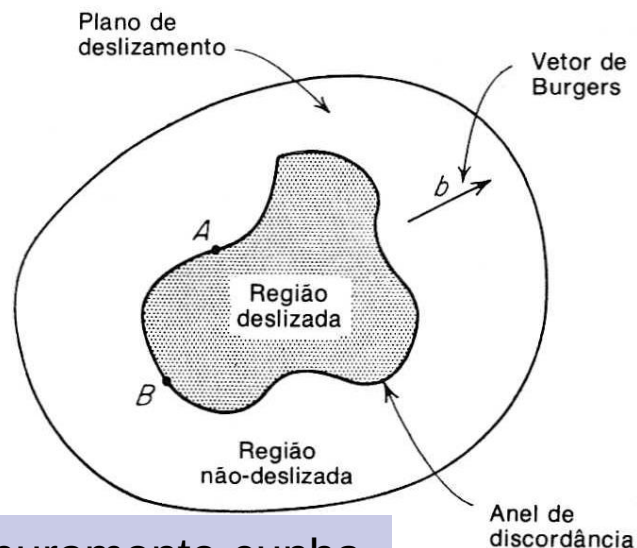


LOM3036
Metalurgia Física

Aula 5
Teoria das Discordâncias

Profa. Maria Ismênia Sodero
maria.ismenia@usp.br

Em A = puramente hélice



Em B = puramente cunha

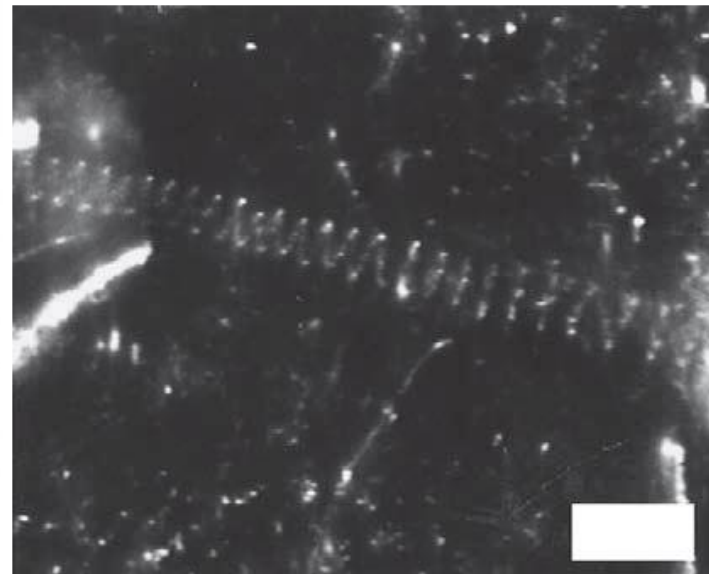


Fig. 5.4 Anel de discordância num plano de deslizamento (esquemático).

Spiral or helical dislocation in CaF_2 (fluorite) revealed by the decoration technique. (After Bontinck and Amelinckx, *Phil. Mag.* 2, 94, 1957.)

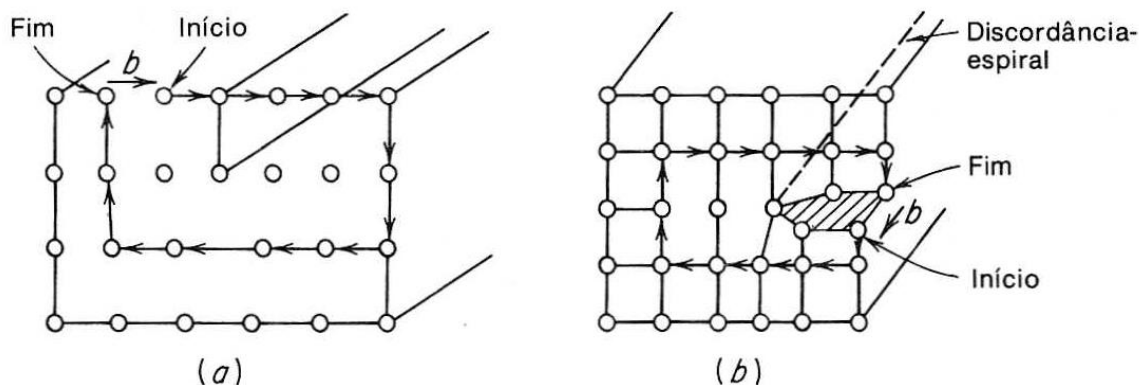
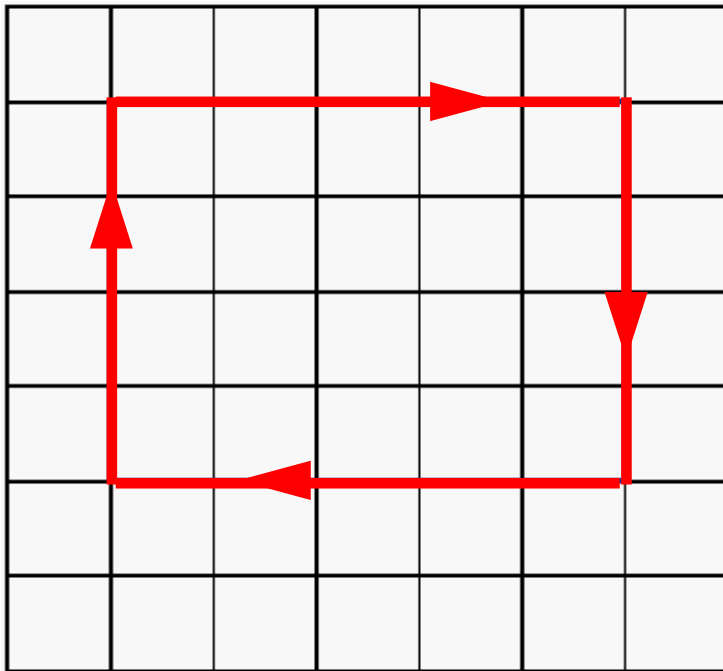


Fig. 5.5 Circuito de Burgers. (a) Em torno de uma discordância-aresta positiva; (b) em torno de uma discordância-espiral direita.

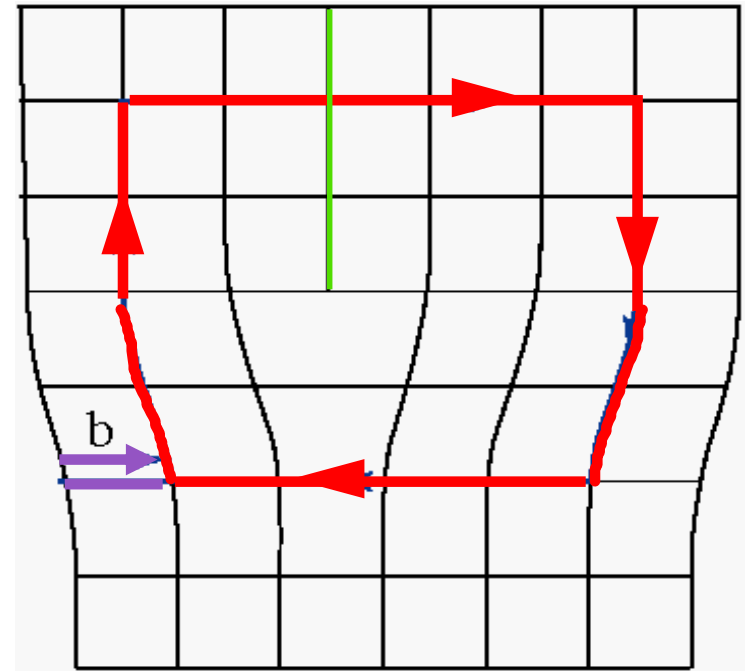
O vetor de Burgers (b)

Cristal Perfeito



O circuito se fecha.

Cristal c/ discordância em linha



O circuito não se fecha. O vetor necessário para fechar o circuito é o **vetor de Burgers**, b , que caracteriza a discordância. Neste caso b é *perpendicular* a discordância

O vetor de Burgers (b)

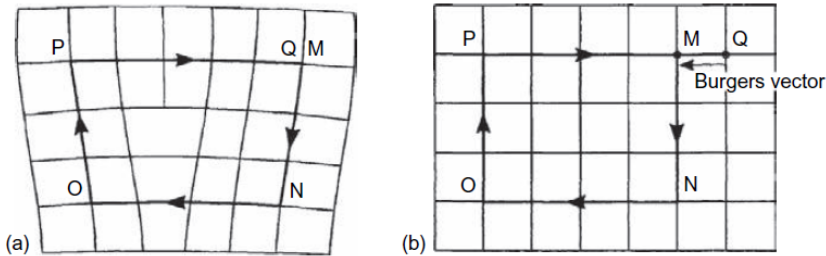


FIGURE 1.19

(a) Burgers circuit round an edge dislocation with positive line sense into the paper (see text); (b) the same circuit in a perfect crystal; the closure failure is the Burgers vector.

- (a) O vetor de Burgers de uma discordância em cunha é normal à linha da discordância.
- (b) O vetor de Burgers de uma discordâncias em hélice é paralelo à linha da discordâncias

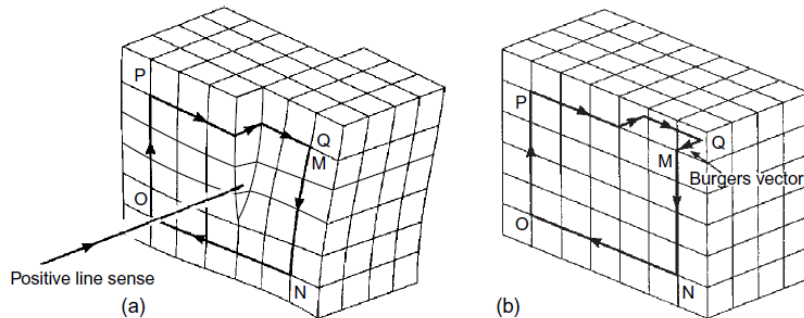
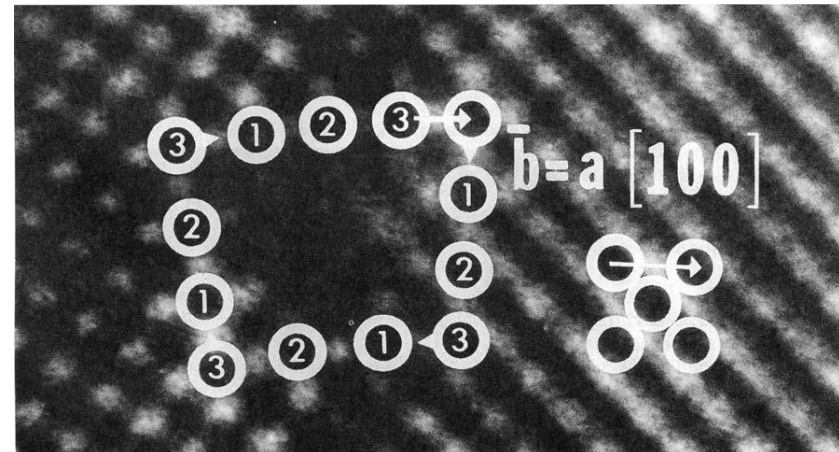
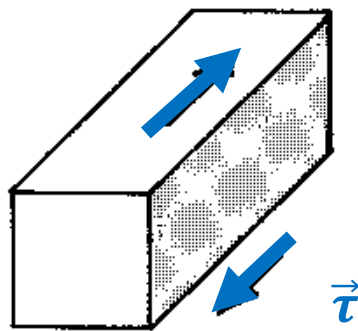
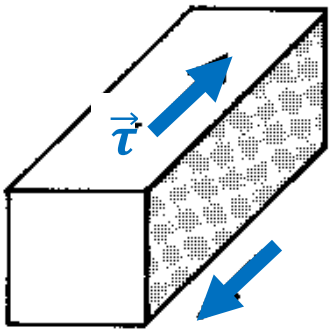


FIGURE 1.20

(a) Burgers circuit round a left-handed screw dislocation with positive line sense in the direction shown; (b) the same circuit in a perfect crystal; the closure failure is the Burgers vector.

