

CIES-11-25-1-4

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA  
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

CUARTO CURSO PANAMERICANO DE METALURGIA

METALURGIA FISICA

Prop. Dr. Amílcar Funes  
(Armada Argentina)

Departamento de Metalurgia  
Buenos Aires - Argentina

1968

Estos apuntes son la síntesis de algunos temas dictados en la materia Metalurgia Física I del Curso Panamericano de Metalurgia de la Comisión Nacional de Energía Atómica.

La selección del material, su redacción y compaginación han sido efectuadas por el profesor de la materia Capitán de Fragata Amílcar Jorge Funes, físico de la Armada Argentina. Esta Institución hace efectivo así su aporte a la formación de profesionales metalurgistas para el país y para América en general.

En el esfuerzo editorial, compartido entre la C.N.E.A. y la Dirección de Electrónica Naval, han colaborado con encomiable dedicación las señoritas Fanny y Norma Drobner, de esta última dependencia.

## 1 - ESTADOS CONDENSADOS DE LA MATERIA

### 1.1 Estructura atómica

Los átomos son las estructuras básicas que constituyen los elementos.

El modelo atómico que hoy consideramos como válido se debe esencialmente a Lord Rutherford (1910), quien propuso un núcleo masivo, cargado positivamente, circundado por un número de electrones suficientes para neutralizarlo eléctricamente.

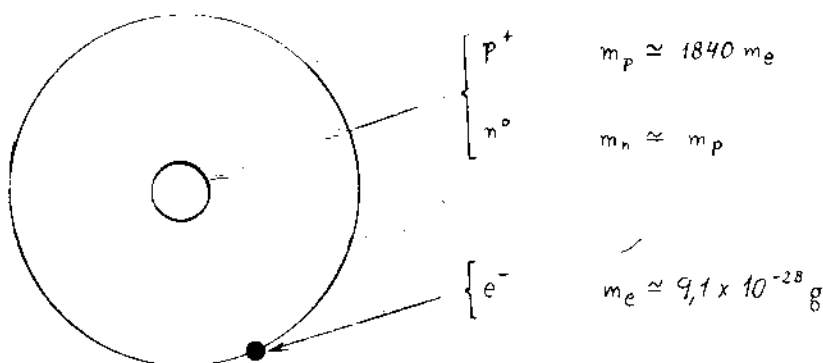


Fig. 1.1

Además de las partículas p, n y e hay muchas otras descubiertas desde Rutherford hasta nuestros días, pero como no las necesitamos para explicar los fenómenos que ocupan nuestra atención en este curso, no nos ocuparemos de ellas.

Rutherford bombardeó con partículas  $\alpha$  ( $2p + 2n$ ), provenientes de la desintegración del  ${}^{84}_{210}\text{Po}$ , láminas de oro muy finas ( $4 \times 10^{-4}$  mm)

Aunque la mayoría de las partículas  $\alpha$  pasaban a través de la lámina, algunas eran deflecionadas con  $\theta > 90^\circ$ , o sea hacia atrás.

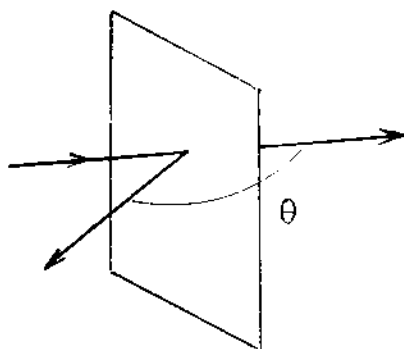


Fig. 1.2

Este fenómeno no podía explicarse por colisiones  $\alpha - e$ , puesto que  $m_\alpha \approx 7000 m_e$  y en tal caso la desviación de las  $\alpha$  debía ser insignificante.

A partir de la relación:

$$\frac{N \text{ partículas deflectadas } \theta < 90^\circ}{N \text{ partículas deflectadas } \theta > 90^\circ}$$

Rutherford calculó el radio del núcleo de oro, que resultó aproximadamente

$$r_n \approx 1,5 \times 10^{-12} \text{ cm.}$$

A partir del peso atómico, N. de Avogrado y peso específico  $\rho$  se puede fácilmente calcular el radio del átomo de oro, que resulta

$$r_o \approx 10^{-8} \text{ cm}$$

Una simple inspección a la tabla periódica nos informa cómo los agrupamientos de p, n y e van constituyendo los elementos, desde los más livianos como  ${}_1\text{H}^1$  y  ${}_2\text{He}^4$ , hasta los más pesados como  ${}_{92}\text{U}^{235}$  y  ${}_{103}\text{Lw}^{257}$

## 1.2 Mecánica atómica

Cuando se analiza mediante un prisma la luz proveniente de una lámpara incandescente, se obtiene un espectro continuo

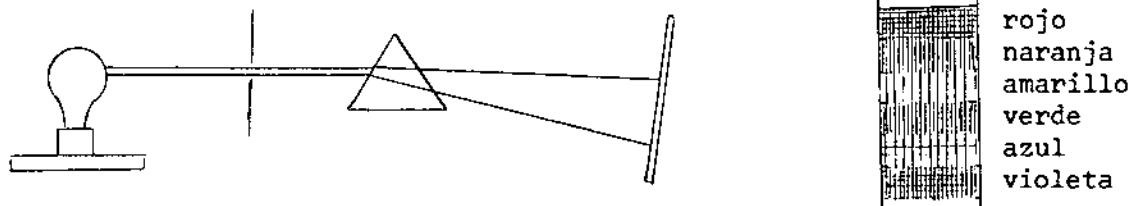


Fig. 1.3

Si usamos como fuente luminosa una llama a la cual se expone una sal vaporizable (sal de Cl o de Hg, por ejemplo), se obtiene un espectro de líneas.

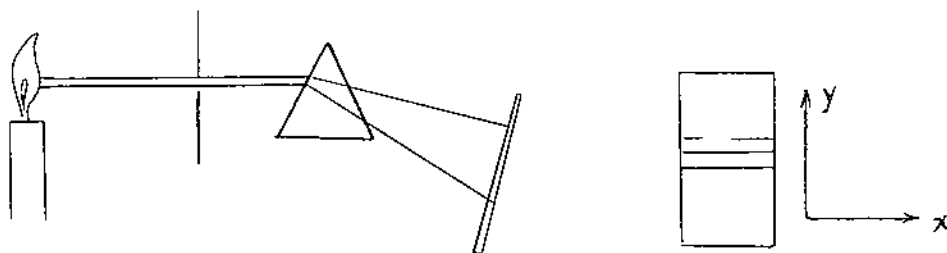


Fig. 1.4

Si la película donde registramos el espectro tiene una escala de longitudes de onda (en Å) según el eje y, observamos que sólo se registra un conjunto de líneas a longitudes de onda determinadas, y que ese conjunto (espectro) es característico de cada elemento.

hay

Si un átomo radía, significa que cargas que se mueven dentro, cargas que han sido excitadas por el calor de la llama, y resulta lógico que los más móviles sean los electrones, por su menor masa respecto del núcleo.

Los electrones no se mueven cayéndose dentro del núcleo, porque tendríamos átomos de  $r_n \approx 10^{-12} \text{ cm.}$ , que no se observan en la naturaleza. Entonces el suyo debe ser un movimiento periódico. Describen órbitas, equilibradas por igualación entre la atracción electrostática del núcleo y la energía cinética del movimiento periódico.

Pero una carga que radia, se frena. Los electrones deberían "decaer" pasando a órbitas mas y más cerradas, hasta caer en el núcleo. Otra vez resultaría  $r_0 \approx 10^{-12}$  cm.

Bohr (1913) explicó el espectro de líneas y también porqué los átomos no se "achican" al radiar energía electromagnética. Supuso que los electrones poseen niveles discretos de energía, y que al radiar efectúan una transición de un nivel más alto a otro más bajo.

El proceso puede ser esquematizado así



Fig. 1.5

Después de los estudios de Planck y Einstein, sabemos que la relación entre  $\Delta E$ , diferencia de energía entre dos niveles atómicos y la frecuencia de la radiación emitida esta dada por

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \nu$$

$h$  (Constante de planck) =  $6,62 \times 10^{-27}$  erg.seg.

En una primera aproximación, se puede visualizar cada órbita en el espacio como una esfera hueca, con centro en el núcleo, sobre la cual se reparte uniformemente la carga eléctrica de los electrones correspondientes a ella. De aquí la denominación de "capas electrónicas". En espectroscopía y R-X se usan las letras K, L, M... para designar las capas a partir de la más cercana al núcleo.

Si la excitación (por ejemplo calórica o luminosa; recordar que luz y calor son sólo dos gamas del espectro electromagnético) es muy intensa, en lugar de "saltar" de  $E_1$  a  $E_2$  ( $E_2 > E_1$ ), el electrón puede ser desprendido del átomo. Esto es lo que sucede en el efecto fotoeléctrico.

Einstein observó que todo acontece como si la luz constase de partículas (fotones) que golpean a los electrones, desprendiéndolos de su órbita. El proceso es hoy familiar a través de las células fotoeléctricas. Los electrones desprendidos son recogidos por una placa positiva y constituyen la corriente fotoeléctrica.

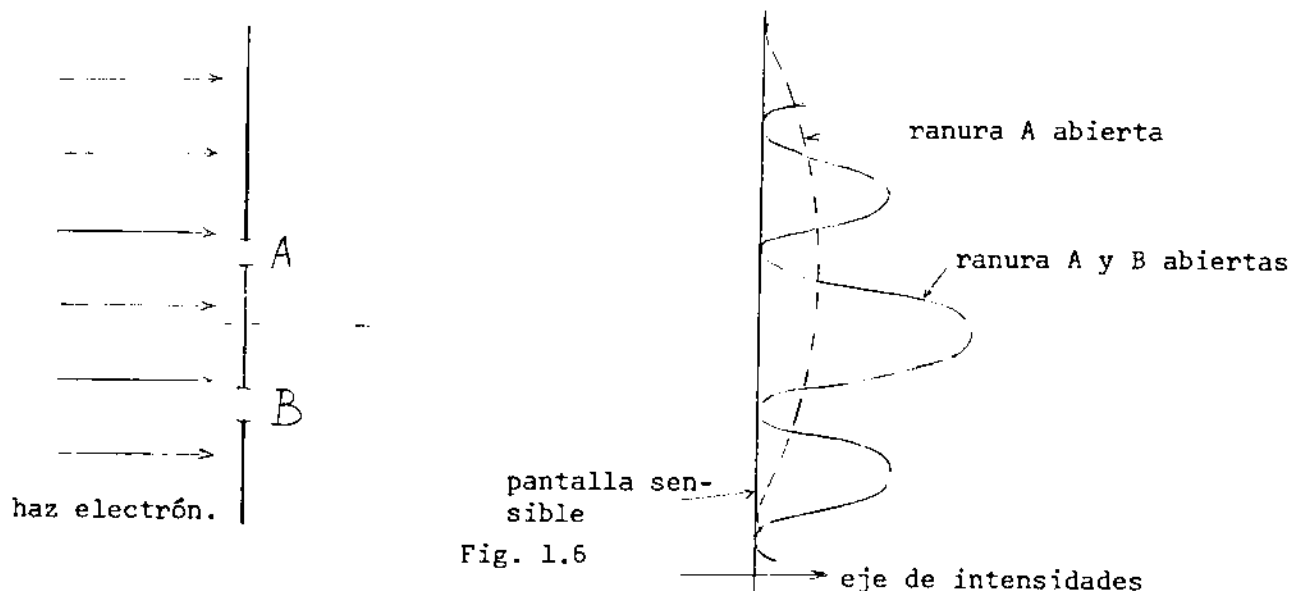
La energía que el fotón entrega al electrón está dada también por

$\Delta E = h \nu$  ( donde  $\nu$  es la frecuencia de la radiación incidente) que no depende de la intensidad. En cambio depende de la intensidad el número de electrones emitidos.

La excitante conclusión que se extrae del fenómeno fotoeléctrico, apoyada por las conclusiones del estudio sobre radiación del cuerpo negro, es que la luz, cuya naturaleza ondulatoria es innegable puesto que provoca fenómenos de difracción, participa también de una naturaleza corpuscular.

La emisión de un fotoelectrón sucede bruscamente, en forma semejante al choque de dos partículas (fotón-electrón)

Más sorprendente que el tratamiento corpuscular para la luz en lo que hace a sus interacciones con la materia, resultan las conclusiones siguientes, derivadas de un sencillo experimento con partículas (electrones)



En ciertas condiciones (ancho de ranura  $< \lambda$ , distancia entre ranuras  $\gg \lambda$ ) el haz de electrones produce difracción. La intensidad (número de partículas por segundo y por  $\text{cm}^2$ .) presenta una sucesión de máximos y mínimos)

La difracción es característica de los fenómenos ondulatorios. Luego los electrones-partículas- se comportan también como ondas.

Su longitud  $\lambda$  está relacionada con el impulso a través de la relación de de Broglie.

$$\left[ \lambda = \frac{h}{p} \right], \quad h = \text{constante de Planck}$$

naturaleza ondulatoria
naturaleza corpuscular

El razonamiento es de validez general para cualquier partícula. Compare el lector las longitudes de onda correspondientes a un electrón y a un proyectil de 30 gramos cuando ambos se mueven con  $V = 3 \times 10^4 \frac{\text{cm}}{\text{seg}}$

### 1.3 El concepto de probabilidad

a) En la Fig. 1.6, si consideramos que la propagación incidente es un haz luminoso, la curva representa intensidad (energía por segundo y por  $\text{cm}^2$ )

b) Si la propagación incidente es un haz electrónico, la curva (número de impactos por segundo y por  $\text{cm}^2$ ) representa probabilidad de impacto.

Ambas propagaciones son susceptibles de un tratamiento ondulatorio del tipo

$$y = y_0 \sin(\omega t - kx)$$

donde  $\omega = 2\pi \nu$  pulsación  
 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  número de onda

La intensidad de una onda (caso a) es proporcional al cuadrado de su amplitud.

$$I \simeq y_0^2$$

En el caso (b) la intensidad está relacionada directamente con la probabilidad. Por analogía, definimos una función de probabilidad  $\psi$ , tal que

$$P \text{ (probabilidad)} = \psi^2$$

Como  $\psi$  puede ser un complejo, la probabilidad se expresa más correctamente por

$$P = \psi \psi^*$$

Para completar la analogía entre el caso b) y el a), anotemos que  $P = \psi \psi^*$  puede interpretarse como la intensidad de una onda

$$\psi = \psi_0 \sin(\omega t - kx) \quad (1)$$

El concepto introducido hasta ahora es el siguiente: el movimiento de una partícula puede estudiarse a través de la probabilidad de localizarla.

La ecuación de movimiento se reemplaza por la ecuación de la onda de probabilidad asociada a la partícula.

Por derivación de (1) respecto de  $x$ , tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= -k \psi_0 \cos(\omega t - kx) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= -k \psi_0 \sin(\omega t - kx) = -k^2 \psi \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 \psi &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Para una partícula de masa  $m$ ,

$$\begin{aligned} k &= \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \cdot \frac{P}{h} = \frac{2\pi}{h} m v \\ k^2 &= \frac{2\pi}{h} \cdot \frac{1}{2} m v^2 = \frac{2\pi^2 m}{h^2} T, \quad T = \text{energía cinética} \\ E &= T + V \text{ (energía total = cinética + potencial)} \\ \therefore T &= E - V \end{aligned}$$

Reemplando en (2)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \quad (3), \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Esta es la ecuación de Schroedinger, instrumento básico de la mecánica ondulatoria.

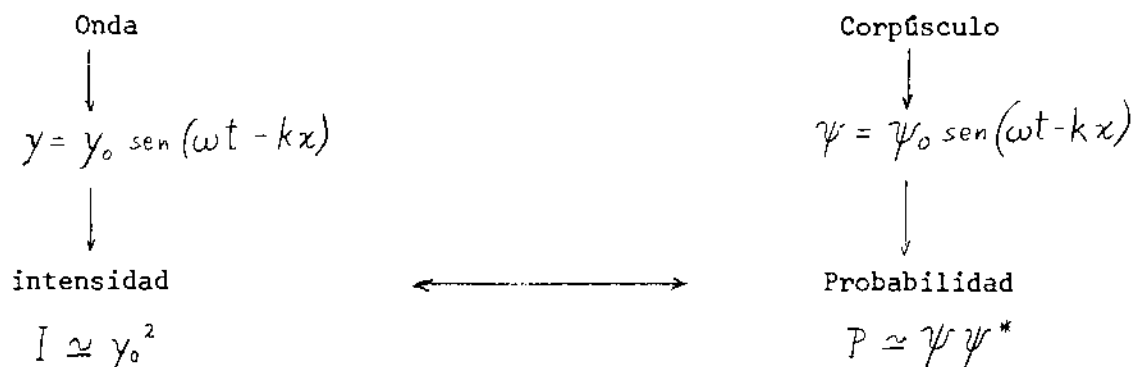
Para tres dimensiones, se escribe

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar} (E - V) \psi = 0 \quad (4)$$

donde

$$\nabla^2 = \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \quad y \quad \psi = \psi(x, y, z)$$

Resumen



#### 1.4 Estados cuánticos

Con el auxilio del concepto de probabilidad y de la ecuación de Schroedinger, resulta fácil dar una idea más exacta sobre la existencia de los niveles discretos de energía del electrón dentro del átomo.

$\psi$  es, en general,  $\psi(x, y, z, t)$

$\psi^2 d\tau$ , donde  $d\tau = dx dy dz$ , representa la probabilidad de hallar la partícula en el entorno del punto  $x, y, z$ , en el instante  $t$ .

Resulta claro que, para el instante  $t$ ,

$$\int \psi \psi^* d\tau = 1 \equiv \text{certeza}$$

todo el espacio

En lo que sigue, haré abstracción del tiempo, considerándolo detenido en un instante dado, como si sacase una fotografía del fenómeno que estudio.

En estas condiciones  $\psi$  es  $\psi(x, y, z)$  solamente

El electrón está constreñido a moverse dentro del átomo, al que considero muy simplificada como una caja de una dimensión. No me interesa que esté el núcleo, de modo que voy a suponer que la energía potencial es cero. La existencia del núcleo que lo atrae, la reemplazo por la condición de que el electrón no puede escapar. En otras palabras, traslado

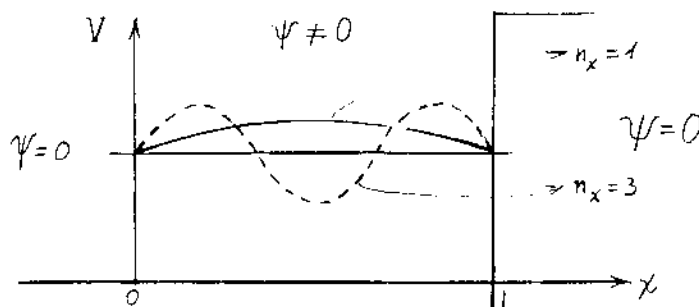


Fig. 1.7



el vínculo del centro (núcleo) al contorno (paredes). Las paredes están representadas por un potencial muy grande fuera del rango  $0-L$

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty & \begin{cases} x > L \\ x < 0 \end{cases} \end{cases}$$

La probabilidad del hallar al electrón fuera de la caja es nula:

$$\psi = 0, \quad x = 0, \quad x = L \quad (5)$$

$$\int_0^L \psi(x) \psi^*(x) dx = 1$$

Sea  $\psi = \psi_0 \sin kx$ , que cumple las condiciones de contorno (5) para  $x = 0$

Para  $x = L$ , debe ser  $kL = n\pi$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\therefore K_{nx} = \frac{n\pi}{L}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_n \psi = 0$$

Por reemplazo de  $\psi$ , tenemos

$$-K_{nx}^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E_n \psi = 0$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} K_n^2 = \frac{\hbar^2}{2mL^2} n^2 \pi^2 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n_x^2$$

$$\boxed{E_n \propto n^2} \quad (6)$$

Como  $n_x$  es un entero, se ve que la energía del electrón, por el solo hecho de estar imposibilitado de escapar de la caja (átomo), sea por atracción nuclear o por existencia de paredes, sólo puede tomar valores discretos. O bien que existen niveles, como lo propuso Bohr.

En este punto podríamos preguntarnos por qué hay niveles  $E_i \neq E_1$  ocupados, cuando el estado de energía mínima  $E_1$  debiera ser el preferido por TODOS los electrones de un átomo. La respuesta es que existe una restricción cuántica, denominada "principio de exclusión de Pauli" que es observada cuando varios electrones se mueven en el mismo campo de fuerza (el del núcleo). El principio de Pauli establece que en cada estado cuántico sólo hay cabida para dos electrones, que deben girar con vector rotación (spin) opuesto.

El número  $n$  se denomina número cuántico principal e individualiza el nivel de energía. Hay otros tres números cuánticos, que individualizan sub-niveles dentro de cada nivel. En rigor, el estado cuántico está individualizado por los cuatro números,  $n$ ,  $m$ ,  $l$  y  $s$ , que se denominan

|       |                           |       |                           |
|-------|---------------------------|-------|---------------------------|
| $n$ , | número cuántico principal | $m$ , | número cuántico magnético |
| $l$ , | número cuántico angular   | $s$ , | número cuántico del spin  |

A  $n$  nos hemos referido.  $s$  representa la orientación del vector rotación del electrón y tiene sólo dos valores posibles:  $+1/2$  y  $-1/2$ , que significan rotación en un sentido o en el opuesto.  $l$  representa el momento angular orbital del electrón.  $m$  representa la proyección del momento anterior sobre un eje preferencial, cuando se aplica un campo magnético externo.

### 1.5 Cohesión

La materia existe como un agregado de átomos. Luego, hay fuerzas interatómicas de atracción.

Por otra parte, pertenece a la experiencia diaria el hecho de que la materia resiste la compresión. Los átomos no pueden ser aproximados indefinidamente.

Para cada estado de presión y temperatura, es lógico pensar en la existencia de un equilibrio de fuerza entre la atracción y la repulsión atómicas, que se traduce en un espaciado de equilibrio.

Este espaciado interatómico o intermolecular es relativamente grande en los gases ( $\approx 10$  diámetros atómicos para el aire a p.t.n.) y mucho más pequeño en los sólidos y líquidos. Estos últimos se denominan por ello, estados condensados.

Para el análisis que sigue, conviene considerar energía de interacción en lugar de fuerza interatómica. La fuerza total está dada por:

$$F = \frac{\delta U}{\delta r}$$

$U$  = energía potencial de un átomo en el campo de otro átomo

$r$  = posición de un átomo a partir de cierto origen

En el equilibrio,  $F = 0$ , de modo que  $\frac{\delta U}{\delta r} = 0$  representa un mínimo de  $U$ , para  $r = a$  = distancia de equilibrio.

Conceptualmente, lo dicho en palabras puede sintetizarse en el siguiente esquema:

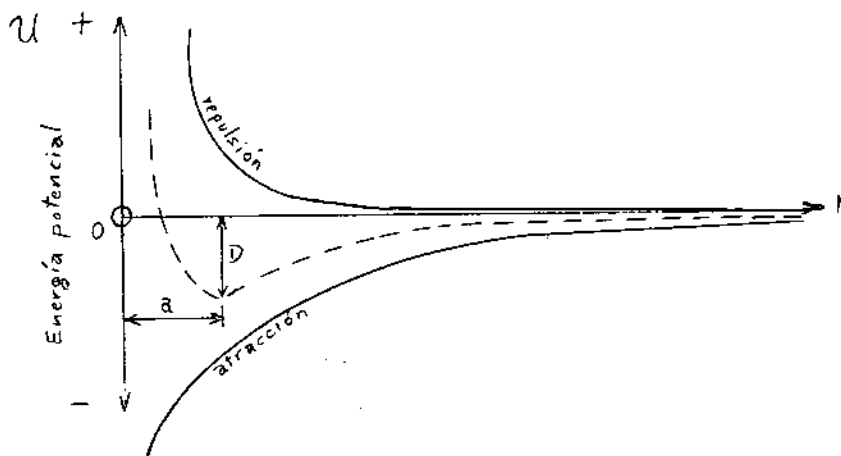


Fig. 1.8

Un átomo está ubicado en 0 y acercamos otro, disminuyendo  $r$  desde el infinito. Se conviene en definir  $U = 0$ ,  $r = \infty$

Para  $r \approx$  algunos diámetros atómicos, la fuerza de atracción se hace más fuerte.  $U < 0$ , porque el trabajo es efectuado por los átomos bajo la fuerza de atracción. La repulsión es prácticamente nula.

Para  $r$  menor, la repulsión aumenta. Su contribución a  $U$  es  $> 0$ , porque el trabajo es hecho sobre los átomos cuando se mueven contra la fuerza repulsiva.

El valor extremo  $U = D$ ,  $r = a$  es igual al trabajo requerido para separar ambos átomos para liberarlos.

La explicación de la repulsión radica básicamente en el principio de exclusión.

Al aproximar los átomos, sus capas de electrones se recubren. Algunos electrones tienen que pasar a estados cuánticos de mayor energía, y esa energía hay que suministrarla por ejemplo, aumentando la presión externa aplicada sobre el cuerpo.

Sobre la naturaleza de la atracción, pasamos a ocuparnos seguidamente. Nos limitaremos a los estados condensados, y particularmente a los sólidos cristalizados, principal objeto de nuestro curso.

### 1.6 Unión iónica

Suponemos que la contribución térmica a la energía  $U$  es cero ( $T = 0^\circ K$ ) y que la energía del punto cero es despreciable (1)

Ejemplos típicos de cristales iónicos son el  $ClNa$  (6 primeros vecinos) y el  $ClCs$  (8 primeros vecinos)

El  $Cl$  tiene configuración electrónica.

$[Ne] 3s^2 3p^5$ , le falta un electrón  $3p$ , para adquirir la configuración estable del  $A$

El  $Na$ , es  $[Ne] 3s^1$ . Le sobra un electrón para tener la configuración del  $Ne$ .

