Reális kristályok, rácshibák

Dr. Szabó Péter János
szpj@eik.bme.hu

Anyagszerkezettan és anyagvizsgálat
BMEGEMTBGA1

Reális kristályok

- Gyakorlati fémek szilárdsága kevesebb, mint 1 %-a az ideális modell alapján számítható szilárdságnak
- Tiszta Si villamos vezetőképességét 10^{-8} tömegszázalék bór adalékolása a kétszeresére növeli
- KRISTÁLYHIBÁK

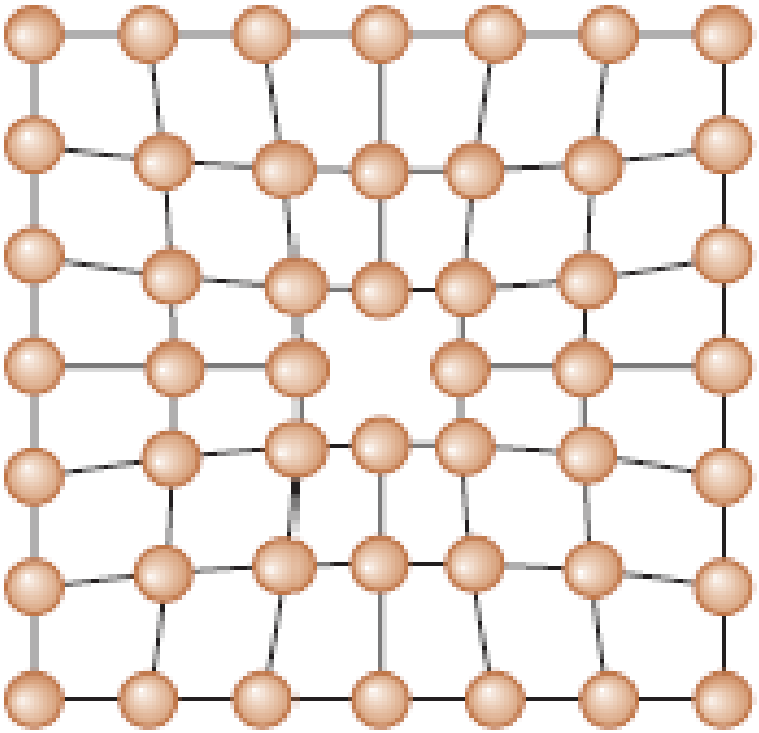
Kristályhiba-típusok

- Ponthibák (0 dim.)
- Vonalszerű hibák (1 dim.)
- Felületszerű hibák (2 dim.)
- Térfogati hibák (3 dim.)

Ponthibák típusai

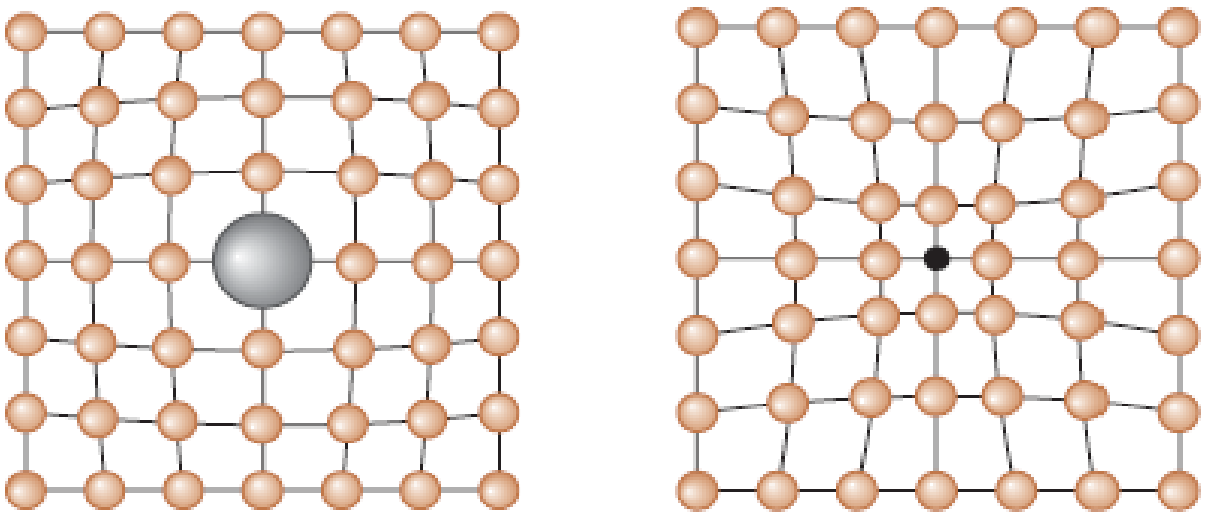
- Vakancia
- Szubsztitúciós atom
- Intersztíciós atom
  - saját
  - idegen

Vakancia



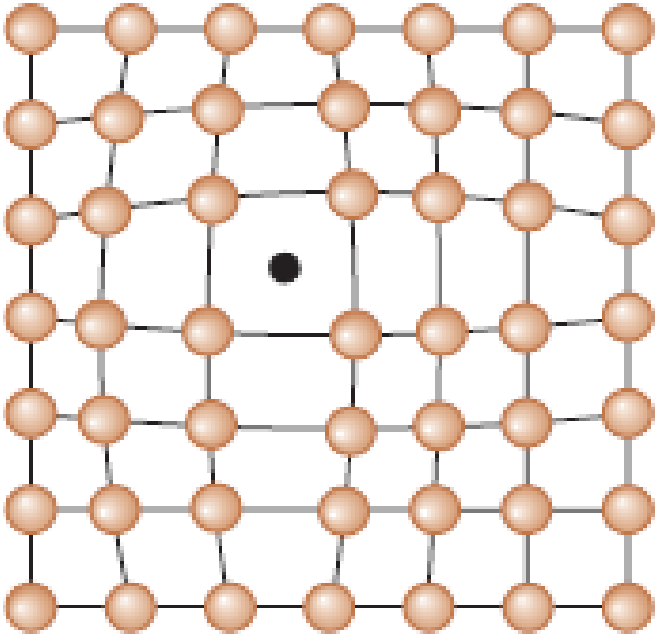
Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.

Szubsztitúciós atom



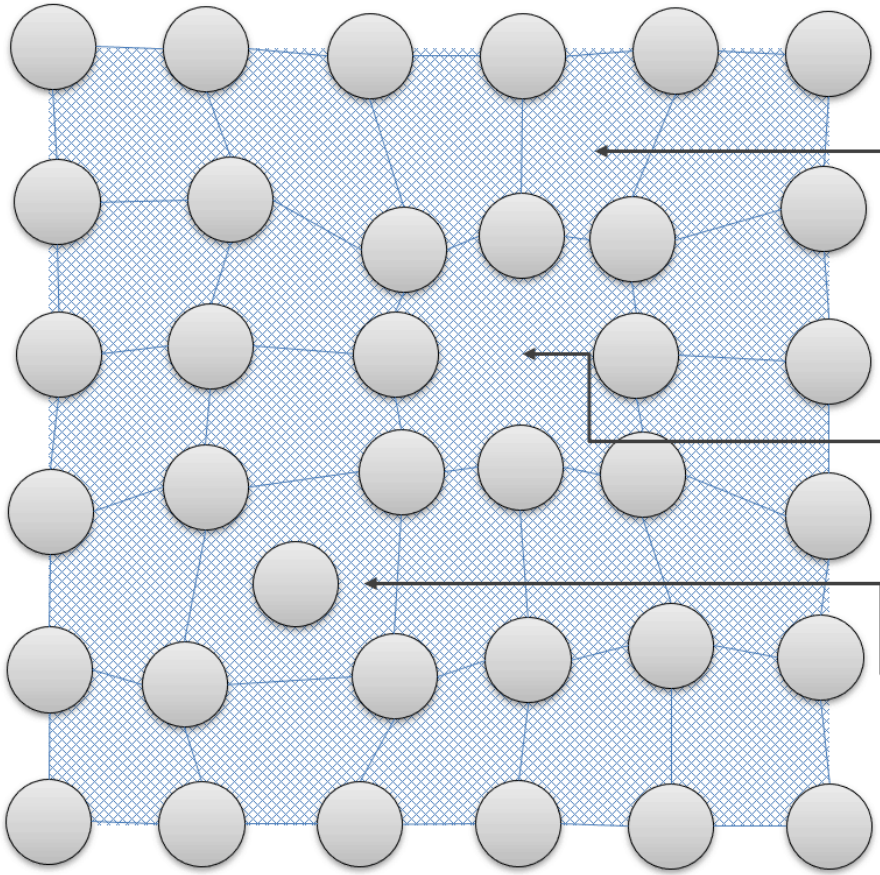
Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.

Intersztíciós atom

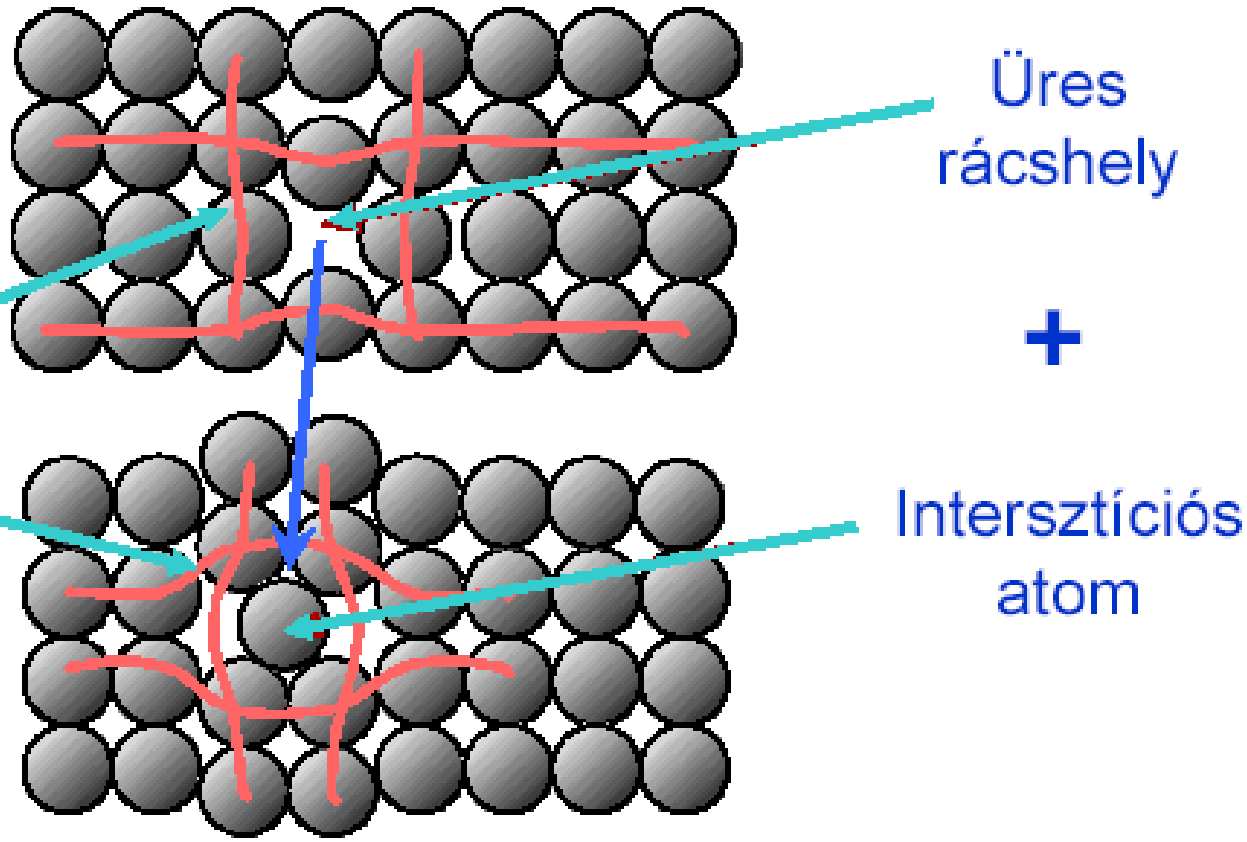


Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.

