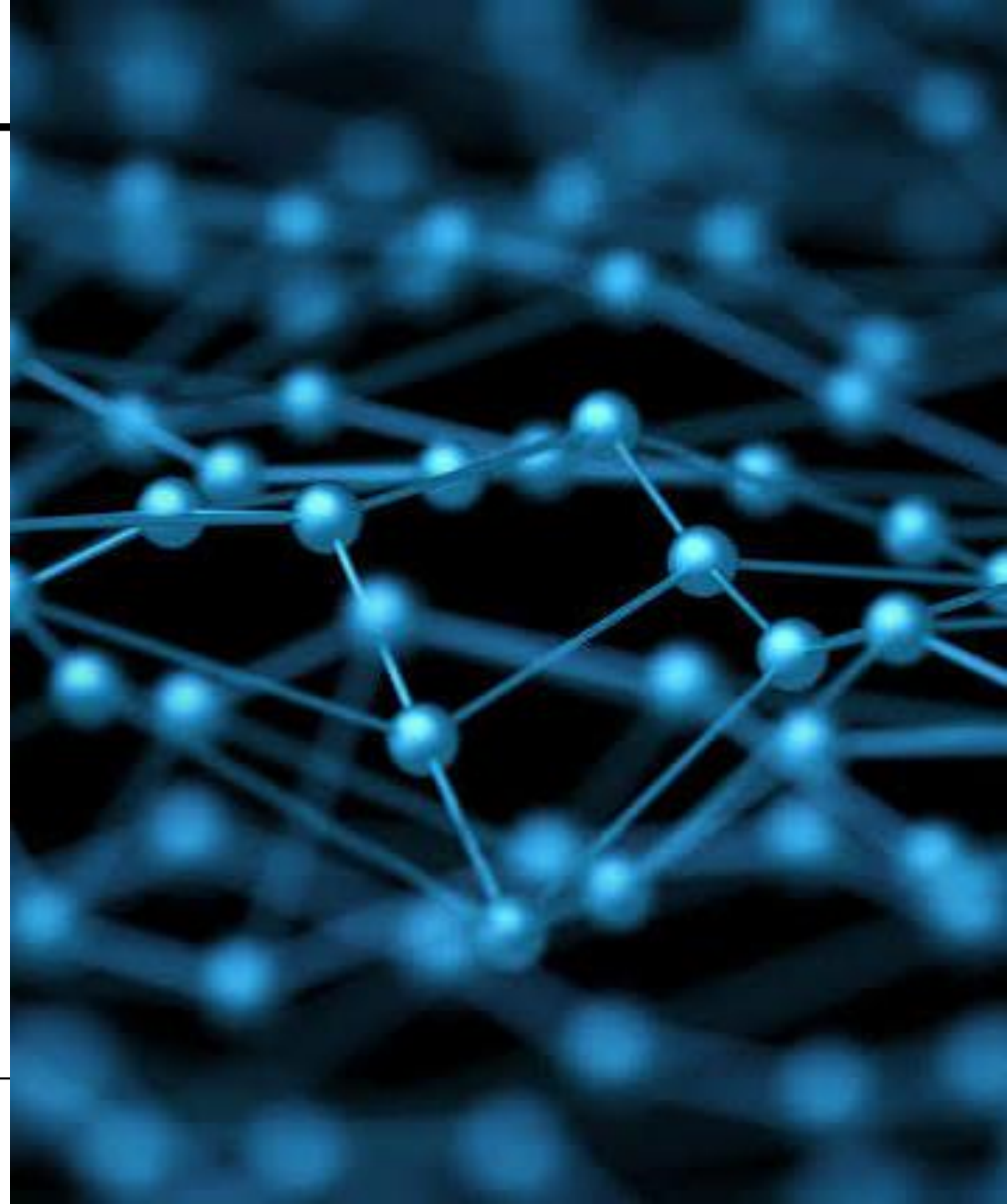
# FYZIKA KONDENZOVANÉHO STAVU

4. prezentace



# Deformace krystalických látek

- **Elasticita a anelasticita**
  - Hookův zákon a jeho zobecněný tvar
  - Anelastické chování
- **Deformace monokrystalů**
  - Kritické skluzové napětí a Schmidův orientační faktor
  - Interakce dislokací s poruchy krystalu
  - Deformační mechanizmy v materiálech s fcc, bcc a hcp strukturou
- **Deformace polykrystalů**
  - Názvosloví mechanických vlastností a typy mechanických zkoušek
  - Výpočet charakteristických veličin mechanických zkoušek
  - Deformační zpevnění a odpevnění

# Elastická deformace

**Hookův zákon –** ("Ut tensio, sic vis" – jaké prodloužení, taková síla)

- V **1D:** $F = k\Delta l$, kde: $F$ – síla, $k$ – tuhost pružiny, $\Delta l$ – prodloužení.
- V **3D** a **malé deformace (elastická oblast)**

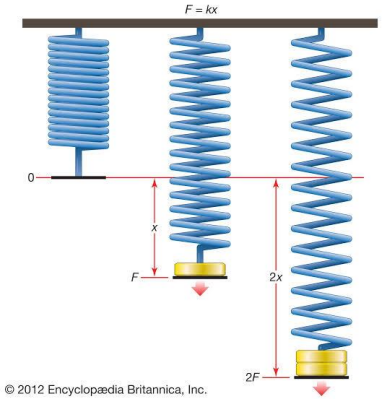
$$\sigma = E\varepsilon$$

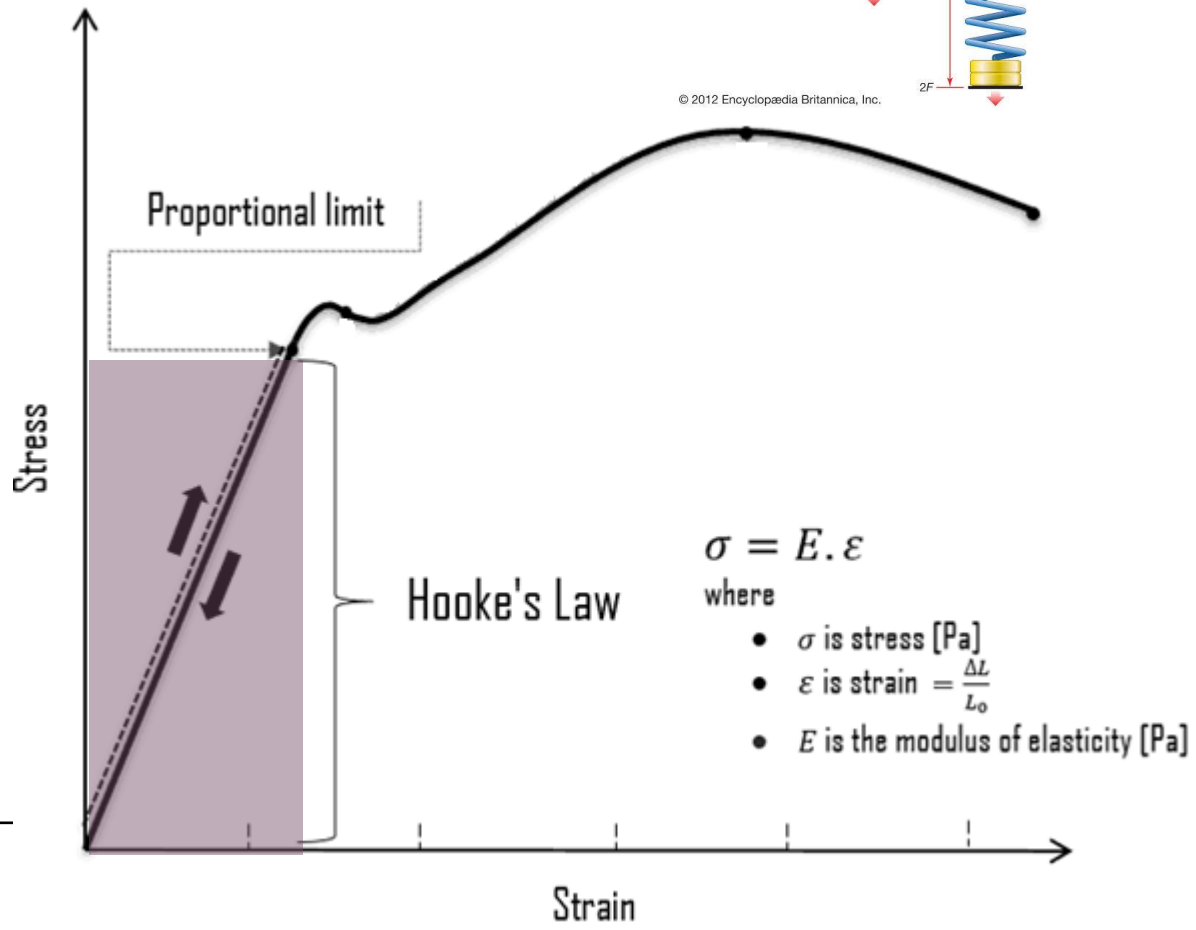
kde $\sigma$ – napětí [Pa], $\varepsilon = \Delta l / l_0$ – deformace,
$E$ – Youngův modul pružnosti [Pa]

- **Po odlehčení se těleso vrací do původního tvaru**

**Typické hodnoty $E$**

- Ocel: 210 GPa
- Al: 70 GPa
- Guma: $10^{-3}$–$10^{-1}$ GPa



# Potenciální energie vazby

- **Lennard – Jonesův potenciál**

  interakční energii mezi dvěma neutrálními částicemi v závislosti na jejich vzdálenosti

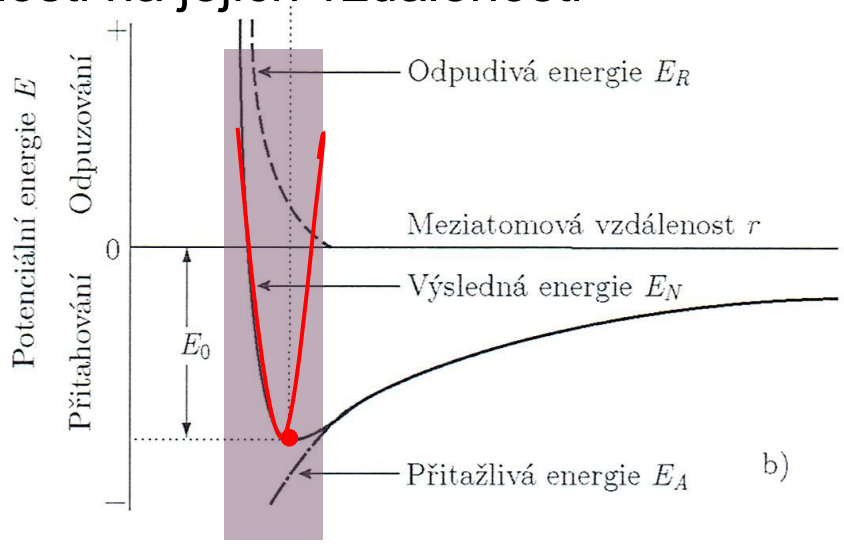
- $U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$, kde

  *r* - vzdálenost mezi středy částic,

  *ε* - hloubka potenciálové jámy - odpovídá maximální vazebné energii,

  σ - vzdálenost, při které je interakční energie nulová; efektivní průměr částice

- Minimum $U \longrightarrow E(r_0)$




- **Souvislost s elastickými vlastnostmi**

- V okolí minima platí: $E(r) \cong E_0 + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$, kde $k = \left.\frac{d^2E}{dr^2}\right|_{r_0}$ → tuhost vazby (viz $F = k\Delta l$)

- Hluboké a úzké minimum → vysoký Youngův modul; mělké minimum → nízký Youngův modul

# Zobecněný Hookův zákon

V kontinuu (reálných tělesech) jsou napětí i deformace tenzorové veličiny a Hookův zákon můžeme napsat ve tvaru:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$$

$\sigma_{ij}$ – tenzor napětí, $\varepsilon_{ij}$ – tenzor deformace, $C_{ijkl}$ – tenzor elastických konstant

- Dvojindexové značení:

  když $i = j$ nebo $k = l$, pak $\boldsymbol{\alpha} = i$ a $\boldsymbol{\beta} = k$; např. $C_{1111} = c_{12}$

  když $i \neq j$, pak $\boldsymbol{\alpha}$ = zbývající číslo posloupnosti + 3, např. $C_{1233} = c_{63}$

  když $i \neq j$, pak $\boldsymbol{\beta}$ = zbývající číslo posloupnosti + 3, např. $C_{2223} = c_{24}$

**Pro nejnižší symetrii krystalu (triklinická soustava) 21 nezávislých elastických konstant**

- Kvůli symetrii $\sigma_{ij}$ a $\varepsilon_{kl}$: 81 (9x9) → 36 (6x6) (z 9 složek jen 6 nezávislých)
- Kvůli I. zákonu termodynamiky (ZZE): výsledná energie napjatosti nezávisí na cestě zatěžování → matice je symetrická podle diagonály: 36 (6x6) → 6 (diagonála) + 15 (mimo diag.) = 21

# Zobecněný Hookův zákon

**Vyšší symetrie krystalu ⇒ méně nezávislých elastických konstant.**

| Krystalová soustava | Počet nezáv. konstant | $C_{ij}$ se nemění při |
|---|---|---|
| Triklinická | 21 | n/a |
| Monoklinická | 13 | otočení o 180° kolem z |
| Ortorombická | 9 | otočení o 180° kolem x,y,z |
| Tetragonální | 6 nebo 7* *závisí na bodové grupě | otočení o 90° kolem z |
| Trigonální | 6 nebo 7* *závisí na bodové grupě | otočení o 120° kolem z |
| Hexagonální | 5 | otočení o 60° kolem z |
| Kubická | 3 | otočení o 90° kolem x,y,z |
| Izotropní materiál | 2 | otočení o libovolný úhel |

**Kubický systém**

$c_{11}$: Odpor proti stlačení/natažení podél hrany krychle.
$c_{12}$: Příčná deformace (vyboulení do stran, při tlaku shora).
$c_{44}$: Odpor proti čistému smykovému zkroucení (střihu)

**Izotropní systém**

$c_{11} = c_{12} + 2c_{44}$

# Zobecněný Hookův zákon

**Výpočet pro monoklinický systém** – elastické vlastnosti se nemění při otočení 180°

- $C_{ijkl}$ je invariantní vůči transformaci: $x_1^* = -x_1; x_2^* = -x_2; x_3^* = x_3$
- $C_{ijkl}^* = a_{im}a_{jn}a_{kr}a_{ls}C_{mnrs}$, a matice směrových kosinů je: $\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
- Když index 3 je zastoupen 0,2 nebo 4x:

$$C_{3321}^* = a_{33}a_{33}a_{22}a_{11}C_{3321} = (+1).(+1).(-1).(-1)\ C_{3321} = C_{3321}$$ - je to **OK**

- Když index 3 je zastoupen 1 nebo 3x:

$$C_{3331}^* = a_{33}a_{33}a_{33}a_{11}C_{3331} = (+1).(+1).(+1).(-1)\ C_{3321} = -C_{3321}$$ - je to **X**

- Proto matice se redukuje na **13** nezávislých koeficientů ($C_{3331} = C_{3332} = C_{3ijk} = 0$)

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & 0 & 0 & c_{36} \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{54} & c_{55} & 0 \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix}$$

# Zobecněný Hookův zákon

- **Izotropní materiál** (elastické konstanty jsou invariantní vůči libovolné rotaci)

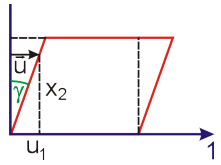
potom Hookův zákon se redukuje na tvar: $\sigma_{ij} = \lambda\delta_{ij}\varepsilon_{kk} + 2\mu\varepsilon_{ij}$

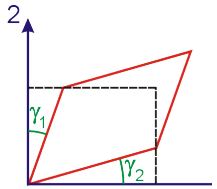
kde $\lambda = c_{12}$, $\mu = c_{44}$ – Lamého koeficienty, $\varepsilon_{kk} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$

- **Elastické konstanty v izotropním materiálu**

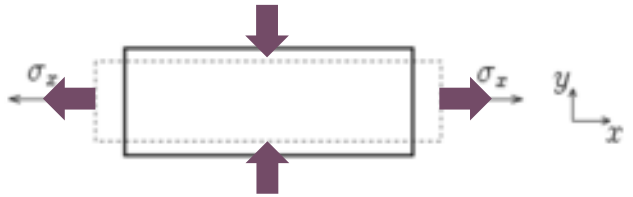
- Youngův modul $E = \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu}$



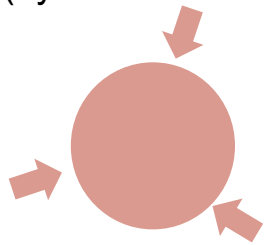




- Modul ve smyku $G = \mu$
- Poissonovo číslo $\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$ poměr mezi příčnou a podélnou deformací materiálu



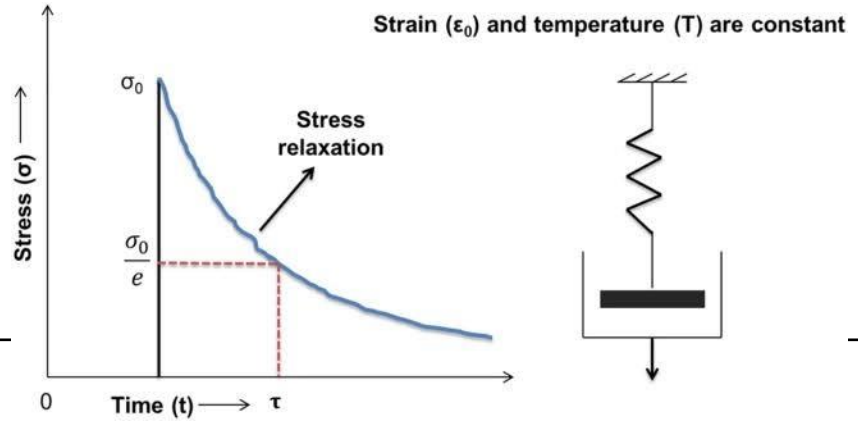

- Objemový modul $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ odpor materiálu vůči rovnoměrnému stlačování (hydrostatickému tlaku)

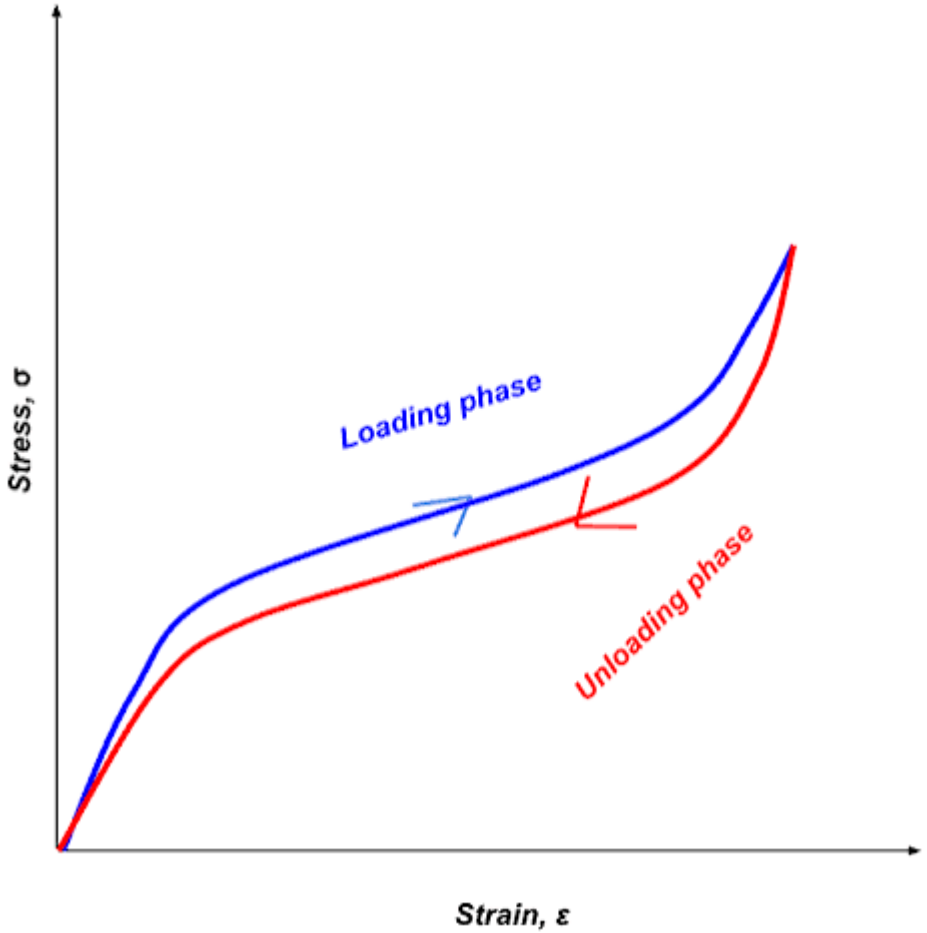


# Anelastické vlastnosti materiálů

- **Anelastická** deformace je vratná deformace, jejíž zotavení po **odlehčení probíhá se zpožděním v čase vlivem mikroskopických procesů v materiálu.**

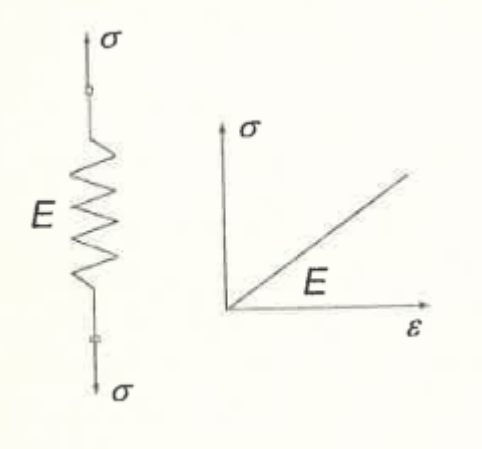
- **Elastické konstanty v izotropním materiálu**
- vratná, ale časově zpožděná deformace
- zotavení probíhá s konečnou relaxační dobou
- souvisí s pohybem defektů a dislokací
- způsobuje hysterézi a vnitřní tlumení



