

10. Plastické vlastnosti kryštálov

Plastické deformácie obvykle nemenia objem, ale tvar telesa. Preto ich vysvetlenie treba hľadať v štúdiu šmykových deformácií. Je experimentálnym faktom, že pri prekročení kritického šmykového napätia σ_c dochádza k plastickému (nevratnému) posunu atómových rovín. Hovoríme o vzájomnom sklze atómových rovín. Geometria sklzu (tzv. sklzový systém) je daná jednak rovinou sklzu a jednak smerom sklzu, t.j. vektorom posunutia rovín navzájom. Smer sklzu leží v rovine sklzu. Hodnota σ_c závisí od sklzového systému. Najnižšie hodnoty σ_c sa realizujú v tých sklzových rovinách, v ktorých sú atómy husto usporiadané. V tejto prednáške ukážeme, že v reálnych kryštáloch je σ_c určené prítomnosťou čiarových porúch v kryštáloch - dislokácií.

Odhad σ_c v dokonalom kryštáli

Skúmame σ_c v tetragonálnom kryštáli s mriežkovou konštantou a v tesne usporiadanej štvorcovej mriežke v rovine x, y a so vzdialenosťou atómových rovín d v smere osi z . Skúmame šmykovú deformáciu, pri ktorej sa dve susedné roviny posunú o u v smere jednej z osí štvorcovej podstavy (povedzme v smere x). Pre malé posunutia $u/a \ll 1$ potom máme $u_{xz} = u/(2d)$ a z Hookovho zákona $\sigma_{xz} = 2\mu u_{xz} = \mu u/d$. Pri zväčšovaní u sa bude rast σ spomaľovať a pri $u = a/2$ bude dokonca šmykové napätie zo symetrie nulové.¹ Argument o nulovosti σ možno uplatniť pre všetky hodnoty $u = 0, \pm a/2, \pm a, \dots$. Nasledovná formula pre σ ako funkciu u reprodukuje známe nulové body a navyše pre malé hodnoty u je zhodná s odhadom pomocou Hookovho zákona:

$$\sigma = \frac{\mu a}{2\pi d} \sin \frac{2\pi u}{a}, \quad \sigma_c = \frac{\mu a}{2\pi d}$$

Podľa tejto formuly pri prekročení hodnoty σ_c sa materiál začne plasticky deformovať. Teda v dokonalom kryštáli by sme mali očakávať $\sigma_c \sim \mu/10$. Experimentálne hodnoty sú však rádovo menšie. Ukazuje sa, že plastické vlastnosti kryštálov sú určené prítomnosťou defektov v kryštáli.



Pojem dislokácie

Volterrova konštrukcia Predstavme si v kryštáli uzavretú čiaru D . Na čiare D si predstavme natiahnutú plochu S . Pozdĺž plochy S kryštál rozrežeme a materiál na oboch stranách rezu posuneme o vektor $\mathbf{b}$, ktorý je vektorom Bravaisovej mriežky. Ak je to potrebné, okrem posunutia odstránime alebo naopak pridáme potrebné množstvo materiálu. Nakoniec kryštál pozdĺž plochy S zlepm. Atómom kryštálu, ktoré boli doteraz fixované, nakoniec dovoľme relaxovať k energeticky najvýhodnejšej konfigurácii. Vznikne deformovaný kryštál, pričom pole deformácií je najväčšie okolo čiar D . Takto deformovaný kryštál nazveme kryštálom obsahujúcim dislokačnú čiaru D . Vektor $\mathbf{b}$ nazveme Burgersovým vektorom dislokácie D .

Poznámka 1. Plocha S hrala len pomocnú úlohu. Konečná konfigurácia kryštálu nezávisí od voľby S .

Poznámka 2. Čiara D nemôže končiť vnútri kryštálu, ale môže mať obidva konce (označme ich A, B) na povrchu kryštálu. V takom prípade však čiaru D možno doplniť čiarou D' po povrchu kryštálu, spájajúc body A a B . Tento prípad teda možno chápať ako špeciálny prípad uzavretej dislokačnej čiar.

Poznámka 3. Burgersov vektor musí byť niektorým z vektorov Bravaisovej mriežky, ináč by kryštál nebolo možné po posunutí "zlepiť".² Keďže existuje len diskretný počet dovolených Burgersových vektorov,

¹Odteraz namiesto σ_{xz} budeme písať jednoducho σ .

²Presnejšie povedané, ináč by energia kryštálu po zlepení musela byť úmerná ploche S .

