

C.N.E.A. 101 102	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO 2	AÑO 1974

01.74.13

PMM/A-141

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

DECIMO CURSO PANAMERICANO DE METALURGIA

Dentro del Programa Multinacional de Metalurgia
(Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico-OEA)

"DEFECTOS EN CRISTALES"

Drs. E.Savino y M. Victoria

Gerencia de Tecnología
Buenos Aires-Argentina

-1974-

DEFECTOS EN CRISTALES

Una posible clasificación de los defectos presentes en un metal, es la siguiente :

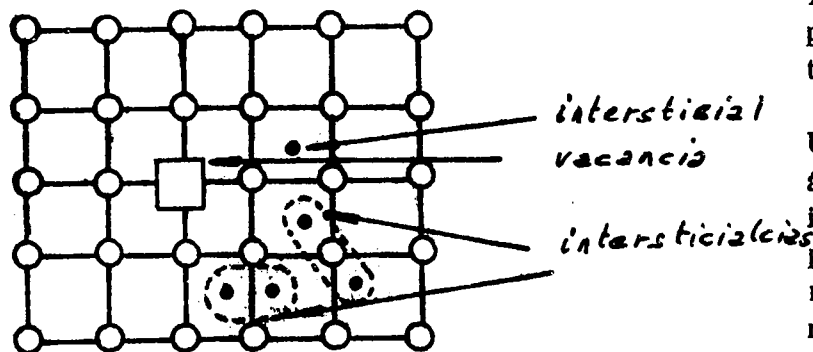
	(Fonones
	(Excitones
	(Electrones + agujeros
Defectos puntuales	(Vacancias
	(Intersticiales (Interstitialcia)
	(Crowdion
	(Impurezas (Intersticiales, sub-
	(titucionales)
Defectos lineales	Dislocaciones
Defectos superficiales	(Bordes de grano, interfases
	(Fallas de apilamiento
	(Superficie del cristal
Defectos en volumen	(Precipitados
	(
	(Displacement spikes

El fonón es la partícula asociada a la cuantificación de los modos de vibración de la red. Se caracteriza por su energía $h\nu$ (ν es la frecuencia de vibración), la dirección de propagación y su polarización (onda transversal o longitudinal). El espectro de fonones puede ser calculado en principio si se conocen las fuerzas de cohesión en el cristal.

Un excitón es un electrón en un estado excitado. El par electrón + agujero se forma al pasar un electrón de un estado a otro dentro de una banda, dejando un "agujero" en su estado inicial. En metales, ambos defectos tienen vida media muy corta.

El resto del curso lo dedicaremos a estudiar los restantes tipos de defectos.

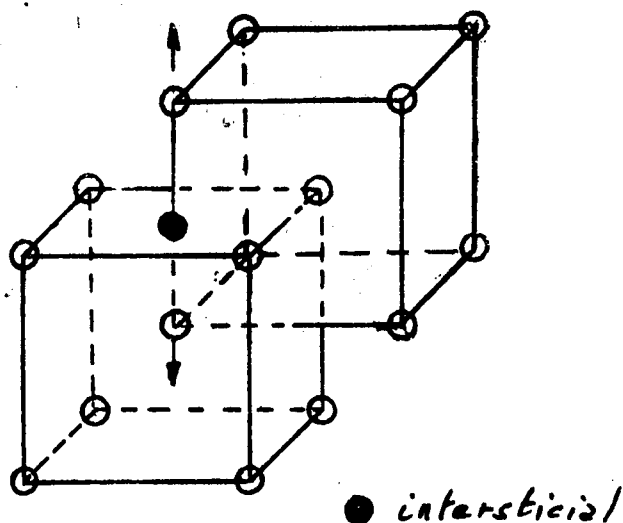
Defectos puntuales



Los distintos tipos de defectos puntuales se indican esquemáticamente en la figura 1.

Una vacancia es la falta de un átomo de un sitio de la red que idealmente debería estar ocupado, un intersticial es un átomo que ocupa una posición que no corresponde a un sitio normal de la red.

Figura 1



Una intersticial se produce al combinarse dos intersticiales para ocupar posiciones simétricas respecto a una posición normal en la red.

En cristales cc, los intersticiales ocupan los centros de caras (o lo que es lo mismo, el centro de las aristas del cubo) en los llamados "agujeros octaédricos" (ver figura 2). La presencia del intersticial deforma la red cúbica según indica la figura.

Figura 2

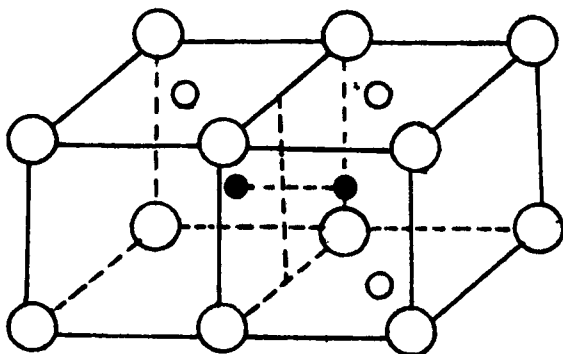


Figura 3

En la red ccc los agujeros intersticiales son por lo general muy pequeños y las configuraciones energéticamente favorables consisten en intersticiales como la indicada en la figura 3 ("dumb-bell intersticial") con la posición centro de cara $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ se asocia no un único átomo sino un par de ellos desplazados de la posición de equilibrio.

Un crowdión puede imaginarse como un intersticial que se ha extendido a lo largo de una línea de sitios atómicos. Es decir, en una dirección cristalográfica dada, en el espacio normalmente ocupado por n átomos, hay $n + 1$ átomos. Es posible que este defecto sea estable solo dinámicamente.

En cuanto a las impurezas, estas consisten en la presencia de átomos de una sustancia B distinta de aquella de la matriz A. Estos átomos pueden ocupar posiciones de la red de A (substitucionales) o lugares intersticiales.

Defectos en equilibrio térmico

Toda vez que formamos un defecto en el cristal, varía la energía libre de éste en una cantidad ΔG_f . Como

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

esto significa que la producción del defecto está asociada con una variación de entalpía ΔH_f y una variación de entropía ΔS_f .

Analicemos el caso de una vacancia. Para formarla llevamos un átomo del interior del cristal a la superficie. Si suponemos que se trata de una red cúbica plana, según indica la figura 4, hemos pasado de una situa-

ción en la que el átomo tiene cuatro vecinos próximos (interior del cristal) a una en la que solamente tiene dos (superficie), es decir, hemos roto dos ligaduras sobre un total de cuatro.

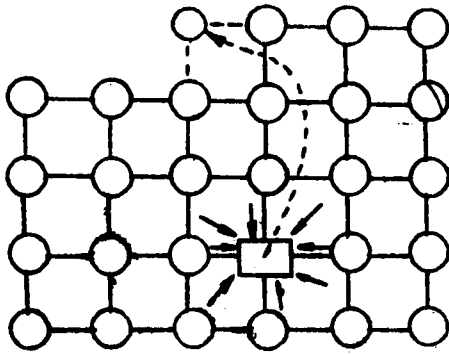


figura 4

el volumen del cristal se reduce en una cantidad δV_f , el llamado volumen de relajación.

Un intersticial se puede crear llevando un átomo de la superficie del cristal a su interior, en una posición intersticial. Es necesario para ello producir una dilatación local de la red, a la que corresponden energías elásticas elevadas. La entalpía de formación de un intersticial es por ello mucho más elevada que la de una vacancia.

Para mover una vacancia, es necesario intercambiarla con un átomo vecino. Esto exige un cierto trabajo ya que, como se indica en la figura 5, para intercambiar la vacancia con el átomo 1 es necesario desplazar los átomos A y B de sus posiciones de equilibrio. Es decir que para moverse la vacancia debe sobrepasar una cierta barrera de potencial, cuyo valor es la entalpía de movimiento ΔH_m .

La energía necesaria para formar la vacancia, es entonces aproximadamente igual a la utilizada para evaporar un átomo de la superficie, o sea, la energía de sublimación de cristal.

Esta evaluación da una sobreestimación de la energía de formación, ya que se desprecia la energía elástica ganada por la red al relajar los átomos que rodean la vacancia. El volumen de la vacancia resulta menor al volumen atómico y por cada vacancia creada

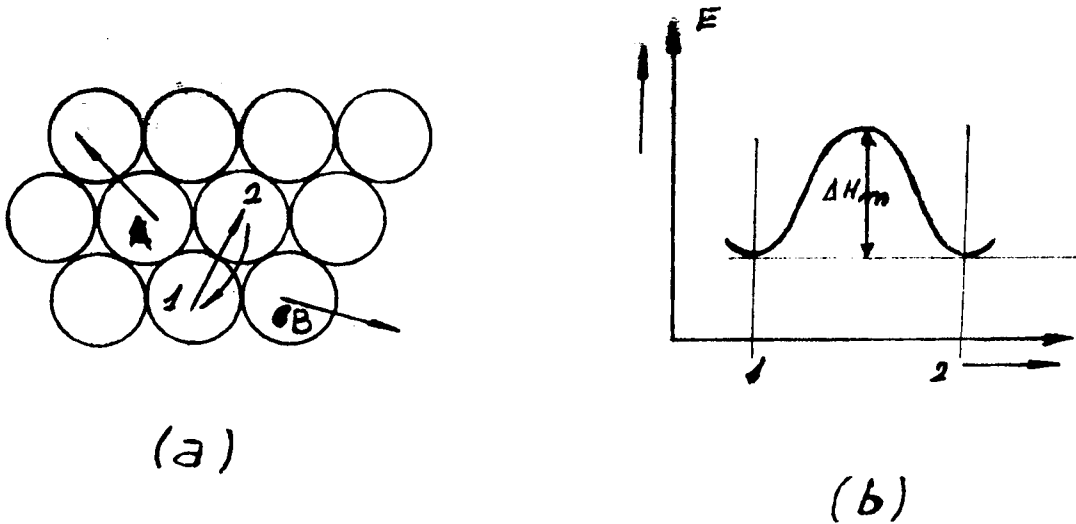


Figura 5

El proceso de salto o movimiento se realiza con la ayuda de las vibraciones térmicas de la red. Puede probarse que la probabilidad de que una vacancia pase del estado 1 al 2 (figura 5.b) a través de la barrera es proporcional a

$$e^{-\Delta H_m / kT} \quad (1)$$

donde k es la constante de Boltzman y T la temperatura absoluta.

La frecuencia con que la vacancia intenta moverse está dada por la frecuencia de las vibraciones térmicas. La frecuencia más alta que se propaga en la red, que corresponde a una longitud de onda del orden de la distancia interatómica, es la llamada frecuencia de Debye ν_D .

$$\nu_D \approx 10^{13} \text{ seg.}^{-1}$$

La frecuencia de salto de una vacancia puede pensarse como el producto del número de veces que la vacancia intenta sobrepasar la barrera de

potencial multiplicada por la probabilidad de que el intento tenga suficiente energía, dada por (1). La frecuencia de salto resulta entonces

$$\nu = \nu_D \exp \left\{ - \frac{\Delta H_m}{kT} \right\}$$

La tabla I muestra las distintas energías asociadas con estos defectos en el caso del Cu.

Tabla I

Vacancia	$\Delta H_f (eV)$	$\Delta H_m (eV)$
	1	1
Divacancia	1,6	0,4
Intersticial	4	0,1

Una divacancia está formada por dos vacancias vecinas próximas. Su energía de formación es menor que la suma de las energías de formación de dos vacancias aisladas, ya que hay menos ligaduras a romper al formar una segunda vacancia en la vecindad de una dada. Esto hace que la divacancia sea estable.

Concentración de equilibrio de defectos

Para que exista una situación de equilibrio en el cristal es necesario tener un mínimo en la energía libre

$$G = H - TS$$

(2)

En el caso de introducir defectos puntuales, es necesario suministrar energía para producirlos, pero simultáneamente se aumenta la entropía

pía del cristal. Si esta variación de entropía es suficiente para compensar la variación de entalpía en (2), es posible obtener un mínimo en G .

Analicemos el caso de vacancias, calculando la variación de energía libre ΔG cuando se introducen n_v vacancias en un cristal que contiene N sitios. Tendremos dos tipos de contribución. Una variación

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T \Delta S_f \quad (3)$$

da una variación total $n_v \Delta G_f$ para la energía libre de formación. Pero en (3) no se ha considerado la variación configuracional de entropía, dada por

$$\Delta S = k \ln W \quad (4)$$

donde W es el número de configuraciones posibles.

La variación total de energía libre es

$$\Delta G = n_v \Delta G_f - T \Delta S \quad (5)$$

Para obtener ΔS , es necesario en (4) calcular el número de configuraciones W ; esto es el número de formas en que es posible disponer vacancias en N sitios. Hay así N sitios para colocar la primer vacancia ($N-1$) para colocar la segunda, ($N-2$) para colocar la tercera, y ($N-n_v+1$) para colocar la última. Pero las permutaciones entre las vacancias introducidas, no cambia una configuración dada y hay $n_v!$ permutaciones. Resulta así

$$W = \frac{N(N-1)(N-2) \dots (N-n_v+1)}{n_v!} = \frac{N!}{(N-n_v)! n_v!}$$

Para calcular ΔS usamos la aproximación de Stirling :

$$\ln m! = m \ln m - m$$

con la que resulta

$$\ln W = -(N - m_v) \ln \left(1 - \frac{m_v}{N}\right) - m_v \ln \left(\frac{m_v}{N}\right)$$

o bien, si $m_v \ll N$

$$\ln W \approx m_v - m_v \ln \frac{m_v}{N}$$

de donde

$$\Delta G = m_v \Delta G_f - kT m_v \left[1 - \ln \frac{m_v}{N}\right]$$

La condición de equilibrio es de que

$$\left. \frac{\partial \Delta G}{\partial m_v} \right|_{T = \text{cte}} = 0$$

con la que resulta

$$\frac{m_v}{N} = C_v = \exp \left\{ - \frac{\Delta G_f}{kT} \right\} = \exp \frac{\Delta S_f}{k} \exp \left(- \frac{\Delta H_f}{kT} \right)$$

y como $\exp \frac{\Delta S_f}{k} \approx 1$ se obtiene para la concentración de equilibrio el valor

$C_v = \frac{m_v}{N} \approx \exp - \frac{\Delta H_f}{kT}$	Concentración de vacancias
--	-------------------------------

De forma similar se puede calcular la concentración de intersticiales.

Si se toma como ejemplo el caso del Cu, se obtienen para la concentración los valores indicados en la Tabla II.

Tabla II

T [°K]	300	800	1300
Vacancias	10^{-17}	$6 \cdot 10^{-7}$	$1,3 \times 10^{-4}$
Intersticiales	10^{-67}	10^{-25}	10^{-15}

La concentración de intersticiales en equilibrio es despreciable. En cambio, a temperaturas próximas al punto de fusión, se tiene una concentración de vacancias de aproximadamente 1 cada 10.000 sitios. Una fracción del orden del 1% de estas consisten en divacancias.

Migración de defectos

Si un defecto se halla en una posición de equilibrio por vibraciones térmicas tiene cierta probabilidad de saltar a las posiciones de equilibrio primeras vecinas de ésta. Si movemos el defecto muy lentamente de una posición a otra la energía libre del cristal va a pasar por un máximo en una configuración intermedia y luego retornar a su valor anterior. El exceso de energía en este máximo es la energía libre de activación para migración : F_m . En condiciones normales ésta va a ser suministrada por el cristal a través de fluctuaciones al azar de la densidad local de energía vibracional. Suponiendo que esta energía obedece a una distribución de Maxwell-Boltzmann la probabilidad de que un exceso de energía F_m se halle disponible está dada por :

$$\exp(-F_m/kT)$$

Este es el cociente de la probabilidad que el defecto se halle en un máximo de la barrera con la probabilidad que permanezca en el valle. Contrariamente a lo supuesto por autores que han criticado el uso de la distribución de Maxwell en una configuración de no equilibrio, en la cual el tiempo de permanencia del defecto es pequeño comparado con las vibraciones propias de la red, esta aproximación solo implica que de las múltiples maneras de pasar de una posición de equilibrio a la siguiente la de mayor probabilidad es a través de un punto de ensilladura.

Entonces el F_m que nos interesa es el del correspondiente a este punto. Si la frecuencia de oscilación del defecto en su posición de equilibrio es ν en un intervalo dt de tiempo cumple νdt períodos y el número de saltos dn es :

$$dn = \nu \exp(-F_m/kT) dt$$

De allí la frecuencia de salto dn/dt resulta por un simple pasaje de términos.

La energía libre F_m puede expresarse como:

$$F_m = U_m - T\Delta S_m$$

U_m es la diferencia entre la energía potencial del cristal con el defecto en el punto de ensilladura y la correspondiente al defecto en equilibrio. ΔS es la diferencia de entropía en los dos estados debida al efecto de la posición del átomo sobre las frecuencias de vibración de la red.

Vacancias, modelos

Vimos en una sección anterior que el número de vacancias en equilibrio en una red dependía de la energía potencial de formación de este defecto. Discutamos algunas aproximaciones al cálculo de ésta. Si el número de coordinación del cristal es z una primera aproximación va a estar dada por la energía necesaria para romper z uniones, separando un átomo de su ubicación en la red y restablecer $z/2$ para ubicarlo en la superficie del cristal. O sea:

$$U_f^v = z w - \frac{z}{2} w$$

donde w es la energía por unión interatómica. Podemos obtener una aproximación de este valor a través del calor latente de sublimación por átomo L_s . Al sublimar un cristal se rompen $zN/2$ uniones (si N es el número de átomos), la energía liberada va a ser:

$$L_s = NL_s = \frac{zN}{2} w$$

Comparando las expresiones anteriores resulta: $U_f^v = L_s$

Este valor es un límite superior para la energía de formación, habría que considerar la energía de relajamiento, que incluye la posibilidad que se formen nuevos vínculos en la red.

Otro modelo considera al cristal como un continuo rígido. Al crear una vacancia se aumenta el volumen porque un átomo va a la superficie, esto implica un aumento del área superficial del sólido.

La energía de formación de este defecto va a estar dada por el producto de la energía por unidad de superficie por este aumento de superficie

$$u_f^v = (S^v - S) \gamma$$

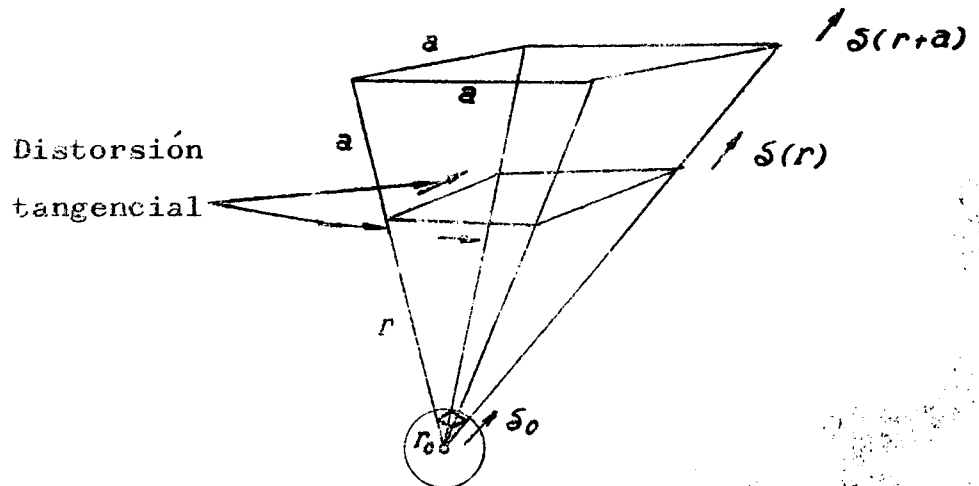
$S^v - S$: superficie debida a un átomo extra en la superficie.

Un tercer modelo consiste en calcular la distorsión provocada en un medio elástica isotrópico infinito por un centro de dilatación en el origen. La vacancia es representada por una cavidad de radio r_0 sobre la cual la tensión superficial produce un desplazamiento δ_0 . Este modelo permite describir cualitativamente una vacancia con un δ_0 negativo o una impureza con radio mayor que el parámetro de la red, al igual que un intersticial, con δ_0 positivo.

Si una superficie a distancia r del origen se desplaza radialmente una cantidad $\delta(r)$, una ubicada en $r+a$ va a desplazarse:

$$\delta(r+a) = \delta(r) + a \frac{d}{dr} \delta(r)$$

Por lo tanto la distorsión radial va a estar dada por $\frac{d}{dr} \delta(r)$



Para determinar la distorsión tangencial vemos que una superficie esférica en r se desplaza a la posición $r + \delta r$, por lo tanto la circunferencia varía su longitud en :

$$\Delta l = 2\pi[r + \delta(r)] - 2\pi r = 2\pi \delta(r)$$

y la distorsión resulta :

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{2\pi \delta(r)}{2\pi r} = \frac{\delta(r)}{r}$$

Como la distorsión total implica un cambio de forma sin cambio de volumen obtenemos la relación entre las distorsiones:

$$\text{distorsión radial} = -2 \times \text{distorsión tangencial}$$

Obteniéndose la ecuación diferencial : $\frac{d}{dr} \delta(r) = -2 \frac{\delta(r)}{r}$

Cuya solución es : $\delta(r) = \delta_0 \frac{r_0^2}{r^2}$

δ_0 : distorsión a la distancia r_0 . Según el modelo δ_0 se relaciona con la tensión superficial o con las fuerzas generadas por el defecto en sus vecinos cercanos en un modelo discreto.

Modelos más refinados se realizan en una aproximación discreta del cristal; entre estos gran cantidad de cálculos se han realizado en cobre utilizando un potencial de interacción entre pares de átomos. Estos cálculos, aún cuando mucho más sofisticados que los anteriores y proveen no sólo la energía sino también la distorsión provocada en los vecinos del defecto, no han podido hasta el momento incluir la contribución de volumen a la energía, aún cuando publicaciones recientes parecen probar que esta no es importante desde el punto de vista configuracional.

Los órdenes de energía de formación calculados y medidos para vacancias en algunos materiales se presentan en la tabla III.

TABLA III

Propiedades de vacancias y divacancias en f.c.c.

C =calculado, E =experiencias de equilibrio, Q =templado

	Al	Cu	Ag	Au
U_i^* (eV)	C Q 0.77 ± 0.03 (20, 21, 22, 23, 40) E 0.75 ± 0.07 (9, 44)	C 1.2 (1, 2, 3, 4, 5, 35, 36) Q 1.1 ± 0.1 (29, 37, 38)	C 1.1 (35, 36) Q 1.08 ± 0.04 (18, 19, 39)	C 1.0 (35, 36) Q 0.98 ± 0.03 (17, 34)
U_i^{**} (eV)	C 1.3 ± 0.1 Q $2U_i^* - 0.17$ (40)	C $2U_i^* - 0.15$ (34) Q $2U_i^* - (0.12 \pm 0.05)$ (34)	C 2.1 (34) Q 1.8 ± 0.05 (19, 24)	C 1.85 (35, 36) Q 1.86 ± 0.04 (17)
U_m^* (eV)	C Q 0.63 ± 0.05 (20, 21, 40)	C 1.0 (2, 3, 7, 35, 36) Q 1.08 ± 0.03 (30, 34)	C 0.86 (35) Q 0.85 ± 0.05 (19, 35, 36, 42)	C Q 0.83 ± 0.03 (17, 34)
U_m^{**} (eV)	$U_m - U_i^* = 0.72$ C Q 0.46 (40)	$U_m - U_i^* = 0.94$ C 0.6 ± 0.4 (8, 3) Q 0.67 ± 0.05 (33, 34)	$U_m - U_i^* = 0.82$ C 0.52 (34) Q 0.57 ± 0.03 (19, 24, 34, 42, 43)	$U_m - U_i^* = 0.85$ C Q 0.67 ± 0.04 (25, 17, 34)
U_{ad} (eV)	1.48 ± 0.1 (10, 11, 41)	2.11 ± 0.02 (13)	1.91 ± 0.01 (14)	1.81 ± 0.02 (16)
$\Delta\rho_0$ for 1 % ($\mu\Omega$ cm)	E + Q 2.2 ± 0.7 (26, 20, 21, 27)	C 1.6 (6, 34)	C 1.7 (34) E + Q 1.3 ± 0.7 (9, 18)	C 1.7 (34) E + Q 1.5 ± 0.3 (15, 17)
$\frac{\Delta a}{a}$ for 1 %		C $-(0.11 \pm 0.05) \times 10^{-2}$ (4, 5)		E + Q $-(0.18 \pm 0.05) \times 10^{-2}$
$\frac{\Delta l}{l}$ for 1 %		C $+(0.22 \pm 0.05) \times 10^{-2}$ (4, 5)		E + Q $+(0.15 \pm 0.05) \times 10^{-2}$ (17, 28, 15)