En la unión iónica, el  $Na$  cede su electrón "extra" al  $Cl$ , y ambos, ahora con configuración de gas noble, quedan ligados por el campo de fuerza coulombiano, que en forma general es

$$f = \frac{e_1 e_2}{r_{12}^2} \quad (7)$$

$e_1$  y  $e_2$ , cargas de los iones 1 y 2  
 $r_{12}$ , distancia entre ambos iones

De acuerdo con la teoría de Born para cristales iónicos, la energía potencial total de un solo ion en un cristal iónico tipo  $NaCl$ , se puede expresar como

$$\phi = \phi_m + \phi_R \quad (8)$$

$\phi_m$  = energía coulombiana de interacción con todos los otros iones del cristal

$\phi_R$  = energía de repulsión

La (8) se puede escribir también

$$\phi = - \frac{z^2 e^2 A}{r} + \frac{B e^2}{r^n} \quad (9)$$

$e$  = carga electrónica  
 $r$  = distancia entre centros de dos iones (+) y (-) adyacentes  
 $A, B$  constantes  
 $n \simeq 9$

La energía potencial de un cristal que contiene un mol de  $NaCl$  es

$$U = - \frac{N z^2 e^2 A}{r} + \frac{N B e^2}{r^n} \quad (10)$$

$N$  = N° de Avogadro

El gráfico de  $U(r)$  es aproximadamente el de la Fig. 1.8, en el cual pueden identificarse las representaciones de cada uno de los términos: atractivo (-) y repulsivo (+)

En el  $ClNa$ ,  $z = 1$ , para un solo ion,

$$\phi_m = - \frac{e^2 A}{r} \quad (\text{energ coul. interacción total})$$

Pero como las interacciones coulombianas son de largo alcance, dentro de  $\phi_m$  hay que considerar las contribuciones de los vecinos del ion en cuestión: sea por ejemplo un ion  $Cl^-$ )

---

(1) Sobre la energía del punto cero daré una idea más adelante.

$$\begin{aligned}
 6 \text{ sodios, atracción} &: \frac{-6e^2}{r} \\
 12 \text{ cloros, repulsión} &: + \frac{12e^2}{\sqrt{2}r} \\
 8 \text{ sodios, atracción} &: \frac{-8e^2}{\sqrt{3}r}
 \end{aligned}$$

$$\phi_m = -\frac{Ae^2}{r} = -\frac{e^2}{r} \left[ \frac{6}{\sqrt{4}} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} \dots \right] \quad (11)$$

La serie que expresa A (Constante de Madelung) no es convergente, pero hay otros métodos para computar la influencia de los iones vecinos.

Resulta  $A = 1,7476$  y  $\phi_m = \frac{1,7476}{r}$

La energía repulsiva para un ion es

$$\phi_R = \frac{Be^2}{r^n}, \text{ donde B y n deben ser evaluados}$$

Esta evaluación se hace a través de 2 magnitudes que se obtienen experimentalmente: a (dist. de equilibrio a 0°K) y  $K_0$ , (compresibilidad a 0°K)

Para  $r = a$ , la fuerza de todos los demás iones sobre un ion es cero:

$$\left( \frac{d\phi}{dr} \right)_{r=a} = \frac{d}{dr} \left( -\frac{Ae^2}{r} + \frac{Be^2}{r^n} \right) = 0 \quad (12)$$

La segunda ecuación que vincula B y n se obtiene del hecho que la compresibilidad es función de la 2ª derivada de  $\phi$

Se puede demostrar que

$$K = \frac{1}{3a} \left( \frac{d^2\phi}{dr^2} \right)_{r=a} \quad (13)$$

a se obtiene por rayos X y se extrapola a 0°K

El sistema (12) y (13) permite obtener B y n

El exponente n para ClNa resulta 8.

$U$  resulta 180,4 Kcal/mol ( $\equiv$  mol vapor  $\text{Na}^+$  + mol gas  $\text{Cl}^-$ )

Midiendo el calor de formación del ClNa a partir de Na metálico y  $\text{Cl}_2$  gaseoso, juntamente con la energía de sublimación del Na, energía de ionización del Na, energía de disociación del  $\text{Cl}_2$ , energía de ionización del Cl,

$$U_{\text{exp}} \text{ resulta} = 182 \text{ Kcal/mol}$$

La ecuación de Born da una 1ª aproximación muy buena del valor de la energía de cohesión para un cristal iónico típico.

La unión iónica no es saturable ni direccional.

Las uniones multivalentes dan materiales de muy alto punto de fusión ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ , p.f. 2020°C)

### 1.7 Unión Van der Waals

Ejemplos típicos: gases nobles, moléculas de aceites, ceras, polímeros; (la unión molecular es generalmente covalente)

También es de naturaleza eléctrica, pero es característica de átomos (y moléculas) eléctricamente neutras, que poseen conformaciones electrónicas de tipo gas noble. Estas fuerzas de unión son pequeñas y de corto alcance y se originan en distribuciones asimétricas de cargas. Sus componentes más importantes se deben a la interacción entre dipolos.

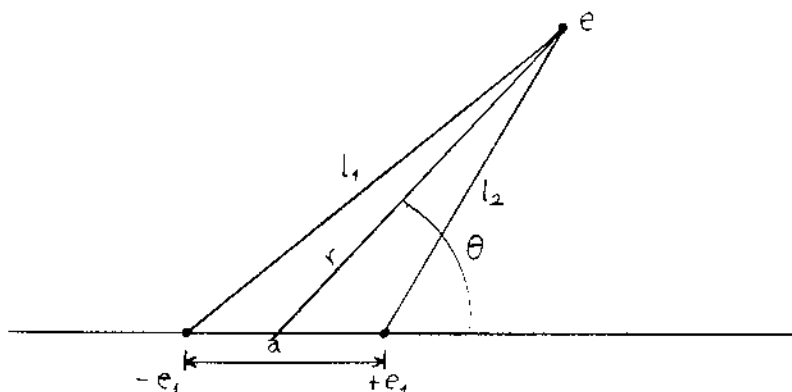


Fig. 1.9 Acción de un dipolo sobre una carga

La carga  $e$  experimenta una fuerza

$$F = -\frac{e_1 e}{l_1^2} + \frac{e_1 e}{l_2^2}$$

Se puede demostrar que para  $r \gg a$ ,

$$F = \frac{e_1 a \cos \theta}{r^3} e = \frac{\mu \cos \theta}{r^3} e, \quad \mu = \text{momento dipolar}$$

La fuerza sobre la unidad de carga (campo eléctrico del dipolo) es

$$E = \frac{\mu \cos \theta}{r^3} \quad (14)$$

Los gases nobles como el Ar y el Ne, a muy bajas temperaturas, cristalizan en f.c.c. y sus átomos son mantenidos en la red por fuerzas de Van der Waals.

Aunque en promedio tienen momento dipolar nulo, el momento instantáneo es distinto de cero.

Si un átomo es sometido a un campo  $E$ , su distribución de cargas no nucleares se altera, dando lugar a la formación de un dipolo inducido de momento

$$\mu_I = \alpha E, \text{ proporcional al campo } E$$

$\alpha$  = polarizabilidad

En el caso del gas noble, un dipolo instantáneo de un átomo induce otro dipolo sobre un 2º átomo (Fig. 1.10)

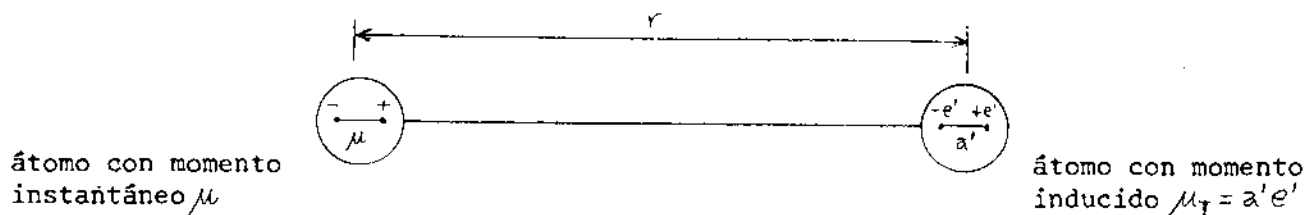


Fig. 1.10 Interacción dipolo-dipolo

$E$  = intensidad de campo sobre  $(-e')$ , debido al dipolo  $\mu$ .  
El campo sobre  $(+e')$  es  $E + \frac{dE}{dR} \cdot a'$

Fuerza total sobre el dipolo inducido:

$$f = -e'E + e'(E + \frac{dE}{dr} \cdot a') = e'a' \cdot \frac{dE}{dr} = \mu_I \frac{dE}{dr}$$

como

$$\mu_I = \alpha E,$$

$$f = \alpha E \frac{dE}{dr} \quad \text{y empleando (14), } E \approx \frac{\mu}{r^3}$$

$$f = \alpha \frac{\mu}{r^3} \frac{d}{dr} \frac{\mu}{r^3} \approx \alpha \frac{\mu^2}{r^5}$$

La energía de unión debida la interacción dipolo-dipolo (o en terminos eléctricos, el potencial), es

$$\phi \approx \int_{\infty}^r \alpha \frac{\mu^2}{r^5} dr \approx \alpha \frac{\mu^2}{r^4}$$

La fuerza varía como  $\mu^2$ ; aunque  $\bar{\mu} = 0$ ,  $\mu^2 \neq 0$  (promedio temporal)

La dependencia como  $\frac{1}{r^4}$  da una idea del corto alcance.

La energía de cohesión en el caso de fuerza Van der Waals es

$$U = \frac{-A}{r^6} + \frac{B}{r^n}, \quad A, B, n = \text{const.} \quad [U = k \text{ cal/mol}]$$

Para  $n = 12$  se tiene una buena correlación con los datos experimentales

$$U_{v.d.W.} \approx \frac{1}{100} U_{iónica}$$

Los gases nobles tienen bajo p.f y p. ebullición.

Una expresión más exacta de la energía de cohesión debida a las fuerzas de Van der Waals es

$$\phi(r) = - \left( \underbrace{\frac{C_1}{r^6}}_{\text{dipolo-dipolo}} + \underbrace{\frac{C_2}{r^8}}_{\text{dipolo-cuadrupolo}} + \underbrace{\frac{C_3}{r^{10}}}_{\text{cuadrupolo-cuadrupolo}} \right)$$

El 2º término representa algunos % y el tercero, sólo menos de 1,5 % de la energía  $\phi$

Resulta lógico en este momento inferir que el tipo de interacciones mencionado (d-d, d-c, c-c) existe también entre átomos de un sólido cualquiera (no necesariamente gas noble). El cuadro siguiente resulta ilustrativo. Muestra las contribuciones a  $\phi$ .

| crystal | atractiva<br>(Madelung) | repulsiva | d-d | d-c | punto<br>cero | total |
|---------|-------------------------|-----------|-----|-----|---------------|-------|
| LiF     | 285,5                   | - 44,1    | 3,9 | 0,6 | - 3,9         | 242,0 |
| NaCl    | 204,3                   | - 23,5    | 5,2 | 0,1 | - 1,7         | 184,4 |

La idea que hay que retener es que no existen uniones puramente de un tipo u otro, sino principalmente de un tipo u otro.

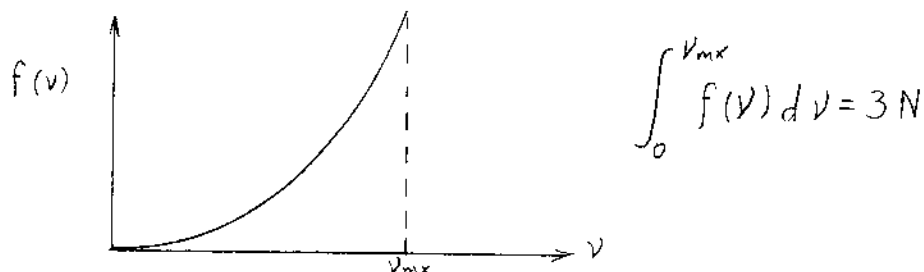
Aunque la hemos soslayado hasta este momento, conviene hacer una brevisima referencia a la energía del punto cero. (en 1.6 la supusimos  $\rightarrow 0$ )

Podemos definirla como la energía térmica de un cristal cuando sus átomos vibran en sus estados más bajos de energía (0°K)

Un cristal de N átomos se considera como equivalente a 3 N osciladores con distintas frecuencias  $\nu$ . Según Debye, se supone que estas frecuencias varían entre 0 y  $\nu_{\text{máx}}$ . El número de osciladores que tienen frecuencias comprendidas entre  $\nu$  y  $\nu + d\nu$  es

$$f(v)dv = \frac{9N}{v_{mx}^3} v^2 dv$$

$f(v)$  = función de distribución cuya representación gráfica es



El área bajo la curva es  $3N$  = número total de osciladores.

Según la mecánica cuántica, la energía del punto cero de un oscilador es  $\frac{h\nu}{2}$

Para todo el cristal a  $0^\circ K$ ,

$$E_z = \int_0^{v_{mx}} f(v) \frac{h\nu}{2} dv = \frac{9}{8} N h v_{mx}$$

Esta es la cantidad que figura en la penúltima columna de la tabla anterior.

### 1.8 Unión covalente (de valencia u homopolar)

Este tipo de unión aparece en su forma más pura en  $H_2$ ,  $Cl_2$ ,  $CH_4$ ,  $CCl_4$  y en el diamante.

Su principal característica reside en que los electrones, no permanecen todo el tiempo unidos a los átomos que intervienen en la unión, como en el caso del cristal iónico  $ClNa$  (el  $Cl$  gana un electrón, que es el que pierde el  $Na$ ), sino que son compartidos por los átomos de la unión.

No existe una explicación clásica satisfactoria para la covalencia. La energía de unión actuante se pone en evidencia cuando se efectúa el tratamiento mecánico-cuántico del problema. Esa energía se denomina "de intercambio", y no tiene un análogo clásico.

El modelo físico de la covalencia puede construirse idealizando el proceso por el que dos  $H$  constituyen una molécula  $H_2$ .

Tomemos dos protones y un electrón. Este último es atraído igualmente por ambos protones, aunque cuando ellos están distantes, se vincula con uno sólo y tenemos así un átomo de  $H$  y un protón (Fig. 1.11)

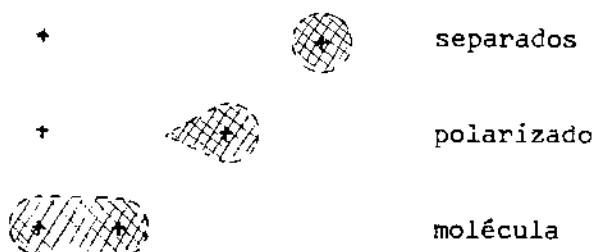


Fig. 1.11

A medida que el  $p^+$  se acerca, la nube electrónica se polariza y es atraída hacia el protón.

En un momento dado, se llega a un régimen estable, en el cual el ( $e^-$ ) distribuye igualmente su movimiento entre los dos ( $p^+$ ) y pasa la mayor parte del tiempo en el espacio intermedio, donde experimenta la atracción electrostática de ambos. El ( $e^-$ ) está ahora en un estado cuántico de unión entre los dos ( $p^+$ ), que no es sino la atracción electrostática que ambos experimentan hacia el mismo electrón. Como en el átomo aislado, hay restricciones cuánticas que impiden a la nube encogerse demasiado, y el espaciado de los núcleos de la molécula se mantiene. Se puede calcular el estado fundamental de este electrón (nivel de energía más bajo), que resulta ser análogo

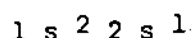
go al del electrón del H aislado.

Pero ( $2p^+$ ) y ( $1e^-$ ) constituyen un ión capaz de dar una molécula neutra  $H_2$  por incorporación de otro ( $e^-$ ). Este segundo electrón puede reunirse con el primero en el estado fundamental y formar un "par electrónico" de unión entre los núcleos.

De acuerdo con el principio de exclusión, ambos electrones deben tener spines opuestos.

Esta unión por par electrónico - o electrón compartido, como también se la denomina - no llega a ser doblemente fuerte que la de un electrón, debido a la repulsión electrostática entre ambos electrones.

Si aproximamos un tercer H a la molécula  $H_2$ , podríamos suponer que el estado fundamental - pensar en una "nube" de carga- se expandiría envolviendo los tres átomos H. Pero el principio de exclusión establece que sólo hay lugar para dos electrones en el estado fundamental, y el 3º que viene con el 3º hidrógeno debe acomodarse en un estado cuántico de mayor energía que el estado fundamental, como sucede por ejemplo en el átomo de Li cuya configuración electrónica es



Este efecto debilita enormemente la atracción entre  $H_2$  y el tercer H, que no se une químicamente a la molécula; decimos que  $H_2$  es una molécula saturada.

Debido a que depende de estados cuánticos que se extienden de un átomo a otro, la unión covalente refleja mucho más fuertemente que la unión iónica, las restricciones cuánticas que gobiernan la estructura atómica.

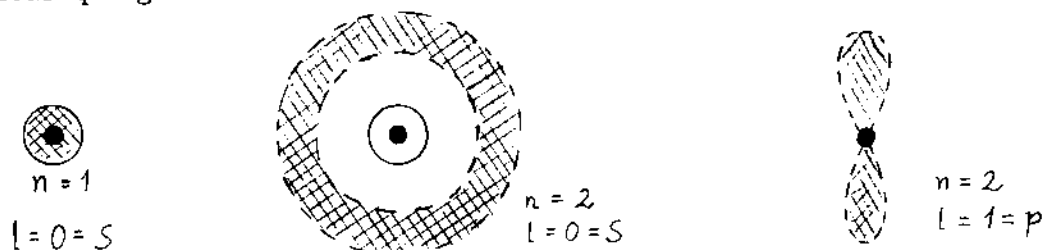


Fig. 1.12 Algunos estados cuánticos electrónicos del átomo H. Las áreas sombreadas representan el espacio alrededor del núcleo en el cual el electrón se mueve la mayor parte del tiempo. El estado fundamental ( $1s$ ) y el primer estado excitado ( $2s$ ) tienen simetría esférica. El estado excitado ( $2p$ ) tiene simetría rotacional alrededor del eje vertical.

Resumiendo lo dicho, tenemos las siguientes notas características de la unión covalente

- Es unión por par electrónico, porque cada estado cuántico de unión tiene lugar para dos electrones ( $\uparrow \downarrow$ )
- Es muy frecuentemente unión dirigida, porque depende de estados cuánticos que pueden extenderse en una configuración espacial distinta de la esféricamente simétrica (ver caso  $2p$ , Fig. 1.12)
- Es saturable, porque entre un átomo y sus vecinos sólo se puede formar un número limitado de estados cuánticos de unión.

La manifestación de esta última nota, está dada por la regla ( $8 - N$ ) que gobierna el número de primeros vecinos.

$$N = \text{Nº electrones órbita más externa}$$

Los halógenos ( $N = 7$ ) se unen de a pares:  $Cl_2$ ,  $F_2$ , etc.

Las moléculas  $Cl_2$ ,  $F_2$ , etc. se unen mediante fuerza Van der Waals.



Muchas sustancias orgánicas (ceras, aceites, polímeros) constan de moléculas covalentes, unidas por fuerzas Van der Waals.

El ejemplo ideal de sólido covalente es el diamante.  $N = 4$ , tiene 4 primeros vecinos

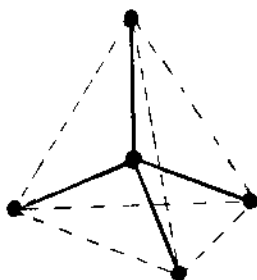


Fig. 1.13 Uniones covalentes del diamante, Si, Ge, y Sn gris.

La alta resistencia mecánica de la unión covalente, se pone en evidencia por la dureza del diamante y su elevado punto de fusión ( $> 3.500^{\circ} \text{C}$ )

El carburo de Si y otros carburos metálicos son también sustancias con uniones covalentes (principalmente), de gran dureza y alto p.f.

### 1.9 Unión metálica

No todos los estados que pueden constituir uniones covalentes se emplean para formar uniones por par electrónico. En el grafito, se emplean sólo 3 de las 4 electrones disponibles (Explicación de la untuosidad del grafito, y su utilidad como lubricante seco)

Muchas sustancias, particularmente aquellas con  $N < 4$  forman uniones metálicas. Este tipo de unión se reconoce por las propiedades eléctricas y ópticas de las sustancias que la poseen; veremos luego que la definición más precisa de un metal es bastante más elaborada y es muy común entre los elementos más pesados.

Conceptualmente, la unión metálica es, podríamos decir, una extrapolación no saturable y no direccional, de la unión covalente; los iones (+) de los átomos metálicos son atraídos electrostáticamente hacia los electrones que se mueven entre ellos.

Estos electrones de unión son libres, no están ni apareados, ni localizados en alguna región interatómica, sino que rodean a los iones (+) como un verdadero gas y más adelante veremos, al tratar propiedades eléctricas, distintas concepciones de este gas de electrones.

En cuanto a fuerza, la unión metálica es semejante a la covalente:

| Li                                    | Na                                     | diamante                                                   |                                 |
|---------------------------------------|----------------------------------------|------------------------------------------------------------|---------------------------------|
| $\frac{1,7 \text{ eV}}{\text{átomo}}$ | $\frac{1,13 \text{ eV}}{\text{átomo}}$ | $\frac{7,4 \text{ eV}}{\text{átomo}} \equiv \frac{7,4}{4}$ | por electrón de unión = 1,85 eV |

Factores que favorecen la unión metálica

- Electrones alejados del núcleo, que los atrae débilmente
- Posibilidad de los electrones más externos, de pasar a estados de energía distintos, aunque muy próximos.

Ejemplos de lo primero, Li y Na, en comparación con H, que constituye unión covalente. Lo segundo permite que la mayoría de los elementos pesados tengan unión metálica (efecto de apantallamiento de núcleos) y que esta unión no sea saturable. (Siempre hay un estado cuántico distinto, próximo, donde puede entrar el electrón de un átomo que viene a unirse a un conjunto de átomos ya unidos metálicamente)

La carencia de saturación permite los empaquetamientos compactos, que dependen sólo de los radios atómicos.

Estos empaquetamientos implican uniones múltiples de un átomo con sus vecinos, y la elevada cohesión resultante explica los altos puntos de fusión y las características mecánicas de los metales.

Aquellos metales que pueden acomodar átomos más pequeños en su estructura cristalina, sin perder el empaquetamiento compacto, resultan con mayor número de vecinos. La unión de cada átomo de la solución es más fuerte. Es el caso del C, N, Si que con el Fe dan origen a los carburos, nitruros y siliciuros, que son materiales muy duros.

La inexistencia de saturación también explica la posibilidad de mezclar átomos metálicos para formar aleaciones, prescindiendo de las restricciones de la valencia (que es la manifestación de la saturación de la unión covalente). Se pueden formar soluciones metálicas con un amplio rango de concentraciones.

- Nociones sobre formación de compuestos intermetálicos, determinados principalmente por diferencias de tamaño de los átomos participantes.

## 2 - ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE CRISTALES

### 2.1 Electrones en metales

Este gas de electrones que rodea los iones de los metales y les da cohesión, debe poder detectarse físicamente

En efecto:

- Aplicando un campo eléctrico, se detecta el movimiento de las cargas electrónicas.
- Aplicando un gradiente térmico, se observan efectos de diferencia de potencial, explicables por "amontonamiento" de electrones en la parte más fría del espécimen.
- También los electrones contribuyen al flujo calórico, y su contribución puede ser separada de la de los átomos de la red.  
A temperaturas normales, existe una correlación entre la conducción eléctrica y la térmica, que se expresa mediante la ley de Wiedmann-Franz.

$$\left(\frac{\sigma}{\mathcal{L}}\right)_T = \text{const. para todos los metales}$$

- Acelerando bruscamente un trozo de metal, los electrones muestran inercia. Se "quedan atrás", y se puede medir una diferencia de potencial entre la parte anterior y la posterior del espécimen. El fenómeno se conoce como "efecto Tolman"

La experiencia a), permite expresar una relación entre la corriente y el campo eléctrico

$$J = \sigma E \quad (1), \text{ ley de Ohm}$$

$\sigma = \text{conductividad eléctrica}$

Esta expresión evidencia que esos electrones que hemos supuesto libres en el metal, se mueven, bajo campo eléctrico aplicado, como esferitas dentro de un fluido, con un rozamiento viscoso que es proporcional a la velocidad. O bien, podemos suponer que, acelerados por el campo  $E$ , experimentan choques sucesivos que los frenan, permitiéndoles sólo moverse con una cierta velocidad media  $v$ .

$$J = Ne v \quad (2) \quad \left[ \frac{\text{electrones}}{\text{cm}^3} \times \text{carga} \times \frac{\text{cm}}{\text{seg}} \right] = \left[ \frac{\text{Carga}}{\text{seg. cm}^2} \right]$$

fuerza sobre un electrón  $e\mathcal{E} = m \frac{dv}{dt}$

$$dv = \frac{e\mathcal{E}}{m} dt$$

Integrando entre 0 y  $\mathcal{L}$  (tiempo entre choques)

$$v = \frac{e\mathcal{E}}{m} \mathcal{L} \quad \text{y reemplazando en (2)}$$

$$J = \frac{Ne^2 \mathcal{L}}{m} \mathcal{E} \quad (3) \quad \text{Comparando con (1)}$$

$$\sigma = \frac{Ne^2 \bar{\epsilon}}{m}$$

y como  $\bar{\epsilon} = \frac{\Lambda}{v}$  ( $\Lambda$  = c.l. medio)

$$\sigma = \frac{Ne^2 \Lambda}{m v} \quad (4) \quad \rho \text{ (resistividad)} = \frac{1}{\sigma} \quad (5)$$

El estudio de  $\sigma$  vs.  $T$  revela la siguiente dependencia

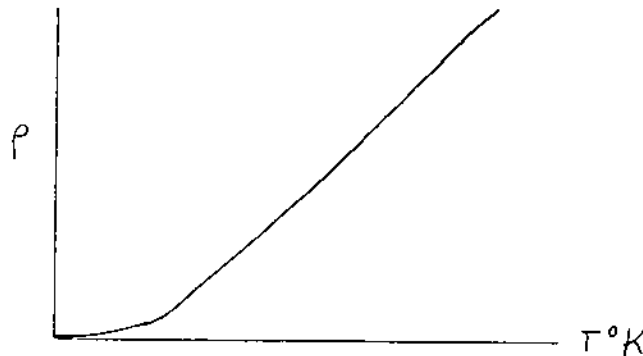


Fig. 2.1

Se advierte que  $\rho \propto \frac{1}{\Lambda}$  aumenta con  $T$ , lo cual significa que el camino libre medio disminuye con la temperatura, todo lo cual es clásicamente coherente con el aumento de entropía (desorden) dentro del sólido.

Sin embargo, cuando se hizo con cuidado el estudio experimental de calores específicos a bajas temperaturas (vibración muy atenuada de los átomos de red) el gas clásico de electrones evidenció contribuir con un 1 % del valor  $3/2 N K$  por mol que era de esperar de un gas clásico.

