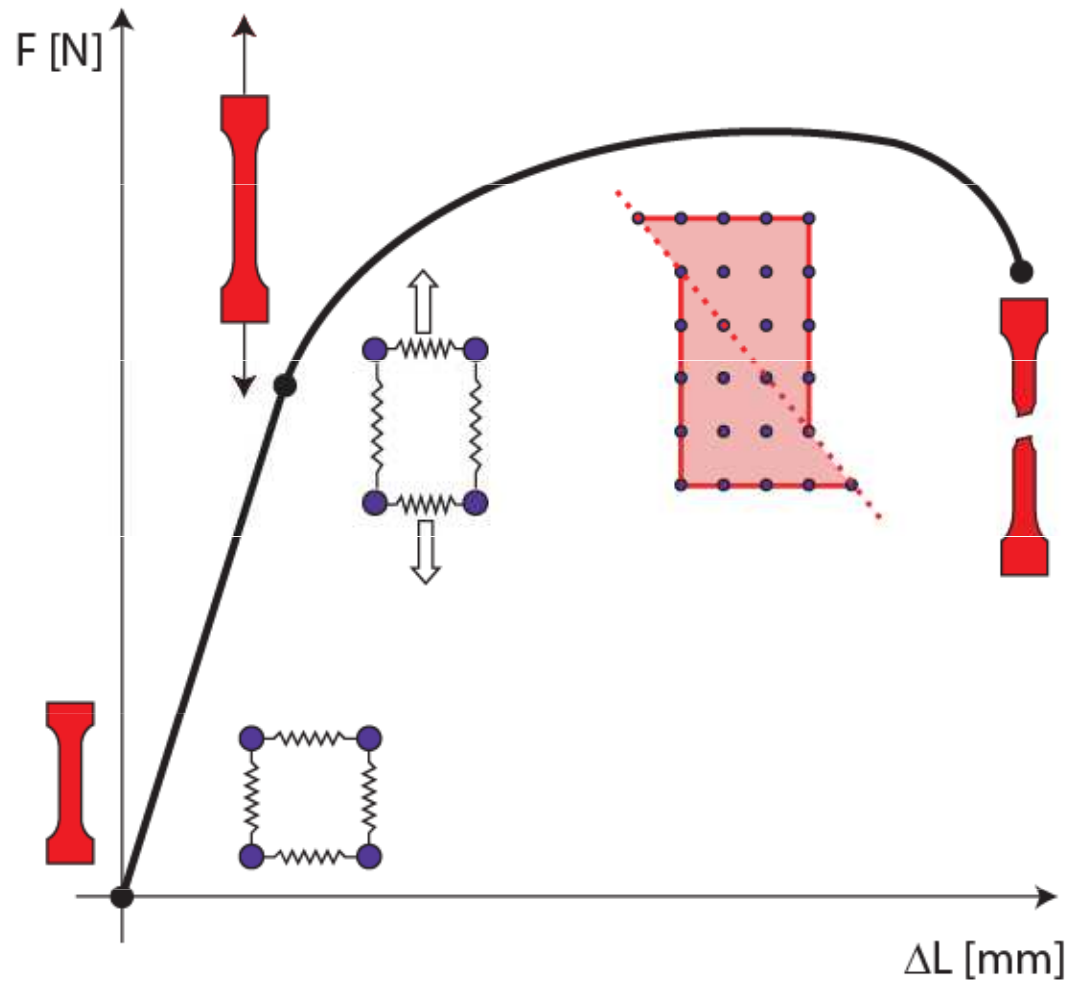
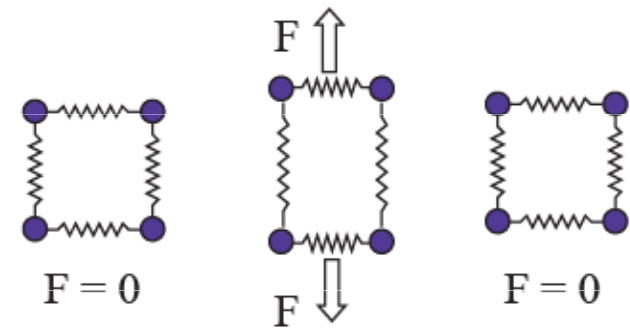


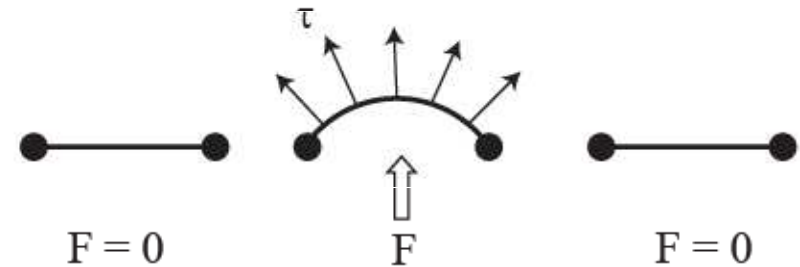
# DEFORMACE



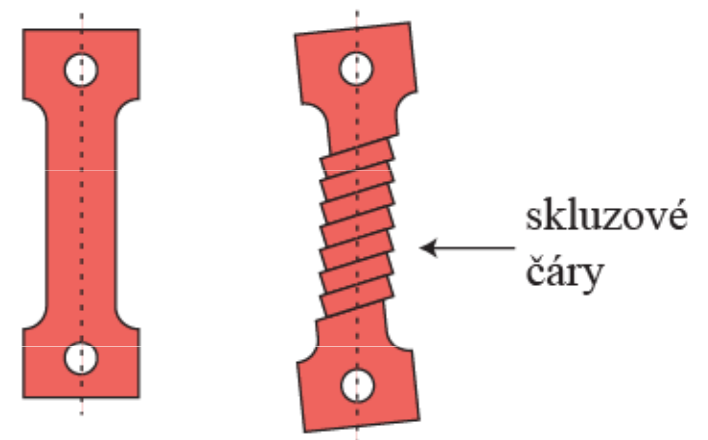
• Elastická deformace :



• Anelastická deformace :



• Plastická deformace (skluz dislokací):



# SKLUZ

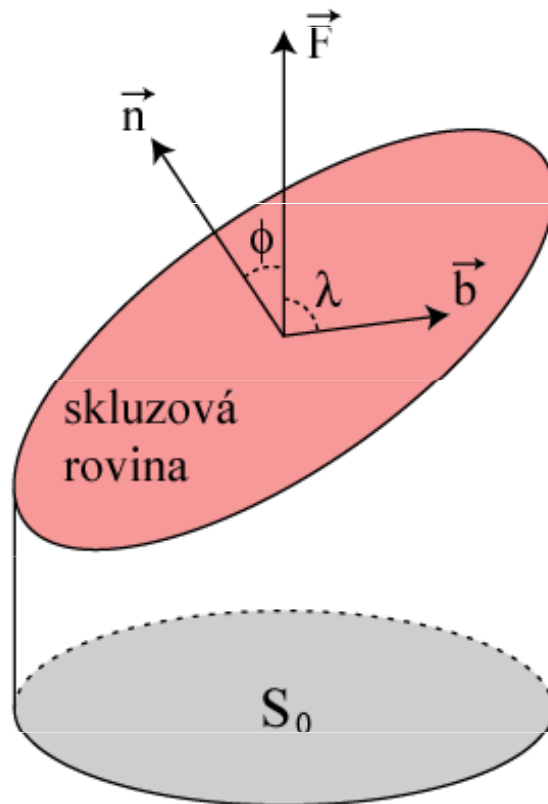
se uskutečňuje :

- 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  $\tau$



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

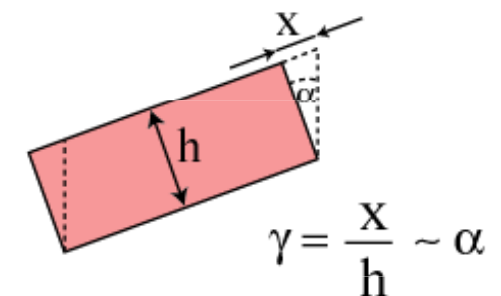
$$= \frac{F}{S_0} \sin \chi \cos \lambda$$

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

$$\tau = m \sigma$$

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

smyková deformace  $\gamma$  :



$$\gamma = \frac{x}{h} \sim \alpha$$

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

pro malá  $\epsilon$

## 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 (udává se 8% rozdíl mezi  $m_p$  a  $m_s$ ).

**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.

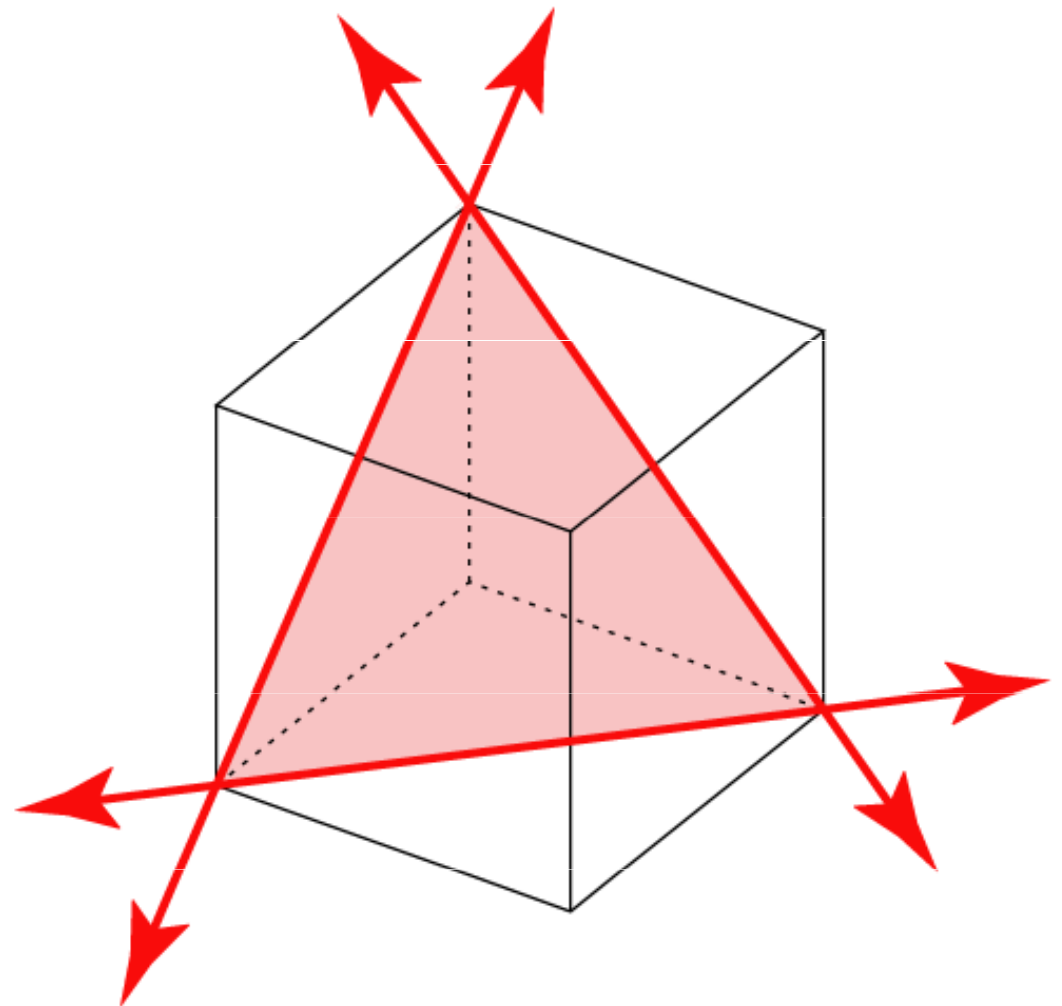
# SKLUZOVÉ SYSTÉMY

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

Cu, Al, Ni,  
Pb, Au, Ag,  
Fe -  $\gamma$

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

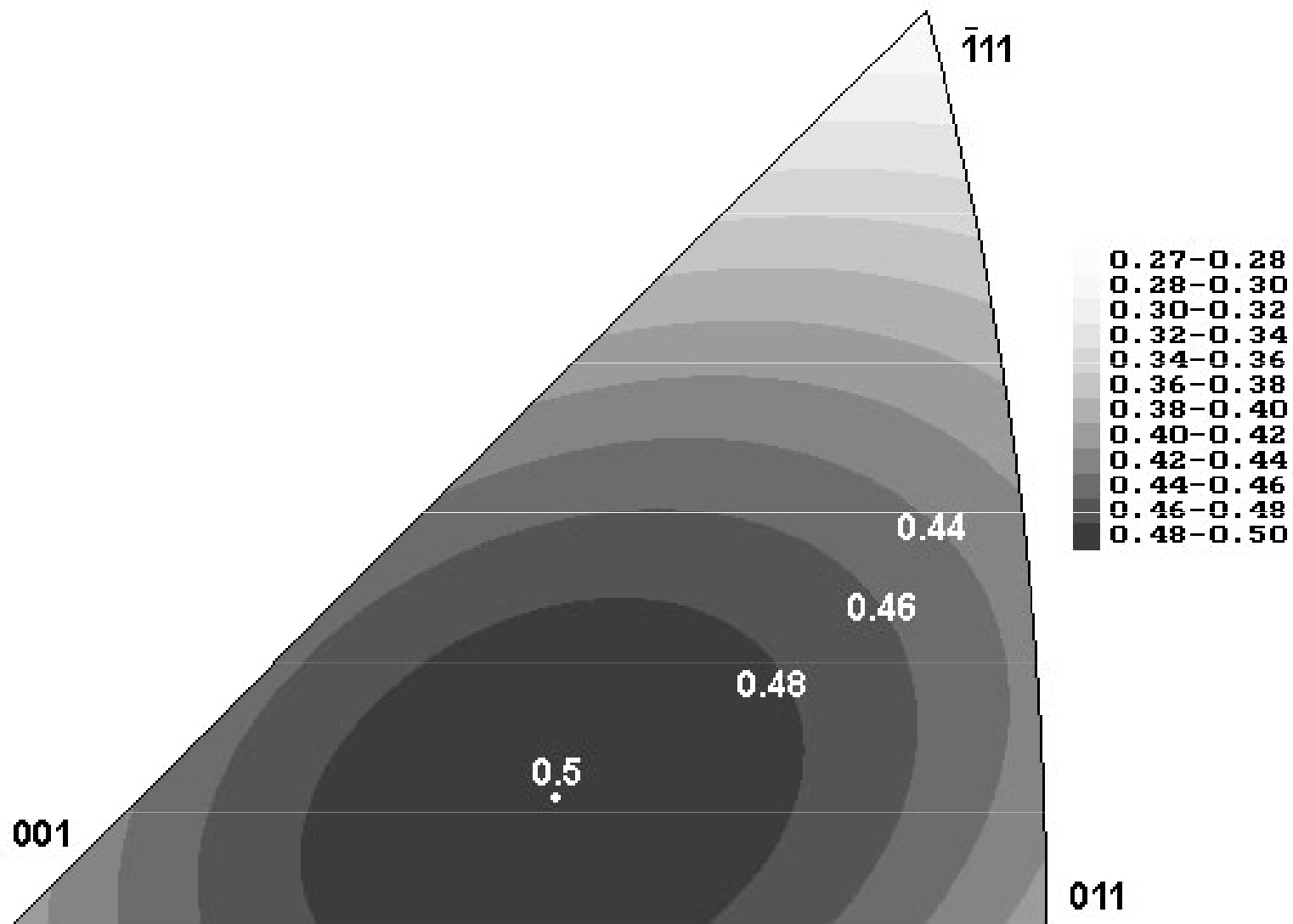
12 skluzových systémů





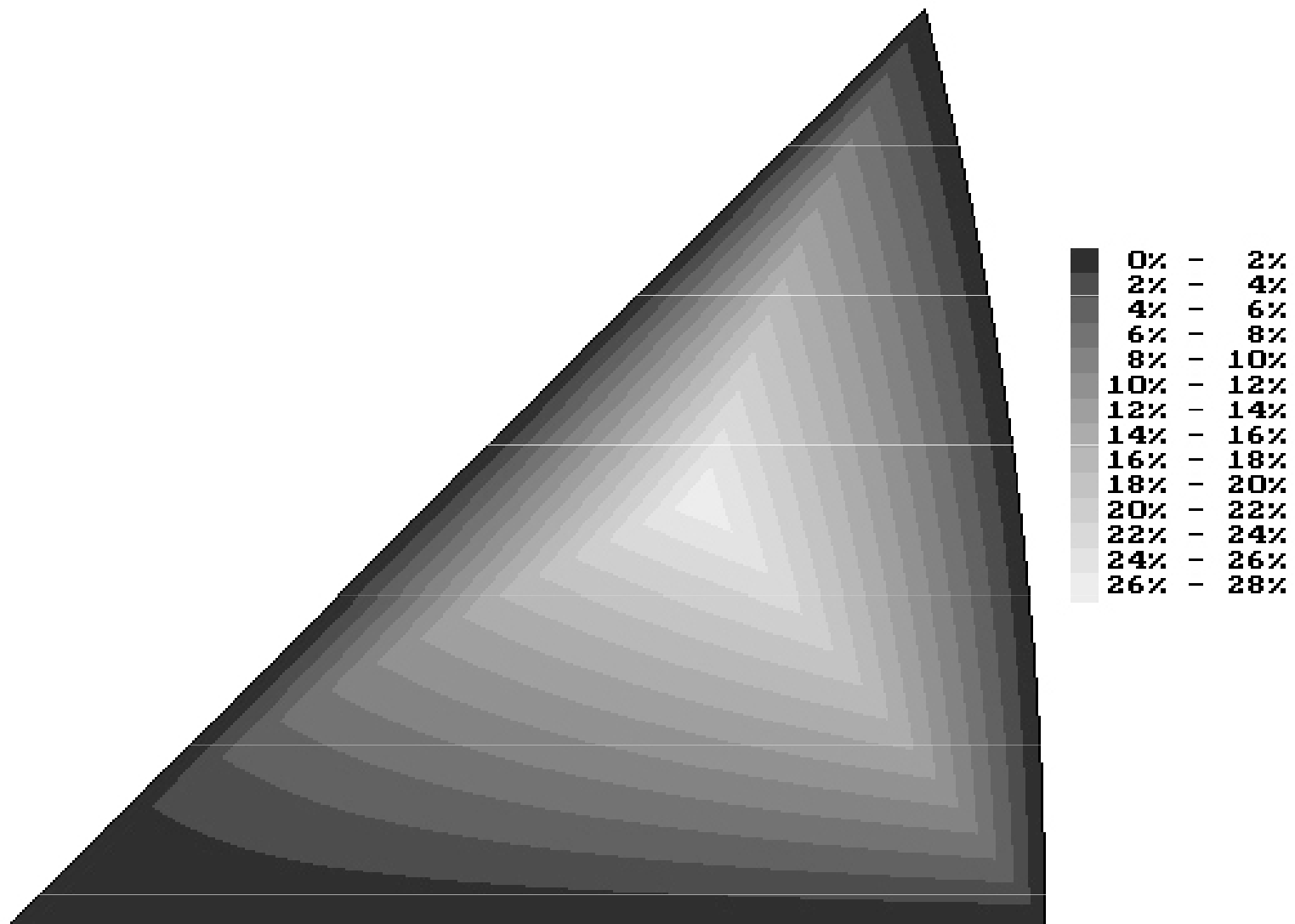
# VELIKOST MAXIMÁLNÍHO SCHMIDOVA FAKTORU

snadný x obtížný skluz

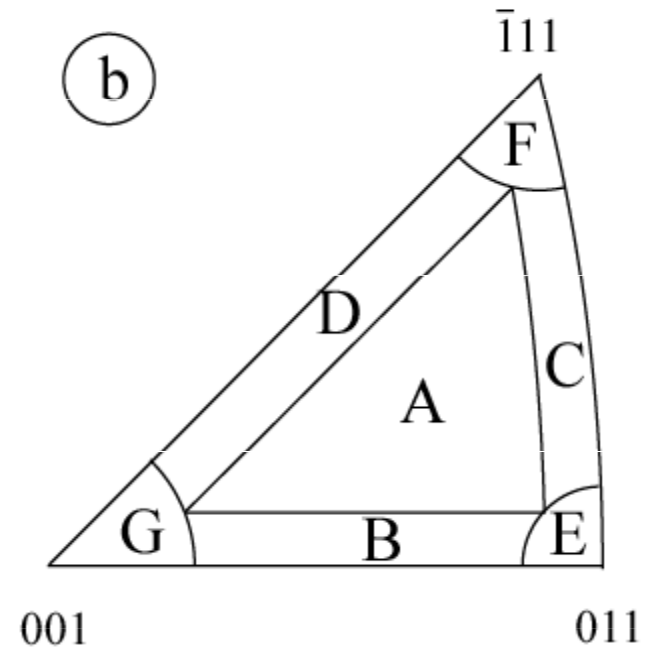
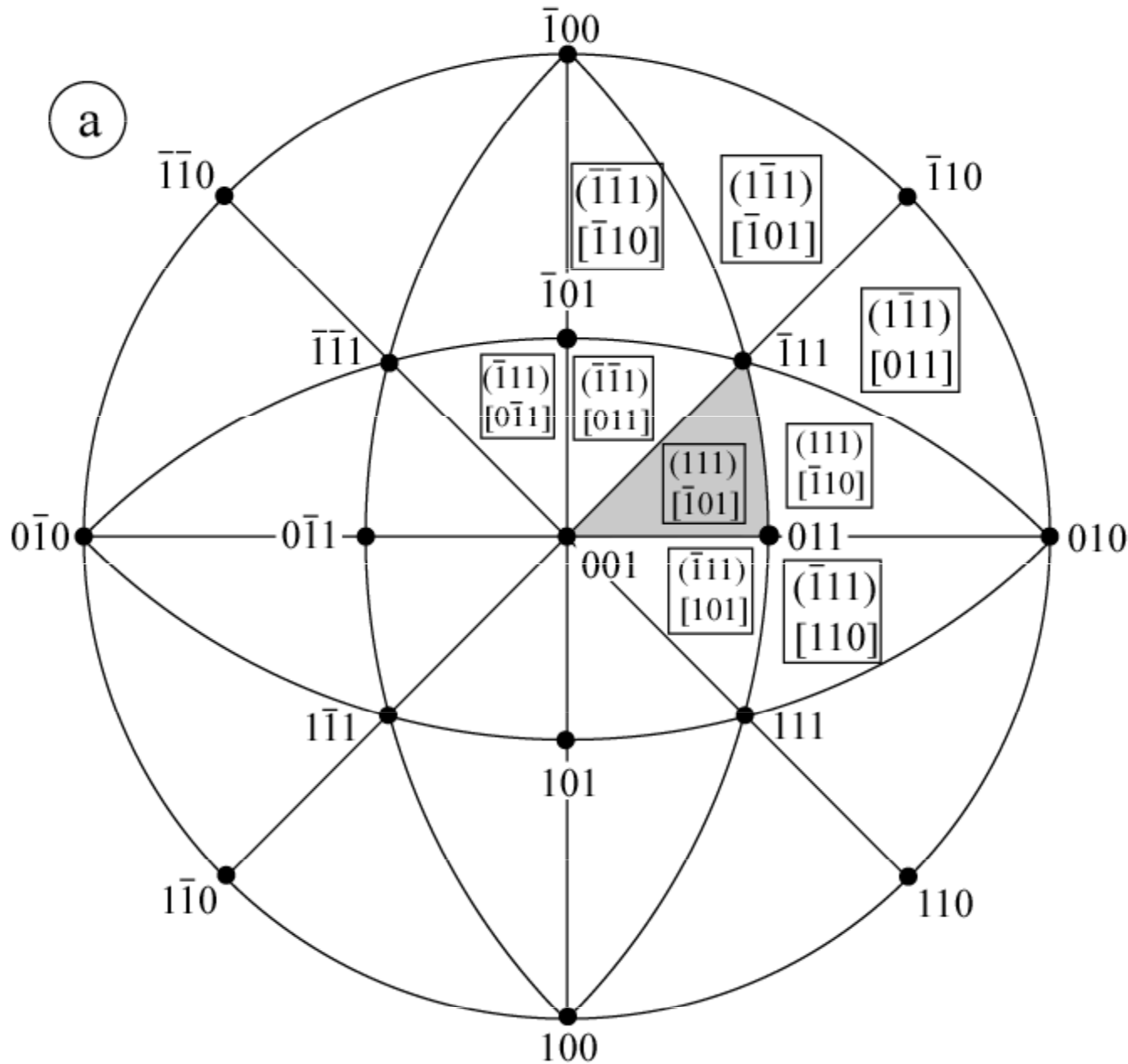


# ROZDÍL DVOU NEJVYŠŠÍCH SCHMIDOVÝCH FAKTORŮ

jednoduchý x vícenásobný skluz



# PRIMÁRNÍ SKLUZOVÉ SYSTÉMY - fcc



A : jednoduchý skluz  
 B-G : vícenásobný skluz

skluzová rovina	Burgersův vektor	m $\bar{o}_z$ $[\bar{1}23]$	m $\bar{o}_z$ $[001]$	m $\bar{o}_z$ $[\bar{1}11]$	m $\bar{o}_z$ $[\bar{1}12]$
(111)	$[0\bar{1}1]$	0.117	<b>0.408</b>	0	0
(111)	$[\bar{1}01]$	<b>0.467</b>	<b>0.408</b>	<b>0.272</b>	<b>0.408</b>
(111)	$[\bar{1}10]$	0.350	0	<b>0.272</b>	<b>0.408</b>
$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}1]$	0.175	<b>0.408</b>	0	0
$(\bar{1}11)$	$[101]$	0.350	<b>0.408</b>	0	0.227
$(\bar{1}11)$	$[110]$	0.175	0	0	0.227
$(1\bar{1}1)$	$[011]$	0	<b>0.408</b>	<b>0.272</b>	0.181
$(1\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$	0	<b>0.408</b>	<b>0.272</b>	0.136
$(1\bar{1}1)$	$[110]$	0	0	0	0.045
$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[011]$	0.292	<b>0.408</b>	<b>0.272</b>	0.181
$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[101]$	0.117	<b>0.408</b>	0	0.045
$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[\bar{1}10]$	0.175	0	<b>0.272</b>	0.136

Tabulka 2.1 Schmidovy faktory pro mřížku fcc.

Video – deformace vzorku

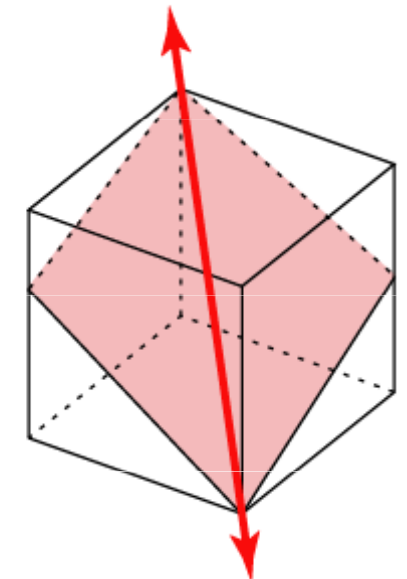
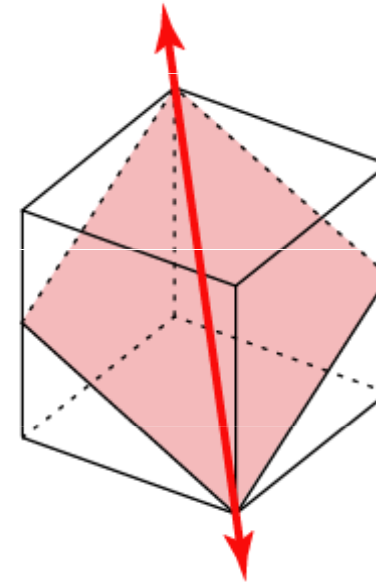
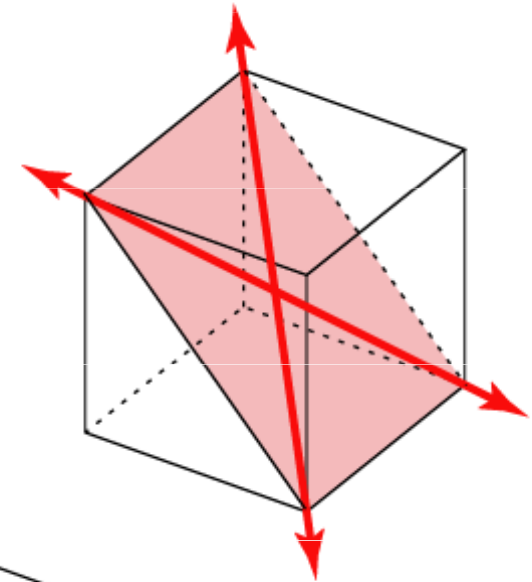
# SKLUZOVÉ SYSTÉMY

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

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

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

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

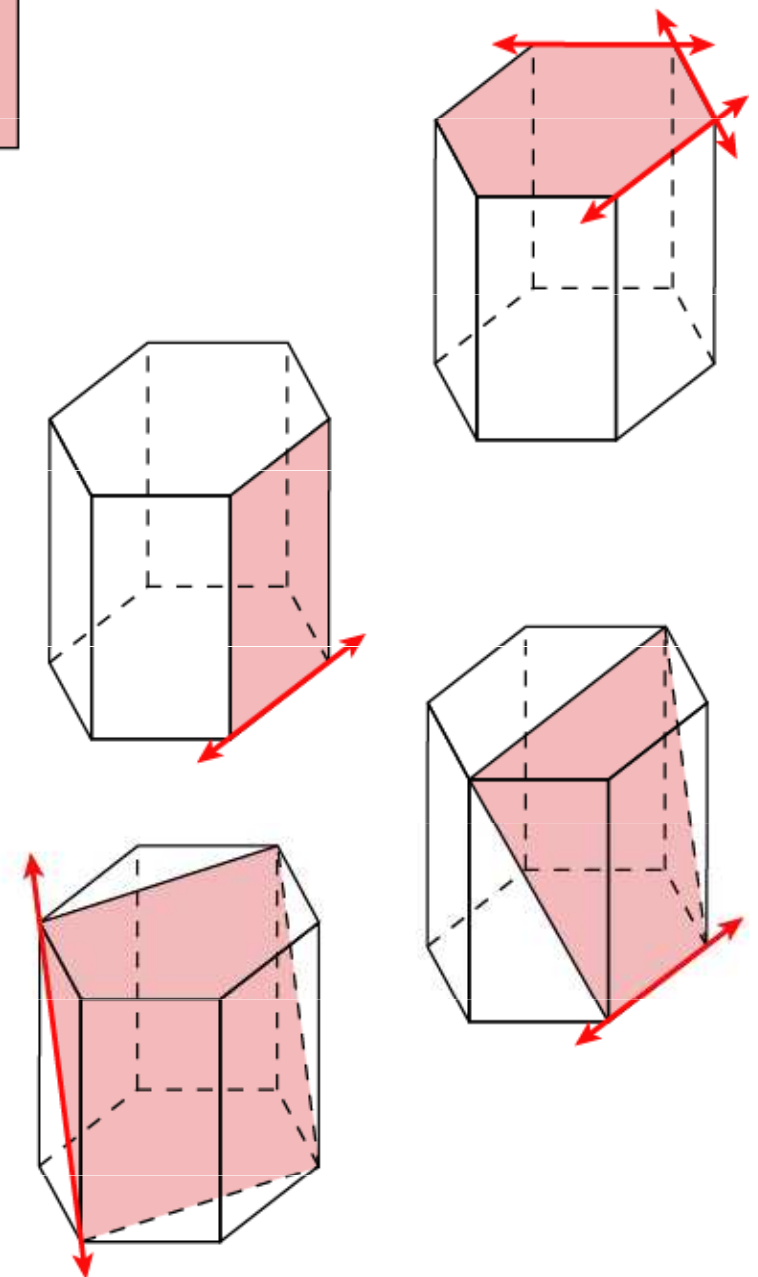


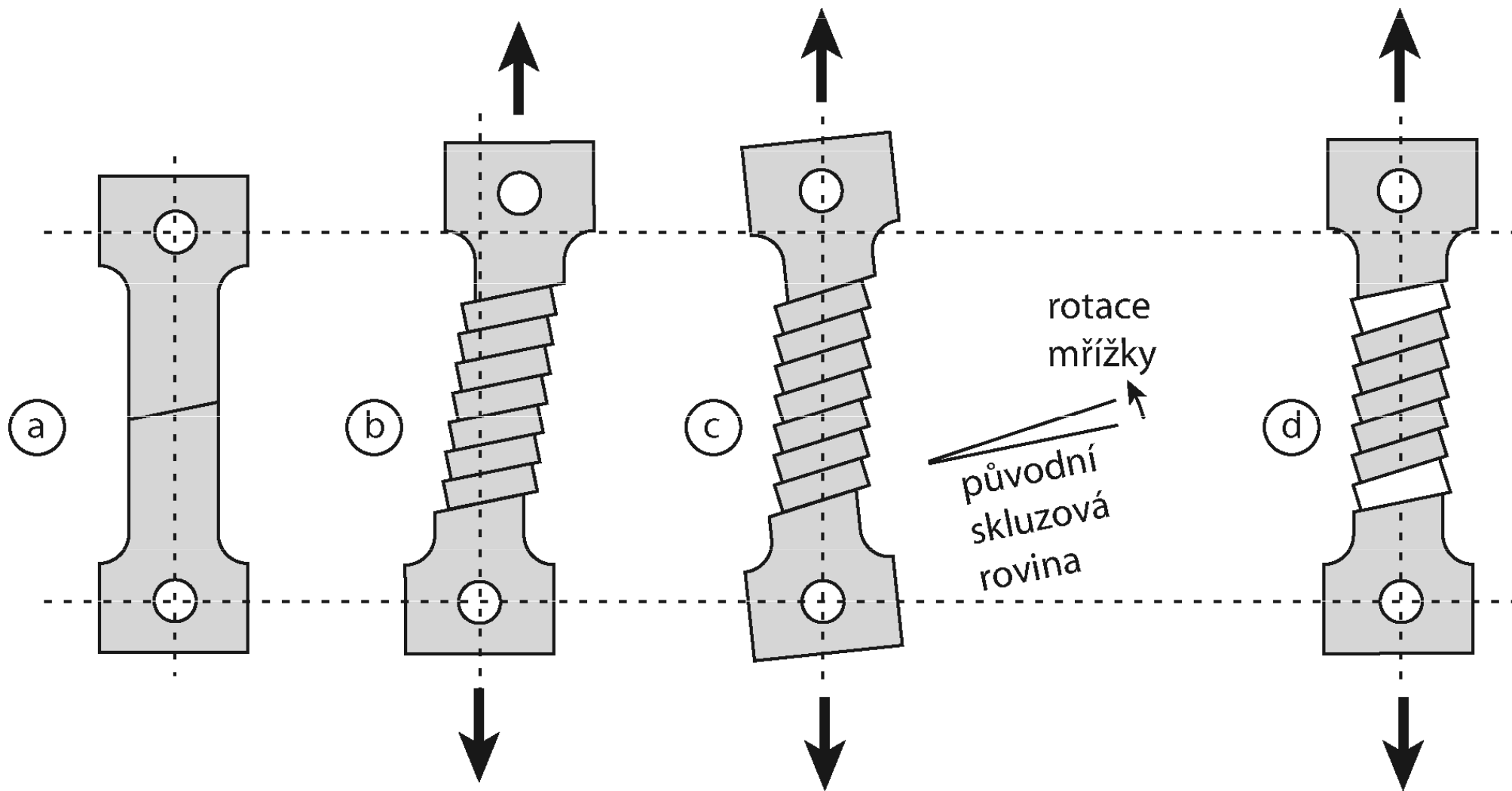
# SKLUZOVÉ SYSTÉMY

hexagonální těsně  
uspořádaná

hexagonal close packed  
hcp

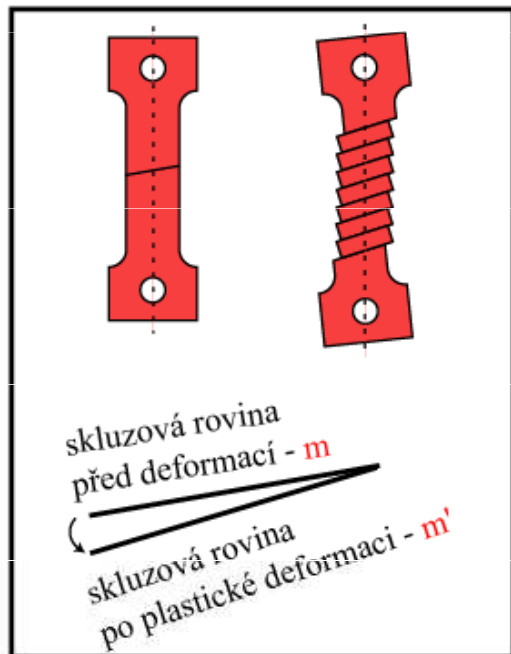
	Rovina		Směr ( $\vec{b}$ )
<b>Cd, Zn, Mg, Ti, Be</b> <i>basální</i>	{0001}	1	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 3
<b>Ti, Zr, Re</b> <i>prismatický</i>	{10 $\bar{1}$ 0}	3	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 1
<b>Ti, Mg</b> <i>pyramidální 1. druhu</i>	{10 $\bar{1}$ 1}	6	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 1
<b>Zn, Cd</b> <i>pyramidální 2. druhu</i>	{11 $\bar{2}$ 2}	6	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 1







# TAHOVÁ ZKOUŠKA - JEDNODUCHÝ SKLUZ

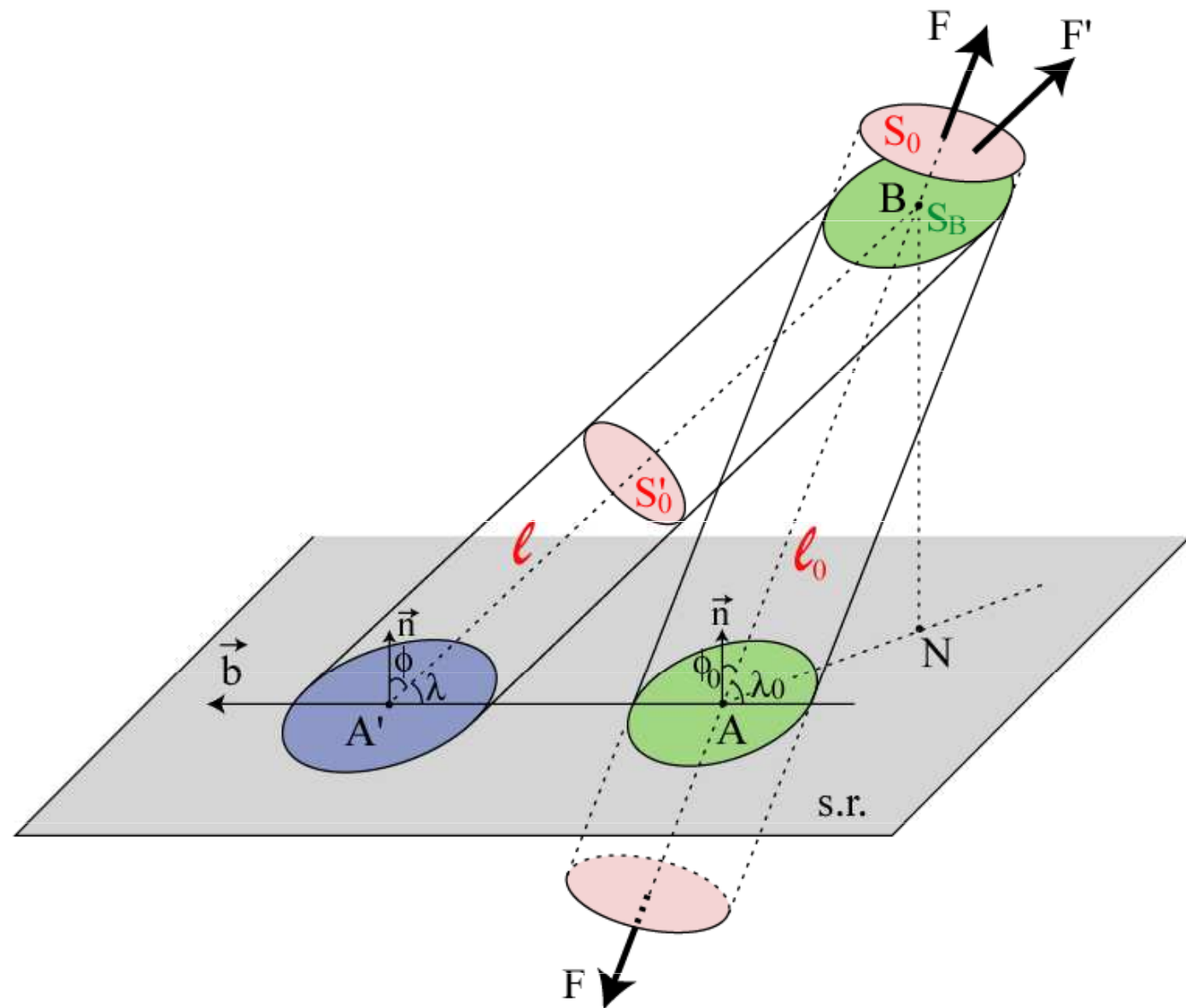


Problém : najít  $\gamma$

Známe :  $l_0, \lambda_0, \phi_0$

měříme :  $\Delta l \Rightarrow e = \Delta l / l_0$

$\gamma = \gamma(e, \lambda_0, \phi_0)$



## Smyková deformace

Trojúhelník AA'B :

$$\frac{|AA'|}{\sin(\lambda_0 - \lambda)} = \frac{l_0}{\sin \lambda} = \frac{l}{\sin \lambda_0}$$