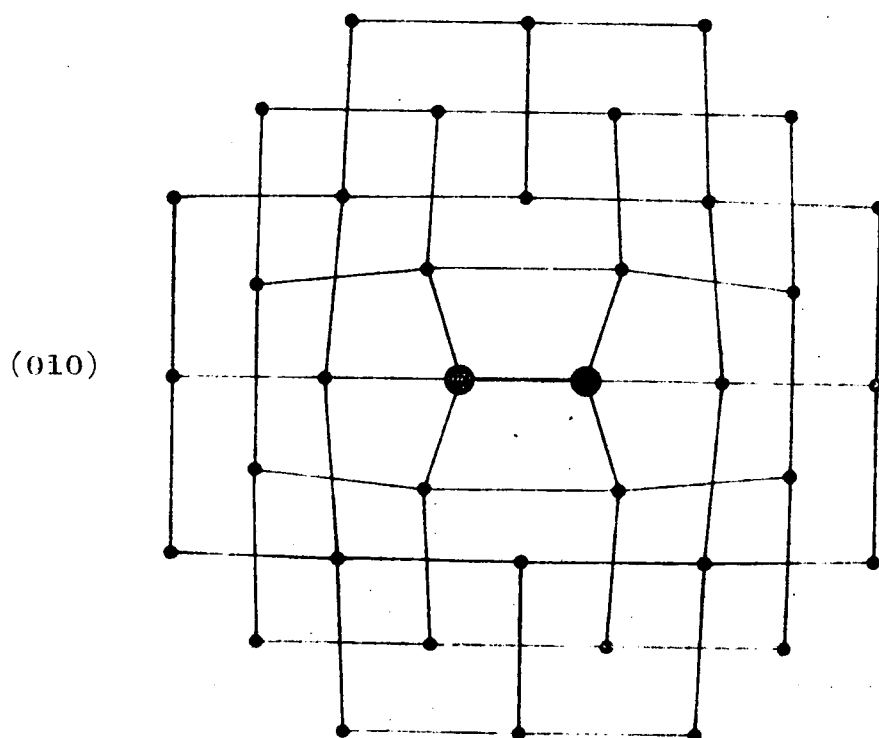
- (1) Huntington & Seitz (1942a) (12) Simmons & Balluffi (1962b) (23) Panseri & Frederighi (1958) (34) Seegar & Schumaker (1963)
(2) Huntington & Seitz (1942b) (13) Kuper *et al.* (1955) (24) Palmer & Koehler (1958) (35) Schottky, Seegar & Schmid (1964a)
(3) Lomer (1959) (14) Tomizuka & Sonder (1956) (25) de Jong & Koehler (1963) (36) Schottky, Seegar & Schmid (1964b)
(4) Tewordt (1958) (15) Simmons & Balluffi (1962a) (26) Simmons & Balluffi (1960a) (37) Budin *et al.* (1963)
(5) Seegar & Mann (1960) (16) Makin, Rowe & Le Claire (1957) (27) Simmons & Balluffi (1960b) (38) Lucasson *et al.* (1963)
(6) Blatt (1957) (17) Bauerle & Koehler (1957) (28) Takamura (1961) (39) Quéré (1960)
(7) Johnson & Brown (1962) (18) Doyama & Koehler (1960) (29) Airoidi, Bachella & Germagnoli (1959) (40) Frederighi (1965)
(8) Bartlett & Dienes (1953) (19) Doyama & Koehler (1962) (30) Schüller *et al.* (1961) (41) Lundy & Murdock (1962)
(9) Simmons & Balluffi (1960c) (20) de Sorbo & Turnbull (1959a) (31) Gibson *et al.* (1960) (42) Quéré (1961)
(10) Spokas & Slichter (1959) (21) de Sorbo & Turnbull (1959b) (32) Benneman (1961a, b) (43) Cuddy & Machlin (1962)
(11) Lundy & Murdock (1961) (22) Bradshaw & Pearson (1957) (33) A. Seeger *et al.* (1963) (44) Feder & Nowick (1958)

Intersticiales, modelos

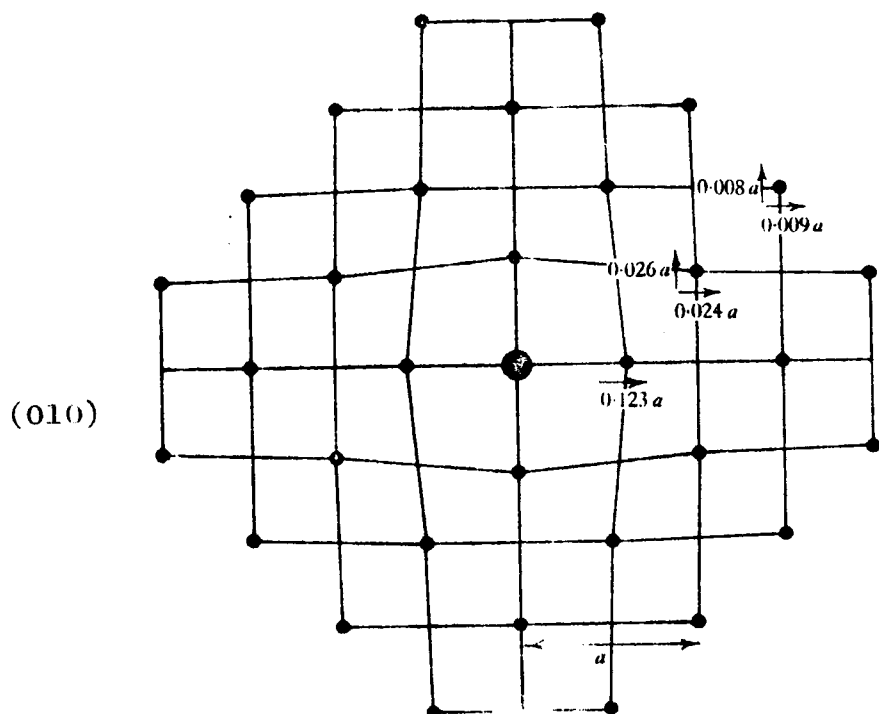
Los modelos del intersticial son similares a los de la vacancia discutidos en la sección anterior. La diferencia es que ahora asumimos que un átomo es sacado de la superficie y depositado en el interior del cristal. En el caso de la vacancia la distorsión elástica sólo contribuye del orden de .1 eV a la energía de formación. Como la distorsión provocada por el intersticial es un orden de magnitud mayor que la de la vacancia la energía acumulada va a ser dos órdenes de magnitud en este modelo, o sea aproximadamente 10eV. Este valor se demuestra experimental y teóricamente que es exagerado, pero la principal contribución a la energía continúa proviniendo de este término.

Aún cuando se han realizado numerosos trabajos teóricos y experimentales en el tema aún no se posee la certeza de la configuración de equilibrio del intersticial en cobre (f.c.c.). Las configuraciones consideradas estables son, ordenadas de supuesta mayor estabilidad a menor:

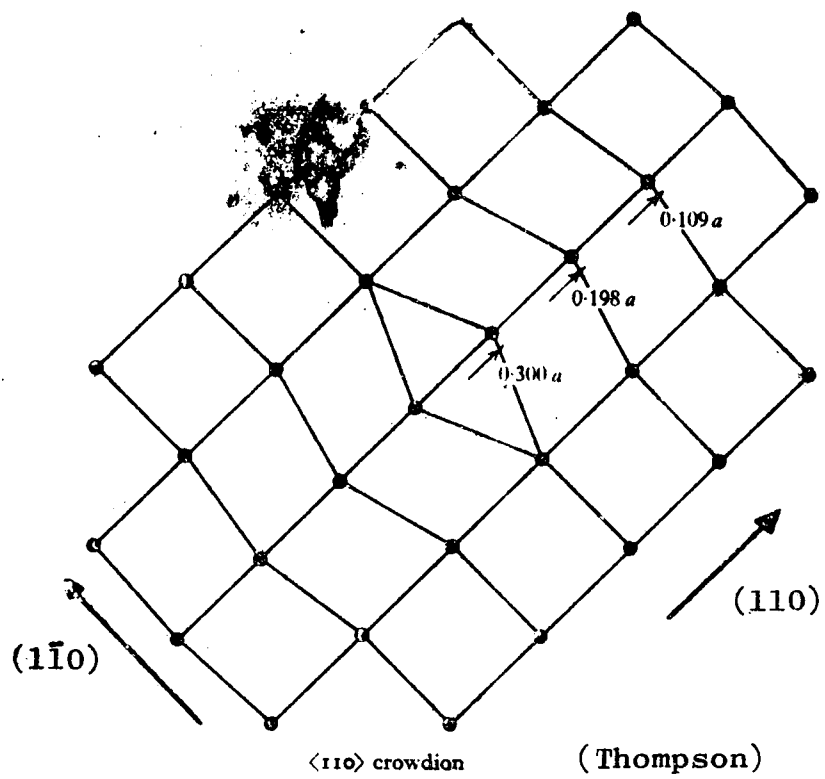
- i) intersticialidad ("dumb bell interstitial") en la dirección (100) : el átomo extra se acomoda compartiendo espacio con otro de la red, el eje del par se encuentra en la dirección (100).
- ii) intersticial centrado en el cuerpo, ubicado en la posición octaedral ($1/2, 0, 0$), que es el espacio abierto más grande en la red f.c.c.
- iii) crowdion : la distorsión debida al átomo extra es compartida por un gran número de átomos en la dirección compacta (110) de la red.



(100)
 Intersticialidad (100) Dumb bell (Thompson)



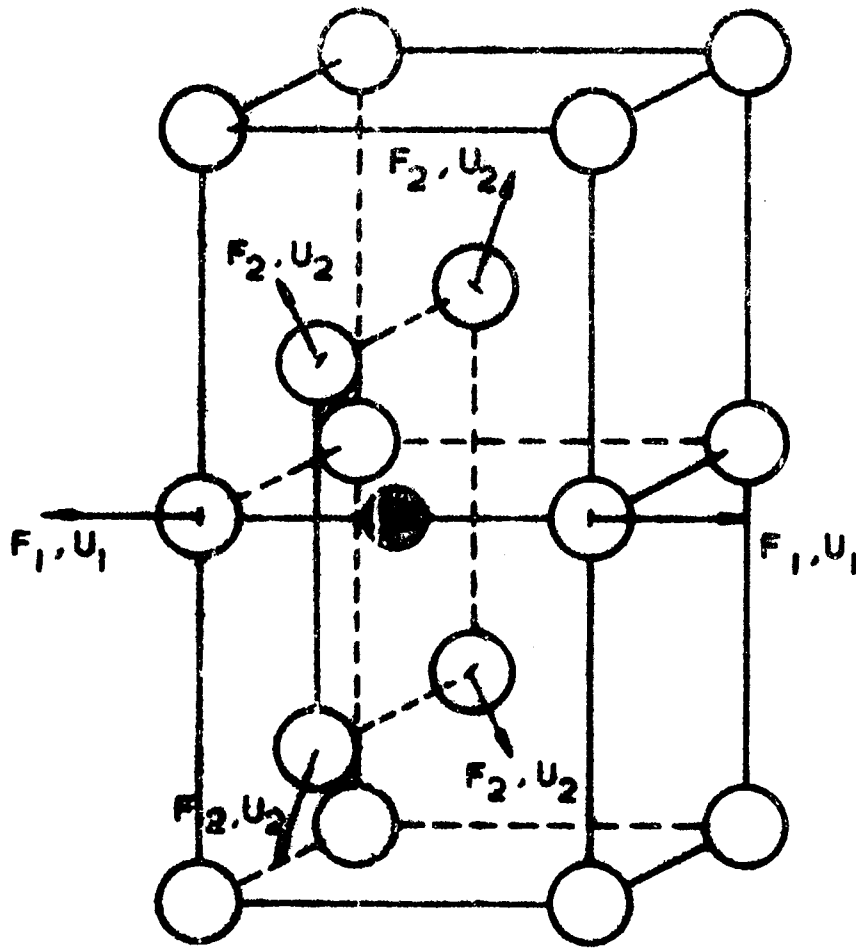
(100)
 Intersticial centrado en el cuerpo (Thompson)



Impurezas

Las impurezas son átomos extraños a la red que se ubican en posiciones sustitucionales o intersticiales. Si el tamaño de la impureza es menor que el de los átomos de la red esta generalmente se ubica en una posición intersticial. La presencia de estos átomos extraños aún en cantidades ínfimas determina gran parte de las propiedades del material; para dar un ejemplo la presencia de carbono en la fase α del hierro (b.c.c.) es fundamental para la existencia de las fases en que transforma a la aleación y dan origen al aprovechamiento tecnológico.

En una red cúbica centrada en el cuerpo existen dos tipos de intersticios, los octaedrales ubicados en la posición $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ y los tetraedrales en la posición $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$. Aún cuando el volumen correspondiente al segundo tipo de intersticio es mayor que el primero existe la certeza que el C en Fe se halla en la posición octaedral. Este surge de la composición de mediciones de fricción interna y el parámetro de la red en la transformación martensítica. La distinción no es tan clara en otros sistemas similares como N y O en Fe, V, Nb y Ta. Aún cuando es creencia general que estos intersticiales son octaedrales no existe evidencia experimental ni teórica suficiente para confirmar esta suposición, especialmente para el caso del O.



Cálculo de la distorsión de la red debido a un intersticial octaedral.

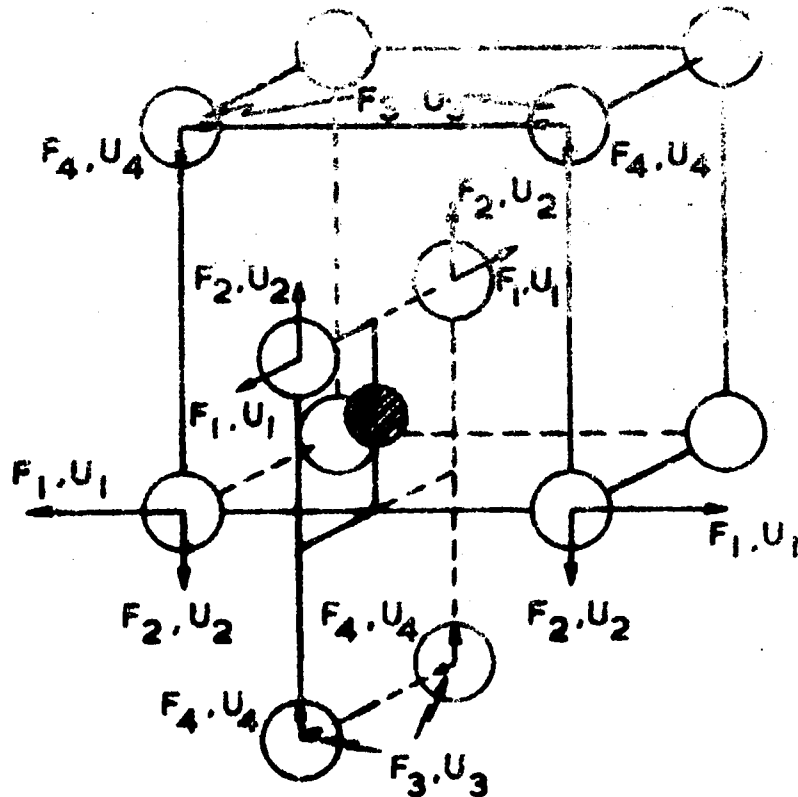
$$A = 2 F_1 a$$

$$B = 4 F_2 a$$

SYSTEM	U_1 [a]	U_2 [a]	F_1 [eV/a]	F_2 [eV/a]	E_f [eV]	A [eV]	B [eV]
Nb - N	·3143	·0019	6·410	1·097	2·02	12·82	4·39
Nb - O	·2823	·0127	5·907	1·223	1·73	11·81	4·89
Ta - N	·3294	·0141	8·200	1·775	2·80	16·40	7·10
Ta - O	·2384	·0130	5·983	1·354	1·50	11·97	5·42
V - N	·3183	·0077	5·470	1·032	1·71	10·94	4·13
V - O	·4829*	·0682*	7·467*	·533*	3·46*	14·93*	2·13*

* No confiable

A, B: valores independientes de la matriz de distorsión elástica.



Cálculo de la distorsión de la red debida a un intersticial tetraédral.

SYSTEM	A_p	U_1 [a]	U_2 [a]	U_3 [a]	U_4 [a]	E_f [eV]	A^* [eV]	B^* [eV]
Nb - N	A	·2381	·0654	··0485	··0843	3·01	1·58	10·01
	B	·2252	··0050	··0351	··0568	2·25		
Nb - O	A	·2170	·0641	··0390	··0664	2·52	2·59	9·51
	B	·2092	·0212	··0309	··0496	2·04		
Ta - N	A	·2493	·0537	··0391	··0620	3·82	4·00	13·30
	B	·2433	·0210	··0330	··0527	3·32		
Ta - O	A	·1818	·0428	··0276	··0433	2·06	3·23	9·78
	B	·1778	·0209	··0235	··0371	1·81		
V - N	A	·2327	·0535	··0539	··0914	2·45	1·86	8·67
	B	·2246	··0044	··0400	··0670	1·94		
V - O	A	·3333	·0455	··1037	··1614	4·93	-2·13	10·67
	B	·3070	··1376	··0797	··1039	3·57		

* $A = 2 (F_2 + 3 F_4) a$ $B = 2 (F_1 + F_3) a$

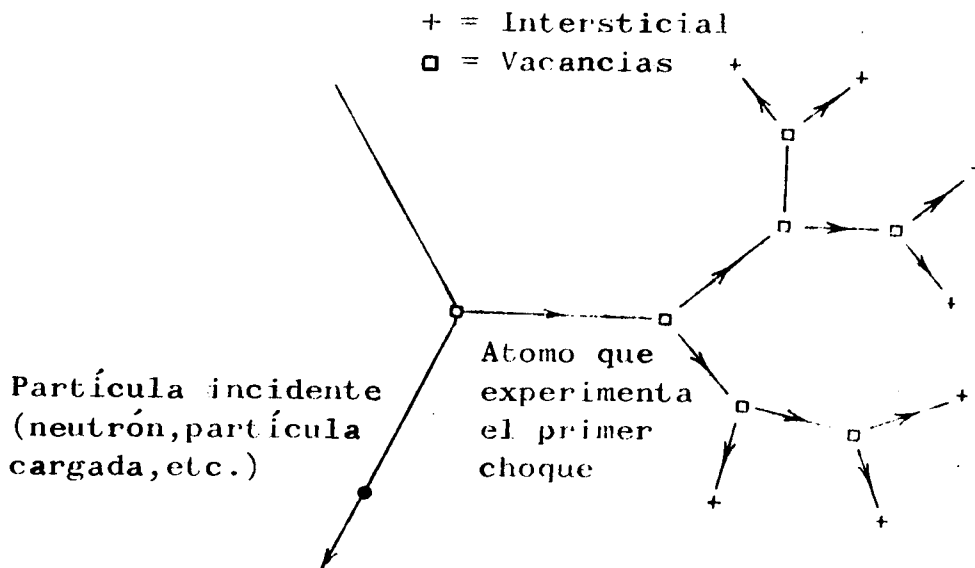
Producción de defectos puntuales

Vimos que el número de defectos en equilibrio a una dada temperatura depende crucialmente de la energía de formación del defecto. ¿Cómo se crean defectos que sobreviven a una dada temperatura en número mayor al equilibrio térmico?. Una forma es por enfriamiento rápido (templado) a partir de una temperatura sensiblemente superior, en la cual el número de defectos en equilibrio es mayor. La rapidez del enfriamiento impide que se alcance el equilibrio a temperaturas intermedias, o sea no hay tiempo para que se produzca una migración del defecto y este se aniquile, ya sea interactuando con otro defecto puntual (intersticial-vacancia) o al ser absorbido por un sumidero mayor en la red como son: dislocaciones, borde de grano, interfase de precipitado, superficie, etc.

Otra forma de generar defectos es por el trabajado mecánico, el cual discutiremos más adelante.

Una tercera forma es el bombardeo del cristal con partículas y la separación de los átomos de su posición de equilibrio debido a la transferencia de energía por las mismas.

Otras fuentes de vacancias son las desviaciones de la estequiometría de ciertos compuestos intermetálicos y por oxidación.



Esquema de la cascada de colisión

Detección de defectos puntuales

Describimos en esta sección la experiencia clásica de Simmons y Balluffi y mediciones de resistividad.

Al crearse una vacancia un átomo migra hacia la superficie. Esto determina un cambio de las dimensiones del cuerpo, densidad, para igual número de átomos componentes. El cambio del volumen Δv debido a V vacancias va a ser :

$$\Delta v = V(\Delta v' + \Omega)$$

Donde Ω : volumen atómico

$\Delta v'$ dilatación o contracción elástica alrededor de la vacancia.

En un sólido elástico isotrópico vimos que :

$$\Delta v' = \delta_0 r_0^2 / r^2$$

El volumen original sin vacancias es .

$$v = N\Omega$$

O sea la variación relativa de volumen va a ser :

$$\frac{\Delta v}{v} = \left(1 + \frac{\Delta v'}{\Omega}\right) C_v$$

C_v = concentración de vacancias

La variación $\Delta v/v$ se puede medir a través de las dimensiones del cuerpo, sea l la longitud resulta :

$$3 \frac{\Delta l}{l} = \frac{\Delta v}{v}$$

Si logramos una medición independiente de $\Delta v'/\Omega$ podemos deducir C_v . Veamos la variación del parámetro de la red medible por Rayos X cuando el cristal posee V vacancias. El volumen por modo de la red va a estar dado por :

$$\Omega + \Delta \Omega = \frac{v + \Delta v}{N + V} = \frac{N\Omega + V(\Delta v' + \Omega)}{N + V}$$

Resultando

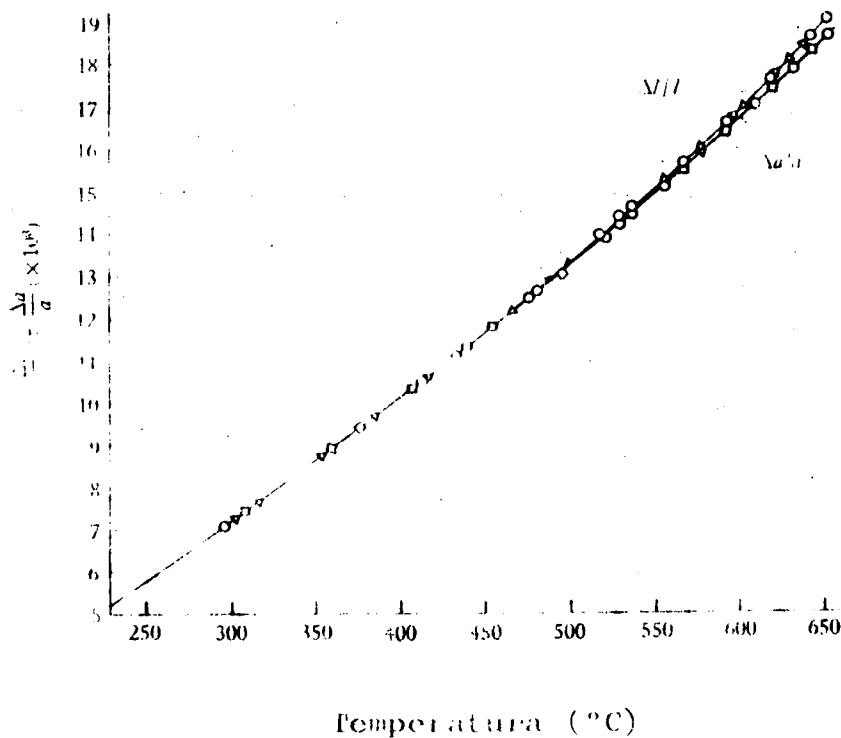
$$\Delta \Omega = C_v \Delta v'$$

La variación del parámetro de la red .

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{1}{3} \frac{\Delta \Omega}{\Omega} = \frac{C_v}{3} \frac{\Delta v'}{\Omega}$$

Obtenemos entonces $\Delta v'/\Omega$ y lo reemplazamos en la expresión de la variación del volumen (dimensiones lineales) de la probeta, obteniendo

$$\frac{1}{3} C_v = \frac{\Delta k}{l} - \frac{\Delta \alpha}{\alpha}$$



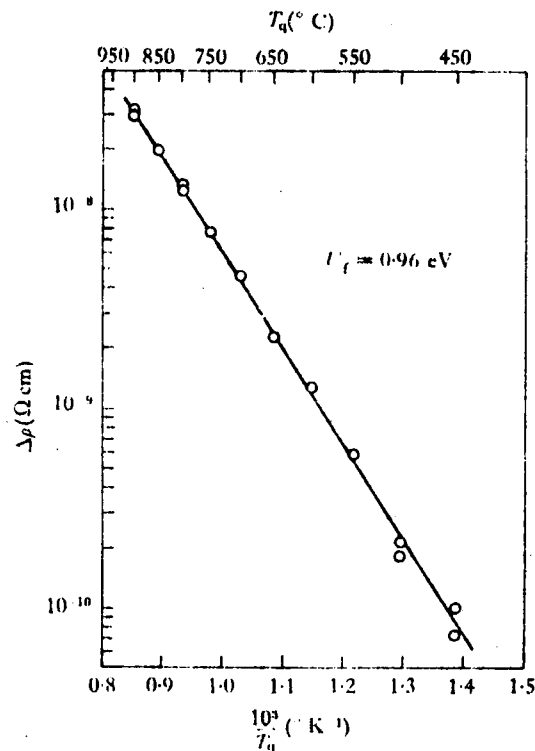
En la figura vemos los resultados de la experiencia de Simmons y Balluffi, que midieron simultáneamente ambos parámetros en Al como función de la temperatura. Ambos crecen debido a la expansión térmica y coinciden dentro del error experimental (del orden a $1/10^5$) a bajas temperaturas, difiriendo a altas temperaturas y dando una medición directa de C_v como función del T.

Otro método más comúnmente usado que el anterior debido a su menor dificultad experimental es el de medición de resistividad a bajas temperaturas. De acuerdo a lo discutido en la sección 3 del apunte de Física del Sólido la resistividad de un metal va a depender del número de defectos que interrumpen la simetría cristalina. A bajas temperaturas el efecto debido a los defectos cristalinos supera al debido a las vibraciones de la red. La ley de Matthiessen especifica que la contribución a la resistividad debida a los diferentes defectos individuales es aditiva.

Por lo tanto si realizamos experiencias de templado rápido a partir de diferentes temperaturas midiendo a bajas obtenemos una resistividad residual proporcional a la concentración de vacancias a estas temperaturas.

O sea $\Delta \rho \propto C_v$

Graficando los valores del $\ln \Delta \rho$ vs $\frac{1}{T}$ obtenemos una recta (figura); recordando la ecuación que da el número de vacancias en equilibrio a una dada temperatura, de la pendiente obtenemos el valor de la energía de fracción de la vacancia.

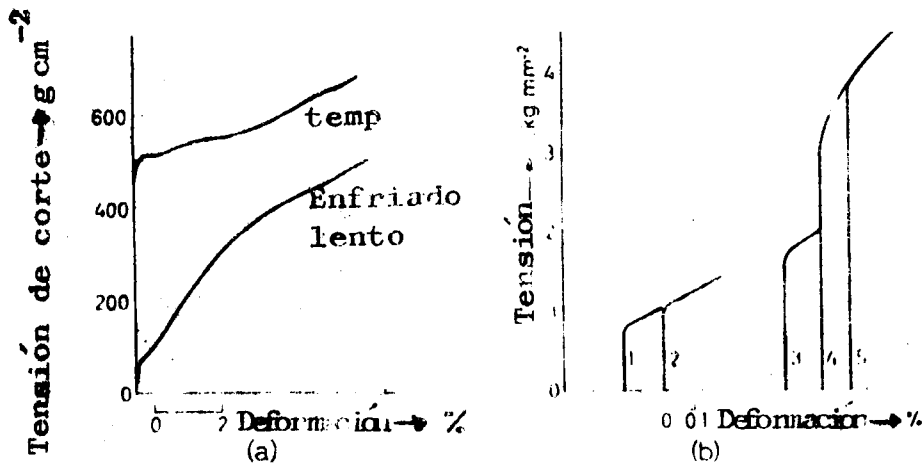


T_g : temperatura de templado

$\Delta \rho$: variación de la resistividad a bajas temperaturas luego de templado a la temperatura T .

