

01.62.04

C. N. E. A. Biblioteca

ARCHIVO PUBLICACIONES

Nº

1

AÑO

1962

1^{er}. Curso Panamericano de Metalurgia

Realizado por el Departamento de Metalurgia

de la

Comisión Nacional de Energía Atómica

TEORIA DE DISLOCACIONES Y DEFECTOS

Dr. GUNTHER SCHOECK

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas
y del

Instituto de Física Dr. José Balseiro

(Apuntes tomados de las clases del Curso)

República Argentina

1962

CAPITULO I

DEFECTOS PUNTUALES

Una clasificación más o menos completa de los distintos defectos que se pueden encontrar en una red cristalina son los siguientes:

	Fonones
	Exitones
	Electrones + Huecos
Defectos puntuales	{ Vacancias (Divacancias-Trivacancias, etc) Intersticiales - Interstititalcy Crowdion (Focussion) Impurezas (Intersticiales, sustitucionales).
Defectos lineales	{ Dislocaciones
Defectos bidimensionales	{ Bordas de Grano (ó de Macías) Fallas de Apilamiento
Defectos tridimensionales	{ Precipitados Displacement Spikes { Brinkman Seeger

El fonon es un cuanto vibracional de la red, es decir, es una partícula asociada con un modo fundamental vibracional de la red.

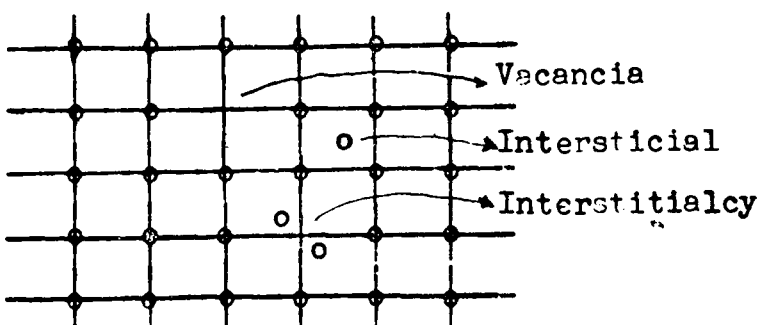
Un exitón es un electrón en un estado excitado y en metales tiene una vida media muy corta. Lo mismo ocurre con los electrones+huecos.

Estos tres tipos de defectos no serán considerados en este curso.

Una vacancia es la falta de un átomo de un lugar que idealmente debería estar ocupado. Un intersticial se forma cuando un átomo se desplaza a una posición que no es punto del reticulado. Un interstitialcy se produce cuando dos intersticiales se combinan de tal forma

de ocupar posiciones simétricas respecto de un punto del reticulado.

Un crowdion puede ser pensado como un intersticial que se ha "extendido" a lo largo de una línea, es decir por ejemplo que en el espacio



EJEMPLO DE VACANCIA, INTERSTICIAL Y INTERSTITIALCY

ocupado normalmente por n átomos ahora hay $n+1$ átomos. Puede ser que el crowdion sea solamente estable dinámicamente, pero en reposo se transforma en un intersticial.

Es importante observar que mientras que el átomo intersticial se mueve a través de la red tanto en el caso de intersticialcy como en el crowdion es la configuración la que se mueve a través de la red.



MOVIMIENTO DE UN INTERSTITIALCY

Los defectos puntuales en los cristales pueden asociarse, debido ya sea a la carga efectiva de los mismos o a la deformación elástica alrededor de ellos. En la mayoría de los metales, la interacción electrostática no es importante, debido al apantallamiento de las cargas por el gas de electrones.

El focusson ocurre en irradiaciones con partículas rápidas. La partícula incidente puede desplazar a un átomo de su posición normal sin que éste llegue a ocupar una posición intersticial; el átomo luego vuelve a su posición de equilibrio. El primer átomo al desplazarse puede obligar a uno vecino a efectuar un movimiento similar y bajo ciertas condiciones de velocidad y ángulo de impacto original la transmisión de impulso puede focalizarse en una cierta dirección cristalográfica. El focusson transmite impulso, mientras que el crowdion transmite también materia.

Se dice que tenemos una impureza cuando en una red formada por áto mos del tipo A, tenemos un átomo del tipo B. B puede ocupar el lu gar de A, en cuyo caso diremos que la impureza es sustitucional; o encontrarse en un lugar intersticial. La mayor parte de las impurezas ocupan posiciones sustitucionales, salvo el C, N y O en b.c.c. , e H en todos los metales.

CONCENTRACION EN EQUILIBRIO TERMICO

La presencia de un defecto aumenta la entropía de un cristal; lue go, aunque su introducción requiere suministrar una cantidad de energía considerable, a elevadas temperaturas la energía libre del cris tal puede ser reducida. Es conveniente recordar que equilibrio implica un mínimo de energía libre.

Llamemos F a la energía libre, U a la energía interna y S a la entropía del sistema:

$$F = U - TS \quad (1)$$

donde:

$$S = k \ln W \quad (2)$$

viene dada por la ley de Boltzman de la mecánica estadística. W es la probabilidad termodinámica, o sea el número de configuraciones en que un estado dado se puede realizar.

De (1) y (2):

$$F = U - kT \ln W \quad (3)$$

Para el caso de una vacancia tenemos:

$$\Delta F = U_v - kT \ln N \quad (4)$$

donde N es el número de puntos del reticulado, ya que una vacancia puede ocupar cualquiera de estos puntos. Usando valores numéricos aproximados para tener un orden de magnitud tenemos que:

$$\Delta F \approx 1 \text{ eV} - \frac{1}{40} \ln 10^{23} \text{ eV} > 0 \text{ ya que } kT \frac{1}{40} \text{ eV a } T \text{ ambiente.}$$

Este resultado implica que si en un cristal introducimos una vacancia, ganamos energía libre.

En general, si hay n vacancias y suponemos que la concentración de vacancias es pequeña, de tal forma de poder despreciar la interacción entre ellas tenemos que:

$$\Delta F = n U_v - kT \ln \frac{N!}{(N-n)! n!} \quad (5)$$

La condición de equilibrio establece que:

$$\frac{\partial \Delta F}{\partial n} = 0 \quad (6)$$

Usando la fórmula de Stirling $A! \approx A \ln A - A$ y resolviendo (6) para n se obtiene:

$$\frac{n}{N} = c_v = e^{-\frac{U_v}{kT}} \quad (7)$$

En la fórmula (7) es necesario agregar un factor α del orden de 1 a 10 (en ciertos casos extremos hasta 10^2); esto es debido a que en la deducción de la fórmula tuvimos en cuenta sólo la entropía de mezcla, es decir la forma en que n vacancias pueden ubicarse en N

lugares. Sin embargo, debido a la vibración de los átomos, existe una cierta incertidumbre acerca del lugar exacto de los mismos, y por consiguiente una entropía de vibración

$$S_v = 3Nk \ln \frac{h\nu}{kT} \quad (8)$$

con ν : frecuencia de vibración de los átomos.

Para determinar el valor de α podemos utilizar el modelo de Einstein de un sólido. Einstein postula que todos los átomos de la red vibran con igual frecuencia independientemente uno de otro.

Supongamos que μ átomos vecinos, cambien su frecuencia de ν a ν' debido a que hemos introducido una vacancia

$$\Delta S_v = \mu k \ln \frac{\nu}{\nu'} \quad (9)$$

$$\Delta F = n U_v - kT \ln \frac{N!}{(N-n)! n!} - kT \mu \ln \frac{\nu}{\nu'} \quad (10)$$

Aplicando la condición de equilibrio (6) y resolviendo para n obtenemos:

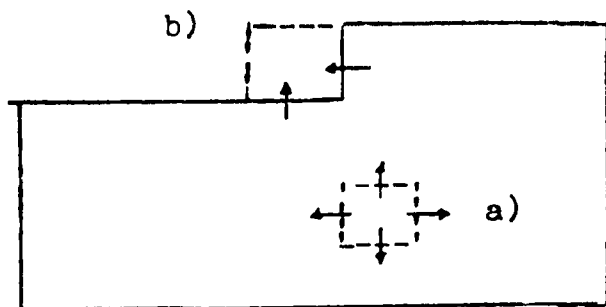
$$C_v = e^{-\frac{\Delta S_v}{k}} e^{-\frac{U_v}{kT}} \quad (11)$$

Este efecto realmente ocurre y contribuye al espectro vibracional de la red.

Cuando la temperatura del cristal aumenta, la concentración de vacancias e intersticiales en equilibrio térmico aumenta. Esto implica que los defectos puntuales son provistos por ciertas fuentes. Inversamente, cuando la temperatura disminuye, parte de los defectos desaparecen en sumideros. Actualmente se sabe que la fuente y sumidero más importante de defectos puntuales son las dislocaciones, como veremos más adelante.

Para calcular la energía de formación de una vacancia podemos considerar en una forma muy rudimentaria, que esta energía es del mismo

orden de magnitud que la necesaria para evaporar un átomo de la superficie del metal. Esto se debe a que para formar una vacancia debemos llevar a un átomo del interior del cristal (posición a) a la su-

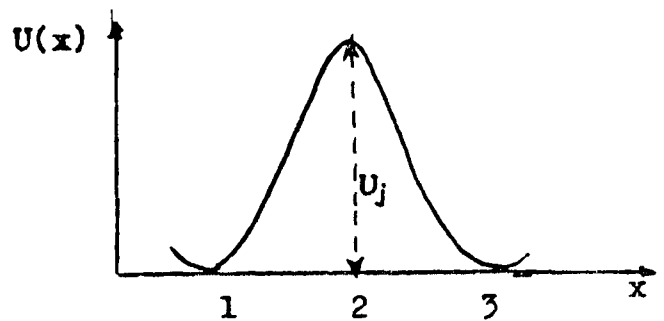
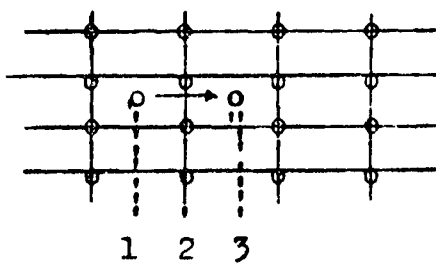


perficie del mismo (posición b)). Para sacarlo de a) necesitamos romper cuatro ligaduras, pero necesitamos restablecer dos para colocarlo en b) . Esto nos dice que para formar una vacancia necesitamos entregar la energía suficiente para vencer dos ligaduras, lo mismo que para evaporar un átomo de la superficie que se encontrara en la posición b) .

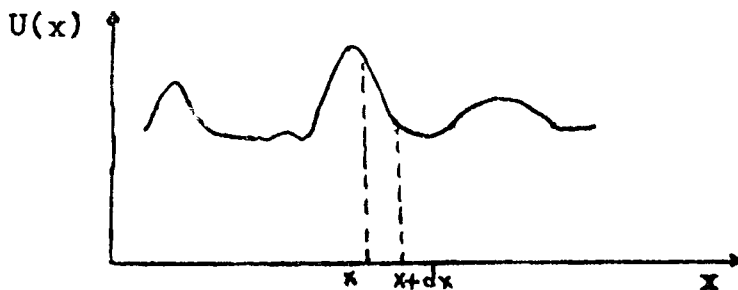
Un átomo en posición intersticial produce una mayor distorsión en la red que una vacancia, por consiguiente la energía de formación es mayor, y por lo tanto la concentración de intersticiales en equilibrio térmico es mucho menor que la de vacancias (prácticamente despreciable en equilibrio térmico aún a elevadas temperaturas).

MOVIMIENTO DE DEFECTOS PUNTUALES

Los defectos puntuales pueden moverse a través de la red cristalina. Consideremos el movimiento de un intersticial de la posición 1 a la 3. Este debe sobrepasar en su movimiento la barrera de potencial que mostramos en la figura.



Para calcular la frecuencia de salto, debemos utilizar un principio de Boltzmann ampliado por Gibbs.



La probabilidad de encontrar un átomo entre x y $x+dx$ viene dada por:

$$p(x)dx = e^{-\frac{U(x)}{kT}} \quad (12)$$

La probabilidad de que un átomo en 1 sea excitado por vibración térmica hasta 2 viene dada por

$$e^{-\frac{U_1}{kT}} \quad (13)$$

Por otra parte la onda más corta que puede existir en un cristal es aquella cuya longitud sea igual a la distancia interatómica. λ

ésta le corresponde la frecuencia más alta, llamada frecuencia de Debye que es del mismo orden de magnitud de la frecuencia de Einstein y cuyo valor es del orden de:

$$\nu \approx 10^{13} \text{ seg}^{-1} \quad (14)$$

Finalmente la frecuencia de un salto vendrá dada por el producto de la frecuencia de Debye, es decir la cantidad de intentos que realiza el átomo de dejar la posición inicial en la unidad de tiempo; multiplicada por la probabilidad de que tenga suficiente energía para sobrepasar la barrera de potencial. De (13) y (14) obtenemos

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{U_j}{kT}} \quad (15)$$

Resumiendo las dos fórmulas más importantes son:

$$C_{dp} = e^{-\frac{U_f}{kT}}$$

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{U_j}{kT}}$$

- C_{dp} : concentración de defectos en equilibrio térmico
 U_f : energía de formación de defectos
 ν : frecuencia de salto
 U_j : energía necesaria para la realización de un salto.

ORIGEN DE DEFECTOS PUNTUALES

Varios procesos pueden dar origen a la creación de defectos puntuales.

Vibración térmica puede dar origen a pares de Frenkel (par vacancia-intersticial). Como la energía de formación de un intersticial es relativamente grande, la concentración de pares en equilibrio térmico debido a este proceso es pequeño.

Dislocaciones pueden actuar tanto como fuentes o sumideros de defectos puntuales. Un átomo, por ejemplo, puede migrar hacia una dislocación, esta trepa, produciendo una vacancia. De la misma forma un átomo puede abandonar una dislocación quedando en posición intersticial.

Las superficies del cristal actúan como fuentes de vacancias. Un átomo puede difundir hacia la superficie, dejando una vacancia en el interior del metal. Este efecto es muy pequeño salvo en el caso de tratarse de láminas muy delgadas, pues a temperatura ambiente una vacancia tarda mucho tiempo en difundir desde la superficie hacia el in-

terior.

Los bordes de grano actúan como fuente de vacancias; así como su mideros.

DETERMINACION DE $\underline{U}_v, \underline{U}_i, \underline{U}_{jv}, \underline{U}_{ji}$

Para poder determinar estos valores, debemos conocer propiedades macroscópicas que sean influenciadas por la presencia de los defectos puntuales.

Algunas de estas propiedades son las que mencionamos a continuación:

a) Resistencia eléctrica

Un cristal perfecto tendría conductividad infinita. Dos procesos no permiten que sea alcanzado este valor. Por una parte los defectos puntuales existentes y por otra la vibración de los átomos alrededor de su posición de equilibrio producen scattering de electrones con la consecuente disminución de la conductividad. La regla de Mathius establece que se pueden superponer estos dos defectos, sin interacción entre ambos:

$$\rho = \rho(T) + \rho(C) \quad (16)$$

ρ : resistividad

$\rho(T)$: resistividad dependiente de la vibración de los átomos en la red

$\rho(C)$: resistividad dependiente de la concentración de defectos puntuales.

Si la concentración de defectos es pequeña se encuentra que la resistividad aumenta linealmente con la concentración:

$$\rho(C) \approx \propto C \quad \text{para } C \text{ pequeña} \quad (17)$$

b) Densidad

Si introducimos vacancias, los átomos migrarán a la superficie del cristal, permaneciendo el número total de átomos inalterado, pero habiendo variado el volumen ocupado por ellos; y como consecuencia habrá variaciones de densidad.

c) Conductividad térmica

No sólo los electrones son dispersados por los defectos puntuales sino que también los fonones. Ambos procesos dan contribución a la conductibilidad térmica de un metal.

d) Magnetización

GENERACION NO TERMICA DE DEFECTOS PUNTUALES

Fundamentalmente tres procesos pueden ser descriptos para la generación no térmica de defectos puntuales.

- A) Templado
- B) Irradiación
- C) Deformación plástica.

Templado

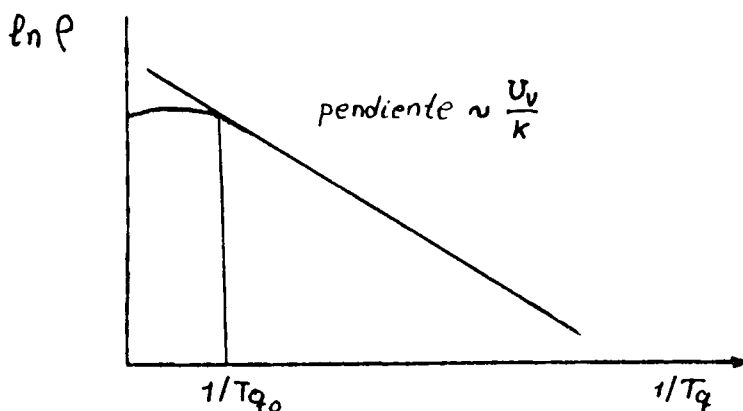
Debido a que a altas temperaturas hay una gran concentración de vacancias en equilibrio térmico, grandes concentraciones pueden ser congeladas, templando muy rápidamente desde una temperatura elevada a una más baja. Experimentalmente hay que obtener una velocidad de templado lo suficientemente grande para que las vacancias no puedan alcanzar un sumidero y se aniquilen.

Podemos medir la resistividad en función de la temperatura de templado y a partir de esta curva obtener una idea de la energía de formación de una vacancia. De (17) sabemos que:

$$\rho \sim c \sim e^{-\frac{U_v}{kT_q}} \quad (18)$$

T_q : temperatura de templado.

$$\ln \rho \sim -\frac{U_v}{k} \cdot \frac{1}{T_q} \quad (19)$$



Templando desde diferentes temperaturas hasta una misma temperatura final podemos determinar para cada caso la recta $\ln \rho$ vs. $1/T_q$ y de ésta obtener U_v . Se encuentra que a partir de una cierta T_{q_0}

la recta deja de ser tal y se convierte en una curva como la indicada en la figura. Una primera interpretación incorrecta sería que la energía de formación disminuye a temperaturas muy altas. Lo que en realidad sucede es que a partir de una cierta temperatura la movilidad de las vacancias es tan grande que es imposible congelarlas antes de que alcancen un sumidero, y consecuentemente estamos midiendo menor número de vacancias de las que realmente existían a dicha temperatura en equilibrio térmico.

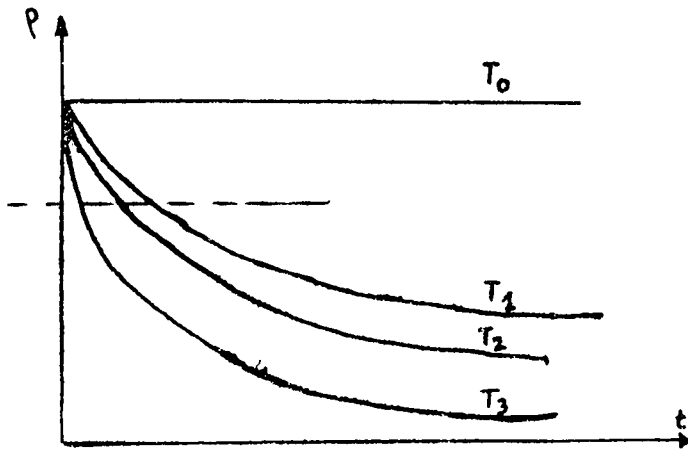
Otros problemas menores que se presentan es la formación de diva-

cancias, grupos de vacancias, etc.

Se encuentra que el orden de magnitud de la energía de formación de una vacancia en f.c.c. es del orden de:

$$U_v \simeq 1 \text{ eV} \quad (20)$$

Para determinar el valor de U_{jv} congelamos vacancias por templado y luego medimos la variación de resistividad con el tiempo a distintas temperaturas, por ejemplo entre temperatura de aire líquido y 300°C.



T_0 : temperatura de aire líquido
 T_1 : temperatura ambiente
 T_2 : temperatura 100°C
 T_3 : temperatura 300°C

De (17):

$$\rho \sim c$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \sim \frac{\partial c}{\partial t} \sim mn_s c \quad (21)$$

m : movilidad de las vacancias

n_s : número de sumideros

c : concentración de vacancias.

La variación de la resistividad con el tiempo es proporcional a la movilidad de las vacancias, ya que cuanto más rápido se mueven, más probabilidad hay de que encuentren un sumidero; asimismo es proporcional a la cantidad de sumideros presentes y a la concentración, ya que cuanto más vacancias haya disponibles, más encontrarán sumidero en la unidad de tiempo.

El número de sumideros puede ser considerado constante si consideramos como tales sólo las dislocaciones, los bordes de grano y las superficies; pero no se mantiene constante si permitimos la recombinación de vacancias e intersticiales. En este caso (21) se transforma en:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \sim \frac{\partial c}{\partial t} \sim mc_1 c_v \quad (22)$$

Debíamos escribir:

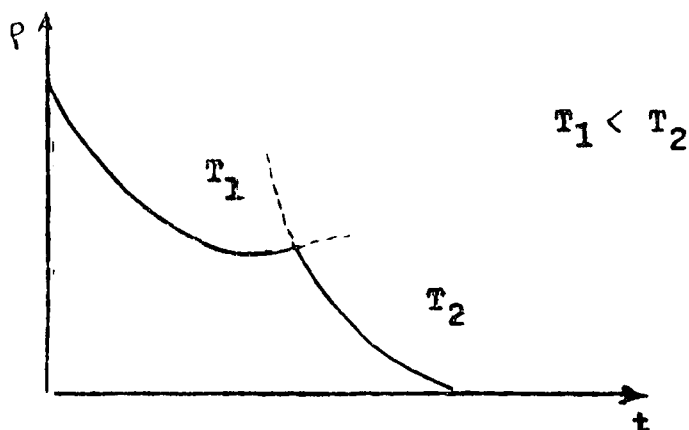
$$n_s = \frac{n_d + n_i}{\text{Vol.}}$$

Debido a que en templado el número de intersticiales es muy pequeño, puede ser despreciado (no así en el caso de irradiación).

Tomando $\partial \rho / \partial t$ a dos temperaturas distintas y efectuando el cociente obtenemos:

$$\frac{\frac{\partial c_i}{\partial t} T_1}{\frac{\partial c_i}{\partial t} T_2} = \frac{c n_s \nu_0 e^{-\frac{U_i}{kT_1}}}{c n_s \nu_0 e^{-\frac{U_i}{kT_2}}} = \frac{e^{-\frac{U_i}{kT_1}}}{e^{-\frac{U_i}{kT_2}}} \quad (23)$$

Luego debemos considerar las pendientes de las curvas de la figura ρ vs. t a dos temperaturas distintas pero para el mismo valor de C . Para poder realizar esto, debemos suponer que a iguales C corresponden iguales ρ (recta paralela al eje de tiempos). Sin embargo esta suposición no es del todo correcta ya que debido a la interacción entre vacancias, pueden formarse divacancias o grupos de vacancias, en cuyo caso no es válida la hipótesis anterior. Debido a estas razones es conveniente hacer la experiencia a una temperatura T_1 y en un momento determinado cambiar abruptamente la temperatura a una $T_2 > T_1$. En el momento del cambio la concentración no puede variar abruptamente y allí podemos medir las pendientes con la seguridad de tener constantes los demás parámetros.



Por medio de estas experiencias se encuentra que U_{jv} es del mismo orden de U_v , es decir alrededor de 1 eV (24)

Así mismo se ha encontrado generalmente que :

$$U_{ji} \ll U_{jv} \quad y \quad U_i \gg U_v \quad (25), (26)$$

Irradiación

Gran cantidad de defectos pueden ser introducidos en un metal irradiándolo. La cantidad de defectos introducidos y la clase de los mismos dependerá de la energía, de la masa, del momento y de la carga de la partícula con la cual estamos irradiando.

Una partícula incidiendo sobre un cristal, pierde velocidad debido a las colisiones elásticas e inelásticas que realiza con los átomos de la red. Para valores moderados de la energía cinética y las masas de las partículas, la energía transferida puede ser lo suficientemente grande para desplazar una partícula de su posición normal. Luego hemos creado una vacancia y al mismo tiempo un intersticial, es decir un defecto de Frenkel. Para obtener un gran número de defectos es conveniente irradiar con partículas pesadas ya que éstas llevan un gran momento. Lo contrario sucede con electrones, por ejemplo, ya que aún en el caso de ser electrones muy energéticos, éstos llevan un pequeño momento.

La carga de la partícula que bombardea es un factor importante, ya que partículas cargadas ionizarán iones o átomos del cristal, perdiendo de esta manera gran cantidad de energía sin haber desplazado los átomos del cristal.

Si el material a ser tratado es fisiónable, irradiándolo con partículas pesadas se puede obtener una gran cantidad de defectos, debido a que se pueden producir fragmentos de fisión en el interior del material que poseen una gran energía cinética.

En materiales no fisiónables los neutrones son las partículas que producen mayor número de pares de Frenkel, displacement spikes y zonas de fundición. Un electrón muy energético tiene generalmente solamente suficiente energía para producir un par de Frenkel y penetra muy poco en un metal ($< 10^{-1}$ cm). Electrones de baja energía sólo producen ionización. Partículas cargadas más pesadas pueden también producir un número de defectos de Frenkel pero tampoco penetran apreciablemente en el material.

DETERMINACION DE C_v

Ya hemos mencionado que la introducción de vacancias en un metal tiene como consecuencia una variación de densidad del mismo.

Sea ΔV la variación de volumen cuando n átomos difunden a la superficie, y sea N el número total de átomos en el metal y Ω el

volumen ocupado por un átomo.

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{id} = \frac{3 \ell_{id}^2 \Delta \ell_{id}}{\ell_{id}^3} = \frac{3 \Delta \ell_{id}}{\ell_{id}} \quad (27)$$

Por otra parte:

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{id} = \frac{n\Omega}{N\Omega} = C_v \quad (28)$$

Igualando (27) y (28) obtendríamos una forma sencilla de calcular C_v . Sin embargo esto no es así en la realidad. Cuando formamos una vacancia en un metal, hay una relajación de los átomos alrededor de la misma y como consecuencia una relajación del cristal que no se sabe si aumenta o disminuye el volumen del mismo. En otras palabras debemos agregar un término de corrección a la fórmula (28) y no cono cemos éste término.

En 1958, Eshelby hizo la suposición de que el cambio relativo del cristal debido al efecto mencionado antes era igual al cambio relativo de la celda unitaria, es decir al parámetro de la red, y esto puede ser medido mediante rayos X.

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{real} = \left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{id} + \frac{3\Delta a}{a} \quad (29)$$

Ahora bien,

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{real} = \frac{3\Delta \ell_{real}}{\ell_{real}} \quad (30)$$

$$\therefore \left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{id} = C_v = 3\left(\frac{\Delta \ell_{real}}{\ell_{real}} - \frac{\Delta a}{a}\right) \quad (31)$$

El aumento relativo tanto de ℓ como de a es el mismo cuando aumenta la temperatura, luego en (32) sólo se tienen en cuenta los cambios producidos en el volumen por la introducción de vacancias. Por este método se obtiene una determinación absoluta de C_v . Como por las experiencias de templado se obtenía el valor de U_v , uniéndolos a ambos podemos obtener el valor de

$$\alpha = e^{-\frac{\Delta S_v}{k}}$$

de la fórmula (11).

CAPITULO II

TEORIA ATOMICA DE DIFUSION

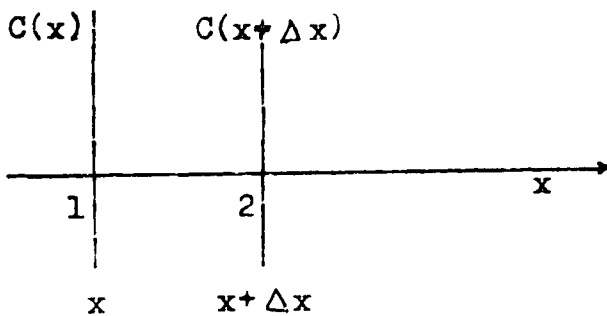
La difusión es esencialmente un flujo irreversible de materia. Experimentalmente, obtenemos la ley de Fick que establece:

$$\mathcal{F} = - D \text{ grad } C \quad (32)$$

donde D : coeficiente de difusión y C es la concentración.

