



HELSINGIN YLIOPISTO
HELSINGFORS UNIVERSITET
UNIVERSITY OF HELSINKI

530117 MATERIALFYSIK VT 2016

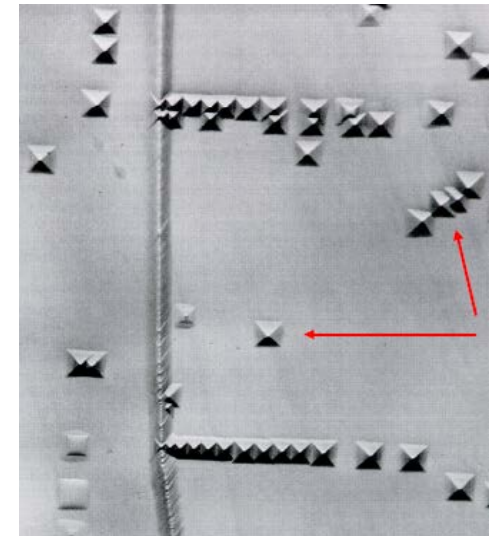
8. Dislokationer

[Callister; Kittel; egen forskning]



8.1. Dislokationers struktur

- De plastiska egenskaperna hos metaller (sgs. alltid) och keramer (oftast) hänger nära ihop med **dislokationer**
- Dislokationer är linjära defekter i material som har den speciella egenskapen att de kan röra sig relativt lätt i kristallen
 - Därmed kan ett stort antal dislokationer tillsammans åstadkomma plastisk deformation av en kristall
- Dislokationer kan göras synliga t.ex. genom att **etsa** (fräta med lämplig kemikalie) en yta.
- Med lämpliga etsnings sätt blir dislokationer då synliga **som etsningsgropar** på ytan





Dislokationernas historia

- Dislokationernas uppfinningshistoria är intressant. På 1930-talet observerades det att kristallers experimentellt uppmätta styrkor var mycket lägre än vad en modell baserad på perfekta kristallstrukturer förutspådde.
- Detta var för ett stort problem i materialfysiken, ända tills tre forskare år 1934 (Orowan, Polanyi och Taylor) oberoende av varann uppfann dislokationen för att beskriva det underliga beteendet.
- Det dröjde dock ända till 1950-talet tills dislokationer observerades experimentellt: då hade transmissions-elektronmikroskop blivit tillräckligt bra att man kunde observera dislokationer direkt
 - Numera kan man tom. observera dislokationers rörelse i kristaller

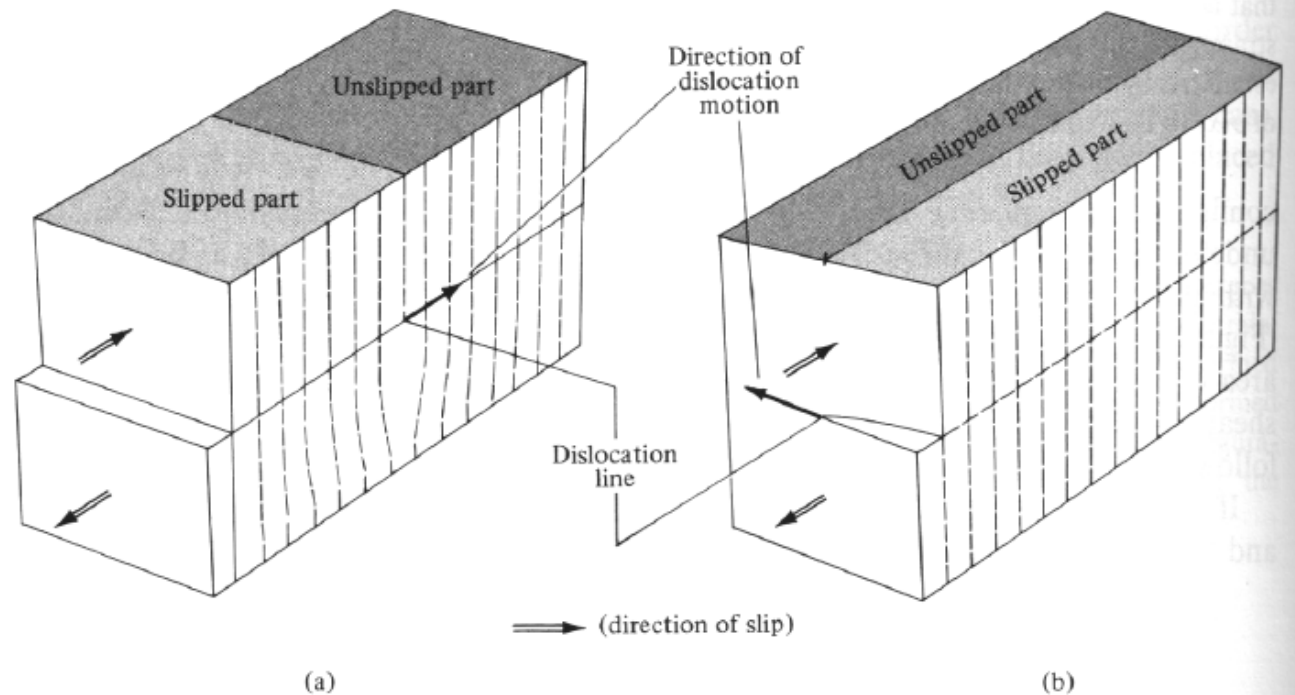


ppt/allanims/source44_mvt_visqueux.mpg



Dislokationers grundstruktur

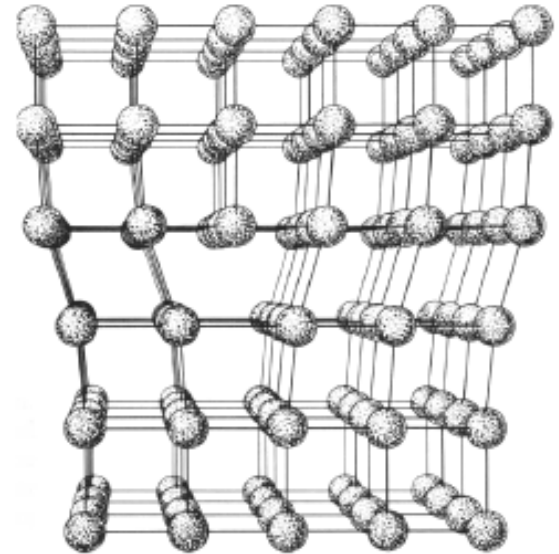
- Namnet dislokation kommer från att uppkomsten av en dislokation kan förstås så att man tar ett block av ett material, och förskjuter, "dislokerar" en del av det i någon riktning
 - Resultatet av detta på kristallplan illustreras schematiskt här:





Kantdislokationen

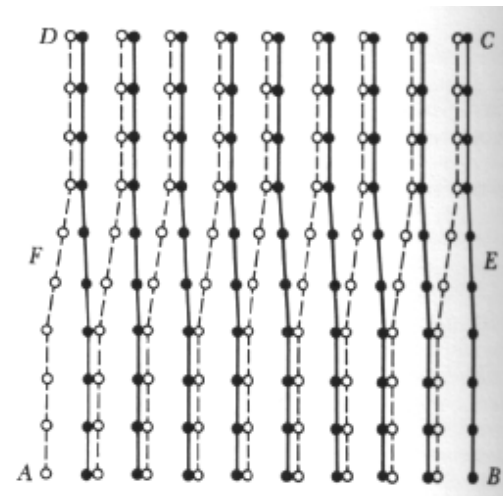
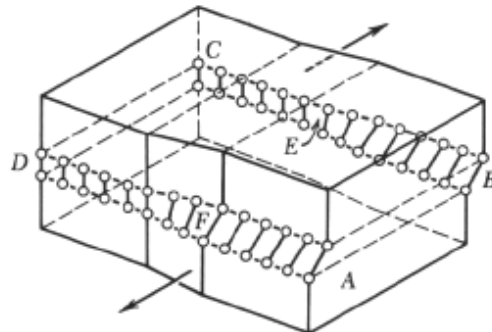
- Det första fallet (a) ser på atomnivå ut på följande sätt (för en enkel kubisk kristall)
- Detta är alltså ett extra plan av atomer som slutar mitt i kristallen
- Strukturen kallas ***kantdislokation*** eller ***eggdislokation*** ("edge dislokation")





Skruvdislokationen

- Den andra huvudtypen av **skruvdislokationen** (“screw dislocation”) kan man förstå om man tänker sig att man skulle skära med en oändligt skarp kniv genom halva kristallen, och sedan vrida en del i förhållande till den andra:
 - Namnet skruvdislokation kommer av att om man nu följer atomplanen just kring dislokationen, och går över från ett plan till ett annat en gång per varv, rör man sig längs med en spiral.



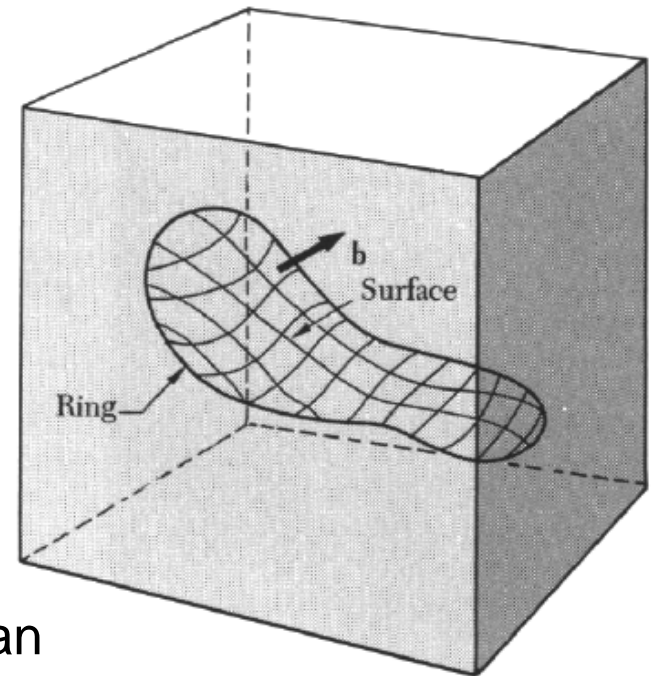


Allmänna dislokationer

- Helt allmänt behöver en dislokation ingalunda börja eller sluta vid en yta, eller vara av ren skruv- eller kant-karaktär. Som ett tanke-experiment kan man skapa en allmän dislokation på följande sätt:

- Välj en godtycklig yta i kristallen. Ta nu materialet på ena sidan kristallen, och förflytta den med en avståndsvektor \mathbf{b} . Fyll sedan i det tomrum som skapades med nya atomer, eller ifall \mathbf{b} är negativ, ta bort material som överlappar.

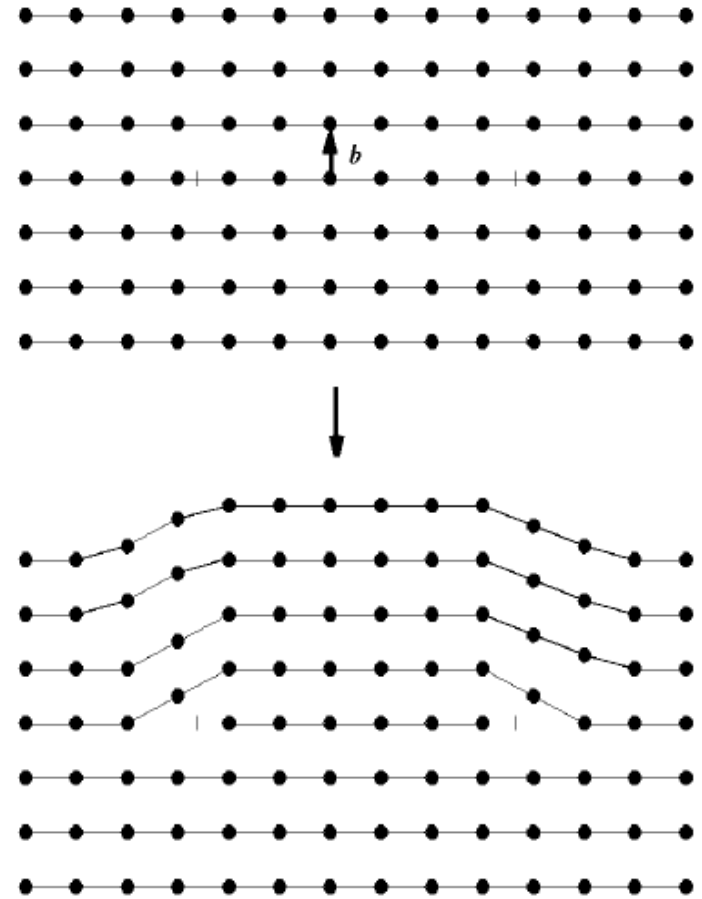
- Ifall ytan är approximativt cirkulär, kan dislokationen som bildas kallas **dislokationsloop**





Burgers vektor

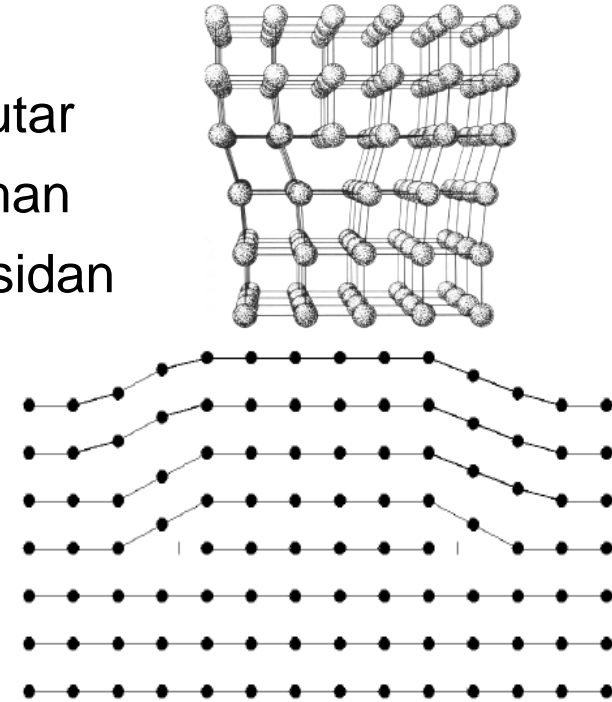
- Ett enkelt exempel på operationen i 2D illustreras här:
 - Vektorn \mathbf{b} är **Burgers vektor**.
 - Notera att kristallen långt borta från skärningsytan alltid är perfekt med undantag av en svag distortion (här i bilden verkar distortionerna alldeles för stor p.g.a det lilla antalet atomer; verkliga dislokationer är oftast flera storleksordningar större).





Kantdislokationernas karaktär

- För allmänna kantdislokationer som slutar vid en yta är det godtyckligt huruvida man anser att ett atomplan lagts till på ena sidan eller tagits bort från den andra
- Men för dislokationsloopar långt inne i kristallen kan man entydigt definiera huruvida atomer lagts till (bilden intill) eller tagits bort
- Om atomer lagts till, talar man om en ***extrinsisk dislokation*** eller ***interstitial-typs dislokation***
- Om atomer tagits bort, talar man om en ***intrinsisk dislokation*** eller ***vakans-typs dislokation***





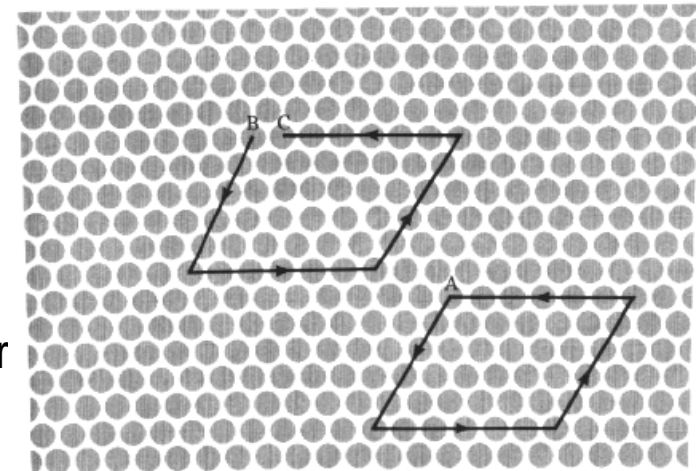
Perfekta och partiella dislokationer

- Om det tomrum som skapas fylls så att kristallstrukturen vid skärningsytan förblir perfekt (som i den senare bilden), har man skapat en **perfekt dislokation** längs med ringen som omger ytan. I annat fall talar man om **partiella dislokationer**.
- P.g.a. att det uppenbart är energetiskt mest fördelaktigt att skapa perfekt kristall, är perfekta dislokationer de vanligaste och teknologiskt viktigaste.
 - Men speciellt i bestrålade material förekommer partiella dislokationer ofta och kan ha en stor betydelse för materialets mikrostruktur.



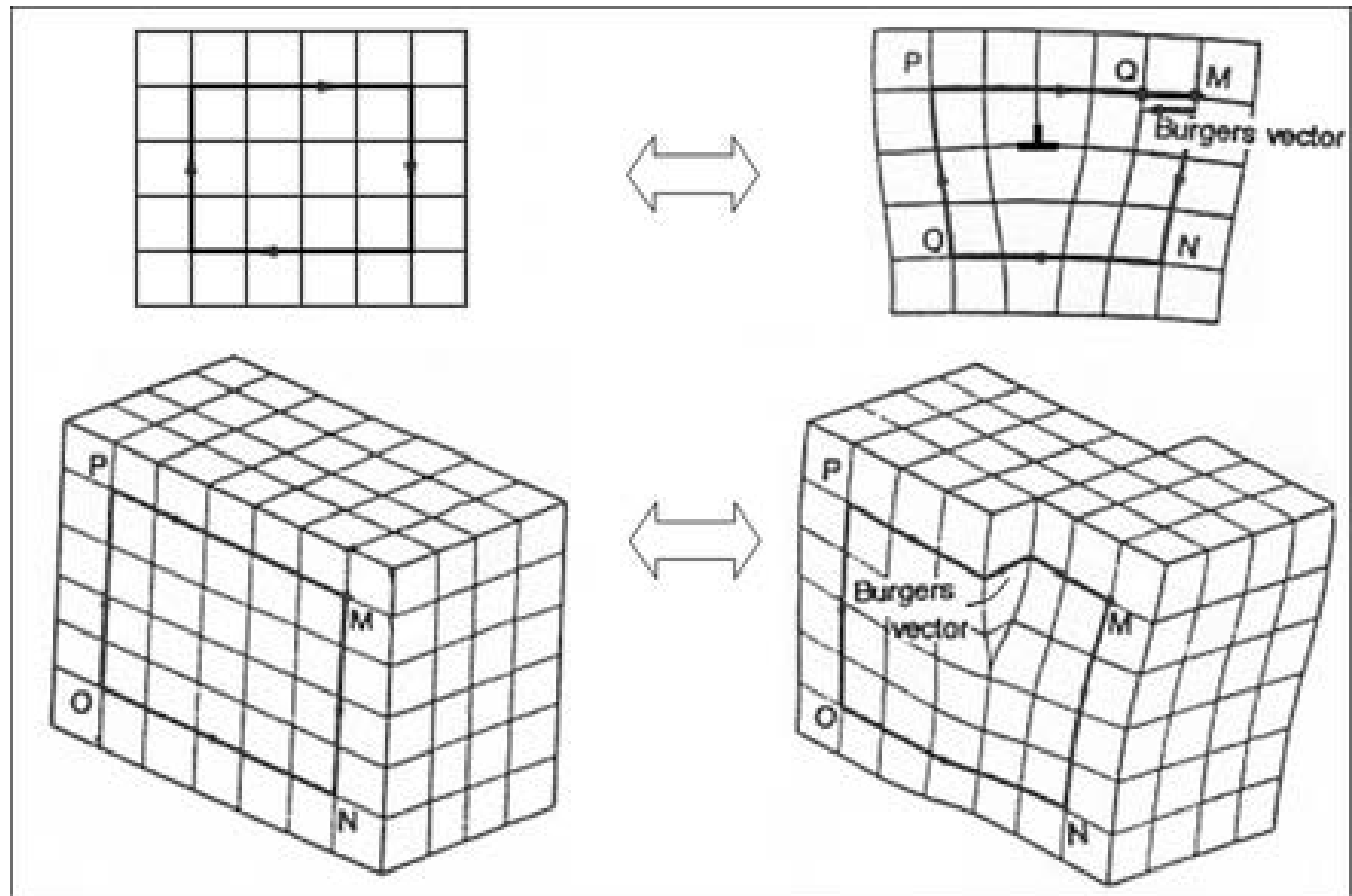
Härledandet av Burgers vektor

- För en allmän perfekt dislokation kan man lista ut Burgers vektor med följande operation.
 - Betrakta först ett perfekt område i kristallen. Rita vektorer som följer atomplan så att de bildar en stängd kurva, och lägg i minnet hur många steg från en atom till en annan du rörde dig i en viss riktning.
 - Gör sedan samma steg kring dislokationen, så långt borta från den att atom-omgivningen är praktiskt taget perfekt. Nu kommer kurvan inte längre att vara stängd. Vektorn som nu krävs för att stänga kurvan är **b** (dess tecken är godtyckligt).





