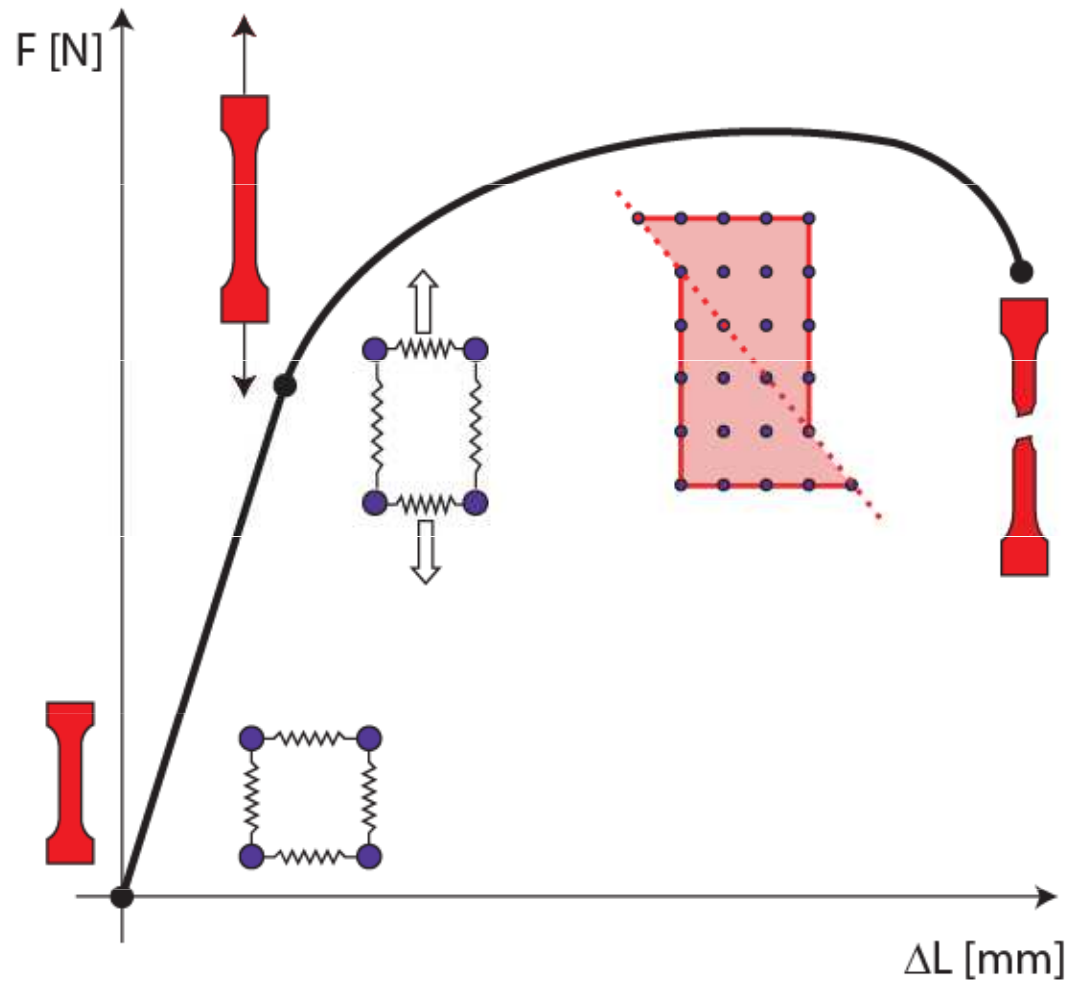
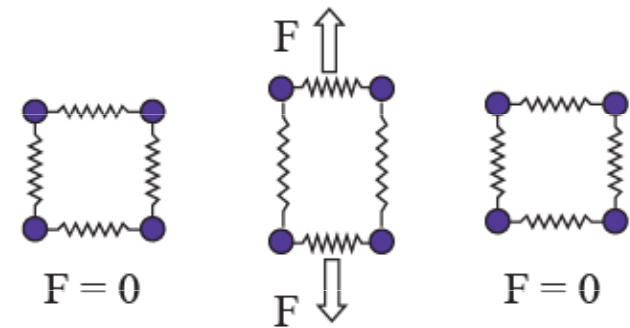


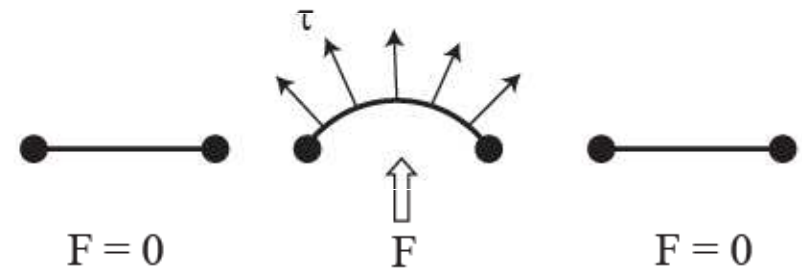
DEFORMACE



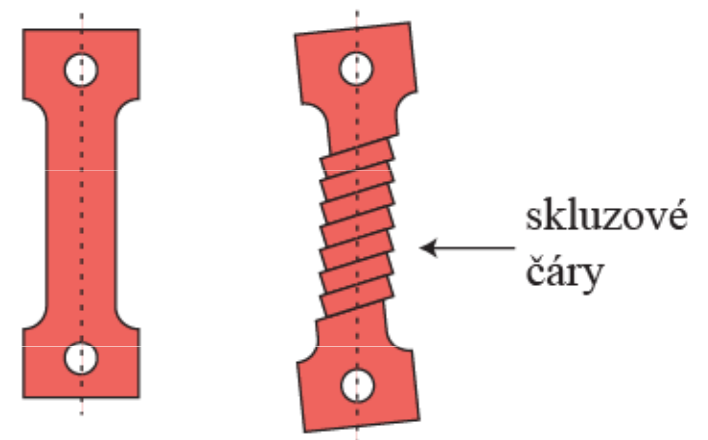
● Elastická deformace :



● Anelastická deformace :



● Plastická deformace (skluz dislokací):



SKLUZ

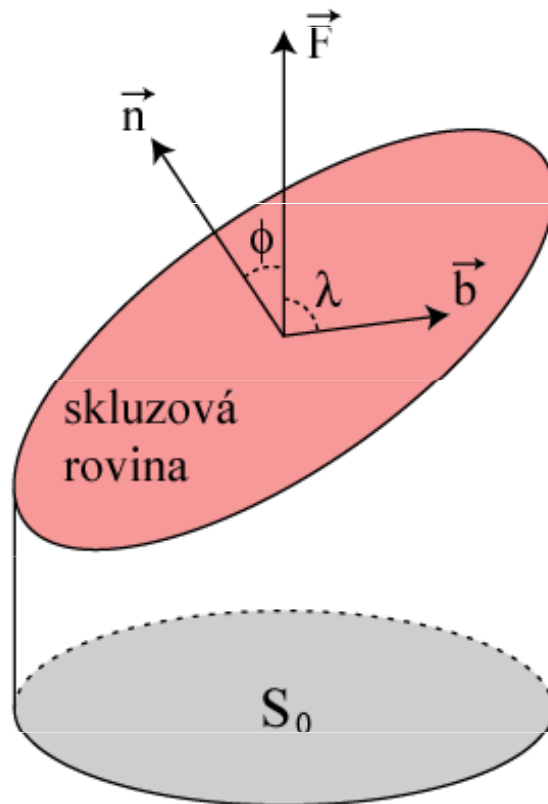
se uskutečňuje :

- po hustě obsazených rovinách
- ve směru nejbližších sousedů
- pohybem dislokací

Skluzový systém =
rovina skluzu + směr skluzu

Více ekvivalentních skluzových systémů:
který si krystal "vybere" ?

Ten, na který působí největší skluzové napětí τ



$$\tau = \frac{F}{S_0} \cos \phi \cos \lambda$$

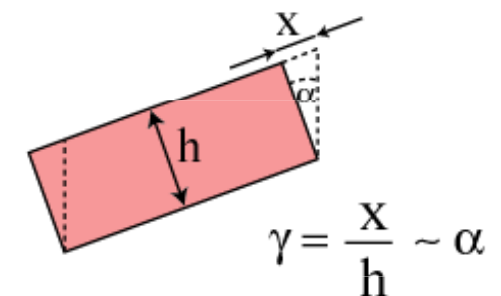
$$= \frac{F}{S_0} \sin \chi \cos \lambda$$

$$(\chi = 90 - \phi)$$

$$\tau = m \sigma$$

m - Schmiduv faktor
 $0 \leq m \leq 0,5$

smyková deformace γ :



$$\gamma = \frac{1}{m} \epsilon$$

pro malá ϵ

Schmidův zákon a kritické skluzové napětí

Primární skluzový systém je systém s maximální hodnotou m .

Sekundární skluzový systém Tento termín se používá ve dvou významech: buď je tak označován systém s druhým nejvyšším m , nebo obecně všechny skluzové systémy s výjimkou primárního.

Jednoduchý skluz je případ, kdy m_p primárního systému je výrazně vyšší než m sekundárního systému.

Vícenásobný skluz: dva nebo i více systémů jsou současně aktivované

Snadný skluz označuje případ, kdy se hodnota m_p primárního systému blíží jeho maximální teoretické hodnotě 0.5

Obtížný skluz případ, kdy hodnota m_p je nízká

Kritické skluzové napětí je napětí nezbytné ke skluzovému pohybu dislokací. Tento parametr závisí na vlastnostech lokálních překážek, které musí dislokace při skluzovém pohybu překonávat a na mikrostruktuře materiálu.

Schmidův zákon tvrdí, že aktivní skluzový systém je ten, který má nejvyšší hodnotu m . Ke skluzu dislokací dojde k okamžiku, kdy napětí $\tau = m\sigma$ dosáhne kritického skluzového napětí.

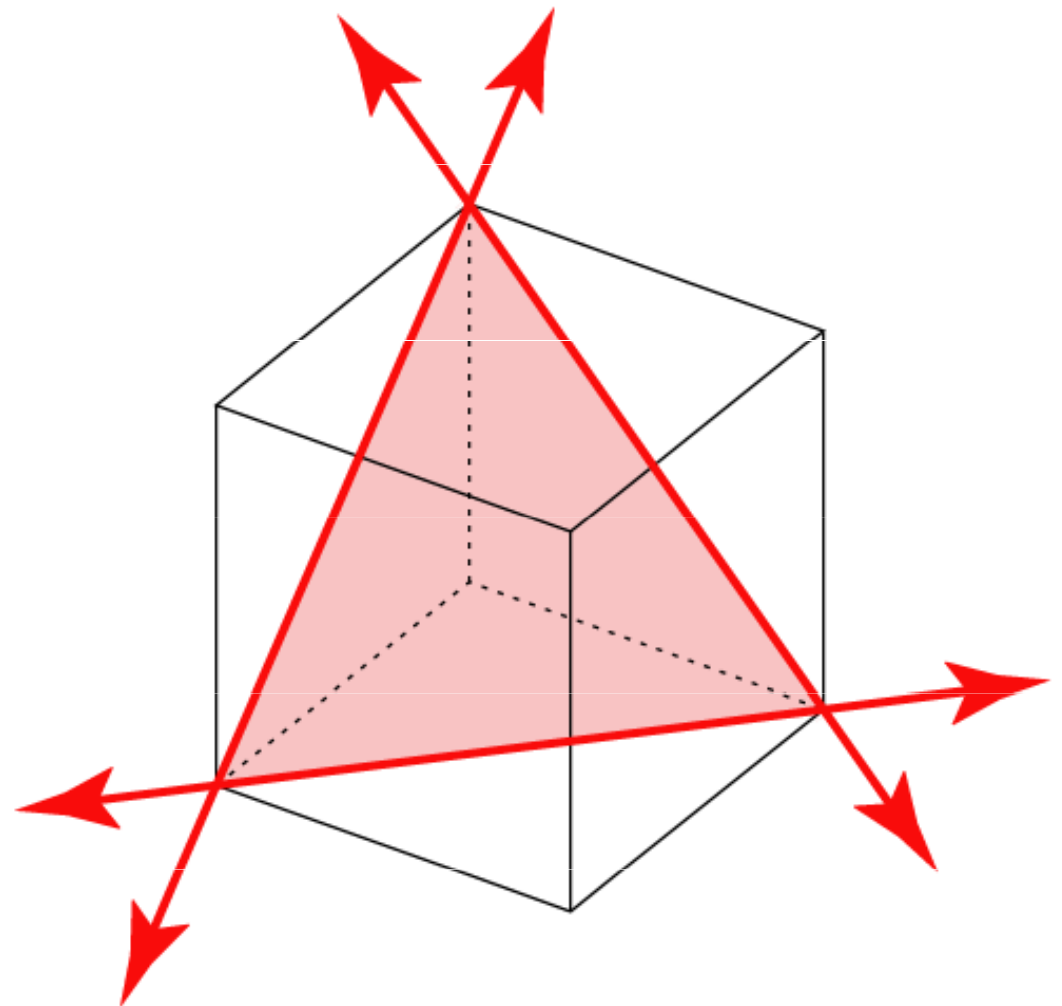
SKLUZOVÉ SYSTÉMY

krychlová plošně centrovaná	face centered cubic fcc
--------------------------------	----------------------------

Cu, Al, Ni,
Pb, Au, Ag,
Fe - γ

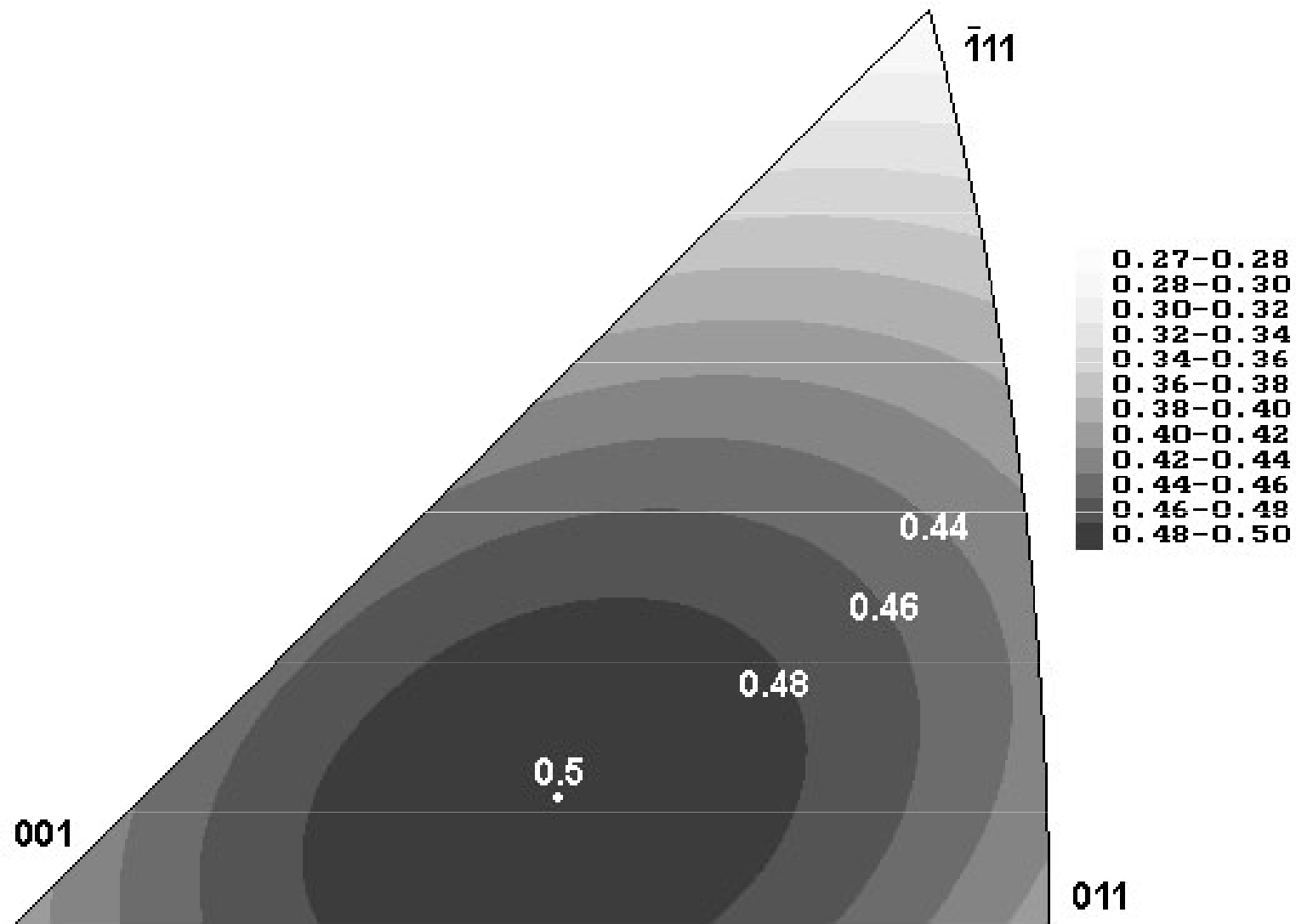
Rovina	Směr (\vec{b})
{111}	$\langle 110 \rangle$
4	3

12 skluzových systémů



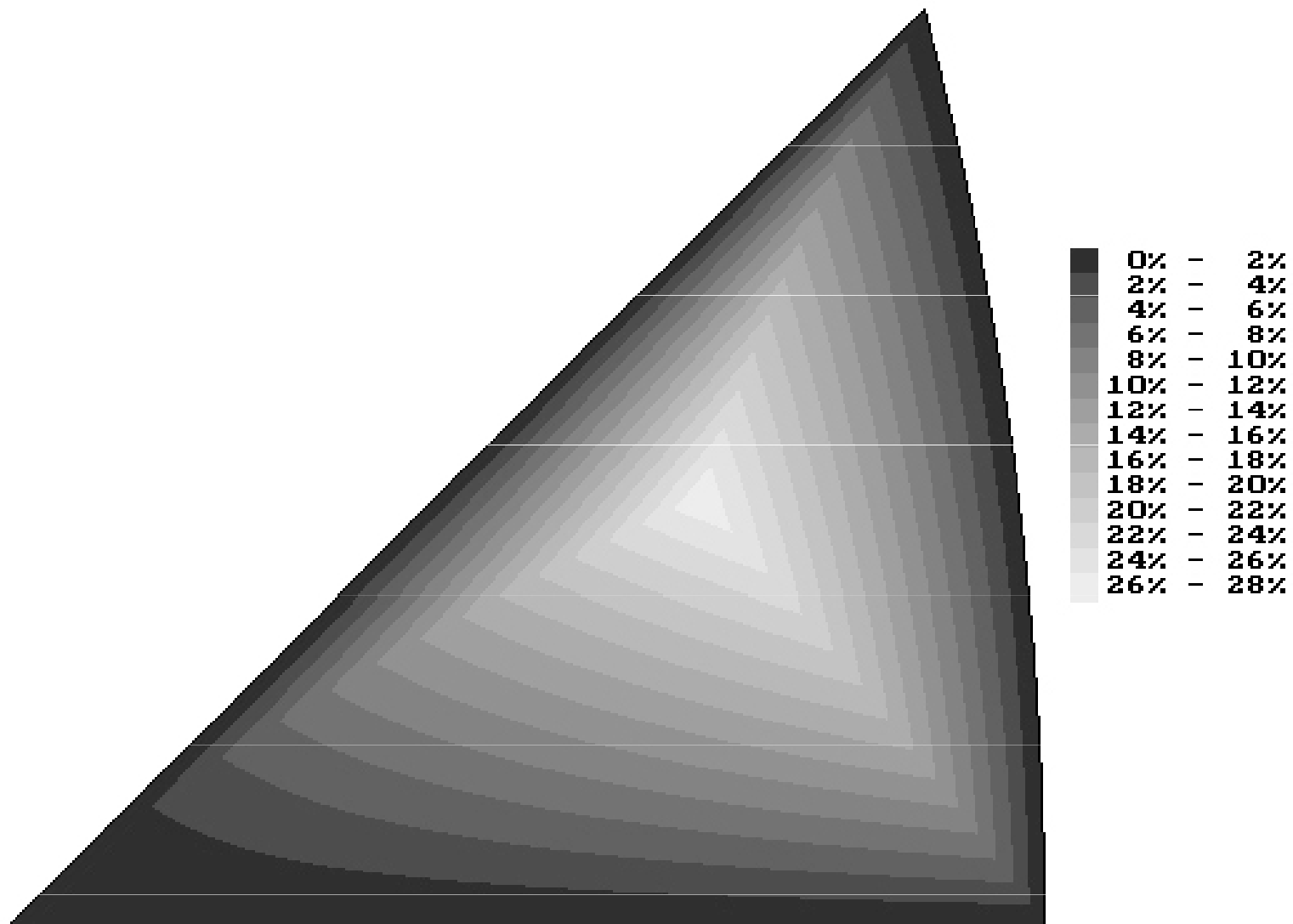
VELIKOST MAXIMÁLNÍHO SCHMIDOVA FAKTORU

snadný x obtížný skluz

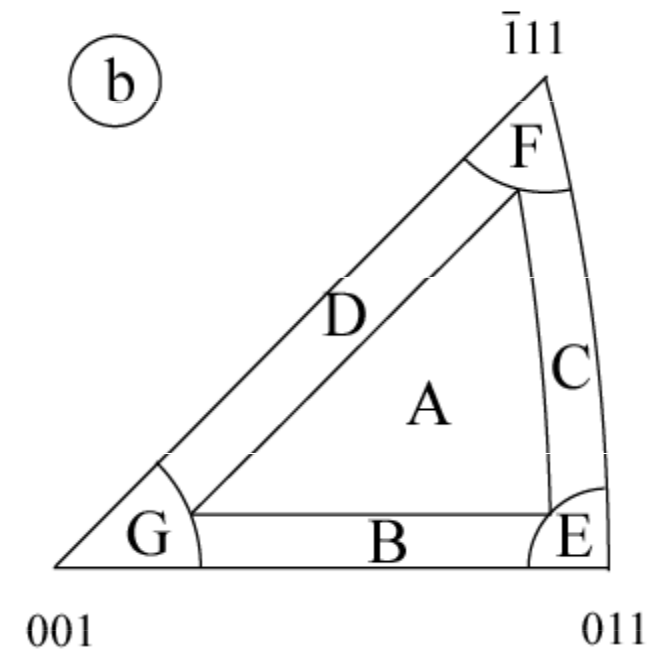
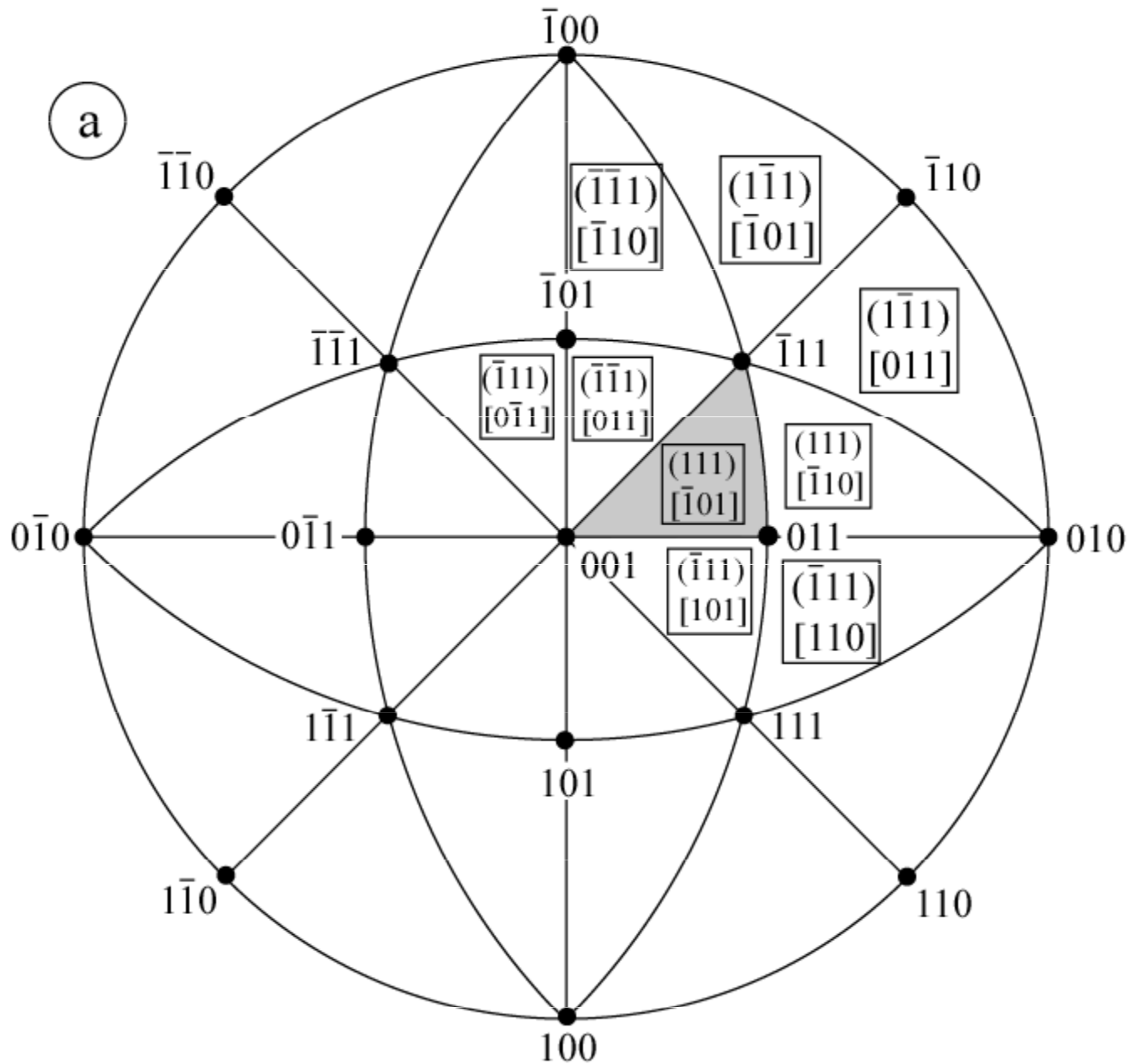


ROZDÍL DVOU NEJVYŠŠÍCH SCHMIDOVÝCH FAKTORŮ

jednoduchý x vícenásobný skluz

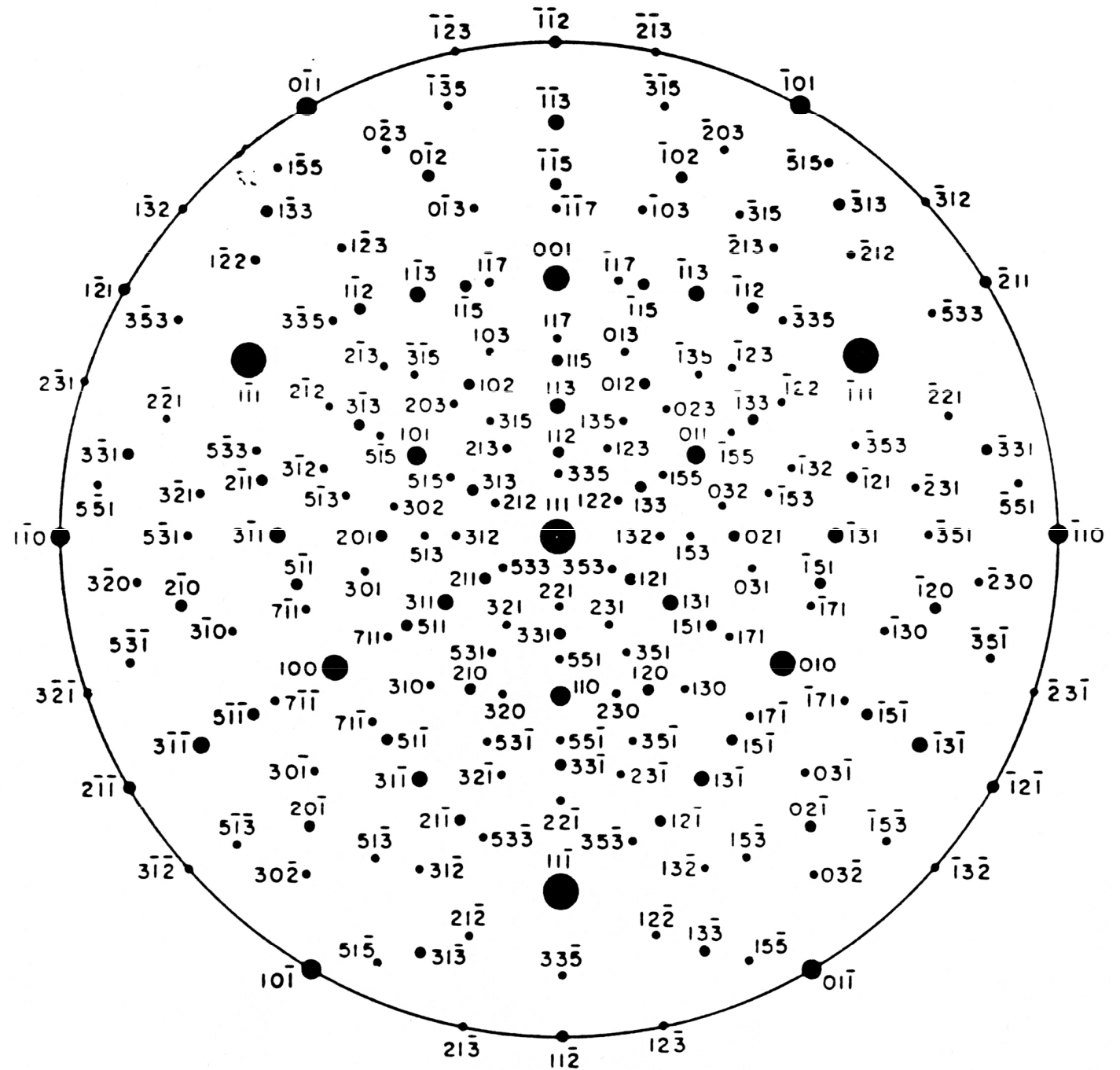


PRIMÁRNÍ SKLUZOVÉ SYSTÉMY - fcc



A : jednoduchý skluz
 B-G : vícenásobný skluz

SKLUZOVÉ SYSTÉMY - bcc



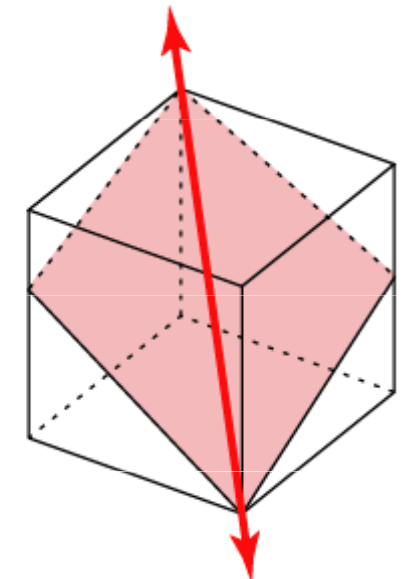
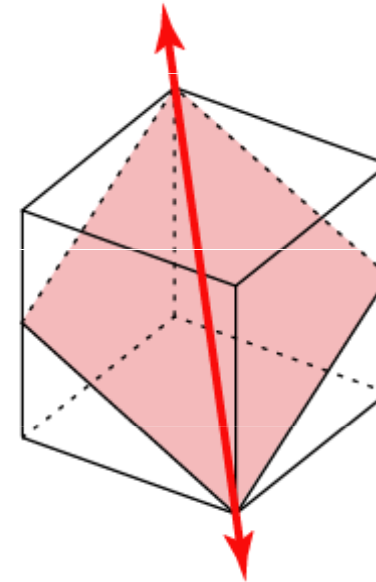
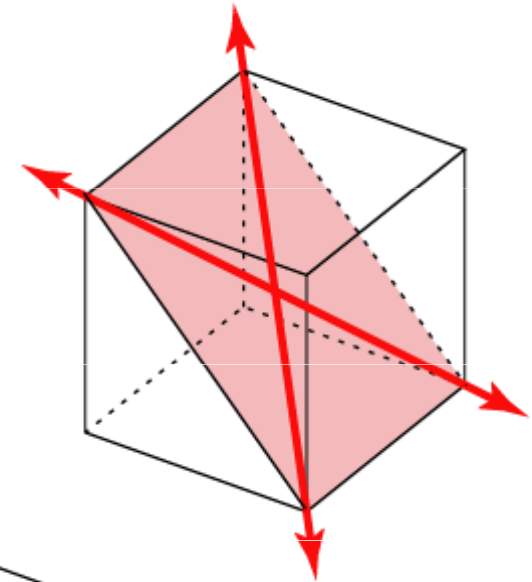
SKLUZOVÉ SYSTÉMY

krychlová prostorově centrovaná	body centered cubic bcc
------------------------------------	----------------------------

	Rovina	Směr (\vec{b})
Mo, W, Fe - α , mosaz β	{110}	$\langle 111 \rangle$
	6	x
		2

