

## Recientes avances en simulación mesoscópica de la dinámica de dislocaciones

D. Gómez-García\*, A. Domínguez-Rodríguez\*, B. Devincre\*\* y L.P. Kubin\*\*

**Resumen** En este trabajo se presentan los últimos avances efectuados en la descripción de la dinámica de un colectivo de dislocaciones de densidad realista (similar a la encontrada en la deformación plástica de monocristales:  $\rho \cong 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ). La descripción se ha efectuado mediante simulación por ordenador en un contexto bidimensional. Se hará especial énfasis en las aproximaciones efectuadas y en los logros obtenidos.

**Palabras clave** Dinámica de dislocaciones. Simulación. Bidimensional.

### Recent advances on mesoscopic simulation of dislocation dynamics

**Abstract** Recent advances in the description of dislocation dynamics are presented. Systems considered have realistic dislocation densities (i.e. densities close to those measured during the plastic deformation of single crystals:  $\rho \cong 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ). The description is made through computer simulations in a bidimensional frame. Special emphasis will be made concerning the simplifications adopted, as well as the achievements.

**Keywords** Dislocation dynamics Simulation. Bidimensional.

## 1. INTRODUCCIÓN

Las dislocaciones constituyen las unidades elementales de deformación plástica en monocristales. El conocimiento de su dinámica permite explicar gran parte de los fenómenos encontrados en la plasticidad de los sólidos cristalinos. Aunque las leyes que rigen el comportamiento individual de las dislocaciones son bien conocidas, dista mucho aún de entenderse el comportamiento colectivo de un número muy alto de estas entidades. En particular, las condiciones que dan lugar a fenómenos de organización interna de la microestructura de dislocaciones están aún por dilucidar.

Aunque se ha hecho mucho trabajo teórico<sup>[1]</sup> (especialmente vía la simulación tridimensional de la dinámica de las dislocaciones), los modelos de simulación por ordenador actuales adolecen de dos limitaciones esenciales:

– Deben restringirse a deformaciones plásticas inferiores al 1 %, típicamente. Esto se debe al

fuerte incremento del tiempo de computación con el número de dislocaciones.

– Las condiciones de contorno no son introducidas de forma rigurosa, y este hecho suele estar en el origen de efectos espúreos. Las simulaciones de la dinámica de dislocaciones en un marco bidimensional permiten superar estas dos limitaciones. Pese a que el uso de un sistema bidimensional para describir la dinámica de estas entidades pueda parecer una aproximación muy grosera, es posible obtener resultados físicamente significativos mediante la adecuada modelización de los mecanismos microscópicos puestos en juego. En concreto, tales mecanismos serán modelados de tal forma que den lugar a la respuesta macroscópica prevista en un verdadero sistema tridimensional. Hasta hace poco tiempo, este último paso era imposible de ser llevado a la práctica. En la actualidad, el desarrollo de los métodos de simulación a escala mesoscópica permite realizarlo, y en este trabajo se pondrán de relieve los modelos originales introducidos.

(\*) Dpto. de Física de la Materia Condensada. Universidad de Sevilla. Ap. 1065. 41080 Sevilla (España).

(\*\*) Laboratoire d'Etude des Microstructures. 29, Av. De la Division Leclerc. 92322 Châtillon Cedex (Francia).

## 2. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

Se considera un sistema en forma de cubo que contiene un número dado de dislocaciones rectas alineadas con una de las aristas del cubo. El plano de la simulación es perpendicular a éstas, y contiene a los vectores de Burgers de las dislocaciones. Dos tipos diferentes de vectores de Burgers son considerados, correspondiendo ambos a los dos sistemas de deslizamiento permitidos.

