

Eldonanto: Internacia Scienca Asocio Esperantista (ISAE)

Ĉefredaktoro: RNDr. Josef Kavka, CSc., Lužná 7, CS-160 00 Praha 6 — Vokovice, Ĉeĥoslov. Ĉeĥoslovakio

Redaktoro de la tehnikaj kajeroj: Inĝ. Jan Werner, Krotova 84, CS-616 Brno, Ĉeĥoslovakio

Grafika redaktoro: Brunetto Casini, Edistudio, cas. post. 213, I-56100 Pisa, Italujo

Administranto por la pagipovaj landoj: Brunetto Casini, pĉk 12230561, Edistudio, Italujo

Administranto por la nepagipovaj landoj: Dr. Václav Hník, CSc., Fakulta architektury ČVUT, Thákurova 7 — CS-166 34 Praha 6 — Dejvice, Ĉeĥoslovakio

Kompostis: Composit, via Giordano Bruno 8, I-56100 Pisa, Italujo

Enpaĝigis: Edistudio, c.p. 213, I-56100 Pisa, Italujo

Presis: Massarosa Offset, Lucca, Italujo

Reguloj por la aŭtoroj:

1. Verki laŭeble pri sia propra originala esplorado tiel, ke ĝin komprenu eĉ alifakaj sciencistoj;
2. Sendi al la ĉefredaktoro la tekston en 2 ekzempleroj, klare tajpitaj sur maldika papero;
3. Maŝinskribi normallitere en la tajp-areo de 165 mm × 250 mm, kun la liniado 1¹/₂, t.e. kun 40 linioj surpaĝe;
4. Ĉiun vorton neesperantan substreki ondlinie (por la kursiva komposto), dum rektlinia substreko signifas komposton dikliteran;
5. En la teksto noti lokojn, kie troviĝu eventualaj figuroj;
6. Ne forgesi referenc-liston;
7. Aldoni koncizan resumon en sia gepatra lingvo.

Estraro de ISAE:

Prezidanto: Prof. D-ro Carl Stóp-Bowitz, Camilla Colletts vei 3, N- Oslo 2, Norvegio

Vicprezidantoj: Prof. Sin'itirō Kawamura, 424-7 Kinasyō Huzii, Takamatu, 760, Japanio

Prof. Vasil Peevski D-ro hc., Gogol 9, BG-1504 Sofia, Bulgario

Ĝenerala sekretario: Christian Darbellay, inĝeniero, Jostenallee 45, D-4040 Neuss 1, FRG

Sekretario-kasisto: Prof. Paul E. Kustaanheimo, Danmarks Tekniske Højskole, 040 DIA-E, DK-2800 Lyngby, Danlando

Aliaj estraranoj: S-ro Rüdiger Eichholz, direktoro de TC-ISAE, R.R.I, Bailieboro, Ontario, KOL 1B0, Kanado

D-ro W.A. Verloren Van Themaat, direktoro de IC-ISAE, Volkerakstraat 38^l, NL-1079 XT Amsterdam, Nederlando

D-ro Josef Kavka CSc.

S-ro Bruĉjo Kasini, cas. post. 213, I-56100 Pisa, Italujo

D-ro Václav Hník CSc., Podjavorinské 1609/6, CS-149 00 Praha 4 — Chodov, Ĉeĥoslovakio

D-ro Gerhard Kalckhoff, Schuckertstraße 14/XI, D-8000 München 70, F.R. Germanio

Metal-dilato kaŭze de dislokaĵoj

Rob Vetter (Nederlando)*

1. Volumena fenomeno: utila helpilo

Oni scias nuntempe, ke la fortikeco de metaloj treege dependas (interalie) de speciala tipo de kristalmalperfektaĵoj nomitaj dislokaĵoj. Precipe gravas la totala longeco de dislokaĵaj linioj en volumena unuo, dislokaĵa denseco. Aliflanke, tiuj malperfektaĵoj lasas preskaŭ neniun fizikan grandon netuŝita, kvankam ofte la efiko estas malgranda. Ekz. dislokaĵoj dilatas la kristalan volumenon per ĉ. 1:100.000, kiam ili formiĝis en kvanto, kiu estas normala post dek procentoj da deformado. Ĉar, sciu, dislokaĵoj ankaŭ estiĝas dum plasteca deformado. Por la praktiko estas do sufiĉa la tezo, ke deformado (ekz. plilongigo) lasas la volumenon de objekto nevaria. Sed por ekscii la kvanton da dislokaĵoj, necesan en la studo de fortikeco, la volumena fenomeno estas utila helpilo.