Härledandet av Burgers vektor: kant vs. skruv



- För kantdislokationen är \mathbf{b} vinkelrät mot dislokationslinjen (kärnan), för skruvdislokation parallel med den.



Burgers vektors betydelse

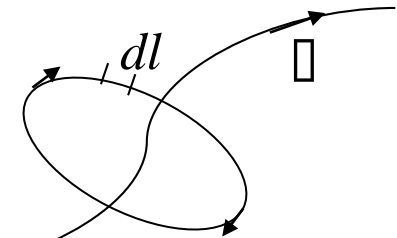
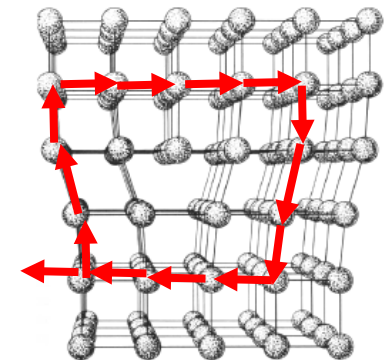
- Om Burgers vektor-konstruktionen ger $\mathbf{b} = 0$ är det inte fråga om en dislokation.
 - T.ex. en lång rad av vakanser är *inte* en dislokation, trots att det nog är en linjär defekt
- I praktiken är de flesta äkta dislokationer blandade dislokationer som har både kant- och skruvkaraktär vid olika segment. Deras storlek kan variera från några nanometer till makroskopiska längder.
 - Till höger ett exempel på några dislokationer i en Al-Mg-legering som har bildats med snabb nedkylning.





Beskrivning av en dislokation

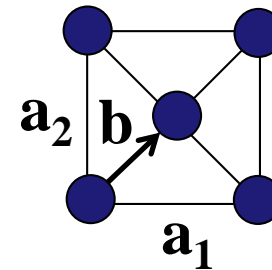
- Vi introducerar också begreppet dislokationens **riktning** ("sense"). Denna är en enhetsvektor ξ som är tangentiell (i samma riktning som) dislokationslinjen.
- Burgers vektor är en integral i ett högerhands-system (se bilden, riktningen är in mot pappret) relativt till ξ av atomförskjutningarna $u(\mathbf{r})$ runt dislokationen:
$$\mathbf{b} = \oint_C \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial l} dl$$
- Dislokationen beskrivs av linjeriktningen ξ och Burgers vektor \mathbf{b} .
- För en kant-dislokation: $\mathbf{b} \cdot \xi = 0$ (vinkelrätt)
- För högerhands-skruv-dislokation $\mathbf{b} \cdot \xi = b$ (parallel)
- För vänster-hands skruv-dislokation: $\mathbf{b} \cdot \xi = -b$





Notation för Burgers-vektorer

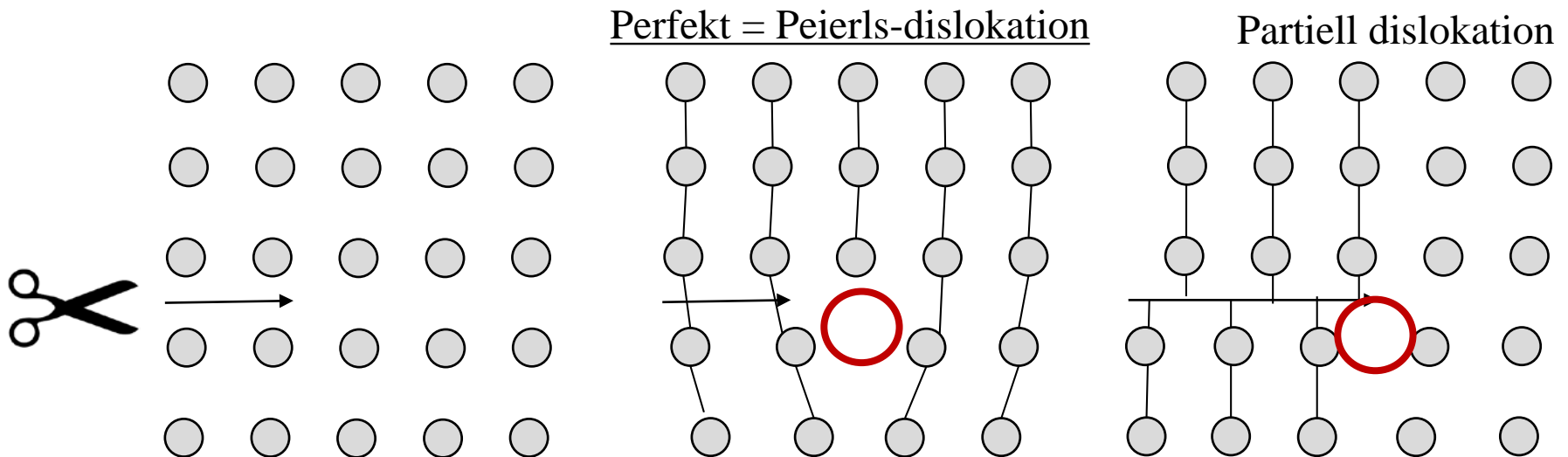
- Det är mycket naturligt att använda Miller-index $[n_1, n_2, n_3]$ för att representera Burgers-vektorer. Dessa är ju i princip vektorer $n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, där n_1 , n_2 och n_3 är Miller-indexena och \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 och \mathbf{a}_3 enhetscellens vektorer.
- Dock vill man ge dem som den äkta längden av vektorn, så $[n_1, n_2, n_3]$ är inte alltid heltal
- T.ex. för dislokationer som ligger i ett 111-plan i fcc blir
$$\mathbf{b} = \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 \text{ or } \frac{1}{2}[101]$$
- Dislokationer kan allmänt beskrivas med en notation där man först ger familjen av plan på vilka de ligger och sedan familjen av riktningar av Burgers vektorer: $\{111\}\langle 110 \rangle$
 - De olika parenteserna är alltså notation för familjer av plan och vektorer





Perfekta och partiella dislokationer

- En perfekt dislokation har en missanpassnings (“misfit”)-energi, som är lokaliserad nära kärnan, och en elastisk uttöjningsfält-energi, som sträcker sig enligt linjär elasticitetsteori till oändligheten. Dessa dislokationer kallas emellanåt också för Peierls-dislokationer.
- Partiella dislokationer har atomer i skärningsplanet som inte har perfekt gitteromgivning. Deras energi divergerar mot oändligt om de blir oändligt stora
- Därför är perfekta dislokationer mest sannolika, speciellt för stora dislokerade gitterområden





Franks energi-kriterium

- Misanpassningsenergin minimeras av dislokationerna med den kortaste Burgers-vektorn, så bara dessa är stabila.
- En dislokations energy är proportionell mot b^2 . Frank visade 1949 en regel för huruvida en dislocation med en b_1^2 kan dissocieras i två perfekta dislokationer $b_2 + b_3$, Detta sker ifall

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

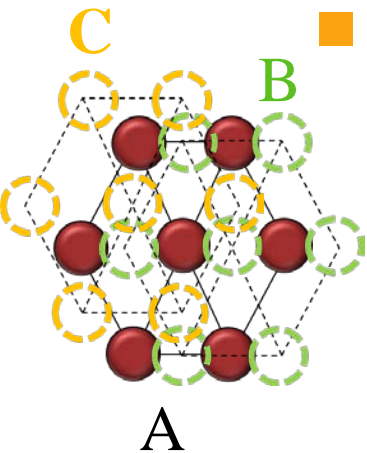
- Tabell över stabila dislokationer i några vanliga system

Kristallstruktur	Stabil b	Marginellt stability b
FCC	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
BCC	$\frac{1}{2}\langle 111 \rangle, \langle 100 \rangle$	
HCP	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle, \langle 0001 \rangle$	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3 \rangle$
Diamond cubic	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
NaCl	$\langle 110 \rangle$	$\langle 200 \rangle$



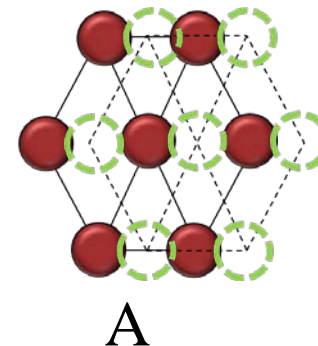
Radningsfel (stacking faults)

- En viktig typ av två-dimensionella defekter är s.k. “stacking faults”, radningsfel.
- Standardexemplet på radningsfel är de i FCC-metaller. Vi påminner oss om att en FCC-kristall kan bildas genom att placera tätt packade atomplan på varandra i ordningen



och en HCP-kristall med packning av identiska plan i ordningen

ABABAB.





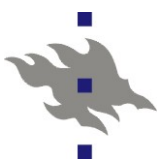
Radningsfel (stacking faults)

- Nu är omgivningen av närmaste grannatomer den samma i de båda fallena, och energi-skillnaden alltså ganska litet. Därför är det inte överraskande att man kan bilda en planär defekt lätt genom att ändra på packningsordningen i kristallen, så länge inte två likadana plan hamnar bredvid varann.

- T.ex. i FCC-gittret kan man ändra

ABCABCABC till ABCAB**A**CABC

där alltså ett extra **A**-plan läggs in. Detta extra plan kan sträcka sig enda till ytan av kristallen, men ofta har de begränsad räckvidd. I så fall kan de anses utgöra en planär defekt som ***begränsas av en partiell dislokation.***



Radningsfel (stacking faults)

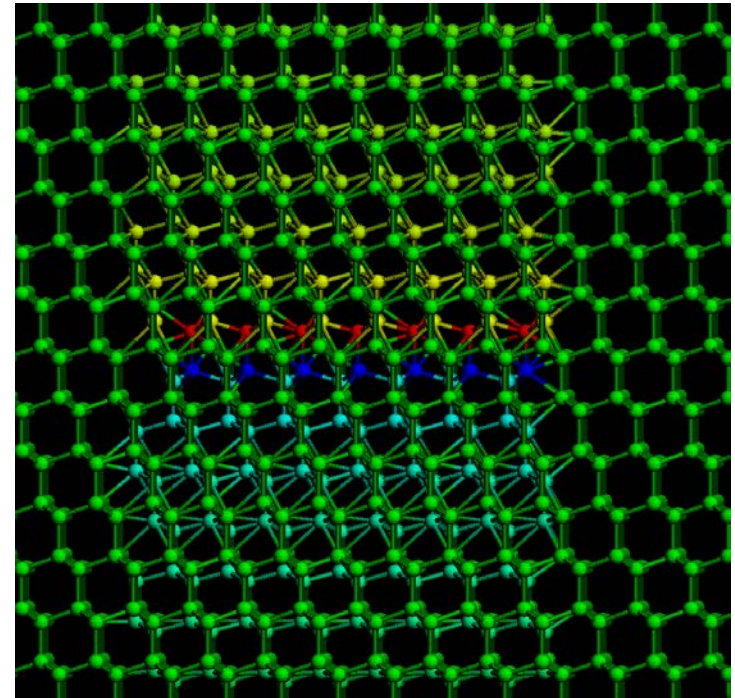
- I.o.m. att diamantstrukturen kan anses vara två interpenetrerande FCC-gitter, kan man göra samma operation i kisel, förutsatt att man skapar två extra atomplan i stället för en:

AaBbCcAaBbCcAaBbCc

till

AaBbCcAaBb**Aa**CcAaBbCc

- En sådan defekt ser ut på sättet som illustreras i bilden till höger
 - Röda och blåa atomerna är det extra Aa-planet, systemet ej relaxerat

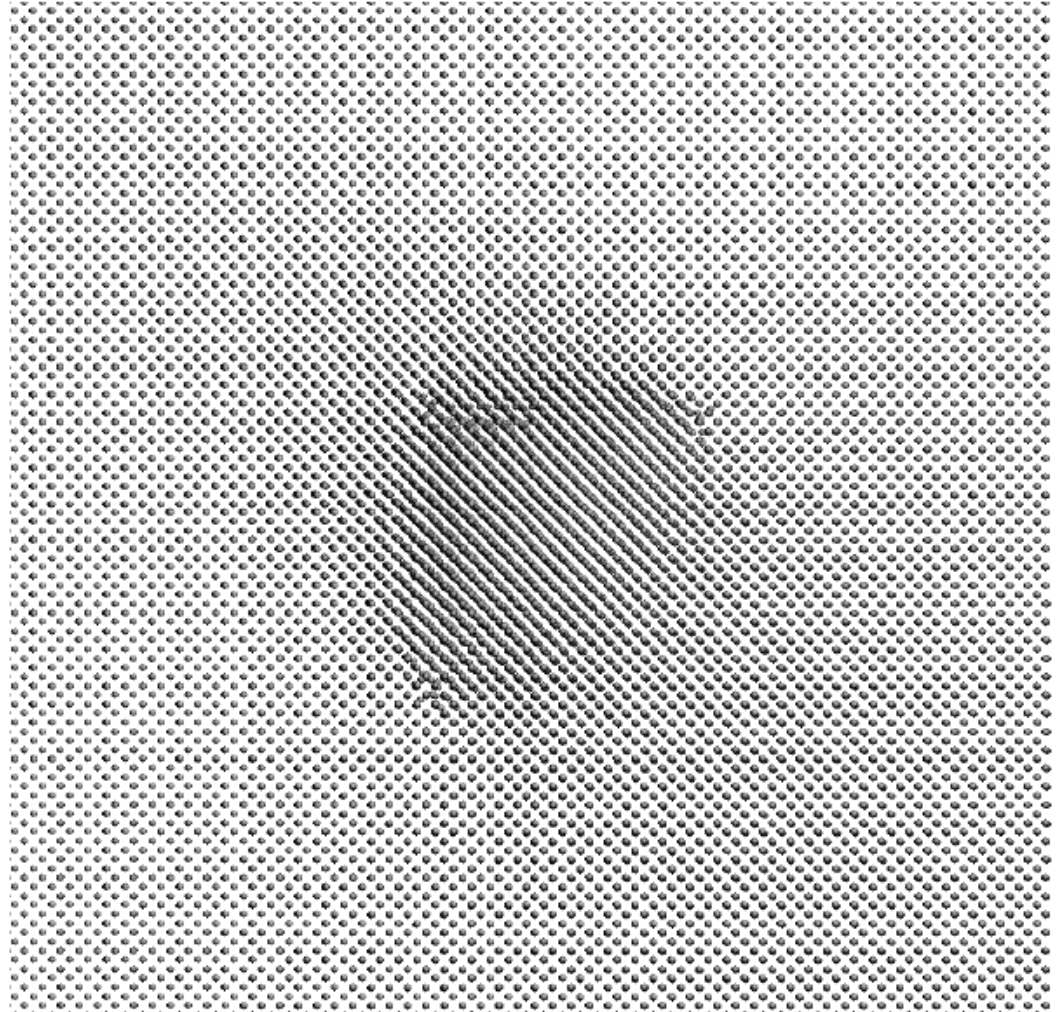


[K. Nordlund et al, Appl. Phys. Lett. 76 (2000) 846]



Radningsfel efter relaxering

- Efter relaxation kan ett radningsfel t.ex. se följande ut (denna bild är sett uppifrån):





Partiella dislokationer i FCC

- Ett radningsfel kan uppkomma i ett system spontant ifall en perfekt dislokation kan delas i två eller flera partiella
- Speciellt viktigt i detta fall är FCC-system där två typer av partiella dislokationer kan existera:

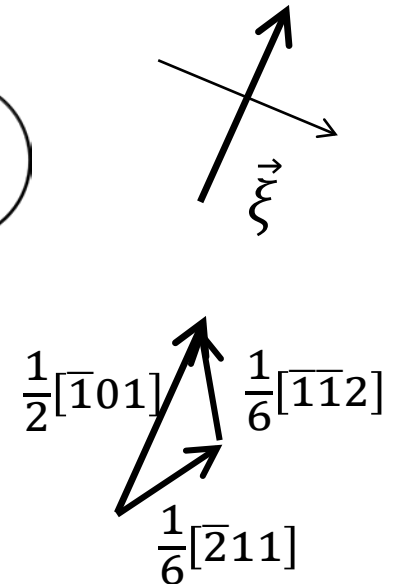
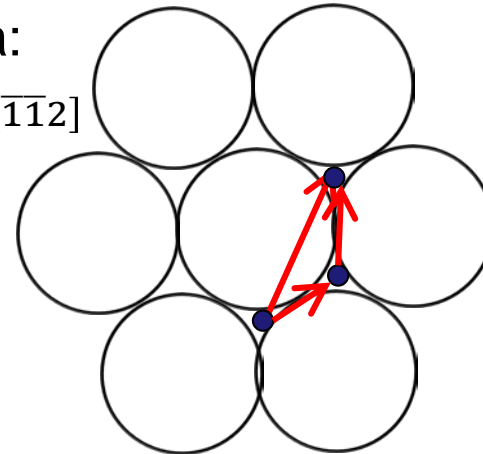
- Shockley partialer $\mathbf{b}_{Shockley} = \frac{1}{6}[\bar{1}12]$
- Frank partialer som är orörliga och omger intrinsiska radningsfel (ett plan av atomer som saknas).

$$\mathbf{b}_{Frank} = \frac{1}{3}[111]$$

- Vi testar nu Franks kriterium för $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ vs. $\frac{1}{6}[\bar{2}11]$:

$$\mathbf{b}_1^2 = \frac{1}{2} \text{ och } \mathbf{b}_2^2 + \mathbf{b}_3^2 = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} \text{ så nu gäller } \mathbf{b}_1^2 > \mathbf{b}_2^2 + \mathbf{b}_3^2$$

- Därmed är faktiskt $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ instabilt energetiskt och dissocierar till två partiella Shockley-dislokationer!





