

# Capítulo 2

## Defectos lineales: Dislocaciones

A pesar de que en un principio, las dislocaciones se consideraron como un simple concepto matemático, en 1934 Taylor, Polanyi y Orowan propusieron, independientemente, que éstas eran las responsables de la capacidad del cristal de deformarse plásticamente. En la década de los 50, se pudo probar esta teoría gracias a unos experimentos realizados mediante un microscopio electrónico de transmisión (TEM). Desde entonces, se ha puesto de manifiesto la importancia de las dislocaciones en la plasticidad del cristal y en numerosos aspectos del comportamiento del material. En este sentido, las dislocaciones definen la capacidad del cristal de deformarse bajo presión, controlan otros comportamientos del material como el creep y la fatiga, la ductilidad y la fragilidad, el endurecimiento mediante indentación y la fricción, e influyen en una gran cantidad de situaciones como en radioactividad, electrónica y crecimiento de cristales, entre otras.

### 2.1. Estructuras cristalinas

Un cristal es un conjunto de átomos dispuestos periódicamente en el espacio, es decir, que puede construirse mediante la superposición de bloques idénticos distribuidos a lo largo del espacio. Estos bloques idénticos se denominan base y la forma en la que se distribuyen en el espacio, red cristalina:

$$\text{Estructura cristalina} = \text{base} + \text{red cristalina}$$

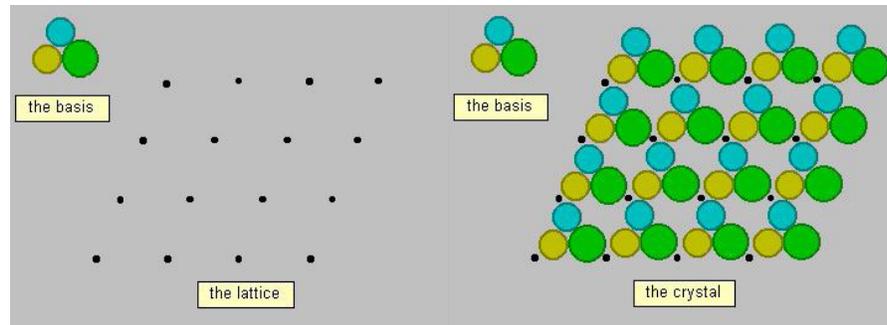


Figura 2.1: Cristal.

Mientras que la base puede estar formada por uno o más átomos, la red cristalina es un conjunto infinito de puntos matemáticos ordenados de forma periódica a lo largo del espacio. En 1948, el físico francés Auguste Bravais demostró que tan solo existen 14 tipos de redes cristalinas en tres dimensiones con distintas propiedades simétricas, desde entonces, dichas redes son conocidas como redes de Bravais. Cualquier red de Bravais está completamente definida por los llamados vectores primitivos de la red, es decir, que cualquier punto de la red se puede escribir mediante una combinación lineal de dichos vectores ( $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  y  $\mathbf{e}_3$ ):

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{e}_1 + n_2\mathbf{e}_2 + n_3\mathbf{e}_3 \quad (2.1)$$

donde  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  son números enteros arbitrarios. Al paralelepípedo más pequeño con un punto de la red en cada uno de sus vértices se le llama celda primitiva y cada lado de dicha celda es un vector primitivo de la red. Normalmente, para reflejar mejor la simetría, se utilizan vectores ( $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ ) distintos a los primitivos, el paralelepípedo formado por estos vectores se denomina celda unidad.

Entre las distintas redes de Bravais cabe citar la SC (cúbica simple), la BCC (cúbica centrada en el cuerpo) y la FCC (cúbica centrada en las caras):

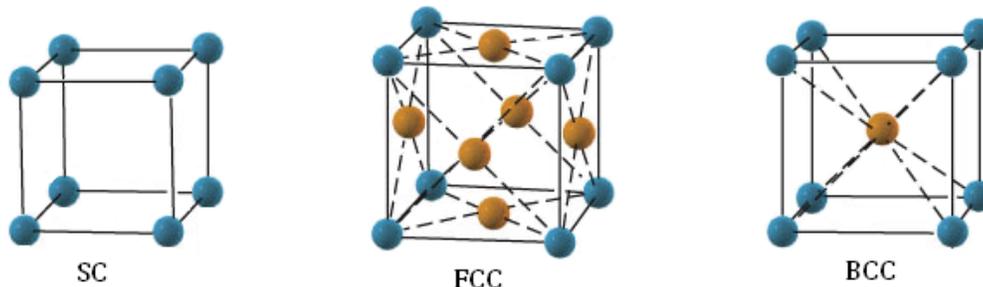


Figura 2.2: Estructuras cristalinas cúbicas.