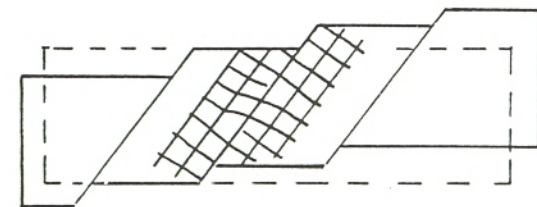


Fig. 1. Plilongiĝo de monokristalo.

* doktoro pri fiziko, Laboratorio por Metalurgio, Tehnologa Universitato de Delft. Rotterdamseweg 137, 2628 AL Delft.

En fig. 1 mi skizis la plilongiĝon de antaŭe perfekta monokristala trabo kun samtempa ekesto de (du) maperfektaĵoj en la tranĉitaj kristalebenoj, kiuj estas desegnitaj kiel kelkaj oblikvaj strekoj. La malperfektaĵo estas ankoraŭfoje pli grande bildigita en fig. 2.

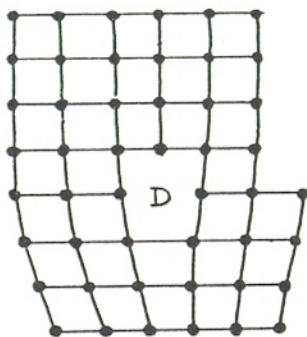


Fig. 2. Randdislokaĵo ĉe D.

Mi prezentis kristalaranĝon per kvadratoj, kun eĝo b , kiuj subiĝis al deformado tiel, ke ĉe D vertikala vico de atomoj finiĝas, kvazaŭ troe. Perpendikle al la papero tiu malperfektaĵo, nomita randdislokaĵo, senfine etendiĝas. Oni emas konkludi el la figuro, ke ĉe D mankas materia volumeno de la grandeco b^3 en la distanco b laŭ la dislokaĵo, do orte al la figuro. Tiaj kavoj evidente dilatatas la volumenon de la trabo.

2. Teorie ne ekzistas dilato!

Sed jam en 1918 *Colonnetti* pruvis, ke internaj piezoj (streĉoj) ne povas rezultigi netan dilaton en la unuagrada elasto-teorio, en kiu piezo estas proporcia kun deformeco. Kaj post-konsidere ankaŭ surbaze de fig. 2 tiu tezo estas akceptebla, se oni pripensas, ke supre de D la fortoj inter la atomoj tendencas kunpremi la kradon proksimume samgrade kiel ili dilatatas ĝin sub D. En 1942 *Zener* tamen montris, ke neta dilato eblas, se oni enkalkulas la ne-

unugradecon, do la dependon de la prem-elasta koeficiento K de la premo p . Tiu K estas la proporcia konstanto en la rilato $p = \Delta V/V$, kie $\Delta V/V$ estas la volumena deformeco aŭ relativa volumenŝanĝo, nomita dilato. *Zener* same kiel *Colonnetti* ankoraŭ ne konsciis pri la ekzisto de dislokaĵoj en metalkristaloj. Tiuj konvinke evidentiĝis nur en la kvindekaj jaroj, precipe pro la elektron-mikroskopaj observoj. Sed *Zener* kalkulis la ekzaktan rilaton inter la energio de internaj deformiĝoj en kristaloj kaj la akompananta dilatiĝo.

