



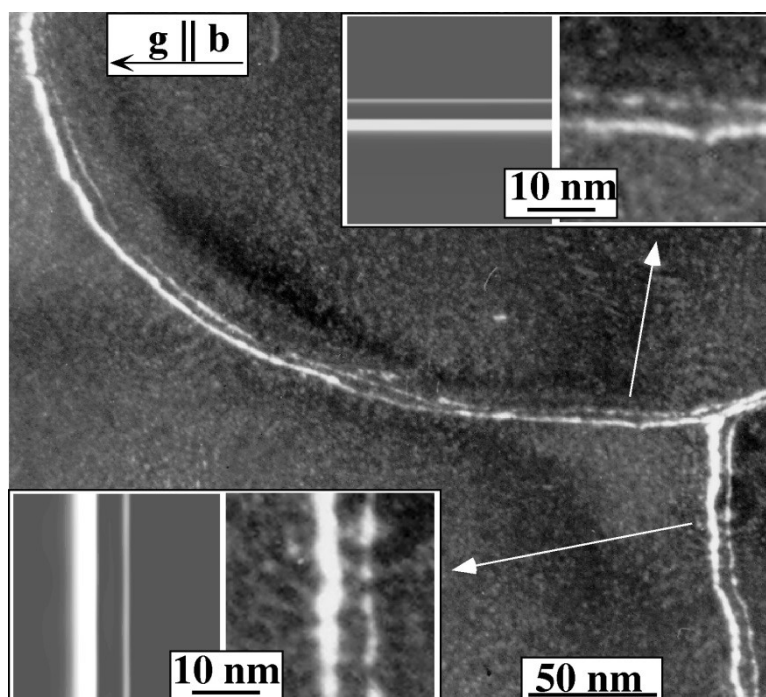
Vysoké učení technické v Brně

# ÚVOD DO TEORIE DISLOKACÍ

Tomáš Kruml

Jean-Pierre Michel

verze 2020





## OBSAH

1. Úvod.....	3
2. Mechanismus plastické deformace.....	4
3. Geometrické vlastnosti dislokací.....	10
4. Pole napětí vytvářené dislokacemi.....	18
5. Energie dislokace.....	21
6. Tah v dislokační čáře.....	23
7. Síly působící na dislokace.....	25
8. Pohyb dislokací.....	26
9. Multiplikace, interakce a anihilace dislokací.....	29
10. Parciální dislokace.....	32
11. Pozorování dislokací.....	35
Shrnutí.....	48
Literatura.....	49
Přílohy.....	50

## 1. ÚVOD

Dislokace představují jednu kategorii poruch krystalové mříže. V konstrukčních materiálech jsou vždy přítomny ve velkých koncentracích a mají vliv na řadu jejich vlastností. Mechanické vlastnosti materiálů jsou dislokacemi ovlivňovány způsobem zcela zásadním.

Plastická deformace kovů a slitin za pokojové teploty je nejčastěji uskutečňována skluzovým pohybem dislokací. Další známé mechanismy plastické deformace, jako je dvojčatění nebo fázová transformace, také úzce souvisí s pohybem dislokací.

Vino Volterra v roce 1907 začal systematicky studovat vlastnosti lineárních krystalových poruch, které nazýval distorze. Termín dislokace zavedl F.C. Frank. Velký pokrok v porozumění role dislokací ve fyzice pevných látek byl učiněn ve třicátých letech, mezi jinými díky Taylorovi a Orowanovi, bez přímého důkazu existence dislokací. Zavedení transmisní elektronové mikroskopie v padesátých letech konečně umožnilo přímé pozorování dislokací, provedené jako prvními Hirschem, Bollmanem a Heidenreichem.

Nejprve odhadneme velikost napětí potřebného ke smykové deformaci dokonalého krystalu a ukážeme nezbytnost zavedení konceptu dislokací (kapitola 2). Poté popíšeme geometrické a krystalografické vlastnosti dislokací (kapitola 3). Krystalová mřížka kolem dislokace je deformovaná a tak vzniká kolem dislokace pole napětí; k vytvoření dislokace je tedy třeba jisté energie (kapitoly 4 a 5). Koncept tahu v dislokační čáře vyjadřuje snahu přírody o minimalizaci energie (kapitola 6). V kapitolách 7 a 8 budeme studovat, jak pohyb dislokací závisí na poli napětí a na teplotě. Hustota dislokací může růst (hovoříme o multiplikaci) nebo klesat (anihilace, ztráta dislokací na povrchu, kapitola 9). Také zjistíme, že jádro dislokace je obecně rozštěpené (kapitola 10). Experimentální metody používané pro pozorování dislokací jsou popsány v poslední kapitole.

Nepodceňujte prosím cvičení, které neslouží jen k procvičování, nýbrž jejich řešení obsahuje často nové a důležité poznatky, které se v hlavním textu již neopakují. Pokud je nevyřešíte sami, podívejte alespoň se na jejich řešení na konci skript.

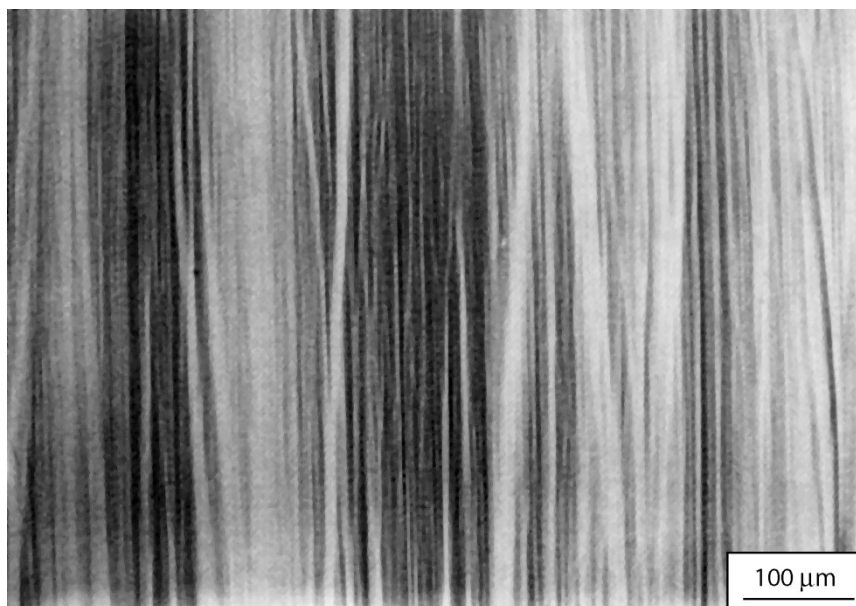
Poznámka : Anglické ekvivalenty jsou psané *italikou*.

## 2. MECHANISMUS PLASTICKÉ DEFORMACE

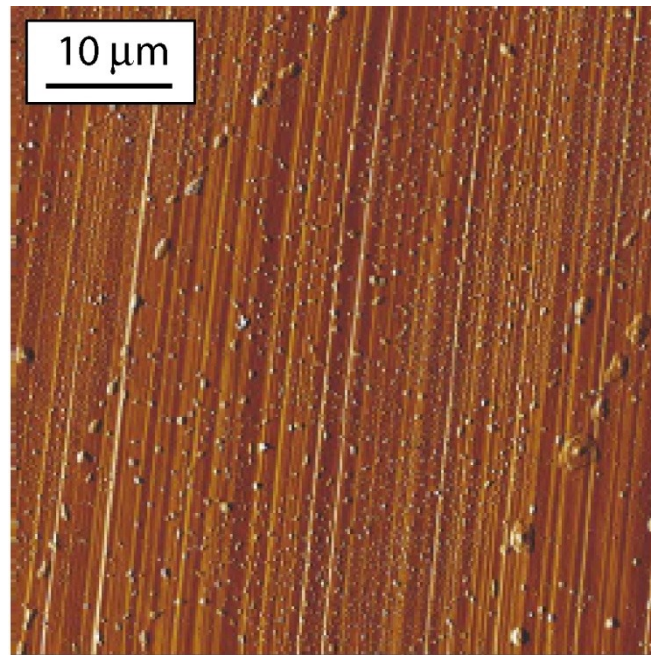
Pozorování povrchu polykrystalického vzorku vyrobeného z plasticky deformovatelného kovu jako je Cu nebo Al, pečlivě vyleštěného a následně deformovaného zkouškou v tahu za pokojové teploty, přineslo tyto dva zajímavé výsledky :

- deformace se uskutečňuje uvnitř zrn (intragranulárně);
- jeden nebo zřídka i více systémů rovnoběžných čar se objevuje uvnitř zrn (obr. 2.1, 2.2). Čáry přitom často sahají od jedné hranice zrna ke druhé (obr. 2.3).

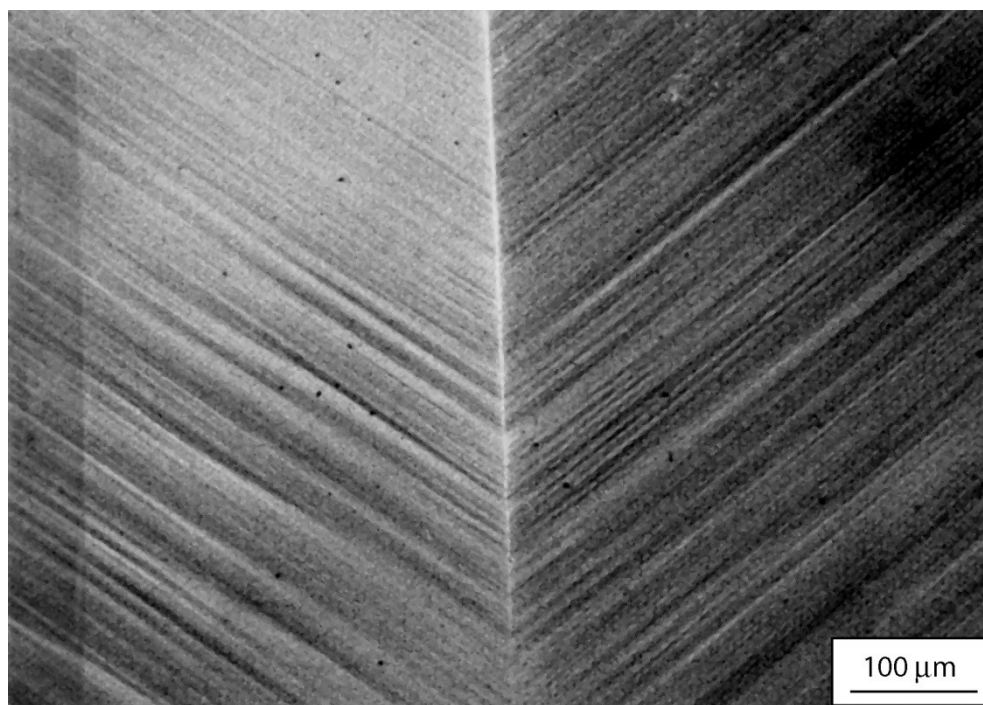
Každá čára je ve skutečnosti ostrý stupeň o výšce jedné nebo více meziatomových vzdáleností vytvořený na povrchu krystalu. Krystalografickým studiem bylo zjištěno, že tyto skluzové čáry (*slip bands*) jsou stopy kompaktních rovin (rovina  $\{111\}$  u fcc,  $\{0001\}$  u hcp, obr. 2.4) nebo rovin hustě obsazených atomy (rovina  $\{011\}$  u bcc,  $\{11\bar{2}0\}$  u hcp apod.). To ukazuje, že plasticita se uskutečňuje smykovou deformací podél hustě obsazených krystalografických rovin, které jsou nazývány skluzové roviny (*slip planes*). K plastické deformaci dochází tehdy, pokud smykové napětí  $\tau$  (*shear stress*) ve skluzové rovině a ve směru skluzu (*slip direction*) dosáhne určité hodnoty nazývané kritické skluzové napětí (*critical shear stress*).  $\tau_c$  je funkcí materiálu, jeho mikrostruktury a experimentálních podmínek ( $T$ ,  $\dot{\epsilon}$ ).



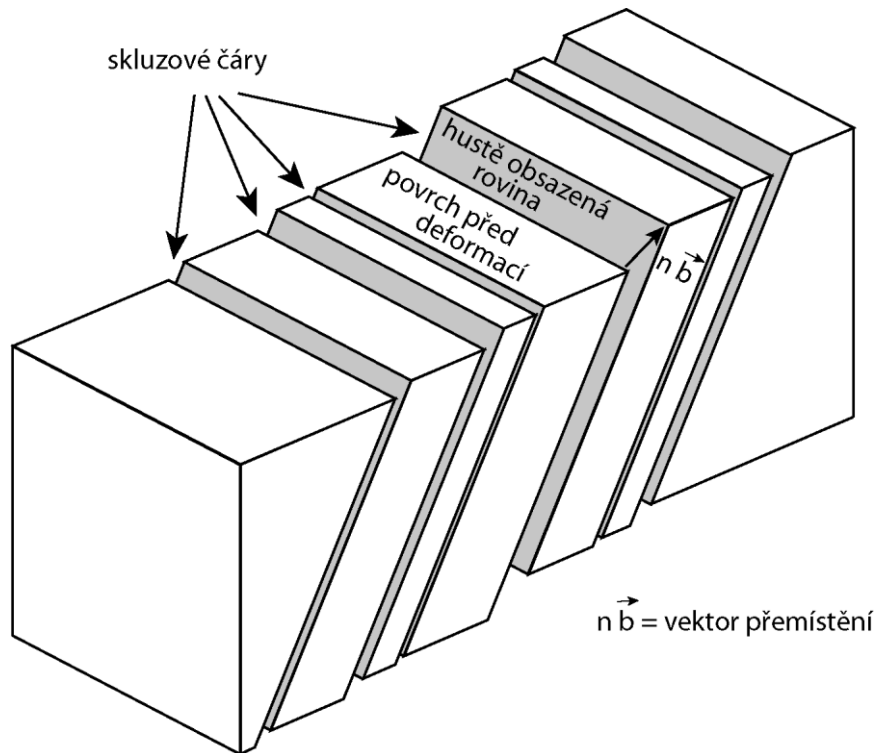
**Obrázek 2.1** Skluzové čáry na povrchu monokrystalu Si, orientovaného pro jednoduchý skluz (*single slip*), světelná mikroskopie (*light microscopy*, J.P. Michel).



**Obrázek 2.2** Skluzové čáry na povrchu monokrystalu Ni<sub>3</sub>Al (jednoduchý skluz, mikroskopie atomárních sil (*atomic force microscopy*), C. Coupeau).



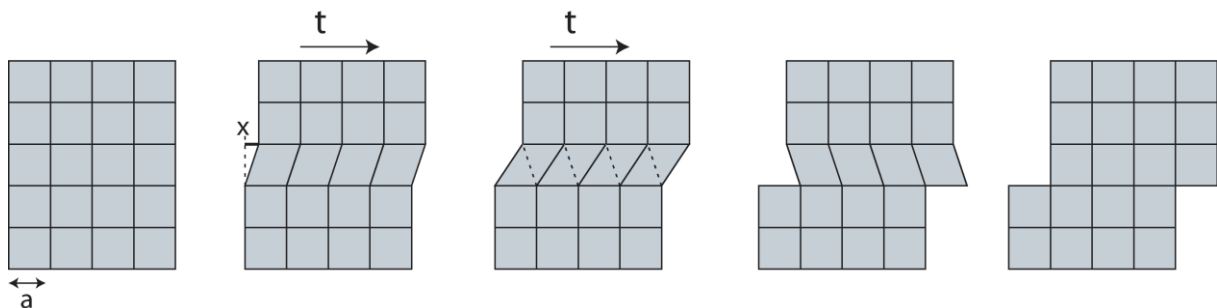
**Obrázek 2.3** Skluzové čáry u bikrystalu křemíku. Oba systémy skluzových čar se stýkají na hranici zrna (*grain boundary*) (světelná mikroskopie, J.P. Michel).



**Obrázek 2.4** Schéma monokrystalu plasticky zdeformovaného zkouškou v tahu. Povrch krystalu, původně hladký, obsahuje několik skluzových čar díky smykové deformaci podél hustě obsazených rovin (znázorněných šedou barvou), ve směru vektoru  $\vec{b}$ , který také souvisí s krystalografií mřížky a nezávisí na vnější geometrii vzorku.

## 2.1 Teoretické napětí nutné ke smyku monokrystalu

Zkusme odhadnout velikost  $\tau_c$  potřebného ke smykové deformaci dokonalého krystalu. Uvažujme pro jednoduchost mřížku kubickou prostou a smykovou rovinu  $\{100\}$  (obr. 2.5).



**Obrázek 2.5** Smyková deformace o velikosti jednoho mřížkového parametru dokonalého krystalu s kubickou prostou mřížkou.

Označme jako  $W(x)$  energii vztaženou na jednotku plochy, nutnou ke smykové deformaci podél osy  $x$ .  $W(x)$  je minimální vždy, když přesunutí  $x$  horní části krystalu vzhledem k dolní je násobek mřížkového parametru:  $x = 0, a, 2a \dots$ , tedy když atomy v mřížce jsou vzájemně v rovnovážné konfiguraci.  $W(x)$  je tedy periodická funkce s periodou  $a$ . Výpočty s využitím kvantové mechaniky jsou využívány pro výpočet  $W(x)$  a teoretické hodnoty napětí nutného pro elementární smykovou deformaci  $\tau_{th}$  pro jednotlivé prvky. Řádově správný odhad  $\tau_{th}$  můžeme získat jednoduchou úvahou. Předpokládejme  $W(x)$  ve tvaru (viz také obr. 2.6):

$$W(x) = W_0 - W_1 \cos \frac{2\pi x}{a}$$

Smykové napětí nezbytné k deformaci  $x$  je rovno směrnicí závislosti  $W(x)$ :

$$\tau(x) = -\frac{dW}{dx} = \frac{2\pi}{a} W_1 \sin \frac{2\pi x}{a} \quad (1)$$

Parametr  $W_1$  můžeme určit v okolí  $x = 0$ , kde můžeme funkci  $\sin$  nahradit jejím argumentem a použít Hookův zákon:

$$\tau(x \rightarrow 0) \cong \frac{2\pi}{a} W_1 \frac{2\pi x}{a} = G \frac{x}{a}$$

odkud určíme  $W_1$ :

$$W_1 = G \frac{a}{4\pi^2} \quad (2)$$

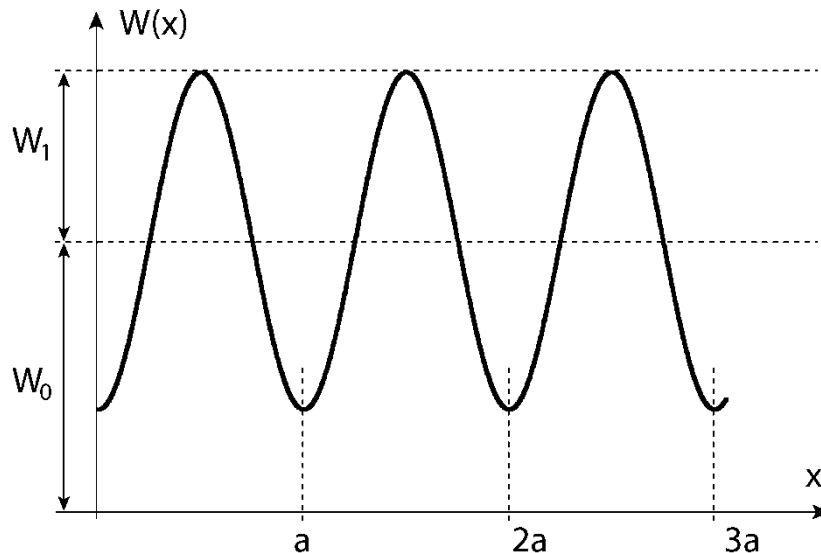
Z rovnice 1 nebo obr. 2.6 vidíme, že  $\tau(x)$  nabývá maximální hodnoty pro  $x = a/4$ . Tato maximální hodnota se nazývá teoretické smykové napětí (*theoretical shear stress*)  $\tau_{th}$ :

$$\tau_{th} \cong \frac{G}{2\pi} = 0.16 G \quad (3)$$

Zpřesněné výpočty, uvažující nejlepší známé aproximace  $W(x)$  poskytují  $\tau_{th}$  zhruba stejné hodnoty jako (3), stejně jako výpočty využívající aparát kvantové mechaniky a nacházející  $\tau_{th}$  nejčastěji okolo hodnoty

$$\tau_{th} \cong 0.10 G \quad (4)$$





**Obrázek 2.6** Průběh konfigurační energie  $W$  mezi dvěma částmi krystalu vzájemně posunutými o  $x$ .

V tabulce 1 jsou uvedeny vypočtené hodnoty  $\tau_{th}$  a hodnoty kritického smykového napětí  $\tau_c$  naměřeného u čistých, vyžíhaných monokrystalů některých prvků. Je zřejmé, že experimentálně zjištěná hodnota  $\tau_c$  je o několik řádů menší než vypočtená hodnota  $\tau_{th}$ . Tento nesoulad dokazuje, že smyková deformace reálných krystalů se neuskutečňuje mechanismem uvažovaným na obr. 2.5.

Kov	$\tau_c$ z experimentu [MPa]	G [GPa]	zlomek $\tau_{th}/\tau_c$ $\tau_{th}$ vypočtené z (4)
$\alpha$ Fe	28	84.7	300
Al	0.9	27.7	3 100
Ni	2.6	78.5	3 000
Cu	1.4	46.4	3 300
Zn	0.2	37.9	19 000
Ti	14	40.6	290
Mg	0.4	17.7	4 400
Be	1.4	150	11 000
Co	6.5	76.3	1 200
Ag	0.4	29.4	7 400
Au	0.5	28.2	5 600
whisker Fe	$1.1 \cdot 10^4$ (lom)	84.7	0.77

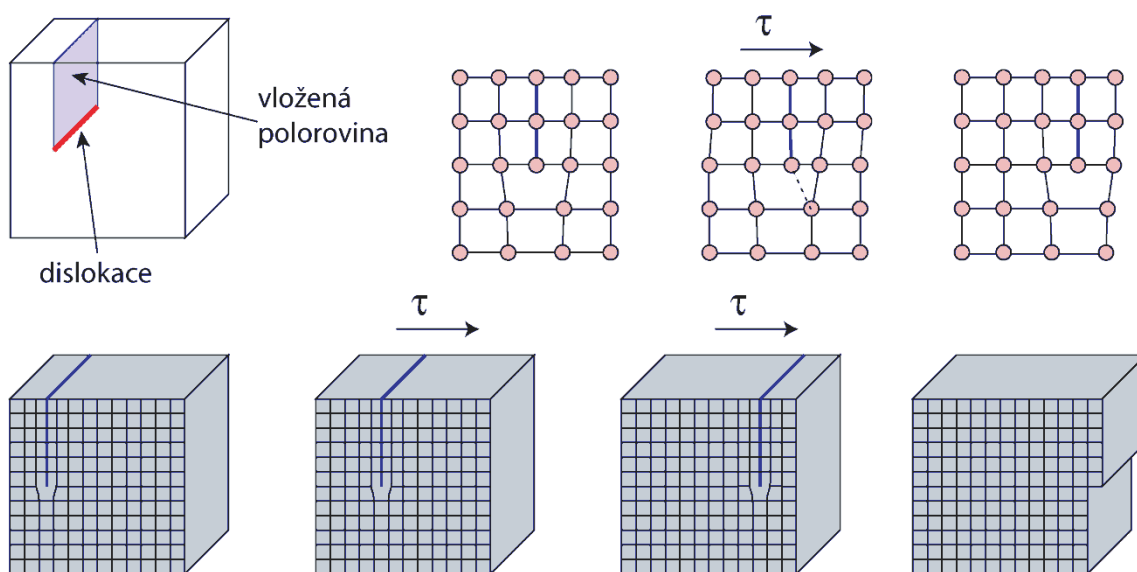
**Tabulka 1.** Srovnání experimentálně změřených (za pokojové teploty) a teoreticky vypočtených hodnot kritického skluzového napětí podle rovnice (4).

