

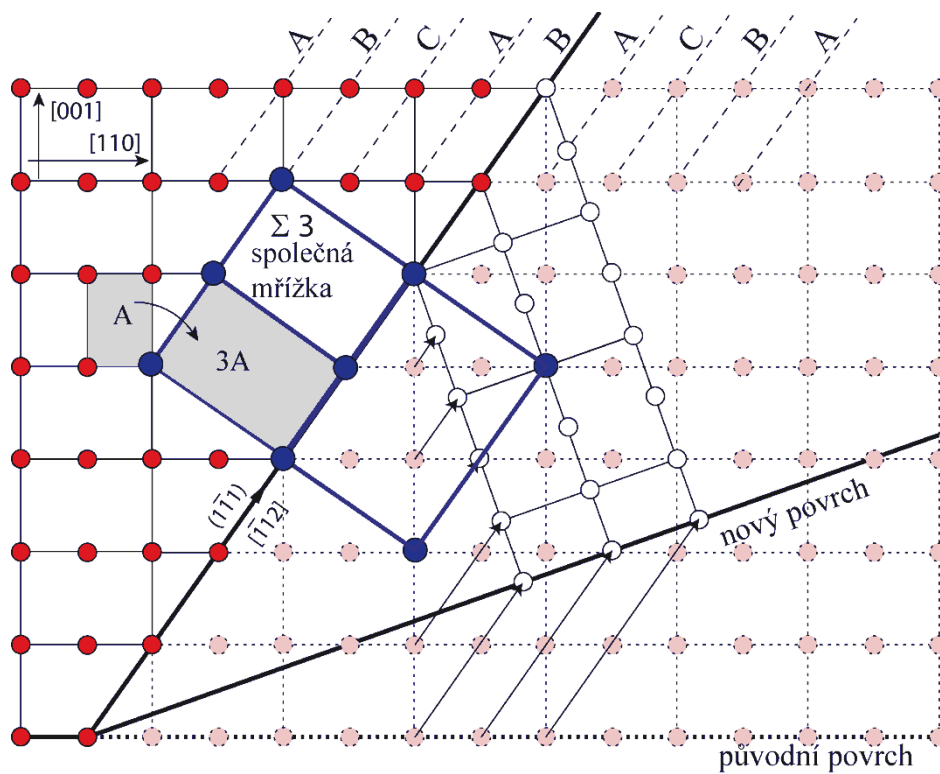


# MECHANISMY PLASTICKÉ DEFORMACE

Tomáš Kruml

Jean-Pierre Michel

verze 2019





## OBSAH

<b>1. Úvod</b> .....	3
<b>2. Plastická deformace monokrystalů dislokačním skluzem</b> .....	4
2.1 Fcc kovy.....	4
2.2 Bcc kovy.....	16
2.3 Hcp kovy.....	21
2.4 Další materiály.....	23
<b>3. Polykrystaly</b> .....	27
3.1 Mikroplasticita a makroplasticita.....	27
3.2 Von Misesova podmínka.....	27
3.3 Sachsův a Taylorův faktor.....	28
3.4 Hall-Petchův vztah.....	28
<b>4. Teorie tepelné aktivace</b> .....	31
4.1 Efektivní a vnitřní napětí.....	31
4.2 Tepelná aktivace a rychlost dislokací.....	37
<b>5. Vazba mezi mikrosvětlem a makrosvětlem</b> .....	41
5.1 Vazba mezi dislokačním skluzem a plastickou deformací.....	41
5.2 Vazba mezi dislokačním skluzem a napětím.....	41
<b>6. Dvojčatění</b> .....	64
6.1 Růstová a deformační dvojčata.....	66
6.2 Růst deformačních dvojčat.....	68
<b>7. Plasticita způsobená fázovou transformací</b> .....	70
7.1 Martenzitická transformace ocelí.....	70
7.2 Slitiny s tvarovou pamětí.....	71
<b>8. Příprava a deformace materiálů s malou velikostí zrna</b> .....	73
8.1 Příprava ultrajemnozrných a nanokrystalických materiálů.....	74
8.2 Superplasticita .....	74
<b>9. Creep a jeho mechanismy</b> .....	75
9.1 Creepová křivka	
9.2 Deformační mechanismy při creepu	
<b>10. Mechanismy únavové degradace</b>	
<b>11. Mechanismy plastické deformace - příklady</b>	
<b>Shrnutí</b> .....	
<b>Literatura</b> .....	
<b>Přílohy</b> .....	xx

## 1. ÚVOD

V tomto textu se pokusíme stručně popsat některé mechanismy, kterými se uskutečňuje plastická deformace pevných látek. I když se omezíme převážně na kovové materiály, je to téma tak obsáhlé, proměnlivé a někdy i obtížné, že tento stručný text nemůže aspirovat ani na úplnost, ani na příliš detailní popis. Aniž bychom chtěli čtenáře nadměrně vyděsit, musíme konstatovat, že prakticky každý materiál má svá specifika, která ovlivňují jeho plastické vlastnosti.

Nejpodrobněji je rozebrána plastická deformace způsobená skluzem dislokací; další mechanismy jako je dvojčatění nebo plasticita způsobená fázovou transformací jsou zmíněny stručněji. Pochopitelně jsme si k vysvětlení základních pojmů zvolili příklady "jednoduchých" materiálů, tedy nejčastěji monokrystalů některých prvků a soustředíme se hlavně na bezdifúzní mechanismy (tj. nízké homologické teploty). Skriptum navazuje na "Úvod do teorie dislokací", na které se často odvolává a jehož zvládnutí je pro pochopení tohoto textu nezbytné.

Základy teorie plastické deformace byly položeny přibližně v letech 1930 – 1960. Na jejich vybudování se podíleli např. Orowan, Taylor, Cottrell, Peierls, Nabarro, Friedel, Seeger a Frank. Zhruba v osmdesátých letech tato vědní oblast získala nový impuls, když do svého výzkumného arsenálu zařadila počítačové simulace. Experimentální úsilí v nacházení detailních fyzikálních procesů při deformaci a získávání relace makroskopických mechanických vlastností na jedné straně a mikrostruktury včetně dějů na atomární úrovni na straně druhé neochabuje, protože jsou denně vyvíjeny nové materiály s někdy překvapujícími vlastnostmi. Nedávné důležité příspěvky pro teorii plastické deformace přinesli resp. přinášejí Cahn, Ashby, Kocks, Kubin, Saada, Hirsch, Weertman, Haasen, Schoeck, Embury, Mughrabi, Caillard, Martin atd. Z řady českých světově známých odborníků jmenujme alespoň Kroupu, Vítka, Paidara, Čadka či Kratochvíla.

V současnosti se výzkumu plastické deformace materiálů v ČR věnuje Ústav fyziky materiálů v Brně, Fyzikální ústav v Praze (oba AV ČR) a týmy na několika vysokých školách – např. na Karlově univerzitě v Praze, Vysoké škole báňské v Ostravě, ČVUT v Praze a Vysokém učení technickém v Brně.

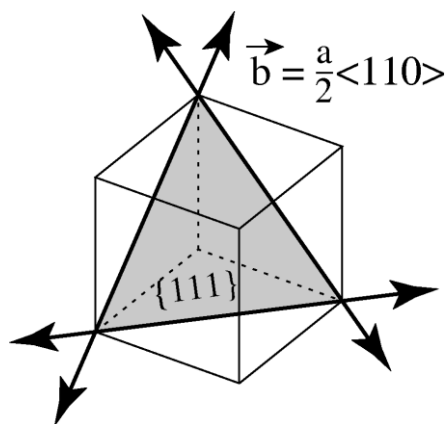
## 2. PLASTICKÁ DEFORMACE MONOKRYSTALŮ DISLOKAČNÍM SKLUZEM

O dislokačním skluzu (*slip, glide*) jsme se již zmínili na zhruba jedné stránce ve skriptu "Úvod do teorie dislokací" v kapitole 8.1. Nyní toto téma rozebereme mnohem podrobněji, včetně vlivu konfigurace dislokačních jader (tedy rozštěpení úplných dislokací na dislokace parciální), nástinu teorie tepelné aktivace a poměrně obtížného konceptu vnitřního a efektivního napětí.

Nejdříve se zaměříme na čisté kovy ve formě monokrystalů, které se plasticky deformují díky skluzovému pohybu dislokací. Dislokační skluz je nejčastější mechanismus plastické deformace kovových materiálů za nízkých homologických teplot ( $T < 0.3-0.5 T_{\text{tání}}$ ). Tato kapitola se tedy týká deformace za pokojové teploty většiny čistých kovů s výjimkou Bi, Sn, Ga, Hg, alkalických kovů a zřejmě také Pb.

### 2.1 Fcc kovy

U materiálů s fcc mřížkou je skluzovou rovinou téměř bez výjimky rovina  $\{111\}$  a Burgersův vektor je typu  $a/2\langle 110 \rangle$  (viz kapitoly 5 a 8 a cvičení 3, skriptum Dislokace). V kubické soustavě existují 4 ekvivalentní roviny  $\{111\}$  a v každé z těchto rovin leží tři možné Burgersovy vektory  $a/2\langle 110 \rangle$  (obr. 2.1); existuje tedy 12 skluzových systémů, tj. nezávislých možností jakými se dislokace mohou pohybovat skluzem (viz tabulka 2.1).



**Obrázek 2.1** Skluzové systémy v fcc mřížce.

Poznámky: 1. Dislokační skluz v rovinách  $\{001\}$ ,  $\{011\}$  a dokonce i v jiných rovinách byl pozorován za vysokých homologických teplot a při speciálních způsobech zatěžování.

2. Při definici skluzových systémů se nejčastěji používají termíny "skluzová rovina" a "směr skluzu" (*slip plane, slip direction*). Směrem skluzu je v tomto případě myšlený směr, ve kterém dojde k posunutí částí materiálu pod a nad skluzovou rovinou, tedy směr rovnoběžný s Burgersovým vektorem. Termín "směr skluzu" může tedy být mírně matoucí, neboť např. šroubová dislokace se pohybuje skluzem kolmo na "směr skluzu". V tomto textu proto místo "směru skluzu" raději používáme "směr Burgersova vektoru".

### 2.1.1 Schmidův faktor

V kapitole 7, skriptum Dislokace, jsme ukázali, že síla  $F_g$  působící na dislokaci o jednotkové délce je vždy kolmá na vektor dislokační čáry  $\vec{d}$ . Její velikost je podél dislokace konstantní, rovná  $\tau b$ , kde  $\tau$  je smyková složka tenzoru napětí působící ve skluzové rovině rovnoběžně s  $\vec{b}$ .

V případě tahové zkoušky monokrystalického vzorku můžeme průmět vnějšího aplikovaného napětí  $\sigma$  do všech 12 skluzových systémů snadno spočítat, pokud známe krystalografickou orientaci směru rovnoběžného s osou zatěžování  $\vec{O}_z$ .

Projekce aplikované síly  $\vec{F}$  do směru  $\vec{b}$ ,  $F_b$ , je (viz obr. 2.2):

$$F_b = F \cos \lambda$$

a  $\tau$  vypočteme z definice

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

Osa zatěžování a  $\vec{b}$  spolu svírají úhel  $\lambda$ , úhel  $\phi$  svírá  $\vec{O}_z$  s normálou skluzové roviny (obr. 2.2). Vztah mezi  $\sigma = F/S_0$  a  $\tau$  je tedy:

$$\tau = m\sigma \quad (1)$$

kde

$$m = \cos \lambda \cos \phi \quad (2)$$

Parametr  $m$  je nazýván Schmidův faktor (*Schmid factor*). Je možné obdobně snadno ukázat, že relace mezi normálovou deformací měřenou ve směru osy zatěžování,  $\varepsilon$ , a smykovou deformací ve skluzové rovině a směru  $\vec{b}$ ,  $\gamma$ , je:

$$\gamma = \frac{\varepsilon}{m} \quad (3)$$

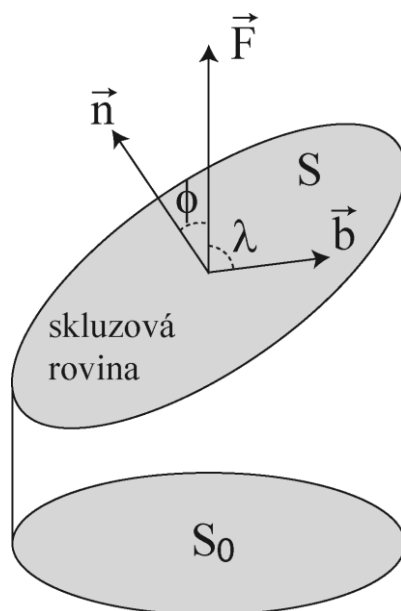
Všimněte si také, že  $\cos \phi$  nabývá své maximální hodnoty pro  $\phi = 0^\circ$ , tj. skluzová rovina je kolmá k ose zatěžování. V tomto případě však  $\lambda$  musí být rovna  $90^\circ$ , tedy  $m = 0$ . Obdobně,  $\lambda = 0^\circ$  implikuje  $\phi = 90^\circ$  a  $m = 0$ . Schmidův faktor tedy nikdy nemůže mít hodnotu 1. Maximální možné hodnoty dosahuje Schmidův faktor pro  $\phi = \lambda = 45^\circ$  a tedy:

$$0 \leq m \leq 0.5 \quad (4)$$

Rovnice (1)-(4) platí pro všechny krystalové mřížky.

#### Shrnutí:

- Ideální skluzová rovina má sklon  $45^\circ$  k ose zatěžování, nezávisle na typu mřížky;
- $\tau$  je vždy menší než  $\sigma$ ;
- $\gamma$  je vždy větší než  $\varepsilon$ .



**Obrázek 2.2** Výpočet Schmidova faktoru.

V tabulce 2.1 jsou uvedeny Schmidovy faktory pro několik zvolených orientací osy zatěžování a pro skluzové systémy mřížky fcc. Je vidět, že  $m$ , a tedy i  $\tau$ , jsou rozdílné pro různé skluzové systémy. Pokud zvyšujeme tahové (nebo tlakové) aplikované napětí, nejrychleji roste  $\tau$  u skluzového systému s nejvyšším  $m$ . K pohybu dislokací dojde tehdy, když  $\tau$  tohoto systému dosáhne kritického skluzového napětí  $\tau_c$ .

skluzová rovina	Burgersův vektor	$m$ $\bar{\sigma}_z [\bar{1}23]$	$m$ $\bar{\sigma}_z [001]$	$m$ $\bar{\sigma}_z [\bar{1}11]$	$m$ $\bar{\sigma}_z [\bar{1}12]$
(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.

### 2.1.2 Terminologie užívaná pro dislokační skluz

**Primární skluzový systém** (*primary slip system*) je systém s maximální hodnotou  $m$ . Tento systém (systémy) je v tab. 2.1 označen tučně. Vidíme, že existuje jeden primární skluzový systém v případě osy zatěžování rovnoběžné se směrem  $[\bar{1}23]$ , dva pro  $\bar{\sigma}_z = [\bar{1}12]$ , šest pro  $\bar{\sigma}_z = [\bar{1}11]$  a osm pro  $\bar{\sigma}_z = [001]$ .

**Sekundární skluzový systém** (*secondary slip system*). 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** (*single slip*) je případ, kdy  $m_p$  primárního systému je výrazně vyšší než  $m$  sekundárního systému. V tomto případě existuje při tahové zkoušce monokrystalu dlouhé stádium, kdy pouze dislokace z primárního skluzového systému jsou aktivní (pohyb, multiplikace). Je to případ osy  $[\bar{1}23]$  v tabulce 2.1.

**Vícenásobný skluz** (*multiple slip*) je opačný případ, kdy dva nebo i více systémů jsou současně aktivované: osy  $[001]$ ,  $[\bar{1}11]$ ,  $[\bar{1}12]$  z tabulky 2.1, obecně celá hranice základního stereografického trojúhelníka.

**Snadný skluz** (*easy slip*) označuje případ, kdy se hodnota  $m_p$  primárního systému blíží jeho maximální teoretické hodnotě 0.5 (osa  $[\bar{1}49]$ ).

**Obtížný skluz** (*difficult slip*) se označuje případ, kdy hodnota  $m_p$  je nízká (osa  $[\bar{1}11]$ ).

**Kritické skluzové napětí**  $\tau_c$  (*critical resolved shear stress, CRSS*) 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. Je to tedy fundamentální vlastnost daného materiálu, lépe fyzikálně definovaná než např. makroskopická mez kluzu polykrystalu.

**Schmidův zákon** (*Schmid law*) tvrdí, že aktivní skluzový systém (tj. systém, jehož dislokace se pohybují) je ten, který má nejvyšší hodnotu  $m$ . Ke skluzu dislokací dojde k okamžiku, kdy napětí  $\tau = m\sigma$  dosáhne kritického skluzového napětí.

#### Cvičení 1:

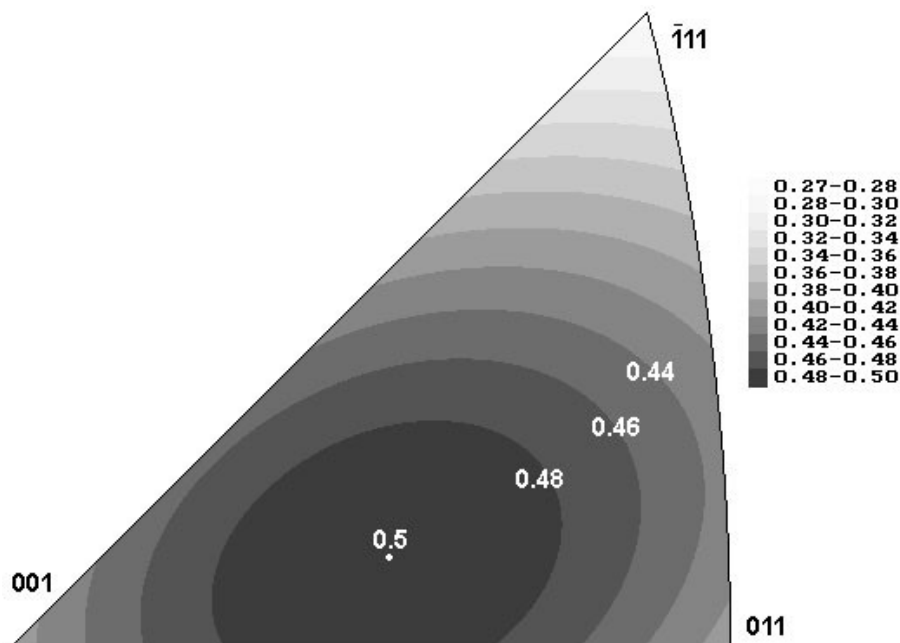
Najděte primární a sekundární skluzový systém pro monokrystal s osou zatěžování rovnoběžnou se směrem  $[215]$ . Jaká je charakteristika skluzu?



### 2.1.3 Schmidův faktor a stereografická projekce

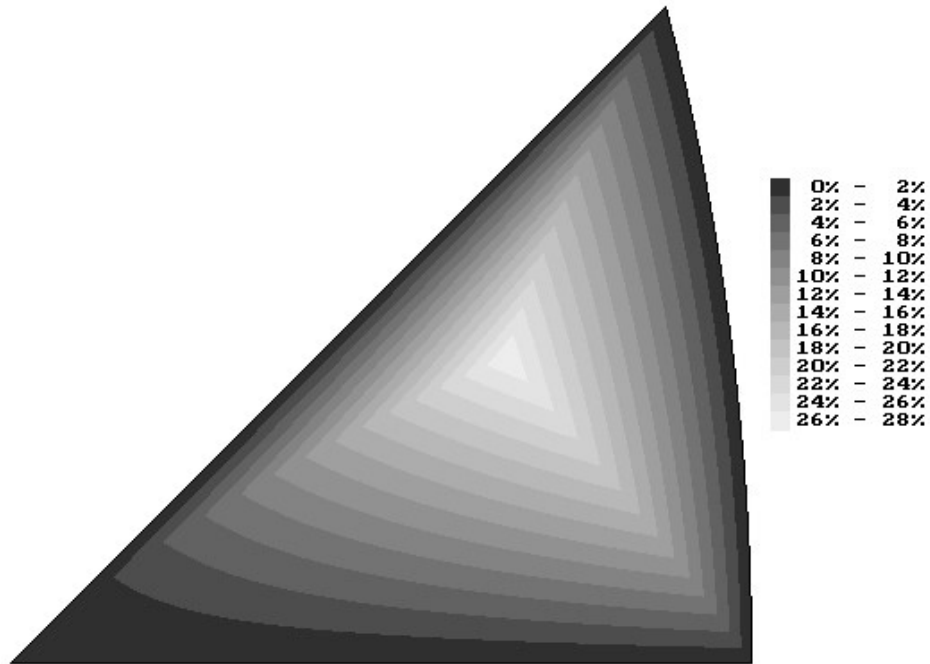
Pokud určujeme systematicky  $m$  pro různé orientace osy zatěžování, lze vypočítat, že uvnitř každého standardního stereografického trojúhelníka je stejný primární systém. Například, pro všechny orientace osy zatěžování uvnitř trojúhelníka definovaného vrcholy  $[001]$ ,  $[011]$  a  $[\bar{1}11]$  je primární skluzový systém  $(111)$ ,  $[\bar{1}01]$ . Hodnota  $m_p$  primárního systému se uvnitř tohoto trojúhelníka mění tak, jak je ukázáno na obr. 2.3. Minimální hodnota  $m_p$  je 0.272 pro  $\bar{\sigma}_z = [\bar{1}11]$ . Zrna s touto orientací vůči směru vnější síly se plasticky deformují nejobtížněji. Naopak orientace  $\bar{\sigma}_z$  s maximálním  $m_p$  je blízko směru  $[\bar{1}49]$ ; takto orientované monokrystaly (nebo zrna v polykrystalickém agregátu) se budou plasticky deformovat nejsnadněji.

U polykrystalu zatěžovaného tahem se tedy nejprve začnou plasticky deformovat zrna s  $\bar{\sigma}_z$  blízko směru  $\langle 149 \rangle$ ; nejobtížněji plasticky deformovatelná zrna budou mít  $\bar{\sigma}_z$  blízko směru  $\langle 111 \rangle$  (zanedbáváme v této jednoduché představě vliv hranic a sousedních zrn, který ve skutečnosti zanedbatelný není).

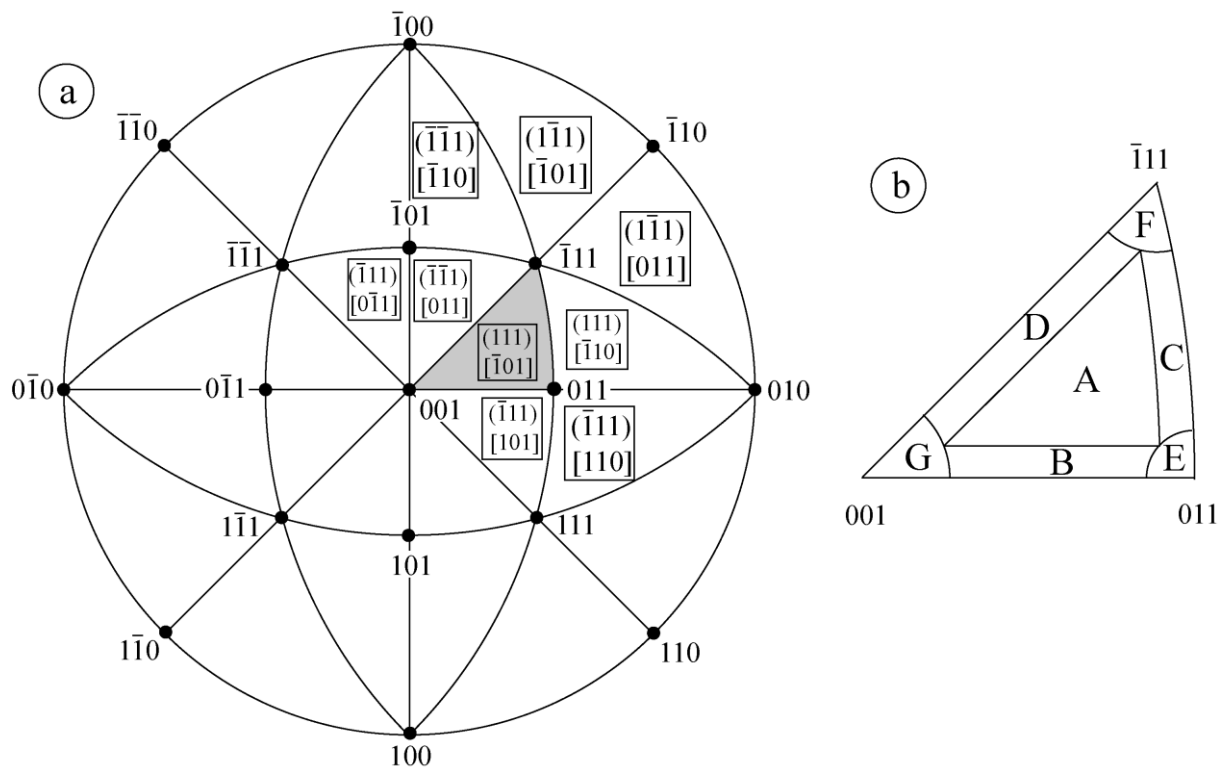


**Obrázek 2.3** Hodnoty Schmidova faktoru primárního skluzového systému pro všechny orientace monokrystalu, kdy směr osy zatěžování je rovnoběžný s některým směrem ze základního stereografického trojúhelníka.

Primární systémy pro sousední stereografické trojúhelníky se liší. Díky symetrii mají na hranicích trojúhelníků tyto dva systémy vždy stejnou hodnotu  $m$ . Rozdíl mezi dvěma nejvyššími Schmidovými faktory je ukázán na obr. 2.4. Primární systémy pro některé trojúhelníky jsou ukázány na obr. 2.5.



**Obrázek 2.4** Rozdíl mezi dvěma nejvyššími Schmidovými faktory. Hodnoty jsou stejné podél hranice trojúhelníka; nejvyšší rozdíl mezi nimi je v blízkosti směru  $\langle 358 \rangle$ .



**Obrázek 2.5** a) Projekce (001) rozdělená na 24 ekvivalentních stereografických trojúhelníků a jejich primární skluzové systémy. b) Základní stereografický trojúhelník se zónami s různými skluzovými charakteristikami.

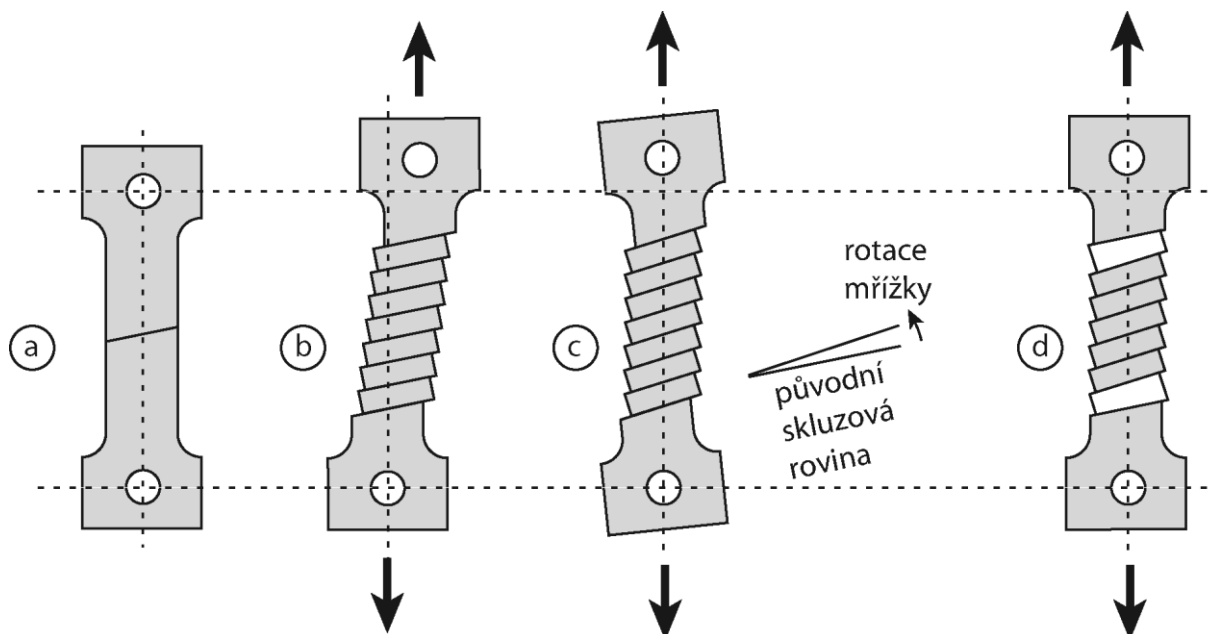
Cvičení 2:

- 2) Dokážete doplnit obr. 2.5 za méně než 1 minutu? Jak?
- 3) Jaké systémy budou aktivní v zónách A-G na obr. 2.5 b)?

**2.1.4 Rotace mřížky během tahové zkoušky**

Uvažujme nyní monokrystalický vzorek orientovaný pro jednoduchý skluz během tahové zkoušky (obr. 2.6 a). Skluz podél primární skluzové roviny způsobí nejen protažení vzorku, nýbrž i translaci jeho hlavy kolmo na osu zatěžování (obr. 2.6 b). Běžně používané konfigurace zatěžovacích strojů a čelistí takový pohyb hlavy vzorku neumožňují (jsou tuhé ve směrech kolmých na osu zatěžování). Na obr. 2.6 c je situace, kdy obě hlavy vzorku zůstávají na stejné vertikální ose. Dislokační skluz vede k tomu, že se vzorek prodlouží, změní se krystalografický směr osy zatěžování a hlavy vzorků se natočí. Nejčastěji jsou hlavy vzorku pevně uchyceny a není možná jejich rotace. V tom případě popisuje deformaci vzorku obrázek 2.6 d: uprostřed měrné délky vzorku je rotace mřížky stejná jako v případě obr. 2.6 c, ovšem v blízkosti hlav vzorku je tenzor deformace složitější (bílá část vzorku na obr. 2.6 d). Ukázali jsme tak následující pravidlo:

Při tahové deformaci se mřížka monokrystalu orientovaného pro jednoduchý skluz natáčí tak, že vektor  $\vec{b}$  primárního skluzového systému se blíží k ose zatěžování.



**Obrázek 2.6** Rotace mřížky monokrystalu deformovaného v tahu, orientovaného pro jednoduchý skluz.

Je zřejmé, že se během plastické deformace mění Schmidův faktor aktivního skluzového systému. Geometrickým rozбором uvedeným v příloze A1 můžeme získat skutečné smykové napětí a skutečnou smykovou deformaci s přihlédnutím k rotaci mřížky:

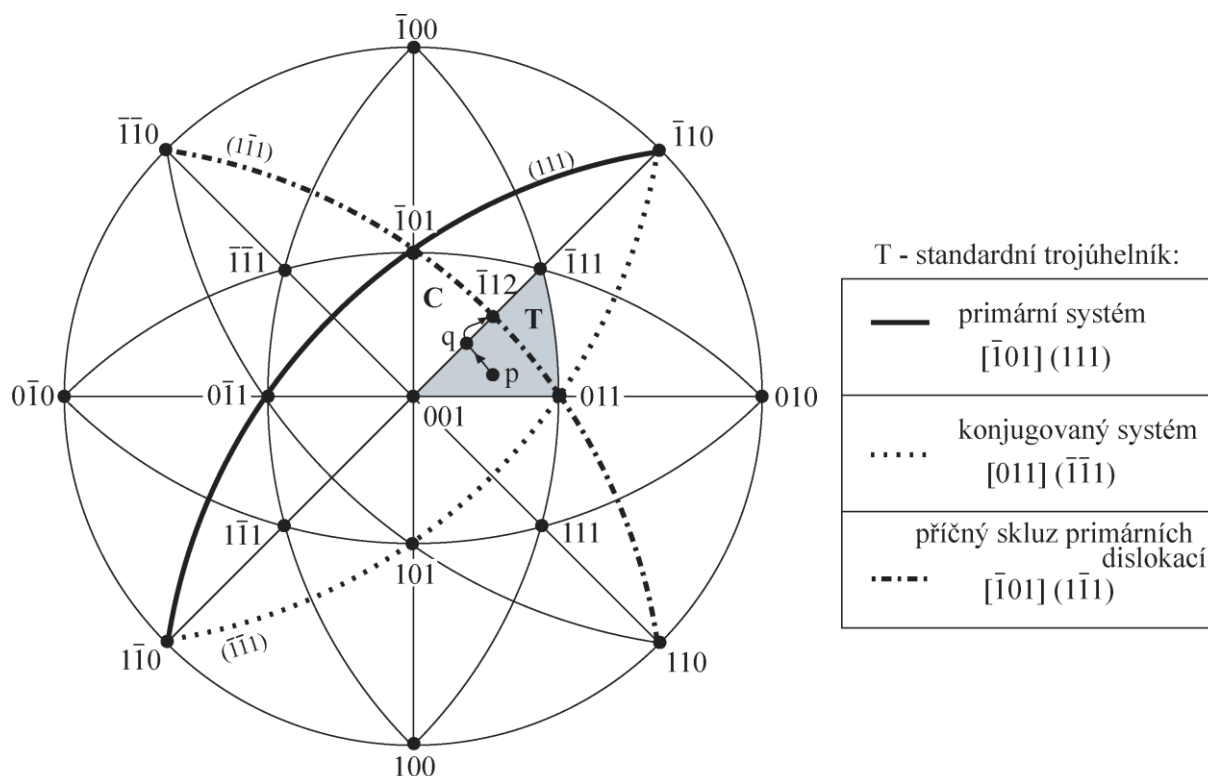
$$\tau = \frac{F}{S_0} \frac{\cos \phi_0}{(1+e)} \sqrt{(1+e)^2 - \sin^2 \lambda_0} \quad (5)$$

$$\gamma = \frac{1}{\cos \phi_0} \left( \sqrt{(1+e)^2 - \sin^2 \lambda_0} - \cos \lambda_0 \right) \quad (6)$$

Zdůrazněme, že rovnice (5) a (6) platí pouze v případě jednoduchého skluzu. Můžeme si tedy položit otázku, kdy jsou použitelné a kdy nikoliv. Studujme vývoj orientace směru osy zatěžování  $\bar{O}_z$  během tahové zkoušky (obr. 2.7). Předpokládejme, že směr  $p$  rovnoběžný s  $\bar{O}_z$  se před deformací nachází někde uvnitř standardního stereografického trojúhelníka T, primární skluzový systém je tedy  $[\bar{1}01]$ , (111).  $\bar{O}_z$  se během deformace blíží směru  $\bar{b} = [\bar{1}01]$ , až do okamžiku, kdy dosáhne hranici se sousedním stereografickým trojúhelníkem C;  $\bar{O}_z$  je v tomto okamžiku rovná  $q$ . V tomto okamžiku jsou Schmidovy faktory primárních systémů pro trojúhelníky T a C stejně velké a primární skluzový systém trojúhelníka C, nazývaný konjugovaný systém (*conjugate system*) začne být také aktivní. Krystal se nyní deformuje v podmínkách dvojitého skluzu a rovnice (5) a (6) tedy nejsou platné. Skluz dislokací primárního systému stáčí krystalovou mřížku vzorku tak, že  $\bar{O}_z$  se blíží směru  $[\bar{1}01]$ , aktivita konjugovaného systému naopak stáčí  $\bar{O}_z$  ke směru  $[011]$ . Směr  $[\bar{1}12]$  leží ve stejné rovině jako  $[\bar{1}01]$  a  $[011]$  a půlí úhel mezi nimi, je tedy nejlepším kompromisem mezi působeními primárního a konjugovaného systému. To je orientace, kterou dosáhne  $\bar{O}_z$  v případě velké deformace při tahové zkoušce monokrystalu.

Ke stáčení osy zatěžování jednotlivých zrn polykrystalického materiálu vlivem skluzu dochází i při tvářecích procesech. Důsledkem této rotace je vznik textury u válcovaných či extrudovaných materiálů. V těchto případech ovšem dochází k velkým deformacím za podmínek trojosé napjatosti a aktivuje se okamžitě mnoho skluzových systémů. Z pozorování je např. známo, že tažené dráty fcc materiálů mají přednostní směr osy drátu rovnoběžný s  $\langle 111 \rangle$  (*wire texture*). Výslednou texturu za různých tvářecích podmínek lze jen obtížně předpovědět, jsou pro to potřeba složitější modely, než je jednoduchá představa podle obr. 2.7; tato oblast modelování je stále ještě živá.