Frenkel-mechanizmus

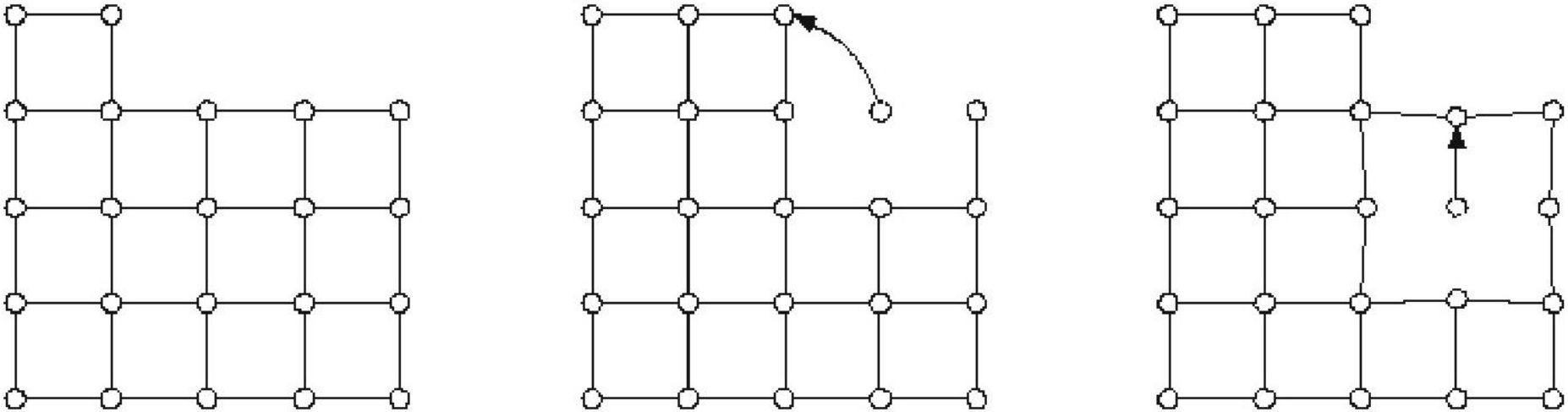


Frenkel-mechanizmus

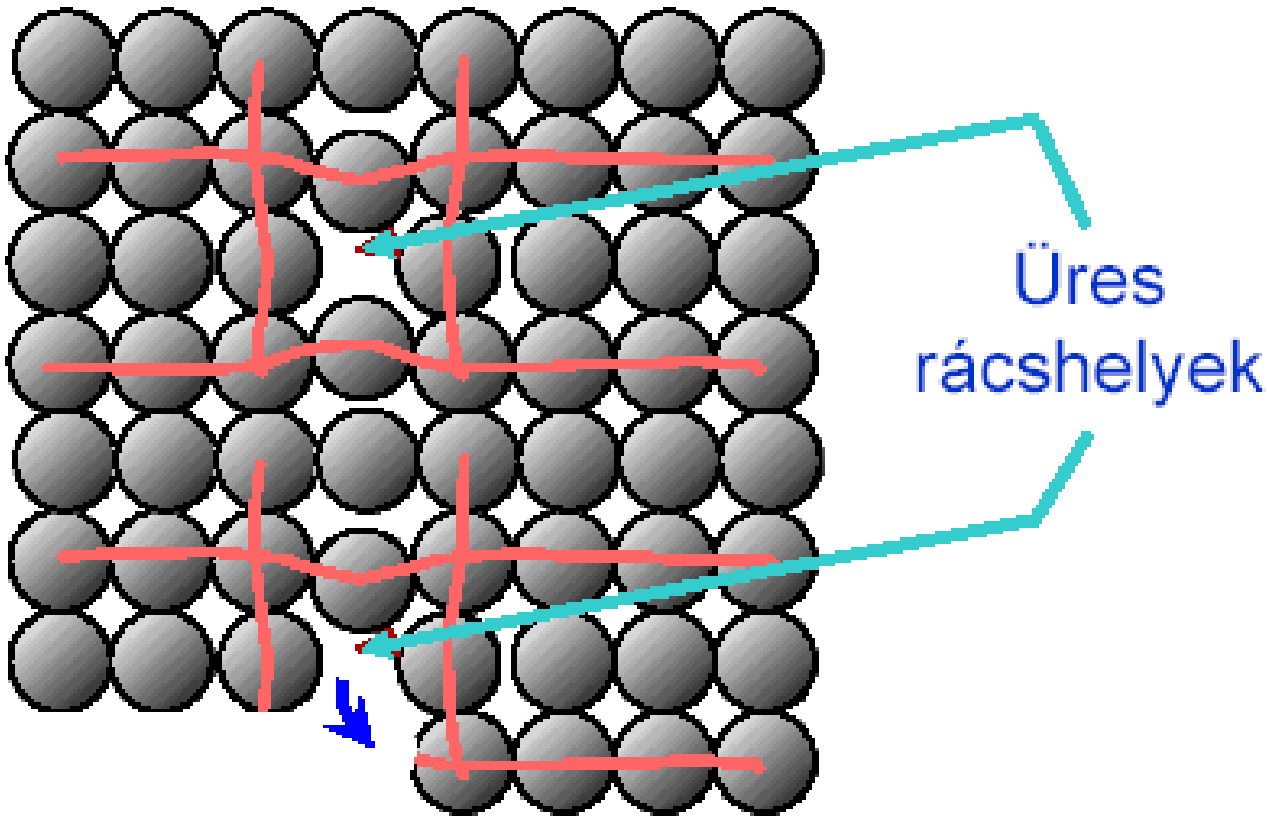


$$\frac{n_{ü}}{N} = \exp\left(-\frac{Q_{ü}}{kT}\right)$$

Wagner-Schottky mechanizmus



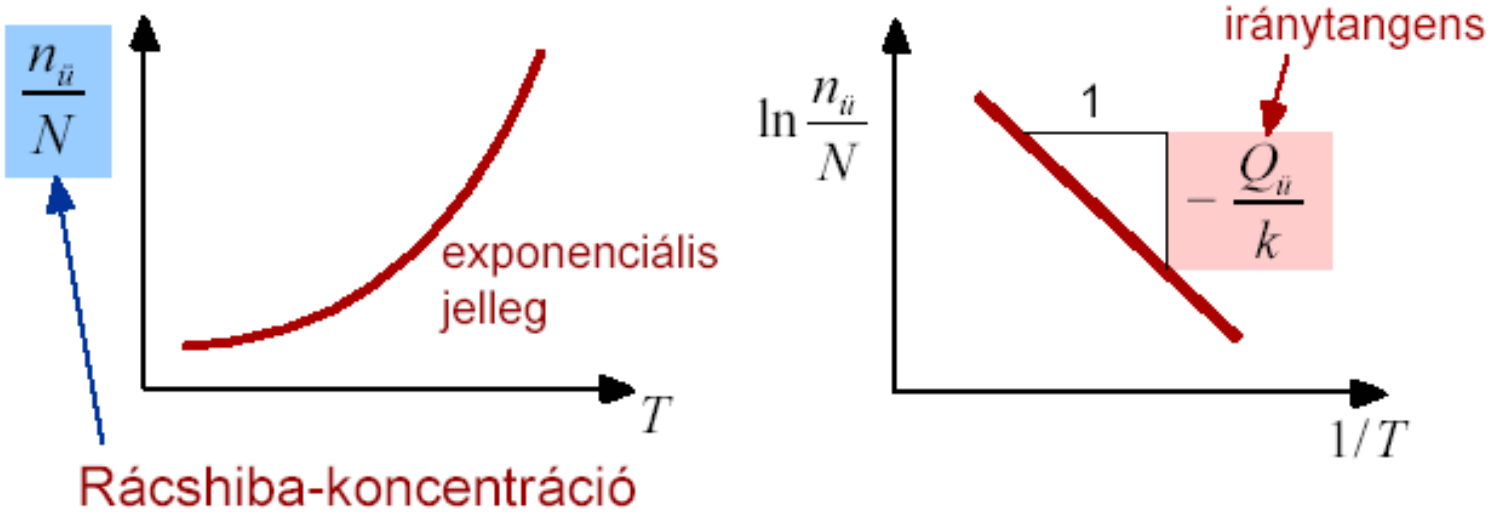
Wagner–Schottky mechanizmus



Ponthibák létrejötte

- Besugárzás hatására
  - Besugárzó részecskék kiütik a rácsatomokat a helyükről (pl. Frenkel-hibapárok)
- Hő hatására

$$\frac{n_{ü}}{N} = \exp\left(-\frac{Q_{ü}}{kT}\right)$$

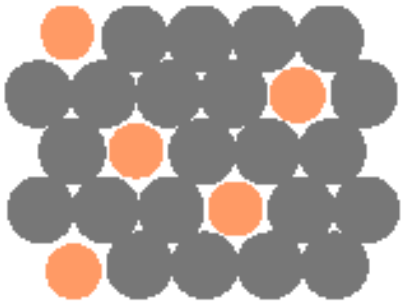


Példa

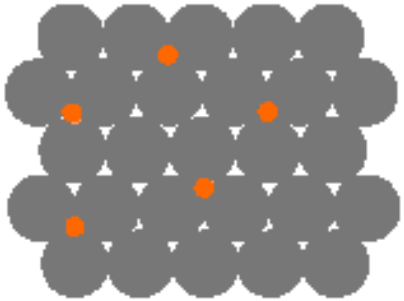
- Mennyi vakanciát kell létrehoznunk a vasban ahhoz, hogy a sűrűsége 7,87 g/cm^3 legyen?

Ponthibák ötvözetekben

- Szilárd oldat: alapfém (A) + oldott atom (B)



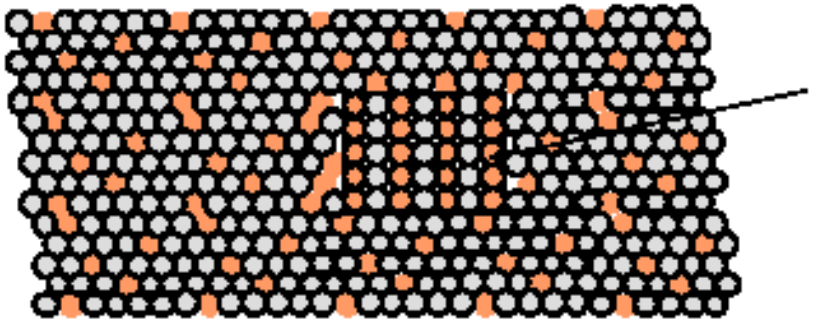
vagy



Szubsztitúciós szilárd oldat
(pl. Ni-alapfém + Cu-ötvöző)

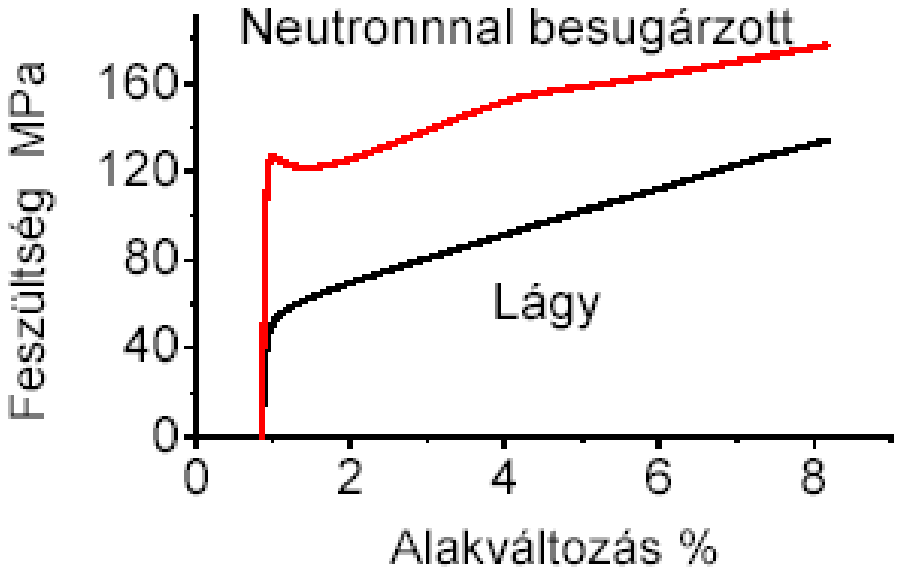
Intersztíciós szilárd oldat
(pl. Fe-alapfém + C-ötvöző)

- Szilárd oldatban (A + B) új második fázis is keletkezhet

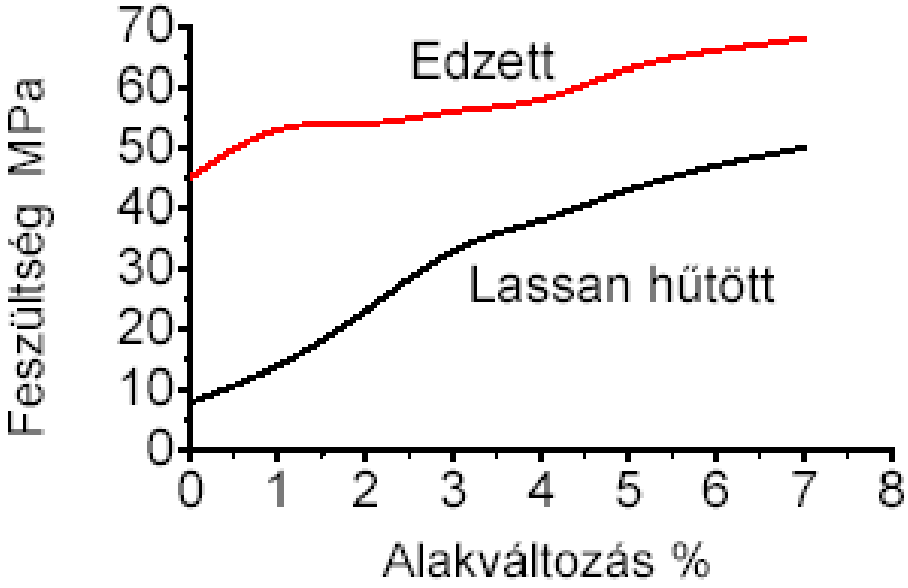


Második fázisú részecske
– különböző összetétel
– különböző szerkezet

Ponthibák hatása



Alumíniumra



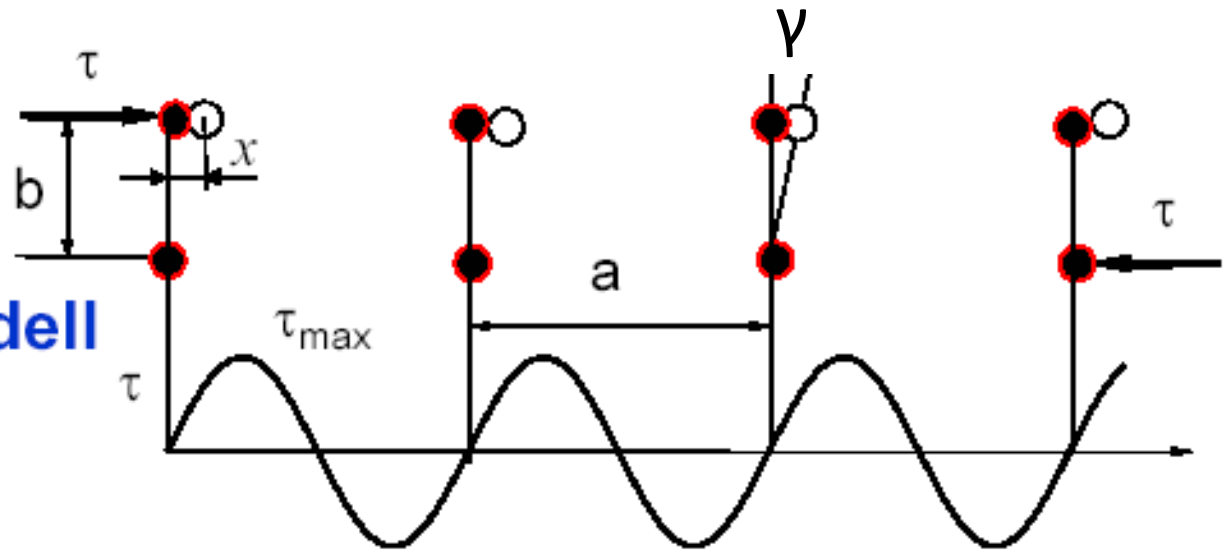
Rézre

Vonalszerű (1 dimenziós) rácshibák

- Fémek elméleti és mért folyáshatára között óriási eltérés, nem magyarázható mérési hibával
- Diszlokációelmélet: az alakváltozás nem egy lépésben történik → diszlokációk mozgása

Elméleti folyáshatár

Frenkel-modell



$$\tau = \tau_{max} \sin\frac{2\pi x}{a}, \quad \text{kis elmozdulásra } \tau = \tau_{max}\frac{2\pi x}{a}$$

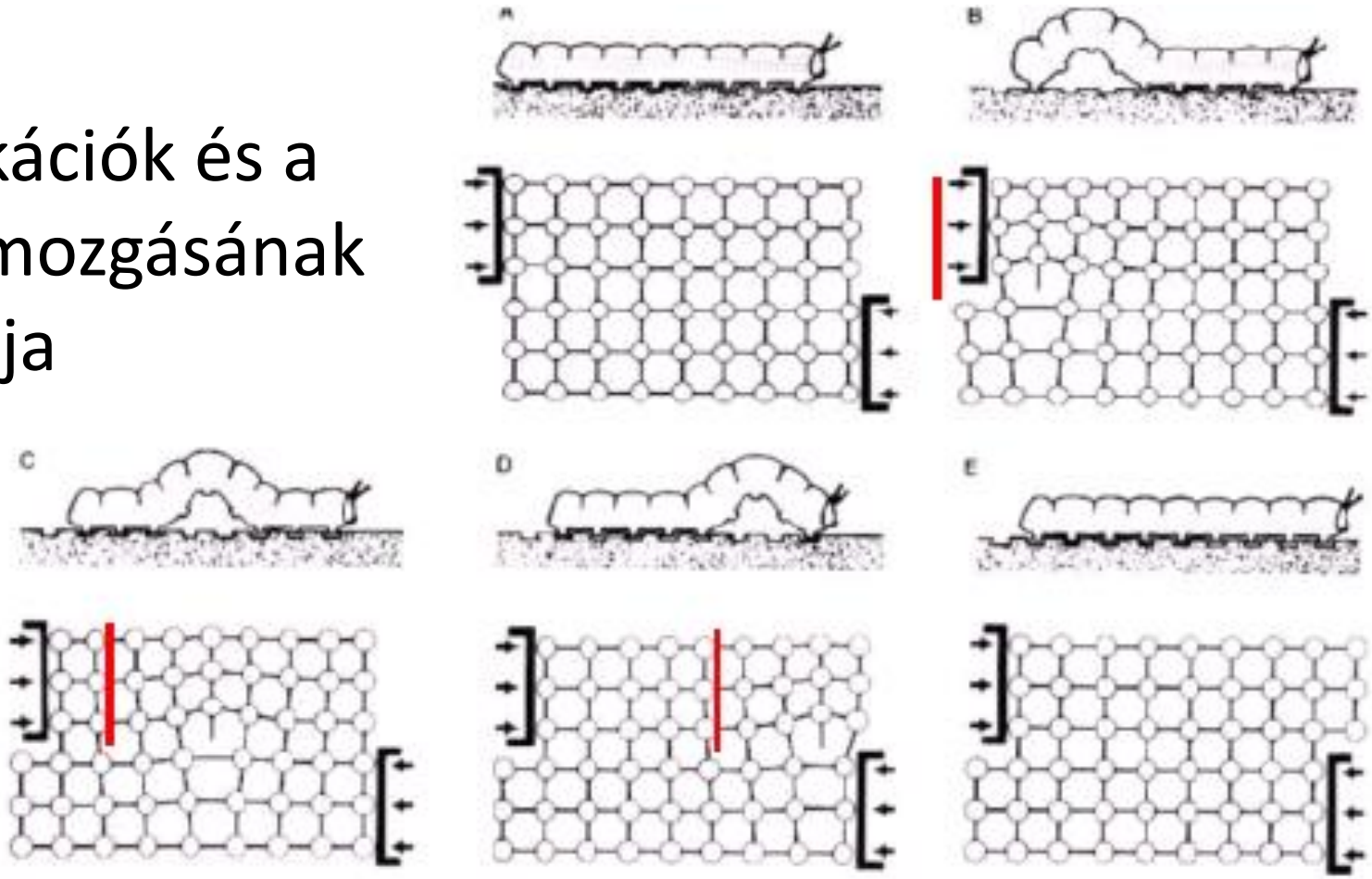
$$\tau = G\gamma = G\frac{x}{b} = \tau_{max}\frac{2\pi x}{a} \Rightarrow \tau_{max} = \frac{a}{b}\frac{G}{2\pi} \approx \frac{G}{2\pi}$$

Fe: τ_{maxelm} = 12960 MPa $\tau_{maxmért}$ = 27 MPa (0,21%)

Al : τ_{maxelm} = 4200 MPa $\tau_{maxmért}$ = 1 MPa (0,023%)

Diszlokációk mozgása

A diszlokációk és a hernyó mozgásának analógiája



Diszlokációk

- Tűkristály (whisker, 1950) kondenzátor Zn, d = 0,1- 0,001 µm
- 1934: Francis Taylor, Orován Emil, Polányi Mihály
- 1960: TEM

Definíció
Diszlokáció: az elcsúszott és nem elcsúszott tartományok határolóvonala.

