

Universidad de Chile  
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
ME42B – Metalurgia Mecánica



# **Procesos de Dislocación y Maclaje de Deformación en Al Nanocristalino**

Profesor:

Rodrigo Palma H.

Prof. Aux.:

Daniel Vera.

Alumnos:

Eduardo Pérez V.

Rodrigo San Martín M.

Fecha Entrega:

Miércoles 06 de Octubre 2004

## Índice

1.- Introducción.	1
2.- Antecedentes Teóricos.	2
3.- Acercamiento a la Simulación.	7
4.- Resultados de la Simulación.	8
5.- Conclusiones.	13
6.- Bibliografía.	14

## **1. Introducción**

El comportamiento mecánico de los materiales nanocristalinos, es aun muy controversial. Esto debido a que las observaciones dan como resultado desde una gran ductilidad a un incremento dramático de la dureza. Actualmente, es por todos conocido que debe presentarse deformación en los procesos de interacción dinámica entre las dislocaciones y los bordes de grano (GBs), sin embargo poco se sabe de los mecanismos de deformación. El presente trabajo pretende describir a gran escala las simulaciones de la dinámica molecular (MD) de los nanocristales de Al y así tratar de desenmarañar esta intrincada interacción durante la deformación plástica a temperatura ambiente. Se espera que las simulaciones provean una poderosa herramienta tanto para exponer los mecanismos a nivel atómico que controlan los complejos procesos de interacción dislocación- dislocación en nanocristales deformados como para aclarar la respuesta de la red de GB a esfuerzos internos y externos.

## 2. Antecedentes Teóricos

El mecanismo común de deformación plástica a baja temperatura en la mayoría de metales y cerámicas involucra una continua nucleación de dislocaciones a partir del mecanismo de las fuentes de Frank-Read y su deslizamiento.

Las fuentes de Frank-Read se explican a grandes rasgos, como sigue: se crea primero una dislocación recta entre dos puntos, la cual avanza en forma radial dando un lazo que acaba cerrándose sobre sí mismo y transformándose en un anillo que emigra hacia el exterior del cristal. Pero, como puede verse en el dibujo n° 7, a la izquierda, parte del lazo queda en el interior del anillo y su avance acaba dando una nueva dislocación recta entre los mismos dos extremos del principio. Entonces, el proceso se repite, de forma que a partir de una dislocación original se generan continuamente anillos de dislocación. En un cristal no deformado hay ya muchas dislocaciones, del orden de  $10^{10}$  por metro cuadrado, causadas por errores de crecimiento y concentraciones de esfuerzos en límites de grano, grietas, etc.

