



Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Μηχανικής, Υλικών & Κατεργασιών

Διπλωματική Εργασία

Πλαστικότητα Μονοκρυστάλλων

Ανδρέας Λεβεντάκης

Επιβλέπων Καθηγητής: Ν. Αράβας

Βόλος, 2013



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»

Αριθ. Εισ.: 11773/1
Ημερ. Εισ.: 16-12-2013
Δωρεά: Συγγραφέας
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ - ΜΜ
2013
ΛΕΒ

Περίληψη

Η παρούσα μελέτη αναφέρεται στην πλαστικότητα των μονοκρυστάλλων και στον αντίστοιχο μηχανισμό ολίσθησης.

Στο πρώτο κεφάλαιο της μελέτης γίνεται μια αναφορά στην κρυσταλλογραφία και πιο συγκεκριμένα στις κύριες κρυσταλλικές δομές, τα κρυσταλλικά συστήματα και τους δείκτες Miller. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η μέθοδος της στερεογραφικής προβολής και πώς αυτή εξυπηρετεί στην περιγραφή της ολίσθησης με τη βοήθεια των διαγραμμάτων πόλων.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται η κινηματική του μηχανισμού ολίσθησης και πιο συγκεκριμένα τα χαρακτηριστικά της πλαστικής ροής των μονοκρυστάλλων, οι εξισώσεις που περιγράφουν την ολίσθηση και η ελαστοπλαστική συμπεριφορά των μετάλλων σε μεγάλες παραμορφώσεις. Τέλος αναλύεται ο μονοαξονικός εφελκυσμός και γίνεται μία εφαρμογή με απλή ολίσθηση στη διεύθυνση φόρτισης [531] στο βασικό τρίγωνο.

Στο τρίτο και τελευταίο Κεφάλαιο, παρουσιάζονται και συγκρίνονται τα αποτελέσματα απλής και πολλαπλής ολίσθησης με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων γίνεται με ένα διάγραμμα τάσης – παραμόρφωσης και με ένα διάγραμμα όπου φαίνεται η πορεία της διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο καθώς εξελίσσεται η παραμόρφωση. Τέλος, γίνεται μια αναφορά στο φαινόμενο της latent σκλήρυνσης που λαμβάνει χώρα κατά την ολίσθηση.

Ευχαριστίες

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου, που χάρη στην αμέριστη συμπαράσταση και υποστήριξή τους μπόρεσα να ολοκληρώσω τις σπουδές μου. Επίσης ένα μεγάλο ευχαριστώ οφείλω στον αδερφό μου για καθώς και στο ευρύτερο οικογενειακό και φιλικό μου περιβάλλον για την πολύπλευρη υποστήριξή τους.

Ευχαριστώ θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Νικόλαο Αράβα για την πολύτιμη βοήθειά του και καθοδήγηση καθ' όλη τη διάρκεια της εργασίας.

Τέλος, τις μεγαλύτερες ευχαριστίες τις οφείλω στο Θεό που με αξίωσε να ολοκληρώσω τις σπουδές μου στην ώρα τους και παράλληλα να καταπιαστώ και με πολλά άλλα πράγματα.

Περιεχόμενα

Περίληψη	2
Ευχαριστίες	3
Περιεχόμενα	4
Κατάλογος Σχημάτων.....	5
Κατάλογος Πινάκων	7
1. 1. ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑ	8
1.1. Πλέγματα Bravais και κρυσταλλικά συστήματα.....	8
1.2. Δείκτες κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων και επιπέδων.....	11
1.3. Κρυσταλλικές δομές	15
1.4. Στερεογραφική προβολή	18
1.5. Διαγράμματα Πόλων και Αντίστροφα Διαγράμματα Πόλων	19
1.6. Ισοδυναμία Καμπυλόγραμμων Τριγώνων	22
2. ΚΙΝΗΜΑΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΥ ΟΛΙΣΘΗΣΗΣ	25
2.1. Χαρακτηριστικά Πλαστικής Ροής στους μονοκρυστάλλους.....	25
2.2. Κινηματική.....	30
2.3. Η ελαστοπλαστική συμπεριφορά των μετάλλων σε πεπερασμένες παραμορφώσεις	32
2.4. Μονοαξονικός Εφελκυσμός μονοκρυστάλλου.....	33
2.5. Εφαρμογή Single Slip για διεύθυνση φόρτισης [531]	36
3. ΑΠΛΗ ΟΛΙΣΘΗΣΗ – ΠΟΛΛΑΠΛΗ ΟΛΙΣΘΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ	39
3.1. Απλή Ολίσθηση.....	39
3.2. Global και κρυσταλλικό σύστημα συντεταγμένων	40
3.3. Latent Σκλήρυνση	42
3.4. Πολλαπλή Ολίσθηση	45
Βιβλιογραφία.....	48

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1-1. Μοναδιαία Κυψελίδα	8
Σχήμα 1-2 Ένα τριδιάστατο πλέγμα που αντιπροσωπεύει μια περιοδική διάταξη σημείων στο χώρο. Η περιοδικότητα ορίζεται από τους κρυσταλλογραφικούς άξονες a, b και c . ^[3] ...	9
Σχήμα 1-3. Τα 14 κρυσταλλικά πλέγματα και τα 7 κρυσταλλικά συστήματα	10
Σχήμα 1-4.Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις στο κυβικό σύστημα. ^[3]	12
Σχήμα 1-5. Δείκτες Miller κρυσταλλογραφικών επιπέδων. ^[3]	14
Σχήμα 1-6. Δείκτες ορισμένων επιπέδων του εξαγωνικού συστήματος ^[3]	15
Σχήμα 1-7. (α) Παραδείγματα υπολογισμού δεικτών Miller επιπέδων, (β) Παράδειγμα οικογένειας επιπέδων στο εξαγωνικό σύστημα	15
Σχήμα 1-8. Κοινές κρυσταλλικές δομές[2]	16
Σχήμα 1-9. Κρυσταλλική δομή χωροκεντρομένου κυβικού (bcc): (α) κυψελίδα, (β) τοποθέτηση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα, (γ) κρυσταλλική δομή bcc που προκύπτει με την παράθεση πολλών κυψελίδων στις τρεις διαστάσεις στο χώρο.....	17
Σχήμα 1-10. Κρυσταλλική δομή εδροκεντρομένου κυβικού (FCC): (α) κυψελίδα, (β) τοποθέτηση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα, (γ) κρυσταλλική δομή FCC που προκύπτει με την παράθεση πολλών κυψελίδων στις τρεις διαστάσεις στο χώρο.....	17
Σχήμα 1-11. Κρυσταλλική δομή μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικού (HCP): (α) κυψελίδα, (β) τοποθέτηση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα, (γ) κρυσταλλική δομή hcp που προκύπτει με την παράθεση πολλών κυψελίδων στις τρεις διαστάσεις στο χώρο.....	17
Σχήμα 1-12. Τα επίπεδα $\{110\}$ του BCC με τις πυκνές διευθύνσεις $\langle 111 \rangle$, όπου τα άτομα έχουν διαδοχική επαφή. Η διεύθυνση $\langle 111 \rangle$ είναι η διαγώνιος του κύβου. ^[3]	18
Σχήμα 1-13. Τα πυκνά επίπεδα $\{111\}$ και οι πυκνές διευθύνσεις $\langle 110 \rangle$ του FCC. ^[3]	18
Σχήμα 1-14.Στερεογραφική προβολή των διευθύνσεων που μας ενδιαφέρουν σε ένα κυβικό κρύσταλλο. ^[5]	20
Σχήμα 1-15.Τυπικό διάγραμμα πόλων όπου απεικονίζεται η υφή που δημιουργείται κατά την έλαση ενός φύλλου FCC μετάλλου. ^[5]	21
Σχήμα 1-16. Απεικόνιση κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων στο διάγραμμα πόλων.	21
Σχήμα 1-17. Καρτεσιανές (x_1, x_2, x_3) και σφαιρικές (r, θ, ϕ) συντεταγμένες ενός σημείου.	22
Σχήμα 1-18. Διάγραμμα πόλων. Συσχετισμοί κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων	23
Σχήμα 1-19. Διάγραμμα πόλων. Συσχετισμοί κρυσταλλογραφικών δεικτών.....	24
Σχήμα 2-1. Η παραμόρφωση του κρυστάλλου λόγω ολίσθησης ενός συστήματος κατά τον μονοαξονικό εφελκυσμό. ^[5]	25
Σχήμα 2-2. Ενεργά συστήματα ολίσθησης κατά τη διάρκεια μονοαξονικού εφελκυσμού σε FCC κρύσταλλο.	27
Σχήμα 2-3. Περιστροφή κρυσταλλικού πλέγματος κατά τη διάρκεια μονοαξονικής φόρτισης. ^[5]	27
Σχήμα 2-4.Διάγραμμα πόλων όπου απεικονίζεται η εξέλιξη του άξονα φόρτισης κατά τη διάρκεια του μονοαξονικού εφελκυσμού σε FCC κρύσταλλο. ^[5]	28
Σχήμα 2-5. Καμπύλες διατμητικής τάσεως-παραμορφώσεως για μονοκρυστάλλους BCC, FCC και HCP. ^[3]	29
Σχήμα 2-6. Διάγραμμα τάσης – παραμόρφωσης στον μονοαξονικό εφελκυσμό σε FCC μονοκρύσταλλο. ^[5]	30
Σχήμα 2-7. Ανάλυση παραμόρφωσης του κρυστάλλου σε ελαστικό και πλαστικό μέρος ^[5]	30
Σχήμα 2-8. Σχηματική απεικόνιση της ενδιάμεσης γεωμετρίας	32
Σχήμα 2-9. Σχηματική απεικόνιση μονοαξονικού εφελκυσμού.	33
Σχήμα 2-10. Γραφική παράσταση του όρου $\tanh x$ ως προς x	36
Σχήμα 2-11. Διάγραμμα $\frac{\sigma}{\tau_0} - \varepsilon$	37

Σχήμα 2-12. Αλλαγή διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο	38
Σχήμα 3-1. Σύγκριση καμπύλης σ-ε με τη χρήση πεπερασμένων σημείων (κόκκινα σημεία) και με την αναλυτική λύση (μπλε γραμμή).	39
Σχήμα 3-2. Πορεία διεύθυνσης ολίσθησης κατά τη διάρκεια της παραμόρφωση. Με μπλε γραμμή απεικονίζεται η αναλυτική λύση και με κόκκινα σημεία είναι τα αποτελέσματα από τα πεπερασμένα στοιχεία.	40
Σχήμα 3-3. Τυπική καμπύλη τ-γ ενός FCC μονοκρυστάλλου που φορτίζεται μονοαξονικά σε ένα αρχικό προσανατολισμό για απλή ολίσθηση. Το σημείο Β δηλώνει εκεί που ξεκινάει η δευτερογενής ολίσθηση και το II δηλώνει μια περιοχή στο στάδιο II της παραμόρφωσης.	44
Σχήμα 3-4. Διάγραμμα σ-ε. Η μπλε γραμμή απεικονίζει την αναλυτική λύση της απλής ολίσθησης, τα κόκκινα σημεία απεικονίζουν την απλή ολίσθηση με χρήση πεπερασμένων σημείων και τα πράσινα σημεία την πολλαπλή ολίσθηση με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων.	46
Σχήμα 3-5. Πορεία διεύθυνσης ολίσθησης. Η μπλε γραμμή απεικονίζει την αναλυτική λύση της απλής ολίσθησης, τα κόκκινα σημεία απεικονίζουν την απλή ολίσθηση με χρήση πεπερασμένων σημείων και τα πράσινα σημεία την πολλαπλή ολίσθηση με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων.	47
Σχήμα 3-6. Η μπλε γραμμή απεικονίζει την αναλυτική λύση της απλής ολίσθησης, τα κόκκινα σημεία απεικονίζουν την απλή ολίσθηση με χρήση πεπερασμένων σημείων και τα πράσινα σημεία την πολλαπλή ολίσθηση με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων.	47

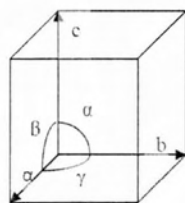
Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1-1. Τα επτά κρυσταλλικά συστήματα (η γωνία \hat{a} είναι η γωνία μεταξύ των αξόνων b και c) ^[3]	11
Πίνακας 2-1. Διευθύνσεις και επίπεδα ολίσθησης για τις συνήθεις κρυσταλλικές δομές. .	25
Πίνακας 2-2. Συστήματα ολίσθησης για FCC κρυστάλλους	26

1.

1. ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑ

Τα μέταλλα είναι κρυσταλλικά στερεά, έχουν δηλαδή κρυσταλλική δομή, καθώς τα άτομα από τα οποία αποτελείται το υλικό διατάσσονται στο χώρο με τρόπο κανονικό, επαναλαμβανόμενο και συμμετρικό. Η τριδιάστατη διάταξη των ατόμων στο χώρο που επαναλαμβάνεται δημιουργώντας ένα δίκτυο περιγράφεται με τη βοήθεια του κρυσταλλικού πλέγματος, με δομικό στοιχείο τη μοναδιαία κυψελίδα. Κυψελίδα ονομάζεται το μικρότερο τμήμα του κρυσταλλικού πλέγματος χωρίς τα άτομα, το οποίο διατηρεί όλα τα χαρακτηριστικά του όλου πλέγματος. Το γεωμετρικό σχήμα της κυψελίδας χαρακτηρίζει τα διαφορετικά κρυσταλλικά συστήματα στα οποία κρυσταλλώνονται τα διάφορα σώματα. Το σχήμα και το μέγεθος της κυψελίδας περιγράφονται από το μήκος των πλευρών της κυψελίδας (a, b, c) και από τις γωνίες α, β και γ που σχηματίζονται μεταξύ των πλευρών της κυψελίδας. Τα μεγέθη αυτά ονομάζονται παράμετροι της κυψελίδας (Σχήμα 1-1).

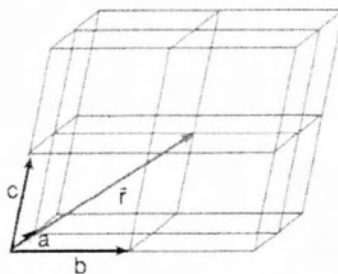


Σχήμα 1-1. Μοναδιαία Κυψελίδα

Οι κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις και τα κρυσταλλικά επίπεδα του πλέγματος προσδιορίζονται με τους δείκτες Miller. Τα κρυσταλλικά στερεά ταξινομούνται σε 14 πλέγματα Bravais τα οποία κατατάσσονται σε 7 κρυσταλλικά συστήματα. Τα άτομα των μετάλλων συντάσσονται σε πυκνές δομές, κυριότερες των οποίων είναι οι δομές FCC, BCC και HCP.

1.1. Πλέγματα Bravais και κρυσταλλικά συστήματα

Στα κρυσταλλικά στερεά η διάταξη των ατόμων στο χώρο είναι περιοδική. Είναι λογικό λοιπόν, να συσχετίσουμε τη διάταξη αυτή με ένα δίκτυο σημείων στο χώρο, το οποίο ονομάζεται πλέγμα. Ένα παράδειγμα τριδιάστατου πλέγματος φαίνεται στο Σχήμα 1-2.











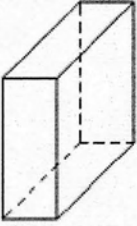











Σχήμα 1-2 Ένα τριδιάστατο πλέγμα που αντιπροσωπεύει μια περιοδική διάταξη σημείων στο χώρο. Η περιοδικότητα ορίζεται από τους κρυσταλλογραφικούς άξονες a, b και c .^[3]

Ας θεωρήσουμε τώρα μια σειρά ατόμων σε ένα κρύσταλλο. Η ατομική διάταξη κατά μήκος αυτής της σειράς επαναλαμβάνεται σε κανονικά διαστήματα με τέτοιο τρόπο, ώστε αυτή η περιοδική διάταξη να μπορεί να αντιπροσωπευτεί από μια σειρά σημείων του πλέγματος. Στο σχ.2.1 το διάνυσμα a καθορίζει τη διεύθυνση και το μέγεθος της μετατοπίσεως από ένα σημείο στο επόμενο κατά μήκος μια σειράς σημείων του πλέγματος. Κατά τον ίδιο τρόπο τα διανύσματα b και c ορίζουν την περιοδικότητα των σημείων του πλέγματος στις άλλες δυο διευθύνσεις του χώρου. Κάθε σημείο του τριδιάστατου πλέγματος μπορεί να ορισθεί από το διάνυσμα θέσεως r

$$r = l a + m b + n c \quad (1)$$

Όπου l , m και n είναι ακέραιοι αριθμοί, που αντιστοιχούν στις συντεταγμένες του σημείου. Στα περισσότερα μέταλλα κάθε σημείο του πλέγματος καταλαμβάνεται από ένα άτομο. Σε πολλά άλλα κρυσταλλικά στερεά κάθε σημείο του πλέγματος καταλαμβάνεται από μια ομάδα ατόμων. Στους τέλειους κρυστάλλους κάθε ομάδα είναι ταυτόσημη σε σύσταση και προσανατολισμό με οποιαδήποτε άλλη ομάδα στο πλέγμα. Τα διανύσματα a , b και c είναι οι άξονες αναφοράς του κρυστάλλου ή οι κρυσταλλικοί άξονες. Ανάλογα με τον κρύσταλλο, οι κρυσταλλικοί άξονες μπορεί να σχηματίζουν ή να μη σχηματίζουν ορθές γωνίες και να έχουν ή να μην έχουν το ίδιο μήκος. Οι τρεις κρυσταλλικοί άξονες αποτελούν τις ακμές ενός παραλληλεπίπεδου, το οποίο ονομάζεται μοναδιαία κυψελίδα ή απλά κυψελίδα. Η κυψελίδα είναι το βασικό δομικό στοιχείο του κρυστάλλου. Εάν η ατομική διάταξη επαναληφθεί στις τρεις διευθύνσεις του χώρου, τότε δημιουργείται η κρυσταλλική δομή. Εάν θεωρηθούν όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί αξόνων σε σχέση με το μήκος τους και τις μεταξύ τους γωνίες, τότε προκύπτουν 14 πλέγματα, τα οποία ονομάζονται πλέγματα Bravais. Στο Σχήμα 1-3 απεικονίζονται οι κυψελίδες των πλεγμάτων αυτών.^[3]

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΠΛΕΓΜΑΤΑ			ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ	
				$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b = c$
ΚΥΒΙΚΟ	ΕΔΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ ΚΥΒΙΚΟ	ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ ΚΥΒΙΚΟ	ΚΥΒΙΚΟ	
				$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b \neq c$
ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΟ	ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΟ		ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΟ	
				$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a \neq b \neq c$
ΟΡΘΟΡΟΜΒΙΚΟ	ΕΔΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ ΟΡΘΟΡΟΜΒΙΚΟ	ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ ΟΡΘΟΡΟΜΒΙΚΟ		
				$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b = c$
ΡΟΜΒΟΕΔΡΙΚΟ			ΡΟΜΒΟΕΔΡΙΚΟ	
				$\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$
ΜΟΝΟΚΛΙΝΕΣ	ΒΑΣΙΚΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ ΜΟΝΟΚΛΙΝΕΣ		ΜΟΝΟΚΛΙΝΕΣ	
				$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$
ΤΡΙΚΛΙΝΕΣ			ΤΡΙΚΛΙΝΕΣ	
				$\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ $a = b \neq c$
ΜΕΓΙΣΤΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΕΞΑΓΩΝΙΚΟ			ΕΞΑΓΩΝΙΚΟ	

Σχήμα 1-3. Τα 14 κρυσταλλικά πλέγματα και τα 7 κρυσταλλικά συστήματα

Κάθε σημείο ενός πλέγματος ή κάθε άτομο σε μια κρυσταλλική δομή προσδιορίζεται από τις συντεταγμένες του στο σύστημα αναφοράς των κρυσταλλικών αξόνων. Πολλοί συμμετρικοί κρύσταλλοι έχουν ορθογώνιο σύστημα αξόνων, οι οποίοι σχηματίζουν τις ακμές ενός κύβου, δημιουργώντας έτσι το κυβικό σύστημα αξόνων. Σε κάθε πλέγμα Bravais αντιστοιχεί ένα σύστημα αξόνων, που χρησιμοποιείται για την περιγραφή του. Στην κρυσταλλογραφία χρησιμοποιούνται συνολικά επτά συστήματα αξόνων, τα οποία αποτελούν και τη βάση για την ταξινόμηση των κρυστάλλων σε κρυσταλλικά συστήματα. Τα συστήματα αυτά αναφέρονται στον Πίνακα 1-1 μαζί με τις σχέσεις μεταξύ των αξόνων και των γωνιών, που σχηματίζουν οι άξονες. Όπως θα δούμε, τα περισσότερα μέταλλα σχηματίζουν κρυσταλλικές δομές στο κυβικό και το εξαγωνικό σύστημα.^[3]

Πίνακας 1-1. Τα επτά κρυσταλλικά συστήματα (η γωνία \hat{a} είναι η γωνία μεταξύ των αξόνων b και c)^[3]

Κρυσταλλικό σύστημα	Άξονες και γωνίες	Παραδείγματα
Τρικλινές	$a \neq b \neq c$ $\hat{\alpha} \neq \hat{\beta} \neq \hat{\gamma} \neq 90^\circ$	K_2CrO_7
Μονοκλινές	$a \neq b \neq c$ $\hat{\alpha} = \hat{\gamma} = 90^\circ \neq \hat{\beta}$	β -S $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ (Γύψος)
Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$ $\hat{\alpha} = \hat{\beta} = \hat{\gamma} = 90^\circ$	α -S Ga Fe_3C (Σεμεντίτης)
Τετραγωνικό	$a = b \neq c$ $\hat{\alpha} = \hat{\beta} = \hat{\gamma} = 90^\circ$	β -Sn TiO_2
Κυβικό	$a = b = c$ $\hat{\alpha} = \hat{\beta} = \hat{\gamma} = 90^\circ$	Cu, Ag, Au Fe NaCl
Εξαγωνικό	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$ $\hat{\alpha} = \hat{\beta} = 90^\circ, \hat{\gamma} = 120^\circ$ Τρεις ίσοι άξονες ομοεπίπεδοι σε 120° γωνία. Ο τέταρτος άξονας κάθετος προς αυτούς	Zn, Cd, Mg
Ρομβοεδρικό	$a = b \neq c$ $\hat{\alpha} = \hat{\beta} = \hat{\gamma} \neq 90^\circ$	As, Sb, Bi

1.2. Δείκτες κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων και επιπέδων

Κατά η μελέτη των κρυστάλλων και των ιδιοτήτων τους προκύπτει η ανάγκη να περιγράψουμε διαφορετικές κρυσταλλικές διευθύνσεις και κρυσταλλικά επίπεδα στο χώρο. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται ένα σύστημα δεικτών. Οι περισσότεροι μεταλλικοί κρύσταλλοι που παρουσιάζουν πρακτικό ενδιαφέρον έχουν κυβική-εδροκεντρωμένη δομή (FCC), κυβική-χωροκεντρωμένη (BCC) ή πυκνή εξαγωνική (HCP) κρυσταλλική δομή. Επομένως πιο κάτω θα αναφερθούμε μόνο στους δείκτες του κυβικού και εξαγωνικού συστήματος.

