

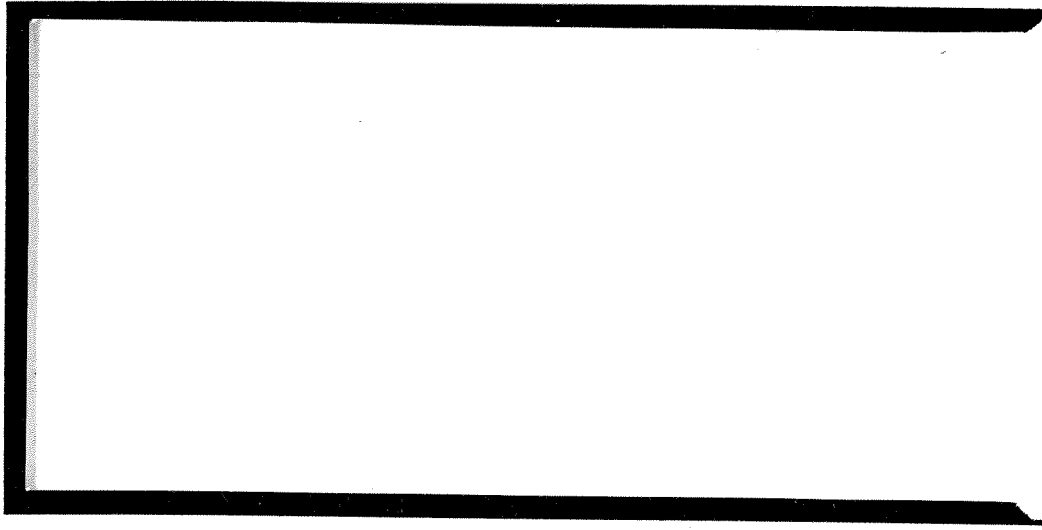


TÜRKİYE BİLİMSEL VE  
TEKNİK ARAŞTIRMA KURUMU

THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL  
RESEARCH COUNCIL OF TURKEY

Değer

1997-423



Temel Bilimler Araştırma Grubu

Basic Sciences Research Grant Committee

**REFRAKTER METALLERDE ARA-İKAME  
ATOMLARLA DİSLOKASYONLARIN  
ETKİLEŞİMLERİNDEN DOĞAN İÇ SÜRTÜNME  
TAYFLARININ BİLGİSAYAR SİMULASYONU**

**PROJE NO : TBAG-1211**

**Prof.Dr. Tarık Ömer OĞURTANI  
Dr. Mehmet Rauf GÜNGÖR**

**Ocak, 1996  
Ankara**

## ÖNSÖZ

Bu Çalışmanın ilk adımlarının atıldığı “Institut für Physik, Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart”ın Direktörü Sayın Profesör Dr. Alfred Seeger'e teşekkür ederiz. Keza, simulasyon araştırma laboratuvarının ilk bilgisayar sisteminin teminini maddi (50000DM) bakımdan destekleyen “Deutsche Gesellschaft für Technische Zusammenarbeit, DGTZ” a ve “METU Özel Araştırma Fonuna, AFP” katkılarından dolayı şükranlarımızı arz ederiz.

Bu çalışmanın büyük çapta oluşumunu, TBAG-1211 projesi kapsamı içerisinde TÜBİTAK desteklemiştir. Zikretmeyi, ve teşekkürlerimizi ayrıcalıkla belirtmeyi görev biliriz.

# İÇİNDEKİLER

Önsöz	ii
İçindekiler	iii
Şekillerin Listesi	v
Öz	viii
Abstract	ix
<b>I. GİRİŞ</b>	<b>1</b>
<b>II. DEKORASYON TAYFININ MAKRO- MODELLENMESİ</b>	<b>4</b>
2.1 MATEMATİK MAKRO-MODEL	4
2.2 NORMALİZASYON TEKNİĞİ	6
<b>III. DİNAMİK İÇ SÜRTÜNME KATSAYISI</b>	<b>10</b>
<b>IV. GÜC SPEKTRUM YOĞUNLUĞU ANALİZİ</b>	<b>11</b>
4.1 METODUN TANITIMI	11
4.2. TEORİK ÖZÜMLEME	13
4.3. UYGULAMA YÖNTEMİ	14
<b>V. SİMULASYON SONUÇLARI VE İRDELEMELER</b>	<b>15</b>
5.1. İÇ SÜRTÜNME KATSAYISI BULGULARI	15
5.2. GÜC KAYIPLARI İLE İLGİLİ SONUÇLAR	31

<b>VI. GENEL DEĞERLENDİRME</b>	<b>37</b>
<b>6.1. KİNK MOBİLİTESİ</b>	<b>37</b>
<b>6.2. SONUÇLAR VE ÖZETLEME</b>	<b>40</b>
<b>REFERANSLAR</b>	<b>41</b>
<b>E K L E R</b>	
<b>EK. A: Komputer Programı; Yaygın Ara-İkame. Paskal</b>	<b>45</b>
<b>“LUMP.PAS”</b>	
<b>EK.B: Komputer Programı; Güc Spektral Analizi</b>	<b>58</b>
<b>“SPECTRUM.PAS”</b>	
<b>EK.C: Komputer Programı;, Dekorasyon I ,Basic</b>	<b>65</b>
<b>“LUMPAM52”</b>	
<b>EK.D: Komputer Programı;, Dekorator II , Basic</b>	<b>69</b>
<b>“LUMPAM53</b>	

## Ş E K İ L L E R İ N B A Ş L I K L A R I

1. Kink zinciri üzerine yerleşik Dekorator atomundan dolayı ortaya çıkan Tayf yarı logaritmik ölçek üzerinde, yaygın ara-ikame atomlara göre normalize edilmiş gevşeme zamanına göre (ters sıcaklık eksenini) plot edilmiştir. Bu şekil, seçilen uygun parametrelere karşısında, dekorator ve yaygın ara-ikame atomlarından sonuçlanan dislokasyon sönüm spektrumunun gayet ayrık olarak ortaya çıkabileceğini kanıtlamaktadır. Parameterler:  $h=0.2$  (kesirsel göç entalpi farkı),  $j_d=1$  (yapışma güc oranı),  $\omega\tau_u^o=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ; [ $F_{bias}=0, F_s=0.1, R_p=1, \underline{L}=100$ ].

2. Kinklerle birlikte sürüklenen dekorator atomlarının, ana yaygın ara-ikame atomlarından dolayı oluşan dislokasyon sönüm (damping) tayfına olan etkisini görmek için, farklı difüzyon entalpi değerleri gösteren dekoratorlar kullanılmış, ve yarı logaritmik ölçek üzerinde İç Sürtünme Katsayısı normalize relaksasyon zamanına, veya ters sıcaklık koordinatına, göre plotlanmıştır. Parameterler:  $\phi_d=1, \omega\tau_u^o=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ; [ $F_{bias}=0, F_s=0.1, R_p=1, \underline{L}=100$ ].

3. Dekorator atomlarından dolayı ortaya çıkan İç Sürtünme Katsayısı mühtelif logaritmik entalpi farkları için, normalize olmuş gevşemis zamanına, veya sıcaklık tersine göre yarı logaritmik ölçek üzerinde plot edilmiştir. Parameterler:  $j_d=1, \omega\tau_u^o=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ; [ $F_{bias}=0, F_s=0.1, R_p=1, \underline{L}=100$ ].

4. Dekorator atomlarından dolayı oluşan tayflara ait İç Sürtünme Katsayıları mühtelif yapışma oranlarına nazarı dikkate alınarak yarı logaritmik skala üzerinde normalize gevşeme zamanına, veya sıcaklık tersine göre plotlanmıştır. Parameterler:  $h=0$ ,  $\omega\tau_u^o=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ; [ $F_{bias}=0$ ,  $F_s=0.1$ ,  $R_p=1$ ,  $\underline{L}=100$ ].

5. Çizgisel kink yoğunluğunun gerek dekorator ve gerekse yaygın ara-ikame atomlarından dolayı oluşan spektruma etkisini incelemek gayesiyle, İç Sürtünme Katsayıları yarı logaritmik ölçek üzerinde normalize edilmiş gevşeme zamanına göre plot edilmiştir. Bu şekil bize yaygın atomlarla ilişkili peyk ve esas tayfların ayrışımını açıkca göstermektedir. Parameterler :  $j_d=100$ , ve  $h=0$ ,  $\omega\tau_u^o=10^{-12}$ ; [ $F_{bias}=0$ ,  $F_s=0.1$ ,  $R_p=1$ ,  $\underline{L}=100$ ].

6. İç Sürtünme Katsayısı, mühtelif gerilim amplitüdüleri için, yarı-logaritmik ölçekde normalize edilmiş Snoek gevşeme zamanına göre plot edilmiştir. Bu şekil bize anormal gerilim amplitüdü (anomalous stress amplitude) bağımlılığı göstermekte, ve yüksek ara-ikame atomları konsentrasyonlarında İç Sürtünme tayfının doyuma ulaşıldığını işaret etmektedir.  $F_s=2$  değerine tekabül eden spektrumda görülen ani sıçrama gerçek olup kinkin atmosferi yırtması olayına karşılık gelmektedir. Parameterler:  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ , ve  $N_k=3$  (Normalize olmuş sistem rezonans frekansı,  $\tilde{\Omega}_A=10$ ).

7. Güç spektral yoğunluğu,  $S(\omega)$  normalize olmuş frekansa,  $\omega$  göre (dış sürücü frekansı) mühtelif gerilim amplitüdülerine,  $F_s$  için plot edilmiştir. Bu şekil sistemin tabii frekansı ( $\tilde{\Omega}_A=20$ ) civarında tek-harmoniklerin jenere olduğunu göstermektedir. Bu çalışmalarda nisbeten mütevazi gerilim amplitüdüleri kullanılmıştır. Çok yüksek gerilim amplitüdülerinde geniş band gürültü spektrumu, ve buna bindirilmiş gayet keskin tayfların ortaya çıktığı gözlenmektedir. Parameterler:  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ ,  $N_k=3$  (data kayıtları  $\tilde{\Omega}_B=1$  değerinde alınmıştır).

8. Güc spektral yoğunluğu,  $S(\omega)$  normalize olmuş frekansa,  $\omega$  göre (dış sürücü frekansı) muhtelif gerilim amplitüdlerine,  $F_s$  için plot edilmiştir. Bu deneylerde çok yüksek sistem tabii frekansı kullanılmıştır, ( $\tilde{\Omega}_A=50$ ). Bu şekil bize tek-harmoniklerin tamamen silindiğini, ve yerlerine geniş band gürültü spektrumlarının oluştuğunu göstermektedir. Parameterler;  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ ,  $N_k=3$  (data  $\tilde{\Omega}_B=1$  deđerinde kayıt edilmiştir).

9. Güc spektral yoğunluğu,  $S(\omega)$  normalize olmuş frekansa,  $\omega$  göre (dış sürücü frekansı) ve mütevazi bir gerilim amplitüdünde,  $F_s = 5$  yarı-logarithmik skala kullanılarak plot edilmiştir. Sistemde kullanılan sürücü frekansı, ( $\tilde{\Omega}_A=50$  çok düşük olup gevşeme modundaki bir çalışmaya tekabül etmektedir. Bu şekil geniş band gürültü spektrumu jenerasyonu yanında, buna bindirilmiş konumda, bazı gayet keskin hat tayflarının ortaya çıktığını göstermektedir. Parameterler;  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ ,  $N_k=3$  ( data kayıtları şu deđerde alınmıştır;  $\Omega_B=1$  ), ve yumuşatma indeksi (the smoothing index) olarak 2 seçilmiştir).



## Ö Z

Paraelastik, yaygın ara-ikame atomlarından oluşan atmosfer içerisinde osilasyonlar yapan, kink zincirinin ortasına yerleştirilmiş, sürünen bir dekoratör atomunu da içeren sistemi temsil eden, eğik differensiyel denklemler takımı, özel bir yeniden normalizasyon ve ölçekleme tekniği kullanılarak sayısal olarak çözülmüştür. Elde edilen iç sürtünme katsayısı iki ayrı spektrumun varlığını, dekoratör ve ana yaygın ikame atomlarına ait, ortaya atmaktadır ki, bunlar sırasıyla lokalize olmuş nokta (sürünen) hata ile paraelastik ara-ikame atmosferlerini oluşturmaktadırlar.

Ayrıca, Çabuk Fürtie Transformasyonu (Fast Fourier Transformation, FFT) ile paraelastik ara-ikame atmosferinde osilasyon yapan kink zincirinin güc spektral analizi yapılmıştır. Gayet keskin bir şekilde temayüz eden, bir gerilim amplitüdünün üstündeki değerlerde, ve dislokasyon iç sürtünme tayfinin düşük sıcaklıktaki bölgesinde, tek-harmonik jenerasyonuna raslanmıştır. Mütevazi gerilim amplitüplerinde ise, sistemin tabii frekansı civarındaki harmoniklerde bir siddetlenme, ve diğerlerinde tamamen bastırılma gözlemlenmiştir. En nihayet, atmosfer yırtma olayına tekabül eden quazi-kaotik kink osilasyonlarına, sistem kuvvetli olarak süper-Snoek rejiminde sürülürken müşahede edilmiştir.

## ABSTRACT

The set of non-linear differential equations which describes the kink chain oscillating in an atmosphere of continuously distributed paraelastic interstitials, and in addition, decorated by a dragging point defect at the midpoint, is solved numerically after introducing a novel scaling and re-normalization procedure. The internal friction coefficient obtained indicates the existence of two separate peaks, the decoration peak and the parent peak, which are directly related to the localized point defect dragging and the paraelastic interstitial atmosphere, respectively.

The power spectrum of a built-in kink chain oscillating in an atmosphere of paraelastic interstitials is investigated numerically by utilizing Fast Fourier Transformation technique. Above a sharply defined value of the strain amplitude, the odd-harmonic generation is observed, only at the low temperature side of the dislocation relaxation peak associated with the interstitials-kink interaction. At moderately high strain amplitudes, a strong enhancement in those harmonics that are situated at the immediate vicinity of the natural resonance frequency of the chain, and the complete depression of the rest is clearly seen. Finally, the onset of quasi-chaotic kink oscillations is detected while system strongly driven in the super-Snoek regime where the atmosphere tearing takes place.

## I. GİRİŞ

Dislokasyon sönümler teorisi ilk olarak Koehler [1] tarafından formüle edilmiş, ve daha sonraları Granato ve Lücke [2] tarafından tam bir matematik modellemeye tabii tutulmuştur. Standard teorilerde dislokasyonlar, gerilmiş ve ataleti olan teller şeklinde tasarlanmış, ve husule gelen sönümler (damping) kafes yapısının viskozitesi ve tellerin boyları cinsinden ifadesini bulmuştur. Koehler-Granato-Lücke (KGL) teorisinde yalnız dislokasyon düğüm (nodal) noktaları değil, dislokasyon üzerinde yığılmış nokta hataları da sıkı bağlayıcı noktalar olarak ele alınmıştır. Simpson, Sosin ve Johnson [4,5] tarafından yapılan elektron radyasyonuna tabii tutulmuş bakır numune deneylerinde, ve keza Seiffert, Simpson ve Sosin'in [6] elektron radyasyonuna uğramış yüksek safiyetteki polikristal halindeki alüminyum parçalarında yapılan gözlemlerde, standard KGL teorisinin geliştirilerek nokta hatalarının dislokasyon osilasyonları esnasında sürüklendikleri nazarı itibare alınması mecburiyeti ortaya çıkmıştır.

Hirth[7] tarafından geniş bir şekilde izah edilen tutarsızlıklar dolayısıyla, KGL teorisi bir hayli tenkite uğramıştır. Seeger [8], bilhassa hacim merkezli kübik (HMK) metallerde Karbon, Azot, Oksijen ve Hidrojen (C, N, O, H) ara-ikame atomları ile ilişkili dislokasyon sönümlerini Kink-Çiftleri modeli ile izah etme yolunu açmıştır. Keza, Hirth [9] HMK dövülmüş demirde hidrojen ara-ikame atomlarının mevcudiyeti ile ortaya çıkan dislokasyon sönümünü, Kink-Çiftleri mekanizması ile açıklama yoluna gitmiştir. Soğuk dövme (cold worked) iç sürtünme tayflarının diğer bir nedenselliği de, geometrik kink zincirlerinin paraelastik ara-ikame atomları ile olan karşılıklı etkileşimleri ile izah edilebilir. Bu mekanizma, Oğurtani ve Seeger [10,11] tarafından bir hayli geliştirilmiştir, ve çok yakınlarda da Oğurtani [12] tarafından anormal amplitud genliklerine bağlı, iç sürtünme tayflarının açıklanmalarında kullanılmıştır.

Burada şu noktayı kuvvetle belirtmekte fayda vardır, şöyle ki; *geometrik kink zinciri* modeli Seeger ve Schiller [13], Suzuki ve Elbaum [14] tarafından ilk olarak ele alınmış, ve daha sonraları Oğurtanı ve Seeger'in [10,11] çalışmaları ile geliştirilmiştir. Matematik makro-yapı bakımından bu teorik model, KGL [15,16], Simpson ve Sosin [17,18] ve en nihayet Schoeck teorilerinde [19] ele alınan *dislokasyon ipliği* modeli ile tam bir uyum içersindedir. Brailsford [20] ve Oğurtanı [21] detaylı çalışmalar sonunda göstermiştir ki, bu iki model arasındaki analitik paralellik, lineer Newtonian viskosite rejimi [22,23] içersinde kalındığı müddetçe aynen geçerliliğini korumaktadır.

Bu araştırma nihai raporunda, dislokasyon hattı üzerinde, ve çok kuvvetli bir şekilde geometrik kinke yapışmış, fakat mobil olan nokta hataların (dekorator atomlarının) tam bir sayısal çözüm işlevi verilecek, ve keza viskosite etkisinin Newtonian olmayan karakteri de nazarı dikkate alınacaktır. Yakın bir geçmişte, çizgisel (lineer) Newtonian rejimde dekorasyon probleminin sürekli ortam (continuum) takribiyet modeli, Oğurtanı [24] tarafından ele alınmış ve analitik olarak incelenmiştir. Şimdiki kademli araştırmacı tarafından, literatürde ilk defa olarak bu tip problemin tam çözümü güçlü Laplace transformasyonu tekniği kullanılarak bulunmuş, ve iç sürtünme katsayısı (internal friction coefficient) ve moduler arıza (modular defect) hesap edilmiştir. Adı geçen çalışmada soğuk işlem tayfinin bilhassa yüksek damping oranlarında, ana-tayf ve dekorasyon-tayfi olarak iki ayrı görüntüye ayrıştığı açıkça grafiksel olarak da gösterilmiştir. Şimdiki araştırmada kullandığımız daneli (discrete) modelde sadece sürtünmenin çizgisel olmayan karakteri değil, ve aynı zamanda sürekli ortam modelinde gözlemlenmesi mümkün olmayan ikinci mertebeden, bazı iç sürtünme davranışları da tetkik edilebilmiştir; mesela kink yoğunluğunun iç sürtünme tepciklerine etkisi gibi.

İkinci bölümde, matematik makro-model ayrıntılı bir şekilde takdim edilecektir. Burada geliştirdiğimiz normalizasyon tekniği ile, malzemenin kendine has sayısal özellikleri yerine, sekiz üniversal parametre takımı ile sistemin bütün dış etkenlere karşı gösterdiği davranışları veya reaksiyonları inceleme imkanı ortaya çıkartılmıştır. Bu tip bir transformasyon kompüter simülasyonu için fevkalade öneme haizdir; böylece, özgün

(specific) bir malzeme veya özgün bir nokta hatalar dizisi ile çalışılacağı yerde, diğer bir deyişle ; bunların kendine özgü özelliklerinin gerçek değerlerini matematik modellemede kullanılacağı yerde, universal parametreleri kullanarak olayın genel davranışı hakkında bir fikir sahibi olmak mümkün olmaktadır.

Özellikle, güç kayıplarını içeren diferensiyel denklemler takımı için geliştirilmiş olduğumuz **Dinamik İç Sürtünme Katsayısı**, veya **Q<sup>-1</sup> faktörü** ifadesini, ve keza bu hususta kullanılan sayısal yöntemi, Bölüm III'de ele almış bulunmaktayız. Kink zincirin cebri osilasyonlar esnasında doğurduğu harmonikler, ve gürültü spektrumları ise, Bölüm IV'de ele alınacaktır. Burada, güç kayıpları spektral yoğunluğunun, Hızlı Fourier Transformasyonu ile hesap edilmesi esas konuyu teşkil edecektir. Coulombik ara etkileşimde bulunan kinklerden müteşekkil zincirin, içersinde bulunduğu Snoek ve/veya Cottrell atmosferinden dolayı maruz kaldığı iç sürtünmeler, ve bunlara ilaveten kink üzerinde lokalize olmuş dekoratör atomlarının etkileri ise, Bölüm.V'de detaylı bir şekilde ele alınacaktır, ve irdelenecektir. Keza, güç spektrumu çalışmalarının sonuçlarıda bu bölümde ayrıntılı olarak sunulacaktır. Bu konuyla ilgili yaptığımız çok geniş ve kapsamlı bilgisayar simulasyon deneyleri bu bölümde sistematik olarak grafikler halinde verilecektir.

Hali hazırda yürütülen bilgisayar simulasyon çalışmaları yalnız geometrik kinkler için değil, ve aynı zamanda termal kinkler için de geçerlidir, ta ki kink çiftlerinin oluşum ve kayboluşum frekansları, dıştan tatbik edilen harmonik uyarıcı gerilim frekansının çok daha üstünde olsun. Diğer bir deyişle, kink-nokta hata etkileşiminden dolayı husule gelen, soğuk plastik deformasyon iç sürtünme tayfları, daima ilişkili oldukları dislokasyonların Gama tayfinin daha yukarısındaki bir sıcaklık derecesinde zuhur edeceklerinden, yukarıda zikredilen şartı tabii olarak sağlamaktadır. Böylece, Seeger teorisindeki kink çiftleri modelinin doğurduğu sonuçlar ve yargılar, şimdiki bilgisayar simulasyonu çalışmasının kapsamı içerisine girmektedir.

## II. DEKORASYON TAYFININ MAKRO- MODELLENMESİ

Hali hazırda kullanacağımız makro-model, matematik yapı bakımından, hacim merkezli kübik metal (HMK) ve alaşımlar için geliştirdiğimiz, mobil ve paraelastik ara-ikame atomları atmosferinde osilasyon yapan geometrik kink zincirinin, kollektif davranışlarından [23,25] esastan esinlenmektedir. İlk etapta, ekstra olarak ilave edilecek lokalize olmuş fakat sürüklenebilen bir nokta hata ile, bu modelin alacağı yapısal değişiklik ele alınacaktır. Daha ilerideki safhalarda, Bölüm. VI.'de ise kompüter simülasyonundan elde edilen sonuçlarla, diğer analitik yarı kantitatif teorilerin ön gördükleri davranışlar karşılaştırılacak, ve en nihayetinde laboratuvar deneyleri ile olan benzerlikleri tartışılacaktır.

### 2.1 MATHEMATİK MAKRO-MODEL

Daha önce yaptığımız analitik çalışmalara [24] ve kompüter simülasyon uğraşlarımıza [23,25] dayanarak aşağıdaki matematik ifadeyi yazabiliriz;

$$N_k \partial_{tt}^2 y^i + B_u \frac{A_u \partial_t y^i}{1 + A_u^2 (\partial_t y^i)^2} + B_d \delta_{id} \frac{A_d \partial_t y^i}{1 + A_d^2 (\partial_t y^i)^2} = b a_k \sigma_r \sin(\alpha x) + \sum_{j \neq i} F(y^i - y^j),$$

$i=2,3,\dots,N_k-1,$  (1)

burada kinkler arasındaki karşılıklı etkileşim kuvveti  $F(y^i - y^j)$ , modifiye edilerek zincirin iki ucundaki kinkler ile nodal noktalar arasındaki bağların güçleri, gerçekçi bir biçimde ele alınabilmesi temin edilmiştir. Bu araştırmamızda, sınır kinkleri ile nodal noktalar arasındaki

etkileşimin Coulombik olduğu varsayımı yapılmıştır, fakat şiddeti serbest olarak bırakılmıştır. Yukarıdaki denklemde,  $M_k$  kinklerin efektif kitlesini,  $y^i$  ise  $i$ 'inci kinkin global koordinatını,  $B_u$  ise kink hareketin maruz kaldığı sürtünme direncini, ara-ikame (yayılmış haldeki) atomlarının oluşturduğu atmosferden dolayı zuhur ettiği kabul edilerek, drag katsayısı olarak vermektedir (Newtonian rejimde). Keza,  $A_u$  sürekli olarak yayılmış ara-ikame atomların, difüzyon esnasında yaptıkları atomik sıçramaların, hız değerlerinin tersine tekabül etmekte, şu ifade  $A_u = \tau_u / a_0$  ile değerlendirilmektedir. Benzer şekilde  $\sigma_r$ , dış gerilim (stress) sisteminin dislokasyonun kayma düzlemindeki makaslama gerilimi bileşkesine karşılık gelmektedir. Burada,  $\tau_u$  Snoek gevşeme zamanıdır.  $b$  ise Burgers vektörünü,  $a_0$  kafes parametresini,  $a_k$  komşu Peierls vadileri arasındaki mesafeyi, ve  $\omega$  ise dış harmonik gerilimlerin frekansını ifade etmektedir.

