

 **att** Anyagtudomány és Technológia Tanszék  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

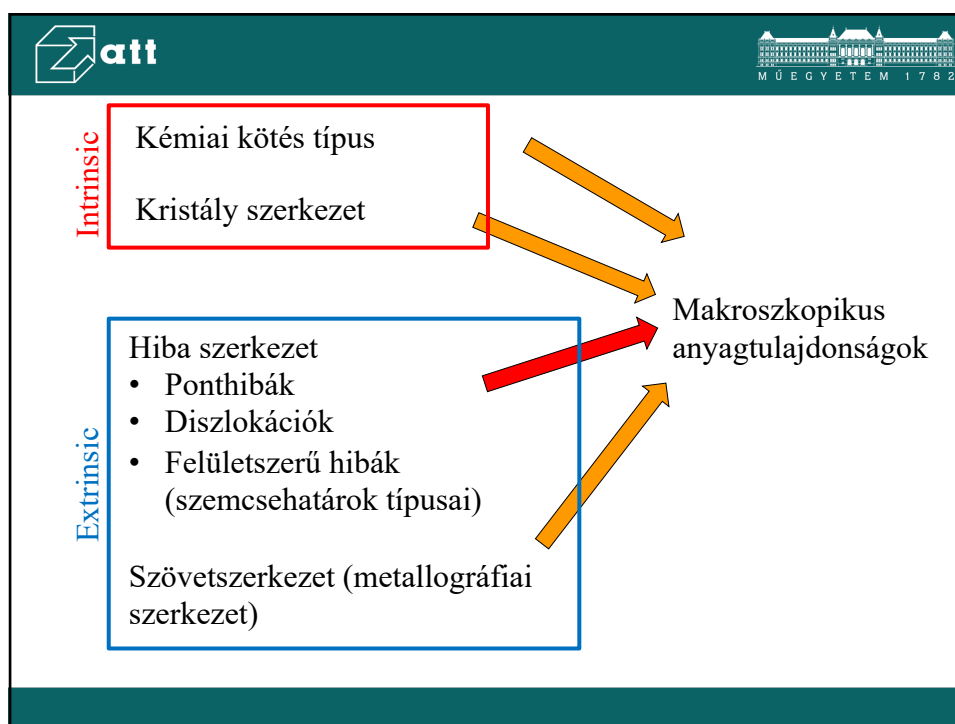
Anyagismeret

# Reális kristályok, rácshibák



Dr. Mészáros István Attila  
meszaros.istvan.attila@gpk.bme.hu

1

1




2

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Reális kristályok, kristályhibák



- 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

3

3



  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Kristályhibák alapvető típusai

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

4

4

   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



## Ponthibák

- Vakancia (üres rácshely)
- Saját intersziciós atomok
- Idegen atomok (intersztíciós, szubsztitúciós helyen)
- Ponthiba komplexek (di-, tri-vakancia, idegen atom-vakancia...)

