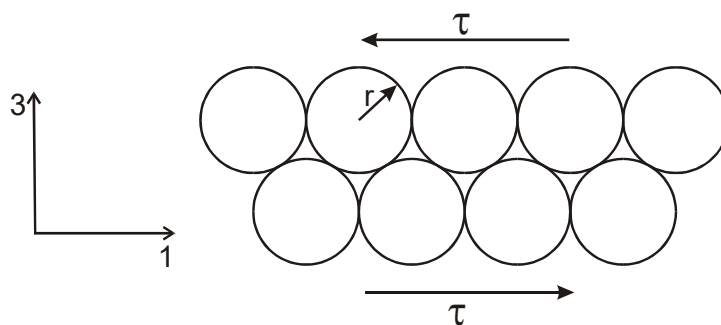


DEFEKTY LINIOWE: DYSLOKACJE

Istnienie dyslokacji tłumaczy, dlaczego obserwowane wytrzymałości mechaniczne materiałów są 10^3 - 10^4 razy mniejsze od teoretycznych (czyli dla materiału idealnego bez defektów).

W przypadku małych sił działających na kryształ odkształcenie jest sprężyste. Przy większych siłach odkształcenie staje się plastyczne, czyli materiał nie powraca do pierwotnego kształtu. Oszacujmy naprężenie, które jest potrzebne do wywołania poślizgu w doskonałym kryształ. Rozważmy przesunięcie dwóch warstw atomów względem siebie (ścinanie)

Zajęcie przez atom górnej warstwy niestabilnego położenia \Rightarrow najmniejsze odkształcenie ścinające dające odkształcenie trwałe.



Rys.1. Przesunięcie ścinające dwóch warstw atomowych

To odkształcenie ścinające opisane jest przez:

$$e_{13} \cong \frac{r}{2r} = \frac{1}{2}, \quad e_{31} = 0, \quad \varepsilon_{13} = \frac{1}{4} \quad (1)$$

W zakresie sprężystym: $\sigma_{13} = G\varepsilon_{13}$,

zatem konieczne naprężenie ścinające wynosi: $\tau = \sigma_{13} = \frac{1}{4}G$.

Weźmy przykład:

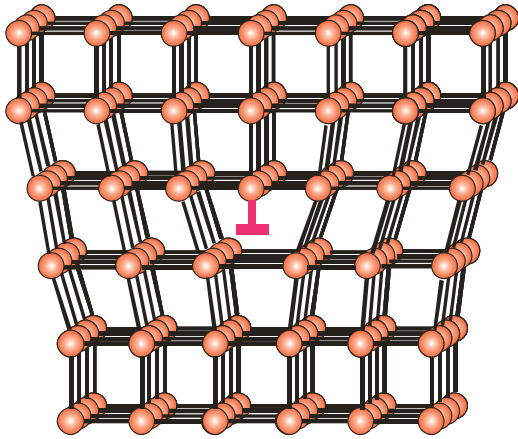
dla Mg: $G = 1,63 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$, $\tau_{\text{teor}} = 0,25 G = 0,4 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$ (wartość teoretyczna)

$\tau_{\text{rzecz}} = 0,77 \cdot 10^6 \text{ Pa}$ (wartość rzeczywista)

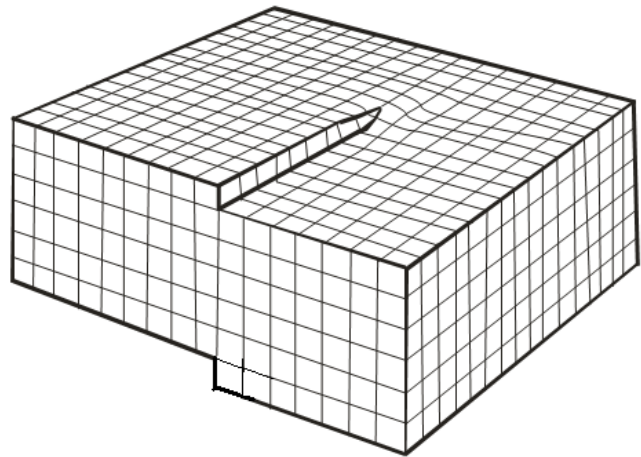
dla Cu: $\tau_{\text{teor}} = 1,2 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$,

$\tau_{\text{rzecz}} = 0,65 \cdot 10^6 \text{ Pa}$

Za te właśnie różnice (w powyższych przykładach – cztery rzędy wielkości) odpowiedzialne są **dyslokacje**, czyli liniowe defekty sieci. Rozróżniamy dwa podstawowe rodzaje dyslokacji: **krawędziowe i śrubowe**.



dyslokacja krawędziowa

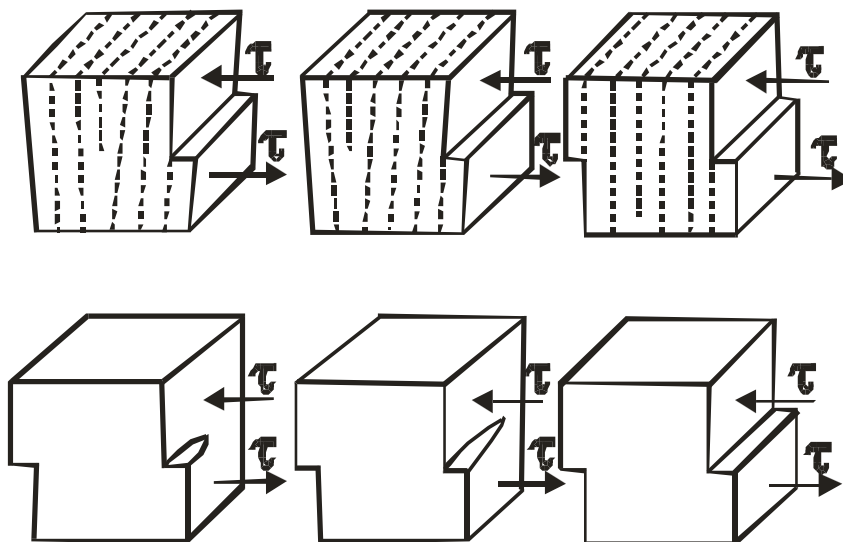


dyslokacja śrubowa

Rys.2. Dwa rodzaje dyslokacji w kryształach
(C. Kittel, *Wstęp do Fizyki Ciała Stałego*, PWN, Warszawa, 1974)

- **Ruch dyslokacji:**

Dyslokacje przemieszczają się po pewnych płaszczyznach i w pewnych kierunkach krystalograficznych (najczęściej są to płaszczyzny i kierunki najgęstszej upakowania). Przejście dyslokacji wytwarza na powierzchni kryształu charakterystyczne schodki:



Rys.3. Dyslokacja śrubowa dochodząca do powierzchni kryształu wytwarza „schodek” (patrz na lewą powierzchnię kryształu).

(na podstawie: R.E. Reed-Hill, *Physical Metallurgy Principles*, Van Nostrand Co., 1973)

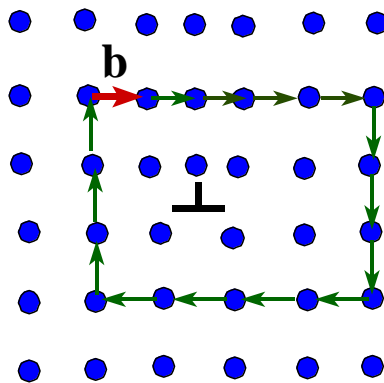
- **Systemy poślizgu [uvw] (hkl):**

Płaszczyzna krystalograficzna (hkl) po której porusza się dyslokacja i kierunek w niej leżący [uvw] wzdłuż którego ona się porusza – definiują system poślizgu: [uvw](hkl). Istnieje oczywiście cała „rodzina” symetrycznie równoważnych systemów poślizgów i oznaczamy ją jako $\langle uvw \rangle \{hkl\}$.

