

DEFECTEN EN MECHANISCHE EIGENSCHAPPEN

De tekst van dit onderdeel is een bewerking van een deel van het dictaat Fysische Chemie van de Vaste Stof (TA3200). Paragraaf 1.4 van dit deel over de theorie van verkleining van materialen is een herziening en bewerking van de originele tekst van Prof. Ir. H.J. Roorda.

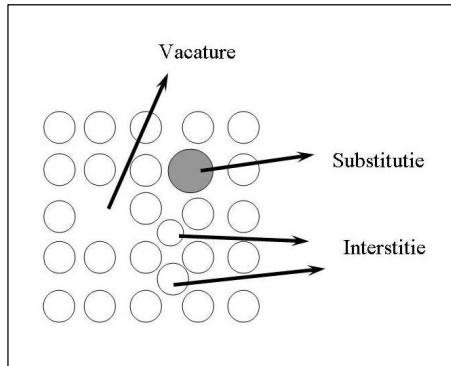
I.1. Soorten Defecten

I.1.1 Inleiding.

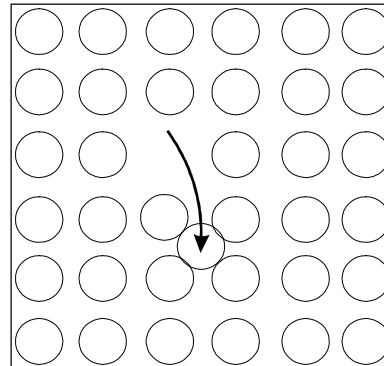
In de Grondstoffentechnologie komt men regelmatig in aanraking met de mechanische eigenschappen van materialen. In dit onderdeel wordt gepoogd om enig inzicht te geven in de beginselen van de dislocatie-theorie (defecten in kristallijne stoffen), de origine van plasticiteit, en in de beginselen van de theorie van (quasi-)brosse breuk, zoals die gebruikt wordt bij de verkleining van materialen (malen en breken).

In inleidingen in de mineralogie en kristallografie wordt een kristalrooster vaak als een ideale rangschikking van atomen voorgesteld. Dit is niet realistisch. Volkomen perfecte kristallen met een volledig ideale atoomstapeling kunnen om thermodynamische redenen niet bestaan. Er zullen in de stapeling altijd een aantal gaten (vacatures) voorkomen. Hun aantal wordt bepaald door de temperatuur. Hoe hoger deze is, des te groter het aantal vacatures. Men drukt dit als volgt uit: een kristal bezit een aantal vacatures dat in temperatuurevenwicht is. Door het vormen van een aantal vacatures zal een perfect kristal in een toestand van lagere vrije energie komen te verkeren. Hoewel het energie kost om zo'n vacature te vormen vindt vacature-vorming toch plaats omdat bij dit proces de entropie toeneemt (vergroting van het aantal realiseringmogelijkheden). Daardoor daalt de vrije energie: de enige voorwaarde waaraan moet worden voldaan, wil een proces kunnen plaats grijpen. In het volgende zullen we aan de hier bedoelde vacatures niet veel aandacht behoeven te besteden. In reële kristallen komen nl. veel meer fouten voor (dan thermodynamisch nodig zou zijn in een perfect kristal). In werkelijkheid is het aantal vacatures in reële kristallen veel groter. Bovendien komen er ook nog fouten van andere aard in

voor. Het zal duidelijk zijn dat reële kristallen een hogere energie-inhoud hebben dan perfecte.



Figuur I.1.1. Typen Puntfouten



Figuur I.1.2. Het Frenkel-defect.


I.1.2 Puntdefecten.

Dit zijn vacatures, interstitiële atomen of substitutionele vervangingen. Figuur I.1.1 geeft een schematisch voorbeeld van een eenvoudig metaal. De interstities kunnen eigen maar ook vreemde ionen zijn. Hetzelfde geldt voor een substitutionele vervanging. Een speciaal type van fout is het Frenkel-defect (figuur I.1.2): er wordt een vacature gevormd en het ion dat de vacature veroorzaakt verdwijnt niet uit het rooster maar komt ergens anders interstitieel in het rooster te zitten.


In ionogene stoffen als NaCl, waarin dus positieve en negatieve ionen voorkomen, kunnen ook zg. Schottky-defecten bestaan. Bij zo'n defect is een Na^+ -ion verdwenen, maar tegelijkertijd ook een Cl^- -ion. Aldus wordt de neutraliteit van het rooster gehandhaafd. In een stof als NaCl kan het voorkomen dat een Na^+ -ion bijvoorbeeld is vervangen door een Ca^{2+} -ion (het NaCl is dus met calcium verontreinigd). Tegelijkertijd dient bij deze substitutie van Ca voor Na een vacature te ontstaan in het positieve deelrooster der Na^+ -ionen, om de elektrische neutraliteit van het rooster te handhaven.

1.1.3 Stapelfouten.

Dit zijn vlakvormige fouten. Een voorbeeld van stapelfouten vindt men bij metalen met een dichtste bolstapeling, hetzij de hexagonale dichtste bolstapeling (bv. bij Zn), hetzij de kubische (bv. bij Cu)¹. De hexagonale stapeling heeft de bekende opeenvolging van dichtst gepakte lagen volgens het schema ABAB..., de kubische stapeling volgens ABCABCABC.... Een dichtst gepakte laag in de hexagonale pakking die op een A-laag rust kan gemakkelijk in een C-positie komen en daarbij op A blijven rusten. In de hexagonale structuur kan dan de volgende fout optreden:

ABABACACAC : in de hexagonale structuur is over 3 lagen een kubische

 pakking ontstaan.
 hex kub hex

In de kubische pakking kan een soortgelijke fout optreden bv. als een dichtst gepakte laag op C rustend, die eigenlijk de A-positie moet innemen, verkeerd geplaatst is en de B-positie inneemt:

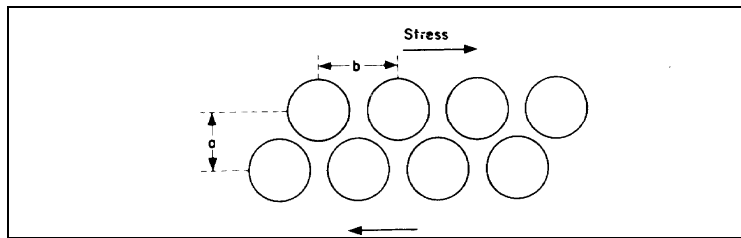
ABCABCBCABCA : nu ontstaat er over 4 lagen een hexagonale pakking in

 de kubische structuur.
 hex

Stapelfouten komen in mineralen ook voor, met name in mineralen met een plaatvormige kristalstructuur, zoals mica's en kleimineralen. Ook bij ZnS komen dergelijke fouten voor. Zwavel kan in een bcc of hcp voorkomen (resultierend in respectievelijk de sfaleriet- en wurtziet-structuur).

¹ Kubische dichtste bolstapeling: *ccp* (*cubic closest packing*)
 Hexagonale dichtste bolstapeling: *hcp* (*hexagonal closest packing*)

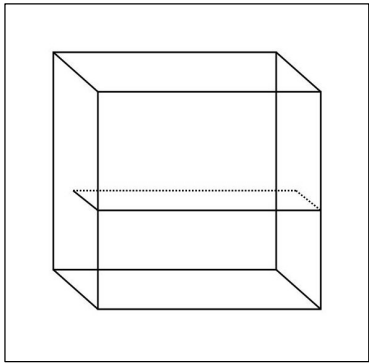
1.1.4 Dislocaties.

Dit zijn lineaire imperfecties. Zij zijn van groot belang omdat zij in belangrijke mate de mechanische eigenschappen van de vaste stoffen bepalen. Voor het eerst bleek de grote betekenis van dislocaties toen met behulp hiervan verklaard kon worden waarom de afschuifkrachten voor een kristal in de praktijk gemiddeld een factor 1000 kleiner bleken te zijn dan de afschuifkrachten die men volgens de theorie kon berekenen. Het is in feite juist dit probleem geweest aan de hand waarvan het begrip dislocatie is ontwikkeld. Het is nog een betrekkelijk nieuw begrip dat na de 2e wereldoorlog tot ontwikkeling is gekomen. De afschuiving zou in een volmaakt perfect kristal moeten plaats vinden door het glijden van een atoomvlak over een aangrenzend vlak, waarbij alle atomen tegelijkertijd over een gelijke afstand verplaatst zouden moeten worden (figuur I.1.3).

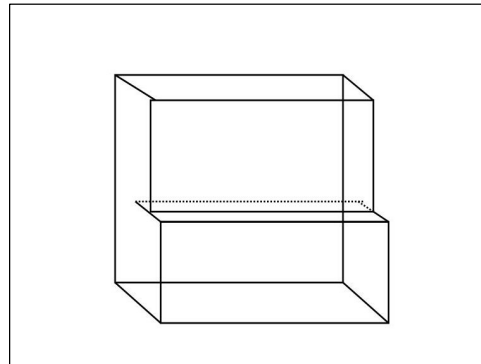


Figuur I.1.3. Afschuiving in een ideaal kristal over 1 atoomafstand.

Als alle atomen van het ene vlak gelijktijdig over die van het andere vlak heen gedrukt moeten worden is er een zeer grote kracht vereist. Theoretisch kan de grootte van deze kracht wel afgeleid worden. Bij aanwezigheid van dislocaties is echter een veel kleinere kracht nodig (zie ook figuur I.1.9a, I.1.9b). Er bestaan verschillende typen van dislocaties. We beginnen met de randdislocatie. Deze kan men zich door het volgende gedachten-experiment ontstaan denken. In een stuk éénkristallijn materiaal wordt een vlakke snede aangebracht (figuur I.1.4a).

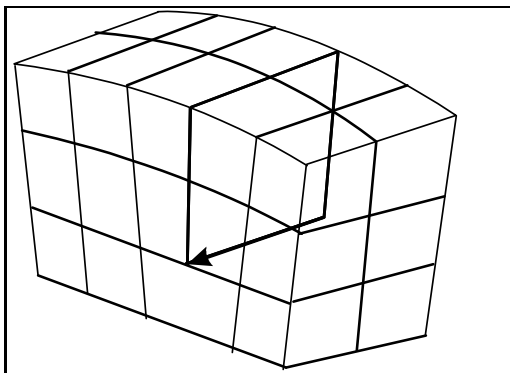


Figuur I.1.4a. Vlakke snede in een stuk ééncrystallijn materiaal.

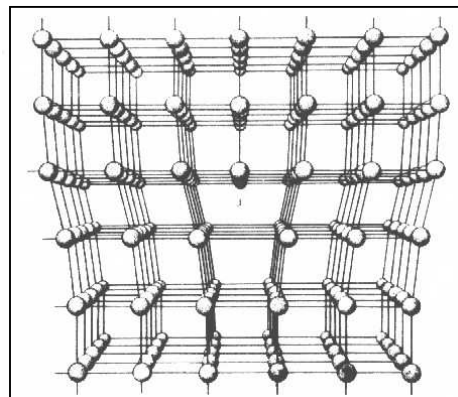


Figuur I.1.4b. Een helft van het kristal wordt een atoomafstand naar binnen gedrukt.

Het gedeelte van het kristal dat zich boven de snede bevindt wordt over één atoomafstand naar binnen gedrukt. De slip-vector geeft in grootte en richting de verplaatsing weer. Er is nu de situatie van figuur I.1.4b ontstaan die in figuur I.1.5 en I.1.6 schematisch op atomaire schaal is getekend. Door de verplaatsing van de bovenste kristalhelft over een atoomafstand zijn n atoomrijen in de bovenste helft komen te staan boven $n - 1$ atoomrijen in de onderste helft. Men kan ook zeggen: ergens is in de bovenste helft een oneindig halfvlak gekomen dat geen voortzetting meer heeft in de onderste helft. De rand van dit halfvlak noemt men de randdislocatie: een rij atomen die het kristal doorloopt.

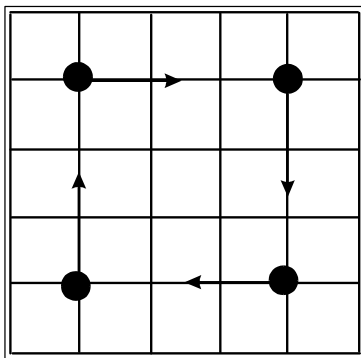


Figuur I.1.5. De situatie van figuur 5 schematisch weergegeven op atomaire schaal.

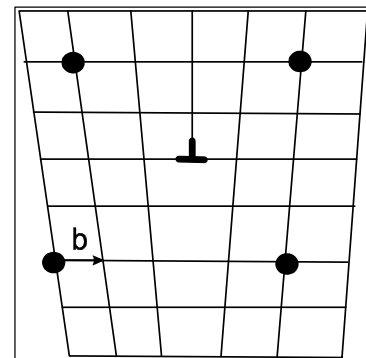


Figuur I.1.6. Randdislocatie.

In de buurt van de dislocatie hebben de netvlakken een gebogen vorm (Figuur I.1.6). Een klein aantal vlakken verder is dit echter niet meer het geval wegens de elastische eigenschappen. Een dislocatie heeft een spanningsveld om zich heen dat zich over een beperkt aantal atoombstanden uitstrekt. Een dislocatie is gekenmerkt door een Burgers circuit en een Burgers vector. Indien men in een netvlak zonder dislocaties een circuit beschrijft door eerst een gegeven aantal atomen naar boven, dan ditzelfde aantal naar rechts, vervolgens naar beneden en tenslotte naar links af te tellen, dan is het circuit gesloten: men komt in het uitgangsatoom terecht. Doet men dit om de dislocatie heen, dan is het circuit niet meer gesloten. De vector \vec{b} , nodig om het circuit te sluiten, is de Burgers-vector. In randdislocaties staat de Burgers-vector loodrecht op de randdislocatie (figuur I.1.7 en I.1.8).

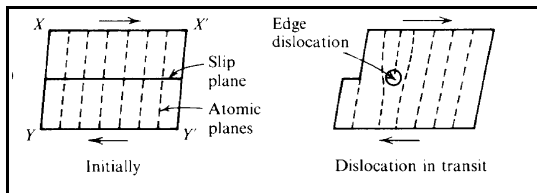


Figuur I.1.7. Burgers Circuit

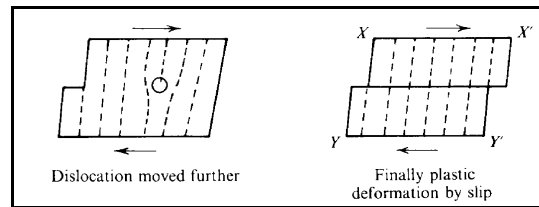


Figuur I.1.8. De burgersvector \vec{b} staat loodrecht op de randdislocatie

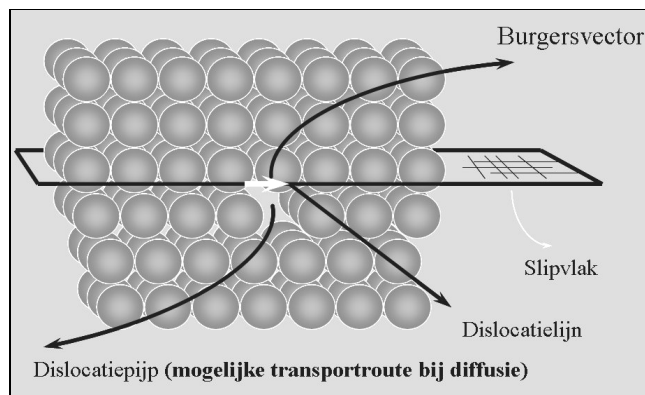
Een belangrijke eigenschap van de dislocaties is dat zij zich gemakkelijk kunnen bewegen. Figuur I.1.9a en I.1.9b laten zien hoe bij het doorlopen van een dislocatie door het kristal tenslotte een afschuiving ontstaat. De dislocaties bewegen zich gemakkelijk omdat o.i.v. de mechanische kracht slechts weinig atombindingen verbroken hoeven te worden, slechts een fractie van het aantal dat verbroken zou moeten worden in een volkomen perfect kristal. Het deformerende proces beperkt zich dus tot een smalle zone die zich gemakkelijk kan verplaatsen. De verplaatsing vindt plaats in een vlak dat het slipvlak wordt genoemd. Het slipvlak wordt gevormd door de Burgersvector en de dislocatielijn (figuur I.1.10).



Figuur 1.1.9a. Dislocatielijn schuift over slipvlak, "slip plane".



Figuur 1.1.9b. Verdere verplaatsing van de dislocatie veroorzaakt afschuiving over 1 atoomafstand

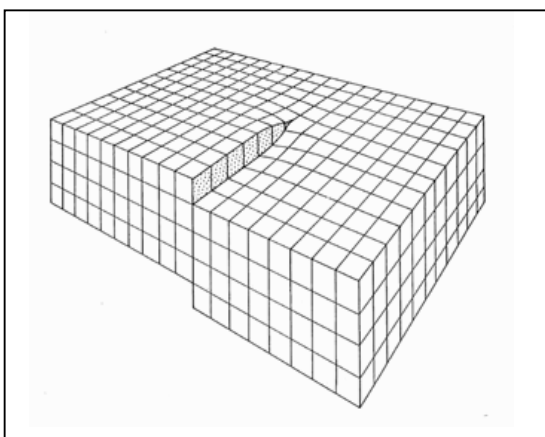


Figuur 1.1.10. Een randdislocatie, met aanduiding van dislocatielijn, burgervector en slipvlak

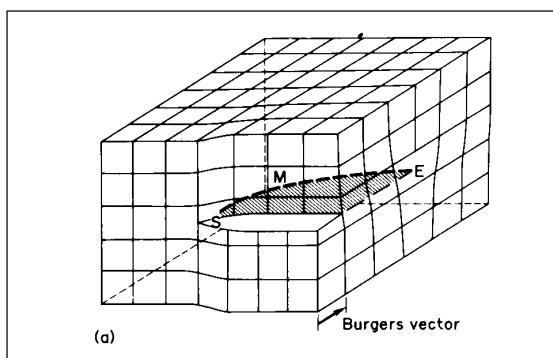
1.1.5 Schroefdislocaties en Gemengde dislocaties.