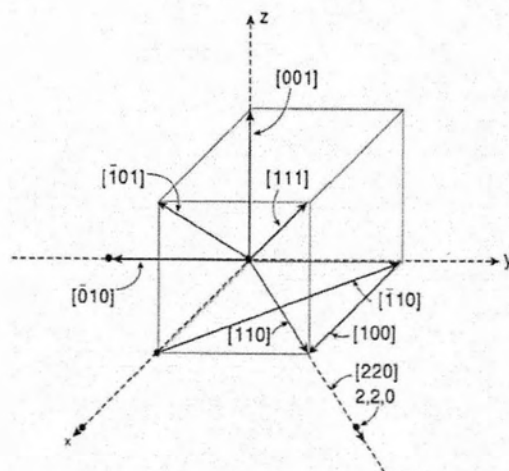
Για την περιγραφή της διευθύνσεως μιας γραμμής που συνδέει την αρχή των αξόνων με το σημείο, που έχει συντεταγμένες l, m και n (όπου l, m, n είναι θετικοί ακέραιοι) χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό $[l, m, n]$. Επιλέγουμε και μια διανυσματική βάση $\{e_1, e_2, e_3\}$ κάθετη στις πλευρές της μοναδιαίας κυβικής κυψελίδας, και ο συμβολισμός αυτός, ορίζει μια διεύθυνση παράλληλη στο μοναδιαίο διάνυσμα

$$(le_1 + me_2 + ne_3) / \sqrt{l^2 + m^2 + n^2} .$$

Στην ουσία πρόκειται για το συμβολισμό του διανύσματος θέσεως \mathbf{r} , που ορίστηκε με τη σχέση (1). Στο συμβολισμό αυτό δε χρησιμοποιούμε κλάσματα, αλλά τους μικρότερους ακέραιους αριθμούς, που αναφέρονται στις συντεταγμένες ενός σημείου γραμμή. Έτσι στο Σχήμα 1-4 αφού η γραμμή περνάει από τα σημεία 0,0,0 και 2,2,0, περνάει επίσης από το σημείο 1,1,0, οι δείκτες που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της διεύθυνσεως και οποιασδήποτε παράλληλης προς αυτήν, είναι [110]. Οι αρνητικοί δείκτες γράφονται με μια μπάρα πάνω από τον αντίστοιχο αριθμό.

Ο συμβολισμός δηλαδή $[l, \bar{m}, n]$, ορίζει μια διεύθυνση παράλληλη στο μοναδιαίο διάνυσμα με συνιστώσες $(le_1 + me_2 + ne_3) / \sqrt{l^2 + m^2 + n^2}$. [2] Έτσι το $[00\bar{1}]$ περιγράφει τη διεύθυνση της γραμμής που περνάει από το 0,0,0 και από το 0,0,-1. Οι τέσσερις διαγώνιοι ενός κύβου έχουν διευθύνσεις $[111]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$ και $[\bar{1}11]$. Αυτή η ομάδα των ισοδύναμων διευθύνσεων συμβολίζεται με $\langle 111 \rangle$.

Γενικά ο συμβολισμός $\langle l, m, n \rangle$ ορίζει την οικογένεια των $[l, m, n]$ διευθύνσεων που είναι ταυτόσημες λόγω της συμμετρίας του κρυστάλλου. Για παράδειγμα η $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ σε έναν κυβικό κρύσταλλο περιλαμβάνει όλες τις $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.



Σχήμα 1-4. Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις στο κυβικό σύστημα. [3]

Για την περιγραφή των κρυσταλλικών επιπέδων χρησιμοποιούμε τους δείκτες Miller. Οι δείκτες αυτοί περιγράφουν τον προσανατολισμό των επιπέδων σε σχέση με τους κρυσταλλικούς άξονες, χωρίς όμως να περιγράφουν τη θέση του επιπέδου σε σχέση με την αρχή των αξόνων. Οι δείκτες βασίζονται στις τομές του επιπέδου με τους άξονες, όπου κάθε τομή μετρείται σε αριθμό ακμών και κυψελίδας (α, b ή c) κατά μήκος του άξονα. Έτσι

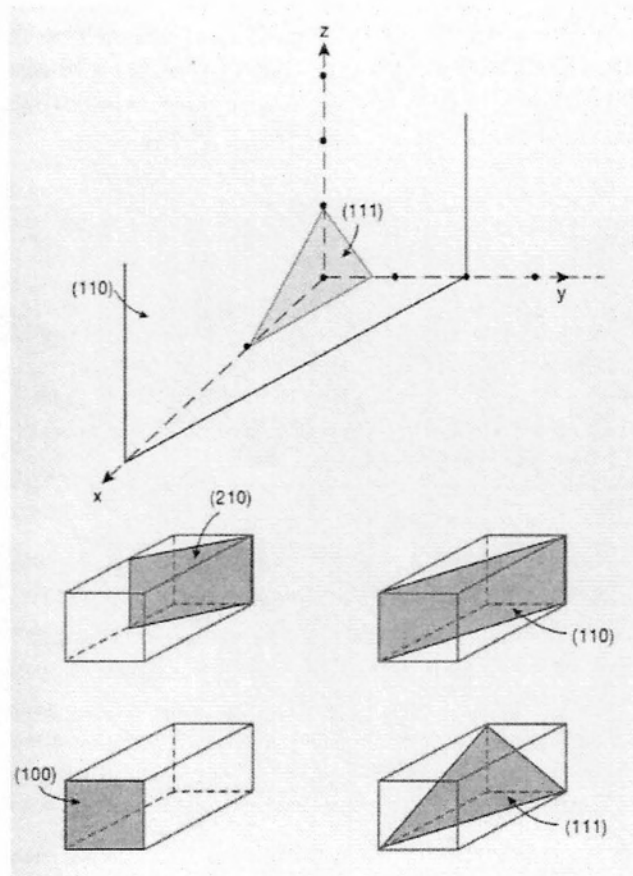
για να προσδιορίσουμε τους δείκτες Miller ενός επιπέδου, ακολουθούμε την εξής διαδικασία:

1. Προσδιορίζουμε τα σημεία τομής του επιπέδου με τους άξονες x, y, z (αποτεμνουσες). έστω ότι είναι α_1, α_2 και α_3 , αντίστοιχα.
2. Υπολογίζουμε τους αντίστροφους των αποτεμνουσών $1/\alpha_1, 1/\alpha_2, 1/\alpha_3$.
3. (α) Εάν προκύπτουν ακέραιοι αριθμοί, καθίστανται πρώτοι μεταξύ τους (διαιρώντας με το Μ.Κ.Δ. τους) και οι προκύπτοντες ακέραιοι l, m, n είναι οι δείκτες Miller του επιπέδου.
(β) Εάν προκύπτουν κλάσματα, καθίστανται ομώνυμα και επαναλαμβάνεται η διαδικασία (α) για τους αριθμητές.
4. Οι δείκτες Miller που υπολογίζονται γράφονται $(l\ m\ n)$.
5. Αρνητικοί ακέραιοι αναγράφονται με μπάρα, π.χ. $-1 = \bar{1}$.

Στο Σχήμα 1-5 φαίνονται οι δείκτες Miller μερικών σημαντικών κρυσταλλογραφικών επιπέδων. Το επίπεδο, που τέμνει τους άξονες στα $\frac{1}{2}, 1$ και ∞ , έχει δείκτες Miller (210) . Όλα τα παράλληλα επίπεδα έχουν τους ίδιους δείκτες Miller. Ο συμβολισμός (l, m, n) ορίζει ένα επίπεδο το οποίο είναι κάθετο σ' ένα μοναδιαίο διάνυσμα με συνιστώσες $(l\mathbf{e}_1 + m\mathbf{e}_2 + n\mathbf{e}_3) / \sqrt{l^2 + m^2 + n^2}$, και αναφέρεται στο ίδιο το επίπεδο αλλά και στα παράλληλα με αυτό επίπεδα. Τέλος, για να συμβολίσουμε τα ισοδύναμα κρυσταλλογραφικά επίπεδα χρησιμοποιούμε αγκύλες $\{l, m, n\}$. Ο συμβολισμός $\{l, m, n\}$ ορίζει μια οικογένεια των επιπέδων (l, m, n) που είναι κρυσταλλογραφικά ταυτόσημα λόγω συμμετρίας.

Για παράδειγμα οι έξι έδρες της κυβελίδας ενός κυβικού κρυστάλλου έχουν δείκτες Miller: $(100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$.

Και τα έξι επίπεδα μαζί τα συμβολίζουμε $\{100\}$. Γενικά όλα τα επίπεδα της ομάδας $\{l, m, n\}$ έχουν την ίδια διάταξη ατόμων και είναι ισοδύναμα.



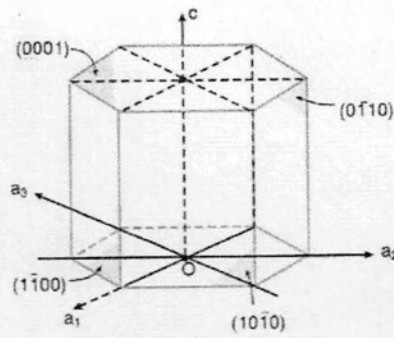
Σχήμα 1-5. Δείκτες Miller κρυσταλλογραφικών επιπέδων.^[3]

Το εξαγωνικό σύστημα έχει 4 άξονες a_1 , a_2 , a_3 και c του Σχήμα 1-6. Άρα, καθορίζονται 4 δείκτες Miller h , k , i και l αντίστοιχα.

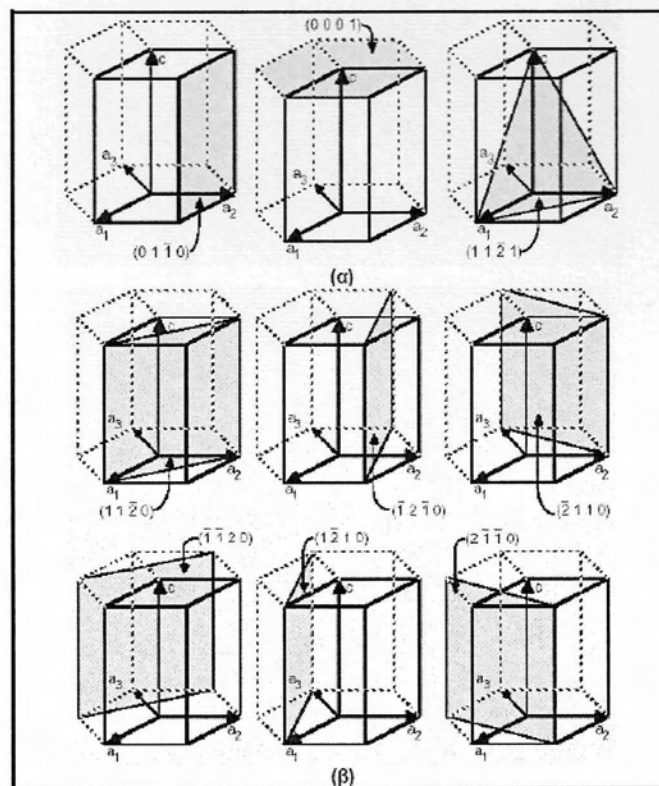
Οι άξονες (a_1, a_2, a_3) βρίσκονται στο επίπεδο της βάσης της εξαγωνικού πρίσματος και σχηματίζουν μεταξύ τους γωνίες 120° . Λόγω αυτής της σχέσης αποδεικνύεται ότι ισχύει: $i = -(h+k)$.

Οι δείκτες Miller των επιπέδων υπολογίζονται ακριβώς όπως και στο κυβικό σύστημα που παρουσιάστηκε πιο πάνω. Παραδείγματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 1-7.

Στο εξαγωνικό σύστημα χρησιμοποιούνται τέσσερις δείκτες $(hkil)$, που βασίζονται στους τέσσερις άξονες a_1 , a_2 , a_3 και c του Σχήμα 1-6. Τα ισοδύναμα επίπεδα στο εξαγωνικό σύστημα προκύπτουν με παραλλαγή των θέσεων των τριών πρώτων δεικτών, αφού οι άξονες (a_1, a_2, a_3) είναι ισοδύναμοι. Έτσι τα επίπεδα $(1\bar{1}00)$, $(10\bar{1}0)$, $(01\bar{1}0)$, $(\bar{1}100)$, $(\bar{1}010)$ και $(0\bar{1}10)$ είναι ισοδύναμα.^[3]



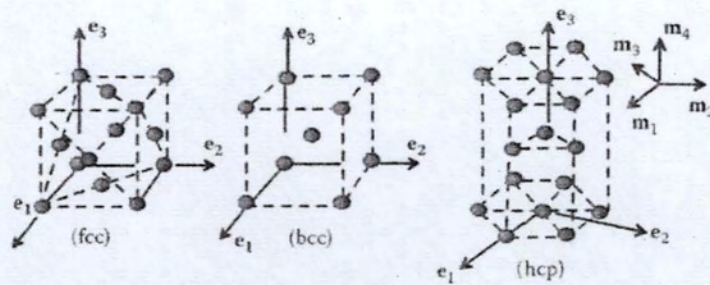
Σχήμα 1-6. Δείκτες ορισμένων επιπέδων του εξαγωνικού συστήματος^[3]



Σχήμα 1-7. (α) Παραδείγματα υπολογισμού δεικτών Miller επιπέδων, (β) Παράδειγμα οικογένειας επιπέδων στο εξαγωνικό σύστημα

1.3. Κρυσταλλικές δομές

Οι περισσότεροι μεταλλικοί κρύσταλλοι που παρουσιάζουν πρακτικό ενδιαφέρον έχουν εδροκεντρομένη δομή (FCC), χωροκεντρομένη (BCC) ή εξαγωνική (HCP) κρυσταλλική δομή. Αυτές απεικονίζονται στο Σχήμα 1-8. Μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας υπάρχουν και για τις τρεις κρυσταλλικές δομές, αλλά για τα FCC υλικά έχουν μελετηθεί πιο εκτεταμένα.



Σχήμα 1-8. Κοινές κρυσταλλικές δομές[2]

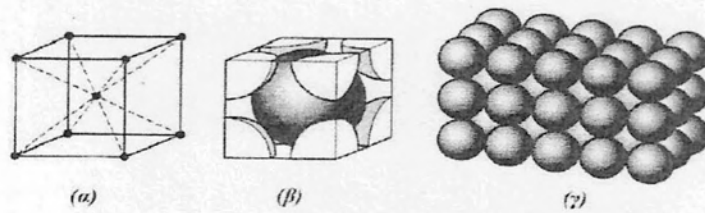
Οι κυψελίδες των δομών αυτών φαίνονται στα Σχήμα 1-9, Σχήμα 1-10 και Σχήμα 1-11. Στα σχήματα αυτά οι κυψελίδες απεικονίζονται με δύο τρόπους. Στο αριστερό μέρος (α) φαίνεται η θέση των ατόμων στην κυψελίδα, όπου κάθε κουκίδα αντιστοιχεί σε μια ατομική θέση. Με τον τρόπο αυτό βέβαια δε φαίνεται το μέγεθος των ατόμων σε σχέση με τις μεταξύ τους αποστάσεις, αλλά προσδιορίζονται ευκολότερα τα ατομικά επίπεδα και οι αποστάσεις μεταξύ των επιπέδων. Στο δεξιό μέρος του σχήματος (β,γ) απεικονίζονται οι κυψελίδες με το μοντέλο των σκληρών σφαιρών γεγονός που αναδεικνύει το μέγεθος των ατόμων σε σχέση με τις μεταξύ τους αποστάσεις. Στις δομές BCC και FCC το μέγεθος της κυψελίδας ορίζεται από την ακμή a του κύβου, που ονομάζεται παράμετρος πλέγματος. Στη δομή HCP το μέγεθος της κυψελίδας ορίζεται από δύο παραμέτρους πλέγματος, την ακμή της εξαγωνικής βάσεως a και την πλευρική ακμή του πρίσματος c .

Παρατηρούμε ότι στην κυψελίδα BCC (Σχήμα 1-11) οι κορυφές του κύβου καταλαμβάνονται από ένα άτομο, ενώ υπάρχει και ένα άτομο στο κέντρο του κύβου. Επίσης στο επίπεδο (110), έχουμε διαδοχική επαφή των σφαιρών κατά μήκος της διαγωνίου του κύβου, όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 1-12. Οι διαγώνιες του κύβου, έχοντας την ίδια διάταξη ατόμων, είναι ισοδύναμες κρυσταλλογραφικά και έχουν διεύθυνση $\langle 111 \rangle$. Επομένως οι διευθύνσεις $\langle 111 \rangle$ έχουν την πυκνότερη διάταξη ατόμων ή όπως αλλιώς λέγεται είναι οι πυκνές διευθύνσεις στο BCC. Μια άλλη σημαντική παρατήρηση, είναι ότι τα άτομα στις κορυφές του κύβου δεν ανήκουν εξ ολοκλήρου στη συγκεκριμένη κυψελίδα αλλά «μοιράζονται» στις οκτώ παρακείμενες κυψελίδες, που έχουν κοινή κορυφή με αυτήν. Αντίθετα το άτομο στο κέντρο του κύβου ανήκει εξ ολοκλήρου στη συγκεκριμένη κυψελίδα. Μπορούμε επομένως να πούμε ότι το κρυσταλλικό σύστημα BCC έχει $8 \times (1/8) + 1 = 2$ άτομα ανά κυψελίδα.