Radningsfeltetraeder

- FCC-system har också en speciellt vacker form av radningsfel som formas vid fyra olika glidplan, och bildar en perfekt tetraeder !

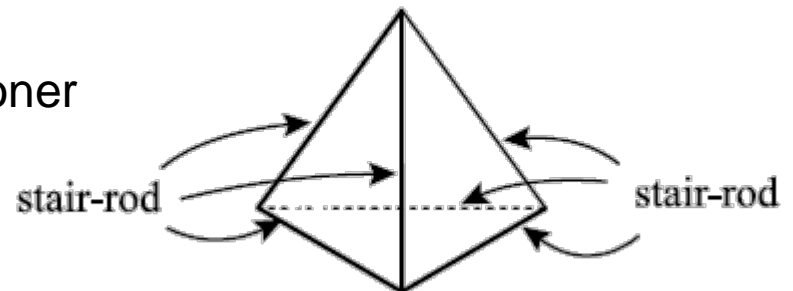
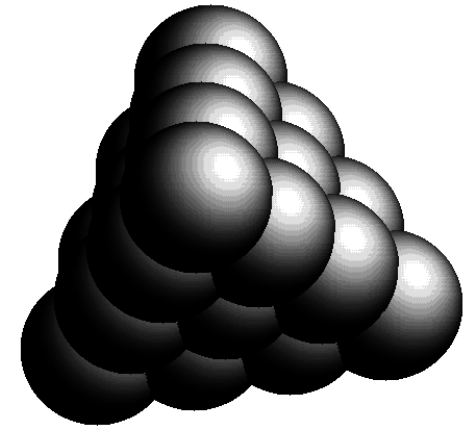
- Känd som "Stacking fault tetrahedron" (SFT)

- eller "Thompson Tetrahedron"

- Alla yttre sidor är 111-sidor, därför är det faktiskt en perfekt tetraeder enligt gammalt grekiskt mönster.

- Dessa är helt orörliga, mycket stabila och saktar ner andra dislokationer

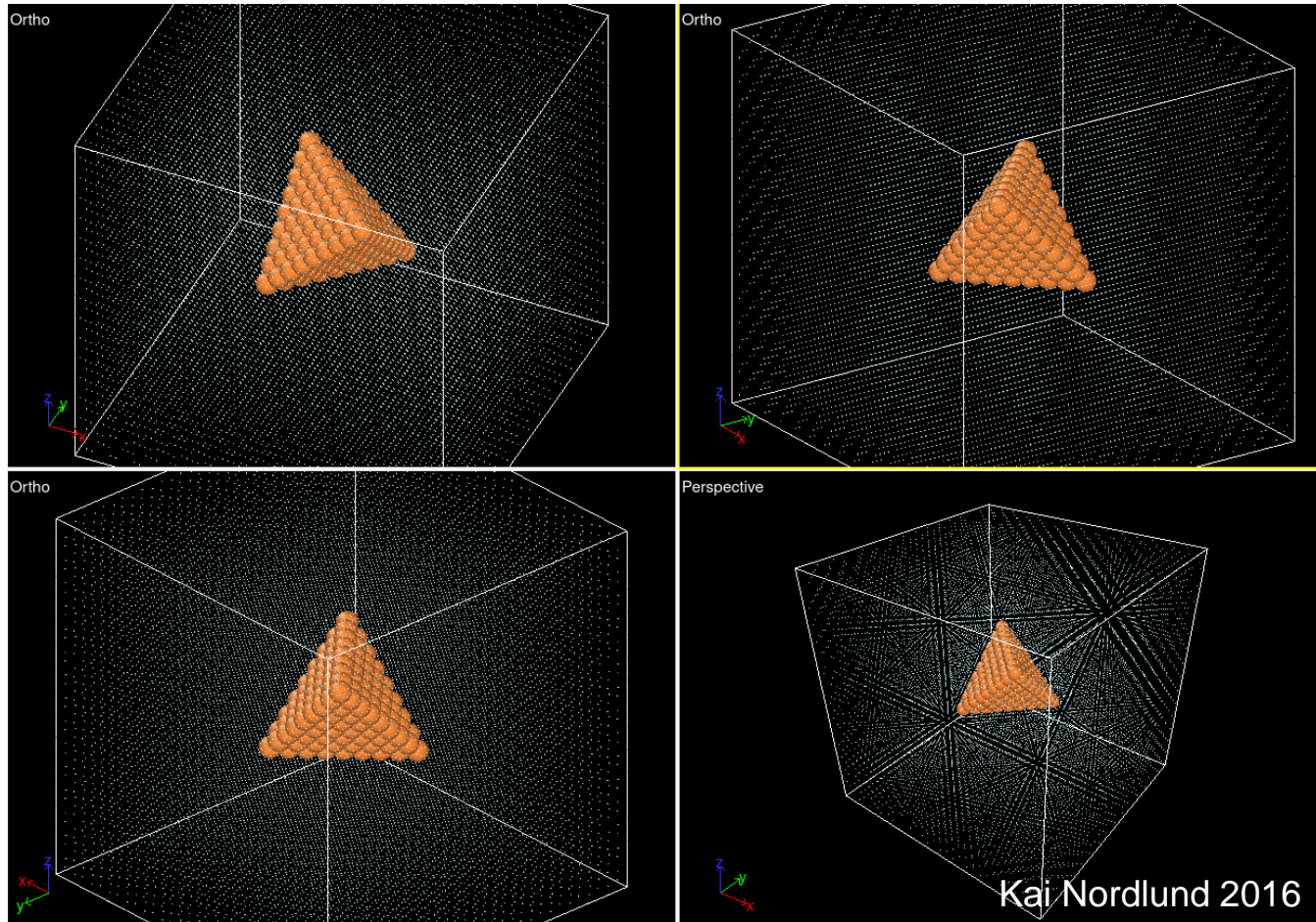
- Omges av s.k. "stair-rod"-dislokationer





Radningsfeltetraeder

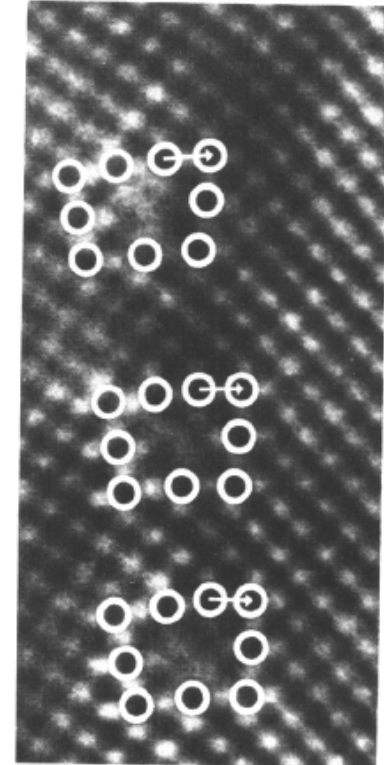
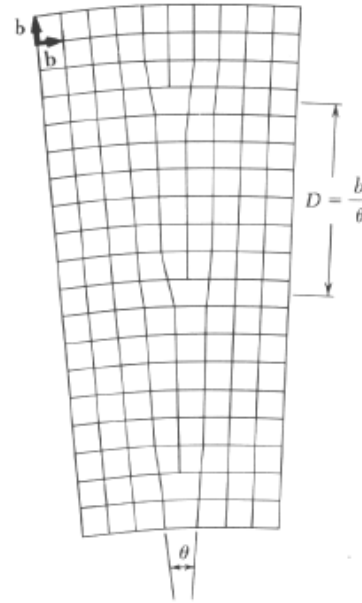
- En SFT-tetraeder innanför Cu: atomerna som har förskjutits visas som mycket större för att göra dem synliga





8.2. Korngränser

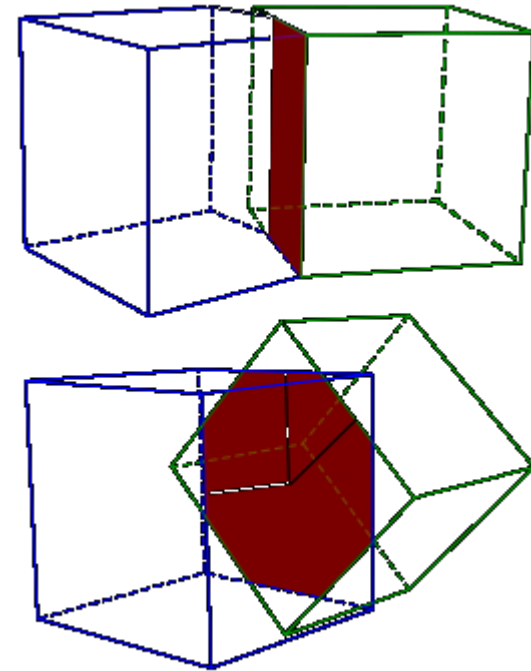
- Med hjälp av dislokationer kan man också förstå små-vinkels korngränser (orienteringen mellan kornena avviker $< 11^\circ$). I vänstra bilden visas atomplan vid en korngräns. De tre atomplanen som slutar/börjar vid korngränsen kan förstås som kant-dislokationer.
- Bilden till höger visar en verklig korngräns, där de individuella atomerna är synliga. De vita cirkelarna visar atomkolumners platser, och vektorerna Burgers vektor för dislokationerna.





Storvinkelskorngränser

- Storvinkelskorngränser kan man förstå som att de kan bildas på två alternativa sätt, eller en kombination av dessa
- Den övre bilden illustrerar en "tilt"-korngräns där två kristalliter lutats mot varandra i någon bestämd vinkel
- Den nedre bilden illustrerar en "twist"-korngräns där två kristalliter roteras mot varandra
- Ifall rotationen eller lutningen görs så att det leder till att lågindex-gitterplan möts perfekt, kan korngränsen ha en hög grad av ordning och är antagligen lågenergetisk
 - Sådana korngränser har ett eget notationssystem, som vi dock inte går in på nu

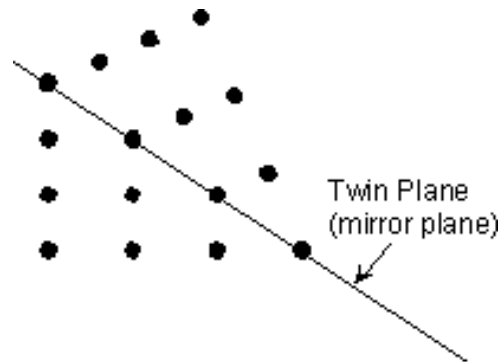


[Wikipedia]

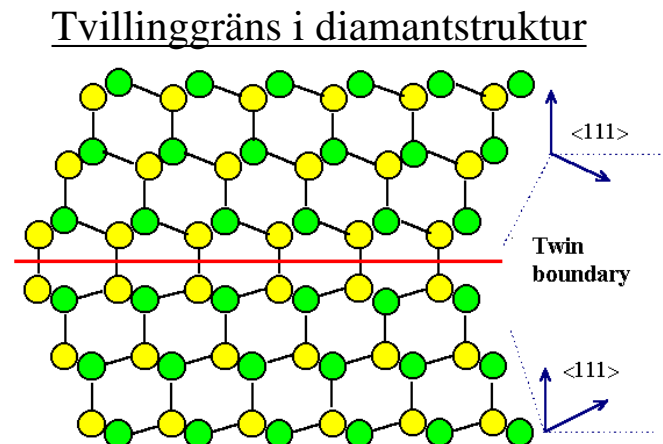


Tvillingkorngränser

- En speciellt viktig variant av lutnings-korngränser är den s.k. **tvillinggränsen**. I den övergår en gitterriktning till en annan så att övergångsplanet kan anses vara ett radningsfel.
 - Gränsen har perfekt spegelsymmetri över gränsytan, och alla atomer har samma antal grannar vid samma avstånd som normalt
 - Därmed är denna gräns uppenbart låg i energi



[<http://www.tulane.edu/~sanelson/eens211/twinning.htm>]



[http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/kap_7/backbone/r7_1_1.html]



Dislokationsdensitet

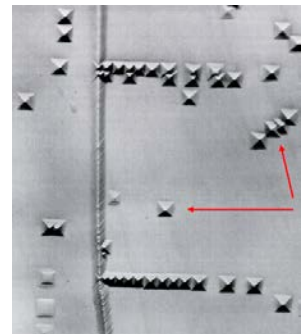
- Densiteten av dislokationer i ett material anges som

Längden av dislokationslinjerna/volym

eller alternativt och ekvivalent

Antalet dislokationslinjer som skär en viss area/area

- Enheten för båda är givetvis $1/\text{area}$
- Den senare storheten kan mätas genom att göra ett tvärsnitt av ett material och räkna hur många dislokationer som skär arean
 - Dislokationer kan t.ex. göra synlig med vissa typer av etsning som selektivt attackerar materialet bara vid dislokationerna, och sedan formar gropar vid dem





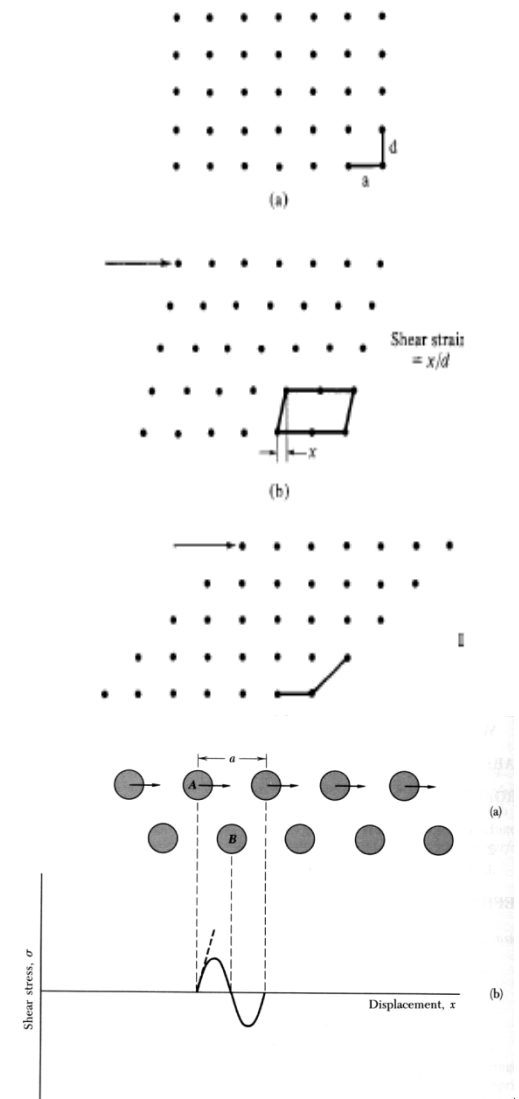
Dislokationsdensiteter

- Typiska dislokationsdensiteter [Callister]:
 - Väckristalliserade metaller: $\sim 10^3$ 1/mm²
 - Starkt deformerade metaller: $\sim 10^9 - 10^{10}$ 1/mm²
 - Samma efter värmebehandling: $\sim 10^5 - 10^6$ 1/mm²



Glid (slip)

- Nära anknytet med dislokationers rörelse är begreppet **glid** ("slip"), som anger hur lätt atomplan kan glida över varann, gränsen för plasticitet
- För en perfekt kristall, där man antar att ytan befinner sig långt bort, kan kraften/trycket uppskattas genom att betrakta potentialen mellan atomer och anta att den har en någorlunda jämn form (potentialgropens form är känd från de elastiska konstanterna)
 - Värdet beror givetvis på avståndet mellan atomerna och deras geometriska arrangemang; den är sannolikt lägst i vissa låg-index-kristallriktningar





Glid och teoretisk styrka

- Denna gräns är känd som kristallens **teoretiska skjuvstyrka** ("theoretical shear strength") och har uppskattats med rimliga antaganden till mellan $G/6$ och $G/30$
- Samma storlek, även känd som den **elastiska gränsen** σ_c , kan mätas experimentellt
- Men förhållandet mellan G och σ_c visar sig vara dramatiskt större än den teoretiska uppskattningen, se tabellen intill
 - Förklaringen är just dislokationer!

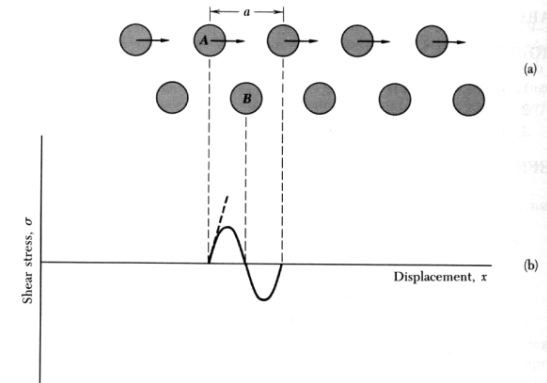


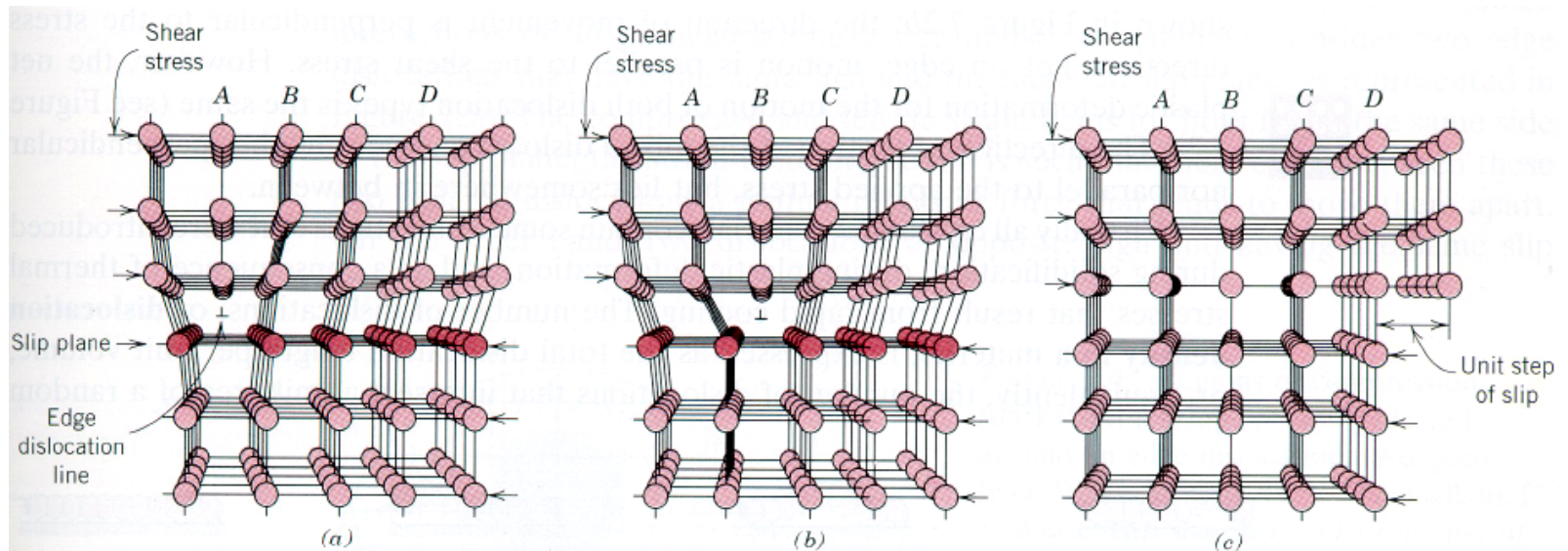
Table 1 Comparison of shear modulus and elastic limit