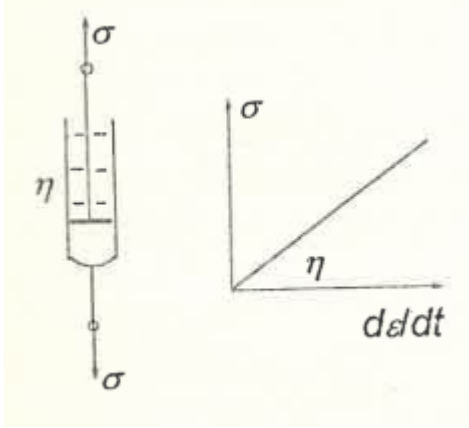
# Základní modely anelastických těles

- **Hookovo těleso**
- Ideálně elastické
- E– Youngův modul



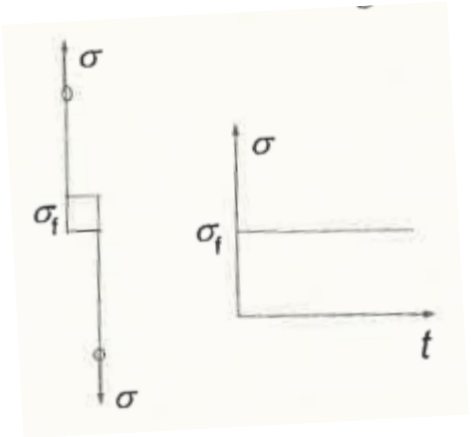

$$\sigma = \mathrm{E}\varepsilon$$

- **Newtonovo těleso**
- Ideálně viskózní
- $\eta$ – koeficient viskozity




$$\sigma = \eta\dot{\varepsilon}$$

- **Dokonale plastické těleso**
- Pro $\sigma < \sigma_s$ dokonalé tuhé těleso
- Pro $\sigma_s = \sigma$ plastické tečení, kdy $\dot{\varepsilon} = \mathrm{konst.}$

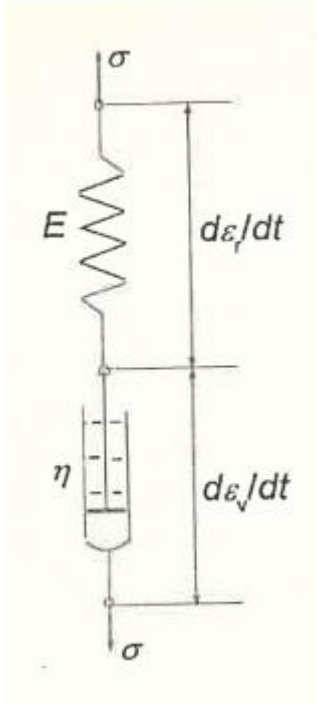



$$\dot{\varepsilon} = \begin{cases} \mathrm{konst.}, \mathrm{když}\ \sigma = \sigma_s \\ 0, \mathrm{jinak} \end{cases}$$

$\sigma_s -$ mez skluzu

# Základní modely anelastických těles

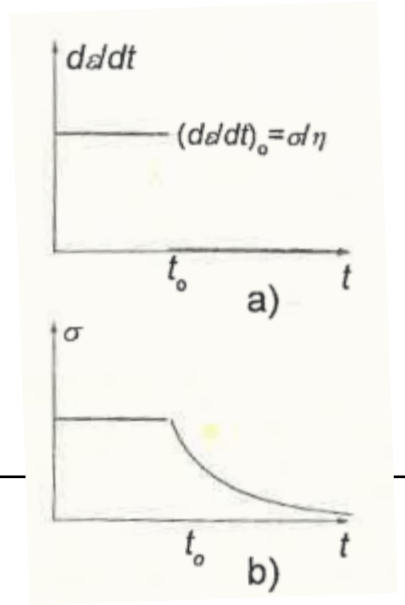
- **Maxwellovo těleso**
- Sériové zapojení elastického a viskózního elementu




- **Materiálová rovnice**
- $\tau$ – retardační čas

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_e + \dot{\varepsilon}_v = \frac{\dot{\sigma}}{E} + \frac{\sigma}{\eta} \longrightarrow \eta\dot{\varepsilon} = \tau\dot{\sigma} + \sigma$$
$$, \text{kde } \tau = \eta/E$$

- **Napěťová relaxace**
- V čase $t_0$ zastavíme deformaci
- Napětí vymizí pozvolna
- $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{t-t_0}{\tau}}, \text{pro } t > t_0$

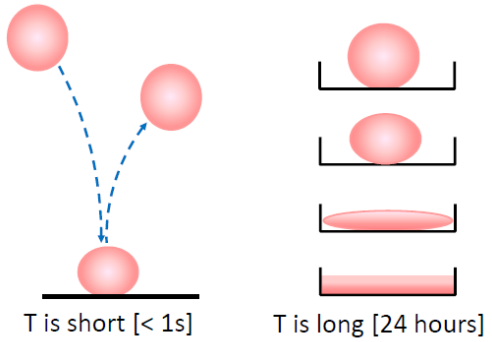



- **Cyklické namáhání**
- Fázový posun mezi napětím a deformací
- Ztráta za periodu ~ $\text{tg } \varphi = 1/\omega\tau$
- Velké ztráty pro pomalé frekvence

$$\sigma = \sigma_0 e^{i\omega t} \quad \varepsilon = \varepsilon_0 e^{i\omega t}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{\sigma_0}{|M|} e^{-i\varphi}, \text{kde } M = \frac{\omega\tau}{\sqrt{1+\omega^2\tau^2}} E; \ \text{tg } \varphi = \frac{1}{\omega\tau}$$

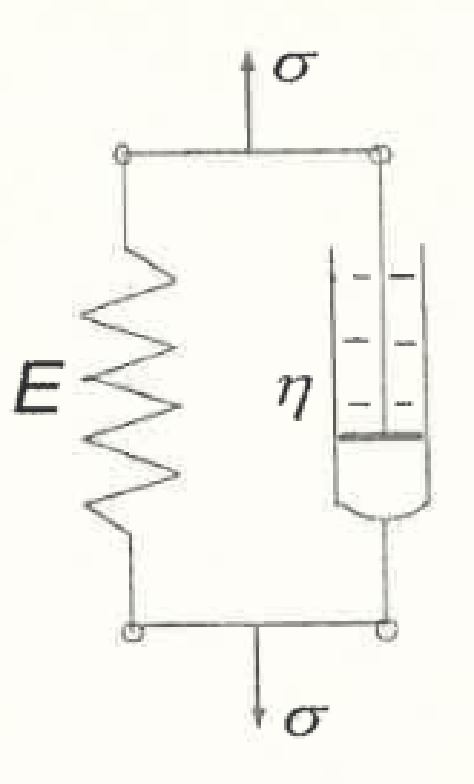
- Maxwellovo těleso dobře popisuje chování inteligentní plastelíny



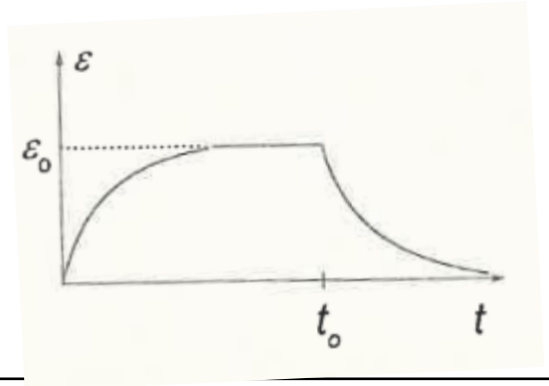
# Základní modely anelastických těles

- **Boltzmannovo těles**
- Paralelní zapojení elastického a viskózního elementu

- **Materiálová rovnice** $\sigma = \mathrm{E}\varepsilon + \eta\dot{\varepsilon} = \mathrm{E}(\varepsilon + \tau\dot{\varepsilon})$
- Vznik rovnovážné deformace




- **Časová závislost deformace**
- V čase $t_0$ zastavíme deformaci
- Napětí vymizí pozvolna
- $\varepsilon = \frac{\sigma_0}{\mathrm{E}}\left(1 - e^{-t/\tau}\right)$




- **Cyklické namáhání**
- Fázový posun mezi napětím a deformací
- Ztráta za periodu ~ $\mathrm{tg}\,\varphi = \omega\tau$
- Velké ztráty pro vysoké frekvence

$$\sigma = \sigma_0 e^{i\omega t} \quad \varepsilon = \varepsilon_0 e^{i\omega t}$$

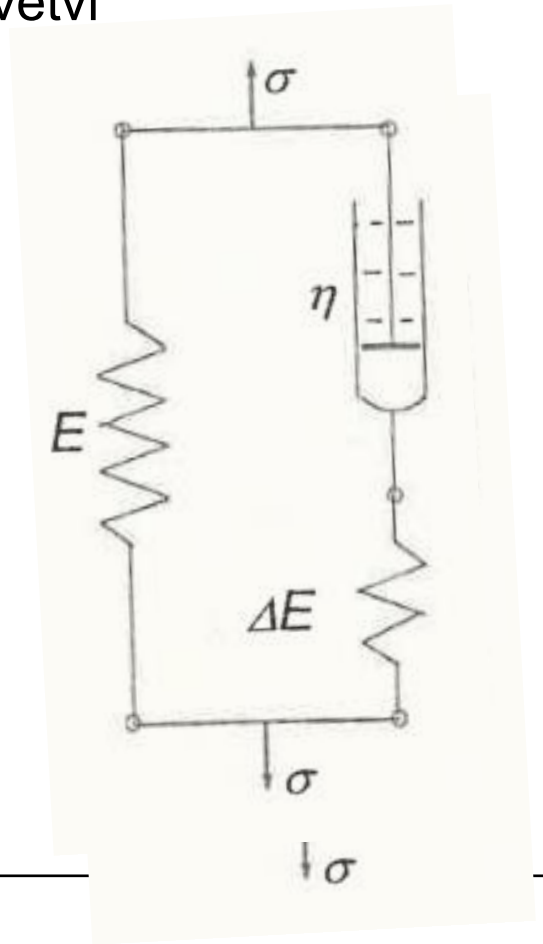
$$\varepsilon_0 = \frac{\sigma_0}{\mathrm{E}\sqrt{1+\omega^2\tau^2}} e^{-i\varphi}, \mathrm{tg}\,\varphi = \omega\tau$$

- Boltzmannovo těleso dobře popisuje chování paměťové pěny nebo běžeckých bot



# Základní modely anelastických těles

- **Standardní lineární těleso**
- Elastický element ve viskózní větvi



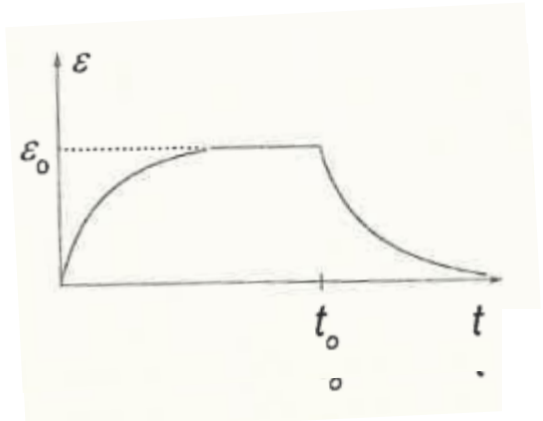

- **Materiálová rovnice**
- Dobře popisuje vnitřní tření

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\sigma} - \mathrm{E}\dot{\varepsilon}}{\mathrm{E}} + \frac{\sigma - \mathrm{E}\varepsilon}{\eta}$$

$$\tau_\varepsilon = \frac{\eta}{\mathrm{E}} + \frac{\eta}{\Delta\mathrm{E}};\ \tau_\sigma = \frac{\eta}{\Delta\mathrm{E}}$$

$$\sigma + \tau_\sigma\dot{\sigma} = \mathrm{E}(\varepsilon + \tau_\varepsilon\dot{\varepsilon})$$

- **Časová závislost deformace**
- V čase *0* zapneme napětí
- $\varepsilon = \frac{\sigma_0}{\mathrm{E}}\left(1 - e^{-t/\tau}\right)$, pro $\mathrm{t} = 0$: $\sigma = \sigma_0$
- Creep

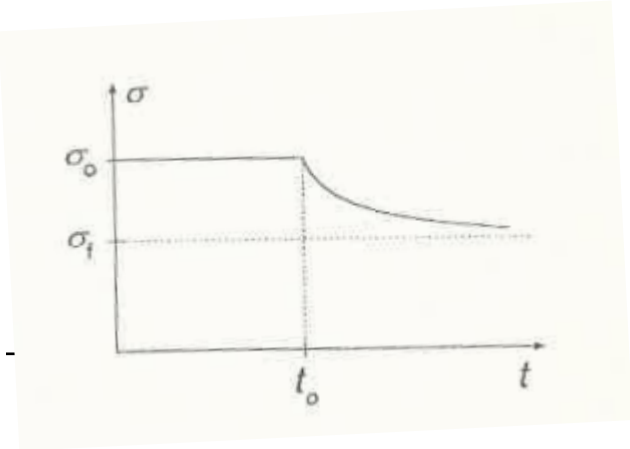



- SLT dobře popisuje chování gumových silentbloků, nebo korku



- **Napěťová relaxace**
- V čase $t_0$ vypneme napětí
- $\sigma = \sigma_0 + (\mathrm{E}\varepsilon_0 - \sigma_0)\left(1 - \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{t}-\mathrm{t}_0}{\tau_\sigma}}\right)$,

  pro $\mathrm{t} \geq \mathrm{t}_0$: $\dot{\varepsilon} = 0$
- K dosažení $\varepsilon_0$ je třeba větší napětí, než pro její udržení



# Měření vnitřního tlumení

**Rezonanční přístroje**

Elektromagnetické buzení – ohybový mód

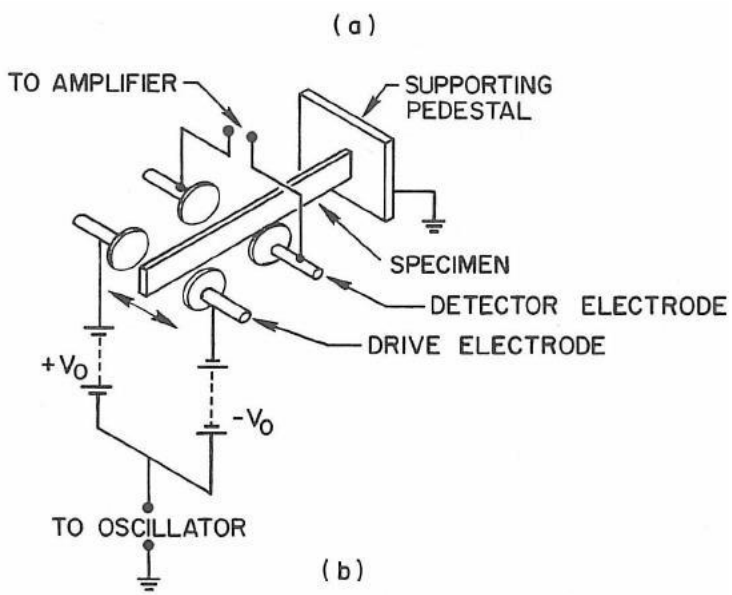
**Trám uchycený za jeden konec**

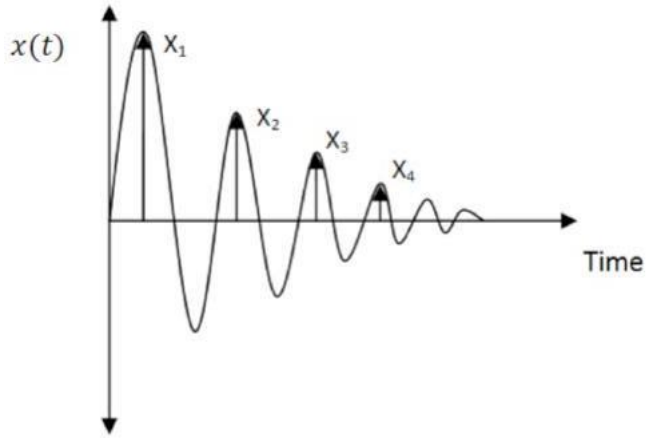
- Malé amplitudy deformace
- Výhody:

Široký teplotní rozsah

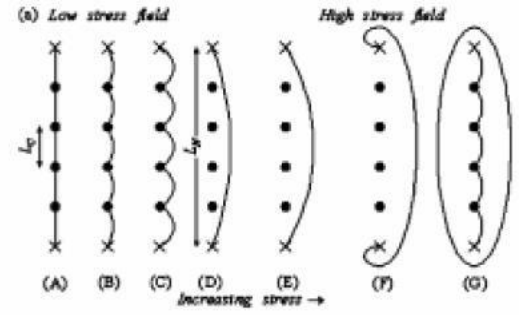
Malé ztráty zařízení

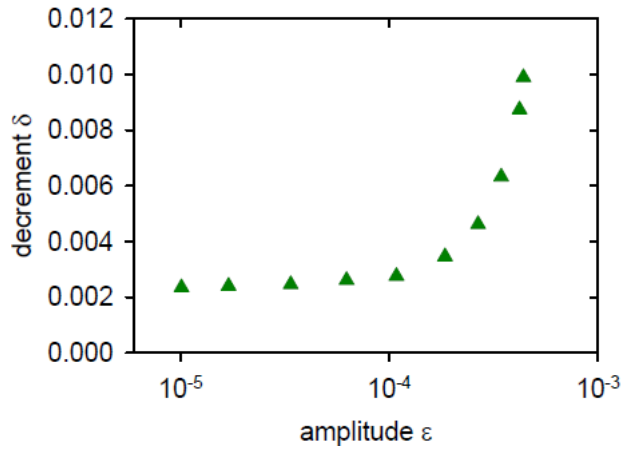
Vysoká citlivost




$Q^{-1} = 1/\pi \ln (x_1/x_2) = \delta/\pi$




$\delta$ – logaritmický decrement útlumu

# Měření vnitřního tlumení

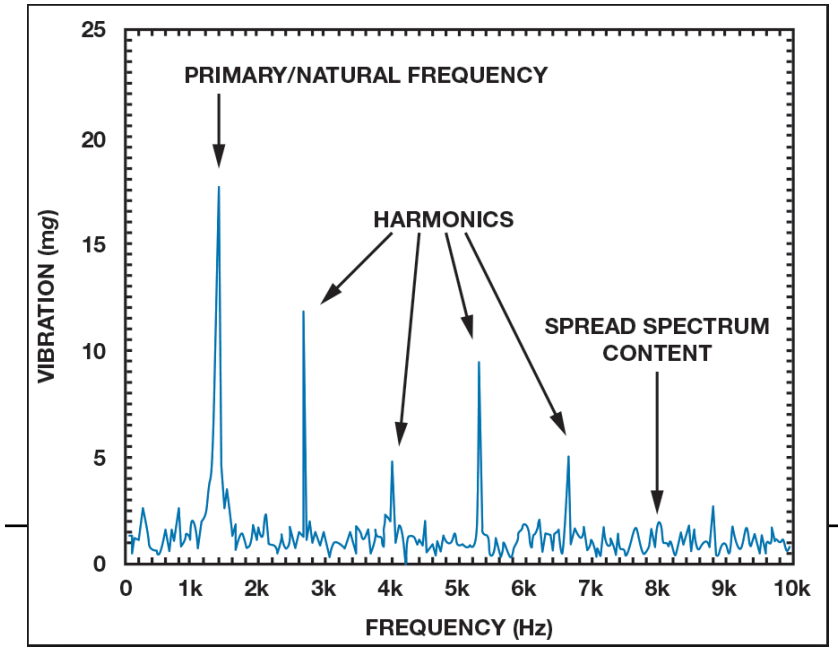
## Rezonanční přístroje

Mechanické buzení –

## Metoda impulsního buzení

Dva pracovní módy:

- Ohybový mód → E
- Torzní mód → G ($\mu$)