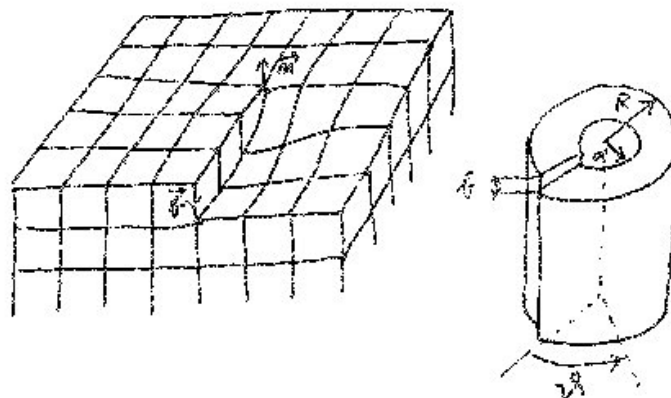
dislokácie sú stabilnými excitáciami kryštálu: nemôžu totiž ubúdať po troške, ale iba skokom.

Poznámka 4. Znamienko Burgersovho vektora. Definujme najprv jednotkový vektor $\mathbf{n}$ v smere dislokačnej čiary.³ Definujme ďalej orientovanú čiaru C obopínajúcu dislokačnú čiaru. Orientácia obehu po C nech je daná pomocou vektora $\mathbf{n}$ pravidlom pravej ruky.⁴ Keďže C je uzavretá čiara, platí $\oint_C d\mathbf{r} = 0$. Nech bod $\mathbf{r}$ z čiary C je v prítomnosti dislokácie posunutý do bodu $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$. V teórii kontinua potom máme

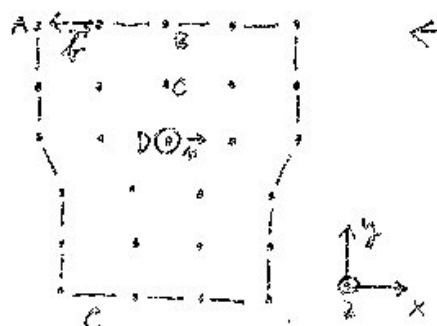
$$\oint_C d\mathbf{r}' = \oint_C d\mathbf{u} = -\mathbf{b},$$

t.j. nedeformovaná uzavretá dráha C sa v prítomnosti dislokácie transformuje na ovorenú dráhu, ktorú možno uzavrieť pripočítaním vektora $\mathbf{b}$ k jej koncovému bodu. Vektor $\mathbf{b}$ nazývame Burgersovým vektorom.

Skrutková dislokácia Ak Burgersov vektor je rovnobežný s dislokačnou čiarou, $\mathbf{b} \parallel \mathbf{n}$, potom dislokáciu nazývame skrutkovou. Skrutkovú dislokáciu si najjednoduchšie možno predstaviť nasledovne: uvažujme kryštál v tvare valca. Nech existuje vektor recipročnej mriežky rovnobežný s osou valca. Rozrežeme kryštál pozdĺž rovinnej plochy obsahujúcej os valca, pričom koniec zárezu je totožný s osou valca. Plochy pozdĺž rezu posuňme jednu voči druhej o $\mathbf{b}$ pozdĺž osi valca. Vznikne špirálovito deformovaný kryštál obsahujúci skrutkovú dislokáciu na osi valca.



Hranová dislokácia Ak je Burgersov vektor kolmý na dislokačnú čiaru, $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}$, potom dislokáciu nazývame hranovou. Ak si hranovú dislokáciu na obrázku predstavíme ako výsledok Volterrovej konštrukcie, potom po posunutí kryštálu o $\mathbf{b}$ musíme do kryštálu vložiť jednu dodatočnú mriežkovú polrovinu.



Poznámka 5. Alternatívna definícia Burgersovho vektora. Uvažujme dráhu C obopínajúcu orientovanú dislokáciu.⁵ Nech dráha spája mriežkové body a nech pozostáva z takého počtu krokov, ktorý v dokonalom kryštáli zodpovedá uzavretej dráhe. V prípade na obrázku dráha začína v bode A a obsahuje 5 krokov

³Vektor $\mathbf{n}$ je jednoznačne daný geometriou dislokácie (až na znamienko).

⁴T.j. pri pohľade zo špičky vektora $\mathbf{n}$ obiehame dráhu C proti smeru hodinových ručičiek.

⁵Dráha by mala ležať dostatočne ďaleko od dislokačnej čiary.

nadol, 3 kroky doprava, 5 krokov nahor a 3 kroky doľava. Burgersovým vektorom nazývame vektor, ktorým treba dráhu doplniť, aby vznikla uzavretá dráha.

Poznámka 6. Všeobecná dislokácia D má zmiešaný hranovo-skrutkový charakter.

