

## Oponentský posudek na diplomovou práci „Simulace deformace a studium dislokační struktury v FCC krystalu“ Anny Benediktové

Přestože základní stavební kameny našeho světa jsou částice, tedy nula-rozměrné objekty, ve fyzice hrají též důležitou roli vícerozměrné objekty. Konkrétně jednorozměrné polymery mají zásadní úlohu v biologii a jednorozměrné struny velikosti Planckovy délky možná tvoří vnitřní strukturu elementárních částic. Stejně důležité jsou jednorozměrné objekty, které vznikají kolektivním chováním částic a často mají topologickou povahu, například víry v supravodičích a supratekutinách nebo řetízky v bosonizaci fermionů v 1+1d, které převádějí lokální interagující fermiony na nelokální volné bosony. Jednorozměrnými topologickými objekty v materiálech jsou dislokace, které hrají zásadní roli v plastické deformaci, a studium jejich chování a interakcí je aktuální téma diplomové práce Anny Benediktové.

Anna ve své práci studovala dislokace při plastické deformaci kombinací dvou technik a to numerické simulace a měření na transmisním elektronovém mikroskopu. Téma a techniky do značné míry určily strukturu práce. První tři kapitoly Anna věnovala základním vlastnostem dislokací, numerické simulační technice molekulární dynamika a experimentální technice transmisní elektronová mikroskopie, jak obecně tak jejich použití pro studium dislokací konkrétně. Ve čtvrté kapitole Anna uvedla výsledky simulací a měření a v páté kapitole diskutovala shody a rozdíly výsledků obou technik se závěrem, že obojí jsou v dosti dobré kvalitativní shodě.

Anna v práci prokázala, že rozumí jak dislokacím samotným tak i oběma technikám, jejich vzájemnému vztahu a jejich použití pro studium dislokací a že své znalosti získala studiem značného objemu pramenů, na něž se odkazuje. Bylo by užitečné, kdyby taky zasadila svoje výsledky do kontextu jiných prací publikovaných v literatuře víc než jen srovnáním s referencí [67], např. diskusí vztahu jejích výsledků k výsledkům simulací, které před dvěma lety prezentoval v NTC Jorge Alcala a získal je ve spolupráci s konzultantem práce Honzou Očenáškem.

Anna práci napsala přehledně a dobrým stylem. Při čtení mě napadly různé drobné poznámky a náměty ke zvážení, jak by třeba mohla různé věci v textu vyjasnit nebo zpřesnit zejména pro nás, kdo nejsme odborníci na dislokace, simulace a mikroskopii. Pro úplnost je přikládám jako přílohu k posudku.

Celkově práce má vysokou úroveň, a proto ji doporučuji k obhajobě a navrhuju známku výborně. Pro obhajobu mám následující tři otázky:

1. Můžeš na příkladu jednoho TEM obrázku ilustrovat, jak identifikuješ různé druhy dislokací?
2. Na str. 32 píšeš, že typ vrstevné chyby se určí z rozdílu kontrastů ve světlém a v tmavém poli. Můžeš trochu rozvést postup?
3. Do jaké míry detailu je možné porovnat simulace a experimenty? Je ještě nějaké další kvantitativní srovnání kromě hustoty dislokací a počtu skluzových systémů?

## Drobné náměty ke zvážení k možnému vyjasnění nebo zpřesnění textu

### •Abstrakt:

„Tato diplomová práce se zabývá studiem plastické deformace FCC krystalu na submikroskopické úrovni.“ Co je submikroskopická úroveň? Submikronová?

Proč jsou jiné materiály pro simulaci a pro TEM měření? Napsat hned tady, že bude vysvětleno později?

### •str. 1:

„Budou pozorovány vzorky dvou polykrystalických jednofázových FCC materiálů, a to chrommanganové oceli P900 a v současnosti pro své vynikající mechanické vlastnosti intenzivně studované vysokoentropické Cantorovy slitiny (high entropy alloy), které se od sebe zásadně liší svojí substrukturou.“ Co je substruktura?

