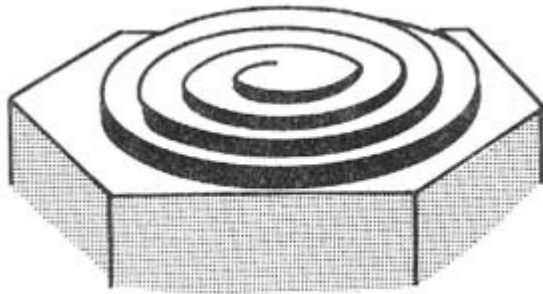


## Cenni sui difetti di linea: Dislocazioni

Le dislocazioni sono una classe molto importante di difetti cristallini. Sono difetti di linea stechiometrici e sono responsabili delle proprietà meccaniche dei solidi come, ad es., la scarsa durezza di alcuni metalli puri, ma anche l'estrema durezza di altri metalli dopo il processo di indurimento. Le dislocazioni giocano un ruolo fondamentale in una varietà di fenomeni di stato solido, come, ad esempio, le transizioni di fase, il meccanismo di crescita dei cristalli (sia da soluzioni che da vapori), le reazioni dei solidi (che spesso avvengono su siti attivi superficiali dove emergono dall'interno del cristallo le dislocazioni). L'esistenza delle dislocazioni fu postulata molto prima di ogni evidenza sperimentale, sulla base di diversi tipi di osservazioni:

**a)** i metalli sono generalmente molto più teneri di quanto previsto. I calcoli, basati sul modello del cristallo perfetto, farebbero prevedere, ad esempio, una resistenza al taglio molto maggiore di quelle reali (circa  $10^4$  volte maggiore). Ciò indica la presenza di qualche tipo di 'legame debole' nelle loro strutture che porta ad una facile scindibilità.



**b)** molti cristalli ben formati mostrano al microscopio ottico o persino a occhio nudo sulle superfici delle spirali che indicano il meccanismo di crescita cristallina (Figura). Tali spirali non dovrebbero essere osservate in un cristallo perfetto.

**c)** le proprietà di malleabilità e duttilità dei metalli sono difficili da spiegare senza invocare

le dislocazioni. Così, ad esempio, nastri di magnesio metallico possono essere stirati fino a raggiungere una lunghezza diverse volte maggiore di quella originale, senza rottura.

**d)** il processo di indurimento dei metalli non si spiega facilmente senza invocare le dislocazioni.

La fragilità dei cristalli di buona qualità fu un mistero per molto tempo, soprattutto se confrontata col fatto che cristalli di bassa qualità, contenenti impurezze e difetti, potevano invece presentare maggiore resistenza, vicina ai valori teorici del cristallo perfetto.

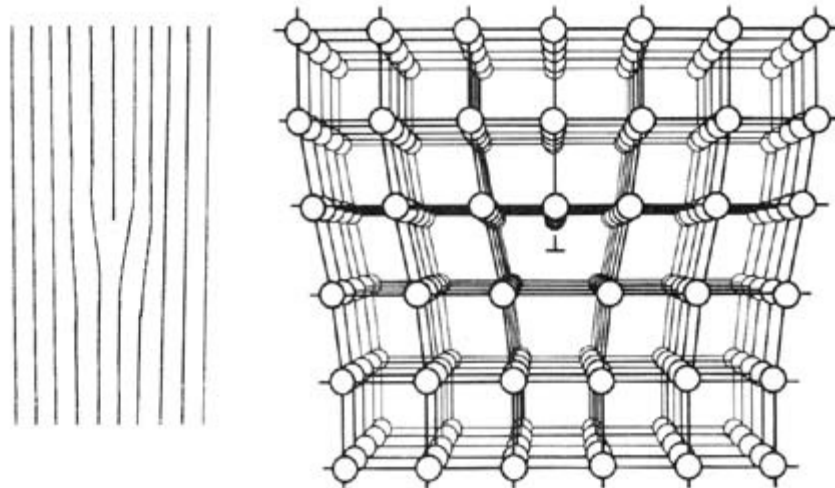
La teoria delle dislocazioni fu proposta da tre ricercatori indipendentemente nel 1934 (G.I. Taylor, E. Orowan, G. Polanyi) per spiegare i numerosi fatti sperimentali. Le dislocazioni però non furono direttamente osservate per almeno altri 10 anni.

Le dislocazioni appartengono a due tipi estremi, dislocazioni di bordo (o di Taylor) e dislocazioni a vite, o possono avere ogni carattere intermedio.