1. The **flexural vibration mode**: This vibration mode is induced to determine the Young's modulus of samples.

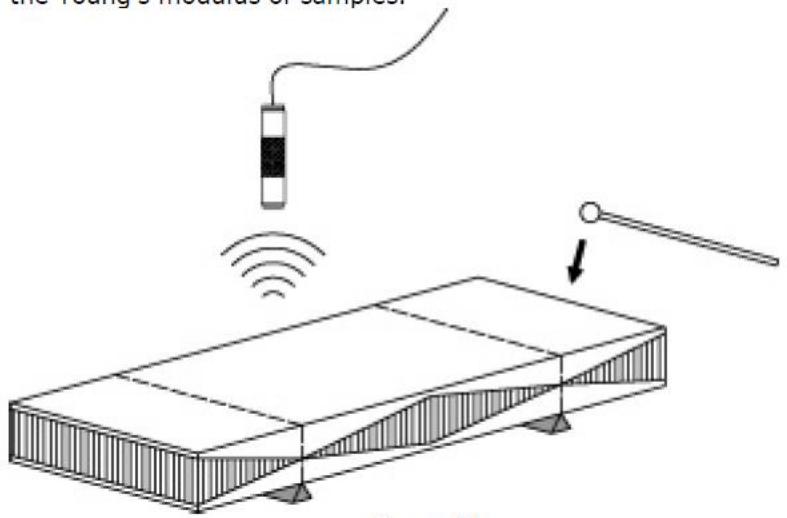


Figure 14

2. The **torsion vibration mode**: This vibration mode is induced to determine the Shear modulus of a sample.

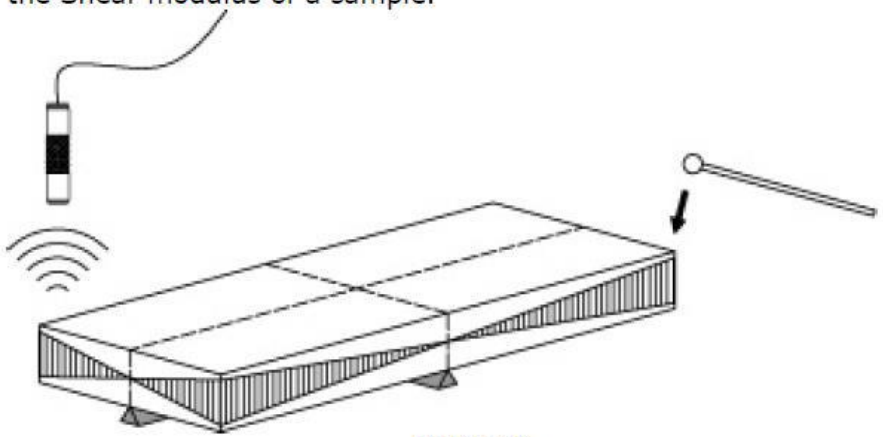
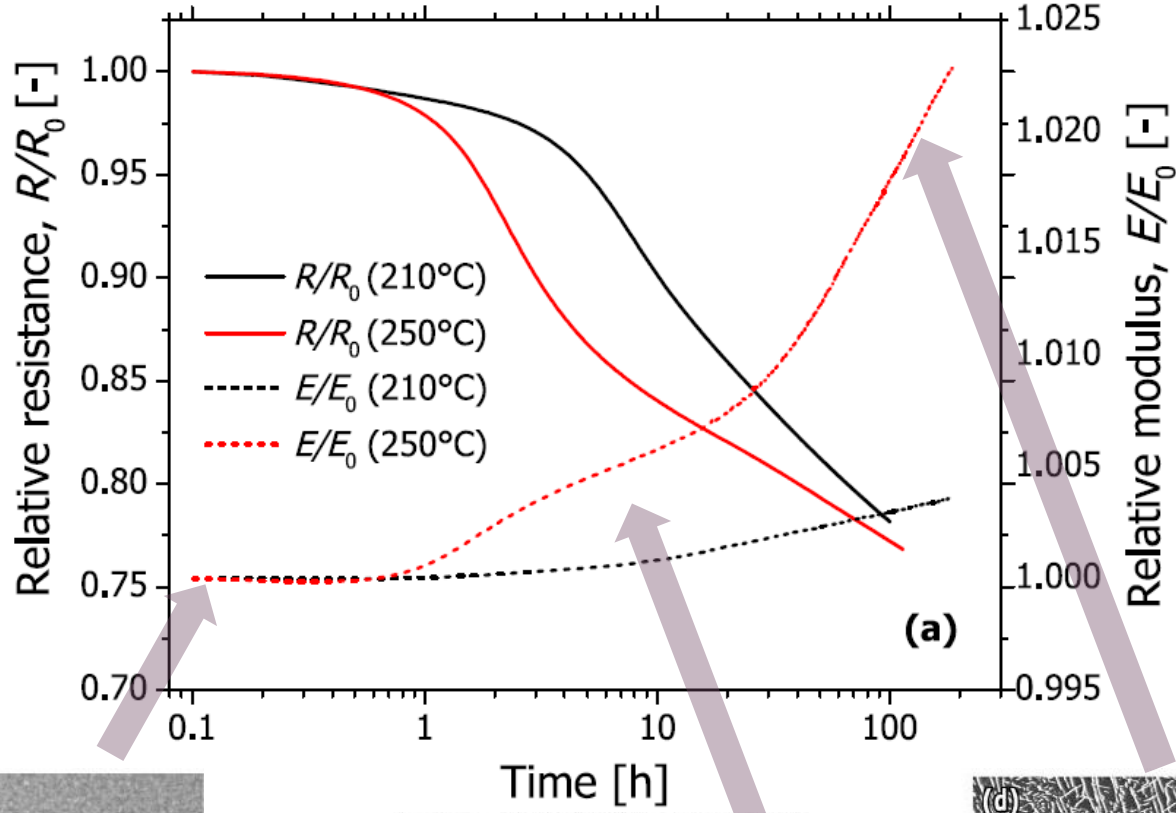


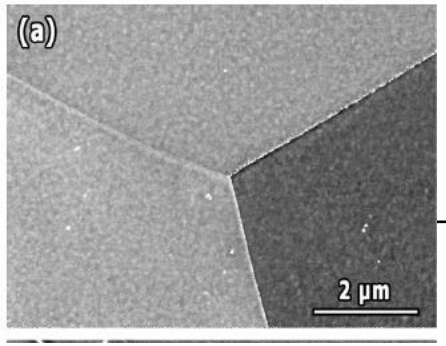
Figure 26

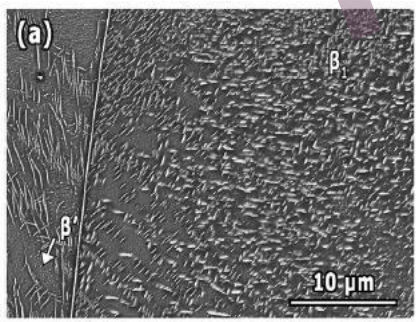
# Měření vnitřního tlumení

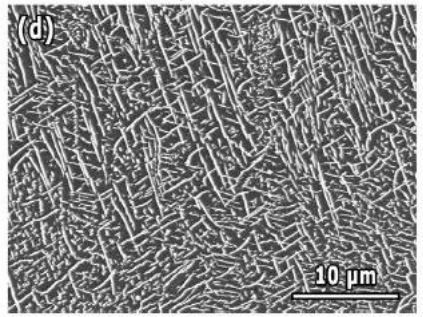
**Metoda impulsního buzení:** Ohybový mód → E

Změna Youngova modulu má mikrostrukturální pozadí – precipitace a změna morfologie fáze $Mg_{14}Nd_2Y$



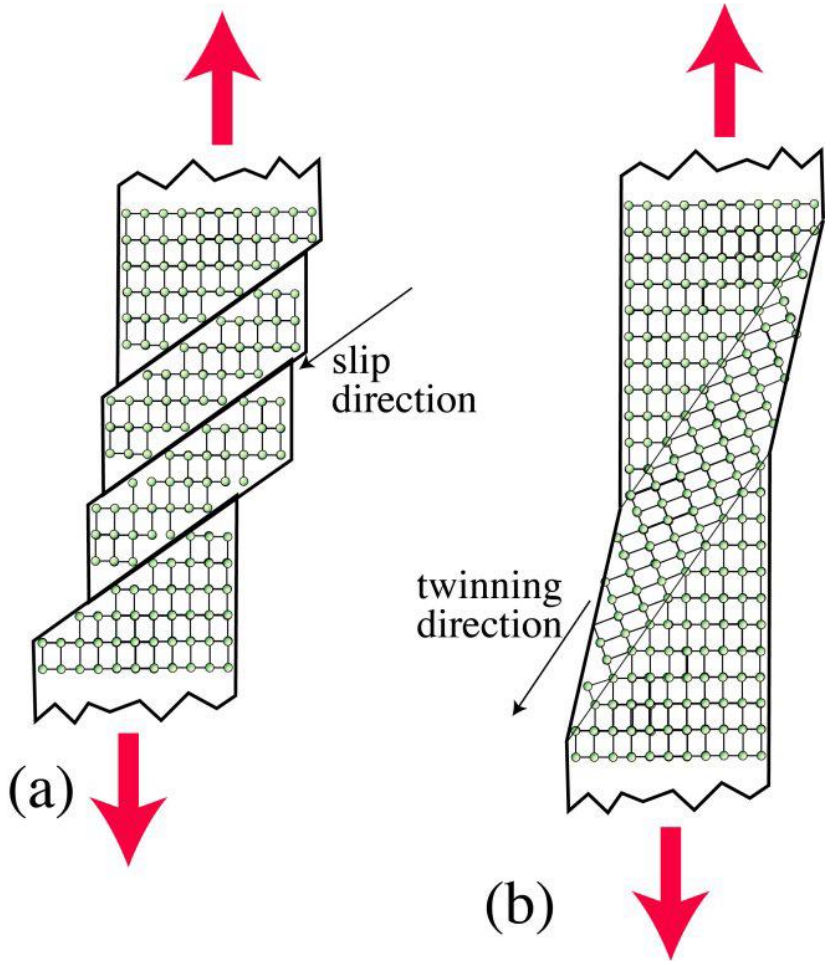



# Plastická deformace monokrystalů

## Plastická deformace

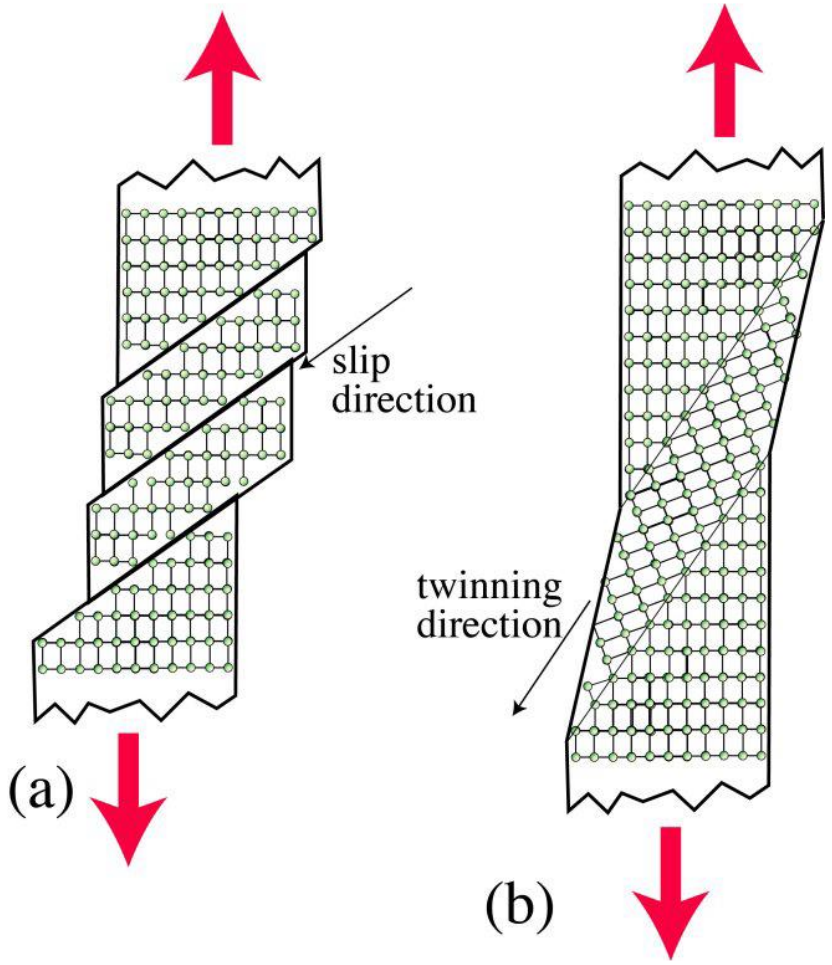
- Nevratná deformace po sejmutí působícího napětí
- Napětí při kterém začne plastická deformace se nazývá **mez skluzu** (yield stress)
- Plastická deformace se zrealizuje zejména pohybem dislokací a dvojčatěním
- Při deformaci se na povrchu vzorku objeví skluzové čáry (jejich hustota závisí na stupni deformace)
- Skluzové čáry tvoří stopy rovin, na kterých došlo k posuvu dvou částí krystalu

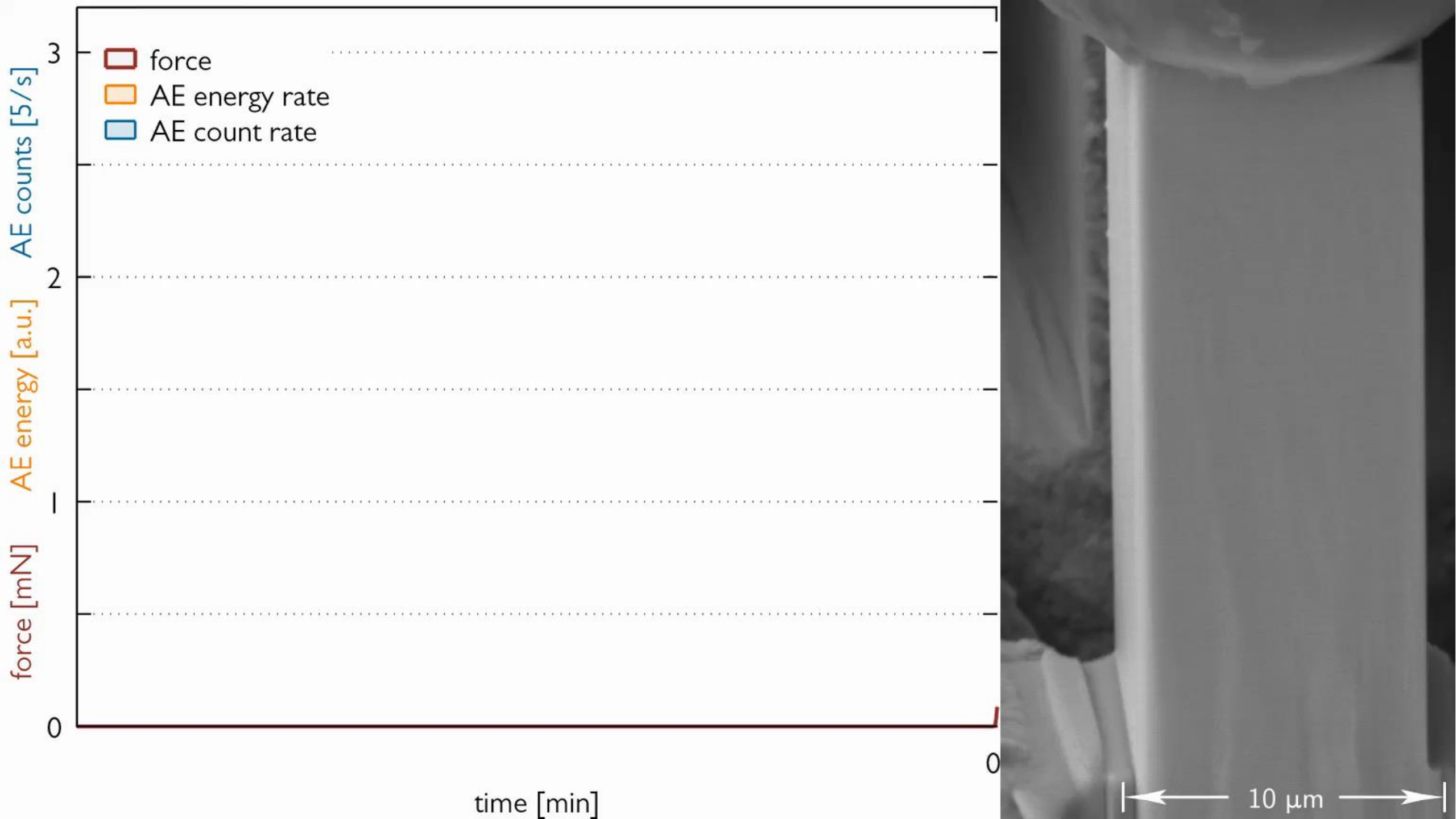


# Plastická deformace monokrystalů

## Plastická deformace

- Nevratná deformace po sejmutí působícího napětí
- Napětí při kterém začne plastická deformace se nazývá **mez skluzu** (yield stress)
- Plastická deformace se zrealizuje zejména pohybem dislokací a dvojčatěním
- Při deformaci se na povrchu vzorku objeví skluzové čáry (jejich hustota závisí na stupni deformace)
- Skluzové čáry tvoří stopy rovin, na kterých došlo k posuvu dvou částí krystalu




force
AE energy rate
AE count rate
AE counts [5/s]
AE energy [a.u.]
force [mN]
3
2
1
0
0
time [min]
10 µm

# Plastická deformace monokrystalů

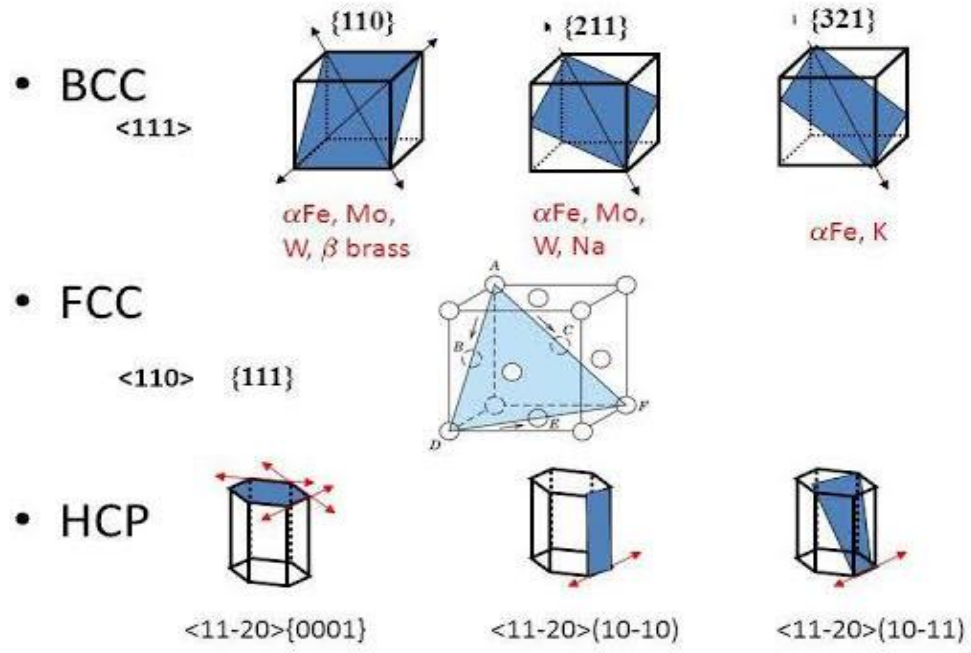
## Skluzový systém

- Rovina skluzu + směr skluzu

| struktura | příklady | směr | rovina |
|---|---|---|---|
| fcc | Cu, Ag, Au, Ni, Al, γ-Fe | ⟨110⟩ | {111} |
| bcc | α-Fe, Mo | ⟨111⟩ | {110} |
| | W, Nb, Ta | | {112} |
| hcp | Cd, Zn, Mg | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | (0001) |
| | Be | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | $\{10\bar{1}0\}$ |
| | Ti, Zr | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | $\{10\bar{1}0\}$ |

## Experimentální poznatky

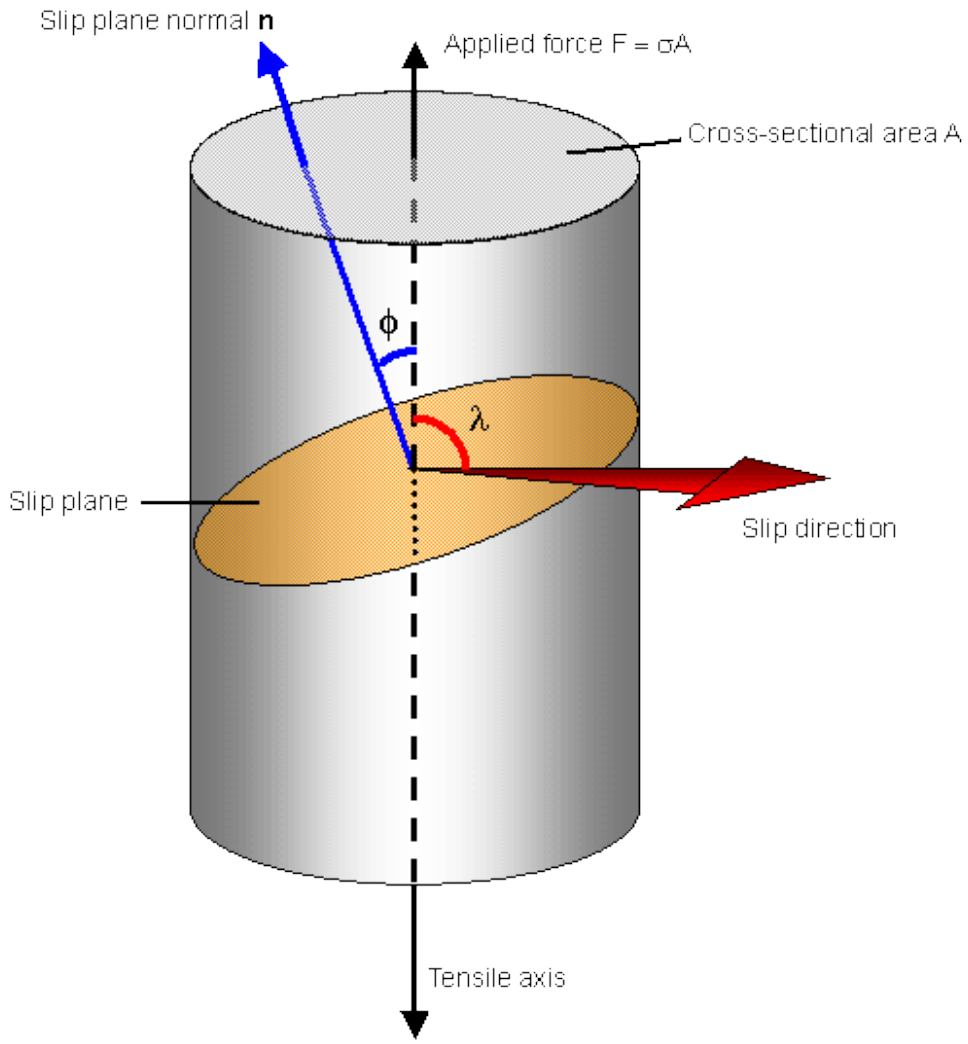
- Směr skluzu je totožný se směrem, který je nejhustěji obsazen atomy
- Skluzová rovina je rovina nejhustěji obsazená atomy
- Skluz nastává v tom skluzovém systému, kde smykové napětí má největší hodnotu



# Schmidův zákon a orientační faktor

**Schmidův zákon** popisuje přenos makroskopického tahového napětí do konkrétní skluzové roviny a směru

- Jednoosý tah, síla *F*
- $\sigma = F/A$ – vnější normálové napětí
- $\phi$ – úhel mezi normálou ke skluzové rovině a osou zatížení
- $\lambda$ – úhel mezi skluzovým směrem a osou zatížení
- Složka *F* ve směru skluzu: $F_s = F \cos \lambda$, tato síla působí na skluz
- Skutečná plocha skluzové roviny: $A_s = \frac{A}{\cos \phi}$




https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/slip/slip_geometry.php

# Schmidův zákon a orientační faktor

**Rozložené smykové napětí** (resolved shear stress)

$$\tau_R = \frac{F_s}{A_s}$$

Dosazením: $\tau_R = \frac{F}{A}\cos\lambda\cos\phi$ .