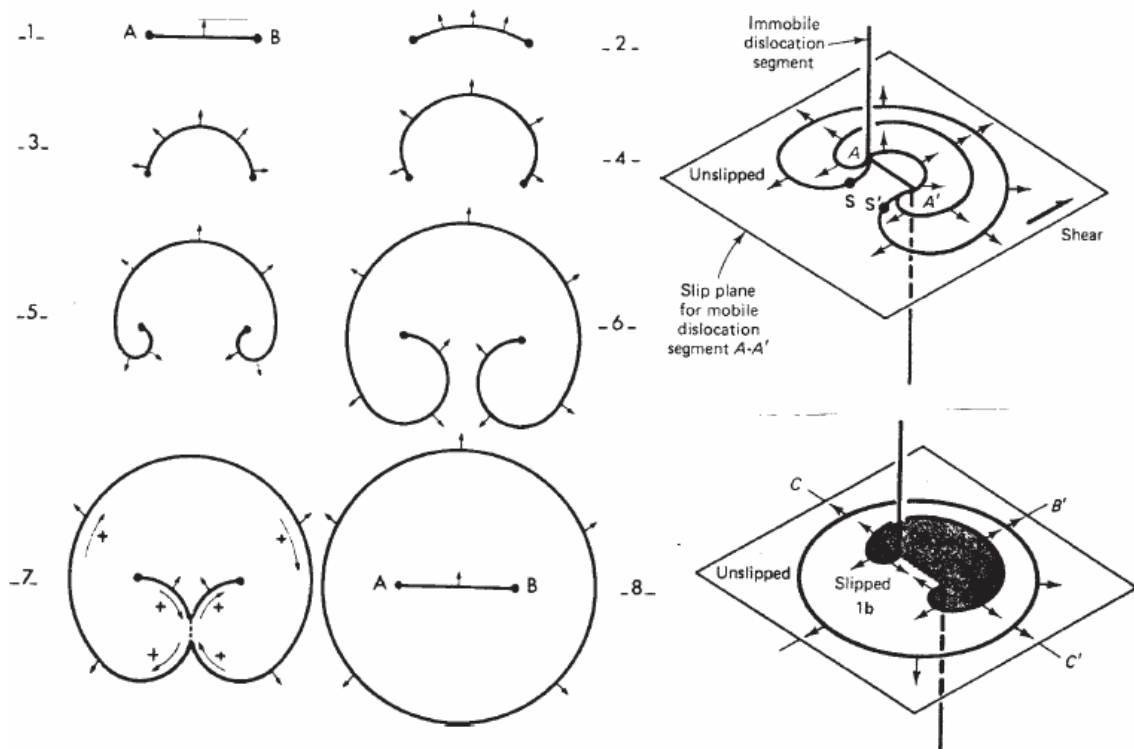


Figura 2.1. Mecanismo de Fuentes de Frank-Read  
Fuente: Martínez Catalán, Juan Ramón. [3]

En un cristal muy deformado, la cantidad de dislocaciones es del orden de  $10^{15}$  por metro cuadrado, es decir, unas cien mil veces mayor. La fuente de Frank-Read es el mecanismo causante de la inmensa mayoría de esas dislocaciones asociadas a la deformación.

En un material policristalino el tamaño de estas fuentes no puede exceder el tamaño de grano. Debido a que el esfuerzo necesario para esta operación es inversamente proporcional al tamaño de la fuente, este mecanismo de deformación puede funcionar solo si el tamaño de grano es de alrededor de 1  $\mu\text{m}$ , luego para un tamaño de grano pequeño las dislocaciones deben ser nucleadas por otras fuentes como los GB.

Para poder entender los procesos de interacción antes mencionados es importante conocer la teoría de dislocaciones en la red cúbica centrada en las caras, que es la que interesa pues es la estructura cristalina del Al. Esta se describe en detalle a continuación:

#### Dislocaciones en FCC:

El plano de deslizamiento primario en la red cúbica centrada en las caras es el plano octaédrico  $\{111\}$ . En la Figura 2.2 se puede apreciar una vista normal a un plano de este tipo y, cuando se mira hacia abajo sobre el plano extra de la dislocación, muestra una dislocación en la orientación de borde. Los círculos oscuros representan al plano compacto (111) en el cual termina el plano extra de la dislocación de borde, mientras que los círculos claros son los átomos en el plano (111) próximo siguiente. La fila de átomos ausente, corresponde al plano faltante de la dislocación de borde. El vector  $b$  mostrado en la Figura 2.2 corresponde al vector de Burgers, el cual se designa  $\frac{1}{2}[-110]$ . Un movimiento en la dirección del vector  $b$  es muy poco probable, ya que produciría una fuerte distorsión en la red, por lo que el movimiento se genera según los vectores  $c$  y  $d$  mostrados en la Figura 2.3 Estos nuevos vectores se designan tal que  $c = \frac{1}{6}[-1\ 2\ -1]$  y  $d = \frac{1}{6}[-2\ 1\ 1]$ .

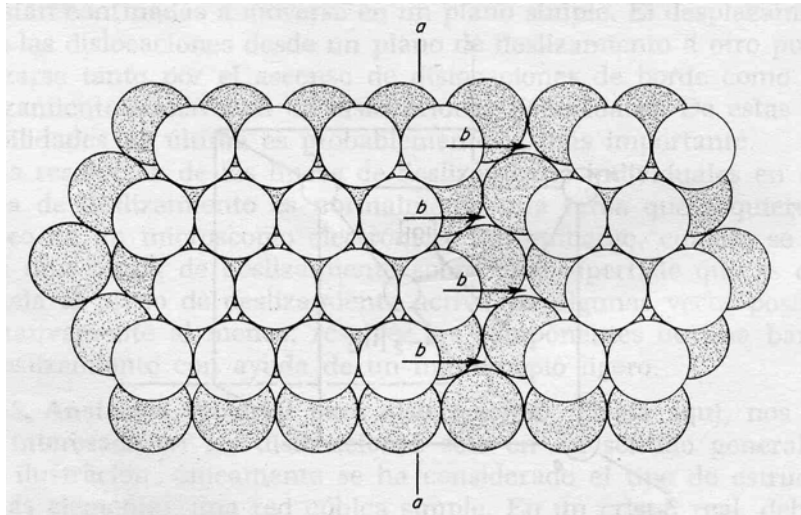


Figura 2.2. Dislocación total en FCC.  
Fuente: Reed Hill, Robert [4].