Kinkler arasında, sadece yakın komşular arasındaki etkileşimi nazarı dikkate alırsak, aşağıdaki denklemler takımını denklem (1)'den hemen elde edebiliriz:

$$N_k \partial_u^2 u_i + B_u \frac{A_u \partial_t u_i}{1 + A_u^2 (\partial_t u_i)^2} + B_d \delta_{id} \frac{A_d \partial_t u_i}{1 + A_d^2 (\partial_t u_i)^2} = F_k \sin(\omega t) + P(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) \cdot \frac{u_{i+1} - u_{i-1} + 2d}{(u_i - u_{i-1} + d)^2 (u_{i+1} - u_i + d)^2}, \quad i=2,3,\dots,N_k-1 \quad (2)$$

$$N_k \partial_u^2 u_1 + B_u \frac{A_u \partial_t u_1}{1 + A_u^2 (\partial_t u_1)^2} = F_k \sin(\omega t) + \frac{P'}{(d' + u_1)^2} - \frac{P}{(d + u_2 - u_1)^2}, \quad (3)$$

$$N_k \partial_u^2 u_N + B_u \frac{A_u \partial_t u_N}{1 + A_u^2 (\partial_t u_N)^2} = F_k \sin(\omega t) - \frac{P'}{(d' - u_N)^2} + \frac{P}{(d + u_N - u_{N-1})^2}, \quad (4)$$

burada  $d$  ve  $d'$ , sırasıyla kinkler arasındaki, ve sınır kinkleri ile düğüm (nodal) bağ noktaları arasındaki, statik denge halindeki mesafeleri göstermektedir.  $P$  ise kinkler arasındaki karşılıklı etkileşimin şiddetini temsil etmekte, ve şu ifade [26-29] ile verilmektedir;

$P = S_o^{el} a_k^2 / 2$ , burada,  $S_o^{el}$  ise dislokasyon hattının elastik enerji kesiminin on logaritmasına [27] tekabül etmektedir.  $P'$  ise benzer şekilde sınır kinkleri ile nodal düğüm noktaları arasındaki karşılıklı etkileşim kuvvetlerinin şiddetini göstermekte, işbu kuvvetlerin ise Coulombik model potansiyel ile ifade edilebileceği varsayımı ele alınmaktadır

## 2.2 NORMALİZASYON TEKNİĞİ

Sırasıyla hemen şimdi sunacağımız normalizasyon transformasyonları kullanarak aşağıda sunduğumuz, tamamen boyutsuz üniversal parametreleri içeren bir differansiyel denklemler takımına erişilmiştir;  $\omega t = \tilde{t}$  (ölçekleme-scaling) ve  $\omega A_u u_i = y$ , (germe-stretching), burada zaman sürücü stress sisteminin frekansına, ve keza deplasmanlar ise yayılmış haldeki ikame atomlarının bir periyottaki sıçrama mesafelerine, göre normalize edilmişler, ve sonuçta:

$$i=2,3,\dots,N_k-1)$$

$$y_i'' = (\tilde{\tau}_u \tilde{\Omega}_A^2 F_s) \sin(\tilde{t}) - (\kappa_u \tilde{\tau}_u \tilde{\Omega}_A^2) \left( \frac{y_i'}{1+y_i'^2} \right) - (\kappa_d \tilde{\tau}_d \tilde{\Omega}_A^2) \left( \frac{y_i'}{1+\zeta_d^2 y_i'^2} \right) + \tilde{\tau}_u \tilde{\Omega}_A^2 F_{Bias} + \left\{ \frac{L}{\pi^2} \tilde{\Omega}_A^2 \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{\underline{d}^2} \right\} \bullet NLF. \quad (5)$$

Burada, NLF çizgisel olmama (nonlinearity) faktörü olup aşağıdaki ifade ile verilebilir:

$$NLF = \frac{\left\{ \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\underline{d}} + 1 \right\}}{\left\{ \frac{(y_{i+1} - y_i)}{\underline{d}} + 1 \right\}^2 \left\{ \frac{(y_i - y_{i-1})}{\underline{d}} + 1 \right\}^2}. \quad (6)$$



Yukarıdaki denklemde  $\underline{L}=L/a$  ölçeklenmiş (scaled) edilmiş dislokasyon parça boyutu,  $\underline{d}=d/a$  denge halindeki normalize edilmiş kink-kink arasındaki mesafe olup, bu da şu ifadeyle değerlendirilebilir;  $\underline{d}=\underline{L}/\{N_k-1+2(P/P)^{1/2}\}$ . Sistemin çizgisel (linear) rejimdeki serbest (normalize edilmiş) osilasyon frekansı  $\tilde{\Omega}_A$  sembolü ile gösterilmektedir. Diğer bir deyişle, normalizasyon harmonik dış kuvvetlerin frekansına nazaran yapılmıştır,  $\tilde{\Omega}_A=\omega^o/\omega$ . Burada şu klasik bağıntı geçerlidir,  $\omega^o=(K_k/M_k)^{1/2}$ .  $K_k$  Coulombik zincirin çizgisel bölgedeki yay sabitesine (stiffness) karşılık gelmekte, ve aşağıdaki denklemle gösterilmektedir:

$$K_k = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{S_o^{el} a_k^2 n_k}{2}. \quad (7)$$

Burada  $n_k$  çizgisel kink yoğunluğu, ve  $F_S$  sürücü kuvvetin amplitüdü olup şöyle verilebilir;  $F_S=F_k/F_{SU}$ ,  $F_{SU}$  statik kuvvet olup kinki bir kafes parametresi kadar deplasmana uğratacak kadar şiddettedir,  $F_{SU}=a_o K_k$ . Benzer şekilde şu eşitliklerde hatırlanması gerekmektedir.  $\kappa_u=B_u/F_{SU}$ , ve  $\kappa_d=B_d/F_{SU}$ ;  $\tilde{\tau}_u = A_u a_o \omega$ , ve  $\tilde{\tau}_d = A_d a_o \omega$ . Burada  $\tau$  sembolleri, sırasıyla, normalize olmuş Snoek gevşeme zamanlarını işaret etmekte, ve yayılmış olan ara-ikame atomlarıyla, lokalize olmuş dekarator atomlarına karşılık gelmektedir. Gene sırasıyla, Kappalar yayılmış ve lokalize olmuş ara-ikame atomlarının, kink-ikame atomu ile kink-kink etkileşimlerinin oranlarını dile getirmektedir. Denklem (5)'de gördüğümüz  $\zeta_d$ , şu ifadeyle tarif edilir,  $\zeta_d=\tau_d/\tau_u$ , ve eğer yayılmış ikame atomları ile dekarasyon atomları arasındaki difüzyon entalpileri çok farklı iseler, kuvvetli olarak sıcaklığa tabiidir. Bizim daha önce sunduğumuz kink viskosite teorisine göre [25] normalize kink drag katsayısı  $B_u$ , mobil ara-ikame atomlarını etkisi ile aşağıdaki ifadeyi geçerli kılar;

$$B_u = \frac{C_o^u a_o^3 a_k^2 C_{44}^2}{3k_B T} \left\{ \frac{1}{9} Tr^2 \lambda \beta_1 + (\lambda_1 - \lambda_2)^2 (\beta_2 - \beta_3) \right\} \quad (8)$$

Burada  $C_o^u$ , başlangıçta uniform olarak dağılmış olan yaygın ara-ikame atomların yoğunluğunu (atomik kesir olarak),  $C_{44}$  elastik sabiteyi,  $\lambda_1$  ve  $\lambda_2$  tetragonal elastik dipol tensörünü,  $\lambda$  'nın paraelastik ara-ikame atomları ile ilişkili (diagonal) köşemli elementlerinin değerini ifade etmektedir. Benzer şekilde,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$ , ve  $\beta_3$  sırasıyla, kinkli dislokasyonun akustik ve optik bağlantı (coupling) sabitelerini göstermektedir. Bu sabiteler referans [23]'de detaylı bir şekilde nümerik olarak hesap edilerek, ve muhtelif vida tipi veya köşe tipi dislokasyonlar için HMK metallerde, elastik anisotropiyi de göz önüne alarak sunulmuştur. Dekorasyon atomları için  $B_d$  benzer bir matematik formül kullanılarak hesap edilebilir, ve burada sadece  $C_o^d$  'yi lokal yoğunluk olarak ele almak yeterli olacaktır. Aksi takdirde sistemin çizgisel olmayan (non-linear) durumu yeniden ele alınması ve viskositenin ona göre hesap edilmesi gerekecektir.

Denklem (5)'de  $F_{Bias}$  dış bayas gerilimini temsil etmekte, ve  $F_S$ 'e göre normalize edilmiş bulunmaktadır. Benzer şekilde,  $\tilde{d} = d\tilde{\tau}_u$ . Makro-sistem, sonuçta şu iç parametrelere (internal) sahip bulunmaktadır;  $\tilde{\Omega}_A$ ,  $\tilde{\tau}_u$ ,  $\tilde{\tau}_d$ ,  $\kappa_u$ ,  $\kappa_d$ ,  $L$ ,  $N_k$  ve  $R_p$ , burada  $R_p = P'/P$ . Keza iki adet daha, dıştan (external) ayarlanabilir parametreleri vardır,  $F_S$  ve  $F_{Bias}$ . Normal Bilgisayar simülasyon çalışmalarında, iç sürtünme katsayısını tek bir parametreye,  $\tilde{\Omega}_u = \kappa_u \tilde{\tau}_u$  göre plotlama yaparız. Bu parametreyi ise yeniden-normalize edilmiş, yayılmış ara-ikame atomlarının gevşeme zamanı olarak tarif edilebiliriz. Böylece sistemin sabit sürücü frekansında, sıcaklığa göre genel davranışını tetkik etmemiz imkanı doğar. Maalesef, bu universal plotlama tekniği, sıcaklık ve frekans değişimleri için ayrı ayrı olarak elde edilen spektrumları aynı baza oturtamamaktadır. Şöyleki; eğer birden fazla çeşitte (more than one type of chemical species) ara-ikame atomları varsa. Bunun da başlıca sebebi, aynı tipten dekorasyon atomlarının iki parametre ile ifade edilebilmeleridir;  $\phi_d = \kappa_d / \kappa_u$  ve  $\zeta_d = \tau_d / \tau_u$ . Burada, ilk oran nisbi olarak dekarator ile yayılmış ikame atomlarının yapışma özelliği göstermekte olup sıcaklığa ve frekansa tabi değildir. Fakat ikinci oran ise, farklı atomik sıçrama entalpilerine sahip olan farklı kimyasal yapıda ara-ikame atomlarının mevcudiyeti durumlarında çok etkili olarak sıcaklıkla değişim

göstermektedir. Bilgisayar simülasyonlarında her zaman hatırlamak gerekmektedir ki bu son parametre yalnız normalize olmuş gevşeme zamanının değil, fakat aynı anda sürücü frekansında zimmi (implicit) bir fonksiyonudur. Bizim çalışmalarımızda bu gerçekler nazarı dikkate alınmıştır.

Daha önceki yayınlarımızda [30] belirttiğimiz veçhile, bilgisayar simülasyonu için diğer bir universal şema daha vardır, şöyleki;

$$y_i'' = \frac{\tilde{\Omega}_u \tilde{\Omega}_A^2 F_B}{2} \sin \tilde{t} - \tilde{\Omega}_u \tilde{\Omega}_A^2 \frac{y_i'}{1+y_i'^2} - \tilde{\Omega}_d \tilde{\Omega}_A^2 \frac{y_i'}{1+\zeta_d^2 y_i'^2} + \frac{\tilde{\Omega}_u \tilde{\Omega}_A^2 F'_{Bias}}{2} + \left( \frac{L^2}{\pi^2} \tilde{\Omega}_A^2 \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{d^2} \right) \cdot NLF. \quad (9)$$

Burada,  $\tilde{\Omega}_d = \kappa_d \tilde{\tau}_d$ ,  $F_B = 2F_S / \kappa_u$ , ve  $F'_{Bias} = 2F'_{Bias} / \kappa_u$ . Bizler genellikle İç Sürtünme Katsayısının, sürücü gerilim amplitüdünden müstakil olduğu, ve düşük frekansların kullanıldığı (relaksasyon modu) deneysel hallerle, ve dislokasyonlarla nokta hataların karşılıklı etkileşimlerinin sıcaklıkla değişimini içeren durumlarla enterese oluruz. Hal böyle olunca, yukarıdaki şema aşağıdaki ilişkileri hatırlayarak rahatlıkla kullanılabilir:  $\tilde{\Omega} = \varphi_d \zeta_d \tilde{\Omega}_u$ , burada  $\zeta_d$  etkin bir biçimde sıcaklığa bağlı bir parametre olup şöyle hesap edilebilir;

$$\zeta_d = \zeta_d^o \left( \frac{\tilde{\Omega}_u}{\tilde{\Omega}_u^o} \right)^\eta \quad (10)$$

Burada,  $\tilde{\Omega}_u^o$  şu ifade ile verilir,  $\kappa_u \omega \tau_u^o$ . Bu da gösterir ki ana tayf (yaygın ara-ikame atomları) ile dekorasyon tayfı arasındaki mesafe, sıcaklık ölçeğinde frekansa tabiidir. Yukarıdaki denklemde  $\eta = \delta Q / Q$ , iki tip ara-ikame atomlarına ait kesirsel aktivasyon enerji

farklarına (logarithmic activation energy difference,  $\delta \text{Ln}Q$ ) tekabül etmektedir. Benzer şekilde,  $\zeta_d^o = \tau_d^o / \tau_u^o$  kesin surette sıcaklığa ve frekansa bağlı olmayan bir parametre olup, biçimsel bilgisayar simulasyonlarında bire eşit olarak alınabilir.

### III. DİNAMİK İÇ SÜRTÜNME KATSAYISI

Referans 30' da iç sürtünme katsayısı , veya  $Q^{-1}$  faktörü, güç kaybı gösteren bir osilatör için geliştirilmiştir, ve ilk olarak kararlı denge halinde sınanmış ve daha sonra da dinamik (temporal) durumlar için genelleştirilmiştir. Makro sistemin operasyonel bir kantite olan kümülatif enerji kayıpları, sistemin faz diagramındaki başlangıç konumundan başlatılacak olan, zaman süresine bölünerek ele edilebilir, şöyle ki:

$$Q_u^{-1} = \frac{2\kappa_u}{\tilde{\tau}_u F_s^2} \frac{1}{N_T N_k} \sum_{i=0, j=1}^{i=N_l, j=N_k} \frac{(y_i^j)^2}{1 + (y_i^j)^2} \quad (\text{ana tayf}) \quad (11)$$

ve

$$Q_{deco}^{-1} = \frac{2\kappa_d}{\tilde{\tau}_d F_s^2} \frac{1}{N_T N_k} \sum_{i=0}^{i=N_l} \frac{(\zeta_d y_i^d)^2}{1 + (\zeta_d y_i^d)^2}, \quad (\text{dekorasyon tayfı}) \quad (12)$$

İkinci şemaya parametrelerine göre ise aşağıdaki denklemler üretilebilir;

$$Q_u^{-1} = \frac{8}{\tilde{\Omega}_u F_B^2} \frac{1}{N_T N_k} \sum_{i=0, j=1}^{i=N_l, j=N_k} \frac{(y_i^j)^2}{1 + (y_i^j)^2} \quad (13)$$

ve

$$Q_{deco}^{-1} = \frac{8\varphi_d^2}{\tilde{\Omega}_d F_B^2} \frac{1}{N_T N_k} \sum_{i=0}^{i=N_t} \frac{(\xi_d \mathcal{V}_i^d)^2}{1 + (\xi_d \mathcal{V}_i^d)^2} \quad (14)$$

Burada,  $i$  harfi ile diferansiyel denklem takımının, denklem (5)'in,  $i$ 'inci nümerik integrasyon adımını ifade ediyoruz.  $N_t$  ise ilk başlangıç durumuyla, istenilen andaki durum arasında geçen kümülatif adım sayısına tekabül etmektedir, yani enterese olunan zaman fasılasına. Benzer şekilde,  $j$  harfi zincir üzerindeki  $j$ 'inci kink tanımlamaktadır. Gerçekte,  $i$  indisi daneli (discrete) zaman süreci ölçeğinde zaman değişkenini ifade etmektedir. Operasyonel noktai nazardan, yukarıda verilen ortalama işlemi, dinamik sistemin **Kümülatif Ortalama Güç Kaybı** olarak tanımlanması mümkündür.

Bizim defalarca, mühtelif değerlerdeki sistem parametreleriyle gerçekleştirdiğimiz bilgisayar deneyleri göstermiştir ki; dinamik kink zinciri sistemi dış harmonik kuvvetlerle sürülürken (driven), eğer sistem Newtoniyen olmayan viskosite rejimi civarında değilse, kararlı denge durumuna bir kaç saykıdan sonra girmektedir; mesela beş saykıl fevkalade güvenilir bir transient sönüm sayısı olarak alınabilir.

## IV. GÜC SPEKTRUMU YOĞUNLUĞU ANALİZİ

### 4.1 METODUN TANITIMI

Bu araştırma projemizde, literatürde ilk defa olarak, paraelastik ara-ikame atomları atmosferinde osilasyon hareketleri yapan, kink zincirinin güc (power) spektrumu, Süratli Fourier (Fast Fourier) Transformasyon, FFT tekniği kullanılarak, sayısal olarak incelenmiş ve grafiksel olarak da sunulmuştur. Gayet keskin (very sharp) bir şekilde belirlenen, (threshold) basamak gerilim amplitüdü değerinin üstündeki değerlerde, ve sadece gevşeme tepesinin düşük sıcaklıktaki bölgesinde, tek-harmonik jenerasyonuna

raslanmıştır. Mütevazi olarak sayılabilecek gerilim amplitüdlerinde ise, kink zinciri sisteminin tabii frekansının hemen civarındaki bölgedeki harmoniklerde kuvvetli bir büyüme (enhancement), ve diğer bölgelerde ise küçülme gözlenmektedir. En nihayetinde, kinklerin ara-ikame atomlarından oluşan atmosferi yırtma aşamasına tekabül eden çok yüksek gerilimlerde (süper-Snoek rejim), quazi-kaotik olarak adlandıracağımız kink osilasyonlarına, veya diğer bir deyimle geniş band gürültü spektrumuna raslanmaktadır.

Çizgisel olmayan (nonlinear) sistemlerin dış kuvvetler altındaki osilasyon karakteristiklerinin tetkiki, çok değişik alanlardaki katı hal fiziği problemlerinin çözümleri bakımından önem taşımaktadır. Mesala, ısı transferinde, ısı genişmesinde, kafes dinamiğinde, katık elemanları kafes titreşimleri modlarında, ve çizgisel olmayan optikte [31] özellikle önemli modelleme özellikleri vardır. Bütün bu saydığımız hallerde, çizgisel olmama durumu karşılıklı etkileşim potansiyelinden [32] kaynaklanma, yani anharmonik-potansiyel durumu söz konusu olmaktadır. Bu tip dinamik denklemlerin çözümlerinde kaotik davranışlara ve gasketli çatallaşmalara tesadüf edilmektedir. Daha önceki çalışmalarımızda [33], literatürde ilk defa olarak güc kayıplarında vukua gelebilecek çizgisel olmama durumunun doğurduğu kaotik ve çatallanma (bifurcation) olguları incelenmiştir. Bunun Debye-tipinde olmayan sönümler (dampinger) gösteren ara-ikame atomları atmosferinde, izole kinklerin yüksek gerilim amplitüdlerinde yaptıkları hareketlerde (hipersonik), ortaya çıktığı belirtilmiştir. Bu tip sistemlerin faz diagramları üzerinde yaptığımız bilgisayar simulasyon çalışmaları bize fevkalade ilginç bir olayın mevcudiyetini, yani disipatif karakterde bir rezonans olgusunun mevcudiyetini ortaya çıkarmış (sıfır  $Q^{-1}$  değerinde). Keza İç sürtünme spekturumunda fevkalade keskin bir sıçrama (quazi-quantum sıçraması) müşahede edilmiştir. Cherenkov radyasyonunu andıran bu davranış, kinkin atmosferi yırtması halinde (ses duvarını aşması halinde) ortaya çıkmakta olup, tamamen reversible bir olay olduğu ayrıca tesbit edilmiştir.

## 4.2. TEORİK

Hali hazır Coulombic kink zinciri probleminde, kinkler arasındaki karşılıklı etkileşim de nazara dikkate alındığından daha realistik bir fiziki model kabul edilmiş olmaktadır. Buna ilaveten, ara-ikame atomları atmosferinin Stokesian olmayan davranışlar gösterdiği rejim de sisteme matematiksel olarak eklenmiştir. Kink zinciri sisteminin, harmonik jenerasyonu yanında gelişigüzel (random) gürültü doğurumunun da incelenmesi için, hız-otokorelasyon fonksiyonu [34] (velocity autocorrelation function) Hızlı Fourier Transformasyonu (Fast Fourier Transformation, FFT) tekniği ile çok kapsamlı bir şekilde incelenmesi cihetine gidilmiştir.

İncelenmeyi basitleştirmek için birinci etapta kink zincirinin sadece uniform olarak dislokasyon boyunca dağılım gösteren ara-ikame atomları atmosferi nazarı dikkate alınmış, ve dekorasyon atomları devreden çıkarılmıştır. Böylece aşağı differensiyel denklem takımı kullanılmıştır,

$$M_k \partial_{tt}^2 y^i + B_k \frac{A_i \partial_t y^i}{1 + A_i^2 (\partial_t y^i)^2} = b a_k \sigma_r \sin(\omega t) + \sum_{i \neq j} F(y^i - y^j), \quad i = 2, 3, 4, \dots, N_k - 1 \quad (15)$$

burada karşılıklı etkileşim kuvveti  $F(y^i - y^j)$ , zincir uçları için modifiye edilmesi gerekmektedir. Yukarıdaki denklemde,  $M_k$  kinkin efektif kitesini,  $y^i$  ise  $i$  noktasındaki kinkin pozisyonu işaret etmekte,  $B_k$  kink hareketinin karşılaştığı viskositenin Newtonian rejimindeki değerini göstermekte,  $A_i$  ters Snoek sıçrama hızına tekabül etmektedir ve şu formülle ifade edilebilir,  $A_i = \tau_s / a_o$ . Burada,  $\tau_o$  Snoek gevşeme zamanı olarak literatürde adlandırılır.

Yukarıdaki denklem zaman ve boyutlarda yapılan normalizasyon transformasyonları ile:  $\omega t = \tilde{t}$  ve  $\omega A_i u^i = y^i$ , aşağıdaki formu almaktadır:

$$y_i'' = (\tilde{\tau}_s \tilde{\Omega}_A^2 F_s) \sin(\tilde{t}) - (\kappa \tilde{\tau}_s \tilde{\Omega}_A^2) \frac{y_i'}{(1+y_i')^2} + \tilde{\tau}_s \tilde{\Omega}_A^2 F_{Bias} + \left( \frac{L^2}{\pi^2} \right) \tilde{\Omega}_A^2 \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{d^2} \cdot NLF \quad (16)$$

burada NLF çizgisel olmama (anharmonicity) faktörü olup daha önce tarif edilmiştir. Yukarıdaki denklemde,  $\underline{L} = L/a_o$  indirgenmiş dislokasyon parça boyutu,  $\underline{d} = d/a_o$  ise kinkler arasındaki denge konumundaki mesafeyi göstermektedir.  $\tilde{\Omega}_A$  sembolü sönüm olmamış sistemin çizgisel rejimdeki serbest osilasyon frekansını (normalize olduktan sonraki) değerini göstermektedir. Burada normalizasyon harmonik sürücünün frekansına nisbeten yapılmıştır, şöyleki,  $\tilde{\Omega}_A = \omega^o/\omega$ . Ayrıca şu klasik ifadeyi,  $\omega^o = (K_k/M_k)^{1/2}$  nazarı dikkate almak gerekmektedir. Coulombic kink zinciri sisteminin sertliği (stiffness)  $K_k$  olup sürücü kuvvvet  $F_s$  şu şekilde normalize edilmiştir;  $F_s = F_k/F_{su}$ .  $F_u$  statik kuvvet olup kink'i bir kafes parametresi kadar deplasmana uğratabilecek değere sahip olacak şekilde tarif edilmiştir. Benzer şekilde, şu eşitliklerde akılda tutulmalıdır;  $\kappa = B_k/F_{su}$  ve  $\tilde{\tau}_s = \tau_s \omega$ . Kappa,  $\kappa$  parametresi bilhassa çok önemlidir, ve sistemdeki iki ayrı etkileşim parametrelerinin oranını temsil eder; yani sırasıyla: ara-ikame atomları ile kinklerin, ve kinkler ile kinklerin etkileşimleri gibi.

### 4.3. UYGULAMA YÖNTEMİ

Daha önceki kısımlarda kink zinciri ile ilişkili İç Sürtünme Katsayısı,  $Q^{-1}$  verilerinin toplama metodunu geniş bir şekilde izah edilmiştik. Burada aynı sisteme ait güç spektral yoğunluğunun (power spectral density),  $S(\omega)$  kinkler gerek çizgisel ve gerekse çizgisel olmayan dinamik hareketler yaptıkları esnada nasıl hesap edildiğini, ve gerekli datanın nasıl toplandığından bahis edilecektir.



**Güç spektral yoğunluğun hesaplanmasında aşağıdaki yöntem uygulanmıştır:**

1. Hızın daneli (discrete) zaman serisini,  $\{y'_r\}$ ,  $r=0-N$ , şu zaman aralıklarını,  $\Delta=T/N$  kullanarak, rekord edilen hız datasından numunelendir (sampling) ;
2. Ortalama değeri hesap et, ve ortalaması sıfır olan yeni hız zaman serisini türet;
3. Bu son serinin Daneli Fourier Transformunu (Discrete Fourier Transform, DFT) hesapla;  $\{Y'_k\}$ ;
4. Geçerli çarpımları yaparak, luzumlu olan spektral katsayılar serisini,  $S_k=|Y'_k|^2$  elde et;
5. Şu formülü kullanarak,  $S(\omega_k)= T/2\pi S_k$  kontinum spektrumun tahmini değerlerini hesapla. Burada  $\omega_k=2\pi k/T$  rad/s , ve  $\pi/\Delta$  Nyquist frekansı olup güvenilir frekans alanının üst limitini bize tanımlar;
6. Yumuşatma (smoothing) işlemini yanlardaki spektral tahminleri kullanarak gerçekleştir. Burada, T rekordun uzunluğunu, N ise data noktalarının sayısını belirtmektedir.

Bizim kompüter çalışmalarımızda:  $\Delta=0.01$ ,  $N=2^{13}$  ve yumuşatma indeksi,  $n=0,1,2$  olarak alınmış olup buda arzu edilen band genişliğini şu formüle göre,  $B_e=(2n+1)/T$  bize vermektedir. Zaman serisi başlangıçta, (cosine-taper) kosinus data penceresi kullanılarak şekillendirilmiştir.

## **V. SİMULASYON SONUÇLARI VE İRDELEMELER**

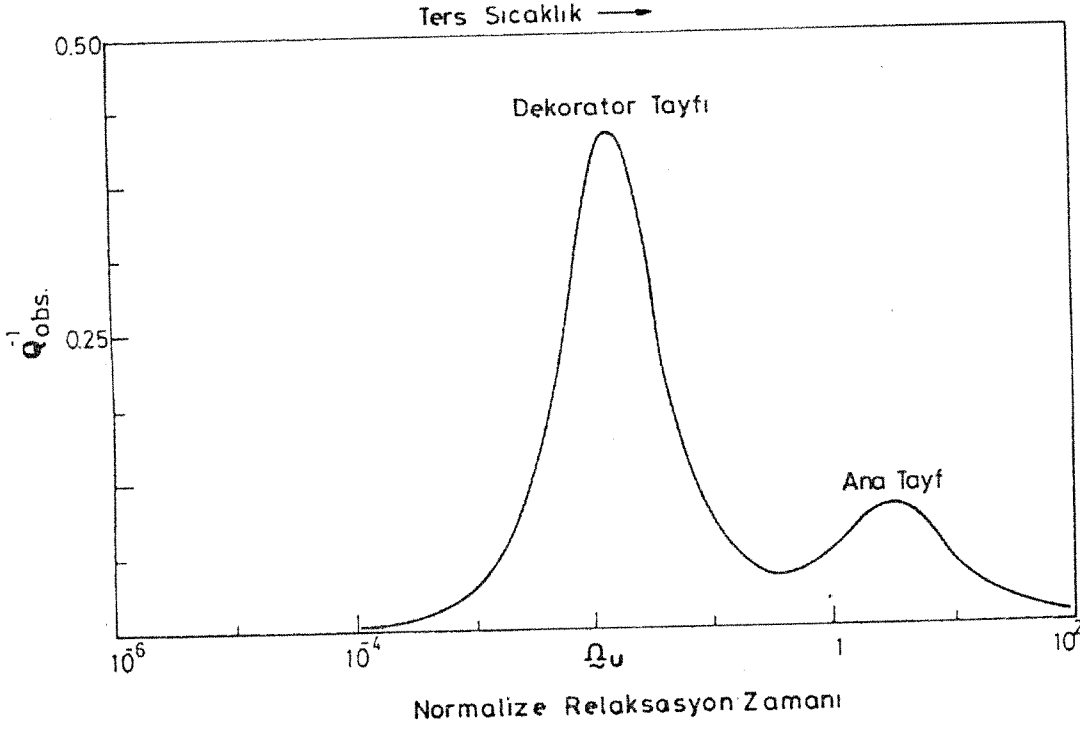
### **5.1. İÇ SÜRTÜNME KATSAYISI BULGULARI**

Bilgisayar simülasyon çalışmalarında kullandığımız diferansiyel denklemler takımının nümerik çözümünde, daha önce kendi geliştirdiğimiz ve büyük başarı ile katı sistemlere tatbik ettiğimiz, fevkalade kararlı (stable), ve hassas (accurate) nümerik çözüm

tekniki kullanılmıştır. Bu teknik esas olarak Adams-Moulton metodunun [35] yeni bir versiyonudur. Runge-Kutta beşinci-mertebe, altıncı-kademe hassas metodu [36] her problem adımı için, başlangıç değerlerinin hesaplanması maksadıyla özellikle kullanılmaktadır. Ayrıca otomatik step kontrolünü icra edilmektedir. Bu çalışmadaki bayağı (ordinary) diferansiyel denklemler katı (stiff) diferansiyel denklemler olarak tanımlanmakta ve nümerik çözümlerinde çok büyük güçlükler ortaya çıkmaktadır. Bilhassa gevşeme (relaxation mode) modunda çalıştığımız zaman, en küçük zaman sabitesi,  $t_u = 2/\tilde{\Omega}_u \tilde{\Omega}_A^2$ , veya  $t_{dec} = 2/\tilde{\Omega}_d \tilde{\Omega}_A^2$  denklemleri ile belirlenmekte olan minimal değere tekabül etmekte, düşük sıcaklıklarda  $2 \times 10^{-4}$ , ve  $2 \times 10^{-6}$  gibi değerlere ulaşmaktadır, sırasıyla  $\tilde{\Omega}_A = 10$  ve  $\tilde{\Omega}_A = 100$ . Böylece, en kısa zaman stepleri aşağı yukarı sırasıyla şu mertebelerdedir;  $10^{-6}$  ve  $10^{-8}$ . Katı diferansiyel sistemlerin çözümde geçerli nümerik integrasyon stepleri en küçük gevşeme zamanı tarafından kontrol edildiği düşünülürse, hali hazırdaki problemde düşük sıcaklıklarda bilgisayar simülasyonun ne kadar büyük çapta prosesör zamanına ihtiyaç gösterdiğini anlamak güç olmaz! Diğer bir gevşeme zamanı da, ki bu bihassa yüksek sıcaklıklarda step büyüklüğünü kontrol eder, tam olarak  $t_2=1$  dir.

