

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA DINÁMICA DE DISLOCACIONES DISCRETAS

F. Langhi^a, P.J. Sánchez^{a,b}, A.E. Huespe^b, R. Weyler^c y V. Sonzogni^a

^a*CIMEC-INTEC-UNL-CONICET, Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina*

^b*GIMNI-UTN-FRSE, Lavaisse 610, 3000 Santa Fe, Argentina*

^c*ETSECCP, Technical University of Catalonia, Barcelona, Spain*

Palabras Clave: Dinámica de dislocaciones discretas; Deformación plástica microscópica.

Resumen.

En este trabajo se describe un modelo matemático para simular numéricamente la dinámica de dislocaciones discretas que es útil para capturar más aproximadamente los efectos micromecánicos que gobiernan el proceso de deformación plástica en sólidos cristalinos. El modelo es similar al propuesto inicialmente en el trabajo de van der Giessen y Needleman [1].

Se asume únicamente la existencia de dislocaciones de borde, y se simula su generación, considerando la existencia predefinida de fuentes de Frank-Read, como también su movimiento y aniquilación. Para reducir el análisis a un caso bidimensional, en estado plano de deformación, las dislocaciones, que sólo se asumen ser de borde, se consideran defectos de punto en un monocristal.

Como aplicación de la metodología desarrollada, se presentan una serie de resultados numéricos obtenidos para un espécimen sujeto a tracción simple. Se discuten algunas particularidades de los resultados provistos por el modelo.

1. INTRODUCCIÓN

La deformación plástica de metales cristalinos está gobernada, al nivel microscópico, por el movimiento de las dislocaciones. En algunos casos, construyendo modelos fenomenológicos macroscópicos como los utilizados en la actualidad, es posible analizar la deformación plástica abstrayéndose del efecto micromecánico producido por las mismas. Sin embargo, en muchos casos de interés, no es posible realizar tal abstracción, ya que los fenómenos micromecánicos influyen fuertemente sobre la respuesta que se quiere representar. Por ejemplo, en los procesos de deformación a nivel de grano, donde aparece una dependencia marcada de la plasticidad con ciertas longitudes características del problema en cuestión. Otro campo de aplicación donde el efecto micromecánico no debería soslayarse, es en la descripción mecánica del comportamiento de un material dúctil, en la punta de una fisura. En este caso, es importante considerar las dislocaciones y los efectos que induce a escalas de longitud mayor.

En este trabajo se desarrolla un modelo matemático, basado puramente en la mecánica, para simular la dinámica de las dislocaciones discretas en sólidos cristalinos. El modelo sigue la metodología propuesta inicialmente por [Van der Giessen y Needleman \(1995\)](#). En trabajos posteriores de los mismos autores ([Cleveringa et al. \(1998\)](#), [Ballint et al. \(2006\)](#), [Deshpande et al. \(2005\)](#)) se analiza, con mayor detalle, los resultados que provee el modelo.

La escala a la que se estudia este problema es una intermedia entre el nivel atómico y aquella en la cual el material es considerado homogéneo. De este modo, el modelo matemático se alimenta con datos tomados de análisis realizados a nivel atómico y provee datos a los modelos de plasticidad (de cristales) del continuo. Para entender más acabadamente el contexto de este modelo, se puede ver el trabajo de revisión de [Xiang \(2006\)](#)

A través de leyes simples que gobiernan el movimiento de las dislocaciones, inmersas en un medio elástico, se intenta simular un número suficientemente grande de dislocaciones interactuando entre sí (del orden de miles). El objetivo de este tipo de simulaciones, que está tomando un impulso muy grande en el ámbito de la Mecánica Computacional aplicada a la ciencia de los materiales, [Bulatov y Cai \(2006\)](#), es evaluar la respuesta plástica del material al nivel de granos, del orden de los micrones, con un modelo constitutivo que introduzca una longitud de escala característica, del orden del vector de Burgers. La misma es introducida, justamente, por las dislocaciones.

En este momento, el trabajo está en una etapa preliminar, donde solo se simulan algunos pocos planos y algunas pocas dislocaciones, del orden de mil, para poner a punto el mecanismo de generación, movimiento y aniquilación de las mismas. Como una etapa posterior, se pretende incluir efectos adicionales con el objetivo de enriquecer el modelo y poder capturar una fenomenología más acabada.

