

3. Modelos clásicos de dislocaciones.

Las dislocaciones pueden bien considerarse y estudiarse con modelos discretos, como el que presentaremos en este trabajo, o con modelos basados y fundamentados en la teoría de elasticidad clásica. También es verdad que existen modelos duales en los cuales se hace una combinación de modelos atomísticos discretos con teorías que parten del continuo. En esta sección hablaremos de las dislocaciones como objetos continuos en un medio isótropo, es decir, la dislocación o modelo de Volterra y luego comentaremos el modelo de Pierls-Nabarro que contempla el efecto de la estructura cristalina sobre la dislocación. Estos dos modelos anteriores son referentes en la literatura clásica de dislocaciones.

3.1. Modelo de dislocación de Volterra.

Volterra considero un cilindro hueco con un corte longitudinal en un medio elástico, homogéneo e isótropo y propuso 6 posibles formas de deformación (figura 13). Algunas de las deformaciones propuestas por Volterra claramente corresponden a un deslizamiento y algunas de las configuraciones resultantes corresponden a dislocaciones. Sin embargo, los que trabajaban en el campo de la elasticidad no se involucraron en el tema de los deslizamientos cristalográficos hasta que las dislocaciones fueran postuladas como defectos cristalinos. Las configuraciones (b) y (c) en la figura (13) corresponden a dislocaciones de borde, y la (d) corresponde a una dislocación helicoidal. Las configuraciones (e), (f) y (g) no corresponden a dislocaciones y no serán discutidas en este trabajo.

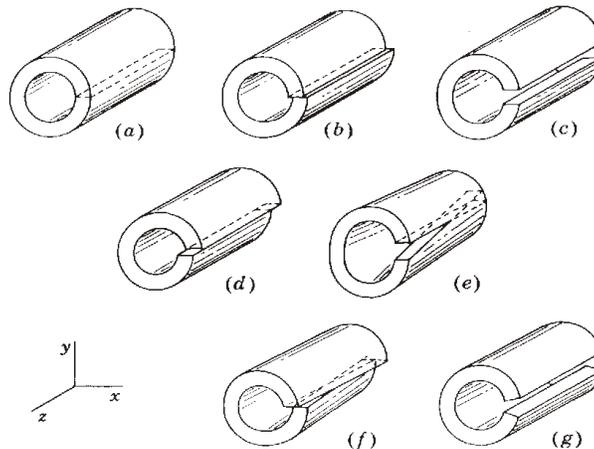


Figura 13: Dislocación de borde de Volterra insertada a lo largo del eje z en el origen $x = y = 0$

Estas configuraciones no aparecen como defectos aislados en metales cristalinos porque los desplazamientos producidos por estas configuraciones son proporcionales al radio externo del cilindro y así no desaparecen cuando el radio tiende a infinito.

3.1.1. Dislocación helicoidal de Volterra

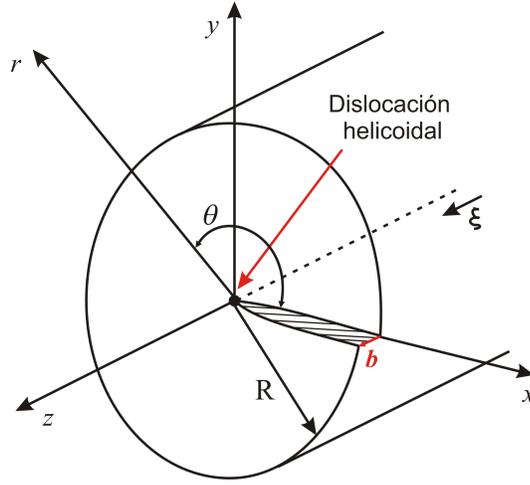


Figura 14: Dislocación helicoidal a lo largo del eje de un cilindro de radio R y longitud L .

Cuando las dimensiones de un cuerpo se incrementan, las tensiones de imagen³ causadas por las condiciones de contorno en la superficie decrecen a una dada distancia desde la dislocación. En el límite, el campo de tensiones es característico de la dislocación en un medio infinito. Este campo de tensiones es llamado auto-tensiones de la dislocación. Consideremos una dislocación helicoidal definida por regla de la mano derecha en el eje de un cilindro de radio R y longitud L (figura 14). Esta dislocación corresponde con la dislocación de Volterra de la figura 13 y puede reproducirse partiendo de un cilindro perfecto con un desplazamiento de corte en la dirección z a lo largo de plano xz . Un Circuito de Burgers muestra que esta dislocación tiene un vector de Burgers positivo b . Como es evidente en la figura 14, $u_x = u_y = 0$, y el desplazamiento u_z es discontinuo en la superficie de corte definida por $y = 0, x > 0$:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0, x > 0} u_z(x - \eta) - u_z(x, \eta) = b_z \quad \eta \text{ positivo.} \quad (5)$$