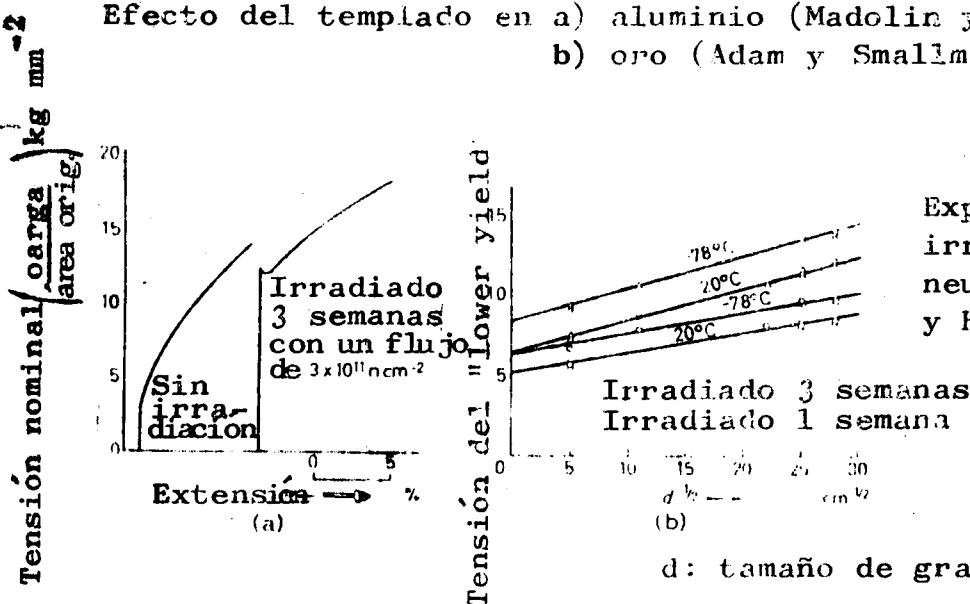
Efectos de la concentración de defectos puntuales en las propiedades mecánicas

La intención de esta sección es sólo mostrar algunos resultados típicos de variación de las propiedades mecánicas de un material al introducir defectos puntuales por encima de la concentración de equilibrio. Vemos primeramente el efecto del templado, que introduce un exceso de vacancias, en las curvas tensión deformación. Vemos que de una curva aproximadamente parabólica pasamos a otra con tensión de fluencia bien definida y con un "plateau" extendido. Además vemos en todas las figuras que hay un endurecimiento del material al introducir defectos puntuales en exceso. Volveremos sobre estas propiedades más extensamente al discutir los mecanismos de endurecimiento en un cristal.



- 1: Enfriado lento
- 2: Enfriado lento y envejecido 17 horas a temperatura ambiente.
- 3: Templado.
- 4: Templado y envejecido 17 horas a temperatura ambiente.
- 5: Experiencia inmediata.

Efecto del templado en a) aluminio (Madolin y Cottrel),
b) oro (Adam y Smallman)



Experiencias con irradiación con neutrones de Adams y Higgins.

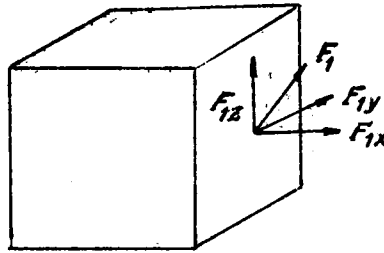
d : tamaño de grano

Elasticidad

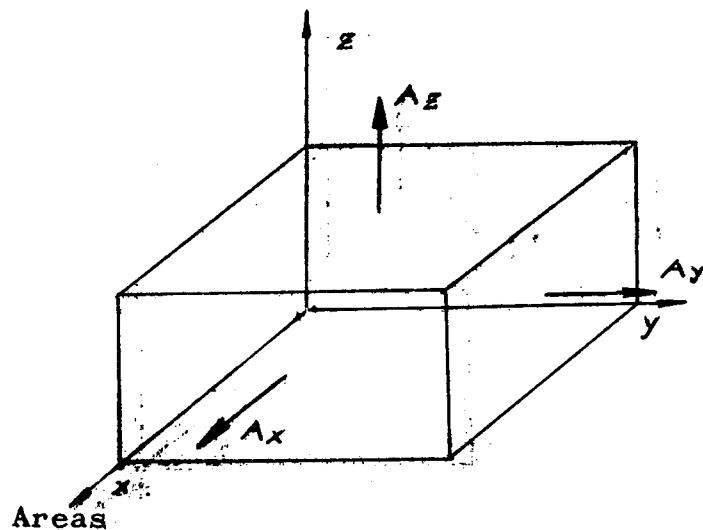
Los metales se deforman elástica y plásticamente. La deformación elástica ocurre a bajas tensiones y tiene 3 características principales : i) es reversible, ii) tensión y deformación se relacionan linealmente a través de la ley de Hooke, iii) es pequeña ($\epsilon \leq 1\%$).

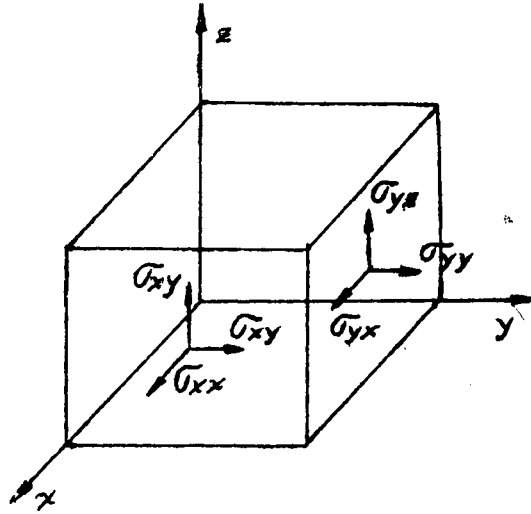
Las tensiones en un punto del cuerpo se definen considerando un cubo infinitesimal alrededor de éste y las fuerzas aplicadas por el medio en las caras del cubo. Esta fuerza en cada cara puede descomponerse en tres direcciones paralelas a los ejes del cubo.

$$\mathbf{F}_1 = F_{1x} \mathbf{i} + F_{1y} \mathbf{j} + F_{1z} \mathbf{k}$$



Además no se considera puntual, o sea está aplicada sobre todo el área de la cara. O sea la tensión está dada por el cociente entre la fuerza y el área. Evidentemente un estado de tensiones en una cara del cubo se describe por dos índices, uno que designa la cara correspondiente y el otro la componente de la fuerza.





Tensiones

Las tensiones σ_{ij} con $i = j$ son normales a las caras mientras que aquellas con $i \neq j$ son de corte.

La deformación de un cuerpo en el límite elástico puede también representarse por un tensor equivalente al de tensiones. Si la posición inicial de un punto del cuerpo está definida por las coordenadas (x, y, z) y la correspondiente bajo tensiones por $(x+u, y+v, z+w)$, el desplazamiento es entonces (u, v, w) . Si el desplazamiento es constante no hay deformación sólo translación rígida. Una deformación uniforme se produce cuando los desplazamientos son proporcionales a la distancia. En el caso tridimensional planteado :

$$\begin{aligned} \underline{u} &= e_{xx} \underline{x} + e_{xy} \underline{y} + e_{xz} \underline{z} \\ \underline{v} &= e_{yx} \underline{x} + e_{yy} \underline{y} + e_{yz} \underline{z} \\ \underline{w} &= e_{zx} \underline{x} + e_{zy} \underline{y} + e_{zz} \underline{z} \end{aligned}$$

$e_{xx} = du/dx$, $e_{yy} = dv/dy$, $e_{zz} = dw/dz$ son deformaciones normales y $e_{ij} = du_i/dx_j$ con $i \neq j$ son de corte.

En general e_{ij} $i \neq j$ contiene además de la componente de deformación ϵ_{ij} una de rotación rígida w_{ij} , o sea:

$$\begin{aligned} e_{ij} &= \epsilon_{ij} \text{ para } i=j \\ e_{ij} &= \epsilon_{ij} + w_{ij} \text{ para } i \neq j \\ \epsilon_{ij} &= \frac{1}{2} (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i) \\ w_{ij} &= \frac{1}{2} (\partial u_i / \partial x_j - \partial u_j / \partial x_i) \end{aligned}$$

El tensor deformación está dado entonces por :

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

Una dilatación pura se expresa por :

$$\begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix}$$

Una deformación uniaxial ϵ en la dirección x está acompañada por una contracción lateral $-\nu\epsilon$ (ν es el módulo de Poisson) entonces :

$$\begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\nu\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\nu\epsilon \end{pmatrix}$$

La vacancia en el módulo de un sólido elástico isotrópico desarrollado en el capítulo anterior; se caracteriza por el tensor de deformación

$$\begin{pmatrix} \delta_0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_0 \end{pmatrix}$$

o sea es una dilatación isotrópica sin cambio de forma.

Constantes elásticas

En el límite elástico dijimos que la ley de Hooke era válida, o sea :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

C_{ijkl} constantes elásticas

Se prueba que $C_{ijkl} = C_{klij}$

Por lo tanto los subíndices de σ , ϵ y C pueden expresarse usando la notación de Voigt.

ij "o" kl	11	22	33	23	31	12	32	13	21
m "o" n	1	2	3	4	5	6	7	8	9

Además

$$C_{ijkl} = C_{ijlk} = C_{jikl}$$

O sea la matriz "c" de 81 componentes se reduce a 36 de las cuales dada la simetría a ambos lados de la diagonal hay 21 independientes.

En un cristal cúbico por simetría resulta :

$$C_{iiii} = C_{11} \quad , \quad C_{iiij} = C_{12} \quad \text{y} \quad C_{ijij} = C_{44}$$

Todas las otras son cero porque el signo de ϵ_{ij} con $i \neq j$ no puede afectar σ_{ii}

$$C_{mm} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

Sólidos isotrópicos

En sólidos isotrópicos

$$2C_{44} = C_{11} - C_{12}$$

Se expresan los coeficientes elásticos en función de la constante de Lamé λ y μ el módulo de corte.

$$\mu = C_{44}$$

$$\lambda = C_{12}$$

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

O sea :

$$1a) \quad \sigma_{11} = (\lambda + 2\mu) \epsilon_{11} + \lambda \epsilon_{22} + \lambda \epsilon_{33}$$

$$1b) \quad \sigma_{22} = \lambda \epsilon_{11} + (\lambda + 2\mu) \epsilon_{22} + \lambda \epsilon_{33}$$

$$1c) \quad \sigma_{33} = \lambda \epsilon_{11} + \lambda \epsilon_{22} + (\lambda + 2\mu) \epsilon_{33}$$

(1)

$$1d) \quad \sigma_{ij} = 2\mu \epsilon_{ij} \quad \text{para } i \neq j$$

El módulo de Young se define como la relación entre tensión uniaxial y deformación en esta dirección :

$$G = \frac{\sigma_{11}}{\epsilon_{11}}$$

con $\sigma_{22} = \sigma_{33} = 0 = \sigma_{ij} \quad i \neq j$ (2)

De la diferencia entre 1b) - 1c) resulta :

$$2\mu (\epsilon_{22} - \epsilon_{33}) = 0$$

O sea :

$$\epsilon_{22} = \epsilon_{33}$$

Reemplazando en 1b)

$$2(\lambda + \mu) \epsilon_{22} = \lambda \epsilon_{11}$$

y en 1a)

$$\sigma_{11} = (\lambda + 2\mu) \epsilon_{11} - \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \epsilon_{11} = \mu \frac{(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \epsilon_{11}$$

O sea :

$$G = \frac{\mu (3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}$$

El módulo de Poisson se define en el ensayo uniaxial como:

$$\nu = \epsilon_{22} / \epsilon_{11}$$

Resulta entonces :

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}$$

Podemos deducir

$$\mu = \frac{G}{2(1 - \nu)}$$

$$\lambda = \frac{\nu G}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$$

La relación entre dilatación y presión $p = -\frac{1}{3} (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})$ está dada por la compresibilidad $K = -\frac{e}{p}$ $e = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}$

$$K = \frac{\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}}{\frac{1}{3} (3\lambda + 2\mu) (\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33})} = \frac{3}{(3\lambda + 2\mu)}$$

Invirtiendo las relaciones anteriores

$$\epsilon_{11} = \frac{1}{G} [\sigma_{11} - \nu (\sigma_{22} + \sigma_{33})]$$

$$\epsilon_{22} = \frac{1}{G} [\sigma_{22} - \nu (\sigma_{11} + \sigma_{33})]$$

$$\epsilon_{33} = \frac{1}{G} [\sigma_{33} - \nu (\sigma_{22} + \sigma_{11})]$$

En general los cristales son anisotrópicos excepto tungsteno. Además se cumple la desigualdad $2C_{44} > C_{11} - C_{12}$ excepto para Molibdeno y Niobio.

Sin embargo los sólidos policristalinos se aproximan a propiedades isotrópicas.

Aún cuando corrientemente durante la manufactura se obtiene una orientación preferencial de los granos. Entonces el material va a presentar características anisotrópicas similares a un monocristal con orientación cercana a la que se hallan la mayoría de los granos.

DISLOCACIONES

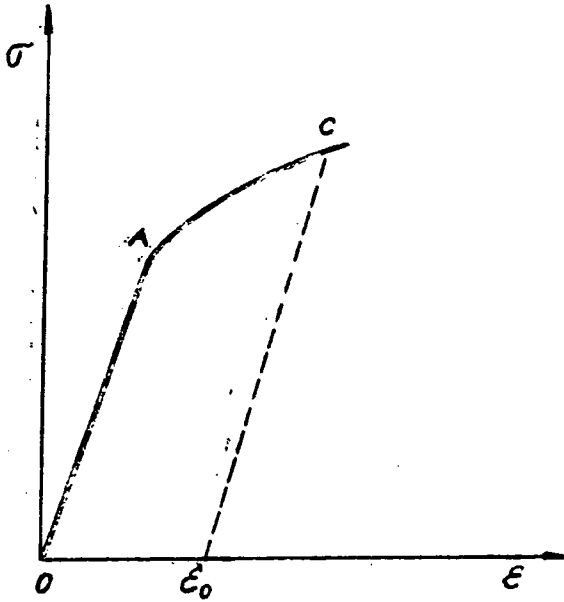


Figura 1

La figura 1 grafica los resultados de un ensayo de tracción en un metal cualquiera. Se pueden distinguir en esta curva dos regiones :

i) una primera zona lineal en la que el esfuerzo es proporcional a la deformación

$$\sigma = E\epsilon \quad (1)$$

Esta es la región elástica OA , que describe la ecuación de Hooke (1). Si llegados a un cierto valor del esfuerzo aplicado dentro de OA , descargamos el espécimen, volveríamos nuevamente al punto O . Es decir, no hay deformación permanente en el metal.

ii) si la carga sobrepasa un cierto valor, denominado límite elástico (punto A) la pendiente de la curva σ - ϵ disminuye apreciablemente y la relación entre σ y ϵ deja de ser lineal. La descarga no reproduce ahora las dimensiones iniciales del espécimen sino que observamos que este ha sufrido una deformación permanente de valor ϵ_0 que llamamos deformación plástica.

Al observar la superficie del metal, aparecen en ella, durante esta última etapa de deformación, marcas en forma de líneas. Si el material que deformamos es monocristalino, se puede identificar la dirección de estas líneas, denominadas líneas de deslizamiento.

Las líneas de deslizamiento constituyen la intersección con la superficie del cristal de planos cristalográficos bien definidos. Una región del cristal se ha deslizado respecto a otra a través de cada uno de estos planos, como indica la figura 2.

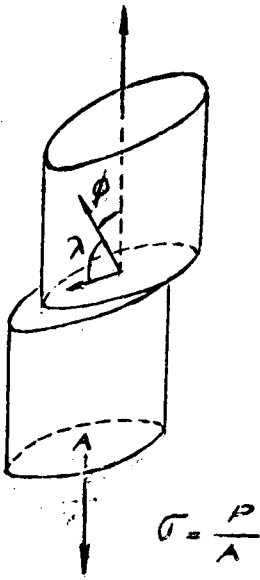


Figura 2

La deformación total se produce entonces por deslizamiento en planos cristalinos, bajo un esfuerzo de corte

$$\tau = \frac{P}{A} \cos \phi \cos \lambda$$

donde ϕ es el ángulo que forma la normal al plano con la dirección de tracción y λ el ángulo que hace ésta con la dirección de deslizamiento.

Para obtener el valor del esfuerzo necesario para producir el deslizamiento calculamos la fuerza necesaria para desplazar un plano atómico sobre otro. Según x , el potencial será periódico, el esfuerzo necesario para mover la fila de átomos de su posición de equilibrio es

$$\tau = \frac{\partial U}{\partial x}$$

El esfuerzo es también periódico, con periodo b . Tomemos

$$\tau = k \sin \frac{2\pi}{b} x$$

Para pequeños desplazamientos, debe cumplirse la ley de Hooke

$$\tau = \mu \gamma$$

donde μ y γ son el módulo y la deformación de corte respectivamente.

$$\gamma = \frac{x}{a}$$

Pero para pequeños desplazamientos vale también

$$\tau = k \sin \frac{2\pi}{b} x \approx k \frac{2\pi}{b} x = \mu \frac{x}{a}$$

$$\therefore k = \frac{\mu}{2\pi} \frac{b}{a}$$

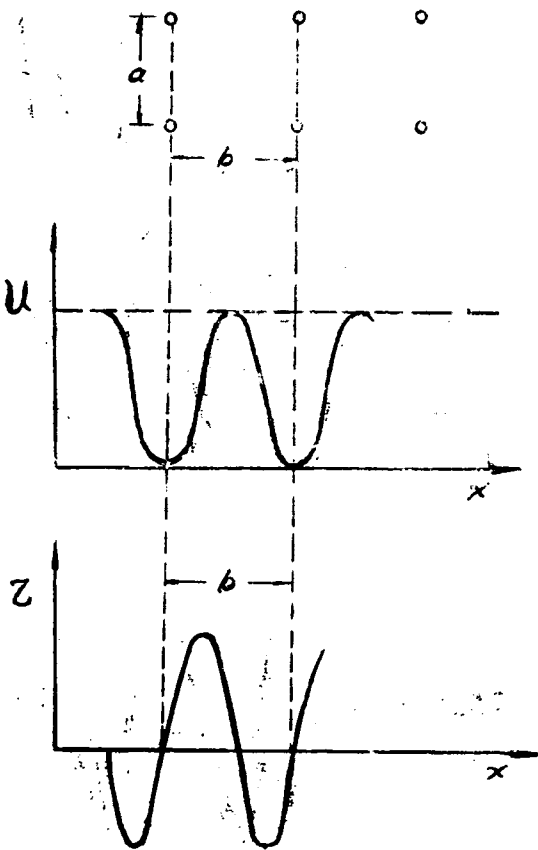


Figura 3

De manera que el esfuerzo de corte máximo corresponde a $\text{sen } \frac{2\pi}{b} x = 1$, o sea

$$\tau_{\max} = \frac{\mu}{2\pi} \frac{b}{a}$$

Tomando $b = a$, el esfuerzo de corte teórico resulta alrededor de $\mu/10$. Ajustando el cálculo mediante el uso de potenciales atómicos más adecuados se obtiene

$$\tau_{\max}^{\text{teo}} \sim \mu/30$$

Pero experimentalmente, se encuentra para cristales metálicos

$$\tau_{\text{crítico}}^{\text{exp}} \sim 10^{-5} \text{ a } 10^{-4} \mu$$

O sea que hay entre tres y cuatro órdenes de magnitud entre el valor calculado y el medido y esta diferencia no se modifica sustancialmente mejorando la aproximación del cálculo teórico.

Hemos tratado hasta aquí el deslizamiento mediante el desplazamiento simultáneo de todo el plano atómico. Esta no es sin embargo, la situación más favorable desde el punto de vista del esfuerzo aplicado.

Imaginemos, por ejemplo, que tratamos de desplazar una alfombra sobre el piso. Podemos deslizarla en su totalidad (lo que corresponde al deslizamiento simultáneo de los planos cristalinicos) o bien formar un bucle de alfombra y desplazar éste en una dirección. Al mover el bucle de un extremo al otro, hemos conseguido mover la alfombra en la longitud de éste. El esfuerzo empleado en producir este movimiento es menor que el necesario para desplazar toda la alfombra simultáneamente.

Podemos llevar a cabo el mismo tipo de procedimiento en el cristal si comprimimos la región por encima del plano de deslizamiento AB y traccionamos la región inferior según el esquema de la figura 3 (a). A nivel atómico tendríamos la secuencia indicada en la figura 3 (b).

Mediante el esfuerzo aplicado conseguimos formar la configuración indicada en (c), que desplazamos a lo largo del plano de deslizamiento. Una vez que esta configuración llega al extremo del cristal, la región superior del cristal se ha desplazado respecto a la inferior en una distancia atómica. La configuración producida en (c) se denomina dislocación. El esfuerzo aplicado debe modificar ahora tan sólo la región próxima al defecto introducido, en

lugar de desplazar todo el plano. El deslizamiento no es simultáneo y ocurre mediante desplazamientos necesarios.

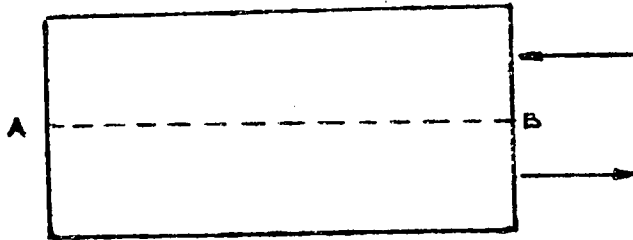


Figura 3(a)

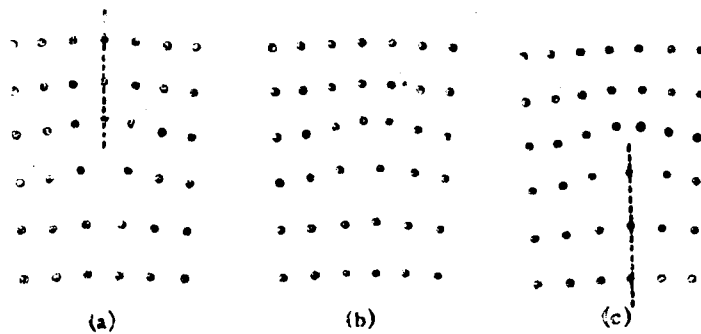


Figura 3 (b)

En general, para producir deslizamiento podemos cortar el cristal según un plano, realizar el desplazamiento (en valor b en la figura 4) y volver a pegar las caras del cristal. El desplazamiento en sentido y magnitud puede indicarse por un vector $\underline{b}$ denominado vector de Burgers.

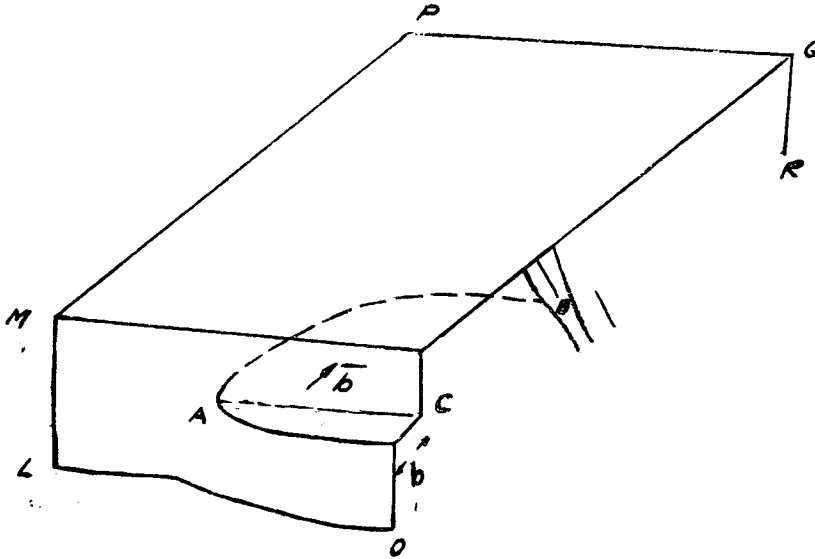


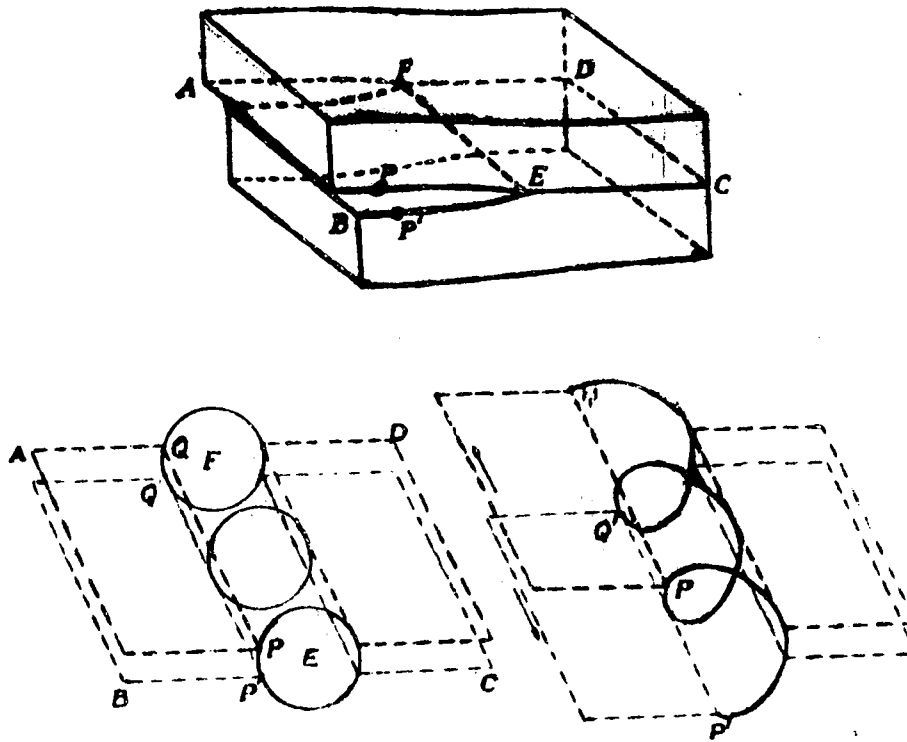
Figura 4

En la figura 4 la región limitada por AB ha deslizado en b , dejando un escalón de altura $|b|$ sobre la cara LMNO del cristal. La línea AB, que limita la zona deslizada del cristal de aquella no deslizada es una dislocación. Observemos que hay en esta línea tres regiones. En una de ellas, la línea es perpendicular al vector desplazamiento. Este caso corresponde a la misma situación que teníamos en la figura 3 (b) donde introducimos un plano "extra" para crear la imperfección.