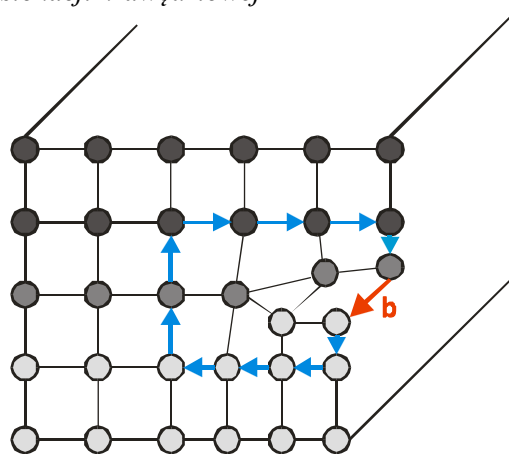
Np. dla metali o strukturze regularnej ściennie centrowanej (RSC) systemami poślizgu są: $\langle 110 \rangle \{111\}$, zaś dla metali o strukturze regularnej przestrzennie centrowanej (RPC) są to: $\langle 111 \rangle \{110\}$, $\langle 111 \rangle \{112\}$ i $\langle 111 \rangle \{123\}$.

- **Wektor Burgersa:**

Jest to najmniejsze niedomknięcie konturu wytyczonego wokół linii dyslokacji. Jest to również elementarny skok, na jaki może się przesunąć dyslokacja (a także elementarny schodek, jaki powstaje przy wyjściu dyslokacji na powierzchnię kryształu). Poniższe rysunki pokazują wyznaczenie wektorów Burgersa w przypadku dyslokacji krawędziowej oraz śrubowej. Zasada jest prosta. Wokół linii dyslokacji zataczamy zamknięty kontur i zliczamy ile skoków atomowych musimy wykonać w lewo i w prawo oraz w górę i w dół, aby zamknąć pętlę. Taką samą pętlę zataczamy dla porównania w obszarze kryształu doskonałego. Porównując obie pętle stwierdzimy, że kontur wokół dyslokacji zawiera jeden dodatkowy skok; to jest właśnie wektor Burgersa.



Rys.4a: Wektor Burgersa dyslokacji krawędziowej



Rys.4b: Wektor Burgersa dyslokacji śrubowej

- **Linia dyslokacji:**

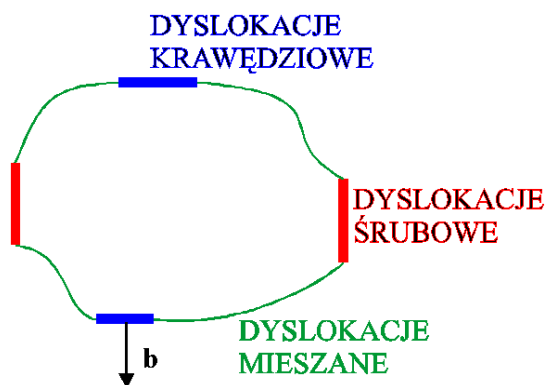
Dyslokacja krawędziowa pojawia się wtedy, gdy płaszczyzna atomowa urywa się (kończy się krawędzią) wewnątrz kryształu; jej linią dyslokacji jest właśnie krawędź urwanej płaszczyzny.

Linią dyslokacji śrubowej jest oś utworzonej przez nią struktury śrubowej (równoważnie można powiedzieć, że oś ta oddziela ona część płaszczyzny poślizgu, na której nastąpiła deformacja ścinająca od tej części, na której deformacja nie wystąpiła).

W przypadku dyslokacji krawędziowej wektor Burgersa jest prostopadły do linii dyslokacji, zaś w przypadku dyslokacji śrubowej – jest do niej równoległy.

- **Pętla dyslokacji:**

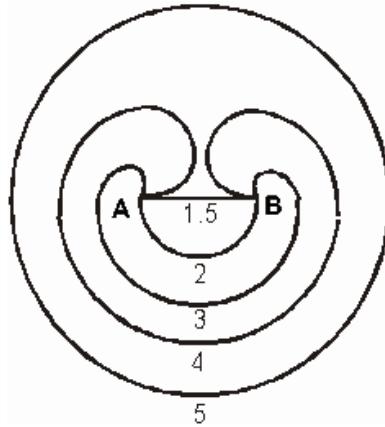
Najczęściej w rzeczywistości nie obserwuje się czystych dyslokacji śrubowych bądź też krawędziowych, ale spotyka się pętle dyslokacji. Część takiej pętli ma charakter śrubowy, a część krawędziowy, jednakże większa część ma charakter mieszany.



Rys. 5. W pętli dyslokacji oprócz dyslokacji typu „czystego” występują przede wszystkim dyslokacje mieszane

- **Wyginanie dyslokacji, źródła Franka-Reada:**

Pętla dyslokacji przesuwa się pod wpływem naprężeń. Czasami jednak linia dyslokacji może zostać zablokowana w dwóch punktach, np. na cząsteczkach wydzieleń drugiej fazy. Kolejne etapy wyginania zablokowanej („zakotwiczonej”) dyslokacji prowadzą w końcu do powstania zamkniętej pętli, która dalej się rozszerza. W międzyczasie tworzy się nowy, zablokowany odcinek linii dyslokacji, który także zaczyna się wyginać itd. Powstaje w ten sposób źródło emitujące kolejne dyslokacje, nazywane źródłem Franka-Reada; pokazane jest ono poniżej.



Rys. 6. Kolejne etapy powstawania kołowej pętli dyslokacji w źródle Franka-Reada

Rozważmy dyslokację, zakotwiczoną na płaszczyźnie krystalograficznej, po której może się ona przemieszczać (płaszczyzna poślizgu). Wykazuje się, że minimalne naprężanie potrzebne do jej wygięcia wynosi:

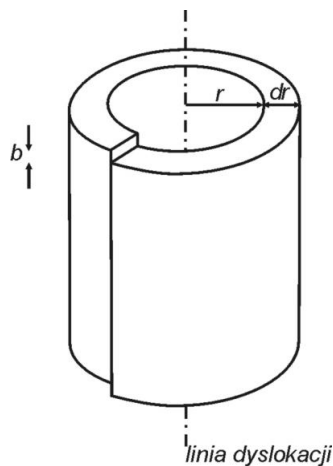
$$\tau_{kr} = G\gamma = G \frac{b}{L} \quad (2)$$

gdzie G jest modułem sztywności, b - wektorem Burgersa oraz L – długością linii dyslokacji.

Źródło Franka-Reada jest podstawowym mechanizmem rozmnażania się dyslokacji podczas deformacji plastycznej. Po dużym odkształceniu plastycznym gęstość dyslokacji może wzrosnąć od 10^6 - 10^8 do 10^{12} linii/cm², czyli o cztery do sześciu rzędów wielkości.

- **Pole naprężeń od dyslokacji:**

Najłatwiej je wyprowadzić dla dyslokacji śrubowej. Poniżej przedstawiono odkształcenie materiału wokół linii takiej dyslokacji. Zagadnienie ma symetrię cylindryczną.