Poznámky:

1. Teoretická hodnota kritického smykového napětí je horní hranicí pevnosti materiálu a nemůže být nikdy překročena, protože je dána pevností atomové vazby.
2. Skutečná hodnota napětí, při kterém se reálný krystal začíná plasticky deformovat, závisí na mnoha faktorech (čistota prvku, predeformace, velikost zrna ...) a může se měnit v rozsahu několika řádů (vždy ovšem musí být menší než  $\tau_{th}$ ).
3. Whiskery jsou tenká vlákna speciálně připravená tak, že neobsahují žádné lineární poruchy krystalové mřížky (eventuálně s výjimkou středové šroubové dislokace, kolem které whisker roste). U whiskerů dochází k lomu při napětích srovnatelných s  $\tau_{th}$ . V tabulce 1 je lomové napětí pro whisker Fe dokonce vyšší než  $\tau_{th}$ . To můžeme vysvětlit dvěma způsoby: buď rovnice (4) neplatí příliš dobře pro Fe, nebo experiment nebyl proveden správně.
4. Kromě  $\tau_{th}$  lze také vypočítat napětí, které je zapotřebí k přerušení vazeb jednosměrným tahem. Tato veličina je nazývána ideální kohezní pevnost. Zcela obdobný výpočet jako jsme provedli pro  $\tau_{th}$  vede k odhadu ideální kohezní pevnosti  $\approx 0.1 E$  (např. pro Fe jsou udávány hodnoty nad 20 GPa). Je zajímavé, že napětí potřebné k přerušení vazeb ideálního krystalu je tedy v obou případech rovno asi desetina příslušného modulu.

**2.2 Dislokační skluz**

Představme si krystal, který obsahuje defekt v podobě vložené poloroviny atomů do jinak dokonalé mřížky (obr. 2.7). Okraj poloroviny může být považován za lineární (čarovou) poruchu krystalu – dislokaci (*dislocation*). Při působení smykového napětí se dislokace může krystalem pohybovat. Když dislokace dosáhne povrchu krystalu, vytvoří na něm schod o velikosti jednoho mřížkového parametru, stejně jako v případě obrázku 2.5.



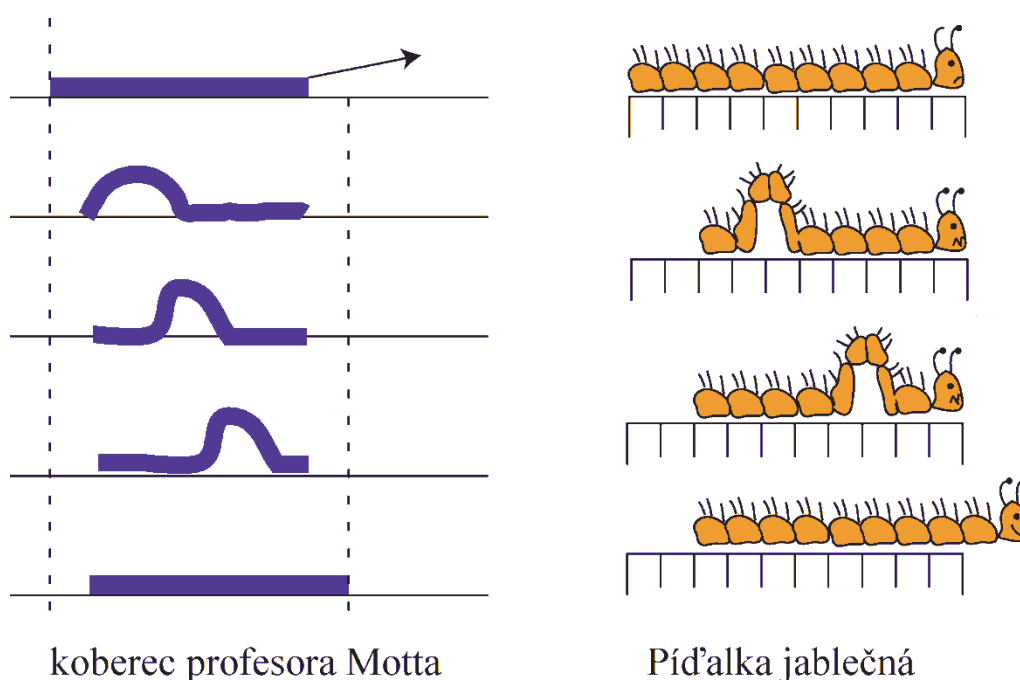
**Obrázek 2.7** Smyková deformace dokonalého krystalu s kubickou prostou mřížkou pomocí skluzu jedné dislokace.

Energie, kterou je nutné vynaložit v daném okamžiku pro pohyb dislokace, je taková, která je nutná k přerušení atomových vazeb podél dislokace a jejich navázání na sousední řadu atomů. Je tedy výrazně nižší, než v případě smykové deformace mechanismem z obr. 2.5, který předpokládá současné přerušení vazeb podél celé skluzové roviny.

Předpoklad, že plastická deformace je způsobena skluzem dislokací, přednesli v roce 1934 Taylor s Orowanem a nezávisle na nich i Polanyi.

### 2.3 Analogie

Je snazší přemístit koberec tak, že přesunujeme záhyb z jednoho konce na druhý, než táhnout celý koberec současně po podlaze. Někteří živočichové používají podobnou techniku při svém pohybu (obr. 2.8).



**Obrázek 2.8** Analogie mechanismu plastické deformace dislokačním skluzem: postupné přemísťování po částech je často snazší než současný pohyb celého předmětu nebo živočicha.

## 3. GEOMETRICKÉ VLASTNOSTI DISLOKACÍ

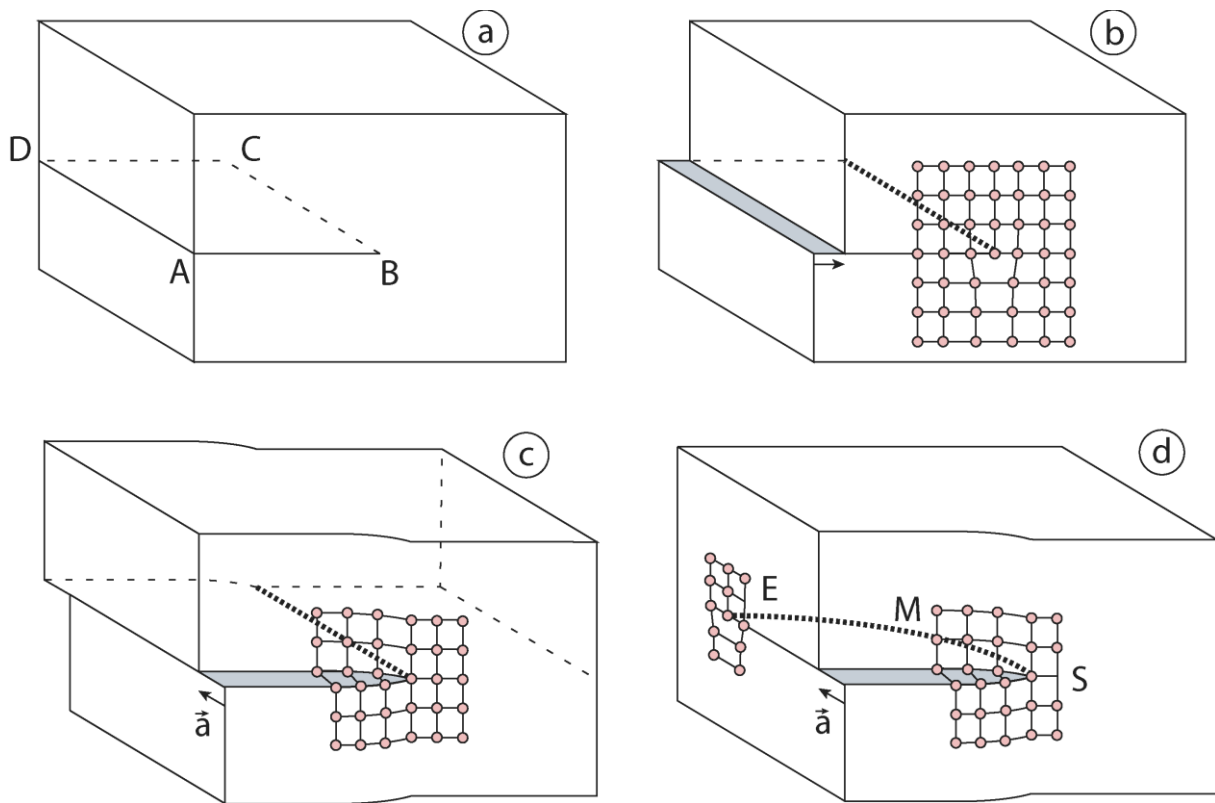
Dislokaci v původně dokonalé krystalové mříži můžeme vytvořit následujícím fiktivním postupem:

- 1) dokonalý krystal nařizneme podél roviny ABCD (obr. 3.1a).
- 2) Přesuneme horní část krystalu vzhledem k dolní části o vektor  $\vec{a}$  tak, jak je znázorněno na obr. 3.1b.
- 3) Atomové vazby jsou znovu navázány podél přímky AD, avšak v okolí přímky BC vznikne defekt v pravidelném uspořádání atomů. Atomy ležící na přímce BC například nemohou navázat jednu atomovou

vazbu. Rozměr tohoto defektu ve směru BC je mnohem větší než ve směrech kolmých k BC; hovoříme proto o lineární nebo čarové poruše. Defekt na obr. 3.1 se nazývá hranová dislokace (*edge dislocations*). Název vznikl proto, že tuto dislokaci si můžeme představit jako hranu vložené atomové poloroviny.

Pokud přemístění  $\vec{a}$  zvolíme jako rovnoběžné s AD (obr. 3.1c), vznikne lineární defekt nazývaný šroubová dislokace (*screw dislocation*), protože v okolí přímky BC vytvářejí atomové roviny šroubovici. Tento typ poruchy předpověděl v r. 1939 Burgers.

Ve skutečnosti nemusí být linie BC přímková. Pokud je zakřivená tak, jako na obr. 3.1d, na jednom okraji krystalu rozeznáme hranový dislokační segment (E) a na druhém okraji šroubový segment (S). Zakřivená část dislokace mezi (E) a (S) se nazývá smíšená dislokace (*mixed dislocation*).



**Obrázek 3.1** Vytvoření dislokace v dokonalém krystalu (fiktivní mechanismus); b) hranová dislokace; c) šroubová dislokace; d) smíšená dislokace.

Poznámka:

Dislokace tedy není reálný objekt, nýbrž pouze lineární porucha v pravidelném uspořádání atomů v krystalové mřížce.

### 3.1 Burgersův vektor a vektor dislokační čáry

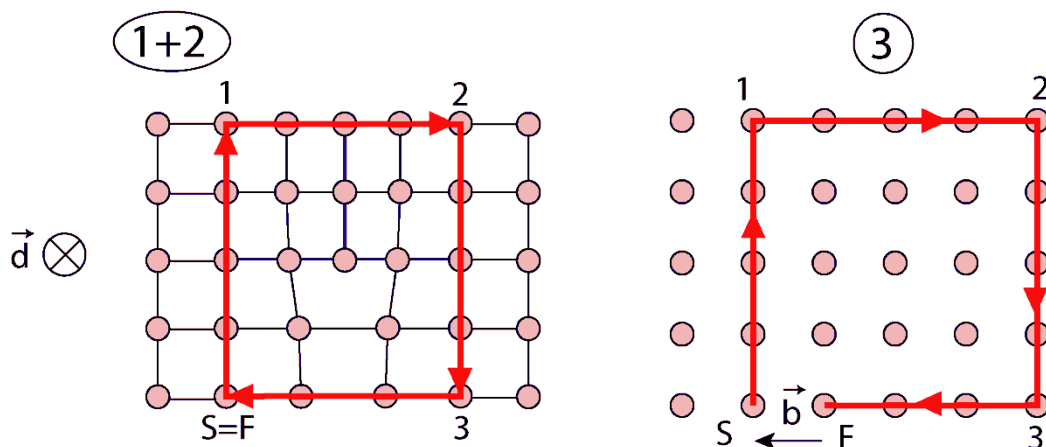
Dislokaci v dané krystalické struktuře plně charakterizují dva vektory: Burgersův vektor  $\vec{b}$  (*Burgers vector*) a vektor dislokační čáry  $\vec{d}$  (*dislocation line*).

Vektor dislokační čáry  $\vec{d}$  je jednotkový a bezrozměrný vektor tečný k dislokaci v daném bodě. Orientaci tohoto vektoru je nutné zvolit (neexistuje pravidlo, podle kterého by bylo možno orientaci tohoto vektoru určit).

Burgersův vektor  $\vec{b}$  je vektor přemístění, jednotka [m]. Nejčastěji se určuje pomocí konvence FS/RH (Finish – Start, Right Hand) tímto způsobem:

- 1) Zvolíme orientaci vektoru dislokační čáry  $\vec{d}$ .
- 2) Zvolíme libovolnou uzavřenou křivku, která spojuje jednotlivé atomy a obchází jádro dislokace v kladném směru vzhledem k  $\vec{d}$  (palec pravé ruky orientovaný ve směru  $\vec{d}$ , prsty ukazují kladný směr – odtud "right hand"); tato křivka se nazývá Burgersův okruh (*Burgers circuit*).
- 3) Zrekonstruujeme zvolenou křivku z bodu 2 v dokonalém krystalu. Počáteční bod označíme S (= "start"). Tento okruh nebude uzavřený a jeho koncový bod označíme F (= "finish"). Vektor  $\vec{FS}$  se nazývá Burgersův vektor (obr. 3.2).

Orientace vektoru  $\vec{b}$  závisí na volbě orientace  $\vec{d}$ ; na obrázcích 3.1b – 3.1d bude vektor  $\vec{b}$  buďto identický s  $\vec{a}$  nebo opačný k  $\vec{a}$ .



**Obrázek 3.2** Určení Burgersova vektoru podle konvence FS/RH. a) uzavřená křivka kolem jádra dislokace, b) stejná křivka zrekonstruovaná v dokonalém krystalu.

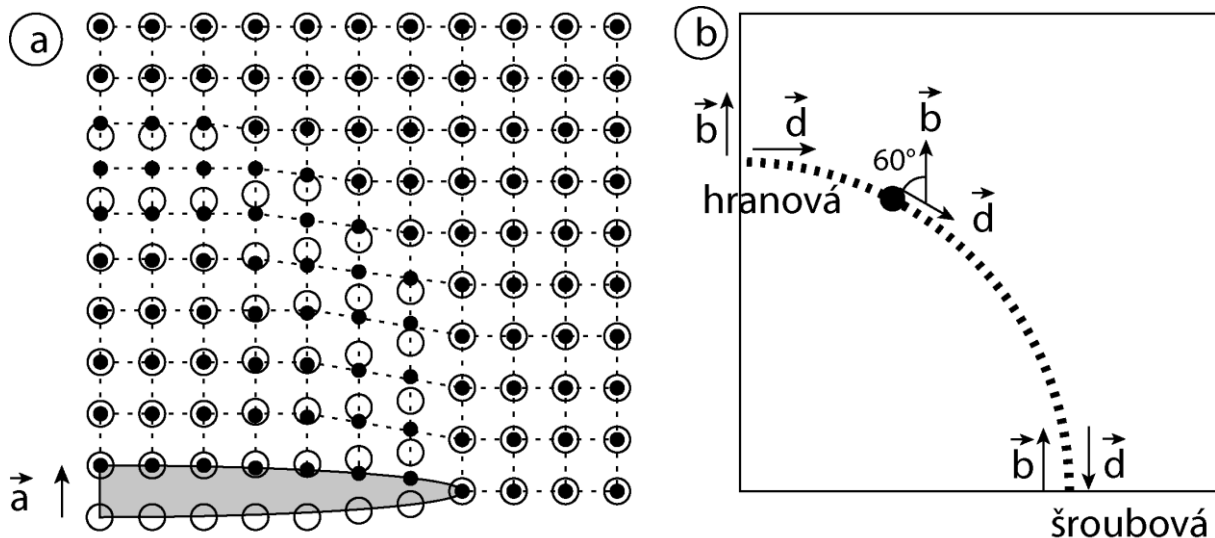
Charakter dislokace (*dislocation character*): nazývá se tak úhel mezi vektory  $\vec{d}$  a  $\vec{b}$  (charakter nabývá hodnot jen mezi  $0^\circ$  a  $90^\circ$ ). Jestliže úhel mezi  $\vec{d}$  a  $\vec{b}$  je např.  $30^\circ$  (nebo  $150^\circ$ ), hovoříme o dislokaci s charakterem  $30^\circ$  nebo o " $30^\circ$  dislokaci".

Skluzová rovina (*slip plane, glide plane*): je to rovina, ve které leží oba vektory  $\vec{d}$  a  $\vec{b}$ .

Dislokační skluz (*dislocation slip* nebo *glide*): je pohyb dislokace, pro který není nutná difuze atomů (viz obr. 2.7).

### Cvičení 1.

1. Na obr. 3.2 ověřte, že orientace  $\vec{b}$  bude opačná, pokud zvolíme opačnou orientaci vektoru  $\vec{d}$ .
2. Ověřte, že hranová dislokace (obr. 3.1b nebo obr. 3.2) má charakter  $90^\circ$  a že šroubová dislokace (obr. 3.1c) má charakter  $0^\circ$ .
3. Nakreslete dislokaci na obr. 3.1d při pohledu shora a najděte dislokační segment s charakterem  $60^\circ$  (řešení obr. 3.3b).
4. Prostudujte obr. 3.3a. Ověřte, že :
  - v každém sloupci je stejný počet atomů v horní i spodní vrstvě,
  - přemístění atomů horní vrstvy je vždy rovnoběžné s vektorem  $\vec{a}$ ,
  - ve směru rovnoběžném s  $\vec{a}$ , horní vrstva je deformovaná v kompresi a spodní vrstva v tahu (orientace  $\vec{d}$  libovolná),
  - vektor dislokační čáry je kolmý na  $\vec{a}$  v případě hranové dislokace, paralelní s  $\vec{a}$  pro šroubový segment a leží mezi těmito dvěma extrémy pro smíšenou dislokaci.



**Obrázek 3.3** a) Dislokace z obr. 3.1d při pohledu shora. o : atomy z atomové roviny pod skluzovou rovinou, ve které leží dislokace, • : atomy z horní vrstvy. b) Schématický náčrt dislokace.

### 3.2 Vlastnosti vektorů $\vec{d}$ a $\vec{b}$

#### a) dislokační čára

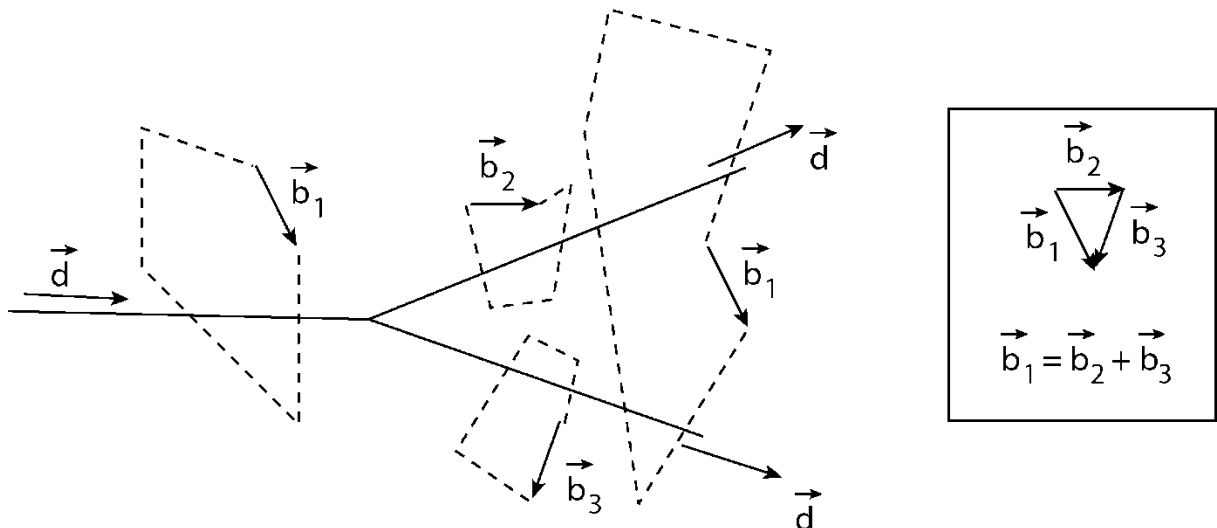
Dislokace nemůže mít počátek ani konec uprostřed krystalu. Dislokace může končit (začínat) na:

- povrchu krystalu
- hranici zrna
- precipitátu, vměstku, kavitě apod.
- jiné dislokaci
- může vytvářet uzavřenou dislokační smyčku.