Sekil (1)'de iç sürtünme katsayısı,  $Q^{-1}$  normalize olmuş yaygın ikame atomlarının gevşeme zamanına göre,  $\tilde{\Omega}_u = \omega \tau_u$  (veya sıcaklık tersine göre  $T^{-1}$ ) yarı-logaritmik ölçekte plot edilmiştir. Burada kullanılan (stress) gerilim amplitüdü,  $F_s$  çok küçük olup, böylece sistemin çizgisel rejimde (ağır sönüm bölgesinde) kalması temin edilmiş bulunmaktadır. Bu şekil açıkça göstermektedir ki, yeni dislokasyon sönüm tayfi (dekorasyon tayfi) ana tayfin yüksek sıcaklık tarafındaki omuzunda, veya bölgesinde ortaya çıkmaktadır. Daha ileri safhalarda ana tayf, ki yaygın ikame atomlarından dolayı husule gelmekte, şiddet (intensity) bakımından faktör beşlik bir zayıflama göstermekte, ve buna paralel olarak da, teorik mülahalalara uygun miktarda daha düşük sıcaklıklara doğru bir tepe kayışı göstermektedir. Bu deneyde, dekoratör atomlarının difüzyon aktivasyon enerjisini yaygın ikame atomlarına nazaran %20 nispetinde büyük olduğu varsayılmıştır, aksi takdirde her iki nokta hatanın da yapışma güçleri,  $\phi_d=1$ , ve difüzyon sabiteleri,  $D_0$  ise bir olarak kabul edilmiştir.

## ŞEKİL (1)



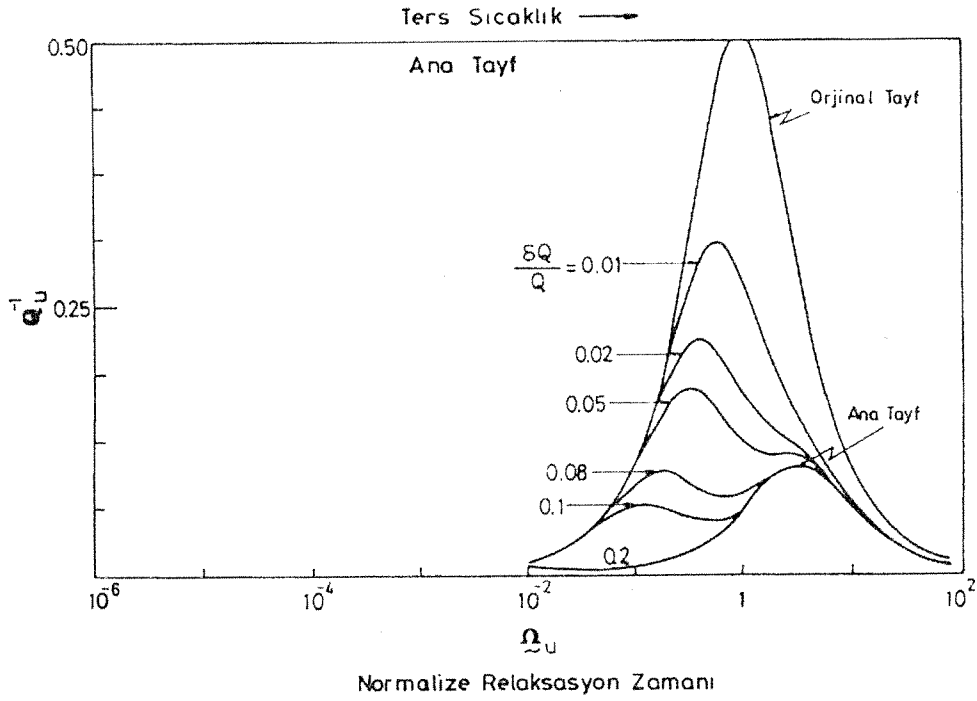
1. Kink zinciri üzerine yerleşik Dekorator atomundan dolayı ortaya çıkan Tayf yarı logaritmik ölçek üzerinde, yaygın ara-ikame atomlara göre normalize edilmiş gevşeme zamanına göre (ters sıcaklık eksenini) plot edilmiştir. Bu şekil, seçilen uygun parametrelere karşısında, dekorator ve yaygın ara-ikame atomlarından sonuçlanan dislokasyon sönüm spektrumunun gayet ayrık olarak ortaya çıkabileceğini kanıtlamaktadır. Parametreler:  $h=0.2$  (kesirsel göç entalpi farkı),  $j_d=1$  (yapışma gücü oranı),  $\omega\tau_u^0=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ; [ $I^{\prime}bias=0$ ,  $F_s=0.1$ ,  $R_p=1$ ,  $L=100$ ].

Şekil (2)'de dislokasyon damping olayına (yaygın ara-ikame atomlarıyla etkileşimden dolayı zuhur eden) dekoratör atomlarının etkisi muhtelif difüzyon aktivasyon entalpileri kullanarak tetkik edilmiş, ve İç Sürtünme Katsayısı,  $Q^{-1}$  yarı logaritmik plotta sunulmuştur. Mukayese imkanı sağlansın diye dislokasyon damping tayfinin dekorasyondan önceki hali (original peak) bu grafikte yer almıştır,. Bu deney serisi göstermektedir ki; dekoratörün aktivasyon enerjisini tedrici şekilde ayarlıyarak, ana tayfta husule gelen distorsiyonu ve keza birlikte oluşan peyk-tayfi (apparent subsidiary peak) gözlemlemek mümkün olabilmektedir. Ayrıca bu deneyler bize, mütevazi veya büyük aktivasyon enerji farklılıklarının bulunduğu hallerde, peyk-tayfin tamamen kaybolduğunu, ve sadece ana tayfin rijid bir durum alarak nihai pozisyonunu ve şiddetini (peak height) kabulenerek sıcaklık ekseninde yerleştiğini göstermektedir.

Dekorasyon atomlarıyla ilişkili İç Sürtünme Tayfinin tam olarak teşekkül etmesi Şekil (3)'de ele alınmıştır. Burada, büyük difüzyon entalpi değişimleri gösteren mühtelif dekoratör atom tipleri ele alınmıştır. Gözlemleri kolaylaştırmak için, bu dekoratör atom türlerinin hepsinin de dislokasyona yapışma güçleri ( $\phi_D=1$ ), yani kink ile ara-ikame atomu arasındaki karşılıklı etkileşimleri hep eşit olarak ele alınmıştır.

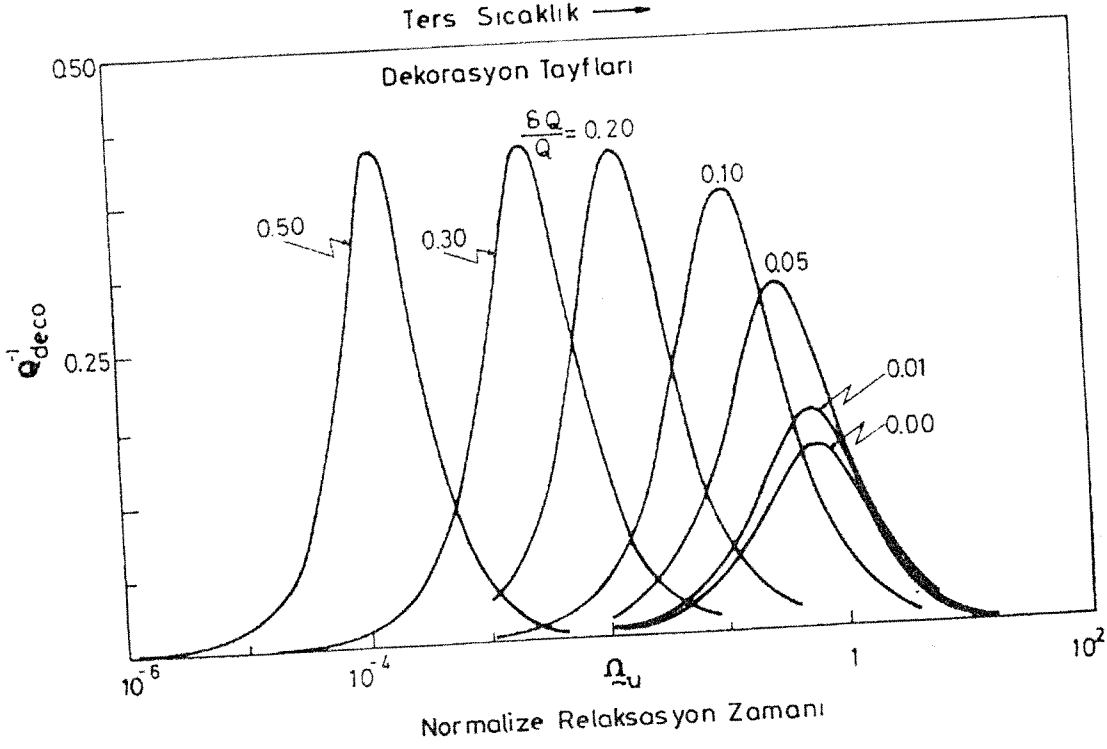
Nisbi yapışma gücünün,  $\phi_D$  gerek dekorasyon tayfına ve gerekse yaygın ara-ikame atomlarından dolayı husule gelen ana tayfa (parent peak) olan etkisi bilgisayar deneyleri ile incelenmiş, ve sonuçlar sistematik bir şekilde Şekil (4)'de rapor edilmiştir. Bu bilgisayarlı deneyleri serisinde, kasıtlı olarak her iki tip ara-ikame atomları (dekoratör ve yaygın) için aynı difüzyon aktivasyon enerjileri seçilmiş, fakat dekoratör atomlarının kinklerle yaygın ara-ikame atomlarına nazaran çok daha güçlü paraelastik etkileşime girdiği varsayılmıştır. Böylece nisbi yapışma katsayısının,  $\phi_D$  arzu edildiği şekilde ayarlanması temin edilmiştir. Bu şekil açıkça göstermektedir ki nisbi yapışma gücünün yüksek olduğu hallerde, dislokasyon dekoratör tayfında yukarı sıcaklıklara doğru negatif bir kayma ortaya çıkmakta, ve keza relaksasyon şiddetinde tedrici bir büyüme zuhur etmekte, ve en nihayetinde doyumuna doğru yönelmektedir. Gevşeme şiddetinin doyum

## ŞEKİL (2)



2. Kinklerle birlikte sürüklenen dekoratör atomlarının, ana yaygın ara-ikame atomlarından dolayı oluşan dislokasyon damping tayfına olan etkisini görmek için, farklı difüzyon enthalpi değerleri gösteren dekoratörler kullanılmış, ve yarı logaritmik skala üzerinde İç Sürtünme Katsayısı normalize relaksasyon zamanına, veya ters sıcaklık koordinatına, göre plotlanmıştır. Parametreler:  $\varphi_d=1$ ,  $\omega\tau_u^0=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ; [ $F_{bias}=0$ ,  $F_s=0.1$ ,  $R_p=1$ ,  $L=100$ ].

### ŞEKİL (3)

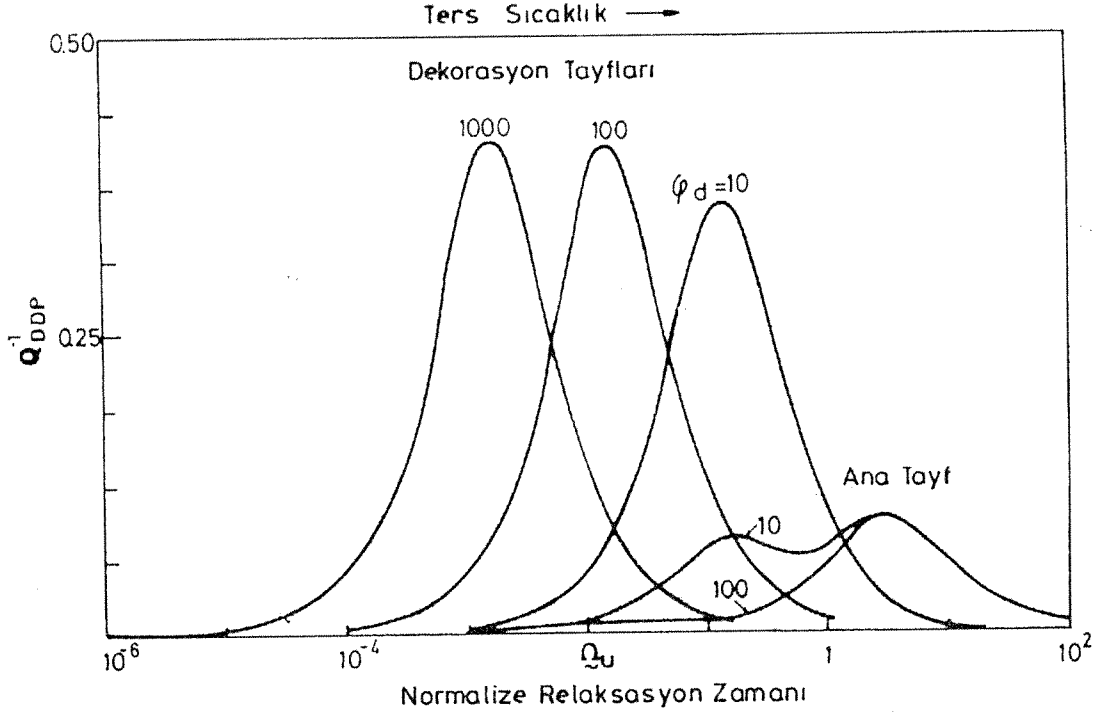


3. Dekorator atomlarından dolayı ortaya çıkan İç Sürtünme Katsayısı mühtelif logaritmik enthalpi farkları için, normalize olmuş relaksasyon zamanına, veya sıcaklık tersine göre yarı logaritmik ölçek üzerinde plot edilmiştir. Parametreler:  $j_d=1$ ,  $\omega\tau_u^0=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ;  $[F_{bias}=0, F_s=0.1, R_p=1, L=100]$ .

değeri, orijinal ana dislokasyon sönüm tayfinin (yaygın ara-ikame atomlarından dolayı) %82 si civarındadır. Diğer taraftan aynı problemin kontinum çözümü [24], dekorasyon tayfinin şiddetinin dislokasyon orijinal ana tayfinin tepe yüksekliğinin %76'sı civarında olması gerektiğini işaret etmektedir. Benzer şekilde yaygın ara-ikame atomları ile ilişkili tayfin ana alt yapısı düşük sıcaklıklara doğru kayış yapmakta, ve gevşeme şiddetinde faktör beşlik bir düşme (relatif şiddet %18 civarında) göstermektedir. **Kontinum modelin** analitik çözümü ise, faktör dördük bir azalmanın, %25, doyum noktasında gerçekleştiğini bize vermektedir. Böylece, çok enteresan ve yeni bir tip **konservasyon (sakınım) prensibi** ile karşılaşyoruz, şöyle ki; dislokasyon sönüm tayflarının toplam şiddeti (dekarator artı yaygın ara-ikame atomlarından dolayı) değişmemekte, ve sadece aralarındaki paylaşım oranları değişim göstermektedir. Bu durum laboratuar deneylerinde de gözlemlenmiştir. Mesela, Tanaka [37] Ni-H alaşımlarında, deformasyona uğramış nünunelerde yaptığı hidrojen sürüklenme (drag) İç Sürtünme ölçmelerinde, yaygın hidrojen atomlarından dolayı husule gelen sönüm tayfi ile hidrojenin dislokasyona çökmesinden dolayı ortaya çıkan dekorasyon tayfinin şiddetlerinin toplamının, ilk orijinal hidrojen-dislokasyon tayfinin şiddetinin aynı olduğunu saptamıştır. Diğer bir **enteresan gözlem** de, yaygın ara-ikame atomlarından dolayı ortaya çıkan ana tayfin, alçak yapışma gücü halinde ikiye ayrıştığıdır. Düşük sıcaklıktaki alt-tayfin gayet kararlı olduğunu, ve yapışma gücünü daha fazla artırdığımızda bu tayfin tamamen kararlı (stabil) kaldığını, fakat yüksek sıcaklıktaki peykin ise ortadan tamamen kaybolduğunu ayrıca bulgularımız arasında yer almaktadır. Bu kompüter simülasyon sonuçlarının aynısını, yazar daha önce geliştirdiği analitik teorisinde de müşahede etmiş bulunmaktadır (Bak. Şekil.(1), Referans.24).

Şekil (5)'de, kinklerin çizgisel yoğunluklarının (lineer kink density), dekorasyon atomları sönüm tayfinin gerek şiddetine, ve gerekse sıcaklık eksenindeki pozisyonuna olan etkileri açıkça gösterilmektedir. Şöyleki; kinklerin birim dislokasyon hattı üzerindeki sayısı (lineer density) tedricen artırıldıkça, dekorasyon tayf tepesi düşük sıcaklıklara doğru kaymakta, ve yavaşça sönüm şiddeti (tepe yüksekliği) azalmaktadır. Bu ikinci mertebeden etkileşimi kontinum teorisinde gözlemlemek mümkün değildir. Bu bilgisayar simülasyon serisinde, maksatlı olarak yaygın ikame atomları ile lokalize olmuş dekoratör

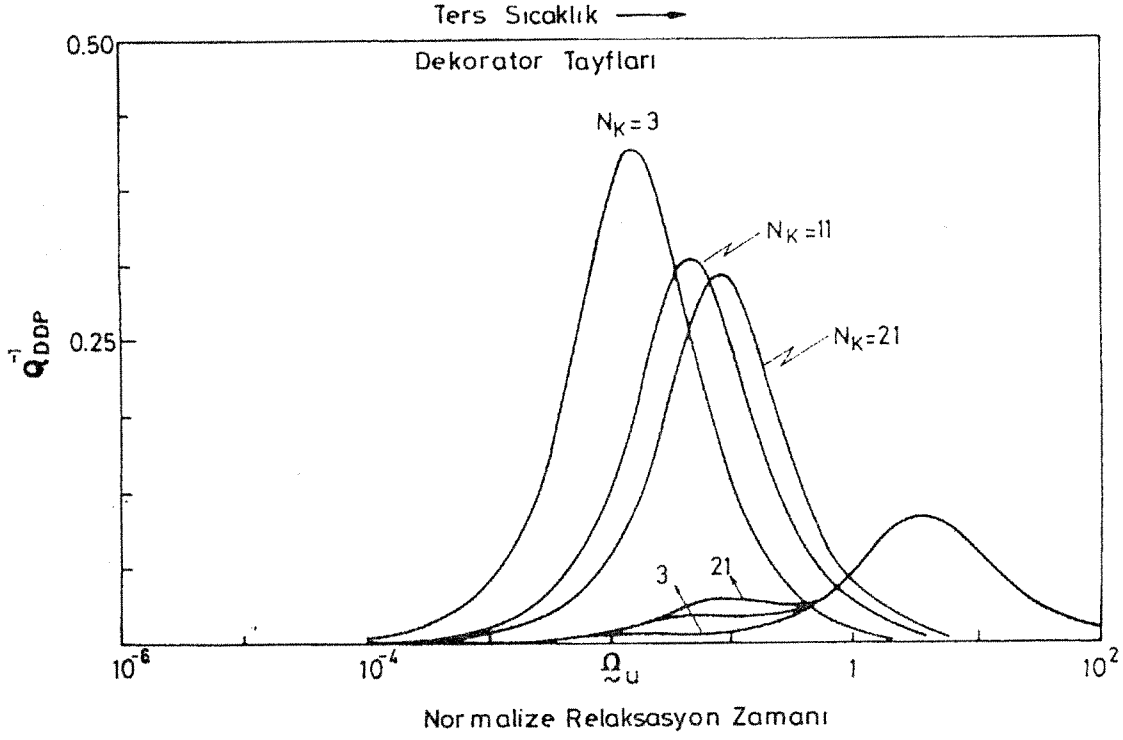
## ŞEKİL (4)



4. Dekorator atomlarından dolayı oluşan tayflara ait İç Sürtünme Katsayıları mühtelif yapışma oranlarına nazarı dikkate alınarak yarı logaritmik ölçek üzerinde normalize relaksasyon zamanına, veya sıcaklık tersine göre plotlanmıştır. Parametreler:  $h=0$ ,  $\omega\tau_u^0=10^{-12}$  ve  $N_k=3$ ;  $[F_{bias}=0, F_s=0.1, R_p=1, L=100]$ .



## ŞEKİL (5)



5. Cizgisel kink densitesinin gerek dekoratör ve gerekse yaygın ara-ikame atomlarından dolayı oluşan spektruma etkisini incelemek gayesiyle İç Sürtünme Katsayıları yarı logaritmik ölçek üzerinde normalize edilmiş relaksasyon zamanına göre plot edilmiştir. Bu şekil bize yaygın atomlarla ilişkili peyk ve esas tayf ayrışımını açıkça göstermektedir. Parametreler:  $j_d=100$ , ve  $h=0$ ,  $\omega\tau_u^0=10^{-12}$ ; [ $F_{bias}=0$ ,  $F_S=0.1$ ,  $R_p=1$ ,  $L=100$ ].

atomları arasında, gerek mobilite ve gerekse aktivasyon entalpileri açısından fark olmadığını varsaydık, ve böylece çizgisel kink yoğunluğunun direk etkisini gözlemlemek imkanını hazırladık. İki tip, yani yaygın ve lokalize olmuş ara-ikame atomları arasındaki yegane fark, bağlantı (coupling) sabitelerinde (Kappa parametresi) olmaktadır. Bu parametrenin dekoratör atomları için yaygın ara-ikame atomlarından yüz misli daha büyük olduğu kabul edilmiştir. Böylece, her iki tip dislokasyon spektrumunun biri birinden tamamen ayrışması (non-overlapping) sağlanmıştır.

Hali hazırda daha gerçekçi bir şekilde ele alınan, interaktif kink zinciri sönüm problemi üzerindeki bilgisayar çalışmalarının sonuçları, daha önce yayınladığımız kontinum modelinin analitik neticeleriyle tam bir uyum içinde olduğunu göstermektedir. Her iki tip modellemede de iki cins sönüm ajanı göz önüne alınmıştır. Şöyle ki; birinci cins, dislokasyon üzerinde ve civarında üniform ve sürekli olarak dağılmış ara-ikame atomları (mobil Cottrell Bulutu), ikincisi cins ise, dislokasyonun ortasında konumlanan geometrik kink üzerinde lokalize olmuş, mobil ara-ikame atomu veya çökereği (cluster) dir. Anatik çalışmamızda, dekorasyon tayfinin gerek tepe pozisyonu ve gerekse tepe yüksekliği bir tek parametreye tabii olduğu, ve bunun R ile gösterildiği, değerinin ise  $R = \tilde{\Omega}_d^c / \tilde{\Omega}_u^c$  ile verildiği belirtilmiştir. Bu değer şu ifadeden de  $B_d^c / LB_u^c$  hesaplanabilir. Burada,  $B_d^c$ , ve  $B_u^c$ , sırasıyla dekoratör ve yaygın ara-ikame atomlarının normalize olmuş sürünme katsayılarıdır. (not: bu bölümde kullandığımız "c" yukarı-indisi (superscript) kontinum modelini işaret etmektedir)

Benzer şekilde,  $\tilde{\Omega}_d^c$  ve  $\tilde{\Omega}_u^c$  normalize olmuş dekaratör ve yaygın ara-ikame atomlarının kontinum takribiyetindeki gevşeme zamanlarına tekabül etmektedir. Sırasıyla, Dirac delta fonksiyonun özelliklerini kullanarak, aşağıdaki ara-bağıntıları göstermek mümkündür;  $B_u^c = B_u \tau_u / a_o$  , ve  $B_d^c = B_d \tau_d L / a_o N_k$ . Böylece kontinum modelle, daneli (discrete) model arasındaki önemli bazı ilişkileri çıkarmak kabil olmaktadır, şöyleki:  $\tilde{\Omega}_u^c = \tilde{\Omega}_u$  ,ve  $\tilde{\Omega}_d^c = \tilde{\Omega}_d / N_k$  . Halihazırdaki daneli (discrete) dislokasyon kink zinciri

modeli için R, parametresini şu şekilde ifade etmek aydınlatıcı olacaktır,  $R=(\varphi_d \zeta_d / N_k)$ . Bu ifade bize, R parametresinin, lokalize dekaratör atomları ile yaygın ara-ikame atomları arasında difüzyon enthalpileri farkı mevcut ise, sıcaklığın kuvvetli bir fonksiyonu olduğu göstermektedir. Bu formül keza göstermektedir ki, verilen bir kink çizgisel yoğunluğu,  $n_k$  için sürünme şiddeti oranı, R dislokasyon segmen boyu L, ile sikica bağıntılı halde dir;  $R=(j_d \zeta_d / L n_k)$ . Böylece, uzun dislokasyon segmenlerinin ortasına yerleşmiş dekaratör atomlarının yaygın ara-ikame atomlarından dolayı oluşan dislokasyon sönümüne olan etkisi tamamen ihmal edilebilir bir mertebededir (aynı çizgisel yoğunlukda kinkler bulunduğu takdirde). Dekorasyon, bilhassa **kısa dislokasyon segmenleri** üzerinde yerleşik bir kaç geometrik veya termal kinkin bulunduğu hallerde, fevkalade negatif etkileşime haizdir, ve yaygın ara-ikame atomlarının oluşturduğu ana tayfin tamamen ortadan kaybolması yönünde davranışta bulunur.