Rys. 7. Odkształcenie wokół dyslokacji śrubowej

Na obwodzie okręgu o promieniu r (obwód Burgersa) występuje prostopadłe przemieszczenie b , zatem wielkość odkształcenia:

$$\gamma = \frac{b}{2\pi r} \quad (3)$$

Przyjmuje się, że w odległości $r > 5b$ od osi dyslokacji spełnione są prawa sprężystości (poniżej tej odległości – trzeba stosować prawa mechaniki kwantowej).

A zatem naprężenie ścinające wytworzone w odległości r od rdzenia (linii dyslokacji):

$$\tau = G\gamma = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (4)$$

Wykazuje się, że dla dyslokacji krawędziowej analogiczny wynik ma postać:

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi r(1-\nu)} \quad (5)$$

gdzie ν jest współczynnikiem Poissona.

- **Energia własna dyslokacji:**

Jest to energia odkształcenia sprężystego materiału, przypadająca na jednostkę długości linii dyslokacji.

Wyliczenia przeprowadzimy dla dyslokacji śrubowej, ze względu na występującą w tym przypadku symetrię cylindryczną. Ogólnie, energia odkształcenia sprężystego wyraża się jako:

$$E_{\text{spr}} = \frac{1}{2} \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dV \quad (6)$$

W wyrażeniu powyższym występuje sumowanie po powtarzających się wskaźnikach i oraz j .

W przypadku dyslokacji śrubowej mamy tylko jedną ścinającą składową naprężenia i odkształcenia, τ i γ (porównaj rysunek powyżej), między którymi zachodzi związek:

$$\gamma = \frac{\tau}{G} \quad (7)$$

Tak więc, energia sprężysta, związana z dyslokacją, wynosi:

$$E_{\text{spr}} = \frac{1}{2} \int_{V_0} \tau \gamma dV = \frac{1}{2} \int_{V_0} \frac{\tau^2}{G} dV = \frac{1}{2} \int_{r_0}^{r_1} \frac{Gb^2}{4\pi^2 r^2} 2\pi r dr \quad (8)$$

gdzie r_0 jest promieniem rdzenia dyslokacji ($r_0 \cong 5b$), zaś r_1 jest odległością przy której kończymy całkowanie (promień obcięcia, np. odległość do zewnętrznej ściany kryształu). (Zauważmy ponadto, że $dV=2\pi r dr$, gdyż energię liczymy na jednostkę długości dyslokacji). Po wyliczeniu powyższej całki otrzymujemy ostateczną postać wyrażenia na energię elastyczną dyslokacji śrubowej:

$$E_{\text{spr}} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{r_1}{r_0} \quad (9)$$

Można wykazać, że energia elastyczna związana z dyslokacją krawędziową ma podobną postać:

$$E_{\text{elast}} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1}{r_0} \quad (10)$$

gdzie ν jest współczynnikiem Poissona.

Zauważmy, że $\ln \frac{r_1}{r_0}$ nie jest dużą liczbą. Weźmy sześcienny kryształ zawierający N_A atomów:

jego bok: $r_1 = \sqrt[3]{6,02 \cdot 10^{23} a^3} \cong 0,78 \times 10^8 a$, gdzie a jest stałą sieci. Pamiętając, że $r_0 \cong 5b$, czyli, że

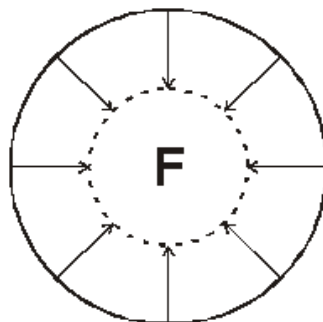
jest rzędu $5a$, otrzymujemy następujące oszacowanie: $\frac{r_1}{r_0} \cong 1,6 \times 10^7$. Zatem $\ln \frac{r_1}{r_0} \cong 17$; ponadto

pamiętając, że $1-\nu \cong 0,7$ oraz, że $4\pi \cong 13$, przyjmuje się jako dobre przybliżenia :

$$\begin{aligned} E_{\text{śrub}} &= Gb^2 \\ E_{\text{kraw}} &= Gb^2 \end{aligned} \quad (11)$$

Siła napięcia linii dyslokacji:

Z powodu dużej energii elastycznej związanej z dyslokacją, występuje siła napięcia linii dyslokacji starająca się skrócić jej długość do minimum, podobnie jak napięcie powierzchniowe ma tendencje zmniejszania wymiaru bańki mydlanej. Rozważmy siłę „napięcia” w kołowej pętli dyslokacji.



Rys. 8. Siły działające na kołową pętlę dyslokacji

Zdefiniujemy siłę, T , przypadającą na jednostkę długości linii dyslokacji i prostopadłą do niej w każdym punkcie. Siła całkowita działająca na całą pętlę wynosi $F=2\pi rT$. Jeśli pod wpływem sił napęcia powierzchniowego promień pętli dyslokacyjnej zmniejszy się o dr , to wykonaną pracę można przyrównać do ubytku energii dyslokacji związanego ze zmniejszeniem jej długości:

$$dW = 2\pi rTdr = E_{\text{dysl.}} 2\pi dr \quad (12)$$

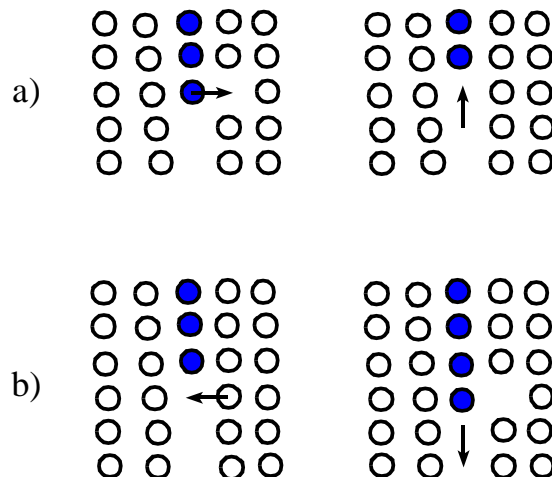
stąd:

$$T = \frac{E_{\text{dysl.}}}{r} \quad (13)$$

$$T \cong \frac{Gb^2}{r}$$

- **Wspinanie się dyslokacji krawędziowych:**

Oprócz ruchu po płaszczyźnie poślizgu, dyslokacje mogą również przemieszczać się w kierunku doń prostopadłym. Dzięki temu ruchowi mogą one przejść na inną, równoległą płaszczyznę poślizgu. Mechanizm ten, pokazany dla dyslokacji krawędziowej, oparty jest na dyfuzji atomów z krawędzi półpłaszczyzny atomów tworzącej tę dyslokację, czyli na skracaniu tej półpłaszczyzny. Możliwe jest też „opuszczanie się” dyslokacji krawędziowej, które polega na wydłużaniu jej półpłaszczyzny, czyli na jej dobudowywaniu, poprzez dyfuzję atomów z sąsiednich luk – rysunek *b*).



Rys.9. Wspinanie (a) oraz opuszczanie (b) dyslokacji krawędziowej

- **Kierunek i płaszczyzna poślizgu:**

Dyslokacje poruszają się w płaszczyznach i w kierunkach poślizgu $\langle uvw \rangle \{hkl\}$. Są to na ogół płaszczyzny i kierunki najgęstszego upakowania.

Dla kryształów o strukturze regularnej ściennie centrowanej (RSC) są to: $\langle 110 \rangle \{111\}$.

Dla kryształów o strukturze regularnej przestrzennie centrowanej (RPC) są to: $\langle 111 \rangle \{110\}$, $\langle 111 \rangle \{112\}$ i $\langle 111 \rangle \{123\}$.