2. MODELO MATEMÁTICO

Las dislocaciones son defectos en las redes cristalinas en las cuales se encuentra inserto un plano extra de átomos (dislocaciones de borde), como se muestra esquemáticamente en la Fig. 1. Cuando la estructura cristalina está sujeta a un estado tensional, las uniones interatómicas del plano extra pueden reacomodarse, de tal modo que este efecto se interpreta como un movimiento horizontal de la dislocación a través de la red cristalina. Miles de estos pseudomovimientos producen un efecto macroscópico que, estadísticamente, equivale a la deformación plástica clásica. Es necesario remarcar, sin embargo, que la teoría clásica de la plasticidad no es un modelo derivado cuantitativamente de la fenomenología asociada con la dinámica de las dislocaciones discretas.

Por otro lado, la dislocación modifica el estado energético en las vecindades del núcleo, de tal modo que dos dislocaciones cercanas interactúan, generando fuerzas mutuas de atracción o repulsión.

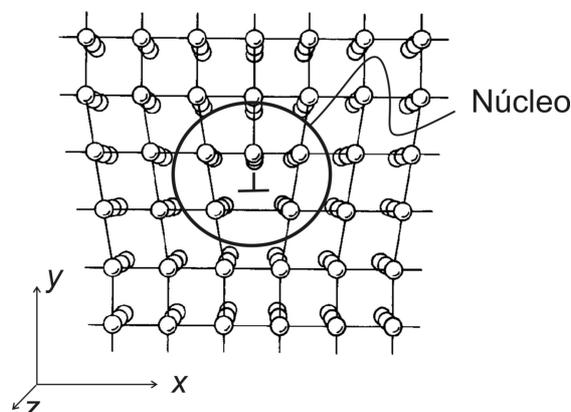


Figura 1: Esquema de una dislocación de borde

A una cierta escala de longitud, el fenómeno del movimiento e interacción de dislocaciones se puede modelar asumiendo una teoría del continuo (teoría de dislocaciones del continuo) despreciando los detalles al nivel atómico en las cercanías del núcleo. Siguiendo la aproximación clásica de Volterra, se considera que la dislocación produce un efecto mecánico similar al generado por un campo de desplazamientos, \mathbf{u} , que verifica:

$$\oint_L d\mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (1)$$

a lo largo de una curva L que encierra al núcleo de la dislocación, y siendo \mathbf{b} el vector de Burgers.

Considerando un sólido elástico, isotrópico e infinito, sujeto a un estado plano de deformación; una dislocación de borde paralela al eje z , y con el plano atómico adicional ubicado en el semiplano $y > 0$, como muestra la Figura 1. La dislocación puede ser caracterizada por un campo de desplazamientos \mathbf{u} , con componentes u_x, u_y ($u_z = 0$), ver [Hirth y Lothe \(1982\)](#), que sigue la siguiente ley:

$$u_x = \frac{b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\Delta x \Delta y}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} - (1-\nu) \tan^{-1} \left(\frac{\Delta x}{\Delta y} \right) \right\} \quad (2)$$

$$u_y = \frac{b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{1}{2} \frac{(\Delta y)^2}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} - \frac{1}{4}(1-2\nu) \ln \left(\frac{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}{(b)^2} \right) \right\} \quad (3)$$

Siendo b el módulo del vector de Burgers, $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ es el vector que une el punto \mathbf{x} donde se quiere evaluar el desplazamiento, de coordenadas (x, y) , con la posición de la dislocación, \mathbf{X} , de coordenadas (X, Y) . E es el módulo elástico y ν el coeficiente de Poisson.

Este campo de desplazamientos induce un campo de tensiones auto-equilibrado, que está dado por:

$$\sigma_x = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{\Delta y [3(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]}{[(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]^2} \right\} \quad (4)$$

$$\sigma_y = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{\Delta y [(\Delta x)^2 - (\Delta y)^2]}{[(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]^2} \right\} \tag{5}$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{\Delta x [(\Delta x)^2 - (\Delta y)^2]}{[(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]^2} \right\} \tag{6}$$

Donde $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_{xy})$ son las componentes del tensor de tensiones, y μ es el módulo de corte ($\mu = E/2(1 + \nu)$).

2.1. Superposición de soluciones

El problema del sólido lineal elástico finito con condiciones de borde impuestas e incluyendo un número de dislocaciones discretas, puede ser resuelto por medio de un procedimiento de superposición de soluciones, como fue propuesto en el trabajo arriba citado de van der Giessen y Needleman. Así, el problema P que corresponde a un cuerpo Ω sujeto a tracciones t en el contorno Γ_σ y desplazamientos u_o en Γ_u y que contiene n dislocaciones, como muestra la Figura 2, se resuelve a través de la superposición de dos problemas \tilde{P} y \hat{P} .