Dekorasyon tayfinin tepe noktasının pozisyonu, aşağıdaki ifadeden bulunabilir, ve bu da R parametresinin başlangıçtaki tarifini kullanarak yapılabilir;

$$\tilde{\Omega}_{u,dec}^{\max} = \frac{\tilde{\Omega}_d^{c,\max}}{R} \quad (17)$$

burada  $\tilde{\Omega}_{u,dec}^{\max}$  değeri,  $\tilde{\Omega}_u$  parametresinin dekorasyon tayfinin tepe noktasına şiddet bakımından tekabül eder, ve keza benzer şekilde  $\tilde{\Omega}_d^c$  değeri ise,  $\tilde{\Omega}_d^c$  parametresinin kontinum takribiyetindeki karşıtı olan değere tekabül eder. Şekil (4), üzerinde yaptığımız analize göre, aşağı yukarı 0.526 civarındadır. Burada, şu dekorasyon sönüm tayfi kullanılmıştır;  $\varphi_d=1000$ ,  $z_d=1$  ve  $N_k=3$ . Bilgisayar çalışmasını basitleştirmek ve irdelemeyi kolaylaştırmak için, her iki nokta-hatanında, yaygın ara-ikame atomları ve lokalize olmuş dekoratör atomlarının difüzyon aktivasyon enthalpilerini, ve  $D_0$  değerlerini eşit olarak seçtik. Şekil (4)' e göre, bütün deneyde kullanılan parametreler muvacehesinde  $\tilde{\Omega}_{u,dec}^{\max} = 1.6 \times 10^{-3}$ , olarak bulduk. Buda bize R parametresinin 1000/3

mertebesinde deęer aldığını göstermektedir.  $\tilde{\Omega}_d^{c,max}$  için elde ettiğimiz sayısal deęer, dislokasyon üzerinde üniform olarak dağılmış kinkler modelinin (kontinuum takribiyeti) analitik çözümünden elde ettiğimiz deęere, şöyleki;  $\tilde{\Omega}_d^{c,max}=4/\pi^2$  , (Bak Denklem (23), Referans.[24] ) aşıęı yukarı eődeęerdir.

Daha önceleri ifade ettiğimiz vechile, yaygın ara-ikame atomları ile dekoratör atomlarının difüzyon aktivasyon enerjileri arasındaki fark büyük olduęu zaman; mesala hidrogen atomları Niobiumdaki dislokasyonda yaygın bir Cottrell atmosferi meydana getirmekte, ve buna karşılık oksijen atomları lokalize olarak kinklere yerleşmektedir,  $\zeta_d$  parametresi kuvvetli bir şekilde  $\tilde{\Omega}_u$  deęişgenin (sıcaklığın tersi ile oranlı) deęerine tabiidir. Daha doğrusu sıcaklığına sıkı sıkı baęımlıdır, ve böylece R parametresi artık deney esnasında sabit kalmaz. İç Sürtünme Deneylerinde ya sürekli ısınma veya sürekli soğuma işlemi kullanılmaktadır. Bu takdirde, denklem [10] ile denklem [15] birleştirilerek, ve R parametresinin tarifi de dikkatle nazara alınarak, aşıęıdaki ifadeyi elde etmek ve kullanmak mümkün olacaktır;

$$\tilde{\Omega}_{u,dec}^{max} = \left( \frac{\tilde{\Omega}_d^{max} N_k}{\varphi_d \zeta_d^o} \right)^{\left( \frac{1}{1+\eta} \right)} \left( \tilde{\Omega}_u^o \right)^{\left( \frac{\eta}{1+\eta} \right)}. \quad (18)$$

Burada  $\eta = (Q_d - Q_u) / Q_u$ , sürüklenen dekoratör atomları ile sıçrayan ara-yaygın atomların difüzyon aktivasyon enerjilerinin kesirsel (veya logaritmik,  $\delta \ln Q$ ) farklarını göstermektedir. Yukarıdaki ifadede,  $\zeta_d^o$  deęerlerinin her iki nokta hata içinde aynı ve bire eőit olarak alabiliriz, çünkü  $D_0$  deęerleri aşıęı yukarı eődeęerdir. Benzer şekilde,  $\tilde{\Omega}_u^o = \alpha \tau_u^o$  içizgisel olarak eksitasyon frekansına tabidir. Refrakter metallerde ve alaşımlarda, bir çok ara-ikame atomları için  $\tau_u^o$  aşıęı yukarı  $10^{-12}$  saniye mertebesindedir.

Yaygın ara-ikame atomları ve dekoratör nokta hataları için, dislokasyon iç sürtünme tayflarının efektif relaksasyon zamanları aşıęıdaki formüllerle belirlenebilir;

$$\tau_{host}^{eff} = \frac{2B_u L^2 \tau_u}{\pi^2 a_o a_k^2 S_o^{el} n_k} \frac{1}{\tilde{\Omega}_u^{max}}, \quad (19)$$

ve

$$\tau_{dec}^{eff} = \frac{2B_d L \tau_d}{\pi^2 a_o a_k^2 S_o^{el} n_k^2} \frac{1}{\tilde{\Omega}_d^{c,max}}. \quad (20)$$

Burada  $\tilde{\Omega}_u^{max} = 4$ , ve  $\tilde{\Omega}_d^{c,max} = 4/\pi^2$ , gerek geliřtirdiđimiz analitik teoriye ve gerekse bilgisayar simülasyon sonuçlarına göre bulunmuřtur. Denklem (20) göstermektedir ki efektif gevřeme zamanları, dekoratör atomlarından dolayı ortaya çıkan dislokasyon sönüm tayflarında, yaygın ara-ikame atomlarına nazaran çok daha az olarak çizgisel kink yođunluđuna bađımlılık göstermektedir. Benzer řekilde, dekoratör atomları ile iliřki iç sürtünme tayfinin gevřeme zamanı, dislokasyon segment boyu ile direkt olarak orantılı olduđu halde, yaygın ara-ikame atomlarından dolayı ortaya çıkan tayflarda bu durum segment boyunun karesi ile orantılı olduđu gözlenmektedir. Mesela, Snoek-Koster SK tepecikleri ile iliřkili gevřeme zamanı buna tam bir misal teřkil etmektedir, bilhassa řu durumlarda;  $n_k^{eq} L \leq 1$  (alçak sıcaklık derecelerinde,[38]).

Yaygın ara-ikame atomları, ve lokalize dekoratör ara-ikame atomları ile iliřkili efektif gevřeme zamanlarını, ařađıdaki formüllerle ifade etmek mümkündür ( $b=1/k_B T$ ):

$$H_{ddp}^{eff} = \frac{d \ln \tau_{ddp}}{d\beta} = \frac{d \ln \beta_u}{d\beta} + \frac{d \ln \tau_u}{d\beta} - \frac{d \ln N_k}{d\beta} \quad (\text{yaygın ara-ikame atomları}), \quad (21)$$

ve

$$H_u^{eff} = H_s^M + H_s^b + k_B T, \quad (\text{Dekarator ikame atomları}). \quad (22)$$

Bu da, bizim daha önce geliřtirdiđimiz kinklerin sürünmeleri ile ilgili çizgisel olmayan viskosite teorilerine göre [28], ařađıdaki sonuçları, doyum sıcaklıklarının yukarısındaki bölgelerde geçerli olmak üzere verir:

$$H_u^{eff} = H_s^M + H_s^b + k_B T, \quad (\text{Sıđ kapanlar, geometrik kinkler}) \quad (23)$$

$$H_u^{eff} = H_s^M + H_s^b + \frac{1}{2} k_B T + H_k, \quad (\text{Sıđ kapanlar, termal kinkler}) \quad (24)$$

$$H_{dec}^{eff} = H_d^M + H_d^b + k_B T, \quad (\text{Sıđ kapanlar, geometrik kinkler}) \quad (25)$$

$$H_{dec}^{eff} = H_d^M + H_d^b + 2H_k, \quad (\text{Sıđ kapanlar, termal kinkler}). \quad (26)$$

Yukarıdaki sonuçlar çizgisel kink sürünme teorisinden [23] elde edilebilir, şöyleki; nümunedeki başlangıçtaki uniform ara-ikame atomlarının dağılımını gösteren,  $C_u^0$  konsantrasyonu yerine geçmek üzere,  $C_d^u$ , yani ara-ikame atomlarının dislokasyon gövdesindeki dağılım konsantrasyonunu ikame etmek şartı ile. Derin kapanların (deep trapping) mevcudiyeti veya yüksek derecede lokalizasyonun var olduđu durumlarda, yukarıdaki formüller gene tatbik edilebilir, řu şartla ki; sönüm tayfları (iç sürtünme tepelikleri) kapanların doyum sıcaklıklarının üstünde zuhur etsinler. Bu durumda, sadece  $2k_B T$  terimini yukarıdaki denklemlerden çıkarmak gerekecektir. Bu rapor ettiđimiz sonuçlar, belki kaza ile veya zahiren, Seeger [39] tarafından *ad hoc* olarak sunulan denklem takımları ile tam bir uyum içindedir. Daha önceki yayınlarımızda belirttiđimiz vechile, kink-sürüklenme probleminin detaylı ve özgün (rigorous) çözümü [23] bize göstermiřtir ki; Seeger'in SK gevřeme teorisinde [39,40], kink viskositesi  $k_B T/D_k$  olarak ele alınmıřtır, ve bu bizim daha önce sunduđumuz  $B_k$ , (viskos-drag katsayısı, referans. (23), denklem. 40) ile ikame edilmelidir. Bu viskosite ikamesinin sıcaklık bađımlılıđı, tamamen Seeger teorisindeki *ad hoc* ifadeden farklıdır, şöyleki  $1/k_B T D_i$ . Aradaki fark, sayısal bakımdan küçük, fakat konsept bakımından çok önemlidir. Yukarıdaki matematik

ifadelerde,  $H_s^M$  ve  $H_d^M$  yaygın ara-ikame atomları ile dekoratör atomlarının, sırasıyla, difüzyon aktivasyon entalpilerine tekabül etmektedir. Benzer şekilde,  $H_s^b$  ve  $H_d^b$  gene sırasıyla, adı geçen nokta kristal hatalarının dislokasyon göbeğine bağlanma enerjilerini göstermektedir. Bu durum, bilhassa Oğurtani ve Seeger'in son yıllarda geliştirdiği (nonlinear) çizgisel olmayan dislokasyon sönüm teorisinin [28] sonuçları olarak, ve sağlam analitik temellere dayanarak ortaya çıkmaktadır, bir takım *ad hoc* varsayımların ve spekülasyonların neticeleri olarak değil!

Benzer şekilde, dekoratör ve ara-yaygın ikame atomları ile ilişkili ön-eksponansiyel faktörleri, denklem (8)'de verilen sürünme katsayısı ifadesini, dislokasyon sönüm gevşeme zamanları formüllerinde, yani denklem (19) ve denklem (20)'de kullanarak elde etmek mümkündür, şöyle ki;

$$\tau_{host}^{\infty} = \tau_u^o \tilde{\beta}_u \tilde{\Omega}_u^{\max} \frac{32GC_u^o L^2}{9\pi k_B T n_k}, \quad (27)$$

burada aşağıdaki takribiyetleri kullandık: makaslama modülü  $G=C_{44}$ , ve  $S_0^{el} = Gb^2 / 4\pi$ . Burgers vektörü  $b$  için de hacim merkezli kübik HMK yapının [111] yönü tabii yön olarak seçilmiştir.  $\tilde{\beta}_u$  sembolü kink-ev sahibi (yaygın) ara-ikame atomları arasındaki karşılıklı etkileşim parametresi olup, denklem (8)'de verilen formülün parantez içinde kalan kesimini göstermektedir. Benzer şekilde, dekoratör atomlarının ön-eksponansiyel faktörü aşağıdaki formülle bulunur;

$$\tau_{deco}^{\infty} = \tau_u^o \tilde{\beta}_d \tilde{\Omega}_{dec}^{\max} \frac{32GC_d L^2}{9\pi k_B T n_k^2} \quad (28)$$

Burada  $\tilde{\beta}_d$  kink-dekoratör atomu arasındaki karşılıklı etkileşim parametresine tekabül eder, ve  $C_d$  ise orta konumdaki kinklerin hemen civarındaki ortalama dekoratör atomları konsantrasyonunu gösterir. Keza zikretmek gerekir ki,  $f_0$  efektif frekansı, tayfin tepe

noktası sıcaklığı  $T_p$  ile eksitasyon frekansı arasındaki Arrhenius grafiğinden elde edilebilir. Bu bulgu teorik olarak elde ettiğimiz şu formülle mukayese edilebilir:  $f_o = 1/2\pi\tau_{ddp}^{\infty}$ , burada  $\tau_{ddp}^{\infty}$  parametresi  $\tau_{host}^{\infty}$  veya  $\tau_{dec}^{\infty}$  on-eksponensiyel faktörleriyle ikame edilebilir, ilgili olduğumuz dislokasyon sönüm olayına bağlı olarak, yani yaygın ara-ikame atomları veya lokalize olmuş dekoratör atomları gibi.

Şu noktayı belirtmekte yarar var; deney malzemesinin (numune) İç Sürtünme Katsayısı ile bu olayı simüle eden diferensiyel denklemler takımının,  $Q^{-1}$  faktörü arasında çok önemli bir ilişki vardır, ve bu da bizler tarafından daha önce yayınlanmıştır [30], şöyle ki:

$$Q_{sample}^{-1} = \left\{ \frac{2\Lambda G b^2 L^2}{\pi^2 S_o^{el}} \right\} Q_{ddp}^{-1} \quad (29)$$

yukarıdaki formülde, arzu edilen duruma göre,  $Q_{ddp}^{-1}$  ya yaygın ara-ikame atomlardan dolayı ortaya çıkan dislokasyon sönüm katsayısını,  $Q_u^{-1}$ , veya dekaratör atomları ile ilişkili dislokasyon sönüm katsayısını,  $Q_{dec}^{-1}$  göstermektedir.  $\Lambda$  sembolü ise numunedeki dislokasyon yoğunluğudur. Büyük parantezler içindeki matematik ifade dislokasyon-nokta hata sisteminden dolayı ortaya çıkan İç Sürütünme Katsayısının doyum halindeki gevşeme şiddetini vermektedir, ve hali hazır durumda kink zincirinin kontinuum analitik [24] çözümünden,  $\pi^2/8$  faktörü kadar daha büyüktür. Dekorasyon tayfi aynı tip bir nokta hata için Snoek-Köster relaksasyon tayfına nazaran 82% kadarlık bir değerde doyuma ulaşmaktadır. Şu noktayı belirtelim ki Snoek-Köster tayfi her zaman uniform olarak yayılmış nokta hatalardan dolayı ortaya çıkmakta, ve teorik olarak 0.5 değerinde  $Q^{-1}$  doyuma ulaşmaktadır. Diğer taraftan daneli kink zinciri üzerinde kurulan bilgisayar simülasyonu işbu doyumun 0.52 gerçekleştiğini göstermektedir, ve buda analitik değere fevkalade yakın bulunmaktadır.[24]

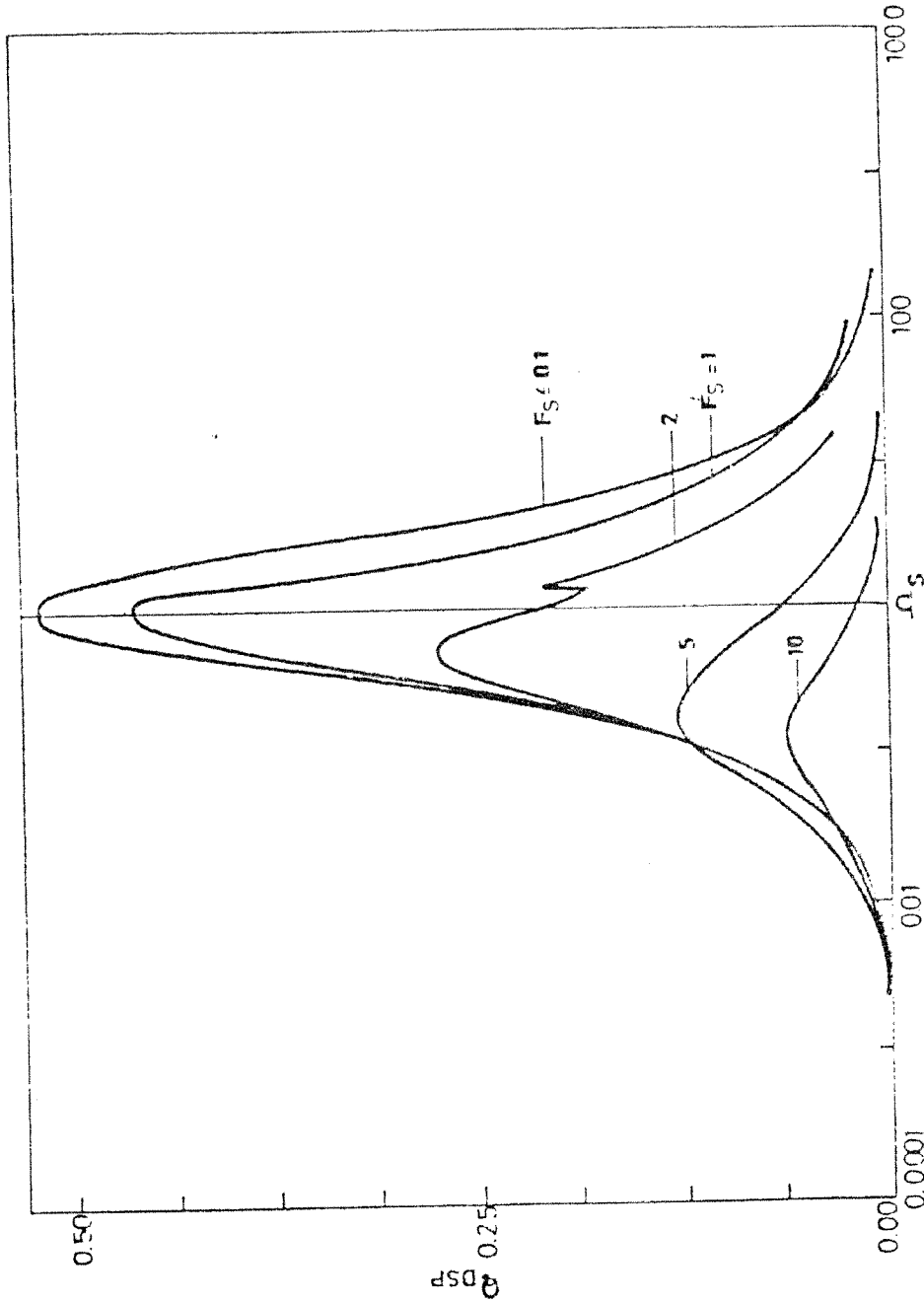


## 5.2. GÜC KAYIPLARI İLE İLGİLİ SONUÇLAR

Şekil (6)' de İç Sürtünme Katsayısı normalize olmuş Snoek gevşeme zamanına,  $\tilde{\tau}_s = \tau_s \omega$  göre veya diğer bir deyişle ters sıcaklığa göre yarı logaritmik ölçekte plotlanmıştır. Burada ağır sönüm bölgesi dediğimiz kesimden, mühtelif normalize gerilim amplitüdüleri,  $F_s$ , kullanılmıştır. Bu şekilden hemen görüleceği üzere, sistem anomalous dediğimiz bir gerilim amplitüdü bağımlılığı göstermektedir. Normal gerilim amplitüdü bağımlılığında <İç Sürtünme Katsayısı> tepe değerinin gerilim şiddeti ile orantılı olarak artması gerekmektedir. Normal gerilim (stress) bağımlılığında, gerilim amplitüdü muayyen bir eşik değerinin (threshold) üstüne çıktığında, iç Sürtünme Katsayısında azalma gözlemlenmekte, ve tepe sıcaklığı ise sürekli olarak düşük sıcaklıklara doğru kayma yapmaktadır. Eşik değerinin ki bu da ara-ikame atomlarının yoğunluğu ile orantılıdır, altındaki gerilimlerde dislokasyon sönümleri bir doyum (saturation) haline ulaşmaktadır. Bu şekildeki graflardan birinde görülen iç Sürtünme Katsayısındaki ani sıçrama olayı, normalize edilmiş gerilim amplitüdünün  $F_s = 2$  değeri için çok belirgin bir şekilde ortaya çıkmakta, ve kinkin etrafını çeviren atmosferi yırtması olayı [33] ile direkt ilişki içerisinde bulunmaktadır.

Doyum haline ulaşmış dislokasyon sönüm eğrisinin, tam tepe noktasına tekabül eden, normalize olmuş gevşeme frekansında,  $\Omega_B=1$ , güç spektrumu yoğunluğu mühtelif gerilim amplitüdüleri için alınmış, ve Şekil (7)' de plot edilmiştir. Bu şekilden açıkca görüleceği üzere, tekli (odd) harmonik jenerasyonu gayet keskin tepeçikler şeklinde kendini göstermekte, ve kink zincirinin tabii osilasyon frekansının,  $\Omega_A=20$  hemen çivarında konumlanmaktadır. Bilhassa yüksek gerilim ( $F_s=10-25$ ) amplitüdülerinde, geniş-band (broad band) gürültü spektrumuna da raslanmaktadır. Çok daha yüksek gerilim amplitüdülerinde ( $F_s=50$ ) ise; sistem bir yandan tabii frekans çivarında çift harmonik jenerasyonu gösterirken, diğer yandan da yüksek şiddette gürültü bandı vermekte, ve tek harmoniklerin kayıp olduğu duruma doğru yönelmektedir.

ŞEKİL (6)



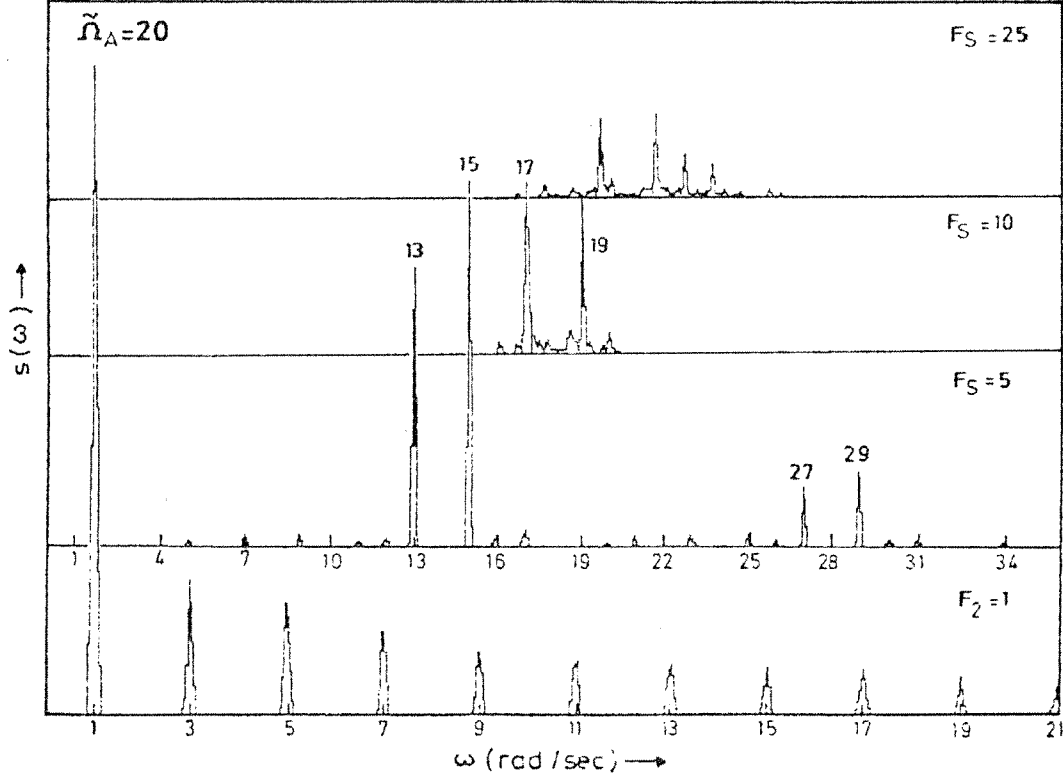
6. İç Sürtünme Katsayısı, mühtelif gerilim amplitüdüleri için, yarı-logarithmik skalada normalize edilmiş Snock relaksasyon zamanına göre plot edilmiştir. Bu şekil bize anormal gerilim amplitüdübağımlılığı göstermekte, ve yüksek ara-ikame atomları konsentrasyonlarında İç Sürtünme tayfinin doyuma ulaşıldığını işaret etmektedir.  $F_s=2$  değerine tekabül eden spektrumda görülen ani sıçrama gerçek olup kinkin atmosferi yırtması olayına karşılık gelmektedir. Parametreler:  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ , ve  $N_k=3$  (Normalize olmuş sistem rezonans frekansı,  $\tilde{\Omega}_A=10$ ).

Şekil (8)' de tabii sistem frekansı yüksek,  $\Omega_A=50$  olan bir kink zinciri ele alınmış, ve burada gene yüksek gerilim amplitüdlerinde genel olarak titreşim dinamiği incelenmiştir. Bu çalışma açıkça göstermektedirki eğer sürücünün frekansı sistemin tabii frekansının çok altında ise, işbu çizgisel olmayan sistem hiç bir tek harmonik jenerasyonu göstermemekte, ve sadece yüksek frekanslarda bazı çift harmonik jenerasyonu gerçekleştirir. Yanında, sistemin tabii frekansı civarında ( $\omega=50$ ) yüksek şiddette gürültü spektrumu (noise band) yaratmaktadır. Bu plotlama sisteminde frekans,  $\omega$  sürücünün frekansına göre normalize edilmiş frekans ölçeğini göstermektedir. Mesala  $\omega=1$  sürücü gerilimlerin frekansına karşılık gelmektedir.

Sistemin düşük sürücü frekanslarında yarattığı geniş band gürültü dinamiğinin ince detaylarını incelemek üzere, Şekil (9)' de yarı-logarithmik plotlama tekniği kullanılmıştır. Bu şekilde nisbeten mütevazi gerilim amplitüdlerinde (fakat hypersonik bölgede) bile kaotik davranışlar görülmektedir. Daha ziyade çizgisel plotlamada bariz bir şekilde ortaya çıkan keskin tayflar veya çizgiler bize Feigenbaum [41] karakterinde bazı periodik hallerin de (states) mevcudiyetini haber vermektedir.