Dla kryształów o strukturze heksagonalnej (HZ) są to: $\langle 1120 \rangle \{0001\}$, $\langle 1120 \rangle \{1100\}$, $\langle 1120 \rangle \{1101\}$ czy też $\langle 1123 \rangle \{1122\}$.

Siły działające na dyslokacje na płaszczyźnie poślizgu:

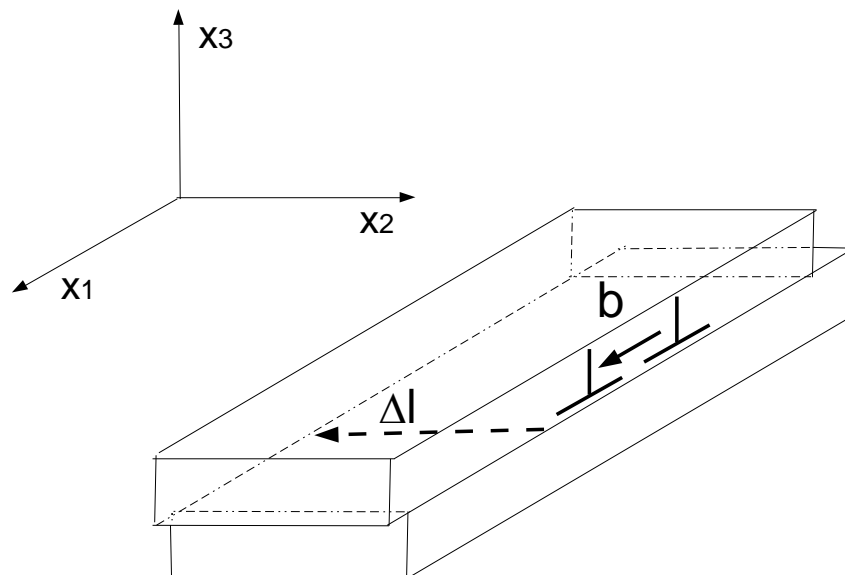
Siłę działającą na pojedynczą dyslokację, gdy w materiale istnieje stan naprężeń σ_{ij} , podaje równanie Peach-Koehler'a):

$$dF = (\sigma \cdot b) \times dl \quad (14)$$

(wyprowadzenie tego równania znajduje się w **Dodatku 1** – na końcu rozdziału).

Jest to siła działająca na element dyslokacji o długości dl . Praktyczny sposób użycia tego wzoru zilustrowany jest na poniższym przykładzie.

Rozpatrzmy dyslokację krawędziową, znajdującą się płaszczyźnie poślizgu:



Rys. 10. Dyslokacja krawędziowa na systemie poślizgu

Wyliczmy najpierw iloczyn $\sigma \cdot b$:

$$\sigma \cdot b = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Rezultatem jest wektor A :

$$\mathbf{A} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b\sigma_{11} \\ b\sigma_{21} \\ b\sigma_{31} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Elementarna siła wynosi:

$$d\mathbf{F} = \mathbf{A} \times \Delta l \quad (17)$$

lub:

$$d\mathbf{F} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ b\sigma_{11} & b\sigma_{21} & b\sigma_{31} \\ 0 & -\Delta l & 0 \end{vmatrix} = b \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \sigma_{11} & \sigma_{21} & \sigma_{31} \\ 0 & -\Delta l & 0 \end{vmatrix} \quad (18)$$

zatem:

$$dF_1 = b\sigma_{31}\Delta l = b\sigma_{13}\Delta l \quad (\text{składowa „napędzająca” poślizg})$$

$$dF_2 = 0$$

$$dF_3 = -b\sigma_{11}\Delta l \quad (\text{składowa „napędzająca” wspinanie dyslokacji}).$$

DEFEKTY POWIERZCHNIOWE

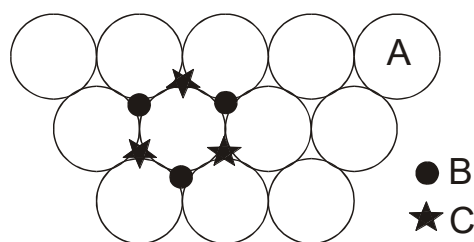
Wyróżniamy tutaj:

- Błędy ułożenia,
- Powierzchnie wewnętrzne kryształów (np. granice ziaren, granice bliźniaków i granice międzyfazowe),
- Powierzchnie zewnętrzne kryształów.

a) Błędy ułożenia:

Jeśli rozważymy problem gęstego upakowania kul, to okazuje się, że istnieją tylko dwie możliwości.

Poniżej przedstawiono je schematycznie:



Rys.11.

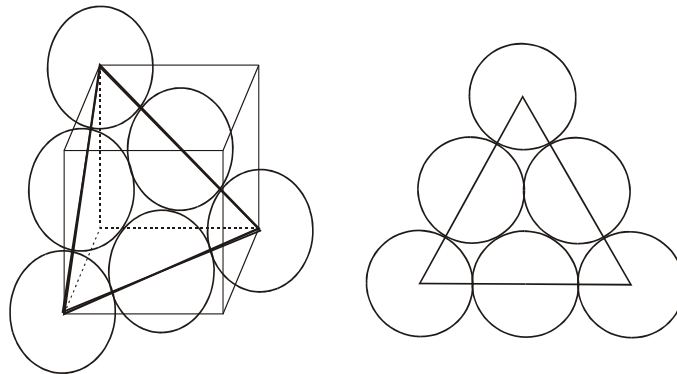
Możliwe sposoby gęstego upakowania kul. Kule pierwszej warstwy znajdują się w położeniach A, środki kul drugiej warstwy umieszczamy w położeniach oznaczonych jako B. Trzecią warstwę kul możemy umieścić:

- w położeniach C (następnie powtarzając procedurę od początku, uzyskujemy ułożenie ABC ABC
- w położeniach A (czyli wracamy do początku procedury; uzyskujemy ułożenie AB AB)

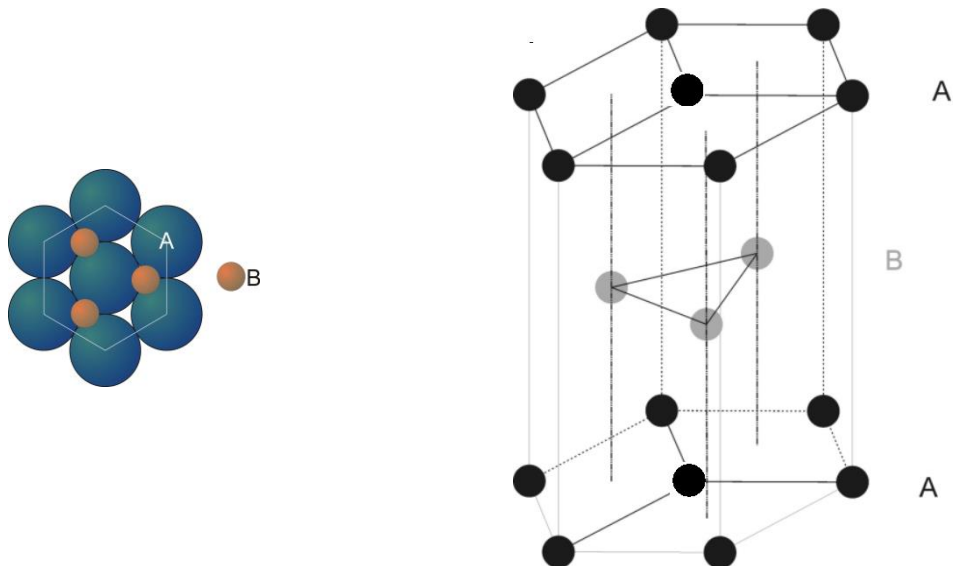
Te sposoby upakowania atomów, traktowanych jako sztywne kule, realizowane są w przyrodzie w dwóch strukturach krystalograficznych:

- w regularnej ściennie centrowanej (RSC), gdzie występuje sekwencja warstw atomowych ABC ABC ABC
- w heksagonalnej zwartej (HZ), gdzie występuje sekwencja warstw atomowych AB AB AB

Na poniższych rysunkach przedstawiono ułożenie atomów w obu tych strukturach.