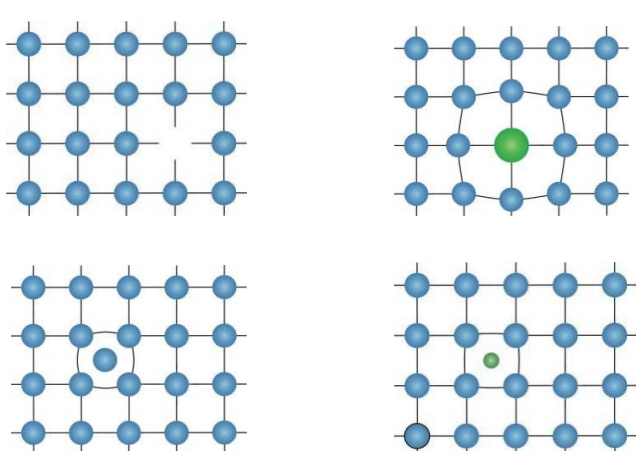
Termikusan aktivált hibák

5

5



   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Ponthibák típusai



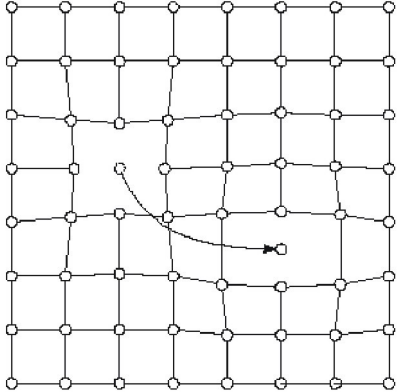
6

6

## Ponthiba képződési mechanizmusok



### Frenkel-mechanizmus



Frenkel hibapár

7

7

## Termikus ponthibák egyensúlyi koncentrációja

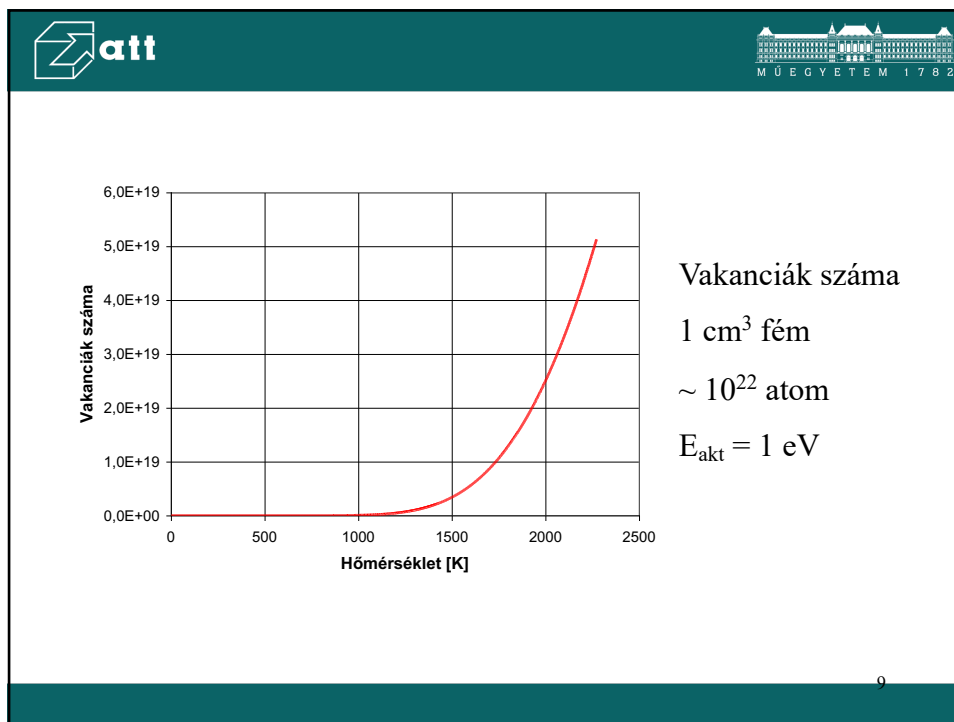
$$n = N \cdot e^{-\frac{E_{akt}}{kT}}$$

$$k = \frac{R}{N_A} = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J / K}$$

Rácstorzulás  $\Leftrightarrow$  aktiválási energia

8

8



9

### Termikus pont hibák egyensúlyi koncentrációja

$$E_{\text{Vakancia}} = 1 - 2 \text{ eV}$$



$$E_{\text{Saját-intersticiós}} = 4 - 6 \text{ eV}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

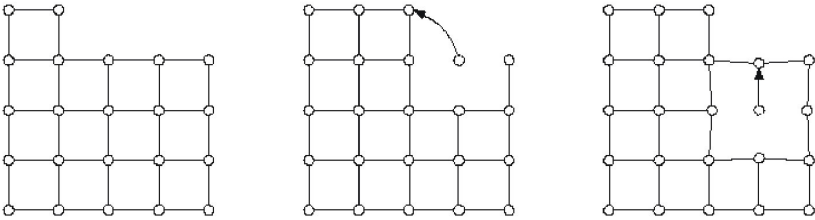
$$(1 \text{ eV}, 5 \text{ eV})$$

$$\frac{N_V}{N_{SI}} \approx 10^{67}$$

10



   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Wagner-Schottky mechanizmus



11

11

   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

### Ponthibák keletkezése

- képlékeny alakváltozás
- nem egyensúlyi hűtés
- részecske besugárzás (gyors neutron → hibakaszád)

### Termikus ponthibák eltűnése

diffúziós mozgás

- szemcsehatár
- éldiszlokáció extrasík (kúszás)

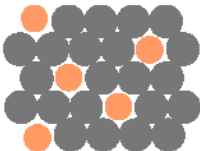
12

12

**zatt** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

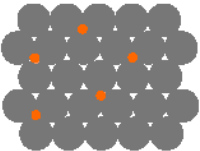
## Ponthibák ötvözetekben

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



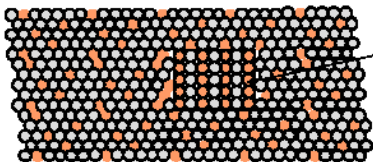
Szubsztitúciós szilárd oldat  
(pl. Ni-alapfém + Cu-ötvöző)

vagy



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

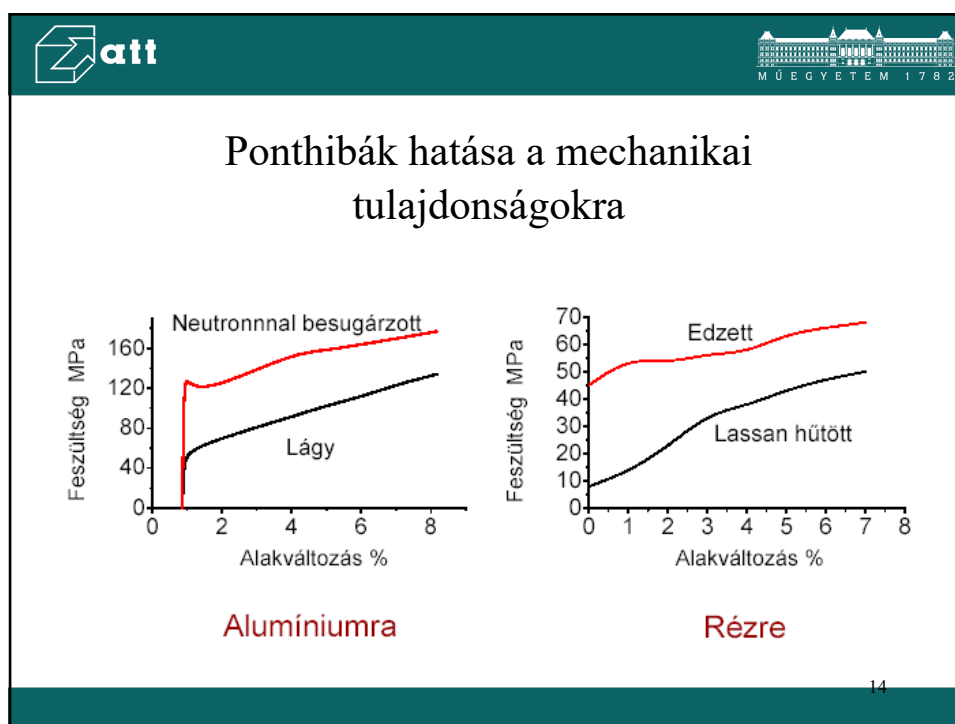
- Szilárd oldatban (A + B) új második fázis is keletkezhet