## 2.2 El gas cuántico

Esta discrepancia entre valores calculados y valores observados del calor específico electrónico hizo pensar

- a) que no todos los electrones libres contribuían a la conducción calórica.
- b) que las hipótesis del gas clásico no eran aplicables en este caso.

La primera especulación era insostenible, ante la evidencia presentada por la conducción eléctrica. Sommerfeld probó que las hipótesis del gas clásico eran demasiado simples. En efecto, no se había tomado en cuenta ni la interacción de los electrones con los iones de la red, ni la de los electrones entre sí (denominada correlación)

La distribución de energías supuesta era la de Maxwell-Boltzman (Fig. 2.2)

El próximo paso fué entonces considerar que el electrón estaba impedido de abandonar el metal, y sometido a un potencial constante dentro del mismo. Este potencial proviene de la acción combinada de todos los iones de la red.

Matemáticamente, el problema se resuelve como lo hicimos ya (ver 1.4) para el electrón en una caja de potencial constante (que puede considerarse como nulo sin que el problema pierda generalidad)

Otra vez se desprecia la correlación (interacción entre electrones)

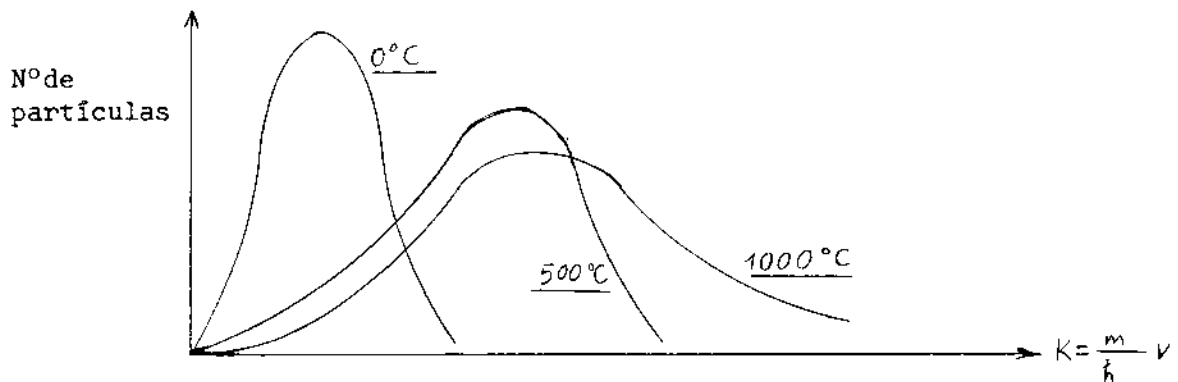


Fig. 2.2 Distribución de Maxwell-Boltzman para un gas clásico

$K$  = vector de onda de la  $\psi$  asociada con la partícula.

Nota: Esta distribución es esencialmente la distribución de velocidades que muestran todos los libros, salvo multiplicación por un factor de escala  $\frac{m}{h}$

Puesto que el electrón puede estar en cualquier parte dentro del metal, se lo puede describir por una función de onda  $\psi$  tal que  $\psi \psi^* = \text{const.}$ , de modo que ponga en evidencia que la probabilidad de hallarlo en cualquier  $(x, y, z)$  es la misma (Nos independizamos de  $t$ )

Una  $\psi$  que cumple esa condición es

$$\psi = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (6) \quad \mathbf{k} = \text{vector de onda} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$\mathbf{r}$  = vector de posición a partir de un origen

$$\int_{\text{Todo el metal}} \psi \psi^* d\mathbf{r} = \int A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} A e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = A^2 \cdot V = 1$$

$$\therefore A = \left(\frac{1}{V}\right)^{1/2} \quad \text{y} \quad \psi \psi^* = \frac{1}{V} = \text{constante}$$

$V$  = volumen del metal

La ecuación de Schroedinger que vincula la "descripción"  $\psi$  del electrón con la energía es

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0, \quad (7) \quad \text{con} \quad V = 0 \text{ (potencial)}$$

El reemplazo de (6) en (7) da

$$-K^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

$$E \cdot \frac{2m}{\hbar^2} = K^2 \quad , \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (8)$$

Por comparación con  $E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$

obtenemos

$$\boxed{p = \hbar K} \quad (9)$$

que relaciona el impulso de la partícula clásica, con el vector de onda (vector de propagación  $\underline{K}$ ) de la onda asociada  $\psi$  (tal que  $\psi \psi^* d\mathcal{E}$  de la probabilidad de hallar la partícula en el entorno de volumen  $d\mathcal{E}$ )

Todavía nos falta introducir condiciones de contorno sobre la  $\psi$ , (como hicimos antes en 1.4) y calcular los  $\underline{K}$  resultantes, o lo que es lo mismo, por (8), los valores de la energía.

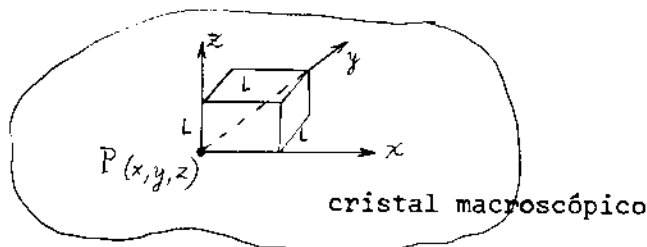


Fig. 2.3 Condiciones cíclicas de contorno para la  $\psi$

Puesto que la probabilidad de hallar al electrón en el seno del cristal es la misma para cualquier  $(x, y, z)$ , la función  $\psi$  que lo describe debe ser la misma sobre cualquiera de los vértices de un cubito elemental de lado  $L$ .

$$\begin{aligned}\psi(\underline{r}) = \psi(x, y, z) &= \psi(x+L, y, z) \\ &= \psi(x, y+L, z) \\ &= \psi(x, y, z+L)\end{aligned}\quad (10)$$

La idea se debe a von Karman y la prueba de la equivalencia física del problema fue dada por Born y Huang en 1954.

$$\begin{aligned}e^{i\underline{K}\underline{r}} &= e^{i(K_1x + K_2y + K_3z)} \\ &= e^{i(K_1(x+L) + K_2y + K_3z)}\end{aligned}\quad \text{y según (10)}$$

$$\therefore e^{iK_1L} = e^{i2\pi n_1}$$

$$K_1 = \frac{2\pi n_1}{L} \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots \text{entero}$$

Análogamente

$$K_2 = \frac{2\pi n_2}{L}, \quad K_3 = \frac{2\pi n_3}{L}$$

Puesto que según (8)

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (K_1^2 + K_2^2 + K_3^2), \quad \text{resulta}$$

$$E = \frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{2m L^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \frac{h^2}{2m(V)^{1/3}} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (11)$$

$V = L^3$ , volumen del cubo elemental

Si Vd. se ha extraviado en el razonamiento, note que

1. Usamos la descripción ondulatoria de la partícula
2. La ecuación de Schroedinger nos permite hallar la expresión de la energía
3. Las condiciones de contorno nos permiten hallar valores de energía que dependen de 3 números enteros  $(n_i) = 0, 1, 2, \dots$  QUE PUEDEN SER POSITIVOS O NEGATIVOS.

Aquí está realmente lo nuevo de este tratamiento formalmente más complejo que el del gas clásico.

En el gas clásico, (ver Fig. 2.2) la energía  $E$  (K) puede tomar toda una gama continua de valores, porque la variación de  $K$  es continua. O si Vd. quiere, la velocidad varía en forma continua.

En el gas cuántico (Sommerfeld), la energía varía en forma discontinua (11). Tenemos niveles cuánticos, discretos.

El nivel más bajo se tiene para  $n_1 = n_2 = n_3 = 0$  y en él podemos ubicar 2 electrones con spines  $\uparrow\downarrow$  (estado fundamental). Veamos cuántos electrones podemos ubicar en el primer nivel excitado:  $n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$

| $n_1$ | $n_2$ | $n_3$ | spin  |              |
|-------|-------|-------|-------|--------------|
| 1     | 0     | 0     | 1/2   | 4 electrones |
| 1     | 0     | 0     | - 1/2 |              |
| - 1   | 0     | 0     | 1/2   |              |
| - 1   | 0     | 0     | - 1/2 |              |
|       | 1     |       |       | 4 electrones |
|       | 1     |       |       |              |
|       | - 1   |       |       |              |
|       | - 1   |       |       |              |
|       |       | 1     |       | 4 electrones |
|       |       | 1     |       |              |
|       |       | - 1   |       |              |
|       |       | - 1   |       |              |

Pruebe Vd mismo que el 2º nivel excitado  $n^2 = 2 (0, \pm 1, \pm 1$  y permutaciones) puede contener 24 electrones.

-----

Este formalismo cuántico que condujo a

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{2m(V^{2/3})}$$

nos ha permitido hallar los estados disponibles para los electrones del metal, la "estantería" donde podemos ubicarlos.

Suponga ahora un sólido que no tiene electrones libres; por arte de magia, allí están sólo los iones. La temperatura es  $0^\circ \text{K}$ . Vamos echando dentro los electrones que, por el principio de mínima energía, tienden a ubicarse todos en el nivel más bajo. Pero aquí entra en acción el principio de exclusión. Solamente dos electrones pueden ubicarse en los dos estados  $s = 1/2$  y  $s = -1/2$  del nivel fundamental  $n = 0$ . De modo que se van llenando los niveles desde el mínimo, hasta un cierto valor  $E_{mx}$ . Por debajo de  $E_{mx}$  todos los niveles están llenos, y por encima de  $E_{mx}$  todos están vacíos.

Esta  $E_{mx}$  se denomina energía de Fermi  $E_F(0)$  y su valor depende del número de electrones disponibles.

El llenado de niveles se representa así:

probabilidad de  
ocupación de un nivel

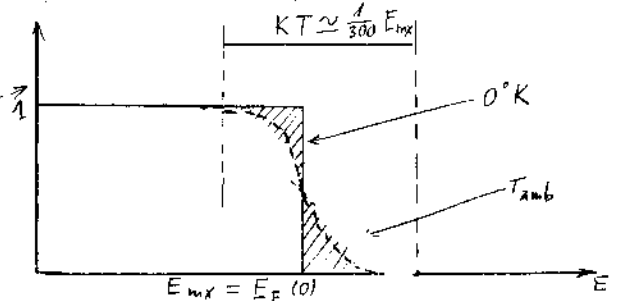


Fig.2.4 Curva de distribución de Fermi

Probabilidad 1  $\equiv$  nivel lleno  
 Probabilidad 0  $\equiv$  nivel vacío

Según la teoría cinética de gases, a  $0^\circ \text{ K}$  los electrones deberían tener una distribución de velocidades centrada cerca del cero (ver Fig. 2.2).

Debido al efecto conjunto de la cuantificación de la energía y del principio de expulsión, hay electrones con energía tan alta como  $E_F(0)$ , que para el caso del cobre [ $E_F(0) \simeq 7 \text{ eV}$ ] significa una "temperatura" de aproximadamente  $84.000^\circ \text{ K} !!!$

En el siguiente diagrama puede sintetizarse la explicación de porqué el calor es específico electrónico es menor que  $3/2 k$  por partícula (clásico)

Sólo los electrones que disponen de niveles cuánticos libres pueden ser excitados por  $kT$  (ver Fig. 2.5) El electrón no es excitado térmicamente, salvo a temperaturas muy altas, que cualquier sólido alcanzaría sólo en forma de vapor.

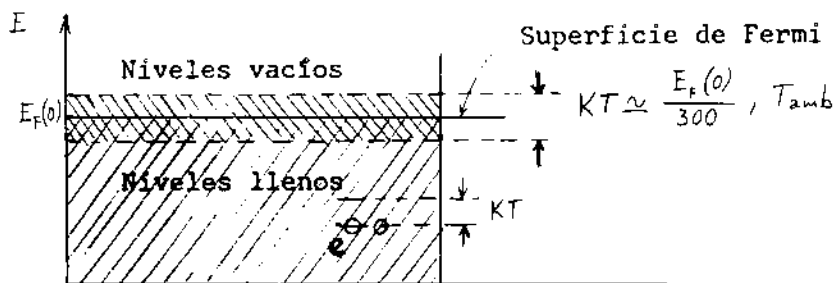


Fig. 2.5 Excitación térmica del electrón de Fermi

Como ejercicio, dibuje y correlacione los diagramas 2.4 y 2.5.

La función  $C_v = C_v(T)$  puede ser deducida muy sencillamente; el % de los electrones excitados térmicamente a  $T^\circ \text{ K}$  es:

$$\frac{\text{ancho banda energía perturbada}}{\text{valor } E \text{ en la superficie}} \times 100 = \frac{KT}{E_F} \times 100$$

Cada electrón absorbe  $KT$ . La energía térmica absorbida por el gas de electrones es proporcional a  $\frac{(KT)^2}{E_F}$

Como el calor específico electrónico es

$$(Cv)_e = \frac{\partial u}{\partial T}, \text{ obtenemos } (Cv)_e \propto \frac{K^2 T}{E_F}$$

Esta dependencia lineal con  $T$  ha sido verificada experimentalmente a bajas temperaturas ( $Cv_{red} \rightarrow 0$ )

Resulta muy fácil calcular  $E_F$  a partir de

$$E = \frac{h^2}{2mV^{2/3}} n^2$$

$$n = n_1 \underline{i} + n_2 \underline{j} + n_3 \underline{k}$$

$$E_F = \frac{h^2}{2mV^{2/3}} n_F^2$$



Los  $n < n_F$  están comprendidos dentro de una esfera de radio  $|n_F|$ , de modo que dentro de ella, tengo

$$2 \times \frac{4}{3} \pi n_F^3 \quad \text{niveles disponibles}$$

(2 electrones por estado)

Este número de niveles (recordar que por debajo de  $E_F$ , a  $0^\circ\text{K}$  están todos ocupados) debe ser igual al número de electrones disponibles  $N$ :

$$\frac{8}{3} \pi n_F^3 = N \quad \therefore \quad n_F^2 = \left( \frac{3}{8\pi} N \right)^{2/3}$$

Consecuentemente

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{3}{8\pi} \left( \frac{N}{V} \right) \right]^{2/3} = \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \frac{3}{\pi} \left( \frac{N}{V} \right) \right]^{2/3} \quad (12)$$

Nota:  $E_F$  depende del número de electrones libres por unidad de volumen.

Es interesante estudiar cómo es la distribución de estados de energía  $N(E)$  desde  $0^\circ\text{K}$  hasta  $E_F(0)$ .

$N(E) \equiv$  densidad de estados por unidad de rango de energía y por unidad de volumen.

A partir de (12), obtenemos:

$$\frac{N}{V} \propto E^{3/2}$$

$$\frac{d\left(\frac{N}{V}\right)}{dE} = N(E) \propto E^{1/2}$$

En la Fig. 2.6 hemos representado  $N(E)$  vs.  $E$

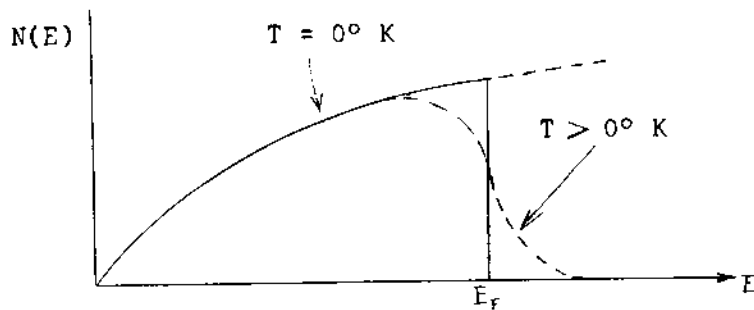


Fig. 2.6 Densidad de estados cuánticos del electrón de Sommerfeld

Los estados están más densamente empaquetados cerca de la superficie y allí la diferencia de energía entre estados es menor.

### 2.3 La superficie Fermi

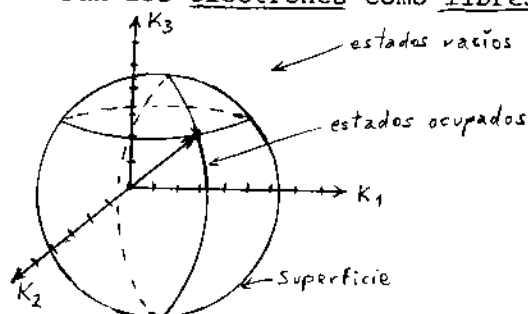
Según vimos en (8)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

Se puede concebir un espacio  $K$ , en el cual cada punto representa un valor de  $E$ . A cada punto se le pueden asignar dos electrones ( $\uparrow$  y  $\downarrow$ )

Una superficie isoenergética ( $K_n = \text{const}$ ) es una esfera. Para  $E_{mx} = E_F \Rightarrow K_{mx} = K_F$

La superficie isoenergética que separa estados ocupados de estados vacíos, se denomina superficie Fermi. Tenga presente especialmente que la superficie Fermi es una esfera, solamente cuando se consideran los electrones como libres.



Aunque esencialmente matemático, el concepto de superficie Fermi permite razonamientos físicos rápidos y elegantes.

Pocos metales responden a un modelo de superficie Fermi esférica (electrón libre). El sodio y el potasio son los que más se aproximan a esta forma; vale decir que en ellos los electrones de conducción pueden considerarse libres. Intuitivamente, la forma de la superficie Fermi parece ser un criterio aceptable para distinguir el tratamiento aplicable a los electrones de un sólido.

En realidad, hay métodos para medir esa superficie, y la correlación entre mediciones y cálculos permite corroborar la intuición.

El tratamiento de Sommerfeld es simple y claro, y explica perfectamente la anomalía del calor específico electrónico. Sin embargo, a través de él resultan inexplicables las diferencias entre conductores y aisladores, el comportamiento de los electrones sometidos a la acción combinada de campos eléctricos y magnéticos, y la evidencia experimental de que las superficies Fermi (aun de buenos conductores como Cu y Ag) se apartan de la esfericidad.

## 2.4 Electrones en potencial periódico - Modelo de bandas

- La representación  $E$  vs  $K$  (vector de onda) es una parábola (electrones libres)

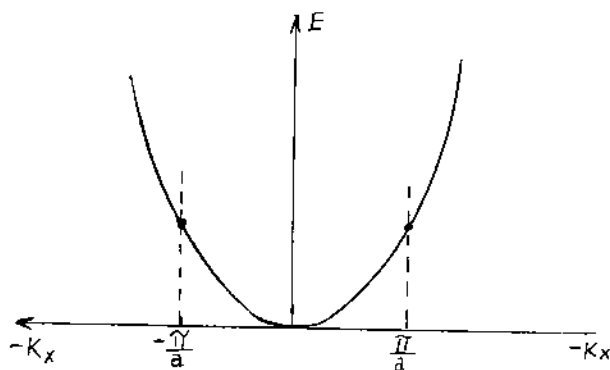


Fig. 2.7

- Un experimento simple revela que para ciertos valores de  $K$ , NO EXISTEN los correspondientes valores de  $E$ .

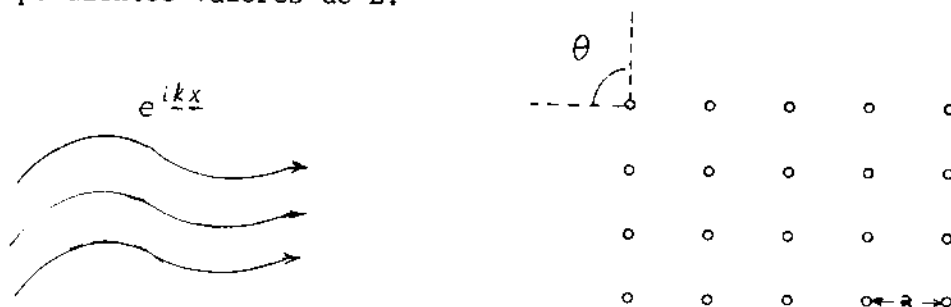


Fig. 2.8 Difracción de una onda electrónica

Sea una "onda" electrónica incidente sobre un cristal metálico.

Variando el potencial acelerador de los electrones, variamos  $\lambda$ , y por consiguiente

$$K = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (\text{vector de onda o de propagación})$$

Hay un cierto potencial, para el cual tenemos reflexión de la onda. La reflexión está gobernada por

$$2a \sin \theta = n\lambda \quad (\text{Bragg})$$

$$2a = n\lambda = n \frac{2\pi}{K} \quad , \quad \theta = -\frac{\pi}{2}$$

Luego la onda con  $K = \pm \frac{n\pi}{a}$ ,  $n = 1, 2, \dots$  entero, NO SE PROPAGA; es reflejada.

- El electrón descripto por esta onda, cuando entra al cristal, es indistinguible de un electrón propio del cristal.
- Deducimos que hay valores de  $K$  que no son posibles dentro del cristal; o bien, como  $E = E(K)$ , que hay valores de energía prohibidos.

$n = 1$ ,  $K_x = \pm \frac{\pi}{a}$ , son puntos de discontinuidad en la parábola de la Fig. 2.7.

- Las ondas con  $K_x = \pm \frac{n\pi}{a}$  no se propagan dentro del cristal. Su velocidad de propagación es cero.

Se puede demostrar que  $v = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_K E(K)$ , de modo que la anulación de  $v$  para  $K = \pm \frac{n\pi}{a}$  conduce a una modificación de la Fig. 2.7: la incidencia de  $E(K)$  sobre los planos  $K = \pm \frac{n\pi}{a}$  debe ser normal ( $\text{grad}_K E = 0$ )

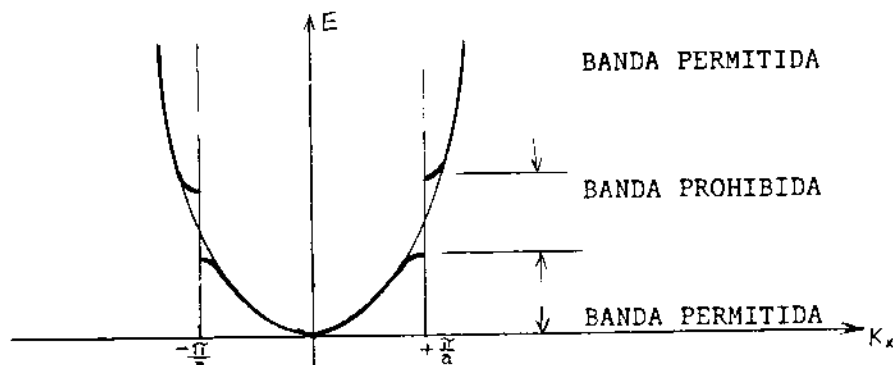


Fig. 2.9 Aparición de las bandas de energía

- La energía prohibida no es un solo valor, sino que se extiende a todo un rango o BANDA
- El experimento puede ser repetido según  $x, y, z$ , y se halla un resultado semejante.
- Si se analiza el fenómeno en el espacio recíproco, todo sucede como si las ondas de vector  $K$  experimentasen reflexión en planos de ecuación  $\frac{n\pi}{a}$ .
- El análisis es coherente, porque el espacio de los vectores de onda  $K$  es el espacio recíproco multiplicado por  $2\pi$ ;
- La existencia de los planos reflectantes en el espacio  $K$  no depende de la naturaleza de la propagación (electrónica,  $R - X$ , sonora, luminosa) sino de la estructura cristalina periódica.

El sólido continuo no tiene valores críticos del  $K$  de propagación.

- Los planos  $K = K_{\text{crit}} = K_{\text{Bragg}}$ , cuyas ecuaciones para la red tridimensional ortogonal son

$$\begin{aligned} K_x &= \pm \frac{n_1 \pi}{a} \\ K_y &= \pm \frac{n_2 \pi}{b} \\ K_z &= \pm \frac{n_3 \pi}{c} \end{aligned} \quad (13)$$

determinan, para  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ , una celda básica denominada 1ª zona de Brillouin. Esta celda unitaria llena el espacio  $K$  sin dejar huecos, en la misma forma que la celda elemental llena el espacio real.

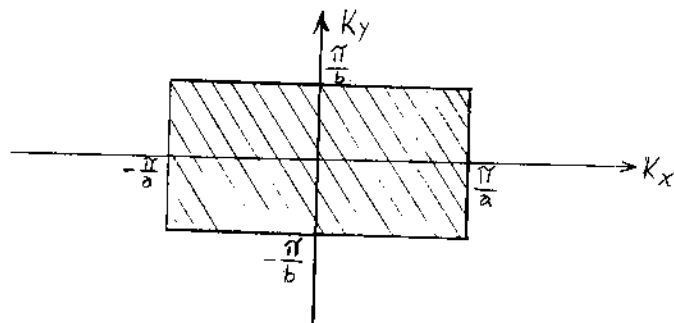


Fig. 2.10 Primera zona de Brillouin en dos dimensiones.

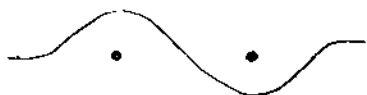
- Otra explicación de la existencia de bandas permitidas y prohibidas para los electrones del sólido cristalino, está dada por el siguiente experimento ideal. Sean dos átomos de hidrógeno separados, cada uno con su electrón en el estado fundamental 1 S.



A medida que los átomos se aproximan uno al otro, sus funciones de onda experimentan recubrimiento y podemos considerar las dos posibilidades siguientes:



$$\psi^+ = \psi_A + \psi_B$$



$$\psi^- = \psi_A - \psi_B$$

En cada combinación está asegurada la igualdad de distribución electrónica para ambos protones.

Pero un electrón en el estado  $\psi^+$  tiene, en lo que respecta a energía,

$$E_{\psi^+} < E_{\psi^-}$$

porque durante cierto tiempo está bajo el potencial atractivo de los dos protones. y hay una energía de unión. Véase la Fig. 1.8 del Capítulo 1. Considerando que la energía de unión es negativa, resulta que la energía correspondiente al estado  $\psi^+$  aunque de mayor valor absoluto que la correspondiente a  $\psi^-$ , es menor que ésta. Esa contribución a la energía de unión no aparece en el caso descrito por  $\psi^-$ , y la energía del electrón descrito por ella es mayor.

Al reunirse dos átomos, aparecen entonces dos niveles de energía separados, por cada nivel del átomo aislado:  $E_{\psi^+} \neq E_{\psi^-}$

Para  $N$  átomos, se forman  $N$  niveles por c /a del átomo aislado. Estos  $N$  niveles estarán asociados con una o más bandas.