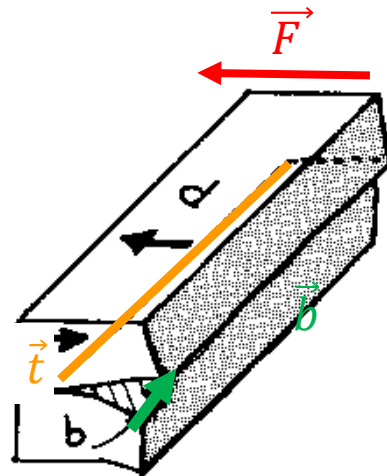
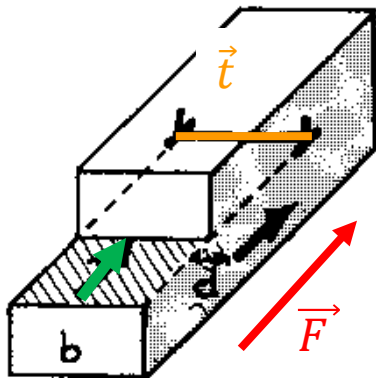


Força sobre as discordâncias



$\vec{\tau}$ = *tensão cisalhante*

$\vec{t}$ = *vetor linha da discordância*

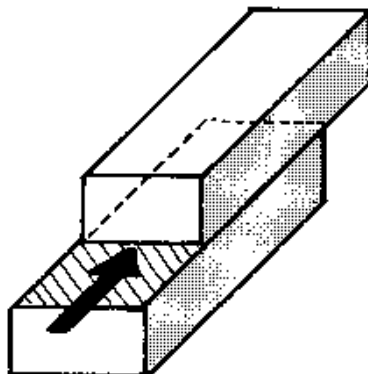
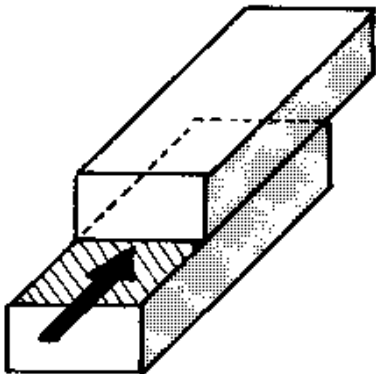


$\vec{b}$ = *vetor de Burgers*

$\vec{F}$ = *força responsável pela movimentação das discordâncias*

Cunha

Hélice



Força sobre as discordâncias

Equação de Peach- Koehler:

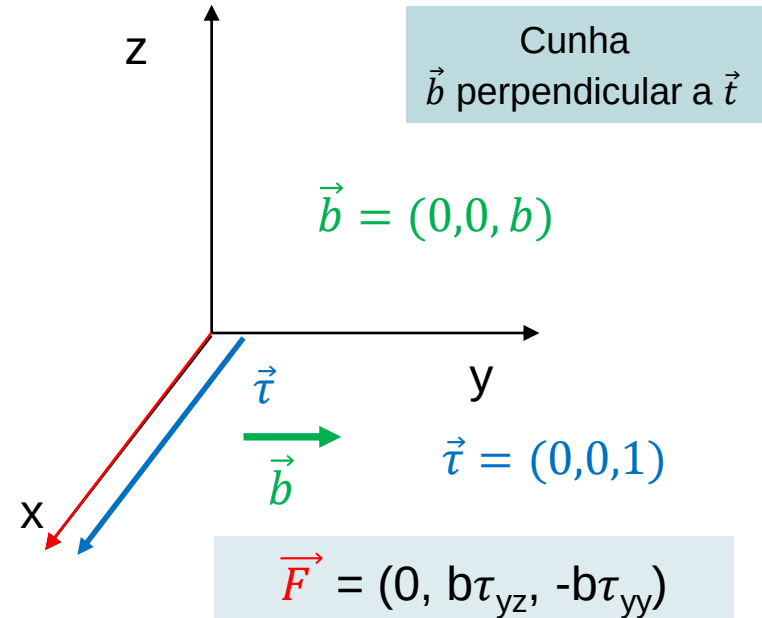
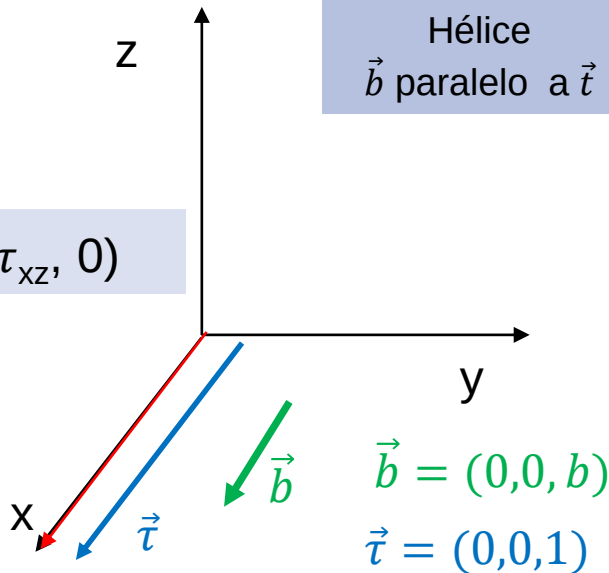
A força de Peach-Koehler é a responsável pelo movimento das discordâncias, que é o mecanismo fundamental da deformação plástica nos materiais.

$$\vec{F} = (\vec{b} \cdot \vec{\tau}) \times \vec{t}$$

$$F = b \cdot \tau \text{ [N/m]}$$

Hélice
 $\vec{b}$ paralelo a $\vec{t}$

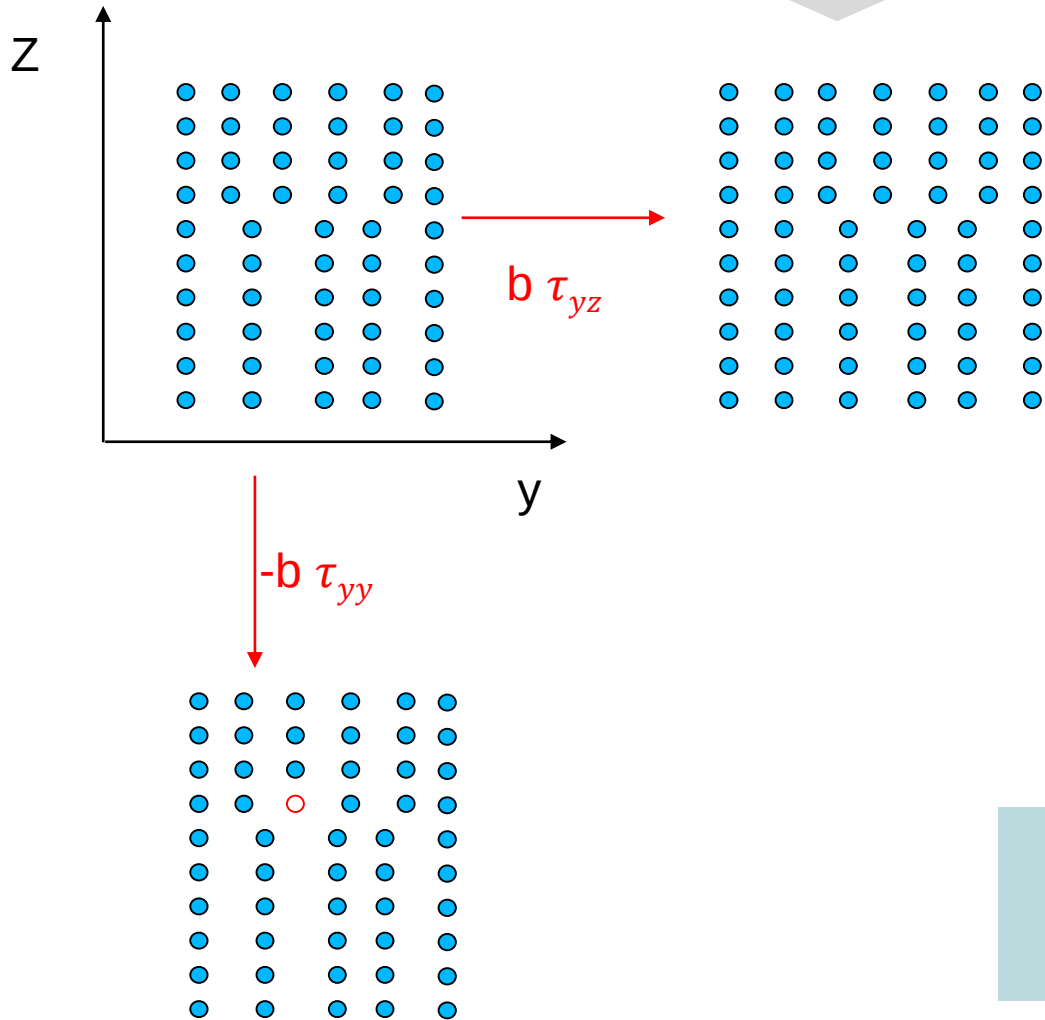
$$\vec{F} = (b\tau_{yz}, -b\tau_{xz}, 0)$$



Plano de escorregamento
contém $\vec{b}$ e $\vec{t}$

$$\bar{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix}$$

Movimento das Discordâncias



Glide

Escorregamento em y -
movimento conservativo

Climb

Escalagem – movimento
não conservativo –
alteração de volume

Escalagem de discordâncias (Climb)

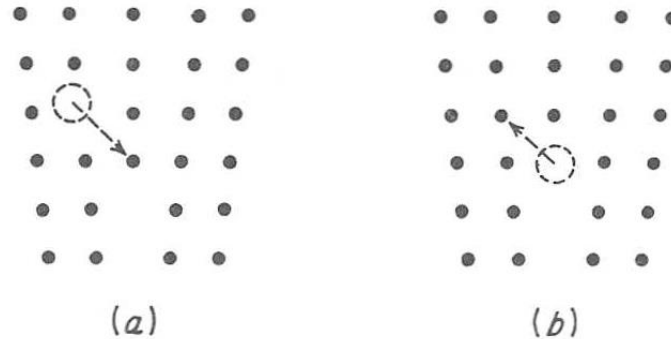
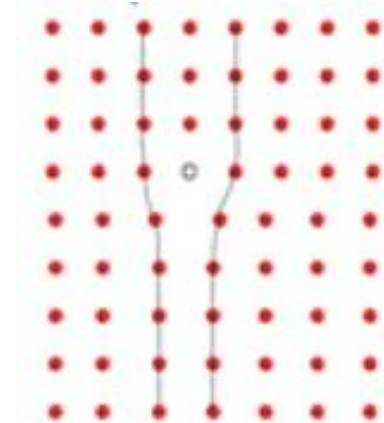


Fig. 5.18 (a) Difusão de lacuna para uma discordância-aresta; (b) a discordância escala uma posição atômica da rede.

Movimento não conservativo



Escalagem –
Consumo ou
criação de
vacâncias

Escalagem de discordâncias (Climb)

Difícilmente, no processo de escalagem, são adicionadas ou retiradas fileiras atômicas inteiras do semiplano extra. Na realidade, pequenos grupos de lacunas, ou mesmo lacunas individuais, se difundem para a discordância e a escalagem ocorre sobre um curto segmento da linha de discordância. Isto dá origem à formação de pequenos *degraus* ao longo da linha da discordância. A escalagem se verifica através da nucleação e movimento de degraus.