Figuur 1.1.11 illustreert hoe men de schroefdislocatie kan voorstellen. Het links van de snede gelegen gedeelte wordt over een atoomafstand omhoog geschoven.

Bij een schroefdislocatie hebben de slipvector en de dislocatielijn dezelfde richting. De Burgers vector is evenwijdig met de schroefdislocatie. Het rooster vormt één doorlopend netvlak dat spiraalvormig om de dislocatie heenloopt. Ook de schroefdislocatie kan zich bewegen. Aangezien b en de schroefdislocatie samenvallen, zijn er zeer veel slipvlakken. (Het slipvlak wordt bepaald door de Burgers-vector en de dislocatielijn. Bij een randdislocatie, waar $b \perp$ dislocatielijn, is er één slipvlak.)



Figuur I.1.11. Het concept van een Schroefdislocatie.



Figuur I.1.12. Een schematische voorstelling van een gemengde dislocatie. Merk op dat er maar één Burgers vector is. Uit Hull & Bacon, *Introduction to Dislocations*.

Behalve zuivere rand- en zuivere schroefdislocaties bestaan er ook tussenvormen. In principe kunnen dislocaties willekeurig gekromde gedaantes bezitten. Ze hebben dan een gemengd rand- en schroef-karakter. Een voorbeeld van een gemengde dislocatie is te zien in figuur I.1.12. Dislocaties kunnen zich vertakken. Ze kunnen netwerken vormen. Zij kunnen echter niet "zomaar" in het inwendige van een kristal eindigen. Zij eindigen slechts aan het oppervlak of vertakken in andere dislocaties. Ze kunnen ook bij vreemde atomen eindigen. Alle kristallen bevatten dislocaties (behalve whiskers, dat zijn zeer dunne, haarvormige éénkristallen die zeer sterk zijn, maar bij slag of stoot zwakker worden door introductie van dislocaties). Onder de dislocatie-dichtheid verstaat men de totale lengte l , aan dislocaties per eenheid van volume, V .

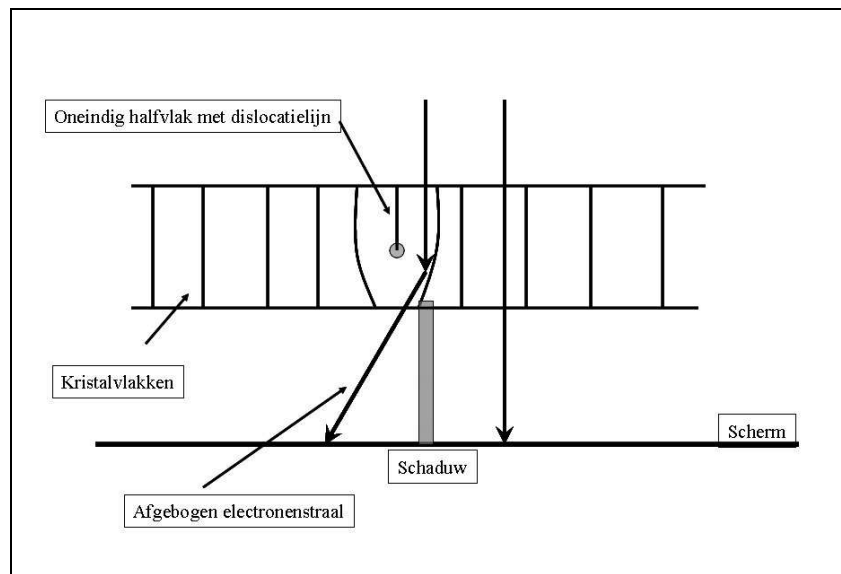
Deze dichtheid, N , is gelijk aan:

$$N = \frac{l}{V} \quad (\text{I.1.1})$$

De eenheid van N is cm^{-2} . In goed uitgegloeide materialen heeft N een waarde van 10^6 a 10^8 cm^{-2} (lagere waarden heeft men kunnen bereiken). Dislocaties (en ook andere defecten) ontstaan al bij de groei van de kristallen. Bij plastische deformatie wordt N veel groter. In hevig koud gewalst metaal bereikt N waarden van ongeveer 10^{12} cm^{-2} . Deformatie veroorzaakt een grote stijging van de dislocatiedichtheid.

1.1.6 Aantonen van dislocaties.

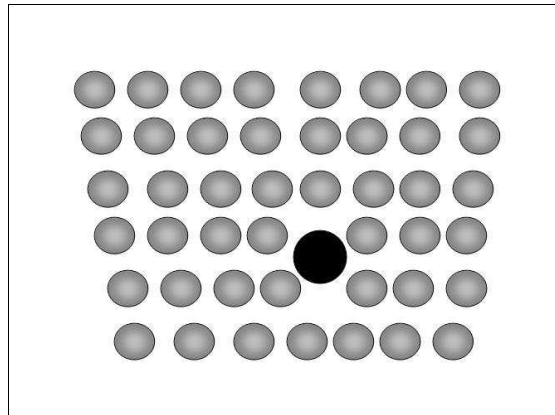
Aanvankelijk bestonden de dislocaties alleen nog maar in theorie. Sinds 1960 is het bestaan van dislocaties ook proefondervindelijk bewezen en zijn ze op verschillende manieren zichtbaar gemaakt. De beste methode is het onderzoek met de transmissie-electronenmicroscop. Bij het proces van beeldvorming veroorzaken de dislocaties wegens onregelmatigheden in de structuur een storing in de verstrooiing van de electronen, waardoor contrasten ontstaan tussen de dislocaties en de rest van het kristal. (Figuur I.1.13). Bewegende dislocaties kunnen op elkaar vastlopen en ook dit is zichtbaar gemaakt.



Figuur I.1.13. Het principe van het zichtbaar maken van dislocaties met een Transmissie-Electronenmicroscop (TEM).

Een andere methode is decoratie. Een voorbeeld hiervan is het aantonen van dislocaties in Si-kristallen met behulp van koperdamp. Bij voorkeur gaan de Cu-atomen bij de dislocaties zitten. De holle pijp van de dislocatie biedt ruimte voor de Cu-atomen (figuur I.1.14).

Men kan nu de dislocatie zichtbaar maken met fotografie met infrarood licht. Si is nl. transparant voor deze straling maar Cu niet.

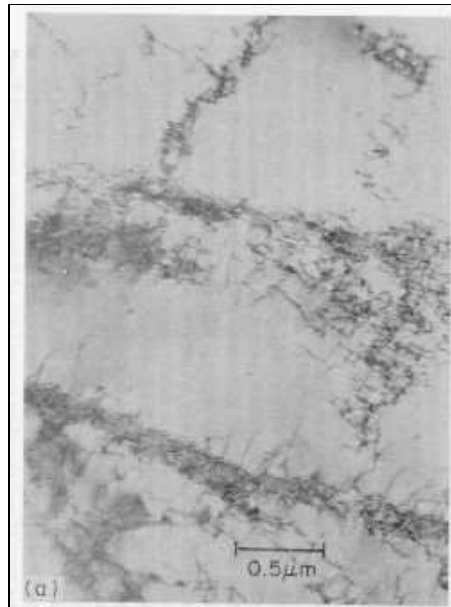


Figuur I.1.14. De dislocatiepijp (Loodrecht op vlak van tekening gezien) biedt ruimte voor grotere atomen. Zie ook figuur I.1.10.

Dislocaties die op een kristalvlak eindigen kunnen zichtbaar gemaakt worden door etsen. Op de plaats van de dislocatie is de spanning in het kristal groter. De etsing grijpt daar veel sneller plaats dan op plaatsen zonder dislocaties. Er ontstaan dan etsputjes. Het etsen gebeurt door de oppervlakken met chemicaliën te behandelen. Men kan ook electrolytisch etsen. Er bestaat ook een methode van het thermisch etsen, waarbij de atomen verwijderd worden door verdampen. Het kristal wordt in een atmosfeer van zeer lage druk op zeer hoge temperatuur verhit. Weer een andere methode maakt gebruik van sputter technieken, d.w.z. dat de atomen aan het oppervlak verwijderd worden door een bombardement met gasvormige ionen. Het is ook mogelijk de dislocaties langs een indirecte weg aan te tonen met röntgendiffractie.

I.1.7 Korrelgrenzen.

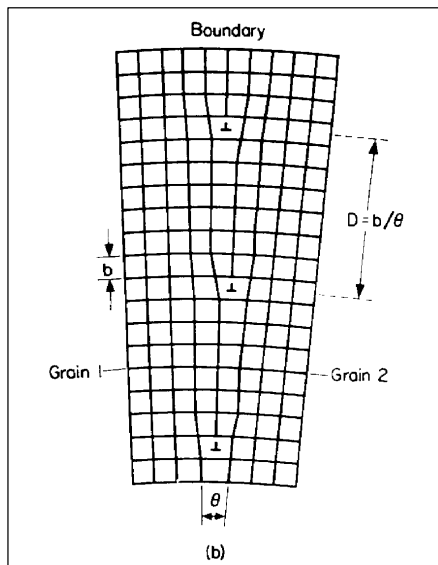
Goed uitgegloeide metaal-kristallen (die lang vlak bij het smeltpunt zijn gehouden) hebben een zeer lage dislocatie-dichtheid. Bij deformatie neemt deze dichtheid sterk toe. Er vormt zich een wir-war (tangles) van dislocaties die in muren (walls) zijn gelegen die gebieden (cells) omsluiten die zelf haast geen dislocaties bevatten (Figuur I.1.15).



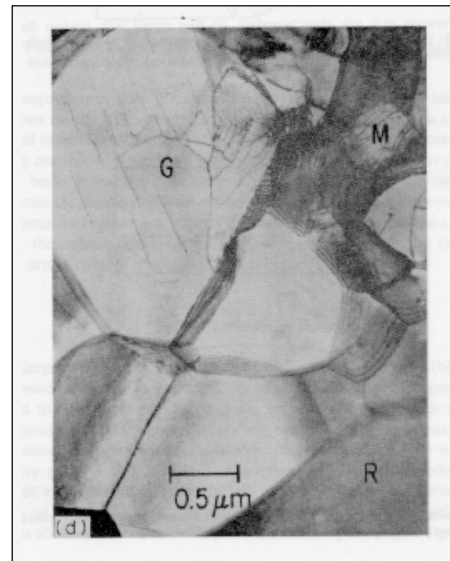
*Figuur I.1.15. Gebieden met weinig of geen
deformatie worden omsloten door zones met
een zeer dicht dislocatie textuur.
Uit Kingery Bowen en Uhlman (1976).*

Deformatie bij zeer lage temperatuur (-135°C) geeft een andere dislocatiestructuur: er ontstaat een homogene verdeling van dislocaties. Als gevolg van de plastische deformatie wordt het kristal harder wegens het grotere aantal dislocaties en de wisselwerking tussen de dislocaties. De dislocaties veroorzaken een grote elastische vervormings-energie (Stored energy). Een deel van deze spanning kan worden opgeheven als de dislocaties zich rangschikken in configuraties van lage energie. Een configuratie van lage energie is de z.g. "low angle boundary". Zie voor een schematisch voorbeeld Figuur I.1.6a, en voor een electronenmicroscopfoto Figuur I.1.16b.

Bij deze korrelgrens bestaat er een klein hoekverschil tussen de twee roosters waartussen de grens optreedt. Een rij randdislocaties van hetzelfde teken (d.w.z. een aantal evenwijdige halfvlakken, die alle naar dezelfde kant zijn gekeerd) veroorzaakt een zekere wigwerking. Het genoemde oriëntatie-verschil neemt toe als de dislocaties dicht bij elkaar komen. De dislocaties kunnen niet te dicht bij elkaar komen in dit model omdat de spanningen dan te groot worden en het materiaal langs de korrelgrenzen zal barsten.



Figuur I.1.16a. Een schematische voorstelling van een low angle boundary. De grens wordt gevormd door op een lijn liggende dislocaties, maar er is nog een zekere continuïteit tussen de korrels. Uit Hull & Bacon, 1992.



Figuur I.1.16b. Polygonisatie en low-angle boundaries. Uit Hull & Bacon, 1992

Bij een afstand tussen de dislocaties van ca. 140 \AA is het oriëntatie-verschil ca. 1° . In polykristallijne materialen komt het voor dat er veel grotere verschillen bestaan tussen de oriëntaties van de aangrenzende roosters. Voor deze "large angle boundaries" zijn de modellen veel ingewikkelder.

Het verminderen van de spanning in het kristal, door het zoeken der dislocaties naar gunstige configuraties wordt bevorderd door hogere temperatuur. In de wirwar treden herrangschikkingen op. Het kristal wordt zachter. Men spreekt van herstel (recovery). Het proces van vorming van low angle boundaries noemt men polygonisatie (polygonisation). Er ontstaan namelijk polygonale "subgrains" (figuur I.1.16b).

Bij hevig koud bewerkte metalen zal bij verhitten boven een kritische temperatuur rekristallisatie optreden. Hierbij verandert de uniforme verdeling van in elkaar verwarde dislocaties naar een structuur met "large" en "small angle boundaries". Bij langere stooktijden

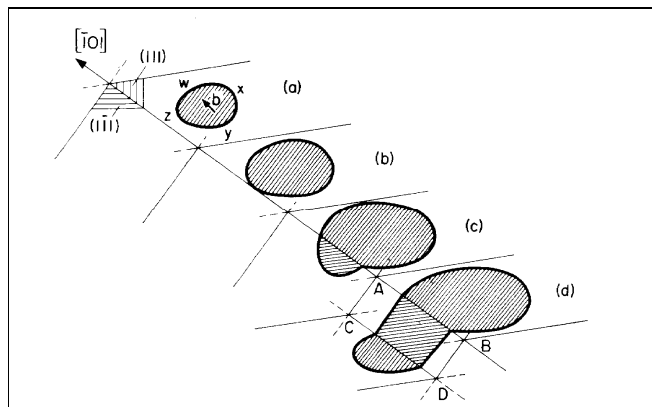
bij hogere temperatuur worden de korrels (kristallieten) groter: men spreekt van korrelgroei (grain growth).

I.2 Eigenschappen Van Dislocaties.

I.2.1 Beweging van dislocaties.

Een dislocatie kan zich op twee manieren verplaatsen: 1e door glijding (slip) (figuur I.9a, b) of conservatieve beweging; 2e door klim (climb) of niet conservatieve beweging (figuur 13). In het eerste geval beweegt de dislocatie zich in het vlak bepaald door zijn lijn en de Burgers-vector. In het tweede geval beweegt de dislocatie zich uit het glijvlak. Het glijden van de dislocatie is in de vorige paragraaf besproken. De kracht die nodig is om de dislocatie in beweging te brengen wordt de Peierls-Nabarro kracht genoemd.

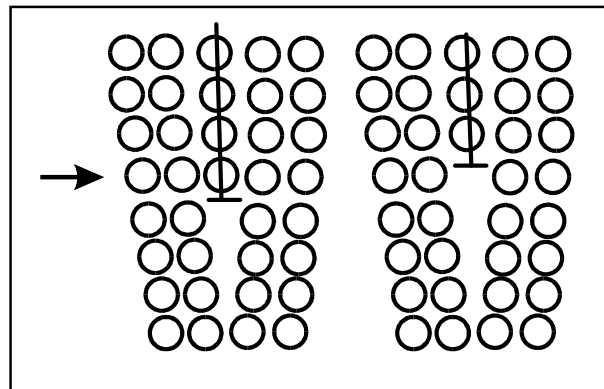
Genoemd moet nog worden het begrip "crossslip". Een schroefdislocatie die zich beweegt in een bepaald vlak van een zekere kristallografische vorm, kan op een gegeven moment zich voortzetten in een ander vlak van dezelfde kristallografische vorm, bv. van het (111) vlak in het (111) vlak (zie figuur I.2.1., waarin de cross-slip van een dislocatielus (loop) is afgebeeld).



Figuur I.2.1. Crossslip: een schroefdislocatie die zich beweegt in een vlak (bijvoorbeeld (111)) kan zich voortzetten in een ander vlak van dezelfde kristallografische vorm. Uit Hull & Bacon (1992).

De snelheid waarmee een dislocatie zich kan bewegen is van veel factoren afhankelijk. Van invloed zijn de grootte van de uitgeoefende spanning, de aard van de stof, de zuiverheid, de temperatuur en het type dislocatie. Randdislocaties lopen harder dan schroefdislocaties.

Afhankelijk van de spanning lopen de dislocaties met snelheden van 10^{-7} tot 10^5 cm sec⁻¹. Bij verhoging van de temperatuur lopen de dislocaties veel sneller. Bij de gangbare toegepaste spanningen liggen de snelheden tussen 10^{-2} en 10^{-7} cm sec⁻¹. bij metalen. Bij hogere temperaturen kunnen randdislocaties uit het glijvlak treden.