Éldiszlokáció

Csavardiszlokáció

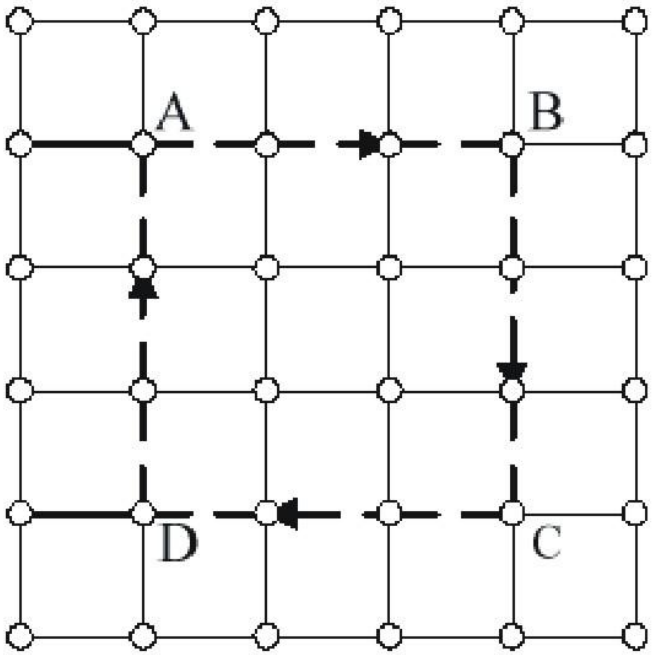
Vegyes diszlokáció

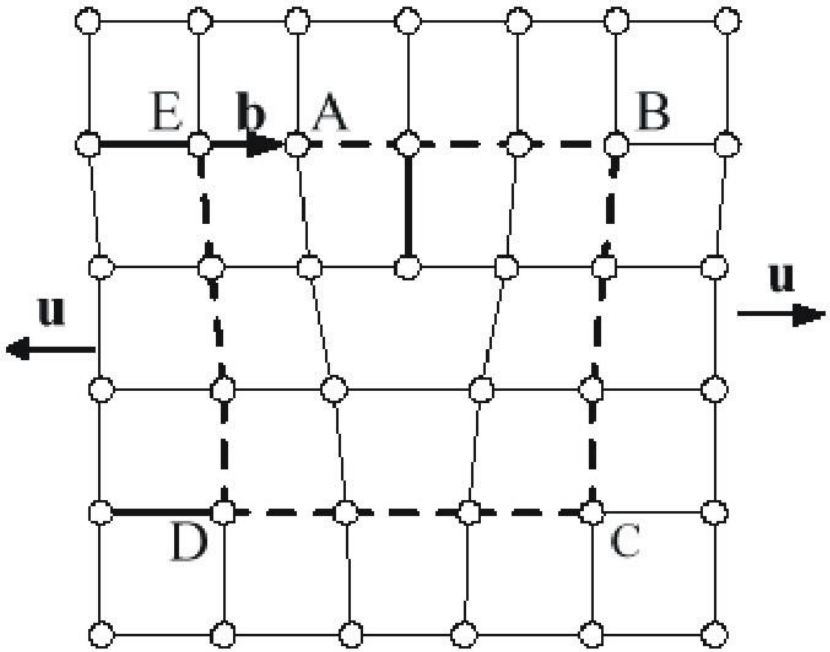
Teljes (perfekt) diszlokáció

Parciális diszlokáció

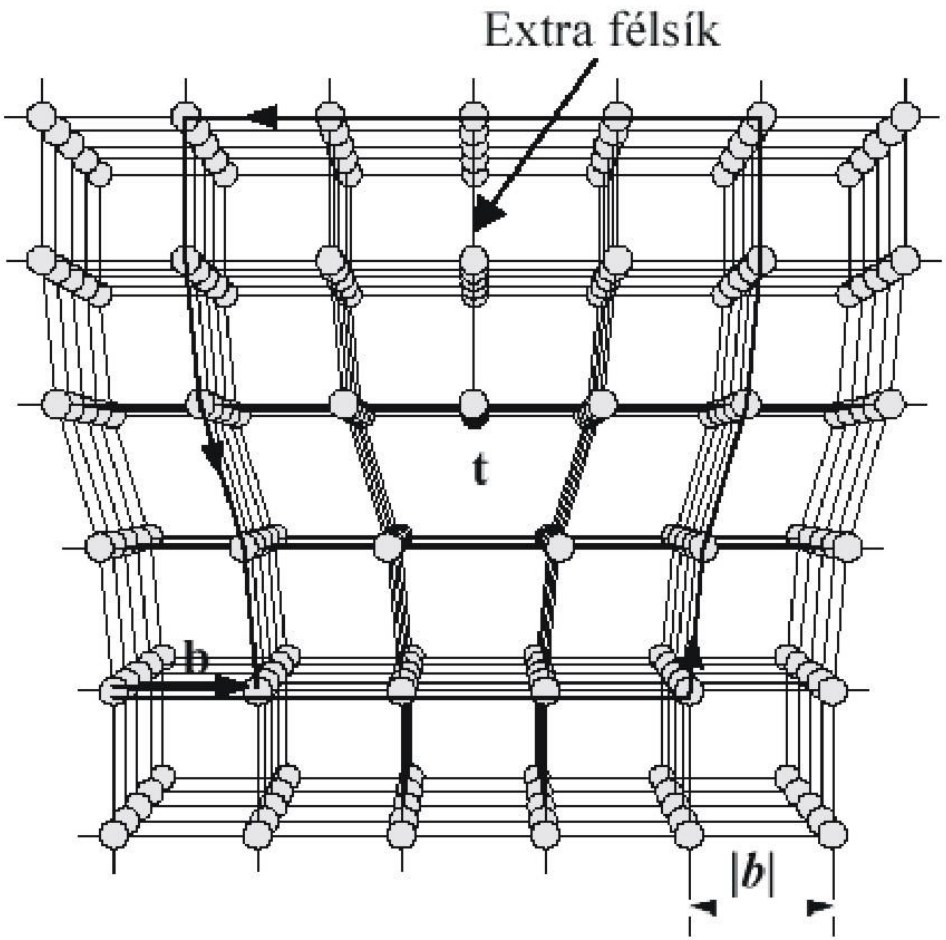
Diszlokáció

Burgers-kör





Éldiszlokáció



Diszlokáció vonala: **l**

Csúszósík adott

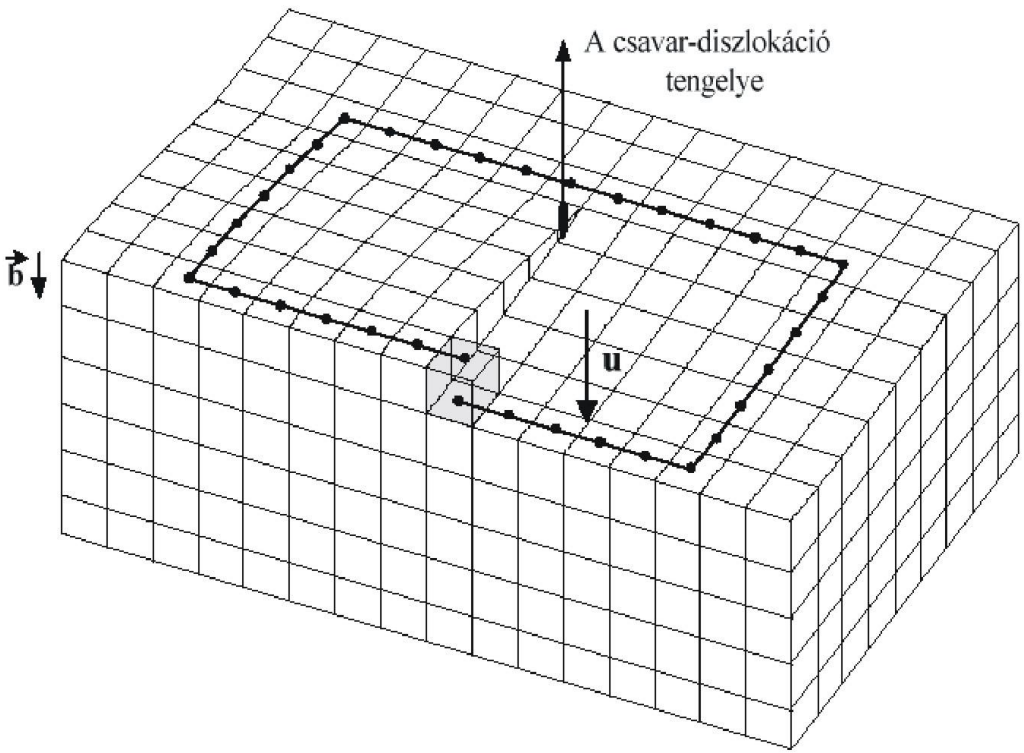
$\Rightarrow$ nem mozgékony

Extra sík

Burgers vektor: **b**

$\mathbf{b} \perp \mathbf{l}$

Csavardiszlokáció



Diszlokáció vonala: **l**

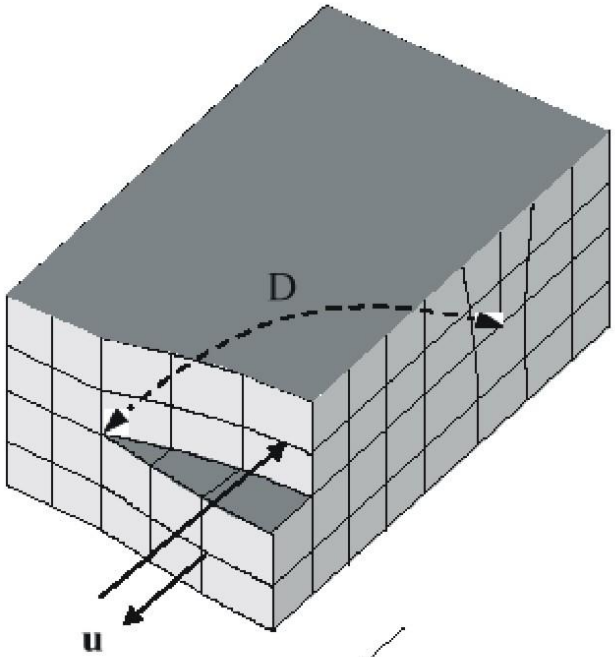
Nincs egyértelmű csúszósík
$\Rightarrow$ mozgékony

Extra sík nincs !

Burgers vektor: **b**

b ll **l**

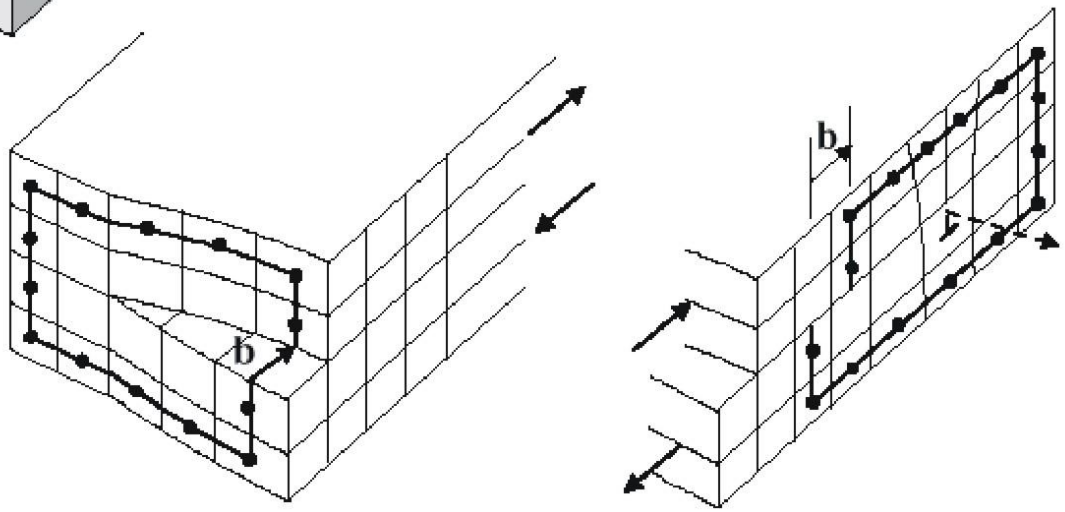
Összetett diszlokáció



Részleges elcsúszás

Térgörbe hálózat

0 - 90°



Diszlokációk alapvető tulajdonságai

- Diszlokáció: elcsúszott és nem elcsúszott részek határa
- Lineáris (lehet görbe)
- Felületen kezdődik és végződik, vagy kristályban záródó görbe
- Az elmozdulás mértéke a diszlokáció egésze mentén állandó
- Burgers vektor a legsűrűbb irányban fekszik és |b| = d

Diszlokációk energiája

Feszültség (nyomó , húzó)