En la estructura cúbica simple la celda unidad coincide con la primitiva y las posiciones de los puntos de la red se pueden definir mediante:

$$\mathbf{R} = i\mathbf{a} + j\mathbf{b} + k\mathbf{c} \quad (2.2)$$

donde  $i$ ,  $j$  y  $k$  son números enteros. Sin embargo, en las redes BCC y FCC la celda unidad es más grande que la celda primitiva. Los puntos de la red BCC son:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= i\mathbf{a} + j\mathbf{b} + k\mathbf{c} \\ \mathbf{R} &= \left(i + \frac{1}{2}\right)\mathbf{a} + \left(j + \frac{1}{2}\right)\mathbf{b} + \left(k + \frac{1}{2}\right)\mathbf{c} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Y los puntos de la red FCC son:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= i\mathbf{a} + j\mathbf{b} + k\mathbf{c} \\ \mathbf{R} &= \left(i + \frac{1}{2}\right)\mathbf{a} + \left(j + \frac{1}{2}\right)\mathbf{b} + k\mathbf{c} \\ \mathbf{R} &= \left(i + \frac{1}{2}\right)\mathbf{a} + j\mathbf{b} + \left(k + \frac{1}{2}\right)\mathbf{c} \\ \mathbf{R} &= i\mathbf{a} + \left(j + \frac{1}{2}\right)\mathbf{b} + \left(k + \frac{1}{2}\right)\mathbf{c} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Para obtener cualquiera de estas estructuras es suficiente con asociar un solo átomo de la misma especie química a cada punto de la red.

Por otra parte, es común expresar la posición de los átomos de un cristal con unidades de vectores de la red y, para este propósito, se introducen los índices de Miller. Éstos se utilizan frecuentemente para describir direcciones de líneas, orientaciones de planos y, en lo relativo a las dislocaciones, para especificar la dirección de su línea y su plano de deslizamiento. Por ejemplo, un vector  $\mathbf{l}$  que conecta dos puntos de la red de Bravais puede describirse como combinación lineal de los vectores:  $\mathbf{l} = i\mathbf{a} + j\mathbf{b} + k\mathbf{c}$ ,  $[i \ j \ k]$  según la notación de Miller. A continuación, se presentan una serie de reglas básicas que hay que seguir para usar correctamente dicha notación:

- Para especificar una dirección paralela a  $\mathbf{l}$  se seleccionan los índices que corresponden al vector con la longitud más pequeña entre todos los paralelos a  $\mathbf{l}$ .
- Las componentes negativas se especifican mediante una barra sobre el correspondiente índice.
- Para identificar una familia de direcciones simétricas los índices se escriben entre corchetes angulares:  $\langle i j k \rangle$ .
- Para describir un plano cristalográfico, se usan los índices de la dirección normal al plano entre paréntesis:  $(i j k)$
- Para identificar una familia de planos simétricos los índices de la dirección normal se escriben entre llaves:  $\{i j k\}$

## 2.2. Concepto de dislocación

Una dislocación es un defecto de línea en la red cristalina y puede definirse especificando qué átomos han perdido su localización respecto a la red perfecta o libre de defectos. Existen múltiples formas de crear una misma dislocación, sin embargo, la estructura y las propiedades de las dislocaciones no dependen de cómo se crearon. A partir de la línea de dislocación, borde situado entre la parte desplazada y la no desplazada del plano de corte, podemos definir el ángulo característico como el ángulo entre dicha línea y el vector de desplazamiento. Atendiendo a dicho ángulo, podemos diferenciar tres tipos de dislocaciones: dislocaciones de cuña o arista ( $0^\circ$ ), dislocaciones helicoidales o de tornillo ( $90^\circ$ ) y dislocaciones mixtas ( $0^\circ$ - $90^\circ$ ).