#### b) Burgersův vektor

- $\vec{b}$  je stejné podél celé dislokace a nezávisí na zvoleném Burgersově okruhu.
- Jestliže  $\vec{b}$  je vektor spojující dva uzlové body krystalové mřížky, mřížka po průchodu dislokace zůstává nezměněná. Taková dislokace se nazývá úplná dislokace (*perfect dislocation*).
- Jestliže  $\vec{b}$  není vektorem spojujícím dva uzlové body, atomy v poloprostoru nad skluzovou rovinou nejsou na stejných místech před a po průchodu dislokace (připomínáme, že  $\vec{b}$  je relativní přemístění částí krystalu pod a nad skluzovou rovinou). Porucha v pravidelném uspořádání atomů leží v rovině skluzu a je planární (rovinná); nazývá se vrstevná chyba (*stacking fault*). Takové dislokace se nazývají částečné nebo parciální (*partial dislocations*) a jejich pohyb je energeticky náročnější než pohyb úplných dislokací, protože k vytvoření vrstevné chyby vznikající při pohybu je třeba dodatečné energie.
- Pokud se jedna dislokace rozštěpí na dvě (anebo z opačného pohledu, když dvě dislokace zrekombinují na jedinou), Burgersův vektor se zachovává (obr. 3.4).
- Pokud Burgersův okruh obchází více dislokací, jejichž vektor dislokační čáry je orientovaný do stejného poloprostoru, výsledný vektor  $\vec{b}$  je součtem  $\vec{b}_i$  jednotlivých dislokací (obr. 3.4). Toto pravidlo je zvykem definovat jiným způsobem: součet Burgersových vektorů dislokací stýkajících se v jednom uzlu je nula, pokud všechny  $\vec{d}_i$  směřují směrem do uzlu:

$$\sum \vec{b}_i = 0$$



**Obrázek 3.4** Při dislokačních reakcích se Burgersův vektor zachovává.

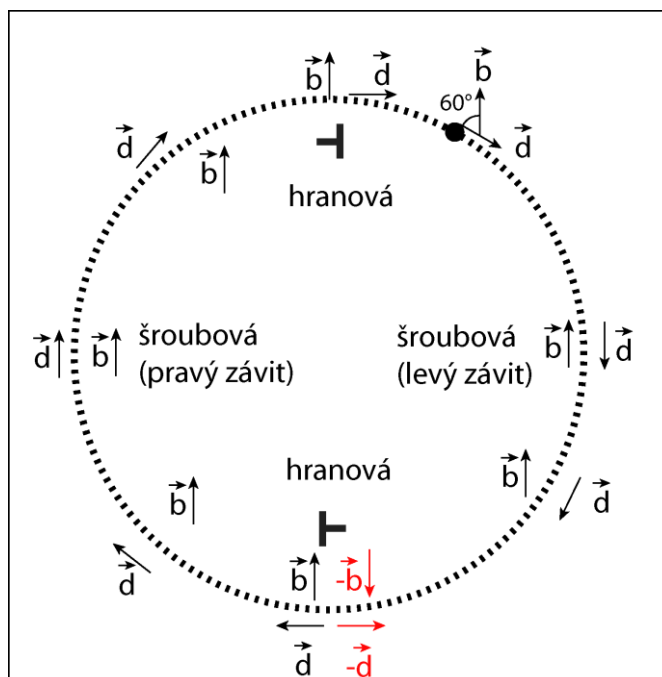
### 3.3 Skluzová a prizmatická dislokační smyčka

Na obr. 3.5 je ještě jednou znázorněna dislokace, kterou jsme již viděli na obr. 3.1d a 3.3, tentokrát jako uzavřená smyčka uprostřed krystalu. Z vlastností  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  uvedených výše vyplývá, že:

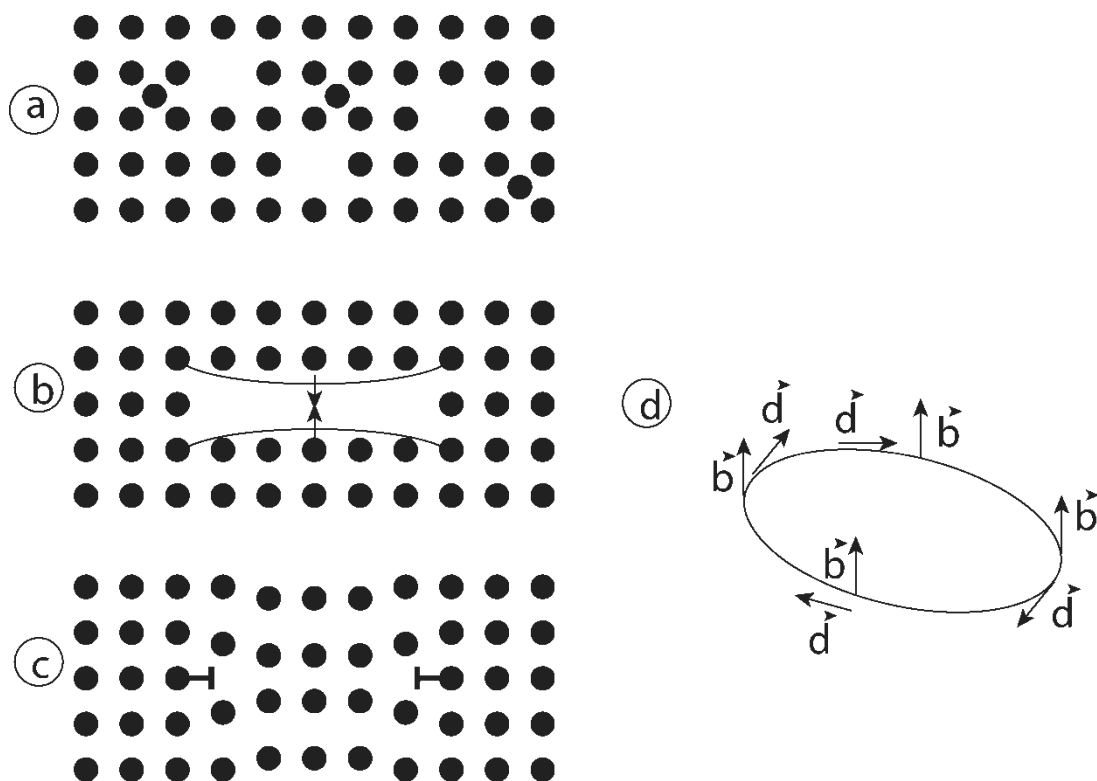
- šroubový segment, u něhož jsou orientace  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  shodné, tvoří pravotočivý závit (viz také obr. 3.1c), a segment s antiparalelními  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  závit levotočivý,
- dislokace leží v rovině, ve které leží i  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$ , každá část dislokace se tedy může v této rovině pohybovat skluzem a celá dislokace se nazývá skluzová dislokační smyčka (*glide dislocation loop*). Pokud na smyčku působí smykové napětí, smyčka může ve skluzové rovině expandovat (anebo se smršťovat, podle orientace smykového napětí).
- polorovina, která vytváří hranovou dislokací, je pro oba hranové segmenty vložena z opačných stran. Je to díky tomu, že vektor  $\vec{d}$  je pro oba segmenty orientován opačně. Pokud bychom zvolili pro oba segmenty stejně orientovanou  $\vec{d}$ , měly by opačné vektory  $\vec{b}$ .

Jedna z možností, jak může dislokační smyčka vzniknout v dokonalém krystalu, je uvedena na obr. 3.6. Taková dislokační smyčka se nazývá vakantní (nebo intersticiální) prizmatická smyčka (*prismatic loop*). V každém jejím bodě je  $\vec{b}$  kolmé k  $\vec{d}$ , smyčka má tedy po celém svém obvodu hranový charakter. Může se pohybovat skluzovým pohybem ve směru  $\vec{b}$  po válcové ploše a přemísťovat tedy vzájemně vnitřní atomy válce o  $\vec{b}$  vzhledem k atomům vně válce. Pokud tato smyčka vyjde na dokonale vyleštěný povrch krystalu, vznikne na něm kruhový stupeň o výšce  $\vec{b}$ .





**Obrázek 3.5** Skluzová dislokační smyčka.

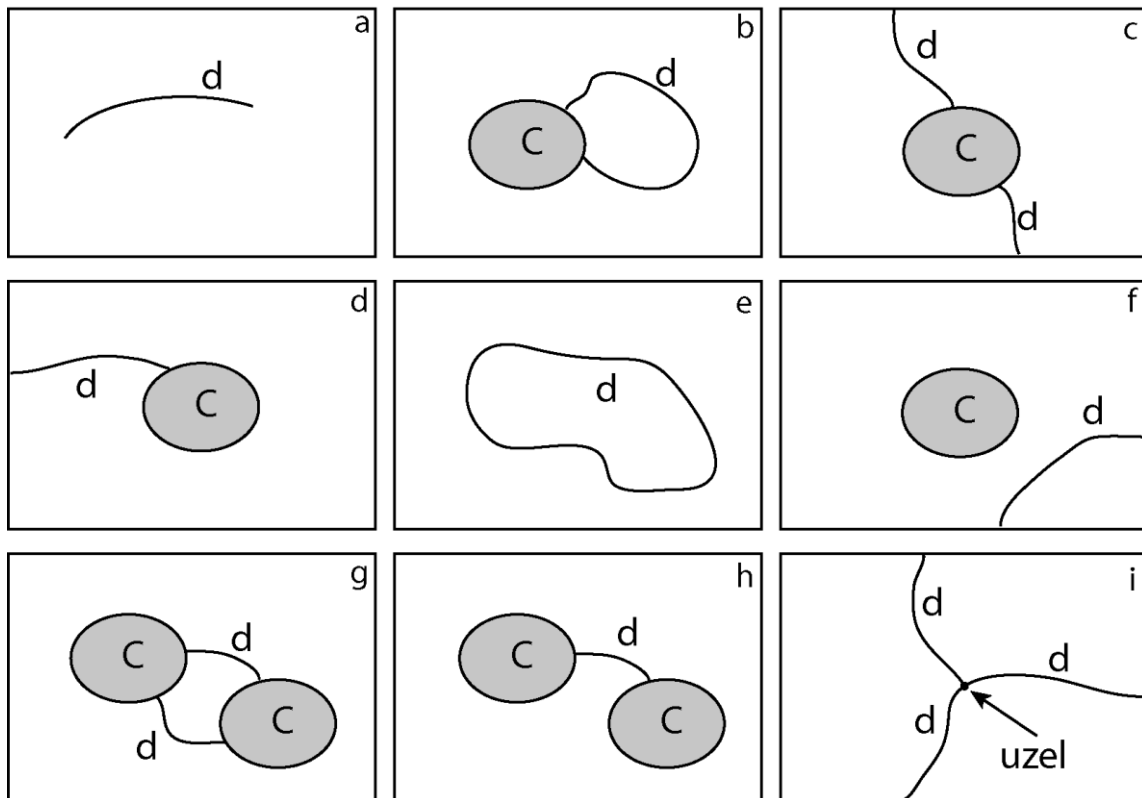


**Obrázek 3.6.** a) Vlivem tepelné energie (= kmitům mřížky) v každém krystalu vznikají vakance a intersticiály. b) Tyto bodové poruchy mohou migrovat pomocí difuze krystalem a mohou tvořit shluky. c) Pokud vznikne větší shluk vakancí v jedné krystalografické rovině, takováto kavita se může zborstit a vytvořit prizmatickou dislokační smyčku. d) Tato smyčka má po celém obvodu hranový charakter.

Poznámka: Dislokační smyčka, která by měla po celém obvodu šroubový charakter, nemůže existovat.

Cvičení 2:

Které konfigurace z obrázků 3.7a-i jsou možné a které ne? C je kavita (nebo precipitát), d je dislokace, okraje obdélníků jsou okraji krystalů (nebo hranice zrn). Žádná dislokace nepokračuje nad nebo pod rovinu papíru. Pravidla uvedená výše nestačí k vyřešení všech obrázků. Je navíc potřeba se zamyslet, jestli je možné vytvořit znázorněnou konfiguraci přerušением vazeb ideálního krystalu a přesunutím částí krystalu, případně expanzí dislokace z bodového zdroje.



**Obrázek 3.7** Které konfigurace jsou možné?

## 4. POLE NAPĚTÍ VYTVOŘENÉ DISLOKACÍ

Z obrázku 3.3 je zřetelné, že atomy v okolí jádra dislokace jsou přemístěny ze svých rovnovážných mřížkových poloh dokonalého krystalu, že vrstva nad skluzovou rovinou je zdeformována v kompresi a vrstva pod skluzovou rovinou v tahu. Dislokace tedy ve svém okolí způsobuje přesunutí atomů, deformaci materiálu a vznik pole napětí.

V klasickém přístupu (např. "bible dislokací", kniha *Theory of dislocations*, autoři Hirth & Lothe), se používají rovnice odvozené pomocí elasticity kontinua, tj. stejný přístup jaký je používán u typických úloh teorie pružnosti. Bezpochyby je tento přístup dosti odvážnou aproximací skutečnosti, protože zanedbáváme existenci jednotlivých atomů a považujeme materiál za homogenní (a ještě hůře, často i izotropní) kontinuum. Tento přístup také předpokládá, že deformace jsou malé, což je pravda jen v dostatečné vzdálenosti od dislokace. Je proto zřejmé, že v blízkém okolí dislokace tento přístup nelze použít. Srovnání výpočtů pozic atomů pomocí elasticity kontinua a experimentálního pozorování jejich skutečných poloh metodou HR TEM (high resolution transmission electron microscopy) ukazuje, že přesnost výpočtů je (možná až překvapivě) dobrá až do blízkosti 2-3 meziatomových vzdáleností od dislokace. Pomyslný válec okolo dislokace, uvnitř něhož elasticita kontinua nelze použít, se nazývá jádro dislokace (*dislocation core*) a jeho poloměr je často volen jako  $3|\vec{b}|$  nebo dokonce jen  $|\vec{b}|$ .

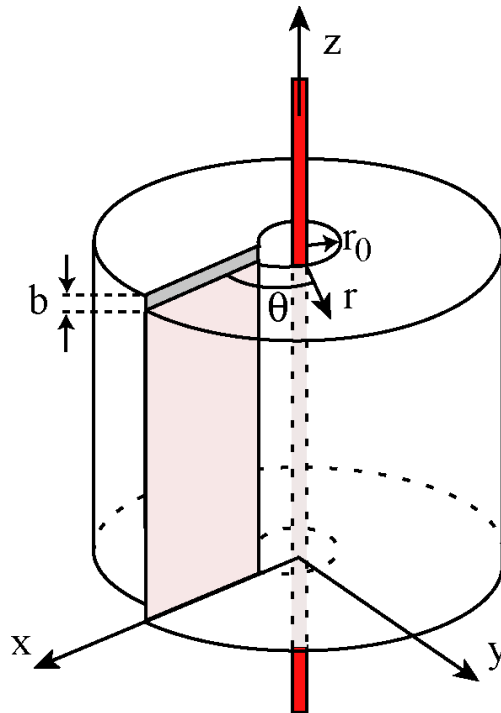
Je možné použít komplikovanější přístupy, které se fyzikálně lépe blíží popisované realitě. Tzv. molekulární dynamika (*molecular dynamics*) považuje atomy za pevné koule (zanedbává tedy strukturu atomu – jádro a obal) a počítá interakce mezi atomy na základě meziatomového potenciálu a Newtonovské mechaniky (síla =  $-\text{grad}$  potenciálu). Výsledky jsou silně závislé na volbě potenciálu, který je a priori neznámý.

Je také možné použít kvantovou mechaniku a počítat vlnové funkce a pravděpodobnosti výskytu jednotlivých elektronů a jader pomocí Schrödingerovy rovnice; tento přístup je nazýván "ab initio" nebo "výpočty z prvních principů". Je nutné řešit soustavu diferenciálních rovnic pomocí výkonných počítačů (stejně jako v případě molekulární dynamiky).

V těchto skriptech budeme pochopitelně používat pouze přístup elasticity kontinua.

### 4.1 Šroubová dislokace

Uvažujme přímkovou šroubovou dislokaci a zvolme si osu z rovnoběžně s dislokací, tedy  $\vec{d} = [001]$  a  $\vec{b} = [00b]$  (obr. 4.1). Složky vektoru přemístění  $\vec{u}$ , tenzoru deformace  $\bar{\varepsilon}$  a tenzoru napětí  $\bar{\sigma}$  jsou uvedeny v příloze 1.



**Obrázek 4.1** Šroubová dislokace; souřadnice ve shodě s přílohou 1.

Na údajích z přílohy 1 si povšimněte, že:

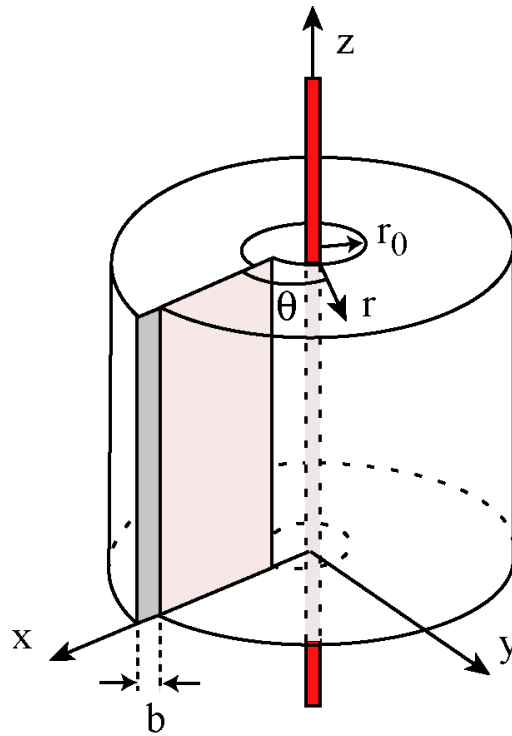
- relativní změna objemu  $\frac{\Delta V}{V} = \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii}$  je v každém bodě nulová,
- ve válcových souřadnicích, pouze složka napětí  $\sigma_{30}$  není nulová,
- napětí klesá s  $1/r$ . Tento pomalý pokles napětí se vzdáleností způsobuje, že pole napětí dislokace jsou "dlouhého dosahu".
- Pokud připustíme, že hranice použitelnosti elasticity kontinua je pro deformace menší než 5 %, můžeme odhadnout poloměr jádra dislokace  $r_0$ :

$$\varepsilon_{30} = \frac{b}{4\pi r} \leq 0.05 \quad \Rightarrow \quad r_0 = 1.7 b$$

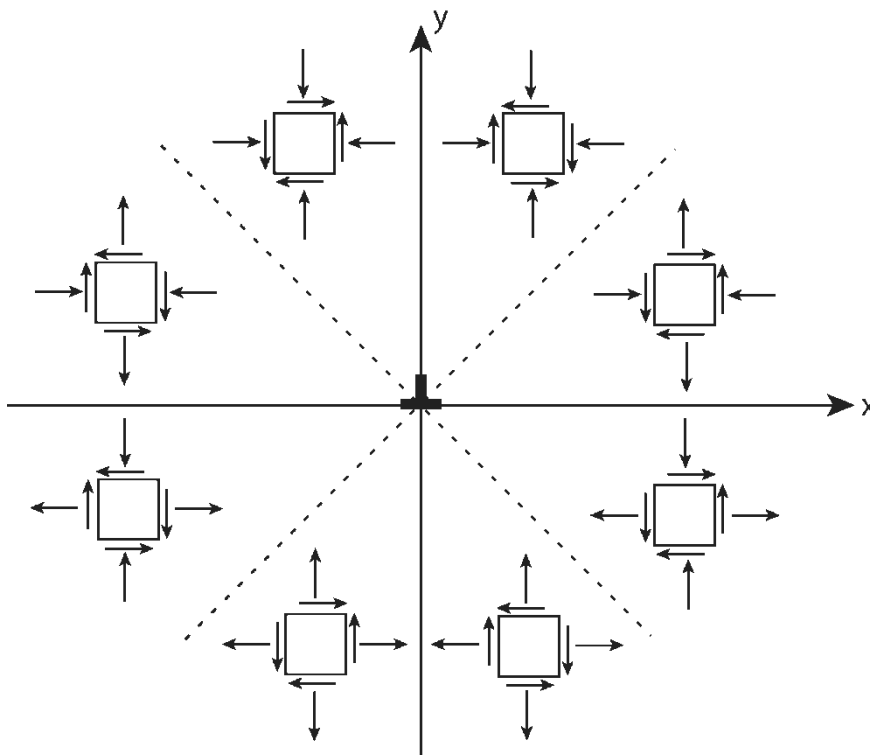
## 4.2 Hranová dislokace

Prohlédněte si část přílohy 1, která se týká hranové dislokace rovnoběžné s osou  $z$  a  $\vec{b}$  rovnoběžným s  $x$  ( $\vec{d} = [001]$  a  $\vec{b} = [b00]$ , obr. 4.2):

- relativní změna objemu  $\frac{\Delta V}{V} = \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii}$  není nulová v každém bodě, ale nulová je její střední hodnota,
- pole napětí je složitější než v případě šroubové dislokace (viz obr. 4.3); znovu si povšimněte, že krystal je deformovaný v kompresi nad skluzovou rovinou  $xz$  (tedy pro  $y > 0$ ) a v tahu pod skluzovou rovinou (oblast pod skluzovou rovinou a pod jádrem dislokace je ideální místo, kde může být umístěn intersticiální atom).



**Obrázek 4.2** Hranová dislokace; osy jsou zvoleny stejně jako v příloze 1.



**Obrázek 4.3** Pole napětí v okolí hranové dislokace ( $\vec{b}$  rovnoběžné s  $x$ ).

## 5. ENERGIE DISLOKACE

Dislokace je obklopena elasticky zdeformovaným objemem. Ve srovnání s dokonalým krystalem je energie krystalu obsahujícím dislokace zvýšená o energii spojenou s touto elastickou deformací.

Energii dislokace  $W_d$  můžeme rozdělit na energii jádra  $W_c$  a na energii vně jádra, počítanou pomocí elasticity kontinua  $W$ :

$$W_d = W_c + W$$

$W_c$  může být vypočítána pomocí molekulární dynamiky nebo výpočtů ab initio; výsledkem je, že  $W_c$  tvoří 10 až 30% celkové energie dislokace.

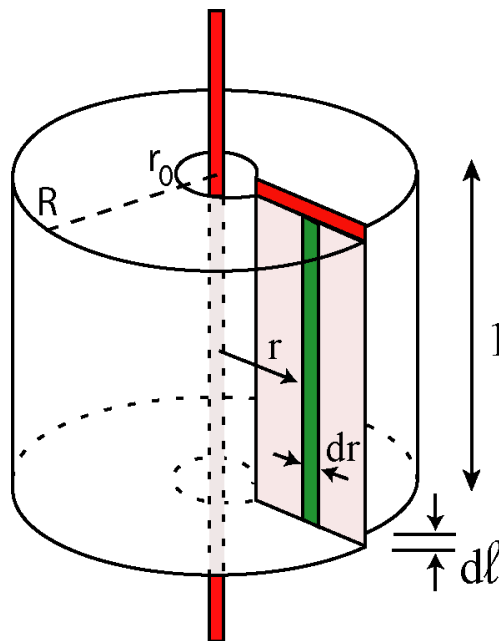
Vypočtíme nejdříve elastickou část energie šroubové dislokace  $W_s$ . Jedná se o nejjednodušší případ, protože tenzor napětí  $\bar{\sigma}$  v okolí dislokace obsahuje pouze jednu nenulovou složku,  $\sigma_{30} = \frac{Gb}{2\pi r}$  (příloha 1). Energie  $W$  je rovná práci nutné k vzájemnému přemístění dvou částí materiálu od 0 po  $b$  ve směru  $\vec{b}$  podél roviny řezu, viz obr. 5.1. Pokud je toto přemístění rovno  $\ell$ , složka tenzoru napětí  $\sigma_{30}$  má velikost:

$$\sigma_{30} = \frac{G\ell}{2\pi r}$$

a tomu odpovídá síla

$$F(\ell) = \int_{r_0}^R \sigma_{30} L dr$$

kde  $r_0$  a  $R$  jsou vnitřní a vnější poloměr uvažovaného válce,  $L$  je jeho výška. Energie dislokace se vztahuje na jednotku délky dislokace, tj. pro  $L = 1$  m.



**Obrázek 5.1** Výpočet energie šroubové dislokace.

Práce  $\delta A$  potřebná k přemístění o velikosti  $d\ell$  je  $\delta A = F(\ell)d\ell$  odkud získáme celkovou práci integrací:

$$A = W = \int_0^b \int_{r_0}^R \frac{G\ell}{2\pi r} dr d\ell$$

$$W_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (5)$$

Podobným způsobem lze vypočítat elastickou energii v okolí hranové a smíšené dislokace:

dislokace hranová: 
$$W_E = \frac{1}{1-\nu} \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (6)$$

dislokace smíšená, charakter  $\phi$ : 
$$W_M = \left( \cos^2 \phi + \frac{\sin^2 \phi}{1-\nu} \right) \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (7)$$

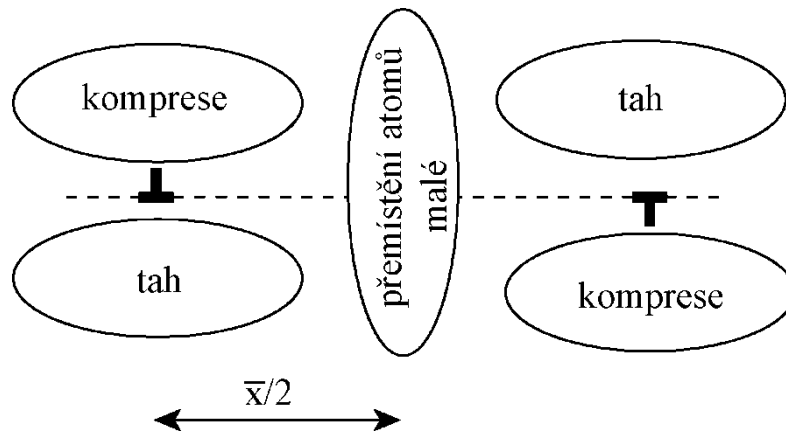
Někdy se uvádí obecná rovnice, kde parametr  $K$  závisí na charakteru dislokace a je zřejmý z rovnic 5-7:

$$W = \frac{1}{K} \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (8)$$

V rovnicích 5 – 8 se skrývá problém, který trápí matematické puristy: neexistuje jasná definice ani vnitřního poloměru  $r_0$  uvažovaného válce, ani vnějšího poloměru  $R$ . Navíc, pro  $r_0$  jdoucí k nule nebo  $R$  jdoucí k nekonečnu energie dislokace diverguje k nekonečnu. Abychom dostali konečnou a vypovídající hodnotu  $W$ , je třeba  $r_0$  a  $R$  vhodně zvolit. Obvykle se používá i)  $r_0$  rovno  $|\vec{b}|$  nebo  $3|\vec{b}|$  a ii)  $R$  rovno poloviční střední vzdálenosti  $\bar{x}/2$  mezi dislokacemi přítomnými v krystalu. Skutečně, pokud si představíme dvě blízké dislokace s opačnými Burgersovými vektory (obr. 5.2), atomy v polovině vzdálenosti mezi dislokacemi se nacházejí ve svých rovnovážných polohách a uvedená volba  $R$  se zdá být správná. Hodnota střední vzdálenosti mezi dislokacemi není za normálních okolností přesně známá, avšak  $W$  se s  $R$  mění jen pomalu (r. 8). Proto se rovnice 5-8 uvádějí ve tvaru:

$$W = \alpha Gb^2 \quad 0.5 < \alpha < 1 \quad (9)$$

a je možné snadno ukázat, že pro běžné dislokační hustoty leží hodnoty parametru  $\alpha$  typicky mezi 0.5 a 1 (pro šroubovou i hranovou dislokaci).