Existirá um número de degraus por comprimento unitário de discordância, em equilíbrio termodinâmico, dado por

$$n_j = n_0 e^{-U_j/kT} \quad (5-23)$$

Onde:

n_0 é o número de posições atômicas por comprimento unitário de discordância

U_j é a energia de ativação necessária para nuclear um degrau. Esta energia de ativação é da ordem de 1 eV.

Escalagem de discordâncias

- Feita pelas discordâncias em cunha
- Como minimizar o efeito da escalagem:
 - Utilizar materiais de maior temperatura de fusão
 - Minimizar o efeito da difusão – adicionar elementos de liga de elevado peso atômico
 - Alteração do tamanho de grão – principalmente quando a difusão é favorecida nos contornos de grão.

Temperatura é o fator de maior impacto, mas pode ser influenciada pela microestrutura (tamanho de grão)

Para temperaturas menores - movimento de desvio é favorecido.

Movimento das Discordâncias

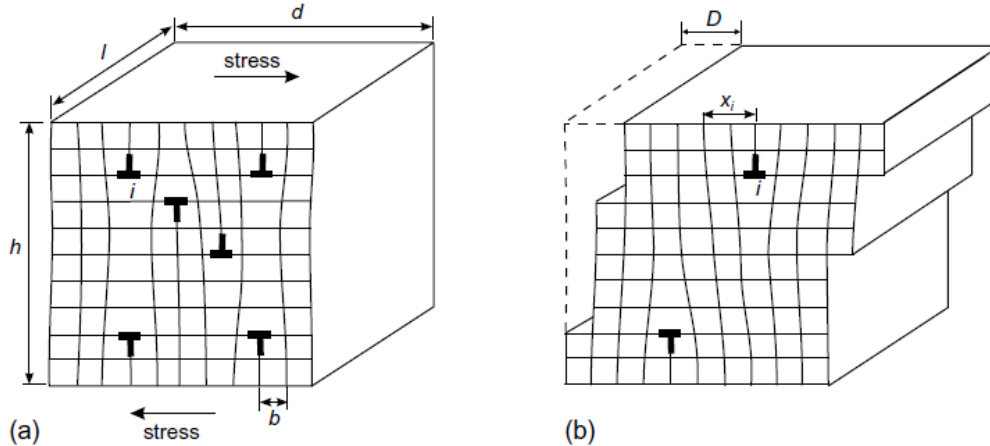


FIGURE 3.25

(a) Edge dislocations in a crystal subjected to an external shear stress resolved for slip. (b) Plastic displacement D produced by glide of the dislocations. Dislocation i has moved a distance x_i as shown.

Se uma discordância se mover completamente através do plano de deslizamento pela distância d , ela contribui b para o deslocamento total D . Como b é pequeno em comparação com d e h , a contribuição feita por uma discordância que se move uma distância x_i pode ser considerada como a fração (x_i/d) de b .

Assim, se o número de discordâncias que se movem é N , o deslocamento total é

$$D = \frac{b}{d} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\epsilon = \frac{D}{h} = \frac{b}{hd} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\epsilon = b \rho_m \bar{x}$$

Deslizamento Cruzado / Deslizamento com Desvio

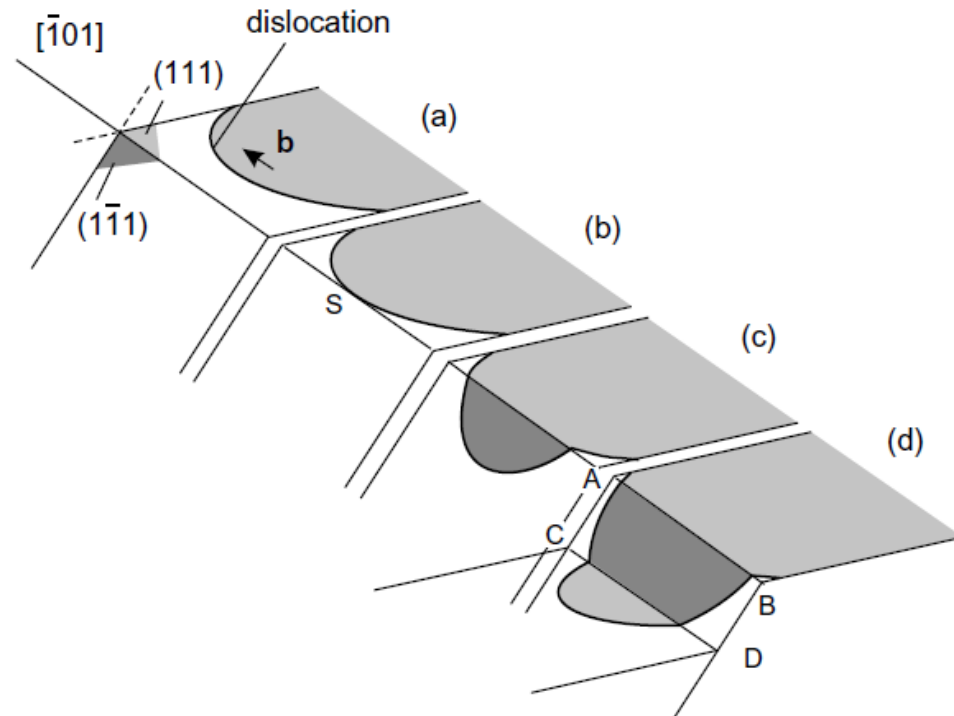


FIGURE 3.9

Sequence of events (a), (b), (c) in cross slip in a face-centered cubic metal. The $[1\bar{1}1]$ direction is common to the (111) and $(1\bar{1}1)$ close-packed planes. A screw dislocation at S is free to glide in either of these planes. Cross slip produces a non-planar slip surface. Double cross slip is shown in (d).

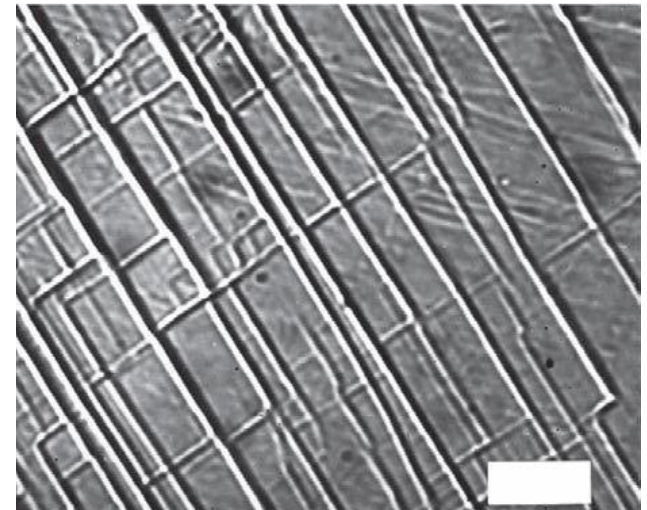


FIGURE 3.10 Cross slip on the polished surface of a single crystal of 3.25 per cent silicon iron.

Importância do Deslizamento com Desvio

- ✓ Independente da Temperatura;
- ✓ Colabora muito com deformação plástica e com a tenacidade do corpo do componente;
- ✓ Materiais com alta EFE (parciais próximas) – tem deslizamento cruzado facilitado, se as parciais forem hélice;
- ✓ Favorece a recuperação – diminuição da densidade de discordâncias (reduz volume de discordâncias) – aumenta a estabilidade termodinâmica – RM diminui.

Velocidade da Discordância

As discordâncias movem-se por deslizamento a velocidades que dependem da:

- ✓ tensão de cisalhamento aplicada,
- ✓ pureza do cristal,
- ✓ Temperatura;
- ✓ tipo de discordância.

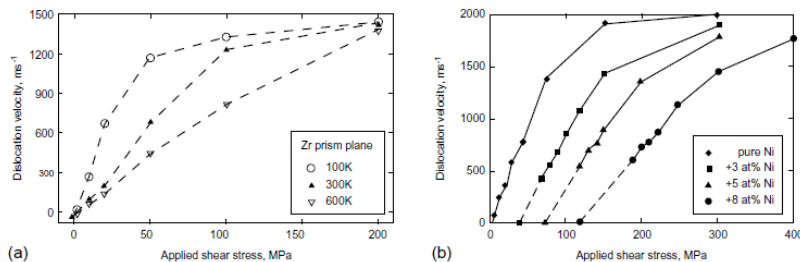


FIGURE 3.13

Dislocation velocity versus applied shear stress obtained by computer simulation of an edge dislocation. (a) Pure zirconium at three temperatures. (From Khater and Bacon, *Acta Mater.* 58 2978, 2010. Copyright (2010) with permission from Elsevier. (b) Pure nickel and Ni-Al solid solutions at 300 K. (With permission from Rodary, Rodney, Provile, Brechet and Martin, *Phys. Rev. B* 70, 05411, 2004. Copyright (2004) by the American Physical Society.)

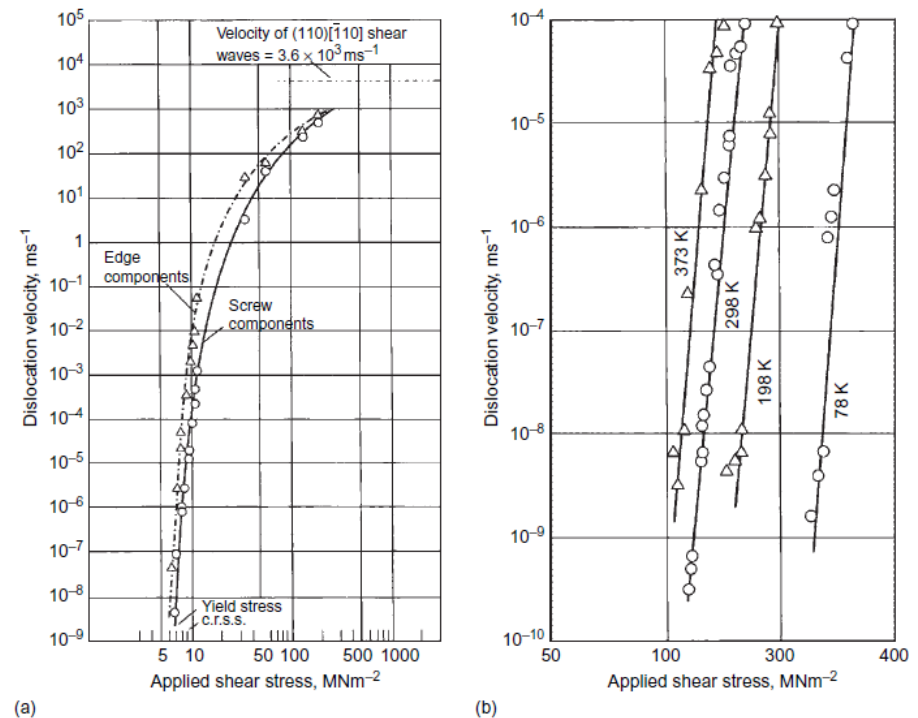
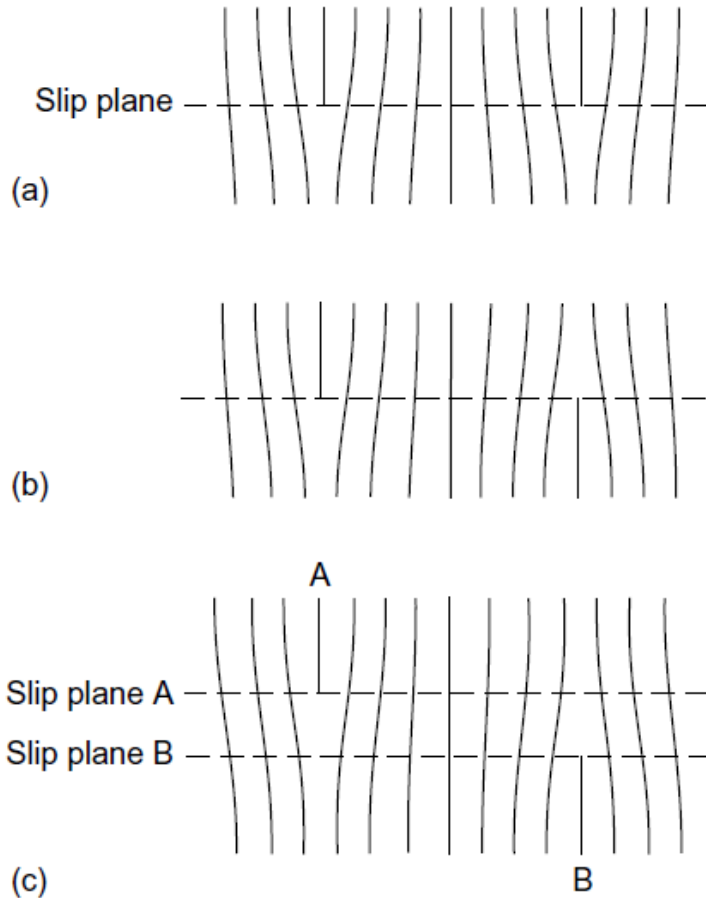


