



Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας  
Πολυτεχνική Σχολή  
Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών

---

**Μοντέλα διάχυσης εξαρμώσεων σε μεταλλικά στοιχεία  
που υπόκεινται σε υψίσυχνη κόπωση.**

---

Χατζοπούλου Γιαννούλα

***Επιβλέποντες :***

Γιαννακόπουλος Αντώνιος  
Ζούπας Ανδρέας

***Τριμελής επιτροπή :***

Γιαννακόπουλος Αντώνιος  
Ζούπας Ανδρέας  
Λιακόπουλος Αντώνιος

ΒΟΛΟΣ  
ΙΟΥΝΙΟΣ 2012



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ  
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 10627/1  
Ημερ. Εισ.: 21-06-2012  
Δωρεά: Συγγραφέα  
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ – ΠΜ  
2012  
ΧΑΤ

## Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Εισαγωγή</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Ανάλυση βασικών όρων</b>	<b>5</b>
2.1	Κρυσταλλική δομή των μετάλλων . . . . .	5
2.2	Εξαρμώσεις . . . . .	9
2.3	Κόπωση (fatigue) . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Ising-model</b>	<b>21</b>
<b>4</b>	<b>Ανάλυση του μοντέλου του Schrödinger</b>	<b>24</b>
4.1	Το μοντέλο του Schrödinger με δυναμικό πεδίο (1) . . . . .	27
4.2	Το μοντέλο του Schrödinger με δυναμικό πεδίο (2) . . . . .	34
<b>5</b>	<b>Θεωρητική ανάλυση του μοντέλου των Puri και Binder</b>	<b>37</b>
<b>6</b>	<b>Αριθμητική ανάλυση του μοντέλου των Puri και Binder</b>	<b>45</b>
<b>7</b>	<b>Συμπεράσματα και προτάσεις για το μέλλον</b>	<b>49</b>
<b>A</b>	<b>Παράρτημα</b>	<b>51</b>
A.1	Puri και Binder . . . . .	51
A.2	Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών (finite difference method)	54
A.3	Matlab . . . . .	55
	<b>Αναφορές</b>	<b>58</b>

## Κατάλογος Σχημάτων

1	Τα 14 κρυσταλλικά πλέγματα[11] . . . . .	7
2	Κυβικό χωροκεντρωμένο σύστημα (BCC - Body-Centered Cubic)[11] . . . . .	8
3	Κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα (FCC2 - Face-Centered Cubic)[11] . . . . .	8
4	Μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα (HCP - Hexagonal Closed-Packed)[11] . . . . .	8
5	Οι τρόποι με τους οποίους κινείται μία ατέλεια κάτω από την ίδια τάση[5] . . . . .	10
6	Κρύσταλλος με μια γραμμική διαταραχή (το επιπλέον επίπεδο ατόμων που παρεμβάλεται)[12] . . . . .	10
7	Απεικόνιση σε έναν απλό κυβικό κρύσταλλο γραμμικής διαταραχής και ελικοειδούς διαταραχής [ <a href="http://courses.eas.ualberta.ca">http://courses.eas.ualberta.ca</a> ] . . . . .	10
8	Μικτή κρυσταλλική διαταραχή <a href="http://metalpass.com">http://metalpass.com</a> . . . . .	11
9	Μικρογραφία από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο όπου ένα λεπτό φύλλο μετάλλου αφαιρείται από το δείγμα μετάλλου (οι ατέλειες βρίσκονται κατά μήκος της ζώνης ολίσθησης) [5] . . . . .	11
10	Μια διαταραχή (γραμμική) μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα [ <a href="http://mpdc.mae.cornell.edu">http://mpdc.mae.cornell.edu</a> ] . . . . .	12
11	Η ατέλεια έλκεται από την επιφάνεια (wall) . . . . .	14
12	Τα δύο υλικά έχουν διαφορετικό μέτρο ελαστικότητας (E) με αποτέλεσμα αυτό με το μικρότερο να έλκει τις ατέλειες . . . . .	14
13	Τα δύο υλικά έχουν διαφορετικό μέτρο ελαστικότητας (E) με αποτέλεσμα αυτό με το μεγαλύτερο να απωθεί τις ατέλειες . . . . .	15
14	Όταν δύο ατέλειες είναι ομόρροπες απωθούνται . . . . .	15
15	Όταν δύο ατέλειες είναι αντίρροπες έλκονται . . . . .	15
16	Η επιφάνεια θραύσης λόγω κόπωσης συχνά απεικονίζει δύο περιοχές. Η μία περιοχή είναι χωρίς ανωμαλίες, ή σιλιπνή, που αντιστοιχεί στην αργή διάδοση της ρωγμής, και η άλλη είναι τραχιά ή κοκκώδη ανάλογα το μέταλλο[5] . . . . .	17
17	Cross-slip of a screw dislocation ( <a href="http://users.encs.concordia.ca">http://users.encs.concordia.ca</a> ) . . . . .	18
18	Σχηματική απεικόνιση ζώνης ολίσθησης από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο [5] . . . . .	18
19	Ίχνος μίας επίμονης ζώνης ολίσθησης στο επάνω αριστερό άκρο [10] . . . . .	19
20	Επίμονη ζώνη ολίσθησης στο κάτω δεξιά άκρο[10] . . . . .	19
21	Σχηματική απεικόνιση PSB[ <a href="http://ars.els-cdn.com/">http://ars.els-cdn.com/</a> ] . . . . .	19



- 22 Συσσωρευμένη πλαστική παραμόρφωση, με την μορφή: ενδολι-  
σθήσεων και εξολισθήσεων [<http://fcp.mechse.illinois.edu/media>] 20
- 23 Διατομή κάθετη στο επίπεδο της επιφάνειας ενός ημιάπειρου  
απλού κυβικού Ising μαγνήτη. Στο πλέγμα οι αποστάσεις είναι  
 $a$ , και οι σταθερές αλληλεπίδρασης  $J$  και  $J_s$  για το εσωτερικό  
του υλικού και στην επιφάνεια αντίστοιχα. Τα spins μπορούν  
να προσανατολιστούν σε μια συγκεκριμένη κατεύθυνση, κατά  
μήκος του οποίου θα εφαρμοστεί στο εσωτερικό του υλικού ένα  
πεδίο  $H$  και ένα αντίρροπο σε αυτό στην επιφάνεια. [4] . . . . . 22
- 24 Κατανομή γραμμικών διαταραχών που υποβάλλεται σε κάμψη[5] 28
- 25 Σχηματική απεικόνιση της επιφάνειας ενός δυαδικού (AB) μίγ-  
ματος στο  $z = 0$  (η σκίαση δείχνει ότι αυτό μπορεί να αντι-  
προσωπεύει ένα αδρανές σκληρό τοίχο). Διαφορετικά άτομα  
(απεικονίζονται με κύκλο) και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των  
γειτονικών (και ο τοίχος), σημειώνονται με διαφορετικούς τύ-  
πους γραμμών [2] . . . . . 40
- 26 Τα διαγράμματα παρουσιάζουν την αλλαγή φάσης ενός υλικού[2][8] 44

## 1 Εισαγωγή

Το θέμα της παρούσας εργασίας είναι να μελετήσουμε το κατά πόσο επιδρά η επιφάνεια ενός υλικού στην αλλαγή φάσης<sup>1</sup> αυτού και τί επιπτώσεις έχει σε αυτό κατά την επαναλαμβανόμενη μηχανική φόρτισή του. Η κόπωση είναι ένα επιφανειακό φαινόμενο και μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε πώς όταν καταπονεί ένα υλικό το οδηγεί σε ρηγμάτωση (fracture) μέσω της συμπεριφοράς των εξαρμώσεων (dislocation) της κρυσταλλικής δομής. Το πρόβλημα προσεγγίζεται με τη βοήθεια των εξισώσεων των Puri και Binder και του Schrödinger των οποίων η ανάλυση έγινε με τη βοήθεια των αριθμητικών μεθόδων και συγκεκριμένα με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (finite difference method). Στα πρώτα κεφάλαια θεωρήθηκε σκόπιμο να γίνει η ανάλυση κάποιων βασικών εννοιών για την καλύτερη κατανόηση του προβλήματος κι η παρουσίαση κάποιων στοιχείων για τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.

---

<sup>1</sup>Με τον όρο " αλλαγή φάσης " εννοούμε την εμφάνιση διατεταγμένων κρυσταλλικών ατελειών που υπόκεινται σε εξαναγκασμένη διάχυση λόγω εναλλασσόμενης φόρτισης ("φάση " χωρίς ατέλειες και "φάση" με ατέλειες)

## 2 Ανάλυση βασικών όρων

### 2.1 Κρυσταλλική δομή των μετάλλων

Η δομή του μετάλλου είναι πολύ μεγάλης σημασίας. Τα μέταλλα έχουν κρυσταλλική δομή όταν έχουν στερεά μορφή. Ένα μέταλλο αποτελείται από πολλούς μικρούς κρύσταλλους, έτσι μπορούμε να πούμε ότι έχουν πολυκρυσταλλική μορφή. Μέταλλα, όπως αυτά της χύτευσης, όπου οι κρυσταλλικές δομές τους είναι ορατές με γυμνό μάτι ή μπορούν να μελετηθούν με χαμηλής ισχύος μικροσκόπιο ονομάζονται μακροδομές (macrostructure) [11].

Στη μεταλλουργία χρησιμοποιούνται μικροδομές (microstructure) κρυσταλλικές δομές οι οποίες μπορούν να παρατηρηθούν με υψηλής ανάλυσης μικροσκόπιο. Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι στη μεταλλουργία η λείανση της επιφάνειας είναι πολύ σημαντική διαδικασία για την αποφυγή της δημιουργίας εξαρμώσεων.

Αξίζει να αναφέρουμε κάποιους ορισμούς για την καλύτερη κατανόηση της κρυσταλλικής δομής των μετάλλων.

**Κρυσταλλική δομή** είναι η διάταξη ατόμων στο χώρο που παρουσιάζει τριπλή περιοδικότητα, δηλαδή υφίσταται μία δομική μονάδα που επαναλαμβάνεται στις 3 διευθύνσεις.

**Στοιχειώδες κύτταρο** είναι η δομική μονάδα, από την οποία προκύπτει η κρυσταλλική δομή.

Στις σχηματικές παραστάσεις που αποδίδονται με την κρυσταλλική δομή ή το στοιχειώδες κύτταρο, τα άτομα τοποθετούνται ως μικρές σφαίρες στις κορυφές.

**Κρύσταλλος ή κρυσταλλίτης ή κόκκος** (grain) είναι το τμήμα στερεού που έχει σ' όλη του την έκταση την ίδια συνεχή κρυσταλλική δομή.

Ανάλογα με το πλήθος των κόκκων ενός στερεού διακρίνουμε: μονοκρυστάλλους και πολυκρυσταλλικά υλικά. Τα πλείστα μεταλλικά υλικά είναι πολυκρυσταλλικά υλικά.

**Κρυσταλλικό πλέγμα** είναι το σύνολο των άπειρων σημείων στο χώρο που διατάσσονται έτσι ώστε να αποδίδουν την κρυσταλλική δομή του κρυστάλλου.

Για τον χαρακτηρισμό των κρυσταλλικών πλεγμάτων και συστημάτων ακολουθείται η εξής ορολογία:

**Κυβικό:** Το γεωμετρικό σχήμα κυψελίδας είναι κύβος.

**Τετραγωνικό:** Το γεωμετρικό σχήμα κυψελίδας είναι ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο με βάση τετράγωνο.

**Ορθορομβικό:** Το γεωμετρικό σχήμα κυψελίδας είναι ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο με βάση ορθογώνιο.

**Ρομβοεδρικό:** Το γεωμετρικό σχήμα κυψελίδας είναι παραλληλεπίπεδο με όλες τις έδρες του ίσους ρόμβους.

**Μονοκλινές :** Το γεωμετρικό σχήμα κυψελίδας είναι παραλληλεπίπεδο με τις δύο βάσεις του και το ένα ζεύγος παράλληλων εδρών ορθογώνια, ενώ το τρίτο ζεύγος παράλληλων εδρών απλά παραλληλόγραμμο.

**Τρικλινές :** Το γεωμετρικό σχήμα κυψελίδας είναι παραλληλεπίπεδο με όλες τις έδρες του παραλληλόγραμμο.

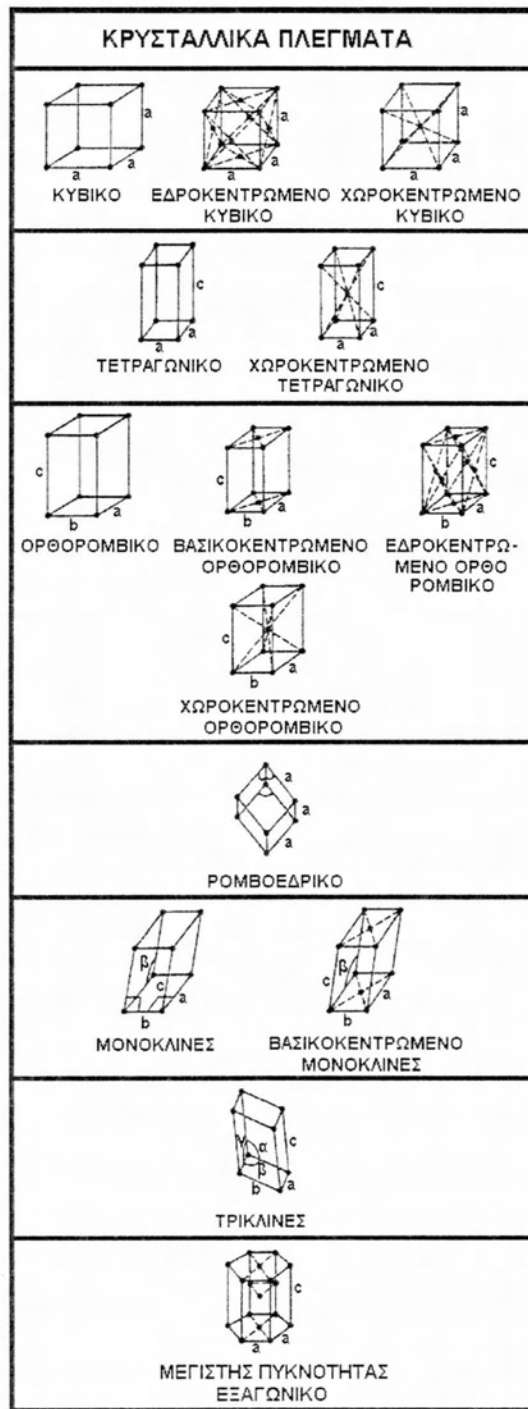
**Εξαγωνικό :** Το γεωμετρικό σχήμα του στοιχειώδους κυττάρου είναι ορθό κανονικό εξαγωνικό πρίσμα, η δε κυψελίδα είναι ορθό πρίσμα με βάση ρόμβο.

**Χωροκεντρωμένο :** Περιλαμβάνει ένα άτομο στο κέντρο βάρους του στοιχειώδους κυττάρου.

**Εδροκεντρωμένο :** Περιλαμβάνει ανά ένα άτομο στο κέντρο βάρους κάθε έδρας του στοιχειώδους κυττάρου.

**Βασικοκεντρωμένο :** Περιλαμβάνει ανά ένα άτομο στο κέντρο βάρους των δύο βάσεων μόνο του στοιχειώδους κυττάρου.

**Μέγιστης πυκνότητας :** Χρησιμοποιείται μόνο για το εξαγωνικό πλέγμα. Πρόκειται για βασικοκεντρωμένο πλέγμα που έχει επιπλέον άλλα 3 άτομα στο μέσο της απόστασης (ύψος) που ενώνει τα κέντρα βάρους των απέναντι τριγώνων που σχηματίζονται από τις διαγωνίους των εξαγωνικών βάσεων και δεν γειτνιάζουν μεταξύ τους (πάνω στη βάση που ανήκουν).



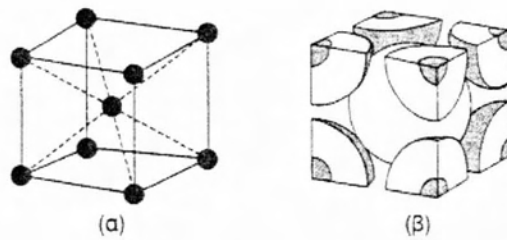
Σχήμα 1: Τα 14 κρυσταλλικά πλέγματα[11]

Τα πλείστα των μεταλλικών υλικών κρυσταλλώνονται στους ακόλουθους 3 τύπους κρυσταλλικής δομής :

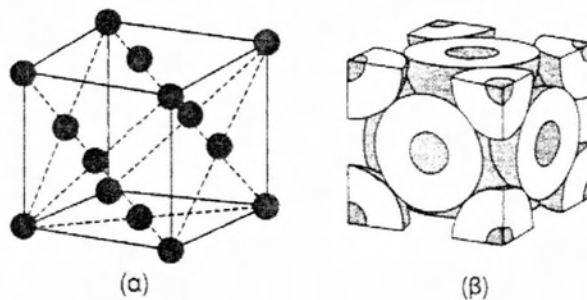
Κυβικό χωροκεντρωμένο σύστημα (BCC - Body-Centered Cubic).

Κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα (FCC - Face-Centered Cubic).

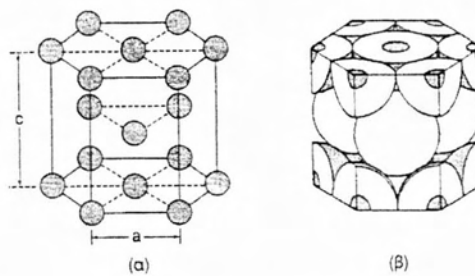
Μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα (HCP - Hexagonal Closed-Packed).



Σχήμα 2: Κυβικό χωροκεντρωμένο σύστημα (BCC - Body-Centered Cubic)[11]



Σχήμα 3: Κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα (FCC2 - Face-Centered Cubic)[11]



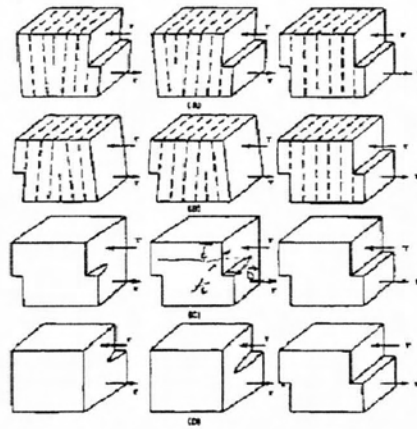
Σχήμα 4: Μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα (HCP - Hexagonal Closed-Packed)[11]

## 2.2 Εξαρμώσεις

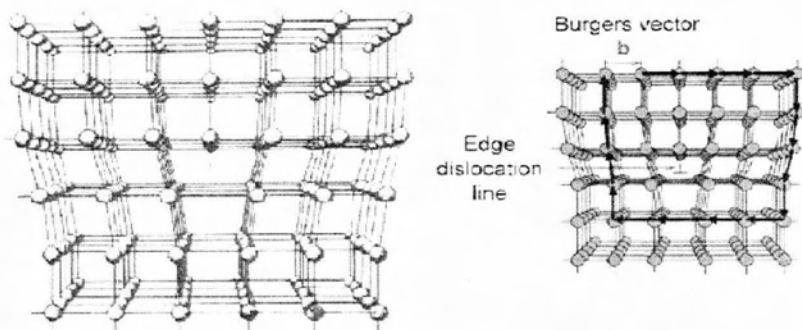
Ο αγγλικός όρος "dislocation" στα ελληνικά μπορεί να μεταφραστεί ως διαταραχή, ατέλεια, εξάρθρωση ή εξάρμωση και περιγράφει τις ανωμαλίες (αταξίες) στην κρυσταλλική δομή των υλικών. Οι ατέλειες αυτές έχουν δεδομένη μορφή, κίνηση και αλληλεπίδραση μεταξύ τους και με το περιβάλλον. Η παρουσία αυτών των ανωμαλιών στη δομή ενός υλικού, καθώς και το μέγεθός τους, επηρεάζει σημαντικά τις περισσότερες από τις ιδιότητες του, τόσο τις μηχανικές (όπως αντοχή, σκληρότητα...) όσο και τις ηλεκτρικές, χημικές κτλ. Έχει παρατηρηθεί διαφορά μεταξύ της πραγματικής και της θεωρητικής αντοχής (πραγματική αντοχή είναι αυτή που παρατηρούμε πειραματικά ενώ θεωρητική αντοχή είναι αυτή που προκύπτει από ανάλυση των ατομικών και μοριακών δεσμών) των κρυσταλλικών υλικών (κυρίως μέταλλα) η οποία οφείλεται στις δομικές ατέλειες του κρυστάλλου, που έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της θεωρητικής αντοχής. Επιπλέον, οι παραμορφώσεις ενός στερεού (κυρίως ελαστικού) υλικού δεν εξαρτώνται μόνο από τη δράση των εξωτερικών φορτίσεων αλλά σε μεγάλο βαθμό και από τις εσωτερικές ατέλειες του ατομικού πλέγματος των κρυστάλλων. Η πλαστική παραμόρφωση σε υλικά με κρυσταλλική δομή είναι εξαιρετικά ανομοιογενής, καθώς παράγεται σε ορισμένες μόνο περιοχές μέσα στο πλέγμα του υλικού. Είναι πλέον γνωστό ότι οι αταξίες αυτές συνδέονται άμεσα με τους μηχανισμούς πλαστικής παραμόρφωσης [5], [6],[13].