El problema \tilde{P} corresponde, a su vez, a la superposición de los efectos producidos por cada una de las n dislocaciones existentes en Ω . Considerando las soluciones (2-6) de cada dislocación (en un medio infinito), el campo solución del problema \tilde{P} es :

$$\tilde{u} = \sum_{i=1}^n \tilde{u}^i \quad ; \quad \tilde{\sigma} = \sum_{i=1}^n \tilde{\sigma}^i \tag{7}$$

donde u^i son dadas por (2-3) y σ^i por (4-6) para cada i -ésima dislocación existente en Ω . Sobre el contorno Γ_u surge naturalmente la condición de borde: $\tilde{u}_o = \tilde{u}(\Gamma_u)$, mientras que en Γ_σ : $\tilde{t} = \tilde{\sigma}n$, con n el vector normal a la superficie Γ_σ .

El problema \hat{P} corresponde a un problema elástico estándar en Ω , con condiciones de borde impuestas sobre Γ_u : $\hat{u} = u_o - \tilde{u}_o$, y sobre Γ_σ : $\hat{t} = t - \tilde{t}$. Luego resulta evidente que $P = \tilde{P} + \hat{P}$.

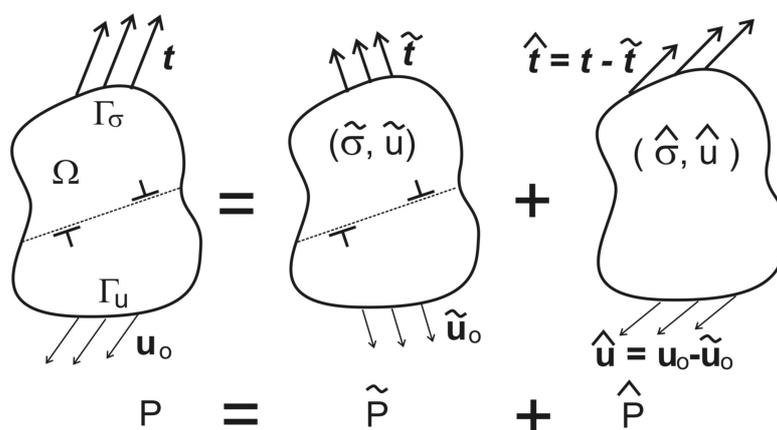


Figura 2: Problema lineal elástico con dislocaciones de borde y dominio finito. El problema a resolver (P) es el de la izquierda. El problema (\tilde{P}) corresponde a la superposición de soluciones debidas a dislocaciones en un medio infinito. El problema imagen (\hat{P}) impone condiciones de borde corregidas.

2.2. Hipótesis constitutivas adicionales

El problema a modelar consiste en, dado un cuerpo (monocristal) que posee un gran número de planos de deslizamiento distribuidos en todo el dominio, y que están orientados en diferentes direcciones dependiendo del tipo de cristal y su orientación espacial, como se muestra en la Figura 3.

El estado tensional generado por las cargas externas, como también por la mutua interacción de las dislocaciones, promueve la generación de nuevas dislocaciones y su movimiento a través de la red cristalina. Así, existe una densidad espacial de puntos (distribuidos aleatoriamente) que representan fuentes de Frank-Read, donde es posible la nucleación de nuevas dislocaciones.

La hipótesis constitutiva asociada con esta fenómeno considera que, dada una fuente sobre un plano, una nueva dislocación se genera si dos condiciones se verifican: *i*) que la tensión de Schmidt (tensión de corte resuelta τ obrante sobre el plano de deslizamiento sobre el cual existe la fuente: $\tau = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{s}$, siendo \mathbf{s} el vector paralelo al plano de dislocación y \mathbf{r} normal al mismo) sobrepase cierto umbral τ_{nucl} , y *ii*) que la generación entre dos dislocaciones diferentes esté separada en el tiempo por un intervalo mínimo t_{nucl} .

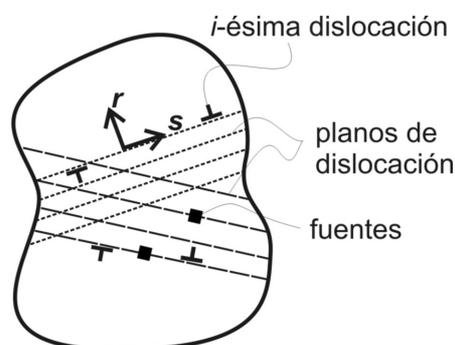


Figura 3: Dominio representando diferentes planos de dislocación y fuentes de Frank-Read.