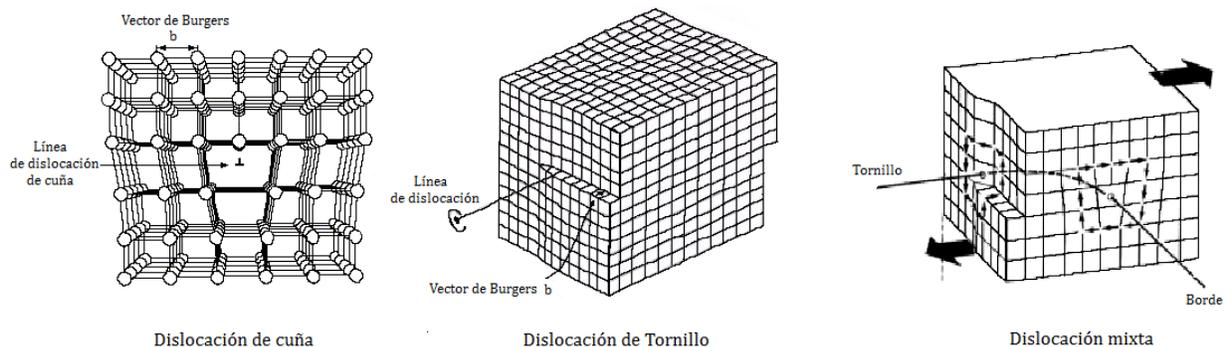


Figura 2.3: Tipos de dislocaciones

A pesar de que la forma de las dislocaciones puede ser muy compleja, la distorsión introducida en el cristal puede ser cuantificada mediante el vector de Burgers. Éste se puede determinar visualmente o realizando el correspondiente circuito de Burgers, secuencia de saltos de un átomo hasta su vecino (por ejemplo, 8 saltos hacia abajo, 8 a la derecha, 8 arriba y 8 a la izquierda). Si el circuito no contiene ningún defecto, el átomo de salida será el mismo que el de llegada, sin embargo, si encierra una dislocación, el vector que apunta al átomo de llegada desde el de salida, es el vector de Burgers. Si se traslada o se deforma el circuito, siempre que no corte la línea de dislocación, el vector no varía, por lo que se puede decir que es una propiedad intrínseca de la dislocación.

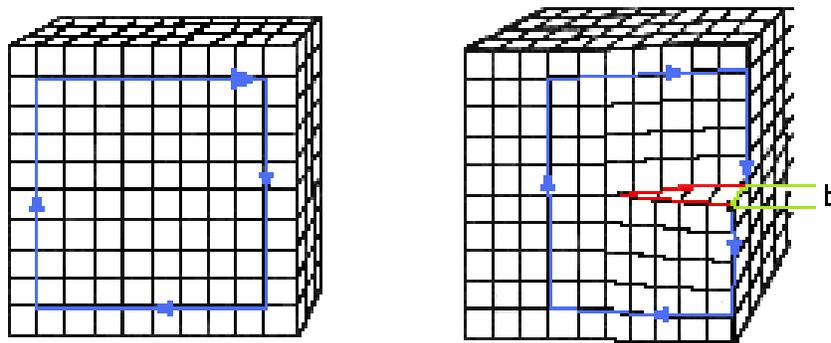


Figura 2.4: Circuito de Burgers

### 2.3. Dinámica de las dislocaciones

El movimiento de la dislocación es un mecanismo que permite al cristal deformarse plásticamente cuando esté sujeto a una tensión aplicada. Si definimos el plano de deslizamiento como aquél que contiene al vector de Burgers y a la línea de dislocación, podemos diferenciar dos tipos de movimiento: deslizamiento o movimiento conservativo, en el que la dislocación se desplaza a lo largo del plano de deslizamiento y tan solo requiere una recombinación de los vecinos, por lo que se conserva el número de átomos alrededor de la dislocación; y el movimiento de escalada o no conservativo, en el que el desplazamiento es perpendicular a dicho plano y requiere que se produzca una difusión atómica (absorción de átomos o emisión de vacantes). Mientras que en las dislocaciones de borde y en las mixtas se pueden dar ambos tipos de movimiento, en las de tornillo no se da la escalada, ya que el vector de Burgers es paralelo a la línea de dislocación y, por eso, el plano no está únicamente definido.

