Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Reális kristályok, rácshibák

Dr. Szabó Péter János
szpj@eik.bme.hu

Anyagszerkezettan és anyagvizsgálat
BMEGEMTBGA1

1

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

2

2

Kristályhiba-típusok

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

3

3

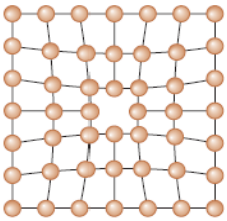
Ponthibák típusai

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

4

4

Vakancia

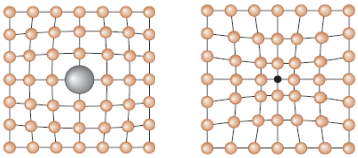


Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.

5

5

Szubsztitúciós atom

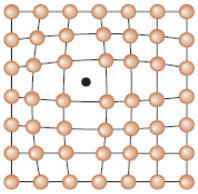


Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.

6

6

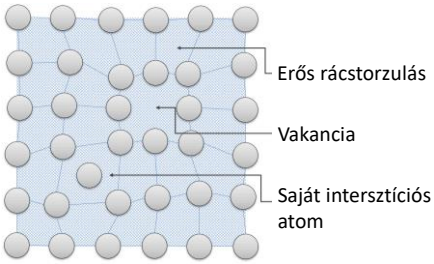
Intersztíciós atom



Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.

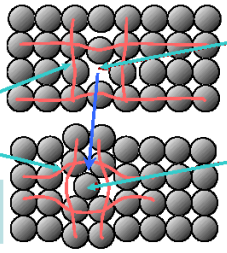
7

Frenkel-mechanizmus



8

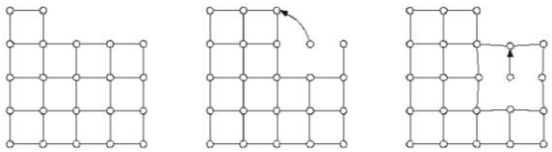
Frenkel-mechanizmus



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

9

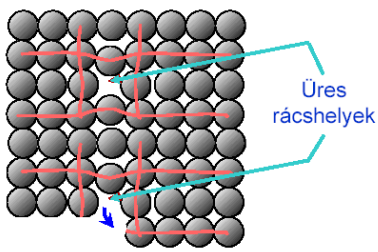
Wagner-Schottky mechanizmus



10

10

Wagner–Schottky mechanizmus



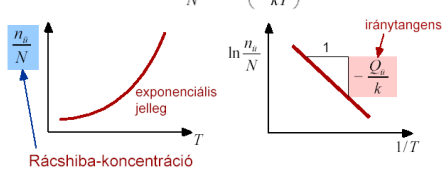
11

11

Ponthibák létrejötte

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

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



12

12

Példa

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

13

13

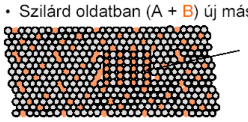
Ponthibák ötvözetekben

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

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

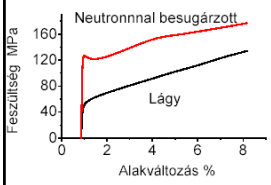


Második fázisú részecske
– különböző összetétel
– különböző szerkezet

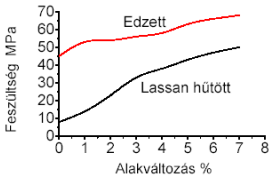
14

14

Ponthibák hatása



Alumíniumra



Rézre

15

15

Vonalszerű (1 dimenziós) rácshibák

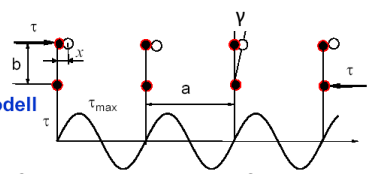
- Fémek elméleti és mért folyáshatára között óriási eltérés, nem magyarázható mérési hibával
- Diszlokációelmélet: az alakváltozás nem egy lépésben történik → diszlokációk mozgása

16

16

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%)