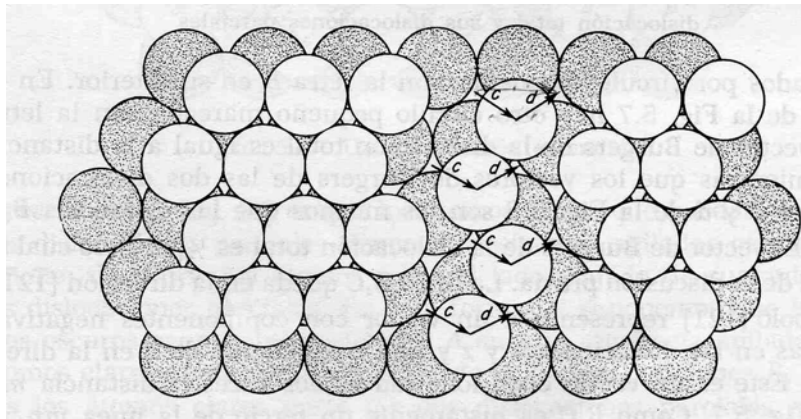


Figura 2.3. Dislocación parcial en FCC.  
Fuente: Reed Hill, Robert [4].

Cuando una dislocación total se convierte en un par de dislocaciones parciales, disminuye la energía de deformación de la red. Esto es debido a que la energía de una dislocación es proporcional al cuadrado de su vector de Burgers. Para los materiales FCC, se cumple que

$$B^2 > C^2 + D^2 \quad (\text{Ecc. 1})$$

Debido a que las dislocaciones parciales de la Figura 2.3 representan aproximadamente iguales deformaciones de la red, existe una fuerza repulsiva entre ellas que las fuerza a separarse. Tal separación añadirá planos adicionales al plano simple en zig-zag de la Figura 2.3, tal como se muestra en la Figura 2.4. Una

dislocación total que se ha dissociado en un par de parciales separadas como las de la Figura 2.4 se conoce como *dislocación extendida*.

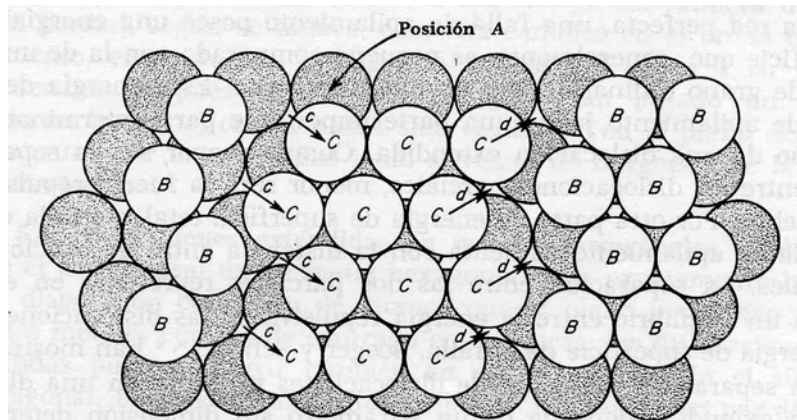


Figura 2.4. Dislocación extendida en FCC.  
Fuente: Reed Hill, Robert [4].

Observando la Figura 2.4, si suponemos que los átomos grises ocupan las posiciones A en una secuencia apilada y los átomos claros en cualquier extremo de la figura ocupan las posiciones B, entonces los átomos claros entre las dos dislocaciones parciales quedan sobre las posiciones C. En esta región, la secuencia normal de apilamiento ABCABC... de la red cúbica centrada en las caras sufre una discontinuidad y se vuelve A|CABCA... la línea indica la discontinuidad. Las discontinuidades en el orden del apilamiento de los planos  $\{111\}$ , o compactos, se llaman *fallas de apilamiento*. Las dislocaciones que confinan la falla de apilamiento, cuyos vectores son c y d; son las llamadas dislocaciones parciales de Shockley.