En el esquema siguiente encontramos el resultado para 6 átomos de hidrogeno en fila:

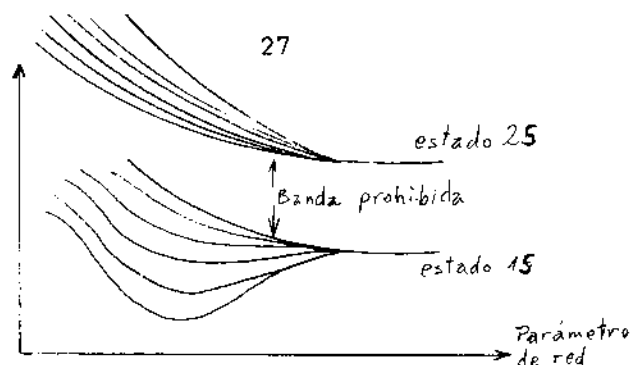


Fig. 2.11

- Formalmente, la existencia de bandas de energía aparece dentro de la teoría si se refina la expresión del efecto combinado de los iones de la red sobre el electrón.
- En el gas de Sommerfeld el efecto se introduce por medio del potencial  $V = \text{const.}$  (ver 1.3 y 2.2)

Block propuso reemplazar  $V$  en la ecuación de Schroedinger

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0$$

por una función periódica, con la periodicidad de la red. La correlación se considera nula para simplificar los cálculos.

La introducción del potencial periódico  $V$ , hace que la función de onda (solución de la ecuación) exhiba características de periodicidad:

$$\psi_k = \underbrace{u_k(r)}_{\text{modulación}} \underbrace{e^{ik \cdot r}}_{\text{onda plana}} ; \quad \psi_k(r) = \psi_k(r + \underline{l})$$

$\underline{l}$  = vector traslación red

- Este resultado puede justificarse lógicamente, analizando la trayectoria del electrón a través de la red cristalina y su interacción con los iones ABCDEF. La energía correspondiente resulta, (cálculos para el electrón fuertemente ligado) para una red cúbica simple con parámetro  $a$ :

$$E_K = E_0 - \alpha - 2\gamma (\cos K_x \cdot a + \cos K_y \cdot a + \cos K_z \cdot a)$$

$\alpha$  y  $\gamma$  son ciertas integrales.  $E_0$  = energ. electrón átomo aislado  
Los valores máx y mín del coseno son  $\pm 1$ , de modo que

$$E_K = E_0 - \alpha \pm 6\gamma$$

Las energías posibles para el electrón en el cristal están comprendidas dentro de una banda de ancho  $12\gamma$  alrededor de  $E_0$ .

- Otra manera de pensar en la aparición de bandas de energía en los sólidos, es mediante el principio de incertidumbre.

$$\Delta p_x \Delta x \leq \frac{\hbar}{2}$$

Electrón libre  $\Rightarrow$  onda plana  $\Rightarrow \Delta x \simeq \infty$  ,  $\Delta p = 0$  :  
Niveles bien definidos.

Electrón en potencial periódico  $\Rightarrow$  onda plana modulada ;  $\psi \psi^* dz = \text{const.} \Delta x < \infty$  (finita),  
 $\Delta p \neq 0$ ;

La intertidumbre en el impulso significa no un nivel bien definido, sino una banda de energía.

#### Resumen:

Al considerar que la influencia de los iones de la red sobre los electrones de un cristal es periódica, resulta que los estados de energía posibles para esos electrones se agrupan en bandas:

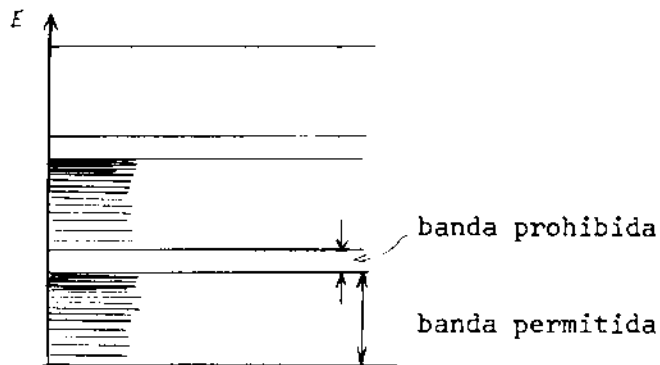


Fig. 2.12

2-Dentro de cada banda, los electrones disponibles se ubican, a  $0^\circ \text{ K}$ , a razón de 2 por cada estado, llenando todos los niveles desde abajo hacia arriba sin dejar huecos.

3-Salvo cerca del tope de la primera banda, y del fondo y tope de las bandas superiores, la relación  $E$  vs.  $K$  es  $E \simeq \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$  (parabólica); los electrones pueden considerarse como partículas de un gas cuántico.

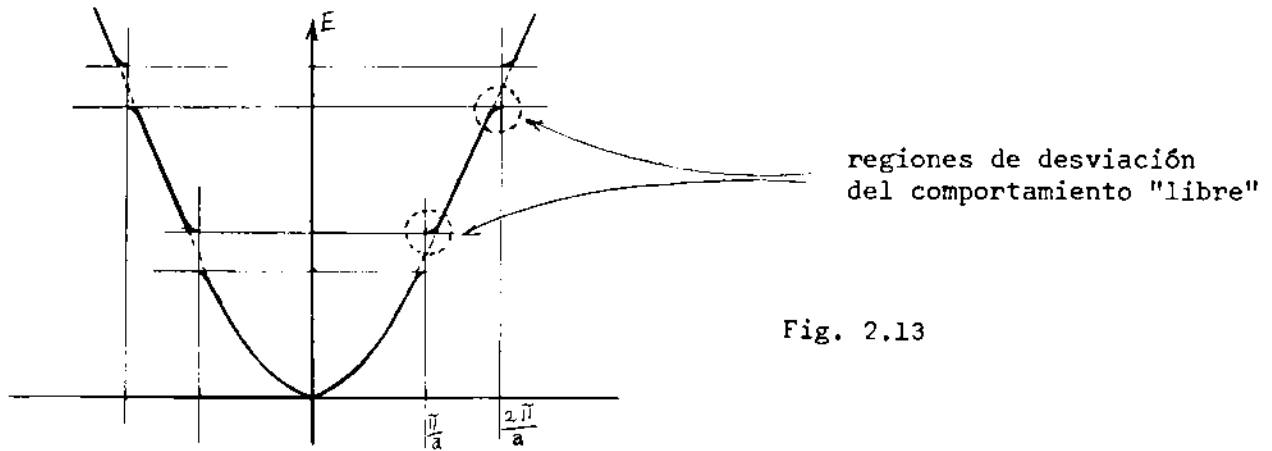


Fig. 2.13

4-La densidad de estados dentro de cada banda es expresable por  $N(E) \simeq E^{1/2}$  (ver Fig. 2.6)

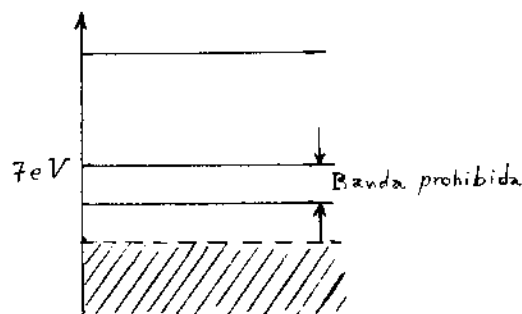
5-La transición de una banda a otra acontece sobre el borde de zona de Brillouin.

6-La relación entre zona de Brillouin y superficie Fermi se ilustra en los diagramas de la Fig. 2.14

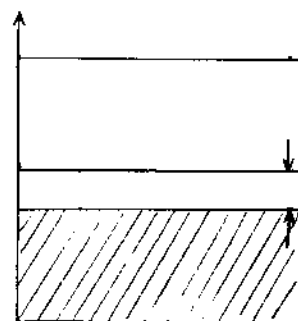
## 2.5 Aplicaciones del modelo de bandas

### 2.5.1 Distintas clases de sólidos cristalinos.

Básicamente, el modelo permite explicar el comportamiento de los conductores, se miconductores y aisladores.



a) Conductor



b) Aislador

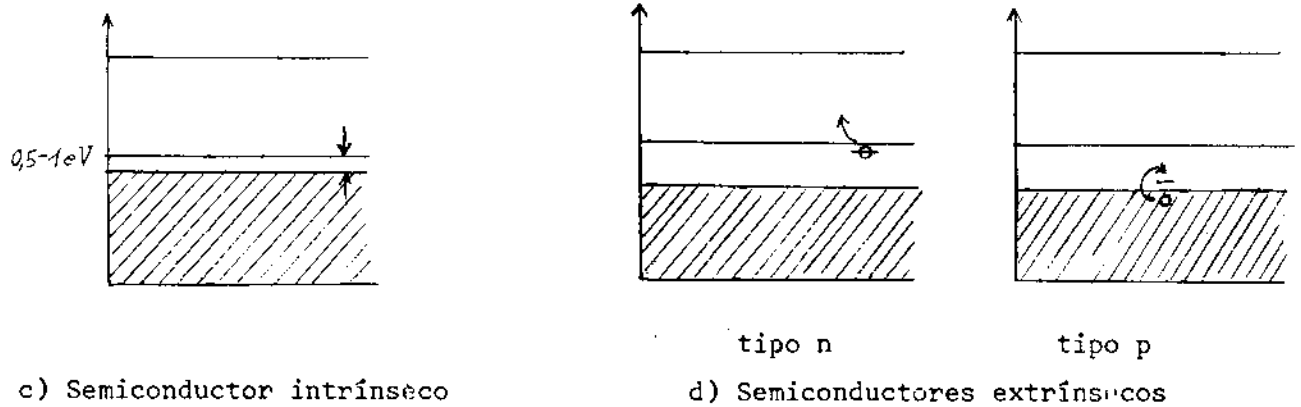


Fig. 2.14

### 2.5.2 Dónde está la resistencia eléctrica ?

De acuerdo con el modelo propuesto, no tenemos sino dos posibilidades extremas:

Conducción infinita (bandas semillenas) o conducción nula (bandas llenas)

Sin embargo, aun el mejor conductor exhibe una conductividad finita.

Ellos se debe a que ningún conductor real es un cristal perfecto, sino que su red cristalina tiene irregularidades:

vibra térmicamente  
 existen { impurezas  
           vacancias  
           intersticiales  
           dislocaciones  
           bordes de grano

Las irregularidades destruyen la periodicidad perfecta; la función de onda  $\psi_k$  con vector de onda  $k$  es difundida por ellas.

Consideremos primero el problema de la vibración térmica. Las vibraciones de la red están cuantificadas; el cuanto de energía vibracional es el fonón, que puede ser tratado como partícula y describirse por una onda asociada con vector de propagación  $q$ . La interacción electrón-red vibrante, se puede estudiar como colisiones electrón-fonón.

El electrón es deflektado a un estado de energía caracterizado por  $k'$

$$k + q \rightleftharpoons k'$$

Para que pueda efectuarse la transición  $k \rightarrow k'$ ,  $k'$  debe estar disponible. Conocida la función de distribución de estados  $k$ , (o en otros términos, la probabilidad de ocupación de los estados), es posible calcular la probabilidad de transición  $P_{kk'}$ , que es proporcional al número de intentos/seg.

Cada colisión electrón-fonón proporciona una oportunidad de que se produzca la transición  $k \rightarrow k'$

$\therefore$  el número de intentos/seg. se mide por el número de colisiones/seg.

$$y P_{kk'} \sim N^{\circ} \text{colisiones/seg.}$$

de modo que  $\frac{1}{P_{kk'}} \sim \tau$ , tiempo entre colisiones  
 Retomando el argumento de 2.1,

$$\sigma = \frac{Ne^2 \tau}{m}$$

adquiere ahora un nuevo sentido físico, a través de la definición de  $\tau$ .

La difusión (scattering) de electrones por otras irregularidades de la red que no sean fonones, también puede tratarse en términos de una deflexión del electrón  $P_{kk'}$ , resultará distinta en cada caso.

Los cálculos son siempre complicados, y en el mejor de los casos se obtiene sólo el orden de magnitud de la conductividad.

### 2.5.3 Regla de Mathiessen

La resistividad de un metal con átomos de impureza se puede escribir

$$\rho = \rho_i + \rho_L$$

$\rho_L$  = resistividad debida a vibraciones térmicas

$\rho_i$  = resistividad originada por difusión de electrones por átomos de impureza que perturban la periodicidad de la red.

Si la concentración de impurezas es pequeña,  $\rho_i$  no depende de la temperatura (Mathiessen)

La resistencia residual es la resistencia extrapolada a  $0^\circ \text{ K}$  y es muy aproximadamente igual a  $\rho_i$ , ya que  $\rho_L \rightarrow 0, T \rightarrow 0^\circ \text{ K}$ .

La resistencia residual es un excelente índice para determinar la pureza de muestras metálicas.

$\rho_i$  puede variar de muestra a muestra

$\rho_L$  no depende de la muestra.



## CAPITULO 3

IMPERFECCIONES GEOMETRICAS DE LOS CRISTALES

Un cristal real no es perfecto (aunque, típicamente, menos de un átomo cada 10.000 está fuera de su lugar).

Esto lo revelan las mediciones de propiedades que son sensibles a la estructura: resistividad eléctrica, tensión de fluencia, tensión de rotura, permeabilidad magnética, que varían mucho de una probeta a otra.

Hay propiedades que no son sensibles a la estructura, como calor específico, densidad, coeficiente de expansión térmica, constantes elásticas, que varían poco de un espécimen a otro.

Una nómina más o menos completa de los distintos defectos que pueden encontrarse en una red cristalina es la siguiente:

Fonones

Defectos puntuales { Vacancias  
Intersticiales - Intersticialidad  
Crowdion - Focusón  
Impurezas { Intersticiales  
Sustitucionales

Defectos lineales { Dislocaciones

Defectos bidimensionales { Bordes de grano (o de maclas)  
Fallas de apilamiento

Defectos tridimensionales { Precipitados  
Spikes, Zonas de Seeger

3.1 Defectos puntuales

Aunque no son propiamente defectos geométricos, los fonones deben incluirse como defectos de red muy importantes. El fonón es un cuanto de vibración de la red (ver también 1.6, Energía del punto cero). Es asimilable a una partícula con energía  $h\nu$ ; también puede describirse por una onda asociada de vector de onda  $q$ , como lo dijimos anteriormente.

Los fonones se ponen en evidencia toda vez que se provoca la interacción de ondas con los cristales, como se estudiará particularmente para el caso de los R-X. La conducción térmica y eléctrica son otros dos fenómenos que se explican empleando el concepto de fonón.

Vacancia: Falta de un átomo de un lugar que idealmente debería estar ocupado.

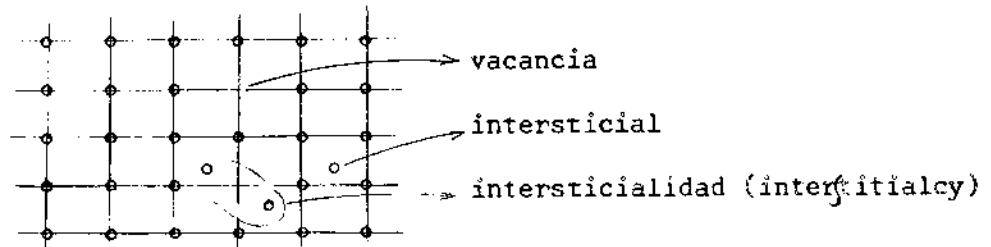


Fig. 3.1 Vacancia, Intersticial, Intersticialidad

Intersticial: Atomo desplazado a una posición que no es punto del retículo cristalino.

Intersticialidad: Dos intersticiales que se combinan de forma tal que ocupan posiciones simétricas respecto de un punto del reticulado.

**Crowdion:** Intersticial "extendido" a lo largo de una línea. Por ejemplo, en una fila donde debía haber  $n$  átomos, hay  $n + 1$ .

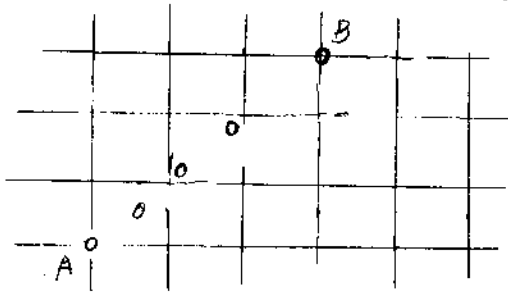


Fig. 3.2 Crowdion

El crowdion es estable a muy bajas temperaturas (por debajo de los  $10^{\circ}$  K). Hay autores que sostienen que sólo es dinámicamente concebible. En reposo se transforma en un intersticial.

Nótese que el intersticial se mueve efectivamente. En la intersticialidad y en el crowdion, es una configuración la que se propaga.

**Impurezas:** En una red de átomos A, tenemos átomos B que pueden ocupar nodos (sustitucional) o hallarse como intersticiales (impureza intersticial). La mayor parte de las impurezas son sustitucionales, salvo C, N, O en b.c.c. y el H en todos los metales.

Una razón muy poderosa para explicar la presencia de defectos es que con ellos aumenta la entropía del cristal. Aunque también hay un aumento de energía interna, la energía libre  $F = E - TS$  resulta menor.

Veamos el caso particular de las impurezas:

Si tenemos  $N$  sitios atómicos, de los cuales  $n$  están ocupados por átomos A y  $(N-n)$  por átomos B y suponemos que la distribución de A y B es al azar, se puede demostrar fácilmente,

partir de  $S = + K \ln W$ , que la entropía de mezcla es

$$S = - N K (c \ln c + (1 - c) \ln (1 - c)), \text{ donde } c = \frac{n}{N},$$

$W$  = probabilidad termodinámica

La representación gráfica para  $N = N_0$  = número de Avogadro, y  $N K = R = 1,987 \frac{\text{cal}}{\text{gr.}}$  es:

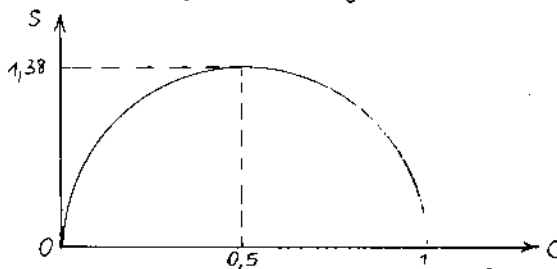


Fig. 3.3 Entropía de mezcla  $\frac{\text{cal}}{\text{gr.}}$ , en función de  $c$ .

La pendiente de la curva es muy pronunciada cerca de  $C=1$  (A puro) y cerca de  $c = 0$  (B puro); la entropía de una sustancia pura aumenta rápidamente con la más pequeña adición de una segunda sustancia.

Por eso es muy difícil producir sustancias de alta pureza. El  $dF = dE - Tds$ , causado por contaminación, es casi siempre negativo. Aunque  $dE$  sea grande y  $> 0$ , casi siempre es sobrepasada por el elevado valor de  $Tds$ . Esto es por la velocidad de variación de  $S$  en los entornos  $C = 0$  y  $c = 1$ .

Otro tanto sucede cuando se considera la mezcla de átomos con vacancias: hay una cierta concentración de vacancias, dependiente de la temperatura, para la cual la energía libre resulta mínima.

### 3.1.1 Concentración en equilibrio térmico

Sea un cristal monoatómico de  $N$  átomos a temperatura  $T$ .

$u$  = energía interna asociada a una vacancia (trabajo para sacar un átomo de su sitio normal y llevarlo a la superficie)

$n$  = número de vacancias presentes

Suponemos  $u$  independiente de  $n$  (interacción entre vacancias nulas), y que no hay cambios de frecuencia de vibración al introducir las vacancias.

La entropía de mezcla de  $N$  átomos con  $n$  vacancias en un cristal de  $N + n$  sitios atómicos es:

$$S = K \ln \left[ \frac{(N + n)!}{n! N!} \right]$$

Usando la aproximación de Stirling,  $\ln x! \simeq x \ln x - x$

$$F = n u - K T \left[ (N + n) \ln (N + n) - n \ln n - N \ln N \right]$$

El valor de equilibrio de  $n$  se tiene para  $\frac{dF}{dn} = 0$

$$0 = u - K T \left[ \ln (N + n) + 1 - \ln n - 1 \right]$$

Reagrupando;

$$\frac{n}{N + n} = e^{-\frac{u}{K T}}$$

$$N \gg n, \quad \frac{n}{N} = C_v = e^{-\frac{u_v}{K T}} = e^{-\frac{u}{R T}} \quad (1) \quad R = Nk$$

El orden de magnitud de  $U$  está dado por la mitad del calor de vaporización.

Si  $U \simeq 23.000$  cal/mol (cobre) y  $T = 1.000^\circ \text{K}$ ,

$$\frac{n}{N} = e^{-\frac{23000}{2000}} = 10^{-5}$$

La formula de  $C_v$  (1) no tiene en cuenta el cambio de frecuencia de vibración de los átomos al introducir las vacancias. Se puede demostrar que este efecto significa un factor  $\propto$  que debe colocarse en (1)

$$C_v = \propto e^{-\frac{u_v}{K T}}, \quad \propto = \text{factor que varia de } 1 \text{ a } 10^2$$

Analogamente para intersticiales, puede demostrarse que

$$C_i = \beta e^{-\frac{u_i}{K T}} \quad (2)$$

$u_i > u_v$ , de modo que la concentración de intersticiales en equilibrio térmico, para una  $T$  dada, es menor que la de vacancias.

Cuando  $T$  aumenta,  $C_i$  y  $C_v$  aumentan y viceversa. Esto implica la existencia de fuentes y sumideros de defectos puntuales. Los más importantes son las dislocaciones, como veremos más adelante.

### 3.1.2 Movimiento de defectos puntuales

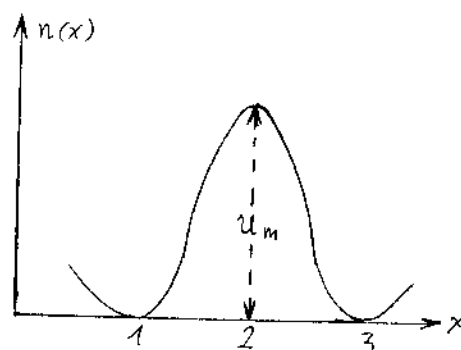
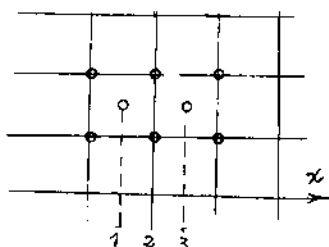


Fig. 3.4

Para pasar de 1 a 3, el intersticial debe sobrepasar la barrera de potencial que nos mostramos en la Fig. 3.4

De acuerdo con la estadística de Maxwell Boltzman, la probabilidad de que un átomo tenga energía  $u$  está dada por  $e^{-\frac{u}{kT}}$ . El número de intentos que el átomo hace para pasar la barrera está dado por la frecuencia de Debye  $\nu$

La frecuencia de salto es

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{u}{kT}} \quad (3)$$

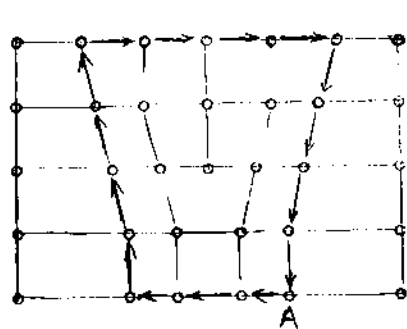
### 3.1.3 Origen de los defectos puntuales

- Vibración térmica (pares Frenkel)
- Dislocaciones (trepado)
- Las superficies de un cristal son fuentes de vacancias. Un átomo puede difundir hacia la superficie, dejando una vacancia en el interior del metal. Salvo en el caso de láminas delgadas, el efecto es pequeño a temperatura ambiente.
- Los bordes de grano actúan como fuentes y sumideros de vacancias.
- El templeado aumenta  $C_v$
- La irradiación introduce gran cantidad de defectos puntuales. El tipo de defecto creado depende de la partícula incidente (carga, masa, energía). Los neutrones con energía moderada producen pares Frenkel. El daño por radiación es complejo, y sólo se menciona aquí uno de sus varios defectos posibles.
- Deformación plástica. Como veremos más adelante, origina multiplicación y movimiento de dislocaciones y de bordes de grano, favorables para la generación de defectos puntuales.

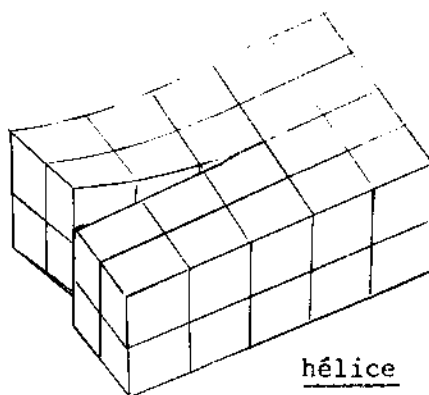
Destacamos por último, que los defectos puntuales interactúan entre sí, y pueden originar "racimos" (clusters) de vacancias, de intersticiales y de impurezas.

### 3.2 Defectos lineales - Dislocaciones

La geometría de estos defectos ya es conocida por todos.



borde



hélice

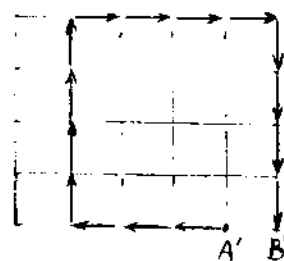


Fig. 3.5

Se insiste solamente en la definición de su vector característico:

- Se circunda la zona dislocada por un circuito cerrado.
- Se circunda una zona no dislocada por medio de un circuito que siga la misma secuencia de vectores de la red.
- $B' A'$ , que es el vector de cierre en la zona que no encierra dislocación, es el vector de Burgers.

El vector  $\underline{b}$  es independiente del circuito elegido para definirlo y del punto de la dislocación alrededor del cual se lo sigue.

Una línea de dislocación tiene el mismo  $\underline{b}$  en todos sus puntos, aunque la línea sea curva.

Dislocación de borde :  $\underline{b} \perp$  línea  
 Dislocación de hélice:  $\underline{b} \parallel$  línea  
 Dislocación mixta :  $\underline{b}$  forma ángulo intermedio

Una línea de dislocación no puede terminar dentro de un cristal porque  $\underline{b}$ , siendo constante, no puede anularse en un punto de la línea. Esta debe emerger por una superficie libre, o constituir un lazo cerrado, o unirse a otras líneas de dislocación para constituir una red.