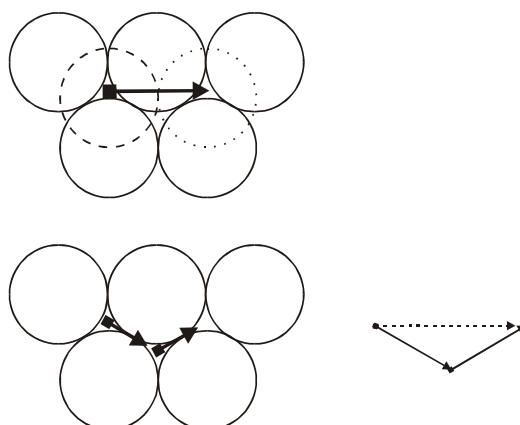


Rys. 12. Ułożenie atomów w kryształach RSC jest sekwencją ułożenia płaszczyzn gęstego upakowania {111}.



Rys. 13. Ułożenie atomów w kryształach HZ jest sekwencją ułożenia płaszczyzn gęstego upakowania $\{0001\}$.

Rozważmy teraz ścinający ruch jednej warstwy atomowej względem drugiej, który występuje w zjawisku poślizgu kryształu. Przemieszczenie to możemy opisać jako ruch dyslokacji kompletnej („doskonałej”), która w sieci RSC opisana jest wektorem Burgersa: $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[\bar{1}10]$. Pokazano to na górnej części poniższego rysunku (atomy warstwy górnej zaznaczono linią przerywaną). Jednak od razu można zauważyć, że będzie istniała tendencja do łatwiejszego ruchu atomów, pokazanego na poniższym rysunku.



Rys. 14. Przemieszczenie jednej warstwy atomów względem drugiej: zgodnie z wektorem Burgersa dyslokacji doskonałej (rysunek górny) oraz zgodnie z wektorami Burgersa dyslokacji cząstkowych (rysunek dolny).

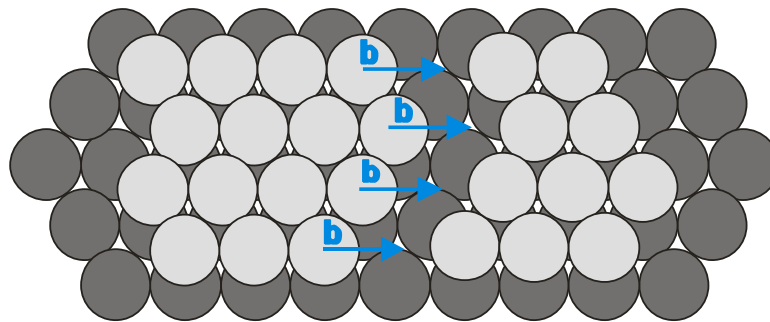
Ten łatwiejszy ruch warstwy atomowej przedstawiamy jako dwa kolejne przemieszczenia (o wektorach zaznaczonych na rysunku). Inaczej mówiąc, wektor Burgersa $\langle 110 \rangle$ zastąpiony jest dwoma innymi wektorami. Efekt znany jest jako rozszczepienie (dysocjacja) dyslokacji doskonałej na dwie dyslokacje cząstkowe i przedstawiamy go w postaci następującego równania:

$$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \frac{1}{6} \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 1 \\ 2 \\ \bar{1} \end{bmatrix} + \frac{1}{6} \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (19)$$

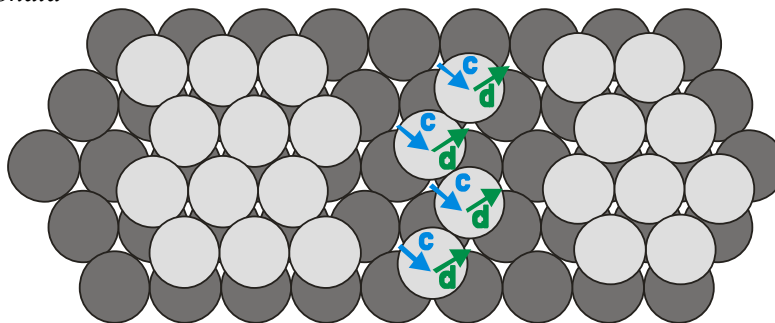
Zauważmy, że opisane przemieszczenie atomów zakłóca sekwencję ułożenia warstw ABC; inaczej mówiąc ruch dyslokacji cząstkowych wprowadza błąd ułożenia.

Błędem ułożenia w strukturze RSC jest np. sekwencja ABC BC ABC, zaś w strukturze HZ jest to np. sekwencja: AB CAB AB.

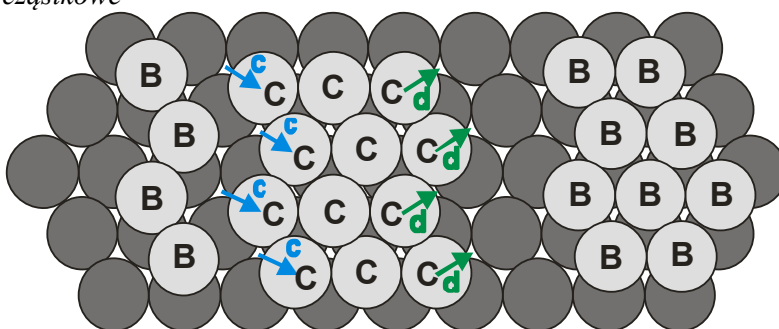
Powstanie obszaru z błędem ułożenia poprzez rozszczepienie dyslokacji doskonałej na dwie dyslokacje cząstkowe w strukturze regularnej płasko centrowanej pokazano na trzech kolejnych rysunkach poniżej:



Dyslokacja doskonała



Dwie dyslokacje cząstkowe



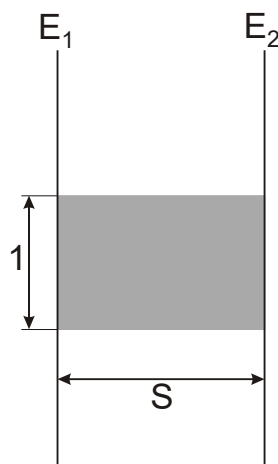
Obszar błędu ułożenia pomiędzy dwiema dyslokacjami częściowymi.

Rys. 15. Kolejne etapy powstawania błędu ułożenia

(na podstawie: R.E. Reed-Hill, Physical Metallurgy Principles, Van Nostrand Co., 1973)

Oszacowanie szerokości obszaru błędu ułożenia:

Pomiędzy dwiema dyslokacjami cząstkowymi, o energiach na jednostkę długości E_1 i E_2 , występuje obszar błędu ułożenia. Błąd ułożenia charakteryzujemy energią błędu ułożenia (EBU), γ , przypadająca na jednostkę ich powierzchni (wyrażaną w J/m^2). Oszacujmy szerokość błędu ułożenia (S), czyli obszaru zawartego między dyslokacjami cząstkowymi.



