

# Physical Processing – TA3390

## Deel I. Defecten in Materialen en Mechanische Eigenschappen

*Puntdefecten,  
Stapelfouten,  
Dislocaties,  
Plasticiteit,  
Hardingsmechanismen,  
(Brosse) Breuk,  
Verkleining van Materialen.*

**Dr. J.H.L. Voncken**

# Defecten en Mechanische Eigenschappen: Onderwerpen

1. Waarom dit college?
2. Inleiding Defecten
3. Puntfouten of Point Defects
4. Stapelfouten of Stacking Faults
5. Lijnfouten of Dislocaties
6. Simuleren en Aantonen van Dislocaties
7. Korrelgrenzen en Dislocaties
8. Beweging van Dislocaties
9. Vermenigvuldiging van Dislocaties
10. Schroefdislocaties en Kristalgroei
11. Elastische Eigenschappen van Dislocaties
12. Pile-Up
13. Plasticiteit en Deformatie
14. Verkleining van Materialen (Theorie)

# Waarom dit college ?

# Waarom dit college?

- Om mineralen uit een erts te kunnen **afscheiden**, moet het erts **vermalen** worden.
- Dat lijkt simpel, maar dat is het niet....
- **Maalprocessen** zijn erg **energie-intensief** en dus **duur**.
- **Maalprocessen** zijn afhankelijk van **defecten** in materialen.



# Waarom dit college?

Wat gebeurt er fysisch met het materiaal in zo'n molen ?



# Waarom dit college?

Bij malen kunnen een aantal vragen naar voren komen:

- **Hoe** lang moet ik malen ?
- **Hoe** fijn kan ik malen ?
- **Waarom** is het ene materiaal beter te malen dan het andere ?
- Moet ik mijn molen **anders** afstellen als ik fijnkorrelig materiaal ga malen **nadat** ik grofkorrelig materiaal gemalen heb?
- Enz...Enz...

# Waarom dit college?

- **Mechanische eigenschappen** van materialen zijn belangrijk voor begrip van **breuk** en **breukvorming**.
- In het algemeen vertonen materialen **bros**, **quasi-bros** of **plastisch** mechanisch gedrag.
- **Mineralen** zijn doorgaans **bros** of **quasi-bros**.

# Brosse en Quasi-brosse Mineralen

## Voorbeelden:

- **Bros:** silikaten, oxiden ( $\text{SiO}_2$ , veldspaten, ijzeroxiden, enz.)
- **Quasi-bros:** sulfiden ( $\text{CuFeS}_2$ ,  $\text{PbS}$ ,  $\text{ZnS}$ , enz.)
- Veel **sulfidische ertsen** vertonen dus gedeeltelijk **quasi-bros gedrag**.
- Soms zijn sulfiden ook broos: **pyriet ( $\text{FeS}_2$ )**.

# Mechanisch Gedrag van Mineralen

- Om het **gedrag** van **quasi-brosse mineralen** te **begrijpen** is begrip van **plasticiteit** nodig.
- Uit **theorie** over **plasticiteit** en **defecten in materialen** volgt een **relatie** die belangrijk is voor **breken** en **malen** (de **Hall-Petch-vergelijking**). Deze geeft de **Maallimiet** (Grind Limit).
- Gesteenten **kunnen na deformatie** weer verhit raken en **rekristalliseren**.
- Daarom wordt ook **rekristallisatie** bij **herstel van deformatie** behandeld.

# Defecten en Mechanische Eigenschappen

# Inleiding Defecten

Thermodynamische achtergrond  
Omgevingsinvloed  
Begrenzing van het kristal  
Temperatuursbeweging  
Classificatie van defecten

# Defecten in Kristallen: waarom ?

1. Om thermodynamische redenen kunnen volkomen perfecte kristallen niet (blijven) bestaan.
2. Interactie met de omgeving: een kristal is niet “alleen”.
3. Een kristal is niet oneindig.
4. Temperatuur en de beweging van de atomen.



# 1. Thermodynamische Redenen

- De energie voor de vorming van een defect kan worden voorgesteld als :  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$
- Aangezien defecten spontaan optreden volgt dat de vrije energie voor de vorming van een defect is:  $\Delta G < 0$
- Dus is :  $T\Delta S > \Delta H$

# 1. Thermodynamische Redenen

- Als er bijvoorbeeld een puntdefect wordt gecreëerd in een **perfect** kristal met **1 mol cationen**, dan zijn daar  **$10^{23}$  mogelijkheden** voor, **elk** met zijn reeks van **invloeden** op naburige ionen.
- De entropiestijging is dan **groter** dan de enthalpiestijging:  $T\Delta S > \Delta H$

# 1. Thermodynamische Redenen

- Deze entropiestijging wordt echter **kleiner** wanneer er **meer en meer** defecten ontstaan.
- Als de **defect-concentratie erg hoog** is, “*maakt een nieuw defect erbij niet veel meer uit*”.
- De entropiestijging wordt dan lager en lager en is dan op een gegeven moment **niet meer groter** dan de enthalpiestijging:  $T\Delta S \leq \Delta H$
- Als  $T\Delta S = \Delta H$ : de vorming van defecten **stopt**.

## 2. Interactie met de omgeving

- Temperatuur (verschillen)
- Druk (verschillen)
- Spanning + vervorming
- Inwerken magnetisch of elektrisch veld
- Interactie met vloeistoffen
- Interactie met gassen

## 3. Begrenzing van een kristal

- In kristallografische beschrijvingen: een kristalrooster wordt als **zich ONEINDIG uitstrekkend naar alle richtingen** voorgesteld.
- Dat is natuurlijk in werkelijkheid **NIET** zo: ook een perfect rooster is in een reële wereld **begrensd !!**
- **Deze begrenzing kan men opvatten als een roosterfout!!**

## 3. Begrenzing van een kristal

- **De begrenzingen van kristallen (zeker in een polykristallijn materiaal) hebben veel met roosterfouten te maken !**
- Dit wordt verder verduidelijkt in de rest van het college.

## 4. Temperatuursbeweging

- In een kristal staan de atomen nooit **“stil”**.
- Ze **vibreren** onophoudelijk.
- Dit kan men opvatten als een **continue** (zij het geringe) **vervorming** van het rooster.

# Classificatie van Defecten

1. Puntdefecten (0 - dimensionaal): *Point defects*.
2. Lijndefecten (1 - dimensionaal): dit zijn de zogenaamde *dislocaties*.
3. Vlakdefecten (2 - dimensionaal): *stacking faults* (*stapelfouten*).
4. Ruimtelijke defecten (3-dimensionaal): o.a. *precipitaten en inclusies (inluitsels)*.



# 1. Puntfouten

Vacature

Interstitialie

Substitutie

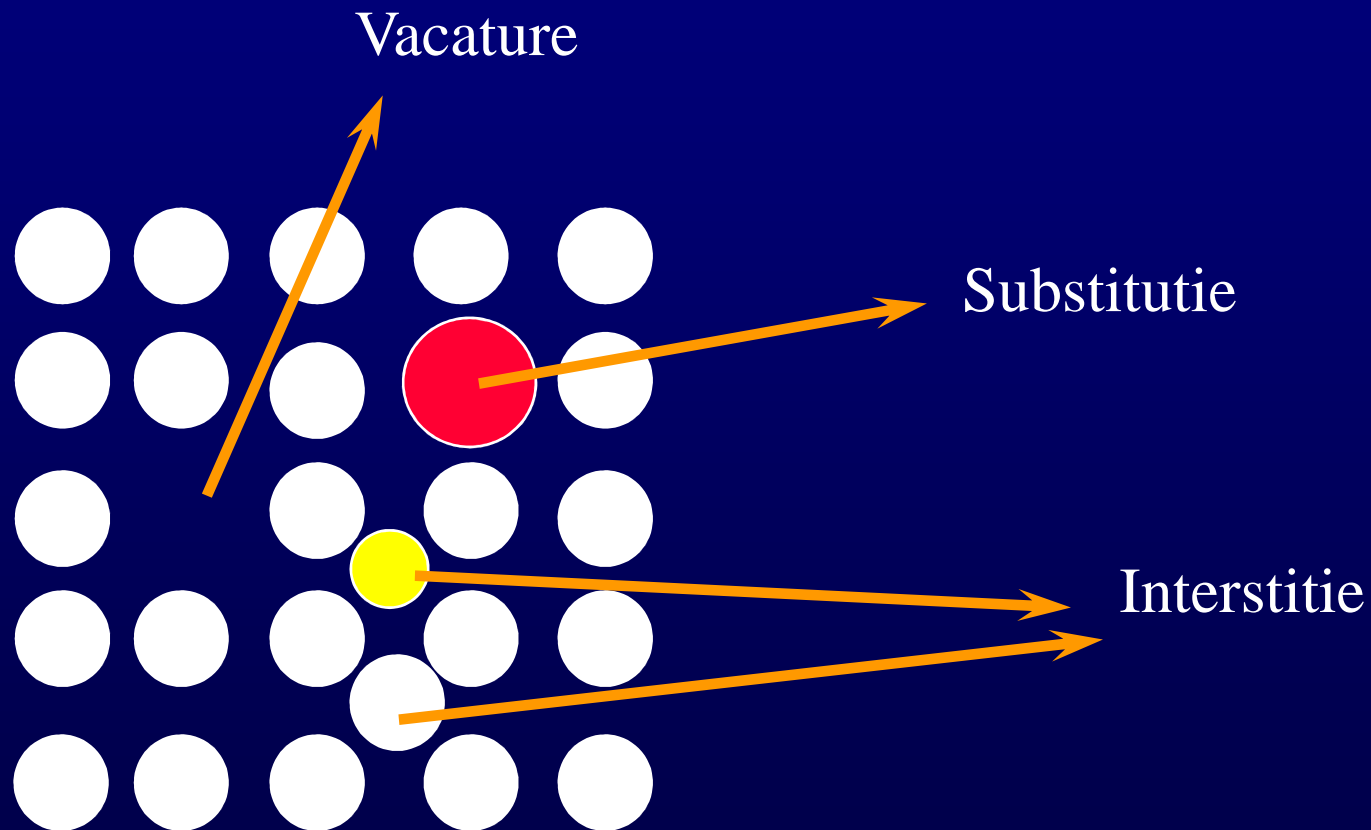
Frenkel Defect

Schottky Defect

# Puntfouten

- Een atoom **tekort: vacature**.
- Een **regulier** of een “**vreemd**” atoom (te veel) op een **niet-reguliere** roosterplaats: **interstitie**.
- een “**vreemd**” atoom op een **reguliere** roosterplaats: **substitutie**.

# Puntfouten



# Puntfouten

- Een atoom verhuist van een **reguliere** roosterplaats naar een **niet-reguliere** plaats: **het Frenkel defect.**
- **Gekoppelde vervanging** in ionogene stoffen: **Schottky defecten.**
- In bijvoorbeeld **NaCl**: ontstaat er een **Na<sup>+</sup> vacature**, dan **ook** een **Cl<sup>-</sup> vacature !**
- Dergelijke fouten noemt men **Schottky defecten.**

# Puntfouten

- In NaCl kan bijvoorbeeld  $\text{Ca}^{2+}$  substitueren voor  $\text{Na}^+$ : om **ladingsneutraliteit** te handhaven ontstaat er een **vacature** van  $\text{Na}^+$ .
- Dit is **energetisch gunstiger** dan een **interstitieel Cl-ion toevoegen**. **Waarom ?**
- Dergelijke vacatures in ionogene stoffen, **gekoppeld aan vervanging** noemt men **OOK Schottky defecten**.

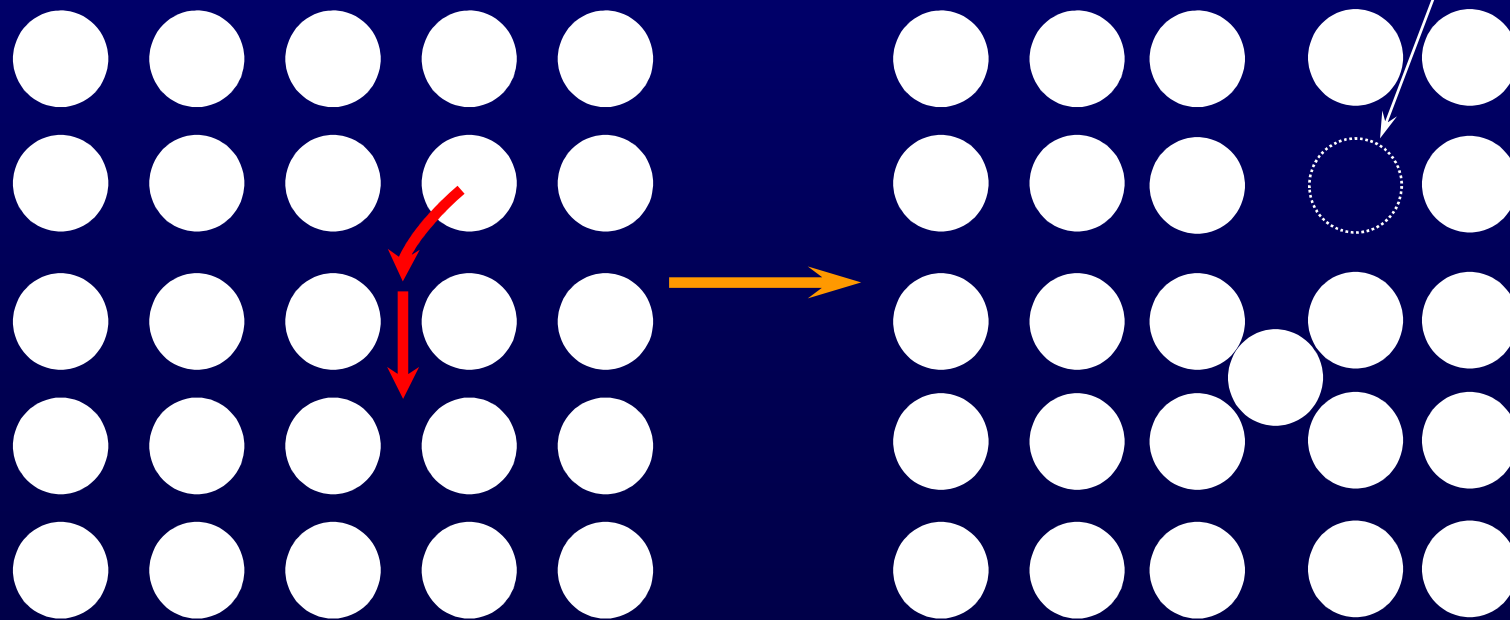
# Puntfouten: Frenkel Defect

Frenkel defect: genoemd naar *Yakov Frenkel* (1894 – 1952).

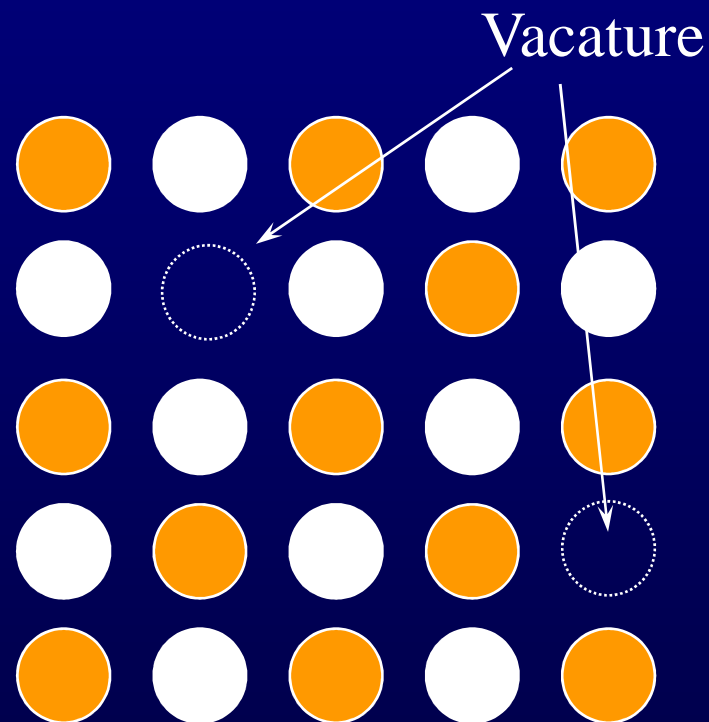
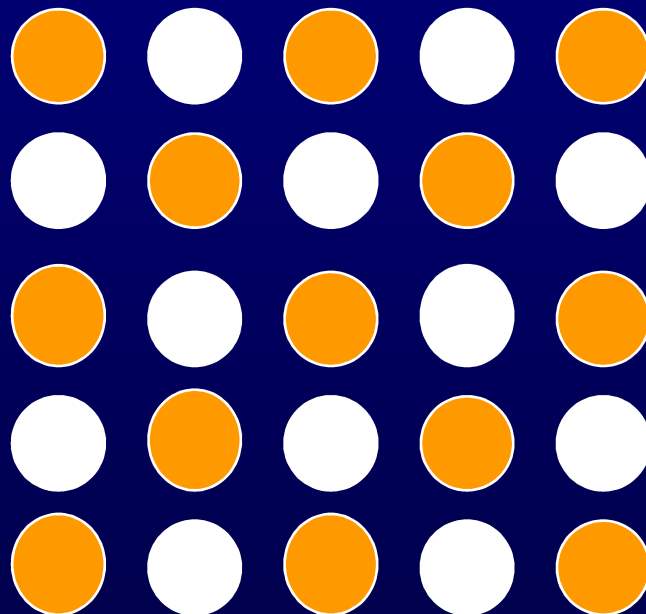


Vervorming van het rooster is **niet** weergegeven.

Vacature



# Puntfouten: Gekoppelde Defecten (Schottky Defecten)

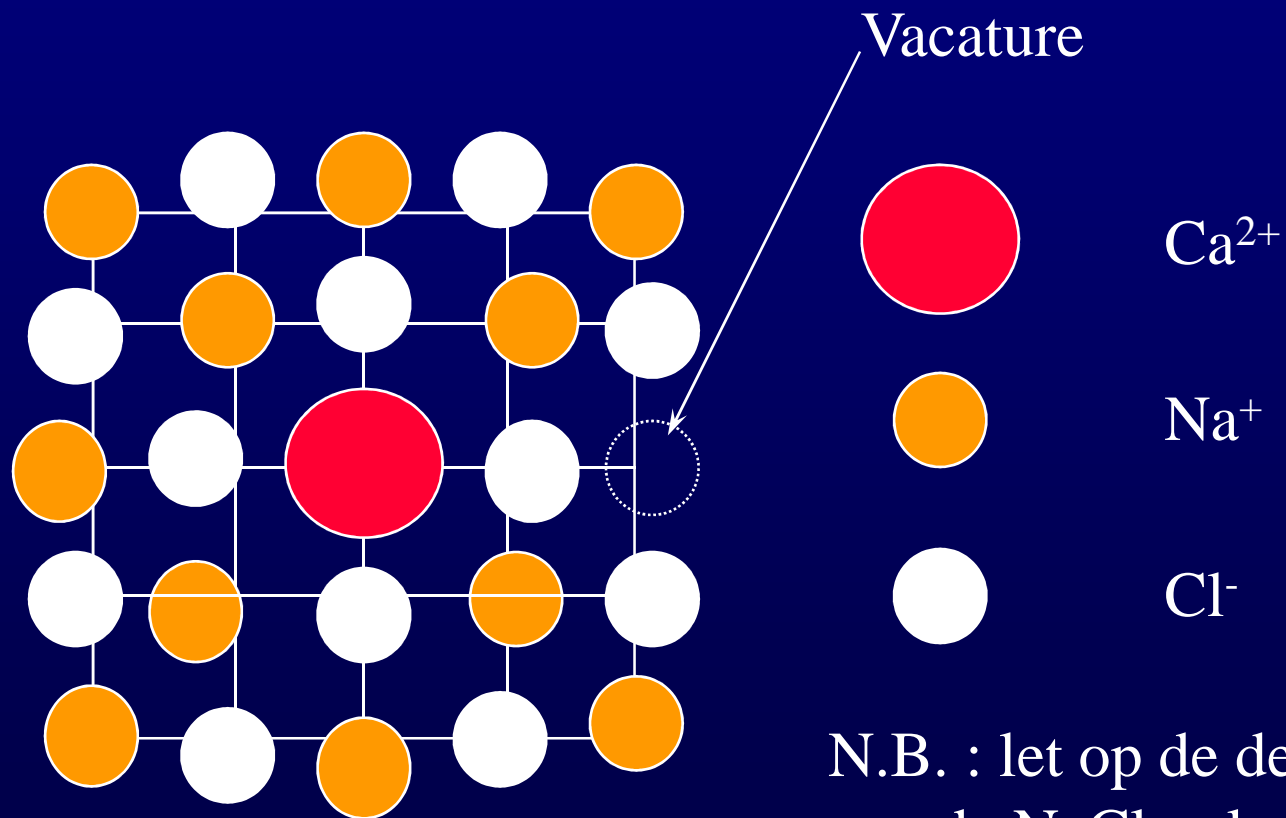


Walter Hermann Schottky (1886 – 1976).



Vervorming van het rooster is **niet** weergegeven

# Puntfouten: Gekoppelde Defecten (Schottky Defecten)



N.B. : let op de deformatie van de NaCl-cel.



# Stapelfouten

Stacking Faults (stapelfouten)

HCP en CCP

Intrinsieke en extrinsieke stapelfouten

# Stapelfouten

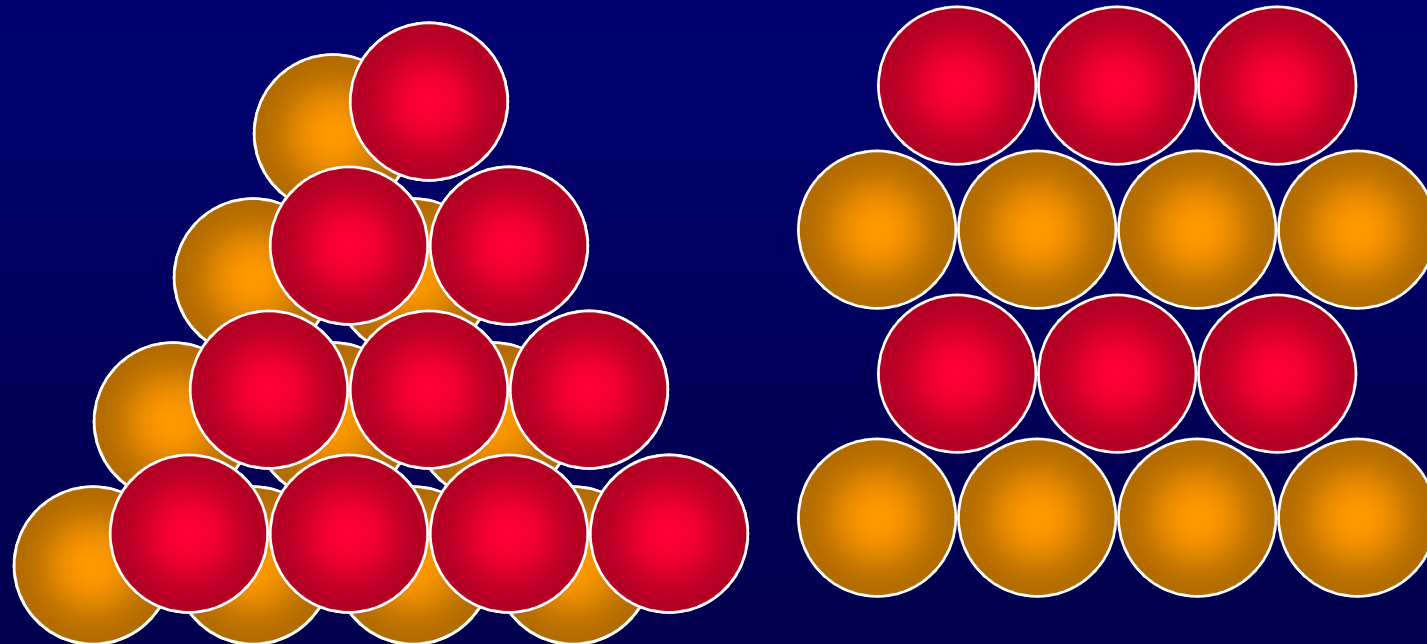
- **Stapelfouten** heten in het Engels: **Stacking Faults**.
- Dit zijn **vlakvormige** fouten.
- Dergelijke fouten komen voor bij metalen met een **dichtste bolstapeling** (kubisch of hexagonaal).
- Men vindt vlakfouten ook zeer vaak in **kleimineralen en mica's (illiet, muscoviet, biotiet, smectiet, kaolinit etc.)**.
- Sommige **sulfiden** vertonen **ook stapelfouten**.

# Stapelfouten: Bolstapelingen

Men onderscheidt 2 zogenaamde *dichtste* bolstapelingen:

- de **hexagonale dichtste bolstapeling.**
- de **kubische dichtste bolstapeling.**

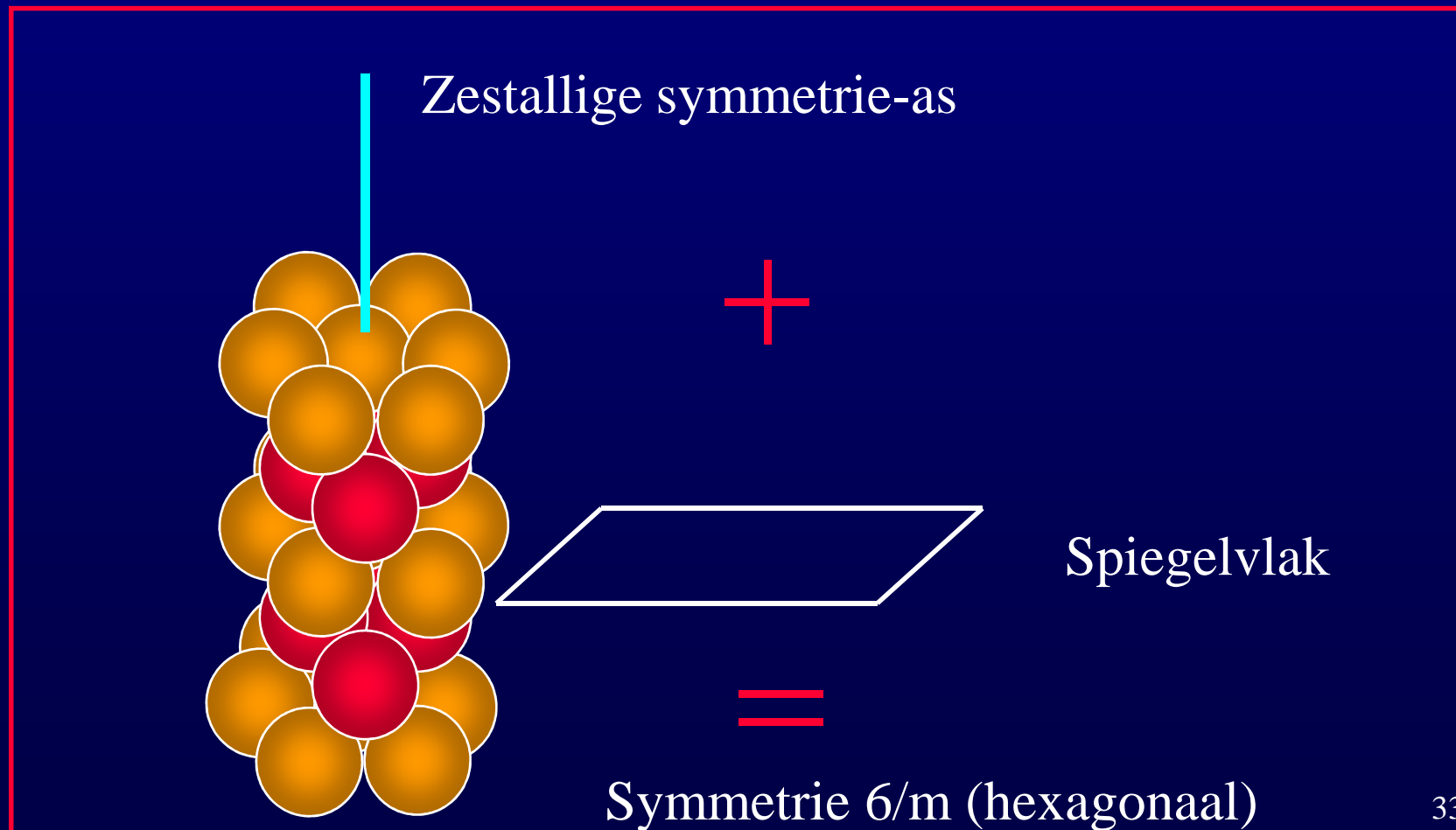
# Stapelfouten: Hexagonal Closest Packing (HCP)



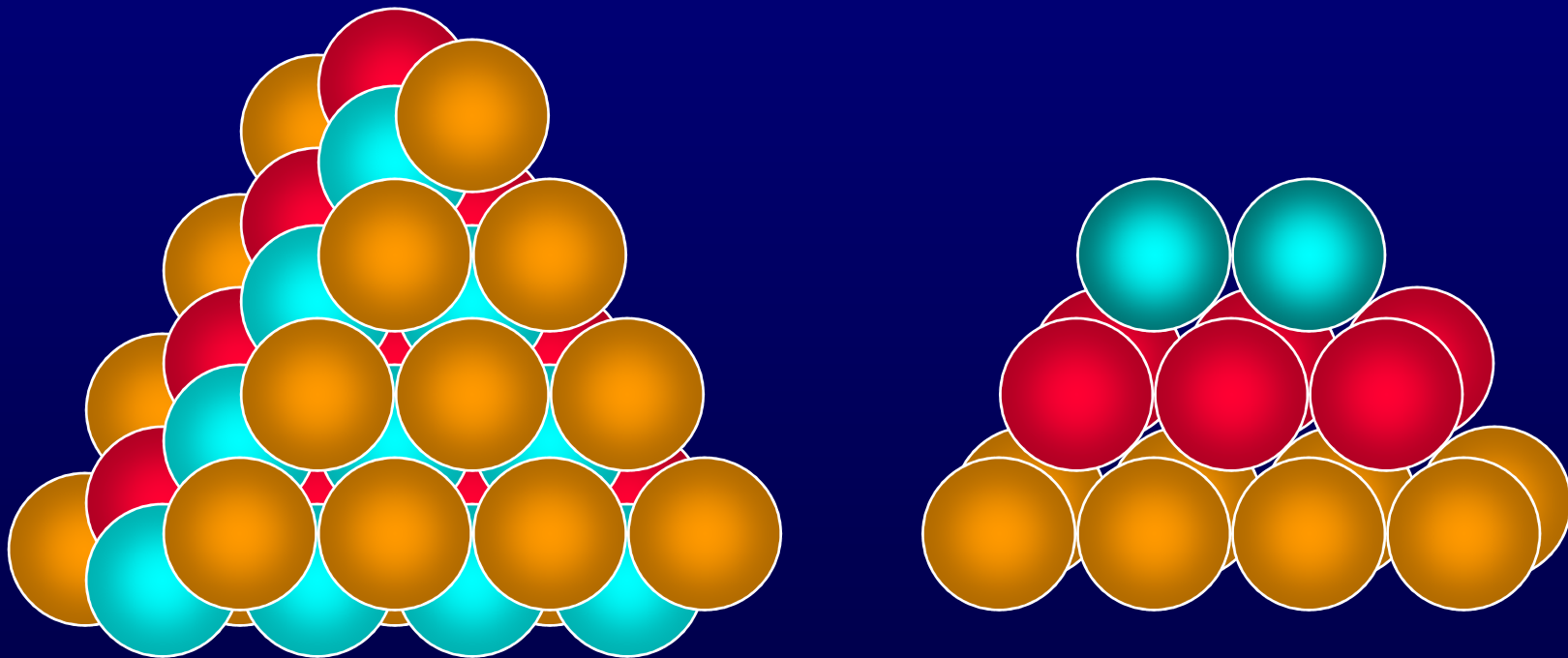
Opeenvolging: **ABABAB...**

# Hexagonal Closest Packing (HCP)

Hexagonale symmetrie ?



# Stapelfouten: Cubic Closest Packing (CCP)

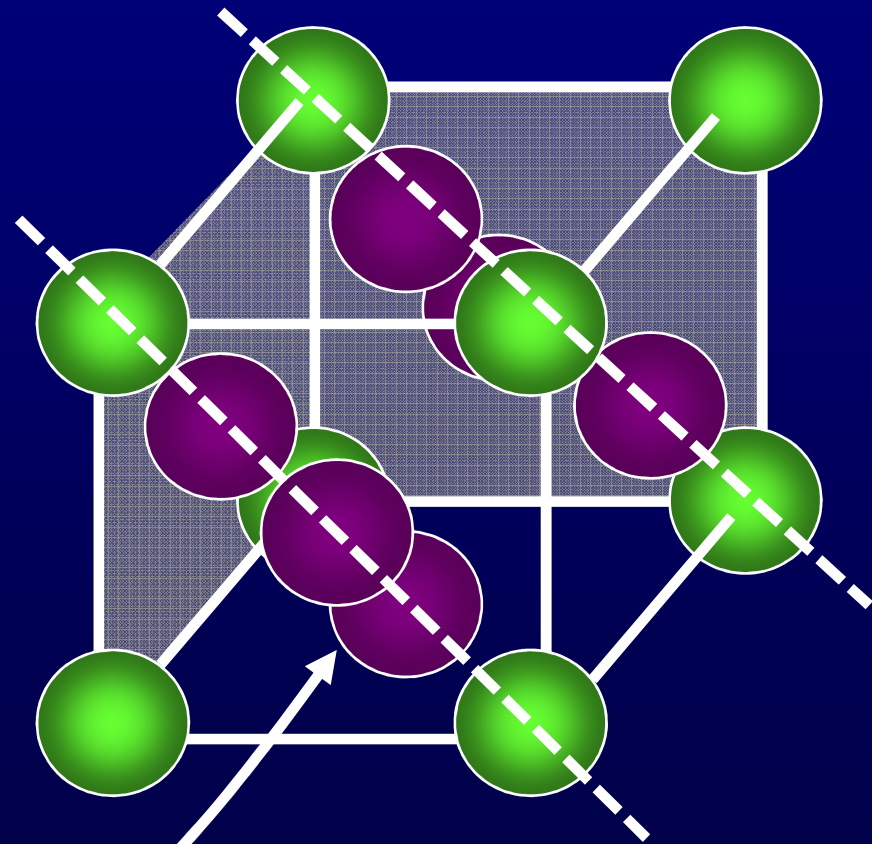


Opeenvolging: **A****B****C****A****B****C****A****B****C**...

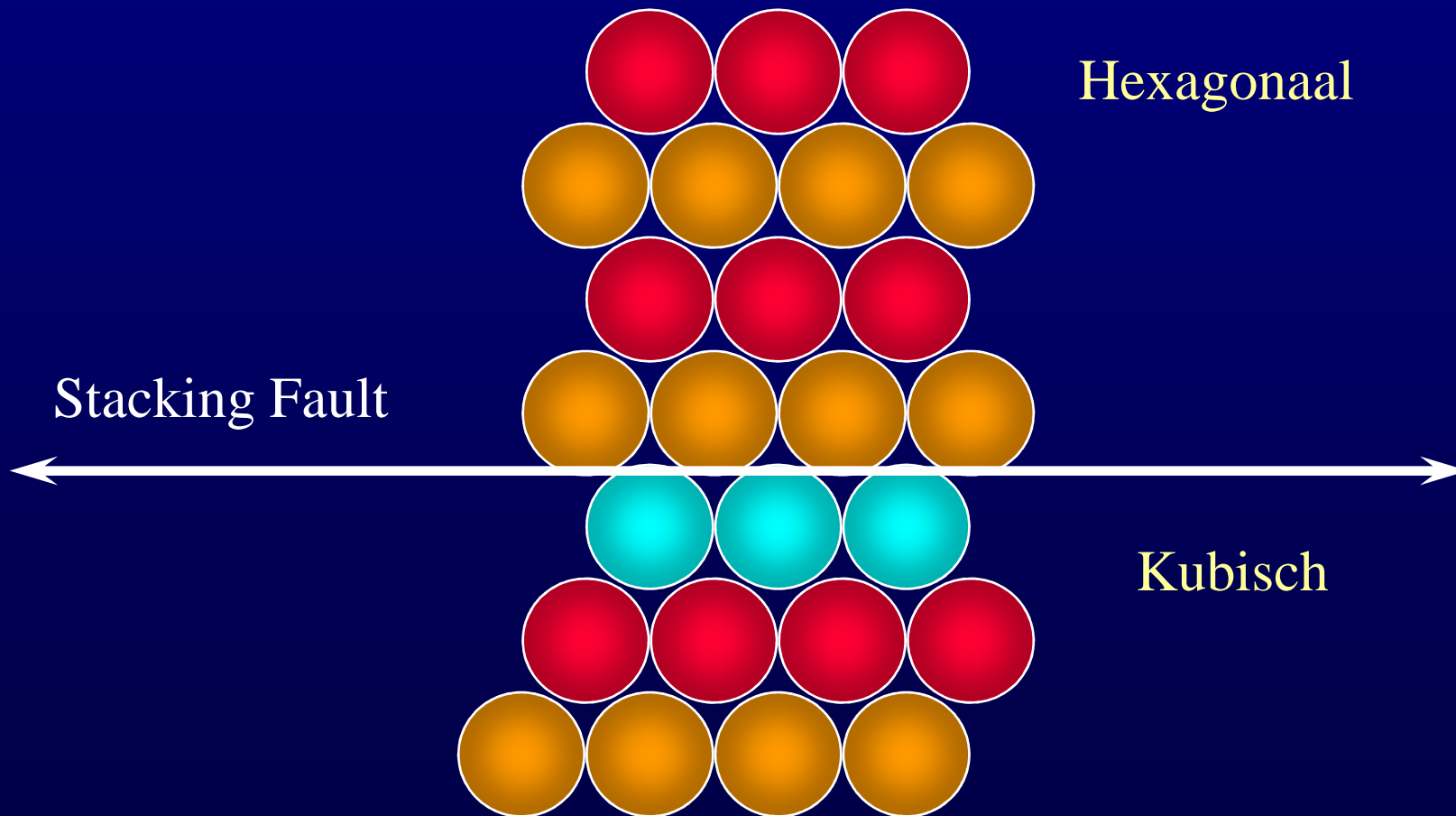
# Cubic Closest Packing (CCP)

Het blijkt dat de **Kubische Dichtste Bolstapeling (CCP)** overeenkomt met een **Vlakkengecentreerde Cel (FCC-cel)**.

De **dichtstgepakte vlakken** liggen **diagonaal** in de cel.



# Stapelfouten



Opeenvolging: ...**A****B****C****A****B****A****B**...



# Stapelfouten

- Stapelfouten kunnen duidelijk zeer divers van aard zijn.  
Enkele voorbeelden:

- **A**BC**A**BC**A**B**A**B**A**BC**A**BC**A**B**A**BC**A**BC



- **A**BC**A**BC**A**B**A**B**A**B**A**BC**A**BC**A**BC**A**B**A**B**A**B**A**B**A**BC



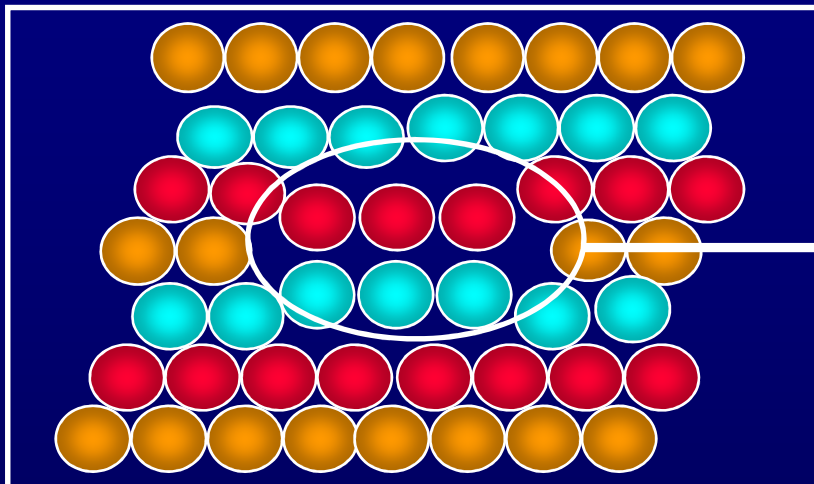
# Stapelfouten

- Bij **kleimineralen en mica's** komen zogenaamde **polytypes** voor: **polymorfen met een gerelateerde maar wel verschillende kristalstructuur.**
- Zo bestaat bijvoorbeeld van **muscoviet** de **1-laags monokliene structuur** (aangeduid als **1M**), maar ook **2M** (met nog 2 varianten  $2M_1$  en  $2M_2$ ), en de 3-laags trigonale variant **3T**.
- Deze polytypes kunnen allemaal gestapeld worden met **stacking faults** tussen de lagen.
- Bijvoorbeeld: **2M 2M 1M 2M 1M 2M 2M 3T 2M 2M.....**

# Stapelfouten

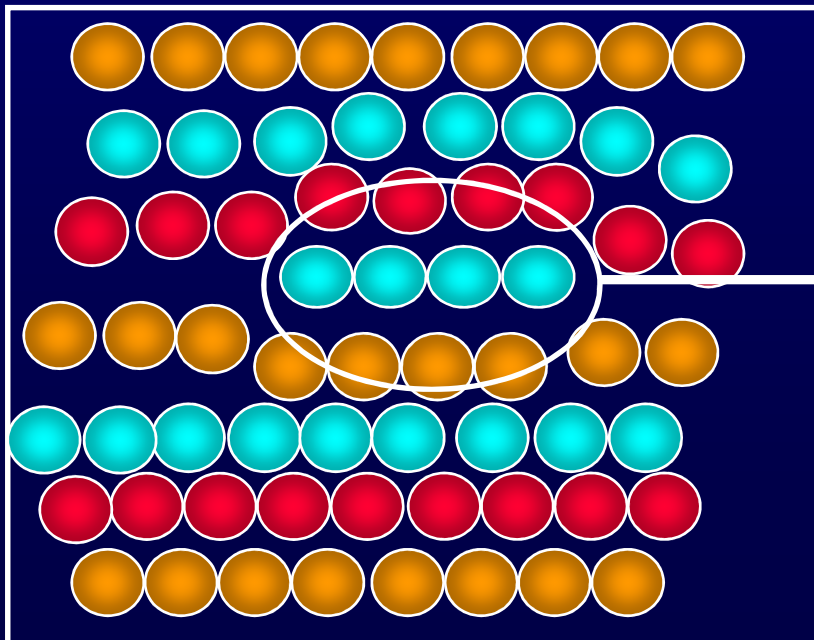
- Een ander bekend voorbeeld komt voor bij **sfaleriet (kubisch ZnS)** en **wurtziet (hexagonaal ZnS)**.
- Deze vertonen stapelfouten analoog aan de voorafgaand behandelde **bolstapelingsen**.
- **Sfaleriet** heeft daardoor heel vaak kristallografisch een zekere **wurtziet-component** (en omgekeerd).
- Het is om deze reden dat beide mineralen met optische microscopie **heel moeilijk te onderscheiden zijn**.

# Stapelfouten



## Intrinsieke Stapelfout

Een deel van de **(gele)** laag is *verwijderd*.



## Extrinsieke stapelfout

Er is een gedeeltelijke extra **(blauwe)** laag *geïntroduceerd*.

# Lijnfouten of Dislocaties

Concept van Lijnfouten

Randdislocatie

Schroefdislocatie

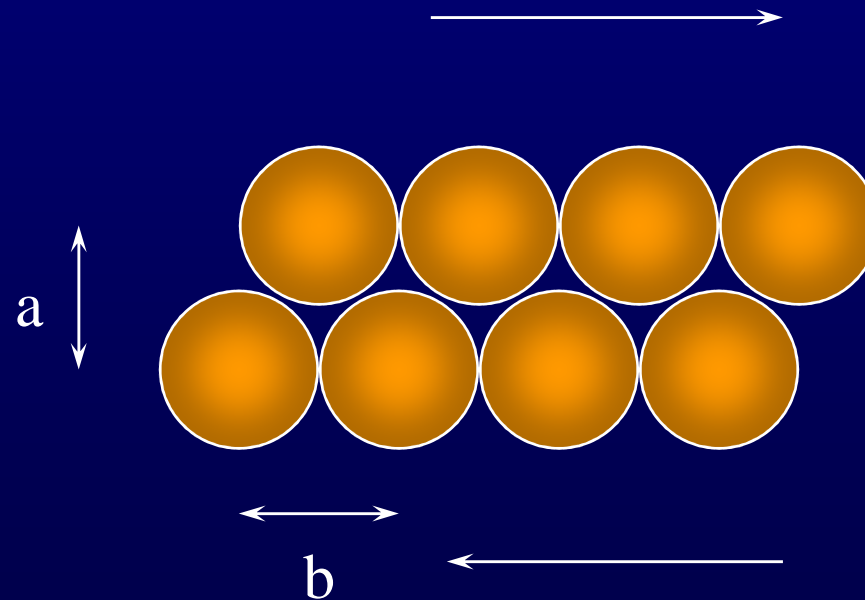
Burgerscircuit

Burgersvector

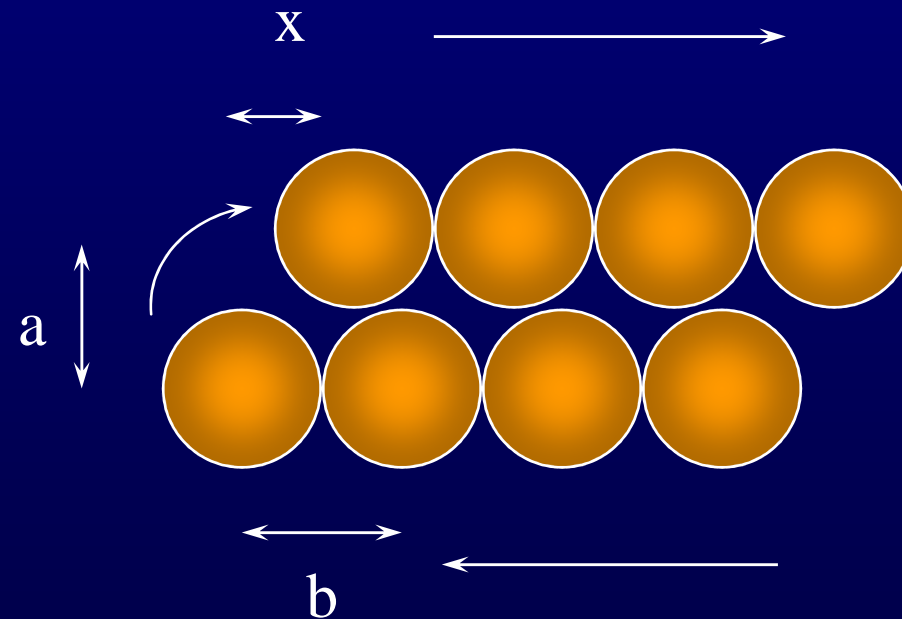
Gemengde dislocatie

Partiële dislocatie

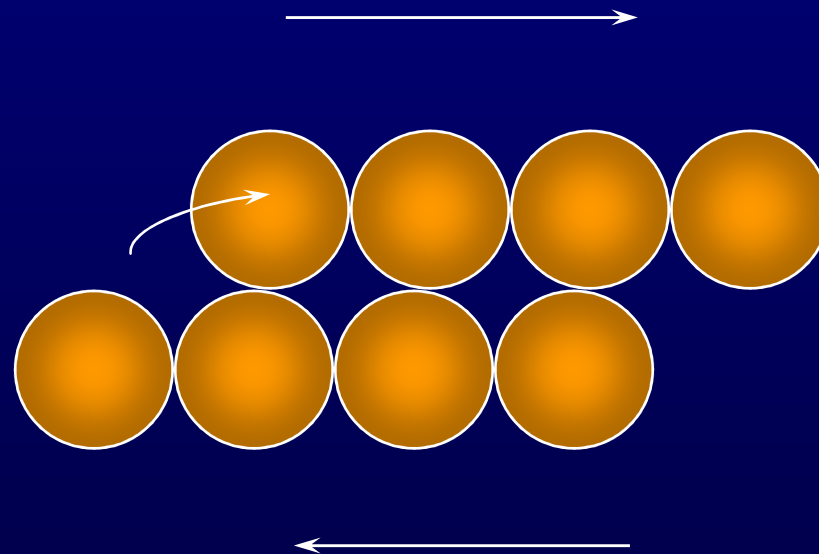
# Lijnfouten: Concept



# Lijnfouten: Concept

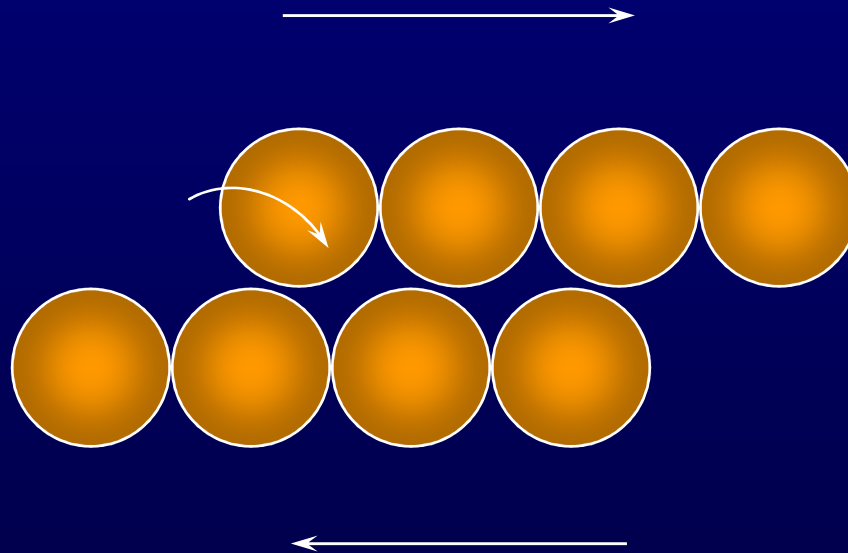


# Lijnfouten: Concept

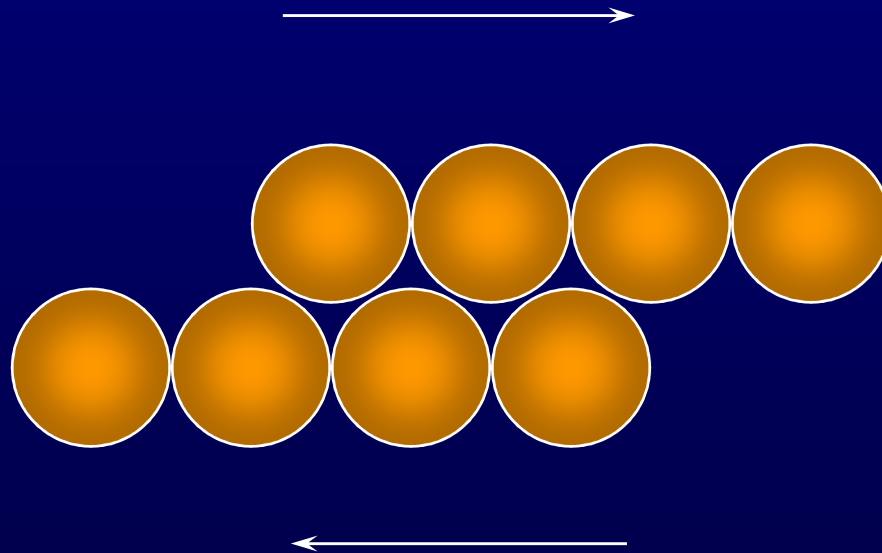




# Lijnfouten: Concept



# Lijnfouten: Concept

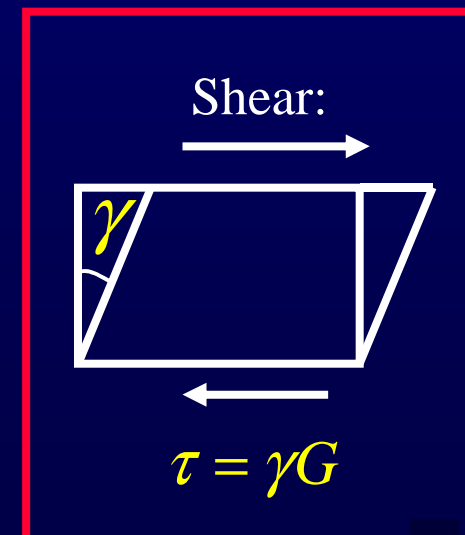


# Lijnfouten: Concept

- Men vond voor de getoonde beweging de volgende relatie :

$$\tau = \frac{G b}{2 \pi a} \sin \frac{2 \pi x}{b}$$

- Hier is :
- **G** = Shear Modulus,
- **x** = de afstand waarover verplaatst is
- **a** = afstand tussen twee atoomlagen
- **b** = afstand tussen de atomen in de laag



# Lijnfouten: Concept

- De *theoretical shear strength* is de maximale waarde die deze relatie kan aannemen:

$$\tau_{th} = \frac{b}{a} \frac{G}{2\pi}$$

- In het voorbeeld is  $a$  ongeveer gelijk aan  $b$ , zodat:

$$\tau_{th} \approx \frac{G}{2\pi} \approx \frac{1}{6} G$$

# Lijnfouten: Concept

- In meer realistische modellen vond men :

$$\tau_{th} \approx \frac{1}{38} G \approx 0.026 G$$

- In de praktijk werden waarden voor de **theoretische shear strength** gevonden die varieerden van:

tot  $\tau \approx 10^{-4} G$

$$\tau \approx 10^{-8} G$$

# Lijnfouten: Concept

- De **discrepantie** tussen praktijk en theorie kon worden **opgelost** met de **introductie** van het concept van **lijnfouten of dislocaties**.
- Lijnfouten (dislocaties) zijn eerst als theoretisch concept geïntroduceerd:  
*1934, door Taylor, Orowan en Polyani, onafhankelijk van elkaar.*
- Pas later is bewezen dat ze echt bestaan (vanaf ongeveer 1957).

# Typen Lijnfouten

- **Randdislocatie**: een lijnfout gevormd door een rij atomen die een niet volledig doorlopend roostervlak begrenzen.
- **Schroefdislocatie**: een lijnfout gevormd doordat in een **richting loodrecht** op een oorspronkelijk roostervlak dit vlak **overgaat** in een ander vlak.

# Randdislocatie en Schroefdislocatie

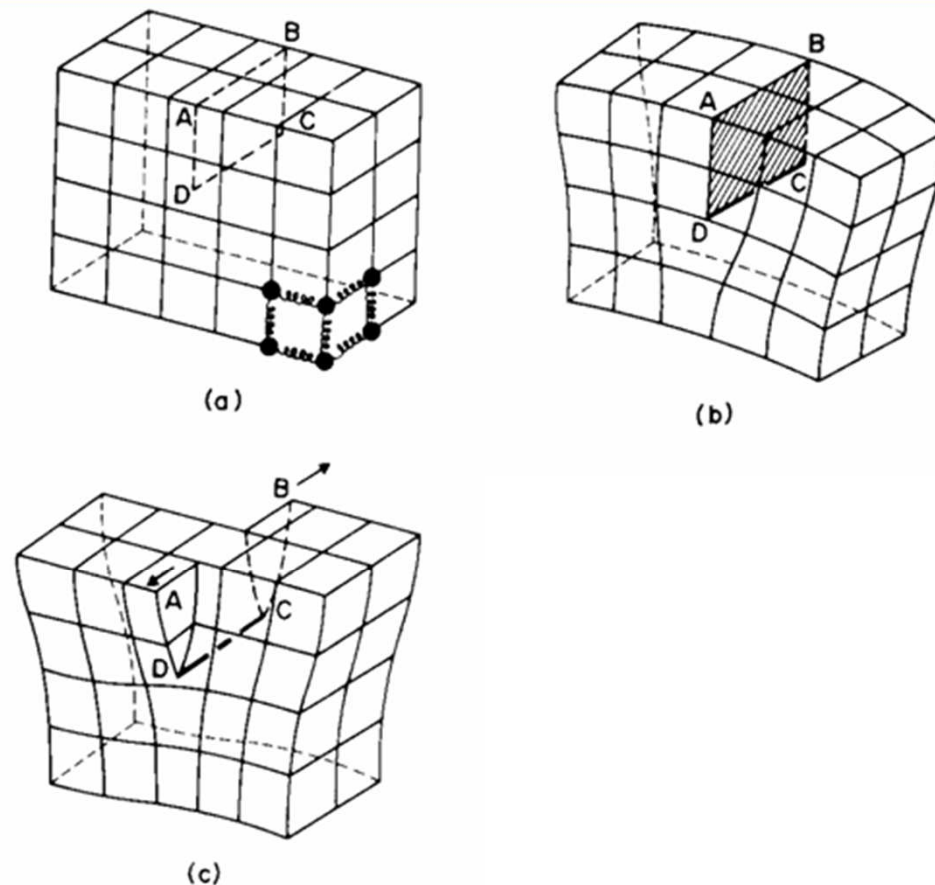
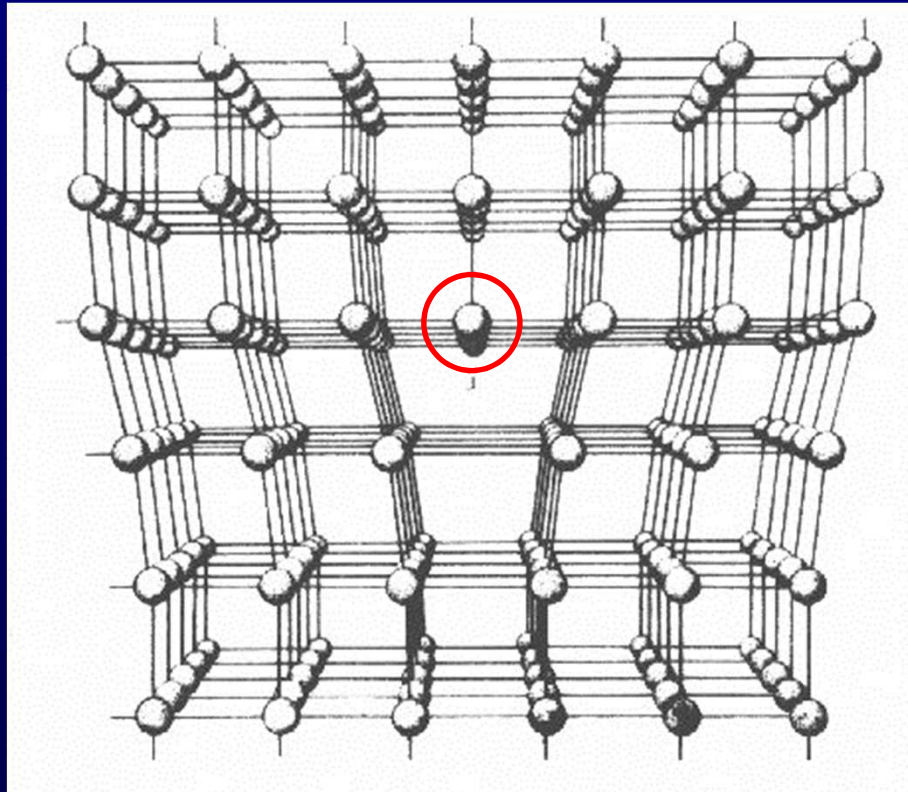


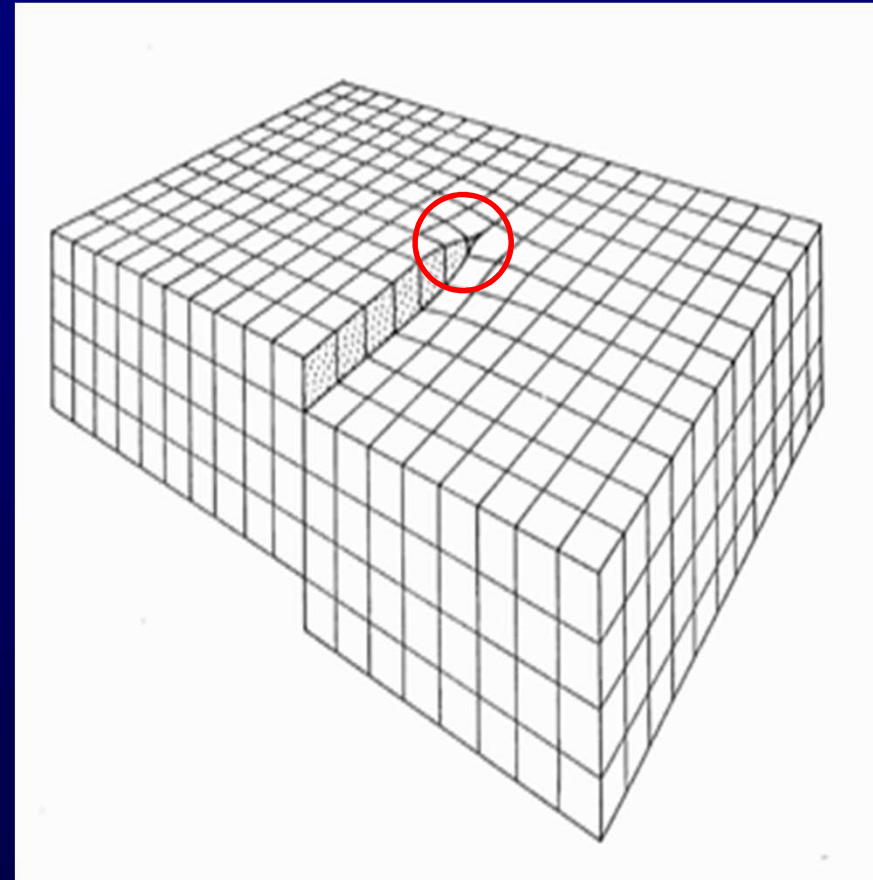
FIG. 1.18. (a) Model of a simple cubic lattice; the atoms are represented by filled circles, and the bonds between atoms by springs, only a few of which are shown; (b) positive edge dislocation  $DC$  formed by inserting an extra half-plane of atoms in  $ABCD$ ; (c) left-handed screw dislocation  $DC$  formed by displacing the faces  $ABCD$  relative to each other in direction  $AB$ ; (d) spiral of atoms adjacent to the line  $DC$  in (c).