Esta ecuación no es válida en el caso que actúen campos externos, como por ejemplo campos eléctricos, campos magnéticos, etc.

Supongamos un gradiente de concentración a lo largo del eje x .



Debido a vibraciones térmicas los átomos saltan continuamente de una posición a otra en una forma totalmente arbitraria.

El flujo de materia puede ser expresado como:

$$\mathcal{F} = C v \quad (33)$$

donde v es la velocidad de las partículas en consideración.

El flujo de materia de 1 a 2 vendrá dado por:

$$\mathcal{F}_{12} = \frac{1}{2} C(x) \cdot \frac{\Delta x}{\tau} \quad (34)$$

τ : tiempo transcurrido entre dos saltos.

El factor $1/2$ incluido en la fórmula (34) se debe a que sólo la mitad de los átomos, en promedio, saltan para cada lado.

Similarmente:

$$\mathcal{F}_{21} = \frac{1}{2} C(x + \Delta x) \cdot \frac{\Delta x}{\tau} \quad (35)$$

Como τ no depende de la concentración podemos usar el mismo en (34) y (35).

Desarrollando (35) en serie de Taylor :

$$\mathcal{F}_{21} = \frac{1}{2} \left[C(x) + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x \right] \frac{\Delta x}{\tau} \quad (36)$$

Finalmente:

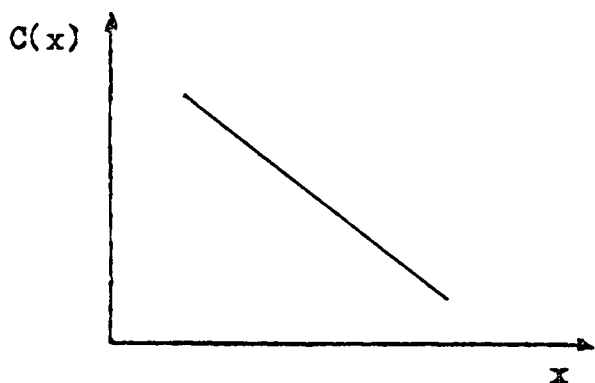
$$F = F_{12} - F_{21} = - \frac{\Delta x^2}{\zeta} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \quad (37)$$

De (32) y (37) obtenemos porque $\Delta x = a =$ distancia de un salto:

$$- D \frac{\partial C}{\partial x} = - \frac{a^2}{\zeta} \cdot \frac{\partial C}{\partial x}$$

$$\therefore D = \frac{a^2}{\zeta} \quad (38)$$

Supongamos ahora un gradiente de concentración como el del gráfico siguiente. Aunque hay un gradiente de concentración, esto no implica



ca que exista alguna fuerza exterior que determine como preferencial a una cierta dirección del movimiento. Lo único que sucede en este caso es que la cantidad de partículas que saltan es proporcional a la concentración. En cambio la probabilidad de saltar es distinta en las dos direcciones en el caso de cristales iónicos cuando aplicamos un campo eléctrico.

El número de saltos que realiza un átomo durante el tiempo t es:

$$n = \frac{t}{\zeta}$$

Lo único que sabemos es que el átomo salta una vez en el tiempo ζ , pero no sabemos en qué dirección lo efectúa.

La distancia recorrida será:

$$x = \pm a_1 \pm a_2 \pm a_3 \dots \pm a_n \quad (39)$$

con $a_1 = a_2 = \dots = a_n$

$$\overline{x^2} = na^2 + \sum_{ik} \pm a_i a_k \quad (40)$$

Para valores de n muy grandes, el segundo término de (40) es pequeño en comparación con el primero ya que en la sumatoria muchos términos se van a anular. En estas condiciones podemos despreciar dicho término:

$$\bar{x}^2 = na^2 = \frac{t}{\tau} a^2 = Dt \quad (41)$$

$$\bar{x} = \sqrt{\bar{x}^2} = \sqrt{Dt} \quad (42)$$

Resumiendo las dos fórmulas más importantes son:

$$D = \frac{a^2}{\tau}$$

$$x = \sqrt{Dt}$$

MECANISMOS DE DIFUSION

Hay distintos mecanismos por los cuales un átomo puede saltar de una posición a otra, a saber:

- 1.- Intersticial
Interstitialcy
- 2.- Intercambio directo
- 3.- Intercambio en anillo
- 4.- Vacancias.

La difusión intersticial es importante en el caso de impurezas que ocupan una posición intersticial. En cambio éste mecanismo no tiene mucha importancia en casos de autodifusión, pues en dicho caso como la concentración de intersticiales en equilibrio térmico es pequeña, el flujo de los mismos a través de la red también es pequeño.

En el caso de intercambio directo se necesita una deformación severa de la red y por lo tanto no es un proceso muy probable, es decir, su energía de activación es grande.

Cuando se produce un intercambio en anillo, como los cuatro átomos se mueven juntos, se produce una distorsión en la red mucho menor que en el caso anterior, y por lo tanto la energía de activación para que ocurra este proceso es menor; pero en este caso la probabilidad de que los cuatro átomos se muevan en el sentido correcto al mismo tiempo es muy pequeña.

El mecanismo más probable es el de vacancia. Sabemos que a una determinada temperatura tenemos una concentración de vacancias en equilibrio, y el proceso de difusión puede llevarse a cabo si un átomo salta al lugar donde hay una vacancia. En este caso hablamos de la vacancia como moviéndose a lo largo del reticulado. En este mecanismo hay que tener en cuenta que la vacancia después de efectuado

un salto tiene mayor probabilidad de volver hacia atrás que de seguir adelante.

De (15) tenemos que $v = v_0 e^{-U_j/kT} = 1/\tau$ y como $D = a^2/\tau$, obtenemos:

$$D = \beta a^2 v_0 e^{-\frac{U_j}{kT}} \quad (43)$$

donde β es un factor geométrico que depende de la de próximos vecinos.

Tenemos que:

$$v \sim \frac{1}{\tau} \sim p = p_v \cdot p_j \quad (44)$$

donde p_v es la probabilidad de encontrar una vacancia y p_j es la probabilidad de efectuar un salto.

$$v \sim \underbrace{\beta c_v}_{p_v} \underbrace{v_0 e^{-\frac{U_j}{kT}}}_{p_j} \quad (45)$$

En equilibrio térmico $c_v = e^{-U_v/kT}$

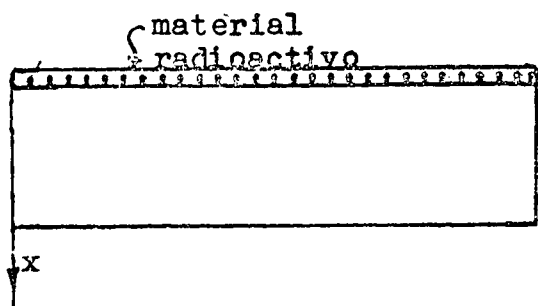
$$\therefore v \sim \beta v_0 e^{-\frac{U_v}{kT}} e^{-\frac{U_j}{kT}} \quad (46)$$

Llamando $\tau = \beta v_0$ tenemos:

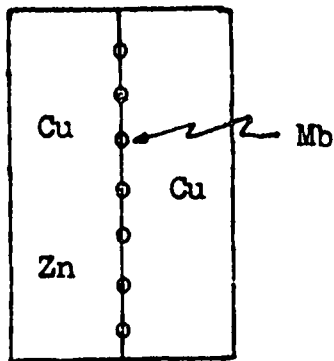
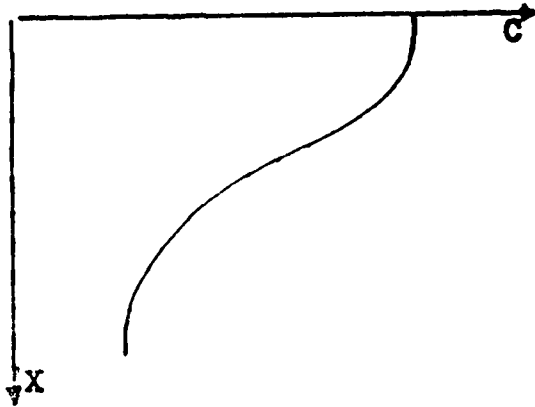
$$v \sim \tau e^{-\frac{U_v + U_j}{kT}} \quad (47)$$

donde $U_d = U_v + U_j$ es la energía de activación para difusión si consideramos el mecanismo de vacancias. En (47) debemos recordar que hemos omitido el factor de entropía $e^{\Delta S/k}$ debido a la distorsión de la red por la introducción de vacancias.

Para medir el coeficiente de difusión, un método consiste en hacer uso de sustancias radioactivas. Colocamos una capa de material radioactivo en la superficie del cristal, elevamos la temperatura y



una vez que los átomos han difundido durante un cierto tiempo, cortamos distintos espesores y medimos la concentración de material radioactivo en función de la distancia a la superficie.



A partir de la ecuación de difusión y del punto de inflexión de la curva se determina el coeficiente de difusión.

Una forma de comprobar que el mecanismo de intercambio no es responsable en el proceso de difusión es el llamado efecto Kirkendall.

Ponemos en contacto dos metales y en la superficie de separación colocamos alambres de molibdeno. Si calentamos a una temperatura suficientemente alta, después de un cierto tiempo, observamos que los alambres se han desplazado hacia la izquierda, lo que indica que hubo un flujo de materia en dicha dirección. Esto se explica por el movimiento de vacancias. Las vacancias quedan atrás de las marcas y los átomos que

se mueven más rápidamente arrastran los alambres.

CAPITULO III

FRICCION INTERNA

Este es otro método para medir D ó γ . Con fricción interna se pueden medir movimientos de átomos a bajas temperaturas, que por ejemplo, no pueden ser medidos mediante métodos de difusión. Con este método se pueden medir saltos de átomos individuales.

La propiedad de amortiguamiento de un metal (fricción interna) es muy sensible a la presencia de imperfecciones físicas, a interacciones de imperfecciones y a la interacción de los defectos con las impurezas químicas. Es por esto que se ha convertido en una técnica muy importante en la actualidad.

Para estudiar esta propiedad producimos una vibración en un metal y medimos el amortiguamiento de la amplitud de la vibración con el tiempo. Se encuentra que este decaimiento no puede ser explicado en función de ciertos procesos exteriores, como ser la fricción con el aire, ya que la energía disipada es mucho mayor que la que esperaríamos si tuviéramos en cuenta sólo los procesos exteriores.

Definimos:

$$Q^{-1} = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta E}{E} \quad (48)$$

ΔE : disminución de energía/ciclo. E : energía máxima almacenada/ciclo.

$$\text{Como } E \sim A^2, \quad \Delta E \sim 2 A \Delta A \quad (49)$$

$$\therefore Q^{-1} = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta A}{A} \quad (50)$$

donde en general $\Delta A/A \ll 1$. Debido a este pequeño valor de ΔA es conveniente usar el decremento logarítmico:

$$\ln \frac{A_1}{A_1 + 1} = \ln \frac{A + \Delta A}{A} = \ln \left(1 + \frac{\Delta A}{A} \right) \approx \frac{\Delta A}{A} \quad (51)$$

Reemplazando este valor en (50):

$$Q^{-1} = \frac{1}{\pi} \delta \quad (52)$$

donde hemos definido:

$$\delta = \ln \frac{A_1}{A_1 + 1} \quad (53)$$

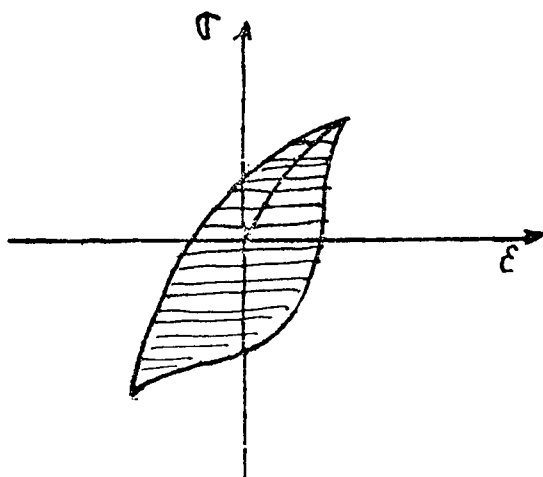
A_1 , A_1+1 amplitudes consecutivas.

Fundamentalmente hay dos mecanismos para la disipación de energía:

1.- Histéresis estática

2.- Histéresis dinámica

El caso estático es similar al problema de histéresis corriente en magnetismo



$$E \sim \oint \sigma d\epsilon \quad (54)$$

Es decir la energía disipada es el área encerrada bajo la curva de histéresis.

En este caso la fricción interna es independiente de la frecuencia. Dentro de ciertos límites la energía disipada es independiente de si realizamos el proceso lentamente o rápidamente. En cambio este caso depende sensiti-

vamente de la amplitud inicial.

En el segundo caso ocurre justamente el proceso inverso. La fricción interna generalmente no depende de la amplitud pero si de la frecuencia.

Tenemos un caso de histéresis dinámica si:

$$\epsilon = \epsilon_l + \epsilon_a \quad (55)$$

donde ϵ_l = deformación elástica y ϵ_a = deformación anelástica

$$\epsilon_a \ll \epsilon_l \quad (56)$$

Si la velocidad de la vibración es muy inferior a la del sonido, a ϵ_l se la puede considerar prácticamente instantánea. Ahora supongamos que:

$$\epsilon_a = \lambda p$$

donde p es un cierto parámetro interno, como por ejemplo la temperatura. El caso más interesante de acuerdo a los resultados que se pueden obtener es considerar a p como la concentración de átomos en

una posición especial. Otra posibilidad es considerar p como la cantidad de dipolos elásticos, la magnetostricción, acoplamiento de spin, etc.

Si consideramos que p representa una cantidad de dipolos elásticos, que cuando aplicamos una tensión \tratan de orientarse en fase con la tensión por un proceso estadístico como difusión tenemos:

$$\frac{dp}{dt} = - \frac{p - p_0}{\tau} \implies p - p_0 = c e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (57)$$

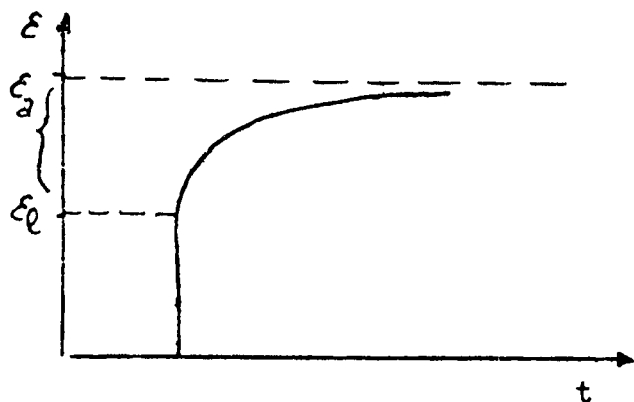
donde τ es el tiempo para que un dipolo realice un salto.

Multiplicando (57) por λ :

$$\lambda \frac{dp}{dt} = - \frac{\lambda p - \lambda p_0}{\tau} \quad (58)$$

$$\text{En este caso } p_0 = \alpha \sigma \quad (59)$$

$$\frac{d\epsilon_a}{dt} = - \frac{\epsilon_a}{\tau} + \frac{\lambda \alpha}{\tau} \sigma \quad (60)$$



ϵ_l es instantáneo, pero para ϵ_a necesitamos difusión pues hay un reordenamiento de los átomos, y para este proceso necesitamos un cierto tiempo.

Supongamos ahora que aplicamos una tensión periódica

de la forma:

$$\sigma = \sigma_0 e^{i\omega t} \quad (61)$$

la ecuación (60) se transforma en:

$$\frac{d\epsilon_a}{dt} + \frac{\epsilon_a}{\tau} = \frac{\lambda \alpha}{\tau} \sigma_0 e^{i\omega t} \quad (62)$$

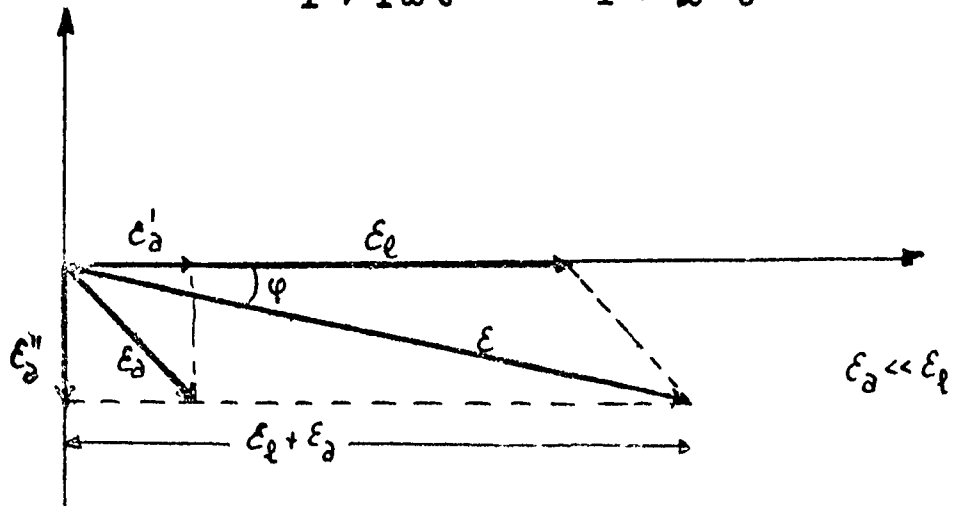
La solución estacionaria de la ecuación es:

$$\epsilon_a = a e^{i\omega t} \quad (63)$$

que reemplazada en la ecuación diferencial da:

$$i\omega a e^{i\omega t} + \frac{a}{\tau} e^{i\omega t} = \frac{\lambda \alpha}{\tau} \sigma_0 e^{i\omega t}$$

$$\therefore a = \frac{\lambda \alpha \sigma_0}{1 + i\omega \tau} = \frac{\lambda \alpha \sigma_0 (1 - i\omega \tau)}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (64)$$



$$\xi_a = \xi'_a - i \xi''_a \quad (65)$$

Para calcular el coeficiente de fricción interna Q^{-1} debemos conocer E y ΔE

La densidad de energía es proporcional a $\sigma \epsilon$

$$E = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \sigma \epsilon \, dt \quad (66)$$

ΔE es el trabajo realizado durante la vibración en un ciclo

$$\Delta E = \oint \sigma \, d\epsilon = \int_0^\tau \sigma \frac{d\epsilon}{dt} \, dt \quad (67)$$

$$\sigma = \sigma_0 \sin \omega t \quad (68)$$

$$\epsilon = \epsilon_0 \sin (\omega t - \varphi) \quad (69)$$

$$\therefore \epsilon = \epsilon_0 (\sin \omega t \cos \varphi - \cos \omega t \sin \varphi)$$

De (66):

$$\begin{aligned} E &= \frac{\sigma_0 \epsilon_0}{\tau} \int_0^\tau (\sin^2 \omega t \cos \varphi - \sin \omega t \cos \omega t \sin \varphi) \, dt = \\ &= \frac{\sigma_0 \epsilon_0}{\tau \omega} \int_0^{2\pi} \sin^2 \omega t \cos \varphi \, d\omega t = \frac{\sigma_0 \epsilon_0}{\tau \omega} \cdot \frac{\pi}{2} \cos \varphi = \frac{\sigma_0 \epsilon_0 \cos \varphi}{2} \end{aligned}$$

ya que $\omega\tau = 2\pi$

$$\therefore E = \frac{\sigma_0 \varepsilon_0 \cos \varphi}{2} \quad (70)$$

donde E es la energía almacenada durante un ciclo.

$$\frac{dE}{dt} = \omega \varepsilon_0 (\cos \omega t \cos \varphi + \sin \omega t \sin \varphi)$$

$$\begin{aligned} \therefore \Delta E &= \omega \varepsilon_0 \sigma_0 \int_0^\tau (\sin \omega t \cos \omega t \cos \varphi + \sin^2 \omega t \sin \varphi) dt = \\ &= \frac{\omega \varepsilon_0 \sigma_0}{\omega} \int_0^\tau \sin^2 \omega t \sin \varphi d\omega t = \varepsilon_0 \sigma_0 \sin \varphi \cdot \pi \end{aligned}$$

$$\therefore \Delta E = \pi \sigma_0 \varepsilon_0 \sin \varphi \quad (71)$$

donde ΔE es la energía que hay que introducir al sistema de tal forma que el proceso pueda continuar. Si no existiera la fricción interna el proceso no requeriría energía ya que $\varphi = 0$ y por consiguiente $\Delta E = 0$.

De la fórmula (70) y (71)

$$Q^{-1} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\Delta E}{E} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\pi \sigma_0 \varepsilon_0 \sin \varphi}{\sigma_0 \varepsilon_0 \cos \varphi / 2} = \operatorname{tg} \varphi$$

$$Q^{-1} = \operatorname{tg} \varphi \quad (72)$$

$$Q^{-1} = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta E}{E} = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta A}{A} \approx \frac{1}{\pi} \delta = \operatorname{tg} \varphi \quad (73)$$

Del gráfico anterior obtenemos:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\varepsilon_a''}{\varepsilon_\ell + \varepsilon_\ell'} \approx \frac{\varepsilon_a''}{\varepsilon_\ell} \quad (74)$$

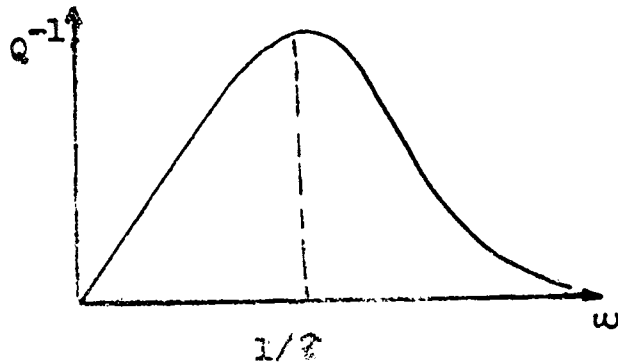
donde

$$\varepsilon_a' = \lambda \propto \sigma_0 \cdot \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} ; \quad \varepsilon_a'' = \lambda \propto \sigma_0 \cdot \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} ; \quad \varepsilon_\ell = \frac{\sigma_0}{M} \quad (75)$$

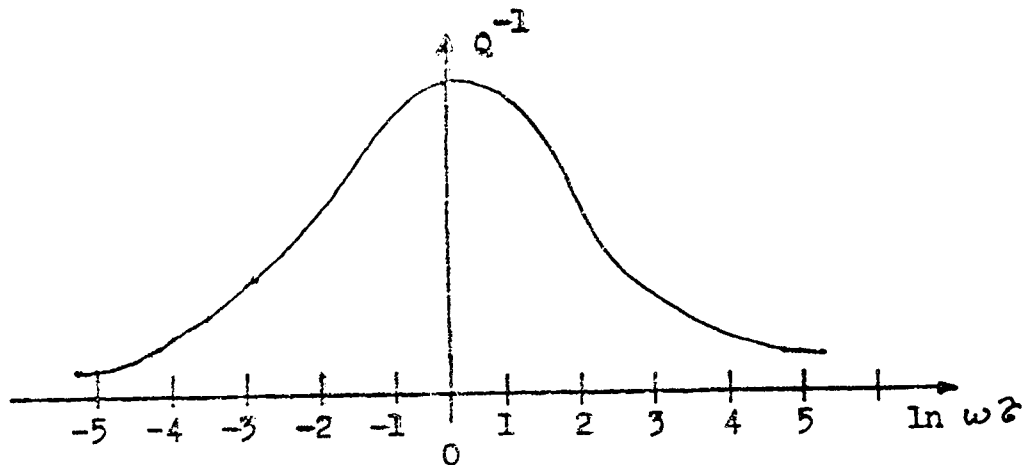
$$Q^{-1} = \frac{\lambda \propto \sigma_0 \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} / \frac{\sigma_0}{M}$$

$$Q^{-1} = M\lambda\alpha \cdot \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (76)$$

Como se puede observar Q^{-1} depende de la frecuencia, pero no de la amplitud de la oscilación.



Es más frecuente el uso de la siguiente representación gráfica

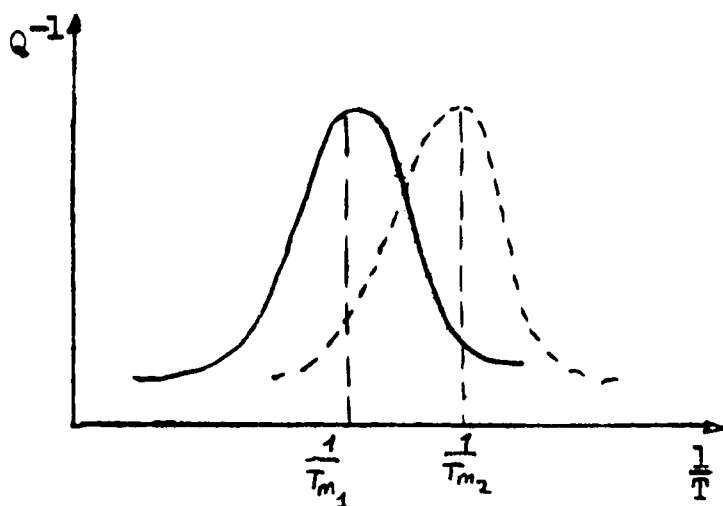


Los cuerpos que muestran un comportamiento como el del gráfico, se los designa "sólidos lineales standard".

Experimentalmente en lugar de variar ω es conveniente variar τ , variando la temperatura, ya que:

$$\tau = \frac{1}{\nu} \approx \frac{1}{e^{-\frac{U_i}{kT}}} \quad (77)$$

El pico de fricción interna ocurre cuando $\omega\tau = 1$.



$$\omega_m = \frac{1}{\tau} = \gamma_0 e^{-\frac{U_j}{kT_m}} \quad (78)$$

donde T_m es la temperatura a la cual ocurre el pico.

En la experiencia indicada en la figura, hacemos de tal forma que la frecuencia de vibración del sistema sea igual a la frecuencia de salto de los átomos. Si ahora tomamos una frecuencia distinta, cambia τ y por lo tanto T . De estas variaciones podemos calcular U_j .

$$\frac{\partial \ln \omega}{\partial T} = -\frac{U_j}{kT^2} = \frac{\Delta \omega}{\Delta T} \quad (79)$$

Como en la fórmula (79) todo es conocido salvo U_j , podemos calcularla. Como se ve con este método se puede medir saltos de átomos individuales.

Por los métodos clásicos, para medir variaciones en propiedades macroscópicas, los átomos tienen que difundir del orden de $x = 10^{-2} \text{ cm}$.

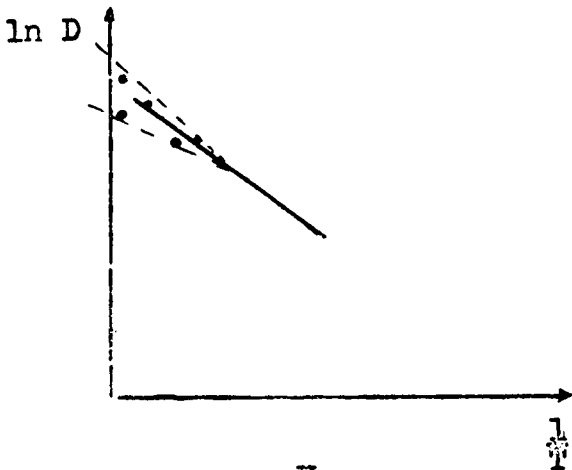
$$x^2 = D t = \frac{a^2}{\tau} t = a^2 n$$

$$n = \frac{x^2}{a^2} \approx \frac{10^{-4} \text{ cm}^2}{10^{-16} \text{ cm}^2} = 10^{12}$$

Como un átomo salta aproximadamente 1 vez/seg hay que esperar $10^{12} \text{ seg} \approx 30.000 \text{ años!}$ para observar algún cambio.