Ιστορικά, πρώτος που ασχολήθηκε και ανέπτυξε την θεωρία των ατελειών αυτών είναι ο Vito Volterra το 1905 (προτείνοντας εξι τύπους, βασισμένος σε έναν κύλινδρο με ένα κόψιμο κατά μήκος του και πως αυτός ο κύλινδρος διαμορφώνεται μετά την εξάρμωση) [14]. Μέχρι την δεκαετία του 1930, ένα από τα πιο δύσκολα προβλήματα ήταν να εξηγηθεί η πλαστικότητα των υλικών σε μικροσκοπικό επίπεδο. Το 1934, σχεδόν ταυτόχρονα, οι Egon Orowan, Michael Polanyi και George.I.Taylor συνειδητοποίησαν ότι η πλαστική παραμόρφωση μπορεί να συσχετιστεί και να εξηγηθεί μέσω της θεωρίας των κρυσταλλικών ατελειών. Στο σημείο αυτό είναι ενδιαφέρον να πούμε ότι η σχετική ορολογία: "πλαστική ροή" (plastic flow) παραπέμπει στην ρευστομηχανική.

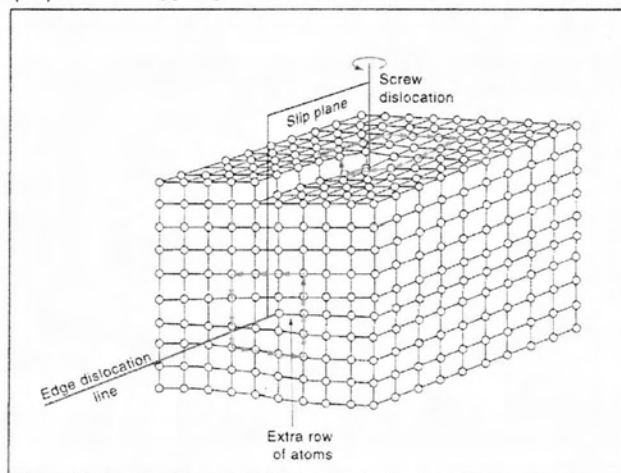
Υπάρχουν τρεις κατηγορίες διαταραχών : γραμμικές, ελίκωσης και μικτές. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι διάφοροι τρόποι κίνησής τους : η ολίσθηση σε επίπεδα slip υπό διατμητική φόρτιση, η αλλαγή επιπέδων ολίσθησης cross slip που είναι ιδιότητα μόνο των διαταραχών ελίκωσης και τέλος η αναρρίχηση των γραμμικών διαταραχών (dislocation climb). Προφανώς ενδιαφερόμαστε κυρίως για τον πρώτο τρόπο κίνησης (μηχανισμός ολίσθησης) όπου έχουμε και τις μικρότερες ενέργειες ενεργοποίησης.



Σχήμα 5: Οι τρόποι με τους οποίους κινείται μία ατέλεια κάτω από την ίδια τάση[5]

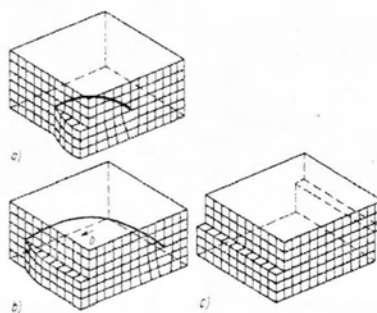


Σχήμα 6: Κρύσταλλος με μια γραμμική διαταραχή (το επιπλέον επίπεδο ατόμων που παρεμβάλεται)[12]

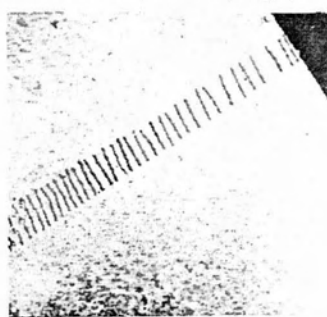


Σχήμα 7: Απεικόνιση σε έναν απλό κυβικό κρύσταλλο γραμμικής διαταραχής και ελικοειδούς διαταραχής [http://courses.eas.ualberta.ca]





Σχήμα 8: Μικτή κρυσταλλική διαταραχή <http://metallpass.com>

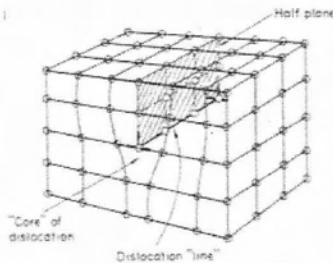


Σχήμα 9: Μικρογραφία από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο όπου ένα λεπτό φύλλο μετάλλου αφαιρείται από το δείγμα μετάλλου (οι ατέλειες βρίσκονται κατά μήκος της ζώνης ολίσθησης) [5]

Στο πλέγμα των κρυσταλλικών υλικών υπάρχει ένας πεπερασμένος αριθμός ατελειών των οποίων η πυκνότητα και η κατανομή εξαρτάται από τις θερμοδυναμικές διαδικασίες που έχει υποστεί στο παρελθόν. Λόγω της ύπαρξης των ατελειών έχουμε την ανάπτυξη τοπικών πεδίων τάσεων και παραμορφώσεων. Οι ατέλειες αυτές περιγράφονται από τα πεδία αυτά τα οποία δεν υπακούουν στο συμβιβαστό των μετατοπίσεων και δημιουργούν αυθεντικά πεδία τάσεων. Γνωρίζοντας τα, μπορούμε να προβλέψουμε την συμπεριφορά τους.

Ένας απλός τρόπος για να περιγράψουμε και κάπως να μπορέσουμε να φανταστούμε τις διαταραχές αυτές, είναι η απότομη διακοπή ενός επιπέδου ατόμων στο εσωτερικό ενός κρυστάλλου. Τα υπόλοιπα επίπεδα γύρω του δεν παραμένουν ευθύγραμμα αλλά καμπυλώνουν γύρω από την άκρη του επιπέδου που έχει διακοπεί έτσι ώστε η κρυσταλλική δομή να είναι τέλεια διατεταγμένη και συμμετρική από τις δυο πλευρές (χαρακτηριστικό το σχήμα που ακολουθεί). Από μαθηματική σκοπιά είναι ένα είδος τοπολογικού ελαττώματος της περιοδικής δομής που καταλαμβάνουν τα άτομα στους τέ-

λειους κρυστάλλους. Μια ιδιότητα τους είναι ότι συμπεριφέρονται σαν ένα ενιαίο σταθερό σωματίδιο και με αυτόν τον τρόπο μπορούν να μετακινούνται διατηρώντας ταυτόχρονα την δομή τους. Εξίσου σημαντικό είναι ότι δύο αντίθετης κατεύθυνσης διαταραχές όταν συναντηθούν αλληλοεξουδετερώνονται (διαδικασία της εκμηδένισης), ενώ μία μόνη της δεν μπορεί να "εξαφανιστεί", εκτός αν βρει διεξοδο σε ελεύθερη επιφάνεια ή σε διεπιφάνεια.



Σχήμα 10: Μια διαταραχή (γραμμική) μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα [<http://mpdc.mae.cornell.edu>]

Υπάρχουν τρεις τρόποι δημιουργίας των εξαρμώσεων - μηχανισμοί που ενεργοποιούνται μέσα στο υλικό :

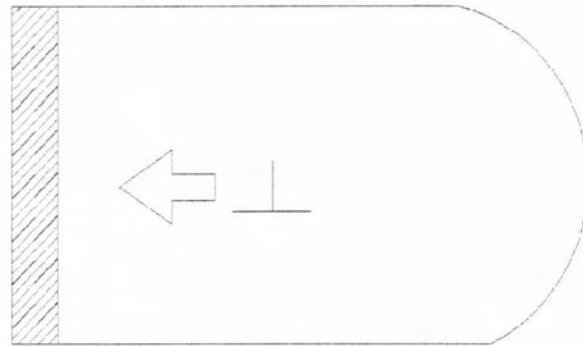
- Η δημιουργία από αυθόρμητη συμπύκνωση είναι αποτέλεσμα της ρήξης των ατομικών δεσμών κατά μήκος μιας γραμμής μέσα στο πλέγμα. Τότε ένα επίπεδο του πλέγματος κόβεται και δημιουργούνται δυο αντίθετα, αντιμέτωπα επίπεδα. Για αυτήν την περίπτωση απαιτείται μεγάλο ποσό ενέργειας ώστε να έχουμε ταυτόχρονα το σπάσιμο πολλών δεσμών.
- Διαταραχές μπορούν να προκύψουν από ανομοιομορφίες - ανωμαλίες στα όρια των υλικών, που στη συνέχεια διαδίδονται προς το εσωτερικό της δομής.
- Εξαιτίας των μικρών ανωμαλιών - αναβαθμών στην επιφάνεια των περισσότερων κρυστάλλων, η τάση σε ορισμένες περιοχές της επιφάνειας είναι πολύ μεγαλύτερη από την συνήθη μέσα στο πλέγμα και έτσι προωθούνται στο εσωτερικό του κρυστάλλου. Το ίδιο ισχύει και για τα σύνορα μεταξύ των κρυστάλλων.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα, όταν ένα μέταλλο αλληλεπιδράσει με ένα οξείδιο τότε αυξάνεται σημαντικά ο αριθμός των διαταραχών που δημιουργούνται, γιατί ουσιαστικά το οξείδιο θέτει την επιφάνεια του μετάλλου υπό πίεση, άρα σύμφωνα με τα παραπάνω αυξάνονται οι διαταραχές στην επιφάνεια. Γενικά, όταν οι διαταραχές δεν βρίσκονται κοντά σε κάποιο σύνορο ή σε κάποια άλλη ατέλεια δεν αντιδρούν. Όταν όμως διαταραχθούν π.χ. αυξηθεί η θερμοκρασία, τότε θα κινηθούν με σκοπό να βρεθούν ξανά σε κατάσταση ισορροπίας. Αυτό μπορεί να οδηγήσει το υλικό σε αστοχία αν υπάρξει μεγάλη συσπείρωση τους και δημιουργηθεί επιφάνειας ολίσθησης.

Δυνατότητα Κίνησης :

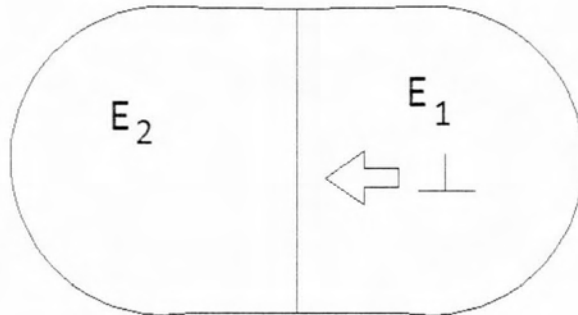
Οι διαταραχές μπορούν να μετακινηθούν εφόσον τα άτομα ενός από τα γειτονικά επίπεδα σπάσουν τους δεσμούς τους και επανασυνδεθούν με άτομα που βρίσκονται στην άκρη του επιπέδου μικρότερου επιπέδου. Με αυτόν τον τρόπο το μικρό, εμβόλιμο επίπεδο ατόμων κινείται καθώς μια σειρά από δεσμούς σπάνε και επανενώνονται. Είναι λογικό ότι η ενέργεια που απαιτείται για να σπάσει ένας μόνο δεσμός είναι πολύ μικρότερη από αυτήν που απαιτείται για να σπάσουν όλοι οι δεσμοί του επιπέδου ταυτόχρονα. Πλέον σε πολλά υλικά οι ατέλειες αυτές θεωρούνται ως "φορείς" της πλαστικής παραμόρφωσης (επιβεβαιώνοντας τους προαναφερθέντες ερευνητές), καθώς η απαιτούμενη ενέργεια για την μετακίνησή τους είναι πολύ μικρότερη από την ενέργεια που χρειάζεται για την θραύση του υλικού (κυρίως διατμητική ελαστική ενέργεια). Χάρη σε αυτές τις ατέλειες τα μέταλλα χαρακτηρίζονται ως εύπλαστα υλικά. Οι διαταραχές αποτελούν το όριο μεταξύ της περιοχής που έχει υποστεί ολίσθηση και αυτής που δεν έχει ολισθήσει μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα του υλικού.

Σε αυτό το σημείο είναι σημαντικό να αναφερθούμε στο πώς συμπεριφέρεται ένα υλικό δηλαδή κατά πόσο επηρεάζεται η κρυσταλλική του δομή όταν έχει ελεύθερη επιφάνεια από τη μία πλευρά του, πώς όταν βρίσκεται σε επαφή με ένα άλλο υλικό, αλλά και πώς όταν σε ένα υλικό οι ατέλειες έχουν την ίδια φορά ή αντίθετη. Όπως φαίνεται και παρακάτω, το πώς θα συμπεριφερθούν οι κρυσταλλικές ατέλειες του υλικού εξαρτάται από το μέτρο ελαστικότητας (E) του καθενός. Είναι σκόπιμο επίσης να αναφέρουμε ότι οι κρυσταλλικές ατέλειες συμπεριφέρονται σαν τα spins ενός μαγνητικού υλικού.



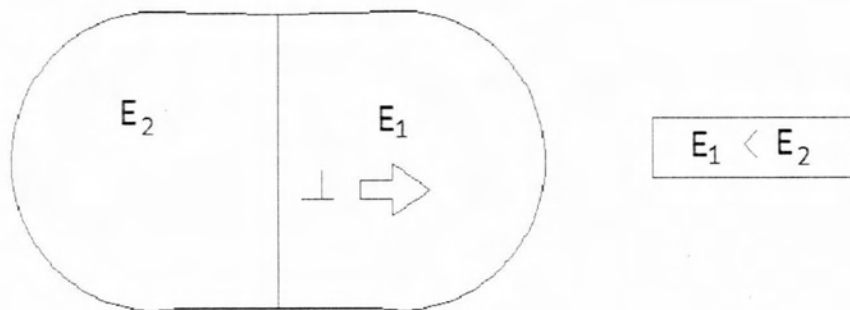
Σχήμα 11: Η ατέλεια έλκεται από την επιφάνεια (wall)

Η παραπάνω εικόνα δείχνει την περίπτωση που έχουμε ελεύθερη επιφάνεια απο τη μια πλευρά και έχει σαν αποτέλεσμα να έλκει τις κρυσταλλικές ατέλειες. Στις εικόνες (σχήμα 12,13) απεικονίζονται οι ατέλειες όταν δύο υλικά είναι σε επαφή. Ενώ στα σχήματα 14,15 φαίνεται η συμπεριφορά των ατελειών όταν έχουν ίδια ή αντίθετη φορά.

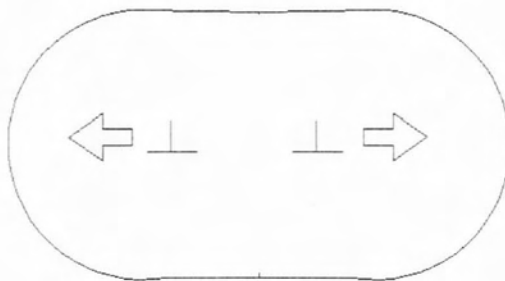


$$E_2 < E_1$$

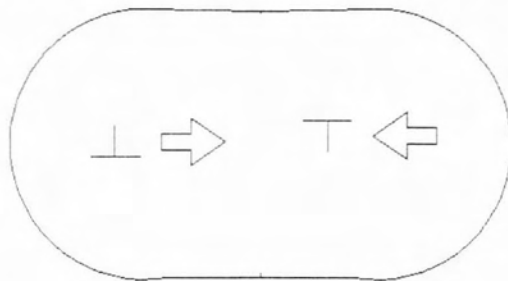
Σχήμα 12: Τα δύο υλικά έχουν διαφορετικό μέτρο ελαστικότητας (E) με αποτέλεσμα αυτό με το μικρότερο να έλκει τις ατέλειες



Σχήμα 13: Τα δύο υλικά έχουν διαφορετικό μέτρο ελαστικότητας ( $E$ ) με αποτέλεσμα αυτό με το μεγαλύτερο να απωθεί τις ατέλειες



Σχήμα 14: Όταν δύο ατέλειες είναι ομόρροπες απωθούνται



Σχήμα 15: Όταν δύο ατέλειες είναι αντίρροπες έλκονται

## 2.3 Κόπωση (fatigue)

Μας ενδιαφέρει η συμπεριφορά των ατελειών όταν υπόκεινται σε κόπωση (fatigue), γι αυτό και κρίνεται απαραίτητη η συνοπτική περιγραφή του φαινομένου αυτού, όπου η φόρτιση είναι εναλλασσόμενη και όχι στατική. Το φαινόμενο μπορεί να παρατηρηθεί τόσο μικροσκοπικά όσο και μακροσκοπικά. Επίσης, υπάρχουν δυο μεθοδολογίες ανάλυσης που ορίζουν το πώς θα συμπεριφερθεί το μέταλλο όταν υποβληθεί σε κόπωση: η μια θεωρώντας ότι δεν υπάρχουν ρωγμές στο υλικό μας και η δεύτερη δέχεται ότι προϋπάρχουν ρωγμές.

Σε μικροσκοπικό επίπεδο:

Κόπωση συμβαίνει όταν ένα υλικό υποβάλλεται σε επαναλαμβανόμενη φόρτιση - αποφόρτιση. Εάν τα φορτία είναι πάνω από ένα ορισμένο όριο θα αρχίσουν να δημιουργούνται μικρορωγμές στην επιφάνεια του υλικού λόγω συσσώρευσης ατελειών. Τελικά όταν το μήκος της ρωγμής θα φτάσει σε ένα κρίσιμο μέγεθος θα επέλθει ξαφνικά η αστοχία. Το σχήμα της δομής του μετάλλου επηρεάζει σημαντικά την διάρκεια ζωής κόπωσης (fatigue life). Τετραγωνικές οπές ή αιχμηρές γωνίες, οδηγούν σε αύξηση των τοπικών τάσεων όπου από εκεί θα γίνει και η έναρξη της ρωγμής λόγω κόπωσης. Αντίθετα όταν υπάρχουν ομαλές μεταβάσεις στην δομή τότε η αντοχή κόπωσης αυξάνεται. Με τον όρο " διάρκεια ζωής του υλικού " (fatigue life) εννοούμε το χρόνο που απαιτείται ώστε η κύρια ρωγμή να δημιουργηθεί και να αποκτήσει το κρίσιμο μήκος της. Ο χρόνος αυτός μετράται σε κύκλους φόρτισης ( $N_f$ ) και ορίζεται σύμφωνα με την σχέση:

$$N_f = N_i + N_p$$

όπου  $N_i$  οι κύκλοι φόρτισης που απαιτούνται για τον σχηματισμό της κύριας ρωγμής (πρώτη φάση), ενώ  $N_p$  είναι οι κύκλοι φόρτισης της δεύτερης φάσης, μέχρι να φτάσει η ρωγμή στο κρίσιμο μέγεθος της. Το χαρακτηριστικό αποτέλεσμα είναι η συσσώρευση τοπικής πλαστικής παραμόρφωσης και η ανάπτυξη ρωγμών μέχρι την τελική αστοχία.