Trojúhelníky ABN a A'BN :

$$BN = l_0 \cos \phi_0 = l \cos \phi$$

Skutečná deformace :

$$e = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{l}{l_0} - 1$$

Odkud:

Využijeme:

$$\frac{\sin \lambda}{\sin \lambda_0} = \frac{1}{1+e} \quad \text{et} \quad \cos \lambda = \sqrt{1 - \sin^2 \lambda}$$

$$\gamma = \frac{1}{\cos \phi_0} \left( \sqrt{(1+e)^2 - \sin^2 \lambda_0} - \cos \lambda_0 \right)$$

## Smykové napětí

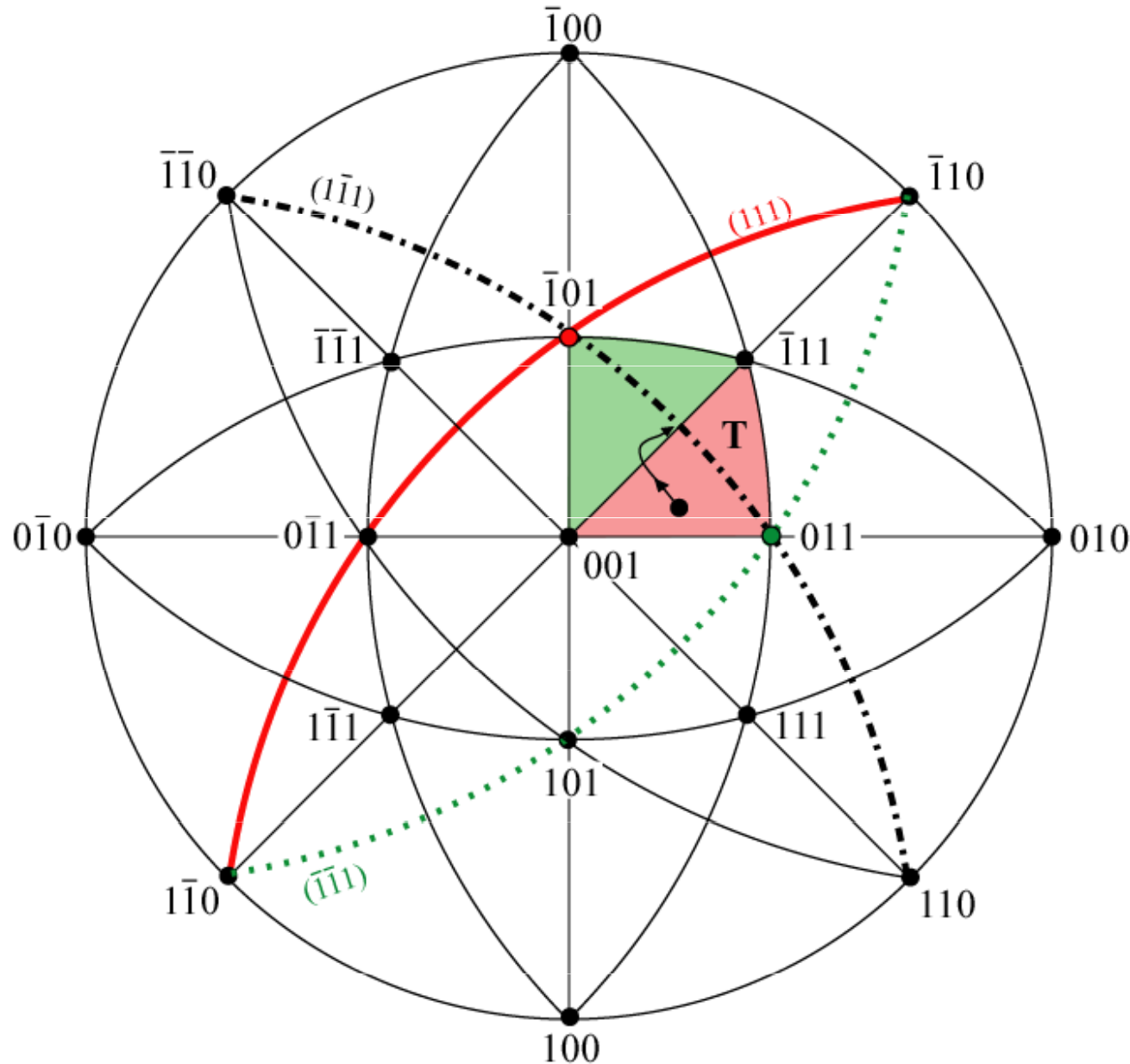
Smykové napětí  $\tau$  ( $S_0$ ,  $\lambda_0$ ,  $\phi_0$  et  $F$ ) :

Zachování objemu :

$$S_0' l = S_0 l_0 \Rightarrow S_0' = \frac{S_0}{1+e}$$

$$\tau = \frac{F}{S_0} (1+e) \cdot \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \lambda_0}{(1+e)^2}} \cdot \frac{\cos \phi_0}{(1+e)}$$

# ZMĚNA ORIENTACE KRYSTALU VZHLEDEM K OSE ZATĚŽOVÁNÍ BĚHEM DEFORMACE MONOKRYSTALU

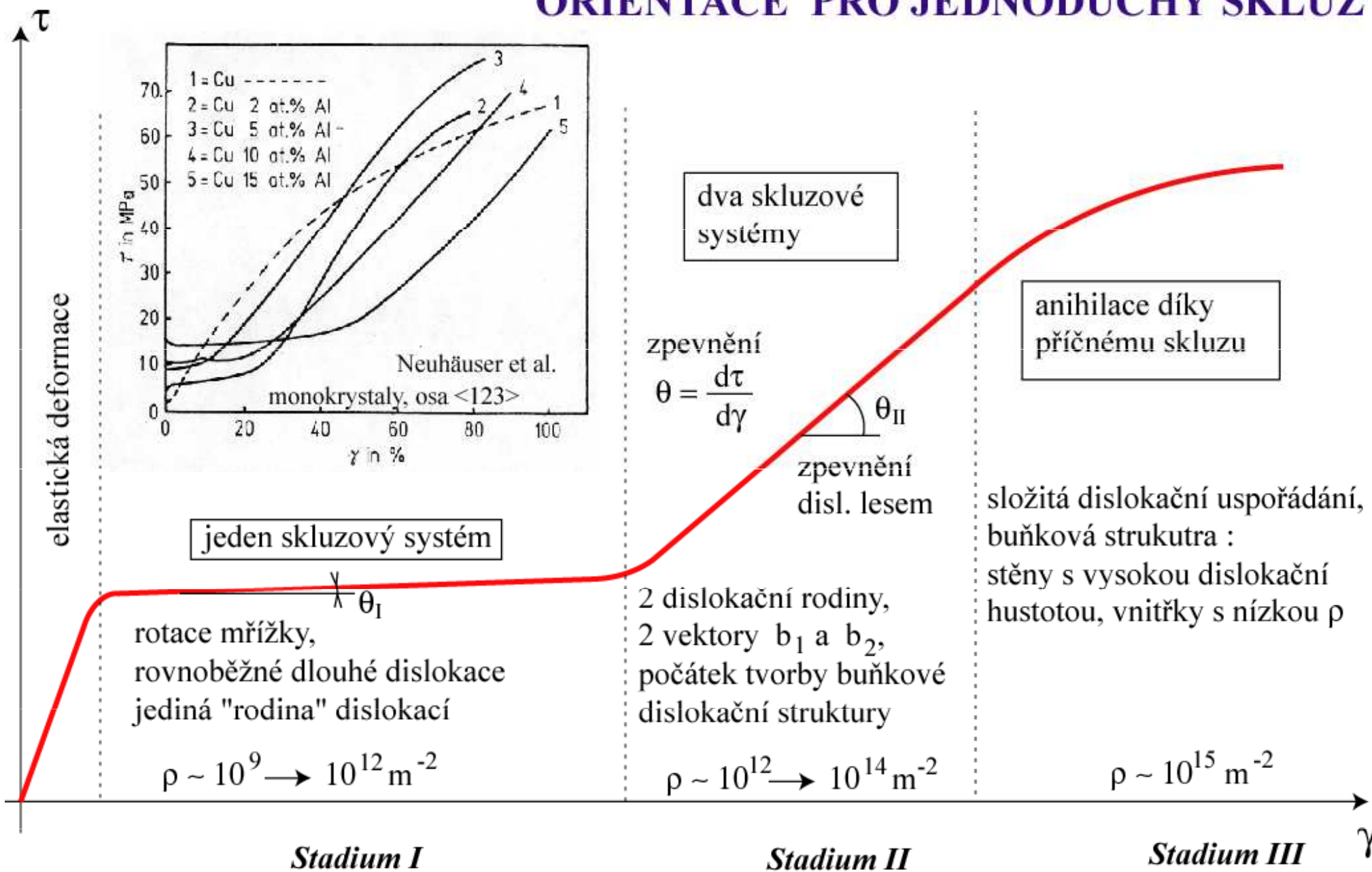


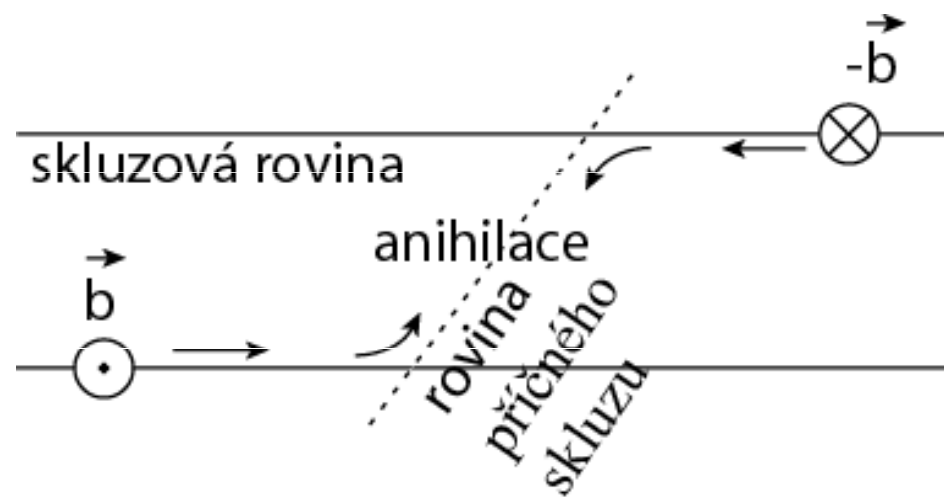
fcc

T - standardní stereografický troj.

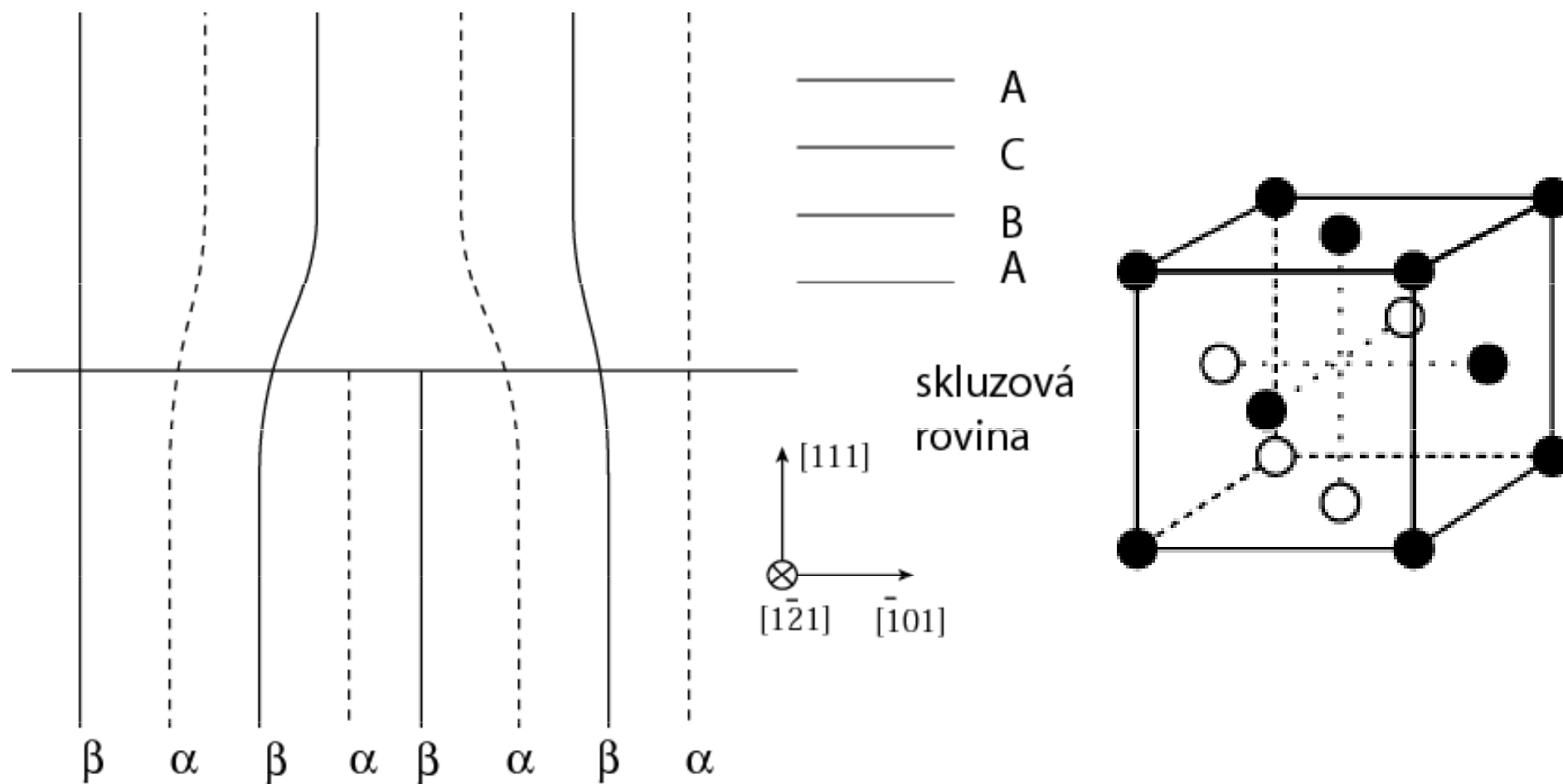
	primární skluzový sst $[\bar{1}01] (111)$
	konjugovaný skluz. s. $[011] (\bar{1}\bar{1}1)$
	příčný skluz $[\bar{1}01] (\bar{1}\bar{1}1)$

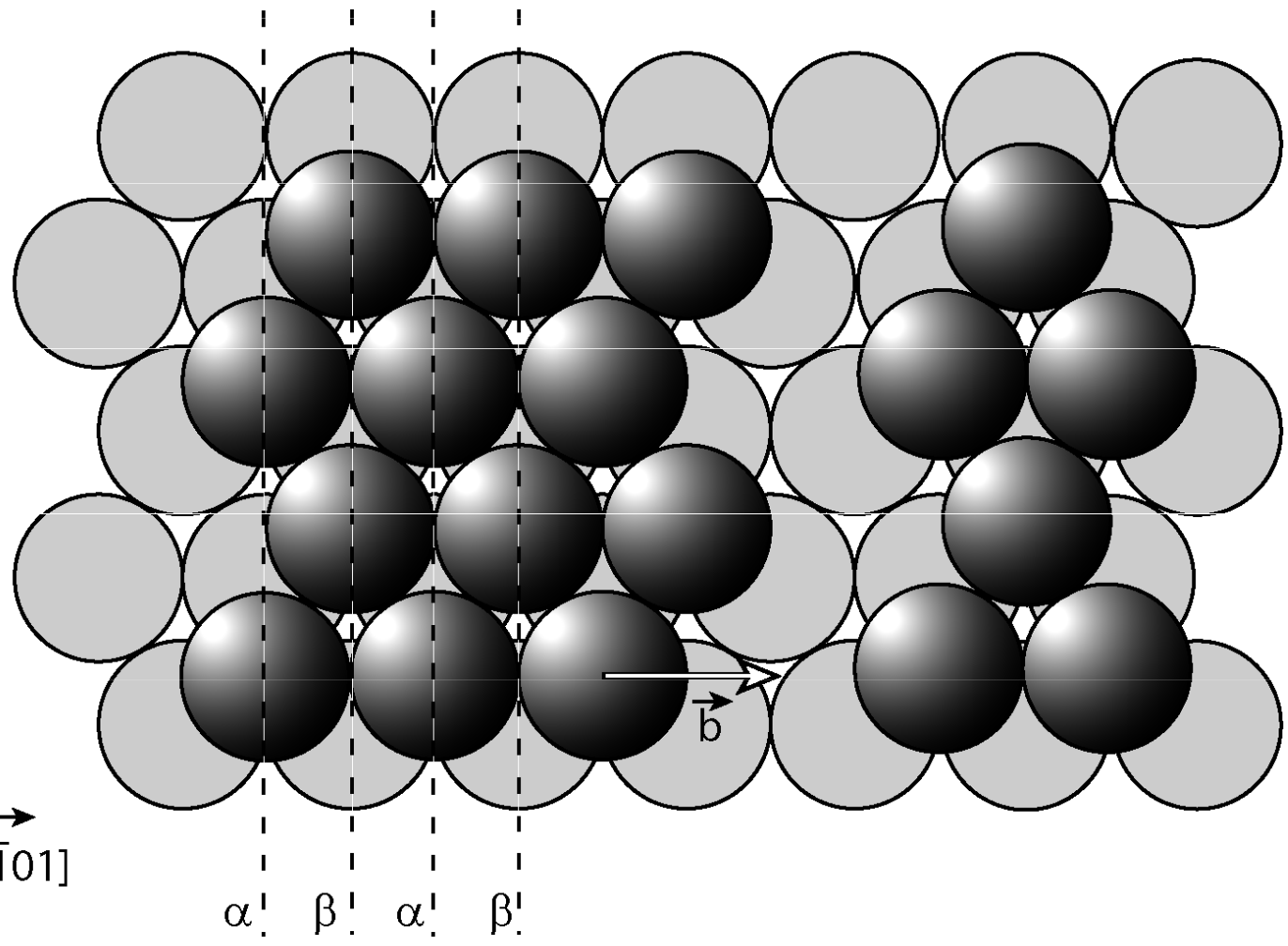
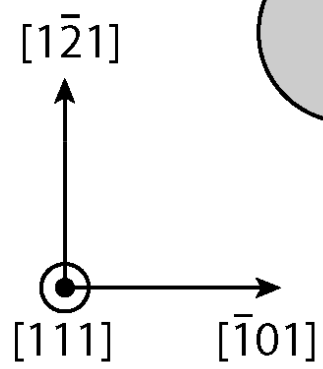
# TAHOVÁ KŘIVKA MONOKRYSTALU fcc, ORIENTACE PRO JEDNODUCHÝ SKLUZ

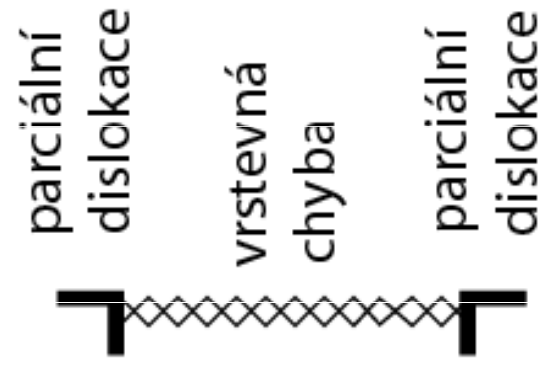
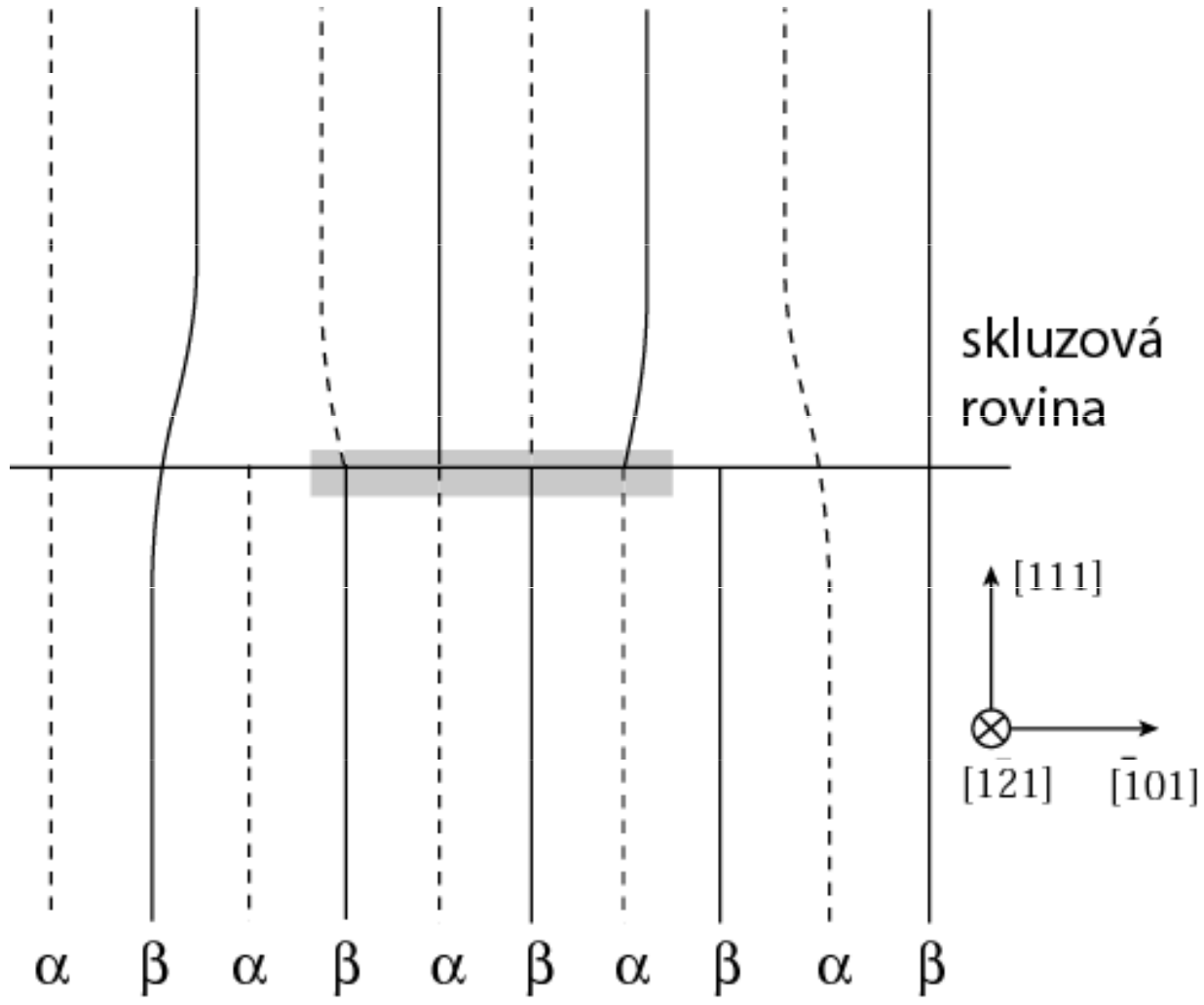




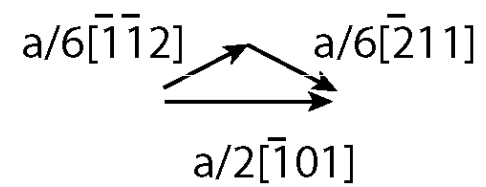
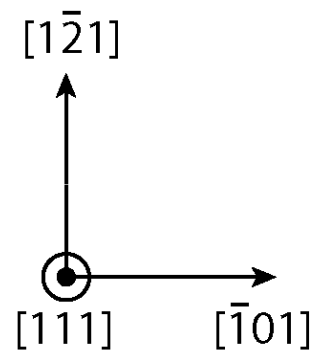
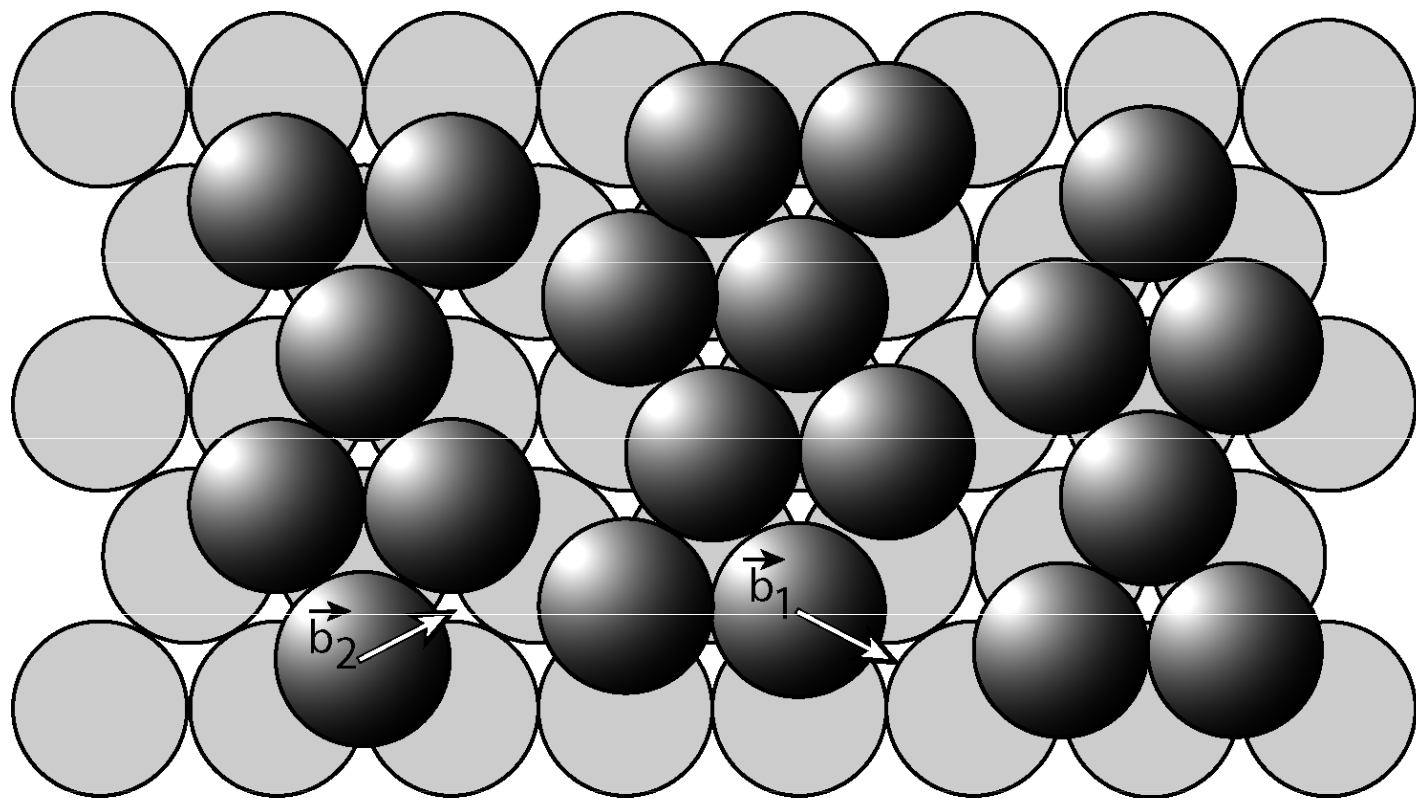
# Parciální dislokace - fcc





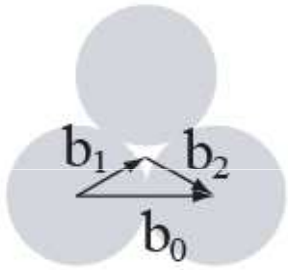






# PARCIÁLNÍ DISLOKACE

fcc



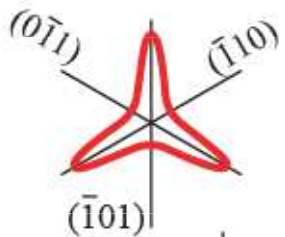
$$\frac{1}{2} [\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{1}21] + \frac{1}{6} [21\bar{1}]$$



vrstevná chyba

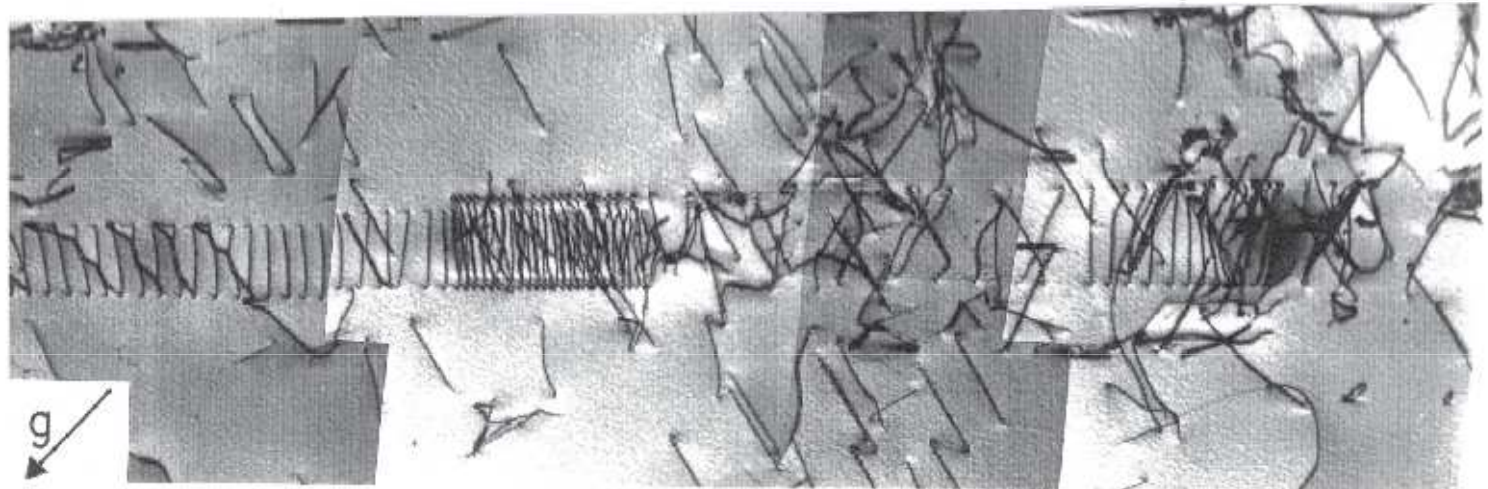
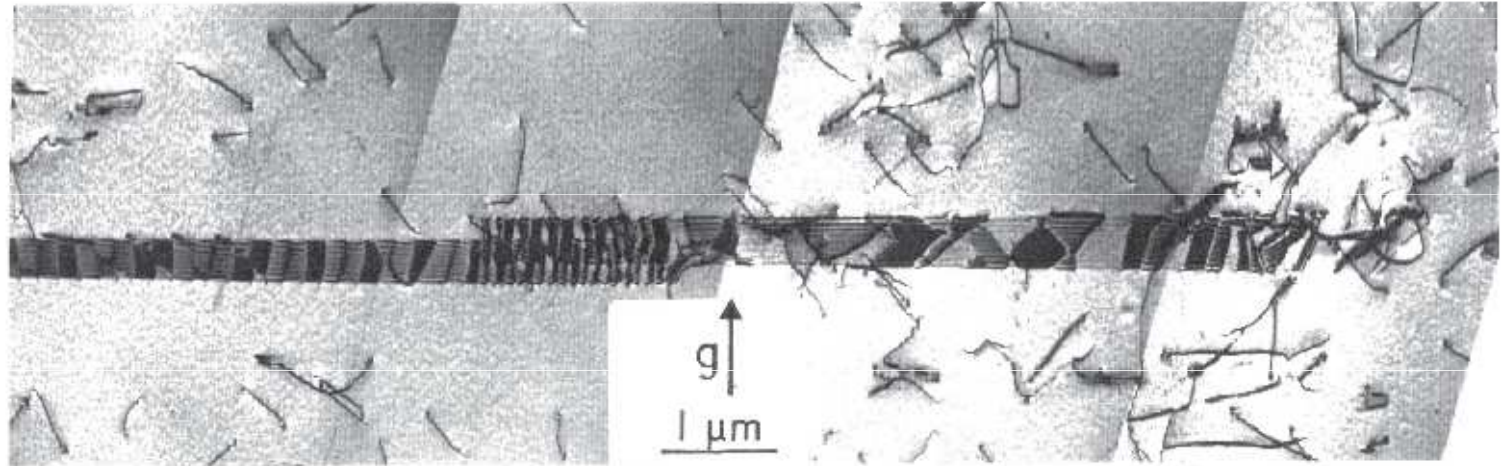
bcc

$b = \langle 111 \rangle$

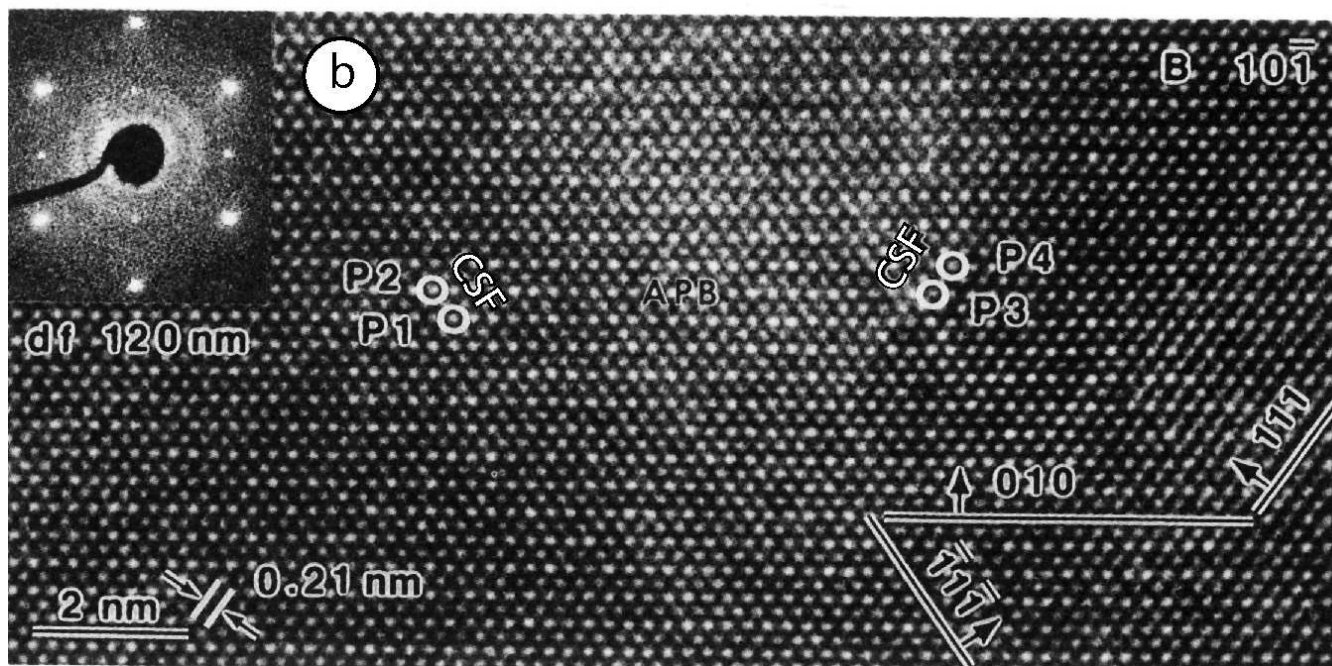


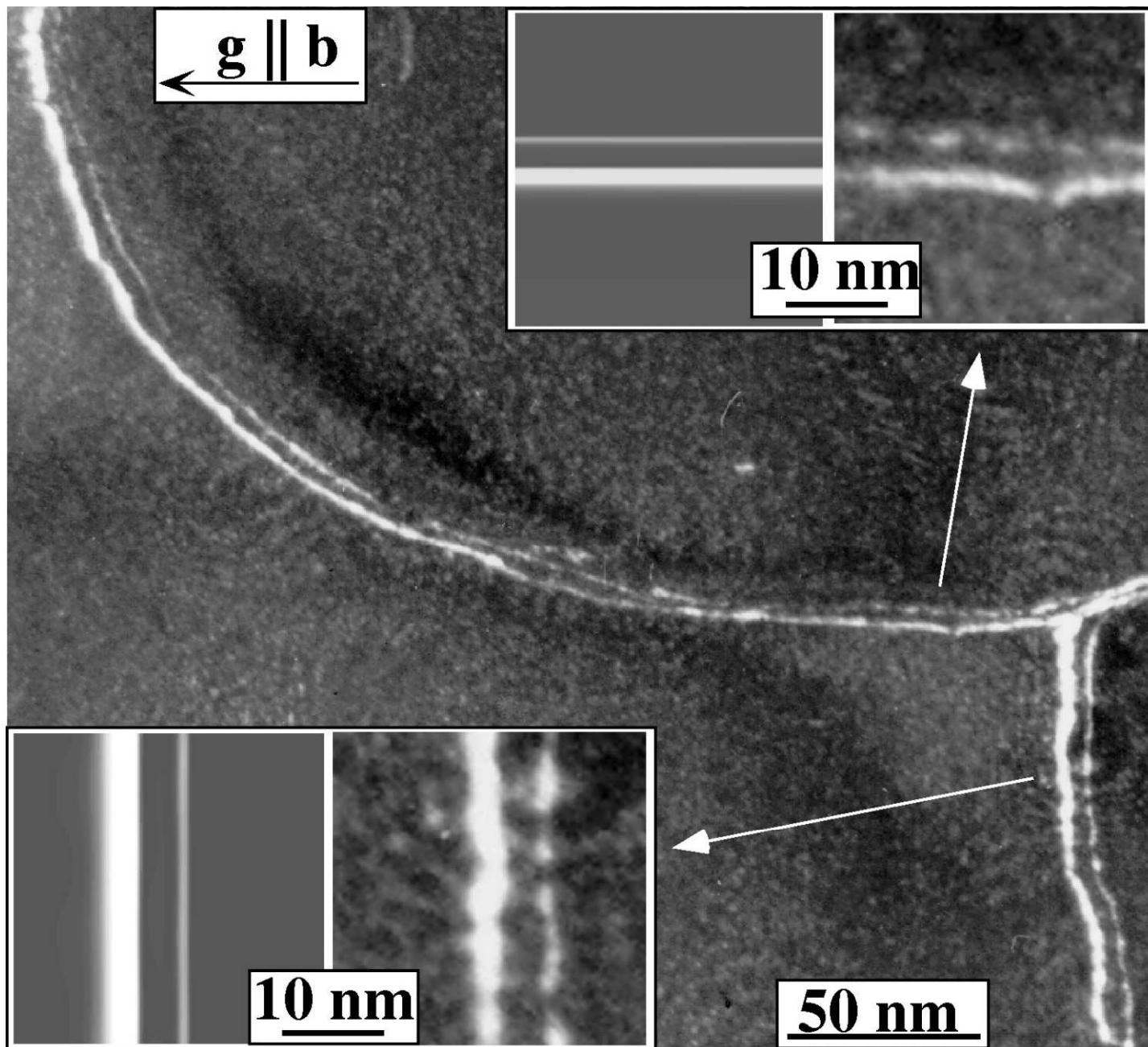
$\odot [111]$

2004:



parciální dislokace v InP

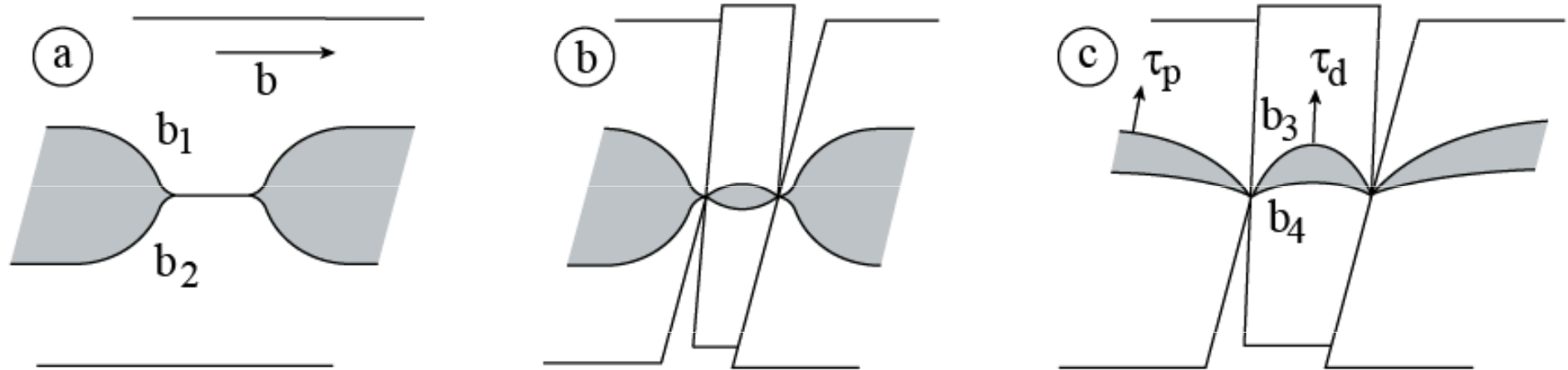




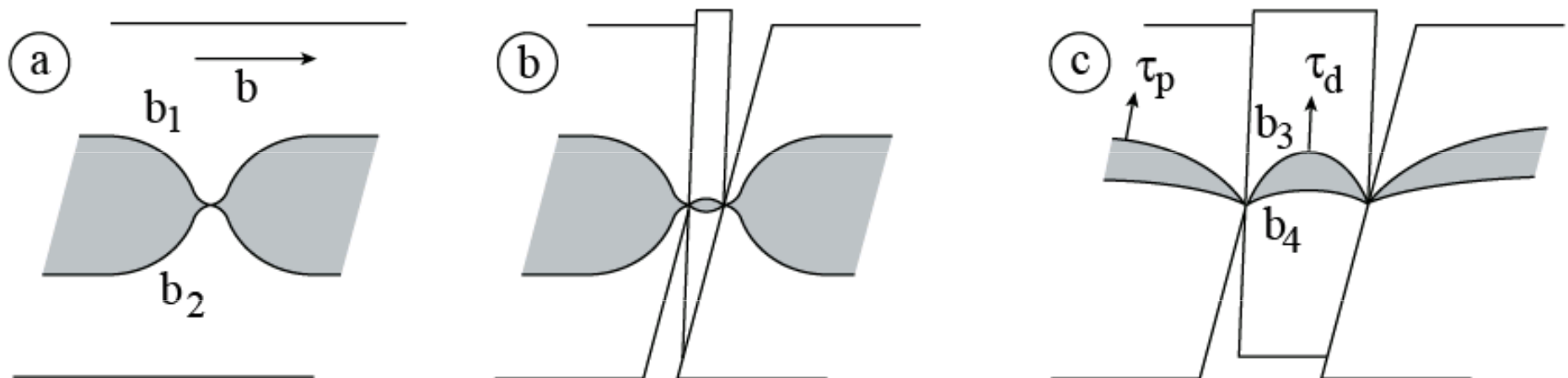


# PŘÍČNÝ SKLUZ - fcc

Wolf, Schoeck, SEEGER



FRIEDEL, Escaig:



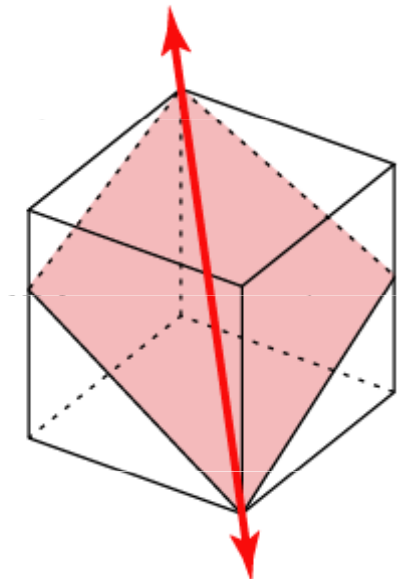
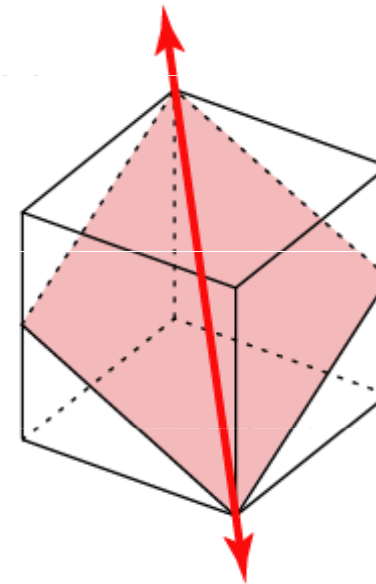
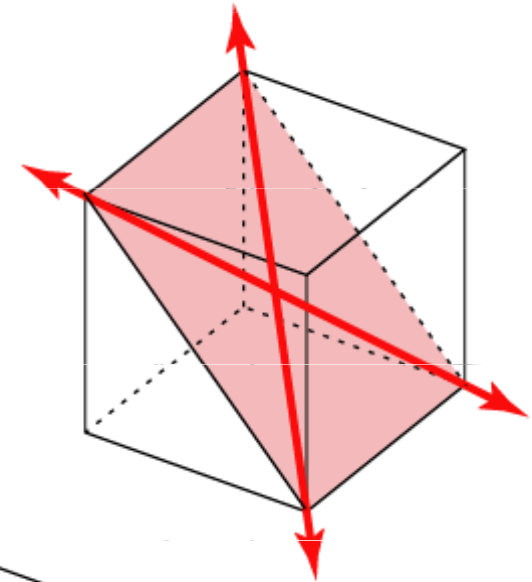
# SKLUZOVÉ SYSTÉMY

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

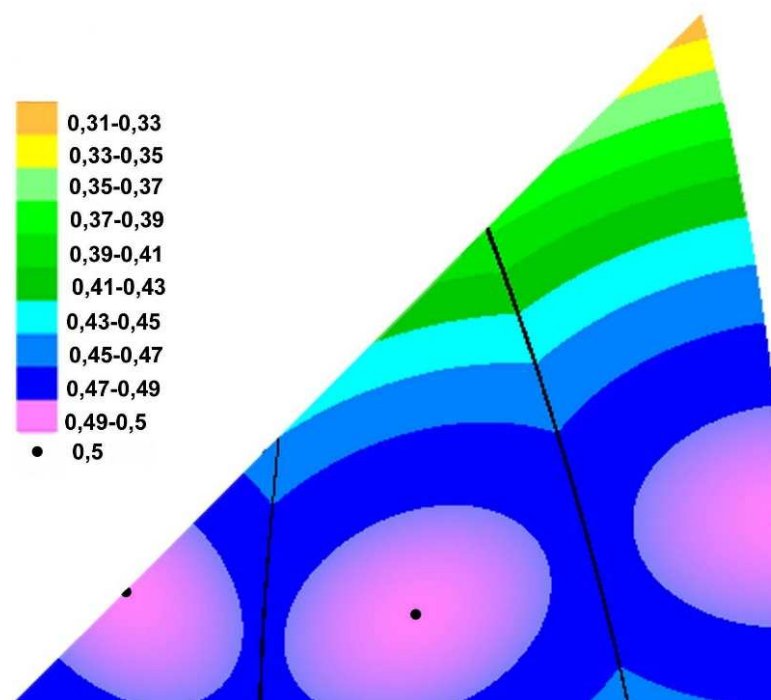
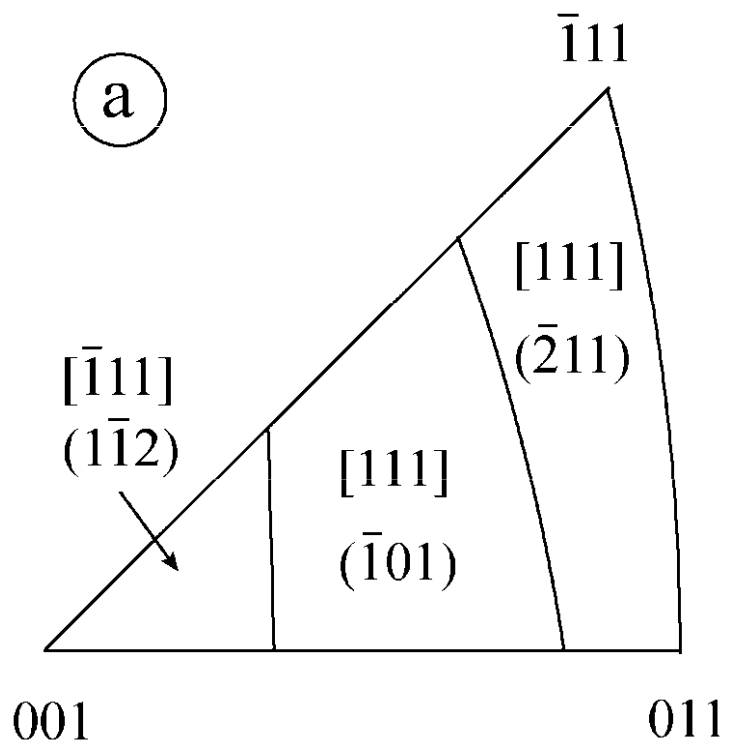
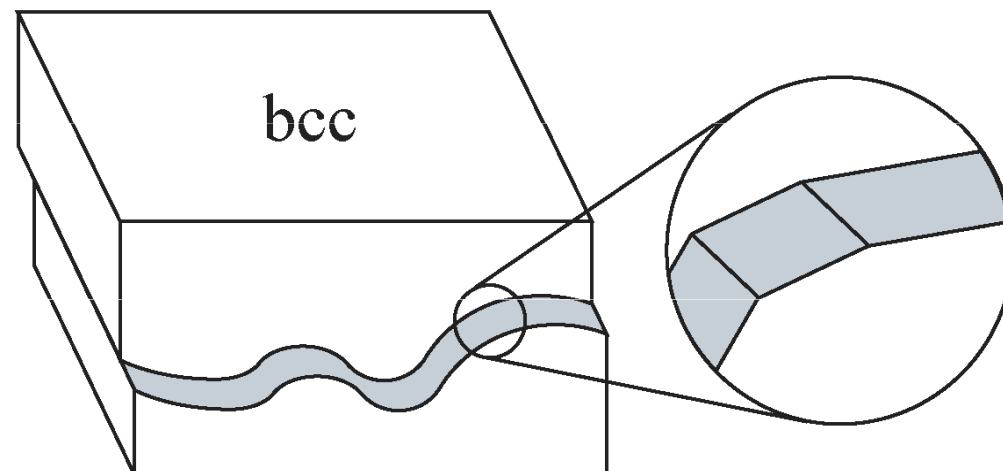
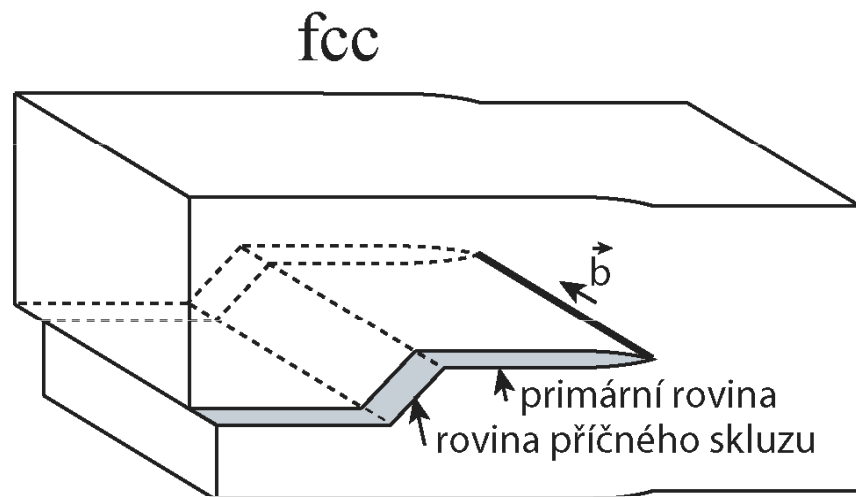
	Rovina	Směr ( $\vec{b}$ )
Mo, W, Fe - $\alpha$ , mosaz $\beta$	{110}	$\langle 111 \rangle$
	6	x
		2

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

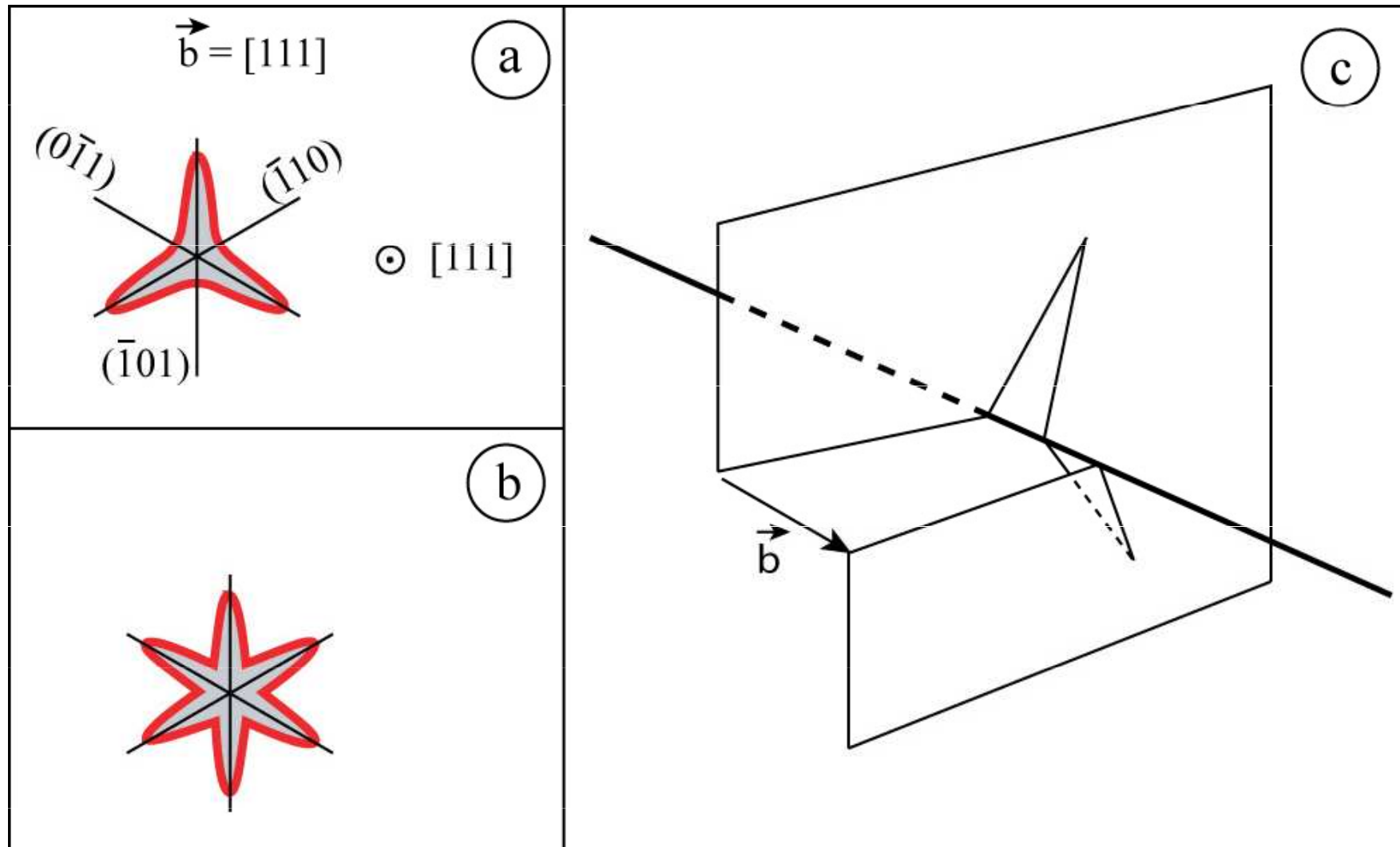
	Rovina	Směr ( $\vec{b}$ )
K, Fe - $\alpha$	{123}	$\langle 111 \rangle$
	24	x
		1



# 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.

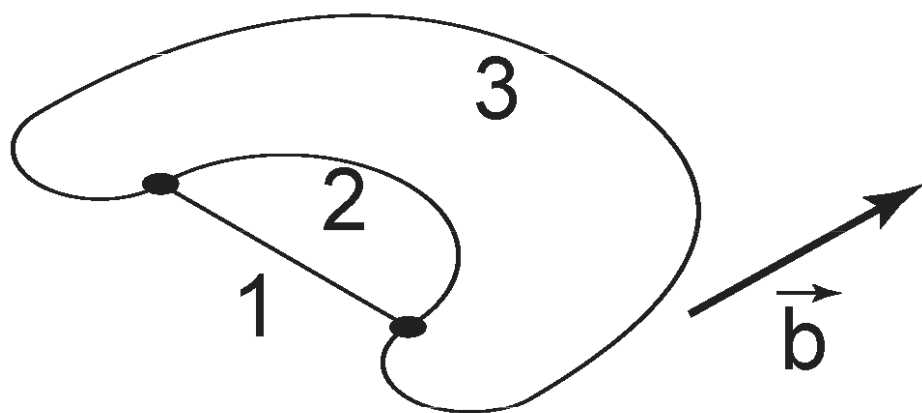


# Křehce – tvárný přechod

(a)

$$T > T_{db}$$

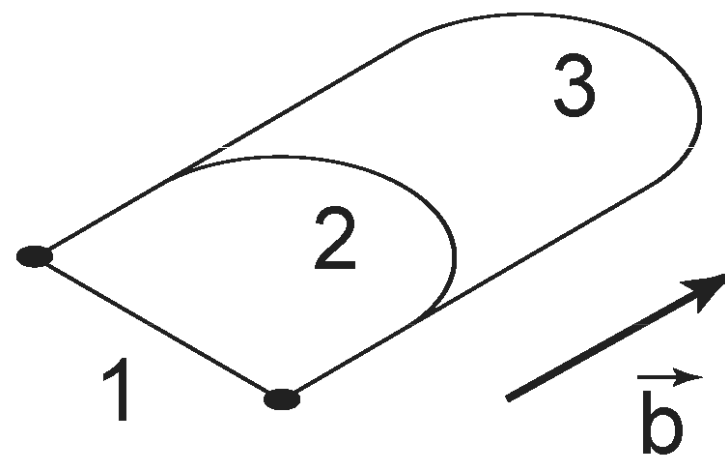
$$V_{\odot} \sim V_{\perp}$$



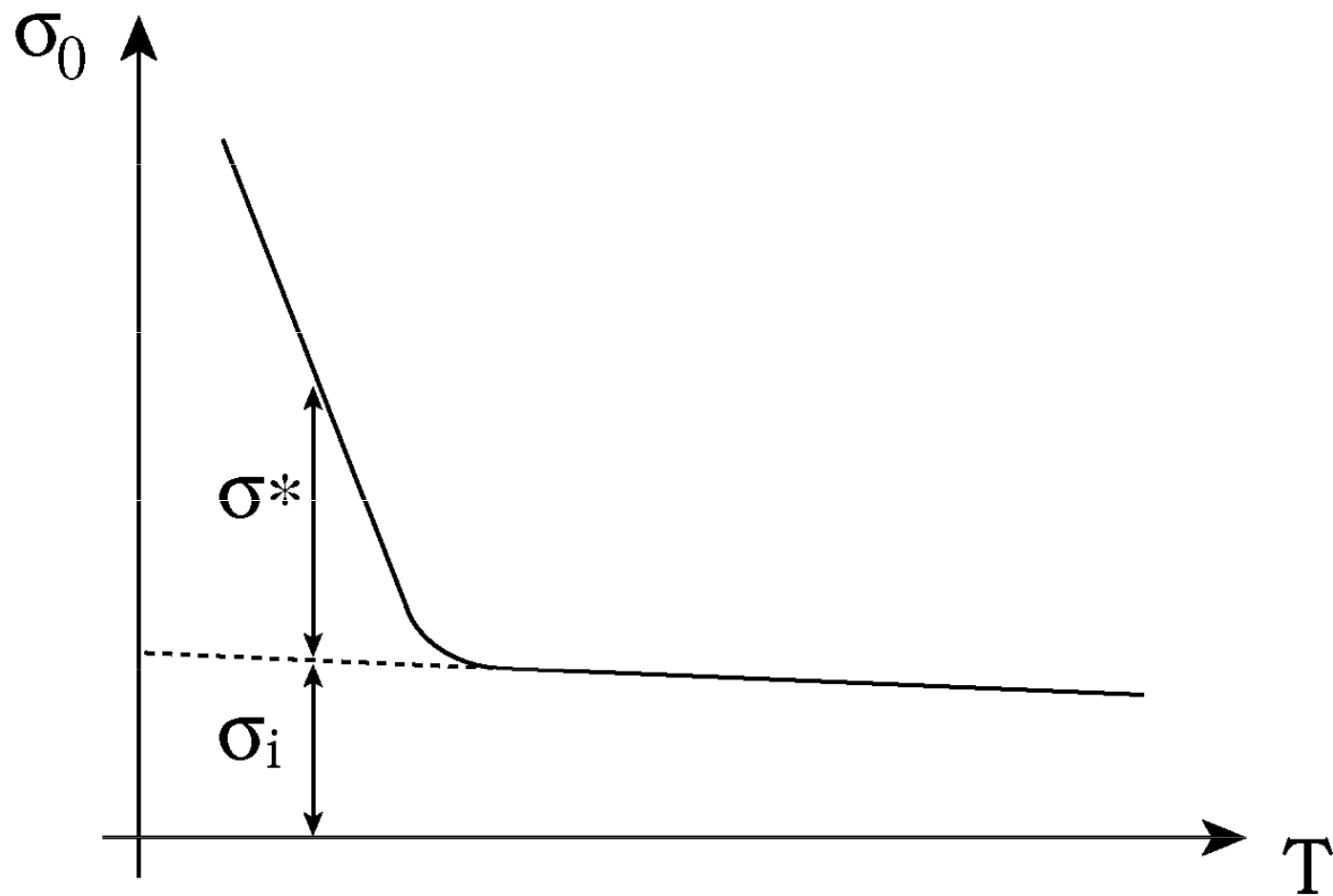
(b)

$$T < T_{db}$$

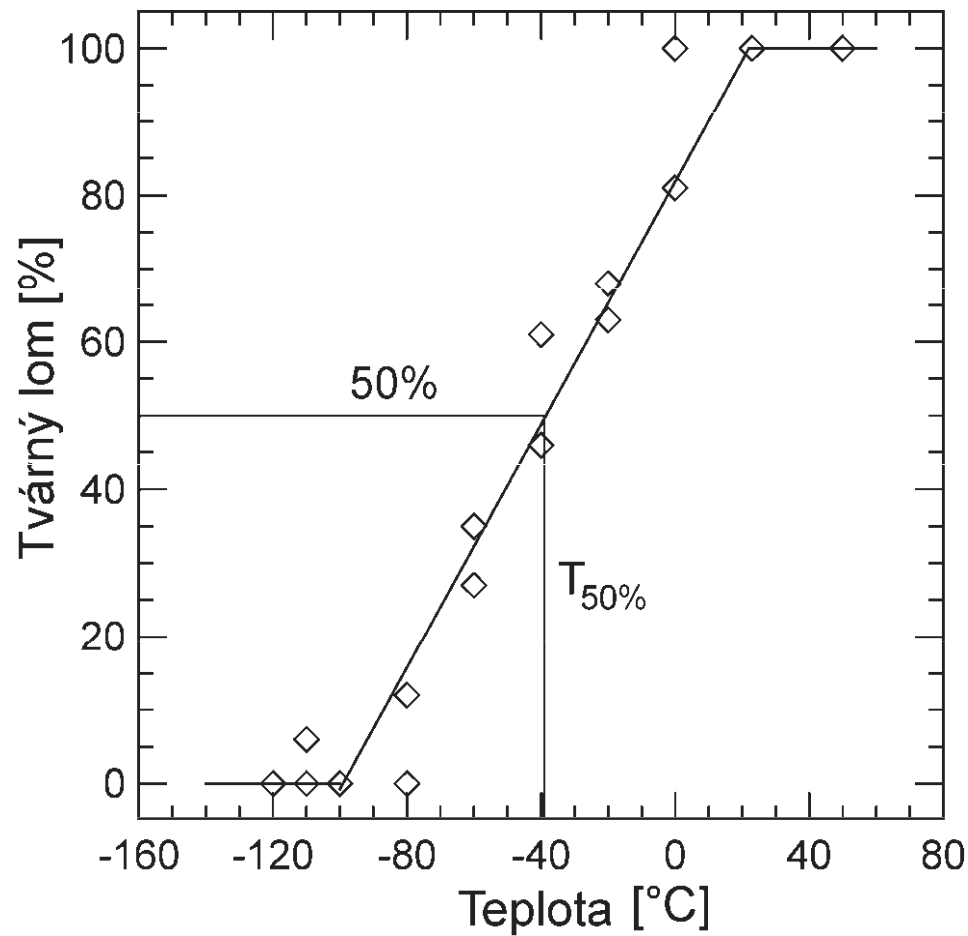
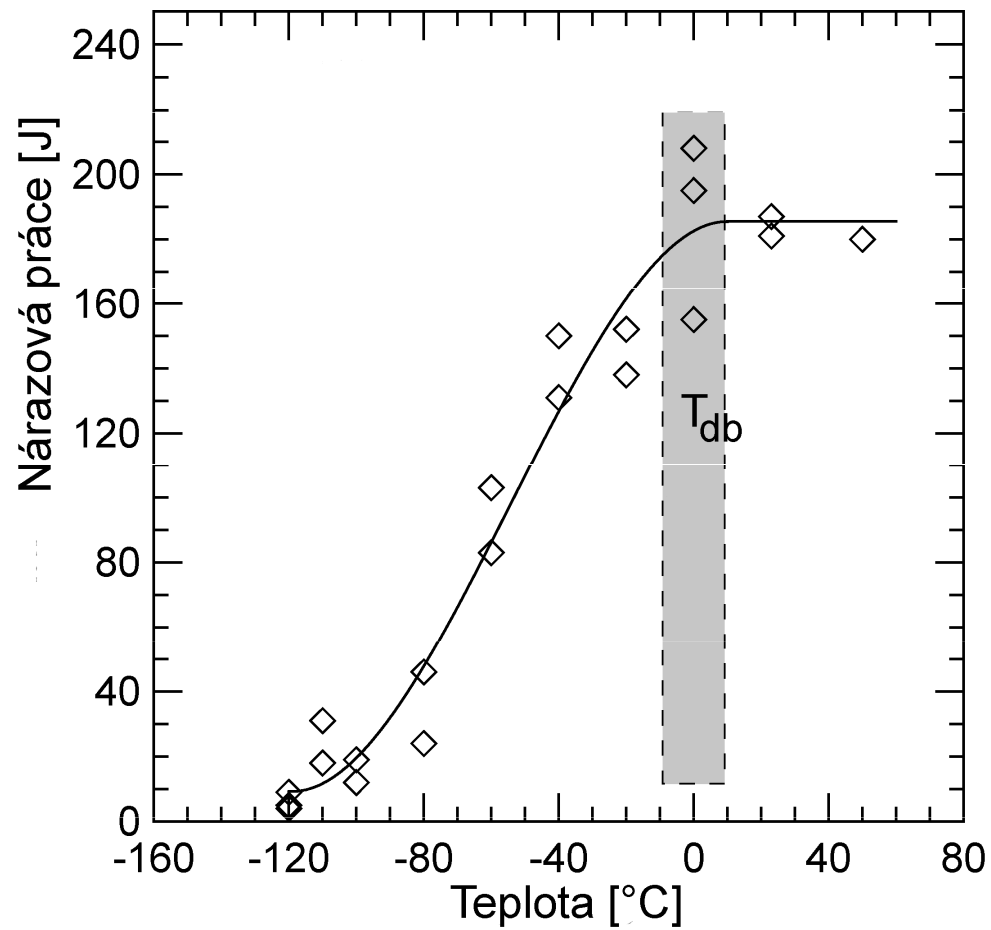
$$V_{\odot} \ll V_{\perp}$$



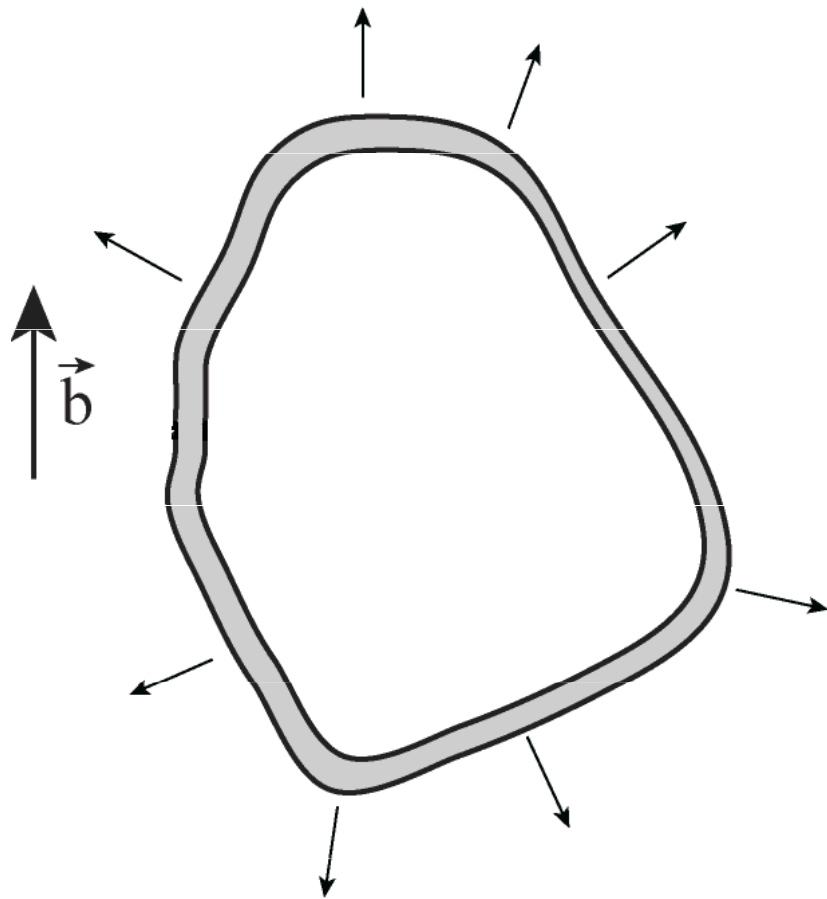
# Mez kluzu



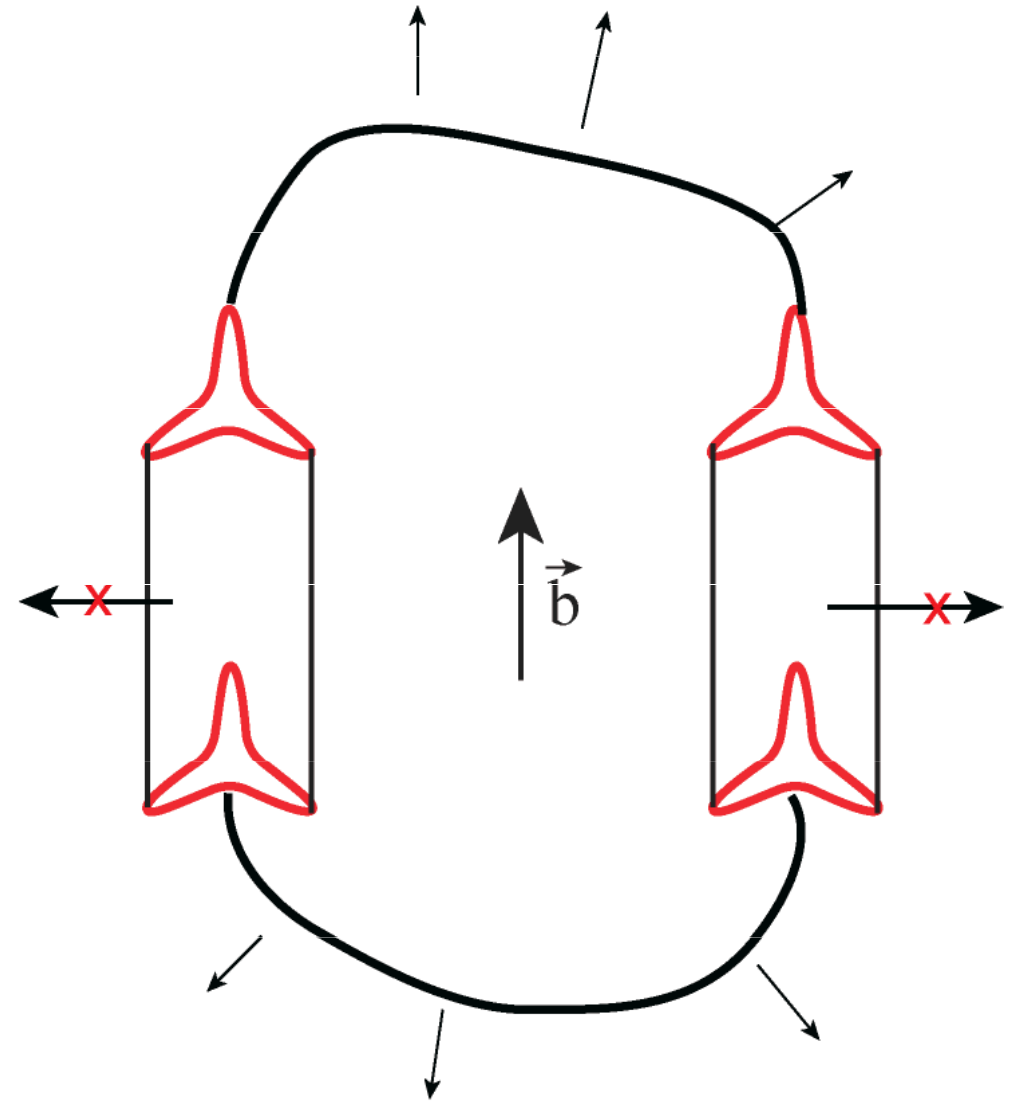
# Křehce – tvárný přechod



# fcc x bcc za nízkých teplot



**fcc**



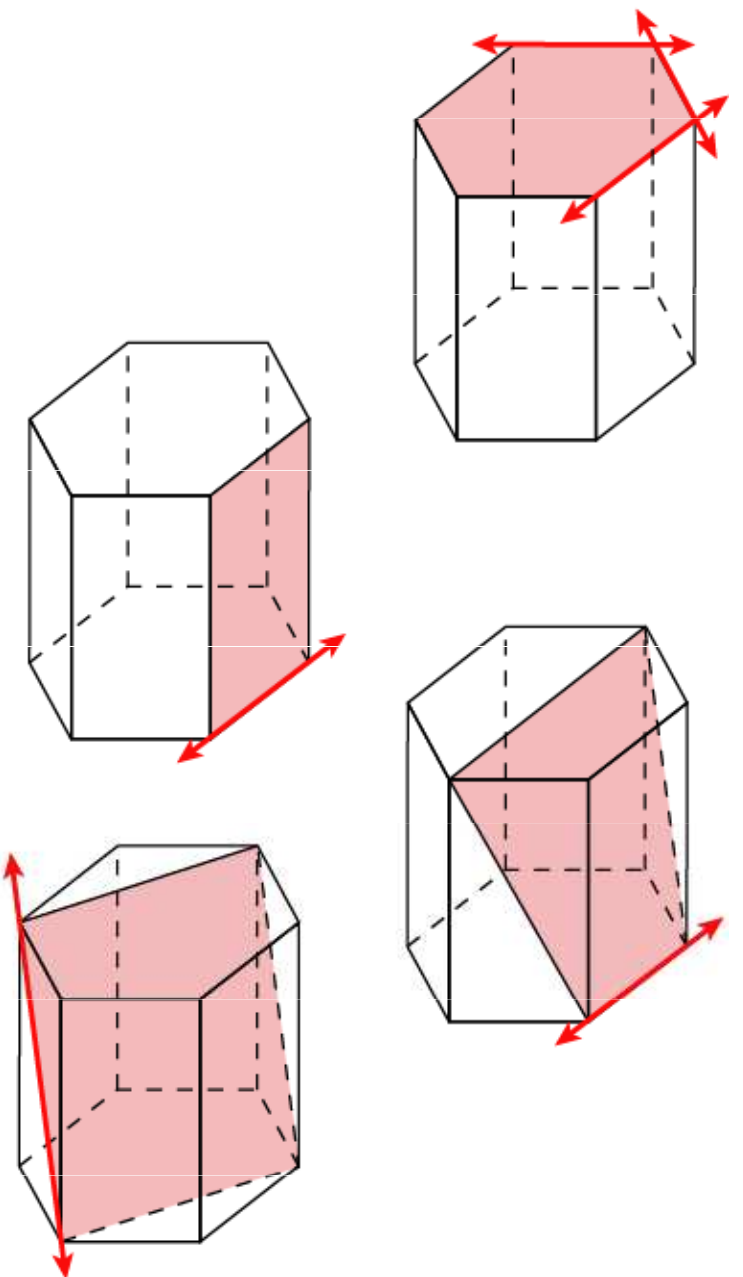
**bcc**

# SKLUZOVÉ SYSTÉMY

hexagonální těsně  
uspořádaná

hexagonal close packed  
hcp

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



## Hcp kovy – pozorované skluzové roviny

prvek	Be	Zr	Ti	Mg	Co	Zn	Cd
c/a	1.58	1.59	1.59	1.625	1.633	1.85	1.89
Skluzová rovina	bazální	prizmat.	bazální prizmat. pyram.	bazální pyramid.	bazální	bazální	bazální

Důležitý je nejen poměr c/a, ale hlavně rovina rozštěpení: bazální nebo pyramidální.

