

DISLOKACE A PLASTICKÁ DEFORMACE

VUT – FSI: WDD

Mechanické vlastnosti pevných látek

MU – Př. F.: F7130

Tomáš Kruml

Ústav fyziky materiálů, Žižkova 22, www.ipm.cz, kruml@ipm.cz

Ivo Kuběna

kubena@ipm.cz

Cíl:

*Pochopení mechanismů, kterými se uskutečňuje plastická deformace:
je nutné jít až na atomární úroveň struktury materiálů*

MECHANISMY ELASTICKÉ DEFORMACE

MECHANISMY ELASTICKÉ DEFORMACE

E ?

Je možné ho měnit ?

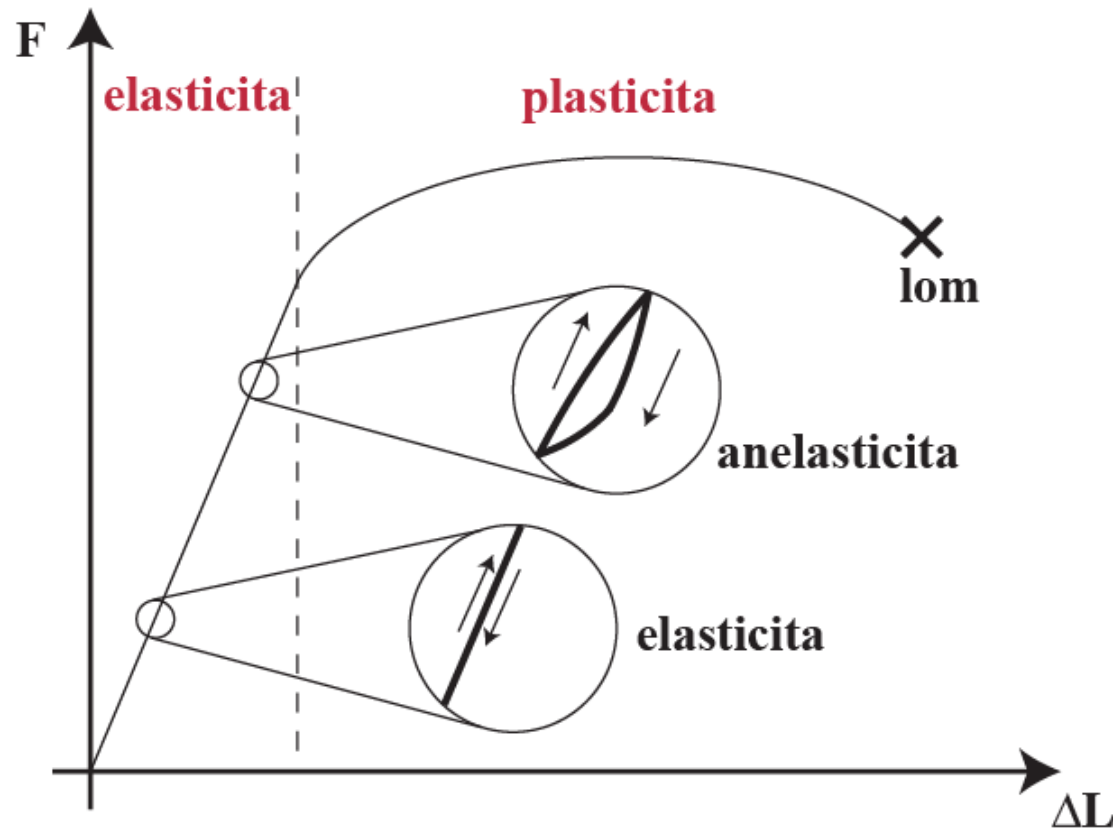
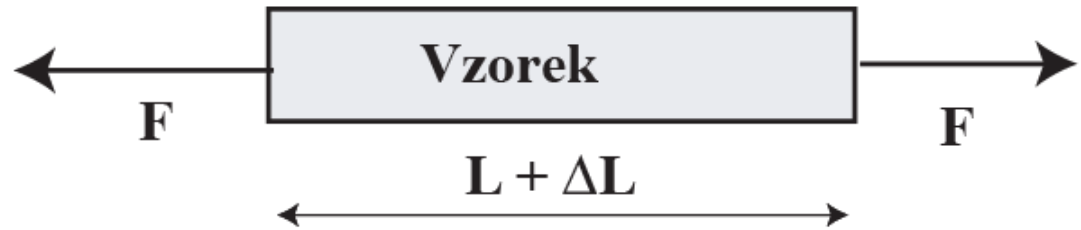
Jakým mechanismem je určen?

MECHANICKÉ VLASTNOSTI

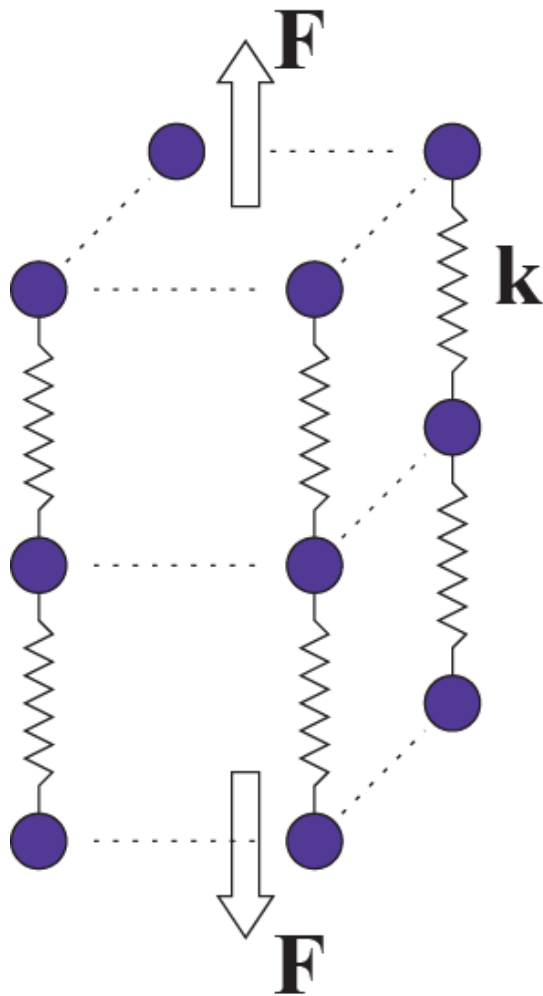
Reakce materiálu na
působení vnější síly
= deformace

- **elastická**
(vratná, okamžitá)
- **anelastická**
(vratná, ~~okamžitá~~)
- **plastická**
(trvalá)

Tahová zkouška



ENTALPICKÁ ELASTICITA



$$F = k \Delta L$$

$$\frac{F}{S_0} = E \frac{\Delta L}{L_0}$$

počáteční stav : $F=0$ L_0 H_0 S_0
za působící síly : F L $H > H_0$ $S \sim S_0$

$$G = H - TS > G_0 = H_0 - TS_0$$

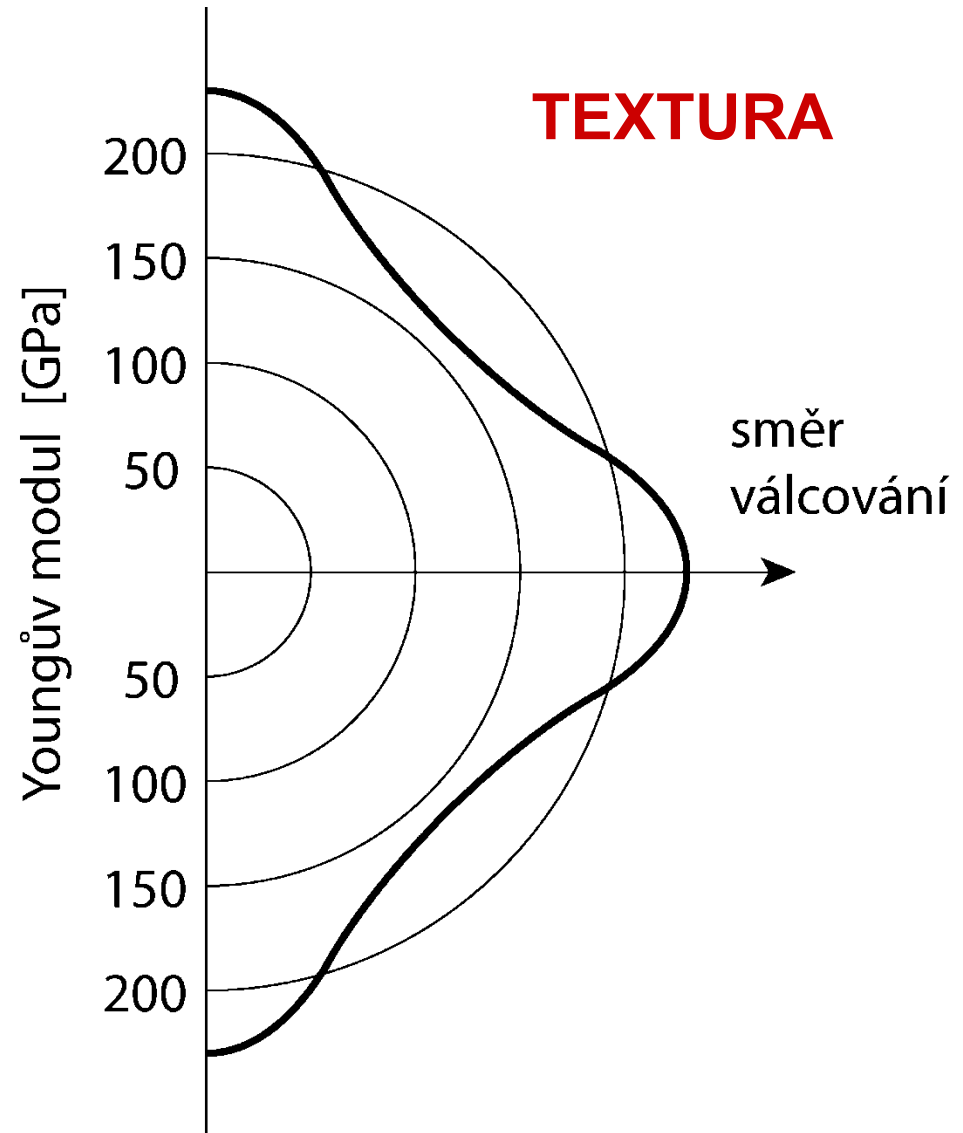
$$H = U + pV$$

E je dané pro každý materiál vlastnostmi vazby
(Fe : $E = 210$ GPa, Al : $E = 80$ GPa)

ANIZOTROPIE ELASTICKÝCH KONSTANT

MONOKRYSTALY

Kov	E_{100} [GPa]	E_{111} [GPa]
Al	64.1	77.4
Cu	68.4	210
Au	43	117
α -Fe	132	277
Pb	11.0	39.6
W	402	400
diamant	1050	1200



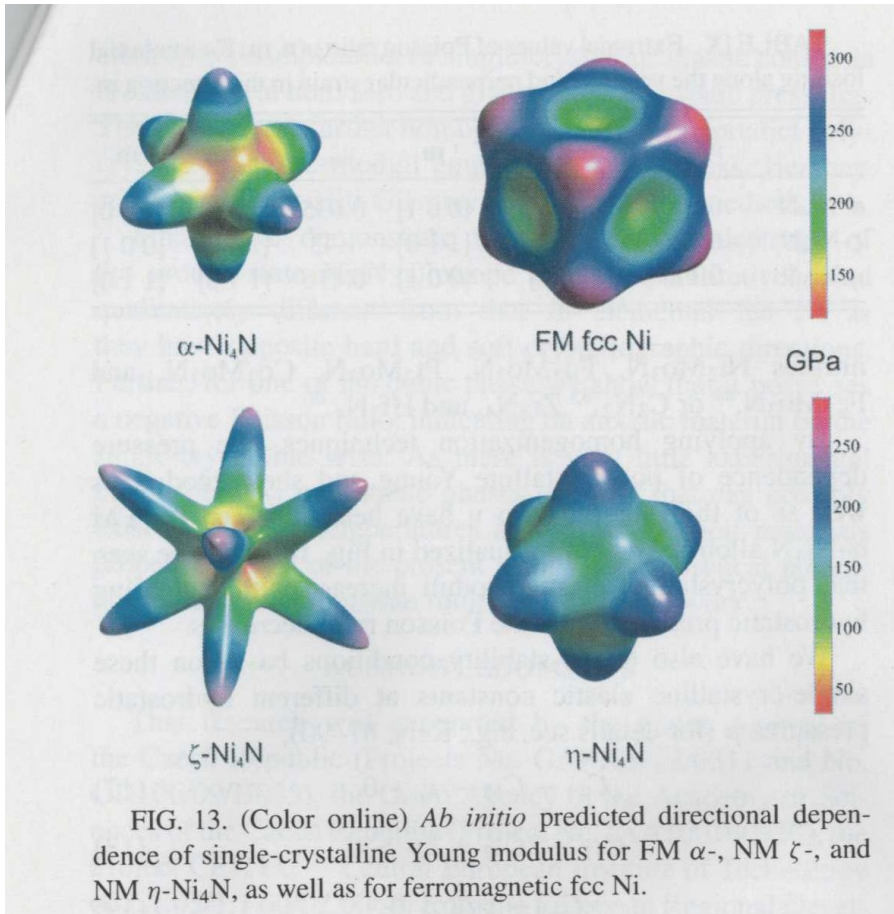
EXTRÉMNÍ PŘÍPADY

ANIZOTROPIE ELASTICKÝCH KONSTANT

Příklad:

Ni_4N

Ni_4N



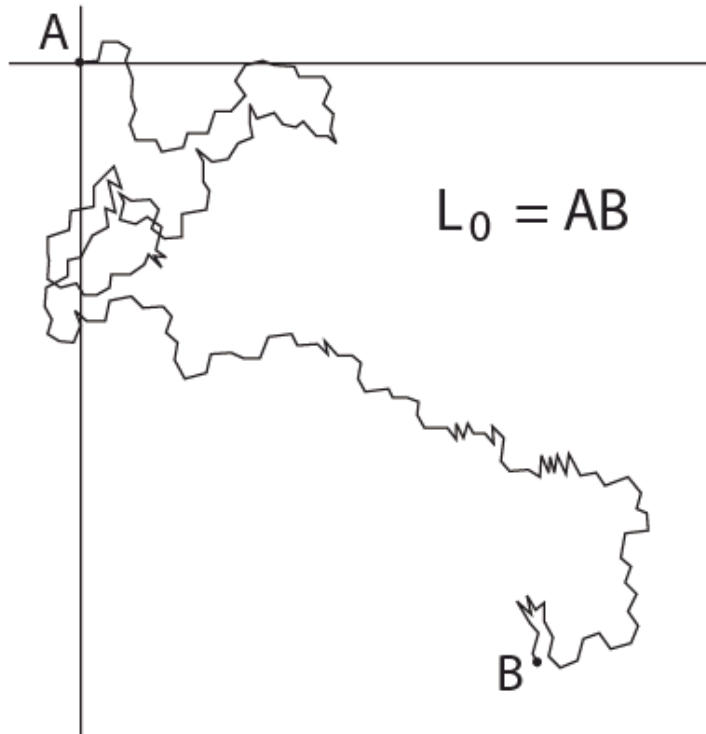
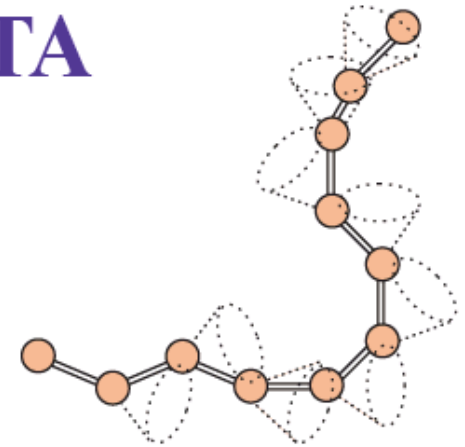
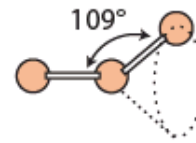
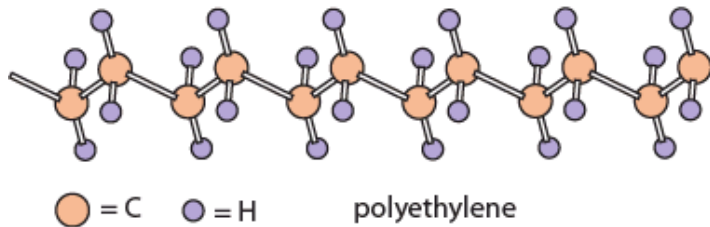
Ni

Ni_4N

Ni_4N

ENTROPICKÁ ELASTICITA

- polymery



- Deformace probíhá tak, že vzdálenosti atomů se téměř nemění, dochází k rotaci => $H_0 \sim H$
- Návrat do původního tvaru díky můstkům (1 segment ze ~100 spojen se sousední makromolekulou)

počáteční stav

$$L_0 \longrightarrow \Omega_0$$

$$S_0 = k \cdot \ln \Omega_0$$

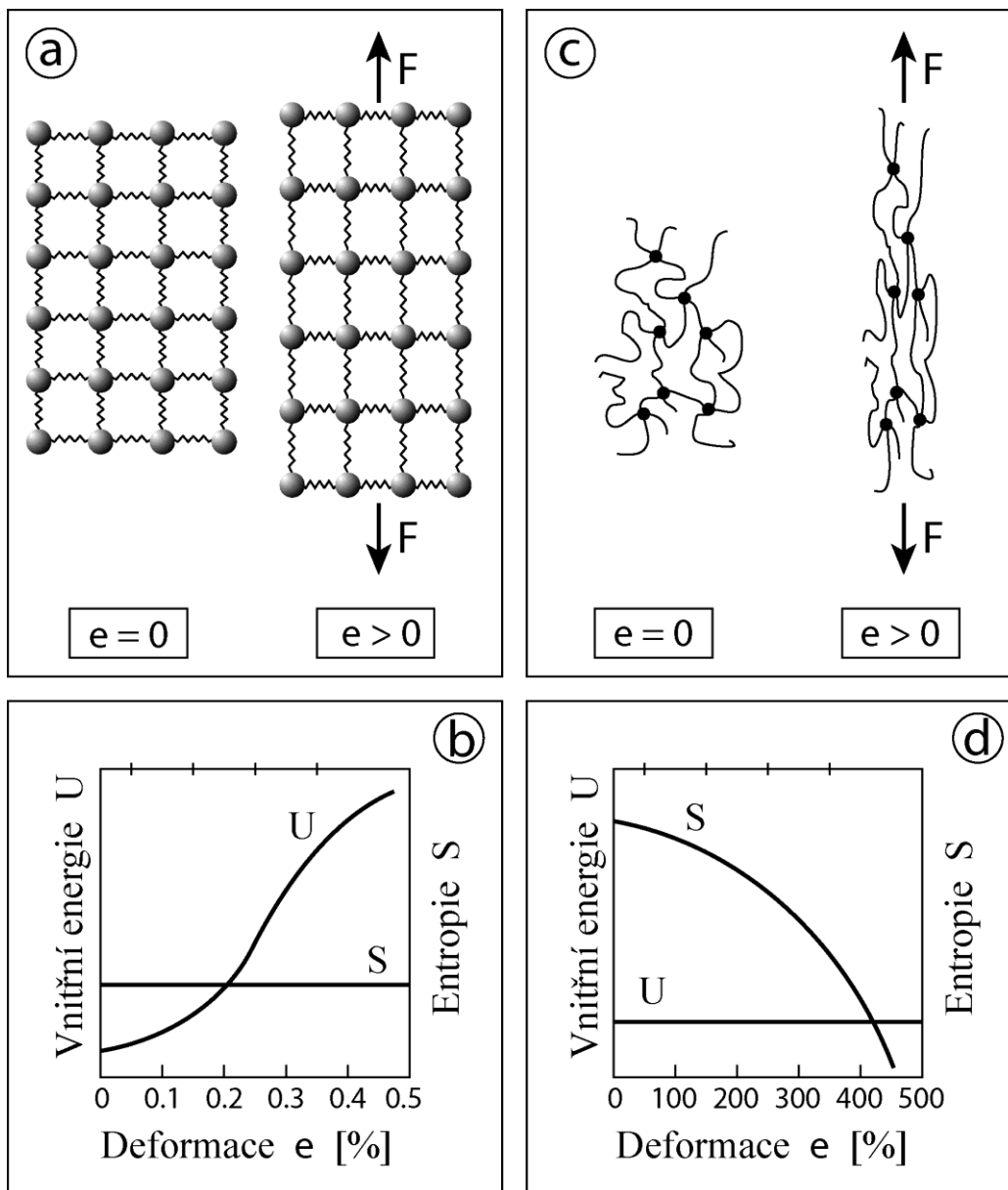
$$G_0 = H_0 - TS_0 < H - TS$$

aplikovaná síla

$$L \longrightarrow \Omega < \Omega_0$$

$$S = k \cdot \ln \Omega$$

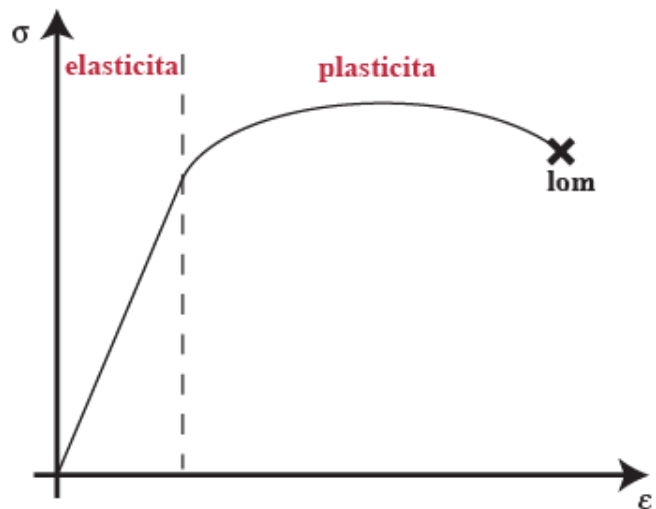
ENTALPICKÁ A ENTROPICKÁ ELASTICITA



ELASTICITA - VRATNÁ DEFORMACE

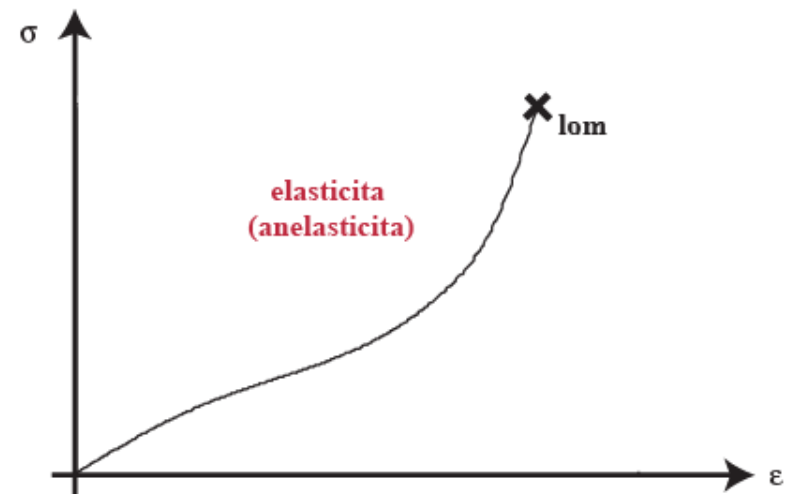
Entalpická elasticita

- krystalické materiály
- E vysoký
- E nezávislý na ε , $\dot{\varepsilon}$
- elastická deformace malá (1 %)