FIGURE 3.11

(a) Stress dependence of the velocity of edge and screw dislocations in lithium fluoride. (From Johnston and Gilman, *J. Appl. Phys.* 30, 129, 1959.) (b) Stress dependence of the velocity of edge dislocations in 3.25 per cent silicon iron at four temperatures. (After Stein and Low, *J. Appl. Phys.* 31, 362, 1960.)

Força entre discordâncias



Disposição de discordâncias de borda com vetores de Burgers paralelos situados em planos de deslizamento paralelos.

(a) discordâncias semelhantes no mesmo plano de deslizamento,

(b) discordâncias diferentes no mesmo plano de deslizamento, e

(c) discordâncias diferentes em planos de deslizamento separados por alguns espaços atômicos.

Força entre discordâncias

$$\tau_{xx} = -\tau_0 y \frac{(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

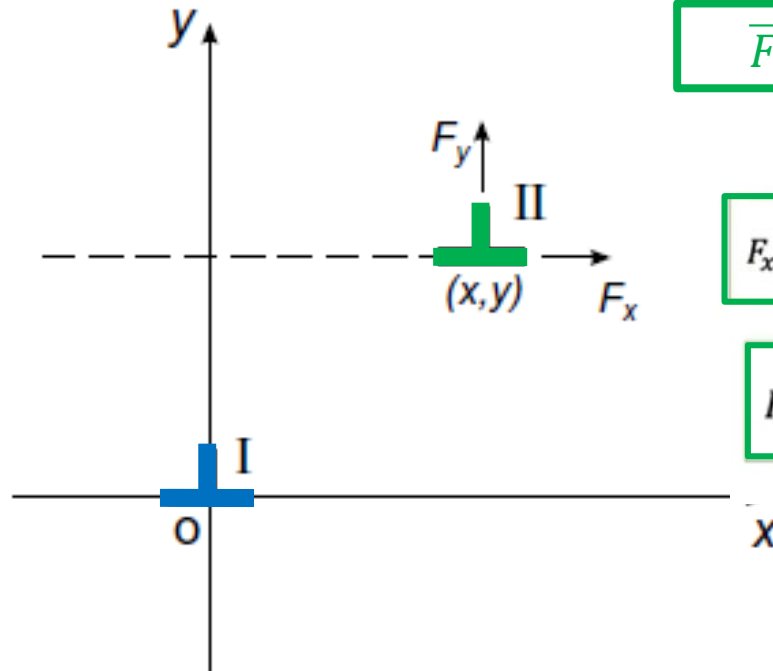
$$\tau_{yy} = \tau_0 y \frac{(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\tau_{zz} = \nu(\tau_{xx} + \tau_{yy})$$

$$\tau_{xy} = \tau_0 x \frac{(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\tau_0 = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$$

$$\bar{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & 0 \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{zz} \end{pmatrix}$$

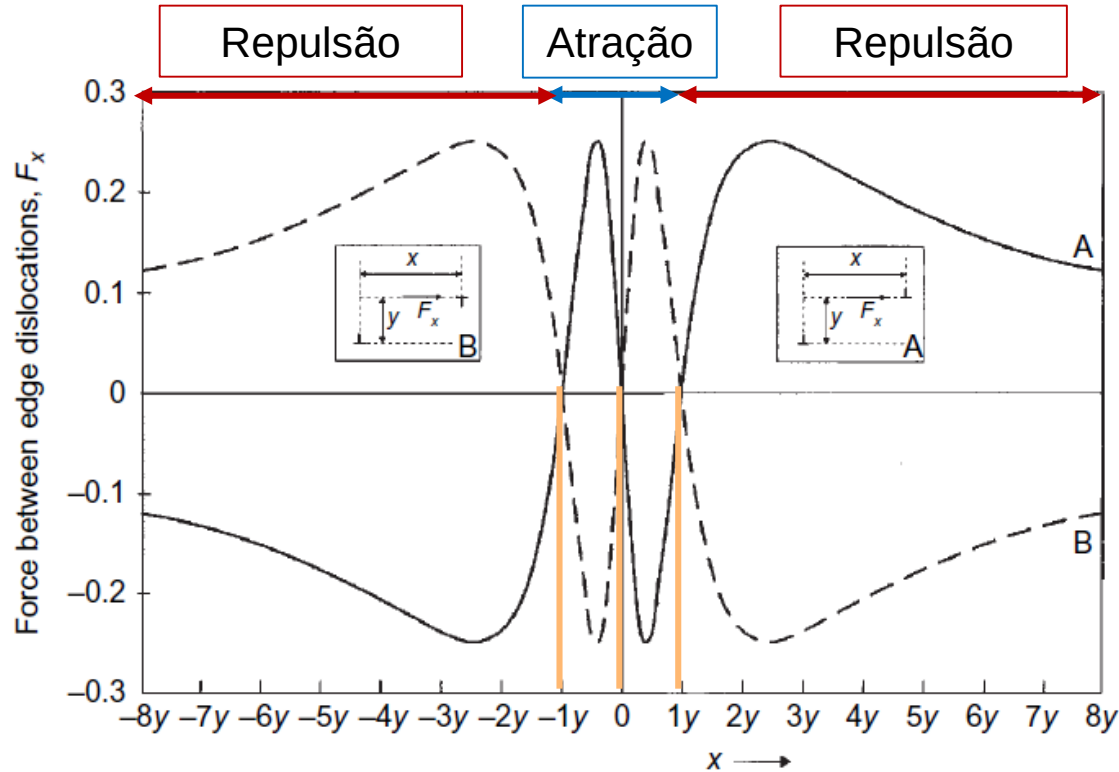


$$\vec{F} = (b\tau_{xy}, -b\tau_{xx}, 0)$$

$$F_x = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} x \frac{(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$F_y = -b\tau_0 y \frac{(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

Forças entre discordâncias



Curva A – linha cheia

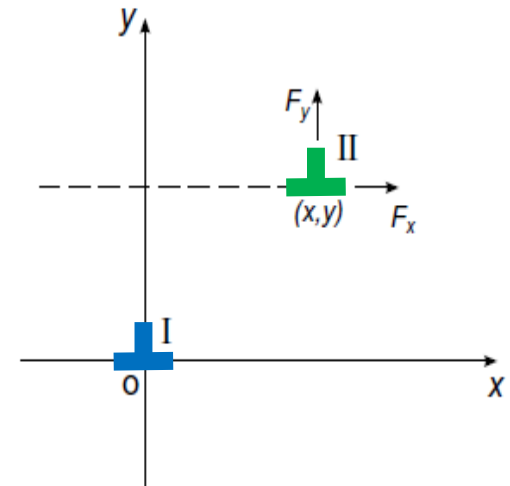


FIGURE 4.14

Glide force per unit length between parallel edge dislocations with parallel Burgers vectors from equation (4.36). Unit of force F_x is $Gb^2/2\pi(1 - \nu)y$. The full curve A is for like dislocations and the broken curve B for unlike dislocations.

Forças entre discordâncias

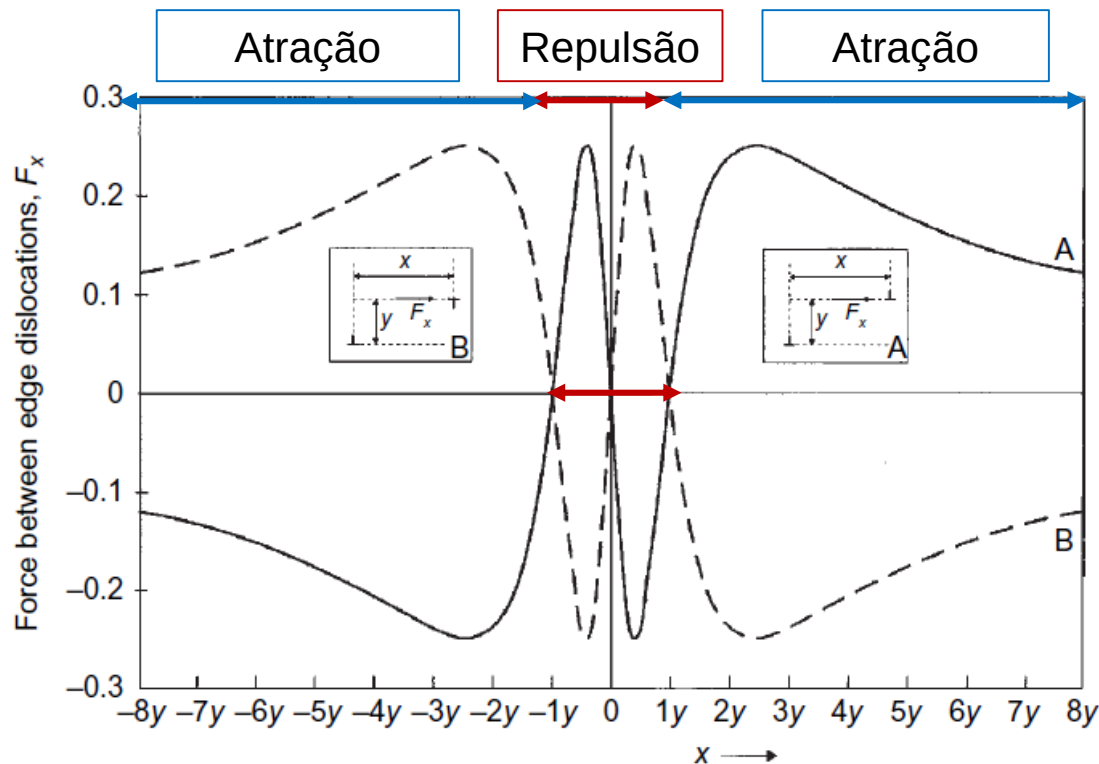
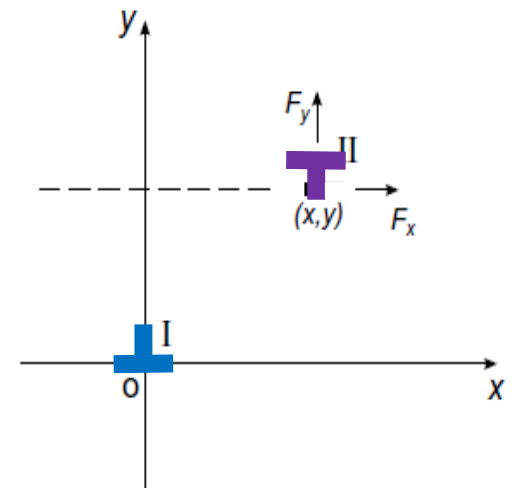


FIGURE 4.14

Glide force per unit length between parallel edge dislocations with parallel Burgers vectors from equation (4.36). Unit of force F_x is $Gb^2/2\pi(1-\nu)y$. The full curve A is for like dislocations and the broken curve B for unlike dislocations.