# Randdislocatie en Schroefdislocatie



Randdislocatie



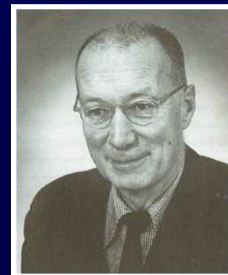
Schroefdislocatie

# Karakterisatie van Lijnfouten

- **Lijnfouten** kunnen worden gekarakteriseerd in termen van **grootte** en **richting**.
- Dit doet men middels de **Burgersvector**  $\vec{b}$

De **Burgersvector** is genoemd naar **Prof. dr. J.M. Burgers** (1895 – 1981), **Hoogleraar TH Delft 1918 - 1955**.

- **Prof. Dr. W.G. Burgers** (broer, 1897-1988, ook **hoogleraar TH Delft, 1940 - ±1963**) deed ook veel onderzoek naar dislocaties.



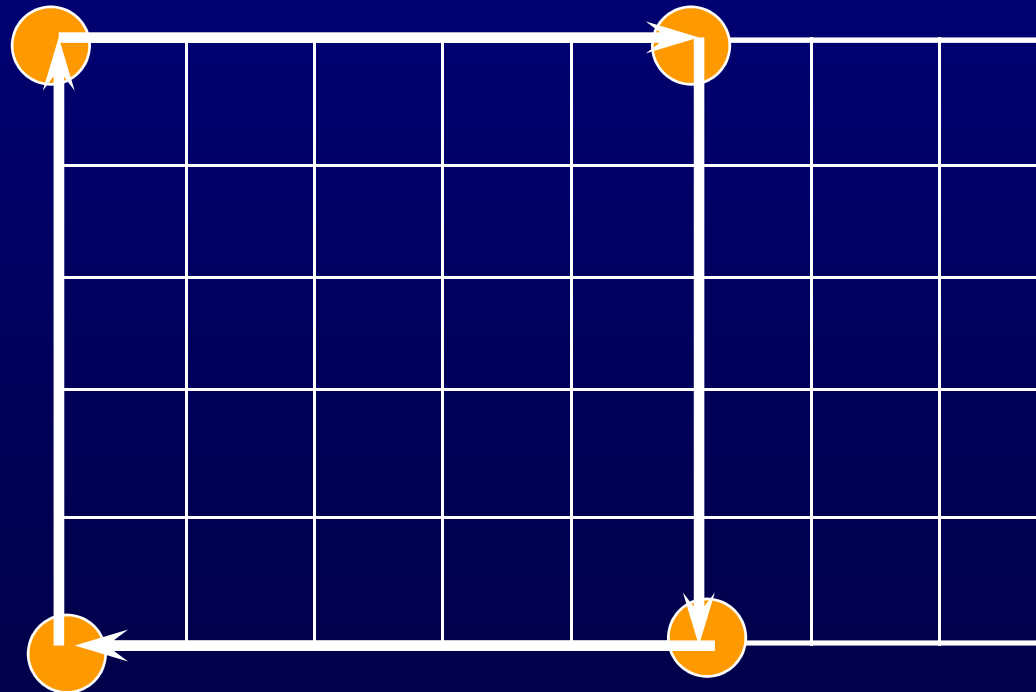
Jan Burgers



Willy Burgers

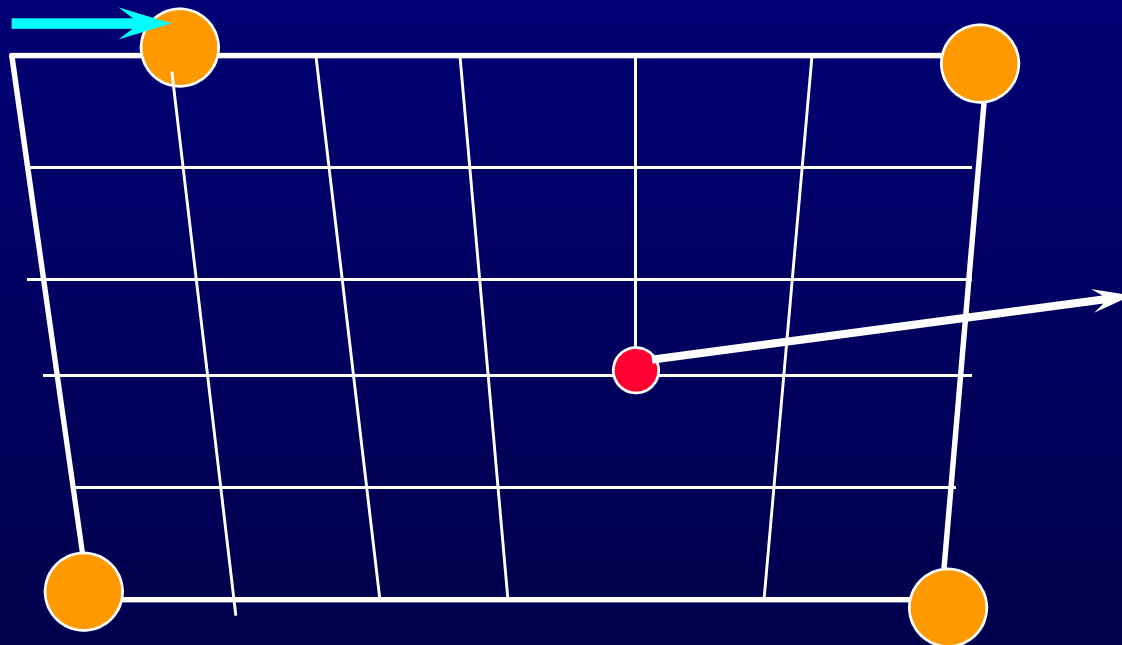


# Lijnfouten: Burgerscircuit



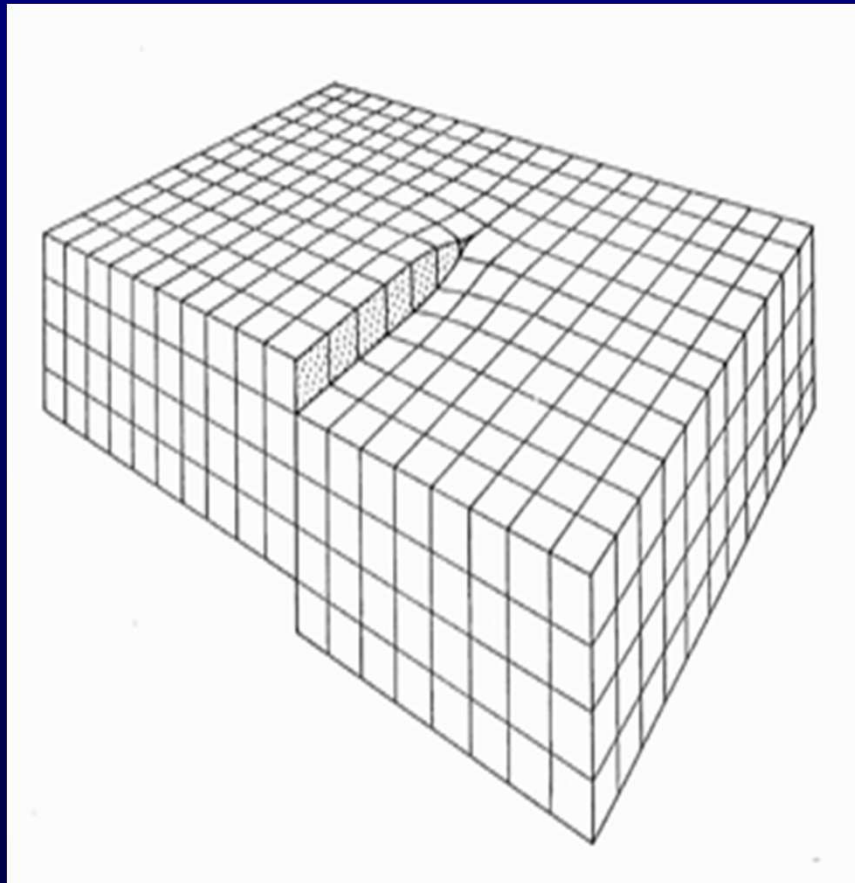
# Lijnfouten: Burgersvector (Burgerscircuit bij een Roosterfout)

burgersvector  $\vec{b}$



Dislocatielijn  
(loodrecht op vlak  
van tekening)

# Lijnfouten: Burgersvector (Burgerscircuit bij een Roosterfout)



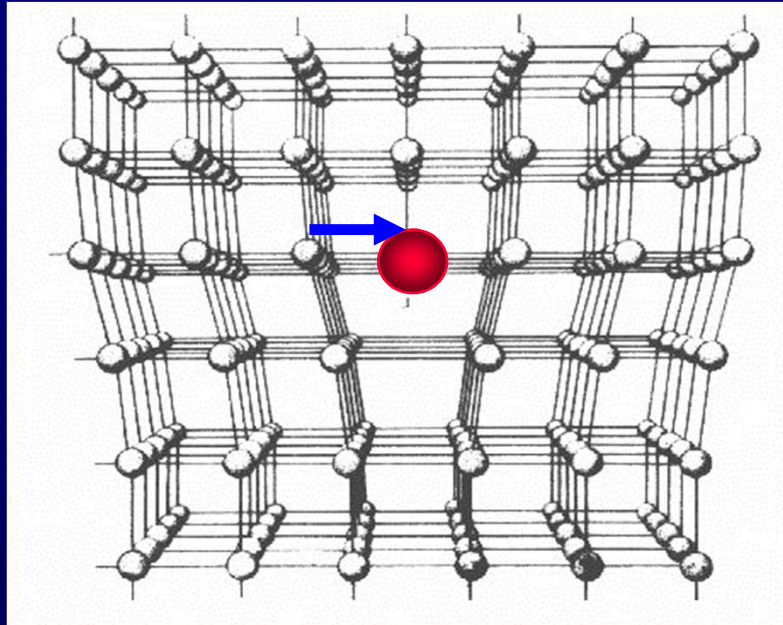
Burgerscircuit bij  
een schroefdislocatie.

De **schroefdislocatie**  
is ontdekt door  
**Prof dr. J.M. Burgers**

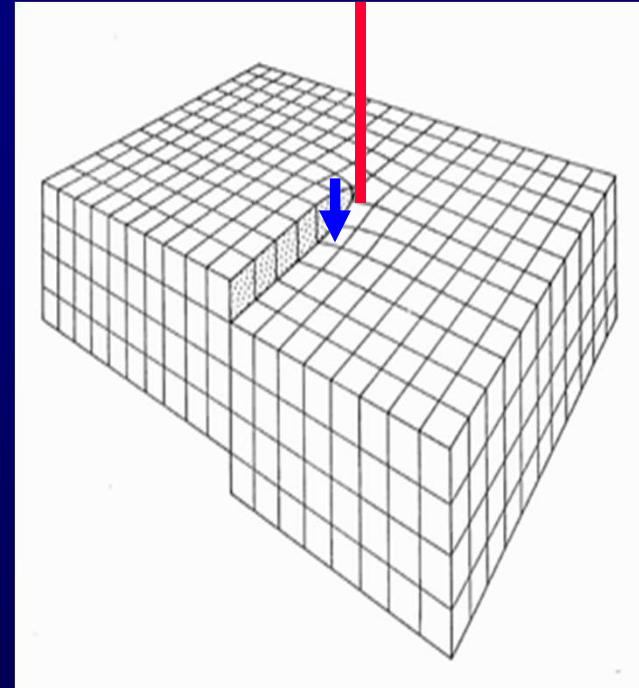
# Lijnfouten: Burgersvector en Dislocatielijn

- Bij een **schroefdislocatie** staat de burgersvector **evenwijdig** aan de dislocatielijn.
- Bij een **randdislocatie** staat de burgersvector **loodrecht** op de dislocatielijn.
- Het **slipvlak** wordt gevormd door **dislocatielijn** en **burgersvector**.

# Randdislocatie en Schroefdislocatie



**Randdislocatie.** Dislocatielijn loodrecht op vlak van tekening  
**Burgersvector loodrecht** op de dislocatielijn



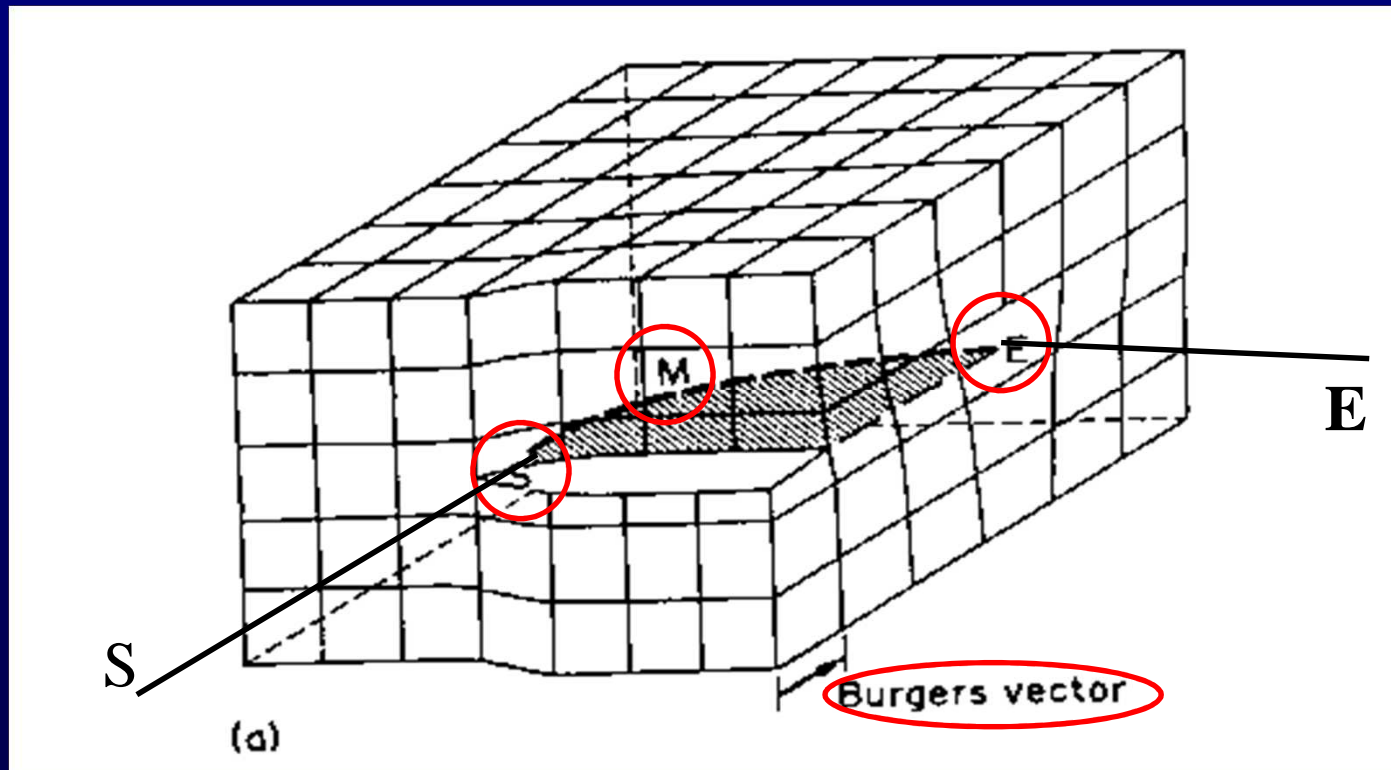
**Schroefdislocatie:** Burgersvector **evenwijdig** aan de dislocatielijn  
(let op het burgerscircuit in de animatie)

# Gemengde Dislocaties

- **Randdislocaties** en **Schroefdislocaties** zijn **uitersten**.
- Er bestaan **mengvormen**: gemengde dislocaties.
- Gemengde dislocaties hebben dus **deels** randkarakter, **deels** schroefkarakter.
- Het **karakter** van de dislocatie **verandert** dus **met de plaats** op de **dislocatielijn**.

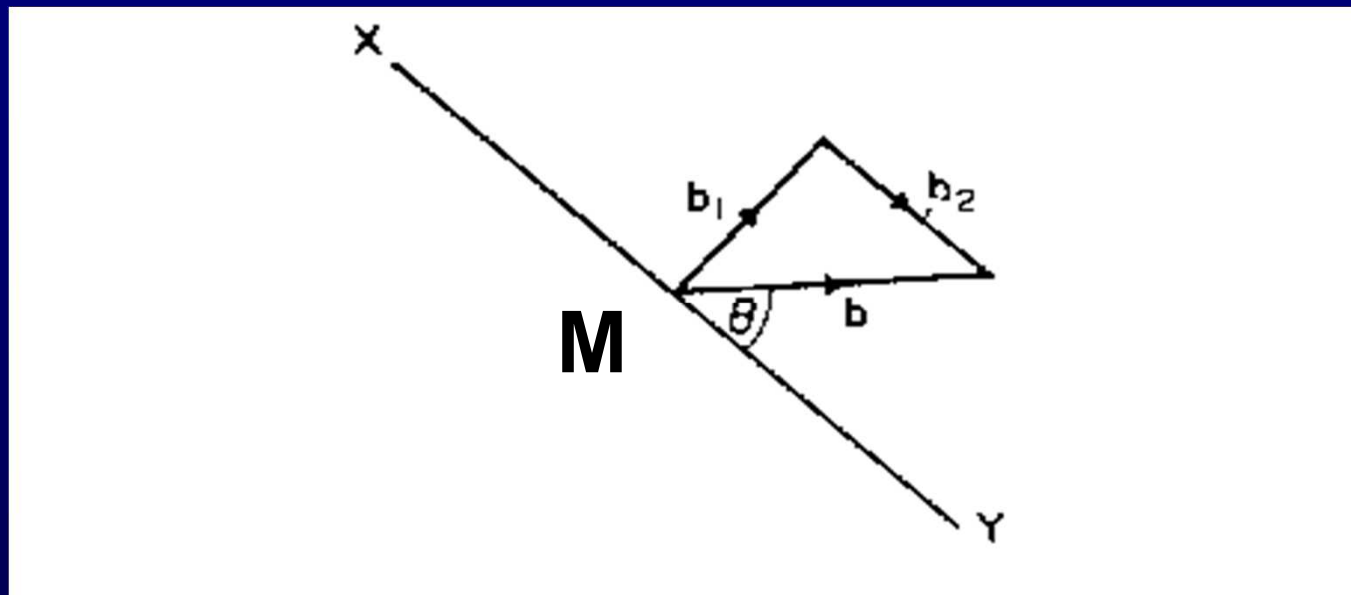


# Gemengde Dislocatie



E = Edge, S = Screw, M = Mixed

# Gemengde Dislocatie - burgersvector



De **burgersvector** op punt M van de gemengde dislocatie wordt gevonden door **vectorieel optellen** van de **randcomponent**  $b_1$  en **schroefcomponent**  $b_2$ .

# Eindigen van dislocaties

Een dislocatie kan:

- zich **vertakken/eindigen** in een andere dislocatie.
- **eindigen** aan het kristaloppervlak.
- **eindigen** in een puntfout.

Een dislocatie kan **NOOIT** “zo maar” eindigen !!

# Dislocatiedichtheid

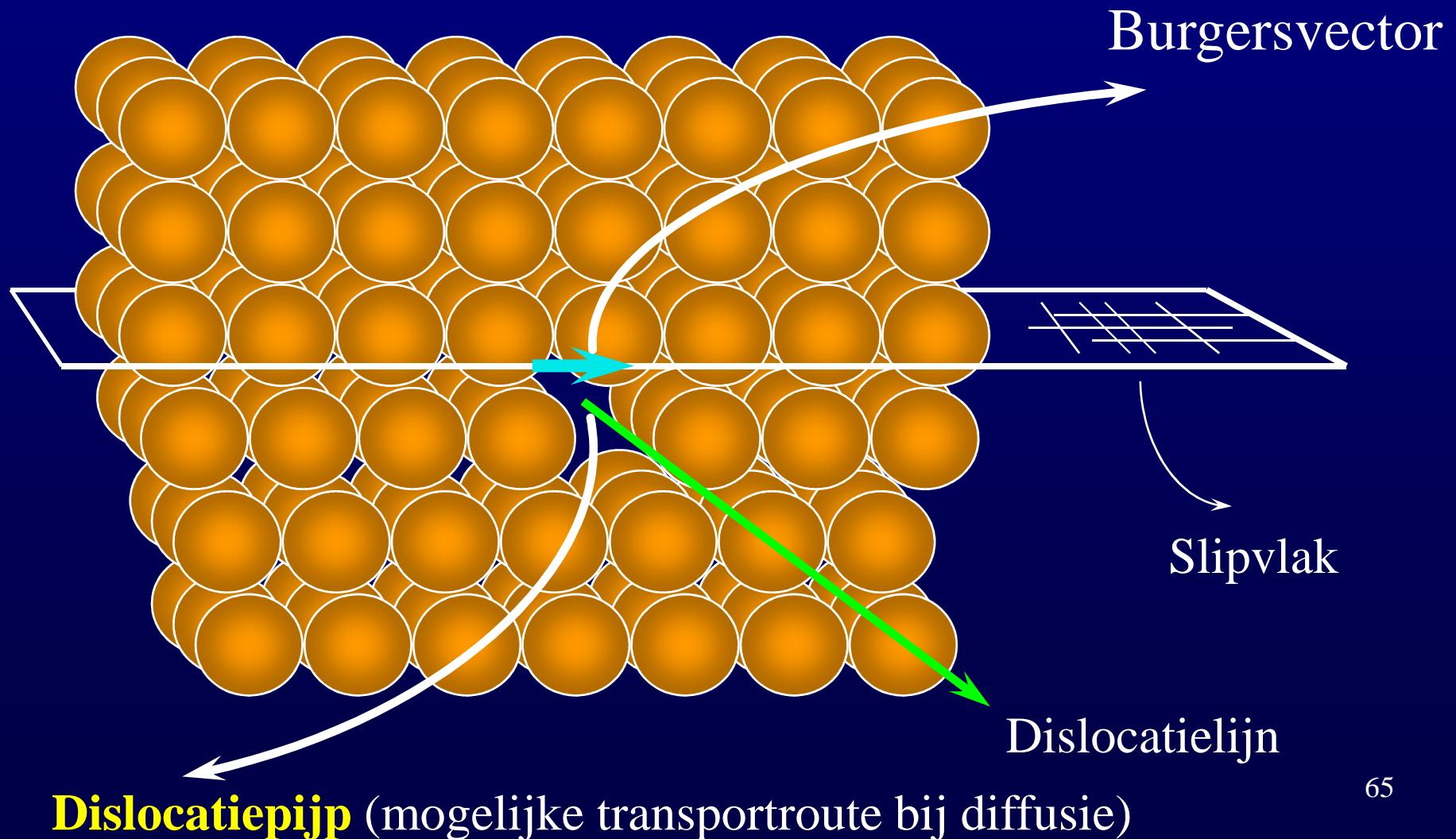
- de totale lengte van dislocaties in het kristal:  $l$
- het volume van het kristal :  $V$
- de dislocatiedichtheid  $N$  met eenheid  $\text{cm}^{-2}$  :

$$N = \frac{l}{V}$$

Voorbeelden :

- goed uitgegloeide materialen:  $10^6 - 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- plastisch gedeformeerde materialen:  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$

# Aspecten van een randdislocatie



# Simuleren en Aantonen van Dislocaties

Bubble-raft

TEM

Etsputten

Decoratie

# Aantonen van dislocaties

- Dislocaties kunnen **gesimuleerd** worden m.b.v. een zogenaamde “**bubble raft**”: een zeepoplossing, waar reproduceerbaar belen op het oppervlak gemaakt worden totdat het oppervlak van de zeepoplossing volledig bedekt is.
- In het **geometrische patroon** van de **belen** ontstaan **spontaan fouten**.

# Het maken van een bubble-raft



De bubble raft kan worden gemaakt door lucht door een zeep-oplossing te blazen met een kleine pomp verbonden met een holle naald. De grootte van de bellen kan worden gecontroleerd m.b.v. de snelheid van de lucht door de naald en de diepte waarop de naald onder het oppervlak zit. De twee platen aan weerszijden dienen om krachten op de het bellenoppervlak uit te oefenen.

Foto's: University of Cambridge, DoITPoMS Teaching and Learning Packages

DoITPoMS = Dissemination of IT for the Promotion of Materials Science

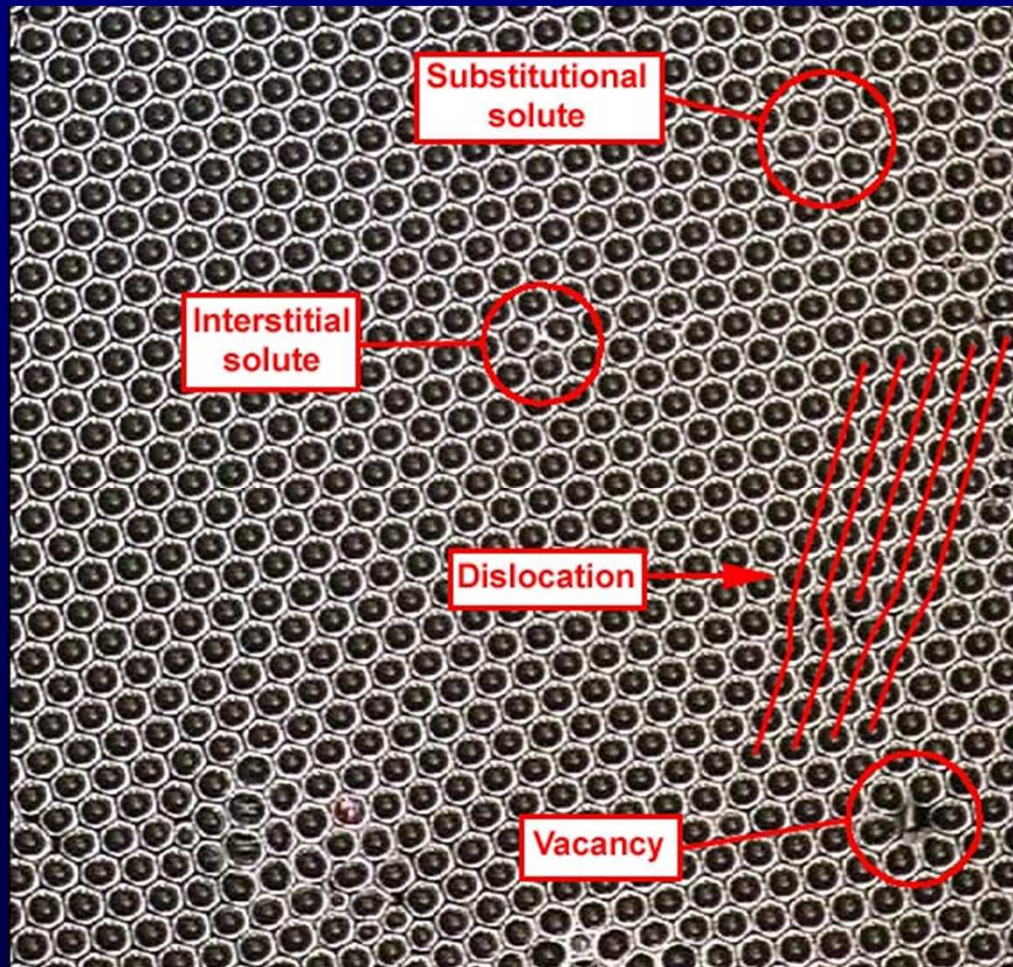
© DoITPoMS Micrograph Library, University of Cambridge

<http://www.doitpoms.ac.uk>

<http://www.msm.cam.ac.uk/phase-trans/2002/dislocations.movies.html>



# Roosterfouten in een bubble-raft



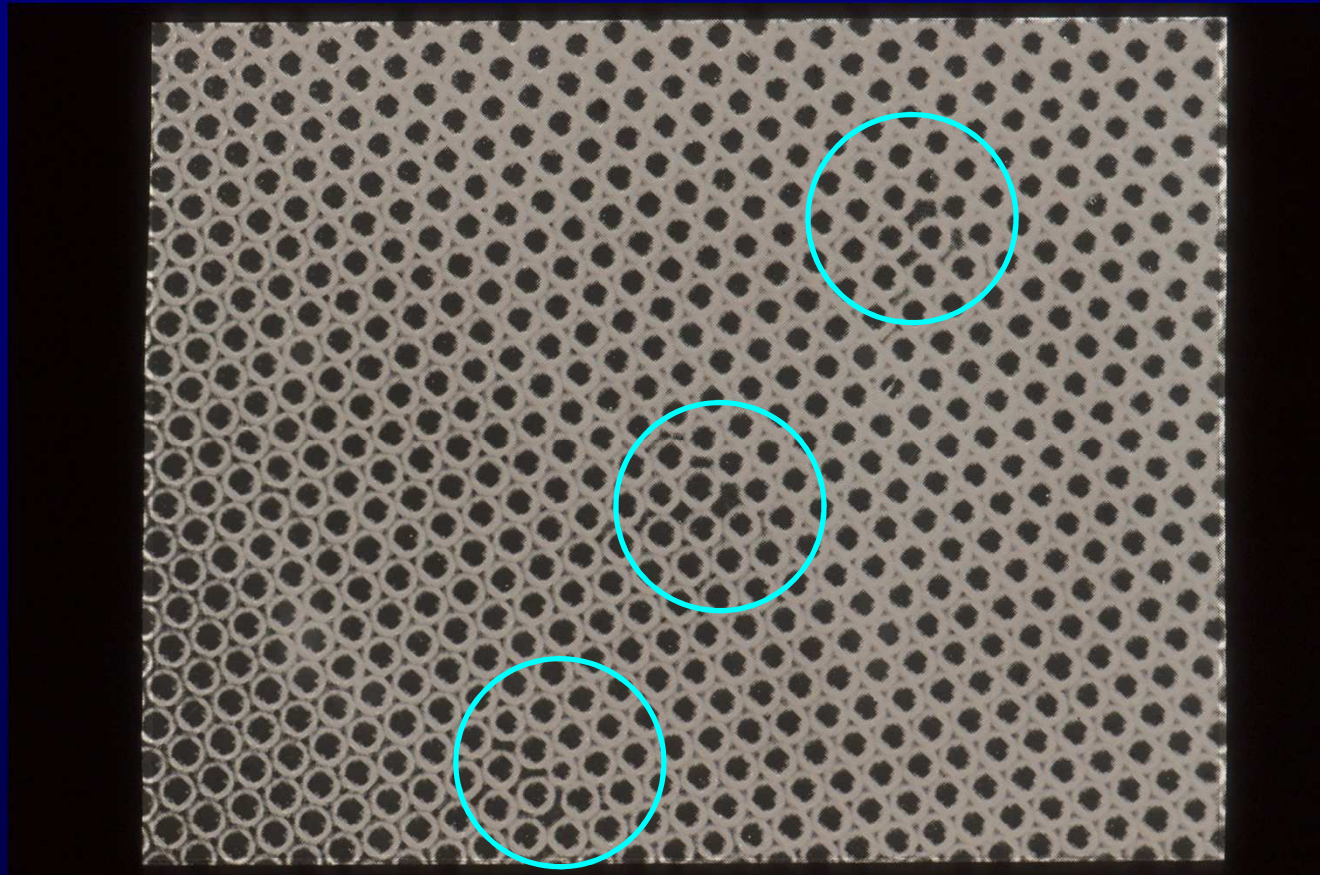
Substitutie

Interstitie

Dislocatie

Vacature

# Roosterfouten in een bubble-raft



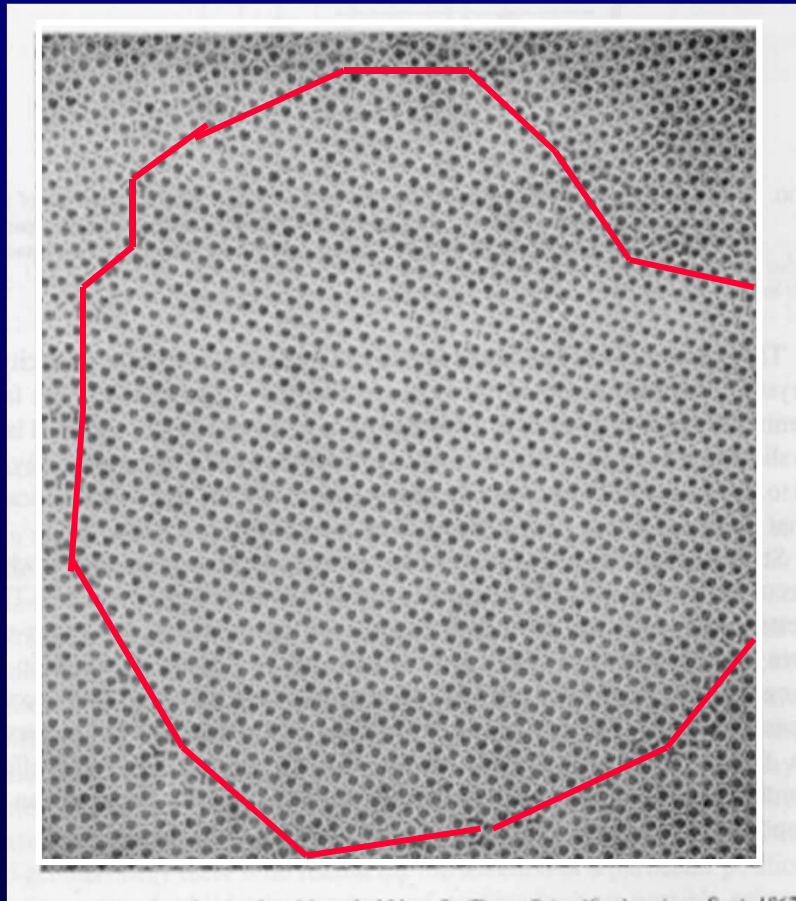
Dislocatie

Dislocatie

Dislocatie en  
substitutie



# “Korrel” in een bubble-raft



Hieruit blijkt al dat **korrelgrenzen** vermoedelijk veel met **roosterfouten** van doen zullen hebben !!

# Deformatie in een bubble-raft:

[http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/dislocations/dislocation\\_motion.php](http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/dislocations/dislocation_motion.php)

# Aantonen van dislocaties

Aanvankelijk bestonden dislocaties alleen maar in theorie.

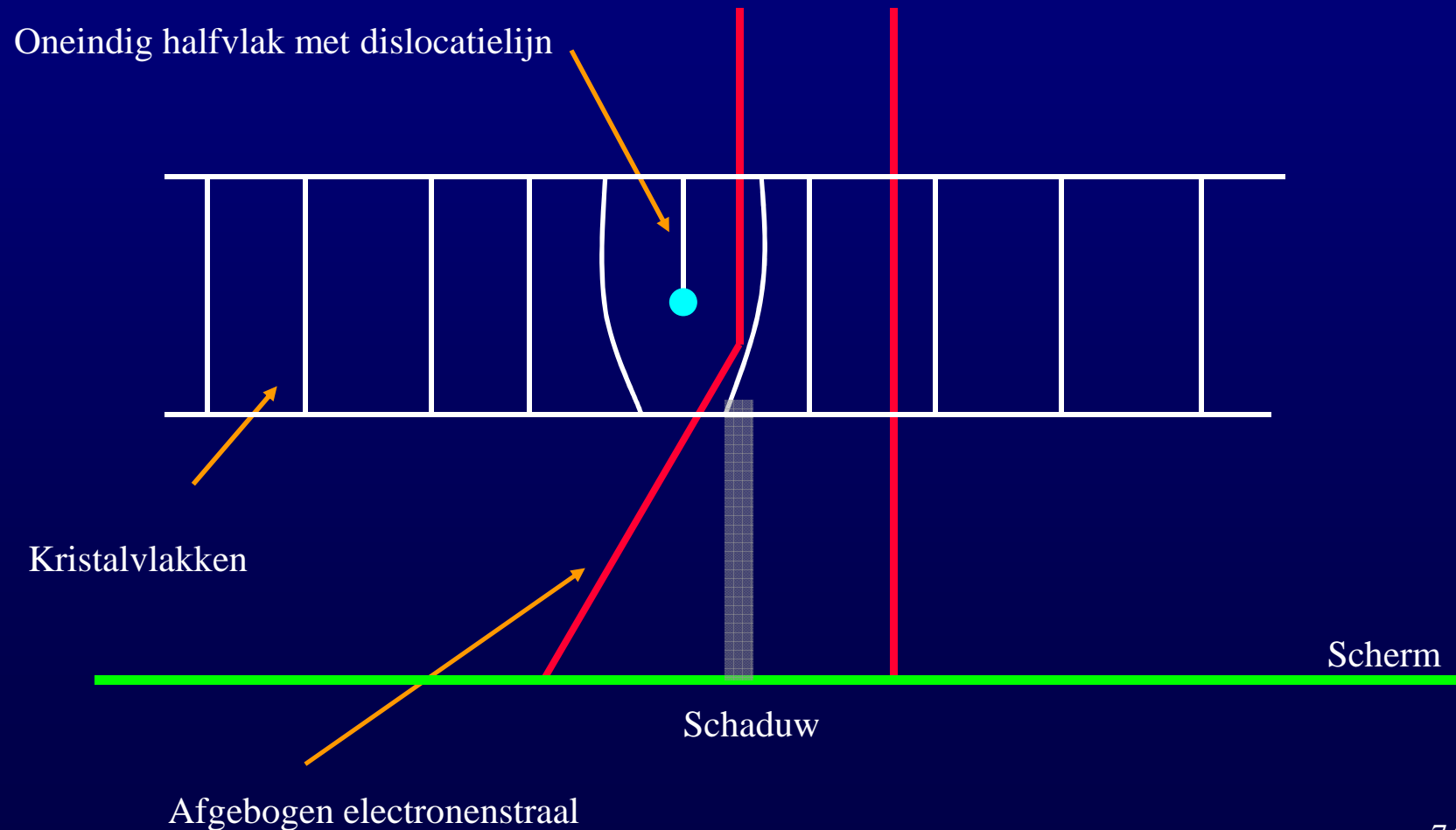
Men heeft dislocaties kunnen aantonen met :

- **transmissie-electronenmicroscopie (TEM)**
- **oppervlaktetechnieken (etsen)**
- **decoratietechnieken**

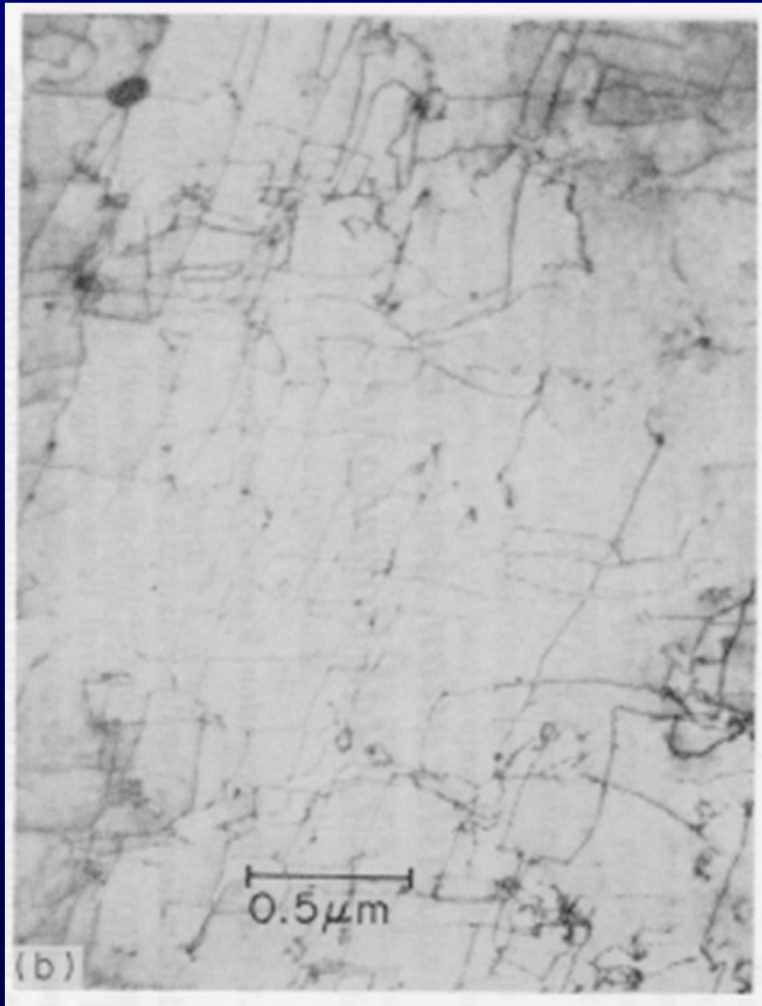
# TEM (Transmissie Electronen Microscop)

## Afbeelden dislocaties

Oneindig halfvlak met dislocatielijn



# TEM-1 (Transmissie Electronen Microscop)

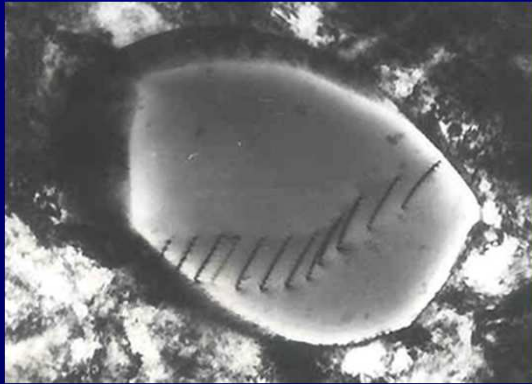


Dislocaties in plastisch gedeformeerd ijzer.

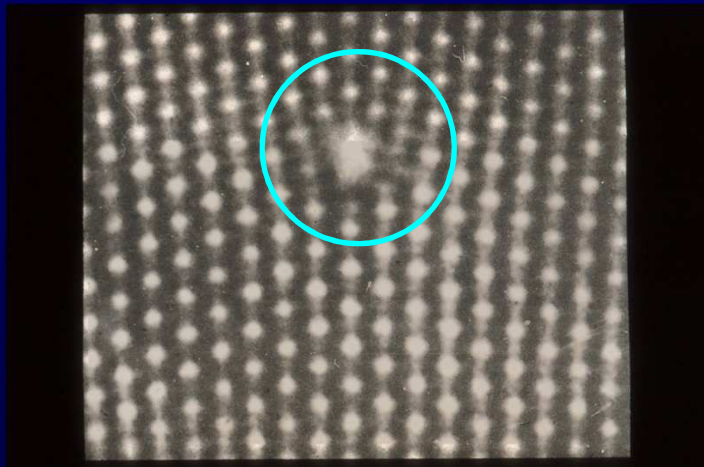
Er zijn op de foto herhaaldelijk dislocaties te zien die “zo maar” lijken op te houden. Maar dat kan niet...

Wat is hier aan de hand ?

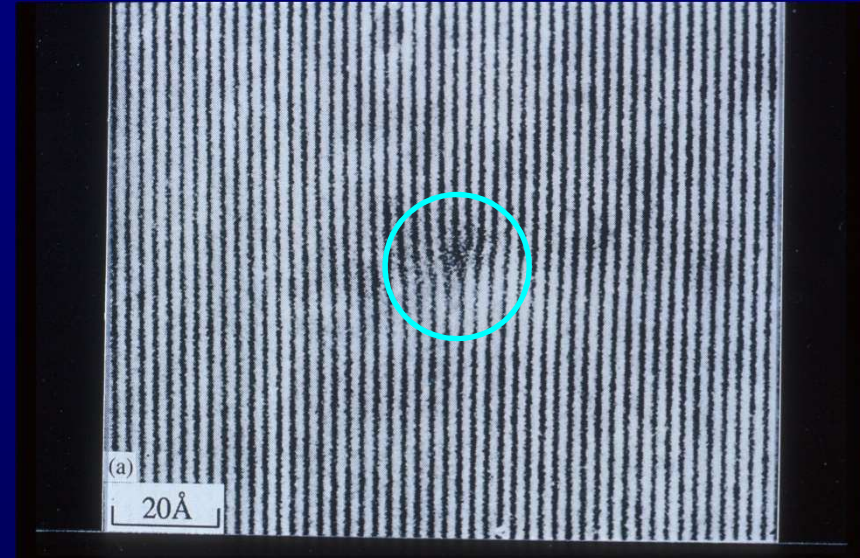
# TEM-2 (Transmissie Electronen Microscop)



Dislocaties in Austenitisch Staal



Twee randdislocaties, **Interferentie patroon**.

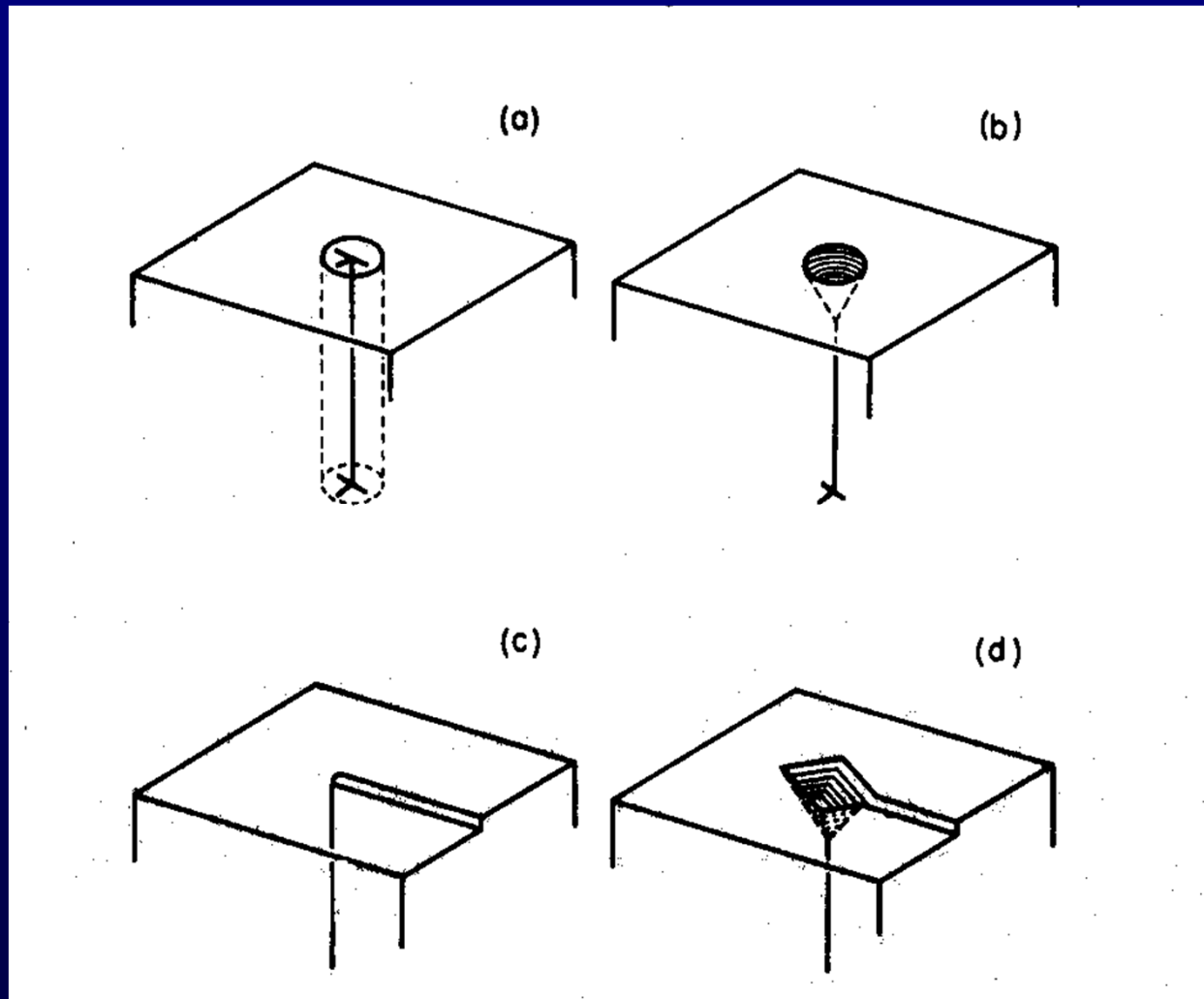


Randdislocatie, **Interferentie Patroon**

Interferentie patronen ontstaan anders dan de tot nu toe getoonde patronen.



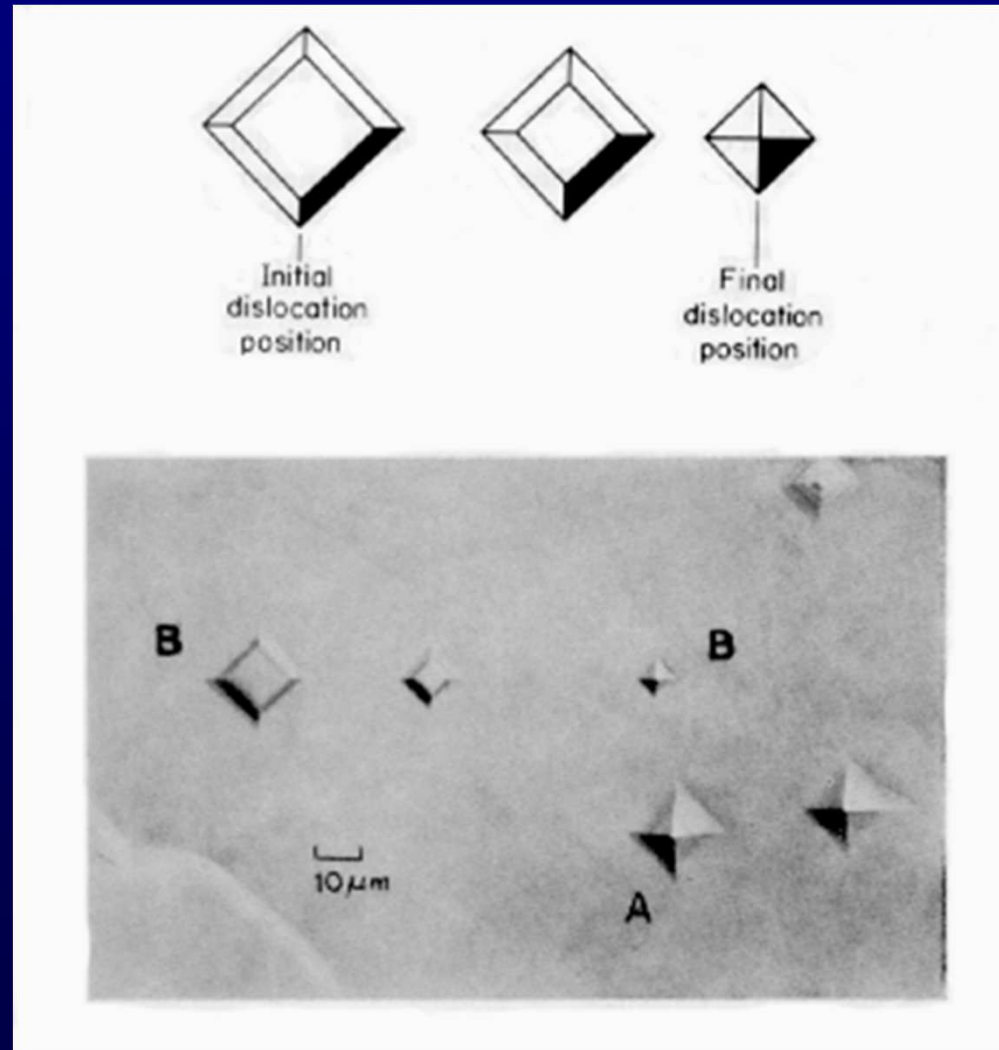
# Etsputten



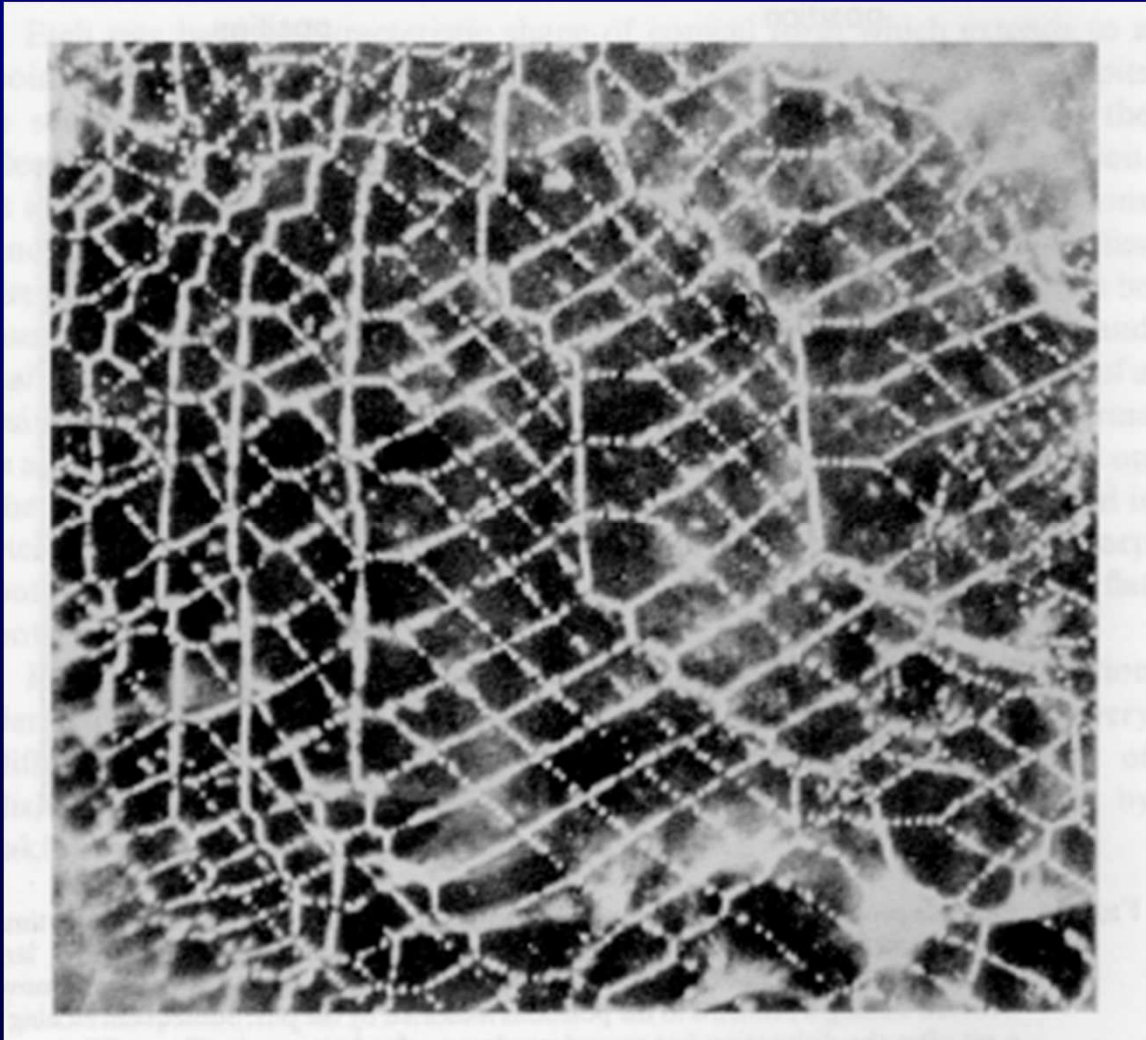
Randdislocatie

Schroefdislocatie

# Etsputten



# Decoratie van de dislocatiepijp door precipitatie



Zilver geprecipiteerd  
in een dun KCL  
kristal.