Es razonable asumir que en un medio isótropo el desplazamiento u_z se incrementa uniformemente con el ángulo θ para representar esta discontinuidad,

$$u_z(r, \theta) = b \frac{\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x} \quad (6)$$

De hecho, puede demostrarse que la Ec. (6) satisface las ecuaciones de la elasticidad. Las tensiones asociadas con este desplazamiento salen de aplicar la teoría de la elasticidad, y son

$$\begin{aligned} \sigma_{xz} &= \frac{-\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} & \sigma_{yz} &= \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

³Este concepto se desarrolla en la sección 3-3 de la Ref.[5]

también para comodidad en el calculo de la energía podemos expresar la tensión en coordenadas polares,

$$\begin{aligned}\sigma_{\theta r} &= \frac{\mu b}{2\pi r} \\ \sigma_{rz} = \sigma_{r\theta} = \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} &= 0\end{aligned}\tag{8}$$

donde, por ejemplo, $\sigma_{\theta z}$ representa la tensión en la dirección z actuando sobre un plano radial, es decir, perpendicular a \mathbf{e}_θ (figura 14). Para calcular la energía almacenada por unidad de longitud de una dislocación infinita en un campo elástico de tensiones, consideremos la región comprendida entre dos cilindros de radio r_0 y R . Utilizando la ecuación 8 e integrando en el volumen considerado tenemos

$$\frac{W}{L} = \int_{r_0}^R \frac{\sigma_{\theta z}^2}{2\mu} 2\pi r dr = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}\tag{9}$$

La energía W/L diverge cuando $R \rightarrow \infty$ o cuando $r_0 \rightarrow 0$. La divergencia con R muestra que no se puede atribuirle a la dislocación una energía característica bien definida, ya que la energía depende del tamaño del cristal. Para el caso de una dislocación en un cristal, puede hacerse una aproximación de $R \approx l$, donde l es la distancia mas corta desde la dislocación a la superficie libre. Otra aproximación que puede hacerse para el caso de un cristal que contenga varias dislocaciones de ambos signos es tomar, para R , el valor medio de la distancia entre las diferentes dislocaciones. Debido a que la energía es función de un termino logaritmico la elección del valor de R afecta de manera considerable el resultado. La divergencia con r_0 surge de la inadecuada linealidad de la teoría elástica para afrontar la fuerte distorsión de la red en las inmediaciones de la dislocación. Por este motivo el uso de la Ec. (9) se limita a considerar la materia fuera del cilindro de radio $r_0 b$, donde la teoría lineal elástica es aplicada. La energía total es obtenida sumándole un termino de energía de desajuste que contempla la materia dentro del cilindro de radio r_0 . Cálculos atomísticos para cristales de *NaCl* indican que la energía en el núcleo para este caso no excede $\approx 0,2\mu b^2$ por unidad de longitud y para el caso de deslizamiento de dislocaciones en materiales con estructuras de empaquetamiento compacto como es el caso del *BCC* este valor se reduce de $\approx 0,1\mu b^2$ a $\approx 0,05\mu b^2$ por unidad de longitud. Formalmente, podemos incluir las dos contribuciones, es decir, la parte elástica mas la energía de desajuste en la siguiente formula:

$$\frac{W}{L} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{\alpha R}{b}\tag{10}$$

donde $r_0 = b/\alpha$ y $\alpha \approx 1$. La elección de α se determina con modelos atomísticos⁴ que contemplen la no linealidad cerca de núcleo de la dislocación. Si bien no nos desviaremos en el calculo de α , en el apartado siguiente comentaremos algo sobre ello.

⁴Para ver la determinación de α en detalle podemos ver el apartado 8-3 de la ref.[5]

3.1.2. Dislocación de borde de Volterra

Después de haber desarrollado el modelo de Volterra para una dislocación helicoidal, la aplicación de los conceptos adquiridos en ese desarrollo se aplican análogamente en este apartado para determinar la energía de una dislocación de borde. Para no extendernos demasiado, solo nos centraremos en el cálculo de la energía y no entraremos en detalles para la obtención de las tensiones de una dislocación de borde definida en un cilindro como el que muestra la Figura (15). Partiendo de que la energía de deformación por unidad de longitud entre dos superficies cilíndricas de radios r_0 y R para una dislocación de borde en un medio infinito es

$$\frac{W}{L} = \int_{r_0}^R r dr \int_0^{2\pi} d\theta \left[\frac{1}{2\mu} \sigma_{xy}^2 + \frac{1}{2E} (\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 - 2\nu\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{zz}^2) \right] \quad (11)$$