Második fázisú részecske

- különböző összetétel
- különböző szerkezet

13

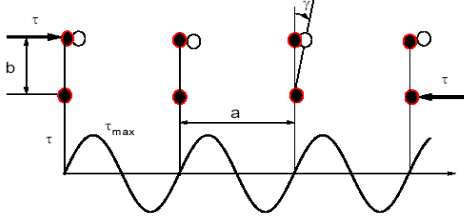


14

## Frenkel-féle folyáshatár modell

Frenkel elméleti folyáshatár számítása





$$\tau = \tau_{\max} \sin \frac{2\pi x}{a}$$

$$\tau = \tau_{\max} \frac{2\pi x}{a}$$

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

15

15

## Vonalszerű (1 dimenziós) rácshibák



Fémek elméleti (Frenkel-moddal számolt) és mért folyáshatára között óriási az eltérés.

Fe:  $\tau_{\max\text{elm}} = 12960 \text{ MPa}$      $\tau_{\max\text{mért}} = 27 \text{ MPa}$  (0,21%)  
 Al:  $\tau_{\max\text{elm}} = 4200 \text{ MPa}$      $\tau_{\max\text{mért}} = 1 \text{ MPa}$  (0,023%)

16

16



  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



**1934:** Fransis Taylor, Orován Emil, Polányi Mihály

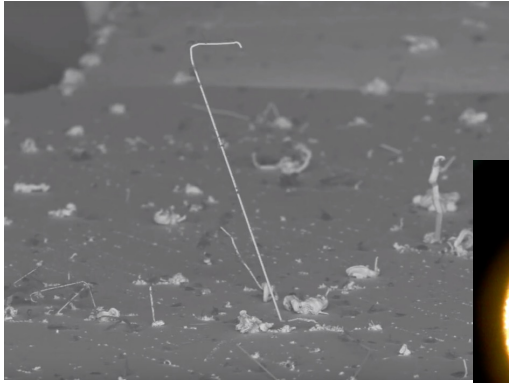
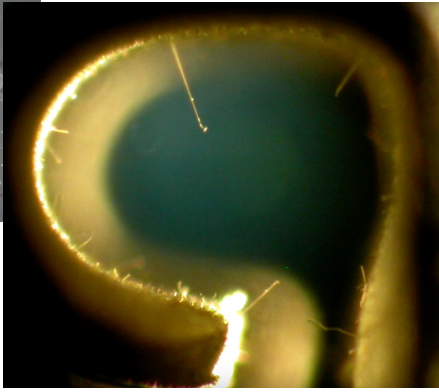
**1950:** Zn tűkristály (whisker) kondenzátor fegyverzetén  
 $d = 0,1 - 0,001 \mu\text{m}$

**1960:** TEM képek diszlokációkról

17



17

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

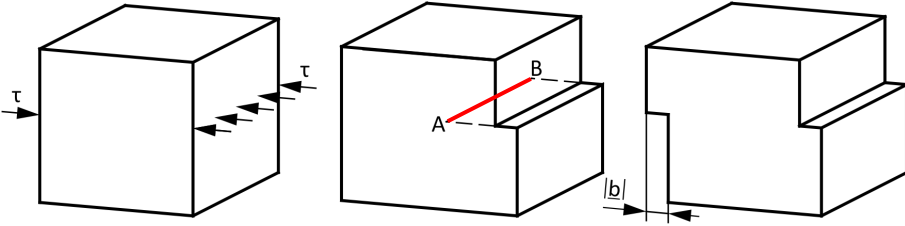
  


18

18

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



## 1 dimenziós hibák vonalszerű hibák, diszlokációk



**A diszlokáció definíciója: Az elcsúszott és a nem elcsúszott tartományok határolóvonala.**

19



19

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

- Jellemzése (Burgers-vektor)
- Diszlokációk típusai
- Tulajdonságai
- Keletkezése (Frank-Read)
- Energiája
- Kölcsönhatása (reakciók)
- Eltűnése
- Mozgása
- Csúszási rendszerek
- Diszlokáció sűrűség mérése
- Diszlokációk szerepe a képlékeny alakváltozásban
- Lomer diszlokációk (alakítási keményedés)
- Egykristályok ill. polikristályok alakváltozása

20

20

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



**Diszlokáció: az elcsúszott és nem elcsúszott tartományok határolóvonalala.**

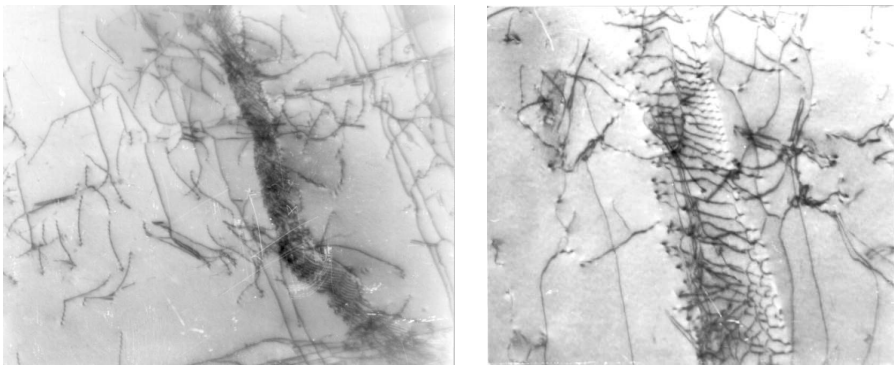
Éldiszlokáció  
Csavardiszlokáció  
Vegyes diszlokáció