**Obrázek 5.2** Možný odhad hodnoty  $R$  z rovnice (8) a obrázku 5.1 je poloviční střední vzdálenost mezi dislokacemi.

Poznámky:

1. Energie  $W$  v rovnicích (5) – (9) je energie dislokace jednotkové délky; její jednotka je tudíž  $J/m$ , stejně jako pro jednotku síly Newton.
2.  $W$  v rovnici (9) je energie dislokace vně jádra dislokace. Pokud ovšem uvážíme, že energie jádra je typicky 15% z  $W_d$  a že hodnota  $W$  je zatížena značnou nejistotou (např.  $\bar{x}/2$  je často znám jen řádový odhad), hodnota  $Gb^2$  se často používá pro celkovou energii dislokace.
3.  $W$  lze počítat také přímo ze znalosti  $\bar{\varepsilon}$  a  $\bar{\sigma}$  v okolí dislokace, podle rovnice známé z teorie elasticity  $U = \int \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}$ .

Cvičení 3:

Najděte nejvýhodnější Burgersovy vektory struktur fcc, bcc a hcp, z hlediska jejich energie.

## 6. TAH V DISLOKAČNÍ ČÁŘE

V předchozí kapitole jsme odhadli velikost energie dislokace o jednotkové délce. Samozřejmě, pokud dislokace zvětší svoji délku (např. skluzová smyčka při expanzi), celková její energie vzrůstá přímo úměrně. Tendence přírody k dosažení stavu o minimální energii se v případě krystalů projevuje snahou o zkracování celkové délky dislokací. Tento efekt se odráží v myšlenkové konstrukci nazývané "tah v dislokační čáře" (*line tension*), která je výhodná při řešení problémů spojených s dislokačními reakcemi, jak uvidíme ve cvičeních.

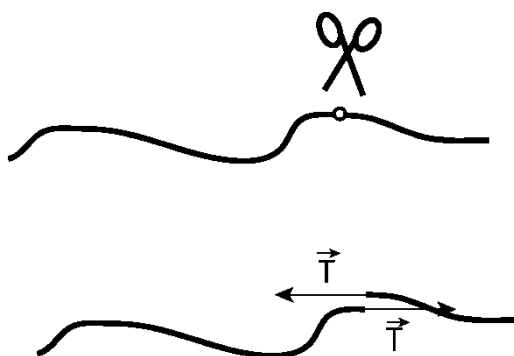


Tah v dislokační čáře (nebo též napětí v dislokační čáře)  $\vec{T}$  je vektor tečný k dislokaci, tedy rovnoběžný s vektorem dislokační čáry  $\vec{d}$ . Jeho velikost je rovna energii dislokace jednotkové délky  $W_d$ , její jednotka je Newton (J/m):

$$\vec{T} = \alpha G b^2 \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|} \quad (10)$$

V literatuře se užívají dvě analogie, které mají ilustrovat podstatu tohoto konceptu.

V prvním případě se předpokládá, že v dislokaci je skutečně tahové napětí, podobně jako v napjaté gumičce. Tah v dislokační čáře je tedy síla, kterou je nutno vynaložit, aby se dislokace udržela ve stejné konfiguraci po jejím imaginárním přestřihnutí (obr. 6.1). Akceptujeme-li takovou představu, je ihned jasné, že tah v dislokační čáře má tendenci udržovat dislokaci přímkovou a vyrovnávat její případná zvlnění (předpokládáme izotropní kontinuum), a také způsobuje smrštění a zánik skluzových dislokačních smyček. Důležitý rozdíl mezi gumičkou a dislokací je v tom, že tah v dislokační čáře nevzrůstá, pokud se dislokace prodlužuje.



**Obrázek 6.1** Tah v dislokační čáře, jako síla nutná k udržení dislokace po jejím myšleném přestřihnutí.

Druhá analogie přirovnává tah v dislokační čáře k povrchovému napětí  $\gamma$ . Kapka vody, kapka rtuti na podložce nebo mýdlová bublina se snaží zmenšit svůj povrch a minimalizovat tak svoji energii; okamžitě mění svůj tvar na kouli. Setkáváme se zde se stejnou terminologickou obtíží jako v případě tahu v dislokační čáře: hnacím principem je minimalizace energie, avšak mluvíme o povrchovém napětí, i když jednotka  $\gamma$  (J/m<sup>2</sup>) není ani jednotkou energie, ani napětí.

## 7. SÍLY PŮSOBÍCÍ NA DISLOKACE

Je možné ukázat, že síla působící na dislokaci o jednotkové délce, umístěné do pole napětí  $\bar{\sigma}$ , které vzniklo mimo danou dislokaci, je daná rovnicí Peache & Koehlera (odvození viz příloha 2):

$$\bar{F} = (\bar{b} \cdot \bar{\sigma}) \times \bar{d} \quad (11)$$

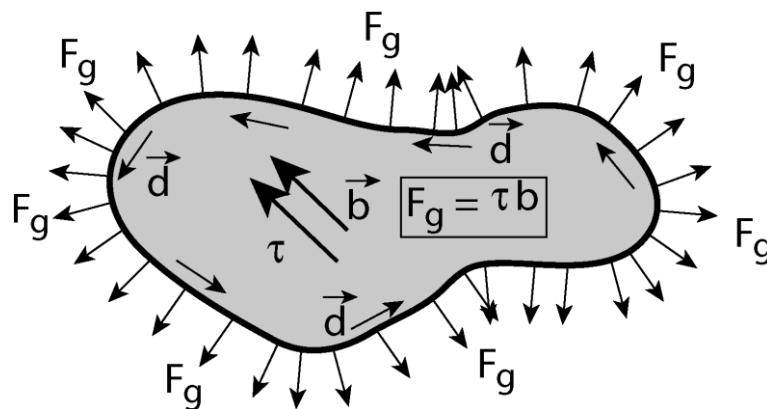
Síla  $\bar{F}$  je v každém bodě dislokace kolmá na dislokační čáru. Může být rozložena na skluzovou složku (v rovině skluzu) a na složku, která způsobuje šplh dislokace (kolmou k rovině skluzu).

Pole napětí může být způsobeno vnějšími silami působícími na krystal nebo vnitřními defekty (dislokace, precipitáty, intersticiální atomy ...).

Často se zajímáme jen o složku síly, která způsobuje skluz dislokace:

$$F_g = \tau b \quad (12)$$

kde  $\tau$  je smykové napětí v rovině skluzu a ve směru Burgersova vektoru (tomuto směru se také říká směr skluzu).  $F_g$  je v každém bodě dislokace kolmá na vektor dislokační čáry, ať je charakter daného dislokačního segmentu jakýkoli. Protože podél celé dislokační smyčky je její Burgersův vektor stejný, na všechny dislokační segmenty působí stejně velké síly (což je možná na první pohled překvapující, obr. 7.1).



**Obrázek 7.1** Vlivem smykového napětí  $\vec{\tau}$  skluzová smyčka expanduje (nebo se smršťuje, v závislosti na orientaci  $\vec{b}$  a  $\vec{\tau}$ ) ve všech směrech se stejnou rychlostí (pokud použijeme předpoklad, že materiál je izotropní). Uvnitř smyčky jsou atomy nad a pod skluzovou rovinou vzájemně přemístěny smykem o vektor  $\vec{b}$ .

Cvičení 4: Dislokace je fixována v bodech A a B, obr, 7.2 (protože žádná dislokace nemůže končit nebo začínat uprostřed krystalu, můžeme předpokládat, že dislokace pokračuje mimo rovinu papíru). Nakreslete rovnovážnou geometrii dislokace

a) bez napětí,

b) za působícího smykového napětí  $\tau$  v rovině skluzu a ve směru skluzu  $\vec{b}$ .



**Obrázek 7.2** Dislokace, která je fixována v bodech A a B.

Poznámky:

- 1) Je třeba si uvědomit jednotku Peach & Koehlerovy síly (N/m).
- 2) Rozpínání smyčky můžeme opět přirovnat k mýdlové bublině, rozpínané všemi směry díky vnitřnímu tlaku.
- 3) Protože každý krystal je anizotropní, podmínka minimální energie nekoresponduje nutně s minimální délkou dislokace bez napětí nebo s tvarem části kružnice při působícím smykovém napětí. Často jsou pozorovány dislokace ve tvaru několika přímých segmentů, místo tvaru části kružnice (viz obrázky 11.4, 11.11).

## 8. POHYB DISLOKACÍ

Plastická deformace většiny pevných látek se uskutečňuje pohybem dislokací. Dislokace se může pohybovat skluzem (*slip*, *glide*) nebo šplhem (*climb*).

### 8.1 Skluz dislokací

Mechanismus popsáný na obr. 2.7 se jmenuje skluz. Skluz se může uskutečňovat jen v rovině, která obsahuje vektory  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$ . Takový pohyb vyžaduje pouze přerušování a rekombinaci atomových vazeb se sousedními atomy. Přemístění jednotlivých atomů je malé, menší, než mřížkový parametr, a atomy jsou stále obklopeny stejnými sousedy. Objem materiálu zůstává konstantní a tento pohyb se proto nazývá konzervativní.

Rychlost dislokací při skluzovém pohybu záleží silně na teplotě a působícím smykovém napětí  $\tau$ . Často se používá empirická rovnice

$$v = B \tau^m$$

(13)

Exponent napětí  $m$  může nabývat pro různé materiály hodnot od 1 až po zhruba 25;  $B$  roste exponenciálně s teplotou.

### 8.1.1. Skluzové roviny u struktur fcc, bcc a hcp

Energetické důvody determinují typy Burgersových vektorů u těchto tří krystalových struktur (viz cvičení 3 na konci kapitoly 5). Uvažujme nyní dislokaci v fcc mřížce s  $\vec{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$ . Tato dislokace se může pohybovat skluzem ve všech rovinách, které obsahují tento směr (roviny zóny  $[\bar{1}01]$ ): např.  $(010)$ ,  $(111)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}1)$ ,  $(121)$ ,  $(313)$ .... Ve které z těchto krystalografických rovin se bude dislokace pohybovat? Experimentální pozorování ukazuje, že dislokační skluz probíhá po nejhustěji obsazených rovinách (počet atomů na jednotku plochy je maximální v dané krystalografické soustavě), i když toto pravidlo neplatí bez výjimek. Ve skriptech "Krystalová struktura pevných látek" jsme uvedli, že rovina ideálně obsazená atomy je kompaktní rovina  $\{111\}$  u fcc a  $\{0001\}$  u hcp; tyto roviny jsou skutečně nejčastějšími skluzovými rovinami u těchto materiálů. Naopak, v případě mřížky bcc neexistuje jedna krystalografická rovina, která by byla výrazně hustěji obsazená atomy, než roviny ostatní; dislokace se pohybují po více typech krystalografických rovin (tabulka 2).

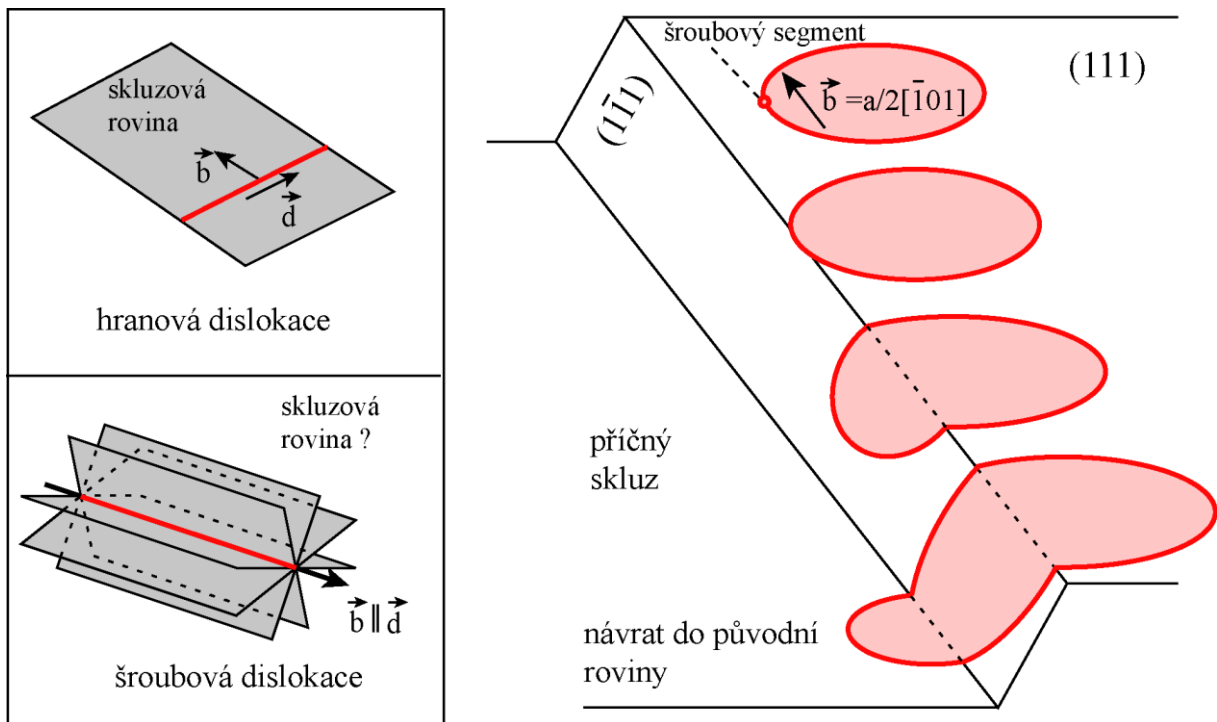
Dvojice Burgersův vektor a skluzová rovina se nazývá skluzový systém (*slip system*), krystalografický směr rovnoběžný s  $\vec{b}$  se nazývá směr skluzu (*slip direction*).

mřížka	Burgersův vektor	rovina skluzu
fcc	$a/2 \langle 110 \rangle$	$\{111\}$
hcp	$a/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\{0001\}$ často i $\{1\bar{1}00\}$ nebo $\{1\bar{1}01\}$
bcc	$a/2 \langle 111 \rangle$	$\{110\}, \{112\}, \{123\}$

**Tabulka 2.** Nejčastěji pozorované skluzové systémy.

### 8.1.2. Příčný skluz

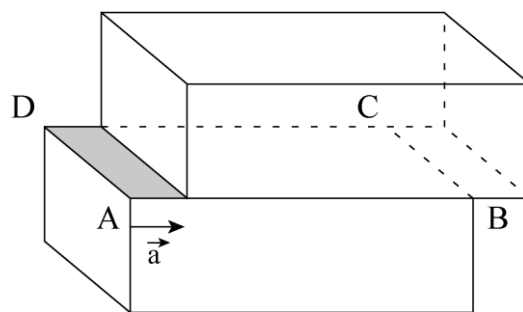
Představme si dislokační smyčku v fcc materiálu s  $\vec{b} = a/2[\bar{1}01]$ , pohybující se po skluzové rovině  $(111)$ . Hranové a smíšené dislokační segmenty mohou klouzat jen v rovině  $(111)$ . Avšak šroubové segmenty mají vektory  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  rovnoběžné, mohou tedy jako skluzovou rovinu použít jakoukoliv rovinu z osy zóny  $\vec{b}$ . Protože dislokace v fcc se pohybují skluzem téměř bez výjimky v rovinách  $\{111\}$ , studovaný šroubový segment může klouzat také v rovině  $(\bar{1}\bar{1}1)$  (obr. 8.1). Změně skluzové roviny během skluzu se říká příčný skluz (*cross-slip*) a je možný jen v případě šroubových dislokací.



**Obrázek 8.1** Příčný skluz u fcc mřížky

### Cvičení 5:

Po průchodu jedné dislokace změnil krystal tvar z dokonalého kvádrů tak, jak je znázorněno na obr. 8.2. Co lze říci o  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  této dislokace?



**Obrázek 8.2** Vzorek po průchodu jedné dislokace.

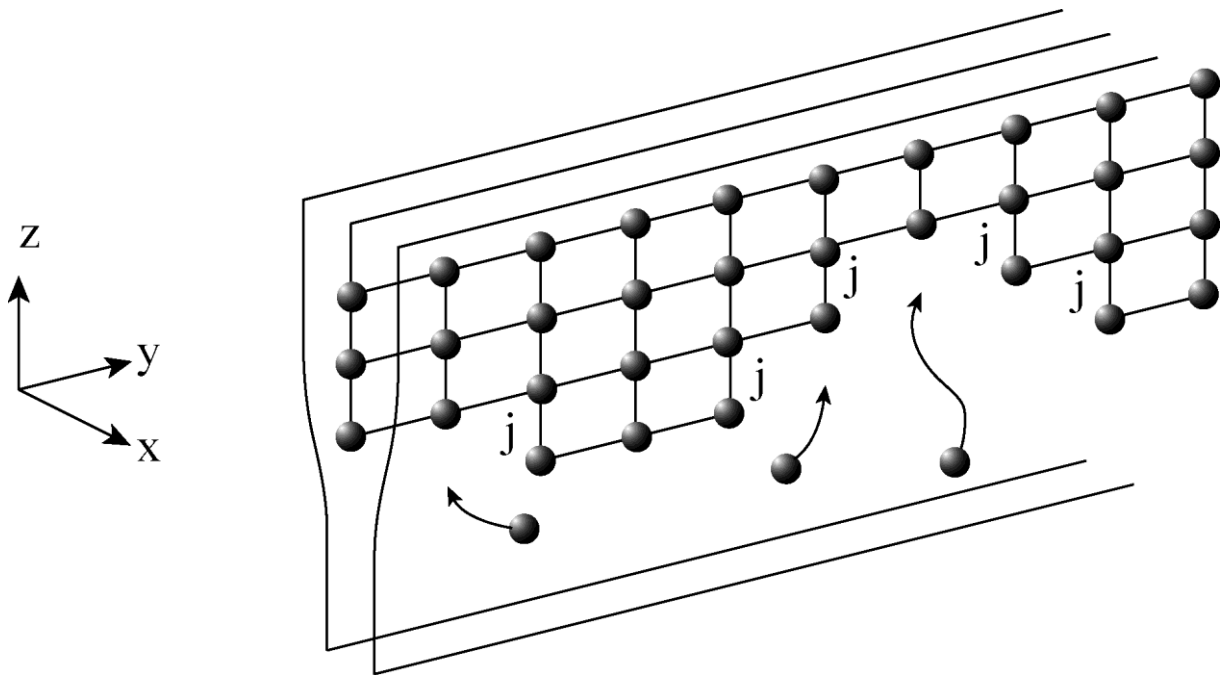
## 8.2 Šplh dislokací

Za zvýšených teplot ( $T > 0.5 T_T$ ,  $T_T$  je teplota tání v absolutní stupnici) se dislokace mohou pohybovat i mimo svoji skluzovou rovinu tzv. šplhem. Jde o pomalý proces, ve kterém hraje roli přemísťování atomů mřížkovou difuzí.

Na obr. 8.3 vidíme dislokaci, která se nachází v takovém poli napětí, kde  $\sigma_{xx}$  je kladné (deformace v tahu podél osy x). Za této podmínky má dislokace tendenci se přesunovat směrem dolů, ve směru  $-\vec{z}$ . Tento pohyb vyžaduje difuzi atomů směrem od povrchu vzorku nebo od hranic zrn směrem k

dislokacím. Dislokace není přímková, tvoří se na ní stupně kolmé k rovině skluzu, které se nazývají (*jogs*).

Pokud je  $\sigma_{xx}$  záporné (komprese), dislokace je hnána pryč z krystalu směrem vzhůru. Tento pohyb může být popsán jako proud vakancí (*vacancies*) směrem k jádru dislokace, což je totéž jako difuze atomů od hrany dislokace do krystalové mřížky.



**Obrázek 8.3** Šplh hranové dislokace.  $j = \text{jog}$ .

Poznámka: pokud se na přímkové dislokaci vytvoří stupeň kolmý na skluzovou rovinu, nazývá se anglicky *jog*. Pokud tento stupeň leží ve skluzové rovině, nazývá se *kink*. V češtině se někdy používají výrazy stupeň a ohyb.

## 9. MULTIPLIKACE, INTERAKCE A ANIHILACE DISLOKACÍ

### 9.1 Dislokační hustota

Množství dislokací v krystalu je nejlépe charakterizováno nikoliv jejich počtem, nýbrž jejich celkovou délkou v jednotkovém objemu. Tato veličina se nazývá dislokační hustota  $\rho$  (*dislocation density*), definována podle vzorce :

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^N \ell_i}{V} \quad (14)$$

Až na velmi vzácné výjimky, (whiskery, monokrystaly Si), všechny krystalické látky obsahují značné množství dislokací. V případě kovů po intenzivním tváření,  $\rho$  může dosahovat řádu  $10^{17} \text{ m}^{-2}$  ( $\sim 10^6$  krát vzdálenost Země – Slunce v  $1 \text{ m}^3$ ). Po dlouhém žihání (*annealing*), dislokační hustota může klesnout až někam k hodnotě řádově  $10^8 \text{ m}^{-2}$ .

Dislokační hustota hraje velkou roli pro mechanické vlastnosti daného materiálu a je tedy důležitou informací. Existuje několik metod pro její měření, žádná ale není snadná ani přesná. Protože se dislokační hustota může v reálném materiálu měnit o mnoho řádů, i méně přesná hodnota může být cenná. Nejčastěji se dislokační hustota měří na snímcích z transmisní elektronové mikroskopie. Na snímek se narýsuje systém náhodně orientovaných přímek o celkové délce  $L_p$ . Spočítá se počet průsečíků přímek a dislokací  $N$ . Dislokační hustota se pak vypočte z přibližného vzorce  $\rho = \frac{2N}{L_p t}$ , kde  $t$  je tloušťka vzorku.

## 9.2 Multiplikace

Během plastické deformace, dislokace se přemísťují a množí (multiplikují, *multiply*). Na obrázku 9.1 je znázorněn dislokační zdroj podle Franka a Reada (*Frank & Read source*). Existuje více možností, jak dislokační hustota ve vzorku může narůstat, například expandující dislokační smyčka prodlužuje svoji délku a tím i  $\rho$ .