Con métodos de fricción interna se pueden hacer experiencias a temperatura ambiente y con $\omega = 1 \text{ cps}$.

Por ejemplo, por métodos clásicos se puede medir el coeficiente de difusión sólo para altas temperaturas, que oscilan entre



$$D = D_0 e^{-\frac{U}{kT}}$$

$$\ln D = -\frac{U}{kT} + \ln D_0$$

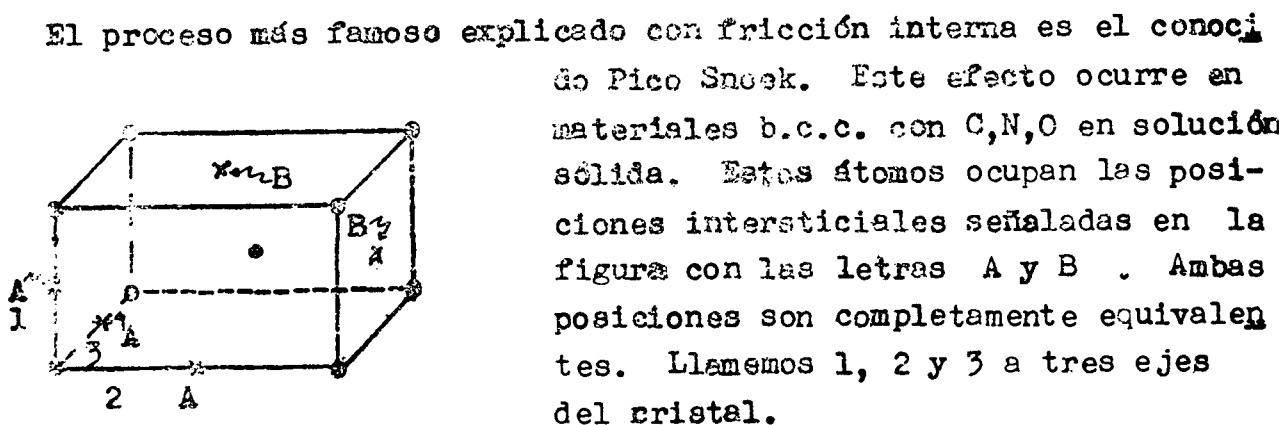
la temperatura de fusión y la temperatura determinada por el máximo tiempo que puede durar la experiencia en cuestión. Este es un problema grave, ya que, debido a la dispersión en los datos experimentales, las mediciones de la ordenada en el origen tienen un gran error que es magnificado aún más en D .

Este problema puede resolverse con los métodos de fricción interna, si el salto de los átomos da origen a la fricción, ya que se pueden determinar puntos

de la recta para bajas temperaturas no quedando en esta forma ninguna ambigüedad para su trazado.

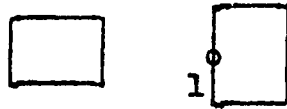
El método de fricción interna también puede ser utilizado para estudiar la influencia de las vacancias en el coeficiente de difusión; congelando vacancias y midiendo si hay algún cambio respecto a la curva original. También se puede analizar la influencia de las dislocaciones.

Un problema interesante es el estudio de la cinética de precipitados, ya que la fricción interna es proporcional a la cantidad de átomos en solución sólida. Si la solución está saturada hay precipitación y es importante ver con qué velocidad los átomos segregan a los precipitados. Para ello medimos el cambio de la fricción interna con el tiempo y podemos medir con qué velocidad las impurezas desaparecen.

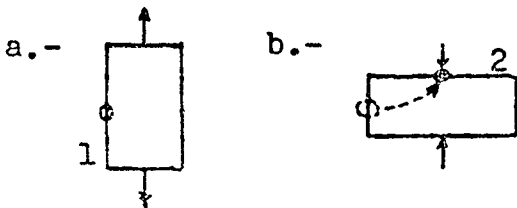


Si tenemos, por ejemplo, un intersticial en el eje 1, éste empuja a los dos átomos sobre este eje hacia afuera, provocando una exten -

sión de la celda unitaria en la dirección de éste eje. Esquemáticamente:



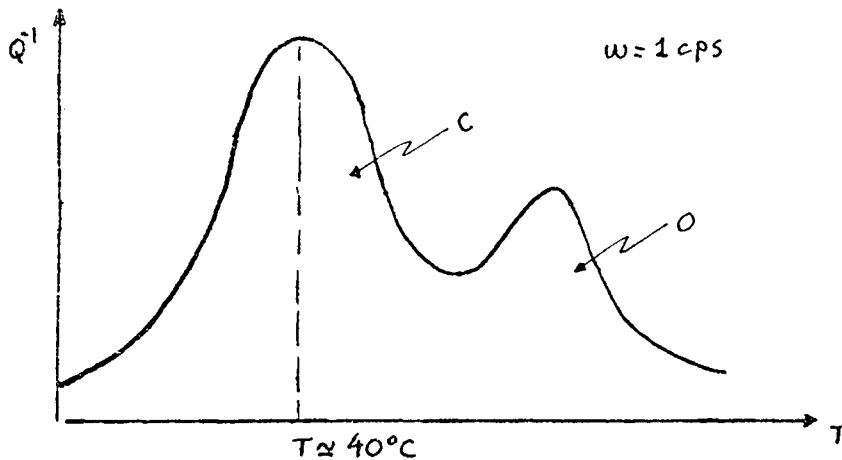
Si aplicamos una tensión en la dirección del eje 1, las impurezas tienden a alinearse en esta dirección. Si ahora comprimimos las impurezas saltan hacia la posición intersticial ubicada en el eje 2. Esquemáticamente:



En el caso a.- la población es más numerosa en el eje 1, y en b.- es más numerosa en el eje 2. Si ahora cambiamos súbitamente de a.- a b.- los átomos saltan con un tiempo de relajación del orden del tiempo

de salto de un átomo.

Para C en Fe tenemos una curva de la siguiente forma:



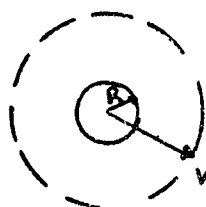
Se encuentra que el valor máximo de Q^{-1} es proporcional a la concentración de átomos de carbono en solución sólida. Para calcular la concentración debemos medir la constante de proporcionalidad por una vez y después se puede tomar siempre la misma.

El método de fricción interna no puede ser usado para análisis analítico ya que medimos únicamente los átomos en solución sólida y no los que han precipitado.

De la cinética de la precipitación, se pueden obtener datos acerca de la forma de los precipitados. En forma aproximada podemos hallar qué forma tendrán las curvas, si suponemos distintas formas geométricas a los precipitados.

a) Bolitas esféricas.

Para llegar al círculo de puntos, las impurezas deben difundir ,



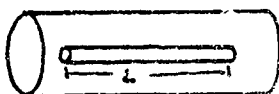
por lo tanto $x = t^{1/2}$

$$V \sim R^3 \sim t^{3/2}$$

(80)

y además V es proporcional a la cantidad de impurezas que ha desaparecido; luego en este caso la curva de Q^{-1} en función de t , tiene que seguir una ley de variación dada por $t^{3/2}$.

b) Cilindros

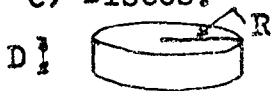


$$V \sim R^2 L \sim t^{3/2} t = t^2$$

(81)

La cantidad que ha desaparecido, es en este caso proporcional al tiempo al cuadrado

c) Discos.



Suponiendo que el disco crece en la dirección del radio.

$$V \sim R^2 D \sim t^{3/2} t^{1/2} = t^2$$

(82)

Estos resultados, son por supuesto, solamente aproximados.

Para obtener resultados exactos, hay que resolver la ecuación de difusión en forma rigurosa.

En hierro se encuentra que el carbono desaparece como $t^{3/2}$ y el nitrógeno como $t^{5/2}$, lo cual nos dice que el carbono responde al modelo de la esfera y el nitrógeno al del disco.

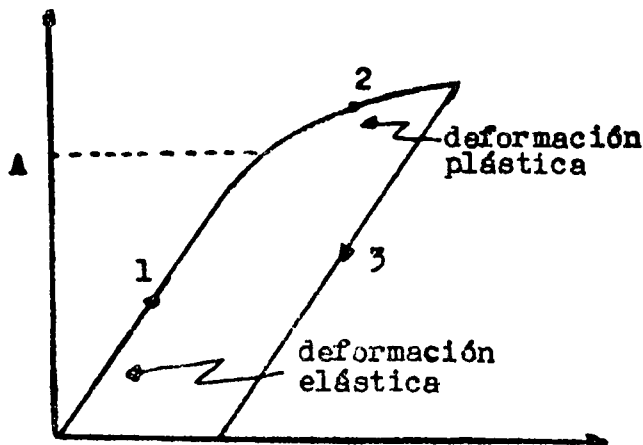
Para poder usar el método de fricción interna se necesita un reordenamiento de los átomos que se encontraban en posición intersticial. Para átomos sustitucionales este método en general no sirve, ya que el átomo impuro produce aproximadamente el mismo campo de tensiones que el normal y cuando se aplica una tensión exterior no hay ningún eje preferido. Si los átomos sustitucionales aparecen en pares, estos se comportan como dipolos elásticos, y se orientan en distintas posiciones de acuerdo a si una tensión o compresión es aplicada. Lo mismo sucede con una impureza sustitucional y una vacancia ya que este par también se comporta como un dipolo elástico.

Aparece en policristales un pico de fricción interna debido a la relajación de los bordes de grano.

En metales ferromagnéticos, a causa del acoplamiento de spin aparecen fuerzas de magnetostricción que dan lugar a un pico de fricción interna.

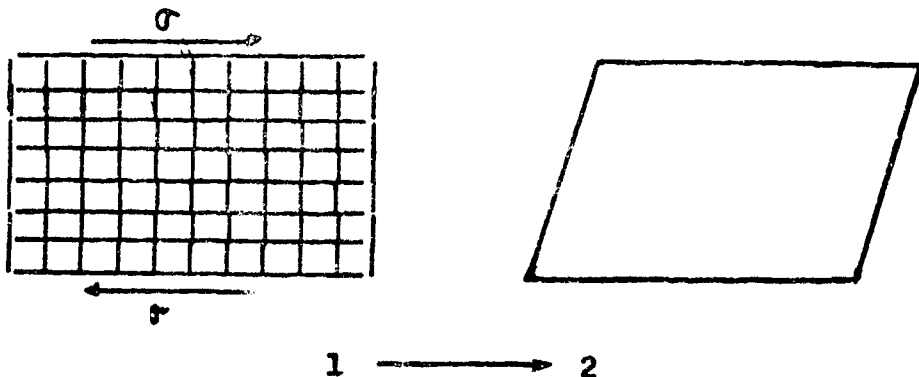
CAPITULO IV

TEORIA DE DISLOCACIONES



Supongamos la curva σ vs. ϵ de la figura, donde σ representa la tensión aplicada y ϵ la deformación. En esta curva podemos distinguir dos zonas. En la primera la deformación es proporcional a la tensión (se cumple la ley de Hooke) y no hay deformación permanente. La segunda zona se caracteriza por el hecho de que una retirada la tensión, no se retorna al estado inicial, sino que el material mantiene una deformación permanente; ésta es la zona llamada de deformación plástica.

El problema que surge ahora es explicar cuáles son los factores que determinan σ_A y cómo se produce la deformación.

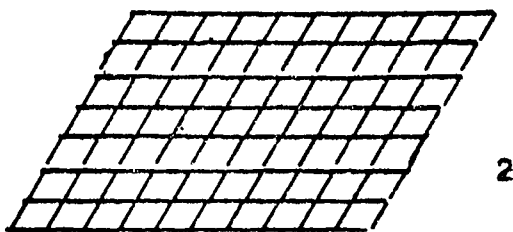


La pregunta es: ¿qué pasa de 1 a 2 ? Varias posibilidades pueden ser encontradas para explicar este hecho:

a.- En 2 , en lugar de una red perfecta como en 1 , la red se

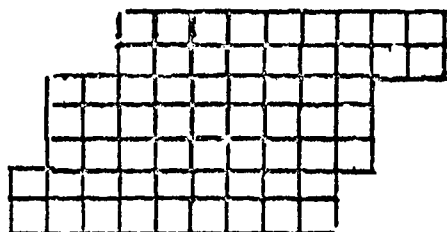
ha destruido completamente.

b.- En 2 tenemos una red ordenada - se conservan los vecinos próximos, pero rotada en un cierto ángulo, como mostramos en la figura a continuación:



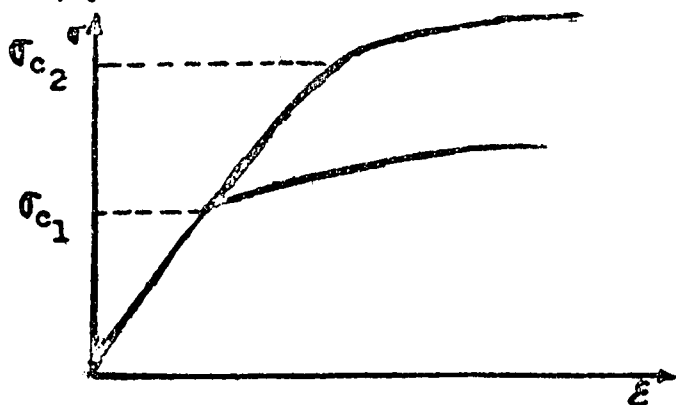
Tanto la hipótesis a como la b pueden ser comprobadas por medio de rayos X. Se encuentra que ambas son falsas.

Lo que se ve en realidad es:



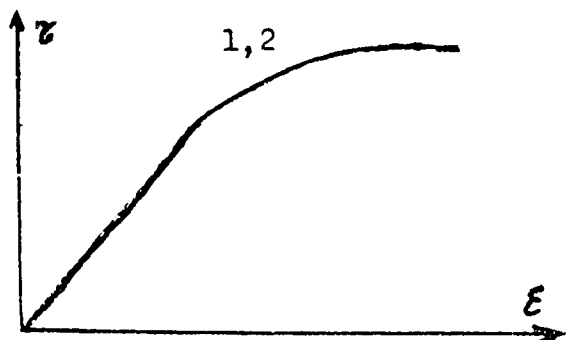
y se encuentra que no hay destrucción de la red cristalina; ésta conserva su forma original. Lo que sucede es que hubo deslizamientos en direcciones de máxima densidad atómica. Este fenómeno se manifiesta como líneas de deslizamiento sobre la superficie del cristal. Estas líneas tienen una orientación cristalográfica determinada y vienen determinadas por la intersección de los planos de deslizamiento con la superficie.

Otro problema a analizar es de qué depende la tensión crítica. Para ello realizamos dos experiencias. Tomamos dos monocristales con distinta orientación de los planos de deslizamiento, el primero por ejemplo con los planos de deslizamiento formando un ángulo de 45° con la tensión aplicada, y el otro formando un ángulo α cualquiera; y determinamos la curva tensión-deformación.



Encontramos que para el ángulo de 45° la tensión crítica es menor. Al mismo tiempo sabemos que la tensión de corte es máxima sobre un plano formando un ángulo de 45° con la tensión aplicada.

Si ahora representamos tensión de corte (τ) vs. ϵ encontramos:

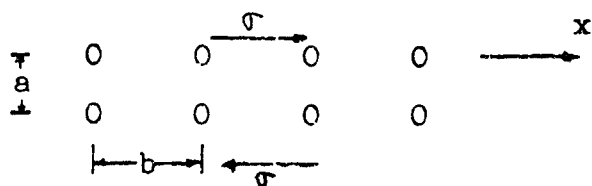


De esta experiencia encontramos que lo que realmente es importante es la tensión aplicada sobre el plano de deslizamiento, para la determinación de σ_c .

De estas experiencias hemos obtenido las siguientes conclusiones:

- a.- La deformación se produce por corrimientos sobre planos de deslizamiento.
- b.- La tensión que actúa es la de corte sobre el plano de deslizamiento.

Calculemos ahora la tensión necesaria para desplazar una fila atómica sobre otra.



Observemos primero que la tensión debe ser periódica en b , ya que después de movernos una distancia b debemos llegar

a una nueva posición de equilibrio. Suponemos la función más simple que cumple esta propiedad:

$$\tau = k \sin \frac{2\pi x}{b} \quad (83)$$

para x pequeños esta ley debe reducirse a la ley de Hooke:

$$\tau = G \epsilon = G \frac{x}{a} \quad (84)$$

Uniendo (83) y (84):

$$\tau = \frac{b}{a} \cdot \frac{G}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{b} \quad (85)$$

$$\tau_{\text{maximo}} \approx G/10 \quad (86)$$

En lugar de tomar una función simple como es el seno se puede tomar:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sin \frac{2n\pi x}{b}$$

y se encuentra:

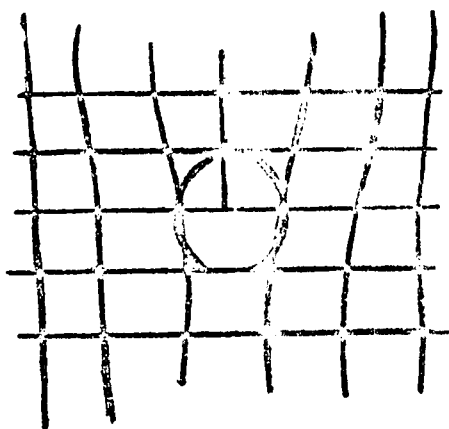
$$\tau_{\text{máximo}} \approx \frac{G}{30} \quad (87)$$

Los valores experimentalmente hallados son del orden de:

$$\tau_{\text{crítico exp.}} \approx 10^{-4} \text{ G} \quad (88)$$

Como se puede apreciar no existe concordancia en el orden de magnitud entre los resultados teóricamente esperados y los hallados experimentalmente. Este era el estado de cosas hasta aproximadamente 1928.

La solución a este problema puede ser pensada de la siguiente forma: en lugar de tener una red perfecta supongamos un semiplano de átomos extra, y llamemos a este defecto dislocación. En un corte tan



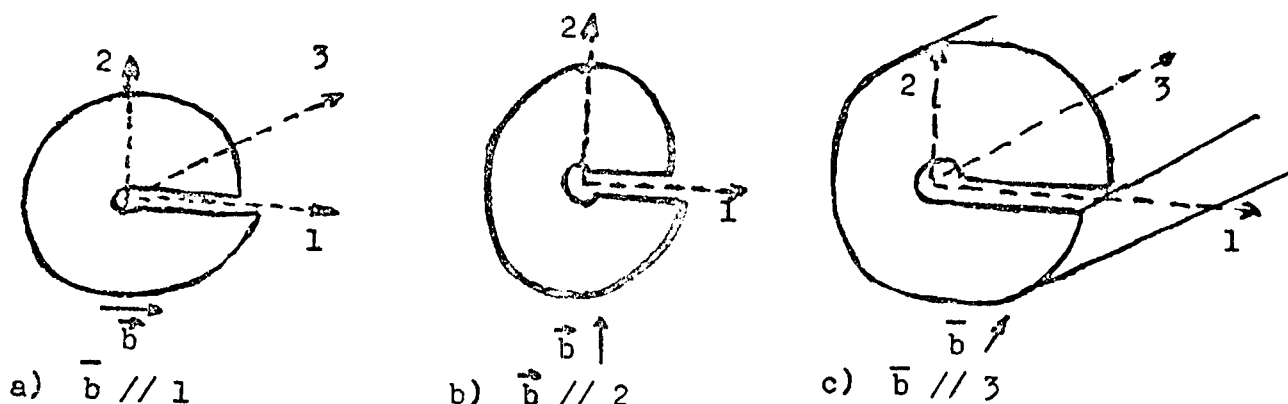
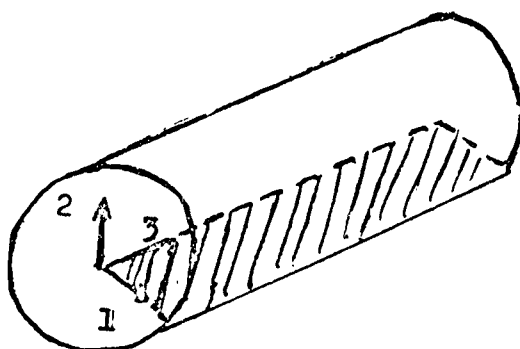
Hay que notar que la red está fuera de registro sólo en la zona dentro del círculo. A este defecto es al que le dimos el nombre de dislocación.

La tensión aplicada sólo tiene que hacer fuerza en los átomos que están próximos a la dislocación, en lugar de efectuarse en toda la fila de átomos como en el caso de la red perfecta. Luego es más fácil mover este defecto a lo largo de la red.

Si no existieran las dislocaciones, la resistencia de materiales a la deformación sería 10^3 más grande que los valores obtenidos experimentalmente.

Para introducir una dislocación en un cristal podemos por ejemplo, cortar el cristal e introducir un plano extra de átomos, o cortar y sacar un semiplano de átomos y volver a pegar las caras. Otra forma es cortar el cristal y deslizar una parte sobre otra en una distancia atómica. De cualquier forma que la dislocación haya sido introducida en el cristal, la configuración del defecto es independiente del proceso de introducción. La forma de cortar no tiene importancia, en general podemos cortar en una forma arbitraria, deslizamos las dos superficies una distancia determinada por un vector $\vec{b}$, llenamos el espacio libre que queda (o quitamos material si hemos desplazado en el sentido opuesto) y luego pegamos nuevamente las caras. El estado final dependerá únicamente de la línea de dislocación y del vector $\vec{b}$, llamado vector de Burgers de la dislocación.

Podemos considerar dos casos extremos de dislocaciones, que dependen de la forma como deslizamos las superficies del cristal.

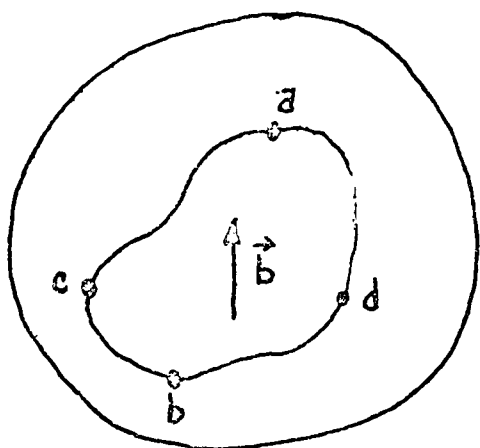


En el cilindro de la figura cortamos como se indica en la zona rayada, y vemos que existen tres posibilidades en la orientación de $\vec{b}$.

En el caso a ó b el vector de Buegers $\vec{b}$ es perpendicular a la línea de dislocación, y este tipo especial es llamado dislocación de borde; geométricamente puede ser representada suponiendo que n átomos en la parte superior se unen con $n+1$ átomos en la parte inferior.

El otro extremo es el caso c, en el cual el vector $\vec{b}$ es paralelo a la línea de dislocación es designado como dislocación de hélice.

Para definir una dislocación en un caso general, supongamos un cuerpo de goma de forma esférica y cortemos en el centro una figura arbitraria y deslicemos tangencialmente las dos partes una distancia $\vec{b}$ y luego peguemos nuevamente las caras. La línea formada en el interior del cuerpo, que separa la zona que ha deslizado de la zona que no ha deslizado es una línea de dislocación. Obsérvese que esta línea contiene segmentos donde la dislocación es de borde como



en a y b y segmentos donde la dislocación es de hélice como en c y d. En todos los demás puntos la dislocación es mixta y se llama dislocación del tipo φ donde φ es el ángulo que forman la

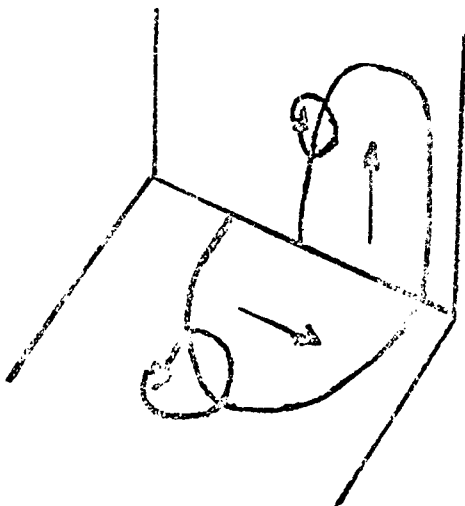
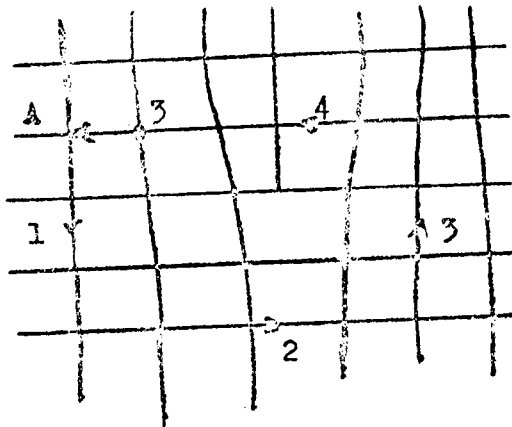
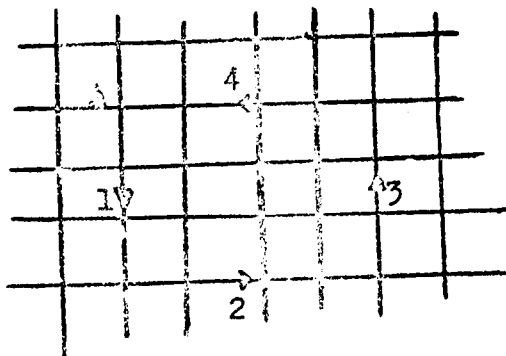
línea de dislocación y el vector de Burgers.

Las características fundamentales de una dislocación vienen determinadas por el vector $\vec{b}$ y el ángulo φ .

Debido a la forma en que hemos definido una dislocación, ésta no puede terminar dentro del cristal. Esta debe ser una línea cerrada o terminar en la superficie del cristal.

Una dislocación puede bifurcarse en varias dislocaciones.

Veamos ahora la definición operacional del vector de Burgers. Supongamos un cristal perfecto y hagamos un circuito como el de la figura:



Si partimos del punto A y recorremos a espacios en la dirección 1, luego b en la dirección 2, nuevamente a en la 3 y b en la 4, llegamos finalmente otra vez al punto A de partida.

Consideremos ahora un cristal que contiene una dislocación y hagamos el mismo circuito.

Partiendo nuevamente de un punto A observamos que al dar la vuelta llegamos a otro punto B. Se define como vector de Burgers de la línea de dislocación al vector que une B y A.

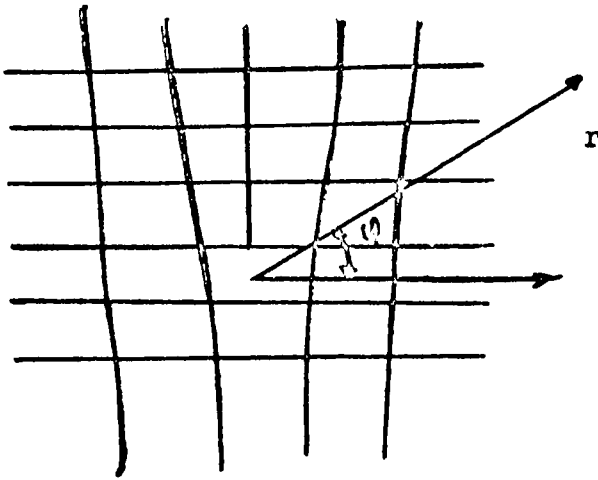
Supongamos ahora una dislocación más general como la que se muestra en la siguiente figura. Cada línea de dislocación tiene su vector de Burgers mientras que la línea que es común a los dos dislocaciones tiene por vector al formado por la suma vectorial de los dos, habiendo definido un determinado sentido de rotación para que tenga sentido unívoco el signo asignado a cada dislocación.