	Shear modulus G , in dyn/cm ²	Elastic limit σ_c , in dyn/cm ²	G/σ_c
Sn, single crystal	1.9×10^{11}	1.3×10^7	15,000
Ag, single crystal	2.8×10^{11}	6×10^6	45,000
Al, single crystal	2.5×10^{11}	4×10^6	60,000
Al, pure, polycrystal	2.5×10^{11}	2.6×10^8	900
Al, commercial drawn	$\sim 2.5 \times 10^{11}$	9.9×10^8	250
Duralumin	$\sim 2.5 \times 10^{11}$	3.6×10^9	70
Fe, soft, polycrystal	7.7×10^{11}	1.5×10^9	500
Heat-treated carbon steel	$\sim 8 \times 10^{11}$	6.5×10^9	120
Nickel-chrome steel	$\sim 8 \times 10^{11}$	1.2×10^{10}	65



8.3 Dislokationsrörelse

- Orsaken att dislokationer hänger ihop med plasticitet är deras rörlighet: de kan röra sig mycket lättare än enskilda atomer (alltså skjuvtrycket som krävs är mycket mindre än den för glid), och ett stort antal dislokationer kan orsaka makroskopisk deformation
- Att en dislokation kan rör sig lätt i en kristall kan förstås för en kantdislokation på basen av följande bild:





Dislokationsrörelse

- Kontentan är alltså att ett helt atomplan förskjuts ut ur kristallen => kollektiv rörelse av ett stort antal atomer
 - För att bindningarna vid dislokationslinjen är i varje fall i ojämavikt, kan de brytas och omformas mycket lättare än i perfekt kristall
- Denna rörelse är analog med den för en tusenfoting
 - Varje atom (eller tusenfotingsdel) rör sig alltså bara lite, < ett atomavstånd, men dislokationen (bucklan ovan tusenfotingen) rör sig stora avstånd

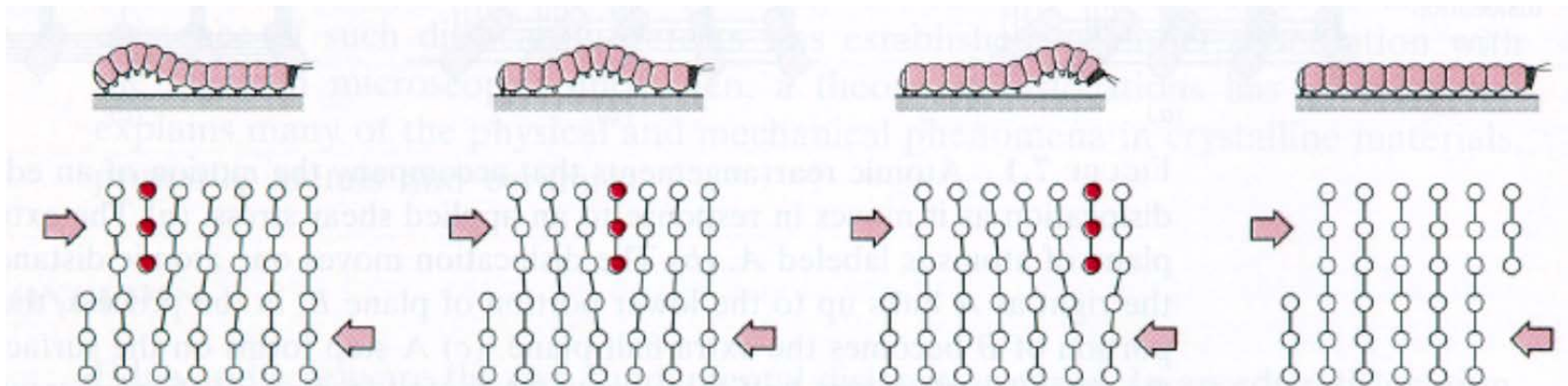
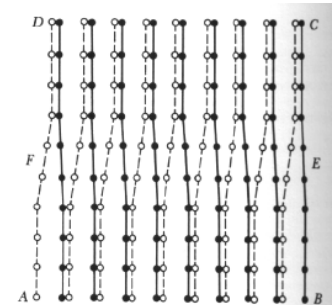
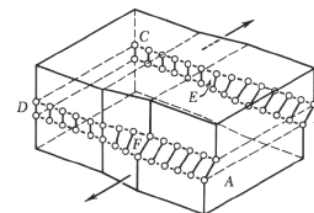
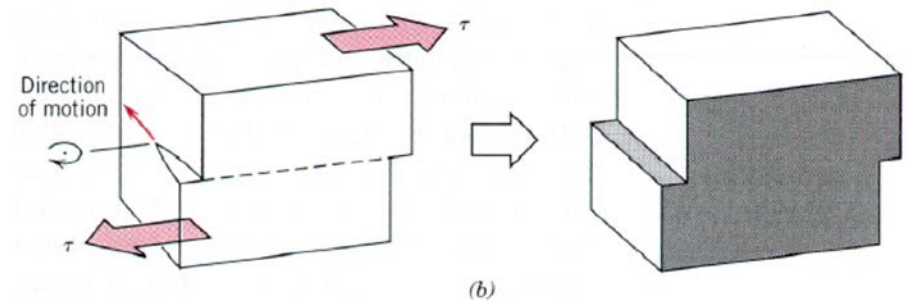
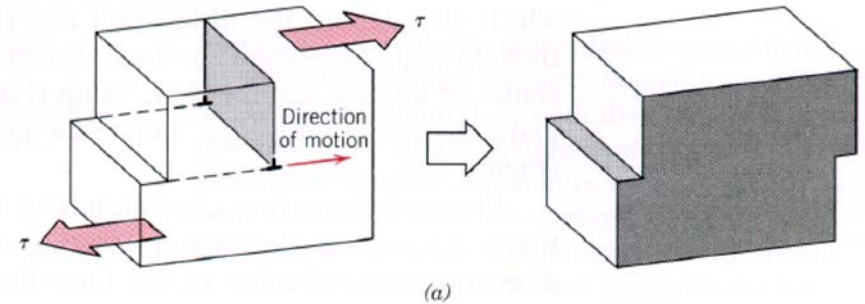


FIGURE 7.3 Representation of the analogy between caterpillar and dislocation motion.



Rörelse hos kant vs. skruvdislokation

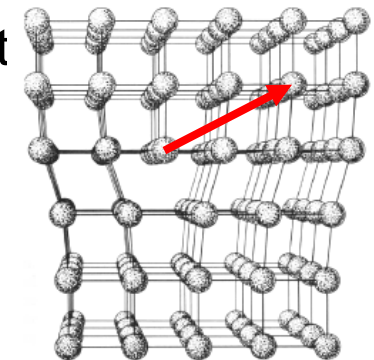
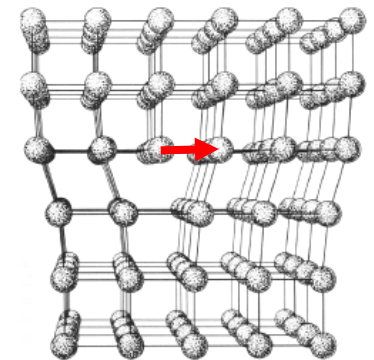
- Betrakta ett system med en kant- eller en skruvdislokation som dras ut på liknande sätt
- Bilden intill illustrerar hur samma slutresultat i deformation kan åstadkommas och hur det hänger ihop med rörelseriktningen hos en (a) kant och (b) skruvdislokation





Glid och dislokationer

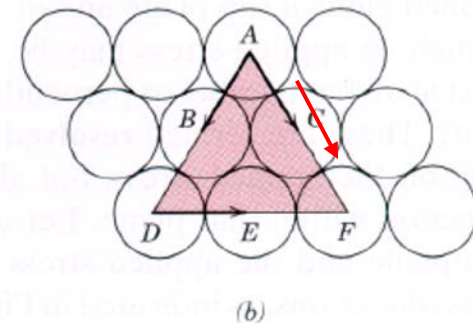
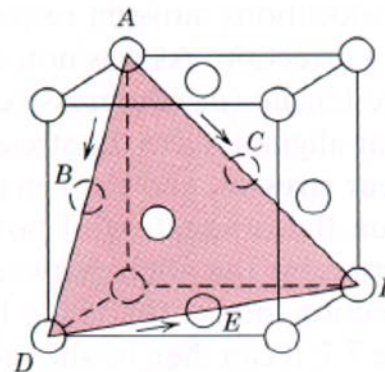
- Det är alltså dislokationer som orsakar glid; bara i total avsaknad av dislokationsaktivitet är den teoretiska styrkan relevant
 - Den har nuförtiden observerats direkt bl.a. i whiskers av kovalent bundna material (tunna enkristallina trådar av material, jfr. tidigare på kursen)
- Men också för dislokationer gäller att de kan röra sig enklare längs med vissa låg-index-kristallriktningar.
- Detta är lätt att först intuitivt: se på de schematiska bilderna av kantdislokationen i en enkel kubisk kristall intill, det är uppenbart vilken rörelseriktning av de två utritade alternativen är den enklaste att åstadkomma
 - 100 vs. 210





Glidsystem

- De kristallografiskt fördelaktiga riktningarna för glid kallas kristallens **glidriktning** (för en gångs skull en logisk benämning!) ("slip direction") och planet vinkelrät mot vilket glidet sker kallas **glidplanet** ("slip plane").
- Kombinationen av alla fördelaktiga glidriktningar och –plan kallas kristallens **glidsystem**.
- FCC-kristaller byggs ju upp av tätpackade hexagonala atomplan, där atomerna ligger på groparna i det närliggande planet. Det är tämligen lätt att förstå att glid av en kantdislokation kan ske vinkelrät mot 111-planet. För att komma från en plats till en annan i FCC måste atomrörelsen ske i en 110-riktning (kom ihåg att bara varannan grop är fylld):
 - För att skapa radningsfel/ partiella dislokationer kan riktningen dock vara en annan, $11\bar{2}$





Glidsystem

- I de andra kristallerna är det inte helt lika uppenbart vad det fördelaktiga glidsystemet är, men här är en tabell över de viktigaste observerade systemen i metaller:

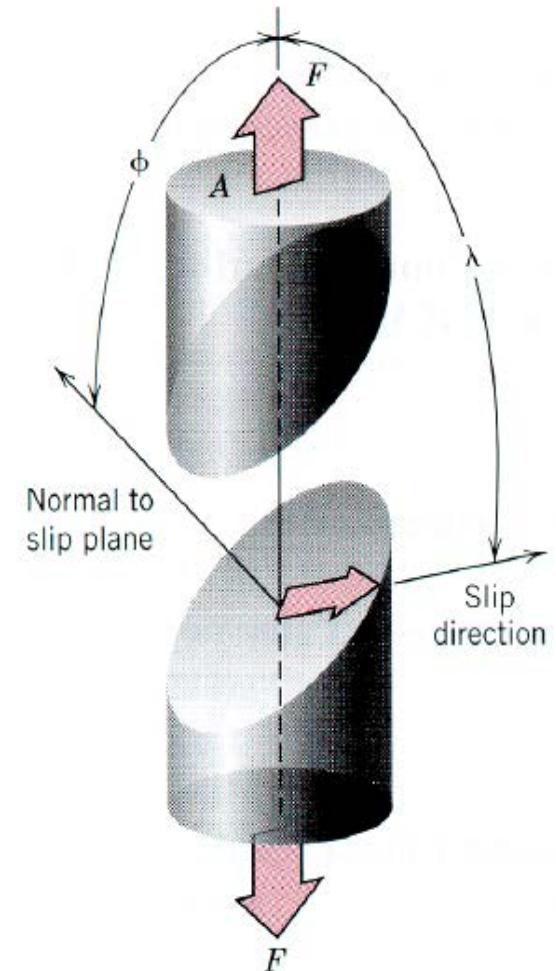
Table 7.1 Slip Systems for Face-Centered Cubic, Body-Centered Cubic, and Hexagonal Close-Packed Metals

<i>Metals</i>	<i>Slip Plane</i>	<i>Slip Direction</i>	<i>Number of Slip Systems</i>
Face-Centered Cubic			
Cu, Al, Ni, Ag, Au	{111}	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	12
Body-Centered Cubic			
α -Fe, W, Mo	{110}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	12
α -Fe, W	{211}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	12
α -Fe, K	{321}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	24
Hexagonal Close-Packed			
Cd, Zn, Mg, Ti, Be	{0001}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Ti, Mg, Zr	{10 $\bar{1}0$ }	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Ti, Mg	{10 $\bar{1}1$ }	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	6



Glid i enhetskristaller

- Tänk dig att man drar ut en enhetskristall i sin längdriktning
- Även om kraften nu är ren uttöjning makroskopiskt sett, kan man givetvis dela upp utdragningsvektorn i komponenter i godtyckliga riktningar bara summan är den samma
 - Alltså kan en ren uttöjning ha också skjuvkomponenter sett ur atomär synvinkel
- Sådana skjuvkomponenter kallas **upplösta skjuvtryck** ("resolved shear stresses")





Glid i enhetskristaller

- Ett allmänt upplöst skjuvtryck mot ett godtyckligt plan har magnituden

$$\tau_R = \sigma \cos \phi \cos \lambda$$

där $\sigma = F/A$

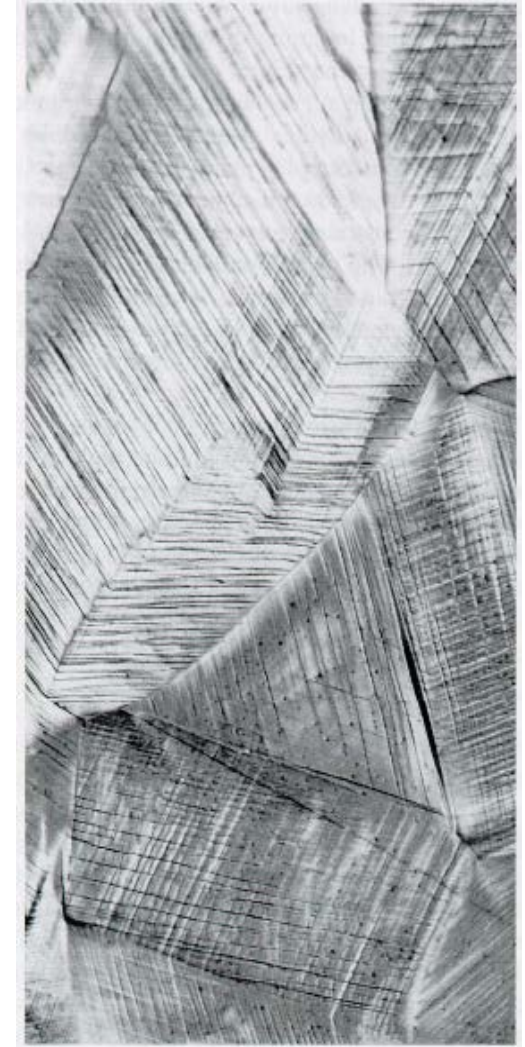
- Man kan beräkna detta för alla möjliga glidsystem, och beroende på geometrin kommer ett av dem ha maximalt värde jämfört med det **kritiska upplösta skjuvtrycket** ("critical resolved shear stress") τ_{crss}
 - Då kommer sannolikt glid att ske i denna riktning
- Detta leder till att utdragning av enhetskristaller kan göra glidplanen makroskopiskt synliga, se bilden intill





Plasticitet i mångkristallina material

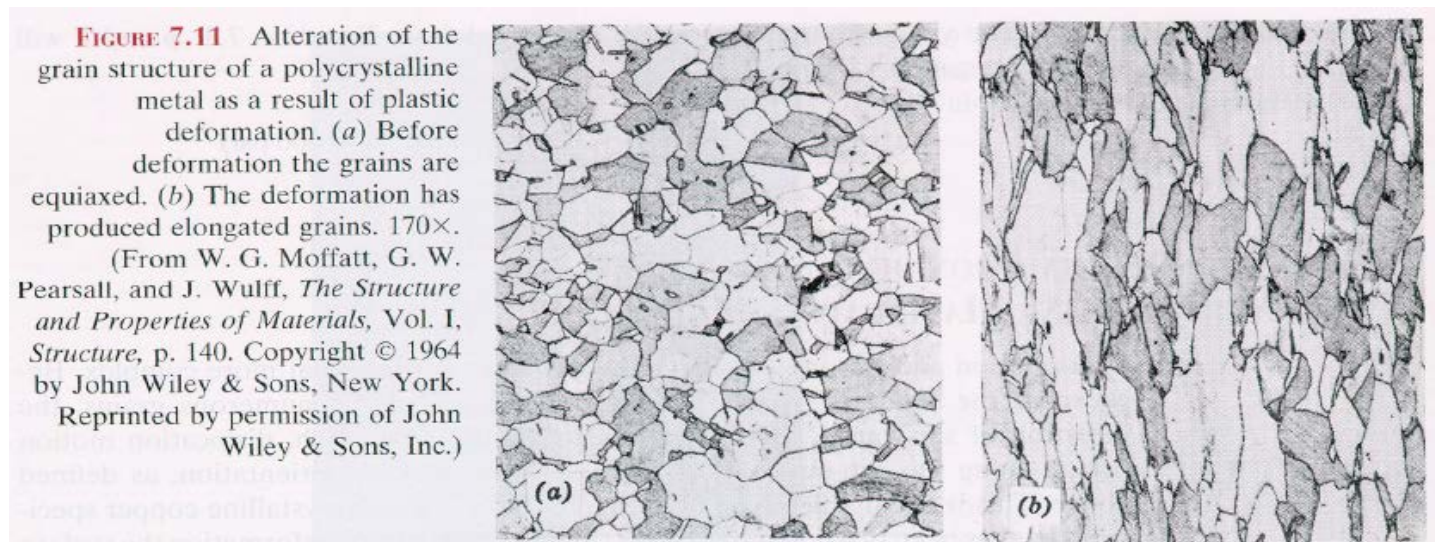
- Förklaringarna ovan förklarar till stor del plasticitet i enhetskristallina material
- I mångkristallina material är läget mer komplicerat. Då de utsetts för deformationstryck, kommer det makroskopiska trycket givetvis att förmedlas till varje kristallkorn
- Men nu är ju varje kristallkorn slumpmässigt ordnat, så t.ex. glid sker i varje kristallkorn i skilda slumpmässiga riktningar
 - Bilden intill visar en experimentell observation av detta i koppar