## 9.3 Interakce a reakce dislokací

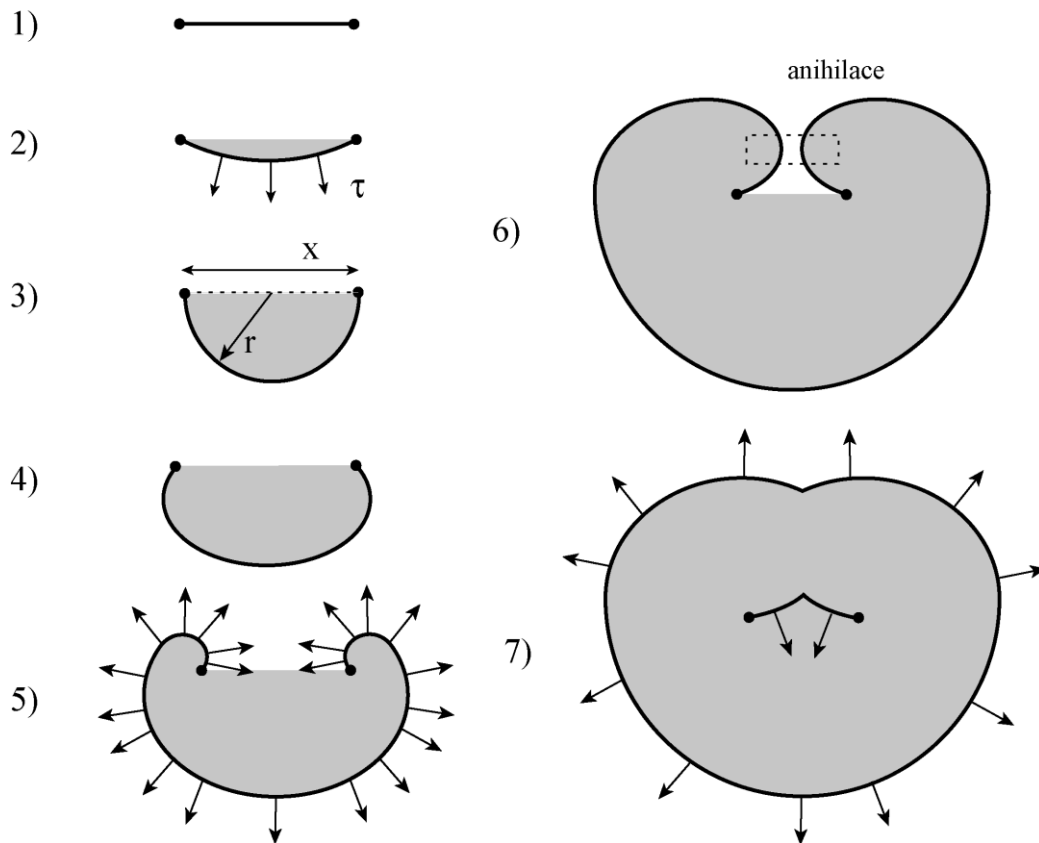
V kapitole 4 jsme viděli, že dislokace kolem sebe vytváří pole napětí. Jiné dislokace v jejím okolí jsou tímto napětím buďto přitahovány, nebo odpuzovány silou Peach & Koehlera (r. 11); říkáme, že existuje silová interakce (*interaction*) mezi dislokacemi.

Lze také argumentovat pomocí energie dislokací. Představme si, že dvě dislokace  $\vec{b}_2$  a  $\vec{b}_3$  na obr. 3.4 se spojí v jednu a vytvoří dislokaci  $\vec{b}_1$ . Taková reakce je možná a v deformovaných krystalech často probíhá. Víme, že musí platit rovnost:

$$\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$$

Srovnajme nyní energii oddělených dislokací :  $W_{2,3} = \alpha G b_2^2 + \alpha G b_3^2$   
s energií dislokace  $\vec{b}_1$ :

$$W_1 = \alpha G b_1^2 = \alpha G (\vec{b}_2 + \vec{b}_3)^2 = \alpha G b_2^2 + \alpha G b_3^2 + 2\alpha G \vec{b}_2 \vec{b}_3$$



**Obrázek 9.1** Dislokační zdroj Franka & Reada. Dislokace je uchycena ve dvou bodech. Protože dislokace nemůže mít volné konce v krystalu, dislokace musí pokračovat z těchto dvou bodů mimo rovinu papíru. Napětí  $\tau$  nutné k jeho funkci je to, které je nutné k prohnutí dislokace v etapě 3, kdy poloměr křivosti dislokace je minimální, rovný poloviční vzdálenosti mezi pevnými okraji dislokace. Přemístění o  $\vec{b}$  proběhlo v šedě vybarvené zóně.

Znaménko u součinu  $\vec{b}_2 \vec{b}_3$  rozhoduje, zda je  $W_1$  větší či menší než  $W_{2,3}$  a tedy o tom, zda je tato reakce (*reaction*) energeticky výhodná.

Dvě dislokace  $\vec{b}_2$  a  $\vec{b}_3$ , které se pohybují ve stejné skluzové rovině, se přitahují, pokud  $W_1 < W_{2,3}$  a odpuzují v opačném případě. Toto tvrzení však neplatí bez výjimky pro dislokace, které se pohybují na různých skluzových rovinách.

Je možné ukázat, že:

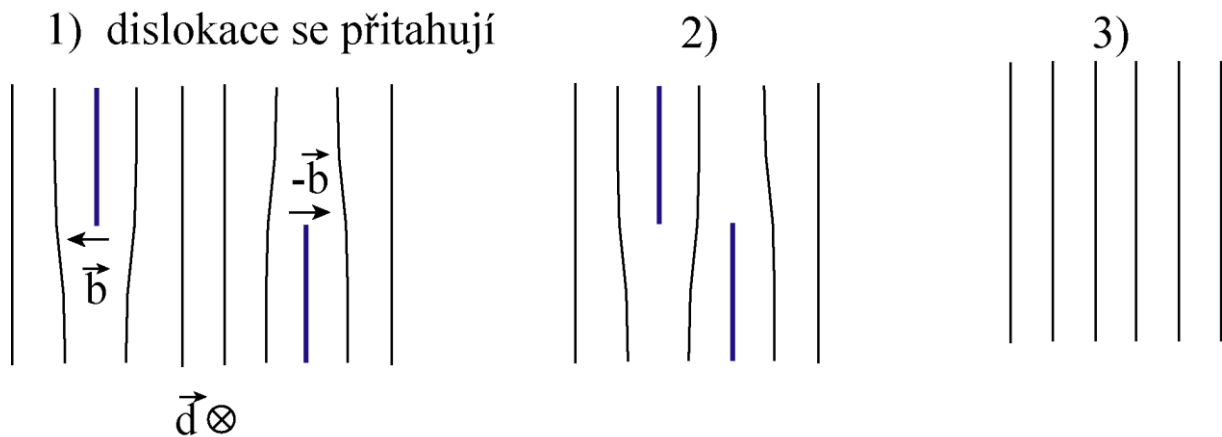
- dvě rovnoběžné dislokace se stejně orientovaným  $\vec{b}$ , pohybující se po stejné skluzové rovině, se odpuzují a s opačně orientovaným  $\vec{b}$  se přitahují (platí pro hranové i šroubové dislokace);
- dislokace jsou přitahovány k volnému povrchu krystalu;
- dislokace jsou přitahovány k rozhraní, pokud sousední materiál má menší  $G$  než ten, ve kterém se dislokace nachází, a odpuzovány, pokud sousední materiál má vyšší elastický modul ve smyku.



## 9.4 Anihilace

Anihilace (*annihilation*) je speciální případ interakce dvou dislokací, které mají stejně velké a opačné Burgersovy vektory. V tom případě obě dislokace zmizí, aniž by byla vytvořena třetí dislokace, což je evidentní ze schématu na obr. 9.2:

$$\vec{b} + (-\vec{b}) = 0$$



**Obrázek 9.2** Anihilace dvou opačných hranových dislokací.

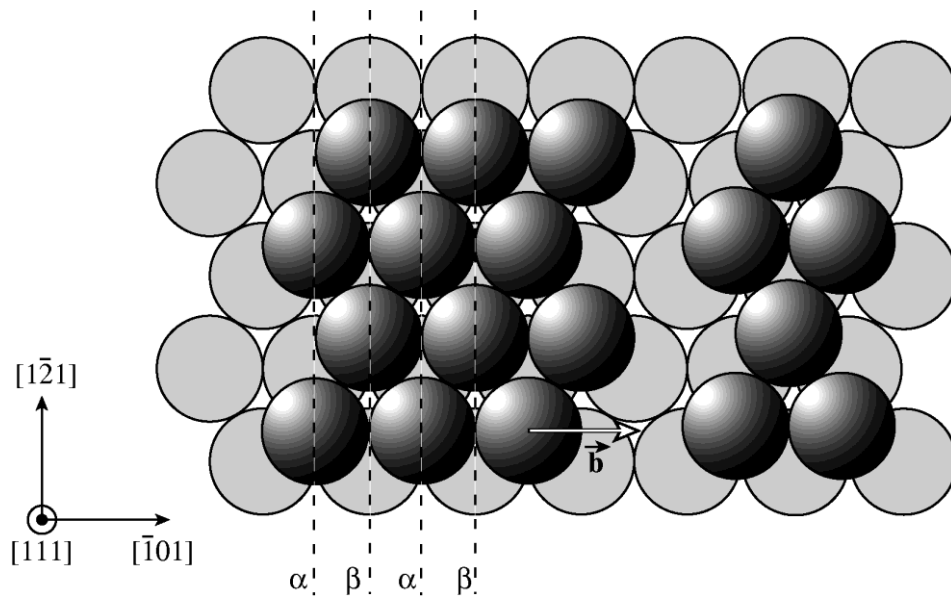
### Cvičení 6:

Podívejte se znovu na obr. 9.1. Jak je možné, že dva segmenty stejné dislokace vzájemně anihilují (fáze 6), když jsme v kapitole 3.2 uvedli, že stejná dislokace musí mít po celé své délce stejný  $\vec{b}$ ?

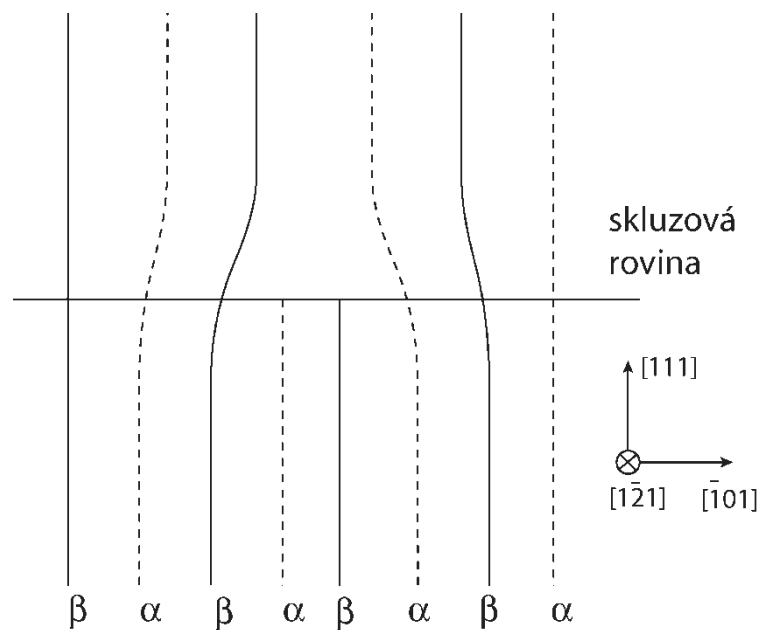
## 10. PARCIÁLNÍ DISLOKACE

Příklad na obr. 2.7 ukazuje hranovou dislokaci v kubické prosté mřížce, která se v přírodě vyskytuje jen zřídka (jediný prvek krystalující v této mřížce je polonium).

Situace v případě mřížky fcc je složitější (obr. 10.1). Vidíme, že roviny kolmé na  $\vec{b}$ , tedy roviny  $(\bar{1}01)$  jsou tvořeny střídáním dvou vrstev:  $\alpha$  a  $\beta$ . Protože  $\vec{b}$  dislokace na obrázku je roven translačnímu vektoru mřížky, průchod dislokace nezmění nijak mřížku a nezavede do ní žádnou poruchu (vrstevnou chybu);  $\vec{b}$  je tedy úplná dislokace. Všimněte si, že obě poloroviny  $\alpha$  i  $\beta$  musí být odstraněny a prostudujte tutéž konfiguraci na obr. 10.2.



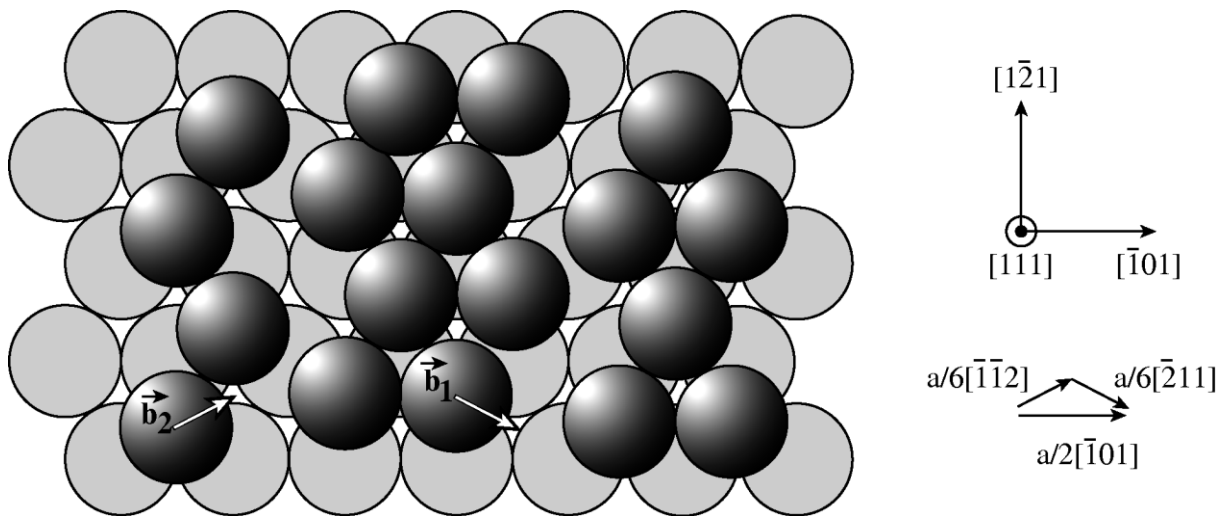
**Obrázek 10.1** Hranová dislokace v fcc mřížce, pohled shora. Skluzová rovina (111) je rovnoběžná s rovinou papíru,  $\vec{b} = a/2[\bar{1}01]$ ,  $\vec{d} = 1/\sqrt{6}[1\bar{2}1]$  ( $\vec{d}$  je jednotkový vektor).



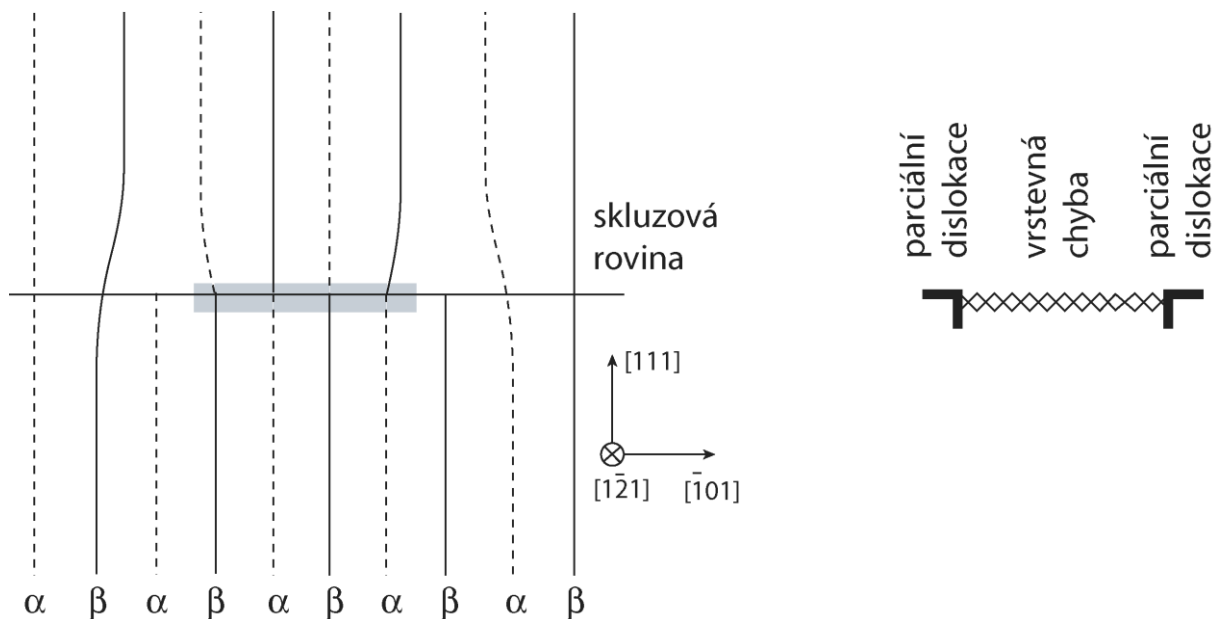
**Obrázek 10.2** Úplná hranová dislokace z obr. 10.1, pohled z boku. Skluzová rovina je nyní kolmá k rovině papíru.

Z obrázků 10.1 a 10.2 intuitivně cítíme, že deformace a napětí v okolí jádra dislokace jsou značné. Toto napětí může být sníženo, pokud se vložené poloroviny  $\alpha$  a  $\beta$  od sebe vzdálí o několik meziatomových vzdáleností (obr. 10.3, 10.4). Avšak u takto rozštěpené dislokace se objevuje nový mřížkový defekt – mezi dvěma dislokacemi je pravidelné vrstvení kompaktních rovin narušeno a vzniká tzv. vrstevná chyba (*stacking fault*, šedá zóna na obr.

10.4). Burgersovy vektory dvou dislokací nejsou translačními vektory mřížky (nespojují sousední uzlové body); takovým dislokacím se říká parciální nebo částečné (*partial dislocations*).



**Obrázek 10.3** Hranová dislokace v fcc mřížce, rozštěpená na dvě Schockleyho parciální dislokace, mezi kterými leží vrstevná chyba. Pohled shora.



**Obrázek 10.4** Rozštěpení úplné dislokace na dvě parciální Schockleyho dislokace, oddělené vrstevnou chybou. Schématický pohled z boku.

Je pozorováno, že většina dislokací (mluvíme nyní o všech možných mřížkách a dislokacích libovolného charakteru) jsou rozštěpené na dvě i více částečných dislokací. Rovnovážná velikost rozštěpení  $d$ , tj. šířka pásu

vrstevné chyby v příkladě fcc mřížky a konfigurace na obr. 10.3 a 10.4 je určena energií vrstevné chyby  $\gamma$  (*stacking fault energy*):

$$d = Gb^2 / 4\pi\gamma$$

Pokud  $\gamma$  je velké (př. Al,  $\gamma = 170 \text{ mJ/m}^2$ , nejčastěji používaná jednotka je miliJoule/metr čtvereční), rozštěpení je srovnatelné s  $\bar{b}$ . Pokud je  $\gamma$  malá (př. Ag,  $\gamma = 22 \text{ mJ/m}^2$ , austenitická ocel,  $\gamma = 10 - 15 \text{ mJ/m}^2$ ), parciální dislokace jsou vzdáleny desítky nm.

Parciální dislokace na obr. 10.3 se nazývají podle Shockleyho, jejich Burgersův vektor je typu  $a/6 \langle 112 \rangle$ .

### Cvičení 7:

Dokažte, že rozštěpení úplné dislokace v fcc mřížce na dvě Schockleyho dislokace je energeticky výhodné.

## 11. POZOROVÁNÍ DISLOKACÍ

Stručně se zde zmíníme o 3 metodách používaných k pozorování dislokací.

### 11.1 Leptové důlky (*etch pits*)

Vhodně zvoleným leptadlem lze naleptat místa, kde dislokace vystupují na povrch krystalu. Kolem dislokačního jádra jsou atomové vazby deformované a oslabené a proto v těchto místech může leptadlo účinněji rozrušovat atomové vazby a rozpouštět materiál. Na povrchu vyleštěného krystalu tak vznikají malé krátery, kterým říkáme leptové důlky.

#### Postup:

- Co nejdokonaleji vyleštíme povrch vzorku.
- Ponoříme vzorek do chemického roztoku, který pomalu rozpouští daný materiál. Některá leptadla narušují materiál přednostně v místech, kde dislokace vystupují na povrch; je ovšem nutno se ujistit, že pro použité leptadlo skutečně existuje jednoznačná korelace mezi leptovými důlky a dislokacemi.
- Leptové důlky pozorujeme světelným mikroskopem, případně SEM či AFM.

#### Výhody a omezení:

- Poměrně snadný experiment;
- Vhodné pro měření dislokační hustoty, zjištění typu skluzových rovin a měření rychlosti dislokací;
- Použitelné jen pro nízké hodnoty  $\rho$ :  $\rho \text{ max} \sim 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ;
- Není možné získat údaje ani o  $\bar{d}$ , ani o  $\bar{b}$ ;

- Leptadla někdy fungují dobře jen pro určité krystalografické orientace povrchu krystalu.

### 11.2 Rentgenová topografie (*X-ray topography*)

Rentgenové záření je schopné prozářit i poměrně tlustý vzorek (několik mm). Dislokace jsou nejlépe viditelné v některém difraktovaném svazku; tj. v zobrazení v tmavém poli. Kontrast dislokací záleží na kombinaci difrakčního vektoru  $\vec{g}$  a vektoru  $\vec{b}$ . Zvláštní případ nastává, pokud jsou tyto dva vektory navzájem kolmé; šroubové dislokace jsou v tomto případě neviditelné a hranové dislokace jsou viditelné jen slabě, v tzv. zbytkovém kontrastu

$$\vec{b} \cdot \vec{g} = 0 \quad (15)$$

#### Postup:

- Pečlivě vyleštíme oba povrchy vzorku, kterými bude vstupovat a vystupovat rtg. záření.
- Umístíme krystal do Braggovy polohy vzhledem ke svazku monochromatického rtg. záření. Zdroje rtg. záření: rentgenka (Cu, W anoda bombardovaná rychlými elektrony) nebo synchrotron.
- Obraz zachycujeme na CCD kameru nebo film.

#### Výhody a omezení:

- Jediná metoda umožňující pozorovat dislokace uvnitř relativně tlustého vzorku;
- Lze pracovat jen se vzorky s velmi nízkou dislokační hustotou:  $\rho \text{ max} \sim 10^{10} \text{ m}^{-2}$ ;
- Neexistují čočky pro rtg. záření – obraz není zvětšený (nebo je zvětšení jen velmi slabé);
- Pro pokusy s laboratorními zdroji rtg. záření je doba expozice filmu dlouhá;
- Pro zkrácení doby osvitu CCD nebo filmu na několik sekund je nezbytné využít náročné techniky synchrotronu.

### 11.3 Transmisní elektronová mikroskopie – TEM

(*transmission electron microscopy*)

Nejčastěji používaná metoda. Rychlé elektrony procházejí vzorkem; protože elektrony pronikají hmotou obtížněji než rtg. záření, vzorek musí být velmi tenký. Podmínka neviditelnosti dislokací (15) platí i v případě TEM.

#### Postup:

- Připravíme vzorek, který je ztenčen až na tloušťku  $\sim 100 \text{ nm}$ .
- Osvětíme vzorek elektrony urychlené vysokým napětím, typicky 200-300kV).

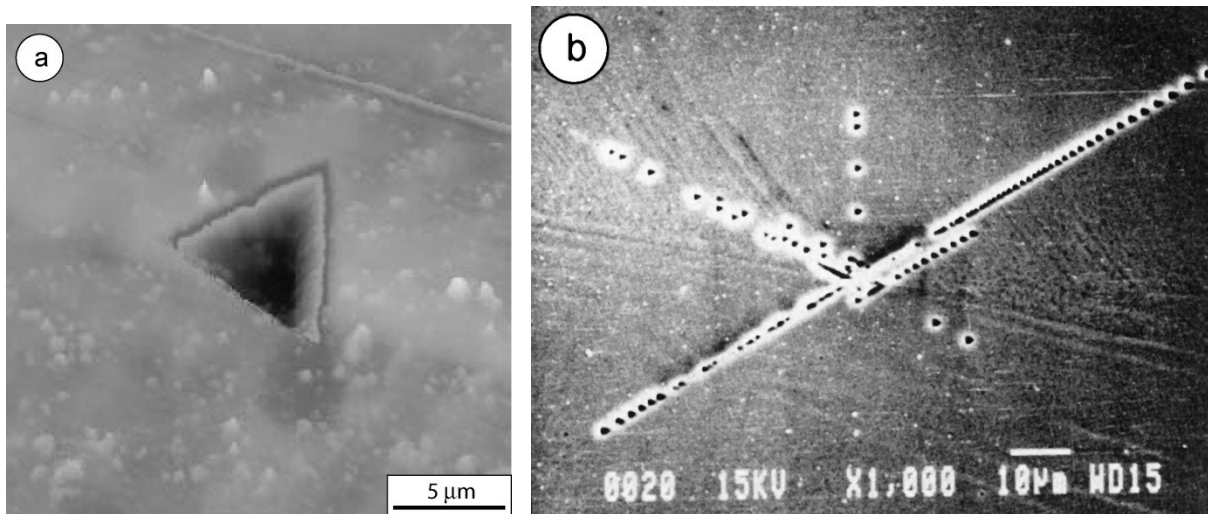
- Pozorování obrazu buď v elektronech prošlých (světlé pole) nebo v elektronech difraktovaných (tmavé pole).