Debemos mencionar que la suma de los vectores de Buerger de todas las dislocaciones que se encuentran en un punto de ramificación es cero.

En un continuo elástico $\vec{b}$ puede tomar cualquier valor arbitrario, en cambio, en un cristal éste debe ser un vector de identidad de la red, ya que de esta forma se mantiene la red cristalina. Además de esta manera, la configuración tiene mínima energía. Por otra parte, $\vec{b}$ es el vector más corto de identidad, como veremos que se deduce a partir de consideraciones de energía de una dislocación.

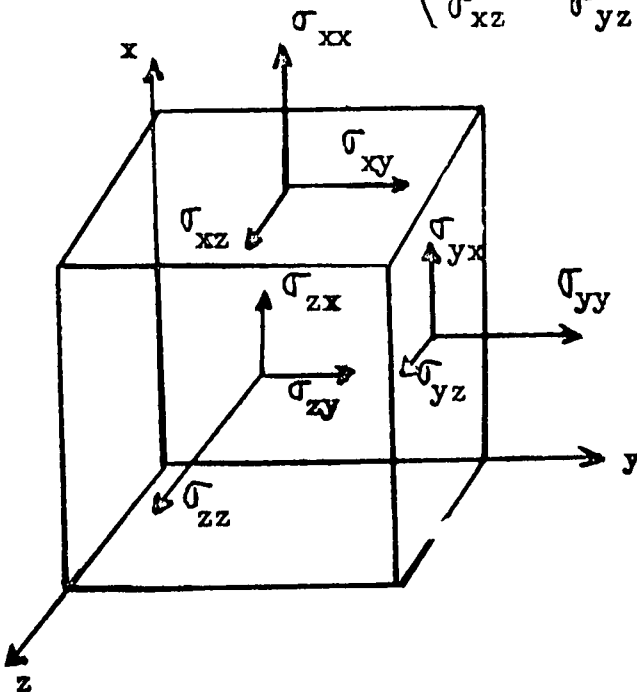
CAMPO DE TENSIONES ALREDEDOR DE UNA DISLOCACION

$$\sigma = f(r, \varphi) \quad (89)$$



El estado de tensión en cada punto, está descrito por un tensor simétrico, llamado tensor de las tensiones, donde los componentes con índice repetido significan presiones o compresiones y los componentes con índices cruzados representan tensiones tangenciales.

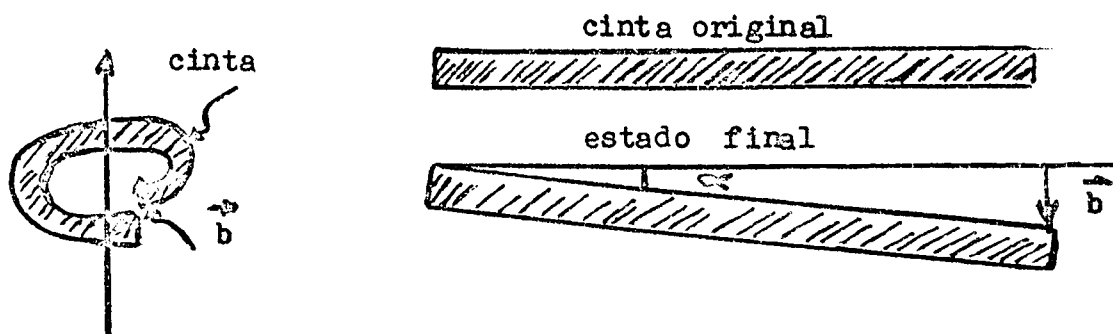
$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (90)$$



En el gráfico de la izquierda mostramos un esquema de las direcciones de las tensiones que actúan sobre un elemento de volumen.

Calculemos a continuación las tensiones alrededor de una dislocación de hélice:

Podemos calcular la deformación elástica de esta cinta:



$$\epsilon = \tan \alpha = \frac{b}{2\pi r} \quad (91)$$

donde r es el radio de la cinta. De acuerdo a la ley de Hooke $\sigma = G\epsilon$ obtenemos:

$$\sigma_{\varphi z} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (92)$$

Tomando coordenadas polares:

$$\sigma_{r\varphi} = 0$$

$$\sigma_{rr} = 0$$

$$\sigma_{rz} = 0$$

como se puede ver de la simetría del problema.

Debido a que el arreglo alrededor del eje z es de simetría cilíndrica $\sigma_{\varphi z}$ no depende de φ como vimos en (92).

Para una dislocación de borde se encuentra que:

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{2\pi} \frac{Gb}{r} f(\varphi) \quad (93)$$

La dependencia con el ángulo φ es en este caso distinta, pero la dependencia Gb/r se mantiene para los componentes de la tensión de cualquier dislocación.

ENERGIA Y TENSION

A causa del estado de tensión que existe en un material debido a la presencia de una dislocación, hay una cierta cantidad de energía elástica almacenada:

$$E = \int_V \sigma \epsilon \, dV \quad (94)$$

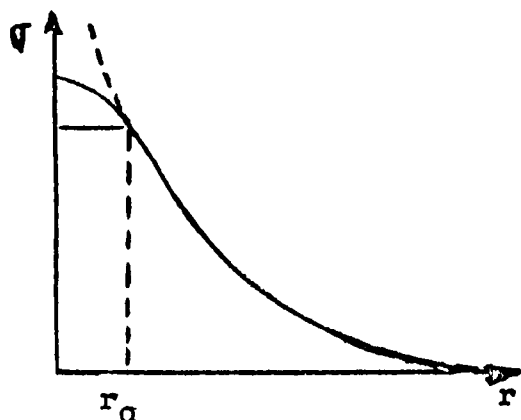
$$E = \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{Gb^2}{4\pi^2 r^2} r \, dr \, d\varphi \, dz = \frac{Gb}{2\pi} \ln r \Big|_0^\infty \quad (95)$$

donde E representa la energía almacenada en un trozo cilíndrico de material de longitud l .

En (95) hemos llegado a un valor que diverge lo cual no tiene significado físico. Matemáticamente podemos resolver este problema reemplazando R por ∞ e r_0 en lugar de cero y tender al límite cuando $R \rightarrow \infty$ y $r_0 \rightarrow 0$ y ver si la integral

A nosotros nos interesa justificar físicamente las suposiciones matemáticas.

Cuando $r = 0$, en (95) $\sigma = \infty$ lo cual es absurdo. Esto se debe a que no tiene sentido hablar de tensión elástica en un límite menor que una distancia atómica.



Veamos ahora la representación de σ vs r . Hasta un valor r_0 observamos la dependencia inversa de σ con r , y a partir de ese valor esta ley no es cumplida, debido a que para $r < r_0$ no se cumple la ley de Hooke.

Este problema puede ser resuelto en primera aproximación suponiendo que hasta r_0 se cumple la ley de Hooke, y entre r_0 y 0, $\sigma = \text{cte}$. Mediante este

razonamiento es justificable reemplazar a cero por r_0 .

Para $r = \infty$, tendríamos la energía almacenada en un cuerpo de dimensiones infinitas, que no tiene realidad física. Supongamos ahora que en el material hay una cierta densidad de dislocaciones, y R es la distancia media entre dos dislocaciones. Debido a la presencia de las demás dislocaciones la tensión debida a una de ellas a una distancia mayor que R es nula. Vemos que se justifica usar en lugar de ∞ , un valor de R del orden de la distancia media entre dislocaciones.

Con estas hipótesis llegamos a que (95) se transforma en:

$$E = \frac{Gb^2}{2\pi} l \ln \frac{R}{r_0} \quad (96)$$

Dividiendo por l , obtenemos la energía por unidad de longitud:

$$T = \frac{Gb^2}{2\pi} \ln \frac{R}{r_0} \quad (97)$$

Si tomamos los valores típicos de $r_0 \approx b$, $R \approx 10^4 b$ obtenemos:

$$T \approx \frac{1}{2} G b^2 \quad (98)$$

$$E = T b = \frac{1}{2} G b^3 \approx 8 \text{ eV} \quad \text{para metales normales}$$

Este es un valor de energía muy grande en consideraciones atomísticas. Debido a este gran valor se puede argüir que fluctuaciones térmicas no tendrán una gran influencia en el equilibrio térmico.

Calculemos ahora la E para una dislocación con vector de Buerger $\vec{b} = 2$ veces el vector de identidad:

$$E_2 = \frac{1}{2} G (b_2)^2 = \frac{4}{2} G b^2 = 2 G b^2$$

Si ahora suponemos dos dislocaciones separadas cada una con vector $\vec{b} =$ vector de identidad tendremos:

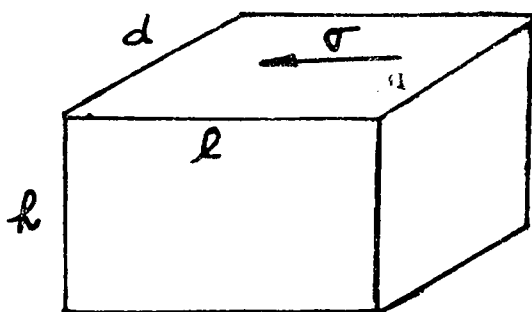
$$E_{\text{dis}} = 2 \cdot \frac{1}{2} G b^2 = G b^2$$

$$\therefore E_2 > E_{\text{dis}}$$

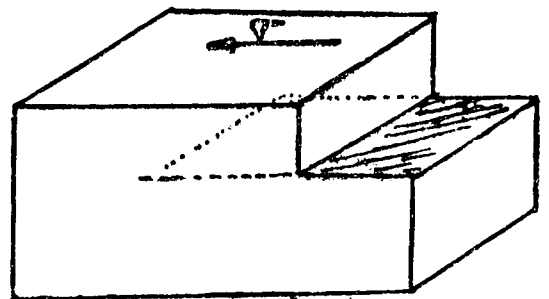
En consecuencia $\vec{b}$ es el vector de identidad de longitud mínima de la red, ya que cualquier dislocación con vector $\vec{b}'$ mayor que $\vec{b}$ poseería mayor energía libre y en consecuencia sería un sistema en equilibrio inestable, descomponiéndose por lo tanto en dislocaciones poseyendo cada una vector $\vec{b}$.

FUERZA

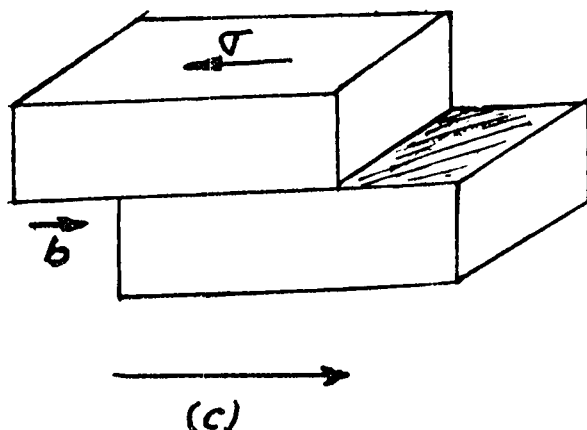
Supongamos que aplicamos una tensión σ sobre un elemento de volumen que contiene una dislocación y queremos calcular la fuerza que actúa sobre la línea de dislocación. Calcularemos la fuerza, computando el trabajo y dividiendo por el camino.



(a)



(b)



El trabajo realizado por la tensión σ para ir desde (a) hasta (b) es:

$$W = \sigma d \cdot l \cdot b \quad (99)$$

Al mismo tiempo hemos realizado trabajo al mover la línea de dislocación. Si llamamos f a la fuerza por unidad de longitud en la dislocación

$$W' = f \cdot d \cdot l \quad (100)$$

Igualando (99) y (100)

$$f = \sigma \cdot b \quad (101)$$

f es la fuerza que cualquier tensión exterior aplicada exige a una línea de dislocación.

El mismo resultado es obtenido si en lugar de una dislocación de borde consideramos una de hélice.

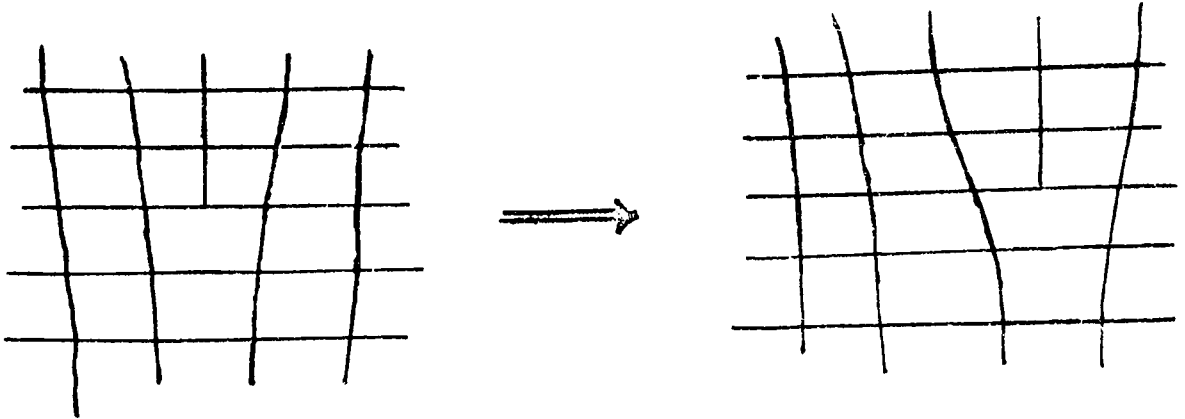
Para recapitular, señalemos que las fórmulas más importantes de la teoría de dislocaciones son:

$$\begin{aligned} \sigma &\sim \frac{1}{2\pi} \frac{Gb}{r} \\ T &= \frac{1}{2} G b^2 \\ f &= \sigma b \end{aligned}$$

MOVIMIENTO DE DISLOCACIONES

Hay fundamentalmente dos tipos distintos de movimiento, movimiento conservativo, y no conservativo.

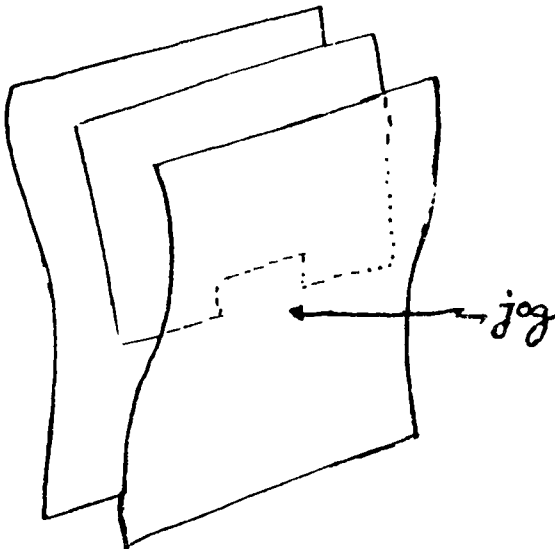
El movimiento conservativo es un desplazamiento en un plano definido por la línea de dislocación y el vector de Buerger. Un ejemplo es el que mostramos en la figura siguiente:



En cuanto al movimiento no conservativo ocurre por ejemplo, cuando debido a la interacción elástica entre dislocaciones y vacancias o intersticiales, estos migran hacia las dislocaciones, produciéndose el fenómeno conocido como trepado. En este tipo de movimiento hay asociado un cambio de volumen, por ejemplo cuando las vacancias añaden el semiplano extra en una dislocación de borde.

Hay que notar que para que una dislocación trepe, tiene que llegar una vacancia a cada plano que la dislocación intercepta. Si bien una

dislocación puede no llegar a trepar, debido a la llegada de vacancias pueden formarse especies de escalones llamados jogs.



Si deseamos calcular la velocidad de trepado, vemos que esta debe ser proporcional a la concentración de vacancias y a la movilidad de las mismas, ya que si las vacancias estuvieran congeladas no sería posible el trepado. Además debe ser proporcional a la probabilidad de encontrar un jog:

$$v \sim C_v m_v p_j \quad (102)$$

Supongamos que tenemos un jog y llega una vacancia y come un átomo. La energía del sistema no ha variado. Lo único que sucedió es el movimiento del jog. No hemos necesitado energía para mover un jog, en cambio sí para formarlo. Un jog actúa como fuente y sumidero de vacancias e intersticiales.

Si reemplazamos en (102) :

$$c_v \sim e^{-\frac{U_v}{kT}} ; \quad n_v \sim e^{-\frac{U_j}{kT}} ; \quad p_j = c_j \quad (103)$$

tenemos:

$$v \sim e^{-\frac{U_v}{kT}} e^{-\frac{U_j}{kT}} \cdot c_j \quad (104)$$

donde c_j es la concentración de jogs en equilibrio térmico.

Es posible obtener la concentración de jogs en equilibrio térmico, ya que este es un defecto en una línea de dislocación, y luego aumenta la entropía y la energía interna del sistema. Similarmente a los casos de vacancias e intersticiales:

$$c_j \sim e^{-\frac{U_s}{kT}} \quad (105)$$

donde U_s es la energía interna del jog.

Reemplazando en (104) :

$$v \sim e^{-\frac{U_v}{kT}} e^{-\frac{U_j}{kT}} e^{-\frac{U_s}{kT}} \quad (106)$$

Si la concentración de jogs es muy grande, es decir la energía interna del jog es muy pequeña, la probabilidad de que una vacancia que llega desaparezca es 1. En consecuencia $p_j = 1$, y (106) se convierte en:

$$v \sim e^{-\frac{U_d}{kT}} \quad (107)$$

siendo U_d la energía de autodifusión.

Si la energía interna de un jog es muy grande, es decir la concentración de jogs en equilibrio térmico es muy pequeña, (105) es independiente de la temperatura y nuevamente vale (107).

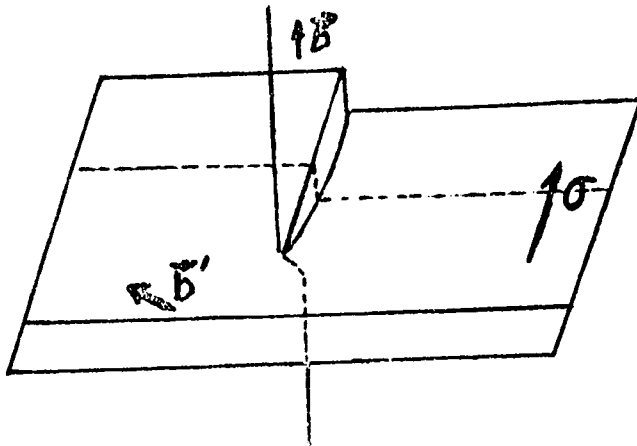
En los casos intermedios:

$$v \sim e^{-\frac{U_d + U_t}{kT}} \quad (108)$$

La energía de activación para la velocidad tiene un valor que se encuentra en el rango limitado por un extremo por la energía de autodifusión y por el otro por la energía de autodifusión + energía necesaria para formar un jog.

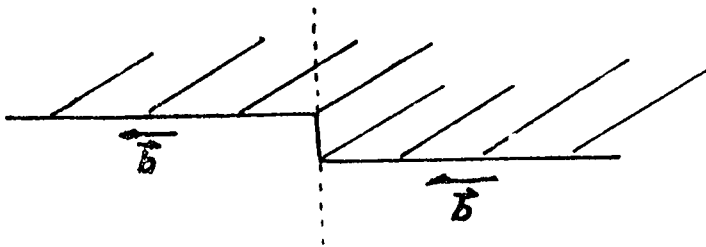
Jogs se forman durante la deformación plástica cuando se produce intersección de dislocaciones.

Como ejemplo supongamos una dislocación de hélice b que es inter



sectada por una dislocación $\vec{b}$ que al menos posee una componente de borde. Se puede ver simplemente de la topografía de los planos que luego de la intersección $\vec{b}$ ha adquirido un jog. La dislocación de hélice también adquiere un jog, debido a que la dislocación que se mueve implica un deslizamiento del plano superior respecto del plano inferior.

El jog en una dislocación es un obstáculo para su movimiento. Como ejemplo tomemos el siguiente caso: si bien la dislocación es de hélice ($\vec{b} //$ línea de dis-



locación), el jog es una dislocación de borde ya que $\vec{b}$ es perpendicular al mismo. Si pongamos que la dislocación trate de moverse en un plano de deslizamiento. El jog debe moverse perpendicular a su plano de deslizamiento, dando en consecuencia tre-

par, para lo cual el jog debe producir vacancias o intersticiales o ser un sumidero de estos. Es decir, se necesita realizar un trabajo y necesitamos aplicar una tensión mayor para mover la dislocación que contiene un jog. Este fenómeno lo aplicaremos cuando estudiemos el endurecimiento por trabajado.

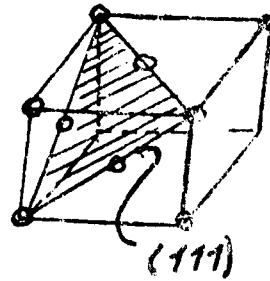
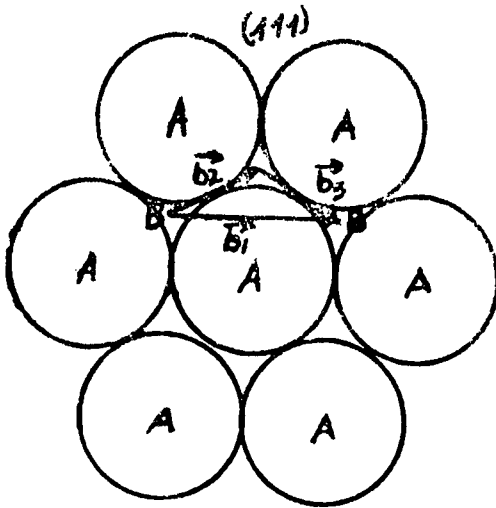
Si quisieramos mover la dislocación de la figura anterior hacia la izquierda, el jog no se opondría al movimiento ya que estaríamos deslizando en su propio plano de deslizamiento.

DISLOCACIONES EXTENDIDAS

En metales que cristalizan en estructuras f.c.c. o hexagonales se pueden producir dislocaciones extendidas. Tanto un tipo de estructura como la otra tienen empaquetamiento compacto.

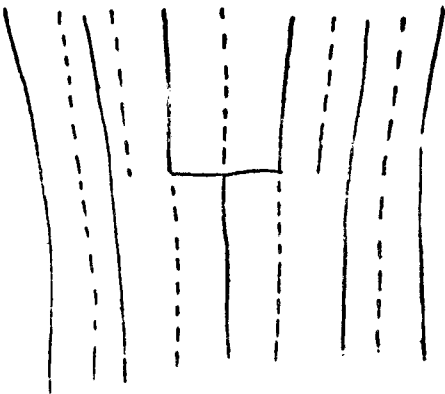
Supongamos el plano (111) en un cristal f.c.c. (ver figura en la página siguiente).

El vector $\vec{b}_1$ define una de las direcciones posibles de slip, pero si pensamos en los átomos como en bolas de billar rodando sobre el



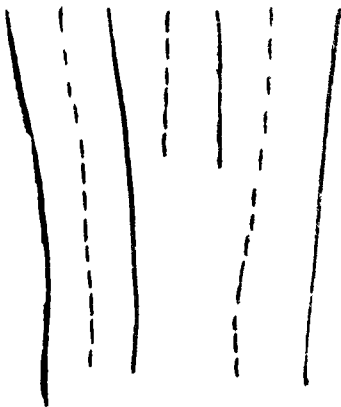
f.c.c.

plano, luego un átomo en la posición B en el plano se moverá más fácilmente a la posición vecina C. Los átomos seguirán el ciclo $B \rightarrow C \rightarrow B$ de acuerdo a los vectores $\vec{b}_2$ y $\vec{b}_3$ alternadamente. Si el slip ocurre de B a C el orden de empaquetamiento en las capas (111) es alterado. En un f.c.c. los planos están en la sucesión ...ABCABCABC..., luego deslizamiento a lo largo de un vector como $\vec{b}_2$ produce una falla tal como ...ABCACABC... . La falla de apilamiento hace



ce que una fina capa de material tenga una estructura h.c.p...CACA... Esquemáticamente tenemos la figura de la izquierda donde la zona con la línea ondulada señala la falla de apilamiento.

Si quisieramos producir una dislocación de borde habría que sacar dos semiplanos, obteniéndose la siguiente situación que se ve en la segunda figura de la izquierda.



Lo importante de las dislocaciones extendidas es analizar cual es su influencia en la deformación plástica.

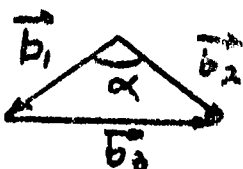
Ahora nos interesa calcular la dimensión de la falla de apilamiento, para lo cual debemos previamente calcular la energía.

Si $\vec{b}_1$ y $\vec{b}_2$ están separados:

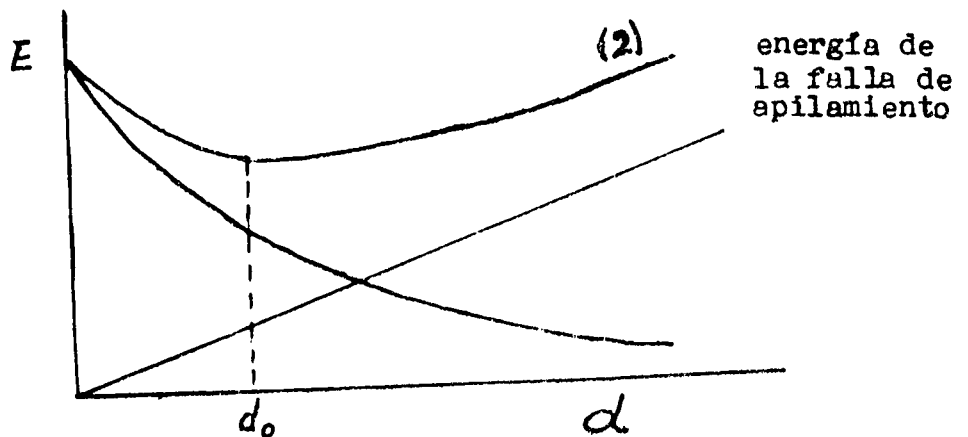
$$E_s = \frac{1}{2} G(b_1^2 + b_2^2) \quad (109)$$

La energía de la dislocación total es:

$$E_d = \frac{1}{2} G b_s^2 \quad (110)$$



Como $\alpha > 90^\circ$ la energía de las dos dislocaciones separadas es menor que la energía de la dislocación total



Teniendo en cuenta que la energía de la falla de apilamiento es:

$$E_{ST} = \gamma d \quad (111)$$

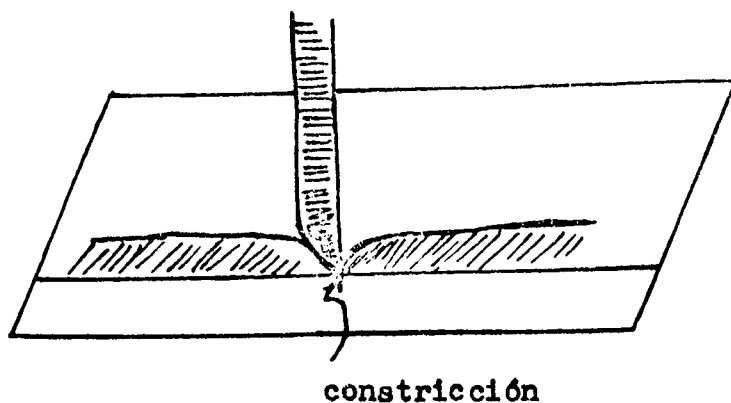
donde γ es la tensión superficial y d el largo de la falla; la energía del sistema total es la representada por la curva (2) suma de las dos curvas. El valor mínimo d_0 corresponde al estado de equilibrio y nos da el valor buscado de la distancia entre las dos semidislocaciones, es decir el ancho de la falla de apilamiento.

Se puede ver del gráfico que cuanto mayor es la energía de la falla de apilamiento, menor es la separación de equilibrio. La separación de equilibrio es el balance entre la repulsión elástica y la tensión superficial.