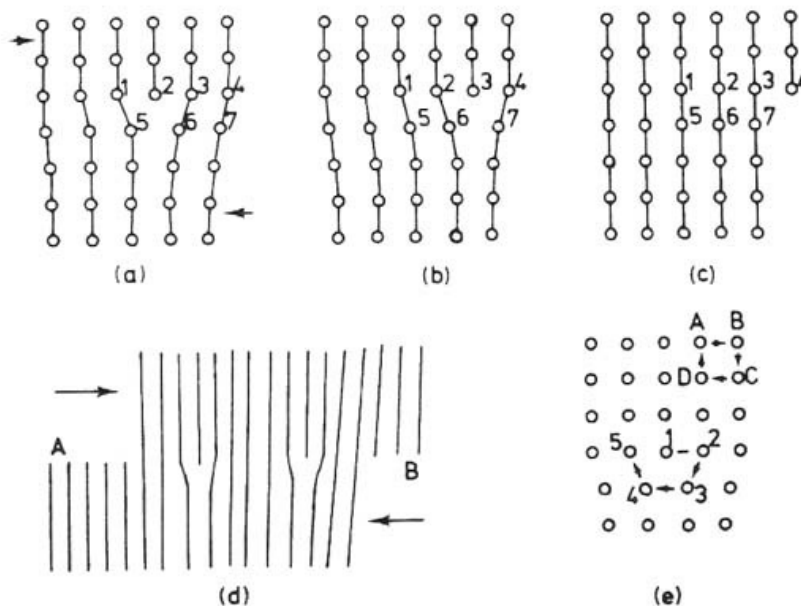
### a) Dislocazioni di bordo (o di Taylor)

Una semplice dislocazione di questo tipo è costituita da un *semipiano addizionale* di atomi (Figura), cioè un piano di atomi che non si estende sull'intero cristallo. I piani di atomi nella struttura sono mostrati in proiezione come delle linee. Queste linee sono parallele salvo che nella regione in cui termina il semipiano aggiuntivo.

Il centro della regione distorta è una linea che attraversa il cristallo, perpendicolarmente al foglio, in corrispondenza della fine del semipiano. Questa è la *linea* della dislocazione, che viene rappresentata con il simbolo a T rovesciata in figura. Al di fuori di questa regione distorta il cristallo è essenzialmente normale. La parte superiore (vedi Figura) deve essere un poco più grande per accomodare il semipiano addizionale.



Per comprendere l'effetto delle dislocazioni sulle proprietà meccaniche dei cristalli consideriamo l'effetto dell'applicazione di uno sforzo su un cristallo che possiede una dislocazione di bordo (vedi Figura sotto). La parte superiore del cristallo è spinta a destra mentre la parte inferiore verso sinistra. Confrontando (a) e (b), il semipiano extra che termina con l'atomo 2 in (a) può effettivamente slittare semplicemente rompendo il legame 3-6 e formando il nuovo legame 2-6 (in realtà sono file di legami nella direzione perpendicolare al foglio). Così, con una minima spesa, il semipiano si è mosso di una unità nella direzione dello sforzo applicato. Se questo processo continua, il semipiano addizionale può arrivare alla superficie del cristallo come in (c). Se ci sono meccanismi che generano semipiani, come vediamo in (d) a sinistra, il processo può continuare fino a sfaldamento completo del cristallo. Per ogni semipiano generato un altro, uguale ed opposto in orientazione e segno, viene lasciato dietro in questa migrazione. Il processo di movimento delle dislocazioni è detto scorrimento (*slip*). La linea AB in (d) rappresenta la proiezione del piano su cui si muove la dislocazione (*slip plane*).