Energiatöbblet

$$W_{cs} = Gb^2 l$$

$$W_{él} = \frac{Gb^2 l}{1-\nu}$$

$$\nu = \frac{\varepsilon_{merőleges}}{\varepsilon_{párhuzamos}}$$

$$\sigma = E \cdot \varepsilon$$

$$\tau = G \cdot \gamma$$

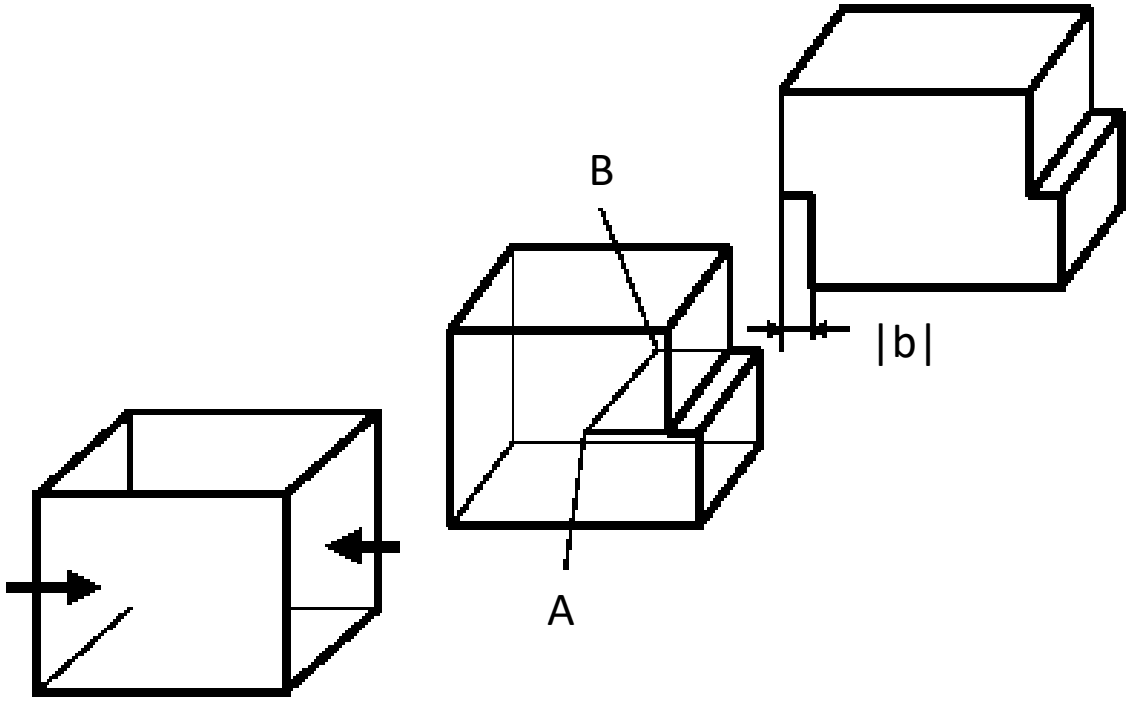
$$E = 2G(1+\nu)$$

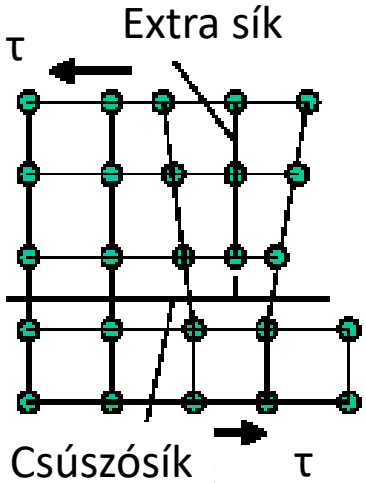
Diszlokációk szerepe a képlékeny alakváltozásban

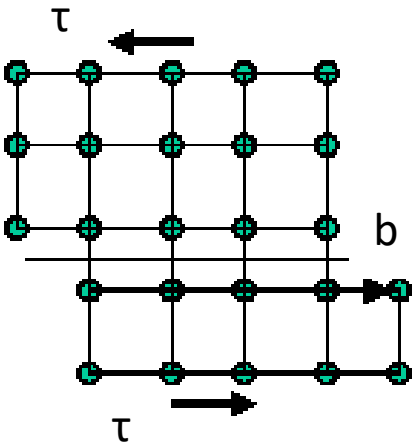
képlékeny alakváltozás

↕

diszlokációk mozgása







Diszlokációsűrűség változása képlékeny alakváltozás során

Jele: ρ_D

Mértékegysége: $\frac{1}{m^2} = \frac{m}{m^3}$

Definíciók

Lágyított: 10^{10}-10^{11} m^{-2}

Alakított: 10^{14}-10^{15} m^{-2}

Diszlokációk mozgásának szabályai

Diszlokáció csak abban a síkban tud csúszni amelyben a vonala és a Burgers vektora fekszik.

$\Rightarrow$ Éldiszlokáció: 1 sík

$\Rightarrow$ Csavardiszlokáció: ∞ sík (elméletileg)

Diszlokáció mozgása mindig a legsűrűbb síkban és a legsűrűbb irányban történik. $\Rightarrow$ **Csúszási rendszerek**

Csúszósík váltás

Csavar $\rightarrow$ keresztcsúszás

Él $\rightarrow$ mászás $\rightarrow$ kúszás (tartós folyás, creep) $\rightarrow$ üregek a szemcsehatáron

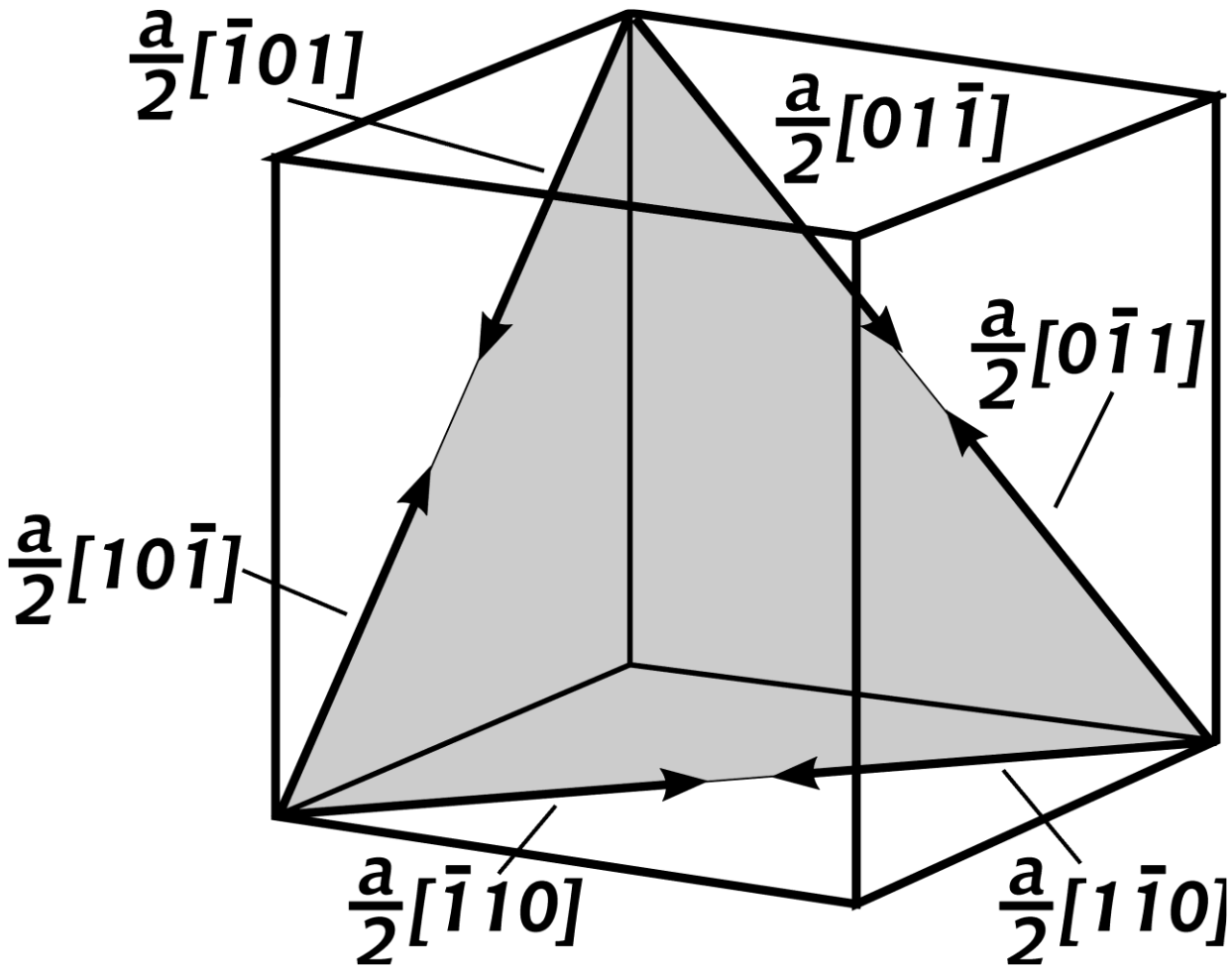
Csúszási rendszerek

Csúszási rendszer: csúszósík + irány

Kristály szerkezet	Csúszó sík	Csúszási irány	Nem párhuzamos síkok száma	Síkonkénti csúszási irány	Csúszási rendszerek száma
p.k	$\{100\}$	$\langle 100 \rangle$	3	2	6=3x2
t.k.k	$\{110\}$	$\langle 111 \rangle$	6	2	12=6x2
f.kk	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	4	3	12=4x3
hex	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	1	3	3=1x3

Tetszőleges csúszási rendszerhez azonos kritikus csúsztatófeszültség tartozik.

Lehetséges elcsúszások, FKK (111)



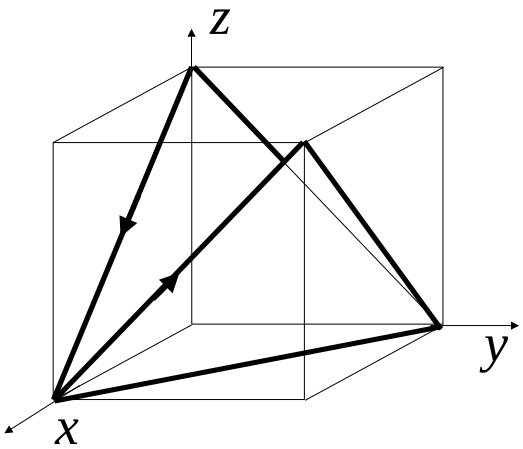
Példa

FKK egykristályban a két berajzolt csúszósíkon egy – egy diszlokáció mozog (Burgers-vektoraik iránya az ábrán bejelölve látható).

Határozza meg

a) a csúszósíkok és a Burgers-vektorok Miller-indexét

b) A diszlokáció-reakcó eredményeként létrejövő új diszlokáció Burgers-vektorát és diszlokációs vonalát!



Diszlokációk kölcsönhatása

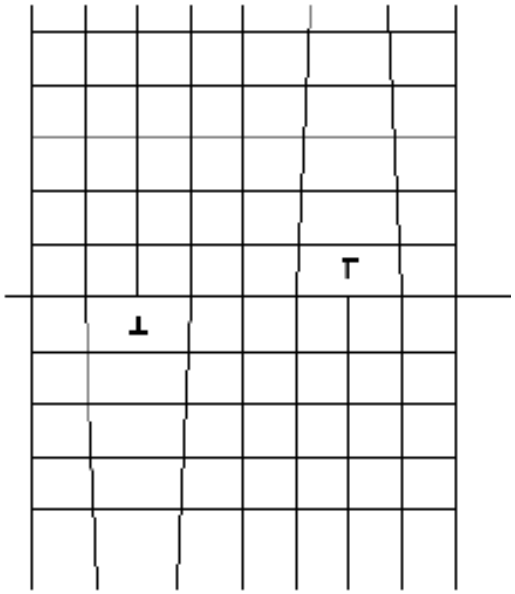
Ellentétes előjelű él-, sodrású csavardiszlokációk kioltják egymást.

Ellentétes előjelű diszlokációk kölcsönhatása:

$\theta = 45°$ egyensúly

$\theta < 45°$ taszítás

$\theta > 45°$ vonzás



Azonos előjelű diszlokációk kölcsönhatása:

sorba rendeződnek $\Rightarrow$ kisszögű szemcsehatár

Egyesülhetnek, felbomolhatnak (Energetikai feltétel)

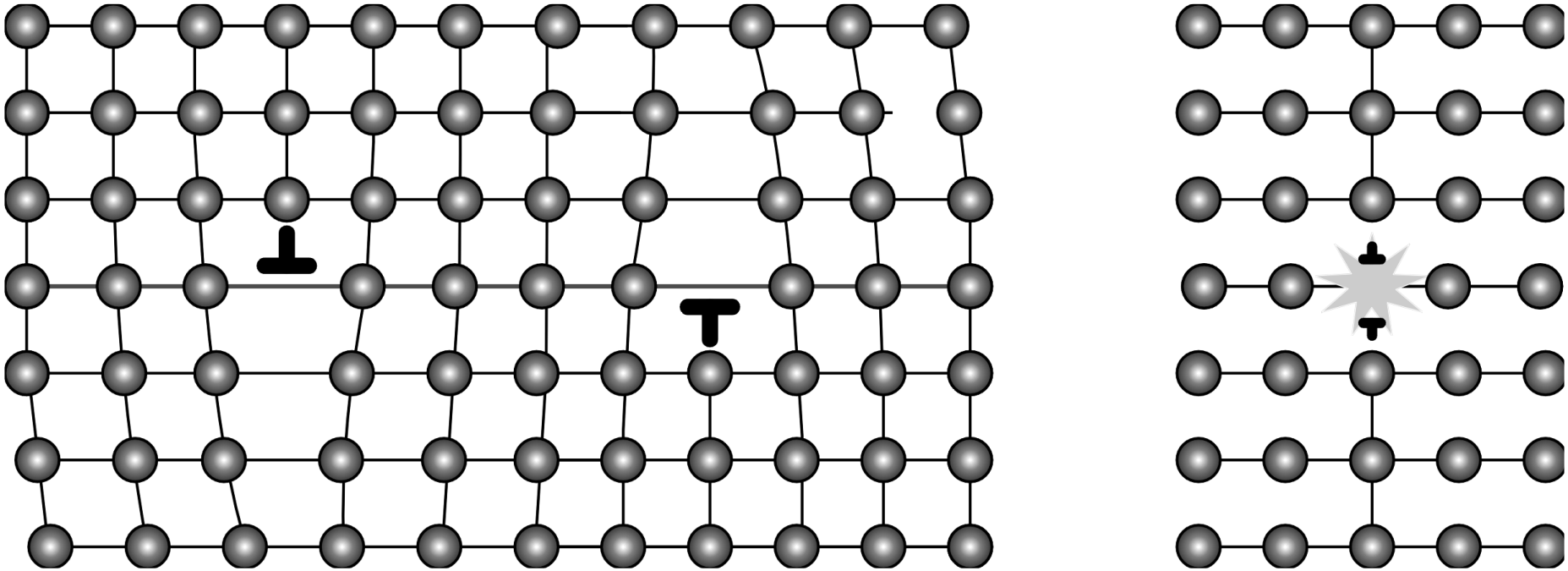
$$\bar{b}_1 + \bar{b}_2 \Leftrightarrow \bar{b}_{eredő}$$