En Al $d_0 \sim 1$ a $2 \vec{b}$; en Cu $d_0 \sim 4$ a $8 \vec{b}$.

Esto ocurre tanto para dislocaciones de borde como para dislocaciones de hélice. Como la repulsión entre dos dislocaciones de borde es mayor que entre dislocaciones de hélice, la separación entre las semidislocaciones es mayor en el primer caso que en el segundo.

Veamos a continuación qué sucede cuando se intersectan dos dislocaciones extendidas. Las fallas de apilamiento tienen que compenetrarse. Como es muy difícil comprimir los átomos en toda la falla de apilamiento es más fácil constreñir los átomos sólo en el punto de intersección.



De la misma forma que en el caso de dislocaciones no extendidas la intersección de una dislocación extendida de borde con una de hélice, por ejemplo, tiene como consecuen -

cia la formación de jogs.

FORMACION DE DISLOCACIONES

La energía libre de un cristal que contiene dislocaciones es mayor que la de un cristal perfecto; ya que si bien la entropía del sistema aumenta al introducir la dislocación el aumento de la energía interna es mucho mayor. Esto es justamente lo contrario de lo que ocurre con los defectos puntuales.

Es decir, es imposible tener un cristal sin defectos puntuales pero se podría tenerlo sin dislocaciones ya que el sistema sería más estable, aunque en la práctica no se consiguen cristales sin dislocaciones.

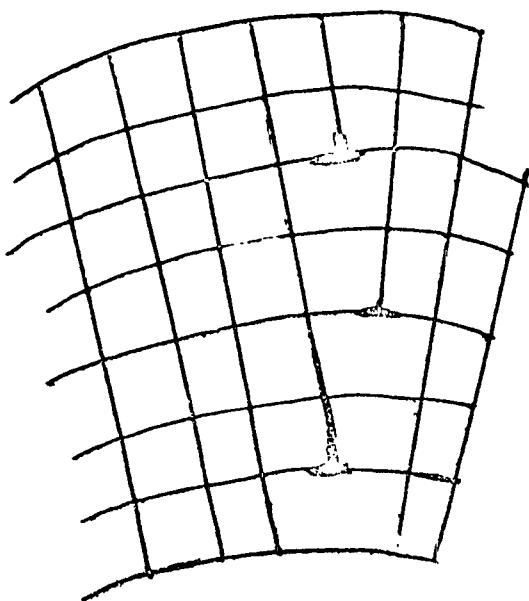
Ya hemos mencionado anteriormente que la densidad de dislocaciones en un metal bien recocido es del orden de $10^6 - 10^8 \text{ cm}^{-2}$, y en un material deformado $\rho \approx 10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. En semiconductores se puede llegar a densidades tan bajas como 100 d/cm^2 . La pregunta es por qué se introducen las dislocaciones en un cristal.

Lo más obvio es suponer un accidente en el crecimiento. Por ejemplo, dos cristales que crecen con una pequeña desorientación. La única forma de unir los filos atómicos, como se ve en la figura, es mediante una pared de dislocaciones de borde.

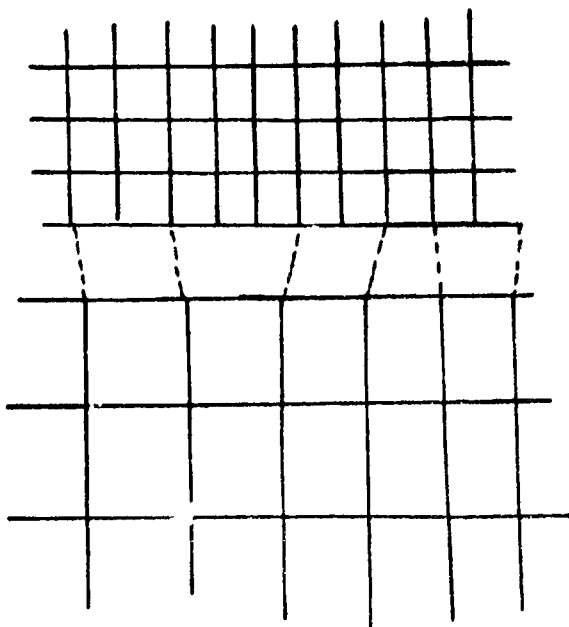
Otra forma es la formación durante el proceso de solidificación debido a la microsegregación.

La microsegregación implica la segregación de impurezas hacia ciertas regiones preferenciales, con el consecuente enriquecimiento de las mismas. Como consecuencia directa dos cristales tienen parámetros reticulares distintos.

La forma de unir los dos cristales, se ve favorecida energéticamente, cuando sucede como en la figura, creando una cantidad de dislocaciones. De esta forma se introducen del orden de

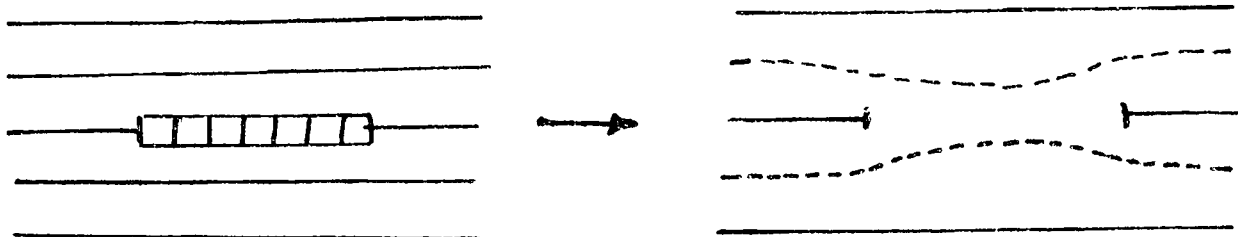


$10^6 - 10^8 \text{ cm}^{-2}$.



Una tercera contribución es por condensación de vacancias. Si recocemos un cristal a alta temperatura, y luego templamos con una alta velocidad de templado, como a alta temperatura hay una gran concentración de vacancias, nos encontramos después de la disminución de la temperatura con una supersaturación de vacancias, que pueden desaparecer en los bordes de grano o en la superficie, pero en general, esto requiere recorrer una gran distancia. Es más favorable

que se unan formando pozos o discos de vacancias, y si el disco es suficientemente grande colapsa para formar un anillo de dislocaciones, para lo cual $E_{\text{disco}} > E_{\text{anillo}}$



El anillo puede deslizarse para arriba o abajo, y puede trepar, para lo cual se necesita la llegada de nuevas vacancias.

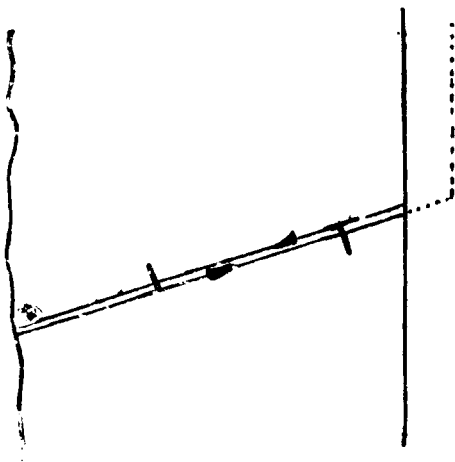
Después de recocer un material, hay ordenamiento de dislocaciones arreglándose en una red tridimensional. Esta se comporta como una red de fibras de goma. La red trata de contraerse pues así se gana energía. Si bien se ganaría energía sacando la red de dislocaciones, se necesita gran energía local para sacar cada trozo de dislocación. Estamos en un estado metaestable. Existe un mínimo relativo de energía, ya que el mínimo absoluto sería un cristal sin dislocaciones.

MULTIPLICACION DE DISLOCACIONES

Cuando observamos las líneas de slip nos encontramos que es el resultado de un cierto número de dislocaciones que han cortado la superficie, todas poseyendo el mismo plano de slip. Si vemos al microscopio óptico una línea de slip necesitamos 10^4 dislocaciones, y para ello es necesario una fuente que produzca esta cantidad en un plano

Hubo varias teorías propuestas para resolver este problema:

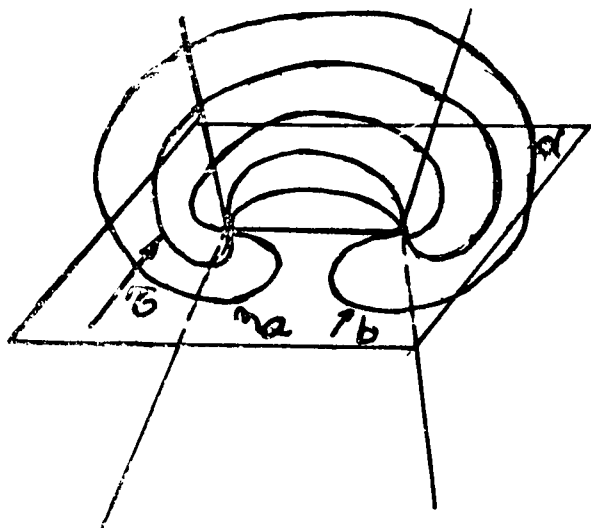
1.- La dislocación que llega a una superficie libre produce un escalón, y debido a la energía cinética que lleva es reflejada como una dislocación de sentido contrario, que es reflejada otra vez en la superficie opuesta, y así siguiendo una y otra vez. Sin embargo se ha



demostrado que este proceso tiene varios inconvenientes. Como primer medida hay varios procesos de fricción; además para conseguir las energías cinéticas necesarias para que el proceso funcione se necesitan velocidades del 90 al 95 % de la velocidad del sonido. Por otra parte si se tiene en cuenta los valores de tiempo observados ($\sim 1 \mu\text{seg}$), la velocidad que deben adquirir las

dislocaciones es mayor que la velocidad del sonido.

2.- En 1950 Frank y Read tuvieron la siguiente idea.

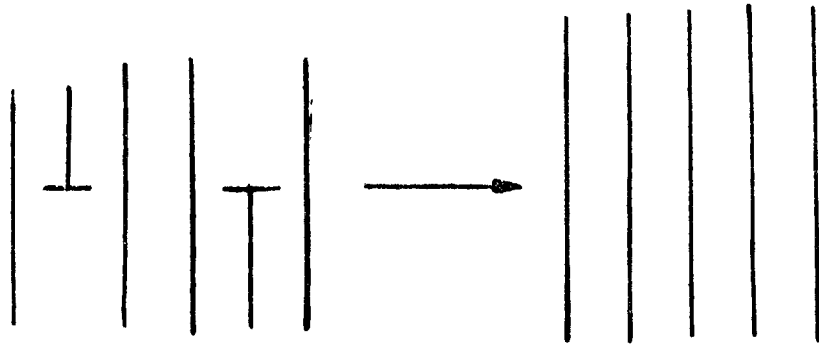


Supongamos que la figura representa una sección de la red de dislocaciones. Si ahora aplicamos una tensión de corte τ sobre el plano α , la línea de dislocación se dobla ya que no puede deslizarse libremente pues está anclada en dos puntos. La línea se dobla más y más a medida que incrementamos la tensión τ . La línea de dislocación se sigue expandiendo hasta que a y b se unen. En este momento el anillo se sigue expandiendo libre del anclaje, pero hemos res-

tornado nuevamente al estado inicial, pudiendo continuar el proceso, produciendo un nuevo anillo de dislocación.

En el momento en que a y b se unen se produce un aniquilamiento.

Con este proceso podemos crear un gran número de anillos de dislocación. Cuando un anillo llega a la superficie produce una línea de slip. Es decir producen un escalon, mientras que las dislocaciones de otro tipo se apilan en los bordes de grano.



Este tipo de proceso de multiplicación se llama fuente de Frank-Read.

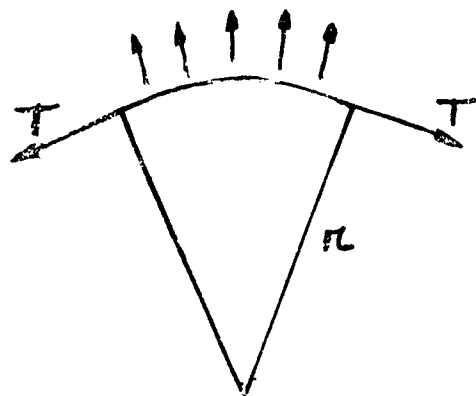
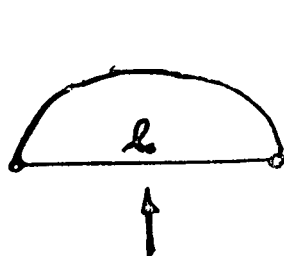
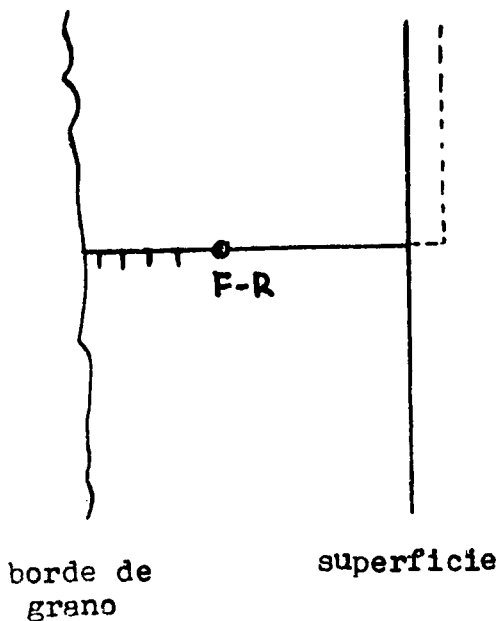
Experimentalmente, Dash obtuvo fotografías de fuentes de Frank-Read en silicio.

A continuación calcularemos la tensión necesaria para hacer operar una fuente de Frank-Read.

r : radio de curvatura.

$$f = \frac{T}{r} \quad (112)$$

$$\therefore \sigma b = \frac{\frac{1}{2} G b^2}{r} \quad (113)$$



De (113) vemos que cualquiera sea el σ existe un r crítico. Cuanto mayor es la tensión menor es el r . Cuando llegamos a una posición crítica $r = \frac{1}{2} l$ nos encontramos en una posición inestable:

$$r_{\text{crítico}} = \frac{1}{2} l \quad (114)$$

$r_{\text{crit.}}$ es el valor menor que puede tener el radio de curvatura para poder formar un anillo de dislocación. A r mínimo le corresponde el

σ máximo:

$$\sigma_{crit} = \frac{Gb}{\ell} \quad (115)$$

σ_{crit} . es la tensión mínima necesaria para producir una dislocación.

En un cristal bien recocido ℓ es del orden de la distancia entre dislocaciones

$$\ell \sim 10^4 b$$

$$\sigma_{crit.} \sim 10^{-4} G$$

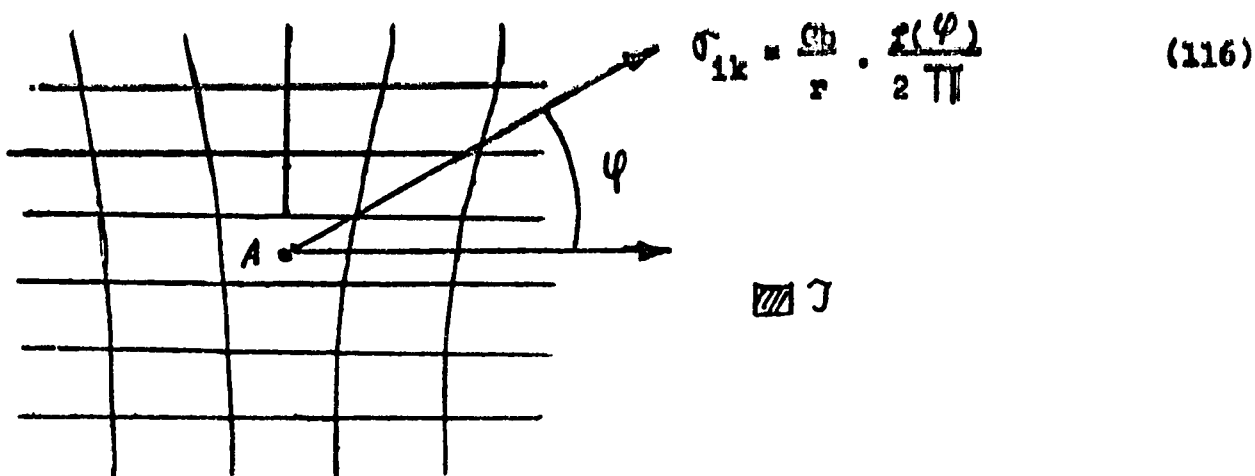
que es del orden de la tensión crítica para deformar cristales bien recocidos o monocristales.

Debido a que hay una diferencia bastante grande entre los distintos ℓ para un mismo material, no existe una única $\sigma_{crit.}$

Un problema que existe es que a partir de la fórmula (115) no podemos comprender como $\sigma_{crit.}$ depende de la temperatura. De acuerdo a aquella la dependencia estaría envuelta en G , pero el módulo varía muy poco, aumenta sólo el 10 % entre la temperatura ambiente y el aire líquido.

El éxito de las fuentes de Frank-Read es que salve casos muy especiales $\sigma_{crit.}$ determina el comienzo de la deformación plástica.

INTERACCIÓN DE IMPUREZAS CON DISLOCACIONES



J representa un intersticial, sustitucional, etc.

J introduce una distorsión de la red alrededor de sí misma. Como en A la red está más extendida, a la impureza le resulta más cómodo estar en esa posición, ya que tiene menor energía en A que en la red perfecta.

Queremos calcular la energía de interacción entre la dislocación y la impureza.

$$U = \sigma \epsilon = \frac{1}{2} \sum_{ik} \sigma_{ik} \epsilon_{ik} \quad (117)$$

Debemos considerar dos sistemas de tensiones, σ_1 debido a la dislocación y σ_2 debidos a la impureza.

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 \quad (118)$$

donde en este caso se superponen los campos de tensión aditivamente. Este hecho puede ser pensado, tomando las tensiones como vectores descomponiéndolos en componentes perpendiculares y paralelos a las caras del cubo unitario, donde éstos cumplen, por supuesto, el principio de superposición.

También los dos sistemas de deformaciones se superponen aditivamente:

$$\epsilon = \epsilon_1 + \epsilon_2 \quad (119)$$

$$\begin{aligned} U &= \int_V \sigma \epsilon \, dV = \int_V (\sigma_1 + \sigma_2) (\epsilon_1 + \epsilon_2) \, dV = \\ &= \int_V \sigma_1 \epsilon_1 \, dV + \int_V \sigma_2 \epsilon_2 \, dV + \int_V (\sigma_1 \epsilon_2 + \sigma_2 \epsilon_1) \, dV \end{aligned} \quad (120)$$

En esta ecuación:

$U_d = \int_V \sigma_1 \epsilon_1 \, dV$ representa la energía de la dislocación en la red perfecta;

$U_i = \int_V \sigma_2 \epsilon_2 \, dV$ representa la energía de la impureza en la red perfecta;

$U_I = \int_V (\sigma_1 \epsilon_2 + \sigma_2 \epsilon_1) \, dV$ representa la energía de interacción entre la impureza y la dislocación.

Como se puede ver, las tensiones y deformaciones se superponen, pero las energías no.

Se puede calcular el término de interacción por varios métodos, el más elegante de los mismos es calcularlo a partir de la teoría de elasticidad. Se encuentra que:

$$\sigma_1 \epsilon_2 = \sigma_2 \epsilon_1 \quad (121)$$

$$U_I = \underbrace{2 \int_V \sigma_1 \epsilon_2 \, dV}_A = \underbrace{2 \int_V \sigma_2 \epsilon_1 \, dV}_B \quad (122)$$

La integral A representa el trabajo de la dislocación debido a un desplazamiento de la impureza; es el trabajo que hay que hacer contra las tensiones debidas a la dislocación, cuando introducimos

en el cristal una impureza. B es el caso inverso.

Para evaluar matemáticamente U_I es más conveniente A. En este caso tenemos inicialmente la dislocación en el cristal e introducimos un átomo. Hay que integrar en un volumen cerca del átomo donde hay deslizamientos debido a la presencia de la impureza. En este modelo suponemos que la impureza es una esfera y aumentamos su radio desde r_0 hasta $r_0(1+\alpha)$.

$$U_I = 2 \int_V \sigma_1 \epsilon_2 dV = 2 \int_S \sigma_1 s_2 df \quad (123)$$

con

$$\epsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_i}{\partial x_k} - \frac{\partial s_k}{\partial x_i} \right) \quad (124)$$

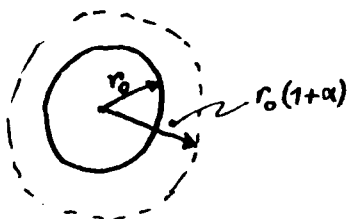
por el teorema de Green, df = diferencial de superficie

s = vector desplazamiento

Supongamos que r es la distancia entre la impureza y la dislocación.

De (123)

$$U_I \approx 2 \frac{Gb}{r} \cdot r_0 \alpha \cdot 4\pi r_0^2 \quad (125)$$



Esta expresión nos da idea del orden de magnitud solamente, ya que la tensión debida a la dislocación varía punto a punto sobre la superficie de la esfera.

$$U_I \sim \frac{A}{r} f(\varphi) \quad (126)$$

Lo importante es que para interacción dislocación-impureza, la energía varía como $1/r$.

$$U_I = \frac{A}{r} \quad \text{para átomos extraños} \quad (127)$$

Para el caso de vacancias tenemos que evaluar nuevamente $\int_V \sigma_1 \epsilon_2 dV$ pero en este caso no conocemos ϵ_2 .

Como realizar una deducción completa es muy difícil, daremos una justificación intuitiva: si formamos una vacancia en un cristal, introducimos una región donde la tensión está relajada, luego la energía disminuye, y esta disminución es proporcional a la energía almacenada en la región debida a la dislocación multiplicada por el volu

$$U_I = \sigma \epsilon \Omega = \frac{\sigma^2}{G} \Omega = - \frac{A}{r^2} \quad (128)$$

Ω = volúmen de la vacancia.

La energía de interacción disminuye en este caso como $1/r^2$.

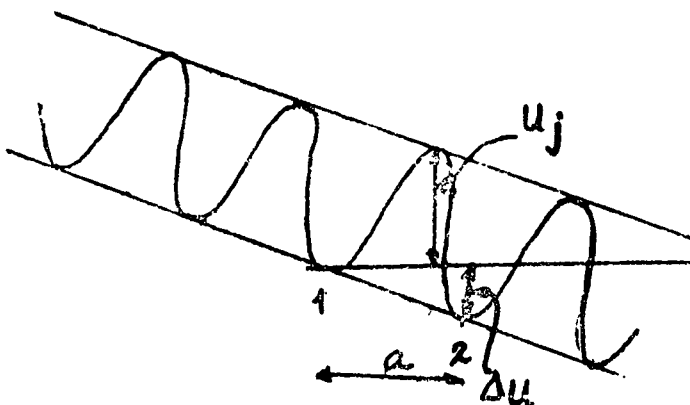
Debido a la interacción, hay una difusión de impurezas hacia la dislocación, ya que de esta forma la energía disminuye en una cantidad U_I .

La velocidad de difusión está dada por la fórmula de Einstein:

$$v = \frac{D}{kT} F \quad (129)$$

En el caso de difusión atomística hay un pasaje neto en la dirección del gradiente de concentración, pero no hay fuerzas aplicadas, la probabilidad de un átomo de saltar hacia un lado o hacia el otro es la misma.

En el caso presente hay un gradiente de energía, es decir una fuerza.



Este gráfico representa la energía potencial entre los átomos.

Debemos calcular la velocidad del flujo de partículas.

El flujo de los átomos de 1 a 2 es:

$$f = C \frac{a}{\tau} = C a v \quad (130)$$

$$\vec{f}_{12} = C a v = C a v_0 e^{-\frac{U_j}{kT}} \quad (131)$$

$$\vec{f}_{21} = C a v_0 e^{-\frac{U_j + \Delta U}{kT}} \quad (132)$$

La probabilidad de ir de 1 a 2 es mayor que de 2 a 1, pues en esa dirección se necesita menor energía.

Si $\Delta U \ll U_j$

$$\vec{f}_{21} = C a v_0 e^{-\frac{U_j}{kT}} e^{-\frac{\Delta U}{kT}} =$$

$$\approx C a v_0 e^{-\frac{U_j}{kT}} (1 - \frac{\Delta U}{kT}) \quad (133)$$

$$\begin{aligned}
 \vec{F}_{12} &= C a v_0 e^{-\frac{U_1}{kT}} \frac{\Delta U}{kT} = \\
 &= C a v_0 e^{-\frac{U_1}{kT}} \cdot \frac{\partial U}{\partial x} \cdot a \cdot \frac{1}{kT} = \\
 &= C a^2 v_0 e^{-\frac{U_1}{kT}} \cdot \frac{\partial U}{\partial x} \cdot \frac{1}{kT} \quad (134)
 \end{aligned}$$

$$\vec{F}_{12} = v C = C a^2 v_0 e^{-\frac{U_1}{kT}} \cdot \frac{\partial U}{\partial x} \quad (135)$$

$\frac{D}{a^2} = D$ (coeficiente de difusión en la red perfecta).

Reemplazando $\partial U / \partial x = F$ tenemos:

$$v = \frac{D}{kT} F \quad \text{Fórmula de Einstein} \quad (136)$$

A continuación calcularemos el número de átomos que pueden llegar a una dislocación en el transcurso de un cierto tiempo.

Usaremos:

$$U = \frac{A}{r^n} \quad (137)$$

para tener en cuenta el caso general, donde $n = 1$ para impurezas y $n = 2$ para vacancias.

De acuerdo a la fórmula de Einstein:

$$v = \frac{D}{kT} \frac{\partial U}{\partial r} = -\frac{D}{kT} \cdot \frac{nA}{r^{n+1}} = \frac{dr}{dt} \quad (138)$$

$$dt = -\frac{kT}{DnA} r^{n+1} dr \quad (139)$$

Integrando:

$$\int_0^t dt = -\frac{kT}{DnA} \int_0^r r^{n+1} dr \quad (140)$$

$$t = -\frac{kT}{DAn(n+2)} r^{(n+2)} \quad (141)$$

Si llamamos C_0 a la concentración original, el número de átomos por largo unitario que han llegado, vendrá dado por:

$$q = \prod r^2 c_0 \quad (142)$$

De (141) :

$$r = - \left[\frac{DAn(n+2)}{kT} \right]^{\frac{1}{n+2}} t^{\frac{1}{n+2}} \quad (143)$$

y reemplazando en (142)

$$q = \prod c_0 \left[\frac{DAn(n+2)}{kT} \right]^{\frac{2}{n+2}} t^{\frac{2}{n+2}} \quad (144)$$

donde q es también el número de átomos que han desaparecido de la solución sólida.

Si $n = 1$, es decir $U = A/r$,

$$q = a_1 t^{2/3} \quad (145)$$

Si $n = 2$, es decir $U = A/r^2$,

$$q = a_2 t^{1/2} \quad (146)$$

donde a_1 y a_2 son constantes.

Este fenómeno se puede comprobar midiendo el pico Snoeck de fricción interna. Como hemos visto anteriormente la fricción interna es proporcional al número de átomos en solución sólida. Una vez que estos han precipitado en las dislocaciones, no tienen la probabilidad de efectuar saltos y producir el pico. Medimos la altura del pico que es proporcional a la concentración de átomos en solución sólida. Luego deformamos y calentamos, obligando a los átomos a difundir hacia las dislocaciones, y medimos nuevamente la altura.

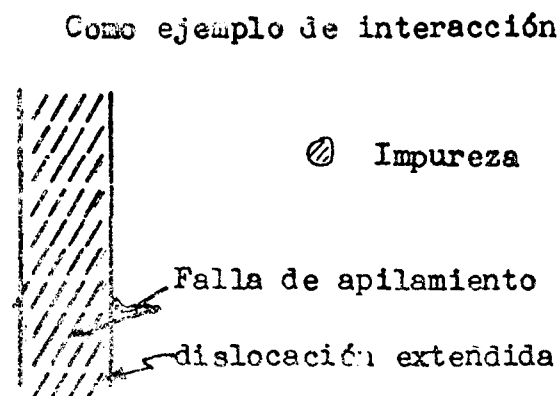
El tratamiento expuesto es muy simplificado.