Plasticitet i mångkristallina material

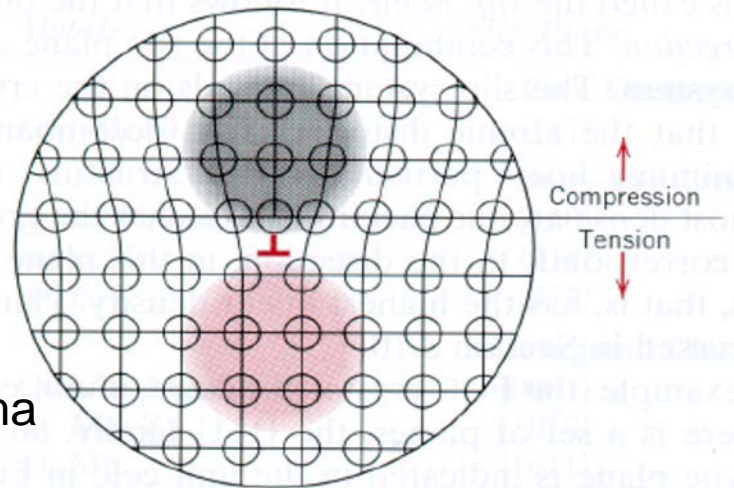
- Korngränserna är i allmänhet stabila, så kornena kan inte glida hur som helst, utan är begränsade av varandra
- Därmed är mångkristallina material i allmänhet starkare än enhetskristallina
- Med stora deformationer ändras deras form givetvis nog, se nedan





Dislokationsreaktioner

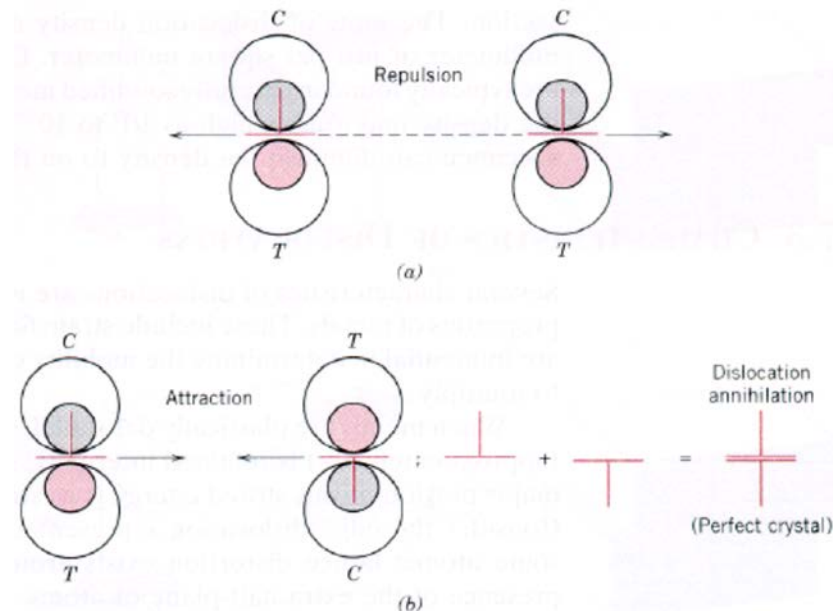
- Dislokationer kan också växelverka och reagera med varandra
- Varje dislokation omges av ett spänningsfält, förskjutningar av atomer kring dislokationslinje som orsakas av att kristallen är oregelbunden där
- För kantdislokationer är spänningsfältet av följande typ:
 - Spänningen är alltså positiv på ena sidan och negativ på andra
 - Spänningsfältet är därmed analogt med elfältet från en dipol – men funktionella formen är nog inte den samma





Dislokationsreaktioner

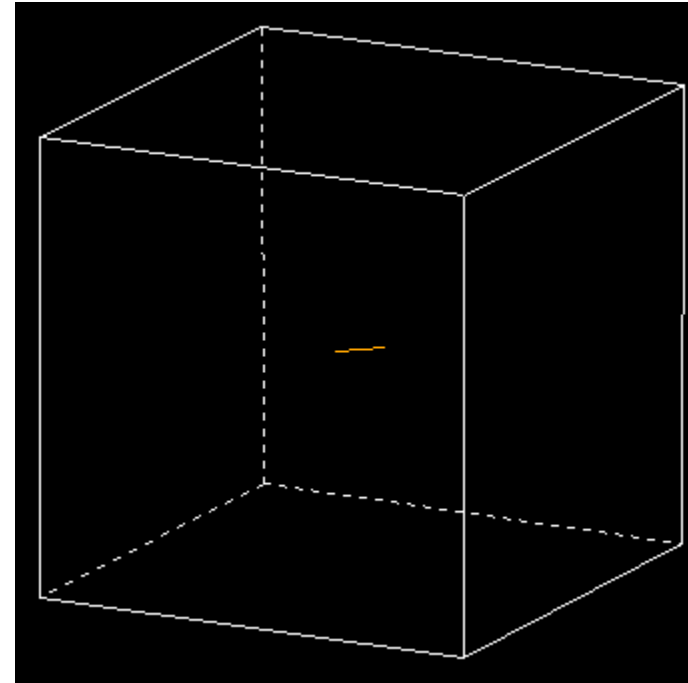
- I.o.m. spänningsfältet har dislokationerna en långräckviddsväxelverkan med varann, så de kan anses vara växelverkande linjära objekt
 - Det finns en simulationsteknik, "discrete dislocation dynamics (DDD)" som använder sig av detta som grund
- Bilden intill illustrerar två av de enklaste tänkbara exemplen för detta:
 - (a) två identiska lika riktade kantdislokationer repellerar varandra
 - (b) två identiska men motsatt riktade kantdislokationer attraherar varann, och kan annihileras till perfekt kristall





Dislokationsskapande

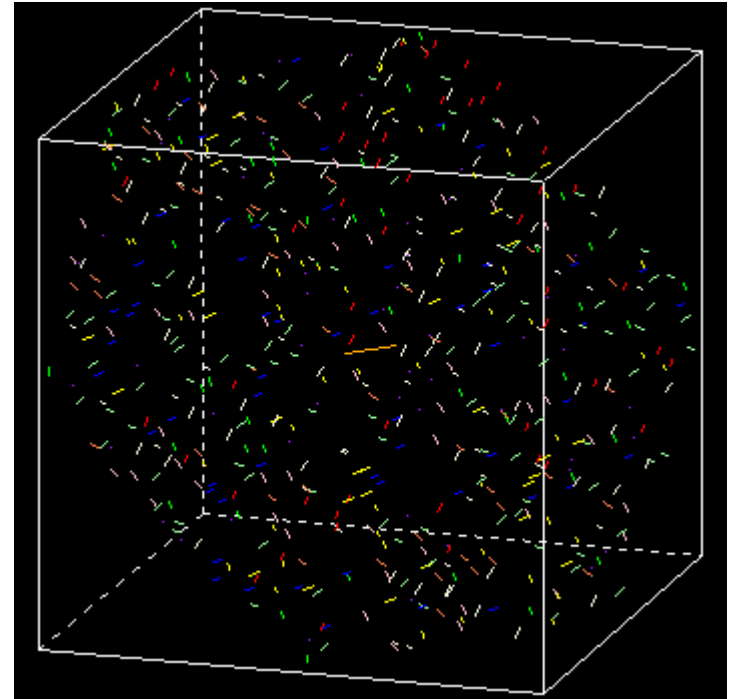
- Dislokationer kan också skapas och multipliceras i kristaller
- Ett berömt exempel är en s.k. **Frank-Read-källa**, som bildas av två dislokationshinder med en dislokation mellan sig
- Om nu ett tryck sätts på kristallen, kan dislokationen växa och till slut brytas i två delar av trycket. Detta illustreras i DDD-animationen intill
- Denna process kan sedan börja från början => dislokationskälla som kan skapa oändliga mängder dislokationer





Dislokationsbromsar

- En dislokations framfart kan även saktas ner av dislokationer
- Detta illustreras i animationen intill för en Frank-Read-källa i mitten som omges av små dislokationssegment
- De skapade dislokationerna saktas uppenbart ner av segmenten!





Dislokationsstapling

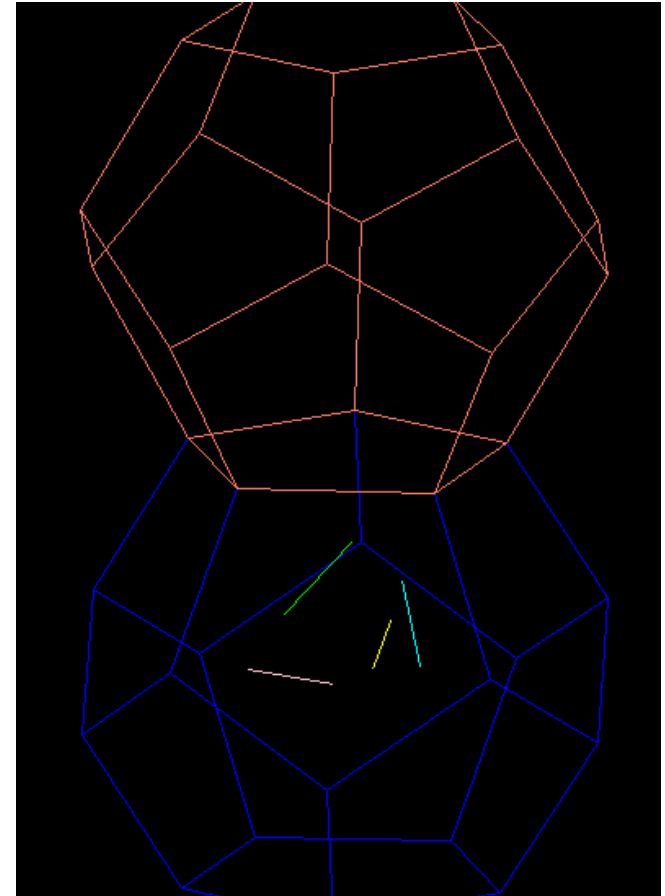
- Dislokationer som rör sig i kristallen i ungefär samma riktning kan också staplas på varandra ("dislokation pile-up")
 - De "tornas upp sig" mot varandra om en av dem saktats ner av ett hinder
- Detta illustreras i TEM-videon nedan för dislokationer i Ge





Dislokationsrörelse över korngränser

- En annan mycket viktig variant av dislokationsbroms är att dislokationer inte kan röra sig fritt över korngränser, utan saktas starkt ner av dem
 - Vid en korngräns är kristallriktningarna olika och glidplanen möts nästan säkert inte
- Detta illustreras bra i animationen intill, som visar för ett förenklat system av två korn hur dislokationer i den ena delen har svårt att röra sig över till den andra



[<http://www.gpm2.inpg.fr/axes/plast/MicroPlast/ddd/bicrystal.html>]



8.4. Förstärkningsmekanismer för material

- Som vi såg ovan förklarar dislokationsrörelse plastisk deformation av material
- Den förklarar också hur metaller kan göras starkare: för att plasticitet möjliggörs av dislokationsrörelse, fungerar nästan alla stärkningssätt för metaller så att de hindrar dislokationsrörelse!



Förstärkning med reducerad kornstorlek

- Som vi såg ovan, reducerar kristallkorn dislokationsrörelse
- Därmed kan man minska på totala dislokationsrörelsen helt enkelt genom att minska på kornstorleken i materialet!
- Det finns en empirisk lag som beskriver detta som kallas **Hall-Petch-ekvationen**, som säger att en kristalls flytgräns σ_y är

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-1/2}$$

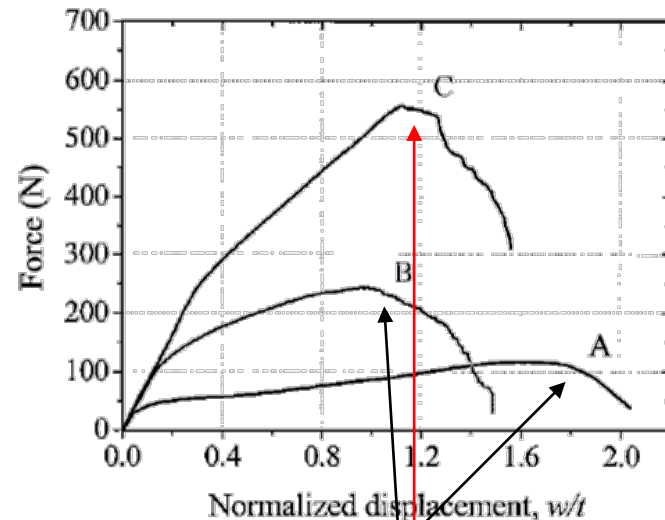
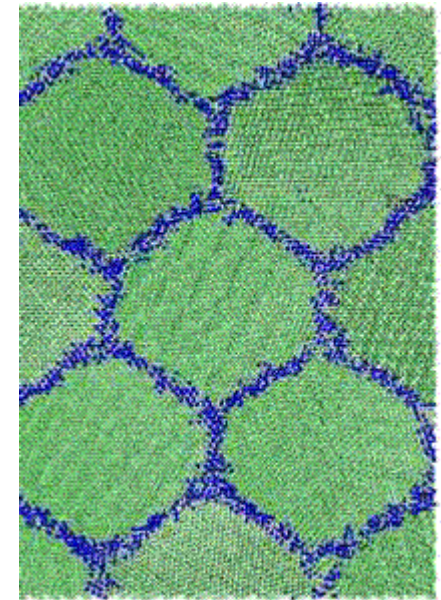
där d är kornstorleken och σ_0 och k_y är konstanter för varje material

- Detta gäller för ett brett spektrum av kornstorlekar, men inte extremt små eller stora
 - T.ex. i Cu vet man nu att det gäller ner till ung. 20 nm
- Det är av stort aktuellt nanovetenskap-intresse, för det säger ju att nanokristallina material kan vara mycket starka



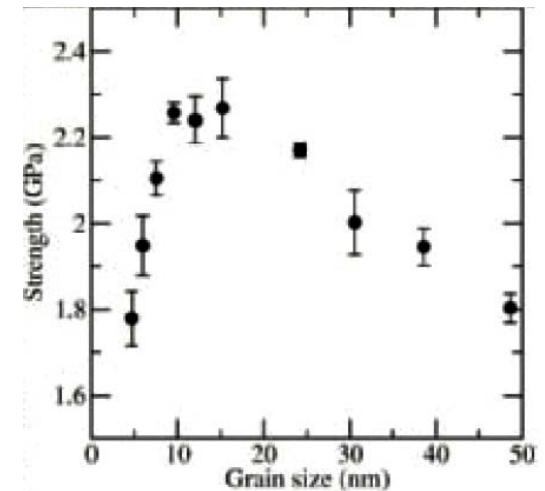
Hall-Petch-relationen på nanoskala

- Datorsimuleringar och experiment har visat att gränsen för förstärkning sker vid 15-20 nm kornstorlek
- Normalt Cu: flytgränsen ~70 MPa
- Nanokristallint koppar har i simuleringar rapporterats förstärkas till 2300 Mpa, experiment 770 MPa => Åtminstone x10 starkare



[Youssef et al, APL 85 (2004) 930]

A, B: normalt Cu
C: nanokristallint Cu

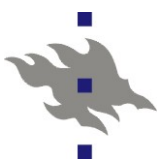


[K.W. Jacobsen; CSC News 1/2005]



Förstärkning med orenheter

- Orenheter tenderar att sakta ner dislokationsrörelse: deras spänningsfält växelverkar med det hos dislokationens
- Därmed kan man genom att introducera orenheter till en metall/bilda en legering av det åstadkomma samma sak
- Detta har också korollarier att mycket rena metaller är oftast mjukare än samma metall normalt: normala "rena" metaller har oftast endast 99.9x % renhet, vilket betyder att 1/1000 – 1/10000 atomer är orenheter. Iom. att dislokationer är ganska stora objekt, kan redan en ganska liten orenhetskonzentration sakta ner dem avsevärt
 - I själva verket kan man tom. med god fog påstå att ingen vet säkert dislokationsrörligheten i fullständigt rena metaller, för att man aldrig kommit tillräckligt nära sådana
 - De bästa metallerna är bara ~99.999% ("five-9") rena



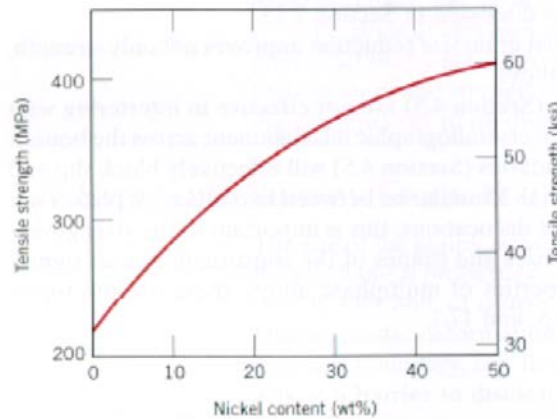
Förstärkning med orenheter

- Orenheter tenderar att sakta ner dislokationsrörelse: deras spänningsfält växelverkar med det hos dislokationens
- Därmed kan man genom att introducera orenheter till en metall/bilda en legering av det åstadkomma samma sak
- Detta har också korollariet att mycket rena metaller är oftast mjukare än samma metall normalt: normala "rena" metaller har oftast endast 99.9x % renhet, vilket betyder att 1/1000 – 1/10000 atomer är orenheter. Iom. att dislokationer är ganska stora objekt, kan redan en ganska liten orenhetskonzentration sakta ner dem avsevärt
 - I själva verket kan man tom. med god fog påstå att ingen vet säkert dislokationsrörligheten i fullständigt rena metaller, för att man aldrig kommit tillräckligt nära sådana
 - De bästa metallerna är bara ~99.999% ("five-9") rena

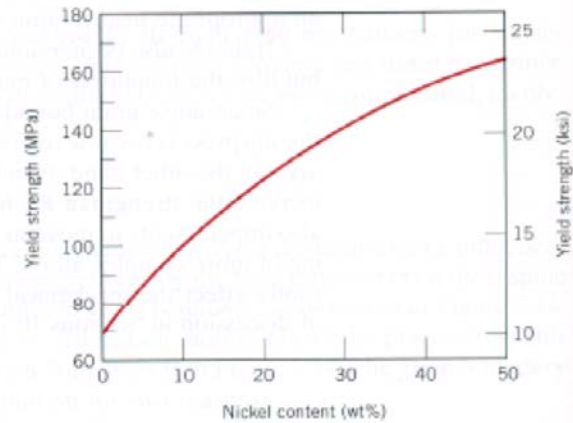


Förstärkning med orenheter: exempel

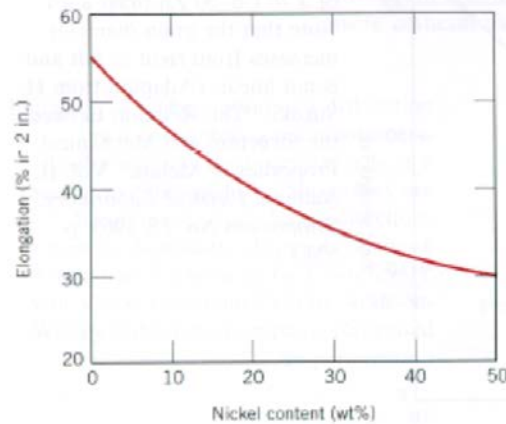
- Exempel för Cu-Ni-legeringar: flytgränsen och draghållfastheten ökar, men samtidigt minskar smidigheten



(a)

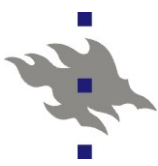


(b)



(c)

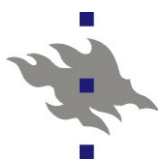
FIGURE 7.16 Variation with nickel content of (a) tensile strength, (b) yield strength, and (c) ductility (%EL) for copper-nickel alloys, showing strengthening.