$$\bar{b}_{eredő}^2 = \bar{b}_1^2 + \bar{b}_2^2 + 2\bar{b}_1\bar{b}_2$$

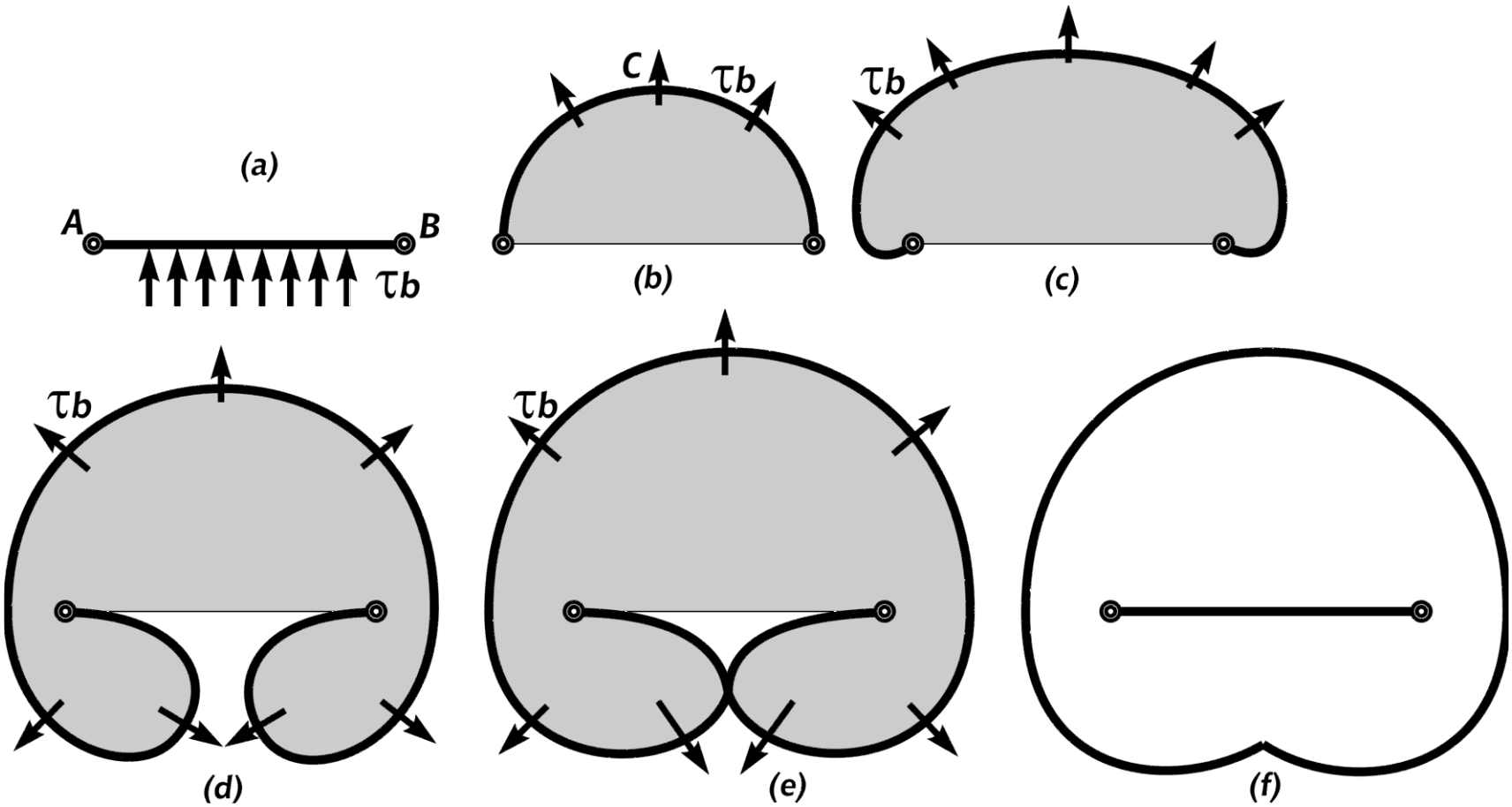
$\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 < 0$ (tompaszög) $\Rightarrow$ egyesülnek

$\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 > 0$ (hegyesszög) $\Rightarrow$ felbomlik

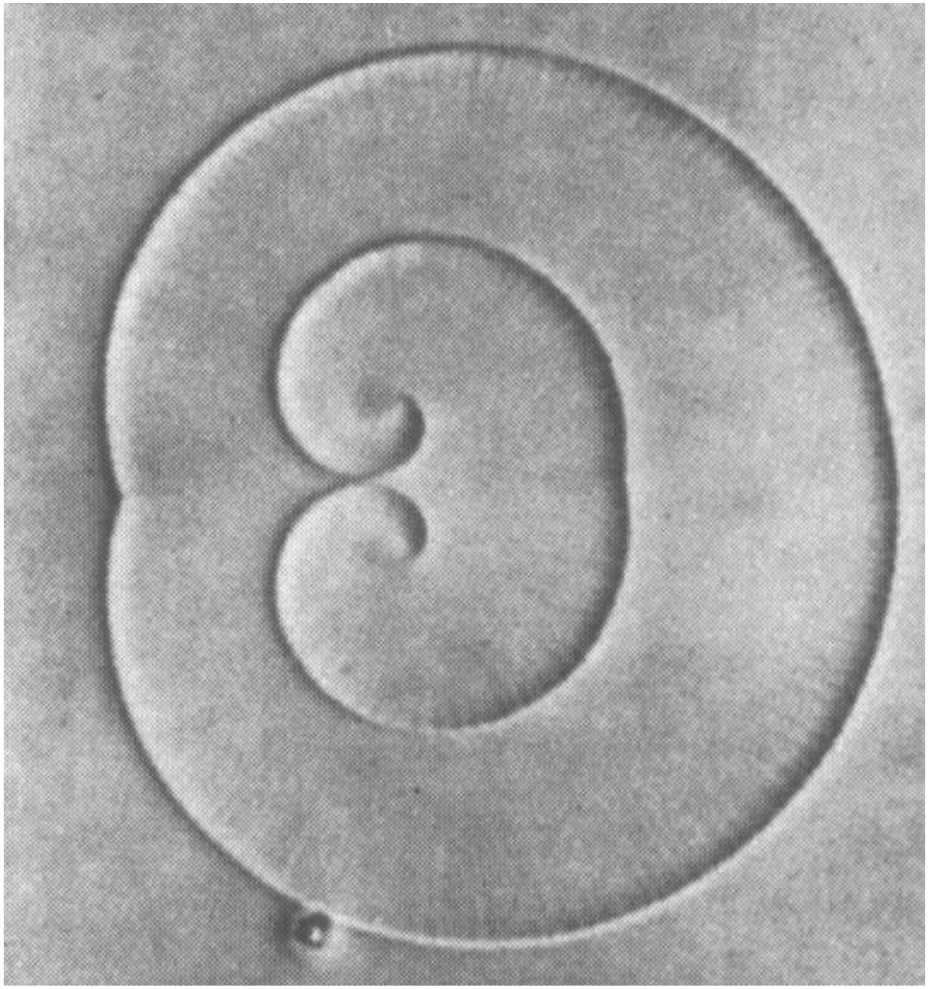
Éldiszlokációk eltűnése

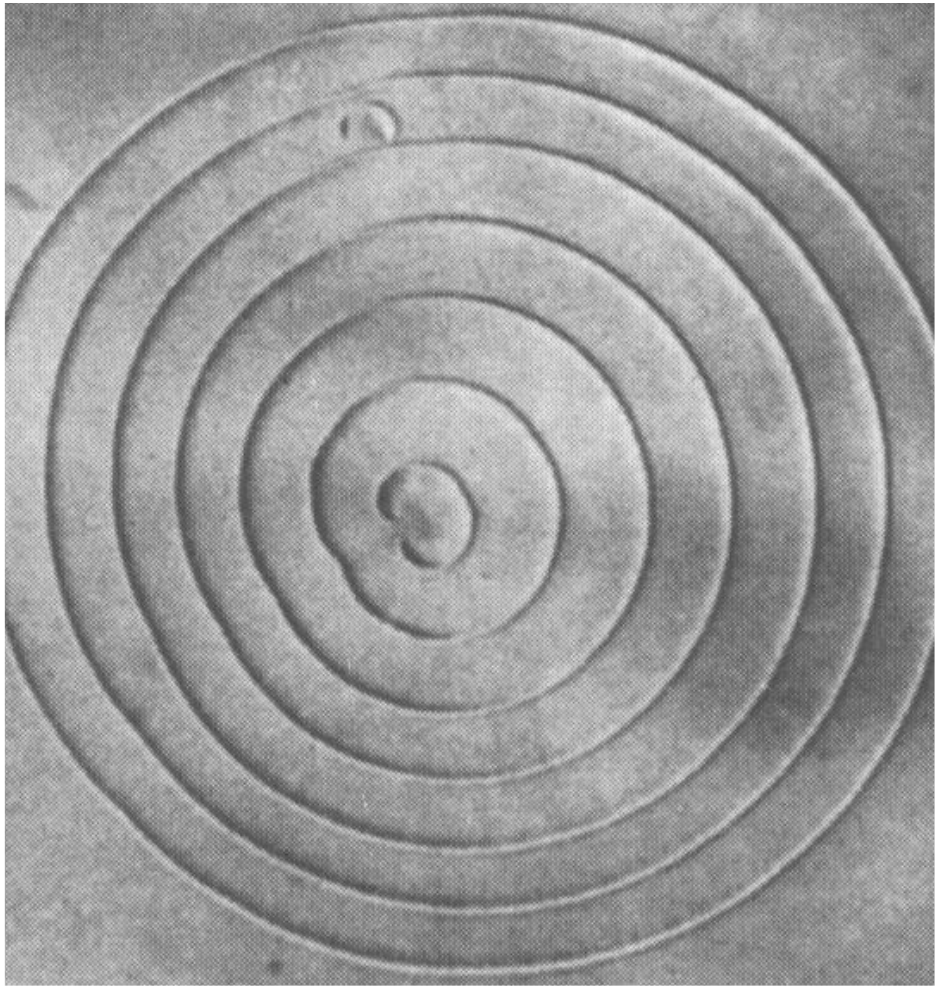


Frank-Read mechanizmus/forrás



Frank–Read forrás TEM képe



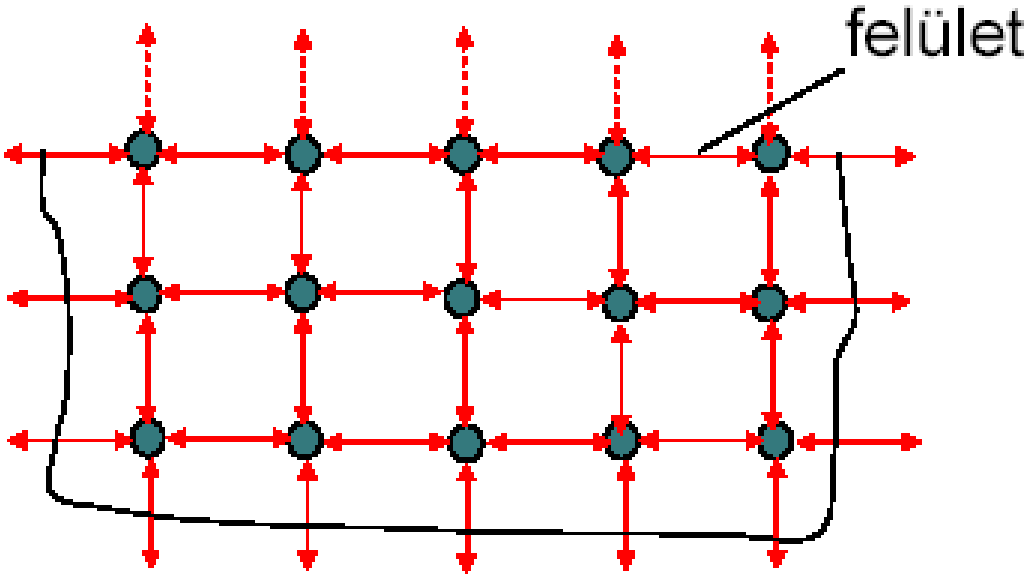


Felületszerű rácshibák

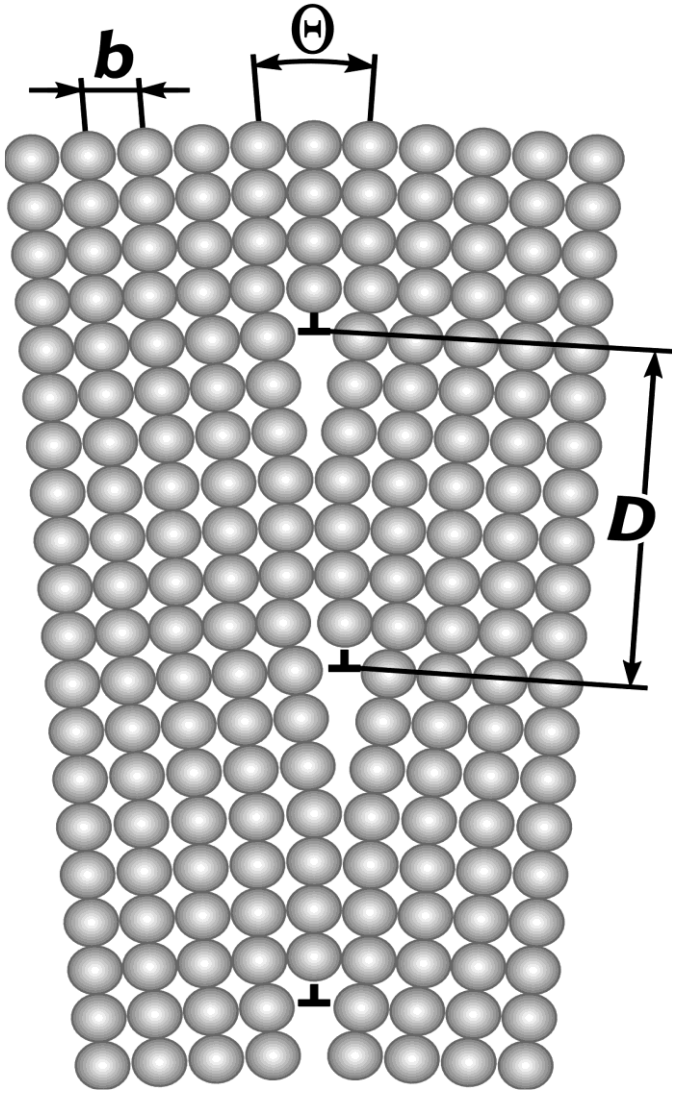
- Makroszkopikus felület
- Szemcsehatárok
  - Kisszögű szemcsehatár
  - Nagyszögű szemcsehatár
- Fázishatárok
  - Koherens fázishatár
  - Szemikoherens fázishatár
  - Inkoherens fázishatár
- Ikerhatár
- Rétegződési hiba

Makroszkopikus felület

- A kristály felületén az atomok magasabb energiaszinten vannak, mint a kristály belsejében, mivel nem jön létre minden irányban atomi kötés.
- A felület energiaszintje csökken, ha a felülethez újabb atomok kapcsolódnak.
- Oxidrétegek kialakulása.
- Kémiai reakciók.