„Ve čtvrté kapitole jsou představeny experimentální výsledky, a to jak z pozorování vzorků polykrystalických FCC materiálů při různých stupních deformace, tak z numerických simulací deformace v tahu nebo tlaku.“ Dávají simulace experimentální výsledky?

### •str. 2:

„Může obsahovat také řadu dalších krystalových poruch, které lze rozdělit podle počtu jejich dimenzí na bodové (vakance, atomy příměsí jako intersticiály a substitute), čárové (dislokace), plošné (povrchy a mezipovrchy, vrstevné chyby) a objemové (dutiny, precipitáty a další).“ Intersticiál může tvořit i atom materiálu?

### •str. 4:

„Uzavřená orientovaná křivka v rovině kolmé na vloženu polorovinu procházející uzlovými body mřížky, uvnitř které leží průsečík s hraniční přímkou, je oproti křivce bez vložene poloroviny delší o Burgersův vektor  $b$ , který je v případě hranové dislokace kolmý na jednotkový vektor ve směru dislokační čáry  $u$ .“ průsečík čeho s hraniční přímkou? Té roviny, v níž leží ta křivka?

„Polorovina může být vsunuta nad nebo pod rovinou skluzu (šedě znázorněnou rovinou na obr. 1.1), dislokace se pak označují jako kladná a záporná.“ Stálo by za to explicitně definovat rovinu skluzu? Co určí nad a pod?

Stálo by za to říct, jak se dostane deformace v objemové hustotě energie pro šroubovou dislokaci a jak se pak dostane deformační energie pro hranovou dislokaci, např. její výpočet ve válcových souřadnicích, i když nemá válcovou symetrii? Když píšeš, že energie hranové dislokace je zhruba o polovinu větší než energie šroubové dislokace, znamená to, že Poissonova konstanta je zhruba jedna třetina? Stálo by za to čísluovat všechny rovnice? Pak bych se tady mohl odvolat na jejich čísla. Taký dál v textu.

### •str. 5:

„Na velikosti (obvykle  $b$  až  $5b$ ) a tvaru dislokačního jádra závisí schopnost dislokace pohybovat se krystalem při působení vnějších sil, neboť její pohyb ve skluzové rovině spočívá v postupném přemisťování atomů jádra (a tím i přeskupení vazeb) do následující rovnovážné polohy, tedy o jednu mezivýškovou vzdálenost, přičemž musí překonat Peierlsovu energetickou bariéru.“ Může pohyb být jenom ve skluzové rovině nebo i mimo ni? Proč se posune o mezivýškovou vzdálenost, když se pohybuje v rovině?

„Při tomto postupném přesunu není dislokační čára (na submikroskopické úrovni) rovná, ale dochází k tzv. vybočení (kink) odpovídajícímu kompromisu mezi polohou s minimální energií (ostrý „schod“) a délkou čáry.“ Proč má ostrý schod minimální energii? Protože dislokace chce být na atomové poloze a ne mezi?

Jak se dostane energie Peierlsovy bariéry a proč je malá pro FCC, tj. proč je jádro planární a s nízkou energií a jak tyto charakteristiky dají Peierlsovu bariéru? Jednotka eV/b znamená, že energie Peierlsovy bariéry nezávisí na  $b$ ?

„Projde-li dislokace celým krystalem, na jeho povrchu se vytvoří stupínek a v případě velkého množství dislokací je tento přenos hmoty makroskopicky pozorovatelný—došlo k plastické deformaci.“ Počtu dislokací? Stupínek na povrchu vytvoří už samotná přítomnost dislokace i bez pohybu, aspoň teda šroubová?

„Tento pohyb probíhá v těch krystalových rovinách, jimiž prochází dislokační čára a jsou rovnoběžné s příslušným Burgersovým vektorem. Bývají to roviny a směry (skluzové

systémy) nejhustěji obsazené atomy, pro které je to energeticky nejméně náročné.“ Proč tyhle roviny jsou nejhustěji obsazené atomy, a proč tím je pohyb nejméně energeticky náročný? Zase protože dislokační čára chce končit na atomu. Tady je definice skluzového systému, tak bylo by dobré ji dát výše, kde o skluzových systémech píšeš poprvé?

Tvrzení v poznámce pod čarou platí pouze pro krychlovou soustavu nebo obecně?