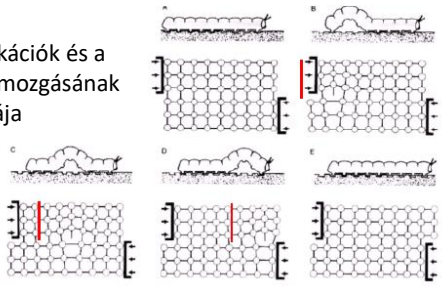
Al : τ_{maxelm}= 4200 MPa $\tau_{maxmért}$ = 1 MPa (0,023%)

17

17

Diszlokációk mozgása

A diszlokációk és a hernyó mozgásának analógiája



18

18

Diszlokációk

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

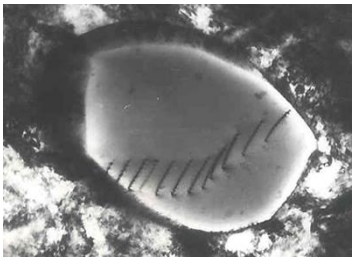
Definíció
Diszlokáció: az elcsúszott és nem elcsúszott tartományok határolóvonala.

Éldiszlokáció	Teljes (perfekt) diszlokáció
Csavardiszlokáció	Parciális diszlokáció
Vegyes diszlokáció	

19

19

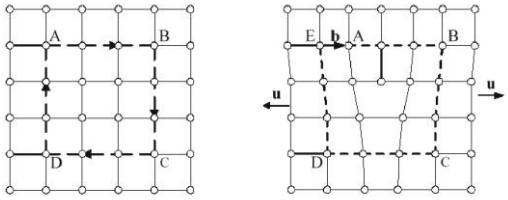
Diszlokáció



20

20

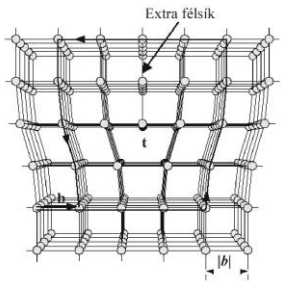
Burgers-kör



21

21

Éldiszlokáció



Diszlokáció vonala: **l**

Csúszósík adott
⇒ nem mozgékony

Extra sík

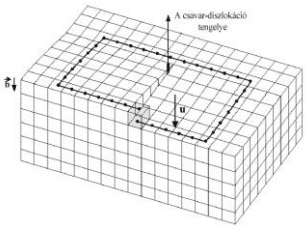
Burgers vektor: **b**

b ⊥ **l**

22

22

Csavardiszlokáció



Diszlokáció vonala: **l**

Nincs egyértelmű csúszósík
⇒ mozgékony

Extra sík nincs !

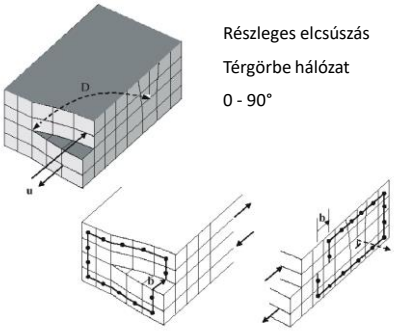
Burgers vektor: **b**

b || **l**

23

23

Összetett diszlokáció



Részleges elcsúszás

Térgörbe hálózat

0 - 90°

24

24

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

25

25

Diszlokációk energiája

Feszültség (nyomó , húzó)

Energiatöbblet

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

$$W_{él} = \frac{Gb^2 l}{1-\nu}$$

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

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

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

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

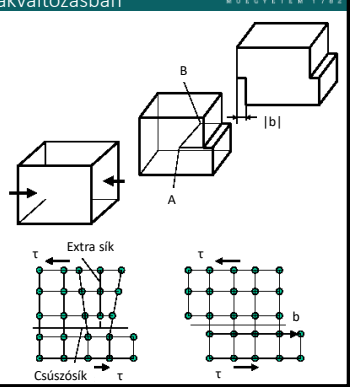
26

26

Diszlokációk szerepe a képlékeny alakváltozásban

képlékeny alakváltozás

diszlokációk mozgása



27

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}

28

28

Diszlokációk mozgásának szabályai

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

⇒ Éldiszlokáció: 1 sík
⇒ Csavardiszlokáció: ∞ sík (elméletileg)

Diszlokáció mozgása mindig a legsűrűbb síkban és a legsűrűbb irányban történik. ⇒ **Csúszási rendszerek**