#### Výhody a omezení:

- Komerčně vyráběné přístroje vynikající kvality, bodové rozlišení až 0.1 nm; rozsah zvětšení od 30x do ~ 2 000 000x (cena 20-70 MKč);
- Není omezení pro materiál nebo dislokační hustotu;
- Existují mikro zařízení pro mechanické testy přímo v mikroskopu (tzv. zkoušky *in-situ*, pozorování vzorků předem deformovaných se někdy říká *post-mortem*);
- Musí být zvládnuta příprava velmi tenkých vzorků, při které navíc nesmí být poškozena vnitřní struktura materiálu;
- Dislokace jsou přitahovány povrchem;
- Doba expozice při snímku krátká (1 s).

## 11.4 Ukázky snímků dislokací

### 11.4.1 Leptové důlky



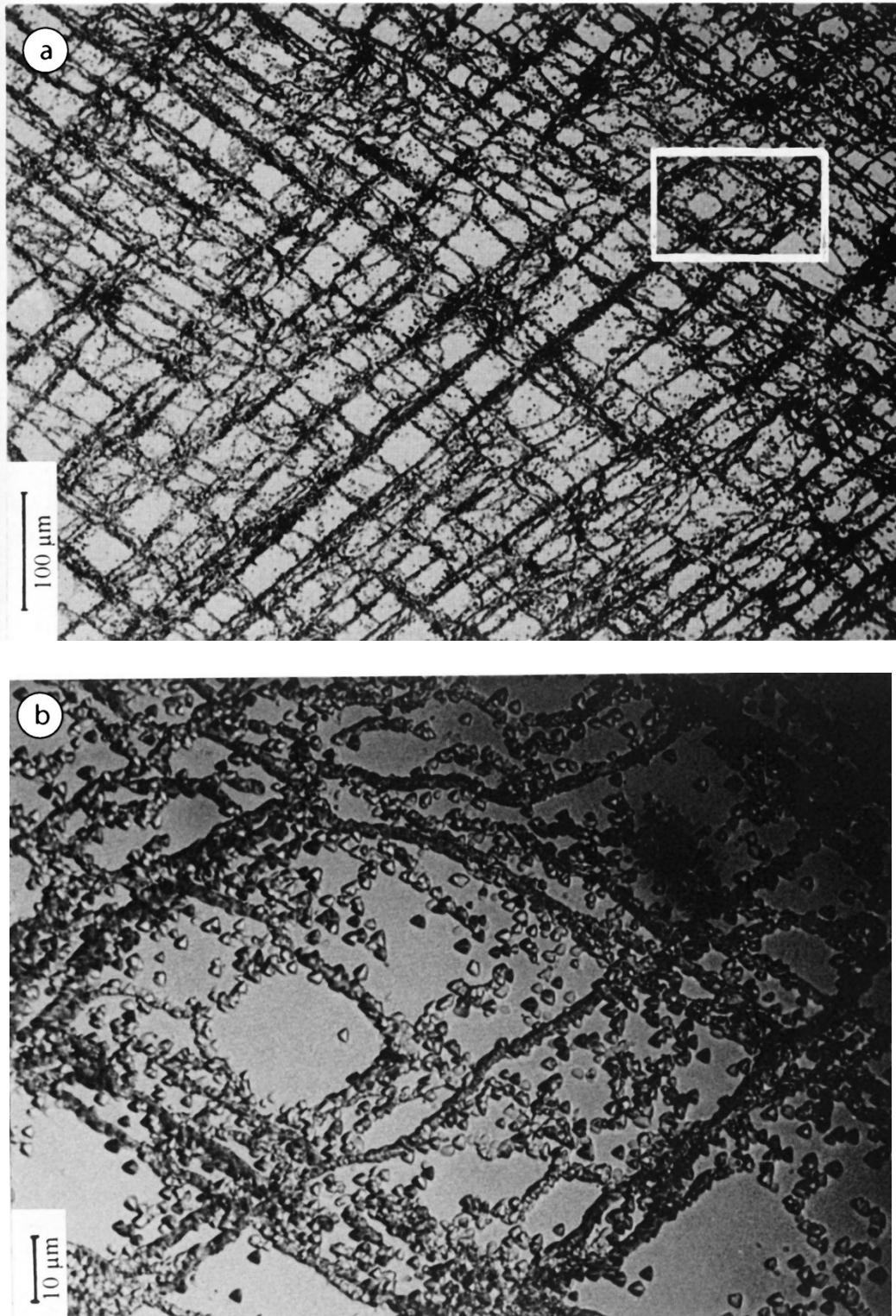
#### **Obrázek 11.1**

a) Monokrystal germania, povrch rovnoběžný s rovinou {145}. Tvar leptového důlku v místě, kde dislokace vystupuje na povrch, po naleptání v HF. Leptový důlek má tvar troj- nebo čtyřbokého jehlanu, jehož stěny mají orientaci {111}.

AFM mikroskopie (*atomic force microscopy*), C. Dupas.

b) Monokrystal Si, rovina {111}

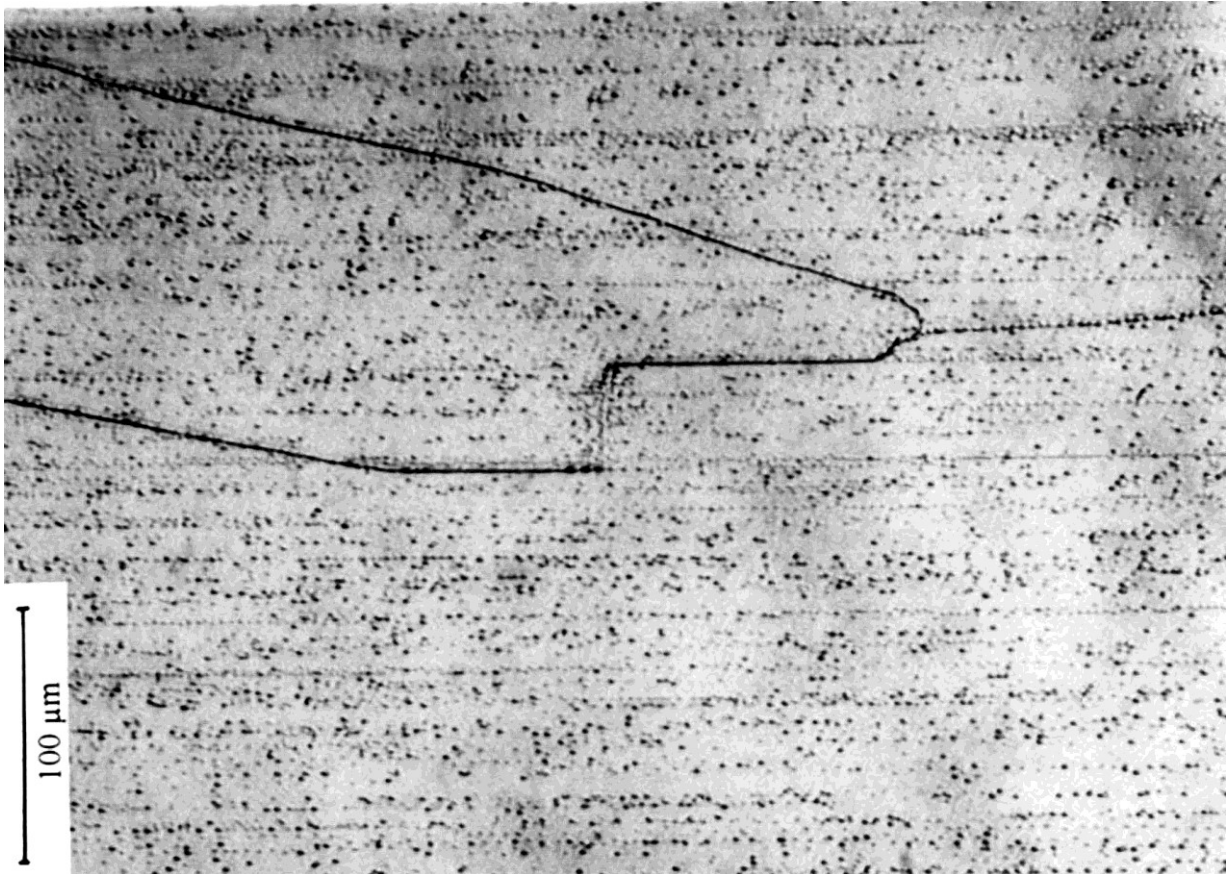
Obraz dislokačního zdroje, který produkoval dislokace ve 3 rovinách typu {111}. Napětí potřebné k fungování zdroje bylo vyvoláno blízkostí špičky trhliny (na snímku není vidět). Rastrovací elektronový mikroskop SEM (*scanning electron microscope*), G. Michot.



**Obrázek 11.2** Monokrystal Si, rovina  $\{111\}$

a) Přehledový snímek oblasti s naleptanými dislokacemi vytvořenými deformací za vysoké teploty ( $1200^{\circ}\text{C}$ ) na dvou rovinách typu  $\{111\}$ .

b) Zvětšený výřez ze snímku a) v místě obdélníka. Lze rozeznat jednotlivé leptové důlky. Světelná mikroskopie, F. Bigorgne, J.P. Michel.

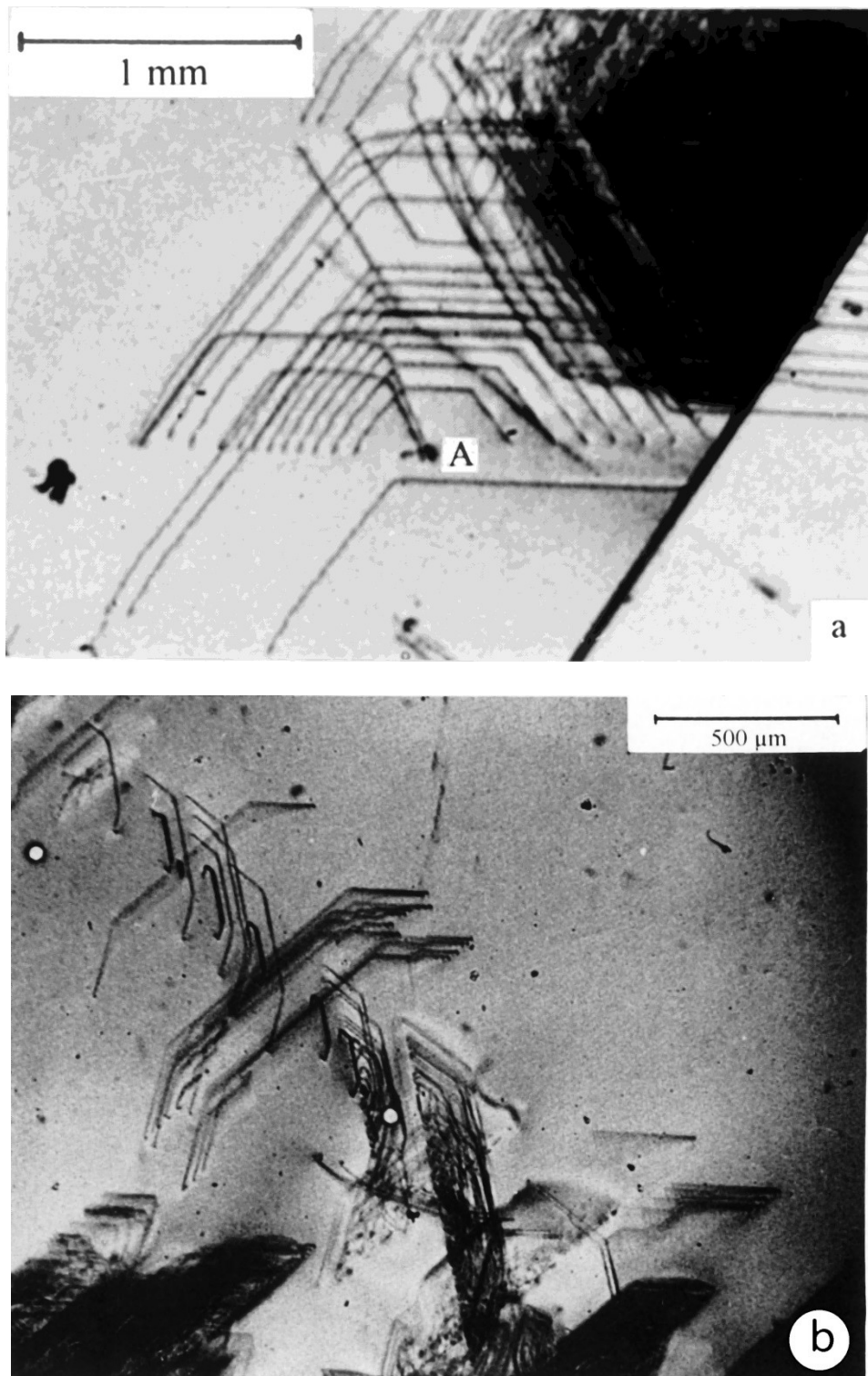


**Obrázek 11.3** Monokrystal Zn, rovina  $\{10\bar{1}0\}$ .

Dislokace vytvořené smykovou deformací, pohybující se skluzem po bazální rovině (0001). Bazální rovina je vodorovná a kolmá na rovinu papíru. Jsou také vidět naleptané hranice subzrn, vzniklých při růstu krystalu z taveniny. Interakce mezi subhranicí a dislokacemi je slabá, s výjimkou části hranice kolmé na skluzovou rovinu, kde lze identifikovat dislokační nakupení (*pile-up*). Světelná mikroskopie, J.P. Michel.



### 11.4.2 Rentgenová topografie

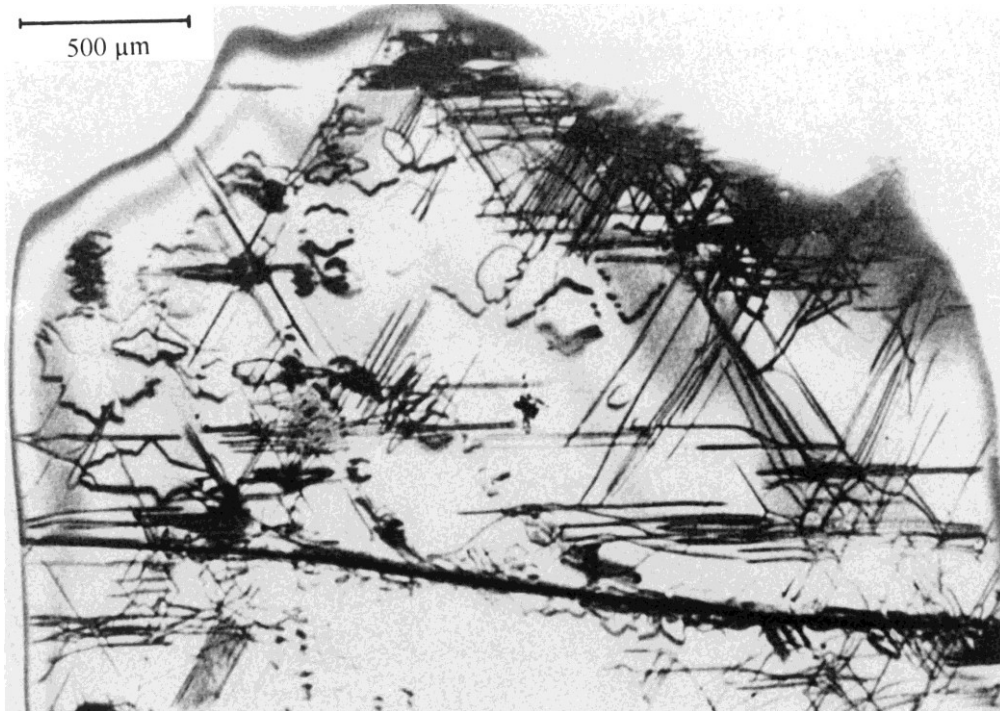


**Obrázek 11.4** Monokrystal Si. Vlivem zvýšené teploty a působícího napětí bylo aktivováno několik dislokačních zdrojů.

a) Zdroj se středem v A emitoval 12 dislokačních smyček, G. Michot.

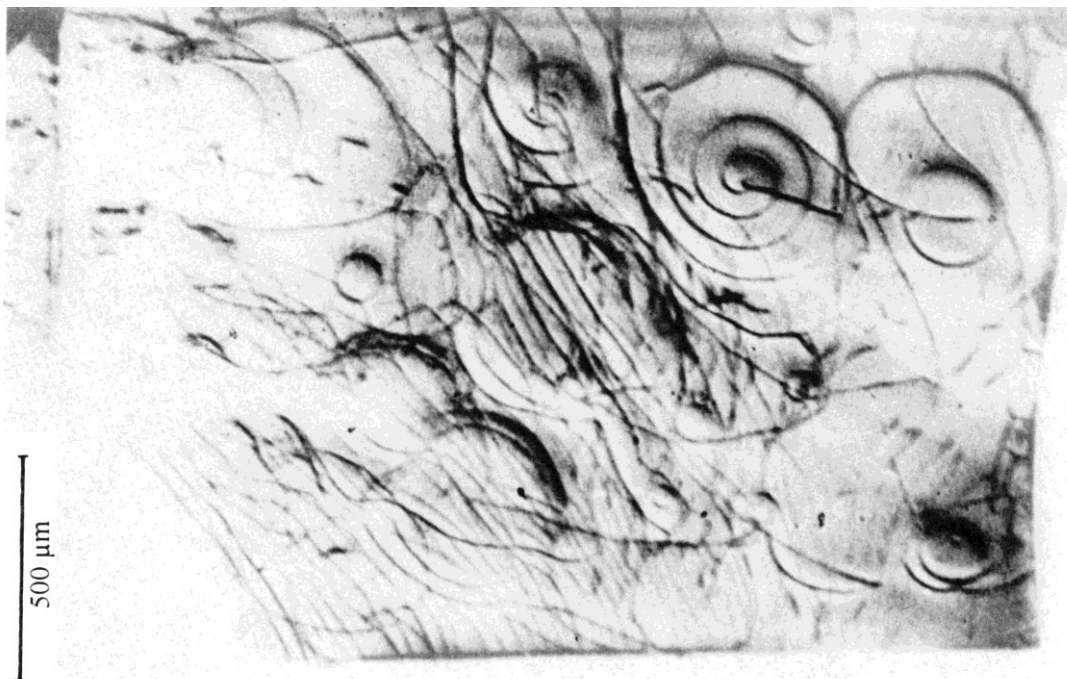
b) Dislokační zdroje produkující dislokace ve dvou různých rovinách, A. George.

Rentgenová topografie (*X-ray topography*).



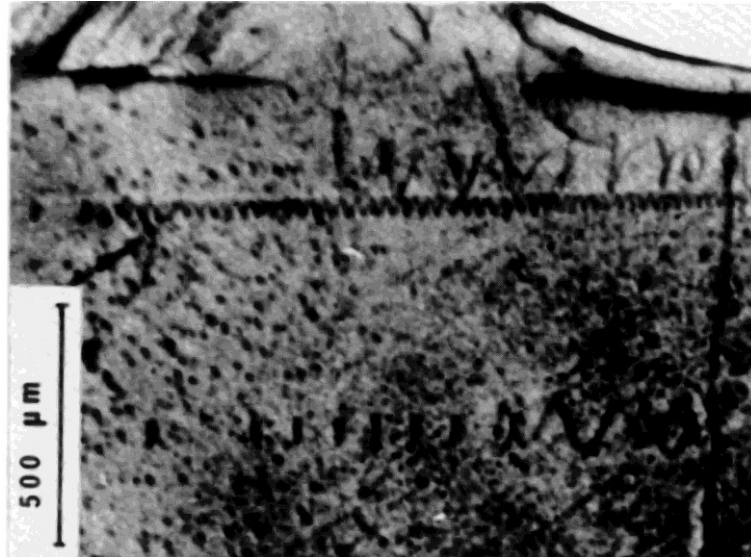
**Obrázek 11.5** Monokrystal kadmia.

Černé čáry jsou dislokační dipóly (dvě dislokace blízko sebe, rovnoběžné s opačnými  $\vec{b}$ ), vytvořené dislokačním šplhem,  $\vec{b} = 1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ . Lze také pozorovat menší prizmatické dislokační smyčky s  $\vec{b} = [0001]$ . J.P. Feireisen, C. G'Sell. Rentgenová topografie.



**Obrázek 11.6** Zn, rentgenová topografie.

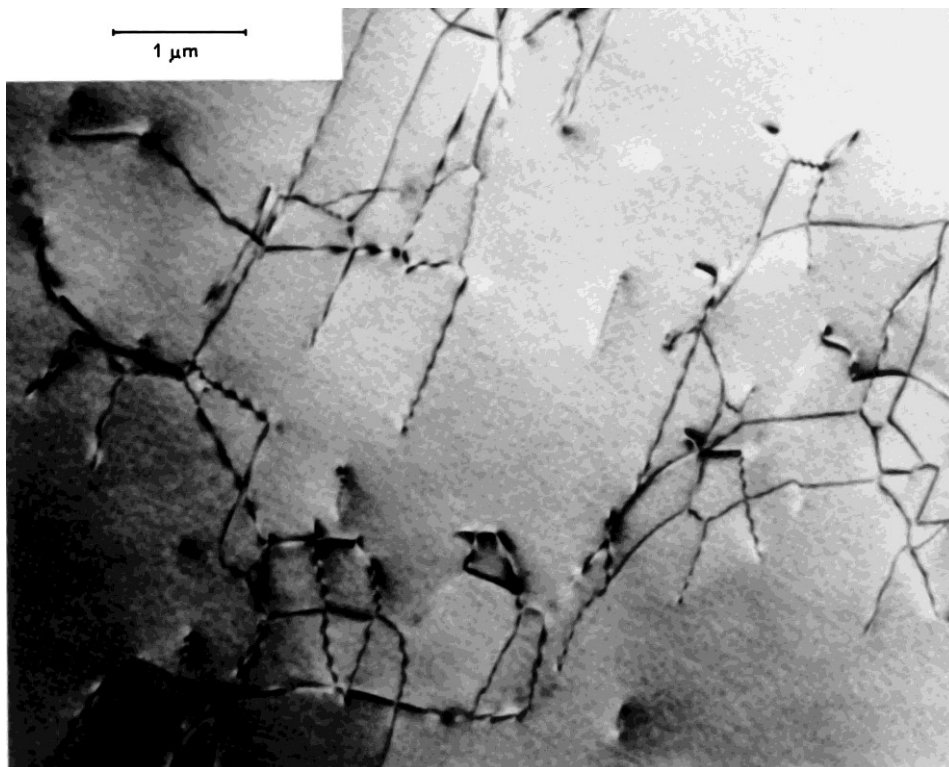
Dislokace ve tvaru spirály, vzniklá díky šplhu,  $\vec{b} = \vec{a} + \vec{c}$  (Burgersův vektor = součet translačních vektorů hexagonální mřížky), C. G'Sell.



**Obrázek 11.7** Al, rentgenová topografie.

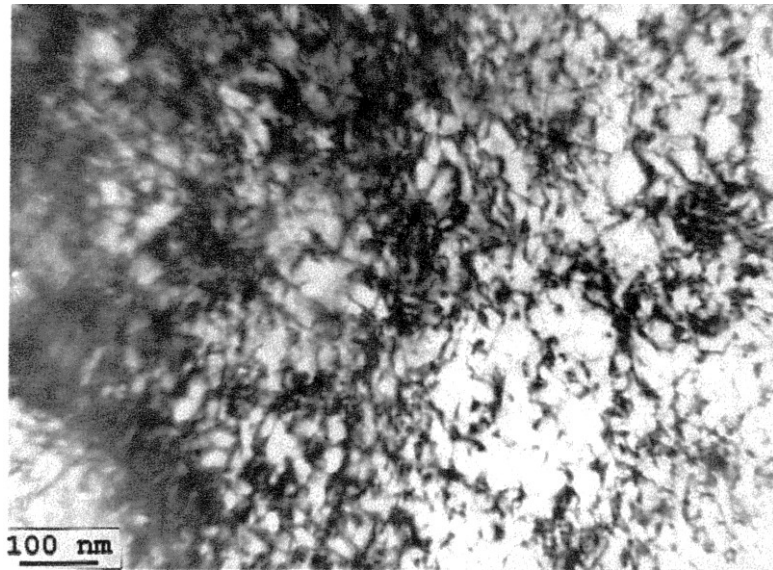
Další příklad spirálové dislokace vzniklé šplhem, která se může rozložit na sérii malých smyček, C. G'Sell.