Entropická elasticita

- elastomery
- E nízký
- $E (\varepsilon, \dot{\varepsilon})$
- velká elastická deformace (800 %)



MECHANISMY PLASTICKÉ DEFORMACE

- Video
- plastická deformace
 - pohybující se dislokace

OBSAH KURSU

- KRYSTALOGRAFIE (2 týdny, text Krystalová struktura pevných látek)
- ELASTICITA (1 týden, text Výpočty v rámci lineární izotropní elasticity)
- TEORIE DISLOKACÍ (3 týdny, text Úvod do teorie dislokací)
- MECHANISMY PLASTICKÉ DEFORMACE (text Mechanismy pl. deformace)

skluz dislokací, dvojčatění, plasticita spojená s fázovou transformací, pokluzy po hranicích zrn, šplh dislokací, difúze

- ÚNAVA, CREEP
- PŘÍKLADY PRO VYBRANÉ MATERIÁLY

PODMÍNKY ZÁPOČTU

- Účast na cvičeních. Každá neúčast musí být nahrazena zpracováním řešeného cvičení. 2 absence na cvičeních jsou tolerovány.
- Odevzdání 1 protokolu ve formě vědeckého článku nebo přednesení vědecké přednášky.

ZKOUŠKA

- Písemná práce 7.-8. týden
- Písemná zkouška
- Ústní zkouška (nepovinná)

KRYSTALOGRAFIE

Počátky – pozorování přírodních krystalů

Krystal – tradiční definice:

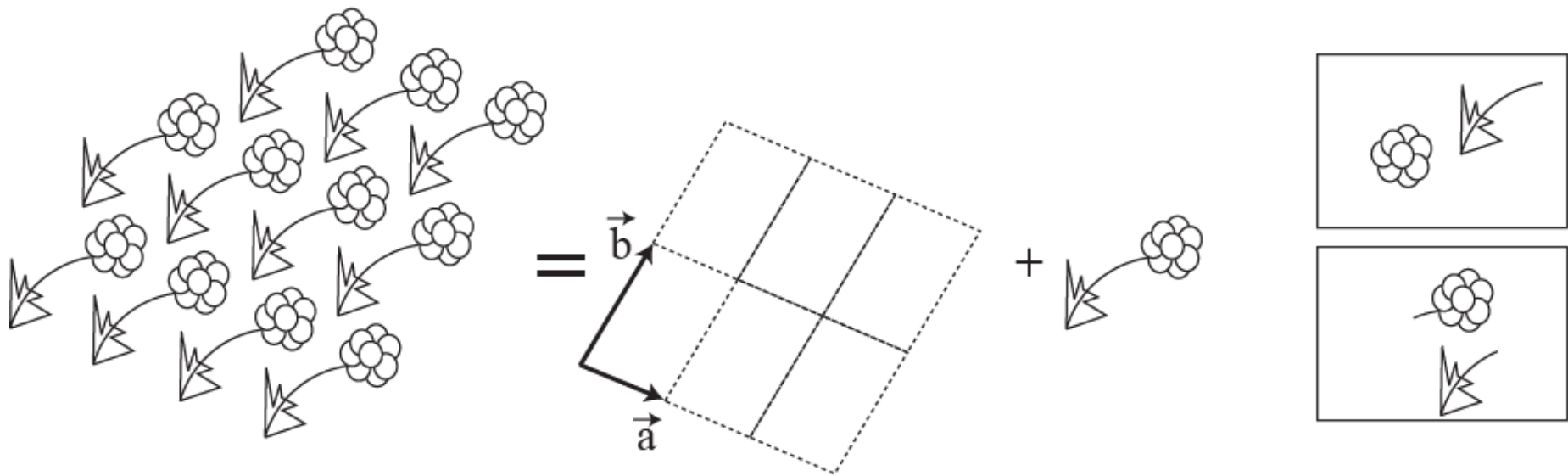
Krystal je periodicky uspořádaná struktura

Krystal – současná definice:

Krystal je pevná látka, která vytváří bodovou difrakci

(rozšiřuje definici i na kvazikrystaly)

KRYSTAL = mřížka + báze



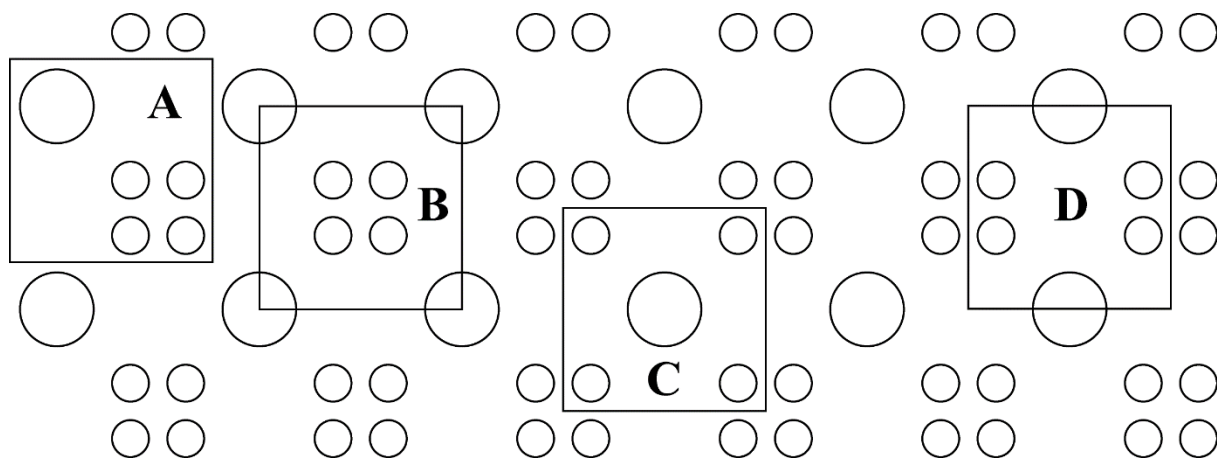
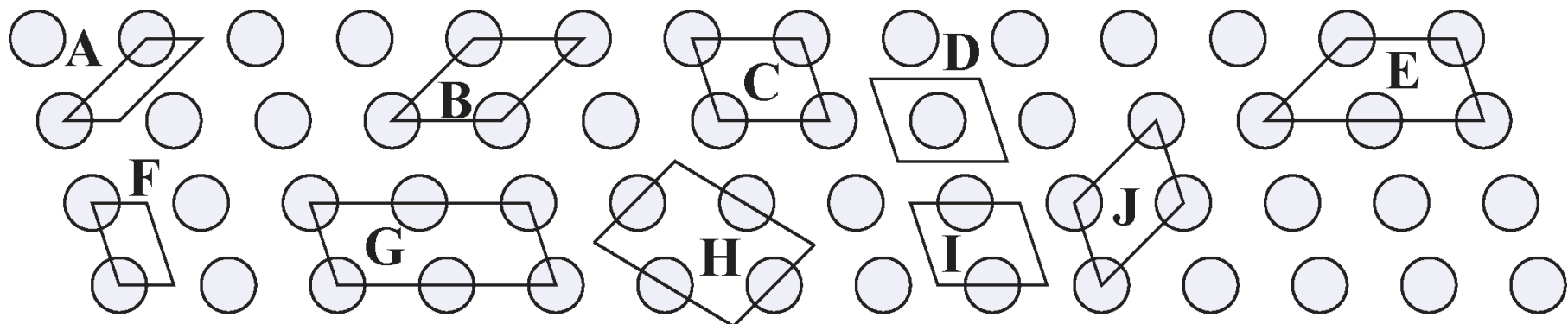
MŘÍŽKA

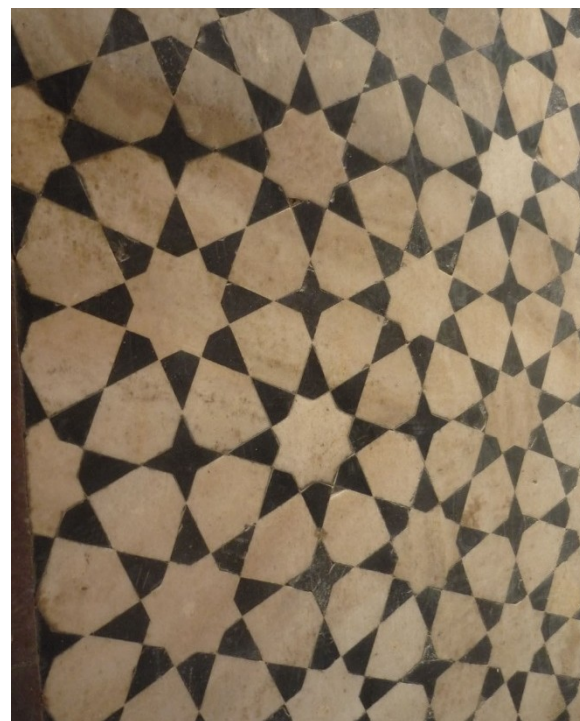
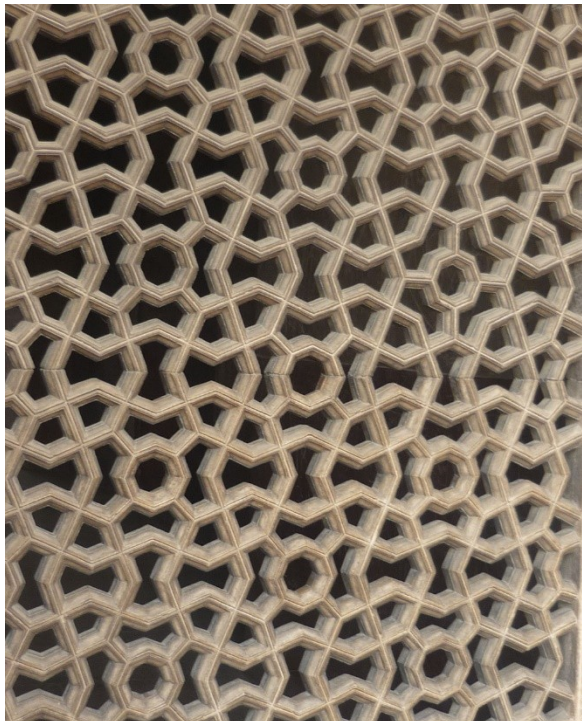
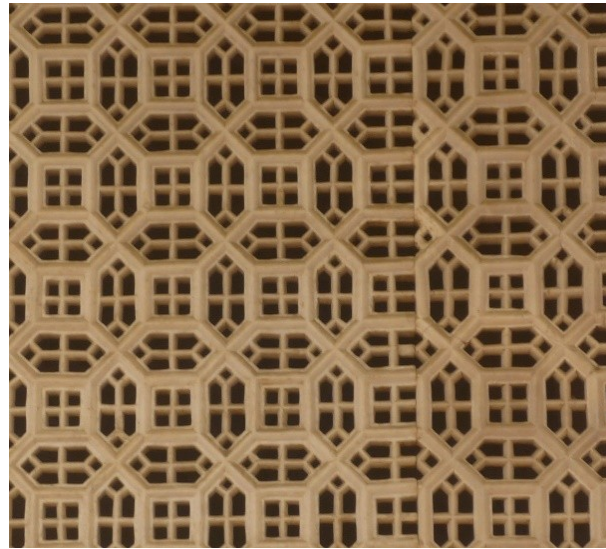
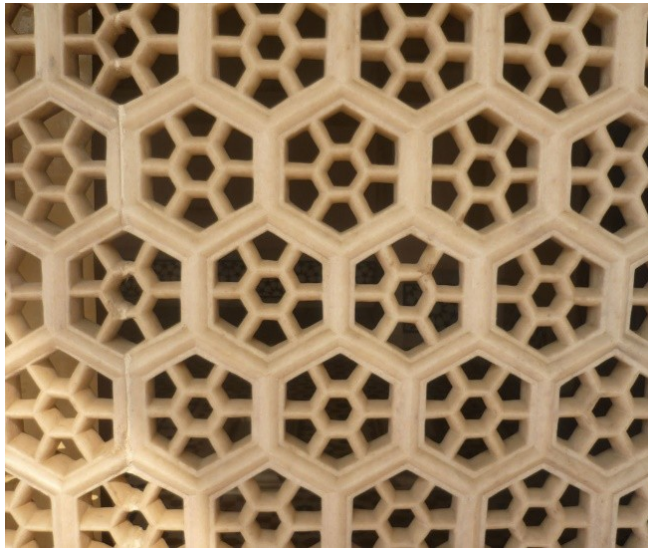
- translační vektory \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- mřížka primitivní nebo násobná
- krystalografické směry $[u\ v\ w]$
- ekvivalentní směry $\langle u\ v\ w \rangle$
- krystalografické roviny $(h\ k\ l)$
- ekvivalentní roviny $\{h\ k\ l\}$
- osy zóny

BÁZE

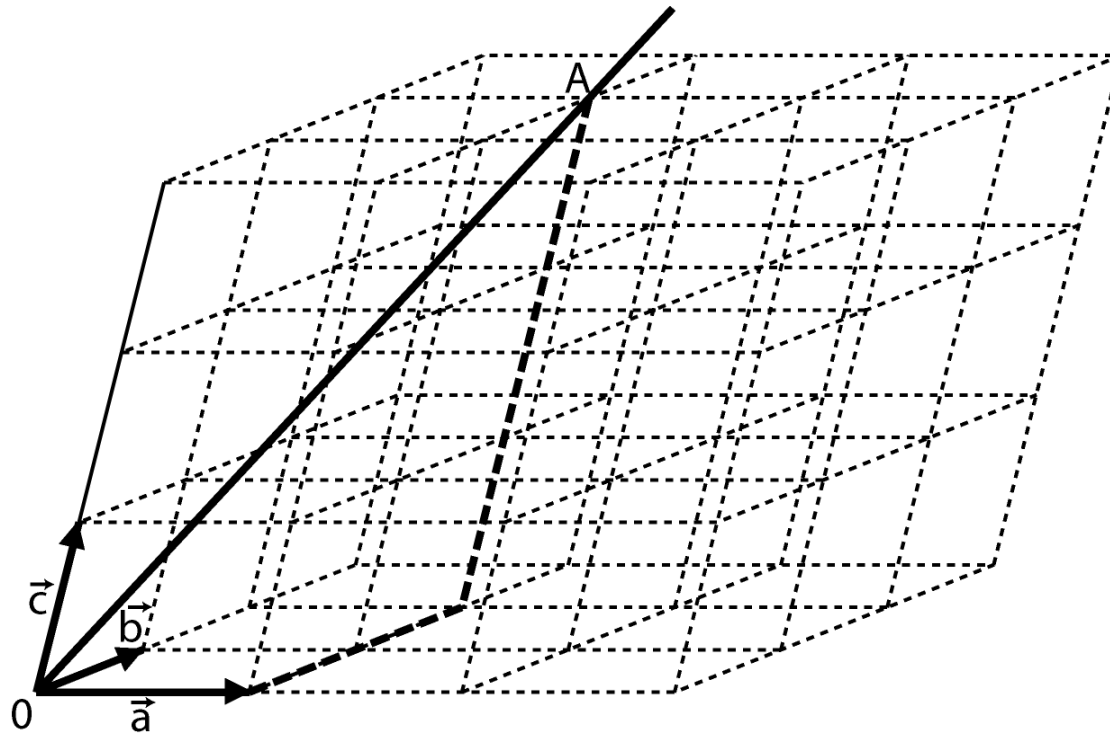
- 1 nebo více atomů
- symetrie & orientace

Elementární buňka: primitivní x násobná





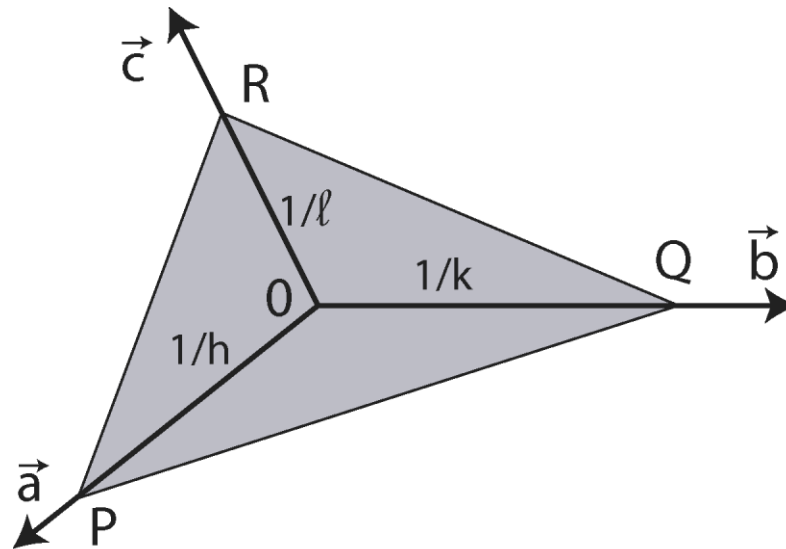
KRYSTALOGRAFICKÝ SMĚR



Konkrétní směr: $u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \dots [uvw]$

Libovolný ekvivalentní směr $\dots \langle uvw \rangle$

KRYSTALOGRAFICKÁ ROVINA



Konkrétní rovina: $\vec{OP} = \vec{a}/h$; $\vec{OQ} = \vec{b}/k$; $\vec{OR} = \vec{c}/l$... (hkl)

Libovolná ekvivalentní rovina ... $\{hkl\}$

Uvažujme mřížku krychlovou prostou. Do primitivní buňky zakreslete tyto roviny:

(100) , (110) , $(1\bar{1}0)$, (111) , (211) , $(2\bar{1}0)$, (220) , (123)

BRAVAISOVY

MŘÍŽKY

Liší se prvky symetrie

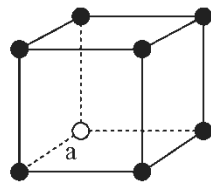
2D – 5 Bravaisových mřížek

3D – 14 Bravaisových mřížek

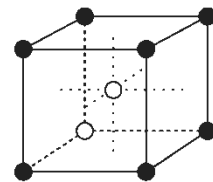
4D – 64 B. m.

Prvky symetrie:

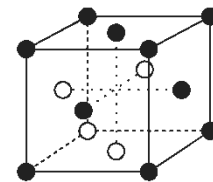
- osa rotace (2,3,4,6)
- rovina zrcadlení
- střed symetrie
- osa rotace + inverze



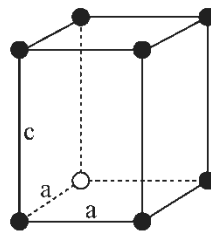
krychlová prostá (sc)



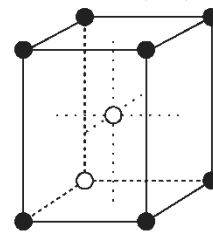
krychlová prostorově
centrovaná (bcc)



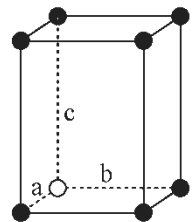
krychlová plošně
centrovaná (fcc)



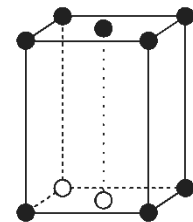
tetragonální prostá



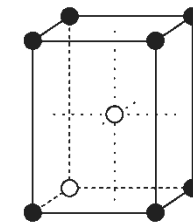
tetragonální prostorově
centrovaná



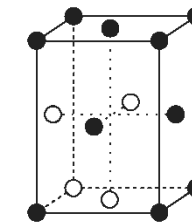
ortorombická
prostá



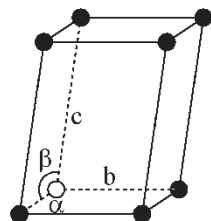
ortor. bazálně
centrovaná



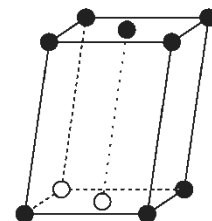
ortor. prostorově
centrovaná



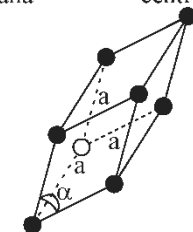
ortor. plošně
centrovaná



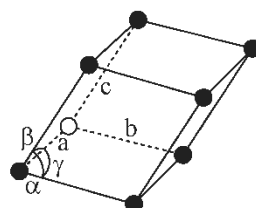
monoklinická
prostá



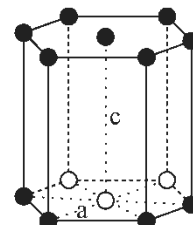
monok. bazálně
centrovaná



romboedrická



triklinická



hexagonální



Přírodní krystaly – monokrystaly, vnější stěny jsou krystalografické roviny s nízkou povrchovou energií. Krystal nemusí mít pravidelný tvar, ale úhly mezi stěnami odpovídají úhlům mezi krystalografickými rovinami.