En realidad, debido a la migración de los átomos la velocidad no es uniforme, produciéndose un gradiente de concentración, con un consiguiente "back flow". Deberíamos considerar también la dependencia con el ángulo ψ y el tipo de dislocación. Por ejemplo si consideramos una dislocación de hélice como las tensiones que produce son de corte puras, en el modelo de la esfera que se expande no habría interacción entre la impureza y la dislocación.

A más de la interacción elástica, existen otros tipos de interacción, como la eléctrica; o en el caso de dislocaciones extendidas interacción química.

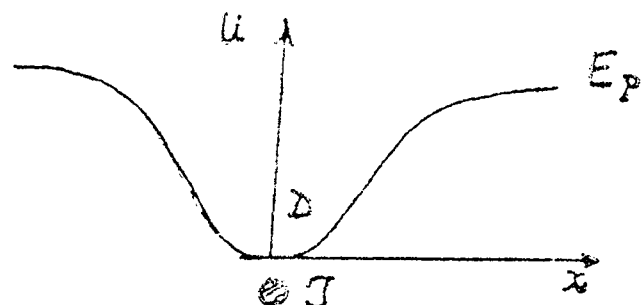
Por ejemplo, se puede demostrar que una dislocación de borde se

comporta similarmente a un dipolo eléctrico, la zona expandida, debajo de la dislocación, cargada negativamente; y la zona de compresión positivamente. La impureza puede tener carga positiva o negativa, interactuando en consecuencia eléctricamente con la dislocación.



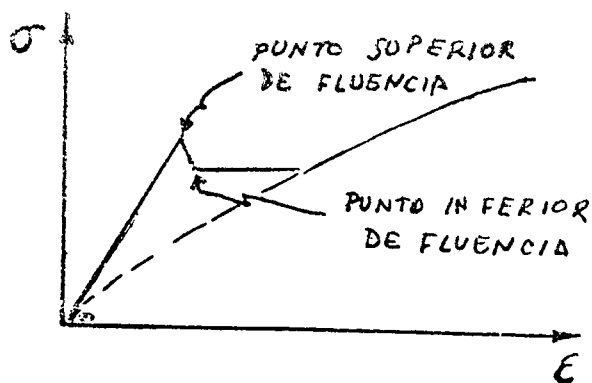
tendida en un metal b.c.c. La solubilidad de impurezas en el cristal b.c.c. es distinta a la solubilidad en una capa hexagonal. Es decir, si la falla de apilamiento es más soluble, por ejemplo hay en esta un enriquecimiento de impurezas, o viceversa.

El efecto más importante en las propiedades mecánicas, es un anclado de dislocaciones debido a dicho fenómeno; luego para hacer mover a la dislocación, hay que entregarle una cierta cantidad de energía.



La fuerza necesaria para mover la dislocación es el gradiente máximo de la energía potencial.

Este hecho se refleja en la necesidad de un aumento en la tensión para producir deformación. Una vez que hemos desanclado las dislocaciones, necesitamos una tensión menor para seguir moviéndolas.



Este proceso da lugar a un punto superior de fluencia y otro inferior. Se habla de una nube de impurezas que anclan las dislocaciones.

Cuando la dislocación se mueve, las impurezas siguen a la dislocación y actúan como una fuerza de fricción. La

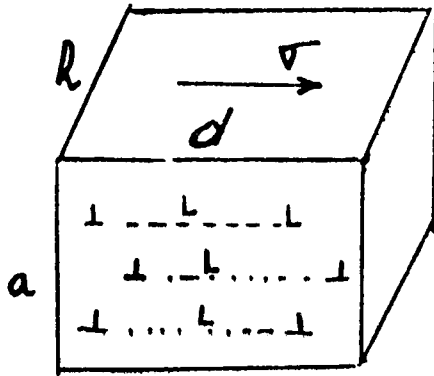
dislocación se mueve en un campo de tensión opuesto a la tensión aplicada.

Para que la dislocación se mueva:

$$\sigma b > \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_{\text{máxima}} \quad (147)$$

TENSION CRITICA PARA DEFORMACION

Cuando las dislocaciones se mueven en el cristal producen deformación plástica. Deseamos saber qué relación existe entre $\bar{\epsilon}_p$ y el movimiento de las dislocaciones.



Supongamos que aplicamos una tensión de corte σ y cada dislocación se mueve en promedio una distancia L .

El trabajo realizado al mover una dislocación será:

$$W = \sigma b h L \quad (148)$$

y si tenemos presentes n dislocaciones:

$$W = n \sigma b h L \quad (149)$$

La fuerza externa aplicada hace el trabajo:

$$W_E = \sigma d h \bar{x} \quad (150)$$

siendo $\bar{x}$ la distancia que se ha movido en promedio la superficie. Esta $\bar{x}$ está relacionada con un $\bar{\epsilon}$ por:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\bar{x}}{a} \quad (151)$$

$$\therefore W_E = \sigma d h a \bar{\epsilon} \quad (152)$$

Pero $W = W_E$

$$n \sigma b h L = \sigma d h a \bar{\epsilon} \quad (153)$$

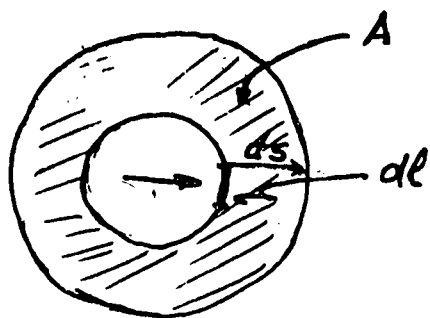
$$\therefore \bar{\epsilon} = \frac{n}{a d} b L \quad (154)$$

$$\therefore \boxed{\bar{\epsilon} = \rho b L} \quad (155)$$

donde $\rho = n/ad$ es el número de dislocaciones que interceptan una superficie perpendicular al movimiento, y es llamada la densidad de dislocaciones.

En esta ecuación hay que incluir un factor multiplicativo $\alpha < 1$ para tener en cuenta que las líneas de slip pueden estar inclinadas.

Este es un modelo lineal simple, que no está siempre de acuerdo con la realidad. Como ejemplo en el caso de actuar fuentes de Frank-Read, sabemos que las líneas de dislocación son anillos. En este caso:



A : área barrida por la dislocación.

$$dW = \sigma b dl ds \quad (156)$$

$$\therefore W = \sigma b \int dl ds \quad (157)$$

$$\therefore W = \sigma b \int dA = \sigma b A \quad (158)$$

Si tenemos γ anillos:

$$W = \gamma \sigma b A \quad (159)$$

El trabajo exterior es el mismo que en el caso anterior:

$$\gamma \sigma b A = \sigma dh a \bar{\epsilon} \quad (160)$$

$$\therefore \bar{\epsilon} = \frac{\gamma}{dh a} b A \quad (161)$$

$$\therefore \boxed{\bar{\epsilon} = N b A} \quad (162)$$

siendo N el número de anillos de dislocación por cm^3 que han cubierto el área A .

En un cristal bien recocido $\rho \approx 10^8$ dislocaciones que interceptan la superficie, y en uno deformado $\rho \approx 10^{12}$.

Para hacer una estimación de la longitud que ocupan las líneas de dislocación en 1 cm^3 de un metal cualquiera, supongamos que tenemos líneas de dislocación orientados solamente según los ejes x,y,z . Luego en 1 cm^3

$$L \approx 3\rho \quad (163)$$

Haciendo un cálculo estadístico, suponiendo las dislocaciones orientadas al azar:

$$L = 2\rho \quad (164)$$

$$\therefore L = 2 \times 10^{12} \text{ cm} = 2 \times 10^7 \text{ Km}$$

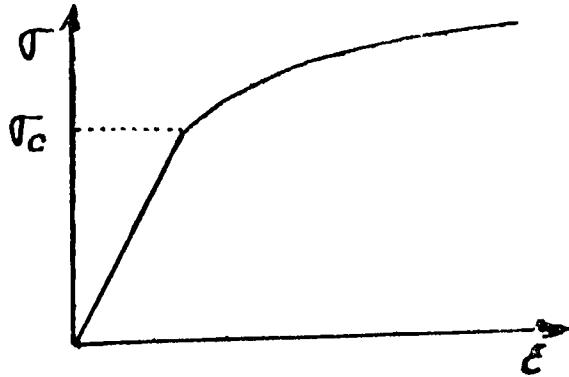
Obsérvese que este valor es ¡¡¡mayor que la distancia de la tierra al sol!!!

El próximo paso es tratar de determinar cuál es el fenómeno que influye fundamentalmente en la deformación plástica de los metales.

Existen varias posibilidades: maclado, kinking, deslizamiento de borde de grano, etc. Sin embargo estas contribuciones son muy pequeñas, y veremos como cuando hay deformación plástica, seguro ésta se debe a movimiento de dislocaciones.

Lo que tratamos de determinar es si el rol fundamental lo juega

la formación o el movimiento de dislocaciones. Puede ser que uno u otro mecanismo sea más difícil, y la mayor dificultad determinará la tensión crítica σ_{cr} .



Veamos los distintos factores que determinan la formación de dislocaciones, y los hechos que se oponen al movimiento de las mismas:

- | | |
|---|--|
| 1) Formación de dislocaciones | $\left\{ \begin{array}{l} \text{a) } F - R, \sigma_{cr.} = \frac{Gb}{l} \\ \text{b) } \text{Impurezas} \Rightarrow \text{anclaje de disloc.} \end{array} \right.$ |
| 2) Movimiento de dislocaciones | |
| $\left\{ \begin{array}{l} \text{A} \\ \text{corto alcance} \end{array} \right.$ | $\left\{ \begin{array}{l} \alpha) \text{Intersección de dislocaciones, es decir formación de jogs.} \\ \beta) \text{Movimiento de jogs.} \\ \gamma) \text{Fuerza de Pierla} \end{array} \right.$ |
| | |
| $\left\{ \begin{array}{l} \alpha) \text{Fuerzas interiores} \\ \beta) \text{Precipitados} \\ \gamma) \text{Aleaciones ordenadas} \end{array} \right.$ | |

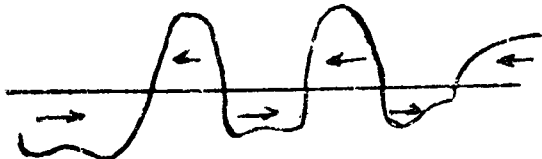
1)b . Hay varios tipos de anclaje, por ejemplo las nubes de impurezas tratadas anteriormente, llamadas atmósferas de Cottrell.

1)a y b son los principales obstáculos para la formación de dislocaciones.

En cuanto a los obstáculos al movimiento de dislocaciones, existen de dos tipos, de corto y de largo alcance.

2Bα . Las fuerzas interiores son debidas a las tensiones producidas por las otras dislocaciones presentes en el cristal. Esta tensión

varía arbitrariamente, pero en general con un período aproximadamente igual a la distancia media entre dislocaciones. La dislocación puede moverse sólo cuando la tensión aplicada es mayor que la tensión promedio interna. Cuando la tensión aplicada es menor, la dislocación pue-



de moverse sólo pequeñas distancias.

Calculemos la distancia que debe moverse en promedio una dislocación para producir una deformación del 10% en un cristal vírgen.

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

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

La dislocación deberá moverse 1 mm, que es del orden de cien veces la distancia promedio entre dislocaciones.

2) B β . Como el precipitado tiene una estructura cristalina diferente de la matriz, se crean tensiones elásticas que fluctúan, y en consecuencia cuando una dislocación se mueve debe sobrepasar la tensión promedio opuesta al movimiento.

2) B γ . Supongamos una aleación con 50% de A y 50% de B .

En general los átomos se distribuyen al azar, pero bajo ciertas condiciones debidas a los potenciales entre A y B puede obtenerse un arreglo regular entre los átomos del tipo A y los átomos del tipo B (aleaciones ordenadas). Este tipo especial de aleaciones depende , también, de la temperatura. En forma general, podemos señalar que la entropía de una red ordenada es menor que la entropía de una red al azar.

A partir de:

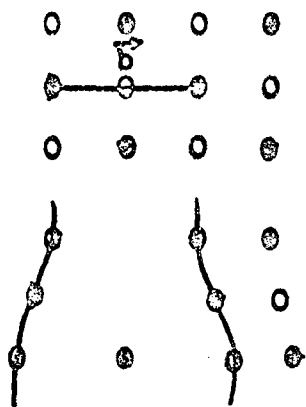
$$F = U - TS \quad (165)$$

vemos que a bajas temperaturas el término TS no tiene mucha influencia, y luego, la aleación puede ser ordenada siempre que la energía de interacción E_{AB} cumpla la condición:

$$E_{AB} < E_{AA} \text{ ó } < E_{BB} \quad (166)$$

A altas temperaturas el factor TS se convierte importante, y en consecuencia, del hecho señalado anteriormente que $S_{\text{ordenado}} < S_{\text{azar}}$, se destruye el estado de orden.

A continuación queremos analizar qué sucede si tenemos una dislocación en una aleación ordenada.



Si ahora quitamos un semiplano de átomos, nos encontramos que tenemos dos átomos del tipo A y asimismo dos átomos del tipo B en contacto, formando así lo que se denomina borde de interfase.

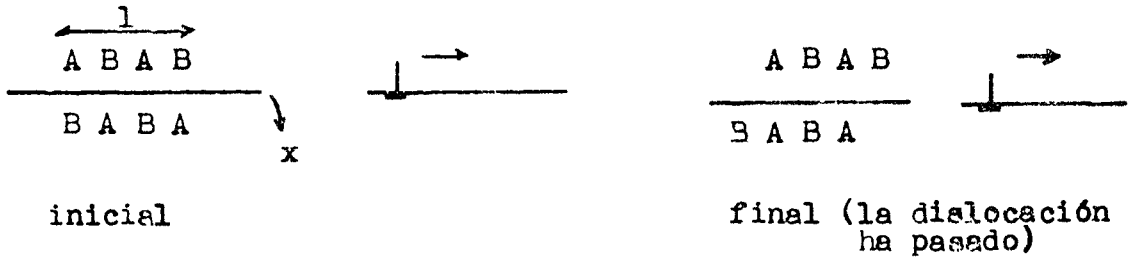
Si la dislocación tenía un b que unía dos átomos del mismo tipo, hay que sacar dos planos para que la super-

red entre nuevamente en registro. Este tipo de orden se denomina de largo alcance.

Se habla de orden de corto alcance, cuando existe una aleación ordenada sólo en una corta distancia. En este caso hay regiones de la aleación donde existe orden y otras donde no existe.

Si una dislocación intersecta una zona ordenada, hay una destrucción del orden a través del plano donde la dislocación ha cortado la región ordenada.

Esquemáticamente:



El estado final es energéticamente desfavorecido, luego para que la dislocación pase a través de la región ordenada hay que entregarle una cierta energía suplementaria. Esta puede ser expresada como energía superficial:

$$W = \sigma b l x = A \sigma \quad (167)$$

donde σ es la energía superficial que hay que suplementar.

$$A \sigma = l x \sigma$$

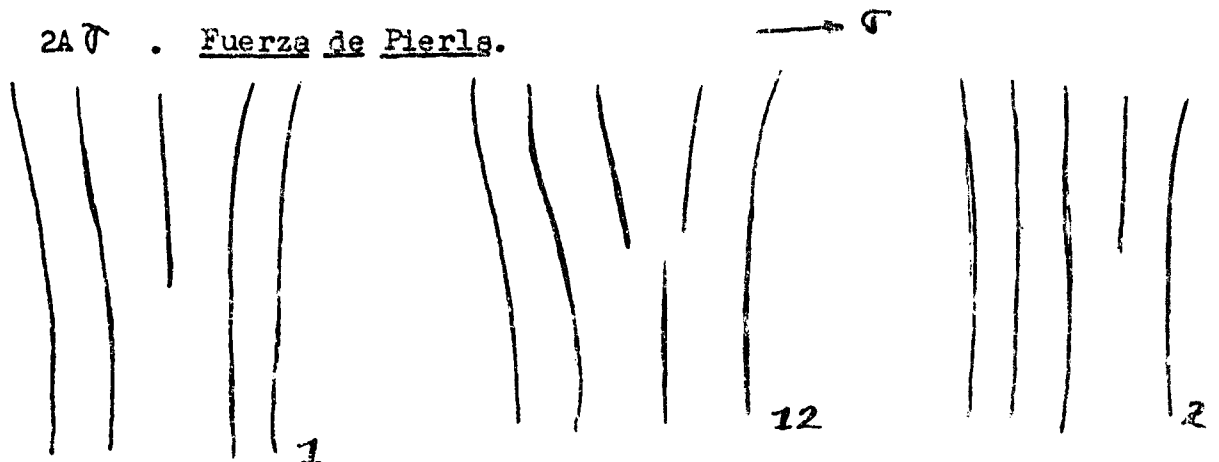
$$\therefore \sigma b l x = l x \sigma$$

$$\therefore \boxed{\sigma = \frac{\gamma}{b}} \quad (168)$$

γ es la energía de la antifase $\sim 500 \text{ ergs/cm}^2$.

El σ de la ecuación (168) puede dar una contribución bastante importante a la tensión de fluencia.

$2A \sigma$. Fuerza de Pierls.



Para pasar del estado 1 al 2, debemos sobrepasar la etapa intermedia 12. Lo que ha sucedido es que la dislocación se ha movido una distancia atómica debido a una tensión externa aplicada σ .

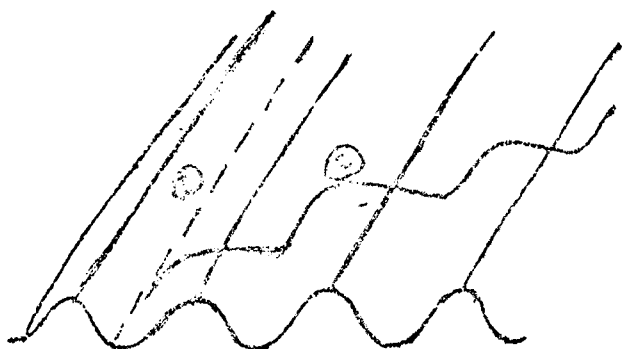
Si ahora se hace un cálculo detallado de la energía de los átomos del núcleo de la dislocación, la energía envuelta en la configuración 12 es distinta al cambio de energía de 1 a 2. En este pasaje hay que sobrepasar una barrera de energía alternada, llamada montañas de Pierls.



Montañas de Pierls
 $E \sim 10^{-4}$ eV

Si bien la diferencia de energía es pequeña, como esta variación toma lugar en una distancia muy corta, la pendiente puede ser muy grande. Esta pendiente es justamente la llamada fuerza de Pierls.

Para hacernos una idea gráfica de los problemas relacionados con la fuerza de Pierls podemos considerar la red perfecta como un papel corrugado.



El modelo es congruente si la dislocación se encuentra como la (1) en un valle; en cambio si se encuentra como la (2) la fuerza de Pierls se compensa y no actúa.

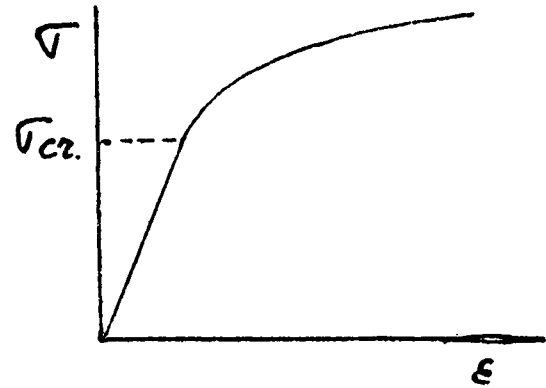
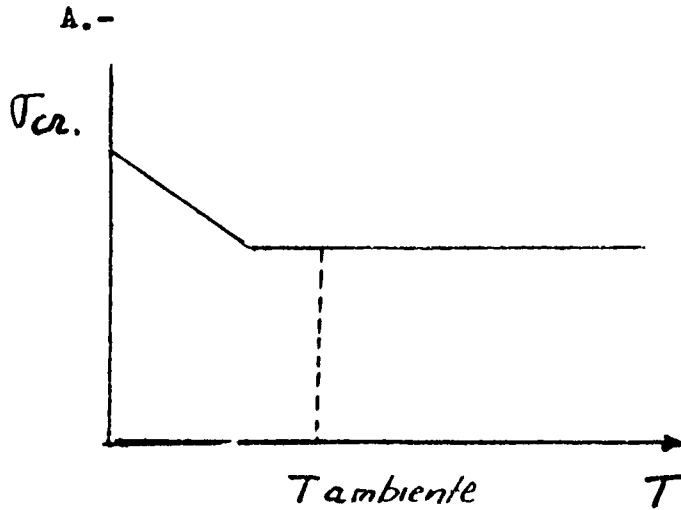
La fuerza de Pierls actúa si la dislocación se encuentra en orientaciones cristalográficas preferenciales. Estas son las que coinciden con las direcciones de mayor densidad de la red.

COMPORTAMIENTO DE σ_{cr} CON LA TEMPERATURA

En este momento estamos en condiciones de considerar el comportamiento de distintos metales con la temperatura. Dividiremos las estructuras en dos grupos:

A - f.c.c. y hexagonales

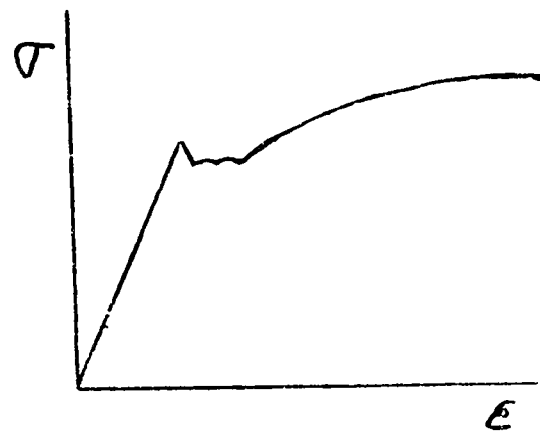
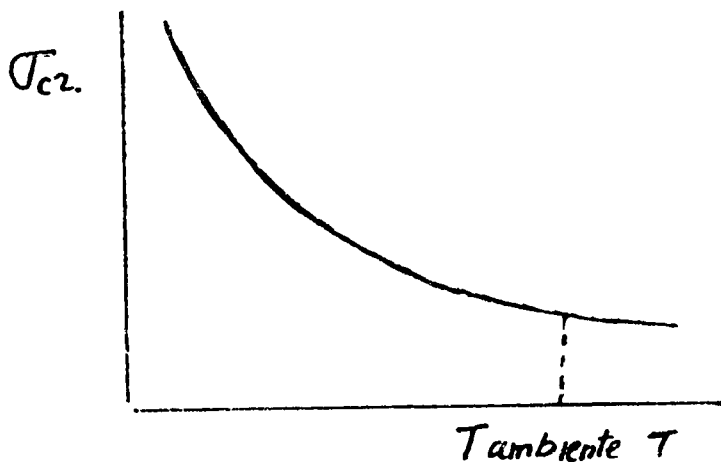
B - b.c.c.



Entre 200°K y la temperatura de fusión encontramos experimentalmente que $\sigma_{cr} = \text{cte.}$ mientras que entre 200°K y 0°K se encuentra que σ_{cr} aumenta linealmente a medida que reducimos la temperatura de la deformación.

N o t a : Obsérvese que en este caso no se observa punto mínimo de fluencia; esto se debe a que todas las impurezas son substitucionales, salvo el H que se encuentra en posiciones intersticiales, pero que es un átomo muy pequeño. Debido a que la distorsión alrededor de un sustitucional es muy pequeña, la interacción impurezas-dislocaciones es tan pequeña que en los test comunes de deformación por tracción no se observa el punto mínimo de fluencia. Como ejemplo típico podemos mencionar por ejemplo el del Cu. Podemos remarcar sin embargo que si irradiamos Cu con un flujo del orden de $10^{18} / \text{cm}^2$ encontramos punto de fluencia, debido a que hemos creado de esta forma, como hemos analizado anteriormente, una gran cantidad de impurezas en posiciones intersticiales.

B.-

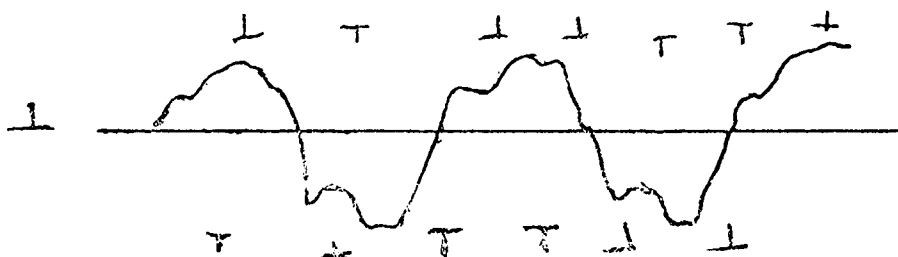


En este caso la dependencia de σ_{cr} con la temperatura es muy pronunciada para bajas temperaturas. La tensión de fluencia es tan grande, a bajas temperaturas, que a menudo, los materiales se rompen sin haber deformado previamente plásticamente. Este fenómeno es el llamado fractura frágil. Es un hecho que se observa prácticamente, únicamente en los metales con estructura b.c.c.

A.- En este caso los obstáculos que se presentan al movimiento de las dislocaciones son otras dislocaciones.

Consideraremos en primer lugar, el efecto de las dislocaciones que se encuentran en planos paralelos al plano en que se mueve la dislocación. Debido a que existen dislocaciones de distinto signo en su camino, la dislocación debe moverse en un campo de tensiones fluctuantes con una longitud de onda promedio igual a la distancia media entre dislocaciones L .

$$\sigma = \pm \frac{Gb}{L} \quad (169)$$



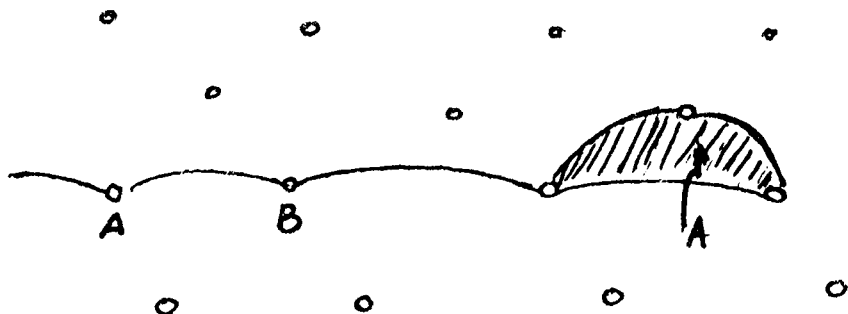
Si la dislocación se mueve siempre encuentra zonas donde la tensión interna es contraria, y, en consecuencia, hay que aplicar una tensión mayor que σ .

Sin embargo este valor de σ (169) no depende fuertemente de la temperatura, ya que σ varía como G , y este, como hemos señalado anteriormente, varía sólo un 10% entre temperatura ambiente y aire líquido.

Consideremos ahora las dislocaciones que intersectan perpendicularmente el plano de deslizamiento. Estas se dicen que forman un bosque de dislocaciones, y la dislocación que se mueve en este plano intercepta al bosque de dislocaciones⁽¹⁾

En el gráfico siguiente los puntos representan el bosque de dislocaciones y la línea llena, a la dislocación que avanza.

(1) Por falta de espacio, ver pie de la página siguiente.



La velocidad de la dislocación es proporcional a la frecuencia que la dislocación intercepte uno de los obstáculos.