Csúszósík váltás

Csavar → keresztcsúszás
Él → mászás → kúszás (tartós folyás, creep) → üregek a szemcsehatáron

29

29

Csúszási rendszerek

Csúszási rendszer: csúszósík + irány

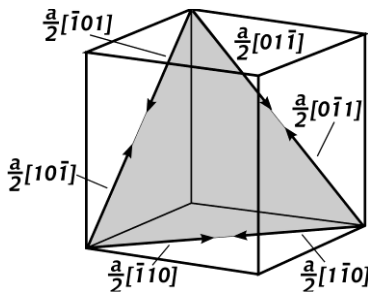
Kristály szerkezet	Csúszó sík	Csúszási irány	Nem párhuzamos síkok száma	Síkonkénti csúszási irány	Csúszási rendszerek száma
p.k	$\{100\}$	$\langle 100 \rangle$	3	2	6=3x2
t.k.k	$\{110\}$	$\langle 111 \rangle$	6	2	12=6x2
f.kk	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	4	3	12=4x3
hex	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0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

Tetszőleges csúszási rendszerhez azonos kritikus csúsztatófeszültség tartozik.

30

30

Lehetséges elcsúszások, FKK (111)



31

31

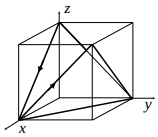
Példa

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-reakció eredményeként létrejövő új diszlokáció Burgers-vektorát és diszlokációs vonalát!



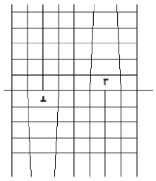
32

32

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)

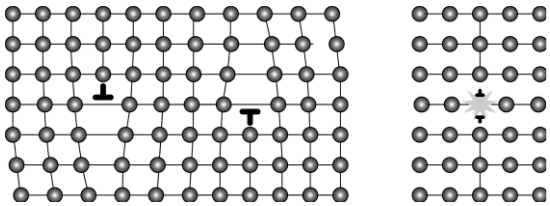
$\bar{b}_1 + \bar{b}_2 \Leftrightarrow \bar{b}_{eredő}$ $\quad$ $\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 < 0$ (tompaszög) $\Rightarrow$ egyesülnek

$\bar{b}_{eredő}^2 = \bar{b}_1^2 + \bar{b}_2^2 + 2\bar{b}_1\bar{b}_2$ $\quad$ $\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 > 0$ (hegyesszög) $\Rightarrow$ felbomlik

33

33

Éldiszlokációk eltűnése

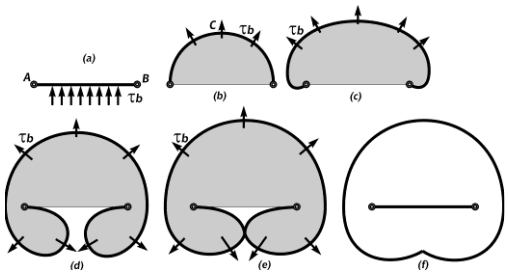


34

34

Diszlokációk keletkezése

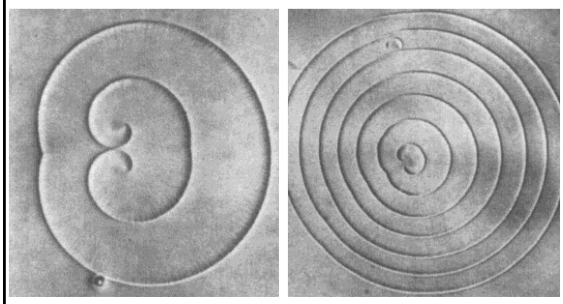
Frank-Read mechanizmus/forrás



35

35

Frank–Read forrás TEM képe



36

36

Felületszerű rácshibák

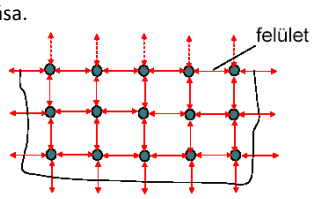
- Makroszkopikus felület
- Szemcsehatárok
  - Kisszögű szemcsehatár
  - Nagyszögű szemcsehatár
- Fázishatárok
  - Koherens fázishatár
  - Szemikoherens fázishatár
  - Inkoherens fázishatár
- Ikerhatár
- Rétegződési hiba

37

37

Makroszkopikus felület

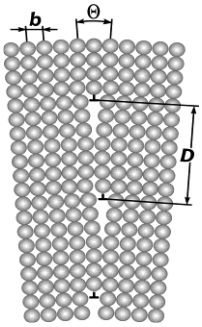
- A kristály felületén az atomok magasabb energiaszinten vannak, mint a kristály belsejében, mivel nem jön létre minden irányban atomi kötés.
- A felület energiaszintje csökken, ha a felülethez újabb atomok kapcsolódnak.
- Oxidrétegek kialakulása.
- Kémiai reakciók.