3. Fizika bildo

Keyes donis en 1958 klarigan fizikan bildon pri la fenomeno. Lia argumento eliras de la volumena elasta energio, kiu akompanas dislokaĵon, kaj kiu estas proksimume $\frac{1}{2} G b^2$ je unuo da longo, do $\frac{1}{2} G b^3$ je atoma distanco. (G estas la ŝer-elasta koeficiento, kaj b la atoma distanco kiel en fig. 2. Vi eble rekonas ĉi tie la formulon de la volumena elasta energio en risorto, esprimeblan per duono oble elastan koeficienton oble etendon kvadratan). La kristalo nun povas akiri staton de malpli granda energio en sia strebado al minimuma energio, se ĝi iom dilatiĝas: pro la dilato la interatoma distanco pliiĝas kaj la interatomaj fortoj malpliiĝas, kaj do G , kaj sekve $\frac{1}{2} G b^3$. Sed pro la dilato la atomoj forlasis la potencialfundajn poziciojn de ekvilibro en nedeformita kristalo, kaj tio kostas energion. Ambaŭ efikoj samtempe, post trovo de la nova minimumo, haltas.

4. Simpla teoria aproksimo

Grava nocio en la teorio de solidaĵoj estas la *Grüneisen*-konstanto Υ , kiu kunligas la kvanton da dilato $\Delta V/V$ de solida korpo kun la ensorbo de termika energio ΔU en volumena unuo ĉe certa temperatur-intervalo: $\Upsilon = K \Delta V/V / (\Delta U/V)$. Ĉi tie ni denove renkontas la prem-elastan koeficienton K . Ĉar la totala termika energio en solidaĵoj konsistas el samaj kvantoj da kineta energio kaj potenciala energio, la totala energio egalas al la duoblo de la potenciala energio, do de la elasta energio ĉi-okaze. Sin bazante sur la *Grüneisen*-konstanto, *Lomer* elpensis en 1957 simplan, kaj eble iom tro aproksiman version de la formulo de *Zener*. Li hipotezis, ke la supra ekvacio validas ankaŭ, se oni metas $\Delta U/V$ egala al la duoblo de la elasta energio, kiu akompanas dislokaĵon. Post substituo de la supre menciita valoro de $\frac{1}{2} G b^3$ por tiu energio, la ekvacio jenas: $\Delta V/V = \Upsilon (G/K) b^3$. Pro tio, ke por multaj metaloj

la *Grüneisen*-konstanto estas ĉ. 2 kaj la prem-elasta koeficiento K ĝenerale estas proksimume trioble tiom granda kiom la koncerna ŝer-elasta koeficiento G , rezultigās aproksima dilato de $2/3 b^3$ je atoma distanco b .

5. Eskperimentoj

Tiuj teoriaj metodoj estas do utiligataj por kalkuli la dilaton pro dislokaĵoj, kaj oni trovas kontentigan kongruon kun eksperimentaj determinoj. Ĉi-lastaj baziĝas ekz. sur la preciza pesado de specimenoj antaŭ kaj post deformado; pesado en fluidaĵo kun granda specifa maso por prononciĝi la volumenon ŝanĝon, ĉar la pezo restas ja konstanta (v. ekz. *Hordon-Averbach* 1961). Ankaŭ utiliĝas mezurado de la termodilata koeficiento de deformita specimeno, dum paso tra la temperatur-regiono, en kiu la dislokaĵoj emas kolapsi (ĉirkaŭ 500°C). Tiun metodon sekvis ekz. *Saindrenan* k.a. (1973). Parenteze, la termodilata koeficiento mem estas ekzemplo de fizika grando, kiu iomete ŝanĝiĝas sub la influo de dislokaĵoj, kvankam ankoraŭ mankas plena klarigo. V. *Savickij* k.k. (1973). La trovitaj valoroj varias inter 0,4 kaj 2,7 en kvantoj de b^3 je atoma distanco. Sed por ĝuste fiksi la rilaton oni unue devas determini la totalan dislokaĵan longecon, la dislokaĵan densecon.