Curva B – linha pontilhada



Arranjo de Discordâncias

Quando a distância entre elas é nula:



Atração

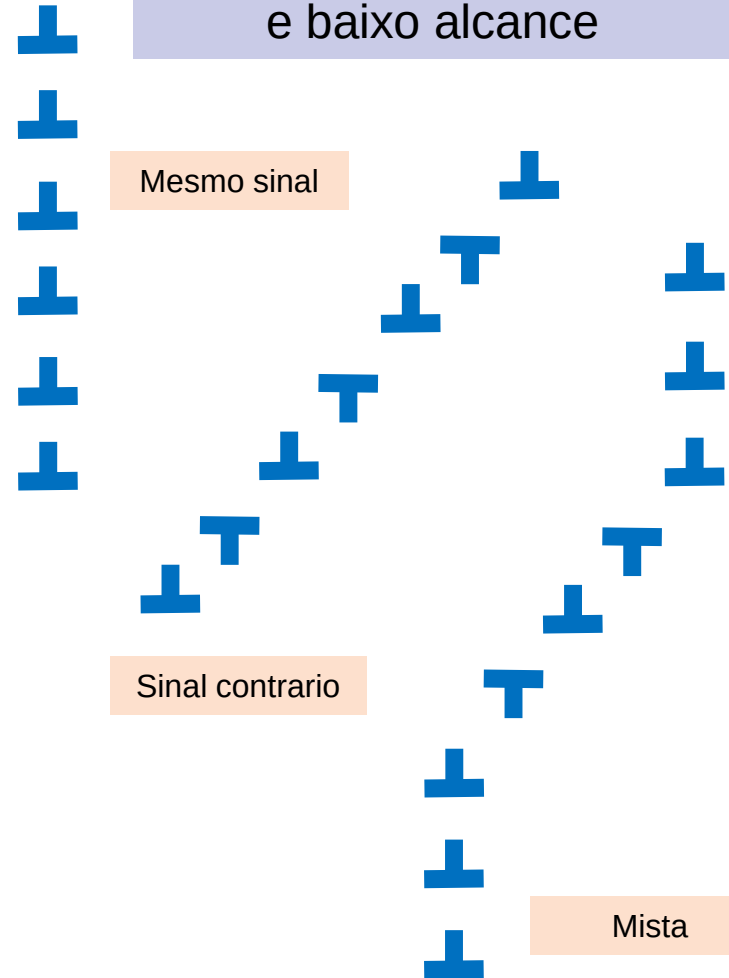


Repulsão



Combinam-se
originando os
contornos de grão
de baixo angulo

Arranjos de baixa Energia
e baixo alcance



Arranjos de Discordâncias

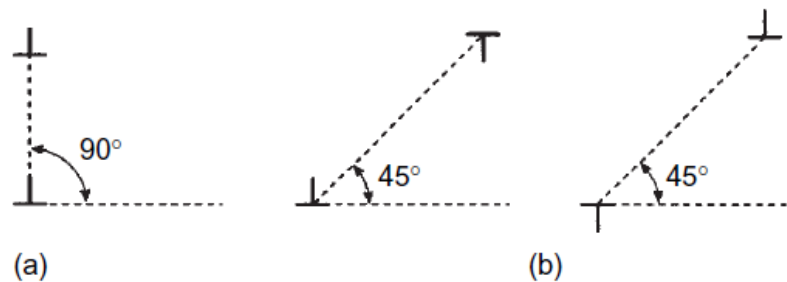
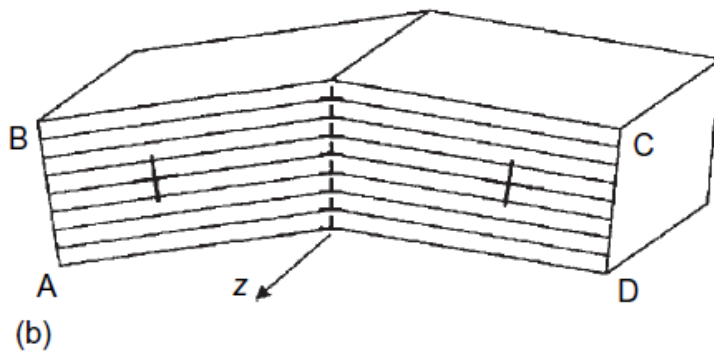
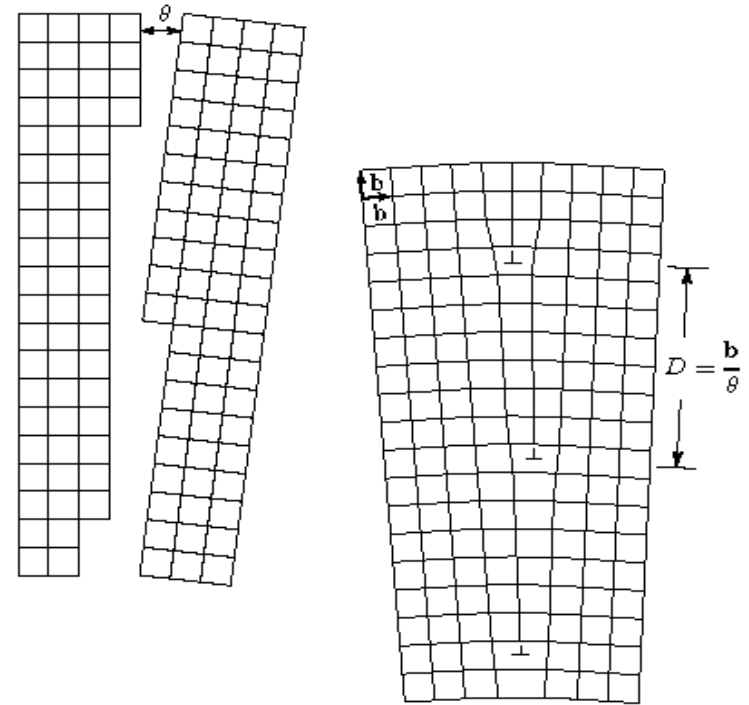


FIGURE 4.15

Stable positions for two edge dislocations of (a) the same sign and (b) opposite sign.



Mesmo sinal – discordâncias arranjadas periodicamente na forma de contorno de baixo angulo



$$\theta = \frac{b}{D}$$

Quanto menor o D, maior é a inclinação, maior a desorientação entre os grãos.

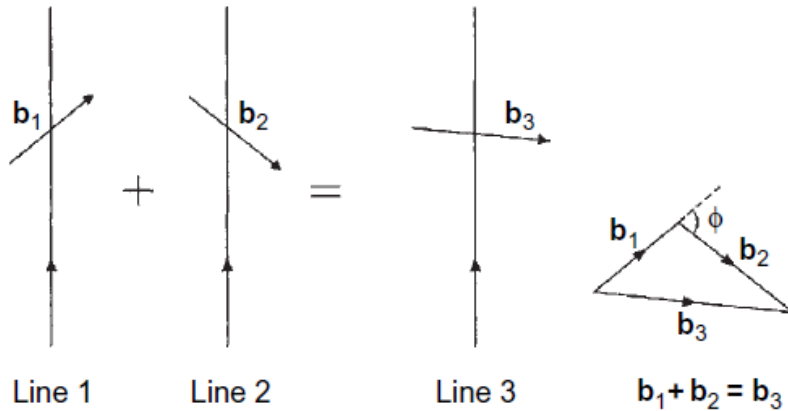
Interação entre Discordâncias

Lei de Frank

Reações entre discordâncias é energeticamente favorável ou não!

Expressão Geral da E. Elástica de uma discordância

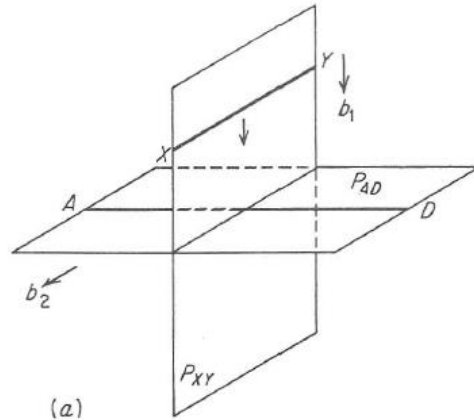
$$\frac{dE_{el}}{l} \approx \alpha G b^2$$



Se $b_1^2 + b_2^2 > b_3^2 \rightarrow$ interação favorável energeticamente

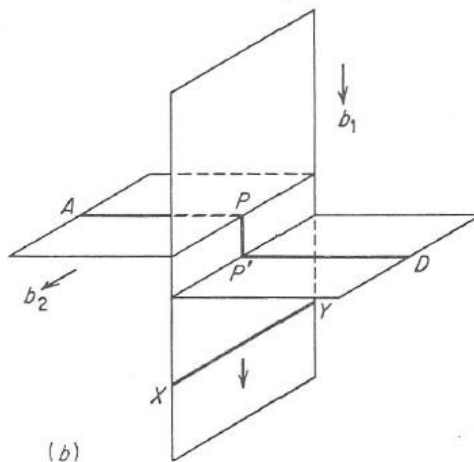
Se $b_1^2 + b_2^2 < b_3^2 \rightarrow$ interação desfavorável energeticamente

Interação entre Discordâncias



Este degrau resultante da interseção de duas discordâncias-aresta possui uma orientação-aresta, podendo, desta forma, deslizar prontamente com o resto da discordância.

Degrau = vetor de Burgers de uma das discordâncias é normal à linha da outra discordância que a corta [b] é normal a AD e lhe causa um degrau, enquanto b2 é paralelo à XY, onde não se forma degrau.



Quando duas discordâncias se cruzam, cada uma adquire um desvio igual em direção e comprimento ao vetor de Burgers da outra,

Fig. 5.19 Interseção de duas discordâncias-aresta. (De W. T. Read, Jr. *Dislocations in Crystals*, MacGraw-Hill Book Company, New York, 1953.)

