DEFEKTY STRUKTURY KRYSTALICZNEJ

KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

Projekt współfinansowany
z Europejskiego Funduszu Społecznego
i Budżetu Państwa

Defekty struktury krystalicznej są to każdego rodzaju odchylenia od idealnej struktury. Najczęściej stosowana klasyfikacja dzieli defekty w zależności od ich charakterystycznego wymiaru na:

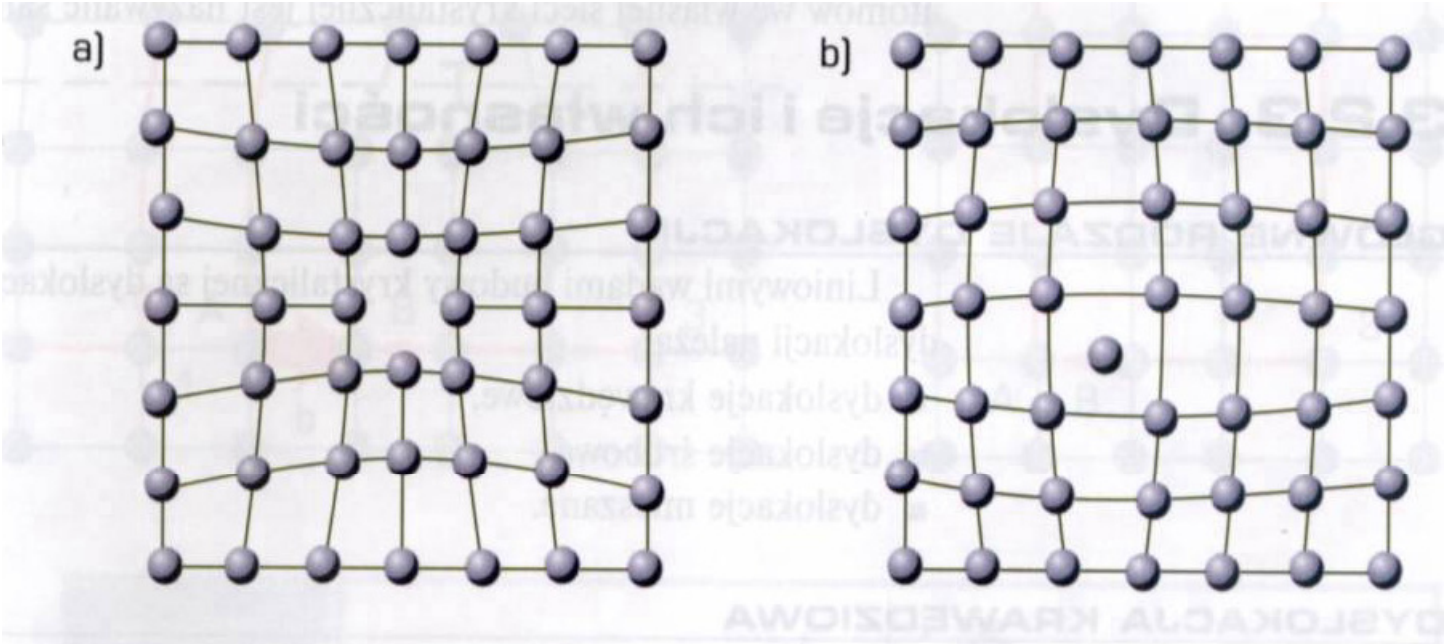
- defekty punktowe
- defekty liniowe
- defekty powierzchniowe.

Występowanie defektów struktury jest odpowiedzialne za szereg charakterystycznych cech ciał krystalicznych:

- defekty punktowe odpowiadają za szybkość dyfuzji atomów w sieci,
- defekty liniowe — za odkształcanie tworzyw metalowych pod wpływem sił znacznie niższych od powodujących zniszczenie (dekohezję) materiału, ale także za plastyczność metali,
- defekty powierzchniowe — w pewnej mierze za umocnienie materiału, tj. wzrost oporu materiału stawiany działającej sile w trakcie odkształcenia plastycznego.

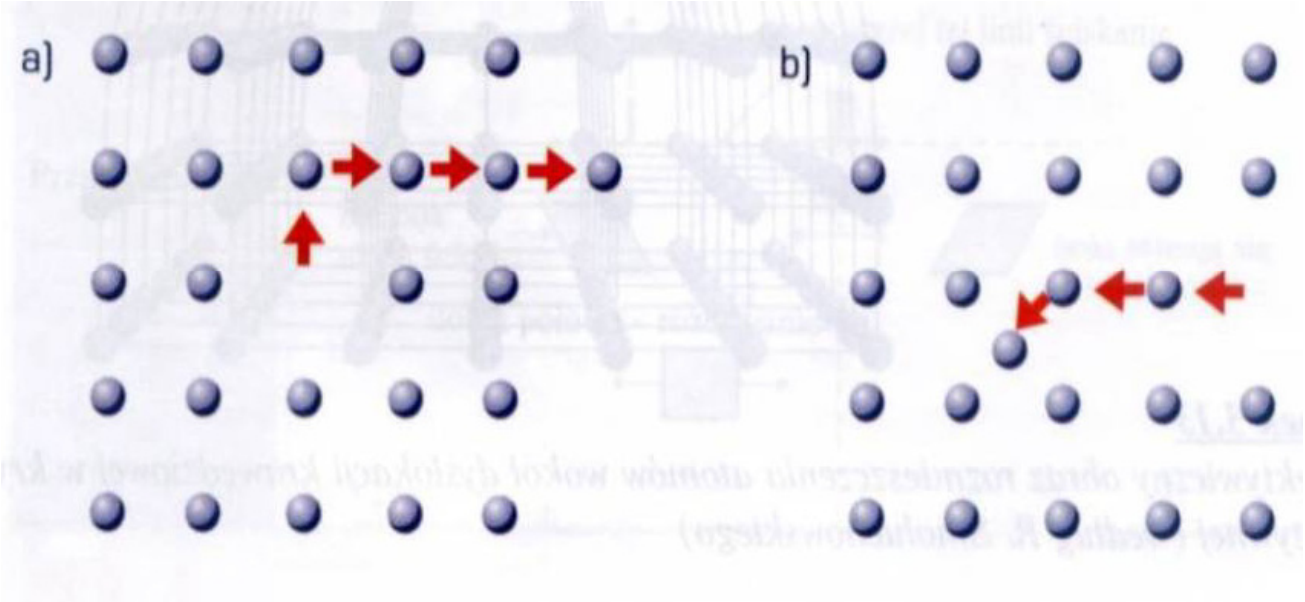
Defekty punktowe — to wakanse (luki) i atomy międzywęzłowe