Adam Ondra

monokrystal

hexagonální symetrie



BRAVAISOVY MŘÍŽKY: PŘÍKLAD 2D

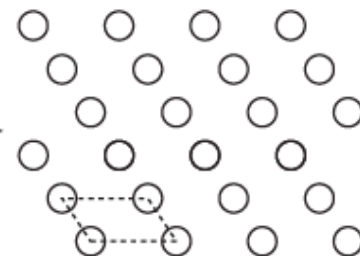
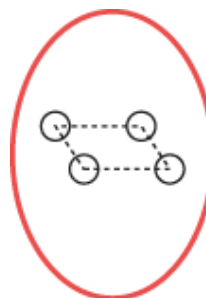
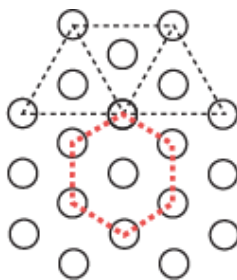
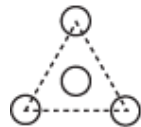
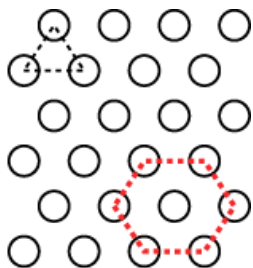
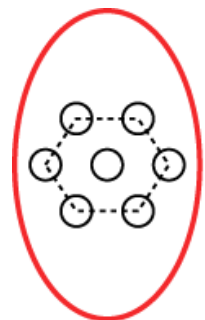
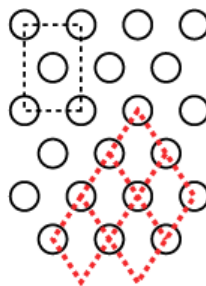
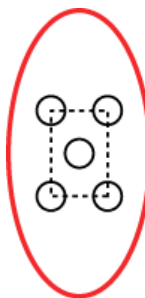
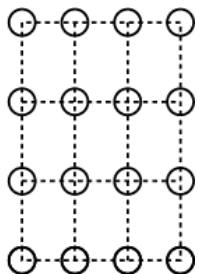
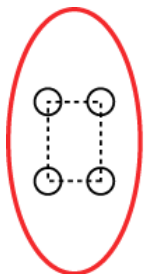
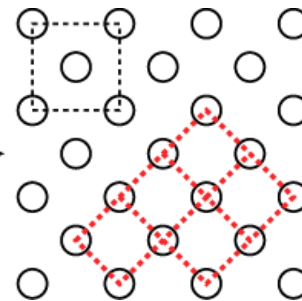
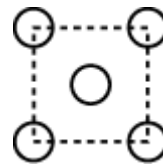
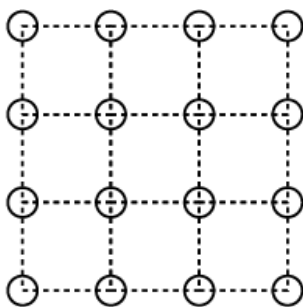
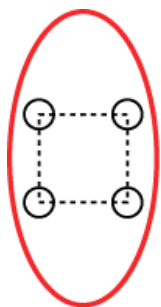
osy rotace

2

3

4

6



KRYSTALOGRAFIE - MATEMATICKÁ FORMULACE

(TEORIE GRUP)

Krystal: 14 Bravaisových mřížek (= **translačních grup**) + **báze s různou symetrií**

Možné symetrie báze:

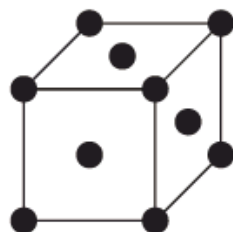
- osy rotace (2, 3, 4, 6)
- roviny symetrie (zrcadlové r.)
- středy symetrie
- osy rotace-inverze

} **32 bodových grup**

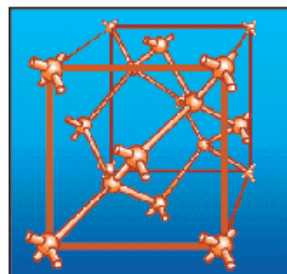
Možné kombinace:

230 prostorových grup

Příklady fcc:



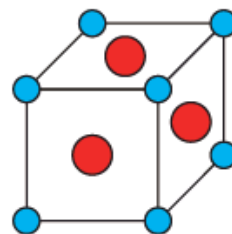
225, $Fm\bar{3}m$



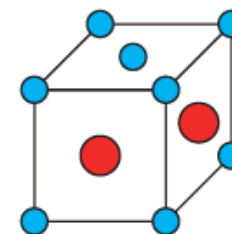
diamant
227 $Fd\bar{3}m$



báze

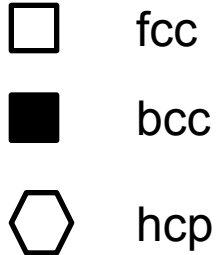


Ni_3Al
221 $Pm\bar{3}m$



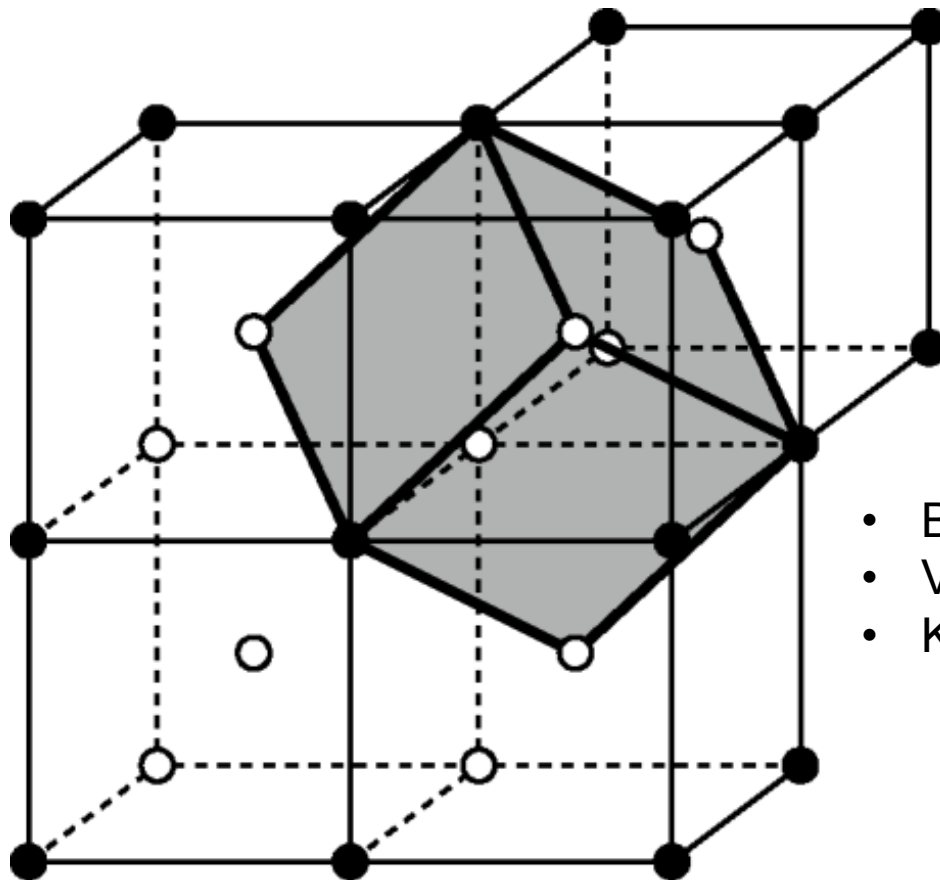
γ -TiAl
123 $P4/mmm$

KRYSTALOVÉ STRUKTURY PRVKŮ



CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS																			
Liaison métallique										Liaison covalente						Gaz nobles			
IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII	VIII	IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	0			
1															1 H	2 He			
2	3 * Li a = 3,509	4 * Be a = 2,206 c = 3,584										5 * B a = 8,730 c = 5,030	6 * C a = 3,567	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3	11 * Na a = 4,291	12 Mg a = 3,209 c = 5,210									13 Al a = 4,049	14 Si a = 5,430	15 * P a = 11,310	16 * S a = 10,437 b = 12,845 c = 24,369	17 Cl	18 A			
4	19 K a = 5,247	20 * Ca a = 5,582	21 * Sc a = 3,302 c = 5,246	22 * Ti a = 2,950 c = 4,683	23 V a = 3,028	24 * Cr a = 2,885	25 * Mn a = 8,912	26 * Fe a = 2,866	27 * Co a = 2,505 c = 4,089	28 Ni a = 3,524	29 Cu a = 3,615	30 Zn a = 2,665 c = 4,947	31 Ga a = 4,524 b = 4,523 c = 7,661	32 Ge a = 5,658	33 As a = 3,760 c = 10,548	34 * Se a = 4,364 c = 4,959	35 Br	36 Kr	
5	37 Rb a = 5,700	38 * Sr a = 6,070	39 Y a = 3,647 c = 5,731	40 * Zr a = 3,231 c = 5,148	41 Nb a = 3,301	42 Mo a = 3,147	43 Tc	44 Ru a = 2,706 c = 4,282	45 Rh a = 3,803	46 Pd a = 3,889	47 Ag a = 4,086	48 Cd a = 2,979 c = 5,618	49 In a = 3,252 c = 4,946	50 * Sn a = 5,831 c = 3,181	51 Sb a = 4,307 c = 11,273	52 Te a = 4,457 c = 5,927	53 I a = 4,792 b = 7,271 c = 9,780	54 Xe	
6	55 Cs a = 6,140	56 Ba a = 5,025	57 * La a = 5,301	72 * Hf a = 3,197 c = 5,058	73 Ta a = 3,805	74 W a = 3,165	75 Re a = 2,760 c = 4,458	76 Os a = 2,734 c = 4,320	77 Ir a = 3,839	78 Pt a = 3,923	79 Au a = 4,079	80 Hg a = 3,456 c = 5,525	81 * Tl a = 4,456	82 Pb a = 4,950	83 Bi a = 4,546 c = 11,860	84 * Po a = 3,345	85 At	86 Rn	
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac a = 5,311	Les paramètres des structures correspondent à la température ordinaire Les périodes sont données en KX															
Lanthanides	58 * Ce a = 5,161	59 * Pr a = 5,160	60 Nd a = 3,658 c = 11,799	61 Pm	62 Sm a = 8,996 α = 23°13'	63 Eu a = 4,606	64 Gd a = 3,636 c = 5,783	65 Tb a = 3,601 c = 5,694	66 Dy a = 3,590 c = 5,647	67 Ho a = 3,577 c = 5,616	68 Er a = 3,559 c = 5,587	69 Tm a = 3,537 c = 5,555	70 Yb a = 5,486	71 Lu a = 3,503 c = 5,551	Actinides	90 * Th a = 5,084	91 Pa a = 3,925 c = 3,238	92 * U a = 2,858 b = 5,877 c = 4,945	
	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr								

Mřížka bcc (body centered cubic)

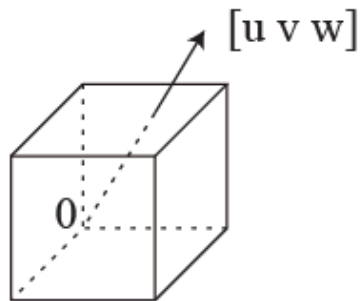


- Bravaisova buňka – násobnost
- Vektor mezi nejbližšími sousedy
- Koordinační číslo

- Koeficient zaplnění 0.68
- Pozor na vzorec pro mezirovinnou vzdálenost

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}}$$

EKVIVALENTNÍ SMĚRY V KUBICKÉ MŘÍŽCE



<u v w> 24 možností

<001>

[100] || $[\bar{1}00]$

[010] || $[0\bar{1}0]$

[001] || $[00\bar{1}]$

<011>

[110] || $[\bar{1}\bar{1}0]$

[1 $\bar{1}$ 0] || $[\bar{1}10]$

[101] || $[\bar{1}0\bar{1}]$

$[\bar{1}01]$ || $[10\bar{1}]$

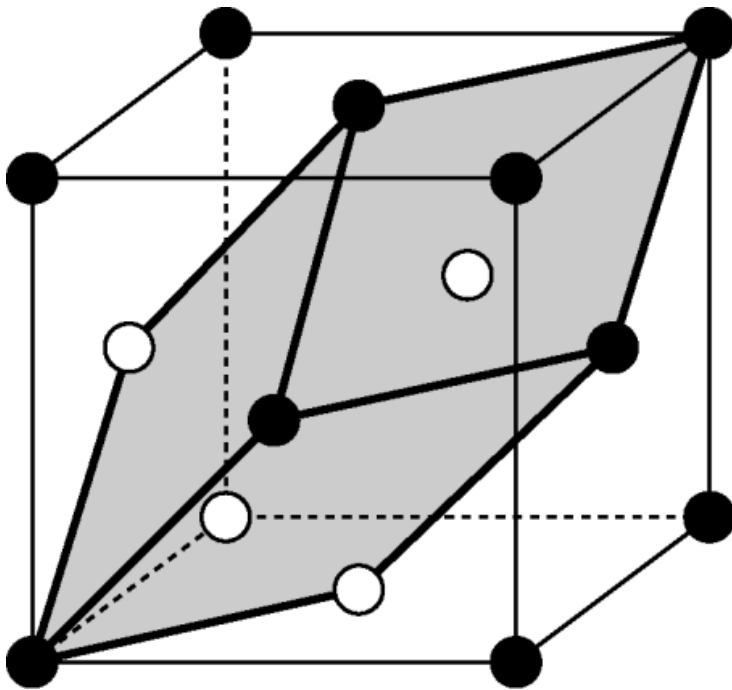
[011] || $[0\bar{1}\bar{1}]$

$[0\bar{1}1]$ || $[01\bar{1}]$

<111>

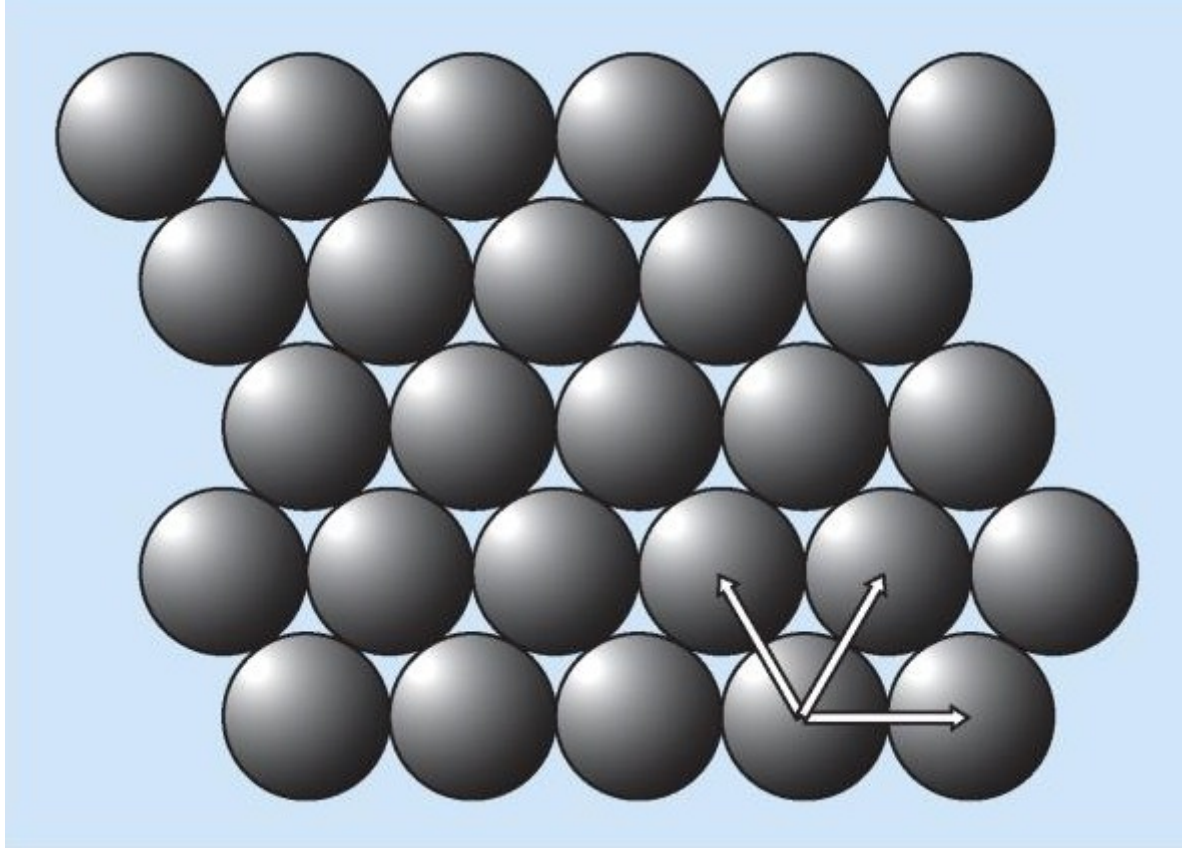
Indexy rovin a jejich normál jsou stejné
Platí **pouze** u všech kubických mřížek

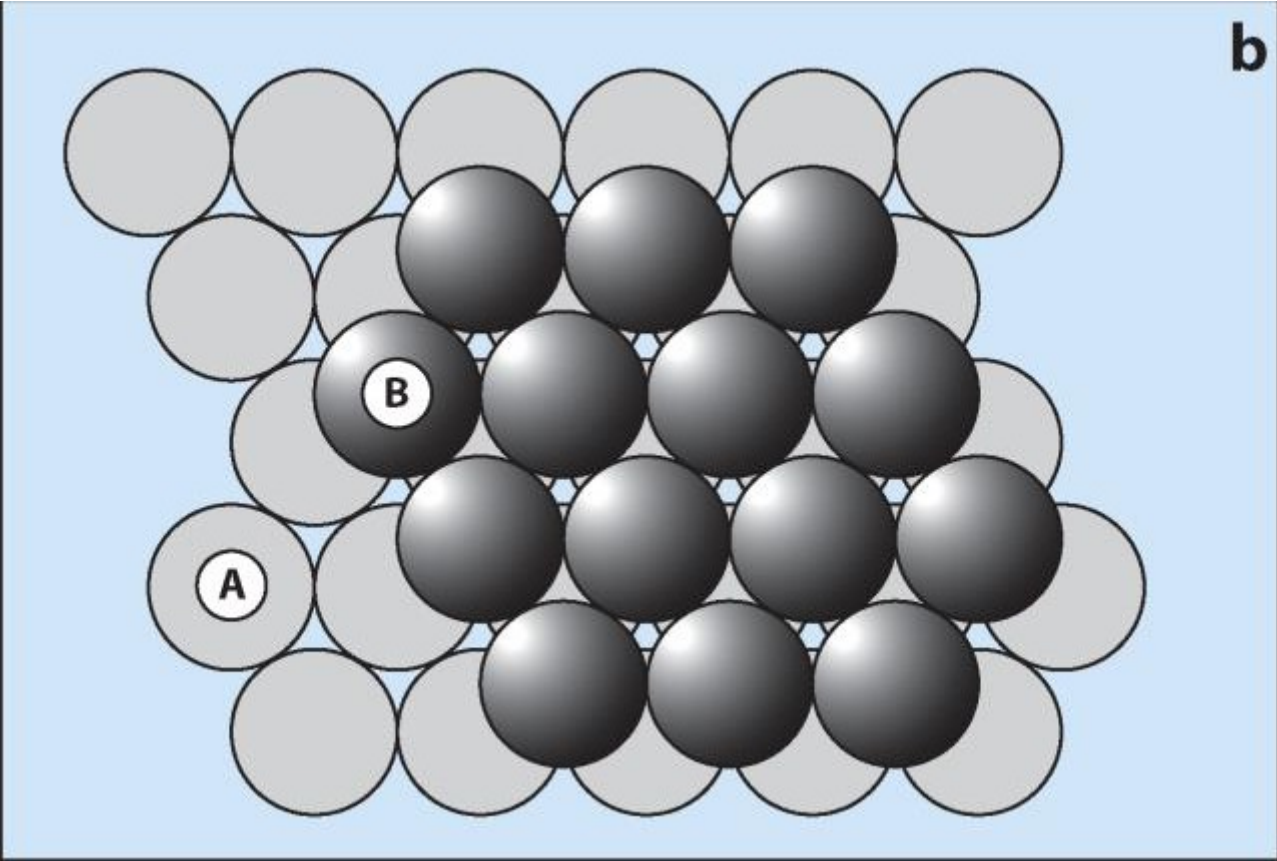
Mřížka fcc (face centered cubic)