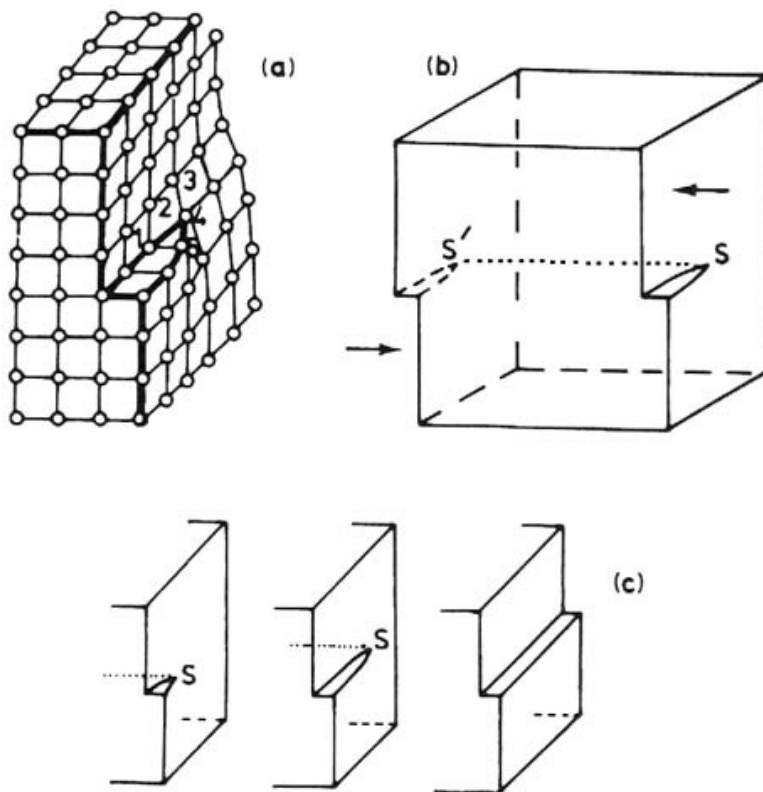
Le dislocazioni sono caratterizzate da un vettore, **b**, detto **vettore di Burgers**. Per trovare il modulo e la direzione di **b** è necessario compiere un circuito immaginario da atomo ad atomo attorno alla dislocazione (e). In regioni normali del cristallo un circuito come

ABCD, con una traslazione unitaria in ogni direzione, rappresenta un giro chiuso, con partenza e ritorno ad A. Invece, il circuito 12345 che passa attorno alla dislocazione non è chiuso perché 1 e 5 non coincidono. Il modulo del vettore di Burgers è dato dalla distanza 1-5 e la sua direzione dalla direzione 1-5 (o 5-1).

Per una dislocazione 'edge', il vettore di Burgers  $\mathbf{b}$  è perpendicolare alla linea di dislocazione e parallelo alla direzione di moto della linea di dislocazione.

## b) Dislocazioni a vite

La dislocazione a vite è più difficile da visualizzare (vedi Figura sotto). In (b), la linea SS' rappresenta la linea della dislocazione. Davanti a questa linea il cristallo ha subito subito scorrimento, mentre dietro la linea questo non è avvenuto.

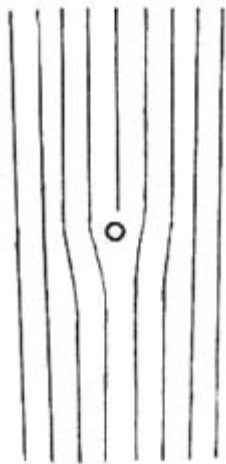


L'effetto dell'applicazione continua di uno sforzo di taglio indicato dalle frecce in (b) è tale che il gradino di slittamento si estende gradualmente sull'intera faccia laterale del cristallo, mano a mano che la linea SS' si muove verso la faccia posteriore (c). Per trovare il vettore di Burgers, consideriamo il circuito 12345(a), che passa attorno alla dislocazione. Il modulo e la direzione del contatto 1-5 sono quelli del vettore  $\mathbf{b}$ . Per una dislocazione 'screw', il vettore di Burgers è parallelo alla linea della dislocazione (SS') e perpendicolare alla direzione del moto di questa linea. Questo è l'opposto di ciò che vale per l'altro tipo di dislocazione "edge". Si noti che gli atomi 54321 in (a) giacciono su una spirale e questo spiega il termine "screw" per questa dislocazione. Per entrambi i tipi di dislocazione, il vettore di Burgers  $\mathbf{b}$  è parallelo alla direzione di slittamento.

Anche in questo tipo di dislocazione è necessaria la rottura di un piccolo numero di legami atomici affinché la dislocazione possa muoversi.

## Effetti delle dislocazioni

Senza entrare nel merito dei processi complessi che generano le dislocazioni, consideriamo brevemente alcune conseguenze associate al movimento delle dislocazioni stesse. La resistenza meccanica di un metallo puro, col formarsi di dislocazioni, può essere notevolmente indebolita. Ciò è ovviamente un pericolo serio per materiali metallici usati nelle costruzioni. E' difficile infatti accertarne la resistenza a piccoli sforzi protratti su un lungo periodo di tempo. Tali piccole sollecitazioni possono essere infatti sufficienti a generare e muovere dislocazioni solo molto lentamente, ma i risultati sono cumulativi e, generalmente, non reversibili; si può così, senza apparente ragione, verificare una catastrofica rottura.