Teljes (perfekt) diszlokáció  
Parciális diszlokáció

21

21

 **TEM diszlokáció kép 40.000x**  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



22

22

**Burgers-kör**

23

23

**Éldiszlokáció**

Extra félsík

t

b

|b|

Diszlokáció vonala: **l**

Csúszósík adott  
⇒ nem mozgékony


Extra sík

Burgers vektor: **b**

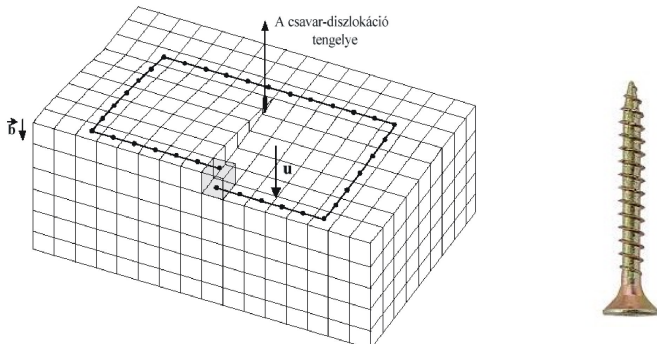
**$b \perp l$**

24

24

## Csavar-diszlokáció





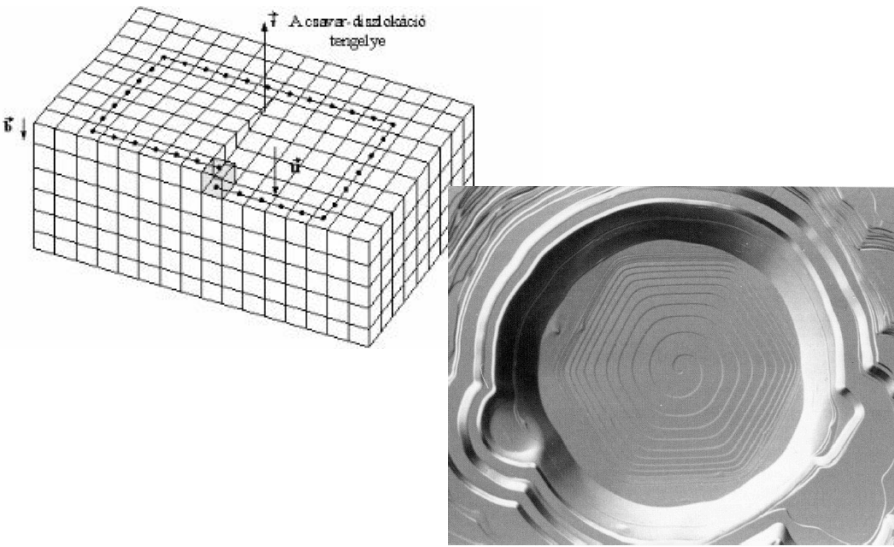
Nincs egyértelmű csúszósík  $\Rightarrow$  mozgékony  
Extra sík nincs !

**$b \parallel l$**

25



25



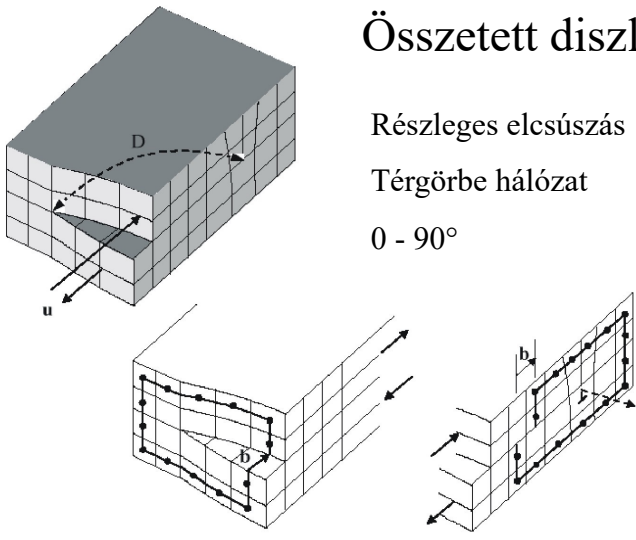
26

26



**Összetett diszlokáció**

Részleges elcsúszás  
Térgörbe hálózat  
0 - 90°



27

27

**Diszlokációk alapvető tulajdonságai**

- Vonalszerű (lehet lineáris vagy görbe vonalú)
- Felületen kezdődik és végződik, vagy a kristályon belül záródó görbe
- Az elmozdulás mértéke a diszlokáció egésze mentén állandó
- Burgers vektor a legsűrűbb irányban fekszik és  $b = N d$  (csak teljes diszlokáció esetén, parciálisnál kisebb)
- A diszlokáció vonalak csomópontban is találkozhatnak. Itt az eredő Burgers-vektor zérus.

28

28

**att** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Diszlokációk energiája

Feszültség (nyomó , húzó)

Energiatöbblet

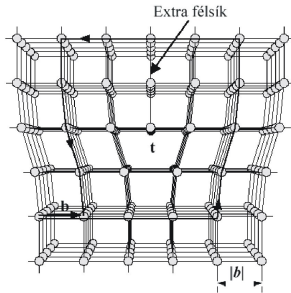
$$W_{cs} = Gb^2l$$

$$W_{él} = \frac{Gb^2l}{1-\nu}$$

$$\nu = \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_p}$$

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

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

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


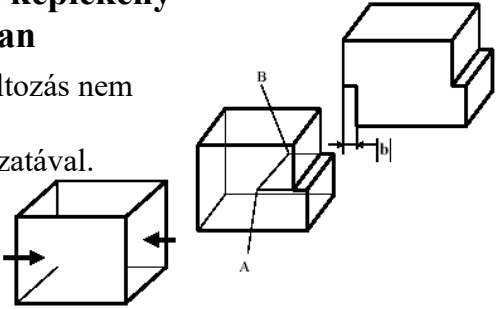
29

29

**att** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

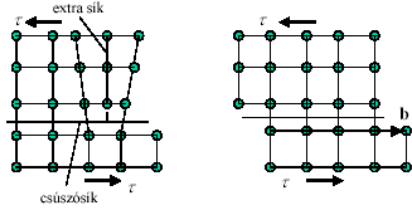
## Diszlokációk szerepe a képlékeny alakváltozásban

Diszlokációelmélet: Az alakváltozás nem egy lépésben történik, hanem diszlokációk mozgásának sorozatával.