Verificada ambas condiciones, un nuevo dipolo (dos dislocaciones de signo contrario) se generan. Ambas ubicadas en el plano de dislocación asociado y separadas por una distancia L_{nucl} :

$$L_{nucl} = \frac{E}{4\pi(1-\nu)(1+\nu)} \frac{b}{\tau_{nucl}} \quad (8)$$

la que es suficiente para contrarrestar la fuerza de atracción mutua. En la ecuación 8, b es el módulo del vector de Burgers.

Bajo un estado tensional en el cuerpo, y también debido a la interacción entre las dislocaciones, aparece una acción sobre cada dislocación. Esta acción se puede imaginar como una fuerza conductora (fuerza de Peach-Koehler) que tiene el efecto de desplazar la dislocación sobre el plano de deslizamiento. La cinética que relaciona la fuerza conductora con la ley de movimiento, se puede introducir en el modelo a través de una ley fenomenológica. Considerando que la fuerza conductora esta dada por:

$$\tau^i = \mathbf{r}_j \cdot \left[\hat{\sigma} + \sum_{k \neq i}^n \tilde{\sigma}_k \right] \cdot \mathbf{s}_j \quad (9)$$

siendo \mathbf{s}_j el vector normal al plano de deslizamiento j -ésimo, donde se mueve la dislocación i y siendo \mathbf{r}_j el vector paralelo al mismo plano. Se debe notar que esta fuerza conductora es la

tensión de corte resuelta sobre el plano de dislocación, considerando las tensiones del problema \tilde{P} a la que se le adiciona las tensiones de cada una de las dislocaciones $\hat{\sigma}_k$ y exceptuando la propia dislocación i .

Siendo también la velocidad v_i a la cual la dislocación i -ésima se mueven a lo largo del plano de deslizamiento, la ley de movimiento sigue una ley viscosa, dada por:

$$v_i = \frac{\tau^i}{B} b \quad (10)$$

donde B es un coeficiente de arrastre viscoso y que se considera un dato para el modelo.

3. APLICACIONES NUMÉRICAS

Como una aplicación del modelo, se ha resuelto un problema de una tira con tracción uniaxial, que se ha tomado del trabajo de [Segurado et al. \(2007\)](#). La geometría consiste en un rectángulo, de relación de lados $L/W = 3$, sometido a una deformación en el sentido longitudinal. Los planos de deslizamiento se asumen que están dispuestos a 45° según la dirección positiva del eje x .

3.1. Condiciones de contorno

El elemento tiene fijo un extremo y en el otro extremo se impone un desplazamiento:

$$\begin{aligned} u_x &= 0, t_y = 0 \text{ para } x = 0 \\ u_x &= U, t_y = 0 \text{ para } x = L \\ t_x &= 0 \text{ para } y = 0 \text{ e } y = W \end{aligned}$$

Siendo t el vector tracción sobre cada una de las superficies del contorno. Los extremos superior e inferior se encuentran libres. La carga se aplica teniendo en cuenta una velocidad de deformación $\dot{\epsilon} = U/L = 2000s^{-1}$

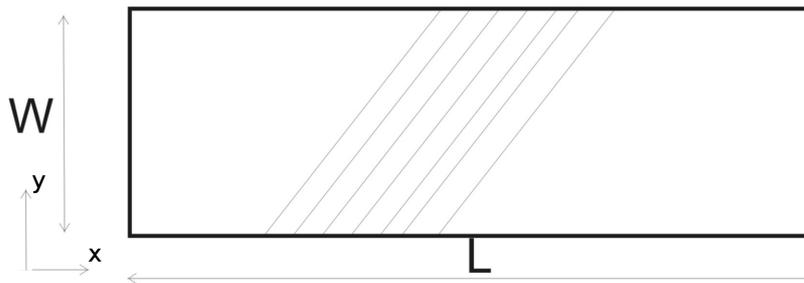


Figura 4: Placa bajo condiciones de carga uniaxial.

3.2. Propiedades del material

Las propiedades del material son:

$$\begin{aligned} E &= 70GPa \\ \nu &= 0,33 \\ b &= 0,25nm \end{aligned}$$

En un primer caso, se modelan sólo 4 planos. El coeficiente viscoso de arrastre es $B = 10^{-4}Pas$, la tensión de nucleación media, $\bar{\tau}_{nucl} = 50MPa$, asumiendo una distribución lineal

a lo largo del plano de deslizamiento, que varía entre $49,5\text{MPa}$ en el punto medio y $50,5\text{MPa}$ en ambos extremos (en el punto donde la línea intersecta a ambos bordes).