Cvičení 4: Jakým způsobem se bude stáčet mřížka monokrystalu orientovaného pro snadný skluz při testu v kompresi?



**Obrázek 2.7** Stáčení osy zatěžování fcc monokrystalu při tahové deformaci.

### 2.1.5. Tahová křivka monokrystalu fcc orientovaného pro jednoduchý skluz

Taková křivka je schématicky ukázána na obr. 2.8. Jsou na ní zřejmá tři stádia:

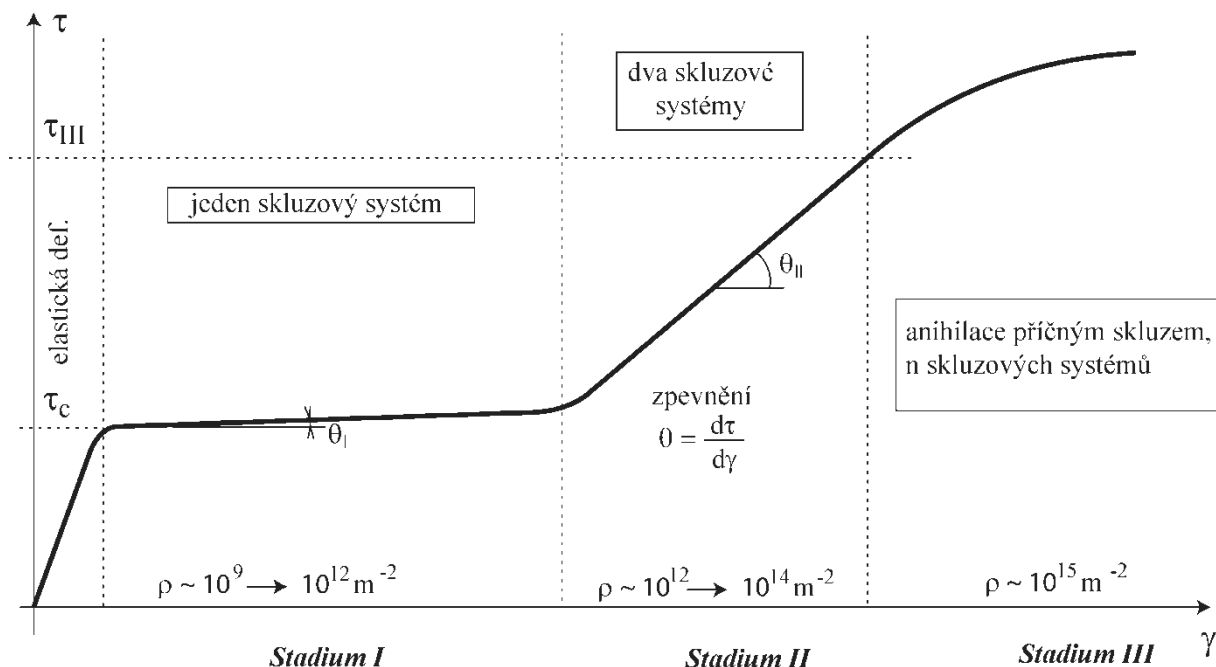
**Stádium I** (*stage I*, nebo také *easy glide*): Primární skluzový systém je jediným aktivním systémem. Zpevnění  $\theta_1$  (*work hardening* nebo *work hardening rate*) je slabé ( $\theta_1/G \sim 10^{-4}$ ) ale kladné díky i) poklesu  $m$  kvůli rotaci mřížky ( $\tau$  a  $\gamma$  mohou být vyjádřeny jako rovnice 5 a 6), ii) zvýšení dislokační hustoty a interakcím mezi dislokacemi na rovnoběžných skluzových rovinách. Mez kluzu je dána u čistých kovů počáteční dislokační hustotou, protože dislokace jsou jedinými překážkami v materiálu.

**Stádium II**: Konjugovaný skluzový systém se stává aktivním. Dvě dislokační rodiny se pohybují po dvou různých skluzových rovinách. Skluz se tak stává obtížnějším, protože při pohybu dislokací je nutné protínat dislokace na druhé skluzové rovině (dislokace "lesa"). Zpevnění je vysoké a konstantní. Dislokační hustota rychle roste.

**Stádium III**: Zpevnění postupně klesá kvůli stále častější anihilaci dislokací s pomocí příčného skluzu. Anihilací je zpomalený nárůst dislokační hustoty. Napětí  $\tau_{III}$  je považováno za napětí, nad kterým je příčný skluz za dané teploty a rychlosti deformace častý. Uspořádání dislokací v materiálu je složité. Dislokace se shlukují do "stěn" (*walls*). Tyto stěny obklopují přibližně

kulové objemy s nízkou dislokační hustotou, taková dislokační struktura je nazývána buňková struktura (*cells structure*).

Pokud má materiál vysokou tažnost, objevují se ještě další 2 stádia deformace: stádia IV a V. Doposud v literatuře nepanuje shoda o tom, jaké deformační mechanismy jsou v těchto stádiích rozhodující.



**Obrázek 2.8** Tři stádia deformace monokrystalu fcc orientovaného pro jednoduchý skluz (za nízké počáteční dislokační hustoty).

#### Cvičení 5:

1. Dokážete přepovědět tvar tahové křivky fcc kovu s orientací osy zatěžování  $\langle 110 \rangle$ ?
2. Shrňte různé způsoby zpracování experimentálních dat ( $F$ ,  $\Delta l$ ) při tahové zkoušce. Jaké veličiny je možné vypočítat a při jakých situacích se používají?

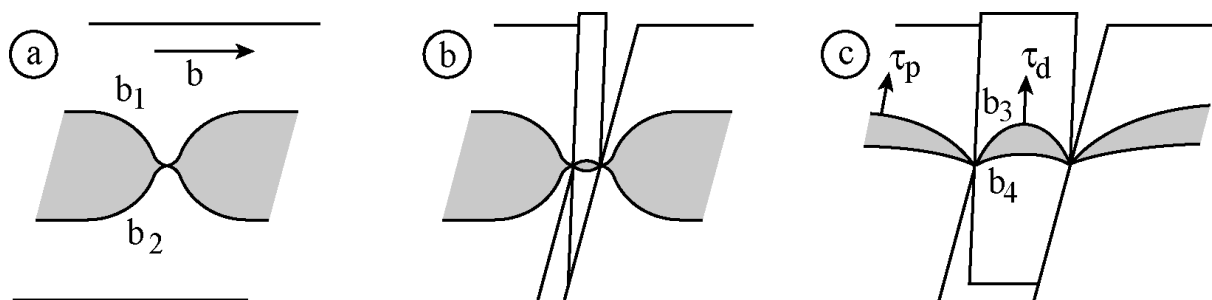
#### 2.1.6. Příčný skluz a rozštěpení dislokací

Šroubové dislokace mohou měnit svou skluzovou rovinu příčným skluzem (*cross-slip*, kap 8.1.2, skriptum "Dislokace"). U fcc kovů se dislokace pohybují skluzovým pohybem téměř výhradně po rovinách  $\{111\}$ . V ose zóny každého možného  $\vec{b} = a/2\langle 110 \rangle$  leží 2 roviny  $\{111\}$ , šroubová dislokace tedy může přecházet ze své primární roviny  $\{111\}$  do druhé roviny  $\{111\}$ , která se nazývá rovina příčného skluzu (*cross-slip plane*). Například, dislokace z primárního skluzového systému na obr. 2.7 mohou uskutečnit příčný skluz v rovině  $(1\bar{1}1)$ .

Víme, že úplné dislokace v fcc mřížce jsou rozštěpené na dvě Shockleyho parciální dislokace (SP) podle schématu (kap. 10, "Dislokace"):

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

Takto rozštěpená dislokace se může pohybovat skluzem v rovině (111), protože v ní leží  $\vec{b}$  obou parciálních dislokací. Pokud je (111) primární rovinou, pro dislokaci o  $\vec{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$  je rovinou příčného skluzu  $(1\bar{1}1)$ . Ani jedna z uvedených parciálních Shockleyho dislokací se však v této rovině nemůže pohybovat skluzem. Friedel a Escaig proto navrhli, že příčný skluz rozštěpených dislokací v fcc probíhá podle schématu na obr. 2.9.



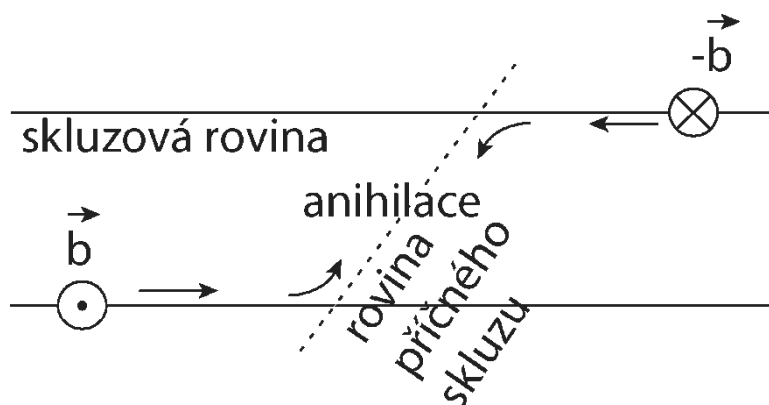
**Obrázek 2.9** Podle tohoto modelu se Shockleyho parciální dislokace  $\vec{b}_1$  a  $\vec{b}_2$  musí spojit (rekombinovat, *recombine*) alespoň v jednom bodě, obr. a). Dislokace se ihned rozštěpí v rovině příčného skluzu, obr. b), na dvě SP  $\vec{b}_3$  a  $\vec{b}_4$ . Na obrázku c je situace, kdy na tyto 4 dislokace působí napětí ( $\tau_p$  – smykové napětí v primární rovině,  $\tau_d$  – napětí v rovině příčného skluzu).

Pravděpodobnost rekombinace SP závisí zejména na 3 faktorech:

- energie vrstevné chyby (*stacking fault energy*) určuje rovnovážnou vzdálenost mezi SP. Čím je tato vzdálenost větší, tím méně pravděpodobná je jejich rekombinace a tím je také menší pravděpodobnost příčného skluzu. Snadný příčný skluz (*easy cross-slip*) se vyskytuje např. u Al ( $\gamma = 166 \text{ mJm}^{-2}$  – miliJoule/metr<sup>2</sup>), Ni ( $\gamma = 128 \text{ mJm}^{-2}$ ), obtížný (*difficult cross-slip*) u austenitických ocelí ( $\gamma = 10\text{-}15 \text{ mJm}^{-2}$ ) nebo Cu-Zn ( $\gamma = 11\text{-}25 \text{ mJm}^{-2}$ ).
- uspořádání na krátkou vzdálenost (*short range ordering*) mění lokálně energii vrstevné chyby a způsobuje, že šířka pásu vrstevné chyby je podél dislokace proměnná; v určitých místech je příčný skluz snazší než jinde.
- teplota zvyšuje energii kmitů mřížky, díky kterým SP mohou rekombinovat; teplota tedy usnadňuje příčný skluz. Příčný skluz je tedy tzv. tepelně aktivovaný proces (*thermally activated mechanism*).

Příčný skluz má důležité důsledky pro mechanické vlastnosti materiálů. Zejména:

- Pokud se dvě šroubové dislokace s opačným  $\vec{b}$  pohybují skluzem po rovnoběžných blízkých rovinách, mohou s pomocí příčného skluzu anihilovat (obr. 2.10). Snížení dislokační hustoty vede ke změkčení materiálu. Pokud je příčný skluz obtížný, k takové anihilaci nedochází často a třetí stádium na křivce na obr. 2.8 je posunuto k vyšším napětím.
- Pokud šroubová dislokace narazí ve své skluzové rovině na překážku (např. precipitát), může se jí vyhnout pomocí příčného skluzu. Pokud příčný skluz není možný, dislokace je buď zablokována, nebo potřebuje vyšší napětí pro překonání překážky.
- Při cyklické deformaci se dislokace pohybují ve skluzové rovině vpřed i vzad podle toho, jestli je vzorek zatěžován v tahovém nebo tlakovém půlcyklu. Pokud vynásobíme průměrnou plastickou deformaci v jednom cyklu celkovým počtem cyklů, kumulovaná hodnota plastické deformace může dosáhnout velmi vysokých hodnot (1000 – 10 000%). Dislokace mají tedy mnoho příležitostí se uspořádat do dobře definovaných 3D struktur (obr. 11.12, skriptum "Dislokace"). Takové struktury se podstatně liší u materiálů se snadným a obtížným příčným skluzem; jejich mechanické vlastnosti se odlišují také. U materiálů se snadným příčným skluzem stačí jeden dislokační zdroj v jednom zrně, aby dislokace postupně vyplnily celé zrno. Díky dislokačním reakcím a interakcím se postupně vytvoří dobře definované 3D dislokační uspořádání s nízkou energií (*3D low-energy dislocation structures*). Pokud příčný skluz není možný, dislokace se mohou pohybovat jen kupředu nebo zpět ve své skluzové rovině a nemají možnost se rozšířit ve směru kolmém na skluzovou rovinu. Dislokační struktura se skládá z tenkých vrstev s vysokou dislokační hustotou a širokých vrstev téměř bez dislokací; tzv. planární struktura (*planar structure*).



**Obrázek 2.10** Anihilace dvou šroubových dislokací s pomocí příčného skluzu.

Poznámka: Friedelův a Escaigův model příčného skluzu není jediný. Seegerův model předpokládá rekombinaci SP na delší vzdálenost, nikoli jen v jednom bodě; tento mechanismus vyžaduje více energie a pravděpodobně se neuskutečňuje. Fleischerův model bude vysvětlen ve cvičení.



## 2.2 Bcc kovy

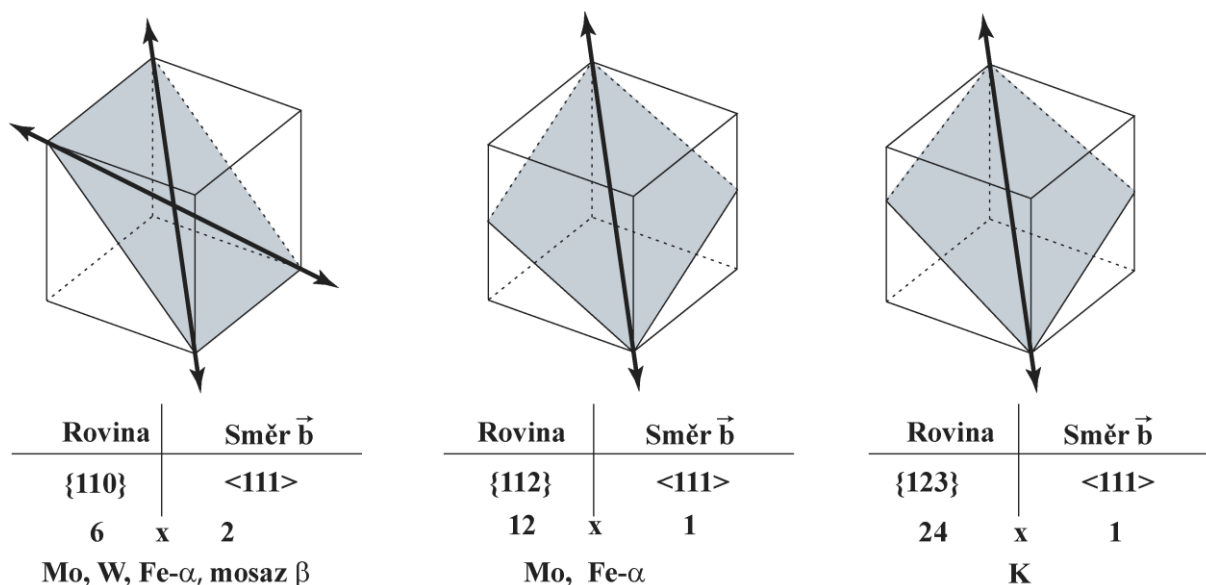
Mezi fcc a bcc kovy existují 2 zásadní odlišnosti:

- u bcc materiálů existuje mnohem větší množství skluzových systémů, které ovšem nejsou vzájemně zcela ekvivalentní;
- u bcc materiálů neexistuje energeticky výhodná možnost rozštěpení úplných dislokací na parciální, dislokace tedy nejsou rozštěpené. Kvantově-mechanické výpočty ovšem ukázaly, že jádro šroubové dislokace u bcc je rozšířené (*core spreading*) a toto rozšíření není planární, což má mimořádně důležité důsledky pro mechanické vlastnosti těchto materiálů.

### 2.2.1 Skluzové systémy

Vektor spojující nejbližší sousedy v mřížce bcc je typu  $a/2\{111\}$ ; dislokace s tímto Burgersovým vektorem jsou skutečně v bcc materiálech pozorovány téměř výhradně.

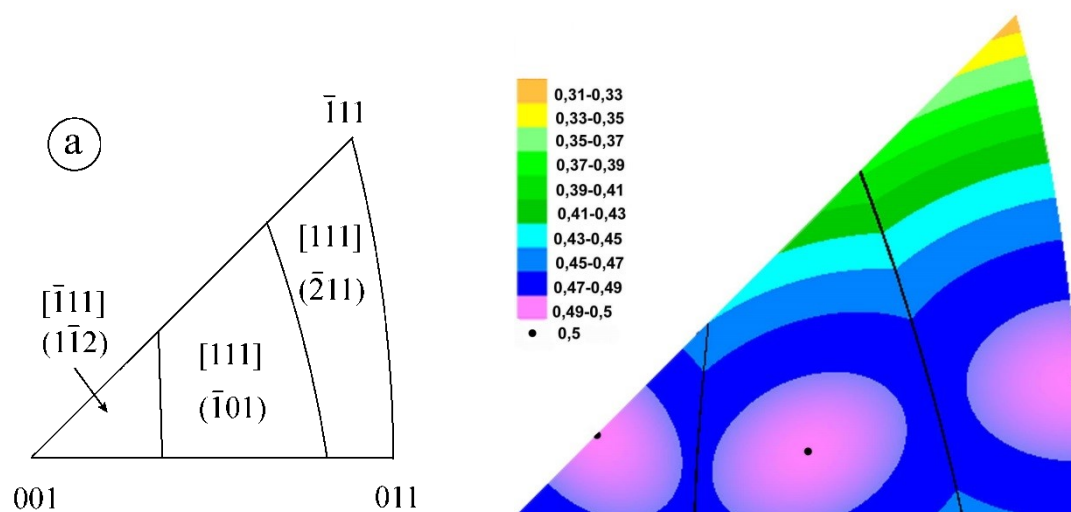
V ose zóny  $\langle 111 \rangle$  se nacházejí 3 druhy relativně hustě obsazených rovin:  $\{011\}$ ,  $\{112\}$  a  $\{123\}$ ; je pozorováno, že dislokace se pohybují skluzem v těchto třech rovinách. Kombinace  $\vec{b}$  s uvedenými rovinami ukazuje, že počet skluzových systémů je 48 (obr. 2.11). Pozorování ukazuje, že skluz po různých typech rovin není pro konkrétní materiál stejně výhodný. Pro posouzení, jestli se dislokace budou snáze pohybovat po rovinách  $\{110\}$  nebo např.  $\{112\}$  tedy nestačí jen porovnat příslušné Schmidovy faktory. V literatuře se uvádí, že důležitým parametrem pro volbu skluzové roviny je anizotropie elastických konstant.



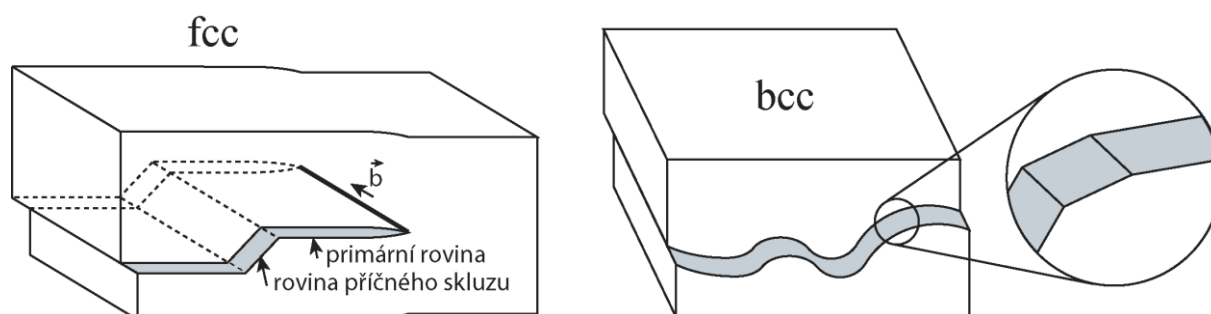
**Obrázek 2.11** Skluzové systémy u bcc kovů. U každého typu skluzové roviny jsou uvedeny kovy, které tyto roviny přednostně využívají.

Uvedeme příklad pro Fe: roviny  $\{110\}$  a  $\{112\}$  jsou nejčastěji aktivní. Pozorování ukazuje, že typ primární skluzové roviny záleží na orientaci osy zatěžování (obr. 2.12). Opačným příkladem je draslík, u kterého dislokace preferují skluz po rovinách  $\{123\}$ .

V reálném krystalu dislokace mění svoji skluzovou rovinu velmi často příčným skluzem, aby se vyhnuly lokalizovaným překážkám, nebo jinými slovy, vybírají si skluzovou rovinu podle lokálního stavu napětí. Skluzové čáry na povrchu (*slip lines*, *slip bands*) jsou často zakřivené, na rozdíl od fcc materiálů (obr. 2.13). Někdy se používá i termín "nekrystalografický skluz" – i když se dislokační skluz vždy musí uskutečňovat v určité krystalografické rovině; bez pozorování při dostatečném zvětšení tento krystalografický aspekt není zřejmý. Je evidentní, že je zde problém při přechodu od normálových veličin ( $\sigma$ ,  $\epsilon$ ) ke smykovým veličinám ( $\tau$  a  $\gamma$ , rovnice 1 až 4), protože neznáme s určitostí skluzový systém, pro který máme vypočítat Schmidův faktor.



**Obrázek 2.12** a) Skluzové systémy ve standardním trojúhelníku pro Fe, b) příslušný Schmidův faktor primárního skluzového systému; jsou uvažovány skluzové roviny typu  $\{110\}$  a  $\{112\}$ .



**Obrázek 2.13** Skluzové čáry u fcc a bcc.

#### Cvičení 6:

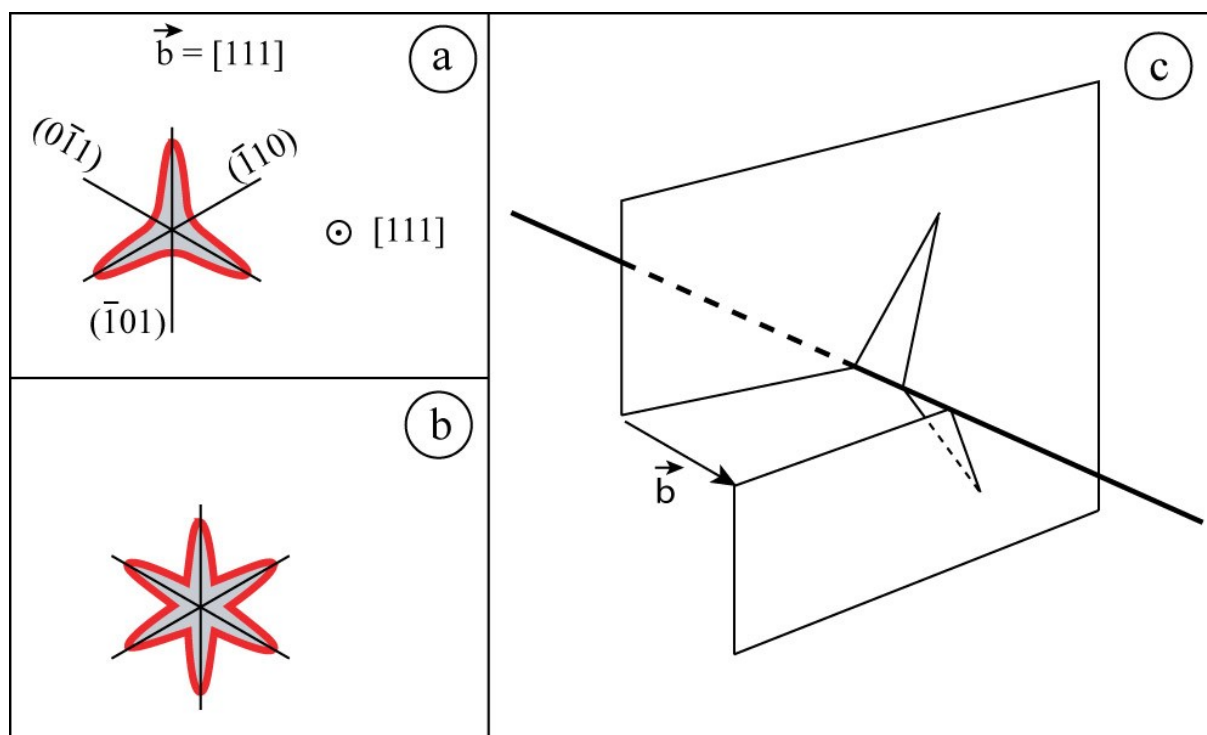
Najděte všechny možné roviny příčného skluzu pro šroubovou dislokaci v bcc materiálu. Primární skluzová rovina je  $(\bar{1}10)$ ,  $\vec{b} = a/2[111]$ .

### 2.2.2 Parciální dislokace v bcc

Dnes mezi odbornou komunitou panuje shoda, že:

- úplné šroubové dislokace v bcc jsou rozštěpené;
- šířka rozštěpení je velmi malá, srovnatelná s  $|\vec{b}|$ . V takovém případě se místo rozštěpení parciálních dislokací užívá spíše termín rozšířené jádro dislokace (*extended core*);
- jádro není rozštěpené v jedné rovině, nýbrž ve třech symetrických rovinách.

Konfigurace jádra dislokací byla teoreticky vypočítána několika vědeckými týmy metodou "ab initio" (z principů kvantové mechaniky). Nejčastěji se uvádí výsledky skupiny prof. Vítka, podle kterých je jádro dislokace v Fe rozštěpeno ve třech rovinách  $\{110\}$  (obr. 2.14 a). Podle nedávných výpočtů je konfigurace jádra u některých jiných bcc materiálů spíše podobná obrázku 2.14b.



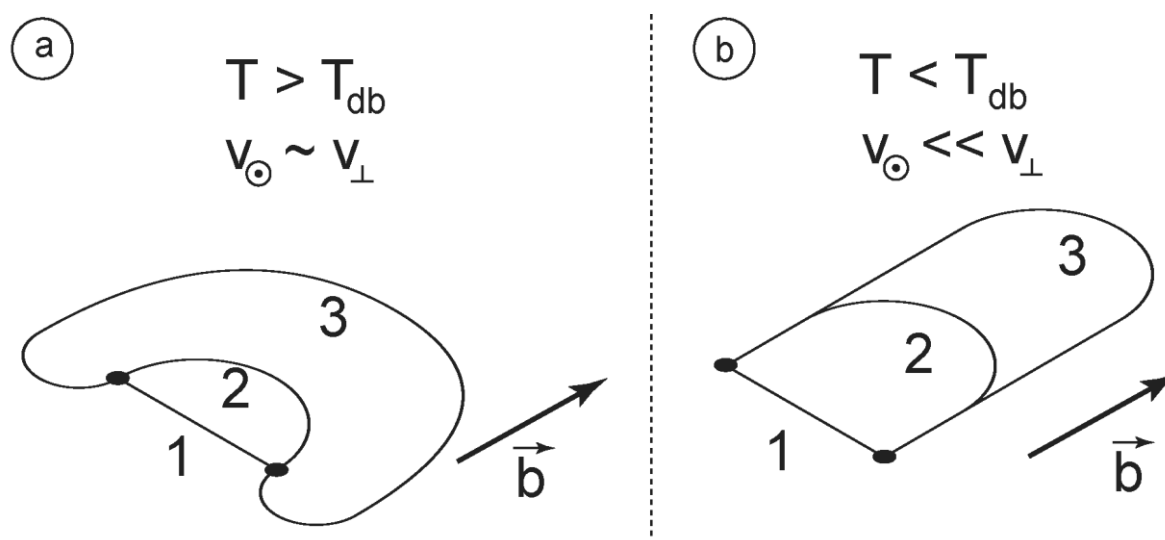
**Obrázek 2.14** Dvě konfigurace rozšířeného jádra šroubových dislokací v bcc a) "klasická" konfigurace, b) nedávné výsledky výpočtů ab initio. Atomy jsou přemístěny ze svých rovnovážných poloh v šedých zónách. c) Jádro rozšířené podle schématu a) v perspektivě.

### 2.2.3 Křehce – tvárný přechod

Jádro šroubové dislokace je tedy rozšířené ve třech nekoplanárních rovinách typu  $\{110\}$ , tedy rovinách ve kterých se skluz uskutečňuje nejčastěji. Aby se taková dislokace mohla pohybovat v jedné z těchto skluzových rovin, je nutné, aby se její jádro spojilo v úplnou dislokaci. Stejně jako v případě příčného skluzu rozštěpených dislokací, je rekombinace jádra

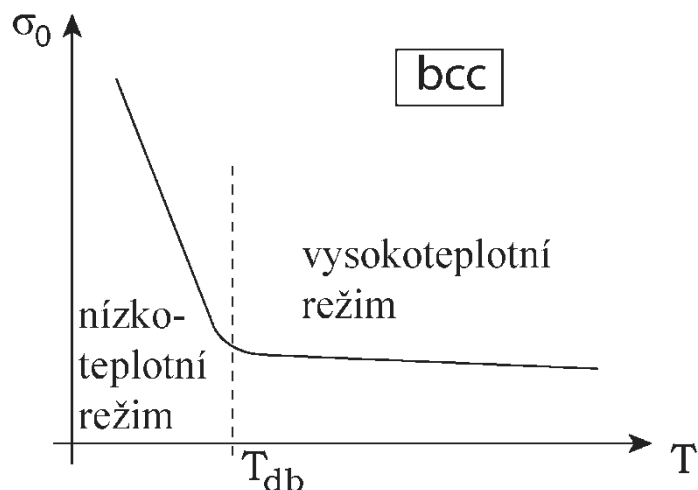
tepelně aktivovaným procesem, který je snadnější za vyšších teplot. U bcc kovů se proto pozorují 2 odlišná chování:

- při vysokých teplotách je energie tepelných kmitů dostatečná k rekombinaci jádra šroubových dislokací. Dislokace všech charakterů se pohybují snadno skluzem a materiál má vzhledem k velkému počtu skluzových systémů vysokou schopnost plasticity.
- za nízkých teplot není tepelná energie mřížky dostatečná k úplné rekombinaci jádra šroubových dislokací a je třeba vyššího aplikovaného napětí, aby se jádro spojilo a šroubový segment se mohl pohybovat skluzovým pohybem. Skluzový pohyb všech segmentů je nutný k plastické deformaci materiálu; bez skluzu šroubových segmentů například nefugují dobře Frankovy-Readovy zdroje (obr. 2.15). Je zvykem uvádět, že plasticita je řízena pohybem těch nejpomalejších segmentů. Mez kluzu tedy s klesající teplotou výrazně roste (obr. 2.16). Materiál se stává křehkým a objevují se další mechanismy plastické deformace, dvojčatění (*twinning*) nebo eventuálně i napětově indukovaná martenzitická fázová transformace.

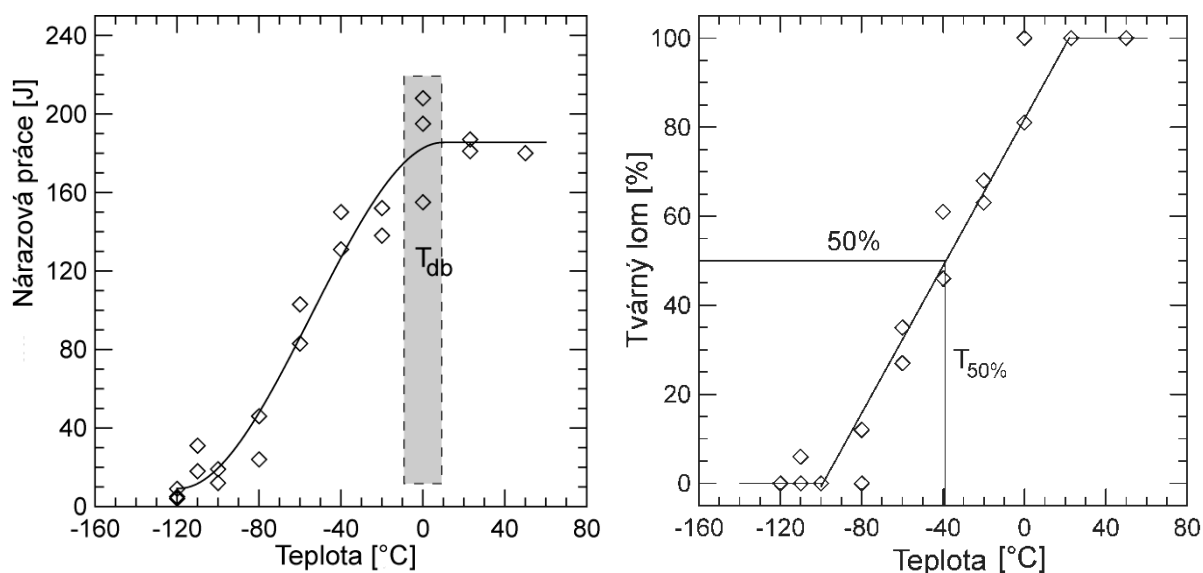


**Obrázek 2.15** a) Za vysoké teploty mají dislokace všech charakterů podobnou mobilitu, FR zdroje fungují normálně. b) Pokud se šroubové segmenty nemohou pohybovat, FR zdroj vyprodukuje jen jedinou dvojici rovnoběžných šroubových nepohyblivých dislokací.

Při snižování teploty tedy dochází od určité kritické teploty  $T_{db}$  k postupné ztrátě houževnatosti materiálu (*ductile to brittle transition*). Tento jev je velmi známý především u feritických ocelí (*ferritic steels*). Na obr. 2.17a je vynesena práce nutná k přeražení vzorku při Charpyho zkoušce vrubové houževnatosti, která výrazně klesá při snižování teploty  $0^{\circ}\text{C}$ . Je také zřejmé, že určení  $T_{db}$  není příliš přesné. Jiný způsob stanovení kritické teploty je ukázán na obr. 17b. Na lomové ploše je možné rozlišit plochy, které vznikly štěným, resp. tvárným lomem.  $T_{50\%}$  je teplota při které je na lomové ploše 50% štěpných fazet.



**Obrázek 2.16** Mez kluzu v závislosti na teplotě u bcc kovů.



**Obrázek 2.17** Křehce – tvárný přechod u feritické oceli (0.09 hm% C, 1.18 hm% Mn). a) Práce nutná k přeražení vzorku při Charpyho zkoušce, b) Procento tvárného lomu na lomové ploše (data I. Dlouhý, M. Holzmann, Z. Chlup).

Poznámky :

1. Přechod od houževnatého k zcela křehkému stavu probíhá na teplotním intervalu cca 100°C. Existuje několik definic kritické teploty  $T_{db}$ , která navíc záleží i na typu provedené zkoušky (tah, ohyb, torze, Charpyho zkouška).  $T_{db}$  je možné definovat jako:

- minimální teplotu, od které začíná klesat práce nutná k přeražení vzorku při Charpyho zkoušce (obr. 2.17a);
- teplotu, při které lomová plocha ukazuje určité procento tvárného lomu (100%, 50%, 0%, obr. 2.17b);

- teplotu, při které je zaručena určitá hodnota nárazové práce při zkoušce rázem v ohybu (20J, 28J, 35J, 42J, 60J apod.), případně kdy je nárazová práce rovná střední hodnotě mezi vysokoteplotní a nízkoteplotní úrovni.
- teplotu, při níž klesne medián faktoru lomové houževnatosti  $K_{Ic}$  na hodnotu  $100 \text{ MPa m}^{1/2}$ .