Do ĉiuj metodoj konverĝas al tiu kvanto b^3 je atom-distanca longo de dislokaĵa linio, same kiel la supra naiva konkludo laŭ fig. 2 (kiu baziĝis sur erara argumento, kiel dirite). Serĉante la dilaton, la teoriaj metodoj ĉirkaŭvojis tra la elasta energio de dislokaĵoj, kaj la eksperimentaj determinoj bezonis antaŭscion de la grando, kiun ni volas ĝuste sendepende akiri. Pli elegante kaj ĝisoste fundamente estus kalkuli la dilaton senpere el la interatomaj fortoj.

6. Atomsimulado per komputoroj

Tion kiel unuaj klopodis fari *Stehle-Seeger* en 1956. Esence ilia rezonado laŭas la sekvan linion: supozu, ke atomoj similas al malmolaj globoj, kiel tablotenisaj pilkoj. Se ebenaĵoj de tiaj atomoj pro internaj deformiĝoj ĉirkaŭ dislokaĵo devas ŝoviĝi unu iom preter la alia, tiam aldone al la ŝova moviĝo ekestas nepre ankaŭ dilata moviĝo; kp. fig. 3. Tiu kalkulo, kvankam primitiva, jam trafis la ĝustan ordon de grandeco. Ekde kelkaj jaroj tamen pli precizaj kalkuloj estas eblaj per komputoraj simuladoj.

Malavantaĝo estas, ke la rezultoj nur validas por la atomspeco elektita. Oni metas fortokampojn, kiuj reprezentas tiujn atomojn per plejble precizaj interatomaj potencialoj, sur la krucpunktojn de ŝemo kiel en fig. 2. Tiu ŝemo estas kalkulita helpe de la unuagrada elasto-teorio, kiu estas strikte valida nur en la okazo de tre malgrandaj atomdelokiĝoj malproksime de la dislokaĵa linio. Do oni povas anticipi, ke tiuj atomoj en la centro de dislokaĵo ne troviĝos en ekvilibraj pozicioj. Pro tio oni kalkulas la rezultajn fortojn,

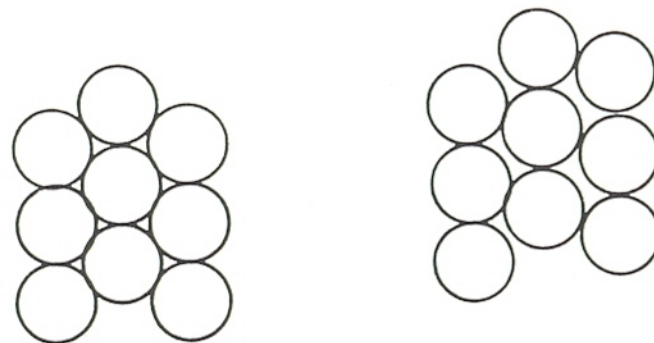


Fig. 3. Vertikala ŝero kaŭzas dilaton horizontale.

per kiuj la ĉirkaŭaj atomoj agas sur la opan atomon en konsidero, kaj oni translokas tiun atomon al pozicio de nula forto. Tio ripetiĝas, ĝis ĉiu atomo atingas kvietan pozicion. Evidente tiu kalkulado estas nur ebla por limigita nombro da atomoj, pro la giganta laboro, kiun tio postulas, eĉ kun moderna komputoro. Tian aron da atomoj oni devas ĉirkaŭbari per cilindroforma tavolo de fiksaĵoj (fig. 4); ĉar se ne, la eksteraj atomoj trovas kvieton nur irante al la infinito, kaj la tuta simula specimeno kvazaŭ disvaporigus. La dilataj moviĝoj de la centraj atomoj nun kaŭzas elcentran forton sur la fiksa vando.

7. Premo-koncepto

Tiun meznombran forton sur unuo de vand-areo laŭ propono de *Baskes* ni konsideris kiel ortan piezon aŭ premon (*Vetter-Fastenau-Baskes* 1981). Eble ŝajnas al vi nekredeble, ke la cirkle tre malsimetria deformiĝo-kampo ĉirkaŭ randedislokaĵo (fig. 2) kun sia prema zono super D kaj sia malprema zono sub D estas karakterizebla per unu meznombra premo. Al tio mi devas rimarkigi, ke la ideo estas ne tiel neverŝajna, ĉar *Woo* kaj *Puls* (1977) kalkulis atom-delokiĝojn ĉirkaŭ la centro de randedislokaĵo kaj trovis elcentre direktitajn movetojn same en la prema kiel en la malprema regiono (fig. 5).