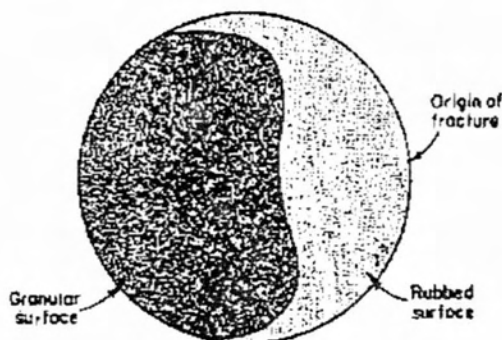
Μακροσκοπικό επίπεδο:

Αξίζει να σημειωθεί ότι όταν ένα υλικό υποβάλλεται σε κόπωση τότε η τάση αστοχίας<sup>2</sup> είναι μικρότερη από αυτή που θα απαιτούνταν αν υπήρχε απλός εφελκυσμός. Μια αστοχία λόγω κόπωσης πάντα ξεκινάει από μία μικρή ρωγμή η οποία κάτω από επαναλαμβανόμενη τάση αυξάνεται το μέγεθος της. Όσο η ρωγμή μεγαλώνει, το φορτίο που μπορεί να φέρει η διατομή μειώνεται και έχει ως αποτέλεσμα η τάση στη διατομή να αυξάνεται. Τελικά μόλις φτάσει η διατομή σε σημείο που να μη μπορεί να φέρει άλλο φορτίο η ταχύτητα

---

<sup>2</sup>Τάση αστοχίας είναι αυτή που εφαρμόζουμε και οδηγεί στη θραύση του μετάλλου

αστοχίας είναι πολύ μεγάλη. Εξαιτίας του τρόπου με τον οποίο εξελίσσεται η αστοχία, η επιφάνεια χωρίζεται σε δύο περιοχές με τελείως διαφορετικά χαρακτηριστικά όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Στις περισσότερες περιπτώσεις η επιφάνεια στη περιοχή όπου η ρωγμή μεγαλώνει αργά θα είναι σιλιπνή ή μαυρισμένη. Αυτή η μορφή οφείλεται στο ότι οι δύο επιφάνειες της ρωγμής του μετάλλου τρίβονται μεταξύ τους λόγω της παραμόρφωσης (μπρος-πίσω) σε κάθε επαναλαμβανόμενο κύκλο. Όταν φθάσει στο τελευταίο στάδιο και τείνει να αστοχήσει, η μορφή που παίρνει η επιφάνεια είναι τραχιά και ακανόνιστη. Η άλλη πλευρά της επιφάνειας έχει κοκκώδη υφή. Στην παρακάτω εικόνα βλέπουμε το αποτέλεσμα ενός μετάλλου το οποίο έχει υποβληθεί σε κόπωση όπου το μέγεθος των τάσεων αλλάζει λόγω της διάδοσης της ρωγμής.

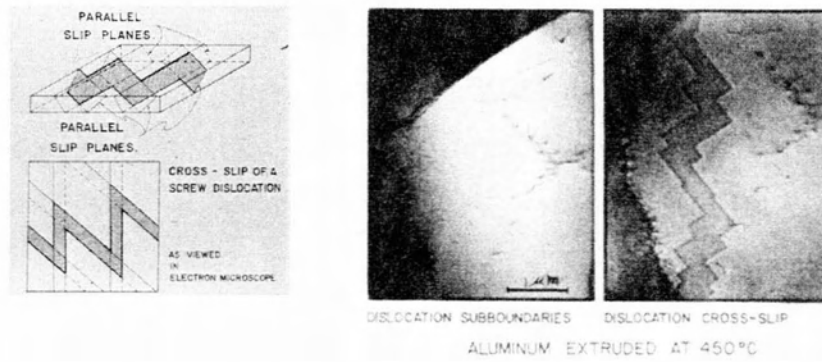


Σχήμα 16: Η επιφάνεια θραύσης λόγω κόπωσης συχνά απεικονίζει δύο περιοχές. Η μία περιοχή είναι χωρίς ανωμαλίες, ή σιλιπνή, που αντιστοιχεί στην αργή διάδοση της ρωγμής, και η άλλη είναι τραχιά ή κοκκώδη ανάλογα το μέταλλο[5]

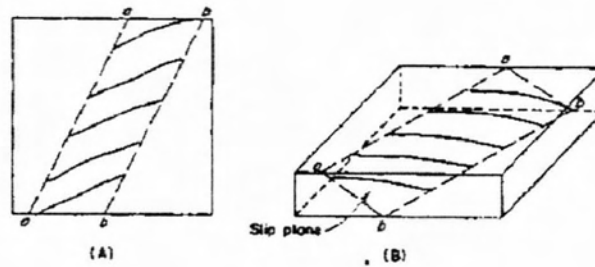
Ένας από τους πιο σημαντικούς παράγοντες που καθορίζουν τη συμπεριφορά σε κόπωση είναι η κατάσταση των διαταραχών στο κρυσταλλικό πλέγμα, καθώς υπάρχουν περιοχές στις επιφάνειες ακόμα και των πιο λείων μετάλλων που ονομάζονται "**επίμονες ζώνες ολίσθησης**" (**persistent slip bands - PSB**) και είναι ουσιαστικά οι περιοχές που συσσωρεύεται η πλαστική παραμόρφωση οι οποίες "επιμένουν" και επανεμφανίζονται στο ίδιο σημείο ακόμα και μετά από επεξεργασία λείανσης της επιφάνειας του υλικού. Στις ζώνες αυτές οι διαταραχές μπορούν να κινούνται πολύ πιο εύκολα από ότι στον υπόλοιπο κρύσταλλο με αποτέλεσμα να δημιουργούνται "βαθμίδες ολίσθησης" στην επιφάνεια που με την κυκλική φόρτιση σχηματίζουν χαρακτηριστικές μορφές ενδολίσθησεων και εξολίσθησεων, από όπου τελικά ξεκινούν πολλές ρωγμές. Μία PBS αποτελείται



από ένα μεγάλο αριθμό επιπέδων ολίσθησης (**slip planes**) τα οποία σχηματίζουν μια επίπεδη πλακοειδή δομή και προκαλούν διάνοιξη εγκάρσιας τομής μέσα στον κρύσταλλο. Οι ζώνες ολίσθησης μπορούν να παρατηρηθούν με το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο, όμως αυτές που εμφανίζονται στην επιφάνεια μπορούν να παρατηρηθούν και με οπτικό μικροσκόπιο [5].



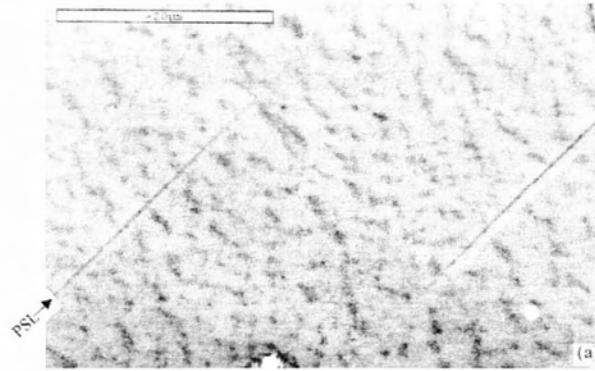
Σχήμα 17: Cross-slip of a screw dislocation (<http://users.encs.concordia.ca>)



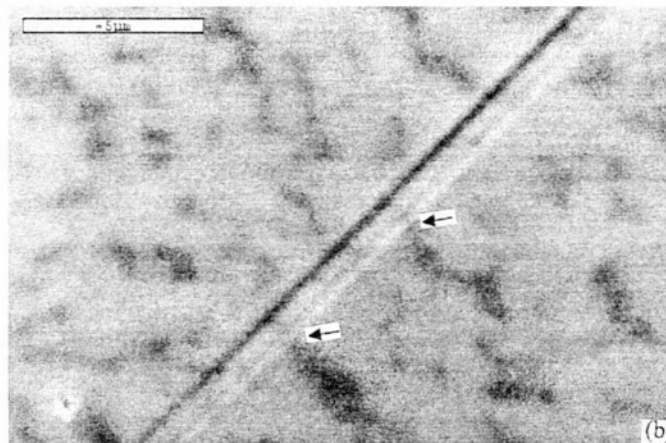
Σχήμα 18: Σχηματική απεικόνιση ζώνης ολίσθησης απο ηλεκτρονικό μικροσκόπιο [5]



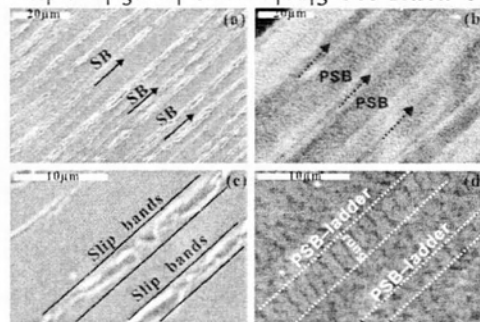
S. X. Li *et al.*



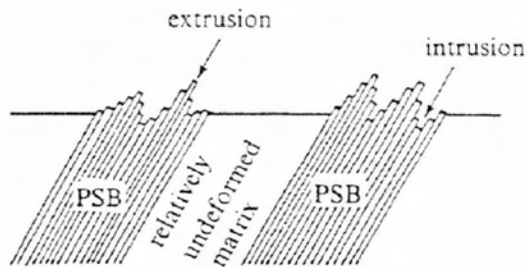
Σχήμα 19: Ίχνος μίας επίμονης ζώνης ολίσθησης στο επάνω αριστερό άκρο [10]



Σχήμα 20: Επίμονη ζώνη ολίσθησης στο κάτω δεξιά άκρο [10]



Σχήμα 21: Σχηματική απεικόνιση PSB[<http://ars.els-cdn.com/>]



Σχήμα 22: Συσσωρευμένη πλαστική παραμόρφωση, με την μορφή: ενδολι-  
σθήσεων και εξολισθήσεων [<http://fcp.mechse.illinois.edu/media>]

Η ομάδα των υπό εξέταση διαταραχών πρέπει να πάρει μια συγκεκριμένη μορφή για να μπορέσουμε να την επεξεργαστούμε και έτσι στραφήκαμε στο μοντέλο του **Ising**, ένα από τα πιο βασικά μαθηματικά μοντέλα της στατιστικής μηχανικής όπου με την βοήθεια της εξίσωσης του **Kawasaki** και την εξίσωση των **Cahn-Hilliard** καταλήξαμε στην εξίσωση των **Puri** και **Binder** όπου και προσπαθούμε να εντοπίσουμε ποιά είναι τα πιθανά σημεία που θα δημιουργηθούν οι "επίμονες ζώνες ολίσθησης" ώστε να μπορούμε να προβλέψουμε τα πιθανά σημεία που θα δημιουργηθούν ρωγμές. Η ίδια μελέτη έγινε και με την εξίσωση του **Schrödinger**. Η αιτία που μας οδήγησε στην μελέτη της εξίσωσης του **Schrödinger** είναι ότι είναι μια εξίσωση ευρέως γνώστη για την μελέτη προβλημάτων διάχυσης και αντίστοιχα στο δικό μας πρόβλημα μπορεί να μας δώσει πολύ καλά αποτελέσματα για την κατανομή των ατελειών μέσα σε ένα μέταλλο. Αξίζει να αναφέρουμε ότι στα μέταλλα, ανάλογα με την φόρτιση, τα πιθανά σημεία αστοχίας μπορεί να είναι παραπάνω από ένα.

### 3 Ising-model

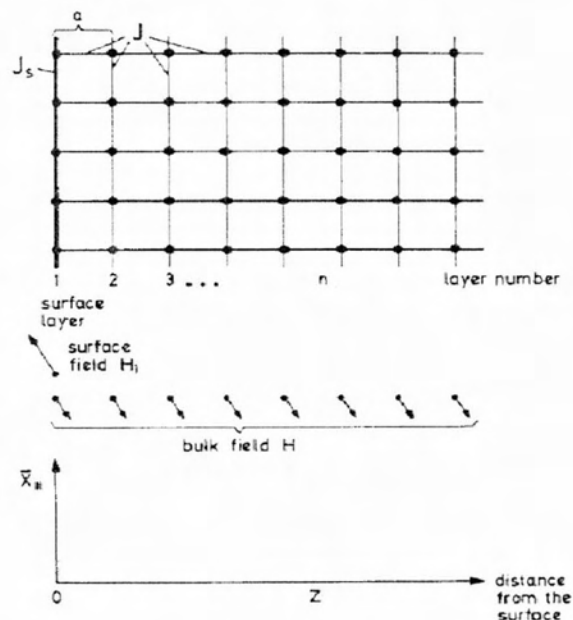
Το μοντέλο του Ising αναπτύχθηκε από τον φυσικό Ernst Ising, το όνομα του οποίου φέρει. Είναι ένα από τα πιο διαδεδομένα, βασικά μαθηματικά μοντέλα της στατιστικής μηχανικής και αποτελεί πρότυπο κυρίως για τις αλλαγές φάσεων λόγω της ύπαρξης μαγνητικού πεδίου. Το μοντέλο αυτό πρωτοπαρουσιάστηκε το 1925 στην διδακτορική διατριβή του Ising, ο οποίος ασχολήθηκε με την περίπτωση της μίας διάστασης, όπου και απέδειξε ότι δεν υφίσταται κάποια αλλαγή φάσης. Βασισμένος σε αυτό, οδηγήθηκε στη λανθασμένη γενίκευση ότι δεν παρουσιάζεται αλλαγή φάσης σε καμία διάσταση. Στα χρόνια που ακολούθησαν, πολλοί επιστήμονες ασχολήθηκαν με το μοντέλο αυτό, μελετώντας το κυρίως σε περισσότερες διαστάσεις. Το μοντέλο Ising σε ένα τετράγωνο πλέγμα (διδιάστατο μοντέλο) χωρίς μαγνητικό πεδίο, λύθηκε αναλυτικά από τον Lars Onsager το 1944. Επίσης έχει αποδειχθεί ότι υφίσταται αλλαγή φάσης μεταξύ των καταστάσεων "τάξης" και "αταξίας" από τις δυο διαστάσεις και πάνω [15].

Το μοντέλο αυτό αποτελείται από μια ομάδα όμοιων μονάδων που τα θεωρούμε ως spin καθώς μπορούν να αλλάξουν προσανατολισμό μόνο κατά την κατακόρυφη διεύθυνση και μπορεί να είναι άτομα, μόρια ή άλλες διατάξεις, ανάλογα με την περίπτωση. Αποτελείται από  $N$  δεσμευμένα σημεία τα οποία σχηματίζουν ένα πλέγμα. Υπάρχουν διάφορες μορφές πλεγμάτων όπως κυβικά, εξαγωνικά κ.α. Υποθέτοντας ένα ημίπειρο χώρο με επίπεδη ελεύθερη επιφάνεια, κάθε κόμβος ( $i$ ) του κυβικού πλέγματος αντιστοιχεί σε ένα spin  $S_i = 1$  ή  $-1$  το οποίο αναπαριστά το βαθμό ελευθερίας όπου είναι για άτομο A  $S_i = 1$  και για B άτομο  $S_i = -1$ . Παρόμοια εικόνα έχουμε και για τις ατέλειες ( $\perp S_i = 1$ ) και ( $\top S_i = -1$ ) καθώς και σε προβλήματα διάχυσης ( $S_i = 1$  υπάρχει και  $S_i = 0$  δεν υπάρχει το άτομο ή το μόριο) [15],[16]. Στο μοντέλο του Ising η Hamiltonian εξίσωση είναι η

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ bulk}} S_i S_j - J_s \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ surface}} S_i S_j - H \sum_i S_i - H_1 \sum_{i \text{ surface}} S_i$$

Το πρώτο άθροισμα αντιστοιχεί στο εσωτερικό του μοριακού πλέγματος χωρίς να συμπεριλαμβάνει την ελεύθερη επιφάνεια, ενώ ο δεύτερος όρος αντιστοιχεί στα spin μεταξύ της ελεύθερης επιφάνειας και της γειτονικής της. Όμως, χάριν απλότητας περιορίζεται το φάσμα αλληλεπίδρασης για τα πιο κοντινά γειτονικά spin και θεωρείται ότι η ενέργεια αλληλεπίδρασης στο επίπεδο της επιφάνειας  $J_s$  είναι διαφορετική από την ενέργεια αλληλεπίδρασης  $J$  στο εσωτερικό του υλικού. Μάλιστα όταν  $J > 0$  επικρατεί το φαινόμενο του φερρομαγνητισμού, ενώ για  $J < 0$  έχουμε την περίπτωση του αντιφερρομαγνητισμού. Προφανώς για όλα τα υπόλοιπα spin που δεν αλληλεπιδρούν

ισχύει  $J = 0$ . Το κάθε ζευγάρι πρέπει να προσμετράται μόνο μια φορά. Το γινόμενο των τελεστών  $S_i S_j$  ισούται είτε με +1 εάν τα spin είναι ομόρροπα, είτε με -1 στην αντίθετη περίπτωση. Η επίδραση από τις δυνάμεις της επιφάνειας συμβολίζονται με  $H_1$  ενώ στο εσωτερικό του υλικού με  $H$  όπου είναι η μεταβολή της θερμοδυναμικής σύζευξης. Για  $H_1$  θετικό, η επιφάνεια έλκει Α-άτομα ενώ για  $H_1$  αρνητικό Β-άτομα.



Σχήμα 23: Διατομή κάθετη στο επίπεδο της επιφάνειας ενός ημιάπειρου απλού κυβικού Ising μαγνήτη. Στο πλέγμα οι αποστάσεις είναι  $a$ , και οι σταθερές αλληλεπίδρασης  $J$  και  $J_s$  για το εσωτερικό του υλικού και στην επιφάνεια αντίστοιχα. Τα spins μπορούν να προσανατολιστούν σε μια συγκεκριμένη κατεύθυνση, κατά μήκος του οποίου θα εφαρμοστεί στο εσωτερικό του υλικού ένα πεδίο  $H$  και ένα αντίρροπο σε αυτό στην επιφάνεια. [4]

Το φαινόμενο του φερρομαγνητισμού είναι ένα ενδιαφέρον φυσικό φαινόμενο στα στερεά. Σε πολλά μέταλλα τα spin των ατόμων προσανατολίζονται τυχαία στην ίδια κατεύθυνση προκαλώντας μακροσκοπικά μαγνητική επαγωγή. Το φαινόμενο αυτό εξαρτάται από την κρίσιμη θερμοκρασία: κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία συμβαίνει προσανατολισμός σε μία διεύθυνση, ενώ πάνω από αυτή τα spin προσανατολίζονται τυχαία. Επιπλέον, όταν η θερμοκρασία του συστήματος είναι υψηλή, καταργείται η όποια συμμετρία, όταν τα spins βρίσκονται διατεταγμένα σε καθορισμένες θέσεις (ordered), η παράμετρος τάξης τους είναι διάφορη του μηδενός (παράμετρος τάξης είναι το συνεχές ανάλογο της μέσης τιμής των spin  $\langle S_i(t) \rangle$ ).

Αντιθέτως, στην περίπτωση χαμηλής θερμοκρασίας, υπάρχει συμμετρία, τα spins βρίσκονται σε αταξία και η παράμετρος τάξης είναι μηδενική. Για αυτή του την ιδιαιτερότητα, το μοντέλο αυτό είναι χαρακτηριστικό παράδειγμα των αλλαγών κατάστασης τάξης αταξίας. Η πιθανότητα της κάθε διάταξης των spin είναι μια κατανομή Boltzmann. Αναφορικά με τα spin και την διάταξη τους ισχύουν κάποιοι βασικοί κανόνες :

- Μαγνητικές αλληλεπιδράσεις τείνουν να κάνουν τα spins ομόρροπα μεταξύ τους. Στην περίπτωσή μας έχουμε αλληλεπιδράσεις λόγω ελαστικής ενέργειας.
- Το πώς θα διαταχθούν τα spins είναι ένα τυχαίο γεγονός, όταν η θερμική ενέργεια τους υπερβεί την ισχύ των μεταξύ τους αλληλεπιδράσεων.
- Μια φερρομαγνητική αλληλεπίδραση τείνει να κάνει τα spins ομόρροπα, αντίθετα με μία αντιφερρομαγνητική.
- Η ύπαρξη ενός μαγνητικού πεδίου σπάει την συμμετρία τους, δηλαδή την τυχειότητα στην κατανομή τους και τα προσανατολίζει.