Optische Microscop

# Korrelgrenzen en Dislocaties

Korrelgrenzen

Annealing

Low angle boundary

Twist boundary

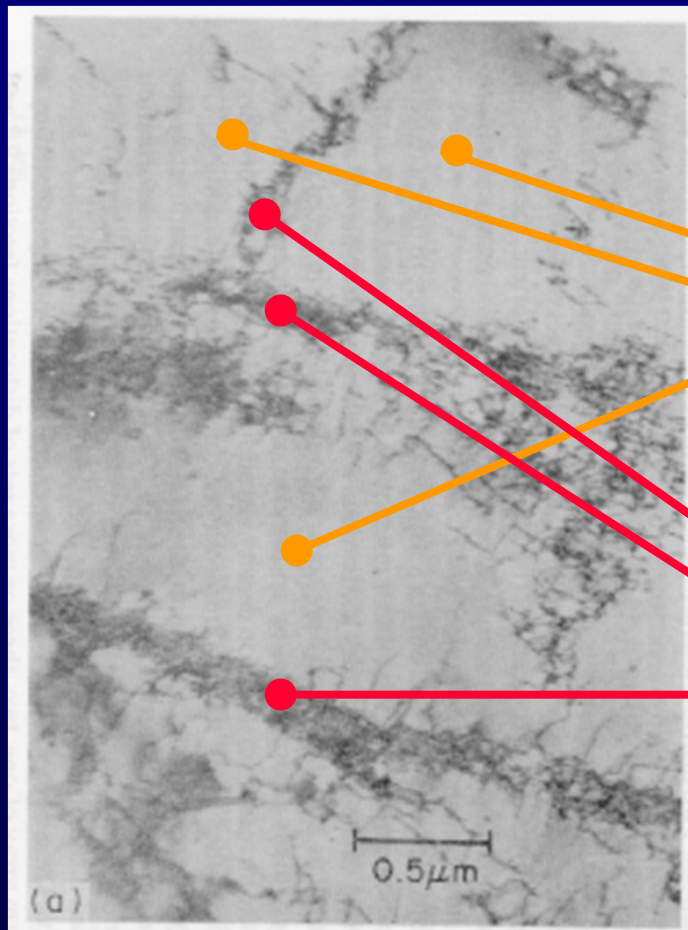
Polygonisatie en Rekristallisatie

# Korrelgrenzen en dislocaties

- Als gevolg van deformatie kunnen nieuwe korrelgrenzen ontstaan
- Plastische deformatie van kristallijn materiaal leidt tot vorming van 3-dimensionale verdelingen van dislocaties



# Korrelgrenzen en dislocaties



Vaak ontstaan er tijdens deformatie ruimtelijke gebieden (vrijwel)

**zonder** dislocaties,

gescheiden van elkaar

door “**muren**” van

**Dislocatieclusters.**

# Annealing (herstelgloeien)

- Als gevolg van plastische deformatie komt energie **vrij** in de vorm van **warmte**.
- Een deel van de energie wordt echter opgeslagen als plastische vervormingsenergie: “**Stored Energy**”.
- Deze energie blijft **alléén** opgeslagen als de temperatuur relatief **laag** is: de dislocaties zijn dan immobiel.

# Annealing (herstelgloeien)

- Bij hogere temperatuur zullen dislocaties zich in **configuraties van lagere energie** willen rangschikken.
- Men moet het materiaal dus gewoonlijk **verhitten** om een merkbare snelheid van her-rangschikking te krijgen.
- Er zijn verschillende typen van configuraties van lagere energie.
- Men onderscheidt wel **Low-angle boundaries** en **Twist-boundaries** (schroefdislocatie).

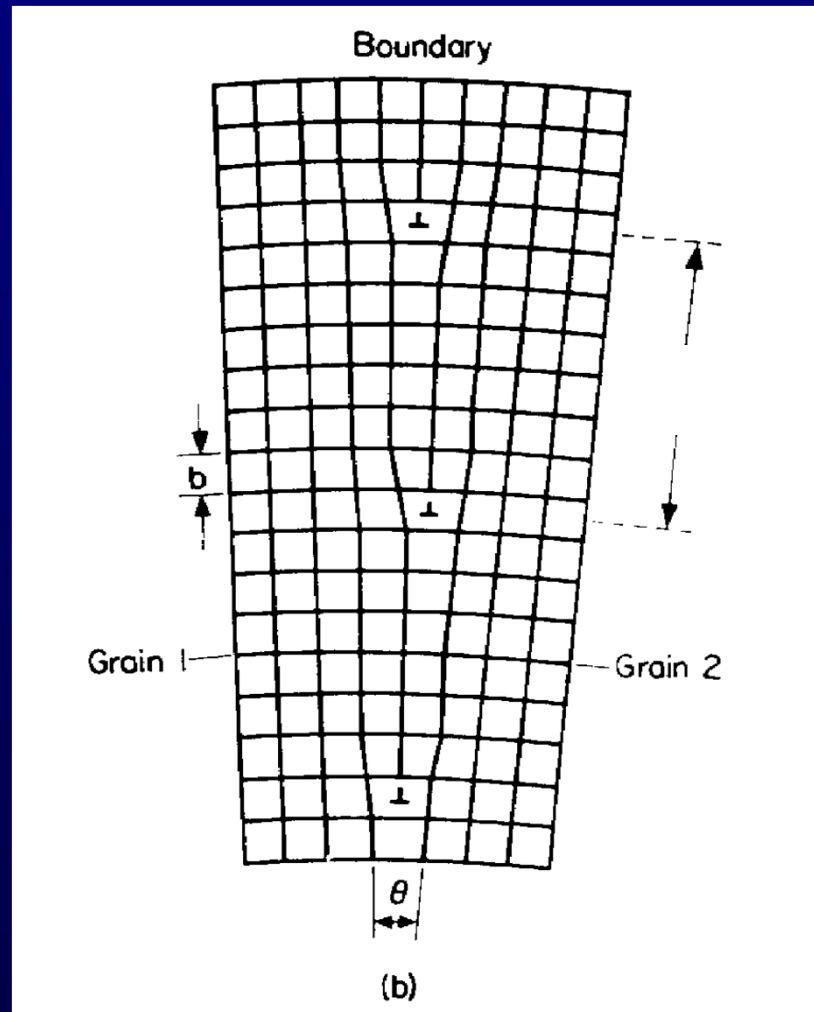


# Annealing (herstelgloeien)

## Randdislocatie

- Eerst ontstaan **Low-angle boundaries**, later de **High (Large)-angle boundaries**.
- Bij low-angle boundaries ontstaat er een kleine hoek **tussen** delen van het rooster als gevolg van het zich opnieuw rangschikken van dislocaties.

# Low-angle Boundary



Hoek tussen de roosters:  $\theta$

Afstand tussen de dislocaties :  $h$

Burgersvector:  $b$

$$\frac{b}{2h} = \sin \frac{\theta}{2} \quad (\theta \text{ in radialen})$$

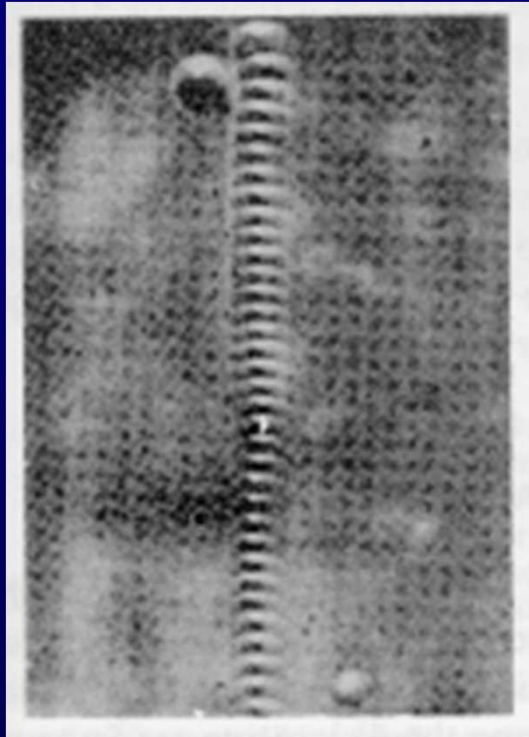
En bij kleine  $\theta$ :

$$\frac{b}{2h} \approx \frac{\theta}{2} \quad \text{ofwel} \quad \frac{b}{h} \approx \theta$$

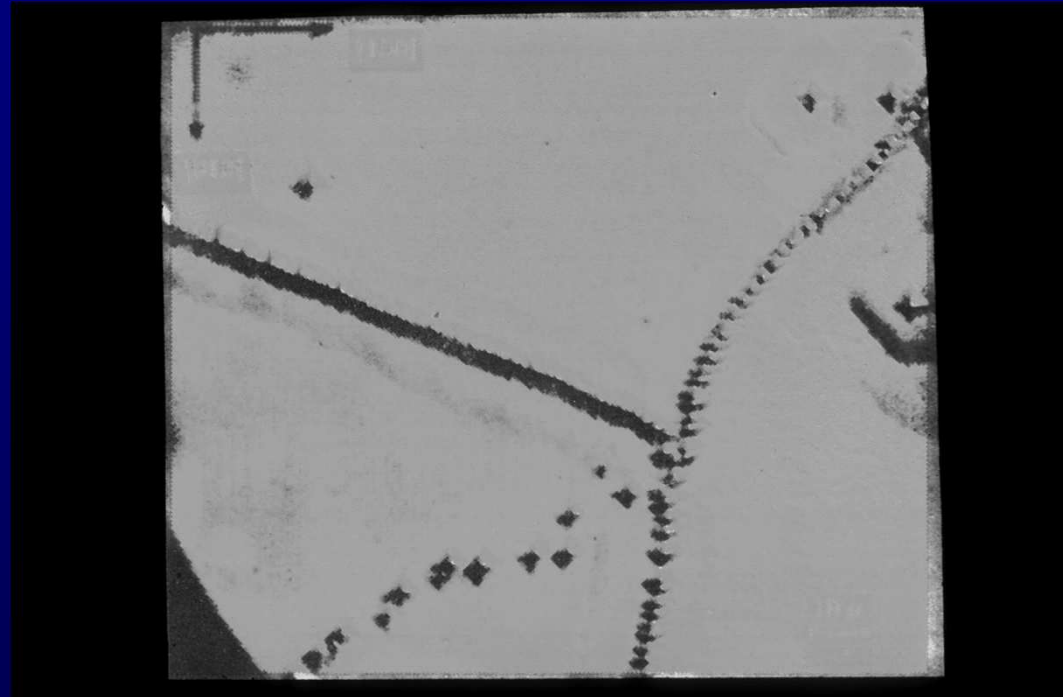
# Low-angle Boundary

- **Typisch** is de hoek tussen de roosters ongeveer **1 tot 2 graden**
- Bij grotere hoeken komen de dislocaties te dicht bij elkaar te liggen
- Er ontstaat dan een ander type grens: de High (Large) Angle Boundary.

# Low-angle Boundary



Reeks etsputten op een rij:  
een **low-angle boundary**  
(hier in Ge-metaal)



Low-angle boundaries. Onbekend materiaal

# Annealing (herstelgloeien)

## Twist boundary

- Bij **schroefdislocaties** komt ongeveer hetzelfde fenomeen voor, maar nu is er geen sprake van een **hoek** tussen twee roosterdelen, maar van een **verdraaiing** van twee roosterdelen.
- Wanneer de vervorming opgevangen wordt door rijen schroefdislocaties ontstaat een **twist-boundary**.

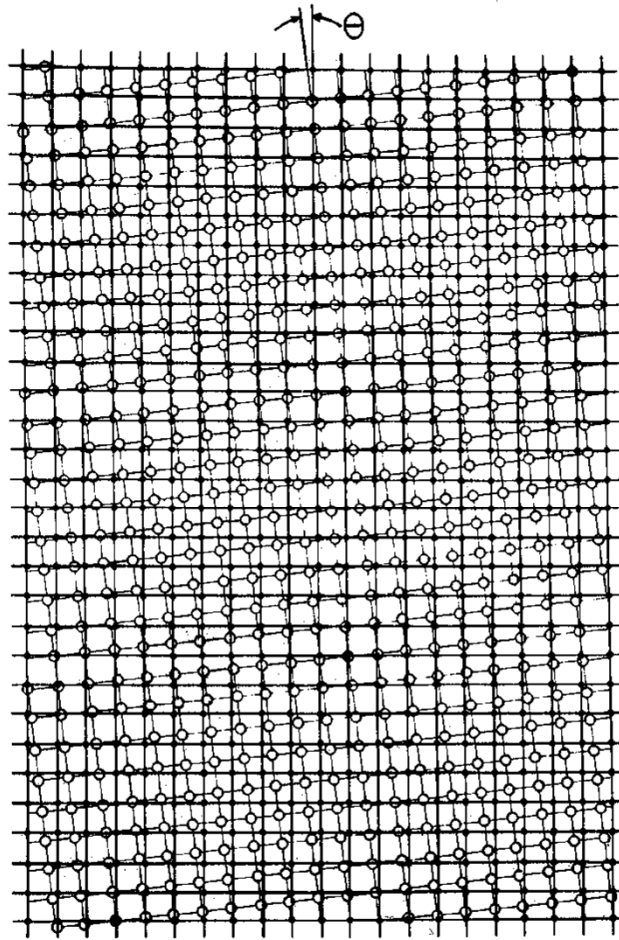
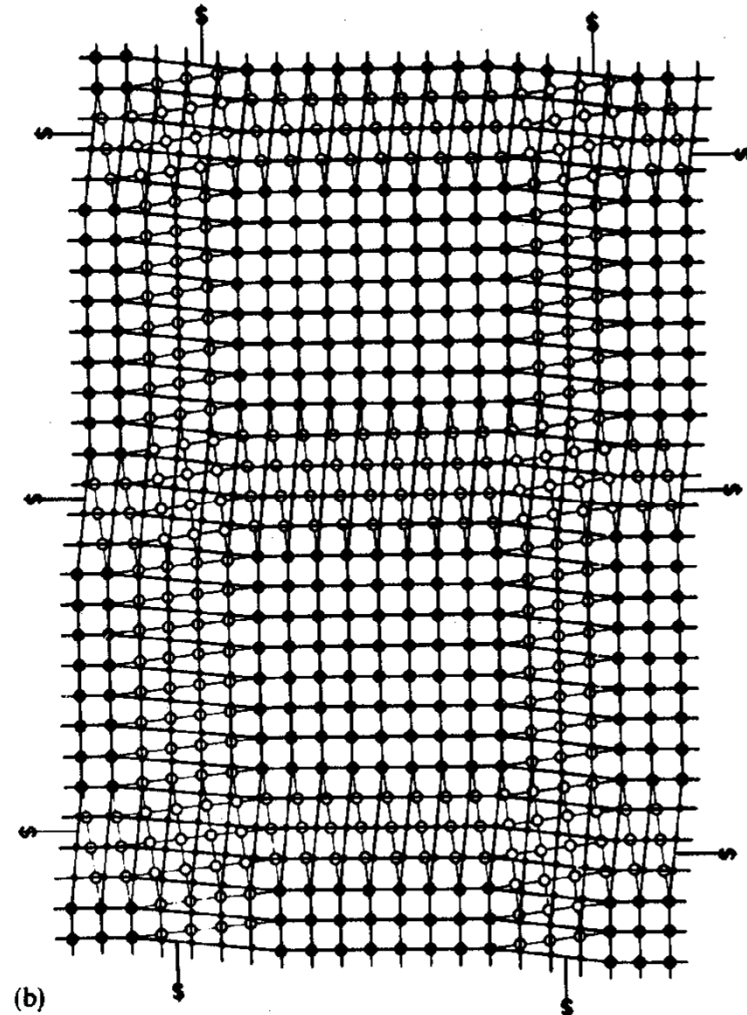


FIG. 9.7(a)

Verdraaiing van het rooster.



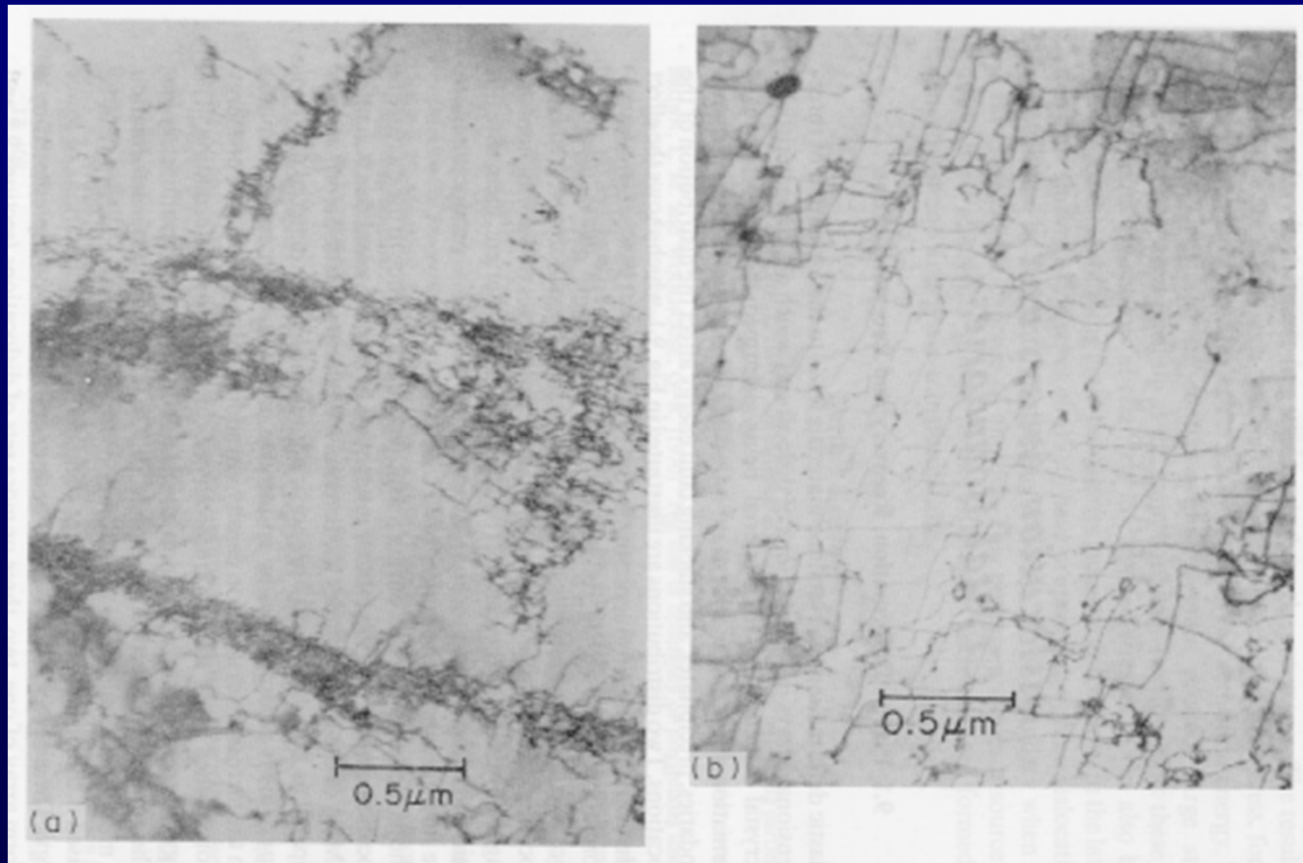
(b)

Rijen schroefdislocaties vangen de vervorming van het rooster op.

# Polygonisatie, Rekristallisatie

- In het annealing proces heet de fase van vorming van Low-angle boundaries: **polygonisatie**.
- Er ontstaan **veelhoekige “subgrains” (polygonisatie)**.
- Bij stijgende temperatuur rekristalliseert de stof en daarna worden gaandeweg de kristallen groter (**korrelgroei**).

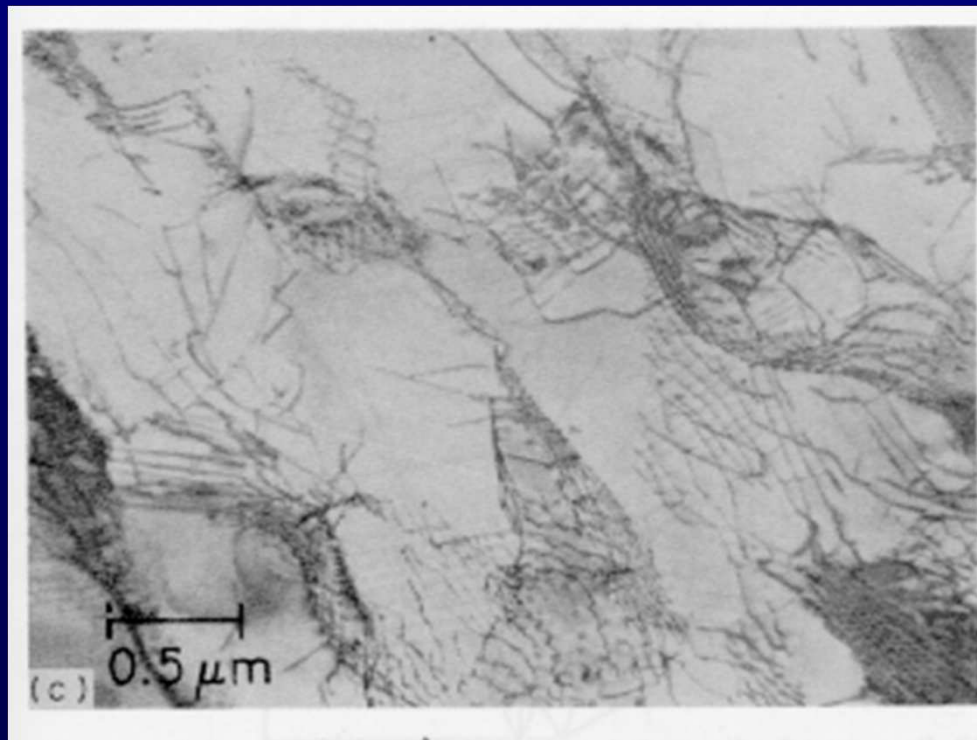
# Polygonisatie, Rekristallisatie



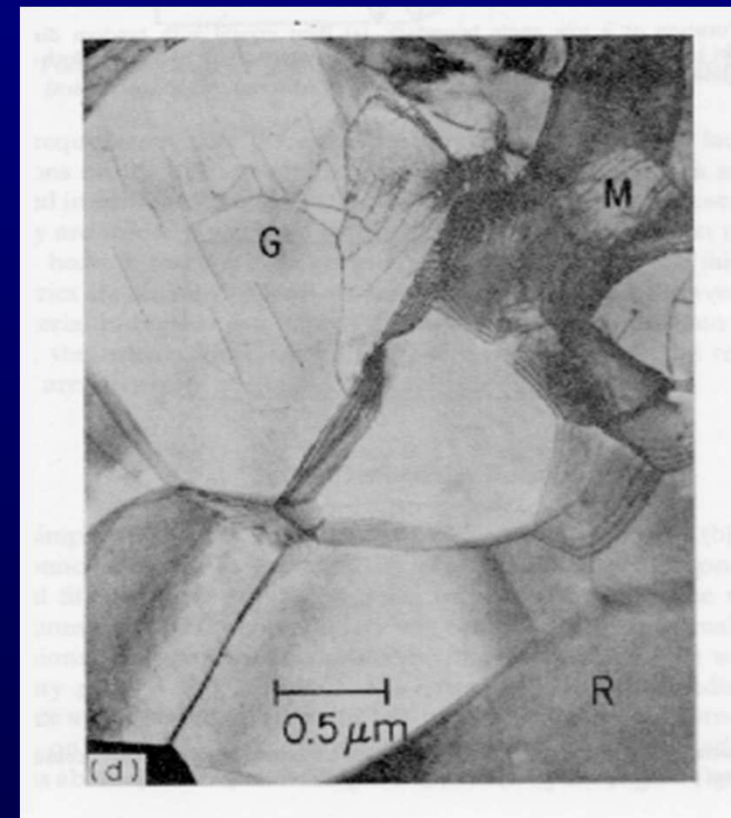
Gedeformeerd materiaal (TEM)



# Polygonisatie, Rekristallisatie

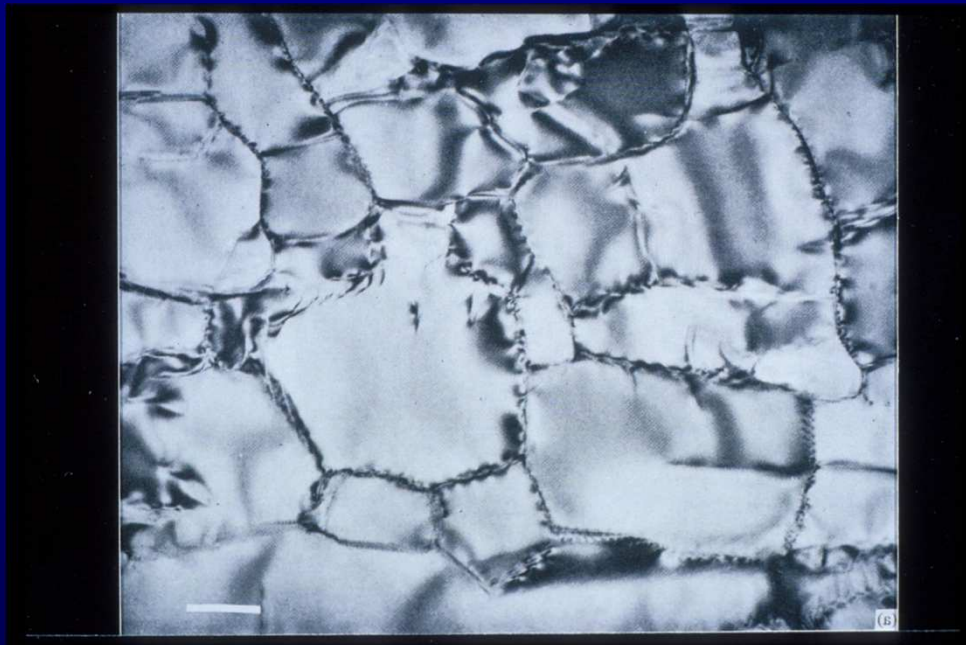


Her-rangschikking van dislocaties



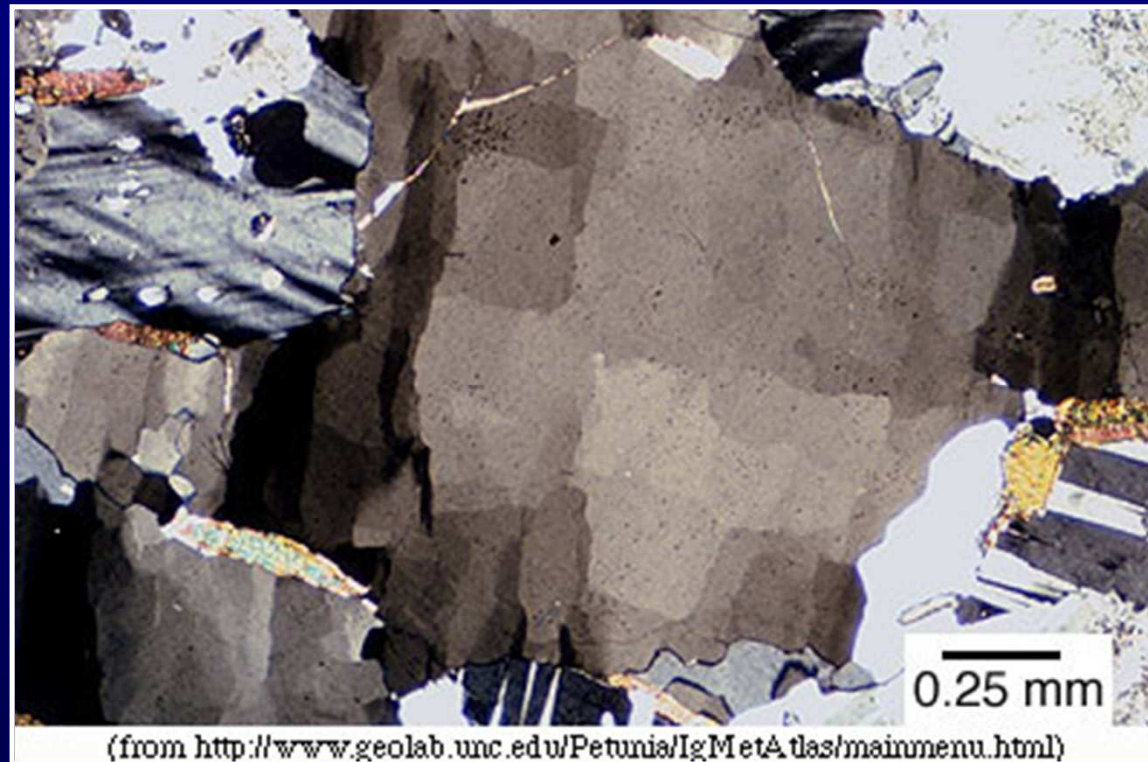
Low-angle boundaries  
en Polygonisatie, Subgrains

# Polygonisatie, Rekristallisatie



Low-angle Boundaries, polygonisatie en subgrains.  
Onbekend materiaal.

# Polygonisatie, Rekristallisatie



**Low-angle boundaries en subgrains in kwarts, polarisatiemicroscop.**  
De **lichte verschillen** in **uitdoving** ontstaan door de **low-angle boundaries**.

# Polygonisatie, Rekristallisatie

[http://www.youtube.com/watch?v=Ac\\_ca\\_NeRnw&NR=1](http://www.youtube.com/watch?v=Ac_ca_NeRnw&NR=1)

**Simulatie** van rekristallisatie en polygonisatie.

<http://www.youtube.com/watch?v=bxpOBVAcMHI&feature=related>

**Polykristallijne kamfer** onder aanwezigheid van met **kampfer verzadigde ethanol**. Van te voren gedeformeerde kamfer korrels tonen herstelprocessen, gevolgd door korrelgroei bij hoge annealing temperaturen. (**dr. J. Schmatz/Prof. dr. J. Urai, RWTH Aken**)

# Annealing: TEM-opnamen

<http://www.msm.cam.ac.uk/phase-trans/2002/dislocations.movies.html>

[http://www.youtube.com/watch?v=J\\_2FdkRqmCA&feature=related](http://www.youtube.com/watch?v=J_2FdkRqmCA&feature=related)

# Beweging van Dislocaties

Beweging van dislocaties

Randdislocatie: Beweging en Afschuiving

Cross-slip

Dislocatieklim

Rol van Obstakels en Onzuiverheden

Verankeren

# Beweging van dislocaties

Het **bewegen van dislocaties** is het **wezen** van **plastische deformatie**: afschuiving over de afstand van enkele atoomlagen !!!!

# Beweging van dislocaties

- De spanning die nodig is om een dislocatie vanuit **rustpositie** over een afstand **b** te **bewegen** in een **zuiver kristal** (geen andere dislocaties) noemt men de **Peierls-(Nabarro) spanning**.

Genoemd naar:

Sir Rudolf Ernst Peierls, (1907–1995),



Frank Reginald Nunes Nabarro (1916 - 2006)



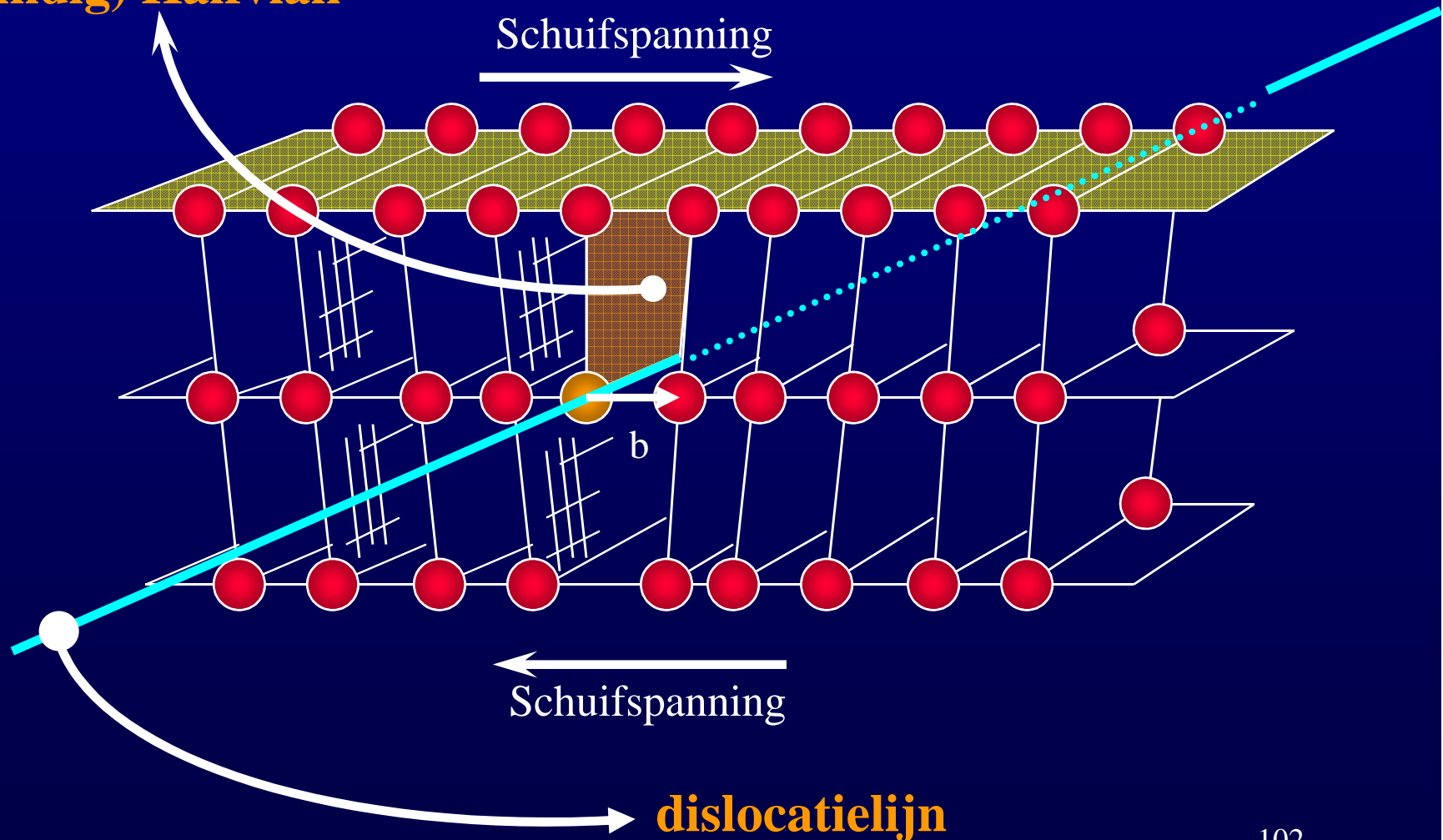


# Beweging van dislocaties

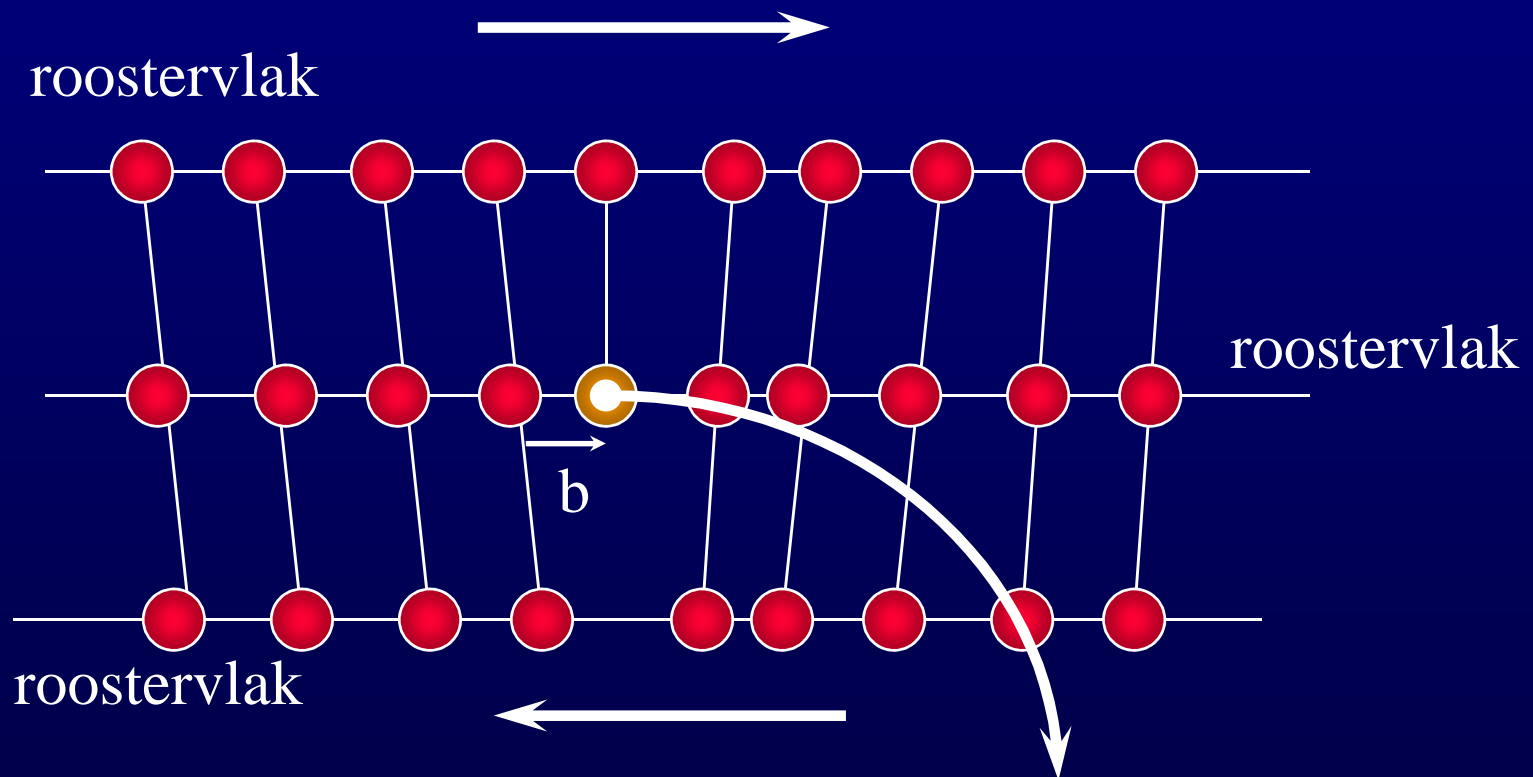
- Er zijn **twee** manieren waarop een dislocatie kan bewegen.
- **Slip** (glijding) in het **slipvlak** dat is gedefiniëerd door dislocatielijn en burgersvector.
- **Klim** (niet in slipvlak).

# Randdislocatie

(Oneindig) Halfvlak

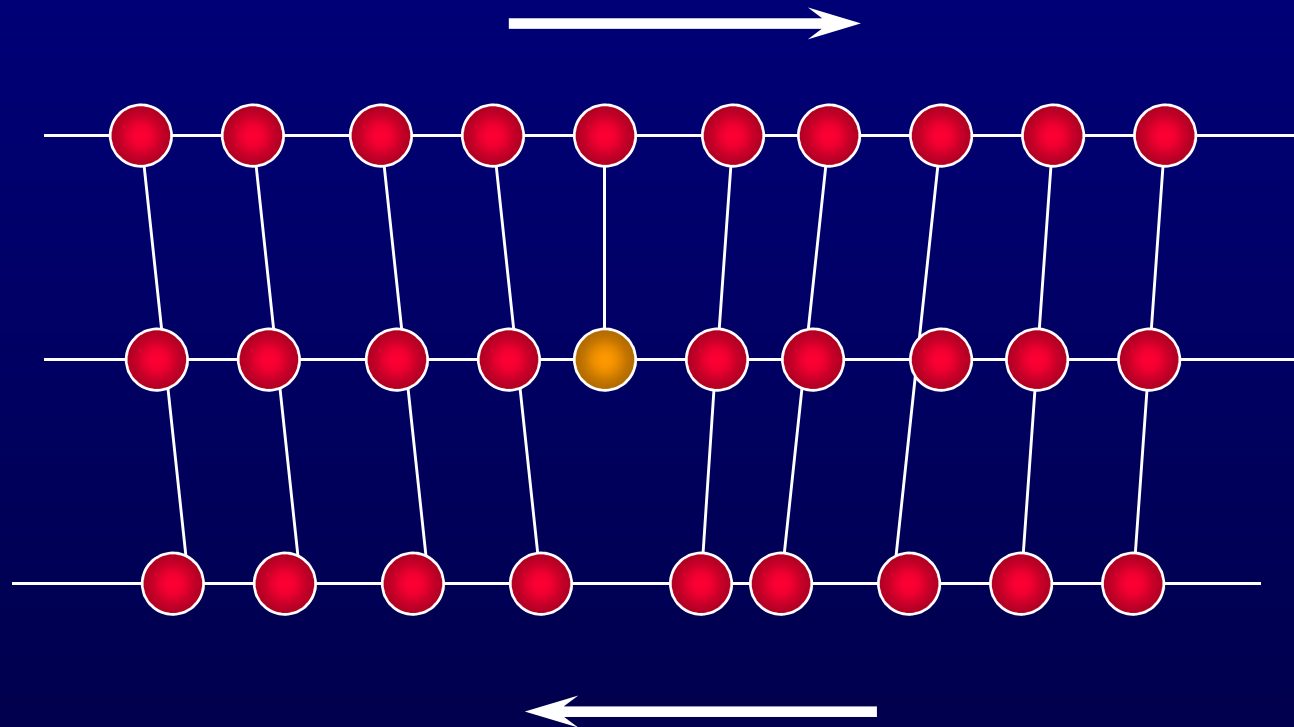


# Randdislocatie: beweging en afschuiving

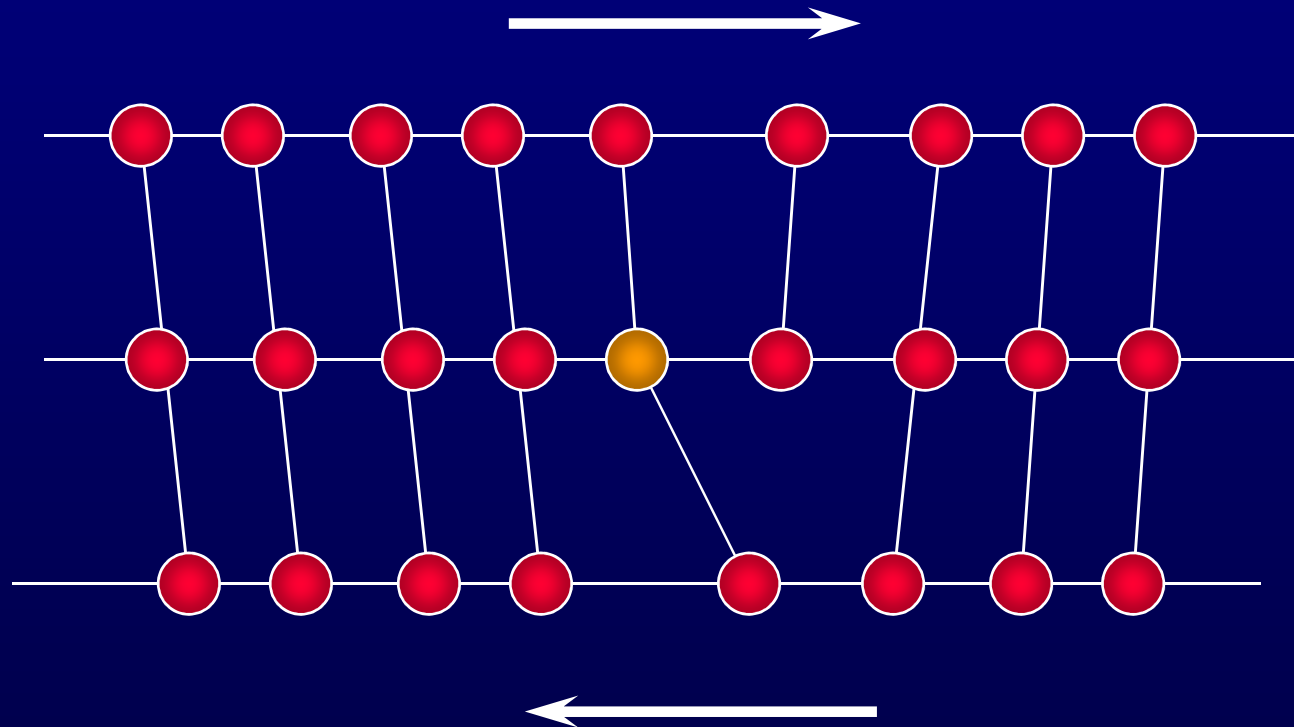


**dislocatielijn, loodrecht op vlak van tekening**  
**b = burgersvector**

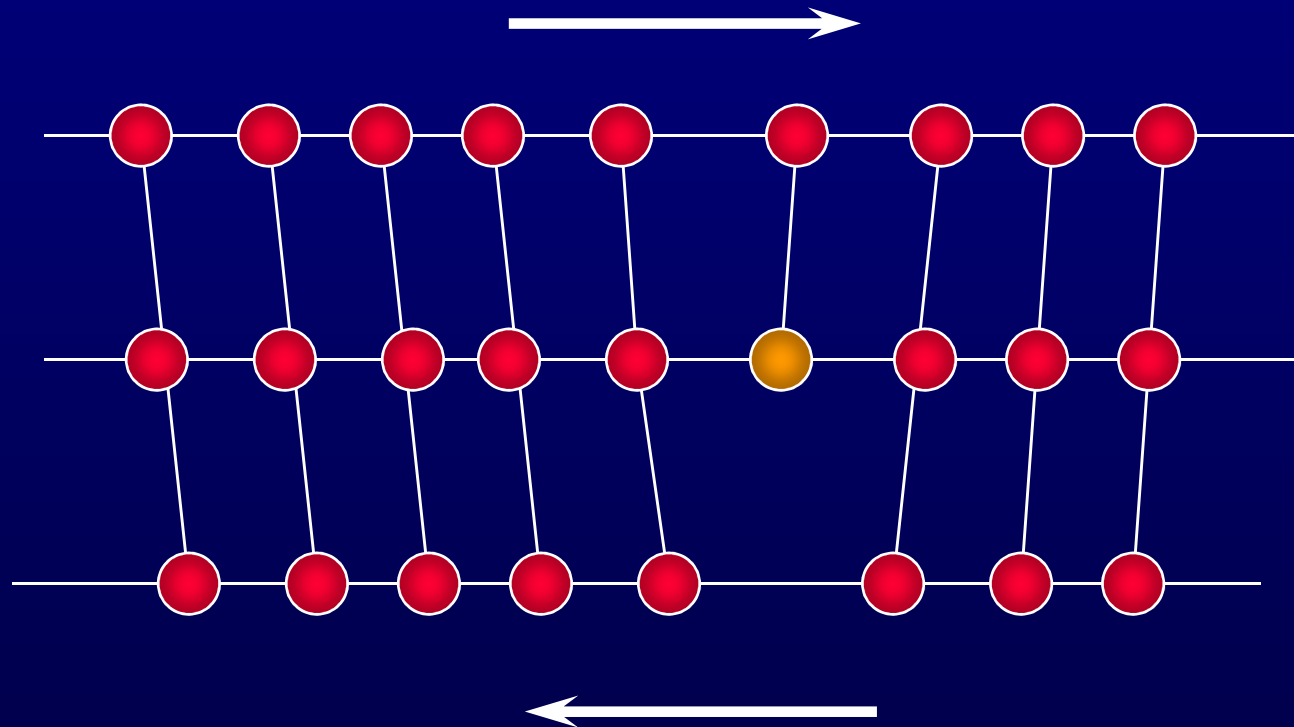
# Randdislocatie: beweging en afschuiving



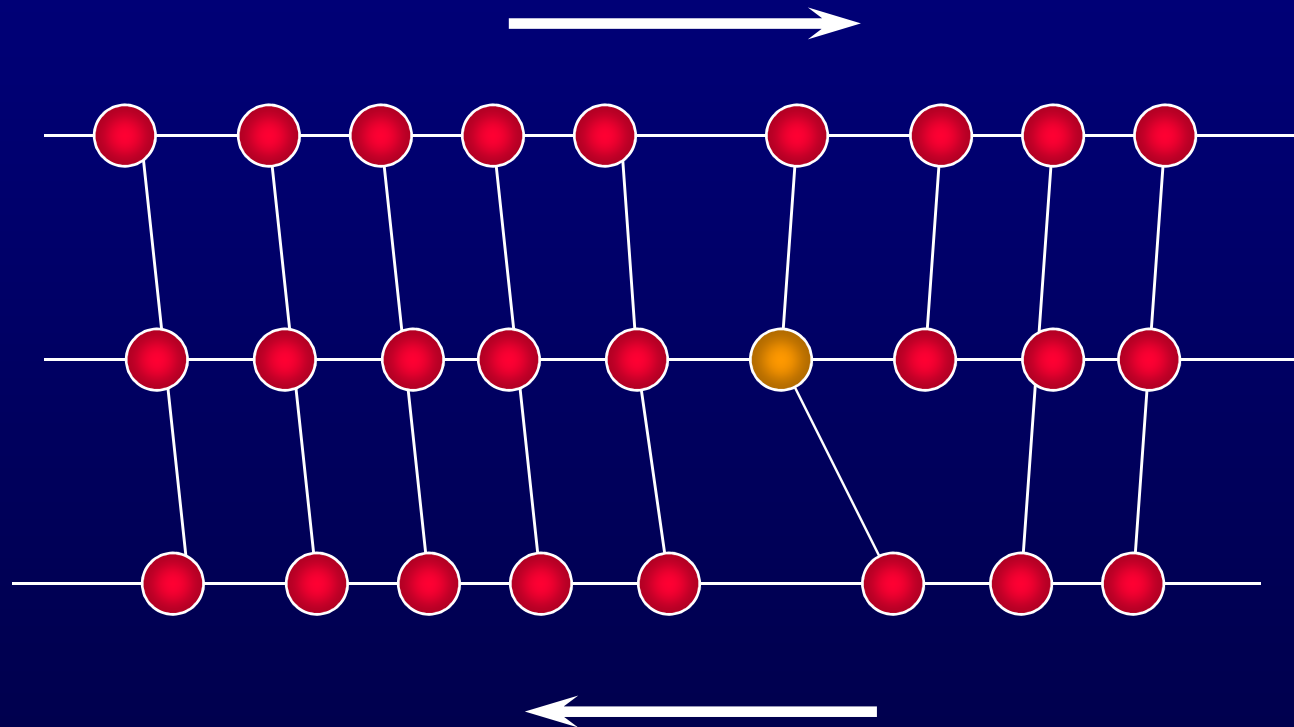
# Randdislocatie: beweging en afschuiving



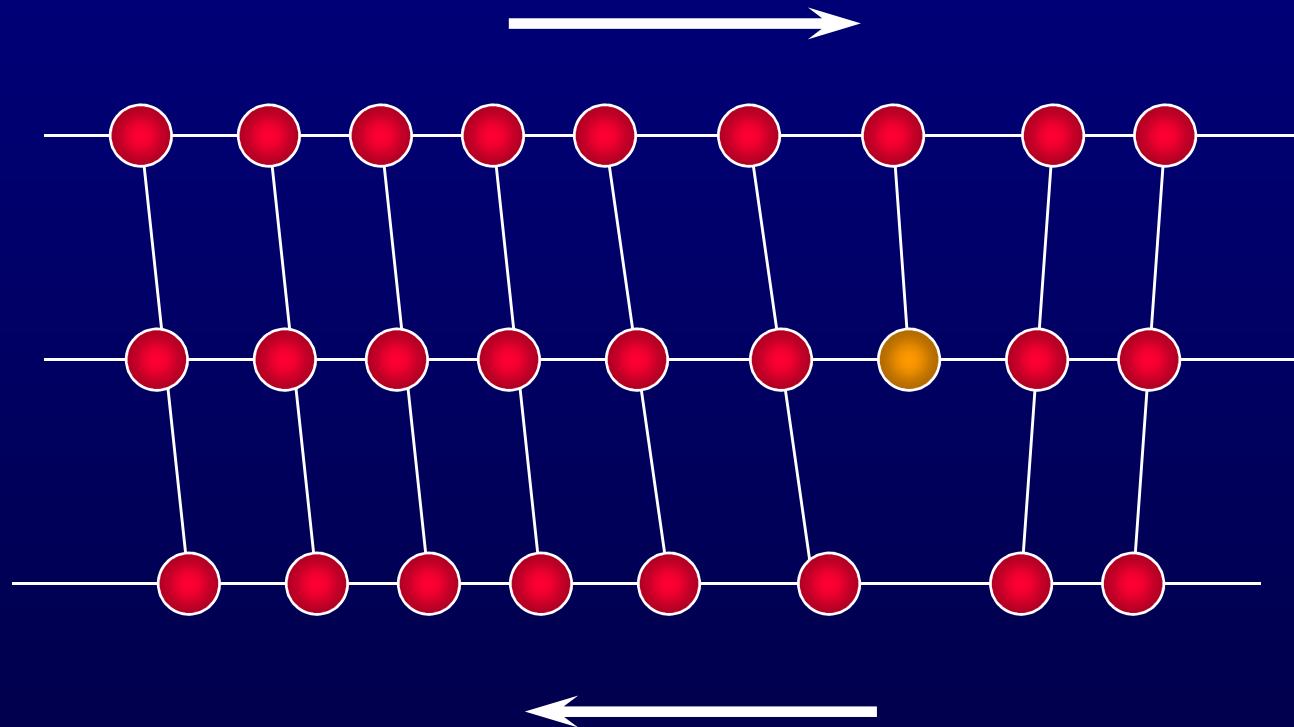
# Randdislocatie: beweging en afschuiving