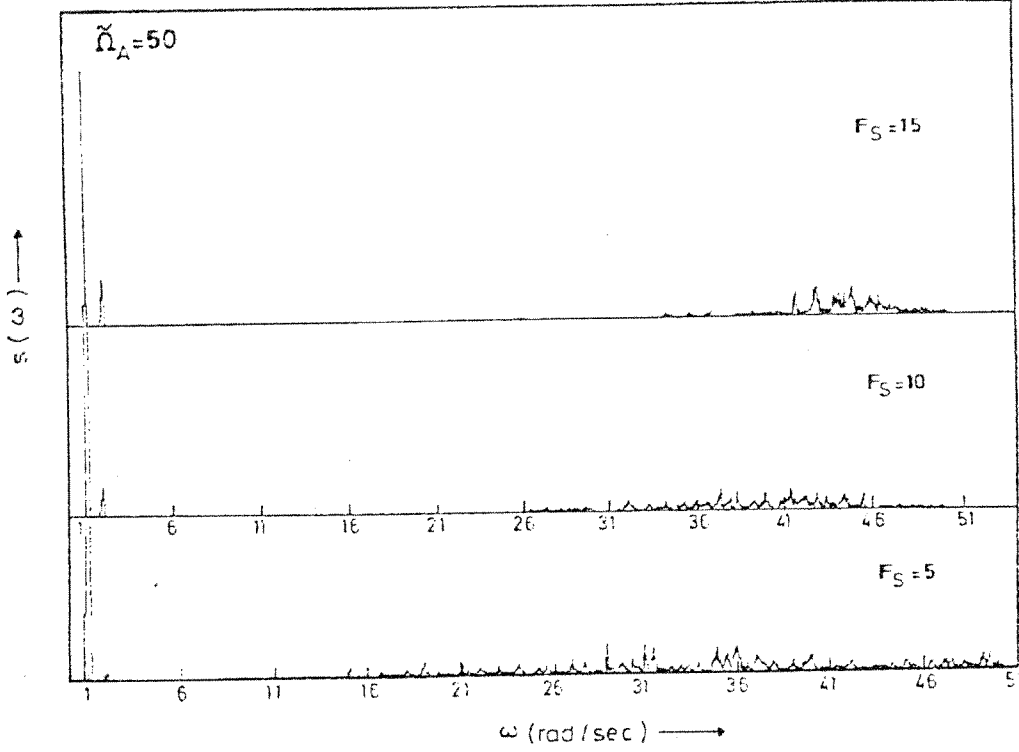
Sonuç olarak şu söylemek mümkündür ki; kuvvetli olarak güc kayıplarına uğrayan çizgisel olmayan sistemlerde, sadece harmonik jenerasyonu değil ve aynı zamanda yüksek sürücü kuvvetlerinde kaotik titreşimlere de raslanmaktadır.[42,43 ]

ŞEKİL (7)



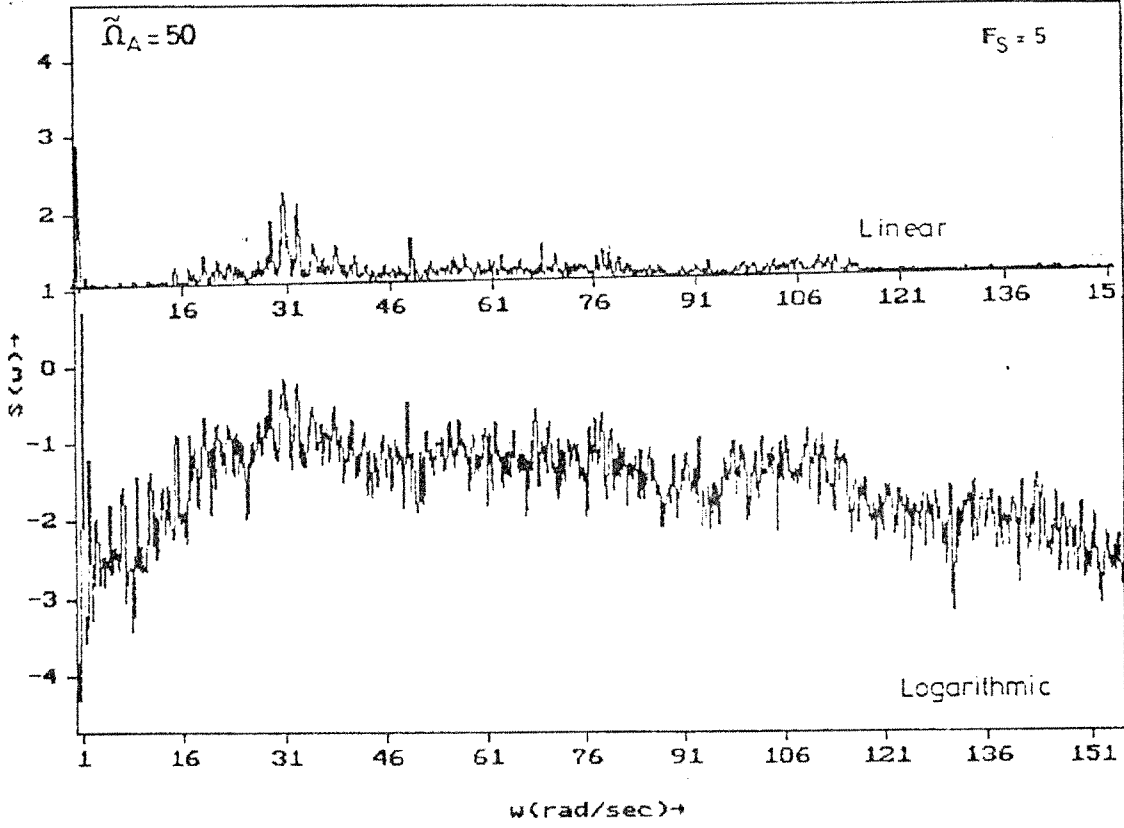
7. Güç spektral densitesi,  $S(\omega)$  normalize olmuş frekansa,  $\omega$  göre (dış sürücü frekansı) muhtelif gerilim amplitüdlerine,  $F_s$  için plot edilmiştir. Bu şekil sistemin tabii frekansı ( $\tilde{\Omega}_A=20$ ) civarında tek-harmoniklerin jenerel olduğunu göstermektedir. Bu çalışmalarda nisbeten mütevazi gerilim amplitüdüleri kullanılmıştır. Çok yüksek gerilim amplitüdlerinde geniş band gürültü spektrumu ve buna bindirilmiş gayet keskin tayfların ortaya çıktığı gözlenmektedir. Parametreler:  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ ,  $N_k=3$  (data kayıtları  $\tilde{\Omega}_B=1$  değerinde alınmıştır).

ŞEKİL (8)



8. Güç spektral densitesi,  $S(\omega)$  normalize olmuş frekansa,  $\omega$  göre (dış sürücü frekansı) muhtelif gerilim amplitüdlerine,  $F_s$  için plot edilmiştir. Bu deneylerde çok yüksek sistem tabii frekansı kullanılmıştır, ( $\tilde{\Omega}_A=50$ ). Bu şekil bize tek-harmoniklerin tamamen silindiğini, ve yerlerine geniş band gürültü spektrumlarının oluştuğunu göstermektedir. Parametreler;  $F_{bias}=0$ ,  $L=100$ ,  $N_k=3$  (data  $\tilde{\Omega}_B=1$  değerinde kayıt edilmiştir).

## ŞEKİL (9)



9. Güç spektral densitesi,  $S(\omega)$  normalize olmuş frekansa,  $\omega$  göre (dış sürücü frekansı) ve mütevazi bir gerilim amplitüdünde,  $F_s = 5$  yarı-logarithmik ölçek kullanılarak plot edilmiştir. Sistemde kullanılan sürücü frekansı, ( $\tilde{\Omega}_A=50$  çok düşük olup relaksasyon modundaki bir çalışmaya tekabül etmektedir. Bu şekil geniş band gürültü spektrumu jenerasyonu yanında, buna bindirilmiş konumda bazı gayet keskin hat tayflarının ortaya çıktığını göstermektedir. Parametreler;  $F_{bias}=0, L=100, N_k=3$  ( data kayıtları şu değerde alınmıştır;  $\Omega_B=1$  ), ve yumuşatma indeksi (the smoothing index) olarak 2 seçilmiştir).

## VI. GENEL DEĞERLENDİRME

### 6.1. KINK MOBİLİTESİ

Snoek-Köster diye adlandırılan dislokasyon sönüm olayı ile ilgili olup da, literatürde en çok kabul edilen model, Seeger [8] tarafından öne sürülmüştür. Bu teoriye göre SK relaksasyonu dislokasyonlar üzerinde oluşan termal kink çiftlerinin, malzemede mevcut yabancı (foreign) atomlarla karşılıklı etkileşinden dolayı ortaya çıkmaktadır. Fiziksel olarak işbu teoride en önemli parametre, kink mobilitesi (tersinir drag katsayısı) dir, ve bu da yabancı atomların (interstitial veya substitutional) mevcudiyeti ile fevkalade etkilenmekte ve adeta olayı kontrol edilmektedir. Seeger [8], bu parametrenin direkt hesaplanmasının fevkalade güç olduğunu sezinliyerek, damping prosesinin ana hatları hakkında bir fikir verebilmek için, şu ilişkiyi *ad hoc* olarak teklif etmiştir;  $\mu_k \approx D' / C_d k_B T$  (orijinal olarak Schoeck tarafından teklif edilmiştir, [19] ). Daha sonraları [33,34], adı geçen araştırmacı Einstein-Nerst ilişkisini,  $\mu_k \approx D_k / k_B T$  kullanarak mobilitiyeyi kink difuzivitesi cinsinden yazmayı denemiştir. Burada da gene *ad hoc* olarak şu ilişkileri zaman zaman makalelerinde kullanmaktadır;

$$D_K = (\lambda_1 - \lambda_2)^2 \exp(-H_k^M / k_B T) / \tau^s C_d , \quad (30)$$

veya

$$D_k = \exp(-H_k^M / k_B T) / \tau^s C_d . \quad (31)$$

Çok yakın bir geçmişte, Seeger ve ortak çalışanları [35], kink difuzivitesi ile atomik difuzyon katsayısı arasındaki ilişki için, yeni bir ifadeyi daha denemişlerdir, şöyleki.:

$$D_k^{SK} = (\beta C_d)^{-1} D' \quad \text{burada} \quad \beta \quad \text{kapling sabitesi olup dislokasyonlarla ilgili ara-ikame}$$

atomlarının karşılıklı etkileşimini içermektedir, ve ayrıca sıcaklıktan etkilenmediğini varsaymışlardır.

Bizim gerek çizgisel [23,25], ve gerekse çizgisel olmayan teorilerle geliştirdiğimiz kink-sürünme [28] hadisesi göstermiştir ki, yukarıdaki *ad hoc* formullerin hepsi de temelden hatalıdır. Mesala, sonuncu formül şu şekilde modifiye edilerek,  $D_k^{SK} = (k_B T)^2 (\beta C_d)^{-1} D^i$  hiç olmazsa çizgisel viskosite rejimi için gerçeli bir ifade yazılabilirdi. Bu viskosite rejiminde Snoek-Köster spektrumlarının tepe noktası yüksekliği tatbik edilen dış gerilimlerinin amplitüdüleri ile değişmezler. Reference. [23'] de zikrettiğimiz veçhile, yukarıdaki doğru sıcaklık bağıntısı, nümerik olarak küçük bir modifikasyon yaparak SK relaksasyon tayfının efektif enthalpisinde  $2k_B T$  kadar bir katkıda bulunmaktadır. Oktahedral [23] ve tetrahedral [25] ikame atomları için, Oğurtani ve Seeger'in geliştirdiği çizgisel teoriye göre birinci mertebeden takribiyet arzeden şu ifade mevcuttur;  $\beta = \left[ a_o^6 C_{44}^2 / 324 \right] \tilde{\beta}$ . Bu ifade de hacim merkezli kubik HMK yapılarında  $\{110\}$  düzlemindeki tek kinkler için caridir, ve kinki taşıyan dislokasyonun karakterine, saf köşe veya saf vida tiplerinde olması gibi, bağımlı değildir.  $\tilde{\beta}$  ise kink-ikame atomları arasındaki karşılıklı etkileşim parametresi olup aşağıdaki formülle hesaplanabilir, ve bilhassa oktahedral yahut ağır ikame atomları dediğimiz, C, N, O için büyük bir hassasiyetle geçerlidir:

$$\tilde{\beta} = \left\{ \frac{1}{9} Tr^2 \lambda * \beta_1 + (\lambda_1 - \lambda_2)^2 (\beta_2 + \beta_3) \right\}. \quad (32)$$

Burada parantez içersinde ki birinci terim dilatasyondan [44] mütevellit (Cottrell Atmosferi) viskosite katkısı, ve ikinci terim ise sabit hacimli hareket (saf makaslama) ile ilişkili viskosite katkısını göstermektedir. Bizim terminolojimize göre ikinci viskosite katkısı Snoek atmosferini teşkil eden ara-ikame atomlarından doğmaktadır.  $\beta_i$  katsayısı mühtelif karakterdeki dislokasyon-kink konfigürasyonları için HMK metallerde, izotropik veya



anizotropik elastik ortamlarda hesap edilmiştir (Bak: Tablo IV, Ref.23). Keza aynı tip hesaplamalar tetrahedral ikame atomları için de yapılmıştır (Bak: Tablo VIII, Ref.25).

Bu sayısal çalışmalar bize göstermiştir ki **kink genişliği** viskosite katsayısına ( $\beta_i$  tayini dolayısıyla) çok önemli bir şekilde etkilemde bulunmakta, ve bu bilhassa vida tipi dislokasyonlar üzerinde konumlanmış kinkler civarında yoğunlaşan küresel ara-ikame atomlarının meydana getirdiği **Cottrell atmosferinin** mevcudiyeti halinde, çok önemli bir fiziksel parametre olarak ortaya çıkmaktadır. Ani kinkler (**abrupt**) durumunda ise, yani kink genişliğinin sıfıra ulaştığı hallerde, sadece izotropik etkileşim değil (**akustik mod**), ve aynı zamanda saf kesme tipi etkileşim (akustik mod), kink taşıyan dislokasyonun karakteri ne olursa olsun (köşe veya vida), viskositin tayininde çok önemli role haizdir . Bundan dolayı, kink genişliğini bilmeksizin ( ki bu parametre kink formasyon enthalpisi ile ters orantılıdır ) , küresel ara-ikame atomların dolayı oluşan SK relaksasyonun sadece kuvvetli köşe komponentine haiz dislokasyonlar tarafından yaratılacağı, ve burada vida dislokasyonun bir rol oynayacağını speküle etmek mümkün değildir. Mesala, Hauptman [42] ve ortak çalışanlarının Palladiumda gözlemledikleri Hidrojen esaslı Snoek-Köster spektrumunun köşe dislokasyonlarından dolayı oluştuğunun varsayımı gibi. Bu alaşım sisteminde, kink genişliği vida dislokasyonlar için köşe dilokasyonlara nazaran takriben faktör iki kadar daha azdır. Dolayısıyla, bu musait şartlar altında Hidrojen SK relaksasyon tepeciğinin vida dislokasyonlar üzerinde oluşan kink-çiftlerinden mutevellit hiusule geldiğini söylemek daha gerçekçidir. Bunu destekleyen diğer bir hususta hidrojen ara-ikame atomları tarafından indüklenen ilave relaksasyon tayfinin, aynı numunedeki Bordoni tayfinin yüksek sıcaklık kanadında zuhur etmesidir. Buna benzer durum, Tanaka ve arkadaşlarının [37] nikelde yaptıkları hidrojen şarjı deneylerinde çok daha vuzuh olarak ortaya çıkmaktadır, çünkü bu metalde hidrojenin solubilitesi çok yüksektir, dolayısıyla konsentrasyonla oynamak çok daha rahattir, şöyleki; hidrojen konsentrasyonu artıkça, ilk olarak şarjsız numunede deformasyon sonucu ortaya çıkan ve vida dislokasyonlardaki termal kink-çiftlerin oluşuma atfedilen Bordoni tayfi,  $P_d$  yavaş yavaş şiddetini kaybetmekte, ve yerini  $P_{dH}$  (hidrojen SK) tipi bir relaksasyon tepeciğinin  $P_d$  nazaran çok daha yüksek sıcaklıklarda husule gelmesini intaç ettirmektedir.

## 6.2. SONUÇLAR VE ÖZETLEME

Gerek yaygın ve gerekse lokalize olmuş (dekoratör) nokta hatalarının kinklerle olan karşılıklı etkileşimi sonucunda ortaya çıkan *Dislokasyon İç Sürtünme olayı*, daneli (discrete) kink zinciri modeli kullanılarak ve bunlar arasında kink-kink etkileşimini de hesaba katarak kompüterde simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Hem dinamik İç Sürtünme Katsayısı, ve hemde Güç Spektral Yoğunluk detaylı bir şekilde irdelenmiştir.

*Hali hazır çok detaylı olarak yapılan kompüter deneyleri bize göstermektedir ki;*

1. Dekoratör atomları yüksek difüzyon aktivasyon enerjisine ve/veya daha büyük yapışma özelliğine sahip oldukları takdirde, yaygın (ana) ara-ikame atomlarının oluşturduğu dislokasyon iç sürtünme tayfinin tepesi daha düşük sıcaklıklara doğru kalmakta, ve aynı zamanda şiddetinde bir azalma husule gelmektedir.

2. Dekoratör atomlarından (lokalize nokta hata) dolayı oluşan dislokasyon iç sürtünme tayfi, difüzyon aktivasyon entalpisi veya kinklere yapışma kapasitesi ana-ikame atomlarına nazaran (diğer bir tabirle yaygın) çok daha yüksek seviyelerde bulunan dekoratör atom çeşitleri için seçkin ve ayrık bir şekilde müşahede edilebilir.

3. Küçük difüzyon aktivasyon veya yapışma gücü farkları için, yaygın nokta hatalardan dolayı oluşan ana-tayfta iki ayrışma husule gelir, şöyleki: esas tayf (main peak) ve peyk tayf (subsidiary peak) olarak isimlendirmek olasılığı ile. Peyk tayf esas tayfin sol üst köşesinde (yüksek sıcaklık omuzu) yer almakta, zamanla dekoratör tayfi güçlendikçe ortadan kalkmaktadır. Fakat esas tayf nihai pozisyonda, fevakalade stabil bir konumda kalmaktadır. Esas tayfin tepesi,  $\tilde{\Omega}_u^{\max} = 4$ , ve relaksasyon şiddeti ise  $Q_u^{-1} = 1/5$  dir, ve bu da analitik teoremin önsezgisi gibi dislokasyon segmenti boyundaki faktör ikilik bir kısaltmanın karesinin yaratacağı şiddet indirimine aynen karşılık gelmektedir

4. Dekorator tayf tepciğinin gerek yüksekliđi (relaksasyon siddeti) ve gerekse normalize olmuş sıcaklık eksenindeki pozisyonu kink yoğunluđunun çok hassas bir şekilde fonksiyonudur.

5. Kink zincirinden oluşan sistem çok yüksek gerilim amplitüdlerinde tahrik edildiđi takdirde geniş band spektrumlu, gelişi güzel (random) gürültü jenerasyonu yapmakta, ve kaotik bir dinamik yapı göstermektedir.

En nihayet, yukarıdaki bilgisayar deneylerinin sonuçlarının ışığı altında şunu söylemek mümkündür; eldeki bilgisayar modellemesini ve verilerini, yalnız geometrik kink zinciri için deđil ve aynı zamanda termal kink ve geometrik kink karışımından oluşan sistemlere de aynen uygulamak mümkündür, yeterki kink yoğunluđundaki, bir eksitasyon periodu süresine tekabül eden zaman aralığındaki deđişim çok az düzeyde olsun. Diđer bir deđişle, termal kinklerin jenerasyon ve anihilasyon frekanları sürücünün eksitasyon frekansına nazaran çok büyük olsun. Buda, gerek dekorator ve gerekse yaygın ikame atomları ile ilişkili dislokasyon iç sürtünme spektrumlarının tepe sıcaklıklarının **Gama** ve **Alfa** tepelerinin [43] sıcaklıklarının çok daha üstünde olması gerektiđini göstermektedir. Böylece, aynen bu raporda verilen matematik yapıyı muhafaza ederek, termal olarak yaratılmış kinkler-çiftlerinden [44] oluşan kink zincirin ara-ikame atomları ile olan etkileşimleri sonucu ortaya çıkabilecek damping spektrumunu bilgisayarda simule etmek mümkün olabilecektir,. Bu esaslar içersinde bizim bilgisayar deneylerimizin verileri ile Seeger'in **SK relaksasyonu** için [38,40] oluşturduđu kink-çiftleri teorisinin verilerinin tam bir uygunluk içinde olduđu müşahede edebiliriz (Mukayese et: Denklem (22) ile Seeger-Denklem (36) ve Denklem (24) ile Seeger-Denklem (30-31), Referans.38, ve keza Referans 40.'deki Tablo.I).

Çok enteransıdır ki, bizim bilgisayar deneylerinin olguları ile Tanaka ve yardımcılarının [37] plastik olarak deforme edilmiş, ve hidrojenle şarj olunmuş Nikel numunelerdeki İç Sürtünme laboratuvar deneyleri sonuçları fevkalade benzerlikler göstermektedir. Tanaka bu deneyleri ile açıkca göstermiştir ki, nikel metali içersinde katı

eriyik halinde bulunan hidrojen ara-ikame atomları metalin zati (intrinsic) tayfını bastırmakta, ve daha yukarı sıcaklıklarda yeni bir iç sürtünme tayfı oluşturmaktadır. İlk tayf Bordoni tipinde olduğu, ve yeni oluşan tayfında SK tipi bir relaksasyon tayfı olduğu sonucuna adı geçen araştırmacılar varmışlardır. Şöyleki, iki tip sürüklenme mekanizması çalışmaktadır; birinci mekanizma dislokasyon boyunca uniform olarak etkileşim dağılımı yapmakta, ve ikinci mekanizma ise lokalize olmuş daneli bir yapı içerisinde kendini göstermektedir. Bu mekanizmalar ve oluşturdıkları iki ayrı tip tepelikler, o zaman içerisindeki mevcut teorilerle [8,13,48,49] izah edilmeye uğraşmıştır. Halbuki teoriler kendi içerisinde çok belirgin bazı tutarsızlıkları vardır. Tanaka tarafından [37] elde edilen Hidrojen ile ilişkili tayfın efektif aktivasyon enerjisi  $(0.50 \pm 0.05 \text{ eV})$  bizim çalışmamızda geliştirilmiş Denklem (26) ile tam bir uyum içerisinde. Burada şu datayı kullanabiliriz:  $H_d^b = 0.14 \text{ eV}$ ,  $2H_k = 0.16 \text{ eV}$ , ve  $H_d^M = 0.19 \text{ eV}$ .

## REFERANSLAR

1. J.S. Koehler, in Imperfections in Nearly Perfect Crystals, edited by W. Shockley (Wiley, New York, 1952), p.197.
2. A. V. Granato and K. Lucke, J. Appl. Phys.27, 583 (1956).
3. A. V. Granato and K. Lucke, J. Appl. Phys.27, 789 (1956).
4. H. M. Simpson, A. Sosin, and D. F. Johnson, J. Appl. Phys.44, 1435 (1973).
5. H. M. Simpson, A. Sosin, and D. F. Johnson, Phys. Rev. B 5, 1393 (1972).
6. L. Seiffert, H. M. Simpson, and Sosin, J. Appl.Phys. 44, 3404 (1973).
7. J. P. Hirth, Scr. Metall. 16, 221 (1982).
8. A. Seeger, Phys. Status solidi (a) 55, 547 (1979).
9. J. P. Hirth, Metall. Trans. 11A, 861 (1980).
10. T. Ogurtani and A. Seeger, Phys. Rev. B31, 5044 (1985).
11. T. Ogurtani and A. Seeger (unpublished).
12. T. Ogurtani, Phys. Status Solidi (a) 128, 69 (1991).
13. A. Seeger and P. Schiller, Acta Metall. 10, 348 (1962).
14. T. Suzuki and C. Elbaum, J. Appl. Phys. 35, 1439 (1964).
15. K. Lucke and A. V. Granato, Phys. Rev. B24, 6991 (1981).
16. A. V. Granato and K. Lucke, Phys. Rev. B24, 7007 (1981).
17. H. M. Simpson and A. Sosin, Phys. Rev. B 16, 1489 (1977).
18. H. M. Simpson and A. Sosin, Phys. Rev. B 5, 1382 (1972).
19. G. Schoeck, Acta Metall. 16, 221 (1963).
20. A. D. Brailsford, in Dislocation Modeling of Physical Systems, edited by M.F. Ashby et al. (Pergamon, New York, 1981), p.430.
21. T. Ogurtani, Phys. Rev. B 21, 4373 (1980).
22. T. Ogurtani and A. Seeger, Phys. Rev. B 29, 1728 (1984).
23. T. Ogurtani and A. Seeger, J. Appl. Phys. 57, 193 (1985).
24. T. Ogurtani, Phys. Rev. B 40, 2873 (1989).
25. T. Ogurtani and A. Seeger, J. Appl. Phys. 58, 4102 (1985).

26. A. Seeger and P. Schiller, *Physical Acoustics*, Ed. W. P. Mason, Vol.3, (Academic Press, New York, 1966),p.361.
27. L. M. Brown, *Canad. J. Phys.* 45, 863 (1967).
28. T. Ogurtani and A. Seeger, *J. Appl.Phys.* 62, 852 (1987).
29. T. Ogurtani and A. Seeger, *J. Appl. Phys.* 62, 3704 (1987).
30. T. Ogurtani and A. Seeger, *J. Appl. Phys.* 65, 4679 (1989)
31. N. Bloembergen, *Nonlinear Optics* (Benjamin, New York, 1965).
32. B. A. Huberman and J.P.Crutchfield, *Phys. Rev.lett.*43, 1743 (1979).
33. T.O.Ogurtani, *J.Appl.Phys.*66, 5274 (1989).
34. D.E.Newland, *Random Vibration and Spectral Analysis* (John Wiley, New York, 1984).
35. D. M. Young and R. T. Gregory, *A Survey of Numerical Mathematics*, Vol.1 (Addison Wesley, New York, 1973),p.488.
36. J.D. Lambert, *Computational Methods in Ordinary Differential Equations* (J. Wiley, London, 1973), p.143.
37. K. Tanaka, T. Inukai, K. Uchida, and M. Yanada, *J. Appl. Phys.* 54. 6890 (1983).
38. A. Seeger, M. Weller, J. Diehl, Z. L. Pan, J. Zhang, and T. S. Ke, *Z.Metallk.* 73, 1 (1962).
39. A. Seeger, *J. de Physique*, 42,C5-201 (1981).
40. A. Seeger, *Scripta Met.*, 16, 241 (1982)
41. M. Feigenbaum, *J. Stat. Phys.*19, 25 (1978).
42. F.J. Di Salvo and T.M.Rice, *Phys. Today* 32, No.4, 32 (1979).
43. J. B. Boyce and B. A. Huberman, *Phys. Rep.* 51, 189 (1979).
44. A. C. Eringen, *Mechanics of Continua* (Krieger, New York, 1980), p.253.
45. G. Hauptmann, W. Ulfert, H. Kronmuller, and A. Seeger, *Z. Metallk.* 83, 457 (1992).
46. G. Alefeld, *J. Appl. Phys.* 36, 2642 (1965).
47. J. Baur, W. Benoit, and H. Schultz, *Acta Metall.* 37, 1159, 1989.
48. K. Lucke and A.V. Granato, *Phys. Rev. B* 24, 6991 (1981).
49. A. V. Granato and K. Lucke, *Phys. Rev. B* 24, 7007 (1981).