Wakans to brak atomu w węźle sieci krystalicznej. W danej temperaturze istnieje zawsze określona liczba wakansów. Defekty te powstają w wyniku drgań sieci o amplitudzie wzrastającej z temperaturą, które powodują wypadanie pewnej liczby atomów ze swoich położeń równowagi. Tworzy się zawsze para defektów atom międzywęzłowy (wytrącony) — wakans.



Wakans i kontrakcja sieci (a), atom międzywęzłowy i ekspansja sieci. Wg.: L.A. Dobrzański, Podstawy nauki o materiałach i metaloznawstwo WNT, Gliwice - Warszawa 2002

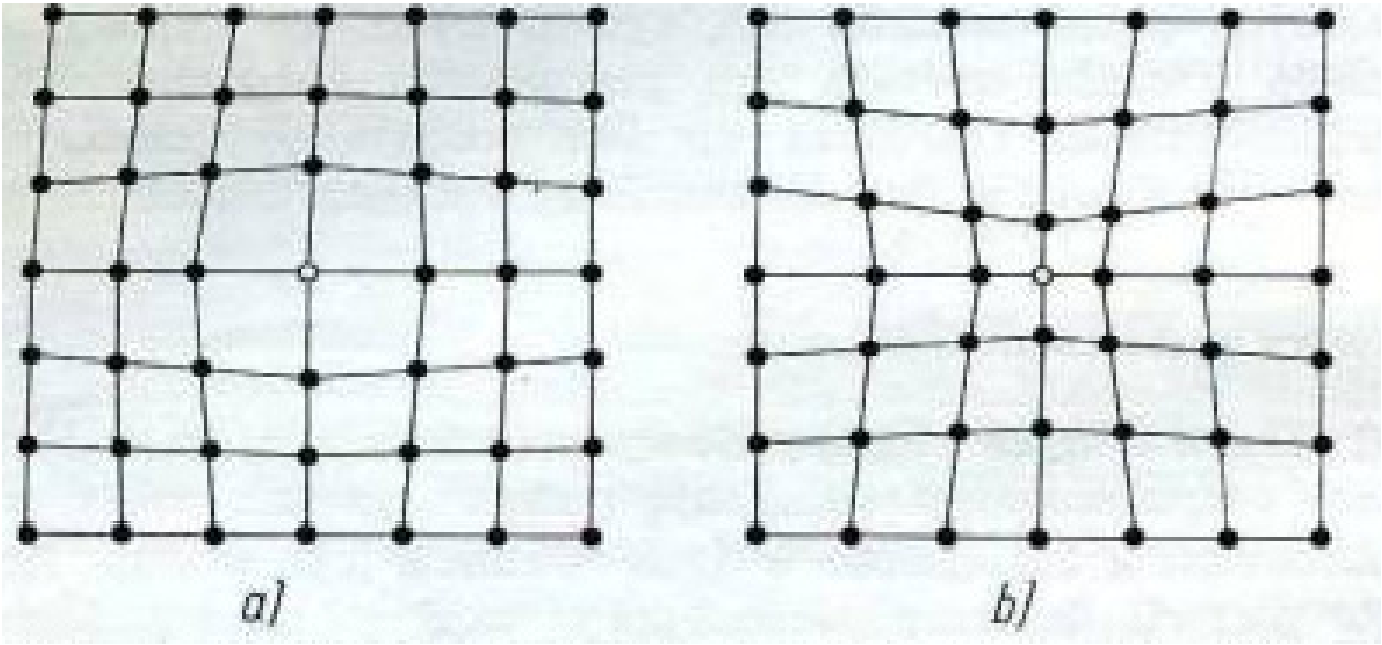
Mechanizm powstawania wakansów zależy od miejsca zajmowanego przez atom wytrącony z położenia równowagi. W modelu Frenkla atom z węzła sieci zajmuje położenie międzywęzłowe, natomiast w modelu Schottky`ego dokonuje on wyjścia na swobodną powierzchnię kryształu.



Mechanizmy tworzenia się wad punktowych budowy krystalicznej: a) Schottky'ego, b) Frenkla.

