{r^2} \ln k. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Ennek az egyenletnek az egyetlen megoldása

$$g(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{r^2} \ln \left(\frac{r}{r_0} \right), \quad (\text{A.13})$$

ahol r_0 egy konstans, értéke nyilvánvalóan a belső levégási sugár.

Összefoglalva az (A.5) és (A.13) képleteket

$$V_1(\mathbf{r}) = \frac{(b_1 - b_2)b^2}{16\pi^2 D} \left[\frac{y(3x^2 + y^2)}{r^4} + 4 \frac{y}{r^2} \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \right]. \quad (\text{A.14})$$

Irodalomjegyzék

- [1] E. Orován, *Z. Phys.* **84**, 634 (1934).
- [2] G. I. Taylor, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **145**, 362 (1934).
- [3] M. Polányi, *Z. Phys.* **84**, 660 (1934).
- [4] G. I. Taylor, *J. Inst. Metals* **62**, 307 (1938).
- [5] R. Hill és J. R. Rice, *J. Mech. Phys. Solids* **20**, 401 (1972).
- [6] R. J. Asaro és A. Needleman, *Acta Metall.* **33**, 923 (1985).
- [7] L. P. Kubin és Y. Estrin, *Acta Metall.* **33**, 397 (1985).
- [8] N. A. Fleck, G. M. Müller, M. F. Ashby és J. W. Hutchinson, *Acta Mater.* **42**, 475 (1994).
- [9] K. W. McElhaney, J. J. Vlassak és W. D. Nix, *J. Mat. Res.* **13**, 1300, (1998).
- [10] D. Walgraef és E. C. Aifantis, *J. Appl. Phys.* **58**, 688 (1985).
- [11] D. Walgraef és E. C. Aifantis, *Int. J. Eng. Sci.* **23**, 1359 (1985).
- [12] D. M. Dimiduk, M. D. Uchic és T. A. Parthasarathy, *Acta Mater.* **53**, 4065 (2005).
- [13] D. M. Dimiduk, C. Woodward, R. LeSar és M. D. Uchic, *Science* **312**, 1188 (2006).
- [14] F. F. Csikor, C. Motz, D. Weygand, M. Zaiser és S. Zapperi, *Science* **318**, 251 (2007).
- [15] I. Groma és B. Bakó, *Phys. Rev. B* **58**, 2969 (1998).

-
- [16] F. F. Csikor és I. Groma, *Phys. Rev. B* **70**, 064106 (2004).
- [17] H. Mughrabi, F. Ackermann és K. Herz, in *Fatigue Mechanisms, Special Technical Publication 675*, szerk. J. T. Fong, 69 (American Society for Testing and Materials, Philadelphia, 1979).
- [18] Z. S. Basinski és S. J. Basinski, *Acta Metall.* **33**, 1307 (1985).
- [19] J. C. Grosskreutz és H. Mughrabi, *Constitutive Equations in Plasticity*, szerk. A. S. Argon, 301 (MIT Press, Cambridge MA, 1975).
- [20] L. Buchinger, S. Stanzl és C. Laird, *Philos. Mag. A* **50**, 275 (1984).
- [21] L. Buchinger, S. Stanzl és C. Laird, *Philos. Mag. A* **62**, 633 (1990).
- [22] B. T. Ma és C. Laird, *Acta Metall.* **37**, 337 (1989).
- [23] N. F. Mott, *Acta Metall.* **6**, 195 (1958).
- [24] J. G. Antonopoulos, L. M. Brown és A. T. Winter, *Philos. Mag.* **34**, 549 (1976).
- [25] U. Essmann, U. Gösele és H. Mughrabi, *Philos. Mag. A* **44**, 405 (1981).
- [26] L. M. Brown és S. L. Ogin, in *Fundamentals of deformation and fracture, Eschelby memorial symposium*, szerk. B. A. Bilby, K. J. Miller és J. R. Willis, 501 (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
- [27] L. M. Brown és F. R. N. Nabarro, *Philos. Mag.* **84**, 441 (2004).
- [28] J. Kratochvíl és S. Libovický, *Scr. Metall.* **20**, 1625 (1986).
- [29] J. Kratochvíl és R. Sedláček, *Phys. Rev. B* **67**, 094105 (2003).
- [30] J. Huang, N. M. Ghoniem és J. Kratochvíl, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12**, 917 (2004).
- [31] J. P. Hirth és J. Lothe, *Theory of Dislocations* (John Wiley & Sons, New York, 1982).
- [32] I. Groma és G. S. Pawley, *Philos. Mag.* **67**, 1459 (1993).
- [33] M.-Carmen Miguel, A. Vespignani, S. Zapperi, J. Weiss és J. R. Grasso, *Nature* **410**, 667 (2001).