#### 11.4.2 Transmisní elektronová mikroskopie



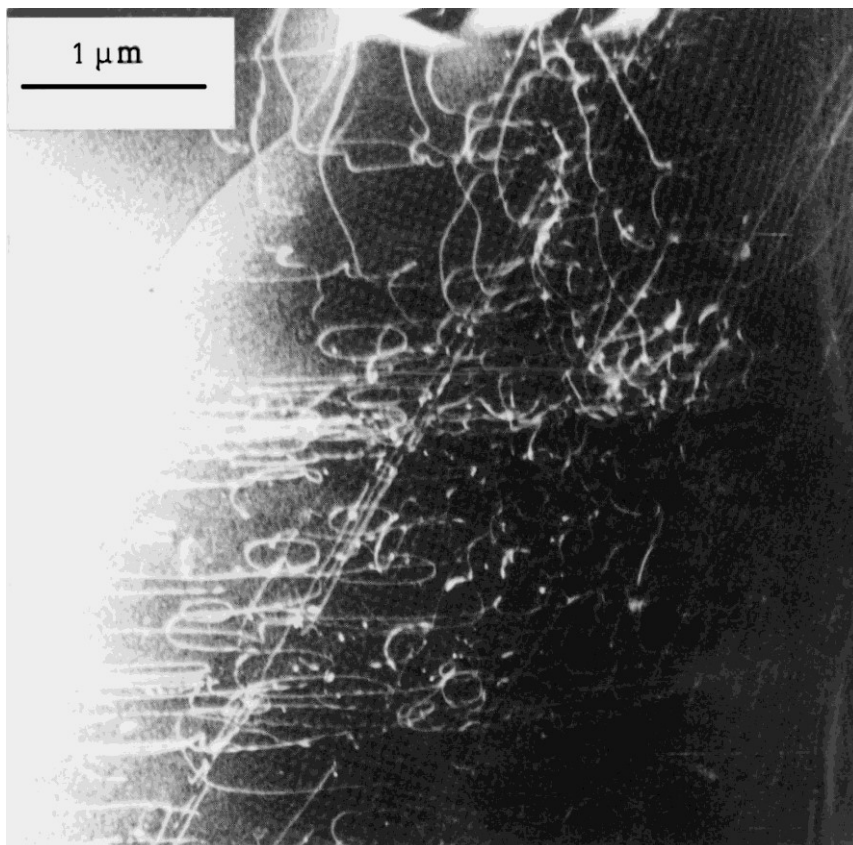
**Obrázek 11.8** Si, TEM světlé pole (*bright field*).

Dislokace vzniklé deformací za vysoké teploty. Všech 6 možných variant Burgersova vektoru typu  $a/2\langle 110 \rangle$  je přítomno. Všimněte si také množství dislokačních reakcí. F. Bigorgne, J.P. Michel.



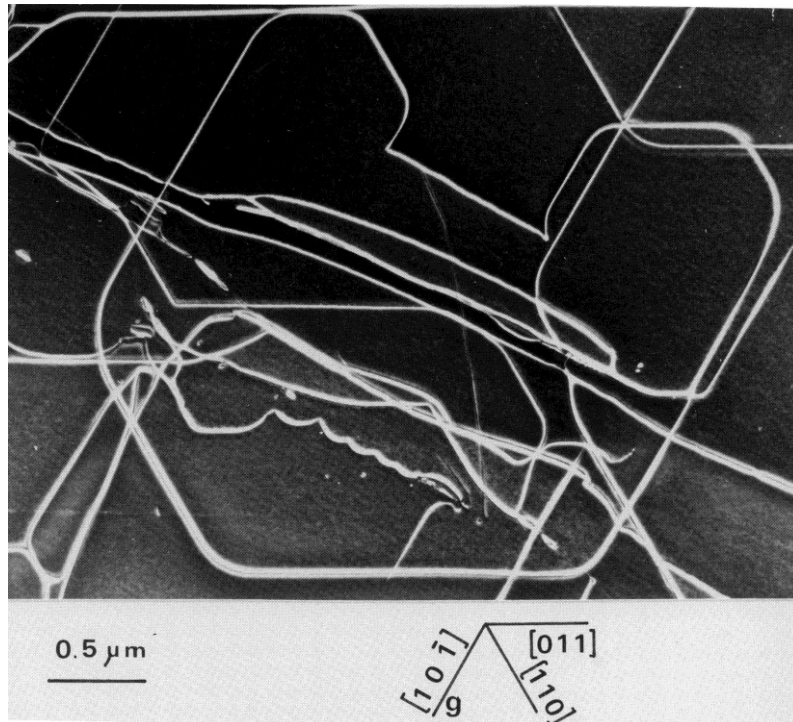
**Obrázek 11.9** Bainitická ocel po kuličkování, fólie vyrobená z těsné blízkosti povrchu, TEM světlé pole.

Kuličkováním je dislokační hustota extrémně zvýšená (dislokační hustota na snímku řádově  $10^{16} \text{ m}^{-2}$ , srovnejte s obr. 11.8 a všimněte si také rozdílu ve zvětšení), T. Kruml.



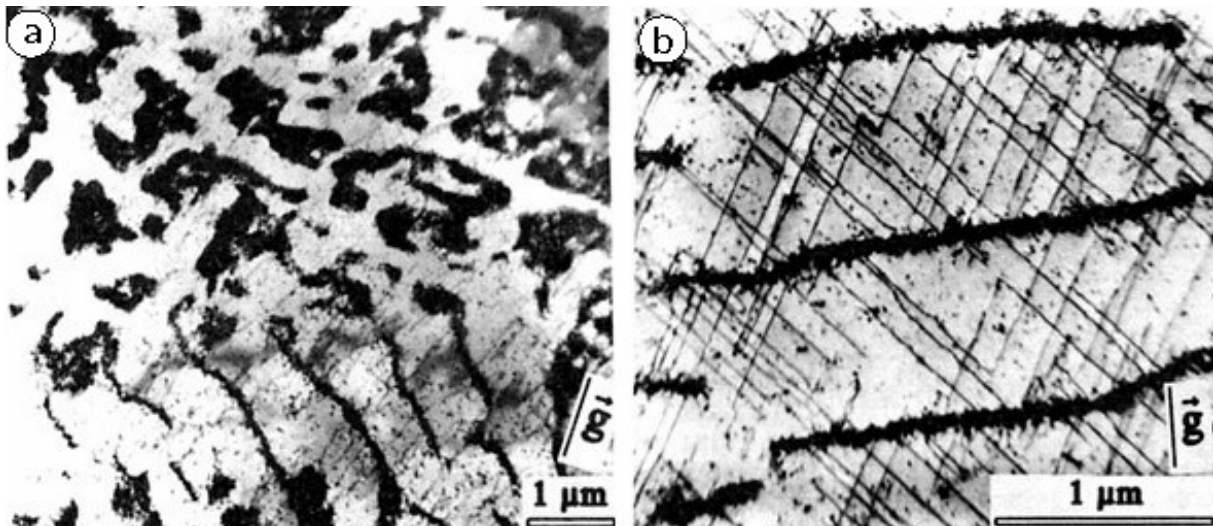
**Obrázek 11.10** Nitrid hliníku (keramika), TEM tmavé pole (*dark field*).

Dislokace v keramikách se pohybují jen za vysokých teplot, zde deformace proběhla za  $1600^\circ \text{ C}$ , I. Masson.



**Obrázek 11.11** Křemík, TEM tmavé pole.

Dislokace s  $\vec{b} = \frac{a}{2} [\bar{1}01]$ . Hranové dislokace byly vytvořeny při deformaci za vysoké teploty. Jedna z nich vytvořila Frank & Readův zdroj, který (za nižší teploty) právě produkuje dislokační smyčku s jedním šroubovým a dvěma  $60^\circ$  segmenty. Rozštěpení dislokací na dvě částečné dislokace je na hranici rozlišitelnosti, R. Allem, J.P. Michel.



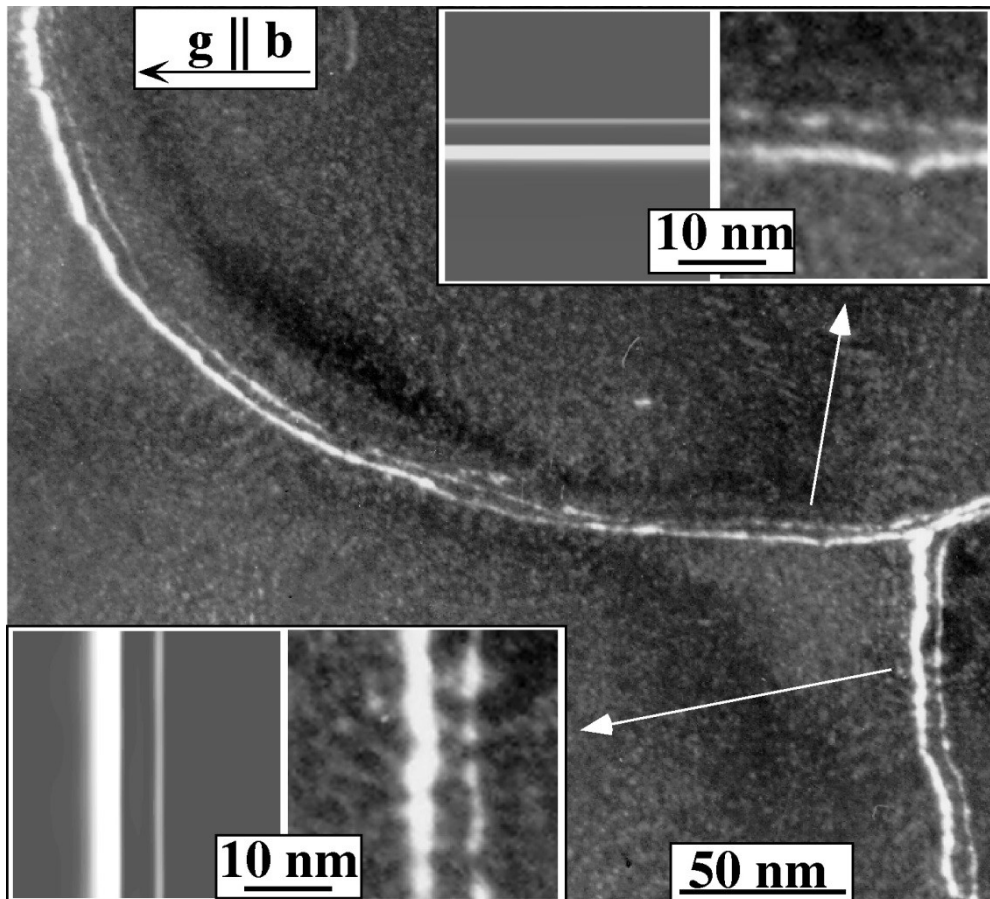
**Obrázek 11.12** Ferritická ocel, TEM světlé pole.

Pravidelné uspořádání dislokací ve ferritické oceli zatěžované cyklickou plastickou deformací.

a) Černé skvrny (tzv. žíly, *veins*) a linie (tzv. stěny, *walls*) jsou hustá seskupení dislokací. Ve stěnách jsou dislokace vzájemně v lokálně rovnovážných pozicích – dipólech.

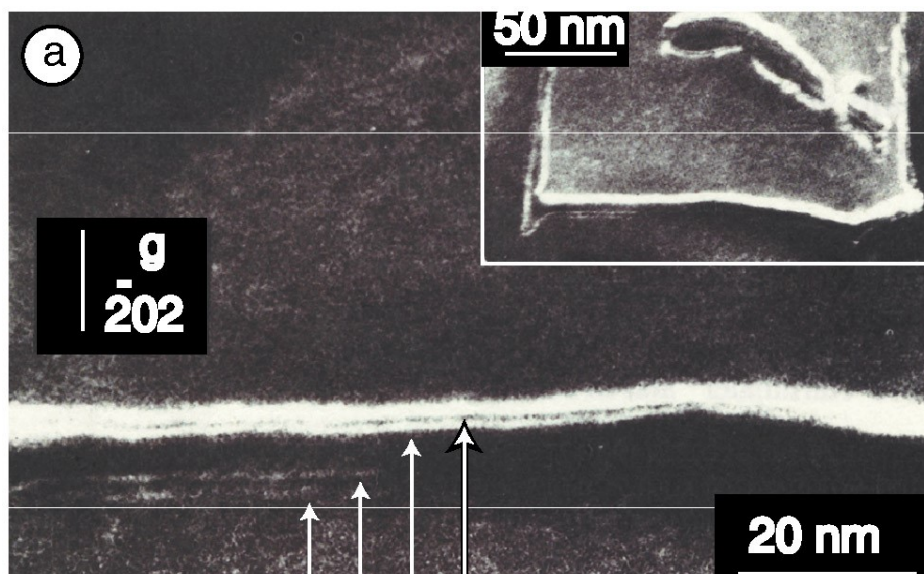
b) V kanálech mezi stěnami jsou vidět šroubové dislokace, T. Kruml.



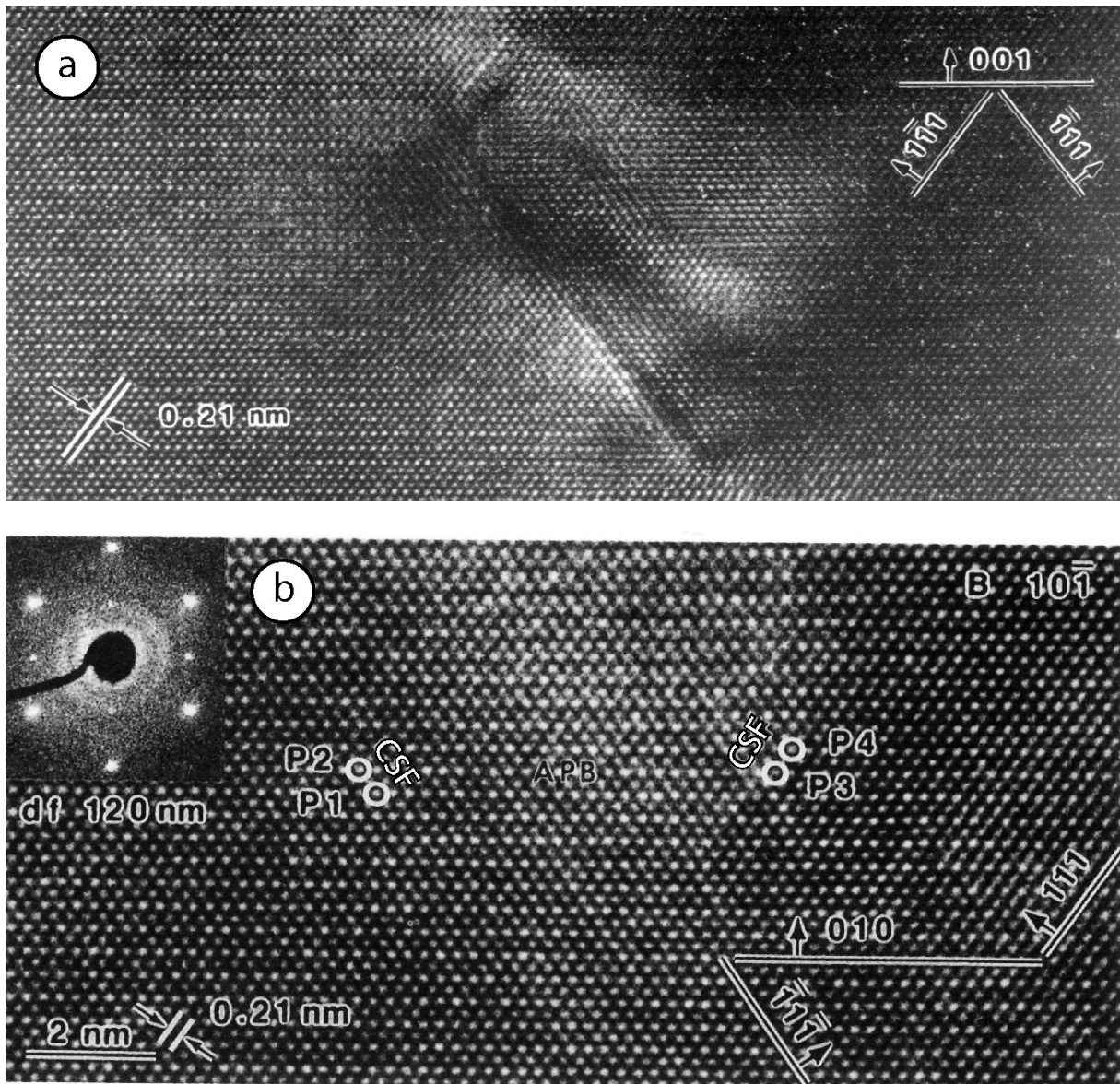


**Obrázek 11.13** Monokrystal  $\text{Ni}_3(\text{Al}, 3\% \text{at. Hf})$ , TEM, technika slabého svazku ve tmavém poli (*weak-beam dark field*).

Úplná dislokace rozštěpená na 2 parciální, srovnání skutečného a teoreticky vypočteného obrazu, T. Kruml.



**Obrázek 11.14** Monokrystal  $\text{Ni}_3(\text{Al}, 1\% \text{at. Ta})$ , TEM slabý svazek. Dislokace rozštěpená na 4 parciální dislokace, N. Baluc.

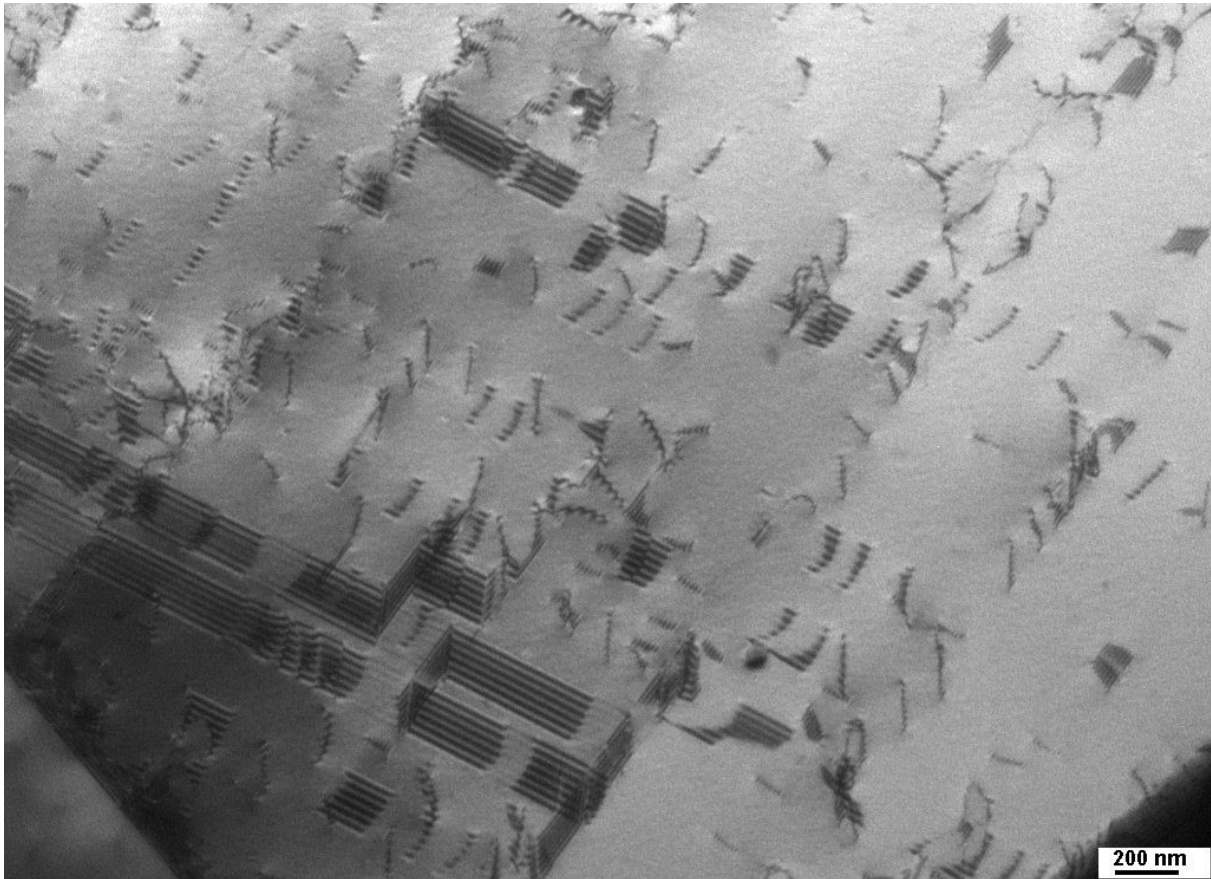


**Obrázek 11.15** Monokrystal  $\text{Ni}_3(\text{Al}, 1\% \text{at. Ta})$ , TEM v módu vysokého rozlišení (HRTEM, *high resolution transmission electron microscopy*).

Moderní TEM přístroje mají lepší rozlišení, než je mřížkový parametr krystalů. V režimu vysokého rozlišení je možné zviditelnit sloupce atomů (bílé skvrny) a přímo pozorovat rozmístění atomů v okolí jádra dislokace.

a) Orientace krystalu vzhledem k elektronovému svazku je  $[110]$ . Hranová dislokace s  $\vec{d}$  kolmý na rovinu snímku, rozštěpená na 4 parciální dislokace se nachází uprostřed snímku. Dobře jsou vidět zejména vrstevné chyby spojující dislokace.

b) Šroubová dislokace rozštěpená na 4 parciální, označené jako P1, P2, P3 a P4,  $\vec{d}$  je kolmé k rovině snímku. Tentokrát jsou dislokace velmi špatně pozorovatelné, protože přemístění atomů jsou (téměř) rovnoběžná s dislokační čarou, tedy také kolmá na snímek, N. Baluc.



**Obrázek 11.16** Austenitická ocel 301LN. Austenitické oceli mají velmi nízkou energii vrstevné chyby, parciální dislokace jsou od sebe vzdálené a pásy vrstevných chyb jsou zobrazeny jako „proužkované“ pásy. Tmavé a světlé proužky se periodicky střídají díky měnící se poloze poruchy ve fólii jako efekt při pozorování využívajícím difrakční kontrast.



## S H R N U T Í

Dislokace jsou čarové poruchy krystalové mřížky, jejichž pohyb způsobuje plastickou deformaci krystalu.

Dislokace je zcela popsána krystalovou mřížkou a dvěma vektory:

- Burgersův vektor  $\vec{b}$  je roven vektoru přemístění atomů způsobených průchodem dislokace. Musí být stejný podél celé dislokační čáry.
- Vektor dislokační čáry  $\vec{d}$  je jednotkový vektor tečný k dislokaci.

Úhel mezi  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  se nazývá charakter dislokace. U hranové dislokace je  $\vec{b}$  kolmé na  $\vec{d}$ , u šroubové dislokace jsou  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$  rovnoběžné.

Dislokace nemůže mít volné konce uprostřed krystalu.

Pole napětí v okolí dislokace (v přiblížení izotropické elasticity) klesá se vzdáleností jako  $1/r$ . Hovoříme proto o interakci na dlouhou vzdálenost.