Energia skrutkovej dislokácie

Uvažujme o skrutkovej dislokácii pozdĺž osi valcovej vzorky s polomerom R . Nech Burgersov vektor dislokácie je $\mathbf{b} = (0, 0, -b)$. Potom pole deformácií vo vzorke možno písať

$$\mathbf{u}(x, y) = \left(0, 0, \frac{\theta b}{2\pi}\right), \quad \text{kde} \quad \theta = \arctan \frac{y}{x}$$

Pre tenzor deformácie teda dostávame $u_{xx} = u_{yy} = u_{zz} = u_{xy} = u_{yx} = 0$ a jediné nenulové zložky sú

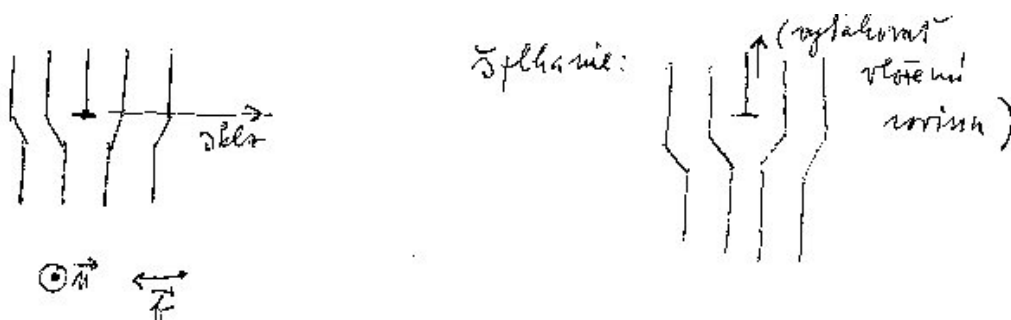
$$u_{yz} = u_{zy} = \frac{b}{4\pi} \frac{x}{r^2}, \quad u_{xz} = u_{zx} = -\frac{b}{4\pi} \frac{y}{r^2}$$

Ak predpokladáme, že elasticke vlastnosti telesa sú dané teóriou pre izotrópne médiá,⁶ potom energia deformácie valca s dĺžkou L je

$$E = \int dV \mu u_{ij} u_{ij} = 2\mu \int dV (u_{yz}^2 + u_{xz}^2) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2} \int dV \frac{1}{r^2} = \frac{\mu b^2 L}{4\pi} \int_a^R \frac{dr}{r} = \frac{\mu b^2 L}{4\pi} \ln \frac{R}{R_0}$$

Všimnime si, že pri integrovaní cez súradnicu r nemôžeme dolnú hranicu položiť rovnú nule a hornú hranicu nekonečnu. V oboch prípadoch by sme dostali divergentný integrál. Dolnú hranicu sme preto nahradili rozmerom jadra dislokácie R_0 , ktorý je porovnateľný s mriežkovou konštantou. Blízko k jadrú dislokácie je totiž tenzor deformácie veľký a, striktne vzaté, v tejto oblasti nemožno použiť poznatky teórie kontinua. Kontrolovaný výpočet v tejto oblasti vyžaduje atomárny prístup. Výsledky takéhoto prístupu však možno zahrnúť vhodnou voľbou veľkosti jadra R_0 v našej formule.

Neobmedzený rast energie s polomerom valca R je síce reálny jav, ale logaritmus je veľmi pomaly rastúca funkcia, napríklad $\ln 10^{10} \approx 23$. Preto energia na jednotku dĺžky dislokácie je $\epsilon = \alpha \mu b^2$, kde α je číslo rádu 1. Pri predĺžení dislokácie o dL narastie jej energia o $dE = \epsilon dL$ = sila $\times$ dráha. Preto dislokáciu možno chápať ako pružnú strunu napínanú silou ϵ .