De (162):

$$\bar{\xi} = N b A$$

luego la velocidad de deformación será:

$$\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial t} = N b \frac{\partial A}{\partial t} \quad (170)$$

pero

$$\dot{A} = A \nu = \frac{A}{\tau} \quad (171)$$

frecuencia de intersección.

$$\therefore \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial t} = \frac{A}{\tau} N b \quad (172)$$

Si un proceso debe ocurrir en una gran distancia, la activación térmica no puede ayudar mucho al proceso, ya que es muy difícil que este proceso de una contribución en el mismo sentido y al mismo tiempo en toda la distancia. En cambio, si la región donde el proceso ocurre es muy pequeña, la activación térmica puede jugar un rol fundamental. Este es el caso cuando tratamos con la formación de jogs o constricciones debido a la intersección de dislocaciones.

$$\frac{1}{\tau} = \nu e^{-\frac{U}{kT}} \quad (173)$$

donde ν tiene un valor un poco menor que la frecuencia de Debye.

$$\nu = \nu_0 \frac{b}{l} \quad (174)$$

(1) Como las dislocaciones cortan perpendicularmente el plano de deslizamiento no interactúan elásticamente con la dislocación que avanza hasta el momento que se interceptan. Para que esto ocurra hay que formar jogs en el caso de dislocaciones simples y constricciones en el caso de dislocaciones extendidas.

donde ν_0 es la frecuencia de la vibración de la onda más corta que puede existir en el cristal.

ν representa la frecuencia de vibración de una cuerda de longitud AB (ver gráfico anterior).

Intuitivamente vemos que si la distancia AB es la distancia entre n átomos, la frecuencia, en primer orden, es n veces más chica como indica (174).

Debemos encontrar ahora la energía de intersección U :

$$U = U_0 - W \quad (175)$$

donde U_0 es la energía de un jog, o de una constricción, etc.

Para pasar del estado 1 al 2 la tensión aplicada efectúa un trabajo



W , y la diferencia $U_0 - W$ debe ser suplementada por las vibraciones térmicas.

$$W = \bar{\sigma} b \cdot 2L \cdot \frac{d}{2} \quad (176)$$

La tensión que actúa sobre la línea de dislocación no es la tensión aplicada, sino que está disminuida en la tensión interna.

$$\bar{\sigma} = \sigma - \sigma_1 \quad (177)$$

En (177) hay que recordar que si la tensión interna ayuda al movimiento el signo es positivo.

En las regiones donde la tensión interna es contraria a la tensión aplicada es más difícil intersectar los átomos y en estos se queda la dislocación. Este proceso es el que determina la velocidad de movimiento.

$$\dot{\epsilon} = N_A b \nu_0 \frac{b}{L} e^{-\frac{U_0 - (\bar{\sigma} - \sigma_1) b L d}{kT}} \quad (178)$$

Llamamos $V = b L d$ al volumen de activación y resolvemos (178) para $\bar{\sigma}$.

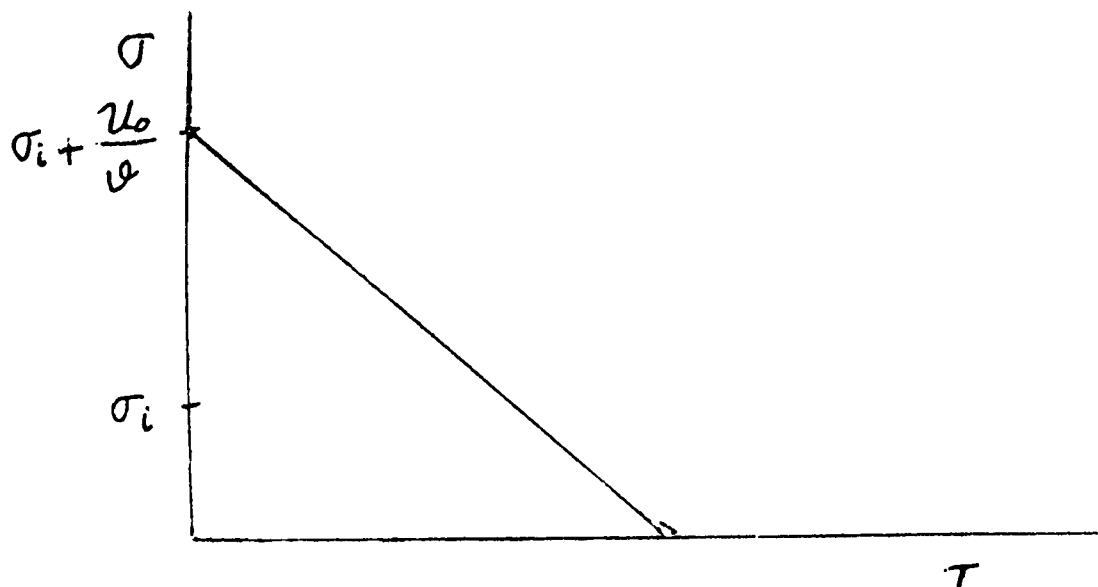
$$\bar{\sigma} = \sigma_1 + \frac{U}{V} - \frac{kT}{V} \ln \frac{N_A b \nu_0}{\dot{\epsilon}} \quad (179)$$

Esta es la tensión que debemos aplicar para que la probeta que estamos estudiando se deforme con una velocidad dada por $\dot{\epsilon}$.

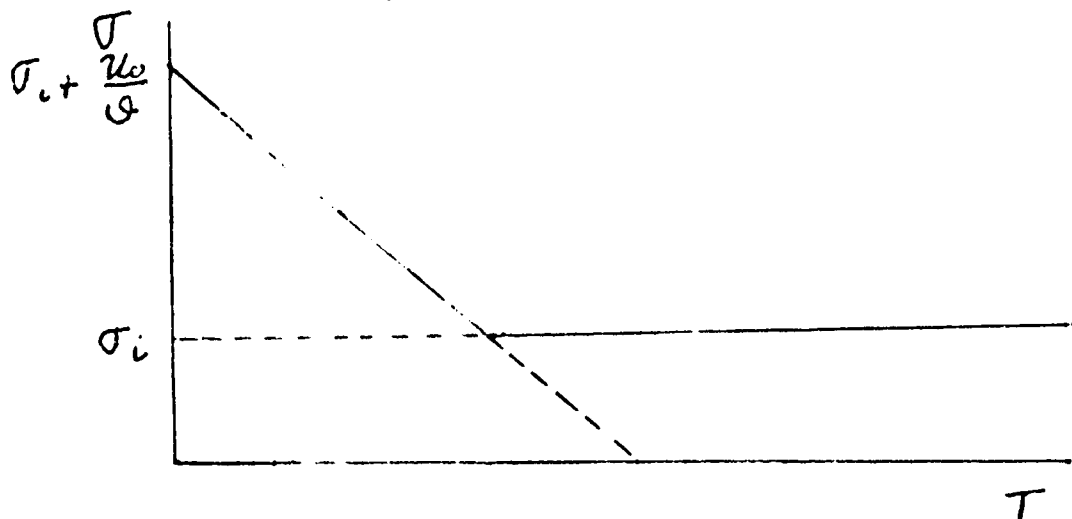
Experimentalmente trabajamos con una máquina de ensayos, le imprimi

mimos con la misma una velocidad de deformación $\dot{\epsilon}$ a la probeta y medimos cuál es la tensión necesaria para la fluencia.

Si graficamos la ecuación (179), tomando en el eje de las ordenadas σ y en abscisas T obtenemos una línea recta cuya pendiente es $-\frac{k}{v} \ln \frac{NAbv}{\dot{\epsilon}}$ y cuya ordenada al origen es $\sigma_1 + (U_0/v)$



Pero sabemos que la tensión aplicada no puede ser menor que σ_i puesto que en caso contrario las dislocaciones no pueden moverse grandes distancias, luego la tensión mínima que podemos aplicar para producir fluencia es σ_i .



Este tipo de curva se observa, por ejemplo, en Al.

U_0/v y σ_i no pueden variar independientemente uno de otro. En σ_i el único parámetro que puede variar es L , pero este también se encuentra en $v = GbL\dot{\epsilon}$. Por ejemplo si L aumenta σ_i disminuye y también ocurre lo mismo con U_0/v .

En primera aproximación la pendiente de la recta del gráfico anterior depende de v . En Cu debido a que las dislocaciones son muy extendidas, la pendiente es tan pequeña que ésta se encontraría con

$\sigma_1 = \text{cte.}$ más allá del punto de fusión.

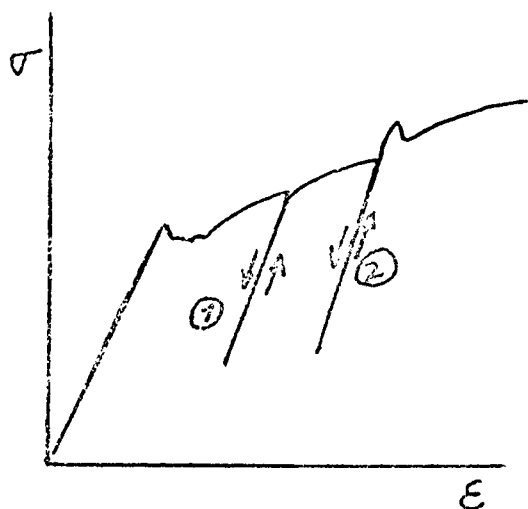
Considerando el ancho de la falla de apilamiento, podemos entender el comportamiento de distintos metales. Distintos metales con anchos similares de las fallas de apilamiento observan comportamientos muy pa recidos.

Como conclusión en metales f.c.c. o hexagonales, el bosque de dislo caciones y las tensiones internas son los elementos que determinan la tensión de fluencia.

B.- En este caso la dependencia de $\sigma_{cr.}$ con la T es mucho más fuerte. Mientras que en f.c.c. la tnesión de fluencia varía en un 20% entre temperatura ambiente y helio líquido, en este caso puede variar en un factor 10 .

Otra característica es que a bajas temperaturas, algunos metales b.c.c. rompen sin deformar plásticamente.

Como hemos visto anteriormente, estos materiales presentan punto de fluencia, que depende del anclado de dislocaciones por impurezas. Es te proceso es llamado envejecimiento por deformación.



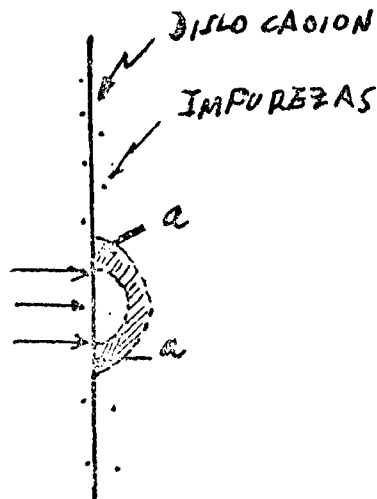
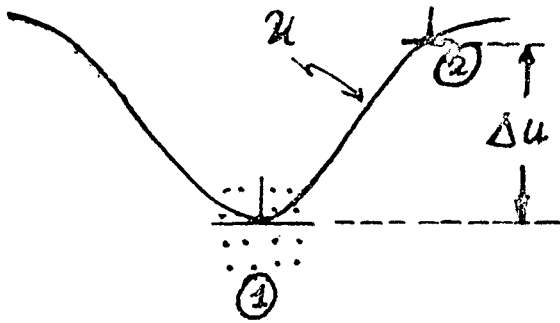
Si en un test de deforma - ción por tensión descargamos en un momento cualquiera y re cargamos inmediatamente como en (1) no observaremos un nue vo punto de fluencia, pero si luego de descargar dejamos la probeta durante un cierto tiem po a alta temperatura, las im purezas fluyen nuevamente a las dislocaciones, formando atmós feras de Cothell y anclándolas. De esta manera si cargamos ob servaremos un nuevo punto de fluencia como en (2).

El fenómeno de punto de fluencia no es encontrado cuando se trabaja con materiales de muy alta pureza. Notar que se necesitan tan pocas co mo 10^{-4} ó 10^{-5} impurezas para producir punto de fluencia.

La primera explicación de la variación de $\sigma_{cr.}$ con la temperatu ra se debe a Cottrell y data de 1949.

Supongamos una dislocación anclada por una nuebe de Cottrell. En la curva de la página siguiente, la mostramos en (1), donde como tam bién se puede ver este estado representa un mínimo de energía.

Para mover a la dislocación, y sacarla de la posición (1), es nece sario aplicar una tensión proporcional al gradiente máximo de la curva de energía potencial.



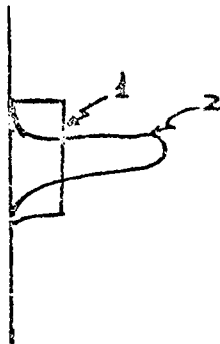
(1) es una posición de energía estable, mientras que (2) es una zona inestable. Para pasar de (1) a (2) hay que entregarle a la dislocación una cantidad de energía Δu por activación térmica.

Puede suceder que en lugar de mover toda la línea de dislocación liberemos por fluctuación térmica un cierto trozo de dislocación de longitud de 5 a 6 b . Este es llamado un lazo de dislocación.

Hay que realizar un cierto trabajo para sacar los trozos iguales de dislocación a . Al mismo tiempo se realiza un trabajo debido al área barrida por la dislocación, que es mayor que el anterior. Si el lazo puede librarse, el proceso puede marchar.

La formulación matemática de este proceso es bastante difícil, ya que la configuración puede variar de muchas formas distintas. Tanto 1 como 2 son dos procesos que pueden tomar lugar, siendo la energía en

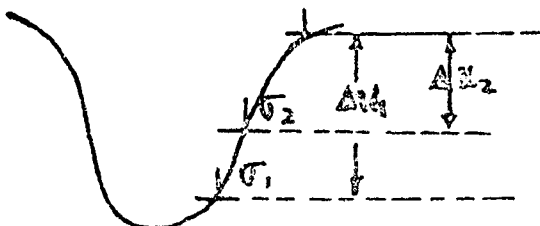
vuelta en cada uno distinta, ya que ésta depende de la configuración. Hay que recurrir a la estadística, y calcular la probabilidad de ocurrencia de cada uno de los procesos posibles (procesos estocásticos). Haciendo el desarrollo matemático adecuado se encuentra que la frecuencia de formación de lazos es:



$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \frac{b}{l} e^{-\frac{U(\sigma)}{kT}} \quad (180)$$

$l \approx 566a$; $U(\sigma)$ es la energía que hay que entregar por activación térmica. Cuanto mayor es σ menor es el Δu que hay que suplementar.

$$\sigma_2 > \sigma_1 ; \Delta u_2 < \Delta u_1$$



La fórmula (180) podría servir para explicar la variación de tipo exponencial de σ_{cr} con la temperatura.

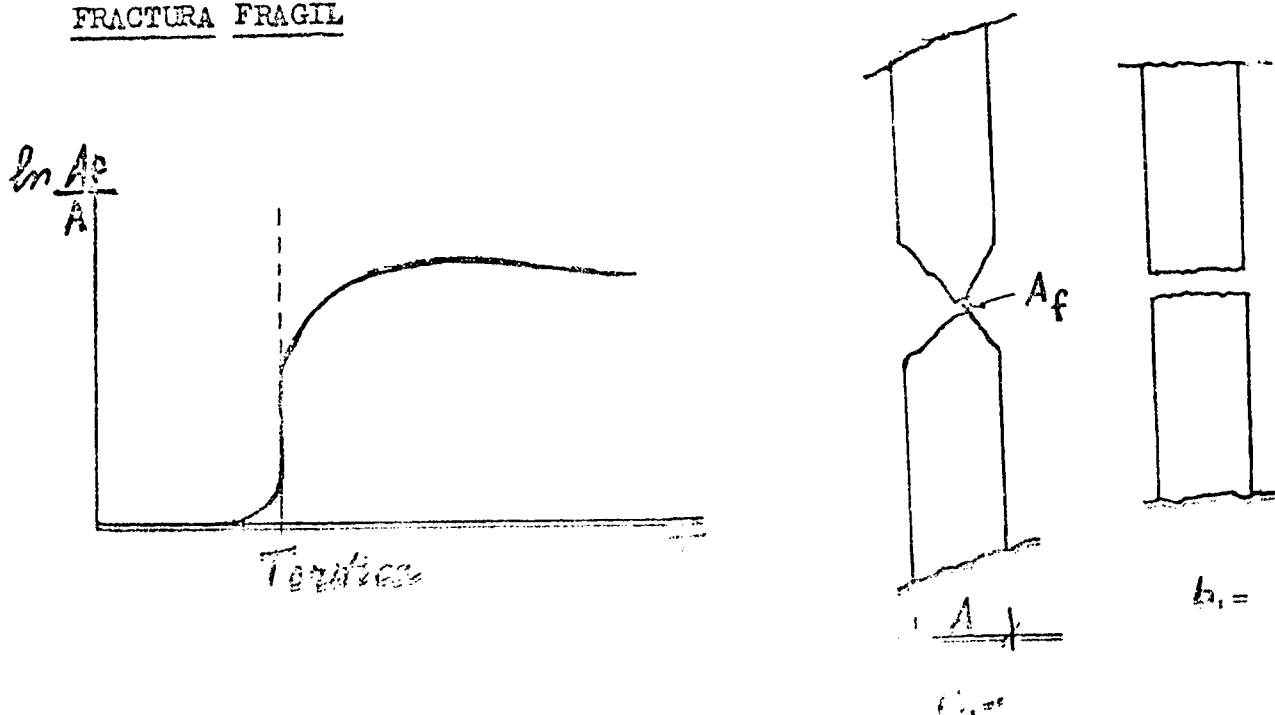
Este era el estado de cosas hasta aproximadamente cuatro años

atrás. Actualmente ciertas experiencias ponen en duda esta teoría . En este momento alrededor de cinco teorías tratan de explicar este fenómeno pero ninguna ha sido confirmada completamente.

Recapitulando, diremos que no hay ninguna duda acerca del anclado de dislocaciones y de la interacción entre estas e impurezas. Lo que está en duda es si el anclado es el responsable de la variación de σ_{cr} con la T .

El problema de la fractura frágil, típica de los metales b.c.c. a bajas temperaturas, nos indica un ejemplo de porque se ha puesto en tela de juicio la explicación clásica.

FRACTURA FRAGIL



En general la deformación plástica precede a la fractura de un metal como en a ; pero a veces no hay ninguna deformación anterior como en b . En este último caso hablamos de fractura frágil.

Representando la reducción de área en la región de fractura en función de la temperatura encontramos que debajo de un cierto valor de la temperatura ($T_{critica}$), el área de fractura es igual al área inicial ; es decir tenemos fractura frágil.

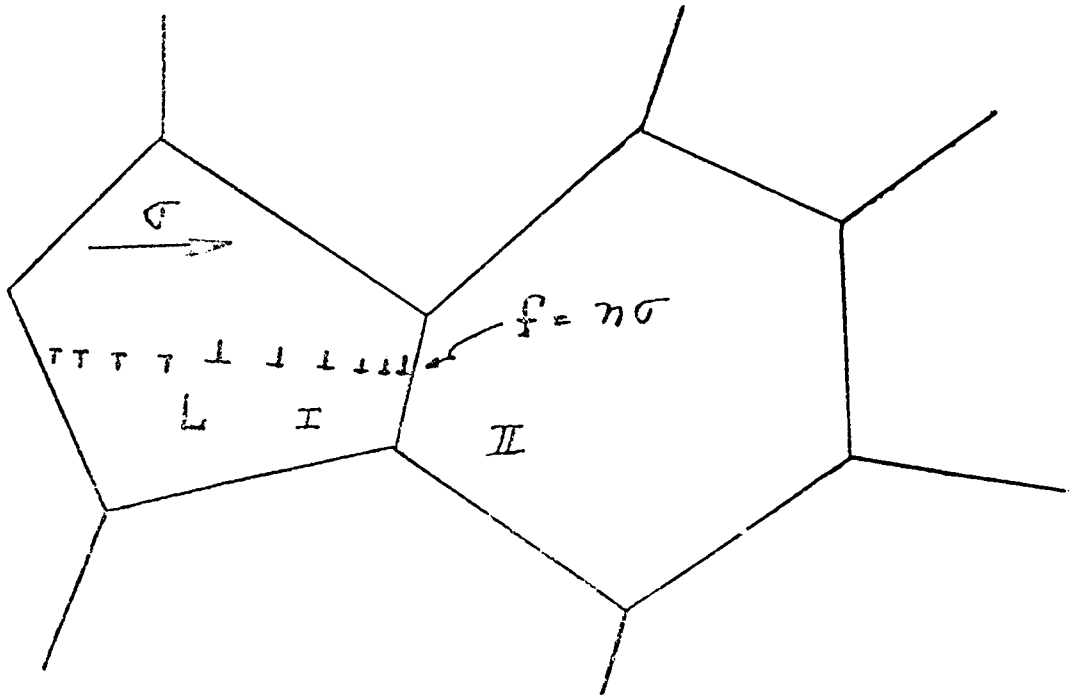
Este es un problema muy serio en construcciones navales, por ejemplo.

Cuando hay deformación plástica, ésta puede relajar las tensiones , en cambio cuando esto no ocurre, cualquier onda o golpe que se produzca en el metal puede producir su rotura.

Es importante recalcar que este fenómeno se presentó fundamentalmente en metales b.c.c. que son los que presentan punto de fluencia.

Consideremos ahora un conjunto de granos de un cristal, y en uno de

ellos una fuente de Frank-Read y apliquemos una tensión σ . Si la tensión alcanza el valor requerido para activar la fuente, esta comienza a emitir dislocaciones que se apilan al llegar a los bordes de grano (a un lado de la fuente dislocaciones de signo positivo y al otro de signo negativo).



Supongamos que el obstáculo que las dislocaciones emitidas por la fuente en su camino sea otra dislocación que está anclada. Movámosla ahora un dx (desplazamiento virtual). ¿Cuál es el trabajo realizado?

Cada dislocación del apilamiento se mueve dx :

$$W = \sigma b n dx = f \cdot \Delta x \Rightarrow f = n\sigma \quad (181)$$

donde σ es la fuerza por unidad de longitud que actúa sobre cada dislocación, y n es el número de dislocaciones del apilamiento.

Debido a estos apilamientos tenemos una concentración de tensiones sobre los obstáculos.

Se puede demostrar que la línea de slip se comporta como una fisura, ya que sobre ella no podemos mantener una tensión de corte, pues en ese caso las dislocaciones comenzarían a moverse.

La expresión clásica que se deduce a partir de la teoría de la elasticidad establece que la tensión disminuye a partir de la cabeza de la fisura de acuerdo a:

$$\sigma_p = \sigma \sqrt{\frac{L}{x}} \quad (182)$$

Supongamos ahora otra fuente de Frank-Read. Debido al apilamiento de dislocaciones, se crean tensiones lo suficientemente grandes para

activar a esta nueva fuente, y así siguiendo, se propaga este fenómeno. En b.c.c. las dislocaciones están rodeadas por nubes de impurezas. Antes de que la dislocación comience a moverse hay que pasar un σ_{cr} que ya hemos visto que depende fuertemente de la temperatura (σ_{cr} es la tensión necesaria para crear un lazo).

A continuación estudiaremos la dependencia de la tensión de fluencia con el diámetro de grano que llamaremos L .

La tensión en el grano II está determinada por la tensión aplicada más la tensión creada debido al apilamiento en I.

$$\sigma_T = \sigma + \sigma \sqrt{\frac{L}{x}} \quad (183)$$

Si σ_T es igual o mayor que σ_{cr} la deformación puede pasar al grano II, y así siguiendo propagarse a todo el cristal.

Al segundo término de la ecuación anterior hay que restarle una tensión interna que se opone al movimiento de las dislocaciones. Con este ajuste la condición que debe cumplirse para que se propague la deformación es:

$$\sigma + (\sigma - \sigma_1) \sqrt{\frac{L}{x}} \geq \sigma_{crit.} \quad (T) \quad (184)$$

Tomando el signo igual

$$\sigma (1 + \sqrt{\frac{L}{x}}) = \sigma_{crit.} + \sigma_1 \sqrt{\frac{L}{x}} \quad (185)$$

$$\text{Si } \sqrt{\frac{L}{x}} \gg 1 \quad (186)$$

$$\sigma \sqrt{\frac{L}{x}} = \sigma_{crit.} + \sigma_1 \sqrt{\frac{L}{x}} \quad (187)$$

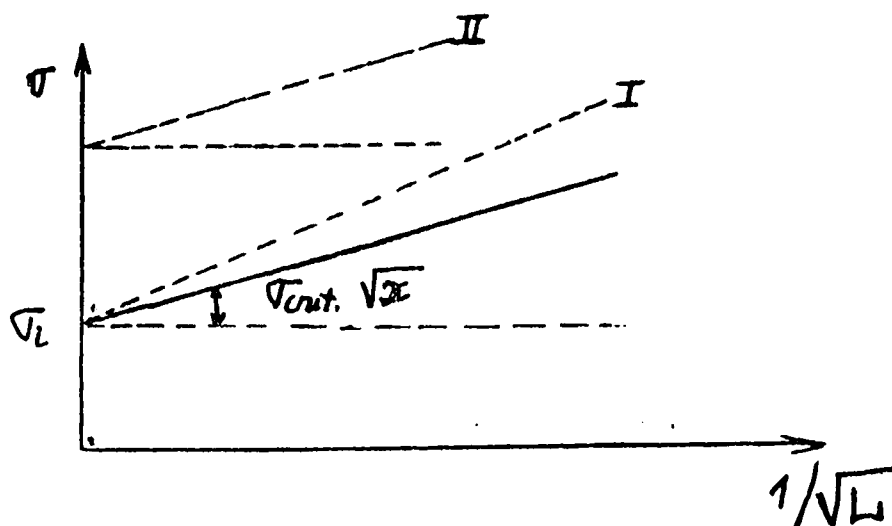
$$\therefore \boxed{\sigma = \sigma_1 + \sigma_{crit.} \sqrt{\frac{x}{L}}} \quad (188)$$

donde x es la distancia hasta la próxima fuente de Frank-Read.

Los trabajos experimentales dan una buena confirmación de esta teoría, que nos muestra la influencia del tamaño del grano en $\sigma_{0.2}$ (punto superior de fluencia).

En la explicación clásica σ_{cr} era la tensión necesaria para liberar un lazo de dislocación, y la tensión dependía de la temperatura.

Podemos medir experimentalmente la dependencia con el tamaño del grano para distintas temperaturas. De acuerdo con la teoría clásica es de esperar que la pendiente de la recta variara como indicamos en I,



sin embargo se encuentra una recta como la II .

Llegamos a la sorprendente conclusión de que la pendiente, es decir σ_{cr} no depende de la temperatura, sino que lo hace σ_1 , y, nuevamente de acuerdo a estos experimentos, esta tensión interna es la que depende fuertemente de la temperatura.

Como hemos señalado anteriormente algunos autores como Heslop y Petch sostienen que la fuerza de Pierls sea la razón fundamental de la gran dependencia con la temperatura de la fuerza de fricción σ_1 , mientras otros como Shóeck, han postulado que una alta concentración de jogs existentes en el equilibrio térmico son los responsables directos del fenómeno estudiado. En b.c.c. debido a que las dislocaciones no son extendidas la formación de jogs es energéticamente favorecida. Una alta concentración de jogs puede dar lugar a una fuerte tensión de fricción sobre la dislocación, ya que un jog en una dislocación de hélice que se mueve, requiere la creación o aniquilación de una fila de vacancias o intersticiales.

ENDURECIMIENTO DE METALES

Estudiaremos dos tipos de endurecimiento:

- a) Por trabajado
- b) Por precipitación

Cuando se trabaja un metal, se crean dislocaciones. Estas involucran alrededor de ellas un campo de tensiones, que tiene como consecuencia que cuando queremos mover una dislocación, esta debe vencer tensiones internas mayores cuanto mayor sea la densidad de dislocaciones presente en el cristal.