Figuur I.2.2. Een rij atomen loodrecht op vlak van tekening, midden in het linker figuurtje, ter hoogte van de pijl wordt verwijderd. De dislocatie komt een atoomafstand omhoog (rechter plaatje).

Het principe van "climb" (klim) van dislocaties wordt uit gelegd in figuur I.2.2. Als ter hoogte van de pijl een rij atomen uit het halfvlak wordt verwijderd komt de dislocatielijn 1 atoomafstand omhoog (positive climb). Wanneer een rij atomen wordt geïntroduceerd zakt de lijn over één afstand (negative climb). Voor klim is dus diffusie van atomen nodig. Derhalve vereist klim een thermische activering. Het is mogelijk dat de klim over een gedeelte van de lijn plaats vindt. De inham wordt "jog" genoemd. Positieve klim heeft ten gevolge dat ergens in de buurt in de structuur vacatures moeten verdwijnen. Negatieve klim creëert in de buurt vacatures.

Defecten (interstitiële of substitutionele onzuiverheden, andere dislocaties, korrelgrenzen) kunnen de beweging van een dislocatie sterk afremmen. Ze kunnen zelfs een dislocatie verankeren.

1.2.2 . Elastische Eigenschappen.

Een dislocatie veroorzaakt verplaatsingen in het rooster en het resultaat is dat een elastisch spanningsveld rondom de dislocatie wordt gevormd. Bij een randdislocatie zal het gebied boven het glijvlak (dat dus het extra halfvlak bevat), in compressie verkeren, het onderste gebied in rek. Men kan de spanningsvelden berekenen ervan uitgaande dat het kristal een isotroop elastisch continuüm is. Zo kan men de energie van een dislocatie berekenen alsmede de krachten die dislocaties op elkaar uitoefenen. Het eenvoudigste geval is dat van een schroefdislocatie.

Rondom een schroefdislocatie bestaat een afschuifspanning, evenwijdig aan de dislocatielijn die op een afstand r gelijk is aan:

$$\tau_{\theta} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (\text{I.2.1})$$

waarin b de lengte van de Burgers-vector en G de glijdingsmodulus is. Een even grote afschuifkracht is werkzaam in een vlak \perp dislocatielijn loodrecht op de straal die het punt met de dislocatielijn verbindt.

$$\tau_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (\text{I.2.2})$$

Het spanningsveld rondom een randdislocatie is veel ingewikkelder en men moet met veel meer componenten werken. Het spanningsveld heeft zowel rekcomponenten als afschuifcomponenten. De maximale compressie bestaat er onmiddellijk boven het glijvlak (op het teken na gelijk aan de maximale rek onder het glijvlak) in de richting // slipvector: (de lijn is de z -richting; de slipvector de x -richting, $y \perp$ beide)

$$\sigma_x = Dy \frac{(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (\text{I.2.3})$$

met

$$D = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \quad (\text{I.2.4})$$

waarin ν = Poissonverhouding $\sim 0,3$

De uitdrukkingen zijn niet geldig in het hart van de dislocatie (r , resp. x en y gelijk aan nul). Immers de spanningen zijn in het hart ("core") niet oneindig groot. Bovendien zijn de uitdrukkingen benaderend, aangezien men uitgaat van een isotroop continuüm terwijl een kristal anisotroop is. Exacte berekeningen stellen hevige wiskundige problemen. Men heeft berekeningen kunnen maken van de totale deformatie-energie van een dislocatie. In het gebied in de vorm van een cilinder met straal r_1 is de elastische energie (per eenheid van lengte der dislocatie) voor de schroefdislocatie:

$$E_{el(s)} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right) \quad (\text{I.2.5})$$

en voor de randdislocatie:

$$E_{el(e)} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right) \quad (\text{I.2.6})$$

Hierin is r_0 de straal van de cilindervormige "core" van de dislocatie (ca. 10^{-7} cm); r_1 is de halve gemiddelde afstand tussen de dislocaties. Voor ieder atoomvlak dat door de dislocatie wordt doorboord bedraagt de elastische energie van een randdislocatie ongeveer 8 eV. Hierbij moet nog het bedrag van de energie van de "core" worden opgeteld. Men schat deze op ca. 1 eV voor ieder atoomvlak dat doorboord wordt.

Voor een dislocatie van het gemengde type is het realistisch om te stellen:

$$E_{(el)} = \alpha Gb^2 \quad (\text{I.2.7})$$

met $\alpha \sim 0,5$ tot $1,0$

1.2.3. De krachten tussen dislocaties.

Op de volgende wijze kan plausibel gemaakt worden dat twee dislocaties met hetzelfde teken (\perp \perp) elkaar zullen afstoten terwijl 2 dislocaties met tegengesteld teken (\perp \top) elkaar zullen aantrekken. Twee evenwijdige randdislocaties met slipvector b in hetzelfde slip-vlak gescheiden door een grote afstand hebben een energie gelijk aan:

$$\frac{2Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right) \quad (\text{I.2.8})$$

(dislocaties met de eenheid van lengte).

Als de dislocaties zeer dicht bij elkaar liggen kan de rangschikking beschouwd worden als één enkele dislocatie met vector $2b$ met energie gelijk aan:

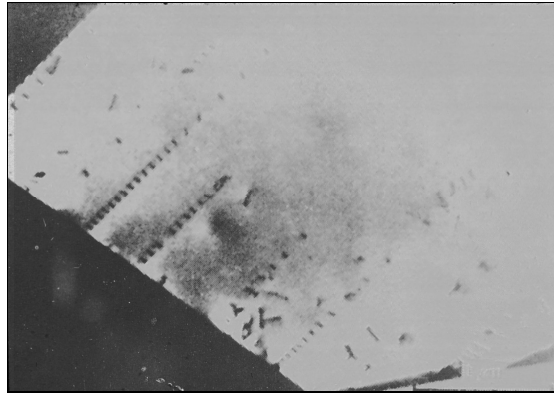
$$\frac{G(2b)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right) \quad (\text{I.2.9})$$

Hieruit volgt dat twee dislocaties met gelijk teken elkaar afstoten. Eveneens valt in te zien dat tegengestelde dislocaties elkaar aantrekken, aangezien twee zeer dicht bij elkaar liggende dislocaties dan een vector $b = 0$ krijgen. Ze combineren met elkaar en vernietigen elkaar.

Wanneer onder invloed van deformerende krachten een aantal dislocaties een bepaalde richting wordt opgedreven kan het voorkomen dat ze een niet te overwinnen barrière ontmoeten b.v. een korrelgrens. Wegens de onderlinge afstoting der dislocaties ontstaat dan een bepaalde rangschikking: pile up (figuur I.2.3.).

Vlak bij de grens is de afstand tussen de dislocaties klein. Er verder vandaan wordt de onderlinge afstand groter. Vlak bij de grens concentreren zich grote spanningen.

Zij kunnen een breuk door de korrelgrens veroorzaken of (minder catastrofaal) een "yield" in de naburige korrel. Dit wordt verder besproken in § I.3.6.



Figuur I.2.3. "Pile-up" van dislocaties. De dislocaties kunnen de korrelgrens niet passeren en hopen zich in een bepaalde rangschikking op voor de korrelgrens. Onbekend materiaal. Elektronenmicroscopfoto.

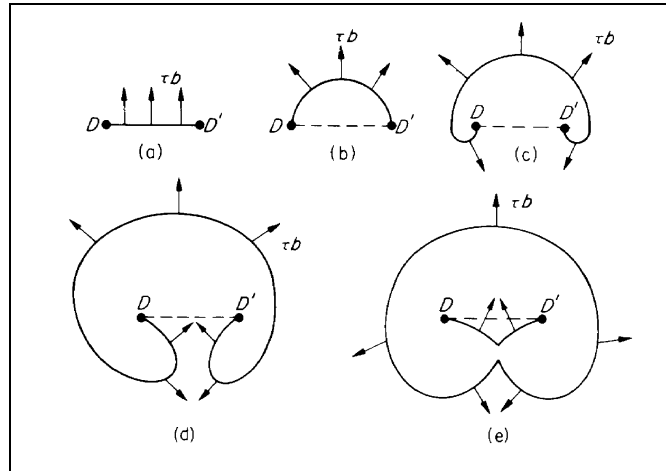
1.2.4. Vergelijking van metaalkristallen met kristallen van niet-metalen.

In ionogene stoffen zijn met ieder roosterpunt minstens twee verschillende ionen (vaak meer) geassocieerd. Het gevolg is dat de Burgers-vector van de dislocatie, groter is dan bij metalen, en aangezien de dislocatie-energie evenredig is met b^2 , is de dislocatie-energie in zo'n ionoogeen kristal veel groter. Het gevolg is dat van nature minder dislocaties in dergelijke kristallen aanwezig zijn. Ook zijn ze veel moeilijker in beweging te brengen. Het gevolg is, dat niet-metalen veel brosser (minder ductiel) zijn dan metalen. De studie van de dislocaties in deze ionogene stoffen is veel moeilijker dan die bij metalen.

1.2.5. Dislocatievermenigvuldiging.

De dislocaties aanwezig in natuurlijke kristallen zijn te gering in aantal om de waargenomen plastische vervormingen te kunnen veroorzaken. Onder invloed van deformerende krachten neemt het aantal dislocaties toe. Het is duidelijk dat er mechanismen moeten bestaan waardoor het aantal dislocaties wordt vergroot. Er bestaan verschillende mechanismen waarvan we hier

slechts één willen behandelen: bron van Frank-Read (figuur I.2.4.). Er zijn experimentele aanwijzingen dat de door de theorie voortgebrachte vermenigvuldigingsmechanismen juist zijn.



Figuur I.2.4. Het vermenigvuldigingsmechanisme van dislocaties volgens Frank & Read. In 5 stappen vormt zich uit een dislocatie d-d een lus en een zelfde dislocatie d'-d.'

De oorspronkelijke dislocatie $d-d$ ligt vastgepind bv. op dislocatieknooppunten, verontreinigingen, eventueel andere oorzaken. Onder invloed van een spanning buigt de dislocatie uit op een wijze als in de figuur aangegeven. Er ontstaat een niervormige lus. Bij uitbreiding vernietigen de delen m en n elkaar. Er wordt een grote gesloten lus gevormd en een nieuwe dislocatie $d'-d'$. Dit proces kan voortdurend worden herhaald. Op deze wijze ontstaan dus dislocatielussen. Andere mechanismen veroorzaken geen gesloten lussen maar een lijn met begin en eind.

I.2.6. Schroefdislocaties en Kristalgroei.

Het is gebleken dat schroefdislocaties een zeer belangrijke rol spelen bij de kristalgroei. Op kristallen zijn vaak zogenaamde groeispiralen aanwezig en deze vormen direct een bewijs voor het bestaan van schroefdislocaties. Wanneer tijdens de groei een onvolledig gevuld kristalvlak verder uitgroeit, gebeurt dat op zo'n manier dat bijkomende deeltjes zo stevig mogelijk worden gebonden.

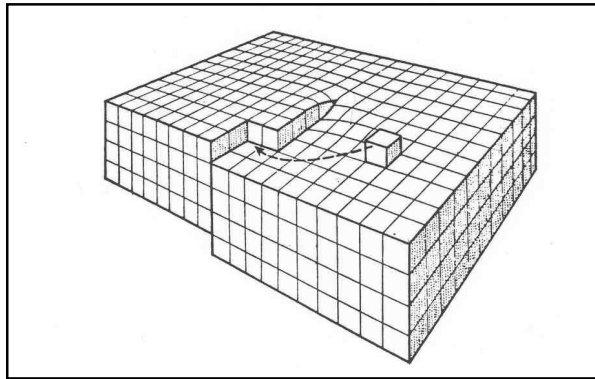
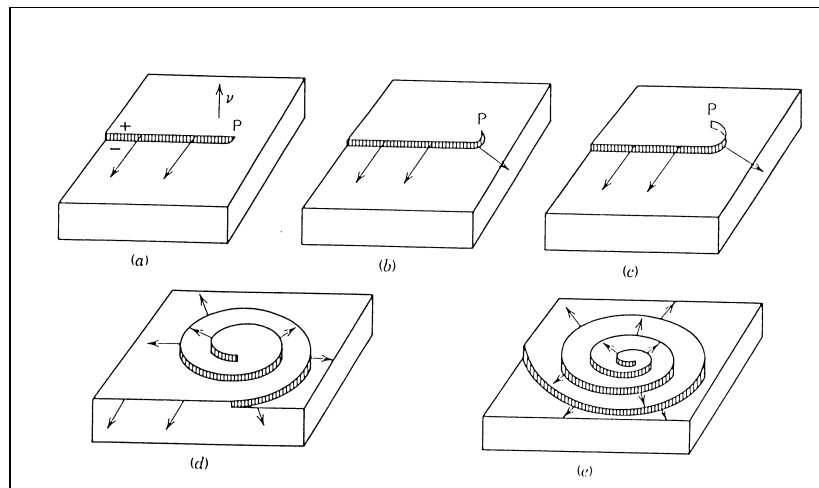


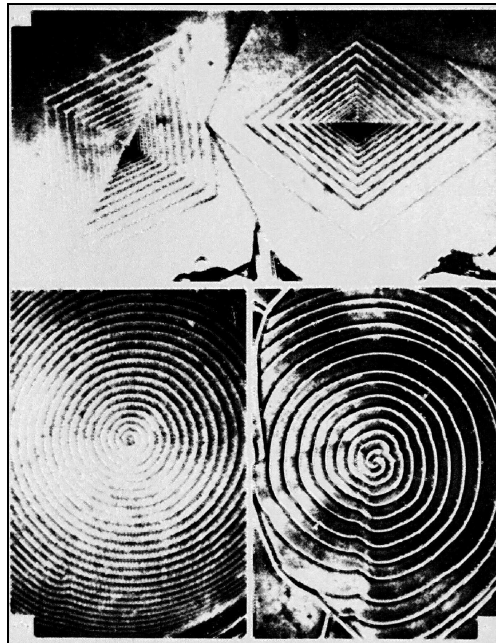
Figure 1.2.5. Een schematische weergave van een onvolledig gevuld kristalvlak. Een nieuw deeltje zal bij A in de hoek worden geplaatst.

In een situatie als geschetst in figuur 1.2.5. zal het nieuwe deeltje in de hoek worden geplaatst. De kans dat het deeltje op het kale bovenzvlak komt te zitten is gering. Vanwege de temperatuur-beweging vliegt het deeltje van het oppervlak af of wandelt het over het oppervlak heen om tenslotte bij de hoek A terecht te komen. Op het kale bovenzvlak wordt het deeltje te weinig stevig gebonden. Hieruit volgt dat tijdens de groei het onvolledige vlak wordt volgebouwd. Daarna is het uiterst lastig om verdere groei te doen plaats vinden. Berekeningen tonen aan dat een kristal niet op een dergelijke wijze



Figuur 1.2.6.. De vorming van een groeispiraal schematisch weergegeven. Uit Kingery Bowen, Uhlman (1976).

kan groeien. Als er nu een schroefdislocatie aanwezig is, is er geen glad oppervlak maar is het oppervlak terrasvormig (Figuur I.2.6.). Dan is aangroei gemakkelijker omdat er meer bindingsenergie kan vrijkomen bij het aanleggen van een nieuw deeltje. Langs de gehele trede is de kans dat een deeltje wordt bijgeplaatst gelijk. Wil de trede nu recht blijven, dan moeten er naar rato meer deeltjes worden bijgeplaatst naarmate men verder van de schroefdislocatie vandaan is. Dit gebeurt echter niet: m.a.w. de "hoeksnelheid" van de trede is niet over de hele trede gelijk bij het draaien om de dislocatielijn. Het resultaat is dat de trede om de schroefdislocatielijn gaat spiraliseren. Bovendien blijft tijdens het aangroeien het terras met de treden bestaan en is continu een aangroeiing mogelijk. Groeispiralen zijn m.b.v. elektronenmicroscopie reeds vele malen aangetoond bij allerlei synthetische kristallijne stoffen, en uiteraard ook bij mineralen (Figuur I.2.7.). (Beroemde studies zijn gemaakt van mica's als muscoviet, phlogopiet en biotiet).



*Figuur I.2.7. Diverse groeispiralen.
Onbekend materiaal.*

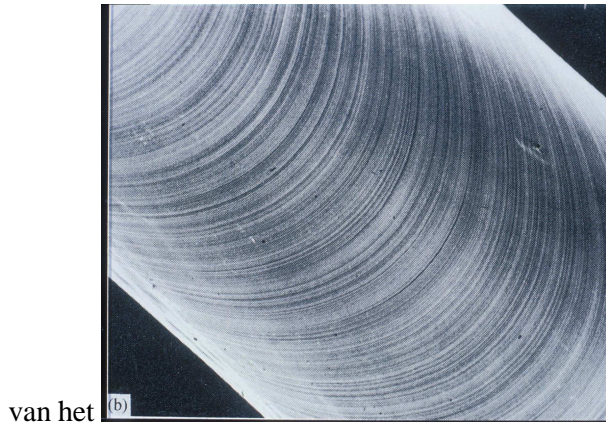
I.3. Plasticiteit, Hardingsprocessen

Hier gaan we nader in op de kristallografie van het deformatie-proces. Aan de orde komen onder andere afschuiving en tweelingvorming. Daarnaast wordt het belangrijke principe van dislocatie pile-up besproken, en komt de vergelijking van Hall-Petch (belangrijk voor maalprocessen) aan de orde. Verder bespreken we processen die een materiaal harder maken. Deze zogenaamde hardingsprocessen worden zeer veel gebruikt bij het bepalen van de eigenschappen van synthetische materialen. Ook vind men in de natuur wel voorbeelden van dergelijke processen. Aan de orde komen oplossingsharding, precipitatieharding, dispersieharding en martensitische harding.