La integral anterior da como resultado

$$\frac{W}{L} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} \quad (12)$$

la cual tiene una forma idéntica a la Ec. (9) obtenida para una dislocación de tornillo, excepto el factor $(1-\nu)$. Con un núcleo real dentro del cilindro más pequeño, el trabajo realizado por

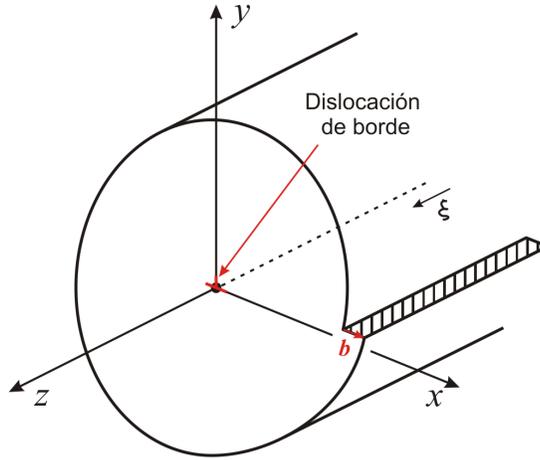


Figura 15: Dislocación de borde de Volterra insertada a lo largo del eje z en el origen $x = y = 0$

el cilindro interior se conserva en el núcleo para un proceso reversible, es decir que la energía radial hacia el interior se acumula como parte de la energía en dicho núcleo. Formalmente, la energía en el núcleo, es incorporada a la expresión (12) por el reemplazo de r_0 por b/α y ajustando α de tal modo que la energía total por la deformación dentro del cilindro limitado por $r = R$ sea dada por la siguiente formula

(13) dando una expresión análoga a la de una dislocación tipo helicoidal, Ec. (10) del apartado anterior.

Como se menciono anteriormente, las Ecs. (10) y (13) pueden ser ajustadas para que contemplen la energía en la zona cercana al núcleo, es decir, dentro del radio r_0 . Haciendo este ajuste de α con modelos discretos podemos lograr estas expresiones que determinan la energía de una dislocación por unidad de longitud en un medio infinito puedan tener el mismo resultado de energía que los obtenidos para cálculos atomísticos.

Para tener un orden un poco mas estimativo, por ejemplo, para una dislocación definida en la dirección $\frac{1}{2}(100)$ sobre el plano 111 en un cristal con estructura cúbica centrada en las caras, $\alpha = 3,3$ para un dislocación helicoidal y $\alpha = 4,5$ para un dislocación de borde.

3.2. Modelo de dislocación de Pierls-Nabarro.

Un modelo mas complejo que el de Volterra fue presentado primero por Pierls[14], luego fue dilucidado y extendido por Nabarro[11]. Como veremos, este modelo es utilizado para determinar la energía en el núcleo de una dislocación y el ancho de esta zona. El modelo de Pierls tiene el gran merito de proveer una solución analítica no lineal de la energía en el núcleo de la dislocación. En la actualidad este modelo es suplantado por cálculos atomísticos, pero es una buena referencia para saber órdenes de magnitud y hacer comprobaciones.

3.2.1. Dislocación de borde de Pierls-Nabarro.

Consideremos dos cristales semi infinito con una red cúbica simple, como se muestra en la figura (16a), con los ejes del cubo paralelos , pero con un desfase inicial en la dirección x a lo largo del plano $y = 0$. Inicialmente el desregistro del cristal inferior con respecto al superior es

$$\phi_x^0 = \begin{cases} \frac{b}{2}, & x > 0 \\ \frac{-b}{2}, & x < 0 \end{cases} \quad (14)$$

Los desplazamientos $u(x)$, antisimétrico sobre el plano $y = 0$, son impuestos sobre los dos medios cristales, los cuales son luego unidos a una dislocación de borde como muestra la figura (16b). El desregistro en el último caso es

$$\phi_x = \begin{cases} 2u_x + \frac{b}{2}, & x > 0 \\ 2u_x - \frac{-b}{2}, & x < 0 \end{cases} \quad (15)$$

con las condiciones de borde $u_x(\infty) = -u_x(-\infty) = -b/4$. Los despeamientos en la expresión anterior están referidos al cristal inferior. La convención para el vector de Burgers es, $\xi = -\mathbf{k}$ y $b = b\mathbf{i}$. Siendo \mathbf{k} e \mathbf{i} los vectores unitarios en las direcciones z y x respectivamente. Al campo de desplazamiento se encuentran asociadas fuerzas de restauración, que son causa de la