Teníamos que:

$$\sigma \approx \frac{1}{2\sqrt{r}} \frac{Gb}{r} \quad (189)$$

Si tenemos una densidad ρ de dislocaciones, la distancia media entre dos dislocaciones será del orden de:

$$R \approx \frac{1}{\sqrt{\rho}} \quad (190)$$

$$\therefore \quad \bar{\sigma}_1 = \frac{1}{2\pi} G b \sqrt{\rho} \quad (191)$$

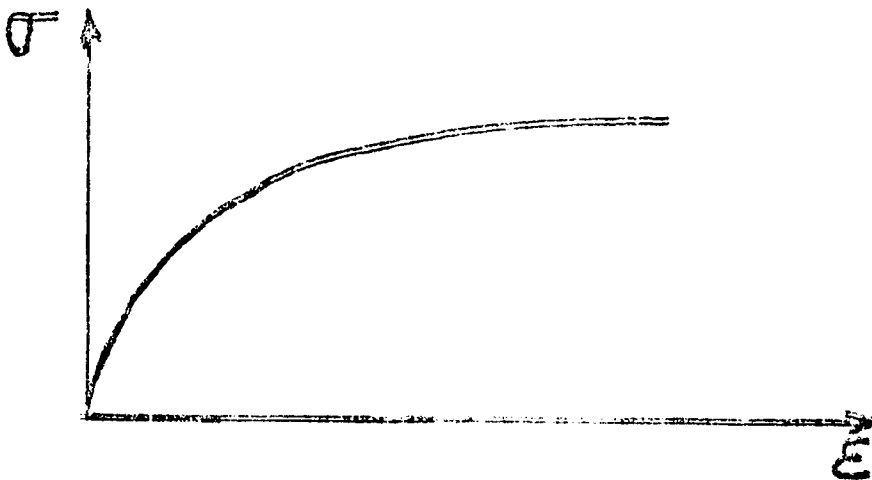
donde vemos que $\bar{\sigma}_1$ aumenta directamente con $\rho^{\frac{1}{2}}$.
Sabemos además que:

$$\bar{\epsilon} = \rho L b \quad (192)$$

Eliminando ρ entre (191) y (192) obtenemos:

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

$$\therefore \quad \boxed{\sigma = \frac{1}{2\pi} G \sqrt{\frac{b}{L}} \sqrt{\epsilon}} \quad (193)$$



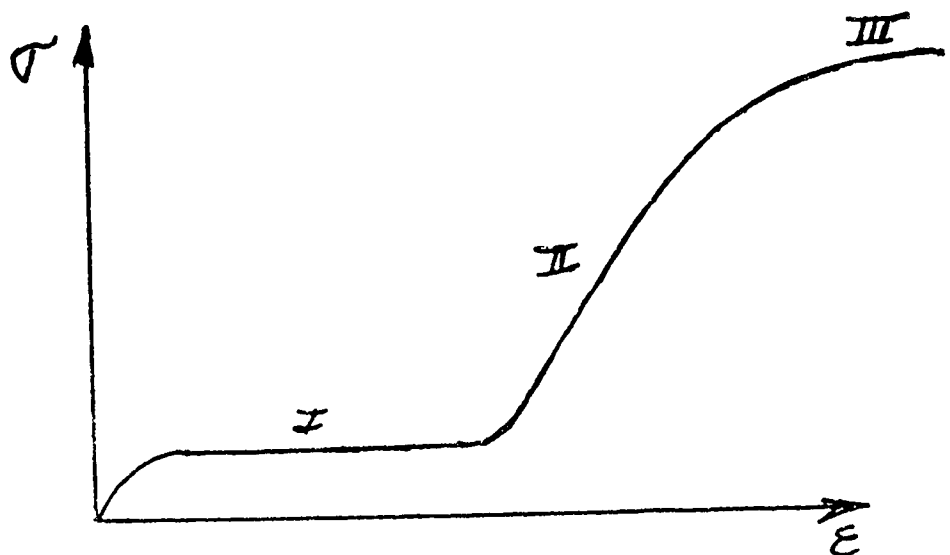
Esta es la teoría de Taylor (1928-30).

La curva σ vs. ϵ describe en forma aproximada el problema de endurecimiento por trabajado para una muestra policristalina, aunque hoy se sabe que la teoría es mucho más complicada que el esquema simple que hemos planteado.

En un monocristal encontramos que el comportamiento responde a la curva del primer gráfico de la página siguiente.

Dos teorías distintas han sido dadas para dar una explicación del endurecimiento por trabajado. Una es la sustentada por la escuela de Stuttgart por Seeger y colaboradores entre 1954-1958, y la otra por Hirsh y sus alumnos en Inglaterra.

En este curso nosotros estudiaremos en detalle la teoría sustentada por Seeger.



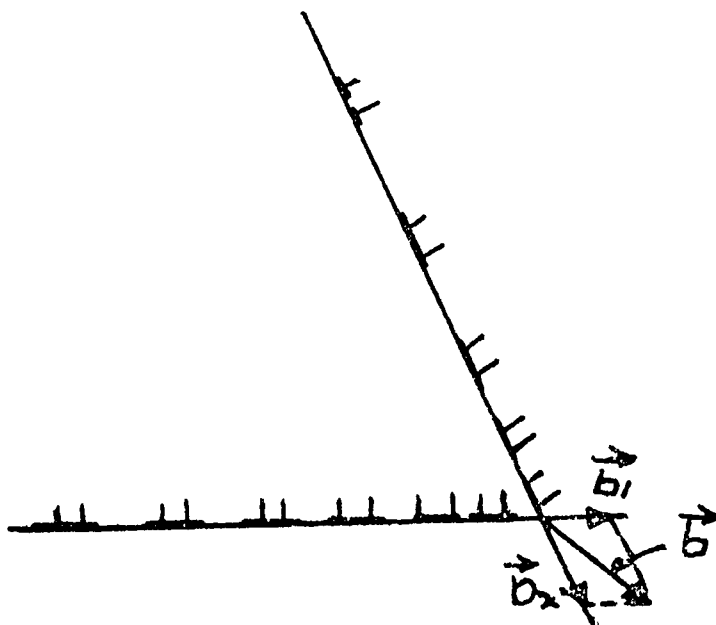
Hasta el momento se ha elaborado una teoría para explicar el endurecimiento por trabajado de metales f.c.c.

Metales de estructura hexagonal presentan solamente la etapa I .

La etapa I viene determinada por el hecho de que un solo plano de deslizamiento ocurre en el proceso de deformación, ya que en un solo plano la tensión de corte es mayor que en los demás. Este hecho ocurre hasta que la tensión es lo suficientemente grande como para actuar sobre otros planos, dando como resultado un aumento del endurecimiento por trabajado.

En II encontramos dislocaciones que intersectan el plano original.

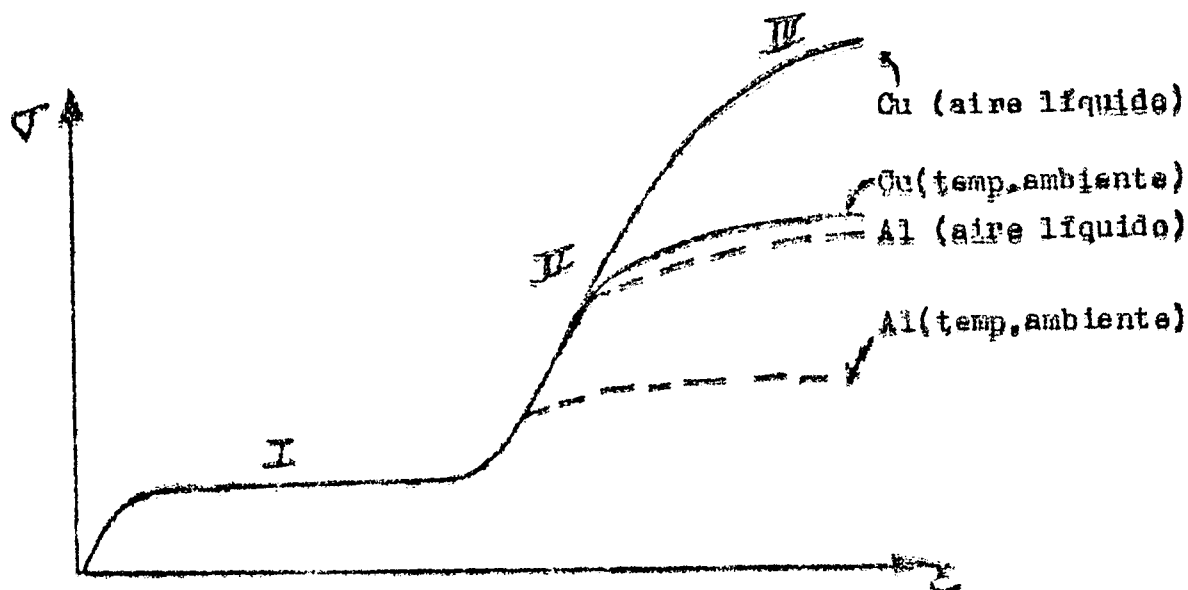
Cuando dos dislocaciones se intersectan como en el punto O de la figura, el vector de Buerger resultante, es igual a la suma vectorial de los vectores de Buerger de las dos dislocaciones.



La dislocación puede moverse libremente en un plano de finido por $\vec{v}$ (vector de línea sobre la dislocación) y $\vec{b}$. Vemos que cada una de las tres dislocaciones trata de moverse en distinta dirección, con el consecuente anclaje de de las mismas. A este tipo se lo denomi

na dislocaciones "sessiles". Ocurre cuando dos dislocaciones extendidas que se mueven en dos planos de slip distintos se encuentran en un punto. Las demás dislocaciones se apilan frente a la dislocación "sessile". El camino libre ha disminuido debido al segundo sistema que está emitiendo en otro plano. Debido al apilamiento tenemos un aumento de la tensión interna. A medida que se encuentran dislocaciones formamos más y más obstáculos, con el consecuente aumento del endurecimiento por trabajado como lo indica la etapa II.

Para comprender el comportamiento de la etapa III debemos estudiar previamente cómo varía la curva de endurecimiento por trabajado en función de la temperatura

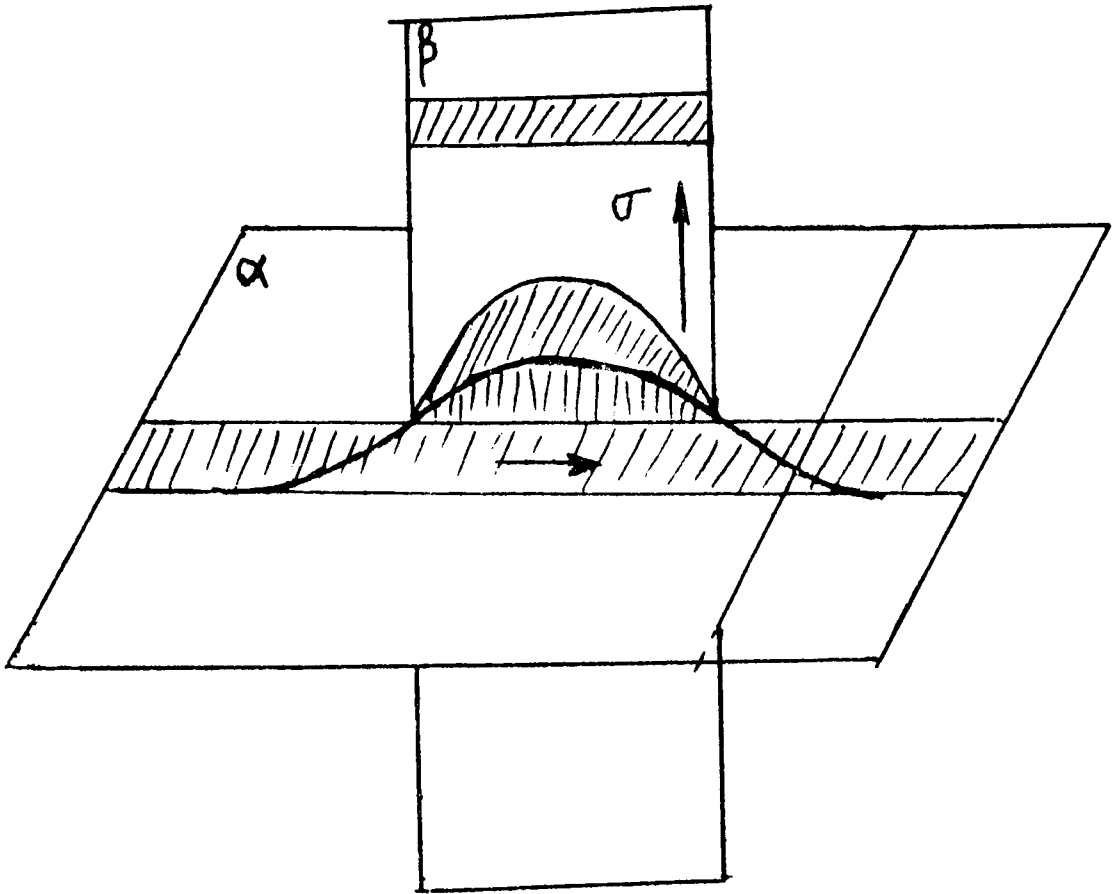


Se encuentra que I y II no dependen prácticamente de la temperatura mientras que σ_3 sí lo hace. Sabemos además que debe haber algún proceso de activación térmica, y que a bajas temperaturas un proceso de este tipo no influye.

El comportamiento de metales como el Cu y el Al nos indica que el problema debe estar relacionado con el ancho de las dislocaciones extendidas. Lo que en realidad sucede es un proceso denominado: "cross-slip" (deslizamiento cruzado). Para poder comprenderlo debemos estudiar las dislocaciones de hélice en f.c.c.

En un continuo elástico una dislocación de hélice posee un número infinito de planos de deslizamiento (es decir, puede moverse sin necesidad de crear o aniquilar vacancias o intersticiales). Supongamos ahora, una dislocación de hélice extendida, debido a la extensión en determinado plano, esta podrá deslizar libremente únicamente en dicho plano. Si la dislocación quiere pasar a otro plano de deslizamiento, primero debemos comprimir la dislocación extendida en su propio plano hasta que se unifiquen las dos semidislocaciones en una dislocación total; luego si aplicamos una tensión σ en otro plano, el β de la figu-

ra, por ejemplo, la dislocación se podrá mover en este nuevo plano de deslizamiento. Es posible calcular la energía que se requiere para que se produzca el proceso descrito, encontrándose que es del orden de 1 a 2 eV, que es un valor que puede ocurrir razonablemente por activación térmica.



Debido a las tensiones internas creadas por los apilamientos se crean fuerzas que impiden la operación de las fuentes de Frank-Read. Asimismo las dislocaciones extendidas se achican, hasta que por activación térmica pueden escaparse, deslizando en otro plano, que no es su propio plano de slip, por el proceso mostrado anteriormente. Este escape hace que el endurecimiento por trabajado disminuya (etapa III). Subsiste sin embargo endurecimiento, ya que la dislocación que escapa es anclada después de un tiempo creando un nuevo apilamiento.

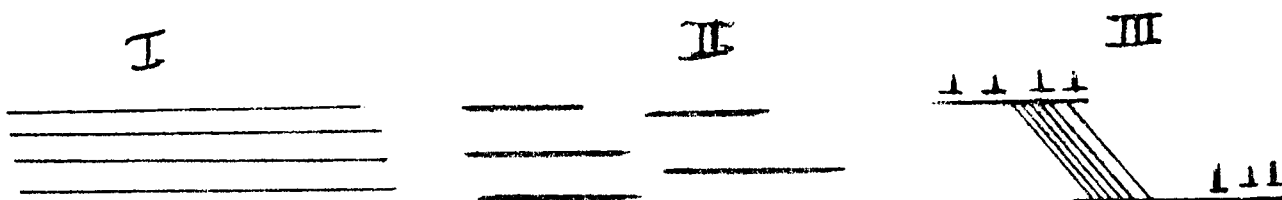
A medida que disminuye la temperatura, como era de esperar, hay menos posibilidad de que por activación térmica las dislocaciones escapen de sus apilamientos.

Visualmente sobre la superficie del metal encontramos:

a.- En la etapa I las líneas de slip son muy finas y largas.

b.- En la etapa II las líneas son más cortas y más densas.

c.- En la etapa III se ven entre las líneas gruesas, líneas muy finas debidas al cross-slip.



Esta es una descripción cualitativa de lo que se observa al microscopio.

Este era el estado de cosas hasta que hace cuatro años, aproximadamente, se comenzó a hacer experiencias con transmisión electrónica. Para ello las chapas del metal a utilizar deben ser muy delgadas de tal forma que sean transparentes a los electrones y se pueda observar como se mueven estos. El problema es que por este método nunca se han encontrado apilamientos. Se ven zonas libres de dislocaciones y otras con una gran densidad. La escuela que ha realizado estas experiencias concluyó que el modelo de Seeger era erróneo ya que se basa en la existencia de apilamientos de dislocaciones. Sostienen que en la superficie de un cristal existen tensiones y otros fenómenos de superficie, y que por lo tanto las observaciones hechas sobre la misma no son representativas de lo que ocurre en el interior.

También puede criticarse el método de transmisión, diciendo que el espesor de las chapas es del orden de diez veces menor que un apilamiento típico, y como consecuencia, la probabilidad de encontrar un apilamiento completo es muy pequeña. Por otra parte como la superficie debe ser libre de tensiones superficiales, cuando cortamos una chapa, debido a los arreglos de dislocaciones en el interior habrá una fuerza sobre la superficie que no puede ocurrir, ya que en dicho caso la misma se movería hasta eliminar las tensiones que existen sobre ella; luego para que la superficie quede libre de tensiones debe ocurrir un reordenamiento de las dislocaciones en el interior de las chapas no siendo por lo tanto nuevamente representativa del interior de un cristal.

POLIGONIZACIÓN

(1) | | | | | | | Supongamos un arreglo de dislocaciones como el de la figura. Si aumentamos la temperatura, aumenta la concentración de las vacancias en equilibrio térmico, y también su movilidad. Como consecuencia las dislocaciones

ciones pueden trepar y acomodarse de tal forma de que el sistema gane energía.

- (2) | En (1) en la parte superior todos los campos de tensión se
 | superponen, como asimismo en la inferior se superponen los
 | campos de compresión, mientras que en (2) el campo de ten-
 | sión de una dislocación tiende a anularse con el campo de
 | compresión de la siguiente; y como consecuencia la energía
 | interna involucrada en este sistema es menor que la ante-
 | rior, ganándose energía libre si pasamos de (1) a (2). Por
 | este razonamiento es lógico suponer que a altas temperatu-
 | ras ocurre el proceso (1) $\rightarrow$ (2).

Se puede demostrar que en el arreglo (2) la tensión disminuye con la distancia como:

$$\sigma \sim e^{-\frac{x}{L}} \quad (194)$$

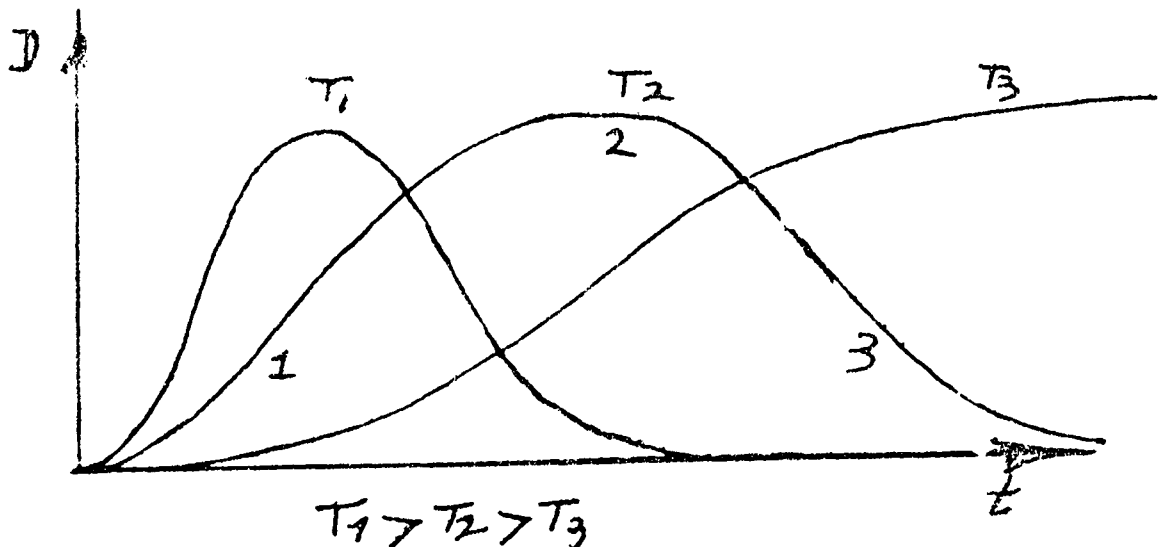
es decir a gran distancia se ve como si no habría un campo de tensión.

Cuando recocemos un metal (2) se transforma en un borde de grano de pequeño ángulo. Este proceso se llama poligonización. La red perfecta se transforma en un gran número de polígonos.

ENDURECIMIENTO POR PRECIPITACION

La precipitación es uno de los procedimientos muy importantes para producir materiales de alta resistencia.

Para comprender el mecanismo envuelto podemos estudiar cómo varía la dureza durante el proceso de precipitación para distintas temperaturas.



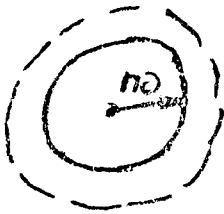
Vemos que una aleación que consiste de una solución sólida sobresaturada es usualmente blanda, pero se hace más dura a medida que la precipitación toma lugar, hasta que, eventualmente, si la temperatura del proceso es alta y el tiempo del recocido es largo, la dureza disminuye nuevamente, proceso conocido con el nombre de sobreenvajecimiento (3). En esta última etapa la medida de las partículas precipitadas crece, y muchas partículas pequeñas son reemplazadas por unas pocas de gran tamaño.

Nuestro interés es formular matemáticamente como depende la dureza, de la dispersión de las partículas precipitadas. Inmediatamente se puede notar que una dislocación se verá dificultada en su movimiento debido a la presencia del precipitado. Es así que este aumenta la tensión interna o lo que es lo mismo la dureza del material.

Debemos estudiar cómo varía la tensión interna promedio con la dispersión de los precipitados.

Asumimos el modelo más simple para representar a los precipitados:

$$a_1 = a_0(1+\alpha) \quad (195)$$



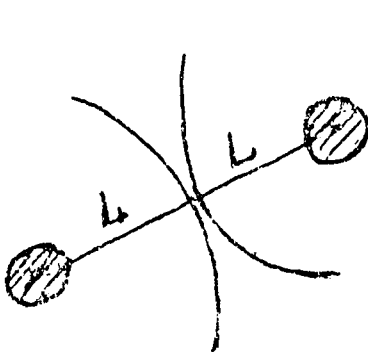
donde el aumento típico es del orden del 20%.

La teoría de elasticidad muestra que la tensión a una distancia r de una inclusión esférica de radio r_0 y parámetro de desencaje α , como hemos visto anteriormente

viene dado por:

$$\sigma = G \propto \frac{r_0^3}{r^3} \quad (196)$$

Si llamamos $2L$ a la distancia media entre precipitados:



$$\bar{\sigma}_1 = G \propto \frac{r_0^3}{L^3} \quad (197)$$

Trazando una esfera con centro en el precipitado y radio L vemos que todas las impurezas que se encuentran en el precipitado, estuvieron disueltas en la esfera de radio L .

$\therefore \frac{r_0^3}{L^3} \sim$ al número de impurezas que existen en la esfera
 $\frac{r_0^3}{L^3} \sim$ al número de sitios que existen en la esfera.

Llamando n al número de impurezas y N el número de sitios tenemos que:

$$\frac{r_0^3}{L^3} \approx \frac{n}{N} = C_1 \quad (198)$$

$$\bar{\sigma}_1 = G \propto C_1 \quad (199)$$

Esta fórmula nos dice que $\bar{\sigma}_1$ no depende de la dispersión de los precipitados, sino que de la concentración inicial. En un primer momento parecía que contradecía el hecho de que la dureza dependía de la dispersión de los precipitados. Para resolver el problema hay que considerar la flexibilidad de una línea de dislocación.

Sabíamos que:

$$f = \sigma b = \frac{T}{R} \quad (200)$$

donde R es el radio de curvatura de la dislocación.

$$T = \frac{1}{2} G b^2 \Rightarrow R = \frac{Gb}{2\sigma} \quad (201)$$

Cuanto mayor es σ menor es R , y más se puede doblar la dislocación.

Para tener deformación:

$$\sigma \geq \bar{\sigma}_1 = G \propto C_1 \quad (202)$$

$$R_1 = \frac{G b}{2 \bar{\sigma}_1} \quad (203)$$

$$R_1 = \frac{b}{2 \propto C_1} \quad (204)$$

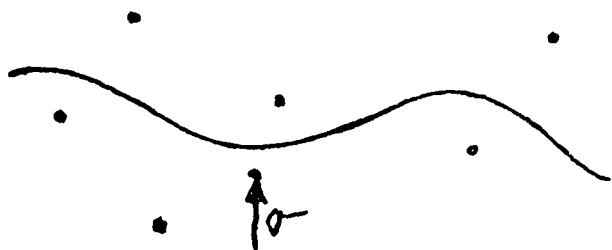
Debemos considerar a continuación tres casos:

- 1) $L \ll R_1$
- 2) $L \simeq R_1$
- 3) $L \gg R_1$
- 1) $L \ll R_1$



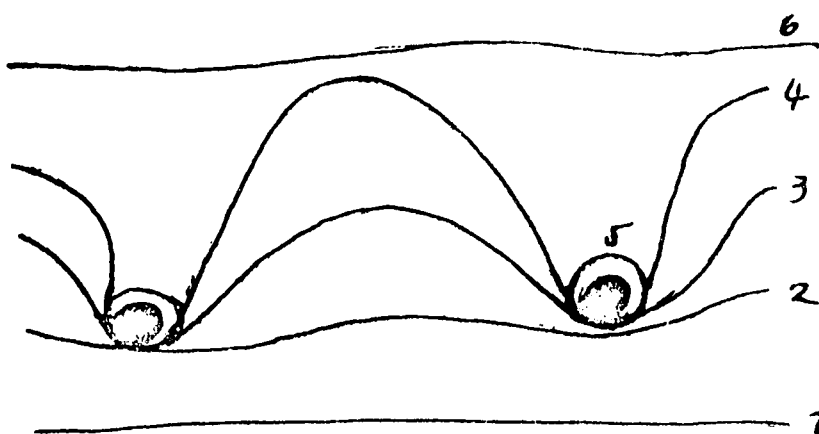
En este caso el radio de curvatura es mucho mayor que la distancia entre precipitados. La tensión interna fluctúa en forma arbitraria. Algunas partículas efectúan una tensión en un sentido y otras en otro; de tal forma que en promedio la fuerza que se opone al movimiento de la línea de dislocación es prácticamente nula, y esta se puede mover libremente.

2) $L \approx R_1$:



La dislocación, en este caso puede doblarse de forma tal de permanecer en los valles. Si aplicamos una tensión σ la dislocación siempre tiene que pasar una región donde las fuerzas internas se oponen a su movimiento, y la tensión aplicada debe ser como mínimo $\bar{\sigma}_1$ para poder mover la dislocación una distancia apreciable.

3) $L \gg R_1$:



En este último caso, debido a la flexibilidad de la línea de dislocación esta se mueve entre los precipitados a los que circunvala dejando un anillo de dislocación alrededor de los mismos.

La tensión necesaria para sortear los obstáculos es menor que en el caso anterior ya que no es necesario alcanzar $\bar{\sigma}_1$ para que la dislocación se mueva.

Calculemos a continuación L para un caso típico cuando $L \approx R_1 = b/2\alpha C_1$.

$$\alpha \approx .2 ; C_1 \approx .05$$

$$\therefore R_1 = 50b \Rightarrow L \approx 100b$$

Es decir para un $L = 100b$ tenemos la máxima dureza. Puede notar se que en el caso de máxima dureza, en el microscopio de luz aún no se ve el precipitado. Cuando estos llegan a verse, estamos en la zona de sobreenviejecimiento.

Este análisis sólo nos da una idea muy general del problema, ya que éste depende sensitivamente de la forma de los precipitados (chapas, discos, esferas, cubos, etc.)