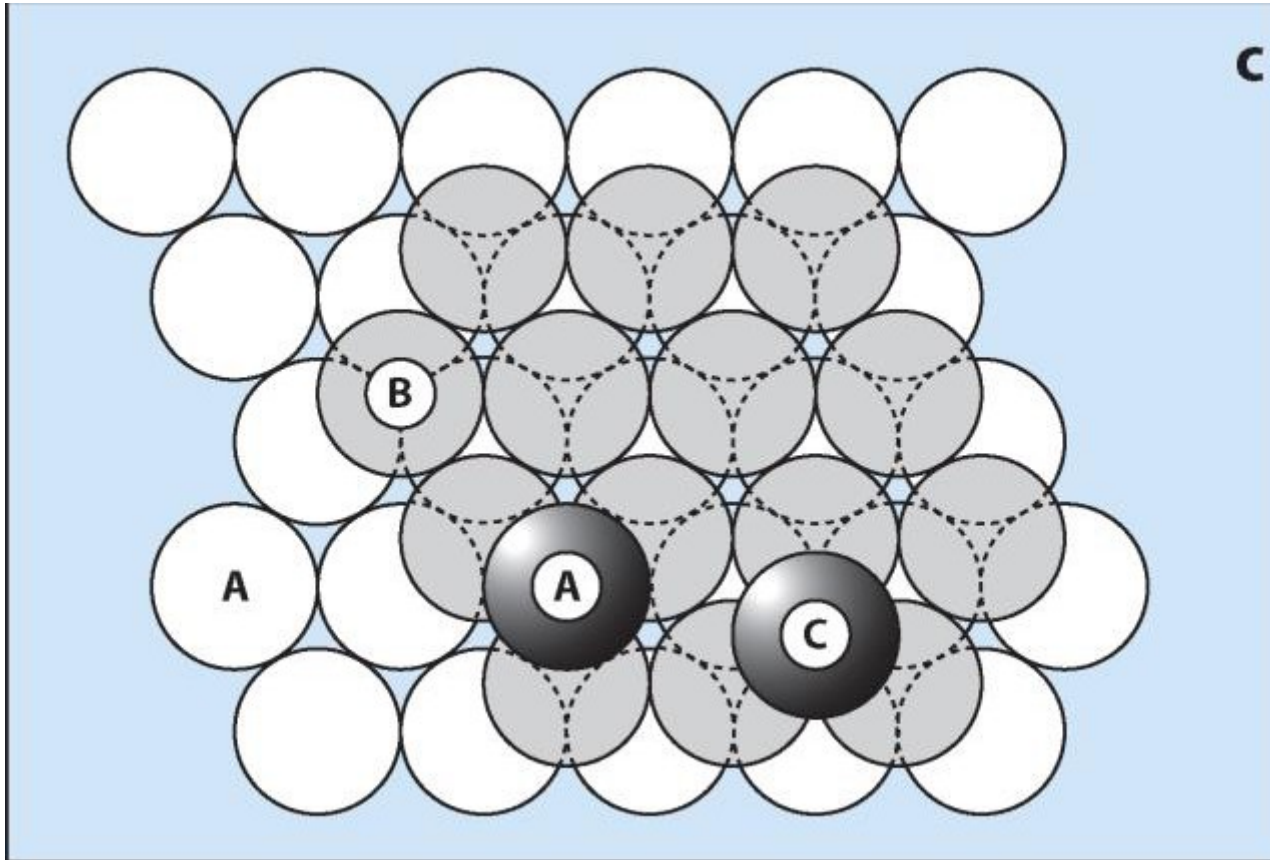


- Bravaisova buňka – násobnost
- Vektor mezi nejbližšími sousedy
- Koordinací číslo

- Koeficient zaplnění 0.74 – ideální vyplnění prostoru tuhými koulemi
- Pozor na vzorec pro meziovinovou vzdálenost
- Vznikne vrstvením kompaktních rovin







Vrstvení ABABAB ... hcp
 Vrstvení ABCABC ... fcc

Kompaktní rovina u fcc – $\{111\}$
 Kompaktní rovina u hcp – $\{0001\}$ bazální rovina

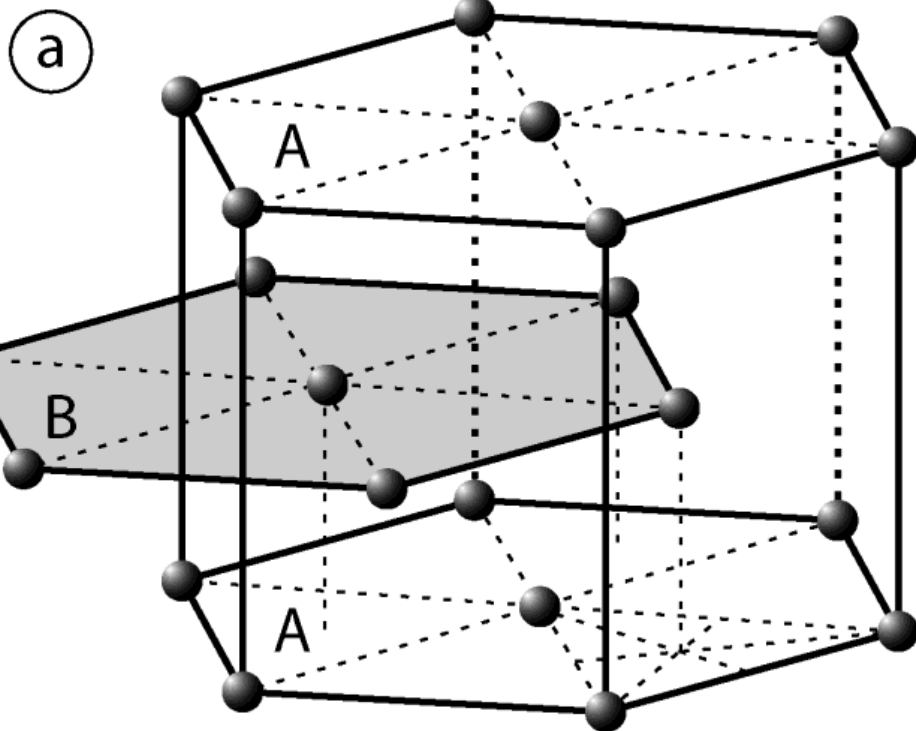
MŘÍŽKOVÉ PARAMETRY (nm)

fcc		bcc		hcp		
	a [nm]		a [nm]	a [nm]	c [nm]	
Ag	0.408	Cr	0.288	Be	0.228	0.361
Al	0.404	Fe α	0.286	Cd	0.297	0.561
Au	0.407	Mo	0.314	Co	0.251	0.410
Cu	0.361	Nb	0.329	Mg	0.320	0.520
Fe γ	0.363	Ta	0.330	Ti	0.295	0.469
Ni	0.351	V	0.301	Zn	0.266	0.493
Pb	0.494	W	0.316	Zr	0.322	0.512
Pt	0.391					

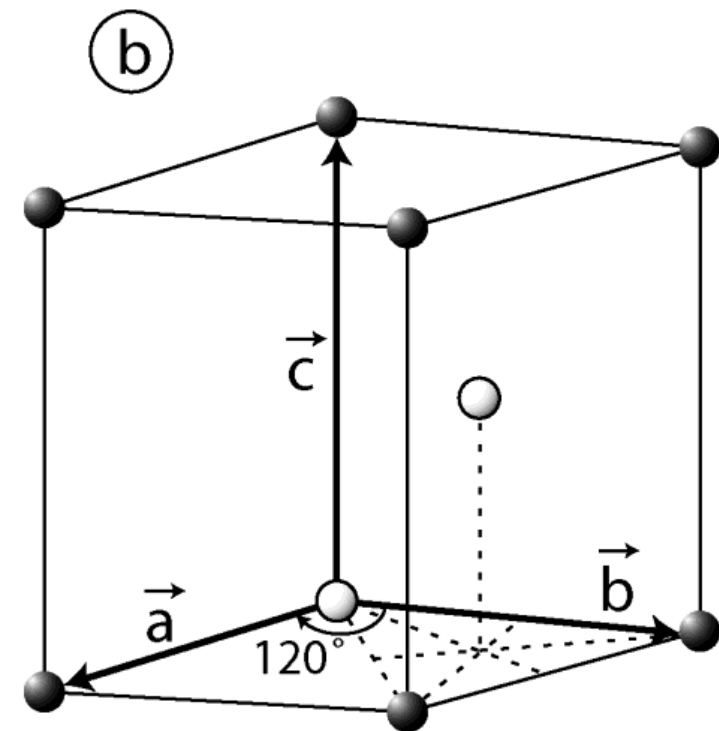
Proč je mřížkový parametr a větší pro fcc kovy než bcc?

Vypočtete vzdálenost mezi nejbližšími sousedy pro Fe γ a Fe α

Hexagonální těsně uspořádaná mřížka (hexagonal close packed, hcp)



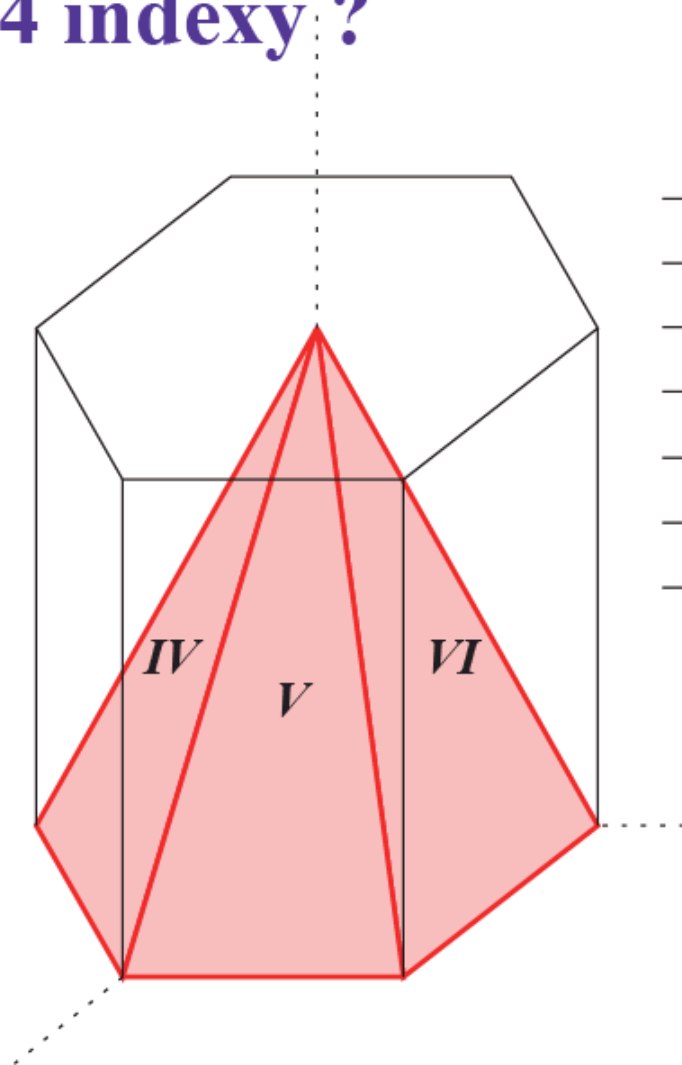
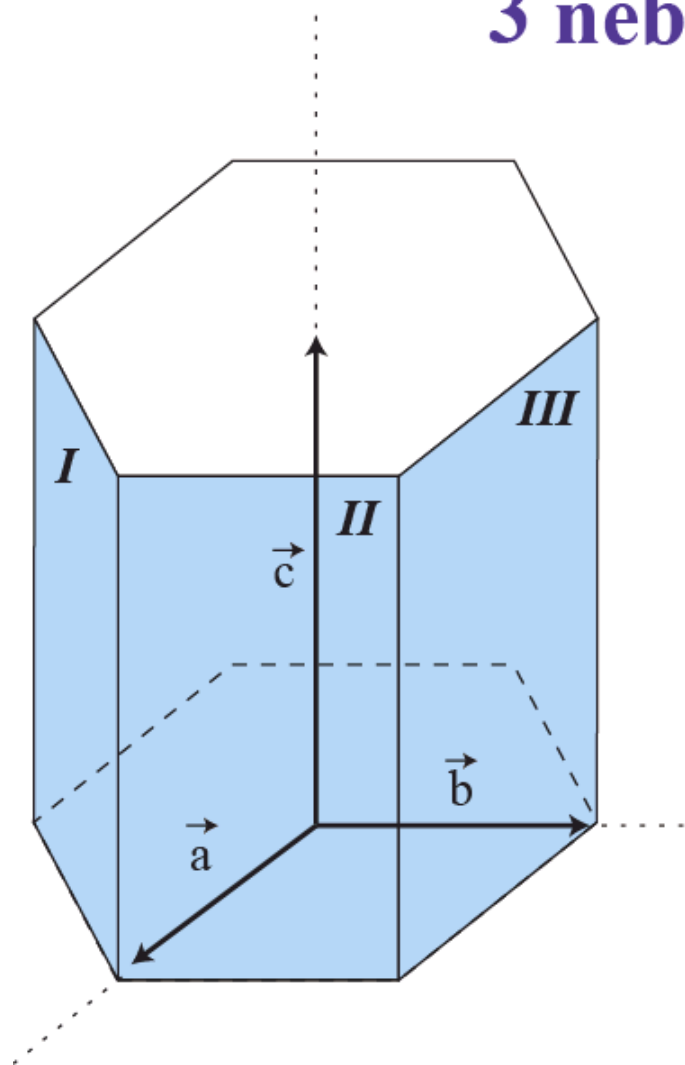
Bravaisova buňka



primitivní buňka

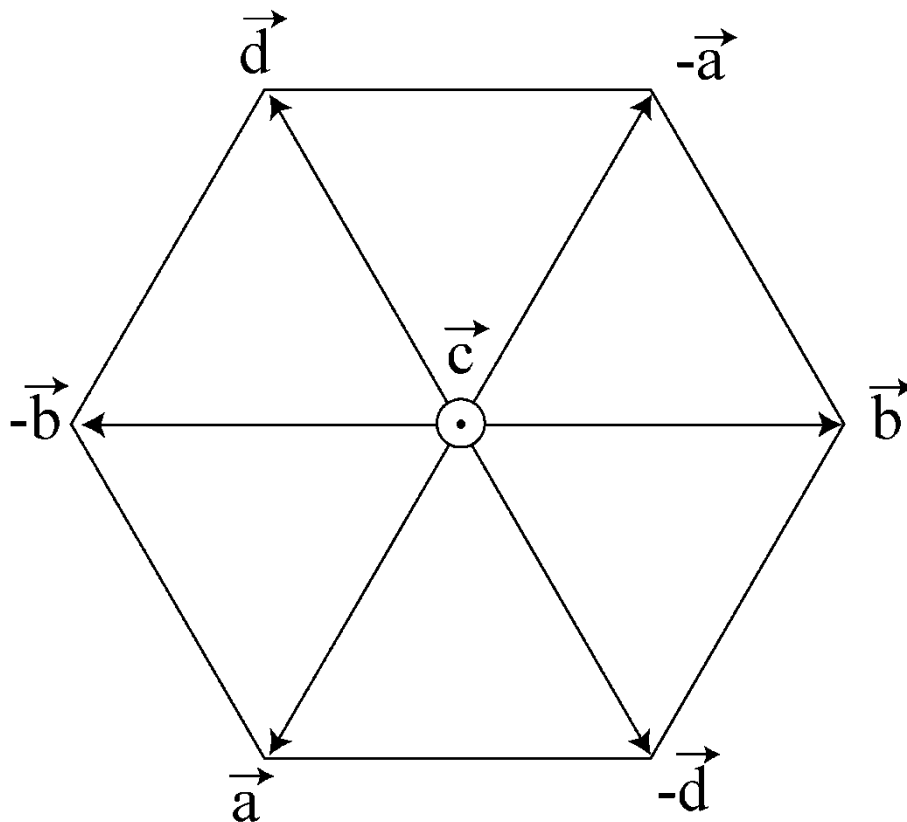
HEXAGONÁLNÍ MŘÍŽKA

3 nebo 4 indexy ?



	(h k l)	(h k $\bar{h}+k$ l)
<i>I</i>		
<i>II</i>		
<i>III</i>		
<i>IV</i>		
<i>V</i>		
<i>VI</i>		

ČTVRTÝ TRANSLAČNÍ VEKTOR d



ROVINY

3 indexy

(h k l)

4 indexy

(h

k
—
h+k

l)

SMĚRY

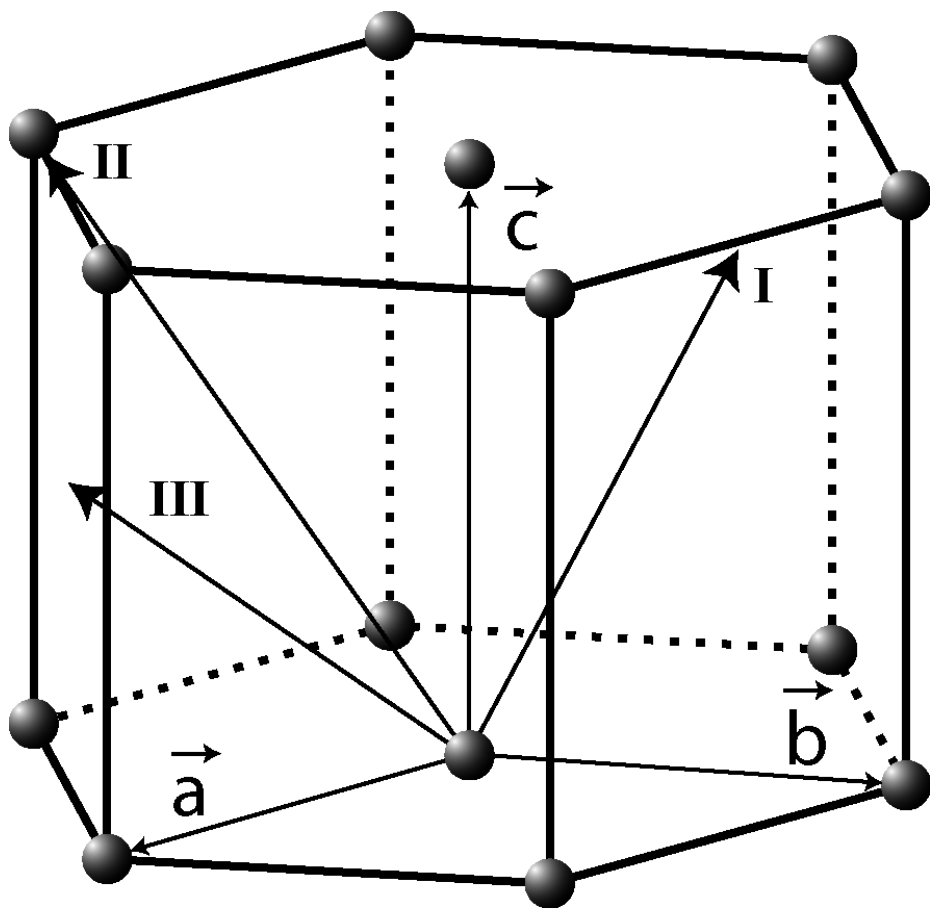
[u v w]

[2/3u – 1/3v

-1/3u + 2/3v

-1/3u – 1/3v

w]



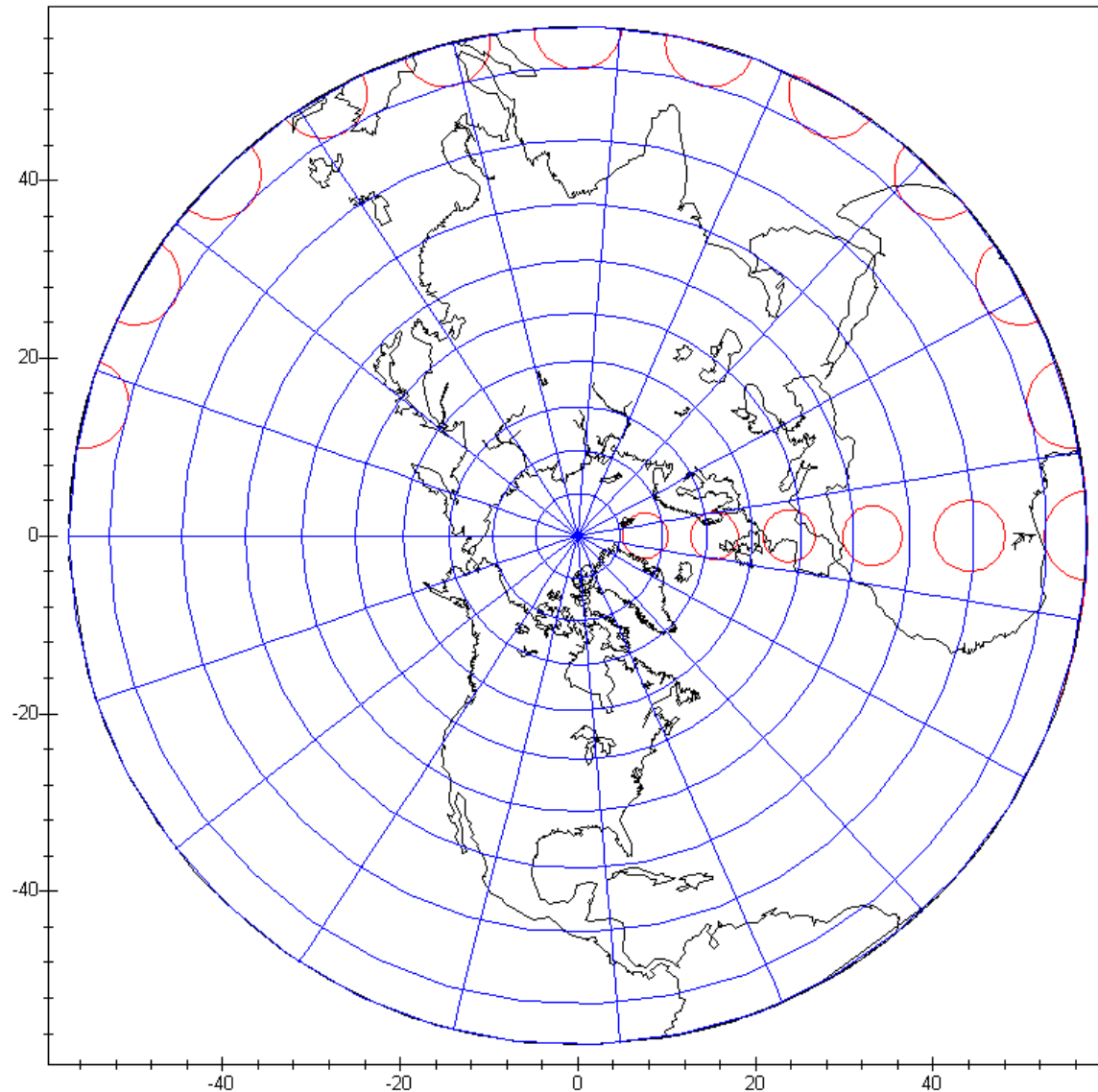
RECIPROKÝ PROSTOR

STEREOGRAFICKÁ PROJEKCE

$$x = \frac{\cos(\phi) \cos(\lambda)}{\sin(\phi) + 1}$$
$$y = \frac{\cos(\phi) \sin(\lambda)}{\sin(\phi) + 1}$$