## 4 Ανάλυση του μοντέλου του Schrödinger

Σ' αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με την εξίσωση του Schrödinger. Ο λόγος που ασχολούμαστε με αυτήν την εξίσωση είναι γιατί είναι μια απλοποιημένη μορφή της εξίσωσης των Puri και Binder με την οποία θα ασχοληθούμε και στο επόμενο κεφάλαιο. Στη εξίσωση αυτή παραλείπεται ο μη γραμμικός όρος  $f^3$  και αυτό έχει ως αποτέλεσμα την κάνει εύκολη στη μαθηματική της μελέτη [18]. Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι η συνοριακές συνθήκες στο μοντέλο του Schrödinger δεν παρουσιάζουν δυναμικό χαρακτήρα.

Η εξίσωση του Schrödinger είναι μια εξίσωση διάχυσης (diffusion) η οποία μας δείχνει πως κατανέμονται οι κρυσταλλικές ατέλειες κυρίως στο bulk του υλικού. Πριν προχωρήσουμε στην εξίσωση του Schrödinger θα ήταν σκόπιμο να αναλύσουμε την έννοια της διάχυσης στα μέταλλα. Με τον όρο διάχυση εννοούμε πώς κινούνται τα άτομα και στην συγκεκριμένη περίπτωση οι κρυσταλλικές ατέλειες μέσα σε ένα στερεό και η συμπεριφορά τους έχει να κάνει με το γεγονός αν είναι ιδανικό ή όχι το στερεό.

Η εξίσωση διάχυσης είναι

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \pm \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^4 f(x, t)}{\partial x^4} \quad (1)$$

Η αρχική συνθήκη (initial condition) της διαφορικής εξίσωσης είναι

$$f(x, 0) = 0 \quad (2)$$

η συνθήκη αυτή ισχύει μόνο στο εσωτερικό του υλικού.

Η συνοριακές συνθήκες (boundary conditions) της διαφορικής εξίσωσης είναι

$$f(0, t) = 1 \quad (3)$$

Η φυσική σημασία αυτής της παραπάνω συνθήκης είναι η κανονικοποιημένη αρχική πυκνότητα των dislocation που είναι συσσωρευμένη στο σύνορο  $x = 0$ . Η πυκνότητα θεωρούμε ότι διατηρείται σταθερή και αυτό συμβαίνει γιατί τα dislocation έλκονται από την ελεύθερη επιφάνεια που υπάρχει ή από το υλικό που είναι δίπλα σε αυτό και έχει μικρότερο μέτρο ελαστικότητας.

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t)] \right|_{x=0} = 0 \quad (4)$$

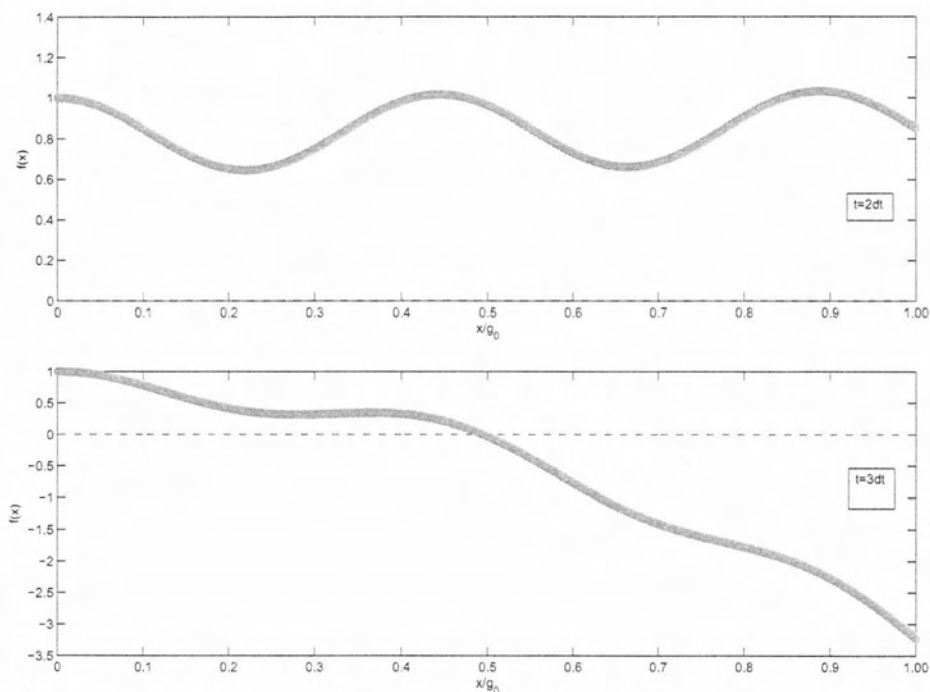
$$\left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} [f(x, t)] \right|_{x=0} = -1 \quad (5)$$

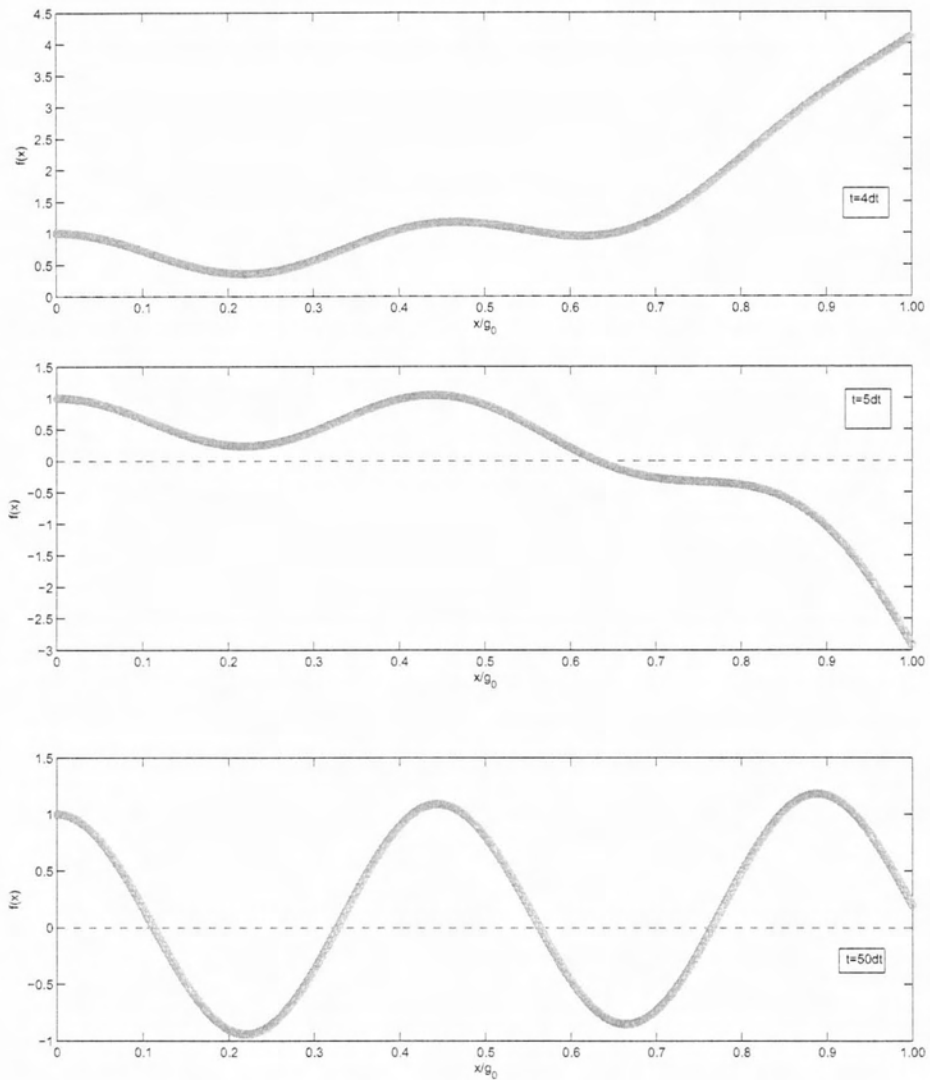
Οι δύο παραπάνω συνοριακές συνθήκες όσον αναφορά την φυσική τους σημασία μας δίνουν πληροφορίες για τη ροή των dislocation στο σύνορο. Δεχόμαστε ότι τα dislocation ρέουν προς την επιφάνεια λόγω των μηχανικών πεδίων που αναπτύσσουν.

$$\left. \frac{\partial^3}{\partial x^3} [f(x, t)] \right|_{x=0} = 0 \quad (6)$$

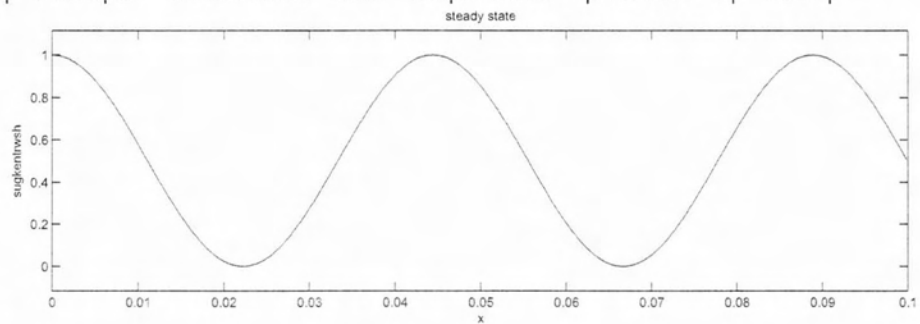
Η φυσική σημασία της τρίτης παραγώγου όταν δεν είναι μηδέν είναι ότι δεν είναι αραή η πυκνότητα των dislocation ,δηλαδή ότι αλληλεπιδρούν μεταξύ τους.

Χρησιμοποιώντας την αριθμητική μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών παίρνουμε τα παρακάτω αποτέλεσμα.





Έπειτα, για σταθερή κατάσταση (**steady state**) ( $t \rightarrow \infty, \frac{\partial f}{\partial t} \rightarrow 0$ ) η διαφορική εξίσωση λύθηκε αναλυτικά και παρακάτω φαίνεται η λύση.





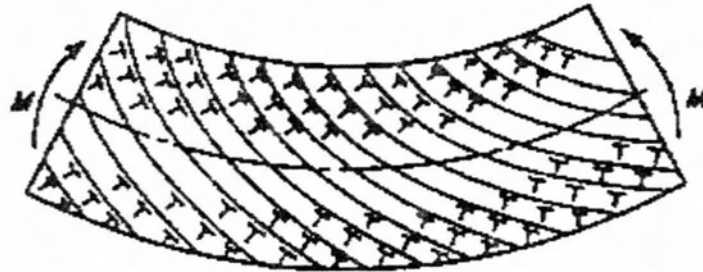
Όπως φαίνεται στα παραπάνω διαγράμματα η εξίσωσή μας παρουσιάζει έντονο δυναμικό χαρακτήρα και μετά από  $t = 50dt$  φτάνει σε σταθερή κατάσταση (**steady state**). Συγκρίνοντας την αναλυτική λύση με την αριθμητική παρατηρούμε ότι καταλήγουμε στο ίδιο αποτέλεσμα.

Σε αυτό το σημείο αξίζει να σχολιάσουμε ότι στα σημεία που παρουσιάζονται ακρότατα στο διάγραμμα, εκεί θα δημιουργηθούν και οι επίμονες ζώνες ολίσθησης (**persistent slip bands**) δηλαδή οι περιοχές που συσσωρεύονται οι παραμόρφώσεις και θα είναι πιθανά σημεία που μπορεί να δημιουργηθούν ρωγμές.

#### 4.1 Το μοντέλο του Schrödinger με δυναμικό πεδίο (1)

Έγινε δοκιμή εισαγωγής ενός δυναμικού στην εξίσωση για να παρατηρήσουμε πώς θα μεταβληθούν τα αποτελέσματα από την επίδραση αυτού. Η διαφορά στο γεγονός της ύπαρξης ή μη δυναμικού, το οποίο είναι διατμητικού τύπου, είναι ότι όταν δεν υπάρχει δυναμικό είναι σαν να έχουμε φόρτιση απλού εφελκυσμού σε κόπωση ενώ η ύπαρξη του δυναμικού δηλώνει κόπωση σε κάμψη όπου η κλίση των τάσεων είναι μη ομογενής δηλαδή τα dislocation έλκονται από τις περιοχές που έχουν δημιουργηθεί επίμονες ζώνες ολίσθησης. Κατά την διάρκεια αστοχίας λόγω κόπωσης το έργο των πλαστικών παραμορφώσεων είναι συνήθως πολύ μεγαλύτερο από αυτό που απαιτείται για την αστοχία λόγω δοκιμής απλού εφελκυσμού. Αυτό πιθανώς προκύπτει από το γεγονός ότι η πλειονότητα από τον κύκλο των πλαστικών παραμορφώσεων είναι αναστρέψιμες ενώ ένα μικρό τμήμα παρουσιάζει μη αναστρέψιμες ολισθήσεις και έτσι προκύπτει η αστοχία λόγω κόπωσης. Έτσι, η αντιστρεψιμότητα του φαινομένου είναι ο πιο σημαντικός παράγοντας ελέγχου για τις ρυθμίσεις εξαρμώσεων και τις κινήσεις στο εσωτερικό του υλικού υπό ανακυκλιζόμενη φόρτιση, από τις μικρές μη αναστρέψιμες παραμορφώσεις.

Η μεταβολή της **οπισθέλκουσας τάσης (back stress)** θα προκαλέσει ανομοιογενείς ολισθήσεις στην επιφάνεια και θα γίνουν η αιτία εμφάνισης των ρωγμών λόγω κόπωσης. Ωστόσο, η ανάπτυξη των ολισθήσεων που οδηγούν σε ρωγμές λόγω κόπωσης προκαλούνται από τις επίμονες, μη αναστρέψιμες παραμορφώσεις.



Σχήμα 24: Κατανομή γραμμικών διαταραχών που υποβάλλεται σε κάμψη[5]

Η εξίσωση είναι η παρακάτω

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial^4 f(x, t)}{\partial x^4} - \frac{1 - Bx/(g_0)}{(g_0)^2} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \quad (7)$$

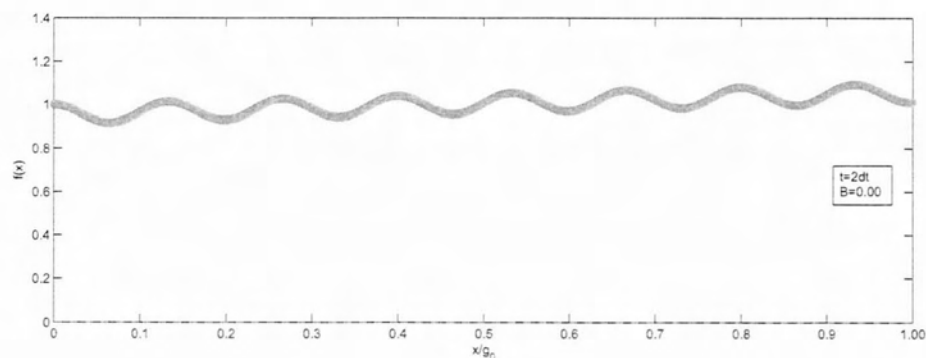
Το δυναμικό πεδίο είναι:

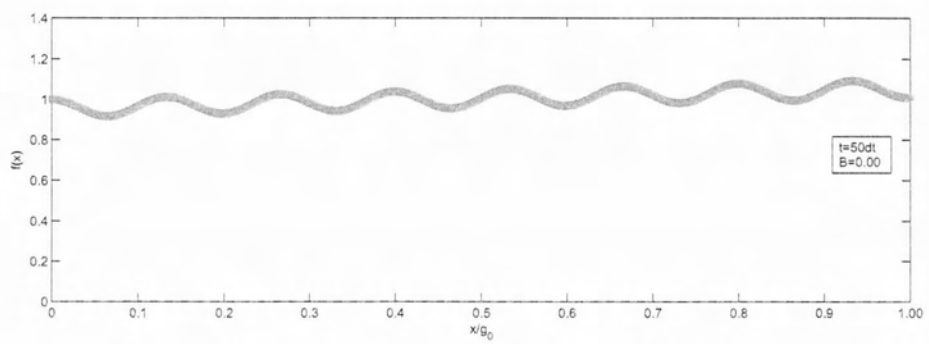
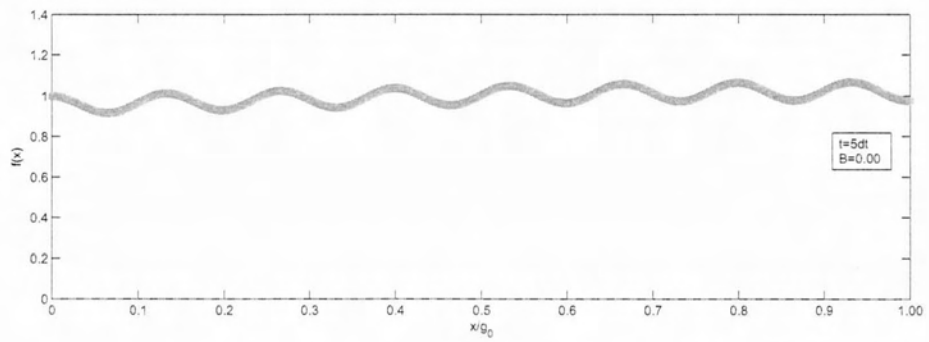
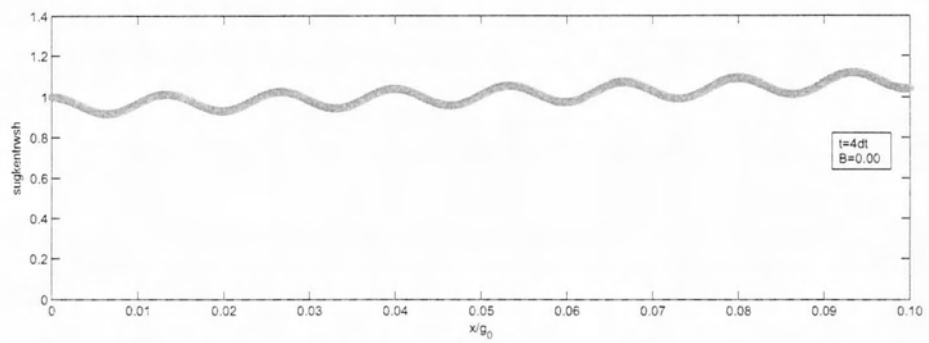
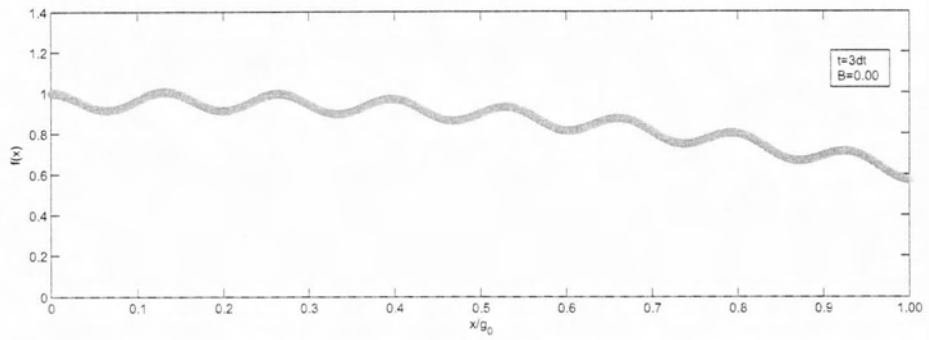
$$\frac{1 - Bx/(g_0)}{(g_0)^2}$$

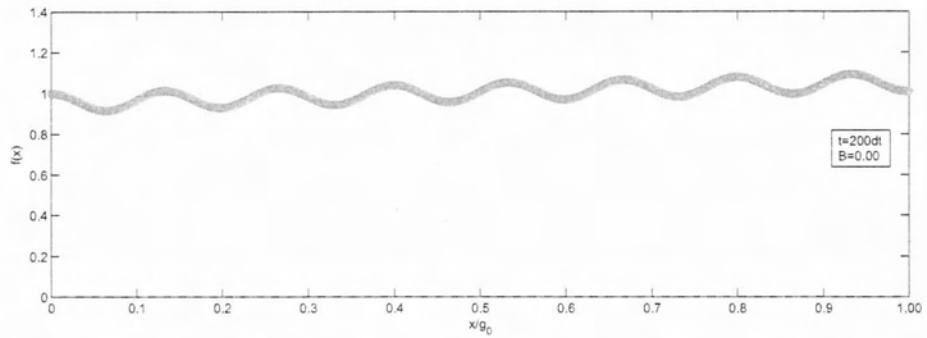
με  $g_0 = 0,3$

Οι συνοριακές συνθήκες παραμένουν οι ίδιες με την προηγούμενη ανάλυση.