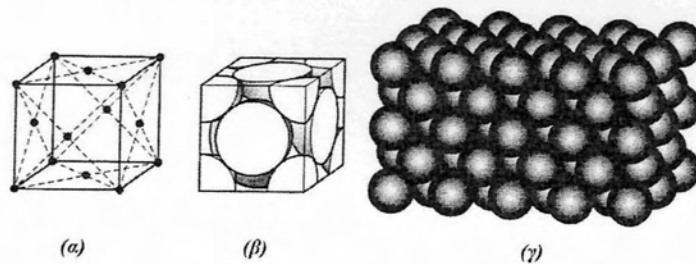
Στην κυψελίδα του κυβικού εδροκεντρομένου συστήματος FCC (Σχήμα 1-11) τα άτομα καταλαμβάνουν τις κορυφές και τα κέντρα των εδρών του κύβου. Δεν υπάρχει άτομο στο



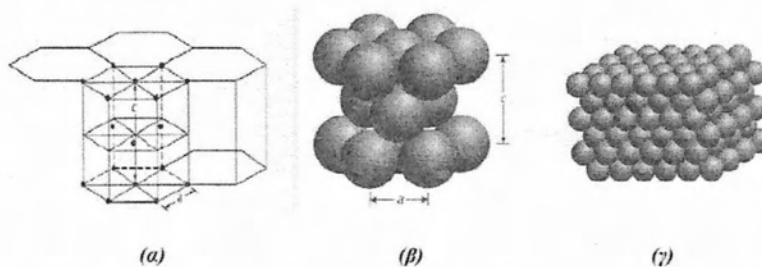
κέντρο του κύβου. Στην περίπτωση του FCC τα πυκνά επίπεδα είναι τα διαγώνια επίπεδα $\{111\}$, τα οποία έχουν από τρεις πυκνές διευθύνσεις του τύπου $\langle 110 \rangle$, όπου τα άτομα εφάπτονται διαδοχικά (Σχήμα 1-13). όπως και στην περίπτωση του BCC, τα άτομα δεν ανήκουν εξ ολοκλήρου στη συγκεκριμένη κυψελίδα αλλά μοιράζονται στις παρακείμενες κυψελίδες. Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο βρίσκουμε ότι το FCC έχει τέσσερα άτομα ανά κυψελίδα, το διπλάσιο αριθμό από το BCC.^[3]



Σχήμα 1-9. Κρυσταλλική δομή χωροκεντρομένου κυβικού (bcc): (α) κυψελίδα, (β) τοποθέτηση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα, (γ) κρυσταλλική δομή bcc που προκύπτει με την παράθεση πολλών κυψελίδων στις τρεις διαστάσεις στο χώρο.



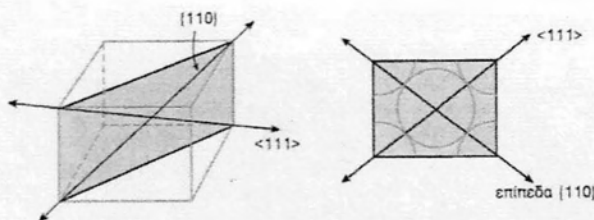
Σχήμα 1-10. Κρυσταλλική δομή εδροκεντρομένου κυβικού (FCC): (α) κυψελίδα, (β) τοποθέτηση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα, (γ) κρυσταλλική δομή FCC που προκύπτει με την παράθεση πολλών κυψελίδων στις τρεις διαστάσεις στο χώρο.



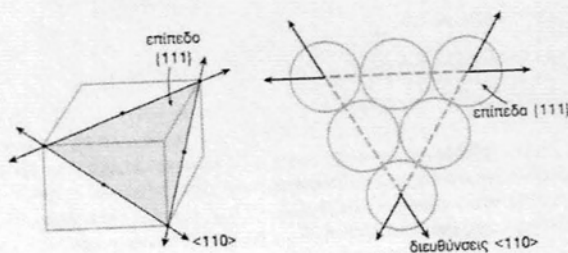
Σχήμα 1-11. Κρυσταλλική δομή μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικού (HCP): (α) κυψελίδα, (β) τοποθέτηση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα, (γ) κρυσταλλική δομή hcp που προκύπτει με την παράθεση πολλών κυψελίδων στις τρεις διαστάσεις στο χώρο.

Η κυψελίδα του πυκνού εξαγωνικού συστήματος φαίνεται στο Σχήμα 1-11. Η κυψελίδα είναι ένα εξαγωνικό πρίσμα με παραμέτρους πλέγματος a και c . Ένα σημαντικό χαρακτη-

ριστικό της δομής HCP είναι ο λόγος c/a , που στην ιδανική περίπτωση πυκνής δομής σφαιρών έχει την τιμή 1.63.[1]



Σχήμα 1-12. Τα επίπεδα {110} του BCC με τις πυκνές διευθύνσεις <111>, όπου τα άτομα έχουν διαδοχική επαφή. Η διεύθυνση <111> είναι η διαγώνιος του κύβου.^[3]



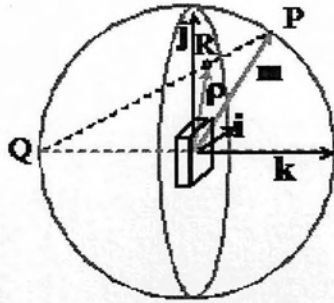
Σχήμα 1-13. Τα πυκνά επίπεδα {111} και οι πυκνές διευθύνσεις <110> του FCC.^[3]

1.4. Στερεογραφική προβολή

Η στερεογραφική προβολή είναι μια γραφική μέθοδος που επιτρέπει την αναπαράσταση τριδιάστατων γεωμετρικών πληροφοριών (π.χ. μια σφαίρα) σε δύο διαστάσεις (πχ. ένα επίπεδο) και την επίλυση τριδιάστατων γεωμετρικών προβλημάτων.

Η προβολή ορίζεται σε ολόκληρη τη σφαίρα εκτός από ένα σημείο: το σημείο προβολής. Επίσης, η προβολή είναι σύμμορφη, που σημαίνει ότι διατηρεί τις γωνίες. Τέλος η μέθοδος της στερεογραφικής προβολής βρίσκει ευρεία εφαρμογή και στην κρυσταλλογραφία.

Στην πράξη, η προβολή επιτυγχάνεται με υπολογιστή ή με το χέρι χρησιμοποιώντας κάποιο συγκεκριμένο είδος γραφήματος που ονομάζεται stereonet ή Wulff-net. Ένας τρόπος για να ερμηνευτεί η προβολή αυτή φαίνεται στο πιο κάτω σχήμα:



1. Το δοκίμιο τοποθετείται στο κέντρο μίας φανταστικής σφαίρας με μοναδιαία ακτίνα, με τις βολικότερες κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις να ευθυγραμμίζονται με τη βάση $\{i, j, k\}$.
2. Η διεύθυνση που επιθυμούμε να προβάλλουμε αναπαρίστανται από ένα διάνυσμα μοναδιαίου μέτρου $\mathbf{m} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$, το οποίο τέμνει τη σφαίρα σε κάποιο σημείο P της επιφάνειάς της.
3. Σχεδιάζεται μία γραμμή από το σημείο P, στο σημείο όπου ο άξονας k τέμνει τη σφαίρα στο Q.
4. Η γραμμή PQ περνάει μέσα από το ισημερινό επίπεδο της σφαίρας σε κάποιο σημείο R.
5. Το διάνυσμα $\overrightarrow{OR} = \boldsymbol{\rho}$ είναι η στερεογραφική προβολή της διεύθυνσης \mathbf{m} .
6. Η γενική μετατροπή ανάμεσα στη 2διάσταση προβολή και στο 3διάστατο μοναδιαίο διάνυσμα γίνεται με τις σχέσεις:

$$7. \quad \boldsymbol{\rho} = \frac{\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}}{1 + \mathbf{m} \cdot \mathbf{k}}, \quad \mathbf{m} = \frac{2\boldsymbol{\rho} + (1 - \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho})\mathbf{k}}{1 + \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}}$$

Η απόδειξη έχει ως εξής:

$$\mathbf{QR} = \xi \mathbf{QP} \Rightarrow \mathbf{k} + \boldsymbol{\rho} = \xi(\mathbf{k} + \mathbf{m}) \quad (2)$$

$$(2) \Rightarrow \underset{1}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}} + \underset{0}{\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{k}} = \xi \left(\underset{1}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}} + \underset{1}{\mathbf{m} \cdot \mathbf{k}} \right) \Rightarrow \boxed{\xi = \frac{1}{1 + \mathbf{m} \cdot \mathbf{k}}} \quad \text{ή} \quad \mathbf{m} \cdot \mathbf{k} = \frac{1 - \xi}{\xi}, \quad (3)$$

$$(2) \Rightarrow \underset{0}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}} + \underset{0}{\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{m}} = \xi \underbrace{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{m} + \mathbf{m} \cdot \mathbf{m})}_1 \Rightarrow \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{m} = 1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{m} \stackrel{(2)}{=} 1 - \frac{1 - \xi}{\xi} = \frac{2\xi - 1}{\xi}, \quad (4)$$

$$(2) \Rightarrow \underset{0}{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}} + \underset{0}{\boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}} = \xi(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\rho}) \Rightarrow \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho} = \xi \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\rho} \stackrel{(3)}{=} 2\xi - 1 \Rightarrow \boxed{\xi = \frac{1 + \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}}{2}}$$

$$(2) \Rightarrow \boldsymbol{\rho} = \xi(\mathbf{k} + \mathbf{m}) - \mathbf{k} = \frac{1}{1 + \mathbf{m} \cdot \mathbf{k}}(\mathbf{k} + \mathbf{m}) - \mathbf{k} \Rightarrow \boldsymbol{\rho} = \frac{\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}}{1 + \mathbf{m} \cdot \mathbf{k}},$$

$$(2) \Rightarrow \mathbf{m} = \frac{1}{\xi}(\mathbf{k} + \boldsymbol{\rho}) - \mathbf{k} = \frac{2}{1 + \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}}(\mathbf{k} + \boldsymbol{\rho}) - \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{m} = \frac{2\boldsymbol{\rho} + (1 - \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho})\mathbf{k}}{1 + \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}}$$

Η συμμετρία του κρυστάλλου κάνει τις $\pm \mathbf{m}$ διευθύνσεις ισοδύναμες. Για αυτό το λόγο, οι προβολές συνήθως απεικονίζουν μόνο διανύσματα με θετική \mathbf{k} συνιστώσα (η προβολή ενός διανύσματος με αρνητική \mathbf{k} συνιστώσα βρίσκεται έξω από τη σφαίρα).^[5]

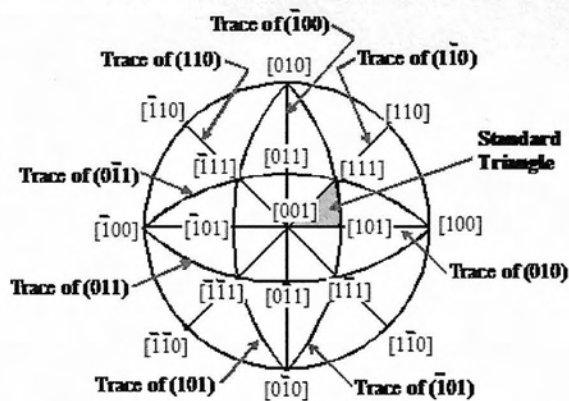
1.5. Διαγράμματα Πόλων και Αντίστροφα Διαγράμματα Πόλων

Στην πλαστικότητα των κρυστάλλων, η προβολή χρησιμοποιείται με δύο τρόπους. Σε μια προσέγγιση, συγκεκριμένες κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις επιλέγονται να είναι παράλληλες με τις διευθύνσεις $\{i, j, k\}$, και οι άλλες διευθύνσεις του ενδιαφέροντός μας (οι οποίες μπορεί να είναι είτε άλλες κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις είτε η διεύθυνση στον

άξονα φόρτισης σε ένα τεστ εφελκυσμού, για παράδειγμα) προβάλλονται. Αυτό είναι γνωστό ως αντίστροφο διάγραμμα πόλων (inverse pole figure).

Για παράδειγμα, στο Σχήμα 1-14 παρουσιάζονται οι βασικές προβολές σε ένα κυβικό κρύσταλλο. Για να ερμηνευτεί το σχήμα πρέπει να σημειωθούν τα ακόλουθα:

1. Οι διευθύνσεις $[100]$, $[010]$, $[001]$ είναι παράλληλες στα i , j , k αντίστοιχα. Ωστόσο αυτή δεν είναι η μόνη επιλογή για τον προσανατολισμό του κρυστάλλου. Συχνά μπορεί να δει κάποιος inverse pole figure με την διεύθυνση $[100]$ παράλληλη στο k για παράδειγμα.
2. Τα σημεία αντιπροσωπεύουν τις προβολές των καθορισμένων κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων.
3. Οι γραμμές αντιπροσωπεύουν τα ίχνη των καθορισμένων επιπέδων, δηλαδή είναι η προβολή της γραμμής στην οποία το επίπεδο διασταυρώνεται με την επιφάνεια της μοναδιαίας σφαίρας.
4. Στο σχήμα ακόμα φαίνεται το βασικό τρίγωνο για τον κυβικό κρύσταλλο. Να σημειωθεί εδώ ότι τα ίχνη των επιπέδων χωρίζουν τη σφαίρα σε 24 καμπυλόγραμμα τρίγωνα, καθένα από τα οποία έχει στις γωνίες του τις διευθύνσεις $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ και $\langle 111 \rangle$. Αυτά τα τρίγωνα είναι ισοδύναμα λόγω της συμμετρίας του κρυστάλλου – μπορεί να εναλλάσσονται δύο οποιαδήποτε τρίγωνα εφαρμόζοντας μια κατάλληλη περιστροφή (rigid rotation) στο κρύσταλλο, χωρίς να επηρεάζεται η διάταξη των ατόμων. Αυτό έχει σημαντικές συνέπειες: για παράδειγμα όταν εξετάζεται η συμπεριφορά ενός κρυστάλλου με κυβική δομή σε μονοαξονική φόρτιση, χρειάζεται μόνο να τρέξει το πείραμα με τη διεύθυνση φόρτισης μέσα στο βασικό τρίγωνο. Για αυτό το λόγο στο inverse pole figure συχνά απεικονίζουν μόνο το βασικό τρίγωνο.^[5]

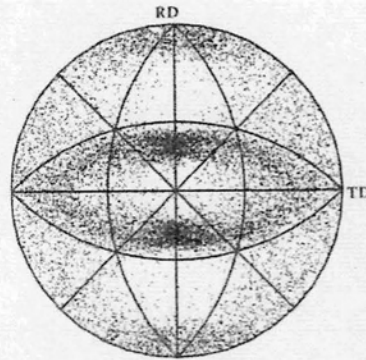


Σχήμα 1-14. Στερεογραφική προβολή των διευθύνσεων που μας ενδιαφέρουν σε ένα κυβικό κρύσταλλο.^[5]

Μια δεύτερη εφαρμογή της στερεογραφικής προβολής στην κρυσταλλική πλαστικότητα είναι να απεικονίζει διαγράμματα πόλων. Σ' αυτή την προσέγγιση, συγκεκριμένες φυσικές διευθύνσεις επιλέγονται να είναι παράλληλες με τη διανυσματική βάση $\{i, j, k\}$, και οι προσανατολισμοί των κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων που μας ενδιαφέρουν εμφανίζονται στην προβολή.

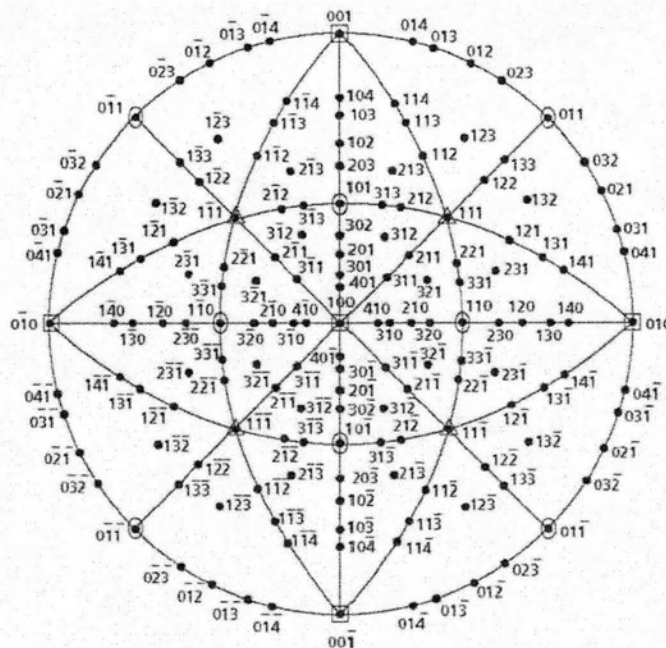
Για παράδειγμα, όταν ένα διάγραμμα πόλων χρησιμοποιείται για ένα δοκίμιο φύλλου έλασης, η διεύθυνση έλασης (ορίζεται ως RD) επιλέγεται συνήθως να είναι παράλληλη με το j , η διεύθυνση εγκάρσια στη διεύθυνση έλασης στο επίπεδο του φύλλου (ορίζεται ως TD) επιλέγεται να είναι παράλληλη στο i , και η διεύθυνση κάθετη στο φύλλο (ορίζεται ως ND) επιλέγεται να είναι παράλληλη στο k . Το φύλλο γενικά περιέχει πολλούς κόκκους και καθένας κόκκος αποτελεί ένα μονοκρύσταλλο. Οι προσανατολισμοί των κόκκων απεικονίζονται πάνω σ ένα διάγραμμα πόλων επιλέγοντας κάποιες βολικές κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις (οι πιο συνηθισμένες είναι οι $\langle 100 \rangle$ ή $\langle 111 \rangle$) και πλοτάροντας τη στερεογ-

ραφική προβολή για κάθε μέλος αυτής της οικογένειας των κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων. Σε ένα κρύσταλλο με κυβική δομή, κάθε κόκκος συμβάλλει 4 σημεία στην προβολή (υπάρχουν 8 διευθύνσεις $\langle 100 \rangle$ αλλά μόνο 4 από αυτές έχουν θετική κ συνιστώσα). Ένα τυπικό $\langle 100 \rangle$ διάγραμμα πόλων για ένα φύλλο αλουμινίου που υπόκειται έλαση μετά από 40% μείωση φαίνεται στο Σχήμα 1-15. Από το διάγραμμα πόλων φαίνεται ότι οι προσανατολισμοί των κόκκων τείνουν να συγκεντρώνονται μαζί, δηλώνοντας ότι το φύλλο έχει αναπτύξει υφή. [2]



Σχήμα 1-15. Τυπικό διάγραμμα πόλων όπου απεικονίζεται η υφή που δημιουργείται κατά την έλαση ενός φύλλου FCC μετάλλου.^[5]

Όλες οι κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις μπορεί να παρασταθούν ως σημεία πάνω στη σφαίρα με τον τρόπο που αναφέρθηκε πιο πάνω. Στο Σχήμα 1-16 παρουσιάζεται ένα πλήθος κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων.



Σχήμα 1-16. Απεικόνιση κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων στο διάγραμμα πόλων.