Este tipo de dislocación, en la que el vector de Burger es normal a la dislocación se denomina dislocación de borde.

La región en la que el vector de Burger es paralelo a la línea de dislocación, se denomina una dislocación de hélice. La región entre ambas situaciones extremas es una dislocación mixta.

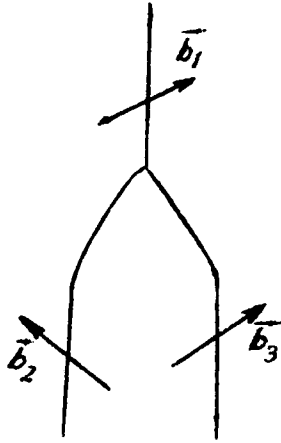
La figura 5 muestra esquemáticamente la estructura de una dislocación de hélice.



Veamos ahora algunas consecuencias de la definición de dislocación. En efecto, supongamos tener el lazo cerrado de dislocación ABCD de la figura 6(a). Por definición éste limita una única zona deslizada en b respecto al exterior del lazo. Supongamos que la región ABD (figura 6(b)) posee un vector de Burger b_1 distinto del de BCD, b_2 . Estas dos regiones encierran entonces zonas que han deslizado en forma diferente. Por definición estas zonas deben estar separadas por una dislocación, por ejemplo BED. Pero esto contradice nuestra hipótesis inicial de que el lazo cerrado ABCD era único. Por lo tanto el desplazamiento encerrado por el lazo es único. O sea que el lazo ABCD tiene un único vector de Burger b .

Figura 6

De manera similar, puede probarse que una dislocación no puede terminar en el interior del cristal. Puede en cambio bifurcarse en dos o más dislocaciones, dando lugar al nodo A (figura 7).



se cumple en este caso

$$\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$$

o en forma general

$$\sum_j b_j = 0$$

para dislocaciones con b_i , que se encuentran en un nodo, si llamamos $\vec{\xi}$ al vector unitario asociado con la dirección de la línea de dislocación, las características fundamentales de estas vienen dadas por $\vec{\xi}$ y $\vec{b}$.

Figura 7

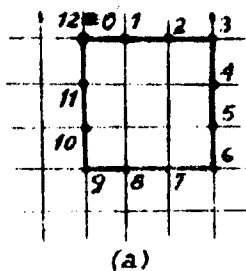
dislocación de borde $\vec{b} \perp \vec{\xi}$

dislocación de hélice $\vec{b} \parallel \vec{\xi}$

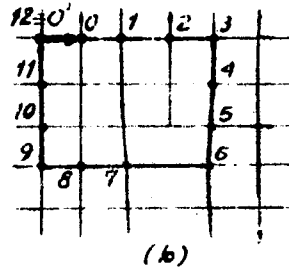
Si $\vec{b}$ forma un ángulo cualquiera con $\vec{\xi}$, se trata de una dislocación mixta.

Para obtener el vector de Burger de una dislocación cualquiera, comparamos los desplazamientos respecto a un cristal perfecto. Por ejemplo, en la figura 8 (a) realizamos en el cristal perfecto un circuito cerrado, contando 3 espacios en cada dirección a partir de 0.

Al realizar el mismo circuito en el cristal que contiene una dislocación, observamos una falla de cierre oo' . Esta falla es justamente el desplazamiento asociado con la dislocación, o sea su vector de Burger. Para definir unívocamente el vector, debemos asumir siempre un mismo sentido de giro al hacer el circuito. En el ejemplo, se ha tomado el sentido de giro horario.



(a)



(b)

Figura 8

II LAS DISLOCACIONES EN UN CONTINUO ELASTICO

Con el objeto de calcular las tensiones elásticas asociadas con una dislocación, es conveniente imaginar que las formamos en un continuo elástico. Para ello, tomamos un cilindro infinito coaxial al eje z y realizamos un corte según el plano xy . En este corte realizamos los desplazamientos necesarios para formar la dislocación, pegando luego los planos según el corte. Este procedimiento da lugar a las dislocaciones de Volterra indicadas en la figura 9.

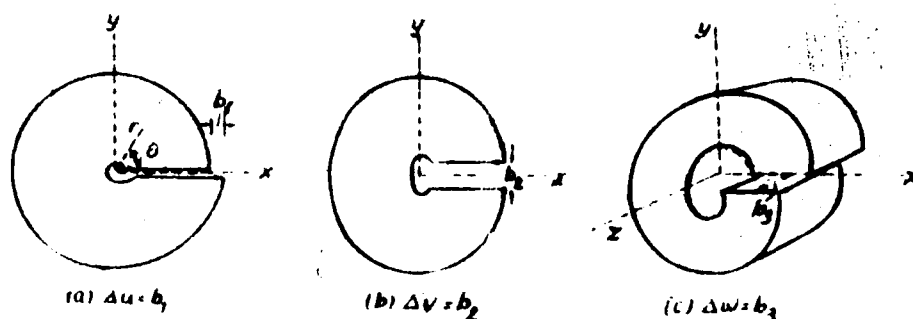


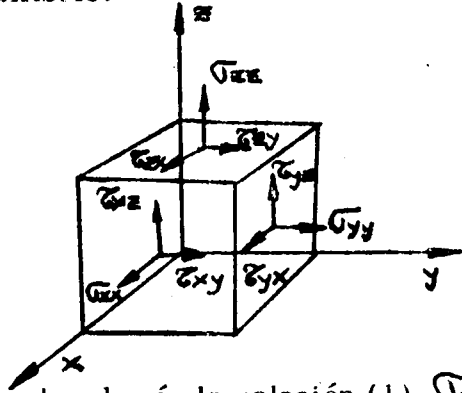
Figura 9

Los casos (a) y (b) corresponden a dislocaciones de borde ($\vec{b} \parallel \vec{\xi} \parallel oz$) y el (c) a una dislocación de hélice ($\vec{b} \perp \vec{\xi} \parallel oz$). Se trata de calcular los campos elásticos asociados con cada tipo de desplazamiento.

En el caso (a) nos encontramos en un estado de deformación plana en el que los desplazamientos u , v , w , según las direcciones x , y , z , respectivamente, cumplen las relaciones

$$w = 0 \quad \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial v}{\partial z} = 0$$

Para encontrar el estado de tensiones en el medio, introducido por estos desplazamientos, debemos hallar las soluciones de la ecuación de equilibrio:



La nomenclatura para los esfuerzos se indica en la figura:

Interesa determinar en este caso los esfuerzos normales σ_{xx} ; σ_{yy} y las tensiones de corte $\tau_{xy} = \tau_{yx}$

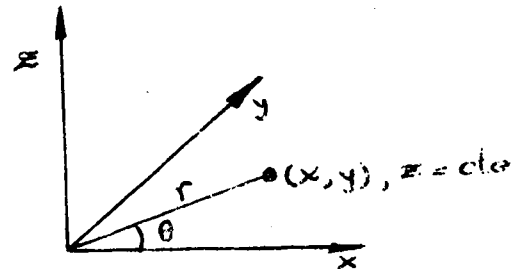
Se cumple además la relación (1) $\sigma_{zz} = \nu (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$

donde ν es el módulo de Poisson.

Como se trata de un problema con simetría cilíndrica, conviene usar coordenadas

$$x = r \cos \theta ; y = r \sin \theta$$

$$z = z$$



Tratándose de un problema de deformación plana se buscan soluciones de la ecuación

$$\nabla^2 \chi = 0$$

con

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} ; \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} ; \tau_{xy} = - \frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial y}$$

o bien

$$\sigma_{rr} = \frac{1}{r} \frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \theta^2} ; \sigma_{\theta\theta} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} ; \tau_{re} = - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right)$$

(1) Para aquellos lectores interesados en seguir el desarrollo completo de las soluciones se recomienda A. E. H. Love "The Mathematical Theory of Elasticity" Cambridge University Press (1927) o en forma resumida A. H. Cottrell "Dislocations and Plastic Flow" (1952) de la misma editorial

Una vez halladas las soluciones en X resulta

$$\sigma_{xx} = \frac{-Dy(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} ; \sigma_{yy} = \frac{Dy(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \tau_{xy} = \frac{Dx(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$$

o bien, en coordenadas cilíndricas

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -D \frac{\sin \theta}{r} ; \tau_{re} = D \frac{\cos \theta}{r}$$

ENERGIA DE UNA DISLOCACION

Esta es la energía acumulada en el campo elástico alrededor de una dislocación. La energía total

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{núcleo}} + E_{\text{elástico}}$$

$E_{\text{elast.}}$ puede calcularse tomando el trabajo hecho al desplazar las caras de un cristal de longitud unitaria para formar la dislocación.

Para dislocación de hélice

$$E_{\text{el}}^H = \frac{1}{2} \int \tau_{\theta z} b \, dr$$

$$\tau_{\theta z} = \frac{\mu b}{2\pi r} \Rightarrow E_{\text{el}}^H = \frac{1}{2} \int_{r_0}^{r_1} \frac{\mu b^2}{2\pi} \frac{dr}{r} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{r_1}{r_0}$$

En el caso de la dislocación de borde la fuerza de corte, que es el que hace el trabajo es $\tau_{\theta z} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{\cos \theta}{r}$

$$E_{\text{el}}^B = \frac{1}{2} \int_{r_0}^{r_1} \tau_{\theta z} b \, dr = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1}{r_0}$$

Tomando $r_1 = 1 \text{ cm}$ $\mu = 4 \times 10^{11} \text{ dynas/cm}^2$

$r_0 = 10^{-7} \text{ cm}$ $b = 2,5 \times 10^{-8} \text{ cm}$

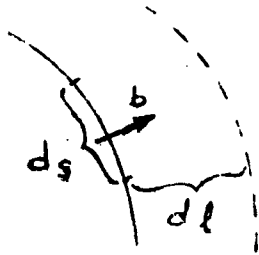
$$E_{\text{el}}^B = 5 \times 10^{-4} \text{ erg/cm ó } 8 \text{ eV por plano atómico.}$$

En cuanto a $E_{\text{núcleo}} \sim 0,5 \text{ a } 1,5 \text{ eV}$

Recalcamos entonces que $E \propto \mu b^2$

FUERZAS SOBRE UNA DISLOCACION

Cuando se aplica un esfuerzo lo suficientemente alto al cristal, las dislocaciones contenidas en él se mueven y producen deformación plástica por desplazamiento. El esfuerzo aplicado hace trabajo sobre el metal que se traduce en el movimiento de dislocaciones y hay consecuentemente una fuerza sobre la dislocación que hace que ésta se mueva.



Si A es el área del plano de deslizamiento donde se mueve la dislocación, el desplazamiento de corte promedio al mover un elemento ds una distancia dl es

$$\frac{ds \cdot dl \cdot b}{A}$$

La fuerza aplicada por el esfuerzo τ es τA , o sea que el trabajo hecho por esta fuerza es

$$\tau \frac{ds \cdot dl \cdot b}{A} = b \cdot ds \cdot dl$$

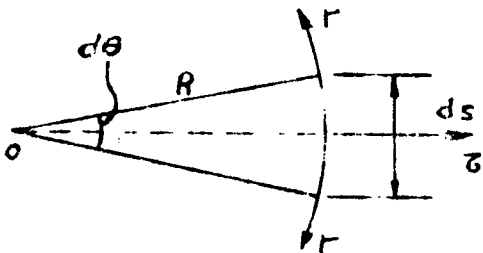
Si llamamos $F ds$ a la fuerza perpendicular a la dislocación. (F es fuerza por unidad de longitud) o sea

$$F ds \cdot dl = \tau b ds \cdot dl \therefore F = \tau b$$

Fuerza por unidad de longitud sobre la dislocación y normal a ella producida por esfuerzo aplicado.

TENSION DE LINEA

La energía propia de la dislocación es proporcional a su longitud. Incremento de ésta produce incremento de energía. Definiendo la tensión de línea como el incremento en energía por incremento unitario de la longitud de la línea de dislocaciones



$$\Gamma = \alpha \mu b^2$$

Para mantener la dislocación curvada a un radio R es necesario aplicar un esfuerzo. Calculemos este esfuerzo:

$d\theta = \frac{ds}{R}$ fuerza aplicada por τ en ds es $\tau b ds$ a la que se opone la tensión de línea que es Γ ser $\frac{d\theta}{2} \sim \Gamma d\theta$

La condición de equilibrio es

$$\Gamma d\theta = \tau ds \therefore \tau = \frac{\Gamma}{b \cdot R}$$

o bien

$$\tau = \frac{\alpha \mu b}{12}$$

ORIGEN DE LAS DISLOCACIONES

Se podría pensar que las dislocaciones son defectos en equilibrio térmico en el cristal como ocurre con los defectos puntuales a temperaturas diferentes de cero.

Sin embargo una primera aproximación al problema nos prueba que el número de dislocaciones que pueden existir en equilibrio térmico es muy pequeño. Por las nociones termodinámicas previamente desarrolladas vemos que el número de dislocaciones de longitud unitaria en equilibrio en un cristal será :

$$n_1 = e^{s/h} e^{-\epsilon/hT} \quad (1)$$

La energía elástica de formación la calculamos anteriormente resultando 8eV/plano atómico aproximadamente. Sumando la energía del núcleo resulta entonces la energía total de formación del orden de los 10eV/plano atómico. La principal contribución a la entropía por unidad de línea S estará dada por el número de configuraciones que pueda tomar una línea continua entre átomos que determina la dislocación. Una vez que la línea de dislocación pasa por un átomo puede elegir continuar entre cualquiera de sus primeros vecinos exceptuando aquel que ya pasó pues esto implicaría volver sobre sí mismo. Supongamos que cada átomo posee 6 primeros vecinos y la dislocación posea una longitud L en un cristal con parámetro de red a . El número de formas posibles de extender esta dislocación estará dado por :

$$w = \alpha (6-1)^{(L/a-1)} \quad (2)$$

Donde α depende del número de formas de seleccionar el origen de la dislocación. Entonces :

$$S = \frac{a}{L} k \ln w = \frac{a}{L} k \ln \alpha + \frac{a}{L} k \left(\frac{L}{a} - 1 \right) \ln 5$$

Como $a \ll L$ y α del orden del número de átomos del cristal. O sea :

$$\alpha \approx 10^{23} \quad \ln \alpha \approx 50$$

$$L \approx 10^5 a$$

Resulta

$$S \approx k \ln 5$$

Reemplazando en (1) vemos que aún a temperaturas cercanas a la fusión la cantidad de unidades de dislocación en equilibrio térmico es despreciable.

Otro posible origen de las dislocaciones en un cristal se debe a las tensiones térmicas acumuladas durante la solidificación de éste. Si durante el enfriamiento se generan gradientes de temperatura apreciables éstos a su vez determinan una acumulación de tensiones que pueden superar el esfuerzo de corte del material y crear dislocaciones. Obviamente este mecanismo va a ser más importante en materiales con baja conducción térmica.

La presencia de impurezas o de una segunda fase segregada en el cristal produce tensiones en la interfase que pueden superar también el esfuerzo de corte generando circuitos de dislocaciones. Además al crecer una segunda fase se crean frecuentemente las llamadas dislocaciones geométricamente necesarias que determinan un relajamiento de la energía elástica introducida en la red por el crecimiento.

Otra forma de originar dislocaciones se debe al agregado de defectos puntuales. A temperaturas cercanas a la de fusión la concentración de vacancias en equilibrio puede ser hasta del 0.1 o 1%. Si un cristal es crecido a partir del líquido al enfriarse los defectos puntuales van a precipitar hacia sumideros tales como la superficie del cristal o dislocaciones existentes. También forman aglomerados de defectos similares (recordar que la energía de formación de la divacancia que calculamos al hablar de defectos puntuales es menor que la suma de las energías en dos vacancias individuales). Estos aglomerados luego colapsan y determinan discos de dislocaciones. Una gran cantidad de dislocaciones pueden crearse por este mecanismo. Por ejemplo la precipitación de 10^{20} defectos/cm³ va a crear 10^5 cm/cm³ de dislocación. Evidentemente el vector de Burgers de un circuito de dislocación generado por un aglomerado de defectos puntuales en un plano va a ser perpendicular a dicho plano.

Otro mecanismo está basado en el crecimiento más rápido a partir del líquido de un cristal que contiene una dislocación que otro libre de las mismas. Esto se debe a que la nucleación de átomos en una superficie tiene mucho menor energía si lo realiza en un escalón de la misma que si lo hace en una cara plana. O sea dada una cara plana primero es necesario nuclear una isla para crear un nuevo plano (figura 1). En cambio si el cristal posee una dislocación de hélice que termina en la cara del mismo su sola presencia provee los escalones y no es necesario entonces nuclear una nueva isla por plano a crear, por lo tanto el crecimiento va a ser

mucho más rápido en el caso ejemplificado en la figura 2 que en la figura 1.

Figura 1 : nucleación de una isla monoatómica en una cara.

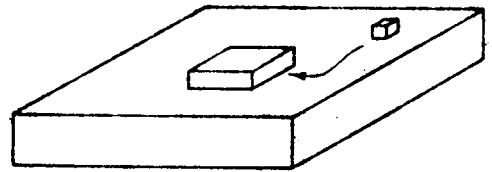
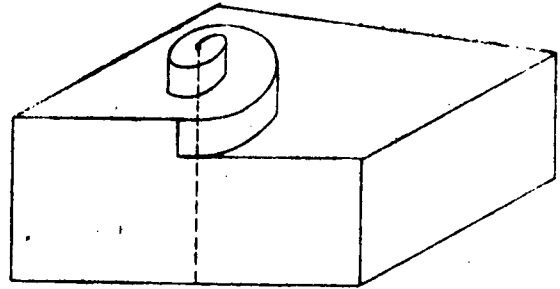


Figura 2:: rampa espiralada producida por una dislocación de hélice en la cara de un cristal en crecimiento.



Bajo condiciones muy cuidadosas pueden crecerse cristales practicamente libres de dislocaciones : Whiskers.

Multiplicación de dislocaciones, fuente de Frank y Read

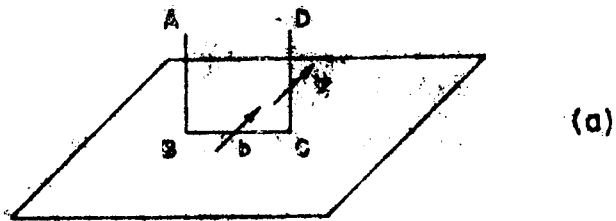
Una pregunta que cabe formularse es como se multiplican las dislocaciones durante la deformación de un cristal. En 1950 independientemente F.C.Frank y W.T.Read propusieron un mecanismo que constituye seguramente la base de esta multiplicación.

Supongamos la dislocación ABCD de la figura 3 a) con vector de Burgers b . Sólo el segmento BC se halla en el plano de deslizamiento. Los segmentos AB y CD son inmóviles. Si se aplica una tensión σ el segmento se va a curvar como se muestra en la figura 3 b). A medida que se aumenta la tensión aumenta esta curvatura. Cuando la tensión de línea es superada por la fuerza externa se alcanza el punto de inestabilidad. El mínimo radio de curvatura que puede alcanzar el segmento BC (máxima tensión que puede oponer a la tensión externa) está dado por $R_{\text{crítico}} = L/2$. O sea la inestabilidad se alcanza con una tensión externa.

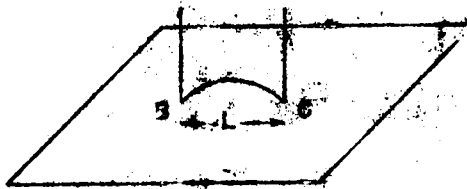
$$\sigma = \frac{\alpha N b}{R_{\text{crítico}}} = \frac{2 \alpha N b}{L}$$

Si la tensión externa supera este valor la dislocación alcanza la configuración mostrada en 3 c). Dada que las líneas de dislocación P y P' tienen signo opuesto se aniquilan al encontrarse y regeneran una porción rectilínea de dislocación entre B y C rodeada por un circuito con igual vector de Burgers.

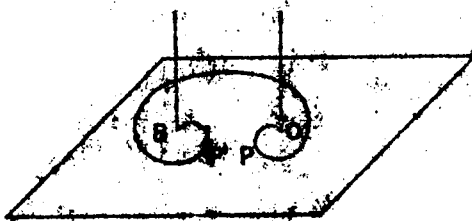
Este nuevo segmento a su vez genera un nuevo círculo y así continúa operando la fuente. Agotándose sólo ante las tensiones que ejercen los propios circuitos generados por ésta al acumularse ante un obstáculo.



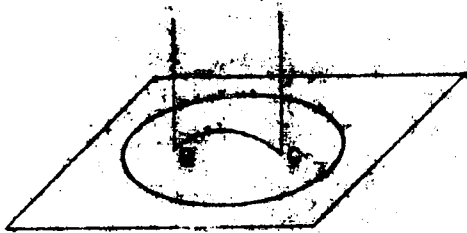
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3 : Fuente de Frank-Read

FUERZAS ENTRE DISLOCACIONES

Un razonamiento semi-cuantitativo nos muestra el efecto de tener dos dislocaciones próximas.

Consideremos dos dislocaciones de borde en el mismo plano de deslizamiento. Cuando se encuentran a distancias grandes la una de la otra la energía total es

$$2 \cdot \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1}{r_0} \quad (\text{si ambas son de longitud unitaria})$$

Cuando se hallan muy próximas, podemos considerar que se trata de una dislocación de vector $2b$ y su energía será entonces

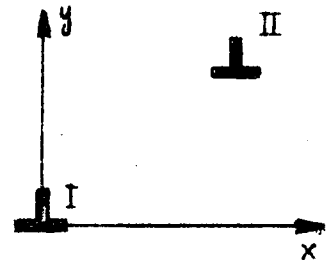
$$\frac{\mu (2b)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1}{r_0}$$

o sea dos veces la anterior. En esta situación las dislocaciones tratan de separarse para reducir su energía elástica o sea se repelen. Lo inverso ocurre si se trata de dislocaciones de distinto signo.

Para calcular la magnitud de la fuerza, calculamos primero el trabajo necesario para introducir una dislocación en un material que ya contiene una dislocación.

La energía estará compuesta de:

- a) Energía propia dislocación I
- b) Energía propia dislocación II
- c) Energía de interacción entre I y II



El valor de la fuerza se obtiene por la relación

$$F = \frac{dU_{int}}{dx} = \frac{dU_i}{dA}$$

(longitud unitaria de dislocaciones)

Resulta así

$$\begin{aligned} F_x &= \tau_{xy} b \\ F_y &= \tau_{yx} b \end{aligned}$$

O.S.R.

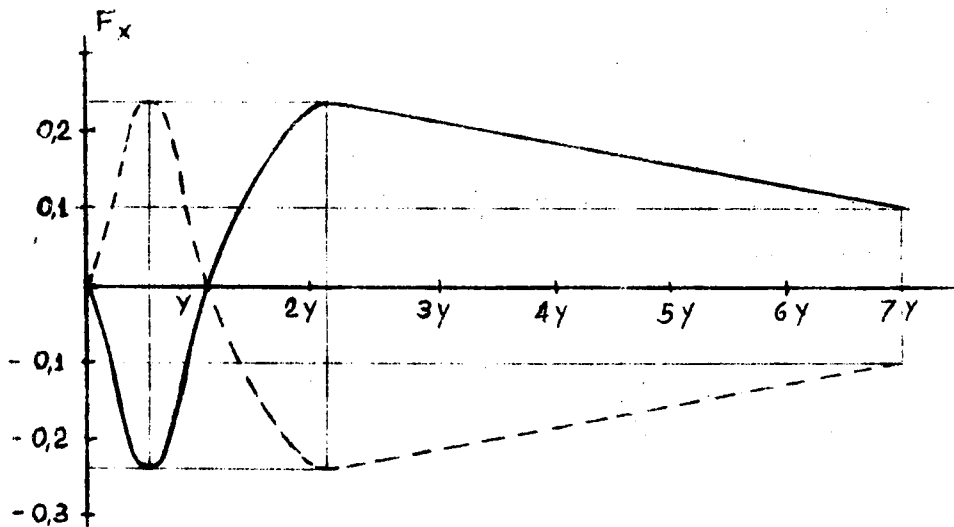
$$F_x = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$F_y = -\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$F_r = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{r}$$

$$F_\theta = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin 2\theta}{r}$$

Se obtiene así, midiendo F_x en unidades de



$F_x > 0$ (repulsión para dislocaciones del mismo signo) para todo $x > y$.

Para dislocaciones de distinto signo $F_x < 0$ para $x > y$ y las dislocaciones se atraen.

Posiciones metaestables en $x < y$ dan lugar a la formación de dipolos.

Para dislocaciones de hélice. Como el campo elástico tiene simetría radial y la única fuerza es

$$F_r = \pm \frac{\mu b^2}{2\pi r}$$

atractiva para distinto signo
repulsiva para mismo signo

DISLOCACIONES EN CRISTALES REALES

Dislocaciones parciales:

Supongamos tener 2 dislocaciones con vectores de Burger $\vec{b}_1$ y $\vec{b}_2$. Si hacemos un circuito de Burger que contenga ambas dislocaciones, mediremos, $\vec{b}_1 + \vec{b}_2$, independientemente de la posición de las dislocaciones.

Podemos en particular pensar que las dos dislocaciones se unen para obtener una sola. En este caso, haciendo los circuitos, se tendrá

$$\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$$

El punto donde se unen se denomina nodo.

El criterio para conocer si esta descomposición es energéticamente favorable se basa en el hecho que

$$E \propto b^2$$

y diremos que la descomposición es energéticamente favorable (ganamos energía al hacerla) toda vez que se cumpla que

$$\textcircled{1} \quad b_3^2 < b_1^2 + b_2^2$$

Regla de Frank

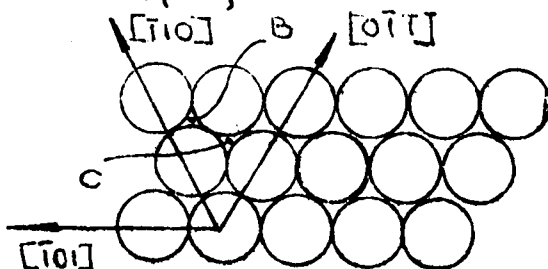
Se desprecia aquí el factor $\lambda \left(\frac{1-\nu}{2} \right)$ contenido en la energía de una dislocación de borde.

Dislocaciones en la red c.c.c. :

Es evidente que debemos considerar separadamente cada tipo de estructura cristalina, ya que para aplicar (1) es necesario conocer los vectores de Burger que son distintos para cada tipo de red.