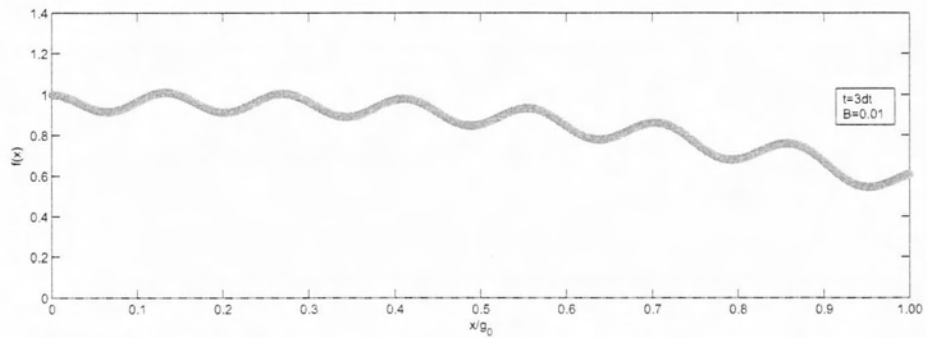
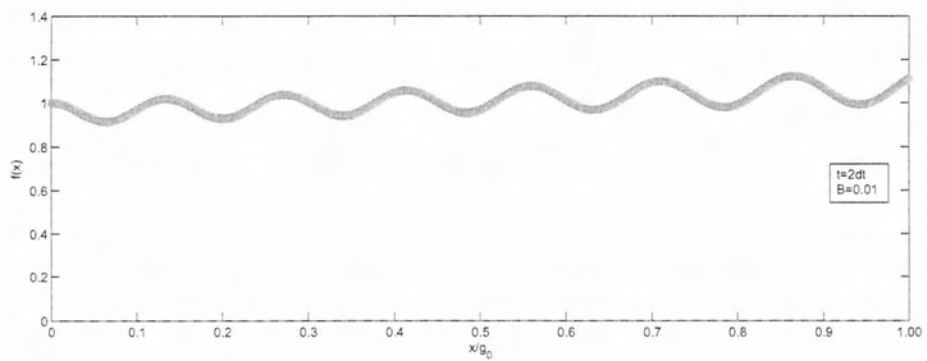
Αρχικά παρουσιάζονται έξι διαγράμματα για διάφορες χρονικές στιγμές με  $B=0,0$

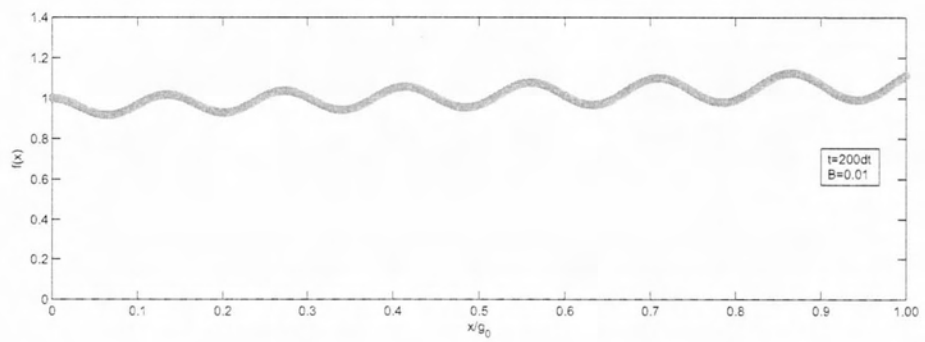
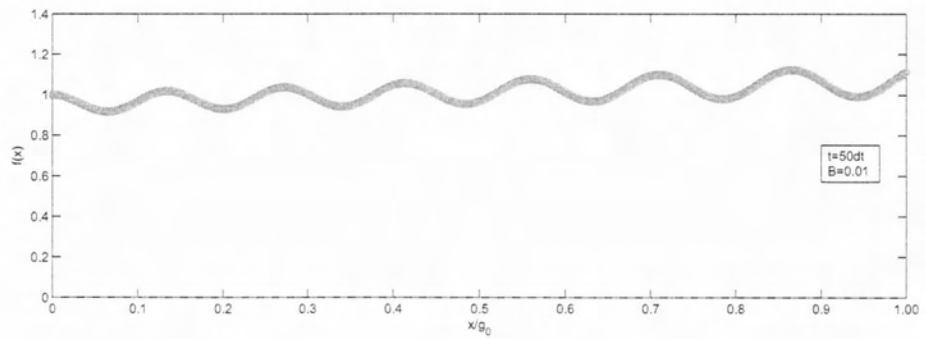
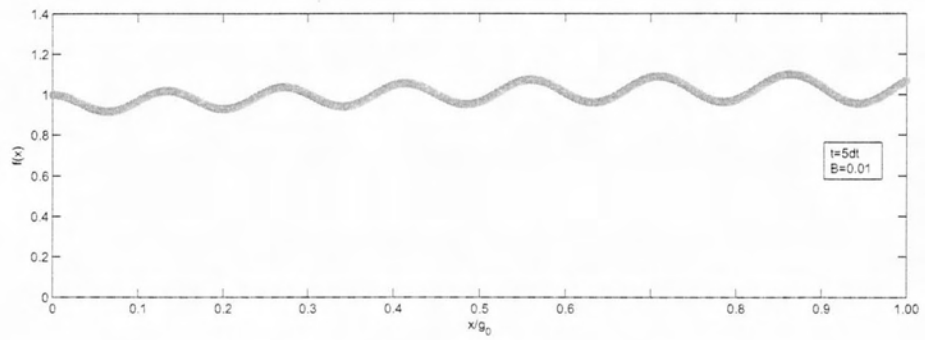
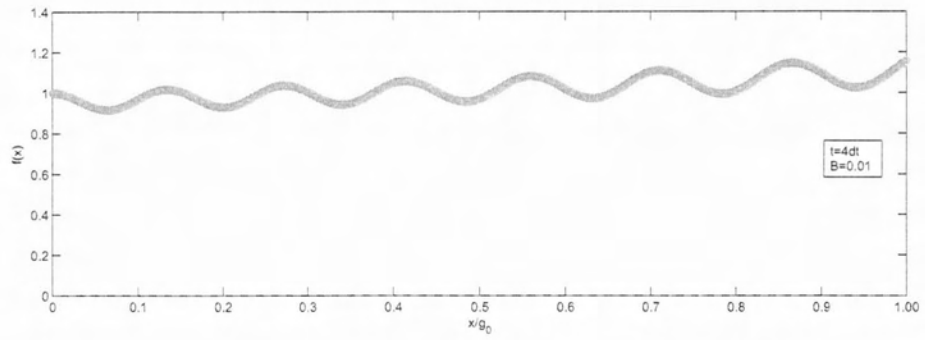






Έπειτα παρουσιάζονται άλλα έξι διαγράμματα για διάφορες χρονικές στιγμές  $B=0,01$

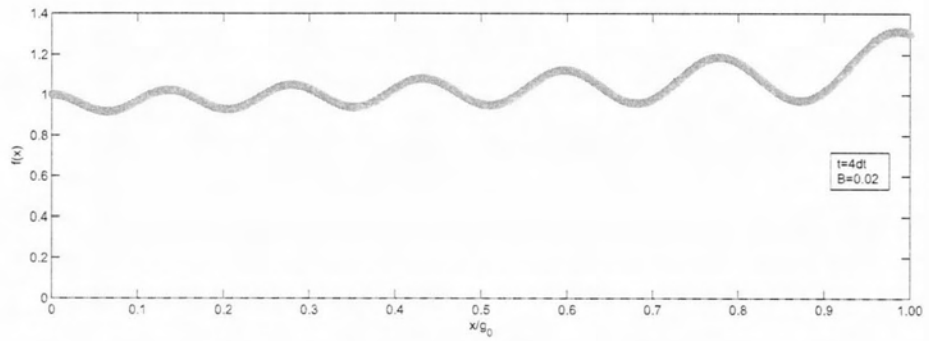
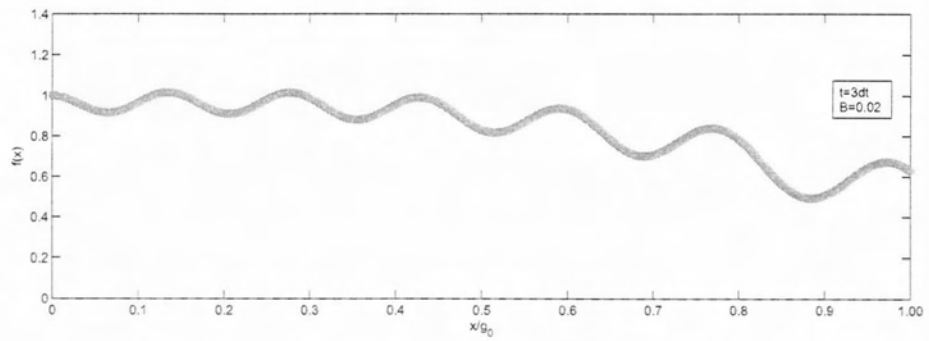
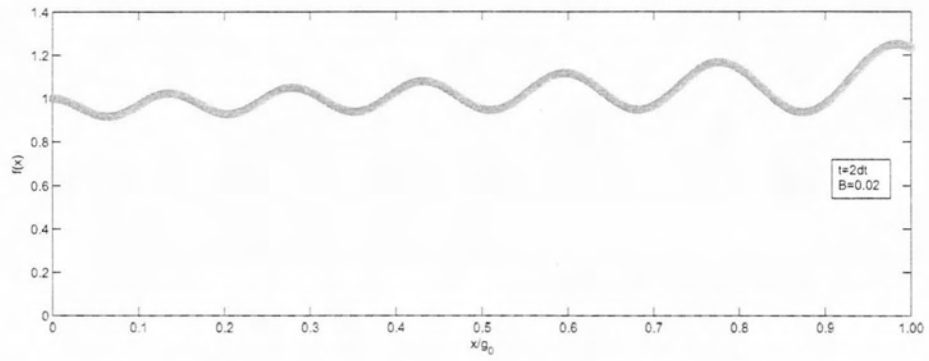


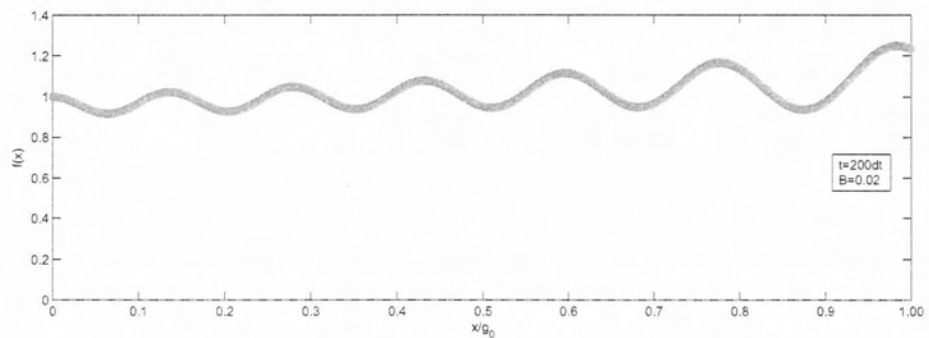
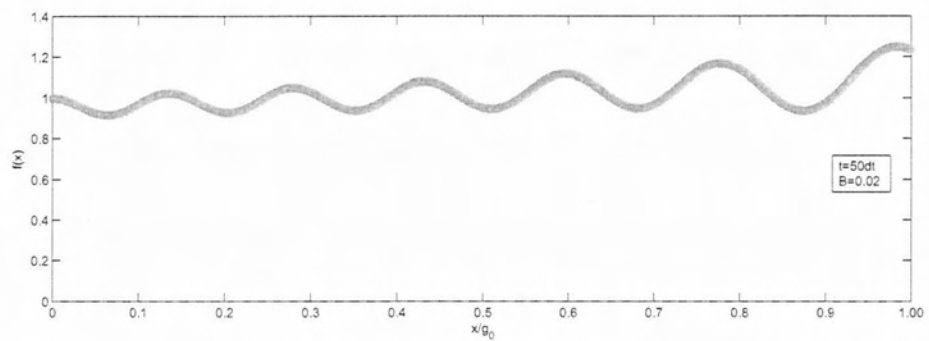
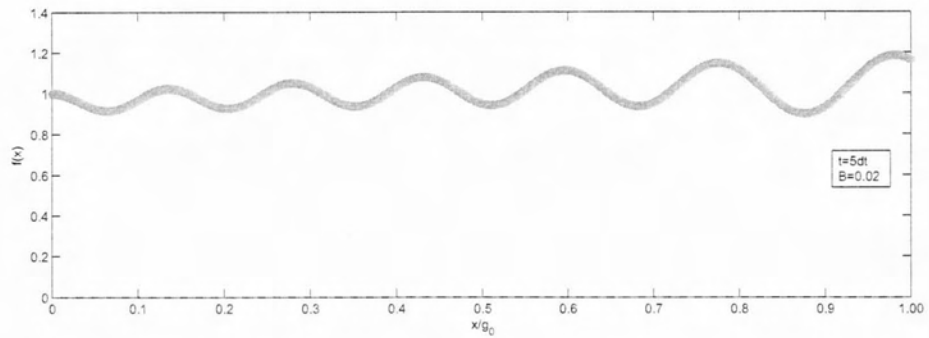


Τέλος

για

$B=0,02$





Από τις παραπάνω εικόνες παρατηρούμε ότι όσο μεγαλώνει το  $B$  δηλαδή η επίδραση του δυναμικού τόσο αυξάνεται το πλάτος της ταλάντωσης. Η αύξηση του πλάτους έχει ως αποτέλεσμα την ισχυρή συσσώρευση dislocation και αυτό οδηγεί στην μείωση της ακαμψίας του υλικού.

## 4.2 Το μοντέλο του Schrödinger με δυναμικό πεδίο (2)

Σ' αυτό το κεφάλαιο έγινε μία προσπάθεια να εισάγουμε ένα άλλο δυναμικό. Η διαφορική εξίσωση είναι:

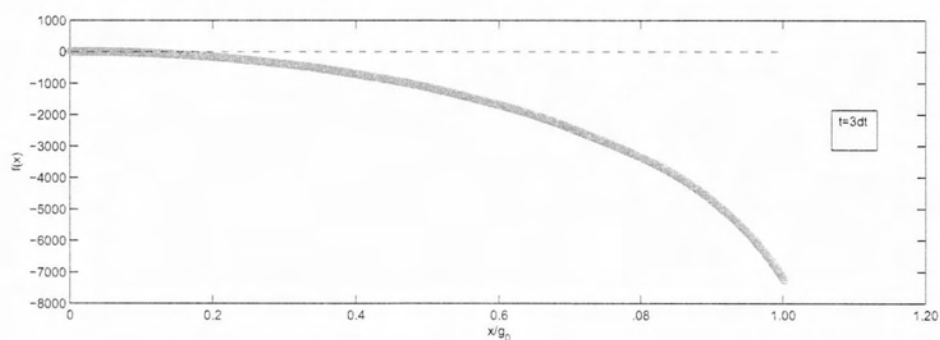
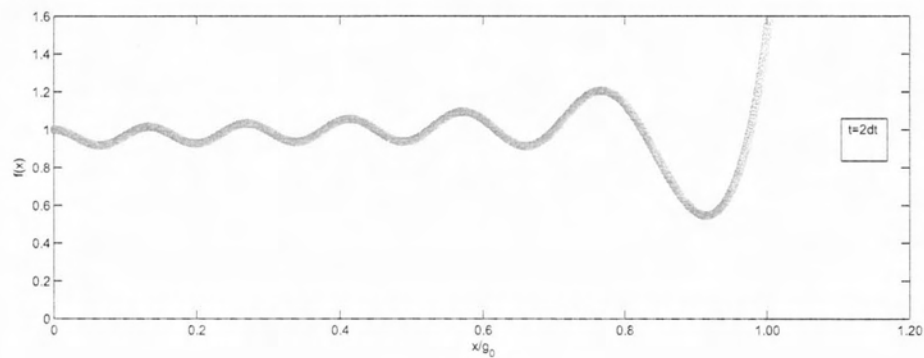
$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial^4 f(x,t)}{\partial x^4} - \frac{1 - A^2 x^2}{(g_0)^2} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \quad (8)$$

Το δυναμικό πεδίο που χρησιμοποιήθηκε είναι:

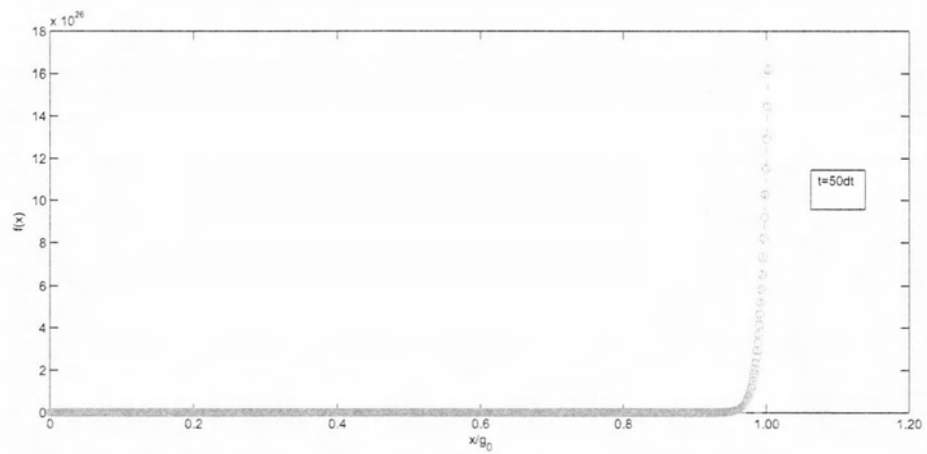
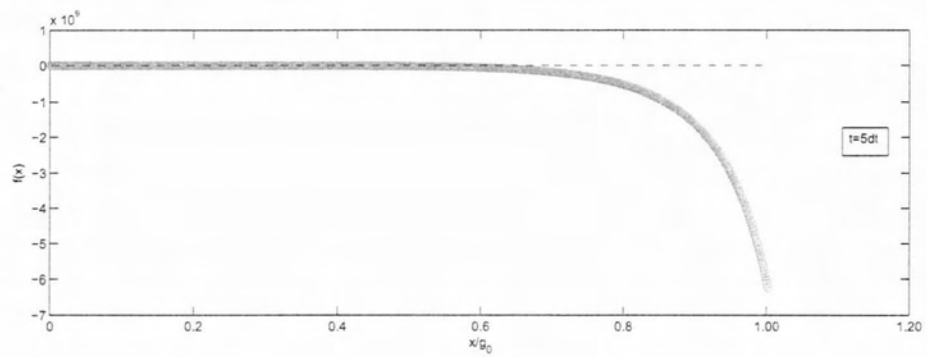
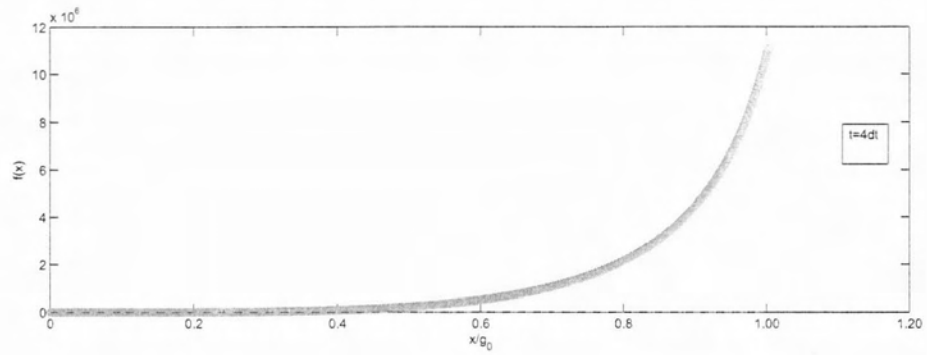
$$\frac{1 - A^2 x^2}{(g_0)^2}$$

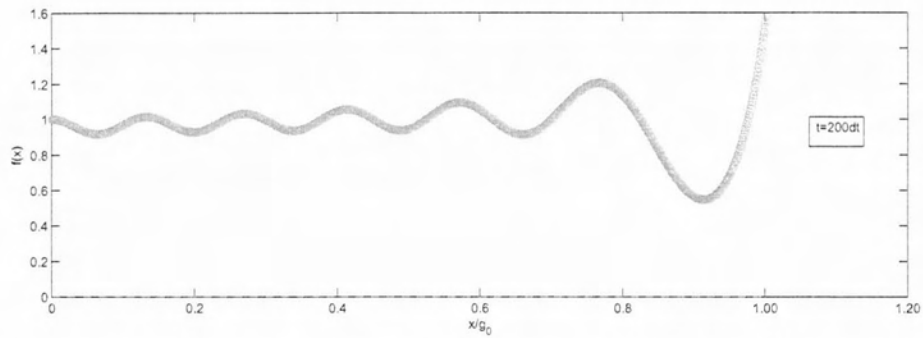
Όπου  $A = 0.11$ ,  $g_0 = 0.3$ .

Οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν είναι οι ίδιες με την προηγούμενη δοκιμή. Τα αποτελέσματα από αυτήν την δοκιμή φαίνονται παρακάτω









Αυτό που παρατηρούμε στα αποτελέσματά μας είναι ότι το πρόβλημα μας παρουσιάζει έντονο δυναμικό χαρακτήρα. Για ενδιάμεσες καταστάσεις τα παραπάνω αποτελέσματα δεν δείχνουν να δημιουργούνται επίμονες ζώνες ολίσθησης (**persistent slip bands**). Τελικά όμως για χρόνο  $t = 200dt$  παρατηρούμε ότι παίρνει ημιτονοειδή μορφή και στα σημεία που παρουσιάζονται τα μέγιστα είναι και τα πιθανά σημεία που θα δημιουργηθούν επίμονες ζώνες ολίσθησης (**persistent slip bands**).

## 5 Θεωρητική ανάλυση του μοντέλου των Puri και Binder

Τα τελευταία χρόνια υπήρξε ένα τεράστιο ενδιαφέρον θεωρητικά αλλά και πειραματικά σχετικά με το πόσο επηρεάζει η επιφάνεια την αλλαγή φάσης ενός υλικού. Η παρουσία της επιφάνειας μπορεί να οδηγήσει σε μία μετατόπιση των τιμών των παραμέτρων σε σχέση με τις τιμές για τις οποίες παρατηρούνται αλλαγές φάσης στο εσωτερικό του υλικού. Το φαινόμενο αυτό μπορεί να παραλληλιστεί με φαινόμενα διαβροχής στην ρευστομηχανική (όπου στην δική μας περίπτωση έχει να κάνει με το κατά πόσο έλκει ή απωθεί η επιφάνεια τα dislocation). Δηλαδή με μία αλλαγή φάσης της (περισσευούμενης) ελεύθερης ενέργειας της επιφάνειας όπου μία διεπαφή μεταξύ δύο συνυπαρχόντων φάσεων αποκολλάται από την επιφάνεια. Λίγα είναι γνωστά σχετικά με την κινητική των εν λόγω φαινομένων τάξης υπό την επίδραση των επιφανειών.

Πρόσφατες μελέτες της κινητικής των μορίων έχουν αποδώσει πολλά στοιχεία που δεν έχουν αναλυθεί σχετικά με την αλληλεπίδραση της αποσύνθεσης και διαβροχής, και σαφώς η λεπτομερής θεωρητική ανάλυση αυτών των φαινομένων είναι πολύ ενδιαφέρουσα. Η μελέτη του Cahn και Hilliard σχετικά με την spinodal αποσύνθεση στο εσωτερικό του υλικού και άλλες μελέτες που έχουν γίνει περιστασιακά για την κινητική ανάπτυξη των στρωμάτων διαβροχής προσπαθούν να ερμηνεύσουν το φαινόμενο. Τελευταία έχουν γίνει μελέτες που έχουν ασχοληθεί με μη συντηρητικές παραμέτρους τάξης αλλά κάτι τέτοιο είναι εκτός του αντικειμένου της παρούσας εργασίας.

Για τη μελέτη των επιφανειακών επιπτώσεων στη δυναμική των διακυμάνσεων της συγκέντρωσης σε μίγματα, η σωστή επιλογή των συνοριακών συνθηκών στην επιφάνεια είναι ζωτικής σημασίας.

Το πρόβλημα έχει αντιμετωπιστεί πρόσφατα θεωρώντας ένα Ising μοντέλο που περιγράφει ένα δυαδικό μίγμα, το οποίο παράγει δυναμικές συνοριακές συνθήκες σε ένα σκληρό τοίχο από την εξίσωση του Kawasaki πράγμα που διαφοροποιεί το πρόβλημα μας σε σχέση με μελέτες που έχουν γίνει μέχρι τώρα. Ένα από τα μοντέλα που ασχολήθηκε ο Puri και Binder και εξετάζεται και στην παρούσα εργασία είναι το **μοντέλο τύπου B** σύμφωνα με την κατάταξη των Hohenberg-Halperin που ισχύει σε διατηρητικές συνθήκες (το σύνολο των ατελειών είναι δεδομένο δηλαδή οι ατέλειες απλά αναδιατάσσονται μέσα στο υλικό και δεν δημιουργούνται νέες εξ αρχής). Ένα από τα χαρακτηριστικά του μοντέλου αυτού είναι η παρουσία κρίσιμης επιβράδυνσης όσον αφορά την χρονική εξέλιξη. Αυτή η ιδιότητα είναι πολύ σημαντική ώστε να μπορέσουμε να κατατάξουμε τα φαινόμενα διαβροχής στην επιφάνεια. Άλλο ένα χαρακτηριστικό του μοντέλου είναι ότι το σύστημα που εξετάζουμε αναπαράσταται γεωμετρικά ως ένα ημίπαιρο χωρίο.

Το μοντέλο των Hohenberg-Halperin ισχύει σε ένα δυαδικό μίγμα που αποτελείται από δύο είδη ατόμων A και B (είναι ανάλογο του Ising-σιδηρομαγνητισμού). Κάτω από το κρίσιμο σημείο θερμοκρασίας  $T < T_c$ , η φάση του μίγματος χωρίζεται σε μία A-ισχυρή και μία A-ασθενή φάση. Η εξίσωση του δυναμικού μοντέλου για το σύστημα είναι μια μη γραμμική Langevin στοχαστική διαφορική εξίσωση

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) + \zeta(\vec{r}, t)$$

όπου η παράμετρος τάξης  $\psi = c(\vec{r}, t)$  υποδηλώνει την τοπική συγκέντρωση σε ένα από τα είδη ατόμων,  $\vec{j}(\vec{r})$  συμβολίζει την διάχυση μεταξύ των ατόμων A και B:

$$\vec{j}(\vec{r}) = -M \nabla \frac{\delta F}{\delta c(\vec{r})}$$

όπου M είναι η κινητικότητα. Το τοπικό χημικό δυναμικό είναι

$$\mu(\vec{r}) = \frac{\delta F}{\delta c(\vec{r})}$$

Η Ginzburg-Landau ελεύθερη ενέργεια  $F\{c\}$  συνδέεται με την ελεύθερη ενέργεια F

$$F\{c\} = \int d\vec{r} \left\{ \frac{1}{2} K |\nabla c|^2 + f(c) \right\}$$

όπου όπως έχει υποθεθεί ότι η  $c(\vec{r})$  περιέχει μόνο την χωρική διακύμανση

$$f(c) = -\frac{1}{2} r c^2 + \frac{u}{4} c^4$$

όπου η σταθερά  $r > 0$  για  $T < T_c$ . Η ίδια συνάρτηση F της ελεύθερης ενέργειας είχε εισαχθεί από τους Cahn και Hilliard στη μελέτη για μετασταθείς φάσεις. Ο όρος συσχέτισης  $\zeta$  ορίζεται από θεωρίες ότι έχει Gaussian κατανομή με μέση τιμή

$$\langle \zeta(\vec{r}, t) \rangle = 0$$

και συντελεστή συσχέτισης

$$\langle \zeta(\vec{r}, t) \zeta(\vec{r}', t') \rangle = -2k_B T M \nabla^2 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t')$$

Από τις παραπάνω εξισώσεις προκύπτει η μη γραμμική εξίσωση διάχυσης.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left\{ -K \nabla^2 c + \frac{\partial f}{\partial c} \right\} + \zeta$$

όπου τελικά προκύπτει η

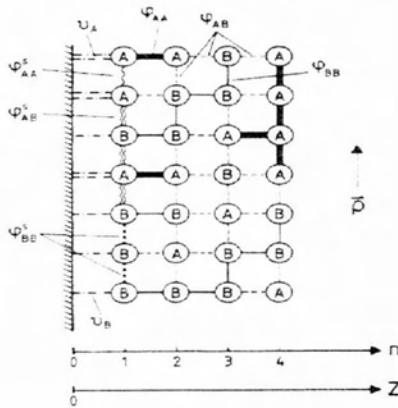
$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \{(-K \nabla^2 - r)c + uc^3\} + \zeta$$

Το μοντέλο αυτό είναι γνωστό ως μοντέλο B και είναι ένα συνεχές μοντέλο ανάλογο του Ising όπου δύο γειτονικά άτομα A και B επιτρέπεται να αλλάξουν θέσεις μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα με κάποιες συγκεκριμένες πιθανότητες μετάβασης, σύμφωνα και με το μοντέλο Kawasaki.

Το μοντέλο που ασχολείται και η παρούσα εργασία περιγράφει ένα δυαδικό μίγμα (AB), όπου A και B είναι οι ατέλειες με αντίθετα διανύσματα Burgers σε επαφή με μια επιφάνεια. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατελειών εμφανίζονται κατά ζεύγη  $\varphi_{AA}, \varphi_{BB}, \varphi_{AB}$  σε απόσταση  $r_i, r_j$  (c η συγκέντρωση των ατελειών τύπου A ή B). Η Hamiltonian εξίσωση είναι

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i \neq j} [c_i c_j \varphi_{AA}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + c_i (1 - c_j) \varphi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \\ & + (1 - c_i)(1 - c_j) \varphi_{BB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)] \\ & + \sum_i [u_A(\mathbf{r}_i) c_i + u_B(\mathbf{r}_i)(1 - c_i)] \end{aligned}$$

και  $u_{A(r_i)}, u_{B(r_i)}$  είναι οι δυνάμεις που ασκούνται στα A και B άτομα λόγω της ύπαρξης σκληρής επιφάνειας στο  $z = 0$ . Στην περίπτωση της ελεύθερης επιφάνειας στο  $z = 0$  είναι φυσικό να θεωρηθεί  $u_{A(r_i)} = 0, u_{B(r_i)} = 0$ . Ωστόσο στη περίπτωση που δεν έχουμε ελεύθερη επιφάνεια αυτό δεν ισχύει. Επίσης λόγω της έλλειψης συμμετρίας στην ελεύθερη επιφάνεια οι αλληλεπιδράσεις κατά ζεύγη  $\varphi_{AA}, \varphi_{BB}, \varphi_{AB}$  δεν εξαρτώνται μόνο από τη σχετική απόσταση  $r_i - r_j$  αλλά και από τα  $r_i, r_j$  ξεχωριστά. Επίσης οι αλληλεπιδράσεις  $\varphi_{AA}^S, \varphi_{BB}^S, \varphi_{AB}^S$  είναι αυτές που ισχύουν διπλά στην ελεύθερη επιφάνεια και διαφέρουν από τις άλλες. Για την απλοποίηση του μοντέλου θεωρήθηκε ότι οι αλληλεπιδράσεις  $\varphi_{AA}, \varphi_{BB}, \varphi_{AB}$  είναι ανεξάρτητες από την τοποθεσία i, j εκτός και αν βρίσκονται στο σύνορο  $z=0$ . Και  $u_{A(r_i)}, u_{B(r_i)}$  διάφορο του μηδενός για  $z=0$ .



Σχήμα 25: Σχηματική απεικόνιση της επιφάνειας ενός δυαδικού (AB) μίγματος στο  $z = 0$  (η σκίαση δείχνει ότι αυτό μπορεί να αντιπροσωπεύει ένα αδρανές σκληρό τοίχο). Διαφορετικά άτομα (απεικονίζονται με κύκλο) και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των γειτονικών (και ο τοίχος), σημειώνονται με διαφορετικούς τύπους γραμμών [2]

Με έναν απλό μετασχηματισμό προκύπτει η κλασική Hamiltonian εξίσωση του Ising . Αναλυτικά ο μετασχηματισμός έχει ως εξής

$$c_i = (1 - S_i)/2$$

$$(S_i = \pm 1)$$

$$J_{ij} = J = \frac{1}{2}\varphi_{AB} - \frac{1}{4}(\varphi_{AA} + \varphi_{AB})$$

$$J_{ij} = J_S = \frac{1}{2}\varphi_{AB}^S - \frac{1}{4}(\varphi_{AA}^S + \varphi_{AB}^S)$$

Όπου  $\mu_A, \mu_B$  το δυναμικό για τα δύο είδη ατελειών αντίστοιχα και το  $\mathcal{H}_0$  είναι μια σταθερά που επηρεάζει μόνο σε ενεργειακή κλίμακα.

Επίσης, το ελαστικό πεδίο στο εσωτερικό του υλικού γίνεται (η σχέση δεν ισχύει στο επίπεδο της επιφάνειας)

$$H = \frac{1}{2}((\mu_B - \mu_A) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} (\varphi_{AA} + \varphi_{AB}))$$

$$H + H_1 = \frac{1}{2}(\mu_B - \mu_A + u_B - u_A) + \frac{1}{2} \left[ \sum_{\substack{i(\neq j) \\ j \in 1st\ layer}} \varphi_{AA}^S - \varphi_{BB}^S + \sum_{j \in 2nd\ layer} \varphi_{AA} - \varphi_{BB} \right]$$

Τελικά η **Hamiltonian εξίσωση** του **Ising** είναι

$$\mathcal{H} - \sum_i c_i \mu_A - \sum_i (1 - c_i) \mu_B = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i - H_1 \sum_{i \in 1st\ layer} S_i + \mathcal{H}_0$$

Η Hamiltonian του μοντέλου Ising δεν εκφράζει από μόνη της καμία δυναμική εξέλιξη. Η μικροσκοπική ανάλυση της χρονικής εξέλιξης μιας δεδομένης διάταξης ατόμων ή spins βασίζεται στο γεγονός ότι τα άτομα ή τα spins έχουν να ξεπεράσουν φραγμούς δυναμικού ώστε να ανταλλάξουν θέσεις ή spins. Για να μπορέσει να πραγματοποιηθεί αυτή η ανταλλαγή η επιπλέον ενέργεια που χρειάζεται προσφέρεται από την θερμική ενέργεια των φωνονίων τα οποία υποθέτουμε ότι αποτελούν ένα θερμικό λουτρό σε θερμοκρασία  $T$  όπου το σύστημα έχει καταλήξει. Σε αυτή την περίπτωση η χρονική εξέλιξη μιας κατάστασης περιγράφεται από μια Markovian εξίσωση για την κατανομή πιθανοτήτων  $P(\{\sigma\}, t)$

$$\frac{d}{dt} [P(\{\sigma\}, t)] = -P(\{\sigma\}, t) \sum_{\{\sigma'\}} W(\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma'\}) + \sum_{\{\sigma'\}} W(\{\sigma'\} \rightarrow \{\sigma\}) P(\{\sigma'\}, t)$$

όπου  $W(\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma'\})$  είναι η πιθανότητα μεταφοράς από το  $\{\sigma\}$  στο  $\{\sigma'\}$  όπου σύμφωνα με το μοντέλο του Kawasaki η αλληλεπίδραση ισχύει μόνο μεταξύ γειτονικών spins. Έτσι με αυτόν το τρόπο εισήχθη ο δυναμικός χαρακτήρας στο μοντέλο και λόγω της ύπαρξης μοριακής κινητικότητας, μετέτρεψε την εξίσωση σε μια μερική διαφορική εξίσωση τέταρτης τάξης η οποία ισχύει στο εσωτερικό του υλικού (η εξίσωση αυτή είναι όμοια με την εξίσωση διάχυσης Cahn-Hilliard).

$$2\tau_s \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} = -\nabla^2 \left[ \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right) \psi(z, t) - \frac{1}{3} \psi^3(z, t) + \frac{J}{T} \nabla^2 \psi(z, t) \right] \quad (z > 0) \quad (9)$$

όπου  $\psi(z, t)$  είναι το συνεχές ανάλογο του μέσου όρου των spin σε χρόνο  $t$  και  $\tau_s$  είναι η βασική παράμετρος της χρονικής κλίμακας του μοντέλου η οποία εξαρτάται ισχυρά από την θερμοκρασία. Στην εξίσωση αυτή η απόσταση του πλέγματος έχει ληφθεί ως μοναδιαία, η συγκέντρωση στο εσωτερικό του υλικού είναι  $c_B^{crit} = \frac{1}{2}$  και η θερμοκρασία  $T$  κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$  είναι  $T_c = qJ/k_B$  όπου  $q$  είναι ο αριθμός συναρμογής (το  $J$  αντιπροσωπεύει την αλληλεπίδραση μεταξύ των spin και  $k_B$  είναι η σταθερά του Boltzmann). Φυσικά, ο λόγος για να εξεταστεί η κρίσιμη περιοχή είναι ότι το χαρακτηριστικό μέγεθος του προβλήματος είναι πολύ μεγαλύτερο από την απόσταση του πλέγματος.