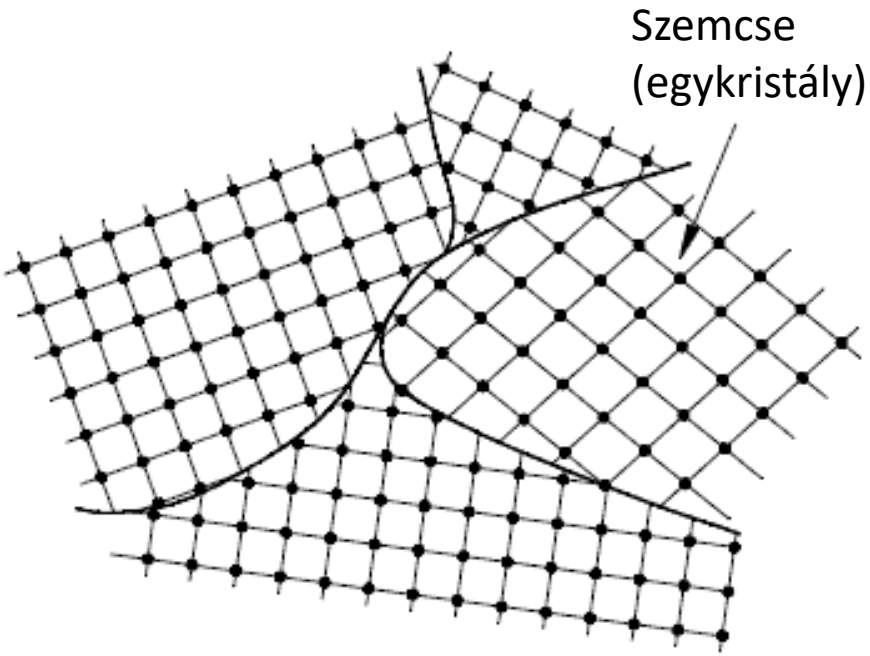
Kisszögű szemcsehatár



Azonos előjelű diszlokációk egymás alá rendeződése

$\Theta < 5º$

Nagyszögű szemcsehatár

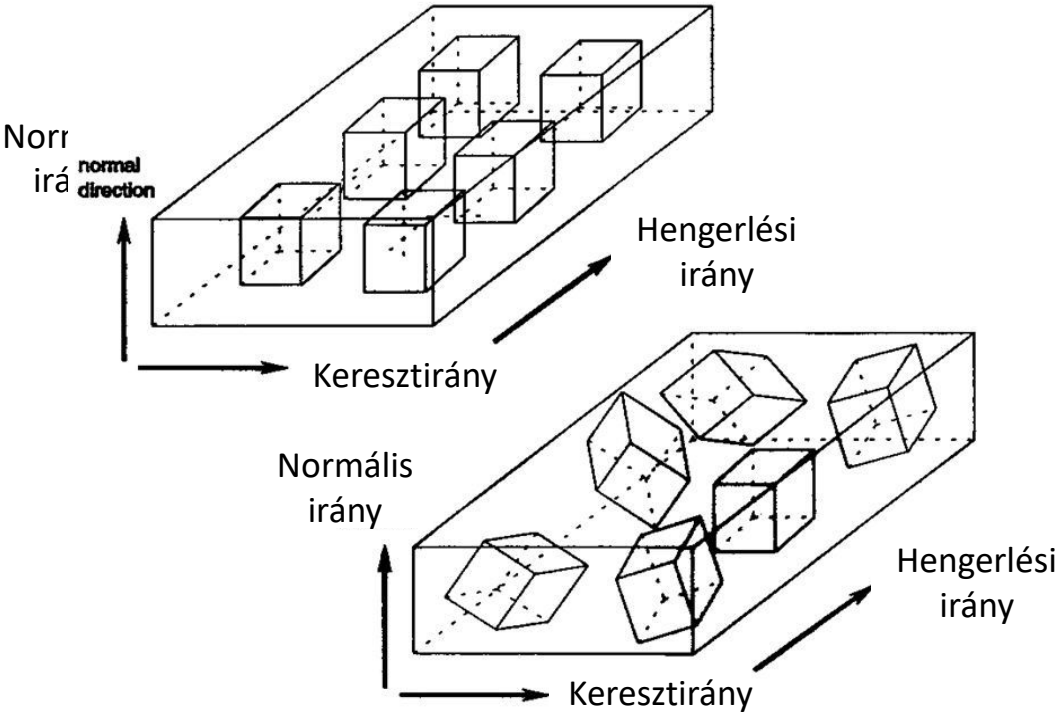


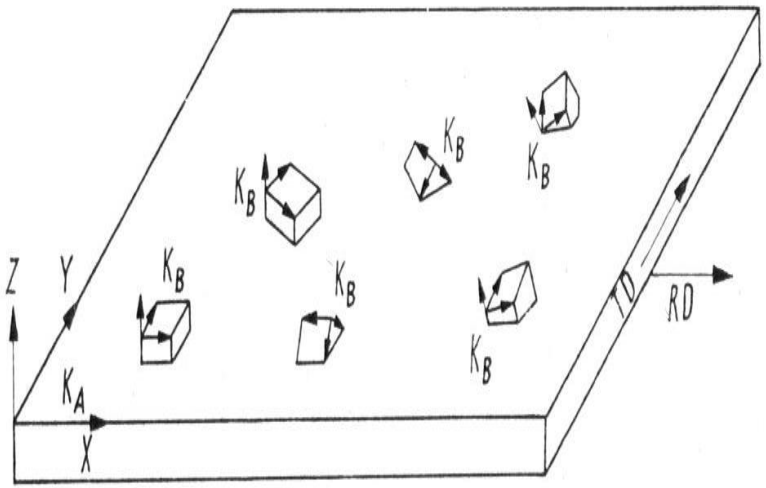
(B)

A dermedés során a véletlen orientációjú kristálycsírák összenőnek.

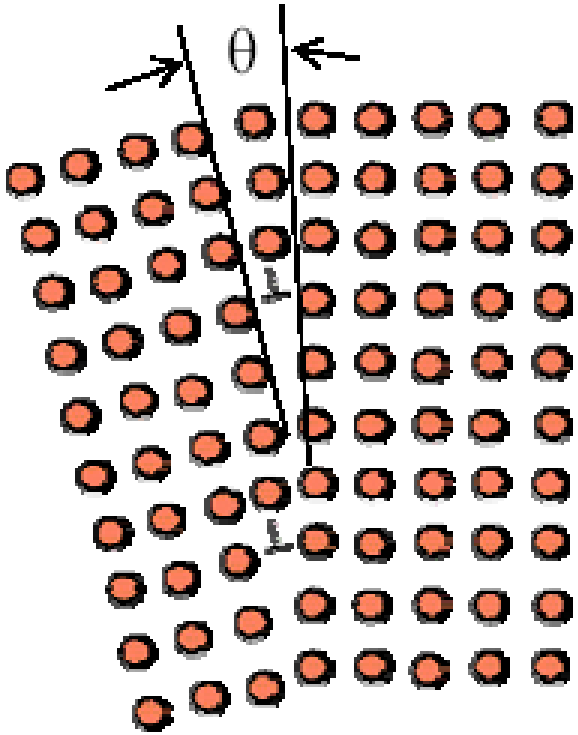
Az egyes szemcsék csak orientációjukban különböznek.

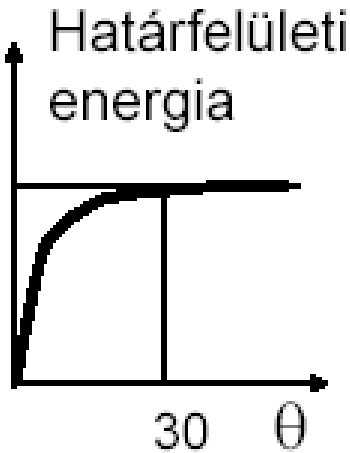
Orientáció

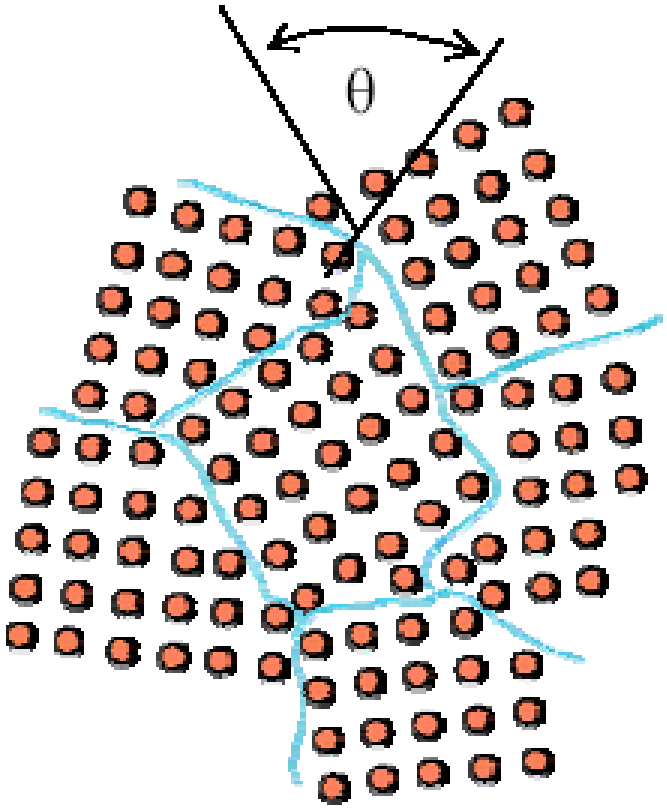

Norr
irá
normal direction
Hengerlési irány
Keresztirány
Normális irány
Hengerlési irány
Keresztirány


Z
Y
X
K_A
K_B
TD
RD

Kis- és nagyszögű határ összehasonlítása







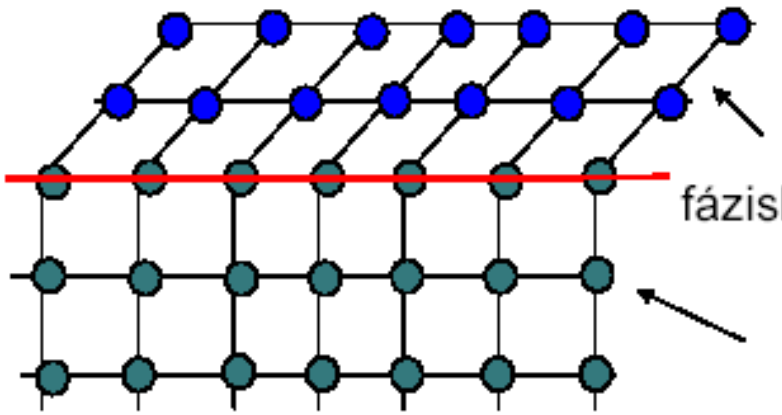
Kisszögű szemcsehatár
$\theta<5^o$

Nagyszögű szemcsehatár
$\theta>15^o$

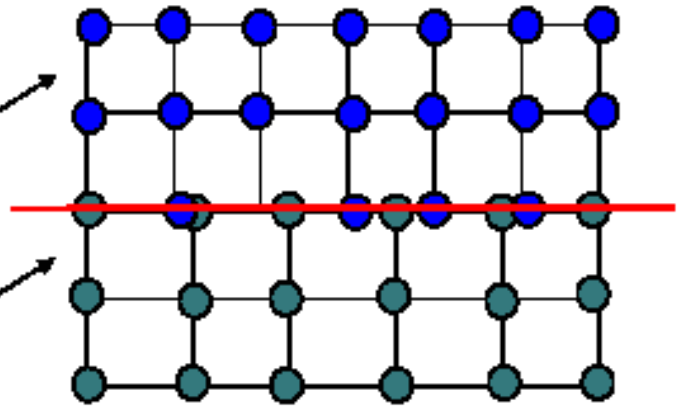
Fázishatárok

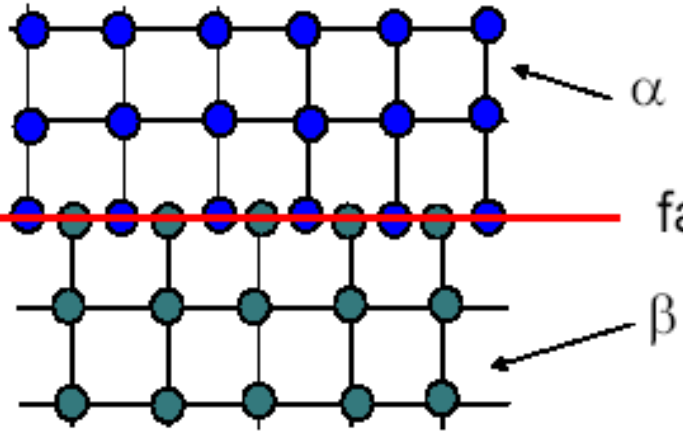
Koherens

Kis felületi energiájú hiba



Szemikoherens

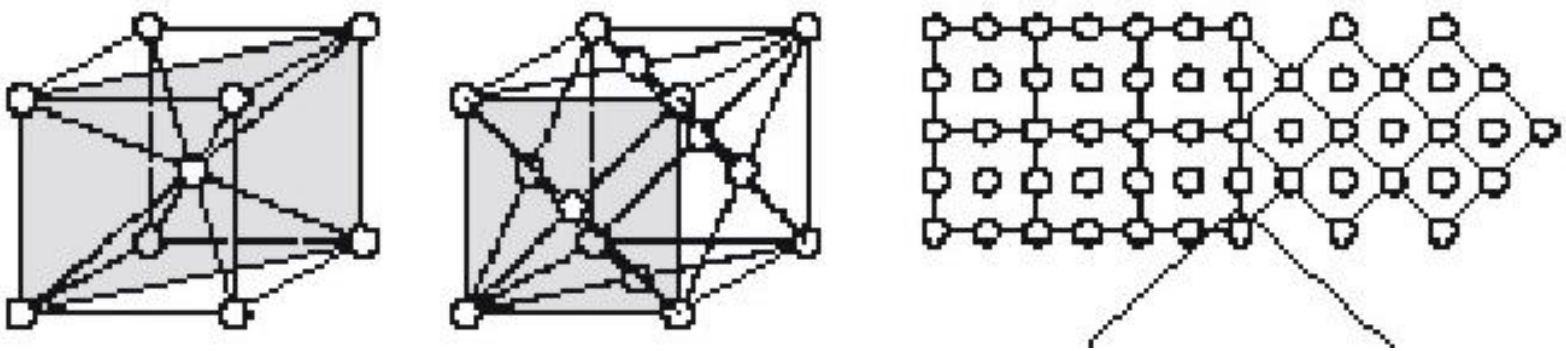




Inkoherens

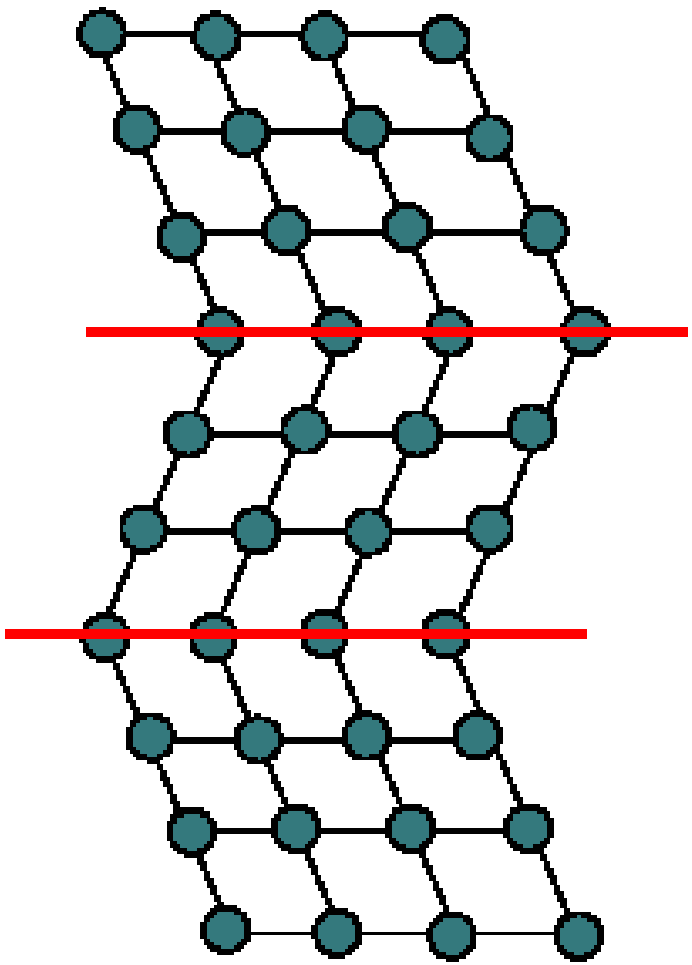
Nagy felületi energiájú hiba

Koherens fázishatár



- A határ két oldalán azonos atomok vannak
- Mindkét fázisban lehet találni olyan síkot, ahol az atomos elrendeződés megegyezik
- A fázishatáron a két fázis kristálytani elrendeződéséből következik (tehát adott) az orientáció-különbség