**Schmidův zákon**

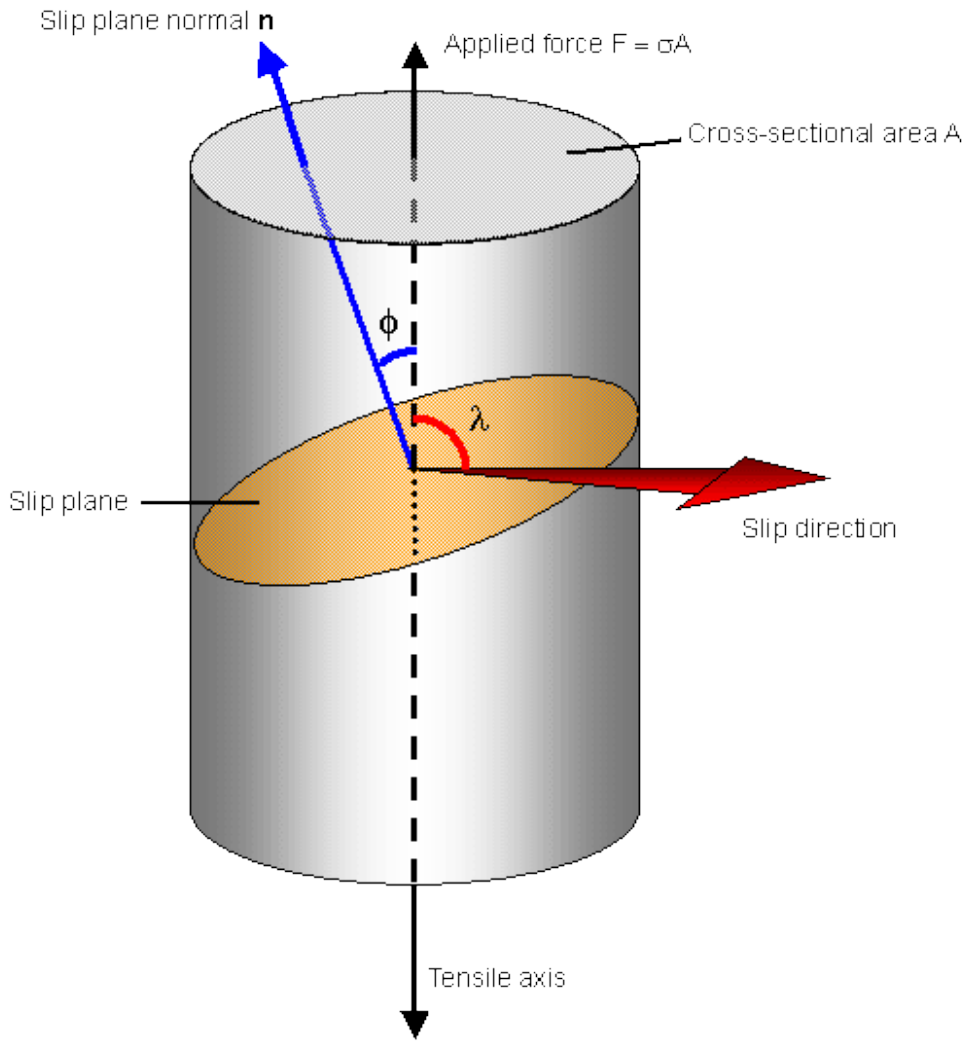
$$\tau_R = \sigma\cos\phi\cos\lambda$$

kde $m = \cos\phi\cos\lambda$ je **Schmidův faktor**

SchF udává, jak efektivně se vnější tahové napětí transformuje na smykové napětí v daném krystalovém systému.

Maximální hodnota: $m_{max} = 0.5$ pro $\phi = \lambda = 45°$

Minimální hodnota pro $\phi$ nebo $\lambda = 90°$




https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/slip/slip_geometry.php

# Schmidův zákon a orientační faktor

**Podmínka skluzu** – skluz v dané rovině a směru nastane, když příslušná složka vnějšího napětí dosáhne hodnoty **kritického rozloženého napětí** (critical resolved shear stress) $\tau_R = \tau_{CRSS}$.

ze Schmidova zákona dostaneme

$$\sigma_y = \frac{\tau_{CRSS}}{m}$$

| Metal | Purity | Slip System | Critical Resolved Shear Stress MPa |
|---|---|---|---|
| Cu* | 99.999 | {111} ⟨110⟩ | 0.63 |
| Ag† | 99.999 | {111} ⟨110⟩ | 0.37 |
| Au‡ | 99.99 | {111} ⟨110⟩ | 0.91 |
| Al§ | 99.996 | {111} ⟨110⟩ | 1.02 |

*Rosi, F. D., *Trans. AIME*, 200, 1009 (1954).
†daC. Andrade, E. N., and Henderson, C., *Trans. Roy. Soc.* (London), 244, 177 (1951).
‡Sachs, G., and Weerts, J., *Zeitschrift für Physik*, **62**, 473 (1930).
§Rosi, F. D., and Mathewson, C. W., *Trans. AIME*, **188**, 1159 (1950).

| Metal | Crystal structure | Purity, % | Slip plane | Slip direction | Critical shear stress, MPa |
|---|---|---|---|---|---|
| Zn | hcp | 99.999 | (0001) | $[11\bar{2}0]$ | 0.18 |
| Mg | hcp | 99.996 | (0001) | [1120] | 0.77 |
| Cd | hcp | 99.996 | (0001) | $[11\bar{2}0]$ | 0.58 |
| Ti | hcp | 99.99 | (1010) | $[11\bar{2}0]$ | 13.7 |
| | | 99.9 | (1010) | $[11\bar{2}0]$ | 90.1 |
| Ag | fcc | 99.99 | (111) | [110] | 0.48 |
| | | 99.97 | (111) | [110] | 0.73 |
| | | 99.93 | (111) | [110] | 1.3 |
| Cu | fcc | 99.999 | (111) | [110] | 0.65 |
| | | 99.98 | (111) | [110] | 0.94 |
| Ni | fcc | 99.8 | (111) | [110] | 5.7 |
| Fe | bcc | 99.96 | (110) | [111] | 27.5 |
| | | | (112) | | |
| | | | (123) | | |
| Mo | bcc | ... | (110) | [111] | 49.0 |

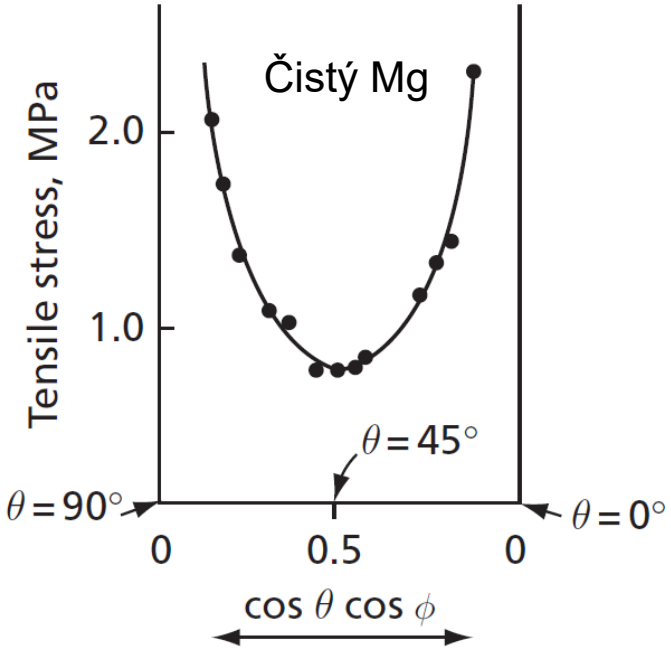
# Schmidův zákon a orientační faktor

**Podmínka skluzu** – skluz v dané rovině a směru nastane, když příslušná složka vnějšího napětí dosáhne hodnoty **kritického rozloženého napětí** (critical resolved shear stress) $\tau_R = \tau_{CRSS}$.

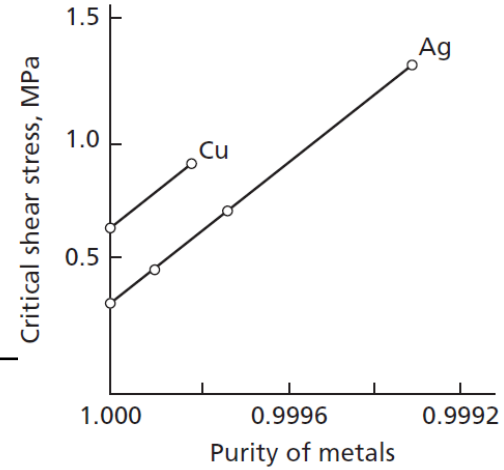
ze Schmidova zákona dostaneme

$$\sigma_y = \frac{\tau_{CRSS}}{m}$$

- Mez skluzu v daném monokrystalu silně závisí na orientaci
- V čistých materiálech CRSS závisí na čistotě (vyšší čistota, menší CRSS)




E. C. Burke et al., Trans. AIME, 194 (1952) 295




F. D. Rossi et al., Trans. AIME, 200 (1954) 1009

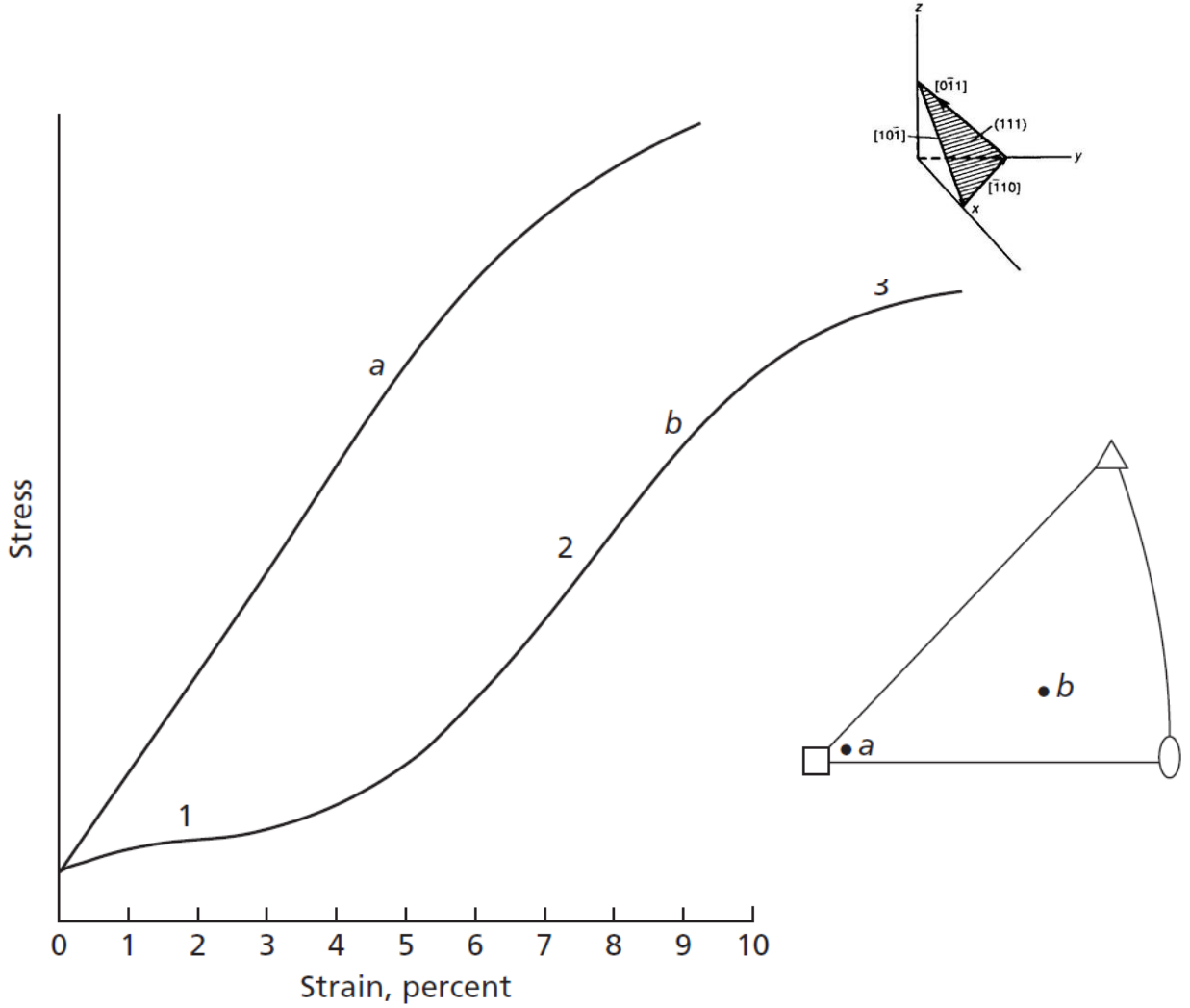
# Plastická deformace fcc monokrystalů

**FCC** – 4 oktaedrické roviny {111} x 3 těsně obsazené směry <110> = 12 skluzových systémů

Závislost deformačního chování na směru namáhání:

**Křivka a** – deformace blízko směru <100>

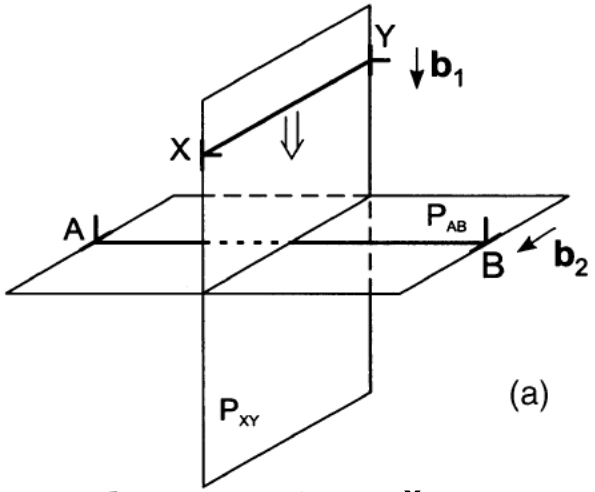
- Několik skluzových systémů mají stejný CRSS → současná aktivace dislokací v několika systémech
- Dochází k tzv. deformačnímu zpevnění v důsledku interakce dislokací



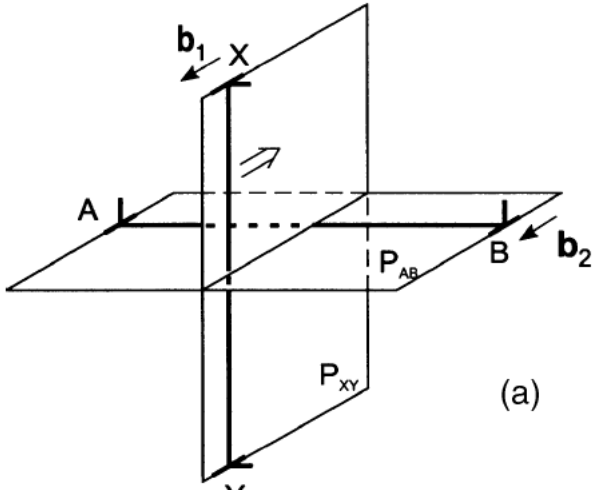
# Interakce dislokací

**Interakce dislokací** – závisí na typu a orientaci interagujících dislokací

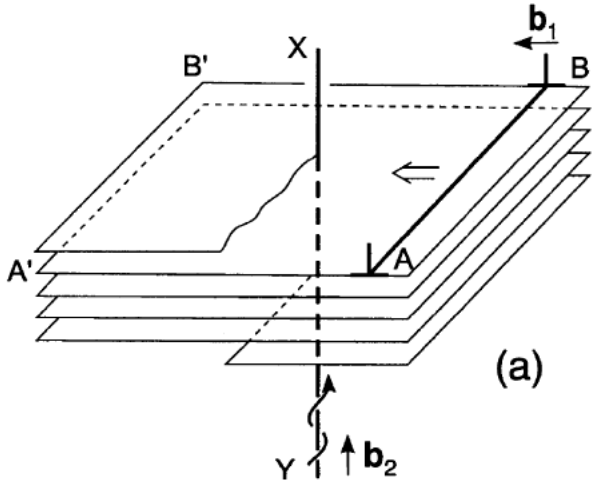
Mohou vznikat stupně (jog $\parallel \vec{n}$) a ohyby (kink $\perp \vec{n}$)



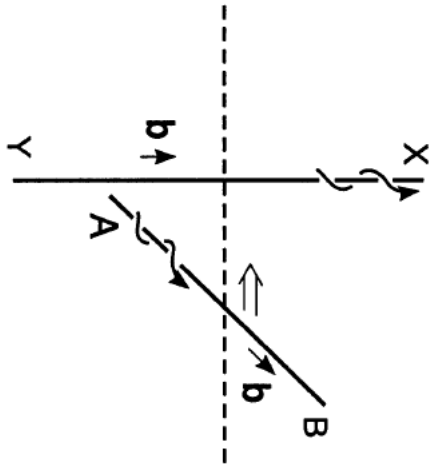

$b_{e1} \perp b_{e2} \rightarrow$ stupeň



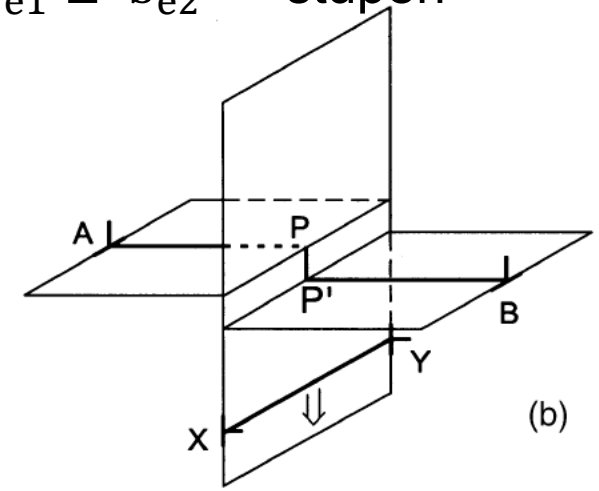

$b_{e1} \parallel b_{e2} \rightarrow$ ohyb

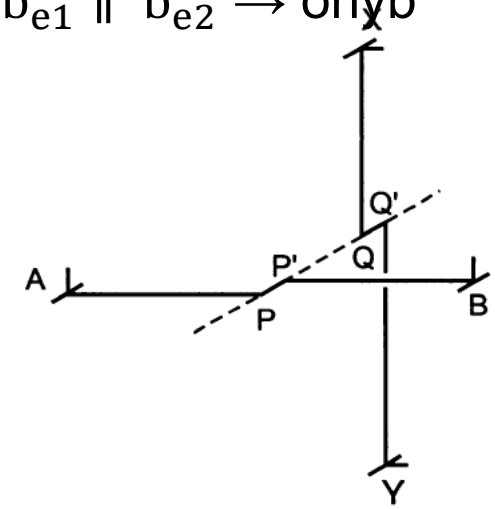


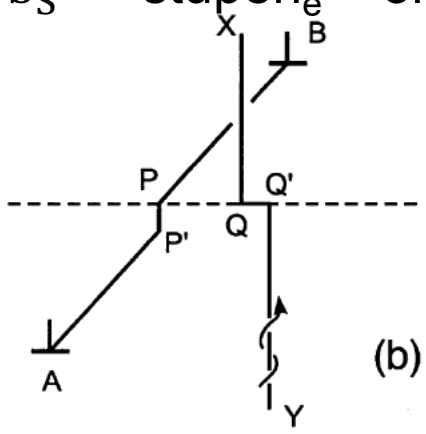

$b_e + b_S \rightarrow$ stupeň$_e$ + ohyb$_s$

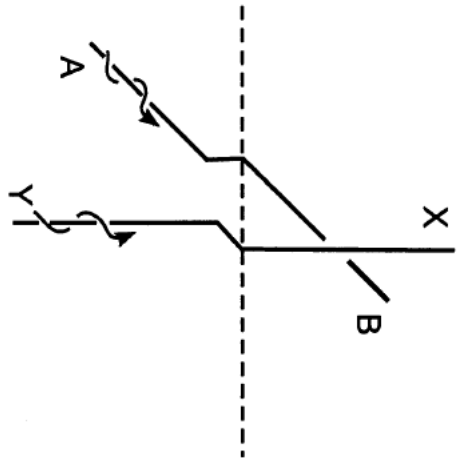



$b_{S1} + b_{S2} \rightarrow$ 2 x stupeň$_e$



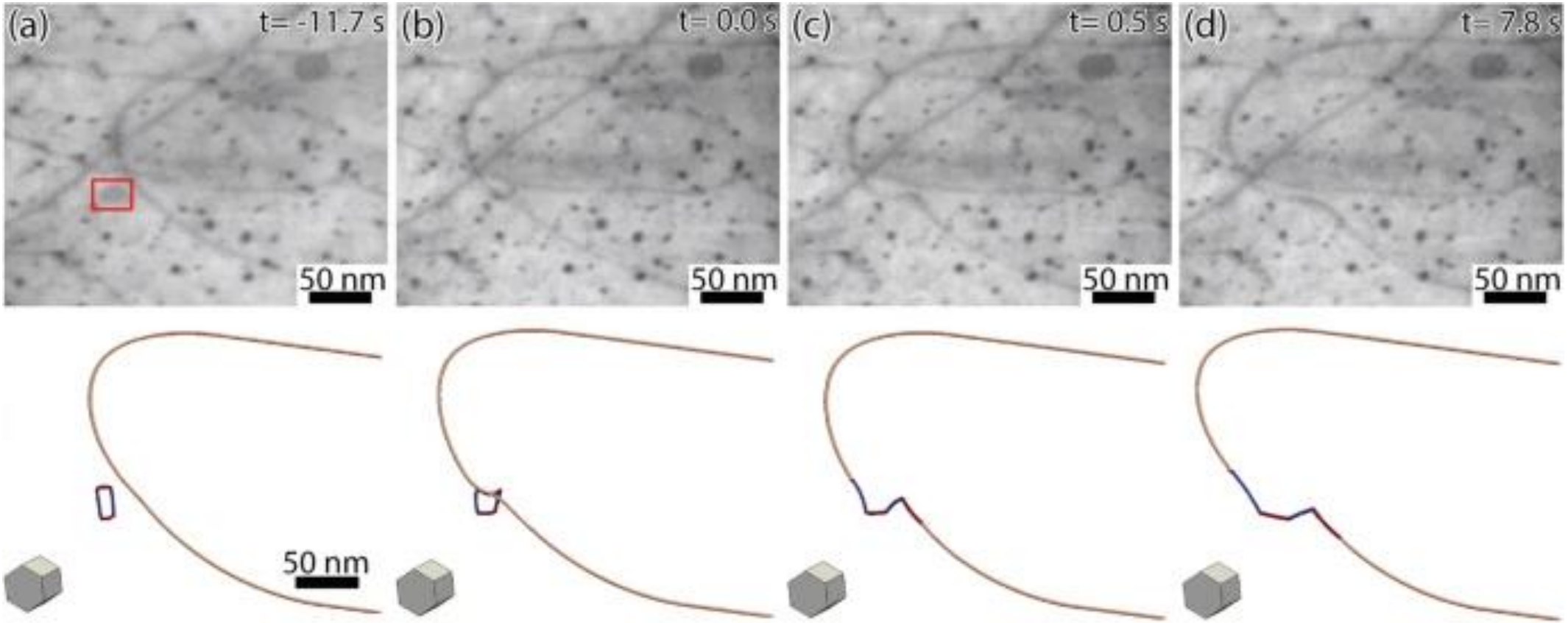




D. Hull and D. Bacon. Introduction to Dislocations, 2001

# Interakce dislokací

**Interakce dislokací** – závisí na typu a orientaci interagujících dislokací

Mohou vznikat stupně (jog $\parallel \vec{n}$) a ohyby (kink $\perp \vec{n}$)