Comenzamos por la red c.c.c. Se ha observado que en esta estructura el deslizamiento toma lugar en planos $\{111\}$ en la dirección $\langle 110 \rangle$. La red es de las llamadas de empaquetamiento compacto, consiguiéndose la estructura por apilamiento de planos, ubicándolos de manera de conseguir máxima densidad. En el caso c.c.c., los planos que apilamos son justamente los $\{111\}$. Si llamamos A al plano inicial, podemos colocar el siguiente

plano en posiciones B ó C para obtener densidades máximas.



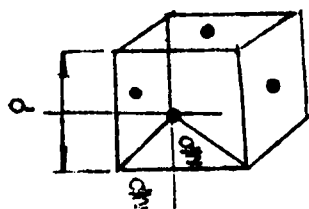
La secuencia de apilamiento para conseguir la red c.c.c. es

... ABC ABC ABC ...

La distancia mínima entre átomos ocurre en las direcciones $[110]$.
Las dislocaciones perfectas con menor vector de Burger, son aquellas en que éste tiene su dirección según las direcciones $[110]$.

Llamamos dislocación perfecta a aquélla que al moverse deja detrás de sí a los átomos en posiciones equivalentes a las que tenían antes de deslizarse.

Si llamamos a al parámetro de la red c.c.c., la distancia entre dos átomos próximos en la dirección $[110]$ es



$$\textcircled{2} \quad \sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}} = \sqrt{\frac{a^2}{2}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

El vector de Burger correspondiente se escribe

$$\vec{b} = \frac{a}{\sqrt{2}} [110]$$

cuyo módulo es

$$b^2 = \frac{a^2}{4} [1^2 + 1^2 + 0^2] = \frac{a^2}{2}$$

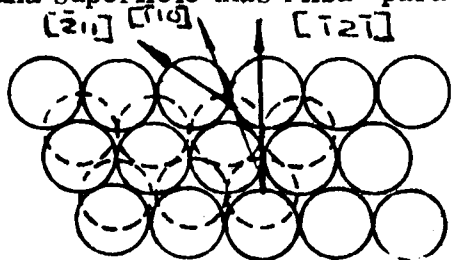
o sea $|\vec{b}| = \frac{a}{\sqrt{2}}$ que coincide con $\textcircled{2}$

En tamaño, el siguiente vector de Burger de esta red podría ser

$$\vec{b} = a [100] \Rightarrow b^2 = a^2$$

el doble de la energía anterior.

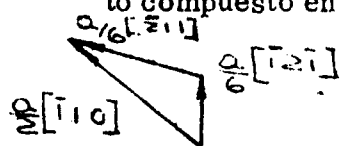
En teoría la dislocación con $\vec{b} = \frac{a}{\sqrt{2}} [110]$ puede deslizarse en cualquiera de los planos que contenga a $[110]$, por ejemplo (100); (110) (111). No tenemos aún teoría que prediga que ocurriría en el (111) y debemos basarnos en la observación experimental. Notamos sí, que los planos (111) ofrecen una superficie más "lisa" para el deslizamiento.



Analícemos más en detalle el comportamiento de la dislocación $\vec{b} = \frac{a}{\sqrt{2}} [110]$ cuando desliza. Notamos dos cosas:

- 1) Para deslizar en un vector de $\frac{a}{\sqrt{2}} [110]$ podemos deslizar el plano en posición B:
 - a) Directamente a la próxima posición B, moviéndolo, por ejemplo, en $\frac{a}{\sqrt{2}} [110]$

- b) Podemos llegar a la misma situación realizando el movimiento compuesto en las direcciones $\begin{bmatrix} 121 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 211 \end{bmatrix}$, o sea



tenemos la reacción

$$\frac{a}{2} [110] = \frac{a}{6} [121] + \frac{a}{6} [211]$$

Energías

$$\frac{a^2}{36} [1+4+1] \quad \frac{a^2}{36} [4+1+1]$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{a^2/6}$

$$\frac{a^2}{4} [1^2+1^2+0] = a^2/2$$

Vemos además que la reacción es energéticamente favorable.

- 2) Si observamos un corte de una dislocación $\frac{a}{2} [110]$ de borde, veremos que hemos introducido en realidad 2 planos extras del tipo $\{110\}$. Estos dos planos pueden en la realidad, deslizar independientemente.

La reacción producida en 1) da como resultado dos dislocaciones parciales, en las que el vector de Burger, produce un deslizamiento que no reproduce la secuencia de apilamiento ABC ABC.

Las dislocaciones del tipo $b = a/6 [11\bar{2}]$ se denominan parciales de Shockley. Observamos que su vector de Burger yace en el plano de deslizamiento y por lo tanto, son móviles.

Ahora bien, las dislocaciones resultantes de la reacción son del mismo signo (y aproximadamente de carácter de borde), según lo que hemos visto anteriormente, habrá repulsión entre ellas tratando de separarse. Sin embargo, al moverse, como su NB no corresponde a la red, dejarán detrás de sí una falla de apilamiento. Esta es una zona de mayor energía que el resto del cristal, y tiene asociada entonces una energía superficial.

Las dislocaciones se separarán entonces hasta una situación en la que se minimice la energía total

$$E_T = E_1 + E_2 + E_{12} + \gamma d$$

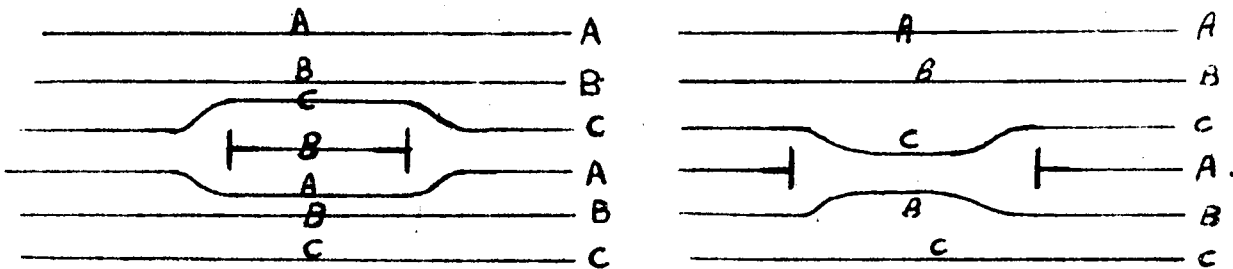
donde γ es la energía de falla de apilamiento y d la separación entre parciales.

Los metales pueden dividirse, desde este punto de vista, según su energía de falla de apilamiento. Algunos valores típicos son

Al	200
Ni	400
Cu	73
Ag	17

$$\delta [\text{vegs}/\text{cm}^2]$$

Un tipo de dislocación sésil (ir-móvil) puede construirse quitando o insertando en la misma un pedazo de plano de empaquetamiento compacto



En a, la remoción de parte de un plano produce dos dislocaciones de borde de signo opuesto, lo mismo en b. Observamos que la región entre las dislocaciones está fallada

En a ABC ABC ABC BC ABC
 En b ABC ABC ABC B ABC doble falta

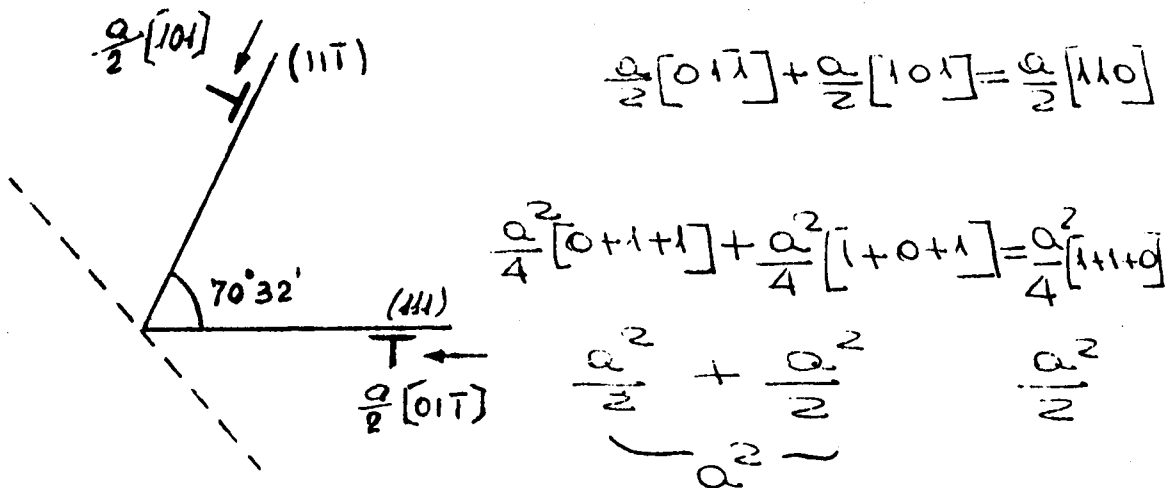
En a tenemos una falla intrínseca (simple)
 En b tenemos una falla extrínseca (doble)

El vector de Burger de estas dislocaciones resulta de sacar o poner parte de un plano $\{111\}$ es perpendicular al plano $\{111\}$. Su magnitud es la distancia entre planos $\{111\}$ o sea $a/\sqrt{3}$. El vector de Burger de estas dislocaciones denominadas parciales de Frank es

$$\vec{b} = \frac{a}{3} [111]$$

son además sésiles, ya que su $\sqrt{3}\vec{b}$ es perpendicular al plano de deslizamiento.

Reacciones entre dos dislocaciones totales: Supongamos tener dos dislocaciones del tipo $\frac{a}{2} [110]$ en planos (111) diferentes, tales como el (111) y el $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$. La intersección ocurre a lo largo de $[\bar{1}10]$. La reacción



La dislocación resultante es la de borde: la dirección de la dislocación $\frac{a}{2} [110]$ es perpendicular a VB $\frac{a}{2} [110]$.

Su plano de deslizamiento sería el (001) que no es un plano de deslizamiento en la estructura ccc. La dislocación es sésil y servirá de barrera a dislocaciones que intenten moverse en estos planos.

Cottrell propuso el siguiente análisis para el caso en que las dislocaciones $\frac{a}{2} [110]$ están disociadas según:

$$\frac{a}{2} [01\bar{1}] = \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6} [11\bar{2}]$$

$$\frac{a}{2} [101] = \frac{a}{6} [2\bar{1}1] + \frac{a}{6} [112]$$

(parciales de Shockley, que son móviles)

Ahora dos parciales, una de cada plano se combinan

$$\frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6} [2\bar{1}1] = \frac{a}{6} [110]$$

$$\frac{a^2}{36} [1+4+1] + \frac{a^2}{36} [4+1+1] = \frac{a^2}{36} [1+1]$$

$$a^2/6 + a^2/6 = a^2/3$$

La dislocación producida es sésil.

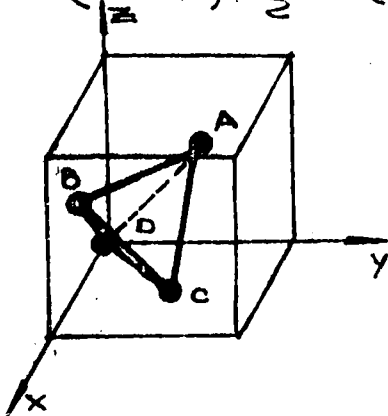
Además se puede verificar que la energía total de la $\frac{a}{6} [110]$ más las dos dislocaciones parciales restantes es menor que la energía de una dislocación, única dislocación del tipo $\frac{a}{2} [110]$ resultante de la reacción.

Esta reacción y decomposición resulta en la llamada barrera de Lower-Cottrell.

El tetrahedro de Thompson:

Un medio gráfico de representar las reacciones mencionadas arriba es el llamado tetrahedro de Thompson. Este tiene vértices en los puntos

$$\frac{1}{2}a(011); \frac{1}{2}a(101); \frac{1}{2}a(110) \text{ y } (000)$$



Las caras del tetrahedro son los cuatro planos $\{111\}$ y sus intersecciones las direcciones $\langle 110 \rangle$.

Llamamos ABC y D a los vértices y el centro de las caras α, β, γ y δ a la opuesta a A, B, C y D respectivamente.

Las dislocaciones se representan:

1) Dislocaciones del tipo $\frac{a}{2}[110]$: por las aristas AB, BC, etc., atendiendo a la dirección y sentido.

2) Parciales de Shockley: por los vectores $B\alpha, \alpha C, B\gamma$, etc. En el plano de deslizamiento α se tiene

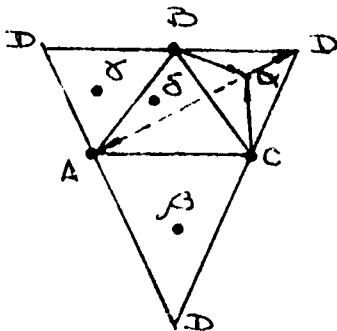
$$\overline{AB} = \overline{A\delta} + \overline{\delta B} \text{ en } \delta$$

C BIEN

$$\overline{AB} = \overline{A\gamma} + \overline{\gamma B} \text{ en } \gamma$$

y además

$$B\alpha + C\alpha = \alpha D$$



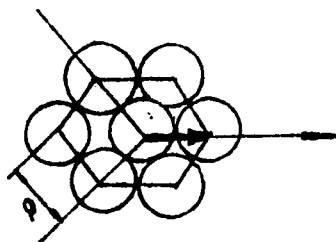
3) Parciales de Frank: en este caso el VB es perpendicular (111) y se representa por los vectores $\alpha A, \beta B, \gamma C$ etc.

Una reacción que elimina la falla es



Dislocaciones en la red hc:

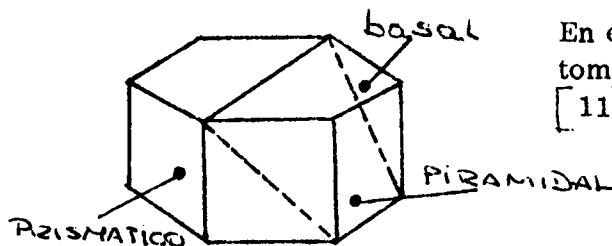
En este caso puede considerarse el empaquetamiento compacto producido al apilar los planos basales en la secuencia ... ABABAB ...



El menor VB posible es en este caso

$$\vec{b} = \frac{a}{3} [2\bar{1}10]$$

De los planos que contienen este vector, se ha observado deslizamiento en el basal (0001); prismático (10 $\bar{1}$ 0) y el piramidal (10 $\bar{1}$ 1).



En estos dos últimos, el deslizamiento toma lugar también en las direcciones $[11\bar{2}3]$.

El tipo de plano de deslizamiento observado depende de la relación c/a. El cristal hc perfectamente empaquetado se caracteriza por una relación c/a = 1,633.

Metal	c/a
Cd	1,886
Zn	1,856

Se observa que los metales con c/a > 1,633 deslizan fundamentalmente en el plano basal.

Mg	1,623
Ti	1,591

En c/a < 1,633 se favorece los otros dos tipos de deslizamiento.

Disociaciones y parciales:

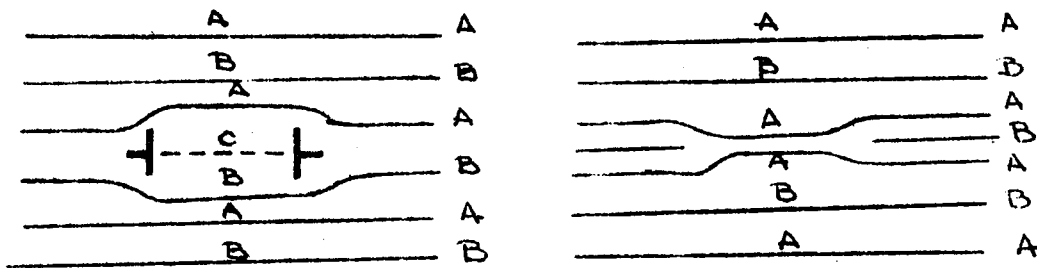
Como en el caso de la estructura c.c.c. podemos describir dos tipos de parciales:

- 1) Parciales de Shockley (móviles). Corresponden a deslizamientos en la dirección $[\bar{1}100]$ y su VB es del tipo $\frac{a}{3} (1100)$

La reacción de decomposición de la dislocación unitaria es:

$$\frac{a}{3}[2\ 1\ \bar{1}\ 0] = \frac{a}{3}[1\ 0\ \bar{1}\ 0] + \frac{a}{3}[1\ \bar{1}\ 0\ 0]$$

En este tipo de cristales se puede producir un par de parciales de Frank por condensación de un plano extra, con la secuencia de apilamiento



ABACBAB. Pero el caso de condensación de vacancias produce ABAABA aparecen dos tipos idénticos de planos yuxtapuestos, situación incompatible con el empaquetamiento compacto. Por ello no existen dislocaciones simples de Frank con faltas simples. Puede sí ocurrir que haya un desplazamiento en la región de la falla, de sitios A a sitios B o de B $\rightarrow$ C. La secuencia de apilamiento es ABAB/CBCB o ABABA/CACA. Esta es una dislocación compuesta de Shockley-Frank.

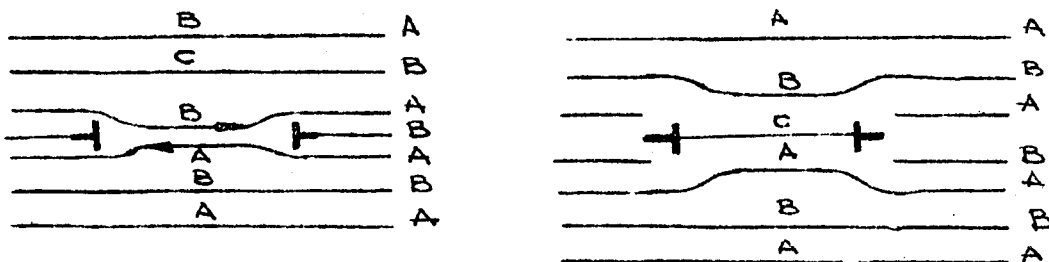
El VB de la dislocación de Frank es:

$$\bar{b} = \frac{a}{2}[0001] \text{ perpendicular al plano basal}$$

y el de la Frank-Shockley

$$\bar{b} = \frac{a}{6}[2\ 0\ \bar{2}\ 3]$$

Las dislocaciones compuestas tienen la forma:

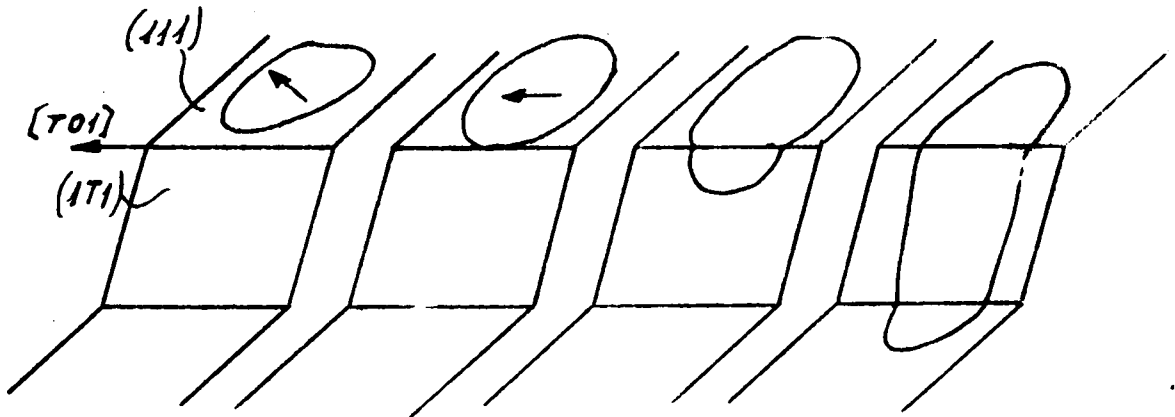


TIPOS DE MOVIMIENTO DE UNA DISLOCACION

Volvamos ahora a las dislocaciones. Hemos visto que el movimiento de ellas produce deformación plástica. Existen fundamentalmente dos tipos de movimiento:

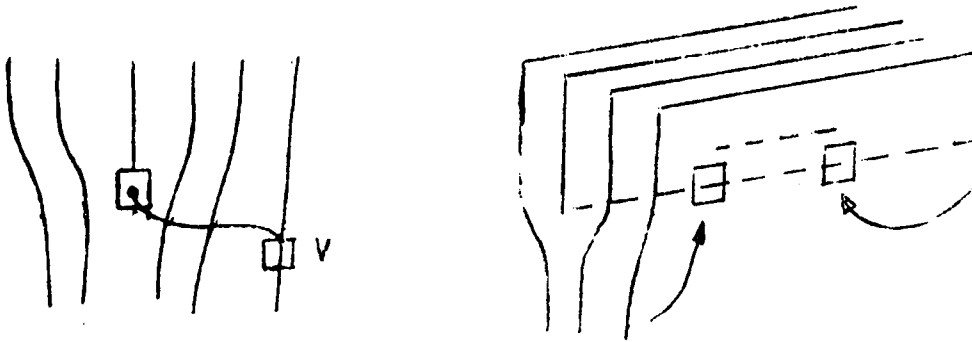
- 1) Movimiento conservativo: es el caso de deslizamiento. La condición para que ocurra este movimiento es de que el vector de Burger de la dislocación esté contenido en el plano de deslizamiento, realizándose éste en este plano.

Un caso particular de este tipo de deslizamiento es el de deslizamiento cruzado



Si tenemos el caso de una estructura como la de en el que la dislocación desliza en planos $\{111\}$ de los que hay por lo menos dos que se intersectan (alrededor de una dirección $(\bar{1}01)$). El loop que se expande en el plano (111) tiene su región de hélice que se aproxima a la intersección en la dirección $[\bar{1}01]$. Si el esfuerzo resuelto en el plano (111) es lo suficientemente alto, la dislocación tenderá a moverse en este plano, en donde prosigue la expansión, para volver después (o no) al plano (111) (deslizamiento cruzado doble). Obsérvese que hemos tomado la parte de hélice para realizar deslizamiento cruzado, ya que el hecho de que su vector de Burger sea paralelo a la línea de dislocación permite una total elasticidad en la elección del plano de deslizamiento.

- 2) Movimiento no conservativo: A temperaturas en las que hay difusión, puede ocurrir que la dislocación se mueva fuera de su plano de deslizamiento. Esto ocurre por un proceso de transporte de materia o, lo que es lo mismo, por difusión de vacancias a la dislocación. Ahora bien, para que la dislocación trepe un espaciado atómico debe llegar una vacancia a cada plano atómico que la dislocación intercepta en forma coordinada y esto es difícil que ocurra.



En cambio pueden llegar vacancias a átomos vecinos del extremo del plano extra, haciendo trepar tan solo una sección de la dislocación y formando jogs en aquellos lugares donde se absorbieron las vacancias. Vemos también como es que las dislocaciones pueden actuar como sumidero de vacancias, a temperaturas suficientemente elevadas como para que éstas se muevan (difusión). Para que la dislocación siga trepando, debe moverse el jog en la dirección de la línea de dislocación.

Esto ocurrirá toda vez que el jog absorba una vacancia.

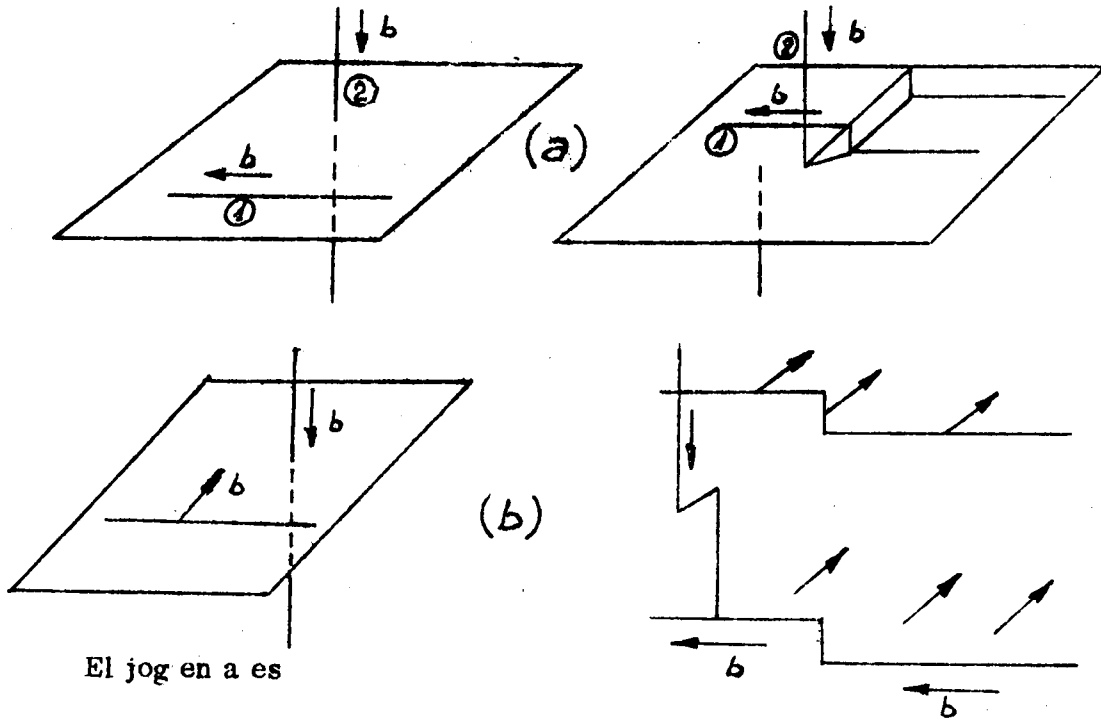
La energía de formación de un jog es ~ 1 eV, y se puede calcular como lo hemos hecho para las vacancias que existen en concentración de jogs en equilibrio, según

$$n_j = n_0 \exp(-U_j/kT)$$

donde n_0 es el número de sitios atómicos por unidad de longitud de la dislocación. Si $n_0 = 1$ a temperatura ambiente $kT \sim \frac{1}{40} \text{ eV}$

$$n_j = \exp(-40) = \frac{1}{e^{40}} \sim 1 \text{ en } 10^{17} \text{ sitios}$$

Los jogs se producen también durante la deformación plástica cuando dos dislocaciones se intersectan. Analicemos ésto en detalle:



pero el jog es de borde, e impide el movimiento de la dislocación (solo puede moverse por trepado, con el auxilio de defectos de vacancias o intersticiales).