Wg.: L.A. Dobrzański, Podstawy nauki o materiałach i metaloznawstwo WNT, Gliwice — Warszawa 2002

Inne defekty punktowe to atomy obcych pierwiastków, które mogą zajmować położenia węzłowe (atomy substytucyjne) lub międzywęzłowe. Atomy międzywęzłowe wywołują wzrost parametru sieci (ekspansję) i lokalne naprężenia ściskające. Atomy substytucyjne większe od atomów rozpuszczalnika wywołują ekspansję i naprężenia ściskające, a mniejsze kontrakcję i naprężenia rozciągające.



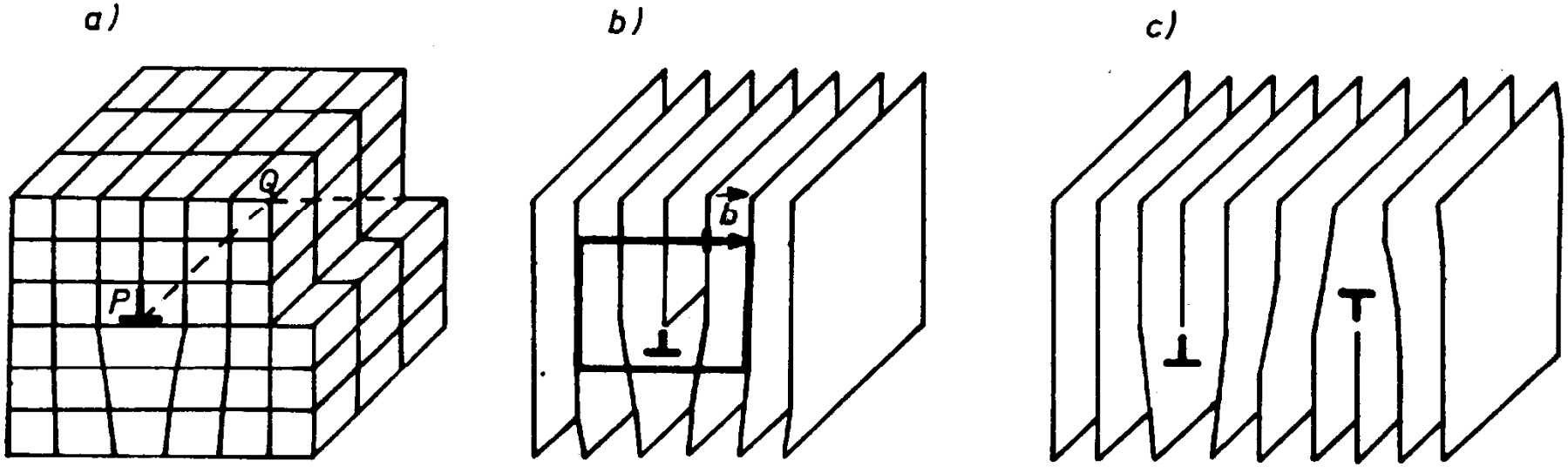
Deformacja sieci wywołana przez atom obcego pierwiastka: a) ekspansja, b) kontrakcja

Defekty liniowe:

- **Dyslokacje**
- krawędziowe
- śrubowe
- Mieszane

2. Błędy ułożenia

Dyslokacja krawędziowa — zaburzenie struktury kryształu powstające wskutek utworzenia się dodatkowej półpłaszczyzny (lub wyjęcie takiej półpłaszczyzny), zwanej ekstra płaszczyzną. Szereg atomów kończących półpłaszczyznę nazywa się osią dyslokacji. W zależności od położenia dodatkowej półpłaszczyzny, dyslokacje mogą być dodatnie (⊥) i ujemne (⊤).