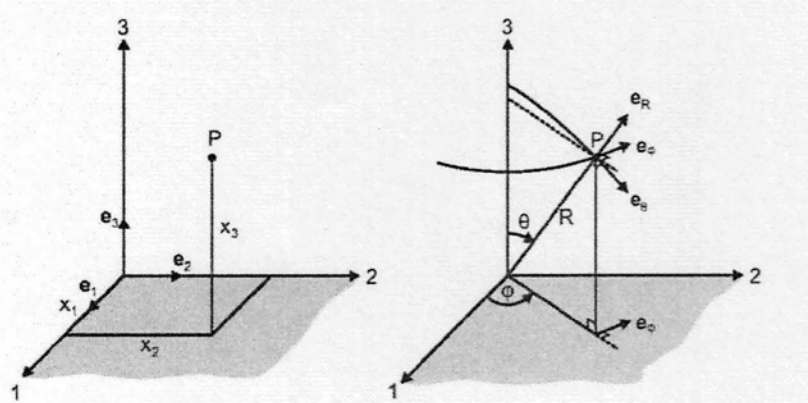
1.6. Ισοδυναμία Καμπυλόγραμμων Τριγώνων

Για την προβολή ενός σημείου P χρησιμοποιούμε τις ακόλουθες σχέσεις σύμφωνα με το πιο πάνω σχήμα. Εάν γνωρίζουμε τις πολικές συντεταγμένες υπολογίζουμε τις καρτεσιανές ως εξής (Σχήμα 13):

$$x = R \sin \theta \cos \phi, \quad y = R \sin \theta \sin \phi, \quad z = R \cos \theta.$$

Ενώ αντίθετα εάν γνωρίζουμε τις καρτεσιανές υπολογίζουμε τις πολικές ως εξής:

$$R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \cos^{-1} \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x}.$$

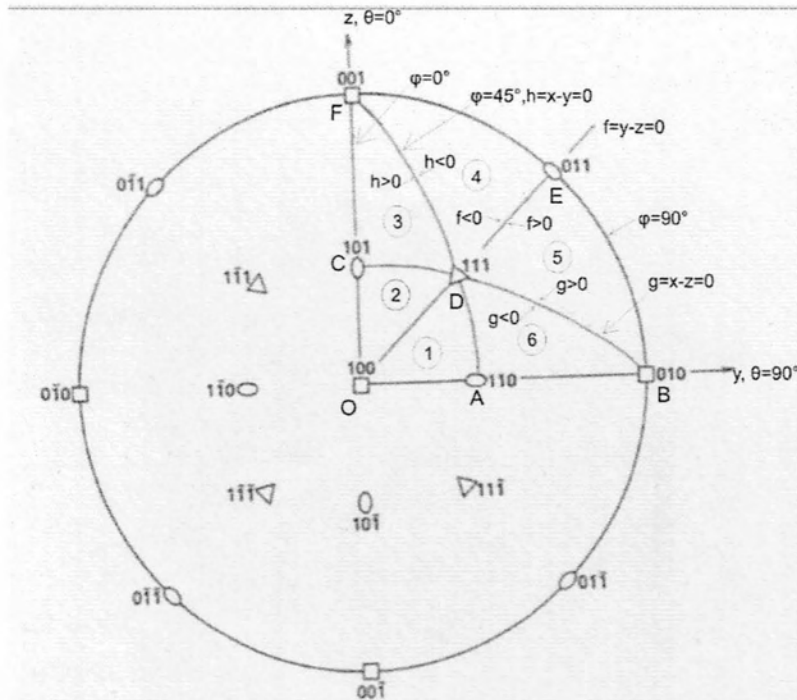


Σχήμα 1-17. Καρτεσιανές (x_1, x_2, x_3) και σφαιρικές (r, θ, ϕ) συντεταγμένες ενός σημείου.

Το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα ορίζεται ως:

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_R = \frac{x}{R} \mathbf{e}_1 + \frac{y}{R} \mathbf{e}_2 + \frac{z}{R} \mathbf{e}_3 = \sin \theta \cos \phi \mathbf{e}_1 + \sin \theta \sin \phi \mathbf{e}_2 + \cos \theta \mathbf{e}_3.$$

Από το διάγραμμα πόλων, προκύπτουν κάποιες σχέσεις συσχετισμού των διάφορων κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων μεταξύ τους, όπως φαίνονται και στο Σχήμα 1-18.



Σχήμα 1-18. Διάγραμμα πόλων. Συσχετισμοί κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων

Πιο συγκεκριμένα οι διευθύνσεις που βρίσκονται στις γραμμές BDC, ODE και ADF έχουν τα εξής κοινά χαρακτηριστικά :

Γραμμή BDC: $g = x - z = 0$ ή $\tan \theta = \frac{1}{\cos \phi}$.

Γραμμή ODE: $f = y - z = 0$ ή $\tan \theta = \frac{1}{\sin \phi}$.

Γραμμή ADF: $h = x - y = 0$ ή $\tan \phi = 45^\circ$.

Ακόμα, επεκτείνοντας τις σχέσεις αυτές σε κάθε τρίγωνο προκύπτουν τα πρόσημα των h, f και g για κάθε ισοδύναμο τρίγωνο (Σχήμα 1-18).

Συνεπώς έχουμε ότι:

Τρίγωνο 1 (Βασικό Τρίγωνο): $h \geq 0, f \geq 0,$

Τρίγωνο 2: $h \geq 0, f < 0, g \geq 0,$

Τρίγωνο 3: $h \geq 0, g < 0,$

Τρίγωνο 4: $h < 0, f < 0,$

Τρίγωνο 5: $h < 0, f \geq 0, g < 0,$

Τρίγωνο 6: $h < 0, g \geq 0.$

Ισοδύναμα τα ανωτέρω μπορεί να γραφούν και ως προς τους κρυσταλλογραφικούς δείκτες ως εξής (Σχήμα 1-19):

Τρίγωνο 1 (Βασικό Τρίγωνο): $x \geq y \geq z, \left(0 \leq \phi \leq 45^\circ, \cos^{-1} \frac{1}{\sqrt{3}} = 54.74^\circ \leq \theta \leq 90^\circ \right),$

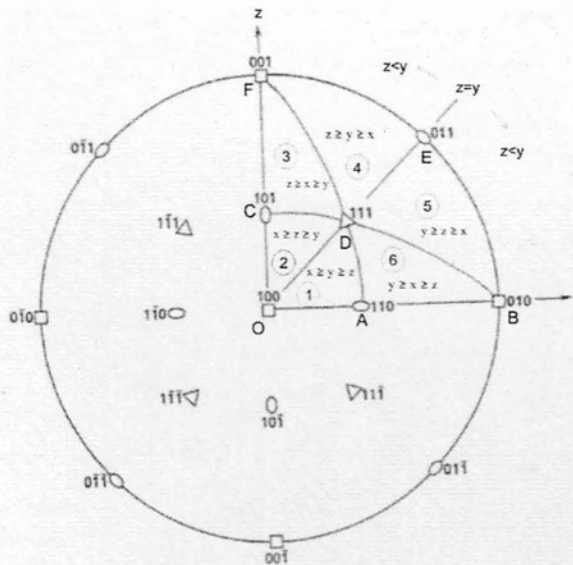
Τρίγωνο 2: $x \geq z \geq y,$

Τρίγωνο 3: $z \geq x \geq y,$

Τρίγωνο 4: $z \geq y \geq x,$

Τρίγωνο 5: $y \geq z \geq x,$

Τρίγωνο 6: $y \geq x \geq z.$



Σχήμα 1-19. Διάγραμμα πόλων. Συσχετισμοί κρυσταλλογραφικών δεικτών

Επομένως, γνωρίζοντας μια διεύθυνση και παρατηρώντας τη σχέση των κρυσταλλογραφικών δεικτών της μπορούμε να συμπεραίνουμε σε ποιο τρίγωνο ανήκει. Στο βασικό τρίγωνο ισχύει ότι $x \geq y \geq z$. Επομένως, για να βρούμε το ισοδύναμο σημείο στο βασικό τρίγωνο ταξινομούμε τους κρυσταλλογραφικούς δείκτες κατά φθίνουσα σειρά, π.χ. $[315]=[351]=[531]$, όπου $[531]$ είναι στο βασικό τρίγωνο καθώς $5 > 3 > 1$.

Λόγω των κυβικών συμμετριών, μπορούμε να αλλάξουμε το πρόσημο από κάθε συνιστώσα της διεύθυνσης ή να αλλάξουμε μεταξύ τους δύο συνιστώσες και θα καταλήξουμε σε μία ισοδύναμη διεύθυνση, για παράδειγμα,

$$[ijk] = [jki] = [kij]$$

$$[ijk] = [jik] = [ikj]$$

$$[ijk] = [\bar{i}j\bar{k}] = [\bar{i}\bar{j}k] = [ij\bar{k}].$$

Στη συνέχεια για να βρούμε αναλυτικά την ισοδύναμη διεύθυνση στο βασικό τρίγωνο αρκεί να την πολλαπλασιάσουμε με τον πιο κάτω αντίστοιχο πίνακα περιστροφής. Για παράδειγμα για να βρούμε την ισοδύναμη διεύθυνση στο βασικό τρίγωνο μιας διεύθυνσης που ανήκει στο Τρίγωνο 2 αρκεί να την πολλαπλασιάσουμε με τον πίνακα $[R_2]$ που ακολουθεί. Για τα υπόλοιπα τρίγωνα χρησιμοποιούμε τους αντίστοιχους πίνακες ως εξής:

$$[R_2] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, [R_3] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, [R_4] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, [R_5] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, [R_6] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

2. ΚΙΝΗΜΑΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΥ ΟΛΙΣΘΗΣΗΣ

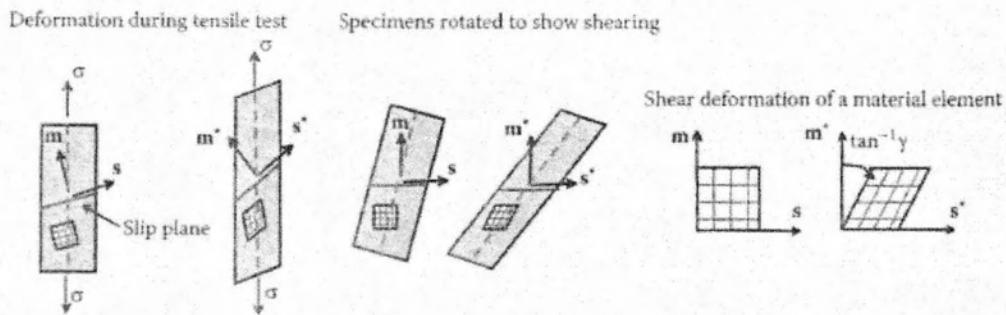
2.1. Χαρακτηριστικά Πλαστικής Ροής στους μονοκρυστάλλους

Η πλαστική ροή σ' ένα κρύσταλλο τις περισσότερες φορές υπολογίζεται εφαρμόζοντας ένα πείραμα εφελκυσμού με τον άξονα φόρτισης παράλληλο σε μια επιλεγμένη κρυσταλλογραφική διεύθυνση. Τα κυριότερα αποτελέσματα από αυτά τα πειράματα είναι τα εξής:

Για τους περισσότερους προσανατολισμούς του άξονα φόρτισης, η πλαστική ροή αρχικά αποτελείται από διάτμηση παράλληλη σ' ένα επίπεδο από την οικογένεια των κρυσταλλογραφικών επιπέδων του κρυστάλλου, στη διεύθυνση ενός διανύσματος s που βρίσκεται σ' αυτό το επίπεδο, όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 2-1. Το κρυσταλλογραφικό επίπεδο στο οποίο λαμβάνει μέρος η διάτμηση λέγεται επίπεδο ολίσθησης. Η διεύθυνση της διάτμησης ονομάζεται διεύθυνση ολίσθησης. Τα επίπεδα ολίσθησης και οι διευθύνσεις για τους πιο κοινούς κρυστάλλους φαίνονται στον Πίνακα 2-1.

Πίνακας 2-1. Διευθύνσεις και επίπεδα ολίσθησης για τις συνήθεις κρυσταλλικές δομές.

Structure	Slip Direction	Slip Plane
FCC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{110\}, \{112\}$
HCP	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$(0001), \{1\bar{1}1\}$
	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$	$\{1\bar{1}01\}, \{1\bar{1}0\bar{1}\}$

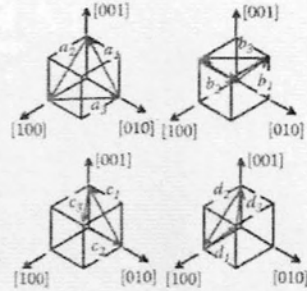


Σχήμα 2-1. Η παραμόρφωση του κρυστάλλου λόγω ολίσθησης ενός συστήματος κατά τον μονοαξονικό εφελκυσμό.^[5]

Οι κρύσταλλοι περιέχουν ένα μεγάλο αριθμό υποψήφιων συστημάτων ολίσθησης. Για παράδειγμα, ένας FCC κρύσταλλος περιέχει 12 πιθανά συστήματα ολίσθησης. Αυτά απεικονίζονται στον Πίνακα 2-2.

Πίνακας 2-2. Συστήματα ολίσθησης για FCC κρυστάλλους

Slip Plane	Slip Direction	
(111)	$[0\bar{1}1]$	a_1
	$[10\bar{1}]$	a_2
	$[\bar{1}10]$	a_3
$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[011]$	b_1
	$[\bar{1}0\bar{1}]$	b_2
	$[1\bar{1}0]$	b_3
$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}\bar{1}]$	c_1
	$[\bar{1}0\bar{1}]$	c_2
	$[110]$	c_3
$(1\bar{1}\bar{1})$	$[011]$	d_1
	$[10\bar{1}]$	d_2
	$[\bar{1}\bar{1}0]$	d_3



Τα επίπεδα ολίσθησης στον απαραμόρφωτο κρύσταλλο αναγνωρίζονται από τα μοναδιαία διανύσματα \mathbf{m}^a που είναι κάθετα στα επίπεδα ολίσθησης, και από τα μοναδιαία διανύσματα \mathbf{s}^a που είναι παράλληλα στη διεύθυνση ολίσθησης. Εδώ είναι $a=1\dots N$, όπου N ορίζεται ο συνολικός αριθμός των συστημάτων ολίσθησης (για παράδειγμα $N=12$ για FCC). Ο κρύσταλλος μπορεί να περιστραφεί κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης. Στο παραμορφωμένο στερεό, τα διανύσματα που είναι κάθετα στα επίπεδα ολίσθησης και παράλληλα στις διευθύνσεις ολίσθησης ορίζονται ως \mathbf{m}^{*a} , \mathbf{s}^{*a} αντίστοιχα.

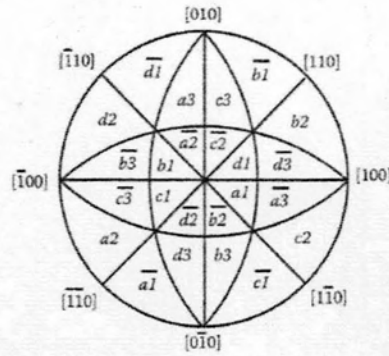
Σε ένα πείραμα εφελκυσμού ενός FCC μονοκρυστάλλου, η διάτμηση συμβαίνει στο σύστημα ολίσθησης στο οποίο αναπτύσσεται η μεγαλύτερη διατμητική τάση. Η διατμητική τάση στο α -σύστημα μπορεί να υπολογιστεί από τον τανυστή τάσεων Cauchy σ που δρα σε ένα στερεό, ως

$$\tau^a = J \sigma_{ij} m_i^{*a} s_j^{*a},$$

όπου $J = \frac{dV}{dV_0}$ είναι ο λόγος του παραμορφωμένου προς τον απαραμόρφωτο όγκο ($J \cong 1$).

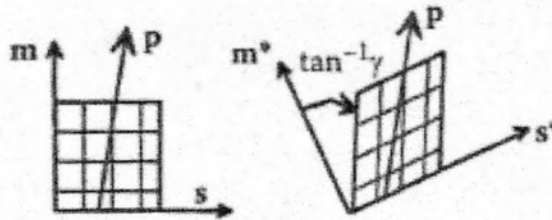
Ολίσθηση σε ένα κρίσιμο σύστημα ξεκινά όταν η διατμητική τάση ξεπεράσει μια κρίσιμη τιμή (την αντίσταση του συστήματος ολίσθησης) $\tau^a > g^a$. Η αντίσταση των συστημάτων ολίσθησης αυξάνεται με την πλαστική παραμόρφωση.

Σε συγκεκριμένους προσανατολισμούς του άξονα φόρτισης, περισσότερα από ένα συστήματα ολίσθησης μπορεί να είναι ενεργά. Για παράδειγμα, σε ένα FCC κρύσταλλο που φορτίζεται παράλληλα στη διεύθυνση $\langle 100 \rangle$, 8 συστήματα υπόκεινται στην ίδια διατμητική τάση και έτσι είναι ενεργά την ίδια στιγμή (στο Σχήμα 2-2 φαίνονται τα ενεργά συστήματα).



Σχήμα 2-2. Ενεργά συστήματα ολίσθησης κατά τη διάρκεια μονοαξονικού εφελκυσμού σε FCC κρύσταλλο.

Η κλίση της παραμόρφωσης που προκύπτει από μια διατμητική παραμόρφωση γ^a στο α -σύστημα είναι: $F_{ij} = R_{ik} (\delta_{kj} + \gamma^a s_k^a m_j^a)$, όπου R_{ij} είναι κανονικός ορθογωνικός τανυστής (δηλαδή $\det[R]=1$, $R_{ik} R_{jk} = \delta_{ij}$) και αναπαριστά την περιστροφή του στερεού. Η περιστροφή εξαρτάται από τον τρόπο που φορτίζεται το στερεό σώμα. Για παράδειγμα σε ένα εφελκυσμό, ο R_{ij} συχνά υπολογίζεται από την κατάσταση ότι οι μεταλλικές ίνες που είναι παράλληλες στον άξονα φόρτισης (καθορίζονται από ένα μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{p}) δεν περιστρέφονται κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης (Σχήμα 2-3).



Σχήμα 2-3. Περιστροφή κρυσταλλικού πλέγματος κατά τη διάρκεια μονοαξονικής φόρτισης. ^[5]

Το κρυσταλλικό πλέγμα περιστρέφεται κατά \mathbf{R} έτσι ώστε, μετά τη παραμόρφωση $s_i^* = R_{ij} s_j$ και $m_i^* = R_{ij} m_j$ για όλα τα συστήματα ολίσθησης.

Ο ρυθμός της παραμόρφωσης που προκύπτει από το ρυθμό διάτμησης $\dot{\gamma}^a$ στο α -σύστημα είναι

$$L_{ij} = \dot{F}_{ip} F_{pj}^{-1} = \dot{R}_{ik} R_{jk} + R_{ik} \dot{\gamma}^a s_k^a m_p^a R_{jp} = \dot{R}_{ik} R_{jk} + \dot{\gamma}^a s_i^a m_j^{*a}.$$

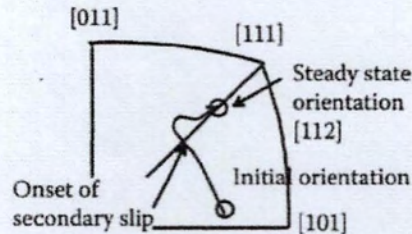
Αυτό μπορεί να αναλυθεί σε ένα συμμετρικό μέρος, που αναπαριστά την αλλαγή μήκους, και ένα αντισυμμετρικό μέρος, που αναπαριστά τη στροφή, ως εξής:

$$L_{ij} = D_{ij} + W_{ij}, \quad D_{ij} = \frac{\dot{\gamma}^a}{2} (s_i^* m_j^{*a} + s_j^* m_i^a), \quad W_{ij} = \dot{R}_{ik} R_{jk} + \frac{\dot{\gamma}^a}{2} (s_i^* m_j^{*a} - s_j^* m_i^a).$$

Εδώ, ο πρώτος όρος στο W_{ij} αναπαριστά την περιστροφή του πλέγματος, ενώ ο δεύτερος όρος είναι η στροφή που αναλογεί στη διάτμηση του πλέγματος.

Σ ένα πείραμα εφελκυσμού προσαρμοσμένο για single slip, ο κρύσταλλος περιστρέφεται τόσο ώστε να γίνει παράλληλη η διεύθυνση ολίσθησης με τον άξονα φόρτισης. Αυτή η

περιστροφή απεικονίζεται για έναν FCC κρύσταλλο στο inverse pole figure στο Σχήμα 2-4. Τελικά ο κρύσταλλος περιστρέφεται αρκετά ώστε να ενεργοποιηθεί και ένα δεύτερο σύστημα ολίσθησης. Το σημείο στο οποίο συμβαίνει αυτό εξαρτάται από το πώς σκληραίνει ο κρύσταλλος. Συνήθως συμβαίνει λίγο πριν ο άξονας φόρτισης κινηθεί έξω από το βασικό τρίγωνο. Η διεύθυνση στροφής αλλάζει μετά από την ενεργοποίηση του δεύτερου συστήματος ολίσθησης: τελικά, ο άξονας φόρτισης γίνεται παράλληλος με την διεύθυνση $\langle 112 \rangle$. Αυτός είναι ένας σταθερός προσανατολισμός και ο κρύσταλλος συνεχίζει να παραμορφώνεται με διπλή ολίσθηση χωρίς επιπλέον περιστροφή.^[5]

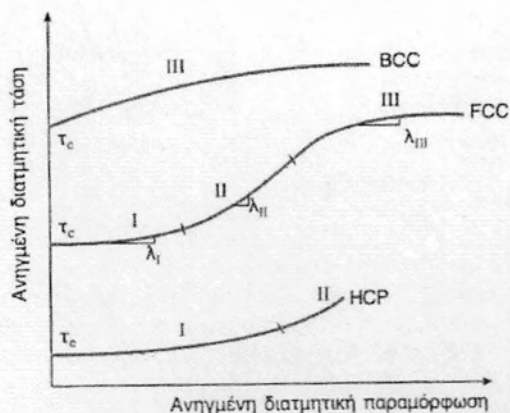


Σχήμα 2-4. Διάγραμμα πόλων όπου απεικονίζεται η εξέλιξη του άξονα φόρτισης κατά τη διάρκεια του μονοαξονικού εφελκυσμού σε FCC κρύσταλλο.^[5]

Ένα διάγραμμα ανηγμένης διαμητικής τάσης- ανηγμένης διαμητικής παραμόρφωσης φαίνεται στο Σχήμα 2-5. Η αντίσταση του κάθε επιπέδου ολίσθησης στη διάτμηση αυξάνεται με την πλαστική παραμόρφωση λόγω της εργοσκλήρυνσης.