**LUMP.PAS**

```

{$n+}
{version 2}
program
  lumpam5;
uses
  crt, graph;
const
  ndata=8192;
type
  viewporttype=record
    x1,y1,x2,y2:double;
  end;
var
  viewportwidth,viewportheight,i,j,k,l,mlc,gd,gm,hght,
  wdth,nl,nk,dumi,its,nls,osl,osr,kbw,ist,iw,it,rec,
  recc,nos,nskip,ntsc,nlsk,rndch,page,npage,logq,pp,
  nlf :integer;
  force,kp,xm,facto,kpb,dw,dlw,xf,kkk0,kpa,xb,idme,id,
  idi,f,fbias,vm,tf,pil,ntp,dtdiv,m,ql,nd,oab,dt,kkb,
  ll,fsb,fbia,os,osb,ose,osl,os2,b,nkk,d0,d01,t,
  tl,sl,x,y,cxmean,cvmean,sfac,osmul,osm,osms,osmul,
  expmul,sos,soos,osmo,osmi,endcheck,mulfac,rndrng,
  sdt,dtds,dtps,dtd,dtpp,ossl,oss2 :double;
  windowwidth>windowheight :array[0..1] of double;
  x0,v0,ff,r1,r2,r3,r4,r5,r6,r11,r12,r13,r14,r15,r16 :array[1..5,1..5] of double;
  ff1,prx,prv,crx,crv,osd,ost :array[1..5] of double;
  wincoor :array[0..1] of viewporttype;
  viewcoor :viewporttype;
  phs,dis :text;
  ss,filename,ssl,prost :string;
  duch,proch :char;
  state :record
    m,t :double;
    velo,disp,forc :array[1..5,1..5] of double;
  end;

function mody(yr:double;vpo:boolean):integer;
var
  yd:integer;
begin
  yd:=round(viewportheight*((wincoor[page].y1-yr)/windowheight[page]+1));
  if vpo then mody:=yd else mody:=yd+viewcoor.y1;
end;

function modx(xr:double;vpo:boolean):integer;
var
  xd:integer;
begin
  xd:=round(viewportwidth*(xr-wincoor[page].x1)/windowwidth[page]);
  if vpo then modx:=xd else modx:=xd+viewcoor.x1;
end;

procedure setusercoord(xd,yd,xu,yu:double;page:byte);
begin
  windowwidth[page]:=xu-xd;
  windowheight[page]:=yu-yd;
  with wincoor[page] do begin
    x1:=xd;
    x2:=xu;
    y1:=yd;
    y2:=yu;
  end;
end;

function power(base,top:double):double;
begin
  power:=exp(top*ln(base));
end;

function log(base,top:double):double;
begin
  log:=ln(top)/ln(base);
end;

procedure printxy(x,y,len,dec:integer;tit:string;num:double);
begin

```

```

    str(num:len:dec,ss);
    outtextxy(x,y,tit+ss);
end;
procedure usepage(pn:integer);
begin
    page:=pn;
    setactivepage(pn);
end;
procedure putparam;
begin
    outtextxy(0,1,'Program : LUMPAM5');
    outtextxy(35*width,1,'Session ID: '+filename);
    outtextxy(width,hght+1,'Mode =' +prost);
    printxy(width,2*hght+1,3,1,'ND.NLF=',nd+nlf/10);
    printxy(width,3*hght+1,6,2,'Mscale=',mulfac);
    printxy(width,4*hght+1,6,2,'Oab =' ,oab);
    printxy(width,5*hght+1,3,0,'NL =' ,nl);
    printxy(16*width,hght+1,6,2,'Kapa =' ,kkb);
    printxy(16*width,2*hght+1,6,2,'LL =' ,ll);
    printxy(16*width,3*hght+1,6,2,'Fsb =' ,fsb);
    printxy(16*width,4*hght+1,6,2,'Fbia =' ,fbia);
    printxy(16*width,5*hght+1,6,2,'A/A =' ,kp);
    printxy(31*width,hght+1,3,0,'Nkink =' ,nk);
    printxy(31*width,2*hght+1,3,0,'Random=',rndch);
    printxy(31*width,3*hght+1,7,3,'RndRng=',log(10,rndrng));
    if proch='P' then printxy(31*width,4*hght+1,7,3,'Os =' ,log(10,os));
    if proch='J' then begin
        printxy(31*width,4*hght+1,7,3,'Osstrt=',log(10,osb));
        printxy(31*width,5*hght+1,7,3,'Osend =' ,log(10,ose));
    end;
    if proch='S' then begin
        printxy(31*width,4*hght+1,7,3,'Osslow=',log(10,ossl));
        printxy(31*width,5*hght+1,3,0,'NLSlow=',nls);
        for i:=1 to iw+1 do begin
            str(log(10,osd[i]):7:3,ss);
            if i=1 then ss:='Osstrt='+ss
            else
                if i=iw+1 then ss:='Osend =' +ss
                else begin
                    str(i-1:1,ssl);
                    ss:='Osret'+ssl+'='+ss;
                end;
            outtextxy(46*width,i*hght+1,ss);
        end;
        if its=1 then begin
            for i:=1 to it do begin
                str(i:1,ss);
                printxy(61*width,i*hght+1,7,3,'Osrec'+ss+'=',log(10,ost[i]));
            end;
        end;
    end;
end;
procedure writephsinfo;
var
    pn:integer;
begin
    if proch='P' then usepage(0) else usepage(1);
    setviewport(0,0,getmaxx,getmaxy,clipon);
    with viewcoor do begin
        bar(x1,y1-hght-1,x2,y1-1);
        str(log(10,os):1:8,ss);
        outtextxy(x1,y1-hght-1,'log(Os)='+ss);
        str(1/sfac:1:8,ss);
        outtextxy(x1+20*width,y1-hght-1,'Scale='+ss);
        if (kbw>nk) or (kbw<1) then ss:='average' else str(kbw:2,ss);
        outtextxy(x1+45*width,y1-hght-1,'Kink='+ss);
        setviewport(x1,y1,x2,y2,clipon);
    end;
end;
procedure writedisinfo;
begin
    usepage(0);
end;

```



```

setviewport(0,0,getmaxx,getmaxy,clipon);
with viewcoor do begin
  bar(x1,y1-hght-1,x2,y1-1);
  str(log(10,os):1:8,ss);
  outtextxy(x1,y1-hght-1,'log(Os)='+ss);
  str(dt:1:12,ss);
  outtextxy(x1+20*width,y1-hght-1,'dt='+ss);
  str(pii:1:0,ss);
  outtextxy(x1+38*width,y1-hght-1,'spc='+ss);
  str(m:1:0,ss);
  outtextxy(x1+52*width,y1-hght-1,'s='+ss);
  setviewport(x1,y1,x2,y2,clipon);
end;
end;
function takechar(instr:string):char;
var
  s:char;
begin
  repeat
    s:=uppercase(readkey);
  until pos(s,instr)>0;
  takechar:=s;
end;
procedure putscope;
var
  c0:integer;
begin
  with viewcoor do begin
    rectangle(x1,y1,x2,y2);
    if page=1 then begin
      c0:=modx(0,false);
      line(c0,y1,c0,y2);
      c0:=mody(0,false);
      line(x1,c0,x2,c0);
    end;
  end;
end;
procedure erasescope;
begin
  if proch='P' then usepage(0) else usepage(1);
  clearviewport;
  setviewport(0,0,getmaxx,getmaxy,clipon);
  putscope;
  with viewcoor do setviewport(x1,y1,x2,y2,clipon);
end;
procedure putxscale(x1,x2,xs:double;xname:string);
var
  y:integer;
  x:double;
begin
  y:=viewcoor.y2;
  setttextjustify(centertext,toptext);
  for i:=0 to trunc((x2-x1)/xs) do begin
    x:=x1+i*xs;
    line(modx(x,false),y,modx(x,false),y+hght div 2);
    printxy(modx(x,false),y+hght,1,1,'',x);
  end;
  i:=modx(wincoor[page].x1+windowwidth[page]/2,false);
  j:=y+2*hght;
  outtextxy(i,j,xname+chr(26));
  setttextjustify(lefttext,toptext);
end;
procedure putyscale(y1,y2,ys:double;xname:string);
var
  x:integer;
  y:double;
begin
  x:=viewcoor.x1;
  setttextjustify(righttext,centertext);
  for i:=0 to trunc((y2-y1)/ys) do begin
    y:=y1+i*ys;
    line(x-width div 2,mody(y,false),x,mody(y,false));
  end;
end;

```

```

    printxy(x-wdth,mody(y,false),1,1,'',y);
end;
i:=x-5*wdth;
j:=mody(wincoor[page].y1>windowheight[page]/2,false);
settextstyle(defaultfont,vertdir,1);
outtextxy(i,j,xsname+chr(26));
settextstyle(defaultfont,horizdir,1);
settextjustify(lefttext,toptext);
end;
procedure keyhandle;
begin
    duch:=upcase(readkey);
    case duch of
        'B':begin
            pp:=1;
            usepage(1);
            writephsinfo;
        end;
        'E':begin
            pp:=0;
            writephsinfo;
        end;
        'P':begin
            setvisualpage(1);
            writephsinfo;
        end;
        'D':begin
            setvisualpage(0);
            writedisinfo;
            writephsinfo;
        end;
        'C':begin
            erasescope;
            writephsinfo;
        end;
        'A':begin
            sfac:=1/fsb/os;
            writephsinfo;
        end;
        'I':begin
            writedisinfo;
            writephsinfo;
        end;
        '+','-','*','/','.':begin
            case duch of
                '+':sfac:=sfac*2;
                '-':sfac:=sfac/2;
                '*':sfac:=sfac*10;
                '/':sfac:=sfac/10;
                '.':sfac:=1;
            end;
            writephsinfo;
        end;
        '0'..'9':begin
            val(duch,kbw,dumi);
            writephsinfo;
        end;
    end;
end;
procedure keyhandlep;
begin
    duch:=upcase(readkey);
    case duch of
        'C':begin
            erasescope;
            writephsinfo;
        end;
        'A':begin
            sfac:=1/fsb/os;
            writephsinfo;
        end;
        '+','-','*','/','.':begin

```



```

end;
procedure timestep;
begin
  if (os>=oss1) and (os<oss2) then
    begin
      osmul:=osms;
      nos:=nls;
      dtdiv:=dtds;
      dtp:=dtps;
    end
  else
    begin
      osmul:=osm;
      nos:=nl;
      dtdiv:=dtd;
      dtp:=dtp;
    end;
  t1:=2*oab*oab/(kkb*os);
  if t1>=0.1 then dt:=dtp else dt:=t1/dtdiv;
  pii:=round(2*pi/dt);
  dt:=2*pi/pii;
  endcheck:=nos*pii;
  if proch='S' then ossmul:=power(osmul,(1/endcheck));
end;
procedure changeos(mul:double);
begin
  os:=os*mul;
  dw:=os*d0;
  dlw:=dw*sqrt(kp);
  fbias:=fbia*os/(oab*oab);
  b:=os*kkb/(oab*oab);
  f:=os*fsb/(oab*oab);
end;
procedure savestate;
begin
  state.m:=m;
  state.t:=t;
  for l:=1 to 4 do
    for i:=1 to nk do begin
      state.disp[i,l]:=x0[i,l];
      state.velo[i,l]:=v0[i,l];
      state.forc[i,l]:=ff[i,l];
    end;
  end;
end;
procedure restorestate;
begin
  m:=state.m;
  t:=state.t;
  for l:=1 to 4 do
    for i:=1 to nk do begin
      x0[i,l]:=state.disp[i,l];
      v0[i,l]:=state.velo[i,l];
      ff[i,l]:=state.forc[i,l];
    end;
  end;
end;
procedure interact;
begin
  if nk=1 then
    force:=-2*kkk0*xm/sqr(sqr(2*xm/l1)-1)
  else
    if i=1 then begin
      if nlf=0 then
        facto:=((xf-kpb*xm)/2/dw+1)/sqr(xm/dlw+1)/sqr((xf-xm)/dw+1)
      else
        facto:=1;
      force:=kkk0*(xf-kpa*xm)*facto;
    end
  else
    if i=nk then begin
      if nlf=0 then
        facto:=((-xb+kpb*xm)/2/dw+1)/sqr(xm/dlw-1)/sqr((xm-xb)/dw+1)
      else

```

```

        facto:=1;
        force:=kkk0*(xb-kpa*xm)*facto;
    end
    else begin
        if nlf=0 then
            facto:=((xf-xb)/2/dw+1)/sqrt((xf-xm)/dw+1)/sqrt((xm-xb)/dw+1)
        else
            facto:=1;
            force:=kkk0*(xf-2*xm+xb)*facto;
        end;
        force:=force+f*sin(tf)+(1-exp(-tf/2))*fbias-b*vm/(1+nd*vm*vm)
    end;
procedure dissipate;
begin
    idme:=0;
    for i:=1 to nk do
        idme:=idme+crv[i]*crv[i]/(1+nd*crv[i]*crv[i]);
    id:=id+idme/nk;
end;
procedure runge_kutta;
begin
    m:=0; id:=0;
    for l:=1 to 3 do begin
        for i:=1 to nk do begin
            r1[i,l]:=dt*v0[i,l];
            xm:=x0[i,l];
            if i>1 then xb:=x0[i-1,l];
            if i<nk then xf:=x0[i+1,l];
            vm:=v0[i,l];
            tf:=t;
            interact;
            ff[i,l]:=force;
            r11[i,l]:=dt*force;
        end;
        for i:=1 to nk do begin
            r2[i,l]:=dt*(v0[i,l]+r11[i,l])/3;
            xm:=x0[i,l]+r1[i,l]/3;
            if i>1 then xb:=x0[i-1,l]+r1[i-1,l]/3;
            if i<nk then xf:=x0[i+1,l]+r1[i+1,l]/3;
            vm:=v0[i,l]+r11[i,l]/3;
            tf:=t+dt/3;
            interact;
            r12[i,l]:=dt*force;
        end;
        for i:=1 to nk do begin
            r3[i,l]:=dt*(v0[i,l]+(4*r11[i,l]+6*r12[i,l])/25);
            xm:=x0[i,l]+(4*r1[i,l]+6*r2[i,l])/25;
            if i>1 then xb:=x0[i-1,l]+(4*r1[i-1,l]+6*r2[i-1,l])/25;
            if i<nk then xf:=x0[i+1,l]+(4*r1[i+1,l]+6*r2[i+1,l])/25;
            vm:=v0[i,l]+(4*r11[i,l]+6*r12[i,l])/25;
            tf:=t+2*dt/5;
            interact;
            r13[i,l]:=dt*force;
        end;
        for i:=1 to nk do begin
            r4[i,l]:=dt*(v0[i,l]+(r11[i,l]-12*r12[i,l]+15*r13[i,l])/4);
            xm:=x0[i,l]+(r1[i,l]-12*r2[i,l]+15*r3[i,l])/4;
            if i>1 then xb:=x0[i-1,l]+(r1[i-1,l]-12*r2[i-1,l]+15*r3[i-1,l])/4;
            if i<nk then xf:=x0[i+1,l]+(r1[i+1,l]-12*r2[i+1,l]+15*r3[i+1,l])/4;
            vm:=v0[i,l]+(r11[i,l]-12*r12[i,l]+15*r13[i,l])/4;
            tf:=t+dt/2;
            interact;
            r14[i,l]:=dt*force;
        end;
        for i:=1 to nk do begin
            r5[i,l]:=dt*(v0[i,l]+(6*r11[i,l]+90*r12[i,l]-50*r13[i,l]+8*r14[i,l])/81);
            xm:=x0[i,l]+(6*r1[i,l]+90*r2[i,l]-50*r3[i,l]+8*r4[i,l])/81;
            if i>1 then xb:=x0[i-1,l]+(6*r1[i-1,l]+90*r2[i-1,l]-50*r3[i-1,l]+8*r4[i-1,l])/81;
            if i<nk then xf:=x0[i+1,l]+(6*r1[i+1,l]+90*r2[i+1,l]-50*r3[i+1,l]+8*r4[i+1,l])/81;
            vm:=v0[i,l]+(6*r11[i,l]+90*r12[i,l]-50*r13[i,l]+8*r14[i,l])/81;
            tf:=t+2*dt/3;
            interact;

```

```

    r15[i,1]:=dt*force;
end;
for i:=1 to nk do begin
    r6[i,1]:=dt*(v0[i,1]+(6*r11[i,1]+36*r12[i,1]+10*r13[i,1]+8*r14[i,1])/75);
    xm:=x0[i,1]+(6*r1[i,1]+36*r2[i,1]+10*r3[i,1]+8*r4[i,1])/75;
    if i>1 then xb:=x0[i-1,1]+(6*r1[i-1,1]+36*r2[i-1,1]+10*r3[i-1,1]+8*r4[i-1,1])/75;
    if i<nk then xf:=x0[i+1,1]+(6*r1[i+1,1]+36*r2[i+1,1]+10*r3[i+1,1]+8*r4[i+1,1])/75;
    vm:=v0[i,1]+(6*r11[i,1]+36*r12[i,1]+10*r13[i,1]+8*r14[i,1])/75;
    tf:=t+4*dt/5;
    interact;
    r16[i,1]:=dt*force;
end;
for i:= 1 to nk do begin
    x0[i,1+1]:=x0[i,1]+(23*r1[i,1]+125*r3[i,1]-81*r5[i,1]+125*r6[i,1])/192;
    v0[i,1+1]:=v0[i,1]+(23*r11[i,1]+125*r13[i,1]-81*r15[i,1]+125*r16[i,1])/192;
    if proch='S' then id:=id+v0[i,1+1]*v0[i,1+1]/(1+nd*v0[i,1+1]*v0[i,1+1]);
end;
m:=m+1;
t:=t+dt;
for i:=1 to nk do begin
    xm:=x0[i,1+1];
    if i>1 then xb:=x0[i-1,1+1];
    if i<nk then xf:=x0[i+1,1+1];
    vm:=v0[i,1+1];
    tf:=t;
    interact;
    ff[i,1+1]:=force;
end;
if proch='S' then changeos(ossmul);
end;
id:=id/nk;
end;
procedure adams_moulton;
begin
    for i:=1 to nk do begin
        prx[i]:=x0[i,4]+(dt/24)*(55*v0[i,4]-59*v0[i,3]+37*v0[i,2]-9*v0[i,1]);
        prv[i]:=v0[i,4]+(dt/24)*(55*ff[i,4]-59*ff[i,3]+37*ff[i,2]-9*ff[i,1]);
        crx[i]:=x0[i,4]+(dt/24)*(9*prv[i]+19*v0[i,4]-5*v0[i,3]+v0[i,2]);
    end;
    for i:= 1 to nk do begin
        xm:=crx[i];
        if i>1 then xb:=crx[i-1];
        if i<nk then xf:=crx[i+1];
        vm:=prv[i];
        tf:=t;
        interact;
        ff1[i]:=force;
        crv[i]:=v0[i,4]+(dt/24)*(9*ff1[i]+19*ff[i,4]-5*ff[i,3]+ff[i,2]);
    end;
    for i:=1 to nk do begin
        x0[i,1]:=x0[i,2];
        x0[i,2]:=x0[i,3];
        x0[i,3]:=x0[i,4];
        x0[i,4]:=crx[i];
        v0[i,1]:=v0[i,2];
        v0[i,2]:=v0[i,3];
        v0[i,3]:=v0[i,4];
        v0[i,4]:=crv[i];
        ff[i,1]:=ff[i,2];
        ff[i,2]:=ff[i,3];
        ff[i,3]:=ff[i,4];
        ff[i,4]:=ff1[i];
    end;
    m:=m+1;
    t:=t+dt;
end;
procedure getrecord;
var
    sdc,dc,skc:double;
begin
    savestate;
    sfac:=1/fsb/os;

```

```

writephsinfo;
if proch='S' then begin
  usepage(1);
  setvisualpage(1);
  erasescope;
  str(rec:1,ss);
  str(mlc:1,ssl);
  ss:=filename+ssl+ss+'.dat';
  end
else
  ss:=filename+'_s.dat';
skc:=round(sdt/dt);
assign(phs,ss);
rewrite(phs);
writeln(phs,dt*skc,' ',os);
for k:=1 to nlsk do begin
  dc:=0;
  repeat
    adams_moulton;
    x_y(kbw);
    putpixel(modx(sfac*x,true),mody(sfac*y,true),15);
    gotoxy(1,1);
    writeln(0,0,dc,pii);
    dc:=dc+1;
  until dc>=pii;
end;
dc:=0;
repeat
  sdc:=0;
  repeat;
    adams_moulton;
    x_y(kbw);
    putpixel(modx(sfac*x,true),mody(sfac*y,true),15);
    sdc:=sdc+1;
  until sdc>=skc;
  writeln(phs,x,' ',y);
  dc:=dc+1;
until dc>ndata;
close(phs);
restorestate;
rec:=rec+1st;
end;
procedure phase;
begin
  nlsk:=0;
  initxv(rndch);
  timestep;
  changeos(1);
  runge_kutta;
  sfac:=1/fsb/os;
  usepage(0);
  writephsinfo;
  repeat
    adams_moulton;
    if keypressed then keyhandlep;
    putphsdot;
  until m>=endcheck;
  if its=1 then getrecord;
end;
procedure jump;
begin
  os:=osb;
  changeos(1);
  sfac:=1/fsb/os;
  repeat
    initxv(rndch);
    timestep;
    t:=0;
    m:=0;
    writedisinfo;
    runge_kutta;
  repeat

```

```

    adams_moulton;
    if keypressed then keyhandle;
    if pp=1 then putphsdot;
    if m>=endcheck then dissipate;
until m>=endcheck+pii;
    putdisdot;
    changeos(osmul);
until os>ose;
end;
procedure sweep;
begin
    assign(dis,filename+'_d.dat');
    rewrite(dis);
    initxv(rndch);
    for i:=1 to nk do begin
        x0[i,4]:=x0[i,1];
        v0[i,4]:=v0[i,1];
    end;
    for mlc:=1 to iw do begin
        osb:=osd[mlc];
        ose:=osd[mlc+1];
        if its=1 then
            if ist=1 then rec:=1 else rec:=it
        else
            rec:=0;
        os2:=osb;
        repeat
            os1:=os2;
            os:=os1;
            timestep;
            changeos(1);
            sfac:=1/fsb/osb;
            osmo:=power(osmul,ist);
            os2:=os1*osmo;
            m:=0;
            writedisinfo;
            osmi:=power(ossmul,ist);
            if ist*(ose-os2)<0 then os2:=ose;
            for i:=1 to nk do begin
                x0[i,1]:=x0[i,4];
                v0[i,1]:=v0[i,4];
            end;
            runge_kutta;
            repeat
                adams_moulton;
                if keypressed then keyhandle;
                if pp=1 then putphsdot;
                if m<=pii then dissipate;
                changeos(osmi);
                if (rec>0) and (rec<=it) then
                    if ist*(ost[rec]-os)<=0 then getrecord;
            until ist*(os2-os)<=0;
            if m>=pii then putdisdot;
            until ist*(ose-os2)<=0;
            ist:=-1*ist;
        end;
        close(dis);
    end;
end;
procedure prepphspage;
begin
    usepage(page);
    putparam;
    putscope;
    putxscale(-4,4,1,'Displacement');
    putyscale(-4,4,1,'Velocity');
end;
procedure prepdisp;
begin
    usepage(0);
    putparam;
    putscope;
    with wincoor[0] do

```



```

    putxscale(x1,x2,1,'Log(Os)');
    if logq=0 then
        putyscale(0,1.5,0.5,'1/Q')
    else
        putyscale(-4,4,1,'Log(1/Q)');
end;
procedure initgraphics;
begin
    detectgraph(gd,gm);
    if gd=9 then gm:=1;
    initgraph(gd,gm,'c:\tp\bgi');
    setfillstyle(1,0);
    setcolor(15);
    hght:=textheight('H');
    wdth:=textwidth('H');
    hght:=hght+1;
    with viewcoor do begin
        x1:=round(getmaxx/10);
        y1:=round(getmaxy/5);
        x2:=x1*9;
        y2:=getmaxy-3*hght;
        viewportwidth:=x2-x1;
        viewportheight:=y2-y1;
    end;
    page:=0;
    if proch<>'P' then begin
        if logq=0 then
            setusercoord(osl,0,osr,1.5,page)
        else
            setusercoord(osl,-4,osr,4,page);
        prepdispag;
        page:=1;
    end;
    setusercoord(-4,-4,4,4,page);
    prepphaspage;
    pp:=1;
    usepage(0);
    setvisualpage(0);
    with viewcoor do setviewport(x1,y1,x2,y2,clipon);
end;
procedure getconst;
begin
    nkk:=nk-1+2*sqrt(kp);
    kbw:=1;
    d0:=11/nkk;
    d01:=d0*sqrt(kp);
    kpa:=(sqrt(kp)+1)/sqrt(kp);
    kpb:=(sqrt(kp)-1)/sqrt(kp);
    kkk0:=sqr(nkk/pi/oab);
    osm:=power(10,sos);
    osms:=power(10,soss);
    sfac:=1;
    t:=0; sdt:=0.01;
    if proch='P' then begin
        oss1:=1e10;
        oss2:=1e10;
        nls:=nl;
    end;
end;
procedure getparam;
begin
    repeat
        clrscr;
        textcolor(black);
        textbackground(white);
        writeln('Program : LUMPAMS');
        textcolor(lightgray);
        textbackground(black);
        writeln;
        write('Enter Session ID:->');readln(filename);
        write('Choose procedure:(dissipation(Jump,Sweep),Phase)->');
        proch:=takechar('JSP');
    until proch='JSP';
end;

```

```

case proch of
  'J': prost:='Jump';
  'S': prost:='Sweep';
  'P': prost:='Phase';
end;
writeln(prost);
writeln('INPUT THE INITIAL PARAMETERS.');
```

```

write('ScreenFact ->'); readln(mulfac);
write('Randomness ->'); readln(rndch);
rndrng:=1;
if rndch=1 then begin
  write('Random range->'); readln(rndrng);
end;
write('Nvisco    ->'); readln(nd);
write('NLF      ->'); readln(nlf);
write('Oab      ->'); readln(oab);
write('Kapa     ->'); readln(kkb);
write('LL       ->'); readln(ll);
write('Fsb     ->'); readln(fsb);
write('Fbias   ->'); readln(fbia);
write('A`/A    ->'); readln(kp);
write('Nkink   ->'); readln(nk);
write('NL      ->'); readln(nl);
write('dt     ->'); readln(dtpp);
write('dtdiv  ->'); readln(dtd);
if (proch='J') or (proch='S') then begin
  write('Log plot 1/Q ? (y/n):');
  if upcase(readkey)='Y' then begin
    writeln('Yes');
    logq:=1;
  end
  else begin
    writeln('No');
    logq:=0;
  end;
  writeln('Input the logarithms of Os.');
```

```

  writeln('Calculation:');
  write('Os step   ->'); readln(sos);
  write('Os start  ->'); readln(osb);
  osb:=power(10,osb); osd[1]:=osb;
  iw:=1;
  if proch='S' then begin
    write('Paths     ->'); readln(iw);
    write('Direction 1->'); readln(ist);
    if iw>1 then begin
      for k:=2 to iw do begin
        write('Osret',k-1:6,'->'); readln(osd[k]);
        osd[k]:=power(10,osd[k]);
      end;
    end;
  end;
  write('Os end     ->'); readln(ose);
  ose:=power(10,ose); osd[iw+1]:=ose;
  write('Slow down ? (y/n):');
```

```

  if upcase(readkey)='Y' then begin
    writeln('Yes');
    writeln('Input the slow range parameters.');
```

```

    write('Os slowstep->'); readln(soss);
    write('Os left   ->'); readln(oss1);
    oss1:=power(10,oss1);
    write('Os right  ->'); readln(oss2);
    oss2:=power(10,oss2);
    write('NL slow   ->'); readln(nls);
    write('dt slow   ->'); readln(dtps);
    write('dtdiv slow ->'); readln(dt ds);
  end
  else begin
    writeln('No');
    oss1:=1e10;
    oss2:=1e10;
    soss:=sos;
    nls:=nl;
  end;
end;

```

```

    dtps:=dtp;
    dtds:=dtd;
end;
if proch='S' then begin
    write('Get record ? (y/n):');
    if upcase(readkey)='Y' then begin
        writeln('Yes');
        its:=1;
        write('NL to skip ->'); readln(nlsk);
        write('# of points ->'); readln(it);
        for k:=1 to it do begin
            write('Osrec',k:6,'->'); readln(ost[k]);
            ost[k]:=power(10,ost[k]);
        end;
    end
    else begin
        writeln('No');
        its:=0;
        it:=0;
    end;
end;
if proch='J' then its:=0;
writeln('Plotting:');
write('Os left ->'); readln(osl);
write('Os right ->'); readln(osr);
end;
if proch='P' then begin
    write('Log(Os) ->'); readln(os); os:=power(10,os);
    write('Get record ? (y/n):');
    if upcase(readkey)='Y' then begin
        writeln('Yes');
        its:=1;
        nlsk:=0;
    end
    else begin
        writeln('No');
        its:=0;
    end;
    osl:=-4;
    osr:=4;
end;
writeln('Is everything okey ? (y/n):');
until upcase(readkey)='Y';
getconst;
end;
begin
    clrscr;
    getparam;
    initgraphics;
    case proch of
        'J': jump;
        'S': sweep;
        'P': phase;
    end;
    setvisualpage(0);
    usepage(0);
    setviewport(0,0,getmaxx,getmaxy,clipon);
    outtextxy(20*width,1,'COMPLETED');
    if proch<>'P' then
        repeat
            if keypressed then keyhandle;
        until duch=#27
    else
        repeat until readkey=#27;
    closegraph;
end.