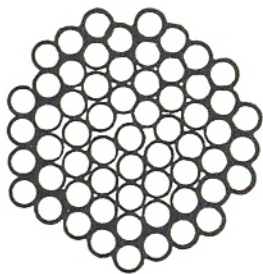


Fig. 4. Simula dislokaĵo, ŝeme.

Nu, tiamaniere kalkulante cilindrosimilajn specimenojn el molibdeno por kelkaj radiusoj, ni trovis la premon kiel funkcion de la radiuso. Principe ni devus nun vastigi la radiuson ĝis makroskalaj dimensioj tiel, ke permeseble ni povus interŝanĝi la fiksan vandon de diskretaj atomoj per kontinua unuagrada elasta medio. Sed la kostoj preventas tion: la plej granda el niaj 3 specimenoj entenas ĉ. 150 atomojn, do estas ankoraŭ atomskala. Por eviti tiun malhelpon ni prove kompletigas la simuladon per kontinuaĵa modelkalkulo.

La centron de la dislokaĵo ni imagas kiel kontinuaĵan cilindron de modifitaj elastaj ecoj, kiu estas ŝtopita en tro malgrandan cilindran truon en kontinuaĵa medio de normalaj elastaj ecoj (fig. 6).

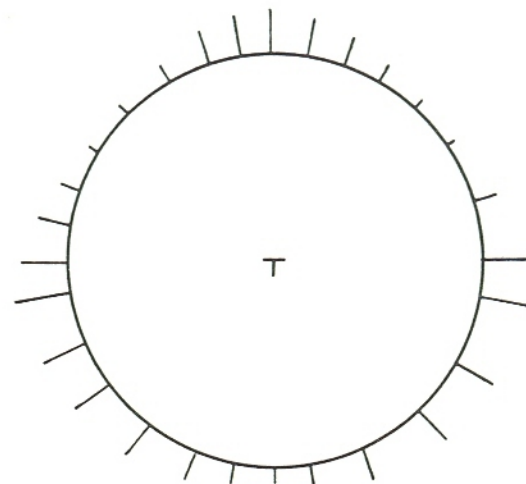


Fig. 5. Atomaj moviĝoj apud centro de dislokaĵo.

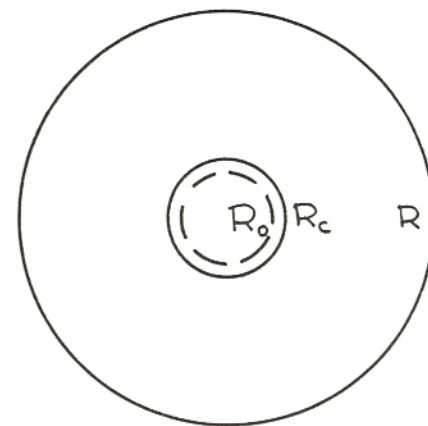


Fig. 6. Ŝtopilo de radiuso R_c en tro malvasta truo, R_o .

La premon, kiun kaŭzas tio sur fiksa vando je R , ni identigas kun la premo trovita en la simulado. Ĉi tiu modelo antaŭdiras premon p , kiu dependas de la radiuso R kiel $1/p = C_1 + C_2 R^2$, kie C_1 kaj C_2 estas konstantoj entenantaj la elastajn ecojn de la kontinuaĵo kaj la volumenan eksceson de la centro. Tiu ekvacio signifas, ke grafikaĵo de $1/p$ kontraŭ R^2 formas rekton. Kaj efektive la valoroj akiritaj en la perkompatora simulado bone akordiĝas kun rekto kiel montras fig. 7.