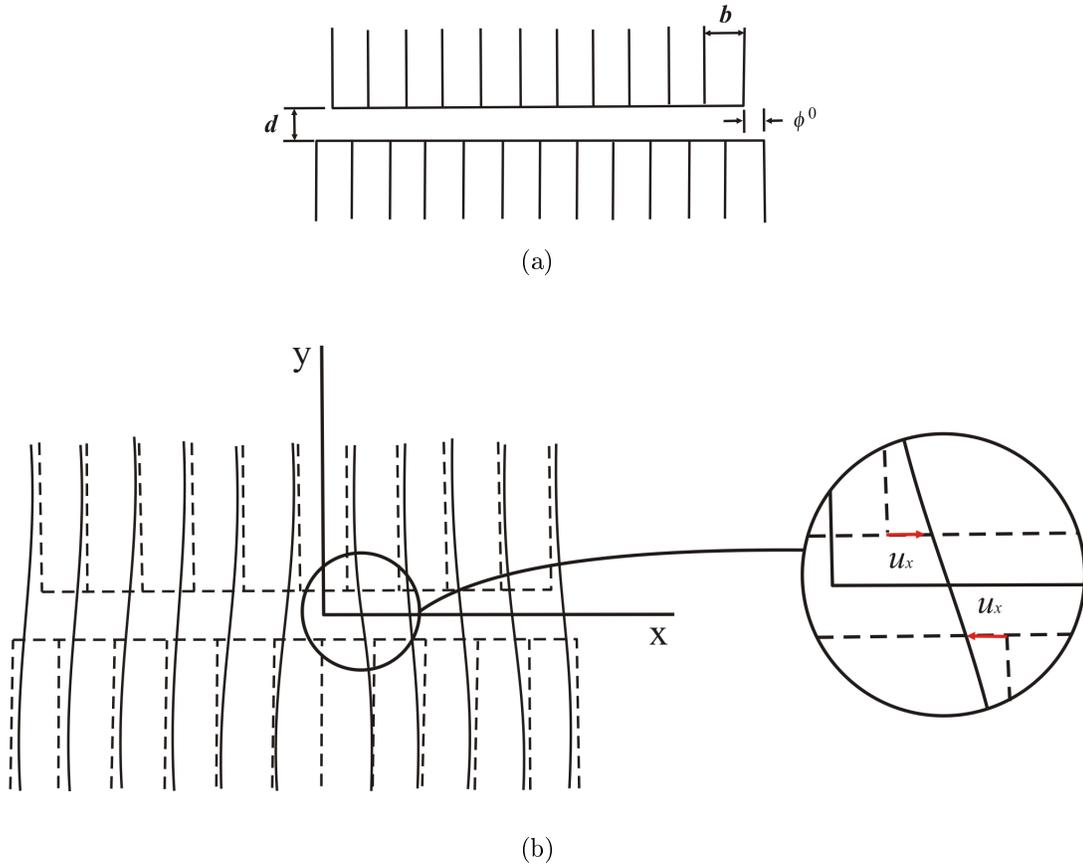


Figura 16: (a) Dos redes cúbicas simples con un desregistro de $b/2$ (b) El mismo cristal desplazado por una dislocación de borde.

distorsión de los enlaces que atraviesan el plano $y = 0$. Como una primera aproximación, estas fuerzas se asumen como un valor local de tensión σ_{xy} en el plano $y = 0$, las cuales son una función sinusoidal del desregistro $\phi(x)$. Esta suposición requiere que los desplazamientos en la dirección y sean pequeños comparados con los desplazamientos en la dirección x . Así, para el cristal inferior, las tensiones asociadas con las fuerzas de restauración son

$$\begin{aligned}\sigma_{xy}(x, 0) &= A \operatorname{sen} \frac{2\pi\phi(x)}{b} \\ &= -A \operatorname{sen} \frac{4\pi}{b}\end{aligned}\tag{16}$$

La contante A se determina a partir de que la ley de Hooke sea verificada para pequeñas deformaciones ϵ . Así

$$\sigma_{xy}(x, 0) = 2\mu\epsilon_{xy} = \frac{\mu\phi_x}{d}\tag{17}$$

donde d es la distancia o espacio entre planos. Combinando las Ecs. (16) y (17), obtenemos

$$\sigma_{xy}(x, 0) = -\frac{\mu b}{2\pi d} \operatorname{sen} \frac{4\pi u_x}{b}\tag{18}$$