Una dislocación se dice perfecta si  $\underline{b} = n \underline{a}$

$n$  = entero

$\underline{a}$  = vector de red.

es imperfecta si  $\underline{b}$  no cumple la condición anterior (por ejemplo  $b = 1/2 a$ ) Volveremos enseguida sobre las dislocaciones imperfectas (parciales), al analizar las fallas de apilamiento.

El movimiento típico de las dislocaciones de borde es el desplazamiento. Pero también pueden efectuar trepado, a temperaturas por encima de la ambiente.

Oportunamente volveremos sobre estos conceptos.

### 3.3 Defectos bidimensionales

#### 3.3.1 Fallas de apilamiento.

Estas fallas se presentan en las estructuras fcc, hcp y bcc, que son las que tienen planos de mayor densidad atómica.

A mayor densidad atómica, la repulsión entre capas electrónicas completas de átomos de planos inmediatos es mayor, con el resultado de que las secuencias de apilamientos de planos puede cambiar. Esto trae aparejado un cambio de estructura que se aparta solo muy ligeramente del empaquetamiento más compacto.

Para el f.c.c., el apilamiento correcto es A B C A B C ó C B A C B A. Se presenta una falla de apilamiento cuando la secuencia es alterada por falta de un plano o por inserción de un plano.

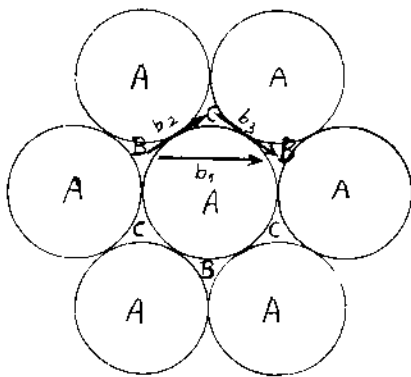
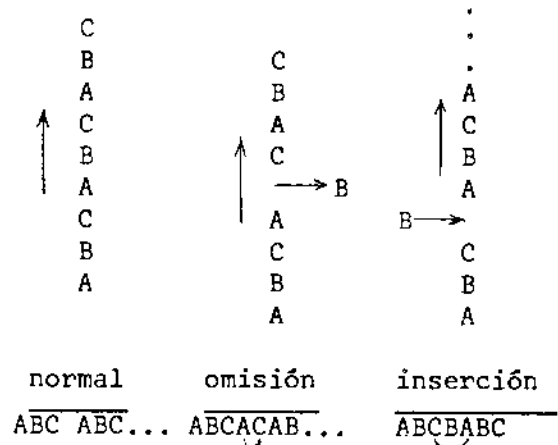


Fig. 3.6



Sobre el plano (111), el vector de Burgers unitario es  $b_1$ . Los vectores  $b_2$  y  $b_3$  caracterizan dislocaciones parciales. (fig. 3.6)

El deslizamiento según  $b_1$  traslada átomos de posiciones B a posiciones B, y la estructura resultante es la misma.

Pero si el plano de átomos B es desplazado según  $b_2$ , la estructura resultante es la de omisión. Un deslizamiento posterior según  $b_3$ , restituye la estructura normal.

El deslizamiento según  $b_1$  puede ser pensado como si los átomos se moviesen según  $b_2$  primero y según  $b_3$  después, de modo que una dislocación de vector unitario  $b_1$

puede ser considerada como la suma de dos parciales de vectores  $b_2$  y  $b_3$ . Energéticamente, la disociación es favorable, como puede demostrarse si se considera que la energía elástica por unidad de línea de dislocación es proporcional al cuadrado del vector de Burgers (Ver apéndice 1, energía de línea)

$$\frac{1}{2}a[10\bar{1}] \rightarrow \frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6}a[11\bar{2}]$$

Un racimo de vacancias que se condensa en un plano, origina una falla de apilamiento, como se muestra en la Fig. 3.7

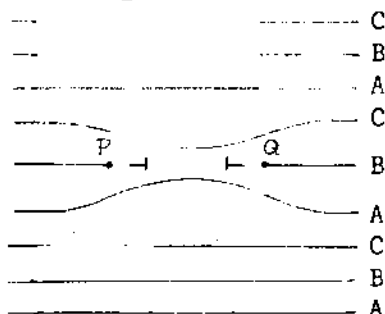
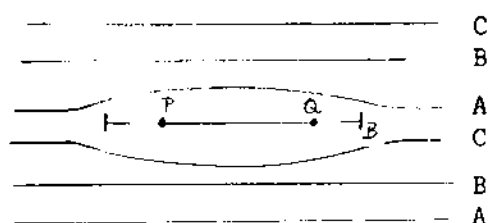


Fig. 3.7 Falla de apilamiento y dislocaciones imperfectas de Frank (P y Q) en f.c.c.

Esta falla es del tipo de omisión.

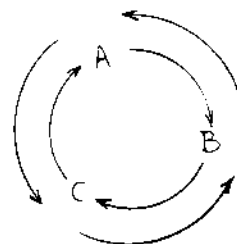
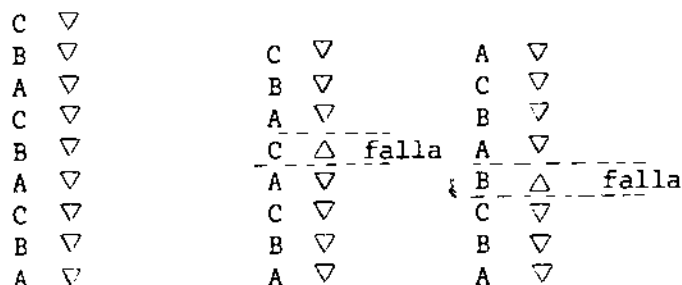
Análogamente, un racimo de intersticiales que se extiende sobre un plano origina una falla de apilamiento del tipo de inserción, limitada por dislocaciones imperfectas de Frank.



La extensión de la falla P.Q. está dada por el balance energético entre la disociación de la dislocación unitaria en las parciales que limitan la falla y la energía superficial de la falla.

Fig. 3.8

Otra manera de simbolizar las fallas de apilamiento es la siguiente, debida a Frank. La secuencia ABC se representa  $\nabla$ , CBA se representa  $\Delta$



NORMAL

OMISION

INSERCIÓN

### 3.3.2 Maclas

Están muy íntimamente vinculadas a las fallas de apilamiento. La definimos como la interfase a través de la cual se invierte la secuencia de empaquetamiento según una reflexión especular.

Las maclas se reconocen fácilmente porque son el límite entre dos cristales "twins" que tienen diferencia de orientación.

El apilamiento correspondiente a un twin en f.c.c. es el siguiente:

C  $\Delta$   
 A  $\Delta$   
 B  $\Delta$   
 - C  $\Delta$  - twin  
 A  $\nabla$   
 C  $\nabla$   
 B  $\nabla$   
 A  $\nabla$

### 3.3.3 Bordes de grano

La mayoría de los materiales cristalinos existen normalmente como conglomerados de cristales pequeños, denominados granos.

Los granos se unen por sus bordes, cuya forma, generalmente, no guarda relación con la simetría interna del cristal.

Los bordes de grano, se originan en el encuentro de dos cristales que solidifican en direcciones diversas, fenómeno que es explicado por el crecimiento dendrítico a partir de núcleos de solidificación.

El borde es considerado como una región estrecha de transición, de unos dos átomos de espesor. A través de esta zona los átomos cambian su ubicación del retículo de un cristal, a sitios del retículo correspondiente al cristal adyacente. Los bordes son estrechos porque las fuerzas interatómicas son de corto alcance.

Si el cambio de orientación cristalina a través del borde es pequeño, (menor de  $\approx 10^\circ$ ) puede constituirse una estructura semicoherente. La estructura de un cristal se continúa en el adyacente en forma coherente, aunque con cambio de dirección, a través de la mayor parte del borde (Fig. 3.9). Alternándose con estas regiones coherentes, hay

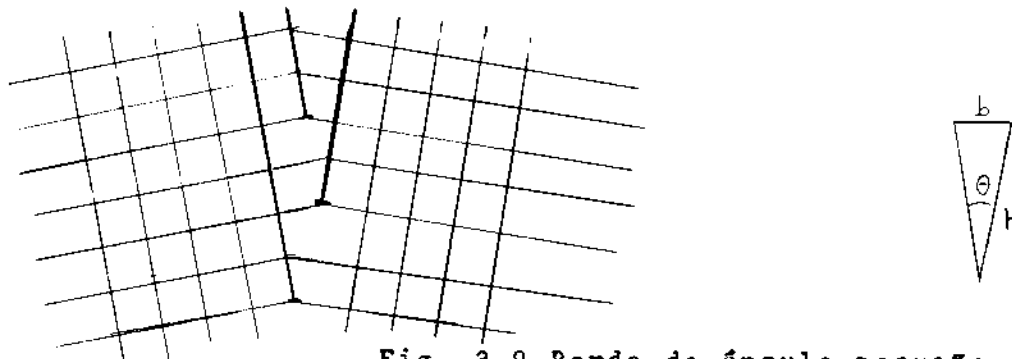


Fig. 3.9 Borde de ángulo pequeño.

regiones incoherentes del borde, a través de las cuales hay una clara alteración de la continuidad cristalina.

Muy frecuentemente, estas regiones incoherentes son dislocaciones. Todo el borde se puede considerar como una pared de dislocaciones. Estos arreglos son visibles en los cristales imperfectos.

Cuando  $\theta$  (radianes) es pequeño resulta

$$\theta \approx \frac{b}{h}$$

En los policristales, los bordes de grano son en su mayoría, del tipo gran ángulo ( $10^\circ - 40^\circ$ ). También su estructura puede describirse por medio de dislocaciones, pero ello no es una ventaja. Las dislocaciones están muy próximas y es difícil resolverlas entre sí.

A pesar de su estructura irregular, el borde es mecánicamente coherente. Los bordes pueden ser fuentes de resistencia mecánica de los sólidos, y se requieren condiciones muy especiales (por ej.: corrosión intergranular) para que un policristal se fracture según los bordes de sus granos.

Los fenómenos de crecimiento de grano, orientación preferencial, etc. concernientes al desplazamiento o cambio de orientación de los bordes de grano, son objeto de estudio en otras asignaturas de este curso.

### 3.4 Defectos tridimensionales

#### 3.4.1 Precipitados

Son agrupamientos de átomos A en una matriz B. Los precipitados pueden tener la estructura de la matriz B, como en el caso de las zonas de Guinier-Preston (Al-Cu) o estructura diferente, como la cementita en el Fe.

La forma de los precipitados es variable: esférica, plana, o aguja.

#### 3.4.2 Spikes

Su formación ha sido propuesta por Brinkman). Ver fig 3.10

Son básicamente regiones cilindroides generadas en los procesos de irradiación.

Una partícula energética, por ejemplo un neutrón, pierde energía por choque con los átomos del metal blanco. Esto origina un enorme aumento de vibración de los átomos golpeados. Los fonones que se emiten durante la vibración inducida disipan su energía en forma de calor. La temperatura sobrepasa el punto de fusión en la zona circundante a la trayectoria (ver Fig. 3.10). El enfriamiento es rápido y la zona fundida generalmente solidifica en forma heterogénea, sin cristalizar.

#### 3.4.3 Zonas de Seeger

Se originan en procesos de irradiación con partículas energéticas y pesadas. Son zonas empobrecidas, donde los átomos que faltan han sido desalojados principalmente por cadenas de desplazamiento y colisiones enfocadas.

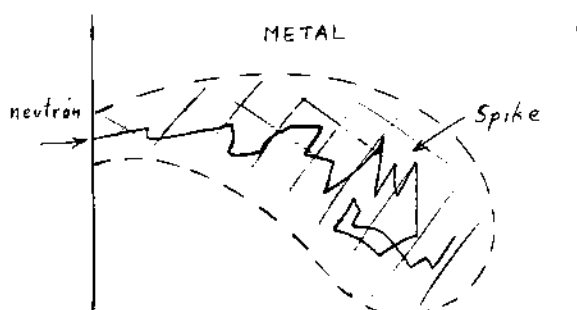


Fig. 3.10 Spike térmico.

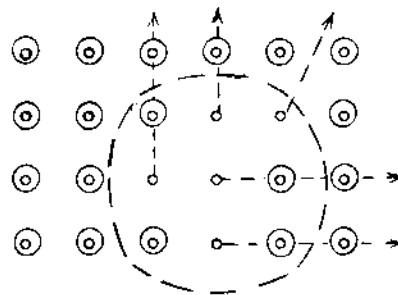


Fig. 3.11 Zona de Seeger. Los átomos que faltan, están como intersticiales a distancias comparables con el diámetro de la zona.



## 4 - DIFUSION

## 4.1 Teoría atómica

Nos hemos referido (3.1.3) al movimiento de defectos puntuales. Este es solamente un caso particular del flujo irreversible de materia que se denomina difusión.

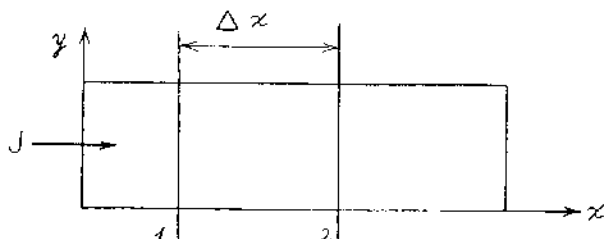


Fig. 4.1

Dicho en otros términos, difusión es la pluralidad de los saltos de los átomos de una posición a otra; la redistribución de las distintas clases de átomos presentes.

Supongamos que la barra de la Fig. 4.1 está hecha de una solución sólida (aleación) y que la concentración  $c$  (átomos/cm<sup>3</sup>) varía a lo largo del eje  $x$ .

El flujo de materia a través de un plano  $x = \text{const.}$  está dado por

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1); \quad \left[ \frac{\text{n}^\circ \text{ partículas}}{\text{seg. cm}^2} \right] = \left[ \frac{\text{cm}^2}{\text{seg.}} \right] \left[ \frac{\text{partículas}}{\text{cm}^3 \text{ cm}} \right]$$

Esta ley, denominada primera ley de Fick, es similar a la ley de Ohm  $J = \sigma E$ , por ejemplo. La fuerza directriz del flujo de cargas es el campo eléctrico, y la fuerza directriz del flujo de partículas es el gradiente de concentración.

El factor  $D$  se denomina coeficiente de difusión. El signo (-) proviene del hecho que para obtener un flujo en el sentido positivo, grad.  $c$  debe ser negativo.

El flujo  $J$  puede ser expresado como

$$J = c v \quad (2); \quad \frac{\text{n}^\circ \text{ part.}}{\text{cm}^2 \text{ seg.}} = \frac{\text{n}^\circ \text{ partículas}}{\text{cm}^3} \frac{\text{cm}}{\text{seg.}}$$

donde  $v$  = velocidad de las partículas en consideración.

El flujo de materia entre los planos 1 y 2 está dado por

$$J_{12} = \frac{1}{2} c(x) \cdot \frac{\Delta x}{\bar{\tau}} \quad (3)$$

$\bar{\tau}$  = tiempo transcurrido entre dos saltos

El factor  $\frac{1}{2}$  se debe a que en promedio, sólo la mitad de los átomos saltan para cada lado.

Análogamente,

$$J_{21} = \frac{1}{2} c(x + \Delta x) \cdot \frac{\Delta x}{\bar{\tau}} \quad (4)$$

Como  $\bar{\tau} \neq \bar{\tau}(c)$ , podemos usar el mismo en (3) y (4)

Desarrollando la (4) en serie de Taylor y despreciando términos superiores al 1º :

$$J_{21} = \frac{1}{2} \left[ c(x) + \frac{\partial c}{\partial x} \Delta x \right] \frac{\Delta x}{\bar{\tau}} \quad (5)$$

El flujo neto es

$$J = J_{12} - J_{21} = - \frac{\Delta x^2}{2 \bar{\tau}} \frac{\partial c}{\partial x} \quad (6)$$

Igualando con (1)

$$-D \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{-\Delta x}{2\tau} \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$D = \frac{a^2}{2\tau}; \quad a = \Delta x \quad \text{longitud de un salto}$$

y más generalmente

$$D = \frac{a^2}{\beta \tau} \quad (7)$$

Supongamos ahora un gradiente de concentración como el de la Fig. 4.3.

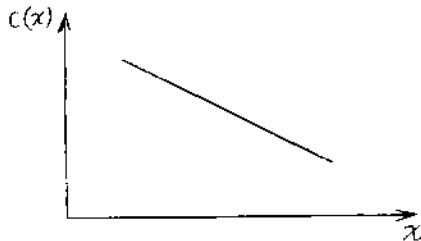


Fig. 4.2

La existencia del gradiente no quiere decir que exista una fuerza exterior que determine una dirección preferencial de movimiento. La cantidad de partículas que saltan es proporcional a la concentración y por ello el número de partículas que saltan  $1 \rightarrow 2$  es mayor que el número de partículas que saltan  $2 \rightarrow 1$ .

El número de saltos realizados por un átomo en el tiempo  $t$  es  $t / T = n$ . Solamente sabemos que el átomo salta una vez en el tiempo  $T$ , pero ignoramos en que dirección lo efectúa. La distancia recorrida al cabo de  $n$  saltos, será entonces

$$x = \pm a_1 \pm a_2 \pm \dots \pm a_n \quad (8)$$

Si suponemos  $a_1 = a_2 = \dots = a_n$ , el promedio cuadrático de la distancia es

$$\begin{aligned} \overline{x^2} &= \sum_{i,k} a_i a_k = \sum_i a_i^2 + \sum_{i \neq k} a_i a_k = \\ \overline{x^2} &= n a^2 + \sum_{i \neq k} a_i a_k \end{aligned} \quad (9)$$

Para valores de  $n$  muy grandes, el segundo término de (9) es despreciable frente al primero, porque en la sumatoria hay muchos términos que se anulan con otros de signo contrario. En estas condiciones, podemos despreciar la sumatoria y tenemos:

$$\begin{aligned} \overline{x^2} &= n a^2 = \frac{t}{\tau} a^2 = \beta D t \\ \overline{x^2} &= \sqrt{\beta D t} \end{aligned} \quad (10)$$

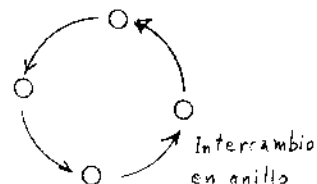
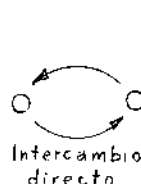
Para cálculos rápidos, podemos tomar sin gran error  $\beta = 1$ . Las dos fórmulas que hay que recordar, por su significado físico y su utilidad, son

$$D = \frac{a^2}{\tau} \quad (11) \quad x = \sqrt{D t}$$

#### 4.2 Mecanismos de difusión

Para explicar el salto de los átomos de una posición a otra, han sido propuestos distintos mecanismos.

1. Intersticial  
Intersticialidad
2. Intercambio directo
3. Intercambio en anillo
4. Intercambio con vacancias.



La difusión por movimiento de intersticiales adquiere importancia en el caso de impurezas que tienen esa ubicación en la red, pero no es relevante en la autodifusión; la concentración de intersticiales en equilibrio térmico es pequeña, y el flujo de los intersticiales a través de la red también es pequeño.

El intercambio directo, debe ir acompañado de una fuerte distorsión de la red circundante, y su energía de activación es elevada; no es un proceso muy probable.

Según Zener, para el intercambio en anillo la deformación requerida de la red circundante es menor; pero en este caso la probabilidad de que los 4 átomos se muevan simultáneamente en la dirección apropiada resulta muy pequeña.

El mecanismo más probable es el de intercambio de átomos con vacancias.

Para el caso de intercambio de átomo con vacancia, la probabilidad de salto de un átomo es:

$$P \sim V \sim \frac{1}{Z} = P_v P_m \quad (12)$$

o sea la probabilidad compuesta de que al saltar, dé en una vacancia.

$P_m$  es, según vimos en 3.1.3, fórmula (3)

$$P_m = V_0 e^{-\frac{u_m}{kT}} \quad (13)$$

Ahora  $u_m$  es una energía de movimiento de una vacancia, porque el salto del átomo hacia la vacancia es equivalente al salto de la vacancia hacia el átomo.

$P_v$  = probabilidad de hallar vacancia,

es proporcional a la concentración  $C_v$  y puede tomar

$$P_v = C_v = e^{-\frac{u_v}{kT}} \quad (14)$$

Combinando (7), (12), (13) y (14) resulta

$$\begin{aligned} D &= \alpha a^2 V_0 e^{-\frac{u_v}{kT}} e^{-\frac{u_m}{kT}} \\ D &= \alpha a^2 V_0 e^{-\left(\frac{u_v + u_m}{kT}\right)} \end{aligned} \quad (15)$$

donde  $\alpha = \frac{1}{\beta}$  es un factor geométrico, que depende del número de primeros vecinos.

$u_d = u_v + u_m$  es la energía de activación para difusión si consideramos el mecanismo de vacancia.

En la (15), hemos omitido un factor  $e^{\frac{\Delta S}{k}}$ , debido a la distorsión de la red por la introducción de vacancias.

Finalmente podemos expresar la variación del coeficiente de difusión con la temperatura como

$$D = D_0 e^{-\frac{u_d}{kT}} \quad (16)$$

con

$$D_0 = \alpha a^2 V_0 e^{\frac{\Delta S}{k}}$$

Para autodifusión, los valores de  $D_0$  oscilan entre  $10^{-1}$  y  $10$  cm<sup>2</sup>/seg.

#### 4.3 Variables que afectan la difusión

4.3.1 Temperatura - Se ve claramente en la (16)

4.3.2 Concentración - En la práctica, se supone  $D \neq D(c)$  o sea que  $D$  no es función de  $c$ ; pero esta suposición es válida sólo cuando se trata de soluciones muy diluidas o cuando la difusión se realiza sobre un gradiente muy pequeño de concentración.

4.3.3 Estructura cristalina - Influye a través del factor geométrico  $\propto$ . Hay también efectos de anisotropía, y de velocidad de difusión que dependen de la estructura.

4.3.4 Defectos geométricos de la estructura.

La difusión a altas temperaturas es poco sensible a la estructura. En cambio, a bajas temperaturas, cuando la expresión (16) sugiere muy poca difusión, se ha observado a veces el fenómeno con una intensidad anormalmente alta (elevado  $D$ ), lo que indica la existencia de caminos anómalos para el movimiento atómico. Estas anomalías se han relacionado con la presencia de defectos como dislocaciones y bordes de grano de pequeño ángulo, introducidos mediante deformación mecánica (trabajado en frío).

Por supuesto, parte del aumento de la velocidad de difusión se debe a la introducción de vacancias e intersticiales.

Se distinguen así dos formas de difusión:

- a) en volumen (preponderante a altas temperaturas)
- b) intergranular (manifiesta a bajas temperaturas)

## 5 - PLASTICIDAD DE CRISTALES

### 5.1 Introducción

Nos hemos ocupado sucesivamente de la estructura del átomo, y de las fuerzas interatómicas que son responsables del estado condensado de la materia que denominamos sólido, con particular énfasis en los agregados cristalinos. Hemos estudiado con cierto detalle la unión metálica y analizado la conducción térmica y eléctrica, y hemos descripto someramente las imperfecciones geométricas de los cristales.

En lo que resta del curso, usaremos los conocimientos sobre estructura y comportamiento elástico para explicar el comportamiento mecánico de los sólidos cristalinos más allá del rango elástico.

En el Apéndice I se incluye un sumario sobre Elasticidad, cuya finalidad esencial es aclarar el significado de la notación que usaremos.

### 5.2 Deformación de monocristales

Aunque todavía los monocristales son en su mayoría productos de laboratorio -salvo excepciones como el caso de las paletas de turbina de una empresa de vanguardia, o esas minúsculas gemas electrónicas de los transistores - nos interesan desde el punto de vista mecánico porque son simples. No tenemos borde de grano cuyo número y orientación introducen variables difícilmente calculables, y en general la geometría de la red cristalina se aproxima más a la de la red ideal.

Los experimentos realizados con monocristales permiten obtener conclusiones de validez general, que son aplicables al estudio de las propiedades mecánicas de los policristales.

Los ensayos mecánicos más simples son tracción, compresión, flexión y torsión. Solo en los dos primeros casos los esfuerzos son uniformes en toda la probeta; el ensayo de tracción es más práctico y es el que se usa más ampliamente en las investigaciones.

Una probeta monocristalina de forma apropiada, ensayada a la tracción en una máquina moderna y precisa como la Instron, puede suministrar valiosa información. Salvo en la proximidad de las mordazas, las tensiones son uniformes.

Si la superficie externa ha sido convenientemente pulida antes del ensayo podemos observar:

a) La deformación se realiza plano sobre plano y define sistemas de slip (plano y dirección)

NOTA: El deslizamiento es inhomogeneo.

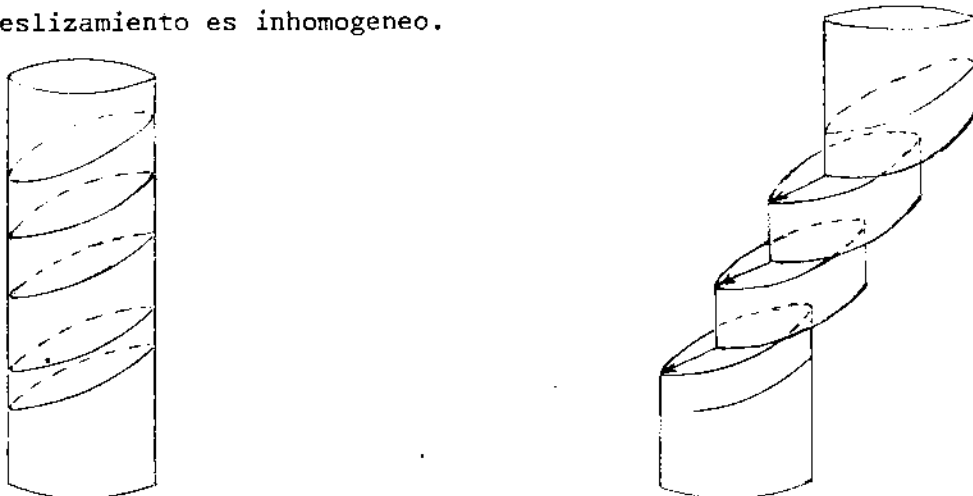


Fig. 5.1 Deformación de un monocristal

b) La magnitud que debe tomarse en cuenta es la de la tensión resuelta sobre el plano de deslizamiento en la dirección del desplazamiento (R.S.S.)