# VAZBY MEZI **MIKRO** **MAKRO** SVĚTEM

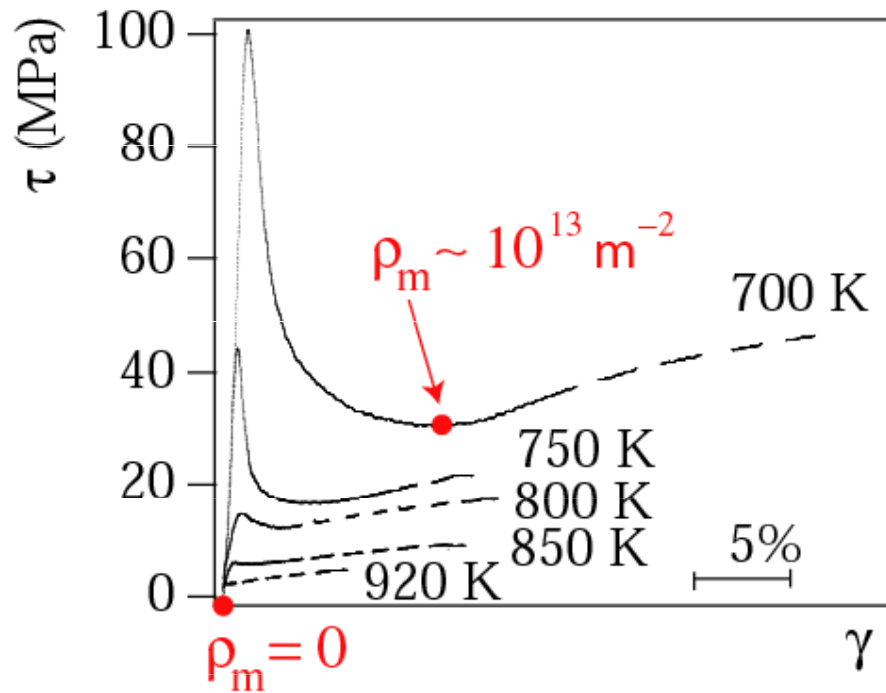
Plastická deformace x pohyb dislokací .... OROWANOVA ROVNICE  
Napětí x pohyb dislokací ... velmi složitý problém

# TRANSPORTNÍ OROWANOVA ROVNICE

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

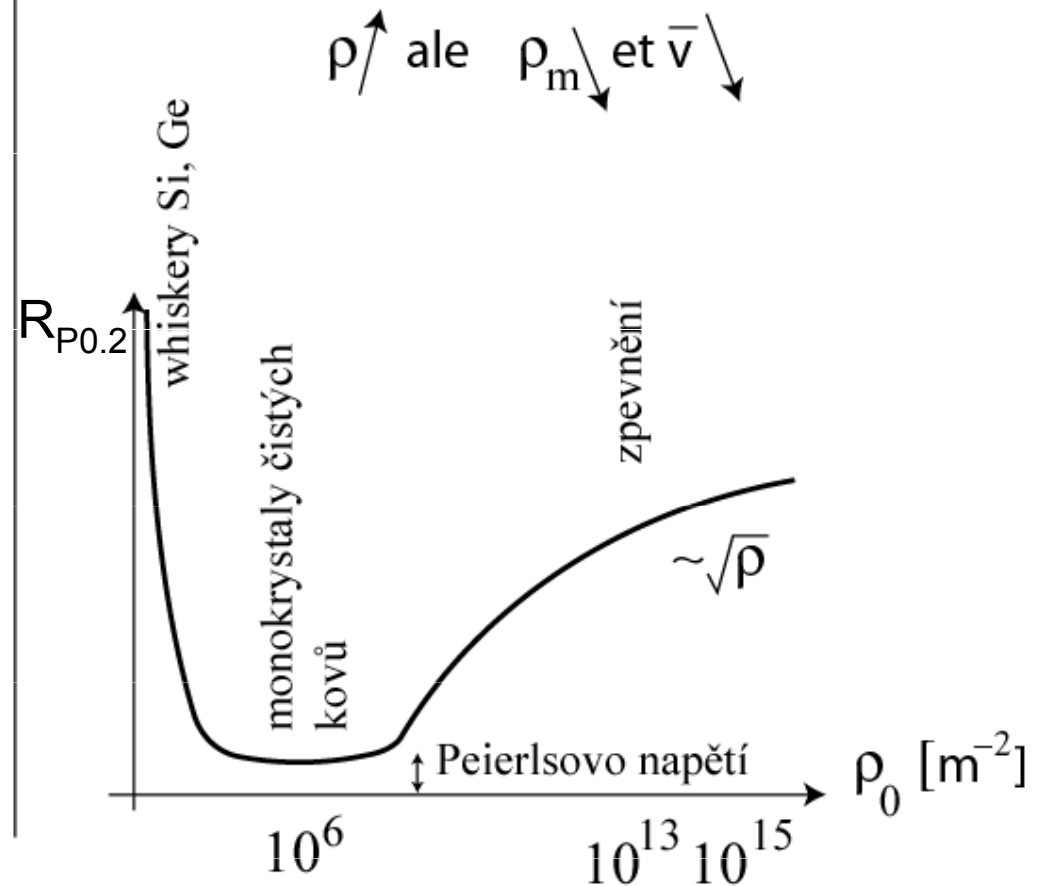
$v(\tau, T)$

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



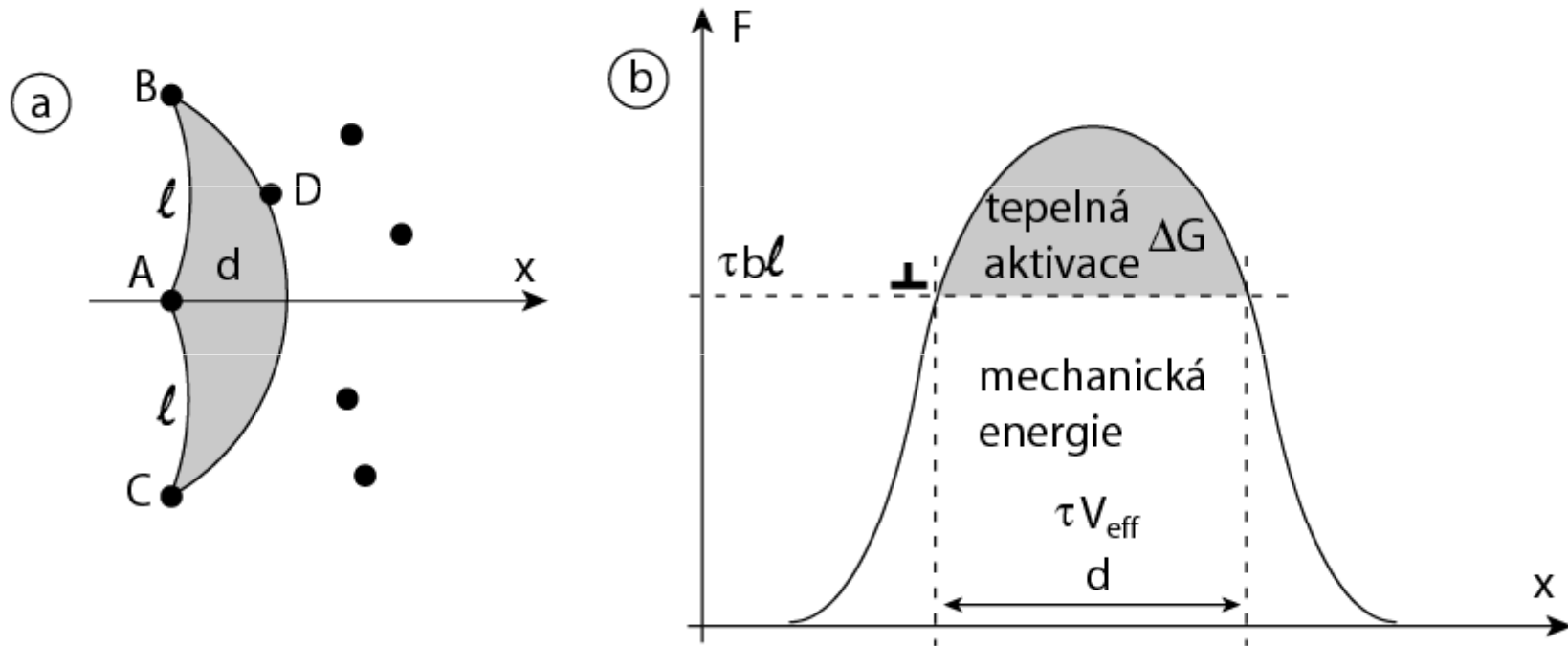
Ge, zkouška v kompresi,  
 $\dot{\gamma} = 9 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$

velké deformace = více aktivních  
 skluzových systémů





# TEPELNÁ AKTIVACE A RYCHLOST DISLOKACÍ



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

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

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

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

# 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.

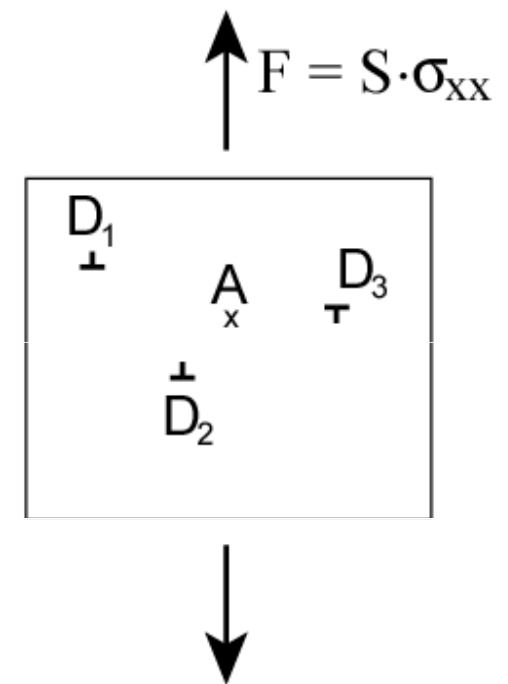
$\bar{\sigma}_{loc}^*$

Efektivní napětí ve stejném bodě =  
aplikované napětí + vnitřní napětí

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

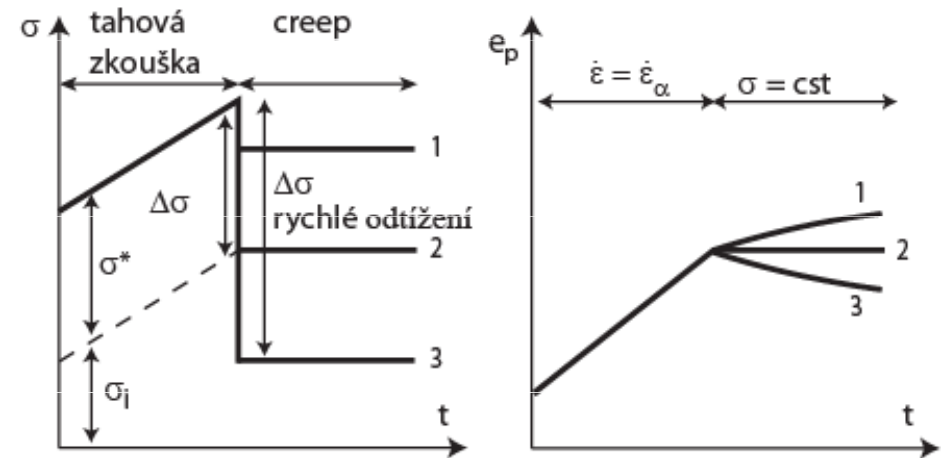
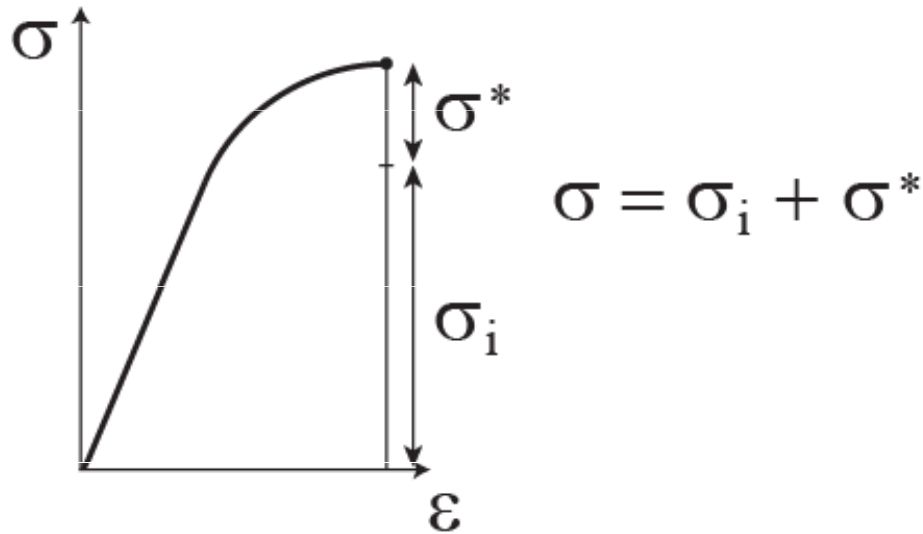
Pokud se dislokace nachází v bodě A, interaguje s  $\bar{\sigma}_{loc}^*$

Rychlost dislokací tedy závisí na lokálním efektivním napětí, nikoli aplikovaném



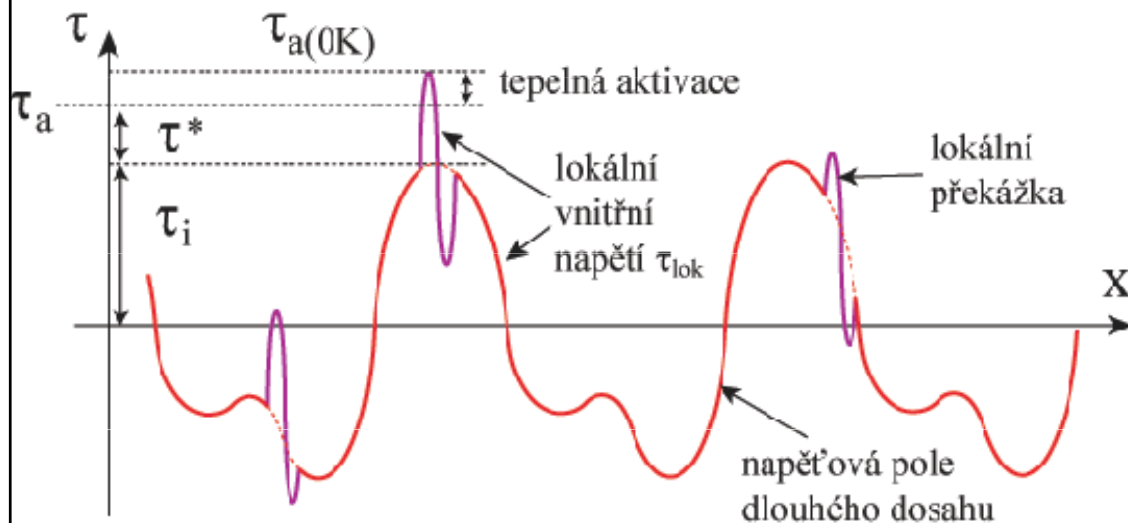
# NAPĚTÍ EFEKTIVNÍ & INTERNÍ

## 2. makroskopické projevy



$\sigma^*$  : efektivní "makroskopické" napětí = napětí potřebné k překonání malé překážky

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

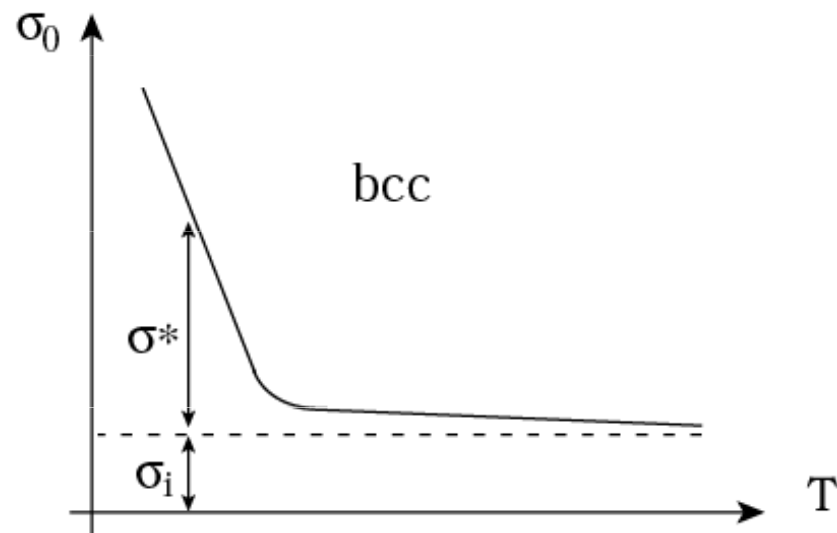
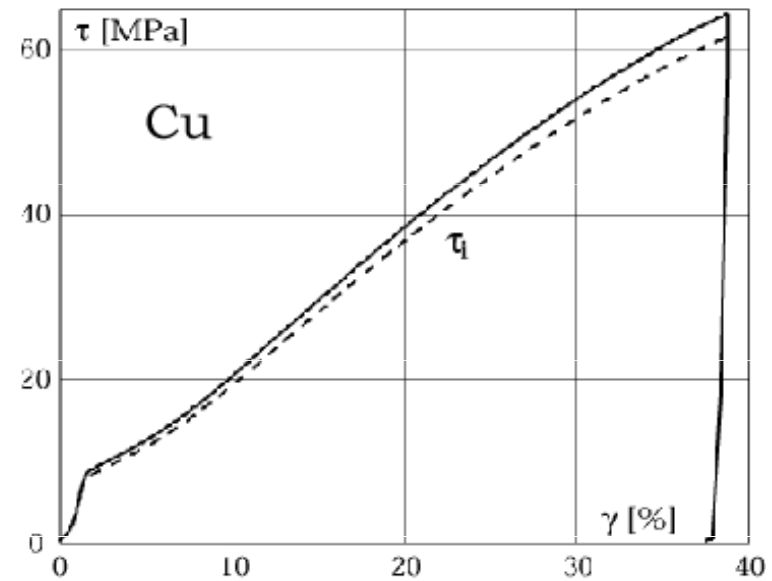
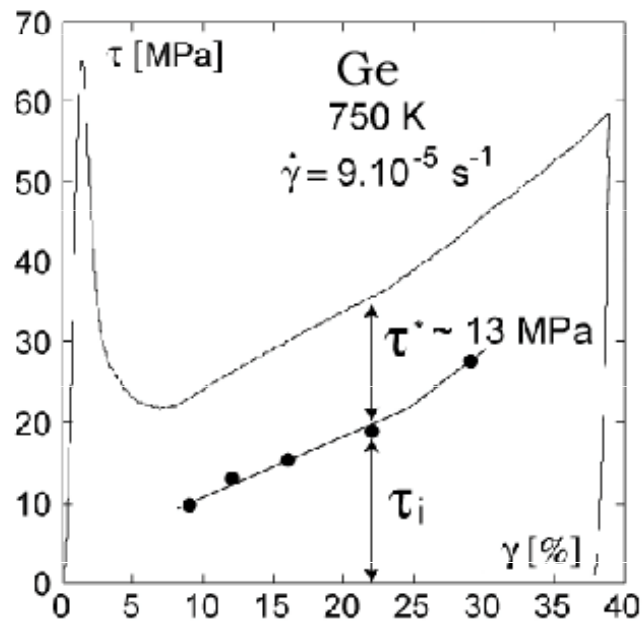


Taylorova rovnice:

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

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

# EFEKTIVNÍ & INTERNÍ NAPĚTÍ



# ČÍM JE DÁNO NAPĚTÍ POTŘEBNÉ K PLASTICKÉ DEFORMACI ?

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

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

$\tau_c$  může být dáno:

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

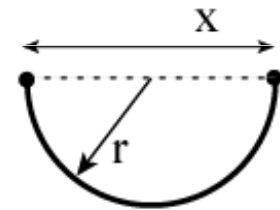
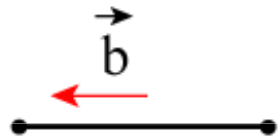
- napětí nezbytné k aktivaci zdrojů mobilních dislokací

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

$\rho_m$

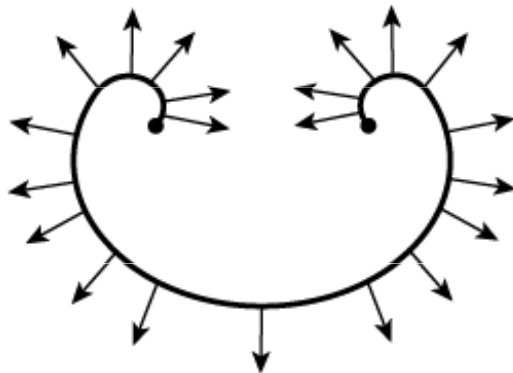
$v$

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

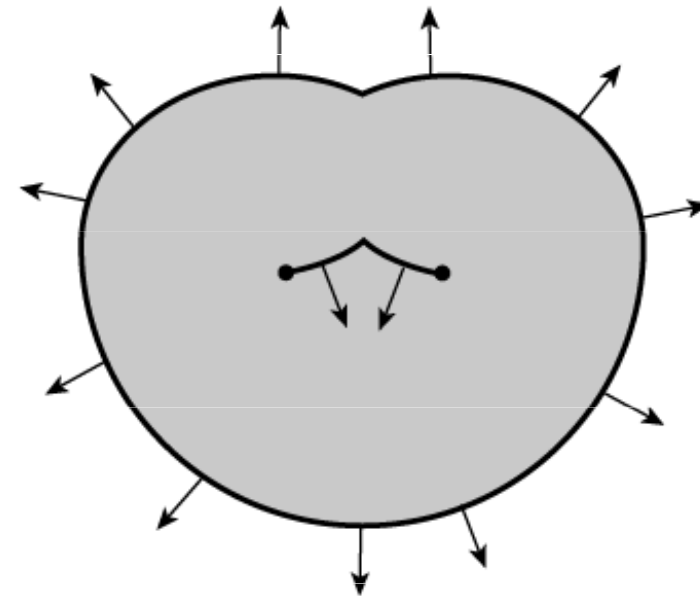
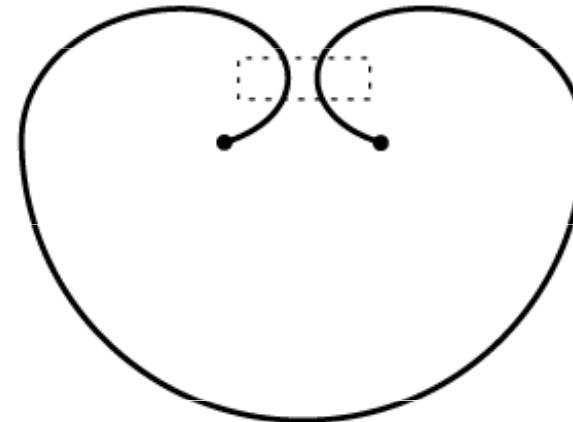


maximální napětí:  $r = x/2$

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



anihilace

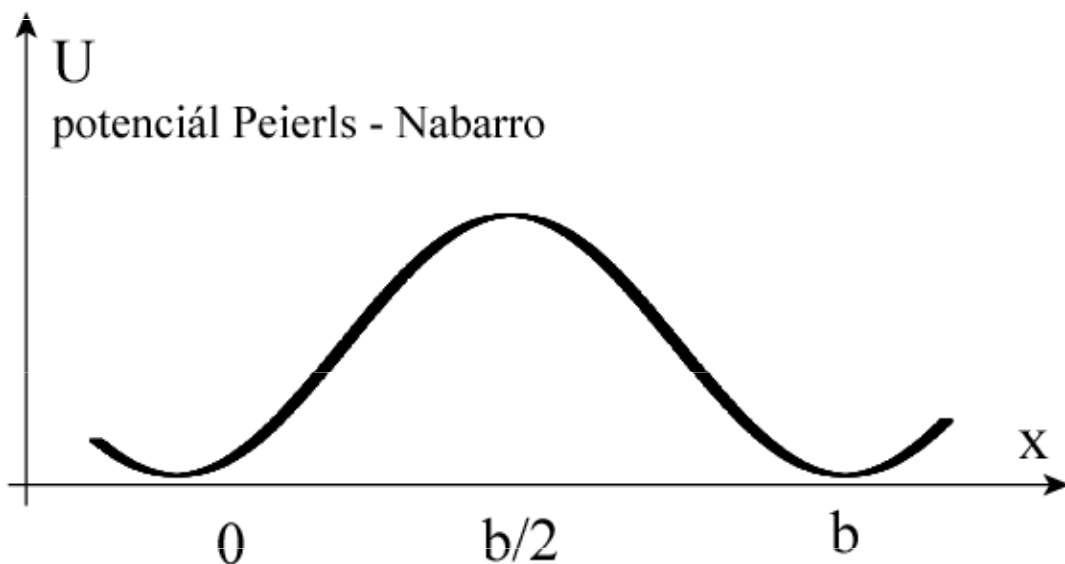
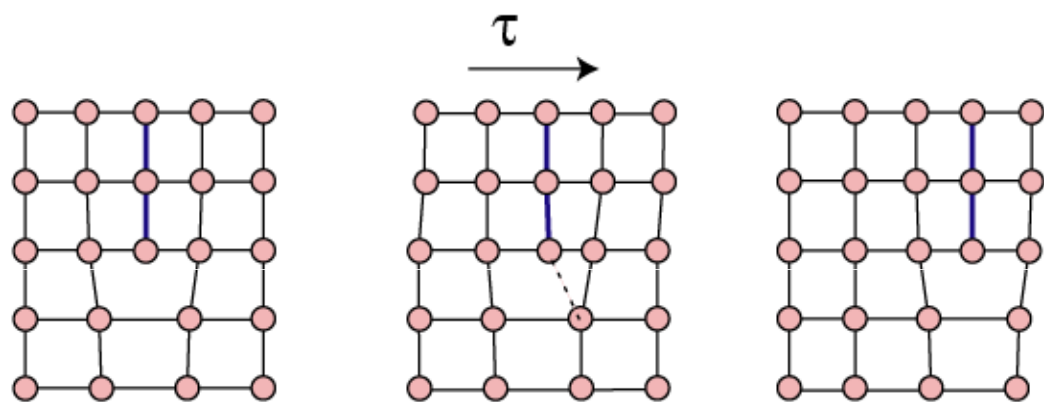


1

# Tření mřížky

1.1

## Intrinsické (čisté kovy): potenciál Peierls - Nabarro



fcc :  
U velmi slabé, < 1 MPa

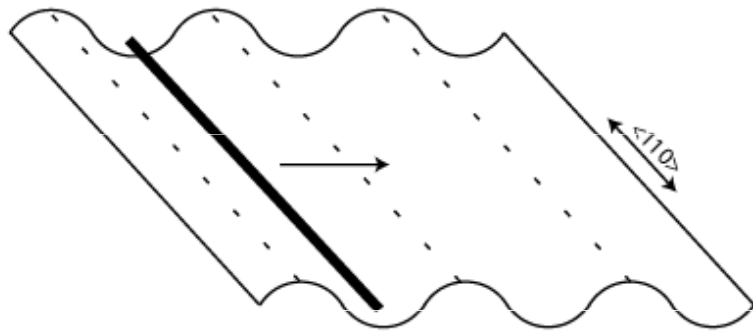
bcc :  
hc nebasální  
roviny      U rychle roste,  
pokud T klesá

polovodiče :  
Si, Ge, GaAs, InP      U vysoké

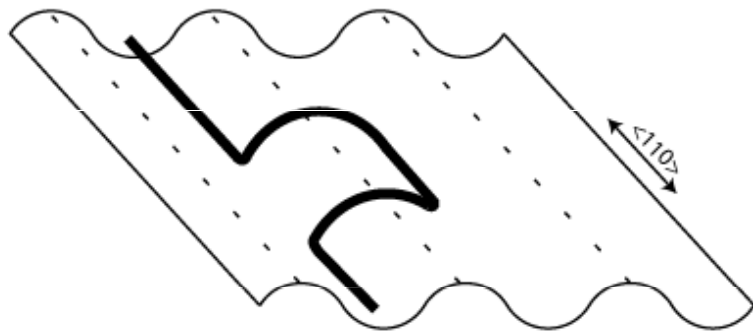
keramiky : U velmi vysoké

# POHYB DISLOKACÍ GENERACÍ "DOUBLE KINK"

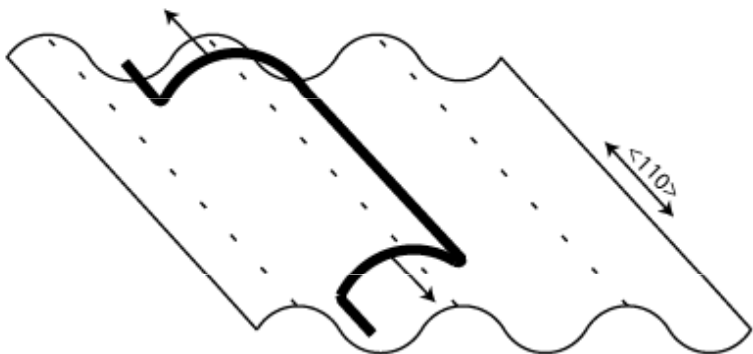
příklad fcc, materiál s vysokým U



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

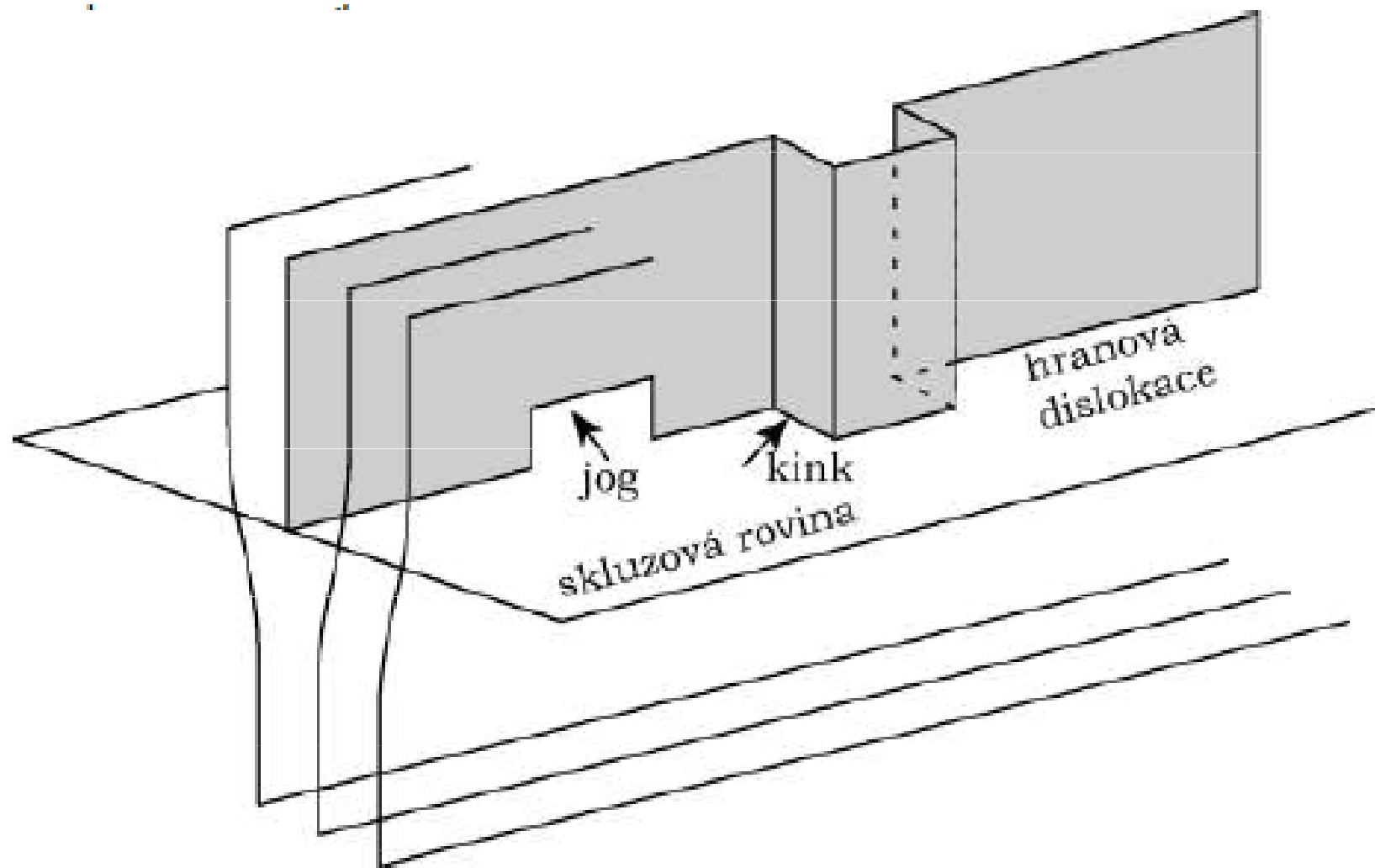


b) Vytvoření double kink pomocí náhodné tepelné aktivace. Kinky se mohou buď šířit podél dislokace, anebo zrekombinovat zpět do konfigurace a)



c) Přesun dislokace do vedlejšího Peierlsova údolí pohybem obou kinků

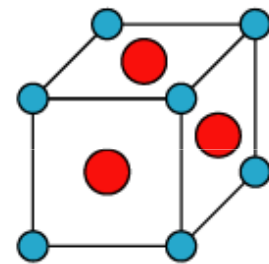
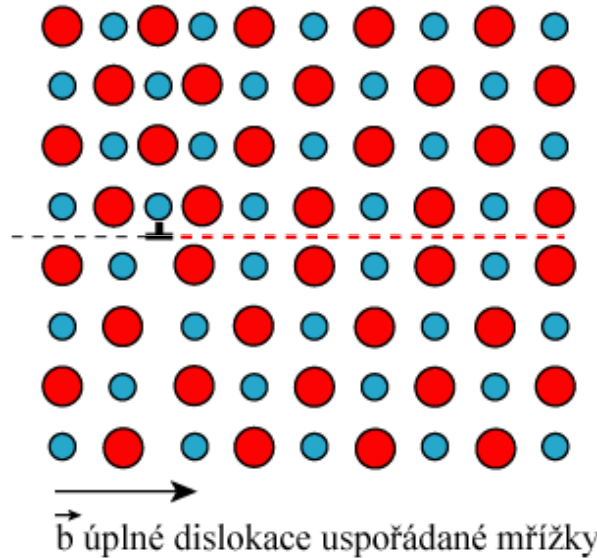
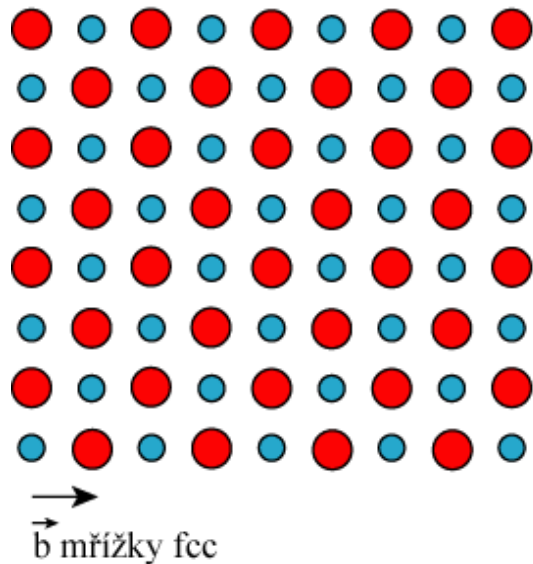




Obrázek 5.2 Definice pojmů jog a kink.

1.2

Tření mřížky - extrinsické, uspořádané slitiny (= intermetalika)



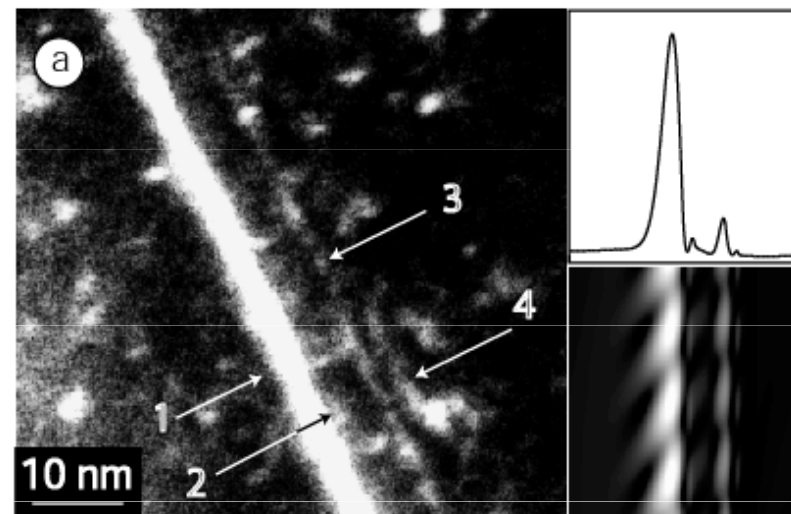
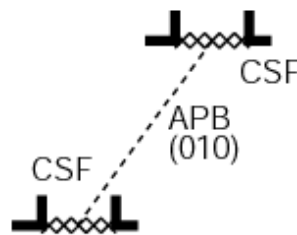
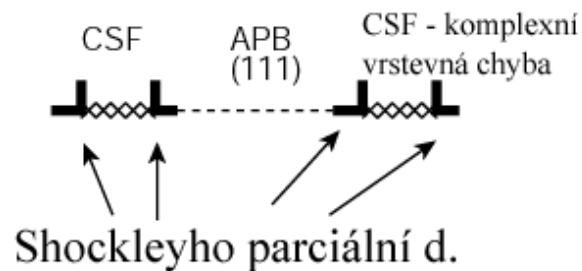
Ni<sub>3</sub>Al  
(superslitiny)

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.

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

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

$K_{\text{sol}}$  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:

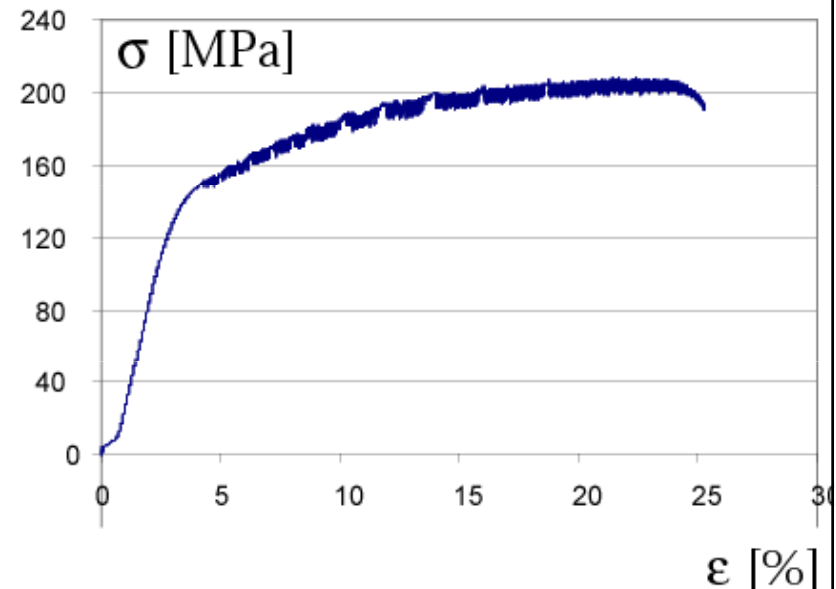
$$\dot{\gamma}_p = \text{cst (vnucená pohybem zatěžovacího stroje)}$$

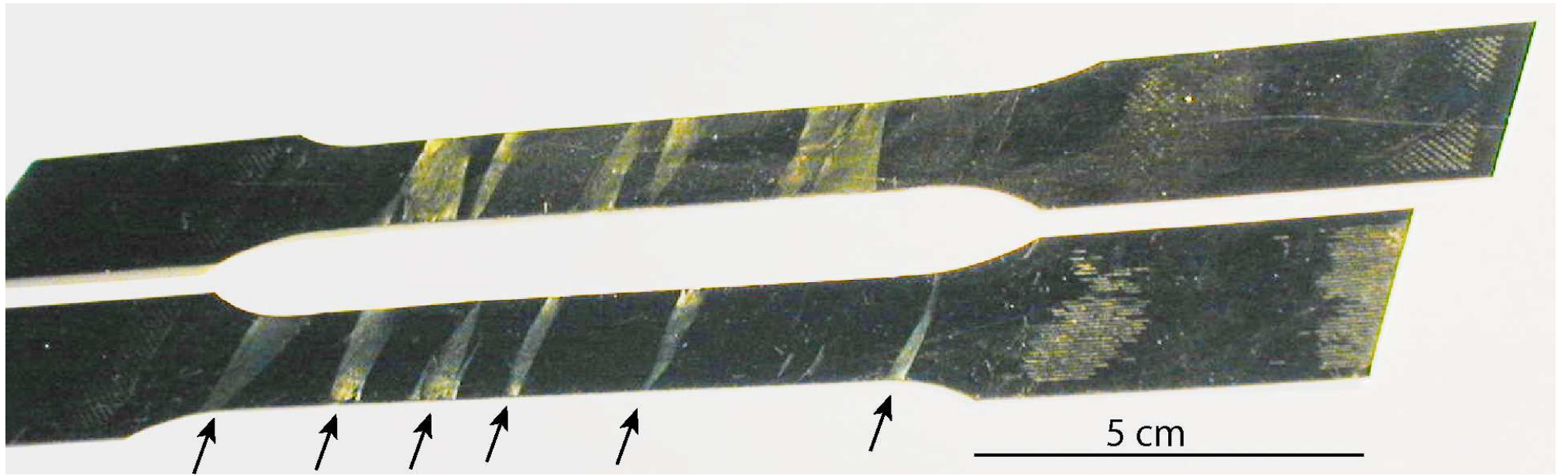
$$v(\tau^*) \text{ klesá} \rightarrow \tau \text{ klesá}$$

**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  $b$  :

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

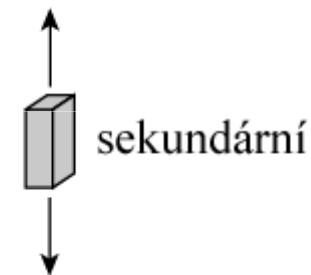
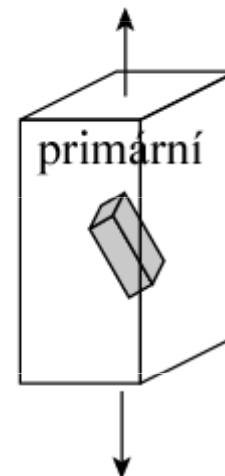
- dislokace z více skluzových systémů "zpevnění dislokačním lesem"  
 $\alpha$  se vypočte způsobem naznačeným v minulém cvičení

Experimentální měření  $\alpha$  pro různé kombinace skluzových systémů - latentní zpevnění (latent hardening ratio)

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

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

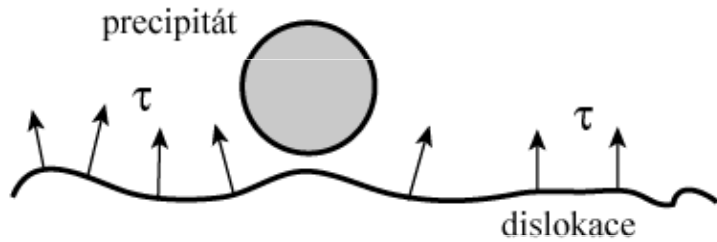
$i, j =$  skluzové systémy



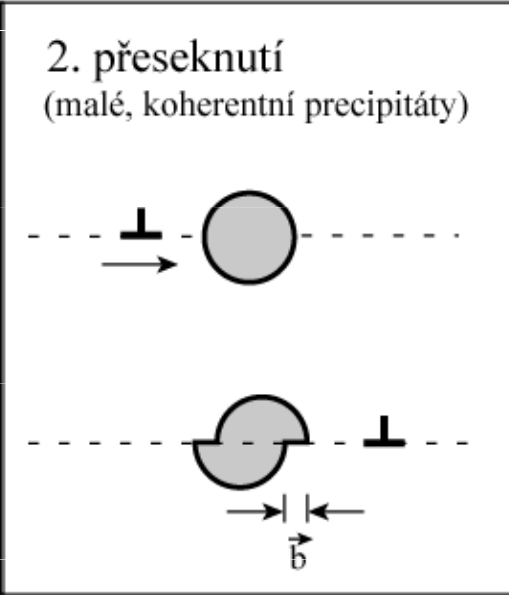
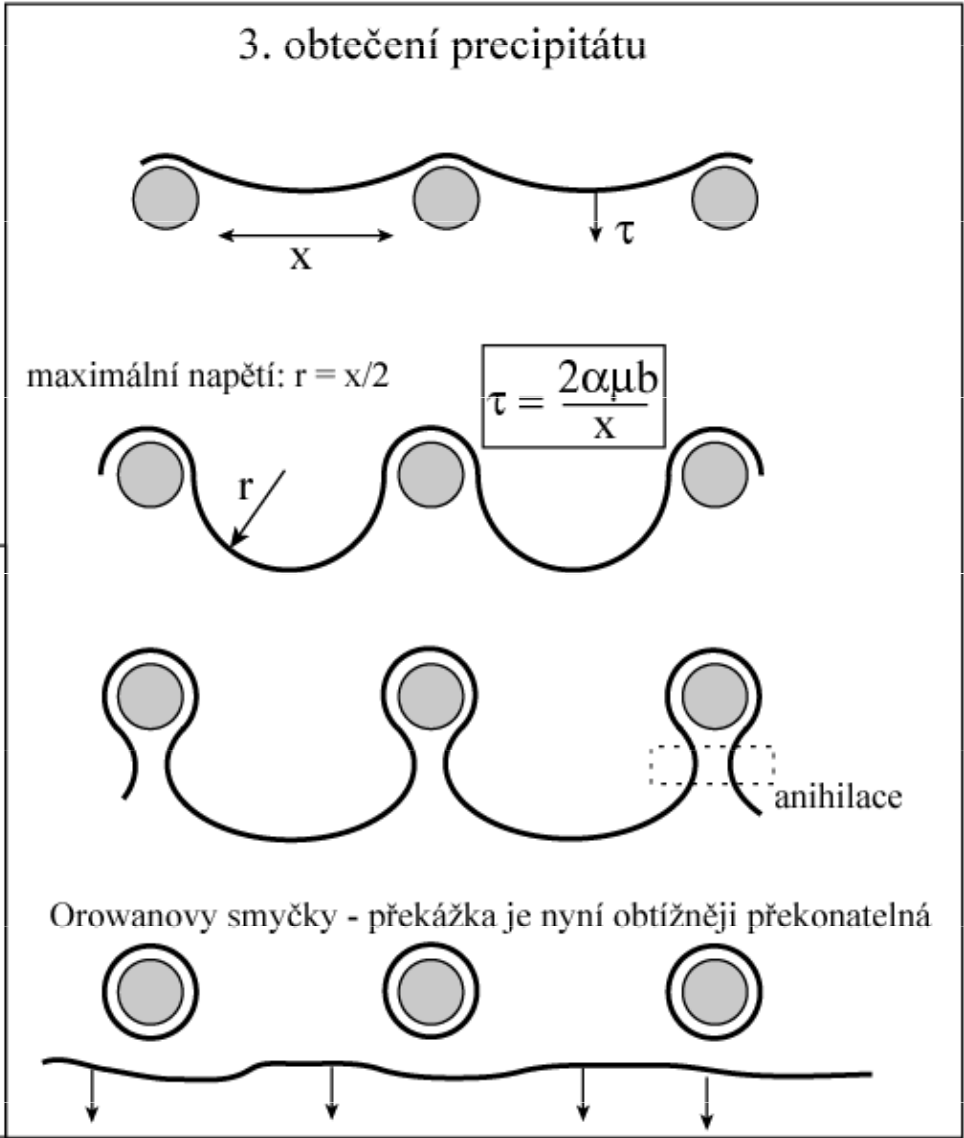
**4** Hranice zrn