# Randdislocatie: beweging en afschuiving

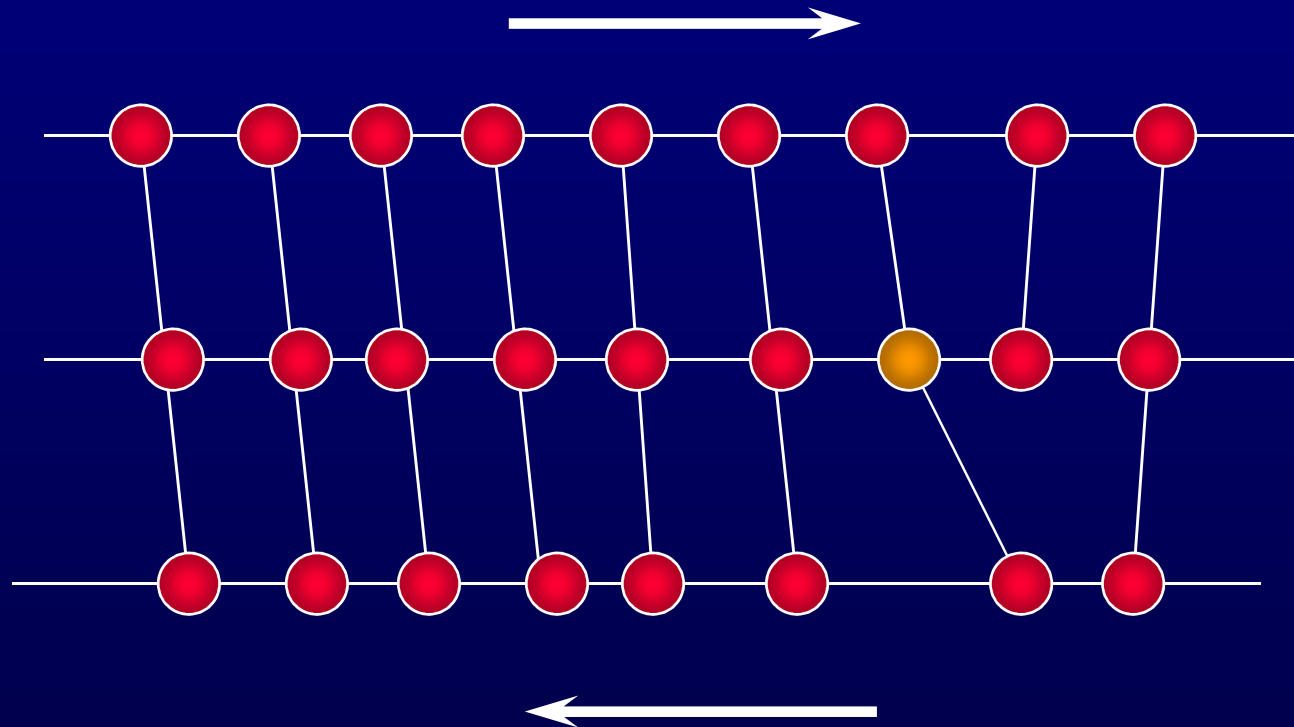


# Randdislocatie: beweging en afschuiving

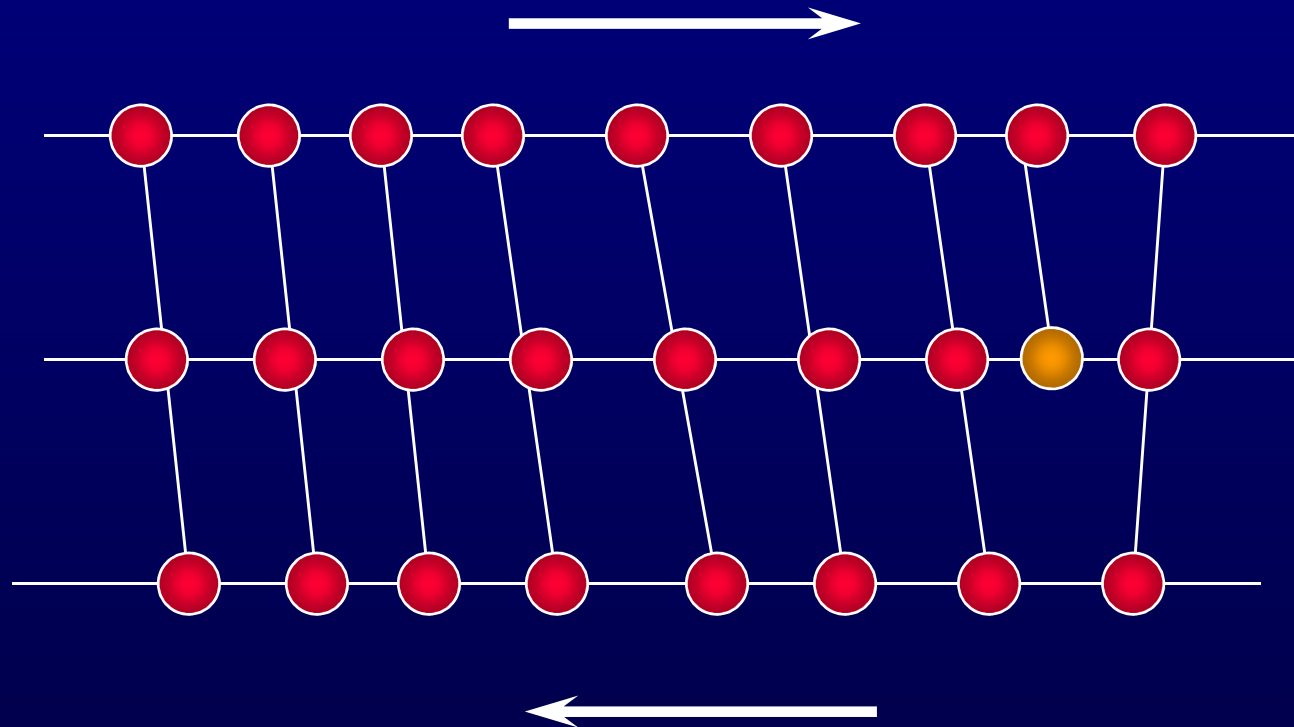




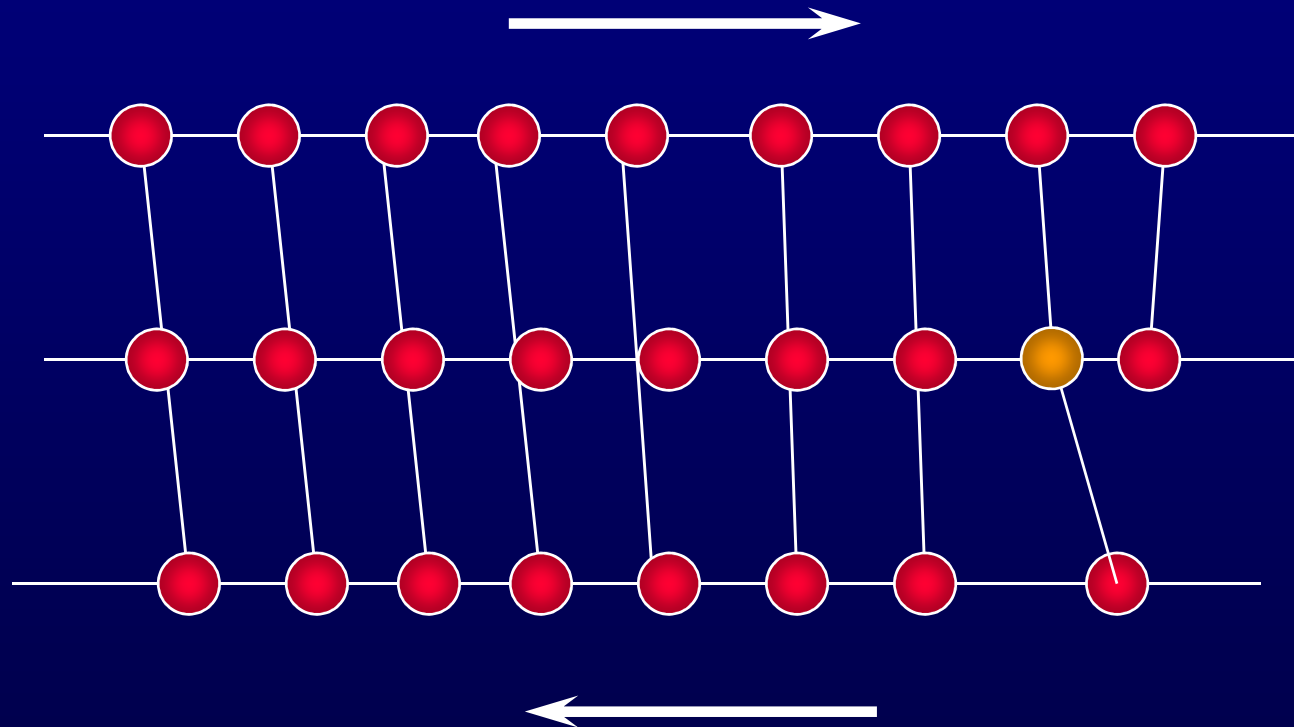
# Randdislocatie: beweging en afschuiving



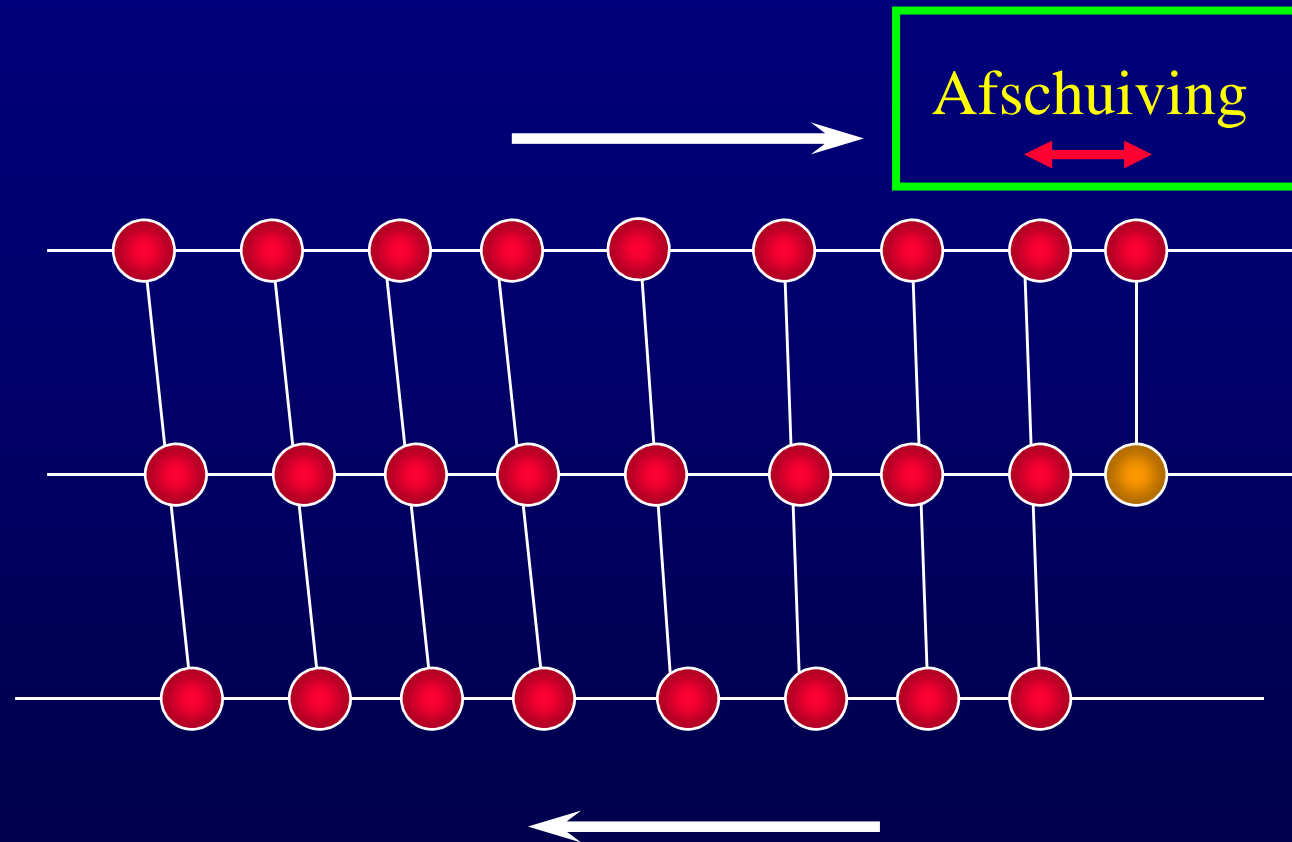
# Randdislocatie: beweging en afschuiving



# Randdislocatie: beweging en afschuiving



# Netto effect van dislocatiebeweging



# Cross-slip

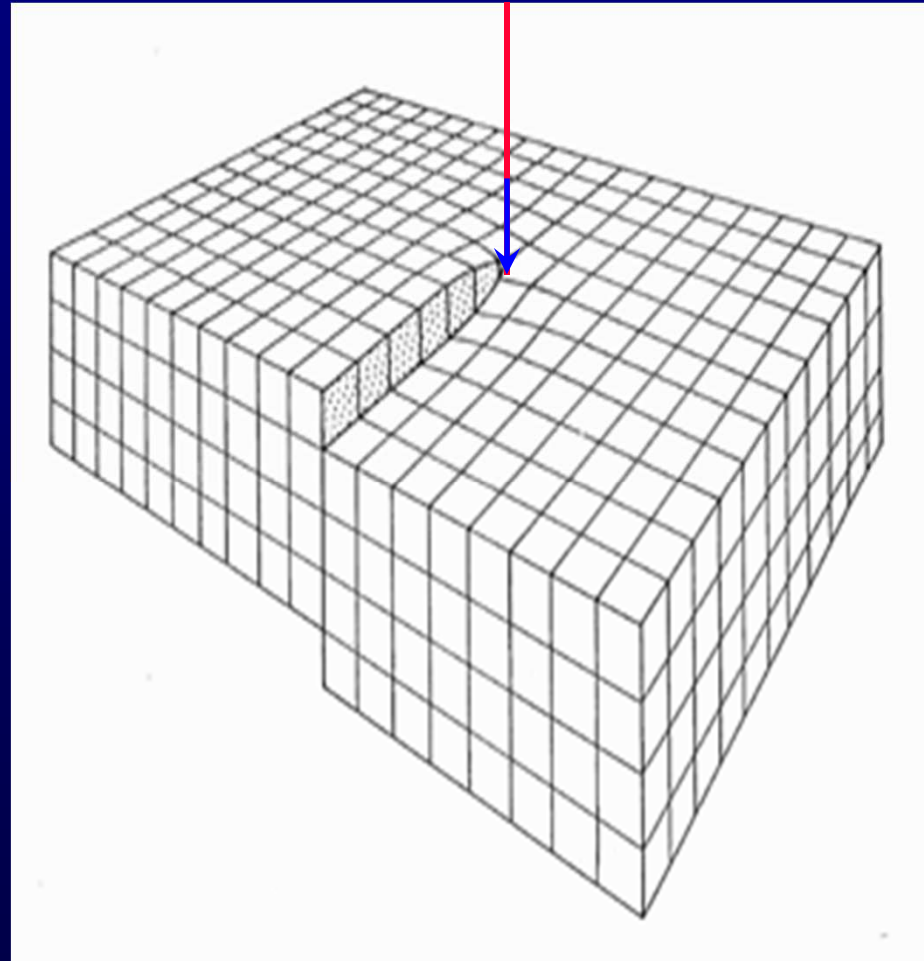
- Een speciaal geval van Slip is de zogenaamde **Cross-slip**.
- Dit doet zich voor bij **schroefdislocaties** of bij **dislocatielussen met een schroefcomponent**.

# Cross-slip

- Schroefdislocaties hebben een burgersvector die **evenwijdig** loopt aan de dislocatielijn.
- Het slipvlak van een dislocatie wordt per definitie gevormd uit **dislocatielijn en burgersvector**.
- Een **schroefdislocatie** heeft dus **vele slipvlakken !**

**Vraag: Is die hoeveelheid slipvlakken trouwens eindig of oneindig?**

# Schroefdislocatie en burgersvector

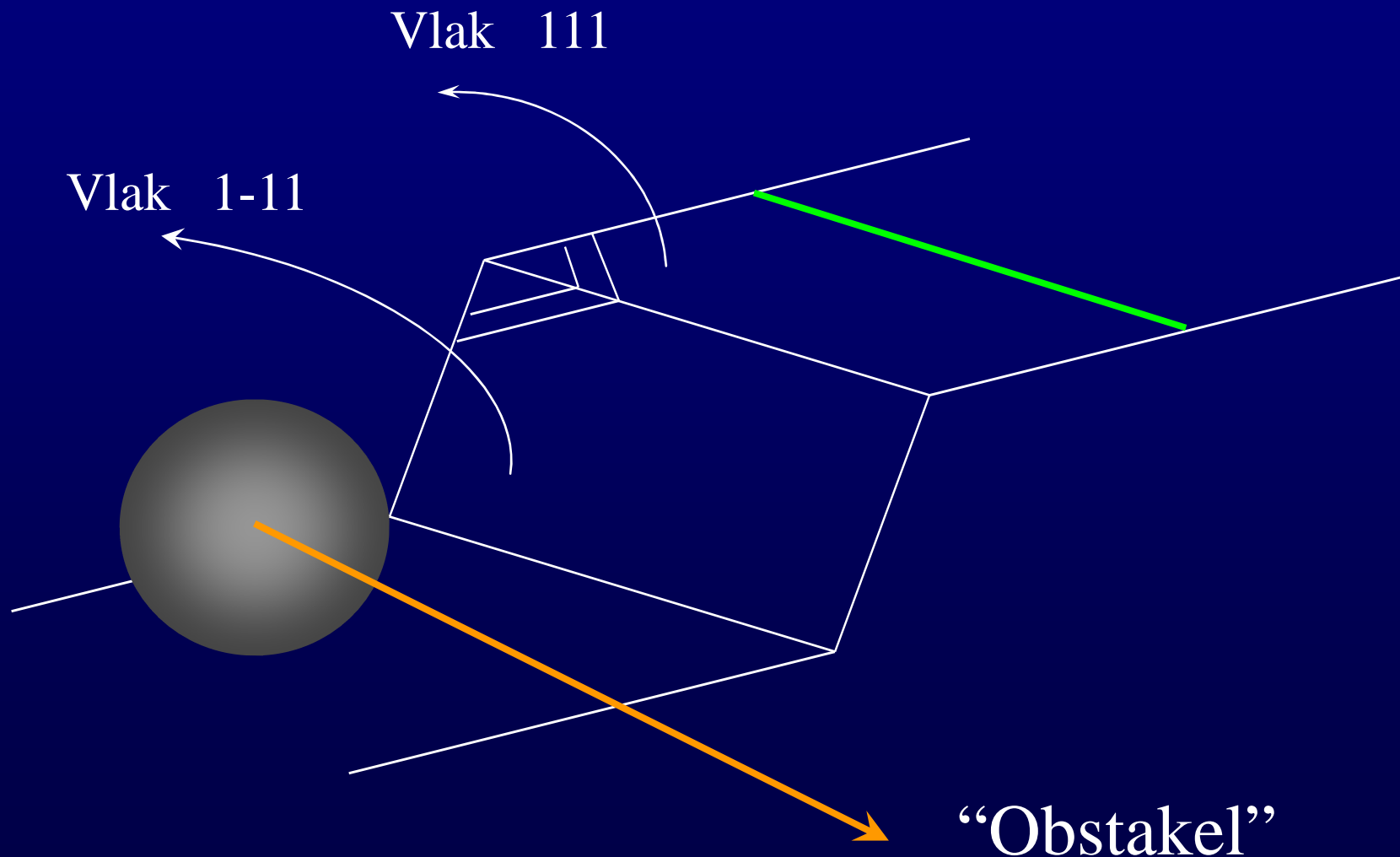


# Cross-slip

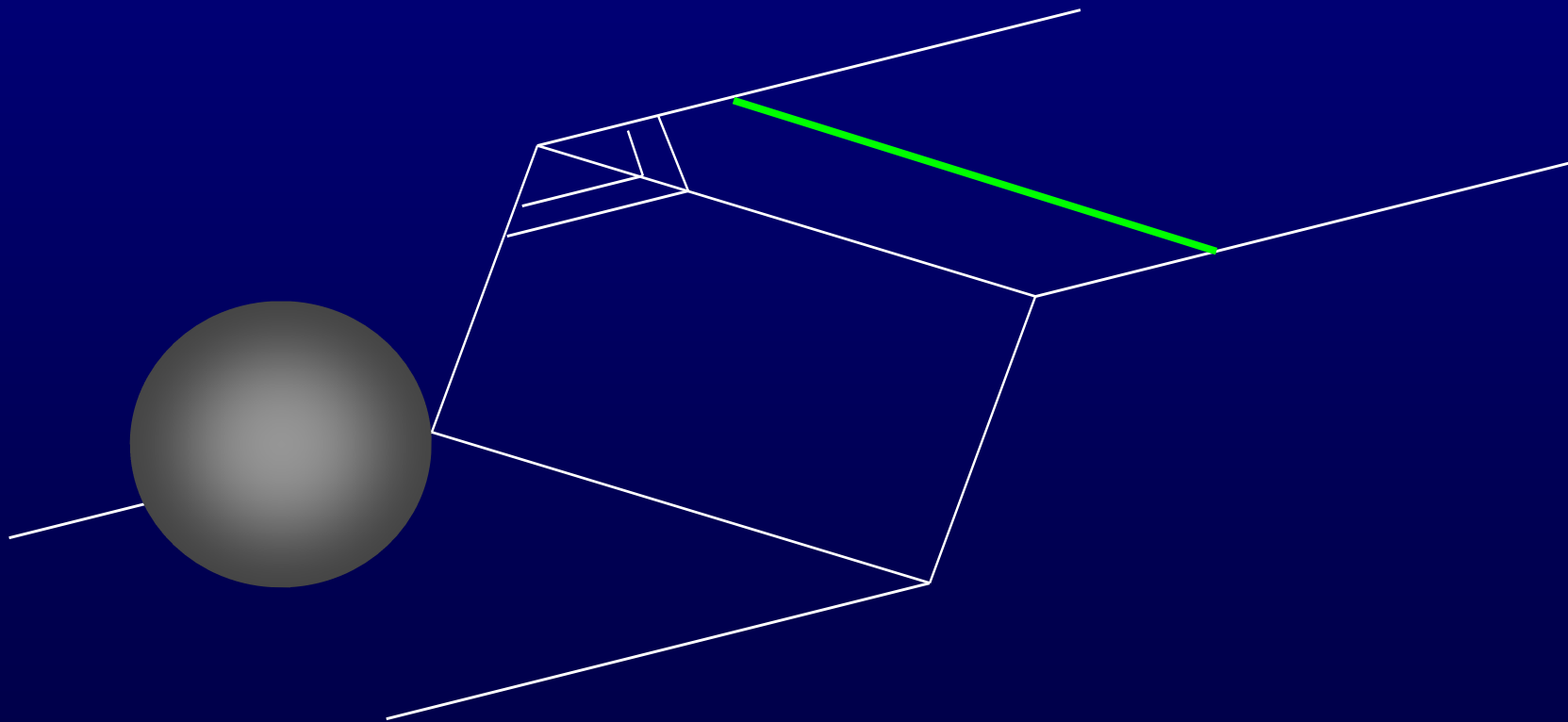
- Die slipvlakken van een schroepedislocatie zijn vlakken van dezelfde **Kristallografische Vorm**.
- **Kristallografische Vorm:** een bij elkaar horende suite van vlakken (hkl) zoals (111), (-111), (1-11), (11-1), (-1-11), (-11-1), (1-1-1), (-1-1-1).
- Men geeft dit aan als **{111}**, algemeen **{hkl}**.



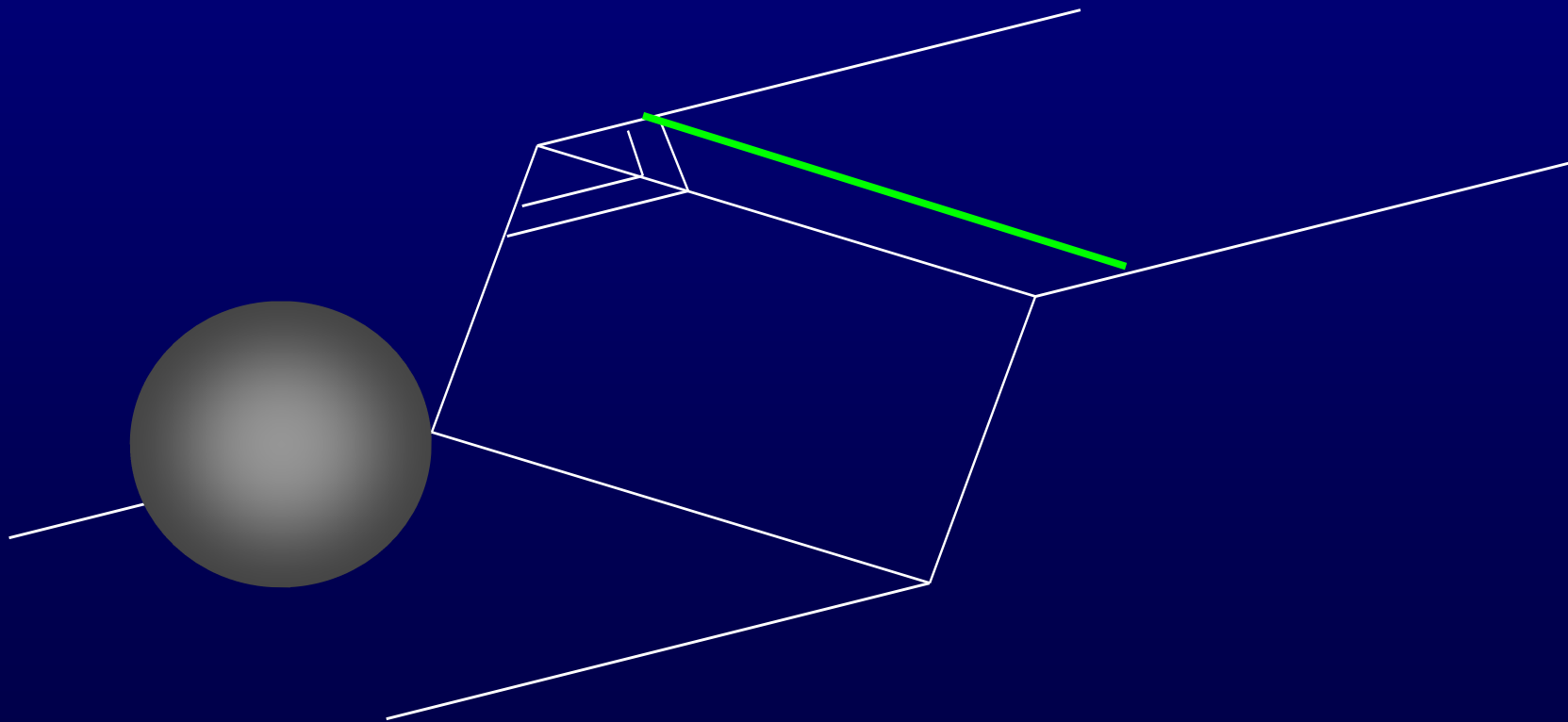
# Cross-slip



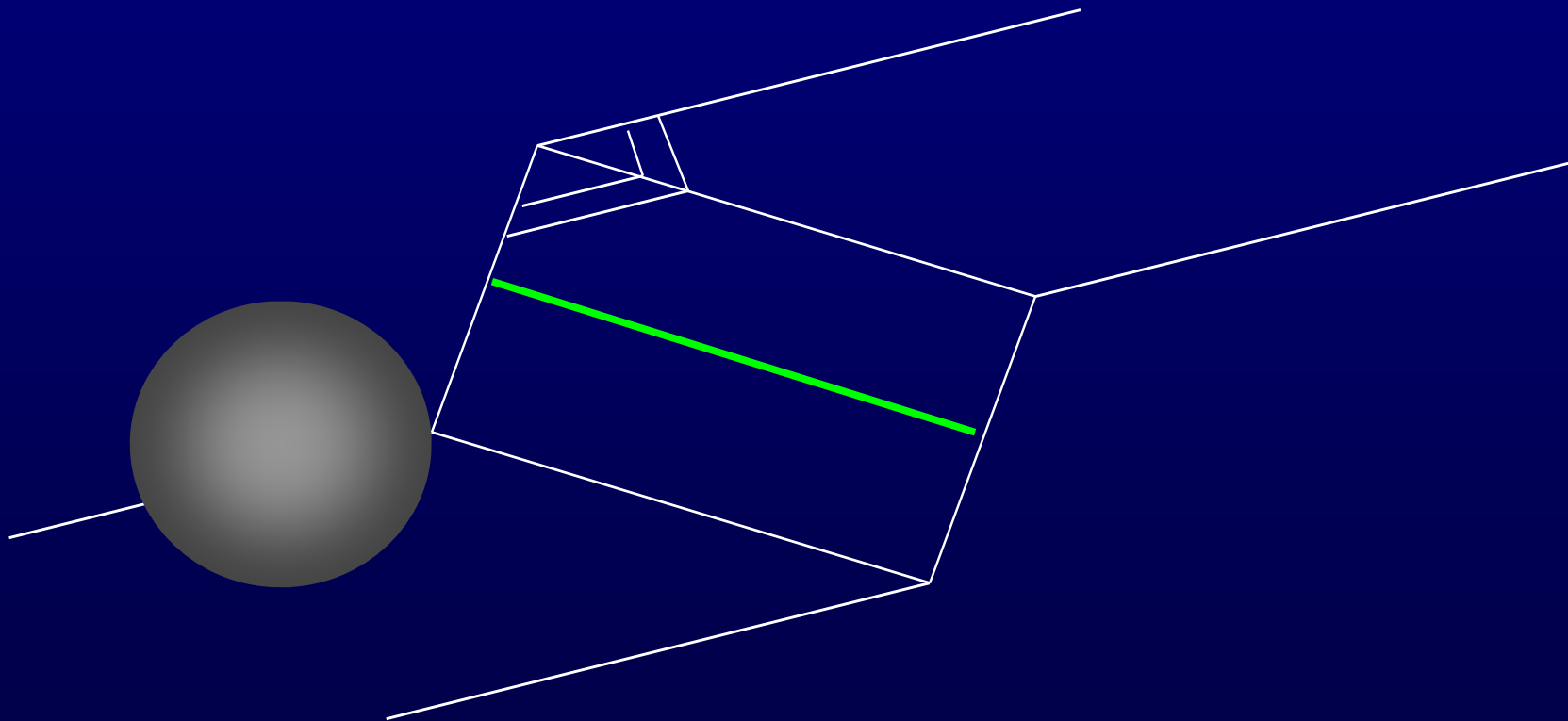
# Cross-slip



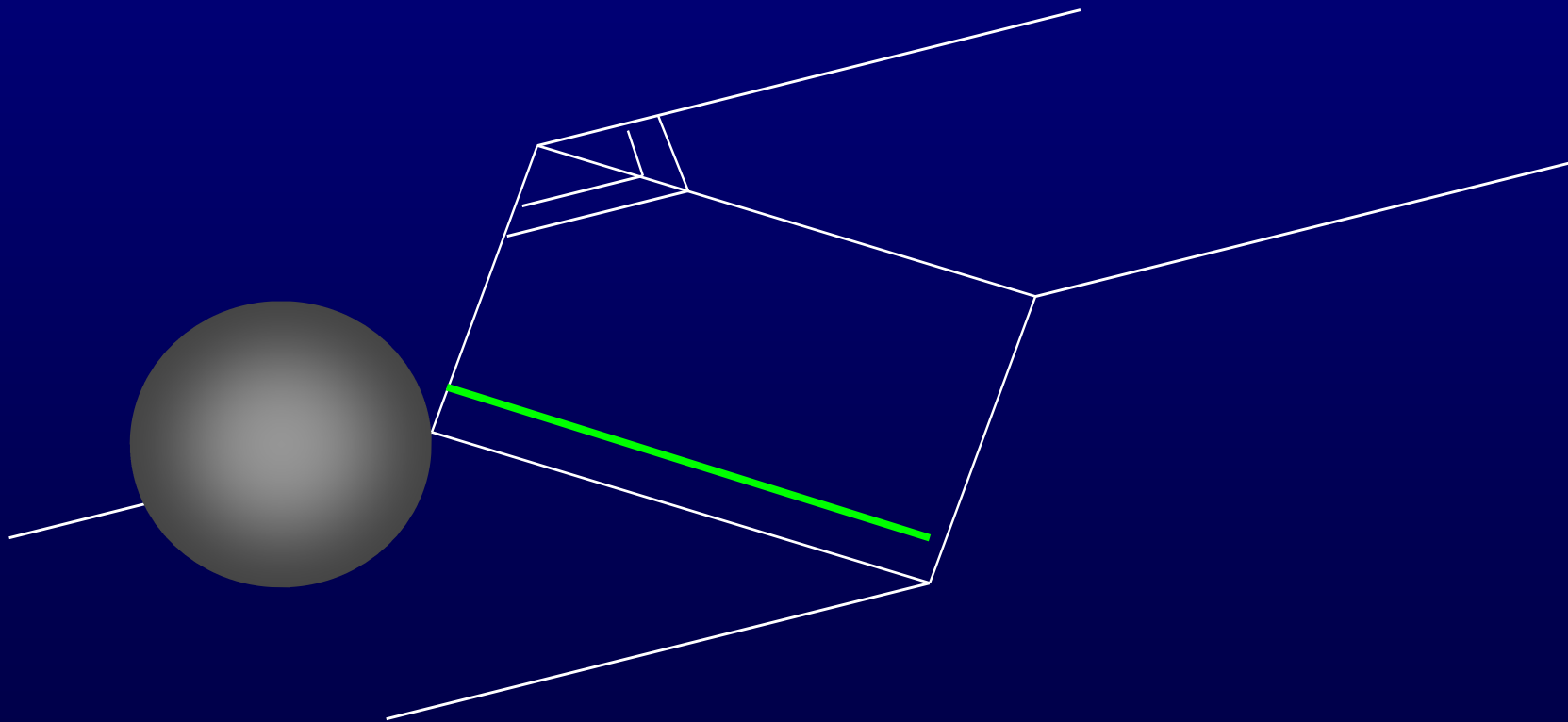
# Cross-slip



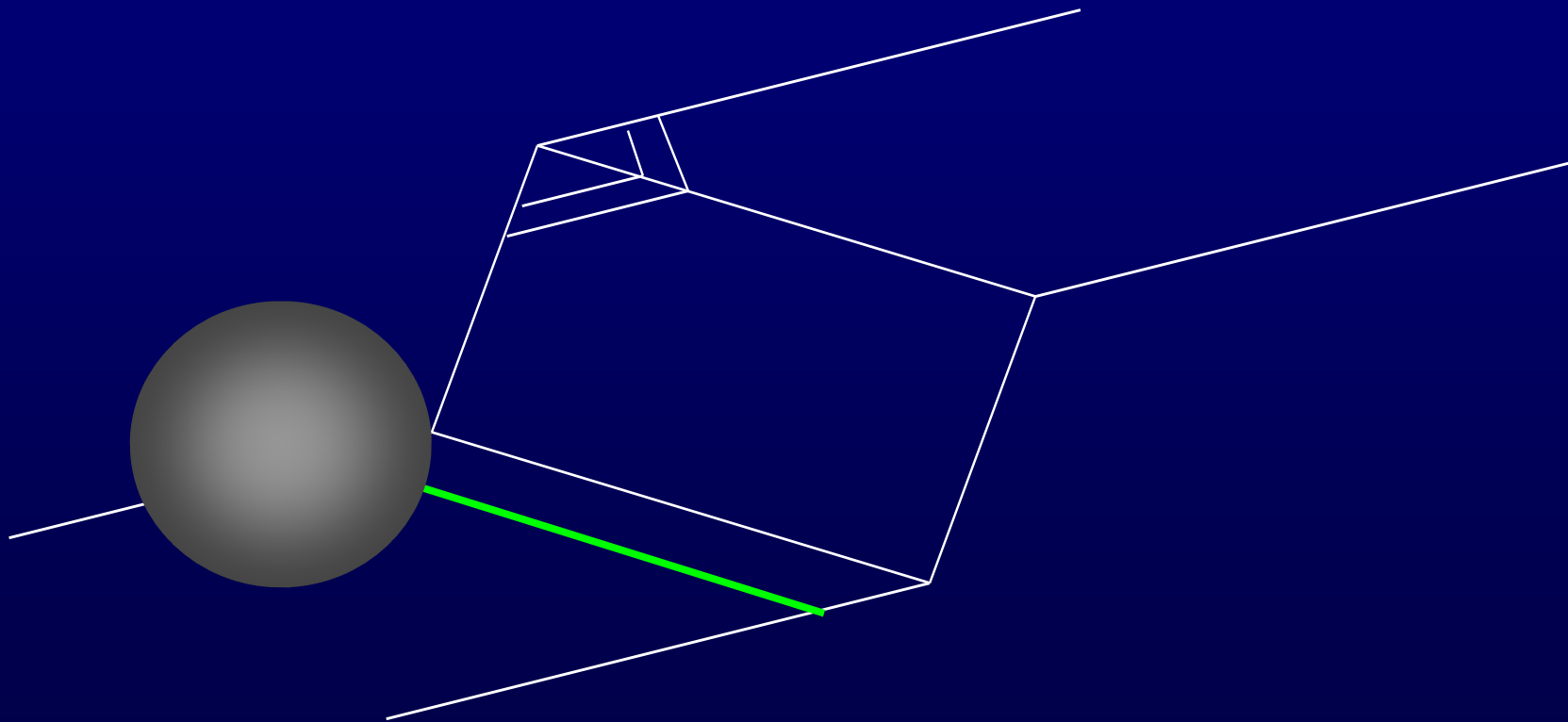
# Cross-slip



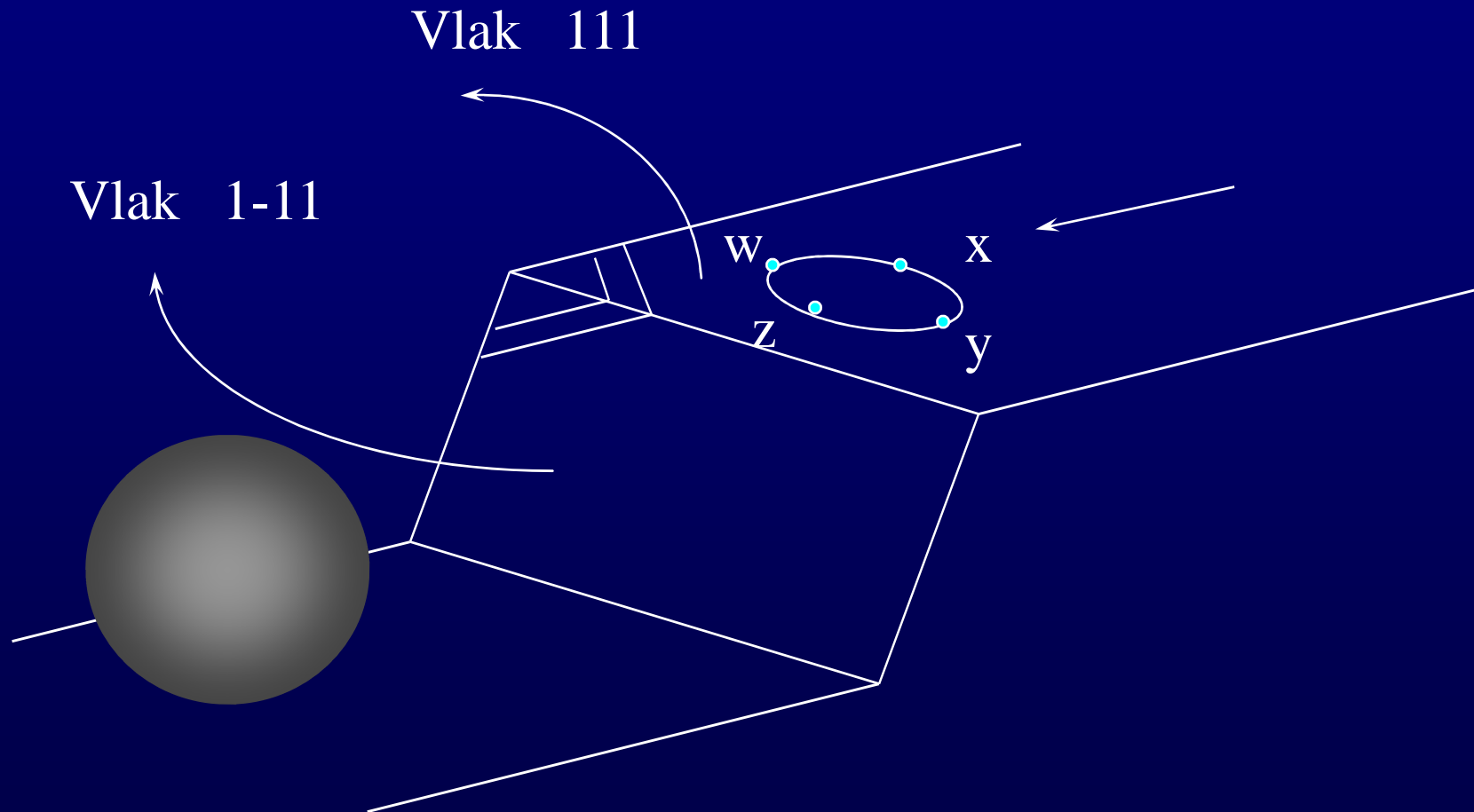
# Cross-slip



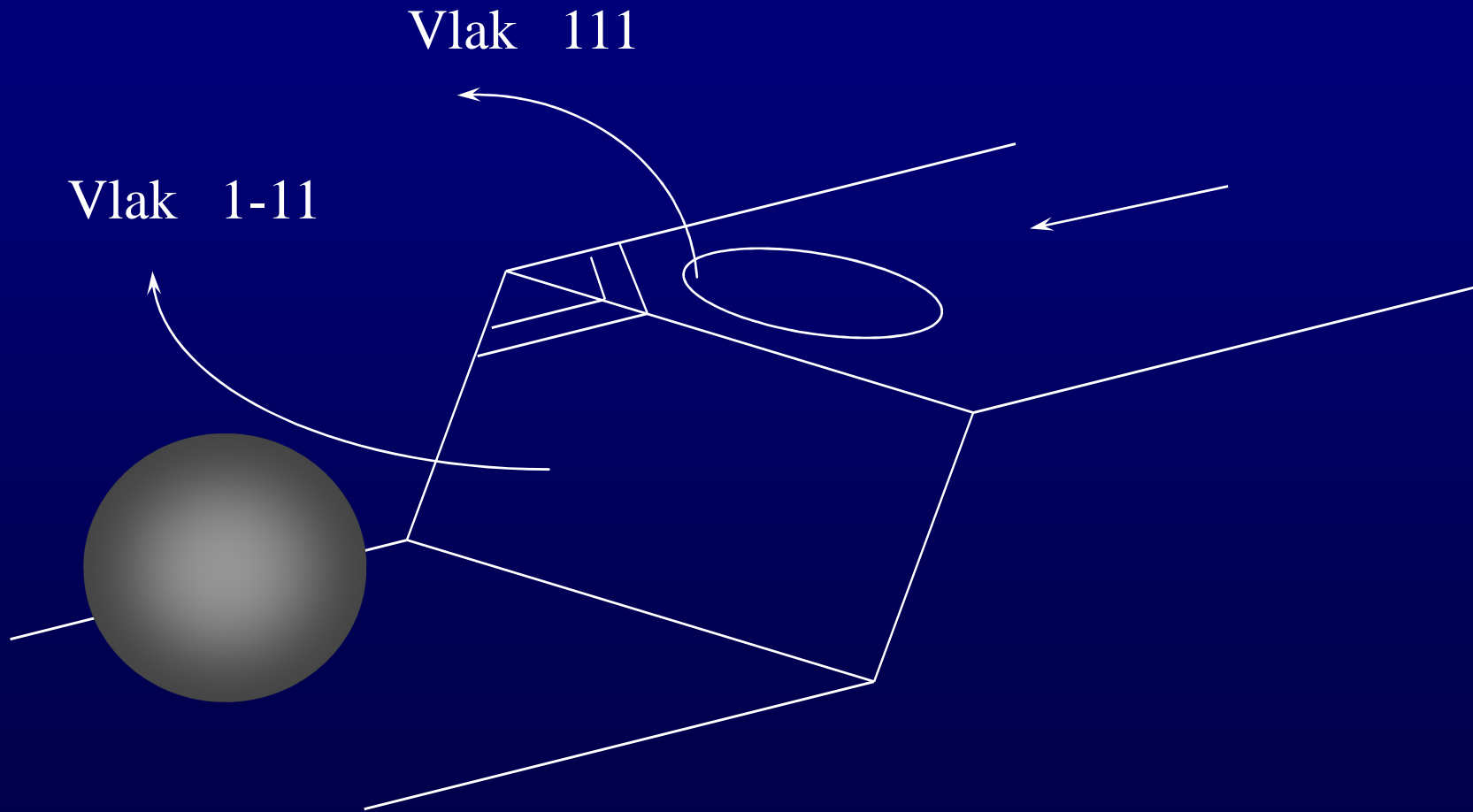
# Cross-slip



# Cross-slip

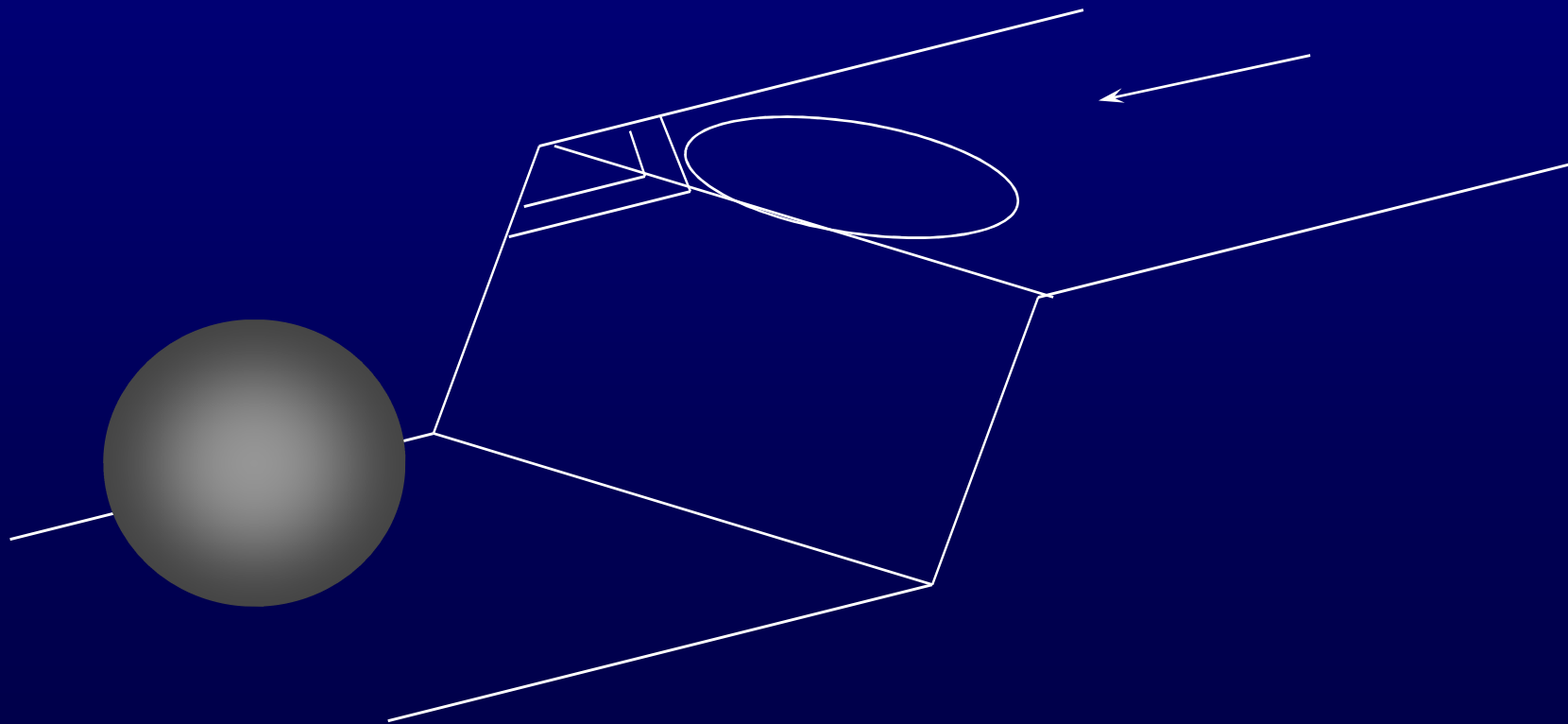


# Cross-slip

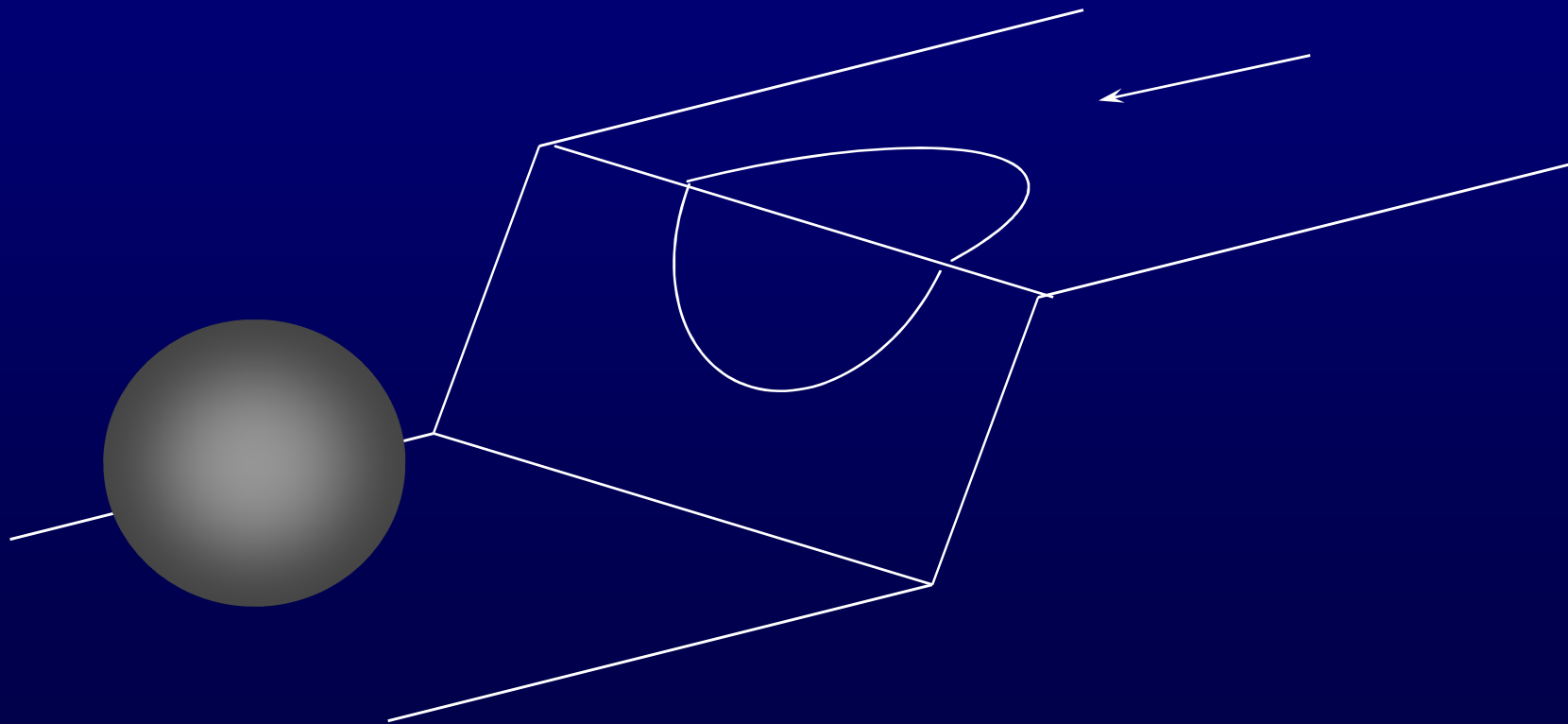




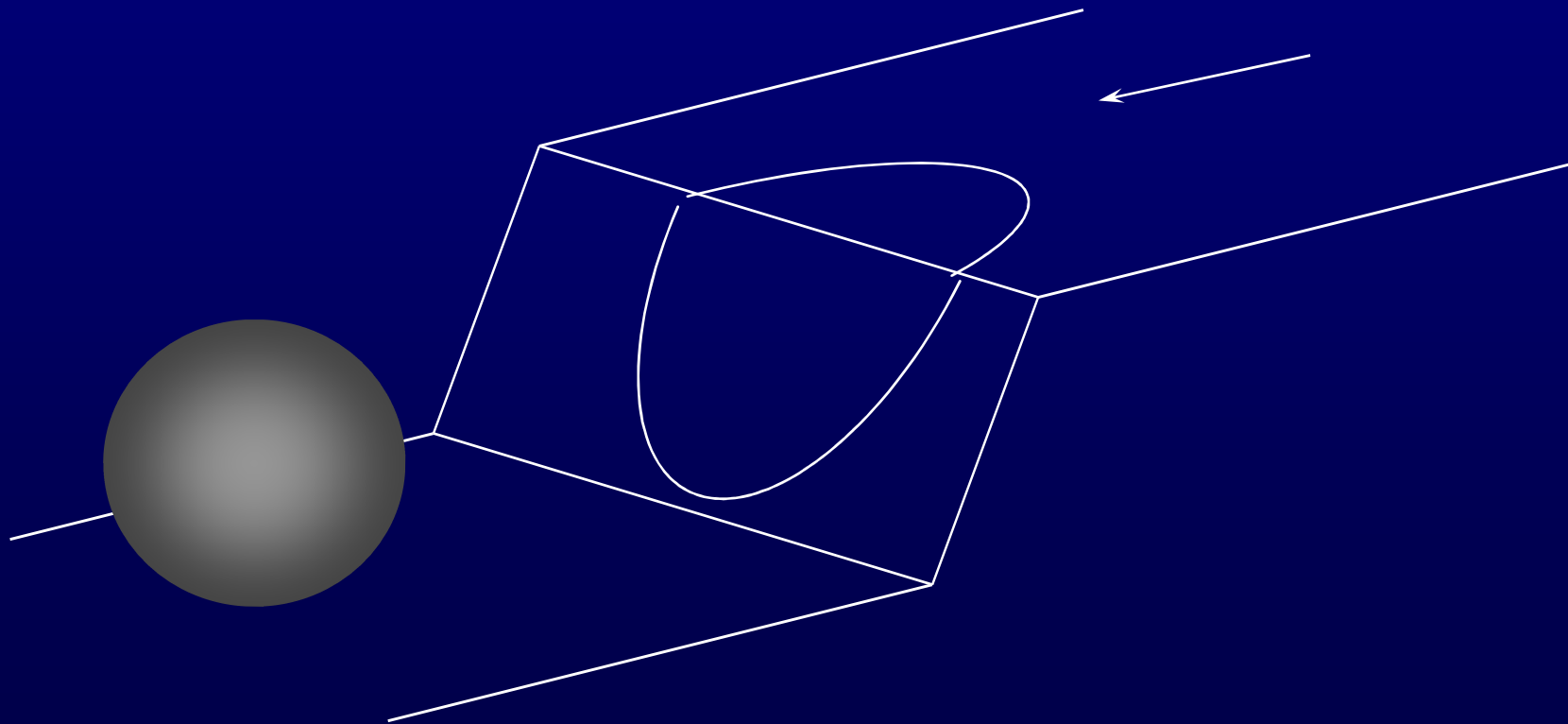
# Cross-slip



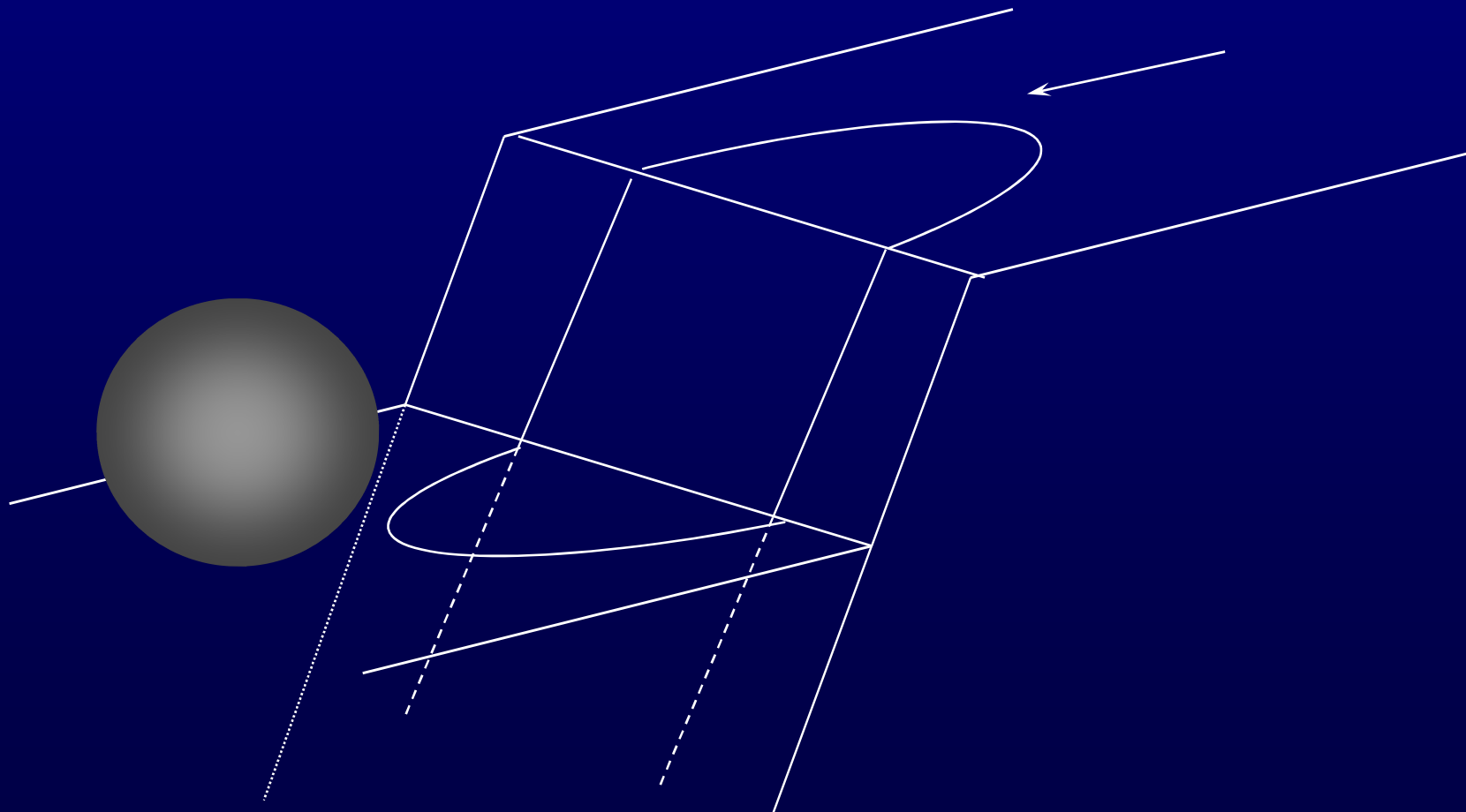
# Cross-slip



# Cross-slip



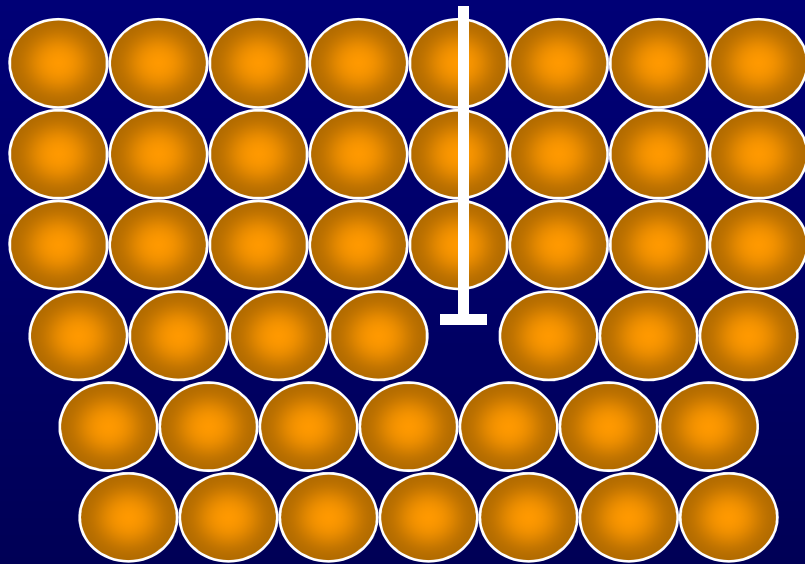
# Cross-slip



# Dislocatieklim

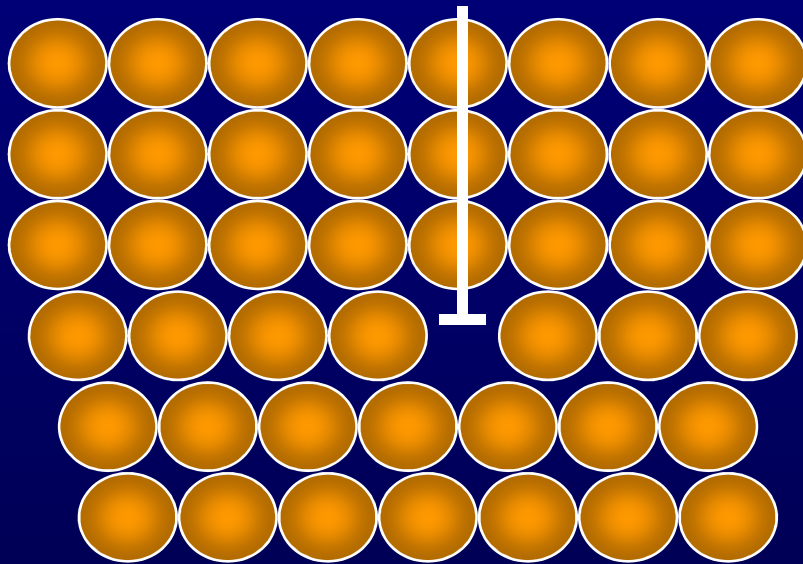
- Bij **dislocatieklim** treedt de dislocatie **uit zijn slipvlak**.