38

38

Kisszögű szemcsehatár



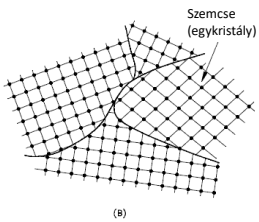
Azonos előjelű diszlokációk egymás alá rendeződése

Θ<5º

39

39

Nagyszögű szemcsehatár



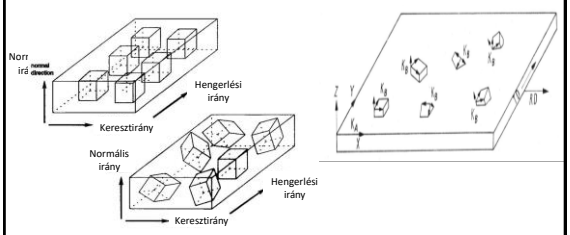
A dermedés során a véletlen orientációjú kristálycsírák összenőnek.

Az egyes szemcsék csak orientációjukban különböznek.

40

40

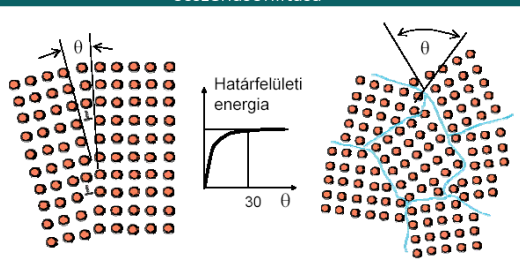
Orientáció



41

41

Kis- és nagyszögű határ összehasonlítása



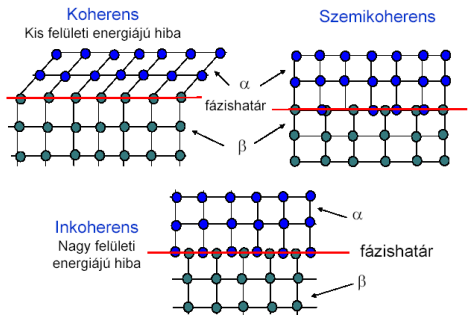
Kisszögű szemcsehatár
θ<5°

Nagyszögű szemcsehatár
θ>15°

42

42

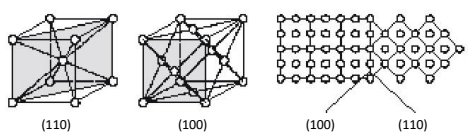
Fázishatárok



43

43

Koherens fázishatár

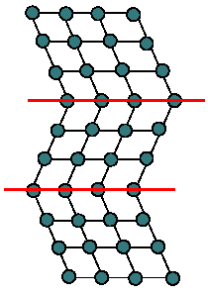


- A határ két oldalán azonos atomok vannak
- Mindkét fázisban lehet találni olyan síkot, ahol az atomos elrendeződés megegyezik
- A fázishatáron a két fázis kristálytani elrendeződéséből következik (tehát adott) az orientáció-különbség