Los efectos inerciales son despreciados, y por ende, la velocidad de una dislocación cualquiera ( $v_i(t)$ ), es proporcional a la resultante de fuerzas aplicada sobre ella en dicho instante:

$$v_i(t) = \frac{\sigma b + \sum_j f_{ij//}}{B} \quad (1)$$

donde la fuerza sobre una dislocación cualquiera es la resultante de la fuerza externa aplicada al sólido ( $\sigma b$ ) más la suma de las fuerzas de interacción con las restantes dislocaciones ( $\sum_j f_{ij//}$ ) y B es el coeficiente de fricción de la red (debido a la interacción de las dislocaciones con los fonones del cristal<sup>[2]</sup>. El desplazamiento de una dislocación cualquiera se realiza mediante el conocido algoritmo de Euler de primer grado. Para más detalles, ver<sup>[3]</sup>.

La parte sustancialmente original en la descripción de la dinámica de las dislocaciones se encuentra en la modelización de los fenómenos de corto alcance ligados a la estructura del corazón de las dislocaciones, esto es: la formación de uniones rígidas, fenómenos de aniquilación mutua y emisión realizada por las fuentes de Frank-Read. Describiremos brevemente estos eventos:

- La formación de uniones rígidas es esencial en cualquier modelo realista de deformación plástica de cristales fcc. Estas uniones forman dímeros. El dímero está compuesto por dos dislocaciones de sistemas de deslizamiento diferentes separadas una distancia inferior a un cierto valor crítico (400 b en nuestro caso). Esta longitud es un parámetro ajustable del modelo.
- Tales uniones han sido reproducidas mediante la formación de dímeros inmóviles en el sistema siempre y cuando se cumpla:
- El criterio de Frank: El cuadrado del módulo de la suma de los vectores de Burgers es menor que la suma de los cuadrados de los módulos de los vectores por separado. Este criterio viene a asegurarnos que la unión es energéticamente estable.

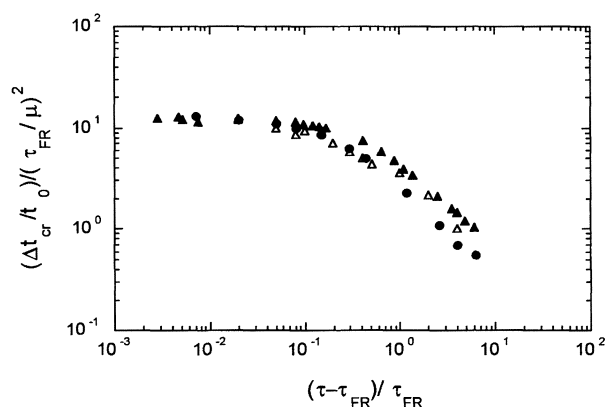
- La fuerza externa que actúa sobre el dímero es inferior a un cierto valor umbral (tensión de destrucción de uniones). Esta tensión es proporcional a la raíz cuadrada de la densidad de dislocaciones presente en un cierto instante t. Esta ley reproduce el hecho de que las uniones se destruyen mediante el proceso de « un-zipping », o ruptura de la unión por separación de los segmentos componentes. La fuerza de ruptura es inversamente proporcional a la longitud de los segmentos componentes, y dicha longitud escala con la distancia media entre dislocaciones.
- La aniquilación de una pareja de dislocaciones se hace siempre que dos dislocaciones del mismo sistema de deslizamiento se encuentran a una distancia tal que la fuerza de atracción entre ellas es del orden del límite elástico teórico de monocristales ( $\mu/30$ ). Dicha distancia es del orden de 10 b.

Con respecto a la emisión de nuevas dislocaciones, se considera inicialmente un cierto número de fuentes de Frank-Read identificadas con ciertas coordenadas del plano de la simulación. Se introducen nuevas dislocaciones en el sistema siempre que se cumplen dos condiciones:

- La fuerza que actúa localmente sobre una fuente dada es superior a un valor umbral, conocido como la tensión de Frank-Read.
- Se permite la emisión de nuevas dislocaciones siempre que el tiempo transcurrido desde la última emisión sea superior al tiempo crítico de emisión de un bucle de Frank-Read. Dicho tiempo crítico ha sido determinado mediante cálculo teórico y verificado mediante simulación tridimensional del proceso de emisión de un bucle de Frank-Read, mediante el modelo « *edge-screw* » desarrollado por Kubin y Devincere<sup>[1]</sup>.