# Dislocatieklim

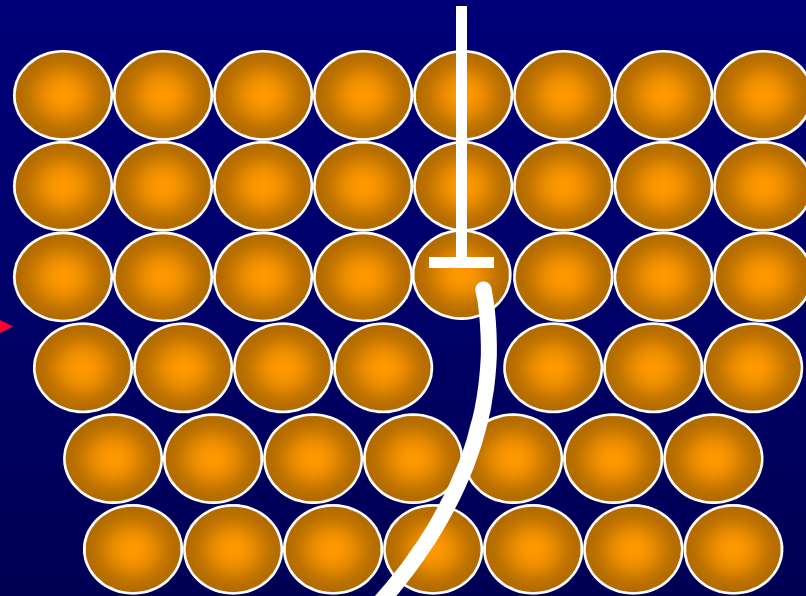


# Dislocatieklim

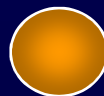
Begin



Eind



Atoom wordt verwijderd: **diffusie** !



Dislocatie is een rij  
“gekloppen”

# Dislocatieklim

- Bij dislocatieklim vindt **diffusie** plaats.
- Diffusie wordt versterkt door hogere temperatuur: voor **dislocatieklim** is **thermische activering nodig**.

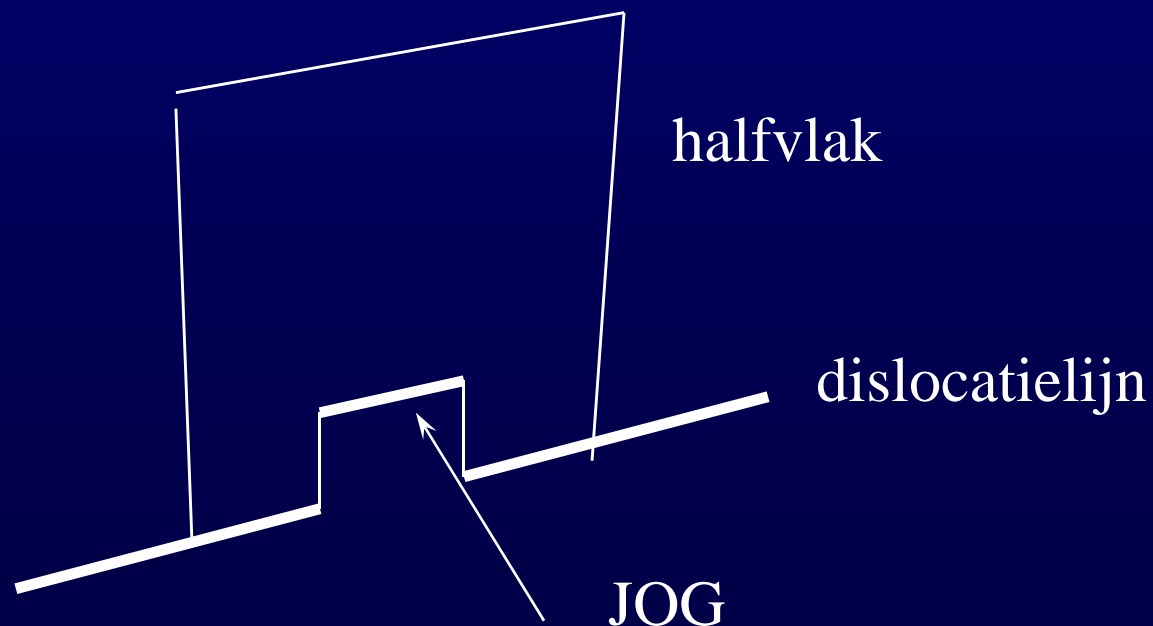


# Dislocatieklim

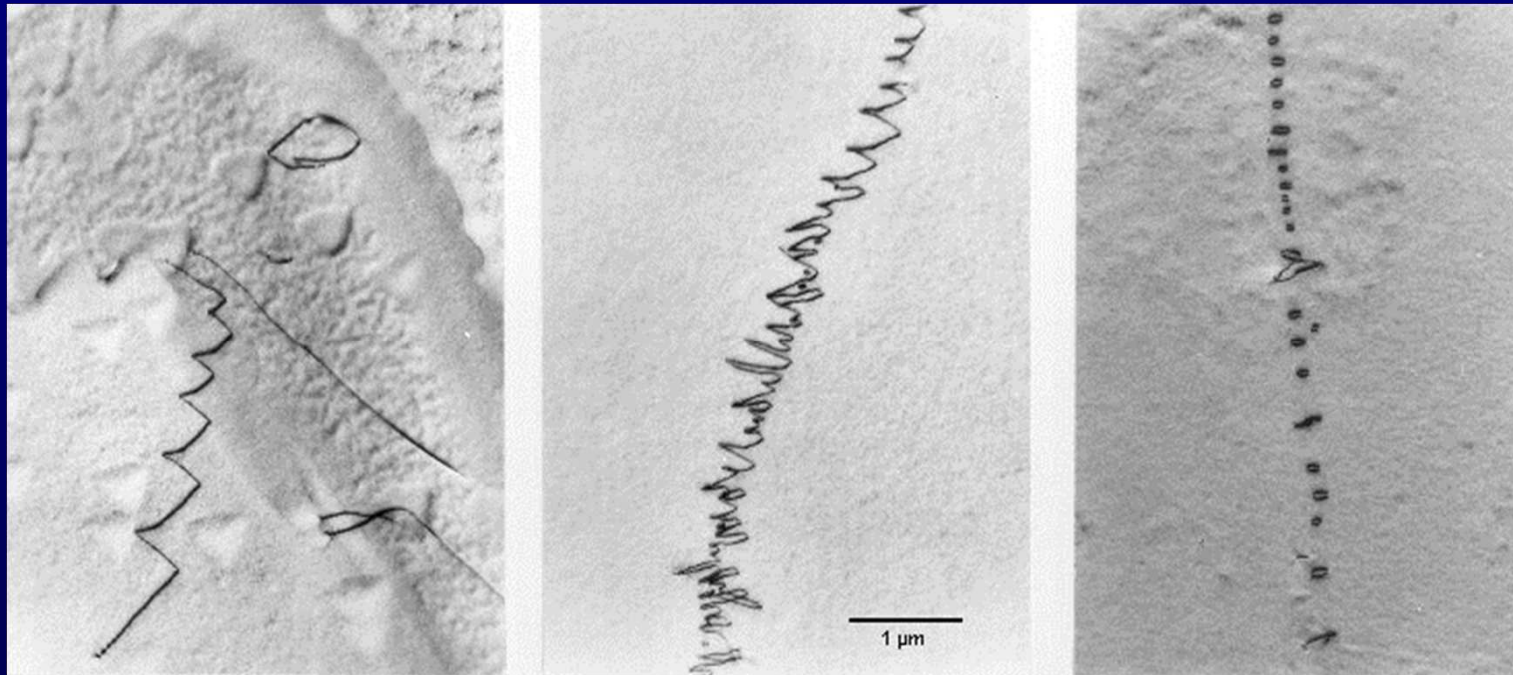
- Om de atomen die uit het halfvlak verwijderd worden te kunnen plaatsen, **moeten vacatures worden opgevuld.**
- Dislocatieklim vermindert dus ook de hoeveelheid vacatures.
- Het omgekeerde van dislocatieklim is: **negatieve dislocatieklim.** Dit proces **creëert** dus vacatures.

# Dislocatieklim

- Klim kan ook over een gedeelte van de dislocatielijn plaatsvinden.
- Dat heet dan een **JOG**.



# Dislocatieklim

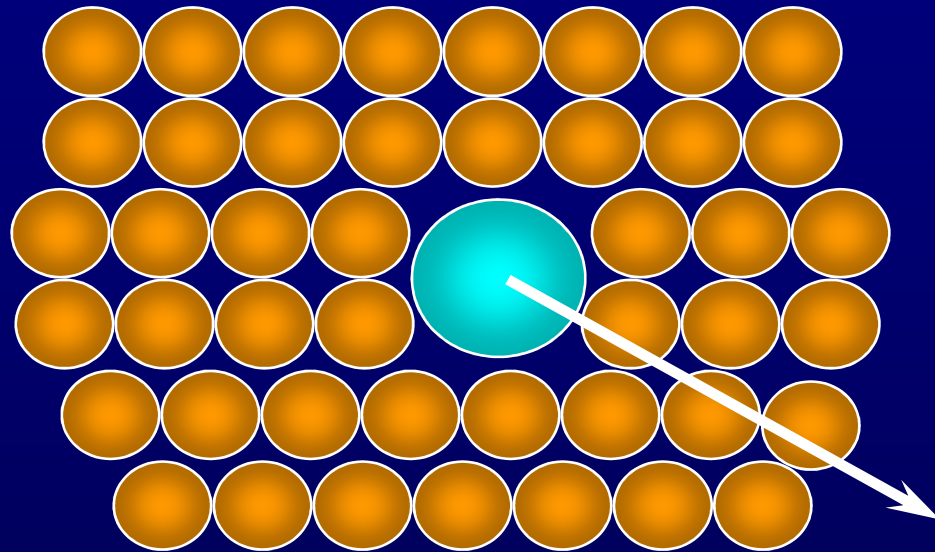


Schroefdislocaties kunnen **óók** klimmen. Ze veranderen dan in een **helix**, een **“echte schroef”**. De segmenten ontaarden uiteindelijk in een systeem van **coaxiale dislocatie-loops**. De foto's tonen schroef dislocaties in transistor materiaal in **vroeg** and **laat** stadium van klim (**links** en **midden**) en het **uiteenvallen in dislocatieloops (rechts)**

# Obstakels en de beweging van een dislocatie

- Zowel klim als cross-slip kunnen er voor zorgen dat een **bewegende** dislocatie **obstakels** kan “**omzeilen**”.
- Bij **lage temperatuur** treedt **alleen** cross-slip op, maar dit biedt beperkte mogelijkheden.
- Bij **hoge temperatuur** kunnen door **klim** obstakels gemakkelijker worden vermeden.

# Rol van Onzuiverheden



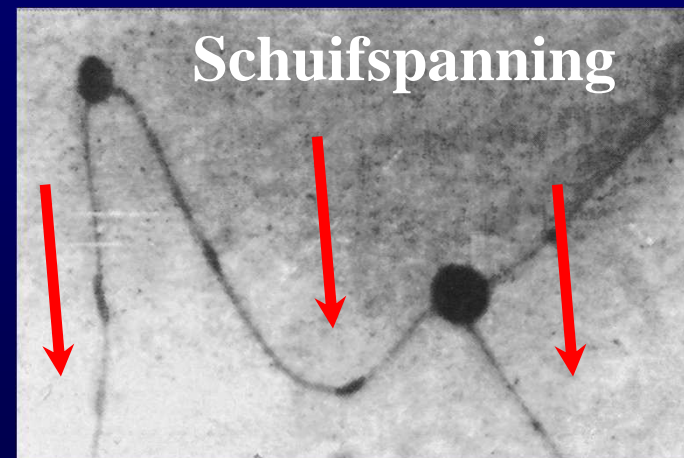
“Vreemd” atoom (substitutie).  
Dit kan bij het proces van klim niet zo gemakkelijk ergens anders in het rooster worden opgenomen.

Klim kan dan **MOEILIJK** of zelfs **NIET** optreden !

Een **onzuiverheid** kan klim **afremmen**, of een dislocatie **verankeren**.

# “Pinnen” of Verankeren van dislocaties

- Wanneer het obstakel te groot is, of wanneer klim niet kan optreden, kan een dislocatie **verankerd** (gepind) worden.
- Als **obstakel** kan een **onzuiverheid**, of een **andere dislocatie(s)** dienst doen.



Dislocatie verankerd door twee andere dislocaties

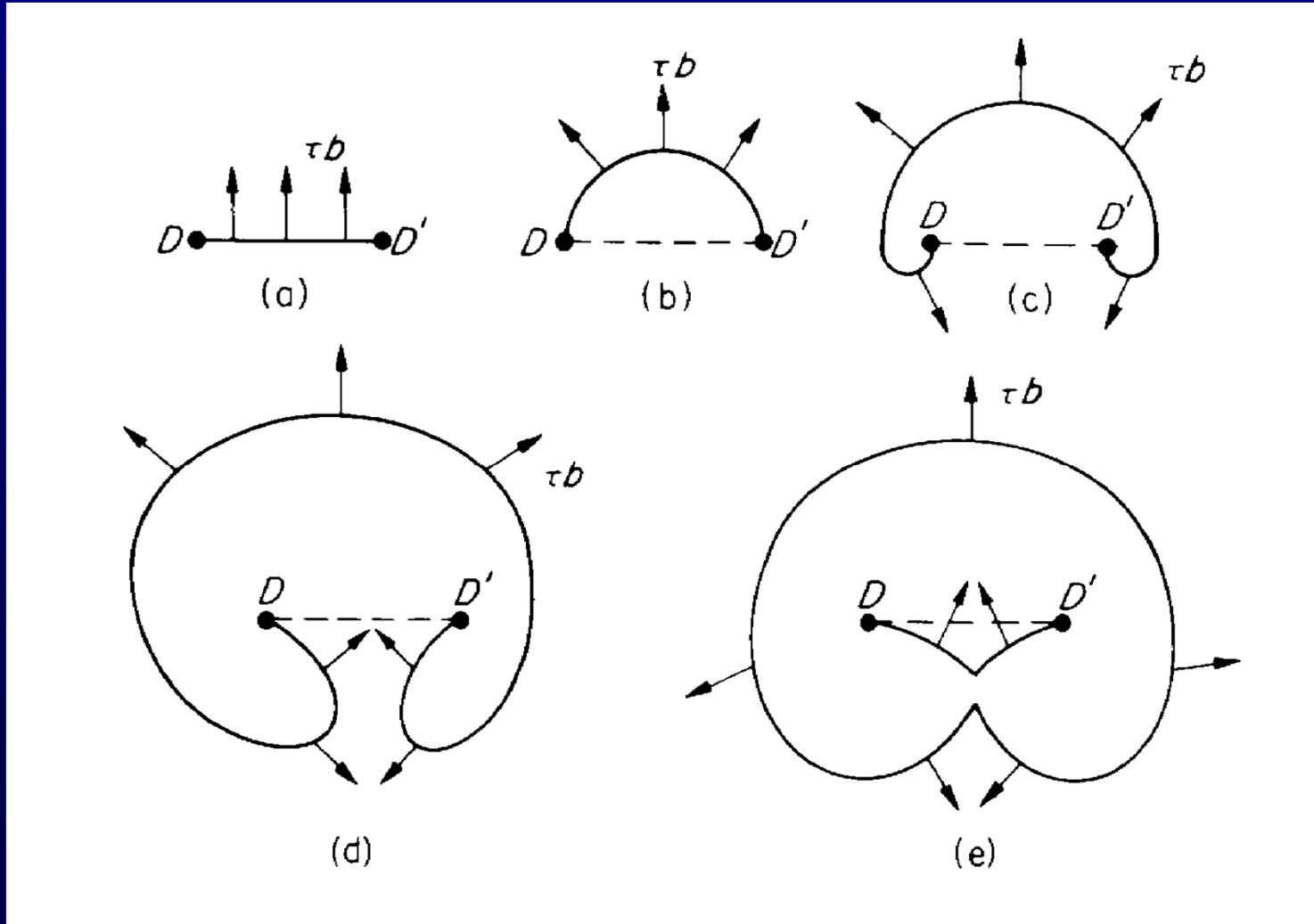
# Vermenigvuldiging van dislocaties

Frank-Read bron

Cross-slip

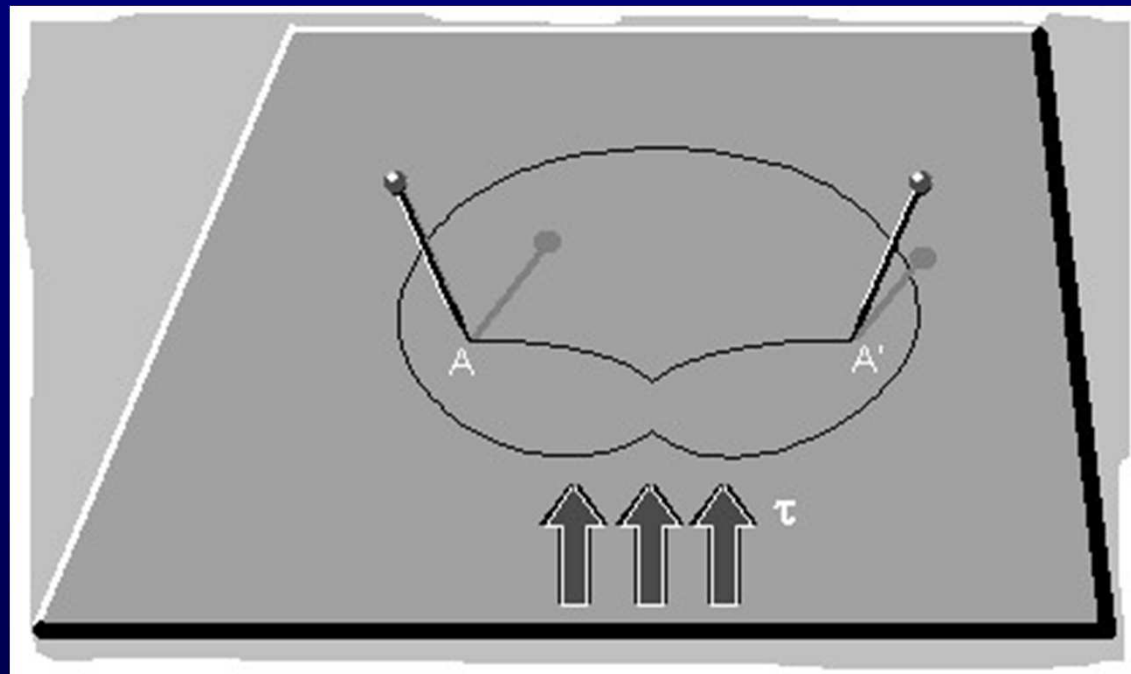
Genoemd naar : Sir Frederick Charles Frank (1911–1998)  
en W. Thornton Read (1921 - )

# Frank-Read Bron (concept)





# Frank-Read Bron

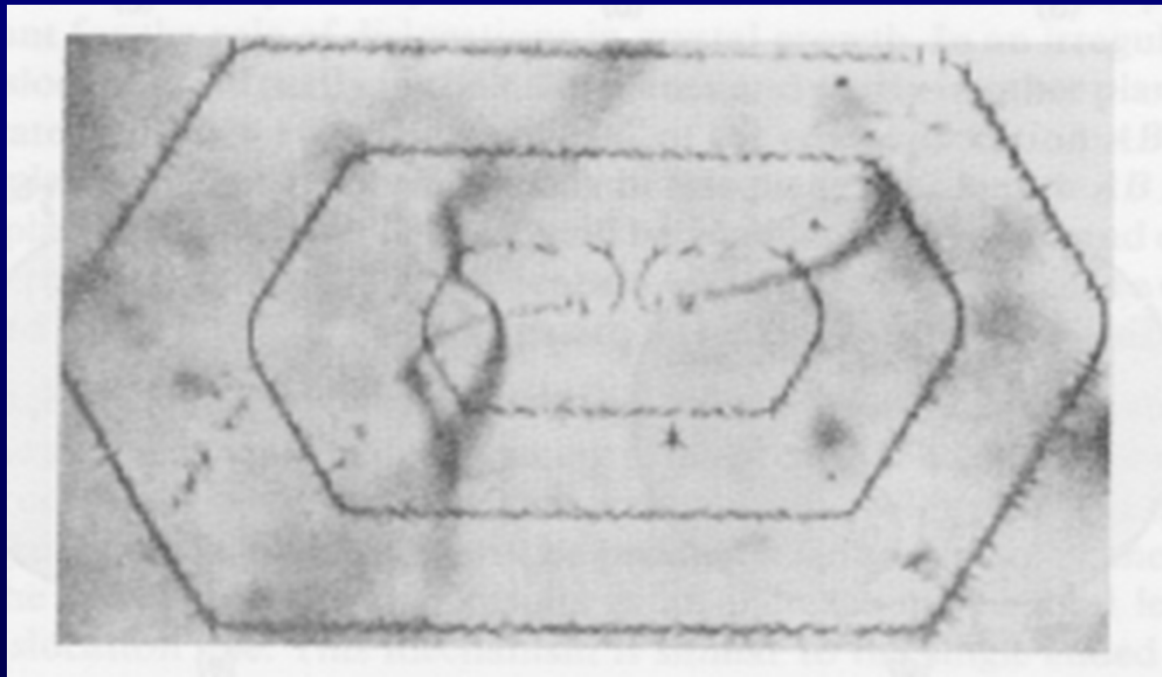


Schematische 3D-weergave van het concept

# Animatie Frank-Read Bron

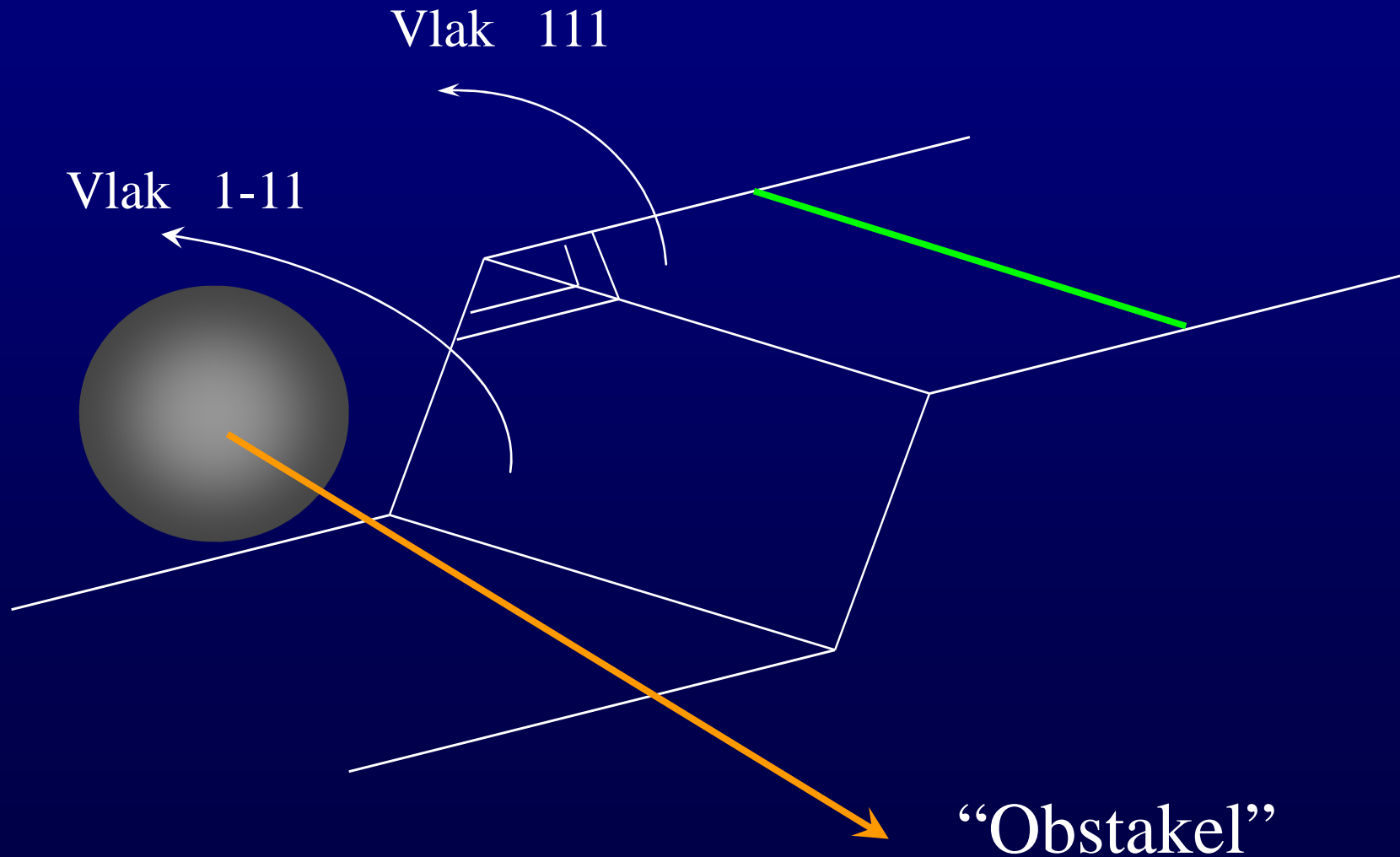
<http://zig.onera.fr/DisGallery/source.html>

# Frank-Read Bron (TEM-foto)

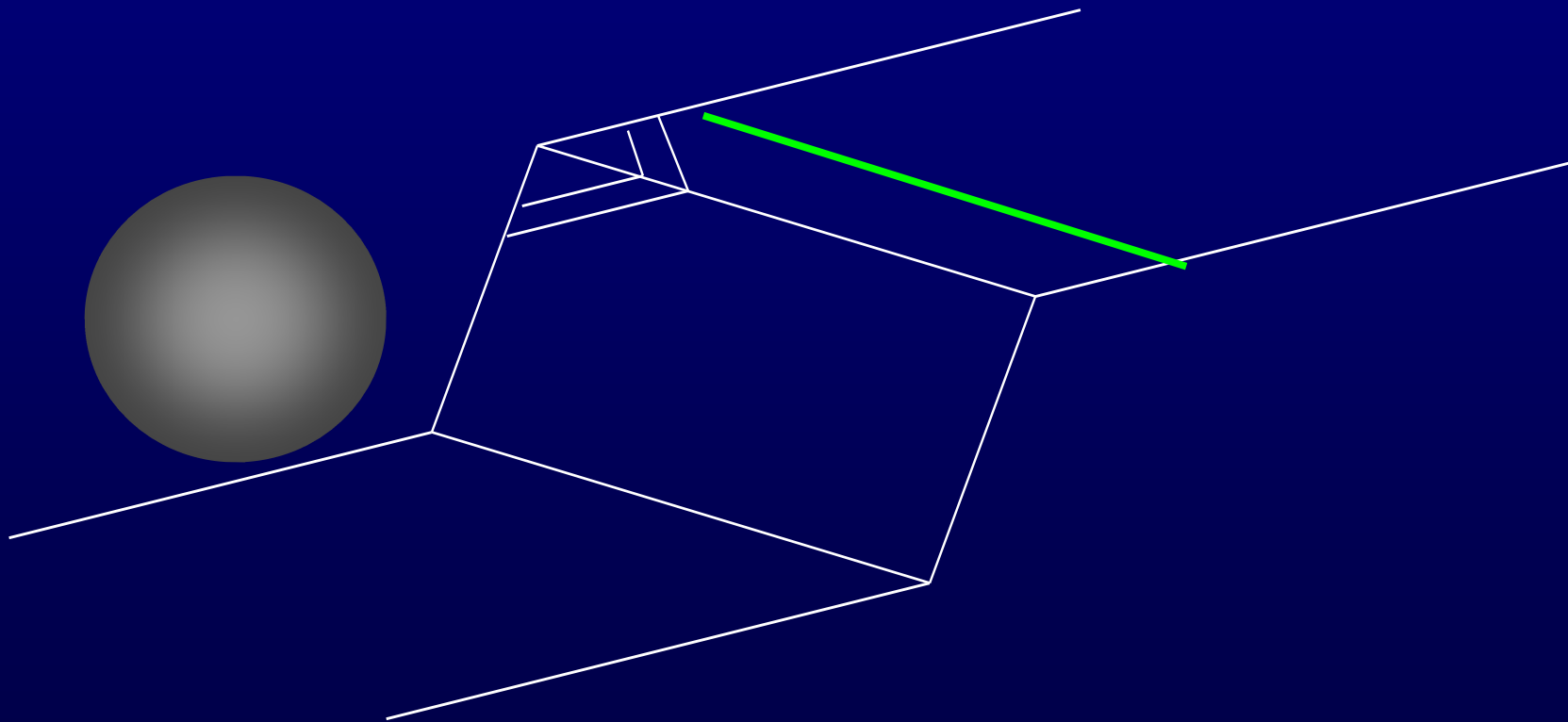


Onbekend materiaal.