2. Až do začátku 20. století byl známý pouze jediný typ oceli: feritická ocel s vysokým obsahem uhlíku. Tato ocel byla používána na tak rozdílné aplikace jako např. Eiffelova věž, železnice na Jungfrauoch nebo Titanic.  $T_{db}$  této oceli se pohybovala mezi  $+10^\circ\text{C}$  až  $+30^\circ\text{C}$  (podle různých autorů). Příčinou takto vysoké hodnoty byl vysoký obsah nečistot: kyslíku vytvářejícího precipitáty, síry zkřehčující hranice zrn nebo fosforu který usnadňuje iniciaci trhlin. Ani moderní oceli nemají  $T_{db}$  příliš vzdálenou od  $0^\circ\text{C}$ ; pro běžnou konstrukční ocel se uvádí  $T_{db} = -15^\circ\text{C}$ .

3. Georges Charpy uveřejnil článek s popisem zkoušky vrubové houževnatosti v r. 1901, bylo tedy možné zjistit závislost nárazové práce na teplotě pro ocel, ze které byl vyroben Titanic (spuštěn na vodu v r. 1912). Systematické testování materiálů z hlediska křehkého lomu však začalo až během 2. světové války, kdy narychlo vyrobené dopravní lodě *Liberty Ships* praskaly i zakotvené v přístavu. Dnes je Charpyho zkouška využívána nejen pro zjišťování vlastností materiálů určených pro aplikace za nízkých teplot (plynovody na Sibíři či Aljašce), ale také pro měření růstu  $T_{db}$  po ozáření materiálu v jaderných reaktorech nebo budoucích fúzních reaktorech.

### 2.3. Hcp kovy

Podle poměru  $c/a$ , nejbližší sousedé jsou spojeni vektorem (viz. skriptum "Krystalová struktura"):

- $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$  pro  $c/a > 1.633$ ;
- $1/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$  pro  $c/a < 1.633$ .

Tyto dva Burgersovy vektory se skutečně pozorují. První z nich je vektor ležící v průsečíku basální (kompaktní) roviny (*basal plane*) a stěny Bravaisovy buňky (prizmatické roviny, *prismatic plane*, obr. 2.18). Dislokace s tímto  $\vec{b}$  ležící v basální rovině jsou geometricky shodné s dislokacemi v fcc. Jsou také rozštěpené ve dvě Schockleyho parciální dislokace s vrstvenou chybou mezi nimi (Schockleyho dislokace mají v hcp struktuře indexy  $\vec{b} = 1/3\langle 1\bar{1}00 \rangle$ ). Zásadní odlišnost od fcc struktury spočívá v tom, že u hcp existuje jen jedna ekvivalentní kompaktní rovina. Příčný skluz dislokací mezi kompaktními rovinami jako u fcc tedy není možný. Dislokace se však mohou pohybovat skluzovým pohybem i v jiných rovinách (obr. 2.18).

- basální skluz (*basal slip*): uspořádání atomů kolem dislokací a jejich rozštěpení je stejné jako u fcc. Je to často nejsnadnější možnost skluzového pohybu dislokací v hcp.
- prizmatický skluz (*prismatic slip*): u některých materiálů (např. Zr) je energie vrstvené chyby v prizmatické rovině menší než v basální rovině.

Dislokace jsou rozštěpené v prismatické rovině a nemohou se tedy pohybovat skluzem v basální rovině.

- pyramidální skluz (*pyramidal slip*): je několik dalších možností skluzu v těchto dvou typech rovin.

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

**Obrázek 2.18** Skluzové systémy u hcp.

Dislokace u řady hcp materiálů se mohou snadno pohybovat pouze v basální rovině; skluz v ostatních rovinách je obtížný nebo nemožný. Pokud je osa zatěžování kolmá nebo rovnoběžná s basální rovinou, basální skluz se nemůže aktivovat ( $m = 0$ ). V takovém případě se tento materiál může deformovat:

- buď s využitím méně výhodných skluzových systémů;
- nebo jiným mechanismem plastické deformace, tj. dvojčatěním;
- nebo nebude mít schopnost plastické deformace, čili bude křehký.

Je pozorováno, že materiály, které mají poměr os  $c/a$  větší, než je ideální poměr pro vrstvení tuhých koulí ( $\sqrt{8/3} = 1.633$ ) preferují basální skluz; basální rovina je nejhustěji obsazena a daný atom spojuje s nejbližšími sousedy vektor  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ , tj. energeticky nejvýhodnější  $\vec{b}$  také leží v basální rovině.

Naopak, pokud je  $c/a < \sqrt{8/3}$ , nejbližší sousedé jsou ve směrech  $a/2\langle 01\bar{1}2 \rangle$ . Dislokace se pohybují snáze v pyramidálních a prismatických rovinách, ne ovšem bez výjimky (viz. Tab. 2.1). U Ti ( $c/a = 1.59$ ) je pozorován skluz v basální, prismatické i pyramidální rovině. Model pevných koulí tedy nestačí k vysvětlení volby aktivních skluzových rovin a  $\vec{b}$  mobilních dislokací.

Pravděpodobně je nutné vzít v úvahu také rozštěpení úplných dislokací  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  na parciální dislokace. V basální rovině je rozštěpení stejné jako u fcc v rovině  $\{111\}$ , vznikají dvě Shockleyho dislokace spojené pásem vrstevné chyby. V případě krátké osy  $c$  se dislokace mohou rozštěpit v prismatické rovině a tím znemožnit skluz v basální rovině.

prvek	Zr	Be	Ti	Be	Mg	Co	Zn	Cd
c/a	1.59	1.58	1.59	1.58	1.625	1.633	1.85	1.89
skluz	prismat	basální	basální prismat pyram.	basální	basální pyram.	basální	basální	basální

**Cvičení 7:** Odhadněte tvar tahové křivky monokrystalu hcp (tj. ekvivalent obrázku 2.11) výrazně preferujícího basální skluz.

## 2.4. Další materiály

Pohyb dislokací je mechanismus odpovědný za plastickou deformaci velké většiny dalších materiálů, jako jsou kovalentní krystaly, iontové krystaly, některé polymery, tekuté krystaly, kvazikrystaly ... Dokonce i plasticita amorfních materiálů bývá popisována s pomocí defektů analogických k dislokacím v krystalických strukturách. V další části uvedeme jen některé zajímavé a důležité příklady dislokací v dalších materiálech.

### 2.4.1. Kovalentní krystaly

Prvky patřící mezi polovodiče (Si, Ge) krystalují v diamantové struktuře. Skluzové systémy jsou stejné jako v případě fcc. Kovalentní vazby (*covalent bonds*) jsou směrové a velmi pevné. Energie jádra dislokace  $W_c$  je vyšší než v případě kovů. Pro vytvoření dislokace je proto nutná vyšší energie. Z tohoto důvodu je možné vyrobit monokrystal Si zcela bez dislokací, což není možné u žádného kovu. Za pokojové teploty není možné vytvořit dislokaci v Si pomocí deformace; je tudíž možné řezat plátky Si z velkého monokrystalu diamantovou pilou a nebo je lámat bez rizika, že v materiálu vzniknou dislokace.

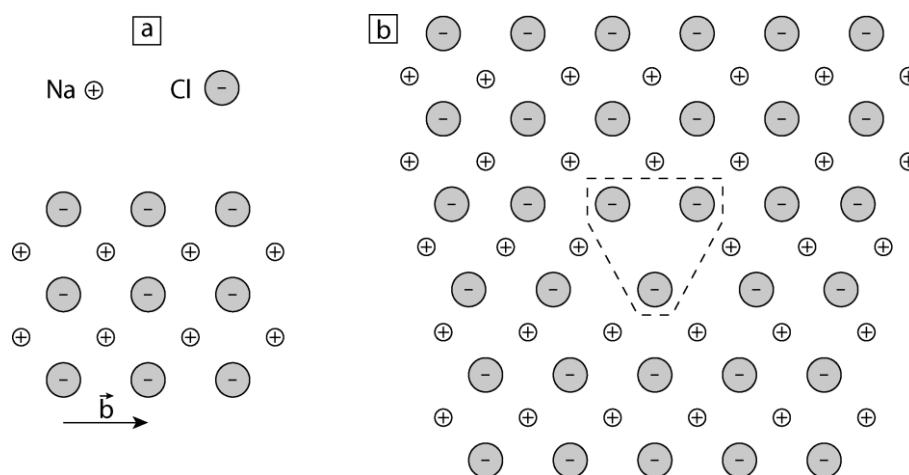
Kovalentní vazby lze jen obtížně přerušit během pohybu dislokace. Za pokojové teploty je proto pohyb dislokací téměř nemožný. Dislokace potřebují silnou tepelnou aktivaci ke svému pohybu. Křemík je proto křehký až do 900°C, Ge do ~700°C.

Ve složených polovodičích (*composed semiconductors*) jako jsou GaAs, InP, apod. jsou kovalentní vazby navíc elektricky polarizované; hovoříme o ionokovalentní vazbě (*ionocovalent bonds*). Mechanické vlastnosti jsou podobné elementárním polovodičům.



### 2.4.2. Iontové krystaly

Vlastnosti iontové vazby (*ionic bond*) jsou podobné jako vazby kovalentní. Navíc jsou  $\bar{b}$  i  $W_c$  velké ( $\bar{b}$  musí spojovat dva stejné atomy, avšak v těchto materiálech jsou nejbližší sousedé typicky atomy jiného druhu) a dislokace vytvářejí ve svém okolí elektrický náboj – viz obr. 2.19. Dislokace proto reagují i s elektrickým nebo magnetickým polem. Jejich mobilita může být dokonce výrazně zvýšena osvětlením materiálu (světlo jsou elektromagnetické vlny); jedná se o tzv. fotoplastický jev (*photoplastic effect*) pozorovaný např. u ZnO nebo CuCl.



**Obrázek 2.19.** Hranová dislokace v krystalu kuchyňské soli. a) Burgersův vektor, b) záporně nabitá dislokace.

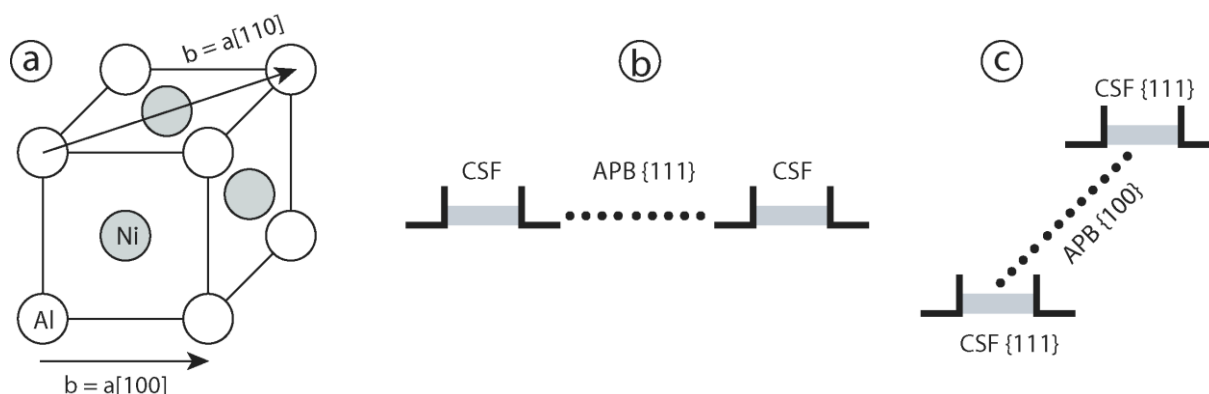
### 2.4.3 Uspořádané slitiny: příklad Ni<sub>3</sub>Al

Ve slitinách složených z atomů Ni a Al jsou vazby Ni-Al energeticky výhodnější než vazby Ni-Ni nebo Al-Al. Pokud je chemické složení slitiny 75 at.% Ni, 25 at.% Al, rovnovážná fáze krystaluje v uspořádané fcc struktuře, ukázané na obr. 2.20. Materiály, které mají přesně definovaný poměr atomů a zvláštní uspořádání jsou nazývány intermetalika (*intermetallics*). Protože atomy Ni a Al zaujímají přesně definované polohy v krystalové mřížce, používá se také označení "uspořádané slitiny" (*ordered alloys*). Pokud není chemické složení přesně stechiometrické, dokonalé chemické uspořádání na dlouhou vzdálenost nemůže být dodrženo. Nicméně, lokálně budou mít atomy tendenci navazovat přednostně energeticky výhodné vazby a tvořit skupiny ideálně uspořádaných atomů; jedná se o uspořádání na krátkou vzdálenost (*short range ordering*).

Nejkratší možný Burgersův vektor úplné dislokace je  $\bar{b} = a\langle 001 \rangle$ . Ve skutečnosti jsou pozorovány dislokace o  $\bar{b} = a\langle 110 \rangle$ . Tyto úplné dislokace mají tedy  $\bar{b}$  dvakrát větší než běžné dislokace v fcc a jsou z tohoto důvodu nazývané superdislokace (*superdislocations*, viz. též obr. 2.20 a 11.13 - 11.15 ve skriptu "Dislokace"). Superdislokace jsou v rovině  $\{111\}$  rozštěpené na 4

Schockleyho parciální dislokace. Taková konfigurace je energeticky výhodnější než úplná dislokace s  $\vec{b} = a\langle 001 \rangle$ . Mezi SP se nacházejí dva typy planárních poruch:

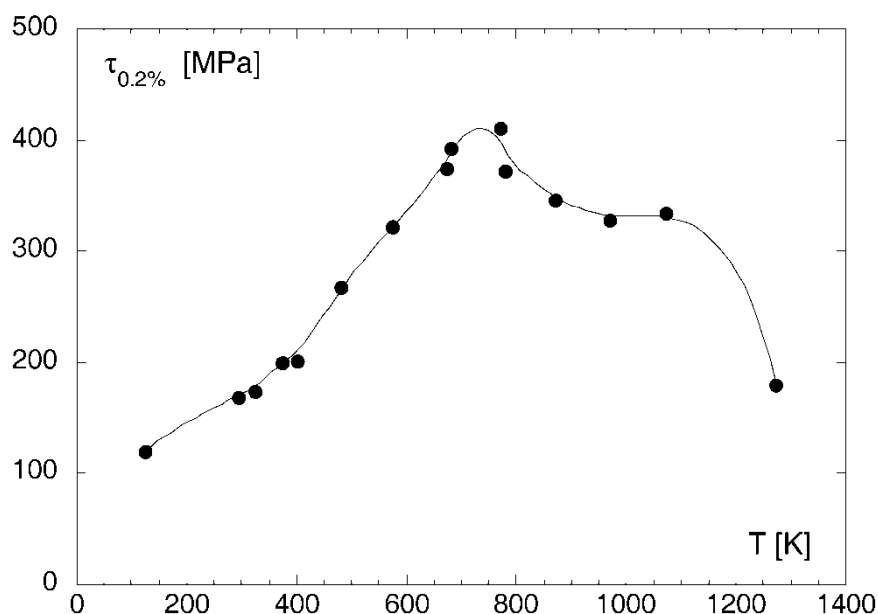
- komplexní vrstevná chyba (*complex stacking fault, CSF*), je plošná porucha analogická k vrstevné chybě u fcc materiálů (kap. 10, skriptum "Dislokace"), kromě toho je ještě porušeno ideální chemické uspořádání nad a pod skluzovou rovinou;
- antifázové rozhraní (*antiphase boundary, APB*), kde se atomy nacházejí na krystalograficky správných pozicích, ovšem se špatným chemickým uspořádáním.



**Obrázek 2.20** Struktura intermetalika  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Superdislokace jsou rozštěpeny na 4 Shockleyho parciální dislokace. b) Pokud je jádro superdislokace rozštěpené v rovině  $\{111\}$ , je superdislokace mobilní. c) Zakotvená Kearova – Wilsdorfova dislokace.

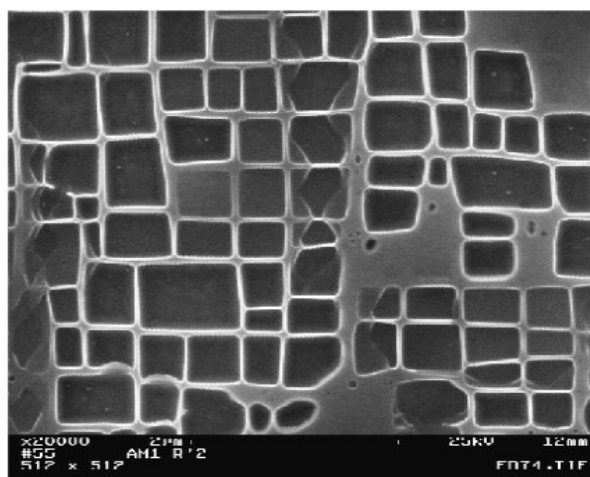
Přechod od pohyblivé konfigurace jádra superdislokace na obr. 2.20b do konfigurace energeticky výhodnější, avšak nepohyblivé skluzem (obr. 2.20c), nazývané Kearova-Wilsdorfova zakotvená dislokace, je příčinou teplotní anomálie skluzového napětí. U běžných materiálů klesá mez kluzu s teplotou. Pokud požadujeme dobrou mechanickou pevnost materiálu za vysoké teploty, je mez kluzu za pokojové teploty tak vysoká, že je materiál křehký, tj. nepoužitelný pro běžné aplikace (např. keramika). Naopak, materiály tvárné za pokojové teploty mají příliš malou pevnost za vysokých teplot (např. oceli, hliníkové slitiny).

Na obr. 2.21 je ukázán anomální nárůst kritického skluzového napětí u  $\text{Ni}_3\text{Al}$  v určitém teplotním intervalu. Tento materiál tedy má výbornou mechanickou pevnost až do  $\approx 1000^\circ\text{C}$ , a přitom je dobře tvárný za pokojové teploty.



**Obrázek 2.21** Kritické skluzové napětí při zkoušce v kompresi jako funkce teploty pro monokrystal  $\text{Ni}_3(\text{Al}, 3 \text{ at.}\% \text{ Hf})$ . Orientace osy zatěžování  $\langle 123 \rangle$ .

Kompozity tvořené precipitáty uspořádané fáze typu  $\text{Ni}_3\text{Al}$  v neuspořádané matici Ni - Al (a dalšími mnoha příměšovými prvky) se nazývají superslitiny (*superalloys*, obr. 2.22). Jsou využívány pro aplikace vyžadující dobré mechanické vlastnosti, zejména odolnost proti creepu za vysokých teplot (např. lopatky turbín vojenských letadel, lopatky plynových turbín).



**Obrázek 2.22** Mikrostruktura superslitiny. Kubické precipitáty zaujmají ~ 70% objemu.

### 3. POLYKRYSYALY

#### 3.1 Mikroplastická a makroplastická

Pro průmyslové aplikace jsou, až na několik extrémních výjimek, používány polykrystalické materiály (*polycrystals*). Každé zrno má svoji specifickou krystalografickou orientaci vzhledem k ose zatěžování a tedy jiný Schmidův faktor primárního skluzového systému. Pokud během tahové zkoušky zvyšujeme napětí, dislokace se začnou pohybovat nejprve v nejvýhodněji orientovaných zrnech, v okamžiku, kdy  $m\sigma = \tau_c$ . Dislokace jsou ve svém skluzovém pohybu omezeny hranicemi zrn. Plastická deformace celého vzorku je malá, na makroskopické křivce je obtížně detekovatelná. Hovoříme o mikroskopické mezi kluzu (*microscopic yield point*). Obvykle bývá 3-4 x nižší než  $R_{0.2}$ .

Makroskopická mezi kluzu  $R_{0.2}$  (nebo  $\sigma_y$ , *yield point*) je dosažena v okamžiku, kdy se plastická deformace rozšíří na (téměř) všechna zrna v materiálu. Hranice zrn představují problém při šíření plastické deformace. Dislokace nemůže přejít snadno přes hranici, protože její  $\vec{b}$  neodpovídá v sousedním náhodně orientovaném zrně směru mezi nejbližšími sousedními atomy.

#### 3.2 Von Misesova podmínka

Pokud se zrno deformuje plasticky, a pokud z pozorování víme, že na hranicích zrn nevznikají trhliny, sousední zrna musejí být schopny se přizpůsobit deformaci zrna. Tenzor deformace má obecně 6 nezávislých komponent. Pokud připustíme, že plastická deformace probíhá za konstantního objemu, součet prvků v diagonále je nulový a počet nezávislých komponent tenzoru deformace se sníží na 5. Skluz dislokací v jednom skluzovém systému způsobuje deformaci krystalu v jednom směru. Von Misesova podmínka kompatibility deformace na rozhraní (hranice zrn nebo fázové rozhraní apod.) tedy říká:

Aby byla zajištěna kompatibility deformace na rozhraních v materiálu, je nutné, aby byl materiál schopen se plasticky deformovat nejméně 5 nezávislými způsoby.

Pokud krystal nemá k dispozici 5 nezávislých skluzových systémů (např. hexagonální kovy), jsou možné dvě situace:

- buď je materiál schopen se plasticky deformovat ještě jiným způsobem než dislokačním skluzem (tj. dvojčatěním, fázovou transformací, pokluzu po hranicích, difúzními mechanismy za zvýšených teplot),
- nebo dekoheze na hranicích zrna vede k předčasnému lomu polykrystalu a materiál se jeví jako křehký, přestože se v něm dislokace mohou pohybovat skluzem.

Dislokace, které musí být přítomny v blízkosti hranice zrna, aby zajistily kompatibility plastické deformace sousedního zrna, jsou nazývány geometricky nezbytné dislokace (*geometrically necessary dislocations*).

### 3.3 Sachsův a Taylorův faktor

Poměrně velké úsili bylo věnováno více autory pokusům najít vazbu mezi makroskopickou mezí kluzu  $\sigma_y$  polykrystalu a kritickým skluzovým napětím  $\tau_c$  monokrystalu stejného materiálu. Tito autoři se snažili vypočítat více způsoby střední nebo charakteristickou hodnotu Schmidova faktoru a pomocí ní vypočítat  $\sigma_y$  při znalosti  $\tau_c$  (nebo naopak).

Sachs udělal při tomto výpočtu dva předpoklady: i) krystalografická orientace zrn je náhodná a ii) pro každé zrno uvažoval pouze aktivaci primárního skluzového systému. Za těchto předpokladů je průměrná hodnota Schmidova v případě fcc mřížky 0.446 (je to průměr hodnot vynesných na obr. 2.3). Je zvykem uvádět převrácenou hodnotu tohoto průměru. Nazývá se Sachsův faktor:

$$1/\bar{m} = M_{\text{Sachs}} = 2.24$$

Taylor provedl tento výpočet pro náhodnou krystalografickou orientaci, ale v každém zrně uvažoval aktivaci 5 skluzových systémů podle von Misesovy podmínky. Pro 12 skluzových systémů u fcc existuje 792 možných kombinací, jak vybrat 5 aktivních systémů. Taylor pro jejich výběr zvolil energetické kritérium a našel tak charakteristickou hodnotu Schmidova faktoru 0.326. Převrácená hodnota tohoto čísla se nazývá Taylorův faktor:

$$M_{\text{Taylor}} = 3.067$$

Existují další komplikovanější přístupy. Tyto faktory se používají při srovnávání vlastností monokrystalů a polykrystalů. Ve starších učebnicích bývá těmto výpočtům a jejich dalšímu upřesňování věnován větší prostor, ale experimentální pozorování jasně ukazují, že  $\sigma_y$  a  $\tau_c$  nelze jednoduše spojit pouze s využitím  $M$  (raději zde tuto jednoduchou rovnici ani neuvádíme). Znamená to, že polykrystal se chová komplikovaněji, než aby ho bylo možné považovat za agregát jednotlivých monokrystalů o známých vlastnostech. Zanedbali bychom přitom vliv hranic zrn, který zanedbatelný není. Hodnota  $\sigma_y$  by bez zavedení dalších korekčních parametrů také nezávisela na velikosti zrna.

### 3.4 Hallův-Petchův vztah

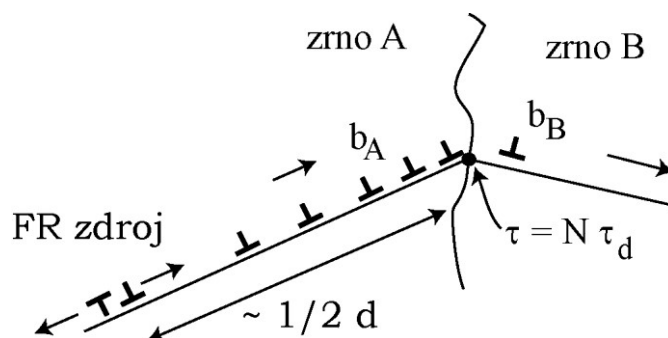
Jedna z nejpečlivěji ověřených a nejlépe fungujících empirických rovnic v metalurgii je jednoduchý vztah mezi mezí kluzu a velikostí zrna nazývaný podle Halla a Petche (HP):

$$\sigma_y = A + k \frac{1}{\sqrt{d}} \quad (21)$$

$A$  a  $k$  jsou materiálové parametry, které je nutné určit z experimentu;  $d$  je střední velikost zrna. Parametr  $A$  je zhruba roven mezí kluzu polykrystalu s velkými zrny (řádově mm).

Teoretické vysvětlení vztahu (21) stejně jako oblast jeho platnosti jsou v současnosti stále tématy otevřená diskusi. Standardně je HP vztah

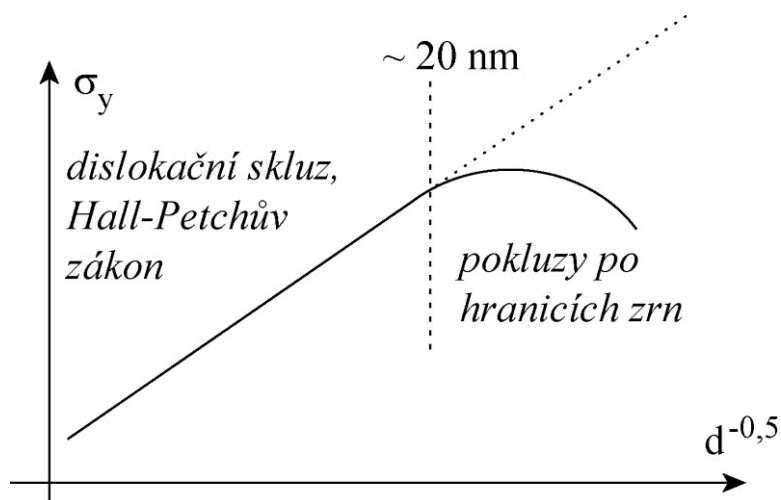
vysvětlován pomocí nakupení dislokací (*pile up*) před hranicí zrna. Uvažujme zrno A na obr. 3.1, ve kterém je v činnosti Frank-Readův zdroj. Ve vedlejším zrně B se dislokace zatím nepohybují, protože buď průmět vnějšího napětí do roviny a směru skluzu nedosáhl kritického skluzového napětí díky nevýhodné krystalografické orientaci (případ, kdy jsou v zrně přítomny dislokace primárního skluzového systému), anebo v něm nebylo dosaženo napětí nutné k aktivaci dislokačních zdrojů. Zdroj v zrně A emituje dislokace, které jsou zastaveny hranicí zrna. Nakupení těchto dislokací jednak zvyšuje lokální napětí v sousedním zrně (v rámci anizotropické elasticity lze snadno spočítat, že toto napětí roste přímo úměrně počtu nahromaděných dislokací), ale zároveň působí zpětně na FR zdroj a způsobí posléze jeho zastavení. Mez kluzu v této představě odpovídá situaci, kdy i v zrně B začne probíhat plastická deformace. K tomu je potřeba zvýšit lokální napětí o určitou hodnotu odpovídající určitému počtu dislokací v nakupení. Pokud je zrno malé, stačí k zastavení činnosti zdroje méně nakupených dislokací, než v případě velkého zrna a velké vzdálenosti mezi zdrojem a hranicí. Aby zdroj v malém zrně vyprodukoval dostatečné množství dislokací potřebné k iniciaci plastické deformace v zrně B, je potřeba zvýšit aplikované napětí a obnovit tak činnost zdroje. Aplikované napětí potřebné k rozšíření plastické deformace z výhodně orientovaných zrn na všechna zrna tedy v tomto modelu závisí na průměrné velikosti zrna a je úměrné  $1/\sqrt{d}$ . Toto vysvětlení není přijímáno bez výjimky. Nakupení dislokací, které tento model předpokládá, není vždy v polykrystalických materiálech s použitím transmisní elektronové mikroskopie pozorováno. Existují i jiné modely, které vysvětlují rovnici (21) pomocí jiných mechanismů. Je tedy možné, že u různých materiálů jsou detaily šíření plastické deformace v okolí meze kluzu přes hranice zrn rozdílné a jen náhodou vedou ke stejné kvalitativní závislosti mezi velikostí zrna a mezí kluzu.



**Obrázek 3.1** Standardní vysvětlení platnosti Halla-Petchova vztahu.

Rostoucí zájem o nanokrystalické materiály otevřel otázku mezí platnosti HP vztah. Pro velmi malá zrna předpovídá rovnice (21) vysoké hodnoty meze kluzu. Z experimentu víme, že mez kluzu např. čisté Cu se může měnit podle velikosti zrna od  $\sim 1$  MPa (vyžíhaný monokrystal) až po více než 1 GPa (velikost zrna  $\sim 100$  nm). V literatuře existují práce, které potvrzují platnost HP vztahu až do velikosti zrna zhruba 20 nm; v literatuře dosud nepanuje shoda o chování materiálů s ještě menší velikostí zrna.

Nejpečlivější měření ukazují, že při dalším snižování velikosti zrna mez kluzu naopak klesá (obr. 3.2). Materiál o tak malé velikosti zrna lze připravit jen velmi obtížně; lze tedy uzavřít, že HP vztah je u běžných materiálů vždy platný.



**Obrázek 3.2** Dolní mez platnosti HP vztahu se odhaduje kolem 20 nm.

Poznámky :

1. Z obrázku 3.1 je zřejmé, že vzdálenost  $d$  je průměrná vzdálenost, kterou se dislokace mohou pohybovat mezi nepřekonatelnými rozhraními, kterými kromě hranice zrna může být i mezifázové rozhraní anebo rovina dvojčatění. Ve složitějších materiálech např. s lamelární strukturou nebo s více fázemi může být definice  $d$  obtížnější.

2. První, kdo si povšiml úměrnosti mezi mezí kluzu a  $1/\sqrt{d}$ , byl Frank Nabarro.

## 4. TEORIE TEPELNÉ AKTIVACE

Některé procesy při pohybu dislokací jsou ovlivňovány teplotou, např. příčný skluz dislokací v fcc mřížce nebo pohyb šroubových dislokací v bcc mřížce. Zvýšení teploty obvykle usnadňuje nebo umožňuje tyto děje; hovoříme o tepelně aktivovaných procesech. V této kapitole nejprve vysvětlíme rozklad napětí na tepelně aktivovanou efektivní složku a složku interní a poté načrtneme základní myšlenky teorie tepelné aktivace.

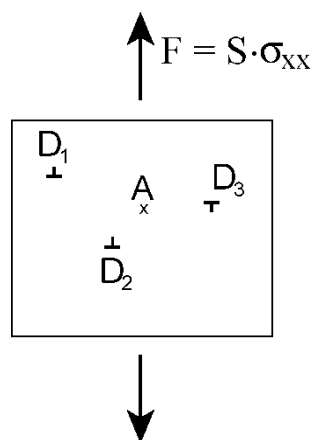
### 4.1 Efektivní a vnitřní napětí

Rozklad napětí působícího v krystalu na efektivní složku (*effective stress*) a vnitřní složku (*internal stress*) není snadný na pochopení; je to ale koncept nutný k porozumění chování materiálů během plastické deformace. Uvedeme čtyři přístupy k tomuto problému:

- lokální a vnitřní napětí definované v jednom bodě;
- makroskopické efektivní a vnitřní napětí, které se projevuje při mechanických zkouškách (tj. průměrované přes celý objem zkušební části vzorku);
- statistický přístup dělicí materiál na tzv. mikroobjemy;
- alternativní definici využívající závislosti efektivního napětí na teplotě.

#### a) lokální hodnoty

Pro tahovou zkoušku se často uvádí, že tenzor napětí je homogenní (ve všech bodech vzorku je stejný) a má jednoduchou formu: jen složka  $\sigma_{xx}$  je nenulová. Toto je přesně splněno pouze v případě dokonalého krystalu neobsahujícího žádný defekt. Uvažujme nyní vzorek, ve kterém se nachází 3 dislokace  $D_1$ ,  $D_2$  a  $D_3$  (obr. 4.1). Víme, že každá dislokace kolem sebe vytváří pole napětí dlouhého dosahu (skriptum Dislokace, kap. 4). Tenzor napětí v bodě A je tedy součtem tenzoru napětí aplikovaného vnější silou  $F$  ( $\sigma_{xx} = F/S$ , ostatní  $\sigma_{ij}$  jsou nulové) a tří tenzorů napětí vzniklých kvůli přítomnosti jednotlivých dislokací. Je zřejmé, že tenzor napětí v jednom bodě  $\underline{\sigma}_{lok}$  nemusí mít ani jednu nulovou složku a je v každém bodě vzorku jiný.



**Obrázek 4.1** V reálných krystalech je lokální tenzor napětí ovlivňovaný přítomností defektů a je v každém bodě jiný.



Pokud v daném bodě sečteme napětí pocházející od všech defektů v krystalu (dislokace, precipitáty, substituční či intersticiální atomy, hranice zrn, fázová rozhraní atd.), dostaneme tenzor napětí pocházející ze zdrojů napětí uvnitř krystalu. Nazýváme ho lokální vnitřní (nebo interní) napětí. Skutečné napětí v daném bodě  $\bar{\sigma}_{\text{lok}}$  je pak součtem vnitřního a aplikovaného napětí  $\bar{\sigma}_a$ :

$$\bar{\sigma}_{\text{lok}}(\vec{r}) = \bar{\sigma}_a + \sum_{\text{defekty}} \bar{\sigma} \quad (7)$$

Pokud se v daném bodě nachází pohyblivá dislokace, bude se pohybovat pod vlivem  $\bar{\sigma}_{\text{lok}}$ , nikoli pouze pod vlivem aplikovaného napětí.

Předpokládejme nyní, že na vzorek nepůsobí žádná vnější síla a pro zjednodušení uvažujme pouze složku napětí  $\tau$  (napětí v rovině skluzu rovnoběžné s  $\vec{b}$ ). Lokální vnitřní napětí  $\tau_{\text{lok}}$  je tedy rovno součtu tenzorů napětí od překážek a mění svoji velikost i orientaci s polohou v krystalu. Vzorek má volné povrchy a z teorie elasticity vyplývá, že na povrchu tělesa musejí být složky napětí kolmé k volnému povrchu (normálové nebo smykové) nulové. V literatuře se většinou používá silnější tvrzení: střední hodnota vnitřního napětí  $\tau_{\text{lok}}$  v celém objemu vzorku je nulová. Skutečně, viděli jsme, že pole napětí vytvářené dislokací je symetrické; pokud je příspěvek napětí od této dislokace k  $\tau_{\text{lok}}$  kladný v jednom poloprostoru, je symetrický a záporný v druhém poloprostoru. Uvedené tvrzení je tedy snadno pochopitelné.

#### b) makroskopické hodnoty

Méně snadno pochopitelný je ovšem fakt, že přítomnost vnitřních napětí se projevuje v makroskopické napěťové odezvě vzorku na vnější deformaci, přestože střední hodnota těchto napětí je nulová. Např. při tahové zkoušce vyžíhaných kovů dochází k výraznému deformačnímu zpevnění, tj. k nárůstu napětí potřebného k plastické deformaci. Je to dáno nárůstem vnitřních napětí spojených s multiplikací dislokací během deformace. Během mechanických zkoušek jsou měřeny průměrné hodnoty napětí a deformace v měrné délce vzorku. Tato měření ukazují, že "makroskopické" vnitřní napětí není nulové a vždy působí proti aplikovanému vnějšímu napětí. To znamená, že:

- při mechanických zkouškách, např. tahové zkoušce, se při měření neprojevuje střední hodnota vnitřního napětí  $\tau_{\text{lok}}$  podél skluzové roviny, ale nějaká jiná hodnota;
- materiály se během deformace chovají tak, že se v nich vytváří vnitřní napětí, které působí proti napětí aplikovanému.