DEFORMACION Y VELOCIDAD DE DEFORMACION

Al moverse las dislocaciones se produce deformación plástica E_p . Veamos cuál es la relación cuantitativa que liga ambos hechos

Al aplicar σ cada dislocación se mueve L

El trabajo realizado al moverla será (cada uno)

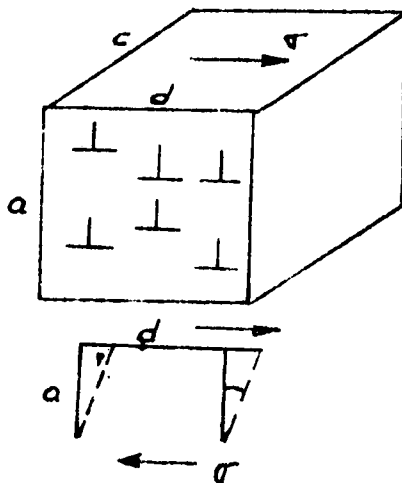
$$W = \sigma b \cdot c \cdot L$$

y si hay n dislocaciones

$$W = n \sigma b c L$$

La fuerza externa hace el trabajo

$$W_{EXT} = \sigma d c \cdot X$$



X es la distancia que se ha movido en promedio la superficie. Para deformación de corte se tiene

$$\bar{\epsilon} = \frac{\bar{x}}{a}$$

o sea $W_{\text{EXT}} = \int_0^{\bar{\epsilon}} \sigma d\epsilon$. Como ambos trabajos deben ser iguales se tiene

$$n \phi b \phi L = \phi d \phi a \bar{\epsilon}$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{n b L}{d a} = \rho b L$$

donde ρ es la densidad de dislocaciones (cm^{-2}).

En cristal recocido $\rho \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$ luego de deformar $\rho \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

La velocidad de deformación es ahora

$$\dot{\epsilon} = \rho b v = \rho b N$$

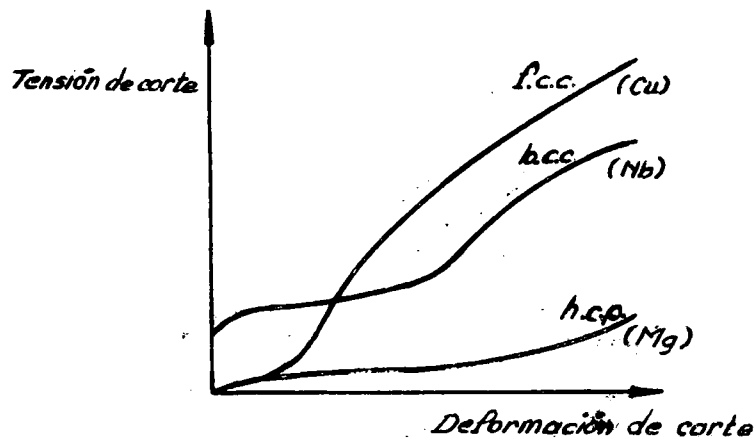
donde N es la velocidad de las dislocaciones.

Endurecimiento por trabajado

Las propiedades de un metal son drásticamente alteradas por el trabajado en frío : deformación a una temperatura baja relativa a la de fusión. En general la deformación incrementa la resistencia y la dureza pero disminuye la plasticidad y maleabilidad. Entre las propiedades físicas disminuye la conductividad eléctrica, la densidad, etc. La tensión de fluencia de un acero se incrementa por trabajado del orden de 170 MN/m^2 a 1050 . Por lo tanto el endurecimiento es muy importante tecnológicamente. Para trabajar un metal dependiendo de la rapidez con que endurece hay que someterlo a recocidos intermedios.

Dado que la deformación ocurre por el movimiento de dislocaciones el hecho que el material endurezca implica que una dificultad creciente ya sea de crear dislocaciones o de moverlas. Dada la facilidad de generar dislocaciones en fuentes del estilo de Frank-Read las teorías de endurecimiento en general se ocupan de los obstáculos a su movimiento por barreras como las que discutiremos en la próxima sección.

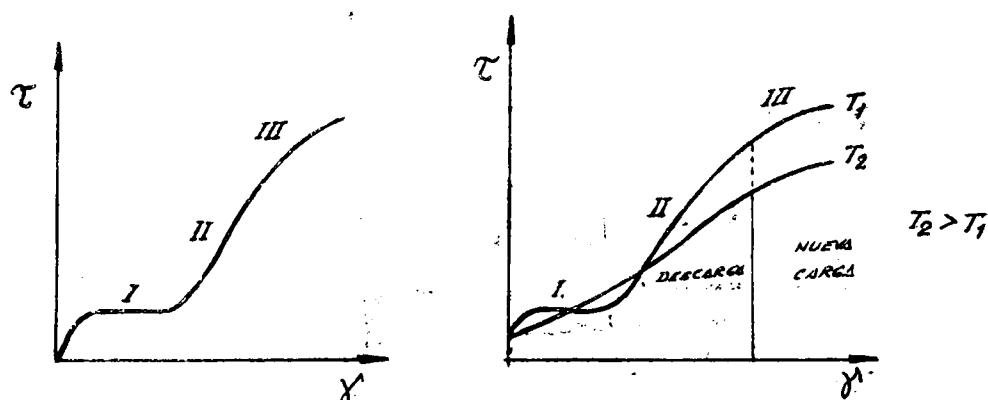
En el caso de la deformación de un policristal en el que actúan simultáneamente múltiples sistemas de deslizamiento la curva tensión-deformación es aproximadamente parabólica. En el caso de monocristales hay un desvío considerable de este comportamiento. La forma de la curva depende de la estructura cristalina, orientación del cristal, pureza y condiciones de la superficie.



En el caso de algunos monocristales hexagonales en que sólo ocurre deslizamiento en una familia de planos (basales) hay poco incremento de la dureza por trabajado. La pendiente $d\tau/d\gamma$ es aún más pequeña al aumentar la temperatura de deformación. Los metales cúbicos, por otro lado, deforman en forma compleja en más de un sistema y muestran generalmente alto endurecimiento por trabajado. Pero aún en estos el endurecimiento puede reducirse notablemente si se orienta en tal forma que sólo un sistema actúe.

Los tres estadios de endurecimiento en un cristal f.c.c.

Los cristales en los cuales se comprende más los distintos estadios del endurecimiento son los de estructura f.c.c. y h.c.p. El cristal f.c.c. convenientemente orientado muestra tres estadios.



a) Estadío I o región de deslizamiento fácil, inmediatamente luego del punto de fluencia y tiene bajo endurecimiento, la longitud de esta región depende de la orientación, pureza y tamaño del cristal. El coeficiente de endurecimiento $\theta_I = d\tau/d\gamma \approx 10^{-4} \mu$ es similar al de metales h.c.p.

b) Estadío II, o región de endurecimiento lineal, muestra un rápido incremento en el endurecimiento. La pendiente θ_{II} es aproximadamente independiente de la tensión, temperatura y orientación ($\theta_{II} \approx 1/300 \mu$). En este estadío se forman súbitamente líneas de deslizamiento cortas durante la experiencia, o sea para un pequeño incremento ΔT , y luego no crecen ni en longitud ni en intensidad. La longitud de estas se muestran en la tabla en el caso de una experiencia en cobre.

Deformación (%)	L (micrones)
12.5 a 17.5	35
12.5 a 21.8	30
20.0 a 24.3	20
20.0 a 28.0	20

c) Estadío III, o región de endurecimiento parabólico, su comienzo depende fuertemente de la temperatura, θ disminuye y aparecen líneas gruesas de deslizamiento. Esta disminución del endurecimiento se halla probablemente vinculada a la aniquilación de dislocaciones por deslizamiento cruzado.

La aparición de estos tres estadios parece depender de la energía de falla de apilamiento; por ello es que en aluminio no se observan a temperatura ambiente, apareciendo sólo el I y el III.

Es razonable esperar que el estadio I termine y comience el flujo turbulento cuando el cristal alcanza una orientación para la cual dos o más sistemas soportan igual tensión resuelta. Sin embargo este estadio termina antes de alcanzar esta configuración debido a la formación de bandas de deformación para acomodar la rotación de los planos de deslizamiento durante la experiencia.

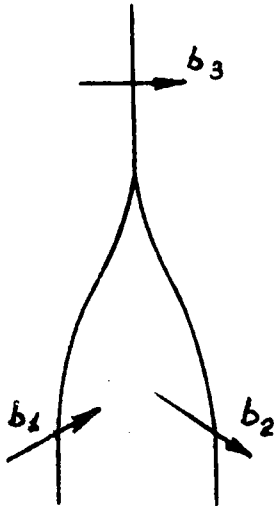
La característica principal del estadio II es que el deslizamiento ocurre en más de un sistema. Por ello nuevas irregularidades de la red incluyendo : 1) la foresta de dislocaciones, 2) barreras de Lomer-Cottrell que explicamos en la próxima sección y 3) jogs. Por lo tanto la tensión debe superar i) campos elásticos debidos a la foresta, ii) campos de largo alcance debidos a grupos de dislocaciones anclados atrás de barreras y iii) fricción en el movimiento de la dislocación debida a jogs. En un material estos 3 mecanismos pueden ser importantes.

El decremento del endurecimiento en el estadio III demuestra que a suficiente tensión o temperatura las dislocaciones que se encontraban ancladas en el estadio II pueden moverse de acuerdo a un nuevo mecanismo. El comienzo del estadio III se caracteriza por el deslizamiento cruzado y las líneas de deslizamiento son gruesas y consisten de segmentos unidos por las trazas de deslizamiento cruzado. Otra demostración de la inestabilidad de la configuración de dislocaciones se muestra por el proceso de ablandamiento por trabajado. Si un cristal se lo deforma a una temperatura T_1 hasta el comienzo del estadio tres y luego se descarga la probeta y calienta a una temperatura T_2 la curva de deformación luego de una inestabilidad continúa sobre la que correspondería a una deformación desde el cristal virgen a esta temperatura. O sea hubo un reordenamiento de la estructura de dislocaciones.

REACCIONES, FORMACION DE BARRERAS

En general, se puede descomponer una dislocación en dos o más componentes que reaccionan en un nodo. La condición que se cumple es:

$$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \vec{b}_3$$



El método de establecer cuál configuración es estable se basa en la ecuación para la energía propia de una dislocación

$$E = \alpha \mu b^2$$

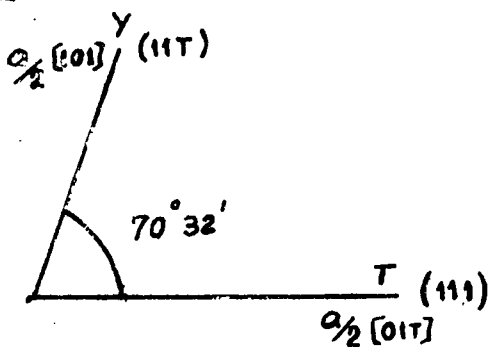
de manera que en una reacción del tipo

$$\vec{b}_3 \rightarrow \vec{b}_1 + \vec{b}_2$$

la reacción ocurrirá espontáneamente en el sentido indicado si (Regla de Frank)

$$b_3^2 > b_1^2 + b_2^2$$

Lo importante de estas reacciones es que a veces ocurren para formar barreras, es decir, dislocaciones sésiles, que no se pueden mover en el plano de deslizamiento. Veamos un ejemplo en la estructura ccc. Dislocaciones deslizan en planos $\{111\}$ y tienen vectores de Burger de la forma $a/2 [110]$. La intersección de los dos planos de la figura es $\parallel [\bar{1}10]$



En esta intersección ocurre la reacción

$$\frac{a}{2} [01\bar{1}] + \frac{a}{2} [101] = \frac{a}{2} [110]$$

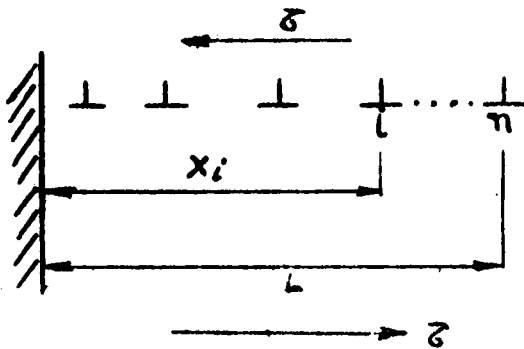
$$\begin{aligned} \frac{a^2}{4} (0+1+1) + \frac{a^2}{4} (1+0+1) &= \\ &= \frac{a^2}{4} (1+1+0) \end{aligned}$$

Pero el plano de deslizamiento de la nueva dislocación, es decir, el plano que contiene la línea de dislocación y el vector de Burger, es un plano (001), que no es un plano de deslizamiento de la estructura ccc. (La normal a este plano, $[001]$ se halla haciendo el producto vectorial del

vector tangente a la línea y su vector de Burger). Por lo tanto, esta dislocación resultante no se puede mover, es sésil.

APILAMIENTOS

Si ahora se producen dislocaciones que intentan moverse hacia la dislocación resultante de la reacción, las dislocaciones sucesivas verán impedido su movimiento por la presencia de la barrera.



Bajo un esfuerzo aplicado τ se forma un apilamiento de n dislocaciones cuya distribución es calculable a partir de la condición de equilibrio según la que la fuerza total que actúa sobre cada dislocación es cero. Para la i -ésima dislocación se tiene

$$\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{x_i - x_j} - \tau b = 0$$

resoluble por métodos iterativos. El resultado más importante es el hecho que la primera dislocación estará sometida a un esfuerzo total

$$\tau^* = n\tau$$

y el ancho del apilamiento es

$$L \sim n\mu b / \pi \tau$$

Se puede también calcular el campo elástico a distancias $L < x < \infty$ que resulta

$$\sim \tau \left(\frac{L}{x} \right)^{1/2}$$

y en $x \gg L$ donde

$$\tau = \frac{n\mu b}{2\pi(1-\nu)x}$$

es decir que el apilamiento se comporta en este caso como una dislocación de vector nb localizada en el origen.

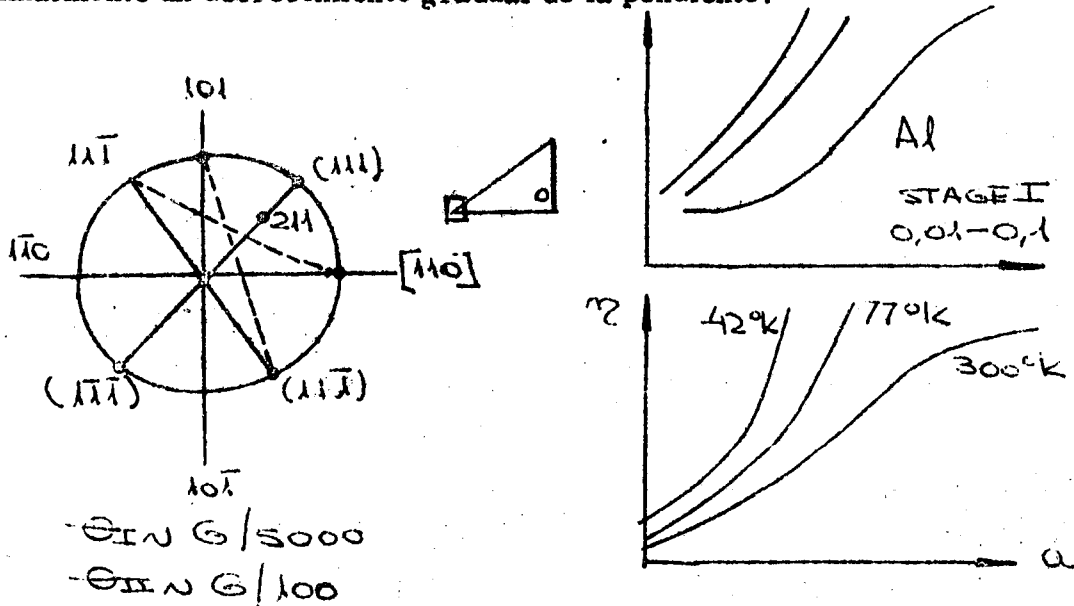
Energía acumulada

$$E = \frac{\mu n^2 b^2}{4\pi(1-\nu)} \left[1 + \log \frac{2R}{L} \right]$$

L R el pile-up se comporta como una única dislocación de energía por vector nb .

Endurecimiento por trabajado de metales c.c.c. y h.c.

Características de la deformación. Curvas características (ver fig.). A medida que la deformación progresa se tiene una zona con pendiente $\theta_I > 0$. Dependiendo de la orientación del eje de tracción aparece a más o menos deformación una región de rápido endurecimiento lineal con θ_{III} . Ocurre finalmente un deoecimiento gradual de la pendiente.



Teoría de Taylor

$$\sigma \sim \frac{1}{2\pi} \frac{Gb}{r}$$

distancia media entre dislocaciones

$$\therefore \sigma_i = \frac{1}{2\pi} Gb \sqrt{\rho}$$

Además

$$\epsilon = \rho b L$$

$$R \sim 1/\sqrt{\rho}$$

reemplazando ϵ

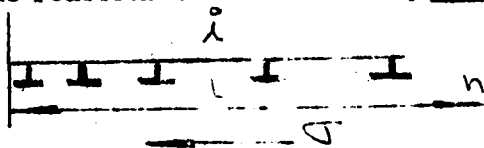
$$\sigma = \frac{1}{2\pi} G b \sqrt{\frac{\epsilon}{Lb}} = \frac{1}{2\pi} G \sqrt{\frac{\epsilon}{L}} \epsilon^{1/2}$$

Dependencia parabólica $\sigma - \epsilon$, anda bien para policristales.

Teoría de Seeger

Etapa I. Un solo plano de activación activado. Esfuerzos con los mismos que determinan esfuerzo crítico.

Etapa II. Aparece deslizamiento en planos conjugado. Posibilidad de reacciones con barreras y apilamientos.



En equilibrio, la fuerza total que actúa sobre cada dislocación es 0.

Para la dislocación i

$$\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \sum_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{x_i - x_j} - \sigma b = 0$$

La fuerza combinada sobre la primera dislocación resulta

$$\sigma^* = n\sigma$$

en el sentido de la tensión aplicada.

El ancho del pile-up es

$$L \sim \frac{n G b}{\pi \sigma}$$

En forma aproximada: Dislocaciones en equilibrio bajo fuerzas sobre

ellas $\left\{ \begin{array}{l} \text{campo externo} \\ \text{campo otras dislocaciones} \end{array} \right.$

Si la cabeza se mueve δx , todas se mueven δx . Trabajo fuerza externa $n\sigma b \delta x$. Trabajo hecho por la cabeza $\sigma^* b \delta x$

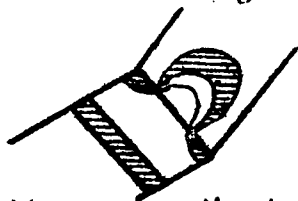
$$n\sigma = \sigma^*$$

Tensión relajada a cero en círculo radio L centrado en la fuente. La deformación se relaja de σ/σ_0 en L por desplazamiento de $2L\sigma/\sigma_0$, producido por n dislocaciones de b

$$nb = 2L\frac{\sigma}{\sigma_0} \Rightarrow n = \frac{2L\sigma}{\sigma_0 b}$$

Estado III. σ_3 depende de la temperatura $\Rightarrow$ hay proceso activación térmica.

Problema relacionado además con la energía falla (mayor dependencia en Cu, baja energía falla) lo que ocurre es el deslizamiento cruzado de dislocaciones de hélice. Energía $\sim 1-2 \text{ eV}$. Esto relaja apilamientos.



Problema con apilamientos: Microscopía electrónica.

Teoría de Hirsch

Estado I: formación de dipolos e interacción dipolo dislocación.

Estado II: interacción con paredes y madejado de dislocaciones.

Deformación de metales b.c.c.. Fenomenología. Los planos de deslizamiento encontrados son de 4 tipos $\{110\}$, $\{112\}$, $\{123\}$ e irracionales, teniendo como dirección la $\langle 111 \rangle$.

Hay creciente evidencia experimental que indica que no hay un sistema único de deslizamiento, en los comienzos de la deformación, aún para cristales orientados favorablemente para deslizamiento único. Esta aparente falla de la ley de Schmidt no tiene aún una explicación congruente.

Hasta época reciente (1963) no se había obtenido una curva similar a la ya mostrada para f.c.c.*

* En este caso se obtiene que el estado I aumenta a medida que nos alejamos de la línea de simetría $[001]$ - $[101]$

La dependencia con T a bajas temperaturas es en cambio muchísimo más pronunciada.

Dependencia C/T disminuye longitud estado I a medida que aumenta T por encima T_A .

Es difícil en el estado actual dar una teoría coherente como la que presentamos para metales cfc y hc.

Las dificultades estriban en las siguientes características:

- 1) Asimetría.
- 2) Estructura de las dislocaciones: no hay falla de apilamiento, sino reordenamiento del núcleo en tres planos cristalográficos.

Puede decirse, sin embargo, que en este caso se tiene una contribución importante de la barrera de Peierls-Nabarro. Se discute aún si no es comparable el efecto de solutos (intersticiales) por medios de endurecimiento que veremos enseguida.

Efectos de aleación

Dos efectos en general:

- 1) Aumento del esfuerzo crítico resuelto.
- 2) Alteraciones de la curva.

La adición de soluto incrementa el esfuerzo resuelto, hasta un máximo en el 50% (cuando hay solubilidad).

La dependencia con T es mayor curva $\tau_{\text{EGAO}} T$.

Para aleaciones diluidas, incrementa la región I de la curva $\tau - \alpha$. También prolonga el estado II, llevando τ_{III} y σ_{III} por encima de los valores del solvente $\Rightarrow$ la adición de soluto es desfavorable al proceso de cross-slip (por ejemplo, reduciendo la energía de falla de apilamiento).

Veamos lo que ocurre a conc. pequeñas (impurezas).

La impureza introduce una distorsión de la red alrededor de sí misma. Por ello es más "cómodo" situarse en el núcleo de la dislocación.

Veamos la energía de interacción. Esta generalmente será:

$$U = \overline{\sigma \epsilon} = \frac{1}{2} \sum_k \sigma_{ik} \epsilon_{ik}$$

σ_1 campo debido a dislocación
 σ_2 campo debido a impureza

Suponemos que los campos se superponen

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$$

y también

$$\epsilon = \epsilon_1 + \epsilon_2$$

$$U = \int_V \sigma \epsilon dV = \int_V (\sigma_1 + \sigma_2)(\epsilon_1 + \epsilon_2) dV =$$

$$= \int_V \sigma_1 \epsilon_1 dV + \int_V \sigma_2 \epsilon_2 dV + \int_V (\sigma_1 \epsilon_2 + \sigma_2 \epsilon_1) dV$$

las energías no se superponen.

Usando elasticidad se encuentra que $\sigma_1 \epsilon_2 = \sigma_2 \epsilon_1$

$$U_I = 2 \int_V \underbrace{\sigma_1 \epsilon_2}_A dV = 2 \int_V \underbrace{\sigma_2 \epsilon_1}_B dV$$

A representa trabajo de la dislocación debido a un desplazamiento de la impureza

B viceversa

Tomamos A y suponiendo que la impureza produce una distorsión esférica

$$r_0 \rightarrow r_0(1+\alpha)$$

Además, según el teorema de Green

$$U_I = 2 \int_V \sigma_1 \epsilon_2 dV = 2 \int_S \sigma_1 s_2 df$$

$$\text{CON } \epsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_i}{\partial x_k} - \frac{\partial s_k}{\partial x_i} \right) \quad s = \text{VECTOR DESPLAZ.}$$

El campo de la dislocación a distancia $\frac{r}{r_0}$ es

$$\sigma_1 \cong Gb/r$$

$$U_I = 2 \frac{Gb}{r} \cdot r_0 \alpha 4\pi r_0^2 = 2\pi Gb \alpha \frac{r_0^3}{r}$$

En realidad la tensión debida a la dislocación varía punto a punto sobre la supuesta esfera. En general $U_I \sim \frac{A}{r} f(\psi)$

Caso vacancia: Al introducir vacancia en cristal creamos zona relajada y la energía disminuye. Disminución $\propto$ energía almacenada en la región por la dislocación $U_i = -A/r^2$

Para una IMPERF. esférica el trabajo es solo hecho por las composiciones hidrostáticas hacen trabajo

$$W = p \Delta V = \frac{1}{3\pi} \frac{(1+\nu)}{1-\nu} G b \Delta V a \frac{\sin \theta}{r}$$

ya que

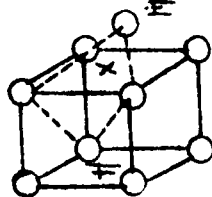
$$p = -\frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

$$\Delta V a = 4\pi \epsilon a^3 \quad \text{ó} \quad r_0^3$$

W tiene valor máx + en $\theta = \frac{\pi}{2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \phi \end{array} \right\}$

con r lo más pequeño posible; y el valor máximo negativo ocurre para $\theta = \frac{3\pi}{2}$. La energía de unión es $\sim 1 \text{ eV}$

Observamos que el cálculo daría una interacción nula para dislocaciones de hélice, ya que éstas no tienen composición hidrostática (solo de corte). Sin embargo, es posible probar que ésta existe en algunos casos). Por ejemplo tomemos el caso de los sitios intersticiales octahedricos



en c.c. La introducción de un intersticial produce una distorsión, tendiendo a separar los átomos F y E. En tal caso, hay tanto una composición hidrostática como una de corte. Cockhart, Shoeck y Wiedersich (1955) calcularon para dislocaciones hélice

$$U_i = \frac{\sqrt{2}}{3\pi} G b a^3 (\epsilon_1 - \epsilon_2) \frac{\cos \theta}{r} \quad \begin{array}{l} \epsilon_1 \text{ según } z \\ \epsilon_2 \text{ " } x \text{ y } y \end{array}$$

posiciones favorables ocurren en posiciones equivalente a 120° una de la otra y la energía de interacción es $\sim 0,75 \text{ eV}$.