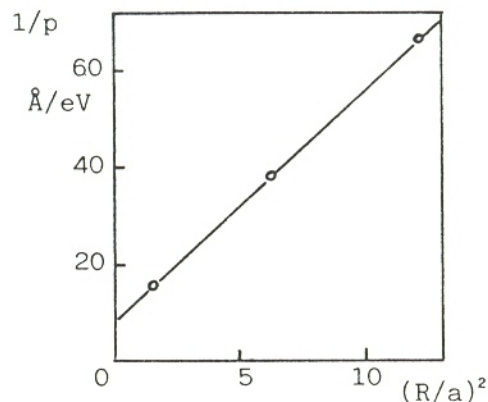


Fig. 7. Inversa premo p kiel funkcio de la kvadrata cilindra radiuso R (a = atomkrada kub-eĝo)

Ni do kuraĝas sen plua komputado eksterpoli la simulaĵan premon de la atoma cilindro al makroskalaj radiusoj, por kiuj certe validas la klasika elastroteorio.

8. Konkludoj

Do nur restis la problemo, kiel kalkuli la dilaton de elasta cilindro de donita radiuso, post relaksado de donita orta piezo. Tiamaniere ni trovis $\Delta V/V = 0,45 b^3$ laŭ atomdistanca longo de nia dislokaĵo en molibdeno. Tiu

valoro bone kongruas kun studoj de aliaj esploristoj, kaj ebligas konfidon al ĉi tiu metodo. Nia rezulto evidente estas nura ĉenero en la pli grava disvolviĝo, kies historiajn radikojn mi klopodis skizi. Fakte, ni staras je la komenco de esplora spuro. Ni estus kontentaj, se ni konus $\Delta V/V$ kun precizeco de 10%, kaj eble mirigos vin, ke ni eĉ ne kuraĝas aserti, kiom akurata tiu nombro 0,45 estas. La kialo estas, ke ni ne povas taksi la sisteman eraron, kiu dependas de la uzitaj atompotencialoj. Restas ankoraŭ sufiĉe da laboro por la estonto.

9. Glosaro

dislokaĵo: Kristalkrada deformiĝo, konsistanta en tio, ke la atomaj ligoj en iu internstruktura ebena estas tranĉitaj, ke laŭ tiu ebena okazas elementa translacia moviĝo de la respektivaj aloj kaj ke la atomaj ligoj estas plejparte refiksitaj.

De: Versetzung, En: dislocation, Fr: dislocation, Ru: dislokacia. (Rim. de la ĉefredaktoro: En Esperanto oni tamen konsideru ke dislokimeti en disajn lokojn; do ankaŭ la normal poziciaj jonoj de la kristalkrado estas "dislokitaĵ"! Por la malperfektatoj super priskribitaj eble sufiĉus la termino "struktur-difekto").

piezo: Fizika kvanto kun la dimensio forto je unuo de areo. Pli ĝenerala ol premo au streĉo.

En stress, Fr contrainte, tension, De Spannung.

ŝeri: Deformi elastan korpon sen volumenŝanĝo per du nesamrektaj fortoj agantaj en kontraŭaj direktoj.

A to shear F cisailier G scheren

De: scheren, En: to shear, Fr: cisailier.