Velmi zjednodušený model, který nicméně kvalitativně vysvětluje toto chování, vypracovali Conrad, Seeger, Schoeck, Jonas, Gibbs a další. Je schématicky znázorněn na obr. 4.2. Podle tohoto modelu lze  $\tau_{\text{lok}}$  rozložit na dvě složky:

i) složku působící na dlouhou vzdálenost (*long range stress fields*) která se mění (více či méně) periodicky s amplitudou, která je (více či méně) konstantní. Tato amplituda, tj. maximální hodnota napěťového pole

dlouhého dosahu orientovaná proti aplikovanému napětí, je v tomto modelu tím, co je v experimentu měřeno jako makroskopické vnitřní napětí  $\tau_i$ . Napěťová pole dlouhého dosahu jsou způsobeny typicky dislokacemi, zejména jejich shluky.

ii) V materiálu ale mohou existovat překážky, které brání dislokaci v pohybu pouze ve velmi omezeném objemu (precipitáty, substituční atomy, individuální sekundární dislokace protínající primární skluzovou rovinu, Peierlsovy bariéry apod.); budeme je nazývat lokální překážky (*localised obstacles*), které vytvářejí napěťová pole krátkého dosahu.

Rozdíl mezi aplikovaným napětím a makroskopickým vnitřním napětím se nazývá makroskopické efektivní napětí  $\tau^*$  :

$$\tau_a = \tau_i + \tau^* \quad (19)$$

Během plastické deformace musejí dislokace překonat oba typy napěťových polí. Při teplotě absolutní nuly by aplikované napětí  $\tau_{a(0K)}$  nutné pro pohyb dislokací muselo být stejně velké jako součet amplitud obou napěťových polí. Při vyšších teplotách mohou náhodné kmity mřížky dodat dislokaci část energie potřebné k překonání překážky; hovoříme o tepelné aktivaci (*thermal activation*). Aplikované napětí  $\tau_a$ , při kterém dochází k plastické deformaci (skluzové napětí, *flow stress*), tedy může být nižší než  $\tau_{a(0K)}$ .

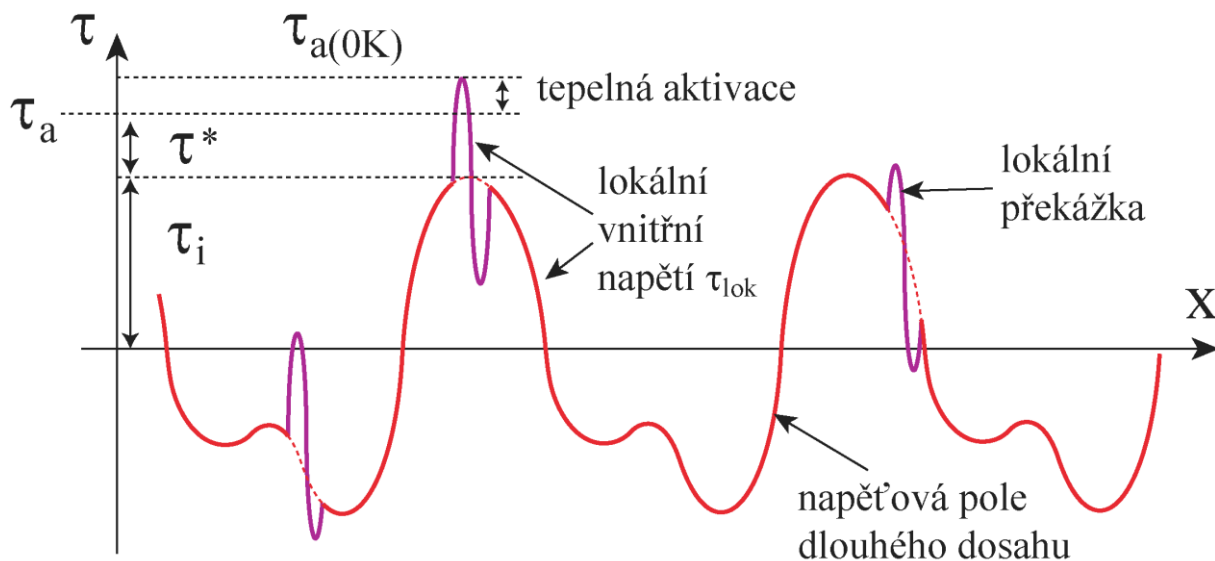
Makroskopické efektivní napětí je tedy napětím potřebným k překonání lokálních překážek, sníženým o příspěvek od tepelné aktivace.  $\tau^*$  závisí především na teplotě a rychlosti deformace (bude vysvětleno v kap. 4.2). Může a nemusí se měnit během plastické deformace, podle toho, jestli se během plastické deformace mění charakter lokálních překážek, např. pokud roste hustota sekundárních dislokací protínajících primární skluzovou rovinu.

Je evidentní, že průběh napěťových polí dlouhého dosahu není v reálném vzorku periodický a že ani jejich maxima nejsou všude stejná. Makroskopické vnitřní napětí souvisí s velikostí a rozložením těchto maxim, ale čemu přesně jeho velikost odpovídá, není jednoduché stanovit.

**Shrnutí:** Makroskopické vnitřní napětí je dáno výhradně mikrostrukturou materiálu, která se vyvíjí během plastické deformace, lze je zhruba srovnat s maximální hodnotou napěťových polí dlouhého dosahu.

Makroskopické efektivní napětí je napětím potřebným k překonání lokálních překážek. Je tepelně aktivované, tj. závisí na teplotě, rychlosti deformace a může záviset i na plastické deformaci:

$$\tau_a = \tau_i(\gamma_p) + \tau^*(T, \dot{\gamma}_p, \gamma_p)$$



**Obrázek 4.2** Vnitřní a efektivní makroskopické napětí podle Schoecka.  $\tau_{a(0K)}$  je aplikované napětí nutné k aktivaci příslušného skluzového systému při  $T = 0\text{ K}$ ,  $\tau_a$  je aplikované napětí při daných  $T$  a  $\dot{\gamma}_p$ .

#### c) Statistický přístup

Lokální vnitřní napětí popisuje stav napětí v jednom bodě vzorku. Pokud bychom chtěli použít  $\tau_{i\text{ lok}}$  k popisu vnitřních napěťových polí, museli bychom znát tenzor napětí  $\sigma_{\text{lok}}$  v každém bodě vzorku, což není možné. Makroskopické vnitřní napětí  $\tau_i$  je zase jednou jedinou skalární hodnotou, která charakterizuje napěťová pole v celé měrné části vzorku, přestože se tato napětí mohou v jednotlivých částech vzorku lišit. Statistický přístup ležící mezi těmito extrémy zvolil Masing a výrazně ho dopracoval Polák. V tomto modelu je vzorek pomyslně rozdělen na mikroobjemy, které jsou tak malé, že je v nich možné vnitřní napětí považovat za konstantní. Mikroobjemy jsou tedy menší než velikost zrna. Mikroobjemy s malým vnitřním napětím se budou deformovat již při nízkých  $\tau_a$ , mikroobjemy s vysokým vnitřním napětím se budou deformovat pouze elasticky až do vysokých hodnot  $\tau_a$ . Plastická deformace se tak bude při vzrůstajícím  $\tau_a$  aktivovat ve stále více mikroobjemech; v tomto modelu je tedy možné materiál popsat distribuční křivkou těchto mikroobjemů, charakterizovaných vnitřním napětím. Tuto distribuční křivku lze podle Poláka experimentálně určit.

#### d) Definice $\tau_i$ a $\tau^*$ založená na teplotní závislosti

Co se stane, pokud provedeme tahové zkoušky na materiálu s vysokým efektivním napětím a se stejnou mikrostrukturou a tedy stejným  $\tau_i$  při různých, narůstajících teplotách, a budeme sledovat např. napětí na mezi kluzu? Tepelná aktivace bude schopná "pomoci" dislokacím při překonávání lokálních překážek stále vyšší energií,  $\tau^*$  tedy bude rychle klesat a mez kluzu také. Naproti tomu  $\tau_i$  např. na mezi kluzu bude stejná; charakterizuje

napěťová pole od defektů ve vzorcích, jejichž mikrostruktura je shodná. Za dostatečně vysoké teploty (tj. desítky stupňů Kelvina pro vyžíhané fcc kovy s velmi slabými lokálními překážkami, tisíce stupňů pro silné lokální překážky jako např. u keramik) dojde k tomu, že teplotní aktivace sama plně dostačuje k překonání lokálních překážek a  $\tau^* \sim 0$  MPa. Naproti tomu napěťová pole dlouhého dosahu nelze pomocí tepelné aktivace překonat; objem materiálu, který by musel být náhodnými fluktuacemi kmitů mřížky "vybuzen" je příliš velký, než aby tento proces byl pravděpodobný. Pokles meze kluzu s teplotou se tedy zastaví (nebo přesněji výrazně zpomalí) a skluzové napětí bude rovné vnitřnímu napětí. Na úroveň skluzového napětí na mezi kluzu pak budou mít vliv spíše další efekty, zejména teplotní závislost elastických konstant.

Závislost meze kluzu na teplotě byla naměřena pro velké množství materiálů. Úroveň napětí, při kterém nemá teplota zatěžování už výrazný vliv na mez kluzu je označována jako atermální napětí (*athermal stress*); složka napětí, která může být pomocí tepelné aktivace odstraněna je nazývána tepelně aktivovatelné napětí (*thermally activated stress*). Pro určení těchto dvou složek napětí z experimentu není třeba uvažovat žádný konkrétní mechanismus plastické deformace. Pokud ovšem víme, že plasticita v daném materiálu a za daných podmínek deformace ( $T, \dot{\gamma}_p$ ) je přenášena skluzem dislokací a pokud věříme modelu na obr. 4.2, atermální napětí je totožné makroskopickým vnitřním napětím a tepelně aktivovatelná složka s napětím efektivním.

#### Cvičení 8 (důležité!) :

Doplňte do obrázku 2.16  $\tau_i$  a  $\tau^*$ . Jakému procesu odpovídá efektivní napětí?

#### e) Měření $\tau_i$ a $\tau^*$ a interpretace výsledků

Existuje několik druhů experimentů, z nichž můžeme velikost  $\tau_i$  a  $\tau^*$  odhadovat. Žádný z nich není normovaný a žádný z nich není vědeckou komunitou přijímán bez výhrad. Pravděpodobně nejméně kritiky je vznášeno proti tzv. *strain dip* testu. Během tahové (nebo kompresní) zkoušky je náhle aplikované napětí sníženo o  $\Delta\sigma$  a následuje krátký interval, kdy je napětí udržováno konstantní (krátký creepový test). Pokud je  $\Delta\sigma$  malé, vzorek se plasticky deformuje ve stejném směru jako během předchozí tahové deformace. Pro určité  $\Delta\sigma$  je plastická deformace během následujícího creepu nulová; toto  $\Delta\sigma$  odpovídá velikosti efektivního napětí.

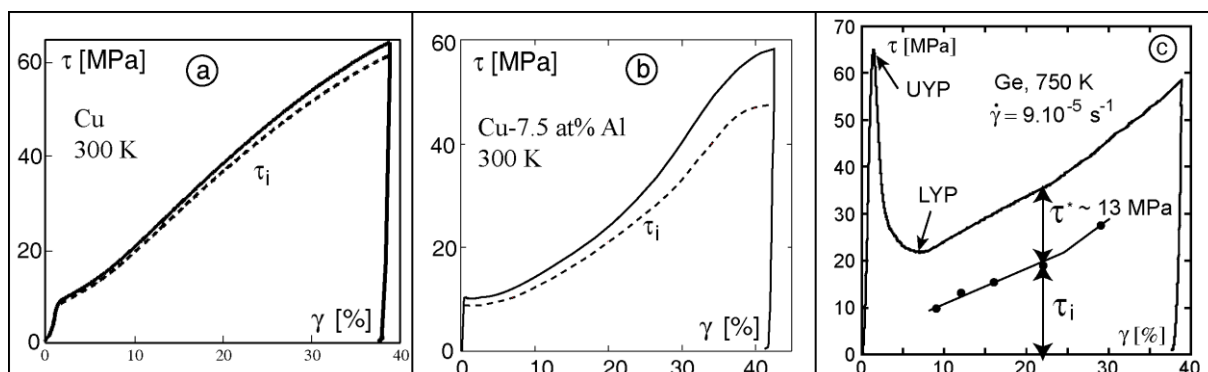
$\tau_i$  a  $\tau^*$  změřené touto metodou pro 3 druhy monokrystalických materiálů se shodnou osou zatěžování  $\langle 123 \rangle$  jsou ukázány na obr. 4.3. Plná čára je  $\tau_a$ , čárkovaná čára  $\tau_i$ , rozdíl mezi dvěma liniemi odpovídá  $\tau^*$ .

- a) čistá Cu (obr. 4.3a): Aplikované napětí je téměř shodné s  $\tau_i$  – skluzové napětí v tomto případě odpovídá napětí potřebnému k překonání napěťových polí dlouhého dosahu vytvořeného přítomností jiných dislokací. Lokální překážky jsou velmi slabé avšak pozorovatelné. Napětí potřebné k jejich překonání pomalu narůstá během deformace. Jedná se zřejmě o sekundární dislokace, které protínají primární rovinu. Takovým dislokacím se říká dislokace lesa (*forest dislocations*)

– jejich hustota narůstá s deformací a protože napětí potřebné k jejich překonání je nepřímo úměrné vzdálenosti mezi překážkami,  $\tau^*$  narůstá.

b) Cu-Al (obr. 4.3b):  $\tau^*$  v tuhém roztoku Al v matici Cu, je vyšší než u čisté mědi. Tření mřížky již není zanedbatelné kvůli přítomnosti substitučních atomů Al. Tření mřížky ovšem nezávisí na deformaci a na obr. 3.3b je vidět, že  $\tau^*$  s deformací roste. Hodnotu  $\tau^*$  tedy ovlivňují přinejmenším dva procesy: tření mřížky a protínání dislokací lesa. Jako v případě obr. 3.3a, jsou patrná tři stadia deformace fcc monokrystalů orientovaných pro jednoduchý skluz.

c) Ge, 750K (obr. 4.3c): Polovodiče jsou křehké za pokojové teploty, jejich plastické vlastnosti mohou být studovány pouze za zvýšených teplot. Na počátku deformace se objevuje velice výrazná ostrá mez kluzu. Poté mají obě složky napětí,  $\tau^*$  a  $\tau_i$ , přibližně stejnou velikost.  $\tau^*$  se s deformací příliš nemění, je pravděpodobně dáno překonáváním Peierls-Nabarroových bariér, tedy třením mřížky (kap. 5.2.2.1). Je známo, že Peierls-Nabarrovo napětí je u materiálů s kovalentní, ionokovalentní a iontovou vazbou velmi vysoké.



**Obrázek 4.3** Experimentální hodnoty  $\tau_i$  a  $\tau^*$ , měřené metodou strain dip testu na monokrystalech během kompresní zkoušky (O. Coddet, T. Kruml, G. Saada, J.L. Martin).

#### Poznámky:

1. V literatuře se často uvádí, že efektivní napětí je pouze funkcí  $T$  a  $\dot{\gamma}_p$ ; jeho závislost na deformaci je však ve většině případů nezanedbatelná, podobně jako v případě Cu nebo Cu-Al na obr. 4.3.
2. Podle Cottrella lze aplikované napětí rozložit na 3 složky, kde 3. složkou je "viskózní napětí", časově proměnné, projevující se jen u některých materiálů a typicky za vyšších teplot.

## 4.2. Tepelná aktivace a rychlost dislokací

Některé procesy jsou usnadněny tepelnými vibracemi mřížky. Představme si dislokaci, která při svém skluzovém pohybu narazí na překážku malého rozměru (překážka A na obr. 4.5a). Každou překážku můžeme charakterizovat napětím  $\tau_0$ , potřebným k tomu, aby ji dislokace překonala za absolutní nuly (v tuto chvíli není nutné blíže určit překážku ani mechanismus, jakým ji dislokace překonává). Pokud smykové napětí  $\tau$ , které působí na dislokaci a tlačí ji proti překážce, je menší než  $\tau_0$ , pravděpodobnost, že dislokace překoná překážku, je:

- nulová za teploty  $T = 0$  K,
- nenulová pro  $T > 0$  K.

Atomy za nenulové teploty kmitají kolem svých rovnovážných poloh s Debyeovou frekvencí ( $\nu_D \sim 10^{13}$  Hz). Je možné uvažovat, že dislokace činí pokusy o překonání překážky se stejnou frekvencí. Pravděpodobnost překonání překážky v určitém časovém intervalu,  $P$ , je daná Arrheniovým vztahem:

$$P \approx \nu_D \cdot e^{-\frac{\Delta G}{kT}} \quad (7)$$

kde  $\Delta G$  je velikost energetické bariéry nutné k překonání překážky, nazývané aktivační energie (*activation energy*).

Pokud předpokládáme, že doba, kterou dislokace potřebuje k pohybu mezi dvěma překážkami (A a D na obr. 4.5a), je zanedbatelná vzhledem k času potřebnému k překonání překážky, je rychlost dislokace v daná rozložením překážek ve skluzové rovině a je přímo úměrná  $P$ :

$$v = v_0 \cdot e^{-\frac{\Delta G}{kT}} \quad (8)$$

$v_0$  je preexponenciální faktor, který obsahuje  $\nu_D$  a závisí na rozložení překážek.

Závislost rychlosti mobilních dislokací na aplikovaném napětí je v rovnici (8) skrytá ve funkci  $\Delta G$ . Síla, kterou na dislokaci působí překážka, je schematicky znázorněná na obr. 4.5b. Energie potřebná k překonání překážky je rovná ploše pod křivkou,  $\Delta G_0$ . Část této energie, přibližně rovná  $\tau b/d$ , je dodaná působícím napětím, tedy ve formě mechanické energie. Zbytek,  $\Delta G$ , musí být dodán tepelnou aktivací. Je možné ukázat (příloha A2), že:

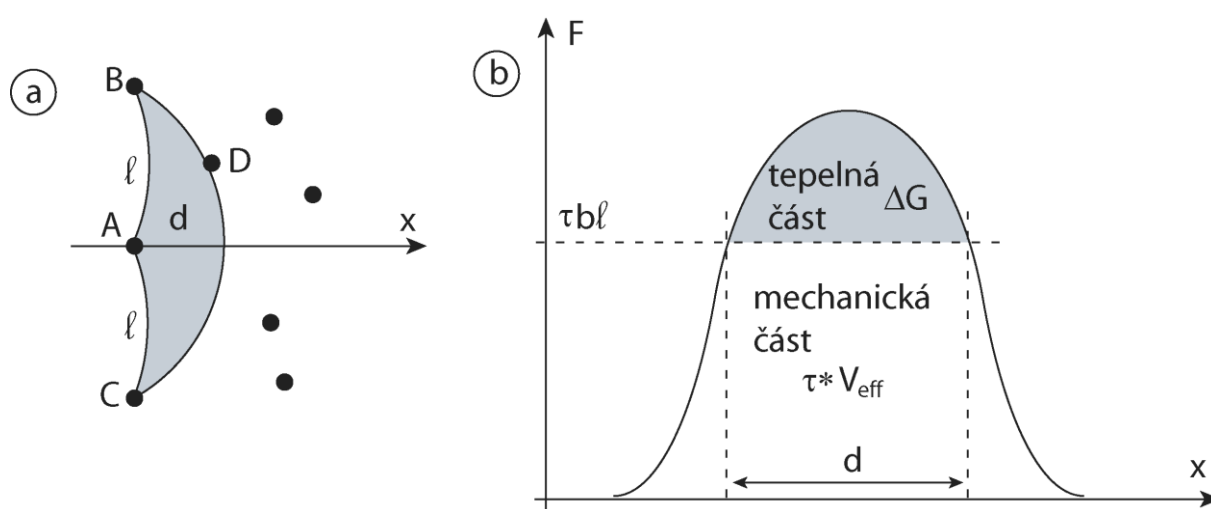
$$\Delta G = \Delta G_0 - \tau \cdot V_{\text{eff}} \quad (9)$$

kde  $V_{\text{eff}}$  je efektivní aktivační objem (*effective activation volume*); tato veličina má důležitý fyzikální význam.  $\tau^*$  je makroskopické efektivní napětí. Efektivní aktivační objem bývá definován dvěma způsoby: buďto termodynamicky jako

$V_{\text{eff}} = -\left(\frac{\partial(\Delta G)}{\partial \tau^*}\right)_T$  (viz příloha A2), nebo geometricky jako objem, ve kterém došlo k vzájemné změně pozic atomů během tepelně aktivovaného procesu.

$$V_{\text{eff}} \approx \ell \cdot b^2 \quad (10)$$

Speciálními mechanickými zkouškami jako je relaxace napětí nebo náhlé změny rychlosti deformace lze měřit  $V_{\text{eff}}$  a při sérii takových zkoušek za různých teplot i  $\Delta G_0$  (střední hodnoty v celém vzorku). Tak lze získat informace o povaze ( $\Delta G_0$ ) a rozložení ( $V_{\text{eff}}$ ) překážek, které jsou rozhodující pro plastickou deformaci materiálu.



**Obrázek 4.5** Překonání lokální překážky dislokací. a) Dislokace překonala překážku A a je zastavena překážkou D. b) Síla působící na dislokaci překážkou jako funkce pozice dislokace. Celková plocha pod křivkou,  $\Delta G_0$ , je aktivační energie nutná k překonání překážky za nulového působícího napětí.

Kombinací (8) a (9) získáváme:

$$v = v_0' \cdot \exp\left(\frac{\tau^* V_{\text{eff}}}{kT}\right) \quad (11)$$

Z fyzikálního hlediska je zřejmě přesnější rovnice (12), kde je exponenciála nahrazena hyperbolickým sinem:

$$v = v_0 \cdot \sinh\left(\frac{\tau^* V_{\text{eff}}}{kT}\right) \quad (12)$$

Hyperbolický sinus je pro velké hodnoty argumentu prakticky totožný s funkcí  $\exp$ , ale je nulový pro nulový argument; předpovídá tedy nulovou rychlost dislokací při nulovém působícím efektivním napětí.

Místo rovnic (11) nebo (12) se pro vyjádření závislosti rychlosti dislokací na napětí a teplotě často používá rovnice (13):

$$v = A \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right)^m ; v = A \left( \frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^m \quad (13)$$

$m$  se nazývá napěťový exponent, konstanty  $\tau_0$  a  $\sigma_0$  jsou rovny 1MPa (jsou zavedeny do rovnice proto, aby rozměr parametru  $A$  byl jednoduchý),  $A$  závisí silně na  $T$ . Za rovnicí (13) se neskrývá žádná fyzikální úvaha, jde o čistě empirický vztah. Rovnice (13) se nejčastěji vyjadřuje, na rozdíl od (11) a (12), jako funkce aplikovaného napětí  $\tau$  (nebo  $\sigma$  v případě polykrystalu) i když lze nalézt i variantu s efektivním napětím. Pokud je  $\tau$  blízko kritickému skluzovému napětí  $\tau_c$ , malá změna v napětí může způsobit velkou změnu v rychlosti dislokací (z téměř nuly na vysokou rychlost). Koeficient  $m$  může být pro kovové materiály v této oblasti velmi vysoký, v literatuře lze najít hodnoty 10 až 50. Naopak v případě krystalů s kovalentní vazbou je  $m$  nízké, rovné 1 pro Si a zhruba 2 pro Ge.

#### Souvislost teploty zatěžování a rychlosti deformace

Během svého skluzu ve skluzové rovině se dislokace pohybují v proměnném poli napětí a překonávají lokální překážky. Čas, který potřebují k překonání každé takové překážky je, za běžných podmínek, mnohem delší než čas, po který se pohybují mezi překážkami; pravděpodobnost překonání překážky za jednotku času je dána rovnicí (7). Pokud rychlost plastické deformace vzroste, tedy pokud zatěžovací stroj zvýší rychlost přemístění pístu či traverzy, dislokace se musí pohybovat polem překážek rychleji, tj. musí překonávat jednotlivé překážky rychleji (předpokládáme zde stejnou hustotu mobilních dislokací před a po zvýšení rychlosti zatěžování). Aby dislokace strávila pokusy o překonání překážky kratší čas, je nutné zvýšit efektivní napětí.

Zvýšení rychlosti deformace má často podobný vliv na mechanické vlastnosti materiálů jako snížení teploty.



## 5. VAZBA MEZI MIKROSVĚTEM A MAKROSVĚTEM

Budeme nyní hledat vazby mezi ději na atomární úrovni a mechanickými vlastnostmi, které měříme v experimentech. Omezíme se na dvě nejdůležitější makroskopické veličiny: napětí a deformaci, a pokusíme se je propojit s ději při skluzovém pohybu dislokací.

### 5.1 Vazba mezi dislokačním skluzem a plastickou deformací:

#### Orowanova rovnice

Egon Orowan jako první provedl jednoduchý výpočet smykové deformace způsobené skluzem dislokací po jedné skluzové rovině. Toto odvození je uvedeno v příloze 3. Orowanova rovnice nabízí vazbu mezi hustotou mobilních dislokací a jejich průměrnou rychlostí na jedné straně a rychlostí plastické deformace měřenou v experimentu:

$$\dot{\gamma}_p = b\rho_m v \quad (15a)$$

$$\dot{\epsilon}_p = Ab\rho_m v \quad (15b)$$

$\rho_m$  je hustota mobilních dislokací,  $v$  jejich průměrná rychlost,  $b$  velikost Burgersova vektoru a  $A$  je geometrický faktor (např.  $1/M_{\text{Sachs}}$ ). Tato rovnice platí jak pro plasticitu způsobenou skluzem tak i šplhem dislokací. Často je také možné najít Orowanovu rovnici v integrálním tvaru:

$$\gamma_p = b\rho_m L \quad (16)$$

$L$  je střední volná dráha mobilních dislokací (Orowan rovnici odvodil v tomto tvaru, viz Příloha 3).

Tato rovnice je používána ve všech simulacích, které se snaží vypočítat plastické chování materiálu na základě dislokační aktivity. Zásadní problém spojený s rovnicí (15) spočívá v tom, že je velmi obtížné provést měření, ze kterého by bylo možné nezávisle určit  $\rho_m$  a  $v$ ; snadno lze měřit jen jejich součin. V případě materiálů, kde se dislokace pohybují skokově (*jerky motion*), tedy velmi rychle mezi překážkami aby byly následně zablokovány překážkou na dlouhou dobu, dokonce není definice mobilní dislokace vůbec jasná.

### 5.2 Vazba mezi dislokačním skluzem a makroskopickým napětím: mechanismy zpevnění

Zatímco makroskopickou deformaci lze jednoduše a úplně popsat Orowanovou rovnicí, otázka jak vypočítat makroskopické aplikované napětí  $\tau_a$  při plastické deformaci dislokačním skluzem je mnohem komplikovanější. V podstatě jsou možné dvě situace: buď v materiálu není dostatek mobilních dislokací a aplikované napětí odpovídá napětí potřebnému k vytvoření nových mobilních dislokací, anebo je  $\tau_a$  určené napětím potřebným k pohybu dislokací, tj. k překonávání překážek.

### 5.2.1 Napětí nezbytné k funkci zdrojů dislokací

Ve většině kovových materiálů existuje za normálních podmínek velké množství dislokací, které se mohou pohybovat. Nicméně, v některých případech může nastat situace, že v materiálu se dislokace pohybovat mohou, ale není jich dostatek a aplikované napětí odpovídá napětí potřebnému k produkci mobilních dislokací. Tato situace existuje u materiálů s velmi nízkou dislokační hustotou: polovodiče Si, Ge, anebo v případech, že v materiálu existuje nějaký účinný a rychlý mechanismus, který způsobí, že se dislokace přítomné v materiálu se po krátké době zablokují a nemohou se dále pohybovat.

Na obrázku 4.3c je ukázána tlaková křivka pro monokrystal Ge, který je na počátku experimentu téměř bez dislokací. Horní mez kluzu (UYP) odpovídá napětí, které je nutné pro aktivaci dislokačních zdrojů. Hustota mobilních dislokací pak začne prudce narůstat a napětí na vzorku klesá. Od okamžiku, kdy dosáhne minima (dolní mez kluzu, LYP), je určeno nikoli nutností multiplikovat dislokace, ale napětím nutným ke skluzovému pohybu po skluzové rovině.

K rychlému vyčerpávání mobilních dislokací (*mobile dislocations exhaustion*) dochází např. u Ni<sub>3</sub>Al díky intenzivní tvorbě Kear-Wilsdorfových nepohyblivých konfigurací jader superdislokací (obr. 2.20).

Jednoduše lze vypočítat napětí potřebné k aktivaci Frank-Readova zdroje (obr. 9.1, skriptum Dislokace):

$$\tau_{FR} = \frac{2\alpha Gb}{L} \approx \frac{Gb}{L} \quad (17)$$

kde L je délka ukotvené dislokace, která slouží jako zdroj a  $\alpha$  je koeficient z rovnice (9), skriptum Dislokace. Bohužel, charakteristická hodnota L pro daný materiál obvykle není známá. Pro jiné zdroje dislokací, jako jsou ostré vruby na povrchu materiálu, hranice zrn nebo fází, spirálové zdroje apod. je výpočet napětí k jejich aktivaci komplikovanější. V případě povrchových zdrojů může být toto napětí srovnatelné s teoretickou mezí pevnosti materiálu ve smyku.

### 5.2.2 Napětí nezbytné ke skluzovému pohybu dislokací

Mnohem běžnější je situace, kdy jsou v materiálu přítomny mobilní dislokace ve vysoké hustotě. Makroskopické napětí potřebné k plastické deformaci je potom určeno napětím nutným k překonávání překážek při pohybu dislokací (jak lokalizovaných, tak překážek vytvářející napětí dlouhého dosahu). Uvedeme nyní 5 mechanismů, které mohou ovlivnit pohyblivost dislokací a způsobit tak zpevnění materiálu.

#### 5.2.2.1 Peierlsovo – Nabarrovo napětí a tření mřížky

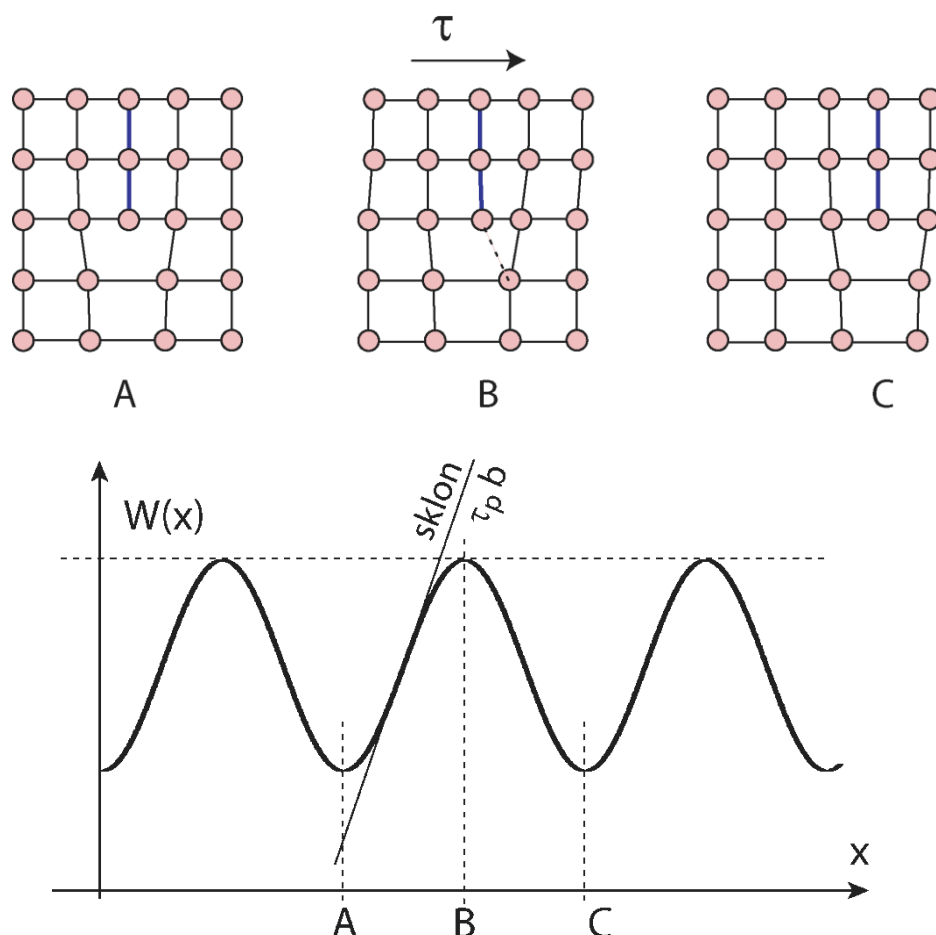
Peierls si povšiml, že během skluzového pohybu dislokace překonává periodický potenciál. Na obr. 5.1 je horní vložena polorovina v rovnovážné poloze v pozicích A a C, avšak mezi těmito pozicemi musí překonat energetickou bariéru. Peierls provedl elegantní výpočet napětí  $\tau_{PN}$ , které je nutné k pohybu dislokace ve skluzové rovině bez přítomnosti dalších překážek a bez pomoci tepelné aktivace (tedy za teploty absolutní nuly). Nabarro jeho výpočet upravit; toto napětí, stejně jako periodický potenciál,

dnes nesou jména obou vědců. Číselně se Peierlsovo - Nabarrovo napětí vypočítá jako

$$\tau_{PN} = \frac{2G}{1-\nu} e^{-2\pi w/b},$$

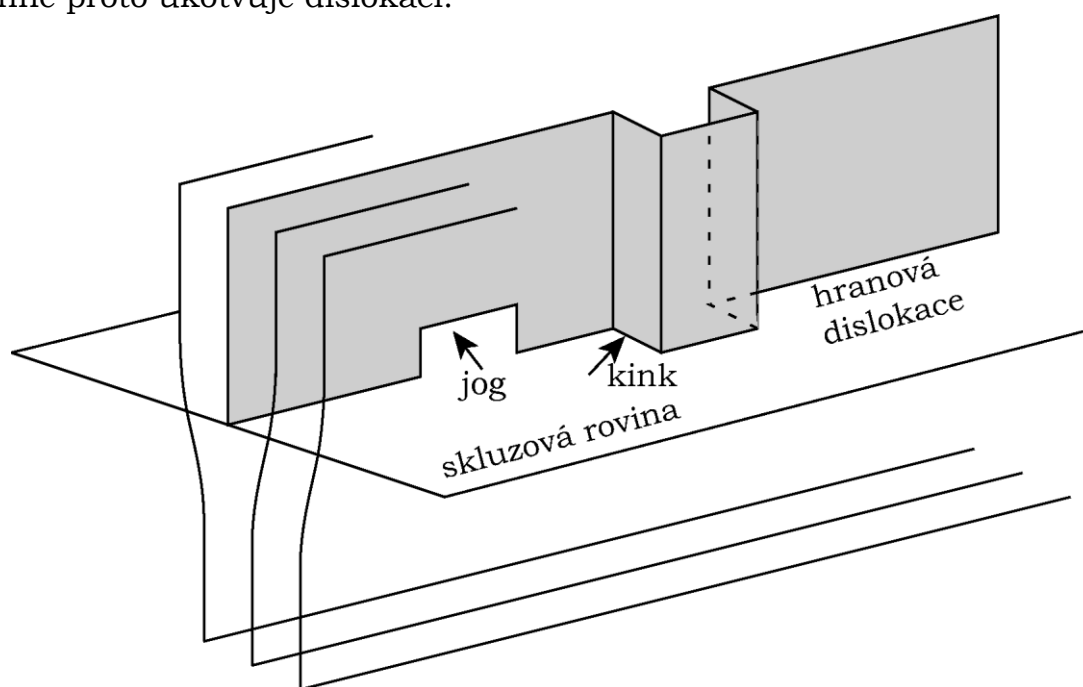
kde  $w = d$  (šroubová dislokace),  $w = d/(1-\nu)$  (hranová dislokace),  $G$  a  $\nu$  jsou známé elastické konstanty,  $d$  mezivřivinná vzdálenost skluzové roviny a  $b$  je Burgersův vektor.