- [34] M.-Carmen Miguel, A. Vespignani, M. Zaiser és S. Zapperi, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 165501 (2002).
- [35] E. N. da C. Andrade, *Proc. R. Soc. A* **84**, 1 (1910).
- [36] A. A. Benzerga, Y. Brechet, A. Needleman, E. Van der Giessen, *Modell. Sim. Mat. Sci. Eng.* **12** 159 (2004).
- [37] D. Gómez-García, B. Devincere és L. P. Kubin, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 125503 (2006).
- [38] L. Nicola, Y. Xiang, J.J. Vlassak, E. Van der Giessen és A. Needleman, *J. Mech. Phys. Sol.* **54**, 2089 (2006).
- [39] L. P. Kubin, G. R. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis és Y. Bréchet, *Solid State Phenom.* **23/24**, 455 (1992).
- [40] B. Devincere, L. P. Kubin, C. Lemarchand és R. Madec, *Mat. Sci. Eng. A* **309-310**, 211 (2001).
- [41] D. Weygand, L. H. Friedman, E. Van der Giessen és A. Needleman, *Modell. Sim. Mat. Sci. Eng.* **10** 437 (2002).
- [42] <http://paradis.stanford.edu/>
- [43] V. V. Bulatov, L. L. Hsiung, M. Tang, A. Arsenlis és mások, *Nature* **440**, 1174 (2006).
- [44] B. Bakó, D. Weygand, M. Samaras, J. Chen és mások, *Philos. Mag.* **87**, 3645 (2007).
- [45] B. Bakó, I. Groma, G. Györgyi és G. Zimányi, *Comput. Mater. Sci.* **38**, 22 (2006).
- [46] P. Hähner, *Acta Mater.* **44**, 2345 (1996).
- [47] P. Hähner, K. Bay és M. Zaiser, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2470 (1998).
- [48] B. Bakó és I. Groma, *Phys. Rev. B* **60**, 122 (1999).
- [49] B. Bakó és I. Groma, *Modell. Sim. Mat. Sci. Eng.* **7** 181 (1999).

- [50] I. Groma és B. Bakó, *Phys. Rev. B* **58**, 2969 (1998).
- [51] V. Beato, L. Pietronero és S. Zapperi, *J. Stat. Mech.* P04011 (2005).
- [52] I. Groma, *Phys. Rev. B* **57**, 7535 (1998).
- [53] F. Székely, I. Groma és J. Lendvai, *Phys. Rev. B* **62**, 3093 (2000).
- [54] A. Borbély és I. Groma, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1772 (2001).
- [55] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943).
- [56] I. Groma és B. Bakó, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1487 (2000).
- [57] M. Wilkens, *Acta Metall.* **17**, 1155 (1969).
- [58] M. Zaiser, I. Groma és M.-Carmen Miguel, *Phys. Rev. B* **64**, 224102 (2001).
- [59] I. Groma, G. Györgyi és B. Kocsis, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 165503 (2006).
- [60] F. F. Csikor, I. Groma, T. Hochrainer, D. Weygand és M. Zaiser, in *Proceedings of the 11th International Symposium on Continuum Models and Discrete Systems*, szerk. D. Jeulin és S. Forest, 271 (Mines ParisTech Les Presses, Paris, 2007).
- [61] A. El-Azab, J. Deng és M. Tang, *Philos. Mag.* **87**, 1201 (2007).
- [62] J. Deng és A. El-Azab, *J. Comput.-Aided Mater. Des.* **14**, 295 (2007).
- [63] D. Walgraef és E. C. Aifantis, *J. Appl. Phys.* **58**, 688 (1985).
- [64] E. C. Aifantis, *Int. J. Plasticity* **3**, 211 (1987).
- [65] A. El-Azab, *Phys. Rev. B*, **61**, 473 (1996).
- [66] M. Zaiser és T. Hochrainer, *Sct. Mater.* **54**, 717 (2006).
- [67] M. Zaiser, N. Nikitas, T. Hochrainer és E. C. Aifantis, *Philos. Mag.* **87**, 1283 (2007).
- [68] R. Sedláček, J. Kratochvíl és E. Werner, *Philos. Mag.* **83**, 3735 (2003).
- [69] C. Schwarz, R. Sedláček és E. Werner, *Acta Mater.* **56**, 341 (2008).