Rys. 16. Obszar błędu ułożenia o szerokości S , zawarty między dwiema dyslokacjami cząstkowymi

Warunek zachowania energii w reakcji rozszczepienia (rozpatrujemy obszar między dwiema dyslokacjami cząstkowymi o długości jednostkowej):

$$E = E_1 + E_2 + S\gamma$$

Jeśli oznaczymy:

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

to

$$\Delta E \cong S\gamma$$

Wielkość ΔE jest rzędu E oraz E_1 (można wykazać, że $\Delta E = fE$, gdzie f jest współczynnikiem zawartym w przedziale $[0,1]$, zależnym od szczegółów reakcji rozszczepienia dyslokacji). A zatem:

$$S = \frac{\Delta E}{\gamma} \quad (20)$$

Czyli, odległość S , na jaką oddalają się od siebie dyslokacje cząstkowe jest odwrotnie proporcjonalna do EBU (γ). W materiałach o dużej EBU te odległości są małe, np. w Cu, natomiast w materiałach o małej EBU odległości te są duże np. Ag, Cu-Zn.

Jeżeli odległość S pomiędzy dwiema dyslokacjami częściowymi jest mała, to ich rekombinacja zachodzi stosunkowo łatwo i utworzą one z powrotem wyjściową dyslokację doskonałą. Jeśli zaś S jest duże to rozszczepienie dyslokacji ma stosunkowo trwały charakter. Efekt ten jest istotny w zjawisku tzw. poślizgu poprzecznego. Polega on na tym, że przykładowo dyslokacja $[110]$ poruszająca się po płaszczyźnie $(\bar{1}\bar{1}1)$ przechodzi na płaszczyznę $(11\bar{1})$ i na niej się dalej porusza. Do zajścia tego efektu konieczne jest, aby dyslokacja $[110]$ była „w całości”, a nie - rozszczepiona na dwie dyslokacje częściowe. Tak więc w materiałach z dużą wartością γ poślizg poprzeczny będzie łatwo zachodził, ze względu na łatwą rekombinację dyslokacji częściowych. Występowanie poślizgu poprzecznego ma istotne znaczenie, gdyż ułatwia on deformację plastyczną w mono- i polikryształach.

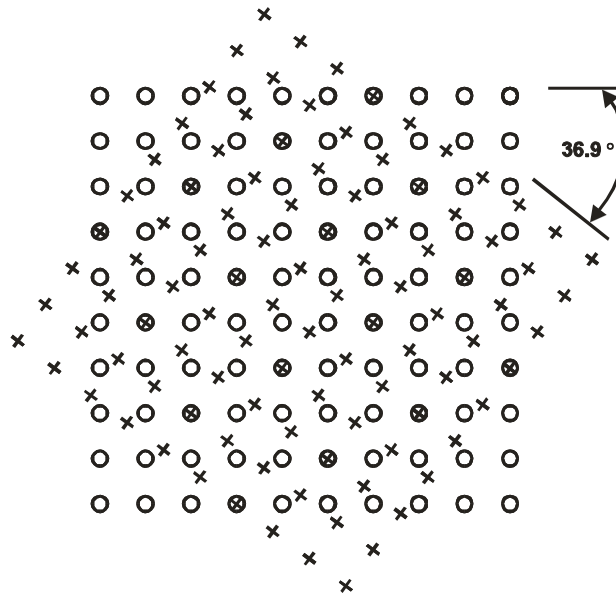
b) Powierzchnie wewnętrzne kryształów (granice ziaren, granice bliźniaków, granice międzyfazowe)

Granice ziaren

Polikryształ zawiera ogromne ilości granic. Mogą to być granice zarówno między ziarnami jak i podziarnami. Granice ziaren charakteryzują się pewnym stopniem chaosu, gdyż w ich obszarze zachodzi przejście między dwoma sąsiadującymi ziarnami o innych orientacjach sieci krystalograficznej. W obrębie granicy obserwujemy na ogół chaotyczny rozkład atomów spowodowany nagromadzeniem się tam dyslokacji i defektów punktowych. Jednak z punktu widzenia opisu struktury, najciekawsze są takie typy granic ziaren, które posiadają jednak pewien rodzaj uporządkowania. Są to na przykład:

- Granice koincydentne oraz koherentne

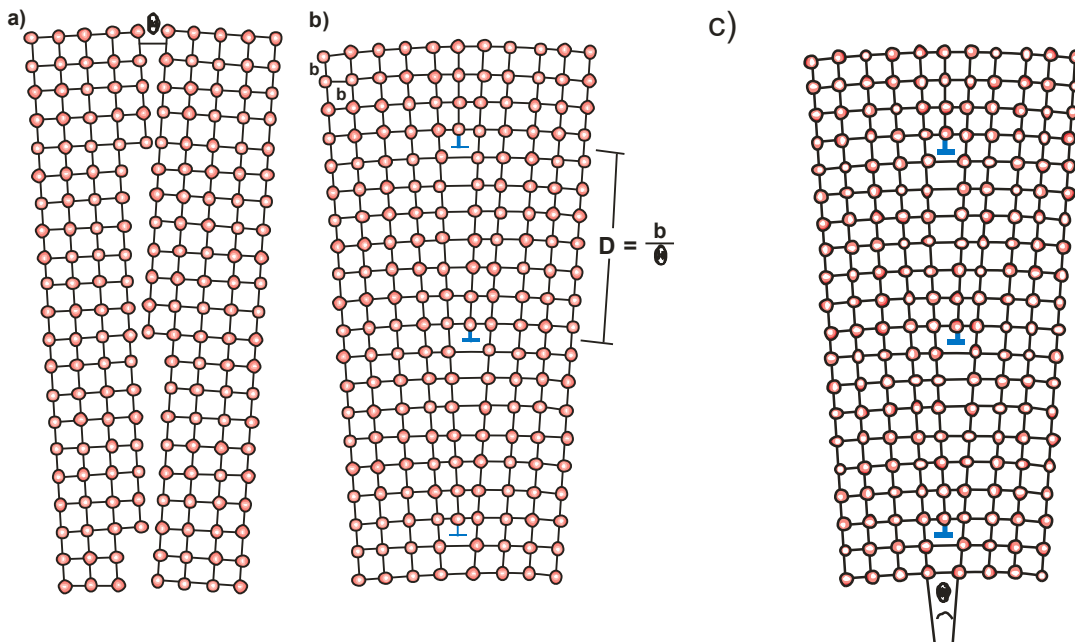
Posiadają one tę własność, że atomy położone na granicy zajmują położenia węzłowe sieci właściwe dla obu sąsiadujących ziaren. Granice takie odgrywają istotną rolę w procesie rekrytalizacji, gdyż wskutek ich mniejszej energii własnej charakteryzują się stosunkowo dużą ruchliwością.