10. Referencoj

- Colonnetti, G. (1918): *Una proprietà caratteristica delle coazioni elastiche nei solidi elasticamente omogenei* — *Atti Reale Accad. Lincei, Rendiconti* 27, 155.
- Hordon M.J., Averbach, B.L. (1961): *Precision density measurements on deformed copper and aluminum single crystals* — *Acta Metallurgica* 9, 247.
- Keyes, R.W. (1958): *Dilatational strain due to dislocations in copper* — *Acta Metallurgica* 6, 611.
- Lomer, W.M. (1957): *Density change of a crystal containing dislocations* — *Philosophical Magazine* 2, 1053.
- Saindrenan, G., Grégoire P., Liang W.K. (1973): *Énergie potentielle élastique et énergie sous forme de phonons emmagasinées dans un métal déformé plastiquement. Influence de ces énergies sur la dilatation de volume du métal à sa température de recristallisation* — *Métaux, Corrosion, Industrie* 48, 329.
- Savickij E.M., Bičkova M.I., Kanikovskij V.B. (1973): *Vlianie plastiĉeskoj deformacii na teplovoje rasshirente niobia (Esperanta traduko de Aslo Szilvási, SRES)* — *Fizika i Ĥimija Obrabotki Materialov*, 6, 73.
- Stehle H., Seeger A., (1956): *Elektronentheoretische Untersuchungen über Fehlstellen in Metallen. III. Der Einfluß von Versetzungen auf die Kristalldichte und verwandte Probleme* — *Zeitschrift für Physik* 146, 217.
- Vetter R., Fastenau R.H.J., Baskes M.I., (1981): *Atomistic computer calculation of the dilatation caused by a 1/2 «111» (110) edge dislocation in molybdenum* — *Physica Status Solidi* 67, 585.
- Woo C.H., Puls M.P., (1977): *Atomistic breathing shell model calculations of dislocation core configurations in ionic crystals* — *Philosophical Magazine* 35, 727.
- Zener C., (1942): *Theory of lattice expansion introduced by cold-work* — *Transactions of the American Institution of Mining Engineers* 147, 361.

Volumevergroting door dislokaties

Hoewel het effect van dislokaties op het volume klein is, opent het een nuttige mogelijkheid om dislokatedichtheden op een onafhankelijke manier te bepalen. Aanvankelijk leek het erop dat de theorie in het geheel geen volumevergroting voor dislokaties voorspelde, totdat men de bijdrage van de nietlineaire elasticiteit in de berekening betrok. De uitzetting is dan te begrijpen doordat via de glijdingsmodulus de energie van het elastisch veld van een dislokatie zich kan verlagen door grotere afstanden tussen de atomen. Met een simpel model schat men de dilatatie op $2/3 b^3$ per atoombuiging b . Ook experimenten leveren getallen van ongeveer $1 b^3$. Tegenwoordig zijn computersimulaties van atoommodellen met dislokaties erin mogelijk. De relaxerende atomen oefenen een soort druk uit op de wand van het simulatiespecimen. Met een continuïmsmodel kan worden voorspeld dat de inverse waarde van die druk lineair met R^2 loopt voor R naar oneindig, zoals in de simulatie. Hieruit heeft de auteur c.s. voor molybdeen een dilatatie berekend van $0,45 b^3$ per atoombuiging dislokatedichtheid.

Metodoj de termoanalizo

*Hanuš Landsperský (Ĉeĥoslovakio)**

1. Enkonduko

La metodoj de termoanalizo baziĝas sur mezurado de transform-fenomenoj en studata substanco, okazantaj dum ties temperatur-variado. Unuavice temas pri dinamikaj procesoj, informantaj pri sinsekvaj ŝanĝoj de iu fizika valoro depende de altiĝanta aŭ malaltiĝanta temperaturo. Ili estas efektive metodoj analizaj, ĉar ili ebligas identigi la ĥemiajn fazojn kaj ties kombinojn surbaze de progresive varianta temperaturo de ekzamenata materialo.

La bazaj principoj de la plej ordinaraĵ termoanalizaj metodoj estas konataj jam pli ol duonjarcenton, sed nur en la lastaj jardekoj ili farigis efika instrumento, kiel en la identigado de industrie gravaj materialoj, tiel en la studado de procesoj, okazantaj en la koncernaj substancoj. Sciencaj laboristoj en la plej diversaj branĉoj de la ĥemia industrio kaj substanc-esplorado preskaŭ ĉiujare renkontiĝas okaze de internaciaj konferencoj, kie ili resumas la atingitajn rezultojn, disvolvas kaj precizigas novajn metodojn kaj decidas pri pluaĵ direktoj en evoluigado kaj aplikado de la termoanalizaj metodoj en industria praktiko.

La celo de tiu ĉi artikolo estas, konigi la bazajn principojn de la termoanalizaj metodoj al sciencaj laboristoj kaj tiamaniere kontribui al la enkonduko kaj enindustria apliko de tiuj metodoj.

* Inĝeniero en Instituto de Nuklea Esplorado (*Ústav jaderného výzkumu*) en Řež, proksime de Prago.