Často je zajímavější charakteristikou potřebné napětí pro skluz dislokací za skutečné teploty deformace,  $\tau_f$ . Pro toto napětí se používá termín tření mřížky (*lattice friction*). U fcc materiálů za pokojové teploty je toto napětí velmi nízké, některé odhady jsou řádu 0.01 MPa. To znamená, že za pokojové teploty se dislokace pohybují skluzem prakticky bez odporu a pokud v materiálu neexistují jiné překážky v jejich pohybu, materiál se plasticky deformuje za velmi nízkých napětí, nižších než 1 MPa (viz tabulka 1, skriptum "Dislokace"). Mez kluzu fcc materiálů je tedy daná hustotou, rozložením v objemu a vlastnostmi překážek. Mezi překážkami se dislokace pohybují velmi rychle; výpočty odhadují tuto rychlost na asi 10% rychlosti šíření fononů mřížkou (= rychlost zvuku v daném materiálu).



**Obrázek 5.1** Skluz dislokace bez přítomnosti překážek; a) přechod z jednoho tzv. Peierlsova údolí do sousedního, b) potenciální energie dislokace během pohybu.

U materiálů, kde je tření mřížky výrazné, se pohyb dislokací uskutečňuje pomocí difúze tzv. kinků (*kink diffusion mechanism*). Ujasněme si nejprve terminologii: pokud je přímková dislokace vybočená ve skluzové rovině o jednu meziatomovou rovinu, nazývá se anglicky toto vybočení "kink". Pokud je vybočení větší, používá se termín "makrokink". Pokud díky difúzním jevům je dislokace vybočená kolmo na skluzovou rovinu, nazývá se toto vybočení "jog" (česky stupeň, obr. 5.2). Část dislokace, která kolmá na skluzovou rovinu a tvoří jog, se nemůže pohybovat skluzovým pohybem a účinně proto ukotvuje dislokaci.



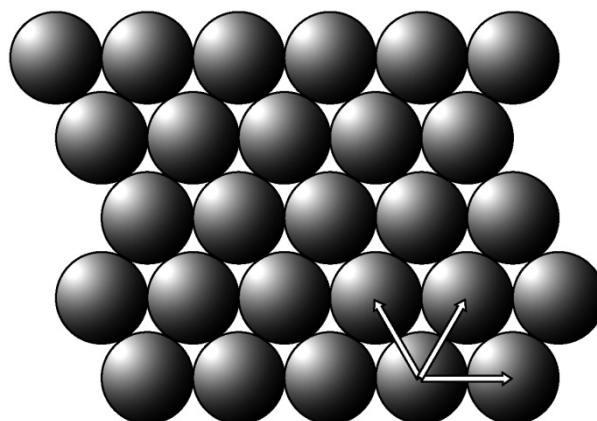
**Obrázek 5.2** Definice pojmů jog a kink.

Vysvětlíme nyní mechanismus difúze kinků pro materiály s diamantovou mřížkou, která má stejné skluzové systémy jako fcc. Analogicky se tento mechanismus uplatňuje pro všechny typy mřížek v případě vysokých hodnot tření mřížky, např. v případě šroubových dislokací u bcc v nízkoteplotním režimu. Na obr. 5.3 je skluzová rovina  $\{111\}$  a v ní jsou označeny 3 směry  $\langle 110 \rangle$ . Je vidět, že v těchto směrech může dislokace ležet v "mezeře" mezi atomy, kterým se říká "Peierlsova – Nabarrova údolí" (*P-N valley*). Dislokace např. v Si nebo Ge skutečně často leží v těchto údolích, viz obr. 11.4 a 11.11 ve skriptu "Dislokace". Pohyb dislokací se uskutečňuje pomocí tepelné aktivace, kdy s pomocí tepelných kmitů část dislokace přeskočí do sousedního údolí. Dva vzniklé kinky se pak pohybují podél dislokace a přemístí celou dislokaci do sousedního P-N údolí (obr. 5.4).

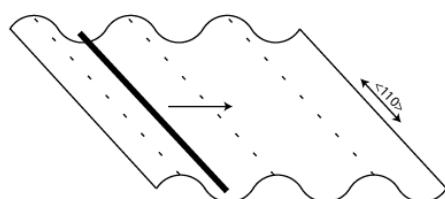
Podle délky dislokace existují dva režimy takového procesu:

1. u krátkých dislokačních segmentů (délka se odhaduje na max. několik mikrometrů) je rychlost pohybu dislokace přímo úměrná její délce, protože pravděpodobnost vzniku dvojice kinků je přímo úměrná délce dislokace, na které může vzniknout. Vzniklá dvojice kinků se pohybuje velice rychle, podél celého dislokačního segmentu až k jeho konci.

2. pro delší dislokační segmenty vznikají dvojice kinků na více místech téměř současně, a proto se nešíří až na hranici dislokačního segmentu, nýbrž dříve anihilují s opačným kinkem. Rychlost pohybu dislokace již nezávisí na jeho délce. Hovoříme o mechanismu kolize kinků (*kink collision mechanism*).



**Obrázek 5.3** Rovina  $\{111\}$  u fcc mřížky a možné Burgersovy vektory, rovnoběžné s P-N údolími.



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 5.4** Mechanismus difúze kinků pro materiály s vysokým třením mřížky (kovalentní krystaly, bcc za nízkých homologických teplot).

Jak již bylo uvedeno v kapitole 2.4 u materiálů s kovalentními a iontovými vazbami (keramiky, oxidy, polovodiče ...) je tření mřížky většinou tak vysoké, že dislokace se za pokojové teploty nemohou pohybovat ani při

vysokých aplikovaných napětích a tyto materiály jsou proto typicky za pokojové teploty křehké.

#### Poznámky:

1. U fcc materiálů je na schématu na obr. 5.2 a 5.4 samozřejmě správnější uvažovat dislokaci rozštěpenou na dvě Shockleyho parciální dislokace.
2. Přesnou velikost Peierlsova-Nabarrova napětí lze jen obtížně vypočítat; je nutné zjistit změnu energie jádra dislokace mezi rovnovážnými polohami (A a C na obr. 5.1) a polohou s maximem energie jádra (poloha B); samozřejmě je nutné brát v úvahu parciální dislokace a odpovídající vrstevnou chybu. V ještě horší situaci jsou experimentátoři: reálné krystaly vždy obsahují defekty a změřit pouze napětí potřebné k průchodu mřížkou bez dalších poruch není téměř možné.
3. Nyní je také zřejmé, proč teoretické výpočty mechanických vlastností materiálů (mez kluzu, mez pevnosti, koeficient zpevnění apod.) nejsou ani snadné, ani přesné. Tyto vlastnosti nesouvisí přímo s vlastnostmi dokonalého krystalu, nýbrž jsou výsledkem interakcí mřížkových poruch (dislokací) s jinými defekty (překážkami pro pohyb dislokací); takovou situaci lze jen obtížně modelovat.

#### **5.2.2.2 Zpevnění substitučními a intersticiálními atomy**

U binárních slitin jsou příměsové atomy přítomny ve formě tuhého roztoku. Vzájemná interakce mezi nimi a dislokacemi vede ke zpomalení pohybu dislokací, ke zvýšení tření mřížky a tedy ke zpevnění materiálu.

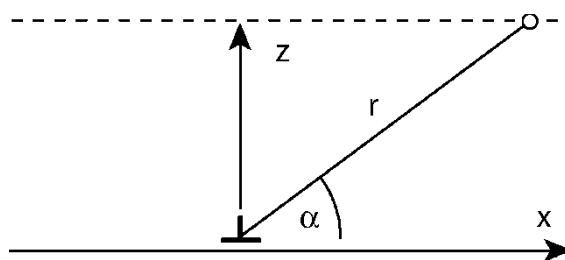
##### **a) Zpevnění substitučními atomy**

Rychlost difúze příměsových substitučních atomů (*substitution atoms*) je zejména za pokojové teploty mnohem nižší, než rychlost pohybu dislokací. Příměsové atomy lze tedy považovat za nepohyblivé.

Příměsový atom (P) mění podmínky pro skluz dislokací nejméně za 3 důvodů: i) má vždy rozdílný objem od atomů matrice (M); ii) jeho atomová vazba se sousedními atomy je jiná než mezi atomy matrice, což můžeme chápat jako lokální změnu elastických konstant a iii) může způsobit polarizaci vazby a změnu ve valenci sousedních atomů matrice. Rozebereme nyní podrobněji vliv rozdílného objemu atomů. Dopustíme se znovu zjednodušení materiálu na elastické izotropní kontinuum. Předpokládejme, že se objem atomů příměsi a matrice liší o  $\Delta V$  (toto je obzvláště hrubé přiblížení světa kvantové mechaniky):

$$\Delta V = V_P - V_M$$

Tento rozdíl způsobuje pole deformace a napětí, které budeme považovat pro izotropní materiál jako sférické. Hranová dislokace způsobuje, že materiál v poloprostoru ohraničeném skluzovou rovinou a obsahujícím vloženou polorovinu (tj.  $0 < \alpha < \pi$  na obr. 5.5) je ve směru  $x$  v kompresi, zatímco druhý poloprostor,  $\pi < \alpha < 2\pi$ , je podroben tahové deformaci (viz. také "Dislokace", obr. 4.3).



**Obrázek 5.5** Substituční atom ve vzdálenosti  $r$  od hranové dislokace.

Ve vzdálenosti  $r$  způsobuje dislokace hydrostatický tlak  $P$ :

$$P = -1/3 (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) = \frac{Gb}{3\pi r} \sin \alpha \frac{1+\nu}{1-\nu}$$

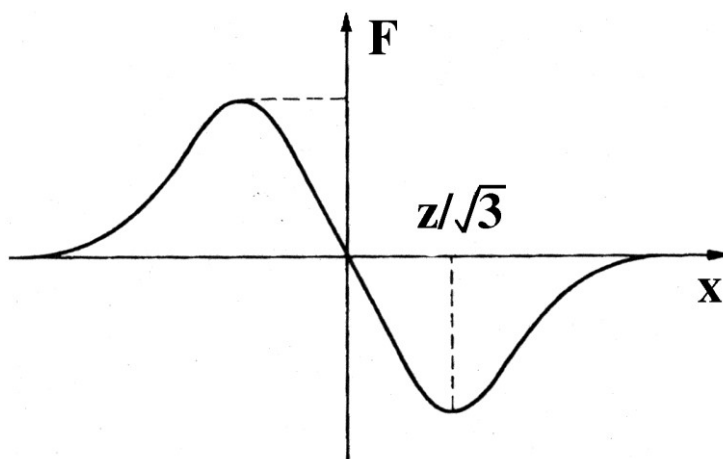
Lze ukázat, že energie interakce mezi dislokací a substitučním atomem  $\Delta E$  závisí na  $\Delta V$ :

$$\Delta E = -3P \Delta V \frac{1-\nu}{1+\nu}$$

Síla, kterou působí substituční atom ve vzdálenosti  $z$  od skluzové roviny na dislokaci ve směru skluzu  $x$  je:

$$F_x = \frac{Gb \Delta V}{\pi z^2} \frac{2(x/z)}{[1+(x/z)^2]^2} \quad (18)$$

Její průběh je ukázán na obr. 5.6.



**Obrázek 5.6** Síla, kterou působí substituční atom na hranovou dislokaci při jejím skluzovém pohybu.

Tenzor napětí způsobený šroubovou dislokací má pouze smykové komponenty; hydrostatický tlak v okolí dislokace je tedy nulový a není narušovaný přítomností substitučního atomu. Šroubová dislokace tedy při svém pohybu "necítí" přítomnost substitučního atomu. Smíšenou dislokací si

můžeme představit jako dislokaci složenou z hranových a šroubových segmentů.

Přítomnost substitučních atomů tedy způsobuje zvýšení smykového napětí, které je potřebné k pohybu dislokací. Empiricky tuto závislost lze napsat jako:

$$\Delta\tau_{\text{sol}} = K_{\text{sol}}c^n \quad (19)$$

kde  $K_{\text{sol}}$  závisí na základním materiálu, na druhu substitučních atomů a vlastnostech dislokací. Exponent  $n$  nabývá typicky hodnot  $1/3 < n < 2/3$ . Tato rovnice se používá i pro případ intersticiálních příměsových atomů. Obecně platí, že vliv intersticiálních atomů je silnější než v případě substitučních atomů a že intersticiální atomy více ovlivňují kovy s bcc mřížkou než s fcc mřížkou.

#### Poznámky :

1. Síla  $F_x$  (rovnice 18) klesá se třetí mocninou  $r$ , tedy mnohem rychleji než v případě interakce mezi dislokacemi. Substituční atomy proto mohou být považovány za lokální překážky.
2. "Velikost atomu" je velmi špatně definovaný termín, takže předvedený výpočet je spíše kvalitativní.

#### Cvičení 9

1. Diskutujte závislost  $F_x$  na  $x$  a vliv znamének  $u$ ,  $z$ ,  $\Delta V$  a  $b$ . Určete, kdy je  $b$  pozitivní nebo negativní pro případ dislokace na obr. 5.5 (konvence FSRH).
2. S pomocí rovnice Peache a Koehlera ověřte, že interakce mezi šroubovou dislokací a sféricky symetrickým polem napětí je nulová.

#### **b) Zpevnění intersticiálními atomy**

Intersticiálními atomy (*interstitial atoms*) jsou nejčastěji H, C a N. Tyto atomy jsou menší než atomy matrice a větší než je velikost intersticiálních poloh mřížky. Způsobují proto deformaci okolního materiálu a s ní spojené pole napětí. Na rozdíl od substitučních atomů je přítomností intersticiálů ovlivněná pohyblivost dislokací všech charakterů.

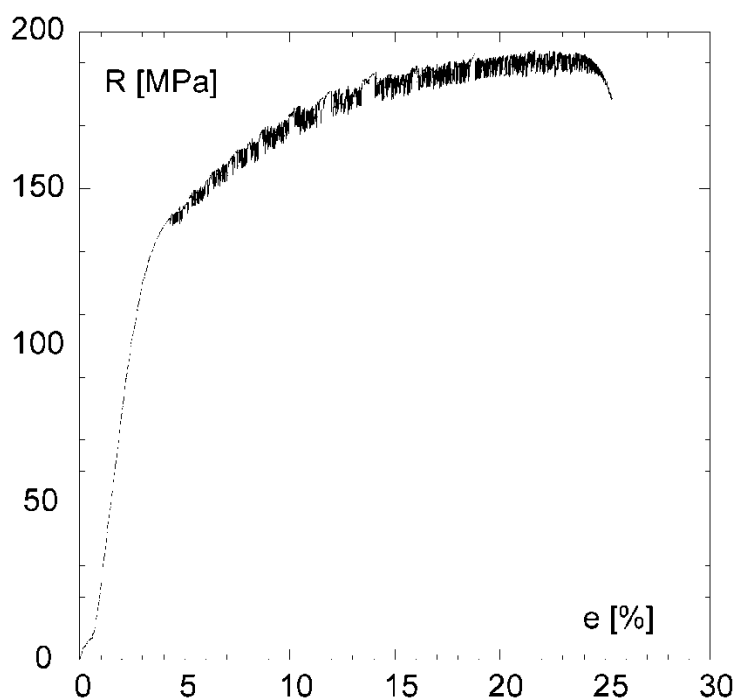
Intersticiální atomy s výhodou obsazují pozice pod vloženou polorovinou hranové dislokace, kde jsou atomy matrice od sebe více vzdáleny a intersticiální polohy mají větší objem (obr. 4.3, skriptum "Dislokace"). Dislokace tedy způsobují zvýšenou koncentraci intersticiálních atomů a tedy chemickou heterogenitu materiálu. V případě, že intersticiály mohou tvořit precipitáty (karbidy, nitridy, ...), je často pozorováno tvoření zárodků precipitátů na dislokacích; hovoříme o heterogenní precipitaci. Pokud k růstu precipitátů nedochází, zvýšenou koncentraci intersticiálů v blízkosti jádra dislokace nazýváme Cottrellovou atmosférou (*Cottrell atmosphere*). Tento jev je pozorován i v případě substitučních atomů.

Nejnámějším projevem existence Cottrellových atmosfér je ostrá mez kluzu (*sharp yield point*) feritických ocelí obsahujících C a následná Lüdersova deformace. Přítomnost atomů uhlíku v blízkosti jádra dislokace



omezuje její pohyblivost. Pokud napětí působící na dislokaci dosáhne takové úrovně, že se dislokace začne pohybovat, uhlíkové atomy dislokaci přestanou brzdit, dislokace se bude moci pohybovat i za nižšího napětí. Na tahové křivce se uvolnění dislokací z Cottrellových atmosfér projeví náhlým poklesem napětí z úrovně horní meze kluzu (*upper yield point*) na úroveň dolní meze kluzu (*lower yield point*), která je nutná pro pohyb dislokací bez zvýšené koncentrace C.

Za pokojové teploty je rychlost pohybu dislokací v ocelích vyšší než je rychlost difúze C. Avšak už při teplotách kolem 150°C a běžných rychlostí deformace je mobilita dislokací i intersticiálů podobná. Dochází k dynamickým jevům, při kterých intersticiální atomy mohou pohybující se dislokaci "dohánět", zvyšovat svou koncentraci v okolí jádra dislokace a tím ji zpomalovat. V tom případě je pro udržení plastické deformace zvýšit napětí, dislokace se začne pohybovat rychleji, tím se zbaví pomalejších intersticiálních atomů, její pohyb je snadnější a napětí na tahové křivce naopak poklesne. Tahová křivka je tedy složená z neustálých nárůstů a poklesů napětí. Tento jev se nazývá Portevinův-Le Chatelierův efekt (obr. 5.7). Teoreticky je pozorovatelný při jakékoli teplotě, jen je třeba zvolit takovou rychlost deformace, aby rychlost pohybu dislokací byla srovnatelná s rychlostí difúze intersticiálů mřížkou.



**Obrázek 5.7** Portevinův – Le Chatelierův jev ve slitině Al – Mg (M. Cieslar)

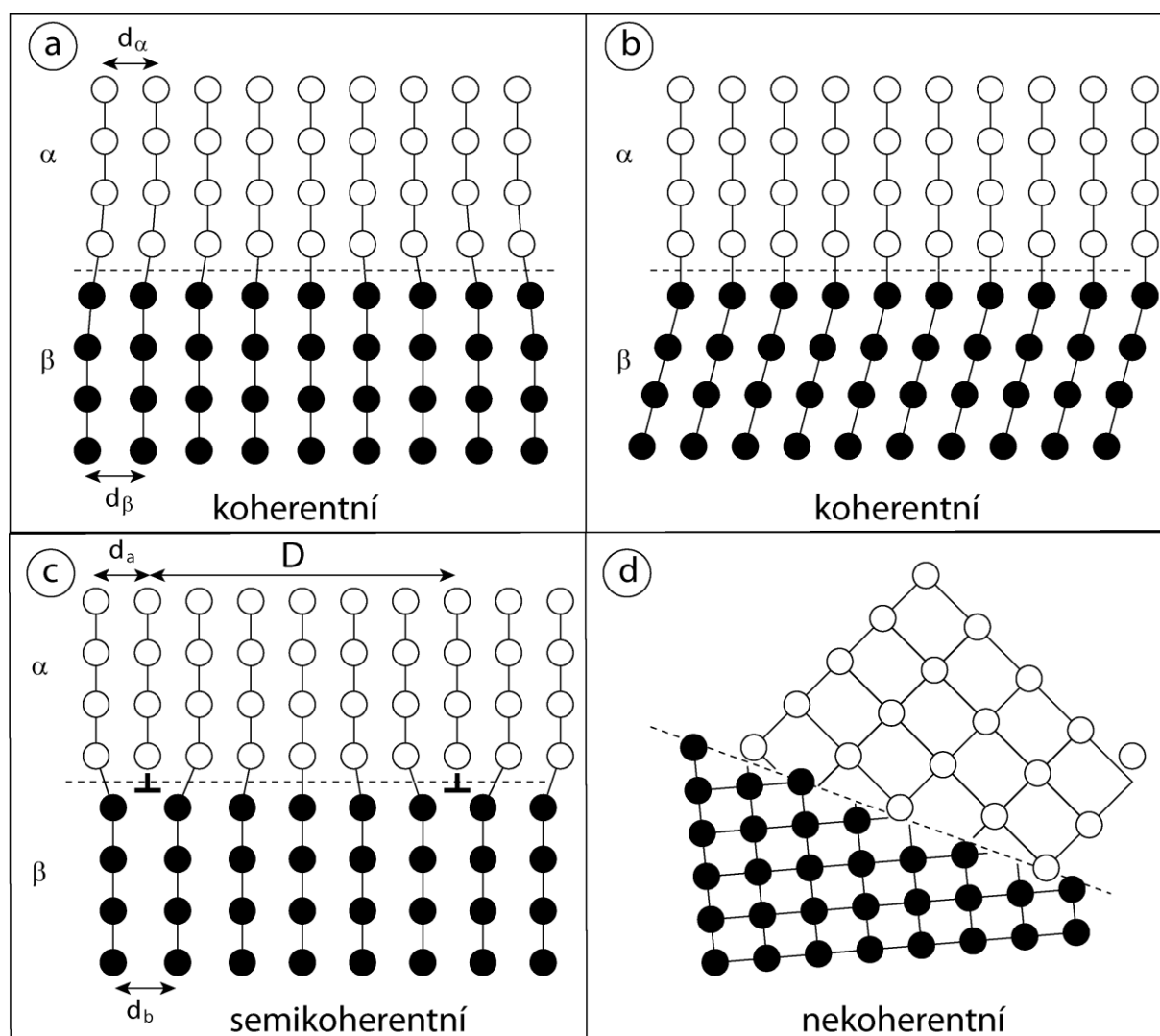
#### Cvičení 10 :

Na tahové křivce určitého materiálu se objevuje Portevinův-Le Chatelierův jev při teplotě  $T_1$  a rychlosti deformace  $\dot{\epsilon}_1$ . Jak musíme změnit rychlost deformace, pokud chceme pozorovat stejný jev za teploty  $T_2 > T_1$ ?

### 5.2.2.3 Precipitáty a inkluze

Míra zpevnění precipitáty (*precipitation hardening*) závisí na hustotě precipitátů (*precipitates*), jejich velikosti, jejich krystalografické struktuře a vzájemné relaci s mřížkou matrice (*matrix*). Obr. 5.8 ukazuje tři možné případy rozhraní (*interface*) mezi precipitátem a maticí:

- koherentní rozhraní: obě mřížky na sebe dokonale navazují. Pokud nemají obě fáze přesně stejný mřížový parametr, související napětí narůstá s délkou rozhraní. Koherentní rozhraní se tedy vyskytuje jen u velmi malých precipitátů;
- semikoherentní rozhraní: atomové roviny matrice i precipitátu na sebe navazují a rozdíl v mřížovém parametru je pravidelně kompenzován přítomností dislokací na rozhraní (*misfit dislocations*);
- nekoherentní rozhraní: mezi mřížkami matrice a precipitátu není žádný vztah, energie rozhraní je vysoká, ale na rozdíl od dvou předchozích případů nevytváří v okolí významná napětí.



**Obrázek 5.8** a) Typy možných rozhraní mezi fázemi  $\alpha$  a  $\beta$ ; a,b) koherentní; c) semikoherentní; d) nekoherentní.

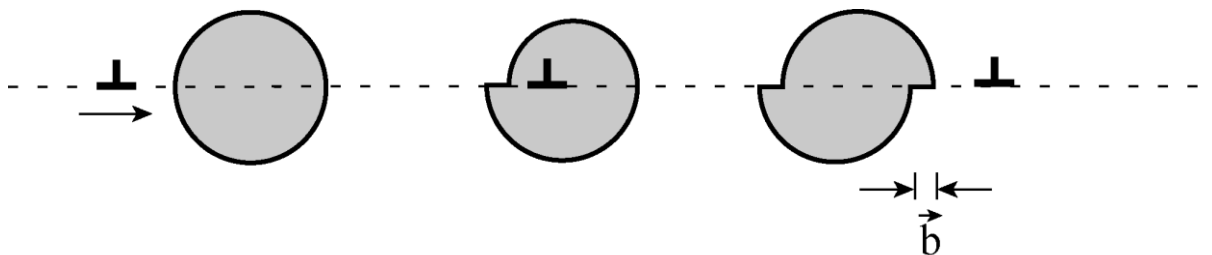
Precipitáty často začínají růst ve formě tenké vrstvy podél určité krystalografické roviny matrice. Nejprve jde o oblast s vyšší koncentrací rozpuštěných atomů bez jasně definované krystalografické struktury a chemického složení; v této fázi se nazývají Guinierova - Prestonova zóna. Po vytvoření zárodku jsou precipitáty velmi často koherentní s matricí, pokud to krystalografie obou fází umožňuje. Během růstu precipitátu se koherence rozhraní částečně nebo úplně ztrácí.

Předpokládejme, že ve skluzové rovině dislokace leží precipitát. Dislokace je ovlivněna polem napětí tvořeným precipitátem. Existuje několik možností, jak dislokace může tuto překážku překonat:

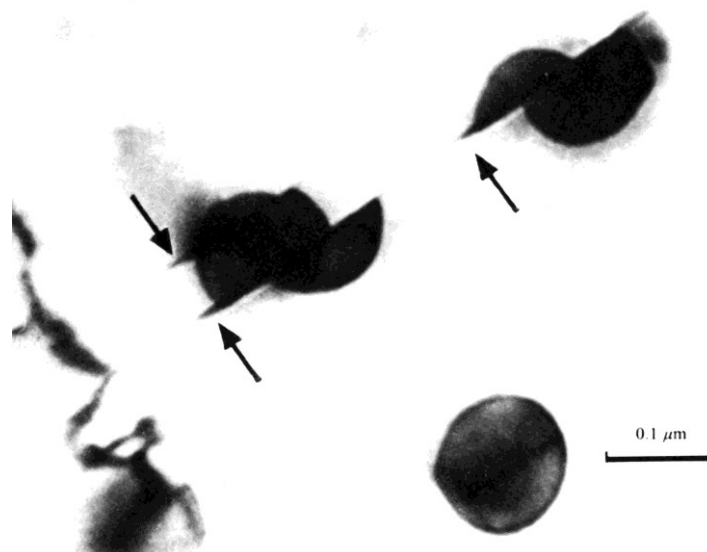
- Jedná-li se o šroubovou dislokaci, může přejít do roviny příčného skluzu a vyhnout se tak precipitátu.
- Za vysokých homologických teplot může i smíšená nebo hranová dislokace šplhem přejít do skluzové roviny nad nebo pod precipitátem.
- Hranová nebo smíšená dislokace za nízkých homologických teplot nemůže využít ani jeden výše uvedený způsob. Pokud je precipitát malý a koherentní, může jím dislokace relativně snadno projít (obr. 5.9 a 5.10). To má za následek vzájemné přesunutí dvou polovin precipitátu a zmenšení jeho "tloušťky". Další dislokace, které se pohybují ve stejné rovině, mohou proto projít precipitátem snadněji; někdy se tomuto efektu říká geometrické změkčení. Při intenzivnějších deformacích nebo při cyklické deformaci může dojít k úplnému oddělení jednotlivých částí precipitátu, ke zmenšení velikosti zbytků precipitátu pod kritickou velikost a k jejich rozpuštění. Napětí, které je potřeba k přeseknutí precipitátu, je dané rovnicí (20):

$$\tau_{\text{cut}} = \frac{\gamma\pi d}{2bx} \quad (20)$$

kde  $d$  je průměr precipitátu,  $x$  průměrná vzdálenost mezi precipitáty a  $\gamma$  je energie rozhraní, které vznikne průchodem dislokace precipitátem. Pokud je precipitát dokonale koherentní a po průchodu dislokace nevznikne žádná plošná porucha, precipitáty žádné zpevnění materiálu nezpůsobí. V případě nekoherentních precipitátů vznikne po vzájemném přesunutí dvou částí precipitátu o vektor  $\vec{b}$  rozhraní, kde atomy jsou nad a pod rovinou průchodu dislokace v nerovnovázných pozicích; takové rozhraní má velkou energii  $\gamma$  a precipitáty mají velký zpevňující účinek.

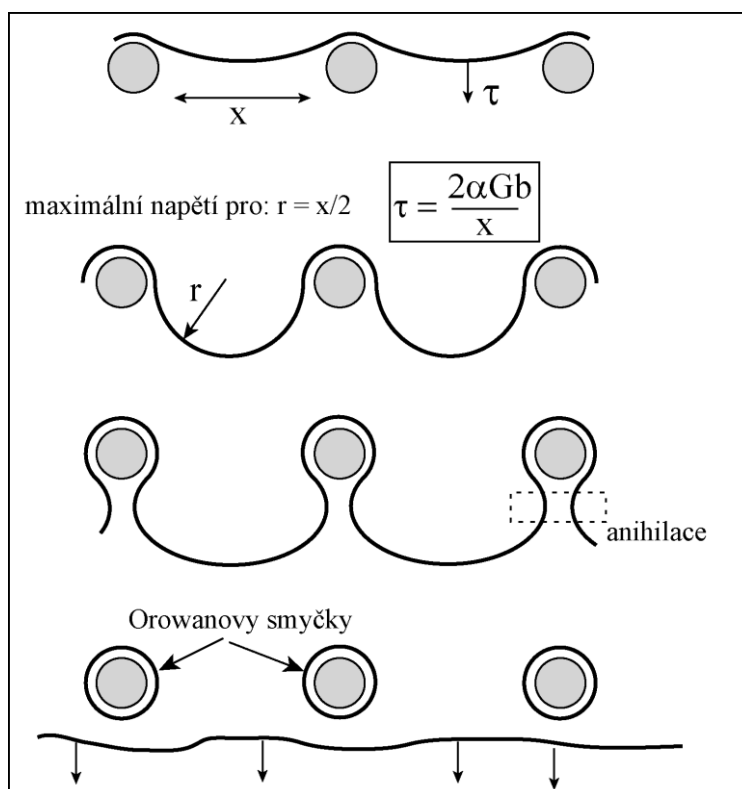


**Obrázek 5.9** Průchod dislokace koherentním precipitátem.



**Obrázek 5.10** Přesekávání precipitátů  $\text{Ni}_3\text{Al}$  dislokacemi ve slitině Ni-19%Cr-6% Al (H. Gleiter, E. Hornbogen).

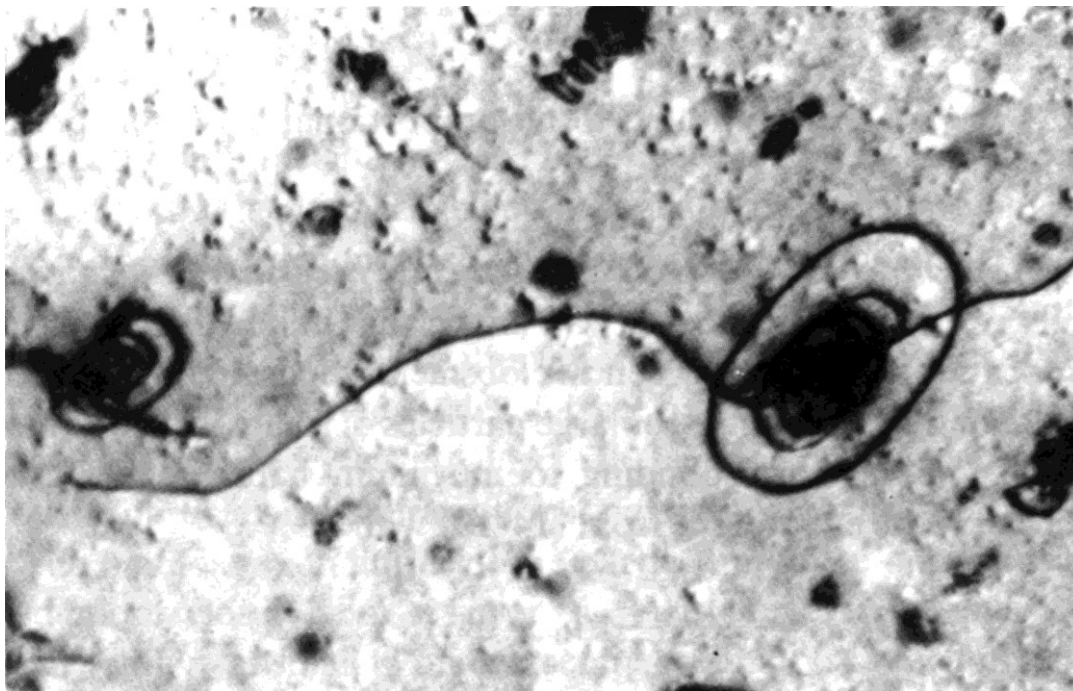
- Pokud je precipitát velký, nekoherentní nebo se směrovými atomovými vazbami (kovalentní, ionokovalentní, iontové), je průchod dislokace precipitátem mnohem obtížnější, ne-li nemožný. Jednodušší způsob překonání takové překážky navržený Orowanem je ukázán na schématu obr. 5.11 a TEM snímku na obr 5.12.



**Obrázek 5.11** Orowanův mechanismus obečtení překážky dislokací.

Dislokace precipitát obteče a při tomto procesu kolem něj zůstane dislokační (Orowanova) smyčka. Napětí potřebné k tomuto procesu je dané napětím nutným k prohnutí dislokace mezi precipitáty, tedy rovnicí (21). Pro další dislokaci, která se pohybuje po stejné skluzové rovině, je průchod přes řadu stejných precipitátů obtížnější; jedná se tedy o zpevňující mechanismus.

$$\tau_{\text{bow}} = \frac{2\alpha Gb}{x} \quad (21)$$



**Obrázek 5.12** Orowanovy smyčky kolem precipitátů  $\text{Al}_2\text{O}_3$  v monokrystalu Cu-30%Zn (P.B. Hirsch, F.J. Humphries).

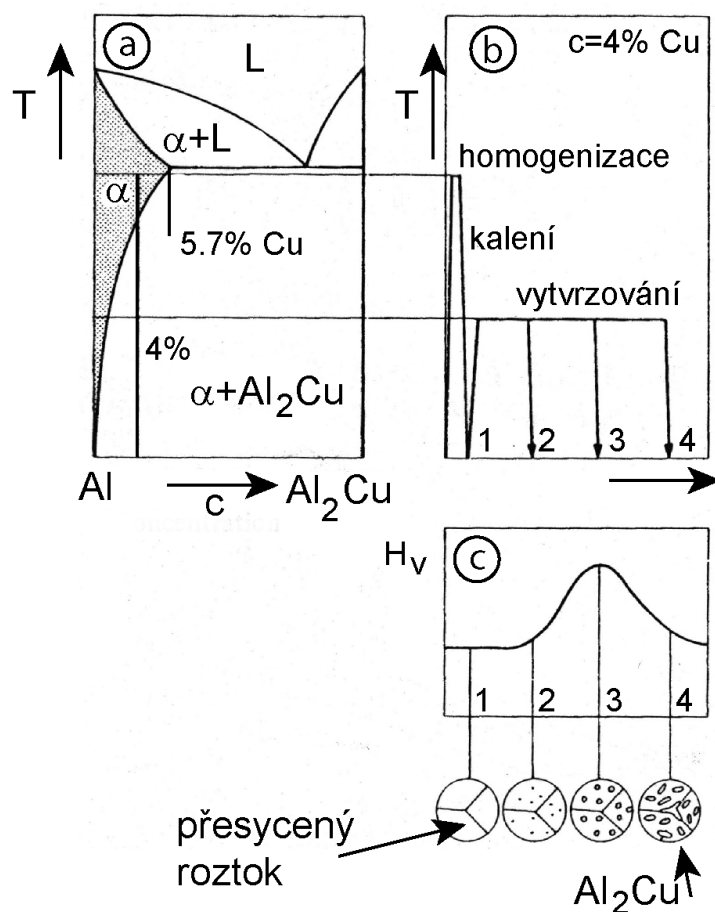
Cvičení 11: Proč jsou na obr. 5.10 precipitáty přeseknuté jen podél dvou rovin? Odhadněte počet dislokací, které precipitátem prošly.