Interação entre Discordâncias

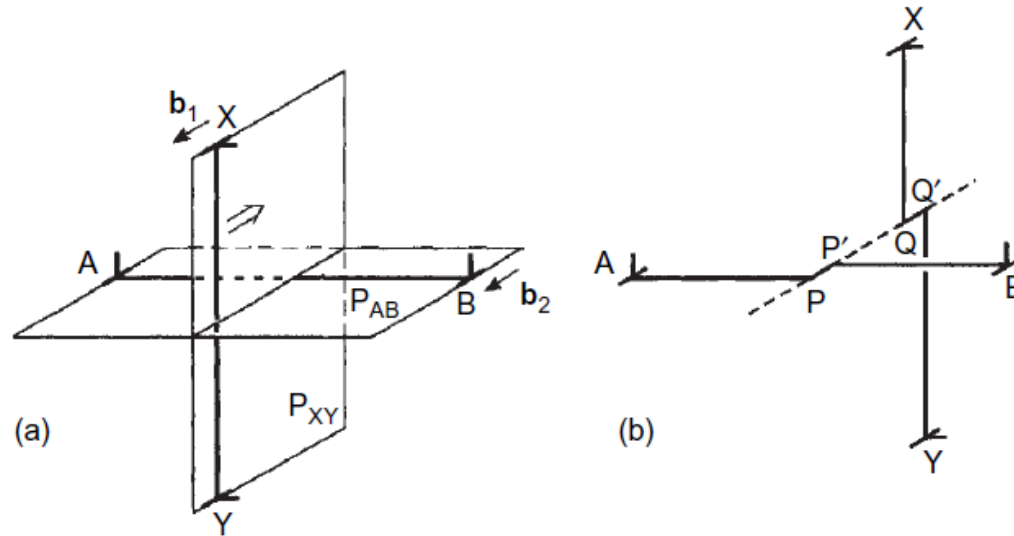


FIGURE 7.2

Intersection of edge dislocations with parallel Burgers vectors. (a) Before intersection. (b) After intersection.

A interseção de duas discordâncias ortogonais com vetores de Burgers paralelos é ilustrada na Fig. 7.2.

São formados degraus em ambas as discordâncias.

O comprimento do degrau QQ' é igual a b_2 e o comprimento do salto PP' é igual a b_1 .
O aumento de energia como resultado da interação é o dobro do exemplo acima.

Intersecção de Discordâncias

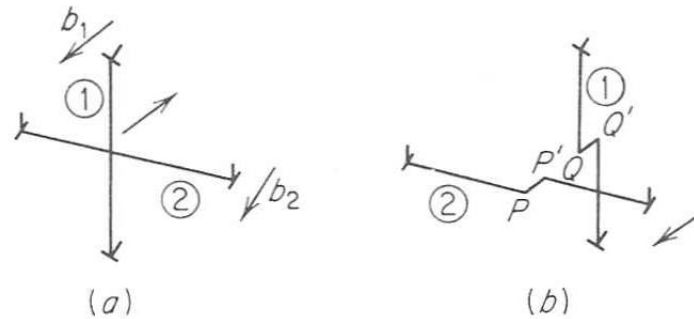


Fig. 5.20 Intersecção de duas discordâncias com vetores de Burgers paralelos. (a) Antes da intersecção; (b) depois da intersecção.

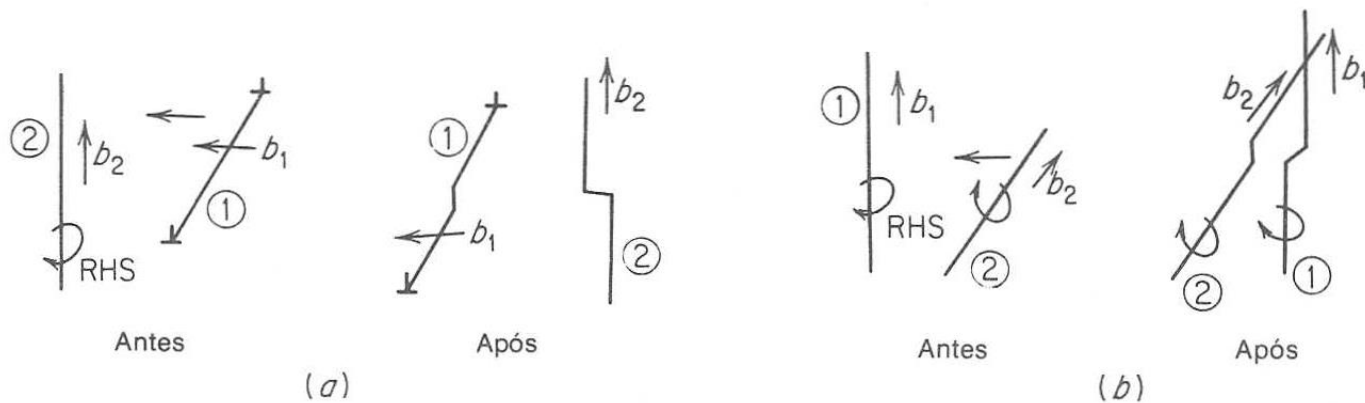
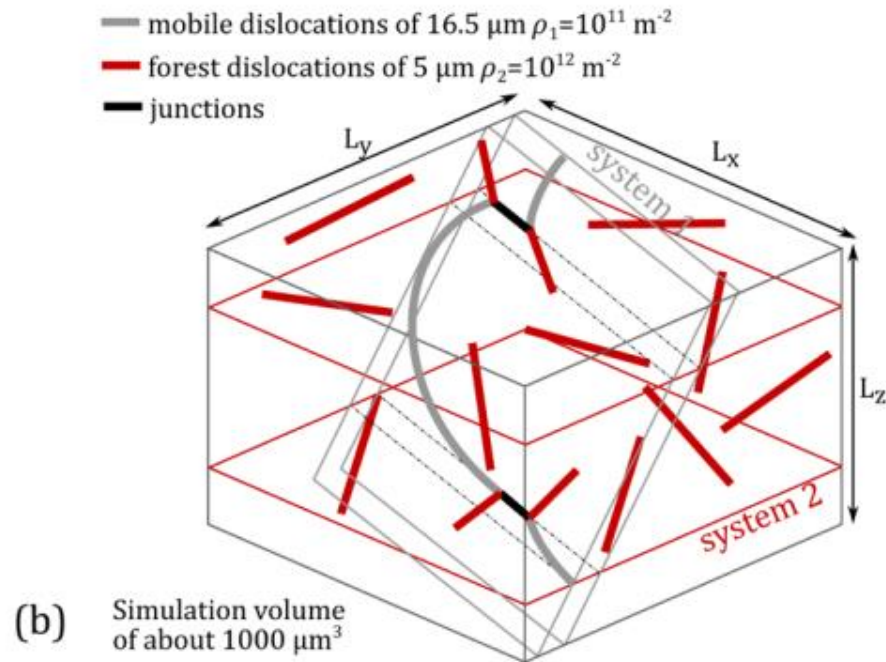


Fig. 5.21 (a) Intersecção de discordância-aresta e espiral; (b) Intersecção de duas discordâncias-espiral.

Floresta de Discordâncias



https://hal.science/hal-02938715/file/Paper_and_supplement-Athermal_dislocation_strengthening_in_UO2.pdf

Degraus (Jogs) e Dobras (Kinks)

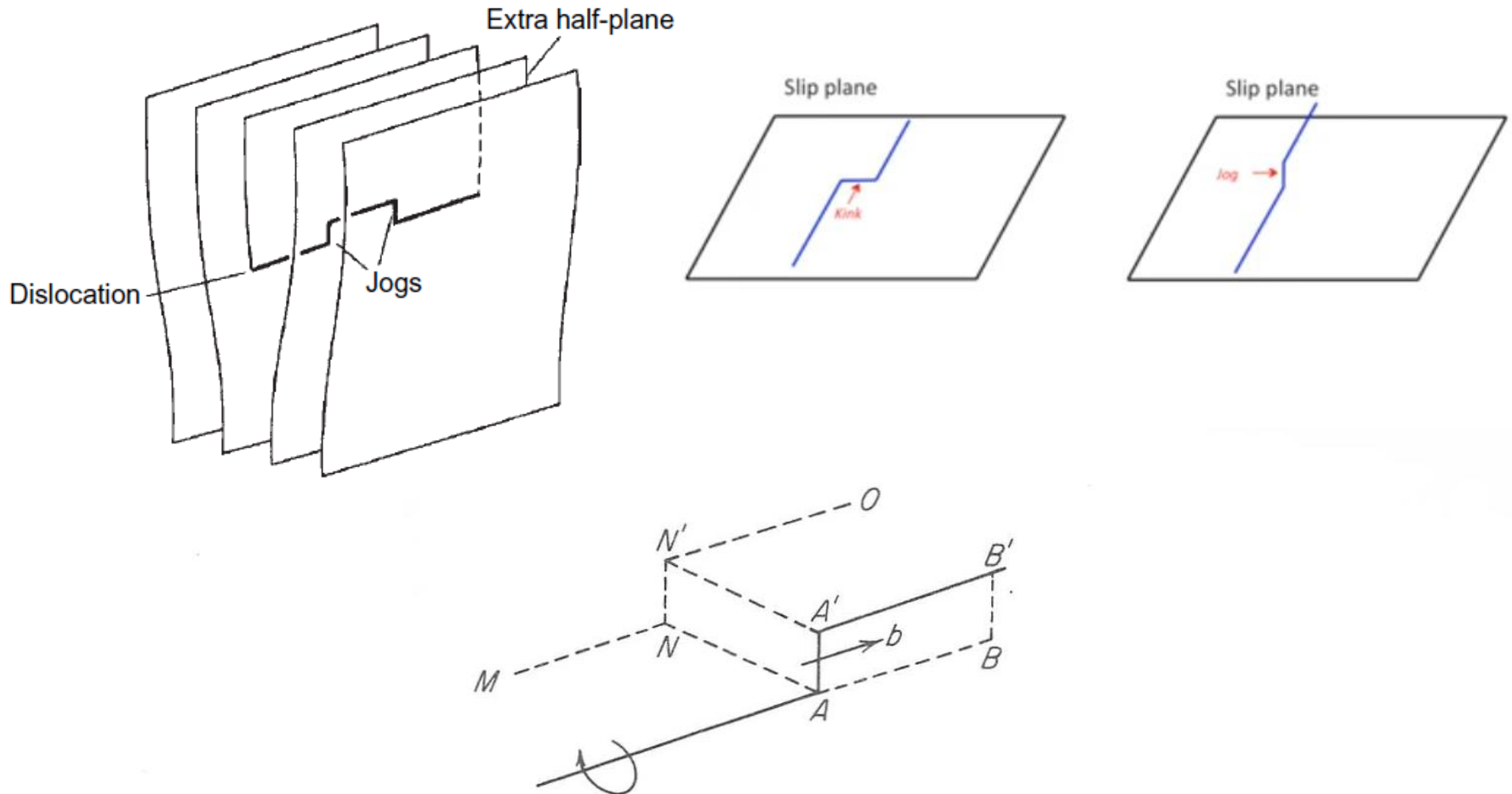


Fig. 5.22 Movimento de degrau sobre discordância-espiral. O degrau tem seu movimento restrito ao plano $AA'BB'$.