**“A képlékeny alakváltozás nem más, mint a diszlokációk mozgása.”**

*Prof. Gillemot László (1912-1977)*



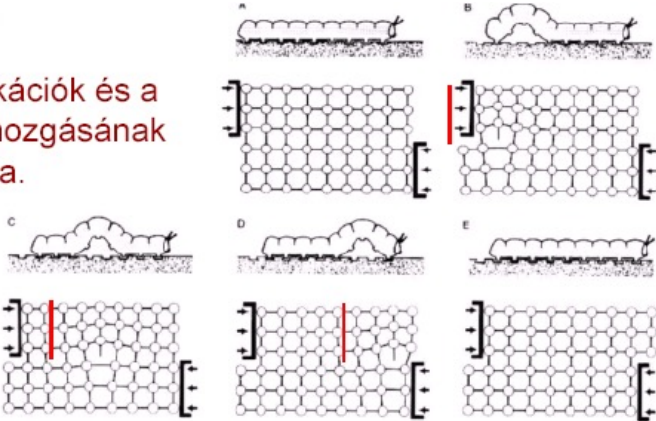
30

30



## Diszlokációk mozgása

A diszlokációk és a hernyó mozgásának analógiája.



31

31

## Diszlokációk mozgásának szabályai 1.

### A diszlokációk **konzervatív** mozgása

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



- ⇒ Éldiszlokáció: egy sík
- ⇒ Csavardiszlokáció: számos sík

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

32

32



## Csúszási rendszerek



Csúszási rendszer : csúszó sík+ 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

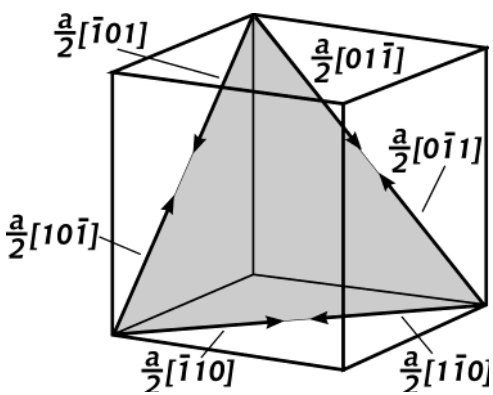
Minden csúszási rendszerhez azonos kritikus csúsztatófeszültség tartozik.

33

33



 

## Lehetséges elcsúszások, FKK (111)



34

34



   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Diszlokációk mozgásának szabályai 2. nem-konzervatív diszlokáció mozgás

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

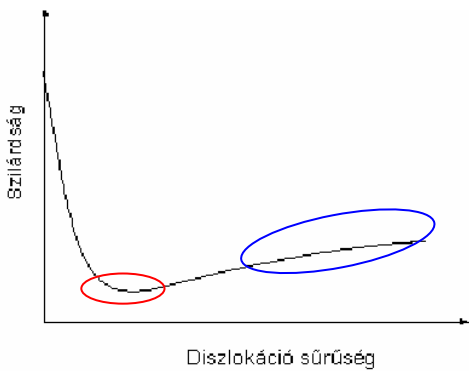
35

35

   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Diszlokációsűrűség változása képlékeny alakváltozás során



**Definíciók**  
**Lágyított:**  $10^{10}$ - $10^{11}$  m<sup>-2</sup>  
**Alakított:**  $10^{14}$ - $10^{16}$  m<sup>-2</sup>  
 (alakítási keményedés)




Folyáshatár – diszlokáció sűrűség

36

36





$\approx 40 \text{ cm}$


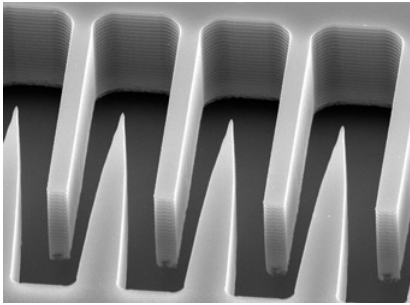
$$D_{single} = \frac{D_{poli}}{\sqrt{440}} = \frac{40 \text{ cm}}{21} = 1,9 \text{ cm} \quad ?$$