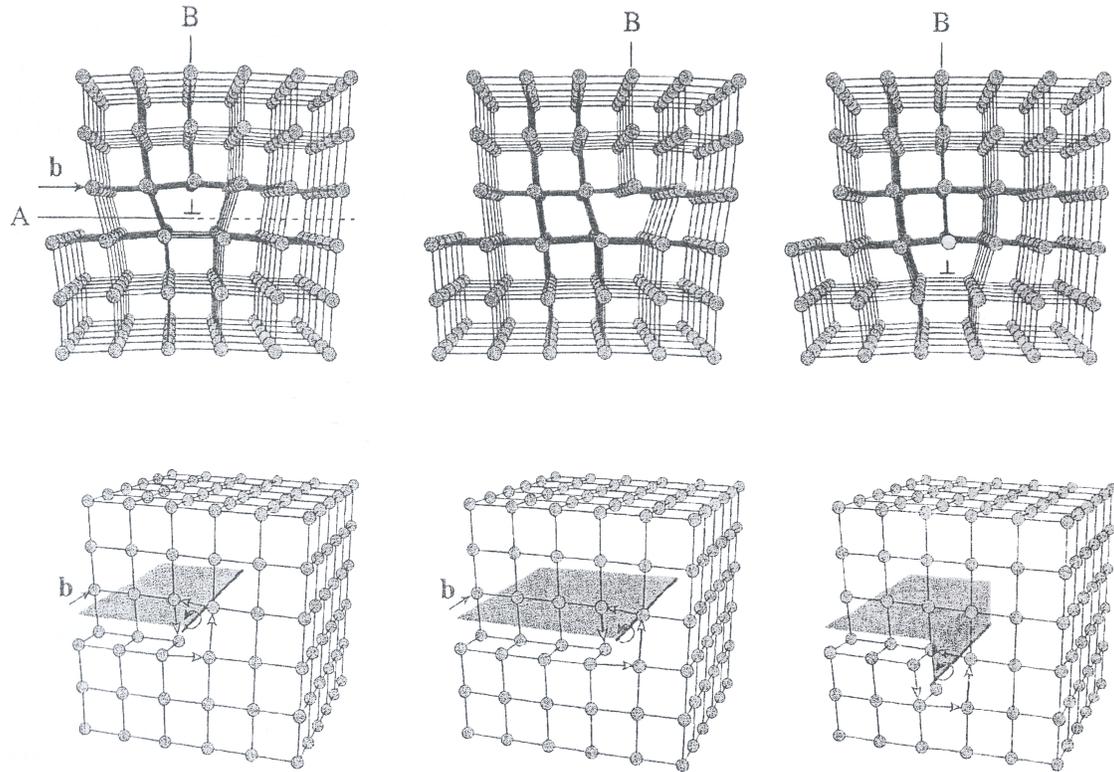


Figura 2.5: Movimiento de las dislocaciones

En realidad, el movimiento de las dislocaciones es una combinación de escalada y de deslizamiento donde, dependiendo de la tensión, temperatura y otras condiciones, uno de los mecanismos es dominante. A bajas temperaturas, el deslizamiento suele ser dominante, mientras que a altas temperaturas o en condiciones de saturación de vacantes, la escalada puede convertirse en el movimiento dominante.

Si consideramos que el movimiento de deslizamiento es el dominante, la movilidad de la dislocación puede estar influenciada por factores extrínsecos, impurezas que actúan como obstáculos por ejemplo, e intrínsecos, como las interacciones interatómicas. Dos parámetros que caracterizan la resistencia intrínseca de la red al movimiento de la dislocaciones son las barreras de Peierls y la tensión de Peierls. Si consideramos que una dislocación se mueve a través de su plano de deslizamiento, los efectos de la red cristalina sobre el movimiento pueden representarse por una energía que varía con la posición de la dislocación en la red. La periodicidad en la variación de la energía es consecuencia de la traslación de la simetría del cristal. Los mínimos de la función, conocidos como valles de Peierls, son las posiciones que preferentemente ocupan las dislocaciones. Para saltar de una valle a otro, éstas necesitan superar una barrera energética, que a tensión cero es conocida como barrera de Peierls. La barrera puede ser modificada por las fuerzas que actúan sobre la dislocación, de forma que si se alcanza la tensión crítica, llamada tensión de Peierls (a temperatura 0), la barrera desaparece completamente.