### •str. 6:

Co je příčný skluz? Existuje též podélný skluz?

Odkud je vidět, že pro FCC jsou roviny skluzu  $\{111\}$  a směry skluzu  $\langle 110 \rangle$  a že jich je 12? Protože těsně uspořádané jsou čtyři roviny 111 a v každé jsou k nejbližším sousedům tři směry 110?

Odkud se dostane vztah pro kritické skluzové napětí?

Jak může být střední hodnota Schmidova faktoru rovna 3, tj. větší než jedna, když ten faktor je součin dvou kosinů?

Odkud je vidět, že se dislokace se stejnou orientací odpuzují a s opačnou přitahují?

Co jsou úplné a co parciální dislokace? Burgersův vektor spojující dva atomy nebo ne?

### •str. 7:

Odkud se dostanou koeficienty  $\frac{1}{2}$  a  $\frac{1}{6}$  a  $\frac{1}{3}$ ?  $\frac{1}{3}$  kvůli tomu, že vzdálenost sousedních rovin typu 111 je třetina tělesové úhlopříčky?

Proč je Shockleyova dislokace pohyblivá a Frankova nepohyblivá?

Říct explicitně, že dislokace  $\alpha A$  není na rozvinutém Thompsonově čtyřstěnu, nýbrž jde objemem čtyřstěnu?

„Dvě takové dislokace mohou například vytvořit zakotvenou koutovou dislokaci, jedna koutová a dvě Shockleyovy dislokace mohou vytvořit Lomerovu-Cottrellovu bariéru, která brání skluzu dislokací hned ze dvou skluzových rovin [4, 5, 9].“ co je zakotvená koutová dislokace a co je Lomerova-Cottrellova bariéra?

„Interakce dislokací s periodickou krystalovou strukturou při jejich pohybu nespočívá jen v přeuspořádání sousedních atomů, ale kvůli velkému dosahu jejich napěťových polí

i v anharmonické interakci s fonony a rozptylu fononů na pohybujících se dislokacích (fononový vítr) a tato odporová síla pohyb dislokací zpomaluje.“ Na velkých vzdálenostech je deformace slabá takže má anharmonická interakce efektivně konečný dosah?

### •str. 8:

„dislokace s velkou kinetickou energií při protnutí povrchu zformují dislokaci opačné orientace.“ Co je velká kinetická energie? Jak velkou mají rychlost? Jak se dostane jejich hmotnost?

### •str. 9:

„Ač toto rozštěpení snižuje elastickou deformační energii (součet deformačních energií parciálních dislokací je menší než energie úplné dislokace), proběhne jen za předpokladu,

že může vzniknout stabilní nízkenergetická vrstevná chyba.“ Proč je potřeba vrstevná chyba pro rozštěpení?

„Burgersův vektor Shockleyovy neúplné dislokace leží v rovině vrstevné chyby, u dislokace tohoto typu tedy může dojít ke skluzu, na rozdíl od Frankových a koutových, jejichž Burgersovy vektory ve skluzové rovině neleží.“ Odkud jsou vidět směry těchto Burgersových vektorů? „Obsahuje-li krystal vrstevnou chybu, pak jsou dvě jeho části vůči sobě posunuty o vektor  $R_i(r)$ ;  $i = 1; 2; 3$ .“ co jsou tyto vektory a proč jsou tři, když se jedná o posunutí dvou částí?

Jak souvisí energie vrstevné chyby s polaritou?

•str. 10:

„Hliník je proto velmi tvárný.“ Proč je pro tvárnost důležitější pohyblivost dislokací, co už jsou, než vznik nových?

„Pro polykrystaly s nízkou energií vrstevné chyby, a tedy nemožností příčného skluzu, je pro uskutečnění plastické deformace zásadní počet skluzových systémů, a to minimálně pět (Misesovo kritérium).“ Proč zrovna pět?

Odkud se dostane rovnice (1.1)?

Co znamená superpozice dislokačních hranic?