37



37

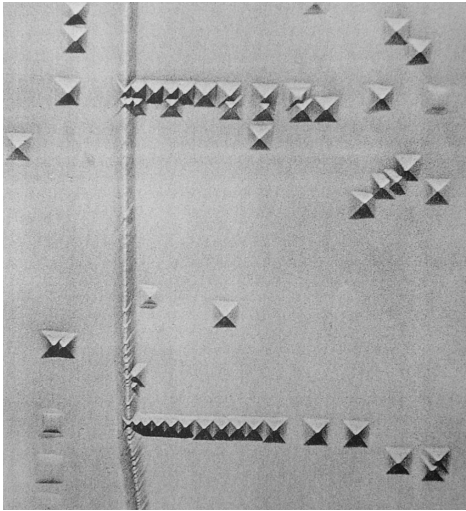



## Micromechanical Systems MEMS

38





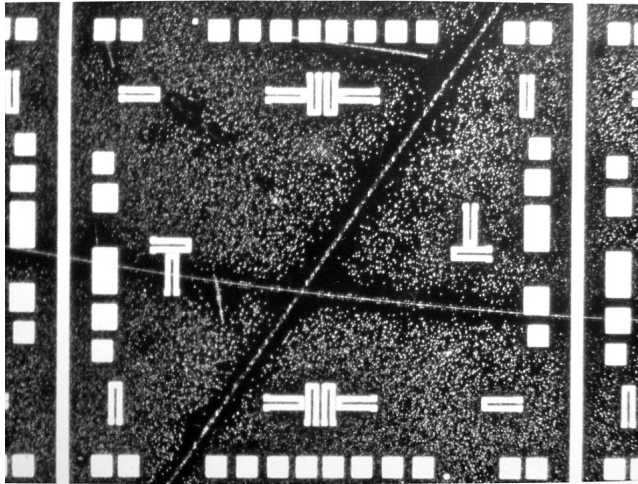
Diszlokáció sűrűség mérése

LiF egykristály (100), etch pits

39

39



 



Si egykristály (111), maratott felület, diszlokációk

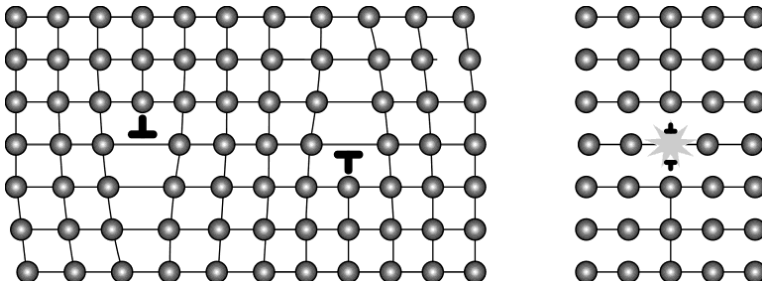
40

40



## Diszlokációk kölcsönhatása 1.

Ellentétes előjelű él-, sodrású csavardiszlokációk kioltják egymást.



41

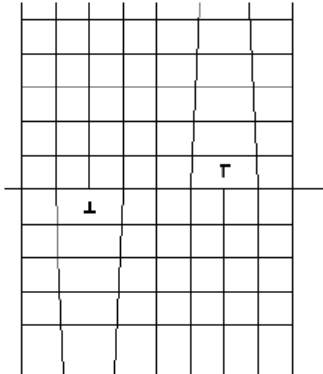
41

## Diszlokációk kölcsönhatása 2.



Ellentétes előjelű diszlokációk kölcsönhatása:

$\theta = 45^\circ$  egyensúly  
 $\theta < 45^\circ$  taszítás  
 $\theta > 45^\circ$  vonzás



42

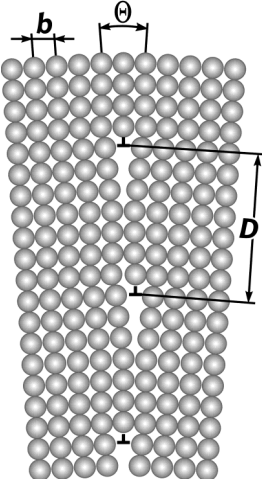
42

## Diszlokációk kölcsönhatása 3.



Azonos előjelű diszlokációk kölcsönhatása:  
sorba rendeződnek  $\Rightarrow$  kisszögű szemcsehatár

Azonos előjelű diszlokációk sorokba rendeződése.  
Diszlokációsor létrejötte.  
Kisszögű szemcsehatár.



43

43

## Diszlokációk kölcsönhatása 4.

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)  $\Rightarrow$  a két diszlokáció egyesül

$\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 > 0$  (hegyesszög)  $\Rightarrow$  a diszlokáció felbomlik két új diszlokációvá

44

44



  
 M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



## Példák diszlokáció reakciókra

$a/2 [\underline{1}10] + a/2 [1\underline{1}0] \rightarrow 0$	kioltás
$a/2 [\underline{1}10] + a/2 [10\underline{1}] \rightarrow a/2 [01\underline{1}]$	stabil
$a/2 [1\underline{0}1] + a/2 [0\underline{1}1] \rightarrow a/2 [\underline{1}1\underline{2}]$	instabil

$\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 < 0$  (tompaszög)  $\Rightarrow$  stabil diszlokáció jön létre  
 $\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 > 0$  (hegyesszög)  $\Rightarrow$  instabil diszlokáció jön létre, ami komponensekre bomlik

45

45



  
 M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Cottrell-Lomer gát

FKK

Elcsúszás két síkon

Eredő diszlok.: metszésvonal

Stabil

Éldiszlokáció



Nincs csúszósíkban

Mozgásképtelen

$$\frac{a}{2} [10\underline{1}]_{(111)} + \frac{a}{2} [01\underline{1}]_{(11\bar{1})} \rightarrow \frac{a}{2} [110]_{(001)}$$