Energie dislokace jednotkové délky je:

$$W = \alpha G b^2 \quad [\text{J/m}], \quad 0.5 < \alpha < 1$$

Tah v dislokační čáře je imaginární síla působící ve směru dislokační čáry. Tento koncept je užitečný při hledání rovnovážné konfigurace dislokací.

Pohyb dislokací vzniká v důsledku působení smykového napětí, které může mít externí původ nebo může vzniknout díky vnitřním poruchám v krystalu. Síla působící na dislokaci o jednotkové délce je daná vztahem Peach & Koehlera:

$$\vec{F} = (\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \vec{d}$$

Na celou dislokaci, nezávisle na charakteru segmentu, působí složka PK síly, která je kolmá k  $\vec{d}$  a má konstantní velikost  $\tau b$  kde  $\tau$  je složka tenzoru napětí v rovině a směru skluzu.

Dislokace se může pohybovat skluzem; za zvýšených teplot pomocí difúze také šplhem. Skluzová rovina je rovina, ve které leží oba vektory  $\vec{b}$  a  $\vec{d}$ .

Dislokační hustota (celková délka dislokací v jednotkovém objemu) se během plastické deformace mění, protože dislokace mohou multiplikovat, reagovat, anihilovat a zanikat (povrch, hranice, rozhraní).

TEM je nejběžnější metodou používanou ke studiu dislokací.

Jádro úplné dislokace je obecně rozštěpené na dvě nebo více parciálních dislokací, oddělených pásem vrstevné chyby.

## LITERATURA

### 1. Detailní knihy:

**J.P. Hirth, J. Lothe:** Theory of dislocations, John Wiley, 2nd ed. (1992)

**J. Friedel:** Dislocations, Pergamon Press (1967)

**F.R. Nabarro:** Theory of crystal dislocations, Dover (1987)

Dislocations in solids, editeurs **F.R. Nabarro, J.P. Hirth**, North Holland; první díl vyšel v r. 1979, dnes série má 13 dílů.

### 2. Stručnější shrnutí:

**J.-L. Martin:** Dislocations et plasticité des cristaux, Presses polytechniques et universitaires romandes (2000)

**D. Hull, D.J. Bacon:** Introduction to dislocations, Pergamon Press, 3rd ed. (1995)

**J. Kovacs, L. Zsoldos:** Dislocations and plastic deformation, Pergamon Press (1973)

**W.T. Read:** Les dislocations dans les cristaux, Dunod (1957)

**J. Weertman, J. Weertman:** Théorie élémentaire des dislocations, Masson (1970)

## PŘÍLOHY

## A1. Přemístění, deformace a napětí v okolí přímkové dislokace (izotropní elasticita).

## a) Šroubová dislokace

Souřadné osy jsou zvoleny tak, že dislokace leží v ose  $x_3$ :  $\vec{d} = [001]$ ,  $\vec{b} = [00b]$ .

	Kartézské souřadnice	Válcové souřadnice
$\vec{u}$	$u_1 = 0$ $u_2 = 0$ $u_3 = \frac{b}{2\pi} \arctg \frac{x_2}{x_1}$	$u_r = 0$ $u_\theta = 0$ $u_3 = \frac{b}{2\pi} \theta$
$\varepsilon$	$\varepsilon_{11} = 0$ $\varepsilon_{22} = 0$ $\varepsilon_{33} = 0$ $\varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} = \frac{b}{4\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2}$ $\varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} = -\frac{b}{4\pi} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2}$ $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = 0$	$\varepsilon_{rr} = 0$ $\varepsilon_{\theta\theta} = 0$ $\varepsilon_{33} = 0$ $\varepsilon_{\theta 3} = \varepsilon_{3\theta} = \frac{b}{4\pi r}$ $\varepsilon_{r3} = \varepsilon_{3r} = 0$ $\varepsilon_{r\theta} = \varepsilon_{\theta r} = 0$
$\sum \varepsilon_{ii}$	0	0
$\vec{\sigma}$	$\sigma_{11} = 0$ $\sigma_{22} = 0$ $\sigma_{33} = 0$ $\sigma_{23} = \sigma_{32} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2}$ $\sigma_{13} = \sigma_{31} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2}$ $\sigma_{12} = \sigma_{21} = 0$	$\sigma_{rr} = 0$ $\sigma_{\theta\theta} = 0$ $\sigma_{33} = 0$ $\sigma_{\theta 3} = \sigma_{3\theta} = \frac{Gb}{2\pi r}$ $\sigma_{r3} = \sigma_{3r} = 0$ $\sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta r} = 0$

### b) Hranová dislokace

$$\bar{d} = [001] \text{ a } \bar{b} = [b00].$$

Kartézské souřadnice, kartézské složky

$\bar{u}$	$u_1 = \frac{b}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{x_2}{x_1} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{x_1 x_2}{x_1^2 + x_2^2} \right]$ $u_2 = -\frac{b}{8\pi(1-\nu)} \left[ (1-2\nu) \ln(x_1^2 + x_2^2) + \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_1^2 + x_2^2} \right]$ $u_3 = 0$
$\varepsilon$	$\varepsilon_{11} = -\frac{b}{2\pi} \left[ \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} \right]$ $\varepsilon_{22} = -\frac{b}{4\pi(1-\nu)} \left[ (1-2\nu) \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} - \frac{2x_1^2 x_2}{(x_1^2 + x_2^2)^2} \right]$ $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{23} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{12} = 0$
$\sum \varepsilon_{ii}$	$\varepsilon_{ii} = -\frac{b}{2\pi} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2}; \quad \varepsilon_{ii, \text{stredni}} = 0$
$\sigma$	$\sigma_{11} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2}$ $\sigma_{22} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2}$ $\sigma_{33} = \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})$ $\sigma_{12} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2}$ $\sigma_{23} = \sigma_{13} = 0$

$\nu$  - Poissonovo číslo

Válcové souřadnice, kartézské složky

$\bar{u}$	$u_1 = \frac{b}{2\pi} \left[ \theta + \frac{\sin 2\theta}{4(1-\nu)} \right]$ $u_2 = -\frac{b}{4\pi(1-\nu)} \left[ (1-2\nu)\log r + \frac{\cos 2\theta}{2} \right]$ $u_3 = 0$
$\varepsilon$	$\varepsilon_{11} = -\frac{b}{2\pi} \frac{\sin \theta}{r} \left[ 1 + \frac{\cos \theta}{2(1-\nu)} \right]$ $\varepsilon_{22} = -\frac{b}{4\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r} (2\nu + \cos 2\theta)$ $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{23} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{12} = 0$
$\varepsilon_{ii}$	$\varepsilon_{ii} = -\frac{b}{2\pi} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\sin \theta}{r}; \quad \varepsilon_{ii, \text{stredni}} = 0$
$\sigma$	$\sigma_{11} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r} (2 + \cos 2\theta)$ $\sigma_{22} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta \cos 2\theta}{r}$ $\sigma_{33} = \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})$ $\sigma_{12} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta \cos 2\theta}{r}$ $\sigma_{23} = \sigma_{13} = 0$

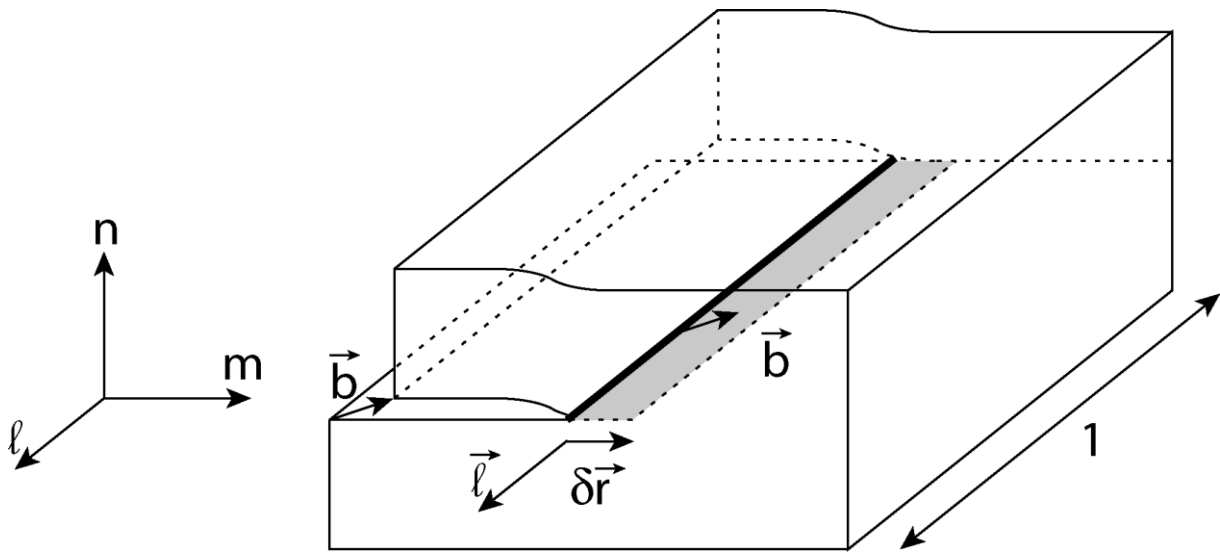
Souřadnice i složky válcové

$\sigma$	$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r}$ $\sigma_{33} = -\frac{\nu Gb}{\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r}$ $\sigma_{r\theta} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta}{r}$ $\sigma_{r3} = \sigma_{\theta 3} = 0$
----------	--

## A.2 Rovnice Peache a Koehlera

### A.2.1 Demonstrace

Uvažujme nekonečný krystal obsahující přímkovou dislokaci, rovnoběžnou s osou  $\vec{\ell}$  (jednotkový vektor). Burgersův vektor dislokace  $\vec{b}$ , leží v rovině, jejíž normála je  $\vec{n}$  a která je tedy skluzovou rovinou uvažované dislokace (obr. A.5). Vlivem homogenního aplikovaného pole napětí  $\overline{\sigma}$  se dislokace posune o vzdálenost  $|\delta\vec{r}|$ , rovnoběžně s vektorem  $\vec{m}$  ( $\delta\vec{r}$  má velikost několik meziatomových vzdáleností).



**Obrázek A.1** Pohyb přímkové smíšené dislokace.

Spočítejme práci nutnou k tomuto přemístění dislokace a omezme délku krystalu podél osy  $\vec{\ell}$  na jednotku. Nejprve vyjádříme napětí, kterým působí část krystalu pod skluzovou rovinou na horní část krystalu (tj. na rovinu o normále  $-\vec{n}$ ):

$$\vec{T} = \overline{\sigma} \cdot (-\vec{n})$$

$\vec{T}$  je vektor, jehož složky tvoří napětí působící ve skluzové rovině (1 normálová a 2 smykové složky). Toto napětí můžeme přepočíst na sílu  $\vec{f}$ , působící na plochu  $1 \times \delta r$ :

$$\vec{f} = \vec{T} \delta r$$

Atomy nad a pod touto plochou byly přemístěny o  $\vec{b}$ ; práce  $W$  vykonaná proti síle  $\vec{f}$  je:

$$W = -\vec{f} \cdot \vec{b} = \left[ -\bar{\sigma} \cdot (-\vec{n}) \delta r \right] \cdot \vec{b}$$

Poznámka : Předpokládáme, že elastická energie zakřivující atomové roviny před a za dislokací je stejná před i po smykové deformaci.

Práce  $W$  může být vyjádřena také jiným způsobem: představme si, že na dislokaci působí fiktivní síla  $\vec{F}$  (na jednotku její délky). Při smykové deformaci bude práce této síly  $W$ :

$$W = \vec{F} \cdot \delta \vec{r}$$

Srovnáním obou výrazů pro práci  $W$  dostáváme:

$$\vec{F} \cdot \delta \vec{r} = (\bar{\sigma} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{b} \delta r$$

Protože 
$$\vec{n} = \vec{\ell} \times \frac{\delta \vec{r}}{\delta r}$$

platí 
$$\vec{F} \cdot \delta \vec{r} = \left[ \bar{\sigma} \cdot (\vec{\ell} \times \delta \vec{r}) \right] \cdot \vec{b} = \left[ \bar{\sigma} \cdot (\vec{b} \times \vec{\ell}) \right] \cdot \delta \vec{r} = \left[ (\bar{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{\ell} \right] \cdot \delta \vec{r}$$

Neboť  $\vec{\ell} \equiv \vec{d}$ , odvodili jsme rovnici Peache & Koehlera :

$$\vec{F} = (\bar{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{d}$$

### A.2.2 Důsledky

a) Síla  $\vec{F}$  je kolmá na dislokační čáru

Z vlastností vektorového součinu okamžitě vidíme, že  $\vec{F} \cdot \vec{d} = 0$ .

b) Složka této síly v rovině skluzu,  $F_g$ , je rovna  $\tau b$

Složku P&K síly v rovině skluzu  $F_g$ , tedy rovnoběžnou s  $\vec{m}$ , vyjádříme jako:

$$\begin{aligned} F_g &= \vec{F} \cdot \vec{m} = \left[ (\bar{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{d} \right] \cdot (\vec{n} \times \vec{d}) = \\ &= (\bar{\sigma} \cdot \vec{b}) \left[ \vec{d} \times (\vec{n} \times \vec{d}) \right] = (\bar{\sigma} \cdot \vec{b}) \cdot \vec{n} \end{aligned}$$

Skluzovým napětím  $\tau$  (*resolved shear stress*) budeme nazývat složku tenzoru napětí v rovině deformace a ve směru Burgersova vektoru; vypočteme ji jako:

$$\tau = (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \cdot \frac{\vec{b}}{b}$$

Srovnáním obou rovnic :

$$F_g = \tau b$$

Závěr: Síla způsobující pohyb dislokace jednotkové délky ve skluzové rovině je vždy kolmá na dislokaci a podél dislokace je konstantní, rovna  $\tau b$ .



## Řešení cvičení

Cvičení 1: řešení vyplývá z obrázků

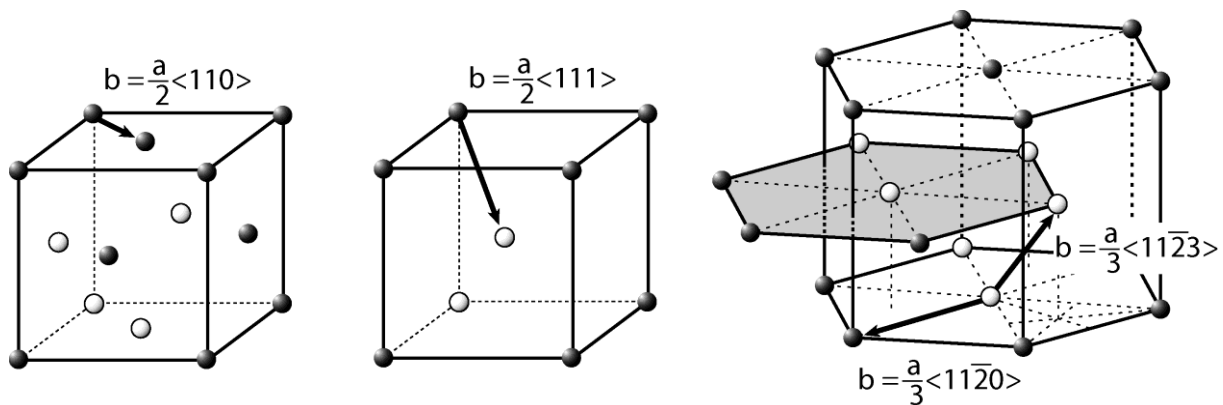
Cvičení 2: a, d, h nejsou možné.

Cvičení 3: Hledáme vektor, který i) spojuje dva sousední atomy a ii) jeho velikost je co nejmenší, aby energie dislokace byla minimální; hledáme tedy nejbližší sousedy.

Podle obrázku C3 (viz také kap. 4 ze skript Krystalová struktura pevných látek) je zřejmé, že ideální Burgersovy vektory tří zmíněných krystalových mřížek jsou :

- fcc :  $a/2\langle 110 \rangle$
- bcc :  $a/2\langle 111 \rangle$
- hcp :  $a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$  nebo  $a/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$  (záleží na poměru a/c)

Tyto  $\vec{b}$  jsou skutečně pozorovány u reálných krystalů.



**Obrázek C3.** Burgersovy vektory ve třech nejčastějších krystalových mřížkách.

Cvičení 4:

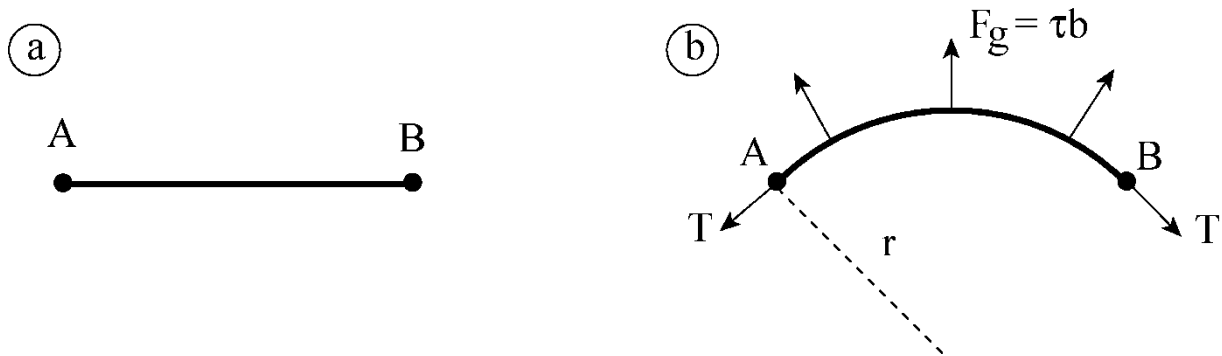
Řešení pro izotropní kontinuum:

a) bez působícího napětí a za předpokladu, že se dislokace může snadno pohybovat ve skluzové rovině, dislokace se stane přímkovou, aby se co nejvíce zmenšila její energie (obr. C4a).

b) pro malé  $\tau$ , dislokace vytvoří část kružnice (obr. 7.3 b). Jednoduchý výpočet ukazuje, poloměr křivosti  $r$  je svázán s  $\tau$  rovnicí:

$$r = \frac{\alpha G b}{\tau}$$

kde  $\alpha$  je koeficient z rovnice (9).



**Obrázek C4** Rovnovážná konfigurace dislokace bez (a) a s aplikovaným smykovým napětím  $\tau$  (b).

#### Cvičení 5:

Burgersův vektor dislokace byl rovnoběžný s  $\vec{a}$  a měl stejnou velikost jako  $\vec{a}$ . Jeho orientace záleží na volbě orientace  $\vec{d}$ .

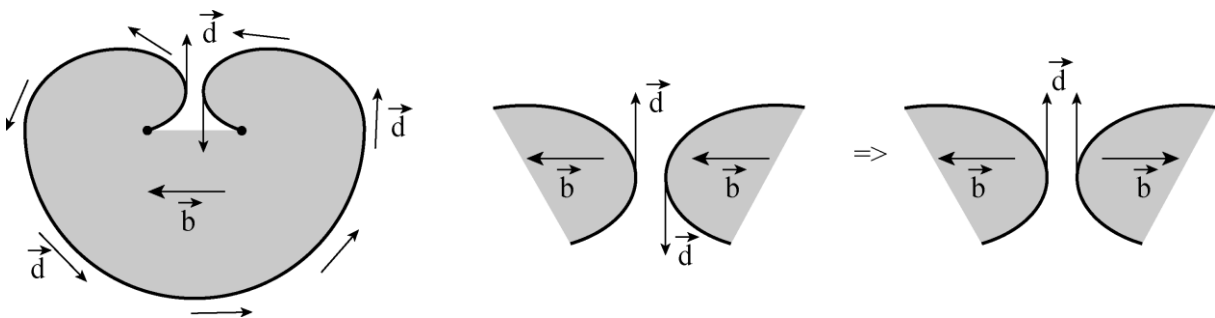
Naopak, o vektoru  $\vec{d}$  dislokace se nemůžeme dozvědět nic. Smyková deformace krystalu mohla být způsobena dislokací:

- hranovou, která prošla krystalem od AD k BC
- hranovou s opačně orientovaným  $\vec{b}$  než v předchozím případě, pohybující se od BC k AD
- šroubovou, klouzající od AB k CD
- šroubovou, klouzající od CD k AB
- $45^\circ$ , pohybující se od jedné hrany vzorku ve směru diagonály,
- skluzovou smyčkou, která vznikla uprostřed krystalu a rozšířila se až k okrajům vzorku, apod.

Smyková deformace vzorku záleží pouze na  $\vec{b}$  pohybující se dislokace;  $\vec{d}$  nemá pro deformaci žádný význam.

#### Cvičení 6:

Je potřeba si uvědomit, že vektor  $\vec{d}$  pro oba zmíněné segmenty je opačný. Pokud  $\vec{d}$  jednoho ze segmentů otočíme tak, aby oba segmenty byly stejně orientované, vektory  $\vec{b}$  budou mít opačnou orientaci, z čehož plyne jejich anihilace (obr. C6).



**Obrázek C6** Anihilace během fungování Frank & Readova zdroje.

Cvičení 7:

Nejprve nalezneme možnou kombinaci  $\vec{b}_1$ ,  $\vec{b}_2$  a  $\vec{b}_3$  pro tři studované dislokace. Jedna možnost je:

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{6}[\bar{2}11]$$

(Ověřte, že vektorový součet vektorů na pravé straně rovnice odpovídá vektoru na levé straně).

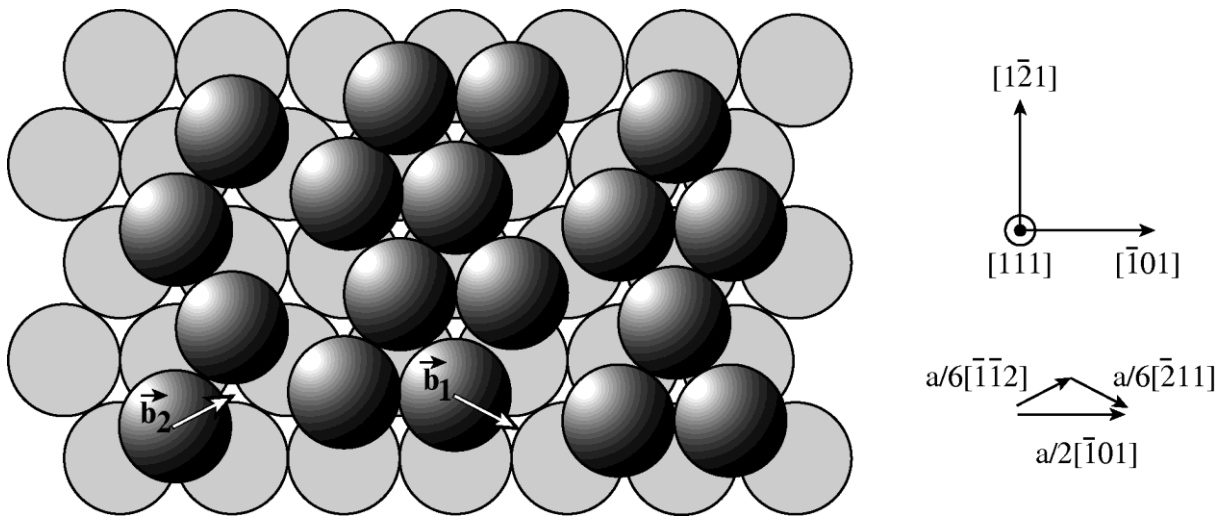
Energie dislokací:

$$W \text{ (úplná dislokace)} = \alpha G b^2 = \frac{a^2}{2} \alpha G$$

$$W \text{ (parciální dislokace)} = \frac{a^2}{6} \alpha G$$

$$\frac{a^2}{2} \alpha G > \frac{a^2}{6} \alpha G + \frac{a^2}{6} \alpha G$$

Elastická energie dvou parciálních dislokací je tedy nižší než jedné dislokace úplné. Prostudujte také obrázek 10.4.



**Obrázek C.7** Stejně rozštěpení jako na obr. 10.3. Všimněte si, že atomy mezi parciálními dislokacemi jsou v pozici hexagonální mřížky a ne mřížky fcc.