	Rovina	Směr (\vec{b})
Mo, Fe - α	{112}	$\langle 111 \rangle$
	12	x
		1

	Rovina	Směr (\vec{b})
K, Fe - α	{123}	$\langle 111 \rangle$
	24	x
		1

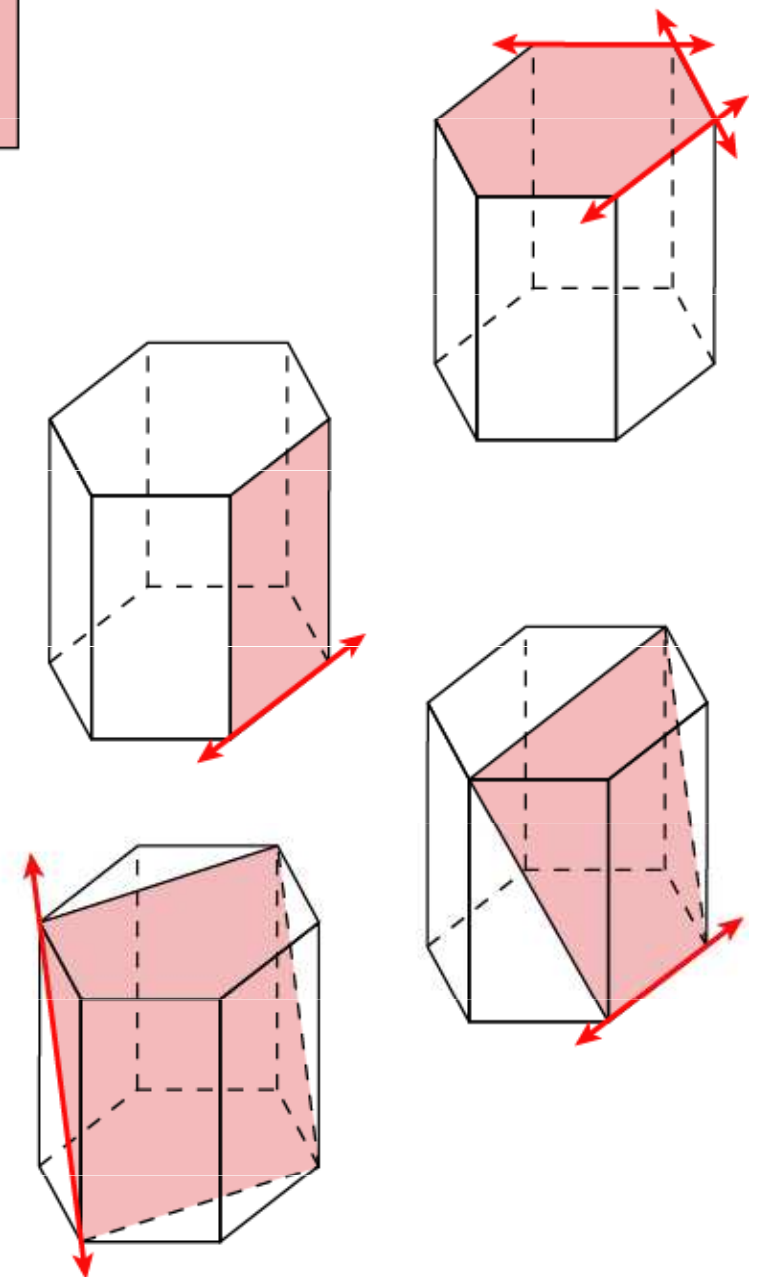


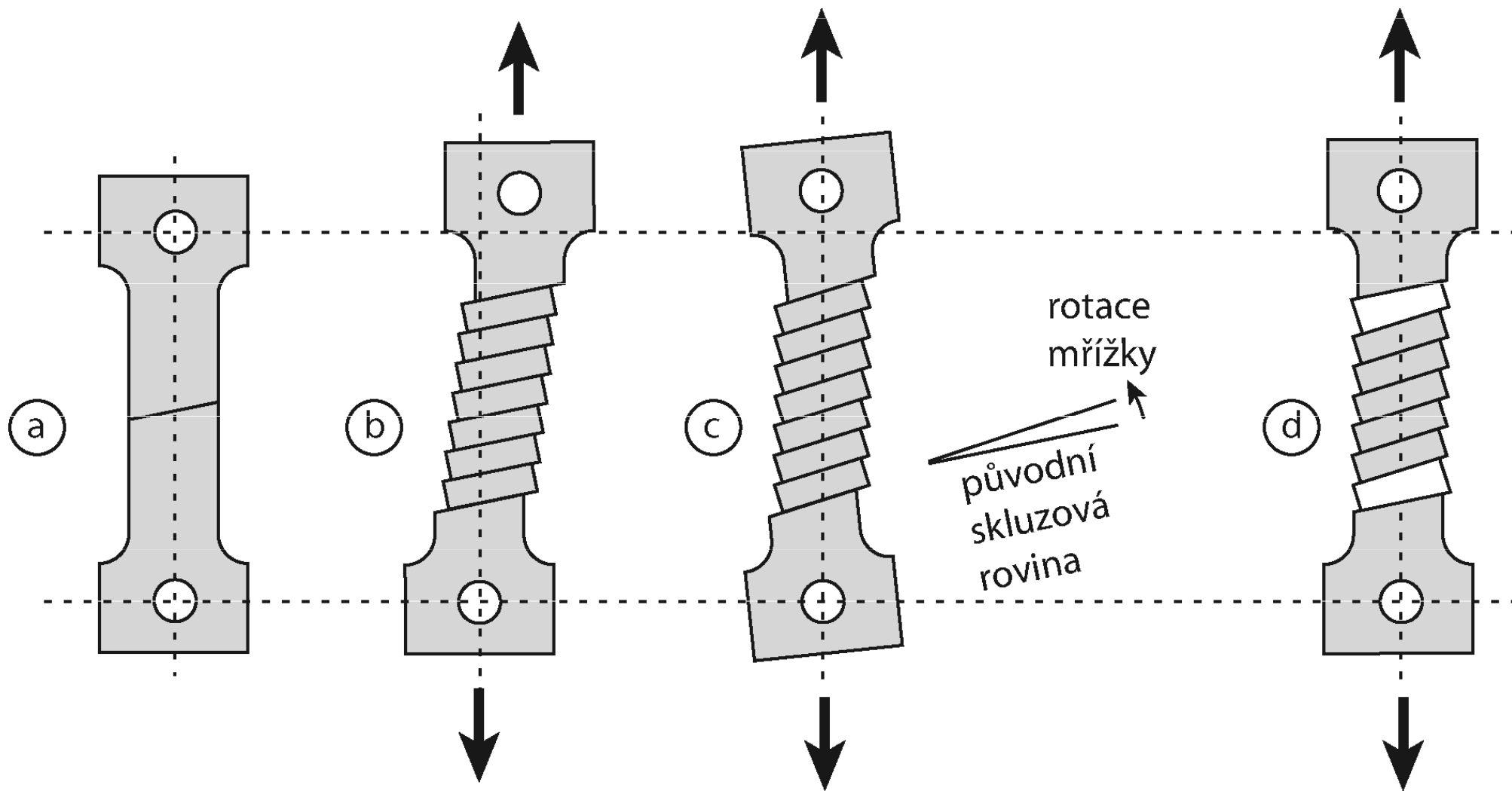
SKLUZOVÉ SYSTÉMY

hexagonální těsně
uspořádaná

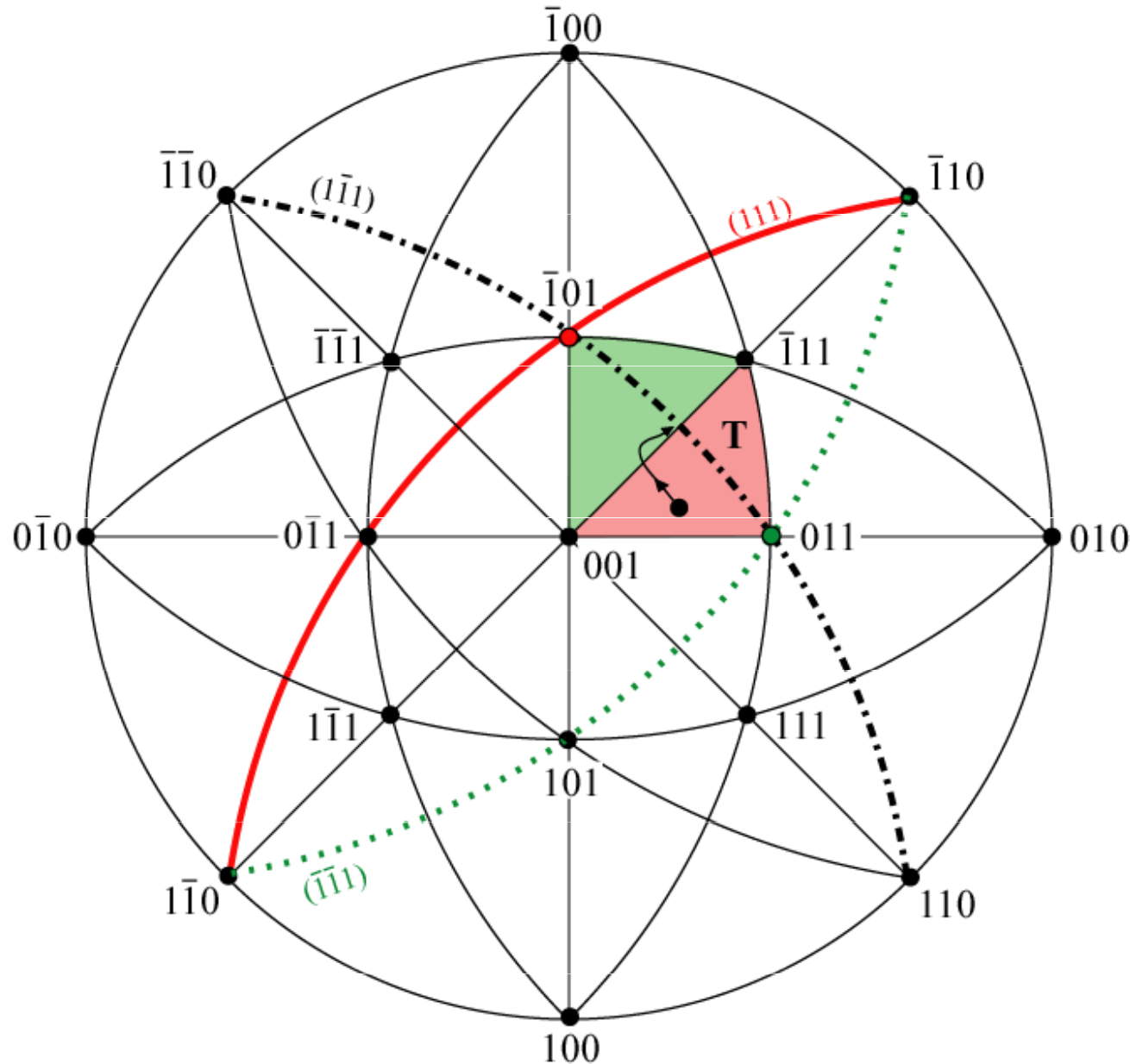
hexagonal close packed
hcp

	Rovina		Směr (\vec{b})
Cd, Zn, Mg, Ti, Be <i>basální</i>	{0001}	x	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 3
Ti, Zr, Re <i>prismatický</i>	{10 $\bar{1}$ 0}	x	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 1
Ti, Mg <i>pyramidální 1. druhu</i>	{10 $\bar{1}$ 1}	x	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 1
Zn, Cd <i>pyramidální 2. druhu</i>	{11 $\bar{2}$ 2}	x	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 1





ZMĚNA ORIENTACE KRYSTALU VZHLEDEM K OSE ZATĚŽOVÁNÍ BĚHEM DEFORMACE MONOKRYSTALU

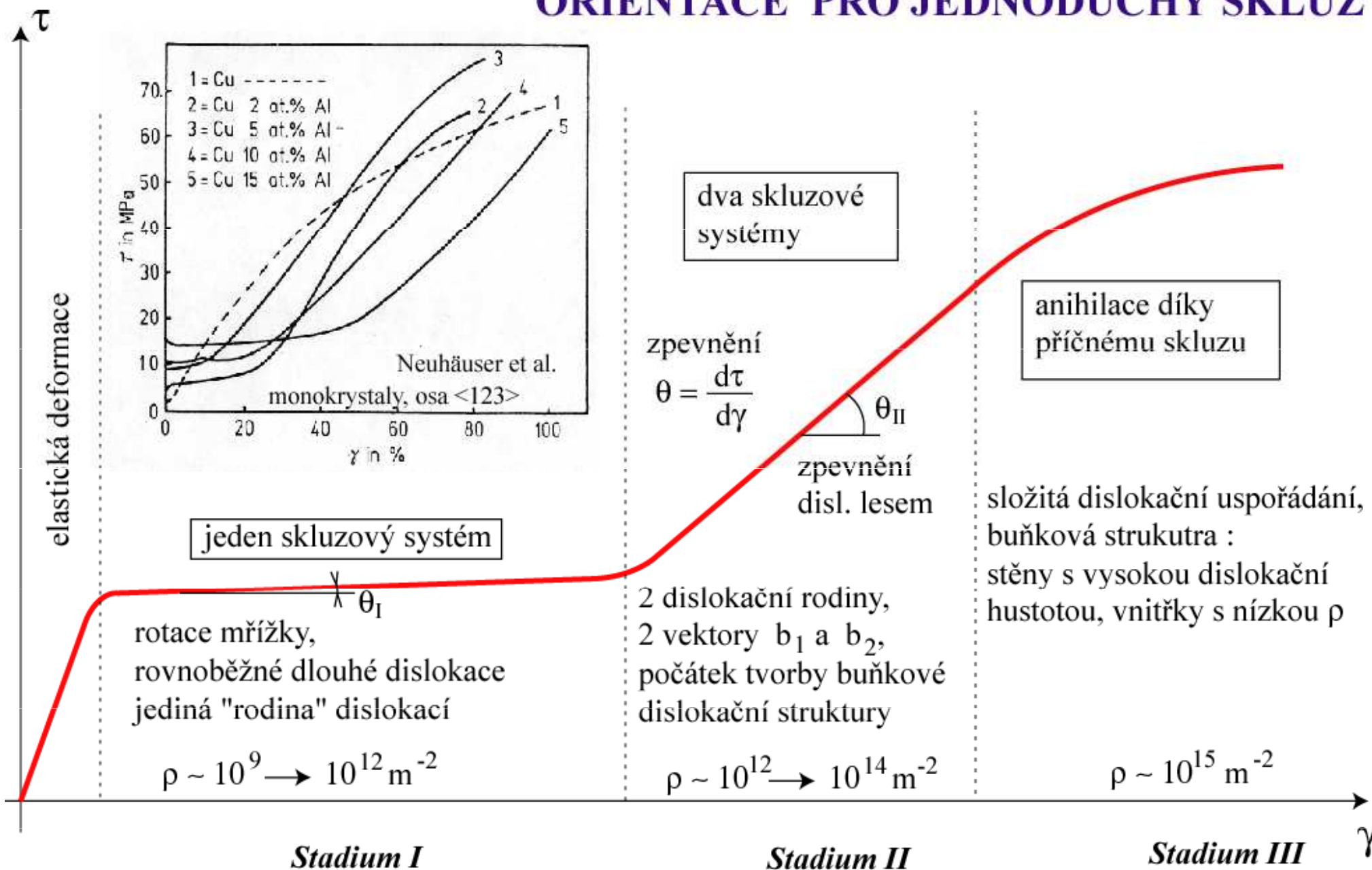


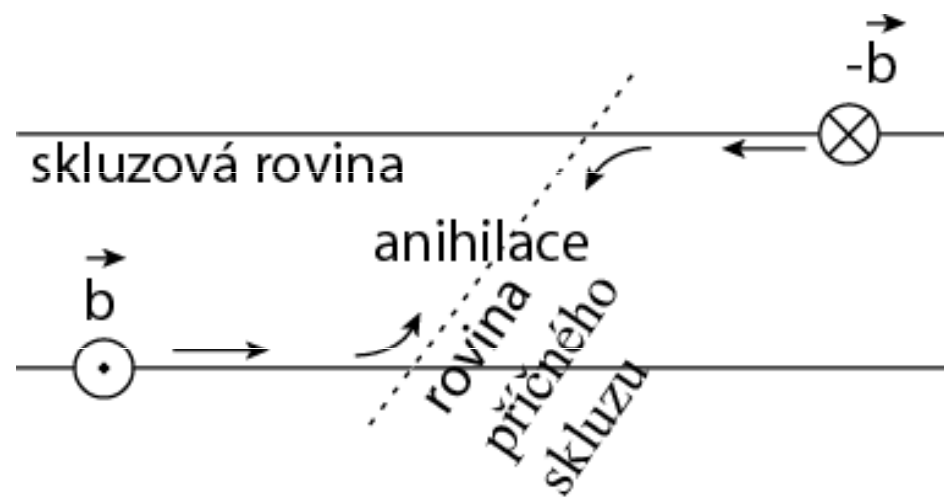
fcc

T - standardní stereografický troj.

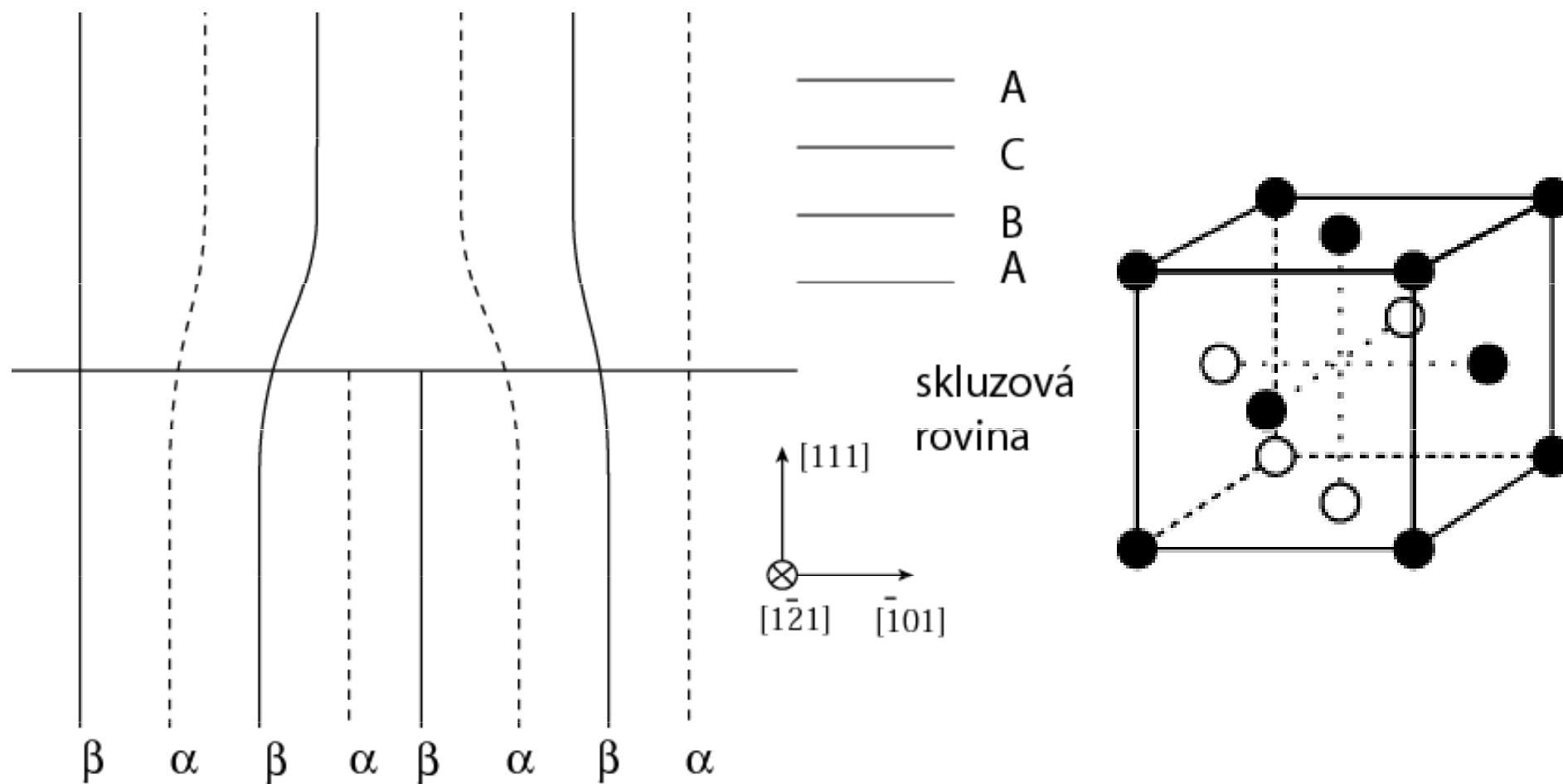
	primární skluzový sst $[\bar{1}01] (111)$
	konjugovaný skluz. s. $[011] (\bar{1}\bar{1}1)$
	příčný skluz $[\bar{1}01] (\bar{1}\bar{1}1)$

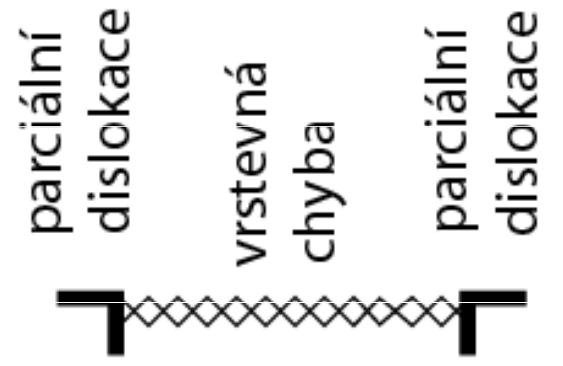
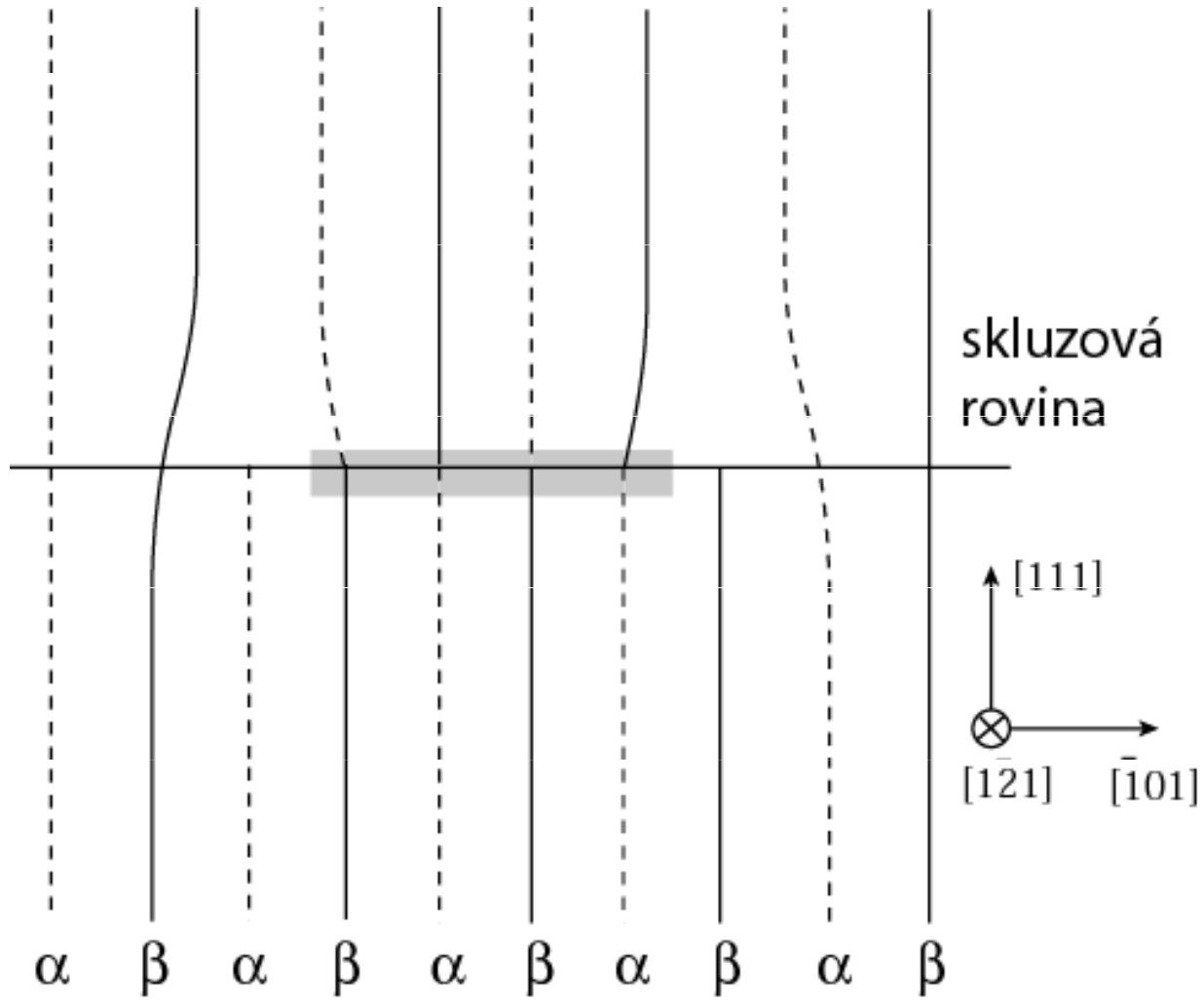
TAHOVÁ KŘIVKA MONOKRYSTALU fcc, ORIENTACE PRO JEDNODUCHÝ SKLUZ

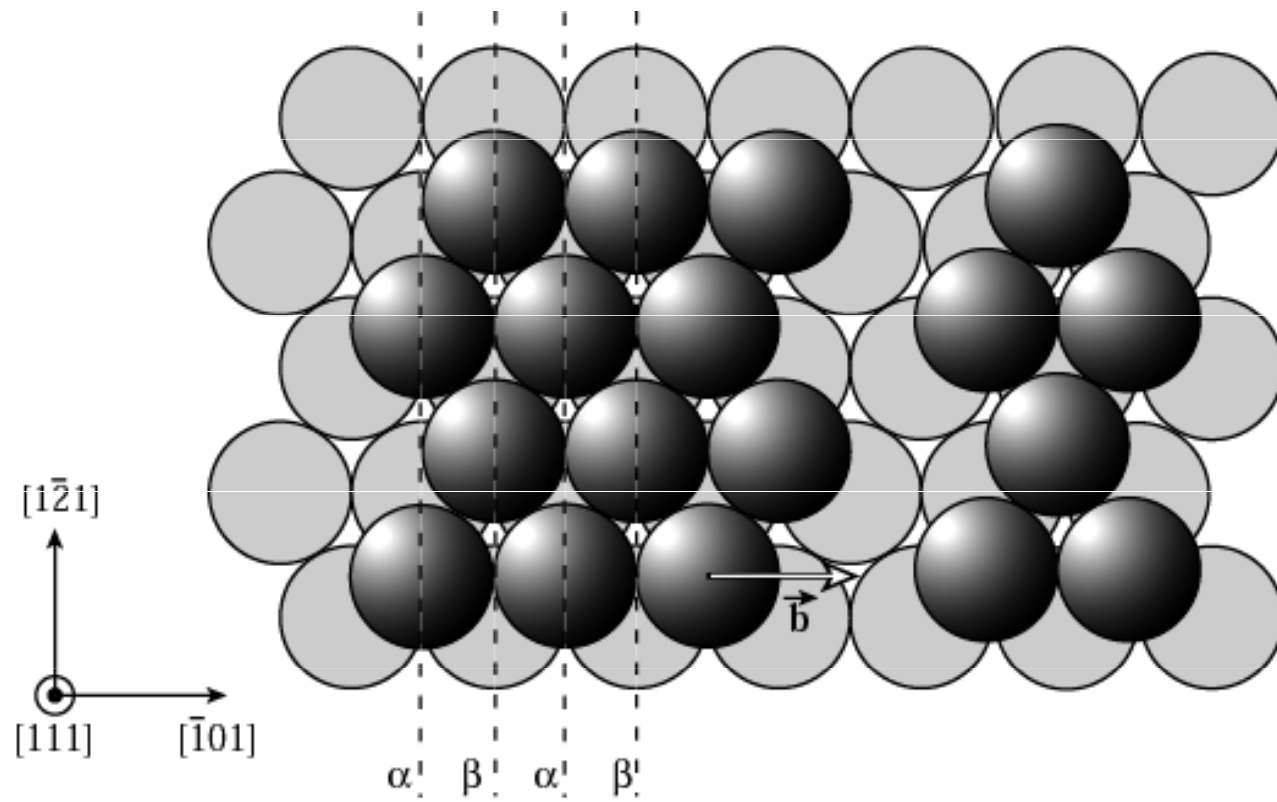


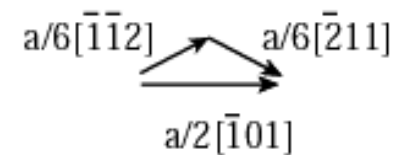
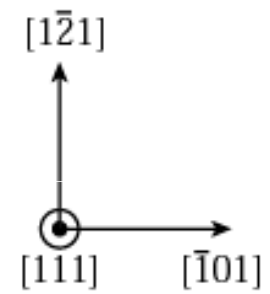
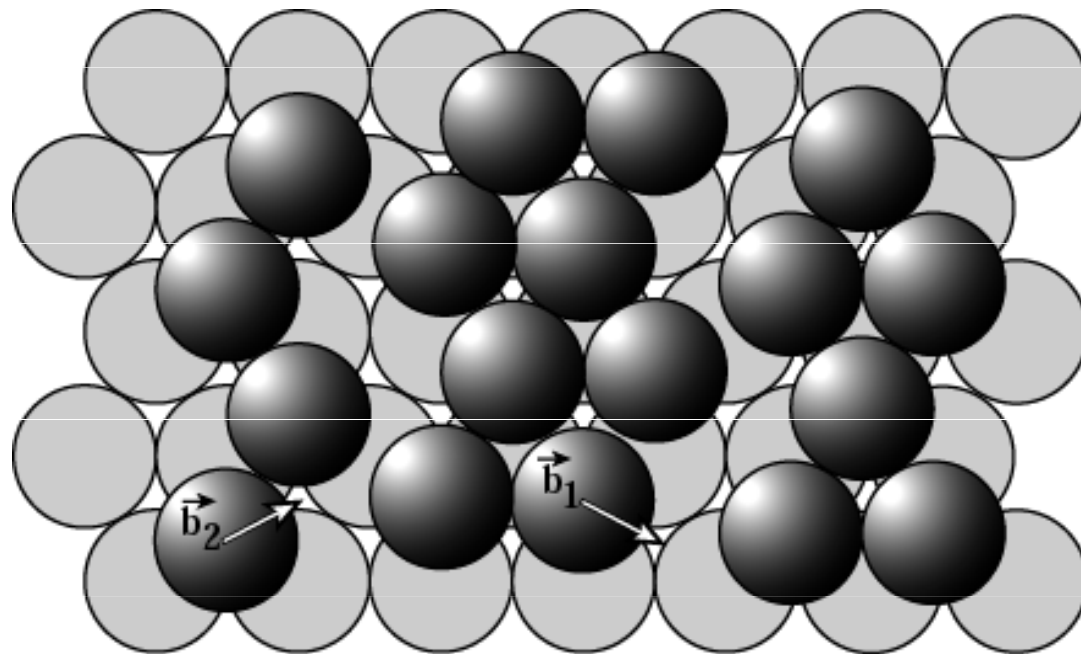


Parciální dislokace - fcc



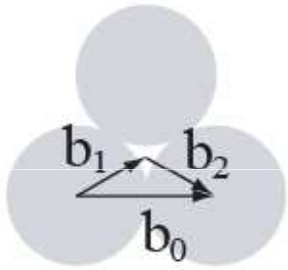






PARCIÁLNÍ DISLOKACE

fcc



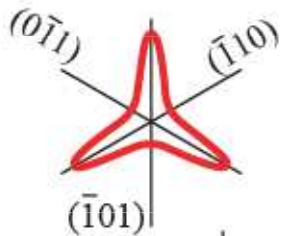
$$\frac{1}{2} [\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{1}21] + \frac{1}{6} [21\bar{1}]$$



vrstevná chyba

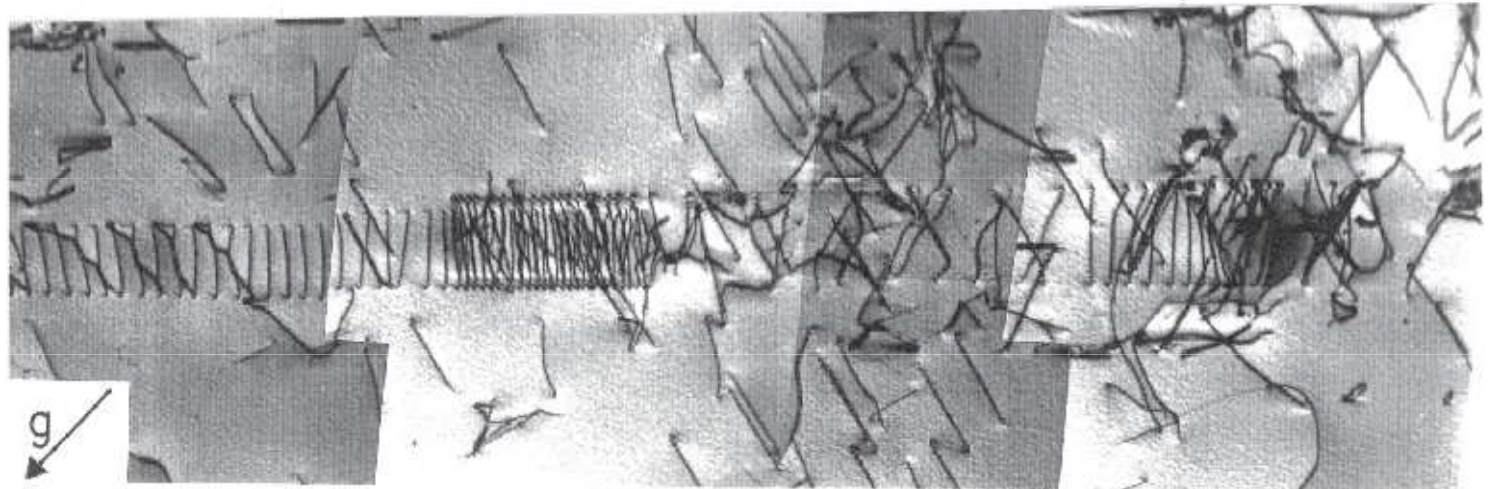
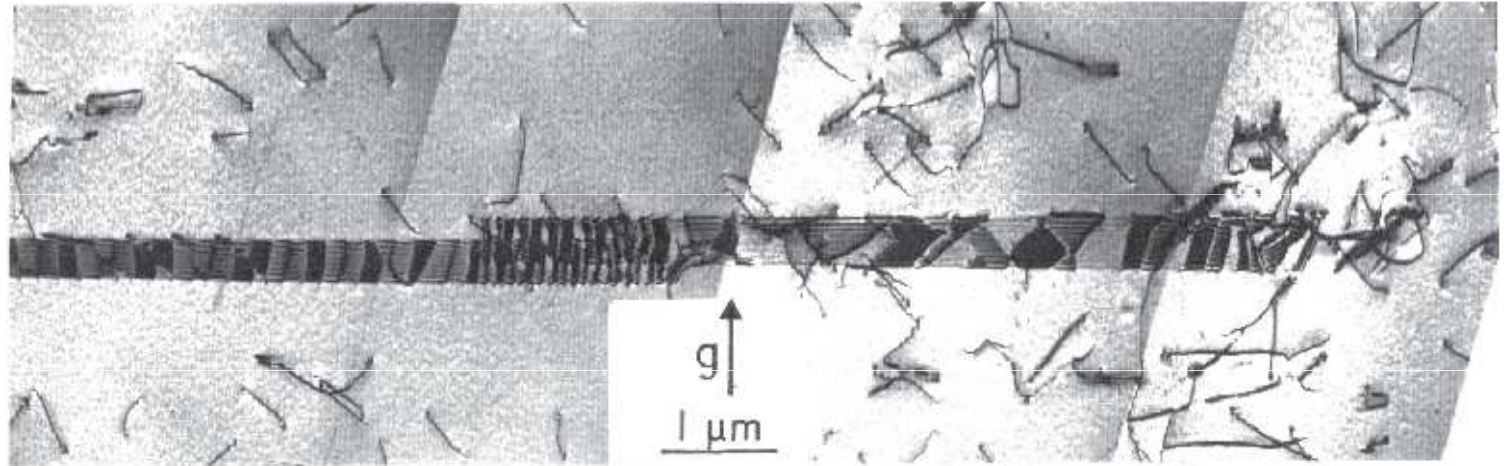
bcc

$b = \langle 111 \rangle$

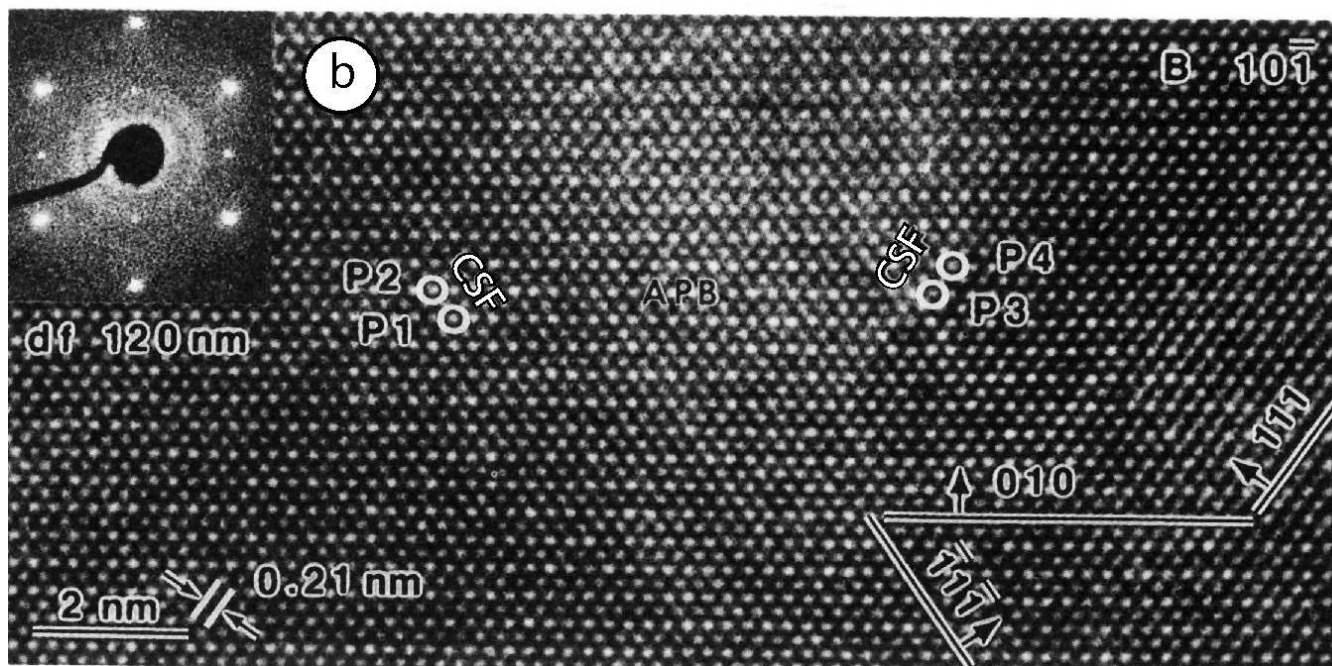


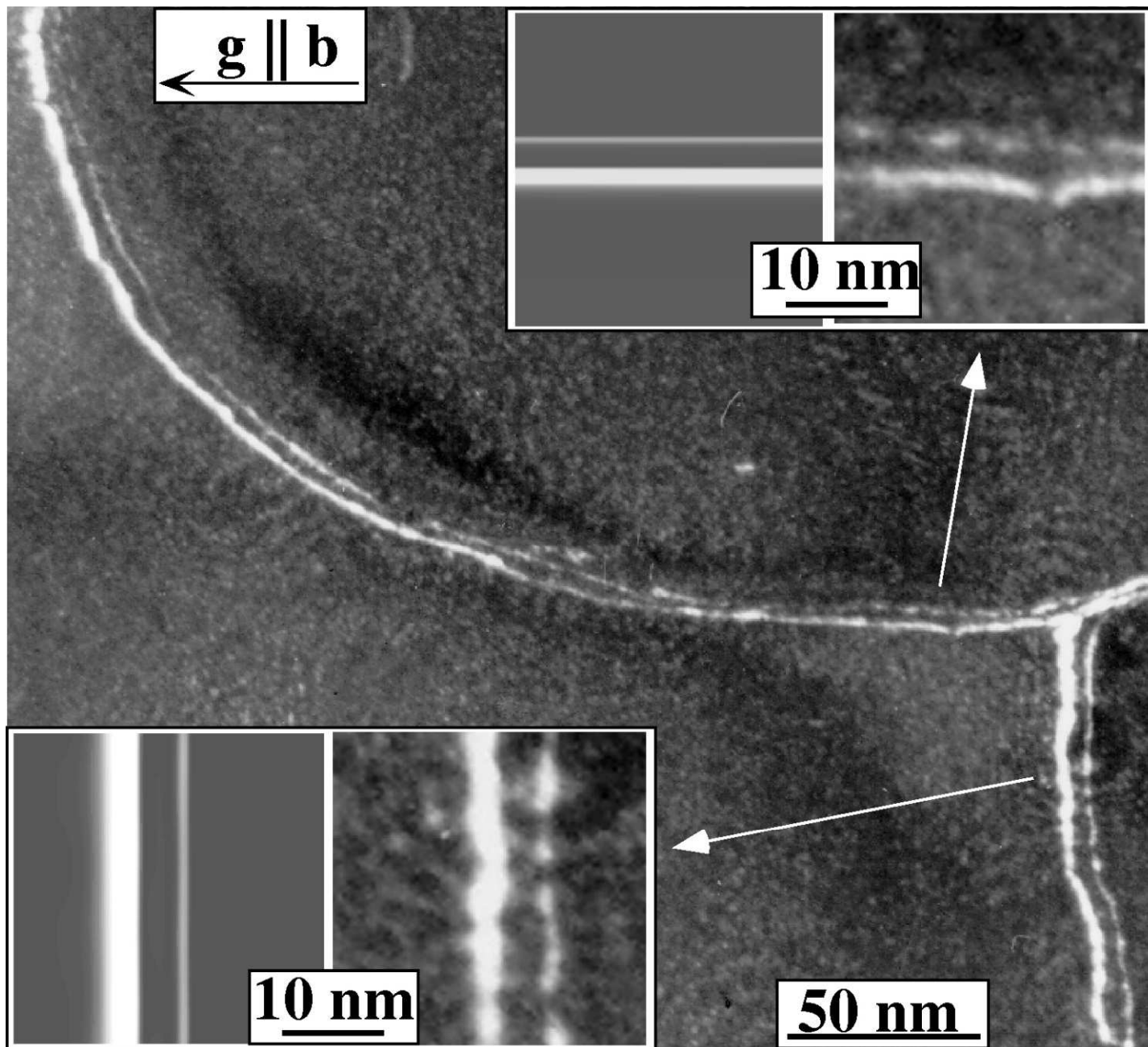
$\odot [111]$

2004:



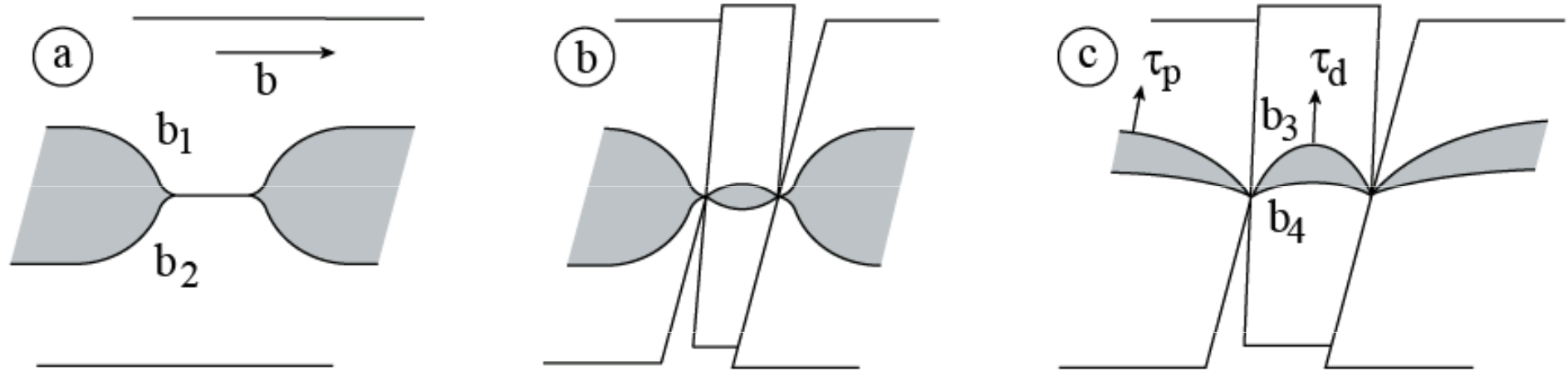
parciální dislokace v InP



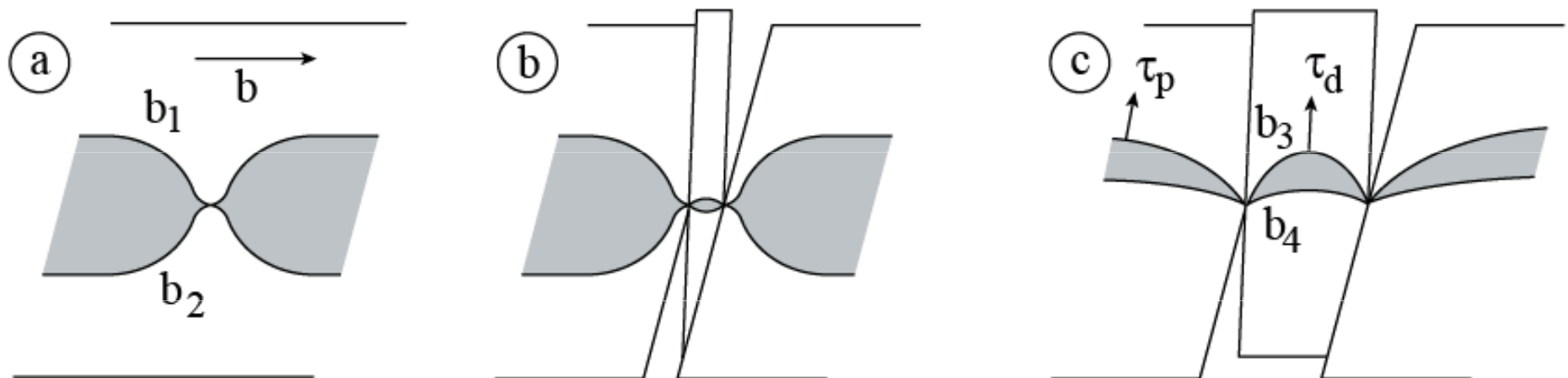


PŘÍČNÝ SKLUZ - fcc

Wolf, Schoeck, SEEGER



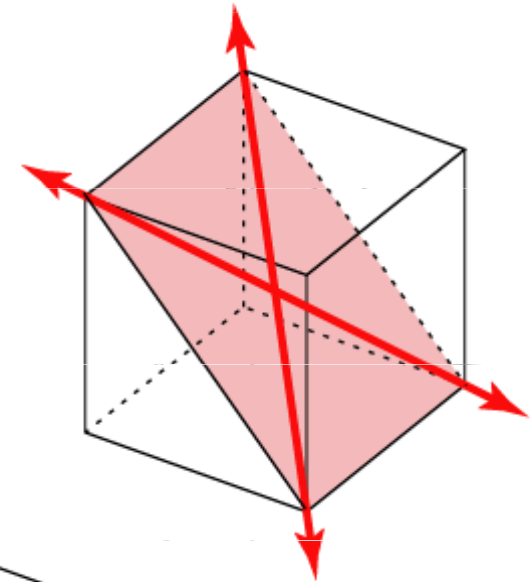
FRIEDEL, Escaig:



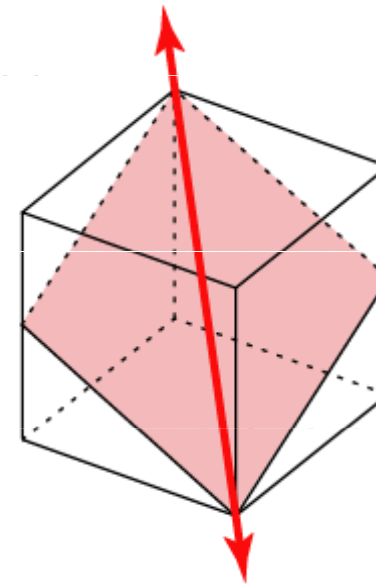
SKLUZOVÉ SYSTÉMY

krychlová prostorově centrovaná	body centered cubic bcc
------------------------------------	----------------------------

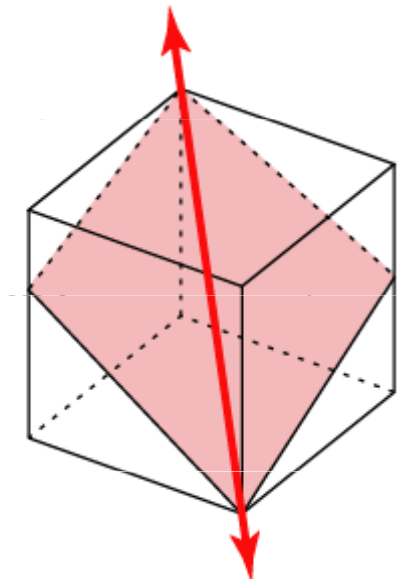
	Rovina	Směr (\vec{b})
Mo, W, Fe - α , mosaz β	{110}	$\langle 111 \rangle$
	6	x
		2



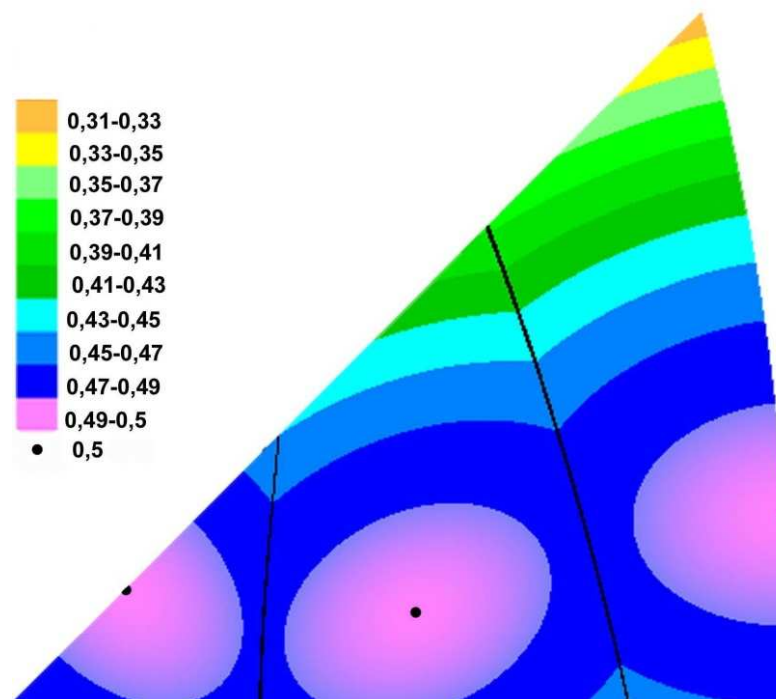
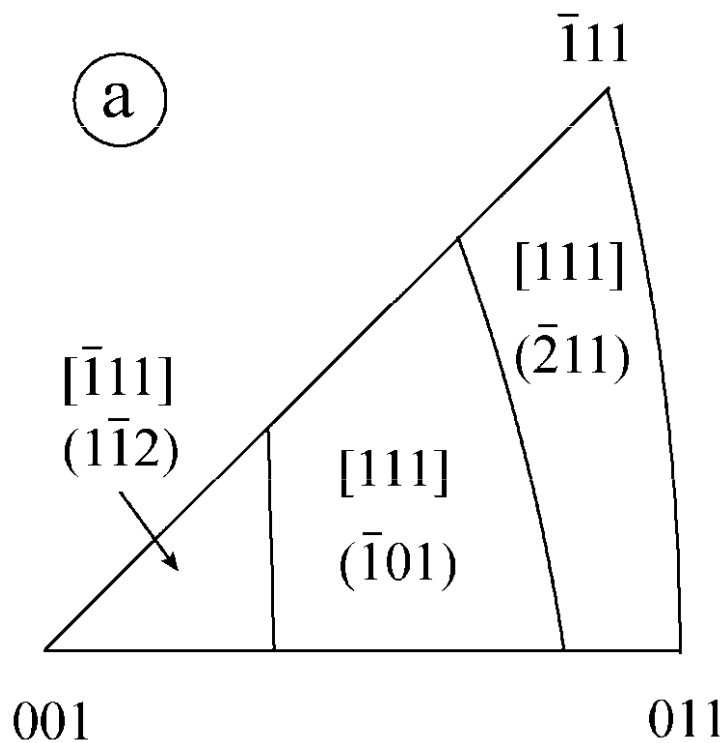
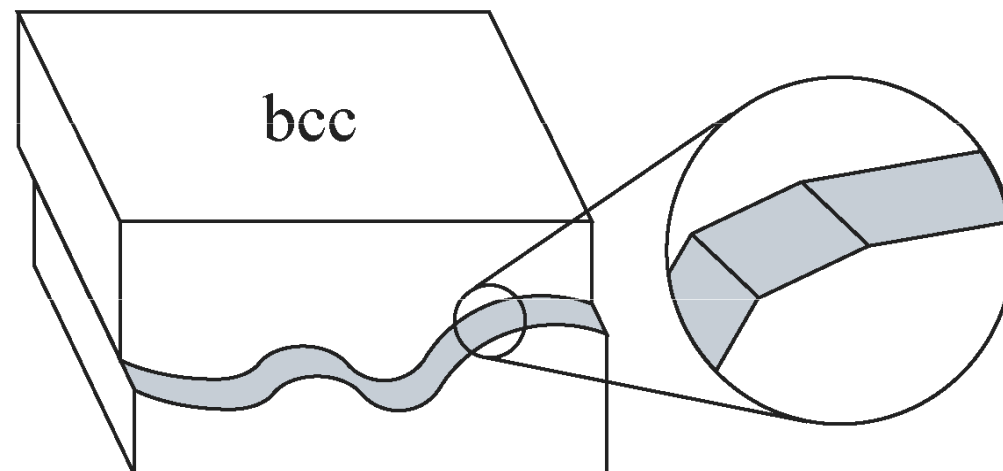
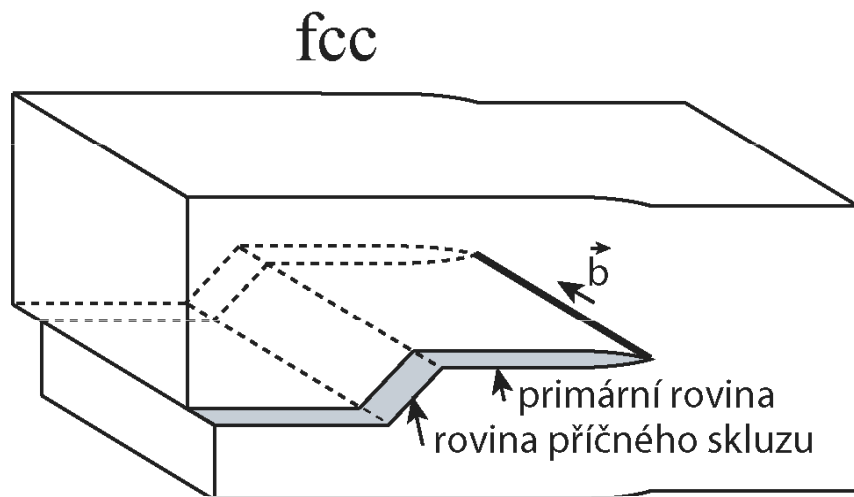
	Rovina	Směr (\vec{b})
Mo, Fe - α	{112}	$\langle 111 \rangle$
	12	x
		1



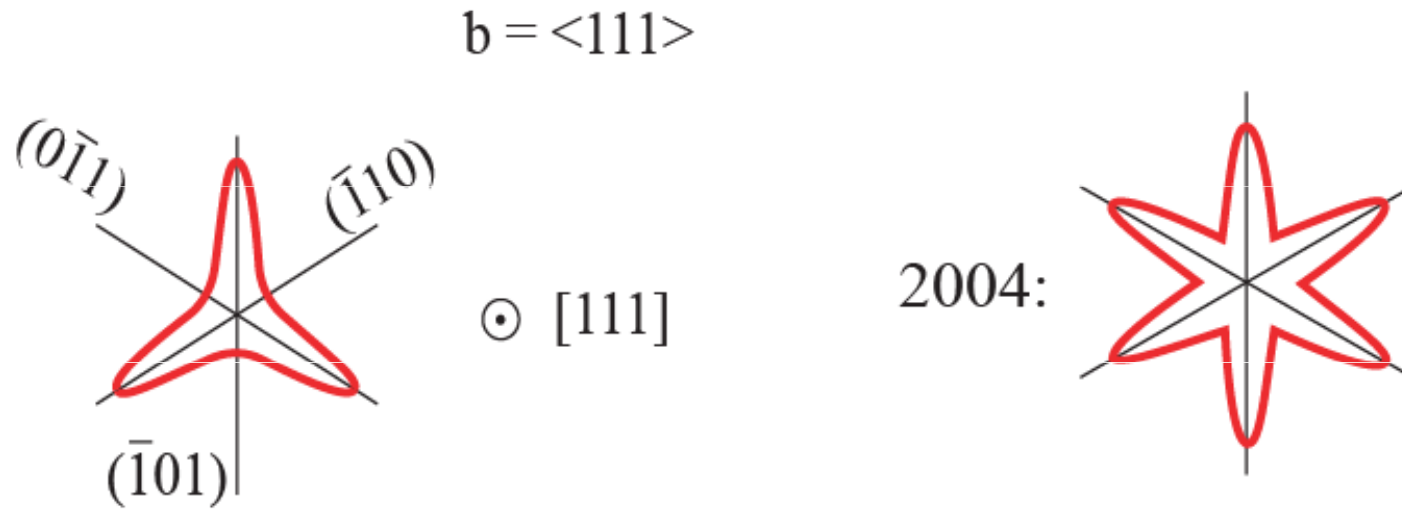
	Rovina	Směr (\vec{b})
K, Fe - α	{123}	$\langle 111 \rangle$
	24	x
		1



Velké množství skluzových systémů



Rozštěpení šroubových dislokací



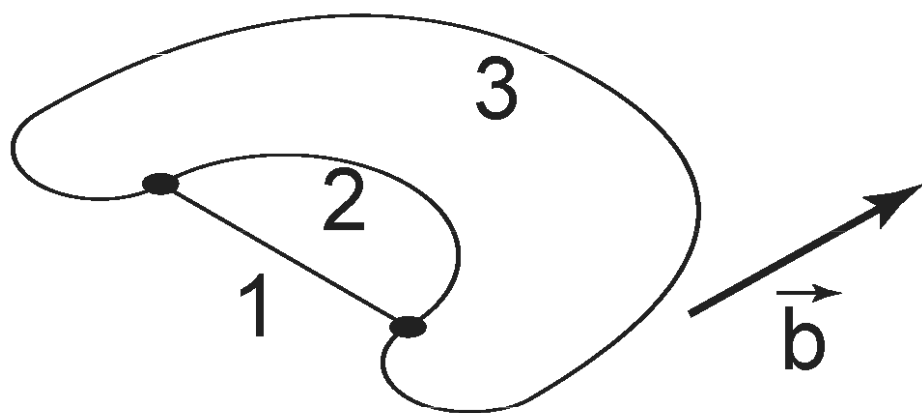
Nutná tepelná aktivace pro rekombinaci jádra dislokace.
Kritická teplota = teplota, při které tepelná aktivace již
nestačí pro rekombinaci jádra.

Křehce – tvárný přechod

(a)

$$T > T_{db}$$

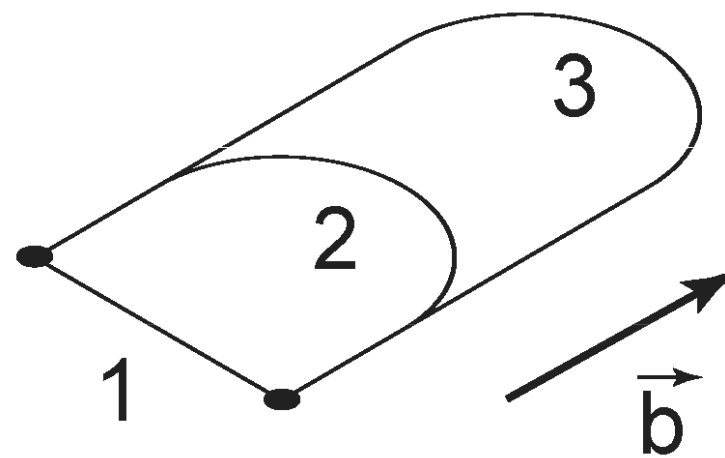
$$V_{\odot} \sim V_{\perp}$$



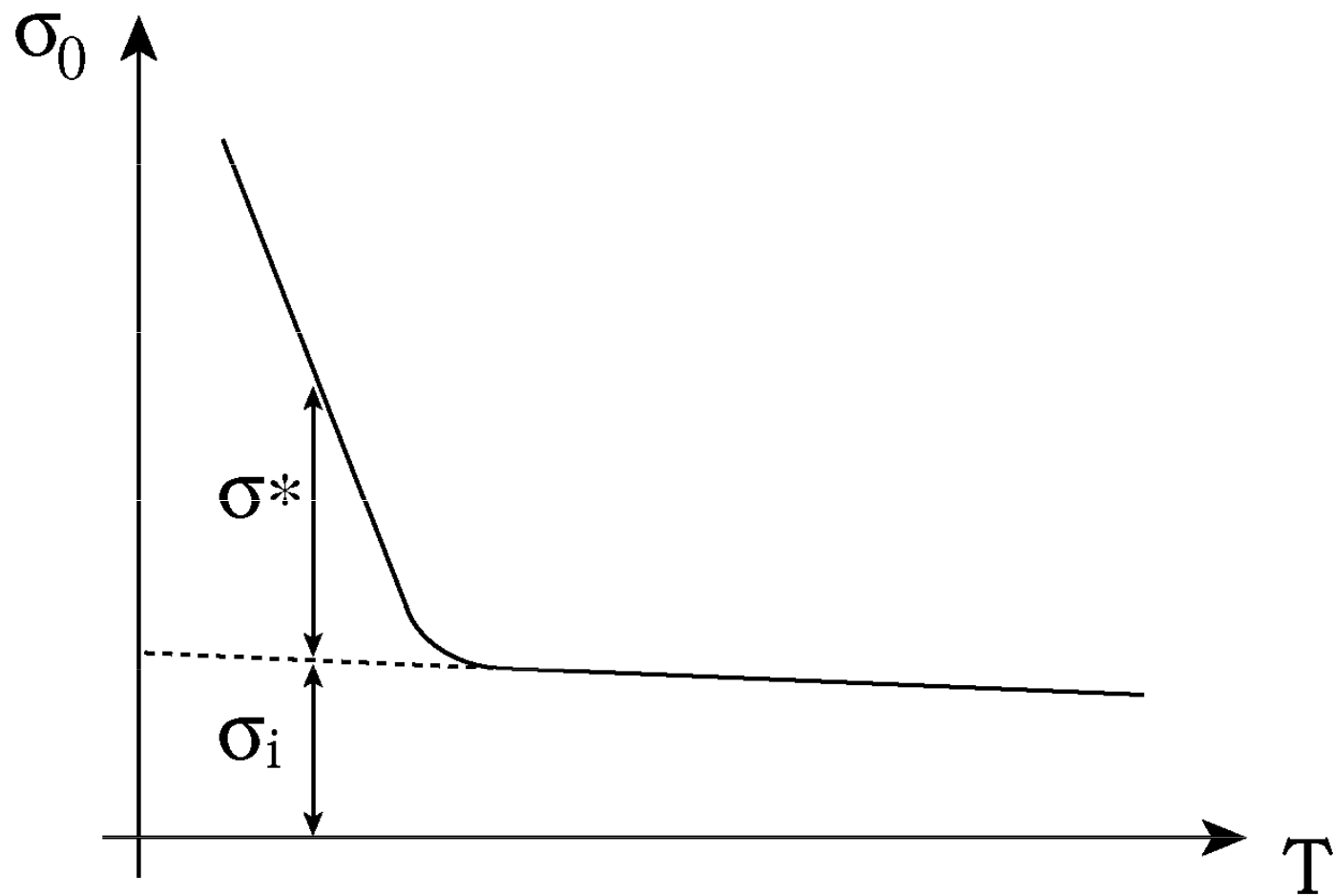
(b)

$$T < T_{db}$$

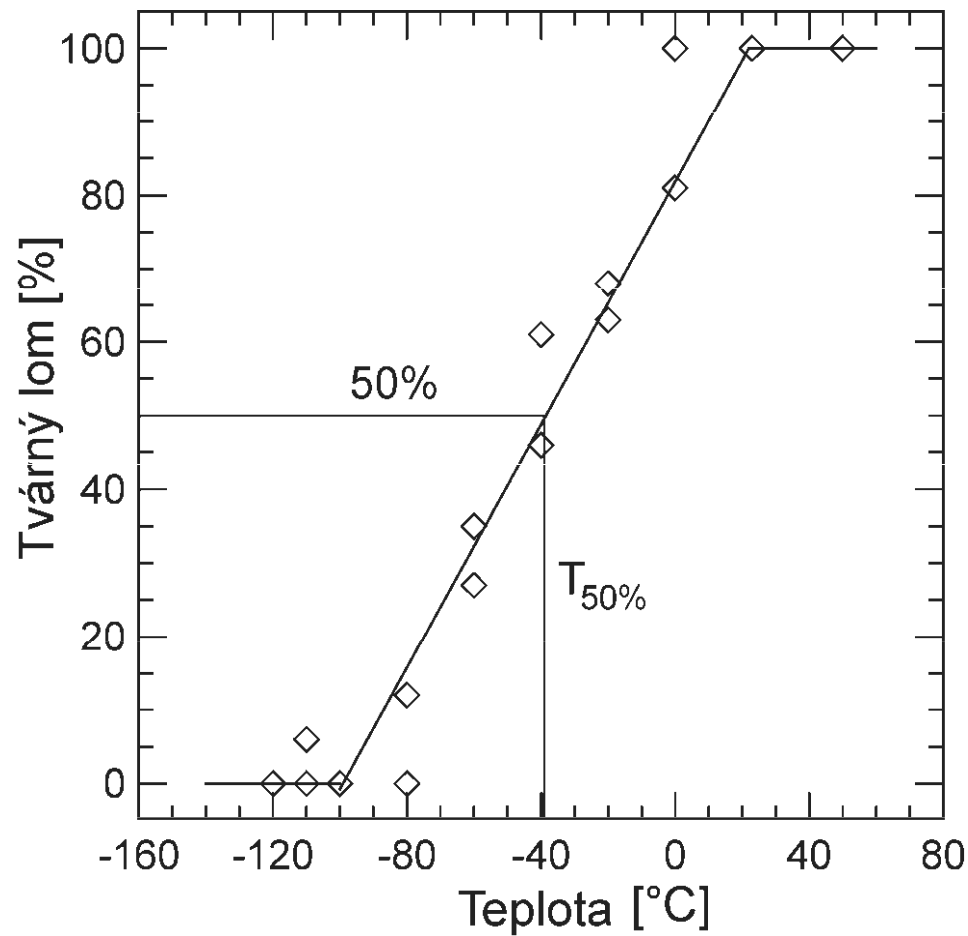
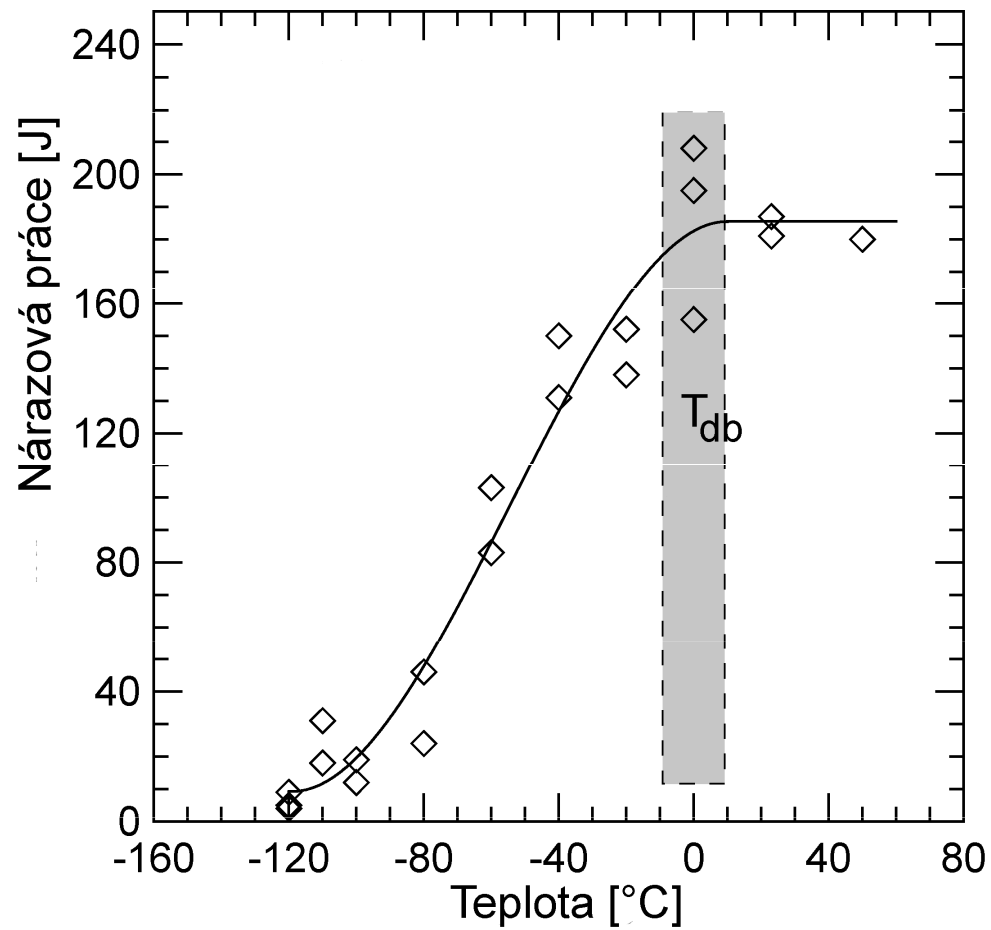
$$V_{\odot} \ll V_{\perp}$$



Mez kluzu



Křehce – tvárný přechod

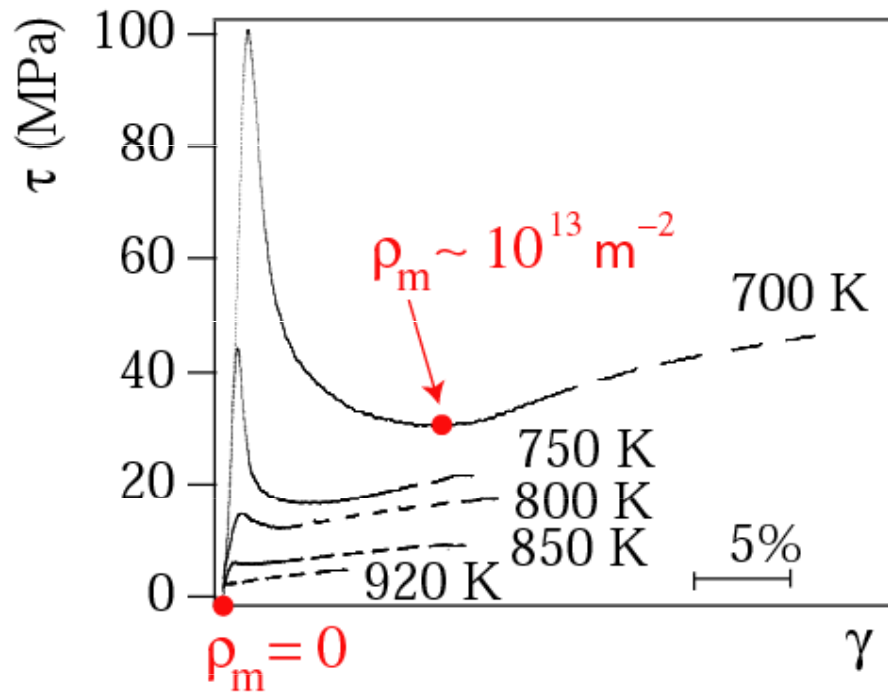


TRANSPORTNÍ OROWANOVA ROVNICE

$$\dot{\gamma}_p = \rho_m b \bar{v}$$

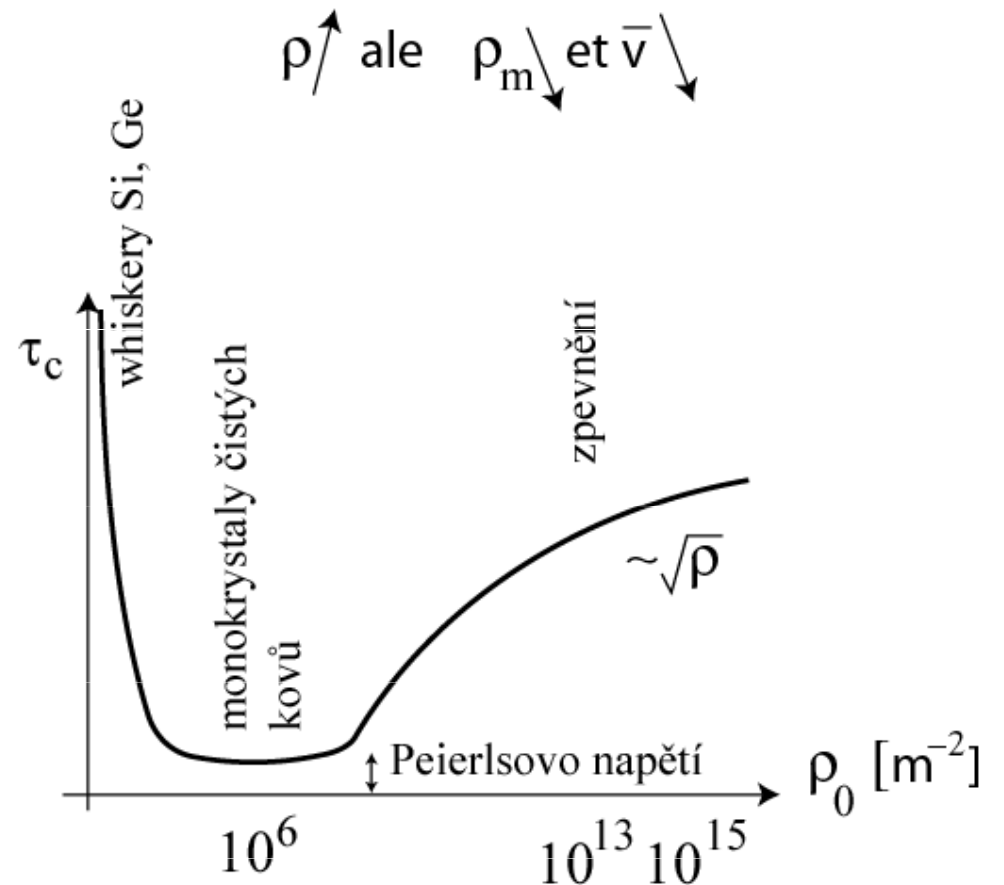
$v(\tau, T)$

$0 < v < 10\%$ rychlosti zvuku v materiálu



Ge, zkouška v kompresi,
 $\dot{\gamma} = 9 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$

velké deformace = více aktivních
 skluzových systémů



EFEKTIVNÍ & INTERNÍ NAPĚTÍ

1. lokální definice

$\bar{\sigma}_{i,loc}$

Vnitřní napětí v 1 bodě = součet tenzorů napětí vytvořených všemi vnitřními defekty v krystalu (dislokace, substituční atomy, precipitáty ...). Hypotéza : vnitřní napětí se mění v krystalu periodicky.

