

Komitet Mechaniki Polskiej Akademii Nauk

Politechnika Rzeszowska
im. Ignacego Łukasiewicza

Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polskiej Akademii Nauk

III KRAJOWA KONFERENCJA

NANO- i MIKROMECHANIKI



ORGANIZATORZY:



KKNM 2012

ISBN 978-83-89687-739

IPPT PAN, WARSZAWA 2012

Komitet Mechaniki Polskiej Akademii Nauk
Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polskiej Akademii Nauk
Politechnika Rzeszowska
im. Ignacego Łukasiewicza

III National Conference of Nano and Micromechanics

Under the auspices of the Ministry of Science and Higher Education
Prof. Barbara Kudrycka

III Krajowa Konferencja Nano i Mikromechaniki

Pod patronatem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego
Prof. Barbary Kudryckiej

4–6 July 2012

IPPT PAN, Warszawa

Grzegorz Maciejewski

Jak dyslokacje zmieniają gęstość kryształów

Change of a crystal density caused by dislocations

IPPT PAN, ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa

e-mail: gmaciej@ippt.gov.pl

słowa kluczowe: dyslokacje, właściwości kryształów, modelowanie, dynamika molekularna, aharmoniczność

W XIX i na początku XX wieku zaobserwowano, że metale pod wpływem obróbki plastycznej zwiększają swoją objętość. Wyjaśnienie tego zjawiska zaproponował Zener w 1942 r. [1]. Zener powiązał zmianę objętości kryształu z dwoma faktami: kryształ zawiera odkształcenia residualne oraz sieć krystaliczna jest sztywniejsza na ściskanie niż na rozciąganie. Połączenie tych dwóch czynników skutkuje wzrostem objętości materiału. W następnych latach hipoteza Zenera została potwierdzona przez:

- mechanikę continuum – analiza drugiego rzędu nieliniowości sprężystych wraz z zasadą równowagi sił prowadzi do wyrażenia na zmianę objętości ciała będącego pod wpływem samonaprężeń. Zgodnie z wyrażeniem, zaproponowanym przez Toupin i Rivlina [2], każda dyslokacja zwiększa objętość materiału;
- symulacje atomowe – wyniki symulacji atomowych potwierdziły, że kryształ zwiększa swoją objętość na skutek nukleacji dyslokacji [3,4,5]. Dyslokacja krawędziowa powoduje wzrost objętości materiału o około $0.25-1.0 |b|^2$ na jednostkę długości linii dyslokacji, gdzie b oznacza wektor Burgersa.

Celem niniejszego komunikatu jest dowiedzenie, że obecny pogląd na zmiany gęstości materiału na skutek powstania dyslokacji jest błędny lub, co najmniej, niekompletny. W celu przeanalizowania wpływu dyslokacji na gęstość kryształu, przeprowadzono szereg symulacji metodą dynamiki molekularnej. By wyeliminować wpływ potencjału międzyatomowego na otrzymane wyniki, każdy z analizowanych kryształów modelowano przy użyciu co najmniej dwóch potencjałów. Otrzymane wyniki wykazują, że pojedyncza linia dyslokacji może **zmniejszać** objętość materiału. Zaproponowano interpretację zmniejszenia objętości

kryształu wykorzystując kontynuinalną teorię dyslokacji [6] oraz metodę elementów skończonych. Podana interpretacja wyjaśnia dlaczego w pewnych przypadkach dyslokacje mogą zwiększać, a w innych zmniejszać objętość materiału.

LITERATURA:

- [1] Zener, C., *Trans. Am. Inst. Mining Met. Eng.* **147**, 361 (1942).
- [2] Toupin, R. A. and Rivlin, R. S., *J. Math. Phys.* **1**, 8, (1960).
- [3] Sinclair, J. E., Gehlen, P. C., Hoagland, R. G., and Hirth, J. P., *J. Appl. Phys.* **49**, 3890 (1978).
- [4] Vetter, R., Fastenau, R. H. J., and Baskes, M. I., *Phys. Stat. Sol. (a)* **67**, 585 (1981).
- [5] Henager, C. H. and Hoagland, R. G., *Phil. Mag.* **85**, 1478 (2005).
- [6] Kröner, E., in: Balian, R., Kleman, M., Poiries, J. P. (eds.), *Physics of defects, Nord-Holland*, pp. 215-315, (1981).