El modelo evalúa para cada fuente en el dominio, la tensión de corte τ . La compara con el valor de la tensión de nucleación, y si ésta supera el valor τ_{nucl} , comienza a acumular el tiempo t . Transcurrido el tiempo de nucleación, con $> t_{nucl}$, se genera un nuevo un dipolo. En la medida en que las tensiones se incrementen en el dominio, debido al aumento de la deformación, las dislocaciones comienzan a moverse por el plano. Las dislocaciones se mueven según la ley viscosa arriba indicada. Puede haber varias dislocaciones en un mismo plano, y cuando se cruzan, ambas se aniquilan. Además, una vez una dislocaciones cruza el borde del espécimen, saliendo del dominio, se introduce un salto $b/2$ en los desplazamientos a través del plano de dislocación correspondiente.

3.3. Verificación del modelo

El dominio rectangular, de dimensiones $12\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$, es discretizado con una malla de 50×50 elementos finitos cuadrangulares estándar. Esta geometría se utiliza en todos los test que reproducimos a continuación.

En las Figuras 5 y 6 se comparan la tensión media (evaluada como la tracción total en el borde derecho, dividida por la longitud W) vs. la deformación (u_x/L) para tres casos, considerando 25, 50 y 100 fuentes distribuidas aleatoriamente en 4 planos de deslizamiento que están separados: $0,085\mu\text{m}$ aproximadamente. Todos los resultados se obtuvieron con dos pasos de tiempos de integración diferentes: $0,25\text{nseg}$ y $0,5\text{nseg}$.

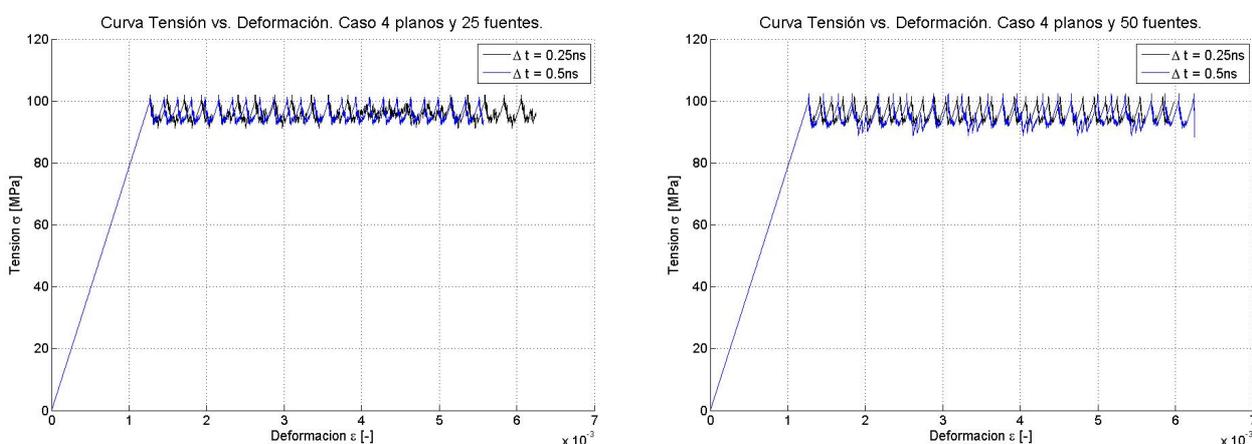


Figura 5: Curvas de tensión vs. deformación superpuestas de los resultados para 4 planos de dislocación con 25 fuentes (izquierda) y 50 fuentes (derecha), para ambos pasos de tiempo $0,25\text{ns}$ la curva en azul y $0,5\text{ns}$ la curva en negro

En la figura 7 se observan superpuestas las curvas tensión vs. deformación de los casos con 50 y 100 fuentes. Se ve que cuando se duplica el número de fuentes, la amplitud de las oscilaciones aumenta.

3.4. Análisis con 30 planos de deslizamiento y 900 fuentes

En las figuras 8 a 10, se observan tres estados de tiempo distintos para una configuración dada de 30 planos y 900 fuentes y se ve la generación, el movimiento y la aniquilación de las dislocaciones como así también se observa, en cada paso, la malla deformada. Como se