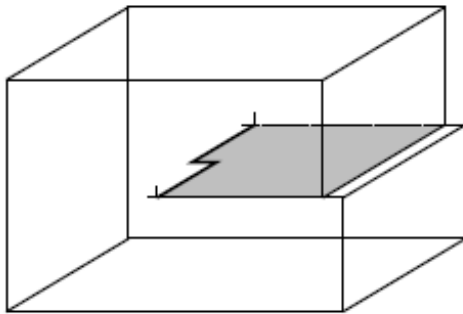
Degraus (Jog) e Dobras (Kink)

Cunha

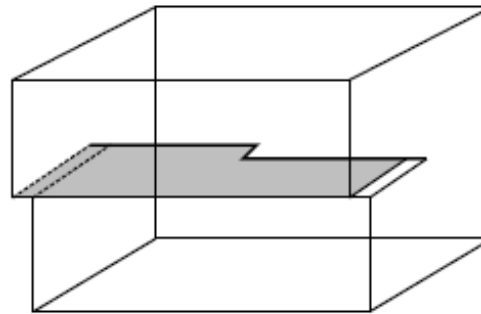
Helice

Dobras

Mesmo plano de escorregamento

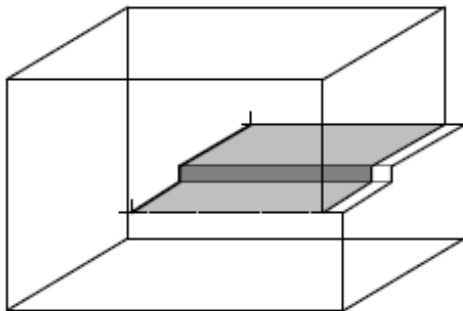


(a)

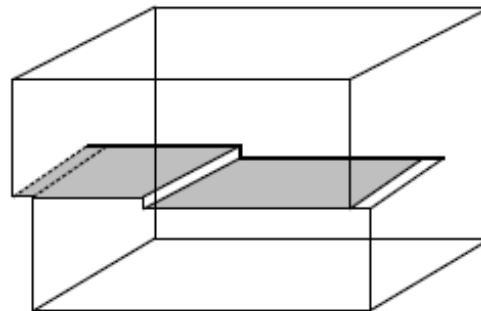


(b)

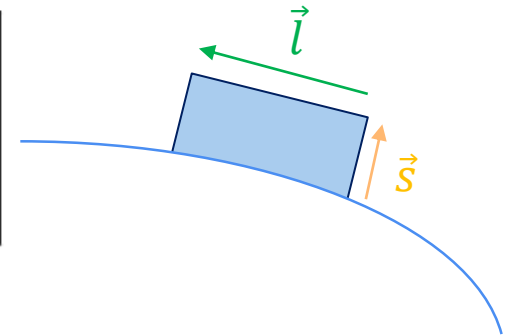
Burgers vector $\vec{b}$



(c)



(d)



$$\left| \vec{l} \times \vec{s} \right| \text{ em } \vec{b}$$

$$\Delta V = (\vec{l} \times \vec{s}) \cdot \vec{b} = (\vec{b} \times \vec{l}) \cdot \vec{s}$$

$$\Delta V = 0 - \text{Dobra}$$

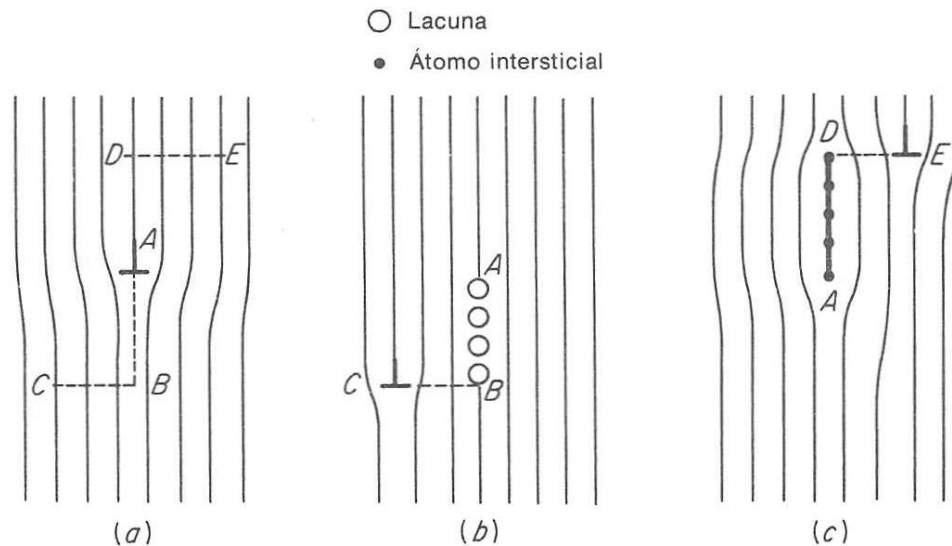
$$\Delta V \neq 0 - \text{Degrau}$$

Degraus

Fora do plano de escorregamento

Movimento de degraus de orientação aresta

Algumas destas interseções produzirão degraus nucleadores de lacunas e outros degraus nucleadores de interstícios (Fig.5.23c).



$$\tau = \alpha_1 \frac{Gb}{l} \quad (5-28)$$

tensão necessária para gerar um defeito e mover a discordância na ausência de ativação térmica.

Fig. 5.23 Formação de defeitos pontuais devido a movimento não-conservativo de degraus de orientação-aresta. (De D. Hull, *Introduction to Dislocations*, p. 134, Pergamon Press, New York, 1965. Com permissão dos editores).

$$U_1 = \alpha_1 Gb^3 \quad (5-26)$$

As estimativas da energia necessária para formar uma lacuna ou um átomo intersticial num degrau de um metal c.f.c. são de 0,7 e V e 4,8 eV.

Movimento de discordâncias espiral com degraus

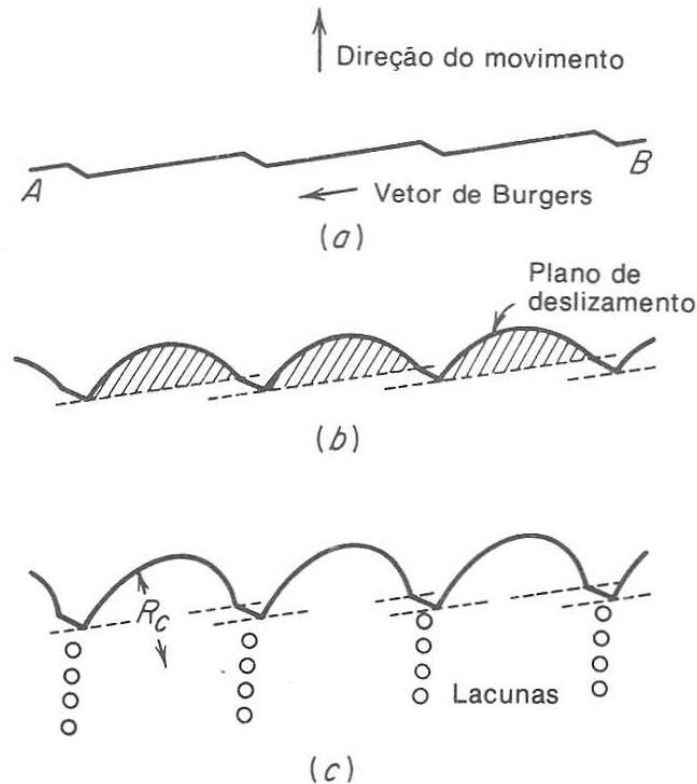


Fig. 5.24 Movimento de discordâncias-espiral com degraus. (a) Discordância reta sob tensão zero; (b) a discordância se curva entre os degraus, no plano de deslizamento, devido à tensão cisalhante aplicada; (c) movimento da discordância deixando rastros de lacunas atrás dos degraus. (De D. Hull, *Introduction to Dislocations*, p. 136, Pergamon Press, New York, 1965. Com permissão dos editores.)

Mais provável formar lacunas ou intersticiais?

A energia de ativação para o movimento do degrau ou formação de defeitos no degrau será:

$$U = \alpha_1 G b^3 - \tau b^2 l \quad (5-29)$$

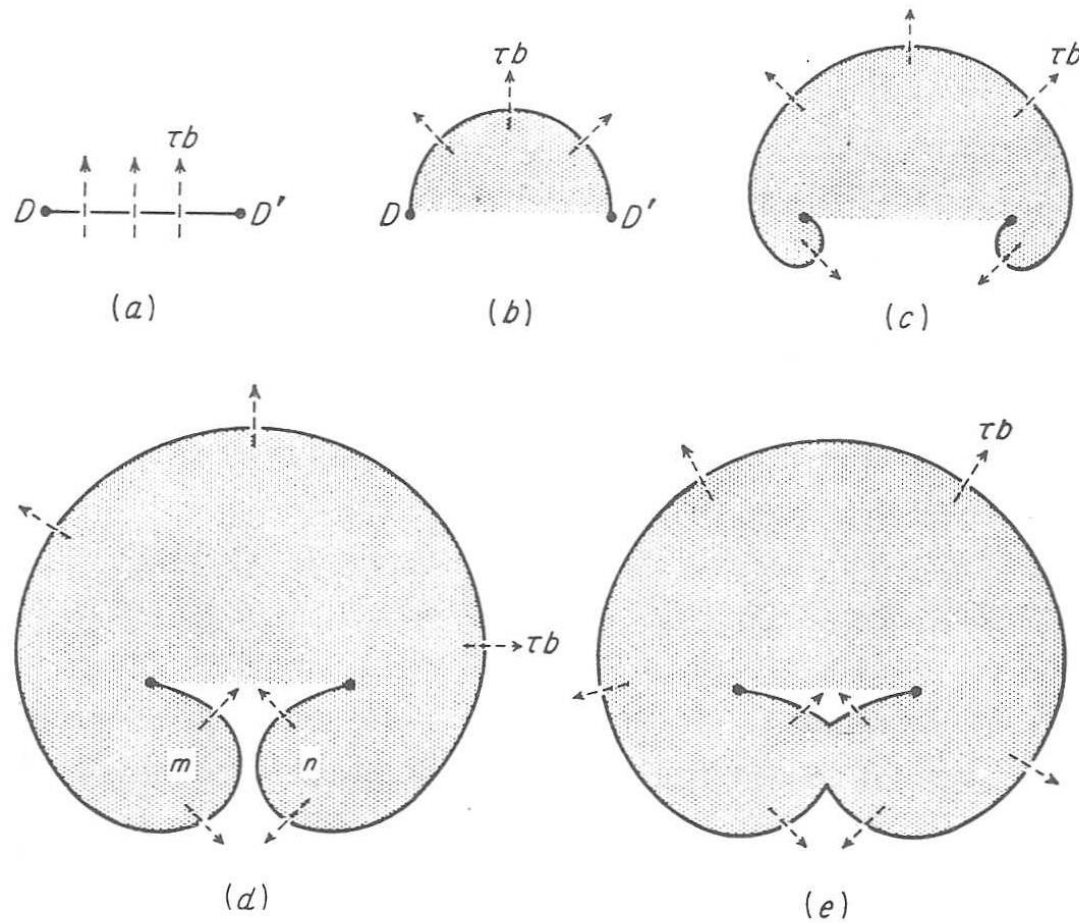
α é muito maior no caso de átomos intersticiais do que para lacunas,

a formação de lacunas ocorrerá de maneira preponderante à formação de intersticiais

Fontes de Discordâncias

- Contornos de grão
- Contorno de macla
- Linhas livres de discordâncias
- Degraus (discordância em outro plano e dobras (discordância no mesmo plano)

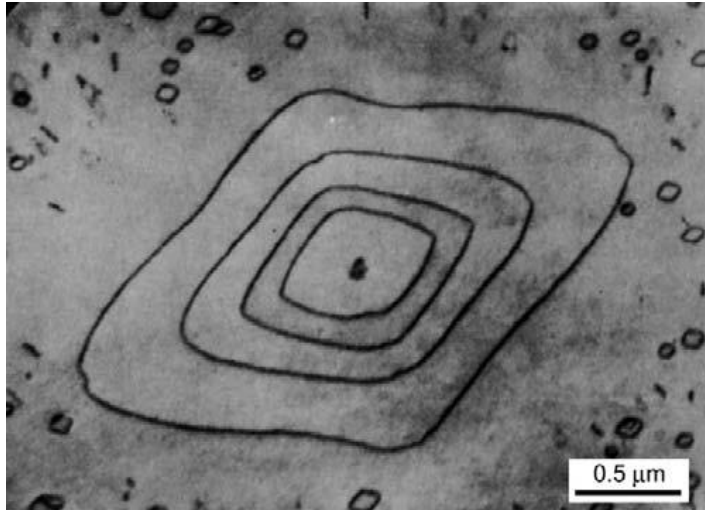
Fontes de Discordâncias



$$\tau \approx \frac{Gb}{l} \quad (5-30)$$

Fig. 5.26 Representação esquemática da operação de uma fonte de Frank-Read. (De W. T. Read, Jr., *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1953.)