I.3.1 Slijplijnen.

Kennis hierover wordt voornamelijk gekregen door experimentele waarnemingen met éénkristallen van enkele mm dikte en enkele cm lengte. De nominale stress-strain curve die men dan verkrijgt hangt af hoe het kristal georiënteerd is ten opzichte van de trekas.

De curve begint met een nominaal lineair Na in eerste instantie elastische vervorming begint de plastische vloeï. De spanning waarbij de vloeï ("yield") optreedt en het verdere verloop van de trek-rek curve hangen sterk af van de oriëntatie. Als de plastische vloeï intreedt ontwikkelen zich rondom het oppervlak van het kristal lussen, afglijdingen die evenwijdig zijn met een bepaald kristallografisch vlak. Iedere lus is een trede op het oppervlak ontstaan als twee delen



van het

Figure I.3.1. slijlijnen (afglijding).

kristal over elkaar glijden. De afglijding vindt plaats over afstanden van 100-10000 Å (10-1000 nanometer). Deze merktekens noemt men slijlijnen en slijbanden (Figuur I.3.1.). Bij hogere spanningen vormen de slijlijnen groepen of slijbanden. Overal vindt de afglijding in dezelfde richting plaats.

1.3.2 Kritisch ontbonden schuifspanning.

Aangezien de plastische deformatie wordt veroorzaakt door slip van een aantal evenwijdige vlakken in een bepaalde richting kan men beter in plaats van de trek-rek kromme een andere curve construeren waarbij de afschuiving op de slijvlakken voorkomt. Men dient daartoe de kritisch ontbonden schuifspanning te bepalen, de per oppervlakte-eenheid werkzame afschuifkracht op het afschuifvlak in de afschuifrichting: τ . Deze τ wordt uitgezet tegen de afschuivingsvervorming γ , shear strain. De τ versus γ curve kan worden afgeleid uit de σ versus ϵ curve te vinden uit de uitgeoefende krachten en waargenomen verlengingen in de trekrichting. Het is een eenvoudige zaak om af te leiden dat de kritisch ontbonden schuifspanning ("critical resolved shear stress", of c.r.s.s.) gelijk is aan (zie figuur I.3.2.)

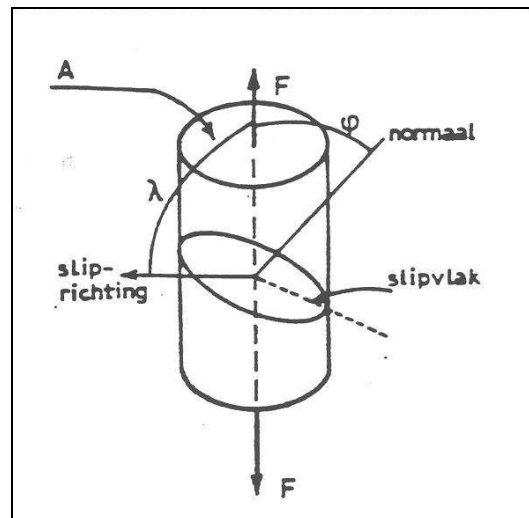
$$\tau = \frac{F}{A} \cos \lambda \cos \phi \quad (\text{I.3.1})$$

Hierin is F de trekkracht \perp werkzaam op de doorsnede A van de cilinder; Φ de hoek tussen de kracht F en de normaal op het slijvlak en λ de hoek tussen F en de slijrichting. De formule

geldt bij benadering bij niet al te grote vervormingen.

1.3.3. Shear-hardening curve.

De yielding begint bij een kritische waarde van de c.r.s.s. op het betreffende slipvlak in de betreffende sliprichting. Zachte kristallen hebben waarden van de c.r.s.s. beneden 1 MN/m^2 (10^2 p.s.i.). Tot de zachte kristallen behoren alle fcc metalen. Dit komt omdat in deze fcc structuren het aantal dicht met atomen bezette vlakken, waarlangs de afschuiving plaats vindt, vergeleken met andere kristallen het grootst is. Ook een aantal hcp



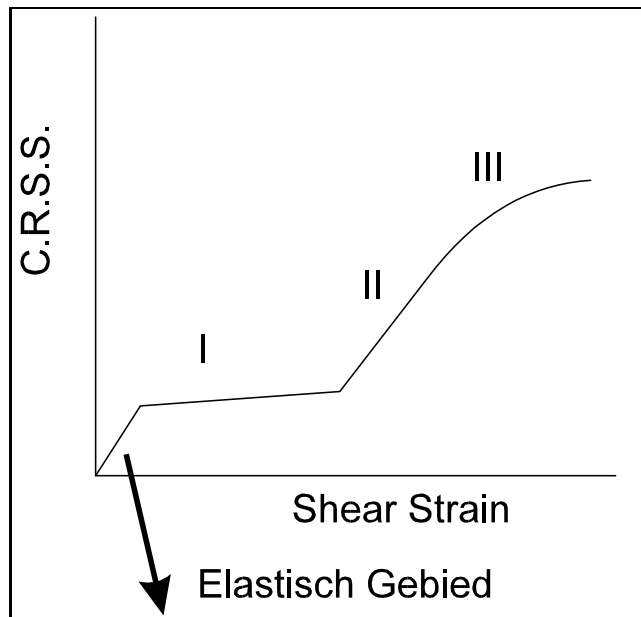
Figuur 1.3.2. Schematische voorstelling van de relaties tussen kritisch ontbonden schuifspanning en trekkracht.

metalen zijn betrekkelijk zwak bv. Zn, Cd en Mg. Harde kristallen hebben c.r.s.s. waarden groter dan 10 MN/m^2 . Hiertoe behoren vele hcp metalen, de bcc metalen en vele ionogene verbindingen. De waarde van de c.r.s.s. van een materiaal wordt sterk beïnvloed door onzuiverheden en de mate waarin het rooster defect is. In de literatuur vindt men voor een en hetzelfde materiaal vaak uiteenlopende waarden. De yield stress van de éénkristallen zijn aanzienlijk kleiner dan die van de polykristallijne materialen die waarden bezitten van rond de

100 MN/m² of soms nog groter. De bcc metalen vertonen moeilijker afschuiving aangezien de vlakken die over elkaar heen moeten schuiven minder dicht bezet zijn, daardoor dichter bij elkaar liggen (dan in fcc en hcp metalen) en onderling sterkere bindingskrachten hebben. Tijdens de deformatie van éénkristallen neemt de yield stress evenals bij polykristallijne materialen toe. In het eerste geval doorloopt de "strain hardening" drie fasen (figuur I.3.3.).

Fase I: gemakkelijke vervorming (easy glide), de snelheid van harding is betrekkelijk klein en blijft constant (onafhankelijk van de spanning). In deze fase treedt slip op langs slechts één slipvlak. In fase II treedt eveneens een lineair verband op, is de snelheid van harding ook constant, maar is de snelheid betrekkelijk groot, veel groter dan in fase I. In dit stadium treedt glijding op langs verschillende glijsystemen.

In fase III is het verband niet meer lineair. Wel neemt de spanning nog steeds toe maar de snelheid van harding neemt af. Tegenover de mechanismen die de strain-hardening veroorzaken



Figuur I.3.3. De drie fasen van strainhardening.

treden nu enkele herstelprocessen op. In polykristallijne materialen treedt in hoofdzaak fase III op. Hexagonale metalen hebben een lange fase van easy glide (I). Als bij lagere temperatuur

wordt gedeformeerd wordt in deze fase de hardingsnelheid groter. In de fcc en bcc metalen kunnen de drie fasen altijd goed waargenomen worden hoewel fase I vaak erg kort is. In alle fasen treden slijplijnen op. In fase I zijn ze lang en recht en op regelmatige afstand van elkaar geplaatst met "stappen" van 50 à 100 Å. In fase II worden ze korter en komen er ook vertakkingen. In de derde fase komen er slipbanden. In fase I neemt de dislocatiedichtheid toe. Er treedt echter nog geen pile up op, het aantal dislocatiedoorsnijdingen neemt niet toe. Anders wordt dit in fase II. De dislocatievermenigvuldiging is nu niet meer beperkt tot 1 glijsysteem. Er treden dislocatiesnijdingen op en ook "Pile Up's". In het derde stadium treedt het proces op dat schroefdislocaties van het ene glijvlak overgaan op een ander glijvlak: cross-slip. Tengevolge van dit proces van cross-slip kan het kristal de hoge spanning verminderen die door de Pile-Up's worden veroorzaakt.

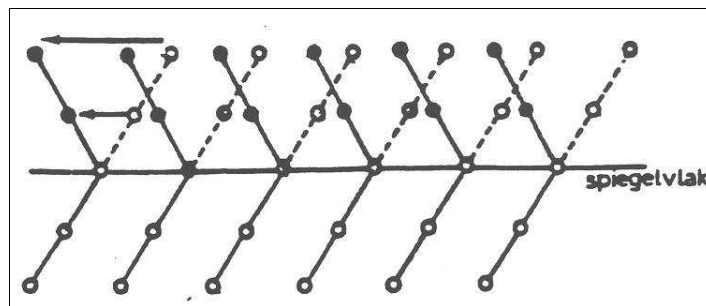
1.3.4. Slip-elementen.

Door metingen van de hoeken waaronder de glijlijnen op de oppervlakken lopen kan men bepalen welke vlakken tijdens de afschuivingen werkzaam zijn en in welke richting de afschuiving plaats vindt. De afschuivingen vinden plaats langs kristalvlakken die het dichtst met atomen zijn bezet. De richting van afschuiving vindt langs de dichtstbezette richtingen plaats. Zoals we reeds hebben behandeld is afschuiving een gevolg van het zich verplaatsen van dislocaties. De schuifspanningen nodig om een dislocatie te laten bewegen worden kleiner als de Burgersvector van de dislocatie kleiner wordt (de arbeid nodig om een stuk van de dislocatie met de eenheid van lengte te verplaatsen over een afstand gelijk aan de eenheid van lengte is gelijk aan τb , waarin τ de spanning is). De dislocaties met de kleinste b liggen in de dichtstbezette vlakken. In fcc metalen is het slipvlak het (111) vlak of andere equivalente vlakken uit de vorm $\{111\}$, de sliprichting is $[011]$ of de equivalenten uit $\langle 011 \rangle$. Het is gemakkelijk in te zien dat er in fcc metalen in totaal 12 glijsystemen mogelijk zijn. In bcc metalen bestaan geen dichtst gestapelde vlakken. De meest dichte vlakken zijn nog $\{110\}$. De afglijding gaat hierlangs en in de richting $[111]$. Andere mogelijke slipvlakken in bcc structuren zijn $\{112\}$ en $\{123\}$ met sliprichtingen uit $\langle 111 \rangle$ (resp. 12, 24). Hcp metalen als Cd, Zn en Mg slippen gemakkelijk langs de basaalvlakken (0001) in de dichtgepakte richtingen $[100]$ en

[110] (n.b. 3 indices gebruikt). Bij andere hcp metalen als Zn, Ti en Be gaat de slip langs de prismavlakken {1010} in dezelfde sliprichtingen. Bij Zn en Cd zijn ook nog andere glijsystemen waargenomen.

1.3.5. Mechanische vertweeling (Multiple Twinning).

Als twee aangrenzende delen van een kristal op een dergelijke wijze in hun atomaire stapeling zijn gerangschikt, dat zij elkaars spiegelbeeld vormen bestaat er een tweelingrelatie (figuur I.3.4.). Het spiegelvlak noemt men tweelingvlak.



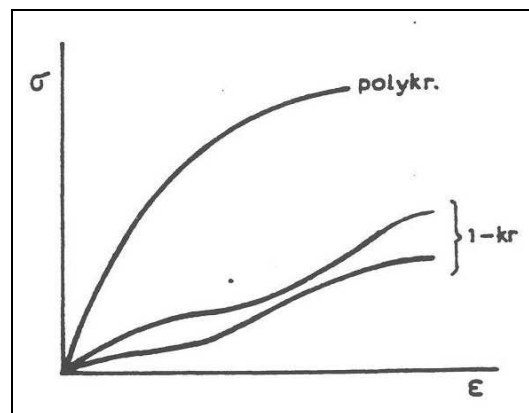
*Figuur I.3.4. Het tweelingvlak. Zie tekst voor verdere verklaring.
N.B.: multiple twinning komt hier niet in tot uitdrukking.*

De open cirkeltjes boven het spiegelvlak geven de oude posities aan en de gevulde cirkeltjes de nieuwe. De tweelingvorming kan worden opgevat als een homogene afschuiving van een deel van het rooster in een richting evenwijdig aan het tweelingvlak. De totale afschuiving is in het geval van vertweeling kleiner dan bij slip. De afschuivingsbeweging der atomen in het stuk van het rooster dat de vertweeling ondergaat, gaat niet voor alle atomen over een gelijke afstand. De verschuiving is evenredig met de afstand tot het tweelingvlak. Het proces verschilt toch van slip. In het eerste geval zijn er wel, in het tweede geval zijn er geen rotaties van het rooster. De deformatie-vertweeling kan vooral optreden in bcc en hcp metalen. In fcc metalen treden wel vertweelingen op na gloeien (annealing twins). Wanneer een tweeling de uitwendige vlakke begrenzingen van het kristal nadert, ontstaat er een helling die microscopisch zeer gemakkelijk waarneembaar is. Twinning treedt vooral op bij deformatie bij lage temperatuur. In fcc metalen treedt mechanische vertweeling bijzonder moeilijk op. Ook de tweelingvorming is gebaseerd op

een beweging van dislocaties. Het zou te ver voeren om uitgebreid op deze zaak in te gaan. Het komt neer op de beweging van een bijzonder type van dislocatie. Afschuiving in het geval van slip komt neer op het doorschuiven van een dislocatie met een Burgers-vector gelijk aan een vector van het rooster.

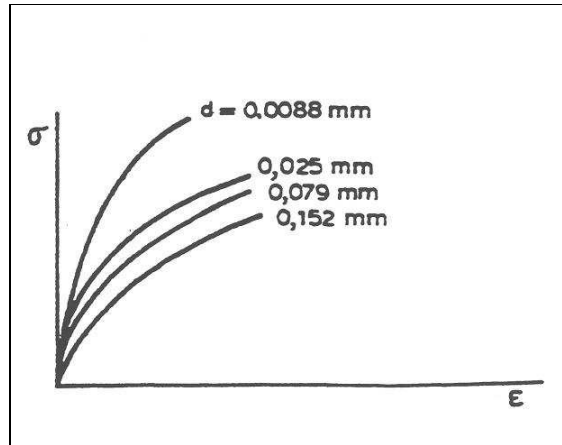
1.3.6. Korrelgrenzen (grain boundaries).

De korrelgrenzen komen in alle polykristallijne materialen voor. Een éénkristal kan in principe volgens één enkel glijstelsysteem deformeren. In polykristallijne materialen bezitten de kristallieten onderling van elkaar verschillende oriëntaties. Er is een sterke samenhang tussen de kristallieten die ook bij de deformatie behouden blijft. De glijdingen in de afzonderlijke kristallieten zijn niet onafhankelijk van elkaar. Verschillende kristallieten kunnen en zullen tijdens het deformatieproces langs verschillende vlakken afglijden op een dusdanige wijze dat de vervormingen in de individuele kristallieten zich het beste bij elkaar aanpassen.



Figuur 1.3.5. Spanningsrecurven van polykristallijne stoffen (polykr.) versus die van 1-kristallen (1-kr.).

De korrels zijn na het deformereren aan elkaar blijven hangen en de korrelgrenzen worden niet geopend. Geldt voor metalen; bij niet-metalen zijn de grenzen zwakker. Onder zeer speciale omstandigheden (langzame deformatie bij hoge temperatuur: kruip) gebeurt dit wel. De spanningsrecurven van polykristallijne stoffen onderscheiden zich van die van 1 kristallen (figuur 1.3.5.).



Figuur I.3.6. Verandering van de yieldcurven met veranderende korrelgrootte.