Erasthotenes ~ 250 BC
Obvod Země 40 000km

Hipparchus ~ 150 BC
stereografická projekce



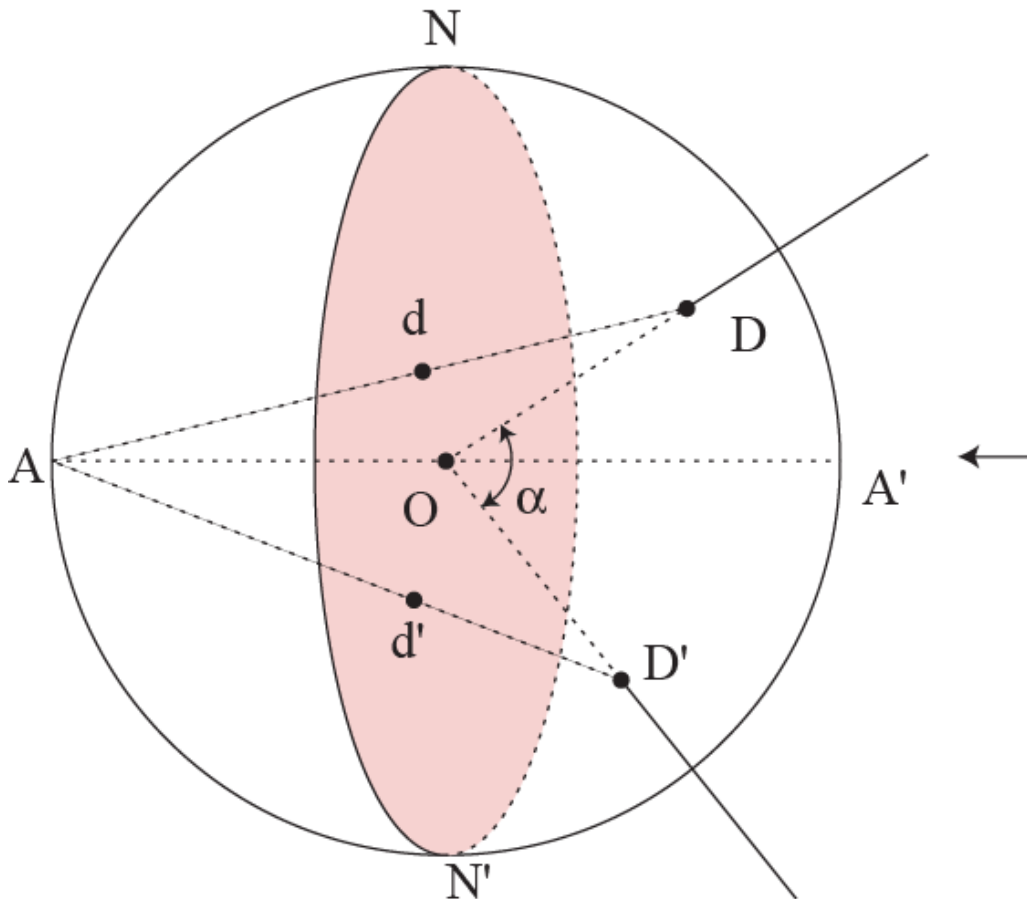
STEREOGRAFICKÁ PROJEKCE

Původ: kartografie

Problém: přenést mapu Země na plochu - zkreslení

SP je jedna z možných projekcí 3D \rightarrow 2D

V krystalografii : znázornění krystalografických směrů a rovin



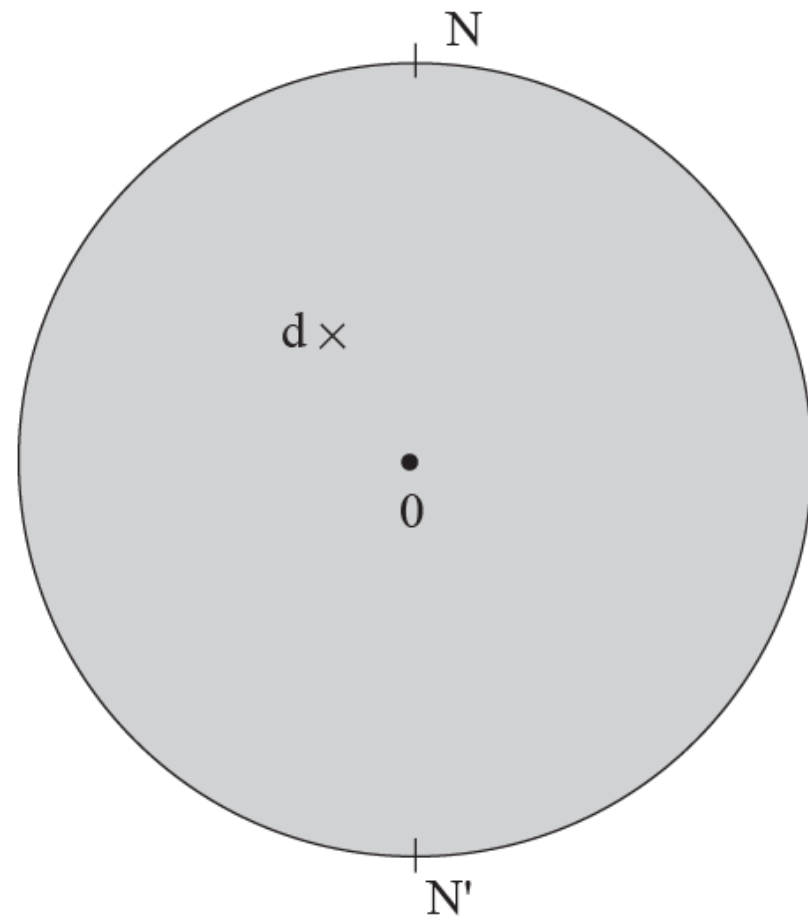
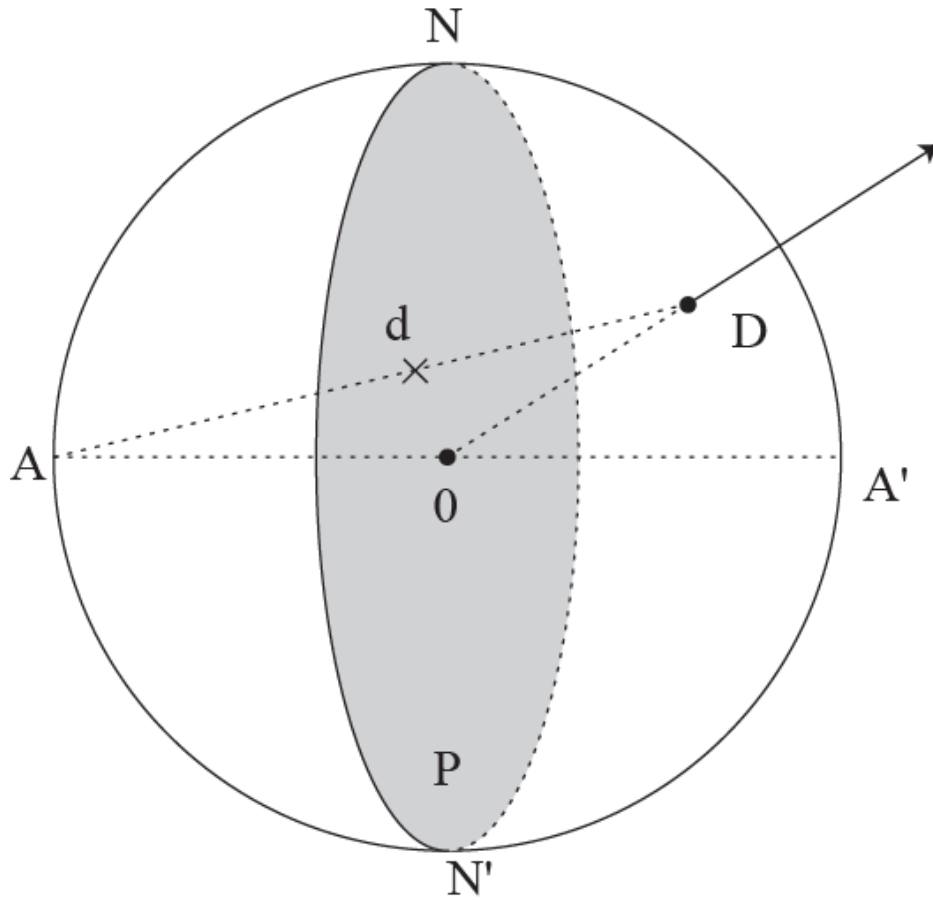
směr	\rightarrow	bod
rovina	\rightarrow	část kružnice

SP zachovává úhly
(viz Wulffova síť)

Nezbytný nástroj v metalurgii,
krystalografii, fyzice pevných látek,
materiálové vědě.

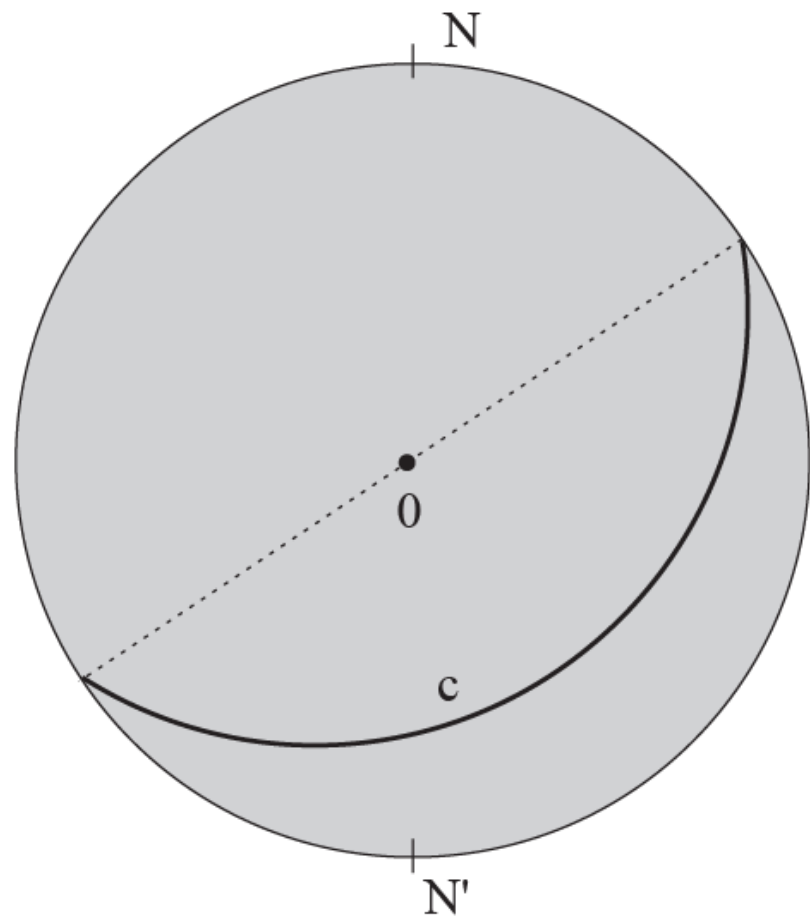
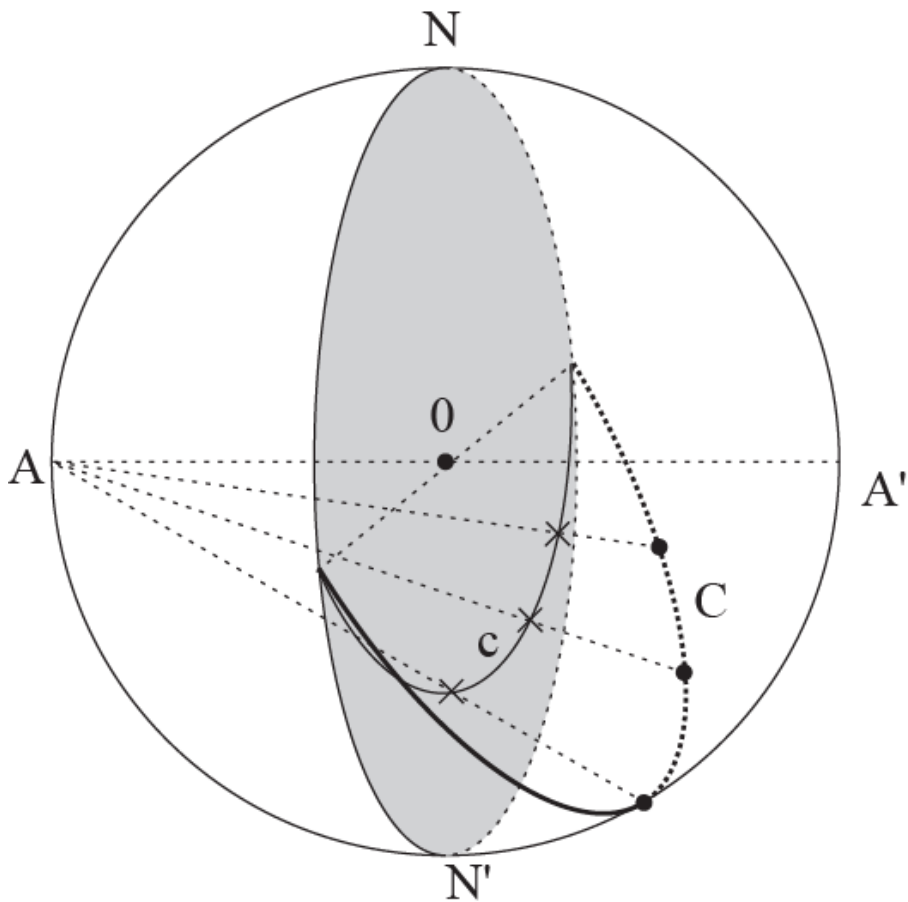
PROJEKCE SMĚRU

Směr musí procházet počátkem 0. Zobrazujeme pouze směry orientované nad SP.

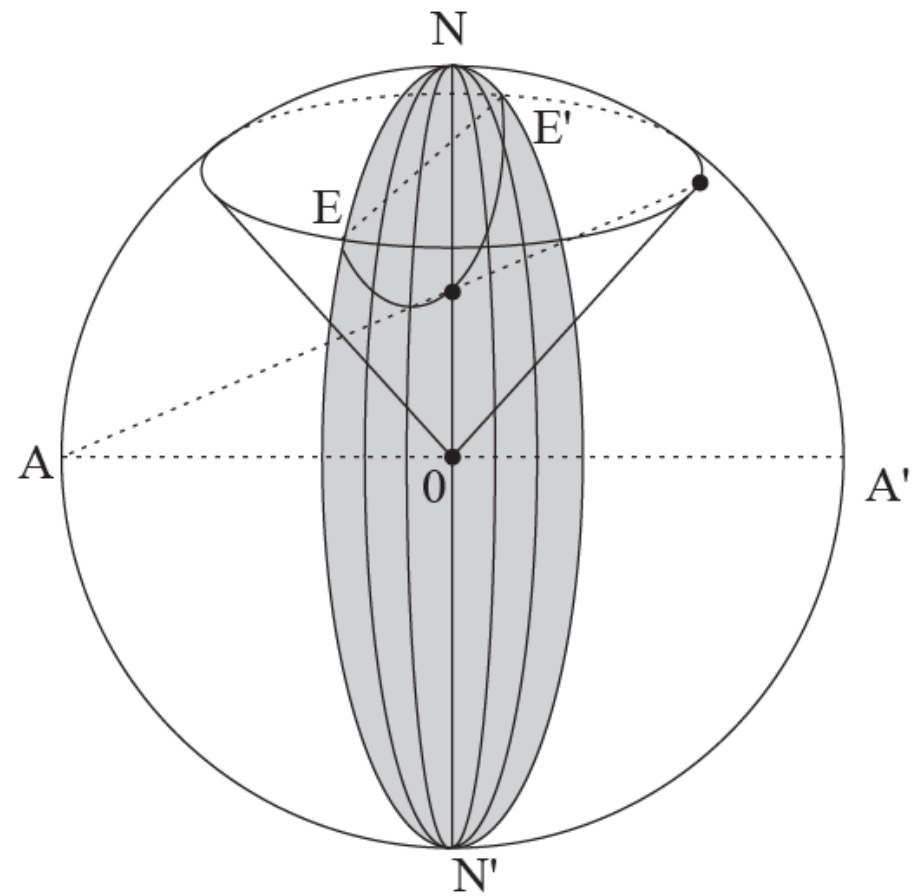
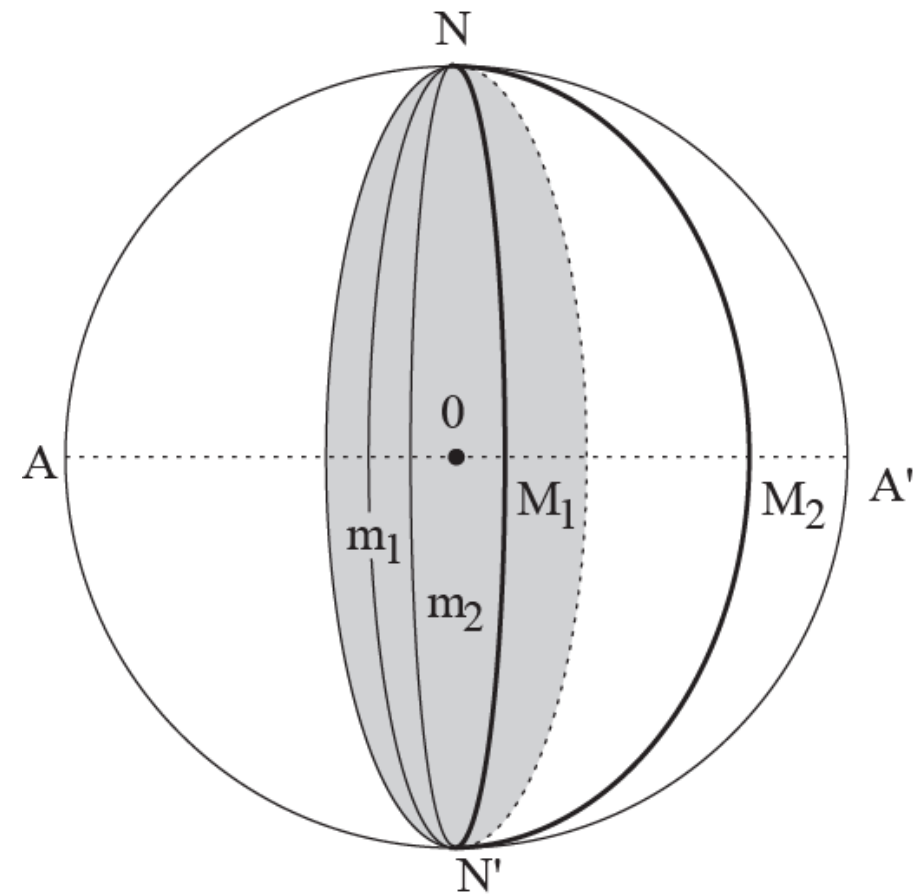