Asimismo, dado que las simulaciones modelan granos deformados plásticamente, es necesario también conocer los procesos de interacción entre dislocación-dislocación. Estos procesos hacen aparecer un nuevo concepto que ayudara a una mejor comprensión de este trabajo como es la barrera de Lommer-Cottrell.

Barreras de Lommer Cottrell:

Corresponden a dislocaciones sesiles o también llamadas parciales de Frank en las redes FCC, y se producen por el deslizamiento de dislocaciones sobre planos

secantes (111). Las dislocaciones parciales de Frank corresponden a una dislocación tal que no puede moverse por deslizamiento ya que éste ha de estar restringido al plano del defecto de apilamiento y el vector de Burgers es normal a dicho plano. Para ayudar a la comprensión se utilizará la Figura 2.5. Allí se muestra una serie de planos (111) apilados, el plano A está incompleto, esto hace que se forme una dislocación de cuña con un vector de Burgers  $(a_0/3)(1\ 1\ 1)$  que es perpendicular al defecto central de apilamiento, esta dislocación es la que corresponde a la *dislocación parcial de Frank*.

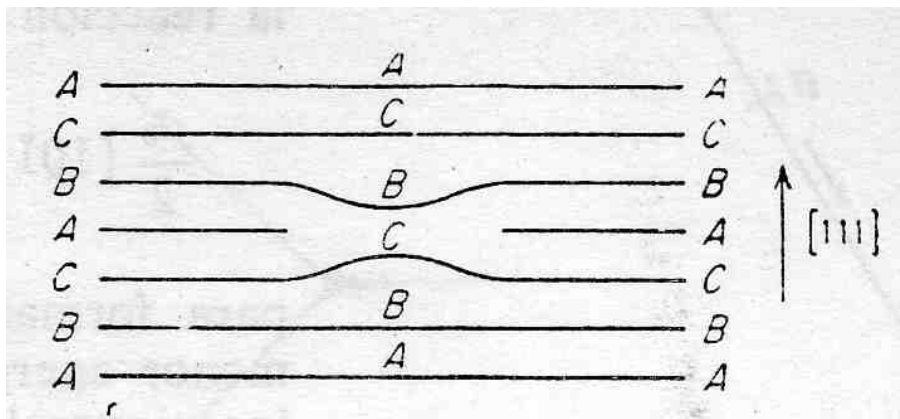


Figura 2.5 Dislocación parcial de Frank.  
Fuente: Dieter, George. [2].



### 3. Acercamiento a la Simulación

Recientes simulaciones en policristales de Al con un tamaño de grano por sobre los 70 [nm] revelaron que cuando se sobrepasa el esfuerzo umbral para la nucleación de dislocaciones desde los GBs, se está en presencia del inicio de la fluencia plástica. Las microestructuras idealizadas consisten en cuatro granos de idéntico tamaño y forma hexagonal regular (ver Figura 1). Las orientaciones de los granos fueron elegidas tales que los 12 GBs de la celda de ensayo tengan límites inclinados asimétricos de alto ángulo. Los ejes de la columna  $\langle 110 \rangle$  fueron elegidos tales que, siguiendo su nucleación, las dislocaciones puedan deslizar sin obstáculos en cada grano en cualquiera de los dos sistemas de deslizamiento (111), por las condiciones tridimensionales y periódicas impuestas en las celdas de simulación.

## 4. Resultados de la Simulación

La Figura 4.1 muestra la emisión de una dislocación extendida  $\frac{1}{2}[0\ 0\ 1]$  en el grano 2 desde un GB a la vecindad de una junta triple. El proceso de nucleación involucra la emisión sucesiva de ambas, la conducción y arrastre de las parciales de Shockley (visto en los terminales átomos negros), conectados por una falla apilada (átomos grises luminosos). Continuando su completa nucleación, estas dislocaciones extendidas viajan a través de los granos en uno de los planos de deslizamiento (111) disponibles, hasta terminar en el GB opuesto, convirtiendo su vector de Burger en deformación plástica.