Como se propuso originalmente por Eshelby, una distribución continua de una dislocación de borde infinitesimal a lo largo del eje x satisface estos requerimientos, produciendo desplazamientos u_x , como se ve en la figura (17) mientras que los desplazamiento en el eje y , es decir u_y se mantienen pequeños. Tomemos el vector de Buergeres $\mathbf{b}' dx'$ para un una dislocación infinitesimal que se encuentra entre x' y $x' + dx'$. El desplazamiento correspondiente es dado por $-2(du_x/dx)dx'$, de modo que

$$b = \int_{-\infty}^{\infty} b'(x') dx' = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du_x}{dx} \right)_{x=x'} dx' \quad (19)$$

De acuerdo con el trabajo realizado por Volterra para una dislocación de borde, esta distribución produce una tensión de corte en $(x, 0)$ dada por

$$\sigma_{xy}(x, 0) = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b' dx'}{x-x'} = \frac{\mu}{\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(du_x/dx)_{x=x'} dx'}{x-x'} \quad (20)$$

donde la integral es definida por su valor principal. En equilibrio la tensión neta en el punto $(x, 0)$ desaparece, de este modo el campo de tensiones σ_{xy} de acuerdo con la Ec. (20) debe ser igual y opuesta al dado por la Ec. (18). La combinación de estas dos ecuaciones conduce a la siguiente ecuación integral para el desplazamiento u_x :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{(du_x/dx)_{x=x'} dx'}{x-x'} = \frac{b(1-\nu)}{2d} \text{sen} \frac{4\pi u_x}{b} \quad (21)$$

La solución de la Ec.(21) es

$$u_x = -\frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{x}{\xi} \quad (22)$$

donde $\xi = d/(1-\nu)$. La Ec. (22) es consecuente con la figura (17), y satisface las condiciones de contorno $u_x(\infty) = -u_x(-\infty) = -b/4$. Además, $u(\xi) = -b/8 = \frac{1}{2}u_x(\infty)$. De ese modo, el ancho de la dislocación, definido por $2\xi = d/(1-\nu)$, incluye la región $-\xi < x < \xi$, donde el desregistro es mayor que la mitad de su valor máximo en $x = 0$. La anchura de la dislocación da una medida aproximada de la extensión de la región central que no puede ser descrito por elasticidad lineal. Si sustituimos la Ec. (22) dentro de la Ec.(20) da la siguiente expresión de la tensión en función de x para el plano $y = 0$ que nos permitirá en el siguiente apartado calcular la energía.

$$\sigma_{xy}(x, 0) = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + \xi^2} \quad (23)$$

No haremos la deducción pero puede demostrarse que la distribución completa de tensiones generadas por una dislocación de borde del modelo de Pierls-Nabarro es

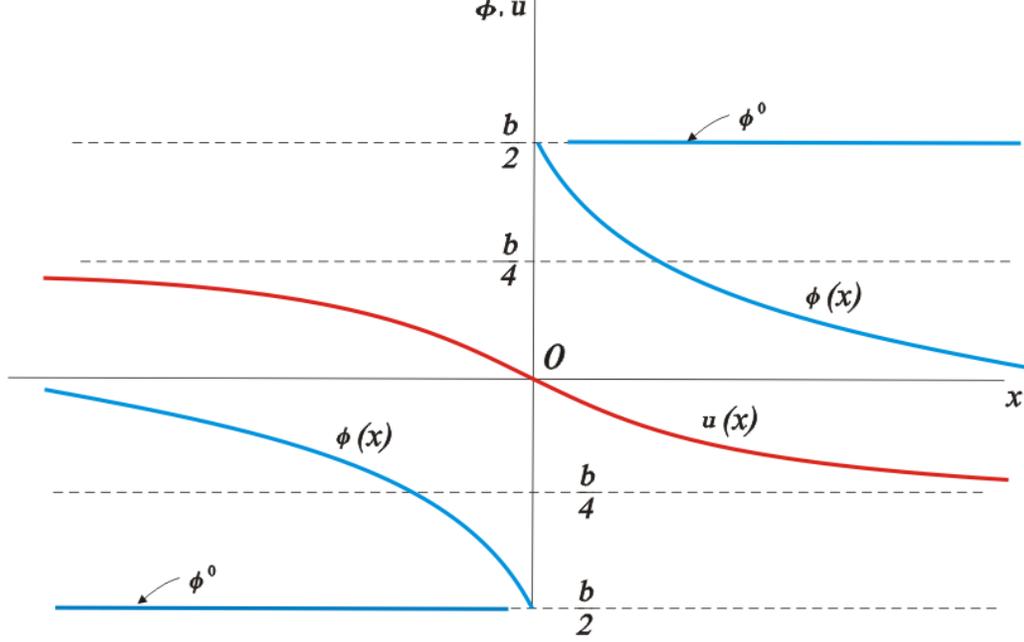


Figura 17: Función de desplazamiento para una dislocación de borde.