•str. 11:

„Nejjednodušší zkrutová hranice je tvořena jedním souborem rovnoběžných šroubových dislokací, ke kterému v hranici existuje podobný soubor dislokací kolmý na první.“ Jak se dá vidět a jak je dále vidět, že dislokace pak tvoří čtvercovou síť?

„(coincidence site lattice—CSL) site“

„(jen lichá čísla, čím větší, tím menší symetrie)“ proč jen lichá?

„Jejich prostřednictvím se při působení smykového napětí natáčejí jednotlivá zrna tak, aby jejich krystalová orientace byla výhodná pro skluz dislokací.“ Jak se výhodnost pro skluz dislokací stane momentem síly pro otáčení?

•str. 12:

„Dalším důležitým mechanismem plastické deformace je dvojčatění, při němž se (na rozdíl od skluzu dislokací) naráz přemístí celý úsek mřížky o zlomek mezivrstevné vzdálenosti.“ Jak přemístění o zlomek mezivrstevné vzdálenosti dá zrcadlový obraz?

„Dvojčatění v FCC krystalu probíhá v rovinách typu  $\{111\}$  a směrech  $\langle 112 \rangle$ .“ odkud je tohle vidět?

•str. 13:

„(viz obr. 2.3)“ má být 1.3? Je to totéž rozštěpení, jako bylo druhé na str. 7?

„V polykrystalech jsou nukleace i růst ovlivněny řadou faktorů jako je velikost zrn, energie

vrstevné chyby, absolutní teplota, rychlost deformace a dalšími [9, 26, 29].“ chybějí čárky kolem vedlejší věty? Taký dál v textu.

•str. 15:

Říct explicitně, proč v potenciální energii jsou pouze párové interakce?

•str. 18:

„Koefficient  $a_{ij}$  slouží k omezení dosahu odpuzivého potenciálu [31, 36, 37, 38].“ dosahu nebo velikosti? Čekal bych, že dosah je dán jako  $1/\lambda_i$ .

Možná říct aspoň náznakem, jak se dostanou čísla v ZBL potenciálu?

•str. 19:

V (2.2) je kroucené F totéž jako nekroucené F zavedené na spodku předchozí stránky?

„Hodnoty parametrů  $F_i$  a  $Z_i$  v rovnici (2.2)“ F a Z jsou parametry nebo funkce? Nebo myslíš parametry, co vystupují v těchto funkcích?

„Tato aproximace je vhodná pro přechodové kovy s FCC strukturou, protože ty mají buď jen málo nebo naopak téměř úplně zaplněný d-orbital a (oproti s-orbitalům a p-orbitalům) lokalizovanější elektrony d-orbitálu tvoří spíše kovalentnější, tedy více směrové vazby.“ p-orbitály taky tvoří směrové vazby?

„Clausius při odvození stavové rovnice vycházel z formálního výrazu“ v jakém smyslu formálního?

•Str. 20:

„Uvažujeme-li izolovaný systém atomů, je člen na levé straně rovnice představující vnější síly roven nule.“ Představuje levá strana vnější síly?

„ze které se určí tlak a teplota systému atomů [42].“ jak z jedné rovnice určíme hodnotu dvou neznámých?

•Str. 21:

„V simulacích uvedených v této práci je použit Nosého-Hooverův termostat, díky němuž lze simulovat systémy, které se asymptoticky blíží statistickému souboru NVT nebo NPT.“ Asymptoticky v jaké závislosti?

Jak se dostane potenciální energie pro fiktivní proměnnou, konkrétně počet stupňů volnosti zvětšený o jedničku a logaritmus? Jak z tohoto tvaru plyne NVT?

•Str. 22:

„Hoover [45] navrhl obměnu této metody, ve které se využije transformace souřadnic a substituce“ když s je rovno s s vlnkou, tak proč si nejsou rovny taky časové derivace? Každá časová derivace na pravé straně dostane faktor s s vlnkou, takže znamená tečka na pravé a na levé straně jinou časovou derivaci, jednu podle času s vlnkou a druhou podle času bez vlnky? Jestli jo, tak bylo by dobré označit ty dvě časové derivace různě?

„Pohybovou rovnici pro  $\gamma$  lze napsat i ve tvaru“ jak se z f+1 dostalo f-1?