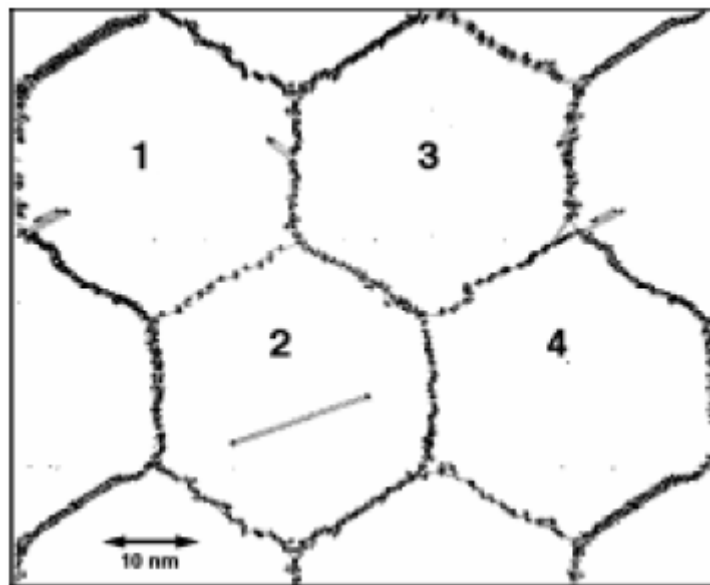


Figura 4.1. Fotografía de Al policristalino con un tamaño de grano de 30 [nm]. Después de ser deformado durante 27.6 [ps] bajo un esfuerzo horizontal de 2.3 [GPa] a 300 [K].  
Fuente: Yamakov, V. [5]

Esto es interesante para notar que para bajos flujos de deformación (es decir, en ausencia de la interacción dislocación-dislocación), la deformación es esencialmente reversible: al descargar el ejemplo, la dislocación desaparece por el deslizamiento detrás de los sitios de GB desde donde es nucleada, para ser reincorporada en la estructura de GB. Como el tamaño de grano decrece hasta más menos 20 nm, la nucleación de dislocaciones completas no es posible, por lo que las dislocaciones comienzan a deslizar mediante la deformación del GB.

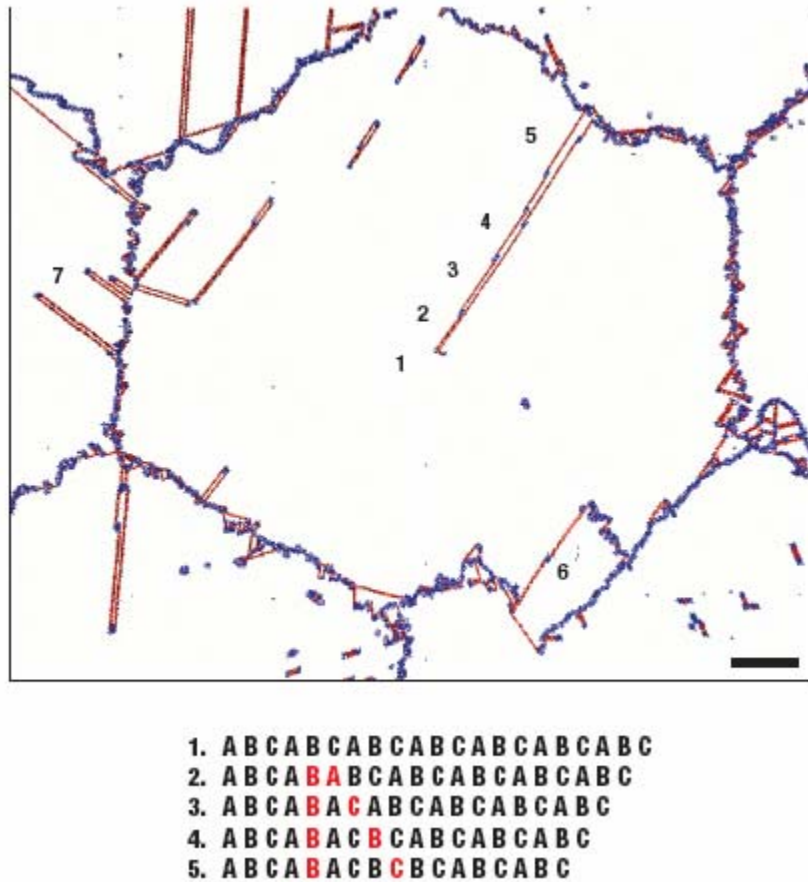


Figura 4.2 Formación de una macla de deformación por sucesiva emisión de dislocaciones parciales desde el mismo BG, hacia las vecindades de planos de deslizamiento.  
 Tamaño de grano 45 [nm].  
 Fuente: Yamakov, V. [5]