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{x}{x^2 + (y + \xi)^2} - \frac{2xy(y + \xi)}{[x^2 + (y + \xi)^2]^2} \right\} \\
 \sigma_{xx} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(3y + 2\xi)}{x^2 + (y + \xi)^2} - \frac{2y(y + \xi)^2}{[x^2 + (y + \xi)^2]^2} \right\} \\
 \sigma_{yy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{y}{x^2 + (y + \xi)^2} - \frac{2x^2y(y + \xi)}{[x^2 + (y + \xi)^2]^2} \right\} \\
 \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = \frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y + \xi}{x^2 + (y + \xi)^2}
 \end{aligned} \tag{24}$$

3.2.2. Dislocación helicoidal de Pierls-Nabarro.

Como se ve en la figura (18a), el tratamiento de una dislocación helicoidal puede tratarse de manera análoga a como se hizo en la sección anterior para una dislocación de borde. Inicialmente las dos cristales semi infinitos tienen un desregistro

$$\phi_z^0 = \begin{cases} \frac{b}{2}, & x > 0 \\ -\frac{b}{2}, & x < 0 \end{cases} \tag{25}$$

La dislocación helicoidal definida por la regla de la mano derecha que se muestra en la figura (18b) es formada por los desplazamientos u_z sobre el eje x , semejantes a u_x para la dislocación de borde. No haremos el desarrollo para el campo de tensiones ya que el objetivo de este trabajo es el cálculo de la energía, y este es semejante al que se hizo para una dislocación de borde en

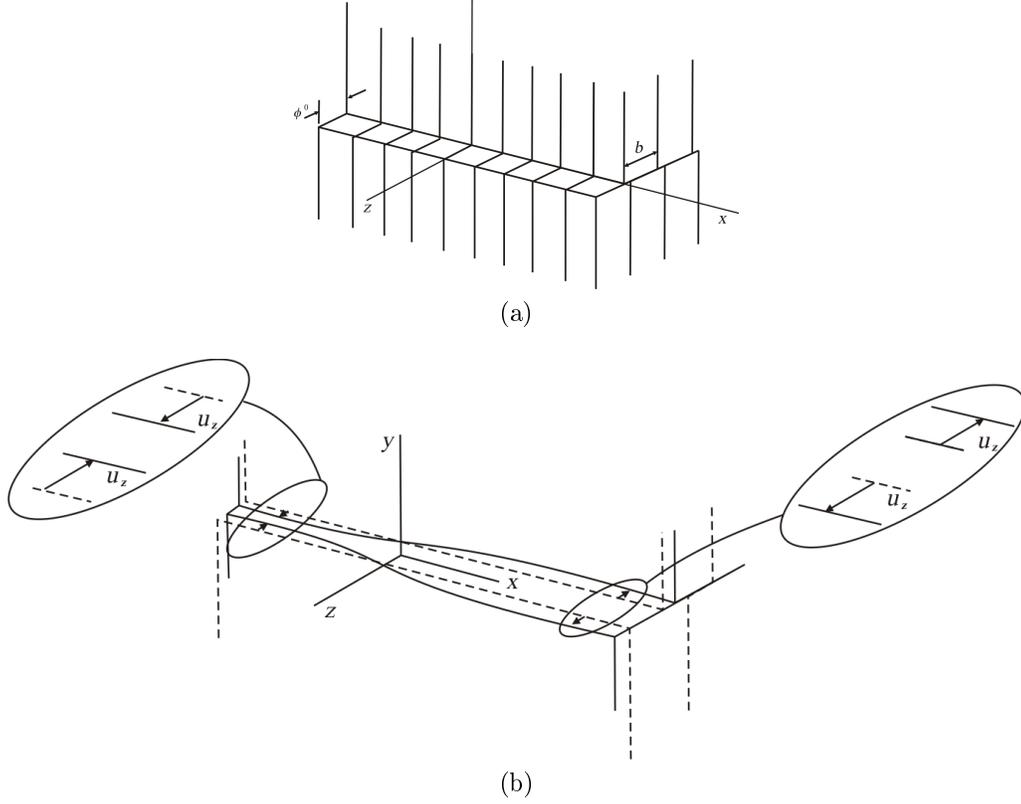


Figura 18: Dos redes cubicas simples. (a) Con un desregistro de $b/2$, (b) desplazada por la presencia de una dislocación de tornillo.