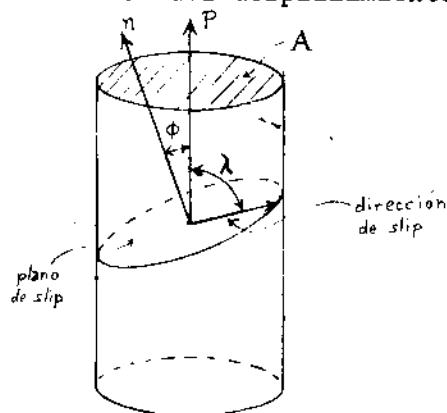


Fig. 5.2 Tensión resuelta sobre el plano de deslizamiento.

$$\sigma(R.S.S.) = \frac{P}{\frac{A}{\cos \phi}} \cos \lambda = \frac{P}{A} \cos \phi \cos \lambda \quad (1)$$

De esta manera, pueden compararse datos de monocristales de distintas orientaciones.

c) Si combinamos la observación microscópica con el estudio de la curva de tracción, podemos establecer que la deformación por deslizamiento acontece después de sobrepasado el período elástico.

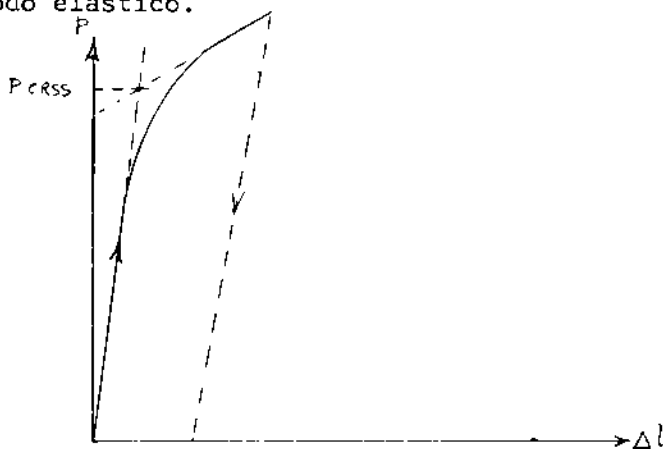


Fig. 5.3 Ensayo de un monocristal de Al.

d) La R.S.S. debe sobrepasar un cierto valor, denominado crítico, característico para cada metal (Ley de Schmidt-Boas). El punto A de la Fig. 5.3 indica el valor de la carga P para la cual la tensión resuelta es igual al valor crítico.

Tabla I

Valores de la C.R.S.S. de algunos monocristales (temperatura ambiente)

| <u>Material</u> | <u>C.R.S.S. (g/mm<sup>2</sup>)</u> |
|-----------------|------------------------------------|
| Al              | 86                                 |
| Al + 6% Ag      | 8.500                              |
| Fe              | 3.000                              |
| Zn              | 50                                 |
| Cu              | 100                                |
| An              | 80                                 |

### 5.2.1 Tensión crítica necesaria para mover una dislocación

Calculamos el valor de la tensión crítica usando un modelo simple como el de la Fig. 5.4. Se trata de obtener la fuerza para deslizar un plano atómico de sección unitaria, sobre otro.

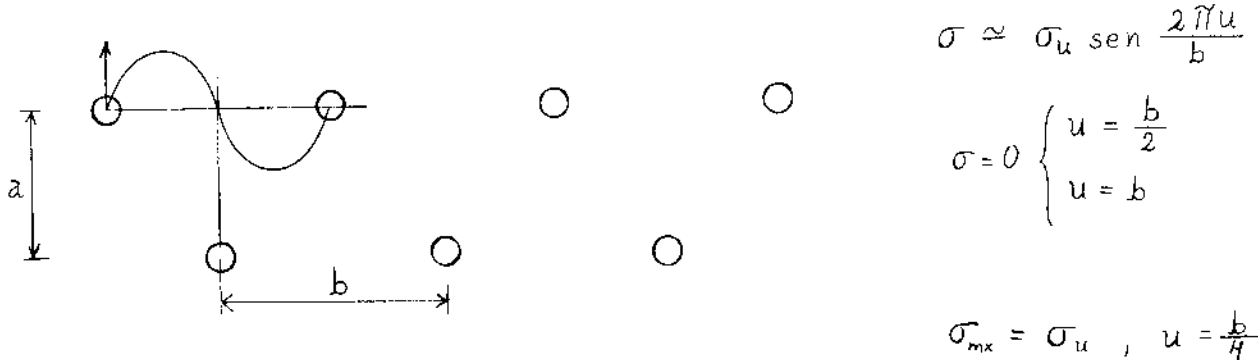


Fig. 5.4

Para desplazamientos pequeños,

$$\sigma = \mu \gamma = G \gamma = G \frac{u}{a} \approx \sigma_u \frac{2\pi u}{b}$$

$$\therefore \sigma_u = \frac{Gb}{2\pi a}$$

$$\therefore \sigma = \frac{Gb}{2\pi a} \sin \frac{2\pi u}{b} \quad (2)$$

$$\sigma_{mx} = \frac{Gb}{2\pi a} \approx \frac{G}{2\pi} \quad (3), \text{ puesto que } a \approx b$$

Mediante cálculos más refinados, se ha llegado a  $\sigma_{mx} \approx \frac{G}{30}$

La C.R.S.S. medida es

$$CRSS \sim \frac{G}{10000} \quad (\text{monocristales})$$

La explicación reside en que un plano cristalino no se mueve rígidamente sobre otro plano, sino que el movimiento está localizado en una línea, que es la dislocación. Esta pasa "barriando" el plano de deslizamiento, moviéndose (borde) en la dirección del vector de Burgers, de modo análogo a como lo hace una arruga en una alfombra.

En buenas cuentas,  $\sigma_u$  es la tensión para crear un lazo de dislocación sobre una superficie de deslizamiento de un cristal perfecto.

Aunque las mediciones sobre cristales reales dan valores de C.R.S.S. tan bajos como  $G/10.000$ , hay confirmación experimental de los valores muy elevados de

$\sigma \approx \sigma_u \approx \frac{G}{2\pi}$  para el caso de whiskers exentos de dislocaciones. La siguiente figura ilustra cómo la tensión de deformación desciende bruscamente en cuanto se crean dislocaciones.  $\sigma_u$ , es entonces el mayor valor que puede alcanzar la C.R.S.S.

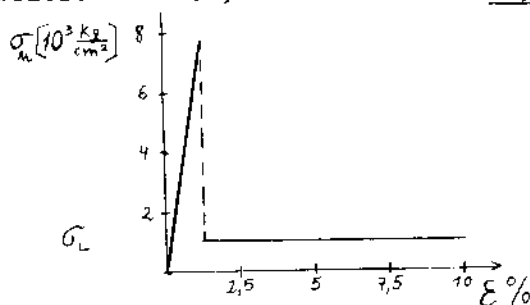


Fig. 5.5  $\sigma$  vs  $\epsilon$ , whisker de Cu (S. Brenner, J.App.Phys. 27, 1484 (1956))

Concentremos nuestra atención en el menor valor que puede tener la tensión de deformación por corte, que denominamos  $\sigma_L$  (Fig. 5.5)

Esta  $\sigma_L$  es la tensión necesaria para deslizar una dislocación existente, en un cristal que no tiene otros defectos.

Una dislocación colocada simétricamente en una red no deformada, no está sujeta a ninguna fuerza proveniente de la red. Pero si se la desplaza un poco de su posición, este desplazamiento es resistido por una fuerza que se manifiesta cuando, se altera la simetría de los átomos del plano de deslizamiento a izquierda y derecha de la dislocación.

En la Fig. 5.6 vemos a la dislocación a) en su posición inicial y b) después de haberse movido una magnitud  $b$  hacia la derecha

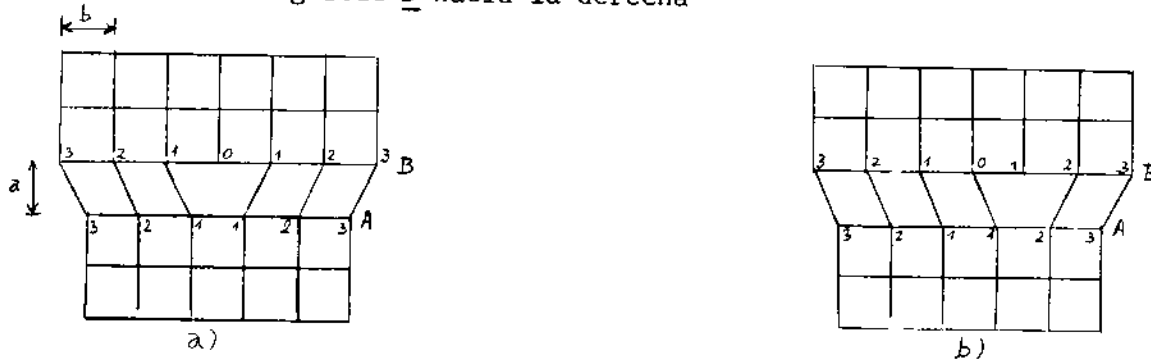


Fig. 5.6

En la etapa intermedia entre a) y b), no hay simetría axial de los átomos del plano de deslizamiento respecto de la dislocación, Este hecho origina un desequilibrio de fuerzas a ambos lados de la dislocación, cuya resultante es una fuerza que se opone al movimiento de la misma.

Peierls, Nabarro y otros han deducido la siguiente expresión para  $\sigma_L$

$$\sigma_L \approx G e^{-2\pi W/b}$$

donde  $W \approx \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)\sigma_u}$

es el ancho de la dislocación;  $\nu$  = relación de Poisson.

La movilidad de las dislocaciones aumenta rápidamente a medida que disminuye  $W$ . De este modo se ven favorecidos para el deslizamiento los sistemas de empaquetamiento compacto, que tienen  $\sigma_u$  pequeña ( $\sigma_u$  pequeña,  $W$  grande,  $\sigma_L$  pequeña)

Notese bien que la relación  $b/a$  grande favorece las dislocaciones anchas, y que éstas se mueven con mayor facilidad. En este hecho reside la diferencia entre los cristales intrínsecamente duros (dislocaciones con ancho pequeño, como los de  $\text{Cu Al}_2$ ) y cristales intrínsecamente blandos ( $b/a$  pequeña,  $\text{Cu Al}$ )

La C.R.S.S. de un cristal es esencialmente la tensión requerida para mover un gran número de dislocaciones. Nótese que cada dislocación sólo provoca un deslizamiento relativo entre planos cristalográficos, del orden de  $b \approx 2 \times 10^{-8}$  cm.

En el caso de un cubo unitario deformado al corte (Fig. 5.7)

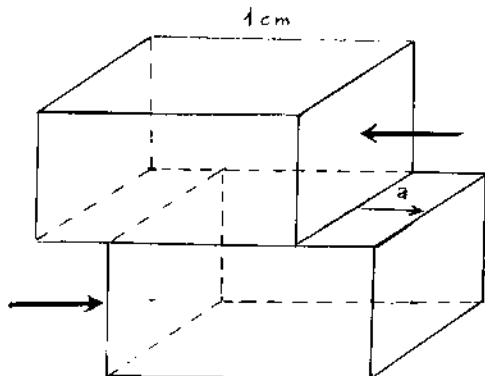


Fig. 5.7

La deformación es

$$a = Nb$$

$$\text{si } a = 0,1\% \approx 0,001 \text{ cm}$$

$$N = \frac{10^{-3}}{2 \times 10^{-8}} = 5 \times 10^4$$



En el caso real, es difícil que todas las dislocaciones de un cristal cúbico de 1 cm. de arista se empiecen a mover simultáneamente; de modo que el número de dislocaciones requeridas para obtener una deformación del 0,1 % tiene que ser mayor aún.

En el caso de los cristales metálicos de Al, Zn ó Ni, la tensión necesaria para mover una dislocación es pequeña, y los bajos valores de la C.R.S.S. reflejan esta circunstancia. Sin embargo, hay que tener en cuenta que la C.R.S.S. no mide la tensión necesaria para mover una dislocación, sino muchísimas dislocaciones en presencia de otras dislocaciones.

En cristales muy perfectos, y puros, podemos decir más correctamente que la C.R.S.S. da una idea de las fuerzas existentes entre dislocaciones.

### 5.3 Cuidado con ese ensayo de tracción!!!

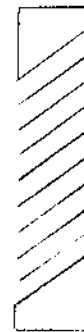
Resulta oportuno incluir algunas observaciones sobre el ensayo de tracción de monocristales, que deben tomarse en cuenta cuando se requieren mediciones más exactas.

Dado que el flujo plástico acontece por deslizamiento sobre planos particulares, en ciertas direcciones, el aumento de longitud de una probeta, para una cierta magnitud de deslizamiento  $a$ , depende de las orientaciones del plano de deslizamiento, y de la dirección de deslizamiento, con respecto al eje de tensión.

Vd. se dará cuenta inmediatamente que un mismo  $\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0}$ , puede obtenerse con distinto deslizamiento (ver Fig. 5.8)



mayor deslizamiento



menor deslizamiento

Fig. 5.8

La expresión que vincula  $a$  con  $\epsilon$  es:

$$a = \frac{1}{\cos \varphi_0} \left( \sqrt{(1+\epsilon)^2 - \sin^2 \lambda_0} - \cos \lambda_0 \right) \quad (4)$$

donde  $\varphi$  y  $\lambda$  son los especificados en la Fig. 5.2, y el subíndice cero indica valores iniciales.

Resulta claro que, por condición de vínculo de la probeta, la deformación tiene lugar como se muestra en la Fig. 5.9.

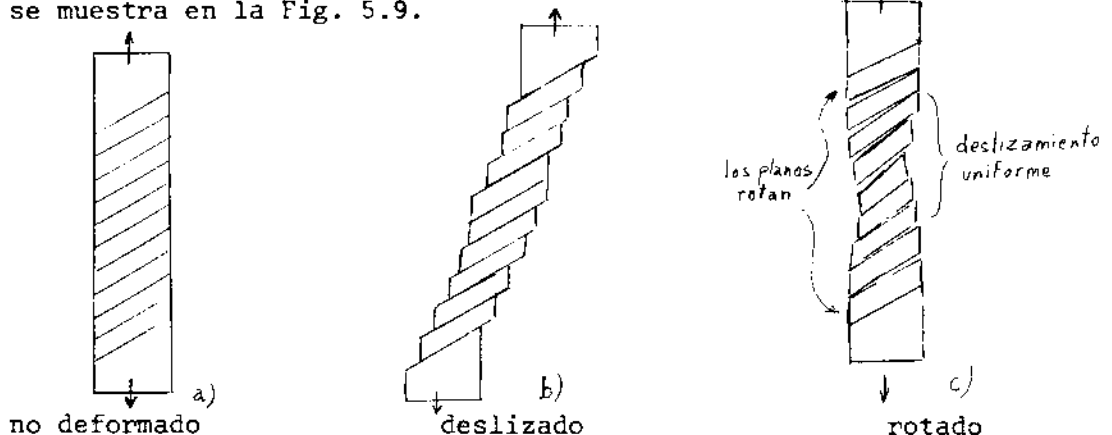


Fig. 5.9 Deformación de una probeta

En las proximidades de las mordazas, hay una rotación de los planos de deslizamiento, por cuanto las mordazas no permiten el desplazamiento lateral mostrado en b). La rotación puede suponerse despreciable en la región central de la probeta, siempre que la relación largo/ancho de la probeta sea grande ( $> 10$ )

De todos modos, la rotación hace variar  $\varphi$  y  $\lambda_0$  y el efecto debe ser tomado en cuenta en determinaciones precisas de

$$\sigma_{crit} = \frac{P}{A} \cos \varphi \cos \lambda$$

Notese que  $\frac{A}{\cos \varphi} = \text{const.}$ , y que  $\lambda_1$  ( $\lambda_0$  rotado) puede calcularse para cada elongación a través de

$$1 + \epsilon = \frac{\text{sen } \lambda_0}{\text{sen } \lambda_1} \quad (5)$$

Otro efecto que debe ser considerado en un ensayo cuidadoso, es la deformación de las mordazas.

Debe efectuarse un ensayo previo, con una probeta mucho más dura que la real, cuya deformación sea despreciable para el valor de carga que soportará la probeta real. La extensión verdadera se obtiene como lo indica la figura 5.10.

El uso de extensómetros permite eliminar este problema.

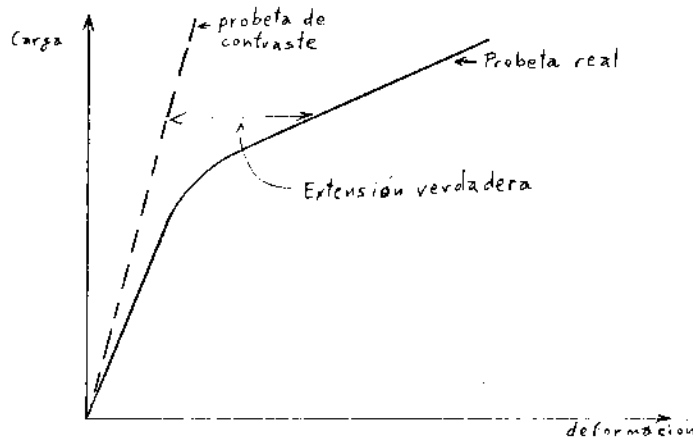


Fig. 5.10

Por último debe cuidarse el diseño de las cabezas de las probetas y de las mordazas, a objeto de evitar concentración de tensiones sobre las cabezas.

Para más detalles sobre el ensayo de monocristales, puede consultarse el folleto "The experimental investigation of the plastic properties of single crystals" by A. Kelly

(Instron Engineering Co. 2500 Washington Street, Canton, Massachussetts)

#### 5.4 Estática y dinámica de dislocaciones

Hasta este momento las dislocaciones son para nosotros defectos geométricos cuya existencia explica el flujo plástico y cuya traza es visible al microscopio (líneas de deslizamiento). Su energía por unidad de longitud de línea es

$$U \propto b^2 \quad (\text{ver apéndice I, (14)})$$

El origen de estos defectos -que no son termodinámicamente estables como los defectos puntuales- radica principalmente en a) accidentes de crecimiento de cristales, b) microsegregación y c) condensación de defectos puntuales.

Para interpretar mejor el flujo plástico necesitamos conocer algo sobre las fuerzas que obran sobre las dislocaciones durante la deformación plástica.

##### 5.4.1 Fuerza sobre una dislocación

Las dislocaciones se mueven disipando el trabajo de las fuerzas exteriores. La fuerza  $F$  aplicada sobre la unidad de línea, se define a partir de los siguientes consideraciones, hechas sobre la Fig. 5.11.

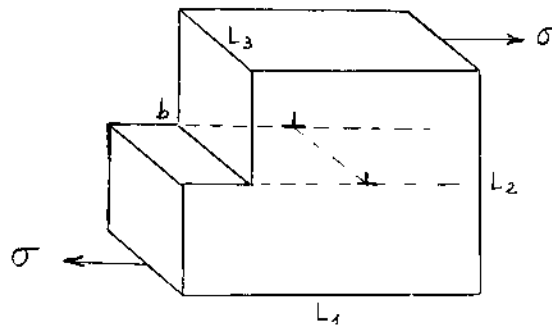


Fig. 5.11 Dislocación de un cristal

La línea de longitud  $L_3$  se mueve bajo la tensión  $\sigma$ . Al cruzar el cristal desplaza la parte superior del mismo respecto de la inferior, una distancia  $b$ .

El trabajo hecho por la tensión es

$$\sigma L_1 L_3 \cdot b$$

y el realizado por la dislocación es

$$F L_3 \cdot L_1$$

Por igualación

$$\therefore \boxed{F = \sigma b} \quad (6)$$

FUERZA SOBRE LA UNIDAD DE LINEA

#### 5.4.2 Tensión de línea

Si una línea de dislocación está solicitada por una fuerza  $F$ , pero tiene dos puntos "anclados", no puede deslizarse. Se comporta como si fuese una banda elástica, estrechándose entre dos puntos de anclaje.

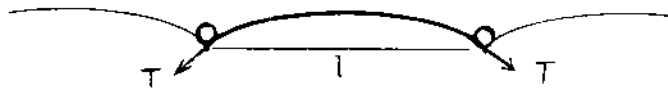


Fig. 5.12

Hay una tensión de línea  $T$  que trata de acortarla. Esta  $T$  no es sino la energía por unidad de línea

$$U \approx \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln\left(\frac{l}{r_0}\right), \text{ donde } \frac{l}{r_0} \approx 10^2 - 10^5 \quad (\text{Ver Apéndice I, (13)})$$

$$\therefore \ln \frac{l}{r_0} \approx 2\pi$$

$$\boxed{T \approx \frac{\mu b^2}{2}}$$

(7)

Tensión de línea

#### 5.4.3 Velocidad de deformación

Las dislocaciones pueden deslizarse a velocidades muy elevadas ( $10^5$  cm/seg), próximas a las de las ondas elásticas. Se puede deducir fácilmente la velocidad de la deformación por corte cuando éste acontece por movimiento de dislocaciones de borde.

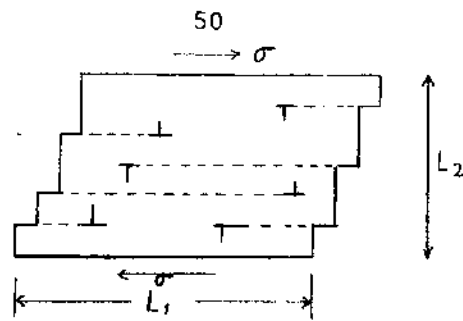


Fig. 5.13

- $\rho$  = número de dislocaciones / unidad de area  
 $\rho_{L_1, L_2}$  = número de dislocaciones actuantes  
 $\frac{L_1}{v}$  = tiempo de pasaje de una dislocación  
 $v$  = velocidad de la dislocación  
 $\frac{b}{L_2} = \dot{\gamma}$  = deformación producida por una dislocación

Velocidad de flujo plástico:  $\dot{\gamma} = \frac{b}{L_2} \cdot \frac{v}{L_1} \cdot \rho_{L_1, L_2} = b v \rho$

$$\dot{\gamma} = b v \rho \quad (8)$$

#### VELOCIDAD DEL FLUJO PLASTICO (CORTE)

$\dot{\gamma}$  puede ser muy grande

$b \approx 3 \times 10^{-8} \text{ cm}$

$v \approx 10^5 \text{ cm/seg}$

$\rho \approx 10^7 \text{ líneas /cm}^2$  (valor común para metales no trabajados)

$\dot{\gamma} = 30.000 \text{ 1/seg}$

Esta velocidad de deformación se obtiene sólo en impactos de alta velocidad o explosiones.

Velocidades de deformación comunes son por ejemplo  $\dot{\gamma} \approx 1 [1/\text{seg}]$ . Durante estos procesos solamente unas pocas dislocaciones se mueven rápidamente en cada instante.

La ecuación (8) es aplicable a distribuciones más complejas de dislocaciones, incluyendo borde y hélice, si  $\rho$  se define como la longitud total de dislocaciones móviles por unidad de volumen.

#### 5.4.4 Multiplicación

Young, en Oak Ridge, preparó cristales de Cu conteniendo del orden de  $10^2$  dislocaciones/cm<sup>2</sup>. Los deformó hasta llegar justamente a la CRSS para el primer sistema de slip operante. Volvió a medir la densidad de dislocaciones, y obtuvo

$$\rho \approx 10^6 \text{ líneas/cm}^2$$

El experimento ilustra dramáticamente la multiplicación de dislocaciones durante el flujo plástico.

Entre los mecanismos de multiplicación más simples propuestos, está el de las fuentes de Frank y Read, ilustrado en la Fig. 5.14.

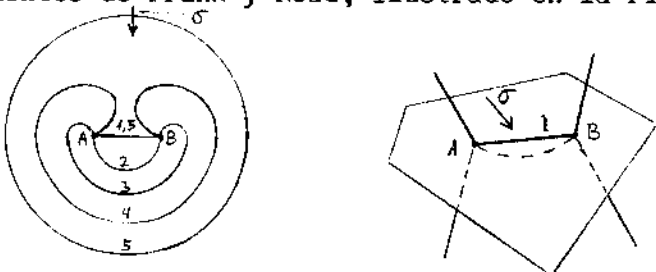


Fig. 5.14 Mecanismo de Frank Read

Bajo una tensión  $\sigma$  aplicada, el lazo AB se curva (hay un equilibrio entre  $\sigma$  y  $T$  para cada radio de curvatura) hasta que, sobrepasado un cierto valor  $\sigma_{FR}$  queda formado un nuevo lazo (5 en la Fig. 5.14) y se restituye el lazo inicial. Con este proceso puede crearse un gran número de anillos de dislocación que son visibles como líneas de deslizamiento cuando llegan a la superficie del cristal. Calculemos ahora la tensión crítica para operar la fuente de F.R. (Fig. 5.15)

$\sigma_{FR} b l$  = fuerza sobre el lazo 1  
 $T$  = tensión de línea  $\frac{\mu b^2}{2}$

$$\sigma_{FR} b l = 2T = \mu b^2$$

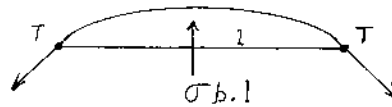


Fig. 5.15

$$\sigma_{FR} = \frac{\mu b}{l}$$

(9) TENSION CRITICA PARA OPERAR FUENTE

La (9) está limitada al caso  $10^2 < \frac{l}{r_0} < 10^5$

Si  $\rho \approx 10^8$ ,  $l$  (espaciado entre dislocaciones) es  $\approx 10^4 b$

$\sigma_{FR} \approx 10^{-4} \mu$  que es el valor observado de CRSS en monocristales bien recocidos.

Exito:  $\sigma_{FR}$  salvo pocas excepciones, justifica el valor observado de CRSS.

Inconveniente: el mecanismo F.R. no permite explicar la variación de la CRSS con la temperatura, puesto que  $\mu$  varía con ella no más de un 10 % en el mismo rango de temperatura (4°K - 200°K) en que la variación de  $\sigma_{crit}$  es del orden del 50 % y aún más (Mg). Son muy pocos los casos en que se han observado fuentes de F.R. activas (Sci. Am. oct. 1961)

Las dislocaciones deslizantes se forman a veces de otras maneras: en los bordes de grano, en las inclusiones (particularmente cuando ellas son centros de tensiones térmicas)

#### 5.4.5 Cómo se mueven las dislocaciones

##### 5.4.5.1 Observaciones experimentales

- Observaciones hechas con microscopio óptico y electrónico.
- Técnicas de decoración (cristales transparentes) y de ataque químico (en cristales transparentes y opacos) Se recomienda leer Scientific American, Octubre 1961, pág. 107)

##### 5.4.5.2 Deslizamiento cruzado

Es un fenómeno que puede suceder en cristales que tienen dos o más planos de deslizamiento con una dirección de deslizamiento común para todos.

