

PMT3540 - Aula 5 - Efeito da irradiação sobre as estruturas de discordâncias

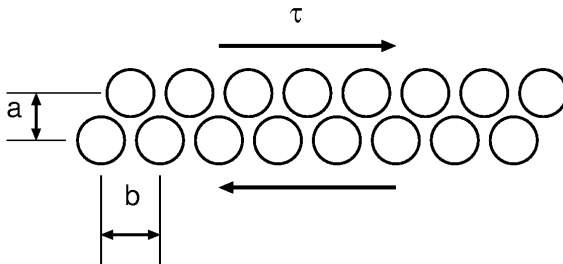
Cláudio Geraldo Schön

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

26 de setembro de 2018

Tensão teórica de escorregamento

Frenkel (1926)



$$\tau = \frac{Gb}{2\pi a} \sin \frac{2\pi x}{b} \Rightarrow \tau_{max} = \frac{b}{a} \frac{G}{2\pi}$$

Tensão teórica de escorregamento

Exemplo: Cu (CFC)

Cu (300K):

- $G = 48 \text{ GPa}$
- $a_0 = 0,36149 \text{ nm}$
- $a = \frac{a_0}{\sqrt{3}} = 0,2087 \text{ nm}$
- $b = \frac{a_0}{\sqrt{2}} = 0,2556 \text{ nm}$
- $\tau_{max} \approx 9,36 \text{ GPa}$
- $\tau_{CRSS} \approx 0,48 \text{ MPa} (\approx 10^{-4} \tau_{max}!)$

Orowan, Polanyi, Taylor (1934, independentemente) $\Rightarrow$ discordâncias.

Cinemática de discordâncias

Velocidade das discordâncias

Discordâncias se movem por:

- Escorregamento (*Glide*)
- Ascenssão (*Climb*)

Para o escorregamento:

$$\ln v_g \propto \ln \tau \Rightarrow v_g = \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m$$

e

$$\ln v_g \propto \frac{1}{T} \Rightarrow v_g = v_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_g}{k_B T} \right)$$

Cinemática de discordâncias

Ascensão

- Importante para discordâncias em cunha e para anéis (*loops*) prismáticos.
- Ocorre pela emissão/absorção de lacunas/intersticiais.

Discordância em hélice

Campo de deslocamento

Em coordenadas cilíndricas (z ao longo da linha de discordância):

$$u_r = u_\theta = 0$$

e

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \theta$$

Em coordenadas cartesianas:

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

Discordância em hélice

Campo de deformação

Da definição:

$$\varepsilon_{\theta z} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} = \frac{b}{2\pi r}$$

todos os outros termos do tensor são nulos.

Em coordenadas cartesianas:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \frac{b}{2\pi r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin \theta \\ 0 & 0 & -\cos \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & 0 \end{pmatrix}$$

Discordância em hélice

Campo de tensão

O campo de tensão é dado por:

$$\sigma_{\theta z} = G\varepsilon_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r}$$

Todos os outros termos se anulam.

Em coordenadas cartesianas:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \frac{Gb}{2\pi r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin \theta \\ 0 & 0 & -\cos \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & 0 \end{pmatrix}$$

Discordância em cunha

Campo de deslocamento

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left[\tan^{-1} \frac{y}{x} + \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{xy}{x^2 + y^2} \right) \right]$$

$$u_y = \frac{b}{2\pi} \left[-\frac{\mu}{(\lambda + 2\mu)} \ln \frac{x^2 + y^2}{c} + \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{y^2}{x^2 + y^2} \right) \right]$$

$$u_z = 0$$

onde $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ e $\mu = G$ são as constantes de Lamé. A constante c é introduzida na equação para fazer o argumento do logaritmo adimensional, mas na determinação das deformações (que são derivadas dos deslocamentos) ele acaba se anulando.

Discordância em cunha

Campo de deformação

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \frac{b}{2\pi(x^2+y^2)^2} \begin{pmatrix} -y \left[\frac{\mu y^2 + (2\lambda + 3\mu)x^2}{(\lambda + 2\mu)} \right] & \frac{x}{(1-\nu)} (x^2 - y^2) & 0 \\ \frac{x}{(1-\nu)} (x^2 - y^2) & -y \left[\frac{\mu y^2 - (2\lambda + \mu)x^2}{(\lambda + 2\mu)} \right] & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Discordância em cunha

Campo de tensão

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \frac{Gb}{\pi(1-\nu)r} \begin{pmatrix} -\sin \theta (2 + \cos 2\theta) & \cos \theta \cos 2\theta & 0 \\ \cos \theta \cos 2\theta & \sin \theta \cos 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & -2\nu \sin \theta \end{pmatrix}$$

Energia da discordância

Discordância em hélice

Lembrando (energia por unidade de volume em um campo elástico):

$$u_{el} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=r,\theta,z} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$$

Aplicando à discordância em hélice:

$$u_{el} = \frac{1}{2} \sigma_{\theta z} \varepsilon_{\theta z} = \frac{Gb^2}{8\pi^2 r^2}$$

Integrando em r obtemos a energia por unidade de comprimento de linha.

$$U_{dis} = \int_{r_0}^{r_{max}} u_{el} 2\pi r dr = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c \quad (1)$$

onde r_0 é o raio do núcleo, que corresponde à região em que a elasticidade linear deixa de ser válida. A energia dessa região é adicionada como uma constante de integração (U_c).