De sterkte van het materiaal neemt toe als de kristallietgrootte afneemt. Figuur I.3.6. geeft weer hoe de yield-curven veranderen met de korrelgrootte in het geval van de legering Cu-Zn met 30 % Zn. Bij dergelijke experimenten is het van belang dat alle andere parameters constant blijven. De legeringen moeten dezelfde zuiverheidsgraad bezitten. Onzuiverheden segregeren in de korrelgrenzen en beïnvloeden de sterkte van het materiaal ten zeerste, maken het materiaal bros. De yield-stress σ hangt op de volgende wijze van de korrelgrootte van een materiaal af :

$$\sigma = A + \frac{B}{\sqrt{d}} \quad (\text{I.3.2})$$

Deze uitdrukking staat bekend als de **Hall-Petch Relatie**. De aanvankelijk experimentele uitdrukking heeft men een theoretische basis kunnen geven door beschouwingen over de spanningen die gecreëerd worden als dislocaties bij een korrelgrens (of ander obstakel) worden opgehouden. Doordat de dislocaties worden tegengehouden door een korrelgrens, ontstaat er pile-up (opstapeling), zie ook §I.2.3, en figuur I.2.3. Wanneer de spanning aanhoudt sluiten zich steeds meer dislocaties aan in de rij en op een gegeven moment ontstaat er een "superdislocatie" die tegen de korrelgrens aanligt. Het aantal dislocaties dat zich kan aansluiten is afhankelijk van de korrelgrootte. (In een bepaald volume kristalrooster kan maar een eindige hoeveelheid dislocaties aanwezig zijn). Op het punt waar deze "superdislocatie" de korrelgrens raakt is de

spanning geconcentreerd. Men kan afleiden dat de spanning evenredig is met het aantal oorspronkelijke dislocaties in de "superdislocatie". Op een gegeven moment is de spanning te hoog en wordt de korrelgrens doorbroken. Er ontstaat dan een microcrack (zie figuur I.4.). In de formule zijn A en B waarden die afhangen van het model dat voor een bepaald materiaal van toepassing is. A is de schuifspanning die nodig is om andere obstakels te vermijden in combinatie met de minimumspanning om dislocaties in beweging te krijgen. B bevat onder andere de maximale schuifspanning van de superdislocatie, evenals het aantal dislocaties.

1.3.7. Versteving (strain hardening).

Deze methode van versterking wordt toegepast bij zuivere metalen waarvoor geen andere methodes beschikbaar zijn. Door herhaalde deformatie wordt het materiaal harder omdat er steeds meer dislocaties ontstaan die elkaar hinderen in het bewegen tijdens (plastische) deformatie.

Tijdens de koude bewerking worden de kristallen verlengd in de richting van maximale rek; het kristalrooster van de kristallieten neemt een preferente oriëntatie aan; het rooster gaat met een bepaalde richting [uvw] in de trekrichting staan. Men spreekt dan van preferente oriëntatie of van textuur (bij draadtrekken ontstaat de z.g. vezeltextuur). Het materiaal krijgt anisotrope eigenschappen. Een gewalste plaat is wegens de door het walsen geïntroduceerde anisotropie niet geschikt voor het stansen van cupjes: de plaat deformeert niet uniform. In polykristallijne materialen komt alleen fase III van de versteving voor. De wisselwerking tussen slipsystemen van aangrenzende korrels beletten de "easy glide" (fase I) en de deformatie van fase II. In polykristallijne materialen (met hun fase III) zijn dus de twee tegengestelde effecten werkzaam: snelle harding vanwege slip op vele systemen en "strain softening" wegens cross-slip (d.w.z. als schroefdislocaties van het ene slipvlak overgaan op een vlak dat het eerst genoemde vlak snijdt), waardoor ze obstructies kunnen vermijden. De dislocatiedichtheid neemt snel toe met de deformatie.

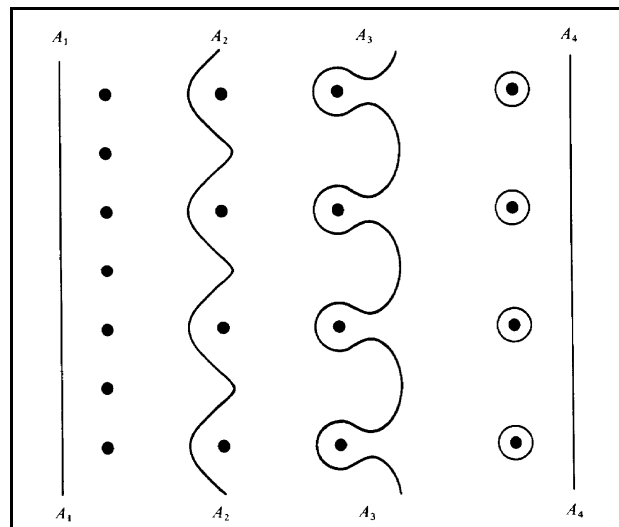
$$\rho = \rho_0 + C \epsilon^\alpha \quad (I.3.3)$$

ρ_0 is de begin-dislocatiedichtheid en C en α zijn parameters.

In metalen: $\rho_0 = 10^5 - 10^7 \text{ cm}^{-2}$. Na hevige koude bewerking ($\epsilon = 1$) wordt het aantal dislocaties ongeveer 10^{12} cm^{-2} . De dislocaties zijn niet homogeen verdeeld maar vormen een celstructuur, zie § I.1.7. De cellen worden kleiner naarmate ϵ toeneemt. De grenswaarde is ca. $1 \mu\text{m}$. Voor de processen, recovery, polygonisatie en kristalgroei die o.i.v. hogere temperaturen optreden wordt eveneens naar § I.1.7 verwezen.

Opgemerkt wordt nog dat de temperatuur, nodig om rekristallisatie te doen optreden daalt als de koude bewerking heviger wordt. Er bestaat echter een minimum rekristallisatie-temperatuur. Grote kristallieten ontstaan bij rekristallisatie wanneer niet een al te grote deformatie is toegepast. Het is zelfs een methode om éénkristallen te maken. Bij het deformeren van de stof neemt de inwendige energie van het rooster toe. Het grootste deel (95 %) gaat echter als warmte verloren. Gedeformeerde materialen hebben meestal een lagere elektrische geleidbaarheid. De chemische reactiviteit neemt echter toe. Zo is de aantasting door corrosie bv. veel groter (spanningscorrosie).

Een ander proces dat bij harding door deformatie optreedt is het Orowan-mechanisme. Hierbij ontstaan dislocatie lussen rond onzuiverheden of uitscheidingen. Figuur I.3.7 laat zien dat een dislocatie die een reeks vreemde atomen of uitscheidingen passeert, hierom dislocatielussen veroorzaakt. Het ontstaan van de lussen verloopt min of meer parallel aan de wijze van dislocatievermenigvuldiging bij het Frank-Read mechanisme. De dislocatielijn wordt gekromd. Zijn lengte neemt toe. Dit kost extra energie. Na passering zijn rondom de vreemde atomen dislocatielussen ontstaan. De dislocatielussen vormen obstakels voor passerende nieuwe dislocaties, waardoor het materiaal harder wordt.



Figuur I.3.7. Als de dislocatielijn (links) de vreemde atomen probeert te passeren, wordt deze gekromd. Tenslotte ontstaan dislocatielussen (rechts) om de vreemde atomen waarna de dislocatie zijn weg vervolgt.

I.4. Theorie van Verkleining van Materialen

1.4.1 Inleiding

Dit onderwerp is grotendeels equivalent aan het onderdeel Size Reduction Theory in de cursus TA3300, (jaar 2003-2004). De tekst is een herziening en bewerking van de originele tekst van Prof. Ir. H.J. Roorda (TU Delft, 1989). Sommige delen van de huidige tekst en sommige figuren zijn ontleend aan het dictaat Materiaalkunde 2 van Prof. dr. ir. A.J. Burggraaf (TU Twente, 1989).

Verkleiningstheorie biedt inzicht in het maal- en breekproces. Dit is van belang voor de voorspelling van energieverbruik, korrelgrootteverdeling, dimensionering van de molen, flowsheet ontwerp, minimalisatie van slijtage van de lining, en proces controle.

Malen en breken is een energie-inefficiënt proces. Gewoonlijk wordt er van uit gegaan dat 0.1 tot 1 procent van de toegepaste mechanische energie omgezet wordt in nieuwe oppervlakte-

energie in het vers gemalen product. Voor een groot deel komt dit omdat er zeer veel energie verloren gaat als warmte. Tenslotte gaat er veel energie verloren met de deformatie van het kristalrooster van de te vergruizen materialen (elastische vervormingsenergie rond dislocaties, pile-up, “stored energy” van dislocatieclusters). Deze deformatie-energie is echter een noodzakelijk energie, omdat zonder deze deformatie de materialen zeer zeker niet zullen breken. Plastische deformatie gaat vrijwel altijd aan breuk vooraf. Bij brosse breuk is de plastische deformatie doorgaans echter zeer klein.

Bij breuk treden diverse processen op, en in de volgende paragrafen zullen we deze wat meer in detail bestuderen. Achtereenvolgens komen de volgende onderwerpen aan de orde:

- elasticiteit,
- afleiding van de Wet van Hooke,
- Poisson’s Ratio,
- brosse breuk en theoretische treksterkte
- de breuktheorie van Griffith,
- een vergelijking van sterkte bij compressie versus sterkte bij rek,
- plastische deformatie en rol van dislocaties,
- mechano-chemische effecten,
- het korrelgrootte-effect en de grind-limit
- voortplanting van brosse breuken,
- zwakheidsverdelingen,
- willekeurige segmentatie van een rechte lijn,
- willekeurige fragmentatie van brosse vaste stoffen
- Schumann’s Theorie,
- vergruizingstappen,
- het zogenaamde mixing concept.

Bij de meeste mathematische relaties in dit hoofdstuk is het eerder de bedoeling om een indruk te geven van wat er speelt, en welke materiaalparameters van belang zijn, dan om een volledig overzicht van de afleidingen te geven. Dit zou voor deze inleidende tekst ook te ver voeren. Het belangrijkste doel van van dit hoofdstuk is om enig inzicht te verschaffen in de materiaalkundige achtergronden van het maal- en breekproces.

Referenties:

Roorda, H.J. (1989) *Dictaat Grondstoffenverwerking II*, TU Delft, Faculteit der Mijnbouwkunde en

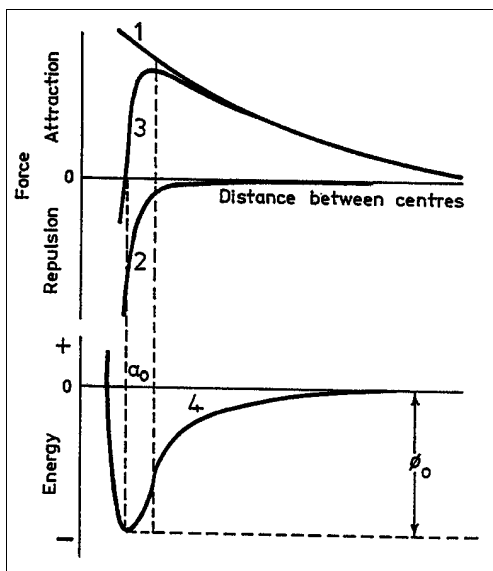
Petroleumwinning, Sectie Grondstoffentechnologie, 166 pp.

Burggraaf, A.J. (1989) *Dictaat Materiaalkunde 2 - Eigenschappen van Materialen*. TU Twente, Faculteit der Chemische Technologie, Sectie Anorganische Materiaalkunde, 123 pp.

1.4.2. Atomaire Binding – Elasticiteit

In deze paragraaf zullen we de essentie van elasticiteit bespreken, en de Wet van Hooke ten tonele voeren. Ook zal de Poisson Ratio worden uitgelegd, en zal de Elasticiteitsmodulus worden uitgelegd.

De short-range attractie kracht tussen twee atomen of moleculen kan worden weergegeven door de curve 1 in figuur 1. De sterke weerstand tegen compressie die begint als de deeltjes in contact komen kan worden weergegeven door de afstotende kracht in weergegeven in curve 2. De resultante van deze curven is de curve 3 in figuur I.4.1. , welke een positie van stabiliteit heeft op afstand a_0 . Elke afwijking van deze positie wordt tegengewerkt door een herstellende kracht. Op vergelijkbare wijze ontstaat bij condensatie van fasen in vloeistoffen of vaste fasen een evenwichtsverdeling van deeltjes op een bepaalde gemiddelde afstand a_0 .

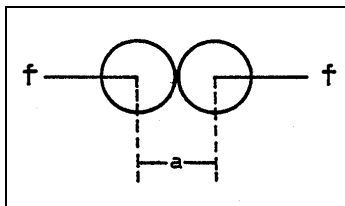


Figuur I.4.1. Krachten en interactie-energie tussen deeltjes.

Inter-atomaire en inter-moleculaire krachten tussen deeltjes waarvan de centra op een bepaalde afstand liggen worden vaak beschreven met een formule van het type:

$$f(a) = Aa^{-n} - Ba^{-m} \quad (\text{I.4.1})$$

met Aa^{-n} is de aantrekking, Ba^{-m} de afstoting en $m > n$.



Figuur I.4.2. Krachten op een atomaire binding.

Het is gebruikelijk om de interactie van moleculen en atomen te beschrijven in termen van energie. Omdat er een hoeveelheid mechanische arbeid verricht wordt ter grootte van $f(a)da$ wanneer de kracht $f(a)$ een afstand da verplaatst wordt langs de richting waarin de kracht werkt, en daar dit equivalent is aan een verandering van energie, kunnen we de energie van interacties van deeltjes $\Phi(a)$ afleiden. We nemen aan dat de deeltjes met een energie van nul beginnen op oneindige afstand. Dan trekken we van deze nulenergie af de arbeid verricht door deze deeltjes als zij bewegen naar diverse afstanden. Dat levert curve 4 in figuur 1, de interactie-energie $\Phi(a)$, door het integreren van vergelijking (1).

We beschouwen nu de mechanische stabiliteit van een vaste stof, wanneer twee gelijkwaardige krachten worden gebruikt om twee atomen uit elkaar te trekken, of om ze tegen elkaar te duwen, zoals in figuur I.4.2. Deze atomen kunnen zowel een geïsoleerd molecuul zijn, of twee buren in een vaste stof. Als $f = 0$, wordt de evenwichtsafstand gegeven door $a = a_0$. Als f klein is, kunnen de atomen een nieuwe evenwichtsafstand a vinden, waarin de atomaire en opgelegde krachten in evenwicht zijn. De verplaatsing u wordt gedefinieerd als;

$$u = a - a_0 \quad (\text{I.4.2})$$

De evenwichtsconditie is:

$$f = \frac{d\Phi(u)}{du} \quad (\text{I.4.3})$$

met $\Phi(u)$ de bindingsenergie bij een verplaatsing. Als f een trekkracht is, is $a > a_0$; als f een compressiekracht is, $a < a_0$

Bij elke verplaatsing u correspondeert een karakteristieke waarde van de kracht $f(u)$, en de deformatie van de binding is reversibel in de zin dat, als de verplaatsing terug komt op een initiële waarde na een verandering, dat de kracht dan ook tegelijkertijd terugkeert naar de oorspronkelijke waarde $f(u)$. Dit zijn de eigenschappen van ideale elastische deformatie. Het bulk elastisch effect van grote vaste lichamen is niets anders dan het verzamelde effect van de individuele deformaties van de binding daarin.

Als de krachten voldoende klein zijn, is de elastische verplaatsing altijd evenredig aan de kracht. Dit staat bekend als de *Wet van Hooke*. De Wet van Hooke volgt uit de volgende 3 zaken:

1. De continue variatie van $\Phi(u)$ met u
2. Het minimum $\frac{d\Phi}{du} = 0$ bij $u = 0$
3. De verplaatsing is klein, dus $u \ll a_0$

Vanwege 1) kunnen we de bindingsenergie uitdrukken als een Taylor-reeks:

$$\Phi(u) = \Phi_0 + \left(\frac{d\Phi}{du}\right)_0 u + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\Phi}{du^2}\right)_0 u^2 + \dots \quad (\text{I.4.3})$$

waarbij Φ_0 gelijk is aan de energie bij $u = 0$, en waar alle differentiaalcoëfficiënten zijn gemeten bij $u = 0$.

Vanwege 2) kunnen we de tweede term uit de reeks weglaten, en vanwege 3) kunnen we alle termen verder dan de derde weglaten. Derhalve:

$$\Phi(u) \cong \Phi_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\Phi}{du^2} \right)_0 u^2 \quad (\text{I.4.4})$$

$$f = \frac{d\Phi(u)}{du} = \left(\frac{d^2\Phi}{du^2} \right)_0 u \quad (\text{I.4.5})$$

Omdat $\left(\frac{d^2\Phi}{du^2} \right)_0$ gelijk is aan de kromming van de Φ - u curve in het minimum, en daarom onafhankelijk is van u , is dit een constante.

We hebben dus: $f \propto u$, dus de *Wet van Hooke*. Indien uitgedrukt in termen van stress (spanning) en strain (vervorming), wordt deze kromming de Elasticiteitsconstante (Elasticiteitsmodulus) van het materiaal genoemd. De waarde is gelijk voor druk en rek, omdat het onafhankelijk is van het teken van u . In eenvoudige gevallen, voornamelijk ionische kristallen en sommige metalen, kan de elasticiteitsconstante worden berekend uit atoombindingskrachten. Voor meer gecompliceerde materialen en structuren is dit een zeer ingewikkelde zaak.

De *Wet van Hooke*² wordt gewoonlijk uitgedrukt als:

$$\boxed{\sigma = \varepsilon E} \quad (\text{I.4.6})$$

Hier is σ de stress (spanning), E de Modulus of Elasticity (Elasticiteitsmodulus), en ε is de strain (vervorming).

² De *Wet van Hooke* is genoemd naar de Britse natuurkundige en astronoom *Robert Hooke* (1635 – 1703). De *Modulus of Elasticity* wordt ook wel *Young's Modulus* genoemd, naar de Engelse natuurkundige *Thomas Young*, 1773 - 1827). De *Poisson Ratio* is vernoemd (evenals de Poisson-verdeling uit de statistiek) naar de Franse wiskundige *Siméon-Denis Poisson* (1781 – 1840).