Drouet et al. Scr Mater 2016

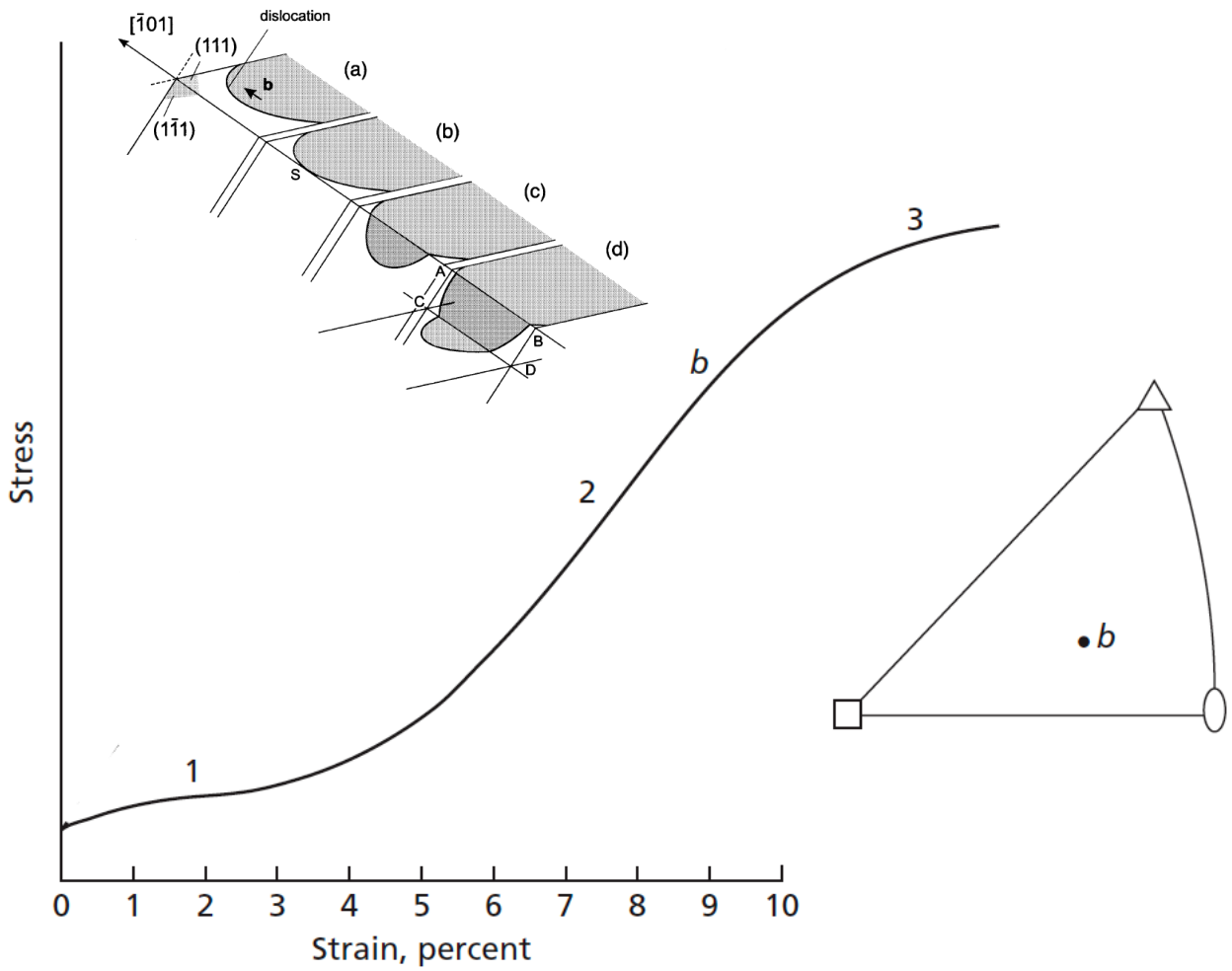
# Plastická deformace fcc monokrystalů

**FCC** – 4 oktaedrické roviny {111} x 3 těsně obsazené směry <110> = 12 skluzových systémů

Závislost deformačního chování na směru namáhání:

**Křivka b** – deformace blízko směru <123>

- Preference jediného skluzového systému $(111)[\bar{1}01]$
- Zóna 1 – snadný skluz po jedné skluzové rovině
- Zóna 2 – mnohonásobný skluz ve vícero systémech → interakce dislokací a heterogenní rozložení dislokací
- Zóna 3 – dynamické zotavení, únik dislokací z bariér pomocí příčného skluzu

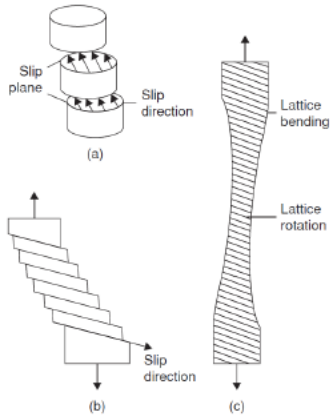


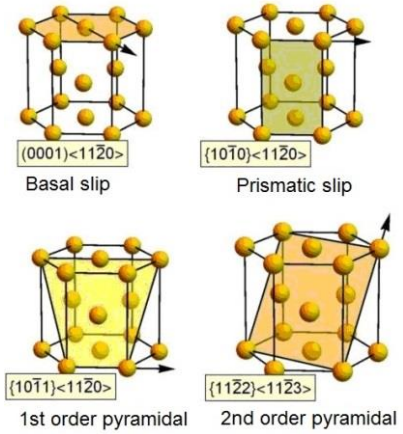
# Plastická deformace hcp monokrystalů

**HCP** – snadný skluz v bazální rovině **(0001) pro Zn, Mg a Cd**, kde poměr krystalografických os $c/a \gtrsim \sqrt{8/3}$

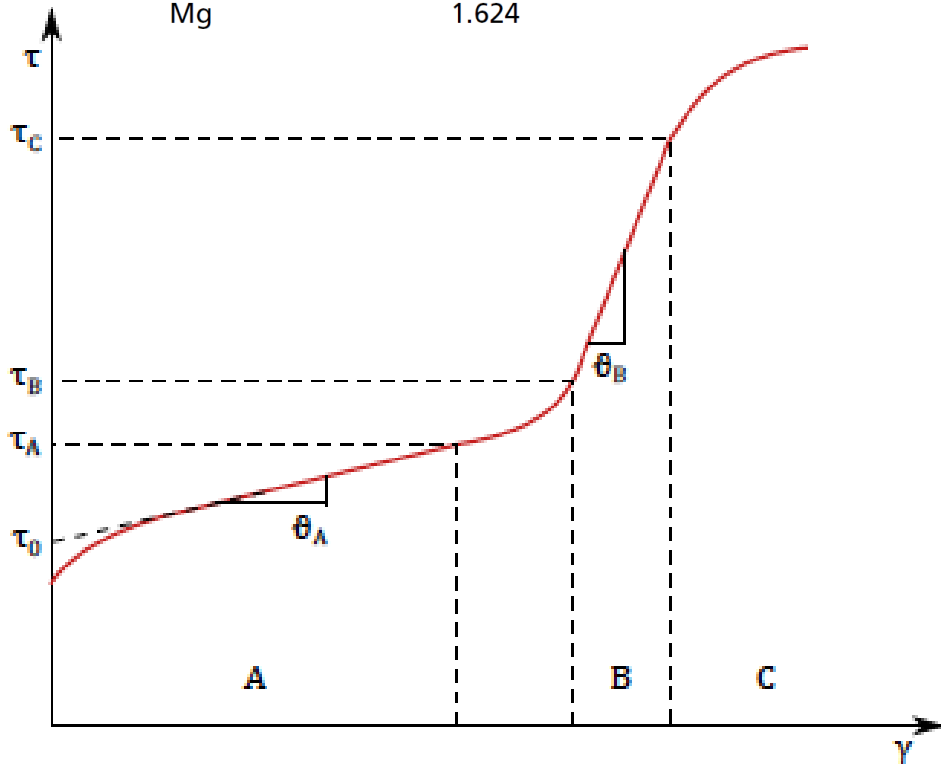
- Zóna A – snadný skluz po bazální rovině
- Zóna B – natáčení krystalu a aktivace nebazálních systémů → interakce dislokací
- Zóna C – dynamické zotavení, únik dislokací z bariér pomocí příčného skluzu

| Metal | c/a |
|---|---|
| Cd | 1.886 |
| Zn | 1.856 |
| Mg | 1.624 |



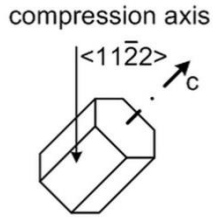

| Metal | Critical Resolved Shear Stress MPa |
|---|---|
| Zinc* | 0.18 |
| Cadmium† | 0.57 |
| Magnesium‡ | 0.43 |

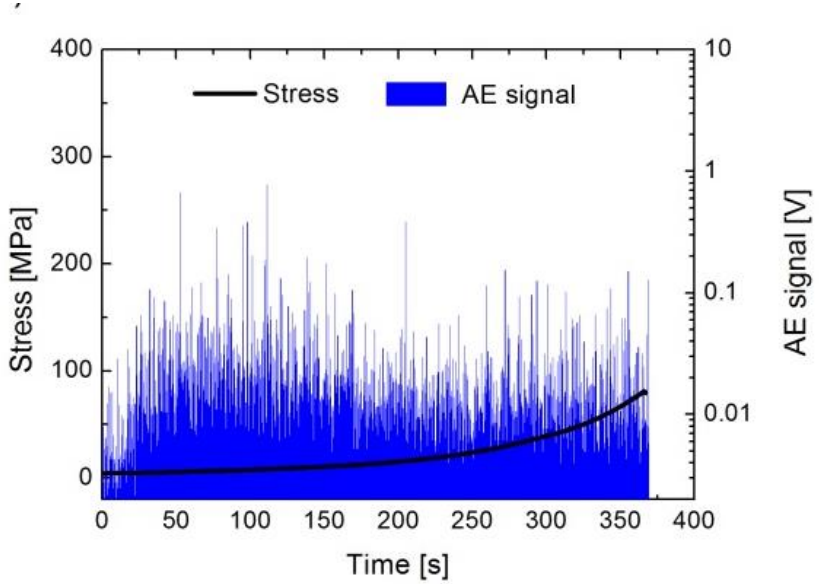


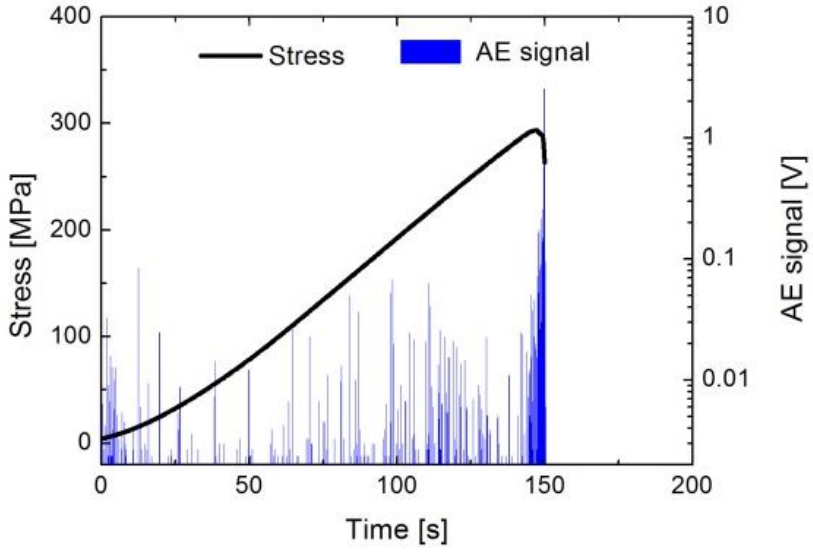

R. E. Smallman and A. H. W. Ngan. Physical Metallurgy and Advanced Materials. Elsevier, 2007.

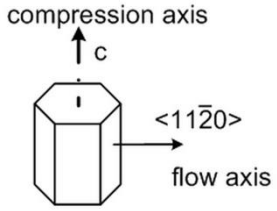
# Plastická deformace hcp monokrystalů

**HCP** – závislost mechanických vlastností na orientaci **pro Mg**



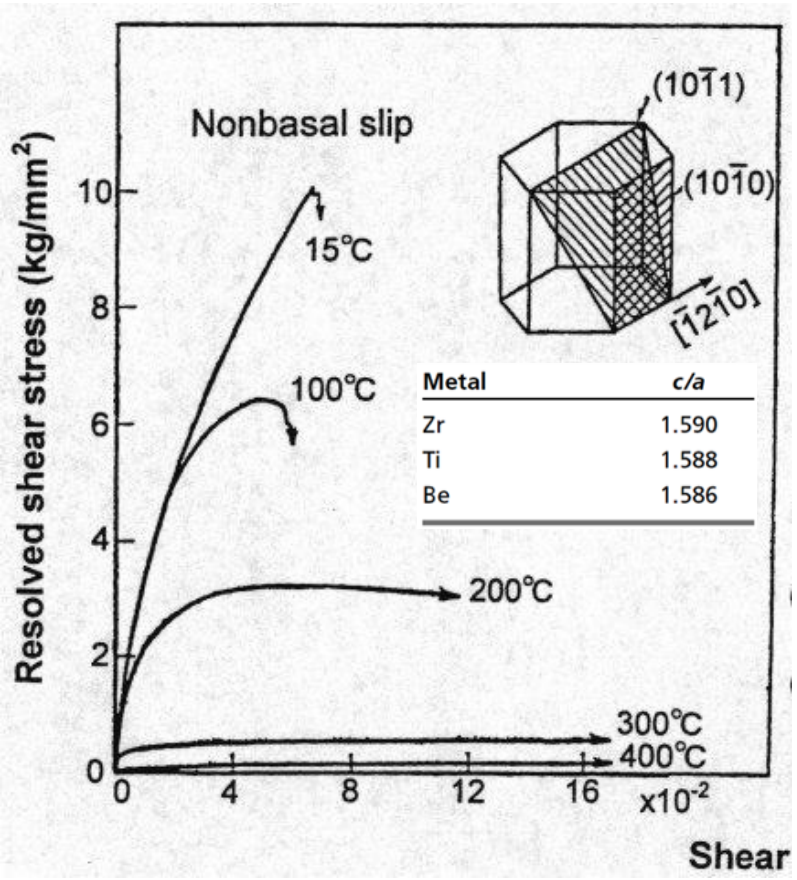




D. Drozdenko et al., Mater. Sci. Eng. A, 2016

# Plastická deformace hcp monokrystalů

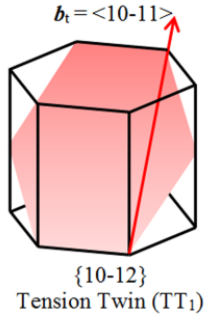
**HCP** – pro **Ti, Be, Zr** ($c/a < \sqrt{8/3}$) **aktivace prismatického nebo pyramidálního systému** je výhodnější než bazální (např. Ti: $CRSS_{basal}$ ~ 110 MPa vs $CRSS_{prism}$ ~ 50 MPa)

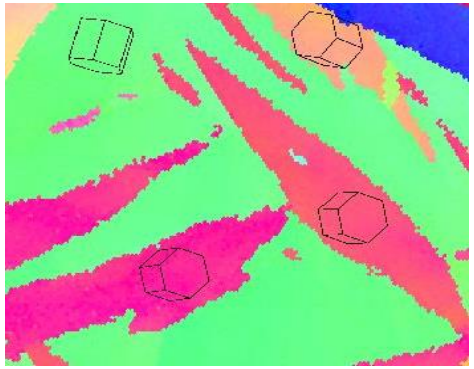


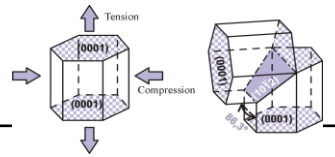

**Dvojčatění** – polární mechanismus:

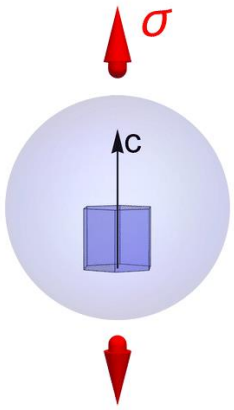
pro tah osa $c \parallel \sigma$, pro tlak $c \perp \sigma$

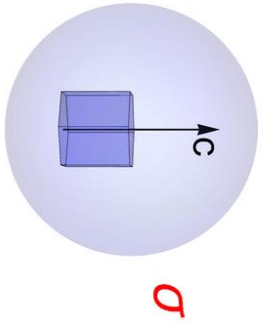
- Charakteristické pro Mg, Ti, Zr při pokojové teplotě





# Plastická deformace hcp monokrystalů

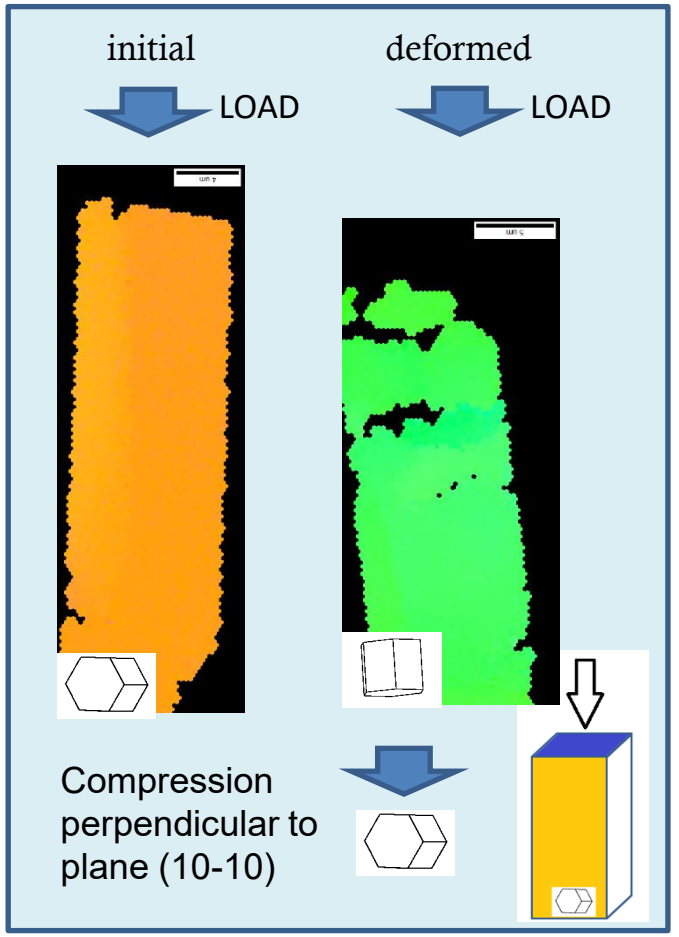
**HCP** – pro **Ti, Be, Zr** ($c/a < \sqrt{8/3}$) **aktivace prismatického nebo pyramidálního systému** je výhodnější než bazální (např. Ti: $CRSS_{basal}$ ~ 110 MPa vs $CRSS_{prism}$ ~ 50 MPa)

**Dvojčatění** – polární mechanismus:

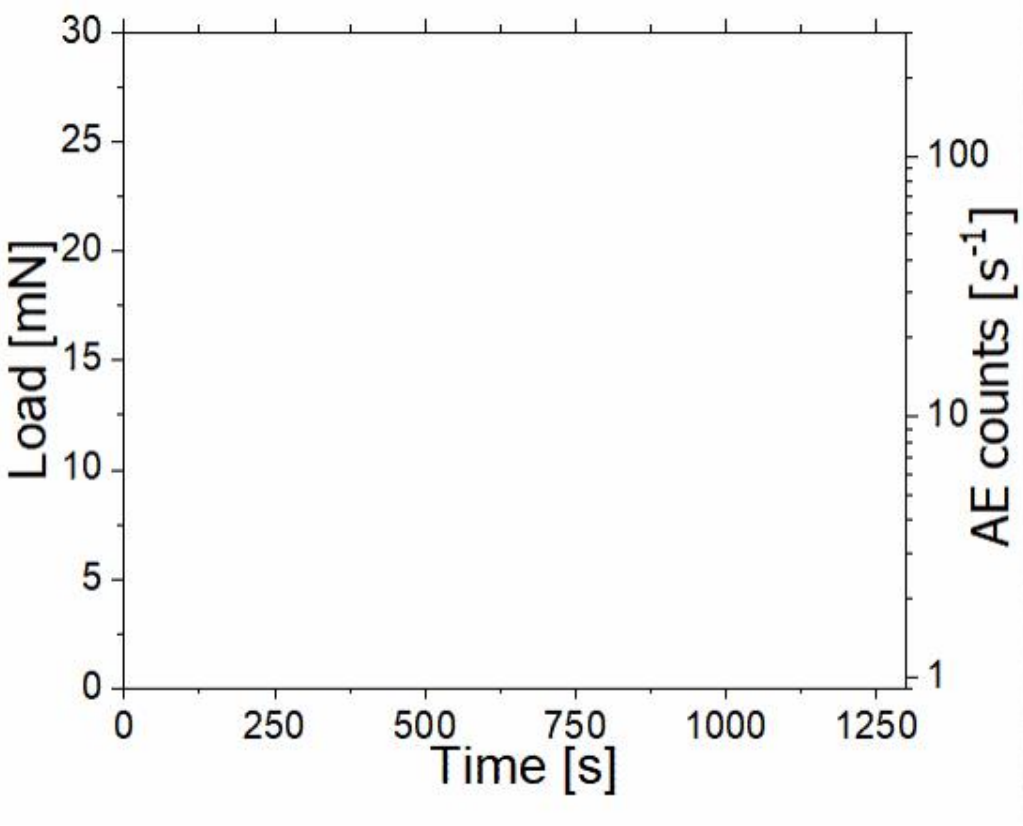
pro tah osa $c \parallel \sigma$, pro tlak $c \perp \sigma$