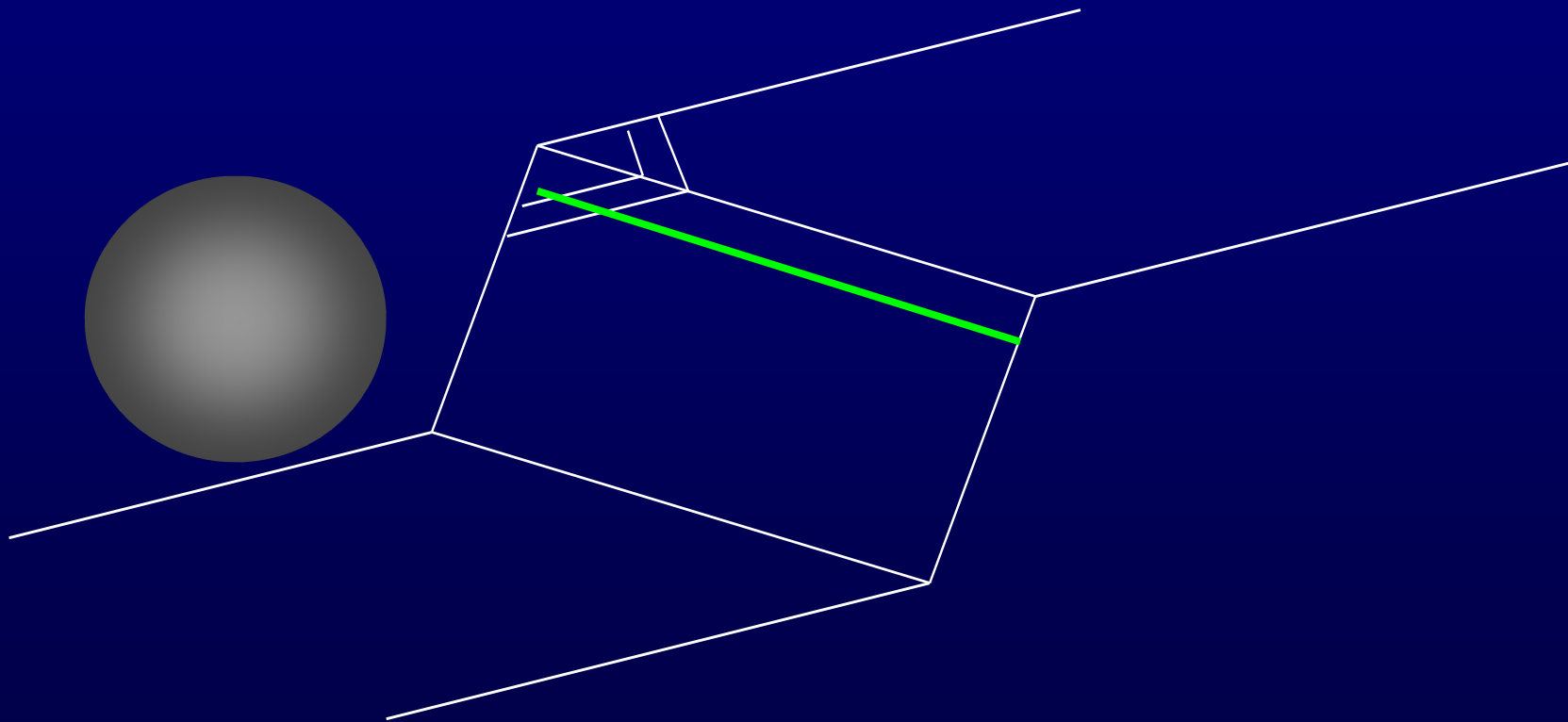
# Cross-slip



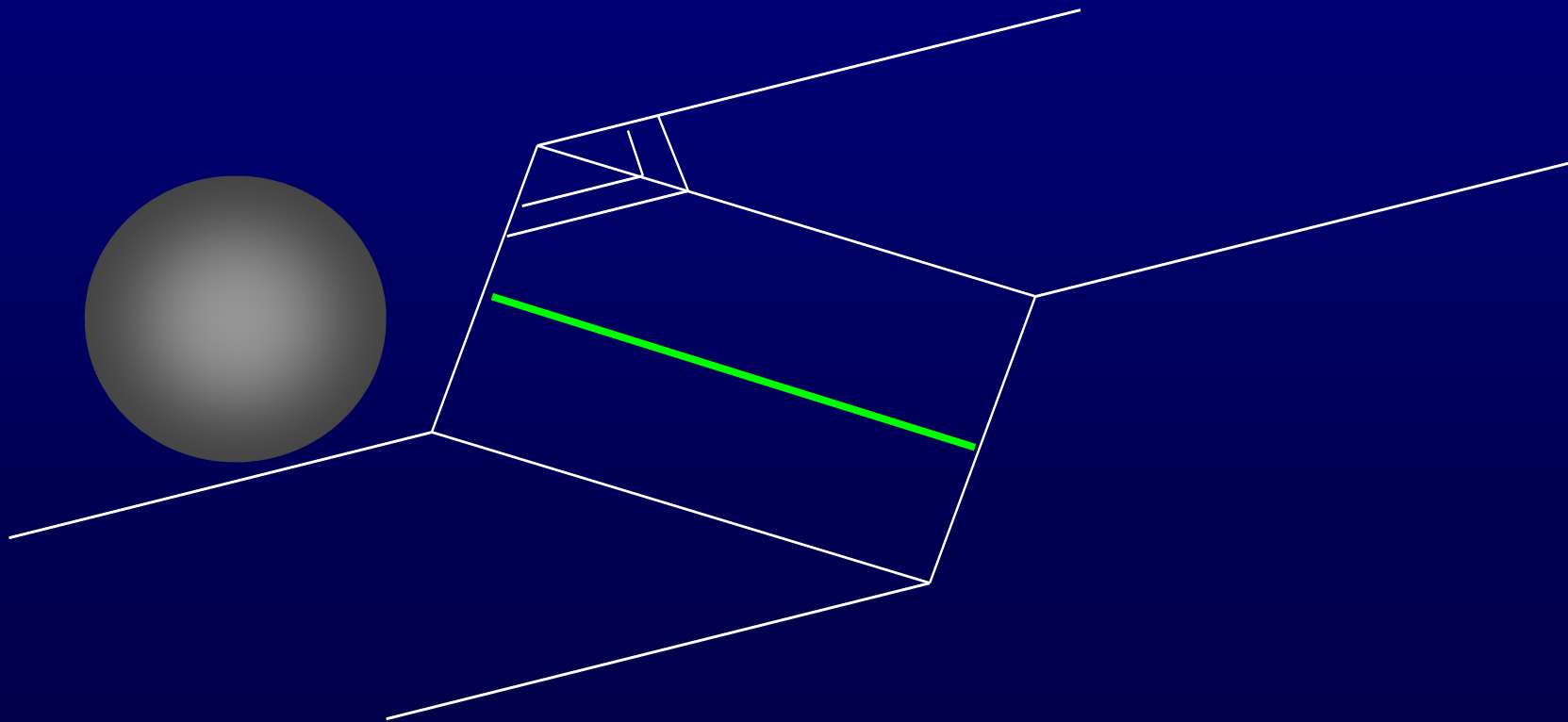
# Cross-slip



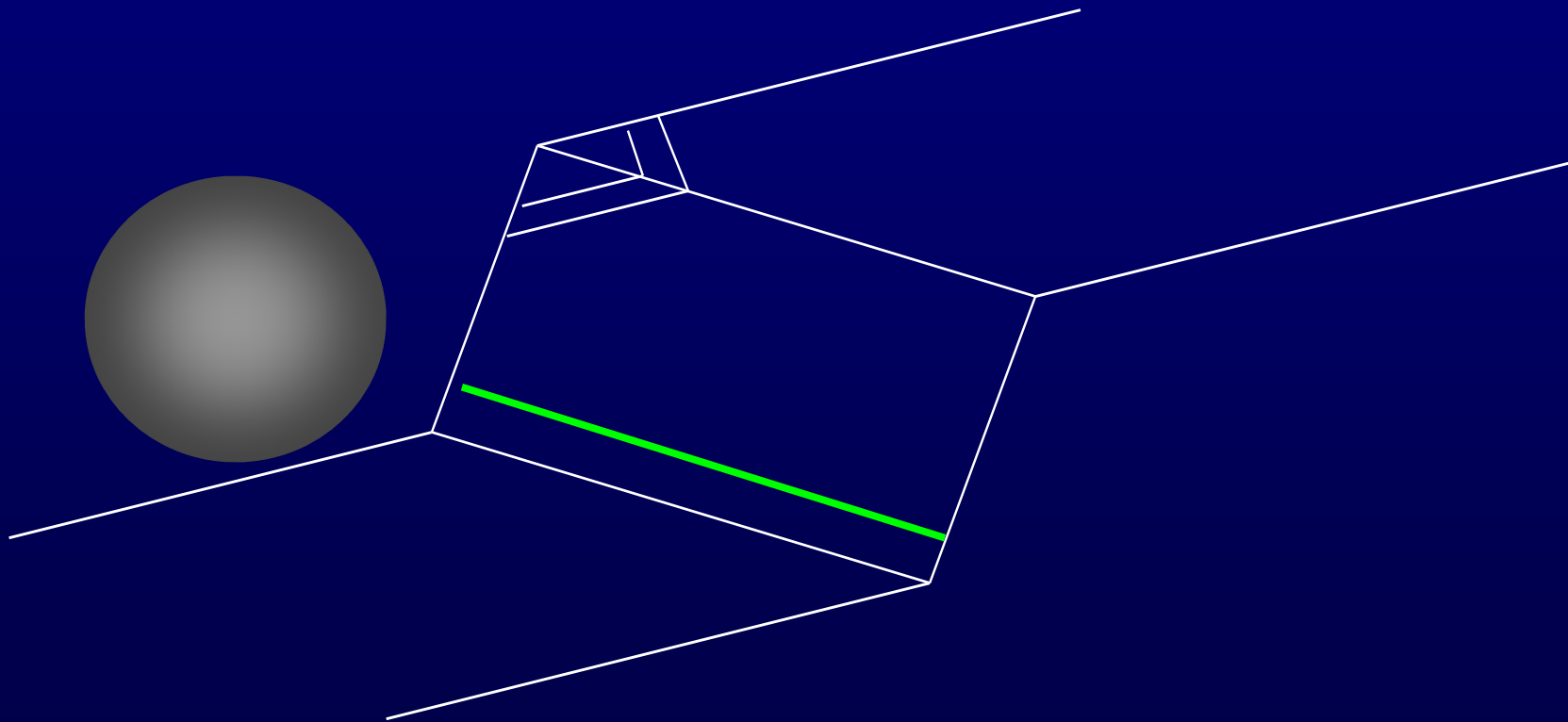
# Cross-slip



# Cross-slip

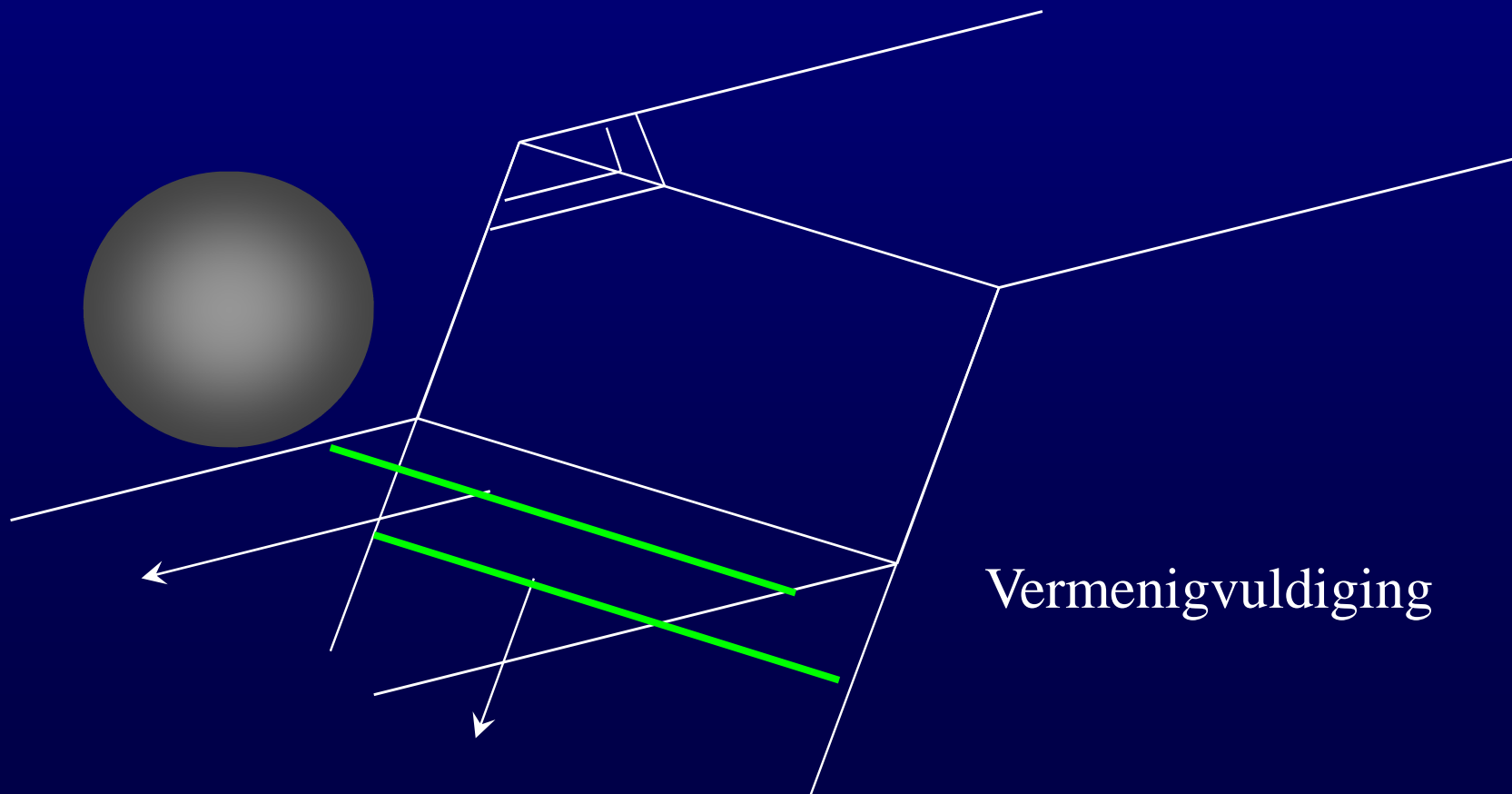


# Cross-slip

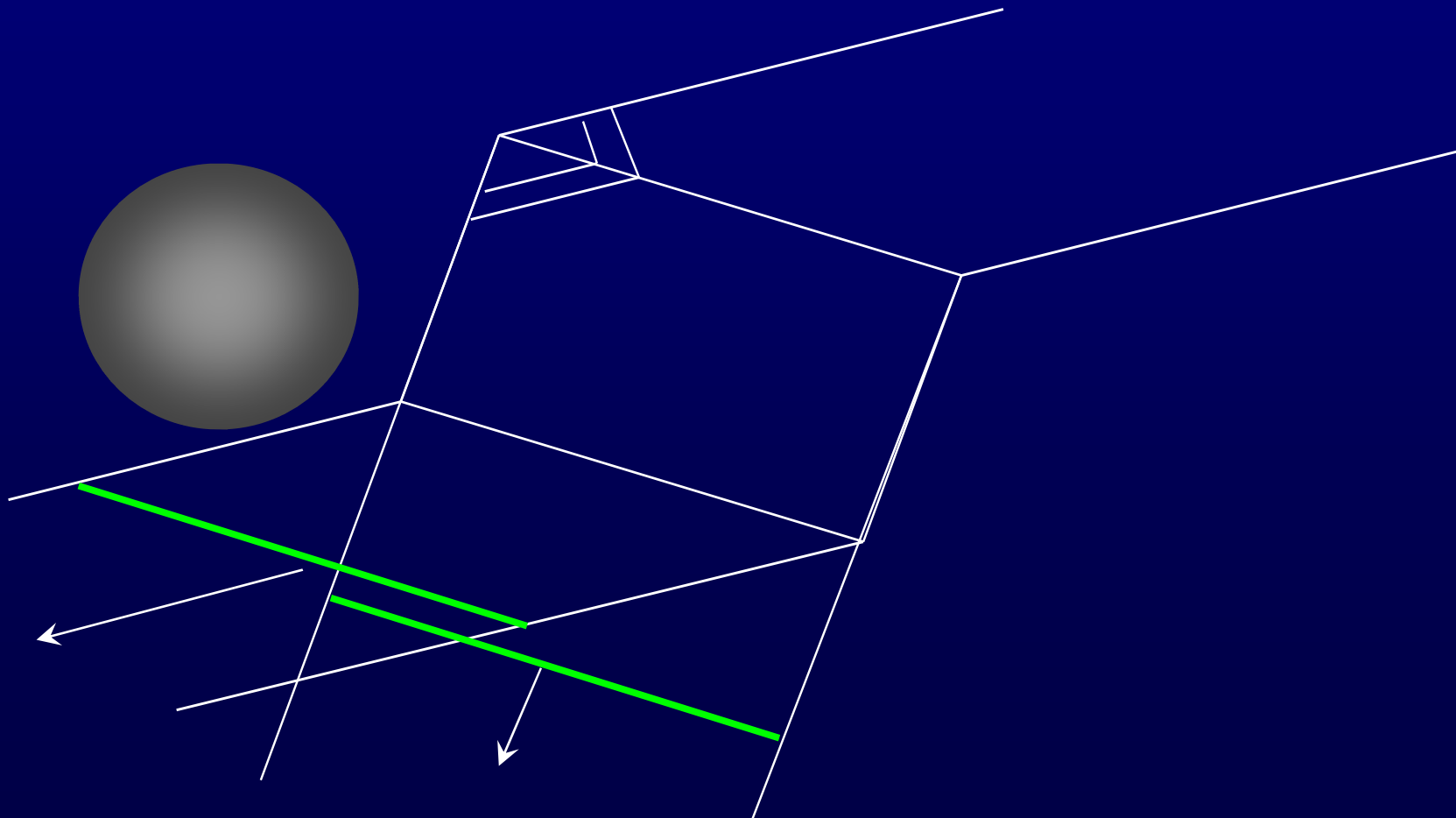




# Cross-slip



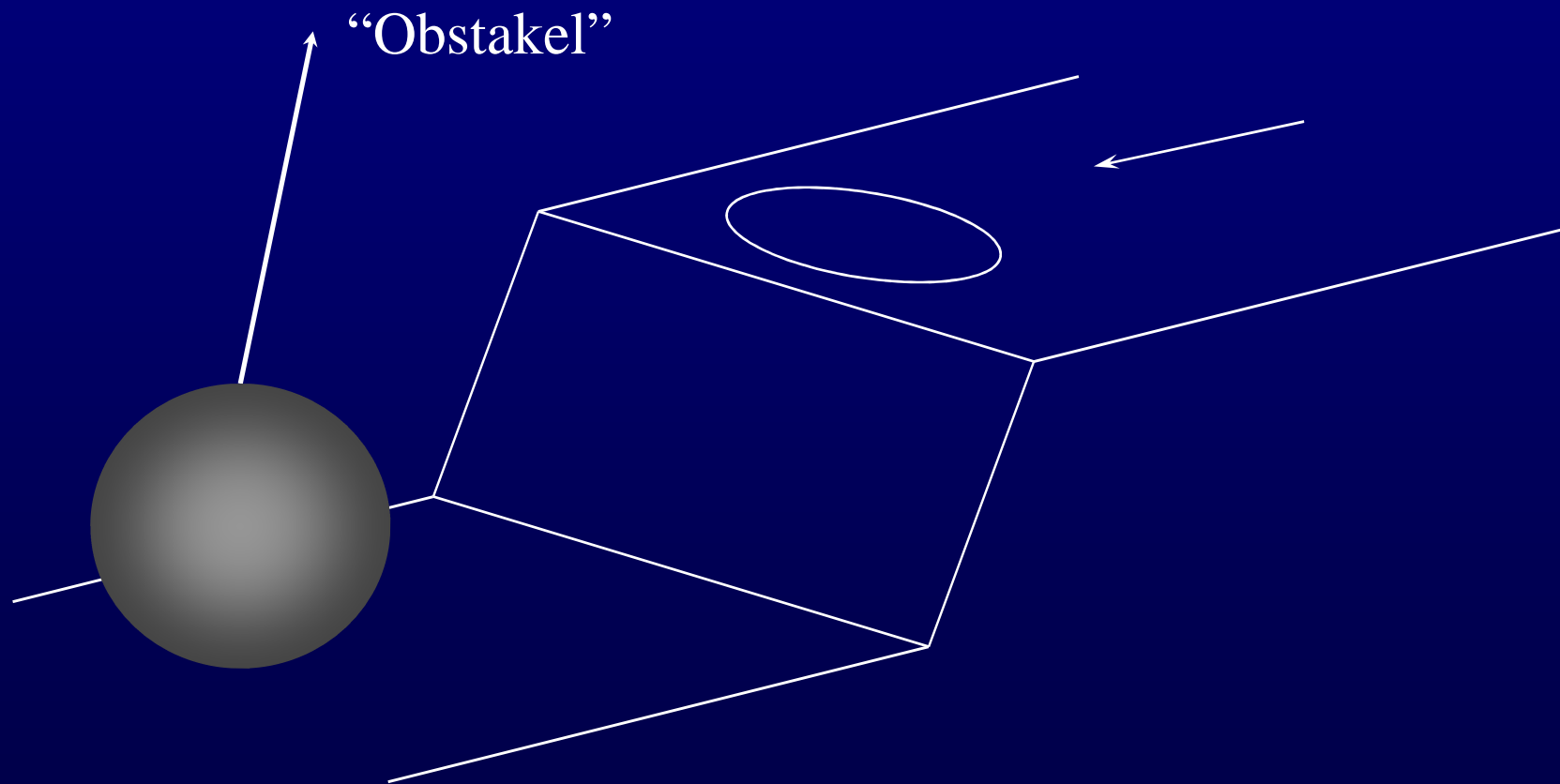
# Cross-slip



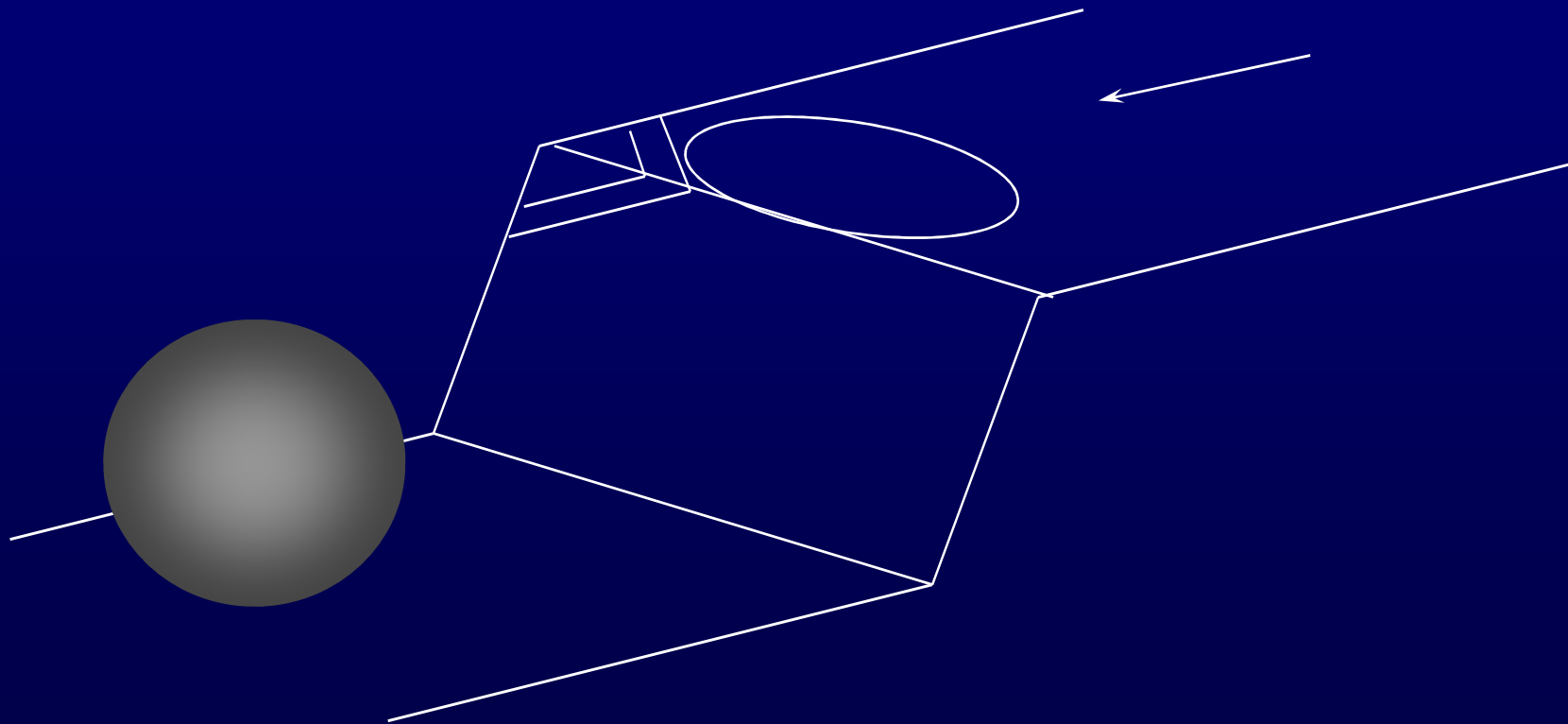
# Vermenigvuldiging door Cross-slip



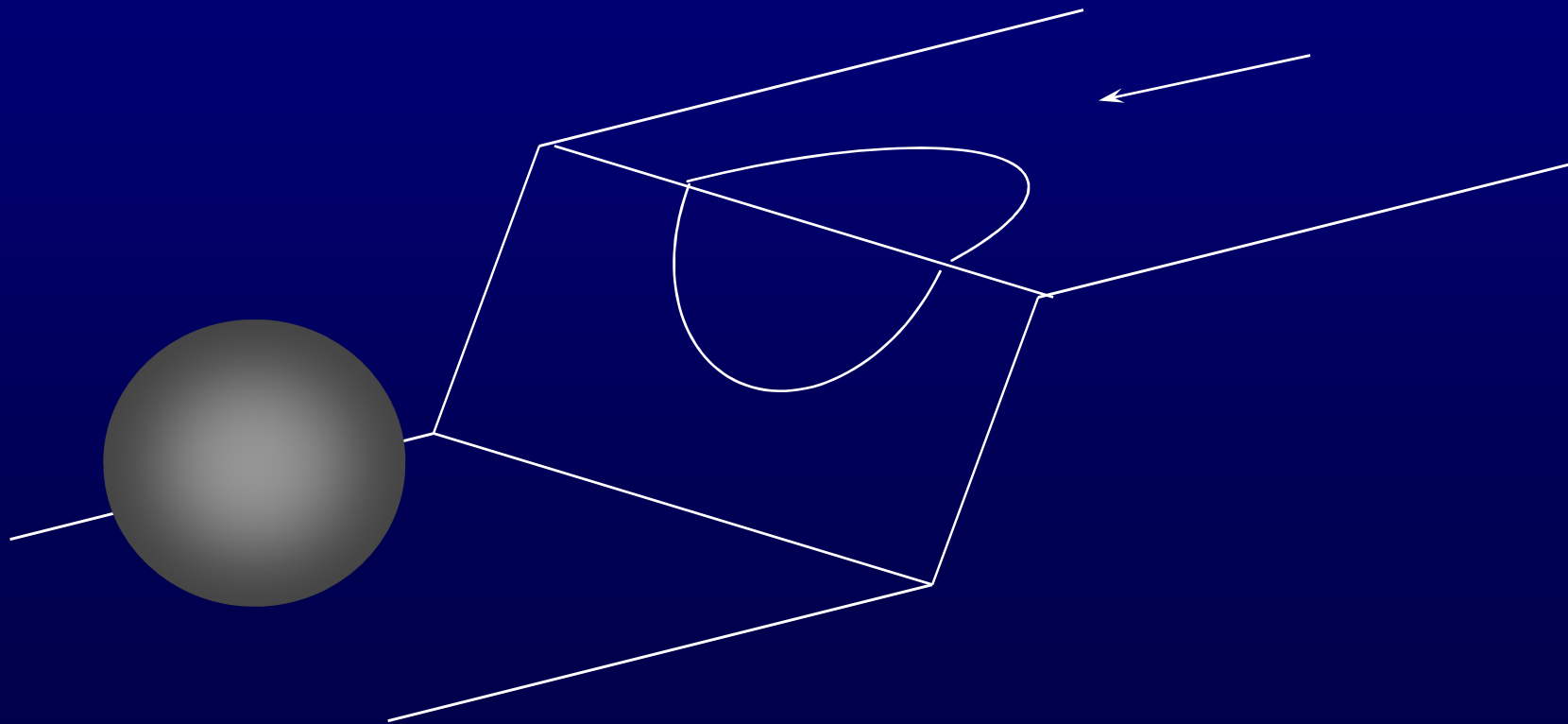
# Vermenigvuldiging door Cross-slip



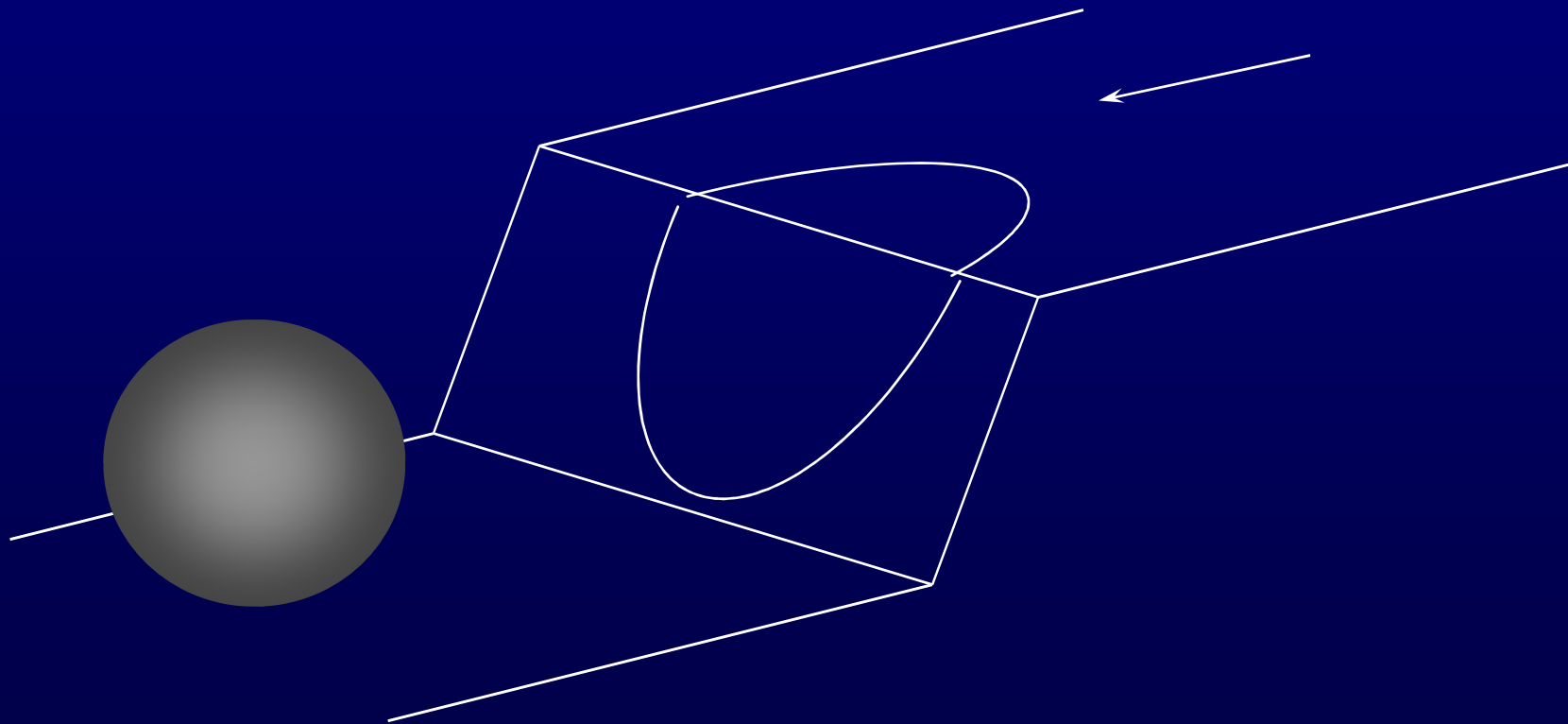
# Vermenigvuldiging door Cross-slip



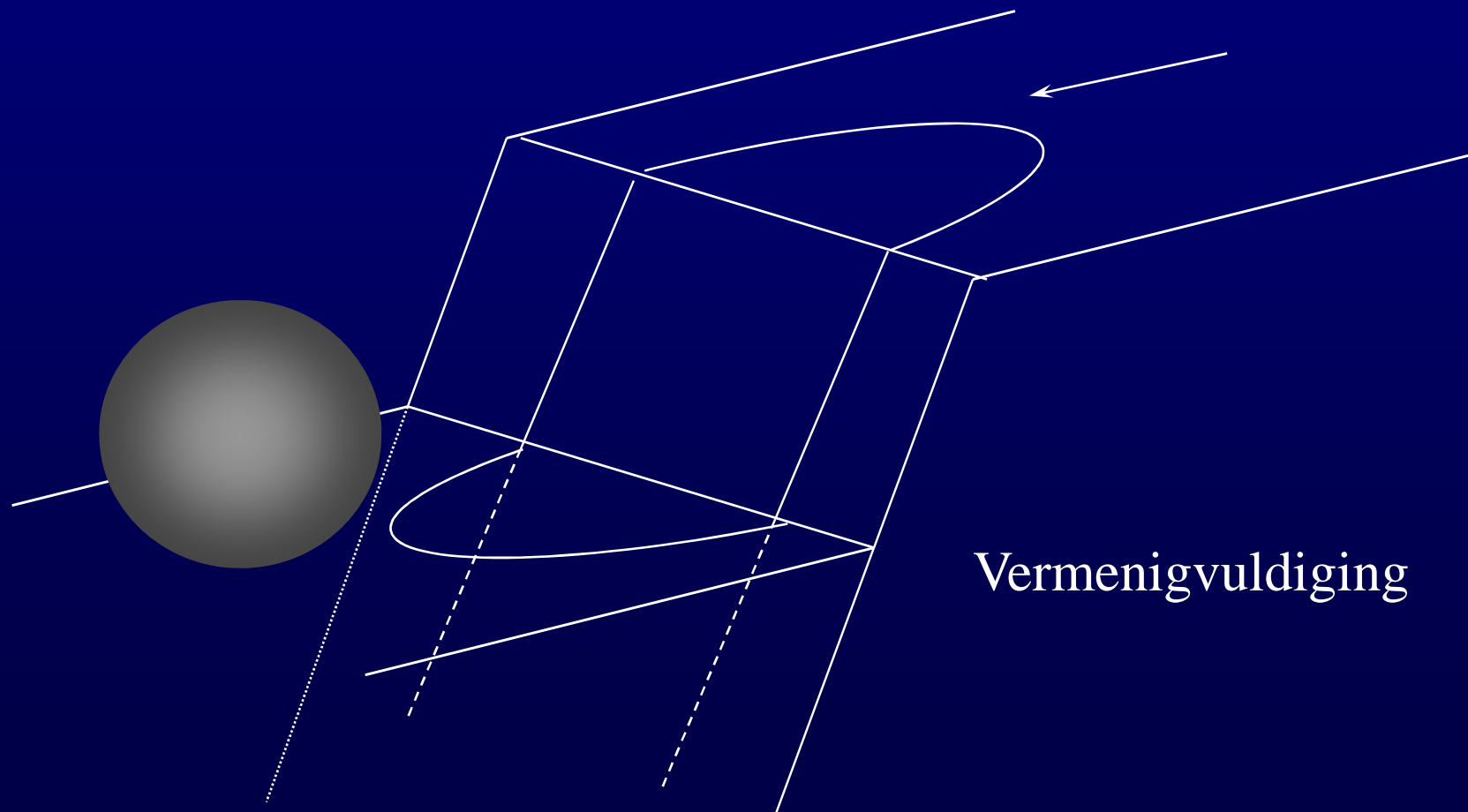
# Vermenigvuldiging door Cross-slip



# Vermenigvuldiging door Cross-slip



# Vermenigvuldiging door Cross-slip





# Schroefdislocaties en Kristalgroei

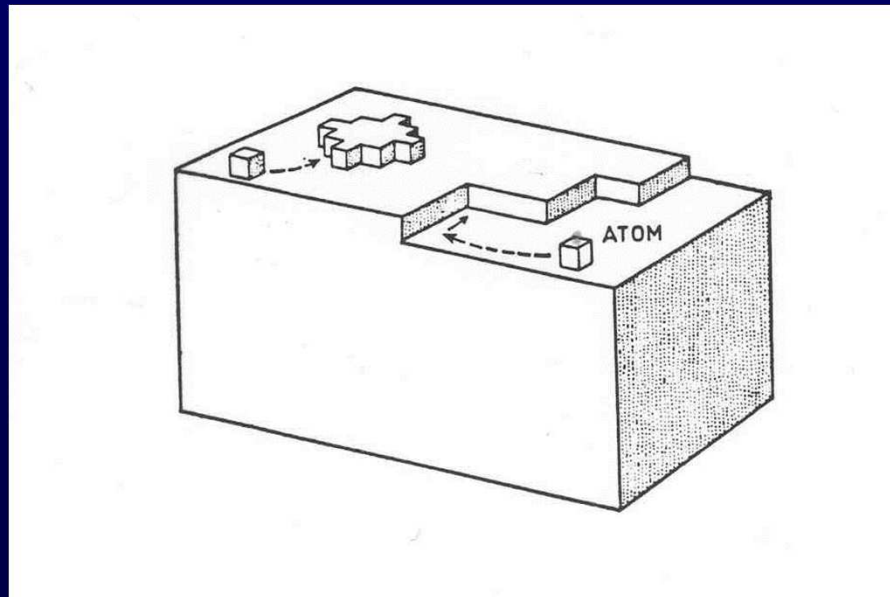
## Groeispiralen

# Schroefdislocaties en Kristalgroei

**Groeispiralen**, die reeds vaak zijn aangetoond bij kristalgroei, zijn **HET BEWIJS** voor het bestaan van **schroefdislocaties**.

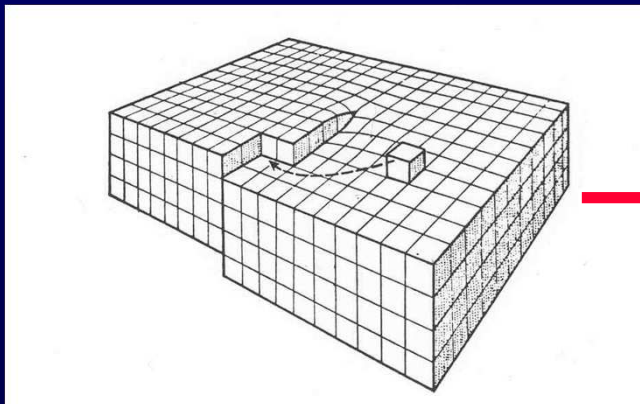
# Schroefdislocaties en Kristalgroei

- Om een kristalvlak aan te laten groeien, moet er een “begin”, een nucleus zijn, of een trede in het vlak.
- Daar is de energie nodig om een atoom “bij te plaatsen” het laagst.

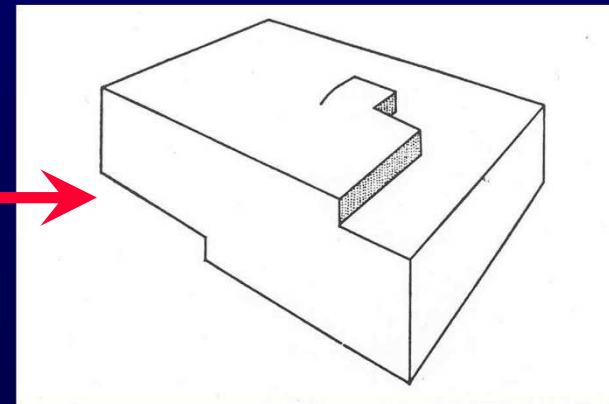


# Schroefdislocaties en Kristalgroei

- Een **schroefdislocatie** die aan het oppervlak komt voorziet **continue** in zo een **trede**: namelijk de **verspringing** die gepaard gaat met het schroefkarakter.



Bijplaatsen atoom aan trede

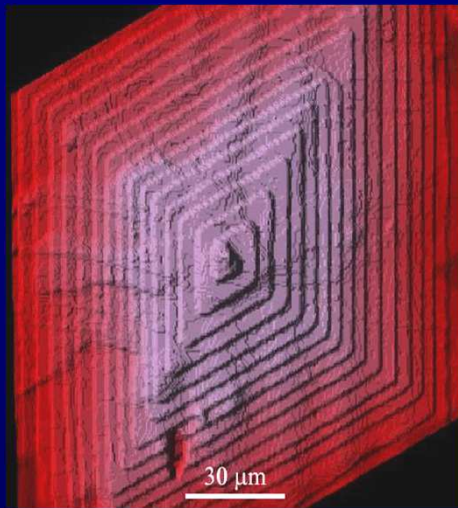


Schroefdislocatie is verder gegroeid.

# Schroefdislocaties en Kristalgroei - Groeispiralen

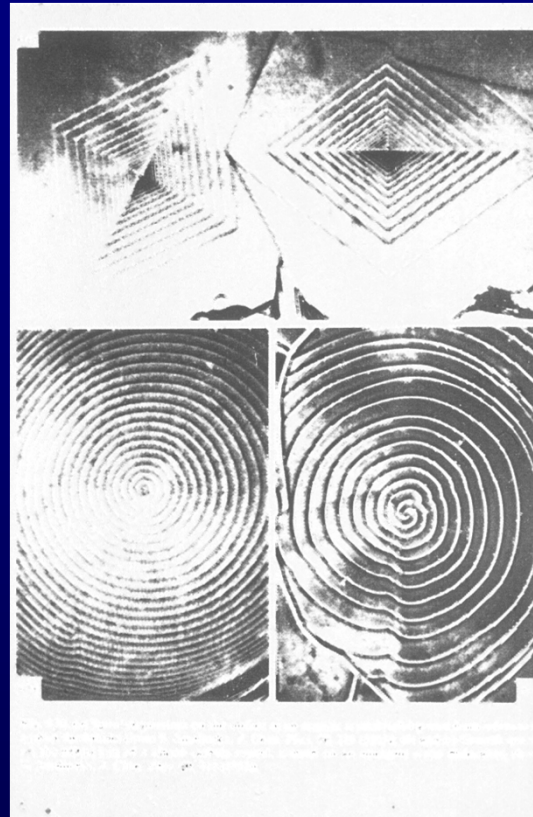
- Als gevolg van het groeien via schroefdislocaties ontstaan er zogenaamde **groeispiralen**.
- Deze zijn doorgaans met een **electronenmicroscop** of een **Atomic Force Microscope (AFM)** zichtbaar te maken.
- Heel soms zijn ze met een gewone lichtmicroscop te zien.
- Complexe interacties van groeispiralen via meerdere systemen van schroefdislocaties zijn mogelijk.

# Voorbeelden van Groeispiralen

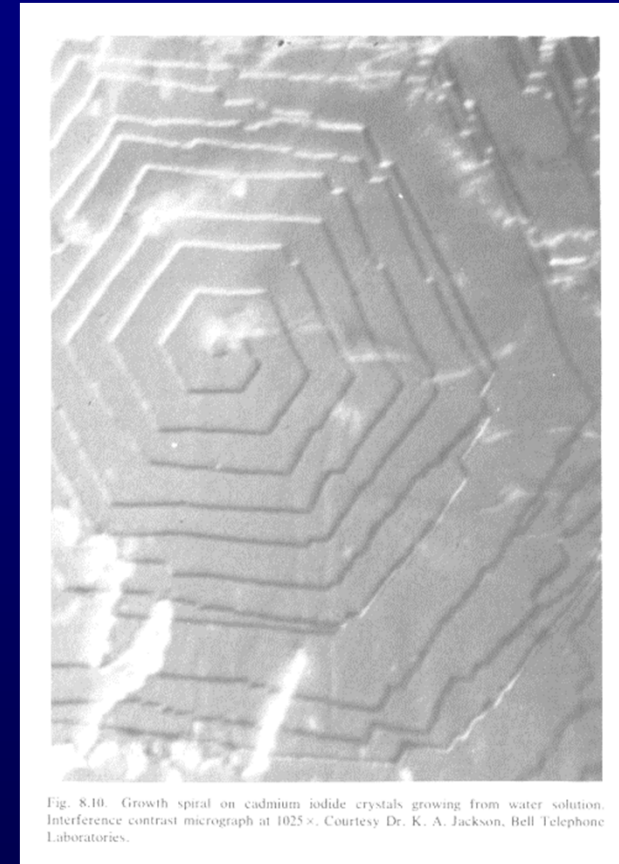


Groeispiraal in een alkaan-kristal ( $C_{34}H_{74}$ ) opgenomen met AFM.

© DoITPoMS Micrograph Library, Cambridge



Diverse groeispiralen (onbekend materiaal)



Groeispiraal in CdI

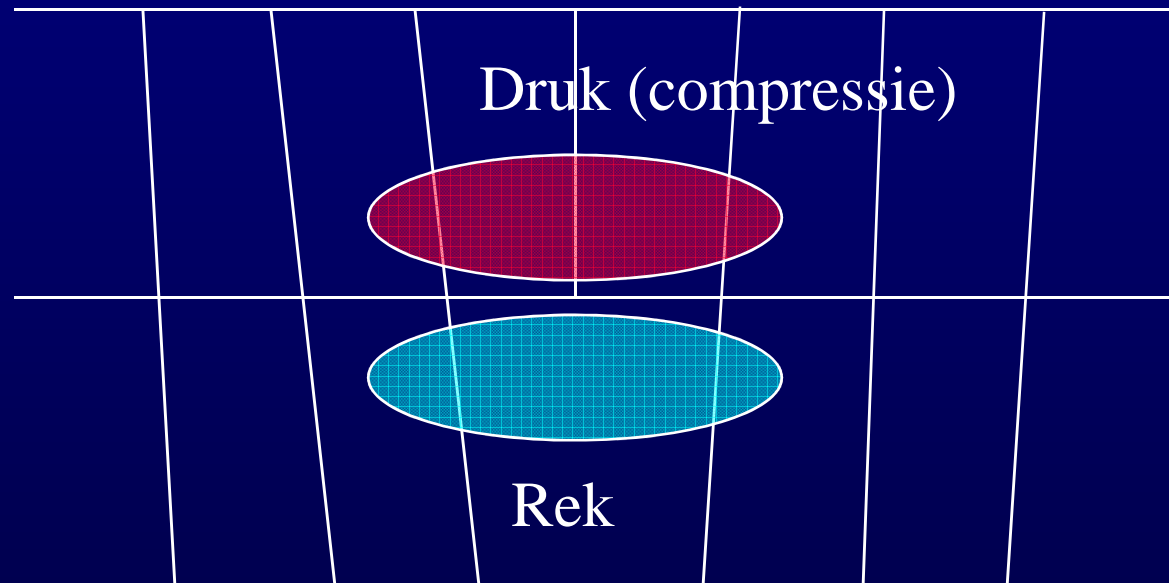
# Elastische Eigenschappen van Dislocaties

# Elastische Eigenschappen van Dislocaties

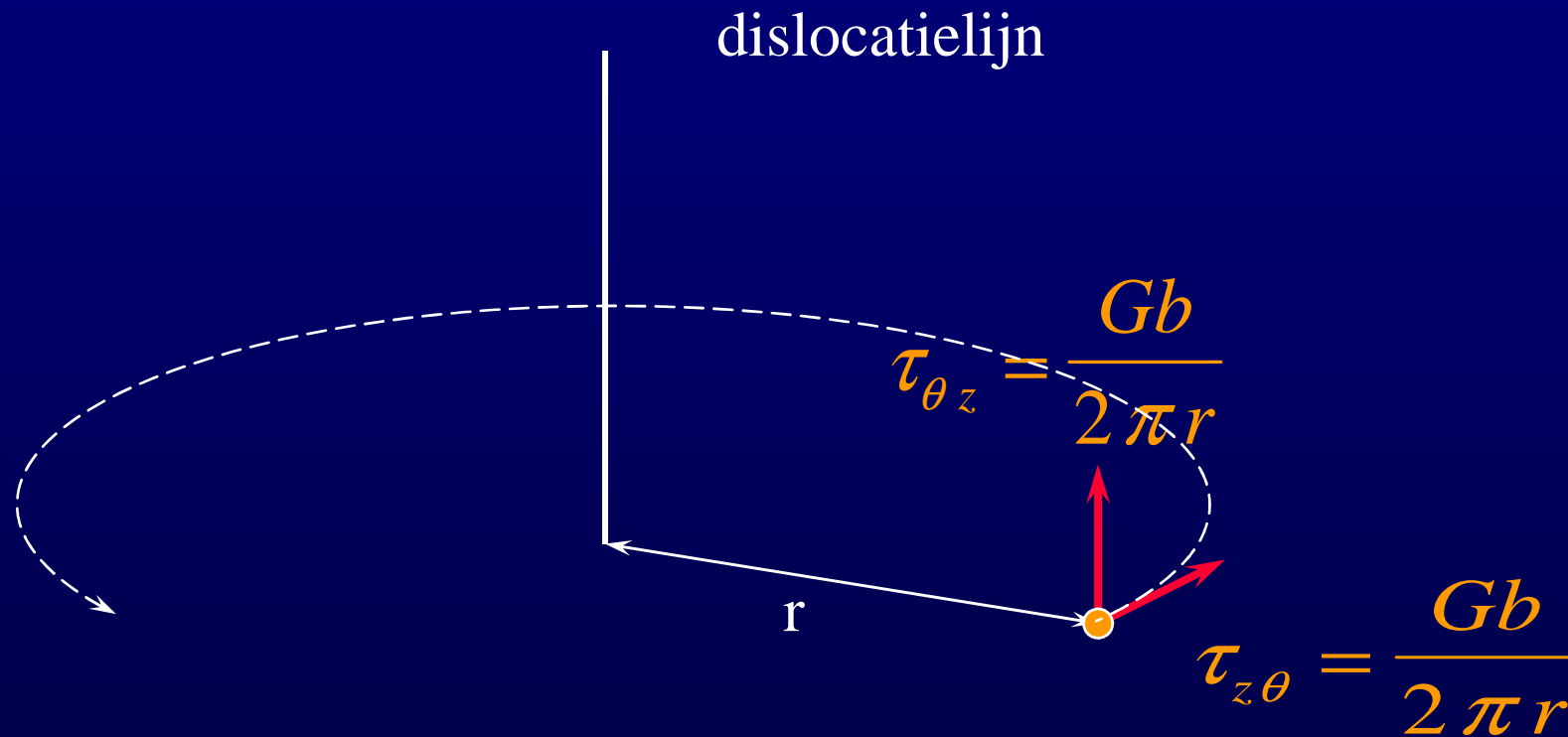
- “Core” van de dislocatie
- Elastische spanningsvelden
- Elastische vervormingsenergie bij een schroefdislocatie
- Energievergelijkingen
- Toepassingen van de energievergelijkingen
  - *metaal versus niet-metaal*
  - *slip in (dichts)gepakte vlakken*
  - *krachten tussen dislocaties*
  - *stabiele configuraties van lage energie*



# Druk en rek bij een randdislocatie

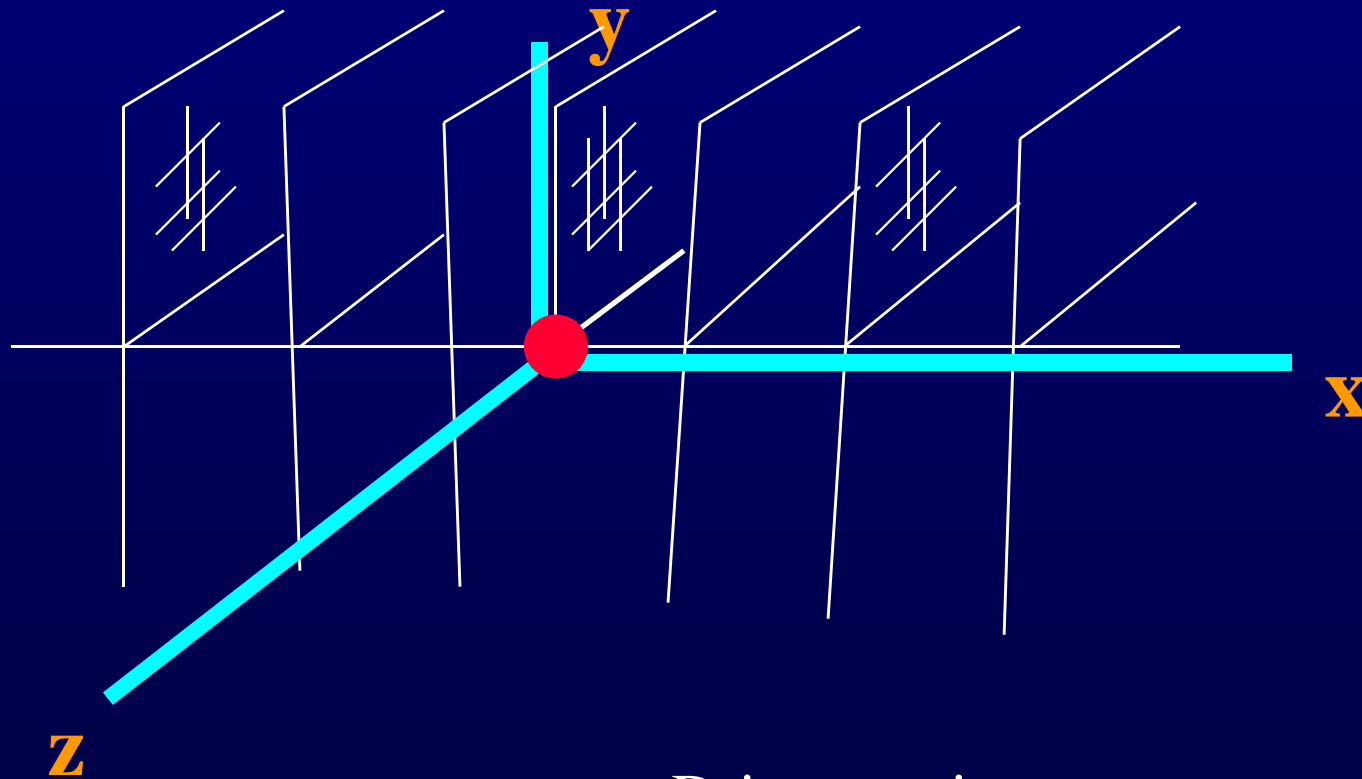


# Schroefdislocatie



Twee spanningscomponenten

# Randdislocatie - coördinatensysteem



Drie spanningscomponenten

# Randdislocatie

Voor de spanning in de x-richting kunnen we schrijven:

$$\sigma_x = -Dy \frac{3x^2 + y^2}{(x^2 + y^2)^2} \quad \text{met}$$

$$D = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$$

$$\nu = \text{Poisson Ratio}$$

# Spanning op de Dislocatielijn ?

Beschouw de de vergelijkingen:

$$\tau_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad \text{en} \quad \tau_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad \text{en}$$

$$\sigma_x = -Dy \frac{3x^2 + y^2}{(x^2 + y^2)^2}$$

als  $r = 0$ , of als  $x = y = 0$  dan wordt de spanning  $\tau$ , of  $\sigma$ , **ONEINDIG !**

# De “Core” van een dislocatie

- Het blijkt in feite dat we met de gebruikte **elasticiteits-theorie niet meer kunnen werken** als we **te dicht** bij de **dislocatie** komen !
- Men definieert daarom een **minimum afstand van af de dislocatielijn**, waarbuiten de theorie nog **WEL** toepasbaar is: **de “core” van de dislocatie.**

## De “Core” van een dislocatie

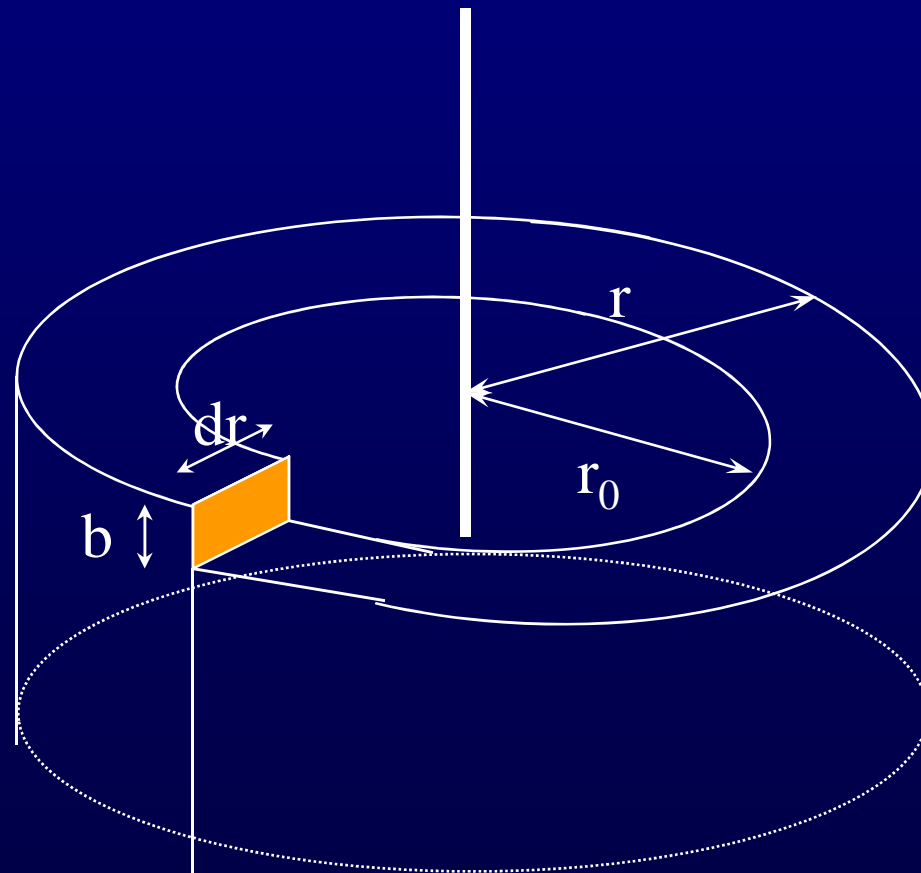
- De **grootte van deze core** is ongeveer  $10^{-7}$  cm, of wel ter grootte van  $\vec{b}$  tot  $4\vec{b}$ .
- Deze core is dus gewoon een zaak van **definitie**, en is **niets iets reëels in de natuur**.

# Spanningsvelden rond een dislocatie

- Rond een dislocatie vinden we dus een **elastisch spanningsveld** !
- Er is energie opgeslagen in zo'n spanningsveld : **strain energy (E)**.
- $E_{\text{total}} = E_{\text{core}} + E_{\text{elastisch}}$
- Buiten de core ( $r > r_0$ ) kunnen we deze spanningsvelden vrij eenvoudig beschrijven.



# Schroefdislocatie

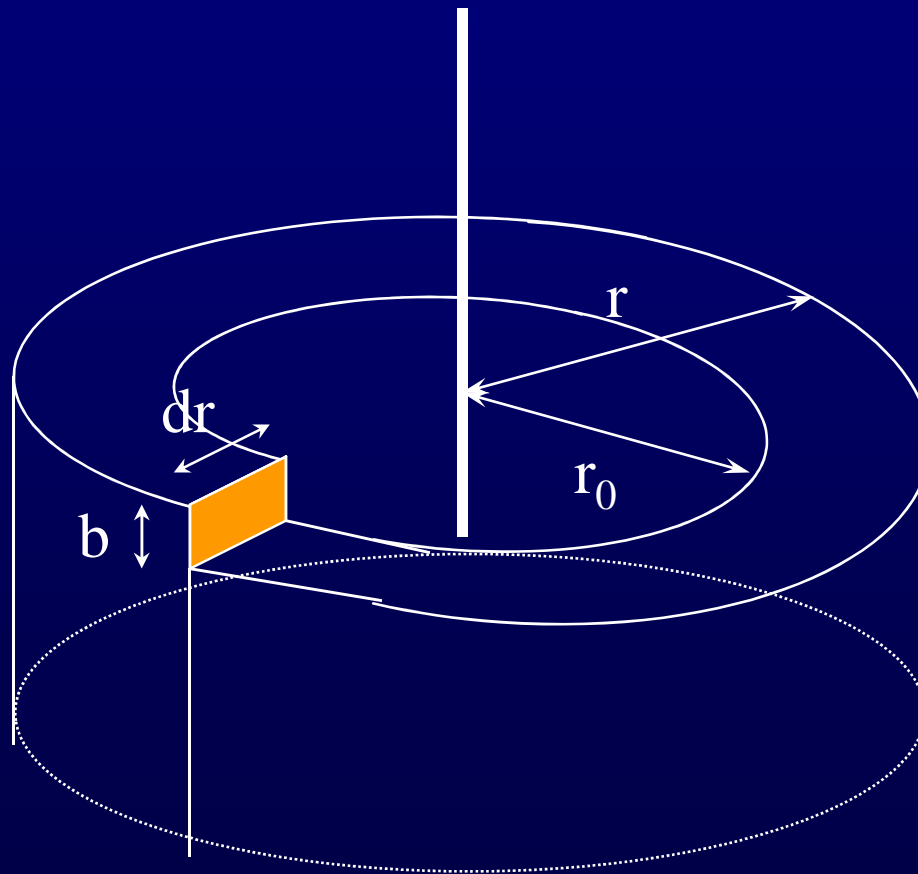


# Schroefdislocatie

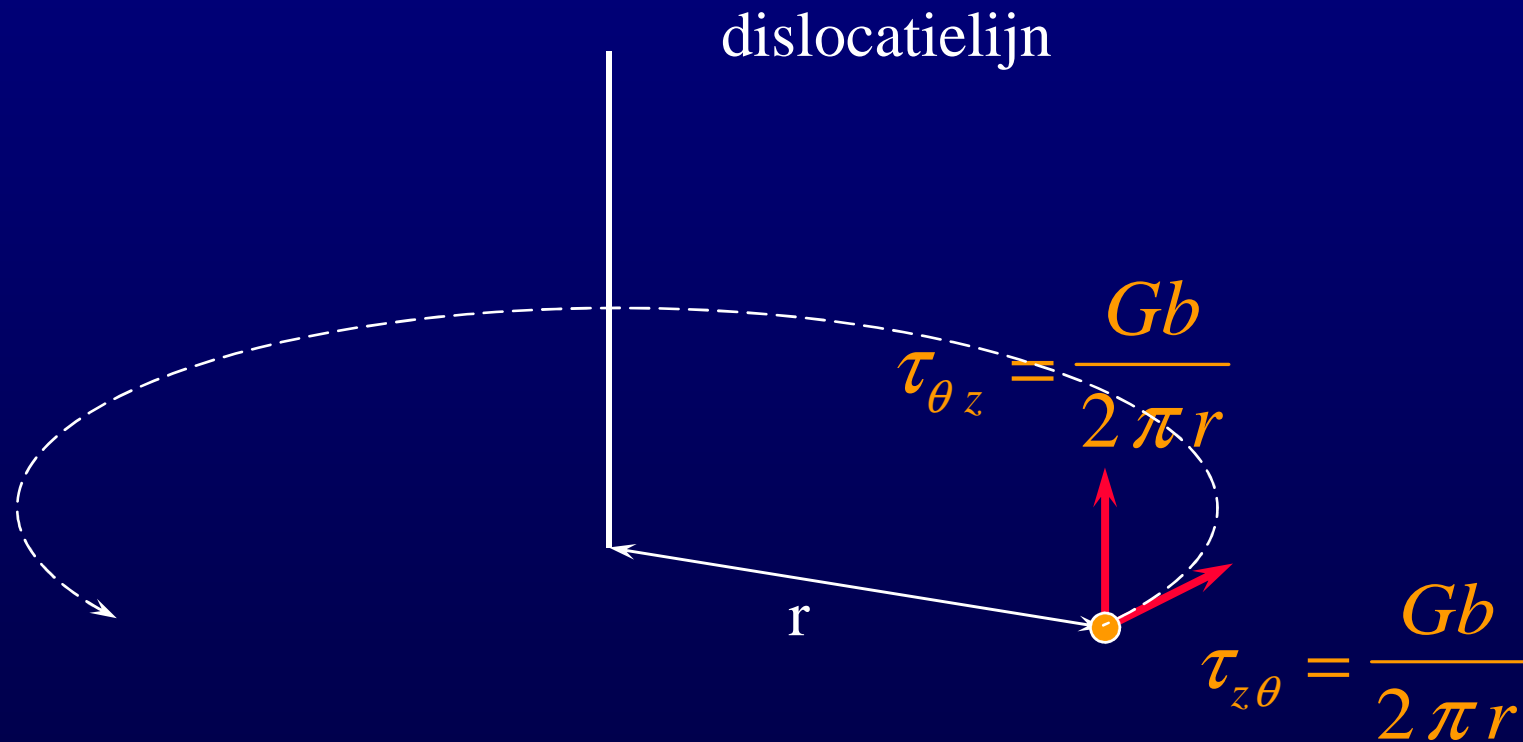
Hoe hangt de elastische vervormingsenergie af van:

1. afstand tot de dislocatielijn ?
2.  $b$  ?
3.  $G$  ?

# Schroefdislocatie



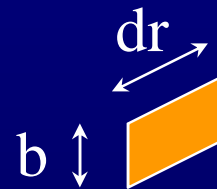
# Schroefdislocatie



Twee spanningscomponenten

# Schroefdislocatie

$$dE = \dots\dots\dots bdr$$



$$dE = \dots\dots ???$$

# Energievergelijkingen

*1*  $dE = \dots\dots bdr$

# Energievergelijkingen

Schroefdislocatie:

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{r}{r_0}$$

Randdislocatie:

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r}{r_0}$$

$\nu$  = *Poissonverhouding*

Gemengde dislocatie:

$$E = \alpha G b^2$$

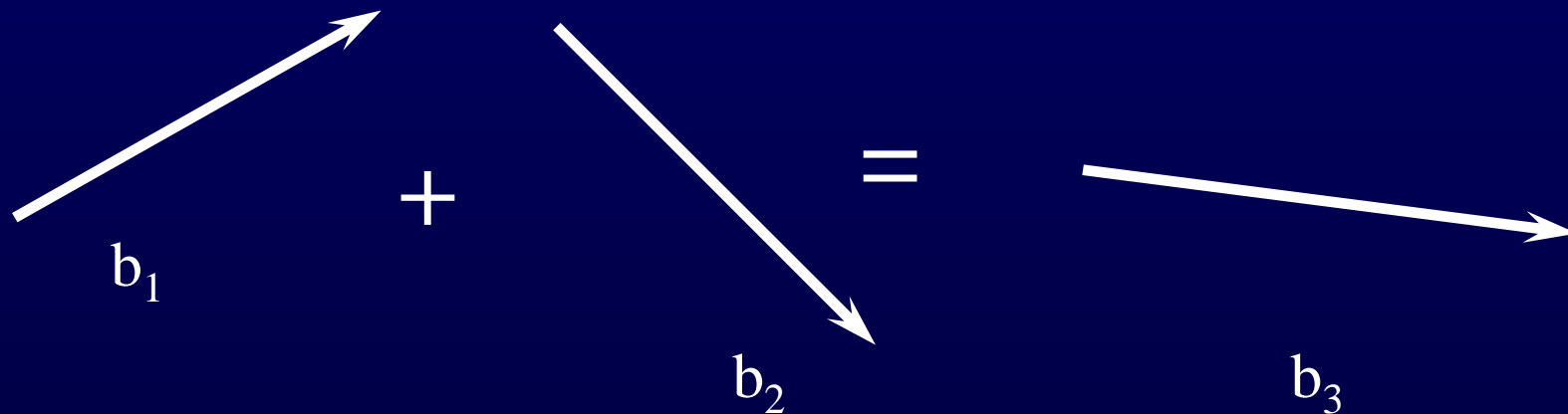
$\alpha$  = constante

Algemeen:

$$E \sim b^2$$

# Energievergelijkingen

- Wat gebeurt er als twee dislocaties met burgersvector  $b_1$  en  $b_2$  elkaar ontmoeten ?
- Ze streven naar een toestand van laagste energie ( $E_{\text{elastisch}}$  is evenredig met  $b^2$ )





# Energievergelijkingen

- Er zijn drie mogelijkheden:

1.  $b_1^2 + b_2^2 = b_3^2$  **Stabiele vertakking**

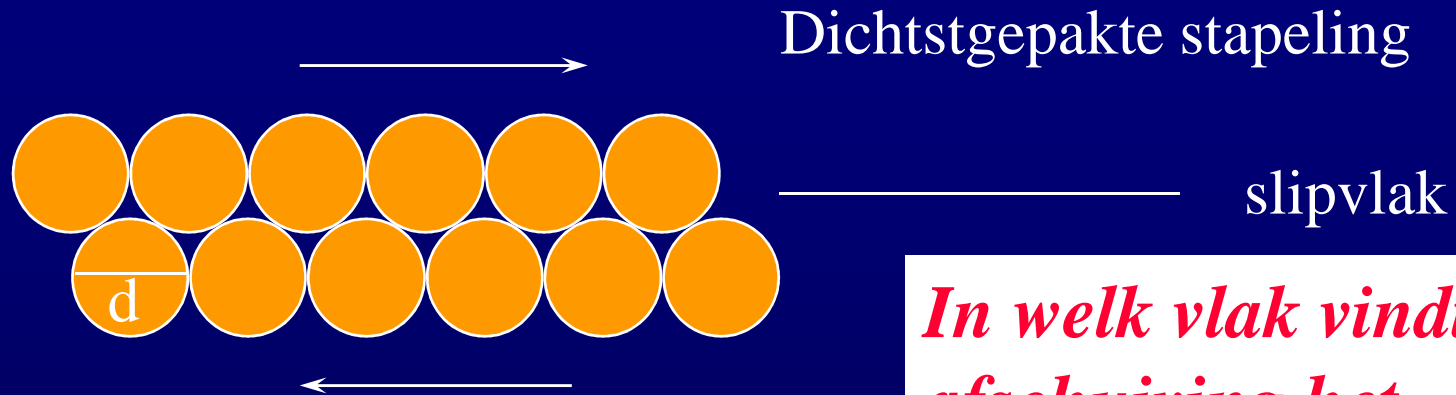
2.  $b_1^2 + b_2^2 > b_3^2$  **vorming nieuwe dislocatie  
gunstig**

3.  $b_1^2 + b_2^2 < b_3^2$  **vorming nieuwe dislocatie  
ongunstig**

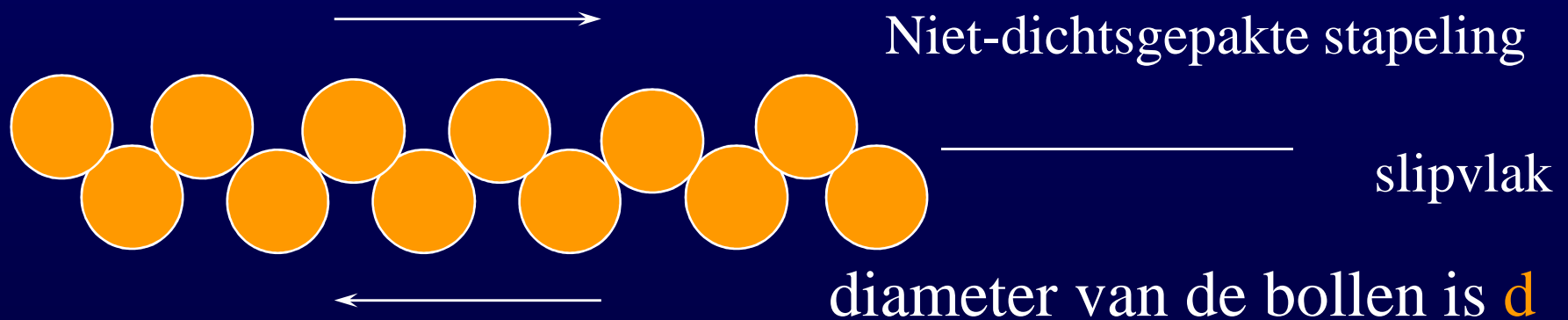
# Metaalkristallen en Niet- Metaalkristallen

- In een ionogene stof (bijvoorbeeld NaCl) zijn met ieder **roosterpunt 2 of meer** (in CaSO<sub>4</sub> bijv. 3) **roosterpunten** geassocieerd.
- De **burgersvector** van een dislocatie is in een **ionogene** stof **veel groter** dan in een **metaalkristal** (bijvoorbeeld NaCl versus Fe).
- Doorgaans zijn **kristallen van niet-metalen** dan ook **brosser** (= minder ductiel) dan **metalen** want  **$E_{\text{elastisch}}$  is evenredig met  $b^2$** .

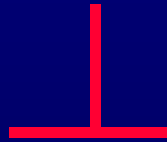
# Slip in (dichts)gepakte vlakken



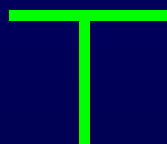
*In welk vlak vindt  
afschuiving het  
gemakkelijkst plaats??*



# Symbolen voor dislocaties



symbool voor een (rand)dislocatie met burgersvector  $\vec{\mathbf{b}}$



symbool voor een (rand)dislocatie met tegengesteld teken van de Burgersvector, dus  $-\vec{\mathbf{b}}$

# Krachten tussen dislocaties



Twee randdislocaties, ver van elkaar vandaan

**Wat wordt de vergelijking voor de elastische vervormingsenergie ?**

# Krachten tussen dislocaties



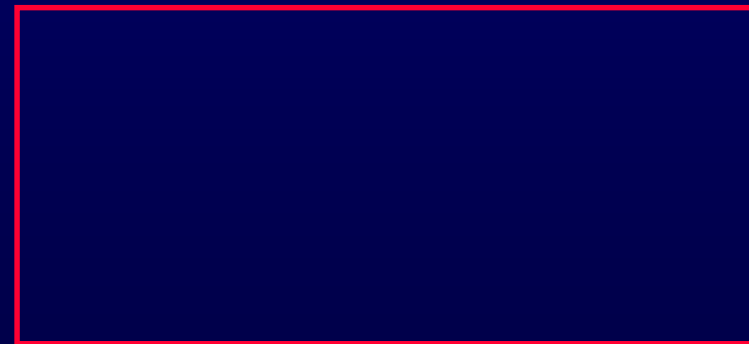
Twee randdislocaties, ver van elkaar vandaan

Voor elke randdislocatie geldt :

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r}{r_0}$$



Voor de totale energie dus :



# Krachten tussen dislocaties

- Wat gebeurt er nu als we deze twee dislocaties tegen elkaar aan drukken ?

# Krachten tussen dislocaties



De twee dislocaties, elk met een burgersvector  $\vec{b}$   
vormen nu...

De energievergelijking  
wordt dus:

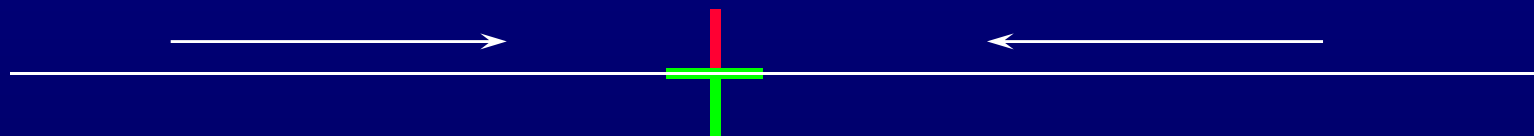




# Krachten tussen dislocaties

- Wat gebeurt er met dislocaties met **tegengesteld teken** in een dergelijke situatie en wat wordt de elastische vervormingsenergie ?

# Krachten tussen dislocaties



# Krachten tussen dislocaties



De vervormingsenergie wordt :

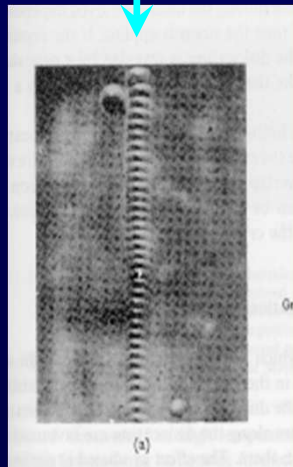
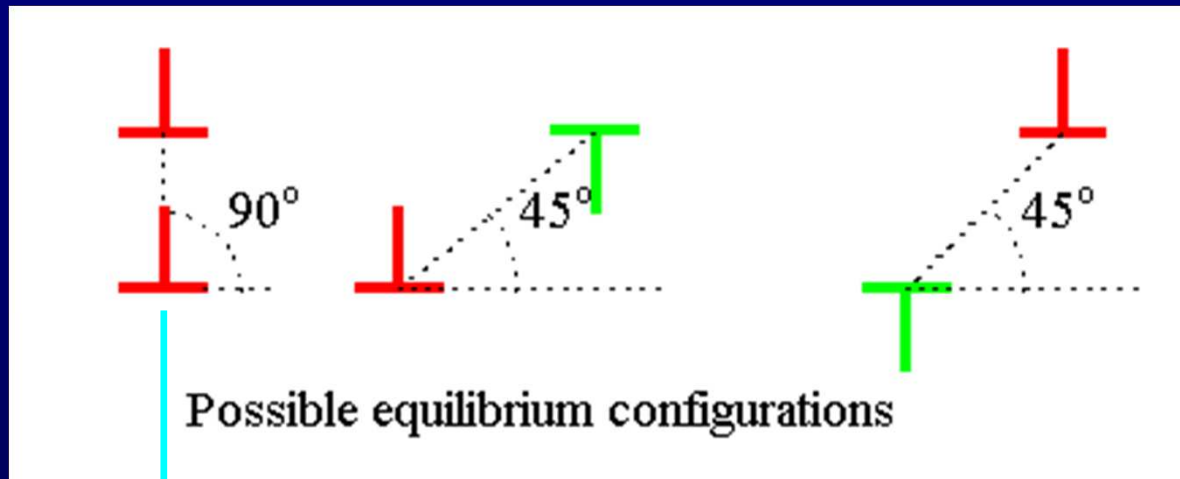


# Krachten tussen dislocaties

Meer algemeen kan men stellen:

- Dislocaties met **hetzelfde** teken.....
- Dislocaties met **tegengesteld** teken.....

# Stabiele configuratie van dislocaties (lage energie)



3 mogelijke stabiele configuraties  
van dislocaties

Low-angle boundary

# Pile-up

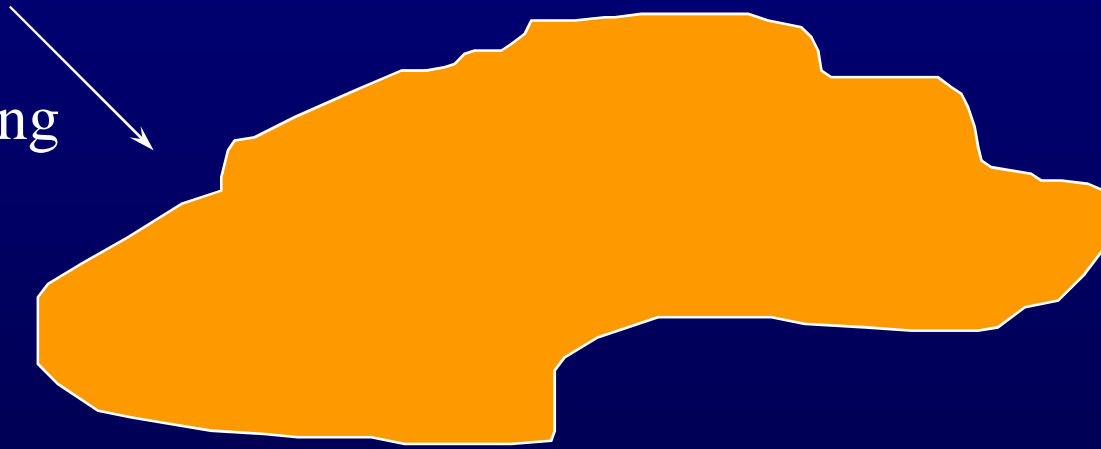
Doorbreken van de korrelgrens  
Haarscheurtjes  
Relatie tussen korrelgrootte en  
ductiliteit

# Pile-Up

- Wanneer **onder invloed** van een **spanningsveld** **dislocaties van hetzelfde teken** in een bepaalde **richting** worden **gedreven**, en ze **ontmoeten** een **obstakel**, dan ontstaat er een zekere **rangschikking** door het afstotende effect: **Pile-Up**.

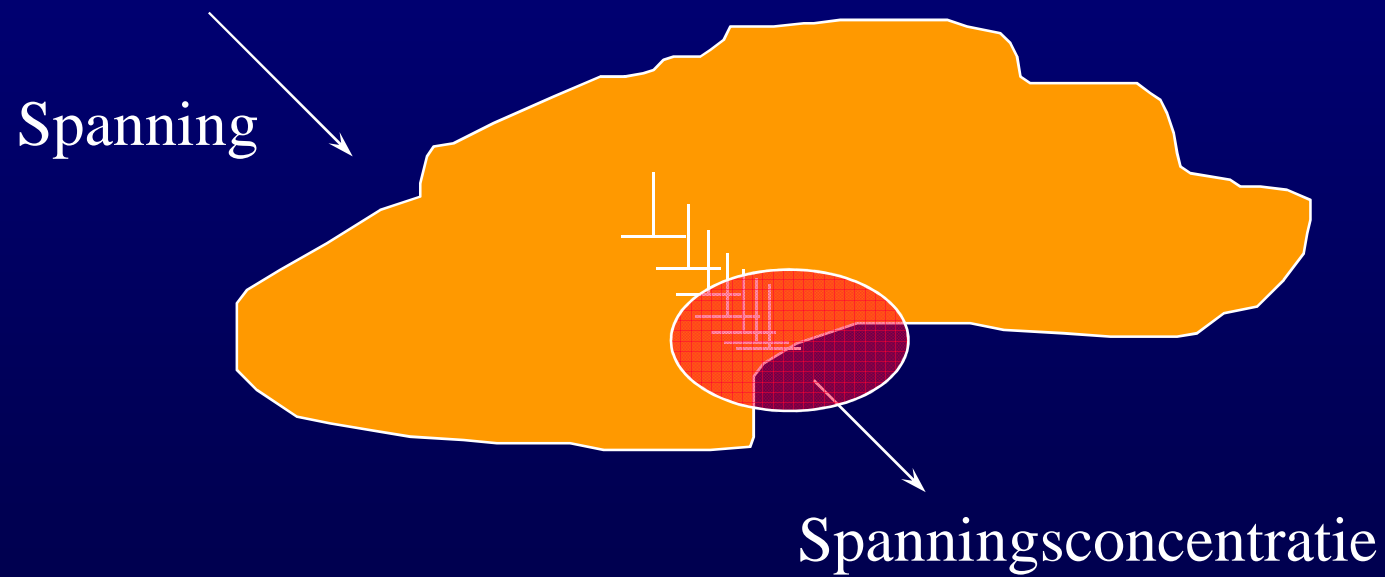
# Pile-Up

Spanning





# Pile-Up

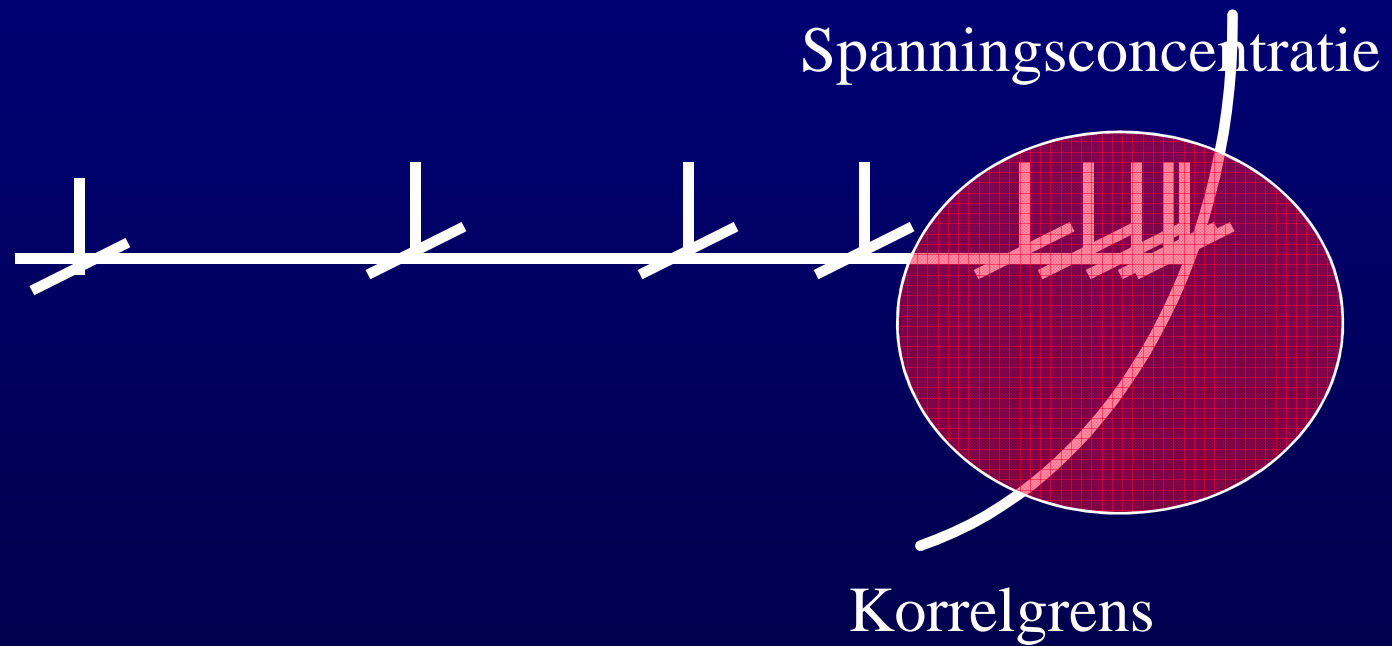


# Pile-up



TEM-foto van **pile-up** aan een korrelgrens. Merk op dat de dislocaties steeds verder uit elkaar liggen naarmate ze verder van de korrelgrens verwijderd zijn. Onbekend materiaal.