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

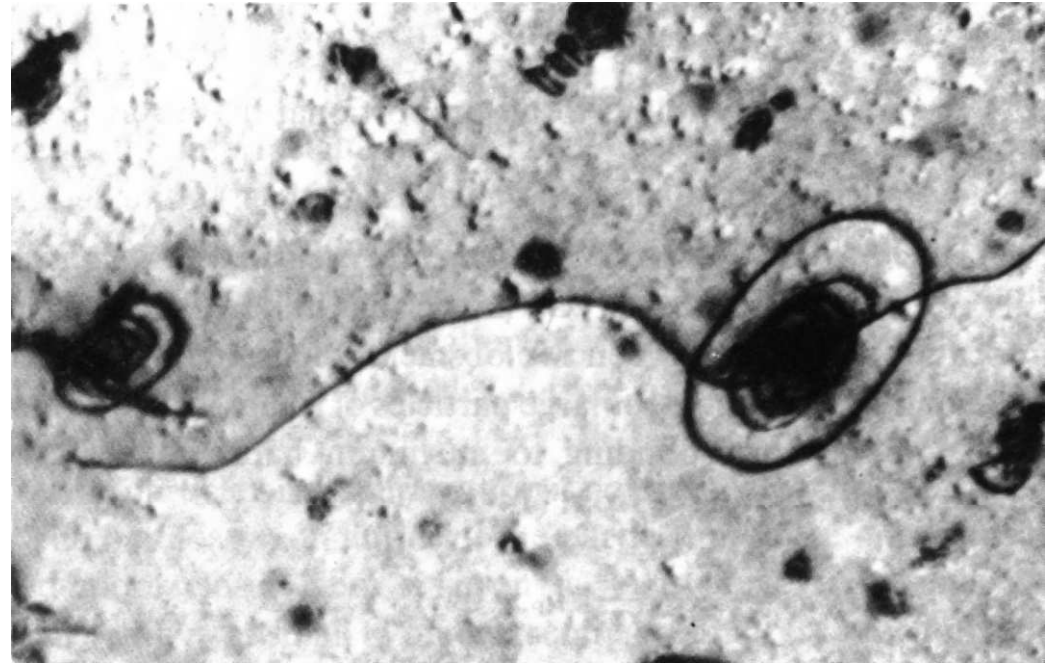
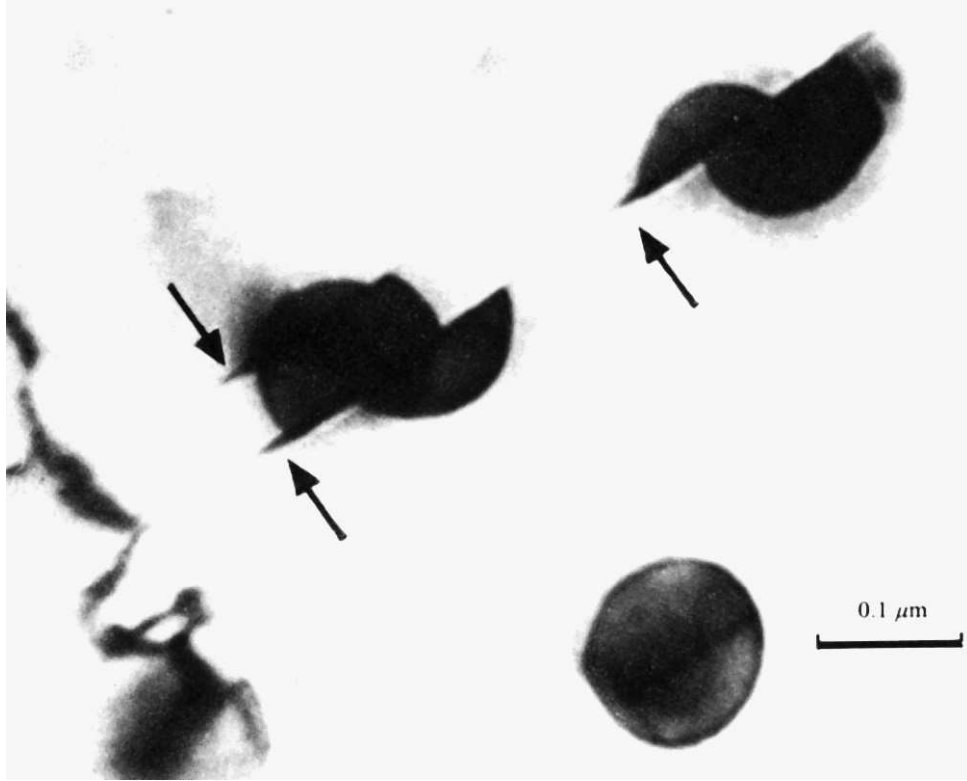
**5** Sekundární fáze



Jak dislokace překoná tuto překážku ? 3 možnosti

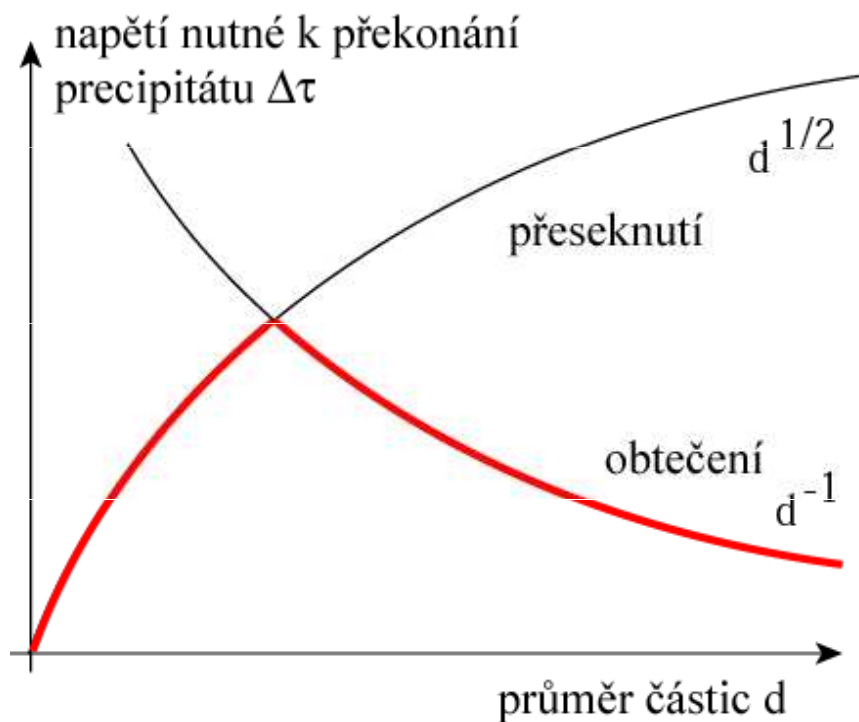


$$\Delta\tau_{cut} = \frac{\gamma\pi d}{2bx_g}$$



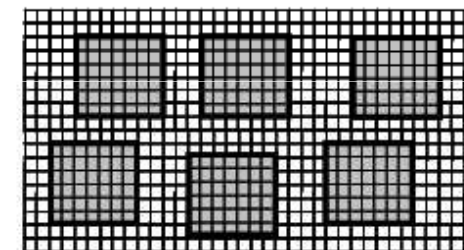
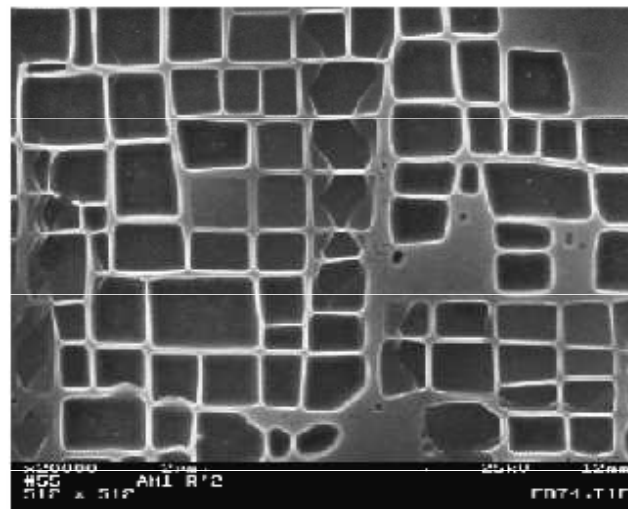


# Vliv velikosti precipitátu při zachování konstantního objemového podílu fází (pokud roste průměr precipitátů, klesá jejich počet)

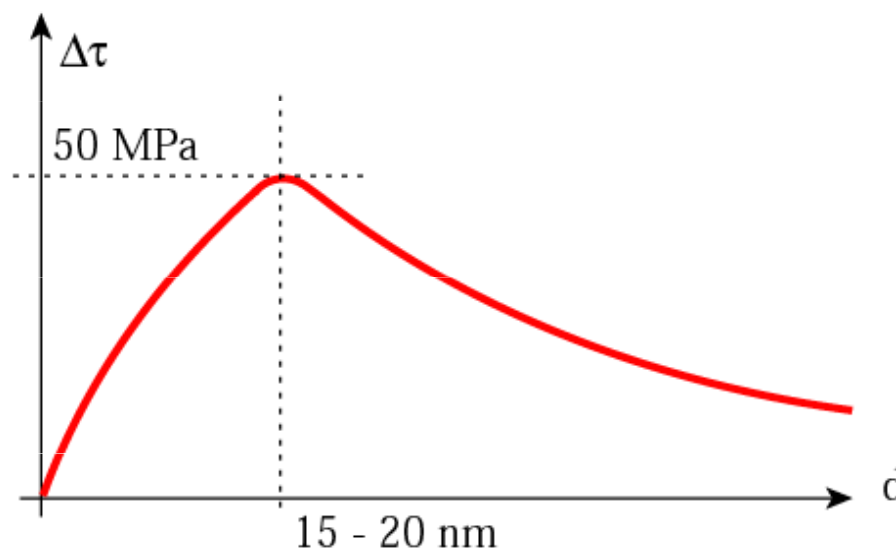


Ex.:  $\text{Ni}_3\text{Al}$

superslitina

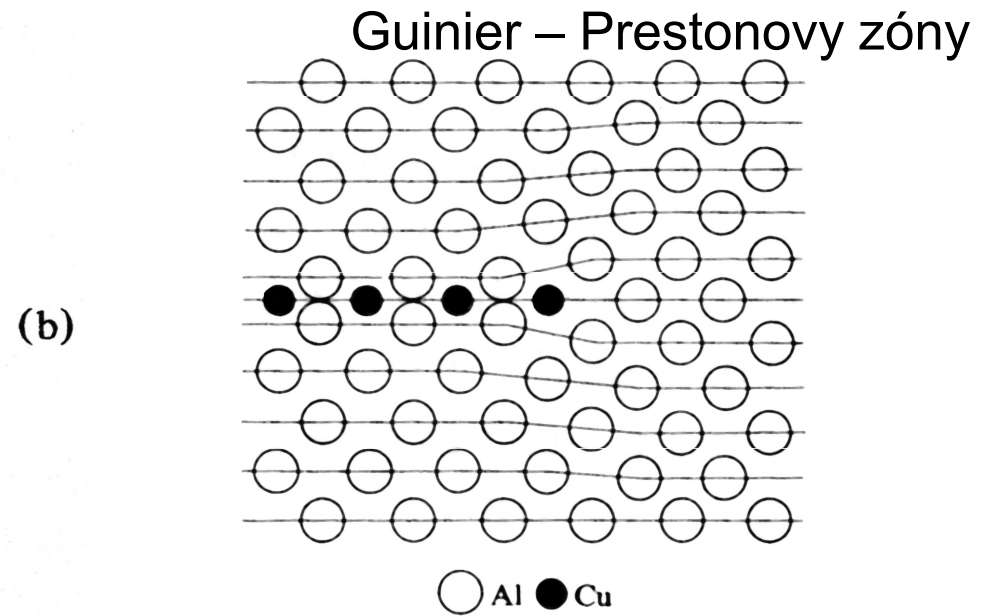
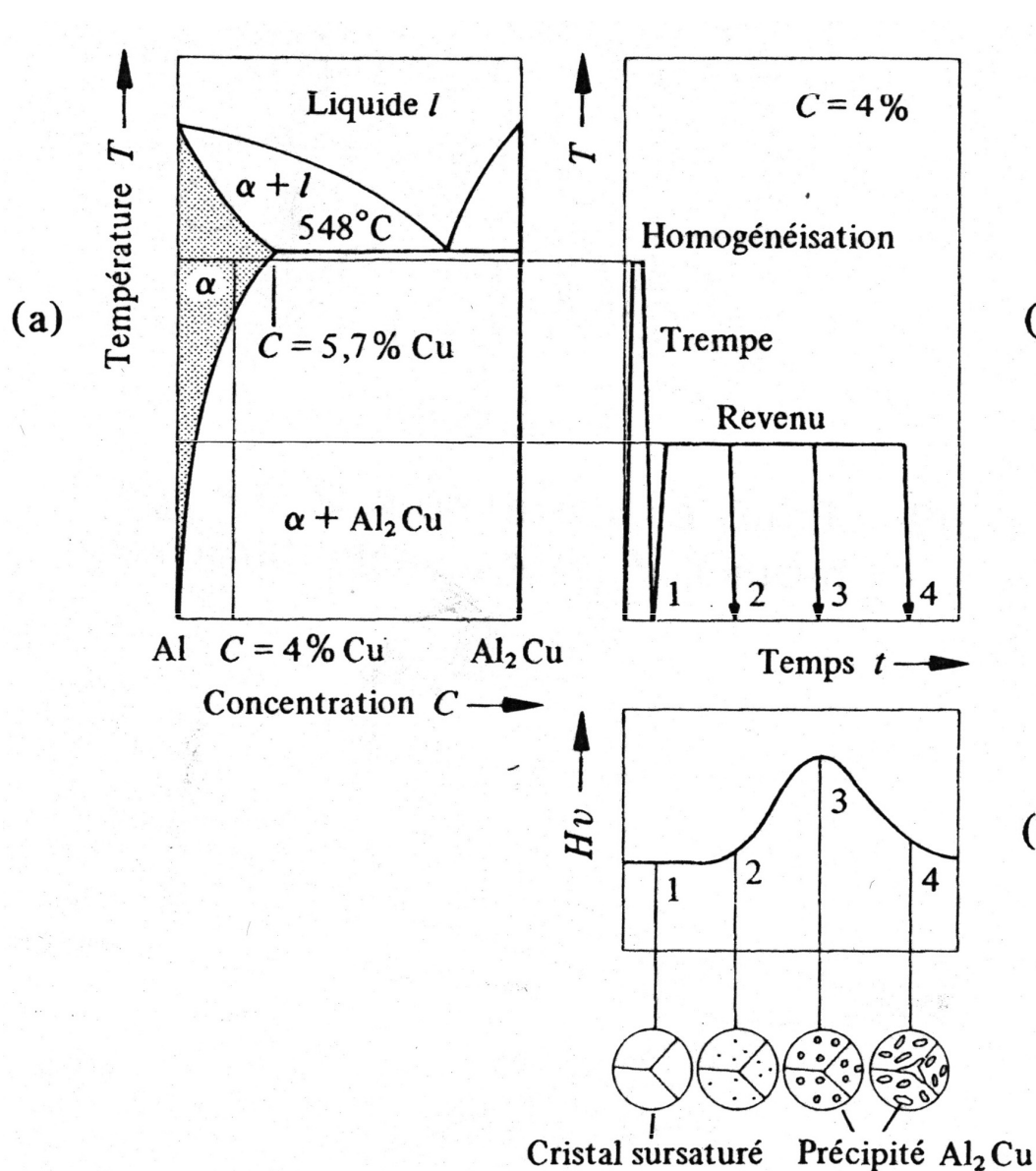


koherentní precipitáty  
uspořádané fáze (60-70%)  
v matici tuhého roztoku





# Al – 4%Cu



- (c)
- precipitační zpevnění
  - nejvyšší pevnost: obtékání a přesekávání precipitátů stejně náročné
  - difúze = stárnutí i za RT
  - ohřev – ztráta pevnosti
  - problém - koroze

# 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  $\tau_c$  (monokrystal), lze vypočítat  $\sigma_0$  (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)

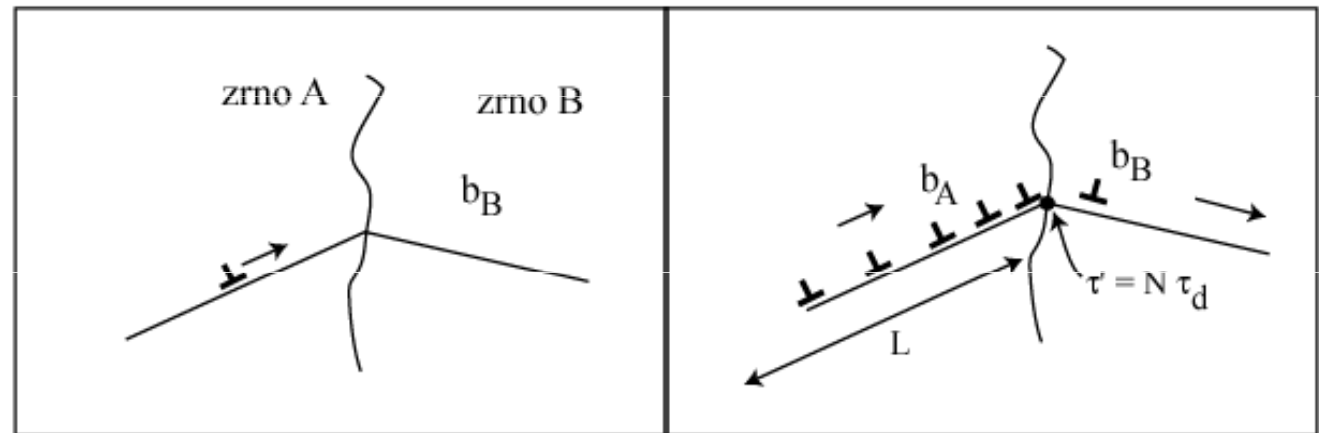
M = 3.06 (Taylor, 5 ss v každém zrně)

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

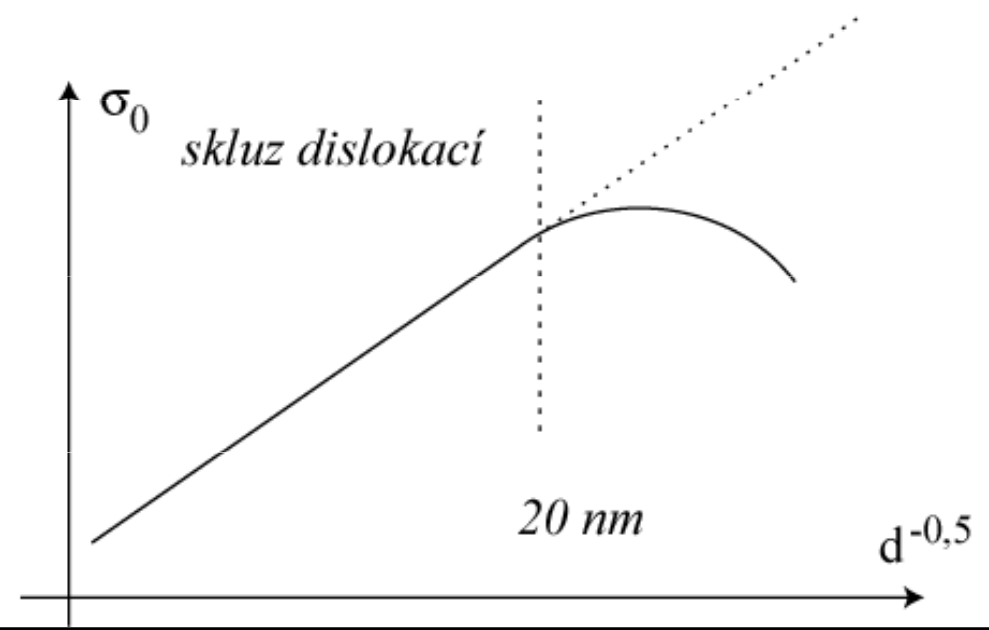
# POLYKRYSTAL - HALL & PETCH

- Hall & Petch :

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



Nanokrystalické materiály :  $\sigma_0$  gigantické?



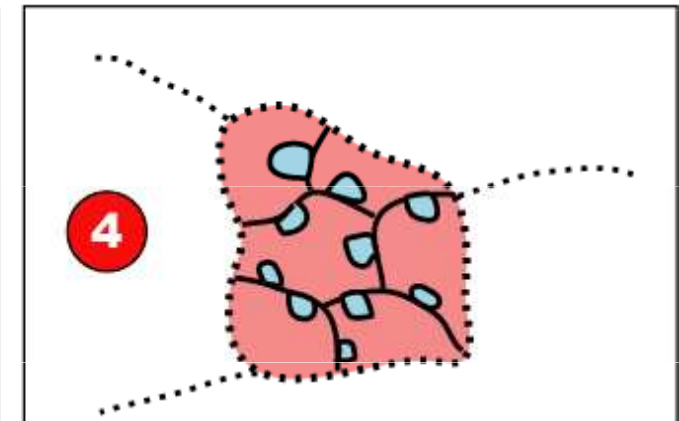
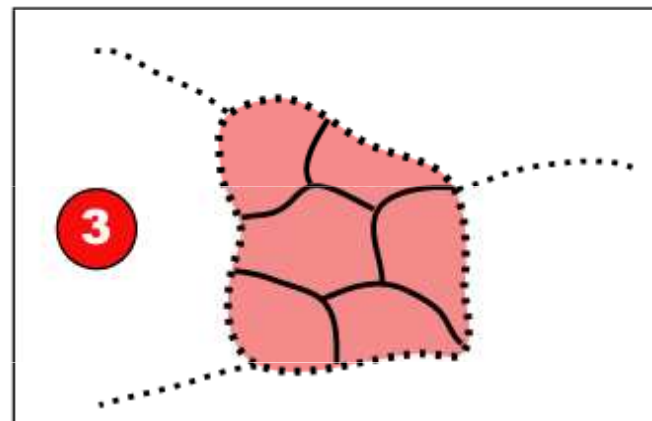
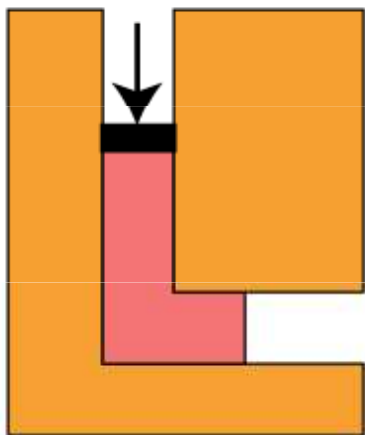
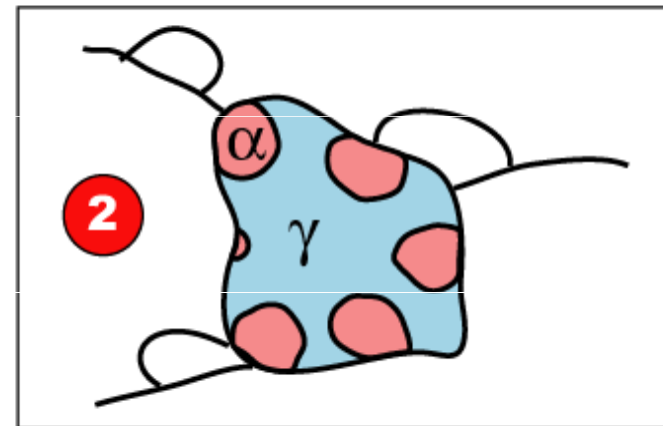
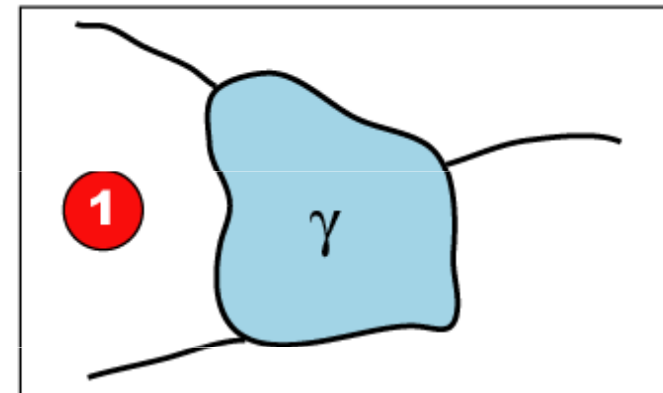
# ŘÍZENÍ VELIKOSTI ZRNA

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

Allotropická transformace => možnost zjemnění zrna

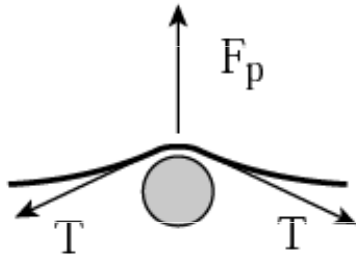
Další možnosti ovlivnění velikosti zrna termomechanickými procesy

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



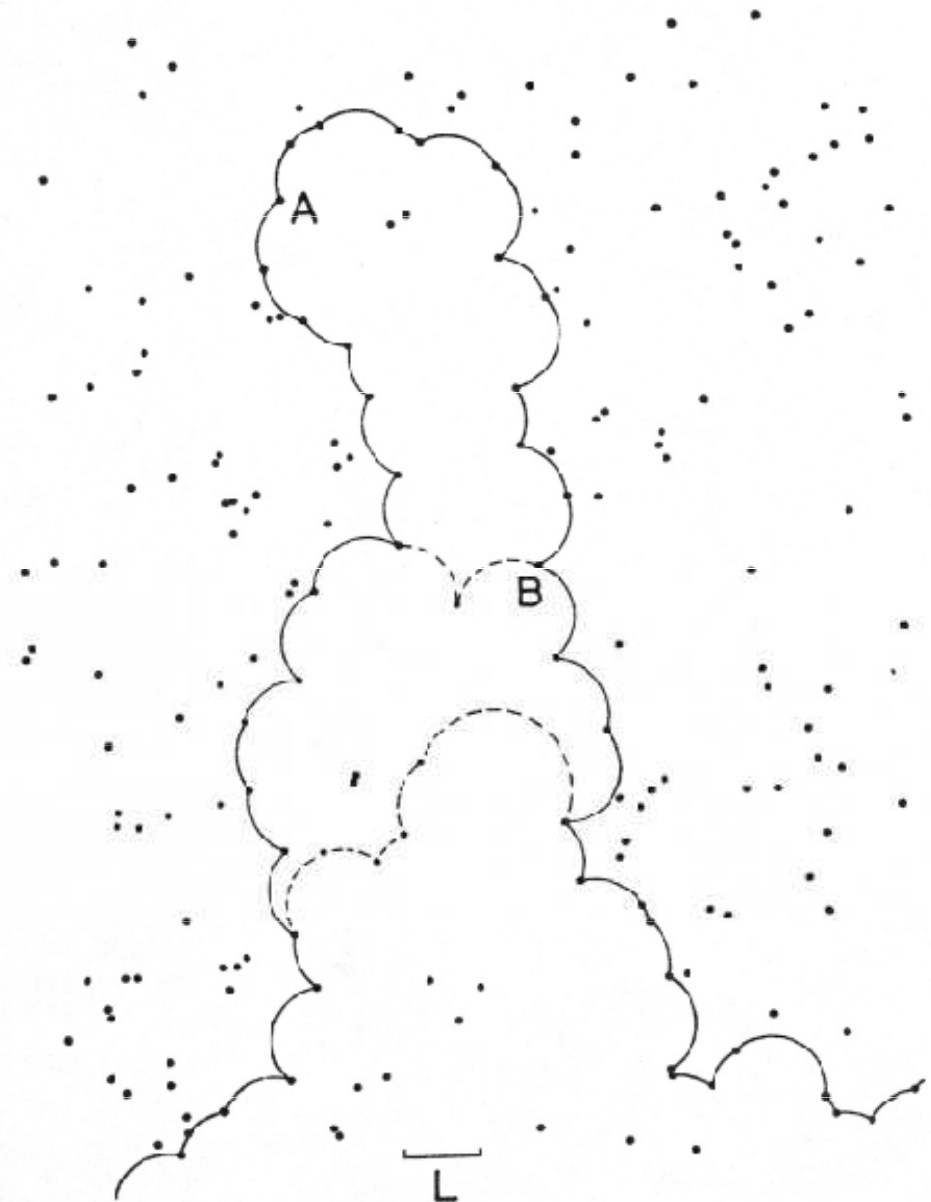
# POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ, FOREMAN & MAKIN: JAKÉ JE $\tau_c$ PŘI VÝSKYTU VÍCE TYPŮ PŘEKÁŽEK ?

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  $180^\circ$  kolem osy  $\eta$ , 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

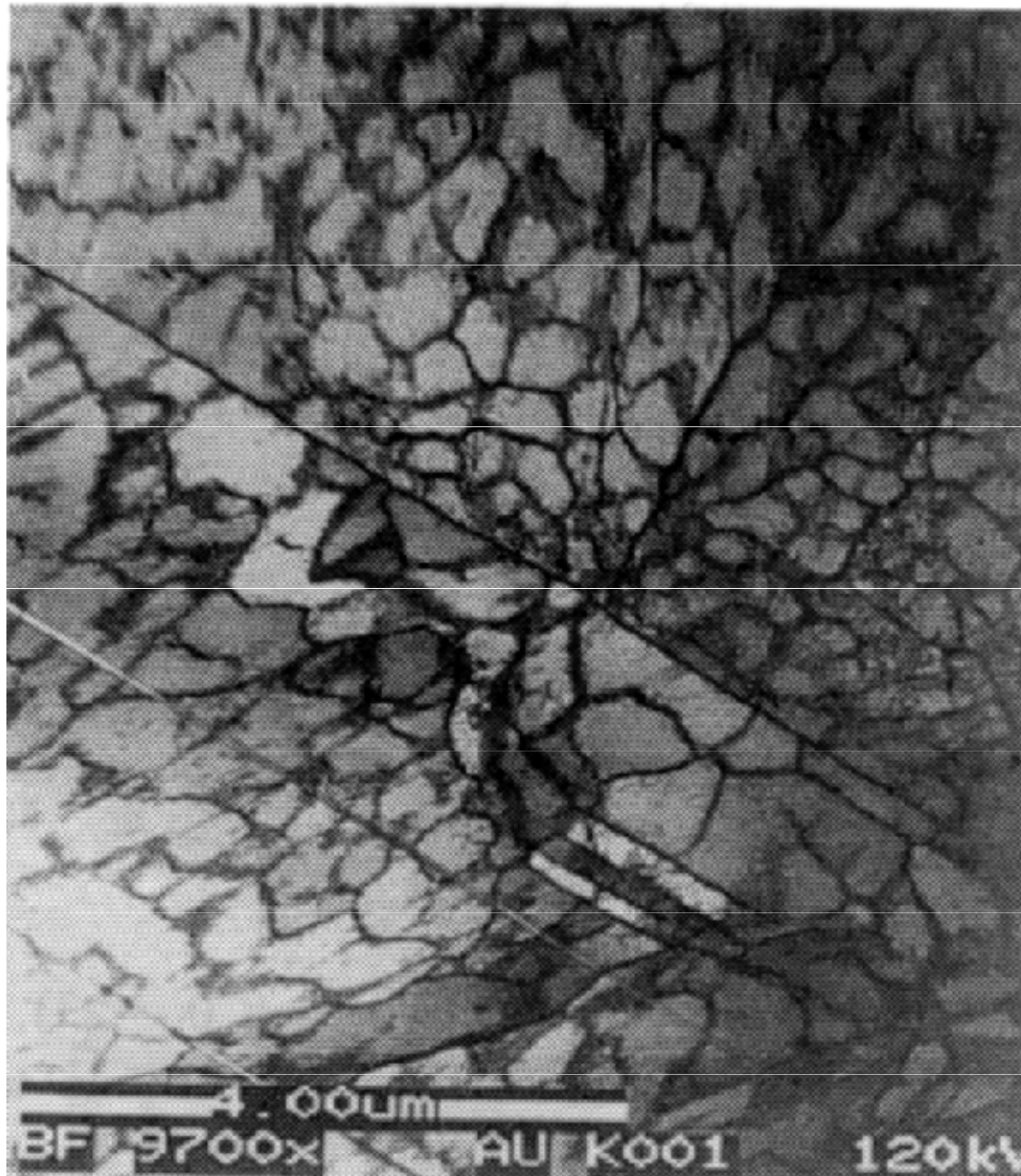
Vznikají během tuhnutí nebo rekrystalizace, různá tloušťka, typicky 10 - 100  $\mu\text{m}$ .

## Dvojčata deformační

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



# DEFORMAČNÍ DVOJČATA



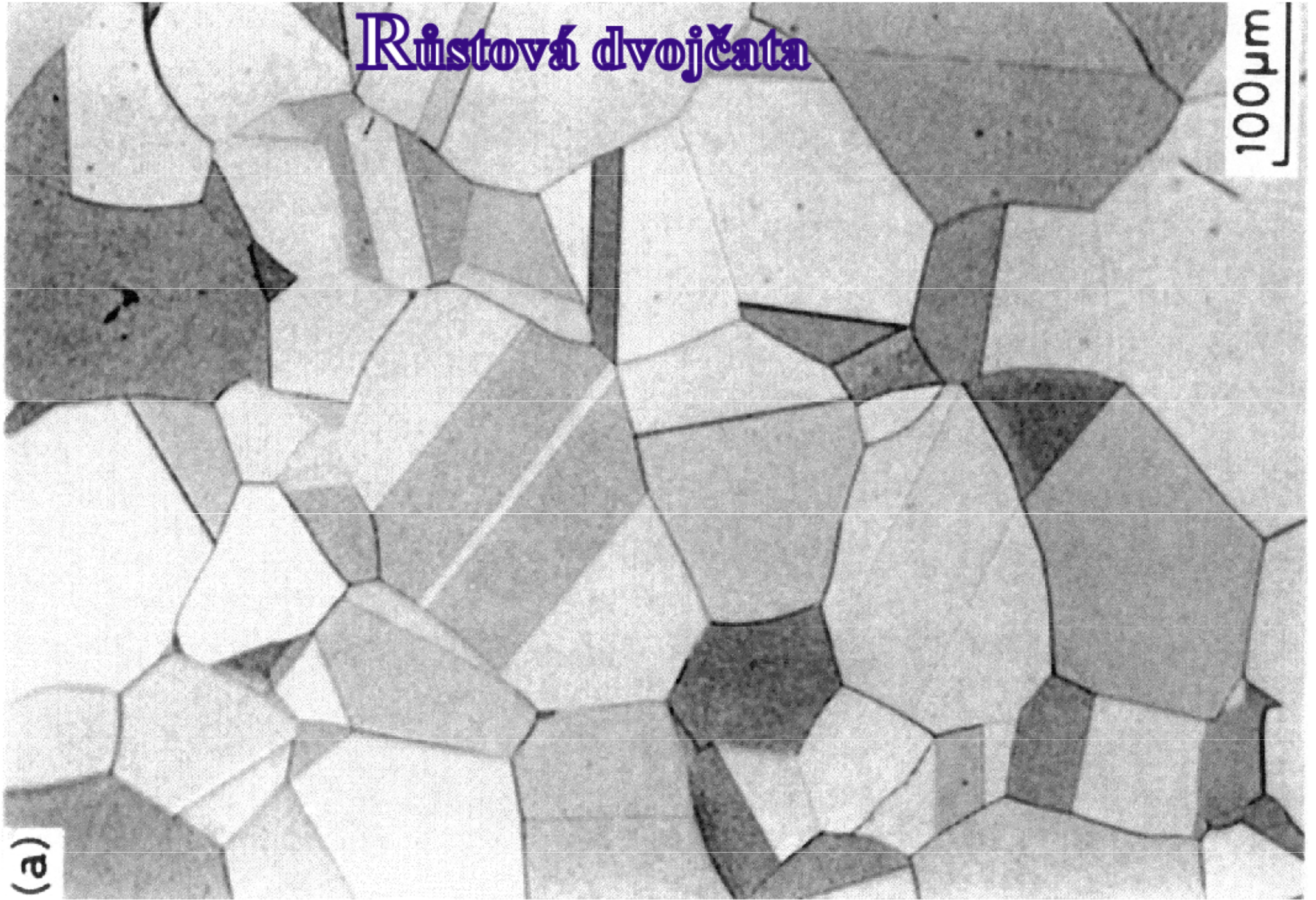
Austenitická ocel po únavě.