- [70] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, 78, (John Wiley & Sons, New York, 1975).
- [71] I. Groma, Phys. Rev. B **56**, 5807 (1997).
- [72] I. Groma és P. Balogh, Mater. Sci. Eng. A **234**, 249 (1997).
- [73] I. Groma és P. Balogh, Acta Mater. **47**, 3647 (1999).
- [74] I. Groma, F. F. Csikor és M. Zaiser, Acta Mater. **51**, 1271 (2003).
- [75] S. Yefimov, E. van der Giessen és I. Groma, Mod. Simul. Mat. Sci. Eng. **12**, 1069 (2004).
- [76] S. Yefimov, I. Groma és E. van der Giessen, J. Mech. Phys. Solids **52**, 279 (2004).
- [77] I. Groma, G. Györgyi és B. Kocsis, Phil. Mag. **87**, 1185 (2007).
- [78] I. Groma, G. Györgyi és B. Kocsis, Phys. Rev. Lett. **96**, 165503 (2006).
- [79] J. Weiss és J. R. Grasso, J. Phys. Chem. B **101**, 6113 (1997).
- [80] J. Schwerdtfeger, E. Nadgorny, F. Madani-Grasset, V. Koutsos, J. R. Blackford és M. Zaiser, J. Stat. Mech. L04001 (2007).
- [81] M. Zaiser és P. Moretti, J. Stat. Mech. P08004 (2005).
- [82] M. Zaiser, Adv. Phys. **55**, 185 (2006).
- [83] E. H. Lee, J. Appl. Mech. **36**, 1 (1969).
- [84] S. Chantasiriwan és F. Milstein, Phys. Rev. B **53**, 14080 (1996).
- [85] C. Sommer, H. J. Christ és H. Mughrabi, Acta Metall. Mater. **39**, 1177 (1991).
- [86] E. Kröner, in *Physics of Defects, Proceedings to the Les Houches Summer School, Session XXXV*, szerk. R. Balian, M. Kléman és J.-P. Poirier, 215, (North Holland, Amsterdam, 1981).
- [87] V. Vinogradov és J. R. Willis, Int. J. Solids Struct. **45**, 3726 (2008).
- [88] V. Vinogradov és J. R. Willis, Math. Mech. Solids **14**, 161 (2009).

-
- [89] J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. **3**, 300 (1935).
- [90] F. F. Csikor, B. Kocsis, B. Bakó és I. Groma, Mater. Sci. Eng. A **400/401**, 214 (2005).

A szerző témához kapcsolódó publikációi

- [A1] I. Groma és P. D. Ispánovity, „Role of anharmonicity in dislocation patterning”, *Phys. Rev. B* **76**, 054120 (2007).
- [A2] P. D. Ispánovity és I. Groma, „The probability distribution of internal stresses in externally loaded 2D dislocation systems”, *J. Stat. Mech.*, P12009 (2008).
- [A3] P. D. Ispánovity, I. Groma és G. Györgyi, „Evolution of the correlation functions in two-dimensional dislocation systems”, *Phys. Rev. B* **78**, 024119 (2008).
- [A4] F. F. Csikor, M. Zaiser, P. D. Ispánovity és I. Groma, *J. Stat. Mech.*, „The role of density fluctuations in the relaxation of random dislocation systems”, P03036 (2009).

Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet szeretném kifejezni Groma Istvánnak, akire munkám során mindig számíthattam, szakmailag ugyanúgy mint emberileg. Hálás vagyok az együtt eltöltött négy évért. Köszönöm továbbá Györgyi Gézának, Csikor Ferencnek, Kocsis Benedeknek és Bakó Botondnak a közös munka során nyújtott segítségét.

Köszönettel tartozom az ELTE TTK Anyagfizikai Tanszék vezetőjének, Lendvai Jánosnak, és összes többi munkatársának is, hogy mindvégig támogatták kutatásaimat.

Végül meg szeretném köszönni középiskolai fizikatanáromnak, Honyek Gyulának, hogy felkeltette érdeklődésemet a fizika iránt.

Magyar nyelvű összefoglaló

A kristályos anyagok maradandó alakváltozása a rácsban elhelyezkedő diszlokációk mozgása révén valósul meg. A dolgozatban ezen lineáris rácshibák különféle kollektív tulajdonságaival foglalkozunk.

