

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA DINÁMICA DE DISLOCACIONES DISCRETAS: EFECTOS DEL PASO DE TIEMPO DE INTEGRACIÓN

Federico Langhi^a, Alfredo E. Huespe^b, Pablo J. Sánchez^{a,b}, Rafael Weyler^c y Angel Ciarbonetti^a

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

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

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

Palabras Clave: dinámica de dislocaciones discretas, integración temporal, apilamiento de dislocaciones.

Resumen

En esta contribución se presenta una serie de estudios relacionados con la simulación numérica de la dinámica de las dislocaciones discretas (Modelo DD) en un cristal. Se asume estados planos y una escala de longitud microscópica predeterminada. En esa escala, las dislocaciones -sólo de borde- son consideradas como líneas rectas ortogonales al plano de análisis y entendidas como discontinuidades puntuales en el plano. Las dislocaciones, embebidas en un medio elástico, se mueven en una serie de planos preestablecidos. El modelo dinámico considera una serie de efectos de interacción entre dislocaciones, tales como las fuerzas de Peach-Koehler, generación (fuentes puntuales), aniquilación y obstrucción.

El interés específico de este trabajo se centra en la integración temporal de las ecuaciones dinámicas del problema. En particular, se han implementado tres métodos para resolver el apilamiento de las dislocaciones contra un obstáculo. Uno, basado en una técnica propuesta en trabajos previos, y otros dos, basados en el método de la secante y bisección, que son propuestos como una nueva alternativa. Se compara el costo computacional requerido en cada caso.

Finalmente, un tercer estudio corresponde a la simulación numérica de un cristal (2D) con una distribución aleatoria de fuentes y obstáculos a lo largo de un sistema de planos de deslizamiento.