•Str. 23:

„V TEM namísto viditelného světla prochází tenkým vzorkem proud elektronů urychlených napětím 100–400kV, tedy elektronových vln o velmi krátké (o mnoho řádů menší než viditelné světlo) vlnové délce a skleněné čočky jsou nahrazeny elektromagnetickými.“ Možná by bylo dobré dát přibližné, aspoň řádové, hodnoty vlnových délek. Ještě kvantově mechanicky: je více vln nebo jen jedna? Možná bys mohla ten výrok zpřesnit, že více jednočásticových vln tvoří jednu mnohočásticovou, aspoň teda v případě, že funguje Hartree-Fock, což je tady asi pravda, dokonce možná i jenom Hartree, protože výměnné jevy nehrajou moc roli, jestli elektrony jsou v nedegenerovaném režimu?

„Transmisní elektronový mikroskop a schematické znázornění tubusu jsou na obrázcích 3.2 a 3.1.“ proč neuděláš označení tak, aby ses na ně odvolávala v pořadí rostoucích čísel?

•Str. 24:

Jak se dostane vztah pro rozlišovací schopnost, zejména mocnina  $\lambda$ ? Co je sférická vada, tj. nejen její velikost nýbrž i definice?

•Str. 26:

„Fázový kontrast vzniká interferencí elektronových vln a díky němu můžeme pozorovat např. tloušťkové kontury, Fresnelovy proužky atd.“ např. a atd. je opakování? Dá se od sebe oddělit amplitudový a fázový kontrast, když nakonec intenzita je stejně daná jen amplitudou?

„Rozptýlený svazek je oproti primárnímu ve fázovém posuvu o  $90^\circ$ .“ jak se dostane tenhle fázový posun?

•Str. 27:

„Vycloněním primárního svazku objektivovou clonou získáme po přepnutí do obrazového režimu obraz ve světlém poli, vycloněním difraktovaného svazku zobrazení v tmavém poli.“ Není tohle opak k tomu, co píšeš v dalších dvou větách?  
„Kontrast v obou polích lze zlepšit částečným odfiltrváním neelasticky rozptýlených elektronů, které přispívají k difúznímu pozadí obrazu.“  
Elasticky rozptýlené k difúznímu pozadí nepřispívají?

„Avšak Braggova podmínka může být např. v blízkosti osy některé zóny splněna pro více svazků“ říct pro více difraktovaných svazků pro odlišení od primárního svazku, který je jenom jeden?

•Str. 28:

„V této podkapitole je použita kinematická aproximace difrakce, v níž předpokládáme pouze elastický koherentní rozptyl na atomech, neuvažujeme vícenásobný rozptyl ani změnu intenzity dopadající vlny.“ Dvě souřadná slovesa oddělená jenom čárkou; taky jinde v textu.

„Vlnovou funkci primárního svazku elektronů v závislosti na polohovém vektoru vztažného atomu  $\psi_0(\mathbf{r})$  uvažujeme jako rovinnou elektromagnetickou vlnu“ elektronovou, jako pak píšeš dál? Rozptýlená vlna má tento tvar jen daleko od rozptylujícího centra? V (3.1) bych pak čekal závislost jenom na směru, ne na poloze. V mikroskopii se vlnový vektor definuje bez  $2\pi$ , tj. jako analog frekvence a ne úhlové frekvence?

„charakterizujícím elastický nekoherentní rozptyl na jádru atomu.“ Čím je nekoherentní?

•Str. 29:

Fourierova transformace elektrostatického potenciálu je na předchozí stránce? Měl by se započítat taky výměnný potenciál?

V rozptýlené elektronové vlně v Bornově aproximaci nemělo by  $f$  záviset na směru? Stálo by za to zavést označení polohových vektorů, které by lépe rozlišilo vektor Bravaisovy mřížky, vektor atomu v jednotkové buňce a jejich součet?

„vektory elementární buňky přímé mřížky, které jsou s vektory reciproké mřížky ortonormální“ spíš duální?

•Str. 30:

„spojuje Ewaldovu kouli“ Ewaldovu sféru, tj. povrch koule?

„předpokládáme ideální krystal o tvaru pravoúhlého rovnoběžnostěnu.“ Kvádrů?