La deformación por maclaje representa otro poderoso proceso de deformación elemental, asociado con la nucleación de dislocaciones parciales desde los GBs. De acuerdo con el mecanismo descrito en la teoría, el mecanismo observado en las simulaciones (ver Figura 4.2) revela que el proceso ocurre por la emisión sucesiva de dislocaciones parciales en los planos adyacentes (111) desde el mismo GB. Las secuencias de apilamiento de los tres tipos de planos (111), llamados A, B y C, en cinco regiones del grano maclado están indicadas debajo de la figura. Estas regiones son:

1. Un cristal FCC perfecto.
2. Falla de apilamiento intrínseca.
3. Falla de apilamiento extrínseca.
4. Dos límites de macla separados por dos planos (111).
5. Macla con ensanchado adicional.

Como la deformación plástica crece, la concentración de dislocaciones en el interior del grano se incrementa gradualmente, dando pie a varios tipos de procesos de interacción dislocación-dislocación en diferentes sistemas de deslizamiento pero en el mismo grano. La mayoría de estos procesos han sido bien descritos en los numerosos estudios de deformación en monocristales y policristales de tamaño de grano grande (grano grueso). Entre los más conocidos están las barreras de deformación de Lomer-Cottrell, vistas en cada uno de los cuatro granos en la Figura 4.3. Estas barreras son formadas en la intersección entre dos dislocaciones extendidas en diferentes planos de deslizamiento, terminados por las parciales de Shockley que atraen a las otras.

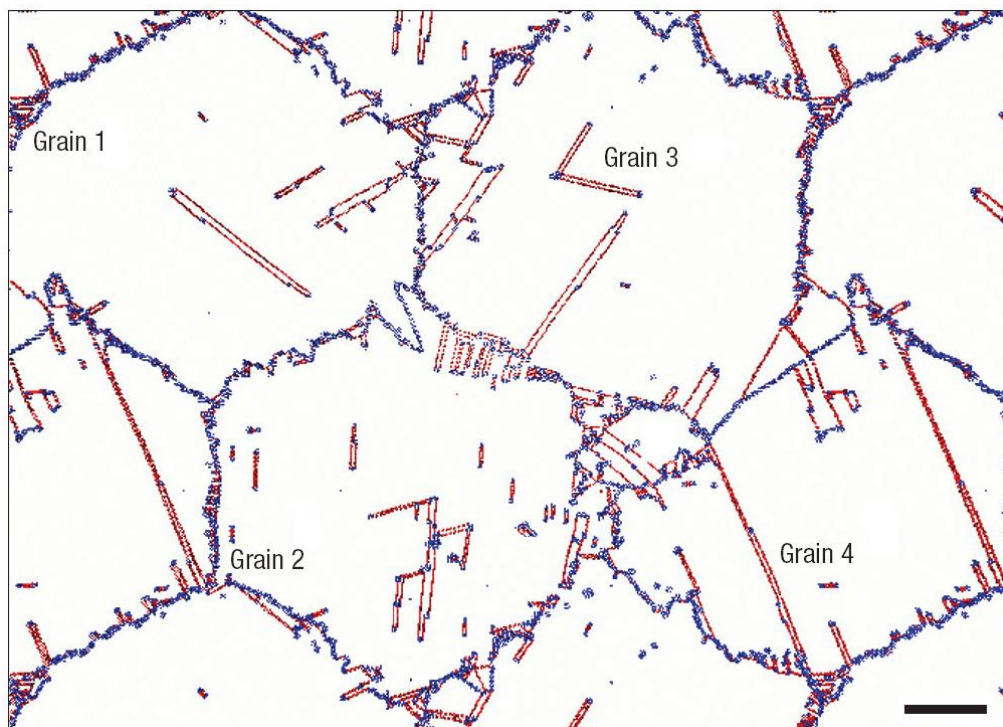


Figura 4.3 Fotografía a una deformación plástica del 12%, para un diámetro de grano de 45[nm].  
Fuente: Yamakov, V. [5]

Además de los efectos asociados a la interacción entre dislocaciones de deslizamiento, para grandes deformaciones las simulaciones revelan una gran variedad de inesperados e intrigantes efectos derivados de la interacción de las dislocaciones con los GBs y con las maclas de deformación. Su efecto combinado neto después de un 12% aprox. de deformación plástica es mostrado en la Figura 4.3 para un tamaño de grano de 45 nm.