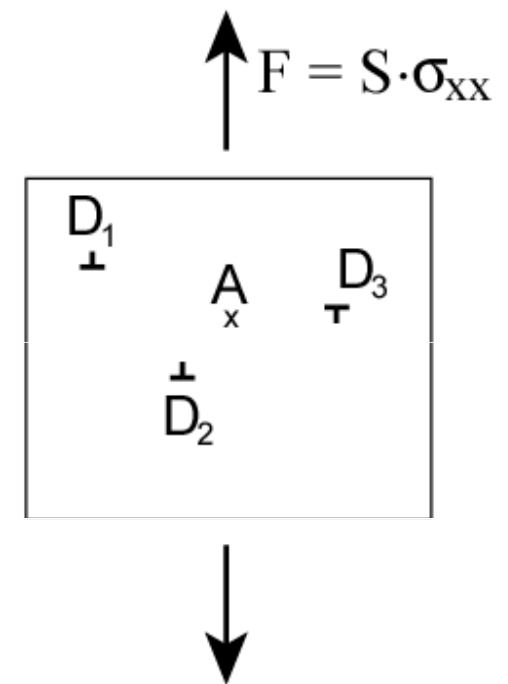
$\bar{\sigma}_{loc}^*$

Efektivní napětí ve stejném bodě =
aplikované napětí + vnitřní napětí

$$\bar{\sigma}_{loc}^* = \bar{\sigma}_a + \bar{\sigma}_{i,loc}$$

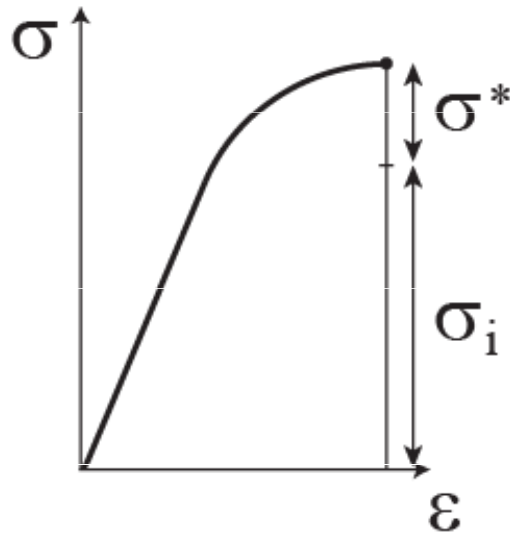
Pokud se dislokace nachází v bodě A, interaguje s $\bar{\sigma}_{loc}^*$

Rychlost dislokací tedy závisí na lokálním efektivním napětí, nikoli aplikovaném

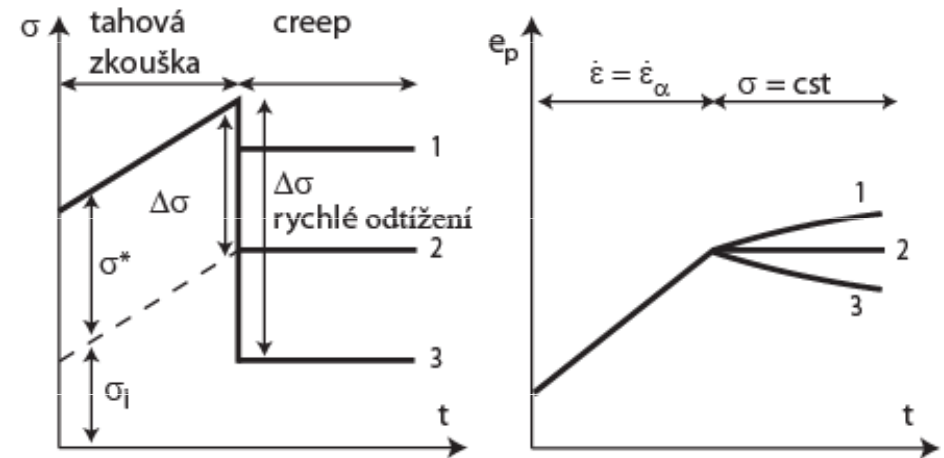


NAPĚTÍ EFEKTIVNÍ & INTERNÍ

2. makroskopické projevy

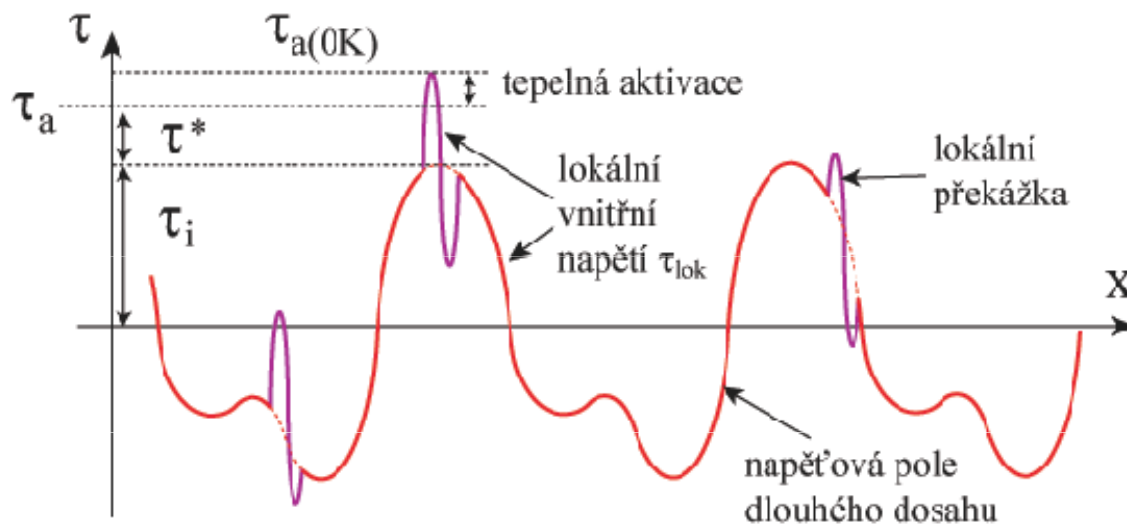


$$\sigma = \sigma_i + \sigma^*$$



σ^* : efektivní "makroskopické" napětí = napětí potřebné k překonání malé překážky

σ_i : vnitřní "makroskopické" napětí : napětí dlouhého dosahu $\sigma_{i,loc}$

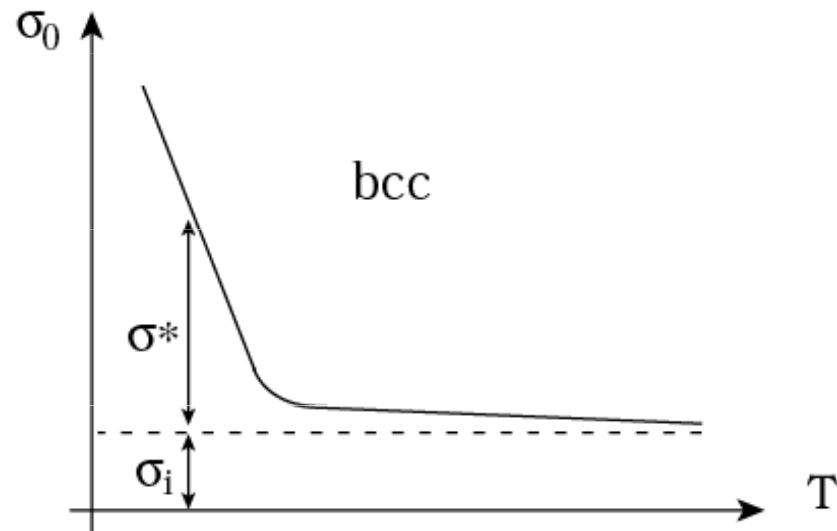
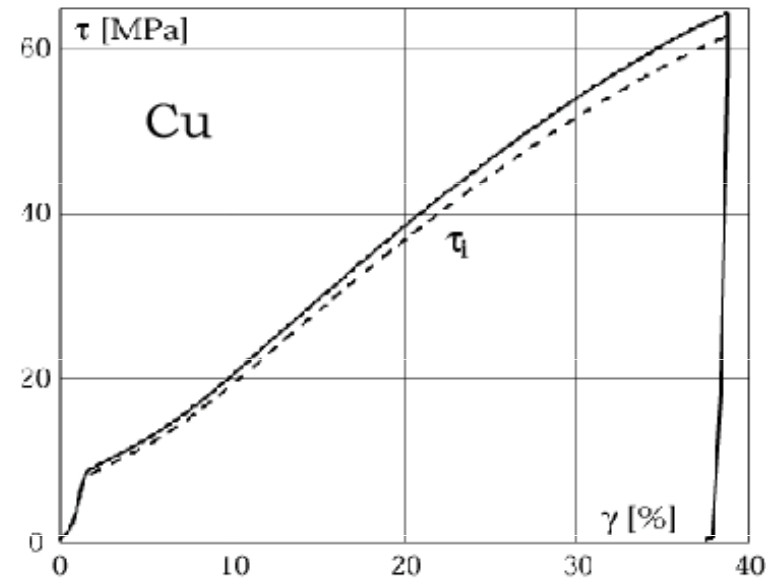
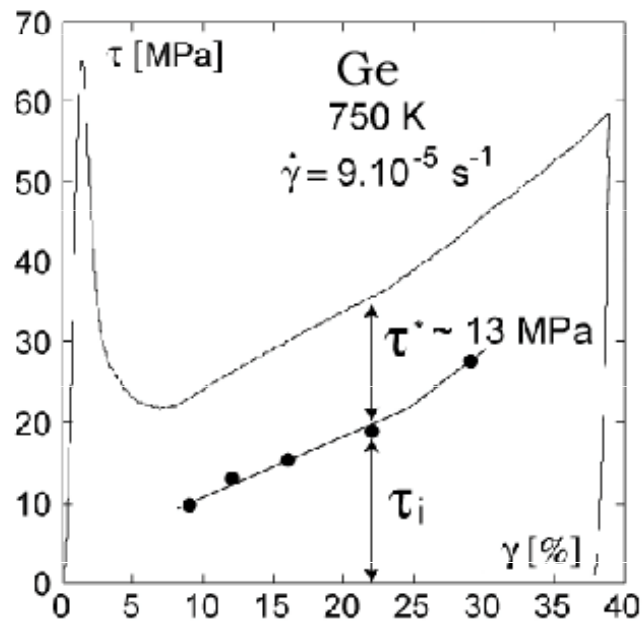


Taylorova rovnice:

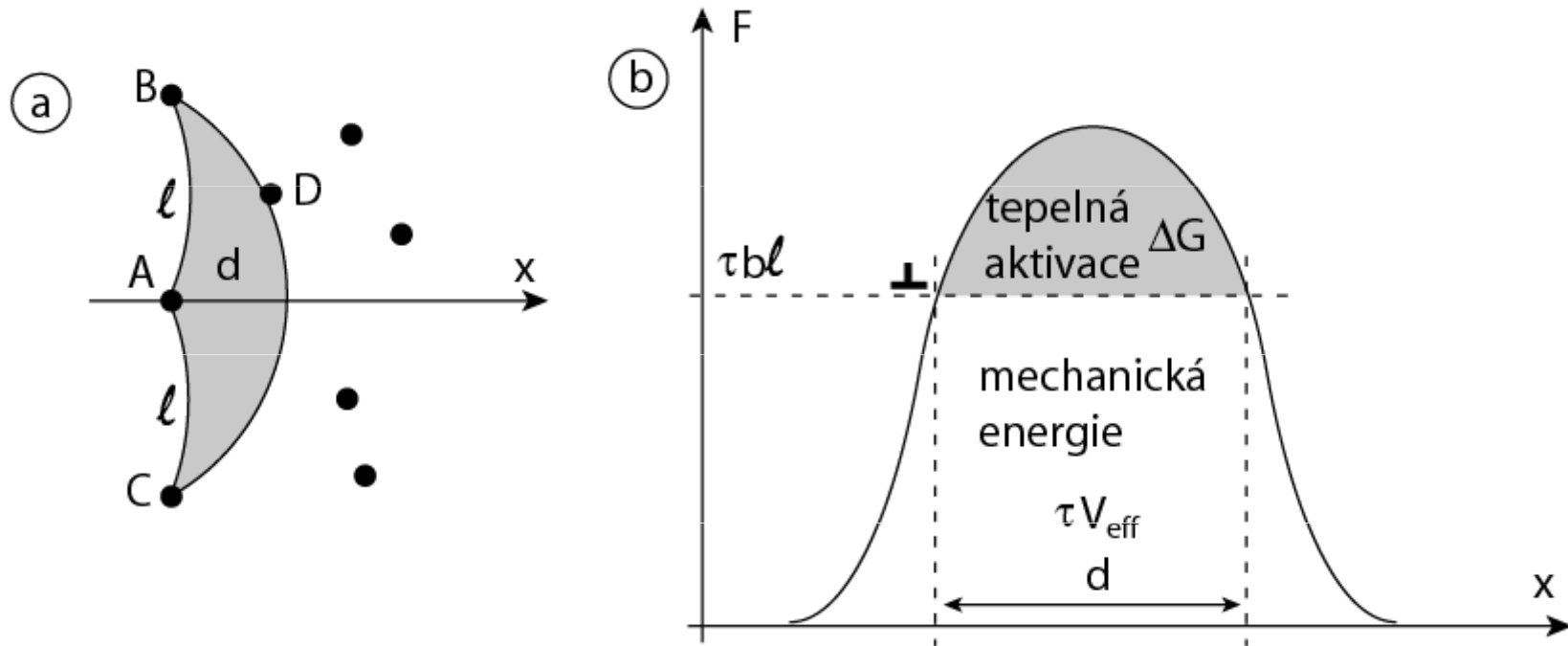
$$\sigma_i = \alpha G b \sqrt{\rho}$$

$$\alpha = \langle 0.1-0.5 \rangle$$

EFEKTIVNÍ & INTERNÍ NAPĚTÍ



TEPELNÁ AKTIVACE A RYCHLOST DISLOKACÍ



$$P \approx \nu_D \cdot e^{-\frac{\Delta G}{kT}}$$

$$v = v_0 \cdot e^{-\frac{\Delta G}{kT}} = v_0 e^{-\frac{\Delta G_0}{kT} + \frac{\tau^* V}{kT}} = v_0' e^{\frac{\tau^* V}{kT}} \quad 1$$

$$v = v_0 \sinh\left(\frac{\tau^* V}{kT}\right) \quad 2$$

$$v = A \left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)^m \quad 3$$

ČÍM JE DÁNO NAPĚTÍ POTŘEBNÉ K PLASTICKÉ DEFORMACI ?

$$\tau_{th} \sim 0.10 G \text{ (ab initio)}$$

$$\tau_c \geq 0.0001 \tau_{th}$$

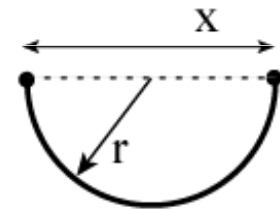
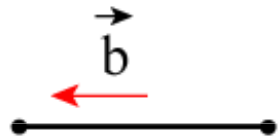
τ_c může být dáno:

- napětí nezbytné k aktivaci zdrojů mobilních dislokací
- překážky:
 - tření mřížky
 - tuhý roztok, substituční atomy
 - napětí nezbytné pro šíření deformace přes hranice zrn (Hall & Petch)
 - reakce dislokace x dislokace
 - precipitáty, inkluze

ρ_m

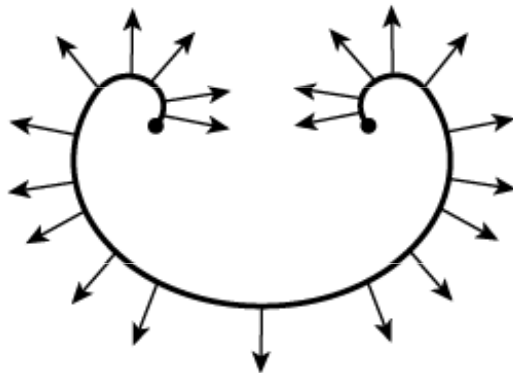
v

NAPĚTÍ POTŘEBNÉ PRO FUNKCI ZDROJŮ DISLOKACÍ - PŘÍKLAD FRANK - READOVA ZDROJE

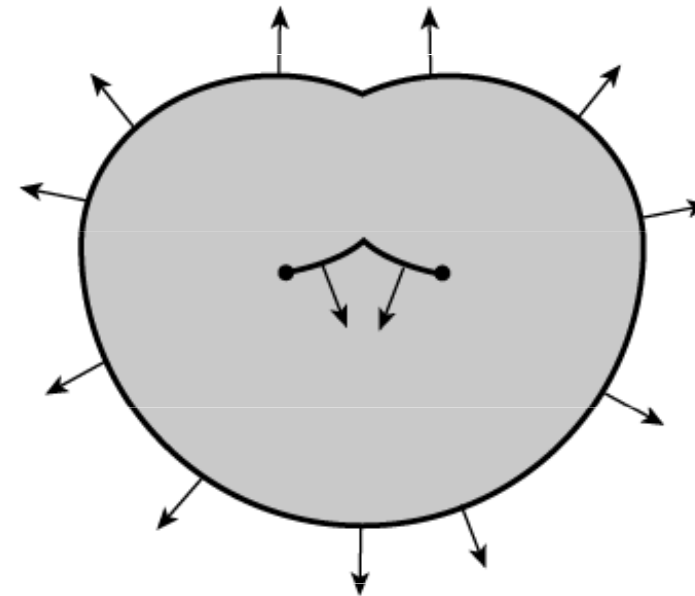
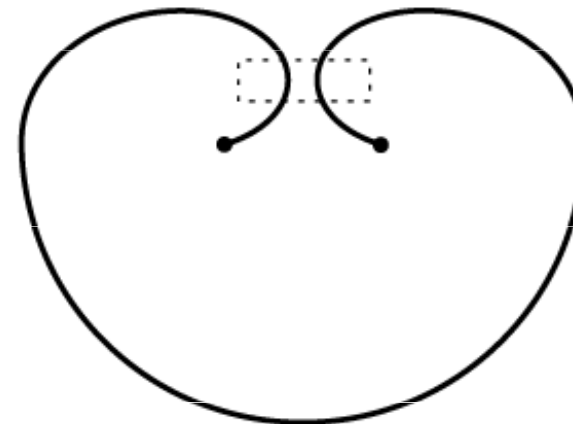


maximální napětí: $r = x/2$

$$\tau = \frac{2\alpha Gb}{x}$$



anihilace

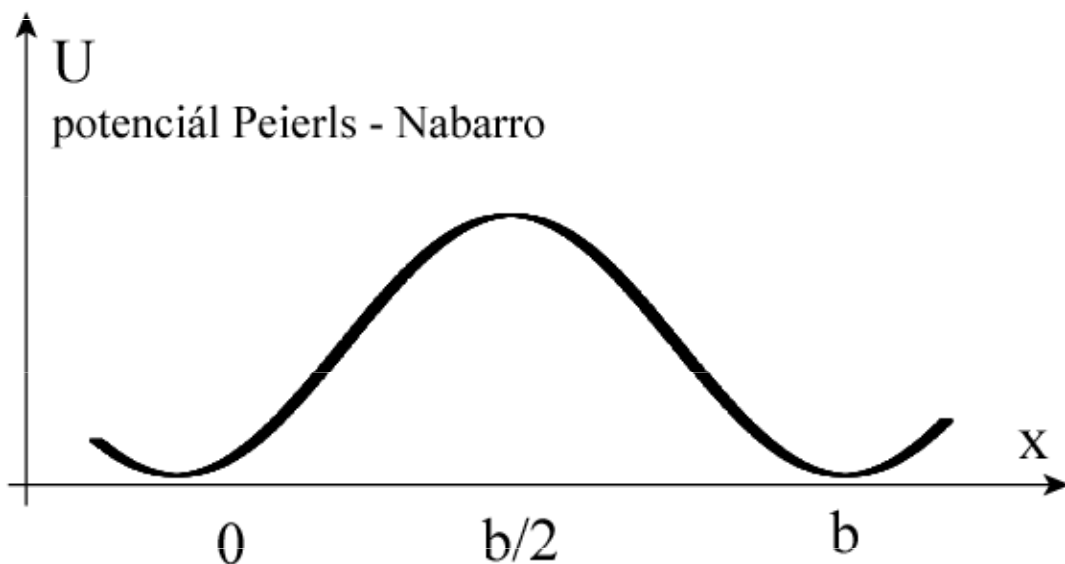
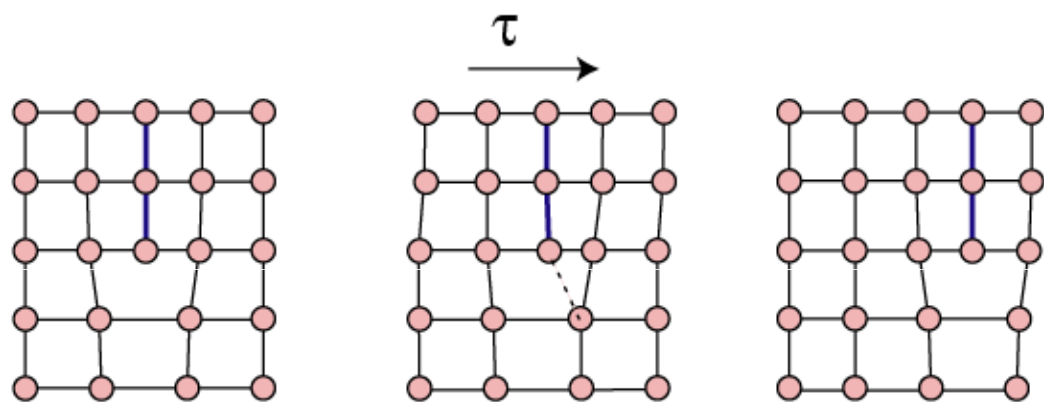


1

Tření mřížky

1.1

Intrinsické (čisté kovy): potenciál Peierls - Nabarro



fcc :
U velmi slabé, < 1 MPa

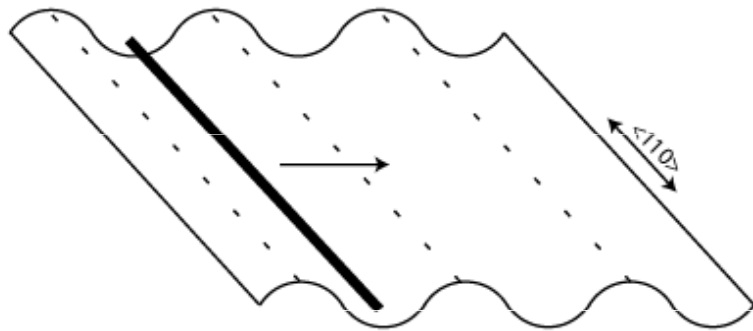
bcc :
hc nebasální
roviny U rychle roste,
pokud T klesá

polovodiče :
Si, Ge, GaAs, InP U vysoké

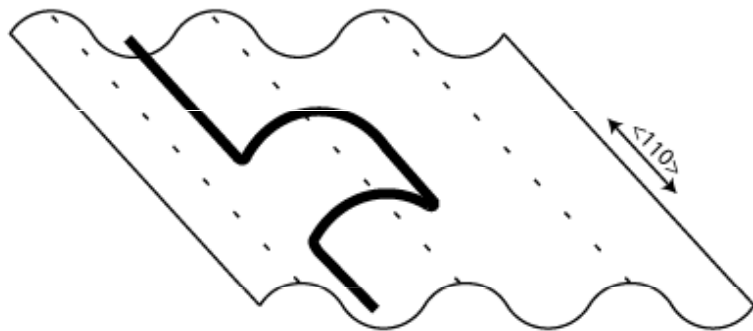
keramiky : U velmi vysoké

POHYB DISLOKACÍ GENERACÍ "DOUBLE KINK"

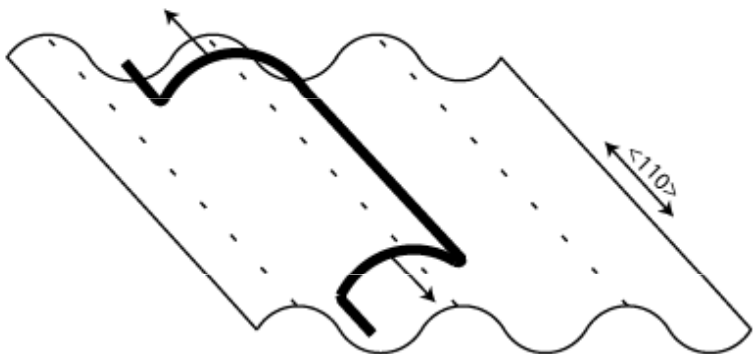
příklad fcc, materiál s vysokým U



a) Přímá dislokace ležící v jednom Peierlsově údolí typu $\langle 110 \rangle$



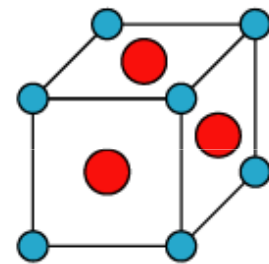
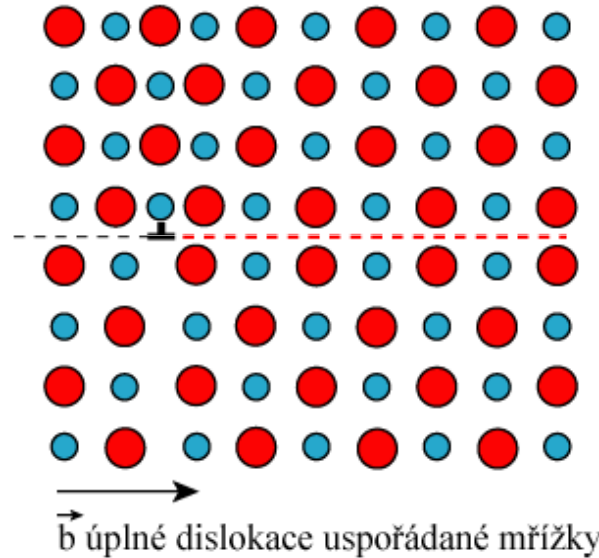
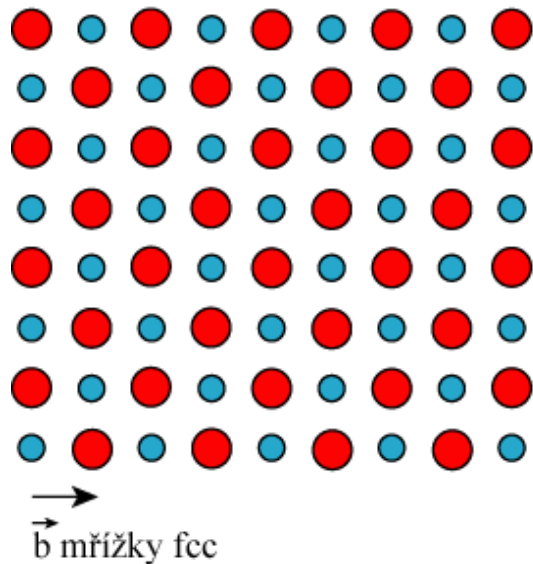
b) Vytvoření double kink pomocí náhodné tepelné aktivace. Kinky se mohou buď šířit podél dislokace, anebo zrekombinovat zpět do konfigurace a)



c) Přesun dislokace do vedlejšího Peierlsova údolí pohybem obou kinků

1.2

Tření mřížky - extrinsické, uspořádané slitiny (= intermetalika)



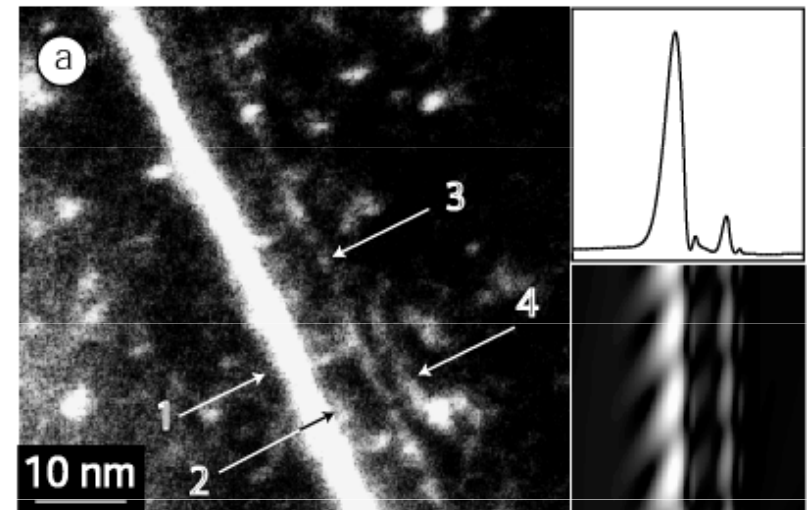
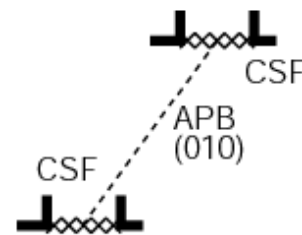
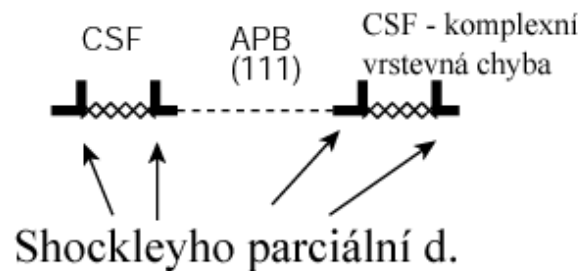
Ni_3Al
(superslitiny)

skluzová rovina

antifázové rozhraní

úplná dislokace v neuspořádané mřížce =
částečná dislokace v uspořádané mřížce

Antifázové rozhraní je vytvořeno průchodem první dislokace a odstraněno průchodem druhé dislokace :
dislokace se přesunují v párech - superdislokace



2

Atomy intersticiální a substituční

Interakce dislokace s atomem příměsi vede ke zvýšení napětí potřebného ke skluzu, díky rozdílné velikosti, jiné chemické vazbě, elektrické polaritě apod.

$$\Delta\tau = K_{\text{sol}} c^n$$

$$1/3 < n < 2/3$$

K_{sol} závisí na:

- základní mřížce
- vlastnostem příměsi
- vlastnostem dislokací

$$\Delta\tau_{\text{interst}} > \Delta\tau_{\text{subst}}$$

$$\Delta\tau_{\text{interst bcc}} > \Delta\tau_{\text{interst fcc}}$$

Ex.: **Ostrá mez kluzu** konstrukčních ocelí kvůli zachycení dislokací atmosférou intersticiálního uhlíku (Cottrellova atmosféra).

$$\dot{\gamma}_p = \rho_m b v$$

uvolnění

$$\rho_m \text{ vzroste}$$

zachycené dislokace:

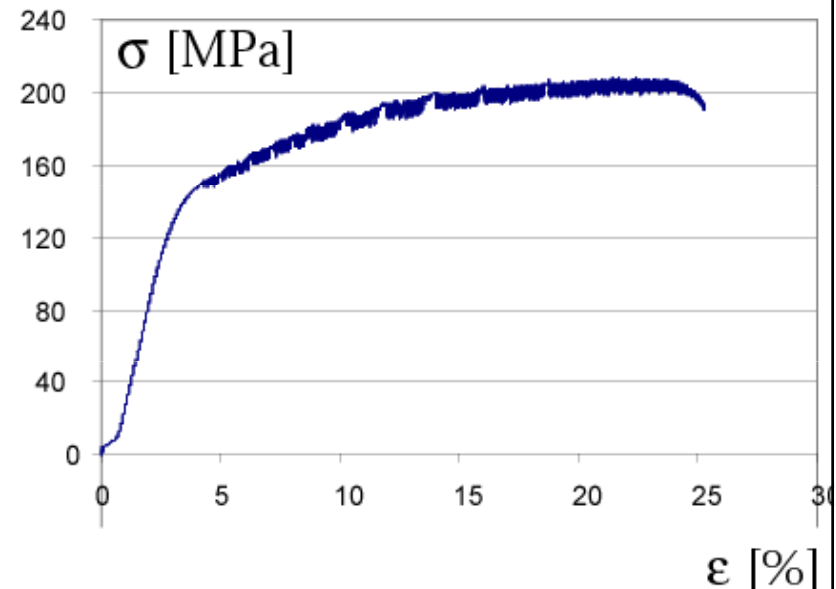
$$\dot{\gamma}_p = \text{cst (vnucená pohybem zatěžovacího stroje)}$$

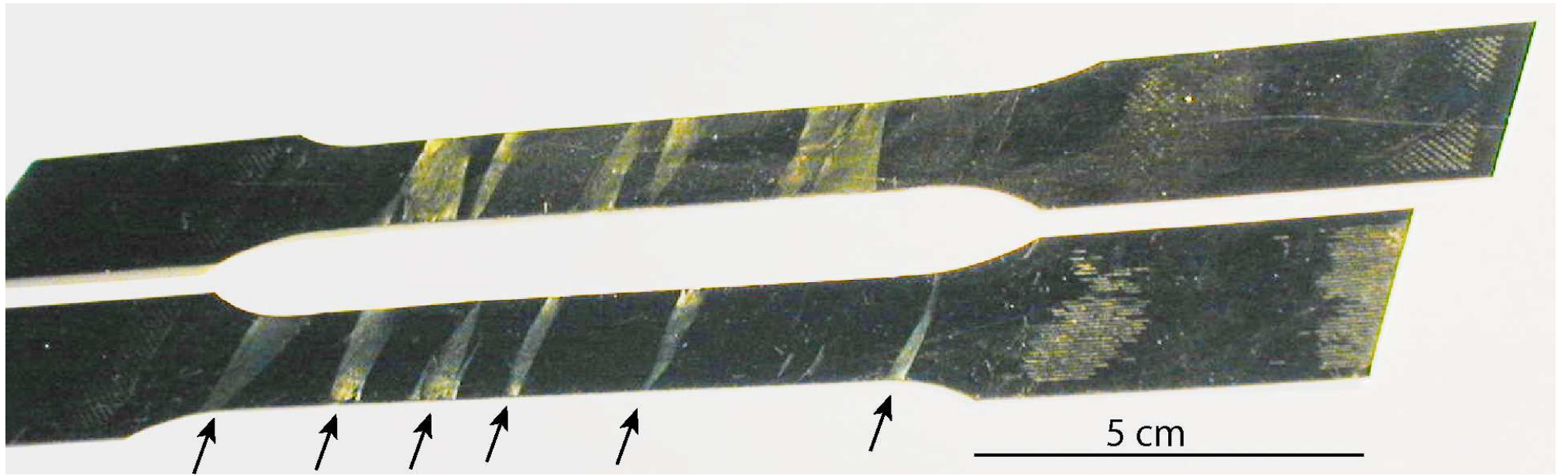
$$v(\tau^*) \text{ klesá} \rightarrow \tau \text{ klesá}$$

Portevin - Le Chatelierův jev :

rychlost difúze interst. atomů srovnatelná s rychlostí pohybu dislokací

Slitina Al-Mg





3

Vzájemné interakce dislokací

Taylorův vztah:

$$\sigma_i = \alpha G b \sqrt{\rho} = \alpha G b \frac{1}{\bar{X}}$$

$\alpha = \langle 0,1 - 1 \rangle$, záleží na typu interakce
 \bar{X} - střední vzdálenost mezi dislokacemi

- 1 aktivovaný skluzový systém: odpudivá síla mezi dislokacemi se stejným b :

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

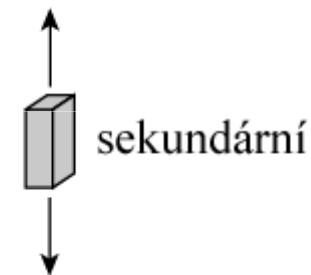
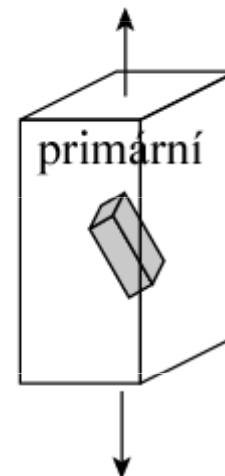
- dislokace z více skluzových systémů "zpevnění dislokačním lesem"
 α se vypočte způsobem naznačeným v minulém cvičení

Experimentální měření α pro různé kombinace skluzových systémů - latentní zpevnění (latent hardening ratio)

1. deformace velkého monokrystalu (primární m.) : vytvoření dislokací lesa, finální napětí τ_{pi}
2. rozřezání primárního m. na menší, sekundární vzorky s výhodnou orientací pro jiný skluzový systém, kritické skluzové napětí τ_{sj}
3. latentní zpevnění je definováno jako

$$L_{ij} = \frac{\tau_{sj}}{\tau_{pi}}$$

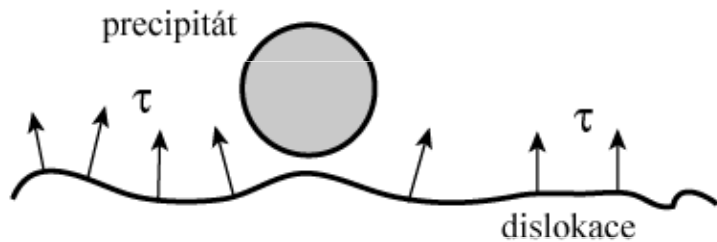
$i, j =$ skluzové systémy



4 Hranice zrn

Hall & Petch : $\sigma_0 = A + k d^{-0,5}$

5 Sekundární fáze



Jak dislokace překoná tuto překážku ? 3 možnosti

1. vynutí se pomocí příčného skluzu

2. přeseknutí (malé, koherentní precipitáty)

$$\Delta\tau_{cut} = \frac{\gamma\pi d}{2bx_g}$$

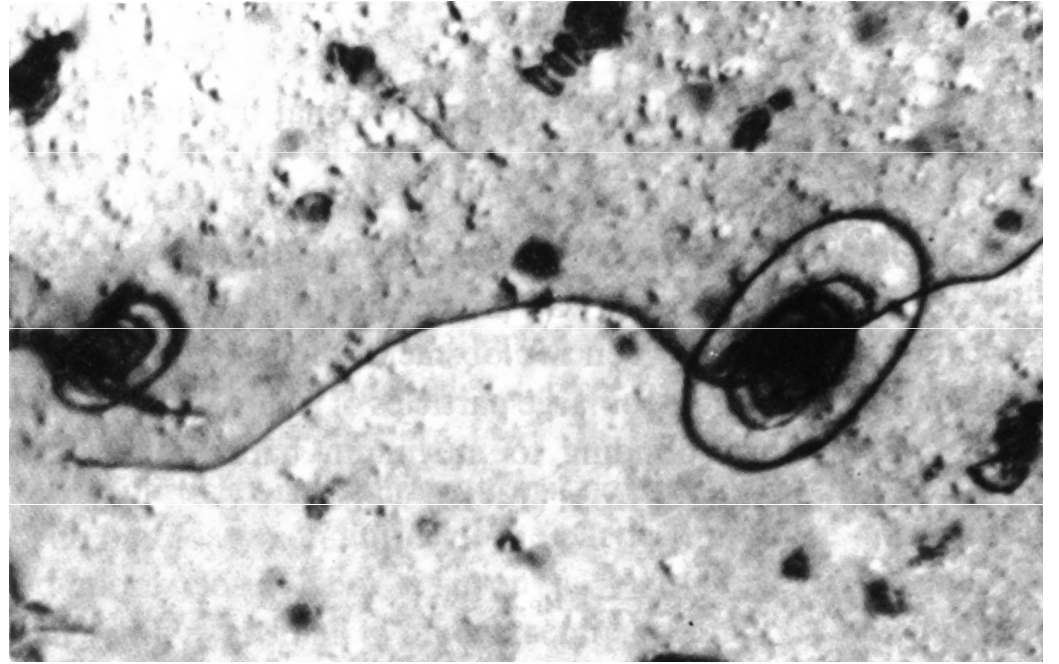
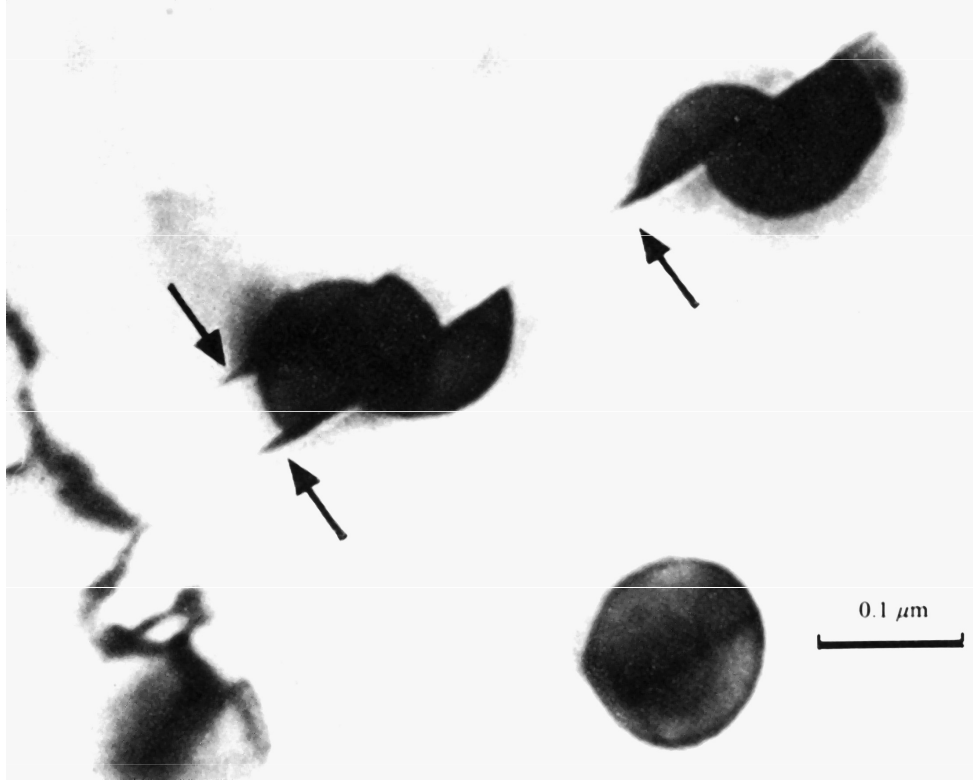
3. obečnění precipitátu

maximální napětí: $r = x/2$

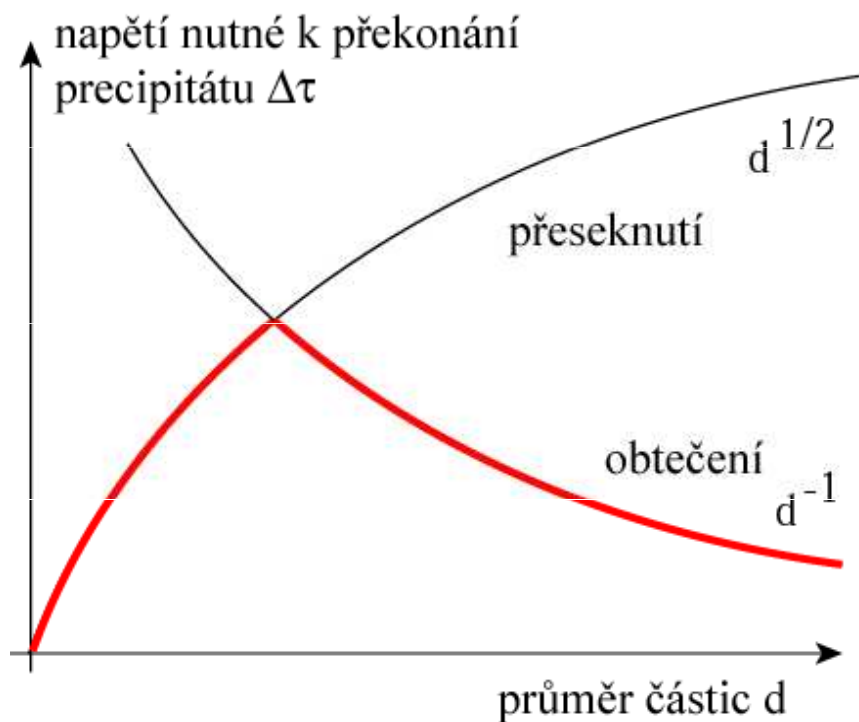
$$\tau = \frac{2\alpha\mu b}{x}$$

anihilace

Orowanovy smyčky - překážka je nyní obtížněji překonatelná

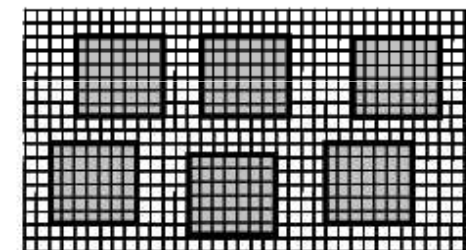
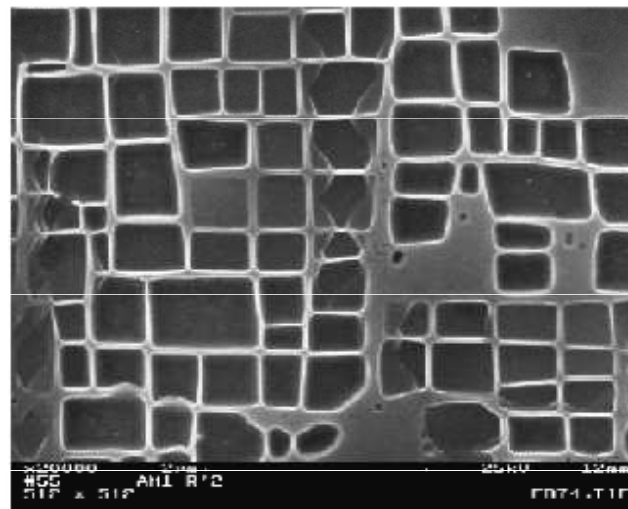