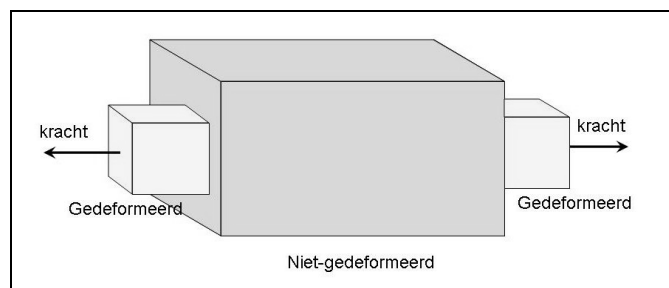
Experimenteel bepaalde waarden van E zijn doorgaans lager dan berekende. Een van de redenen hiervoor is het weglaten (ter vereenvoudiging) van de invloed van laterale contractie (Poisson Ratio). De SI-eenheid van de elasticiteitsmodulus is de Pascal (Pa). Gezien de grote waarden voor vele typische materialen gebruikt men wel Megapascal (MPa) of Gigapascal (GPa). Een aantal voorbeelden worden gegeven in Tabel 1. Materialen met een grote elasticiteitsmodulus hebben vaak ook een hoog smeltpunt.

Tabel 1. Een aantal voorbeelden van Elasticiteitsmoduli (zie referenties). De waarden gelden bij kamertemperatuur.

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

Poisson's 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). Poisson's Ratio wordt aangeduid met het symbool ν . Vervorming door rek wordt als positief beschouwd, vervorming door druk als negatief.

$$\nu = -\frac{\epsilon_{\text{transversaal}}}{\epsilon_{\text{longitudinaal}}} \quad (\text{I.4.7})$$



Figuur.I.4.3. Het concept van Poisson's Ratio: materiaal

dat uitgerekt wordt, wordt niet alleen langer maar ook smaller.

De definitie van Poisson's Ratio bevat een minteken om te bewerkstelligen dat materialen een positieve ratio hebben.

Strain (vervorming) wordt gedefinieerd als de ratio van de verandering in lengte (ΔL) en de originele lengte (L_0). Strain wordt doorgaans met het symbool ε weergegeven.

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L_0} \quad (\text{I.4.8})$$

Materialen worden smaller in doorsnede als ze worden uitgerekt. De reden hiervoor is dat materialen gemakkelijker van vorm veranderen dan van volume.

Als de vervorming van de bindingen te groot wordt, en de hogere termen van de Taylor-reeks (vgl. 3) niet meer mogen worden verwaarloosd, geldt de Wet van Hooke niet meer, en de relatie tussen spanning en vervorming is niet langer lineair. Meestal wordt dit aspect volledig overschaduwd door plastische deformatie. Bij weghalen van de spanning verdwijnt het elastische effect dan uiteraard wel, maar er blijft een permanente vervorming over.

Er zijn variaties van de elasticiteitsmodulus met kristallografische oriëntatie. Voor monominerale materialen, zoals keramiek, kan men gewoonlijk uit de voeten met een gemiddelde elasticiteitsmodulus, omdat de variatie van de modulus van korrel tot korrel een niet-uniform spanningspatroon oplevert. De korrels welke zo georiënteerd zijn dat ze vervormd worden in de richting van een lagere modulus zullen lagere spanningen hebben dan naburige korrels, georiënteerd in de richting van een hogere modulus. Omdat korrels met dergelijke oriëntaties gelijk vervormd zullen worden, zullen sommige korrels plastisch deformereren, of zelfs breken, terwijl dat bij andere nog niet het geval is.

In een multifase systeem is de gemiddelde modulus intermediair tussen de hoge en lage modulicomponenten. Voor een twee fase materiaal, aannemende dat de twee componenten

dezelfde Poisson Ratio en coherentie tussen de korrels hebben, kan men een schatting van de modulus maken:

$$E = E_a V_a + E_b V_b \quad (9)$$

waarbij V_a en V_b de volumefracties van de twee fasen zijn.

Poriën mag men beschouwen als een tweede fase zonder een elasticiteitsmodulus. In dit soort gevallen kan de gemiddelde elasticiteitsmodulus bij porositeiten tot ongeveer 50% berekend worden uit de volgende empirische relatie:

$$E = E_0(1 - 1.9\omega + 0.9\omega^2) \quad (I.4.10)$$

De volumefractie van de poriën is ω en E_0 is de modulus van de niet-poreuze vaste fase van hetzelfde materiaal.

Referenties:

Handbook of Chemistry and Physics, 77ste editie, CRC. Publishing Company (1997)

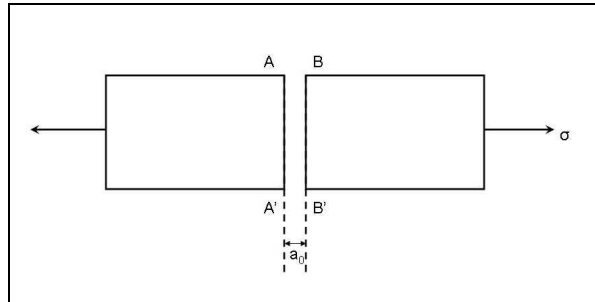
Burggraaf, A.J. (1989) *Dictaat Materiaalkunde 2 - Eigenschappen van Materialen*. TU Twente, Faculteit der Chemische Technologie, Sectie Anorganische Materiaalkunde, 123 pp.

I.4.3. Brosse Breuk, Theoretische Treksterkte

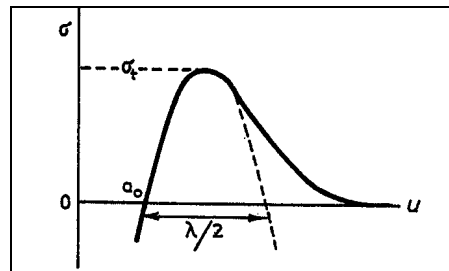
In deze paragraaf zullen we het concept van brosse breuk bespreken, en een relatie afleiden voor de zogenaamde theoretische treksterkte. Bij brosse breuk is er weinig plastische deformatie voordat het materiaal uit elkaar valt. In het extreme (theoretische) geval dat er geen plastische deformatie optreedt, is de elastische energie die opgenomen werd tot aan het tijdstip van breuk, gelijk aan energie van het door breuk nieuw gecreëerde oppervlak.

Om de theoretische treksterkte van een elastisch materiaal te schatten, rekken we een cilindrische staaf met eenheidsdoorsnede uit in de lengterichting met een spanning σ (Figuur 3).

Als σ de ideale sterkte σ_i bereikt, worden de atomaire bindingen tussen twee naburige atoomvlakken AA' en BB' verbroken.



Figuur I.4.4. Staaf van een materiaal met eenheidsdoorsnede wordt uit elkaar getrokken.



Figuur I.4.5. Rekbreuk van een vaste staaf

De atomaire stress-strain curve voor deze bindingen kan benaderd worden met een sinus met golflengte λ , zoals getoond in Figuur 4. Dit is aannemelijk indien we zorgen dat de initiële helling in overeenstemming is met Young's Modulus E van het materiaal en als we zorgen dat de oppervlakte eronder gelijk is aan 2γ . Derhalve:

$$\sigma = \sigma_i \sin\left(\frac{2\pi u}{\lambda}\right) \quad (\text{I.4.11})$$

Hier is u de verschuiving van de evenwichtsverplaatsing a_0 .

Voor kleine vervormingen reduceert vergelijking (I.4.11) tot

$$\sigma \cong \sigma_i \frac{2\pi u}{\lambda} \quad (\text{I.4.12})$$

En gebruikmakend van de Wet van Hooke ($\sigma = E u/a_0$):

$$\sigma_t \cong \frac{\lambda}{2\pi} \frac{E}{a_0} \quad (\text{I.4.13})$$

De oppervlakte-energie wordt gegeven door:

$$\gamma = \frac{1}{2} \int_0^{\lambda/2} \sigma_t \sin\left(\frac{2\pi u}{\lambda}\right) du = \frac{\lambda \sigma_t}{2\pi} \quad (\text{I.4.14})$$

zodat de uitdrukking voor de theoretische treksterkte wordt:

$$\boxed{\sigma_t = \sqrt{\frac{E\gamma}{a_0}}} \quad (\text{I.4.15})$$

Uit Vgl. 15 kunnen we verder ook afleiden dat stoffen met kleine atoomafstanden (kleine waarden voor a_0) en dus hoge dichtheden relatief sterk zijn. Dit zijn meestal materialen/verbindingen met hoge smeltpunten.

Algemeen kan worden gesteld dat voor de meeste vaste stoffen geldt dat:

$$\sigma_t \cong \frac{E}{10} \quad (\text{I.4.16})$$

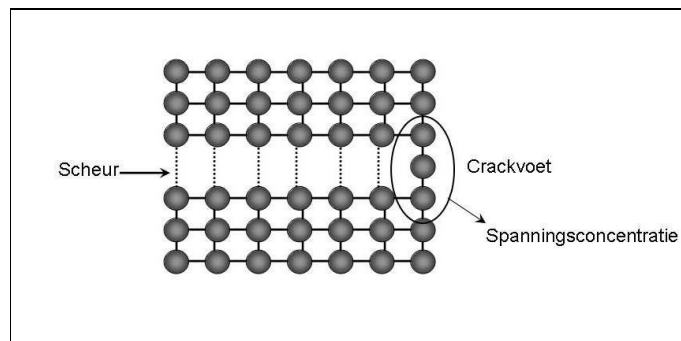
Deze hoge sterktes worden in de praktijk zelden bereikt, en de meeste vaste stoffen bezwijken bij spanningen die 1 tot 3 ordes van grootte kleiner zijn dan de ideale treksterkte. Deze discrepanties kunnen niet worden verklaard met de vele vereenvoudigende aannames die hierboven zijn gemaakt.

1.4.4. Griffith's Theorie voor Brosse Breuk

De belangrijkste bijdrage aan het begrip van het fenomeen brossse breuk werd geleverd door de Britse materiaalkundige A.A. Griffith (1893 – 1963). Hierbeneden wordt zijn theorie over brossse breuk in een notendop gepresenteerd. De diverse mathematische relaties worden hier

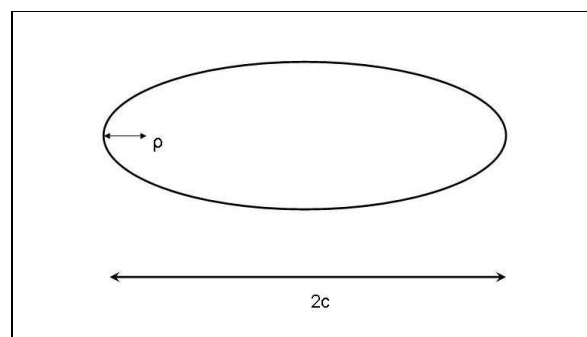
i.h.a. slechts gepresenteerd, niet afgeleid. Complete afleidingen kan men vinden in de handboeken en literatuur over breukmechanica (Eng.: Fracture Mechanics).

Griffith (1921) nam aan dat het verschil tussen de theoretische sterkte en de experimentele resultaten te wijten waren aan de aanwezigheid van zwakke plaatsen (flaws) of kleine submicroscopische scheurtjes, rond welke spanning zich concentreert als de vaste stof onder mechanische spanning wordt gebracht. In figuur 6 is schematisch weergegeven hoe dit voor te stellen. Zonder scheur wordt de totale belasting gedragen door alle atoomrijen (ketens) in de figuur (getrokken en gestippelde lijnen). Bij aanwezigheid van een scheur worden een aantal ketens doorbroken (gestippelde lijnen) en concentreert de spanning uit deze ketens zich op de dichtstbijzijnde, intact gebleven ketens (getrokken lijn). Dit is aan de voet van de crack (einde van de scheur). Deze haarscheurtjes dienen dus als spanningsconcentrators, en initiatie van breuk treedt op aan de uiteinden van deze kleine scheurtjes, waar de concentratie van spanning het hoogst is. Dergelijke scheurtjes worden Griffith Flaws (of Griffith Cracks) genoemd.



Figuur 1.4.6. Schematische weergave van een scheur die optreedt als spanningsconcentrator.

Griffith berekende de spanningsverdeling rond een vlakke elliptische scheur.

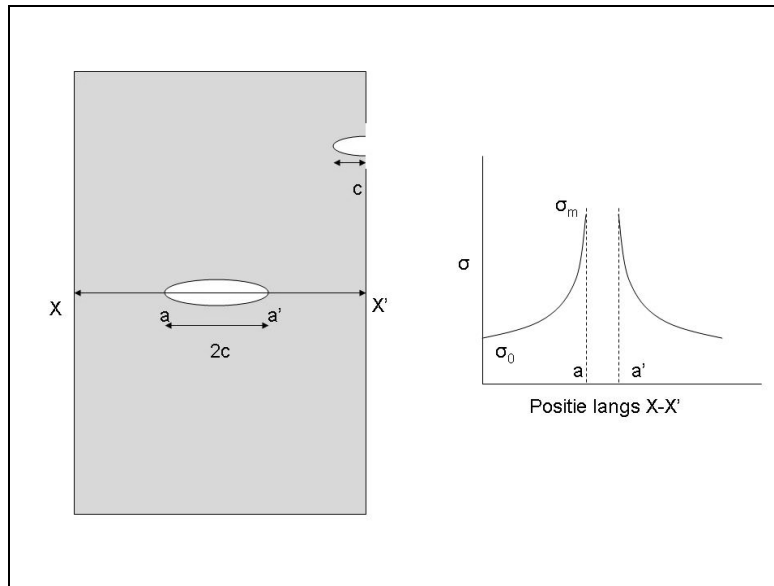


Figuur I.4.7. Elliptische scheur.

Als de hoofdas met lengte $2c$ onderworpen wordt aan een trekspanning a , dan is de maximale trekspanning σ_m aan het eind van de scheur gegeven door:

$$\sigma_m = 2\sigma \sqrt{\frac{c}{\rho}} \quad (\text{I.4.17})$$

met ρ de krommingstraal van het einde van de scheur. De spanning aan de scheurvoet zal toenemen met toenemende scheurlengte c en afnemende kromtestraal ρ . Zodra $\sigma_m > \sigma_t$ kan de scheur zich gaan voortplanten.



Figuur I.4.8. Schematische weergave van de spanningsconcentratie aan de cracktip.

Oppervlaktebreuken met een diepte c leiden tot ongeveer dezelfde spanningsconcentratie als interne breuken met lengte $2c$.

Essentieel in de theorie van Griffith is dat een energiebalansconcept wordt beschouwd. De totale energie U is gelijk aan de som van de elastische energie in de ongebroken toestand minus de energie die vrijkomt als gevolg van de vorming van de scheur, plus de energie nodig om twee

nieuwe oppervlakken (aan weerszijden van de scheur) te maken:

$$U = U_0 - U_c + U_\gamma \quad (\text{I.4.18})$$

Voor een plaat met oppervlak A kan men in de literatuur vinden dat men kan men U_0 kan uitdrukken als:

$$U_0 = \frac{\sigma^2 A}{2E} \quad (\text{I.4.19})$$

De term U_c wordt kan men uitdrukken als:

$$U = \frac{\pi\sigma^2 c^2}{E} \quad (\text{I.4.20})$$

waarbij c de halve (!) lengte van de scheur is (zie figuur I.4.8).

Uit de literatuur volgt dat de oppervlakte-energieterm wordt gegeven door:

$$U_\gamma = 4c\gamma_s \quad (\text{I.4.21})$$

waarbij γ_s de specifieke oppervlakte-energie is en c de halve scheurlengte.

Omdat de specifieke oppervlakte-energie een materiaaleigenschap is, is U_γ evenredig met de cracklengte.

Er volgt dus uit de bovenstaande relaties:

$$U = \frac{\sigma^2 A}{2E} - \frac{\pi\sigma^2 c^2}{E} + 4c\gamma_s \quad (\text{I.4.22})$$

Volgens Griffith (1921) treedt scheurvoortplanting op als $\delta U / \delta c < 0$ (met als kritieke situatie, de scheurinitiatie, $\delta U / \delta c = 0$).

In de kritieke situatie $\delta U / \delta c = 0$ vind men in de literatuur dat

$$\boxed{\sigma\sqrt{\pi c} = \sqrt{2E\gamma_s}} \quad (\text{I.4.23})$$

De rechterkant van deze vergelijking is voor een bepaald materiaal een constante. Deze parameter wordt de *Critical Stress Intensity Factor* genoemd, of ook wel *Fracture Toughness* (breuktaaiheid), doorgaans aangeduid met het symbool K_c . Uit deze relatie kan door herrangschikking worden afgeleid dat:

$$\boxed{G = \frac{\pi\sigma^2 c}{E} = 2\gamma_s} \quad (\text{I.4.24})$$

Deze relatie wordt wel de *Strain Energy Release Rate* genoemd en aangeduid met het symbool G (voor Griffith). De term $2\gamma_s$ wordt ook wel de *Crack Resistance* (scheurweerstand) genoemd. Vgl. 23 kunnen we herrangschikken en schrijven als:

$$\boxed{\sigma_b = \sqrt{\frac{2\gamma_s E}{\pi c}}} \quad (\text{I.4.25})$$

Hierbij is σ_b de zogenaamde *Experimentele Breuksterkte*.