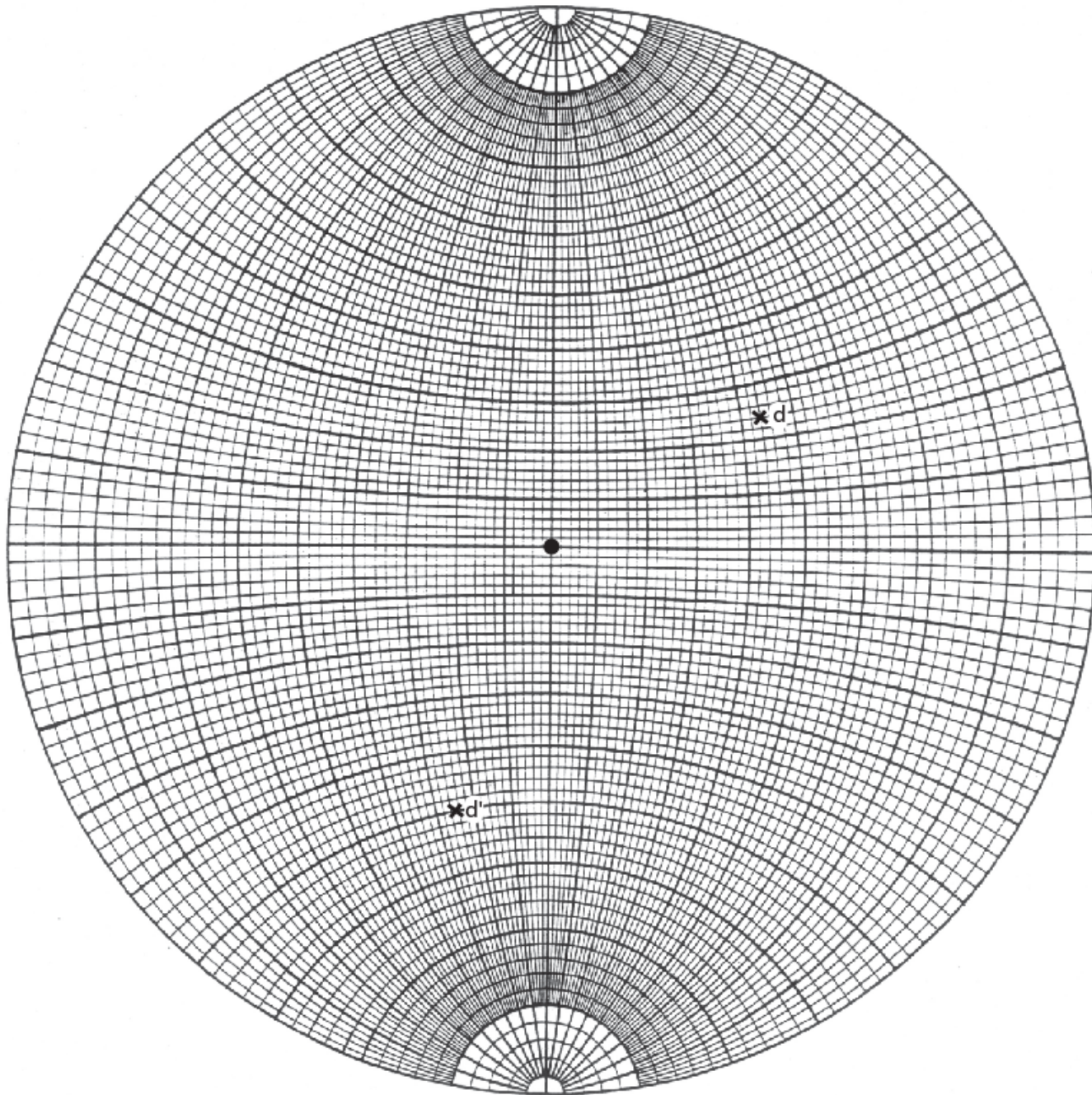
PROJEKCE ROVINY

Rovina musí procházet počátkem 0.

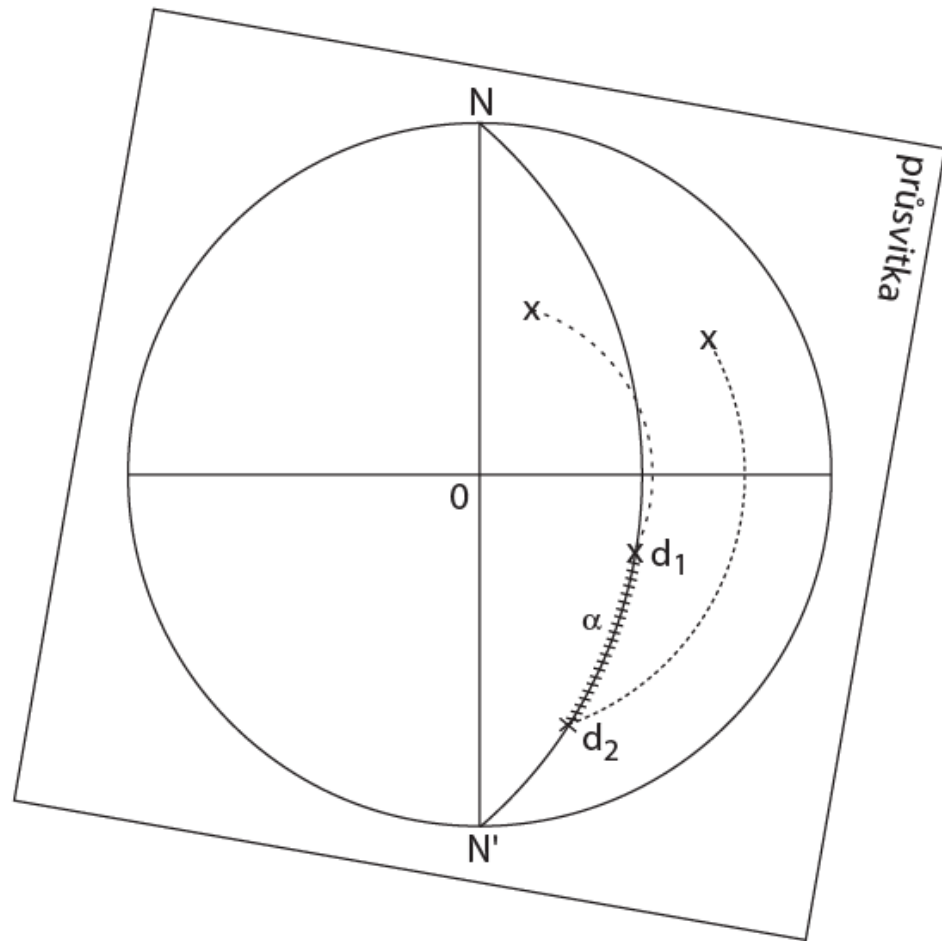
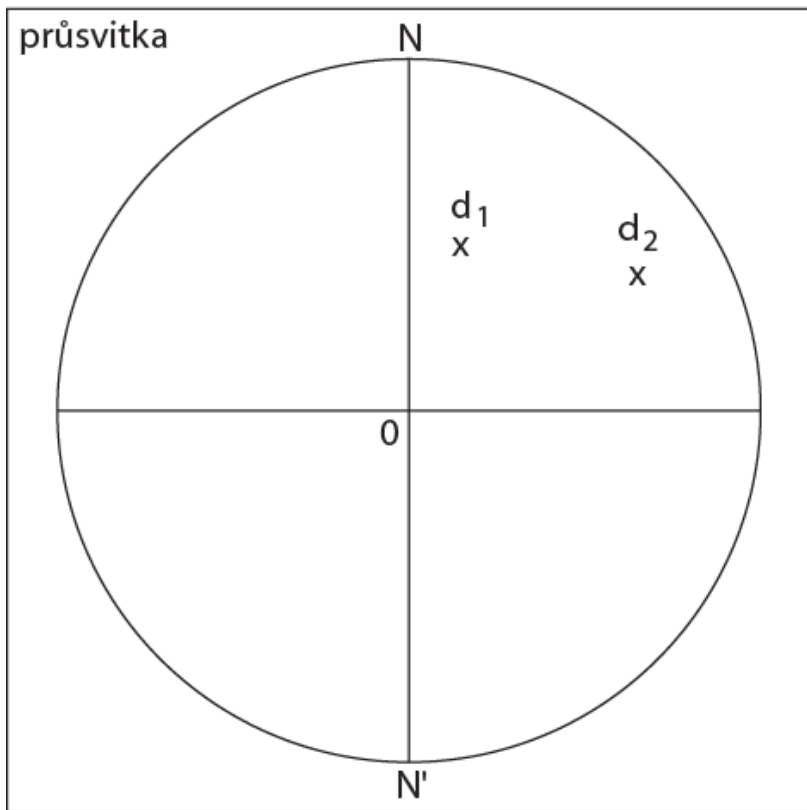


WULFOVA SÍŤ

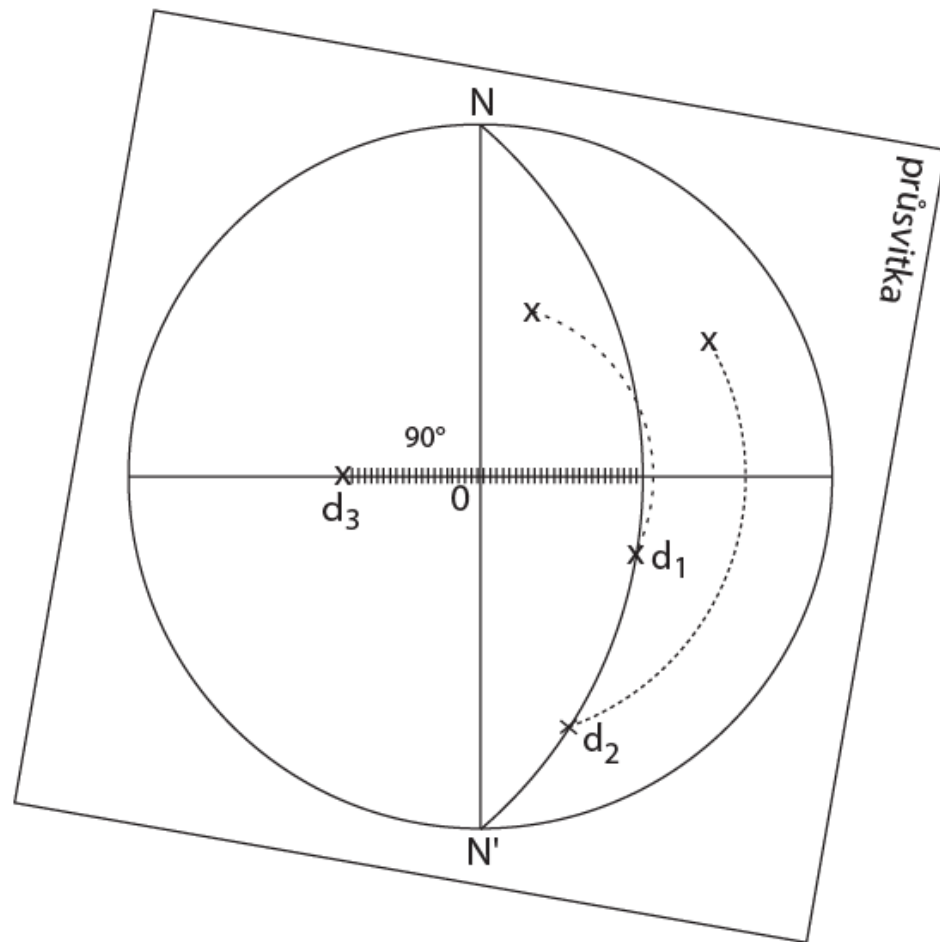
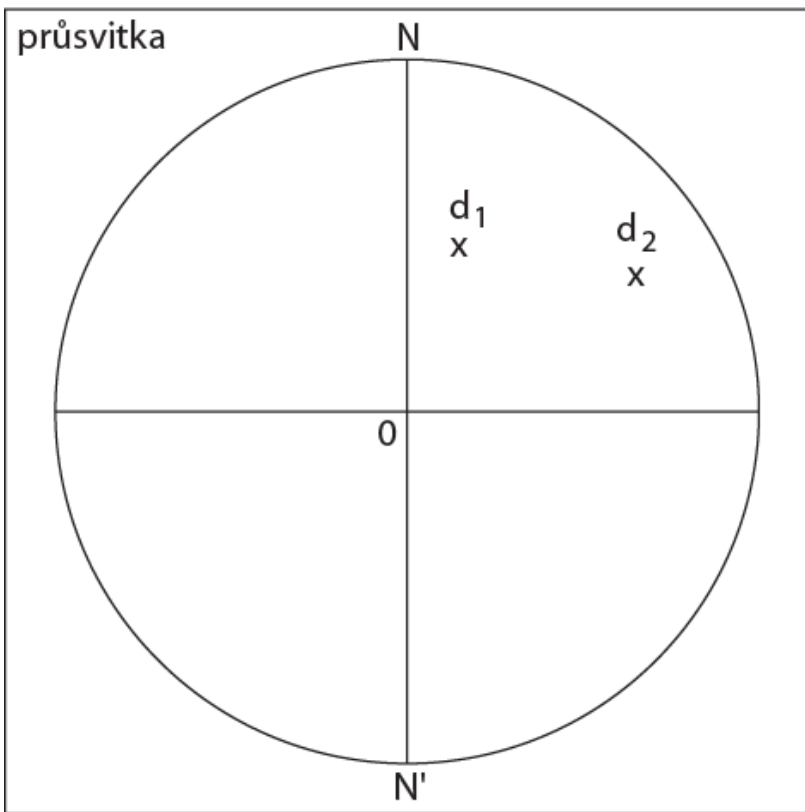