„Je-li vzorek ve dvousvazkové poloze,“ kolikasvazková poloha může být a jak se nastaví?

„Jedná se o jednoduchou aproximaci v dynamické teorii difrakce, ve které uvažujeme

vícenásobnou difrakci a vzájemné ovlivňování svazků, což vede k periodickým změnám jejich amplitud a tím i intenzit.“ Proč pro poruchy je potřeba započítat všechny tyto efekty?

•Str. 31:

V Howie-Whelanových rovnicích je vztah mezi směrem vlnového vektoru a směrem osy z?

„a  $\xi_g$  je extinkční délka svazků difraktujících ve směru vektoru  $k$ .“ V první rovnici je tato délka u  $\phi_0$ , které se šíří ve směru vektoru  $k_0$ ? Takže je to extinkční délka pro difrakci v jakémkoliv směru?

„Vezmeme-li v úvahu vysokou rychlost elektronů v primárním svazku, bude úhel rozptylu při difrakci velmi malý“ on bude malý nezávisle na naší úvaze?

„a uvažujeme jen složky vektorů rovnoběžné se svazkem,“ proč?

V (3.3) a (3.4) proč vystupují  $g$  a  $s$  různě, i když za rozdíl vlnových vektorů dosazujeme jejich součet?

Proč se ve vztahu pro  $I_g$  nezkrátí  $t^2$ ?

•Str. 32:

„V případě vrstevné chyby je pro FCC krystal  $R = 1/6(112)a$ “ Na str. 7 jsi psala, že tohle je taky Burgersův vektor parciální Shockleyovy dislokace. Stálo by za to říct explicitně, že pro dislokaci je souvislost vektoru posunutí a Burgersova vektoru?

„hkl jsou buď jenom sudé, nebo jenom liché (viz (3.3))“ bez čárky? Rovnice má být (3.2)?

„Pro tloušťky  $t$ , pro něž platí  $\sin(\pi t s + \alpha/2) = 0$ “ může platit současně pro všechny tři hodnoty, kterých  $\alpha$  nabývá?

Polární souřadnice v (3.5) jsou válcové souřadnice kolem dislokační čáry? V (3.6) se předpokládá dislokační čára ve směru osy  $y$  a rovnoběžná s povrchem?

„Typ vrstevné chyby, tj. jedná-li se o intrinsic nebo extrinsic chybu, lze určit s využitím dvousvazkové aproximace dynamické teorie difrakce v blízkosti Braggovy polohy díky odlišnému kontrastu Moiréových proužků ve světlém a tmavém poli.“ Následující popis se ale hodí na oba typy vrstevné chyby?

•Str. 36:

„Jako výchozí stav byly použity vzorky oceli P900 odebrané z hotové bandáže, tepelně zpracované žháním při 1050°C po dobu 2 h s následným zchlazením ve vodě. Tyto vzorky byly následně deformovány tahem.“ Co je bandáž? Možná by byl lepší činný rod, aby bylo vidět, co jsi dělala Ty a co dělal někdo jiný. Taky jinde v textu.

„Oproti tomu HEA je tuhý roztok pěti základních prvků a prostorově rozložení atomů v mřížce je náhodné, tedy mikroskopicky homogenní.“ Rozložení je náhodné v oceli taky?

•Str. 37:

„Rozdíl je i v energiích potřebných k růstu už vzniklého deformačního dvojčete, kdy u standardní slitiny není dodatečné energie potřeba, ale u HEA není růst dvojčete energeticky výhodný—procházející parciální dvojčatová dislokace mění stabilní okolí dvojčatové hranice a na rozšíření dvojčete o každou atomovou vrstvu je zapotřebí dodání energie.“ Z čeho plynou tyto různé vlastnosti růstu dvojčat v těchto dvou slitinách?

„byl vytvořen společností Sandia National Laboratories“ Sandia je vládní laboratoř spíš než společnost?

•Str. 38:

„Rozložení atomů v simulační buňce se načítá ze souboru vygenerovaného programem Mathematica, v případě hliníku je zadán typ a velikost krystalové mřížky.“ Dvě hlavní věty oddělené jenom čárkou. Taky jinde v textu. Co je velikost krystalové mřížky? Počet elementárních buněk uvedený v další větě?