La considerable rugosidad de los planos de GBs, es particularmente apreciable (comparado con la figura 1). Por otro lado, más allá de una deformación plástica de alrededor de 8% se produce la nucleación de un nuevo grano (denominado A) en esos GBs que han sido particularmente activos durante estos eventos de emisión/absorción.

La rugosidad de la red de GB se presenta en parte por la continua nucleación y aniquilación de dislocaciones. Además, la Figura 4.3 muestra un mecanismo para lo que, a primera vista, parece deslizamiento de GB, (ver el GB entre granos 2 y 3). Sin embargo, un análisis detallado revela que la subestructura de deformación ordenada en el grano 2 aparece de la emisión de una serie de fallas extrínsecas de apilamiento desde los GB, por la nucleación de parciales de Shockley dobles (comparadas con la región (3) en la Figura 4.2). De manera muy interesante, estos núcleos se alinean en una línea recta, presumiblemente debido a la interacción elástica entre ellos, y eventualmente conducen a la formación de un nuevo límite de dislocación.

Esta nucleación de los parciales de Shockley dobles representa otro elemental proceso de deformación asociado con la nucleación de dislocaciones desde los GBs. Es sabido, de todos modos, que este proceso requiere de esfuerzos locales muy grandes.

El proceso más intrigante en la Figura 4.3 involucra la nucleación de un nuevo grano, A. La secuencia de fotos en la Figura 4.4 captura en detalle el GB subyacente y los procesos de dislocación. La nucleación del nuevo grano comienza con la emisión de una dislocación completa  $\frac{1}{2}[110]$  desde el GB entre los granos 3 y 4 (proceso (1) en (a)). La compleja estructura del núcleo denominado (1') fue formada por dos dislocaciones, emitidas sin embargo sobre diferentes planos de deslizamiento. Como se ve en (b), esta nueva y virtualmente inmóvil estructura del núcleo comienza a emitir continuamente parciales, produciendo un crecimiento de una lámina de macla por "escapada de dislocaciones parciales", éste es el proceso (2). Esta lámina crece aun más por la absorción de dislocaciones  $\frac{1}{2}[110]$ , emitidas desde el mismo GB (proceso (1) en (b)), llevando a su aumento de tamaño en (c). Como se ve también en (c), el desarrollo del nuevo grano también involucra la emisión de otra laminilla de macla (denominada (3)) junto con las fallas de apilamiento extrínsecas terminadas por las parciales de Shockley dobles (denominadas (4)). Finalmente, la algo compleja subestructura así formada subsecuentemente se une para formar el grano final A en (d) y la Figura 4.3.