Vliv velikosti precipitátu při zachování konstantního objemového podílu fází (pokud roste průměr precipitátů, klesá jejich počet)

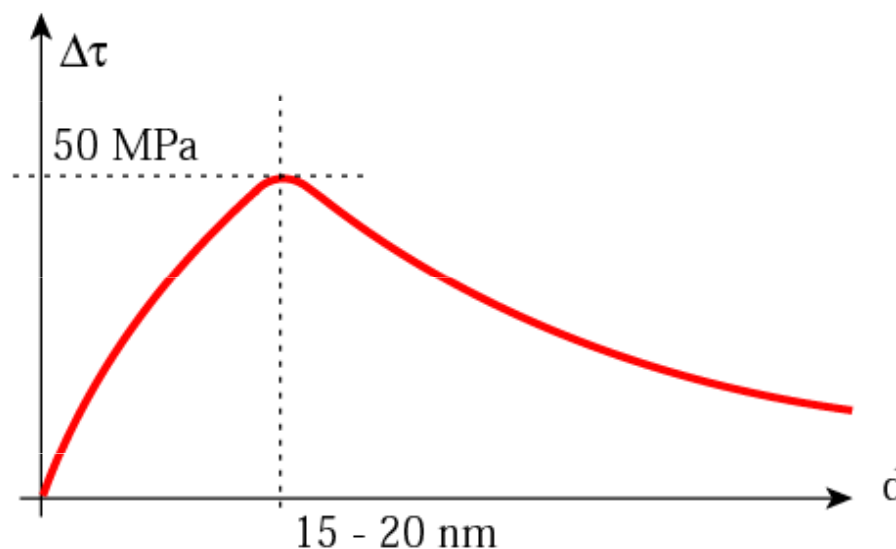


Ex.: Ni_3Al

superslitina



koherentní precipitáty
uspořádané fáze (60-70%)
v matici tuhého roztoku



POLYKRYSTAL

PLASTICITA

- Mez kluzu polykrystalů je vyšší než u monokrystalů
- **Mez kluzu mikroskopická** deformace v jednom zrně
- **Mez kluzu makroskopická** plastická deformace ve všech zrnech
- **Podmínka von Misesa** :
je nutné mít 5 nezávislých módů plastické deformace (6 nezávislých komponent tenzoru deformace + podmínka konstantního objemu)

Ex. :

Zn má méně než 5 skluzových systémů => dvojčatění nebo lom

fcc kovy - 12 skluz. systémů,
snadná plasticita

TAYLOROVA TEORIE (fcc)

Q : Známe-li τ_c (monokrystal), lze vypočítat σ_0 (polykrystal), když použijeme náhodné orientace a Schmidovy faktory?

$$\tau_c = \bar{m} \sigma_0 = \frac{1}{M} \sigma$$

M = 2.24 (Sachs, jeden ss. v každém zrně)

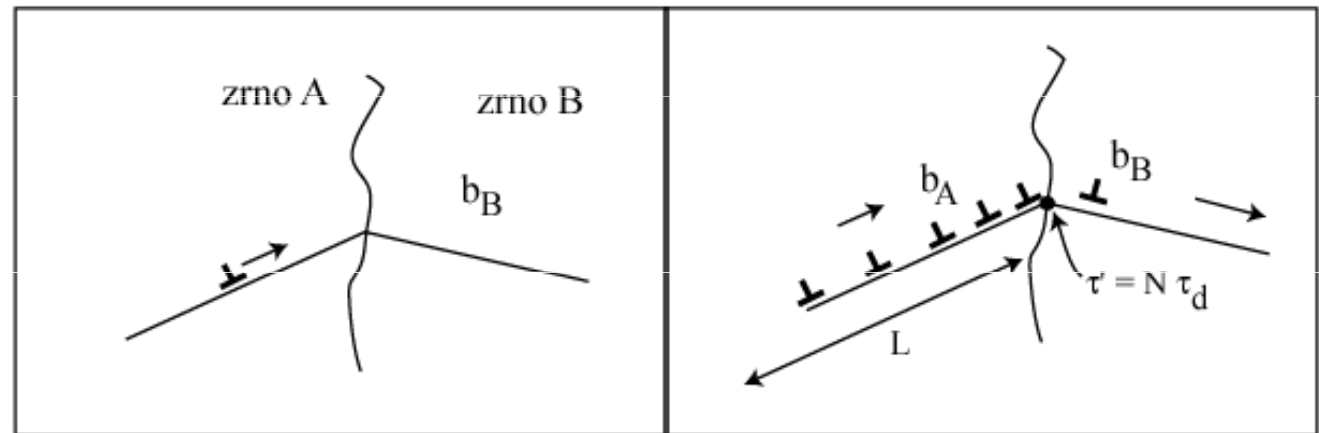
M = 3.06 (Taylor, 5 ss v každém zrně)

A : moc dobře to nefunguje => důležitý vliv hranic zrn

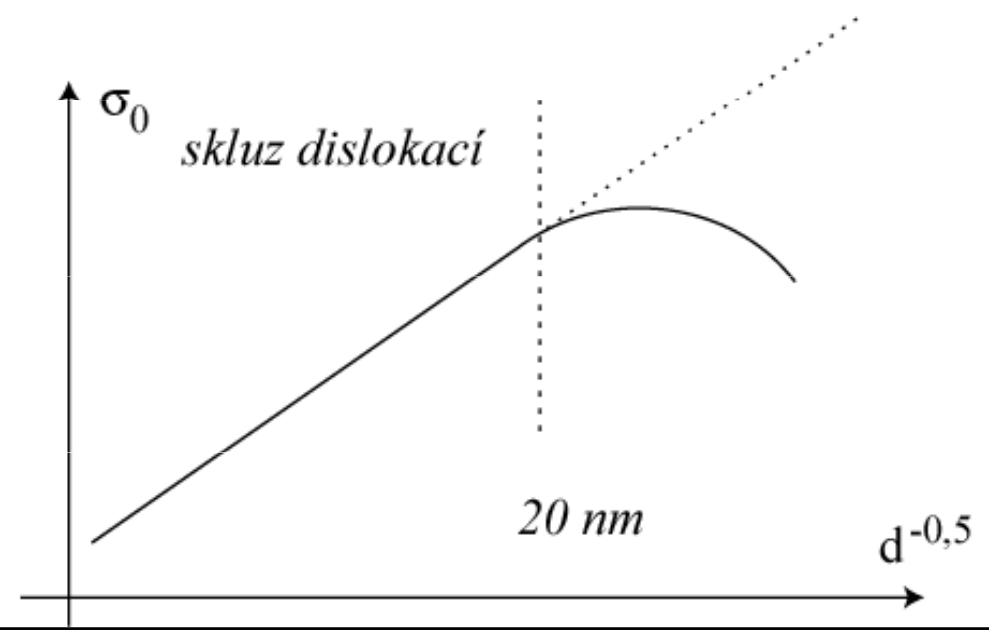
POLYKRYSTAL - HALL & PETCH

- Hall & Petch :

$$\sigma_0 = A + k d^{-0,5}$$



Nanokrystalické materiály : σ_0 gigantické?



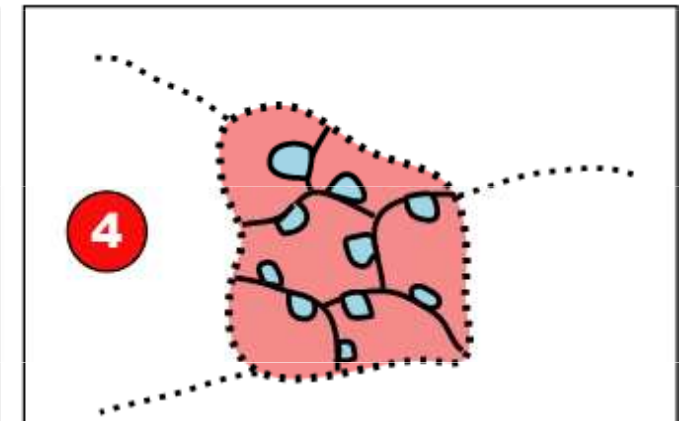
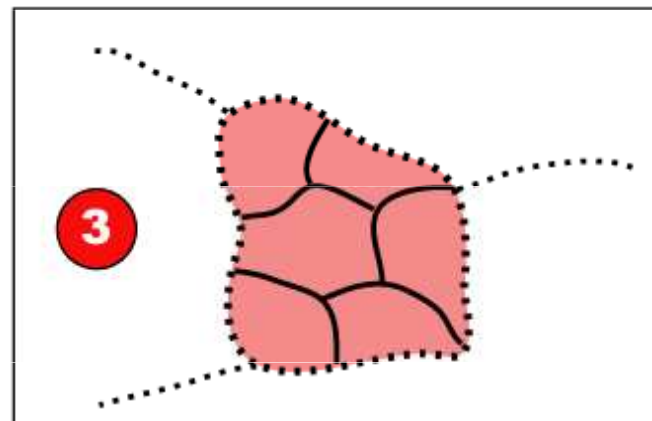
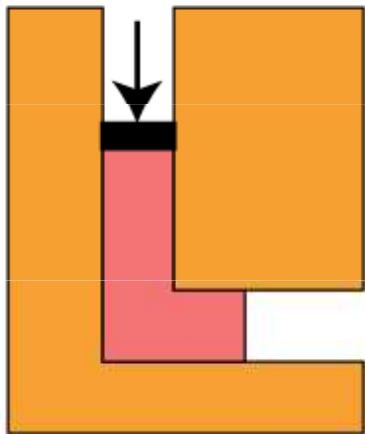
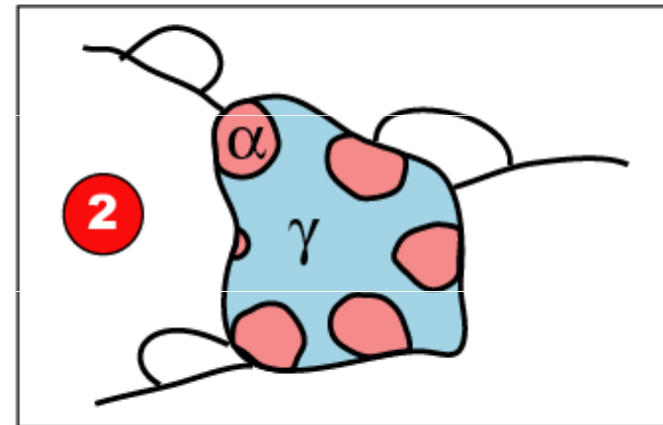
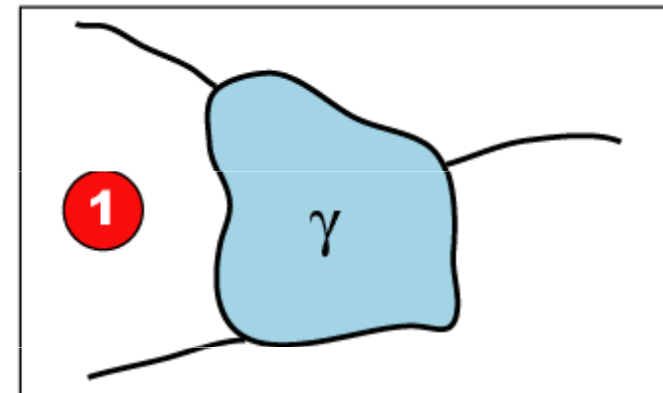
ŘÍZENÍ VELIKOSTI ZRNA

Velikost primárního zrna závisí na podmínkách tuhnutí ingotu (rychlost ochlazování, počet zárodků ...)

Allotropická transformace => možnost zjemnění zrna

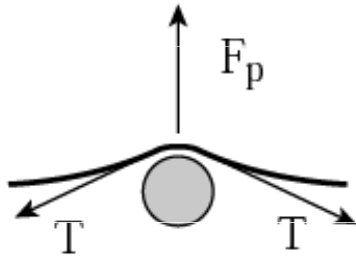
Další možnosti ovlivnění velikosti zrna termomechanickými procesy

Bulkové materiály se submikrometrickou velikostí zrna - metodou velké plastické deformace (ECAP, HPT)



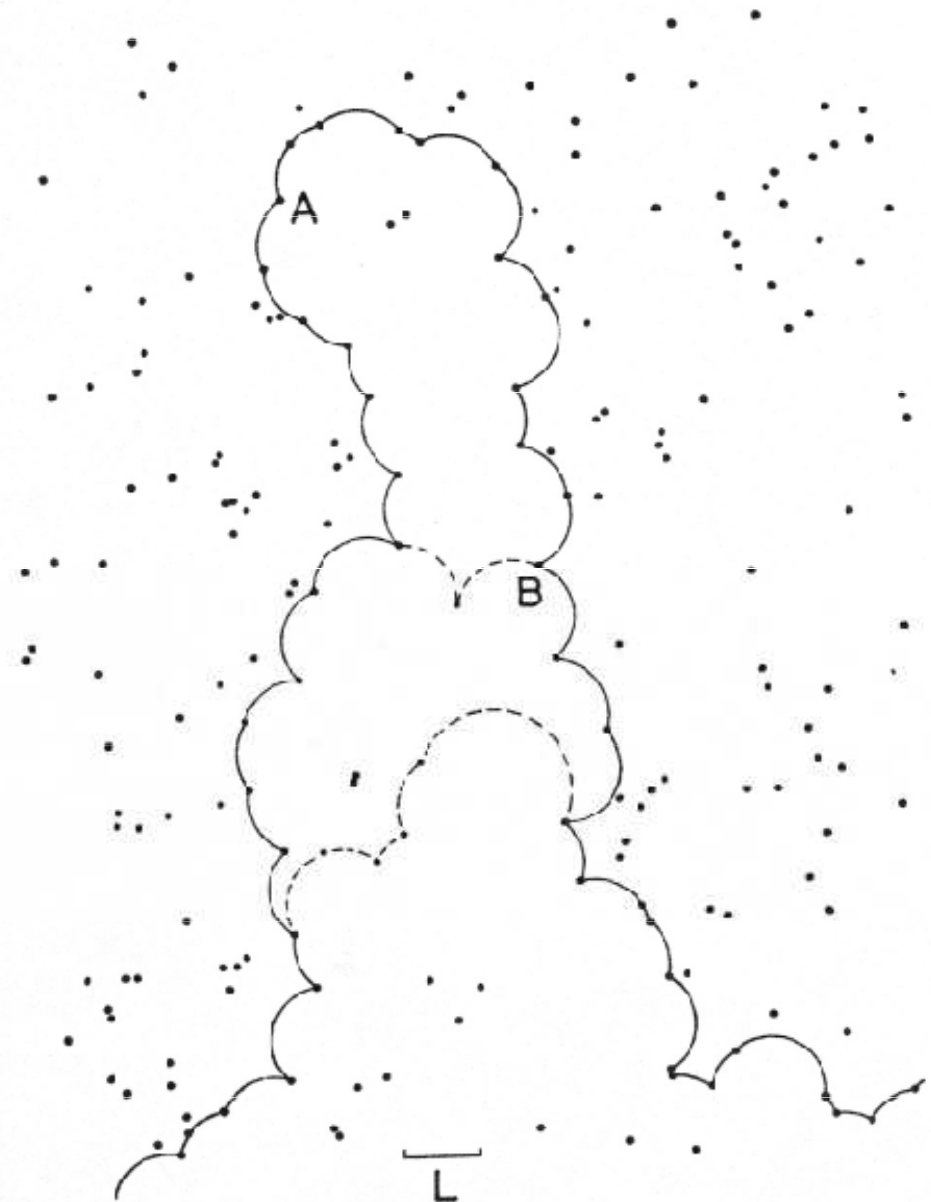
POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ, FOREMAN & MAKIN: JAKÉ JE τ_c PŘI VÝSKYTU VÍCE TYPŮ PŘEKÁŽEK ?

Překážka je charakterizovaná silou F_p , nutnou k jejímu přeseknutí.



- $F_p < 2T$ precipitát je přeseknut
- $F_p \geq 2T$ precipitát je obtečen
- $F_p \sim d^{1/2}$, závisí na koherenci a typu částice

Závěr : nelze jednoduše sčítat vliv jednotlivých překážek.



DVOJČATĚNÍ

Definice: dva krystaly A a B jsou dvojčata, pokud:

- mají stejný typ krystalové mřížky
- existuje společná krystalografická rovina K (rovina dvojčatění)
- existuje vícenásobná mřížka k primitivní mřížce, která je společná oběma krystalům A a B (symetrie)

Dvojčata prvního typu

Krystal B je zrcadlovým obrazem krystalu A, rovina dvojčatění je zrcadlová rovina.

Mřížky s vysokým stupněm symetrie.

Dvojčata druhého typu

Krystal B je obrazem krystalu po rotaci o 180° kolem osy η , která leží v rovině dvojčatění a je rovnoběžná s vektorem posunutí, vedoucím k dvojčatění.

Mřížky s nízkým stupněm symetrie (ortorombický uran).

Dvojčata složená

Oba typy zároveň (kubické mřížky)

DVOJČATĚNÍ - DĚLENÍ PODLE VZNIKU

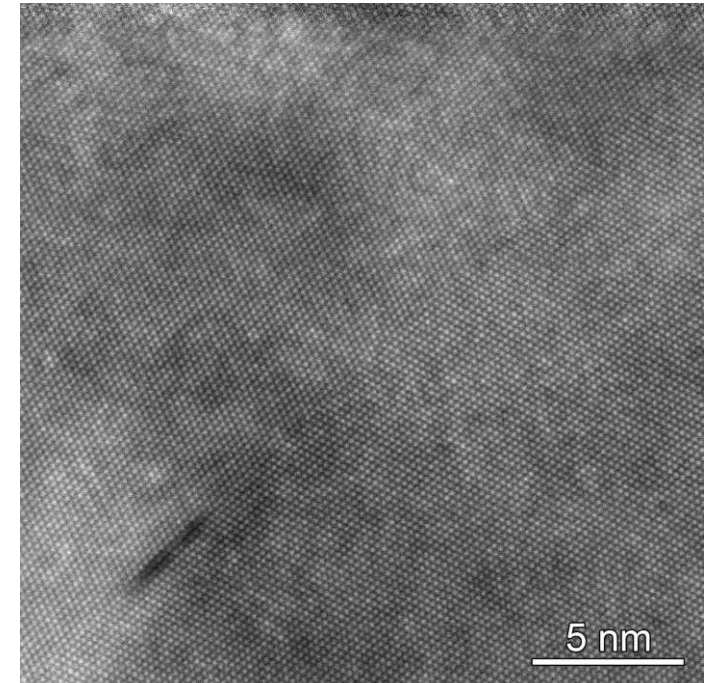
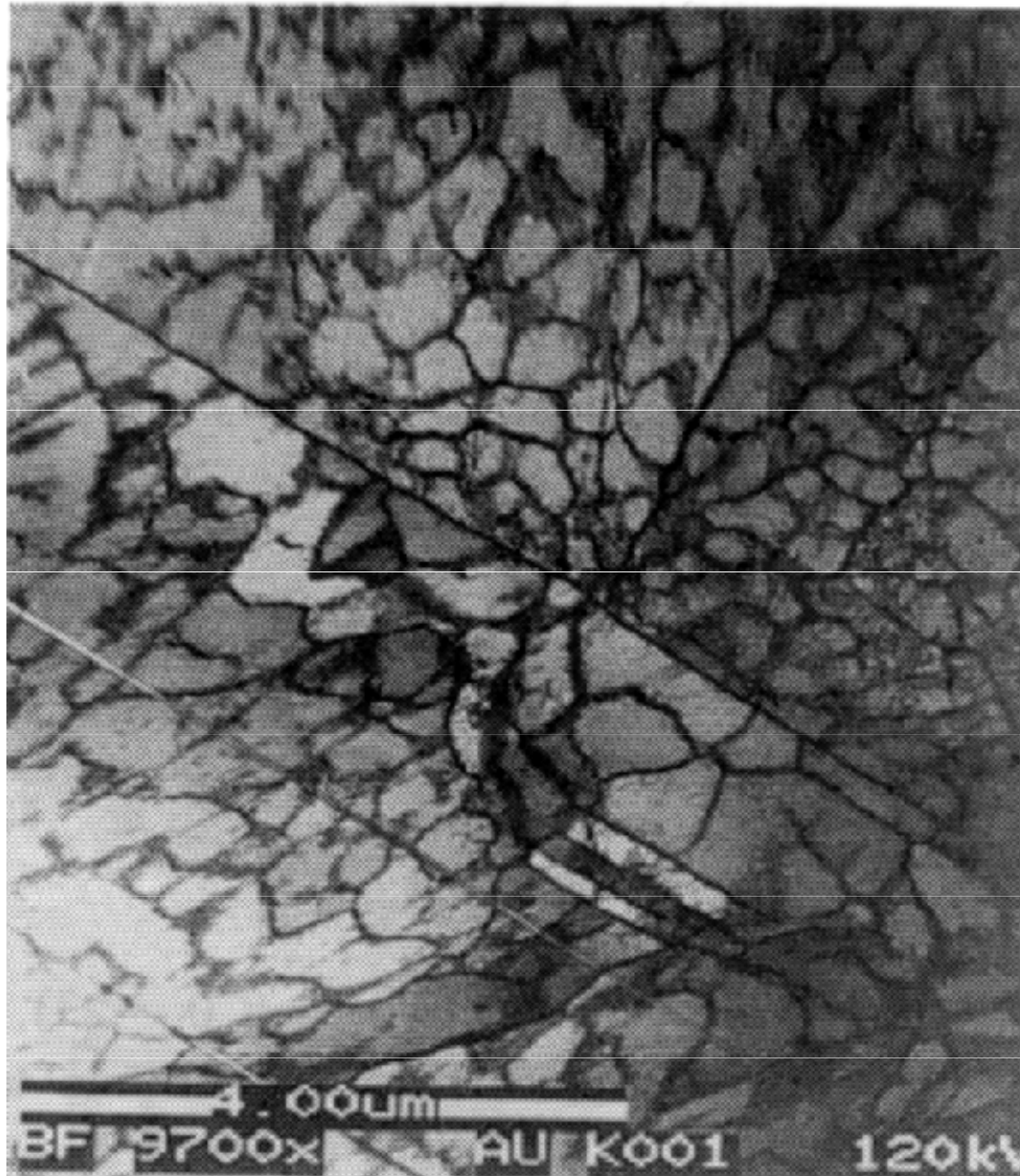
Dvojčata růstová

Vznikají během tuhnutí nebo rekrystalizace, různá tloušťka, typicky 10 - 100 μm .

Dvojčata deformační

Vznikají kvůli působení mechanického napětí ($\bar{\sigma}$), bývají velmi tenká, max. 1 μm . Vznikají skluzem podél rovin dvojčatění, vektor přemístění narůstá se vzdáleností od K

DEFORMAČNÍ DVOJČATA

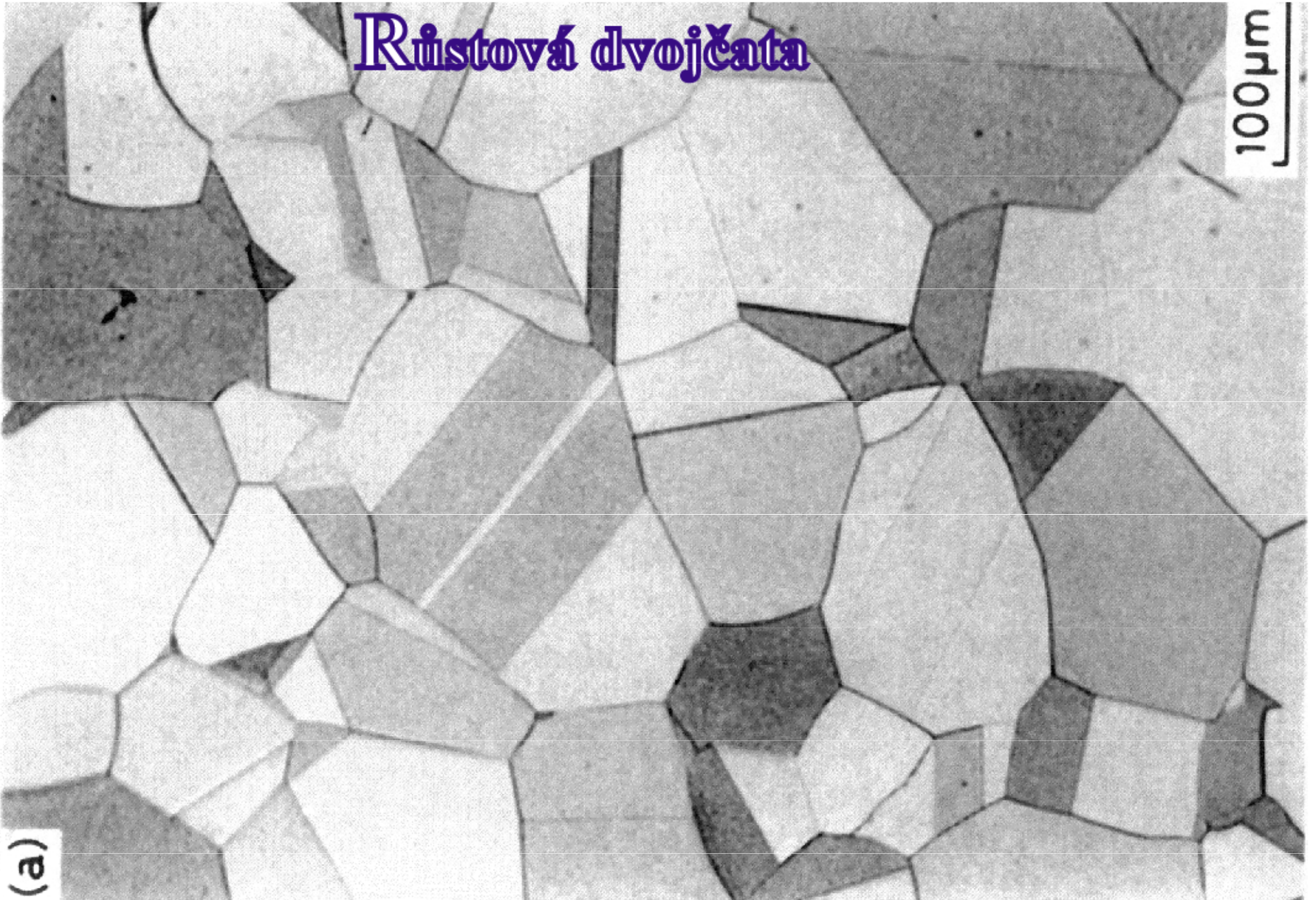


Austenitická ocel po únavě.

Růstová dvojčata

100 μm

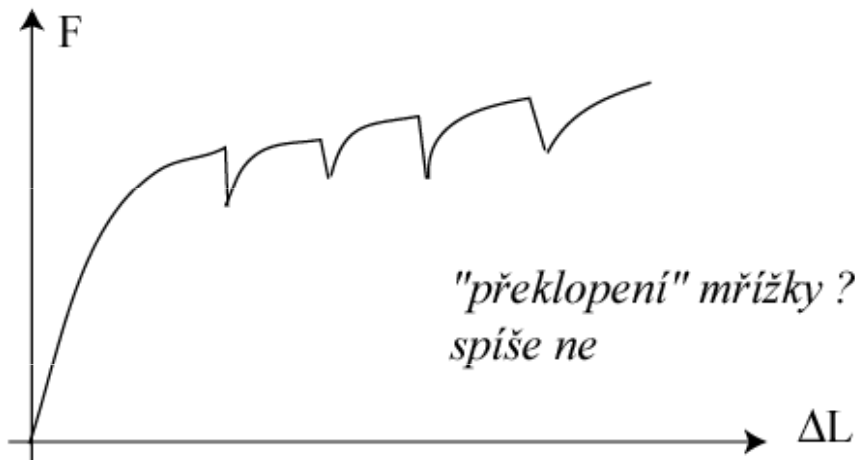
(a)



DEFORMAČNÍ DVOJČATĚNÍ

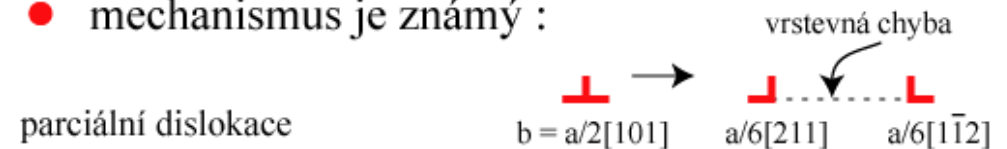
1. Dvojčatění "rychlé" nebo "katastrofické"

- rychlost vytváření a šíření dvojčat je srovnatelná s rychlostí zvuku
- doprovázeno akustickými efekty (křik Sn, Zn)
- pozoruje se pro < 5 skluzových sst
- \uparrow pro T \downarrow $(\sigma \uparrow)$
 $\dot{\epsilon}$ \uparrow
- způsobuje $\Rightarrow \epsilon_p$
změna krystalografické orientace

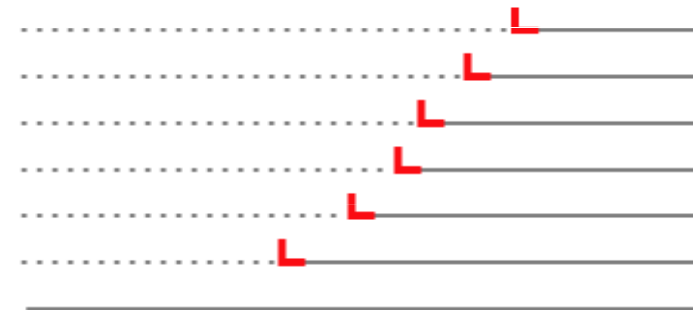


2. Dvojčatění "pomalé"

- rychlost vytváření a šíření dvojčat je "pomalé"
- mechanismus je známý :

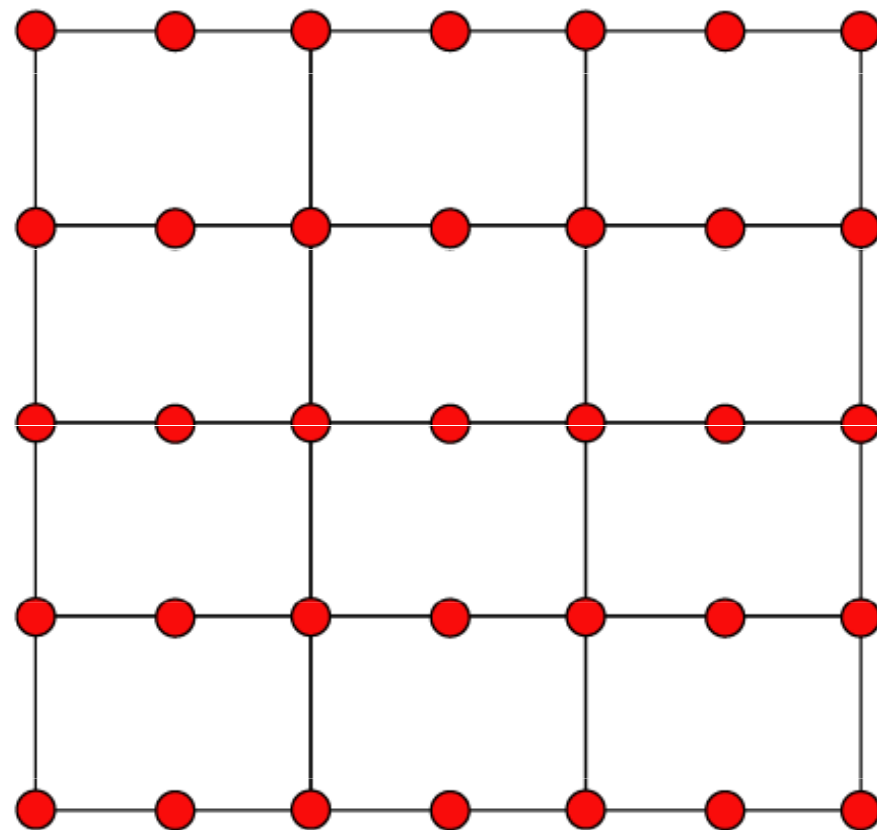
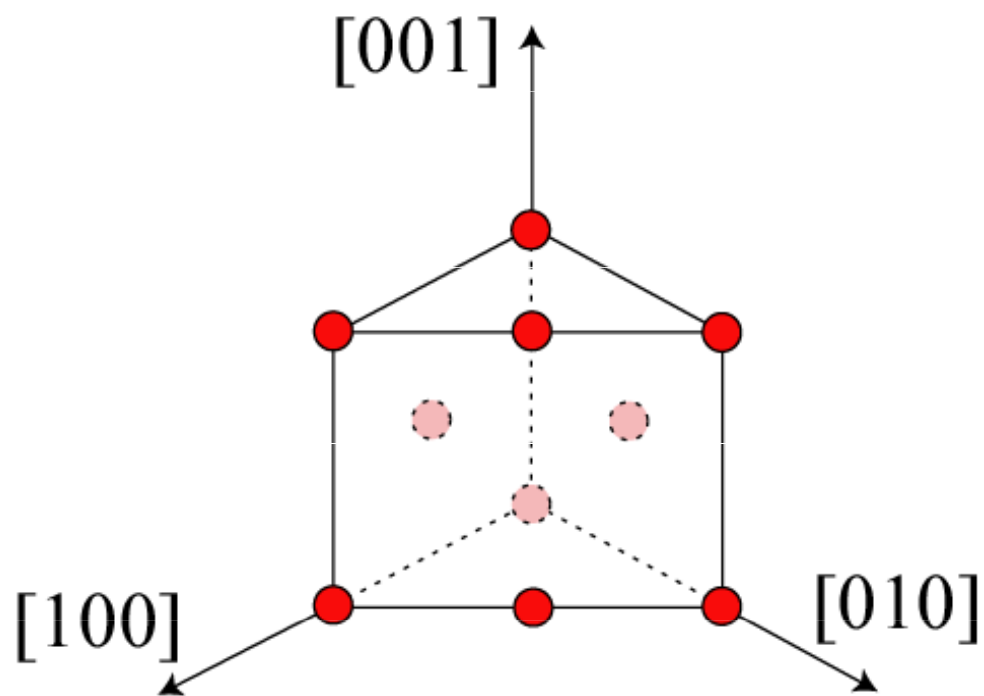