el apartado anterior. El desplazamiento u_z es

$$u_z = -\frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{x}{\eta} \quad (26)$$

donde $\eta = \frac{d}{2}$. Una notable diferencia para la dislocación helicoidal es que η reemplaza a ξ , donde $\eta = (1 - \nu)\xi$. Así el ancho de la dislocación helicoidal, 2η , es menor que el ancho de una dislocación de borde. Las tensiones obtenidas para la dislocación de tornillo en coordenadas polares son

$$\begin{aligned} \sigma_{\theta z} &= \frac{\mu b}{2\pi r} \left(1 \mp \frac{d \sin \theta}{2r} \right) \\ \sigma_{rz} &= \frac{\mp \mu b}{4\pi r} \left(1 \mp \frac{d \cos \theta}{r} \right) \end{aligned} \quad (27)$$

Las tensiones se reducen al modelo de Volterra cuando $\eta = d/2 \ll r$. Asimismo, el parámetro η tiene el efecto de eliminar la singularidad en las tensiones en $r = 0$. La diferencia con el modelo de dislocación de tornillo de Volterra, es que el modelo de dislocación de Pierls posee una tensión σ_{rz} cerca del núcleo. Esta componente surge porque la dislocación se extiende fuera del plano $y = 0$. Este fenómeno nos anticipa la disociación de la dislocación de su plano de deslizamiento.

3.2.3. Energía del modelo de Pierls-Nabarro.

La energía asociada con este modelo es dividida en dos partes; la energía por deformación elástica almacenada entre los dos cristales, correspondiente a la dislocación de Volterra, y la energía de desajuste asociada a la distorsión de los enlaces en el plano $y = 0$, equivalente a la energía de núcleo de Volterra asociada al factor α . En vista de la continuidad esperada del campo de desplazamientos alrededor de la dislocación, esta división es mas bien un artificio, pero es consistente con las suposiciones del modelo. La energía elástica almacenada en el medio cristal superior es igual al trabajo hecho por las fuerzas de superficie en generar el desplazamiento u_x . Sobre un elemento de área δx por unidad de longitud en la dirección z , a partir de la Ec. (18) este trabajo es

$$\delta W = \int_0^{u_x} \sigma_{xy}(x, 0) \delta x du = \frac{1}{2} \sigma(x, 0) u_x \delta x \quad (28)$$

Integrando esta expresión sobre ambas superficies desde $x = -r$ hasta $x = r$ obtenemos un resultado equivalente a la expresión (12), si luego sustituimos por σ_{xy} y u_x de las ecuaciones (22) y (23), llegamos a

$$W = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r}{2\xi} \quad (29)$$

Para obtener la energía elástica total para un cilindro de radio r alrededor de la dislocación, hay que considerar el trabajo adicional hecho por las tensiones actuando sobre la superficie del cilindro cuando la superficie de éste se desliza, este termino adicional es

$$W = \frac{\mu b^2 \gamma}{4\pi(1-\nu)} \quad (30)$$

donde $\gamma = (1 - 2\nu)/4(1 - \nu)$. Similamente para una dislocación helicoidal se obtiene que la energía elástica es

$$W = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{r}{2\eta} \quad (31)$$

En este caso no hay tensiones que realicen trabajo sobre la superficie del cilindro. Ahora evaluaremos el segundo término de la energía propuesta por este modelo, es decir, el término relacionado a la energía de desajuste cerca del núcleo. La tensión local de corte sobre el plano de deslizamiento de la dislocación de borde (figura 16) es

$$\epsilon_{xy}(x, 0) = \frac{\phi_x}{2d} = -\frac{2u_x + (b/2)}{2d} \quad (32)$$

La energía de deformación local es consecuencia de la contribución de tensiones $\sigma_{xy} d\epsilon_{xy} + \sigma_{xy} d\epsilon_{yx} = 2\sigma_{xy} d\epsilon_{xy}$. Así, la energía de desajuste almacenada en un elemento de volumen de altura d , ancho δx , y de profundidad unidad en la superficie de deslizamiento $y = 0$ es

$$\begin{aligned} \delta W(x) &= -2 \int d\delta x \sigma_{xy} \epsilon_{xy} = 2 \int_{b/4}^{u_x} \delta x \sigma_{xy} du_x \\ &= -\frac{\mu b \delta x}{\pi d} \int_{b/4}^{u_x} \text{sen} \frac{4\pi u_x}{b} du_x = \frac{\mu b^2 \delta x}{4\pi^2 d} \left(1 + \cos \frac{4\pi u_x}{b} \right) \end{aligned} \quad (33)$$

utilizando la Ec. (18) para σ_{xy} . La energía total de desajuste en el plano de deslizamiento es

$$W_d = \frac{\mu b^2}{4\pi^2 d} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \cos \frac{4\pi u_x}{b} \right) dx = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \quad (34)$$