Zowel Fracture Toughness als Crack Resistance zijn parameters die van invloed zijn op de weerstand van een materiaal bij breken, en (op een verder niet genoemde wijze) gerelateerd zijn aan de *Workindex* W_i in de door *F.C. Bond (1952, 1961)* empirisch afgeleide relatie voor de benodigde energie voor een bepaalde verkleiningsstap (*Bond Theory of Comminution*):

$$E = 10W_i \left[\left(\frac{1}{\sqrt{d_{80}}} \right)_{\text{product}} - \left(\frac{1}{\sqrt{d_{80}}} \right)_{\text{voeding}} \right] \quad (\text{I.4.26})$$

De Workindex geeft in feite aan hoe moeilijk of gemakkelijk een materiaal zich laat malen, en het zal duidelijk zijn dat bijvoorbeeld materialen met een grote breuktaaiheid en scheurweerstand een grote W_i zullen hebben.

De theorie van Griffith kan worden toegepast op materialen met weinig of vrijwel geen plastische deformatie. In werkelijkheid zullen veel materialen een zekere plasticiteit vertonen

aan de uiteinden van de scheur. Ook treedt hier vaak microcracking op. Deze zone rond de uiteinden van de scheur wordt doorgaans de niet-lineaire deformatiezone genoemd. Bij de vorming van deze zone moet wat energie verbruikt worden, en hiervoor is in de oorspronkelijke theorie van Griffith geen rekening mee gehouden. Irwin (1948) , en Orowan (1949) hebben de theorie van Griffith aangepast, door een term toe te voegen die de geabsorbeerde energie bij plastische deformatie verdisconteert. Men spreekt dan van *quasi-brosse breuk*. Deze term neemt de vorm aan van een oppervlakte-energie, en wordt aangeduid met het symbool γ_p . De *Strain Energy Release Rate* wordt dan:

$$G = \frac{\pi\sigma^2 c}{E} = 2\gamma_s + 2\gamma_p \quad (\text{I.4.27})$$

en de uitdrukking voor de *Experimentele Breuksterkte* wordt:

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{2E(\gamma_s + \gamma_p)}{\pi c}} \quad (\text{I.4.28})$$

Wanneer de spanning de waarde gegeven door vgl. 28 overschrijdt, zal de breuk zich voortplanten. Hierdoor neemt de cracklengte toe, waardoor de spanning aan de crackvoet weer toeneemt, lokaal de waarde voor σ_b afneemt (c wordt groter), en de scheur zich weer sneller voortplant, etc., etc. Bij brosse breuk kunnen de voortplantingssnelheden in zeer korte tijd een snelheid bereiken die dicht bij de geluidssnelheid ligt.

De theorie van Griffith (en ook de aangepaste theorie) geldt alleen als de plastische deformatie erg klein is. Voor materialen met een hoge mate van plasticiteit (bijvoorbeeld rubber, plastic) zijn voor het bezwijkgedrag andere modellen van toepassing. Deze worden hier niet behandeld.

Referenties:

Griffith A.A. (1921) *The Phenomenon of Rupture and Flow in Solids*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A 221, 163-198.

Irwin G.R. (1948) *Fracture Dynamics*. Fracture of Metals, American Society of Metals, 147 – 166

Orowan, E. (1949) *Fracture and Strength of Solids*. Reports on Progress in Physics, 12, 185 e.v.

Bond F.C. (1952) *The 3th Theory of Comminution*. Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, 193, (5), 484 – 494

Bond, F.C. (1961). *Crushing and Grinding Calculations Part I*, British Chemical Engineering, Vol 6., No. 6, 378 - 385

Bond, F.C. (1961). *Crushing and Grinding Calculations Part II*, British Chemical Engineering, Vol 6., No. 8, 543 – 548

1.4.5. Sterkte bij compressie versus sterkte bij rek

In het bovengaande is er vanuit gegaan dat de mechanische spanning werd opgelegd als *rek* (tensile stress). Bij malen en breken hebben we echter met druk (compressive stress) te maken. Het is een ervaringsfeit dat materialen die bros breken bij rek, vele malen sterker zijn in compressie (druk), doorgaans tien keer sterker. Niet voor niets zijn vele bouwmaterialen (bijvoorbeeld baksteen) brosse materialen. Een van de redenen voor het sterker zijn van brosse materialen in compressie is dat de twee vlakken van een scheur tegen elkaar gedrukt worden, zodat er wrijving optreedt, welke de voortplanting van de scheur tegenhoudt. Tijdens druk bezwijkt een materiaal doorgaans omdat er door niet-homogene belasting rekspanningen ontstaan, ofwel omdat er schuifspanningen (shear stresses) ontstaan (bijv. door afschuiving onder hoeken van 45 graden – Wet van Schmid). Als deze spanningen een kritische waarde te boven gaan bezwijkt het materiaal.

1.4.6. Plastische Deformatie en Rol van Dislocaties, Mechano-Chemische reacties

In een ander deel van deze cursus is behandeld hoe dislocaties, welke verantwoordelijk zijn voor plastische deformatie, kunnen samenvloeien om een microcrack te vormen. De dislocaties moeten daartoe zich opstapelen achter een obstakel (korrelgrenzen, onzuiverheden). Deze pile-up van dislocaties (figuur 9) leidt tot de vorming van een microcrack (figuur 10). omdat de spanning van de superdislocatie, welke vlak bij het obstakel ontstaat door samenvloeien van de individuele dislocaties in de pile-up, de sterkte van het

materiaal overtreft.

Er is een relatie tussen de benodigde spanning om een dergelijke microcrack te bewerkstelligen en de korrelgrootte: de *Vergelijking van Hall-Petch*

$$\sigma = A + \frac{B}{\sqrt{d}}$$

met σ de spanning waarbij breuk optreedt, A en B constanten voor een bepaald materiaal en d de korreldiameter. De *vergelijking van Hall-Petch* kan worden afgeleid uit *dislocatietheorie*. Hoewel de dislocatietheorie op de atomaire schaal speelt, heeft zij zeker relevantie voor de meer grofstoffelijke wereld van het malen en breken:

de $\frac{1}{\sqrt{d}}$ -term uit de *Vergelijking van Hall-Petch* vinden we namelijk ook terug in de empirische formule van *Bond* (vgl. 26):

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



Figuur I.4.9. Pile-up van dislocaties bij een korrelgrens. Onbekend materiaal. Elektronenmicroscopfoto.



Figuur I.4.10. Haarscheurtjes bij doorbraak van een korrelgrens. De enorme pile-up van dislocaties is goed zichtbaar. Foto van etsputten in onbekend materiaal.

Als een scheur ontstaan is in brosse materialen, zijn de mechanische spanningscondities gewoonlijk zodanig dat de scheur zich blijft voortplanten. Er is geen belangrijk energieabsorberend proces zoals de plastische vervorming in ductiele (gemakkelijke plastisch vervormbare) materialen. In taai materialen (materialen met een grote “toughness”) moeten nieuwe scheuren nucleëren elke keer als de breuk een fasegrens overschrijdt. In ductiele materialen is de plastische vervorming, als gevolg van de beweging van dislocaties een mechanisme voor energieabsorptie. Om in deze materialen een breuk zich te laten voortplanten moet steeds energie worden toegevoerd.

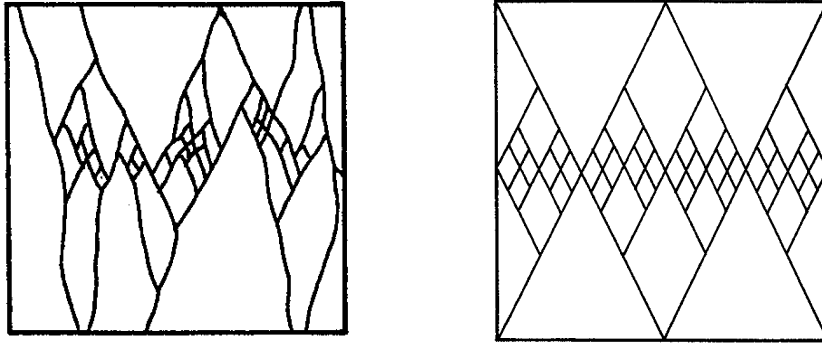
Er is ruimschoots bewijs voor plastisch gedrag van de onder hoge mechanische spanning staande regio's direct aangrenzend aan de breuken. Veranderingen van het kristalrooster en veranderingen van chemische binding zijn goed gedocumenteerd als onvermijdbare effecten van malen. In het bijzonder treden deze neveneffecten op bij het zeer fijn malen. Voorbeelden zijn: de vorming van een glazige of amorfe laag op het oppervlak van deeltjes, ontbinding van gibbsiet, opname van Mg in het kristalrooster van CaCO_3 . Er zijn nog vele andere mechano-chemische reacties. En al deze processen vereisen energie, welke daar eigenlijk niet voor bedoeld is. Het is echter onmogelijk om deze processen te voorkomen.

1.4.7. Korrelgrootte-effect, Grind-limit

Brosse breuk is cataclysmisch, m.a.w. the uitbreiding van een enkele breuk is genoeg om het materiaal te breken. Het is altijd de grootste crack die de zwakste schakel vormt in brossse breuk. Statistisch gezien is er een grotere waarschijnlijkheid dat er al grote scheuren bestaan in grote lichamen dan in kleine. Door de bank genomen breken grote delen van bros materiaal gemakkelijker en bij een lagere spanning dan kleine. Dit statistisch effect heet het *Korrelgrootte-effect*. Aan de andere kant is er door de Wet van Hall en Petch ($\sigma_{breuk} = A + \frac{B}{\sqrt{d}}$) een grens aan de korrelgrootte die men kan bereiken met een specifiek maalapparaat. Namelijk, omdat de spanning voor intragranulaire breuk toeneemt met de reciprook van de wortel uit de (*bij maling afnemende*) korrelgrootte, ontstaat er een punt waarop een korrel zo klein is geworden dat het maalgereedschap (bijvoorbeeld een kogelmolen) niet meer voldoende kracht kan uitoefenen om de spanning benodigd voor intragranulaire breuk (σ_{breuk}) te overtreffen. Verder malen kan dan alleen door meer kinetische energie van de molen over te brengen op de deeltjes. Hiervoor zijn molens van aangepast ontwerp nodig. De deeltjes zullen bij verder malen met het tot dan gebruikte maalgereedschap alleen nog langs elkaar schuren, en verkleining ontstaat dan nog door abbrasie, waarbij waarschijnlijk alleen enkele zeer kleine fragmenten worden geproduceerd. Er is dus sprake van een limiet-waarde van de te bereiken korrelgrootte, de *grind-limit*.

1.4.8. Voortplanting van brossse breuken, breukpatronen, morfologie van breukvlakken

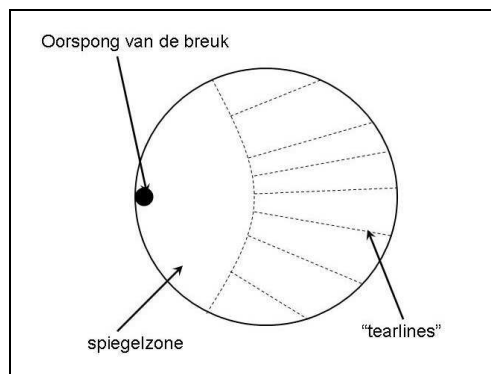
Op het moment dat een brossse breuk zich gaat voortplanten wordt arbeid verricht die uitwendige belasting omzet in kinetische energie. De kinetische energie kan niet sneller toenemen dan de energie die door uitwendige arbeid wordt aangevoerd, en dit zet een limiet aan de snelheid van een elastische breuk.



Figuur I.4.11. breuk van een kubus door drukspanning (links) en de ideale situatie (rechts).

Nadat de primaire crack een bepaalde afstand van zijn bron verwijderd is geraakt, en genoeg snelheid en kinetische energie heeft verzameld, kan de crack nieuwe scheuren laten ontstaan in de spanningsgolf aan de cracktip. Zodoende ontstaat een breukpatroon (figuur I.4.11).

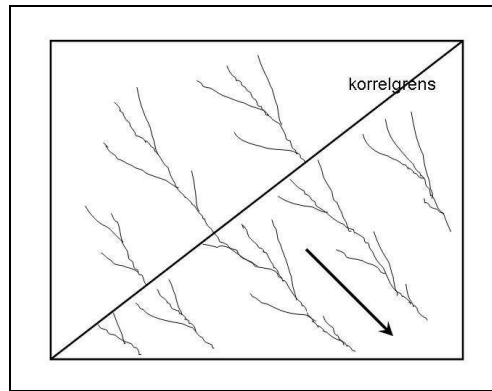
Het brossre breukvlak in glas dat begonnen is vanuit één ernstige crack ziet er gewoonlijk uit als in figuur I.4.12.



Figuur I.4.12. Schematische weergave van het breukvlak van glas.

De crack breidt zich 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 ("tearlines"). In kristallijne materialen treedt breuk meestal op langs bepaalde kristallografische vlakken (spleitvlakken), waarbij de breuk in polykristallijne materialen doorgaans transgranulair is (door de korrel heen). Ook hier treden weer karakteristieke

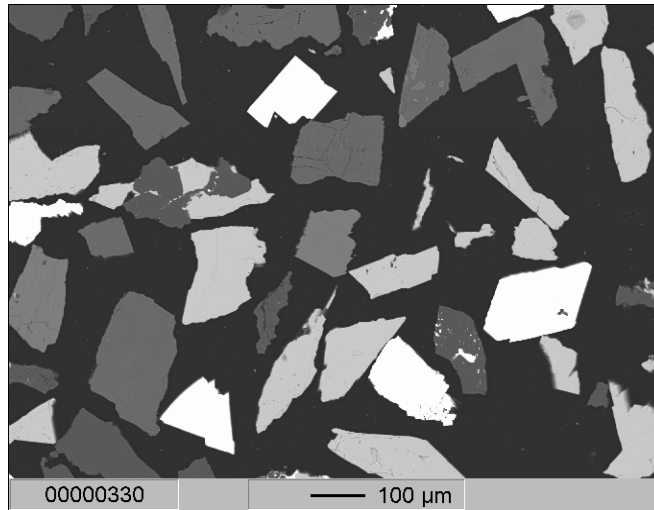
tearlines op (figuur I.4.13).



Figuur I.4.13. brosse breuk in polykristallijn materiaal (schematisch)

Bij iedere korrelgrens passage neemt het aantal lijnen eerst toe, om daarna , als zich samenvoegende riviertjes in een delta, weer af. De ruwheid van het breukvlak neemt toe met toenemende voortplantingssnelheid van de breuk.

Vaak kan men observeren dat splijtvlakken ook een invloed hebben op de geometrie van de gebroken korrels. Bijvoorbeeld bij het malen van loodzinkerts, met sfaleriet (ZnS) en galeniet (PbS) als ertsmineralen ontstaan in een maalstap relatief kleine, equidimensionale galenietfragmenten, omdat galeniet 3 perfecte splijtingen heeft. Sfaleriet heeft echter maar één matige splijting, en bij het malen ontstaan enigszins afgeplatte fragmenten, die bovendien doorgaans wat groter zijn dan de galenietfragmenten. In figuur I.4.14 is te zien dat de doorsneden van de galenietkorrels alle enigszins equidimensionaal zijn, terwijl de sfalerietkorrels, in 3D enigszins afgeplat van vorm, in doorsnede equidimensionale vlakken of langwerpige vormen hebben.



Figuur I.4.14. Elektronenmicroscopfoto van een polijstvlak van gemalen lood-zinkerts. Helder witte, min of meer equidimensionale korrels zijn galeniet. Grijsz korrels, vaak enigszins langwerpige, zijn sfaleriet. Donkere korrels zijn nevengeesteente.

I.4.9. Zwaktezoneverdelingen

Het is gebruikelijk om een onderscheid te maken tussen enkelvoudige breuk, meervoudige breuk, en vergruizing of verpulvering (*comminution*).

Enkelvoudige breuk is gedefinieerd als breuk als gevolg van een extern spanningsstelsel hetgeen onmiddellijk en definitief wordt verwijderd op het moment dat de breuk is geïnitieerd. Meervoudige breuk bestaat uit enkelvoudige breuk van oorspronkelijke lichaam, gevolgd door een sequentie van slechts enkele secundaire breuken, bijvoorbeeld wanneer brokstukken van het originele lichaam met elkaar in botsing komen. Vergruizing/verpulvering (*comminution*) verschilt hiervan in die zin dat de secundaire breuken in een groot aantal herhalende stappen ontstaan.

De distributie functie van de fragmentgrootte, resulterend van één enkele breuk kan worden berekend als bepaalde aannames worden gemaakt met betrekking tot de verdeling van geactiveerde Griffith flaws. Experimentele studies hebben aangetoond dat deze zwaktezoneverdeling een Poissonverdeling is. Om dit waar te laten zijn, moet de verdeling

van de zwaktezones (flaws) willekeurig zijn, zowel individueel als collectief. De positie van een zwaktezone moet dus onafhankelijk zijn van een andere.