# Pile-Up



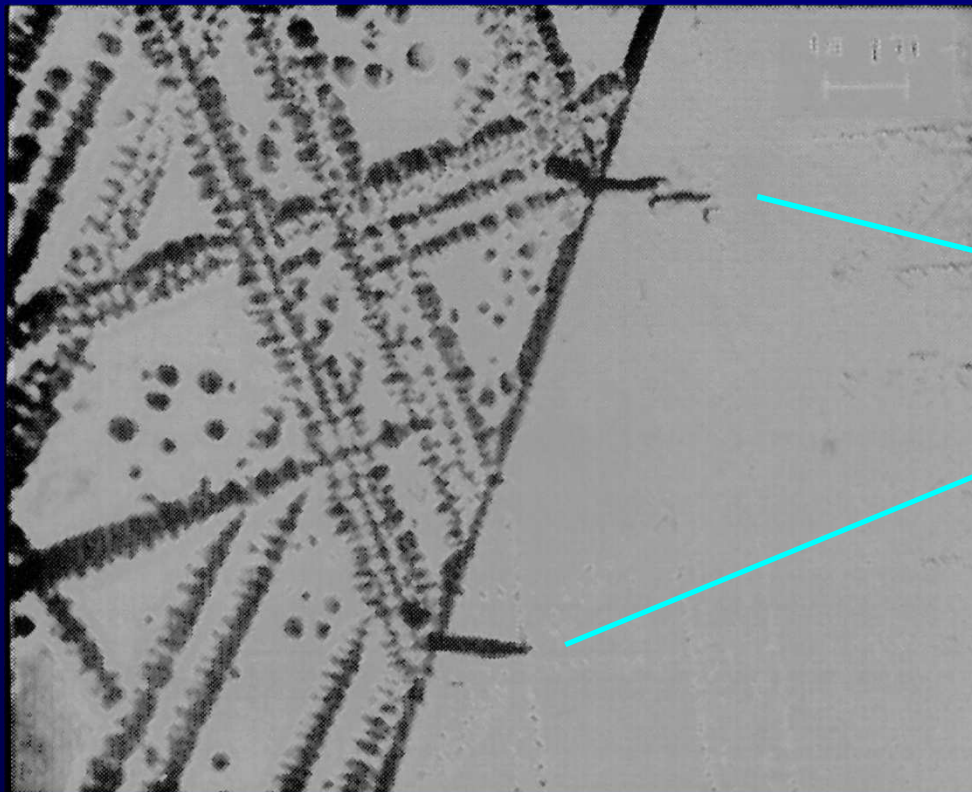
# Pile-Up

$$E = \frac{G(b)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r}{r_0}$$

Omdat de dislocaties op elkaar geduwd worden, ontstaat er aan de korrelgrens een “*superdislocatie*” met een burgersvector die enorm veel groter is: **E wordt dus ook zeer veel groter (vanwege de  $b^2$ -term).**

Op een geven moment kan de korrelgrens de opgebouwde spanning niet meer aan, en treedt er **doorbraak** op: er ontstaat een **haarscheur**.

# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens



Doorbraak (haarscheuren)

Etsputten in onbekend materiaal

# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens



- Spanningsvelden van  $n$  dislocaties met burgersvector  $\vec{b}$  kunnen worden samengenomen als het spanningsveld van een “**superdislocatie**” met burgersvector  $n\vec{b}$
- dislocaties kunnen zich bij de superdislocatie aansluiten zolang:

$$\tau_{\text{uitwendig}} > \tau_{\text{dislocatie}}$$

# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

- Hoe groter de korrel, hoe meer dislocaties zich kunnen aansluiten.
- Bij een bepaalde  $\tau_{uitwendig}$  is  $n$  evenredig met  $d$  ( $n$  = aantal aangesloten dislocaties,  $d$  = korreldiameter)
- de spanning bij de korrelgrens is :

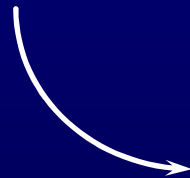
$$\tau_{korrelgrens} = n \tau_{uitwendig}$$

- Als de korrelgrens doorbroken wordt is :

$$\tau_{korrelgrens} = \dots \quad \text{en} \quad n = \dots$$

# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

$$\tau_{\text{maximaal}} =$$



maximale spanning van de superdislocatie

Als we voor het gemak veronderstellen dat we **alléén schroefdislocaties** hebben, dan kunnen we de spanning schrijven als:

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi r}$$



# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

Voor de superdislocatie geldt :

als  $n = n_{\text{maximaal}}$ , dan is  $r = \dots\dots$   
( $d$  = diameter van de korrel)

- maar ook :



# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

en omdat  $\tau_{maximaal}$  een constante is per materiaal  
(en G en b zijn ook constanten):

$$\tau_{uitwendig}^{doorbraak} =$$

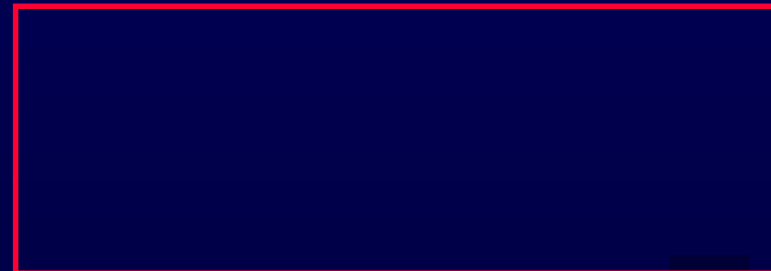
# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

Eigenlijk moet er nog een zekere extra spanning opgebracht worden, alvorens de dislocaties gaan bewegen:

deze spanning is de som van de **Peierls-spanning** en de spanning nodig om de **weerstand van overige dislocaties** en **spanningsvelden** als gevolg van andere **verstoringen** te overwinnen

**Hetzelfde kan ook worden bewezen voor randdislocaties**, zodat we in het algemeen kunnen schrijven:

**(A, B zijn constantes)**



# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

De gebruikelijke vorm van deze vergelijking is:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{K_y}{\sqrt{d}}$$

$\sigma_0, K_y = \text{constant}$   
 $d = (\text{gemiddelde})$   
korreldiameter

- Deze relatie staat in de materiaalkunde bekend als de **Relatie van Hall & Petch.** (E.O. Hall, 1950; N.J. Petch, 1953, onafhankelijk van elkaar).  **$K_y$**  is **de Hall-Petch-constante**, een materiaalconstante.

# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

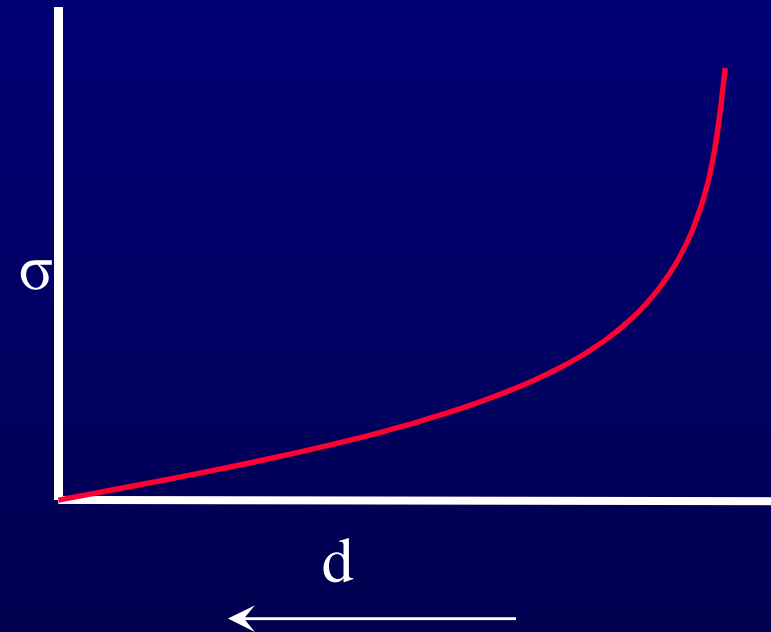
$$\sigma = \sigma_0 + \frac{K_y}{\sqrt{d}}$$

$\sigma_0, K_y = \text{constant}$   
 $d = (\text{gemiddelde})$   
korreldiameter

Een polykristallijn materiaal wordt dus **brosser en harder met afnemende korrelgrootte** (bij gelijkblijvende initiële dislocatiedichtheid).

# Pile-up en het doorbreken van de korrelgrens

- Dit heeft betekenis voor het proces van **malen en breken** in Grondstoffentechnologie:
- Naarmate het te malen materiaal **fijner** wordt, wordt het **moeilijker** om verder te malen (verder te verkleinen).
- Dit blijkt o.a. ook uit het snel **oplopen van de benodigde energie voor malen** naarmate het materiaal **verder verkleind** wordt. (zie ook Verkleining van Materialen)



$$E = 10W_i \left[ \frac{1}{\sqrt{d_{80}} (product)} - \frac{1}{\sqrt{d_{80}} (voeding)} \right]$$

*Formule van Bond*

# Industriële Malen



De **Hall-Petch Relatie** is hier van groot belang: **met een bepaald maalapparaat kun je slechts een minimale korrelgrootte bereiken.**

# Plasticiteit en Deformatie

Slijplijnen

Kritisch Ontbonden Schuifspanning

Shear – éénkristal

Shear - Polykristallijn

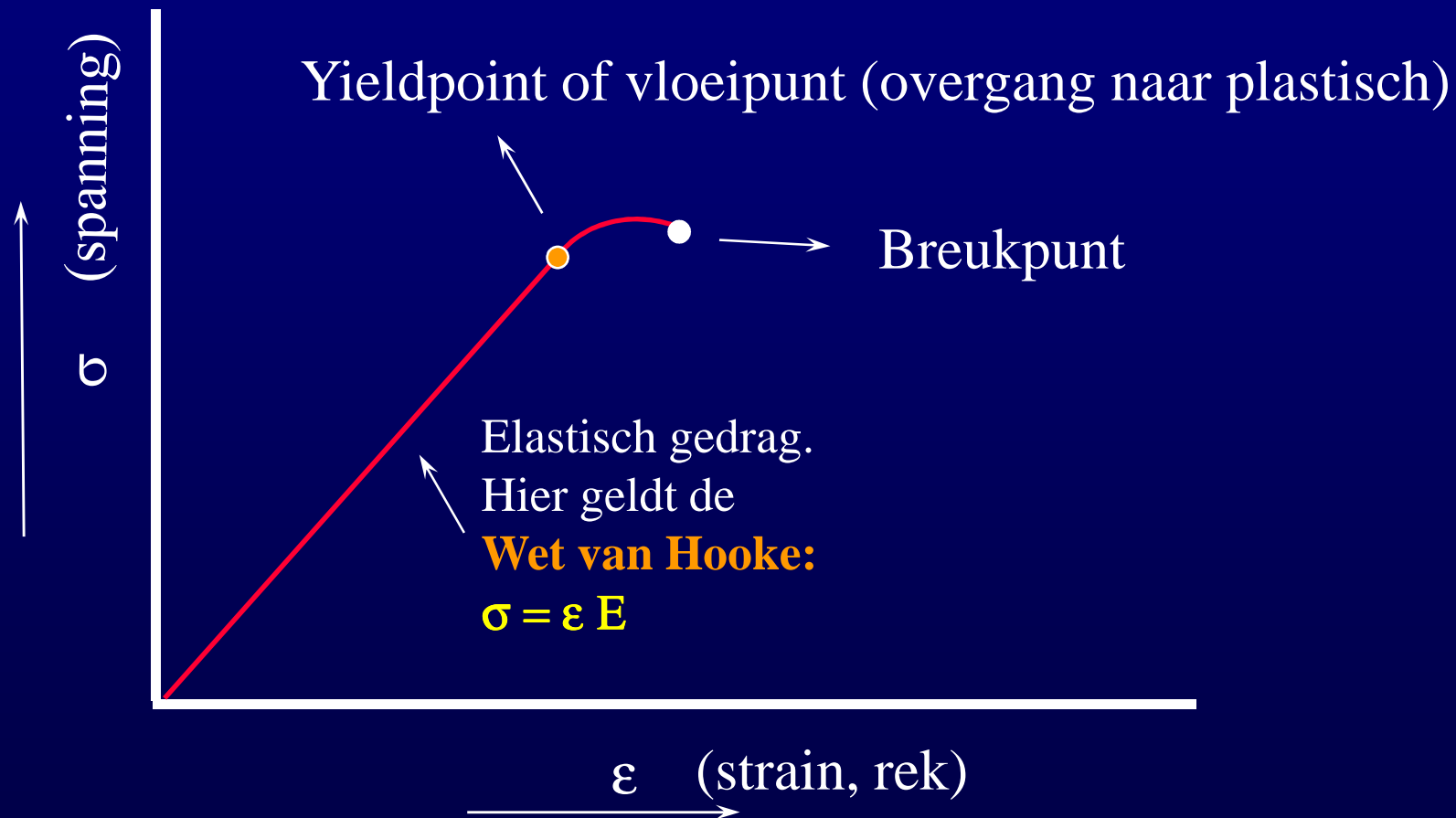
Strain Hardening

Deformation Twinning

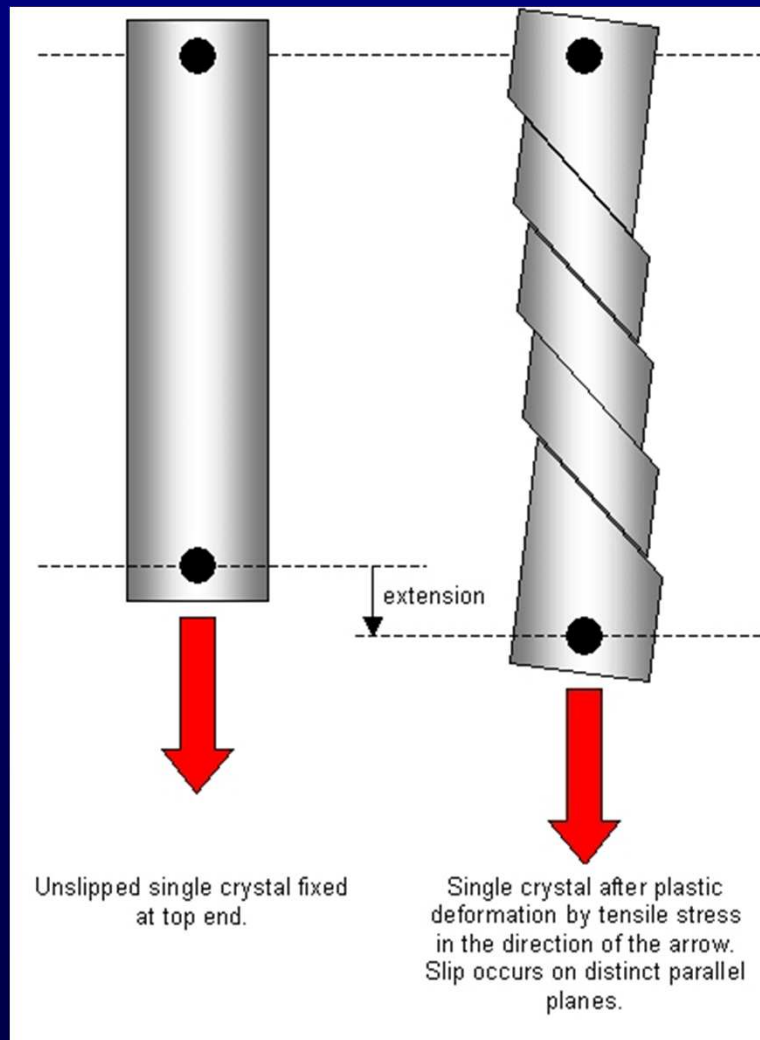
Orowan Mechanisme



# Plasticiteit - Trek-rek diagram

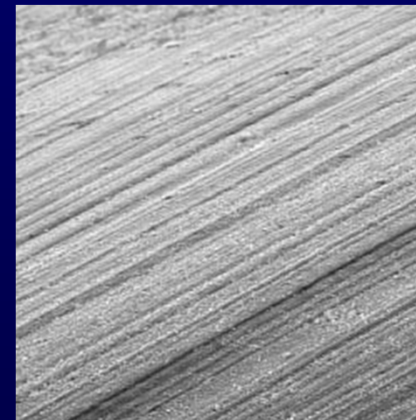


# Plasticiteit - Slijlijnen

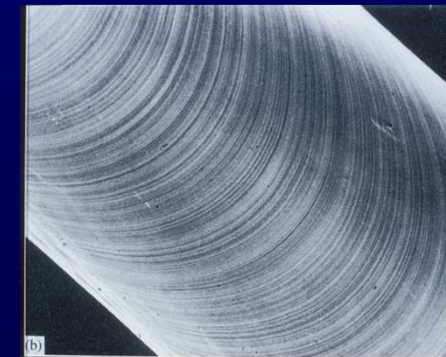


© Image DoITPoMS, Cambridge

Wanneer men een één-kristal onder een trekspanning plaatst, zal, wanneer er plastische deformatie plaats vindt, sprake zijn van afschuiving van het rooster. Er ontstaan dan **slijlijnen en slijbanden**



© Image DoITPoMS, Cambridge

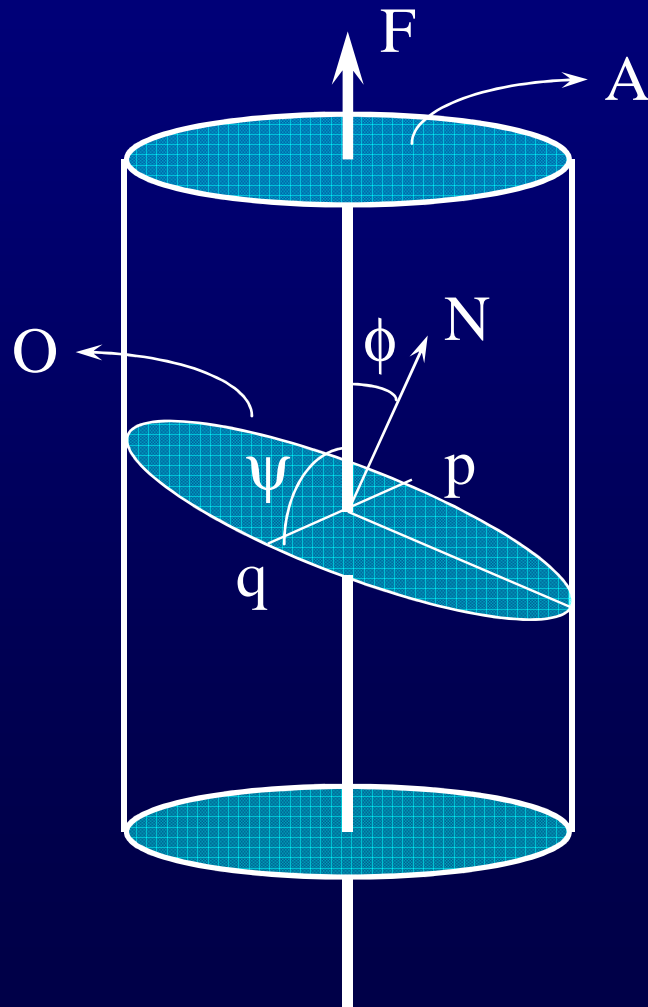


Slijlijnen en slijbanden

# Plasticiteit - kritisch ontbonden schuifspanning

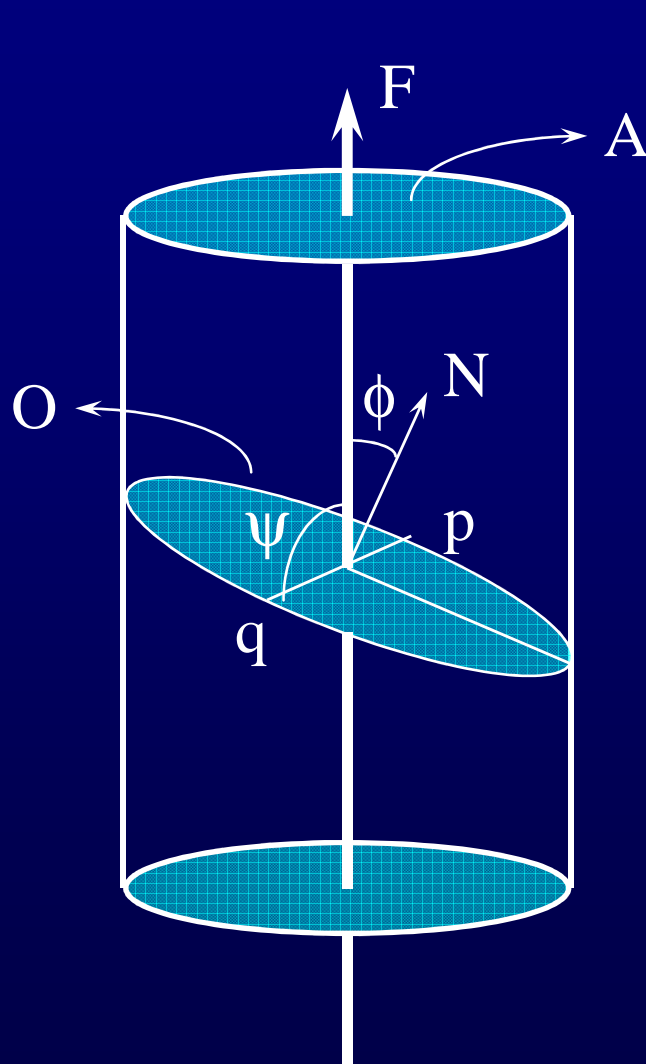
- **Slip** wordt veroorzaakt door **plastische deformatie** in een aantal **evenwijdige vlakken** in een bepaalde richting.
- In plaats van een **trek-rek curve** kan men beter een curve construeren waarbij **de afschuiving op de slipvlakken** voorkomt: men moet de **kritisch ontbonden schuifspanning** bepalen

# Plasticiteit - kritisch ontbonden schuifspanning



**Wat is de schuifspanning  
langs de lijn  $pq$  ?**

# Plasticiteit - kritisch ontbonden schuifspanning



$$\sigma = \frac{F}{A}$$

$F_{pq}$  = component in glijvlak

$$F_{pq} = \dots$$

Oppervlak van  $O$  :

Schuifspanning op  $O$  in richting  $pq$ :

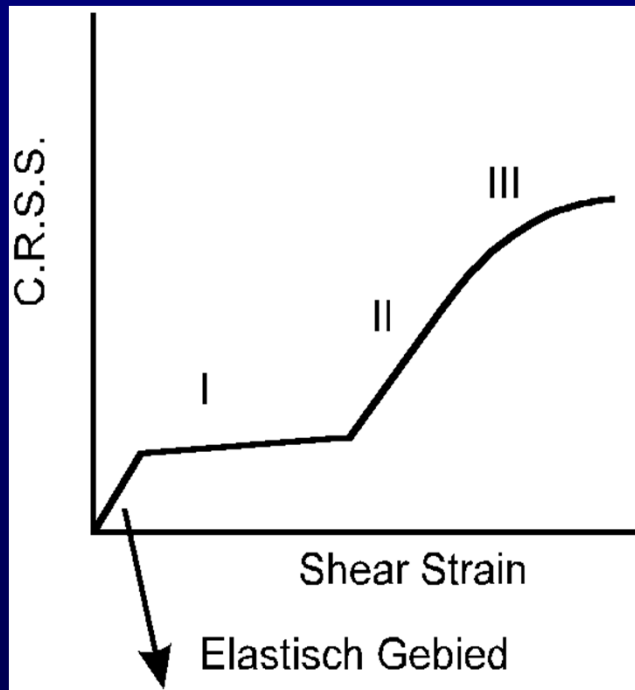
$$\tau_{pq} = \frac{F_{pq}}{O} =$$

Dus:

$$\tau_{pq} =$$

(Wet van Schmid)

# Shear - éénkristal



**C.R.S.S** =  
**C**ritical **R**esolved **S**hear **S**train =  
**K**ritisch **O**ntbonden **S**chuifspanning.

Er zijn naast het elastisch gebied  
nog 3 andere gebieden te  
onderscheiden.

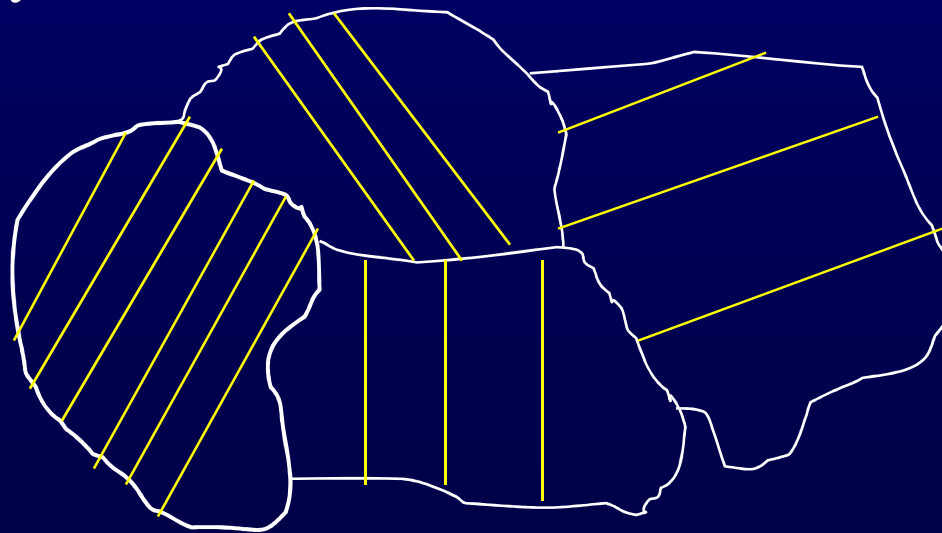
# Shear - éénkristal

- Bij deformatie van éénkristallen zijn er drie fasen te onderscheiden :
- **Fase I. “Easy glide”** slip langs een slipvlak
- **Fase II. Snelheid van deformatie is constant maar groter.** Er zijn meerdere glijsystemen.
- **Fase III. Geen lineaire toename van shear strain en spanning:** nu ook herstelprocessen (cross-slip)
- Wanneer geen herstelprocessen meer mogelijk (cross-slip mogelijkheden uitgeput): **breuk**

# Shear - polykristallijn

- **Fase I** treedt nu **niet** op !
- Meestal vinden we **Fase III**, soms ook nog **Fase II**.
- Een proces als **pile-up** gaat nu optreden (Fase II, en Fase III)

Meerdere slipsystemen:





# Strain Hardening (verstevinging)

- Als gevolg van **deformatie** ontstaan er **meer dislocaties**. Hierdoor wordt de **beweging** van diezelfde dislocaties **afgeremd**.

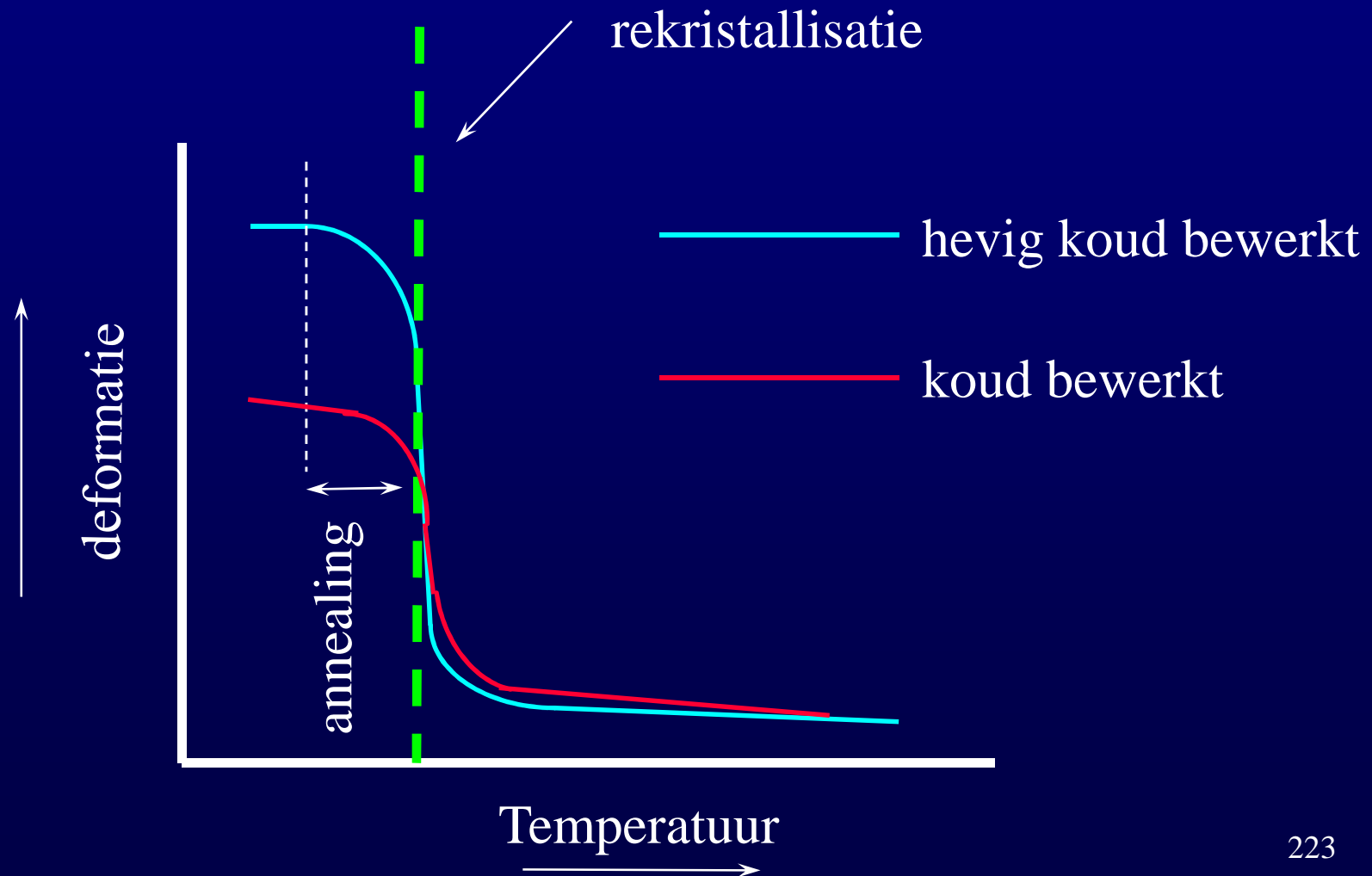
- **Deformatie** maakt een materiaal dus **HARDER: strain-hardening, of work-hardening of verstevinging**).

Ook dit is van belang bij breken en malen....

# Strain Hardening (versteving)

- De temperatuur om voor **annealing** (herstel o.i.v. warmte) daalt als de **koude** bewerking **heviger** wordt.
- Omdat er **meer** dislocaties zijn, en de “Stored Energy” groter is, zullen de dislocaties bij **lagere temperatuur** al naar een **lagere energietoestand** “willen”.
- Er is echter een **minimum temperatuur** voor **volledige rekristallisatie**.

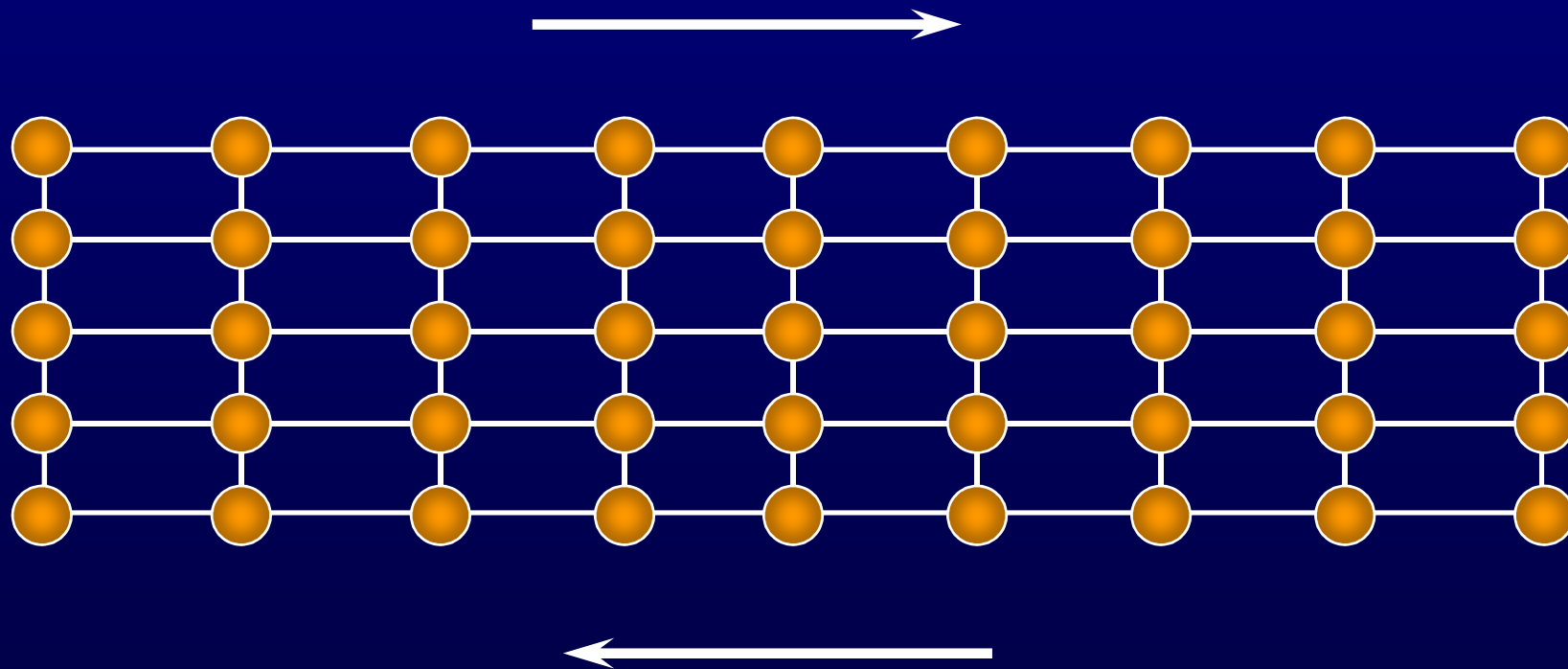
# Strain Hardening (versteving)



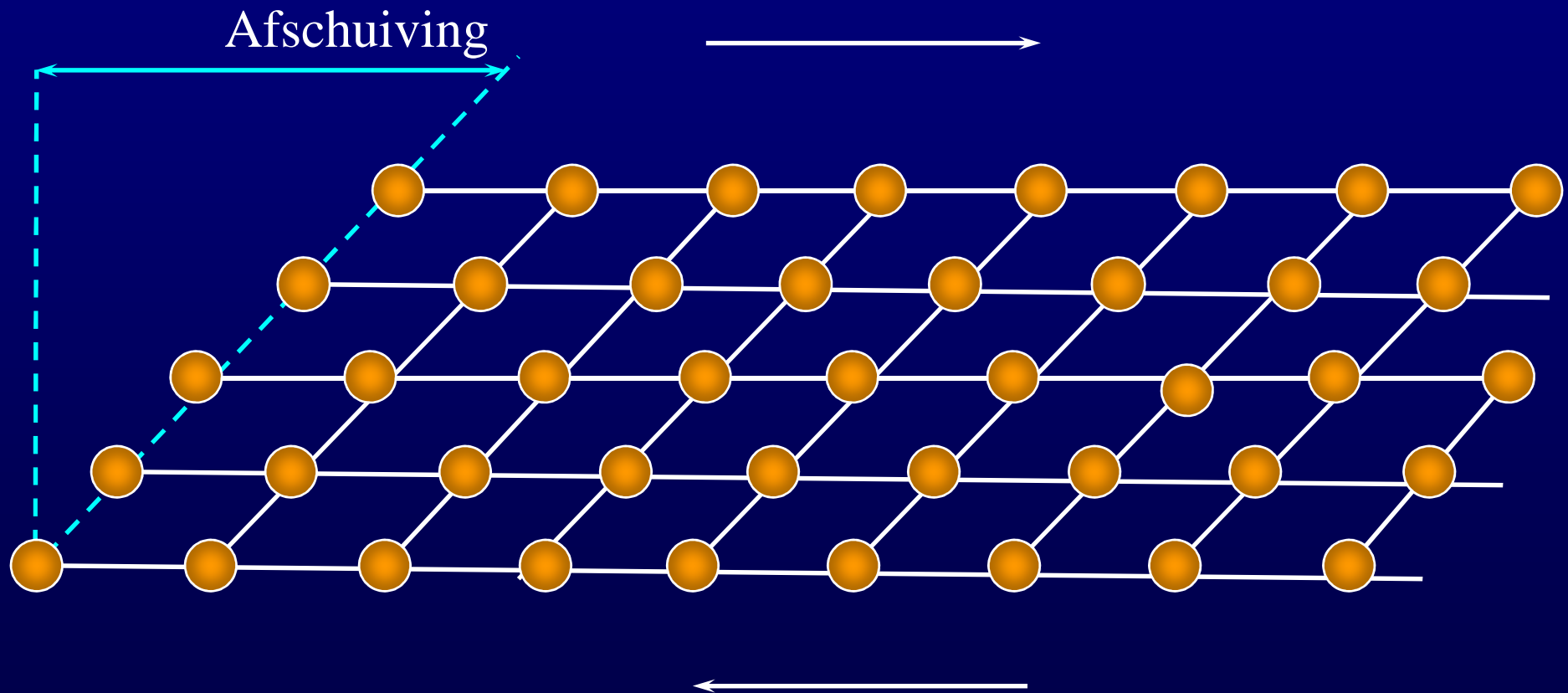
# Deformation Twinning

- Sommige kristalroosters kunnen **vertweelingen** als gevolg van deformatie.
- Men spreekt dan van **Mechanische Vertweeling** of **“Deformation Twinning”**
- Door te vertweelingen kan het rooster de totale afschuiving als gevolg van deformatie **beperken**.
- Dit is **energetisch gunstiger**.

# Deformation Twinning

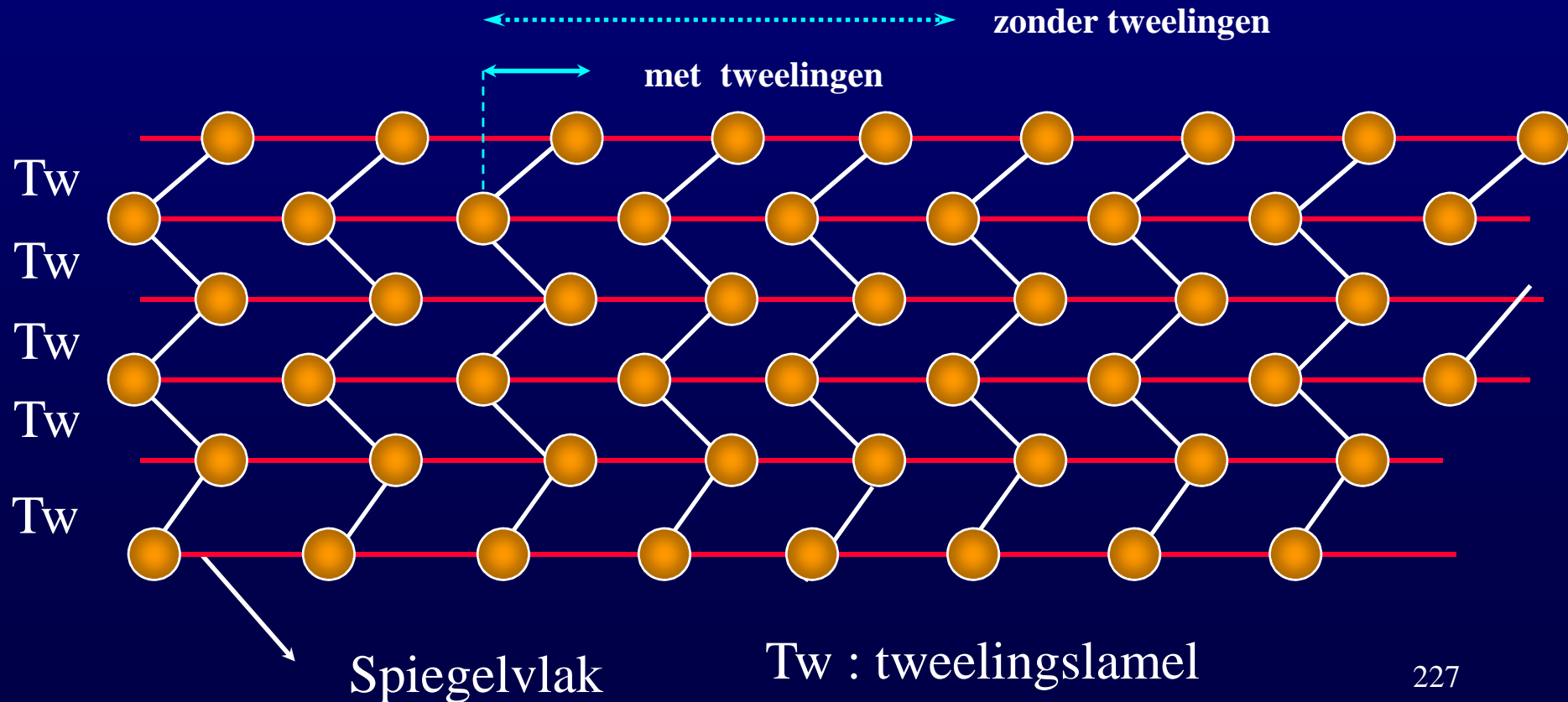


# Deformation Twinning

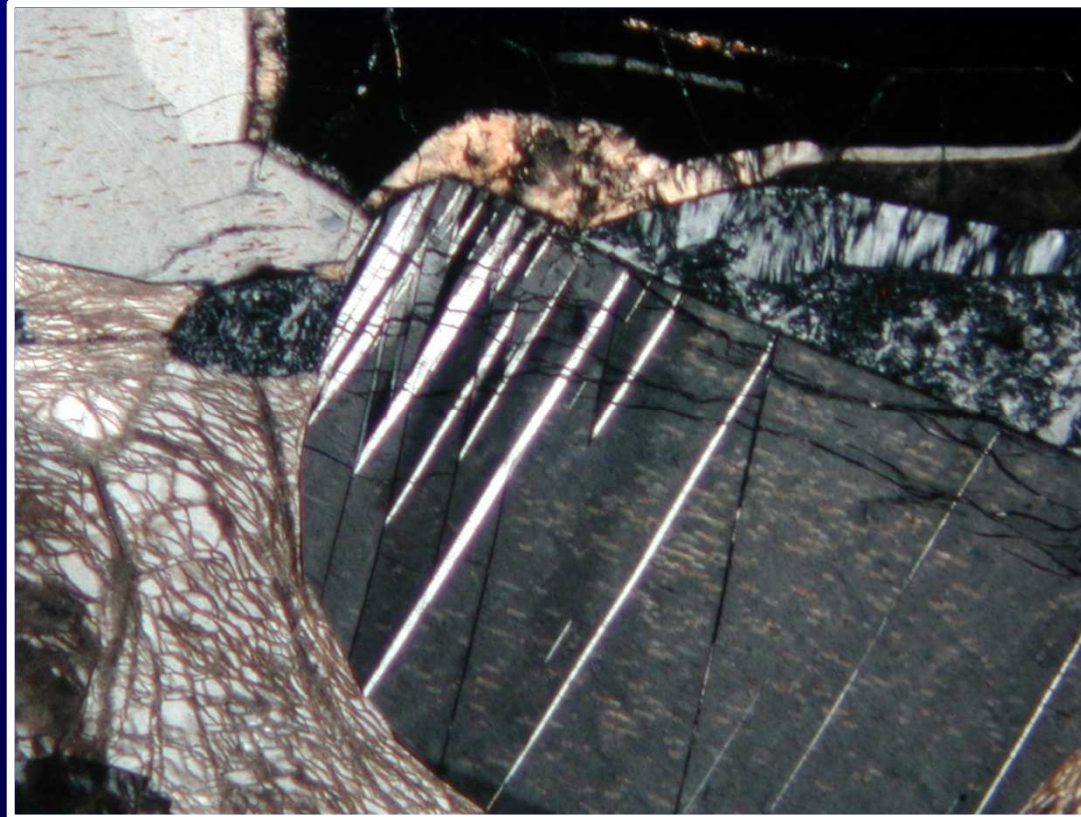


# Deformation Twinning

Er treedt **vertweeling** op (lamellair) :  
Afschuiving wordt nu **veel kleiner**



# Deformation Twinning



Deformatie-tweelingen in kyaniet. (polarisatiemicroscopie)



# Deformation Twinning

<http://www.youtube.com/watch?v=teG1IxpgnLc>

Twining in dry Bischofite,  $\text{MgCl}_2 \cdot 6(\text{H}_2\text{O})$  single crystal (Urai and Humphreys, 2000)



Egon Orowan  
1902 - 1989

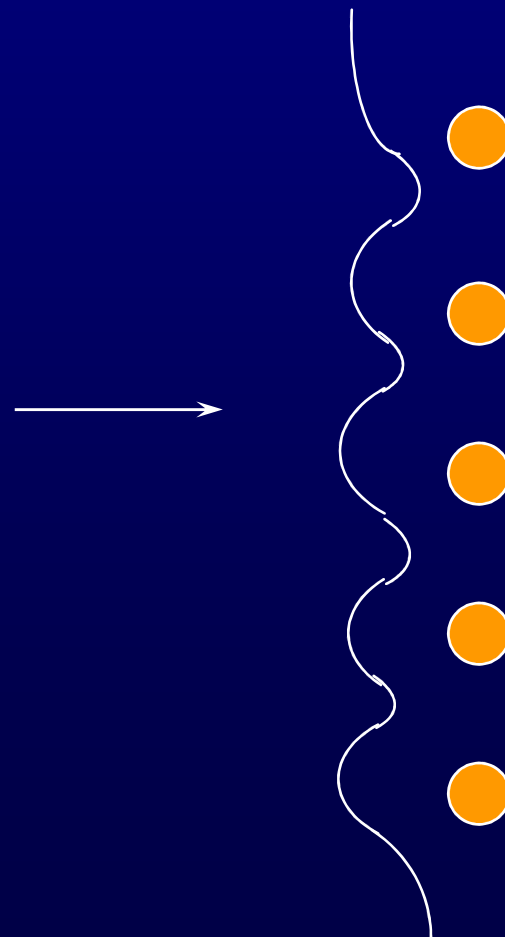
# Orowan Mechanisme

Dislocatie



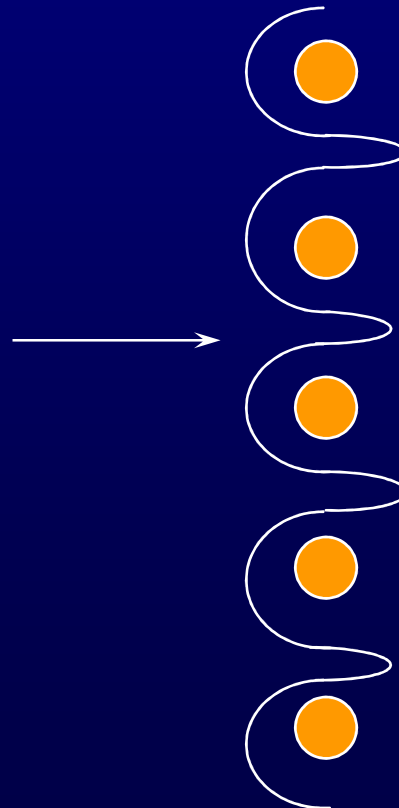
# Orowan Mechanisme

Dislocatie



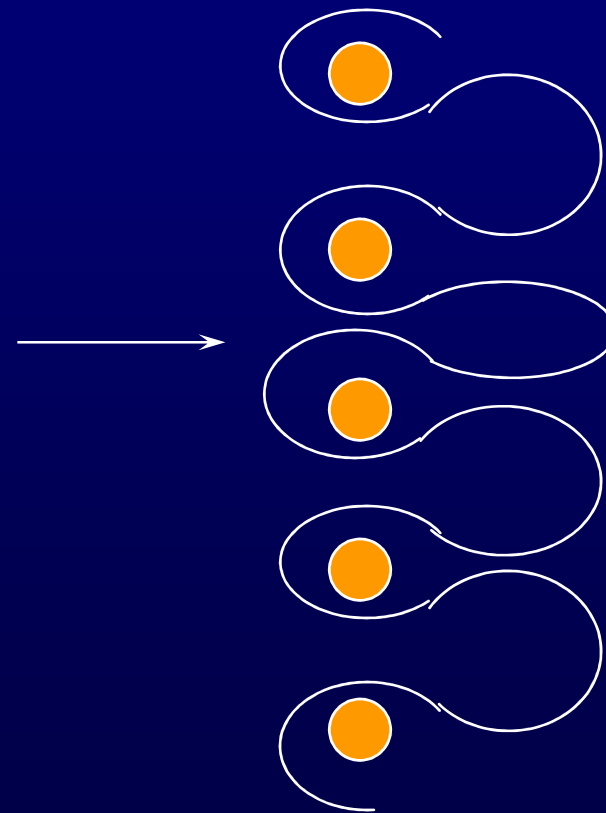
# Orowan Mechanisme

Dislocatie



# Orowan Mechanisme

Dislocatie



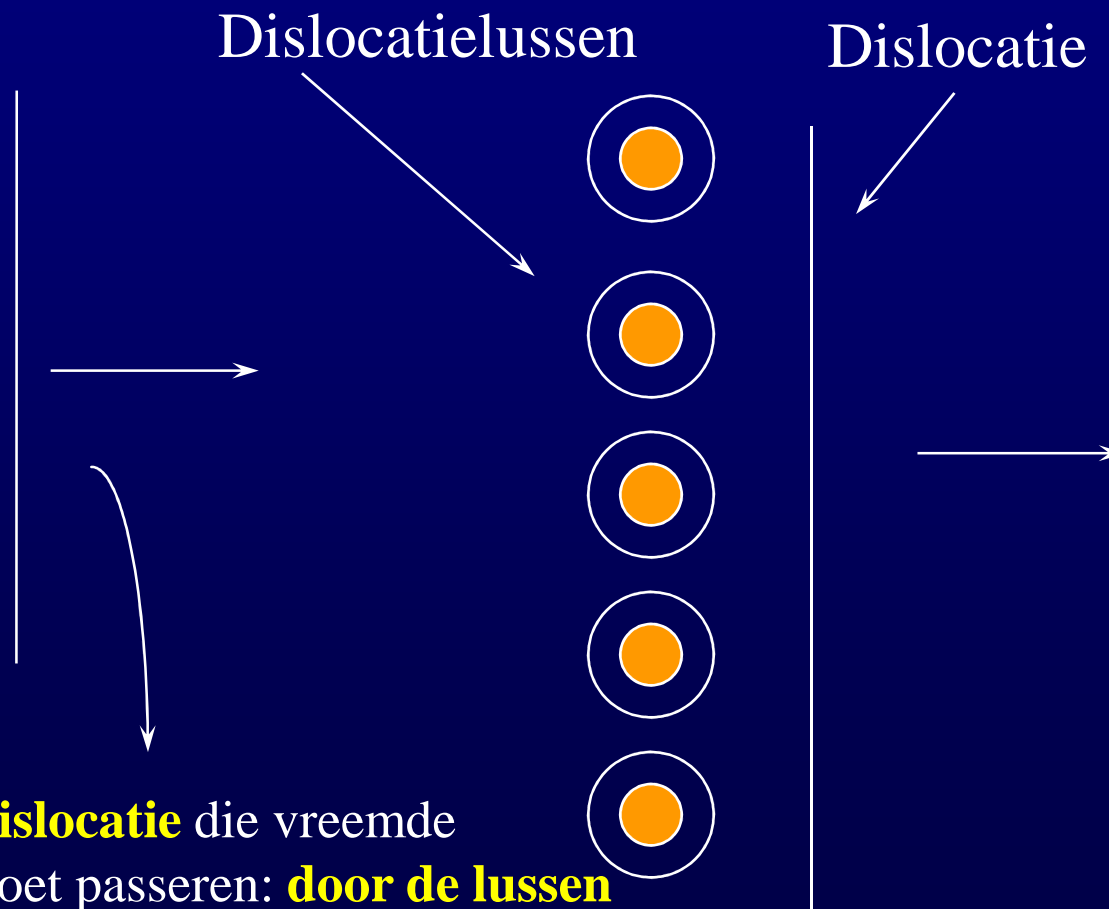
# Orowan Mechanisme

Dislocatielussen

Dislocatie



# Orowan Mechanisme



**Nieuwe dislocatie** die vreemde atomen moet passeren: **door de lussen**

**nog meer afremming, produceert zelf echter ook weer nieuwe lussen, enz.**

# Orowan Mechanisme

<http://www.youtube.com/watch?v=InOHfdd2Vwk&feature=related>



# Theorie van Verkleining van Materialen

Elasticiteit

Wet van Hooke

Poisson Ratio

Brosse breuk en theoretische treksterkte

Breuktheorie van Griffith

Mechanochemische effecten

Korrelgrootte effecten en grind-limi,  
Voortplanting van brosse breuken

Schumann Theorie

Vergruizingsstappen

Mixing Concept van Schumann

# Inleiding

De wiskundige relaties in dit onderdeel zijn bedoeld als **illustratie**, en be-ogen **geen uitputtende behandeling** van de besproken processen te geven.

# Inleiding

- Verkleiningstheorie biedt inzicht in het breek- en maalproces.
- Dit is van belang voor
  - **voorspelling van energie-verbruik,**
  - **korrelgrootteverdeling,**
  - **dimensionering van de molen,**
  - **flowsheet-ontwerp,**
  - **minimisatie van de slijtage van de lining van de molen,**
  - **proces-controle**

# Inleiding

- Breken en malen (verkleinen) is **energie-inefficiënt**.
- **0.1 tot 1 procent** van de toegepaste mechanische energie wordt omgezet in **nieuwe oppervlakte-energie** van het vers gemalen product.
- Er gaat namelijk **erg veel energie verloren** als **warmte**.
- Ook gaat **veel energie verloren** bij de **deformatie** van de te vergruizen kristalroosters (**elastische vervormings-energie** rond dislocaties, “**stored energy**” van dislocatieclusters, etc.).



Robert Hooke  
1635 -1703

# Wet van Hooke

Gewoonlijk wordt de **Wet van Hooke** uitgedrukt als:

$$\sigma = \varepsilon E$$

$\sigma$  = *stress (spanning)*

$\varepsilon$  = *strain (vervorming)*

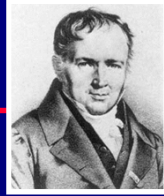
$E$  = *Elasticiteitsmodulus* (materiaalconstante)

De *Elasticiteitsmodulus*  $E$  wordt weergegeven in de eenheid  $Pa$  of  $GPa$

# Voorbeelden van Elasticiteitsmoduli

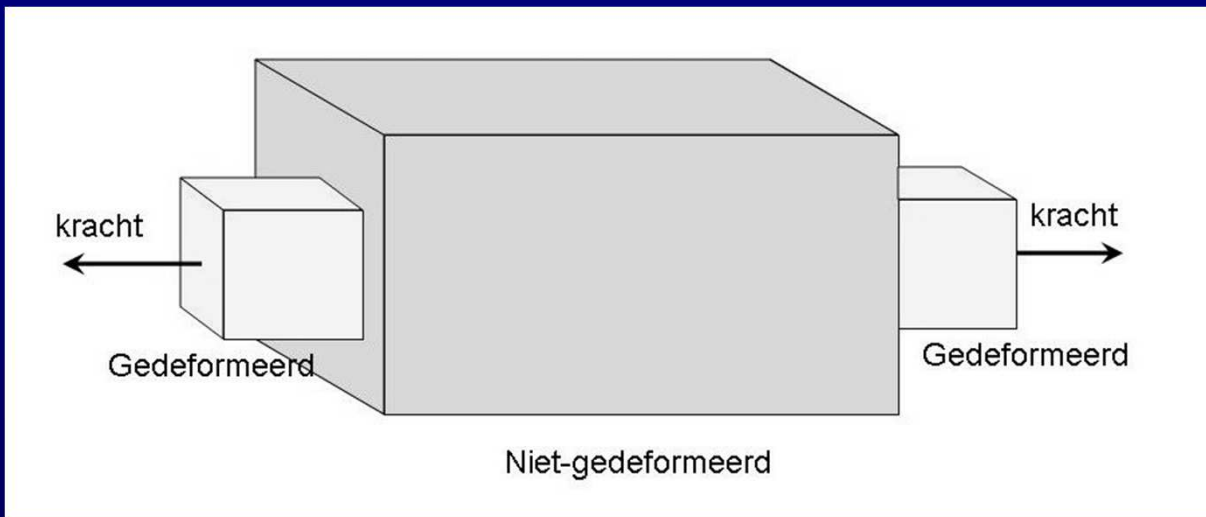
	Materiaal	Elasticiteits Modulus (GPa)
	Gietijzer	110
→	Staal	205
	Aluminium	70
	Electrolytisch koper	120
	Geel Messing	100
	Rood Messing	90
→	Lood	13
	Nikkel	200
	Titanium	110
	Zirkonium	95
	Vensterglas	50
→	Porselein	60
	Kwartsglas	70
→	Polytheen (polyethyleen )	0.7-2
	Polystyreen	1

Siméon-Denis Poisson:  
1781-1840  
Frans wiskundige



# Poisson Ratio

TA3390



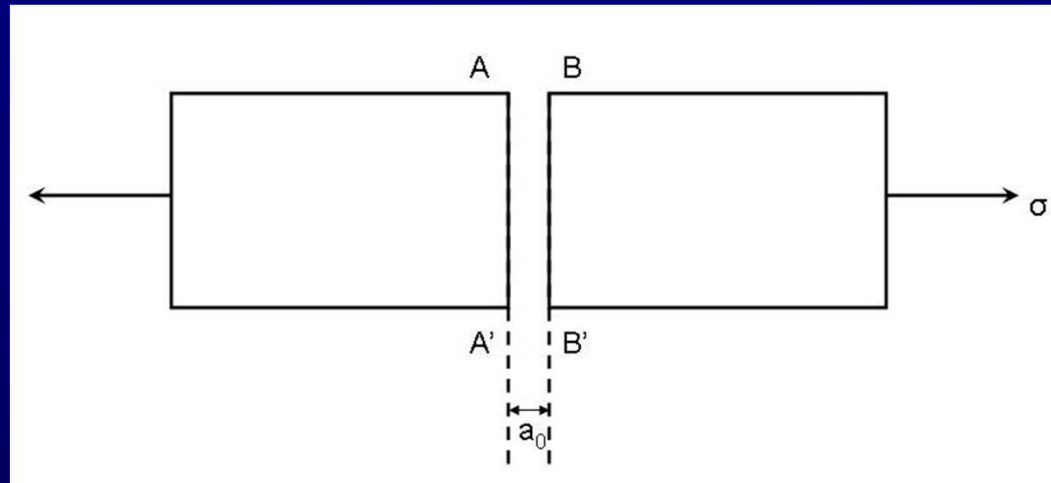
!!

$$\nu = - \frac{\epsilon_{\text{transversaal}}}{\epsilon_{\text{longitudinaal}}}$$

**De Poisson Ratio** (ook wel genoemd de **dwarscontractie-coëfficiënt**) wordt gedefinieerd als de ratio van de vervorming dwars op de trekrichting (transversaal) t.o.v. de vervorming in de trekrichting (longitudinaal).