Η παραπάνω εξίσωση είναι μια διαφορική εξίσωση τέταρτης τάξης ως προς  $\psi$  και έτσι χρειάζονται 4 συνοριακές συνθήκες. Επειδή το μοντέλο αναφέρεται στον ημιάπειρο χώρο, για  $z$  τείνοντας στο άπειρο το  $\psi$  είναι μηδέν, ενώ στην επιφάνεια ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις.

$$2\tau_s \frac{\partial \psi(z=0, t)}{\partial t} = \frac{H_1}{T} + \frac{J}{T} \left[ (q-2) \frac{J_s}{T} - (q-1) \right] \psi(z=0, t) - \left[ \frac{T_c}{T} - 1 - \frac{J}{T} \right] \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} - \frac{1}{2} \left[ \frac{T_c}{T} - 1 + \frac{J}{T} \right] \frac{\partial^2 \psi(z, t)}{\partial z^2} \Big|_{z=0} - \frac{1}{6} \left[ \frac{T_c}{T} - 1 + \frac{5J}{T} \right] \frac{\partial^3 \psi(z, t)}{\partial z^3} \Big|_{z=0} \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right) \psi(z, t) - \frac{1}{3} \psi^3(z, t) + \frac{J}{T} \frac{\partial^2 \psi(z, t)}{\partial z^2} \right] \Big|_{z=0} = 0 \quad (11)$$

Η εξίσωση (11) περιγράφει απλώς το γεγονός ότι η συγκέντρωση τρέχουσα προς την κατεύθυνση κάθετα προς την επιφάνεια πρέπει να μηδενιστεί για  $z = 0$ , η οποία ενεργεί ως ένα αδιαπέραστο τείχος. Ενώ αυτή η εξίσωση μπορεί



να εύκολα να τεκμηριωθεί, η εξίσωση (10), έχει το μεγαλύτερο ενδιαφέρον, δεδομένου ότι χαρακτηρίζει τα αποτελέσματα της επιφάνειας, ως συνάρτηση των εξής παραμέτρων:

- ( $J_s$  διάφορο του  $J$ )
- του επιφανειακού πεδίου  $H_1$
- των μονόπλευρων κλίσεων λόγω της απουσίας του υλικού  $-z$  κατεύθυνση

Επειδή αυτοί οι όροι δεν είναι όροι διάχυσης αλλά απλού χαλαρωτικού τύπου είναι σαφές ότι η συγκεκριμένη συνθηριακή συνθήκη έχει ως αποτέλεσμα να οδηγεί ραγδαία την τοπική παράμετρο τάξης της επιφάνειας σε μία τιμή που καθορίζεται απο την στατική ισοροπία στην επιφάνεια . Έχουμε περιορίσει πλέον την προσοχή μας σε  $T < T_c$ , (όπου το ομοιογενές μίγμα είναι θερμοδυναμικά ασταθές) και εισάγουμε μία αλλαγή στην κλίμακα των παραμέτρων όσον αφορά το εσωτερικό του υλικού με το μήκος συσχέτισης  $\xi_b$

$$\xi_b = [2q(1 - T/T_c)]^{-1/2}$$

$$h_1 = \frac{4H_1}{\sqrt{3T}} (T/T_c)^{3/2} (2q)^{3/2} \xi_b^5$$

$$g = 8 \left[ (q - 2) \frac{J_s}{J} - (q - 1) \right] \xi_b^4$$

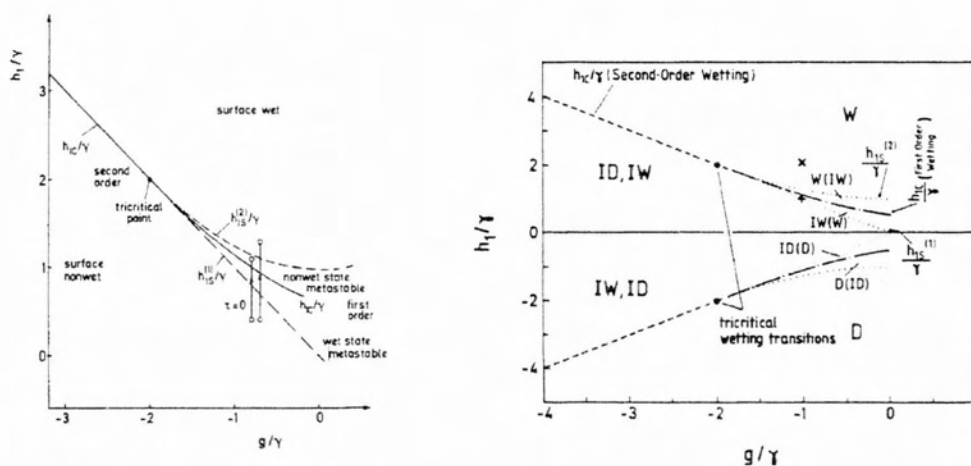
$$\gamma = 4\xi_b^3$$

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \text{sgn}(T_c - T) \phi(x, t) - \phi^3(x, t) + \frac{1}{2} \partial^2 \phi(x, t) \partial x^2 \right] (x > 0)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(0, t)}{\partial t} = h_1 + g\phi(0, t) + \gamma \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} & - \left( \frac{\gamma}{4} \right)^{2/3} \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{x=0} \\ & - \frac{5}{6} \left( \frac{\gamma}{4} \right)^{1/3} \frac{\partial^3 \phi(x, t)}{\partial x^3} \Big|_{x=0} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \phi(x, t) - \phi(x, t)^3 + \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \right] \Big|_{x=0} = 0$$

Η αλλαγή κλίμακας του χρόνου εκφράζει ακριβώς την κρίσιμη επιβράδυνση του μοντέλου B στη οποία αναφερθήκαμε προηγουμένως. Αυτό δείχνει ότι το rescaling έχει επιρροή στη εξίσωση στο εσωτερικό του υλικού όχι μόνο στο ότι αδιαστατοποιεί την εξίσωση αλλά και ότι το εσωτερικό του υλικού είναι απαλλαγμένο από οποιαδήποτε παράμετρο του συστήματος. Τα  $h_1$ ,  $g$ ,  $\gamma$  που εμφανίζονται στην πρώτη συνοριακή συνθήκη, συνδέονται με το αν έχουμε φαινόμενο διαβροχής ή όχι δηλαδή στην περίπτωση μας αν έλκονται τα dislocations από την επιφάνεια ή απωθούνται.



Σχήμα 26: Τα διαγράμματα παρουσιάζουν την αλλαγή φάσης ενός υλικού[2][8]

Στα παραπάνω διάγραμμα παρουσιάζεται η αλλαγή φάσης ενός υλικού. Αρχικά να αναφέρουμε ότι υπάρχουν τέσσερις καταστάσεις, wet (W), incompletely wet (IW), dry (D), incompletely dry (ID). Το διάγραμμα είναι συμμετρικό ως προς τον οριζόντιο άξονα  $h_1/\gamma = 0$  και χωρίζει την wet από την dry κατάσταση. Για  $g/\gamma < -2$  η μετάβαση είναι μετάβαση διαβροχής δεύτερης τάξης, στο σημείο  $g_t/\gamma = -2$  και  $h_{1t}/\gamma = \pm 2$  είναι το κρίσιμο σημείο διαβροχής. Για  $g/\gamma > 2$  η μετάβαση διαβροχής είναι πρώτης τάξης, επίσης όπως φαίνεται στο διάγραμμα υπάρχουν και στις δύο φάσεις (wet, dry) ευθεία γραμμή ( $h_{1s}^{(1)}/\gamma = -g/\gamma$ ) και η παραβολική  $h_{1s}^{(2)}/\gamma = 1 + (g/2\gamma)^2$ . Μεταξύ της παραβολικής και της διακεκομμένης ευθείας υπάρχει nonwet μετασταθής κατάσταση, ενώ μεταξύ της διακεκομμένης και της ευθείας υπάρχει wet μετασταθής κατάσταση. Οι λόγοι  $h_1/\gamma$  και  $g/\gamma$  θα καθορίσουν και στην ανάλυση που κάνουμε παρακάτω σε ποια περίπτωση ανήκει η επιφάνεια η οποία εξετάζουμε.

## 6 Αριθμητική ανάλυση του μοντέλου των Puri και Binder

Αυτό το κεφάλαιο σκοπό έχει να μας παρουσιάσει την επίδραση της επιφάνειας σε ένα μίγμα (binary mixture AB), δηλαδή πώς τα στοιχεία είτε από το A είτε το B έλκονται ή απωθούνται από την επιφάνεια (ανάλογα για τις κρυσταλλικές ατέλειες έλκονται ή απωθούνται από την επιφάνεια). Το πώς θα επιδράσει η επιφάνεια στο εσωτερικό του υλικού εξαρτάται από το αν η θερμοκρασία που υπάρχει στο εσωτερικό του είναι πάνω ή κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$ . Επίσης η θερμοκρασία στο εσωτερικό του υλικού αλλά και η κρίσιμη θερμοκρασία που έχει κάθε μέταλλο είναι τα στοιχεία που θα καθορίσουν το αν η επιφάνεια έλκει τις ατέλειες ή τις απωθεί.

Όπως γνωρίζουμε η κρίσιμη θερμοκρασία γενικά παίζει καθοριστικό ρόλο σε μετάβαση από κατάσταση αταξίας σε κατάσταση τάξης. Το ίδιο συμβαίνει και με την παρουσία επιφάνειας. Ένα φαινόμενο το οποίο μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε για να καταλάβουμε τι περιμένουμε να συμβεί εξαιτίας της ύπαρξης επιφάνειας είναι αυτο του σιδηρομαγνητισμού. Έτσι περιμένουμε ότι όταν ένας σιδηρομαγνήτης είναι σε επαφή με μία επιφάνεια τότε η επιφάνεια μπορεί να ταξινομήσει τα spins σε μία συγκεκριμένη κατεύθυνση, όταν  $T > T_c$  στην επιφάνεια τείνει να δημιουργηθεί μαγνητικό πεδίο όπου στο εσωτερικό του υλικού μηδενίζεται. Αντίθετα στην περίπτωση που  $T < T_c$  τότε στο εσωτερικό του υλικού δημιουργούνται αυθόρμητα τομείς μαγνήτισης με αποτέλεσμα να υπάρξει μια ενδιαφέρουσα αλληλεπίδραση μεταξύ επιφάνειας και εσωτερικού. Παρόλο που επιφανειακά μαγνητικά πεδία δύσκολα εμφανίζονται στην πράξη δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι το μοντέλο Ising είναι ισοδύναμο με το μοντέλο πλέγματος αερίου ενός ρευστού και τότε το αντίστοιχο των επιφανειακών μαγνητικών πεδίων είναι η δυναμική ενέργεια μεταξύ τοιχώματος (wall) και των απορροφούμενων ατόμων του αερίου.

Τώρα όσο αφορά τα δυαδικά μίγματα (AB) σε επαφή με μία επιφάνεια τα οποία περιγράφουν την συμπεριφορά των dislocation έχουμε να πούμε τα εξής : η επιφάνεια συνήθως παρουσιάζει μια προτιμητέα έλξη για κάποια από τα δύο συστατικά, το οποίο οδηγεί στη δημιουργία ενός στρώματος από το συστατικό αυτό στην επιφάνεια. Αυτό το φαινόμενο είναι πολύ γνωστό στη ρευστομηχανική στη περίπτωση διαβροχής. Για  $T < T_c$  όπου είναι η περίπτωση που θα ασχοληθούμε, το εσωτερικό του υλικού είναι αυθόρμητα ασταθές και διασπάται μέσω του γνωστού μηχανισμού spinodal διάσπασης σε A πλούσιες και B πλούσιες περιοχές. Κοντά στην επιφάνεια υπάρχει μια αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο μηχανισμών δηλαδή του μηχανισμού εμπλουτισμού της επιφάνειας και του μηχανισμού spinodal διάσπασης. Αυτή η αλληλεπίδραση έχει ως αποτέλεσμα επιφανειακά προσανατολισμένα κύμα-

τα spinodal διάσπασης που προέρχονται από την επιφάνεια και διαδίδονται στο εσωτερικό του υλικού [1][2].

Στην παρούσα εργασία εξετάζεται η περίπτωση που η θερμοκρασία είναι κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία  $T < T_c$ .

Η εξίσωση των Puri και Binder είναι

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} [\text{sgn}(T_c - T)f(x,t) - f^3(x,t) + \frac{1}{2}\partial^2 f(x,t)\partial x^2] \quad (x > 0) \quad (12)$$

Επειδή όπως είπαμε παραπάνω στην παρούσα εργασία εξετάζουμε την περίπτωση όπου  $T < T_c$  ισχύει  $\text{sgn}(T_c - T) = +1$ .

Η αρχική συνθήκη (initial condition) της διαφορικής εξίσωσης είναι

$$f(x,0) = 0 \quad (13)$$

η συνθήκη αυτή ισχύει μόνο στο εσωτερικό του υλικού.

Οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος είναι

$$\frac{\partial f(0,t)}{\partial t} = h_1 + gf(0,t) + \gamma \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} - \left(\frac{\gamma}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=0} - \frac{5}{6} \left(\frac{\gamma}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\partial^3 f(x,t)}{\partial x^3} \Big|_{x=0} \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} [f(x,t) - f(x,t)^3 + \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}] \Big|_{x=0} = 0 \quad (15)$$

$$h_1 = \frac{4H_1}{\sqrt{3T}} (T/T_c)^{3/2} (2q)^{3/2} \xi_b^5$$

$$g = 8 \left[ (q-2) \frac{J_s}{J} - (q-1) \right] \xi_b^4$$

$$\gamma = 4\xi_b^3$$

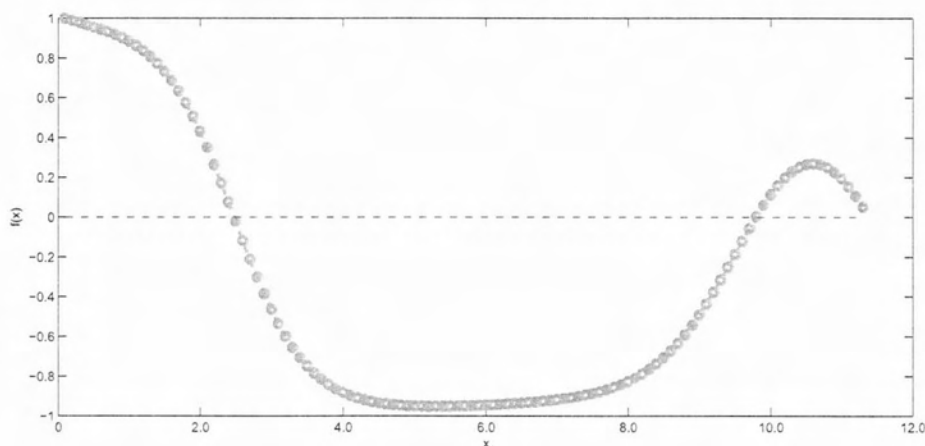
Επειδή η περίπτωση που εξετάζουμε είναι στέρεη κατάσταση (**μέταλλα** και όχι ρευστά στα οποία αναφέρεται γενικά το μοντέλο) η διαφορά μεταξύ wet και nonwet είναι πολύ μικρή. Στην περιπτώσή μας αυτό που μας ενδιαφέρει είναι κατά πόσο η επιφάνεια έλκει τα dislocation (wet) και κατά πόσο τα απωθεί

(dry). Μερικές περιπτώσεις που έλκονται τα dislocation από την επιφάνεια είναι για παράδειγμα όταν δεν υπάρχει άλλο υλικό που να συνορεύει με το υλικό που εξετάζουμε, δηλαδή υπάρχει αέρας. Μια δεύτερη περίπτωση είναι όταν η επιφάνεια του υλικού είναι πιο μαλακή (soft) από το εσωτερικό του. Αντίθετα τα dislocation απωθούνται από την επιφάνεια όταν σε αυτήν υπάρχει ένα οξείδιο. Το οξείδιο έχει μεγαλύτερο μέτρο ελαστικότητας από το μέταλλο και αυτό έχει ως αποτέλεσμα να απωθεί τα dislocation από την επιφάνεια και να τα σπρώχνει προς το εσωτερικό του υλικού.

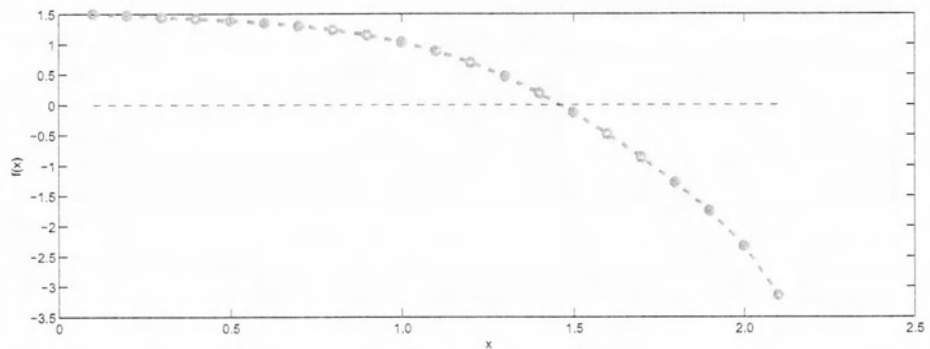
Ένας άλλος παράγοντας που επηρεάζει την επιφάνεια είναι το πόσο καλά λειασμένη είναι. Με το να λειάνουμε καλά την επιφάνεια απομακρύνουμε τυχόν μικρορωγμές και έτσι προστατεύουμε το υλικό μας από το να προχωρήσουν οι ατέλειες προς το εσωτερικό του υλικού.

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από την αριθμητική ανάλυση του προβλήματος ανάλογα με την συνθήκες που επικρατούν στην επιφάνεια. Το διάγραμμα (σχήμα 26) μας βοηθάει στο να προσδιορίσουμε τις συνθήκες wet ή dry. Αυτό που παρουσιάζεται στα διαγράμματα είναι η μεταβολή της σχετικής πυκνότητας των ατελειών συναρτήσει της απόστασης από την ελεύθερη επιφάνεια. Επίσης, πρέπει να σημειωθεί ότι εξετάστηκε η σταθερή (steady state) κατάσταση του προβλήματος του Binder, ο λόγος είναι ότι το πρόβλημα που μας ενδιαφέρει είναι η υψίσυχη κόπωση και το φαινόμενο αυτό χρειάζεται πολύ χρόνο για να παρουσιασθούν τα αποτελέσματα που περιγράφουμε.

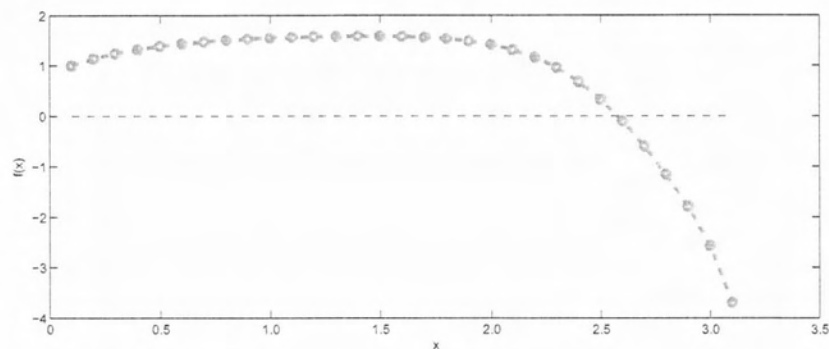
Η πρώτη περίπτωση που εξετάστηκε είναι μία nonwet στατική ισορροπία για  $\gamma = 4$ ,  $g = -4$ ,  $h = 4$ , δηλαδή  $h/\gamma = 1$ ,  $g/\gamma = -1$ .



Έπειτα εξετάσθηκε περίπτωση για  $\gamma = 4$ ,  $g = -4$ ,  $h = 8$ , δηλαδή  $h/\gamma = 2$ ,  $g/\gamma = -1$ , όπου είναι μία wet στατική ισορροπία .



Μια τρίτη περίπτωση είναι για  $\gamma = 4$ ,  $g = -4$ ,  $h = 2$ , δηλαδή  $h/\gamma = 0,5$ ,  $g/\gamma = -1$ , υπάρχει incompletely wet(IW) στατική ισορροπία .



Συγκρίνοντας τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε το πώς επιδρά η επιφάνεια στο εσωτερικό του μετάλλου ανάλογα με τις συνθήκες που υπάρχουν σ' αυτήν. Κρατώντας το λόγο  $g/\gamma = -1$  σταθερό και αλλάζοντας το  $h/\gamma$  εξετάζεται ένα εύρος φάσεων . Αλλάζοντας τις συνθήκες επιφάνειας στο πρώτο διάγραμμα έχουμε μια ενδιάμεση τιμή, στο δεύτερο παρατηρούμε ότι η επιφάνεια έλκει τις ατέλειες προς αυτήν ενώ στο τρίτο οι ατέλειες απωθούνται από την επιφάνεια προς το εσωτερικό του υλικού.

Τα σημεία που παρατηρούνται τα μέγιστα είναι αυτά στα οποία πιθανόν να δημιουργηθούν επίμονες ζώνες ολίσθησης (**persistent slip bands**) άρα και τα σημεία που κινδυνεύουν περισσότερο να δημιουργηθούν ρωγμές. Καταληκτικά οι τρεις παραπάνω περιπτώσεις μας δείχνουν το πώς αλλάζοντας τις συνθήκες που επικρατούν στην επιφάνεια ενός μετάλλου, αλλάζοντας την θερμοκρασία που επικρατεί στο εσωτερικό αυτού, αλλάζουν και οι πιθανές θέσεις συγκέντρωσης ατελειών. Επειδή όπως δείχνουν τα παραπάνω αποτε-



λέσματα οι συνθήκες που επικρατούν στην επιφάνεια παίζουν καθοριστικό ρόλο, έγινε μία προσπάθεια να εξεταστούν και άλλες περιπτώσεις όπου θα φαίνονται στο παράρτημα.

## 7 Συμπεράσματα και προτάσεις για το μέλλον

Το κεντρικό θέμα της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη δύο μοντέλων διάχυσης ατελειών σε μέταλλα που υπόκεινται σε υψίσυχνη κόπωση. Η μελέτη των ατελειών μας ενδιαφέρει γιατί επηρεάζουν σε σημαντικό βαθμό την τελική συμπεριφορά των υλικών. Από την άλλη η κόπωση μας ενδιαφέρει γιατί είναι ένα φαινόμενο που πλήττει τα μέταλλα και έτσι δημιουργούνται ρωγμές. Τα δύο μοντέλα που μελετήθηκαν παρέχουν τη δυνατότητα να προσδιορίσουν τις πιθανές ζώνες ολίσθησης που είναι και οι πιθανές θέσεις δημιουργίας ρωγμής. Το γεγονός αυτό είναι πολύ σημαντικό γιατί αν μπορούν να προσδιοριστούν οι επίμονες ζώνες ολίσθησης τότε θα μπορούν να ληφθούν και τα κατάλληλα μέτρα για την αποφυγή τους. Τα δύο μοντέλα που εξετάστηκαν είναι του **Schrödinger** και των **Binder** και **Puri**.