Otra contribución proviene de la diferencia entre las propiedades elásticas de la matriz y el soluto (Fleisher, 1961). Particularmente importante para soldaduras sustitucionales. La relación entre la contribución por cambio de volumen y por cambio de corrientes elásticas es:

$$\frac{\sigma^y}{\sigma^e} \approx \frac{4\pi^2(1-\nu)}{b} \frac{y}{\epsilon_0} \approx 24 \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \frac{y}{b}$$

$$\epsilon_0 = \frac{\Delta G}{G} = \frac{G^{sol} - G}{G} \quad G: \text{mod. corte matriz}$$

y: distancia del plano de deslizamiento al átomo, Fleisher encuentra

$$\sigma^y / \sigma^e \approx 1$$

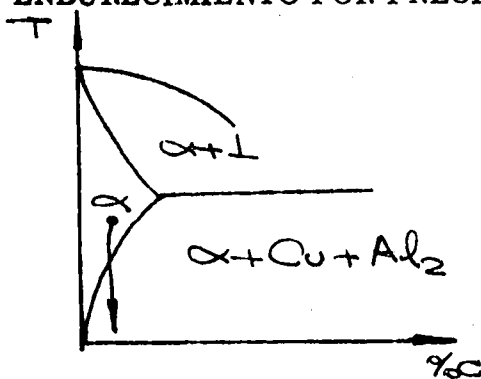
En el caso de vacancias éstas son atraídas hacia la región comprimida por encima del plano de deslizamiento en el caso de una dislocación de borde. La energía de interacción es (Bullough and Newman, 1962).

$$U_i = \frac{5Gb^2}{\pi(1-\nu)(7-5\nu)} \cdot \frac{r_0^3}{r^2} \left[1 - \frac{1+6\nu-5\nu^2 \sin^2 \theta}{5} \right]$$

y para el caso de la dislocación de hélice

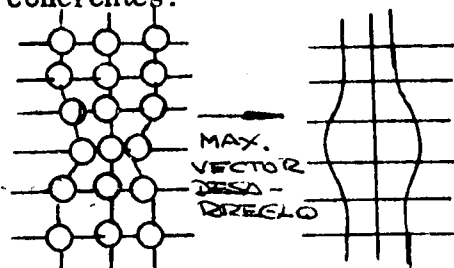
$$U_i = -\frac{5Gb^2(1-\nu)}{\pi(7-5\nu)} \cdot \frac{r_0^3}{r^2} \quad r_0 \text{ rad. nac.}$$

ENDURECIMIENTO POR PRECIPITACION



Ejemplo diagrama Al-Cu

2 tipos precipitados: coherentes e incoherentes:



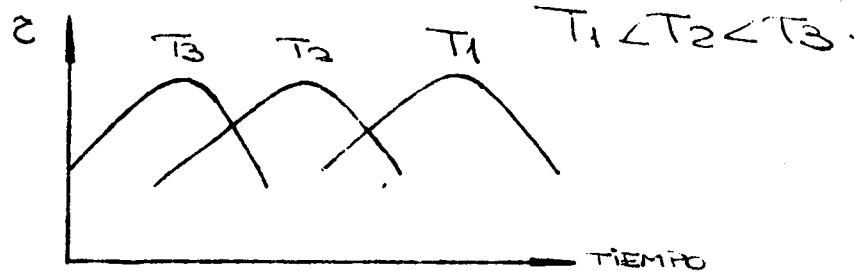
El cristal acomoda el cambio de tamaño por una deformación elástica: caso coherente.

La deformación elástica puede ser relajada por:

- 1) Creación de dislocaciones en la matriz.
Formación de una interfase de dislocaciones (límite semicoherente)

- 2) Creación de un límite de alto ángulo por difusión en volumen.

Recocidos (cinéticas) de las estructuras desarrolladas según diagrama



Esto fué explicado por Mott & Nabarro (1948-1952). Se supone que la resistencia al movimiento de la dislocación proviene del campo elástico del precipitado esférico, de radio r que a distancia r vale

$$G \epsilon r_0^3 / r^3 \quad r > r_0$$

Si el cristal contiene N partículas por unidad de volumen. La concentración atómica de soluto será

$$\text{VOL PART} \times \frac{\# \text{PARTIC.}}{\text{VOLUMEN}} = \frac{4}{3} \pi r_0^3 N$$

En promedio, la distancia a una partícula es $\frac{1}{2} N^{-1/3}$. La deformación promedio es

$$\frac{G r_0^3}{r^3} = \epsilon \frac{r_0^3}{\left(\frac{1}{2} N^{-1/3}\right)^3} = 8 \epsilon r_0^3 N$$

y el esfuerzo es entonces

$$G \epsilon \frac{r_0^3}{r^3} = 8 G \epsilon r_0^3 N \frac{4}{3} \pi \frac{3}{4} \frac{1}{\pi} \quad \sigma \approx 2 G \epsilon c.$$

que es independiente de Λ , la distancia entre partículas, lo que significaría que la aleación es siempre endurecida, independientemente del estado de dispersión.

Por otro lado, si se toma un promedio algebraico, lo que da un esfuerzo = 0 sobre la dislocación, si se supone que esta es una línea rígida de longitud $L \gg \Lambda$

Sabemos, sin embargo, que la línea de dislocación se comporta como

una línea elástica, flexible. En esta aproximación la fuerza sobre la dislocación es

$$F = \sigma b = \tau / R \quad R = \frac{1}{2} G b^2$$

Debe ser
$$R = \frac{\tau}{\sigma b} = \frac{1}{2} \frac{G b^2}{\sigma b} = \frac{G b}{2\sigma}$$

$$\sigma \geq \sigma_i = G \alpha C_i$$

o sea

$$R = \frac{G b}{2\sigma} = \frac{b}{2\alpha C_i}$$

consideramos tres casos:

- a) Dispersión fina $\Lambda \ll R_i$

El radio de curvatura es mucho mayor que la distancia entre precipitados. En promedio, la fuerza que se opone al movimiento de la dislocación es muy pequeña

$$\sigma = G \epsilon^2 C$$

o bien

$$\sigma = 2.5 G \epsilon^{4/3} C$$

ambas predicen proporción a concentración lo que es experimentalmente observado.

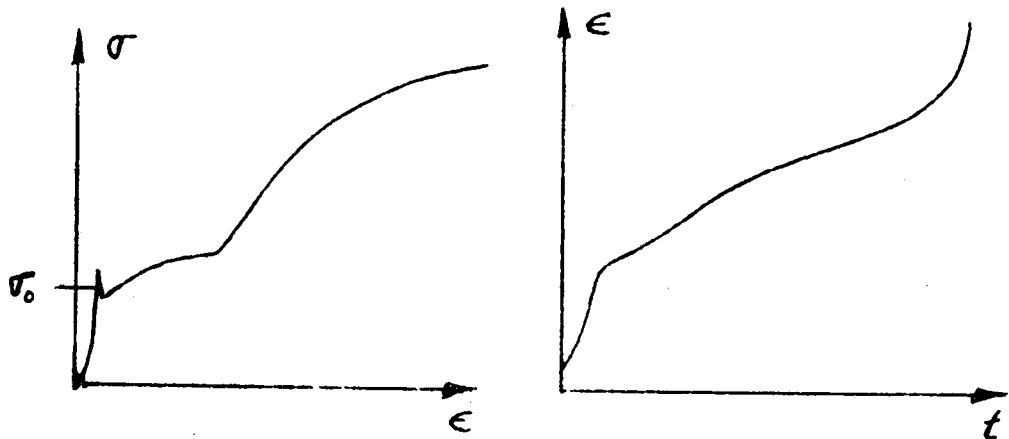
- b) $\Lambda \approx R$

La dislocación se dobla de tal manera de permanecer en los valles y al moverse siempre debe sobrepasar la fuerza operada por el obstáculo. Los loops pueden moverse uno independiente del otro.

MECANISMOS TERMICAMENTE ACTIVADOS

Hay dos tipos de ensayos muy usados para determinar las características mecánicas de un material. En uno, una probeta del material a ensayar se deforma a través de un cabezal que se mueve a velocidad corriente y se miden los esfuerzos necesarios para que ésto ocurra (ensayo de tracción a $\dot{\epsilon} = \dot{\sigma} / E_0$ cte).

En otro se miden las deformaciones introducidas a carga corriente en función del tiempo



El fenómeno de fluencia (creep) así medido, es característico del hecho que la deformación plástica es un fenómeno térmicamente activable.

La descripción de lo que ocurre puede hacerse así: el cristal posee en su interior dos tipos de obstáculos:

1) Campo largo alcance:

que corresponde a obstáculos cuyos campos elásticos actúan en largas distancias de la red. Según veremos estos obstáculos no pueden sobrepasarse con activación térmica.

2) Campo corto alcance:

corresponde a obstáculos localizados, que son los que se pueden saltar con la ayuda de la activación térmica.

Según hemos visto:

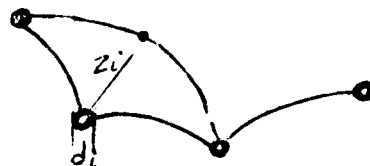
$$\dot{\epsilon} = \rho_m b \bar{v}$$

si en el cristal existen obstáculos localizados

$$\bar{v} = \frac{L}{t}$$

$$L = \sum_i (d_i + l_i)$$

$$t = \sum (t_i + t'_i)$$



Si consideramos que la dislocación permanece el mayor tiempo de su movimiento frente al obstáculo localizado, se tiene:

$$t \sim \sum_i (t_i) \text{ y } l \sim \sum_i l_i \quad (\text{obstáculos localizados})$$

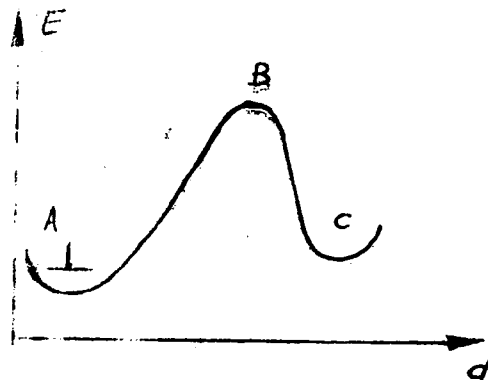
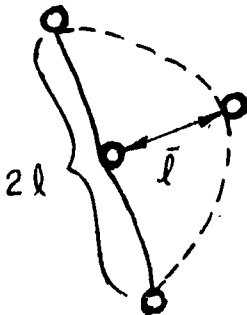
$$\frac{l}{t} \sim \frac{\sum_i l_i}{\sum_i t_i} = \frac{\bar{l}}{\bar{t}} \quad \text{donde} \quad \bar{l} = \frac{\sum_i l_i}{n}$$

$$\bar{t} = \frac{\sum_i t_i}{n}$$

la velocidad de deformación es

$$\dot{\epsilon} = \rho_m b \bar{l} \frac{1}{\bar{t}}$$

la velocidad de deformación depende de la distribución de obstáculos y del tiempo de permanencia frente a ellos.



La energía necesaria para pasar la barrera y seguir hasta el próximo obstáculo es suplida por la activación térmica.

Hipótesis

- 1) Tanto en A como en B (punto de ensilladura) existen estados de energía bien definidos.
- 2) El tiempo de estadía del sistema en A y B es lo suficientemente largo como para que el sistema esté en equilibrio con el baño térmico que rodea (resto del cristal).
- 3) En condiciones externas fijas existe un único camino del estado inicial A al activado (camino de activación).

Las condiciones 1, 2 y 3 se pueden definir funciones de estado en A y B. El resultado que se obtiene para la frecuencia de pasaje a través de la barrera es:

$$\frac{1}{t} = \underbrace{\nu_0 \frac{b}{L}}_{a)} \cdot \underbrace{\exp - \frac{\Delta G}{kT}}_{b)}$$

ν_0 = frecuencia de Debye

L = longitud de dislocación entre obstáculos

b = distancia interatómica

Se puede interpretar esta ecuación como el producto de la frecuencia a) con que el segmento intenta pasar la barrera por b) la probabilidad de que uno de esos intentos tenga éxito. Para la velocidad de deformación, se tiene:

$$\dot{\epsilon} = \rho_m b \bar{l} \frac{1}{t} = \rho_m b \bar{l} \nu_0 \frac{b}{L} \exp - \frac{\Delta G}{kT}$$

$$\dot{\epsilon} = N A \nu_0 \frac{b}{L} \exp - \frac{\Delta G}{kT}$$

$N = \frac{\rho_m}{L}$ número de lugares por unidad de volumen donde los segmentos de dislocación son frenados.

$A \approx \frac{1}{2} 2\bar{l}\bar{l} \approx L\bar{l}$ área barrida por el segmento luego de activado.

La barrera es una barrera de energía libre y no de energía potencial solamente, ya que hay modificación de la entropía al moverse la dislocación por las diferentes configuraciones.

Para calcular ΔG , llamaremos

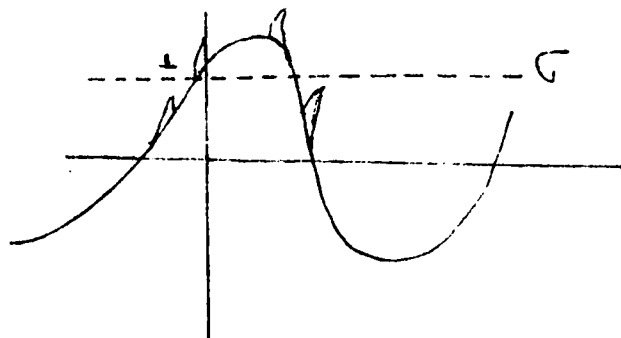
$\bar{\sigma}_i$: tensiones campo largo alcance ($> h$)

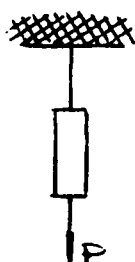
$\bar{\sigma}_s$: tensiones corto alcance ($< h$)

h no está definida en forma precisa. Representa la distancia que una dislocación puede moverse por efecto de las fluctuaciones térmicas.

σ_a : tensor campo esfuerzos aplicados externos.

El campo interno será del mismo y distinto sentido que el aplicado y éste ayudará a las dislocaciones a sobrepasar los obstáculos.

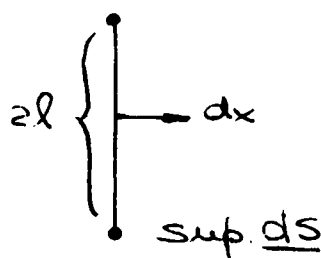


Cálculo ΔG 

$T = \text{cte}$ En la superficie del cristal

$P = \text{cte}$ $\gamma_a \rightarrow \gamma_a^s$

Energía libre de Gibbs (T y fuerzas externas constantes) = trabajo para llevar el sistema en forma reversible de uno a otro lado.



Corte en cristal; debemos usar fuerzas externas iguales y de distinto sentido para mantener el cristal en equilibrio. Desplazamos una cara del corte respecto a la otra en b manteniendo ecuación de fuerzas y luego pegamos las 2 caras. El trabajo es

$$-dW = (\bar{\gamma} ds) \bar{b}$$

tomando las distintas composiciones de $\bar{\gamma}$

$$-dW = (\bar{\gamma}_s ds) \bar{b} + (\bar{\gamma}_i ds) \bar{b} + (\bar{\gamma}_a ds) \bar{b}$$

Integrando entre las posiciones que corresponden al estado frente al obstáculo (x_1) y el estado activado (x_2).

$$\Delta G = -\Delta W = \Delta F_s + \bar{\gamma}_i b l \Delta x - \bar{\gamma}_a b l \Delta x$$

donde

$$\Delta F_s = \int_{x_1}^{x_2} (\bar{\gamma}_s ds) \bar{b}$$

$$\Delta x = x_2 - x_1$$

Los estados normal y activado definen x_1 y x_2 a través de la condición de equilibrio

$$\left[\frac{\partial \Delta G}{\partial x} \right]_{x=x_1} = \left[\frac{\partial \Delta G}{\partial x} \right]_{x=x_2} = 0$$

El término

$$\tau_a b l \Delta x$$

es el trabajo total realizado por los esfuerzos aplicados externos.

Los términos restantes pueden interpretarse como la variación de energía libre de Helmholtz.

$$\Delta F = \Delta U - T \Delta S = \Delta F_s + \tau_i b l \Delta x$$

Contiene los términos de variación de entropía. Como el trabajo de los esfuerzos aplicados es traducible en el trabajo realizado por la fuerza sobre la dislocación $\tau_a b$, se acostumbra a definir una fuerza que se opone al movimiento de la dislocación por la presencia del obstáculo

$$F = - \partial F_s / \partial x$$

y las condiciones de equilibrio pueden interpretarse como el equilibrio entre esta fuerza y la fuerza efectiva sobre la dislocación.

$$(\tau_a - \tau_i) b \cdot 2l = \tau^* b \cdot 2l$$

El factor $b l \Delta x = V$ es llamado en la literatura el volumen de activación que caracteriza en general el tipo de mecanismo de activación que actúa.

Fluctuaciones térmicas negativas: no hemos tenido en cuenta fluctuaciones inversas que lleven la dislocación a la posición inicial nuevamente. Esto se debe a que en general $l_i \ll l$, donde l es la distancia promedio hasta el próximo obstáculo, que es la posición final de la dislocación bajo el esfuerzo aplicado. En algunos casos $l_i \sim l$ y es necesario tener en cuenta las fluctuaciones negativas (ej. movimiento jogs).

La expresión final para la velocidad de deformación es:

$$\dot{\epsilon} = N A b \gamma_0 \frac{b}{l} \exp \left\{ \frac{+ \Delta F_s - \tau^* b l \Delta x}{kT} \right\}$$

Cómo evaluamos ΔG ? $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp \left\{ \frac{+ \Delta F_s - \tau^* b l \Delta x}{kT} \right\}$

$$\ln \dot{\epsilon} = \ln \dot{\epsilon}_0 - \frac{\Delta F_s}{kT} + \frac{\tau^* b l \Delta x}{kT}$$

o bien si escribimos $\dot{\epsilon} = \epsilon_0 \exp - \Delta G / kT$

$$\ln \dot{\epsilon} = \ln \epsilon_0 - \frac{\Delta G}{kT} = \ln \epsilon_0 - \frac{1}{k} \left(\Delta G \frac{1}{T} \right)$$

Si $\epsilon_0 \neq \epsilon_0(T)$

$$\frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial T} = -\frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Delta G}{T} \right) = -\frac{1}{k} \left(\frac{1}{T} \frac{\partial \Delta G}{\partial T} - \frac{\Delta G}{T^2} \right)$$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial T} = -\Delta S \therefore \frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial T} = +\frac{1}{k} \left(+\frac{\Delta S}{T} + \frac{\Delta G}{T^2} \right)$$

$$kT^2 \frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial T} = \Delta G + T\Delta S = \Delta H = -k \frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \frac{1}{T}}$$

Para obtener ΔG es necesario conocer ΔS

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Tenemos por otro lado la ecuación:

$$\dot{\epsilon} = \epsilon_0 \exp \left\{ -\frac{\Delta F_s}{kT} - \frac{\sum^* b \Delta x}{kT} \right\}$$

$$\ln \dot{\epsilon} = \ln \epsilon_0 - \frac{\Delta F_s}{kT} - \frac{\sum^* b}{kT}$$

o bien

$$v = kT \left(\frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \sum^*} \right)_{T, \text{estruct}}$$

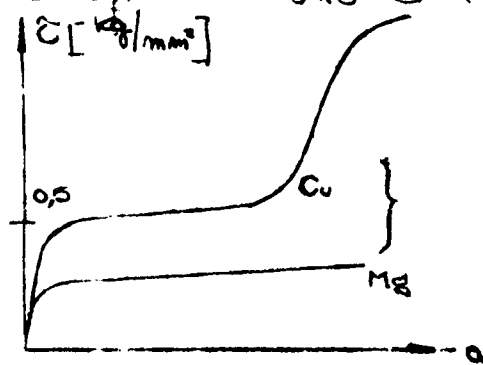
$$v = kT \left(\frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \sum^*} \right)_{T, \tau_a}$$

Si se modifica $\sum_i$ durante el proceso.

El esfuerzo de fluencia en cristales c.c. y h.c. puros:

Podemos dividir los cristales según sus esfuerzos por fluencia en dos grandes grupos:

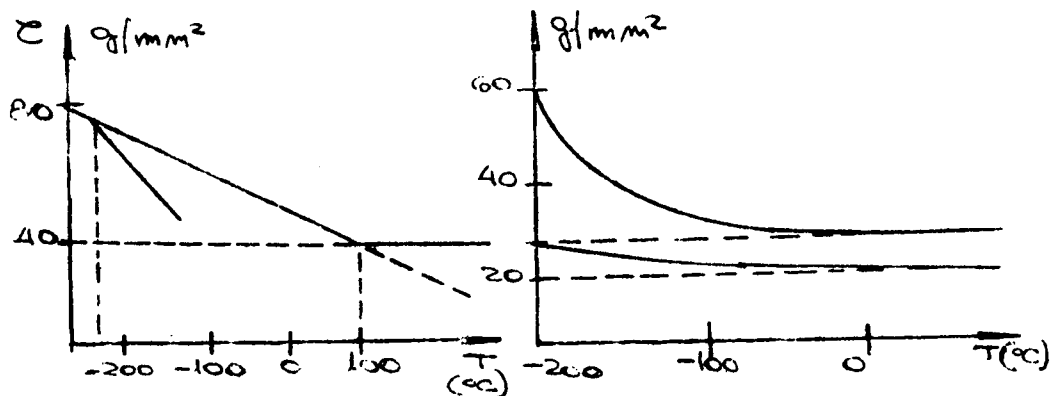
- a) **Cristales blandos:** pertenecen a este grupo los metales c.c.c. y los h.c. orientados para deslizamiento basal. El esfuerzo de fluencia macroscópico es gradual y ocurre $\sim 10^{-5} G$ ($\sim 0,1 \text{ kg/mm}^2$). Observaciones de microfluencia indican que hay ya contribución plástica a la deformación a esfuerzos
- b) **Cristales duros:** Este grupo incluye a los metales c.c. y los h.c. que deslizan en planos distintos del basal. También entrarían en esta categoría la mayoría de los cristales iónicos. El esfuerzo de fluencia es $\sim 10^{-4} G$ (1 kg/mm^2)



c.c.c. y h.c. basal: la fluencia es por lo general gradual sin un Y.P. bien definido.

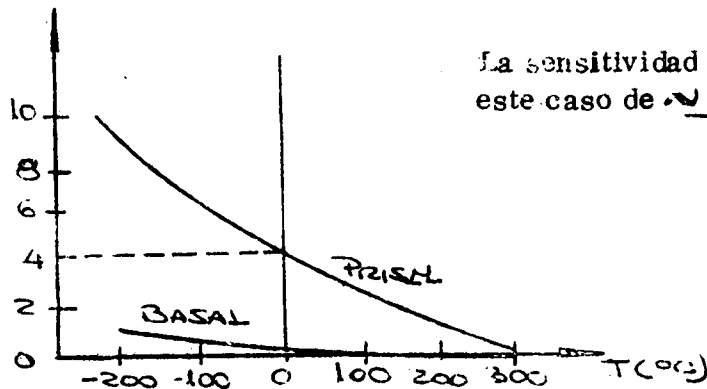
Se encuentra experimentalmente que el esfuerzo de fluencia depende de la temperatura.

La dependencia con la temperatura tiene la forma:



La variación es aproximadamente Al 0,05 kg/mm² por cada 100°C
Cu 0,5

Si consideramos en cambio deslizamiento prismático (en Mg)



La sensibilidad a la temperatura es en este caso de ~ 23 kg/mm² cada 100°C

El incremento en la tensión de fluencia se debe a la presencia de uno o más procesos térmicamente activados. La forma general de la curva puede explicarse si se supone que existe un único proceso con variación ΔG de energía libre. La expresión para la velocidad de deformación es entonces

$$\dot{\gamma} = N A b \dot{\gamma}_0 \frac{b}{L} \exp - \left(\frac{\Delta F_s - (\tau_a - \tau_i) \sqrt{\gamma}}{kT} \right)$$

$$\ln \dot{\gamma} = \ln N A b \dot{\gamma}_0 \frac{b}{L} - \frac{\Delta F_s}{kT} + \frac{(\tau_a - \tau_i) \sqrt{\gamma}}{kT}$$

$$\text{o bien } (\tau_a) \frac{\sqrt{\gamma}}{kT} = \frac{\Delta F_s}{kT} + \frac{\tau_i \sqrt{\gamma}}{kT} - \ln \frac{N A b \dot{\gamma}_0 b}{L \dot{\gamma}}$$

$$\tau_a = \tau_i + \frac{\Delta F_s}{\sqrt{\gamma}} - \frac{kT}{\sqrt{\gamma}} \ln \frac{N A b \dot{\gamma}_0 b}{L \dot{\gamma}}$$

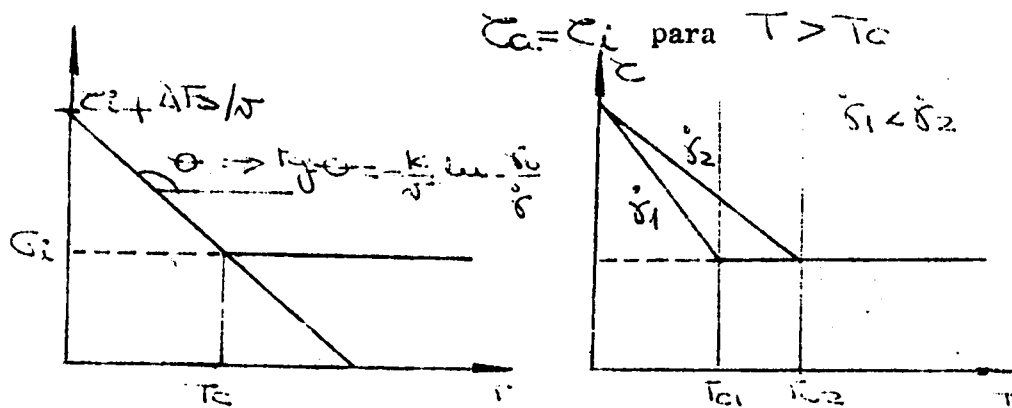
La tensión crítica de fluencia disminuye a medida que la temperatura aumenta (en forma lineal). Sin embargo no puede ser menor que puesto que las tensiones del campo de largo alcance no son superables por activación térmica. La ecuación (1) es entonces solo válida para temperaturas tales que

$$\frac{\Delta F_s}{\sqrt{\gamma}} - \frac{kT}{\sqrt{\gamma}} \ln \frac{\dot{\gamma}_0}{\dot{\gamma}} \geq 0$$

o sea para

$$T \leq T_c = \frac{\Delta F_s}{k \ln \dot{\gamma}_0 / \dot{\gamma}}$$

A $T > T_c$, los obstáculos localizados se vuelven transparentes, ya que la energía térmica es suficiente para atravesarlos sin ayuda de la tensión aplicada. El proceso se vuelve atómico. El esfuerzo necesario es aquél con el que debemos vencer el campo de tensiones, o sea:



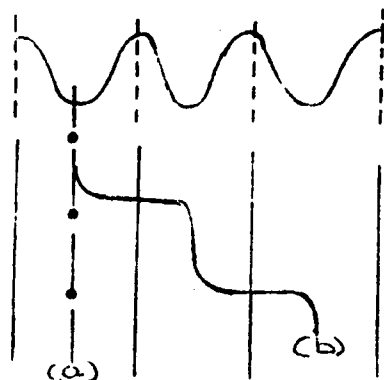
PROCESOS QUE DETERMINAN EL ESFUERZO DE FLUENCIA CRÍTICO

a) La fuerza de Peierls-Nabarro

Esta fuerza corresponde a la necesaria para que la dislocación pase por encima de la barrera de potencial, que separa dos posiciones de equilibrio, al deslizarse.