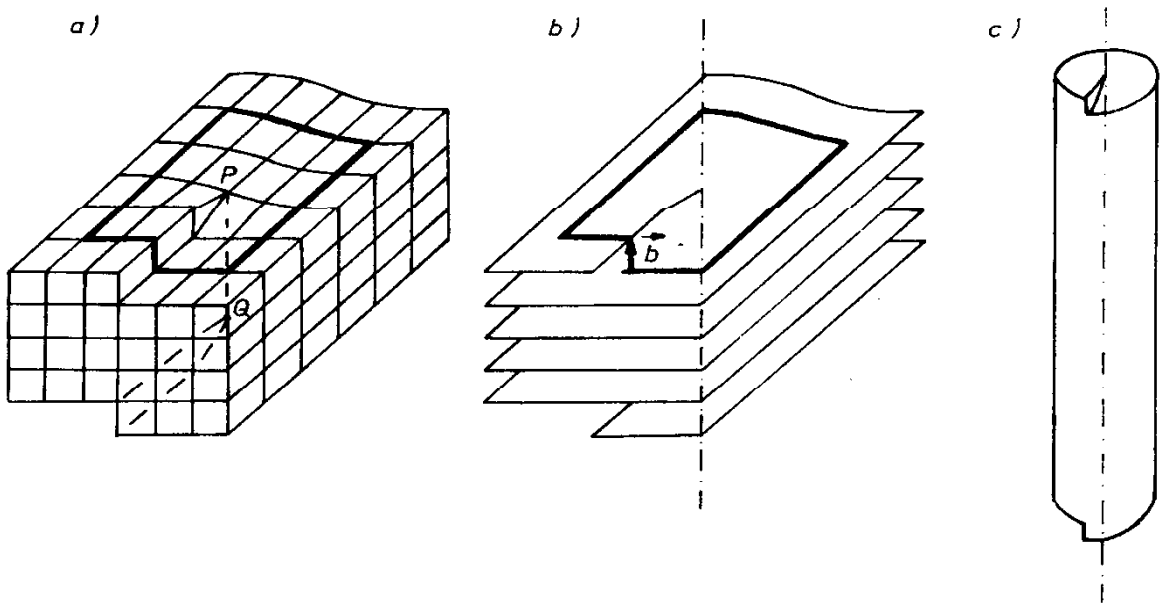


Dyslokacja krawędziowa: a) schemat dyslokacji krawędziowej, b) układ powierzchni sieciowych z zaznaczonym konturem Burgersa i wektorem Burgersa b, c) dodatnia (⊥) i ujemna (⊤) dyslokacja krawędziowa; PQ — krawędź dyslokacji.

Wielkość dyslokacji i wywołane nią odkształcenie charakteryzuje wektor Burgersa b. Jeżeli w krysztale wokół osi dyslokacji wykreślić kontur Burgersa, to pozostanie on niedomknięty. Domknięcie można uzyskać, wykreślając wektor Burgersa skierowany przeciwnie do kierunku ostatniego odcinka. Kierunek wektora Burgersa jest prostopadły do linii dyslokacji krawędziowej i w przypadku dyslokacji doskonałej ma wartość równą odległości między dwoma najbliższymi atomami.

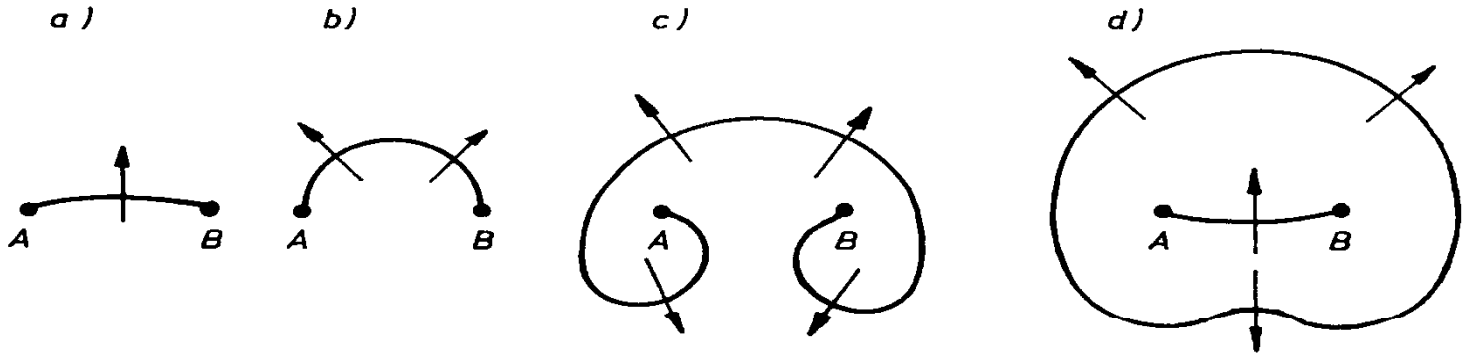
Liczba dyslokacji (gęstość dyslokacji) — łączna ilość linii wszystkich dyslokacji w jednostce objętości. Wartości w metalach: od 1 dyslokacji śrubowej w wiskerach, poprzez 10^6 dyslokacji w 1 cm^2 w metalach wyżarzonych, do 10^{15} dyslokacji w 1 cm^3 w silnie zdeformowanych.

Dyslokacja śrubowa — defekt liniowy struktury krystalicznej spowodowany przemieszczeniem części kryształu wokół osi, zwanej linią dyslokacji śrubowej. Wektor Burgersa jest równoległy do linii dyslokacji. Dyslokację określa się jako dodatnią, gdy kontur Franka-Burgersa wykazuje układ prawoskrętny (+) — rys. b — lub ujemną, gdy wykazuje układ lewoskrętny (-).



Dyslokacja śrubowa: a) schemat dyslokacji śrubowej, b) układ powierzchni sieciowych z zaznaczeniem konturu Franka-Burgersa i wektorem Burgersa b, c) wisker z pojedynczą dyslokacją śrubową

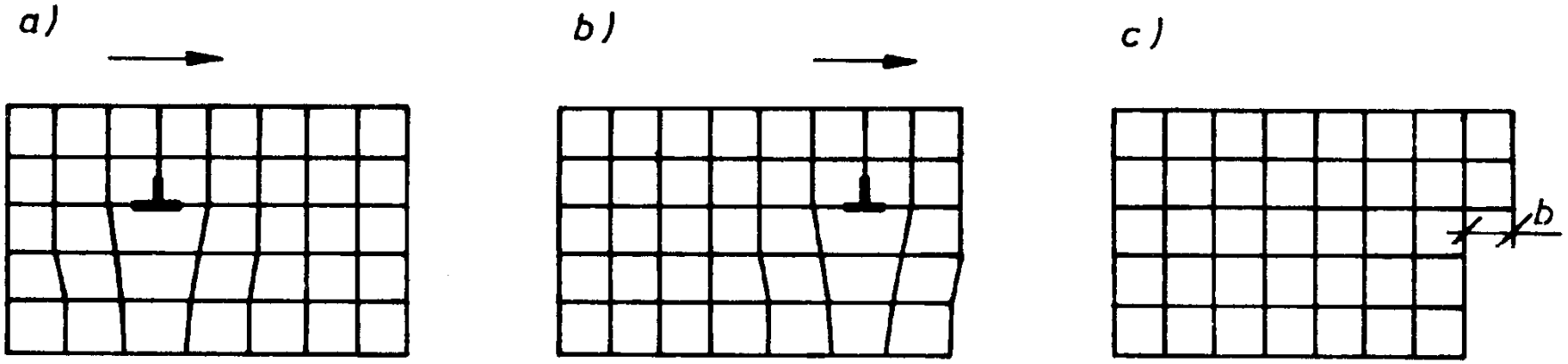
Dyslokacje w kryształach mogą powstawać m.in. w czasie stygnięcia kryształów i podczas obróbki plastycznej metali. Mechanizm generowania nowych dyslokacji wyjaśnia model Franka-Reada. W pobliżu dyslokacji kryształ jest silnie odkształcony. Na skutek stosunkowo niewielkiego naprężenia w krysztale odkształcenie to może przemieszczać się w płaszczyźnie poślizgu.