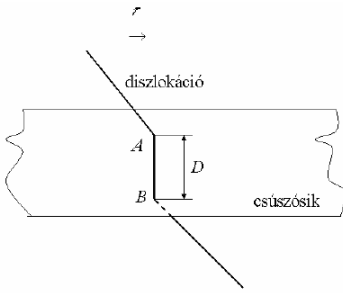
46

46

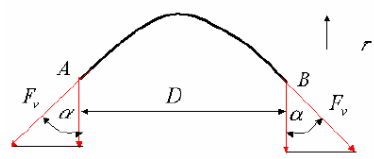



## Diszlokációk keletkezése

Frank-Read mechanizmus/forrás



Félkörív  
labilis  
zárt hurok





$$\tau = \frac{2Gb}{D} \cos \alpha$$

$$\tau_{Max} = \frac{2Gb}{D}$$

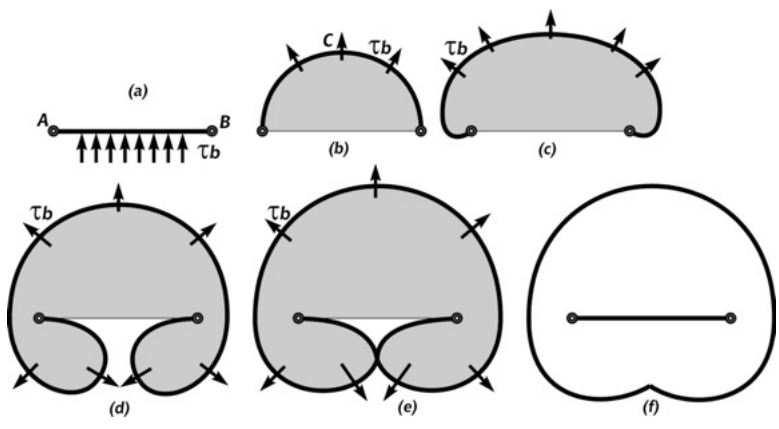
$$\alpha = 0$$

47

47



## Frank-Read forrás működése



48

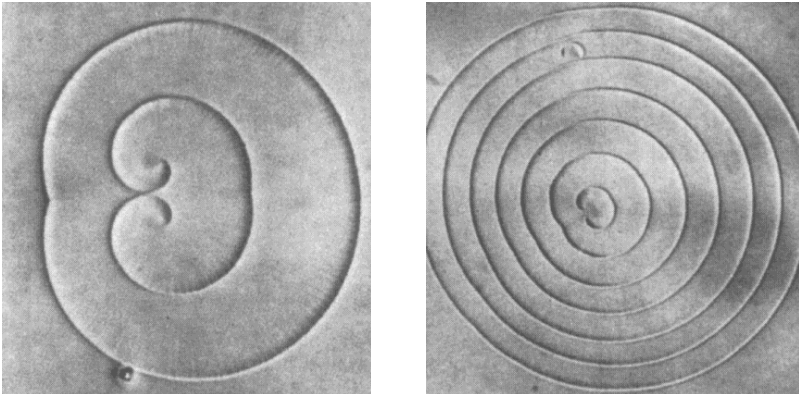
48





M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Frank-Read forrás TEM képe (Al)



49

49

M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



## Diszlokációk

Egy TKK egykristályban lévő éldiszlokáció Burgers vektora  $[1 \ 1 \ 1]$  irányú. A diszlokáció a kristály  $(1 \ 1 \ 0)$  síkjában fekszik. Határozzuk meg a diszlokáció vonal Miller-indexeit.

Egy Al (FKK) egykristályban egy  $[1 \ 2 \ 1]$  irányú éldiszlokáció van. Adjuk meg a diszlokáció Burgers vektorát.

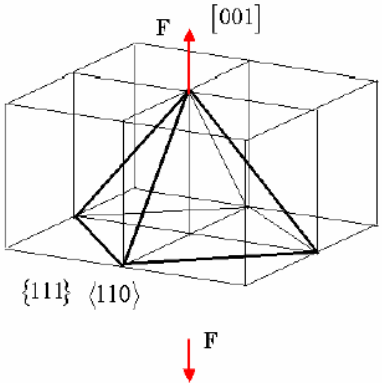
50

50

## Egykristályok képlékeny alakváltozása



**Egyszerű csúszás:** alakváltozás egy csúszási rendszerben  
**Többszörös csúszás:** elcsúszás egyszerre több csúszási rendszerben



FKK  
 4 db {111} síkban  
 síkonként 2 db <110> irányban

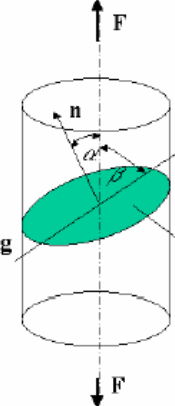
51

51

## Egykristályok képlékeny alakváltozása

Alakváltozás: csúszósíkok a csúszási irányok mentén elcsúsznak egymáson.



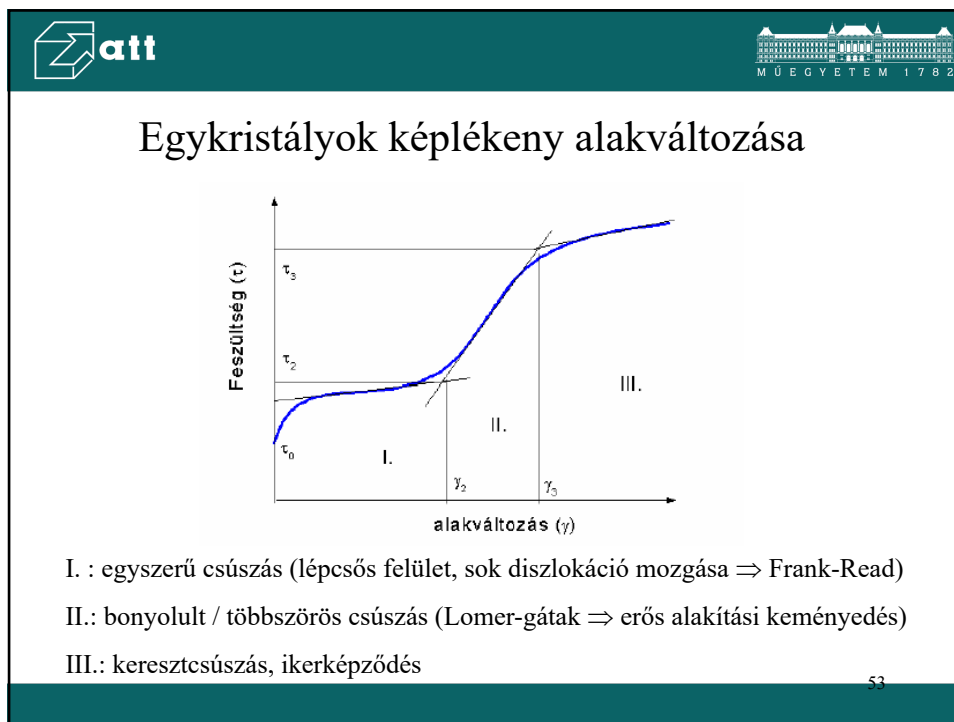
$$\tau = \frac{F \cos \beta}{A} = \sigma \cos \alpha \cos \beta = \sigma \sin \beta \cos \beta = \sigma m$$