Podemos diferenciar dos desencadenantes del movimiento, uno cuando la tensión local es menor que la tensión de Peierls y el otro cuando es mayor. En el primer caso, la dislocación puede moverse gracias a las fluctuaciones térmicas: un segmento de la dislocación pasa al siguiente valle creándose dos curvas (“Kinks”), posteriormente, debido a la tensión y/o a la temperatura, las curvas avanzan hacia los extremos hasta que la dislocación pasa completamente al siguiente valle. De esta forma, a medida que aumenta la temperatura se favorece el movimiento. En el segundo caso, si la tensión local es mayor que la tensión de Peierls ocurre el llamado regimen de arrastre viscoso, donde la velocidad es una función de la tensión y está limitada por la viscosidad debida a la interacción de la dislocación con la vibración de la red. Aquí, por lo tanto, la movilidad decrece con la temperatura.

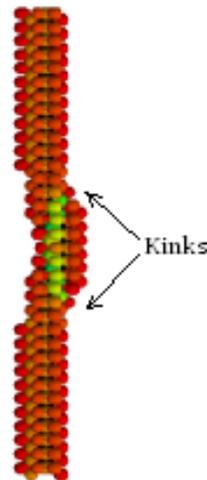


Figura 2.6: Movimiento mediante fluctuaciones térmicas

## 2.4. Análisis y visualización de los datos

Si bien una simulación puede abarcar un gran número de átomos, no tiene el mismo valor la información que ofrecen unos átomos que la que ofrecen otros. En simulaciones atómicas de cristales sólidos, es importante encontrar dónde están los defectos y cómo se organizan los átomos alrededor de éstos, mientras que el resto de los átomos son normalmente mucho menos interesantes. Como la estructura perfecta del cristal normalmente se corresponde con el estado de mínima energía, una forma de localizar los defectos del cristal es encontrar dónde la energía local excede a la energía por átomo en una red perfecta.

Una forma útil de observar los niveles de energía de los átomos es mediante un histograma. Distintos niveles de energía pueden corresponder a diferentes formas de configuraciones atómicas, en concreto, los picos más altos del histograma corresponden a configuraciones cercanas a la perfecta. Después de un breve estudio, es posible localizar un intervalo de energía que

corresponde a defectos en la red. A pesar de que este método es simple y se usa frecuentemente, presenta algunas limitaciones, la más importante es que la relación señal-ruido suele ser baja. A temperatura finita, las fluctuaciones térmicas pueden difuminar las diferencias entre las energías de los átomos, por lo tanto, el rastro de los defectos, que sería observado claramente a temperatura cero, puede ser completamente borrado por el ruido térmico. Para reducir la influencia de éste, se puede usar un algoritmo para calcular el mínimo local eliminando los efectos de la temperatura.