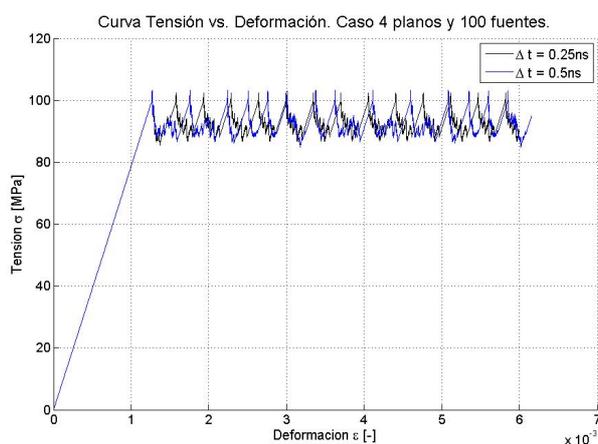


Figura 6: Curvas superpuestas de los resultados para 4 planos de dislocación con 100 fuentes, para ambos pasos de tiempo $0,25ns$ la curva en azul y $0,5ns$ la curva en negro

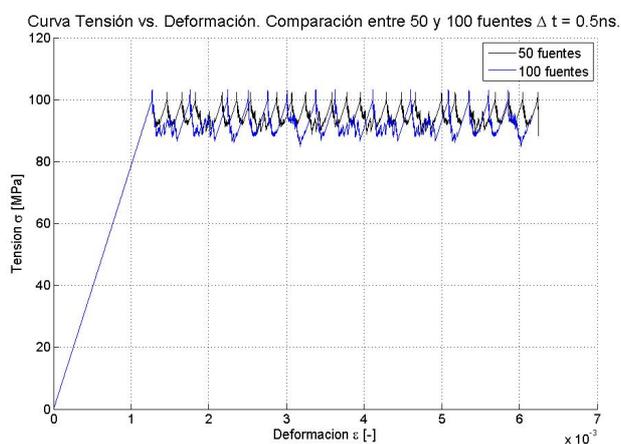


Figura 7: Curvas superpuestas de los resultados para 50 fuentes la curva en negro y 100 fuentes la curva en azul, para un paso de tiempo de $0,5ns$

puede ver en la figura 8, hay una distribución bastante homogénea de las dislocaciones en casi todos los planos. En la figura 9, ya se observa como las dislocaciones se concentran en un solo plano, se aprecia que solo queda activo un solo plano de deslizamiento. Y en la figura 10 ya la deformación continúa a lo largo de este único plano activo.

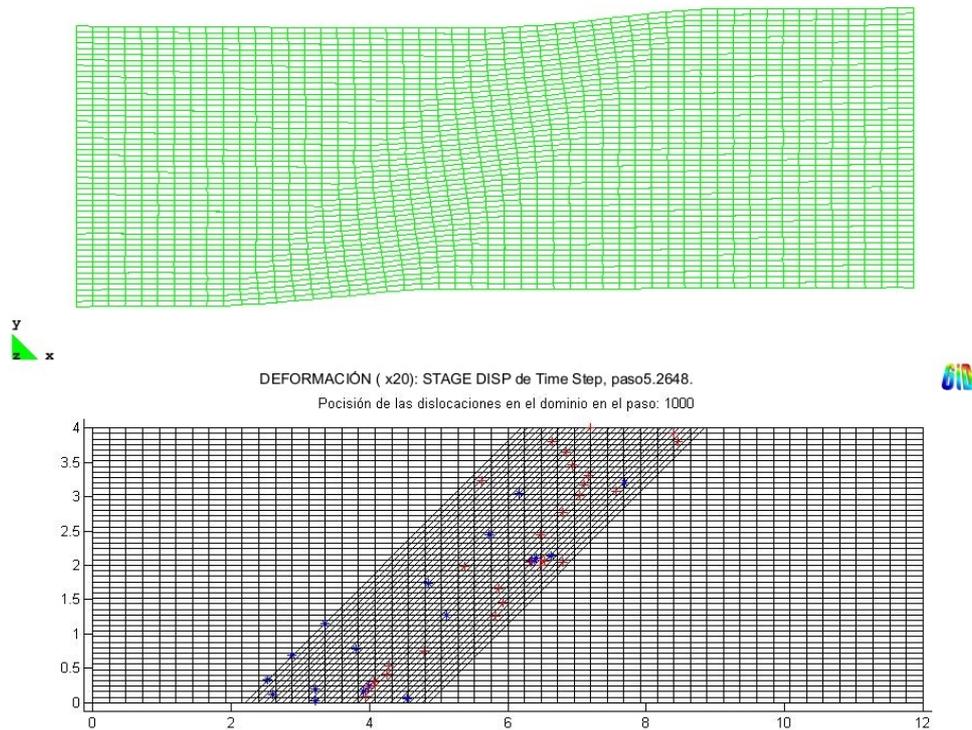


Figura 8: Posición de las dislocaciones para el paso 1000, y la malla deformada, para 30 planos, 900 dislocaciones y un $\Delta t = 0,25ns$.