Ξεκινώντας από τους μονοκρυστάλλους FCC, παρατηρούμε ότι υπάρχουν τρία διακριτά στάδια στην παραμόρφωση του μονοκρυστάλλου. Στο στάδιο I, ενεργοποιείται ένα μόνο από τα δώδεκα συστήματα ολίσθησης (αυτό που είναι πιο ευνοϊκά προσανατολισμένο προς την επιβαλλόμενη τάση). Αυτό το σύστημα παράγει και την παρατηρούμενη πλαστική παραμόρφωση στο στάδιο I. Παράλληλα ενεργοποιούνται πηγές αταξιών που παράγουν αταξίες, οι οποίες ολισθαίνουν στο ίδιο σύστημα ολίσθησης συνεισφέροντας στην παραμόρφωση. Η ολίσθηση των αταξιών στο στάδιο I γίνεται σχεδόν ανεμπόδιστα και η εργοσκλήρυνση (κλίση λ_1) στο στάδιο I είναι περιορισμένη. Για το λόγο αυτό, το στάδιο I ονομάζεται εύκολη ολίσθηση (easy glide). Η έκταση του σταδίου I εξαρτάται από τον προσανατολισμό του κρυστάλλου σε σχέση με την επιβαλλόμενη τάση και από την κρυσταλλική δομή. Έτσι στους κρυστάλλους FCC η παραμόρφωση του σταδίου I περιορίζεται σε μερικά εκατοστά (<10%), διότι σύντομα ενεργοποιούνται και άλλα ισοδύναμα συστήματα ολίσθησης προκαλώντας πολλαπλή ολίσθηση και την έναρξη του σταδίου II. Αντίθετα στους κρυστάλλους HCP και ειδικότερα στα μέταλλα Zn, Cd και Mg η έκταση του σταδίου I μπορεί να είναι πολύ μεγάλη (έως και 100% παραμόρφωση) λόγω της παρουσίας ουσιαστικά ενός μόνο συστήματος ολίσθησης (Σχήμα 2-5).^[3]



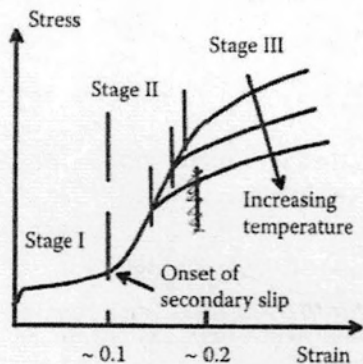


Σχήμα 2-5. Καμπύλες διατμητικής τάσεως-παραμορφώσεως για μονοκρυστάλλους BCC, FCC και HCP.^[3]

Τα μέταλλα του χωροκεντρομένου συστήματος BCC χαρακτηρίζονται από την απουσία του σταδίου I αφού διαθέτουν πολλά επίπεδα ολίσθησης με κοινή την πυκνή διεύθυνση $\langle 111 \rangle$. Το τέλος του σταδίου I και η έναρξη του σταδίου II συμπίπτουν με την ενεργοποίηση και άλλων ισοδύναμων ή δευτερευόντων συστημάτων ολίσθησης, όπου η ανηγμένη διατμητική τάση ξεπερνάει την κρίσιμη τιμή τ_c για ολίσθηση αταξιών. Έτσι στους κρυστάλλους FCC λαμβάνει χώρα πολλαπλή ολίσθηση σε ισοδύναμα και τεμνόμενα μεταξύ τους επίπεδα ολίσθησης, με αποτέλεσμα την αλληλεπίδραση των αταξιών, που οδηγεί στο σχηματισμό εμποδίων στην ολίσθηση. Ο ρυθμός εργοσκλήρυνσεως του σταδίου II, λ_{II} παραμένει σταθερός και για αυτό το στάδιο II έχει ονομαστεί στάδιο γραμμικής εργοσκλήρυνσεως. Στην κατάσταση αυτή οι αταξίες σχηματίζουν ομάδες διαπλεγμένων αταξιών χωρίς περαιτέρω δυνατότητα ολίσθησης. Ο μόνος τρόπος για να συνεχιστεί η παραμόρφωση είναι η αλλαγή επιπέδου ολίσθησης από ορισμένες αταξίες. Το γεγονός αυτό σηματοδοτεί την έναρξη του σταδίου III, το οποίο ονομάζεται στάδιο δυναμικής αποκαταστάσεως (dynamic recovery). Στα FCC μέταλλα η αλλαγή επιπέδου ολίσθησης γίνεται με το μηχανισμό της αναρρίχησης, ο οποίος απαιτεί τη διάχυση σημειακών ατελειών και επομένως ενεργοποιείται σε υψηλές θερμοκρασίες (Σχήμα 2-6). Επομένως οι ρυθμοί σκλήρυνσης στα στάδια I και III είναι ανεξάρτητα της θερμοκρασίας, ενώ στο στάδιο II ο ρυθμός σκλήρυνσης μειώνεται με τη θερμοκρασία.^[3]

Ένα τυπικό διάγραμμα τάσης-παραμόρφωσης για ένα μονοκρύσταλλο FCC που είναι αρχικά προσανατολισμένος για single slip απεικονίζεται στο Σχήμα 2-6. Η διάτμηση στο α-σύστημα αυξάνει την αντοχή του g^a : αυτό είναι γνωστό ως εργοσκλήρυνση (self-hardening). Ωστόσο η διάτμηση στο α-σύστημα αυξάνει επίσης και την αντοχή όλων των άλλων συστημάτων ολίσθησης g^b , $b \neq a$: αυτό είναι γνωστό ως latent hardening. Self-hardening μπορεί να μετρηθεί κάνοντας πειράματα single slip. Ενώ latent hardening συχνά υπολογίζεται παραμορφώνοντας πρώτα το υλικό με απλή ολίσθηση και στη συνέχεια ξαναφορτίζοντας το δοκίμιο για να ενεργοποιηθεί και ένα δεύτερο σύστημα ολίσθησης. Ακόμα ποσοτικοποιείται από το latent hardening ratio, το οποίο καθορίζει το λόγο της δύ-

ναμης του δεύτερου συστήματος προς το πρώτο $q^{ab} = \frac{g^b}{g^a}$.



Σχήμα 2-6. Διάγραμμα τάσης – παραμόρφωσης στον μονοαξονικό εφελκυσμό σε FCC μονοκρύσταλλο.^[5]

Η πλεγματική περιστροφή κατά τη διάρκεια ενός πειράματος εφελκυσμού προκαλεί ένα φαινόμενο που είναι γνωστό ως «geometric softening», το οποίο παίζει σημαντικό ρόλο στον εντοπισμό της διάτμησης στους μονοκρυστάλλους. Ο όρος geometric softening αναφέρεται στο γεγονός ότι ο κρύσταλλος περιστρέφεται τόσο ώστε να αυξηθεί η διατμητική τάση στο ενεργό σύστημα ολίσθησης και συνεπώς οδηγεί σε μία μείωση στην εφελκυστική τάση ροής του κρυστάλλου.^[5]

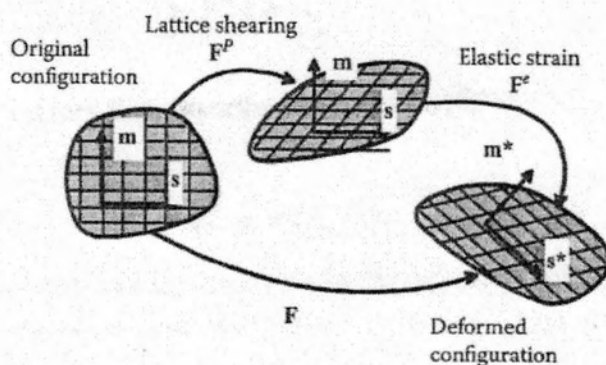
2.2. Κινηματική

Έστω x_i η θέση ενός σωματιδίου στον απαραμόρφωτο κρύσταλλο. Υποθέτουμε ότι το σώμα υπόκειται σε ένα πεδίο παραμορφώσεων $u_i(x_i)$, έτσι ώστε το σημείο από τη θέση x_i να μεταβεί στη θέση $y = x_i + u_i$, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2-7. Ορίζουμε τα πιο κάτω: Η κλίση της παραμόρφωσης και η Ιακωβιανή της είναι:

$$F_{ij} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad J = \det \mathbf{F}.$$

Η κλίση της ταχύτητας είναι:

$$L_{ij} = \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial y_j} = \dot{F}_{ik} F_{kj}^{-1}.$$



Σχήμα 2-7. Ανάλυση παραμόρφωσης του κρυστάλλου σε ελαστικό και πλαστικό μέρος^[5]

Και ο ρυθμός αλλαγής μήκους (Stretch rate) και στροφή (spin) είναι αντίστοιχα:

$$D_{ij} = \frac{1}{2}(L_{ij} + L_{ji}) \quad \text{και} \quad W_{ij} = \frac{1}{2}(L_{ij} - L_{ji}).$$

Να θυμηθούμε εδώ ότι το F_{ij} συσχετίζει τις απειροελάχιστες υλικές ίνες dy_i και dx_i στην παραμορφωμένη και απαραμόρφωτη κατάσταση, αντίστοιχα, ως

$$dy_i = F_{ij} dx_j.$$

Για να αναλύσουμε την κλίση της παραμόρφωσης σε ελαστικό και πλαστικό μέρος, υποθέτουμε ότι η παραμόρφωση λαμβάνει μέρος σε δύο στάδια. Το πλαστικό μέρος θεωρούμε ότι προκαλεί διάτμηση στο κρυσταλλικό πλέγμα χωρίς να το στρέφει ή να το τεντώνει. Το ελαστικό μέρος τεντώνει και στρέφει το πλέγμα. Θεωρούμε αυτά τα δύο γεγονότα να συμβαίνουν σε ακολουθία, με την πλαστική παραμόρφωση πρώτη και την αλλαγή μήκους και τη στροφή δεύτερη, δηλώνοντας

$$dy_i = F_{ij} dx_j = F_{ik}^e F_{kj}^p dx_j.$$

Για να αναλύσουμε την κλίση της ταχύτητας σε ελαστικό και πλαστικό μέρος, σημειώνουμε ότι

$$L_{ij} = \dot{F}_{ik} F_{kj}^{-1} = (\dot{F}_{ik}^e F_{kl}^p + F_{ik}^e \dot{F}_{kl}^p) F_{lm}^{p-1} F_{mj}^{e-1} = \dot{F}_{ik}^e F_{kl}^{e-1} + F_{ik}^e \dot{F}_{kl}^p F_{lm}^{p-1} F_{mj}^{e-1}.$$

Έτσι, η κλίση της ταχύτητας περιέχει δύο όρους, ένας από τους οποίους περιέχει μόνο ποσότητες ελαστικής παραμόρφωσης, ενώ ο άλλος όρος ποσότητες πλαστικής παραμόρφωσης. Το χρησιμοποιούμε αυτό για να αναλύσουμε τον L σε ελαστικό και πλαστικό μέρος και έχουμε:

$$L_{ij} = L_{ij}^e + L_{ij}^p, \quad \text{όπου} \quad L_{ij}^e = \dot{F}_{ik}^e F_{kj}^{e-1} \quad \text{και} \quad L_{ij}^p = F_{ik}^e \dot{F}_{kl}^p F_{lm}^{p-1} F_{mj}^{e-1}.$$

Η πλαστική ροή στον κρύσταλλο συμβαίνει με την διάτμηση που προκαλεί η ολίσθηση ενός αριθμού N συστημάτων ολίσθησης. Τα συστήματα ολίσθησης χαρακτηρίζονται από μοναδιαία διανύσματα παράλληλα στις διευθύνσεις ολίσθησης s_i^a και από επίπεδα ολίσθησης με κάθετα διανύσματα m_i^a στην απαραμόρφωτη κατάσταση. Ο ρυθμός διάτμησης στο α-σύστημα δηλώνεται με τον όρο $\dot{\gamma}^a$. Η κλίση της ταχύτητας που αποδίδεται σε αυτή τη διάτμηση είναι:

$$\dot{F}_{ik}^p F_{kj}^{-1} = \sum_{a=1}^N \dot{\gamma}^a s_i^a m_j^a.$$

Είναι βολικό να ορίζουμε τα διανύσματα που περιγράφουν τη πλαστική διάτμηση στη συγκεκριμένη στιγμή ως

$$s_i^{*a} = F_{ik}^e s_k^a \quad \text{και} \quad m_i^{*a} = m_k^a F_{kl}^{e-1}.$$

Ο πρώτος όρος μπορεί να ερμηνευθεί και ως η διεύθυνση ολίσθησης στην παραμορφωμένη κατάσταση (να σημειώσουμε ωστόσο ότι δεν είναι μοναδιαίο διάνυσμα), ενώ ο όρος m_i^{*a} μπορεί να ερμηνευθεί ως το κάθετο διάνυσμα στο επίπεδο ολίσθησης στην παραμορφωμένη κατάσταση.

Το πλαστικό μέρος της κλίσης της ταχύτητας μπορεί τότε να εκφραστεί με όρους τους ρυθμούς διατμήσεως ως

$$L_{ij}^p = \sum_{a=1}^N \dot{\gamma}^a s_i^{*a} m_j^{*a}.$$

Το ελαστικό και πλαστικό μέρος της κλίσης της ταχύτητας μπορεί να αναλυθεί σε ένα συμμετρικό και έναν αντισυμμετρικό μέρος, αντιπροσωπεύοντας την αλλαγή μήκους (stretch) και τη στροφή (spin), αντίστοιχα, ως

$$D_{ij}^e = \frac{1}{2}(L_{ij}^e + L_{ji}^e), \quad W_{ij}^e = \frac{1}{2}(L_{ij}^e - L_{ji}^e), \quad D_{ij}^p = \frac{1}{2}(L_{ij}^p + L_{ji}^p) \quad \text{και} \quad W_{ij}^p = \frac{1}{2}(L_{ij}^p - L_{ji}^p).$$

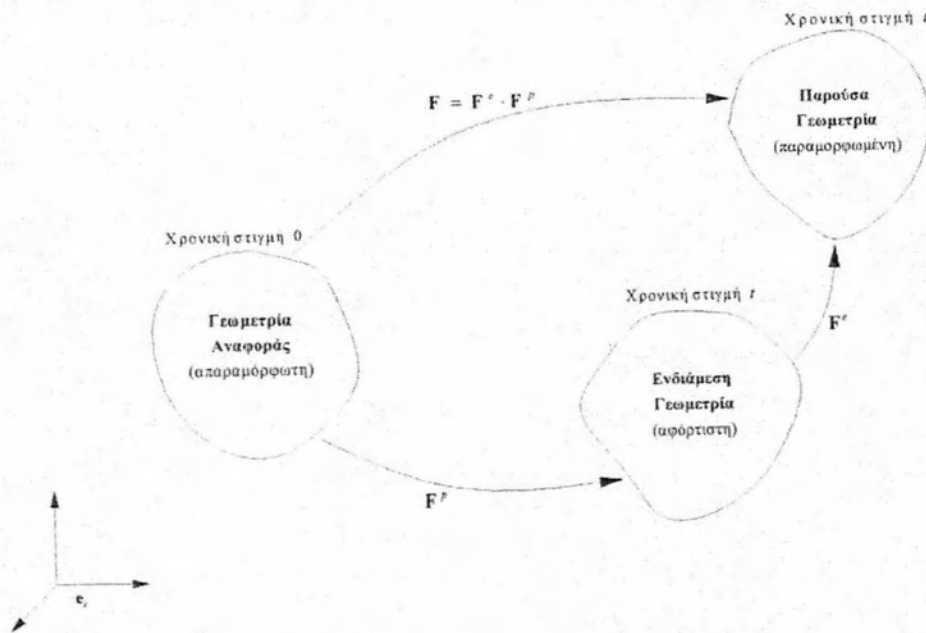
Η πλαστική αλλαγή μήκους και η στροφή μπορεί να εκφραστούν με όρους διατμήσεως του πλέγματος ως εξής:

$$D_{ij}^p = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \dot{\gamma}^a (s_i^{*a} m_j^{*a} + s_j^{*a} m_i^{*a}) \quad \text{και} \quad W_{ij}^p = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \dot{\gamma}^a (s_i^{*a} m_j^{*a} - s_j^{*a} m_i^{*a}).$$

2.3. Η ελαστοπλαστική συμπεριφορά των μετάλλων σε πεπερασμένες παραμορφώσεις

Αξίζει εδώ να σημειώσουμε δύο γενικά συμπεράσματα που προκύπτουν από όσα είναι γνωστά μέχρι σήμερα απ' τη μελέτη της μηχανικής συμπεριφοράς των υλικών. Το πρώτο αφορά τη διαφορετικότητα της φύσης των φαινομένων Ελαστικότητας και Πλαστικότητας. Το γεγονός αυτό σημαίνει ότι οι σχέσεις έντασης-παραμόρφωσης στην ελαστική και πλαστική περιοχή πρέπει να είναι διαφορετικές. Το δεύτερο αφορά την εξάρτηση της αποκρίσεως απ την ιστορία της φόρτισης, όταν υπάρχουν πλαστικές παραμορφώσεις, κάτι που σημαίνει ότι η σχέση έντασης-παραμόρφωσης δεν είναι αμφιμονοσήμαντη στην πλαστική περιοχή. Αυτό μας οδηγεί στην ανάπτυξη καταστατικών νόμων που σχετίζουν χρονικούς ρυθμούς μεταβολής τάσεων- παραμορφώσεων και όχι τα ίδια τα μεγέθη τάσεων και παραμορφώσεων.

Έτσι λοιπόν είναι προφανές ότι ο ορισμός του συνολικού τανυστή των παραμορφώσεων δεν επαρκεί. Πρέπει να γίνει σαφής διαχωρισμός μεταξύ ελαστικού και πλαστικού τμήματος. Αυτό επιτυγχάνεται θεωρώντας ότι η κίνηση \mathbf{F} , συνίσταται από έναν μετασχηματισμό \mathbf{F}^p , στην πλαστική περιοχή, ακολουθούμενο από ένα μετασχηματισμό \mathbf{F}^e , στην ελαστική περιοχή, δηλαδή $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p$. Έτσι, προκύπτει η ανάγκη για τον ορισμό μιας επιπλέον γεωμετρίας, την οποία καλούμε ενδιάμεση. Η νέα εικόνα της κίνησης παρουσιάζεται στο Σχήμα 2-8.

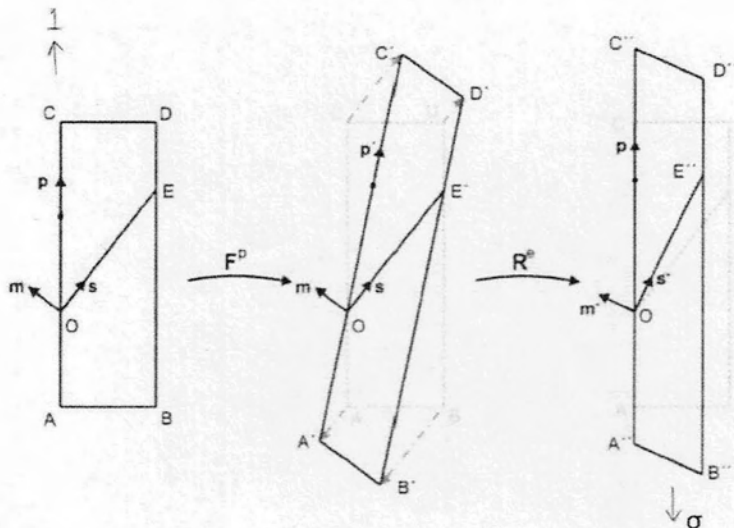


Σχήμα 2-8. Σχηματική απεικόνιση της ενδιάμεσης γεωμετρίας

Ο τανυστής κλίσης της ταχύτητας γράφεται $\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p$, όπου \mathbf{L}^e και \mathbf{L}^p είναι το ελαστικό και πλαστικό του τμήμα αντίστοιχα. Η ανάλυση που παρουσιάστηκε προηγουμένως και

αναφέρονταν στα μεγέθη F και L , μπορεί εύκολα να προσαρμοστεί για τα νέα μεγέθη, δηλαδή τα F^e , F^p και L^e , L^p , αντίστοιχα.