Forsknings exempel: extremt legeringsformande

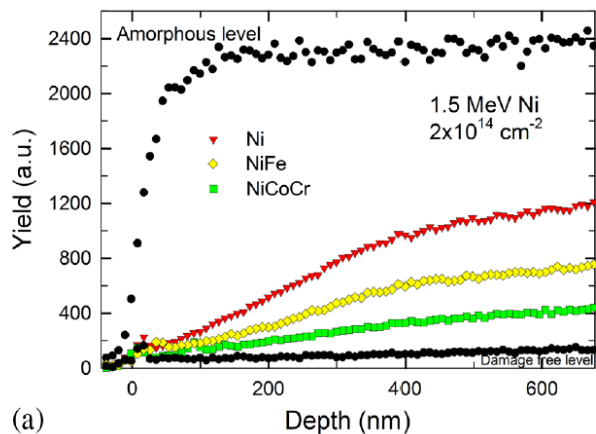
- Nyligen har en ny klass av metallegeringar introducerats, som kallas “koncentrerade ekviatomära legeringar” eller om antalet grundämnen ≥ 5 ”hög-entropi-legeringar”
- Vi har forskat i hur bra dessa tål strålning. En combination av experimentella och modellerings-arbete visade att oordning som resulterar från slumpmässiga arrangemang av grundämnen i NiFe och NiCoCr legeringar jämfört med normal ren Ni, ledde till en märkbar reduction av strålningsskador
- Orsak: slumpmässigt arrangemang av atomer leder till unika gitterdistortioner, då varje atom är ett dilatationscenter. Detta saktar ner tillväxten av stora dislokationsslingor (“dislocation loop”), som är den dominerande typen av strålningsskador på högra doser.

[F. Granberg, K. Nordlund, M. W. Ullah, K. Jin, C. Lu, H. Bei, L. M. Wang, F. Djurabekova, W. J. Weber, , and Y. Zhang,, Phys. Rev. Lett. **116**, 135504 (2016),]



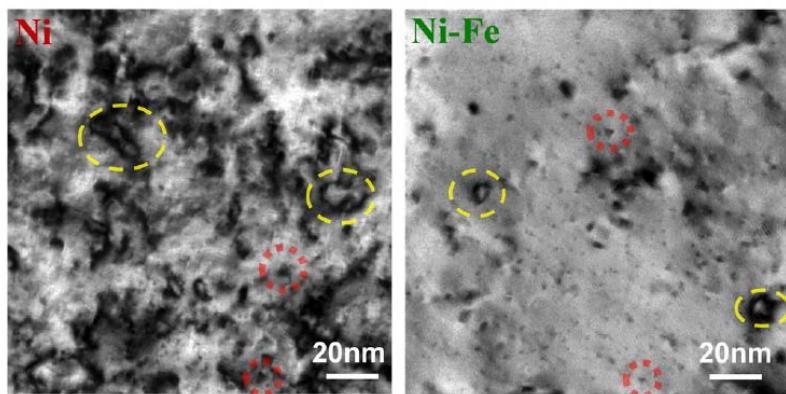
Forsknings exempel: extremt legeringsformande

Experiment: RBS channeling



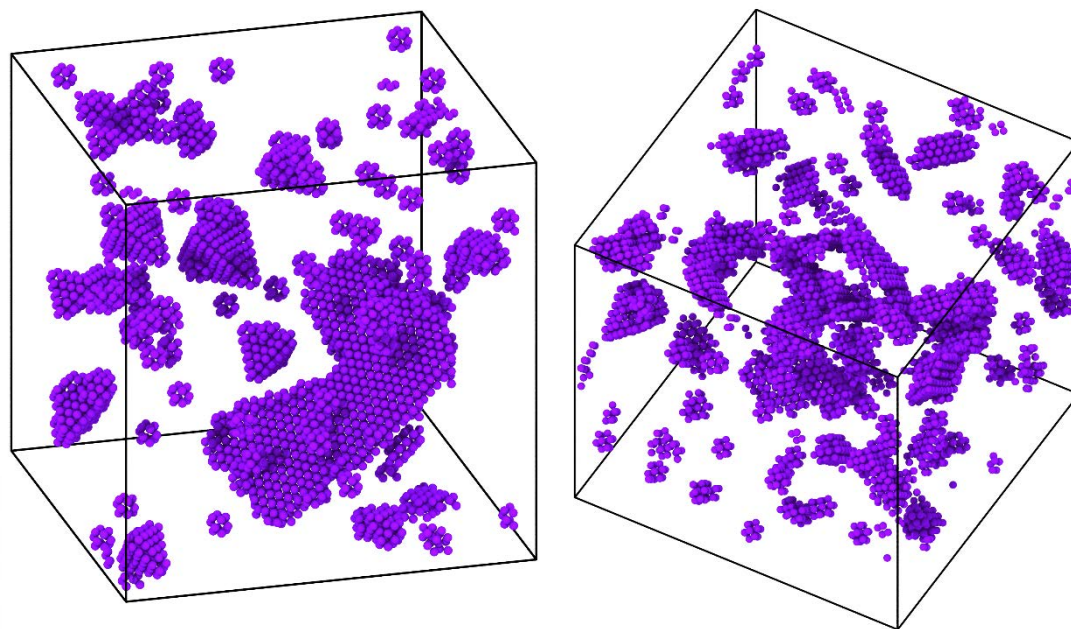
(a)

Experiment: TEM



(a)

Simulation: molekylodynamik

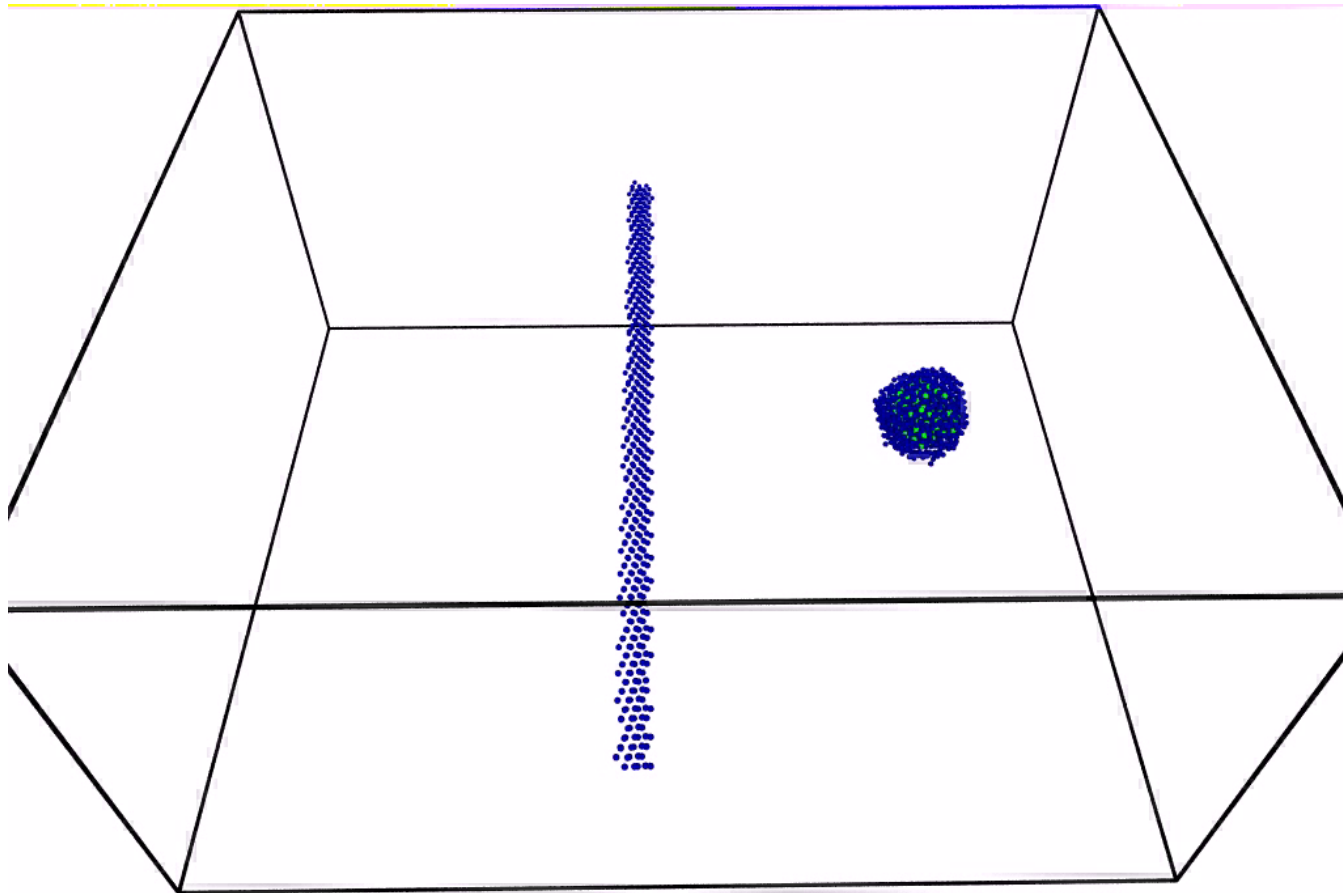


Vänster: strålningsskador i normal metal, Ni.
Höger: strålningsskador för samma dos i en
NiFe ekvatomär legering. Bild Fredric Granberg.



Förstärkning med dispersion

- Hur saktas en dislokation ner av en karbid-dispersionspartikel? 1. Molekyldynamik

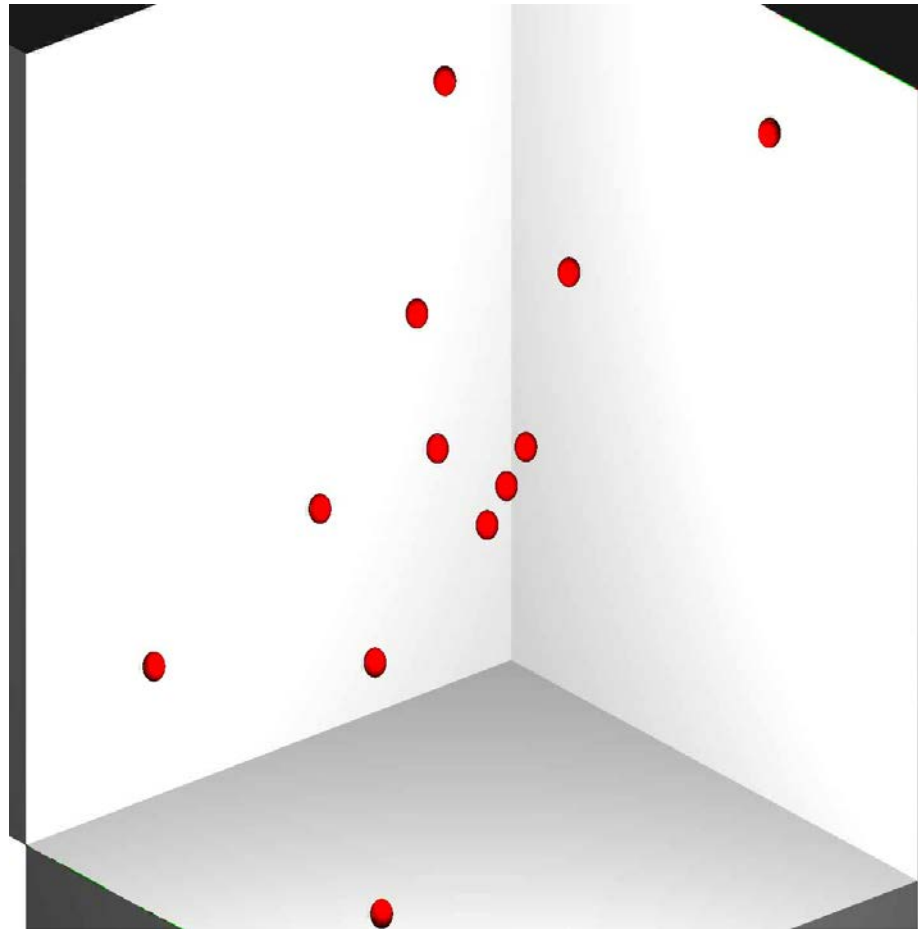


[Fredric Granberg, Helsingfors universitet 2014;
Fusion Science and Technology **66**, 283 (2014)]



Förstärkning med dispersion

- Hur saktas en dislokation ner av av flera karbid-dispersionspartikel? 2. Dislokationsdynamik





Förstärkning med deformationshärdning

- Då ett smidigt material deformerats repetitivt, tenderar det ofta att styrkas och härdas av det. Detta kallas **deformationshärdning** ("strain hardening", "cold working", "work hardening")
- Orsaken är att deformationen orsakar dislokationer att skapas (jfr. Frank-Read-källan). Dislokationerna i sin tur växelverkar med varann så att de saktar ner varandra. Till slut, då dislokationstätheten är mycket stor är alla dislokationer "låsta" med varandra, och materialet är skört
 - Detta är väsentligen mekanismen med vilken en metallsked bryts om man vänder på den av och an
 - Oberoende av vad Uri Geller påstår... (Tydligt hade han och andra charlatener vridit på skeden av och an före en föreställning så att de blev sköra och sedan gick sönder under den)

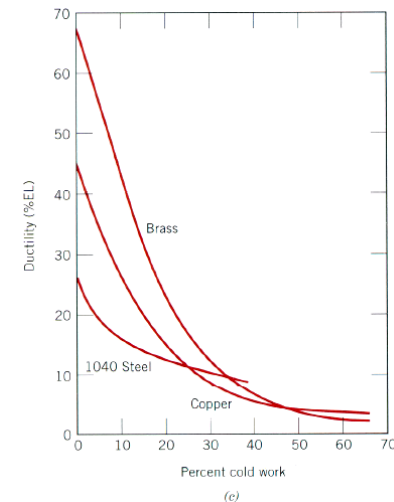
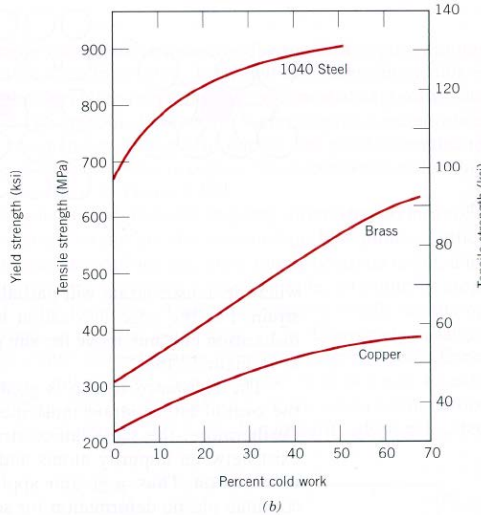
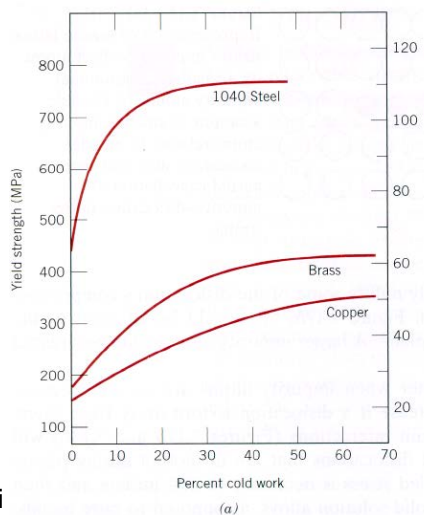
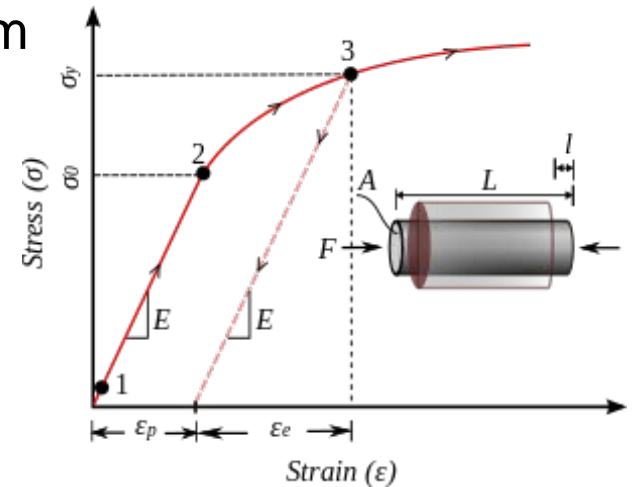


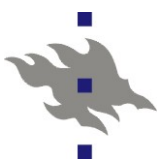
Förstärkning med deformationshårdning

- Andelen deformationshårdning kan för ett enkelt utdragningsexperiment beskrivas med procent deformationshårdning ("percent cold work") som definieras som

$$\%CW = \left(\frac{A_0 - A_d}{A_0} \right) \times 100$$

där A_0 är den ursprungliga arean före deformation och A_d arean efter. Nedan är exempeldata för flytgränsen, draghållfastheten och smidigheten.