- Charakteristické pro Mg, Ti, Zr při pokojové teplotě

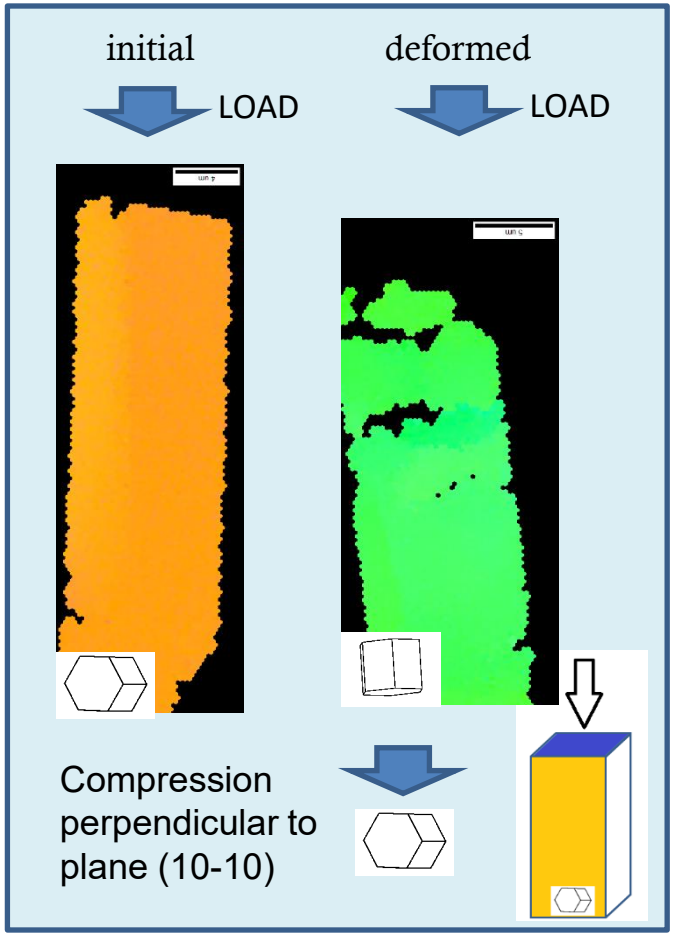




# Dvojčatění v monokrystalu Mg

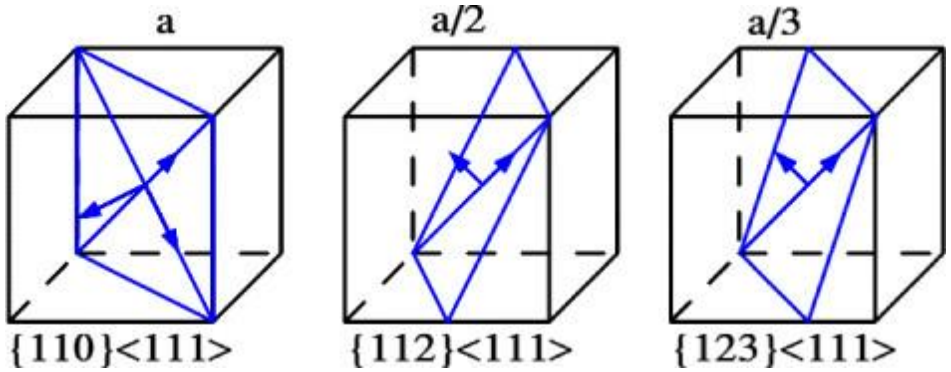




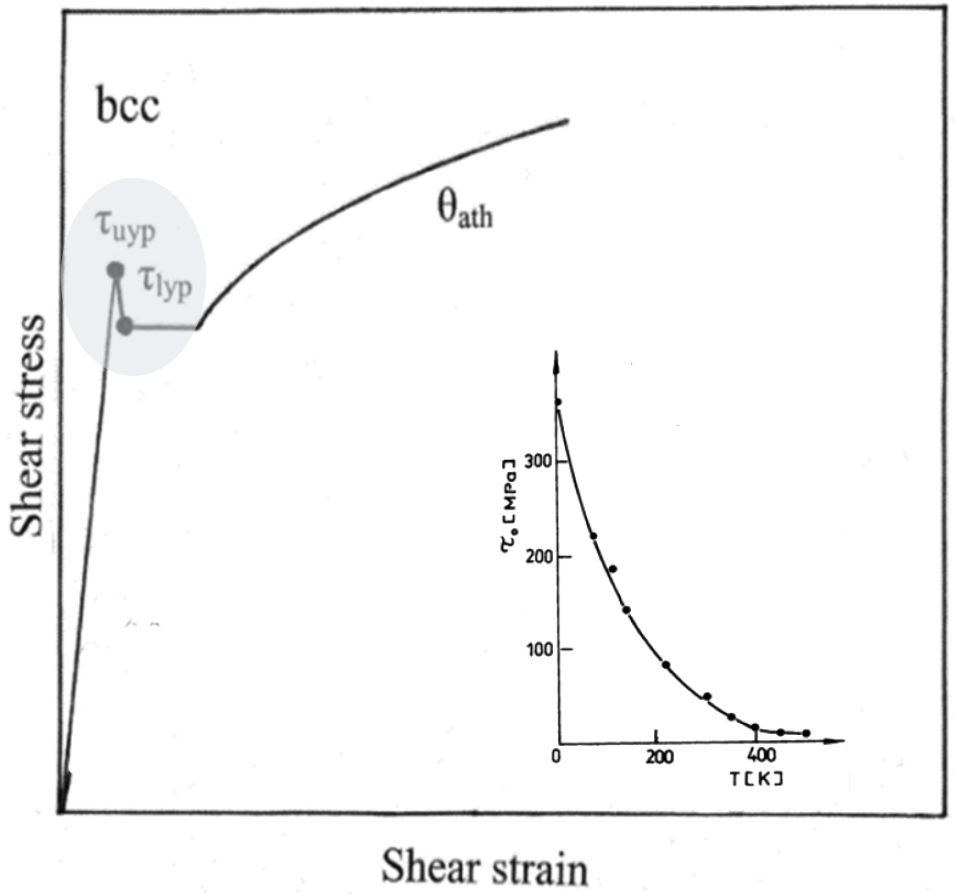



# Plastická deformace bcc monokrystalů

**BCC** – mnoho ekvivalentních skluzových systémů (až 48)




- Mnohonásobný skluz již od začátku deformace
- V případě příměsí se může objevit tzv. ostrá mez skluzu
- Silná teplotní závislost kritického skluzového napětí



# Taylorův vztah

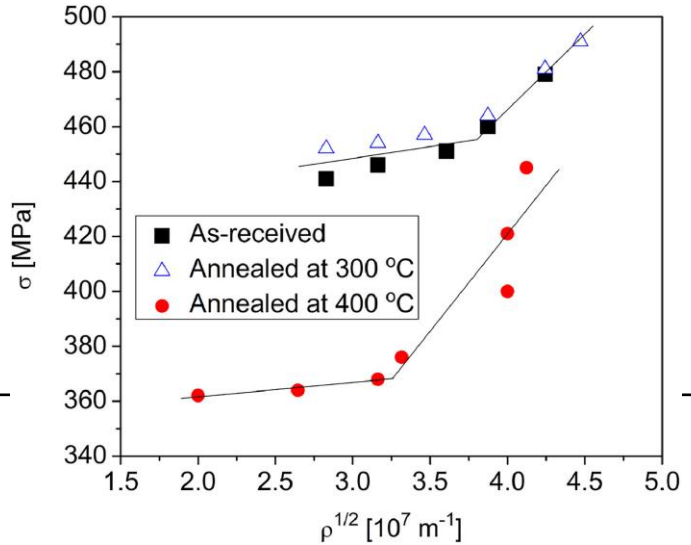
Předpoklad – rovnoměrně rozmístěné dislokace v paralelních rovinách

- Průměrná vzdálenost mezi dislokacemi $\mathrm{L} \propto \rho^{-1/2}$
- Napěťové pole dislokací: $\tau \approx \frac{\mathrm{Gb}}{\mathrm{r}}$, kde *G* je modul ve střihu, *r* je vzdálenost od dislokace.
- Jelikož dislokace při pohybu musí překonat napěťové pole ostatních dislokací, platí

$$\tau = \tau_0 + \alpha \mathrm{Gb}\sqrt{\rho}$$

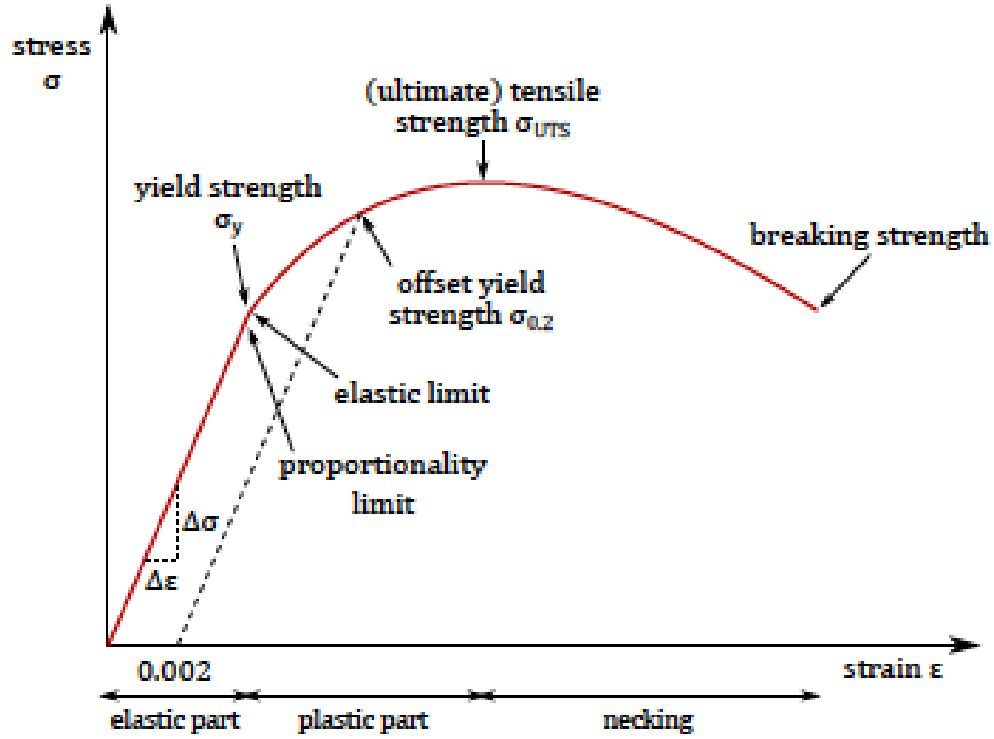
Kde $\alpha$ je empirický geometrický faktor (~0.2-1.0), $\tau_0$ – vnitřní odpor mřížky proti pohybu jediné dislokace v krystalu

Přes jednoduchost modelu, jeho platnost byla prokázána v nespočetně mnoho případech

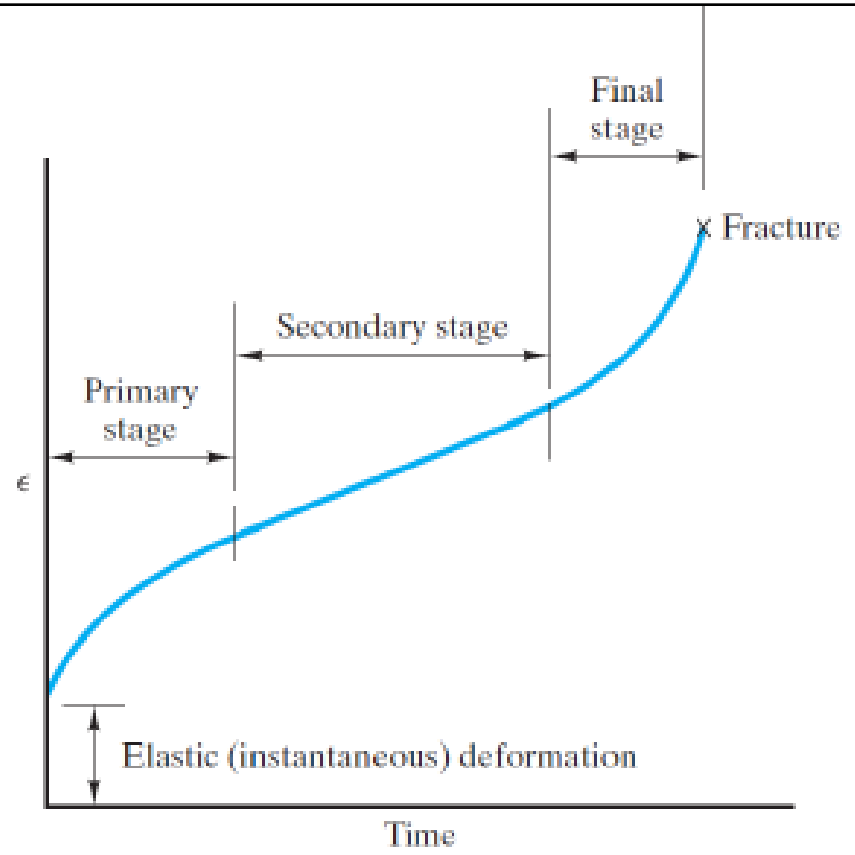



J. Gubicza et al., JMA,, 2024

# Deformační zkoušky



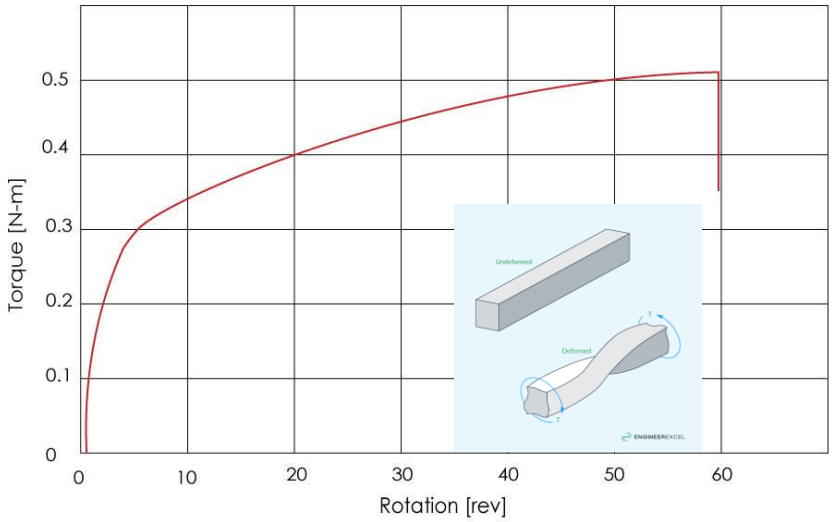

Jednoosý tah/tlak – $\dot{\varepsilon} = \text{konst.}$



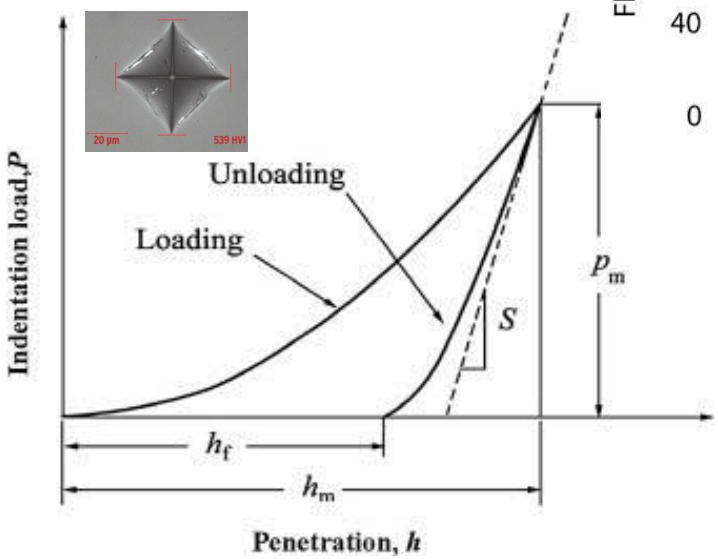

Creep (plastické tečení) – $\sigma = \text{konst.}$

Měření v závislosti na teplotě, rychlosti deformace, zatížení atd.

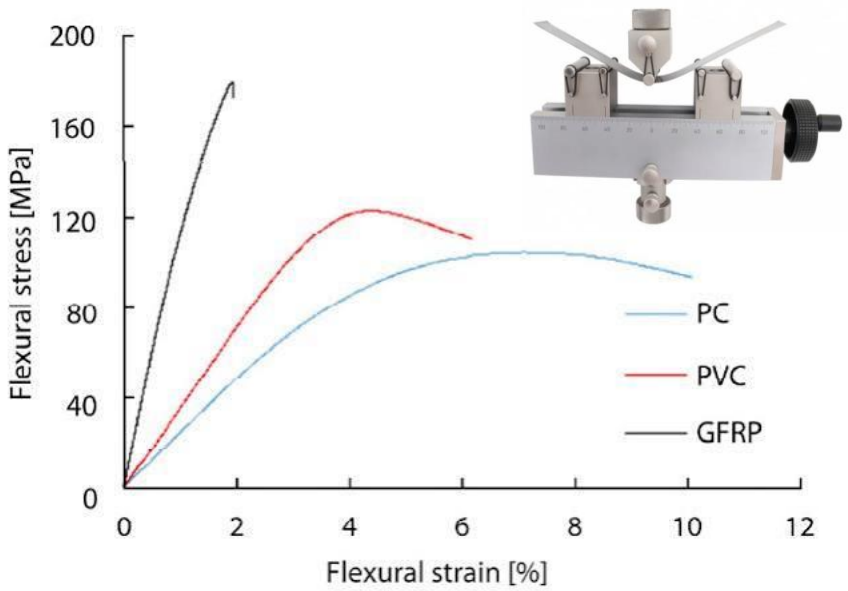
# Deformační zkoušky




Zkouška krutem – $\dot{\theta} = \text{konst.}$




Indentace – $F = \text{konst.}$

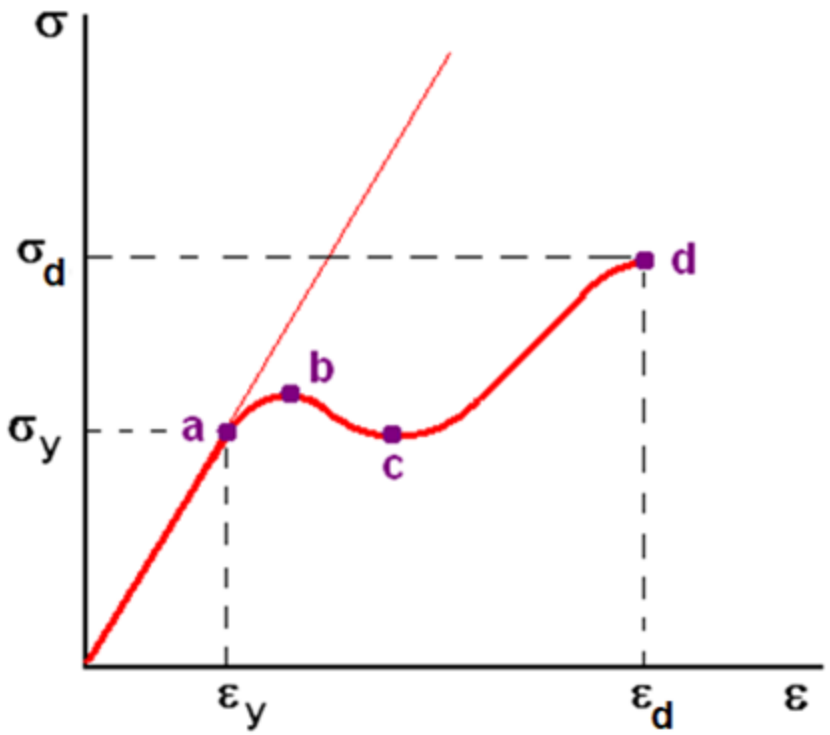



Tří/čtyřbodový ohyb
$v_{\text{def}} = \text{konst.}$

Měření v závislosti na teplotě, rychlosti deformace, zatížení atd.