2.4. Μονοαξονικός Εφελκυσμός μονοκρυστάλλου



Σχήμα 2-9. Σχηματική απεικόνιση μονοαξονικού εφελκυσμού.

Η ενδιάμεση κατάσταση, που ορίζεται από τη σχέση $F^p = \delta + \gamma s m$, είναι ισοκλινής, το οποίο σημαίνει ότι είναι τέτοια ώστε τα διανύσματα κατεύθυνσης s και m έχουν τις ίδιες διευθύνσεις με την απαραμόρφωτη κατάσταση.

Έστω p το μοναδιαίο διάνυσμα στη διεύθυνση της φόρτισης. Τότε ο τανυστής των τάσεων θα είναι της μορφής

$$\sigma = \sigma p p \quad \text{ή} \quad [\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Η μηχανή εφελκυσμού επιβάλλει τον ακόλουθο περιορισμό: υλικές ίνες παράλληλες στο p επεκτείνονται αλλά δεν περιστρέφονται, δηλαδή

$$p \equiv F \cdot p = \lambda p \quad (\lambda = |p| > 0). \quad (6)$$

Καθώς οι ελαστικές παραμορφώσεις είναι μικρές $U^e \cong \delta$, μπορούμε να γράψουμε ότι

$$F = F^e \cdot F^p \cong R^e \cdot F^p = R^e \cdot (\delta + \gamma s m) \quad \text{με} \quad R^e \cdot R^{eT} = \delta. \quad (7)$$

Τότε, (6) \Rightarrow

$$R^e \cdot (\delta + \gamma s m) \cdot p = \lambda p \Rightarrow (\delta + \gamma s m) \cdot p = \lambda R^{eT} \cdot p \Rightarrow p + \gamma (m \cdot p) s = R^{eT} \cdot (\lambda p). \quad (8)$$

Από την τελευταία εξίσωση προσδιορίζονται τα λ και R^e ως εξής:

Υπολογισμός λ

$$\lambda = |p + \gamma (m \cdot p) s| = \sqrt{[p + \gamma (m \cdot p) s] \cdot [p + \gamma (m \cdot p) s]} = \sqrt{1 + 2\gamma (m \cdot p) (s \cdot p) + \gamma^2 (m \cdot p)^2}.$$

Υπολογισμός R^e

Από τη σχέση (4) φαίνεται ότι ο όρος $\gamma (m \times p) s$ προστίθεται στο p και προκύπτει ένα νέο διάνυσμα $R^{eT} \cdot (\lambda p)$, το οποίο είναι το αρχικό διάνυσμα p επεκτεινόμενο κατά λ και πε-

ριστρεφόμενο κατά \mathbf{R}^{eT} . Αυτό σημαίνει ότι ο άξονας περιστροφής λόγω του \mathbf{R}^{eT} είναι κάθετος στο επίπεδο που ορίζεται από τα \mathbf{p} και \mathbf{s} .

Επομένως το μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{n} που ορίζει τον άξονα περιστροφής λόγω του \mathbf{R}^{eT} μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση :

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{s}}{|\mathbf{p} \times \mathbf{s}|}, \quad (\mathbf{n} \times \mathbf{p} = \mathbf{n} \times \mathbf{s} = \mathbf{0}). \quad (9)$$

Η περιστροφή \mathbf{R}^e μπορεί να γραφτεί επίσης και ως

$$\mathbf{R}^e = \cos \theta \delta + (1 - \cos \theta) \mathbf{n} \mathbf{n} + \sin \theta (\mathbf{n} \times), \quad (\mathbf{n} \times)_{ij} = e_{ikj} n_k = -e_{ijk} n_k. \quad (10)$$

Όπου θ είναι η γωνία περιστροφής και μπορεί να υπολογιστεί με τον τρόπο που παρουσιάζεται στη συνέχεια. Η τελευταία εξίσωση υπονοεί ότι

$$\mathbf{R}^{eT} = \cos \theta \delta + (1 - \cos \theta) \mathbf{n} \mathbf{n} - \sin \theta (\mathbf{n} \times) \Rightarrow$$

$$\mathbf{R}^{eT} \cdot \mathbf{p} = \cos \theta \mathbf{p} + (1 - \cos \theta) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{n} - \sin \theta (\mathbf{n} \times \mathbf{p}) = \cos \theta \mathbf{p} - \sin \theta \mathbf{n} \times \mathbf{p}.$$

Τότε από την (4) \Rightarrow

$$\mathbf{p} + \gamma (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{s} = \lambda \cos \theta \mathbf{p} - \lambda \sin \theta \mathbf{n} \times \mathbf{p}. \quad (11)$$

Εάν πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο της τελευταίας εξίσωσης με το \mathbf{p} ή το \mathbf{s} , μπορούμε να βρούμε τη γωνία περιστροφής θ . Αν πράγματι (7) $\cdot \mathbf{p} \Rightarrow$

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} + \gamma (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{s} \cdot \mathbf{p} = \lambda \cos \theta \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} - \lambda \sin \theta (\mathbf{n} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{p} \Rightarrow 1 + \gamma (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p}) = \lambda \cos \theta \Rightarrow$$

$$\cos \theta = \frac{1 + \gamma (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})}{\lambda}.$$

Για να ορίσουμε πλήρως τη γωνία θ , πρέπει να υπολογισθεί αντίστοιχα και το $\sin \theta$:
(11) $\cdot \mathbf{s} \Rightarrow$

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + \gamma (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{s} \cdot \mathbf{s} = \lambda \cos \theta \mathbf{p} \cdot \mathbf{s} - \lambda \sin \theta (\mathbf{n} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s} \Rightarrow$$

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + \gamma \mathbf{m} \cdot \mathbf{p} = \lambda \cos \theta \mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + \gamma \mathbf{m} \cdot \mathbf{p} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2 - \lambda \sin \theta (\mathbf{n} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s} \Rightarrow$$

$$\sin \theta = -\frac{\gamma \mathbf{m} \cdot \mathbf{p} [1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2]}{\lambda (\mathbf{n} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s}}. \quad (12)$$

Αλλά

$$|\mathbf{p} \times \mathbf{s}| = \sqrt{(\mathbf{p} \times \mathbf{s})_i (\mathbf{p} \times \mathbf{s})_i} = \sqrt{(e_{ijk} p_j s_k)(e_{imn} p_m s_n)} = \sqrt{(\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}) p_j s_k p_m s_n} =$$

$$= \sqrt{p_j s_k p_j s_k - p_j s_k p_k s_j} = \sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}$$

Και

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{s}}{|\mathbf{p} \times \mathbf{s}|} = \frac{e_{ijk} p_j s_k \mathbf{e}_i}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{p} = \frac{(e_{ijk} p_j s_k \mathbf{e}_i) \times (p_l \mathbf{e}_l)}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} = \frac{e_{ijk} p_j s_k p_l e_{mil} \mathbf{e}_m}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} = \frac{e_{ijk} e_{ilm} p_j s_k p_l \mathbf{e}_m}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} =$$

$$= \frac{(\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) p_j s_k p_l \mathbf{e}_m}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} = \frac{p_j s_k p_j \mathbf{e}_k - p_j s_k p_k \mathbf{e}_j}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} = \frac{\mathbf{s} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p}}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} \Rightarrow$$

$$(\mathbf{n} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s} = \frac{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}} = \sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}.$$

Επομένως, (12) \Rightarrow
$$\sin \theta = -\frac{\gamma(\mathbf{m} \cdot \mathbf{p})\sqrt{1-(\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}}{\lambda}$$

Η λογαριθμική αξονική παραμόρφωση ισούται με $\varepsilon = \ln \lambda$.

Συνοψίζοντας τα ανωτέρω, για μια δεδομένη διεύθυνση φόρτισης \mathbf{p} και για ένα σύστημα ολίσθησης (\mathbf{s}, \mathbf{m}) , μπορούμε να υπολογίσουμε αναλυτικά την καμπύλη $\sigma - \varepsilon$ ως εξής:

Αρχικά υπολογίζουμε το $\lambda(\gamma)$:

$$\lambda(\gamma) = \sqrt{1 + 2\gamma(\mathbf{m} \cdot \mathbf{p})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{p}) + \gamma^2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{p})^2}$$

Στη συνέχεια το \mathbf{n} και το συνημίτονο της γωνίας θ :

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{s}}{|\mathbf{p} \times \mathbf{s}|}, \quad \sin \theta = -\frac{\gamma(\mathbf{m} \cdot \mathbf{p})\sqrt{1-(\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2}}{\lambda(\gamma)}, \quad \cos \theta(\gamma) = \frac{1 + \gamma(\mathbf{m} \cdot \mathbf{p})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})}{\lambda(\gamma)}$$

Υπολογίζουμε το ελαστικό μέρος του ταυστή περιστροφής

$$\mathbf{R}^e(\gamma) = \cos \theta(\gamma) \delta + [1 - \cos \theta(\gamma)] \mathbf{nn} + \sin \theta(\gamma) (\mathbf{n} \times), \quad [\mathbf{n} \times] = \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix}$$

Και έπειτα την διαμητική τάση

$$\frac{d\tau(\gamma)}{d\gamma} = h(\gamma) = \frac{h_0 - h_s}{\cosh^2\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0}\right)} + h_s, \quad (13)$$

$$\tau(\gamma) = \tau_0 + \int_0^\gamma h(\gamma) d\gamma \quad \Rightarrow \quad \tau(\gamma) = \tau_0 + (\tau_1 - \tau_0) \tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) + h_s \gamma. \quad (14)$$

Τα διανύσματα \mathbf{s} και \mathbf{m} μετά την παραμόρφωση ισούνται με

$$\mathbf{s}^* = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{s} = \mathbf{s} \cdot \mathbf{R}^{eT}, \quad \mathbf{m}^* = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{m} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{R}^{eT}$$

Τέλος, υπολογίζουμε τη τάση από τη σχέση:

$$\begin{aligned} \tau &= \mathbf{s}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m}^* = \mathbf{s}^* \cdot (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \mathbf{p}) \cdot \mathbf{m}^* = \sigma (\mathbf{s}^* \cdot \mathbf{p})(\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}^*) = \sigma [(\mathbf{R}^e \cdot \mathbf{s}) \cdot \mathbf{p}] [\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}^e \cdot \mathbf{m})] = \\ &= \sigma (\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{s})(\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{m}) \end{aligned}$$

Και προκύπτει ότι :

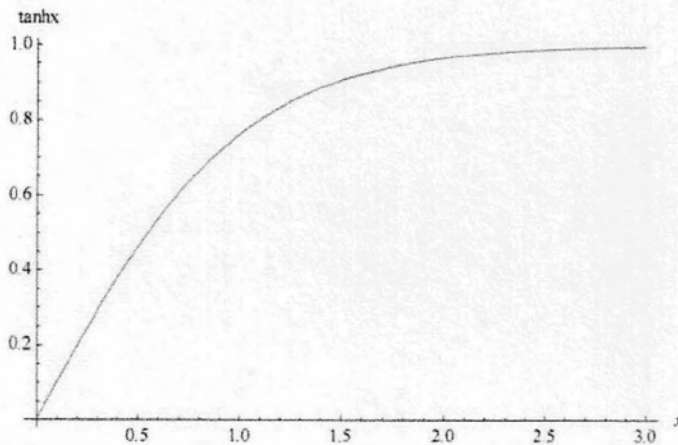
$$\sigma(\gamma) = \frac{\tau(\gamma)}{[\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}^e(\gamma) \cdot \mathbf{s}] [\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}^e(\gamma) \cdot \mathbf{m}]}, \quad \varepsilon(\gamma) = \ln \lambda(\gamma). \quad (15)$$

Οι πιο πάνω εξισώσεις αποτελούν μια παραμετρική περιγραφή της καμπύλης $\sigma - \varepsilon$.

Για τις εξισώσεις Bassani-Wu (13) και (14)

$$\tau(\gamma) = \tau_0 + (\tau_1 - \tau_0) \tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) + h_s \gamma, \quad h(\gamma) = \frac{d\tau(\gamma)}{d\gamma} = \frac{h_0 - h_s}{\cosh^2\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right)} + h_s,$$

όπου $\tau(0) = \tau_0$, $h(0) = h_0$ και $h(\infty) = h_s$. Παρατηρούμε ότι ο όρος $\tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right)$ αυξάνεται πολύ γρήγορα από το 0 στο 1 καθώς αυξάνεται το γ από το 0. (Σχήμα 2-10). Επίσης ο όρος $\operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right)$ μειώνεται πολύ γρήγορα από το 1 στο 0 καθώς το γ αυξάνεται από το 0, λόγω της σχέσης $\tanh^2 x = 1 - \operatorname{sech}^2 x$, όπου $x = \frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma$.



Σχήμα 2-10. Γραφική παράσταση του όρου $\tanh x$ ως προς x .

Πράγματι, $\tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) = 0.999 \Rightarrow \frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma \cong 3.8 \Rightarrow \gamma \cong 3.8 \frac{\tau_1 - \tau_0}{h_0 - h_s} \equiv \gamma_1 \ll 1$.

Π.χ., $\tau_1 = 1.3\tau_0$, $h_0 = 90\tau_0$ και $h_s = 1.5\tau_0 \Rightarrow \gamma_1 = 3.8 \frac{1.3\tau_0 - \tau_0}{90\tau_0 - 1.5\tau_0} = 0.013 \ll 1$.

Επομένως, καθώς $\gamma \rightarrow \gamma_1 = \text{μικρό}$, $\tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) \rightarrow 1$ και

$$\tau = \tau_0 + (\tau_1 - \tau_0) \tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) + h_s \gamma \rightarrow \tau_0 + (\tau_1 - \tau_0) \times 1 + \underbrace{h_s \gamma}_{\text{μικρό}} \cong \tau_1.$$

Επίσης, αφού $\tanh^2 x = 1 - \operatorname{sech}^2 x$ καθώς $\tanh x \rightarrow 1$, $\operatorname{sech}^2 x \rightarrow 0$. Επομένως, καθώς $\gamma \rightarrow \gamma_1$, $\tanh\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) \rightarrow 1$, $\operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) \rightarrow 0$ και

$$h = (h_0 - h_s) \operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) + h_s \rightarrow (h_0 - h_s) \times 0 + h_s = h_s,$$

δηλαδή, καθώς $\tau \rightarrow \tau_1$, $h \rightarrow h_s$. Για τιμές $\gamma > \gamma_1$

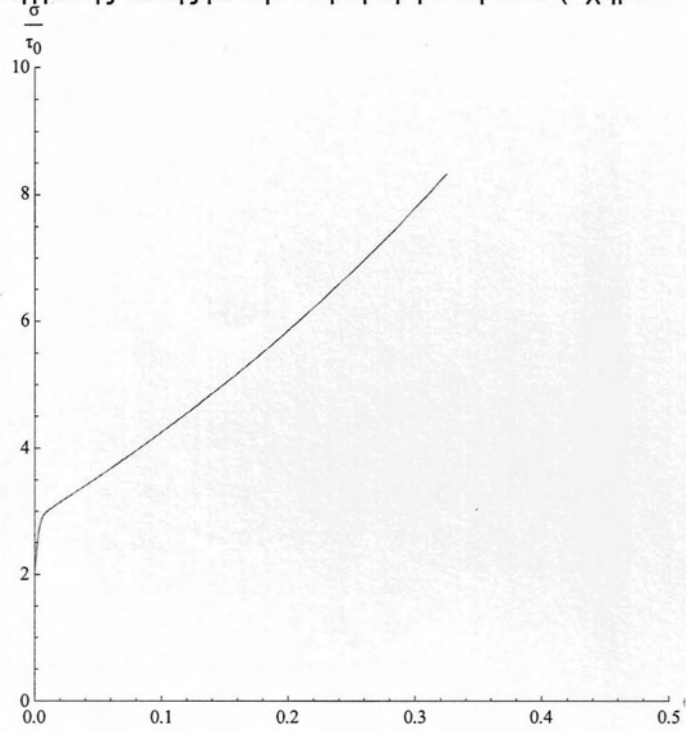
$$h(\gamma) = (h_0 - h_s) \operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0 - h_s}{\tau_1 - \tau_0} \gamma\right) + h_s \cong (h_0 - h_s) \times 0 + h_s = h_s.$$

2.5. Εφαρμογή Single Slip για διεύθυνση φόρτισης [531]

Εφαρμόζοντας τις ανωτέρω σχέσεις με την αναλυτική λύση για τη διεύθυνση φόρτισης [531] στο βασικό τρίγωνο, βρίσκουμε με τη χρήση της Mathematica την καμπύλη τάσης –

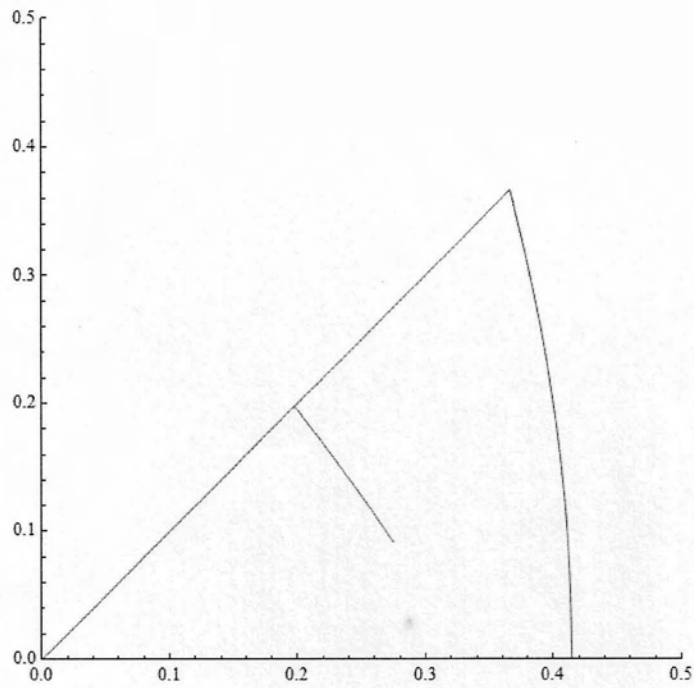
παραμόρφωσης (σ - ε) καθώς επίσης και την αλλαγή της διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης του κρύσταλλου.

Η καμπύλη της ανηγμένης τάσης με την παραμόρφωση είναι (Σχήμα 2-11):



Σχήμα 2-11. Διάγραμμα $\frac{\sigma}{\tau_0} - \varepsilon$.