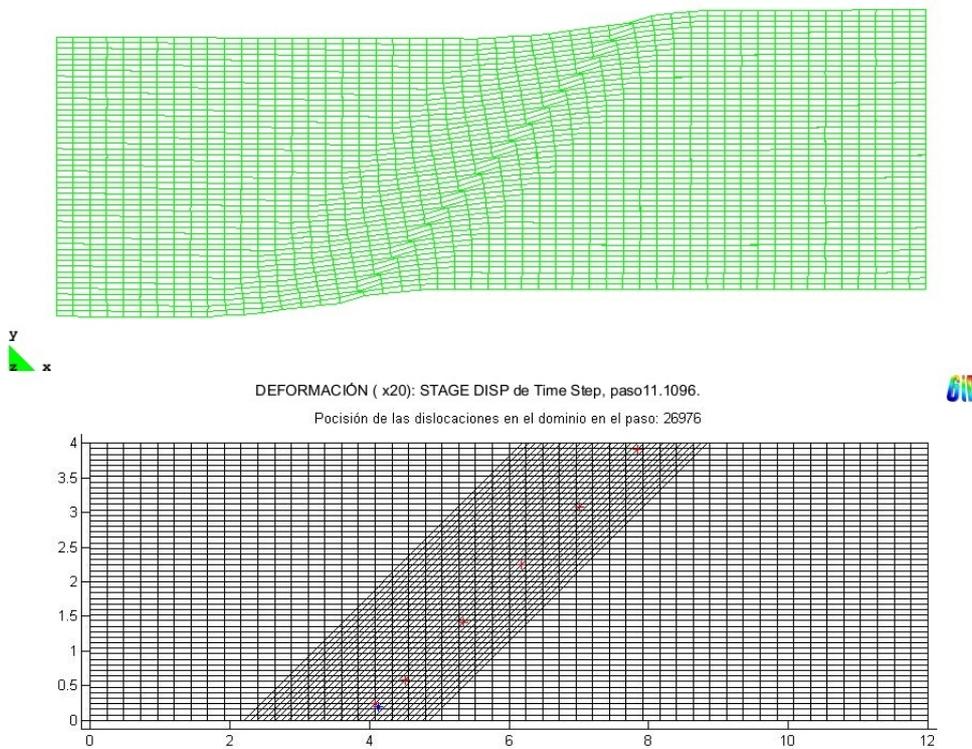


Figura 9: Posición de las dislocaciones para el paso 26976, y la malla deformada, para 30 planos, 900 dislocaciones y un $\Delta t = 0,25ns$.

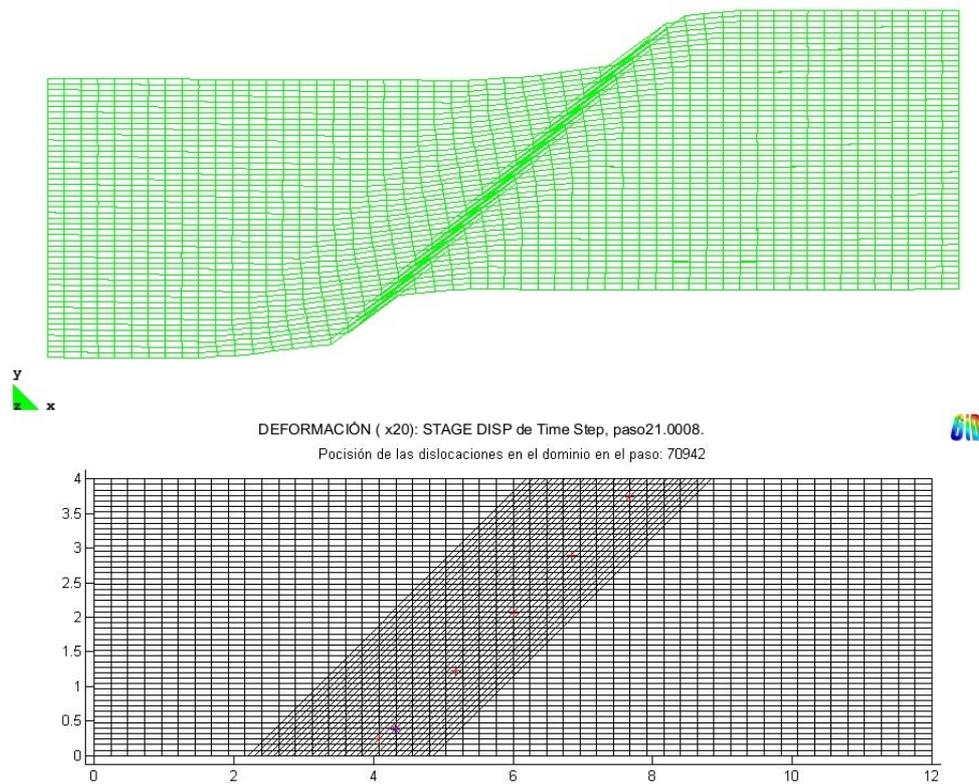


Figura 10: Posición de las dislocaciones para el paso 70937, y la malla deformada, para 30 planos, 900 dislocaciones y un $\Delta t = 0,25ns$.