## 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tal como se comentó anteriormente, la determinación del tiempo crítico de emisión de un bucle de Frank-Read es un logro original de este trabajo. Dicho parámetro es crucial, porque define de forma rigurosa la cinética de multiplicación de las dislocaciones. La ley encontrada (Fig. 1) ha sido explicada mediante un sencillo modelo teórico; según el cual el tiempo de nucleación depende de la tensión externa conforme a la ecuación siguiente:



**Figura 1.** Tiempo de nucleación versus la tensión externa aplicada, donde  $\tau_{FR}$  es la tensión de Frank-Read,  $\tau$  es la tensión resuelta aplicada,  $\Delta t_{cr}$  es el tiempo de nucleación,  $t_0$  es una escala característica de tiempos, definida como el cociente entre el coeficiente de fricción de la red ( $B$ ) y el módulo de cizalladura ( $\mu$ ). La curva continua es el resultado del cálculo teórico, mientras que los puntos corresponden a los resultados de simulación.

Figure 1. Nucleation time versus the applied stress ( $\tau$ ), where  $\tau_{FR}$  is the Frank-Read stress,  $\Delta t_{cr}$  is the nucleation time,  $t_0$  is a time scale given by the ratio between the friction lattice coefficient ( $B$ ) and the shear modulus ( $\mu$ ). The continuous plot corresponds to equation (2), whereas the points correspond to simulation outputs for different Frank-Read sources with different lengths.

$$\Delta t_{cr} = \frac{0.5\mu B}{\tau_{FR}^2} \text{Ln} \left( \frac{\tau}{\tau - \tau_{FR}} \right) \quad (2)$$

donde  $\tau$  es la tensión externa aplicada,  $\tau_{FR}$  es la tensión de Frank-Read, y  $B$  es el coeficiente de fricción de la red.

Dicha ley puede deducirse analíticamente del siguiente modo:

La ecuación de movimiento del bucle de Frank-Read que se emite es:

$$\tau b - \frac{\mu b^2}{R} = B \frac{dx}{dt} \quad (3)$$

Donde  $R$  es el radio de curvatura del bucle que se emite,  $x$  es el desplazamiento medio experimentado por cada uno de los puntos del segmento que se curva, y  $b$  es el vector de Burgers del bucle emitido.

Esta ecuación es difícil de resolver, porque no se conoce la relación entre el radio de curvatura y el desplazamiento medio del bucle. Una primera estimación puede hacerse si suponemos que, en todo momento, el bucle es circular. Esta aproximación es razonablemente válida siempre que  $x$  no supere el valor de  $L/4$ , siendo  $L$  la longitud de la

fuerza. En ese caso, es fácil mostrar que hay una relación lineal entre  $1/R$  y  $x$ .

Mediante cálculos elementales de trigonometría, se infiere que:

$$x = R \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{L^2}{4R^2}} \right) \cong \frac{L^2}{8R} \quad (4)$$

Con lo que, sustituyendo en (2) se obtiene una ecuación diferencial de primer orden; que integrada nos da:

$$\Delta t_{cr} = \int_0^{L/4} \frac{B dx}{\tau b - \frac{\mu b^2}{L^2} x} = \frac{BL^2}{8\mu b^2} \text{Ln} \left( \frac{\tau}{\tau - \frac{2\mu b}{L}} \right) \quad (5)$$

Tomando la tensión de Frank-Read como:

$$\tau_{FR} \cong 2 \frac{\mu b}{L} \quad (6)$$

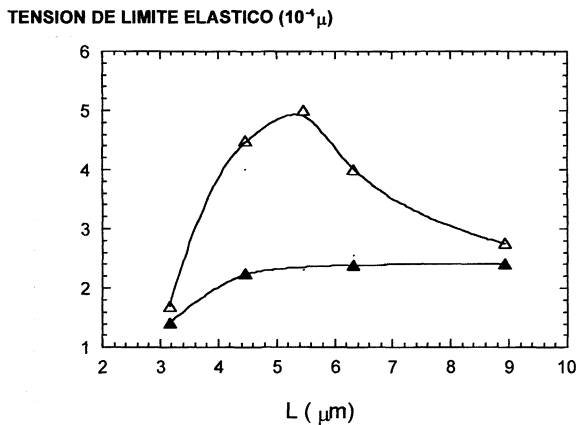
Se obtiene directamente la ecuación (2).