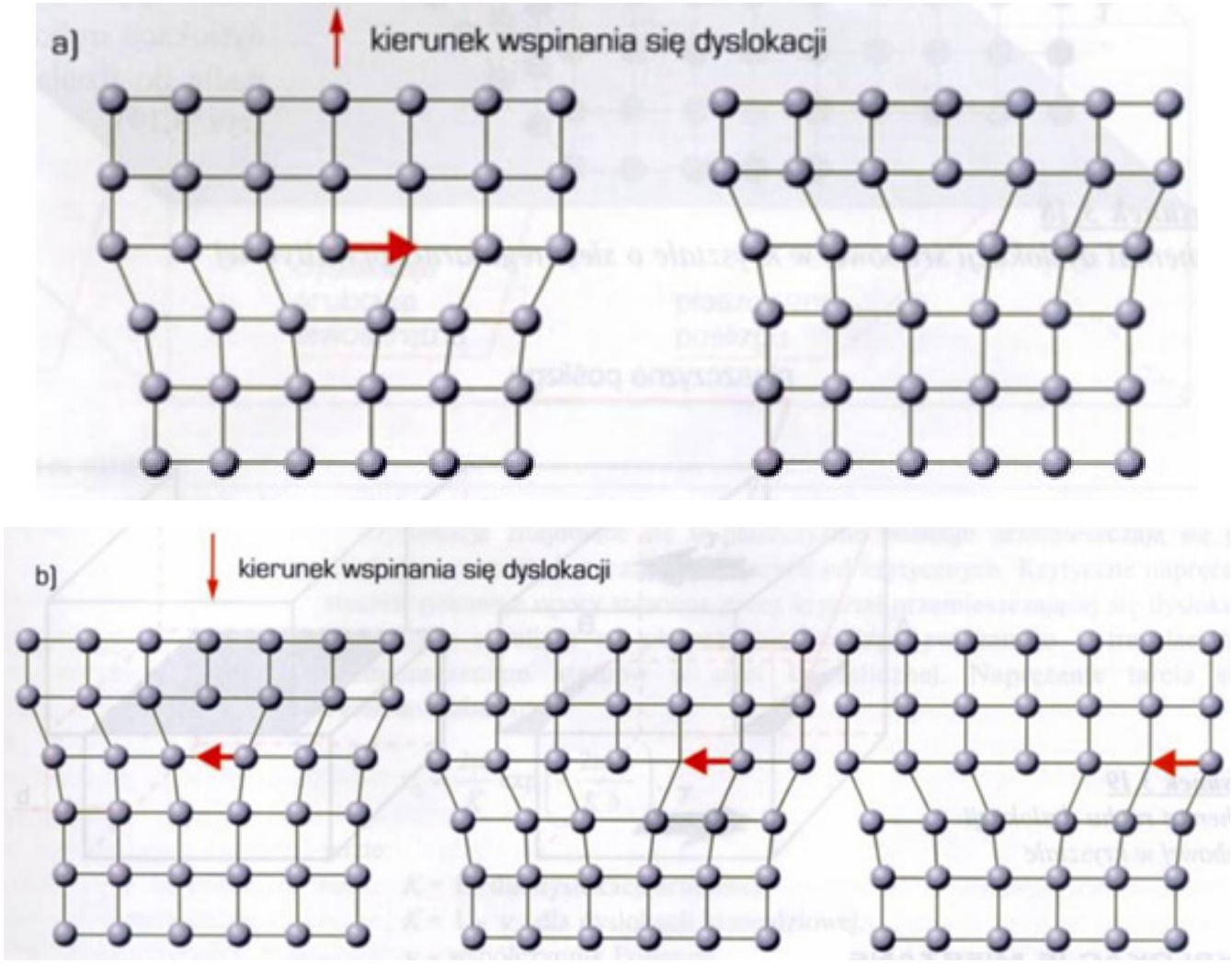
Źródło Franka-Reada: a), b), c), d) kolejne stadia generowania dyslokacji; A, B — punkty zakotwiczenia dyslokacji; → kierunek propagacji linii dyslokacji, wywołanej naprężeniami w krysztale.

Sposoby przemieszczania się dyslokacji:

- poślizg
- wspinanie



Wędrówka dyslokacji przez poślizg po płaszczyźnie poślizgu: a), b), c) kolejne stadia przemieszczania dyslokacji.