Rys. 17. Granica skrecona typu koincydentnego. Obie sieci obrócone są względem siebie o 36.9° wokół kierunku $[100]$ i wskutek tego piąta część węzłów obu sieci pokrywa się.
(na podstawie: A. Kelly, G.W. Groves, *Krystalografia i defekty kryształów*, PWN, Warszawa, 1980)

- Granice nisko-kątowe:

- granica daszkowa

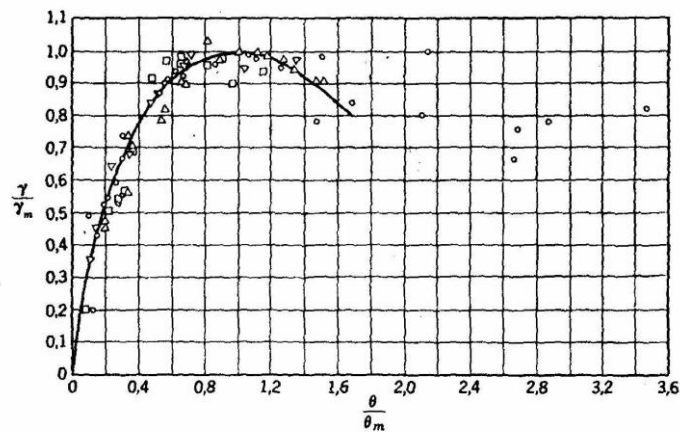


Rys. 18: a, b) Powstawanie granicy daszkowej oraz c) wynikowa granica pomiędzy dwoma obszarami o różnicy orientacji (czyli o dezorientacji) θ .
(na podstawie: W.T. Read, *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill Book Co., 1953)

Granica taka jak powyżej, zbudowana jest z zespołu jednoimiennych dyslokacji krawędziowych, kompensujących niedopasowanie obu części kryształu. Dyslokacje te wytwarzają pewne pole naprężeń. Wykazuje się, że energia γ (liczona na jednostkę powierzchni) zależy od kąta wzajemnej orientacji sieci krystalograficznej sąsiadujących ziaren θ i wyraża się następująco:

$$\frac{\gamma}{\gamma_m} = \frac{\theta}{\theta_m} \left[1 - \ln \frac{\theta}{\theta_m} \right]$$

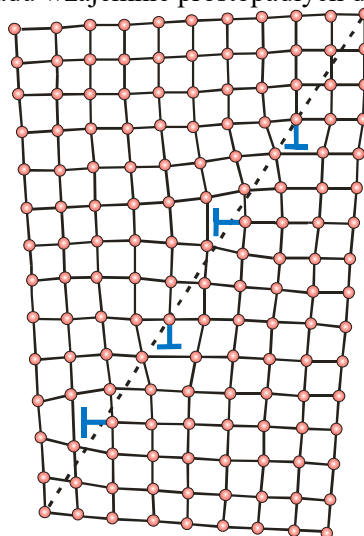
gdzie: γ_m i θ_m są wartościami energii granicy i kąta dezorientacji odpowiadającymi maksimum tej zależności. Poniższy rysunek pokazuje, że relacja ta dobrze opisuje dane doświadczalne:



Rys. 19. Znormalizowana energia granicy niskokątowej w funkcji kąta wzajemnej orientacji sąsiednich ziaren (W.T. Read jr., *Dislocations in Crystals*, Mc Graw-Hill, 1953).

- niesymetryczna granica daszkowa

Granica taka zbudowana jest z układu wzajemnie prostopadłych dyslokacji krawędziowych.

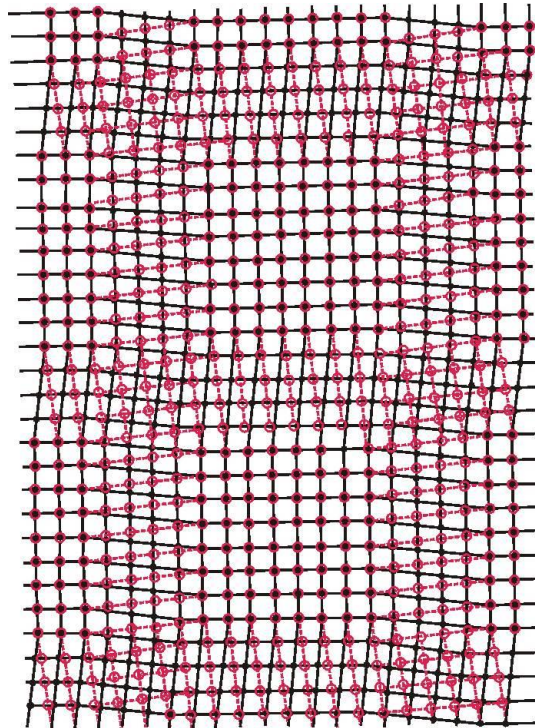


Rys. 19. Niesymetryczna granica daszkowa

(na podstawie: W.T. Read jr., *Dislocations in Crystals*, Mc Graw-Hill, 1953).

- granica skręcona

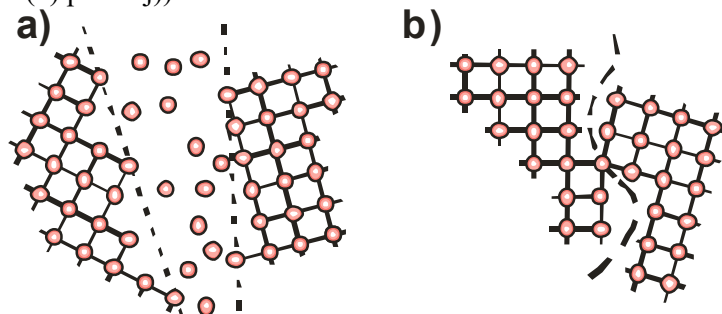
Granice taką można je przedstawić jako układ dyslokacji śrubowych:



Rys. 20. Granica skręcona
(wg. W.T. Read, *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill Book Co., 1953)

- Granice wysoko-kątowe

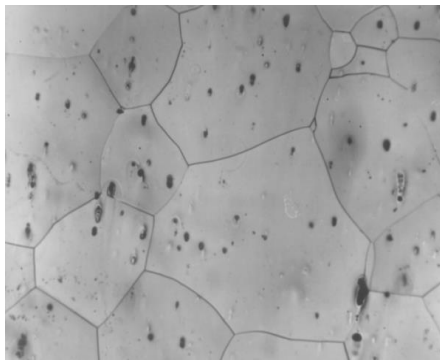
Granice wysoko-kątowe mają na ogół niższy stopień uporządkowania niż granice rozpatrywane powyżej. Często można je przedstawić jako chaotyczną warstwę przejściową (rysunek (a) poniżej). Czasem jednak wykazują one wyższe uporządkowanie typu obszaru przejściowego o wymiarach atomowych (rysunek (b) poniżej)).



Rys. 21. Modele granicy wysokokątowej: a) model Bilby'ego - warstwa przejściowa, b) model Friedla - obszar przejściowy o wymiarach atomowych
(na podstawie: W. Kleber, K. Meyer, W. Schoenborn, *Einführung in die Kristallphysik*, Akademie Verlag, Berlin, 1968).

Oglądając dwu-wymiarowy przekrój materiału po rekrytalizacji, przekonujemy się, że struktura topologiczna granic ziaren nie jest zbyt odległa od układu sześciokątów. Istnieją trzy argumenty przemawiające na korzyść takiego układu:

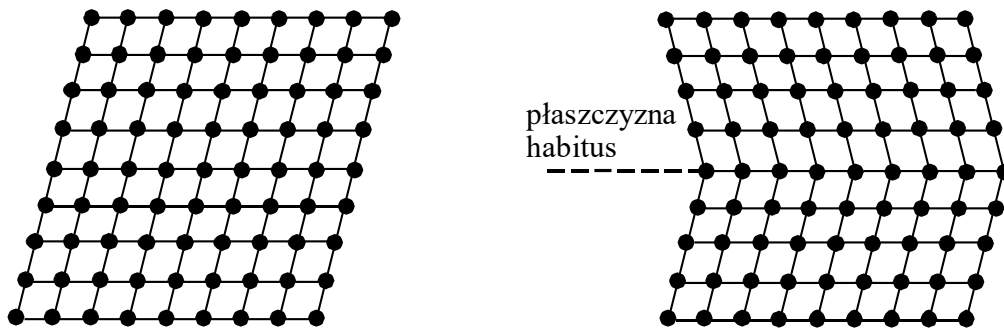
- z sześciokątów można utworzyć zwartą zabudowę płaszczyzny (spośród wielokątów regularnych, własność tą mają jeszcze trójkąty i kwadraty),
- siły napięcia granic w punktach połączeń granic idealnie się równoważą (gdyż spotykają się tam trzy granice tworzące między sobą 120°),
- sześciokąt posiada lepszy stosunek obwodu do powierzchni niż trójkąt czy kwadrat (granice to obszar o podwyższonej energii, więc istnieje tendencja do minimalizacji rozmiarów granic).