Fontes de Discordâncias

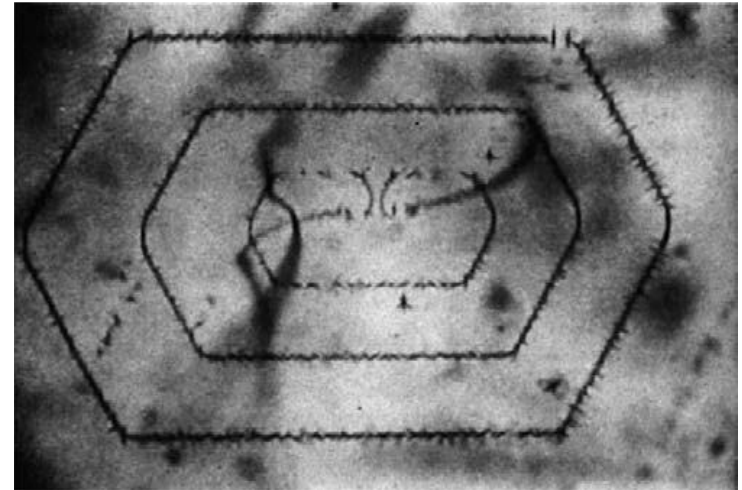


Transmission electron micrograph of concentric loops formed at a climb source in aluminum 3.5 per cent magnesium alloy quenched from 550°C. (From Westmacott, Barnes and Smallman, Phil. Mag. 7, 1585, 1962.)

Bardeen Herring sources

A grande concentração de lacunas em excesso resultou na formação de quatro loops concêntricos.

Cada loop representa a remoção de um plano de átomos. Arranjos de fontes mais complexos também foram observados nesta e em outras ligas



Frank Read source in a silicon crystal. The dislocations have been revealed by the decoration technique described in section 2.3. (From Dash (1957), Dislocation and Mechanical Properties of Crystals, Wiley.)

Frank Read source

Interação da Discordância com Soluto

Endurecimento por solução sólida

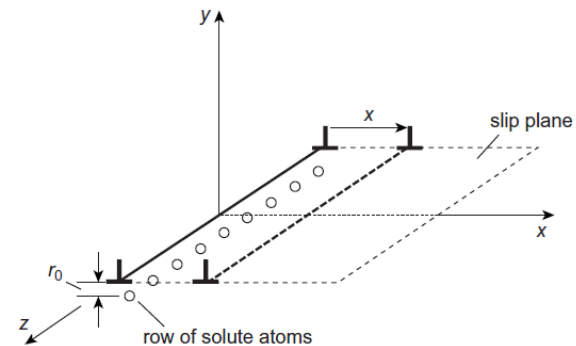


FIGURE 10.13

Diagrammatic representation of a row of solute atoms lying in the position of maximum binding at an edge dislocation. An applied shear stress will cause the dislocation to separate from the solute atoms by gliding in the slip plane to position x .

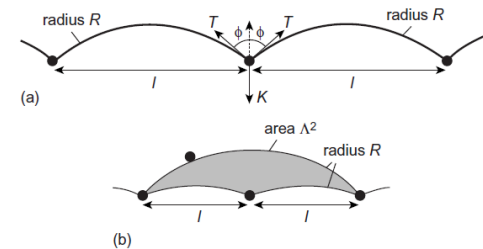


FIGURE 10.20

(a) Dislocation on a slip plane in which each obstacle exerts a localized glide resistance force K , balanced in equilibrium by line tension forces T . (b) The area used to calculate the effective obstacle spacing l for weak forces.

Interação da Discordância com Soluto

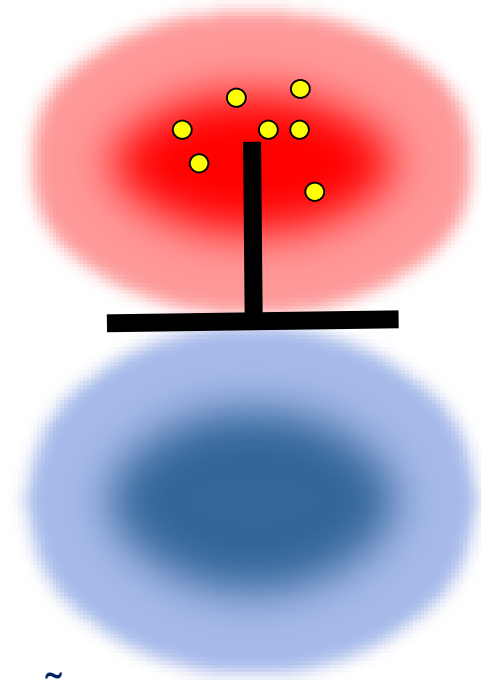
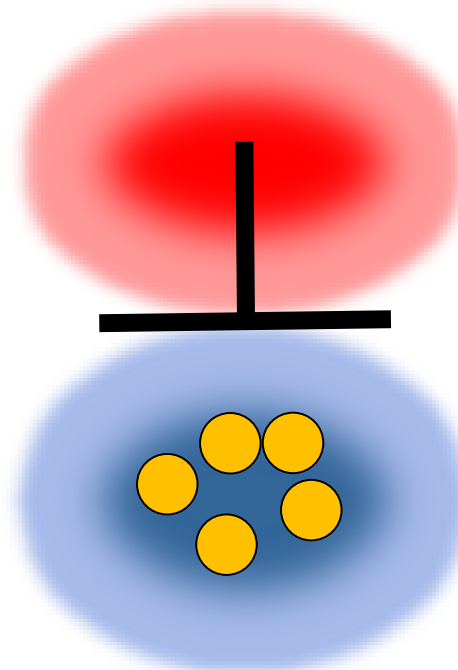
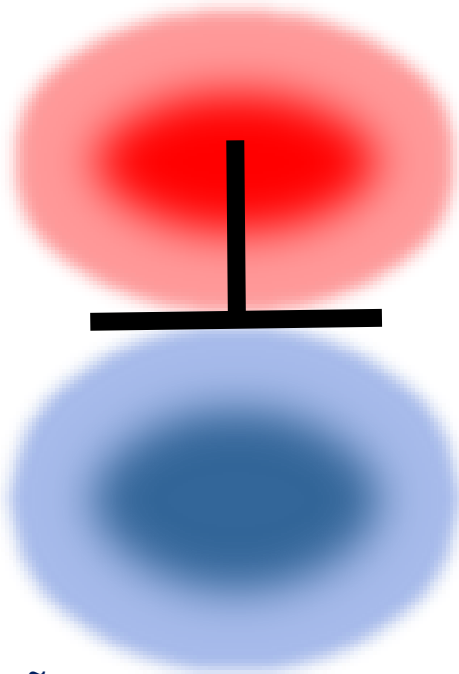
Soluto maior que solvente

Soluto menor que solvente

Compressão

Compressão

Compressão



Tração

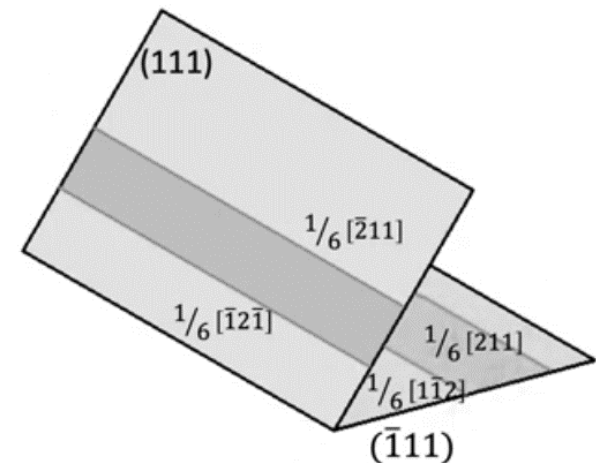
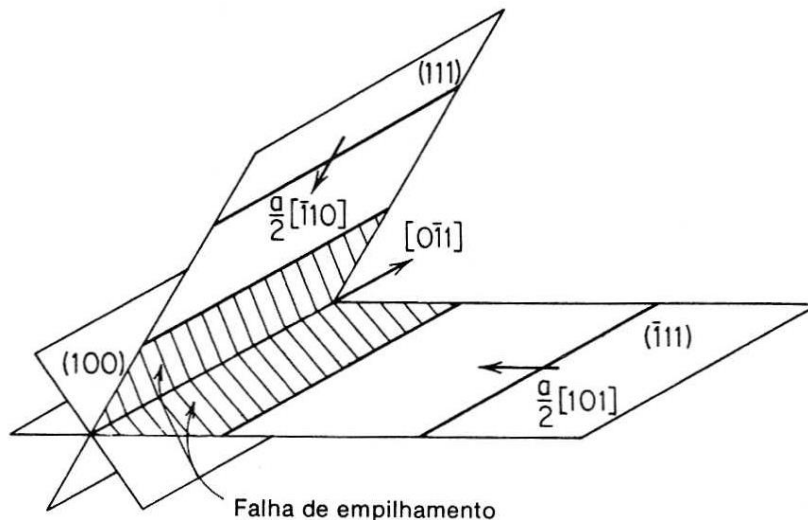
Tração

Tração

Discordâncias em matérias CFC

Na rede c.f.c., a interseção de discordâncias pertencentes a dois planos $\{111\}$, durante o deslizamento dúplex, pode produzir discordâncias bloqueadas. A discordância bloqueada produzida através desta reação é chamada de uma *barreira de Lomer-Cottrell*.

a fim de produzir uma nova discordância de menor energia, a qual vem a ser paralela à linha de interseção dos planos de deslizamento iniciais e pertence ao seu plano bisetor . (100). Esta discordância é aresta pura, visto que seu vetor de Burgers está no plano (100) e é normal à linha de interseção. Uma vez que o plano (100) não é compacto na rede cristalina c.f.c., esta discordância não deslizará livremente.



Discordância em estrutura CCC

Uma vez que o plano (001) não é um plano de deslizamento compacto na rede C.C.C., a discordância é imóvel. Além disso, o plano (001) é o plano de clivagem ao longo do qual ocorre a fratura frágil

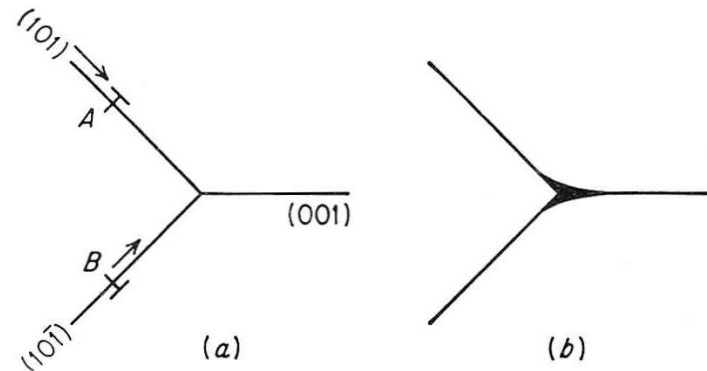


Fig. 5.13 Deslizamento sobre planos (110) que se cortam. (De A. H. Cottrell, *Trans. AIME*, vol. 212, p. 196, 1958.)

Exercícios

- 1- Qual a importância do Deslizamento Cruzado
- 2- Como minimizar o efeito da Escalagem?
- 3- Descreva sobre as Fontes de Discordâncias?
- 4- O que são Degraus e Dobras?
- 5- Como deve ocorrer a interação de uma discordância com o soluto adicionado a uma material? Qual a influência nas propriedades?