Ej: Magnesio. A bajas temperaturas, tenemos los planos  $\{0001\}$  (basal) y  $\{10\bar{1}0\}$  (prismáticos). Las direcciones de slip para ambos son las  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$

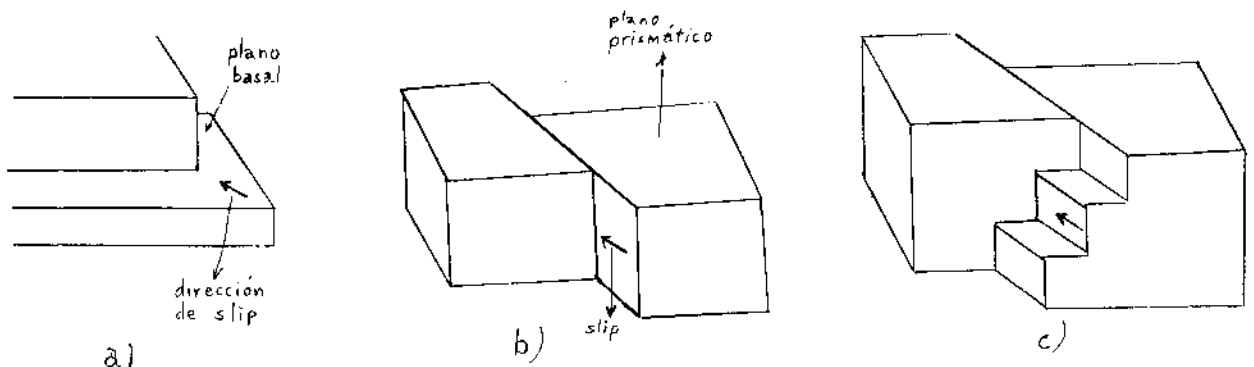


Fig. 5.16

Representación esquemática del slip en un metal exagonal.

- Deslizamiento en el plano basal
- Deslizamiento en el plano prismático
- Deslizamiento cruzado sobre planos basal y prismático

La superficie de deslizamiento tiene un perfil escalera.

Para que haya deslizamiento cruzado, las dislocaciones tienen que pasar de un plano a otro, cosa que sólo pueden hacer las de hélice. Las de borde, para mantener coplanares  $b$  y la línea de dislocación, están confinadas a un plano. Las dislocaciones de hélice pueden moverse en cualquier plano que las contenga.

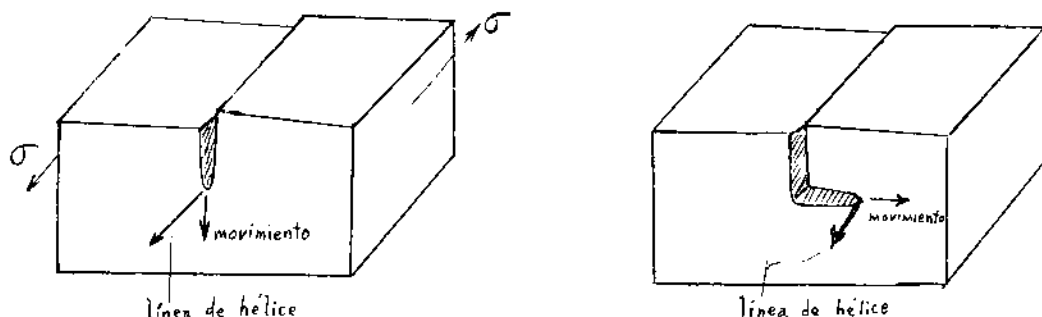


Fig. 5.17 Movimiento de una dislocación de hélice durante el deslizamiento cruzado

Las dislocaciones de borde son varias veces más veloces que las de hélice (unas 50 veces en LiF)

#### 5.4.5.3 Bandas de deslizamiento

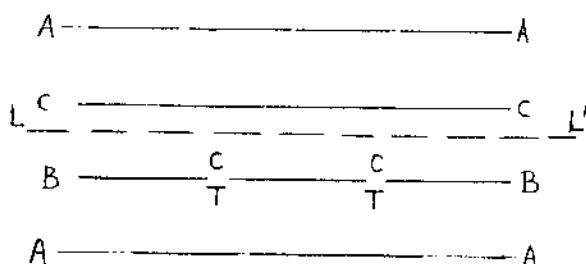
Es un grupo de líneas de deslizamiento con muy pequeña separación entre líneas. Con poco aumento, se ve como una línea gruesa. A veces la línea es sinuosa debido al deslizamiento cruzado (hélice) o al trepado (borde) o a ambos fenómenos.

#### 5.4.5.4 Trepado

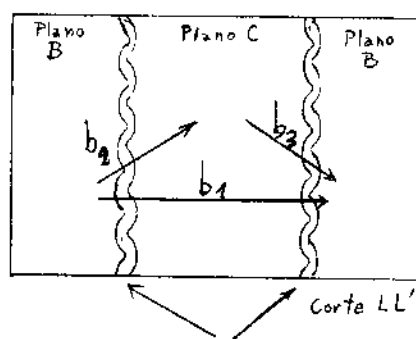
Es un movimiento perpendicular al plano de deslizamiento, realizado por las dislocaciones de borde. Cuando el borde del extraplano se desgasta por incorporación de vacancias, el trepado se dice positivo. Cuando crece por incorporación de nuevos átomos, negativo. En el primer caso la dislocación sube, y en el segundo baja.

#### 5.4.5.5 Dislocaciones extendidas

Cuando una falla de apilamiento es de la forma mostrada en la Fig. 5.18, es decir que empieza y termina en el cristal, sus bordes son dislocaciones parciales (ver también la Fig. 3.6) y ambas constituyen lo que se denomina dislocación extendida.



a)



b) Parciales de Shockley

Fig. 5.18 Falla acuada por dislocaciones parciales

En 5.18 a) un corte según LL' nos permite ver el arreglo mostrado en 5.18 b). La dislocación  $b_1$  (perfecta) sobre un plano (111) reproduce el mismo plano. La dislocación extendida, al moverse transforma sucesivamente B en C ( $b_2$ ) y luego restituye C a B ( $b_3$ ).

La disociación  $b_1 \rightarrow b_2 + b_3$  es energéticamente favorable. Una vez formadas  $b_2$  y  $b_3$ , se repelen creando entre sí la falla con una energía superficial  $\gamma$ . El apartamiento entre  $b_2$  y  $b_3$  está limitado por el balance energético, de modo que la energía, que disminuyó por la disociación, no aumenta por encima de su valor original al constituirse la falla.

En el aluminio, la separación entre parciales es del orden de una distancia interatómica.

En el Cu, es de una 12 distancias interatómicas para dislocaciones de borde y de unas 5 distancias interatómicas para dislocaciones de hélice.

El Al tiene alta energía de falla  $\gamma$  y en el Cu esta energía es mucho más baja.

En los metales hexagonales, el plano basal tiene el mismo empaquetamiento compacto que los octaédricos {111} del f.c.c., y se produce en ellos la misma disociación  $b_1 \rightarrow b_2 + b_3$ . Al moverse la dislocación extendida, la parcial  $b_2$  cambia la secuencia ABABAB... en ACBCBCB..., (Nótese que CBCB... es también secuencia hexagonal. La parcial  $b_3$  restituye la secuencia adecuada: ABABAB...).

En la literatura, se denominan parciales de Shockley a las que tienen el vector de Burgers, en el plano de la falla (glisiles o móviles) y parciales de Frank (sisi les o inmóviles) a las que lo tienen normal al plano de la falla.

En circunstancias normales, una dislocación extendida está confinada a moverse en un plano {111} o en un plano basal.

Para poder hacer deslizamiento cruzado, debe recombinarse previamente (Fig.5.19)

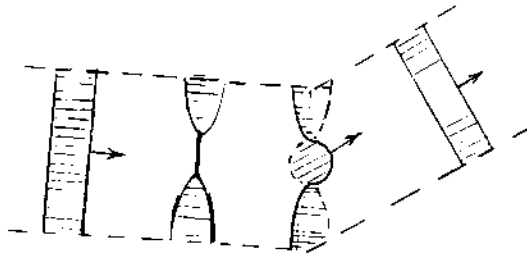


Fig. 5.19 Deslizamiento cruzado de una dislocación extendida

De acuerdo con lo que dijimos sobre la extensión de las fallas en Al y en Cu, en el primero el deslizamiento cruzado es más fácil que en el Cu, cuyo mayor ancho de falla hace más difícil la recombinación de las parciales previa al cambio de plano.

#### 5.4.6 Intersección de dislocaciones

En un cristal, las dislocaciones constituyen una red tridimensional (red de Frank)

Dado un plano de slip, habrá siempre dislocaciones que pueden deslizarse en él, y dislocaciones que lo intersectan. El corte de dislocaciones por dislocaciones requiere realización de trabajo, y éste hecho determina en buena medida la mayor o menor facilidad con que se realiza el flujo plástico.

Como regla general, cuando una dislocación corta a otra, cada una forma un escalón que es igual a la componente normal a su plano del vector de Burgers de la otra.

Véanse los siguientes ejemplos:

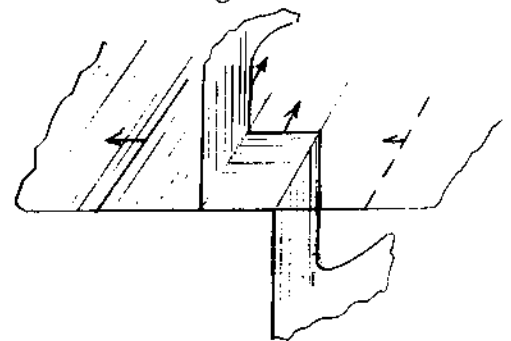
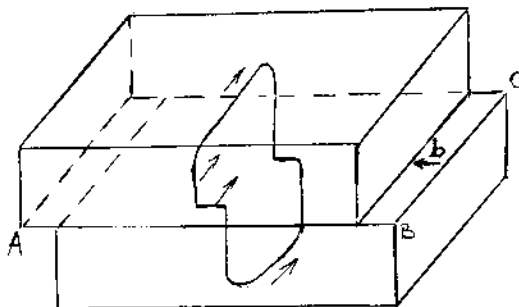


Fig. 5.20 a) una dislocación de borde ha pasado a través del plano ABC y ha formado dos escalones en el lazo prismático. b) Detalle del corte borde-borde.

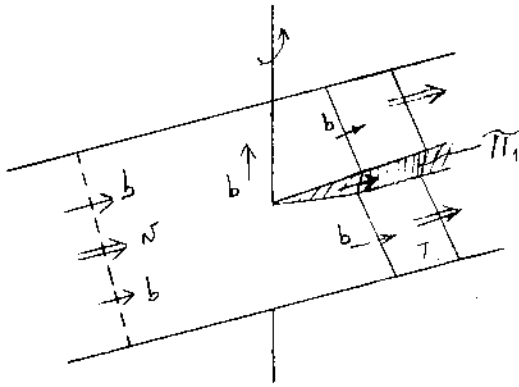


Fig. 5.21 Una dislocación de borde corta a una de hélice.  $\pi_1 \parallel$  vector  $b$  de borde.

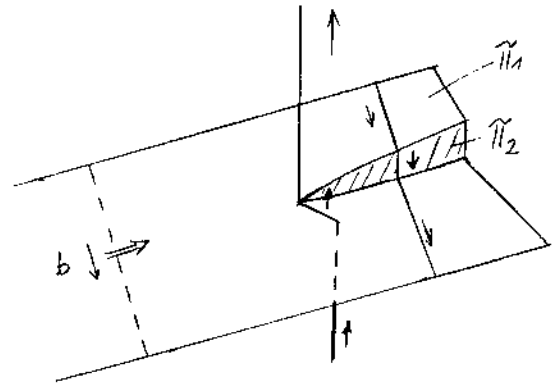


Fig. 5.22 Una dislocación de hélice corta a otra de hélice.

Para discutir el problema del movimiento de las dislocaciones de las Fig. 5.21 y 5.22, nos conviene rehacer los dibujos de la siguiente forma:

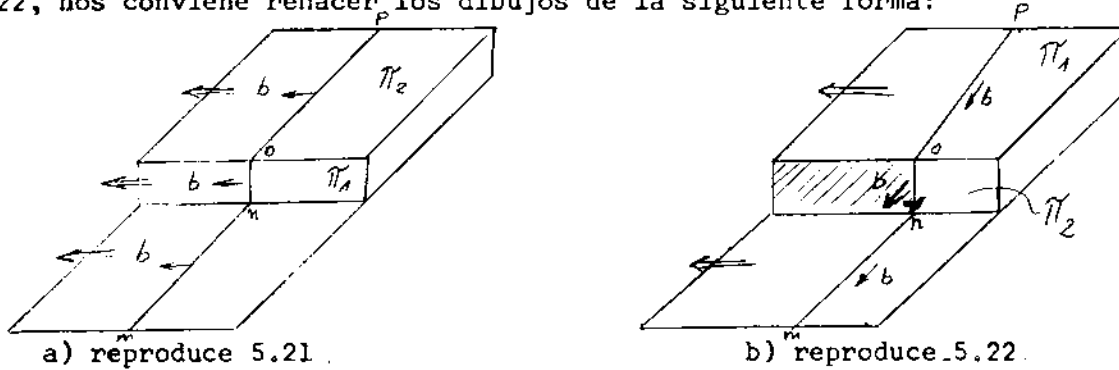


Fig. 5.23 Dislocaciones con escalones normales a sus planos de deslizamiento.

En la Fig. 5.23 b), el escalón puede desaparecer si la hélice (m n) cambia de plano hasta unirse con (o p) (movimiento sobre el plano vertical)

Analicemos el movimiento sobre los planos horizontales. La dislocación de 5.23 a) tienen los 3 segmentos de borde, y se puede mover libremente sobre la superficie escalonada. La 5.23 b), en cambio, tiene un escalón (n o) que es de borde. El extraplano está sobre el escalón mismo, que resulta entonces un plano incompleto (tiene un átomo de altura), supongamos que el extraplano es la parte rayada.

Podemos suponer que la parte rayada es una fila de intersticiales; o bien que es una fila reticular normal y que a su derecha tenemos una fila de vacancias.

En general, entonces, cuando una hélice corta a otra tenemos una fila de defectos puntuales (vacancias o intersticiales) que se extiende desde la dislocación móvil hasta la estacionaria (suponemos que no hay difusión)

En la Fig. 5.23 b), el escalón de borde sólo puede moverse por trepado. Esto significa que el movimiento hacia la izquierda va generando una fila de vacancias; hacia la derecha, genera una fila de intersticiales.

Cuando los escalones están sobre el plano de deslizamiento, se eliminan fácilmente por deslizamiento sobre él. Ver Fig. 5.24



Fig. 5.24 Escalones sobre el plano de deslizamiento.



El escalón aumenta la longitud de línea y el aumento de energía que ello significa debe ser provisto por la fuerza que mueve a la dislocación.

El movimiento de dislocaciones con escalones  $\perp$  a su plano de deslizamiento, es frenado por la hilera de defectos puntuales que hay que crear en el escalón. Por eso las hélices se mueven más lentamente que las de borde.

## 5.5. El diagrama de tracción de un monocristal

### 5.5.1 Monocristales puros

Ahora estamos en condiciones de interpretar más correctamente este diagrama.

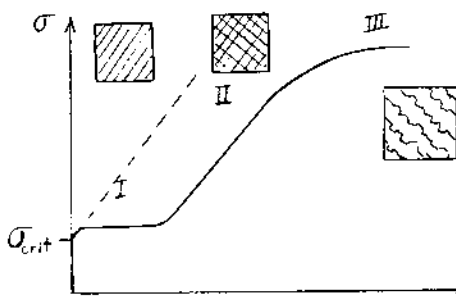


Fig. 5.25 Curva de tracción de un monocristal fcc

La curva (Fig. 5.25) se considera dividida en 3 etapas.

#### Etapas I: Easy glide - Multiplicación

Acontece inmediatamente después del período elástico que es muy corto (menor que  $\epsilon = 1\%$ ) y dura hasta  $\epsilon \approx 10\%$ . Hay un sistema de deslizamiento en operación. De los doce sistemas  $\{111\} \langle 110 \rangle$ , hay uno solo para el cual la tensión resuelta es  $\sigma_{crit}$ . Para todos los demás sistemas,  $\sigma < \sigma_{crit}$ .

En esta etapa el deslizamiento se denomina laminar.  $\sigma$  aumenta poco. El aumento se debe a la pequeña interacción con las pocas impurezas que inevitablemente existen (recordar lo dicho sobre la entropía de mezcla), a la influencia de las superficies y al corte de dislocaciones.

Debemos aclarar que habiendo 12 sistemas de deslizamiento, para ubicar uno solo en condiciones de operar, hay que escoger una orientación cristalográfica adecuada para que coincida con el eje de tracción (ver Fig. 5.26). Aún así, tener un solo sistema operante constituye una idealización del problema. Esta etapa I es básicamente de multiplicación (activación de fuentes)

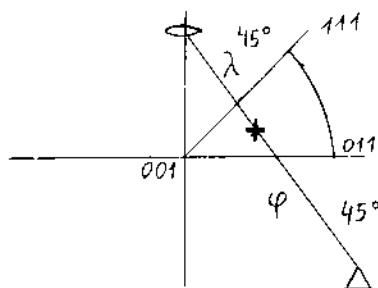


Fig. 5.26 La + indica la dirección cristalográfica adecuada para easy-glide

#### Etapas II - Intersección

Para que la deformación continúe,  $\sigma$  aumenta sensiblemente durante esta etapa, que se denomina zona lineal del endurecimiento por trabajado.

El aumento de  $\sigma$  (pequeño pero sensible) durante la etapa I por una parte, y la

rotación de planos cristalinos (ver 5.3) por otra, hacen que  $\sigma$  resuelta llegue al valor  $\sigma_{crit}$  para otros sistemas de deslizamiento. Entonces el deslizamiento acontece sobre varios sistemas simultáneamente (deslizamiento múltiple), y la intersección de dislocaciones en movimiento requiere más y más energía, que es provista por el trabajo de deformación.

Si la probeta no está orientada cuidadosamente para easy glide, el diagrama comienza directamente en la etapa II (línea de puntos en la Fig. 5.25).

El microscopio electrónico muestra densas redes tridimensionales de dislocaciones en esta etapa.

El proceso de corte de dislocaciones es dificultado por las fallas de apilamiento, los campos de tensión de las dislocaciones; el movimiento de las hélices se ve restringido por los escalones formados durante los cortes.

Una prueba de que la etapa II es básicamente de intersección, está dado por la prolongada etapa I que se observa en los hexagonales como Zn, Cd, Mg. En ellos, el único plano de deslizamiento fácil es el exagonal.

### Etapa III - Parabólica - Deslizamiento cruzado.

Las líneas de deslizamiento aparecen entrelazadas con líneas cortas de deslizamiento cruzado. El endurecimiento continúa, pero a velocidad menor (cambio de curvatura). Esto se debe principalmente a que las dislocaciones de hélice que al efectuar deslizamiento cruzado, pueden evitar los obstáculos pasándose a otro plano. Así se favorecen procesos de aniquilamiento entre dislocaciones de signos opuestos.

Metales con dislocaciones poco extendidas pueden hacer deslizamiento cruzado más fácilmente que los que tienen dislocaciones más extendidas. Por eso el Al, por ejemplo, se endurece menos que el Cu.

El aumento de temperatura, favorece el pasaje de la etapa II a la etapa III. (La energía térmica se suma a la de deformación)

El diagrama de tracción para monocristales de Fe puro (bcc) es el mostrado en la Fig. 5.27.

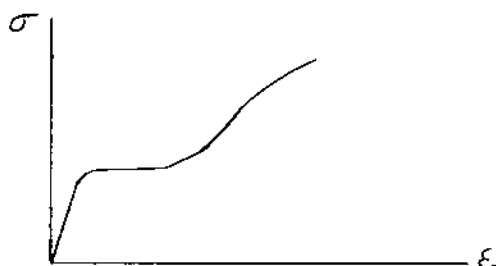


Fig. 5.27 Monocristal de Fe de alta pureza  $\langle 111 \rangle$

El cristal bcc tiene filas de empaquetamiento compacto que son direcciones de deslizamiento. Trabajos recientes indican que cualquier plano que contenga direcciones  $\langle 111 \rangle$  puede ser plano de slip.

Han sido identificados  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  y  $\{123\}$ . Estos planos no son de empaquetamiento compacto; la distancia interplanar es más pequeña. El deslizamiento es más difícil (mayor  $\sigma_{crit}$ ). Por estas características geométricas,  $\sigma$  vs  $\epsilon$  muestra una elevada  $\sigma_{crit}$ , y una zona lineal pequeña que se corresponde con líneas de slip onduladas e irregulares.

### 5.5.2 Efecto de las impurezas - Punto de fluencia

En términos generales, las impurezas bloquean las dislocaciones.

El efecto más dramático de este bloqueo es la aparición del denominado punto de fluencia que exhiben claramente el hierro y el latón.

Véase las curvas de las Fig. 5.23 y compárese con la 5.27.

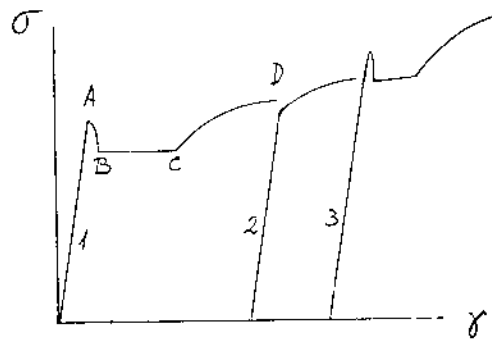


Fig. 5.28 Curvas  $\sigma$  vs.  $\gamma$  para monocristal de Fe con C ó N

a) La tensión cae bruscamente desde el punto de fluencia superior A, al inferior B. La región BC indica el flujo plástico que se corresponde con el desplazamiento a través del cristal de una banda de deformación: banda de Luders. Esta banda se mueve mientras  $\sigma \approx \text{const.}$

Después de esta región, empieza la parte "normal" de la curva  $\sigma$  vs.  $\gamma$

b) Si la probeta es descargada e inmediatamente después se la carga otra vez, (curva 2) no aparece ninguna caída de tensión.

c) Si después del ensayo 1 se deja la probeta varios días a temperatura ambiente o algunos minutos a  $100^\circ \text{C}$  y se repite el ensayo, reaparece el fenómeno observado en el ensayo 1, como se aprecia en la curva 3.

El fenómeno del punto de fluencia se explica mediante la interacción de dislocaciones con impurezas (Fig. 5.29)

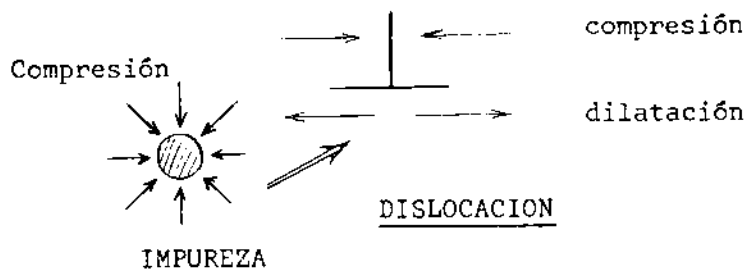


Fig. 5.29 Interacción dislocación-impureza

Si idealizamos la dislocación como un corte en el cristal, con inserción posterior de un extraplano, vemos que hay compresión por encima del plano de deslizamiento y dilatación por debajo de él. Las impurezas intersticiales (C y N en hierro) están rodeadas por un campo de tensión de signo opuesto al existente por debajo del plano de deslizamiento.

Existe una atracción entre impurezas y dislocaciones, la cual tiende a anular las tensiones internas alrededor de la dislocación, haciendo mínima la energía del cristal.;

La difusión, activada térmicamente, favorece el movimiento de impurezas hacia las dislocaciones.

Cuando la segregación de las impurezas alrededor de las dislocaciones es pequeña, forman nubes o atmósferas a su alrededor (nubes de Cottrell)

Cuando la segregación es fuerte, las impurezas precipitan a lo largo de la línea de dislocación, en forma de partículas cristalinas (carburos o nitruros)

Como la interacción dislocación-nube es atractiva, la dislocación tiende a arrastrar consigo la nube, que no puede seguirla puesto que su velocidad está controlada por el proceso de difusión; está frenada por el "arrastre" de la nube.

Hay dos factores conjuntos que tienden a liberar la dislocación del anclaje de su nube

a) vibración térmica de la línea de dislocación

b) acción de la tensión  $\sigma$  aplicada

Una vez liberada, la dislocación necesita menos fuerza para ser movida. De ahí la caída AB.

El punto de fluencia, tal como cabe esperar, decrece con la temperatura (Fig. 5.30)

Cuando la segregación es fuerte, las impurezas precipitadas constituyen puntos de anclaje. La línea de dislocación se arquea entre ellos, y la  $\sigma$  aplicada debe crecer hasta que los arcos entre anclajes sobrepasen la tensión crítica, como en el mecanismo Frank-Read.