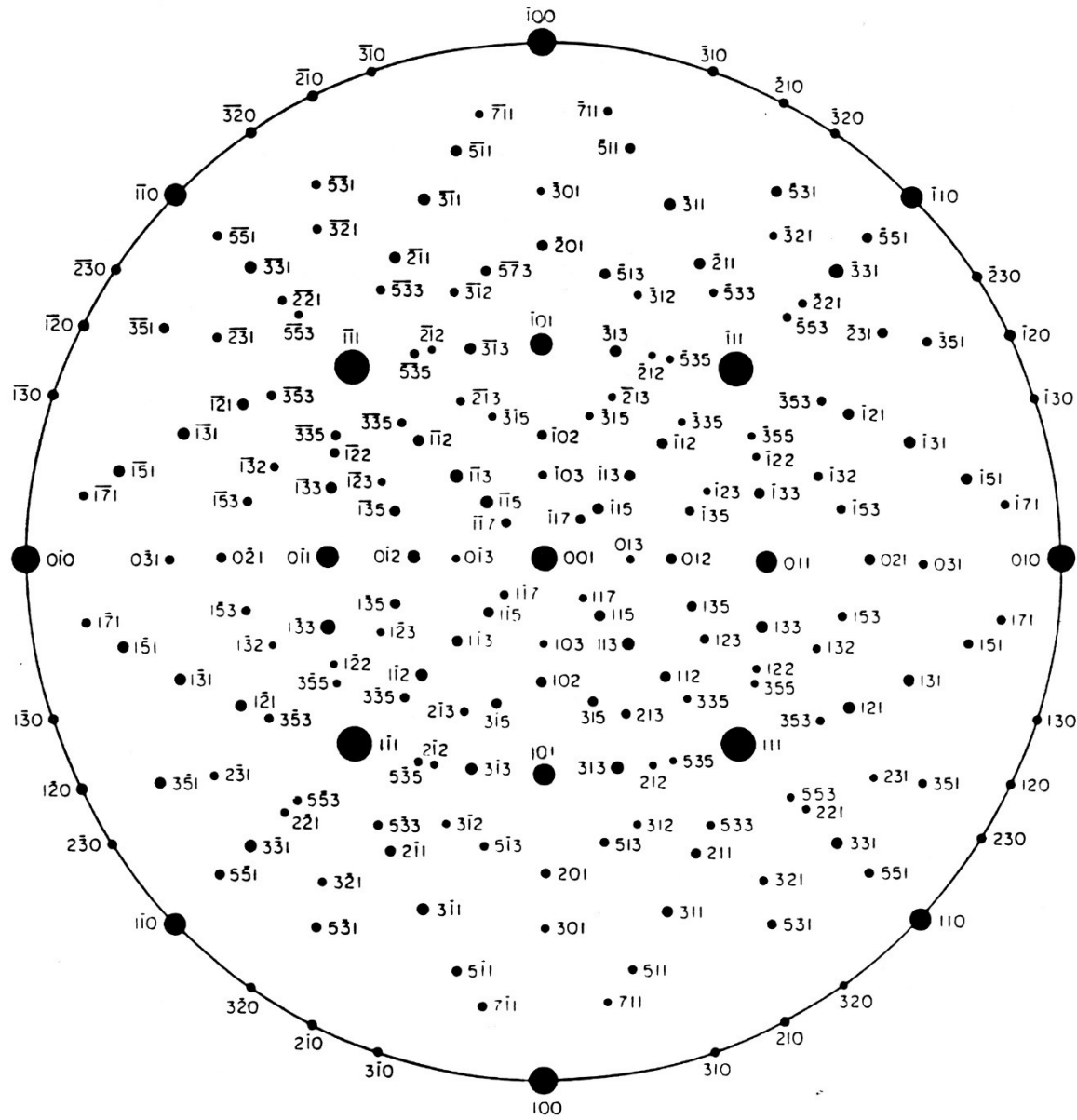
ÚHEL MEZI DVĚMA SMĚRY



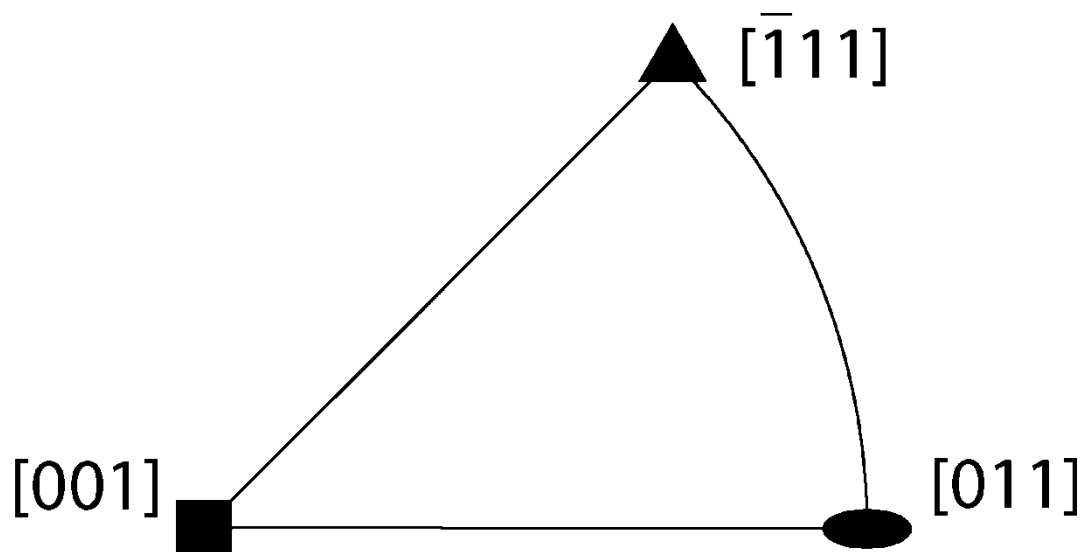
ROVINA URČENÁ 2 SMĚRY A JEJÍ NORMÁLA



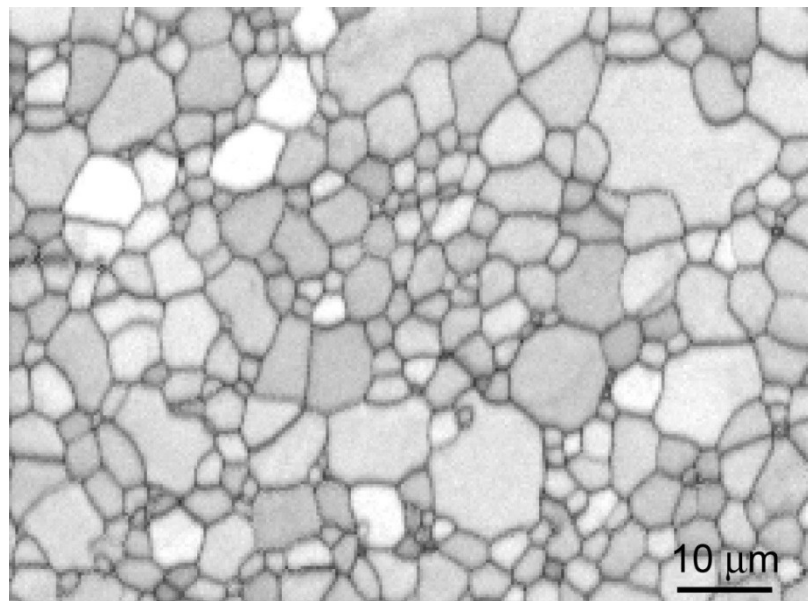
KRYCHLOVÁ MŘÍŽKA, $z = [001]$



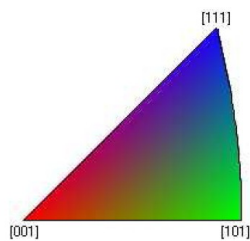
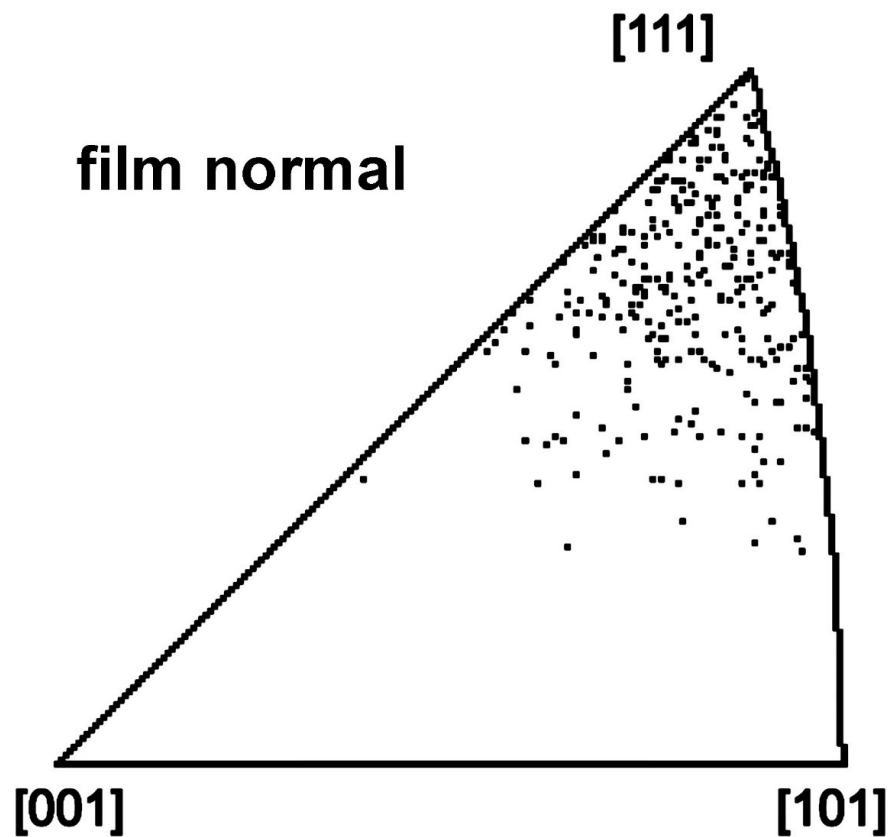
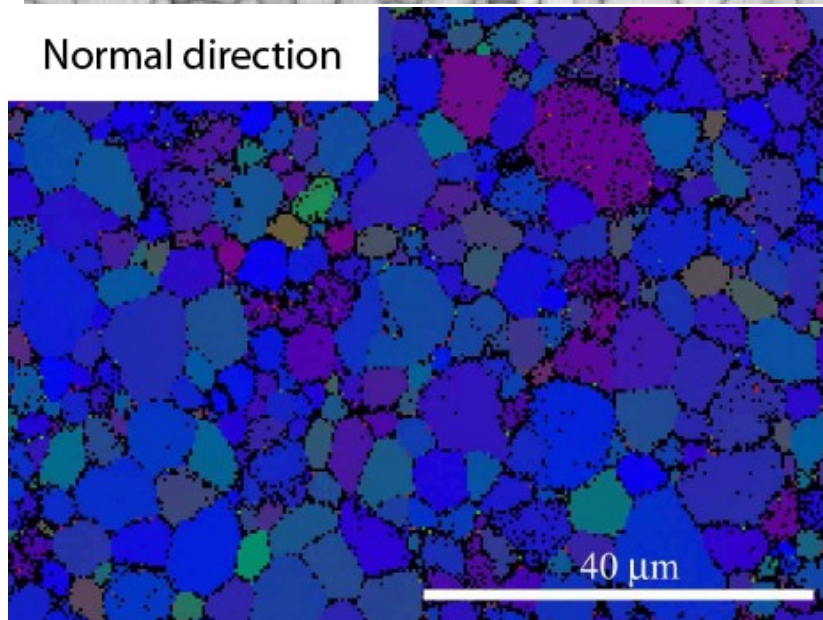
ZÁKLADNÍ STEREOGRAFICKÝ TROJÚHELNÍK (krychlová soustava)



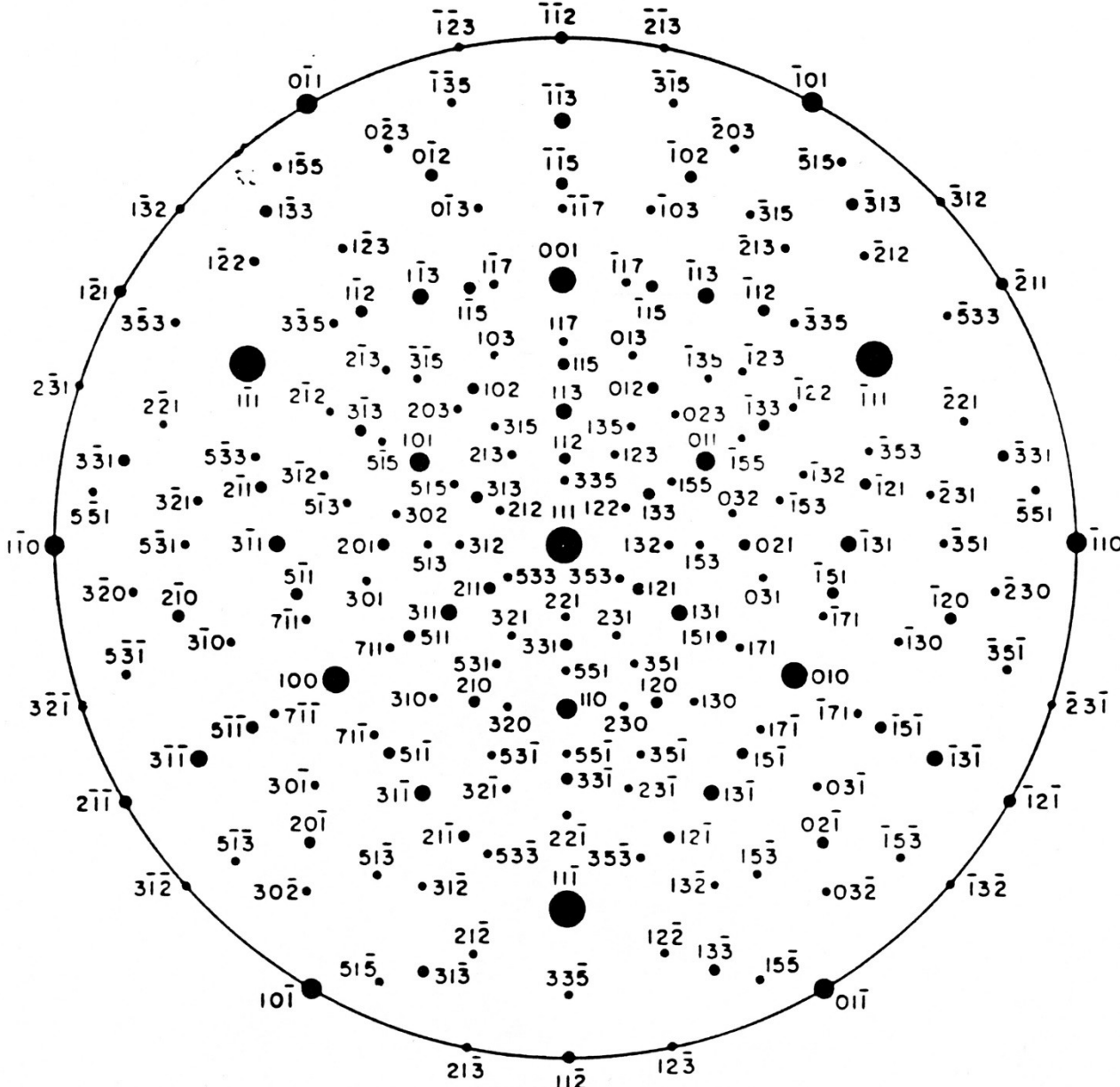
Znázornění textury pomocí ster. trojúhelníka



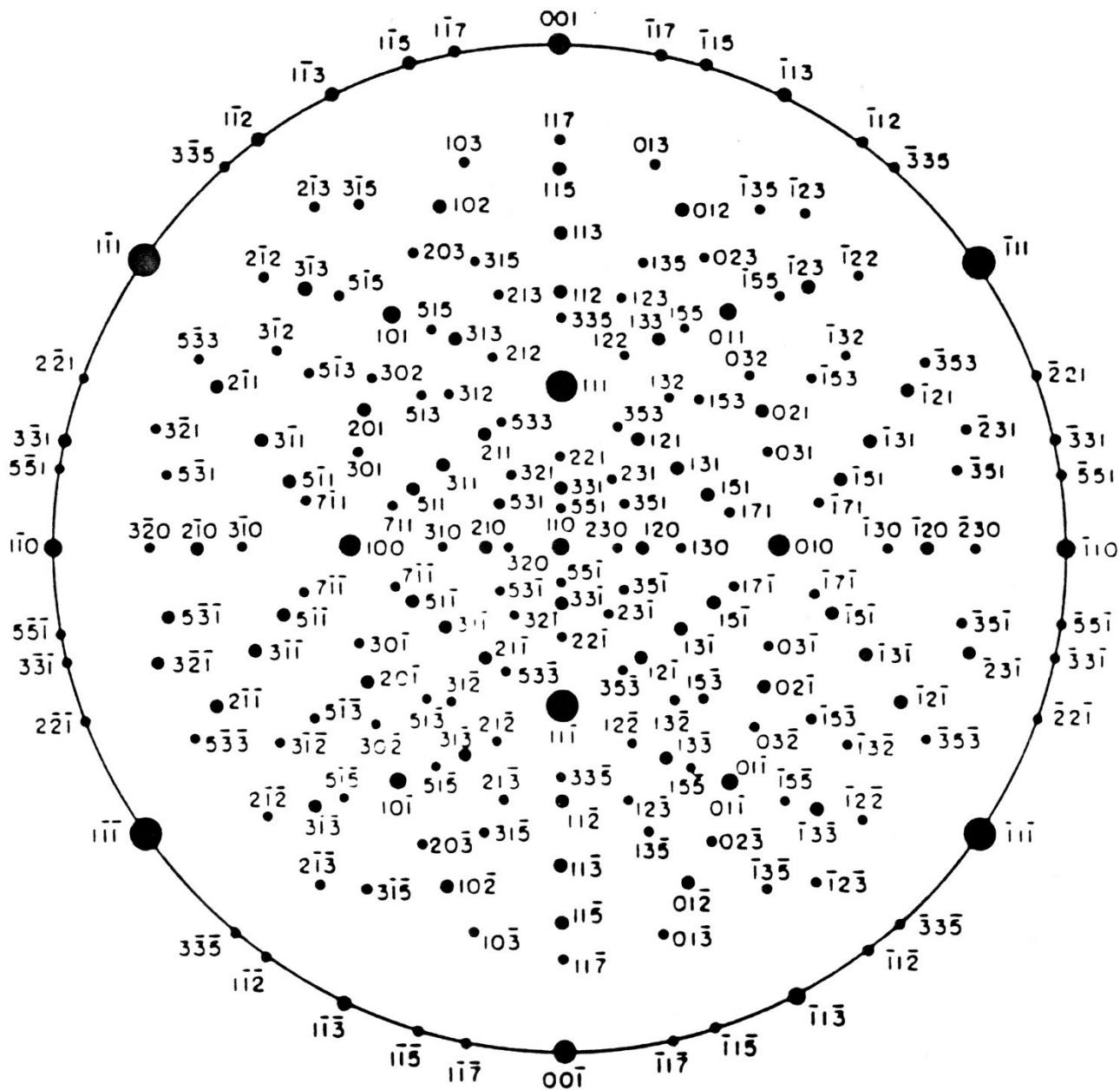
Normal direction



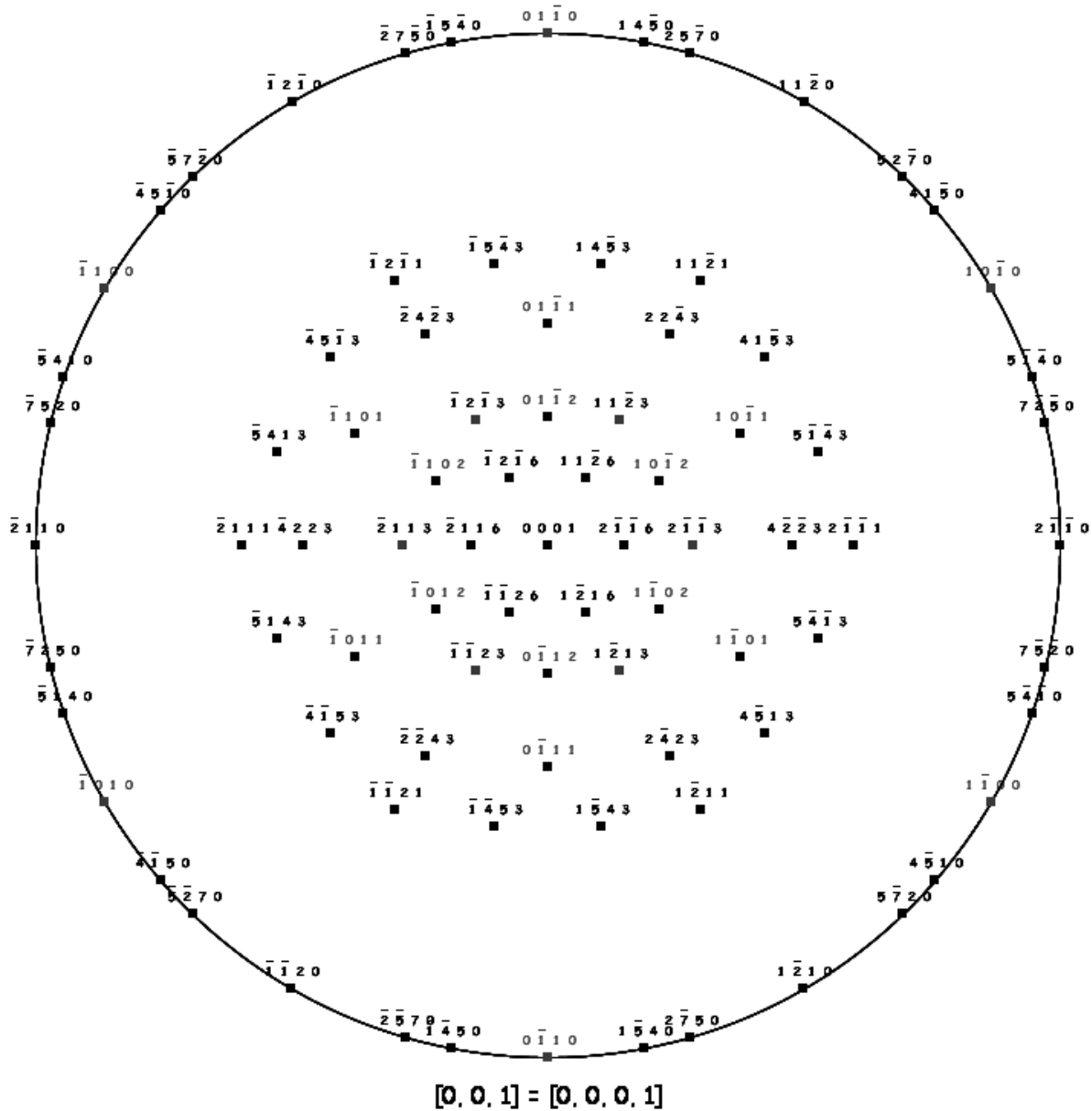
KRYCHLOVÁ MŘÍŽKA, $z = [111]$



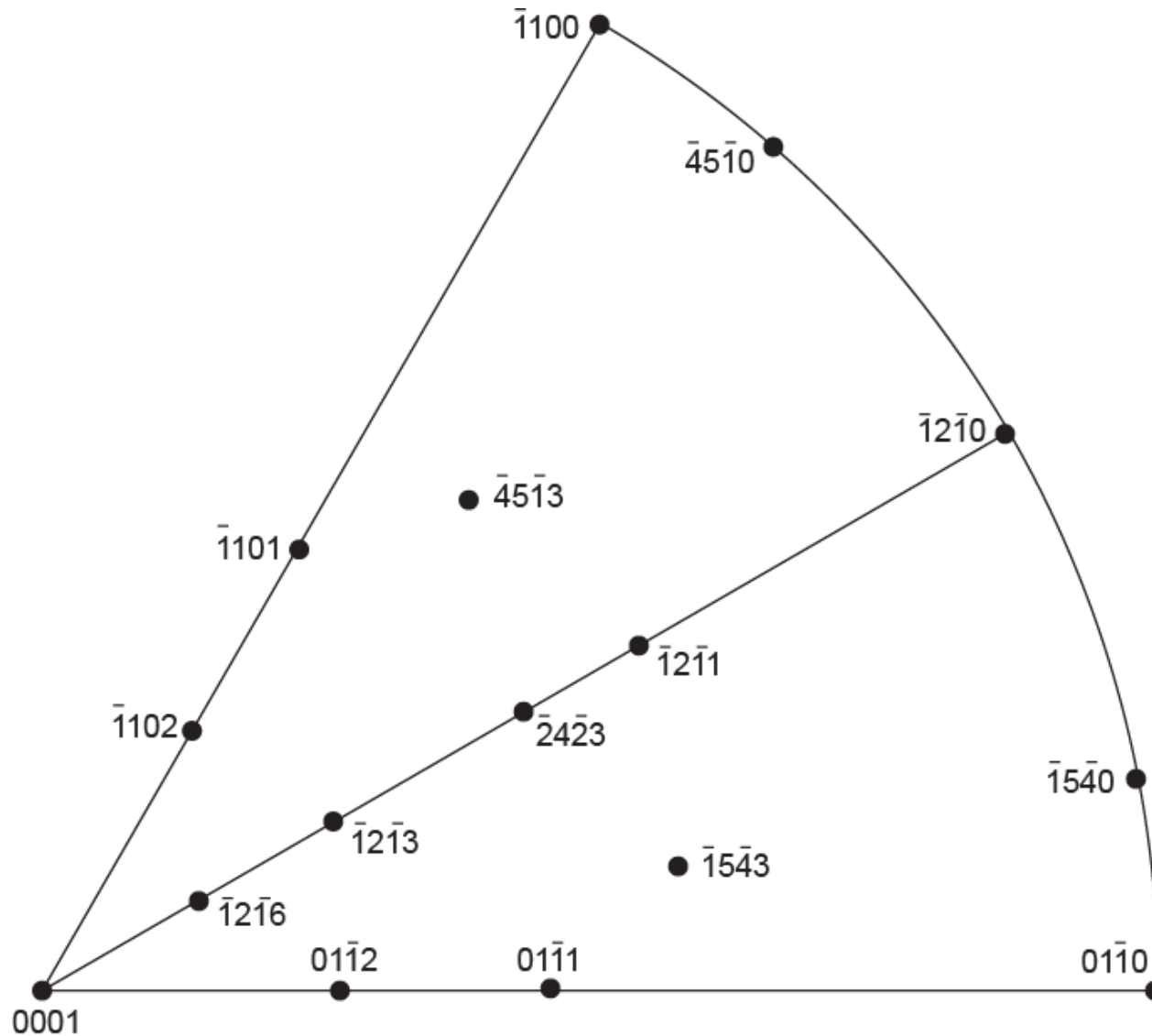
KRYCHLOVÁ MŘÍŽKA, $z = [110]$



HEXAGONÁLNÍ SOUSTAVA, $z = [0001]$



HEXAGONÁLNÍ SOUSTAVA, $z = [0001]$ základní stereografický trojúhelník

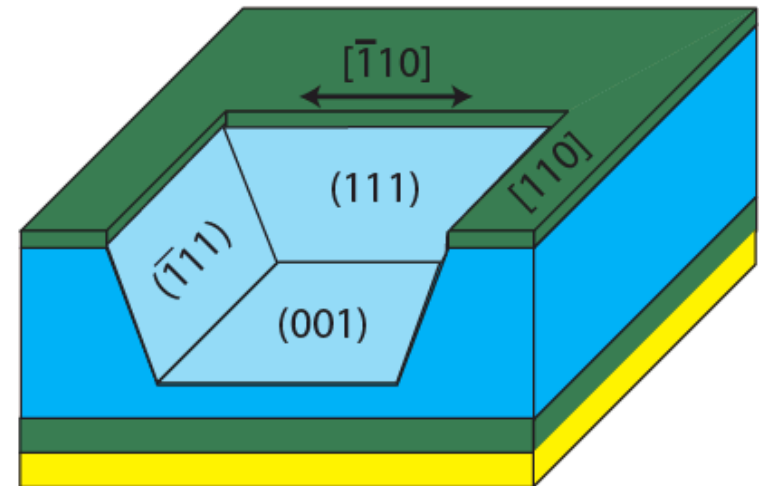
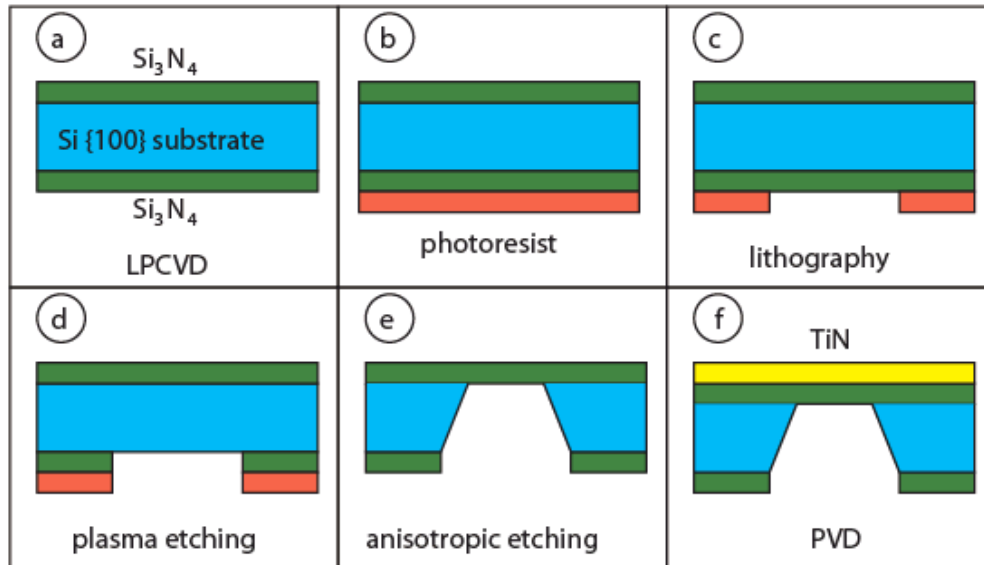


ANIZOTROPICKÉ LEPTÁNÍ

V některých případech je rychlost leptání různá pro různé krystalografické roviny.