```

## SPECTRUM.PAS

```
{ $n+ }
program
  spectrum;
uses
  crt, graph;
const
  n=8192;
  halfn=n div 2;
type
  complex=record
    r, i:double
  end;
  comptr=^complex;
  viewportyper=record
    x1, y1, x2, y2:double;
  end;
var
  a                               :array[1..n] of comptr;
  ts, ft                          :text;
  flnm, ss, ssl                   :string;
  sigma, mean, max, min, be, nyf, tl, dt, os, ist, famp, xw, xw0,
  yw, yw0, windowwidth, windowheight, jsx, jsy           :double;
  gd, gm, i, j, k, viewportwidth, viewportheight, ch, cw, xv, yv,
  cy, jsm, lch, sn                :integer;
  wincoor                        :viewportyper;
  viewcoor                       :viewporttype;
  s                               :char;
  ps, pp, pe                      :pointer;

procedure setusercoord(xd, yd, xu, yu:double);
begin
  windowwidth:=xu-xd;
  windowheight:=yu-yd;
  with wincoor do begin
    x1:=xd;
    x2:=xu;
    y1:=yd;
    y2:=yu;
  end;
end;

function mody(yr:double; vpo:boolean):integer;
var
  yp:integer;
begin
  yp:=round(viewportheight*((wincoor.y1-yr)/windowheight+1));
  if vpo then mody:=yp else mody:=yp+viewcoor.y1;
end;

function modx(xr:double; vpo:boolean):integer;
var
  xp:integer;
begin
  xp:=round(viewportwidth*(xr-wincoor.x1)/windowwidth);
  if vpo then modx:=xp else modx:=xp+viewcoor.x1;
end;

procedure beep;
begin
  Sound(1000);
  Delay(50);
  NoSound;
end;

function int2str(num:integer):string;
var
  s:string;
begin
  str(num, s);
  int2str:=s;
end;
```

```

end;

function flt2str(flt:single;w,d:byte):string;
var
  s:string;
begin
  str(flt:w:d,s);
  flt2str:=s;
end;

function logy(x,y:double):double;
begin
  logy:=ln(x)/ln(y);
end;

function power(x,y:double):double;
begin
  power:=exp(y*ln(x));
end;

procedure putyscale(xsname:string);
var
  x,ys,n,i:longint;
  ym,y:double;
begin
  x:=viewcoor.x1;
  settextjustify(righttext,centertext);
  n:=trunc(logy(wincoor.y2,10));
  if n<0 then n:=n-1;
  ym:=power(10,n);
  ys:=trunc(wincoor.y2/ym);
  for i:=0 to ys do begin
    y:=i*ym;
    line(x-cw div 2,mody(y,false),x,mody(y,false));
    outtextxy(x-cw,mody(y,false),int2str(i));
    if (xsname<>'S(w)') or ((xsname='S(w)') and (lch=1)) then begin
      line(x-cw div 2,mody(-y,false),x,mody(-y,false));
      outtextxy(x-cw,mody(-y,false),int2str(-i));
    end;
  end;
  settextstyle(defaultfont,vertdir,1);
  if n<>0 then
    outtextxy(2*cw,viewportheight div 2+viewcoor.y1,xsname+chr(26)+'x10^'+int2str(n))
  else
    outtextxy(2*cw,viewportheight div 2+viewcoor.y1,xsname+chr(26));
  settextstyle(defaultfont,horizdir,1);
  settextjustify(lefttext,toptext);
end;

procedure putxscale(xsname:string);
var
  y,xb,dx,n:longint;
begin
  y:=viewcoor.y2;
  settextjustify(centertext,toptext);
  xb:=trunc(wincoor.x1)+1;
  n:=trunc(wincoor.x2)-trunc(wincoor.x1)-1;
  if n>10 then n:=10;
  if n=0 then n:=1;
  dx:=trunc((wincoor.x2-wincoor.x1)/n);
  repeat
    line(modx(xb,false),y+ch div 2,modx(xb,false),y);
    outtextxy(modx(xb,false),y+ch,int2str(xb));
    xb:=xb+dx;
  until xb>wincoor.x2;
  i:=modx(wincoor.x1>windowwidth/2,false);
  j:=y+2*ch;
  outtextxy(i,j,xsname+chr(26));
  settextstyle(defaultfont,horizdir,1);
  settextjustify(lefttext,toptext);
end;

```

```

procedure initarray;
begin
  for i:=1 to n do new(a[i]);
end;

procedure initialize;
begin
  lch:=-1;
  if s='D' then ss:='displacement' else ss:='velocity';
  detectgraph(gd, gm);
  initgraph(gd, gm, 'c:\tp\bgi');
  with viewcoor do begin
    x1:=round(getmaxx*0.1);
    y1:=round(getmaxy*0.2);
    x2:=round(getmaxx*0.9);
    y2:=round(getmaxy*0.9);
    viewportwidth:=x2-x1;
    viewportheight:=y2-y1;
  end;
  ch:=textheight('H');
  cw:=textwidth('H');
  i:=imagesize(0,0,2*cw,2*ch);
  getmem(pp,i);
  getmem(ps,i);
  getmem(pe,imagesize(0,0,40*cw,ch));
  getimage(0,0,40*cw,ch,pe^);
  line(20-cw,20,20+cw,20);
  line(20,20-ch,20,20+ch);
  getimage(20-cw,20-ch,20+cw,20+ch,pp^);
  cy:=-ch-1;
end;

procedure readfile;
var
  x:array [1..2] of double;
  ii:byte;
begin
  write('Enter file name:');readln(flnm);
  write('Enter SN:');readln(sn);
  s:=' ';
  write('Displacement or Velocity (D/V)');
  repeat
    s:=upcase(readkey);
  until (s='D') or (s='V');
  if s='D' then ii:=1 else ii:=2;
  ss:=flnm+'.dat';
  assign(ts,ss);
  reset(ts);
  readln(ts,dt,os);
  for i:=1 to n do begin
    readln(ts,x[1],x[2]);
    a[i]^r:=x[ii];
    a[i]^i:=0;
  end;
  close(ts);
end;

procedure writefile;
begin
  ss:=flnm+'.DAT';
  assign(ft,ss);
  rewrite(ft);
  for i:=1 to halfn do
    writeln(ft,(i-1)/(halfn-1)*nyf,' ',a[i]^r);
  close(ft);
end;

procedure maxmin(strt,fin:integer);
begin
  max:=a[strt]^r;
  min:=max;
  for i:=strt to fin do begin

```

```

    if a[i]^r>max then max:=a[i]^r;
    if a[i]^r<min then min:=a[i]^r;
end;
end;

procedure getdataspec;
begin
    mean:=0;
    sigma:=0;
    for i:=1 to n do begin
        mean:=mean+a[i]^r;
        sigma:=sigma+sqr(a[i]^r);
    end;
    mean:=mean/n;
    sigma:=sigma/n;
    sigma:=sqr(sigma-sqr(mean));
    tl:=dt*(n-1);
    nyf:=pi/dt;
    be:=(2*sn+1)/tl;
end;

procedure zeromean;
begin
    for i:=1 to n do a[i]^r:=a[i]^r-mean;
end;

procedure wind;
begin
    for i:=1 to n do a[i]^r:=a[i]^r*0.5*(1-cos(2*pi*(i-1)/(n-1)));
end;

procedure swap(var v1,v2:double);
var
    dum :double;
begin
    dum:=v1; v1:=v2; v2:=dum;
end;

procedure fft(dir:integer);
var
    nbd2,nbml,me,lpk,basen,j,k,l,m :integer;
    ui,ur,wi,wr,tr,ti,sr           :double;
begin
    basen:=round(ln(n)/ln(2));
    if dir=1 then
        for j:=1 to n do begin
            a[j]^r:=a[j]^r/n;
            a[j]^i:=a[j]^i/n;
        end;
    dir:=-dir;
    nbd2:=n div 2;
    nbml:=n-1;
    j:=1;
    for l:=1 to nbml do begin
        if l < j then begin
            swap (a[j]^r, a[l]^r);
            swap (a[j]^i, a[l]^i);
        end;
        k:=nbd2;
        while k<j do begin
            j:=j-k;
            k:=k div 2;
        end;
        j:=j+k;
    end;
    for m:=1 to basen do begin
        ur:=1;
        ui:=0;
        me:=round(exp(m*ln(2)));
        k:=me div 2;
        wr:=cos(pi/k);
        wi:=dir*sin(pi/k);
    end;
end;

```

```

for j:=1 to k do begin
  l:=j;
  while l<=n do begin
    lpk:=l+k;
    tr:=a[lpk]^r*ur-a[lpk]^i*ui;
    ti:=a[lpk]^i*ur+a[lpk]^r*ui;
    a[lpk]^r:=a[l]^r-tr;
    a[lpk]^i:=a[l]^i-ti;
    a[l]^r:=a[l]^r+tr;
    a[l]^i:=a[l]^i+ti;
    l:=l+me;
  end;
  sr:=ur;
  ur:=ur*wr-ui*wi;
  ui:=ui*wr+sr*wi;
end;
end;
end;

procedure spectra;
begin
  max:=t1/2/pi;
  for i:=1 to n do
    a[i]^r:=max*(sqr(a[i]^r)+sqr(a[i]^i));
  end;

procedure smooth(sn:integer);
var
  aa:array[1..9] of double;
  i,j,k:integer;
begin
  for i:=1 to sn do aa[i]:=a[i]^r;
  for i:=sn+1 to n-sn do begin
    aa[sn+1]:=a[i]^r;
    for j:=1 to sn do aa[sn+1]:=aa[sn+1]+a[i-j]^r+a[i+j]^r;
    aa[sn+1]:=aa[sn+1]/(2*sn+1);
    a[i-sn]^r:=aa[1];
    for j:=1 to sn do aa[j]:=aa[j+1]
  end;
  for i:=1 to sn do a[n-2*sn+i]^r:=aa[i];
end;

procedure clipcoord(k:integer);
begin
  case k of
    6:if xw>wincoor.x2 then begin
      beep;
      xw:=wincoor.x2;
      xv:=modx(xw,false);
    end;
    4:if xw<wincoor.x1 then begin
      beep;
      xw:=wincoor.x1;
      xv:=modx(xw,false);
    end;
    8:if yw>wincoor.y2 then begin
      beep;
      yw:=wincoor.y2;
      yv:=mody(yw,false);
    end;
    2:if yw<wincoor.y1 then begin
      beep;
      yw:=wincoor.y1;
      yv:=mody(yw,false);
    end;
  else
    end;
end;

procedure remplus;
begin
  putimage(xv-cw,yv-ch,ps^,normalput);

```



```

end;

procedure putplus;
begin
  getimage(xv-cw,yv-ch,xv+cw,yv+ch,ps^);
  putimage(xv-cw,yv-ch,pp^,xorput);
  putimage(viewcoor.x1,viewcoor.y1-ch-1,pe^,normalput);
  outtextxy(viewcoor.x1,viewcoor.y1-ch-1,'w='+flt2str(xw,1,4));
  outtextxy(viewcoor.x1+20*cw,viewcoor.y1-ch-1,'S(w)='+flt2str(yw,1,4));
end;

procedure carryplus(xc,yc,k:integer);
begin
  remplus;
  xv:=xc;
  yv:=yc;
  clipcoord(k);
  putplus;
end;

procedure newplus;
begin
  xw:=wincoor.x1;
  yw:=wincoor.y1;
  xv:=modx(xw,false);
  yv:=mody(yw,false);
  putplus;
end;

procedure plot(heading,xlabel,ylabel:string;xb,xe:double;yb,ye:double);
var
  dx,xl:double;
  ist,ien,nn:integer;
begin
  if heading='SPECTRUM' then begin
    nn:=halfn;
    xl:=nyf;
  end
  else begin
    nn:=n;
    xl:=tl;
  end;
  ist:=round(xb*(nn-1)/xl)+1;
  ien:=round(xe*(nn-1)/xl)+1;
  dx:=xl/(nn-1);
  if yb>ye then begin
    maxmin(ist,ien);
    if heading<>'SPECTRUM' then
      if abs(min)>abs(max) then max:=-min else min:=-max;
    else begin
      if lch=1 then begin
        max:=logy(max,10);
        min:=logy(min,10);
        if abs(min)>abs(max) then max:=-min else min:=-max;
      end
      else
        min:=0;
    end;
    yb:=1.1*min;
    ye:=1.1*max;
  end;
  setusercoord(xb,yb,xe,ye);
  setviewport(0,0,getmaxx,getmaxy,true);
  cleardevice;
  outtext(heading+'  Filename:'+flnm);
  if lch=1 then outtext('  Logarithmic');
  outtextxy(cw,2*ch,'Total Time      ='+flt2str(tl,1,4));
  outtextxy(cw,3*ch,'Sampling Interval='+flt2str(dt,1,6));
  outtextxy(cw,4*ch,'Nyquist Frequency='+flt2str(nyf,1,4));
  outtextxy(cw,5*ch,'Bandwidth      ='+flt2str(be,1,8));
  with viewcoor do rectangle(x1,y1,x2,y2);
  putxscale(xlabel);

```

```

putyscale(ylabel);
with viewcoor do setviewport(x1,y1,x2,y2,true);
if lch=1 then
  moveto(modx(xb,true),mody(logy(a[ist]^r,10),true))
else
  moveto(modx(xb,true),mody(a[ist]^r,true));
for i:=ist to ien do
  if lch=1 then
    lineto(modx((i-1)*dx,true),mody(logy(a[i]^r,10),true))
  else
    lineto(modx((i-1)*dx,true),mody(a[i]^r,true));
setviewport(0,0,getmaxx,getmaxy,true);
repeat until readkey=#13;
xw0:=xb;
yw0:=yb;
xw:=xb;
yw:=yb;
if heading='SPECTRUM' then begin
  jsx:=windowwidth/(viewportwidth+1);
  dx:=ln(jsx)/ln(10);
  if dx<0 then i:=trunc(dx)-1 else i:=trunc(dx);
  if i<>0 then
    jsx:=int(jsx/exp(i*ln(10)))*exp(i*ln(10))
  else
    jsx:=int(jsx);
  jsy:=windowheight/(viewportheight+1);
  dx:=ln(jsy)/ln(10);
  if dx<0 then i:=trunc(dx)-1 else i:=trunc(dx);
  if i<>0 then
    jsy:=int(jsy/exp(i*ln(10)))*exp(i*ln(10))
  else
    jsy:=int(jsy);
  jsm:=5;
  newplus;
end;
end;

procedure graphhandle;
var
  xb,xs,yb,ys:double;
begin
  repeat
    s:=readkey;
    case s of
      #0 :begin
        s:=readkey;
        case s of
          #77:begin
            xw:=xw+jsm*jsx;
            carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),6);
          end;
          #75:begin
            xw:=xw-jsm*jsx;
            carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),4);
          end;
          #72:begin
            yw:=yw+jsm*jsy;
            carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),8);
          end;
          #80:begin
            yw:=yw-jsm*jsy;
            carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),2);
          end;
          #79:begin
            xw:=wincoor.x2;
            carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),6);
          end;
          #71:begin
            xw:=wincoor.x1;
            carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),4);
          end;
          #73:begin

```

```

        yw:=wincoor.y2;
        carryplus(modx(xw, false), mody(yw, false), 8);
    end;
    #81:begin
        yw:=wincoor.y1;
        carryplus(modx(xw, false), mody(yw, false), 2);
    end;
    #82:begin
        yw0:=yw;
        xw0:=xw;
        putplus;
    end;
    else
    end;
end;
end;
'L', 'l': lch:=lch*(-1);
#13 :begin
    if xw>1 then begin
        if xw0=xw then xw0:=0 else if xw0>xw then swap(xw,xw0);
        if yw0>yw then yw:=yw0;
        if (yw>0) and (lch=-1) then
            plot('SPECTRUM', 'w(rad/sec)', 'S(w)', xw0, xw, 0, yw)
        else
            plot('SPECTRUM', 'w(rad/sec)', 'S(w)', xw0, xw, 0, -1);
        end;
    end;
    #8 :plot('SPECTRUM', 'w(rad/sec)', 'S(w)', 0, nyf, 0, -1);
    #43 :if jsm<10 then jsm:=jsm+1 else beep;
    #45 :if jsm>1 then jsm:=jsm-1 else beep;
    else
    end;
until s=#27;
end;
begin
    clrscr;
    initarray;
    readfile;
    getdataspec;
    initialize;
    plot('SIGNAL', 'time', ss, 0, tl, 0, -1);
    zeromean;
    wind;
    fft(1);
    spectra;
    smooth(sn);
    writefile;
    plot('SPECTRUM', 'w(rad/sec)', 'S(w)', 0, nyf, 0, -1);
    graphhandle;
    closegraph;
end.

```

```

        yw:=wincoor.y2;
        carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),8);
    end;
    #81:begin
        yw:=wincoor.y1;
        carryplus(modx(xw,false),mody(yw,false),2);
    end;
    #82:begin
        yw0:=yw;
        xw0:=xw;
        putplus;
    end;
    else
    end;
end;
end;
'L','l': lch:=lch*(-1);
#13 :begin
    if xw>1 then begin
        if xw0=xw then xw0:=0 else if xw0>xw then swap(xw,xw0);
        if yw0>yw then yw:=yw0;
        if (yw>0) and (lch=-1) then
            plot('SPECTRUM','w(rad/sec)','S(w)',xw0,xw,0,yw)
        else
            plot('SPECTRUM','w(rad/sec)','S(w)',xw0,xw,0,-1);
        end;
    end;
    #8 :plot('SPECTRUM','w(rad/sec)','S(w)',0,nyf,0,-1);
    #43 :if jsm<10 then jsm:=jsm+1 else beep;
    #45 :if jsm>1 then jsm:=jsm-1 else beep;
    else
end;
until s=#27;
end;

begin
    clrscr;
    initarray;
    readfile;
    getdataspec;
    initialize;
    plot('SIGNAL','time',ss,0,t1,0,-1);
    zeromean;
    wind;
    fft(1);
    spectra;
    smooth(sn);
    writefile;
    plot('SPECTRUM','w(rad/sec)','S(w)',0,nyf,0,-1);
    graphhandle;
    closegraph;
end.

```

```

680 VM = V0(I, L): TF = T
690 GOSUB 1990
700 FF(I, L) = FORCE
710 R11(I, L) = DT * FORCE
720 NEXT I
730 FOR I = 1 TO NK
740 R2(I, L) = DT * (V0(I, L) + R11(I, L) / 3)
750 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + R1(1, L) / 3: XF = X0(2, L) + R1(2, L) / 3: GOTO 770
760 XM = X0(I, L) + R1(I, L) / 3: XB = X0(I - 1, L) + R1(I - 1, L) / 3: XF = X0(I + 1, L)
+ R1(I + 1, L) / 3
770 VM = V0(I, L) + R11(I, L) / 3: TF = T + DT / 3
780 GOSUB 1990
790 R12(I, L) = DT * FORCE
800 NEXT I
810 FOR I = 1 TO NK
820 R3(I, L) = DT * (V0(I, L) + (4 * R11(I, L) + 6 * R12(I, L)) / 25)
830 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (4 * R1(1, L) + 6 * R2(1, L)) / 25
840 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (4 * R1(2, L) + 6 * R2(2, L)) / 25: GOTO 880
850 XM = X0(I, L) + (4 * R1(I, L) + 6 * R2(I, L)) / 25
860 XB = X0(I - 1, L) + (4 * R1(I - 1, L) + 6 * R2(I - 1, L)) / 25
870 XF = X0(I + 1, L) + (4 * R1(I + 1, L) + 6 * R2(I + 1, L)) / 25
880 VM = V0(I, L) + (4 * R11(I, L) + 6 * R12(I, L)) / 25: TF = T + 2 * DT / 5
890 '
900 GOSUB 1990
910 R13(I, L) = DT * FORCE
920 NEXT I
930 FOR I = 1 TO NK
940 R4(I, L) = DT * (V0(I, L) + (R11(I, L) - 12 * R12(I, L) + 15 * R13(I, L)) / 4)
950 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (R1(1, L) - 12 * R2(1, L) + 15 * R3(1, L)) / 4
960 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (R1(2, L) - 12 * R2(2, L) + 15 * R3(2, L)) / 4: GOTO
1000
970 XM = X0(I, L) + (R1(I, L) - 12 * R2(I, L) + 15 * R3(I, L)) / 4
980 XF = X0(I + 1, L) + (R1(I + 1, L) - 12 * R2(I + 1, L) + 15 * R3(I + 1, L)) / 4
990 XB = X0(I - 1, L) + (R1(I - 1, L) - 12 * R2(I - 1, L) + 15 * R3(I - 1, L)) / 4
1000 VM = V0(I, L) + (R11(I, L) - 12 * R12(I, L) + 15 * R13(I, L)) / 4: TF = T + DT / 2
1010 GOSUB 1990
1020 R14(I, L) = DT * FORCE
1030 NEXT I
1040 FOR I = 1 TO NK
1050 R5(I, L) = DT * (V0(I, L) + (6 * R11(I, L) + 90 * R12(I, L) - 50 * R13(I, L) + 8 *
R14(I, L)) / 81)
1060 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (6 * R1(1, L) + 90 * R2(1, L) - 50 * R3(1, L) + 8 *
R4(1, L)) / 81
1070 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (6 * R1(2, L) + 90 * R2(2, L) - 50 * R3(2, L) + 8 *
R4(2, L)) / 81
1080 IF I = 1 THEN GOTO 1130
1090 '
1100 XM = X0(I, L) + (6 * R1(I, L) + 90 * R2(I, L) - 50 * R3(I, L) + 8 * R4(I, L)) / 81
1110 XB = X0(I - 1, L) + (6 * R1(I - 1, L) + 90 * R2(I - 1, L) - 50 * R3(I - 1, L) + 8 *
R4(I - 1, L)) / 81
1120 XF = X0(I + 1, L) + (6 * R1(I + 1, L) + 90 * R2(I + 1, L) - 50 * R3(I + 1, L) + 8 *
R4(I + 1, L)) / 81
1130 VM = V0(I, L) + (6 * R11(I, L) + 90 * R12(I, L) - 50 * R13(I, L) + 8 * R14(I, L)) /
81: TF = T + 2 * DT / 3
1140 GOSUB 1990
1150 R15(I, L) = DT * FORCE
1160 NEXT I
1170 FOR I = 1 TO NK
1180 R6(I, L) = DT * (V0(I, L) + (6 * R11(I, L) + 36 * R12(I, L) + 10 * R13(I, L) + 8 *
R14(I, L)) / 75)
1190 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (6 * R1(1, L) + 36 * R2(1, L) + 10 * R3(1, L) + 8 *
R4(1, L)) / 75
1200 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (6 * R1(2, L) + 36 * R2(2, L) + 10 * R3(2, L) + 8 *
R4(2, L)) / 75
1210 IF I = 1 THEN GOTO 1240
1220 XM = X0(I, L) + (6 * R1(I, L) + 36 * R2(I, L) + 10 * R3(I, L) + 8 * R4(I, L)) / 75:
TF = T + 4 * DT / 5
1230 XB = X0(I - 1, L) + (6 * R1(I - 1, L) + 36 * R2(I - 1, L) + 10 * R3(I - 1, L) + 8 *
R4(I - 1, L)) / 75
1240 XF = X0(I + 1, L) + (6 * R1(I + 1, L) + 36 * R2(I + 1, L) + 10 * R3(I + 1, L) + 8 *
R4(I + 1, L)) / 75

```

```

1250 VM = VO(I, L) + (6 * R11(I, L) + 36 * R12(I, L) + 10 * R13(I, L) + 8 * R14(I, L)) /
75: TF = T + 4 * DT / 5
1260 GOSUB 1990
1270 R16(I, L) = DT * FORCE
1280 NEXT I
1290 FOR I = 1 TO NK
1300 XO(I, L + 1) = XO(I, L) + (23 * R1(I, L) + 125 * R3(I, L) - 81 * R5(I, L) + 125 *
R6(I, L)) / 192
1310 VO(I, L + 1) = VO(I, L) + (23 * R11(I, L) + 125 * R13(I, L) - 81 * R15(I, L) + 125 *
R16(I, L)) / 192
1320 ID = ID + VO(I, L + 1) * VO(I, L + 1) / (1 + ND * VO(I, L + 1) * VO(I, L + 1))
1330 NEXT I
1340 M = M + 1
1350 T = T + DT
1360 TF = T
1370 FOR I = 1 TO NK
1380 IF I = 1 THEN XM = XO(1, L + 1): XF = XO(2, L + 1): GOTO 1400
1390 XM = XO(I, L + 1): XB = XO(I - 1, L + 1): XF = XO(I + 1, L + 1)
1400 VM = VO(I, L + 1): TF = T
1410 GOSUB 1990
1420 FF(I, L + 1) = FORCE
1430 NEXT I
1440 NEXT L
1450 PII = 2 * 3.1216 / DT
1460 'ff(i,1)=0
1470 FOR I = 1 TO NK
1480 PRX(I) = XO(I, 4) + (DT / 24) * (55 * VO(I, 4) - 59 * VO(I, 3) + 37 * VO(I, 2) - 9 *
VO(I, 1))
1490 PRV(I) = VO(I, 4) + (DT / 24) * (55 * FF(I, 4) - 59 * FF(I, 3) + 37 * FF(I, 2) - 9 *
FF(I, 1))
1500 CRX(I) = XO(I, 4) + (DT / 24) * (9 * PRV(I) + 19 * VO(I, 4) - 5 * VO(I, 3) + VO(I,
2))
1510 NEXT I
1530 FOR I = 1 TO NK
1540 IF I = 1 THEN XM = PRX(1): XF = PRX(2): GOTO 1560
1550 XM = PRX(I): XF = PRX(I + 1): XB = PRX(I - 1)
1560 VM = PRV(I): TF = T
1570 GOSUB 1990
1580 FF1(I) = FORCE
1590 CRV(I) = VO(I, 4) + (DT / 24) * (9 * FF1(I) + 19 * FF(I, 4) - 5 * FF(I, 3) + FF(I,
2))
1600 NEXT I
1610 IF M / PII > NL THEN GOSUB 2080
1620 M = M + 1: T = T + DT
1630 FOR I = 1 TO NK
1640 XO(I, 1) = XO(I, 2)
1650 XO(I, 2) = XO(I, 3)
1660 XO(I, 3) = XO(I, 4)
1670 XO(I, 4) = CRX(I)
1680 VO(I, 1) = VO(I, 2)
1690 VO(I, 2) = VO(I, 3)
1700 VO(I, 3) = VO(I, 4)
1710 VO(I, 4) = CRV(I)
1720 FF(I, 1) = FF(I, 2)
1730 FF(I, 2) = FF(I, 3)
1740 FF(I, 3) = FF(I, 4)
1750 FF(I, 4) = FF1(I)
1760 NEXT I
1770 CXMEAN = 0: CVMEAN = 0
1780 FOR I = 1 TO NK
1790 CXMEAN = CXMEAN + CRX(I) / NK: CVMEAN = CVMEAN + CRV(I) / NK
1800 NEXT I
1810 IF ISEC = 2 THEN PSET (sfac * CXMEAN, sfac * CVMEAN)
1820 NKM = INT(NK / 2) + 1
1830 IF ISEC = 20 THEN PSET (sfac * CRX(NKM), sfac * CRV(NKM))
1840 IF M / PII <= NL + 1 THEN GOTO 1470
1850 IF ISEC = 20 THEN GOTO 480
1860 IF ISEC = 2 THEN GOTO 480
1870 IDI = ID / PII
1871 IDI2 = (ID2 / NK) / PII
1872 q2 = 2 * IDI2 * kkb2 / (osj * FSB * FSB)
1880 q1 = 2 * IDI * KKB / (os * FSB * FSB): q3 = q2 + q1