# Růstová dvojčata

100  $\mu\text{m}$

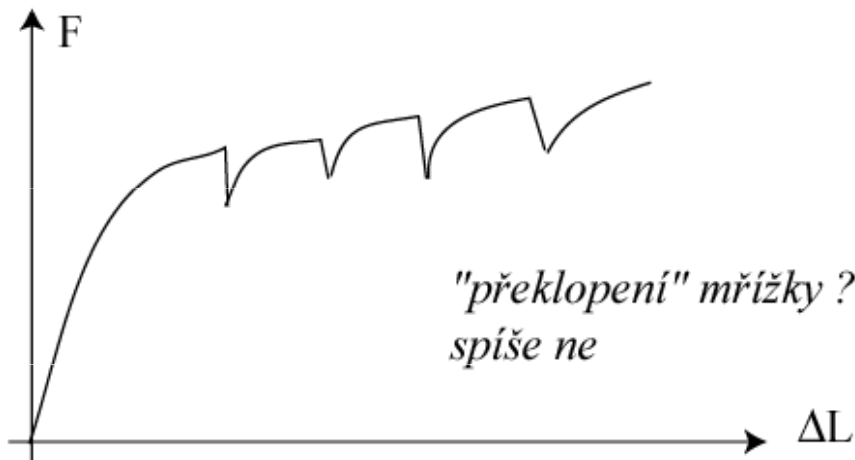
(a)



# DEFORMAČNÍ DVOJČATĚNÍ

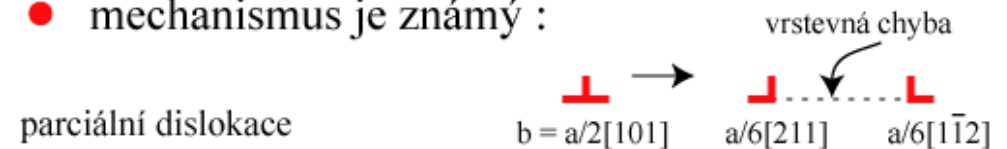
## 1. Dvojčatění "rychlé" nebo "katastrofické"

- 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

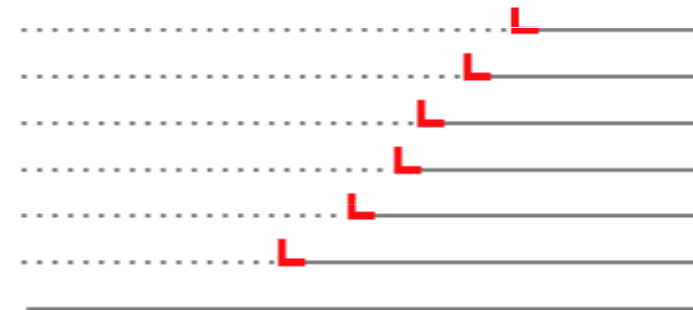


## 2. Dvojčatění "pomalé"

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

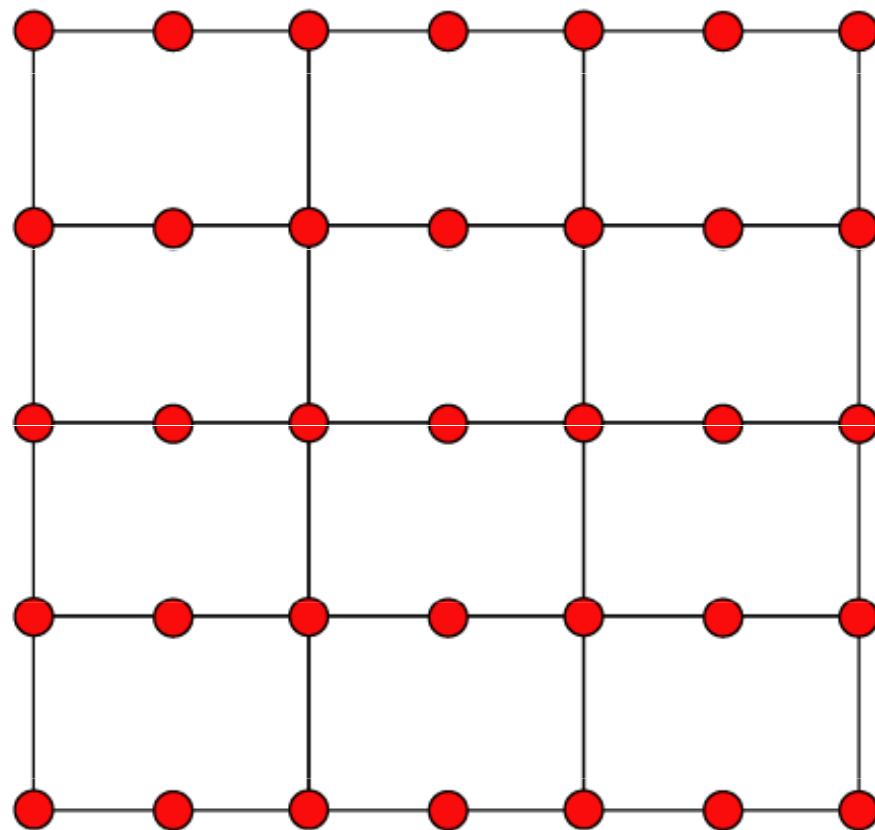
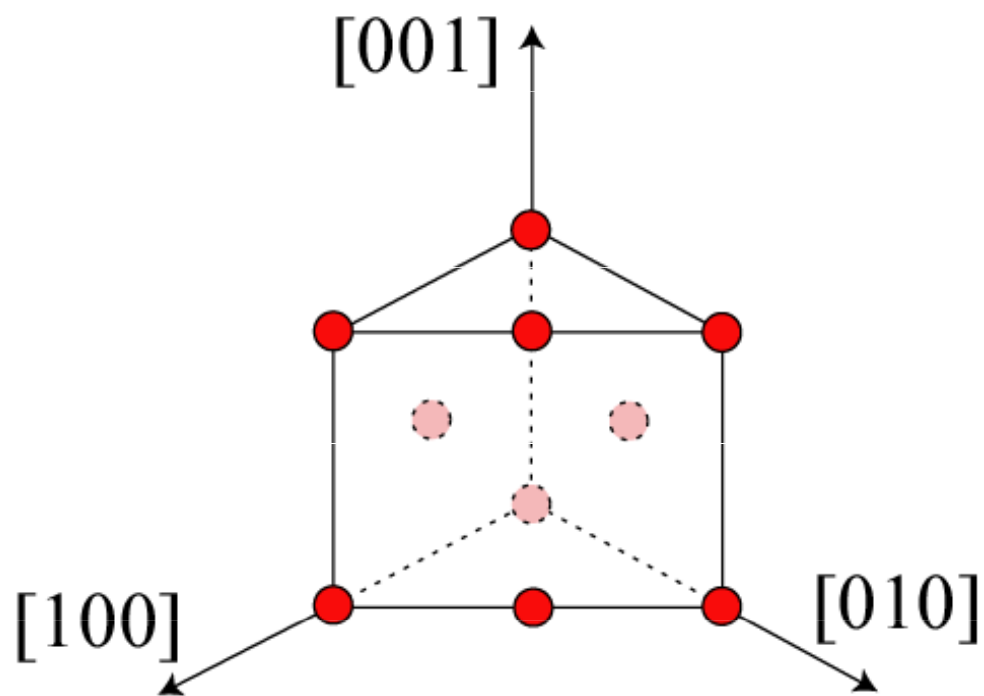


TEM



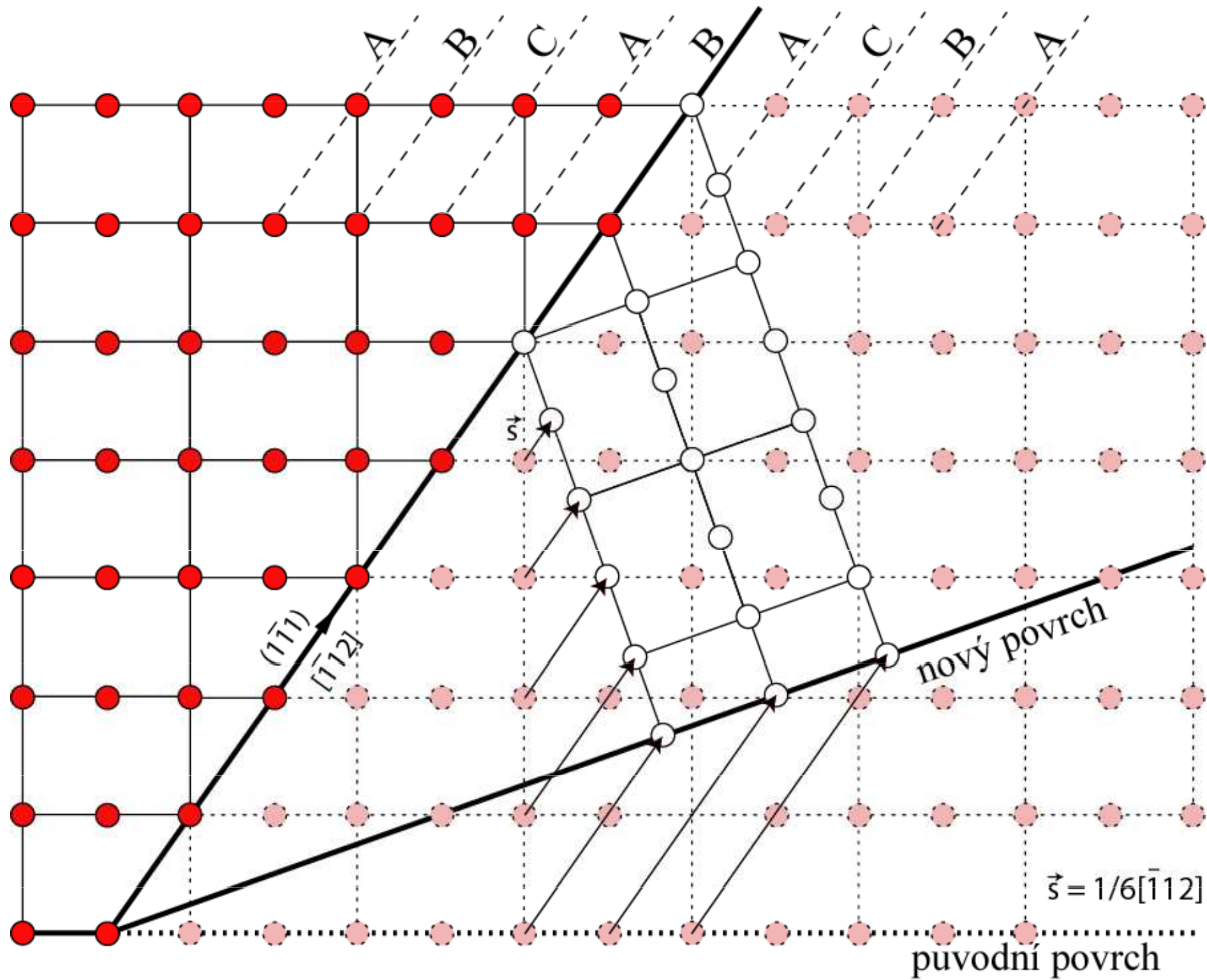
- tahová křivka je hladká
- energeticky nenáročný mechanismus

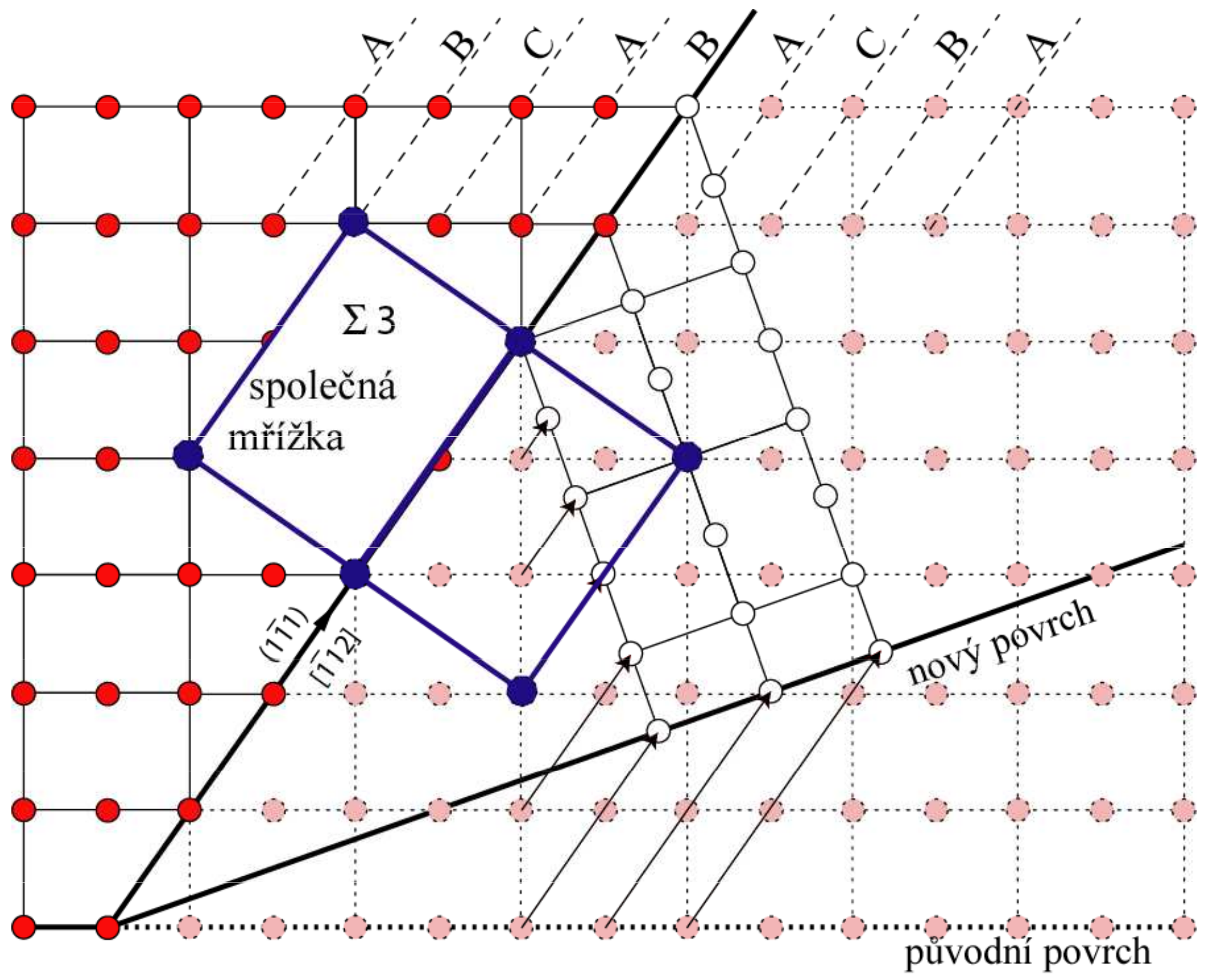
# DVOJČATĚNÍ - fcc



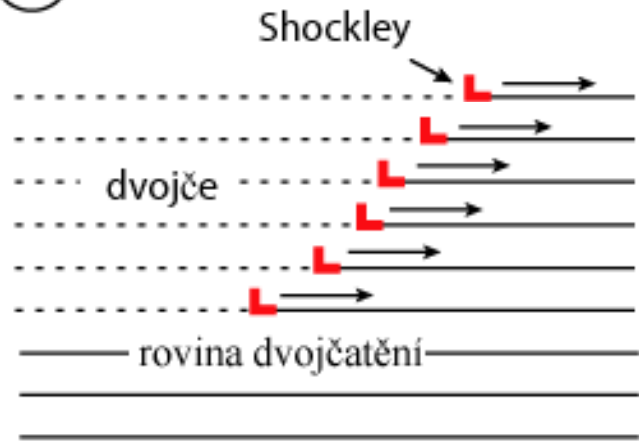
rovina (110)



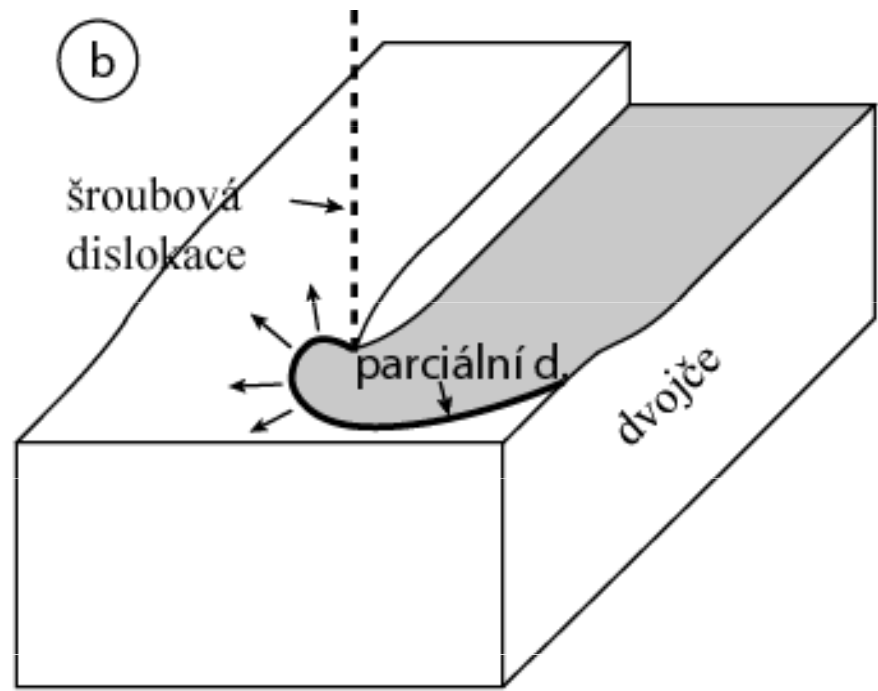




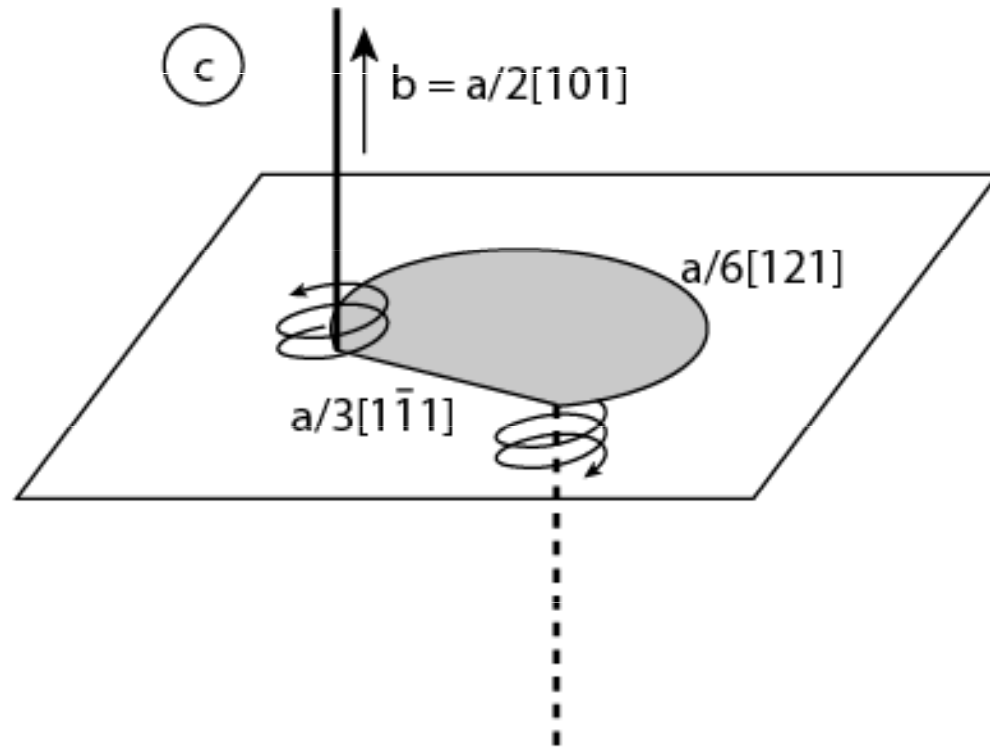
(a)



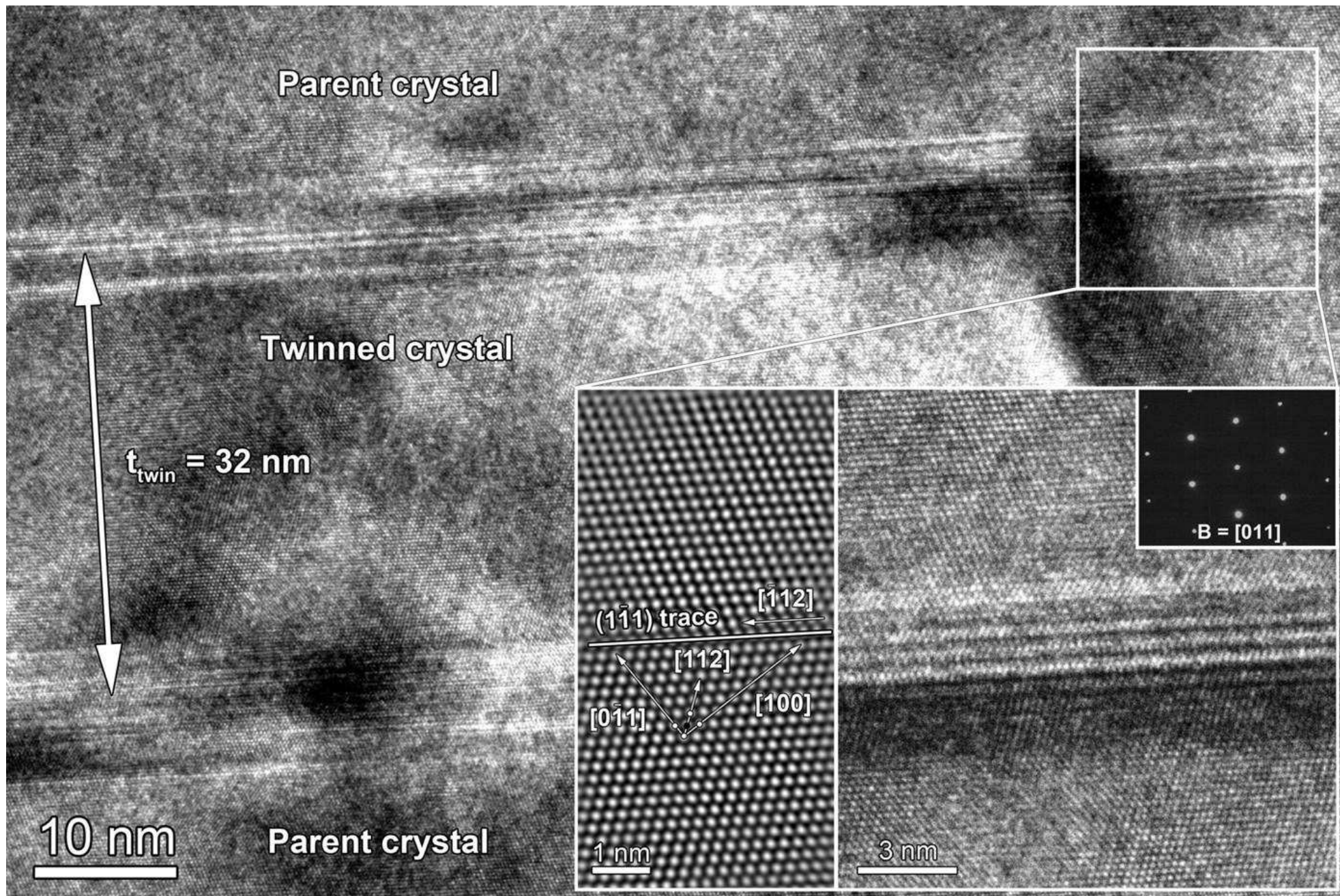
(b)



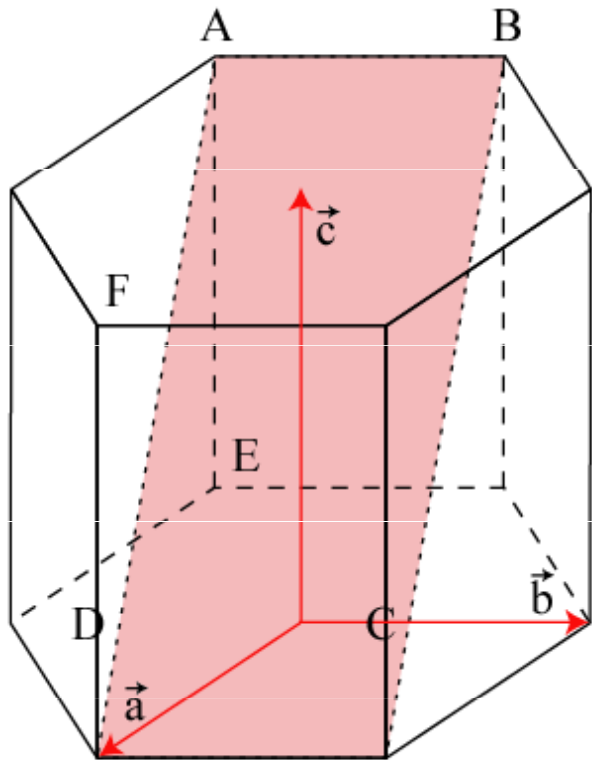
(c)





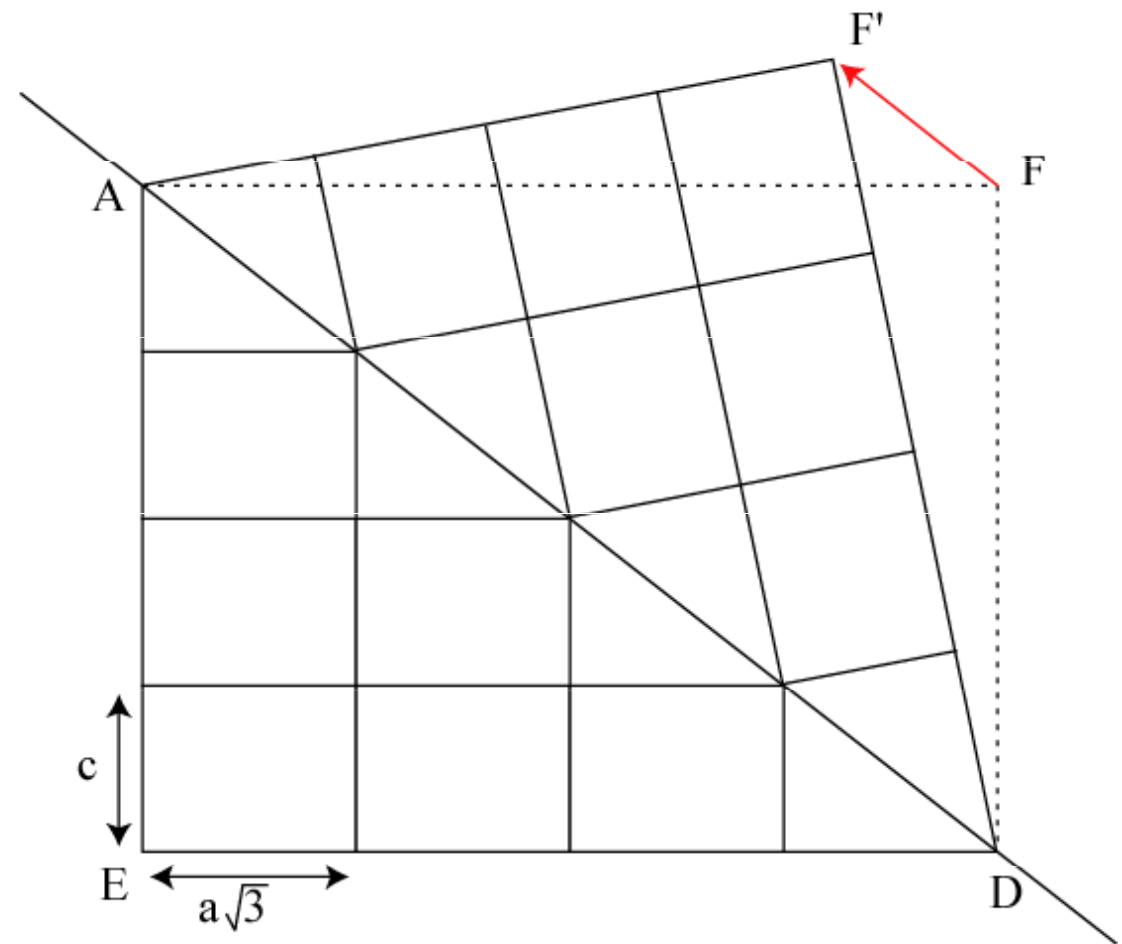


# DVOJČATĚNÍ - hc



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

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



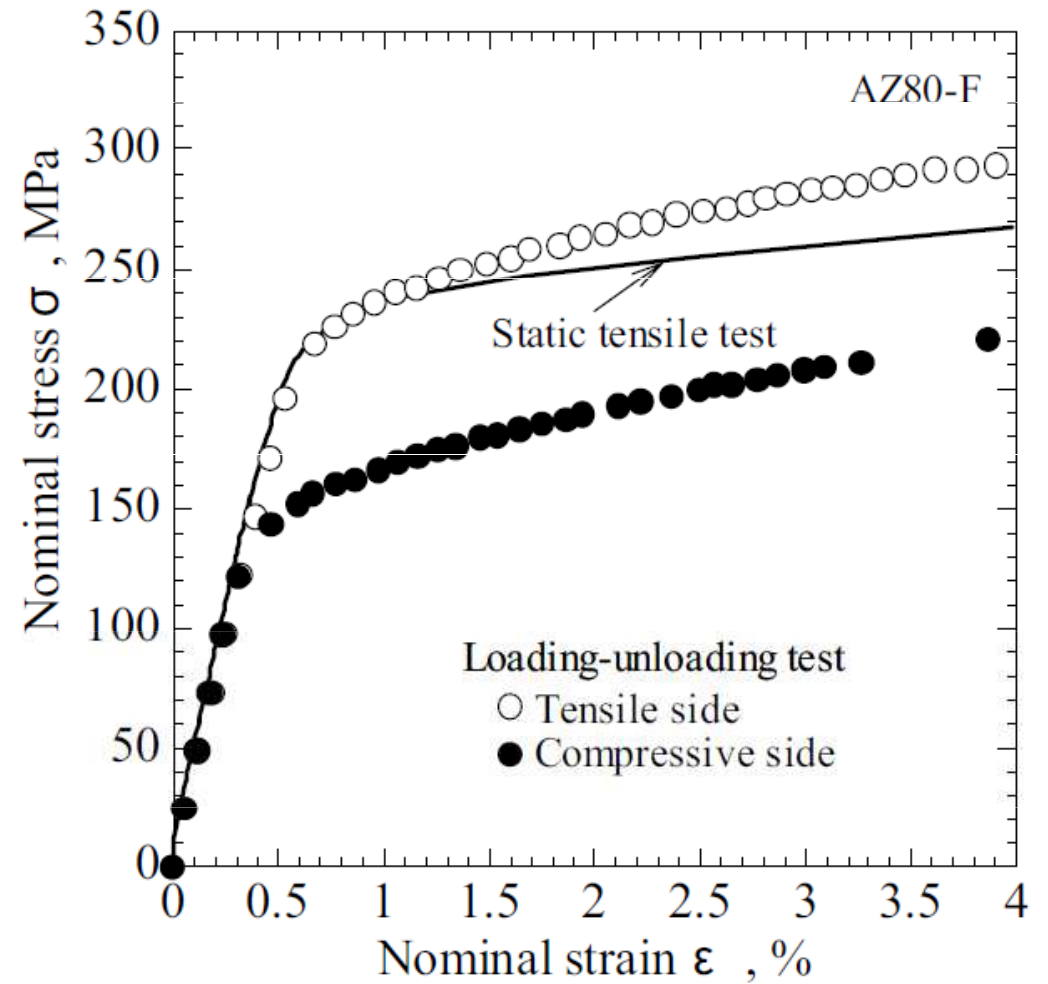
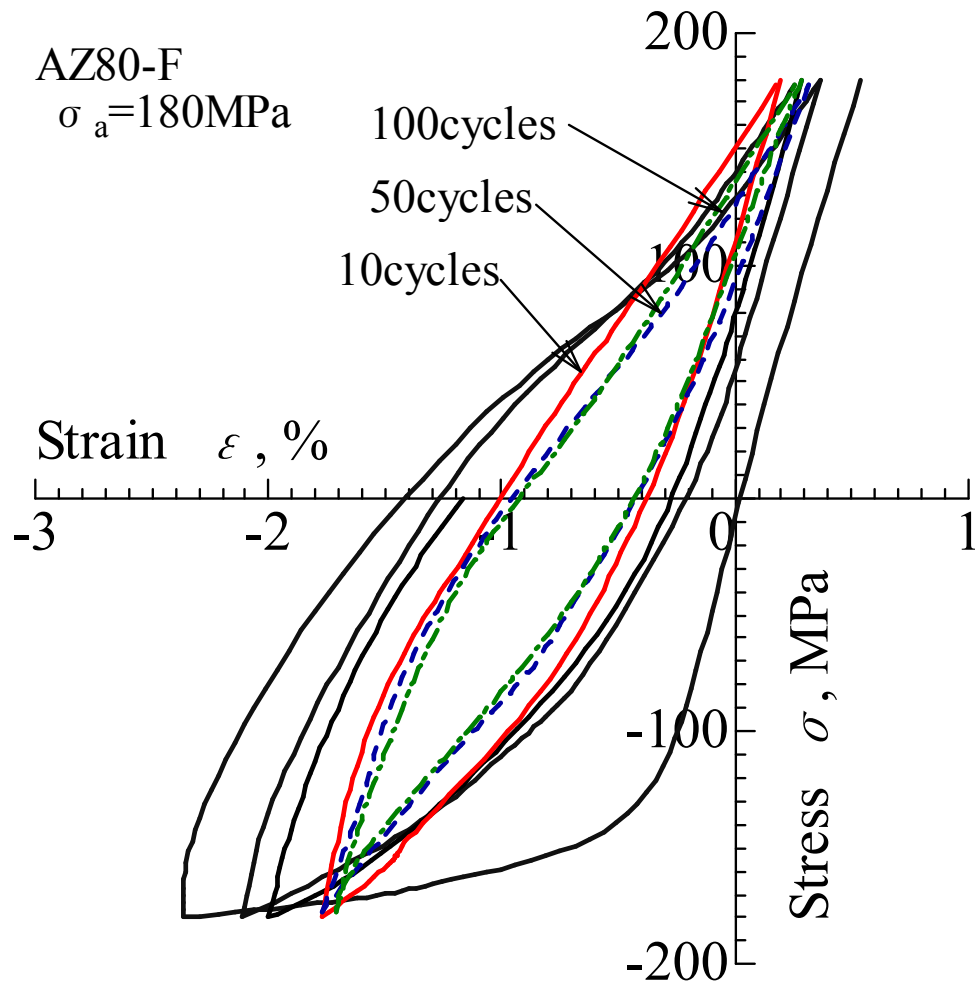
$c/a < 1,732 \dots$  dvojčatění v tahu

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



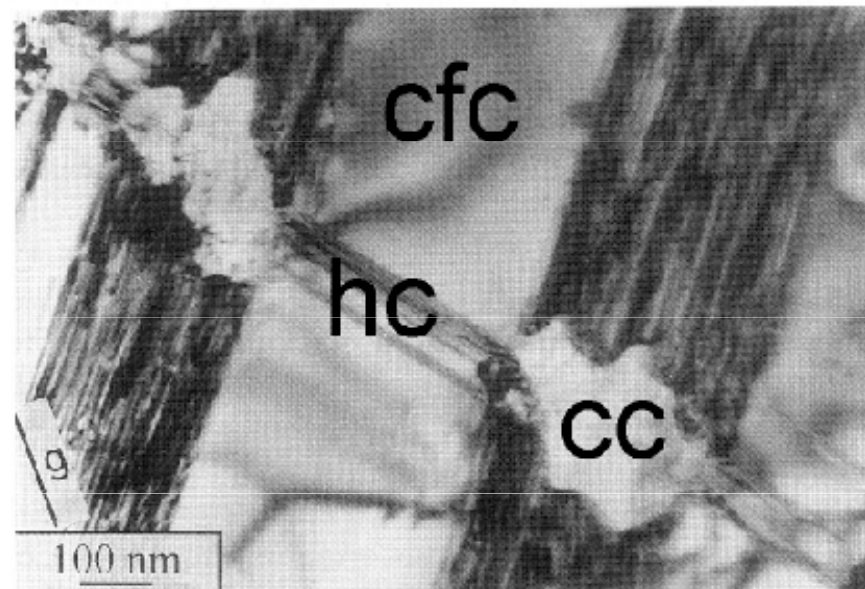
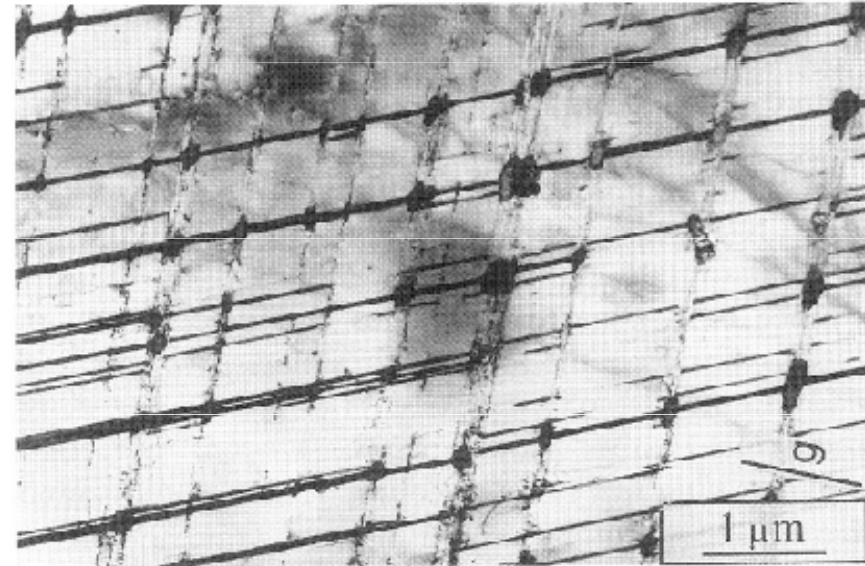
# Hcp kovy – asymetrie tah/tlak u texturovaných materiálů

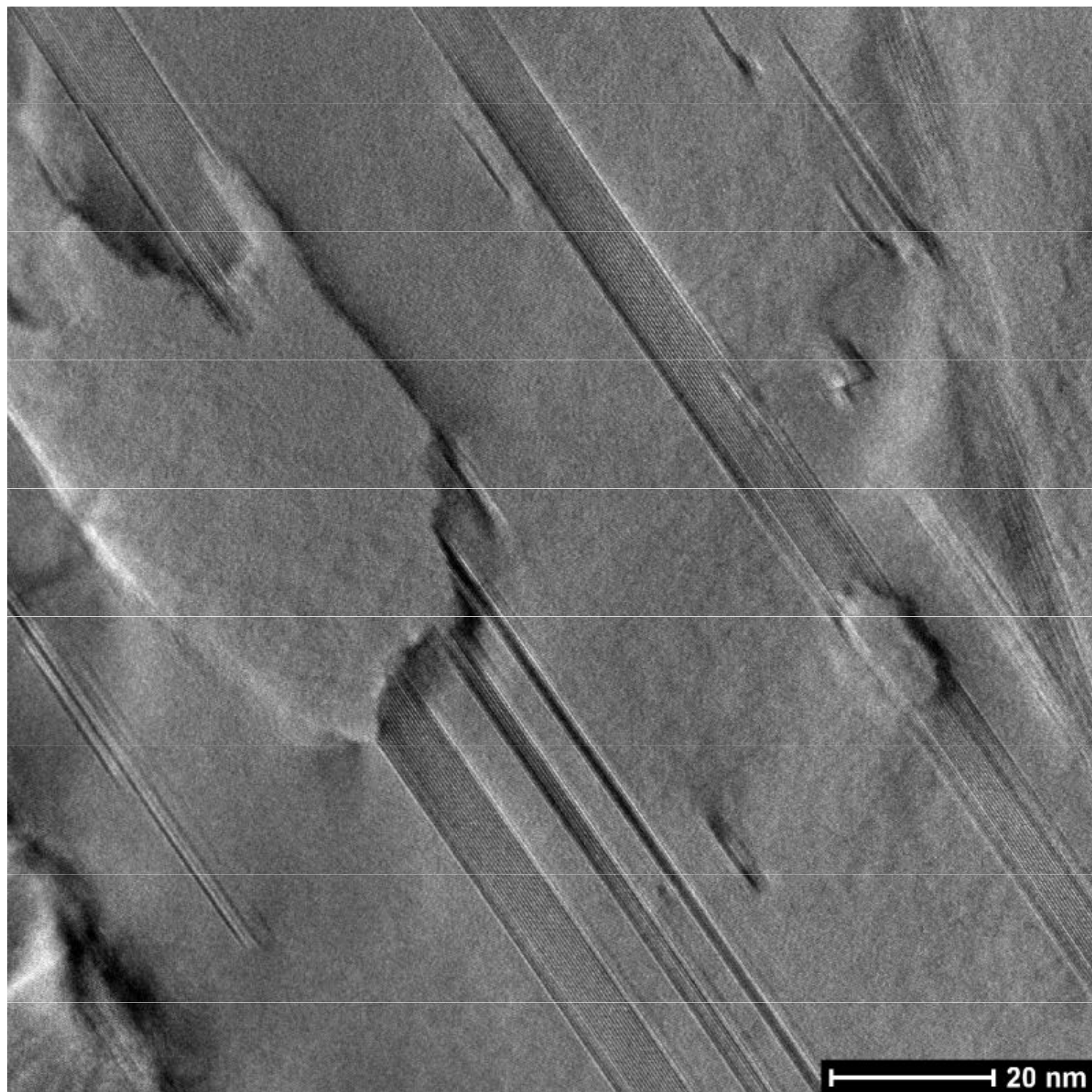
Mg slitina AZ 80 extrudovaná



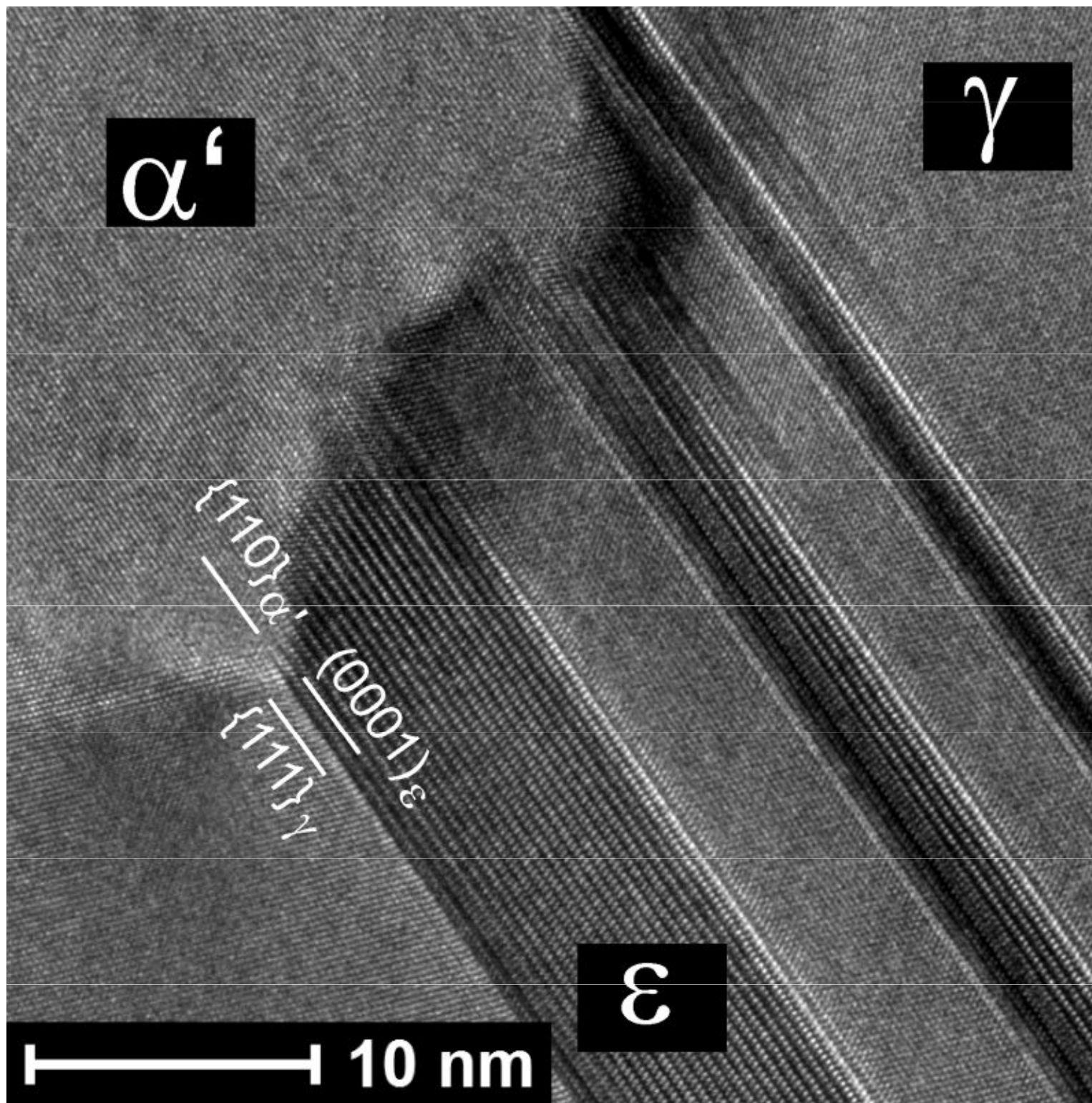
# DEFORMACE KVŮLI FÁZOVÉ TRANSFORMACI

Austenitická ocel po únavě  
v kapalném dusíku:  
transformace fcc → hcp → cc









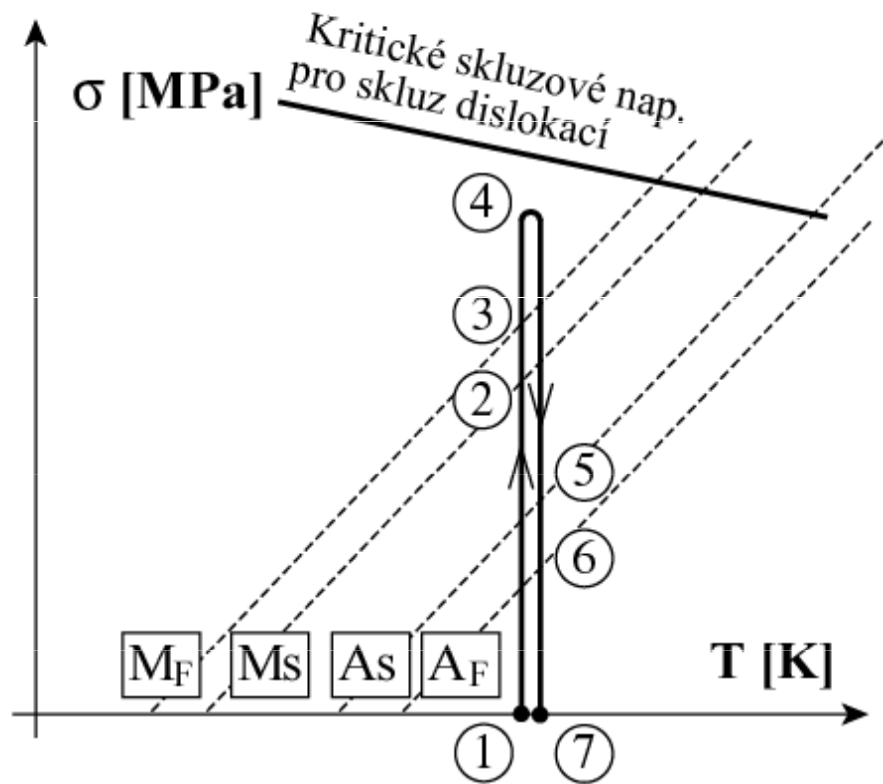
MEMORANDUM

MEMORANDUM  
FOR THE RECORD

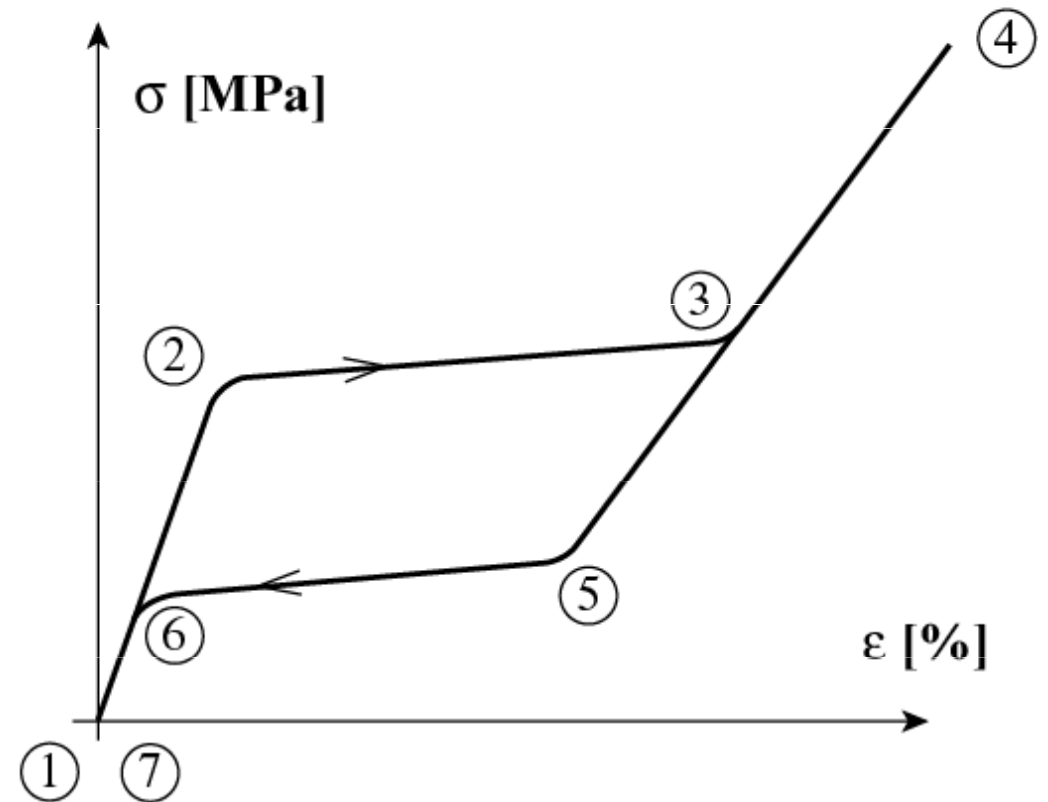
# SLITINY S TVAROVOU PAMĚTÍ (SHAPE MEMORY ALLOYS)