D'altro canto, come le dislocazioni possono indebolire notevolmente un metallo, così esse possono determinare l'effetto opposto, cioè aumentarne la resistenza e la durezza. Un meccanismo consiste nell'incatenare le dislocazioni a certe impurezze atomiche, come gli atomi interstiziali di carbonio nel Fe. Una dislocazione si muove liberamente fino a che non incontra l'impurezza e viene effettivamente intrappolata e bloccata da questa (Figura).

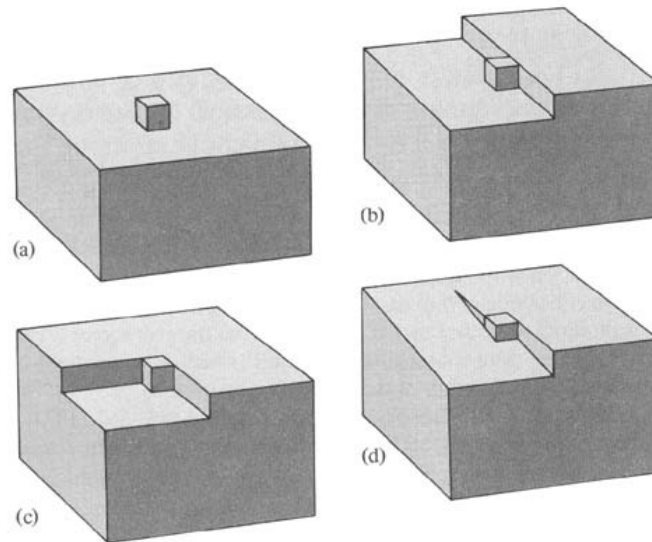
Un processo molto importante per rendere maggiore la resistenza meccanica di un metallo è la lavorazione di indurimento (*work-hardening*). Martellando un metallo si genera un enorme numero di dislocazioni che, in un materiale policristallino, presentano un gran numero di orientazioni. Le dislocazioni iniziano a muoversi nel cristallo ma, prima o poi, si fermano a causa della presenza di difetti di piano esistenti (ad es. i "grains boundaries") oppure perché due dislocazioni che si avvicinano troppo si respingono fino a fermarsi.

Troppe dislocazioni generano un intrappolamento e ciascuna dislocazione non riesce a procedere in avanti e neppure all'indietro. Ciò rafforza notevolmente il metallo (*strain-hardening*). Questi metalli induriti possono essere resi nuovamente malleabili e duttili mediante **annealing** ad alta temperatura. Le alte temperature consentono agli atomi di muoversi e le dislocazioni possono riorganizzarsi o annullarsi.

E' a tutti familiare il fatto che un filo di metallo tenero può essere ripetutamente piegato avanti e indietro e che dopo un po' si rifiuta di farsi piegare e si spezza. Ad ogni piega si creano sempre più dislocazioni che scorrono nel metallo, fino al punto in cui il loro numero è tanto elevato che si impediscono a vicenda il movimento. A questo punto il filo metallico è incapace di ulteriori deformazioni plastiche e si rompe alla sollecitazione successiva.

Anche il problema della crescita dei cristalli (*crystal growth*) è stato risolto invocando l'esistenza di dislocazioni a vite.

Supponiamo di voler far crescere un grande cristallo per esposizione di un piccolo frammento cristallino a vapori della specie. Dal vapore le unità (atomiche, molecolari) condenseranno ai nodi reticolari più facilmente e velocemente se i vicini del sito da occupare si trovano già in posizione. Quindi una nuova unità sarà poca attratta da un piano cristallino perfetto, più attratta da un gradino tra due piani e ancora più attratta da un angolo (Figura sotto).



Se si assume il modello del cristallo perfetto e che la crescita avvenga piano dopo piano, la condensazione deve avvenire sopra un piano perfetto sottostante (a). A causa della debolezza delle interazioni in (a) un tale processo avviene troppo lentamente per accordarsi con le velocità di crescita sperimentali. Risulta più facile un processo di condensazione come in (b) o meglio ancora in (c). Se il cristallo contiene una dislocazione a vite (screw) come in (d), l'aggiunta di unità (come mostrato) consente alla struttura planare locale di crescere a spirale indefinitamente attorno alla dislocazione. I cristalli possono crescere più rapidamente in questo modo perchè la nucleazione di nuovi piani non richiede mai il meccanismo (a).