Z průmyslového hlediska je nejdůležitějším příkladem využití precipitačního zpevnění slitina Al-4%Cu. Svou nízkou měrnou hmotností a dobrými pevnostními charakteristikami umožnila rozvoj letectví. Na obrázku 5.13 je uveden fázový diagram Al-Cu spolu se schématem tepelného zpracování a výsledné mikrostruktury.

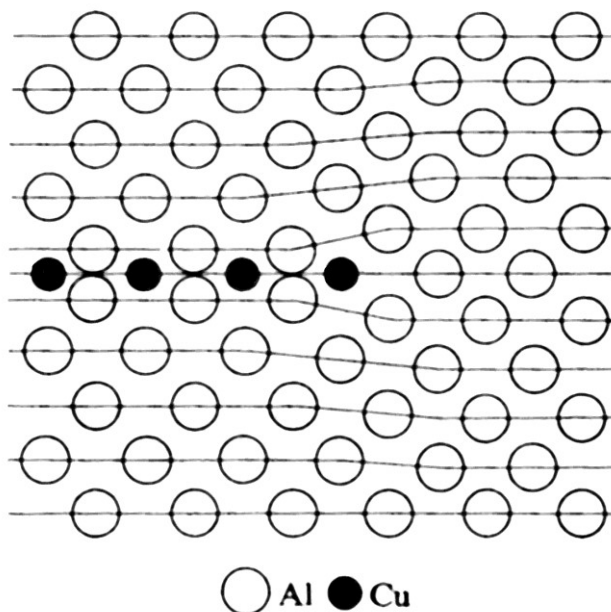
Cílem tepelného zpracování je dosažení homogenní mikrostruktury s velmi jemnými precipitáty:

- 1) Nejprve probíhá homogenizace tuhého roztoku za teploty  $540^\circ\text{C}$ .
- 2) Ochlazení na pokojovou teplotu, materiál je v nerovnovážném stavu přesyceného tuhého roztoku. Jeho mechanické vlastnosti jsou podobné jako pro čistý hliník, tedy tvárný s nízkou mezí kluzu. Substituční atomy Cu způsobují jen malé zpevnění. Je to stav, který je vhodný pro tváření materiálu.

- 3) Následuje ohřev a výdrž na teplotě mezi 100 a 200°C ; cílem je vyvolání precipitace. Protože materiál je velmi vzdálen od rovnovážného stavu, zárodky precipitátů se tvoří ve velkém množství jakmile je umožněna difúze substitučních atomů. Rozložení zárodků precipitátů je dosti homogenní, vznikají i mimo hranice zrn nebo dislokace. Protože rychlost difúze atomů Cu je ještě nízká, růst těchto zárodků je pomalý. Materiál tedy obsahuje velké množství velmi malých precipitátů, což je výhodné pro jeho mechanické vlastnosti. Navíc, rovnovážná fáze  $\text{Al}_2\text{Cu}$  se objevuje až později, předchází jí několik intermediálních fází. Nejprve vznikají Guinierovy – Prestonovy zóny ve formě monoatomárních vrstev atomů Cu v rovinách  $\{100\}$  Al matrice (obr. 5.14). Mají výrazný zpevňující účinek, protože efektivně blokují dislokace pohybující se skluzem po rovinách  $\{111\}$ . S přibývajícím časem precipitáty hrubnou, při vhodné volbě teploty a doby výdrže lze dosáhnout optimálních mechanických vlastností (příklad 3 na obr. 5.13b a c). Tento způsob zvýšení mechanické odolnosti materiálu se nazývá precipitační zpevnění anebo strukturální zpevnění (*precipitation hardening, structural hardening*).



**Obrázek 5.13** Tepelné zpracování "duralu". a) Rovnovážený fázový diagram Al-Cu; b) schéma tepelného zpracování a c) jemu odpovídající mikrostruktura a průběh tvrdosti.



**Obrázek 5.14** Guinierovy – Prestonovy zóny v Al-Cu.

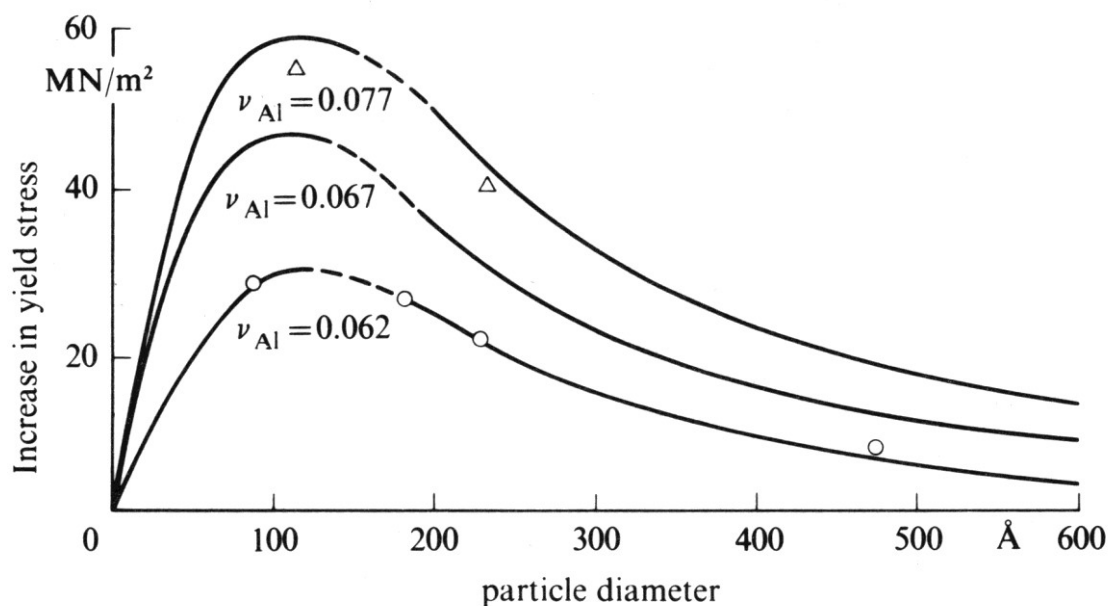
Poznámky:

- 1) Pokud je ochlazení z homogenizační teploty 540°C provedeno pomalu, výsledkem je heterogenní precipitace na hranicích zrn. Precipitáty jsou poměrně velké, jedná se o rovnovážnou fázi  $\text{Al}_2\text{Cu}$ . Zpevňující efekt takových precipitátů je nulový, a navíc je možné pozorovat křehnutí hranic zrn.
- 2) I když je rychlost difúze atomů Cu v matici Al za pokojové teploty nízká, není úplně zanedbatelná. Po zhruba 10 dnech po ochlazení z homogenizační teploty na teplotu pokojovou je možné pozorovat zpevnění materiálu způsobené začínající precipitací. Hovoříme o stárnutí materiálu. Pokud chceme zachovat materiál ve stavu maximální tažnosti, je třeba ho uchovávat za teplot nižších než 0° C.
- 3) Slitina, kterou lze výrazně zpevnit precipitací, ale která nestárne za pokojové teploty, je slitina Cu-Be. Průmyslově se nepoužívá, protože má vyšší měrnou hmotnost, Be je drahé a jeho oxid je vysoce toxický.

Při daném chemickém složení je možné vytvoření určitého objemového podílu precipitátů, podle rovnovážného fázového diagramu. Můžeme si položit otázku, jestli je z hlediska mechanické pevnosti materiálů výhodnější větší množství menších precipitátů, anebo menší množství větších precipitátů?

Experimentálně je prokázáno, že existuje určitá optimální velikost precipitátů, typicky v řádu desítek nm, při které má materiál nejvyšší pevnost či tvrdost. Obr. 5.15 ukazuje zvýšení hodnoty meze kluzu díky precipitačnímu zpevnění ve srovnání s přesyceným tuhým roztokem u tří slitin  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Na křivkách je vidět jednak vliv celkového množství precipitátů, které se liší pro jednotlivé slitiny a také maximum pro velikost precipitátů zhruba 12 nm.

Vysvětlení tohoto jevu je následující: malé (většinou koherentní nebo semikoherentní) precipitátymou být dislokacemi přesekávány (obr. 5.9). Při zvětšování velikosti precipitátů je přesekávání čím dál obtížnější; je k němu zapotřebí vyšší napětí (rovnice 20). Naopak Orowanův mechanismus obtékání překážek je tím snadnější, čím je větší průměrná vzdálenost mezi překážkami; na vlastní velikosti překážky nezáleží. Existuje tedy určitá optimální velikost precipitátů, kdy obtečení a přeseknutí je stejně energeticky náročné a materiál má nejvyšší mechanickou pevnost. Tato velikost se pohybuje typicky kolem 10 – 20 nm.



**Obrázek 5.15** Změna hodnoty meze kluzu v závislosti na velikosti precipitátů a na chemickém složení slitiny typu Ni<sub>3</sub>Al;  $\nu$  je relativní hmotnostní obsah Al.

Nevýhodou precipitačně zpevněných slitin je to, že ve svém optimalizovaném stavu nejsou v termodynamické rovnováze. Jejich vlastnosti, vynikající za pokojové teploty, při zvýšení teploty zpravidla rychle degradují, protože dochází k růstu precipitátů, ztrátě jejich koherence a ke snížení jejich počtu. Superslitiny (obr. 2.22) jsou příkladem precipitačně zpevněného materiálu, který si udržuje velmi dobré mechanické vlastnosti až do zhruba 1000°C, tedy do teploty 0.8 T<sub>M</sub>. Precipitáty zabírají typicky 75% objemu, jsou kubické a semikoherentní.



### 5.2.2.4 Interakce mezi dislokacemi

#### Deformační zpevnění

Napětí na tahové křivce nad mezí kluzu typicky narůstá (obr. 4.3), tj. materiál se díky plastické deformaci stává pevnějším. Tento jev se nazývá deformační zpevnění (*work hardening*). V případě deformace v tahu nebo tlaku lze zpevnit celý objem vzorku, kuličkováním, což je vlastně lokální plastická deformace, je možné zpevnit jen povrchovou vrstvu materiálu. V těchto případech je zvýšení pevnosti materiálů způsobeno nárůstem dislokační hustoty.

Nárůst pevnosti materiálů během deformace se projevuje zejména při tvářecích operacích za studena (*cold forming, cold working*), zde ovšem hraje důležitou roli při zvýšení pevnosti hlavně zmenšování velikosti zrna. Například ocelový pás při válcování za studena (*cold rolling*) zvyšuje svou mez kluzu při každém průchodu. Naopak při tomto procesu ztrácí houževnatost. Eutektická ocel se používá např. pro ocelový kord pneumatik. Opakovaným protahováním je možné zvýšit mez kluzu drátů pro kord až na hodnotu kolem 3000 MPa.

V současnosti je velká pozornost věnovaná snaze přiblížit pevnost materiálů co nejblíže teoretické pevnosti. Proto jsou studovány další způsoby zpevnění materiálů pomocí tvářecích operací, při kterých dochází k velkým plastickým deformacím materiálů, angličtině se tyto metody označují jako *severe plastic deformation* a je o nich zmínka v kapitole 8.1.

Souvislost mezi zvýšením napětí a dislokační hustotou jako první studoval G.I. Taylor. Uvažoval dislokaci pohybující se ve skluzové rovině, kterou protínají dislokace z jiného skluzového systému. Tyto dislokace nazval dislokačním lesem (*dislocation forrest*) a zvýšení napětí nutného pro pohyb dislokace kvůli těmto překážkám zpevněním lesa (*forrest hardening*). Dále předpověděl, že toto zpevnění  $\Delta\tau_{FH}$  bude nepřímo úměrné průměrné vzdálenosti mezi dislokacemi lesa  $\bar{x}$ :

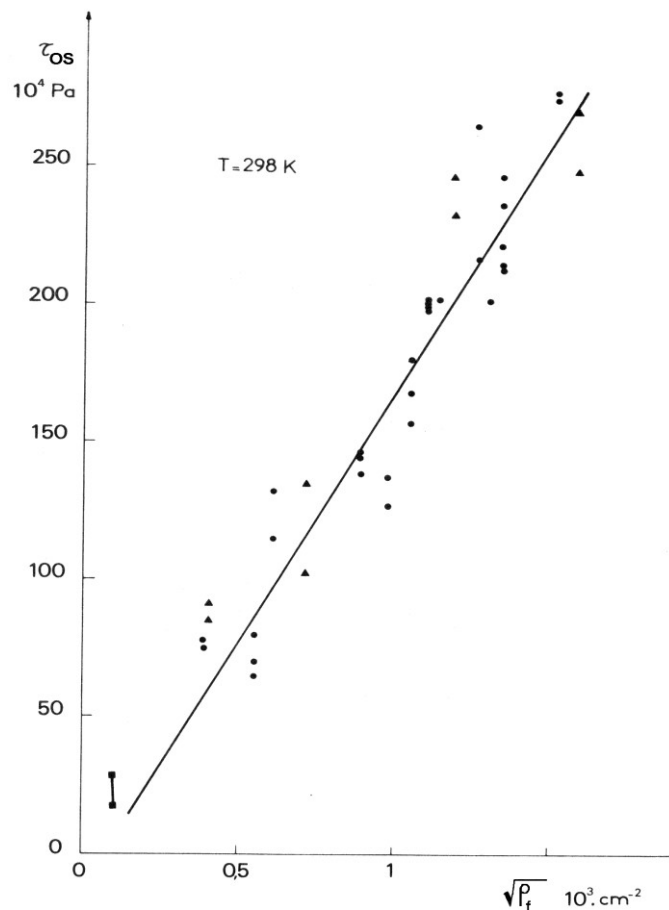
$$\Delta\tau_{FH} \approx 1/\bar{x} = \sqrt{\rho_F} \quad (22)$$

kde  $\rho_F$  je hustota dislokací lesa, obdobně jako v případě Orowanova mechanismu obtékání precipitátů (rovnice 21).

G. Saada pak provedl analytický výpočet  $\Delta\tau_{FH}$  pro různé interakce mezi pohyblivou dislokací a dislokacemi lesa a odvodil rovnici, která je dnes (trochu nespravedlivě) nazývána Taylorovou:

$$\Delta\tau_{FH} = \alpha Gb\sqrt{\rho_F} \quad (23)$$

$\alpha$  je bezrozměrný parametr, který záleží na typu interagujících dislokací a nabývá hodnot typicky 0.1 – 0.3 pro bcc a fcc materiály, v případě hexagonálních krystalů i více. Rovnice (23) byla experimentálně potvrzena pro mnoho materiálů, viz. např. obr. 5.16.



**Obrázek 5.16** Kritické skluzové napětí u monokrystalů zinku orientovaného pro bazální skluz jako funkce hustoty dislokačního lesa.

Cvičení 12: Ukažte, že mezi dislokační hustotou a průměrnou vzdáleností rovnoběžných dislokací platí vztah  $1/\bar{x} = \sqrt{\rho}$ .

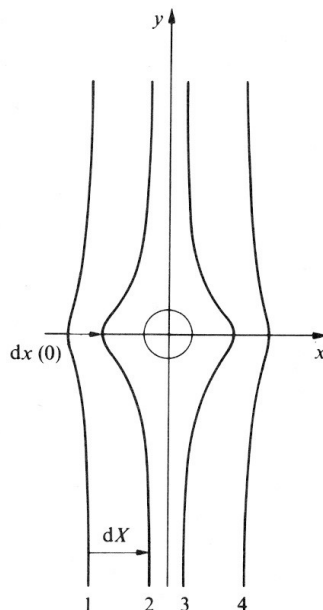
### Odvození Taylorovy rovnice

Saada při odvození rovnice (23) uvažoval reakci dislokace s Burgersovým vektorem  $\vec{b}_1$  pohybující se skluzovým pohybem po skluzové rovině s dislokací lesa  $\vec{b}_2$ , která tuto rovinu protíná. Existují 2 možné scénáře této události, podle toho, jestli je reakce těchto dvou dislokací a vytvoření 3. dislokace s Burgersovým vektorem  $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$  energeticky výhodné nebo ne.

1) dislokace se odpuzují

Pokud výše uvedená reakce energeticky výhodná není, dislokace se odpuzují. Na obr. 5.17 je rozfázovaný přechod dislokace  $d_1$  přes dislokaci lesa. Aby dislokace  $d_1$  protlnula překážku, je nutné zvýšit napětí působící na dislokaci

$d_1$  ve skluzové rovině. Toto zvýšení napětí lze odhadnout; ukazuje se (možná překvapivě), že je nižší než v případě, kdy se dislokace přitahují.

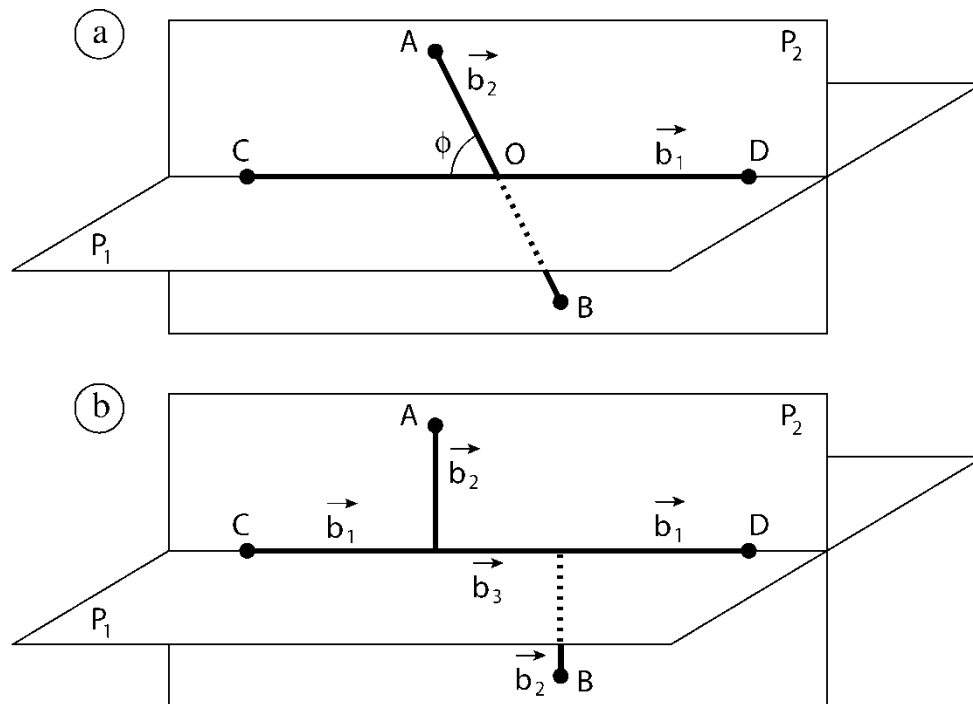


**Obrázek 5.17** Konfigurace dislokace (pozice postupně 1 až 4), která prochází přes překážku. Překážkou je dislokace lesa, která protíná skluzovou rovinu v počátku souřadnic. Obě dislokace se vzájemně odpuzují.

2) dislokace se přitahují

V tomto případě je vytvoření dislokace s Burgersovým vektorem  $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$  energeticky výhodné (obr. 5.18). Tato dislokace, ležící v průsečnici skluzových rovin původních dislokací se ve většině případů nemůže pohybovat ani v  $P_1$ , ani v  $P_2$  (*sessile dislocation*). Aby se dislokace  $\vec{b}_1$  mohla pohybovat dále v rovině  $P_1$ , je nutné nejprve dislokaci  $\vec{b}_3$  odstranit, což je obtížné a vyžadující značné napětí  $\tau$  ve skluzové rovině. Protože dislokace  $\vec{b}_3$  může být poměrně dlouhá a nachází se v její blízkosti značný počet atomů, tepelná aktivace její destrukci nemůže výrazně napomoci; jedná se tedy o atermální proces (= potřebné napětí nezáleží na teplotě, *athermal process*). Je možné analyticky vypočítat napětí  $\tau$  nutné k tomu, aby dislokace  $\vec{b}_1$  prošla lesem rovnoběžných, pravidelně rozmístěných dislokací s Burgersovým vektorem  $\vec{b}_2$ . Pokud bychom chtěli řešit obecný problém, kdy dislokace  $\vec{b}_1$  prochází lesem různě orientovaných dislokací s několika různými vektory  $\vec{b}$ , je nutné použít počítačové simulace.

V případě, že se dislokace z různých skluzových systémů pohybují po svých skluzových rovinách (např. při víceosém namáhání), blokují se vzájemně, tj. jeden systém slouží jako dislokační les pro jiné dislokace a vice versa.

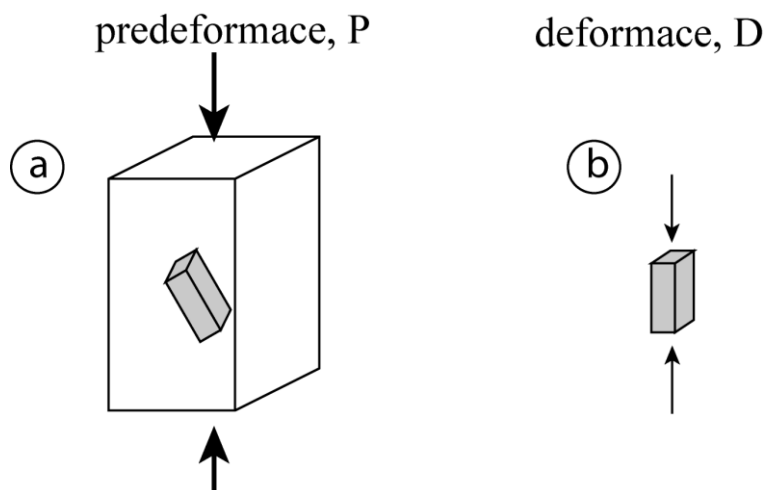


**Obrázek 5.18** a) Dislokace  $\vec{b}_1$  se při svém skluzovém pohybu po skluzové rovině  $P_1$  setkala s dislokací  $\vec{b}_2$  ležící v rovině  $P_2$ . b) Během energeticky výhodné reakce těchto dvou dislokací byla vytvořena dislokace  $\vec{b}_3$ , která leží na průsečnici rovin  $P_1$  a  $P_2$ .

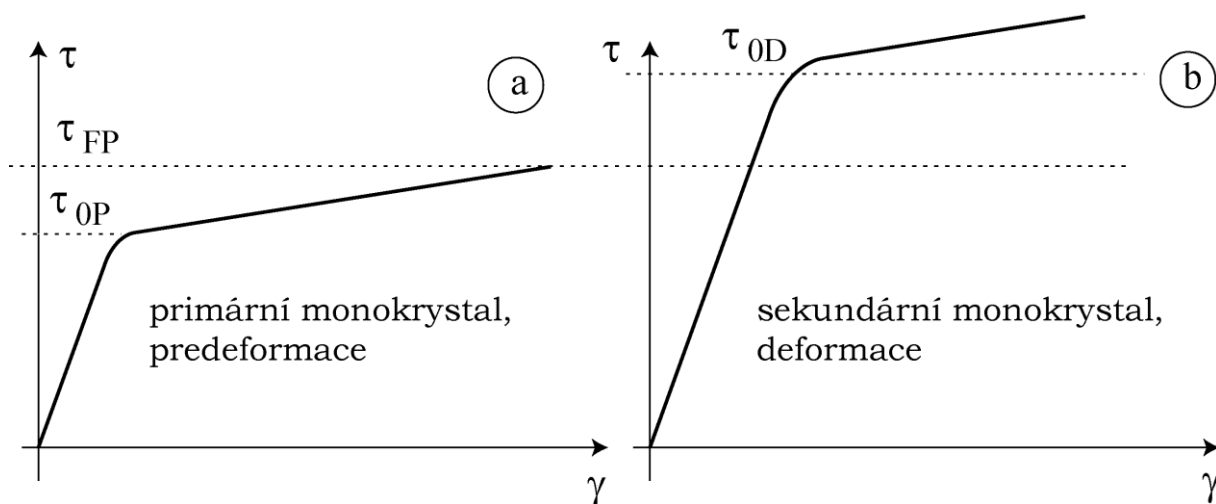
### Experimentální měření latentního zpevnění

Koeficient  $\alpha$  z rovnice (23) lze teoreticky vypočítat (viz předchozí odstavec; koeficienty pro všechny možné dislokační reakce u fcc materiálů jsou známé), ale je také možné ho, nebo alespoň jemu podobný parametr, změřit experimentálně. Slouží k tomu následující komplikovaný experiment.

1. Připravíme velký monokrystal s co nejnižší dislokační hustotou (vyžíhaný stav). Tento primární monokrystal zdeformujeme při orientaci preferující jednoduchý skluz, tedy vytvoříme v něm vysokou dislokační hustotu dislokací z jediného skluzového systému (obr. 5.19a). Kritické skluzové napětí primárního monokrystalu je  $\tau_{0P}$ , deformaci přerušíme ještě ve stádiu I při napětí  $\tau_{FP}$  (obr. 5.20). Napětí  $\tau_{FP}$  odpovídá napětí, které potřebují dislokace z aktivního skluzového systému ke svému pohybu. Této deformaci budeme říkat "predeformace", P.
2. Z primárního monokrystalu vyřezeme menší sekundární monokrystal s jinou krystalografickou orientací, preferující skluz dislokací z jiného skluzového systému a zdeformujeme je (obr. 5.19 b). Kritické skluzové napětí je v tomto případě  $\tau_{0D}$ . Protože dislokace z aktivního skluzového systému musí procházet dislokačním lesem vytvořeným při deformaci primárního monokrystalu,  $\tau_{0D}$  je větší než  $\tau_{FP}$ .



**Obrázek 5.19** a) Predeformace (P) primárního monokrystalu v kompresi a orientace sekundárního monokrystalu. b) deformace (D) sekundárního monokrystalu.



**Obrázek 5.20** a) Deformační křivka primárního monokrystalu a b) sekundárního monokrystalu.  $\tau$  a  $\gamma$  je vypočteno vždy pro primární skluzový systém (různý pro predeformaci a deformaci).

Latentní zpevnění (*Latent Hardening Ratio*, LHR), je definováno jako poměr

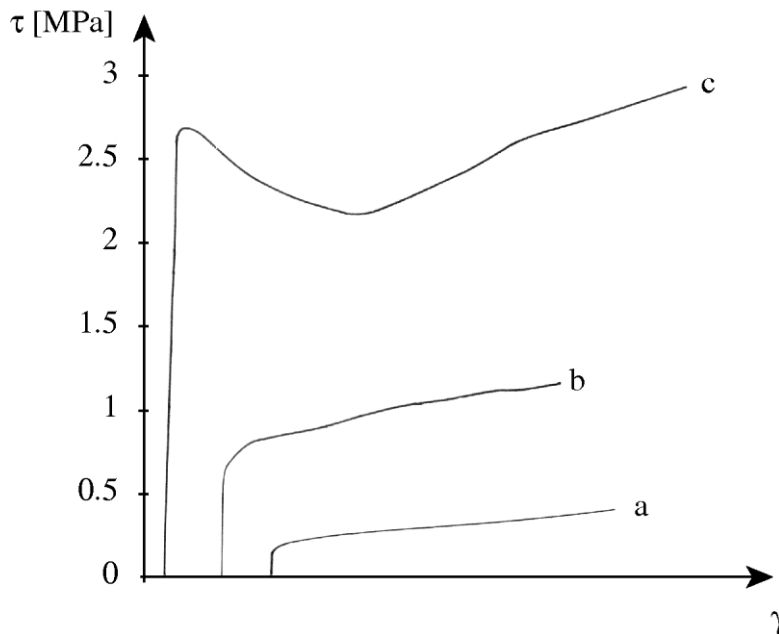
$$L = \tau_{0S} / \tau_{FP} \quad (24)$$

Je možné pozorovat 2 případy:

1. Pokud je aktivní skluzová rovina u deformace sekundárního monokrystalu stejná jako v případě primárního monokrystalu,  $L$  je blízké 1. Situace je podobná, jako kdybychom pokračovali po odtížení v deformaci primárního monokrystalu.
2. Pokud jsou obě skluzové roviny nekoplanární,  $L$  je typicky vyšší než 1.

Čím je  $L$  vyšší, tím je větší zpevňující účinek dislokačního lesa na pohyb aktivních dislokací, tj. tím je větší parametr  $\alpha$  v rovnici (23).

Příklad popsaného experimentu je uveden na obrázku 5.21 v případě Zn (mřížka hexagonální těsně uspořádaná). Primární monokrystal byl orientován tak, že dislokační les leží v pyramidální rovině druhého druhu a aktivní skluzovou rovinou během deformace sekundárního monokrystalu je bazální rovina. Je vidět, že i nízká hustota dislokací lesa na pyramidální rovině zinek zpevňuje.



**Obrázek 5.21** Deformační křivky pro monokrystal Zn s orientací vhodnou pro bazální skluz; a) stav bez predeformace; b) a c) materiál po predeformaci, hustota dislokací na pyramidální rovině 2 druhu  $\rho_F$  je  $3.0 \times 10^9 \text{ m}^{-2}$  (b) a  $2.3 \times 10^{10} \text{ m}^{-2}$  (c), křivky jsou vzájemně posunuté na ose x kvůli lepší čitelnosti.

Cvičení 13: Srovnejte průměrnou vzdálenost mezi překážkami ve skluzové rovině feritické oceli a jimi způsobené zpevnění pro případ i) zpevnění dislokacemi lesa o hustotě  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  a ii) zpevnění substitučními atomy o atomové koncentraci 1 % ( $K_{\text{sol}} = (G/135) \text{ MPa}$ ,  $n = 0.5$ ).

Poznámka: Deformační zpevnění zvyšuje kritické skluzové napětí u monokrystalů (nebo alternativně mez kluzu u polykrystalů), ale snižuje koeficient zpevnění  $\theta = d\tau/d\gamma$  a tažnost.

### 5.2.2.5 Hranice zrn a mezifázová rozhraní

Hallův-Petchův vztah včetně diskuse jeho teoretického vysvětlení již byl uveden v kap. 4.

### 5.2.3 Kombinace více zpevnujících mechanismů

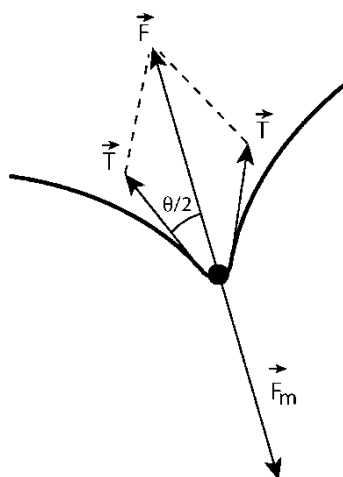
Ve velké většině případů se v materiálu uplatňuje zároveň více zpevnujících mechanismů. Např. u běžné konstrukční oceli se setkáváme se všemi mechanismy probranými v kapitole 5.2.2: existuje zde velké množství dislokací, precipitáty (karbidy aj.), substituční atomy, intersticiální uhlík, hranice zrn a při teplotách pod 0 °C není zanedbatelné ani tření mřížky. Pokud bychom byli schopni odhadnout napětí nutné k pohybu dislokací pro každý jednotlivý mechanismus zpevnění, čemu odpovídá měřené kritické skluzové napětí? Bohužel, univerzální odpověď na tuto otázku není jasná a toto téma není v učebnicích dosud ani příliš diskutované. V odborné literatuře lze nalézt následující dva extrémy. Někteří autoři navrhuji započítat všechny příspěvky od všech mechanismů a aritmeticky je sečíst, to dává teoreticky nejvyšší hodnotu zpevnění (a tento přístup je asi nejčastěji používaný). Jindy lze najít argument, že je třeba vybrat pouze největší příspěvek k zvýšení skluzového napětí a ostatní příspěvky zanedbat, protože pokud dislokace je schopna překonat nejobtížněji překonatelné překážky, překoná i všechny ostatní. Skutečnost se nachází někde mezi těmito extrémy, což ukázali již v roce 1966 Foreman s Makinem pomocí jednoho z prvních počítačových experimentů v materiálové vědě.

#### Počítačová simulace Foremana a Makina

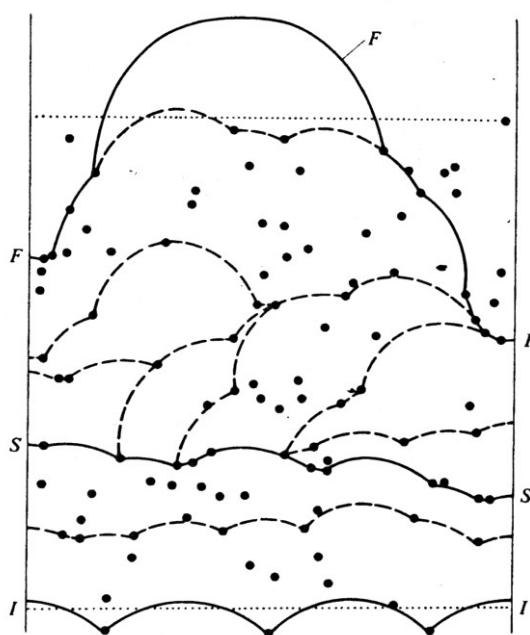
Foreman s Makinem v této počítačové simulaci umístili do skluzové roviny 10 000 překážek s těmito vlastnostmi:

- Překážky jsou nepohyblivé.
- Všechny mají stejnou pevnost, tj. dokáží ukotvit dislokaci až do limitní síly  $F_m$ , kterou můžeme také charakterizovat podle úhlu  $\theta_c$  (viz obr. 5.22).
- Překážky jsou ve skluzové rovině rozmístěné náhodně.
- Interakce mezi jednotlivými dislokačními segmenty zanedbáme.

Foreman s Makinem nechali v počítačové simulaci procházet dislokaci polem takových překážek (obr. 5.23) z počáteční pozice I až po konfiguraci F, kdy dislokace opustila pole překážek. Pokud se dislokace uchytila na překážkách a přitom její segmenty na žádné z nich neměly úhel  $\leq \theta_c$ , dislokace se zastavila v pohybu. Program zvyšoval smykové napětí  $\tau$  ve skluzové rovině až do okamžiku, kdy dislokace jednu z překážek překonala a pokračovala v pohybu. Maximální napětí, kterým bylo nutné působit na dislokaci, je rovno kritickému skluzovému napětí  $\tau_c$ .



**Obrázek 5.22** Dislokace zachycená na překážce. Poloměr jejího prohnutí je nepřímo úměrný působícímu napětí  $\tau$ . Síla  $\vec{F}$ , kterou dislokace na překážku působí, je dvojnásobek průmětu tahu v dislokační čáře  $\vec{T}$  a roste tedy se zmenšujícím se úhlem  $\theta$ . Pro určitý kritický úhel  $\theta_c$  dosáhne síla  $\vec{F}$  pevnosti překážky  $F_m$  a dislokace překážku překoná.



**Obrázek 5.23** Průchod dislokace polem 100 překážek o  $\theta_c = 120^\circ$ . Z polohy I při zvyšování napětí  $\tau$  prochází postupně konfiguracemi znázorněnými čárkovaně (nestabilní konfigurace) a plnou čarou (stabilní konfigurace,  $\tau$  musí být zvýšeno).

Foreman s Makinem takto stanovili  $\tau_c$  pro překážky pro překážky s různým kritickým úhlem  $\theta_c$ . Potom do skluzové roviny rozmístili dva typy překážek zároveň. Pokud by bylo možné napětí nutné k překonání dvou zpevňujících



mechanismů jednoduše algebraicky sčítat, kritické skluzové napětí  $\tau_c$  by bylo rovno

$$\tau_c = \tau_{c1} + \tau_{c2} \quad (25)$$

Tento počítačový experiment ukázal, že rovnice (25) obecně neplatí. Závěry této studie lze shrnout takto:

- Pokud se kombinují dva typy „slabých“ překážek, výsledný zpevňující efekt odpovídá rovnici (26).

$$\tau_c^2 = \tau_{c1}^2 + \tau_{c2}^2 \quad (26)$$

- Pokud se kombinují dva typy silných překážek, výsledný zpevňující efekt se blíží rovnici (25).
- Pokud se do pole slabých překážek přidá malá koncentrace silných překážek, je jejich vliv na celkové zpevnění materiálu výrazný.
- Pokud se do pole silných překážek přidá malá koncentrace slabých překážek, je jejich vliv na celkové zpevnění materiálu zanedbatelný.