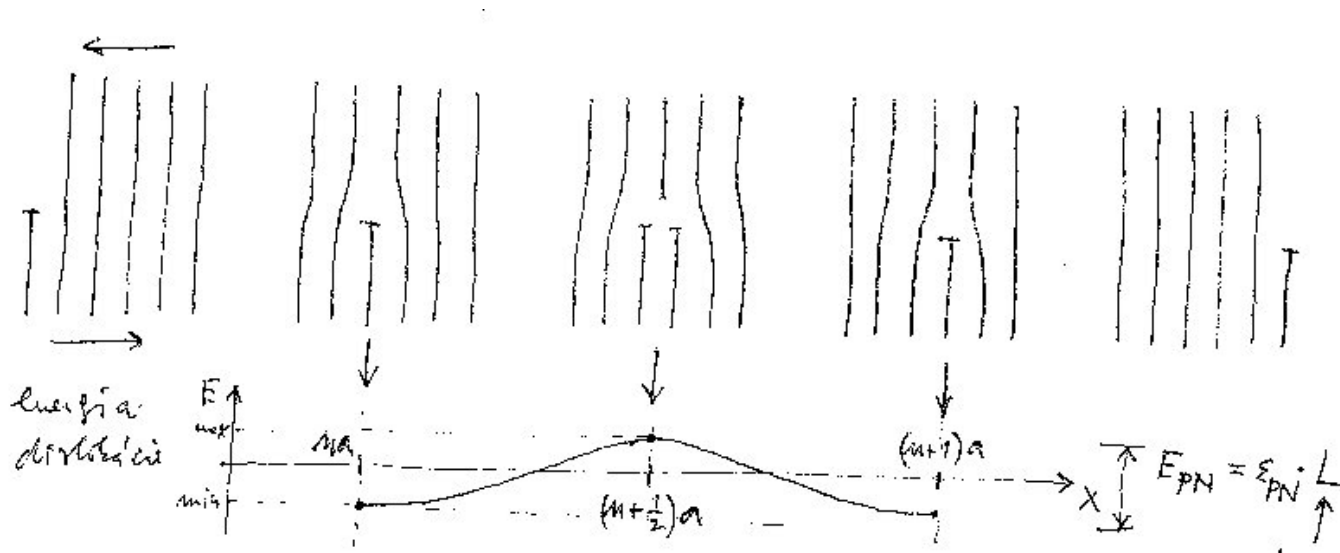
Pohyb dislokácií

Z Volterrovej konštrukcie vidno, že element dislokácie $d\mathbf{x}$ sa môže kĺzať v rovine definovanej vektormi $d\mathbf{x}$ a $\mathbf{b}$. Pohyb v smere kolmom na túto rovinu (tzv. šplhanie dislokácií) totiž vyžaduje pridávanie alebo uberanie materiálu z oblasti dislokácie. Takýto transport hmoty je možný len pomocou difúzie atómov a preto je šplhanie dislokácií pri nízkych teplotách málo pravdepodobné.

Ukážeme teraz, že plastická deformácia sa môže realizovať pohybom dislokácií. Naozaj, zmena tvaru sa napríklad môže realizovať vznikom a zánikom stupienkov na povrchu kryštálu, ktoré možno spôsobiť pohybom atómovej polroviny, t.j. pohybom hranovej dislokácie, viď obrázok.

Pri pohybe dislokácie v sklzovej rovine je jej energia modulovaná. Ak označíme veľkosť modulácie energie dislokácie jednotkovej dĺžky ako ϵ_{PN} (Peierlsova-Nabarrova energia), potom, keďže energia dislokácie je modulovaná s periódou a , na posunutie dislokácie je potrebné pôsobiť na jednotku dĺžky dislokácie

⁶Izotrópne médium nemože byť tvorené monokryštálom. Správny popis by teda mal využívať výsledky teórie kontinua pre kryštály.



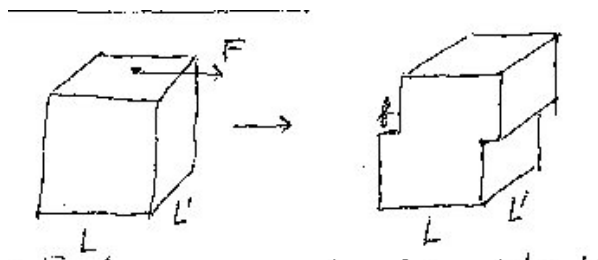
silou $f \sim \varepsilon_{PN}/a$.

Silové pôsobenie napätového poľa na dislokáciu

Uvažujme o kryštáli v tvare hranola s podstavou $L_x \times L_y$. Kryštál nech je vystavený pôsobeniu šmykového napätia $\sigma_{xz} = \sigma$, následkom ktorého je horná časť kryštálu posunutá oproti dolnej časti v sklzovej rovine rovnobežnej s podstavou kryštálu. Nech sklz prebieha v smere osi x a jeho veľkosť je b . Práca, ktorú vykoná napätové pole potom je $\delta E = Fb = \sigma L_x L_y b$, pretože pôsobiaca sila je $F = \sigma L_x L_y$. Na druhej strane, deformáciu si možno predstaviť ako premiestnenie dislokácie dĺžky L_y o L_x v smere osi x . Ak silu na jednotku dĺžky dislokácie označíme f , potom musí byť $\delta E = (f L_y) L_x$. Porovnaním oboch výrazov pre prácu dostávame

$$f = \sigma b,$$

teda sila na jednotku dĺžky dislokácie je daná súčinom aplikovaného napätia a Burgersovho vektora.