Nótese que esta ley es reproducida de forma bastante aceptable por los resultados de simulación por ordenador; excepto para tensiones muy próximas al valor crítico de Frank-Read. En dicho caso, el tiempo de emisión tiende a infinito (la velocidad del bucle de Frank-Read tiende a cero). Para velocidades extremadamente pequeñas, los resultados de simulación dejan de ser válidos<sup>[3]</sup>.

Utilizando este modelo de simulación, hemos podido determinar la dependencia de la tensión de límite elástico con el tamaño del sistema; esto es, hemos podido reproducir de forma cuantitativa el efecto de talla asociado al tamaño de la muestra. La figura 2 muestra la dependencia de la tensión de límite elástico en función de la talla del sistema, dependiendo asimismo de las condiciones de contorno aplicadas al sólido.

La dependencia obtenida en el caso de condiciones de contorno periódicas es fácil de interpretar: no hay dependencia con la talla del sistema, excepto para sistemas cuya talla sea inferior a  $4 \mu\text{m}$ . En este último caso, el descenso en la tensión de límite elástico se explica teniendo en cuenta que las condiciones de contorno periódicas dan lugar a una tasa de eliminación mutua más elevada de la esperada.

Mucho más interés presenta la dependencia de la tensión de límite elástico con la talla del sistema en el caso en el que las superficies externas



**Figura 2.** Tensión de límite elástico en función de la talla del sistema. Los triángulos blancos corresponden a un sistema en el que las condiciones de contorno corresponden a una superficie externa libre de tensiones. Los triángulos negros corresponden al caso en el que aplican condiciones de contorno periódicas. Todas las experiencias se hacen a una velocidad de deformación unitaria constante de  $1 \text{ s}^{-1}$ , y todas las tensiones están medidas a una deformación total del 0.2 %.

*Figure 2. Yield stress as a function of the system size. The white triangles corresponds to free surface stress boundary conditions. The black ones refer to the case of periodic boundary conditions (Born-Von Karman conditions). All tests are made to a typical strain rate of  $1 \text{ s}^{-1}$ , and all tests were made up to a final deformation of 0.2 %.*

del sólido no están sometidas a tensión alguna. En este caso, la tensión de límite elástico se incrementa para dimensiones inferiores a las  $8 \mu\text{m}$ . Esto puede explicarse si se tiene en cuenta que en dicha

circunstancia la relación superficie a volumen no es despreciable en absoluto. La tasa de dislocaciones eliminadas en la superficie es muy importante, y por consiguiente es necesario aplicar tensiones más elevadas para “excitar” las fuentes de Frank-Read y la velocidad de deformación unitaria pueda mantenerse inalterada.

Para tallas inferiores a las  $4 \mu\text{m}$ , la tasa de eliminación de dislocaciones en las superficies compensa exactamente la tasa de creación; y dado que la talla del sistema decrece, la velocidad media de las dislocaciones necesaria para dar lugar a la velocidad de deformación unitaria requerida es cada vez menor.

### Agradecimientos

Diego Gómez agradece la financiación recibida por la Fundación Ramón Areces durante el periodo 1998-2000 de estancia postdoctoral en el LEM, en la que se realizó este trabajo.

### REFERENCIAS

- [1] L.P. KUBIN, G. CANOVA, M. CONDAT, B. DEVINCRE, V. POTINKIS e Y. BRECHET; *Solid State Phenomena* 23-24 (1992) 455.
- [2] HIRTH AND LOTHE, *Theory of Dislocations*, Mc. Graw Hill ; New York, 1982.
- [3] D. GÓMEZ-GARCÍA, B. DEVINCRE y L.P. KUBIN, *MRS- Proceedings*, Vol. 547 (aceptado para su publicación).