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

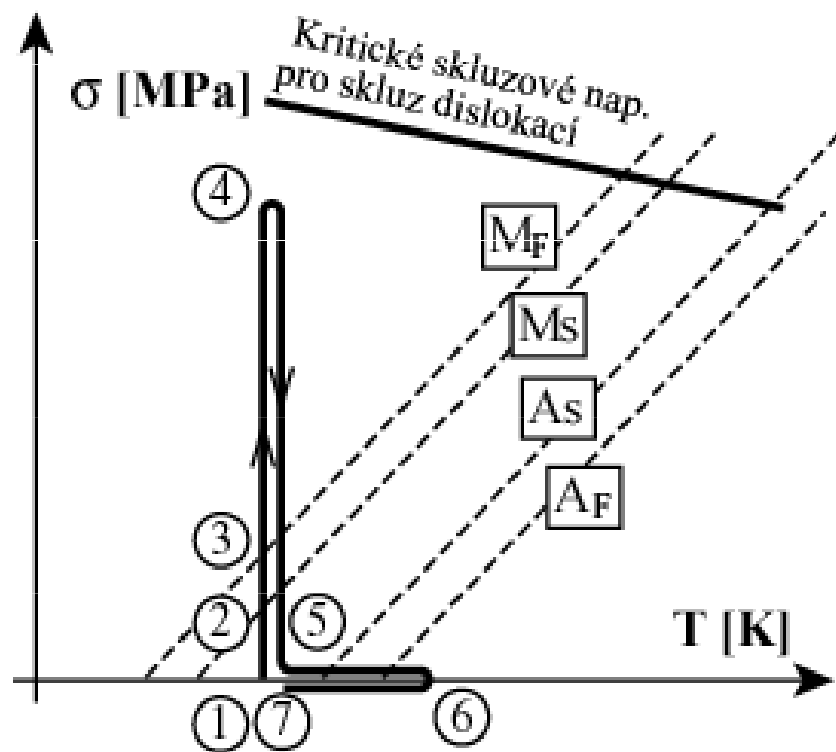
## a) Pseudoelasticita



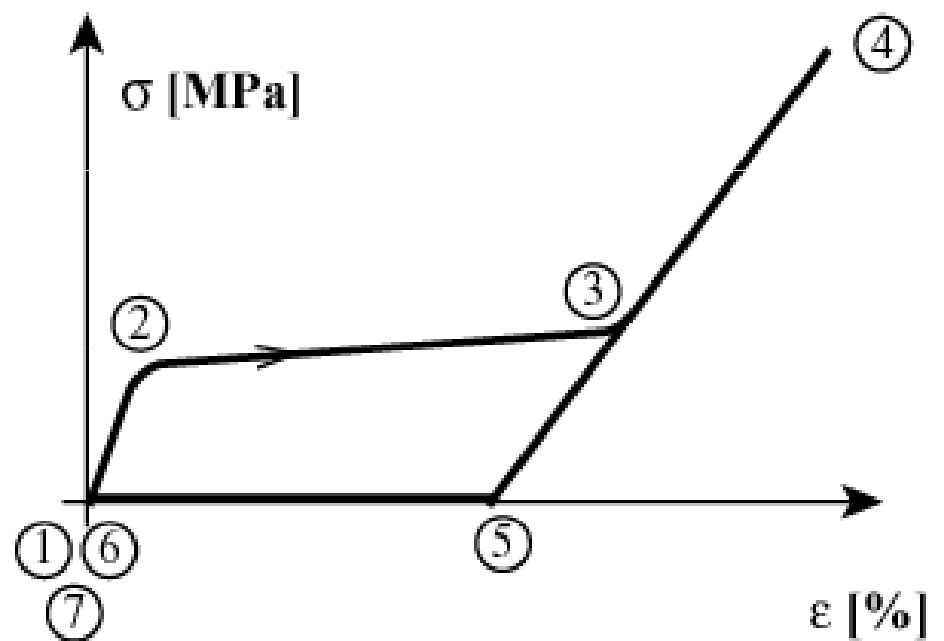
## b)

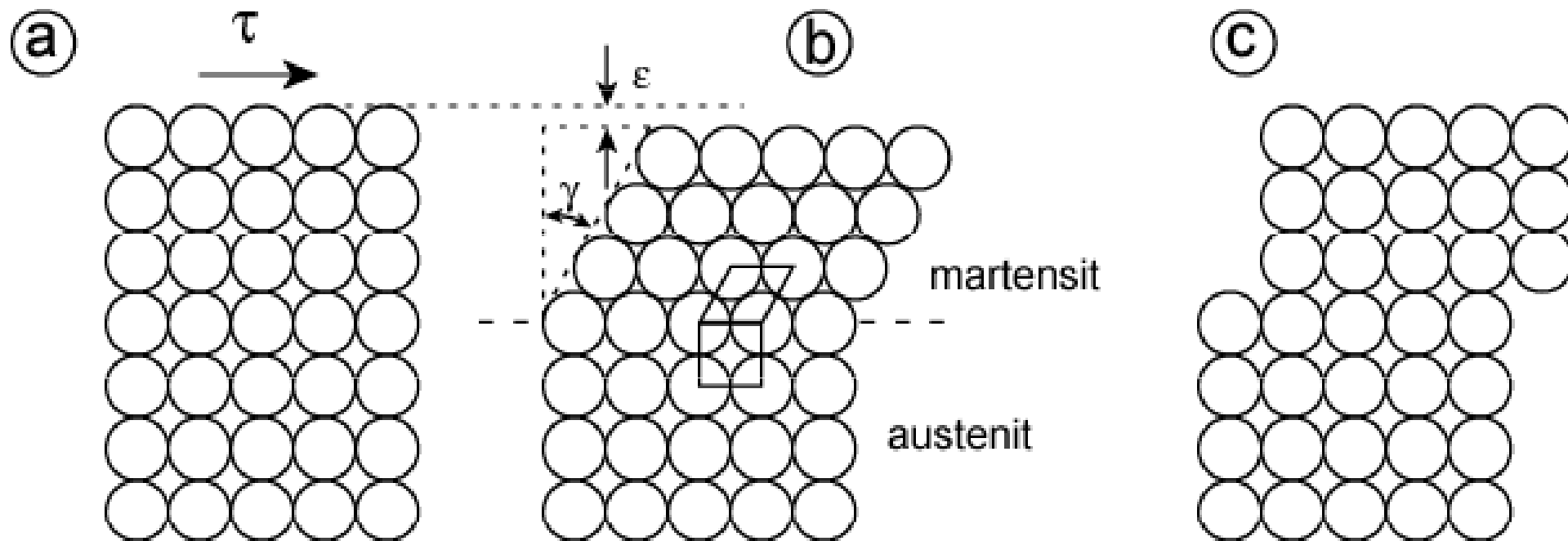


**a** Paměťový efekt jednoduchý



**b**





transformace fází  
podobná dvojčatění

dislokační skluz



# MODELOVÁNÍ MECHANICKÝCH VLASTNOSTÍ

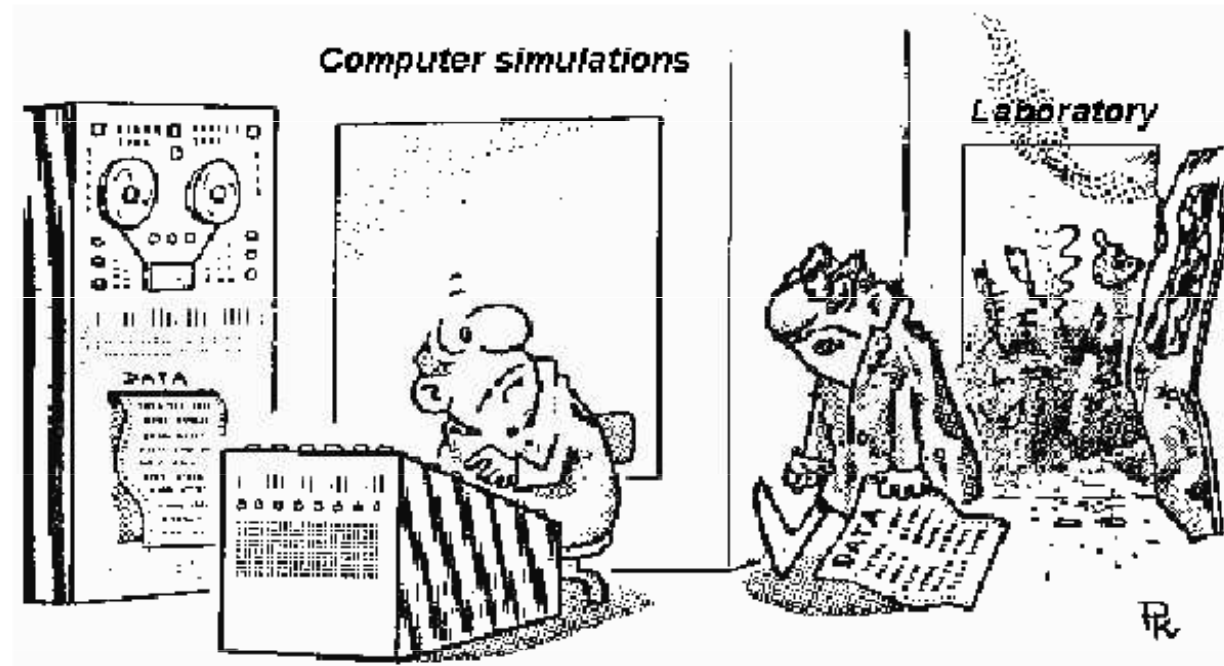
Sen ...

chemické složení,  
tepelně-mechanické zpracování

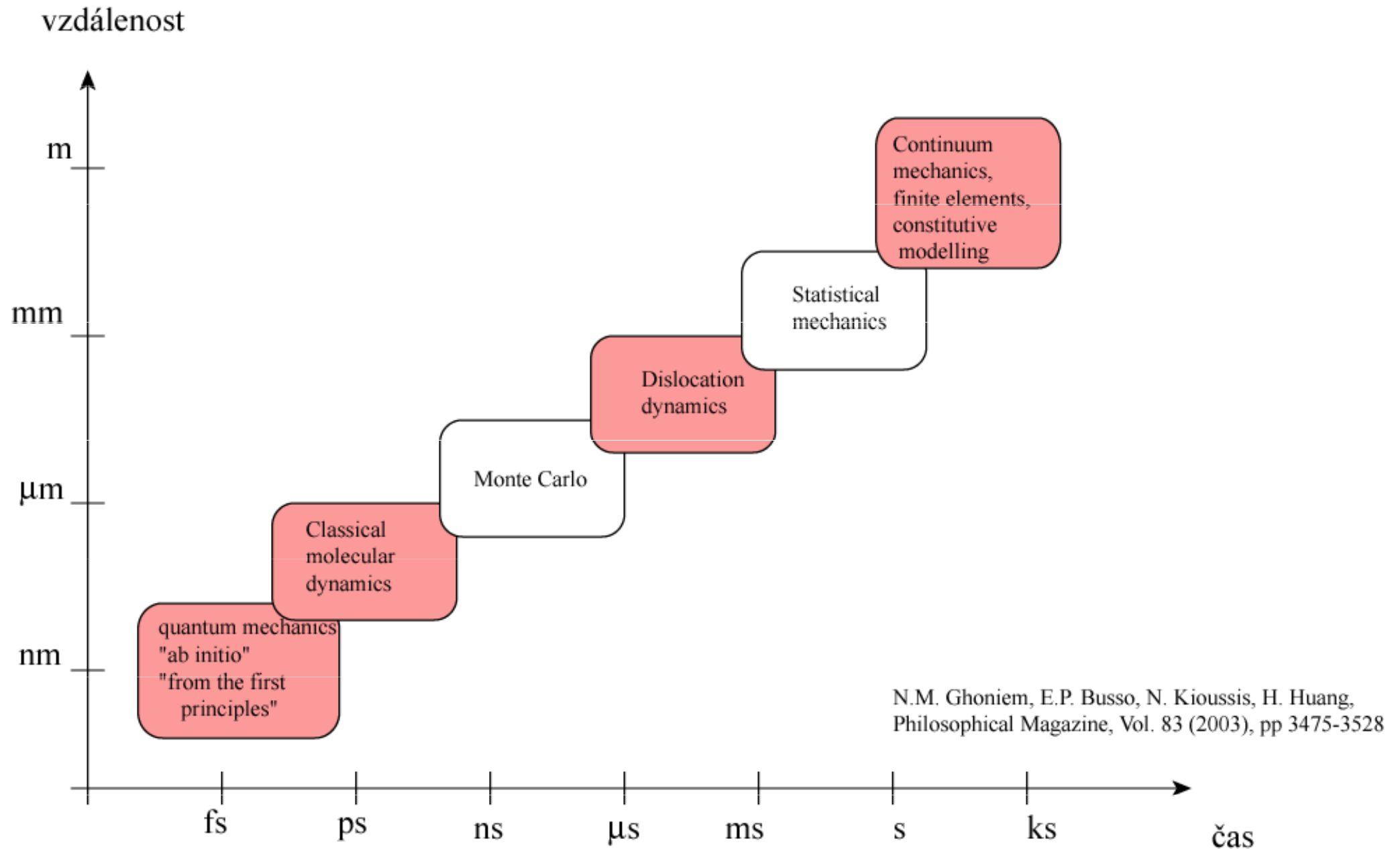


mechanické vlastnosti

... 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

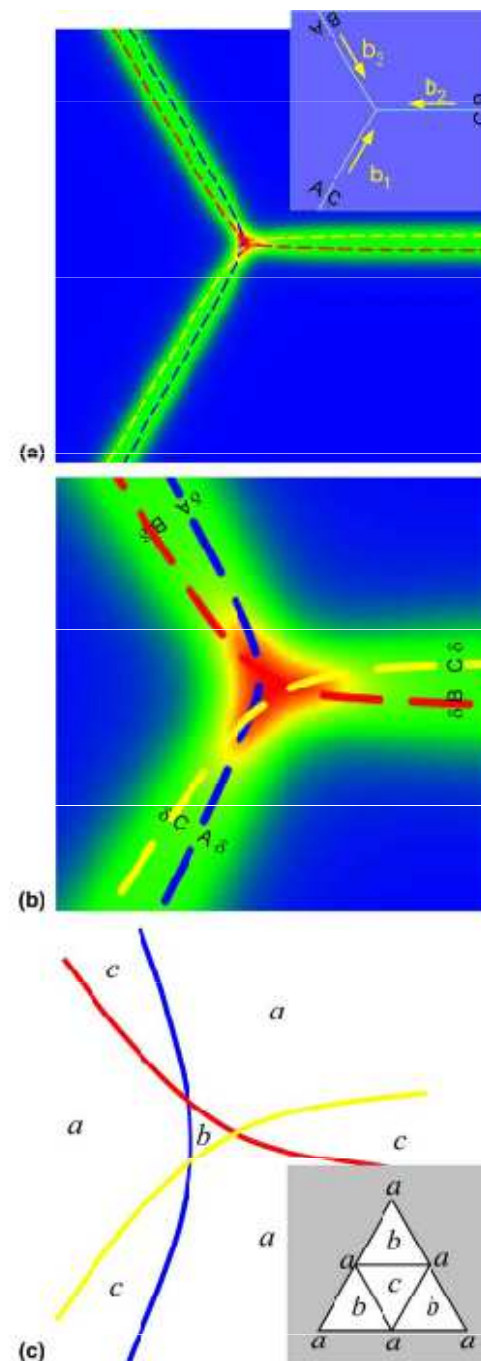
$\tau_c$  Fe: 7.8 GPa

**Omezení:** počet atomů  $\sim 100$

dynamické problémy v řádu ps

vypočtená mřížka někdy nesouhlasí s pozorováním

led neplave na vodě



# MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKA

výpočty založené na Newtonovské mechanice

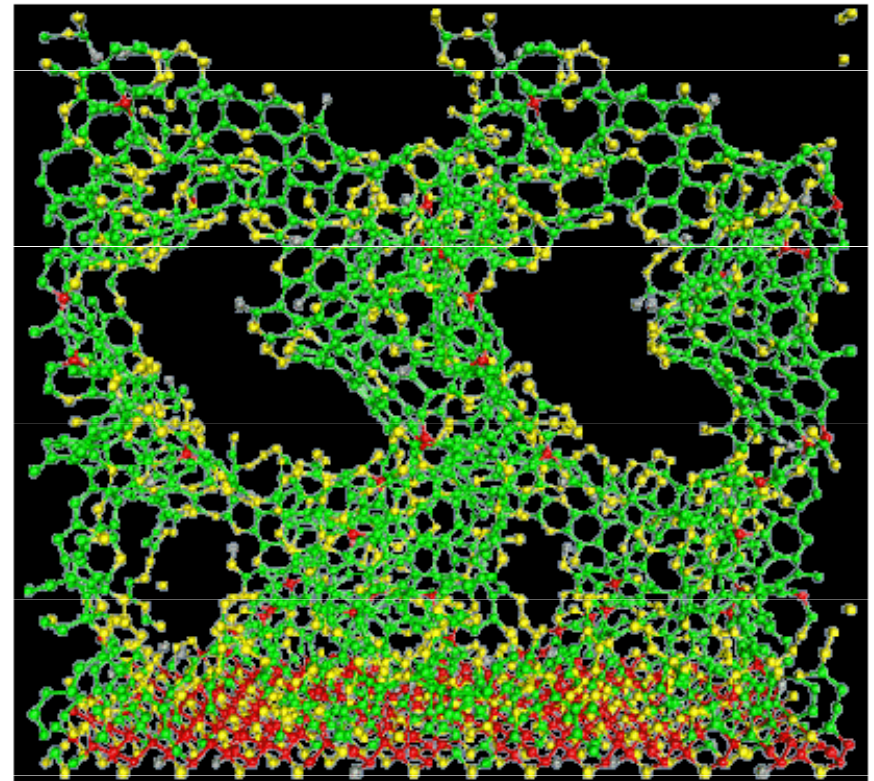
- počítají se síly mezi atomy/molekulami
- je nutno zvolit meziatomový potenciál (získán z ab initio → multiscale modelling)
- síla působící na atom =  $-\text{grad}(U)$  : klasická mechanika

## 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



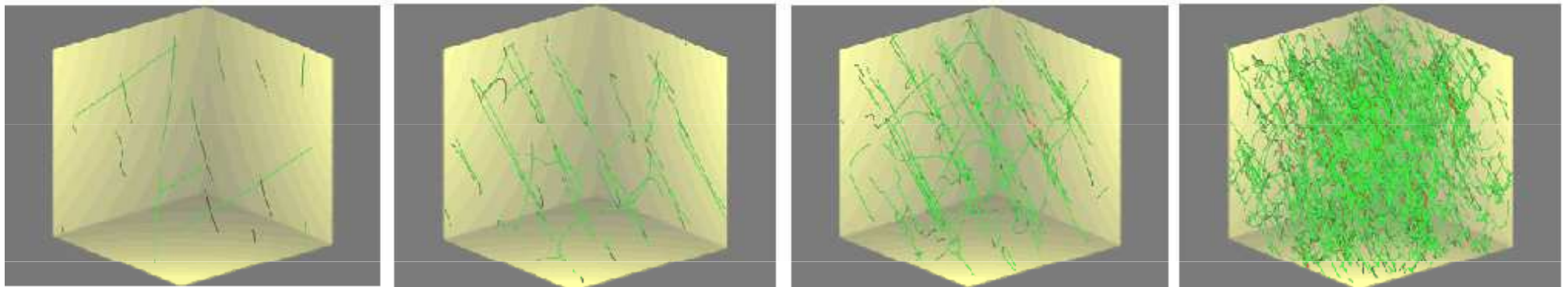
# DISLOKAČNÍ DYNAMIKA

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://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:

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

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:  $v_0$ ,  $m$ ,  $\Delta G$ ,  $\alpha$ ,  $K_{\text{multi}}$ ,  $K_{\text{dip}}$ ,  $K_{\text{an}}$

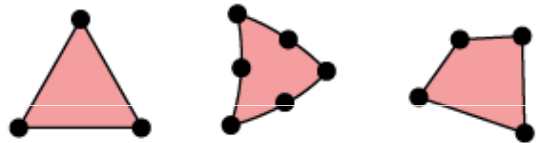


# KONEČNÉ PRVKY výpočet $\bar{\sigma}$ , $\bar{\varepsilon}$ a $\bar{u}$

## 1 DISKRÉTNÍ geometrický model objektu.

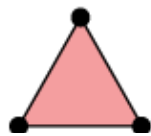
Objekt je sestaven z konečných útvarů (= prvků) v 1D, 2D, 3D.

Ex. 2D :



Výběr prvků:

počet uzlů = počet neznámých

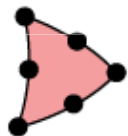


**lineární reprezentace**

$\bar{u}$  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**

Systém rovnic

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

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

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

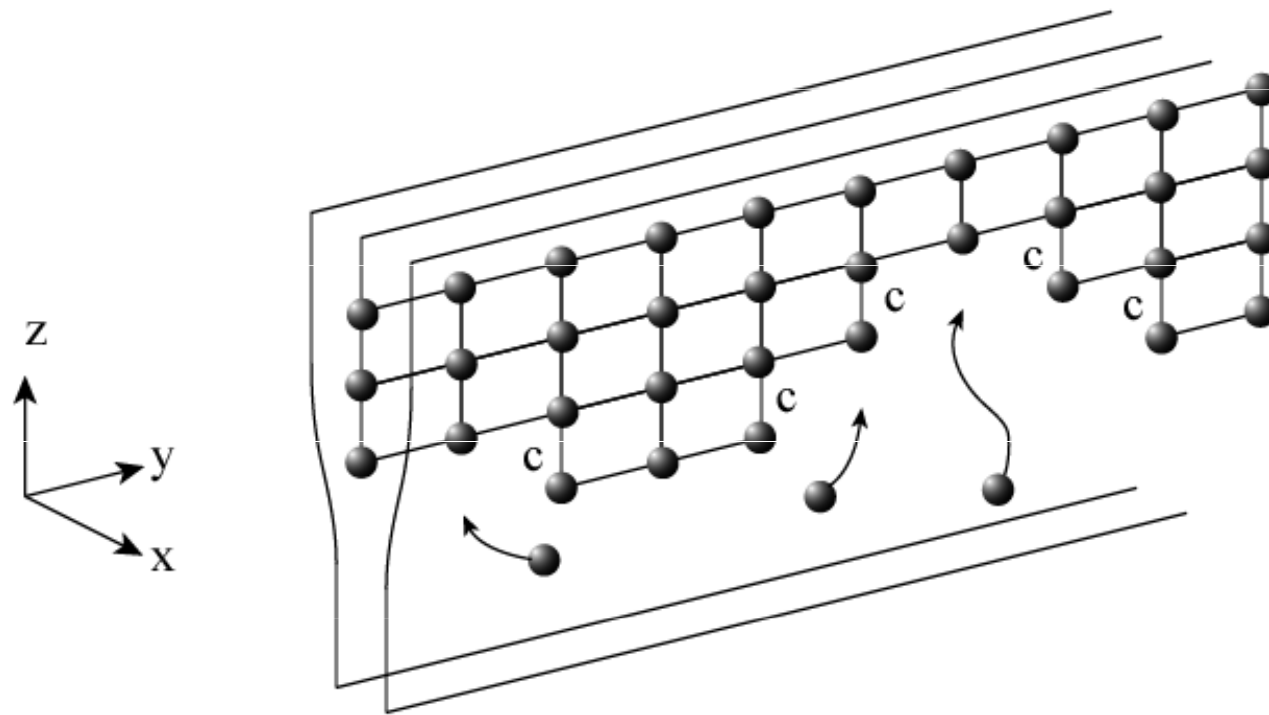
(tzv. silný princip, používá se také výpočet přes energii)

- podmínky na hranicích musí být známy

# VYSOKÉ HOMOLOGICKÉ TEPLoty

## DIFUZNÍ MECHANISMY

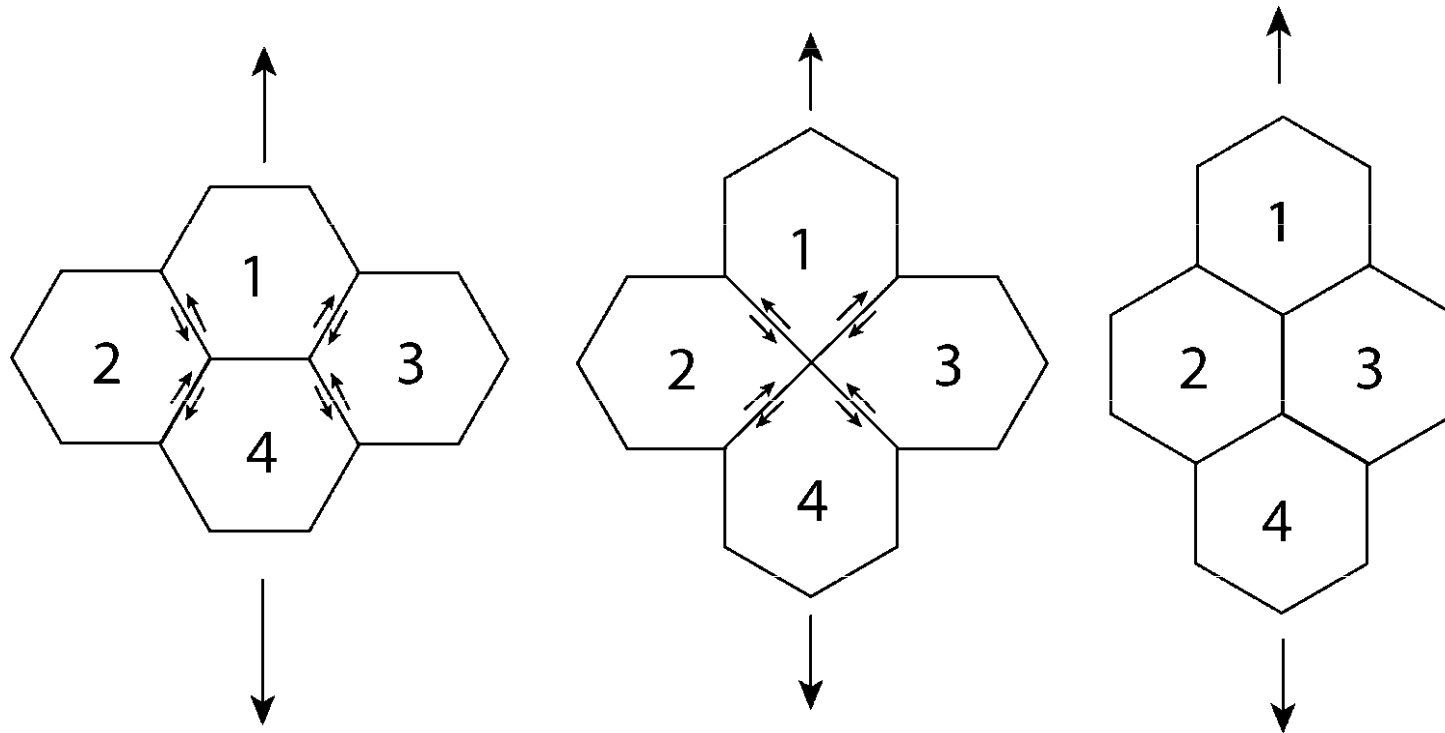
šplh dislokací



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



# SUPERPLASTICITA

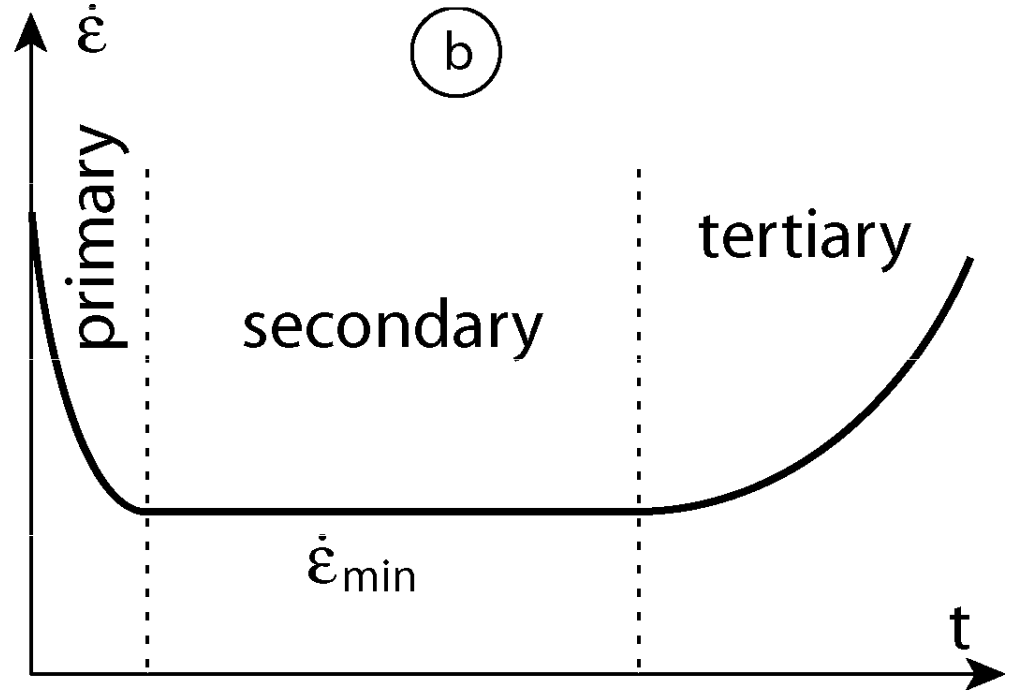
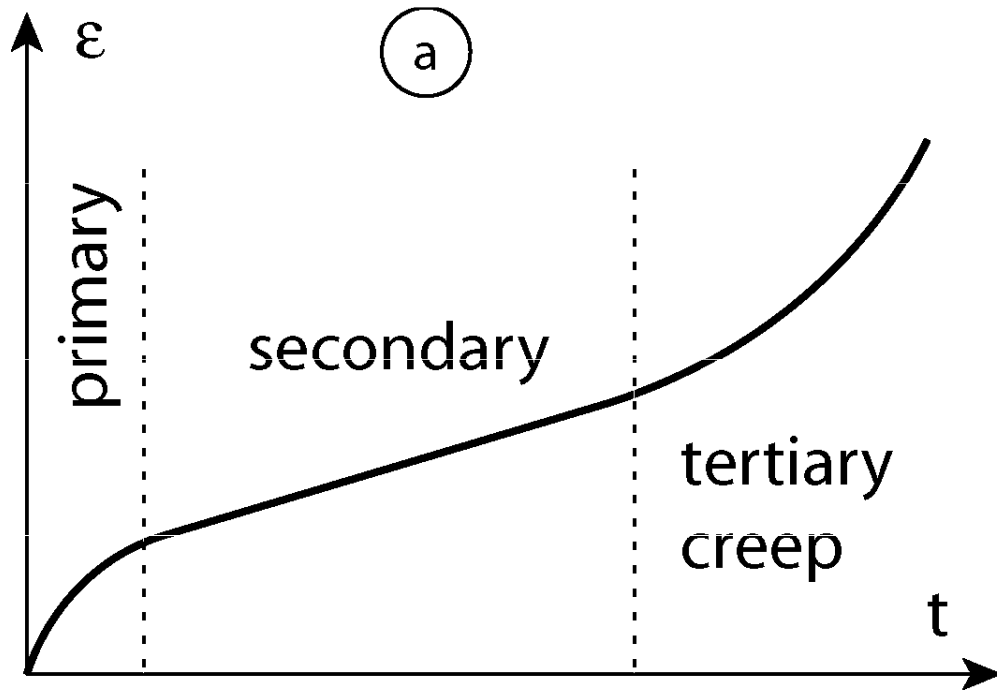


- pro  $T > 0.5 T_m$
- pro malá  $d$

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

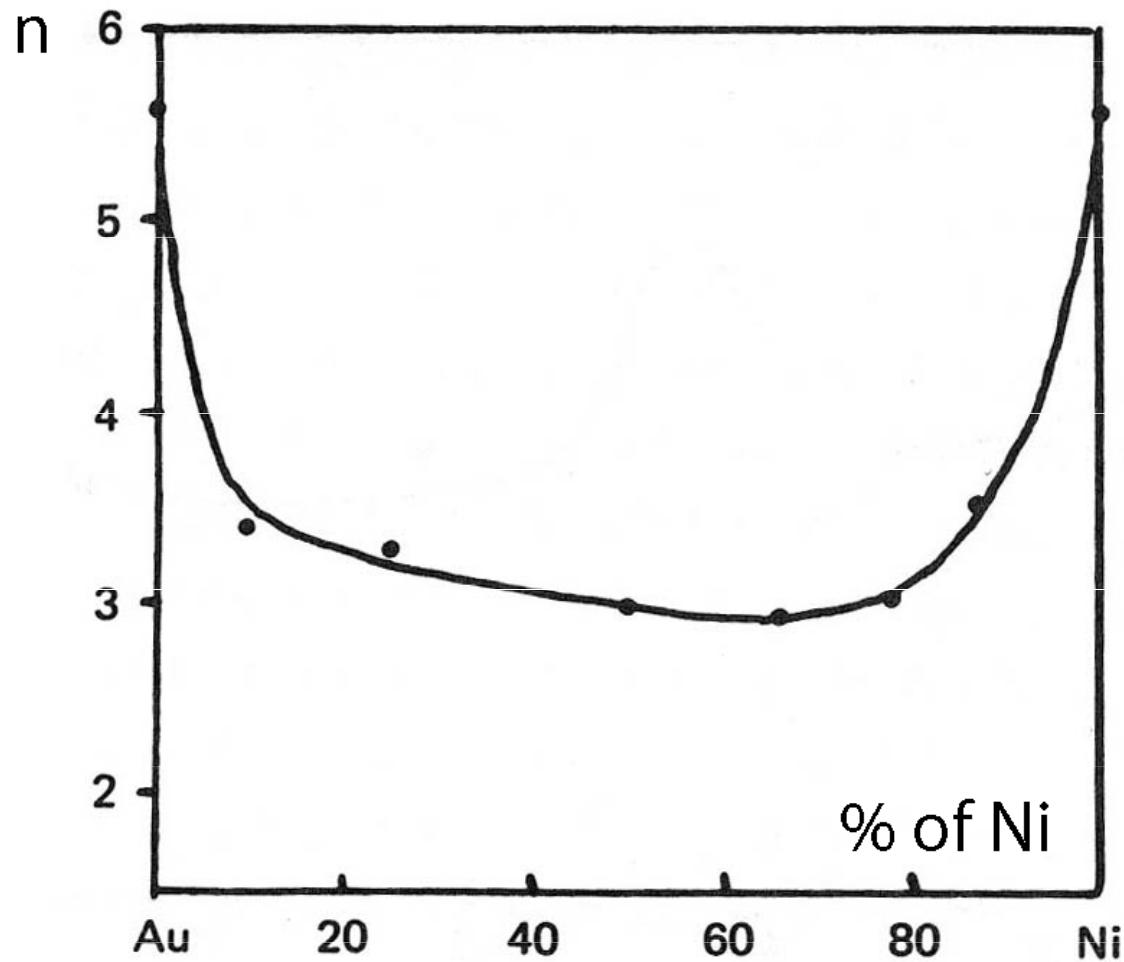
Vysokorychlostní superplasticita : natavení  
hranic zrn