Το μοντέλο του Schrödinger μας δείχνει πως κατανέμονται οι κρυσταλλικές ατέλειες κυρίως στο εσωτερικό του υλικού. Πολύ σημαντικός παράγοντας για το πώς θα διαταχθούν οι ατέλειες είναι οι συνθήκες στην επιφάνεια του υλικού. Επίσης, όπως φάνηκε και στο κεφάλαιο 4, ένας δεύτερος παράγοντας για την διάταξη των ατελειών είναι η ύπαρξη ή μη δυναμικού πεδίου, όπως είπαμε και στο κεφάλαιο που μελετήθηκε το μοντέλο η ύπαρξη δυναμικού οδηγεί στο να έλκονται οι ατέλειες από τις περιοχές που έχουν δημιουργηθεί επίμονες ζώνες ολίσθησης.

Το δεύτερο μοντέλο που εξετάστηκε είναι των Puri και Binder. Όπως παρατηρήθηκε και στο κεφάλαιο 5, αυτό το μοντέλο μας δείχνει πόσο πολύ μπορούν να επηρεάσουν οι συνθήκες που υπάρχουν στην επιφάνεια του μετάλλου αλλά και πώς η θερμοκρασία που υπάρχει στο υλικό σε σύγκριση με την κρίσιμη θερμοκρασία αυτού. Χρησιμοποιώντας το μοντέλο του Ising που μας δείχνει την σχέση αλληλεπίδρασης των ατελειών σε ένα επιφανειακό πλέγμα και με την βοήθεια της εξίσωσης του Kawasaki που εισάγει τον δυναμικό χαρακτήρα στο μοντέλο και την εξίσωση των Cahn-Hilliard όπου είναι μία εξίσωση διάχυσης καταλήξαμε στην διαφορική εξίσωση των Binder και Puri που μας δείχνει πως διατάσσονται οι ατέλειες ανάλογα με τις συνθήκες που υπάρχουν στην επιφάνεια του υλικού.

Αυτό που αξίζει να σημειωθεί είναι ότι ο σκοπός της μελέτης και των δύο μοντέλων είναι να παρατηρήσουμε πως διατάσσονται οι ατέλειες και ποια είναι τα πιθανά σημεία που θα δημιουργηθούν οι επίμονες ζώνες ολίσθησης άρα ποιο είναι το σημείο που θα δημιουργηθεί ρωγμή. Όπως έγινε αντιληπτό και

από την παραπάνω ανάλυση, οι συνοριακές συνθήκες είναι ένας καθοριστικός παράγοντας για το πού πιθανόν να δημιουργηθεί ρωγμή. Άρα λαμβάνοντας τα κατάλληλα μέτρα όπως για παράδειγμα την καλή λείανση του μετάλλου ή την αποφυγή ύπαρξης κάποιου οξειδίου στην επιφάνεια του υλικού μπορούμε να προστατεύσουμε το μέταλλο από το να προχωρήσουν οι ατέλειες προς το εσωτερικό του.

Μέσα από την παρούσα εργασία, εμφανίζονται αρκετές ιδέες για μελλοντική ανάπτυξη και μελέτη. Μια από αυτές είναι η περαιτέρω μελέτη των συνοριακών συνθηκών γιατί όπως δείχνει κυρίως το δεύτερο μοντέλο, λόγω της μορφής της διαφορικής εξίσωσης δείχνει να έχει μεγάλο "πλούτο" ως προς την ευαισθησία στις συνοριακές συνθήκες. Επίσης, η μορφή των συνοριακών συνθηκών μπορούν περιγράψουν πολλές περιπτώσεις ως προς το πώς πρόκειται να συμπεριφερθούν οι ατέλειες.



## A.1 Περαιτέρω μελέτη συνοριακών συνθηκών

Αυτό το κεφάλαιο σκοπό έχει να παρουσιάσει την ευαισθησία του προβλήματος ως προς τις συνοριακές συνθήκες.

Η εξίσωση των Puri και Binder παραμένει ίδια και για τις τρεις περιπτώσεις.

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} [\text{sgn}(T_c - T)f(x,t) - f^3(x,t) + \frac{1}{2}\partial^2 f(x,t)\partial x^2] \quad (x > 0) \quad (16)$$

Αρχικά έγινε ανάλυση του προβλήματος όχι σε ένα ημίπειρο χώρο αλλά ένα πεπερασμένο που έχει μήκος  $L$  [3].

Η αρχική συνθήκη (initial condition) της διαφορικής εξίσωσης είναι

$$f(x,0) = 0 \quad (17)$$

η συνθήκη αυτή ισχύει μόνο στο εσωτερικό του υλικού.

Στην περίπτωση αυτή οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν είναι οι εξής :

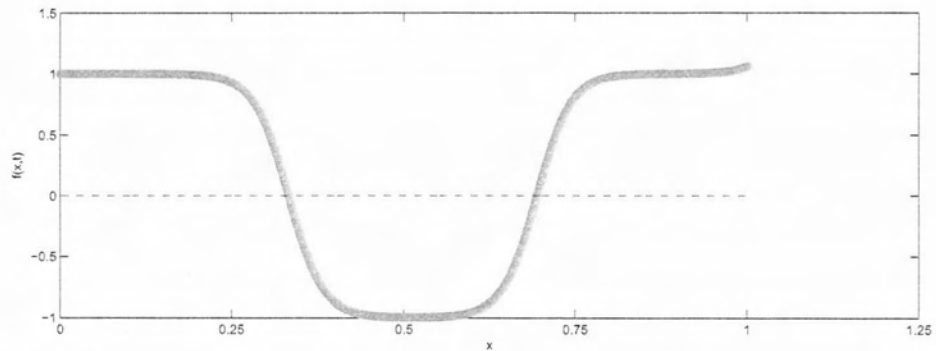
$$\begin{aligned} \frac{\partial f(0,t)}{\partial t} = h_1 + gf(0,t) + \gamma \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} \\ - \left(\frac{\gamma}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=0} - \frac{5}{6} \left(\frac{\gamma}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\partial^3 f(x,t)}{\partial x^3} \Big|_{x=0} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} [f(x,t) - f(x,t)^3 + \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}] \Big|_{x=0} = 0 \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(L,t)}{\partial t} = h_1 + gf(L,t) - \gamma \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=L} \\ - \left(\frac{\gamma}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=L} + \frac{5}{6} \left(\frac{\gamma}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\partial^3 f(x,t)}{\partial x^3} \Big|_{x=L} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} [f(x,t) - f(x,t)^3 + \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}] \Big|_{x=L} = 0 \quad (21)$$

Το αποτέλεσμα απο την αριθμητική ανάλυση είναι το ακόλουθο.



Στην δεύτερη περίπτωση ισχύουν οι ακόλουθες συνοριακές συνθήκες

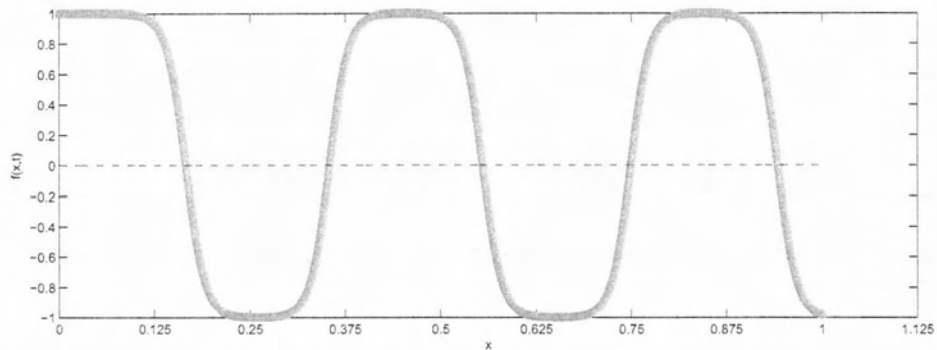
$$\left. \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t)] \right|_{x=0} = 0.001 \quad (22)$$

$$f(0, t) = 1 \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(0, t)}{\partial t} = h_1 + g f(0, t) + \gamma \left. \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} \\ - \left( \frac{\gamma}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \left. \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \right|_{x=0} - \frac{5}{6} \left( \frac{\gamma}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \left. \frac{\partial^3 f(x, t)}{\partial x^3} \right|_{x=0} \end{aligned} \quad (24)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t) - f(x, t)^3 + \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}] \right|_{x=0} = 0 \quad (25)$$

το αποτελέσμα απο την αριθμητική ανάλυση είναι



Τέλος έγινε δοκιμή κάποιων άλλων συνοριακών συνθηκών, οι οποίες είναι:

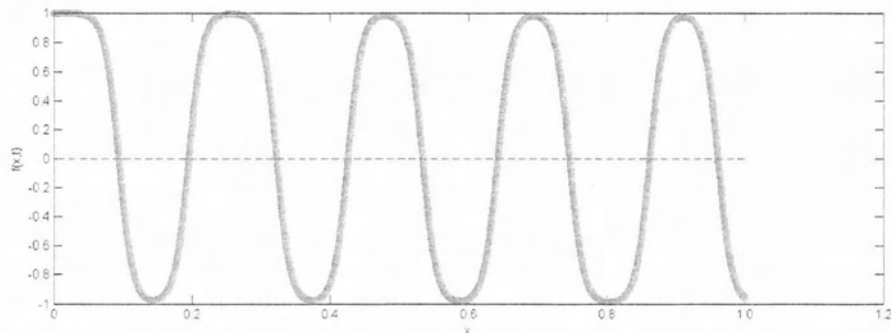
$$\left. \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t)] \right|_{x=0} = -0.00001 \quad (26)$$

$$f(0, t) = 1 \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(0, t)}{\partial t} = h_1 + g f(0, t) + \gamma \left. \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} \\ - \left( \frac{\gamma}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \left. \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \right|_{x=0} - \frac{5}{6} \left( \frac{\gamma}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \left. \frac{\partial^3 f(x, t)}{\partial x^3} \right|_{x=0} \end{aligned} \quad (28)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \left[ f(x, t) - f(x, t)^3 + \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \right] \right|_{x=0} = 0 \quad (29)$$

το αποτελέσμα απο την αριθμητική ανάλυση είναι



## A.2 Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών (finite difference method)

Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών (finite difference methods) είναι από τις παλαιότερες και πλέον συνηθισμένες και διαδεδομένες υπολογιστικές τεχνικές επίλυσης διαφορικών εξισώσεων με πλήθος εφαρμογών στην φυσική, στην μηχανική και σε άλλες επιστήμες. Στο σημείο αυτό θα δώσουμε μία πρώτη σύντομη και γενική περιγραφή της μεθόδου που ισχύει για συνήθεις και μερικές διαφορικές εξισώσεις. Το συνεχές πεδίο ορισμού  $P$ , όπου ορίζεται η μερική διαφορική εξίσωση αντικαθίσταται από ένα πεπερασμένο αριθμό σημείων  $R_h$ , όπου το  $R_h \subseteq R$  και παράλληλα το όριο  $S$  του πεδίου ορισμού αντικαθίσταται από ένα πεπερασμένο αριθμό σημείων  $S_h$  που μπορεί να ανήκουν ή και να μην ανήκουν στο  $R + S$ . Για κάθε σημείο  $P$  του  $R_h$  διατυπώνεται μια αλγεβρική εξίσωση που περιλαμβάνει την τιμή της εξαρτήμενης μεταβλητής στο σημείο  $P$  και σε γειτονικά σημεία του  $P$  εντός των  $R_h$  και  $S_h$ . Η αλγεβρική εξίσωση ονομάζεται εξίσωση πεπερασμένων διαφορών και αποτελεί προσέγγιση της μερικής διαφορικής εξίσωσης στο σημείο  $P$ . Η μεθοδολογία διατύπωσης και η μορφή της αλγεβρικής εξίσωσης εξαρτώνται άμεσα από την εφαρμοζόμενη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών. Εάν υπάρχουν  $N$  σημεία στο  $R_h$  προκύπτει ένα σύστημα  $N$  αλγεβρικών εξισώσεων με  $N$  αγνώστους. Οι αλγεβρικές εξισώσεις που προσεγγίζουν τις μερικές παραγώγους της διαφορικής εξίσωσης προκύπτουν με δύο τρόπους: τη σειρά Taylor και την πολυωνυμική προσέγγιση. Παρακάτω θα δοθούν οι μορφές των πεπερασμένων διαφορών που παίρνουν οι τέσσερις πρώτες τάξεις μερικών παραγώγων.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x)}{\partial x} &= \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} &= \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \\ \frac{\partial^3 f(x)}{\partial x^3} &= \frac{f(x + 2\Delta x) - 3f(x + \Delta x) + 3f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x^3} \\ \frac{\partial^4 f(x)}{\partial x^4} &= \frac{f(x + 2\Delta x) - 4f(x + \Delta x) + 6f(x) - 4f(x - \Delta x) + f(x - 2\Delta x)}{\Delta x^4}\end{aligned}$$

### A.3 Matlab

```
1 function [E]=modelo2(N)
2
3     if(nargin==0)
4         N=100;
5         K=200;
6     end
7
8     N=100;
9     o arithmos tw n epanalhpsevn ws pros thn apostash ...
10        apo thn epifaneia
11
12     h=0.1 diakritopoihsh
13
14     r=(h)^2;
15
16     E1=1;
17     m=4;phase diagram
18     g=-4;phase diagram
19
20     for i=3:N
21         gamma=4;phase diagram
22         k=0.1181;
23         a=1;
24         boundary conditions
25         E(1)=a;
26
27         E0=E(1)-h*(k);
28
29         e=2*E0-E(1)+h^2*(m*(gamma/4)^(-2/3)...
30            +g*(gamma/4)^(-2/3)*E(1)...
31            +k*(gamma*(gamma/4)^(-2/3)...
32            -5*(gamma/4)^(-1/3)*(E(1))^2...
33            +10/6*(gamma/4)^(-1/3));
34         v=E(1)-3*E0+3*e-(h^3)*2*k*(3*(E(1))^2-1);
35
36         E(2)=E0;
37         E(3)=e;
38         E(4)=v;
39
40         P=(E(i+1)-2*E(i)+E(i-1))*2*r;
41         Q=(E(i)^2)*(E(i+1)-2*E(i)+E(i-1));
42         R=E(i)*(E(i+1)-E(i-1))^2;
43         S=-4*E(i+1)+6*E(i)-4*E(i-1)+E(i-2);
44         eksiswsh sto bulk tou ulikou
45         E(i+2)= -2*r^2*0-(P-3*2*r*(Q+0.5*R)+S);
```

```

45     end
46 end

```

```

1     N=111
2     E= modelo2(N);
3     [rows cols]=size(E)
4     x=1:cols;
5     figure(N)
6     plot(x,E,'--go',x,zeros(length(x),1),'--r')

```

```

1 function [E]=modelo1(N,K)
2     if nargin==0
3         N=100;
4         K=200;
5     end
6     o arithmos tw n epanalhpsewn ws pros thn apostash apo thn ...
       epifaneia
7     N=1000;
8     o arithmos tw n epanalhpsewn ws pros ton xrono
9     K=200;
10
11
12     h=10/N; diakritopoihsh
13     r=(h)^2;
14
15     E1=1;
16     E0=1;
17     for i=1,N
18         F(1,i)=0
19         h taxutha arxika einai mhden
20     end
21
22     e=1-h^2;
23     v=1-3*h^2;
24     for j=1:K
25         for i=3:N
26             boundary conditions
27             E(j,1)=1;
28             if(j==1)
29
30                 E(j,2)= -2*r^2*0-2*r*(E(j,1)-2*E0+e)...
31                     +4*E(j,1)-6*E0+4*e-v;
32                 E(j,3)= -2*r^2*0-2*r*(E(j,2)-2*E(j,1)+E0)...
33                     +4*E(j,2)-6*E(j,1)+4*E0-e;
34                 E(j,4)= -2*r^2*0-2*r*(E(j,3)-2*E(j,2)...
35                     +E(j,1))+4*E(j,3)-6*E(j,2)+4*E(j,1)-E0;

```

```

36     E(j,i+2)= 0;
37     else
38     e=1+2*(h^2)*(exp(-(j)*dt)-1);
39     v=1+6*(h^2)*(exp(-(j)*dt)-1);
40     E(j,2)= -2*r^2*0-2*r*(E(j,1)-2*E0+e)...
41             +4*E(j,1)-6*E0+4*e-v;
42     E(j,3)= -2*r^2*F(j,1)-2*r*(E(j,2)...
43             -2*E(j,1)+E0)...
44             +4*E(j,2)-6*E(j,1)+4*E0-e;
45     E(j,4)= -2*r^2*F(j,2)-2*r*(E(j,3)...
46             -2*E(j,2)+E(j,1))...
47             +4*E(j,3)-6*E(j,2)+4*E(j,1)-E0;
48     eksiswsh sto bulk tou ulikou
49     E(j,i+2)= -2*r^2*F(j,i)-2*r*(E(j,i+1)...
50             -2*E(j,i)+E(j,i-1))...
51             +4*E(j,i+1)-6*E(j,i)...
52             +4*E(j,i-1)-E(j,i-2);
53     end
54
55     end
56     for i=1:N
57     h taxuthta
58     if(j==1)
59     F(j+1,i)=0;
60     else
61     F(j+1,i)=(E(j,i)-E(j-1,i))/5;
62     end
63     end
64     end
65
66 end

```

```

1 N=1000;
2 K=200;
3 E= modelo1(N,K);
4 [rows cols]=size(E);
5 x=1:cols;
6 for a=1:rows
7     if (a==1 || a==K/100 || a==K/100+1 || a==K/100+2 || ...
8         a==K/100+3 || a==20 || a==50 || a==100 || a==K )
9         figure(a)
10        plot(x,E(a,:) , '--go', x, zeros(length(x),1), '--r');
11    end
12 end

```

## Αναφορές

- [1] Sanjay Puri\* and Kurt Binder "Surface-directed spinodal decomposition: Phenomenology and numerical results", 46(8), October 1992.
- [2] Sanjay Puri\* and Kurt Binder "Surface effects on spinodal decomposition in binary mixtures and the interplay with wetting phenomena ", 49(6), June 1994.
- [3] Sanjay Puri\* and Kurt Binder "Surface-Directed Spinodal Decomposition in a Thin-Film Geometry: A Computer Simulation", 77, March 24, 1994.
- [4] H.L. Frisch\* and Kurt Binder "Dynamics of surface enrichment: a theory based on the Kawasaki spin-exchange model in the presence of a wall", Z. Phys. B 84, 403-408, 1991.
- [5] Robert E. Reed-Hills "Physical Metallurgy Principles", D. VAN NOSTRAND COMPANY NEW YORK CINCINNATI TORONTO LONDON MELBOURNE
- [6] J. D. Gunton, M. San Miguel, and P. S. Sahni, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983), Vol. 8, p. 267.
- [7] J. D. Gunton, M. San Miguel, and P. S. Sahni, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983), Vol. 8, p. 267
- [8] I. Schmidt and K. Binder, "Dynamics of Wetting Transitions: A Time-Dependent Ginzburg-Landau Treatment" I. Z. Phys. B 67, 369-385 (1987)
- [9] Zhilin Li "Finite Diference Methods Basics"
- [10] H. Yang, Z. G. Wang and K. Lu "The early stages of fatigue and evolution of persistent slip bands in a copper single crystal", PHILOSOPHICAL MAGAZINE A 82 (5), August 2001.
- [11] ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑΣ [<http://courseware.mech.ntua.gr/ml26012>]
- [12] [http://en.wikipedia.org/wiki/Burgers\\_vector](http://en.wikipedia.org/wiki/Burgers_vector)
- [13] K. Binder, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983), Vol. 8, p. 1



- [14] <http://en.wikipedia.org/wiki/dislocation>
- [15] "Fifty Years of the Exact solution of the Two-dimensional Ising Model by Onsager" Somendra M. Bhattacharjee and Avinash Khare Institute of Physics, Sachivalaya Marg, Bhubaneswar 751 005, India. (December 11, 2010)
- [16] "An Introduction to the Ising Model" Barry A. Cipra The American Mathematical Monthly, Vol. 94, No. 10. (Dec., 1987), pp. 937-959.
- [17] Kyozi Kawasaki, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M. S. Grenn (Academic, New York, 1972), Vol. 2, p. 443
- [18] "Cahn-Hilliard Kinetics and Spinodal Decomposition in a Difuse System", Tristan S: Ursell Department of Applied Physics California Institute of Technology Pasadena CA 91125,(October, 2007)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ



004000110379