Ikerhatár

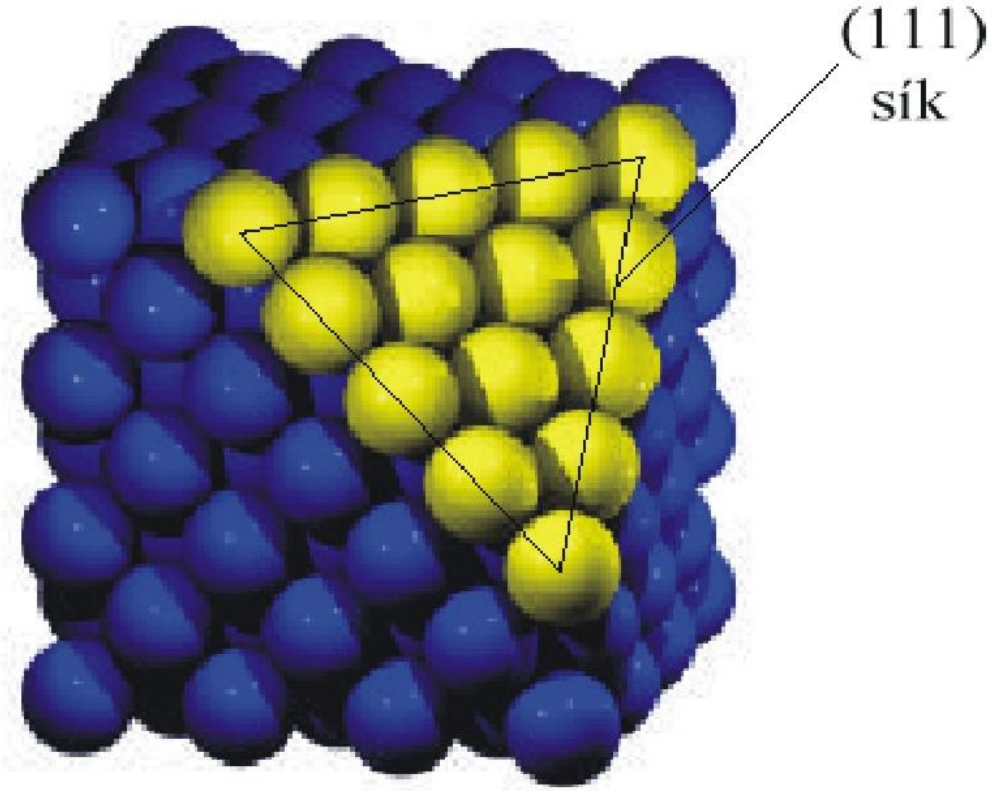


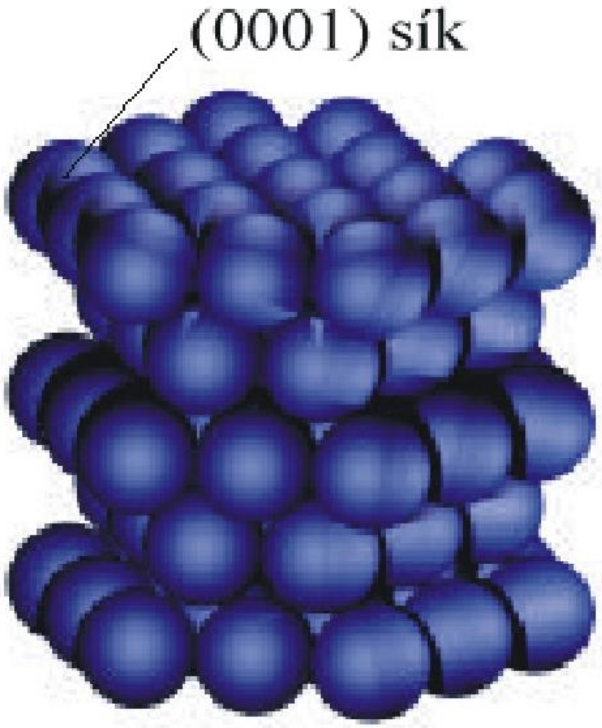
- Koherens határ, mindkét oldalon azonos fázis van
- A határ két oldala egymás tükörképe
- Keletkezhet kristályosodáskor és képlékeny alakváltozáskor, elsősorban az FKK és HCP kristályokban

Ikerhatár

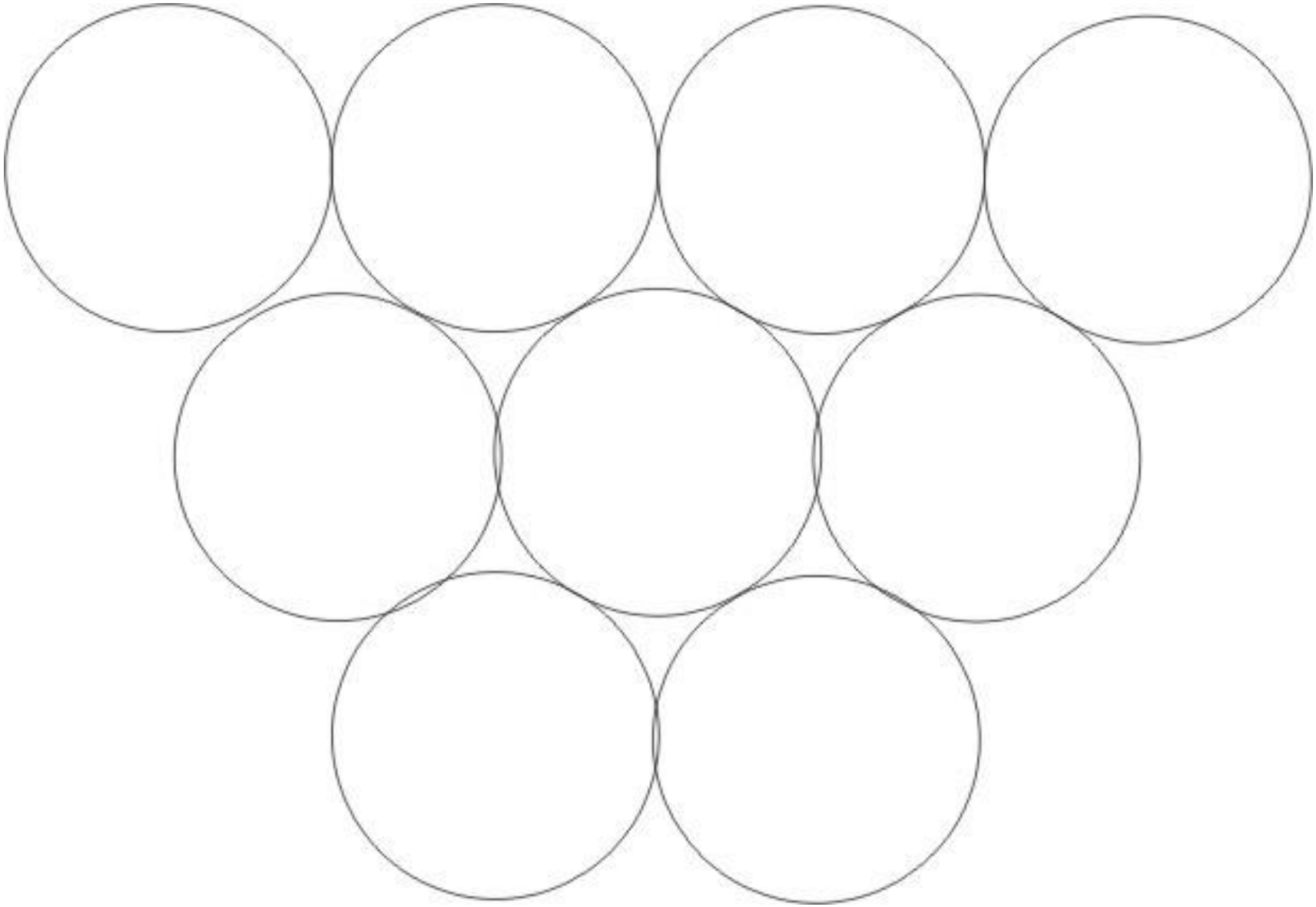
Mikroszkópi csiszolatokon párhuzamos egyenesekként jelenik meg