```

```

1890 s1 = LOG(os) / 2.303 / 2
1900 'Where q10 is normalized properly with respect to resonance frequency
1910 IF (ISEC = 1) AND (sfac > 0) THEN
1911   LOCATE 1, 20
1912   IF 4 * sfac * q3 - 2 > 2 THEN
1913     PRINT "OUT"
1914   ELSE
1915     PRINT "IN "
1916     PSET (s1, -2 + 4 * sfac * q3)
1917   END IF
1918 END IF
1920 IF (ISEC = 1) AND (sfac = 0) THEN
1921   LOCATE 1, 20
1922   IF ABS(LOG(q3) / 2.303 / 2) > 2 THEN
1923     PRINT "OUT"
1924   ELSE
1925     PRINT "IN "
1926     PSET (s1, LOG(q3) / 2.303 / 2)
1927   END IF
1928 END IF
1930 os = os * 10 ^ .1
1940 IF os > 100 THEN GOTO 1960
1950 GOTO 540
1960 INPUT KJ
1970 END
1980 ' the following system involves the coulombic kink-kink interaction
1990 IF NK = 1 THEN FORCE = 2 * KKK * KP * XM: GOTO 2070
2000 IF I = 1 THEN FACTO1 = ((XF - KPB * XM) / 2 / DW + 1) / (XM / D1W + 1) ^ 2 / ((XF -
XM) / DW + 1) ^ 2
2010 IF I = 1 THEN FORCE = KKK0 * (XF - KPA * XM) * FACTO1: GOTO 2070
2020 IF I = NK THEN FACTO2 = ((-XB + KPB * XM) / 2 / DW + 1) / (XM / D1W - 1) ^ 2 / ((XM -
XB) / DW + 1) ^ 2
2030 IF I = NK THEN FORCE = -KKK0 * (-XB + KPA * XM) * FACTO2: GOTO 2070
2040 FACTO = ((XF - XB) / DW / 2 + 1) / ((XF - XM) / DW + 1) / ((XM - XB) / DW + 1)
2050 FACTO = FACTO / ((XF - XM) / DW + 1) / ((XM - XB) / DW + 1)
2060 FORCE = KKK0 * (XF - 2 * XM + XB) * FACTO
2070 FBI = FBIAS * (1 - EXP(-TF / 2))
2071 IF I = NKO THEN GOTO 2073
2072 FORCE = FORCE + (F * SIN(TF) + FBI) - B * VM / (1 + ND * VM * VM): RETURN
2073 FORCE = FORCE + (F * SIN(TF) + FBI) - B * VM / (1 + ND * VM * VM)
2074 FORCE = FORCE - B2 * VM / (1 + ND * BET * BET * VM * VM): RETURN
2080 IDME = 0
2090 FOR I = 1 TO NK
2100 IDME = IDME + CRV(I) * CRV(I) / (1 + ND * CRV(I) * CRV(I))
2110 NEXT I
2111 ID2 = ID2 + CRV(NKO) * CRV(NKO) * BET * BET / (1 + ND * BET * BET * CRV(NKO) *
CRV(NKO))
2120 ID = ID + IDME / NK
2130 RETURN
2140 DAY = VAL(MID$(DATE$, 4, 2)): LOCATE 1, 30: PRINT DAY - 1; " "; TIME$
2150 RETURN

```

```

LUMPAM53.PAS
10 'Decoration Damping Peak in Kink Chain-Interstitial System
20 'It starts with Runge-Kutta and Continous with Adams Moulton
30 ' File Name /LUMPAm53/
40 DEFDBL B-D, F, K, O-P, R, T, V, X
50 SCREEN 12: KEY OFF
60 DIM X0#(50, 5), VO#(50, 5), FF#(50, 5), r1#(50, 5), r2#(50, 5), r3#(50, 5), r4#(50, 5)
70 DIM r11#(50, 5), r12#(50, 5), r13#(50, 5), r14#(50, 5), r15#(50, 5), R16#(50, 5)
80 DIM FF1#(50), prx#(50), prv#(50), CRX#(50), CRV#(50), r5(50, 5), R6(50, 5)
90 VIEW (64, 96)-(576, 393)
100 WINDOW (-3, -2)-(1, 2)
110 LINE (-3, -2)-(1, -2)
120 LINE (1, -2)-(1, 2)
130 LINE (1, 2)-(-3, 2)
140 LINE (-3, 2)-(-3, -2)
150 LINE (0, -2)-(0, 2)
160 LINE (-3, 0)-(1, 0)
170 FOR I = -3 TO 3
180 COOR = I / 2
190 LINE (COOR - 1, -2)-(COOR - 1, -1.94)
200 LINE (-3, COOR)-(-2.96, COOR)
210 NEXT I
280 LOCATE 16, 4: PRINT "1/Q";
282 LOCATE 11, 4: PRINT "100"
284 LOCATE 21, 4: PRINT ".01"
290 XX$ = "0.000001" + SPACE$(9) + "0.0001" + SPACE$(13) + CHR$(234) + "s" + SPACE$(14) +
"1" + SPACE$(14) + "100"
300 LOCATE 26, 5: PRINT XX$;
360 LOCATE 1, 60
370 PRINT "Sec: Q=1, Phase=2"
380 LOCATE 2, 60
390 INPUT ISEC
400 LOCATE 1, 1
410 LOCATE 3, 60
420 PRINT "Nvisco,SFact,Pin"
430 LOCATE 4, 60
440 INPUT ND, sfac, spin
450 LOCATE 1, 1: PRINT "File: LUMPAM53"
460 LOCATE 2, 1: PRINT "Enter Oab,dT,NLoop,Kapa1,Kapa2,LL,Fs"
470 LOCATE 3, 1: INPUT oab, DT1, NL, kkb, kkb2, LL, FSB
480 LOCATE 4, 1: PRINT "Enter Bias,A'/A,KINK,NKO,OS,DQ,BETO,TH0"
490 LOCATE 5, 1: INPUT FBIA, KP, NK, nko, os, DQ, BETO, OS2
500 'TIMER ON
510 'TIMES$ = "0:0:0": DATE$ = "1-1-1988": LOCATE 1, 30: PRINT " 0:"; TIMES$
520 'ON TIMER(300) GOSUB 2140
530 NKK = NK - 1 + 2 * SQR(KP): D0 = LL / NKK: D01 = D0 * SQR(KP)
540 DW = os * D0: D1W = DW * SQR(KP): KPA = (SQR(KP) + 1) / SQR(KP): KPB = (SQR(KP) - 1) /
SQR(KP)
550 FBIAS = FBIA * os / (oab * oab)
551 QI = LOG(os / OS2): bet = BETO * EXP(DQ * QI): osj = os * bet
552 B2 = osj * kkb2 / (oab * oab)
555 IF (kkb2 * bet / kkb > 30) AND (kkb2 * osj > 100) THEN pin = spin ELSE pin = 0
560 B = os * kkb / (oab * oab): F = os * FSB / (oab * oab): KKK0 = NKK ^ 2 / (3.1416 ^ 2 *
oab * oab)
561 'time constant estimation procedure
565 t1 = 2 * oab * oab / (kkb * os): t2 = 2 * oab * oab / (kkb2 * osj)
566 IF (t2 < t1) AND (pin = 0) THEN t1 = t2
567 IF t1 > 1 THEN DT = .001
568 IF t1 < 1 THEN DT = t1 / DT1

570 T = 0: M = 1: ID = 0: IDI = 0: s1 = 0: P1 = 0: CXMEAN = 0: CVMEAN = 0
571 IDI2 = 0: ID2 = 0
580 FOR L = 1 TO 4
590 FOR I = 1 TO NK
600 X0(I, L) = 0: VO(I, L) = 0
610 NEXT I
620 NEXT L
630 FOR L = 1 TO 3
640 FOR I = 1 TO NK
641 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN r1(I, L) = r11(I, L) = 0: GOTO 720
650 r1(I, L) = DT * VO(I, L)

```



```

660 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L): XF = X0(2, L): GOTO 680
670 XM = X0(I, L): XB = X0(I - 1, L): XF = X0(I + 1, L)
680 VM = V0(I, L): TF = T
690 GOSUB 1990
700 FF(I, L) = FORCE
710 r11(I, L) = DT * FORCE
720 NEXT I
730 FOR I = 1 TO NK
731 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN r2(I, L) = r12(I, L) = 0: GOTO 800
740 r2(I, L) = DT * (V0(I, L) + r11(I, L) / 3)
750 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + r1(1, L) / 3: XF = X0(2, L) + r1(2, L) / 3: GOTO 770
760 XM = X0(I, L) + r1(I, L) / 3: XB = X0(I - 1, L) + r1(I - 1, L) / 3: XF = X0(I + 1, L)
+ r1(I + 1, L) / 3
770 VM = V0(I, L) + r11(I, L) / 3: TF = T + DT / 3
780 GOSUB 1990
790 r12(I, L) = DT * FORCE
800 NEXT I
810 FOR I = 1 TO NK
811 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN r3(I, L) = r13(I, L) = 0: GOTO 920
820 r3(I, L) = DT * (V0(I, L) + (4 * r11(I, L) + 6 * r12(I, L)) / 25)
830 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (4 * r1(1, L) + 6 * r2(1, L)) / 25
840 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (4 * r1(2, L) + 6 * r2(2, L)) / 25: GOTO 880
850 XM = X0(I, L) + (4 * r1(I, L) + 6 * r2(I, L)) / 25
860 XB = X0(I - 1, L) + (4 * r1(I - 1, L) + 6 * r2(I - 1, L)) / 25
870 XF = X0(I + 1, L) + (4 * r1(I + 1, L) + 6 * r2(I + 1, L)) / 25
880 VM = V0(I, L) + (4 * r11(I, L) + 6 * r12(I, L)) / 25: TF = T + 2 * DT / 5
890 '
900 GOSUB 1990
910 r13(I, L) = DT * FORCE
920 NEXT I
930 FOR I = 1 TO NK
931 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN r4(I, L) = r14(I, L) = 0: GOTO 1030
940 r4(I, L) = DT * (V0(I, L) + (r11(I, L) - 12 * r12(I, L) + 15 * r13(I, L)) / 4)
950 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (r1(1, L) - 12 * r2(1, L) + 15 * r3(1, L)) / 4
960 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (r1(2, L) - 12 * r2(2, L) + 15 * r3(2, L)) / 4: GOTO
1000
970 XM = X0(I, L) + (r1(I, L) - 12 * r2(I, L) + 15 * r3(I, L)) / 4
980 XF = X0(I + 1, L) + (r1(I + 1, L) - 12 * r2(I + 1, L) + 15 * r3(I + 1, L)) / 4
990 XB = X0(I - 1, L) + (r1(I - 1, L) - 12 * r2(I - 1, L) + 15 * r3(I - 1, L)) / 4
1000 VM = V0(I, L) + (r11(I, L) - 12 * r12(I, L) + 15 * r13(I, L)) / 4: TF = T + DT / 2
1010 GOSUB 1990
1020 r14(I, L) = DT * FORCE
1030 NEXT I
1040 FOR I = 1 TO NK
1050 r5(I, L) = DT * (V0(I, L) + (6 * r11(I, L) + 90 * r12(I, L) - 50 * r13(I, L) + 8 *
r14(I, L)) / 81)
1051 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN r14(I, L) = r4(I, L) = 0: GOTO 1160
1060 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (6 * r1(1, L) + 90 * r2(1, L) - 50 * r3(1, L) + 8 *
r4(1, L)) / 81
1070 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (6 * r1(2, L) + 90 * r2(2, L) - 50 * r3(2, L) + 8 *
r4(2, L)) / 81
1080 IF I = 1 THEN GOTO 1130
1090 '
1100 XM = X0(I, L) + (6 * r1(I, L) + 90 * r2(I, L) - 50 * r3(I, L) + 8 * r4(I, L)) / 81
1110 XB = X0(I - 1, L) + (6 * r1(I - 1, L) + 90 * r2(I - 1, L) - 50 * r3(I - 1, L) + 8 *
r4(I - 1, L)) / 81
1120 XF = X0(I + 1, L) + (6 * r1(I + 1, L) + 90 * r2(I + 1, L) - 50 * r3(I + 1, L) + 8 *
r4(I + 1, L)) / 81
1130 VM = V0(I, L) + (6 * r11(I, L) + 90 * r12(I, L) - 50 * r13(I, L) + 8 * r14(I, L)) /
81: TF = T + 2 * DT / 3
1140 GOSUB 1990
1150 r15(I, L) = DT * FORCE
1160 NEXT I
1170 FOR I = 1 TO NK
1180 R6(I, L) = DT * (V0(I, L) + (6 * r11(I, L) + 36 * r12(I, L) + 10 * r13(I, L) + 8 *
r14(I, L)) / 75)
1181 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN r5(I, L) = r15(I, L) = 0: GOTO 1280
1190 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L) + (6 * r1(1, L) + 36 * r2(1, L) + 10 * r3(1, L) + 8 *
r4(1, L)) / 75
1200 IF I = 1 THEN XF = X0(2, L) + (6 * r1(2, L) + 36 * r2(2, L) + 10 * r3(2, L) + 8 *
r4(2, L)) / 75
1210 IF I = 1 THEN GOTO 1240

```

```

1220 XM = X0(I, L) + (6 * r1(I, L) + 36 * r2(I, L) + 10 * r3(I, L) + 8 * r4(I, L)) / 75:
TF = T + 4 * DT / 5
1230 XB = X0(I - 1, L) + (6 * r1(I - 1, L) + 36 * r2(I - 1, L) + 10 * r3(I - 1, L) + 8 *
r4(I - 1, L)) / 75
1240 XF = X0(I + 1, L) + (6 * r1(I + 1, L) + 36 * r2(I + 1, L) + 10 * r3(I + 1, L) + 8 *
r4(I + 1, L)) / 75
1250 VM = V0(I, L) + (6 * r11(I, L) + 36 * r12(I, L) + 10 * r13(I, L) + 8 * r14(I, L)) /
75: TF = T + 4 * DT / 5
1260 GOSUB 1990
1270 R16(I, L) = DT * FORCE
1280 NEXT I
1290 FOR I = 1 TO NK
1291 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN GOTO 1330
1300 X0(I, L + 1) = X0(I, L) + (23 * r1(I, L) + 125 * r3(I, L) - 81 * r5(I, L) + 125 *
R6(I, L)) / 192
1310 V0(I, L + 1) = V0(I, L) + (23 * r11(I, L) + 125 * r13(I, L) - 81 * r15(I, L) + 125 *
R16(I, L)) / 192
1320 ID = ID + V0(I, L + 1) * V0(I, L + 1) / (1 + ND * V0(I, L + 1) * V0(I, L + 1))
1330 NEXT I
1340 M = M + 1
1350 T = T + DT
1360 TF = T
1370 FOR I = 1 TO NK
1371 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN FF(I, L + 1) = 0: GOTO 1430
1380 IF I = 1 THEN XM = X0(1, L + 1): XF = X0(2, L + 1): GOTO 1400
1390 XM = X0(I, L + 1): XB = X0(I - 1, L + 1): XF = X0(I + 1, L + 1)
1400 VM = V0(I, L + 1): TF = T
1410 GOSUB 1990
1420 FF(I, L + 1) = FORCE
1430 NEXT I
1440 NEXT L
1450 PII = 2 * 3.1216 / DT
1460 'ff(i,1)=0
1470 FOR I = 1 TO NK
1471 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN prx(I) = prv(I) = 0: GOTO 1510
1480 prx(I) = X0(I, 4) + (DT / 24) * (55 * V0(I, 4) - 59 * V0(I, 3) + 37 * V0(I, 2) - 9 *
V0(I, 1))
1490 prv(I) = V0(I, 4) + (DT / 24) * (55 * FF(I, 4) - 59 * FF(I, 3) + 37 * FF(I, 2) - 9 *
FF(I, 1))
1500 CRX(I) = X0(I, 4) + (DT / 24) * (9 * prv(I) + 19 * V0(I, 4) - 5 * V0(I, 3) + V0(I,
2))
1510 NEXT I
1530 FOR I = 1 TO NK
1531 IF (I = nko) AND (pin = 1) THEN FF1(I) = CRV(I) = CRX(I) = 0: GOTO 1600
1540 IF I = 1 THEN XM = prx(1): XF = prx(2): GOTO 1560
1550 XM = prx(I): XF = prx(I + 1): XB = prx(I - 1)
1560 VM = prv(I): TF = T
1570 GOSUB 1990
1580 FF1(I) = FORCE
1590 CRV(I) = V0(I, 4) + (DT / 24) * (9 * FF1(I) + 19 * FF(I, 4) - 5 * FF(I, 3) + FF(I,
2))
1600 NEXT I
1610 IF M / PII > NL THEN GOSUB 2080
1620 M = M + 1: T = T + DT
1630 FOR I = 1 TO NK
1640 X0(I, 1) = X0(I, 2)
1650 X0(I, 2) = X0(I, 3)
1660 X0(I, 3) = X0(I, 4)
1670 X0(I, 4) = CRX(I)
1680 V0(I, 1) = V0(I, 2)
1690 V0(I, 2) = V0(I, 3)
1700 V0(I, 3) = V0(I, 4)
1710 V0(I, 4) = CRV(I)
1720 FF(I, 1) = FF(I, 2)
1730 FF(I, 2) = FF(I, 3)
1740 FF(I, 3) = FF(I, 4)
1750 FF(I, 4) = FF1(I)
1760 NEXT I
1770 CXMEAN = 0: CVMEAN = 0
1780 FOR I = 1 TO NK
1790 CXMEAN = CXMEAN + CRX(I) / NK: CVMEAN = CVMEAN + CRV(I) / NK
1800 NEXT I

```

```

1810 IF ISEC = 2 THEN PSET (sfac * CXMEAN, sfac * CVMEAN)
1820 NKM = INT(NK / 2) + 1
1830 IF ISEC = 20 THEN PSET (sfac * CRX(NKM), sfac * CRV(NKM))
1840 IF M / PII <= NL + 1 THEN GOTO 1470
1850 IF ISEC = 20 THEN GOTO 480
1860 IF ISEC = 2 THEN GOTO 480
1870 IDI = ID / PII
1871 IDI2 = (ID2 / NK) / PII
1872 q2 = 2 * IDI2 * kkb2 / (osj * FSB * FSB)
1880 Q1 = 2 * IDI * kkb / (os * FSB * FSB): q3 = q2 + Q1
1890 s1 = LOG(os) / 2.303 / 2
1900 'Where q10 is normalized properly with respect to resonance frequency
1910 IF (ISEC = 1) AND (sfac > 0) THEN
1911   LOCATE 1, 20
1912   IF 4 * sfac * q3 - 2 > 2 THEN
1913     PRINT "OUT"
1914   ELSE
1915     PRINT "IN "
1916     PSET (s1, -2 + 4 * sfac * q3)
1917   END IF
1918 END IF
1920 IF (ISEC = 1) AND (sfac = 0) THEN
1921   LOCATE 1, 20
1922   IF ABS(LOG(Q1) / 2.303 / 2) > 2 THEN
1923     PRINT "OUT"
1924   ELSE
1925     PRINT "IN "
1926     PSET (s1, LOG(Q1) / 2.303 / 2)
1927   END IF
1928 END IF
1930 os = os * 10 ^ .1
1940 IF os > 100 THEN GOTO 1960
1950 GOTO 540
1960 INPUT KJ
1970 END
1980 ' the following system involves the coulombic kink-kink interaction
1990 IF NK = 1 THEN FORCE = 2 * KKK * KP * XM: GOTO 2070
2000 IF I = 1 THEN FACTO1 = ((XF - KPB * XM) / 2 / DW + 1) / (XM / D1W + 1) ^ 2 / ((XF -
XM) / DW + 1) ^ 2
2010 IF I = 1 THEN FORCE = KKKO * (XF - KPA * XM) * FACTO1: GOTO 2070
2020 IF I = NK THEN FACTO2 = ((-XB + KPB * XM) / 2 / DW + 1) / (XM / D1W - 1) ^ 2 / ((XM -
XB) / DW + 1) ^ 2
2030 IF I = NK THEN FORCE = -KKKO * (-XB + KPA * XM) * FACTO2: GOTO 2070
2040 FACTO = ((XF - XB) / DW / 2 + 1) / ((XF - XM) / DW + 1) / ((XM - XB) / DW + 1)
2050 FACTO = FACTO / ((XF - XM) / DW + 1) / ((XM - XB) / DW + 1)
2060 FORCE = KKKO * (XF - 2 * XM + XB) * FACTO
2070 FBI = FBIAS * (1 - EXP(-TF / 2))
2071 IF I = nko THEN GOTO 2073
2072 FORCE = FORCE + (F * SIN(TF) + FBI) - B * VM / (1 + ND * VM * VM): RETURN
2073 FORCE = FORCE + (F * SIN(TF) + FBI) - B * VM / (1 + ND * VM * VM)
2074 FORCE = FORCE - B2 * VM / (1 + ND * bet * bet * VM * VM): RETURN
2080 IDME = 0
2090 FOR I = 1 TO NK
2100 IDME = IDME + CRV(I) * CRV(I) / (1 + ND * CRV(I) * CRV(I))
2110 NEXT I
2111 ID2 = ID2 + CRV(nko) * CRV(nko) * bet * bet / (1 + ND * bet * bet * CRV(nko) *
CRV(nko))
2120 ID = ID + IDME / NK
2130 RETURN
2140 DAY = VAL(MID$(DATE$, 4, 2)): LOCATE 1, 30: PRINT DAY - 1; ":", TIMES$
2150 RETURN

```

**Project Director:**  
**Research Assistant:**

**Professor Dr. Tarik Ömer Oğurtanı**  
**Dr. Mehmet Rauf Güngör**

**COMPUTER SIMULATION OF INTERNAL FRICTION PEAKS  
ASSOCIATED WITH THE DISLOCATION - INTERSTITIAL  
INTERACTIONS IN REFRACTORY METALS**

**ABSTRACT**

The set of non-linear differential equations which describes the kink chain oscillating in an atmosphere of continuously distributed paraelastic interstitials, and in addition, decorated by a dragging point defect at the midpoint, is solved numerically after introducing a novel scaling and re-normalization procedure. The internal friction coefficient obtained indicates the existence of two separate peaks, the decoration peak and the parent peak, which are directly related to the localized point defect dragging and the paraelastic interstitial atmosphere, respectively.

The power spectrum of a built-in kink chain oscillating in an atmosphere of paraelastic interstitials is investigated numerically by utilizing Fast Fourier Transformation technique. Above a sharply defined value of the strain amplitude, the odd-harmonic generation is observed, only at the low temperature side of the dislocation relaxation peak associated with the interstitials-kink interaction. At moderately high strain amplitudes, a strong enhancement in those harmonics that are situated at the immediate vicinity of the natural resonance frequency of the chain, and the complete depression of the rest is clearly seen. Finally, the onset of quasi-chaotic kink oscillations is detected while system strongly driven in the super-Snoek regime where the atmosphere tearing takes place.

**Keywords:** Internal Friction, Dislocation, Kink, Simulation

## BİYOĞRAFİK BİLGİ FORMU

Proje No: TBAG-1211

2- Rapor Tarihi: Ocak 1996

Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: Ekim 1993-Ekim 1995

Projenin Adı:

**Refrakter Metallerde Ara-İkame Atomlarla Dislokasyonların Etkileşimlerinden Doğan İç Sürtünme Tayflarının Kompüter Simülasyonu**

Proje Yürütücüsü ve Yardımcı Araştırmacılar:

Prof. Dr. Tarık Ö. Oğurtanı  
Mehmet Rauf Güngör

Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:

Metalurji Mühendisliği Bölümü  
Orta Doğu Teknik Üniversitesi

Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:

TÜBİTAK

Öz (Abstract):

Paraelastik, yaygın ara-ikame atomlarından oluşan atmosfer içersinde osilasyonlar yapan, kink zincirinin ortasına yerleştirilmiş sürünen bir dekoratör atomunu da içeren sistemi temsil eden, eğik differensiyel denklemler takımı, özel bir yeniden normalizasyon ve skalalama tekniği kullanılarak sayısal olarak çözülmüştür. Elde edilen iç sürtünme katsayısı iki ayrı spektrumun varlığını, dekoratör ve ana yaygın ikame atomlarına ait, ortaya atmaktadır ki, bunlar lokalize olmuş nokta (sürünen) hata ve paraelastik ara-ikame atmosferlerini oluşturmaktadırlar, sırasıyla.

Ayrıca, Çabuk Fourier Transformasyonu (Fast Fourier Transformation, FFT) ile paraelastik ara-ikame atmosferinde osilasyon yapan kink zincirinin güç spektral analizi yapılmıştır. Gayet keskin bir şekilde temayüz eden bir gerilim amplitüdünün üstündeki gerilimlerde, ve dislokasyon iç sürtünme tayfının düşük sıcaklıktaki bölgesinde, tek-harmonik jenerasyonuna raslanmıştır. Mütevazı gerilim amplitüplerinde ise sistemin tabii frekansı civarındaki harmoniklerde bir siddetlenme, ve tamamen diğerlerinde bastırılma gözlemlenmiştir. En nihayet, atmosfer yırtma olayına tekabül eden quazi-kaotik kink osilasyonlarına sistem kuvvetli olarak süper-Snoek rejiminde sürülürken müşahede edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: İç Sürtünme, Dislokasyon, Kink, Simülasyon

Proje ile ilgili Yayın/Tebliğlerle ilgili Bilgiler

Tarık Oğurtanı, Rauf Güngör, "The Power Spectrum Associated with a Kink" Journal of Alloys and Compounds, 211/212 (1994) p.140-143

-Doçentlik B. Dah Kodu: 604.02.00  
Uzmanlık Alanı Kodu: 604.02.07

ISIC Kodu:

Dağıtım (\*):  Sınırlı Sınırsız

Raporun Gizlilik Durumu :

 Gizli Gizli Değil

Projenizin Sonuç Raporunun ulaştırılmasını istediğiniz kurum ve kuruluşları ayrıca belirtiniz