# Jednoosé namáhání

Charakteristické body deformační křivky jednoosého namáhání

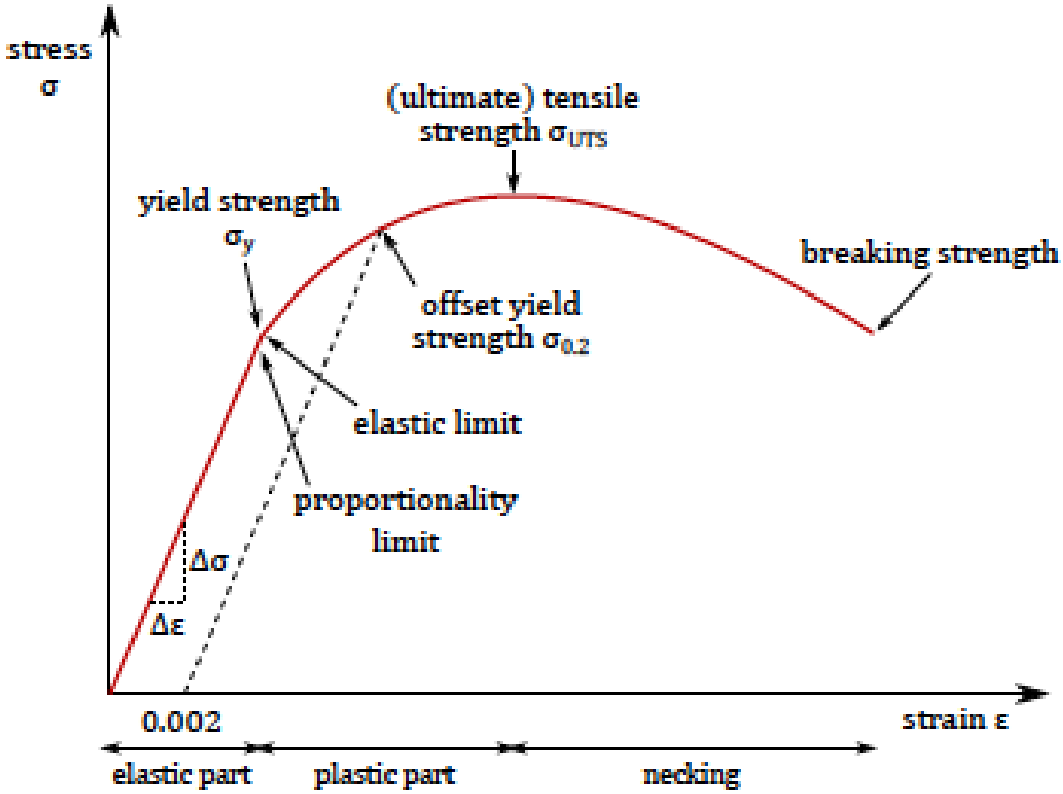



a mez úměrnosti
b horní mez kluzu
c dolní mez kluzu
d bod přetržení

$\sigma_d$ mez pevnosti

$\varepsilon_d$ tažnost

$(\sigma_y, \varepsilon_y)$ mez kluzu




Smluvní napětí: $\sigma = \mathrm{F}/\mathrm{A}_0$

Smluvní deformace: $\varepsilon = (\mathrm{l} - \mathrm{l}_0)/\mathrm{l}_0 = \Delta\mathrm{l}/\mathrm{l}_0$

# Jednoosé namáhání

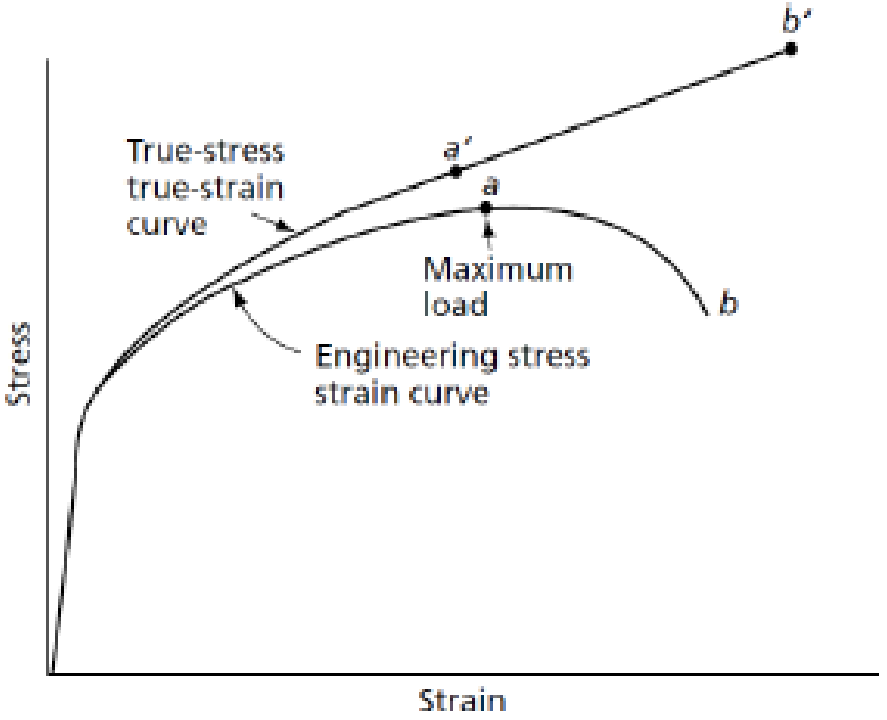
Výpočet skutečného napětí a skutečné deformace

**Skutečné napětí** – aktuální síla/aktuální plocha průřezu $\sigma_{\mathrm{true}} = \frac{\mathrm{F}}{\mathrm{A}}$.

- Za předpokladu konstantního obejmu $A_0 l_0 = Al$ platí:

$$\sigma_{\mathrm{true}} = \frac{\mathrm{F}}{\mathrm{A}} = \frac{\mathrm{Fl}}{\mathrm{A_0 l_0}} = \frac{\mathrm{F}}{\mathrm{A_0}} \frac{(\mathrm{l_0} + \Delta \mathrm{l})}{\mathrm{l_0}} = \sigma(1 + \varepsilon)$$

Kde $l_0$ je počáteční délka vzorku, Δl je nárůst délky, σ a ε je smluvní napětí a deformace




**Skutečná deformace**

$$\varepsilon_{\mathrm{true}} = \int_{\mathrm{l_0}}^{\mathrm{l}} \frac{\mathrm{dl}}{\mathrm{l}} = \ln \frac{\mathrm{l}}{\mathrm{l_0}} = \ln(1 + \varepsilon)$$

Platí dokud deformace je uniformní (do zaškrcení)

---

Když dojde ke zaškrcení musí se určit aktuální průměr vzorku: $\varepsilon_{\mathrm{true}} = \ln \frac{\mathrm{A_0}}{\mathrm{A}} = 2 \ln \frac{\mathrm{D_0}}{\mathrm{D}}$

# Plastická deformace polykrystalů

**Von Misesova podmínka** – aby mohl polykrystal podstoupit obecnou plastickou deformaci bez změny objemu a bez vzniku trhlin, musí mít k dispozici alespoň 5 nezávislých skluzových systémů

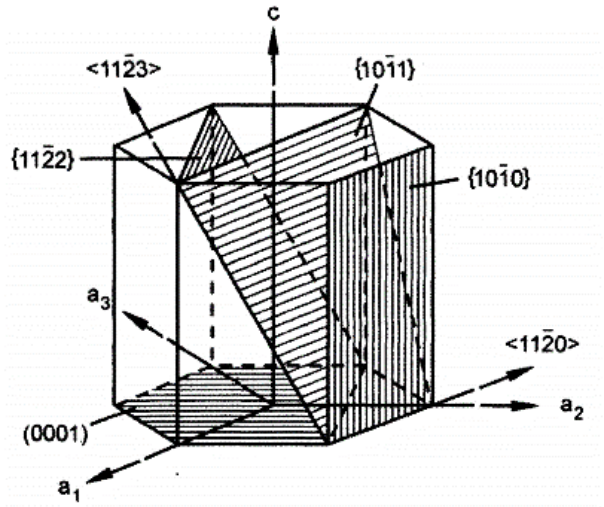
- **Polykrystaly** – obecná deformace, jednotlivá zrna se nedeformují jednoosým namáháním, stav napjatosti určuje okolí
- **Zachování celistvosti:** Aby při deformaci polykrystalu nevznikaly mezi zrny trhliny a dutiny, musí se každé zrno tvarově přizpůsobit svému okolí.
- **Redukce složek deformace:** Obecný popis změny tvaru (tenzor deformace) má **6 složek**. Protože je ale plastická deformace kovů izoobjemová (nedochází ke změně objemu), klesá počet nezávislých složek na **5**. (stopa tenzoru deformace $\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx} = 0$)
- **Potřeba 5 systémů:** Každý aktivní skluzový systém poskytuje právě 1 stupeň volnosti. K úspěšné obecné deformaci zrna je proto matematicky nutné zkombinovat **minimálně 5 nezávislých skluzových systémů**.

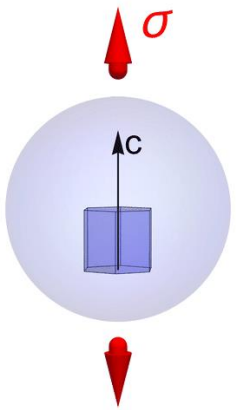
# Plastická deformace polykrystalů

**Von Misesova podmínka** – aby mohl polykrystal podstoupit obecnou plastickou deformaci bez změny objemu a bez vzniku trhlin, musí mít k dispozici alespoň 5 nezávislých skluzových systémů

- **Kubické materiály** – fcc – 12, bcc – 48 nezávislých skluzových rovin - OK
- **Hexagonální materiály –** bazální rovina – 2, prismatické a pyramidální <*a*> - 4 nezávislé skluzové systémy. Pyramidální <*c*+*a*> - 5, ale vysoké CRSS – funguje jen při vysokých teplotách nebo napětích.

Řešení – dvojčatění – poskytuje prodloužení ve směru *c*



# Propojení plastické deformace mono- a polykrystalů

## Taylorův faktor

- **Mikro-makro propojení:** Taylorův faktor ($M$) dává do vztahu makroskopickou mez kluzu $\sigma_Y$ a mikroskopické napětí potřebné ke skluzu v krystalu $\tau_{CRSS}$ vztahem:

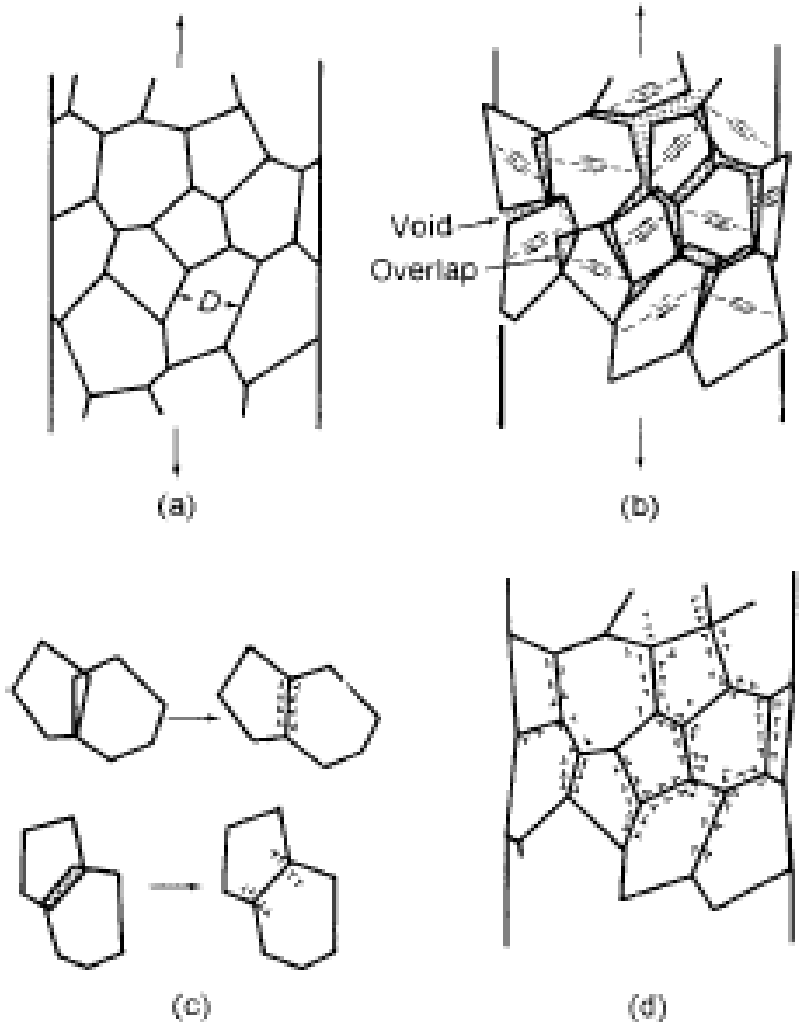
$$\sigma_Y = M \cdot \tau_{CRSS}$$

- **Vícesměrný skluz:** Na rozdíl od Schmidtova faktoru pro jednoosý monokrystal zohledňuje Taylorův faktor nutnost aktivovat **minimálně 5 skluzových systémů současně** pro zachování celistvosti polykrystalu.
- **Typické hodnoty:** Pro náhodně orientovaná zrna v kovech s krychlovou mřížkou (tah/tlak u FCC) je průměrná hodnota $M \approx 3{,}06$.
- **Vliv textury:** Hodnota $M$ závisí na orientaci zrn. Pokud materiál získá tvářením preferovanou orientaci (texturu), Taylorův faktor se změní, což způsobuje směrovou závislost mechanických vlastností (anizotropii).

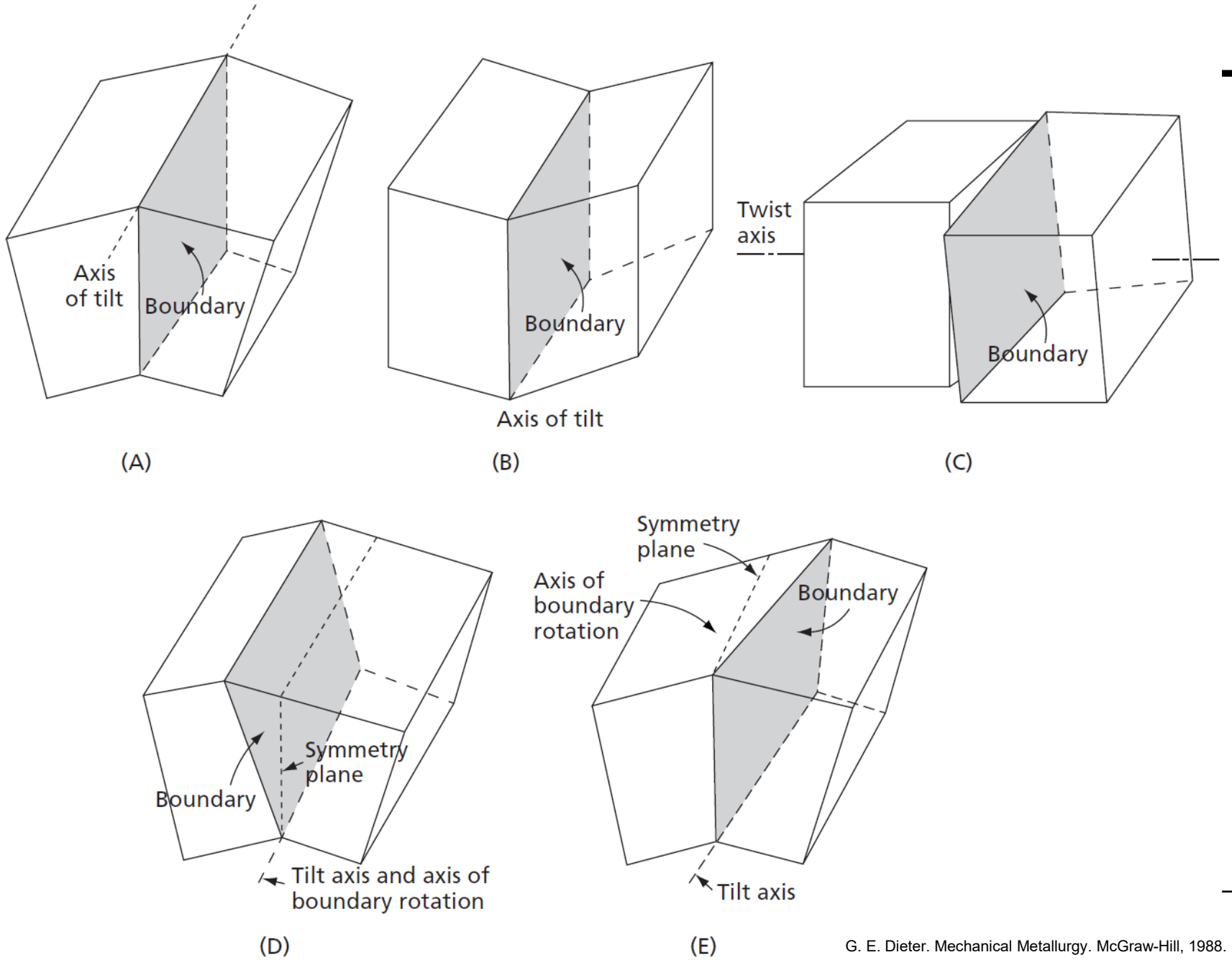
# Plastická deformace polykrystalů

**Ashby** – dislokační model deformace polykrystalů

- **Statisticky uložené dislokace (SSD)** – hromadí v důsledku náhodného (statistického) vzájemného střetávání a blokování
- **Geometricky nutné dislokace (GND)** – vznikají kvůli zachování kontinuity mřížky při nerovnoměrné deformaci nebo gradientu napětí.
- Při deformaci polykrystalu každé zrno se deformuje podle Schmidova zákona, vznikají SSD ale i GND kvůli zamezení vzniku dutin a překryvu zrn.




G. E. Dieter. Mechanical Metallurgy. McGraw-Hill, 1988.

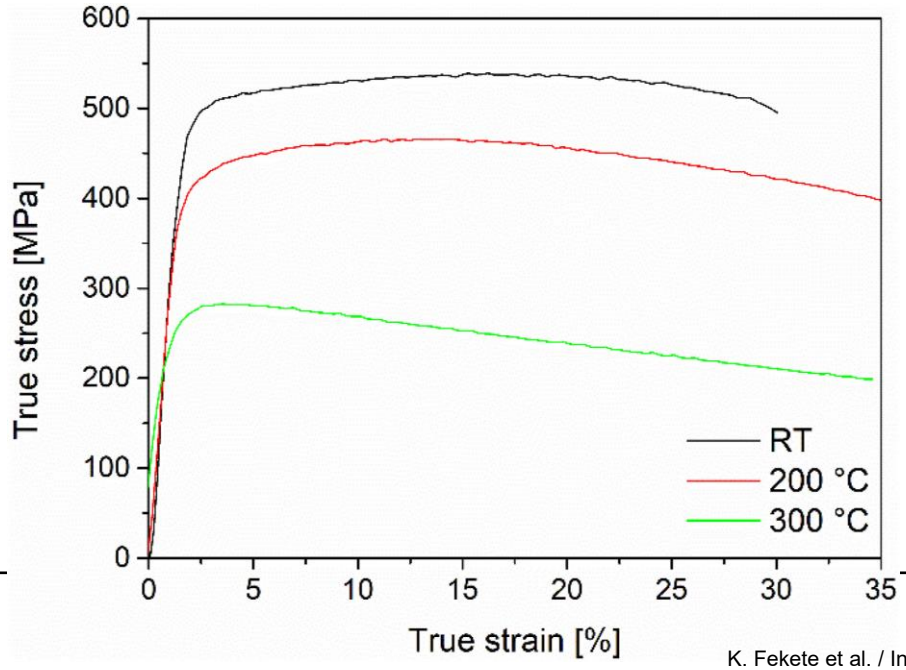



G. E. Dieter. Mechanical Metallurgy. McGraw-Hill, 1988.

# Mechanismy zpevnění a odpevnění

**Zpevnění** – dislokace interagují s dalšími poruchami mříže

- **Překonatelné překážky**– dislokační, příměsové atomy
- **Nepřekonatelné překážky** – precipitáty, hranice zrn, dvojčat.




K. Fekete et al. / Intermetallics 2014

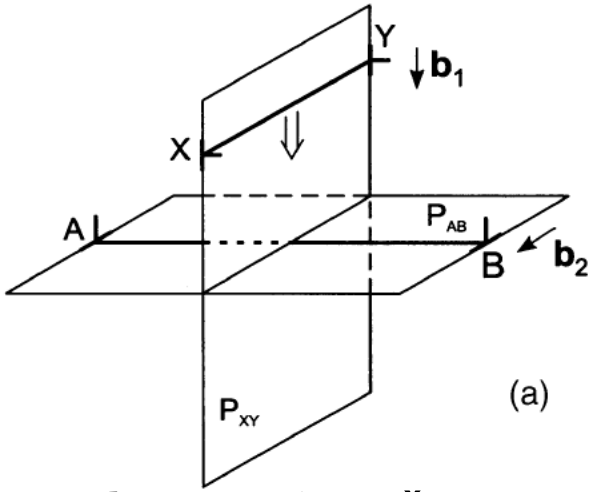
**Odpevnění** – procesy vedoucí k anihilaci dislokací. Zejména u vyšších teplot

- **Příčný skluz** – šroubové dislokace
- **Šplh dislokací** – hranové dislokace.