Και η γραφική παράσταση της αλλαγής της διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο κατά την παραμόρφωση είναι (Σχήμα 2-12):



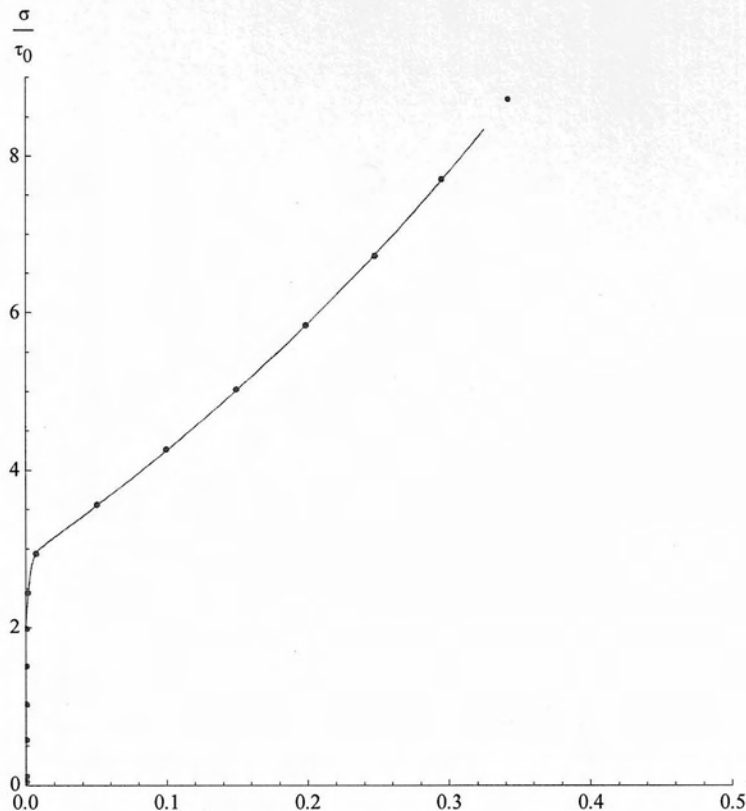
Σχήμα 2-12. Αλλαγή διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο

3. ΑΠΛΗ ΟΛΙΣΘΗΣΗ – ΠΟΛΛΑΠΛΗ ΟΛΙΣΘΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

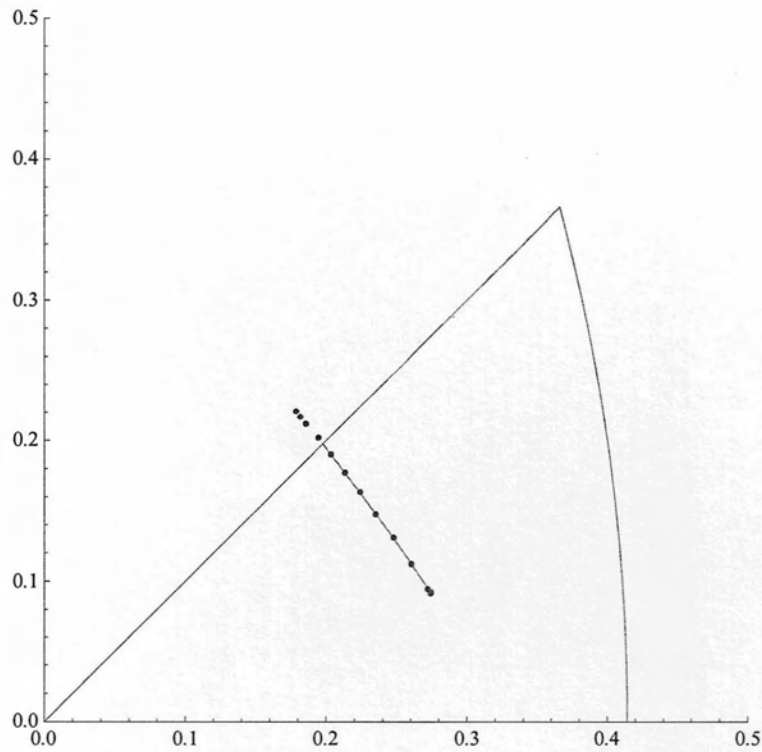
3.1. Απλή Ολίσθηση

Με τη χρήση του προγράμματος πεπερασμένων στοιχείων ABAQUS και μιας υπορουτίνας UMAT προέκυψαν οι τιμές των μετατοπίσεων και της τάσης για απλή ολίσθηση. Καθώς επίσης και η τιμή του διανύσματος p' που δείχνει τη διεύθυνση ολίσθησης σε κάθε επανάληψη στο βασικό τρίγωνο κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης.

Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3-1 η καμπύλη της ανηγμένης τάσης με την παραμόρφωση για την αναλυτική λύση συμπίπτει με τα αντίστοιχα σημεία από τα πεπερασμένα στοιχεία. Το ίδιο συμβαίνει και για την πορεία της διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο (Σχήμα 3-2), όπου και οι δύο λύσεις πάλι συμπίπτουν.



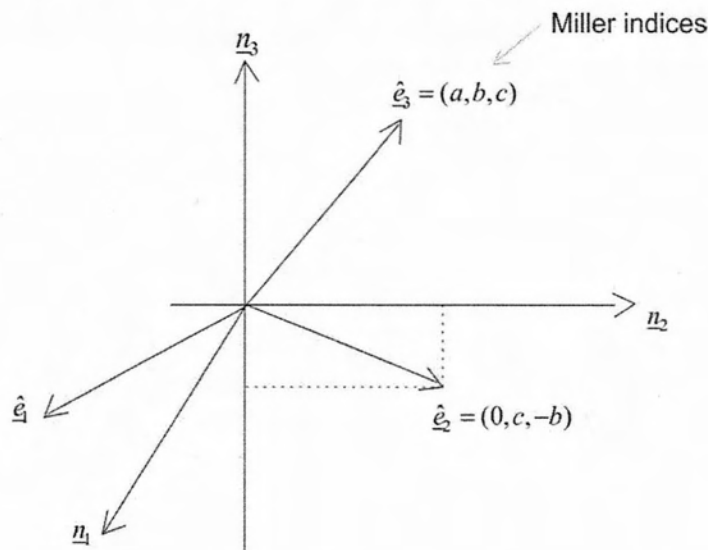
Σχήμα 3-1. Σύγκριση καμπύλης σ - ϵ με τη χρήση πεπερασμένων σημείων (κόκκινα σημεία) και με την αναλυτική λύση (μπλε γραμμή).



Σχήμα 3-2. Πορεία διεύθυνσης ολίσθησης κατά τη διάρκεια της παραμόρφωση. Με μπλε γραμμή απεικονίζεται η αναλυτική λύση και με κόκκινα σημεία είναι τα αποτελέσματα από τα πεπερασμένα στοιχεία.

Για την εύρεση της διεύθυνσης \mathbf{p}' χρειάστηκαν κάποιοι περαιτέρω υπολογισμοί καθώς οι συντεταγμένες του διανύσματος \mathbf{p}' αναφέρονται ως προς το κρυσταλλικό σύστημα συντεταγμένων ενώ οι υπολογισμοί των πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιούν ένα "global" καρτεσιανό σύστημα που δεν συμπίπτει με το κρυσταλλικό. Οι σχέσεις που συνδέουν το "global" με το κρυσταλλικό σύστημα παρουσιάζονται αναλυτικά στην ενότητα που ακολουθεί.

3.2. Global και κρυσταλλικό σύστημα συντεταγμένων



Έστω $\mathbf{n}^{(i)}$ τα μοναδιαία διανύσματα στις κατευθύνσεις ενός κυβικού κρυστάλλου. Επίσης, έστω $[abc]$ οι δείκτες Miller για τη διεύθυνση φόρτισης και ορίζουμε το μοναδιαίο $\hat{\mathbf{e}}_3$, το οποίο μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\hat{\mathbf{e}}_3 = a\mathbf{n}^{(1)} + b\mathbf{n}^{(2)} + c\mathbf{n}^{(3)}.$$

Υποθέτουμε ότι $b^2 + c^2 \neq 0$ και ορίζουμε το $\hat{\mathbf{e}}_2$ ως:

$$\hat{\mathbf{e}}_2 = c\mathbf{n}^{(2)} - b\mathbf{n}^{(3)},$$

Γνωρίζοντας τα $\hat{\mathbf{e}}_3$ και $\hat{\mathbf{e}}_2$ προκύπτει το $\hat{\mathbf{e}}_1$ να ισούται με:

$$\hat{\mathbf{e}}_1 = \hat{\mathbf{e}}_2 \times \hat{\mathbf{e}}_3 = (b^2 + c^2)\mathbf{n}^{(1)} - ab\mathbf{n}^{(2)} - ac\mathbf{n}^{(3)}.$$

Στη συνέχεια ορίζουμε τα μοναδιαία διανύσματα

$$\mathbf{e}_1 = \frac{\hat{\mathbf{e}}_1}{|\hat{\mathbf{e}}_1|} = \frac{1}{m_1} \left[(b^2 + c^2)\mathbf{n}^{(1)} - ab\mathbf{n}^{(2)} - ac\mathbf{n}^{(3)} \right], \quad \text{όπου } m_1 = m_2 m_3,$$

$$\mathbf{e}_2 = \frac{\hat{\mathbf{e}}_2}{|\hat{\mathbf{e}}_2|} = \frac{1}{m_2} (c\mathbf{n}^{(2)} - b\mathbf{n}^{(3)}), \quad \text{όπου } m_2 = \sqrt{b^2 + c^2},$$

και
$$\mathbf{e}_3 = \frac{\hat{\mathbf{e}}_3}{|\hat{\mathbf{e}}_3|} = \frac{1}{m_3} (a\mathbf{n}^{(1)} + b\mathbf{n}^{(2)} + c\mathbf{n}^{(3)}), \quad \text{όπου } m_3 = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}.$$

Εάν $b = c = 0$, τότε θέτουμε $\mathbf{e}_3 = \mathbf{n}^{(1)}$, $\mathbf{e}_1 = \mathbf{n}^{(2)}$ και $\mathbf{e}_2 = \mathbf{n}^{(3)}$.

Γράφουμε ότι $\mathbf{e}_i = (\mathbf{n}^{(k)} \cdot \mathbf{e}_i)\mathbf{n}^{(k)} = Q_{ki}\mathbf{n}^{(k)}$, όπου $Q_{ki} = \mathbf{n}^{(k)} \cdot \mathbf{e}_i$ είναι τα συνημίτονα κατεύθυνσης για την αλλαγή συντεταγμένων $\mathbf{e}_i \rightarrow \mathbf{n}^{(i)}$, δηλαδή $\mathbf{p} = p_i \mathbf{e}_i = p'_i \mathbf{n}^{(i)}$ και με τη μορφή πινάκων γράφεται $\{p\}_{\mathbf{n}^{(k)}} = [Q]\{p\}_{\mathbf{e}_k}$, ή για τον αντίστροφο υπολογισμό $\{p\}_{\mathbf{e}_k} = [Q]^T \{p\}_{\mathbf{n}^{(k)}}$.

Να σημειώσουμε ότι $\mathbf{n}^{(i)} = (\mathbf{n}^{(i)} \cdot \mathbf{e}_k)\mathbf{e}_k = Q_{ik}\mathbf{e}_k$. Επομένως οι σχέσεις αυτές μπορεί να γραφούν αναλυτικά ως εξής:

$$\mathbf{n}^{(1)} = \frac{b^2 + c^2}{m_1} \mathbf{e}_1 + \frac{a}{m_3} \mathbf{e}_3,$$

$$\mathbf{n}^{(2)} = -\frac{ab}{m_1} \mathbf{e}_1 + \frac{c}{m_2} \mathbf{e}_2 + \frac{b}{m_3} \mathbf{e}_3,$$

$$\mathbf{n}^{(3)} = -\frac{ac}{m_1} \mathbf{e}_1 - \frac{b}{m_2} \mathbf{e}_2 + \frac{c}{m_3} \mathbf{e}_3.$$

Συνοπώς, ο πίνακας των συνημίτονων κατεύθυνσης είναι

$$[Q] = \begin{bmatrix} \{\mathbf{e}_1\}_{\mathbf{n}^{(k)}} & \{\mathbf{e}_2\}_{\mathbf{n}^{(k)}} & \{\mathbf{e}_3\}_{\mathbf{n}^{(k)}} \\ 3 \times 3 & 3 \times 1 & 3 \times 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left[\mathbf{n}^{(1)} \right]_{\mathbf{e}_k} \\ \left[\mathbf{n}^{(2)} \right]_{\mathbf{e}_k} \\ \left[\mathbf{n}^{(3)} \right]_{\mathbf{e}_k} \\ 1 \times 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{b^2 + c^2}{m_1} & 0 & \frac{a}{m_3} \\ -\frac{ab}{m_1} & \frac{c}{m_2} & \frac{b}{m_3} \\ -\frac{ac}{m_1} & -\frac{b}{m_2} & \frac{c}{m_3} \end{bmatrix}.$$

3.3. Latent Σκλήρυνση

Οι διατμητικές τάσεις Schmid είναι αυτές που είναι υπεύθυνες για την κινούσα δύναμη της ολίσθησης σε ένα καλά ορισμένο σύστημα ολίσθησης. Η Kuhlmann-Wilsdorf (1989)[6] επισημαίνει ότι η τάση διαρροής από μόνη της δεν μπορεί να αντιπροσωπεύει το μέγεθος της εργοσκλήρυνσης σε πολλαπλή ολίσθηση. Τονίζει ότι το μέγεθος της εργοσκλήρυνσης συσχετίζει την αύξηση στη τάση διαρροής με την αύξηση στην παραμόρφωση, όπου το τελευταίο έχει ως αποτέλεσμα την κίνηση των γραμμοαταξιών. Συνεπώς, προϋπάρχουσες γραμμοαταξιακές δομές μπορεί να οδηγήσουν σε ρυθμούς σκλήρυνσης που είναι τόσο υψηλοί ώστε να είναι λάθος να θεωρηθούν ελαστικοί.

Απ' ευθείας μετρήσεις της εξέλιξης των μοντέλων σκλήρυνσης κατά τη διάρκεια της πλαστικής παραμόρφωσης είναι πολύ δύσκολες, εάν όχι ανέφικτες, λόγω των περιορισμών για την ταυτόχρονη μέτρηση απειροελάχιστων τιμών τάσεων και παραμορφώσεων σε διαφορετικά συστήματα ολίσθησης. Αντί αυτού, έμμεσες μετρήσεις συνηθίζονται για να εξαγουμε συμπεράσματα για τους ρυθμούς σκλήρυνσης σε διαφορετικά συστήματα που βασίζονται σε ενδεχόμενες παραδοχές για απλή ολίσθηση σε συγκεκριμένα συστήματα για παραμόρφωση και σε μια απλή εξάρτηση της σκλήρυνσης με το ιστορικό της τάσης. Για παράδειγμα, σε latent hardening πειράματα πρώτα ενεργοποιείται το σύστημα ολίσθησης με τη μεγαλύτερη τάση (primary test). Έπειτα, σε ένα επιτυχημένο δευτερεύον (secondary) πείραμα, το προηγούμενο latent σύστημα ενεργοποιείται, και το ποσό της latent σκλήρυνσης στο πρωταρχικό πείραμα υπολογίζεται από το φαινόμενο αρχικό όριο διαρροής στο δευτερεύον πείραμα, όπως μετρήθηκε βασισμένο σε ένα αποτύπωμα της τάσης ή με τη χρήση μιας προέκτασης. Αυτή η διαδικασία που εμπεριέχει την ενεργοποίηση του προηγούμενου latent συστήματος, οδηγεί σε μία εκτίμηση της σκληρότητας στο τέλος του πρωταρχικού πειράματος που τυπικά εξαρτάται από το μέγεθος της ολίσθησης στο δευτερεύον πείραμα και όπως επίσης από την παραδοχή της απλής ολίσθησης στο πρωταρχικό πείραμα.^[9]

Σε ένα άλλο παράδειγμα, όπου ένας μονοκρυσταλλος φορτίζεται μονοαξονικά, καθώς η ολίσθηση προχωράει το κρυσταλλικό πλέγμα περιστρέφεται σε σχέση με τον άξονα φόρτισης. Η τάση του άξονα φόρτισης να υπερβαίνει τις συνοριακές συμμετρίες των στερεογραφικών τριγώνων, αντί να σταματάει εκεί, όπως είχε προβλεφθεί από τους Taylor & Elam (1925)^[9], θεωρείται ένα μέτρο μέτρησης της ανισοτροπίας σκλήρυνσης μεταξύ των διάφορων συστημάτων ολίσθησης. Να σημειωθεί ξανά ότι αυτή η έμμεση μέτρησης της latent σκλήρυνσης υποθέτει απλή ολίσθηση.

Μία ακριβής ερμηνεία αυτών των έμμεσων μετρήσεων είναι δύσκολη. Ωστόσο, έχουν προταθεί απλές περιγραφές της σκλήρυνσης, οι οποίες είναι συνεπείς με μερικές από αυτές τις παρατηρήσεις, όπως π.χ. το ότι η σκλήρυνση του προηγούμενου latent συστήματος μετά από κάποια ολίσθηση σε αυτό το σύστημα στο δευτερεύον πείραμα είναι περίπου 1-1.6 φορές η σκλήρυνση στο πρωταρχικό σύστημα και ότι ο ενεργός ρυθμός σκλήρυνσης είναι της ίδιας τάξης μεγέθους ανεξάρτητα από το ιστορικό της παραμόρφωσης. Παρ' όλα αυτά, μέσα στο πλαίσιο της ανεξάρτητης από το χρόνο πλαστικότητας, οι καταστατικές εξισώσεις που βασίζονται στις περιγραφές απλής σκλήρυνσης δεν οδηγούν σε μια μοναδική περιγραφή του συνόλου των ενεργών συστημάτων ολίσθησης όπως σημειώνεται από τους by Hill (1966) [8], Hill and Rice (1972) ^[9], and Asaro (1983) ^[5].

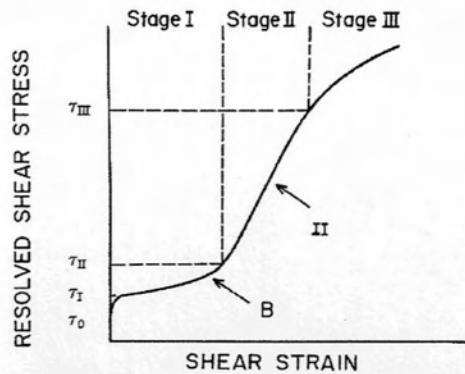
Ψάχνοντας για μια περιγραφή της σκλήρυνσης που να είναι συνεπής με αυτές τις γνωστές παρατηρούμενες φυσικές συμπεριφορές, μια προσεκτική εξέταση των προηγούμενων πειραμάτων λήφθηκε και πολλές σημαντικές παρατηρήσεις μπορεί να γίνουν. Για παράδειγμα, (α) η ενεργοποίηση ενός δεύτερου συστήματος ολίσθησης κατά το στάδιο II παραμόρφωσης πριν η υπέρβαση να είναι ασυνεπής με την έννοια μια μεγαλύτερης latent σκλήρυνσης κατά την απλή ολίσθηση για τους περισσότερους προσανατολισμούς του κρυστάλλου. (β) η ανισοτροπία σκλήρυνσης όπως καθορίστηκε από το πείραμα υπέρβα-

σης είναι βασισμένη στην παραδοχή της απλής ολίσθησης, ενώ πειράματα δείχνουν ότι ένα αρκετά μεγάλο ποσό της δευτερεύουσας ολίσθησης συμβαίνει πολύ πριν την υπέρβαση, και ότι η τροχιά περιστροφής είναι ασυνεπής με την υπόθεση της απλής ολίσθησης. (γ) οι υπολογισμοί του αρχικού ορίου διαρροής βασισμένοι στην προέκταση πίσω στη δευτερεύουσα δοκιμή του πειράματος latent σκλήρυνσης αγνοούν τις λεπτομέρειες της αρχικής σκλήρυνσης. Συνεπώς η υψηλή ενεργοποίηση σκλήρυνσης που προκλήθηκε από αλληλεπιδράσεις της ολίσθησης στη δεύτερη δοκιμή, συχνά μπερδεύεται με την latent σκλήρυνση κατά την πρωταρχική δοκιμή. Αυτές οι παρατηρήσεις φαίνεται να έχουν συμπαντικές επιπτώσεις στην επιλογή κατάλληλων περιγραφών για την στιγμιαία σκλήρυνση για όλα τα συστήματα ολίσθησης.

Φαίνεται ότι η ενισχυμένη σκλήρυνση που απορρέει από τις δευτερογενείς ολισθήσεις κατά το στάδιο II της παραμόρφωσης (π.χ. δάσος αταξιών) καθώς επίσης και η ενεργοποίηση των δευτερογενών ολισθήσεων προτού ο άξονας φόρτισης φτάσει στο σύνορο συμμετρίας δηλώνουν ότι η σκλήρυνση ενός ενεργού (primary) συστήματος είναι μεγαλύτερη από αυτή ενός αδρανούς (latent) συστήματος. Επιπλέον φαίνεται ότι η αρχική ταχεία σκλήρυνση που συνδέεται με την ενεργοποίηση ενός προηγούμενου αδρανούς (latent) συστήματος προκλήθηκε από αλληλεπίδραση ολίσθησης και για αυτό το λόγο μπορεί να ερμηνευτεί ως ενεργή σκλήρυνση (εργοσκλήρυνση).