A dolgozat első részében azt vizsgáljuk, hogy a rugalmas anharmonicitásnak (mely egy nemlineáris rugalmas jelenség) milyen szerepe van a diszlokáció mintázatok kialakulásában. A diszlokációk térelméletének újrafogalmazása után sikerül zárt alakban megadni a megváltozott diszlokációk között ható erőhatást. Numerikus szimulációkkal is alátámasztjuk azt az elméleti jóslatot, hogy a lineáris esettel ellentétben valódi mintázat alakul ki, mely egy karakterisztikus hosszal jellemezhető.

Ezt követően a kristályban mérhető nyírófeszültség eloszlását határozzuk meg, abban az esetben, amikor külső feszültség is hat a rendszerre. Megállapítottuk, hogy a zérus külső feszültség esetén megfigyelhető $1/|\tau|^3$ -ös lecsengéshez egy, a külső feszültséggel arányos, $1/(\tau|\tau|^3)$ típusú járulék adódik, ahol τ a nyírófeszültséget jelöli. Az eloszlás origó közeli része eközben a külső feszültséggel arányosan eltolódik.

A harmadik részben a diszlokációk közötti korrelációk időbeni változását vizsgáljuk. A háromrészescke korrelációkra tett Kirkwood közelítés segítségével zárt integro-differenciál egyenletet vezetünk le a korrelációk evolúciójára. Bemutatjuk továbbá, hogy a korrelációk és az árnyékolt diszlokációk körül létrejövő sűrűségek egymással ekvivalens mennyiségek. Az elméleti eredményeket numerikus szimulációk is alátámasztják.

Ezután az egyszerű csúszás esetére kidolgozott kontinuum modell több csúszó-síkra törtéző általánosításával foglalkozunk. Szimmetriaelvek alkalmazásával evolúciós egyenleteket adunk meg a sűrűségekre két, egymásra merőleges csúszosík esetén. Az egyenletek egyensúlyi megoldását is megadtuk egy külső diszlokáció árnyékolása esetén abban a közelítésben, amikor a teljes diszlokáció sűrűség konstans. Az előjeles sűrűségekre kapott analitikus függvények jó egyezést mutatnak a numerikus szimulációból kapott adatokkal.

A dolgozat utolsó fejezetében diszlokációk sebességének eloszlását vizsgáljuk, miközben a rendszer egy véletlenszerű kezdőállapotból relaxálódik. Kiderült, hogy a különböző időpontban mért sebességeloszlások összekálázhatóak, ami azt eredményezi, hogy a sebességek különböző hatványainak átlagai lassan, hatványfüggvény szerint csengenek le.

Angol nyelvű összefoglaló

The plastic deformation of crystalline materials is the result of dislocation motion. In the thesis different collective properties of these line like lattice defects are discussed.

Firstly, we investigate the role of elastic anharmonicity (which is a nonlinear elastic effect) on dislocation patterning. After the reformulation of the classical field theory of dislocations, we give a closed form of the modified interaction force. Numerical simulations support our theoretical finding, that contrary to the linear elastic case, a real dislocation pattern evolves with a well-defined length scale.

In the second part of the thesis the distribution of internal shear stresses is determined in the special case, when an external stress is applied to the system. It was found, that the $1/|\tau|^3$ type tail of the distribution is still present, but an additional $1/(\tau|\tau|^3)$ type term proportional to the external stress appears. Here τ denotes the shear stress. It is also demonstrated that the centre of the distribution is shifted with a value again proportional to the external stress.

Afterwards dynamics of dislocation correlations are discussed. The three body correlations are approximated by the Kirkwood superposition approximation, and with this we obtain closed evolution equations for the correlation functions. We also show, that the correlations and the density fields induced by an external dislocation are equivalent quantities. The theoretical predictions are confirmed by numerical simulations.

In the fourth part the generalization of the continuum theory from single to multiple slip is presented. By applying symmetry considerations, we derive evolution equations for the dislocation densities when two perpendicular slip planes are present. We also give the analytical solution of the equations in the situation of a screened external dislocation, while assuming that the total dislocation density is constant. The results for the geometrically necessary dislocation densities are in agreement with the data obtained from numerical simulations.

In the last section of the thesis, we study the relaxation of initially random dislocation systems. It is found, that the velocity distributions taken at different times obey a simple scaling law. It follows that the average of different powers of dislocation velocities decay slowly with power laws.