44

44

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

45

45

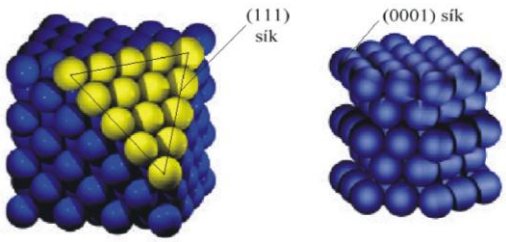
Ikerhatár

Mikroszkópi csiszolatokon párhuzamos egyenesekként jelenik meg

46

46

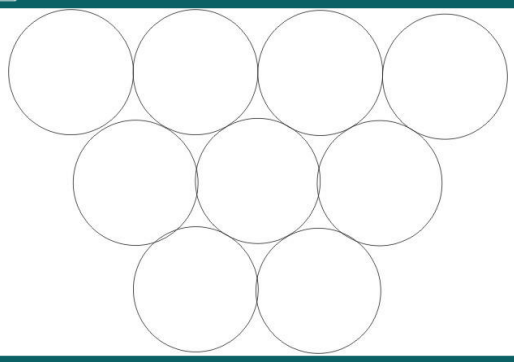
Rétegződési hiba



47

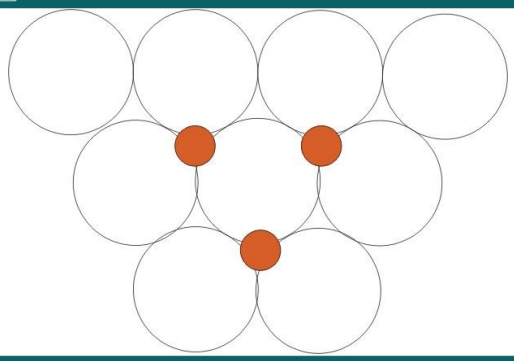
47

Rétegződési hiba



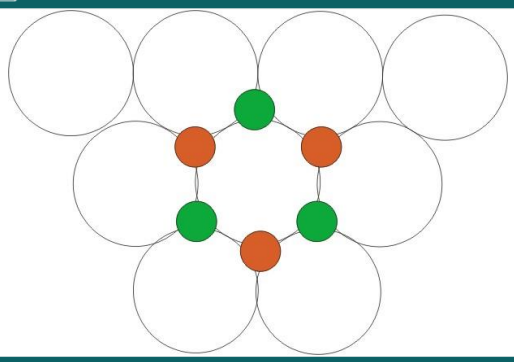
48

Rétegződési hiba



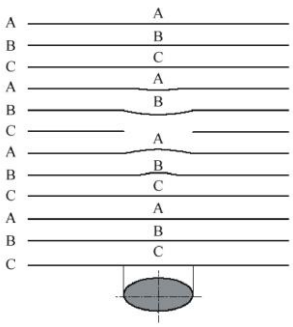
49

Rétegződési hiba



50

Rétegződési hiba

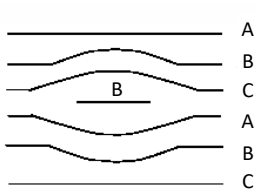


Atomok hiánya miatt jött létre
(belső rétegződési hiba)

51

51

Rétegződési hiba



Beékelődött atomok miatt jött létre (külső rétegződési hiba)

52

52

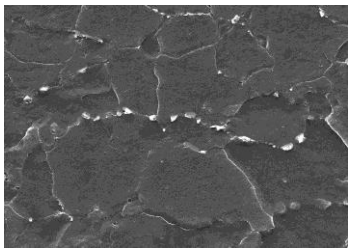
Térfogati (3D) hibák

- Üregek
- Zárványok
- Kiválások
- Gázbuborékok

53

53

Üregek

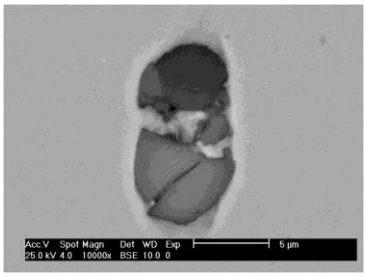


Szemcsehatármenti üregek erőművi főgőzvezetékben (replika-minta)

54

54

Zárvány

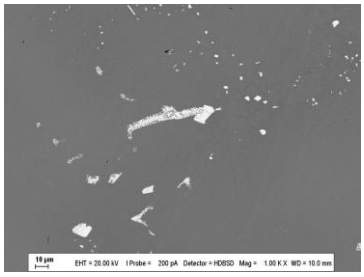


Al_2O_3 – CaS komplex zárvány

55

55

Kiválások



Hf-ban és Ta-ban gazdag kiválások nikkelbázisú öntvényben

56

56

Angol nyelvű irodalom

William D. Callister, Jr.

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

Chapter 4
Imperfections in Solids
81-97 pp.

57

57