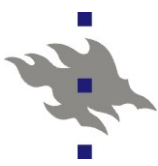
Förstärkning: balans mellan hårdhet och smidighet

- Vi har alltså sett att metaller kan härdas på flera olika sätt
- Givetvis kan dessa också användas i en kombination med varandra
- Men den allmänna trenden är att samtidigt som materialet blir starkare, blir det också skörare
 - Detta var synligt i datat både för CuNi och deformationshärdning
 - En kompromiss mellan de två storheterna kan sökas enligt önskad tillämpning



6.5 Återhämtning

- En process av förstärkning som deformationshärdning är åtminstone delvis reversibel. Helt enkelt genom att hetta upp materialet kan de ursprungliga egenskaperna helt eller delvis återfås. Att göra detta kallas **glödning** ("annealing").
- Processerna som sker vid glödning kan indelas till **återhämtning** ("recovery"), **rekristallisering** och **korntillväxt**
- Med återhämtning kallas processen där defekter i kristallen försvinner
 - Punktdefekter blir mobila och rekombineras med defekter av motsatt typ eller vid ytan
 - Dislokationer blir termiskt rörliga och annihileras eller förvandlas till andra dislokationer med lägre energi



Rekristallisation och korntillväxt

- Efter stark deformation kan en metall ha blivit i ett tillstånd med små kristallkorn med hög sparad energi i korngränserna och i defekter
 - En keram kan helt amorfiseras
- Med glödning kan de höga energierna i kristallkornen reduceras, och vid långvarig upphettning kristallkornen fås att växa
- Detta illustreras i bilderna på denna och nästa sida

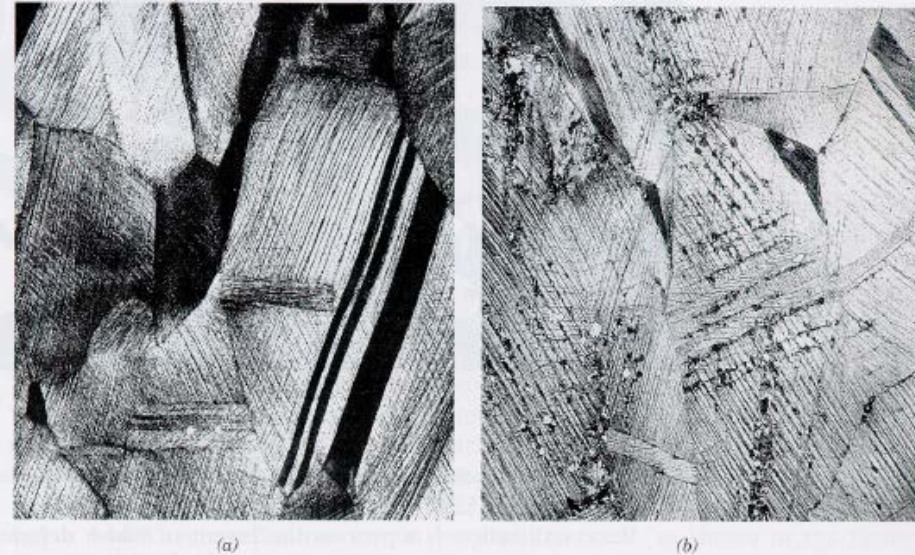
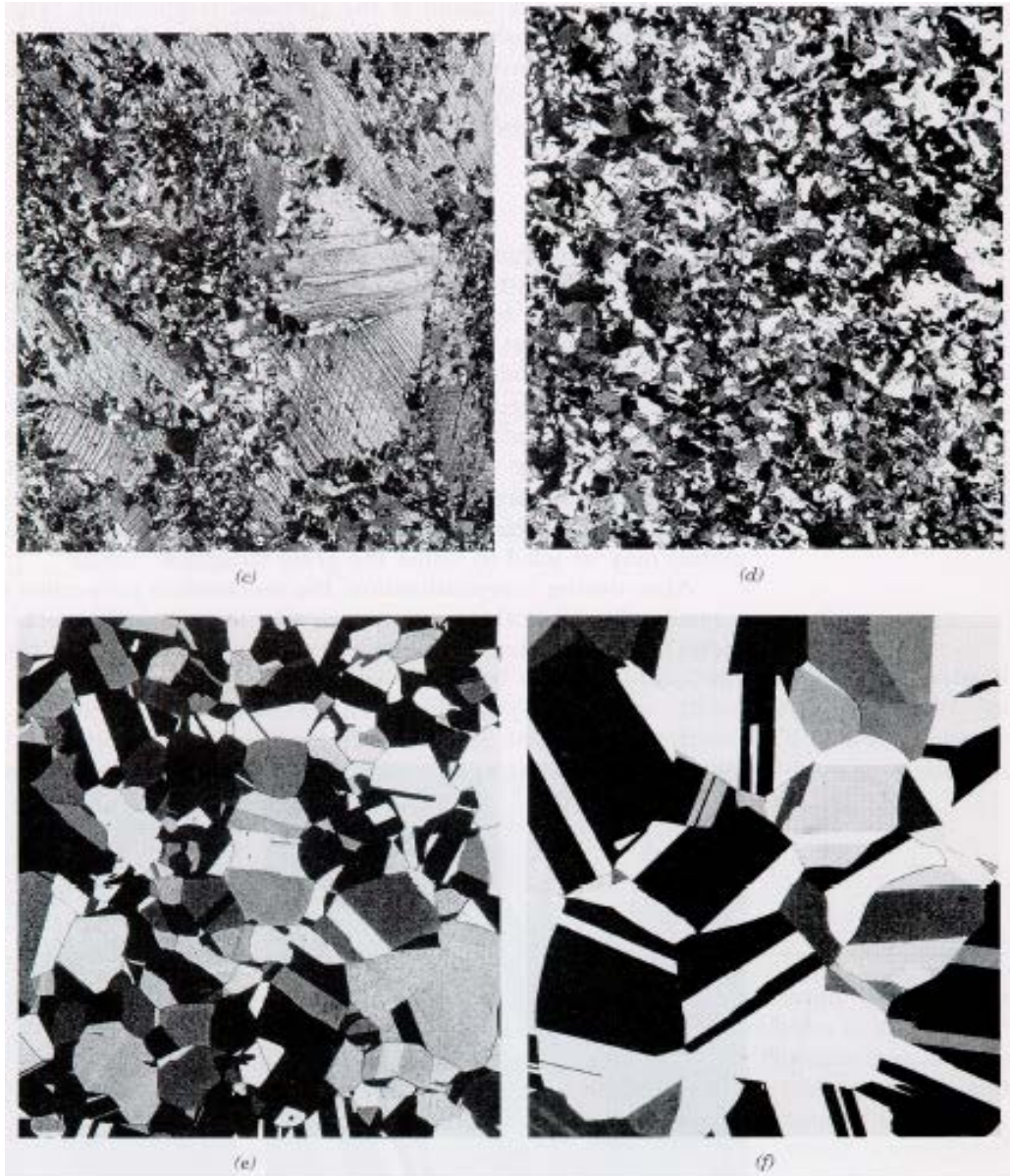


FIGURE 7.21 Photomicrographs showing several stages of the recrystallization and grain growth of brass. (a) Cold-worked (33%CW) grain structure. (b) Initial stage of recrystallization after heating 3 s at 580°C (1075°F); the very small grains are those that have recrystallized. (c) Partial replacement of cold-worked grains by recrystallized ones (4 s at 580°C). (d) Complete recrystallization (8 s at 580°C). (e) Grain growth after 15 min at 580°C. (f) Grain growth after 10 min at



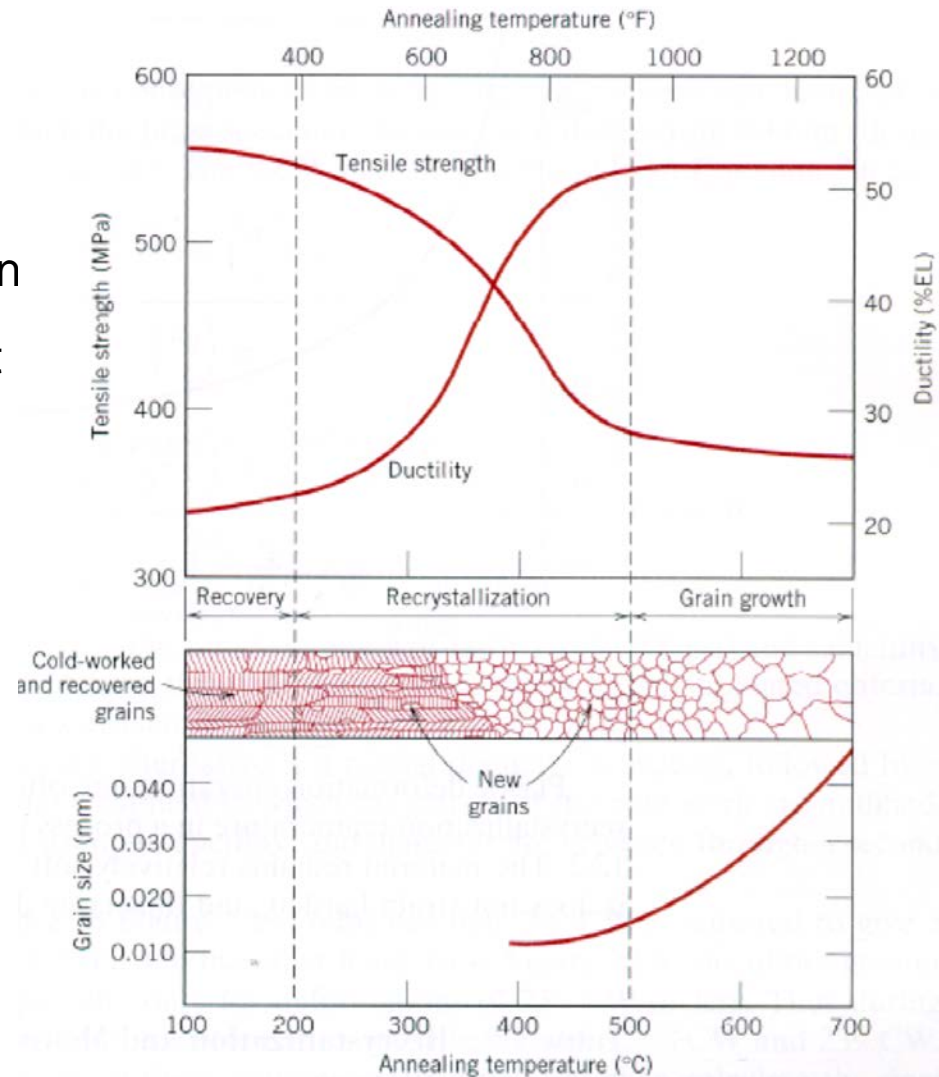
Rekristallisation





Rekristallisation

- Vad som sker illustreras schematiskt här
- Notera hur draghållfastheten och smidigheten går igen åt motsatta håll





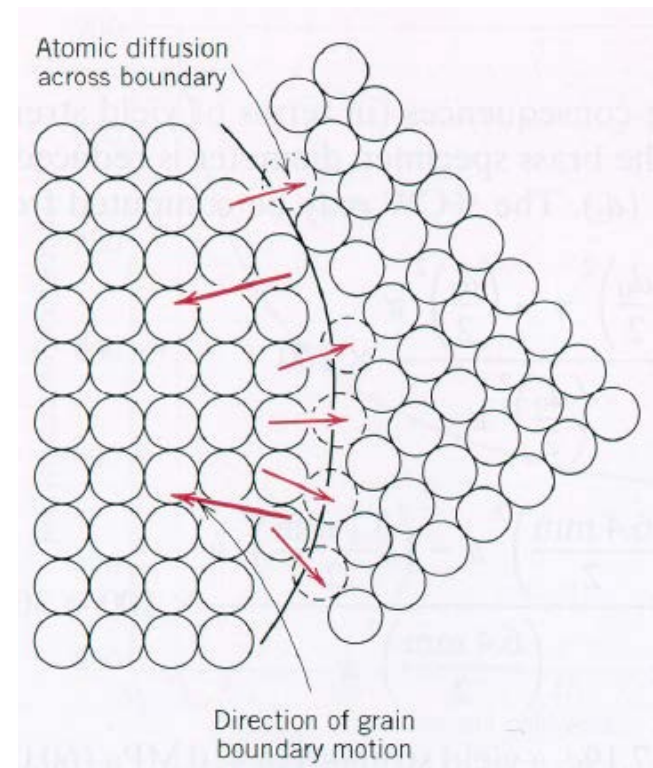
Korntillväxt

- Korntillväxt kan förstås ske genom att större korn som är mer stabila växer genom att mindre korn övergår till dem genom atomdiffusion
- Tidsberoendet observeras ofta ha den enkla formen

$$d^n - d_0^n = Kt$$

där d_0 är den ursprungliga storleken (effektiv diameter), och K och n är materialberoende konstanter

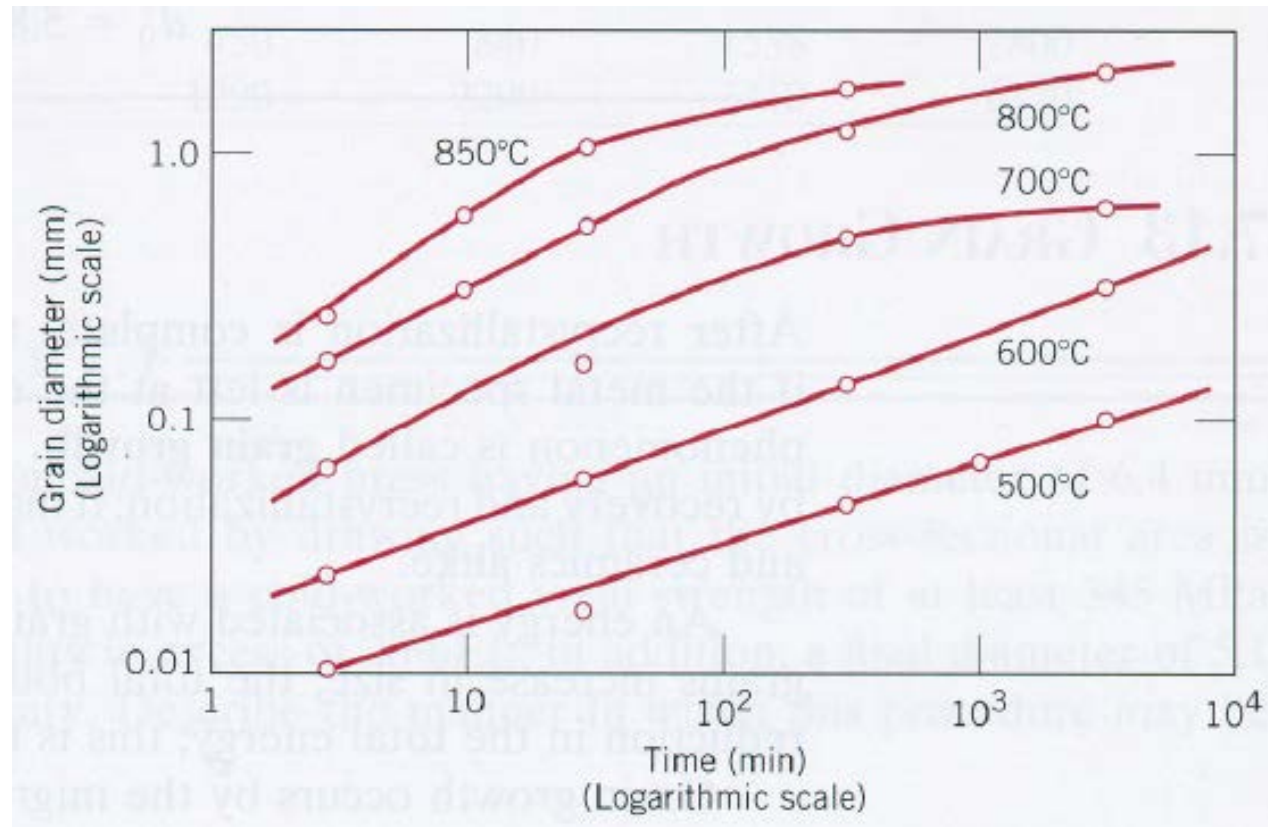
- n är i allmänhet ≥ 2





Korntillväxt

- Exempel på tids- och temperaturberoendet av korntillväxt i brons (notera log-log-skalan):





7.4. Hur material går sönder

- Material kan gå sönder på många olika sätt
- Vi skall här bara kort definiera grundmekanismerna
- Det redan tidigare definierade begreppet fraktur kan indelas i två huvudkategorier:
 - **Smidig fraktur** ("ductile fracture")
 - **Skör fraktur** ("brittle fracture")
- Med smidig fraktur menas sådan som inte fortgår av sig själv: även om en spricka uppkommit i materialet, fortskrider den inte av sig själv utan att man ökar på den yttre belastningen
- Med skör fraktur avses motsatsen: en spricka sprids snabbt genom hela materialet efter att den bildats
- Smidig fraktur är typisk i metaller, skör i keramer. Polymerer kan uppvisa båda typer



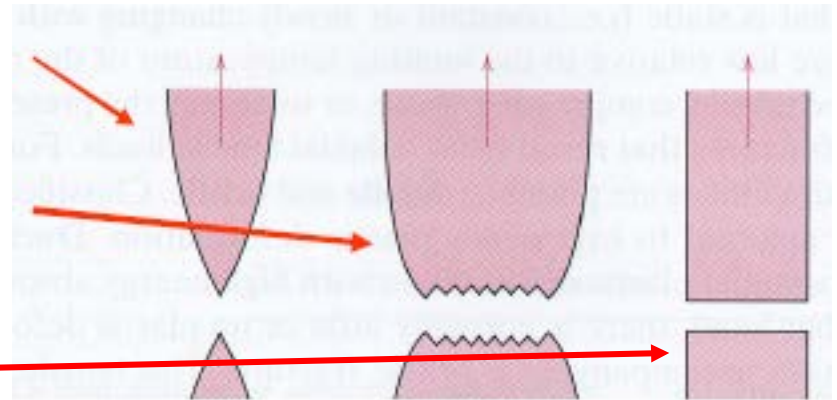
Typer av fraktur

■ Skillnaden illustreraras nedan:

■ (a) mycket smidig fraktur

■ (b) något smidig fraktur

■ (c) totalt skör fraktur

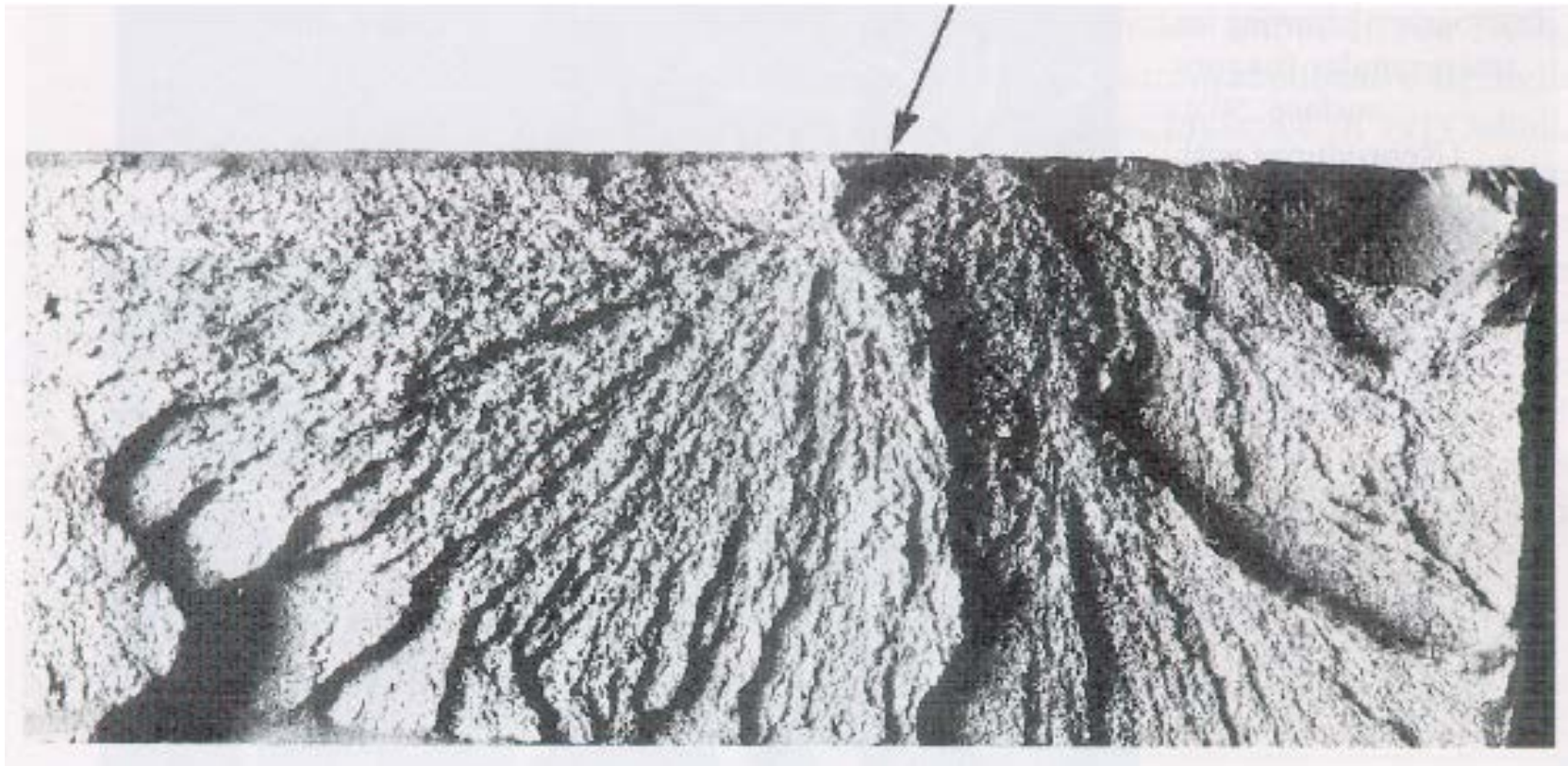


Fraktur kan ske oberoende av kristallkornens gränser (*transgranulär fraktur*) eller längs med korngränserna (*intergranulär fraktur*)