TEM

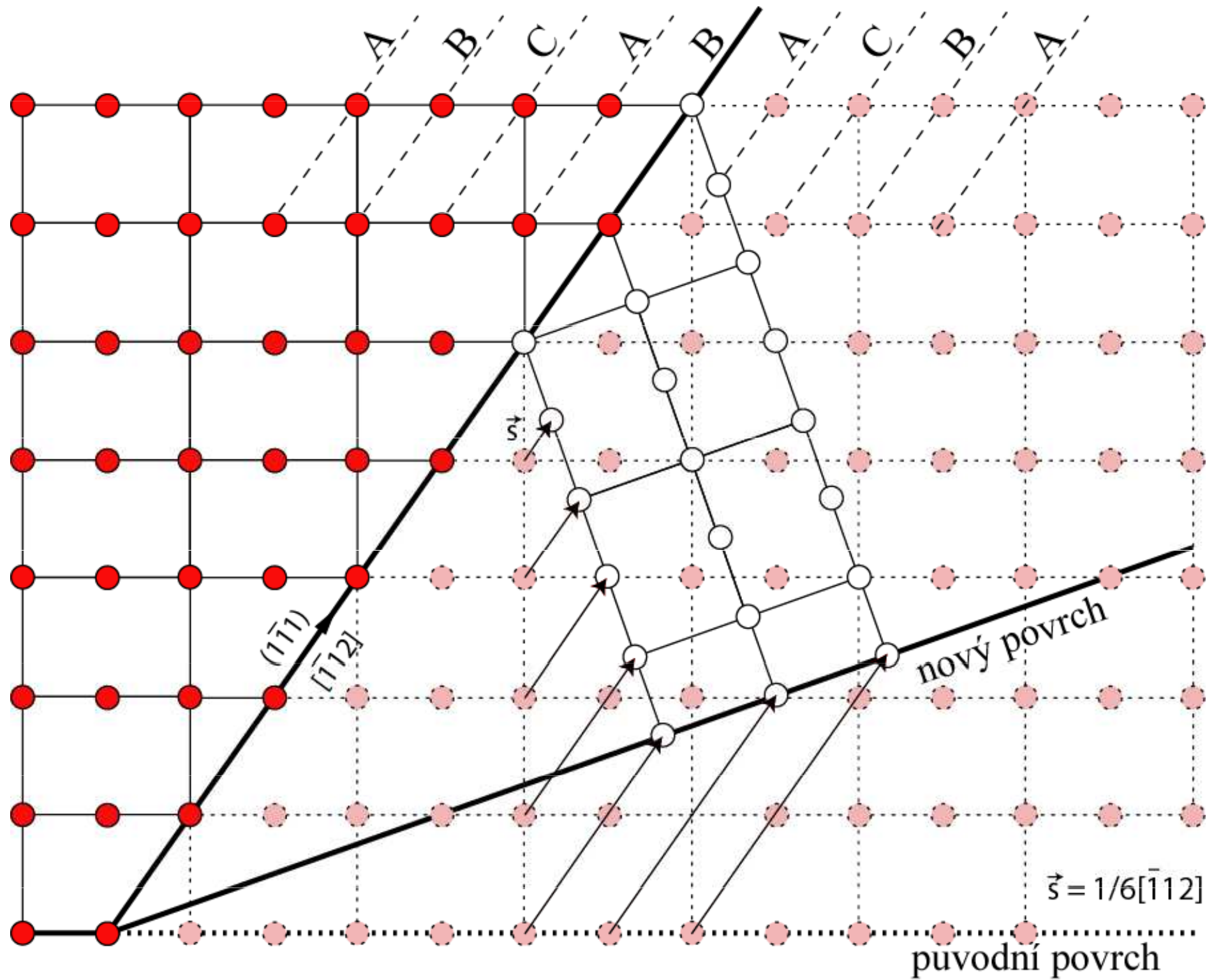


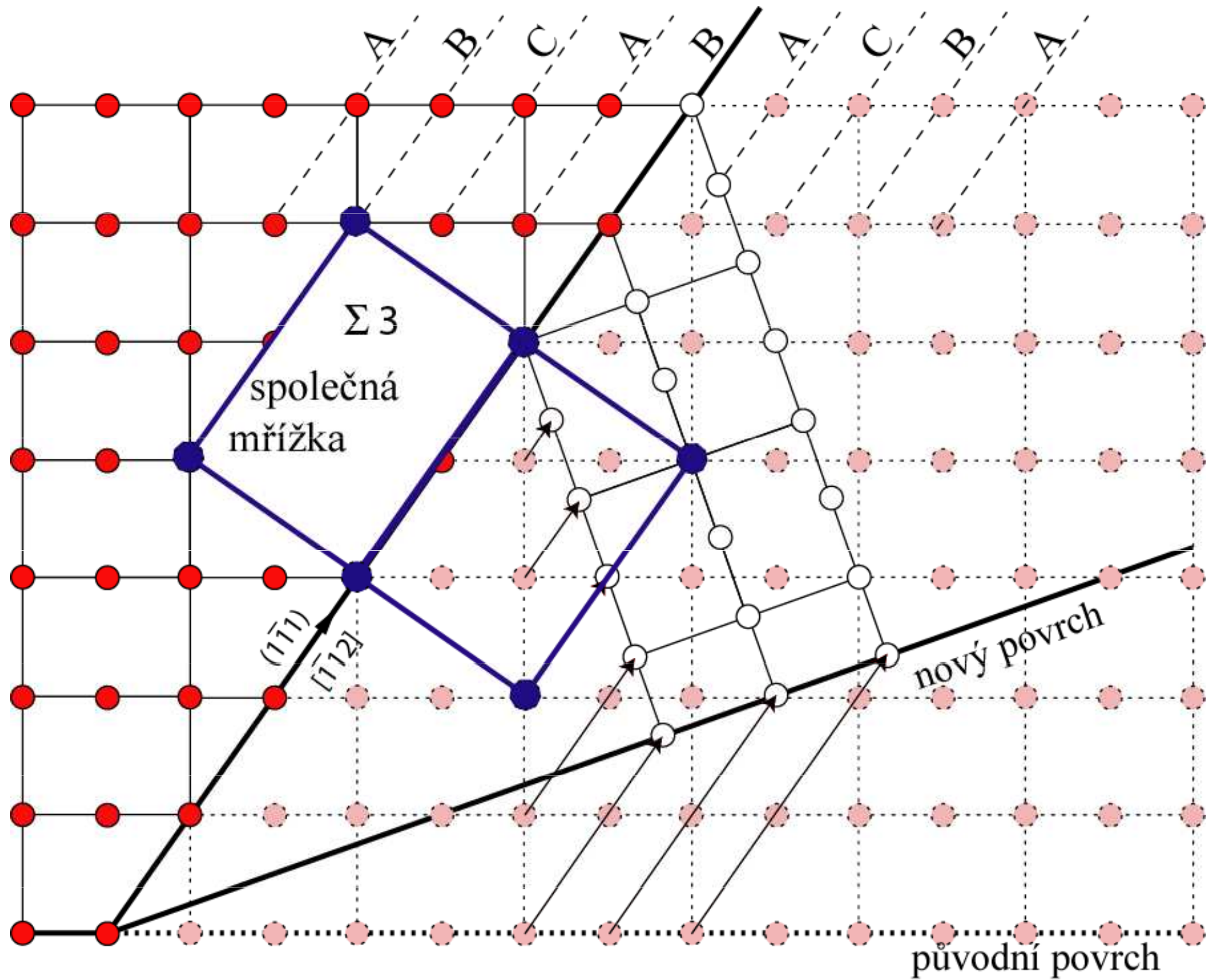
- tahová křivka je hladká
- energeticky nenáročný mechanismus

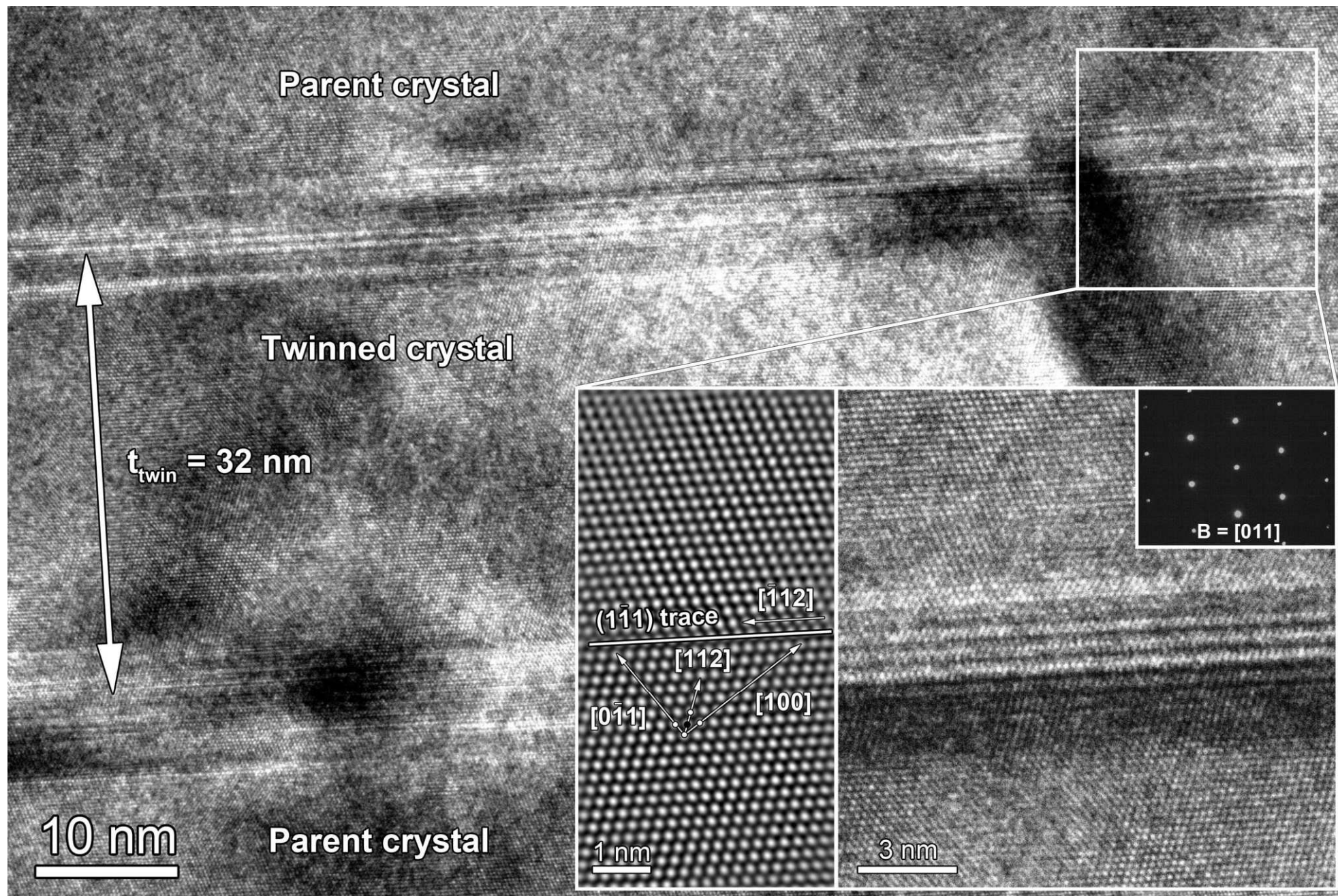
DVOJČATĚNÍ - fcc



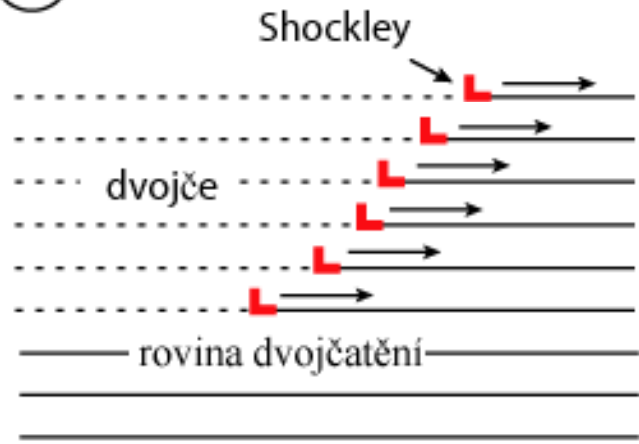
rovina (110)



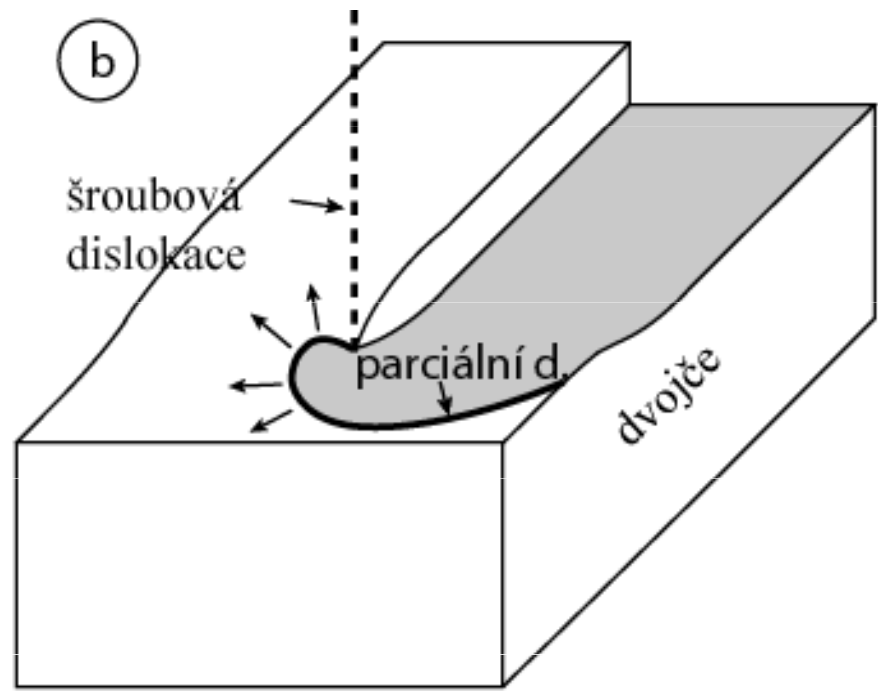




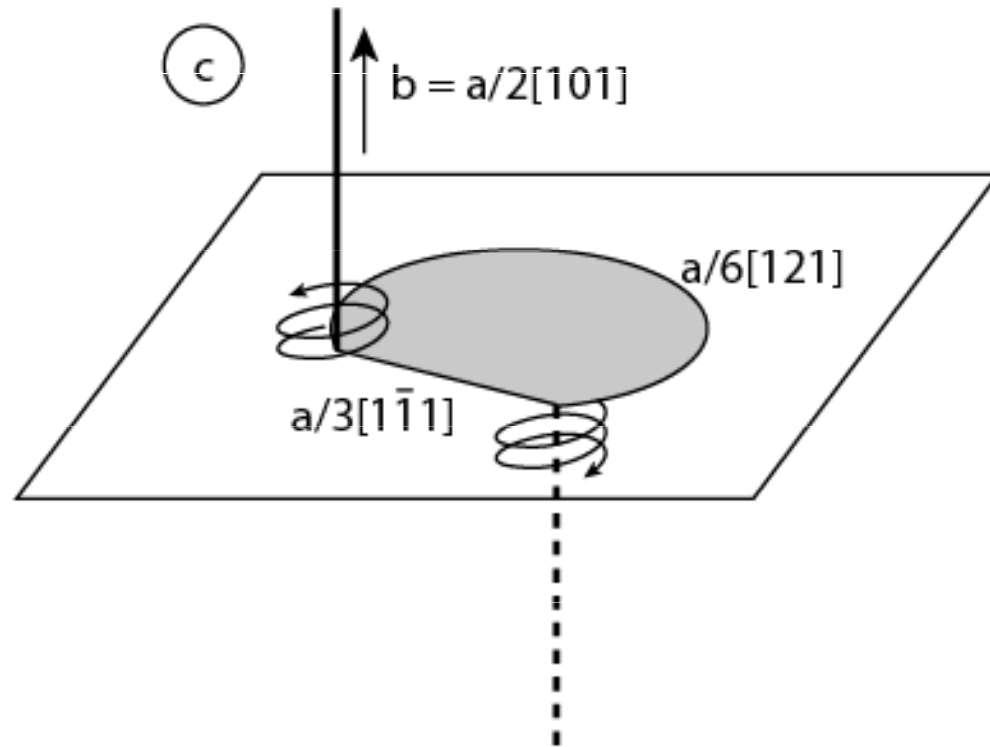
(a)



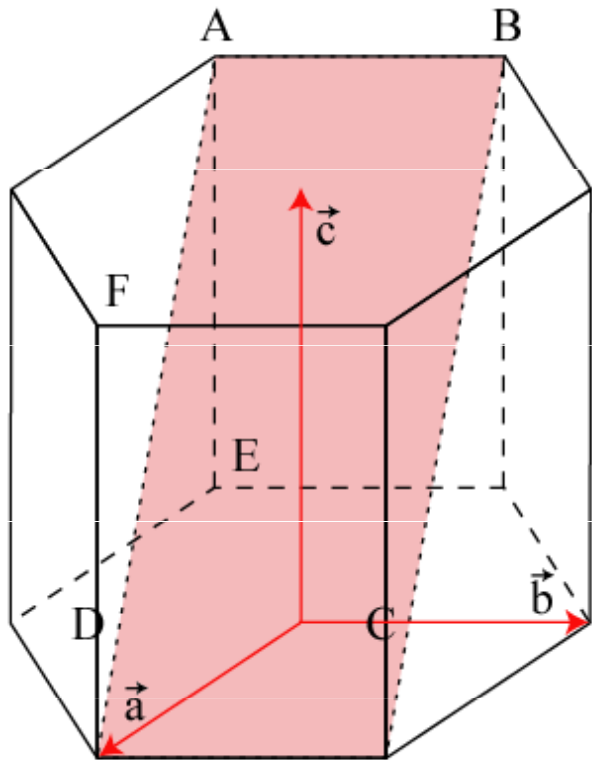
(b)



(c)

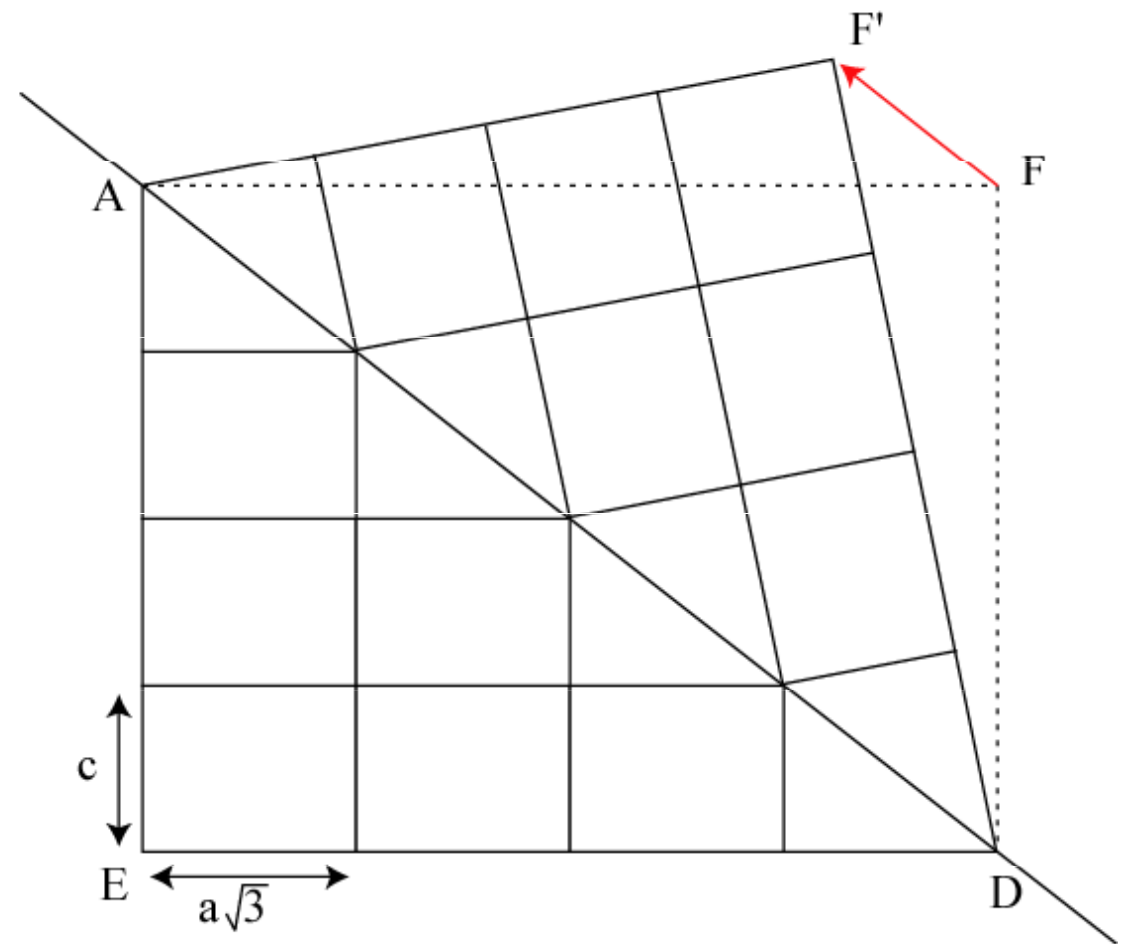


DVOJČATĚNÍ - hc



Rovina dvojčatění : $ABCD = (10\bar{1}2)$

Směr dvojčatění : $AD = [10\bar{1}\bar{1}]$

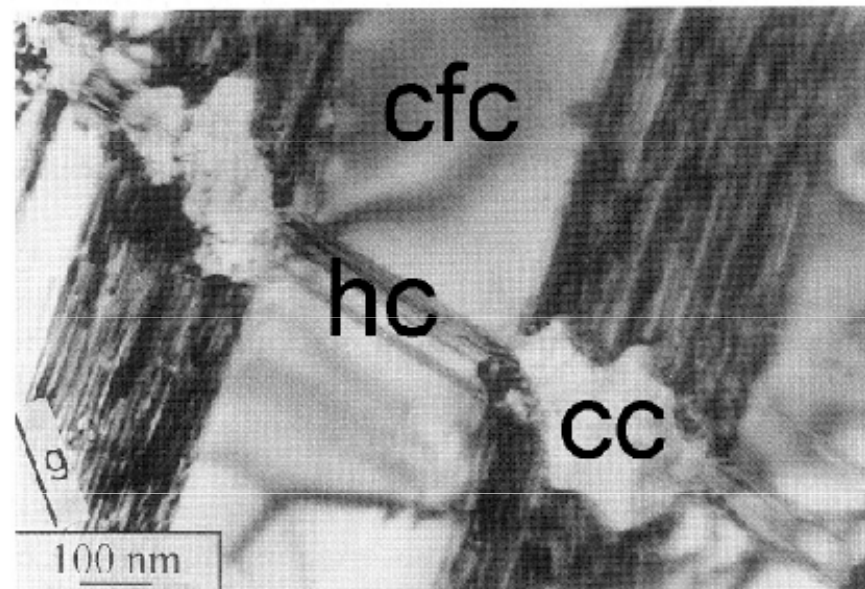
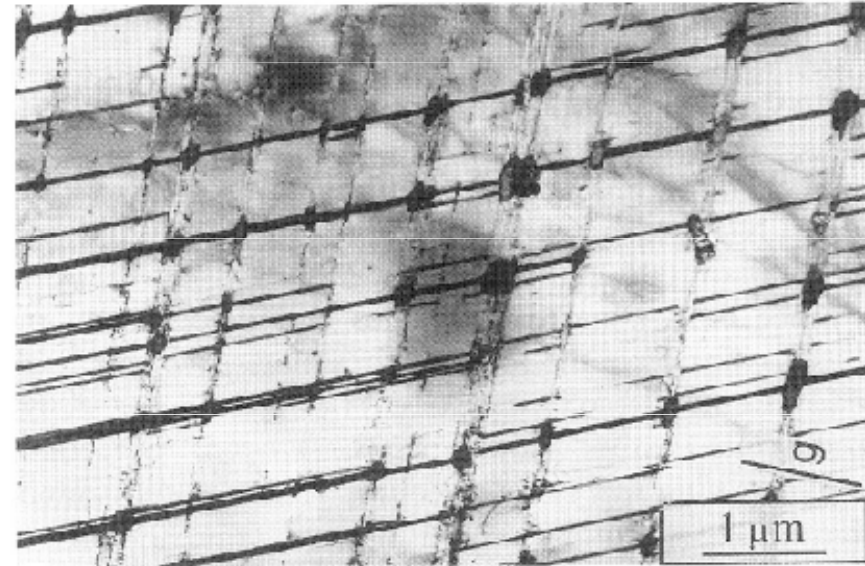


$c/a < 1,732 \dots$ dvojčatění v tahu

$c/a > 1,732 \dots$ dvojčatění v kompresi (Zn, Cd)

DEFORMACE KVŮLI FÁZOVÉ TRANSFORMACI

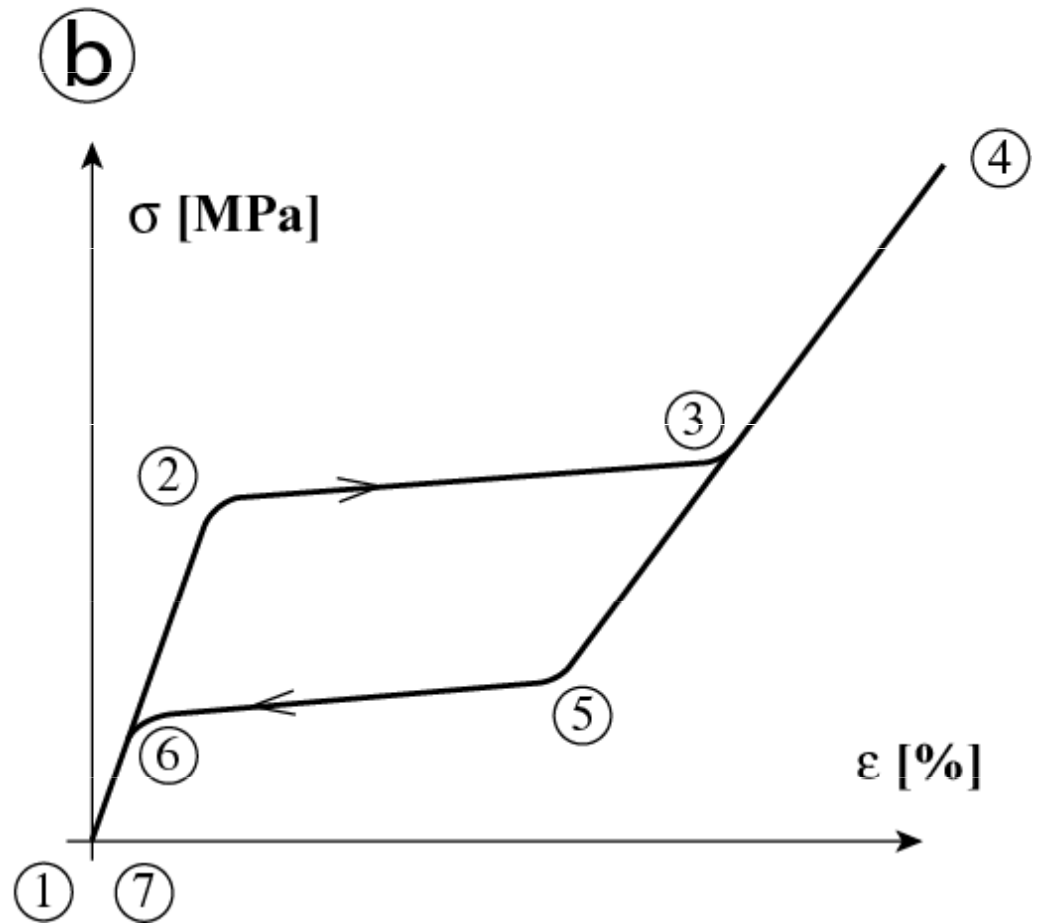
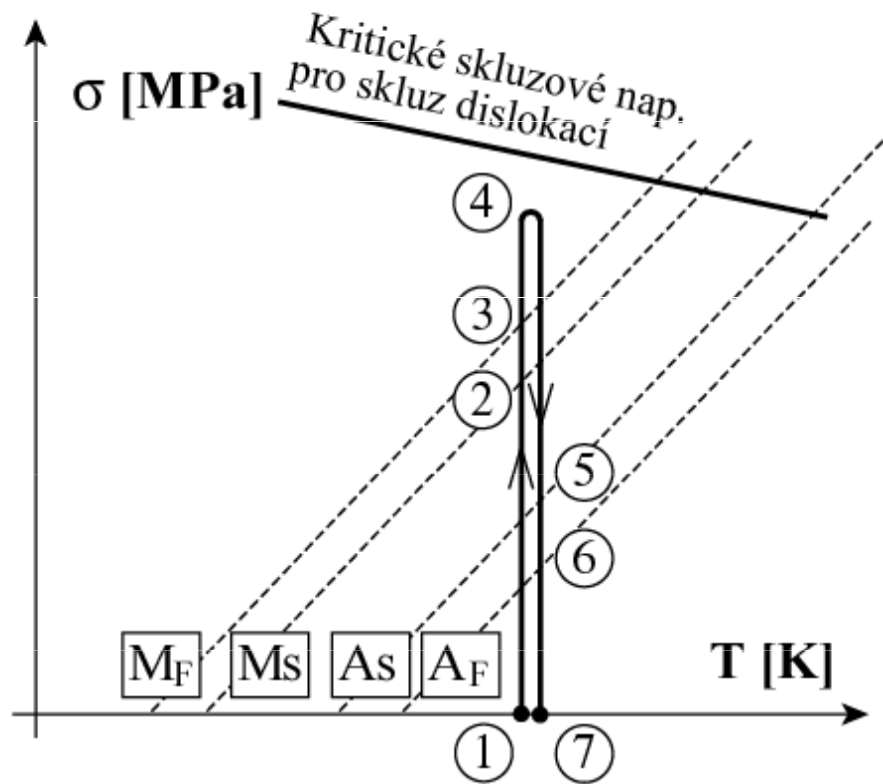
Austenitická ocel po únavě
v kapalném dusíku:
transformace $\text{fcc} \rightarrow \text{hcp} \rightarrow \text{cc}$



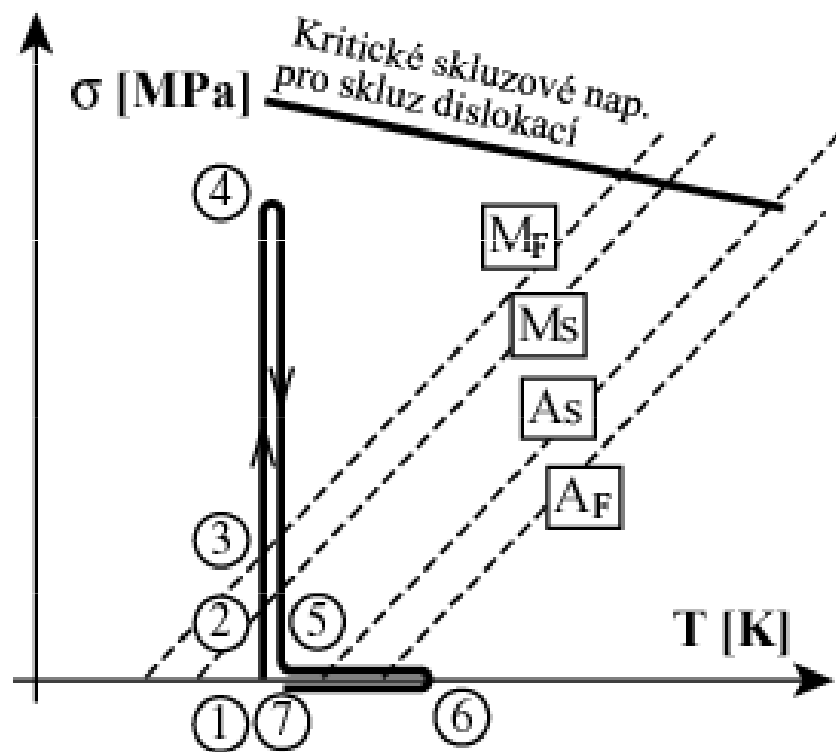
SLITINY S TVAROVOU PAMĚTÍ (SHAPE MEMORY ALLOYS)

2 zajímavé efekty spojené s transformací fází: austenit (fcc) \leftrightarrow martensit

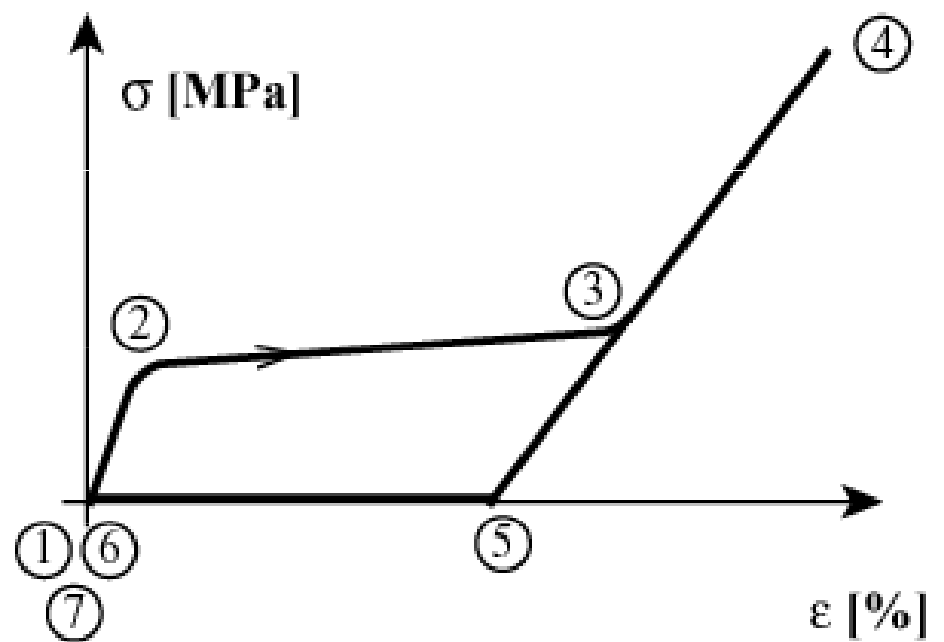
a) Pseudoelasticita

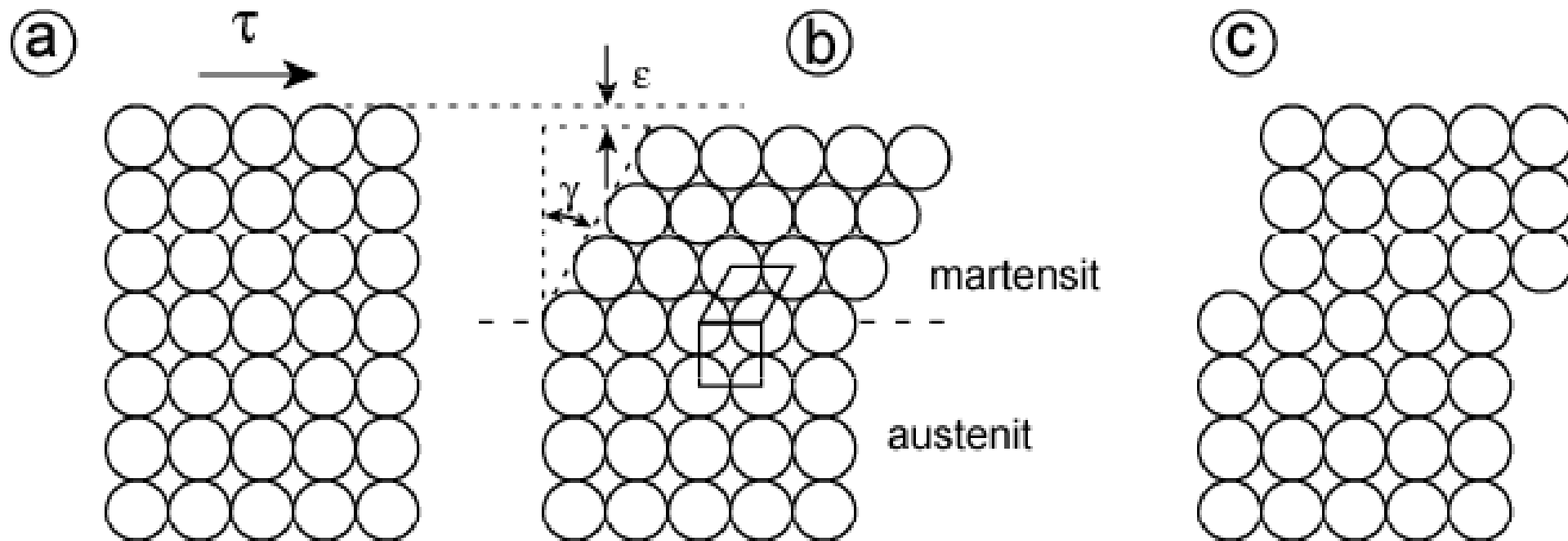


a Paměťový efekt jednoduchý



b





transformace fází
podobná dvojčatění

dislokační skluz

MODELOVÁNÍ MECHANICKÝCH VLASTNOSTÍ

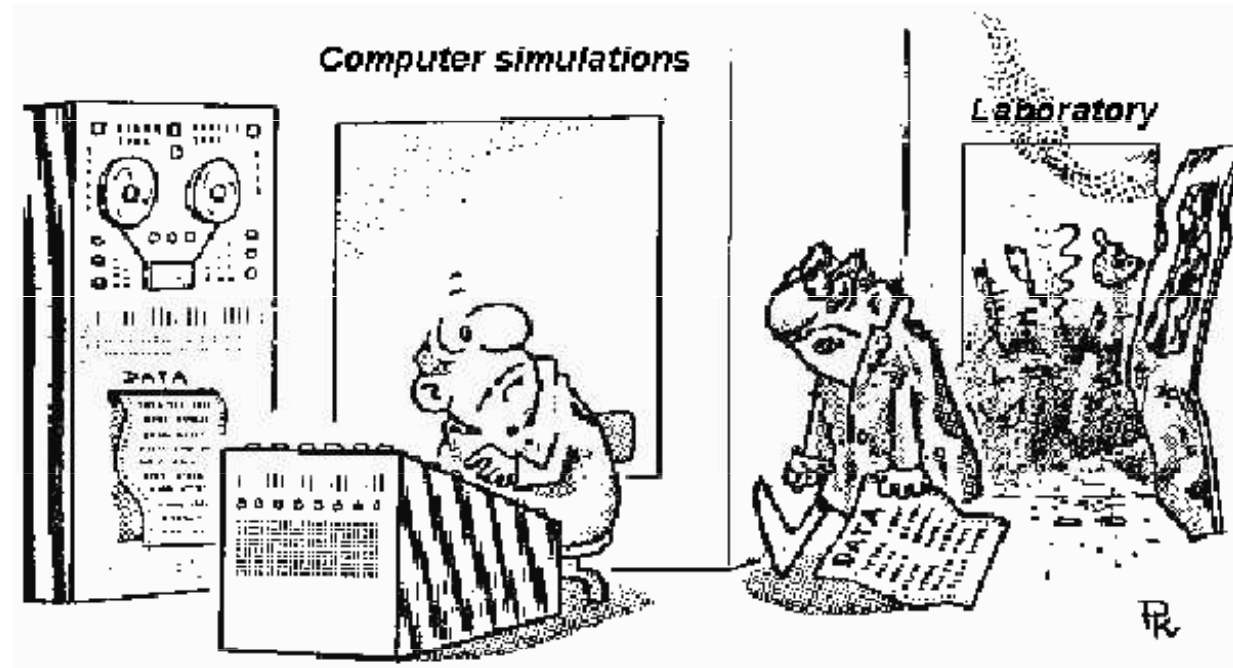
Sen ...