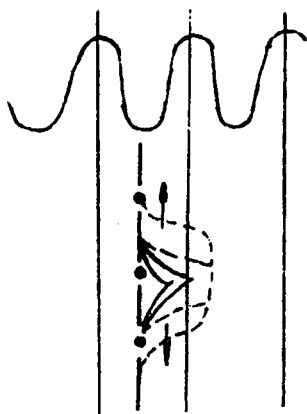
En general, podemos decir que esta fuerza es menor cuanto más ancha es la región en la que se distribuye la perturbación introducida por la dislocación. Este ancho es determinado por las fuerzas interatómicas y depende sensiblemente de ellas.

Podemos pensar que la dislocación se arreglará de tal manera de



minimizar su energía, situándose en los valles (a). En general tomará una forma zigzagante, tratando de reducir la longitud que se halla por encima de la barrera (b).

Es difícil estimar la magnitud de la fuerza de Peierls, ya que corresponde a las variaciones de energía introducidas a medida que el núcleo de la dislocación se mueve en b, de una posición de equilibrio a la siguiente, pero en base a las estimaciones actuales, este factor es bajo. En el caso de la red c.c.c. y del deslizamiento en el plano basal para $h_c \sim 10^{-4}$ eV.



Un mecanismo posible para sobrepasar la barrera de Peierls por activación térmica, es el indicado en la figura, a través de la formación de un par de kinks, que luego se mueven a lo largo de la dislocación, produciendo el pasaje de un valle a otro.

b) Intersección de dislocaciones

Calculemos según la ecuación

$$\bar{\epsilon} = \rho b L$$

el movimiento necesario para deformar el cristal 10%. Esto es:

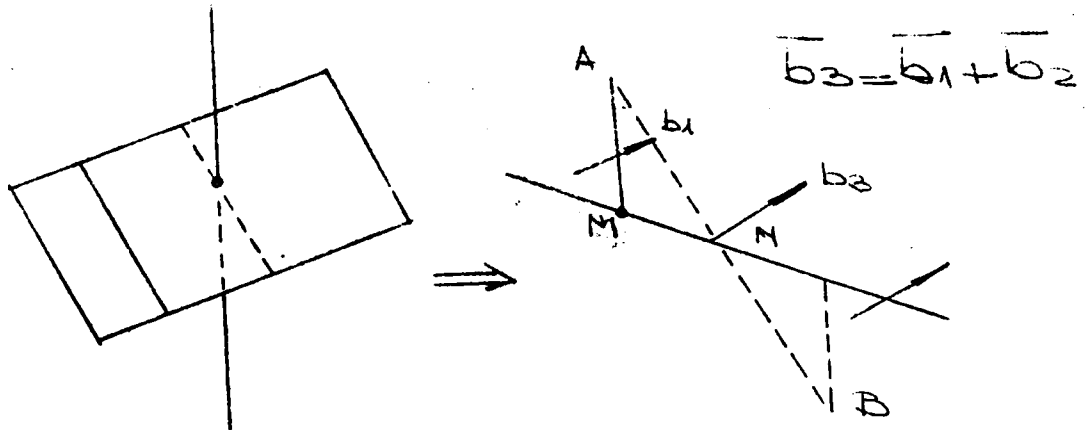
$$10^{-1} = 10^8 \cdot 10^{-8} L \Rightarrow L \sim 1 \text{ mm}$$

ésto es una distancia ~ 100 veces la distancia entre dislocaciones.

De manera que es de esperar un alto número de intersecciones ocurran en el camino.

Un cierto número de estas intersecciones producen jogs.

Otra porción puede producir (cuando las dislocaciones no son perpendiculares) procesos atractivos o repulsivos. En el caso atractivo las dislocaciones reaccionan localmente, produciendo una región sésil y reduciendo por lo tanto la longitud efectiva de la dislocación.



long. de reacción $MN \propto l$ (long. árbol AB)

La energía para separar la dislocación del árbol es

$$\Delta U_{atr} \sim \frac{1}{3} \tau l = \frac{1}{3} G b^2 l$$

Aproximadamente la mitad de los árboles son atractivos. Es más difícil para una dislocación cruzar un árbol atractivo que uno repulsivo, ya que en el primer caso, las reacciones producidas estabilizan el sistema. El endurecimiento debido a árboles atractivos predomina - $\sigma_j \approx Gb/\beta l$
 $\beta \sim 3-4$

Los cálculos permiten predecir que la energía ΔU_{atr} es tan alta como para que la dependencia con T sea pequeña

c) Intersección de dislocaciones: formación de jogs

Si no hay interacción elástica (caso hac):

$$\hat{\epsilon} = \epsilon_0 \exp - (\Delta U / kT)$$

donde

$$\Delta U = 2U_j - \sqrt{(\sigma_a - \sigma_i)}$$

y U_j^0 la energía para formar un jog (no extendido) es aproximadamente

$$U_j^0 \sim \frac{6}{10} b^2$$

Si las dislocaciones son extendidas debe agregarse la energía para formar una construcción:

De acuerdo con Stroh

$$U_{os} \sim \frac{G a^2 d}{15} \left(\ln \frac{a}{b} \right)^{1/2}$$

Campo de largo alcance: Esta como hemos visto oscila entre 0 y un valor máximo

$$G_M = \frac{Gb}{2\pi l}$$

longitud de onda $\sim$ distancia entre dislocaciones

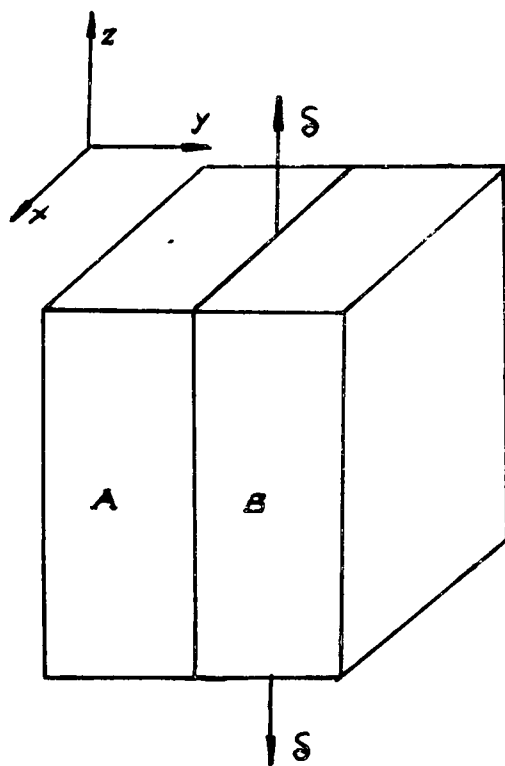
y no es sensible a la temperatura.

AGREGADOS POLICRISTALINOS

Hasta ahora hemos tratado, en general, la deformación plástica en monocristales. Sin embargo, salvo casos de excepción, los materiales que se usan técnicamente son policristales, que consisten en agregados de un gran número de granos orientados al azar.

Para entender las condiciones que impone a la deformación la presencia de bordes de grano, estudiamos primero lo que ocurre en monocristales. Estos están formados por unos pocos cristales (dos como mínimo) entre los que se ha prescripto de antemano su geometría y orientación cristalográfica relativa.

El caso más sencillo de un multicristal es un bicristal isoaxial. Este consiste en dos cristales (bicristal) A y B (ver figura 1) unidos en un plano z x de tal manera que tienen el mismo



eje cristalográfico a lo largo del eje de tracción. Es fácil ver que los bicristales isoaxiales pueden formarse:

a) por rotación de un cristal respecto al otro, alrededor del eje común.

b) por reflexiones a través del plano común o borde de grano.

Al analizar la deformación en un cristal de este tipo, denominaremos compatible a aquella deformación en que, bajo el supuesto que ocurre en forma homogénea en el plano primario de deslizamiento, cada cristal deforma en forma independiente, como si no formara parte del agregado. Esto significa que no hay que compensar deformaciones en el plano del borde de grano.

Figura 1

Si suponemos entonces que la deformación ocurre por deslizamiento homogéneo y que las inhomogeneidades en el límite de grano son microscópicas y pueden despreciarse, tenemos en el caso de un bicristal seis componentes de la deformación que la describen totalmente:

$$\epsilon_{xx}; \epsilon_{yy}; \epsilon_{zz}; \gamma_{xy}; \gamma_{xz}; \text{ y } \gamma_{yz}$$

Si el cristal A de la figura 1 desliza la cantidad (pequeña) γ_1^A en su sistema primario, en el límite de grano se tienen las componentes para el caso isoaxial

$$\epsilon_{zz}^A = a_1^A \gamma_1^A; \epsilon_{xx}^A = b_1^A \gamma_1^A; \gamma_{xz}^A = c_1^A \gamma_1^A \quad (1)$$

donde los factores $a_1^A; b_1^A; c_1^A$ dependen de la relación geométrica entre las caras del cristal y el sistema primario de deslizamiento. Estos factores se pueden expresar en función de los dos directores de la normal al plano de deslizamiento y de la dirección de deslizamiento respectivamente.

En forma similar, si el cristal B desliza γ_1^B en su sistema primario, se tiene

$$\epsilon_{zz}^B = a_1^B \gamma_1^B; \epsilon_{xx}^B = b_1^B \gamma_1^B; \gamma_{xz}^B = c_1^B \gamma_1^B \quad (2)$$

Si estas deformaciones se llevan a cabo en forma simultánea en el bicristal, debe mantenerse la continuidad en el borde de grano. La compatibilidad requiere entonces que

$$\epsilon_{zz}^A = \epsilon_{zz}^B; \epsilon_{xx}^A = \epsilon_{xx}^B; \gamma_{xz}^A = \gamma_{xz}^B \quad (3)$$

Debe entonces cumplirse que

$$a_1^A = k a_1^B; b_1^A = k b_1^B; c_1^A = k c_1^B \quad (4)$$

En el caso isoaxial de la figura 1, en la que ambos cristales tienen un mismo eje cristalográfico según Z, debe ser $a_1^A = a_1^B$ y por lo tanto $k = 1$. Es decir que el bicristal isoaxial puede deslizar en el sistema primario y satisfacer las condiciones de compatibilidad solo si $b_1^A = b_1^B$ y $c_1^A = c_1^B$.

De no ocurrir así la deformación es incompatible y la continuidad en el borde de grano se satisface solo con el deslizamiento de cuatro sistemas independientes. La necesidad de deslizamientos en cuatro sistemas es consecuencia de las condiciones de compatibilidad (4). En efecto, si el cristal A desliza en un sistema, impone al cristal B una deformación tres de cuyas componentes satisfacen las ecs. (4). Estas condiciones pueden ser satisfechas por el deslizamiento en tres sistemas independientes en B. O sea que damos cuenta de la deformación del bicristal como un todo con cuatro sistemas de deslizamiento.

Para aproximarnos mejor a la situación en un policristal, en el que un grano dado puede estar rodeado totalmente por granos de otras orientaciones, analizamos a continuación un bicristal "cerrado" o "totalmente rodeado" como el dibujado en la figura 2. En este caso tenemos dos límites

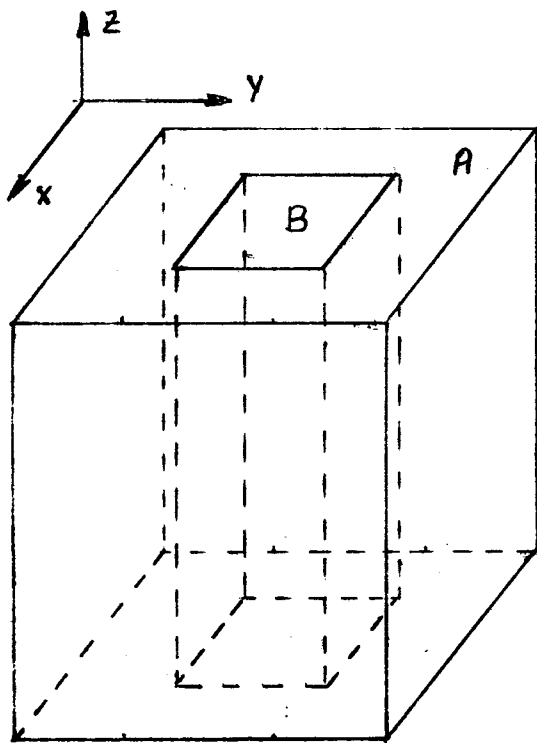


Figura 2

en planos (xz), similares al límite en el bicristal plano de la figura 1, pero además tenemos bordes de grano en dos planos (zy). Esto significa que a las relaciones dadas por (3), debemos agregar las correspondientes en los planos zy, que son

$$\begin{aligned} \epsilon_{zz}^A &= \epsilon_{zz}^B \\ \epsilon_{yy}^A &= \epsilon_{yy}^B \\ \gamma_{zy}^A &= \gamma_{zy}^B \end{aligned} \quad (5)$$

Pero ϵ_{zz}^A ; ϵ_{xx}^A ; ϵ_{yy}^A no son independientes debido a que el volumen de la muestra es constante. Se obtienen así las relaciones

$$\begin{aligned} \epsilon_{zz}^A &= \epsilon_{zz}^B \\ \epsilon_{yy}^A &= \epsilon_{yy}^B \\ \gamma_{zx}^A &= \gamma_{zx}^B \\ \gamma_{zy}^A &= \gamma_{zy}^B \end{aligned} \quad (6)$$

Para evitar que el cristal se rompa en las aristas del cristal interior, debe valer también

$$\gamma_{xy}^A = \gamma_{xy}^B \quad (7)$$

Si especificamos la elongación ϵ_{zz} se tienen seis requerimientos a cumplir para deformar el bicristal. En el caso de total incompatibilidad estas condiciones implican el deslizamiento en seis sistemas independientes.

La deformación de un cristal cerrado es comparable con la de un policristal del mismo material según muestra la figura 3. En la práctica el nú-

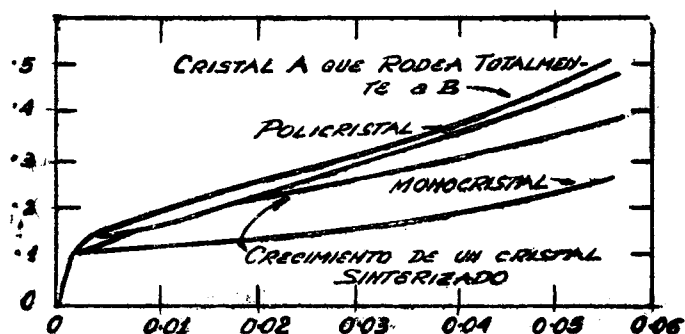


Figura 3

mero de sistemas activados depende de las dimensiones del cristal central, ya que el tamaño de cada conjunto de bordes de grano determina la preponderancia de un tipo de condiciones sobre otras.

El policristal puede entonces considerarse como un conjunto de bicristales cerrados con diferentes orientaciones, donde las incompatibilidades dan en promedio la necesidad de cinco sistemas independientes para deformarlo. Esta condición se conoce con el nombre de criterio de Von Mises para la deformación del policristal.

El efecto de tamaño o de la cantidad de superficie libre en un policristal puede observarse experimentalmente. En la figura 4 se muestra el caso de policristales de aluminio, con 5 a 12 granos por sección, deformados a 4°K. Con 5 granos por sección se tiene aún deslizamiento fácil, au-

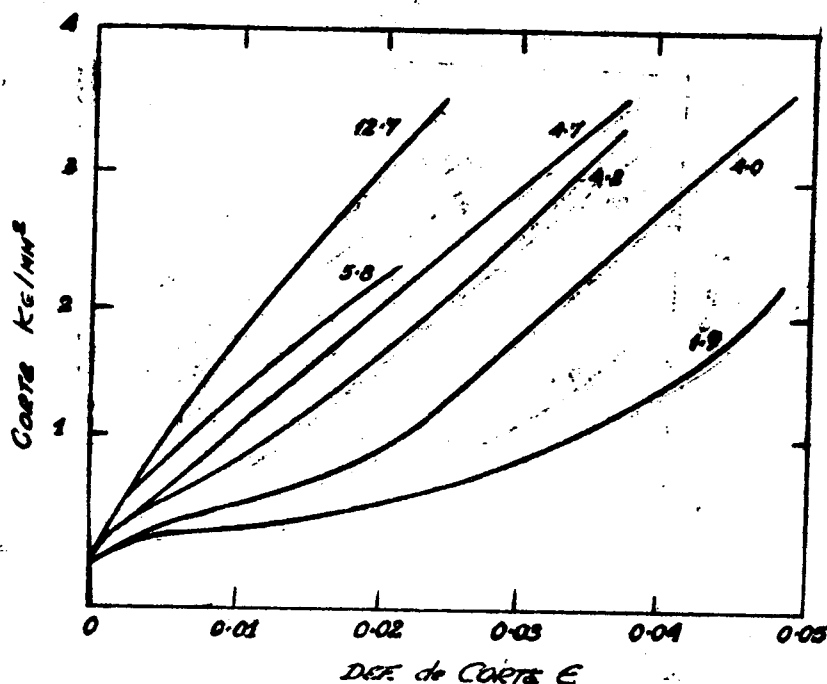


Figura 4

mentando el endurecimiento por deformación a medida que aumenta el número de granos por sección. Esto se debe a que el deslizamiento es más difícil a medida que se limita la superficie libre, tendiendo a cumplirse las condiciones de máxima incompatibilidad. Debido a este efecto, para realizar experimentos sobre influencia del tamaño de grano deben usarse, en general, especímenes con más de 20 granos por sección.

El marcado superficial proveniente de la reacomodación por el deslizamiento produce también el efecto conocido como "cáscara de naranja" (orange peel) observable a menudo en el estampado de chapas de grano grande.

Las condiciones impuestas a la deformación de un policristal con

más de 20 granos por sección, son aceptadas con relativa facilidad en cristales ccc y cc debido al alto número de sistemas de deslizamiento presentes en estos cristales. En el caso de policristales hc el comportamiento depende fuertemente del metal y la temperatura de ensayo. Para aquellas temperaturas donde existe ductilidad apreciable, el rápido endurecimiento por deformación de los sistemas no basales activados, es en parte compensado por la deformación por maclado. Si bien la deformación total en promedio producida por el maclado es pequeña, permite, a través del cambio de orientación asociado, una relativa relajación de los sistemas para un nuevo deslizamiento.

A temperaturas bajas en las que la difusión no es aún apreciable, se observa que la presencia de bordes de grano endurece el cristal, tanto en metales puros como aleaciones. Contribuyen primariamente al endurecimiento dos factores que provocan concentraciones de tensiones:

- a) El deslizamiento múltiple; según vimos, el criterio de Von Mises, establece que deben activarse cinco sistemas para deformar homogéneamente el policristal.
- b) Como superficie límite entre granos de distinta orientación, el borde de grano impide la propagación del deslizamiento de un grano a otro.

Experimentalmente se determina una dependencia lineal del esfuerzo de fluencia con $d^{-1/2}$, donde d es el diámetro de grano. Esta dependencia se grafica en la figura 5 en la que los valores observados pueden describirse por la ecuación

$$\sigma = \sigma_i + k_y d^{-1/2} \quad (7)$$

donde σ_i y k_y son constantes.

La situación puede describirse de la siguiente manera. Bajo el esfuerzo aplicado σ_a , en algún grano del policristal orientado adecuadamente, se activa una fuente de Frank-Read (figura 6). Supondremos que las dislocaciones pueden, bajo el esfuerzo aplicado, moverse hasta el borde de grano, donde la dislocación generada inicialmente se detiene. Las

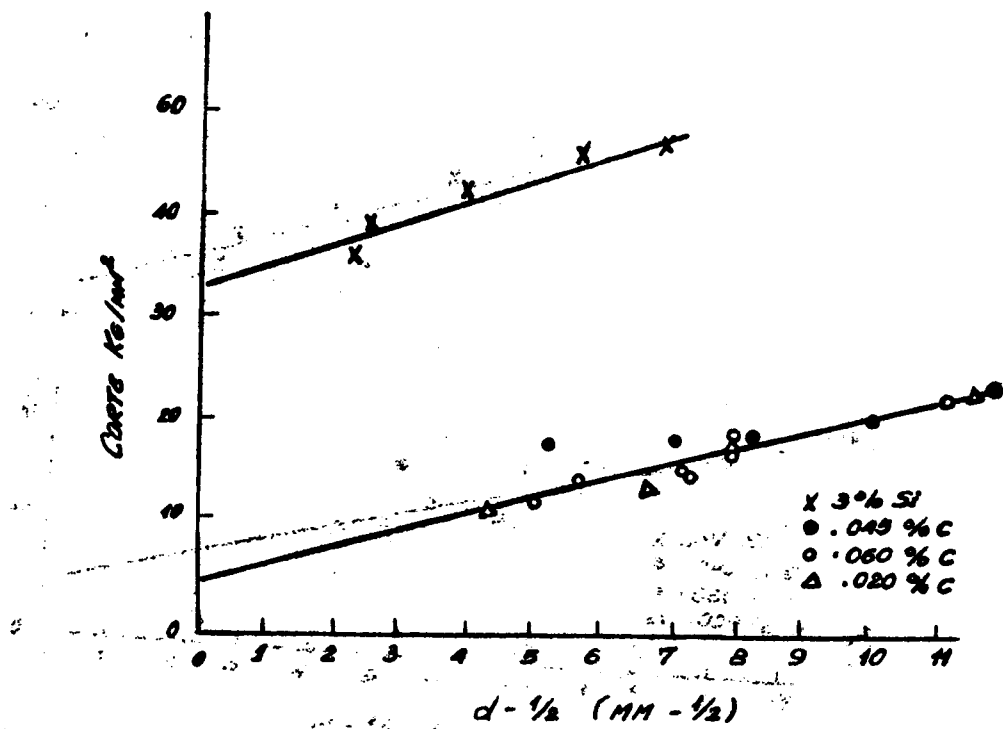


Figura 5

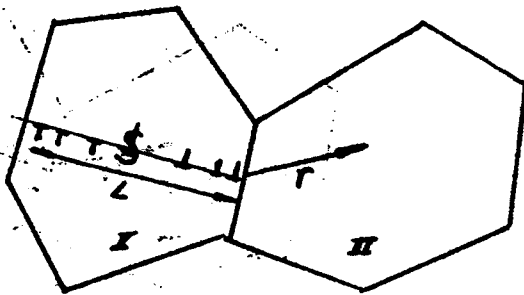


Figura 6

dislocaciones generadas sucesivamente en la fuente se apilarán contra ella. Sabemos ya que el apilamiento produce una concentración de tensiones

$$\sigma^* = n \sigma_a$$

donde n es el número de dislocaciones apiladas. Si elevamos aún el esfuerzo aplicado podemos llegar a generar tensiones lo suficientemente altas para activar una fuente FR en el grano Π vecino, propagando de esta forma la

deformación.

Se puede demostrar que en la línea de deslizamiento no pueden aplicarse esfuerzos de corte que rompan el apilamiento. En estas condiciones, el esfuerzo se relaja a partir de la cabeza del apilamiento, según

$$\sigma = \sigma_a \left(\frac{L}{r} \right)^{1/2}$$

Considerando que en el grano II se debe vencer un esfuerzo de fricción σ_i (debido a interacción con solutos y otros defectos a la fuerza de Reierls) para mover una dislocación, los esfuerzos en este grano serán:

$$\sigma_a + (\sigma_a - \sigma_i) \left(\frac{L}{r} \right)^{1/2}$$

Para que la deformación se propague en este grano, debe activarse la fuente FR a un esfuerzo σ_{CR} . Debe ser entonces

$$\sigma_a + (\sigma_a - \sigma_i) \sqrt{\frac{L}{r}} \geq \sigma_{CR}$$

Tomando el signo igual, para la condición crítica se tiene

$$\sigma_a \left(1 + \sqrt{\frac{L}{r}} \right) = \sigma_{CR} + \sigma_i \sqrt{\frac{L}{r}}$$

de donde, si $\left(\frac{L}{r} \right) \gg 1$

$$\sigma_a = \sigma_i + \sigma_{CR} \sqrt{\frac{r}{L}}$$

y tomando $L \sim d$

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_{CR} r^{1/2} d^{-1/2}$$

o bien

$$\sigma = \sigma_i + k_y d^{-1/2} \quad \text{con} \quad k_y = \sigma_{CR} r^{1/2}$$

De acuerdo a esta derivación k_y depende de la temperatura, ya que se trata en general no de activar una fuente FR, sino de desanchar un lazo de dislocación anclado por soluto.

Se encuentra experimentalmente que k_y no depende de la temperatura, pero si lo hace σ_i . Esto puede explicarse si las dislocaciones se generan en forma atérmica, por ejemplo, en los bordes de grano. La dependencia de σ_i con T se atribuye, en metales cc, a la fuerza de Peierls.

A temperaturas lo suficientemente altas como para que haya difusión apreciable en el policristal la presencia de bordes de grano ablanda al material. Este efecto puede atribuirse a dos tipos de fenómenos:

- 1) El deslizamiento en borde de grano, que ocurre en grado creciente cuanto menor el tamaño de grano.
- 2) La contribución creciente de los bordes de grano a los mecanismos de deformación controlados por difusión. El borde de grano constituye un corto circuito que incrementa la difusión, además de ser una fuente o sumidero de defectos puntuales.

A temperaturas elevadas, puede haber también una contribución al ablandamiento por la nucleación en los bordes de grano de nuevos granos favorablemente orientados para deformar.

El caso extremo de ablandamiento asociado con 1) es el fenómeno de superplasticidad, donde se observa que el esfuerzo de fluencia aumenta con el tamaño de grano, en forma opuesta a lo establecido por la relación (7).

BIBLIOGRAFIA

- DIETER, G.E. "Mechanical Metallurgy"
Mc-Graw Hill Comp. (1961).
- HIRTH, J.P. y "Theory of dislocations"
LOTHE, J. Mc-Graw Hill Comp. (1968).
- SCHOECK, G. "Teoría de Dislocaciones y Defectos"
1er Curso Panamericano de Metalurgia-CNEA-Buenos
Aires-Argentina (1962).
- SMALLMAN, R.E. "Modern Physical Metallurgy"
London, Butterworth (1970).
- THOMPSON, M.W. "Defects and Radiation Damage in Metals"
Cambridge - University Press (1969).
- WEERTMAN, J. y "Elementary Dislocation Theory"
WEERTMAN, J.R. The Macmillan Company - New York (1965).