Na tomto půvabném historickém počítačovém experimentu je zřetelně vidět, že problém kombinace různých zpevňujících mechanismů není jednoduše řešitelný. Nelze jednoduše rozhodnout, v jakých případech lze rovnice (25) nebo (26) použít pro vyjádření kritického skluzového napětí při působení více zpevňujících mechanismů.

Cvičení 14: Pokuste se zařadit jednotlivé mechanismy popsané v kap. 5.2.2. z hlediska efektivního a vnitřního napětí.

## 6. DVOJČATĚNÍ

Dvojčatění (*twinning*) je poměrně častým mechanismem plastické deformace za nízkých teplot. Pro tento mechanismus je zpravidla potřebná vyšší úroveň napětí než pro dislokační skluz. Vyskytuje se proto zejména tehdy, pokud dislokační skluz z nějakého důvodu nedokáže plně přenášet plastickou deformaci materiálu.

**Definice:** Krystaly A a B nazýváme dvojčata (*twin*), pokud mají stejnou krystalografickou mřížku a:

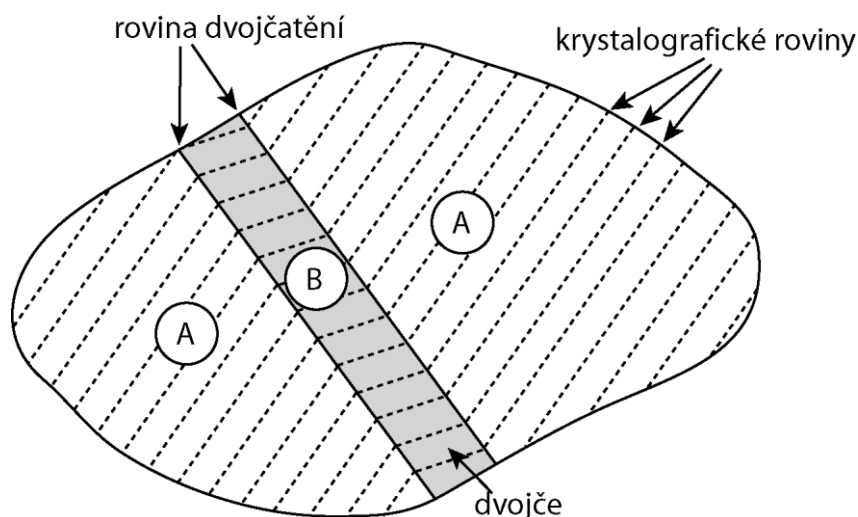
1. stýkají se na společné krystalografické rovině (jsou koherentní). Tato rovina je nazývána rovinou dvojčatění (*twin plane*);
2. existuje vícenásobná mřížka, která je společná oběma krystalům (*coincidence lattice*).

Existují dva typy dvojčat:

Pro dvojčata prvního typu (*type I twins*) platí, že rovina dvojčatění je rovinou zrcadlení mezi oběma krystaly A a B (obr. 6.1).

Dvojčata druhého typu (*type II twins*) se vyskytují u mřížek s nízkým počtem operací symetrie, jako je např. romboedrická mřížka. Krystal A lze získat z krystalu B jeho rotací o  $180^\circ$  kolem osy, která leží v rovině dvojčatění.

U struktur s vysokým stupněm symetrie (fcc, bcc, hcp) jsou u dvojčat, která se v nich nejčastěji vyskytují, splněny obě podmínky; dvojčata jsou nazývána složená (*composed twins*).



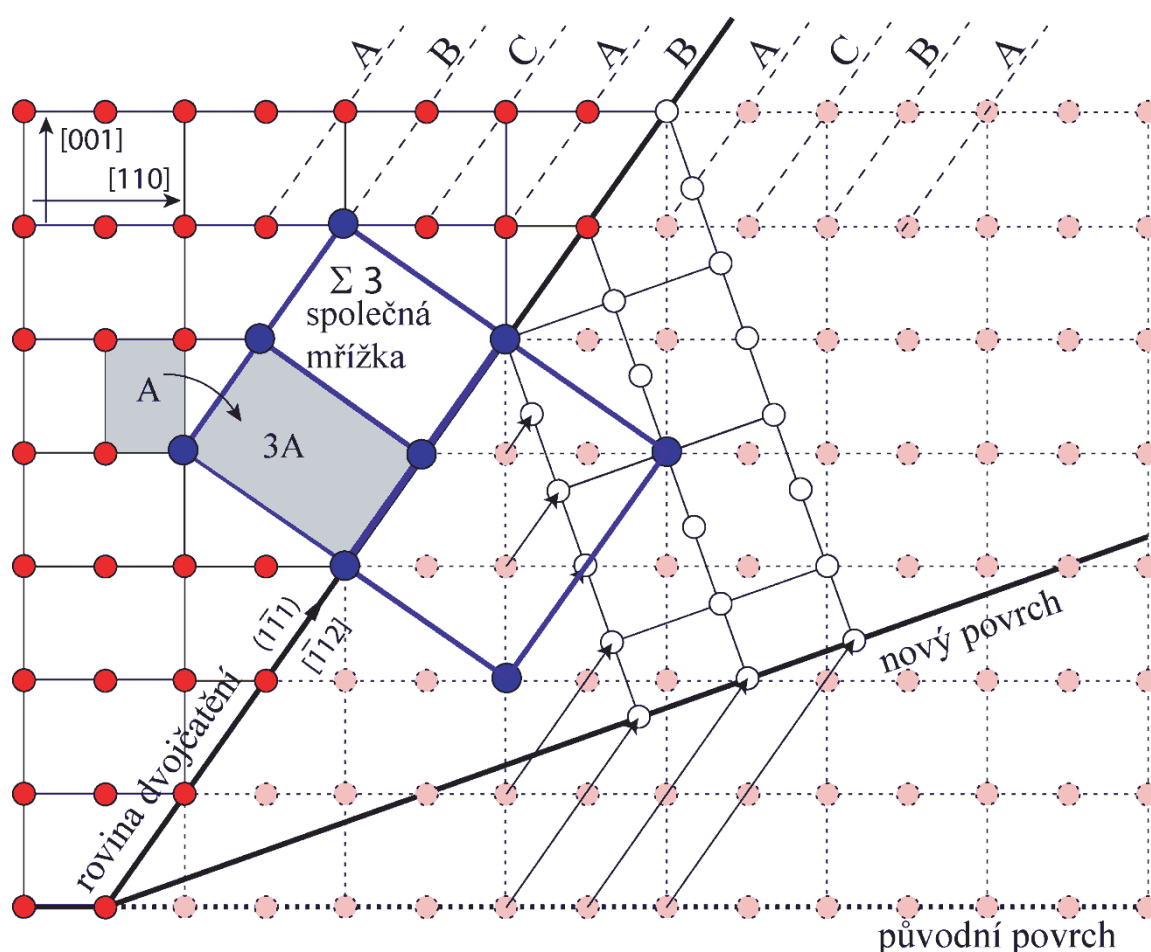
**Obrázek 6.1** Krystaly A a B v pozici dvojčat. Dvě roviny dvojčatění jsou kolmé k rovině papíru.

Na obr. 6.2 je znázorněna fcc mřížka se dvěma krystaly v pozici dvojčat (uzlové body krystalu vlevo znázorněné červenými kolečky, krystalu vpravo prázdnými kolečky). Rovina dvojčatění je kolmá k rovině papíru. Krystal vpravo lze vytvořit z krystalu vlevo, pokud si představíme, že po každé krystalografické rovině rovnoběžné s rovinou dvojčatění prošla dislokace se

stejným Burgersovým vektorem. Každá dislokace způsobí přesunutí všech atomů vpravo o stejný vektor posunutí. Takovému vektoru se říká vektor dvojčatění  $\vec{s}$ , jeho směru pak směr dvojčatění. Roviny a směry dvojčatění, které se pozorují u tří nejčastějších krystalografických struktur, jsou uvedeny v tabulce 6.1.

struktura	Rovina dvojčatění	Směr dvojčatění
fcc	$\{111\}$	$\langle 112 \rangle$
bcc	$\{112\}$	$\langle 111 \rangle$
hcp	$\{10\bar{1}2\}$	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$

Tabulka 6.1 Směry a roviny dvojčatění.



**Obrázek 6.2** Dvojčatění v fcc mřížce. Krystalografická rovina rovnoběžná s rovinou papíru je  $(\bar{1}10)$ . Rovna dvojčatění  $(\bar{1}\bar{1}1)$  je kolmá k rovině papíru. Vektor směru dvojčatění  $\vec{s}$  je roven  $1/6[\bar{1}12]$ , tedy stejný jako Burgersův vektor parciální Shockleyho dislokace. Všiměte si, že posunutí atomů z původních pozic (plná kolečka) na nové pozice (prázdna kolečka) způsobuje rovnoměrnou deformaci povrchu krystalu (anebo hranice zrna v případě polykrystalu). Dvojčatová rovina tvoří speciální typ hranice zrna, která je označována jako  $\Sigma N$ , kde  $N$  je celé číslo definované pomocí společné mřížky. Primitivní buňka společné mřížky má v tomto případě 3x větší objem než primitivní buňka fcc mřížky, dvojčatová rovina tedy odpovídá hranici typu  $\Sigma 3$ .

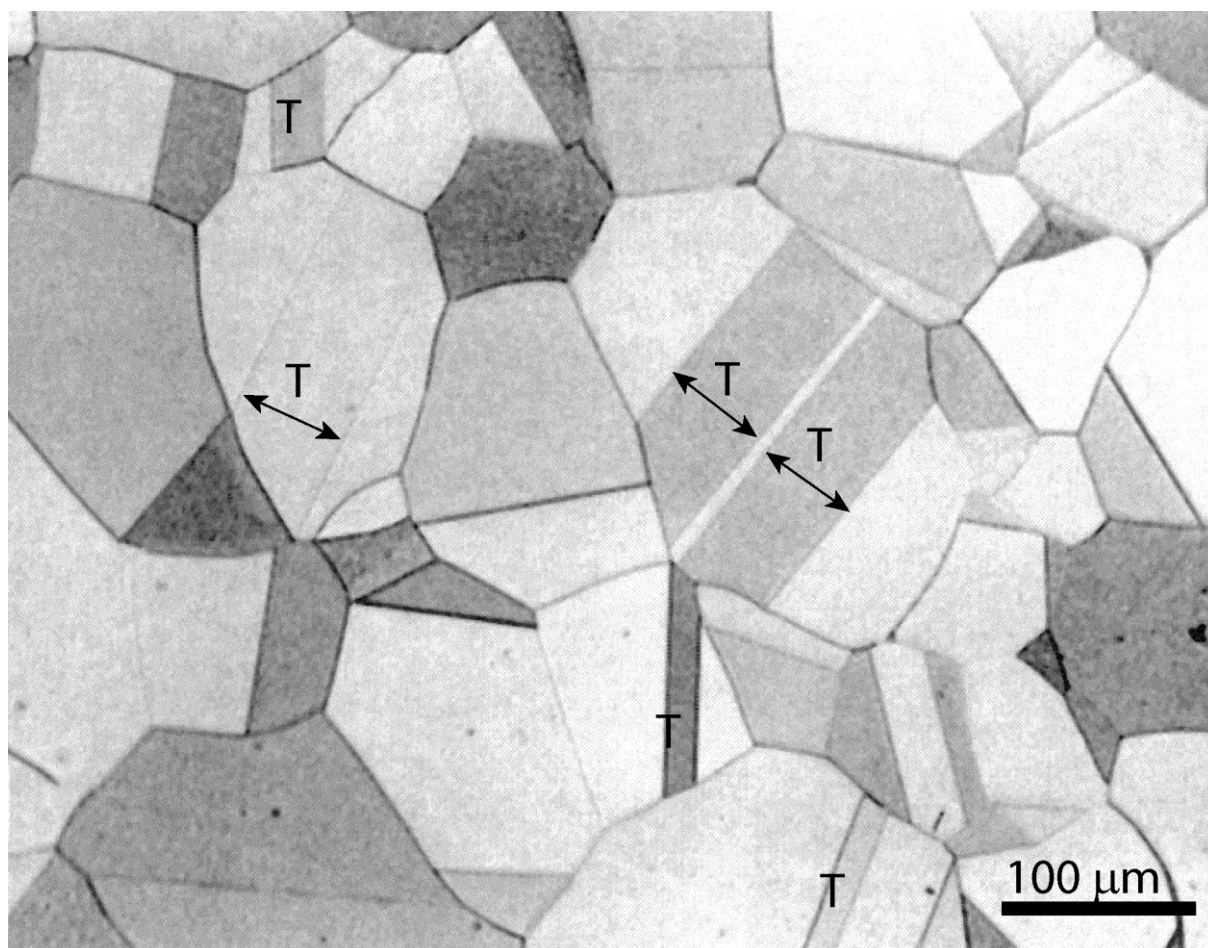
Poznámky: 1) Ve většině učebnic se hovoří pouze o dvojčatech prvního typu. Výskyt dvojčat druhého typu však není vzácný, vyskytují nejen u složitějších intermetalických mřížek, ale i u některých prvků, např. u romboedrického uranu.

2) Dále lze v učebnicích nalézt, že dvojčatění se vyskytuje častěji při nízkých teplotách a vysokých rychlostech deformace. Korektnější je tvrzení, že dvojčatění se objevuje při vyšších úrovních napětí (jak nízká teplota, tak vysoká rychlost deformace napětí zvyšují).

3) U fcc existuje více typů dvojčatových hranic  $\Sigma N$ , N je vždy liché.

## 6.1 Růstová a deformační dvojčata

Růstová dvojčata vznikají během tuhnutí, krystalizace nebo rekrystalizace, tedy za vysokých teplot kdy je možná difúze atomů. Důvod, proč tato dvojčata vznikají, je energetický: energie dvojčatové roviny je podstatně nižší než energie obecné vysokoúhlové hranice zrn. Tloušťka těchto dvojčat je téměř libovolná, často desítky mikrometrů (obr. 6.3).

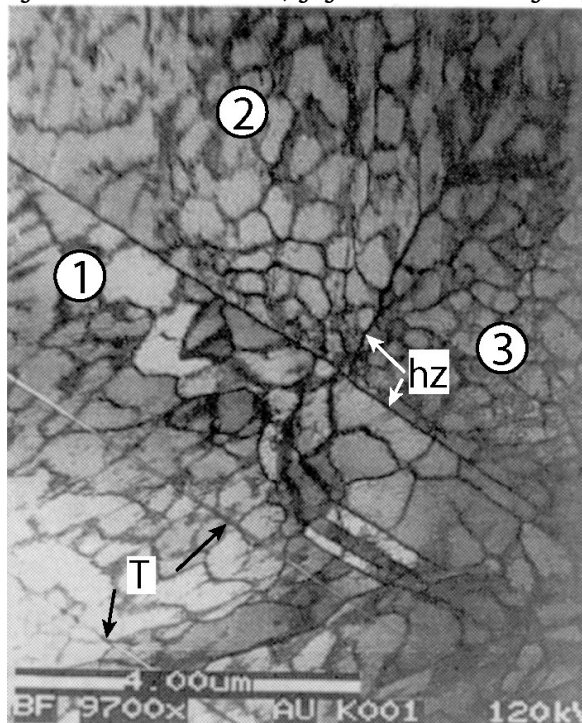


**Obrázek 6.3** Polykrystal obsahující velké množství růstových dvojčat. Některá jsou označena písmenem T, najděte další (hranice mezi krystalem a jeho dvojčetem je často dokonale rovná). Dvojčetem je zvykem nazývat tu část zrna, která zabírá menší objem.

Deformační dvojčata se vytvářejí při deformaci krystalu a proto nás zde zajímají více. Tvoří se zejména v těchto případech:

- není k dispozici dostatek skluzových systémů pro splnění von Misesovy podmínky kompatibility deformace (např. hexagonální krystaly jako Zn, Sn, Mg);
- skluz dislokací je obtížný (např. bcc kovy za nízkých teplot);
- u fcc kovů s nízkou energií vrstevné chyby, takže Shockleyho parciální dislokace mohou být snadno od sebe odděleny (např. austenitické ocele, obr. 6.4).

Deformační dvojčata jsou velmi tenká, jejich tloušťka je typicky pod  $1\mu\text{m}$ .



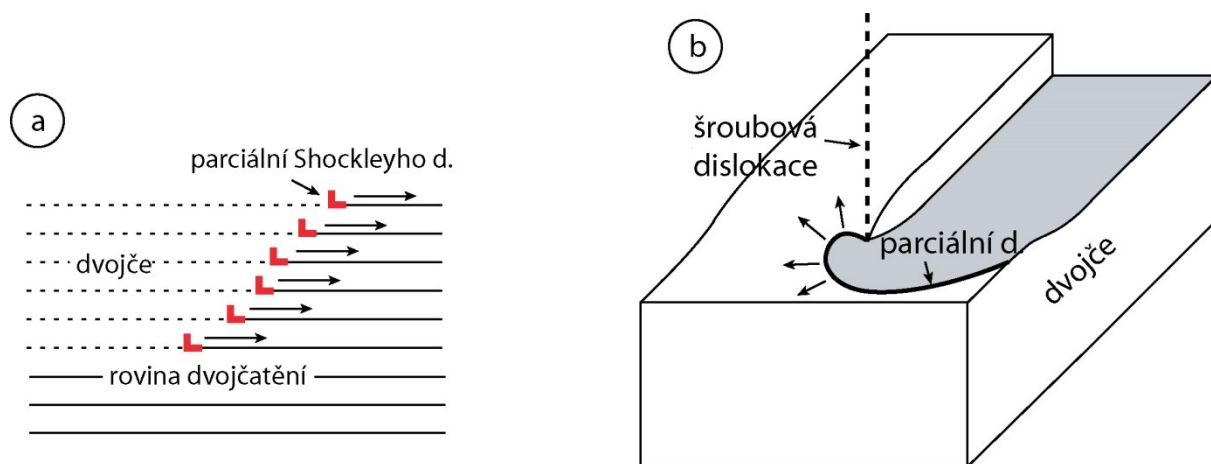
**Obrázek 6.4** Austenitická ocel po cyklické deformaci a únavovém lomu. Na obr. jsou 3 různá zrna označená čísly (hz = hranice zrna) s tzv. buňkovým dislokačním uspořádáním. Tmavé linie jsou dislokační stěny, ne jednotlivé dislokace. Dvě velmi tenká deformační dvojčata (T) jsou pozorovatelná v dolním zrně.

#### Cvičení 15:

- Vysvětlete pomocí obr. 6.2, proč jsou deformační dvojčata vždy velmi tenká (zaměřte se na situaci na hranici zrn polykrystalu).
- Nakreslete schéma tahového monokrystalického vzorku po plastické deformaci skluzem dislokací a dvojčatěním.
- Basální rovina (0001) u hcp je krystalograficky identická s rovinou {111} u fcc. Proč tato rovina nemůže být u hcp rovinou dvojčatění?
- Uveďte roviny, které ze stejného důvodu nemohou být dvojčatovou rovinou u krychlových mřížek.

## 6.2 Růst deformačních dvojčat

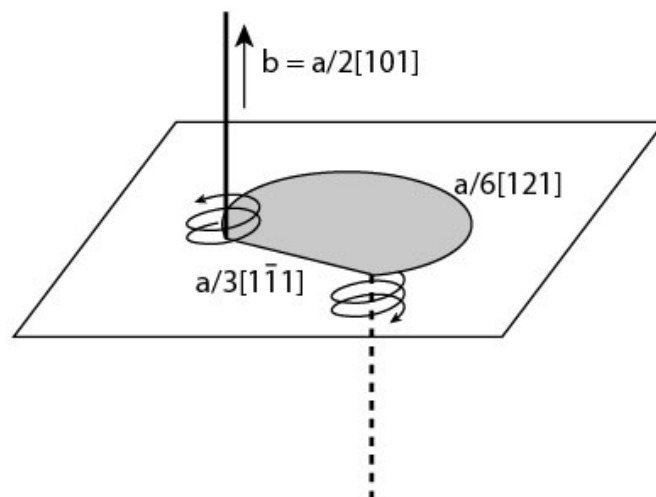
Z obrázku 6.2 je vidět, že deformační dvojče může vzniknout v zrně tak, že po každé rovině  $\{111\}$  projde právě jedna parciální Shockleyho dislokace. Na první pohled se zdá být velmi nepravděpodobné, že by v materiálu existovala taková dokonalá "dislokační stěna" parciálních dislokací schopných pohybu, jako na obr. 6.5a. Existuje nicméně model, který vznik takové stěny vysvětluje (obr. 6.5b). Představme si šroubovou dislokaci, kolem níž má krystalografická rovina  $\{111\}$  tvar spirály. Pokud dojde k takové dislokační reakci, že se na tuto šroubovou dislokaci naváže pohyblivá parciální dislokace, bude při svém pohybu okolo šroubové dislokace vysílat právě jednu parciální dislokaci po každé krystalografické rovině a bude vytvářet dvojče.



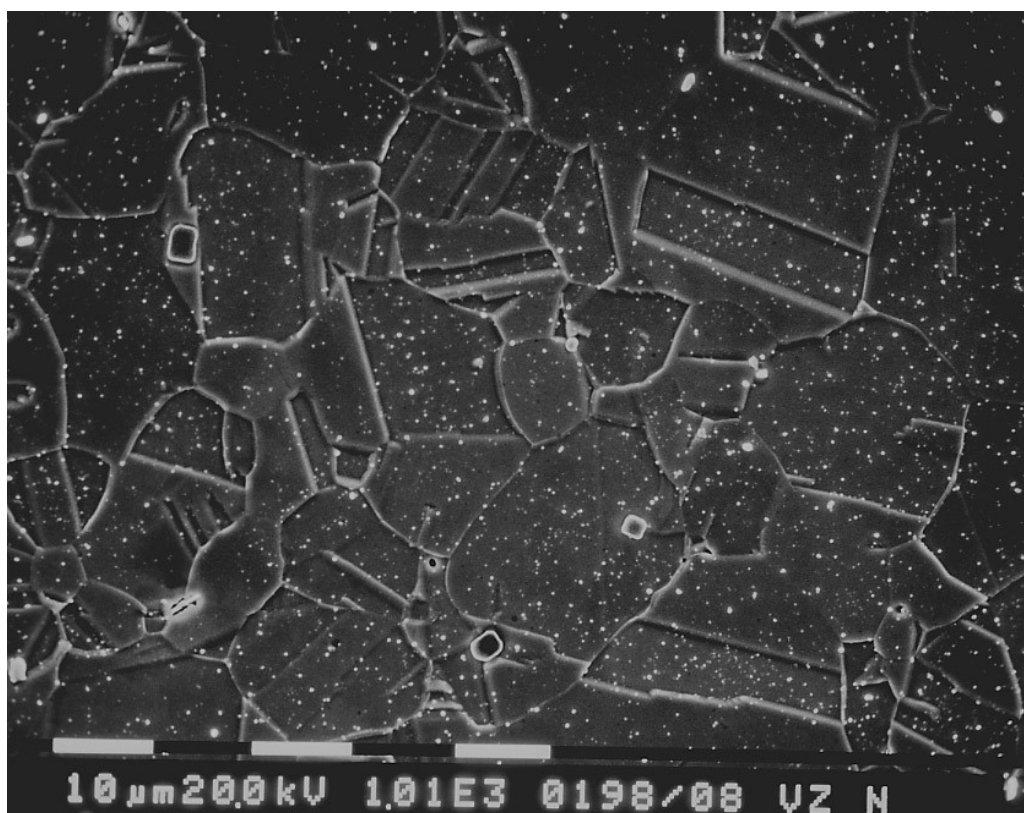
**Obrázek 6.5** a) Stěna tvořená parciálními dislokacemi nezbytnými k vytvoření deformačního dvojčete b) taková stěna může být vytvořena spirálovým pohybem jediné parciální dislokace okolo šroubové dislokace.

Mechanismus vzniku deformačních dvojčat ukázaný na obr. 6.5 je obecný, platí pro všechny mřížky. Na obrázku 6.6 je uveden konkrétní příklad pro mřížku fcc včetně Millerových indexů jednotlivých dislokací.

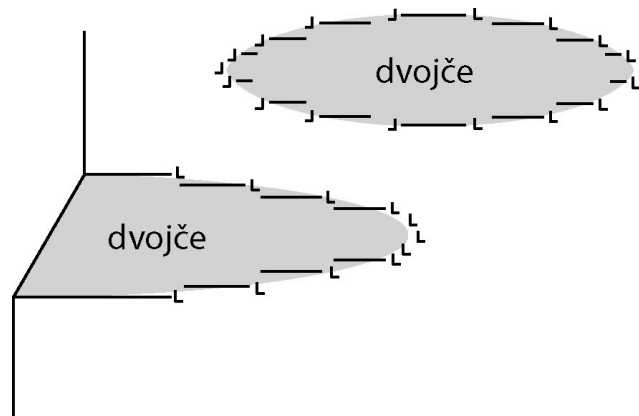
Protože dvojče vzniká pohybem dislokací, hranice mezi dvojčetem a původním krystalem nemusí být rovinná a nemusí vést přes celé zrno, i když tomu tak často je. Srovnejte obrázek 6.3, kde všechna dvojčata mají rovinnou hranici s okolními zrny a dvojčata vždy sahají až k hranici zrn a opačnou situaci na obr. 6.7. Na obrázku 6.8 je ukázáno dvojče, které má lentikulární tvar a existuje jen v omezeném objemu uprostřed zrna. Taková dvojčata se také často pozorují.



**Obrázek 6.6** Mechanismus dvojčatění u fcc. Hranový segment dislokace s  $\vec{b} = a/2[101]$  ležící v rovině  $(1\bar{1}1)$  je rozštěpený na nepohyblivou dislokaci s  $\vec{b} = a/3[1\bar{1}1]$  a Shockleyho parciální dislokaci s  $\vec{b} = a/6[121]$ , která rotuje proti směru hodinových ručiček okolo levého šroubového segmentu a rozšiřuje přitom dvojče ve směru nad znázorněnou rovinu, a ve směru hodinových ručiček okolo pravého šroubového segmentu.



**Obrázek 6.7** Na tomto snímku dvojčata často končí uprostřed zrna a jejich hranice nejsou rovinné.



**Obrázek 6.8** Schéma kolmého řezu vzorkem. Lentikulární dvojčata. Horní dvojče leží uprostřed materiálu, dolní se rozšiřuje od povrchu dovnitř materiálu.

Poznámka: V některých materiálech a za vysokých úrovní napětí je tvorba dvojčat extrémně rychlá. Je doprovázena silnou emisí akustických vln ("křik" při deformaci Zn nebo Sn). Předpokládá se, že tvorba dvojčete probíhá rychlostí srovnatelnou s rychlostí zvuku v materiálu. Vznik každého dvojčete navíc způsobuje viditelný pokles napětí na tahové křivce.

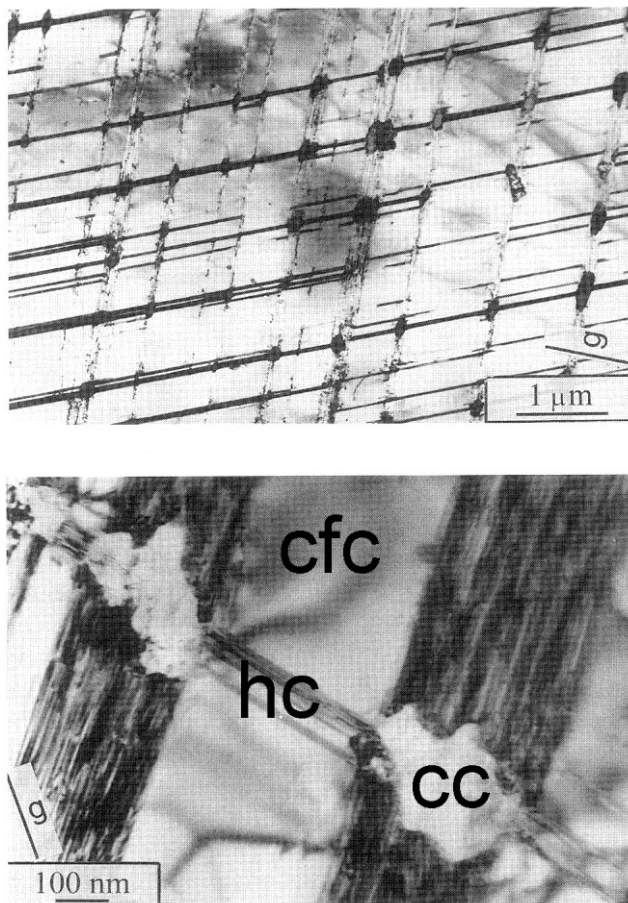
Ve starších učebnicích lze najít názory, že takové dvojčatění probíhá bez pomoci parciálních dislokací, "překlopením" mřížky, tj. současným posunem atomů bez pomoci mřížových poruch. K tomu by ovšem bylo nezbytné napětí blízké teoretickému skluzovému napětí, tedy řádově GPa. Většina vědců v současnosti proto na možnost "překlopení" mřížky nevěří.

## 7. PLASTICITA ZPŮSOBENÁ FÁZOVOU TRANSFORMACÍ

### 7.1 Martenzitická transformace ocelí

Pokud na materiál působí vnější napětí, za určitých podmínek je možné, že v něm dojde k fázové transformaci, která je doprovázená plastickou deformací (*transformation induced plasticity*). Napětově indukovaná martenzitická transformace je známým jevem u ocelí. Na obrázku 7.1 je jeden takový příklad. Austenitická ocel 316L byla zchlazena na teplotu varu kapalného dusíku. Při této teplotě se austenit stává metastabilní fází; bez vnějšího napětí je ovšem kinetika fázové transformace austenit  $\rightarrow$  martenzit, tedy fcc  $\rightarrow$  bcc (nebo přesněji tetragonální prostorově uspořádaná mřížka, bct, *body centered tetragonal*) tak pomalá, že by ocel zůstala trvale austenitická. Při plastické deformaci se v austenitu pohybují dislokace, jak úplně, tak, díky nízké energii vrstevné chyby, parciální. Ty mohou způsobit změnu vrstvení kompaktních rovin z ABCABC na ABABA, tedy vytvořit v materiálu tenké lamely hcp fáze, nazývané  $\epsilon$  - martenzit. V místech, kde se hcp lamely protínají, vznikají zárodky tetragonálního  $\alpha$  martenzitu.





**Obrázek 7.1** Cyklická deformace austenitické oceli 316L v kapalném dusíku způsobila nejprve tvorbu lamel hexagonální fáze a pak i bct fáze v místech průniku dvou lamel.

Napětově indukovaná martenzitická deformace nízkolegovaných ocelí je velmi známý jev, který čtenář jistě zná z jiných kurzů a proto zde nebude opakován.

Cvičení 16: Dokážete změnit mřížku fcc v mřížku hcp za pomoci skluzu Shockleyho parciálních dislokací?

## 7.2 Slitiny s tvarovou pamětí

U slitin s tvarovou pamětí (*shape memory alloys*), jako je např. NiTi, se objevují dvě unikátní vlastnosti, které obě mají původ ve schopnosti tohoto materiálu měnit svou krystalografickou mřížku vlivem teploty nebo napětí reverzibilním způsobem. Jedná se o paměťový efekt (*shape memory effect*) a pseudoelasticitu (*pseudoelasticity*).

Rovnovážná fáze za vysoké teploty se nazývá austenit, fáze termodynamicky stabilní za nízké teploty je nazývána martenzit. Pokud ochlazujeme vzorek s austenitickou strukturou, martenzit se začne tvořit při teplotě  $M_s$  (*martensite start*). Procento martenzitu při dalším ochlazení vzrůstá a transformace je dokončena při teplotě  $M_F$  (*martensite finish*), kdy je vzorek již čistě martenzitický. Při zvyšování teploty a zpětné fázové

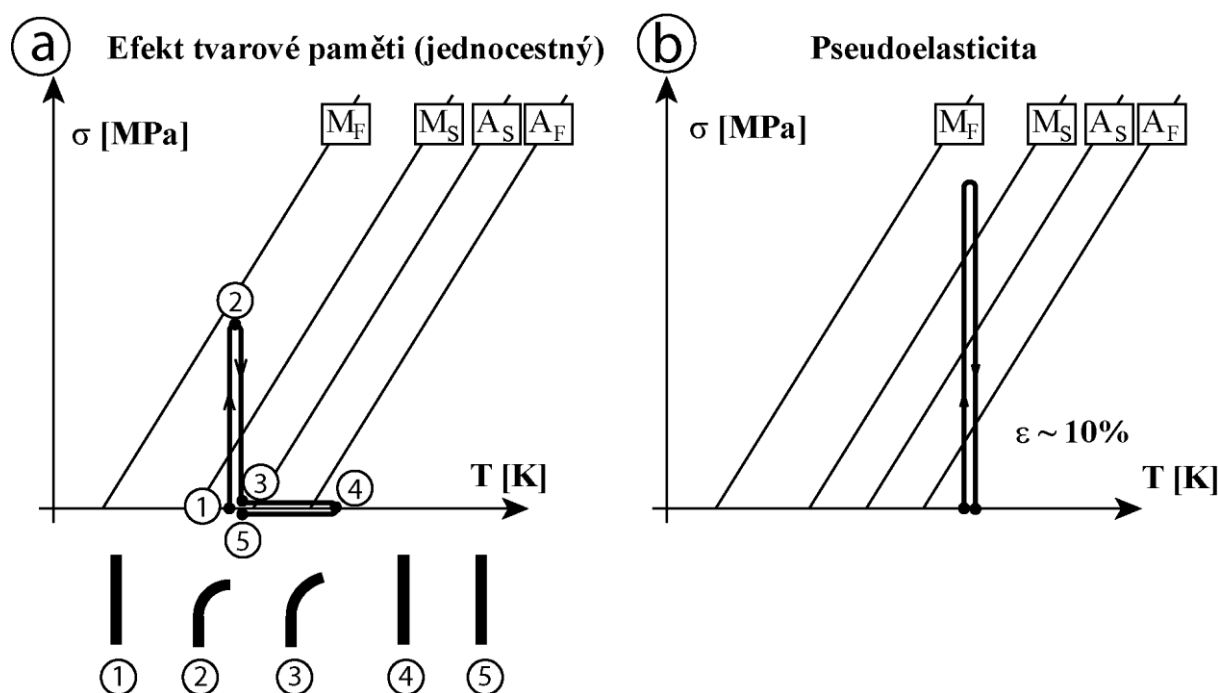
transformaci se objevuje silná hystereze: austenit se začne vytvářet při teplotě  $A_S$  (*austenite start*), která je vyšší než  $M_S$ . Teplota, při které vzorek obsahuje 100% austenitické fáze, je  $A_F$  (*austenite finish*); vztah mezi zmíněnými teplotami je:

$$M_F < M_S < A_S < A_F$$

Je pozorováno, že tyto teploty jsou navíc přibližně lineárně závislé na působícím napětí (obr. 7.2).

Paměťový efekt (*shape memory effect*, – obr. 7.2a). Uvažujme vzorek za teploty  $T$ ,  $M_S < T < A_S$ . Těto situaci odpovídá bod 1 na obr.7.2a. Při této teplotě může být vzorek jak čistě austenitický, tak čistě martenzitický, případně dvoufázový. Aplikujme nyní na vzorek rostoucí napětí; vzorek se deformuje elasticky až do okamžiku, kdy se v diagramu napětí-teplota dostane do stavu odpovídajícímu přímce  $M_S$ . Austenitická fáze se začne měnit na martenzit a tomu odpovídá deformace vzorku díky této fázové transformaci, která může dosahovat několika procent. Napětí můžeme zvyšovat až do bodu 2, který může ležet pod i nad přímkou  $M_F$ . Nad  $M_F$  bude vzorek plně martenzitický a další deformace bude probíhat elastickou deformací martenzitu. Aby deformace mezi 1 a 2 byla plně vratná, nesmí být překročena mez kluzu martenzitu (dislokace se nesmí hýbat, protože by způsobily nevratnou plastickou deformaci). Během odlehčení se martenzit netransformuje zpět na austenit, protože vzorek se nachází ve stavu nad přímkou  $A_S$ . Vzorek má tedy stejný tvar jako v bodě 2, až na malou zpětnou elastickou deformaci. Aby se vzorek vrátil zpět do tvaru jako na počátku celého procesu, je nutné vrátit jej zpět do austenitického stavu. To je možné udělat zahřátím nad teplotu  $A_F$  (bod 4). Zvláštností, která umožňuje paměťový efekt, je to, že zpětná fázová transformace z martenzitu na austenit je reverzibilní, tj. atomy se vrací do své původní pozice a navazují vazby se stejnými sousedy jako před deformací. Vzorek se proto vrátí zpět do původního tvaru i na makroskopické úrovni. Při ochlazení zpět na počáteční teplotu nedochází vlivem hystereze fázové transformace k přeměně na martenzit.