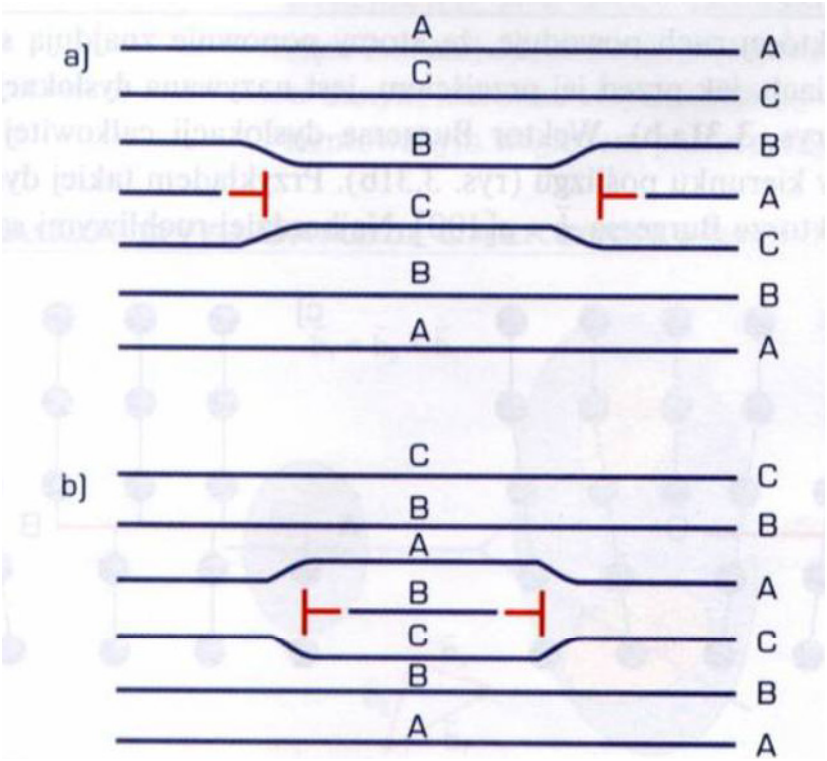


Schemat wspinania się dyslokacji krawędziowej poprzez dyfuzję do krawędzi dyslokacji: a) wakansów, b) atomów.

Wg.: L.A. Dobrzański, Podstawy nauki o materiałach i metaloznawstwo WNT, Gliwice — Warszawa 2002

Błędy ułożenia powstają wskutek: kondensacji wakansów, zaburzonego wzrostu kryształu, odkształcenia plastycznego.

Np. w metalach o sieci A1 płaszczyzny gęstego ułożenia atomów {111} są usytuowane w kolejności np. ACBACB. Kolejność ułożenia płaszczyzn może ulec zaburzeniu, np. CBCB. Jest to błąd ułożenia. Błąd wewnętrzny — płaszczyzna usunięta (a), błąd zewnętrzny — płaszczyzna wprowadzona (b).



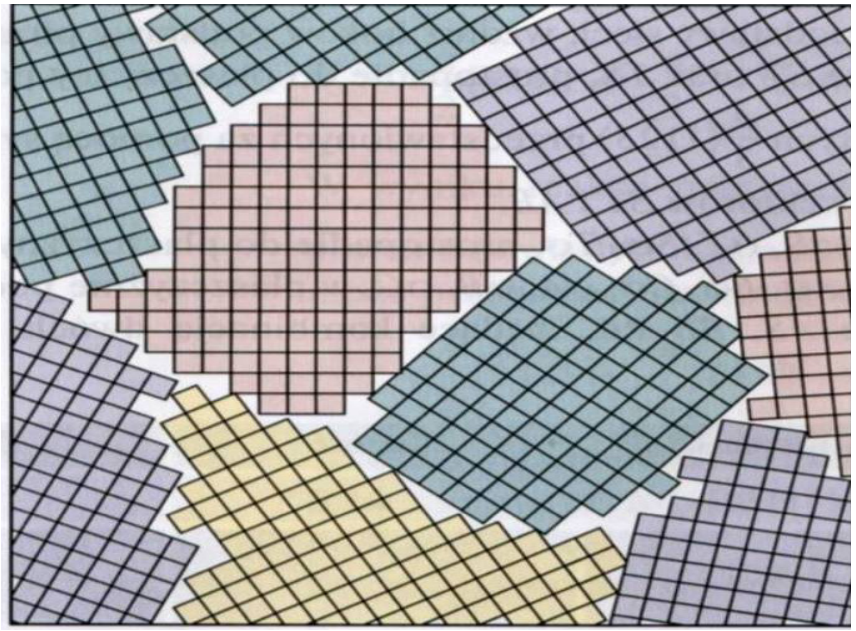
Wg.: L.A. Dobrzański, Podstawy nauki o materiałach i metaloznawstwo WNT, Gliwice - Warszawa 2002

Defekty złożone — granice ziaren oddzielają ziarna różniące się orientacją krystaliczną a także składem:

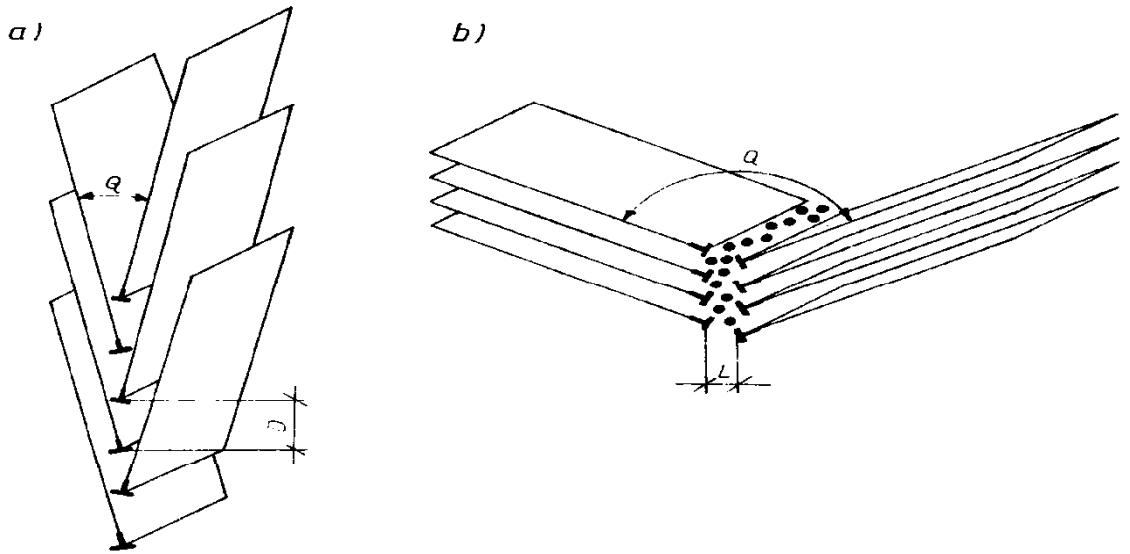
- granice niskokątowe (wąskokątowe)
- granice wysokokątowe (szerokokątowe)

•**Monokryształy** charakteryzują się prawidłowym rozmieszczeniem przestrzennym atomów z zachowaniem jednakowej orientacji wszystkich elementarnych komórek sieciowych w całej objętości kryształu. Są to ciała anizotropowe. Materiały rzadko wykazują strukturę monokryształów.

•Materiały techniczne są zwykle **polikryształami**, składającymi się z ziaren, z których każde ma w przybliżeniu prawidłową strukturę krystaliczną. Przypadkowa orientacja krystaliczna poszczególnych ziaren powoduje, że polikryształy są ciałami quasi-izotropowymi. Wielkość ziaren w metalach technicznych 1-100 μm. W obrębie ziarna można wyróżnić podziarna ułożone względem siebie pod małymi kątami, od kilku minut do kilku stopni.



Wg.: L.A. Dobrzański,
Podstawy nauki o materiałach
i metaloznawstwo WNT,
Gliwice - Warszawa 2002

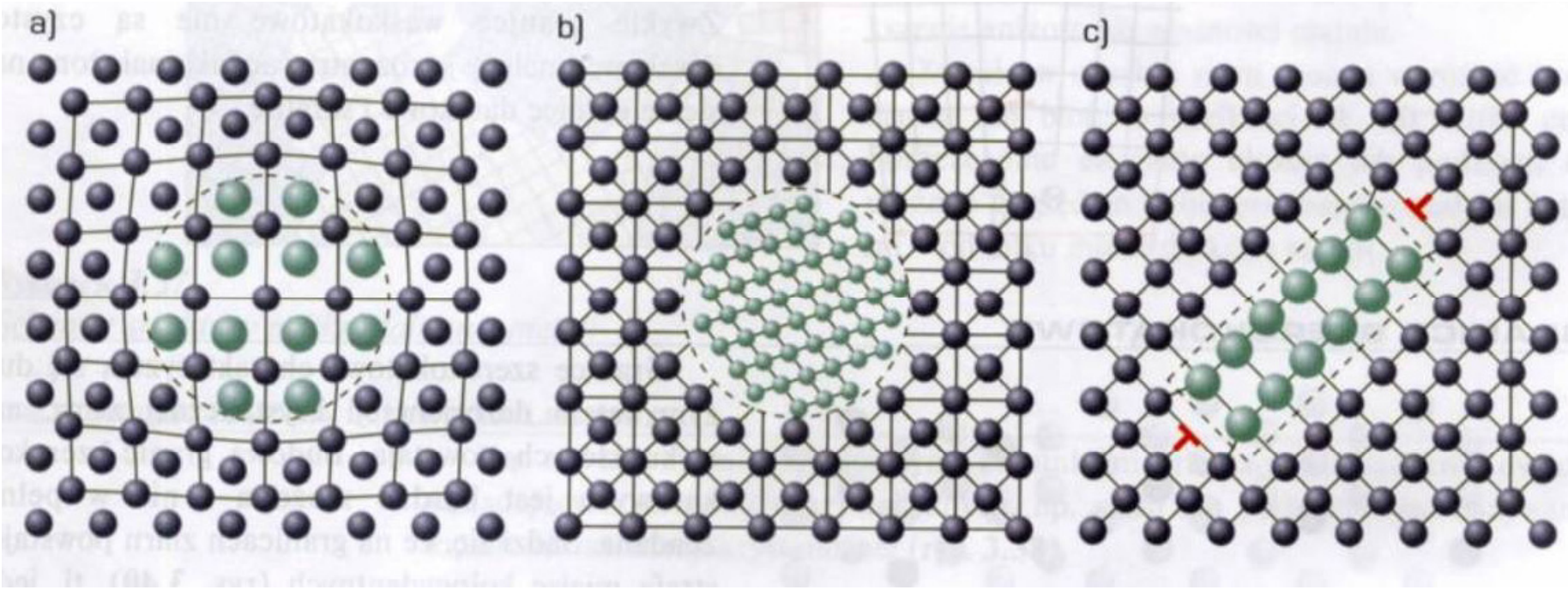


Model granicy ziaren: a) niskokątowa granica, b) wysokokątowa granica;
D — odległość między dyslokacjami, L — szerokość warstwy bezpostaciowej,
Q — kąt różnicy orientacji krystalograficznej