Energia da discordâncias

Discordâncias em cunha e mistas

Para o caso de discordâncias em cunha o resultado para a energia elástica por unidade de comprimento de linha é:

$$U_{dis} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c$$

Para o caso geral (discordâncias mistas):

$$U_{dis} = \left[\frac{Gb^2 \sin^2 \psi}{4\pi(1-\nu)} + \frac{Gb^2 \cos^2 \psi}{4\pi} \right] \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c(\psi) =$$

$$\frac{Gb^2(1-\cos^2 \psi)}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c(\psi)$$

onde ψ é o ângulo no plano que contém a linha da discordância entre a direção da linha e a direção correspondente à configuração em cunha.

Energia da discordância

Valores típicos

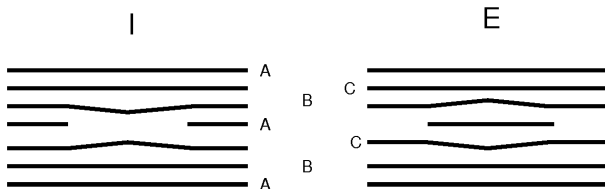
- $r_0 \approx 5b$
- r_{max} : livre caminho médio entre discordâncias
- $U_c \approx 0,1 u_{el}$

$$U_{dis} = \alpha Gb^2$$

com $\alpha \approx 0,5 - 1,0$.

Anéis de Frank

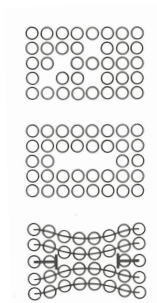
Cascata de dano: enorme população de lacunas e de intersticiais fora de equilíbrio → nucleação de anéis de Frank.



Anéis de Frank intrínsecos (I) e extrínsecos (E) → Defeito de empilhamento (DE).

Formação de anéis de Frank

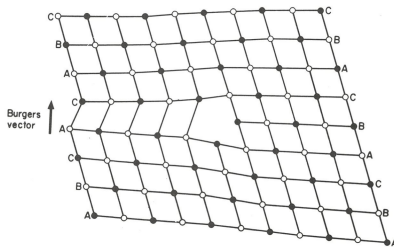
Formação de um anel intrínseco pela condensação de lacunas fora de equilíbrio.



Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Parcial de Frank

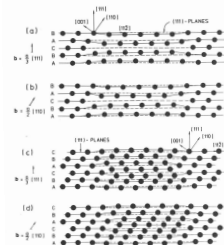
A discordância que delimita um anel de Frank logo após sua formação não é uma discordância completa, mas sim uma parcial de Frank, com vetor de Burgers $b = \frac{1}{3}[111]$, essa discordância é sésil.



Produção de anéis prismáticos em metais de alta EDE

$$\frac{1}{3}[111] + \frac{1}{6}[11\bar{2}] \rightarrow \frac{1}{2}[110]$$

Representação esquemática da evolução de anéis de Frank intrínsecos e extrínsecos para anéis prismáticos.



Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Evolução dos anéis de Frank

Produção de anéis prismáticos em metais de alta EDE

As parciais de Frank podem se dissociar para reação:

$$\frac{1}{3}[111] + \frac{1}{6}[11\bar{2}] \rightarrow \frac{1}{2}[110]$$

Exemplo em Al- 5%Mg, note o desaparecimento das franjas de interferência no anel A.

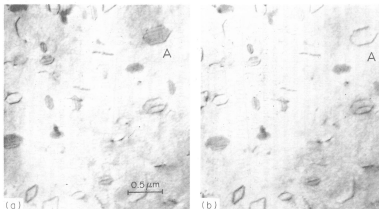


FIG. 5.12. Prismatic and sessile dislocation loops in an aluminium 3.5 per cent magnesium alloy quenched from 550°C into silicone oil at -20°C. (a) Immediately after quenching, some of the loops, e.g. A, contain stacking faults and are Frank sessile dislocations. (b) After being heated slightly, stacking fault in one of the loops has disappeared indicating that the loop is now a perfect dislocation. (From Westmacott, Barnes, Hull and Smallman, *Phil. Mag.* 6, 929, 1961.)

Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Evolução dos anéis de Frank

Produção de anéis prismáticos em metais de alta EDE

As parciais de Frank podem se dissociar para reação:

$$\frac{1}{3}[111] + \frac{1}{6}[11\bar{2}] \rightarrow \frac{1}{2}[110]$$

A reação de dissociação depende do balanço de energia entre o anel de Frank e o custo de formação do anel prismático, que tem que ser compensado pelo desaparecimento do DE. Hull e Bacon deduzem a expressão:

$$\gamma_{DE} > \frac{Ga^2}{24\pi r} \left(\frac{2 - \nu}{1 - \nu} \right) \ln \left(\frac{2r}{r_0} \right) \quad (2)$$

r : raio do anel.

Usando valores típicos para o Al, os autores estimam que a EDE tem que ser superior a 60 mJ m^{-2} para que a reação seja energeticamente favorável.

Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Evolução dos anéis de Frank

Tetraedros de defeitos de empilhamento em metais de baixa EDE

Em metais de baixa EDE, a parcial de Frank pode se decompor pela reação:

$$\frac{1}{3}[111] \rightarrow \frac{1}{6}[101] + \frac{1}{6}[121]$$

A discordância $\frac{1}{6}[101]$ é conhecida pelo termo em inglês "stair-rod" e a parcial de Shockley é emitida em um plano de escorregamento que intersecta o plano do anel original.