1.4.10. Willekeurige segmentatie van een rechte lijn.

Beschouw een rechte lijn van oneindige lengte waarop punten willekeurig zijn verdeeld met een constante verwachte dichtheid van $1/s'$ per eenheidslengte. Kies een segment van de lijn zodat een van de uiteinden samenvallen met een arbitrair punt van de set. Laat dit vanaf dit punt uitgroeien in beide richtingen over een afstand s . De waarschijnlijkheid dat dit segment n punten van de set bevat wordt gegeven door de Poissonwet:

$$P(n) = \frac{1}{n!} \left(\frac{s}{s'} \right)^n e^{-\frac{s}{s'}} \quad (\text{I.4.29})$$

De kans dat geen punten in dit interval vallen is dus:

$$P(0) = e^{-\frac{s}{s'}} \quad (\text{I.4.30})$$

Dit is echter ook de kans dat een arbitrair segment van de lijn, begrensd door twee opeenvolgende punten van de willekeurige set, een lengte s heeft of groter. Een eindig interval L , groot in verhouding tot s' , zal daarom een waarschijnlijke hoeveelheid hele segmenten bevatten die gegeven is door het grootste gehele getal kleiner dan

$$N = \frac{L}{s'} \text{ met } N \gg 1 \quad (\text{I.4.31})$$

Derhalve mag men verwachten dat een groot maar eindig aantal N van segmenten verkregen door het bemonsteren van een oneindige homogene populatie een aantal ν “oversized” segmenten ($>s$) bevat, waarbij ν vrijwel gelijk is aan:

$$\nu(>s) = N e^{-\frac{s}{s'}}$$

Hier is s' te schatten uit vergelijking (I.4.31).

Het voorafgaande is experimenteel bevestigd door Lienau (1936) door het breken van een groot aantal glazen staven. Het lineaire geval is uitgebreid naar een 3-dimensionaal model door Gilvarry en Bergstrom (1961).

Referenties:

Lienau, C.C. (1936) *Random Fracture of a Brittle Solid*. Journal. Franklin Institution, April, May June, 1936, Part I, 485 – 494, Part II, 673 – 686, Part III, 769 - 787

Gilvarry, J.J. and Bergstrom B.H. (1961) *Fracture and Comminution of Brittle Solids (Theory and Experiment)*. Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, 220, 380 – 389.

1.4.11. Willekeurige Fragmentatie van Brosse Vaste Stoffen (3-Dimensionaal)

In het geval van willekeurige fragmentatie van brosse vaste stoffen is het noodzakelijk om aan te nemen dat breuk voortgaat door activering van zwaktezones in het volume van het specimen, in breukvlakken in het specimen, en in de randen die ontstaan door doorsnijding van breukvlakken. Als we aannemen dat alle deeltjes geometrisch gelijkwaardig zijn, kunnen we lengte, oppervlakte, en volume uitdrukken in een lineaire dimensie x . De uitdrukking voor de cumulatieve fractie van het initiële volume, corresponderend aan deeltjes met een grootte tot aan x , wordt dan gegeven als:

$$y = 1 - e^{-\left\{ \left[\frac{x}{k} + \left(\frac{x}{j} \right)^2 + \left(\frac{x}{i} \right)^3 \right] \right\}} \quad (I.4.32)$$

waarbij k , j , en i , proportionele constanten zijn, met betrekking tot de gemiddelde verdeling van rand-, vlak-, en volumezwakheden.

In het lineaire geval, of als de effecten van oppervlakte en volume zwakheden verwaarloosd worden, vereenvoudigd vergelijking 32 tot vergelijking 33.

$$y = 1 - e^{-\left(\frac{x}{k}\right)^\alpha} \quad (\text{I.4.33})$$

Vergelijking 33 is gelijk aan de vergelijking van *Rosin-Rammler*.

Als $x \rightarrow 0$, ontstaat $y = \frac{x}{k}$, hetgeen de vorm is voor $\alpha=1$ van de empirische vergelijking van *Gaudin en Schumann*.

Men moet zich bewust zijn van een verschil tussen de theoretische verdelingen die hier zijn gegeven en de Rosin-Rammler en Gaudin-Schumann relaties. De theoretische vormen zijn afgeleid voor het geval van enkelvoudige breuk. De vergelijking van Rosin-Rammler en Gaudin-Schumann zijn empirisch afgeleid voor vergruizing/verpulvering. Dit uit zich in het feit dat de parameter α in de empirische relaties zelden de waarde één heeft. Verder is α geen materiaalconstante, maar is ook afhankelijk van de gebruikte maalapparatuur.

Hoe dan ook, er zijn duidelijke aanwijzingen dat zowel in enkelvoudige breuk, als in vergruizing/verpulvering de activering van randzwakheden (edge flaws) het dominante mechanisme is in de fragmentatie.

Strikt genomen is vergruizing/verpulvering meer dan een sommatie van een grote hoeveelheid enkelvoudige breuken. Deze moeilijkheid kan men omzeilen door de introductie van het begrip *comminution event* (vergruizingstap).

1.4.12. Theorie van Schumann. Vergruizingstappen (Comminution Events). Mixing Concept.

Schumann (1960) beschouwt het vergruizing/verpulveringsproces als de sommatie van vele individuele vergruizingstappen (*comminution events*). Ter vereenvoudiging, beschouw de vergruizing van 100 volumes van toevoermateriaal met relatief uniforme deeltjes grootte. In een vergruizingstap (comminution event) wordt een hoeveelheid energie δU toegevoerd aan

een enkel deeltje met grootte d en volume δv . Het breken van dit deeltje produceert fijnere deeltjes met een korrelgrootte verdeling vergelijkbaar met de empirische vergelijking van Gaudin-Schumann:

$$y_0 = 100 \left(\frac{x}{k_0} \right)^{\alpha_0} \quad (\text{I.4.34})$$

In deze vergelijking worden y_0 , α_0 , en k_0 gebruikt om het product van een individuele vergruizingstap te karakteriseren, in tegenstelling tot de karakterisatie van het product als geheel. We zullen waarden van x dicht bij de korrelgrootte d van de voeding niet beschouwen. We nemen aan dat de vergelijking alleen toepasbaar is voor de aller-fijnste korrelgroottes.

In 100 volumes van product, is het werkelijke volume van product fijner dan x uit een enkele vergruizingstap, Y , gegeven door:

$$\delta y = \delta v \frac{y_0}{100} = \delta v \left(\frac{x}{k_0} \right)^{\alpha_0} \quad (\text{I.4.35})$$

Het totale volume van materiaal met een grootte kleiner dan x , resulterend uit z vergruizingstappen wordt dan gegeven door:

$$y = z(\delta y) = z(\delta v) \left(\frac{x}{k_0} \right)^{\alpha_0} \quad (\text{I.4.36})$$

Als $\alpha_0 = \alpha$, reduceert deze vergelijking tot de Gaudin-Schumann vergelijking, en

$$z = \frac{100}{\delta v} \left(\frac{k_0}{k} \right)^{\alpha_0}, \quad \text{ofwel} \quad k = k_0 \left(\frac{z(\delta v)}{100} \right)^{-\frac{1}{\alpha}} \quad (\text{I.4.37})$$

Als de verdelingsmodulus van het totale product dezelfde is als die van de vergruizingstap ($\alpha_0 = \alpha$), dan toont vergelijking 37 hoe de groottemodulus van vergruizingproduct k varieert met

de mate van vergruizing, zoals aangegeven door het aantal stappen z , of zoals gemeten door de fractie van de voeding die werkelijk aan vergruizing is onderworpen, $\frac{z(\delta v)}{100}$

De energie die moet worden toegevoerd aan 100 volumes van totale voeding, ofwel $100 U$, is de som van de energietoevoer naar alle vergruizingstappen:

$$100U = z(\delta U) \quad (\text{I.4.38})$$

Als we z elimineren uit vergelijkingen 37 en 38, krijgen we

$$U = \frac{\delta U}{\delta v} \left(\frac{k_0}{k} \right)^\alpha \quad (\text{I.4.39})$$

Als we nu stellen dat $A = \frac{\delta U}{\delta v} k_0^\alpha$ krijgen we

$$U = Ak^{-\alpha} \quad (\text{I.4.40})$$

In deze vergelijking is de constante A dus een karakteristieke constante voor een enkele vergruizingstap. M.a.w. A is het product van de energie per eenheidsvolume $\delta U/\delta v$ en k_0^α , waarbij k_0 en α de twee korrelgrootte verdelingsparameters zijn voor een enkele vergruizingstap.

De hierboven gegeven afleiding was gebaseerd op het model van een vergruizingproces dat een sommatie was van vele in wezen gelijke vergruizingstappen. Om een meer algemene en minder beperkende afleiding te maken, is het nodig om in ogenschouw te nemen dat de meeste in de praktijk voorkomende vergruizingprocessen bestaan uit een hele reeks van vergruizingstappen, met variërende energie-input, variërende korrelgroottes van de voeding, en variërende verdelingen daarvan. Echter, met een gegeven voeding en een en dezelfde set maalapparatuur mag men redelijkerwijze verwachten dat de verschillende vergruizingstappen alle tot een familie behoren, en derhalve alle beschreven zouden kunnen worden door één vergelijking. Gebruikmakend van experimentele gegevens heeft men kunnen aantonen dat diverse soorten vergruizingstappen in een bij elkaar horende groep worden geregeerd door

$$\frac{\delta U_i}{\delta v_i} = A k_i^{-\alpha} \quad (\text{I.4.41})$$

Waarin A en α constanten zijn, die karakteristiek zijn voor de combinatie van materiaal en maalapparaat. We kunnen nu uitrekenen wat de grootteverdeling en het energieverbruik zijn voor het complexe proces, door sommaties te maken over alle stappen. Dat resulteert in vergelijking 41.

Als vergelijking 34 en 41 worden gecombineerd om k te elimineren, verkrijgen we:

$$U = A \frac{y}{100} x^{-\alpha} \quad (\text{I.4.42})$$

Deze vergelijking zegt dat de energietoevoer direct proportioneel is aan het cumulatieve percentage deeltjes dat kleiner is dan een gegeven grootte x . Als men korrelgrootte in millimeter zou uitdrukken kan men de relatie zelfs schrijven als

$$U = A \frac{y_{1\text{mm}}}{100} \quad (\text{I.4.43})$$

Waarbij $y_{1\text{mm}}$ het cumulatieve percentage deeltjes is dat kleiner is dan 1 mm.

Maalbaarheid (*Grindability*) kan nu worden gedefinieerd als $\frac{1}{A}$.

Vergelijking 43 geeft een eenvoudige manier om de maalbaarheid ($1/A$) te bepalen: de hoeveelheid vergruisd materiaal kleiner dan de eenheidsgrootte geproduceerd per eenheid van verbruikte energie.

Wanneer deze definitie van maalbaarheid wordt gebruikt, moet men bedenken dat berekening van de hoeveelheid materiaal kleiner dan eenheidsgrootte extrapolatie van de rechte-lijnpositie in log-log grootteverdelingen vereist.

Volgens het concept van Schumann, kan elk vergruizingproduct beschouwd worden als een

mengsel van tot het eindstadium verkleind materiaal en grover materiaal, dat nog niet compleet vergruisd is. Een vergruizingproces converteert het grove materiaal in het materiaal dat het eindstadium van de vergruizing bereikt heeft, maar het proces verandert niet de deeltjesgrootteverdeling of gemiddelde deeltjesgrootte van het eindstadiummateriaal. Alleen de relatieve hoeveelheden van grof materiaal en eindstadium materiaal veranderen. Het is deze verandering die zorgt voor de continue afnemende gemiddelde deeltjesgrootte van het totale product tijdens vergruizing.

Vergruizing moet derhalve 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 in het eindstadium met materiaal dat nog niet zover verkleind is, of zelfs materiaal dat nog in het geheel niet verkleind is.

Maaltesten op heterogeen materiaal (kwarts, kalksteen, en mengsels van deze) hebben aangetoond dat de kalksteendeeltjes hun eigen typische distributiemodules bezitten, of ze nu alleen, of samen met kwarts worden gemalen. Het zelfde geldt voor de kwarts in dit voorbeeld. Dit is de essentie van Schumann's concept van enkelvoudige vergruizingstappen (*single comminution events*). In figuur I.4.14 is dit voor een lood-zinkerts te zien: de sfaleriet en galeniet (en nevingesteente) zijn *sámen* gemalen, maar vertonen beide hun *eigen* verdeling van grootte en vorm.

Als twee mineralen, A en B , samen worden gemalen in een molen, dan wordt de deeltjesgrootteverdeling van mineraal A in het product gegeven door:

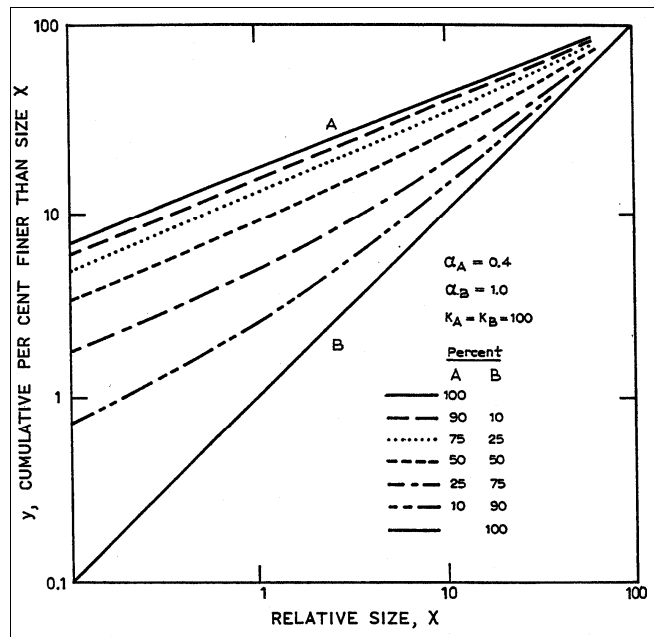
$$y_A = 100 \left(\frac{x}{k_A} \right)^{\alpha_A} \quad (\text{I.4.44})$$

Waarbij de waarde van α_A gelijk is aan de waarde die bereikt wordt door het malen van A alleen, en y_A het percentage A is in het product dat kleiner is dan grootte x . k_A is de deeltjesgroottemodulus. Idem voor mineraal B :

$$y_B = 100 \left(\frac{x}{k_B} \right)^{\alpha_B} \quad (I.4.45)$$

Omdat het product dat voortkomt uit de vergruizing van het mengsel van mineralen gelijk moet zijn aan de som van de deeltjesgrootteverdeling van de homogene mineralen waaruit het mengsel is opgebouwd, is de deeltjesgrootteverdeling van het product met p procent A en $100-p$ procent B gelijk aan:

$$y = p \left(\frac{x}{k_A} \right)^{\alpha_A} + (100-p) \left(\frac{x}{k_B} \right)^{\alpha_B} \quad (I.4.46)$$



Figuur I.4.15. Berekende deeltjesgrootteverdelingen verkregen door het mengen van twee materialen met verschillende distributiecoëfficiënten. (Naar Fuerstenau, 1961)

Referentie:

Fuerstenau, D.W. (1961) *Size distributions resulting from the comminution of heterogeneous materials.*

Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers., 220, 395 – 396

Lijst van gebruikte symbolen in § 1.4.

a_0, a	(evenwichts)afstand van twee atomen
u	verplaatsing
U	energie
$\Phi(u)$	bindingsenergie tussen twee atomen bij een verplaatsing u
f	kracht
σ	spanning (druk of rek) (Eng: stress)
ε	vervorming (Eng: strain)
E	elasticiteitsmodulus, of Young's Modulus
ω	volumefractie van poriën
ν	Poisson's Ratio
λ	golflengte
L	lengte
σ_t	theoretische treksterkte
σ_b	experimentele breuksterkte
γ	oppervlakte-energie
d	korreldiameter, korrelgrootte
A, B	constanten
W_i	Workindex (kWh/ton)
$P(n)$	waarschijnlijkheid
s, s'	afstanden
N, z	aantal
y	(cumulatieve) fractie, of volume
x	een bepaalde deeltjesgrootte
k, k_0, k_A, k_B	deeltjesgrootte modulus
$\alpha, \alpha_0, \alpha_A, \alpha_B$	deeltjesgrootte verdelingsmodulus

Literatuurlijst Deel I

Boeken:

D. Hull, D.R. Bacon (1994) Introduction to Dislocations, 3th Edition, Pergamon Press, Oxford, 257 pp

W.D. Kingery, H.K. Bowen, D.R. Uhlmann (1976) Introduction to Ceramics, Wiley, New York, 1032 pp

Papers:

Bond F.C. (1952) The 3th Theory of Comminution. Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, 193, (5), 484 – 494

Bond, F.C. (1961). Crushing and Grinding Calculations Part I , British Chemical Engineering, Vol 6., No. 6, 378 - 385

Bond, F.C. (1961). Crushing and Grinding Calculations Part II , British Chemical Engineering, Vol 6., No. 8, 543 - 548

Fuerstenau, D.W. (1961) Size distributions resulting from the comminution of heterogeneous materials. Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers., 220, 395 – 396

Gilvarry, J.J. and Bergstrom B.H. (1961) Fracture and Comminution of Brittle Solids (Theory and Experiment). Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, 220, 380 – 389.

Griffith A.A. (1921) The Phenomenon of Rupture and Flow in Solids. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A 221, 163-198.

Lienau, C.C. (1936) Random Fracture of a Brittle Solid. Journal. Franklin Institution, April, May June, 1936, Part I, 485 – 494, Part II, 673 – 686, Part III, 769 - 787

Irwin, G.R. (1948) Fracture Dynamics. Fracture of Metals, American Society of Metals, 147 – 166

Orowan, E. (1949) Fracture and Strength of Solids. Reports on Progress in Physics, 12, 185 e.v.