„Počáteční rychlost atomů je zadána jako nulová a je provedena minimalizace potenciální energie systému, aby výchozí systém byl v (téměř) rovnovážném stavu.“ Proč téměř? Kvůli numerické nepřesnosti nebo z nějakého koncepčního důvodu, jako že rovnovážným stavem nemyslíš minimum, nebo aspoň stacionární bod, potenciální energie?

„byla ještě před deformací tahem/tlakem nasimulována nanoindentace kulatým indentorem ve směru [0-10].“ Udělá nanoindentace jiné dislokace než tah nebo tlak?

•Str. 40:

„Na obrázcích 4.6 b)-f) jsou zachyceny detaily dislokační struktury.“ Na obrázcích 4.6 b)-f) jsou taky, ale chtěla jsi tady dál popisovat obrázek 4.3?

•Str. 43:

Obr. 4.3a vypadá, jako že dislokace a vrstevné chyby jsou jenom u hranic kolmých k y. Je to tak nebo jenom jiné nejsou namalované. Jestli to tak je, tak proč? Naproti tomu na str. 41 píšeš, že na obr. 4.5 zobrazujícím deformaci 10% jsou dislokace v celém objemu, teda menším než v obr. 4.3. Podobně pak pro ocel na obr. 4.6 pro deformaci 5% jsou dislokace jenom u hranic, ale na obr. 4.8 pro deformaci 10% nezasahují do celého objemu. Tady jen píšeš, že buňka je menší, ale ne jestli je stejně velká jako na obr. 4.5.

•Str. 45:

Co je Hirthova dislokace?

•Str. 49:

„Na obrázku 4.9 a) je zachycen časový vývoj dislokační struktury během namáhání tlakem.“ Proč jsi namáhala HEA tlakem, kdežto hliník a ocel tahem?

•Str. 54:

„Ze vzorků dodaných slitin ve tvaru válečku (oceli P900 a Cantorovy slitiny) byly příčnými řezy odříznuty na speciální pile plátky o tloušťce kolem 1 mm, které byly následně ztenčovány pomocí brusných papírů s SiC a s diamantovými zrnky na přístroji HandyLap od firmy Jeol.“ Zase by tady byl možná lepší činný rod.

„Po dosažení tloušťky plátku 0.1 mm u oceli P900 a 0.15 mm u HEA následovalo vyrazení kruhových terčíků o průměru 3 mm a jejich elektrolytické leštění v přístroji Tenupol-3 od výrobce Struers. Jako elektrolyt byl použit 6% roztok 60% kyseliny chloristé v metanolu chlazený směsí lihu se suchým ledem.“ Elektrolyzá s kyselinou odleptala terčíky? Koncentrace byla 3,6%? Co je trysková metoda o dvě věty dál?

„Nastavitelný slit (štěrbina) v obrazové rovině omega filtru, který je součástí tubusu mikroskopu, propustí jen elektrony s kinetickou energií v určitém rozsahu, a tím se zlepší kontrast.“ Co je omega filtr a jak štěrbina propustí jen některé energie? Nějakým převedením energie na polohu, třeba pohybem v elektrickém nebo magnetickém poli?

Proč jsou v (4.1) zrovna dvě testovací čáry?

•Str. 55:

Jak se dostane vztah pro tloušťku pomocí extinkční délky a počtu tmavých proužků? A jak se dostane vztah (4.2) pro extinkční délku? Navíc rozptylový faktor ve jmenovateli může být komplexní, takže by měla být absolutní hodnota?

„k výrobě fólií byly vybrány oblasti, které zhruba odpovídají 5% ekvivalentní deformaci [9].“ Fólie jsou vzorky pro TEM? Čemu je deformace ekvivalentní?

„Ve slitině bez deformace byly pozorovány segmenty dislokací v tenké vrstvě odpovídající lokálně tloušťce fólie náhodně rozmístěné i uspořádané ve skluzových pásech nebo v dislokačních stěnách tvořících hranice subzrn.“ Tenká vrstva je něco jiného než fólie? Co jsou skluzové pásy a dislokační stěny?