Εάν χρησιμοποιηθεί η μέθοδος της προέκτασης προς τα πίσω, το αρχικό όριο διαρροής στο προηγούμενο αδρανές (latent) σύστημα υπολογίζεται να είναι μεγαλύτερο από ότι η τάση ροής στο αρχικό σύστημα. Σε αυτή την περίπτωση ακολουθούν οι παραδοσιακές απόψεις, δηλαδή ότι η latent σκλήρυνση είναι μεγαλύτερη από την εργοσκλήρυνση και ότι ο ρυθμός εργοσκλήρυνσης είναι σταθερός. Παρ' όλα αυτά, όταν το όριο διαρροής υπολογίζεται από την πρώτη πτώση στο συνολικό (μονοαξονικό) ρυθμό σκλήρυνσης (κλίση της καμπύλης τάσης-παραμόρφωσης) από το μέτρο ελαστικότητας, προκύπτει ότι (α) η latent σκλήρυνση είναι στην πραγματικότητα μικρότερη από την εργοσκλήρυνση στην πρωταρχική δοκιμή και (β) ο υψηλός ρυθμός εργοσκλήρυνσης στη δευτερεύουσα δοκιμή (που προκλήθηκε από αλληλεπίδραση ολίσθησης) ακαριαία προκαλεί την ροή τάσης στο δευτερεύον σύστημα να ξεπεράσει αυτή του πρωταρχικού και να κορεστεί μετά από μια μικρή πλαστική παραμόρφωση.^[5]

Οι Rosi (1954) και Garstone *et al.* (1956)^[6] παρατήρησαν ότι το $\tau_{II} - \tau_I$ είναι σχεδόν σταθερό για όλους τους προσανατολισμούς που υφίστανται απλή ολίσθηση, ενώ ο ρυθμός σκλήρυνσης $\Theta_I = (d\tau/d\gamma)_I$ είναι συνήθως μία τάξη μεγέθους μικρότερος από το Θ_{II} . Παρόλο που η γραμμική τ-γ συμπεριφορά και στα δύο στάδια I και II δηλώνει ένα σταθερό ρυθμό εργοσκλήρυνσης, η πιθανότητα για δευτερογενή ολίσθηση στο στάδιο II δηλώνει μία πιο περίπλοκη σκλήρυνση για τα επιμέρους συστήματα. Σε αυτά τα πειράματα, ο Θ_I παρατηρήθηκε να ποικίλει ανάλογα με τον προσανατολισμό κατά σχεδόν μία τάξη μεγέθους, ενώ ο Θ_{II} κυμαίνεται περισσότερο από ένα συντελεστή 2.



Σχήμα 3-3. Τυπική καμπύλη τ-γ ενός FCC μονοκρυστάλλου που φορτίζεται μονοαξονικά σε ένα αρχικό προσανατολισμό για απλή ολίσθηση. Το σημείο B δηλώνει εκεί που ξεκινάει η δευτερογενής ολίσθηση και το II δηλώνει μια περιοχή στο στάδιο II της παραμόρφωσης.

Οι καταστατικές εξισώσεις εκφράζονται σε συμφωνία με ένα καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων που συμπίπτει με το κρυσταλλικό πλέγμα. Οι πολύπλοκες κινηματικές που συνδέονται με την παραγωγή αταξιών και την κίνησή τους θεωρούνται πιο πολύ σαν συνεχείς κρυσταλλογραφικές διατμήσεις ή ολισθήσεις σε κάθε σύστημα, παρά σαν πυκνότητα των αταξιών, που χρησιμοποιείται για να συσχετίσει την εξέλιξη της σκλήρυνσης. Η μοναδική κινούσα δύναμη για ολίσθηση είναι η ανηγμένη διατμητική τάση σε κάθε σύστημα ολίσθησης (Schmid stress).

Για να ολοκληρωθεί η καταστατική περιγραφή, ο ρυθμός σκλήρυνσης σε κάθε σύστημα ολίσθησης θεωρείται ότι είναι ένα γραμμικός συνδυασμός των ρυθμών ολίσθησης όλων των συστημάτων, όπου

$$\dot{\tau}_{cr}^{(a)} = \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} .$$

Εδώ το $\dot{\tau}_{cr}^{(a)}$ δηλώνει το ρυθμό σκλήρυνσης στο α-σύστημα ολίσθησης καθώς περιστρέφεται με το κρυσταλλικό πλέγμα. Το στιγμιαίο μέτρο σκλήρυνσης $h_{\alpha\beta}$, αντικατοπτρίζει, για παράδειγμα την (ελαστική) αλληλεπίδραση μεταξύ των αταξιών στο α-σύστημα ολίσθησης και στην κίνηση των αταξιών στο β- σύστημα ολίσθησης. Για μεμονωμένες γραμμοαταξίες αυτές οι αλληλεπιδράσεις μπορεί να αναλυθούν από την άποψη ενός ελαστικού πεδίου τάσεων όπου μία δοθείσα γραμμοαταξία ασκεί δυνάμεις σε μία άλλη.^[11]

Για παράδειγμα, μία ολίσθηση σε ένα σύστημα ολίσθησης α προκαλεί μία αύξηση στην τάση ροής $h_{\alpha\alpha}$ (εργοσκλήρυνση) στο σύστημα α και μία αύξηση στην τάση ροής $h_{\beta\alpha}$ (latent σκλήρυνση) στο σύστημα ολίσθησης β.

Η πρόωρη ενεργοποίηση δευτερογενών ολισθήσεων κατά το στάδιο II της παραμόρφωσης, το οποίο συμβαίνει όταν ο άξονας φόρτισης παραμένει ακόμα μέσα στο στερεογραφικό τρίγωνο, υποδεικνύει ότι η αρχική ροή τάσης στο δευτερεύον (πρώην latent) σύστημα είναι στην πραγματικότητα μικρότερη από την τάση ροής στο αρχικό σύστημα. Αυτό σημαίνει ότι η σκλήρυνση ενός latent ή αληθινά αδρανούς συστήματος είναι ασθενέστερη από αυτή ενός ενεργού συστήματος. Επιπλέον ταχεία σκλήρυνση στο στάδιο II υποδεικνύει ότι ο ρυθμός εργοσκλήρυνσης εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το ιστορικό παραμόρφωσης σε όλα τα συστήματα ολίσθησης.

Αυτοί οι περιορισμοί (α) δείχνουν τη σημασία των αλληλεπιδράσεων των αταξιών και την εξάρτηση από το ιστορικό της παραμόρφωσης στη διαμόρφωση της συμπεριφοράς σκλήρυνσης, ειδικά στα στάδια I και II, (β) διευκολύνουν την ερμηνεία του πειράματος la-

latent σκλήρυνσης και (γ) παρέχουν τη βάση για μια αναλυτική περιγραφή του στιγμιαίου μέτρου σκλήρυνσης.^[11]

Συνοπτικά, μια περιγραφή της σκλήρυνσης σε ένα μονοκρυστάλλο (τουλάχιστον για FCC κρυστάλλους) θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει τις πιο κάτω φυσικές παρατηρήσεις.

- (α) Η συνολική σκλήρυνση σε ένα latent, δευτερεύον σύστημα είναι μικρότερη από τη συνολική εργοσκλήρυνση στο πρωταρχικό σύστημα, τουλάχιστον πριν την ενεργοποίηση των δευτερευουσών ολισθήσεων.
- (β) Η αλληλεπίδραση των ολισθήσεων σε διαφορετικά συστήματα έχει μεγαλύτερη επίδραση στην εργοσκλήρυνση από ότι η ολίσθηση από το ίδιο σύστημα.
- (γ) Η ενεργοποίηση ενός νέου συστήματος ολίσθησης προκαλεί μεγαλύτερη αύξηση του ρυθμού σκλήρυνσης σε συστήματα με χαμηλή ένταση ολίσθησης από ότι σε συστήματα με υψηλή ένταση ολίσθησης.

Ο συμβατικός τρόπος για τον υπολογισμό του ορίου διαρροής ενός δευτερεύοντος συστήματος τ_s είναι να γίνει η προέκταση από τη γραμμική πλαστική περιοχή πίσω σε μηδενική παραμόρφωση. Αυτός ο ορισμός της τ_s είναι ασαφής όσον αφορά τον καθορισμό του μέτρου latent σκλήρυνσης επειδή η αρχική ταχεία σκλήρυνση ή περιοχή μετάβασης, η οποία περιέχει ένα πεπερασμένο ποσό δευτερεύουσας ολίσθησης Y_s δεν λαμβάνεται υπόψη.

Με βάση αυτές τις παρατηρήσεις έχουν δημιουργηθεί κάποιοι περιορισμοί μεταβλητότητας για το στιγμιαίο μέτρο σκλήρυνσης $h_{\alpha\beta}$. Πρώτον για να προβλεφθεί μία δευτερογενής ολίσθηση πριν ο άξονας φόρτισης ξεπεράσει το σύνορο συμμετρίας των στερεογραφικών τριγώνων, τα μη διαγώνια στοιχεία του $h_{\alpha\beta}$ (οι όροι που χαρακτηρίζουν την latent σκλήρυνση) πρέπει να έχουν μικρότερη τιμή από τα στοιχεία της διαγωνίου (εργοσκλήρυνση) τουλάχιστον κατά το στάδιο I της παραμόρφωσης. Δεύτερον, το μέτρο της σκλήρυνσης θα πρέπει να ποικίλει τουλάχιστον όσο ο συνολικός ρυθμός σκλήρυνσης, ο οποίος για τη μετάβαση από το στάδιο I στο στάδιο II εμποδίζει μία μονότονη μείωση στο $h_{\alpha\alpha}$ με την αύξηση της αρχικής ολίσθησης. Καθώς ένα νέο σύστημα γίνεται ενεργό, ο ρυθμός σκλήρυνσης σε κάθε σύστημα τείνει να αυξηθεί κατά ένα μέγεθος το οποίο εξαρτάται από το είδος των γραμμοαταξιών και των εμποδίων που δημιουργούνται με τα άλλα συστήματα. Παρ' όλα αυτά το καινούργιο σύστημα θα τείνει να σκληρύνει γρηγορότερα από τα άλλα, καθώς το υπάρχον δάσος αταξιών ξεπερνάει τα νεοσύστατα συστήματα. Η πρώτη μεταβλητότητα μπορεί να εξασφαλίσει ένα μοναδικό προσδιορισμό του συνόλου των ενεργών ολισθήσεων, στο χρονικά ανεξάρτητο πλαίσιο, για έναν αυθαίρετο ρυθμό τάσης ή παραμόρφωσης που επιβάλλεται στον κρύσταλλο. Τέλος η δεύτερη μεταβλητότητα ξεκάθαρα προσδιορίζει ότι η υψηλή σκλήρυνση που προκαλείται από την αλληλεπίδραση των ολισθήσεων θα πρέπει να ερμηνευτεί ως εργοσκλήρυνση.^[11]

3.4. Πολλαπλή Ολίσθηση

Με τη χρήση του ABAQUS και μίας κατάλληλης υπορουτίνας umat για τον υπολογισμό της πολλαπλής ολίσθησης προέκυψε η καμπύλη σ - ϵ . Στο Σχήμα 3-4 παρουσιάζονται συγκριτικά οι καμπύλες με την αναλυτική λύση, με απλή ολίσθηση και με πολλαπλή ολίσθηση. Παρατηρούμε ότι με την πολλαπλή ολίσθηση η τάση αυξάνεται πολύ πιο γρήγορα με την παραμόρφωση σε σχέση με την απλή ολίσθηση.

Στους υπολογισμούς χρησιμοποιούμε τα εξής $h_{\alpha\beta}$ (Bassani and Wu^[9])

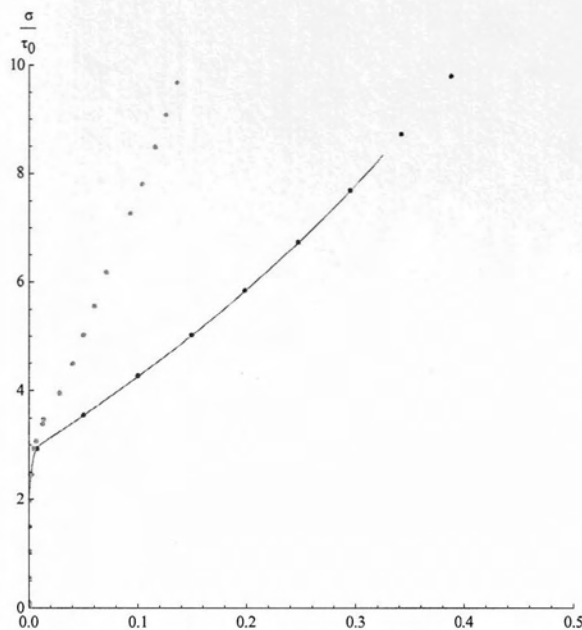
$$h^{\alpha\beta} = \begin{cases} F(\gamma^\alpha)G(\gamma^\delta) & (\delta=1,\dots,N, \delta \neq \alpha), \quad \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta, \end{cases}$$

με

$$F(\gamma^\alpha) = (h_0 - h_s) \operatorname{sech} \left[\frac{(h_0 - h_s) \gamma^\alpha}{\tau_l - \tau_0} \right] + h_s,$$

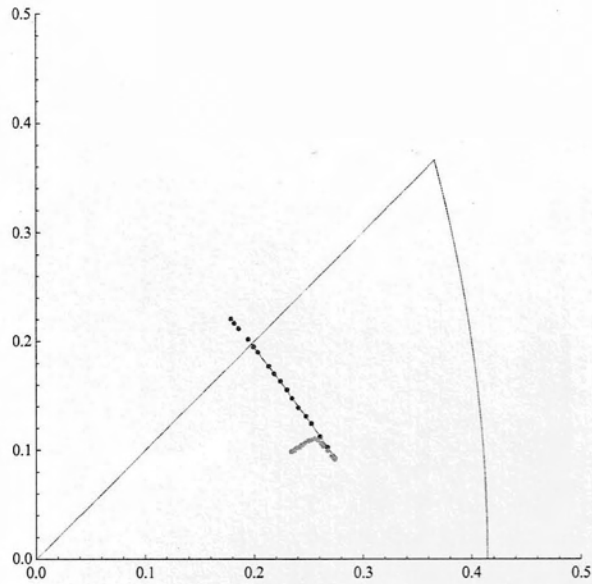
$$G(\{\gamma^\delta, \delta=1 \dots N, \delta \neq \alpha\}) = 1 + \sum_{\delta \neq \alpha} f_{\alpha\delta} \tanh \frac{\gamma^\delta}{\gamma_0},$$

όπου $\frac{\tau_l}{\tau_0} = 1.41$, $\frac{h_0}{\tau_0} = 58.82$, $\frac{h_s}{\tau_0} = 3.06$, $\gamma_0 = 0.001$ και οι σταθερές αλληλεπίδρασης $f_{\alpha\delta}$ ορίζονται στον Πίνακα 2 (σελ. 32 και 34) των Bassani and Wu ^[9].



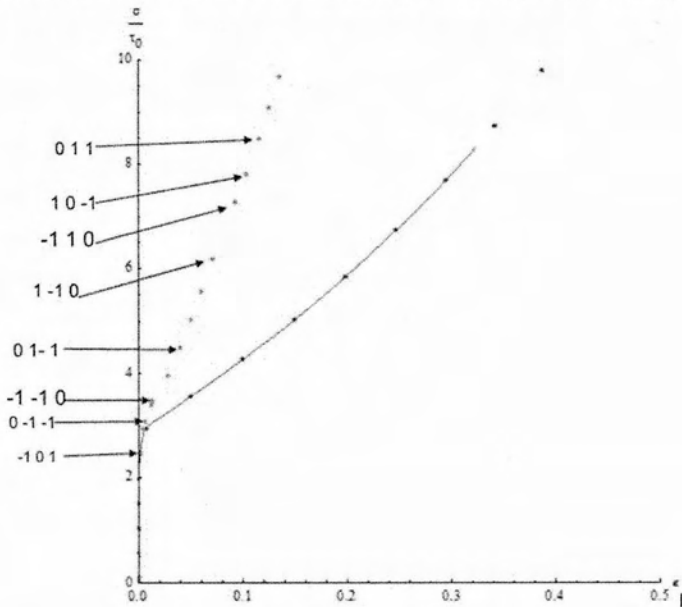
Σχήμα 3-4. Διάγραμμα σ-ε. Η μπλε γραμμή απεικονίζει την αναλυτική λύση της απλής ολίσθησης, τα κόκκινα σημεία απεικονίζουν την απλή ολίσθηση με χρήση πεπερασμένων σημείων και τα πράσινα σημεία την πολλαπλή ολίσθηση με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων.

Η πορεία της διεύθυνσης ολίσθησης στο βασικό τρίγωνο παρουσιάζεται στο Σχήμα 3-5, όπου γίνεται και μία σύγκριση με την αντίστοιχη πορεία με την αναλυτική λύση και με τη λύση των πεπερασμένων στοιχείων για την απλή ολίσθηση.



Σχήμα 3-5. Πορεία διεύθυνσης ολίσθησης. Η μπλε γραμμή απεικονίζει την αναλυτική λύση της απλής ολίσθησης, τα κόκκινα σημεία απεικονίζουν την απλή ολίσθηση με χρήση πεπερασμένων σημείων και τα πράσινα σημεία την πολλαπλή ολίσθηση με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων.

Τέλος παρουσιάζεται στο διάγραμμα σ - ϵ πολλαπλής ολίσθησης (Σχήμα 3-6) ποιο σύστημα ολίσθησης ενεργοποιείται κάθε φορά καθώς προχωράει η παραμόρφωση.



Σχήμα 3-6. Η μπλε γραμμή απεικονίζει την αναλυτική λύση της απλής ολίσθησης, τα κόκκινα σημεία απεικονίζουν την απλή ολίσθηση με χρήση πεπερασμένων σημείων και τα πράσινα σημεία την πολλαπλή ολίσθηση με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων.

Βιβλιογραφία

- [1] Αράβας Ν. (2005), Καρτεσιανοί Τανυστές, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Θεσσαλίας.
- [2] Καλογεροπούλου Σ., Κρυσταλλικές Δομές. Διαθέσιμο στο δικτυακό τόπο <http://ikaros.teipir.gr/kalogeropoulou/chapter2.pdf>
- [3] Χαϊδεμενόπουλος Γ. (2007), Φυσική Μεταλλουργία, Εκδόσεις Τζιόλα.
- [4] Στοιχεία Κρυσταλλογραφίας. Διαθέσιμο στο δικτυακό τόπο <http://courseware.mech.ntua.gr/ml26012/mathimata/krystallografia.pdf>

- [5] Asaro, R.J. (1983), "Micromechanics of crystals and polycrystals", *Advances in Applied Mechanics*, vol. 23, pp. 1-115.
- [6] Asaro, R.J. and Lubarda, V. (2006), *Mechanics of Solids and Materials*, Cambridge University Press.
- [7] Asaro, R.J. and Rice, J.R. (1977), "Strain localization in ductile single crystals", *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 25, pp. 309-338.
- [8] Bassani, J.L. (1994), "Plastic flow of crystals", *Advances in Applied Mechanics*, vol. 30, pp. 191-258.
- [9] Bassani, J.L. and Wu, T-Y. (1991), "Latent hardening in single crystals II. Analytical characterization and predictions", *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, vol. 435, pp. 21-41.
- [10] Bhadeshia, H.K.D.H. (2012-2013), *Crystallography Materials Science and Metallurgy*. Διαθέσιμο στο δικτυακό τόπο <http://www.msm.cam.ac.uk/teaching/partII/courseC6/C6H.pdf>
- [11] Bower, A.F. (2010), *Applied Mechanics of Solids*, CRC Press.
- [12] Garstone, J., Honeycombe, R. W. K., and Greetham, G. (1956), "Easy glide of cubic metal crystals", *Acta metall.*, vol. 4, pp. 485-494.
- [13] Hill, R. (1966), "Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip", *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 14, pp. 95-102.
- [14] Hill, R. and Rice, J.R. (1972), "Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain", *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 20, pp. 401-413.
- [15] Honeycombe, R.W.K. and Bhadeshia, H.K.D.H. (1995,) *Steels: Microstructure and Properties*, 2nd edition, Butterworth-Heinemann.
- [16] Prantl, W. (1988), "A computer program for plotting stereographic projections", *Metallography*, vol. 21, pp. 33-39.
- [17] Rosi, F.D. (1954), "Stress-strain characteristics and slip-band formation in metal crystals: Effects of crystal orientation", *Journal of Metals*, vol. 6, pp. 1009-1020.
- [18] Wu, T-Y., Bassani, J.L., and Laird, C. (1991), "Latent hardening in single crystals I. Theory and experiments", *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, vol. 435, pp. 1-19.





ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ



004000049018