Pseudoelasticita, někdy také superelasticita – (*pseudoelasticity, superelasticity*, viz obr. 7.2b). Tentokrát budeme deformovat austenitický vzorek při konstantní teplotě vyšší než  $A_F$ . Vzorek se deformuje opět elasticky až do  $M_S$  a dále dochází k fázové transformaci na martenzit; nad přímkou  $M_F$  by byl vzorek plně martenzitický. Během odlehčení se martenzit transformuje zpět na austenit a v okamžiku, kdy na vzorek nepůsobí vnější napětí, vzorek nabyde stejného tvaru jako před deformací. Tímto způsobem lze vratně deformovat materiál až do přibližně 10%, tedy řádově více než v oblasti entalpické elasticity.



**Obrázek 7.2** Trajektorie v diagramu  $\sigma - T$  během a) paměťového efektu b) pseudoelasticity. Pod obrázkem a) je schématicky ukázán tvar vzorku při ohybu.

#### Poznámky:

Zde popsáný paměťový efekt se nazývá jednocestný nebo jednosměrný; existuje i dvoucestný paměťový efekt.

## 8. DEFORMACE MATERIÁLŮ S MALOU VELIKOSTÍ ZRNA

### 8.1 Příprava objemových ultrajemnozrných materiálů

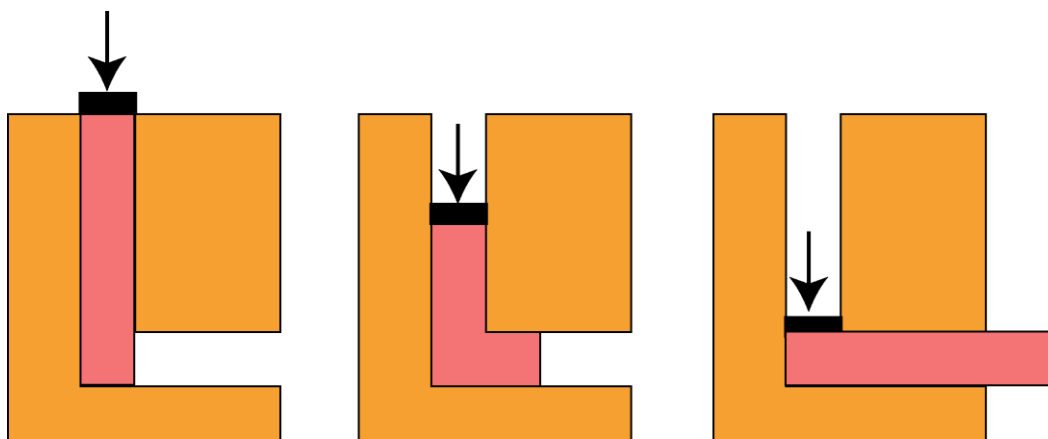
Materiály s velikostí zrna mezi 100 nm a 1  $\mu\text{m}$  jsou nazývány ultrajemnozrné (*ultrafine grained materials, UFG*), s velikostí pod 100 nm nanokrystalické (*nanocrystalline materials*). Velká část atomů se nachází v blízkosti hranic zrn a jsou více či méně odchýleny ze svých rovnovážných poloh. Materiál je natolik vzdálen od termodynamicky rovnovážného stavu (tím je dokonalý monokrystal), že je obtížné ho nejen připravit, ale i udržet ho ve stejném stavu, protože tyto materiály mají silnou tendenci k rekrystalizaci.

UFG materiály lze připravit v makroskopickém měřítku např. pomocí metod využívajících výrazné plastické deformace (*severe plastic deformation, SPD*). Jsou to v podstatě procesy tváření za studena zaměřené na vznik co nejmenšího zrna. Existuje několik možností. Na obr. 8.1 je ukázáno protlačování materiálu kanálem. V místě ohybu kanálu je materiál výrazně plasticky deformován. Touto metodou, nazývanou ECAP (*equal channel angular pressure*) lze připravit UFG materiál z běžných kovů včetně ocelí.

Metoda ARB (*accumulative rolling-bonding*) spočívá v opakovaném rozválcování a přeložení materiálu; tuto myšlenku používali již kováři při výrobě damascénských mečů. Metoda HPT (*high pressure torsion*) je zřejmě nejúčinnější. Spočívá v sevření disku mezi dva písty, které vzájemně rotují. Podle některých autorů tak kovový materiál lze i zamorfizovat.

Další možností přípravy UFG materiálů je prášková metalurgie.

Nanokrystalické materiály mohou být připraveny pomocí elektrodpozice. Je tak možné připravit makroskopický vzorek s kontrolovanou velikostí zrna i pod 10 nm. Depozicí ve vakuu pomocí PVD (*physical vapour deposition*) či CVD (*chemical vapour deposition*) metod lze připravit amorfni nebo velmi jemně nanokrystalické vrstvy, bohužel pouze o tloušťce omezené na maximálně několik  $\mu\text{m}$ .



**Obrázek 8.1** Procedura ECAP pro výrobu ultrajemnozrnných materiálů. Kvádrový vzorek je opakovaně protlačován kanálem o tvaru L.

Cvičení 17: Má u nanokrystalů o velikosti zrna cca 20 nm smysl zavádět mez kluzu  $R_{0.2}$ ? (vypočtete skluzovou plastickou deformaci, která je způsobena průchodem jediné dislokace každým zrnem).

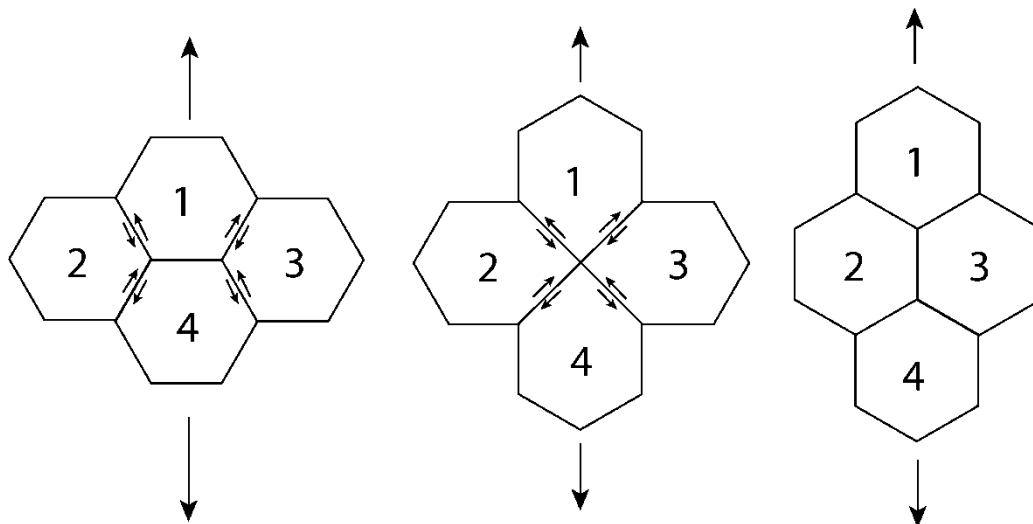
## 8. 2 Superplasticita

Pokud se nám podaří připravit materiál se stále se zmenšující velikostí zrna, můžeme pozorovat, že při malé velikosti dochází ke dvěma jevům:

- Hall-Petchův vztah přestává být platný ( $d < \sim 20 \text{ nm}$ );
- za zvýšené teploty (nad  $0.4 T_m$ ) a pro  $d$  menší než určitá mez  $d_s$  se materiál může stát velmi tvárný a jeho tažnost může dosáhnout hodnot až  $\sim 1000\%$ . Hovoříme o superplasticitě (*superplasticity*).

Hodnota  $d_s$  závisí na typu materiálu a teplotě; typické hodnoty jsou menší než 1  $\mu\text{m}$ . Za vysokých homologických teplot ovšem může být superplasticita pozorována i u materiálů o velikosti zrn v řádech desítek  $\mu\text{m}$ . Zdá se evidentní, že se setkáváme s novým mechanismem plastické deformace. Výzkum chování nano a UFG materiálů je v této době poměrně intenzivní a neukončený. Existuje několik modelů popisujících

superplastické chování. Nejčastěji uváděný model předpokládá vzájemné přemístění jednotlivých zrn díky pokluzům po hranicích zrn (*grain boundary sliding*) doprovázený stáčením mřížky zrn (obr. 8.2). Předpokládá se, že pro tento mechanismus je nutná difúze atomů, i když existují i dislokační modely, které difúzi nevyžadují.



**Obrázek 8.2** Pokluzy po hranicích zrn.

## 9. CREEP A JEHO MECHANISMY

Pokud je materiál podroben současnému působení malého napětí, menšího než mez kluzu, a zvýšené teploty, vyšší než poloviny teploty tání ( $T > 0.5 T_m$ ), dochází k pomalé, ale stálé plastické deformaci. Tomuto jevu se říká tečení nebo creep. Pro studium tohoto jevu se vykonávají mechanické zkoušky nejčastěji v tahu, kdy na zavěšený vzorek udržovaný na konstantní teplotě je zavěšeno závaží. Prodloužení vzorku jako funkce času je průběžně zaznamenáváno. Problémem je, že v praxi tento jev může probíhat roky nebo desítky let, což je neúnosná doba pro laboratorní zkoušky. Je otázkou, jestli urychlením zkoušky (zvýšením  $\sigma$  nebo  $T$ ) není změněn mechanismus deformace a jestli výsledky naměřené při krátkých creepových expozicích mohou být extrapolovány pro požadovanou životnost součástky. V praxi se také často teplota nebo napětí v průběhu používání součástky mění.

**9.1 Creepová křivka****9.2 Deformační mechanismy při creepu****10. Mechanismy únavového poškození****11. Příklady mechanismů plastické deformace u konkrétních materiálů**

## SHRNUTÍ

Za nízkých homologických teplot ( $T < 0.3T_m$ ), kdy je difúze substitučních prvků zanedbatelná, tedy pro většinu materiálů i za pokojové teploty, může být plastická deformace krystalických materiálů způsobena 3 mechanismy. Nejčastěji je pozorován **skluz dislokací**. **Dvojčatění** a deformačně indukovaná **fázová transformace** jsou další možnosti.

Pro **plastickou deformaci způsobenou skluzem dislokací** platí:

- Smykové napětí  $\tau$  a smykovou deformaci  $\gamma$  v rovině a směru skluzu je možné vypočítat při znalosti Schmidova faktoru  $m$ :

$$\tau = m \sigma, \quad \gamma = \varepsilon / m, \quad m = \cos \lambda \cos \phi$$

- **Kritické skluzové napětí**  $\tau_c$  je smykové napětí potřebné ke skluzu dislokací. Je fyzikálně lépe definovanou charakteristikou materiálu než makroskopická mez kluzu polykrystalu.
- Materiály s **fcc** strukturou mohou využívat 12 skluzových systémů a jsou proto často dobře tvárné.
- Chování **bcc** materiálů závisí silně na teplotě. Ve vysokoteplotním režimu, kdy efektivní napětí je blízké nule, jsou snadno plastické a mají mnoho skluzových systémů. V nízkoteplotním režimu jsou šroubové dislokace obtížně mobilní díky neplanárnímu rozštěpení jádra: objevuje se deformace pomocí dvojčatění a materiál se stává křehkým.
- Materiály s **hcp** strukturou mají omezený výběr skluzových systémů. Často dvojčatí a často jsou křehké.
- **Polykrystaly**: von Misesova podmínka pro zaručení kompatibility deformace na hranicích zrn (případně mezifázovém rozhraní) vyžaduje 5 nezávislých deformačních módů.
- **Polykrystaly**: fenomenologický Hallův - Petchův zákon velmi dobře platí pro většinu materiálů ve velmi širokém rozmezí velikostí zrna, od milimetrových zrn až po cca 20 nm.
- Aplikované napětí může být rozloženo na dvě složky. Atermální **vnitřní napětí** charakterizuje napěťová pole dlouhého dosahu vytvářená typicky dislokačními shluky. **Efektivní napětí** je nezbytné k překonání lokalizovaných překážek a může být zcela "vymazáno" tepelnou aktivací.
- Zvýšení rychlosti deformace má často stejný efekt jako snížení teploty.
- Rovnice, které tvoří most mezi mikro- a makrosvětem:

**Orowanova rovnice:**  $\dot{\gamma}_p = b \rho_m \bar{v}$

**Taylorova rovnice** pro deformační zpevnění:  $\tau_i = \alpha G b \sqrt{\rho}$

- **Zpevnění materiálů** může být dosaženo více způsoby: tvářením (nárůst dislokační hustoty), přidáním substitučních nebo intersticiálních atomů, precipitací, fázovou transformací (zejména martenzitickou), zjemněním zrna (Hall-Petchův zákon) atd. Vždy jde o zvýšení počtu překážek pro pohybující se dislokace.

**Za zvýšených teplot** se uplatňuje **šplh dislokací**, difúze atomů podél hranic zrn (**Cobleův creep**), difúze atomů mřížkou (Nabarro-Heringův creep) a při submikronové velikosti zrna také **pokluzu po hranicích zrn**.

### Literatura

**R.E. Smallman** Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering. Elsevier, 7th Edition 2007.

**P. Haasen:** Physical Metallurgy, Cambridge University Press, 1978.

**A. Mortensen,** Déformation et rupture des matériaux, skripta EPFL.

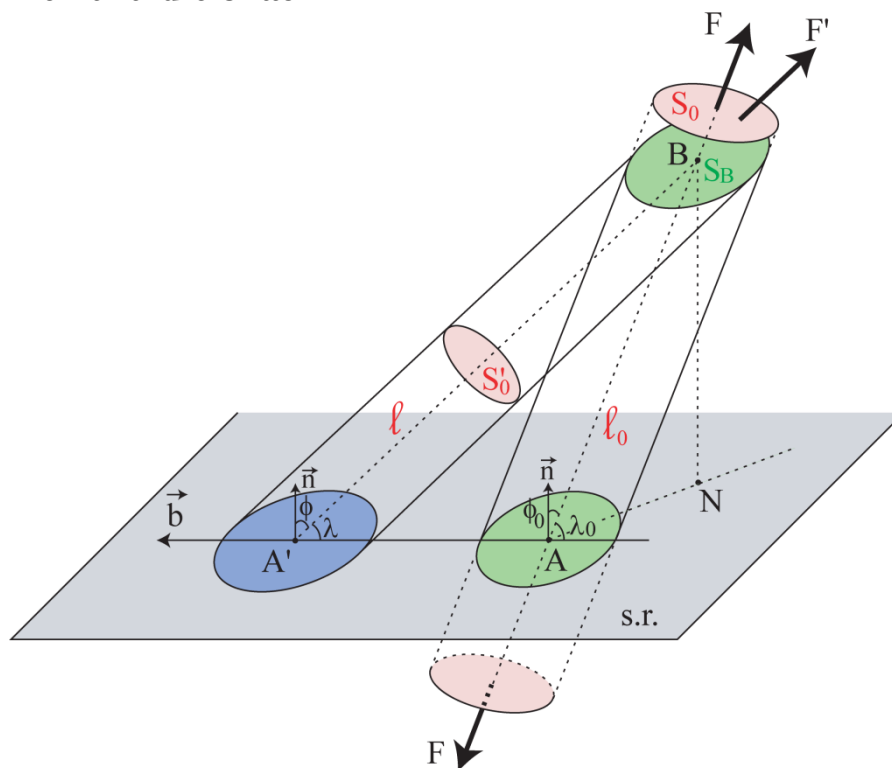
**J. Pokluda, F. Kroupa, L. Obdržálek:** Mechanické vlastnosti a struktura pevných látek, PC Dir, Brno 1994.

**W.D. Callister:** Materials Science and Engineering, An Introduction. John Wiley & Sons, 8th Edition 2010.



## Přílohy

**Příloha 1. Výpočet smykového napětí a smykové deformace monokrystalu s uvažováním rotace mřížky při jednoduchém skluzu dislokací**



**Obrázek A1.1** Stáčení mřížky v důsledku dislokačního skluzu.

Stáčení mřížky monokrystalu v důsledku skluzu dislokací z primárního skluzového systému je schématicky znázorněno na obr. 2.7. Znamená to, že během plastické deformace dochází ke změně úhlu  $\phi$  mezi osou zatěžování a normálou skluzové roviny a úhlu  $\lambda$  mez osou zatěžování a směrem skluzu. Smidův faktor (rovnice 2) se tedy během tahové deformace mění. Na obr. A1.1. je skluzová rovina (s.r.) horizontální a směr skluzu je rovnoběžný s  $\vec{b}$ . Pokud zafixujeme bod B, bod A se díky skluzovému pohybu primárních dislokací přesune na A'. Na počátku zkoušky známe počáteční hodnoty  $l_0$ ,  $S_0$ ,  $\lambda_0$  a  $\phi_0$ . Během zkoušky měříme  $\Delta l$  a  $F$ . Cílem je vypočítat  $\gamma$  a  $\tau$  jako funkci  $\Delta l$ ,  $l_0$ ,  $S_0$ ,  $F$ ,  $\lambda_0$  a  $\phi_0$ , s uvažováním stáčení mřížky.

Sinová věta pro trojúhelník AA'B :

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

Z trojúhelníků ABN a A'BN :

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

Smluvní deformace  $e$ :

$$e = \frac{\Delta \ell}{\ell_0} = \frac{\ell - \ell_0}{\ell_0} = \frac{\ell}{\ell_0} - 1$$

Odtud:

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{|AA'|}{BN} = \frac{\ell \sin(\lambda_0 - \lambda)}{\sin \lambda_0 \cdot \ell_0 \cos \phi_0} = \frac{1+e}{\sin \lambda_0 \cos \phi_0} \sin(\lambda_0 - \lambda) = \\ &= \frac{1+e}{\sin \lambda_0 \cos \phi_0} (\sin \lambda_0 \cos \lambda - \cos \lambda_0 \sin \lambda) \end{aligned}$$

Navíc platí:

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

**Smyková deformace :**

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

Výpočet smykového napětí  $\tau$  jako funkce ( $S_0$ ,  $\lambda_0$ ,  $\phi_0$  a  $F$ ):

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

Při plastické deformaci způsobené skluzem dislokací se zachovává objem :

$$S_0' \ell = S_0 \ell_0 \Rightarrow S_0' = \frac{S_0}{1+e}$$

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

**Smykové napětí :**

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

Je důležité si uvědomit, že tyto vztahy platí jen pro jednoduchý skluz dislokací; na obr. 2.7 tedy platí jen mezi body p a q.

## Příloha 2. Teorie tepelné aktivace

V této příloze vyjdeme ze situace znázorněné na obr. 4.5 v kombinaci s fyzikálními veličinami zprůměrovanými přes celý vzorek. Místo lokálního napětí  $\tau$  tedy budeme používat makroskopické efektivní napětí  $\tau_{\text{eff}}$ , místo vzdálenosti  $\ell$  použijeme střední vzdálenost mezi překážkami  $\bar{d}$  a  $V_{\text{eff}}$  bude mít význam střední hodnoty efektivního aktivačního objemu.

$\Delta G$  je funkcí  $\tau_{\text{eff}}$  a  $T$ . Totální diferenciál je tedy:

$$d(\Delta G) = \left( \frac{\partial(\Delta G)}{\partial \tau_{\text{eff}}} \right)_T d\tau^* + \left( \frac{\partial(\Delta G)}{\partial T} \right)_{\tau^*} dT$$

Koeficient u diferenciálu efektivního napětí  $d\tau^*$  je z definice nazýván efektivní aktivační objem  $V_{\text{eff}}$ ; koeficient u  $dT$  má význam entropie:

$$V_{\text{eff}} = - \left( \frac{\partial(\Delta G)}{\partial \tau^*} \right)_T$$

Pokud  $V_{\text{eff}}$  nezávisí na  $\tau^*$ :

$$\Delta G = \Delta G_0 - \tau^* V_{\text{eff}}$$

kde  $\Delta G_0$  je energetická bariéra pro pohyb dislokací za nulového efektivního napětí. Navíc lze ukázat, že  $\Delta G$  závisí lineárně na  $T$  a je nulové při absolutní nule:

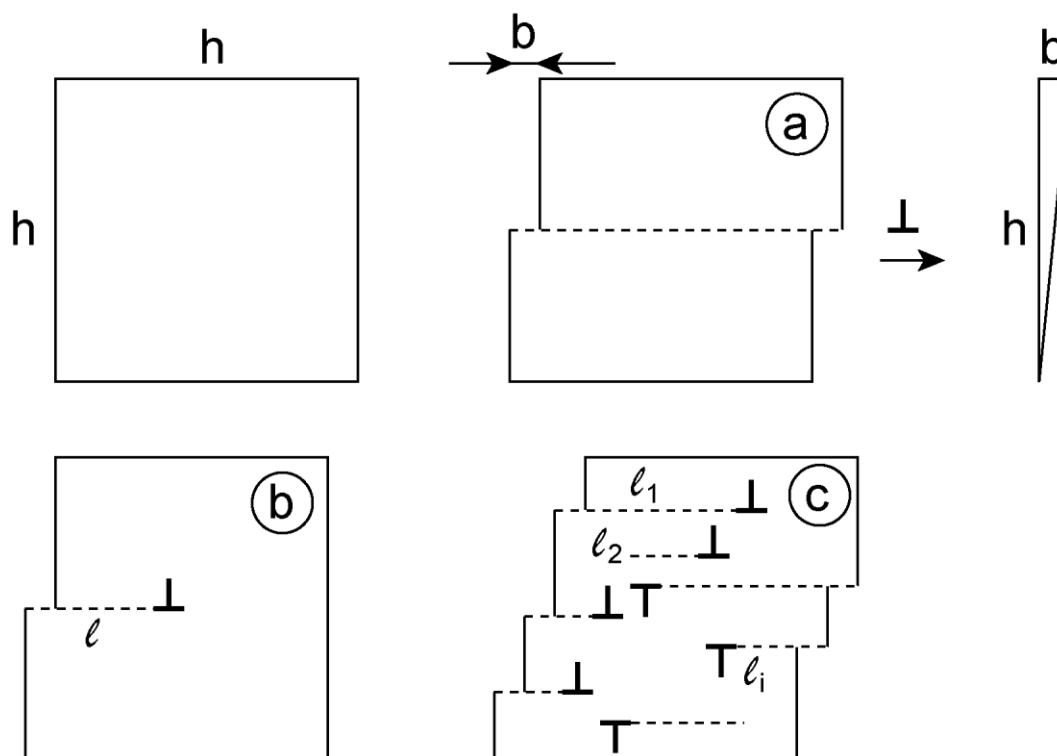
$$\Delta G = \alpha kT$$

Koeficient  $\alpha$  je poměrně málo závislý na druhu pevné látky (lze ukázat, že  $\alpha \approx 21 - 23$ ). Tento výsledek je možné snadno pochopit:  $\Delta G$  je energie dodaná tepelnými kmity mřížky a proto závisí primárně na teplotě. Také je zřejmé, že překážka je dobře charakterizovaná  $\Delta G_0$  a nikoliv  $\Delta G$ . Konečně, kombinací dvou předchozích rovnic získáme efektivní napětí při zvolené deformaci:

$$\tau^* = + \frac{\Delta G_0}{V_{\text{eff}}} - \frac{\alpha kT}{V_{\text{eff}}}$$

Pokud mechanismus řídící plastickou deformaci má malý  $V_{\text{eff}}$ , napětí potřebné k deformaci rychle klesá při růstu  $T$ . V opačném případě, závislost  $\tau$  na  $T$  není silná; mechanismus je slabě tepelně aktivovaný.

## Příloha 3 Orowanova rovnice



**Obrázek A3.1** Vazba mezi smykovou deformací a skluzem dislokací z jediného skluzového systému.

Dokažme platnost Orowanovy rovnice pro nejjednodušší případ: krychle o hraně  $h$  se pohybuje skluzovým pohybem hranové dislokace z jediného skluzového systému. Skluzová rovina je rovnoběžná s podstavou krychle (obr. A3.1) a dislokační čára je rovnoběžná s jednou ze stěn krychle. Pokud krychle projde jediná dislokace, způsobí přemístění horní části krystalu vůči dolní o  $|\vec{b}|$  (obr. A3.1 a) a tedy plastickou smykovou deformaci  $\gamma_p$ :

$$\gamma_p = b/h$$

Pokud by dislokace neprošla celou krychlí, ale urazila by dráhu  $l_1$  (obr. A3.1 b), smyková deformace bude  $l_1/h$  krát menší:

$$\gamma_p = \frac{l_1}{h} \frac{b}{h} = l_1 \frac{b}{h^2}$$

Když se krystalem pohybuje více dislokací (jejich počet označíme jako  $N$ ), celková smyková deformace je součtem příspěvků od jednotlivých dislokací:

$$\gamma_p = \sum_{i=1}^N l_i \frac{b}{h^2}$$

Zjednodušíme tuto rovnici tím, že zavedeme  $L$  jako střední dráhu, kterou mobilní dislokace urazily za sledovaný časový interval. Potom:

$$\gamma_p = NL \frac{b}{h^2}$$

Vypočítáme hustotu mobilních dislokací. Z definice,  $\rho_m$  = celková délka mobilních dislokací dělená objemem krystalu.:

$$\rho_m = Nh/h^3 = N/h^2$$

z čehož odvodíme Orowanovu rovnici ve tvaru rovnice (16):

$$\gamma_p = \rho_m Lb$$

Derivováním podle času pak získáme obvyklý tvar Orowanovy rovnice (15):

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

## Řešení cvičení z textu

### Cvičení 1:

primární skluzový systém:  $(1\bar{1}1)$ ,  $[011]$ ,  $m = 0.490$

sekundární skluzový systém:  $(111)$ ,  $[0\bar{1}1]$ ,  $m = 0.435$

Jednoduchý snadný skluz.

### Cvičení 2:

Pomalá metoda určování primárního systému:

- zvolíme libovolný směr ležící uvnitř studovaného trojúhelníka;
- vypočteme 12 Schmidových faktorů;
- najdeme jejich maximum a odpovídající primární systém;

Rychlá metoda s využitím symetrie:

- normála skluzové roviny je symetrická k vrcholu  $\langle 111 \rangle$  studovaného trojúhelníka vzhledem k jeho vrcholu  $\langle 011 \rangle$ .
- $\vec{b}$  primárního systému je směr symetrický k vrcholu  $\langle 011 \rangle$  studovaného trojúhelníka vzhledem ke jeho přeponě (strana  $\langle 001 \rangle - \langle 111 \rangle$ ).

### Cvičení 3:

Aktivní systémy:

A – jediný skluzový systém;

B, D – 2 systémy s dvěma různými skluzovými rovinami, dislokace se dvěma různými  $\vec{b}$ ;

C – 2 systémy ve stejné skluzové rovině, dislokace s dvěma různými  $\vec{b}$ ;

E – 4 systémy : 2 různé skluzové roviny, 2 různá  $\vec{b}$  v každé rovině;

F – 6 systémů : 3 roviny, 2 různá  $\vec{b}$  v každé z nich;

G – 8 systémů : 4 roviny, 2 různá  $\vec{b}$  v každé z nich.

### Cvičení 4:

Osa zatěžování při kompresi bude mít snahu se stát kolmou na Burgersův vektor primárních dislokací.

### Cvičení 5:

1. Při této orientaci mají maximální Schmidův faktor 4 skluzové systémy. Křivka nebude obsahovat stádium I.

2.

napětí	deformace	použití
$R = \frac{F}{S_0}$	$e = \frac{\Delta l}{l_0}$	polykrystaly, smluvní veličiny, vyhodnocení tahové zkoušky podle normy ( $R_{0.2}$ , $R_m$ , $E, \dots$ )
$\sigma = F / S = R(1 + e)$	$\varepsilon = \ln\left(\frac{l}{l_0}\right) = \ln(1 + e)$	polykrystaly, skutečné veličiny, studium deformačních mechanismů

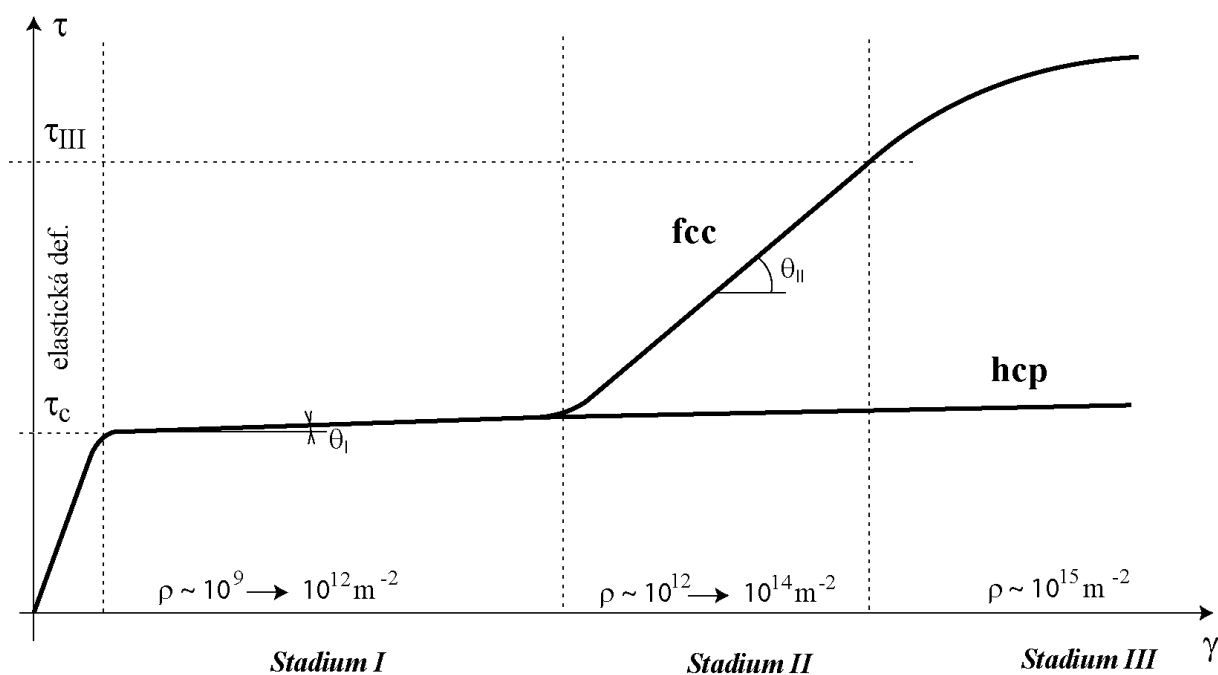
$\tau = m \sigma$	$\gamma = \frac{\varepsilon}{m}$	monokrystaly, bez započítání rotace mřížky
rovnice (5)	rovnice (6)	monokrystaly při jednoduchém skluzu s korekcí na rotaci mřížky

Cvičení 6:

Uvažujme roviny  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  a  $\{123\}$ . Dislokace s  $\vec{b} = a/2[111]$  se mohou pohybovat skluzem v rovinách  $(\bar{1}01)$ ,  $(0\bar{1}1)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}2)$ ,  $(1\bar{2}1)$ ,  $(\bar{2}11)$ ,  $(\bar{1}\bar{2}3)$ ,  $(\bar{2}\bar{1}3)$ ,  $(1\bar{3}2)$ ,  $(2\bar{3}1)$ ,  $(\bar{3}12)$  a  $(\bar{3}21)$ . Vidíme, že dislokace mají velkou volnost v pohybu.

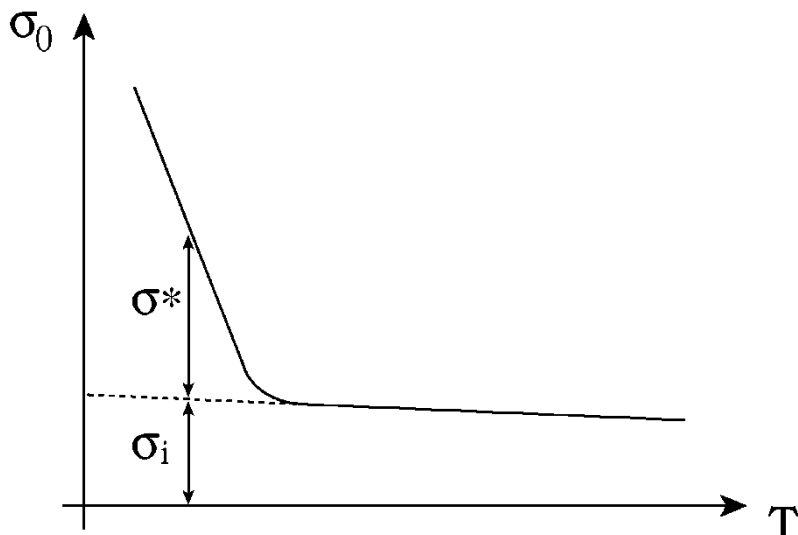
Cvičení 7:

Pokud Schmidův faktor pro basální skluz není nulový a aktivace prismatických a pyramidálních skluzových systémů je obtížná, tahová křivka monokrystalu bude mít tvar podobný jako na obr.



Obrázek C1. Srovnání tahových křivek fcc monokrystalu orientovaného pro jednoduchý skluz a hcp monokrystalu preferujícího basální skluz.

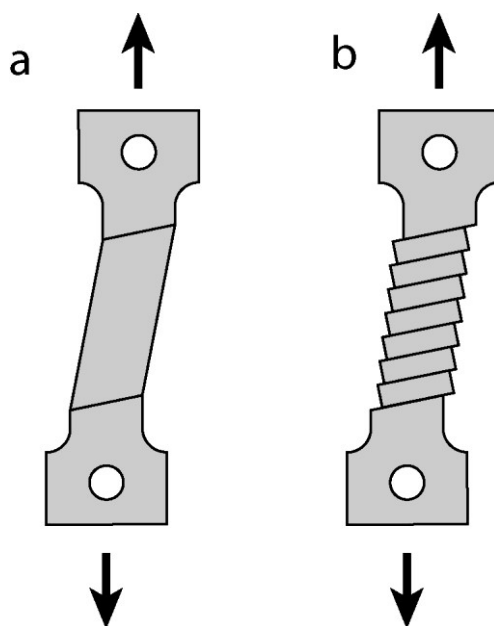
Cvičení 8. Řešení viz. obrázek C2. Efektivní napětí je u čistých bcc kovů dáno především napětím potřebným pro pohyb šroubových dislokací, kap. 2.2.3.



Obrázek C2. Schéma meze kluzu bcc kovů; skluzové napětí je rozdělené na interní a efektivní složku.

Cvičení 15. a) Při dvojčatění dochází ke změně sklonu povrchu. Pokud by dvojče mělo větší tloušťku a sahalo by až ke hranici zrna, došlo by k roztržení této hranice. Viz. také část b).

b)



Obrázek C3. a) tvar monokrystalu po plastické deformaci dvojčatěním, b) tvar monokrystalu po plastické deformaci dislokačním skluzem.

c) Rovina (0001) je u hcp rovinou symetrie a tudíž je krystal nad touto rovinou a pod ní svým zrcadlovým obrazem. Dokonalý krystal je tedy sám sobě dvojčetem.

d) Ze stejného důvodu nemůže být žádná rovina symetrie dvojčatovou rovinou ani u krychlových mřížek; týká se to rovin  $\{100\}$  a  $\{110\}$ .



Cvičení 16. Je potřeba změnit sekvenci rovin  $\{111\}$  z BCABCABC na BABABAB. Pokud jedna Shockleyho parciální dislokace projde po druhé rovině (rovina C), sekvence se změní na: BABCAB. Nyní jsou první 3 roviny uspořádané jako u hcp. Nyní je nutné vyslat parciální dislokaci po 4. rovině, pak 6., 8., atd.

Pokud u fcc mřížky projde stejná Shockleyho parciální dislokace po každé skluzové rovině právě jednou, dostaneme dvojče. Pokud projde po každé druhé rovině, dostaneme hcp mřížku.