„Dislokaci lze charakterizovat pomocí jejího Burgersova vektoru b, který je konstantní po celé délce dislokační čáry u“ u je čára nebo jednotkový vektor v jejím směru? Jestli je to vektor, pak může měnit směr?

„Burgersův vektor můžeme určit jedním z výpočtů v podkapitole 3.4“ Z (3.5) dosaženého do (3.3) a (3.4)?

„Je-li smíšený součinn nulový, dislokační čára se jeví jako klikatá (cikcak kontrast, např. obr. 4.21 c)) nebo s periodicky oscilujícím kontrastem symetrickým podle středu čáry.“ Jak je tohle vidět?

„Na snímcích HEA bez deformace na obr. 4.14 je skluzový pás zobrazený ve světlem poli v orientaci zrna blízko pólu [110].“ Je skluzový pás ta skoro vodorovná řada dislokací? V tom případě není jasné, co zvláštního se děje zrovna v místě, kde jsou šipky v a). Co je pól 110 a jak je vidět v obrázku? Jak jsou vidět hodnoty skalárního a smíšeného součinu v obrázku a co tam je c pro smíšený součinn? Hodnoty g se dostanou z difrakčních obrazců? Jaké souřadnice má u? Asi úvaha by mohla být, že  $b \times u$  je kolmý na b, tedy kolmý na 110, takže musí mít souřadnice (p,-p,q). Aby byl kolmý na  $g=200$ , musí být  $p=0$ , takže  $b \times u=00q$  a smíšené součiny dají hodnoty v obrázcích, pokud položíme  $q=c$ . Jestli tohle je správná úvaha, stálo by za to ji uvést v textu?

•Str. 56:

„z nichž zvolíme první směr.“ Můžeme směr zvolit?

„Na obrázku 4.15 jsou snímky Cantorovy slitiny po deformaci, které zobrazují dislokace ve skluzových pásech i náhodně orientované.“ Které jsou které?

„dvojice dislokačních uzlů, mezi nimiž se nachází dislokace s nulovým kontrastem.“ Tak jak víme, že tam je? Protože jinak by dislokace neudělaly takové ostré rohy? Jestli tohle je důvod, stálo by za to ho napsat?

„je-li v tmavém poli proužek odpovídající hornímu povrchu světlý, je tento součinn kladný a lze určit znaménko posunutí R“ co je proužek odpovídající hornímu povrchu? Jak z něj určíme znaménko skalárního součinu? Co je znaménko vektoru posunutí? Myslíš tím intrinsic nebo extrinsic?

Co jsou špičky označené kroužky v obr. 4.15d)? Jsou tam zase interakce s neviditelnými dislokacemi?

„Dislokace se na ní hromadí (zprava) a některé dislokace jsou pozorovatelné i za ní (vlevo).“ Jak víme, kterým směrem se dislokace pohybují?

Jak z obr. 4.17 poznám, jestli je hranice nízkouhlová nebo vysokouhlová?

•Str. 59:

Jak poznám osu zóny -112 v obr. 4.18?

„Na obrázku 4.20 a), který byl pořízen bez difrakčního kontrastu, je z důvodu zvětšující se tloušťky fólie směrem nahoru patrná snižující se intenzita v důsledku hmotového-tloušťkového kontrastu“ co je difrakční a co hmotový-tloušťkový kontrast? Nahoru se zmenšuje intenzita ale zvětšuje kontrast?

„což se projevilo zdvojením difrakčních stop označených TP1 a TP3 na obr. 4.22 a).“ já teda vidím zdvojení spíš u jiných, zejména napravo od TP1 a nalevo od TP2.

•Str. 68:

„Rozptýlený svazek, který byl původně blíž optické ose a tedy intenzivnější, se po difrakci od optické osy víc odchýlí a vznikne světlá linie, zatímco linie blíž směru primárního svazku bude tmavá.“ V obr. 4.23a jsou tmavé linie po celém obrázku?

•Str. 72:

Dvě platné číselnice u hodnot hustoty dislokací v tabulce odpovídají chybě určení hodnot?