Niskokątowe granice ziaren — obszary dwóch sieci krystalicznych stykających się ze sobą pod kątem nie większym niż kilkanaście minut do 2°. Są to najczęściej zespoły dyslokacji krawędziowych jednakowego znaku, położonych jedna nad drugą.

Wysokokątowe granice ziaren — obszary o grubości kilku odległości międzyatomowych. Atomy w obrębie obszaru granicznego mają budowę bezpostaciową.

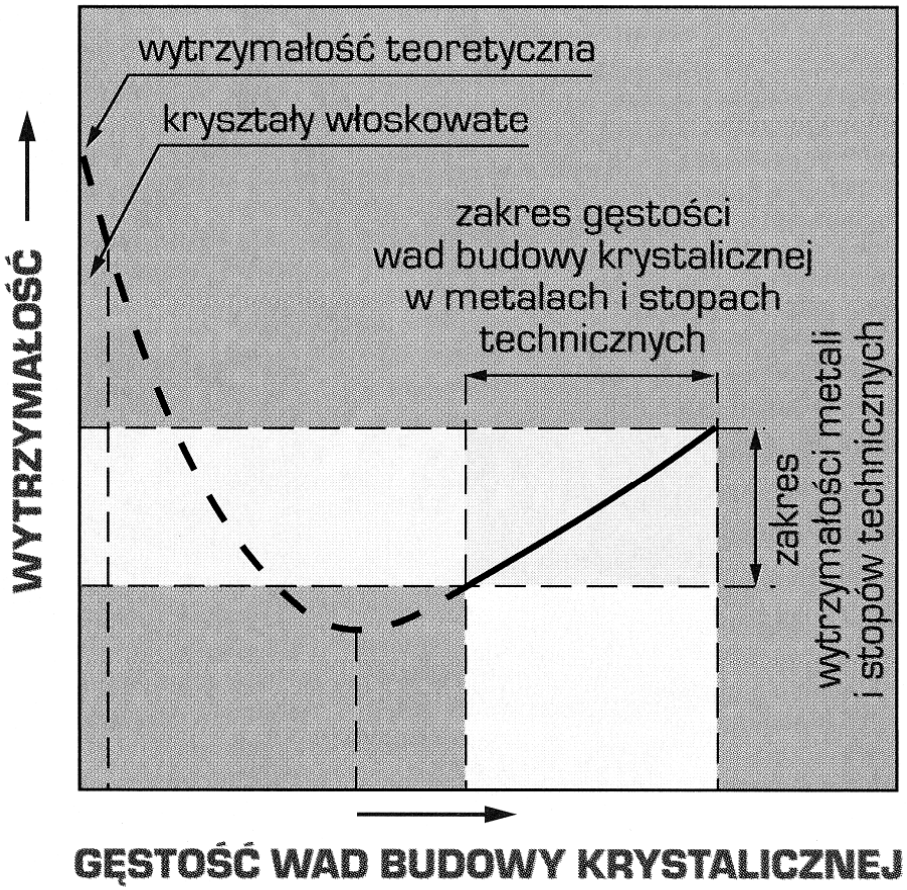
Granice między ziarnami różnych faz nazywają się granicami międzyfazowymi. Dzieli się je na: koherentne (a), niekoherentne (b) i półkoherentne (c).



Wg.: L.A. Dobrzański, Podstawy nauki o materiałach i metaloznawstwo WNT, Gliwice — Warszawa 2002

Wpływ defektów na własności metali

Występowanie dyslokacji w sposób istotny wpływa na własności wytrzymałościowe i plastyczne metali. Obliczenia teoretyczne wykazują, że metale o idealnej budowie krystalicznej powinny posiadać wytrzymałość determinowaną siłą wiązania atomowego, a więc dwa do trzech rzędów wielkości wyższą od obserwowanej dla metali technicznych. Różnice przypisuje się występowaniu zjawiska plastyczności. O ile przykładowo w ceramikach siła wywołująca zniszczenie materiału niezbędna jest do zerwania wszystkich wiązań naraz w pewnej określonej płaszczyźnie, o tyle w przypadku metali przyłożenie znacznie mniejszej siły wystarcza w zupełności do wywołania poślizgu dyslokacji. Poślizg dyslokacji nie oznacza przy tym ruchu atomów; przeciwnie, proces ten jest równoznaczny jedynie ze zrywaniem w określonym momencie wiązań tylko szeregu atomów bliskich osi dyslokacji.



Wzrost własności wytrzymałościowych materiałów inżynierskich osiągany jest przez stosowanie m.in. materiałów drobnokrystalicznych i nanomateriałów o ogromnej liczbie granic ziaren oraz umocnienie dzięki wydzieleniom faz o dużej dyspersji oraz znacznemu wzrostowi gęstości dyslokacji wskutek odkształcenia plastycznego na zimno.