Rétegződési hiba

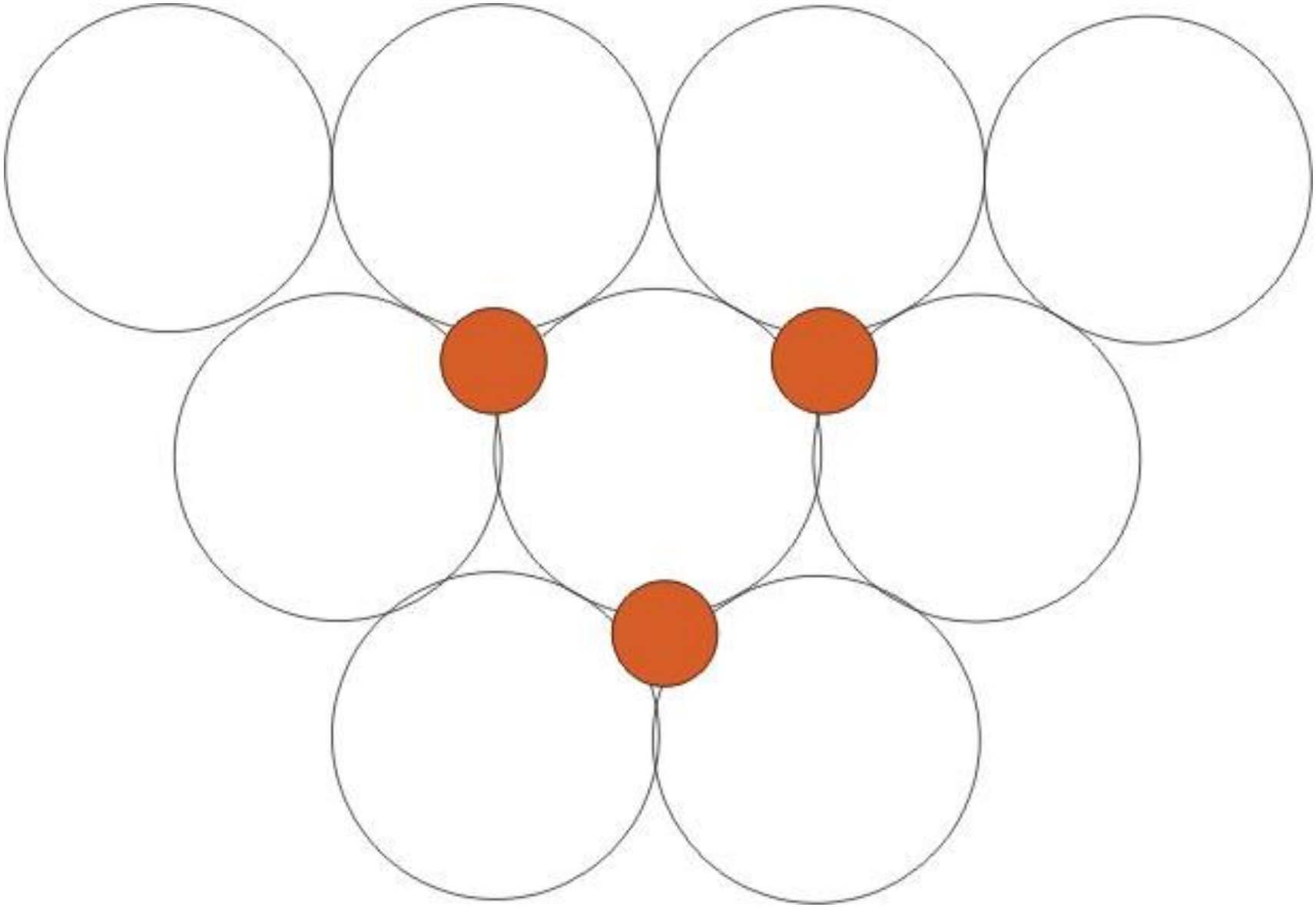




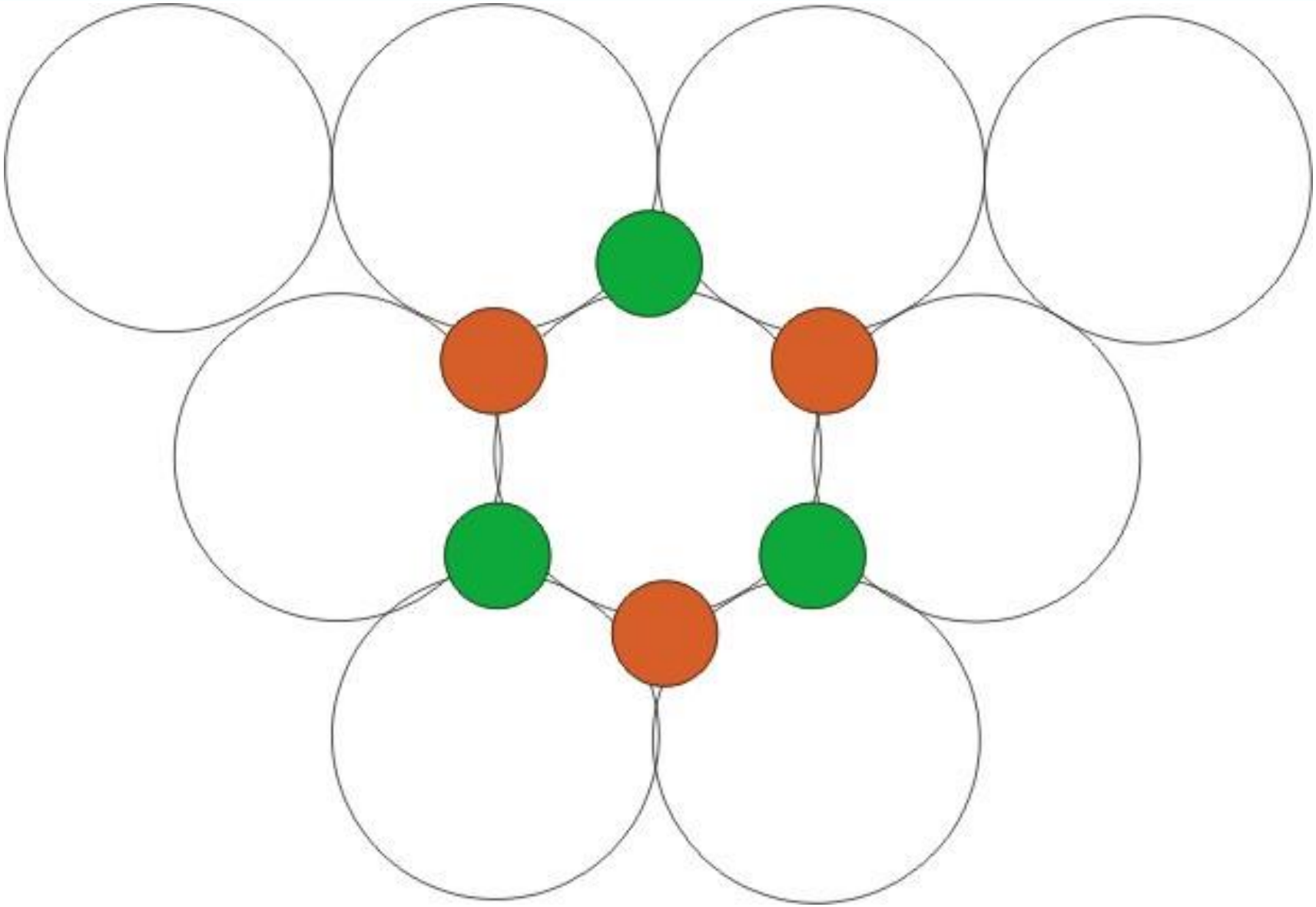
Rétegződési hiba



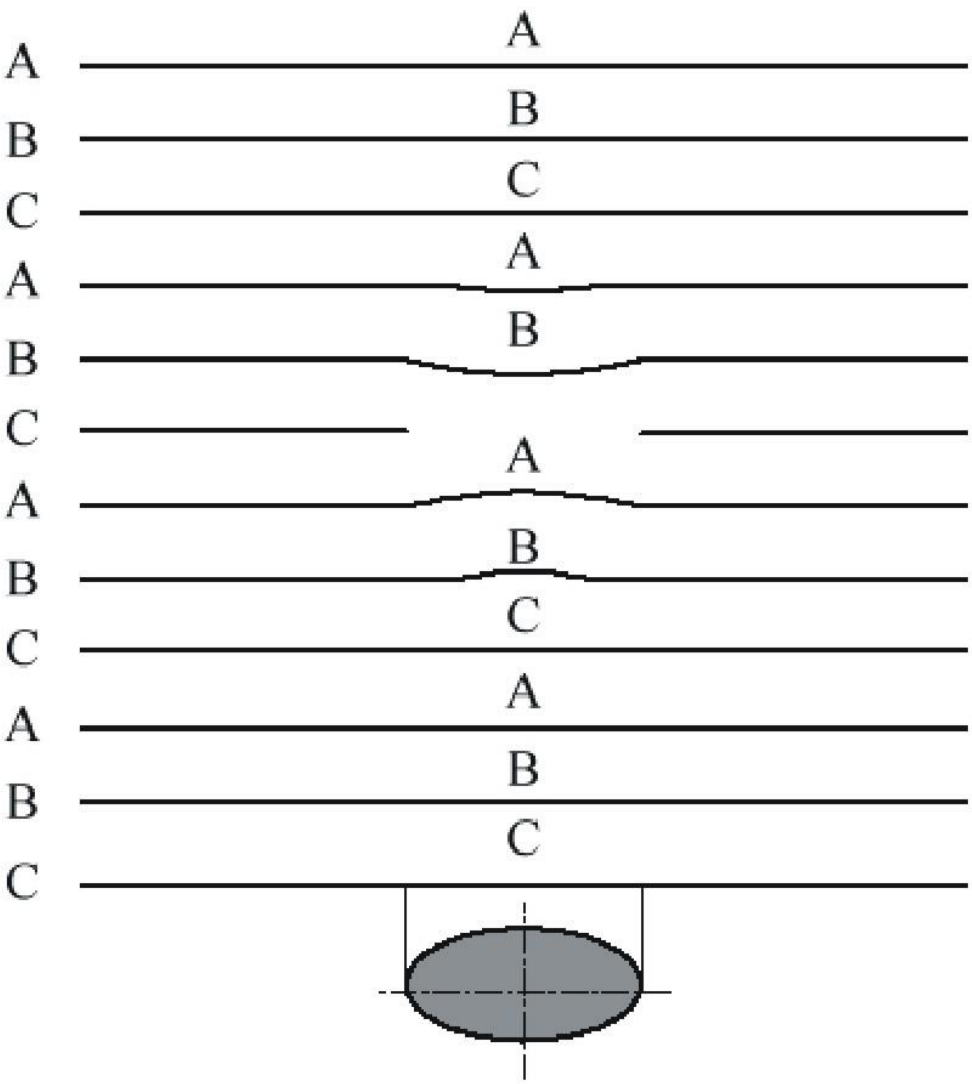
Rétegződési hiba



Rétegződési hiba

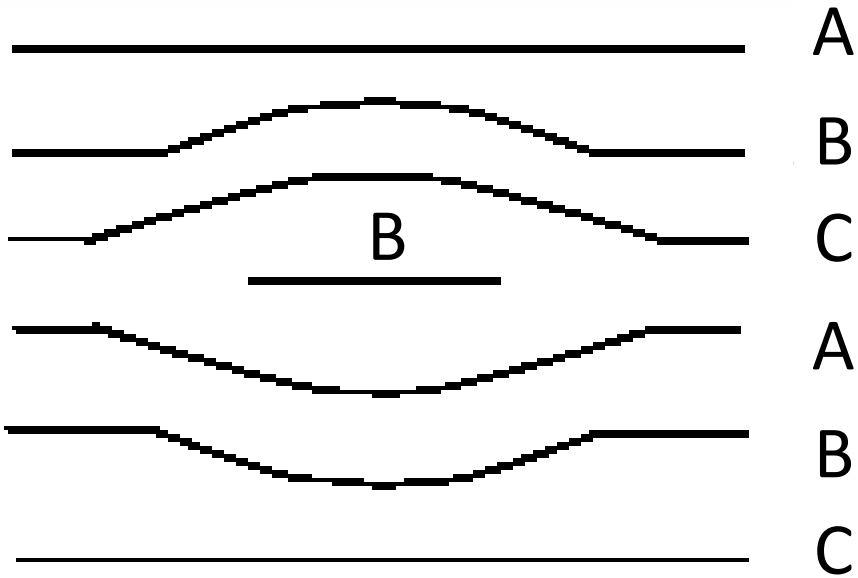


Rétegződési hiba



Atomok hiánya miatt jött létre
(belső rétegződési hiba)

Rétegződési hiba

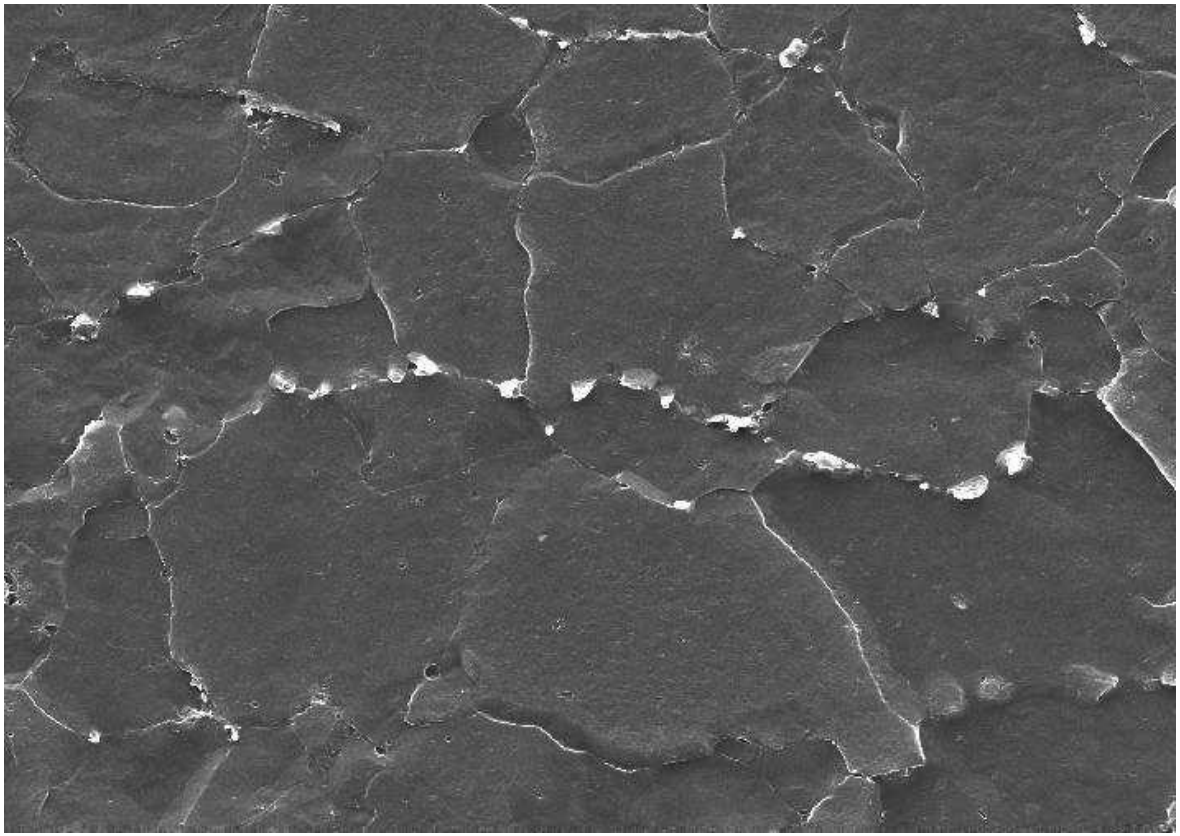


Beékelődött atomok miatt jött létre (külső rétegződési hiba)

Térfogati (3D) hibák

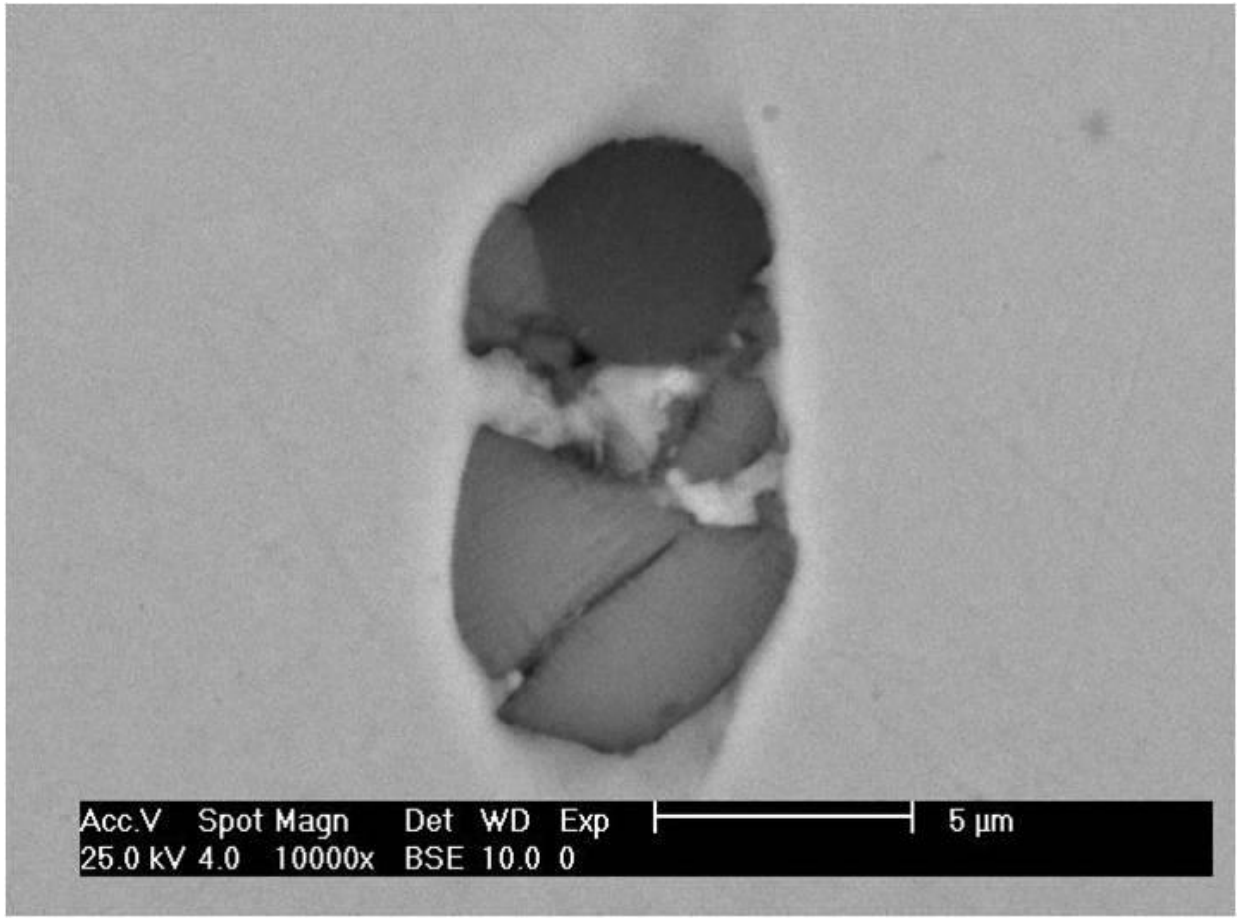
- Üregek
- Zárványok
- Kiválások
- Gázbuborékok

Üregek



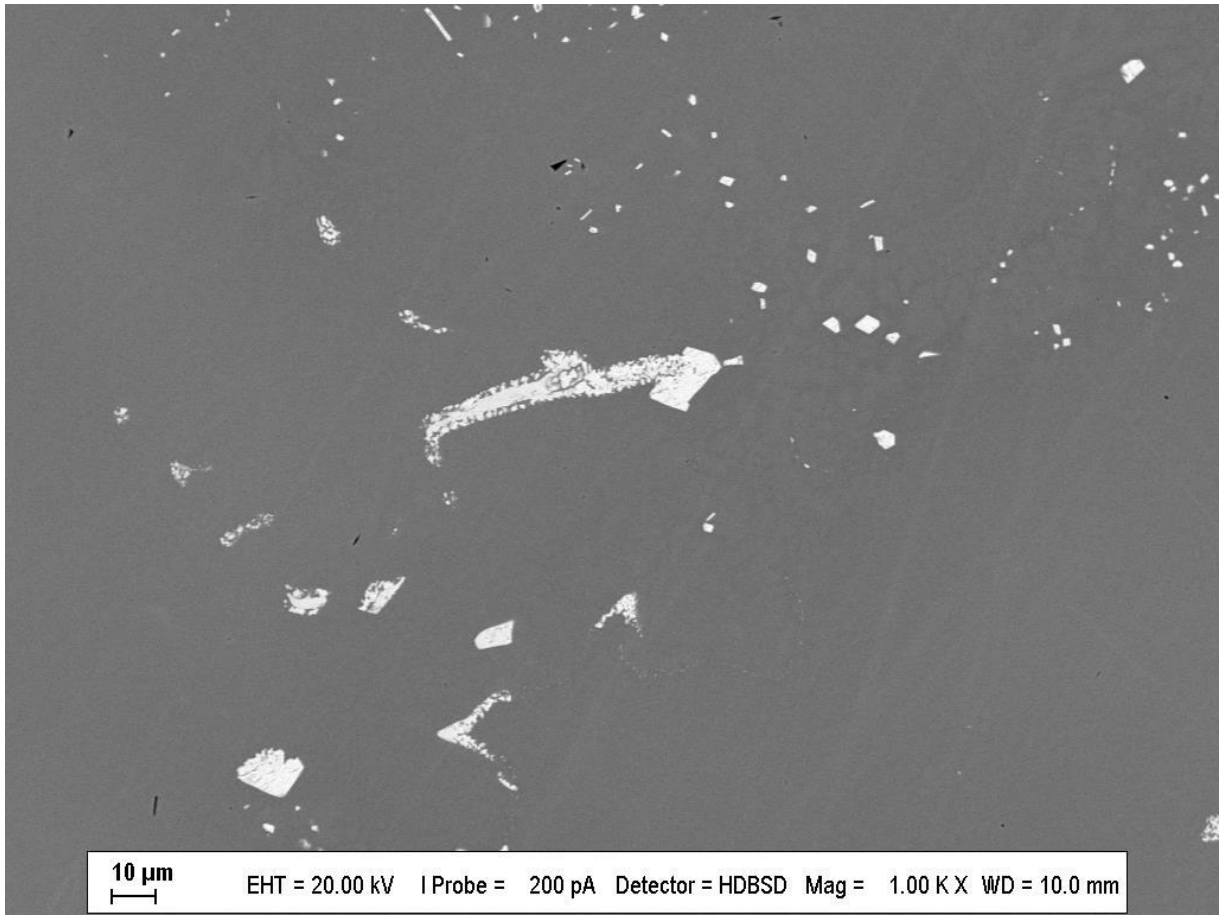
Szemcsehatármenti üregek erőművi főgőzvezetékben (replika-minta)

Zárvány



Al_2O_3 – CaS komplex zárvány

Kiválások



Hf-ban és Ta-ban gazdag kiválások nikkelbázisú öntvényben

Angol nyelvű irodalom

William D. Callister, Jr.

Materials Science and Engineering
An Introduction, 7th edition, 2006

Chapter 4
Imperfections in Solids
81-97 pp.