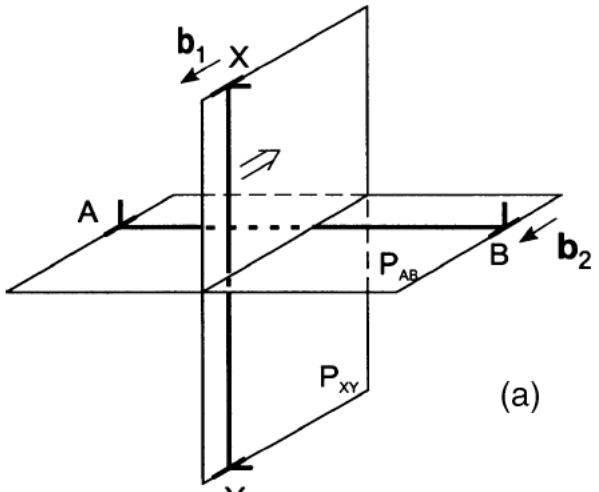
# Dislokační zpevnění – překonatelné překážky

**Interakce dislokací** – závisí na typu a orientaci interagujících dislokací

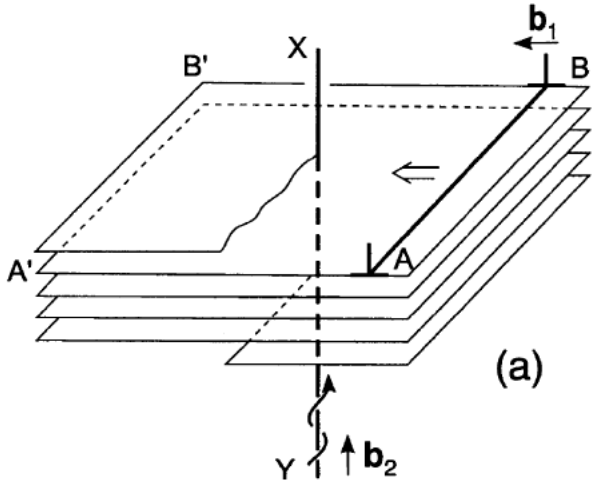
Mohou vznikat stupně (jog $\parallel \vec{n}$) a ohyby (kink $\perp \vec{n}$)



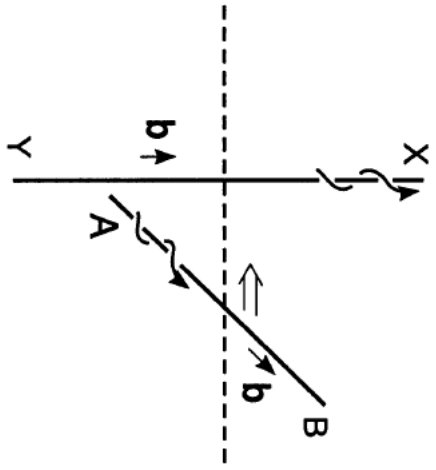

$b_{e1} \perp b_{e2} \rightarrow$ stupeň



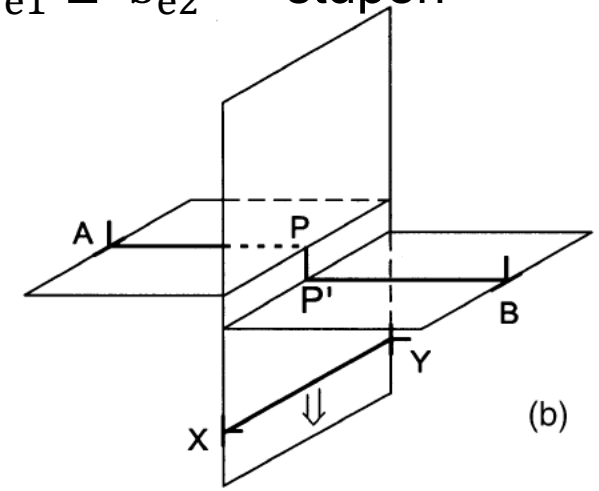

$b_{e1} \parallel b_{e2} \rightarrow$ ohyb

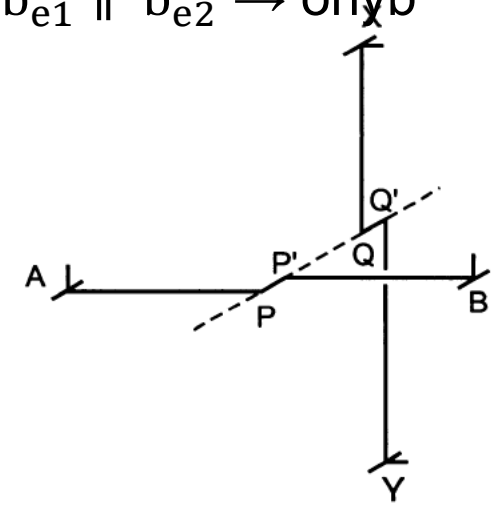


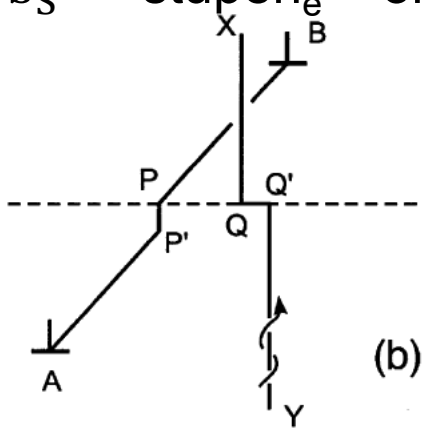

$b_e + b_S \rightarrow$ stupeň$_e$ + ohyb$_s$

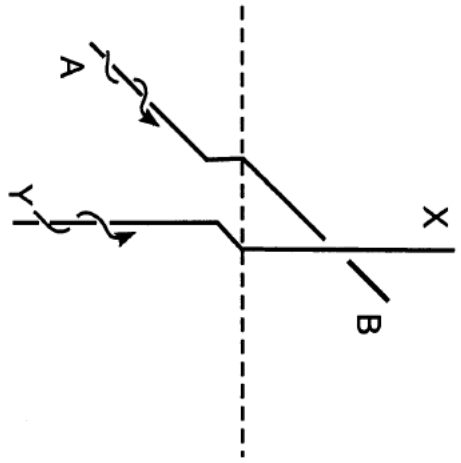



$b_{S1} + b_{S2} \rightarrow$ 2 x stupeň$_e$



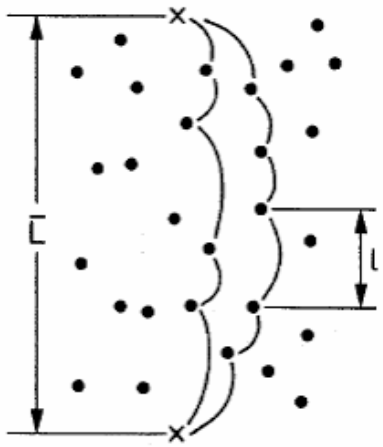



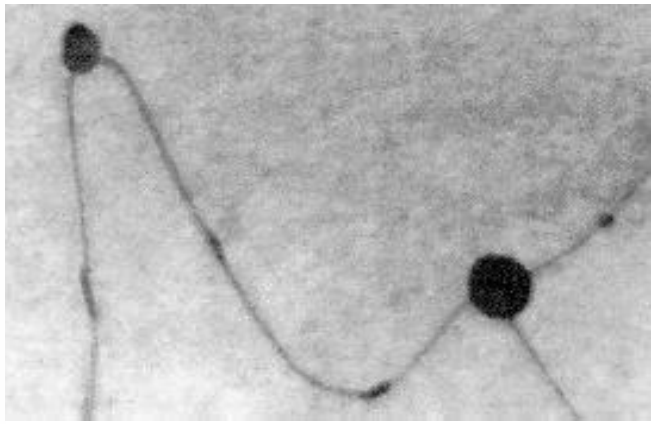

D. Hull and D. Bacon. Introduction to Dislocations, 2001

# Dislokační zpevnění –překonatelné překážky

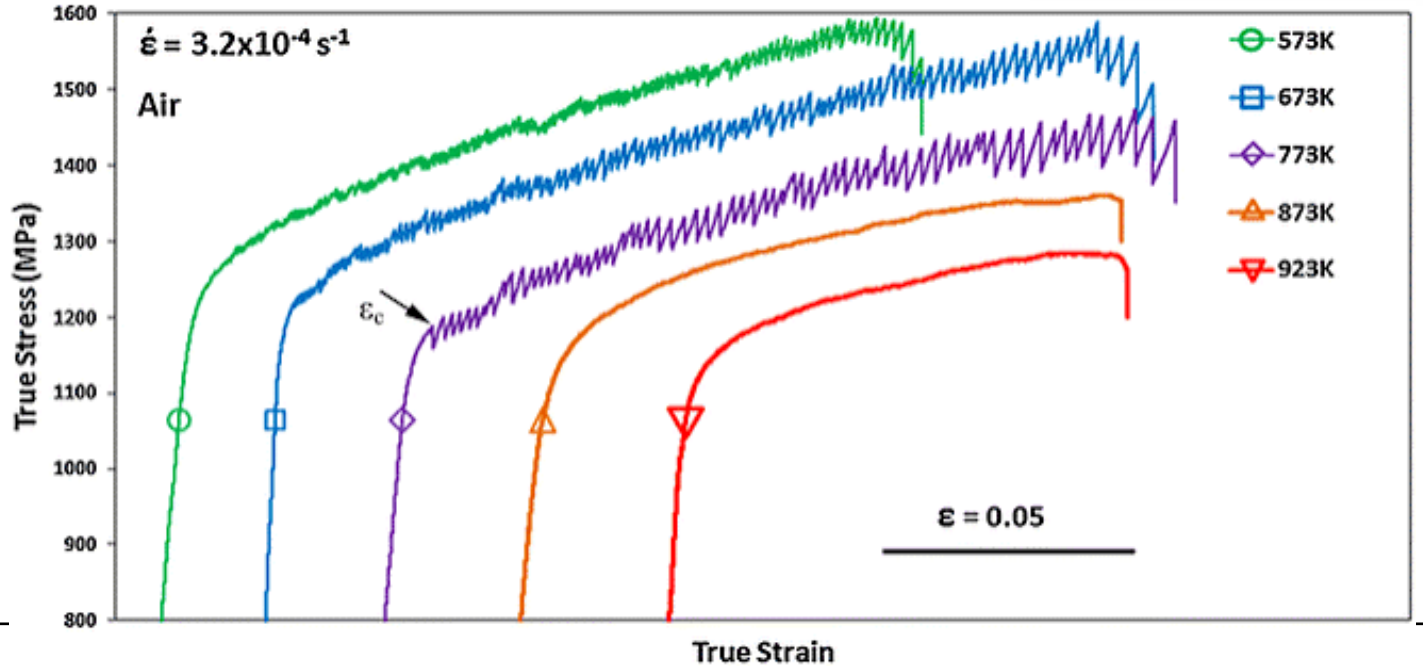
## Interakce dislokace - příměsi

- **Kotvení dislokací**– dojde k dočasnému zachycení dislokací na příměsových atomech
- **Portevin – Le Chatelierův jev** – přerušovaná deformace v určitém oboru teplot a deformačních rychlostí



Cottrell, "The Nature of Metals," Scientific American (1967)

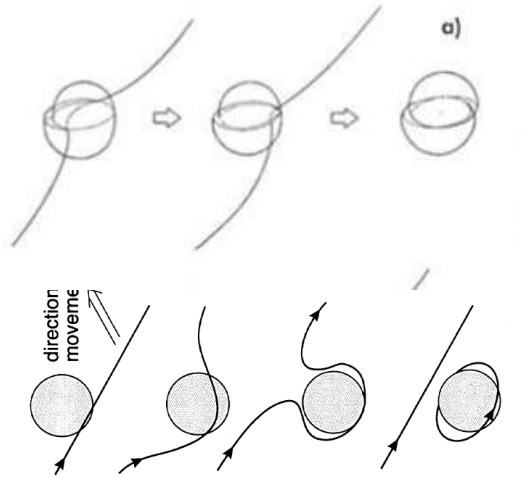


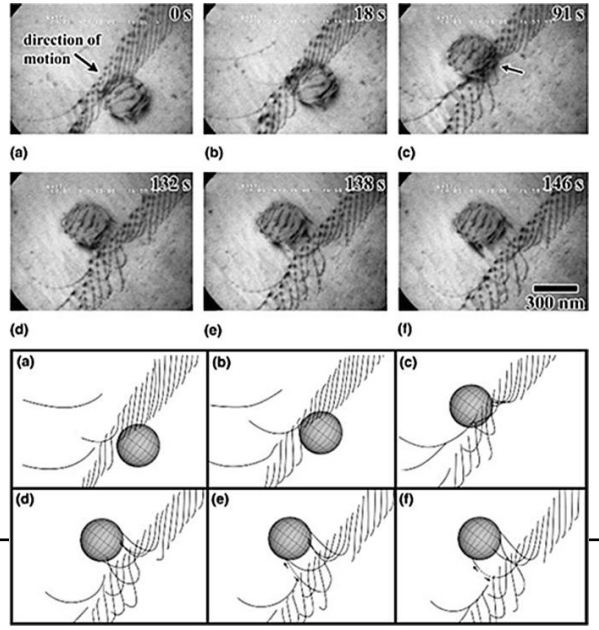

B. Max et al Metall. Mater. Trans. A 2014

# Dislokační zpevnění – nepřekonatelné překážky

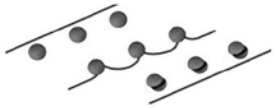
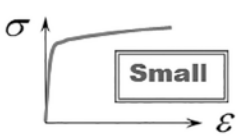
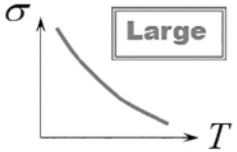
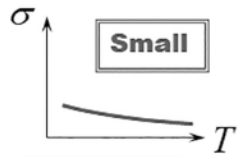
## Interakce dislokace - precipitáty

- **Koherentní precipitáty** – dojde k „přeříznutí“ precipitátů dislokacemi a jejich pokluzu
- **Nekoherentní precipitáty** – dislokace obchází precipitáty tzv. Orowanovým mechanismem, zůstávají kolem dislokační smyčky.




Clark et al J Mater Res 2005

| | | |
|---|---|---|
| **Dislocation-Precipitate Interactions** | **Shear**  | **Orowan Mechanism**  |
| **Precipitates** | **Coherent GP Zone** $\bar{l}_p <\sim 10^{-7} m$ | **Incoherent Partially-coherent** $\bar{l}_p >\sim 10^{-7} m$ |
| **Hardening Modulus** $\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\varepsilon}\right)$ |   |   |
| **Temperature Dependency of Yield Stress** $\sigma_y(T)$ |   $\sigma_y(T) \propto A - T^{2/3}$ |   $\sigma_y(T) \propto G(T)$ |

T. Hasebe – Dislocation Theory and Metallurgy, Cambridge University Press, 2024

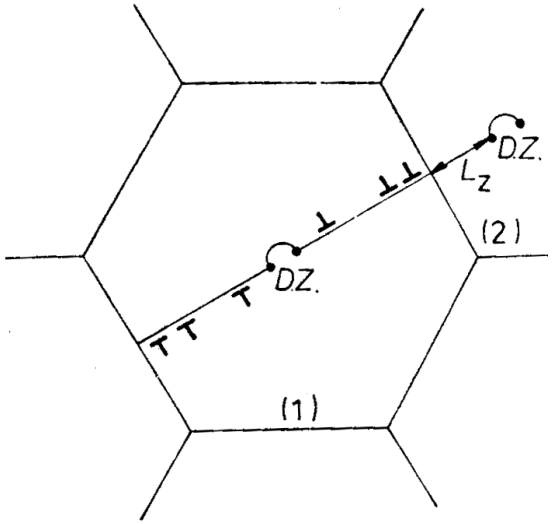
# Dislokační zpevnění – nepřekonatelné překážky

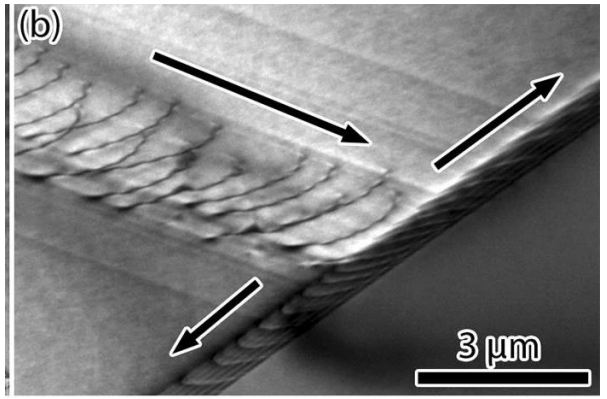
## Interakce dislokace – hranice zrn

**Hall – Petchův vztah** – popisuje vztah mezi napětím na mezi skluzu a velikostí zrna

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}}$$

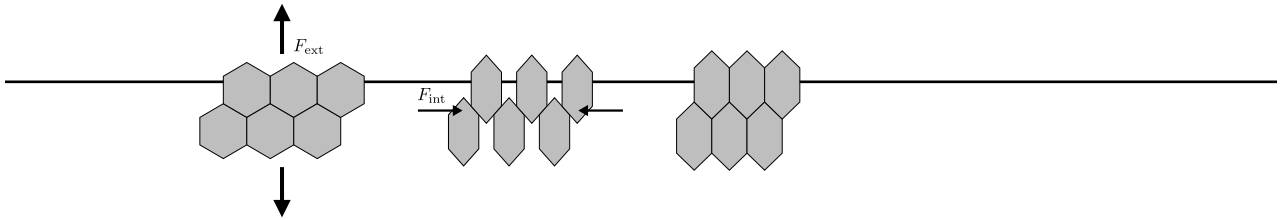
kde $\sigma_y$ je napětí na mezi skluzu, $\sigma_0$ - je třecí napětí popisující odpor krystalové mříže vůči pohybu dislokací, $k$ je míra zpevňujícího účinku hranic zrn a $d$ je průměrná velikost zrn.

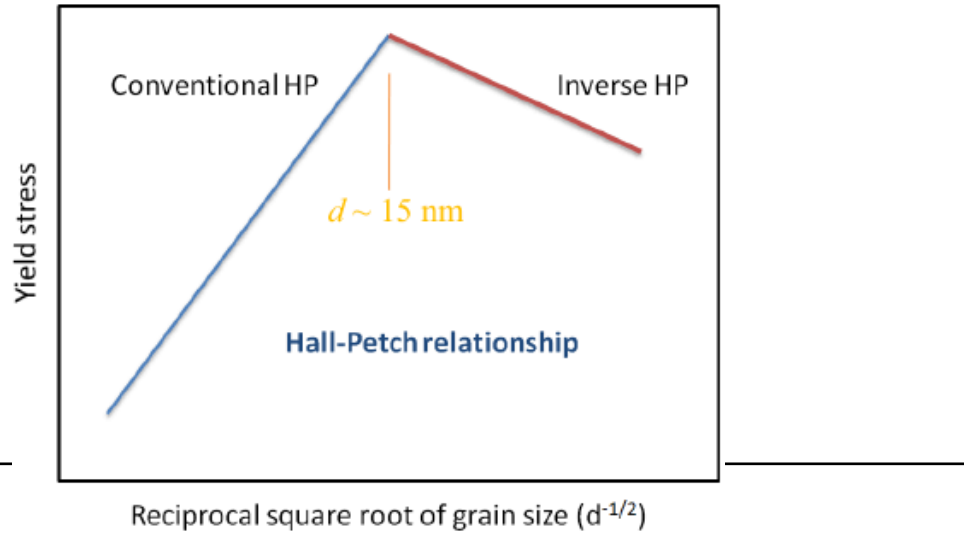



Kacher and al. Handbook of Mechanics, Springer, 2019

Pod $d < 15$ nm platí inverzní HP, deformace probíhá **pokluzem po hranicích zrn**




scielo.org.co

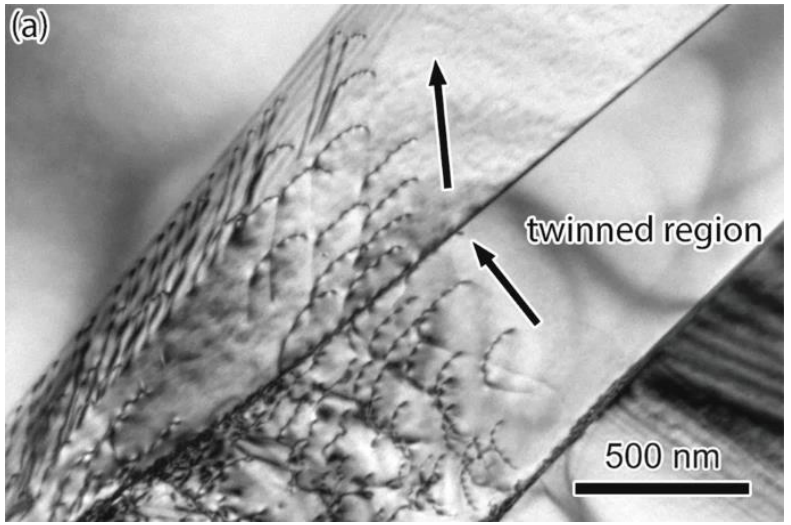
# Interakce dvojčat s dalšími poruchami mříže

## Interakce dislokace – dvojčatová hranice

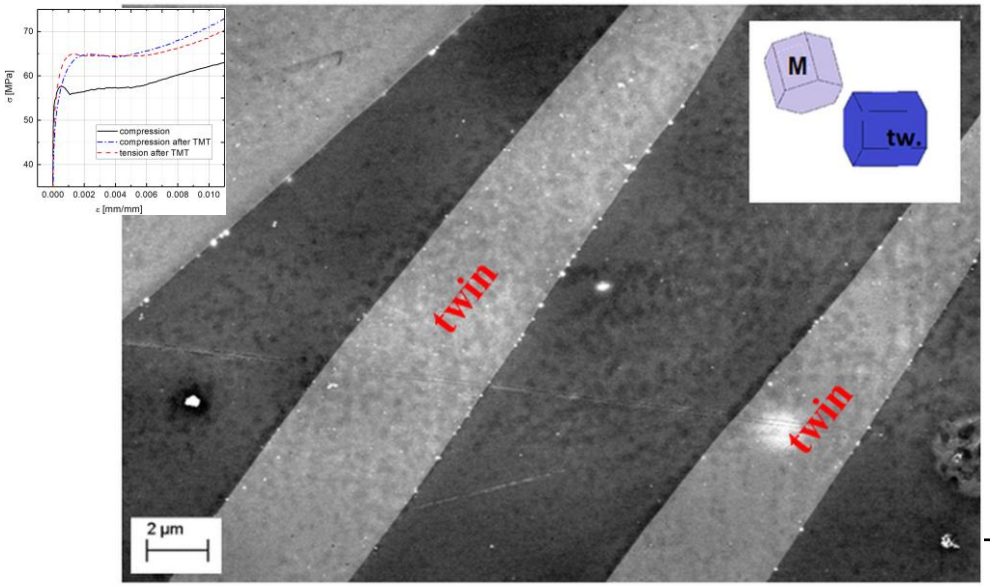
většinou nepřekonatelná překážka, napěťové pole indukuje skluz na druhé straně hranice

## Interakce dvojčatová hranice – příměsové atomy

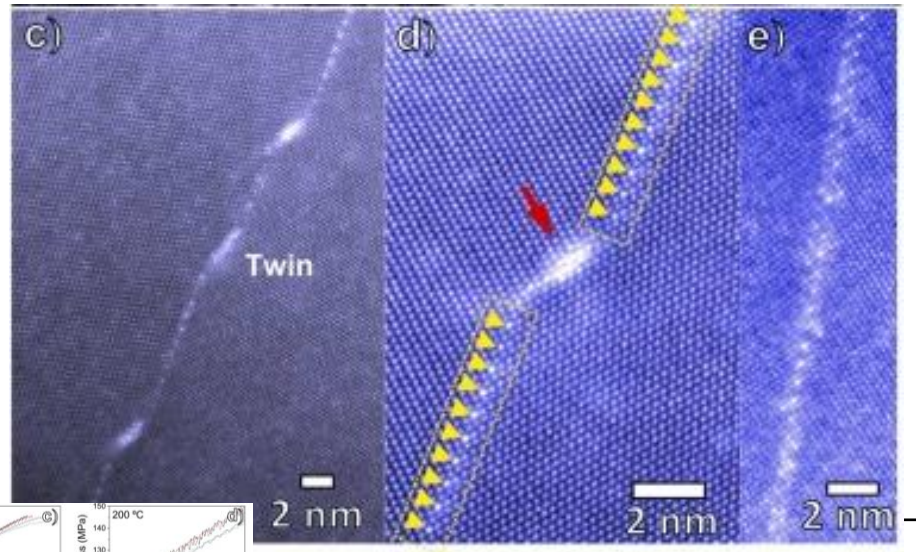
Mohou jak pevně ukotvit hranice dvojčat (viz vlevo), nebo jen dočasně (viz pravo). Závisí na experimentálních podmínkách




Kacher and al. Handbook of Mechanics, Springer, 2019




D. Drozdenko et al., Mater. Char. 2018




G. Garcés et al. J Alloys Comp 2026

# Dislokační odpevnění

**Příčný skluz** – změna skluzové roviny šroubové dislokace – může přejít do paralelní roviny příčným skluzem a tam se anihilovat

**Šplh dislokací** – pohyb hranové dislokace kolmo na skluzovou rovinu. nekonzervativní pohyb, vyžaduje difuzní mechanismus (zkracování nebo prodloužení