# CREEP (TEČENÍ)



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

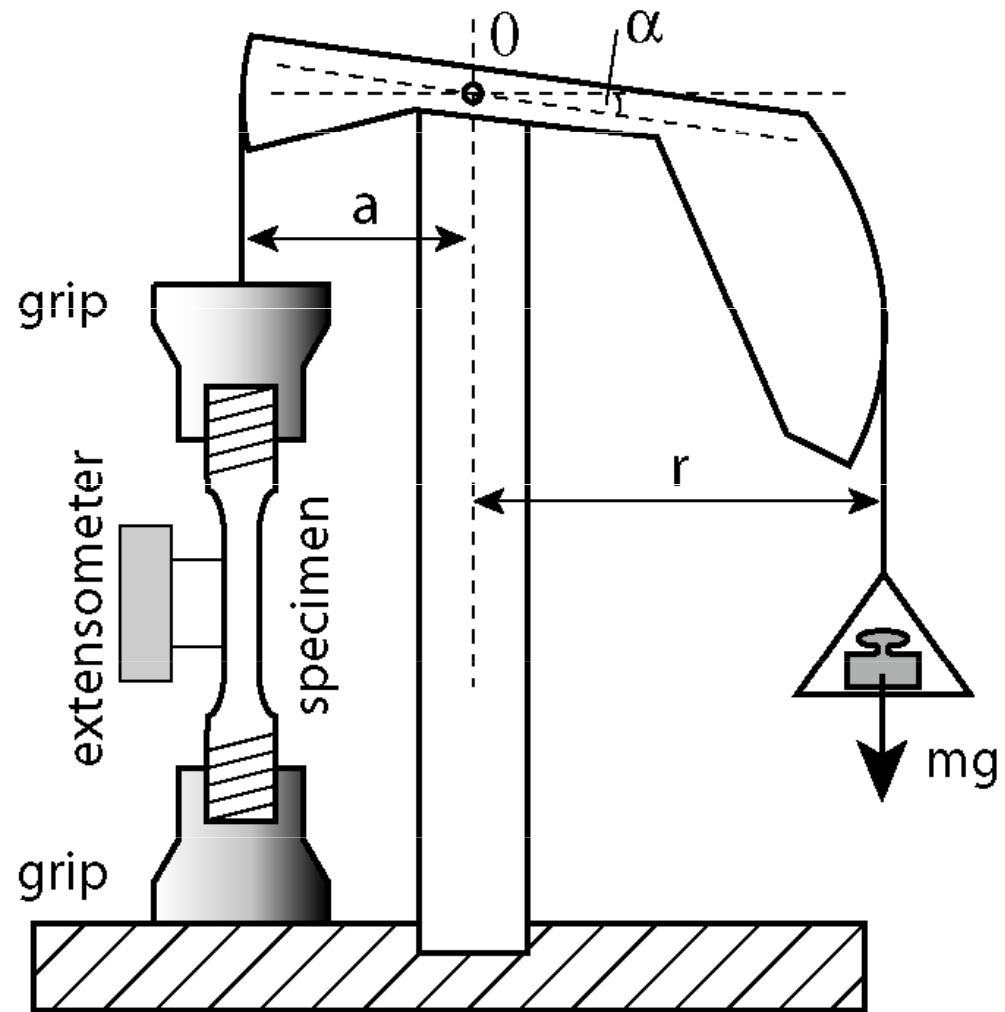
$n \sim 3$  ... "class I alloys"    tuhé roztoky  
 $n \sim 4-5$  ... "class II alloys"    čisté kovy



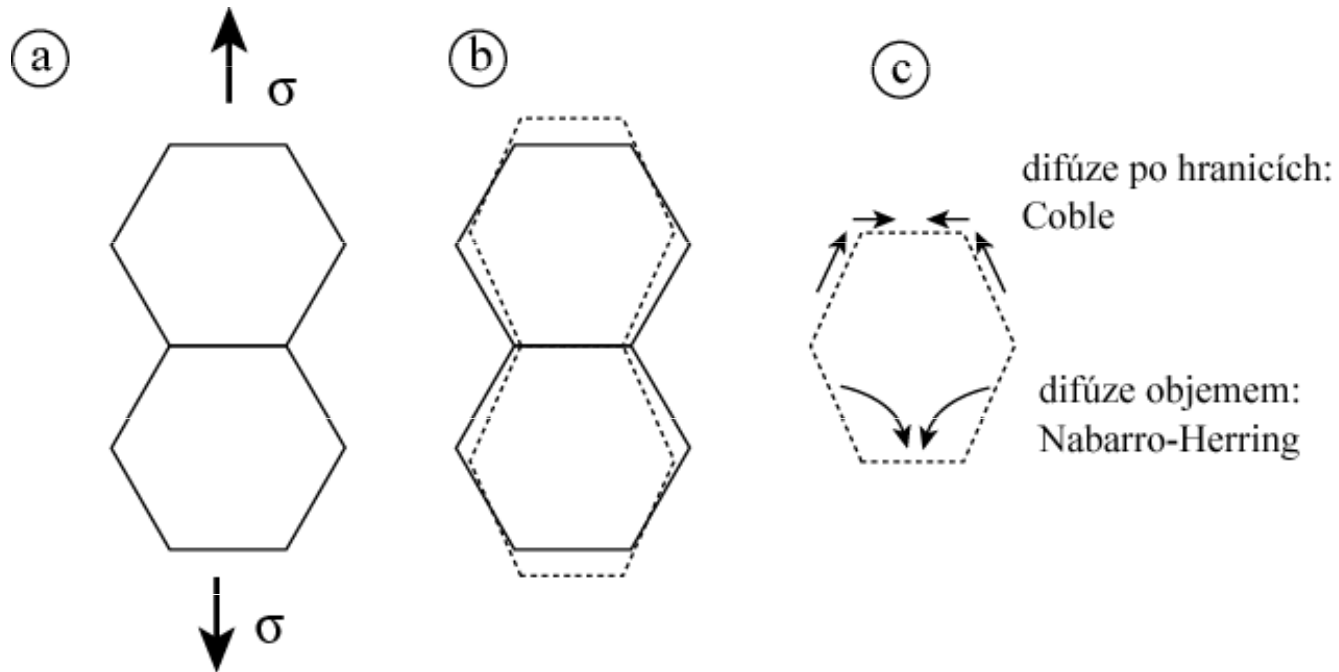
n ~ 3 ... "class I alloys"    tuhé roztoky  
 n ~ 4-5 ... "class II alloys"    čisté kovy

# CREEPOVÉ STROJE

- konstantní síla
- konstantní skutečné napětí



# DIFÚZE



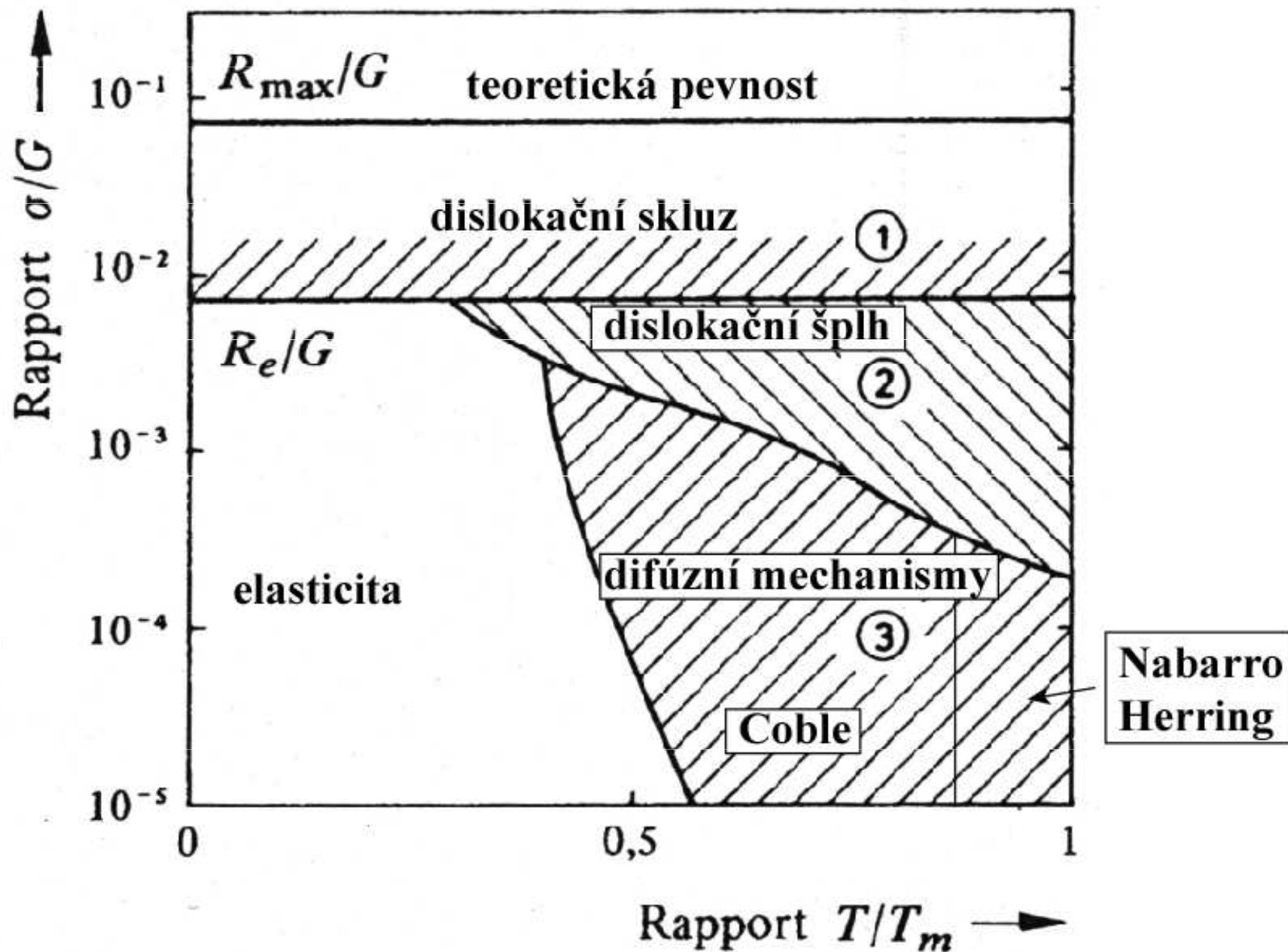
1. Fickův zákon

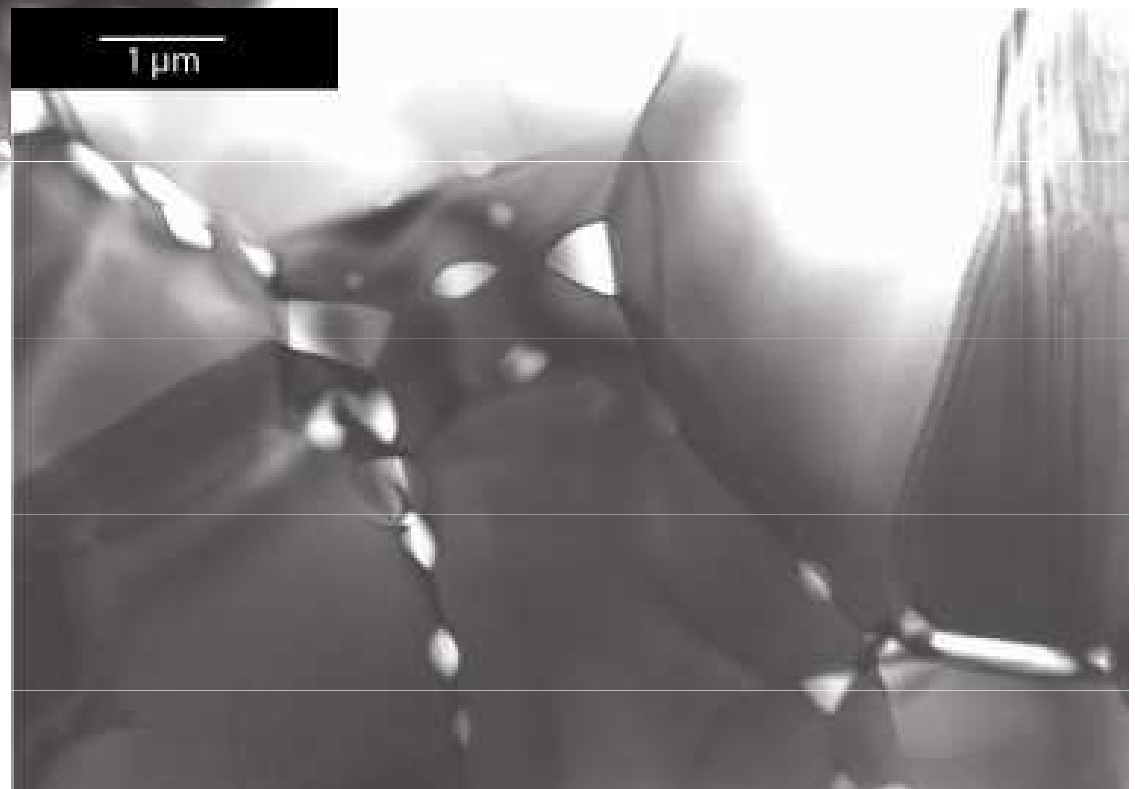
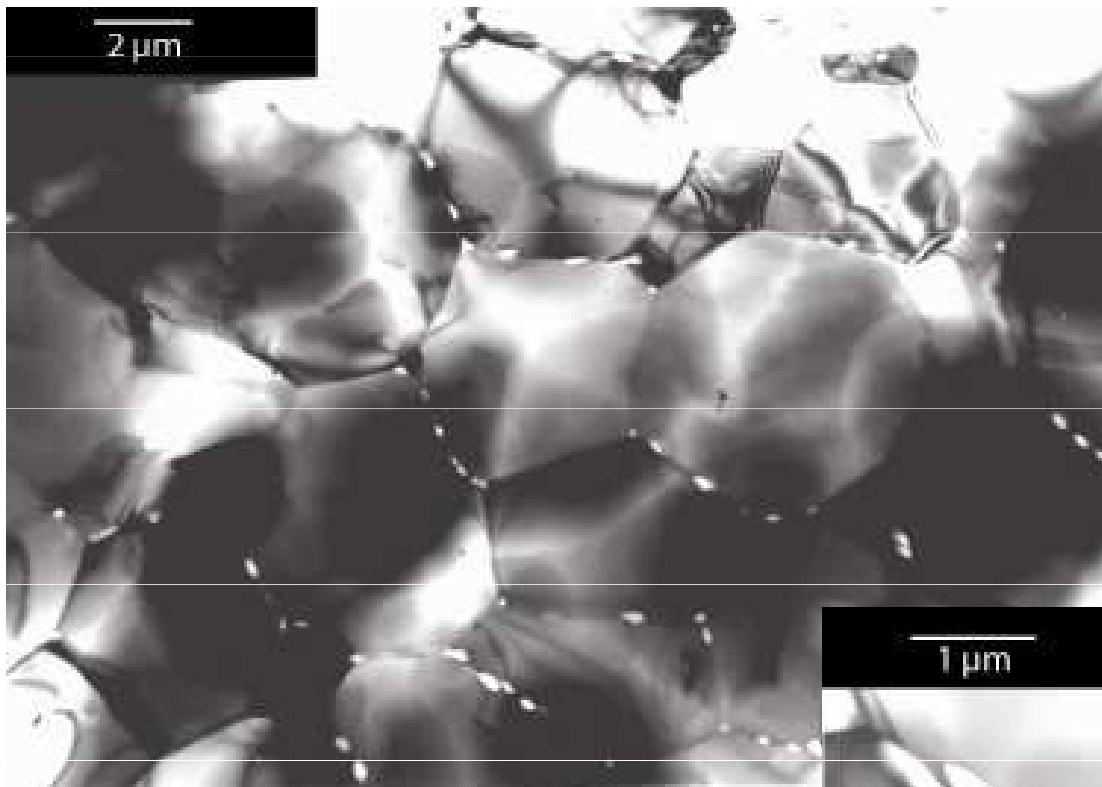
$$\vec{J}_A = -D_A \overrightarrow{\text{grad}C_A}$$

2. Fickův zákon

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

# CREEP - MECHANISMS

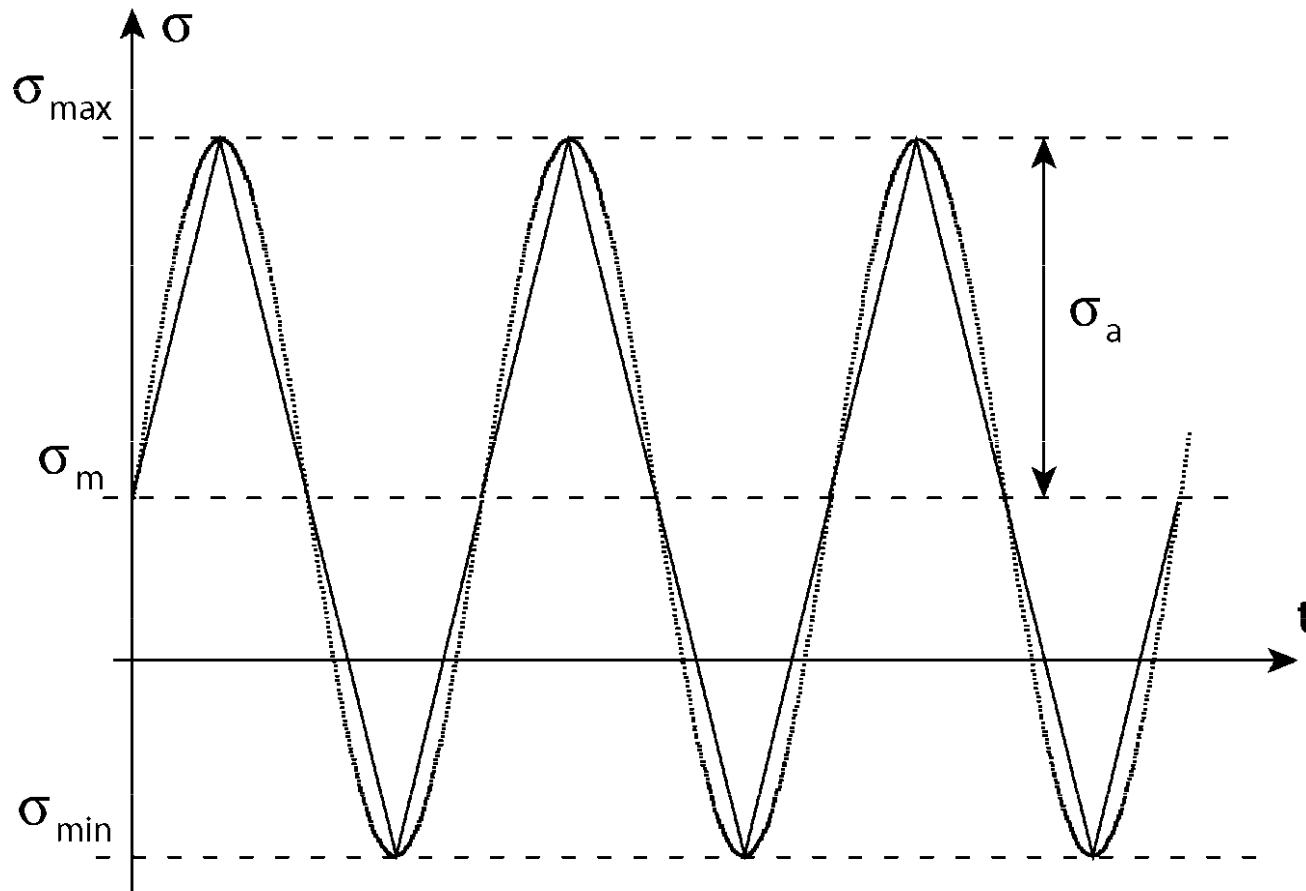




Cobleův creep:  
difúze po hranicích

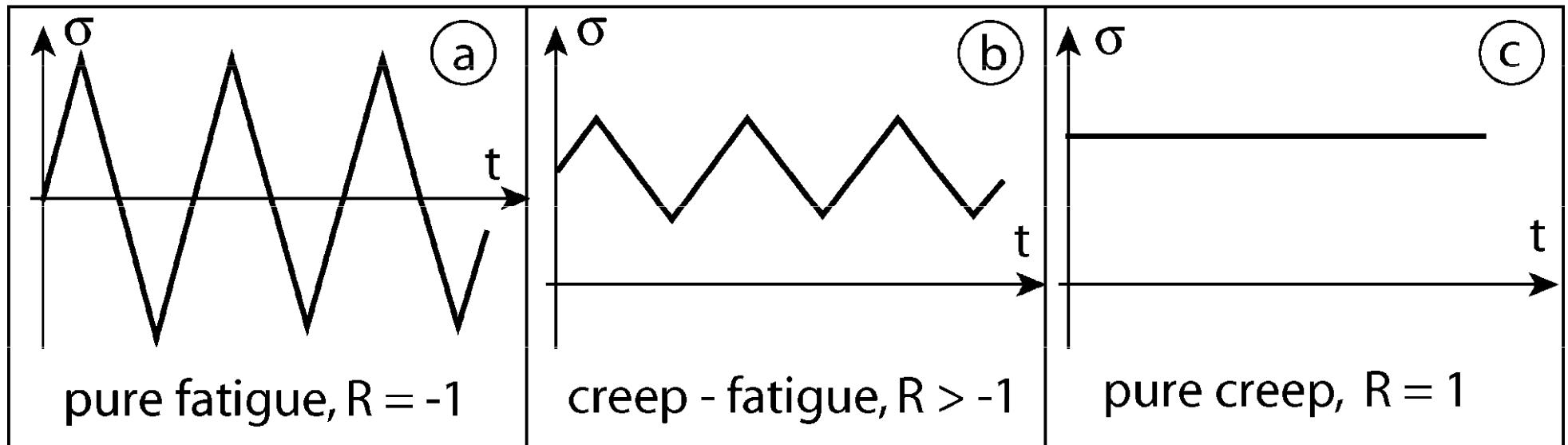
# ÚNAVA

poškození materiálu opakovanou deformací



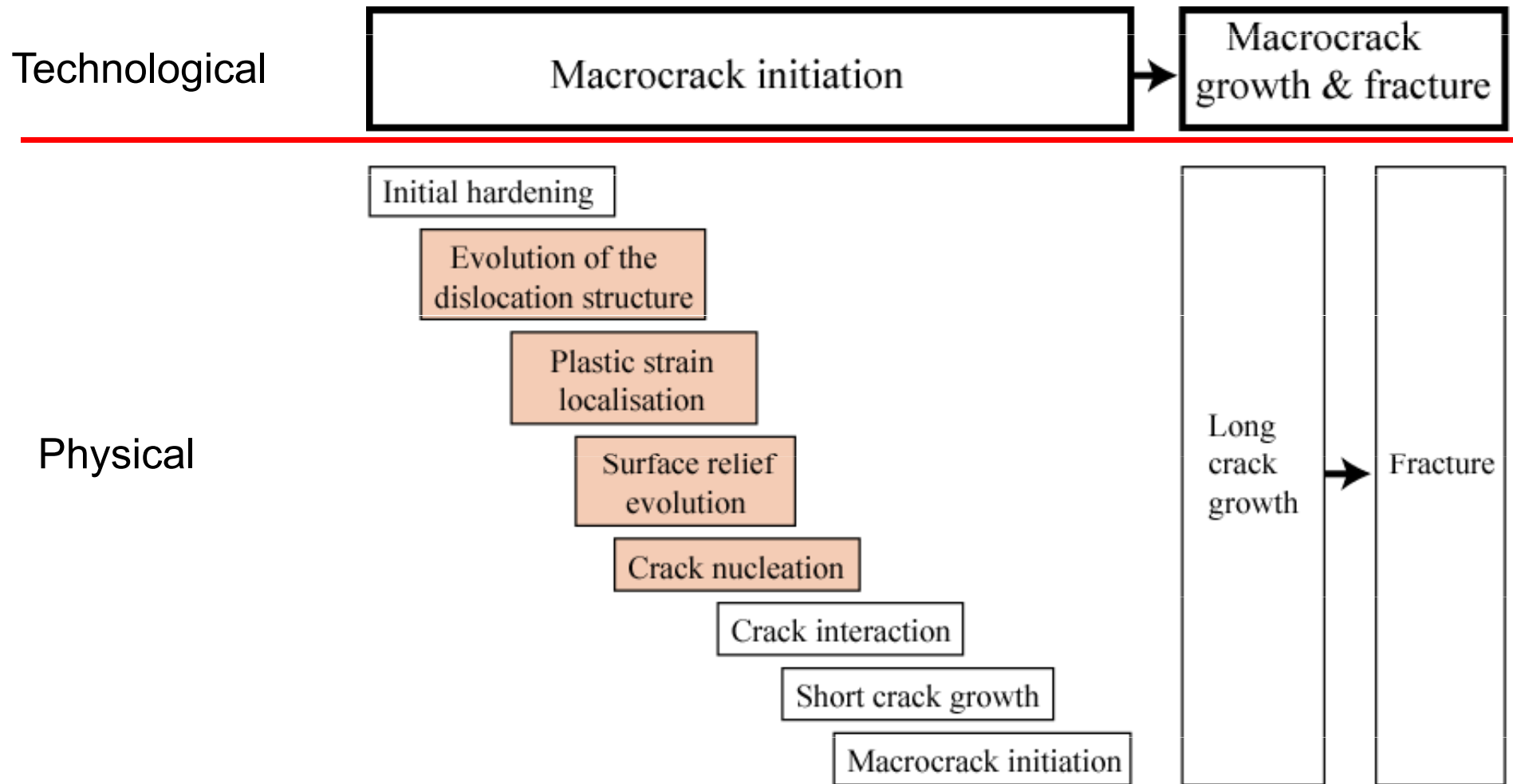
$$R = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}$$





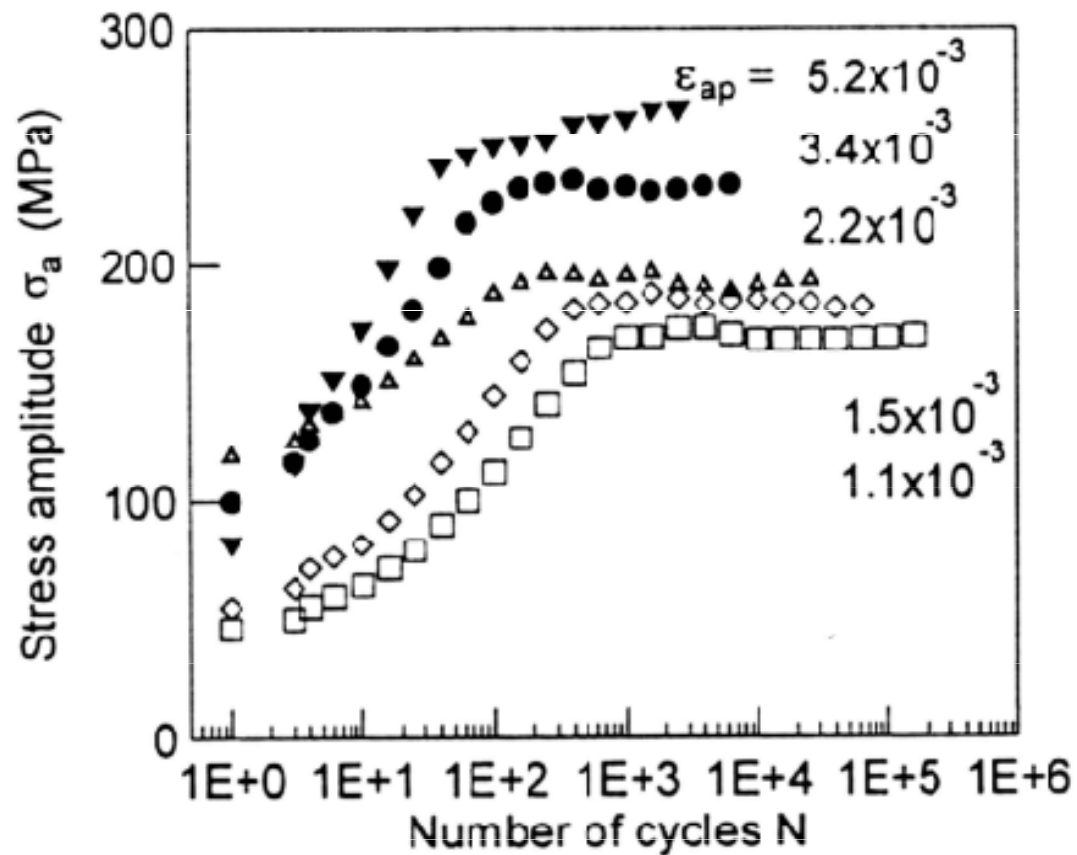
$$R = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}$$

# FATIGUE DAMAGE ACCUMULATION



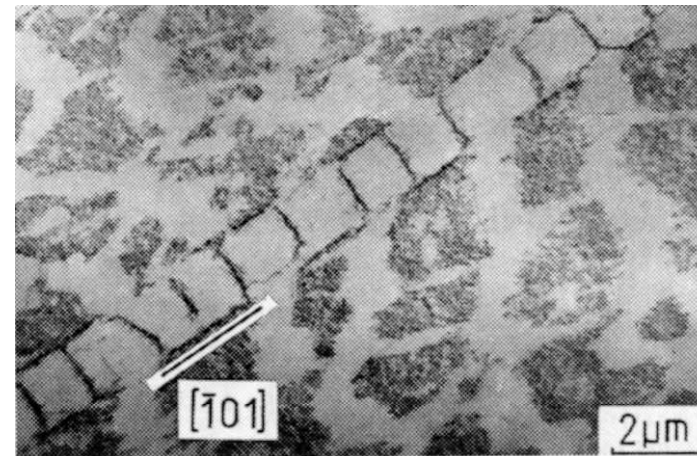
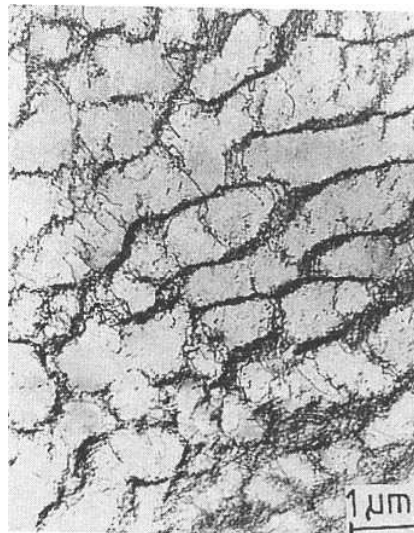
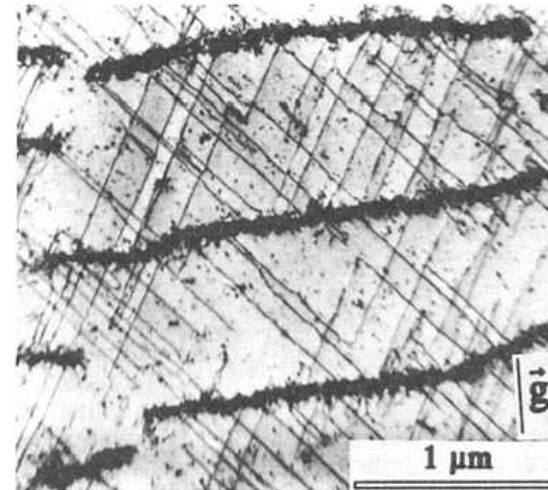
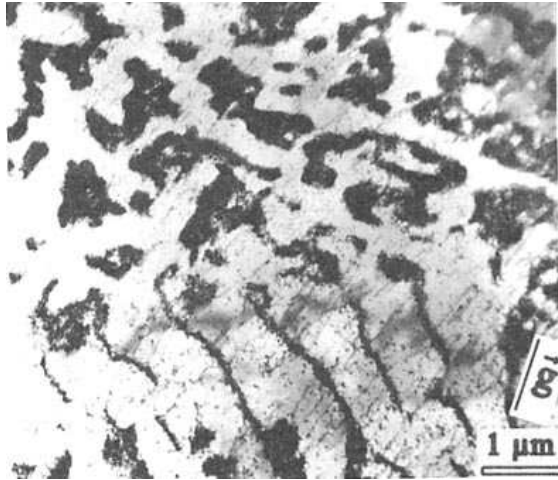
# INITIAL CYCLIC HARDENING / SOFTENING:

a consequence of microstructural evolution



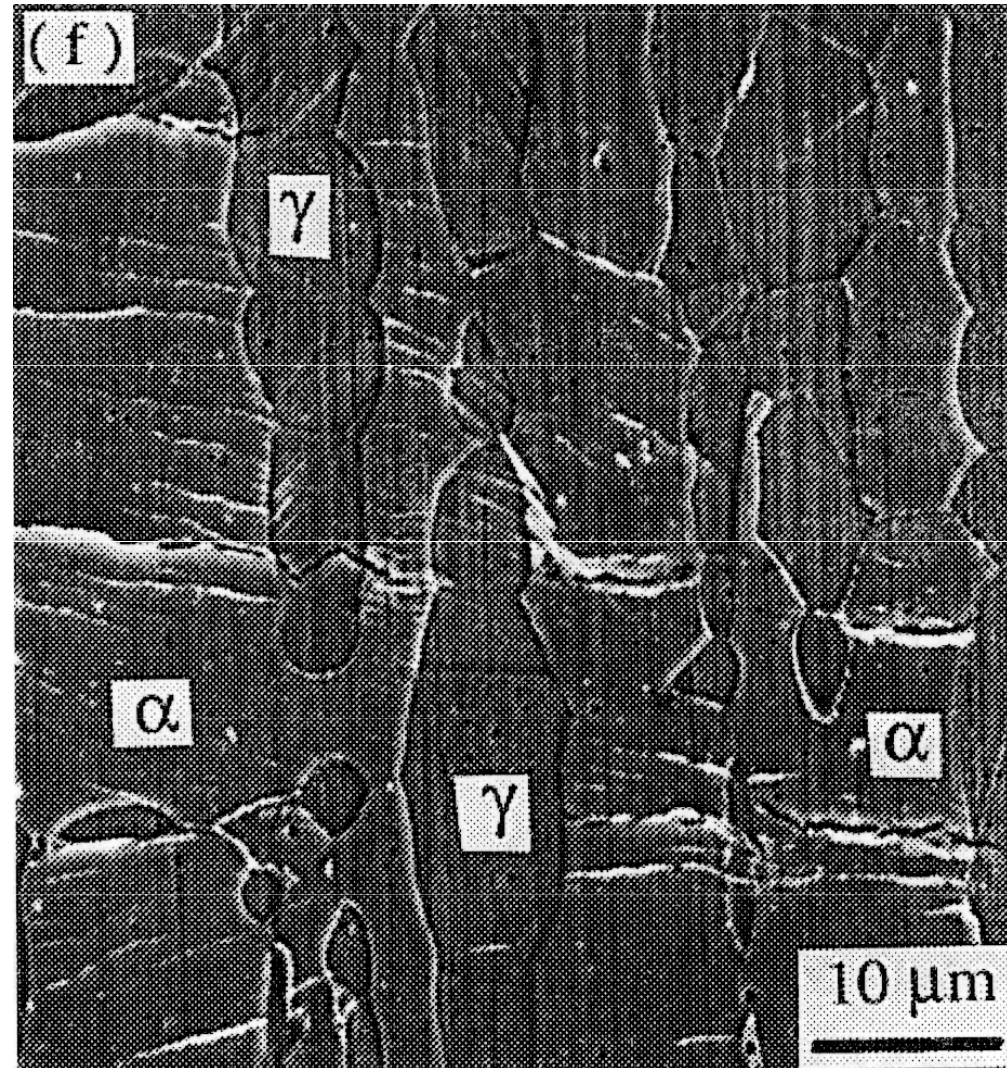
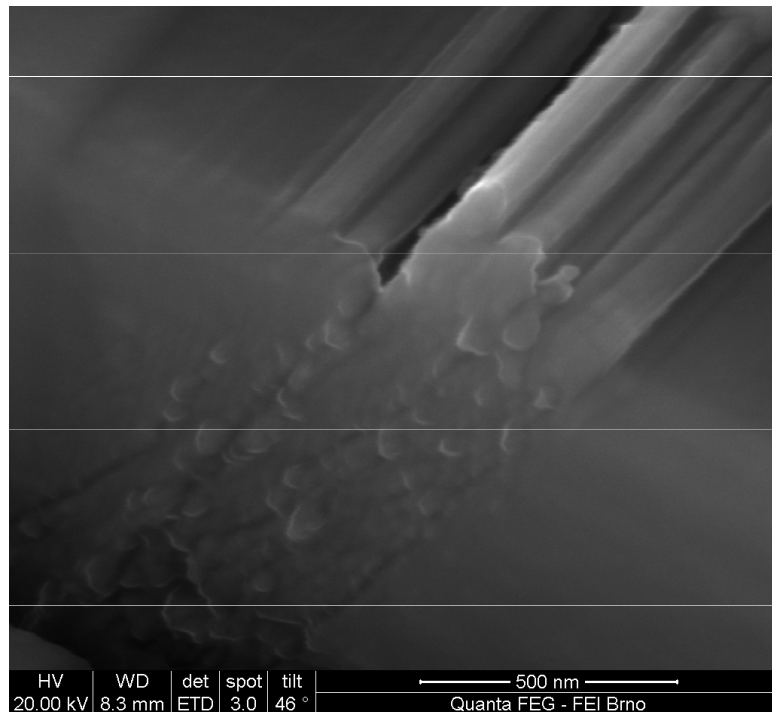
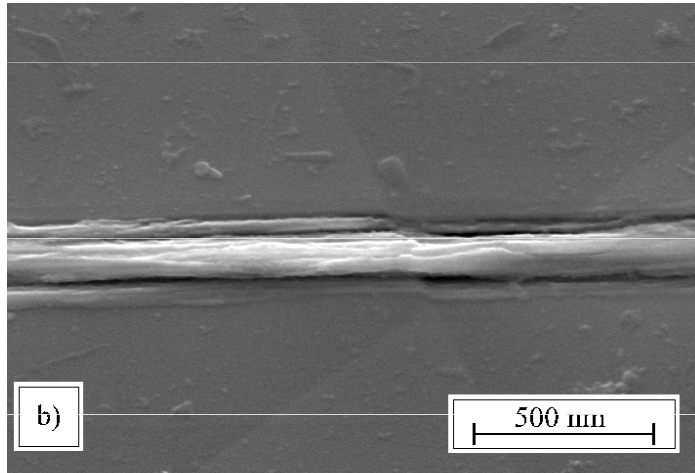
# MICROSTRUCTURE EVOLUTION:

well defined 3D arrangements of dislocations

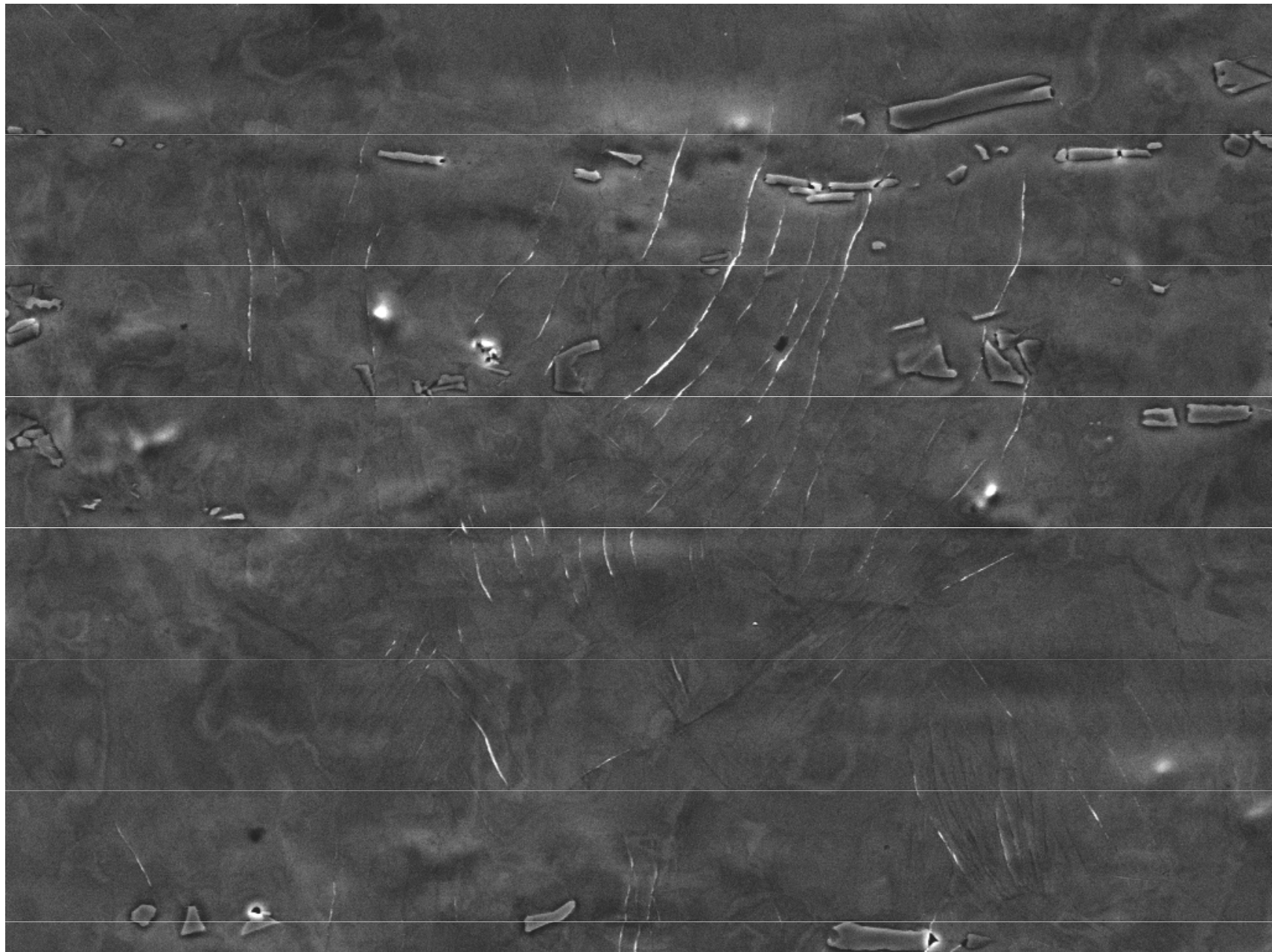




# EXTRUSIONS / INTRUSIONS / SHORT CRACKS







70µm

# LONG CRACKS (or macrocraks)