Typer av fraktur

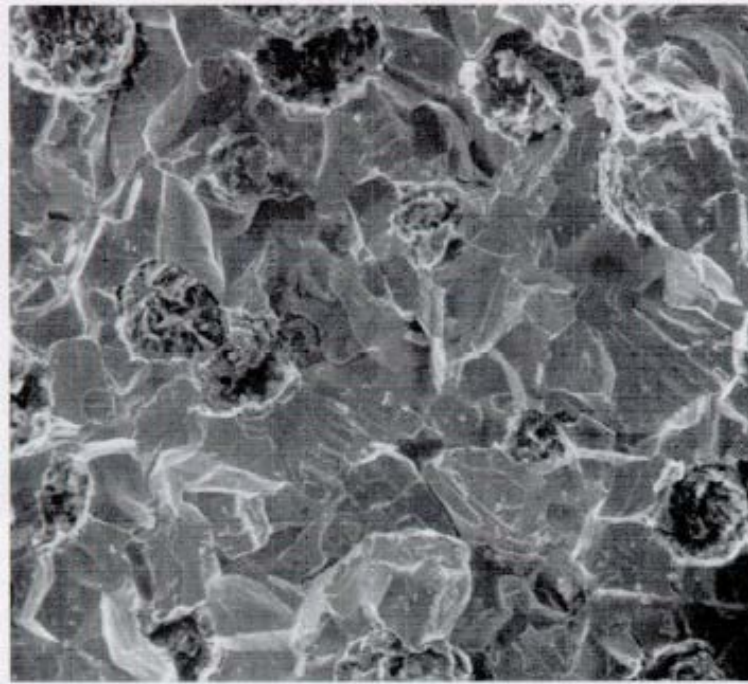
- Bild av skör fraktur; pilen visar den ursprungliga sprickans läge





Typer av fraktur

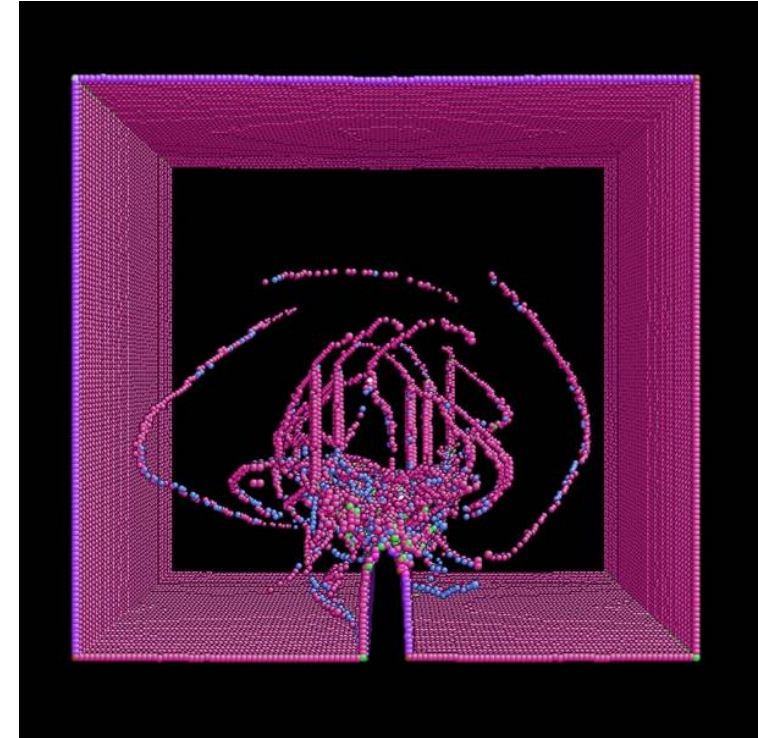
- Vänster: transgranulär fraktur i smidigt gjutjärn
- Höger: intergranulär fraktur: kristallkornen är vackert synliga





Fraktur i keramer vs. metaller

- I keramer kan fraktur ofta leda till mycket plana raka ytor: atombindningar bryts direkt i en rad längs med sprickan
- Orsaken att metaller uppvisar smidig fraktur är att efter att en spricka bildats, multiplicerar den dislokationer framför sig själv, och den höga koncentrationen hindrar sprickan från att fortskrida
- Keramer har lägre dislokationsaktivitet så detta är mindre sannolikt

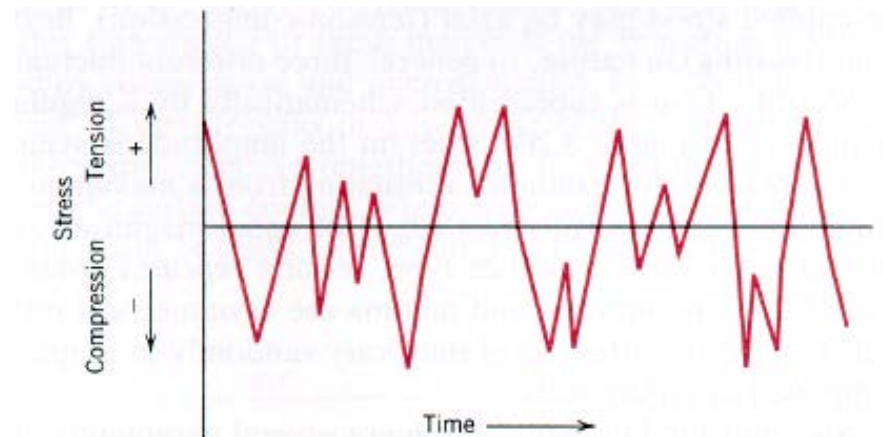


[<http://www2.tokai-sc.jaea.go.jp/ccse/eng/section/sec4.html>]



Utmattning

- Med **utmattning** ("fatigue") avses en effekt där material efter att ha utsetts för lång upprepad cyklisk påfrestning går sönder
 - Utmattning är den viktigaste orsaken till sönderfall av metaller [Callister], och också polymerer och keramer (men inte glas) är känsliga för det
 - Den är 'farlig' därför att efter utmattning kan ett material gå sönder vid betydligt lägre tryck än den ursprungligen hade förmåga att tåla
- Utmattningssönderfall sker ofta i form av skört sönderfall, vilket gör den ytterligare farlig





Krypning

- Med krypning ("creep") avses att ett material minskar på ett deformationstryck som den utsetts för genom att ändra form permanent
 - Detta är alltså inte en elastisk transformation
- Krypning sker definitionsmässigt vid höga temperaturer, så det är inherent en kinetisk process
 - "Hög" temperatur avser typiskt > halva smälttemperaturen
- Deformationen beskrivs med hjälp av en tidsberoende funktion

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \frac{C\sigma^m}{d^b} e^{\frac{-Q}{kT}}$$

där σ är trycket, m och b exponenter, Q en aktiveringsenergi och d kornstorleken i materialet



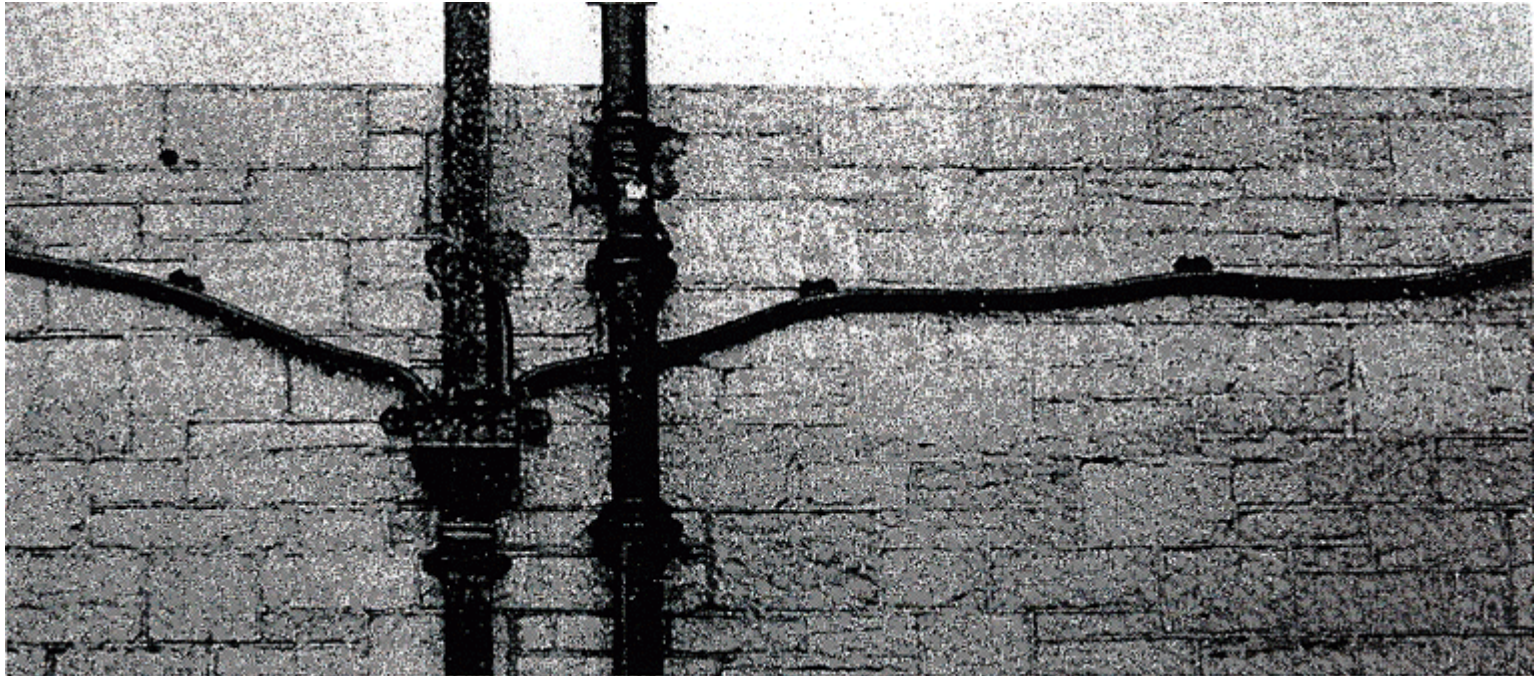
Krypning

- Krypning kan orsakas av dislokationer eller atomdiffusion
- För **dislokationskryp** är $m=4-6$, $b=0$ (inget kornstorleksberoende) och Q = självdiffusions-aktiveringsenergin
- För atomdiffusionkryp med diffusion genom kornena, som orsakar dem att växa i tryckets riktning (**Nabarro-Herring-kryp**) är $m=1$, $b=2$ och Q = självdiffusions-aktiveringsenergin
- För atomdiffusionkryp med diffusion mellan kornena, som orsakar dem att växa i tryckets riktning (**Coble-kryp**) är $m=1$, $b=3$ och Q = korngränsdiffusionenergin $<$ självdiffusions-aktiveringsenergin
 - Pga. den lägre aktiveringsenergin dominerar Coble-kryp ofta vid låga temperaturer

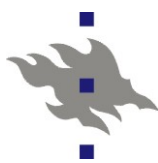


Exempel av kryp

- Kryp i 75 år gamla bly-vattenledningar: böjningen!



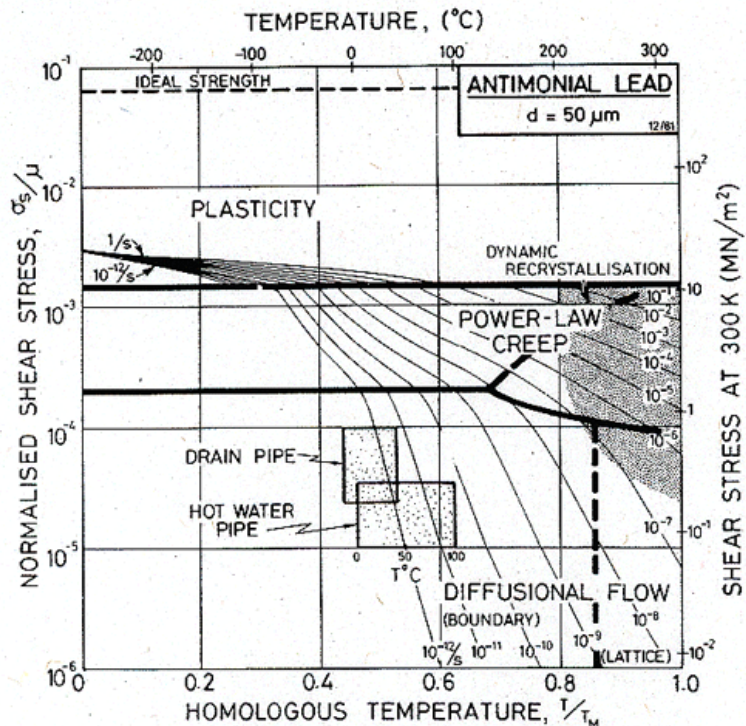
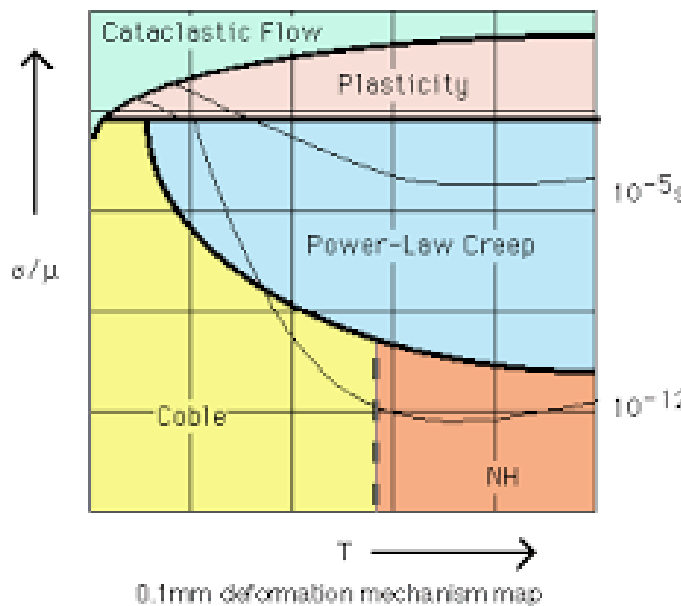
[http://engineering.dartmouth.edu/defmech/Chapter_19.htm]



Ashby eller deformationsmekanism-diagram

- Krypmekanismer illustreras ofta med så kallade Ashby eller deformationsmekanism-diagram, som illustrerar i vilken kombination av temperatur och skjuvtryck en viss krypmekanism förekommer
 - s-1 kurvorna innanför diagrammet visar den väntade krypraten vid en viss punkt i

diagrammet



<http://legacy.virtualexplorer.com.au/special/mea>



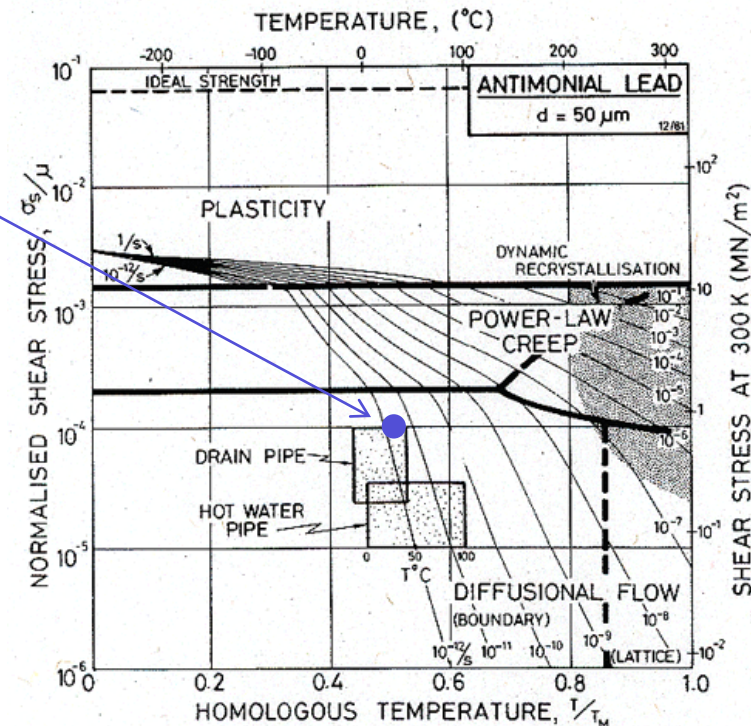
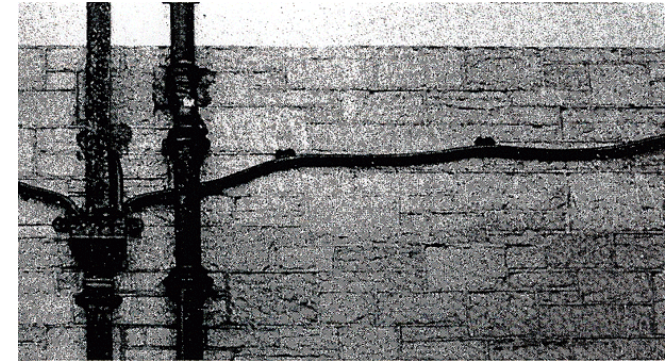
Exempel på hur Ashby-diagram kan läsas

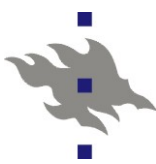
- Låt oss göra en **storleksordnings-** uppskattning a trycket i blyröret som syns I bilden. Vi gissar en massa på 1 kg och ett tvärsnitt på 1 cm². Med dessa får man tryck av storleksordningen $mg/A = 1 \times 10 / 0.01^2 = 10^5 \text{ N/m}^2 = 0.1 \text{ MN/m}^2$. Denna extremt simpla estimat stämmer bra med den mer noggranna som visas I bilden
- Sedan om vi laser grafen vid T=20 °C säger detta att vi är i den blå punkten i grafen. Denna punkt ligger vid ungefär 3×10^{-12} i uttöjningsrat-kurvorna
- Alternativt, kan vi uppskatta uttöjningsratem självständigt från bilden för 75 år med

$$\dot{\gamma} \approx \frac{1 \text{ cm}}{1 \text{ m} \times 75 \text{ years}} = \frac{0.01 \text{ m}}{1 \text{ m} \times 75 \times 365 \times 24 \times 60 \times 60 \text{ s}} \approx 4 \times 10^{-12} \frac{1}{\text{s}}$$

- Överensstämmelsen är överraskande bra !
- Noggrannare beräkning::

http://engineering.dartmouth.edu/defmech/Chapter_19.htm





Exempel på allvarliga krypproblem

- Exempel på system där kryp är ett allvarligt problem är jetmotorer, kärnreaktorer
 - -- och brinnande skyskrapor
 - Orsaken att World Trade Centrena kollapsade år 2001 var till en del kryp i den upphettade stålstommen
- [<http://wtc.nist.gov/NISTNCSTAR1CollapseofTowers.pdf>]