Teraz odvodíme všeobecnú formulu pre vektor sily pôsobiacej na jednotku dĺžky dislokácie. Budeme vychádzať z Volterrovej konštrukcie. Nech teda D je uzavretá dislokačná čiara, S nech je na ňu natiahnutá plocha a $\mathbf{b}$ je Burgersov vektor dislokácie. Energia dislokačnej čiary v danom vonkajšom napätovom poli σ_{kj} potom je $E = -b_k \int_S dS_j \sigma_{kj}$. Skúmame teraz, o koľko sa zmení energia dislokačnej slučky, ak jej element $d\mathbf{x}$ posunieme o $\delta \mathbf{R}$. Pri takomto posunutí k ploche S pribudne nový plošný element $\delta \mathbf{S} = \delta \mathbf{R} \times d\mathbf{x}$, alebo $\delta S_j = \epsilon_{jlm} \delta R_l dx_m$. Preto prírastok energie dislokačnej slučky je

$$\delta E = -b_k \sigma_{kj} \delta S_j = -\epsilon_{mj l} dx_m \sigma_{kj} b_k \delta R_l = -dF_l \delta R_l,$$

kde v poslednej rovnici sme δE interpretovali ako súčin sily dF_l pôsobiacej na element dx a dráhy $\delta \mathbf{R}$ jeho premiestnenia. Ak napíšeme element dislokačnej čiary $d\mathbf{x} = \mathbf{n} dx$ kde $\mathbf{n}$ je jednotkový vektor v smere $d\mathbf{x}$, potom nakoniec dostávame tzv. Kohlerovu-Peachovu formulu pre vektor sily na jednotku dĺžky dislokácie,

$$f_l = \frac{dF_l}{dx} = \epsilon_{lmj} n_m \sigma_{jk} b_k, \quad \mathbf{f} = \mathbf{n} \times (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \quad (1)$$

kde v druhej forme sme definovali pôsobenie tenzora na vektor nasledovne: $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{b})_j = \sigma_{jk} b_k$. Teda sila pôsobiaca na dislokáciu je kolmá na dislokačnú čiaru. Vektor $\mathbf{n}$ je určený až na znamienko. Pri zmene

znamienka $\mathbf{n}$ však znamienko zmení aj $\mathbf{b}$, a teda sila $\mathbf{f}$ nezávisí od konvencií použitých pri popise dislokácie, ako samozrejme aj má byť.

Kritické napätie za prítomnosti dislokácie

Teraz sme pripravení ukázať, že prítomnosť dislokácií znižuje kritické napätie σ_c . Naozaj, rovnica $f \sim \varepsilon_{PN}/a$ definuje minimálnu hustotu sily potrebnú na posun dislokácie a rovnica (1) ukazuje, akou silou pôsobí dané napäťové pole na dislokáciu. Porovnaním oboch rovníc dostaneme odhad kritického sklzového napätia za prítomnosti dislokácie,

$$\sigma_c \sim \frac{\varepsilon_{PN}}{ab} \ll \frac{\mu a}{2\pi d}.$$

Posledná silná nerovnosť, ktorá porovnáva σ_c s kritickým sklzovým napätím dokonalého kryštálu, je dôsledkom malej hodnoty Peierlsovej-Nabarrovej hustoty energie ε_{PN} .

Poznámka 1. Hodnota ε_{PN} závisí od typu väzby v kryštáli. V kovoch je energia dominantne určovaná hustotou atómov. Keďže táto nie je výrazne modulovaná pri pohybe dislokácie cez kryštál, je v kovoch ε_{PN} malé a kovy sú kujné, t.j. plasticky deformovateľné. V kovalentne viazaných materiáloch treba očakávať veľké hodnoty ε_{PN} , lebo pri pohybe dislokácie cez kryštál sa významne menia koordinačné čísla atómov. Dislokácie sú preto takmer nepohyblivé, aplikácia veľkých napätí sa neuvoľňuje sklzom, ale lomom.⁷ Preto kovalentne viazané kryštály sú obvykle krehké.

Poznámka 2. Kritické sklzové napätie možno zvýšiť blokovaním pohybu dislokácií. Dislokácie možno v kryštáloch ukotviť napr. zavedením prímiesí. Hovoríme pritom o spevňovaní materiálov. Tejto téme, diskutovanej predovšetkým v inžinierskej literatúre, sa nebudeme venovať.

⁷Mechanizmus lomu nebudeme v týchto prednáškach analyzovať.