chemické složení,
tepelně-mechanické zpracování

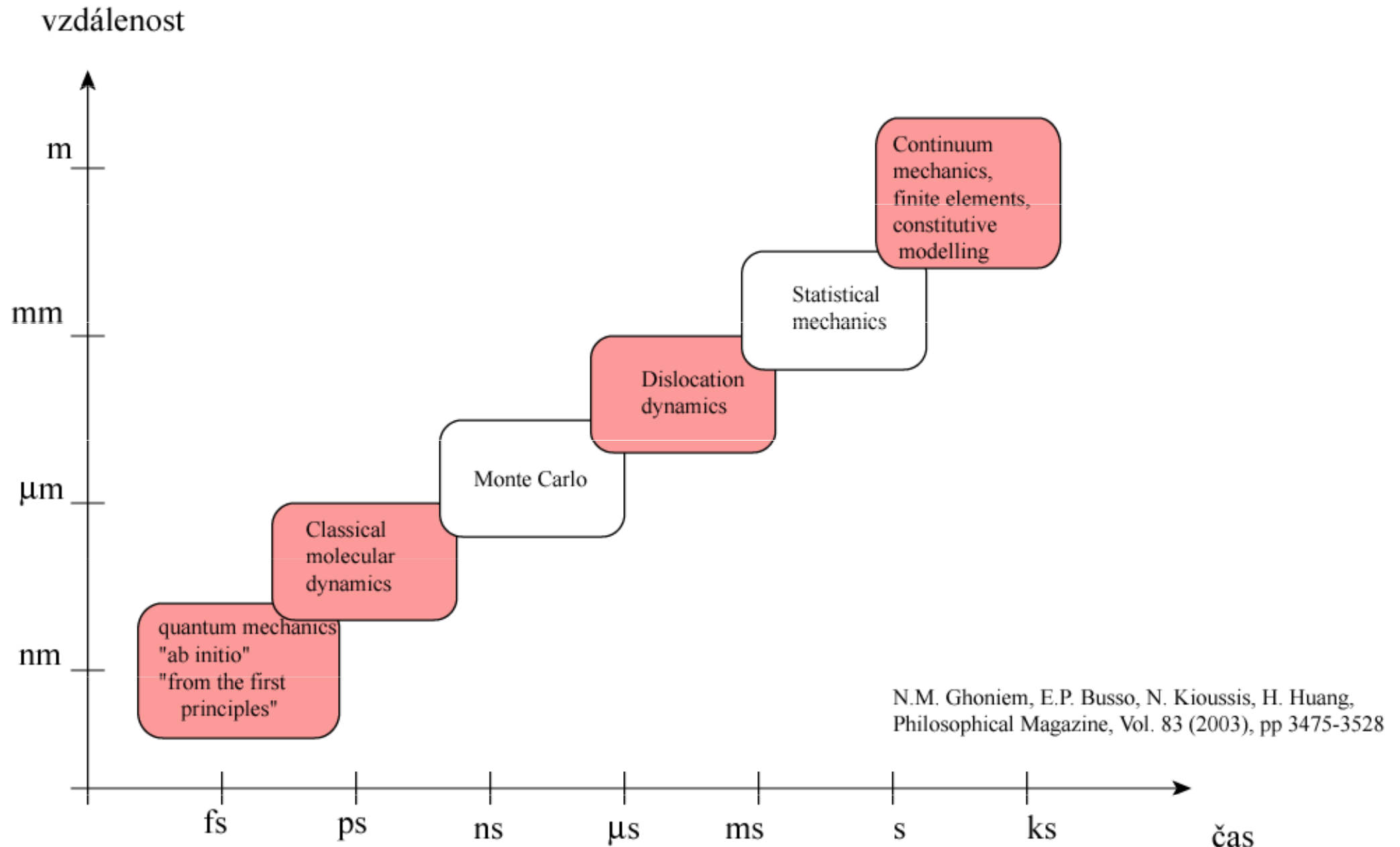


mechanické vlastnosti

... a realita



MULTISCALE MATERIALS MODELLING



AB - INITIO

výpočty pomocí kvantové mechaniky

- Schrödingerova rovnice
- Born-Oppenheimerova aproximace: separace proměnných elektronů a jader
- adiabatický princip: jádra jsou nepohyblivá

"even with this simplifications, the many-body problem remains formidable"

Užitečné pro:

výpočty meziatomových potenciálů

konfigurace jader dislokací

rozhraní

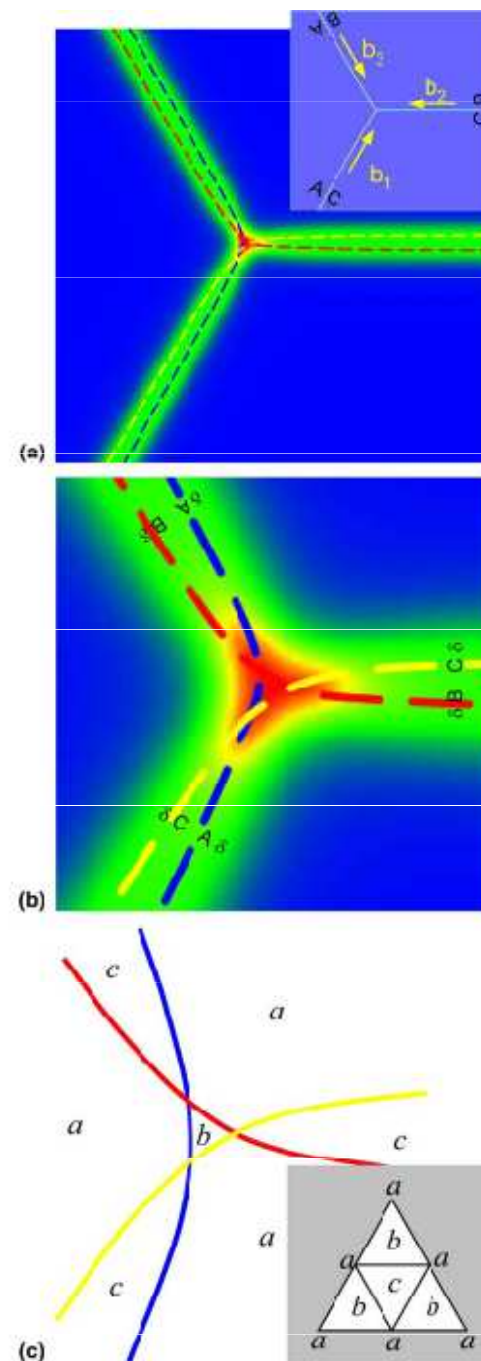
τ_c Fe: 7.8 GPa

Omezení: počet atomů ~ 100

dynamické problémy v řádu ps

vypočtená mřížka někdy nesouhlasí s pozorováním

led neplave na vodě



MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKA

výpočty založené na Newtonovské mechanice

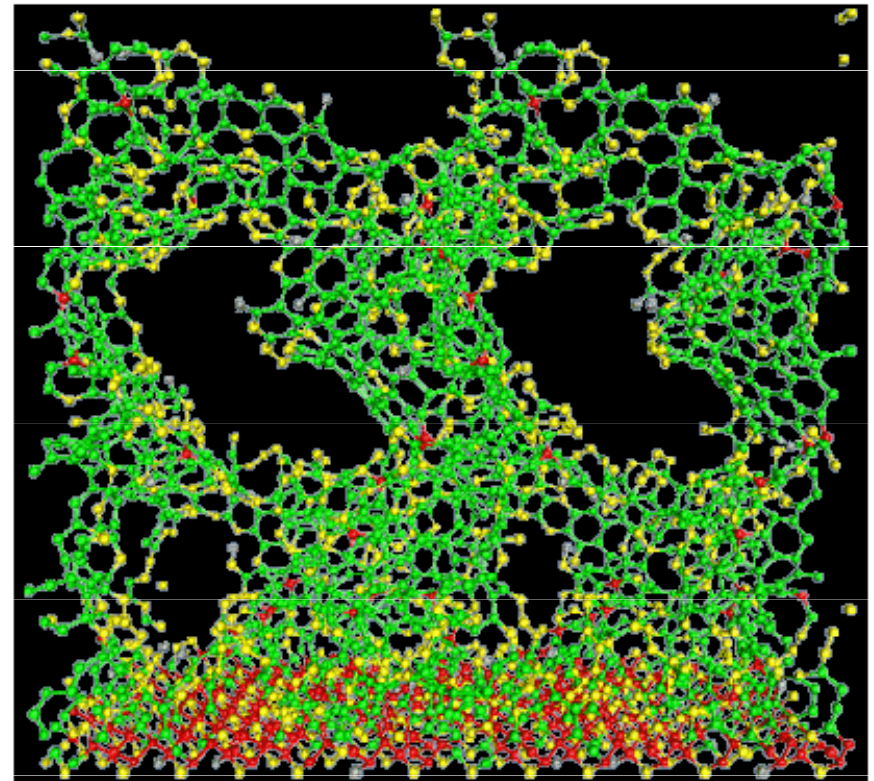
- počítají se síly mezi atomy/molekulami
- je nutno zvolit meziatomový potenciál (získán z ab initio → multiscale modelling)
- síla působící na atom = $-\text{grad}(U)$: klasická mechanika

Užitečné pro:

difúze bodových poruch
interakce dislokací
interakce dislokace x hranice zrna
procesy na čele trhliny
deformace nanokrystalů

Omezení:

10^9 atomů - nestačí pro zákony popisující
kolektivní chování dislokací
výsledky závisí na volbě potenciálu



tvorba uhlíkové vrstvy na substrátu

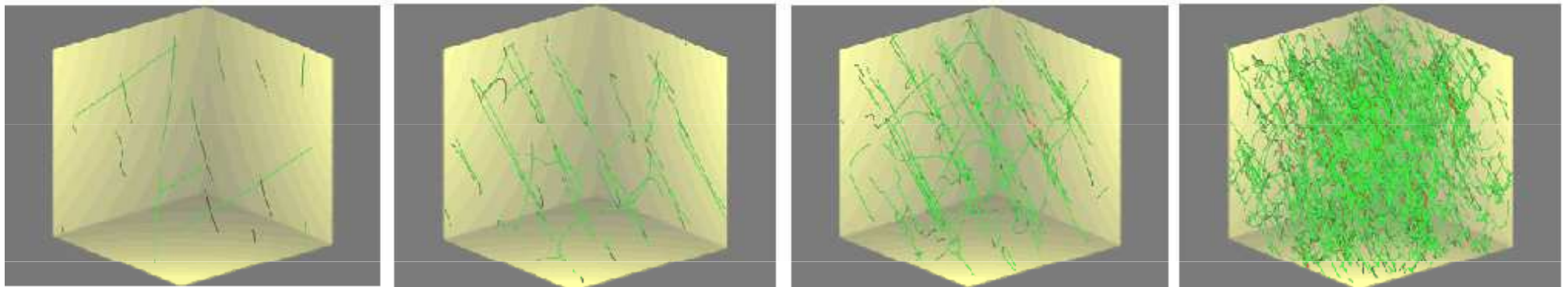
DISLOKAČNÍ DYNAMIKA

výpočty v rámci elasticity anisotropického kontinua

- výpočty interakčních sil mezi dislokacemi : Peach + Koehler
- procesy jako multiplikace, anihilace, interakce dislokací
- aproximace: isotropie, nekonečný krystal (periodické podmínky na hranicích)

Užitečné pro:

vývoj mikrostruktury během plastické deformace
lze modelovat "velké" objemy, až do cca $1000 \mu\text{m}^3$



Vasilij Bulatov : 132 000 CPU

http://www-cms.lnl.gov/bios/bulatov_vbio.html

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

KONSTITUTIVNÍ MODELOVÁNÍ

system empirických zákonů, které spojují makroskopické chování a mikrostrukturu

$$\dot{\gamma}_p = b v \rho_m \quad \text{Orowanův zákon}$$

hustota:

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_p + \frac{\dot{\tau}}{E}$$

rychlost:

$$v = v_0 \left(\frac{\tau^*}{\tau_0} \right)^m e^{(-\Delta G/kT)}$$

$$\tau^* = \tau - \tau_i = \tau - \alpha \mu b \sqrt{\rho}$$

Taylorův vztah

$$\rho = \rho_m + \rho_i$$

$$\dot{\rho}_{\text{multi}} = K_{\text{multi}} \dot{\gamma}_p$$

multiplikace

$$\dot{\rho}_{\text{surf}} = -\frac{1}{bl} \dot{\gamma}_p$$

ztráta dislokací na povrchu

$$\dot{\rho}_{\text{dip}} = K_{\text{dip}} \dot{\gamma}_p \rho$$

imobilizace tvorbou dipólů

$$\dot{\rho}_{\text{an}} = K_{\text{an}} \dot{\gamma}_p \rho_t d_{\text{dc}}$$

anihilace

$$\dot{\rho}_m = \dot{\rho}_{\text{multi}} - \dot{\rho}_{\text{surf}} - \dot{\rho}_{\text{dip}} - \dot{\rho}_{\text{an}}$$

$$\dot{\rho}_i = \dot{\rho}_{\text{dip}} - \dot{\rho}_{\text{an}}$$

volné parametry: v_0 , m , ΔG , α , K_{multi} , K_{dip} , K_{an}

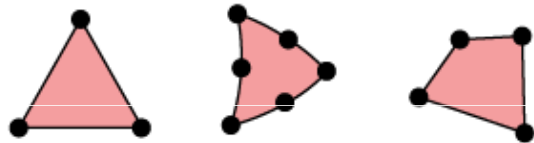


KONEČNÉ PRVKY výpočet $\bar{\sigma}$, $\bar{\varepsilon}$ a \bar{u}

1 DISKRÉTNÍ geometrický model objektu.

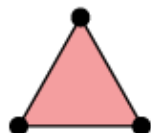
Objekt je sestaven z konečných útvarů (= prvků) v 1D, 2D, 3D.

Ex. 2D :



Výběr prvků:

počet uzlů = počet neznámých

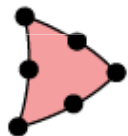


lineární reprezentace

\bar{u} uvnitř jednoho prvku :

$$u_x = a_1 + b_1x + c_1y$$

$$u_y = a_2 + b_2x + c_2y$$



quadratická reprezentace

$$u_x = a_1 + b_1x + c_1y + d_1xy + e_1x^2 + f_1y^2$$

$$u_y = a_2 + b_2x + c_2y + d_2xy + e_2x^2 + f_2y^2$$

2 Řešení soustavy diferenciálních rovnic

hledáme : u_x, u_y, u_z **3 neznámé pro každý uzel**

System rovnic

$$\bullet \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

$$\bullet \sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \varepsilon_{ij} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \varepsilon_{kk} \delta_{ij}$$

$$\bullet \frac{\partial \sigma_{i1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{i2}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{i3}}{\partial x_3} = 0 \quad \dots 3 \text{ rovnice pro každý uzel}$$

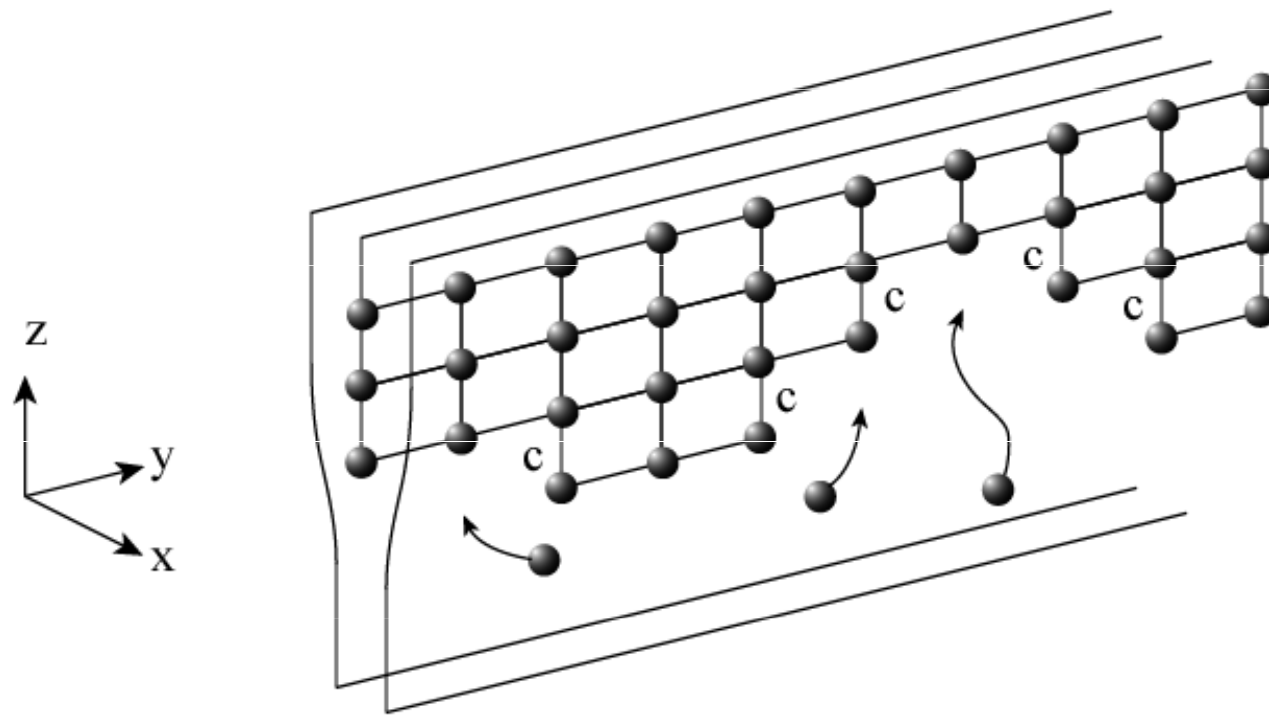
(tzv. silný princip, používá se také výpočet přes energii)

- podmínky na hranicích musí být známy

VYSOKÉ HOMOLOGICKÉ TEPLoty

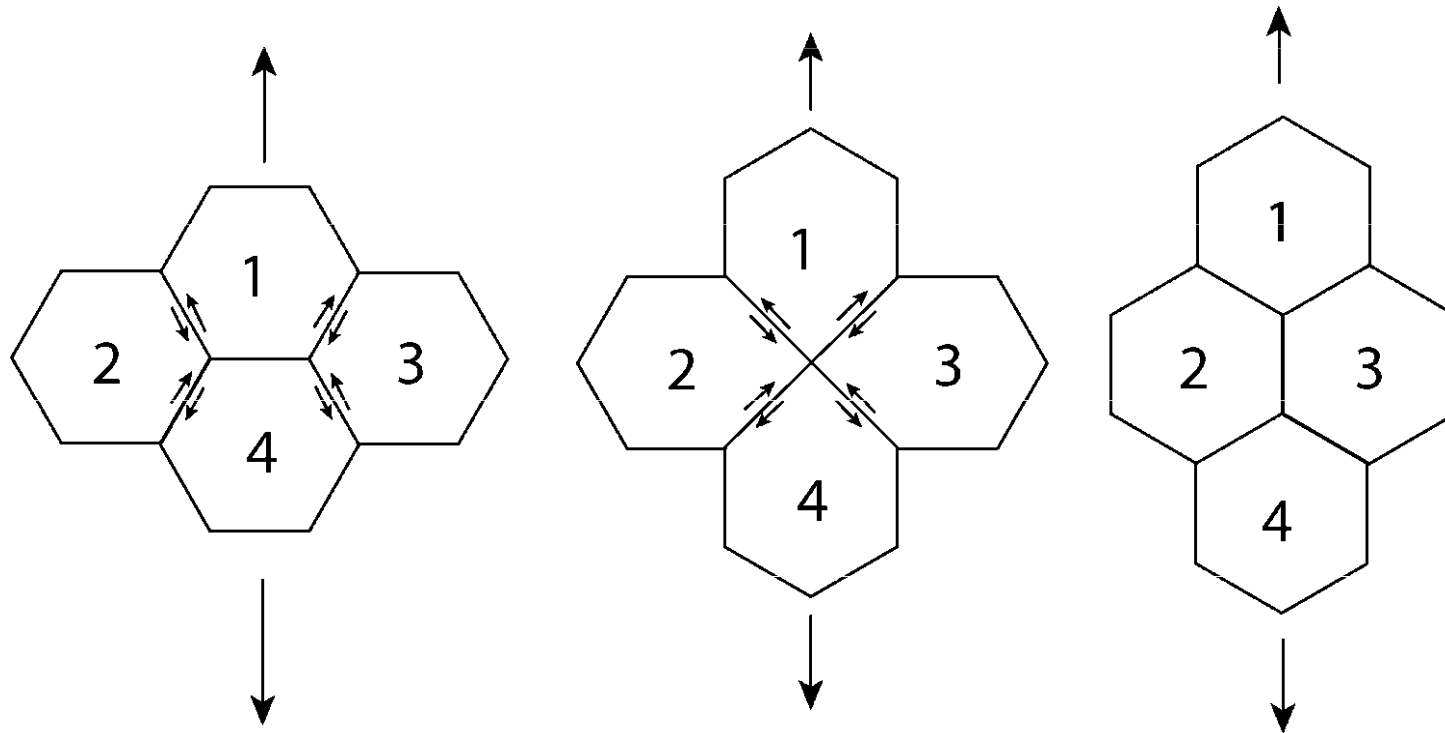
DIFUZNÍ MECHANISMY

šplh dislokací



- platí Orowanova rovnice
- Bardeen-Herringův zdroj dislokací - analogie k Frank-Readovu zdroji

SUPERPLASTICITA



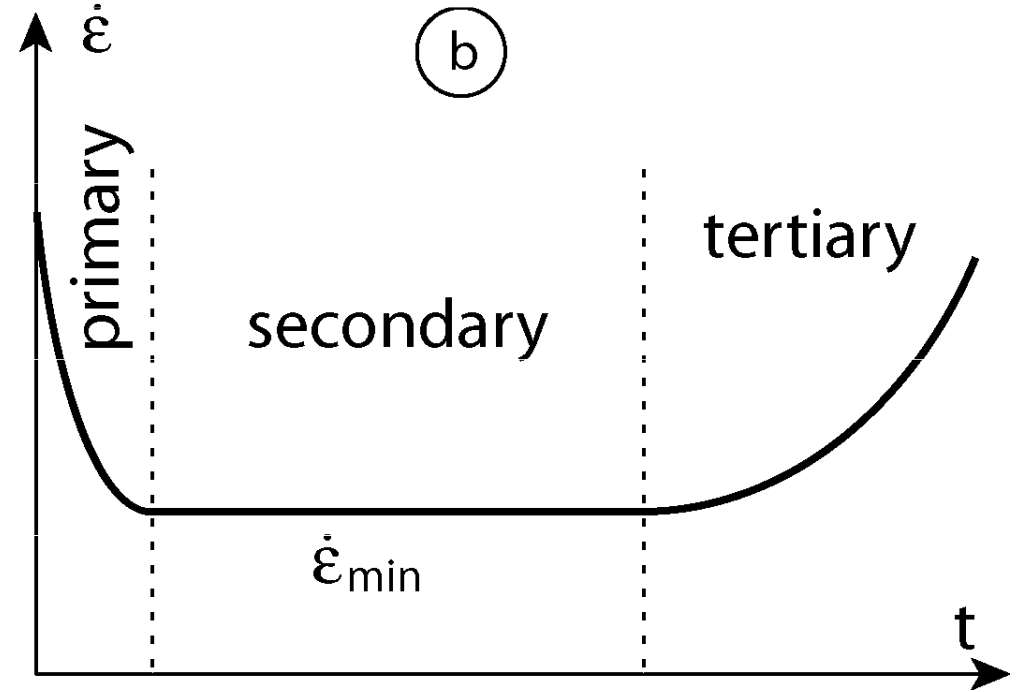
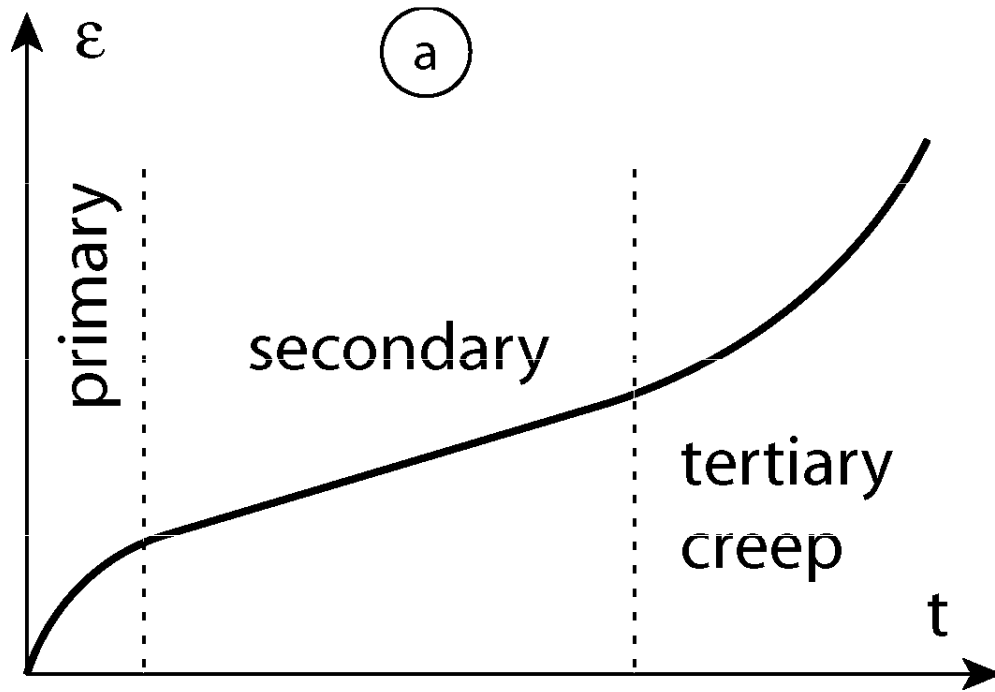
- pro $T > 0.5 T_m$

- pro malá d

Nízkorychlostní superplasticita :
pokluz po hranicích zrn doprovázený difúzí
a/nebo dislokačním skluzem/šplhem

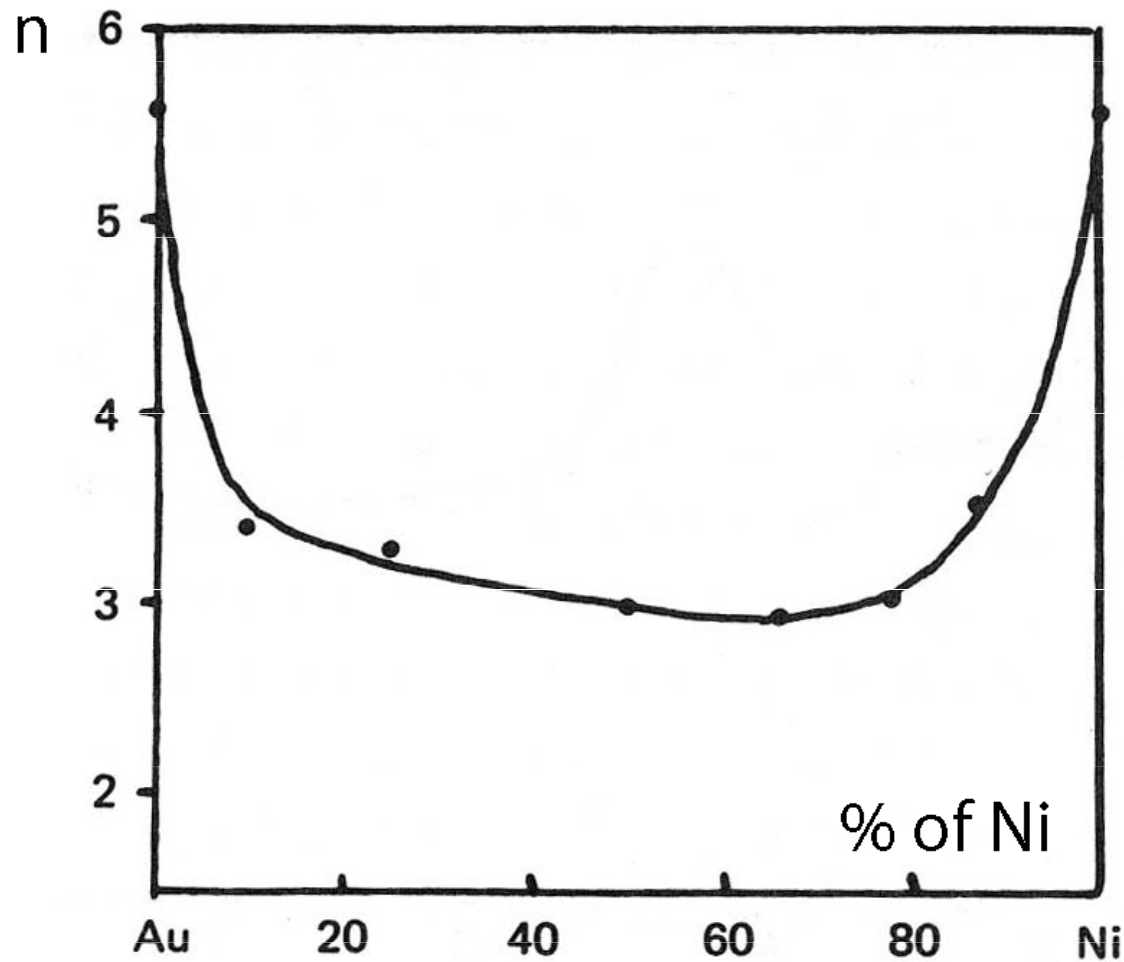
Vysokorychlostní superplasticita : natavení
hranic zrn

CREEP (TEČENÍ)



$$\dot{\epsilon}_{\min} = B\sigma^n$$

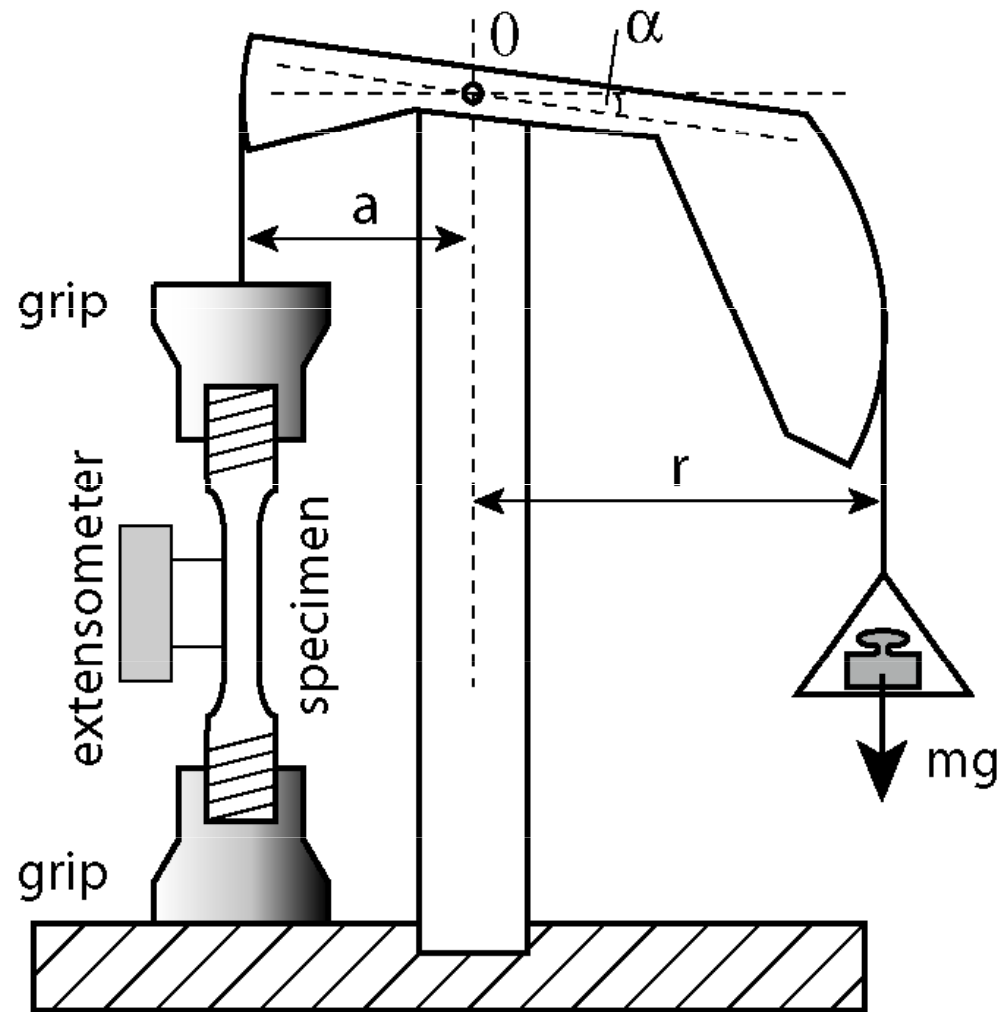
$n \sim 3$... "class I alloys" tuhé roztoky
 $n \sim 4-5$... "class II alloys" čisté kovy



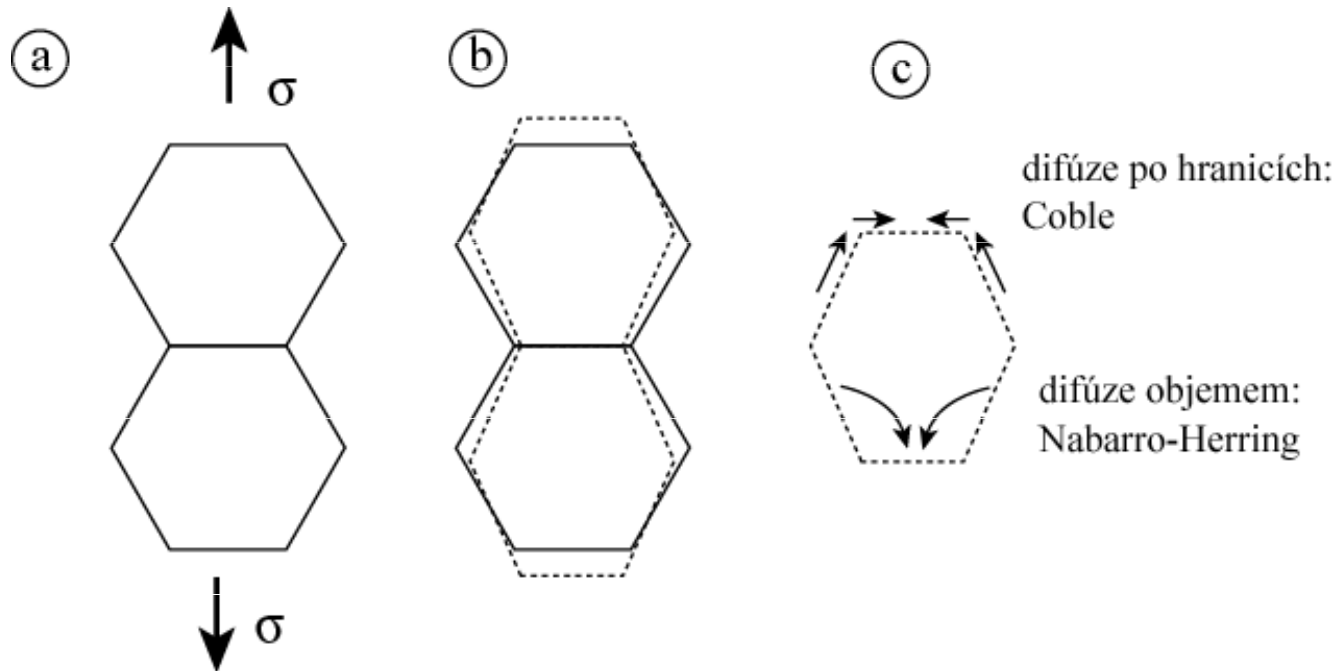
n ~ 3 ... "class I alloys" tuhé roztoky
 n ~ 4-5 ... "class II alloys" čisté kovy