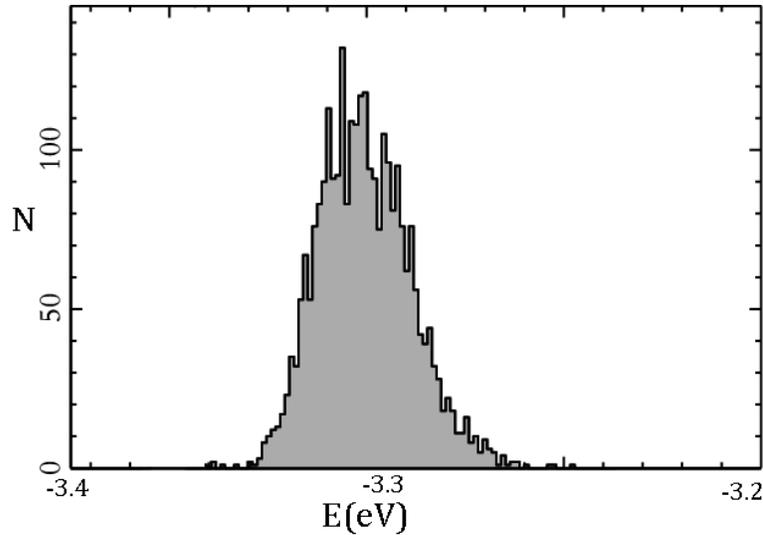


Figura 2.7: Histograma de la energía local

Otra de las limitaciones del método es que en los átomos de los defectos no se tiene por qué apreciar un nivel de energía más alto que en el resto de los átomos, esto ocurre, por ejemplo, en los defectos de apilamiento en un metal con estructura FCC. En estas ocasiones, el mejor indicador de los defectos del cristal es el llamado parámetro de desviación centrosimétrico (CSD). En muchas estructuras cristalinas, como las cúbica simple, las FCC y las BCC, cada átomo es un centro de inversión simétrica, es decir, que por cada vecino que ocupa una posición relativa  $\mathbf{r}$ , existe otro que ocupa una posición  $-\mathbf{r}$  con el que forma un par centrosimétrico. El parámetro CSD de un átomo mide cuantitativamente su desviación respecto a la simetría ideal de los átomos contiguos y se puede definir como:

$$P = \sum_{i=1}^{N_p} |\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_{i+N_p}|^2 \quad (2.5)$$

donde  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_{i+N_p}$  son las posiciones del par alrededor del átomo bajo consideración, y  $N_p$  es un número que depende de la estructura atómica (6 para FCC y 4 para BCC). Para las estructuras perfectas, los vectores  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_{i+N_p}$  se cancelan, por lo que  $P$  sería cero; mientras

que, como los defectos de los cristales rompen la simetría local,  $P$  suele ser distinto de cero cerca de un defecto. Además de detectar los defectos cuyo rastro de energía es débil, el análisis CSD es más robusto que el filtrado de energía en cuanto al ruido térmico, es decir, que los defectos se detectan mediante el análisis CSD hasta temperaturas relativamente altas. A pesar de presentar estas ventajas, dicho análisis solo puede aplicarse cuando cada átomo es el centro de inversión de simetría en la estructura perfecta del cristal. A continuación podemos observar un :

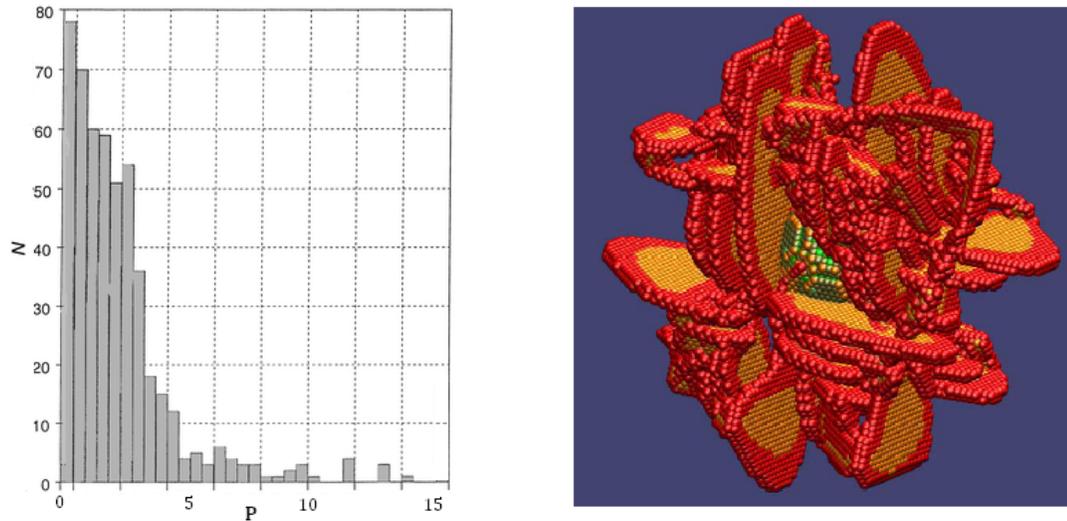


Figura 2.8: Histograma del parámetro CSD y resultado de una simulación en el que se pueden observar los defectos alrededor de un microhuevo tras haberlo deformado. La escala de colores de los átomos depende del valor del parámetro CSD, así los átomos rojos corresponden a dislocaciones parciales y los naranjas y amarillos a defectos de empaquetamiento