4. CONCLUSIONES

El modelo de la dinámica de dislocaciones tiene naturaleza caótica ([Deshpande et al. \(2001\)](#), [Segurado et al. \(2007\)](#)). Por lo que, interpretar los resultados que provee el mismo dista mucho de ser trivial. Debido a esto, se observa una sensibilidad muy alta de la respuesta del modelo con los parámetros. Algunos de estos parámetros son de base física y otros estrictamente numéricos, e introducidos con el único objetivo de hacer viable el cálculo computacional.

El modelo que se ha desarrollado, y a pesar que aún no considera efectos claves tales como la simulación de obstáculos al movimiento de las dislocaciones, en alguna medida ha capturado los resultados comentados por otros autores, como [Deshpande et al. \(2005\)](#) y [Segurado et al. \(2007\)](#).

De todos modos, las conclusiones más importantes de este trabajo son útiles, aunque sea, al sólo efecto de marcar un camino de desarrollos futuros para construir un modelo más aproximado a la realidad.

Algunos puntos a considerar, están relacionados con la temática específica de la Mecánica Computacional, por ejemplo:

- i) el modelo se mostró computacionalmente viable para simular problemas (aproximadamente) reales del orden del micrometro y en 2D (lo cual es en sí mismo una simplificación importante para estudiar este fenómeno). Los ejemplos presentados han requerido unas 8hs de cálculo con procesamiento serie. Un próximo paso inminente es la paralelización del código. Por ejemplo, el esquema de evaluación de las fuerzas de Peach-Koehler sobre cada dislocación, es altamente demandante en tiempo de cálculo y de muy fácil paralelización.

- ii) los resultados se han mostrado muy sensibles al esquema de integración temporal del movimiento de las dislocaciones (actualmente un esquema explícito). Y además el intervalo de tiempo de integración, es un aspecto crítico para la viabilidad del cálculo. En este punto en particular, se pueden proponer alternativas para mejorar la aproximación.

Otros puntos a considerar, de base física y que deben tender a mejorar el presente modelo, son por ejemplo: incluir hipótesis constitutivas adicionales. Específicamente, obstáculos al movimiento de las dislocaciones. Fenómeno que está estrechamente asociado al endurecimiento del material.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado con fondos provenientes de los proyectos ANPCyT PICT-2005- 34273 de Argentina, y por un CAI+D-2009 de la Universidad Nacional del Litoral. A estas Instituciones se agradece su aporte.

REFERENCIAS

- Ballint D., Deshpande V., Needleman A., y Van der Giessen E. Size effect in uniaxial deformation of single and polycrystals: a discrete dislocation plasticity analysis. *Modell. and Simulat. in Mat. Sci. and Eng.*, 14:409–422, 2006.
- Bulatov V. y Cai W. *Computer simulation of dislocations*. Oxford Univ. Press, 2006.
- Cleveringa H., Van der Giessen E., y Needleman A. Discrete dislocation simulations and size effect dependent hardening in single slip. *J. of Phys.*, 8:Pr4–83,Pr4–92, 1998.
- Deshpande V., Needleman A., y Van der Giessen E. Dislocation dynamics is chaotic. *Scr. Mater.*, 45:1047–1053, 2001.
- Deshpande V., Van der Giessen E., y Needleman A. Plasticity size effects in tension and compression of single crystals. *J. of the Mech. Phys. of Solids*, 53:2661–2691, 2005.
- Hirth J. y Lothe J. *Theory of Dislocations*. 2nd. Edition, John Wiley, New York, 1982.
- Segurado J., Lorca J., y Romero I. Computacional issues in the simulation of two-dimensional discrete dislocation mechanics. *Modell. and Simulat. in Mat. Sci. and Eng.*, 15:S361–S375, 2007.
- Van der Giessen E. y Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 3:689–735, 1995.
- Xiang Y. Modeling dislocations at different scales. *Commun. Comp. Physics*, 1:383–424, 2006.