Después, la dislocación necesita menos fuerza para continuar su movimiento (Fig. 4.25 a)

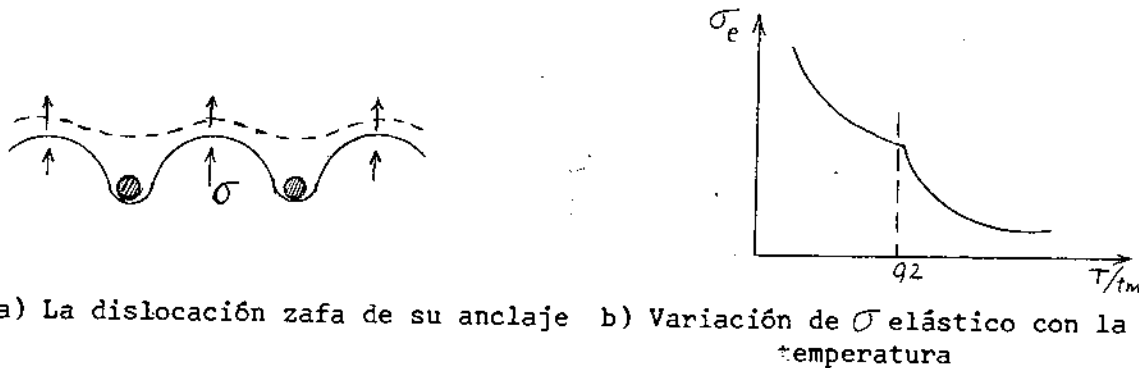


Fig. 5.30

La elevada tensión que se requiere para liberar dislocaciones de sus nubes ( $\approx \frac{E}{50}$ ) se observa muy raramente en la práctica, porque la fluencia se inicia prematuramente en regiones de elevada concentración de tensión, casi siempre en la proximidad de las cabezas de las probetas. Esta deformación localizada se expande al material que circunda las zonas de tensión concentrada, porque el borde entre las regiones deformada y no deformada es a su vez zona de concentración de tensión. Este borde móvil avanza desde los extremos de la probeta hacia el centro, constituyendo un frente de deformación (frente de Lüders) tras el cual van quedando bandas de deformación (bandas de Lüders). Mientras el frente se propaga, la tensión es  $\sigma \approx \text{const.}$  Corresponde al tramo BC del diagrama 5.28.

Las bandas de Lüders forman un ángulo de aproximadamente  $45^\circ$  con el eje de tracción. No confundirlas con líneas de slip!!

Las bandas de Lüders se presentan también en cristales puros cuyas dislocaciones son ancladas por otros defectos de red. Nosotros las hemos observado en Cu irradiado, en el cual se sabe que el anclaje se debe a la presencia de zonas de Seeger.

Se puede decir sin grave error que el fenómeno se presenta toda vez que haya muy pocas dislocaciones móviles para iniciar la deformación. Esto requiere una mayor  $\sigma$  para iniciar el flujo plástico, fenómeno que, si las condiciones de contorno son adecuadas, origina a su vez la concentración de tensiones necesarias.

Para el tramo CD de la curva, tenemos la explicación correspondiente a la etapa III de los monocristales puros: intersección. Naturalmente, habiendo impurezas presentes, su efecto es aditivo para el endurecimiento.

### 5.5.3 Envejecimiento por deformación (Strain aging)

En el experimento graficado por la curva 2 de la Fig. 5.28, la fluencia no se presenta porque las dislocaciones ya fueron liberadas de sus anclajes o sólo hace falta la tensión necesaria para seguir las moviendo (recordar los procesos de corte, por eso  $\sigma$  va en aumento).

El experimento graficado por la curva 3, ha sido efectuado después que el efecto temperatura-tiempo ha permitido a las impurezas difundir otra vez hacia las dislocaciones y reconstituir el anclaje. Ha reaparecido el punto de fluencia. El fenómeno se denomina envejecimiento por deformación.

Referencia: Cottrell (The plastic flow...)

### 5.6 Deformaciones de policristales

Un monocristal puede ser transformado en policristal por doblado, traccionado, estampado; en general, por severo trabajo mecánico. Aunque la estructura granular que se obtiene en este caso resulta bastante diferente de la que se obtiene por enfriamiento en molde, resulta claro que los bordes de grano en ambos casos significan configuraciones bidimensionales que aumentan la energía total del sólido.

Parte de la energía gastada en el trabajado, está concentrada en los bordes de grano, pudiéndose evaluar específicamente, por ejemplo en  $\text{erg/cm}^2$ . Microscópicamente, podemos hacer abstracción de la compleja estructura granular, considerar el borde simplemente como un obstáculo para la marcha de las dislocaciones, y analizar la interacción entre éstas y aquellos.

Los mismos bordes de grano pueden ser resueltos como arreglos de dislocaciones.

Este punto de vista, aunque útil para interpretar ciertos aspectos del endurecimiento, no debe hacernos dejar de lado el otro, más general: los bordes son regiones bidimensionales de energía almacenada.

El policristal sometido a elevación de temperatura, trabajo de deformación, ataque químico, recibe en su masa o en su superficie (caso del ataque químico) una energía de activación que particularmente en sus dos primeras formas (mecánica y térmica) promueve cambios estructurales por interacción con los bordes de grano. Así podemos tener efectos de rotación, traslación y corrosión de esos bordes.

La "novedad" con respecto a lo estudiado sobre deformación microscópica de monocristales es la desaparición del deslizamiento fácil (fcc y hcp). Naturalmente que un policristal es más duro. Los bordes de grano son nuevos obstáculos para las dislocaciones, y ni siquiera las de hélice pueden sortearlos (a temperatura adecuada) por procesos de deslizamiento cruzado, como lo hacen cuando se encuentran con impurezas.

Si nos muestran la curva de un monocristal de  $\text{Cu}$  orientado para deslizamiento múltiple, junto a la curva de un policristal (ambos de igual pureza), podemos distinguir una de otra porque el endurecimiento del policristal es más rápido (Fig. 5.31), pero ambos son de la misma naturaleza.

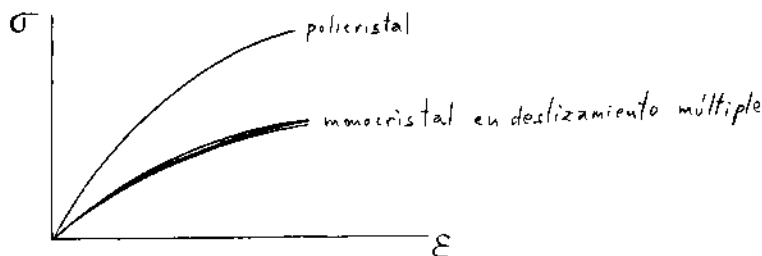
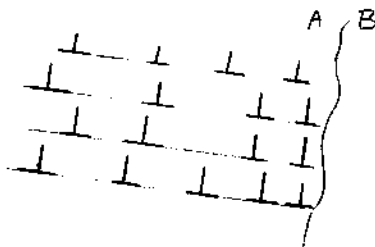


Fig. 5.31

En el policristal las deformaciones están confinadas dentro de cada grano. Bajo una  $\sigma$  aplicada, las dislocaciones constituyen apilamientos contra el borde de grano, como lo muestra la Fig. 5.32



A grano en el que ha habido deslizamiento  
B grano en el que no ha habido deslizamiento

Fig. 5.32 Apilamiento de dislocaciones en un borde de grano.

Experimentalmente, se ha comprobado que el deslizamiento a través de un borde de grano depende del tamaño de grano. Siendo  $\sigma_y$  la tensión de fluencia inferior, se ha verificado que

$$\sigma_y = \sigma_i + k_y d^{-1/2}$$

ECUACION DE PETCH

donde  $K_y$  = constante empírica  
 $d$  = diámetro del grano  
 $\sigma_s$  = tensión para deslizar dislocaciones. Se la interpreta como una medida de la resistencia intrínseca del material al movimiento de una dislocación.

Esta ecuación muestra que el material de grano fino es más resistente a la fluencia que el de grano grueso.

En realidad, esta aseveración es válida solamente para deformaciones de unos pocos por ciento. Para deformaciones mayores, el endurecimiento (aumento de  $\sigma$ ) es casi independiente del tamaño de grano.

### 5.6.1 Influencia de la temperatura

Con referencia a la figura 5.32, el grano B puede fluir: a) liberando dislocaciones que están bloqueadas en su interior

b) creando dislocaciones desde el borde AB.

Si el bloqueo es débil (material que tiene las impurezas muy dispersas, como un acero no envejecido), el proceso es a). Si el bloqueo es fuerte (acero envejecido, impurezas agregadas formando obstáculos más grandes para las dislocaciones), el proceso es b).

La liberación a) es muy sensible a la temperatura. La creación b) no lo es. Véase la siguiente variación de  $K_y$  con T.

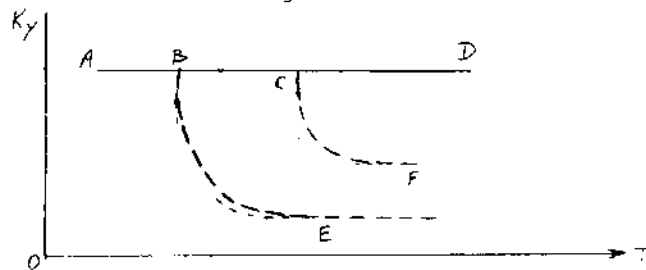


Fig. 5.33 Variación de  $K_y$  con la temperatura

# AD = probetas muy envejecidas. Las impurezas están segregadas a lo largo de las líneas de dislocación, bloqueándolas.

$\sigma_y = f(T)$  sólo a través de  $\sigma_s$

El grano B deforma por creación de dislocaciones desde el borde AB (el proceso se ve dinámicamente por medio de microscopía electrónica)

† ACF = envejecimiento moderado

# ABE = envejecimiento incipiente.

### 5.6.2 Influencia de la velocidad de deformación

La unión metálica favorece la estructura de empaquetamiento compacto, porque no hay efectos de saturación de fuerzas interatómicas.

Las estructuras compactas tienen sistemas de deslizamiento en los que la relación  $b/a$  ( $b$  espaciado en el plano,  $a$  espaciado interplanar) es pequeña.

Más generalmente, los cristales pueden agruparse, según cómo efectúan el deslizamiento, en

- a) intrínsecamente blandos ( $b/a$  pequeño) como el Cu, Mg
- b) intrínsecamente duros ( $b/a$  grande) como el Ge, Si

Cuando un cristal intrínsecamente duro es deformado rápidamente, la tensión aumenta mucho al principio, porque las pocas dislocaciones deslizantes que están presentes inicialmente no pueden producir la velocidad de deformación requerida, salvo si se mueven muy rápidamente (ver Fig. 5.34)

Por ejemplo, en el Ge, si  $\rho = 10^3 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\dot{\gamma} = 3 \text{ seg}^{-1}$ , se requeriría

$$V_{\text{disl}} = 10^5 \text{ cm/seg}$$

A medida que las dislocaciones se multiplican, ya no necesitan moverse tan rápido, y su tensión de deslizamiento disminuye. El fenómeno se ve así en el diagrama

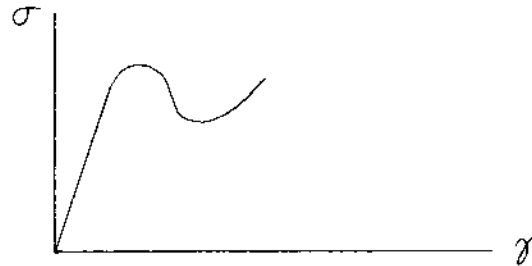


Fig. 5.34 Diagrama tensión-deformación; deformación rápida

El efecto se presenta también en los cristales intrínsecamente blandos, cuando la velocidad de deformación es muy grande (impacto, explosión)

# APENDICE I

## SUMARIO DE ELASTICIDAD

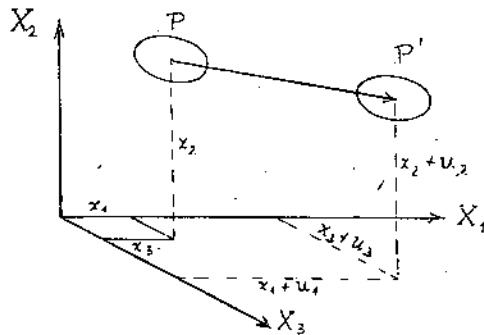


Fig. I.1

### 1.1 Deformaciones (ver Fig. I.1)

$x_i$  simboliza una coordenada ( $x_1, x_2, x_3$ )

$u_i$  simboliza corrimiento;  $u_i = f(x_i)$

$e_{ij}$  deformación específica =  $du_i / dx_j$ ;  $i, j = 1, 2, 3$

$u_i = e_{ij} x_j$ , donde se aplica la convención de Eistein sobre suma de subíndices repetidos

$\epsilon_{ij} = 1/2 (e_{ij} + e_{ji})$  = componente de deformación

$\omega_{ij} = 1/2 (e_{ij} - e_{ji})$  = componente de rotación

$e_{ij} = \epsilon_{ij} + \omega_{ij}$

$\epsilon_{ij}$  es un tensor simétrico

### 1.2 Esfuerzos

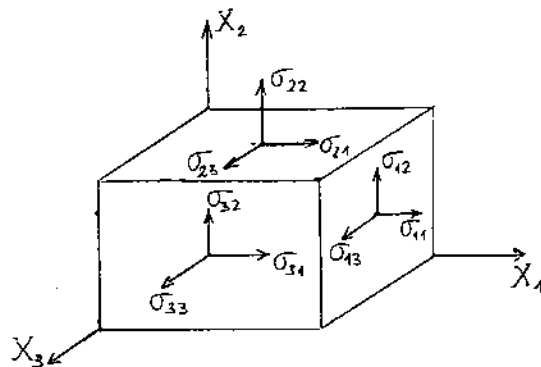


Fig. I.2

$\sigma$  = carga/área = tensión

$\sigma_{ij}$  es un tensor simétrico  $i, j = 1, 2, 3$

El significado de sus componentes está explícito en la Fig. I.2

### 1.3 Ley de Hooke (vinculación entre deformación y esfuerzo)

En su forma más general es

$$\sigma_{ij} = c_{hki j} \cdot \epsilon_{ij} \quad \text{donde para cada par } i, j, k, h \text{ toman los valores } 1, 2, 3$$

$$\begin{aligned} \text{por ejemplo: } \sigma_{11} = & c_{1111} \epsilon_{11} + c_{1211} \epsilon_{12} + c_{1311} \epsilon_{13} + \\ & + c_{2111} \epsilon_{21} + c_{2211} \epsilon_{22} + c_{2311} \epsilon_{23} + \\ & + c_{3111} \epsilon_{31} + c_{3211} \epsilon_{32} + c_{3311} \epsilon_{33} \end{aligned} \quad (1)$$



$C_{hki j}$  = constantes elásticas

Se acostumbra la siguiente simplificación de notación:

$$\sigma_{11} \rightarrow \sigma_1$$

$$\sigma_{23} \rightarrow \sigma_4$$

$$\sigma_{22} \rightarrow \sigma_2$$

$$\sigma_{31} \rightarrow \sigma_5$$

$$\sigma_{33} \rightarrow \sigma_3$$

$$\sigma_{12} \rightarrow \sigma_6$$

OMITIR  $\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{11} \rightarrow \sigma_1 \\ \sigma_{23} \rightarrow \sigma_4 \end{array} \right\}$   $\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{22} \rightarrow \sigma_2 \\ \sigma_{31} \rightarrow \sigma_5 \end{array} \right\}$   $\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{33} \rightarrow \sigma_3 \\ \sigma_{12} \rightarrow \sigma_6 \end{array} \right\}$

que se resume así

|        |    |    |    |       |       |       |
|--------|----|----|----|-------|-------|-------|
| vieja: | 11 | 22 | 33 | 32,23 | 31,13 | 12,21 |
| nueva: | 1  | 2  | 3  | 4     | 5     | 6     |

Hay 9 ecuaciones como la (1), lo cual implica  $9 \times 9 = 81$  Constantes elásticas. Como  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  y  $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ , quedan sólo 6 componentes del tensor  $\sigma_{ij}$  que son diferentes y las constantes se reducen a  $6 \times 6 = 36$ .

Para cristales cúbicos isotrópicos se puede probar que quedan solamente 2 constantes elásticas independientes:  $C_{11}$  y  $C_{12}$ .

En la práctica, se usa la nomenclatura siguiente:

$$\left. \begin{array}{l} C_{11} = \lambda \\ C_{44} = \mu \end{array} \right\} \text{Constantes de Lamé; } C_{44} = 1/2 (C_{11} - C_{12})$$

$$C_{11} = \lambda + 2\mu$$

$$E = \text{módulo de Young} = \frac{\mu (3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad (2)$$

$$K = \text{módulo de compresión} = \lambda + 2/3\mu$$

$\mu$  = módulo de corte; también se lo designa por G

$$\nu = \text{relación de Poisson} = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$$

#### I.4 Energía elástica

Supongamos un sólido lineal, que cumple la ley de Hooke

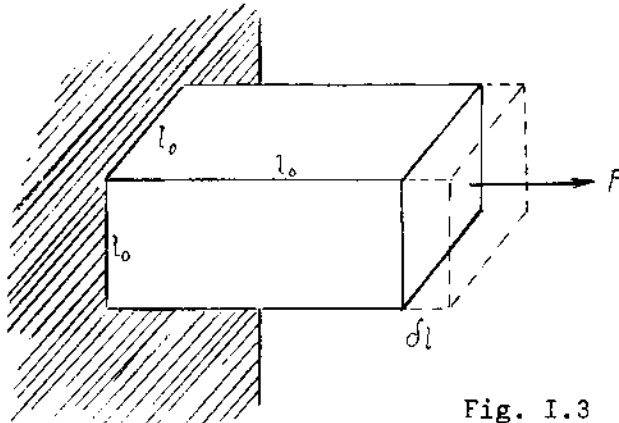
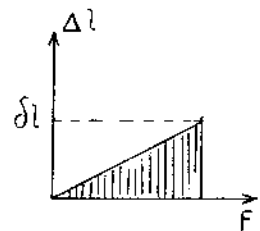


Fig. I.3



Sea una tensión uniaxial, cuya fuerza varía lentamente desde cero hasta  $F$ , mientras  $l$  varía desde  $l_0$  hasta  $l_0 + \delta l$ .

Trabajo efectuado = energía almacenada

$$W = 1/2 F \delta l \quad (3)$$

$$\sigma = \frac{F}{l_0^2} ; \quad \epsilon = \frac{\delta l}{l_0} \quad (4)$$

Con las relaciones (3), la (2) se escribe:

$$W = 1/2 \sigma l_0^2 \epsilon l_0 = 1/2 \sigma \epsilon V$$

Por unidad de volumen la energía almacenada es

$$W' = 1/2 \sigma \epsilon = 1/2 \frac{\sigma^2}{E} = 1/2 \epsilon^2 E \quad (5)$$

Para corte puro, la energía elástica es

$$W' = 1/2 \gamma^2 \mu, \text{ donde } \gamma \text{ son las componentes de deformación de corte definidas en I.3}$$

### I.5 Coordenadas polares cilíndricas

Para estudiar el campo de tensiones alrededor de los defectos lineales, resultan más adecuadas las coordenadas cilíndricas  $r, \theta, z$  que las cartesianas, porque ese problema elástico tiene simetría cilíndrica.

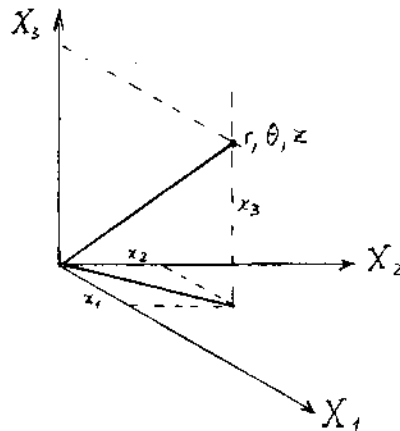


Fig. I.4

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cos \theta \\ x_2 &= r \sin \theta \\ r^2 &= x_1^2 + x_2^2 \\ x_3 &= z \end{aligned} \quad (6)$$

#### I.5.1 Deformaciones $\epsilon_{ij}$

En función de los corrimientos  $u_i$ , son las siguientes:

$$\begin{aligned} \epsilon_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r} \\ \epsilon_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \epsilon_{rz} &= \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ \epsilon_{\theta\theta} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} - \frac{u_r}{r} \\ \gamma_{r\theta} = 2\epsilon_{r\theta} &= \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \\ \gamma_{\theta z} = 2\epsilon_{\theta z} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \end{aligned} \quad (7)$$

### I.5.2 Tensiones $\sigma_{ij}$

Se definen de acuerdo con la figura I.5

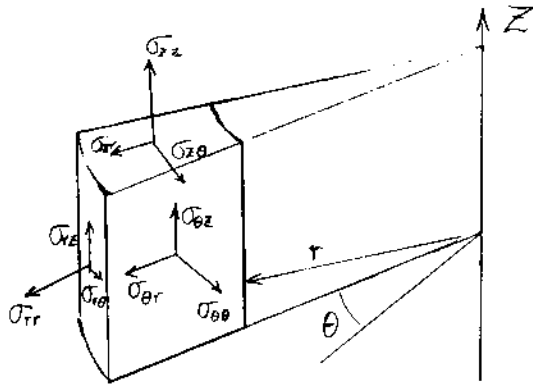


Fig. I.5 Componentes de la tensión

### I.6 Dislocaciones de hélice

El tratamiento elástico de estas dislocaciones no es válido en el centro mismo de la dislocación porque las expresiones de la tensión divergen para  $r$  (distancia radial desde la línea de dislocación) tendiendo a cero. Sin embargo, como el sólido real no es continuo sino cristalino, la tensión no puede variar en el espacio entre dos átomos y la dislocación se puede tratar como "vacía" en el núcleo, en un entorno de magnitud  $b$ .

Consideremos la dislocación siguiente

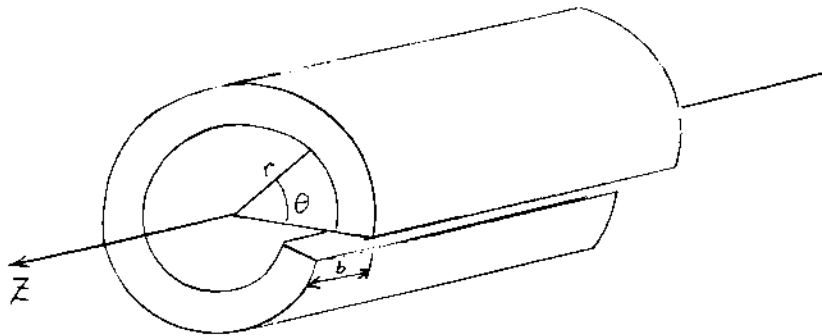


Fig. I.6 Dislocación de hélice

Desplazamiento  $u_z$  entre  $\theta = 0$  y  $\theta = 2\pi$  es  $b$ .  
Para un  $\theta$  cualquiera,

$$u_z = \frac{\theta}{2\pi} b ; u_r = 0 ; u_\theta = 0$$

$$\gamma_{\theta z} = 2\epsilon_{\theta z} = \frac{b}{2\pi r} \quad (\text{ver fórmulas del I.5.1})$$

$$\sigma_{\theta z} = \mu \gamma_{\theta z} = \frac{\mu b}{2\pi r} \quad (\text{Ley de Hooke}) \quad (8)$$

No hay componentes radiales de tensión  $\sigma_{rj}$ , ni dependencia de  $\theta$  (simetría radial)

### I.6 Dislocaciones de borde

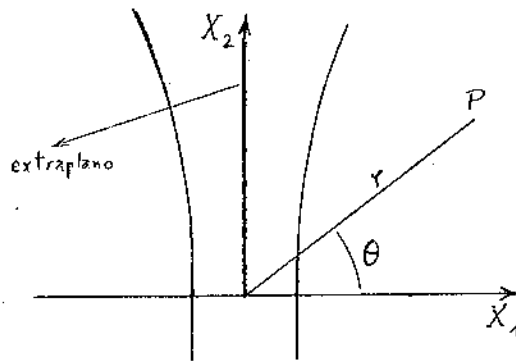


Fig. I.7 Dislocación de borde

El campo de tensión de la dislocación de borde es más complejo. La circuitación de  $2\pi b$  alrededor del origen da  $b$ , de modo que intuimos la existencia de un factor  $\frac{b}{2\pi r}$  en las expresiones de  $\epsilon$  y  $\sigma$ .

La simetría cilíndrica no existe, porque en el semiplano superior tenemos compresión y en el inferior tensión

$$\sigma \text{ debe ser de la forma } \frac{b}{2\pi r} \cdot f(\theta)$$

Se puede demostrar que las expresiones de la tensión son

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -D \frac{\sin \theta}{r} \quad ; \quad \sigma_{r\theta} = D \frac{\cos \theta}{r} \quad (9)$$

donde 
$$D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$$

Empleando las fórmulas del cambio de coordenadas (ver I.5), se obtiene, en coordenadas cartesianas:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= -D \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{22} &= D \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{12} &= D \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \end{aligned} \quad (10)$$

Observaciones:

$\sigma_{11} < 0$  para  $y > 0$  (compresión en el semiplano superior)

$\sigma_{11} > 0$  para  $y < 0$  (tracción en el semiplano inferior)

### I.7 Energía elástica de dislocaciones

De acuerdo con I.4,

$$W = \frac{1}{2} \sigma \epsilon V = \frac{1}{2} \int_{vol} \sigma \epsilon dV \quad (11)$$

Considerando una dislocación de hélice y reemplazando en (11) las (8)

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{2} \int_{vol} \sigma_{\theta z} \epsilon_{\theta z} dV = \frac{1}{2} \int_{r_0}^{r_1} \frac{b}{2\pi r} \frac{\mu b}{2\pi r} 2\pi r dr = \\ &= \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{r_1}{r_2} \end{aligned} \quad (12)$$

La integración se ha efectuado sobre cilindros sucesivos como el de la figura I.8.

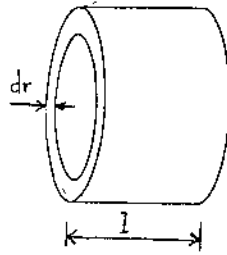


Fig. 1.8

Por unidad de línea, la energía es

$$U = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{r_1}{r_0} \quad (13)$$

Si tomamos  $r_0 \simeq b$  y  $r_1 \simeq 10^5 b$ ,  $\ln 10^5 \simeq 5 \times 2,3 = 11,5 \simeq 4\pi$

Con estas aproximaciones, la (13) resulta

$$U \simeq \mu b^2 \quad (14)$$

BIBLIOGRAFIA

- |                     |                                                                                                                        |
|---------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| COTTRELL A. H.,     | The Mechanical Properties of Matter.<br>Dislocations and Plastic Flow in Crystals<br>Theoretical Structural Metallurgy |
| HALLIDAY & RESNICK, | Physics for Scientists and Engineers.                                                                                  |
| KITTEL C. ,         | Introduction to Solid State Physics.                                                                                   |
| LOVE A. E. H.,      | Tratado de Elasticidad.                                                                                                |
| NYE M.A. ,          | Physical Properties of Crystals.                                                                                       |
| PEARSON C.E.,       | Theoretical Elasticity                                                                                                 |
| REED - HILL R.E.,   | Physical Metallurgy Principles.                                                                                        |
| ZIMAN ,             | Electrons and Phonons                                                                                                  |
|                     | Scientific American                                                                                                    |
|                     | Science and Technology                                                                                                 |