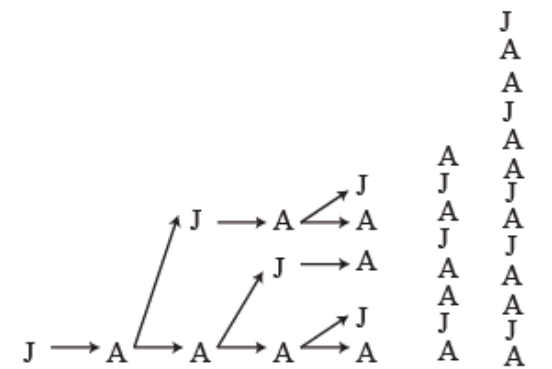
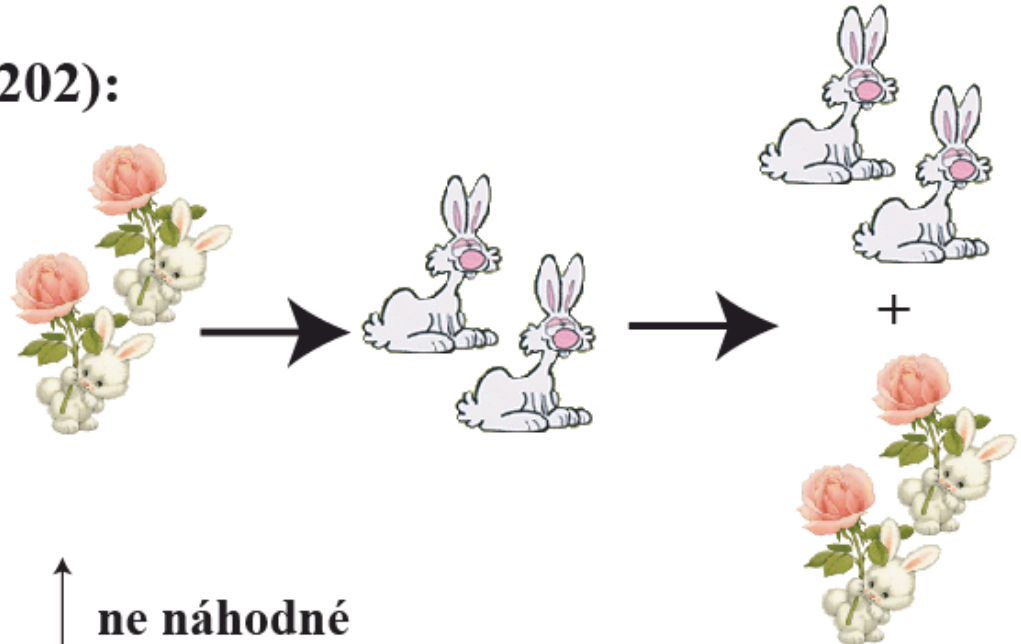
Cvičení : Al+ leptadlo (61% HCl + 36% HNO₃ + 3% HF)

Jiný příklad: Si + (30%KOH + 70% H₂O)
→ roviny {111} leptané nejpomaleji



KVAZIKRYSTALY - USPOŘÁDÁNÍ BEZ PERIODICITY

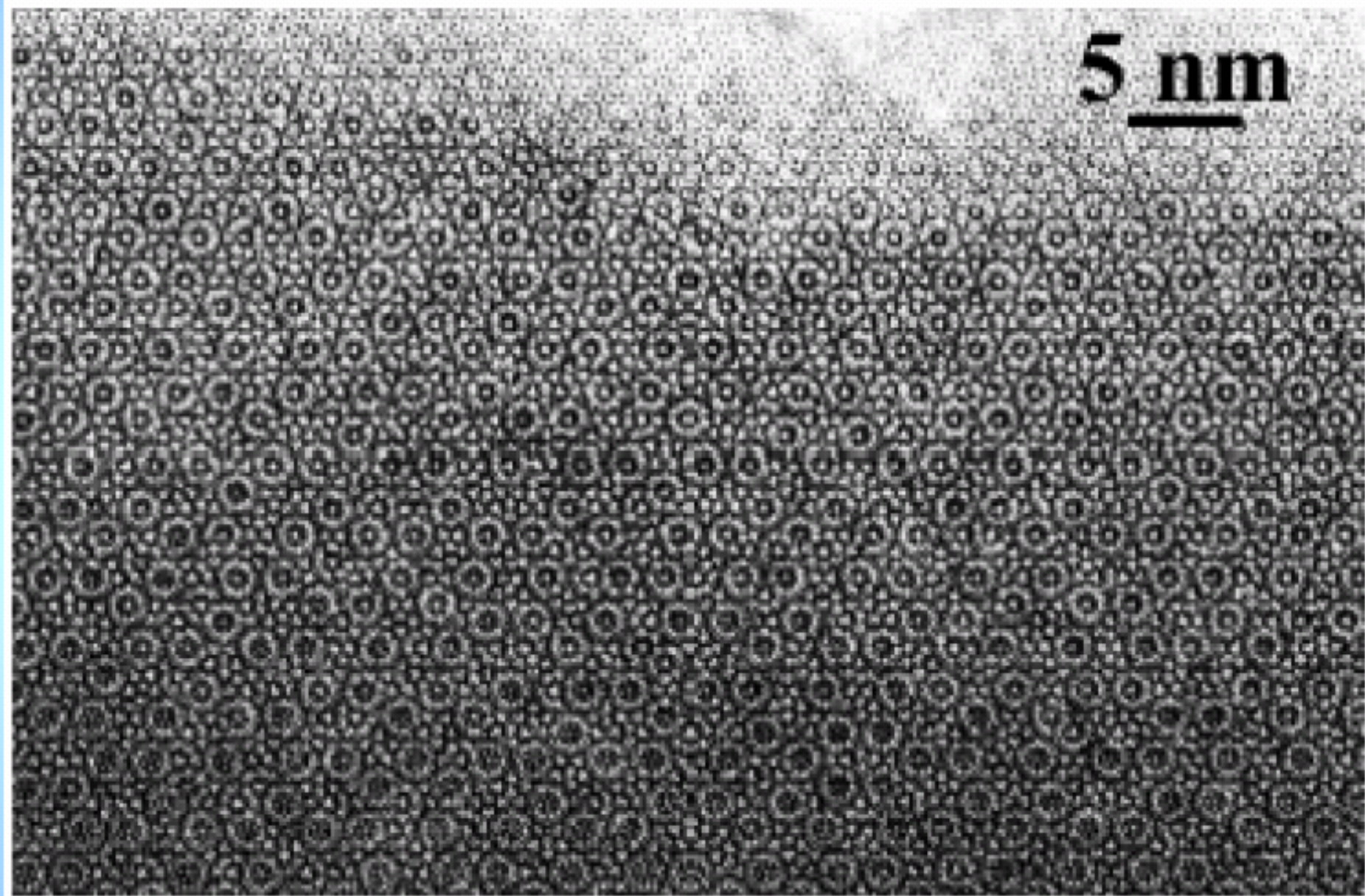
**Leonardo Pisano (Fibonacci, 1202):
nesmrtelní králíci**



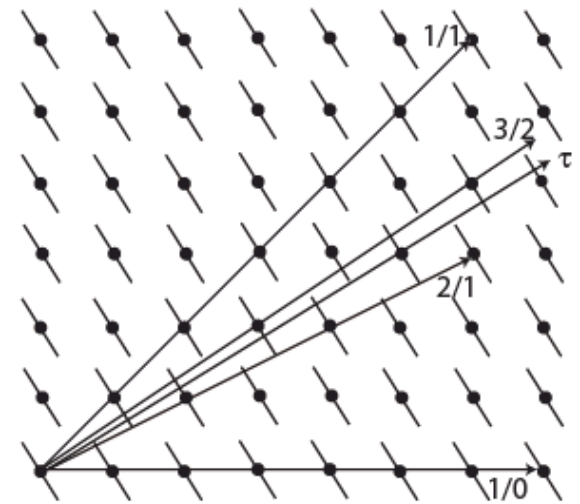
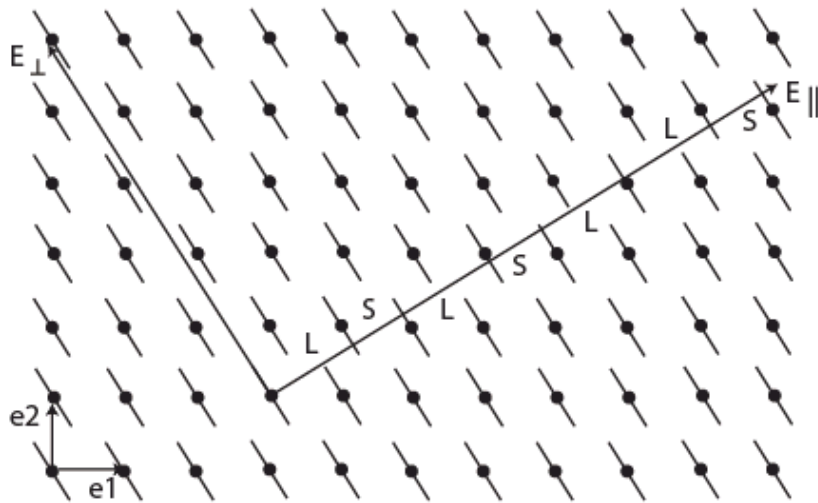
páry	1	1	2	3	5	8	13
dospělí			1	2	3	5	8
mladí				1	2	3	5

ne náhodné
ne periodické
symetrie 5, 8, 10, 12....

$$A/J = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = \frac{1}{\tau} = 1,618..$$



KVAZIKRYSTALY - HYPERPROSTOR



Skutečný prostor (1D), E_{\parallel} jako projekce z hyperprostoru (2D)

Icosahedrální kvazikrystaly (AlCuFe): symetrie 5, τ



KVAZIKRYSTALY - VLASTNOSTI

- jedna kvazikrystalická osa
- dvě kvazi krystalické osy
- tři kvazikrystalické osy (pravé kvazikrystal)

Objev: 1984 Shetchman, Blech, Gratias, Cahn,

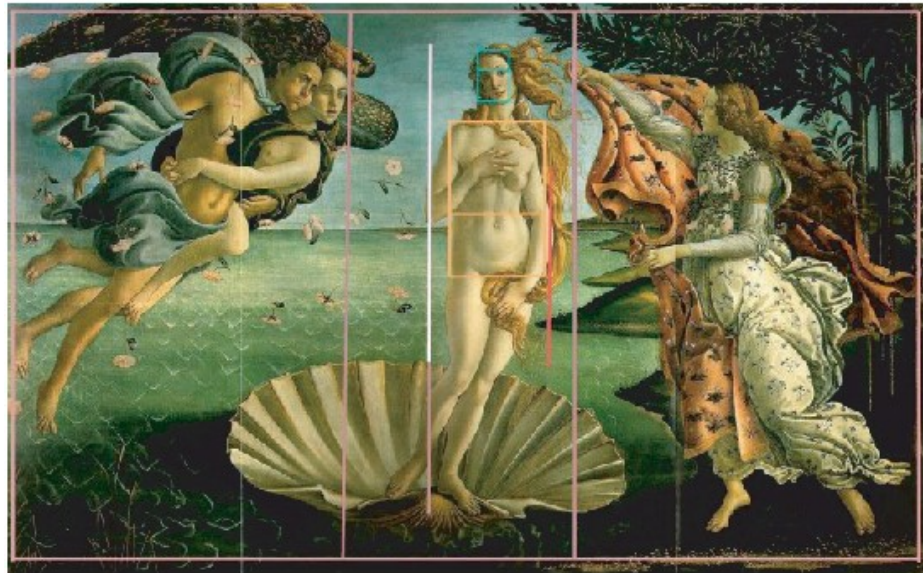
Dnes existují desítky - stovky kvazikrystalů o různých chemických složeních:
Al-Mn, Al-Cu-Fe, Ti₂-Mn, Al₄-Fe ...

Velmi křehké za pokojové teploty!

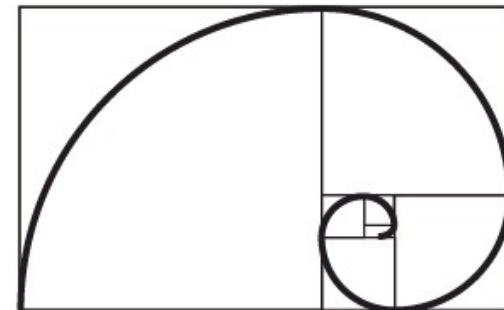
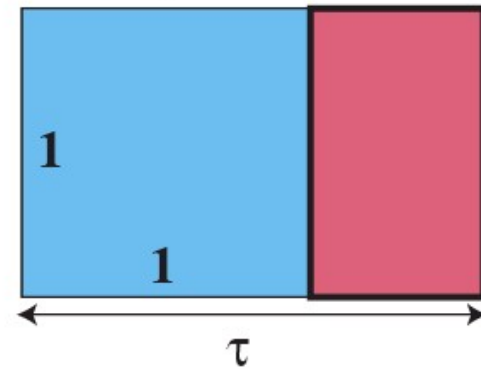
D. Caillard: nemožný skluz dislokací, jen šplh

Užitečná vlastnost - nízký koeficient tření

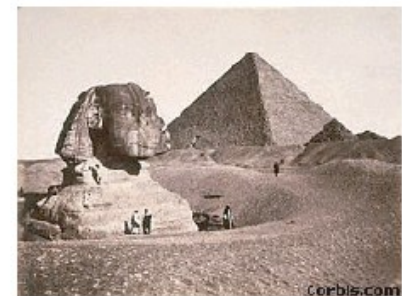
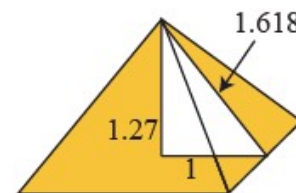
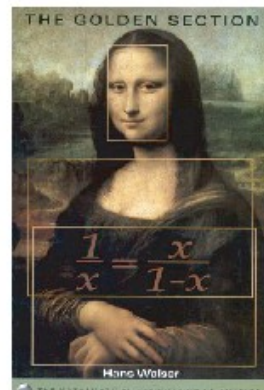
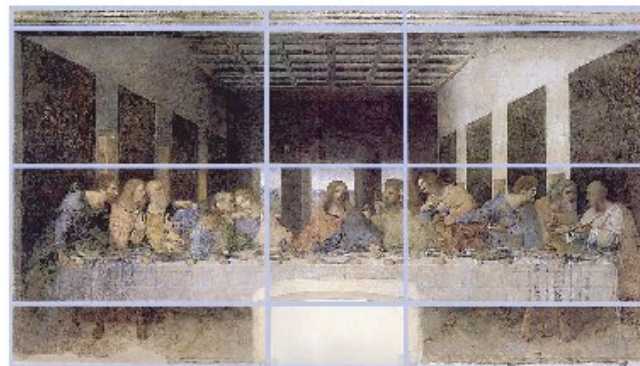
ZLATÝ ŘEZ



zlatý obdélník



Zrození Venuše, Botticelli



Corbis.com

Poslední večeře, da Vinci

Mona Lisa, da Vinci

<http://facultystaff.vwc.edu/~trfanney/golden-mean-WOWslides/gm10.html>

http://www.rtsq.qc.ca/aiguillart/projet/rech/artmath/no_or/artor1.htm
<http://www.geocities.com/davidjayjordan/GoldenSectionandyourBody.html>

STRUKTURY UHLÍKU

Příloha

Do 1980 :
- grafit (hcp)
- diamant (diamantová mřížka = fcc s bází)

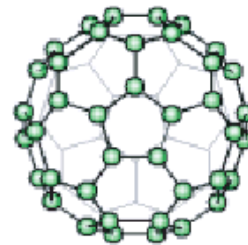
1980 Iijima : **carbon onions**

1985 Kroto et al. (Nobelova cena 1996)
: **fullerenes**

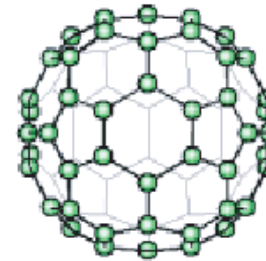
1991 Iijima : **nanotubes**

? carbyn - není důkaz jeho existence

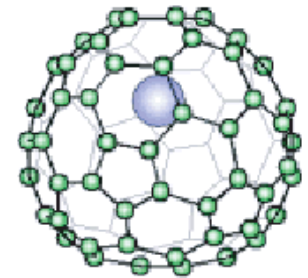
? graphene : monoatomární vrstva



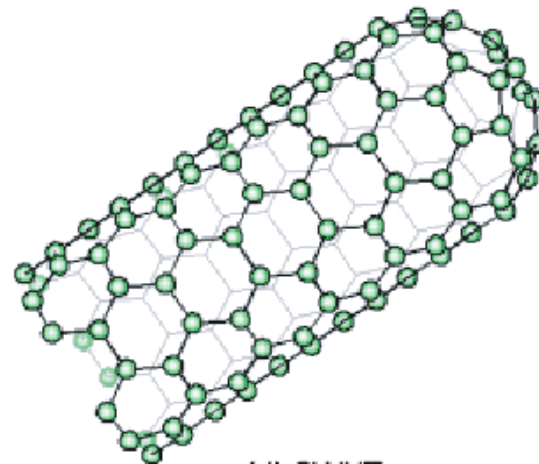
(a) C₆₀



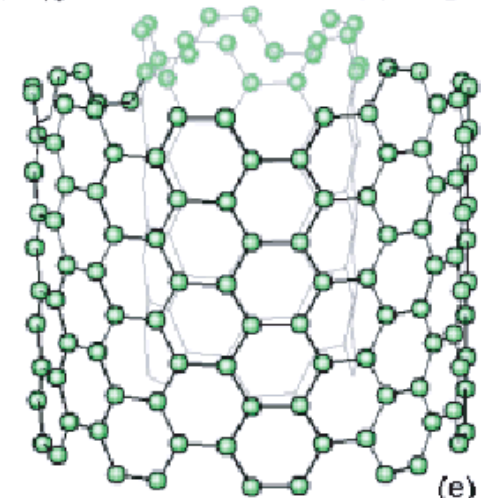
(b) C₇₀



(c) La@C₈₂



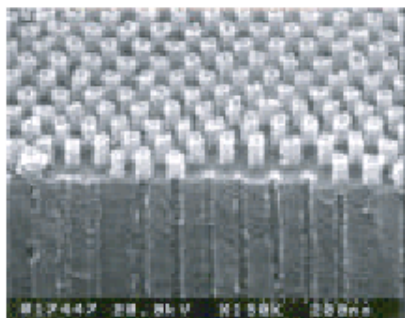
(d) SWNT



(e) MWNT

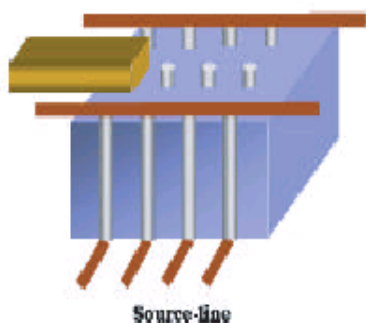
BUDOUČÍ APLIKACE (?)

1. Mikroelektronika



Gate-line

Drain-line

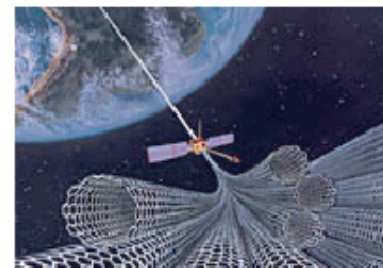
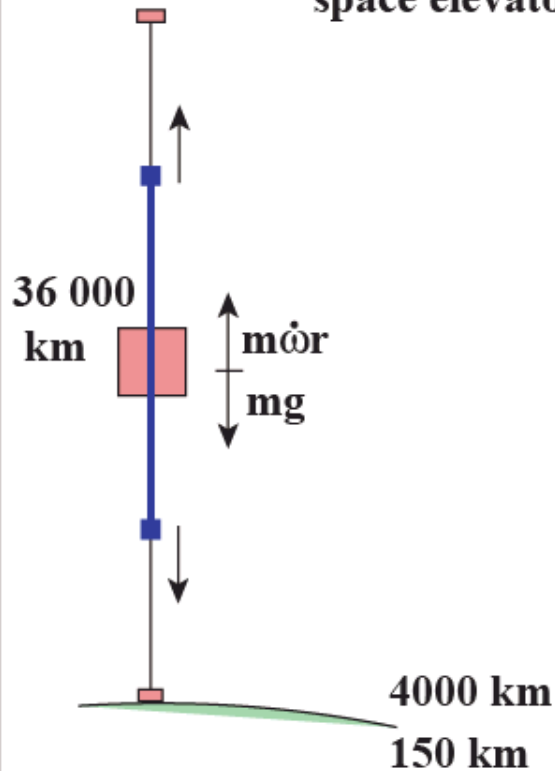


Source-line

SEM image of vertically aligned CNTs (upper), and device architecture of vertical CNT-transistor array (lower).

W.B Choi et al.

2. Pevná vlákna : space elevator



http://flightprojects.msfc.nasa.gov/pdf_files/elevator.pdf

Jak postupuje čtenář vědeckého článku