Similarmente, la energía de desajuste para una dislocación de tornillo representada por este modelo es dada por

$$W_d = \frac{\mu b}{4\pi} \quad (35)$$

3.3. Energía de dislocaciones definidas por segmentos rectos

Basándonos en la referencia [5], en esta sección vamos a considerar algunas configuraciones de dislocaciones definidas por tramos rectos. Es decir vamos a hacer una discretización de una dislocación o un lazo de dislocación por segmentos rectos, como por ejemplo el de la figura 19. El vector de Burgers como se vio en la sección anterior se conserva en los nodos, es decir

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_4 \quad (36)$$

$$\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_5 \quad (37)$$

etc. Esta configuración puede ser considerada por estar constituida de lazos simple, un bucle $C_1C_2C_3$, con vector de Burgers \mathbf{b}_1 , otro $C_4C_2C_5$, con vector de Burgers $\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$, etc. Puede demostrarse y calcularse la auto energía de lazos simples y su mutua interacción, entonces podemos escribir la energía de una configuración de dislocaciones rectas constituida por segmentos C_i con vectores de Burgers \mathbf{b}_i . Esto lo escribimos de la siguiente manera

$$W = \sum_i W_{S_i} + \sum_{i < j} W_{ij} \quad (38)$$

donde la notación $i < j$ en la segunda sumatoria indica que cada interacción será considerada solo una vez. El termino de la energía de interacción W_{ij} converge. Pero la auto energía diverge logarítmicamente. Para remover esta divergencia, se hace la aproximación de que dos elementos $d\mathbf{l}_1$ y $d\mathbf{l}_2$ no interactúan entre sí cuando están a una distancia menor que ρ . Sobre la base de esta convención, la auto energía de un segmento de una dislocación de tipo helicoidal de longitud L es

$$W_S = \frac{\mu b^2}{8\pi} \int_0^L dl_1 \left(\int_0^{l_1-\rho} \frac{dl_2}{l_1 - l_2} + \int_{l_1+\rho}^L \frac{dl_2}{l_2 - l_1} \right) \quad (39)$$

Integrando la ecuación (39) obtenemos

$$W_S = \frac{\mu b^2 L}{4\pi} \ln \frac{L}{e\rho} \quad (40)$$

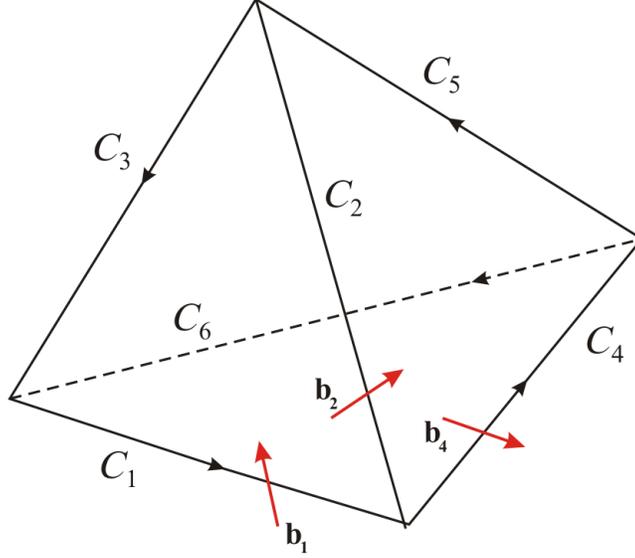


Figura 19: Configuración para una dislocación definida por segmentos rectos. Las flechas sobre las líneas indican el sentido de ξ .

Para este método de corte de dislocaciones debemos tener presente la interacción. Si consideramos una línea de dislocación de longitud L entonces su energía la calcularemos siguiendo la ecuación (40). Ahora si esta misma dislocación la discretizamos en dos tramos, es decir, $L = L_1 + L_2$ la energía de esta línea L será

$$W_S = W_{S_1} + W_{S_2} + W_{12} \quad (41)$$

donde

$$W_{12} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \int_0^{L_1} dl_1 \int_0^{L_2} \frac{dl_2}{l_1 + l_2} \quad (42)$$

El convenio que adoptamos es considerar el valor de constante, independientemente del tipo de dislocación. Una aproximación de este valor en función del α que se comentó en secciones anteriores es la siguiente

$$\rho = \frac{b}{2\alpha} e^\gamma \quad (43)$$

para típicos valores de ν de 0,2 a 0,33, e^γ varía entre 1,13 y 1,21, es decir cerca de la unidad.