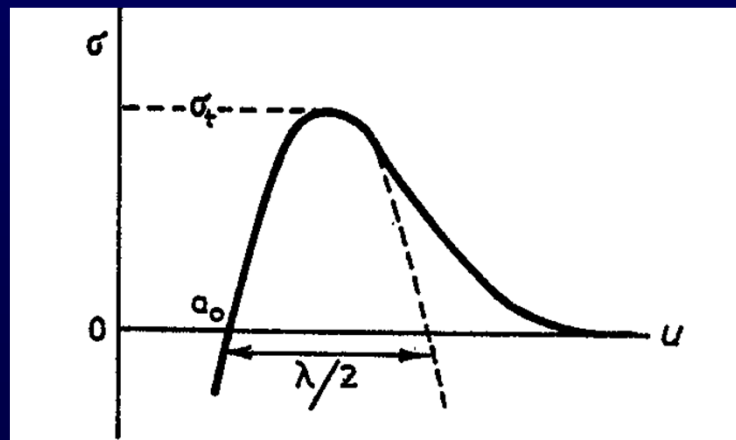
Vervorming door **rek** wordt als **positief** beschouwd, vervorming door **druk** als **negatief**.

# Brosse Breuk en Theoretische Treksterkte



Staf met eenheidsdoorsnede  
Wordt uit elkaar getrokken.

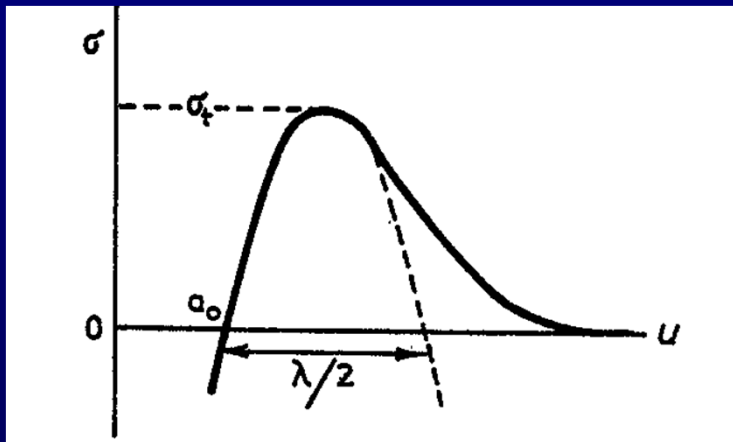
Als  $\sigma$  de ideale sterkte  $\sigma_t$   
bereikt worden de  
verbindingen tussen de  
atoomvlakken AA' en BB'  
verbroken



De atomaire stress-strain curve kan worden  
benaderd met een sinus met golflengte  $\lambda$



# Brosse Breuk en Theoretische Treksterkte



Met  $u$  de verschuiving t.o.v. de evenwichtsverplaatsing  $a_0$  geldt:

$$\sigma = \sigma_t \sin\left(\frac{2\pi u}{\lambda}\right)$$

Voor **kleine** vervormingen geldt:

$$\sigma \cong \sigma_t \left(\frac{2\pi u}{\lambda}\right)$$

Met de Wet van Hooke  $\sigma = E \frac{u}{a_0}$  volgt  $\sigma_t \cong \frac{\lambda}{2\pi} \frac{E}{a_0}$

# Brosse Breuk en Theoretische Treksterkte

De oppervlakte-energie kan worden uitgedrukt als:

$$\gamma = \frac{\lambda \sigma_t}{2\pi}$$

Zodat:

$$\sigma_t = \sqrt{\frac{E\gamma}{a_0}}$$

Stoffen met kleine  $a_0$  (kleine atoomafstanden) en **hoge dichtheden** zijn relatief **sterk**.

Dit zijn vaak materialen met **hoge smeltpunten** (diverse **metalen**, bijv. Fe, Ni)

Voor de meeste vaste stoffen kan men aannemen dat :  $\sigma_t \cong \frac{E}{10}$

# Griffith-Theorie

Samenvatting van de **Theorie van Brosse Breuk** volgens **A.A. Griffith**



Alan A. Griffith  
(1893 – 1963)

# Griffith Theorie

Voor de meeste vaste stoffen kan men aannemen dat :  $\sigma_t \cong \frac{E}{10}$

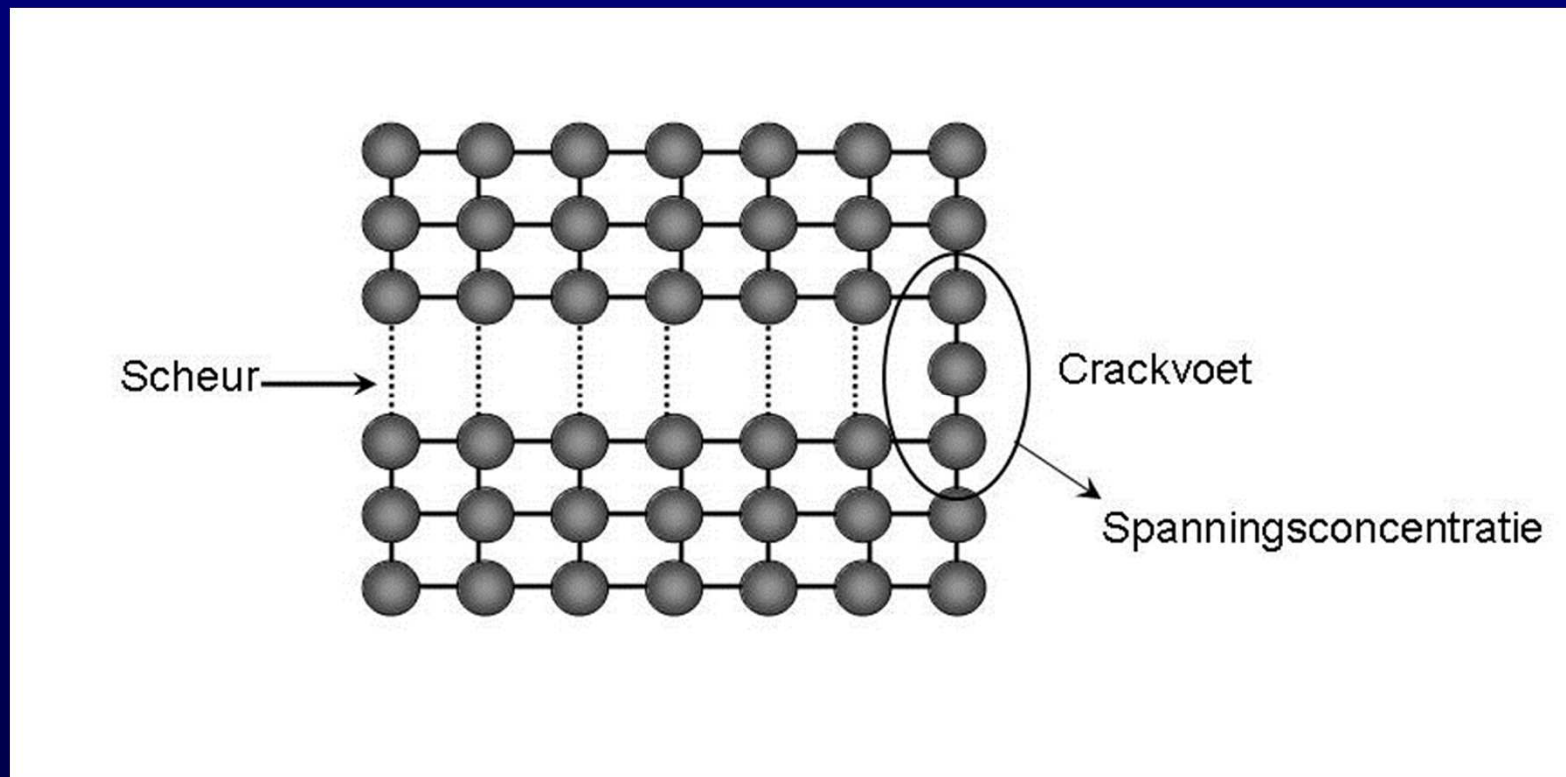
- De hoge sterktes (  $\sigma_t \cong \frac{E}{10}$  ) worden in de praktijk maar zelden bereikt.
- Meestal bezwijken materialen als bij sterktes die **1 tot 3 ordes van grootte kleiner** zijn.

# Griffith Theorie

- Dit kan worden verklaard met de aanname van de aanwezigheid van **zwaktezones en microcracks**.
- Deze zwaktezones en microcracks fungeren als **spanningsconcentrators** als de stof onder mechanische spanning wordt gebracht.

# Griffith Theorie

## Microcrack als Spanningsconcentrator



# Griffith Theorie

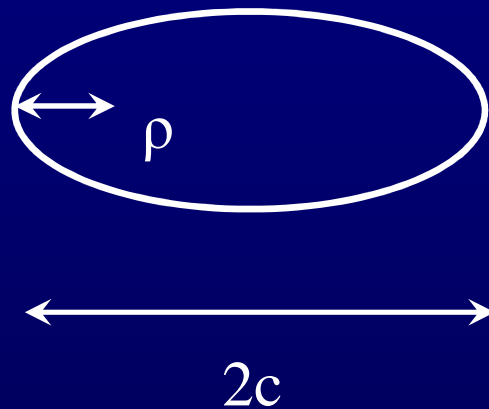
## Microcrack als Spanningsconcentrator

Simulatie van het spanningsveld rond de Crackvoet.

<http://www.youtube.com/watch?v=1eJF6x6ZyY&feature=related>

# Griffith Theorie

## Microcrack als Spanningsconcentrator



Als de hoofdas van de scheur met lengte  $2c$  onderworpen wordt aan een trekspanning  $\sigma$ , dan is de maximale  $\sigma_m$  aan het einde van de scheur gegeven door :

$$\sigma_m = 2\sigma \sqrt{\frac{c}{\rho}}$$

De **spanning** aan de scheurvoet zal **toenemen** met **toenemende scheurlengte  $c$**  en **afnemende kromtestraal  $\rho$**

Als  $\sigma_m > \sigma_t$  kan de scheur zich gaan voortplanten



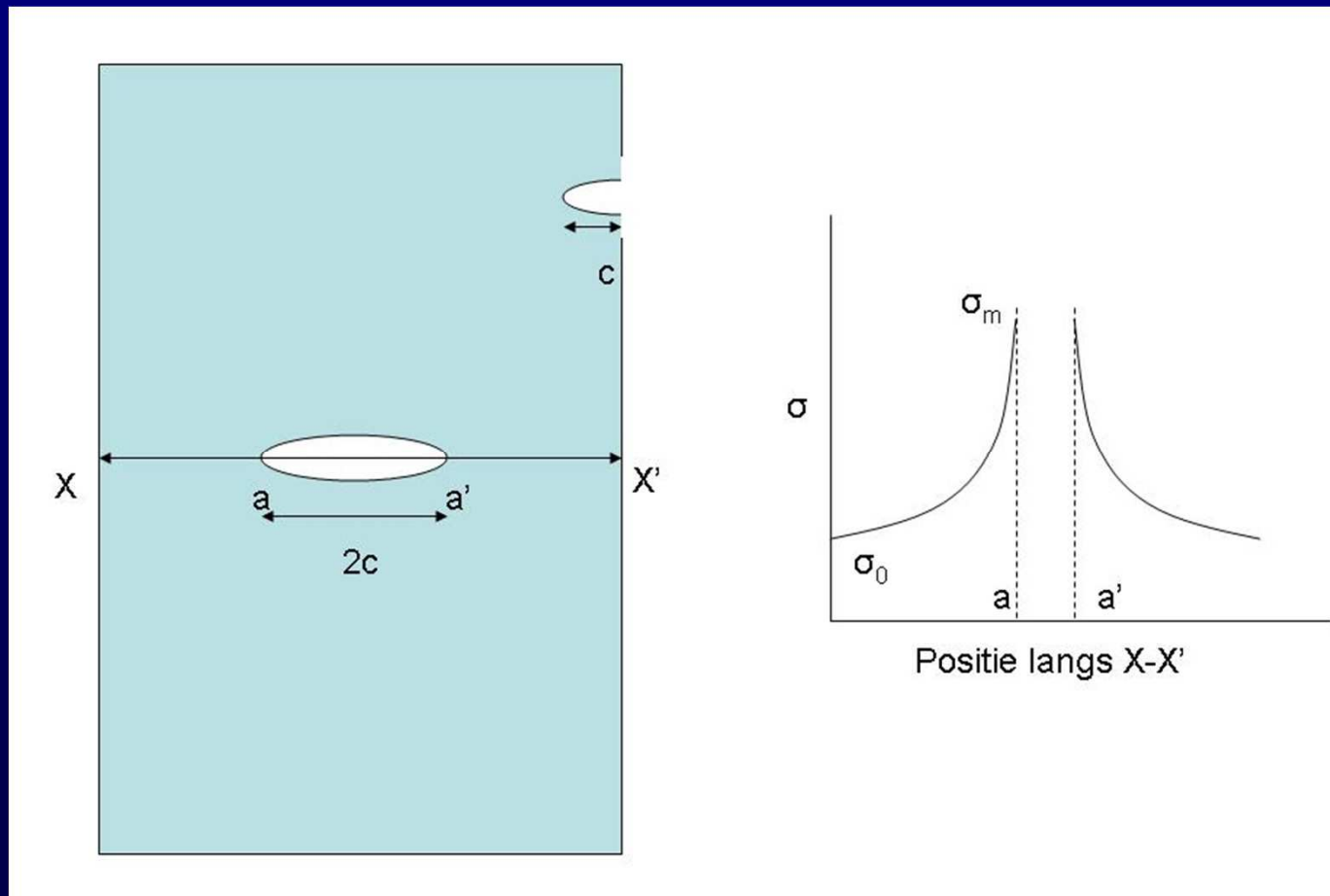
# Griffith Theorie

## Zich Voortplantende Breuk

<http://www.youtube.com/watch?NR=1&v=iBuuVd0JIM>

# Griffith Theorie

## Microcrack als Spanningsconcentrator



# Griffith Theorie

## Energiebalansconcept

- Essentieel in de **Theorie van Griffith** is het **Energiebalansconcept**.
- De **totale energie U** is gelijk aan:
  1. de elastische energie in de ongebroken toestand  $U_0$
  2. **minus** de energie die vrijkomt als gevolg van de vorming van de scheur  $U_c$
  3. **plus** de energie nodig om twee nieuwe oppervlakken te creëren (aan weerszijden van de scheur)  $U_\gamma$

$$U = U_0 - U_c + U_\gamma$$

# Griffith Theorie

## Energiebalansconcept

Uit de literatuur volgt dat de totale energie  $U$  uitgedrukt kan worden als:

$$U = \frac{\sigma^2 A}{2E} - \frac{\pi\sigma^2 c^2}{E} + 4c\gamma_s$$

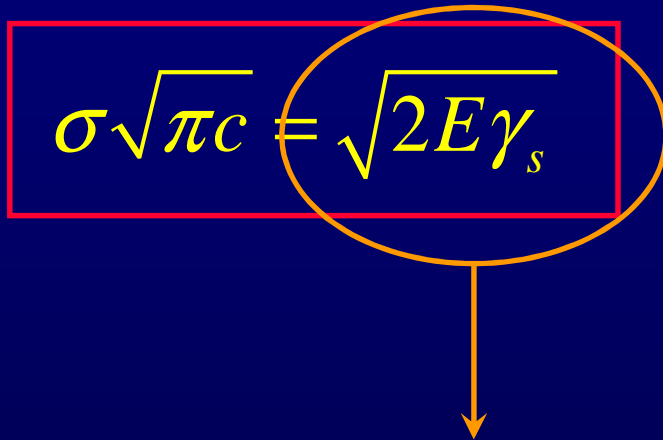
Volgens Griffith vind **scheurvoortplanting** plaats als  $\frac{\delta U_c}{\delta c} < 0$

Met als kritieke situatie de **scheurinitiatie**  $\frac{\delta U_c}{\delta c} = 0$

# Griffith Theorie

## Energiebalansconcept

- In de kritieke situatie vindt men dat geldt:

$$\sigma \sqrt{\pi c} = \sqrt{2E\gamma_s}$$


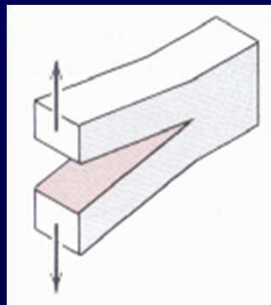
Constante voor een bepaald materiaal:

*Critical Stress Intensity Factor*, of *Fracture Toughness*,  
*Breuktaaiheid*, meestal aangeduid met  $K_c$

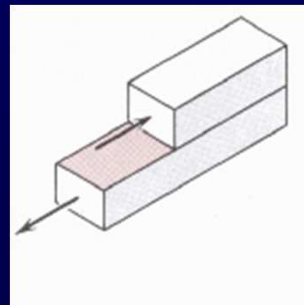
# Griffith Theorie

## Fracture Toughness

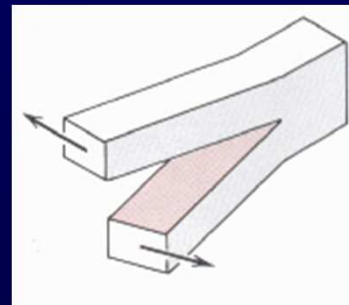
- **Fracture Toughness** wordt nog onderscheiden in **3 Modes**.
- Deze modes zijn, al naar gelang de aard van de crack displacement:
  - 1) **Tensile Mode,  $K_{Ic}$**  (“**Rek**”)
  - 2) **Sliding Mode,  $K_{IIc}$**  (“**Schrapen/Schuren**”)
  - 3) **Tearing Mode  $K_{IIIc}$**  (“**Scheuren**”)



$K_{Ic}$



$K_{IIc}$



$K_{IIIc}$

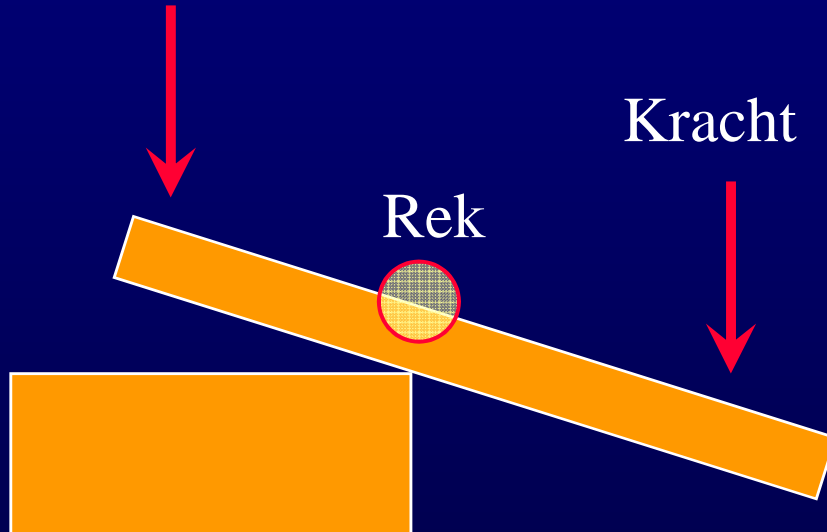
Het is te verwachten dat tijdens een maalproces de *belangrijkheid* van de verschillende *Modes* *verandert* gedurende het proces.

(Waarom ?)

# Griffith Theorie

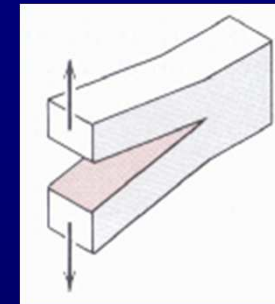
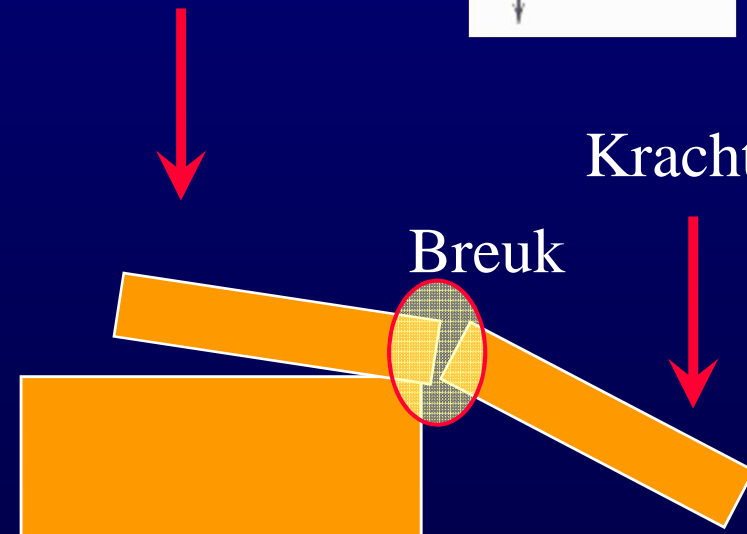
Fracture Toughness  $K_{IC}$

Kracht



Kracht

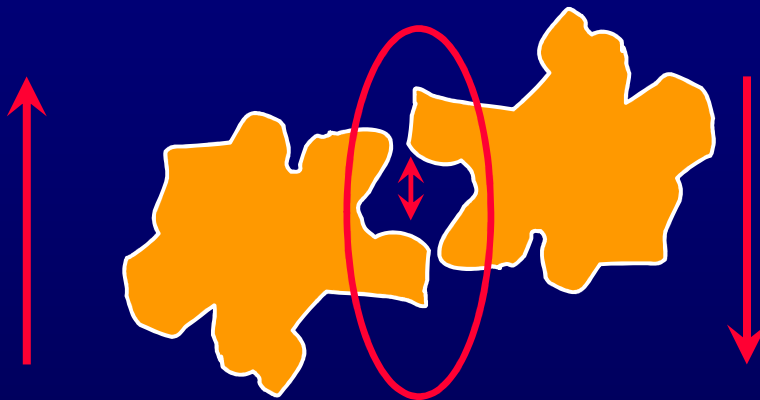
Kracht



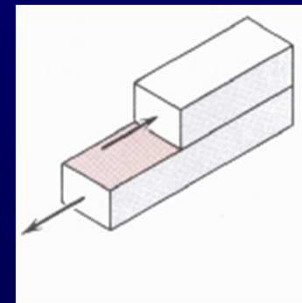
Kracht

# Griffith Theorie

Fracture Toughness  $K_{IIC}$



Langs elkaar **schuren** van korrels



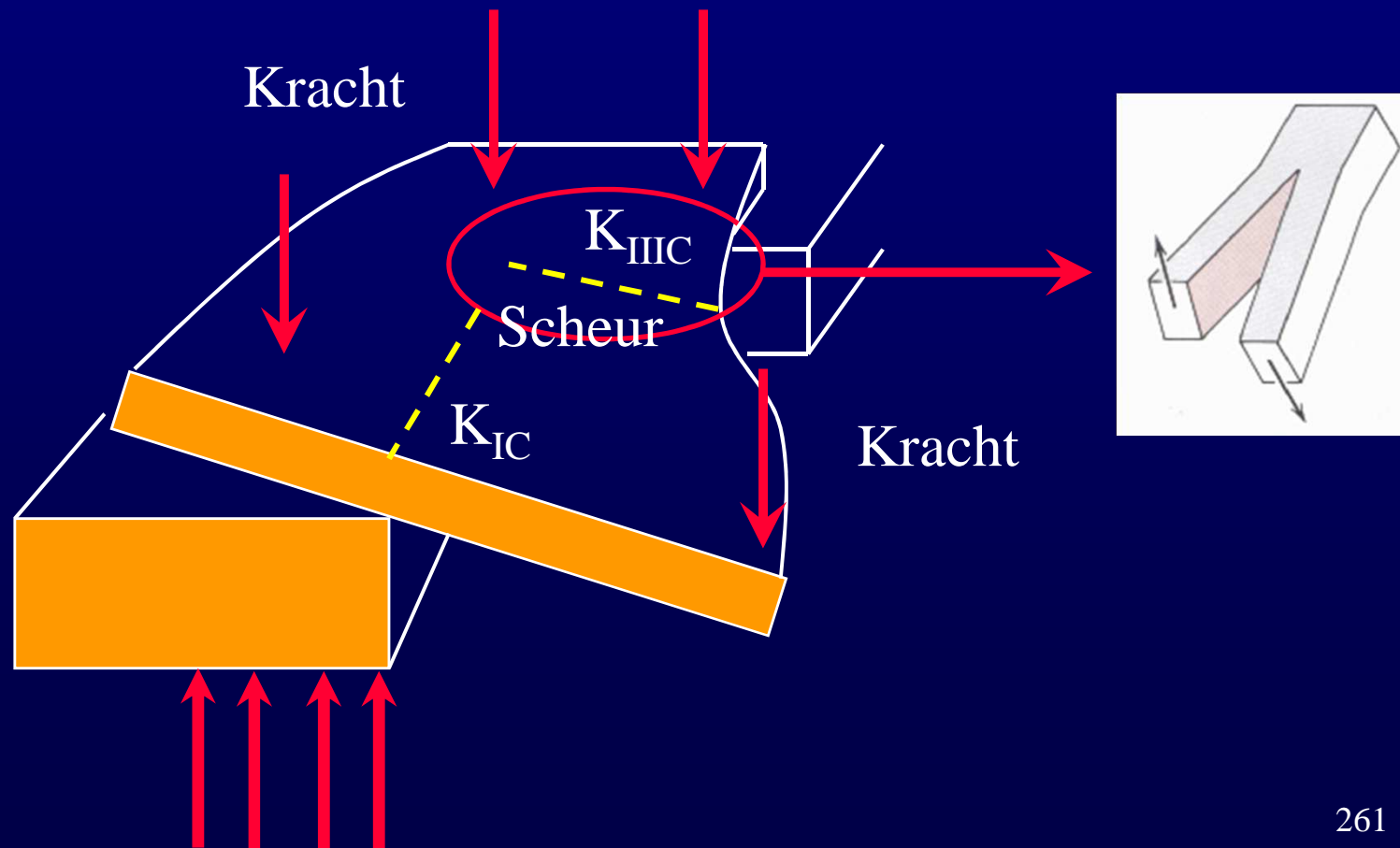
Resultaat: korrels met  
relatief gladde oppervlakken





# Griffith Theorie

Fracture Toughness  $K_{IIIc}$



# Griffith Theorie

## Energiebalansconcept

Uit de vorige relatie kan worden afgeleid dat:

$$G = \frac{\pi \sigma^2 c}{E} = 2\gamma_s$$

G (voor Griffith) = Strain Energy Release Rate

De term  $2\gamma_s$  heet **Crack Resistance (scheurweerstand)**

De **Experimentele Breuksterkte  $\sigma_b$**  kan worden geschreven als:

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{2\gamma_s E}{\pi c}}$$

# Griffith Theorie

## Relatie met Malen en Breken

De **Workindex**  $W_i$  uit de empirische **Formule van Bond** geeft aan hoe **moeilijk** of **gemakkelijk** een materiaal te malen is.

$$E = 10W_i \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{d_{80}}} \right)_{product} - \left( \frac{1}{\sqrt{d_{80}}} \right)_{voeding} \right]$$



Fred C. Bond  
(1899 – 1977)

In deze parameter  $W_i$  zitten de hiervoor gegeven materiaalkundige parameters **Breuktaaiheid** en **Scheurweerstand** “opgesloten”.

# *Griffith-Irwin-Orowan Theorie*

## Quasi-brosse breuk

- De theorie van Griffith kan worden toegepast op materialen met **vrijwel geen** plastische deformatie.
- In **werkelijkheid** zullen de meeste materialen **WEL** een **zekere mate** van **plastische deformatie** vertonen aan de uiteinden van de scheur.
- Men noemt dit **Quasi-brosse Breuk**.

# *Griffith-Irwin-Orowan Theorie*

## Quasi-brosse breuk

- Bij de vorming van deze plastische deformatiezone moet wat **energie verbruikt** worden.
- **Irwin en Orowan** hebben de theorie van Griffith hiervoor **aangepast**:
- term toevoegen die de **geabsorbeerde energie** bij **plastische deformatie** verdisconteerd.

# Griffith-Irwin-Orowan Theorie

## Quasi-brosse breuk

- De toegevoegde term neemt vorm aan van een oppervlakte energie, aangeduid met  $\gamma_p$
- De **Strain Energy Release Rate** wordt dan:

$$G = \frac{\pi\sigma^2 c}{E} = 2\gamma_s + 2\gamma_p$$

- De uitdrukking voor de **Experimentele Breuksterkte** wordt dan:

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{2E(\gamma_s + \gamma_p)}{\pi c}}$$

# Griffith-Irwin-Orowan Theorie

## Breukvoortplanting

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{2E(\gamma_s + \gamma_p)}{\pi c}}$$

- Als de spanning de waarde van  $\sigma_b$  overtreft zal de breuk zich **voortplanten**.
- De **cracklengte neemt toe** en dus de spanning aan de crackvoet,  $\sigma_b$  **neemt af** ( $c$  wordt groter)
- De scheur plant zich **weer sneller voort**, de cracklengte **neemt weer toe**, en  $\sigma_b$  neemt verder af, etc. etc.

# Sterkte bij Compressie versus Sterkte bij Rek

- Tot nu toe is er (om het eenvoudig te houden) vanuit gegaan dat de spanning wordt opgelegd als **rekspanning**.

- Bij **breken en malen** is de spanning echter vrijwel altijd een **drukspanning**.

- Materialen die **bros** zijn bij **rekspanning** zijn doorgaans in **compressie veel sterker**, vaak **10 x sterker**.

- **Vraag: Hoe komt dat ?**



# Sterkte bij Compressie versus Sterkte bij Rek

- Door de compressie ontstaan twee nieuwe scheurvlakken die bij breuk **tegen elkaar gedrukt blijven**, zodat de scheurvoortplanting afneemt.
- Tijdens **compressie** bezwijkt een materiaal meestal omdat er door **niet-homogene belasting trekspanningen** of **schuifspanningen ontstaan**.
- Door **compressie** kunnen **inderdaad schuifspanningen** ontstaan: afschuiving onder hoeken van 45 graden (**Wet van Schmid**)

$$\tau = \sigma \cos \phi \cos \psi$$

# Plastische Deformatie en de Rol van Dislocaties

- Dislocaties, verantwoordelijk voor de plastische deformatie, kunnen **samenvloeien** en een **microcrack** vormen.
- De dislocaties moeten dan echter de mogelijkheid hebben zich op te stapelen achter een obstakel: **pile-up**.
- Voor het ontstaan van een microcrack tijdens pile-up is de **Relatie van Hall & Petch** afgeleid, een fundamentele materiaalkundige relatie tussen spanning en korrelgrootte:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{K_y}{\sqrt{d}}$$

# Plastische Deformatie en de Rol van Dislocaties

Hoewel de **dislocatietheorie** op atomair niveau speelt, is er wel degelijk **relevantie** voor **breken en malen**:

De  $\frac{1}{\sqrt{d}}$  -term uit  $\sigma = \sigma_0 + \frac{K_y}{\sqrt{d}}$  vinden we ook terug in de

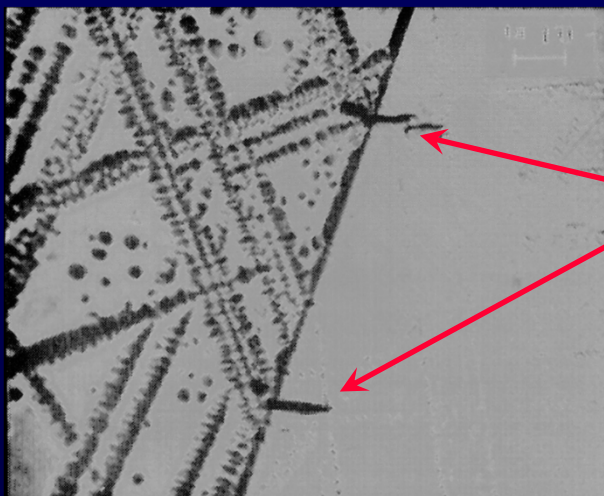
(empirische) **Formule van Bond**:

$$E = 10W_i \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{d_{80}}} \right)_{product} - \left( \frac{1}{\sqrt{d_{80}}} \right)_{voeding} \right]$$

# Plastische Deformatatie en de Rol van Dislocaties



Pile-up van dislocaties



Haarscheuren (microcracks)

# Plastische Deformatie en Fase-veranderingen

- Als **ONVERMIJDBARE** effecten van malen gelden o.a. **veranderingen van het kristalrooster** en **verandering van chemische binding** in hevig gedeformeerde zones van materiaal.
- De **warmte** die ontstaat door malen kan voor **fase-veranderingen** zorgen.
- Voorbeelden:
  - Vorming van glazige of amorfe laag op oppervlak van deeltjes
  - Ontbinding van Gibbsiet  $\text{Al}(\text{OH})_3$
  - Opname van Mg in rooster van Calciet
  - Oxidatie van Enargiet ( $\text{Cu}_3\text{AsS}_4$ )

# Korrelgrootte-effect

- **Statistisch** is het **waarschijnlijker** dat er al grote(re) **scheuren bestaan** in **grote** lichamen dan in **kleine**.
- **Grote delen** van bros materiaal breken **gemakkelijker** dan **kleine**.

(Waarom ?)

- Dit heet het **Korrelgrootte-effect**.

# Grind-limit

- Door de **Relatie van Hall & Petch** is er een **grens** aan de **korrelgrootte** die men met een **bepaald maalapparaat** kan bereiken.

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{K_y}{\sqrt{d}}$$

- De spanning voor intragranulaire breuk **neemt toe** met  $\frac{1}{\sqrt{d}}$  (waarbij ***d*** bij maling **afneemt**).

# Grind-limit

- Er ontstaat er een punt waar een korrel **zo klein** is geworden dat het maalgereedschap **niet meer voldoende spanning kan uitoefenen** om de spanning benodigd voor intragranulaire breuk te **overtreffen**.

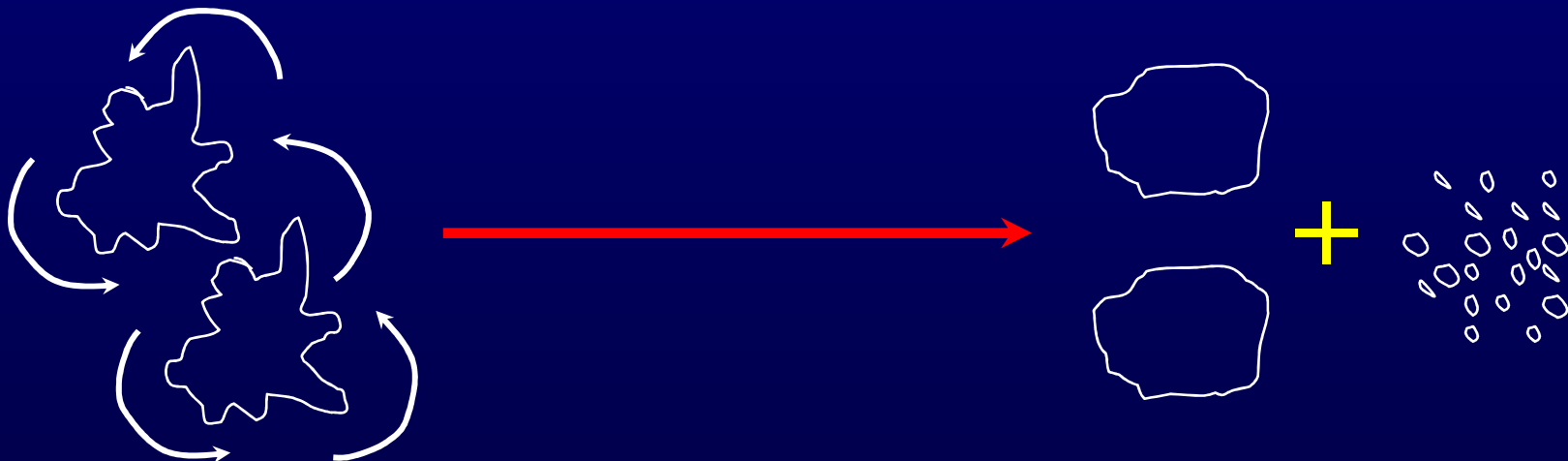
**Deze korrelgrootte noemt men de Grind-limit.**

- Laat men het **maalapparaat** verder **doorgaan**, dan wordt de **energie** van de **molen** hoofdzakelijk omgezet in **warmte**.
- Het maalapparaat (de molen) **maalt** dan in feite **NIET meer**.



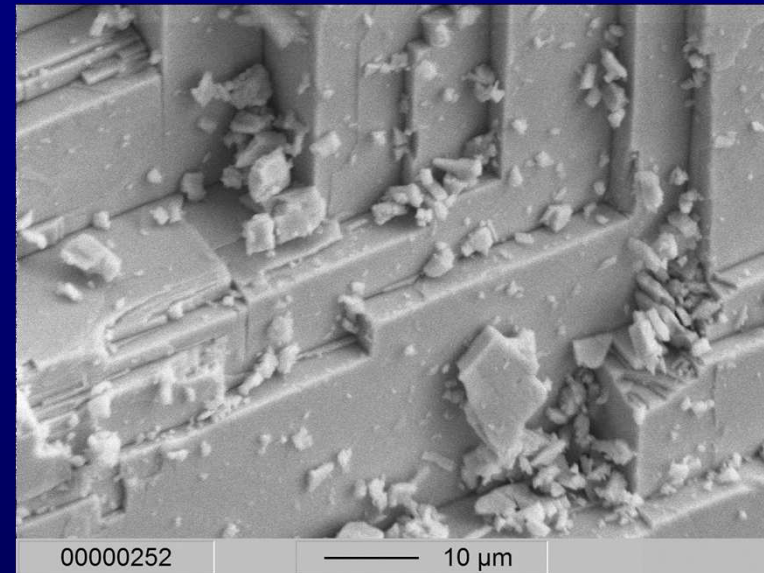
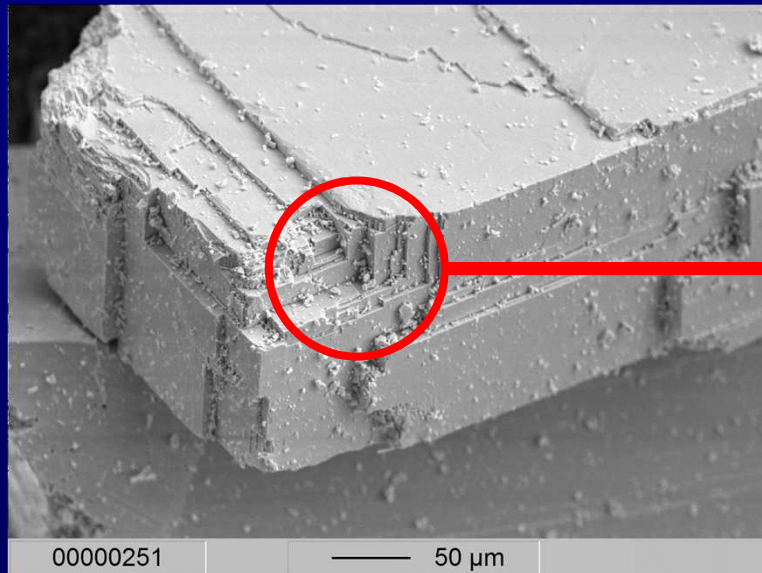
# Grind-limit

- Bij malen zullen de deeltjes ook nog langs elkaar **schuren (abrasie)**, waarbij alleen **z er kleine fragmenten** worden geproduceerd.



(Fracture Toughness Mode II, of  $K_{IIc}$ )

# Grind-limit



Gemalen **galeniet** (PbS) met **zeer fijne korreelfragmenten** als gevolg van **abrasie**. Galeniet heeft 3 perfecte slijtrichtingen loodrecht op elkaar.

Daarom is de galeniet toch nog zo hoekig.

# Grind-limit

- Als de **Grind-limit** bereikt is, kan men alleen nog **verder malen** door de **kinetische energie** die het maalgereedschap op de deeltjes **overbrengt** te **vergroten**.
- Dit zou bij een **kogelmolen** kunnen gebeuren door **zwaardere kogels** ( betekent meestal grotere kogels) te nemen,
- Maar de **efficiëntie** van het maalproces **neemt dan af**, omdat er **minder deeltjes** door de kogels **geraakt** worden als de **kogels zelf vrij groot** zijn.
- Ook het **sneller** laten draaien van de **molen** om de kinetische energie van de kogels te vergroten is geen optie.

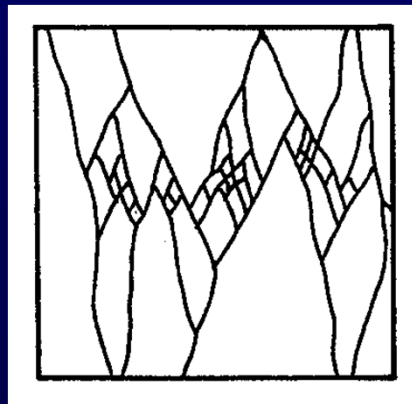
(Waarom niet ?)

# Voortplanting van Brosse Breuken

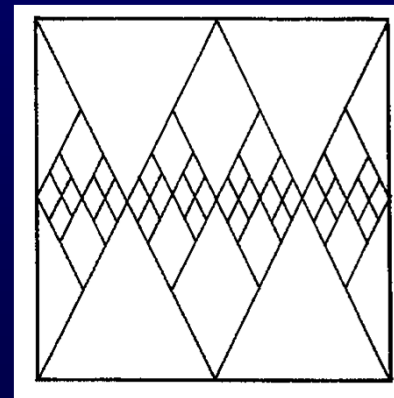
- Op het moment dat een brosse breuk zich gaat **voortplanten** wordt arbeid verricht die uitwendige belasting **omzet** in kinetische energie.
- De kinetische energie **kan niet sneller toenemen** dan de energie die door uitwendige arbeid wordt **toegevoerd**.
- Dit plaatst een **grens** aan de **voortplantingsnelheid** van brosse breuken.

# Breukpatronen

- Nadat de **primaire crack** op een bepaalde afstand van zijn bron genoeg **snellheid** en **kinetische energie** heeft verzameld, kunnen er door de crack **nieuwe scheuren** ontstaan.
- Er ontstaan breukpatronen:

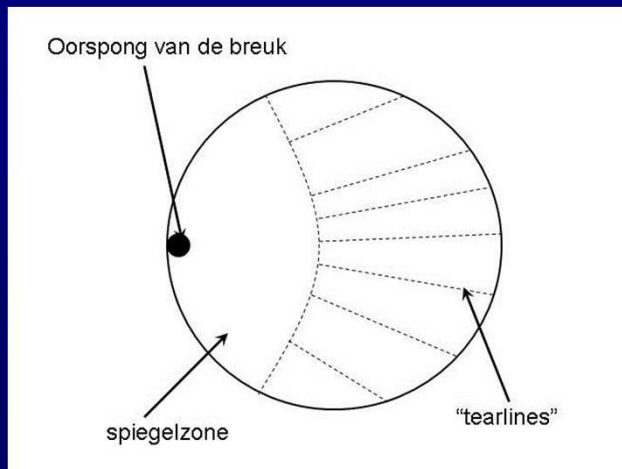


Breuk van een kubus  
door drukspanning

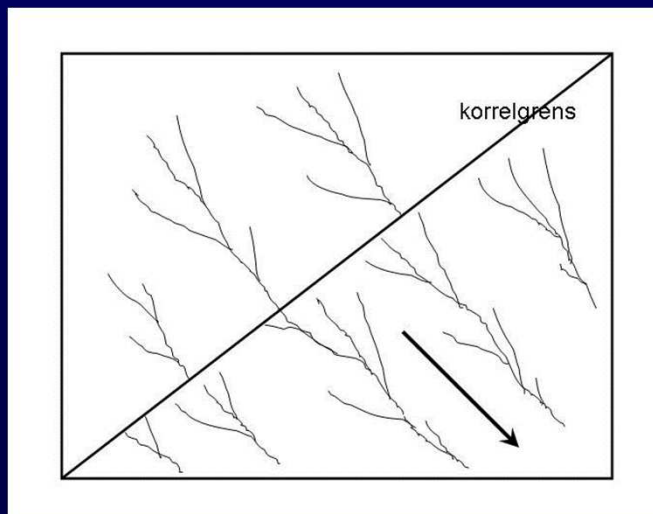


Ideaal situatie

# Morfologie van Breukvlakken

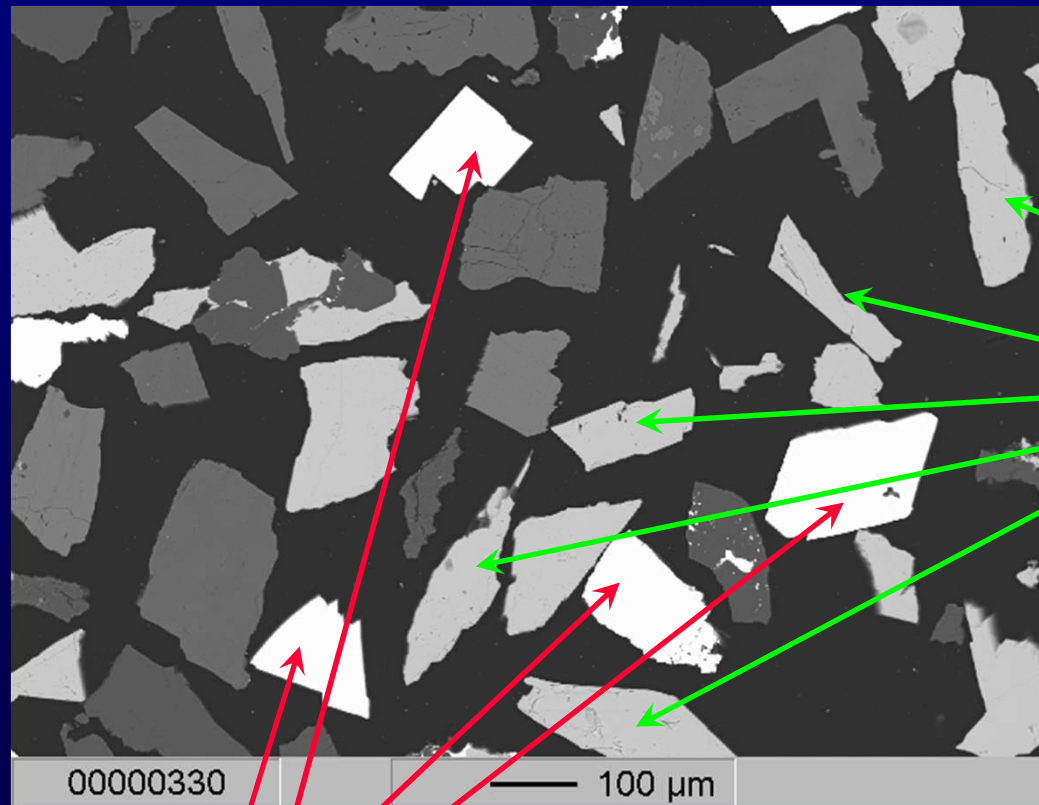


Breukvlak in glas: de crack breidt zich eerste relatief langzaam uit door een gladde zone (**spiegelzone**) en daarna snel door de rest van het materiaal. In deze laatste zone treden vanaf de rand uitwaaiende lijnen op. Dit zijn **"tearlines"**.



Tearlines in polykristallijn materiaal.

# Invloed van slijtvlakken op de geometrie van gebroken korrels



**Voorbeeld:**  
gemalen Lood-Zink-erts

Sfaleriet  
(één matige slijting)

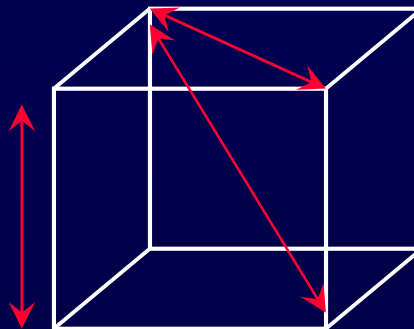
Galeniet (3 perfecte slijtrichtingen)

# Fragmentatie van Vaste Stoffen



# Willekeurige Fragmentatie van Vaste Stoffen (3-D)

- Bij een maalproces ontstaan verdelingen van de korrelgroottes van de deeltjes.
- Hiervoor kunnen een korrelgrootteverdelingsfunctie  $P(d_p)$  worden gedefinieerd.
- Randvoorwaarden:  $P(0) = 0$ ,  $P(\infty) = 1$ ,  $P(d_p)$  stijgt monotoon van  $0$  naar  $1$  als  $d_p$  stijgt van  $0$  naar  $\infty$
- Deeltjesgrootte is **NIET straightforward !!**



**Welke afstand neem je ??**

# Willekeurige Fragmentatie van Vaste Stoffen (3-D)

- In **mineral processing** neemt men als **maat** voor de **deeltjesgrootte het kleinste gat** in een **zeef** met **vierkante gaten** waar het deeltje **nog doorheen kan**.
- Deeltjesgroottes worden niet voor afzonderlijke deeltjes beschreven, maar voor **deeltjesgrootte-classes**.
- Dit heeft alleen zin **als de classes voldoende klein** zijn.
- In de praktijk is de grootste afmeting waarmee nog gewerkt kan worden een serie waarbij de classes  $\sqrt{2}$  verschillen.

# Willekeurige Fragmentatie van Vaste Stoffen (3-D)

- Er zijn diverse empirische verdelingsfuncties voor deeltjesgroottes afgeleid.
  - **Rosin-Rammler**
  - **Lognormale verdeling**
  - **Logistische verdeling**
- Ook zijn er zogenaamde truncated (afgesneden) verdelingen: alle deeltjes hebben een grootte die **kleiner** is dan een bekende waarde:
  - **Gaudin-Meloy verdeling**
  - **Logaritmische verdeling**
- Er bestaan nog diverse andere statistische verdelingsfuncties:
  - **Gaudin-Schumann**
  - **Weibul**

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

- In de **Theorie van Schumann**, wordt het **vergruizingsproces** gezien als de **sommatie** van vele **individuele vergruizingsstappen (comminution events)**.
- In de praktijk hebben deze **vergruizingsstappen**
  - een **variërende energie-input**,
  - **variërende korrelgroottes** van de voeding,
  - **variërende verdelingen** daarvan.
- Bij een gegeven voeding en een dezelfde set maalapparatuur mag men redelijkerwijze verwachten dat de **verschillende vergruizingsstappen tot één familie behoren**.

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

- Elk **vergruizingsproduct** kan worden beschouwd als een **mengsel** van tot het **eindstadium verkleind materiaal** en grover materiaal, dat **nog niet compleet vergruisd** is.
- Een **vergruizingsproces** converteert het **grove materiaal** in het materiaal dat het **eindstadium** bereikt heeft.

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

- Het proces verandert **niet** de **deeltjesgrootteverdeling** van het eindstadium-materiaal. (Waarom niet ?)
- Alleen de **relatieve hoeveelheden** van grover materiaal en eindstadium-materiaal **veranderen**.
- Het is **deze verandering** die zorgt voor de **continue afname** van de **gemiddelde deeltjesgrootte** van het totale product tijdens de vergruizing.

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

- **Vergruizing** moet beschouwd worden als een **Discontinue Mengproces**, waarin de algemene deeltjesgrootte-verdeling van het product het resultaat is van de menging, in verschillende hoeveelheden, van materiaal
  - dat het **eindstadium nog niet bereikt** heeft,
  - met **materiaal in het eindstadium**.
- Dit is het **Mixing-concept**.

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

- Wanneer men dit op **heterogeen materiaal** (bestaande uit verschillende typen materialen) toepast...,

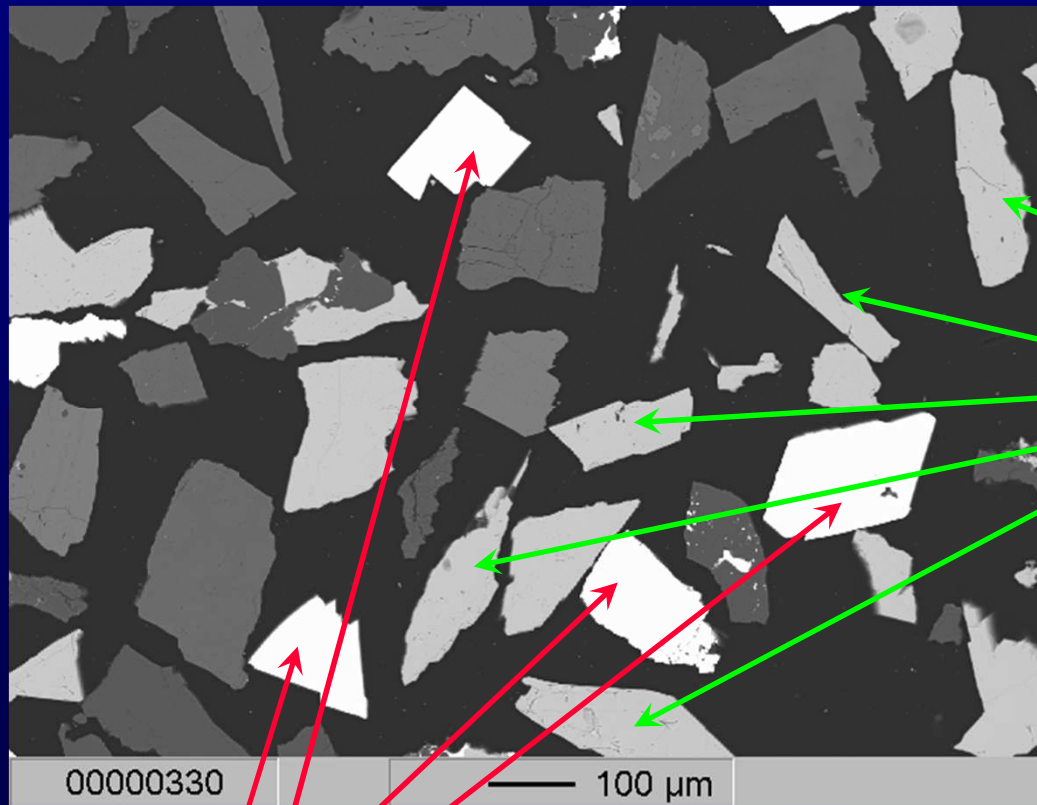
mag men dus met betrekking tot korrelgroottes  
**verwachten** dat...



# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

- In het navolgende voorbeeld vertonen de **galeniet**, en **sfaleriet** (maar ook de **nevengesteentemineralen**) elk hun eigen verdeling qua grootte en vorm.
- De foto is genomen van een polijstvlak.
- De deeltjes in de foto komen echter uit een **zeeffractie**, waarbij een heel **scherpe korrelgrootte-verdeling** is aangehouden. **Daarom zijn de deeltjes vrijwel allemaal even groot.**
- Heel kleine deeltjes in de foto zweven voor een groot deel onder het zichtbare oppervlak (vgl. ijsberg).

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,

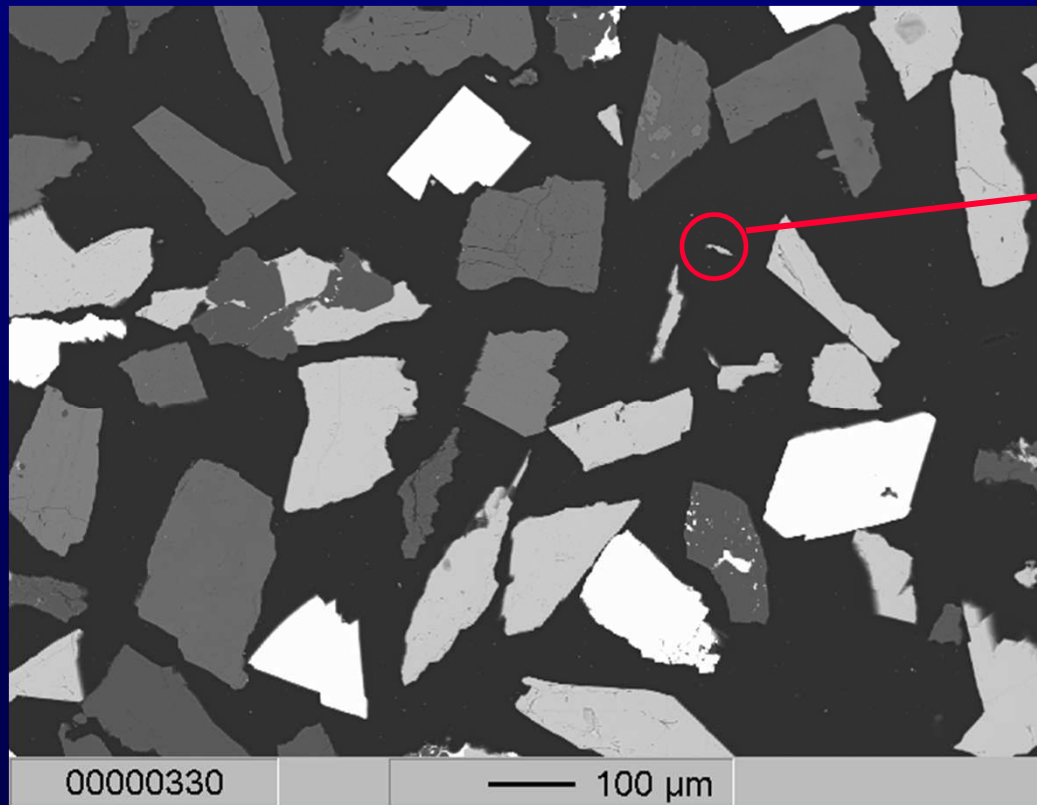


**Voorbeeld:  
gemalen Lood-Zink-erts**

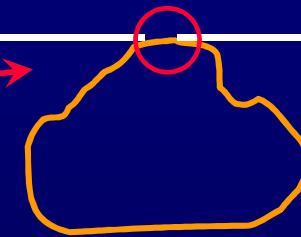
**Sfaleriet**  
(een matige splijting)

**Galeniet** (3 perfecte splijtrichtingen)

# Vergruizingsstappen, Mixing Concept Schumann-Theorie,



Hele kleine korrel



“IJsberg”

# Defecten en Mechanische Eigenschappen

Einde