CREEPOVÉ STROJE

- konstantní síla
- konstantní skutečné napětí



DIFÚZE



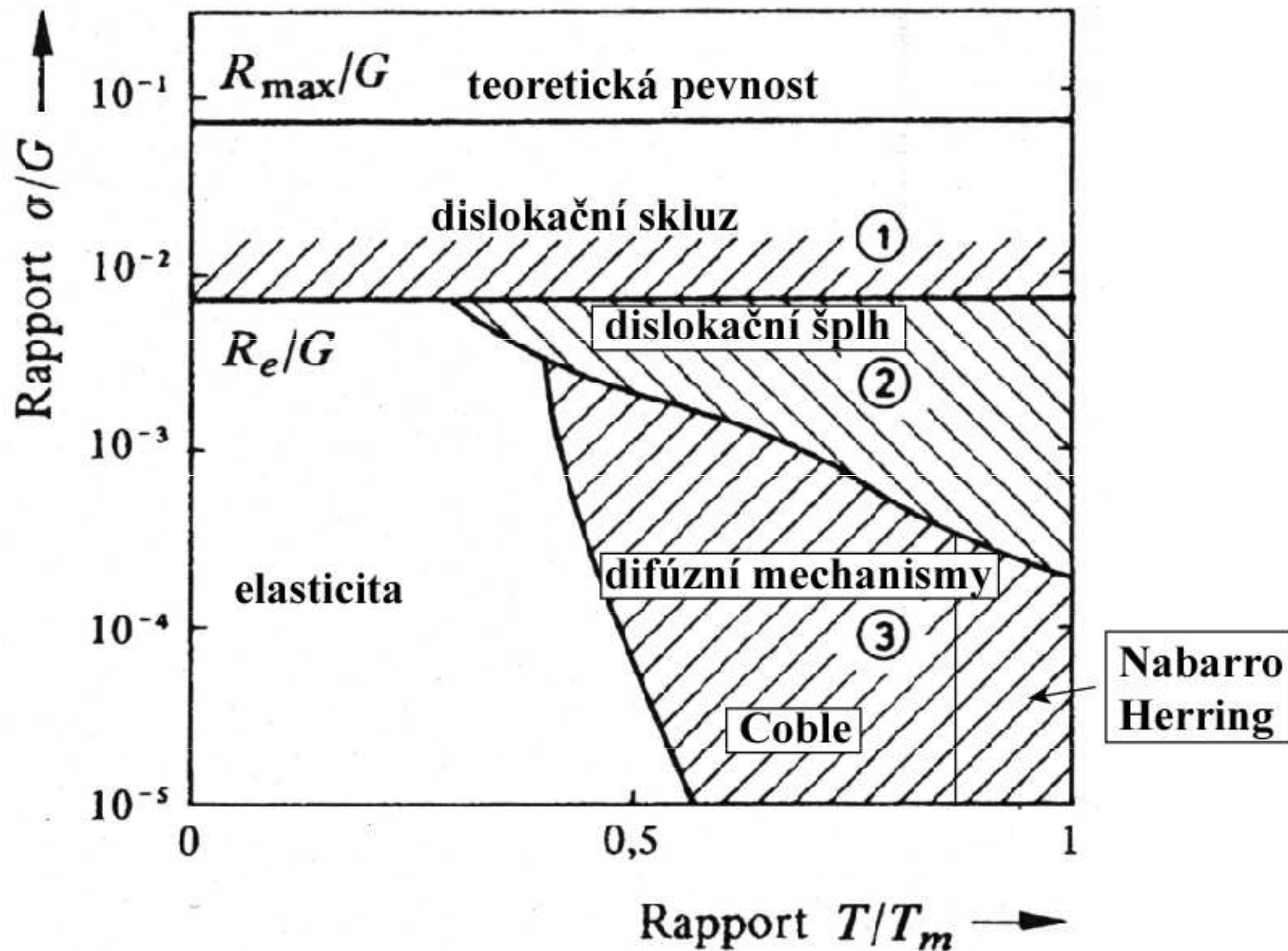
1. Fickův zákon

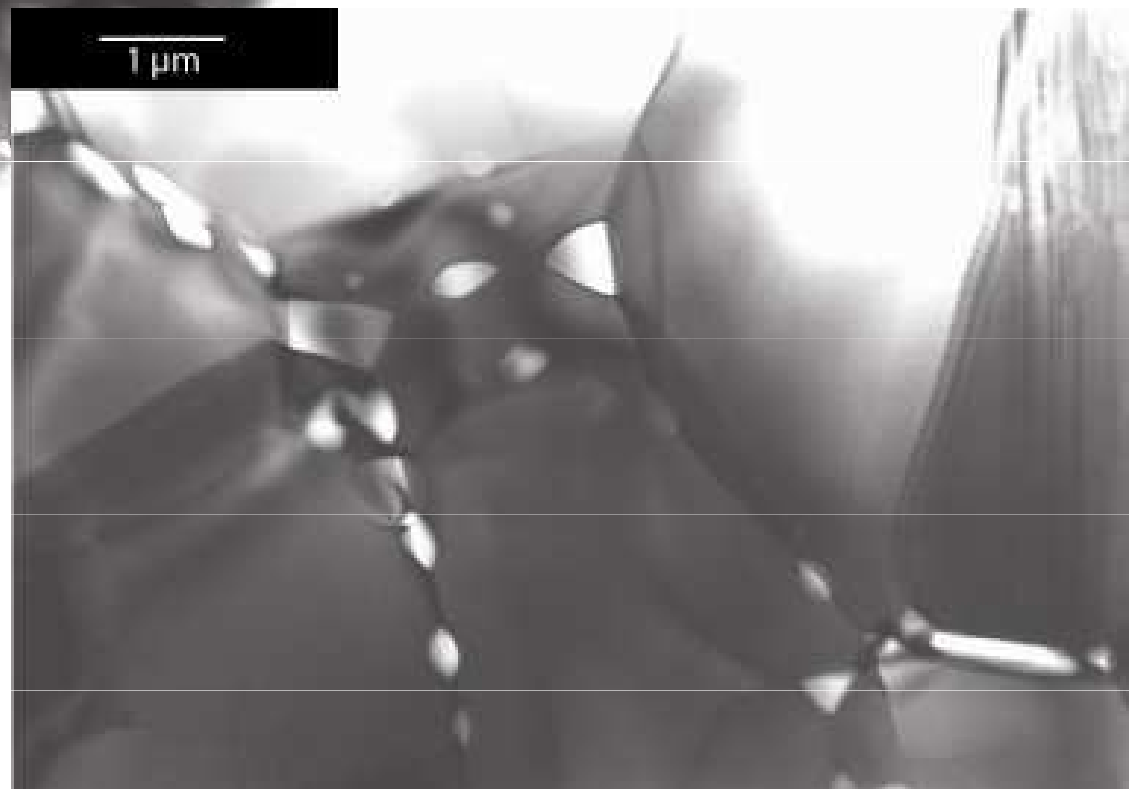
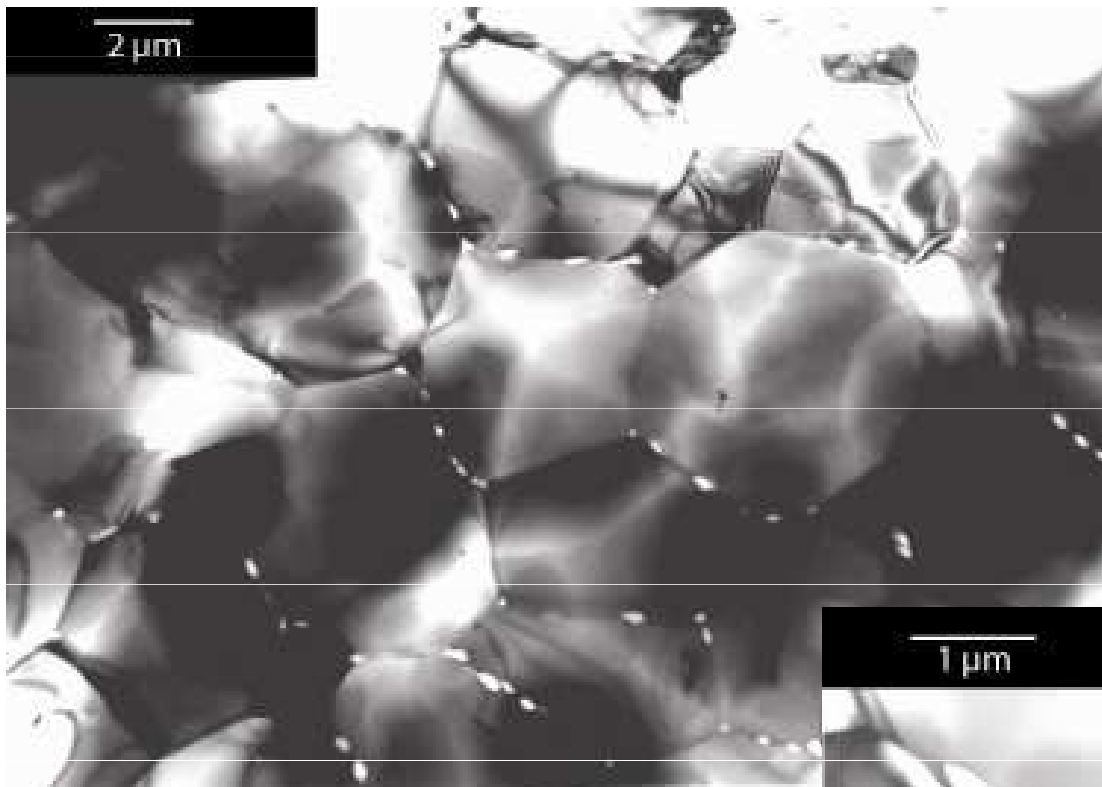
$$\vec{J}_A = -D_A \overrightarrow{\text{grad}C_A}$$

2. Fickův zákon

$$\dot{C}_A = -\text{div} \vec{J}_A$$

CREEP - MECHANISMS

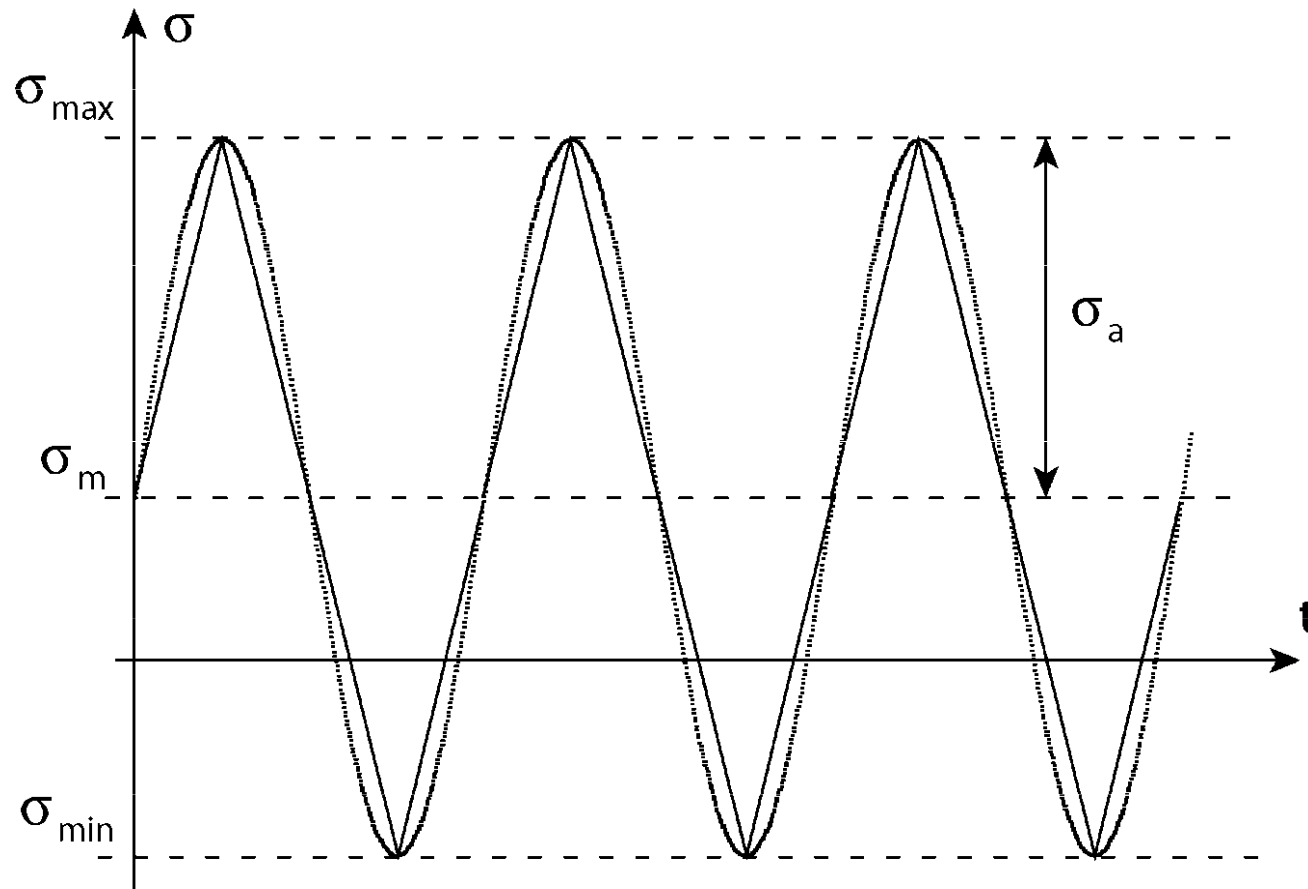




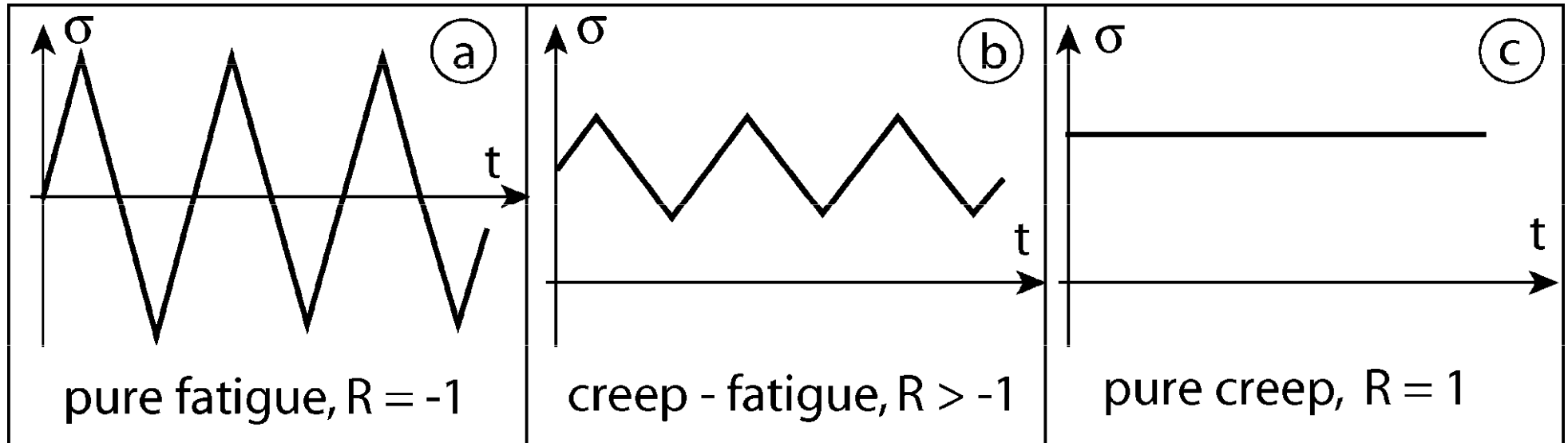
Cobleův creep:
difúze po hranicích

ÚNAVA

poškození materiálu opakovanou deformací

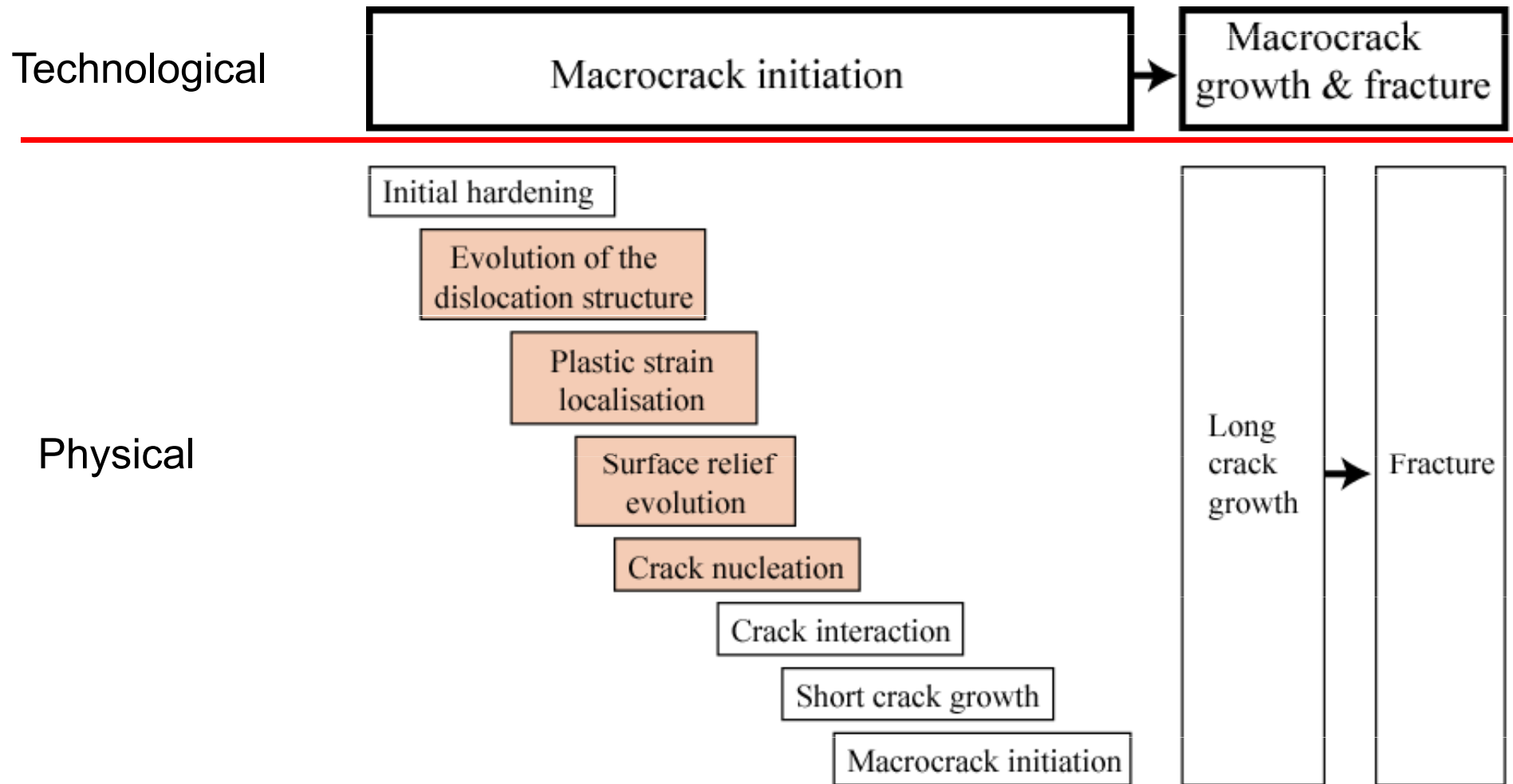


$$R = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}$$



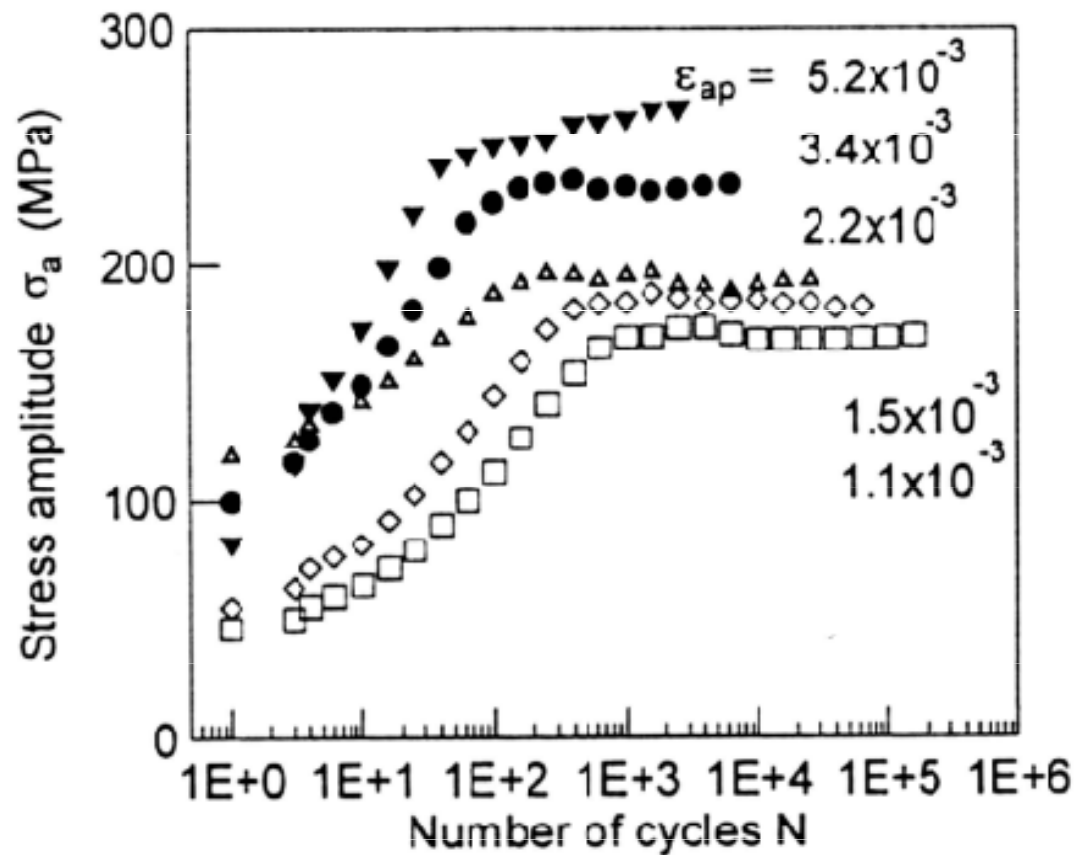
$$R = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}$$

FATIGUE DAMAGE ACCUMULATION



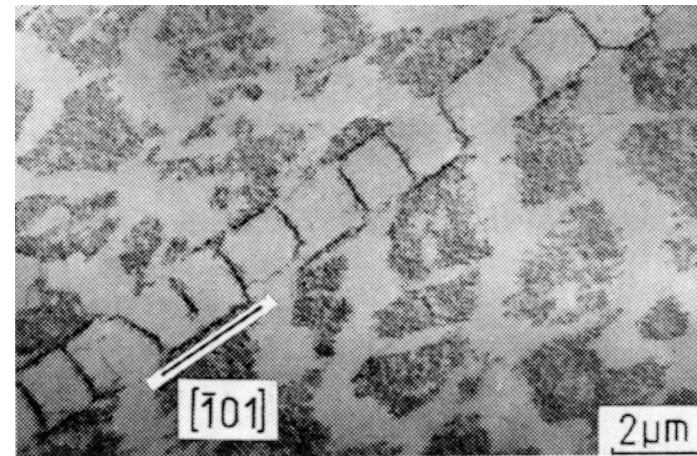
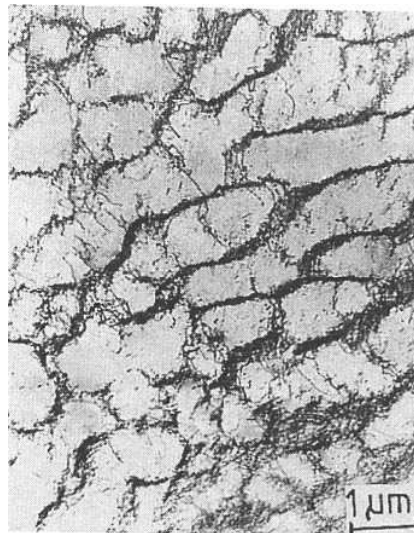
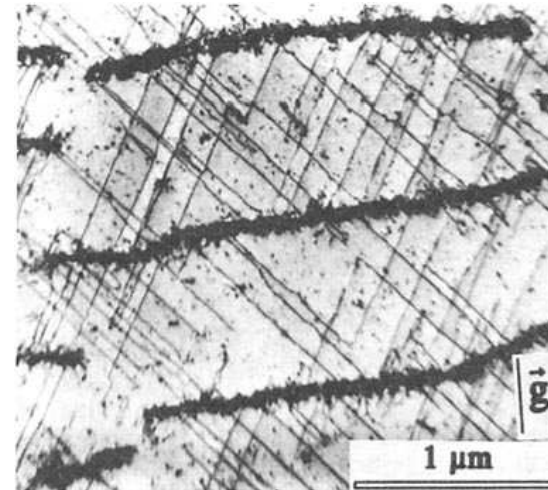
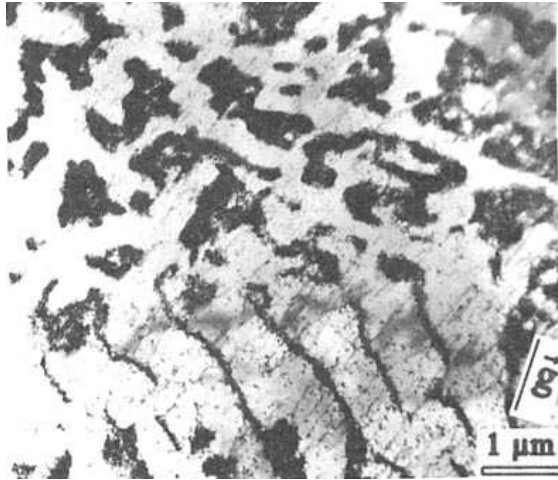
INITIAL CYCLIC HARDENING / SOFTENING:

a consequence of microstructural evolution

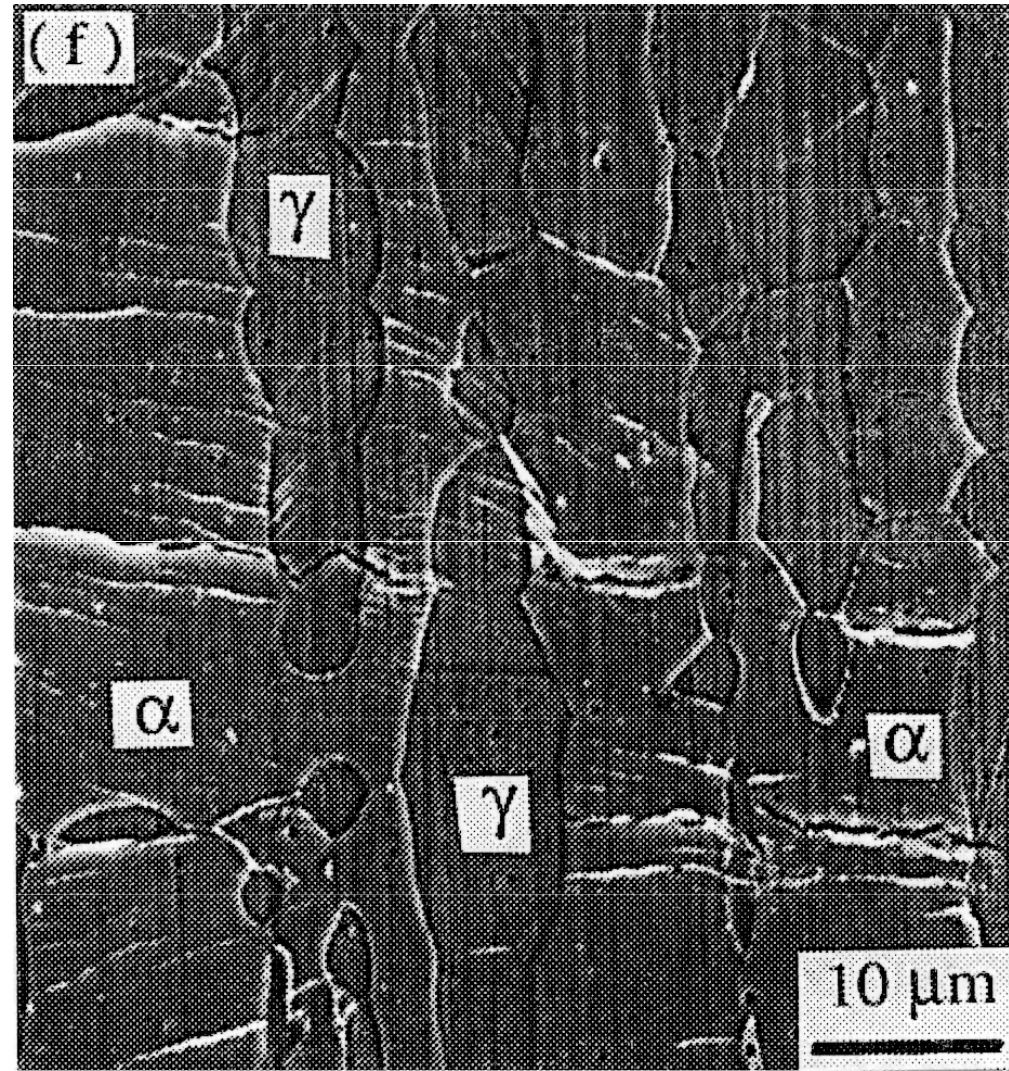
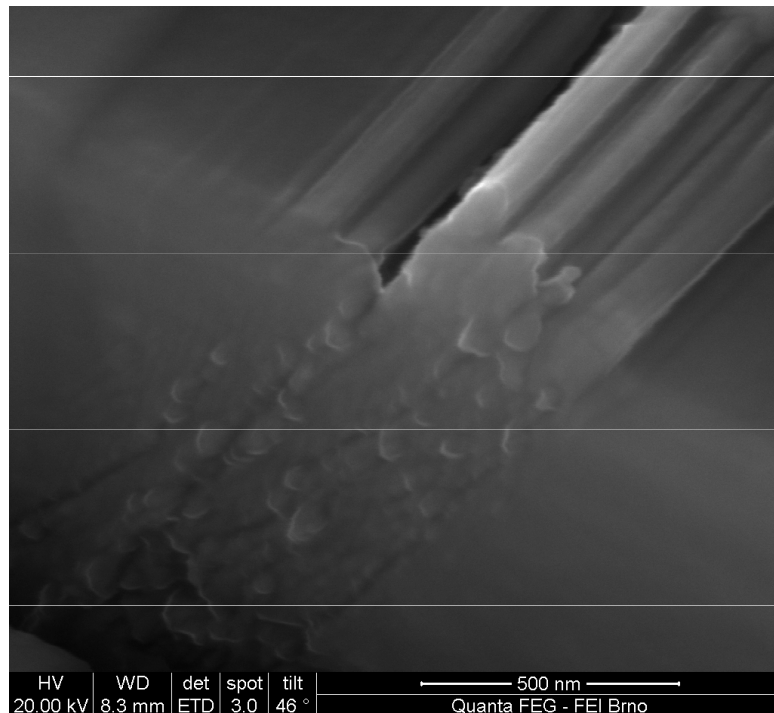
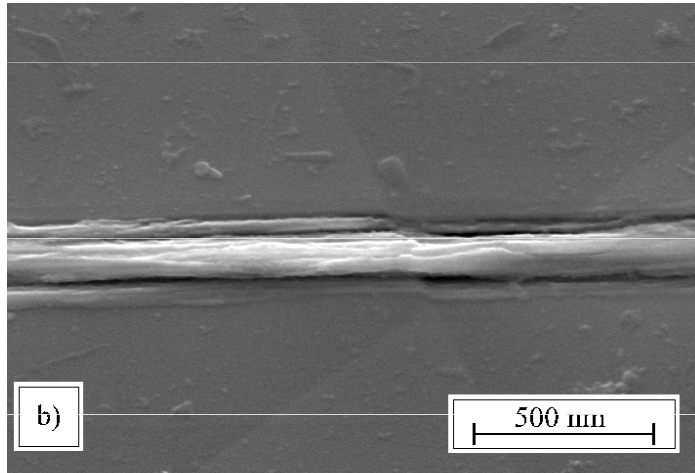


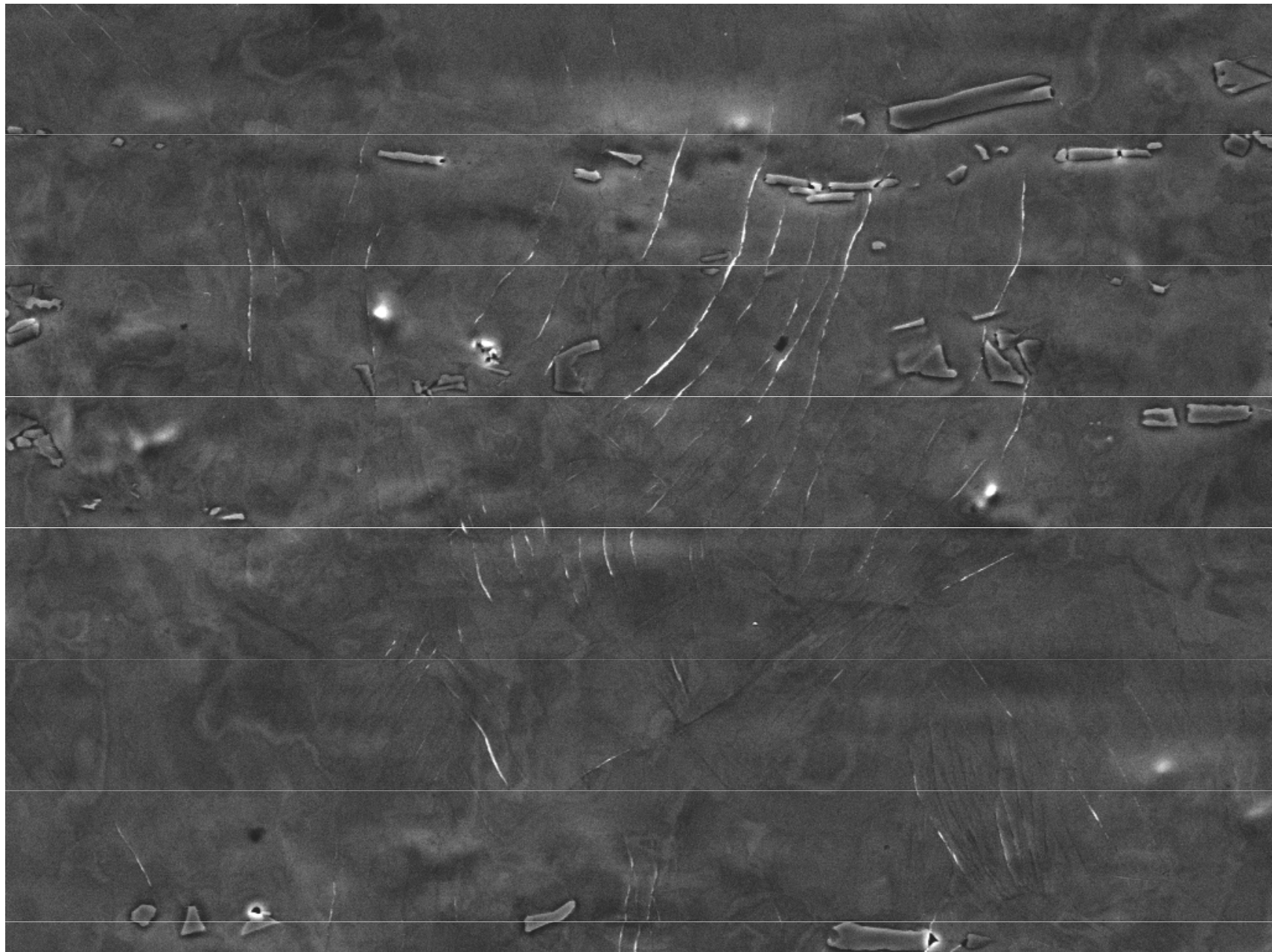
MICROSTRUCTURE EVOLUTION:

well defined 3D arrangements of dislocations



EXTRUSIONS / INTRUSIONS / SHORT CRACKS





70µm

LONG CRACKS (or macrocraks)