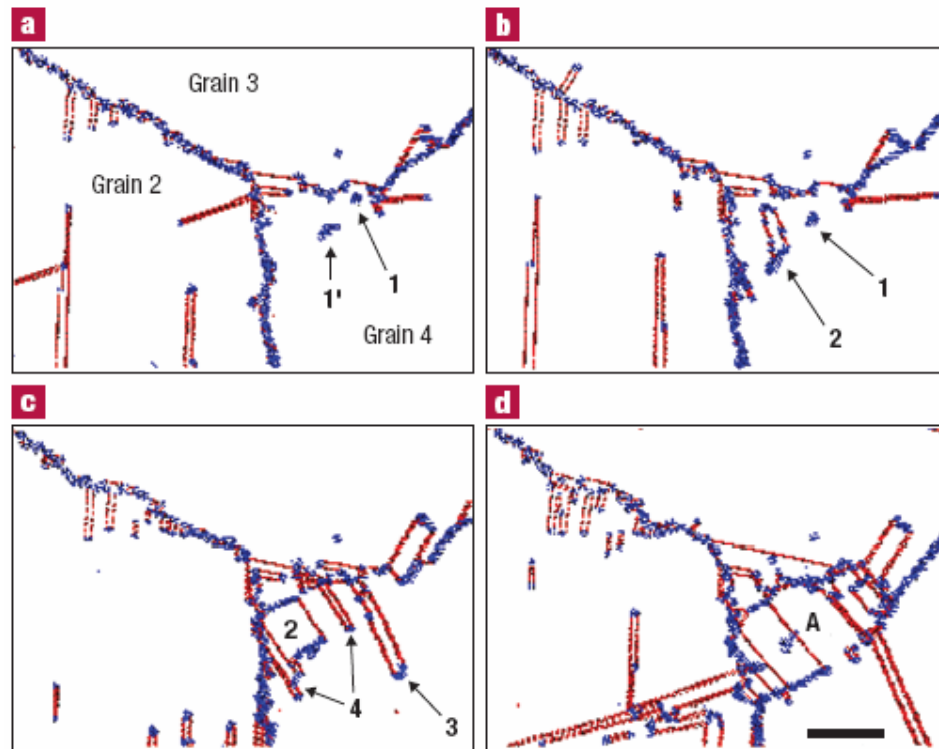


Figura 4.4 Fotografías sucesivas de la vecindad de la triple juntura, uniendo los granos 2, 3, 4; demostrando el mecanismo por el cual el nuevo grano A fue formado.

Fuente: Yamakov, V. [5]

En aluminio de grano grueso, la propensión a la deformación por maclaje observado en las Figuras 4.1-4.4 es muy sorprendente, dado que el Al tiene una algo mayor energía de falla de apilamiento. Sin embargo, es también sabido que la relación entre la energía de falla de apilamiento y la ocurrencia de deformación por maclaje es algo indirecta y de hecho, enteramente inexplorada en materiales nanocristalinos. Las observaciones sugieren fuertemente que sería oportuna una reexaminación de los modelos básicos de maclaje, con particular énfasis en el tamaño de grano nanocristalino.

## 5. Conclusiones

En gran parte, las simulaciones cubren territorios completamente nuevos y experimentalmente inexplorados no sólo en cuanto concierne al tamaño de grano pequeño sino también en otros importantes aspectos. Mediante el contraste con los típicos experimentos de microscopia de transmisión electrónica in-situ, las miradas obtenidas de las Figuras 4.3 y 4.4 capturan un comportamiento de deformación de volumen inherente, sin ser afectado por ningún otro esfuerzo mecánico y efectos de superficie que inadvertidamente afectan las observaciones en muestras de película delgada. También, para cualquier material de grano grueso, sería extremadamente difícil los mecanismos de deformación subyacentes, como los detalles atómicos y dinámicos disponibles en las Figuras 4.3 y 4.4.

Las simulaciones nombradas, bien caracterizadas no obstante los sistemas de modelación altamente idealizados, ilustran las nuevas y excitantes oportunidades ofrecidas por las simulaciones MD a gran escala, en cuanto al desenmarañamiento de la compleja interacción entre los procesos de dislocación y GB en materiales policristalinos. Sin embargo, esto es igualmente importante para estar al tanto de las limitaciones fundamentales de este acercamiento. Aparte de estar limitado a sistemas relativamente pequeños, debido a sus muy naturales simulaciones MD, están restringidos a muy altos esfuerzos y frecuencias de deformación, varios ordenes de magnitud más alto que los valores experimentales.

En resumen, las simulaciones proporcionan miradas a nivel atómico acerca de los procesos de interacción dislocación-GB en materiales nanocristalinos, nunca antes vistos en otros experimentos o simulaciones, y con un grado de detalle mecánico imposible de obtener en experimentos. Estos ofrecen así una mirada de cómo, en el futuro cercano, cada simulación puede revolucionar nuestro entendimiento de los procesos de deformación plástica en materiales fuertemente deformados. En particular, sería posible que pronto se puedan aclarar los mecanismos físicos que controlan tecnológicamente importantes procesos, como la deformación superplástica. Por otro lado, la capacidad de cada simulación de caracterizar completamente la altamente heterogénea situación de esfuerzos internos, estimulará indudablemente el desarrollo de mejores materiales físicos basados en modelos de deformación.

## **6. Bibliografía**

- [1] Callister, William. “Ciencia e Ingeniería de los Materiales”, Editorial Reverté, Barcelona(2001).
- [2] Dieter, George. “Metalurgia Mecánica”, Editorial Aguilar, Barcelona(1967).
- [3] Martínez Catalán, Juan Ramón. Apunte del curso “Geología Estructural y Dinámica Global”, Universidad de Salamanca(2002).
- [4] Ree-Hill, Robert. “Principios de Metalurgia Física”, Editorial CECSA, Santiago(1972).
- [5] Yamakov, V et al. “Dislocation Processes and Deformation Twinning in Nanocrystalline Al”.(2002)