Rys. 22. Struktura granic ziaren w materiale wyżarzonym (po rekrytalizacji)

Granice bliźniaków

Bliźniaki powstają zarówno w trakcie deformacji materiału wskutek wystąpienia naprężeń ścinających (bliźniaki deformacji) jak i podczas rekrytalizacji (bliźniaki rekrytalizacji). Geometrię bliźniakowania można przedstawić jako przemieszczenia ścinające kolejnych warstw atomowych względem siebie, co prowadzi do odkształcenia ścinającego o stosunkowo dużej wartości γ . W bliźniakowaniu utworzona zostaje druga część kryształu o tej samej strukturze, ale o innej orientacji sieci krystalograficznej. Granica pomiędzy kryształem wyjściowym a bliźniakiem – zwana płaszczyzną *habitus* – jest koherentna (tzn. pasuje bez żadnych zniekształceń do obu części kryształu – patrz rysunek poniżej). Orientacja sieci krystalograficznej bliźniaka jest lustrzanym odbiciem sieci kryształu macierzystego względem płaszczyzny *habitus* (stąd nazwa procesu). Bliźniakowanie jest ważnym, drugim obok poślizgu, mechanizmem deformacji plastycznej. Ma ono duże znaczenie szczególnie w tych metalach, w których jest mało systemów poślizgu.

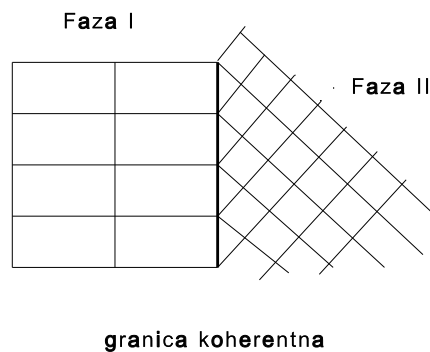


Rys. 23. Powstanie bliźniaka przez ścinające przemieszczenia warstw atomów: kryształ macierzysty (po lewej), oraz kryształ macierzysty wraz z bliźniakiem – rozdziela je płaszczyzna habitus (po prawej).

Granice międzyfazowe

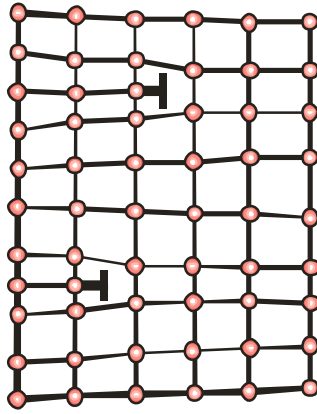
W niektórych przemianach fazowych powstaje dobrze zdefiniowana płaszczyzna graniczna między dwiema fazami o innej strukturze krystalograficznej (również w tym przypadku nazywa się płaszczyzną habitus). Tak jest na przykład w przemianie martenzytycznej, w której martenzyt powstaje przez ścinanie warstw atomowych fazy austenitycznej, a granica między tymi fazami (płaszczyzna habitus) jest granicą koherentną.

Poniżej pokazano schemat granicy koherentnej pomiędzy dwoma różnymi fazami krystalicznymi.



Rys. 24. Koherentna granica międzyfazowa

Granica międzyfazowa może też mieć charakter pół-koherentny, zawierając dyslokacje krawędziowe:



Rys. 25. Przykład pół-koherentnej granicy międzyfazowej (wg. Chalmersa)

Powierzchnie zewnętrzne kryształów

Powierzchnie zewnętrzne kryształu stanowią naturalny rodzaj defektów spowodowanych nagłym zanikiem periodycznie zorganizowanej struktury ułożenia atomów (przy wyjściu na zewnątrz kryształu). Zmiana wielu własności fizycznych przy dojściu do powierzchni kryształu może być bardzo radykalna. Zagadnieniami tymi zajmuje się m.in. fizyka powierzchni.

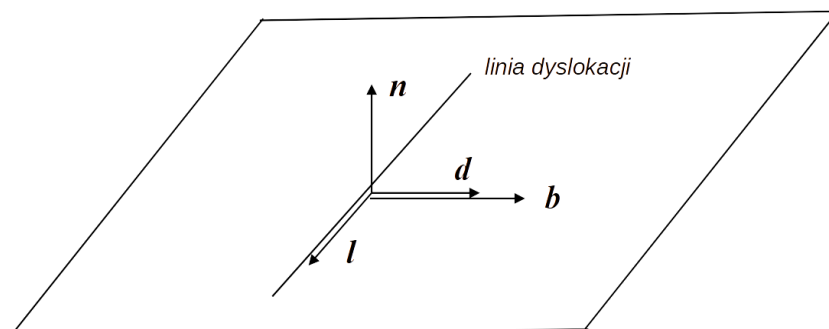
Dodatek 1 – wyprowadzenie wzoru Peach-Koehler’a

Założmy, że w materiale istnieje stan naprężeń σ_{ij} . Siła, jaka wywierana jest na płaszczyznę reprezentowaną jednostkowym wektorem \mathbf{n} wynosi:

$$F_i = \sigma_{ij} n_j$$

lub krócej:

$$\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$$



Zauważmy, że:

$$\mathbf{n} = \mathbf{l} \times \mathbf{d}$$

gdzie: \mathbf{l} jest jednostkowym wektorem linii dyslokacji, natomiast \mathbf{d} jest jednostkowym wektorem w kierunku ruchu dyslokacji (równoległym do wektora Burgersa \mathbf{b}) – patrz rysunek.

Przy elementarnym przemieszczeniu się dyslokacji o wektor Burgersa \mathbf{b} , wykonana praca wynosi:

$$W = \mathbf{F} \cdot \mathbf{b}$$

Czyli:

$$W = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{b}$$

Tensor $\boldsymbol{\sigma}$ jest *symetryczny* i w takim przypadku powyższe równanie można zapisać równoważnie:

$$W = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n}$$

Podstawiając wyrażenie na \mathbf{n} otrzymujemy::

$$W = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{l} \times \mathbf{d})$$

Korzystając z własności iloczynu mieszanego: $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}$, równanie powyższe możemy przepisać w postaci:

$$W = [(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{l}] \cdot \mathbf{d}$$

Zauważmy, że powyższe równanie możemy również zinterpretować jako pracę przy przemieszczeniu jednostkowej linii dyslokacji o jednostkowy wektor \mathbf{d} :

$$W = \mathbf{F}' \cdot \mathbf{d}$$

gdzie \mathbf{F}' jest siłą działającą na dyslokację:

$$\mathbf{F}' = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{l}$$

Jest to relacja Peach-Koehler'a na siłę działającą na jednostkową linię dyslokacji, gdy w materiale obecne są naprężenia σ_{ij} .