$$m = \cos \alpha \cos \beta \quad m: \text{Schmid-tényező}$$

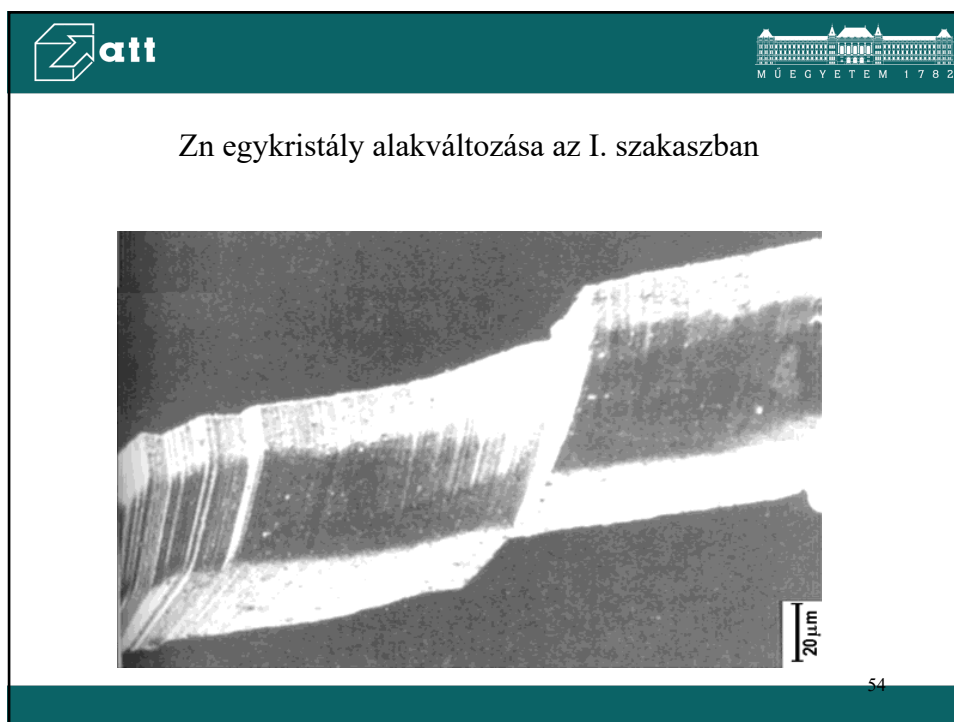
A képlékeny alakváltozás abban a csúszási rendszerben indul meg, aminek a Schmid-tényezője a legnagyobb.

52



52



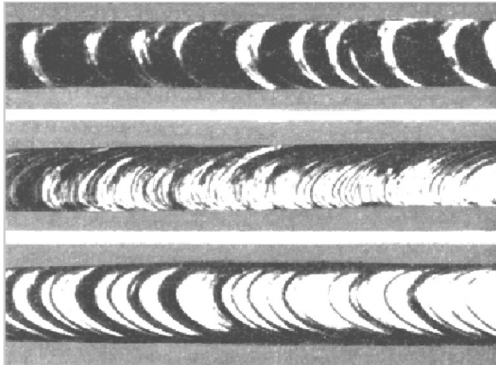
53



54

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Egykristályok makroszkópikus alakváltozása szakítás hatására





Ón

Bizmut

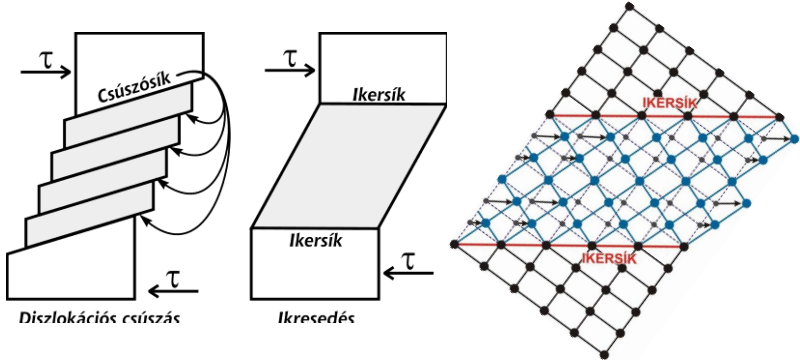
Horgany

55

55

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Ikerképződéssel járó képlékeny alakváltozás





Diszlokációs csúszás: elmozdulás csak néhány csúszósíkon

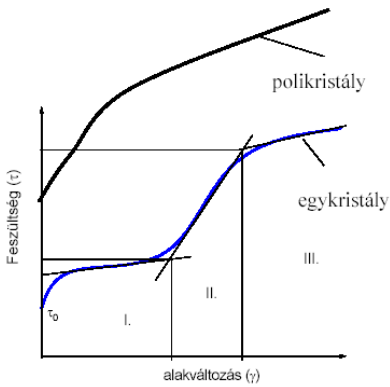
Ikeresedés: az ikertartomány valamennyi síkja egyszerre elmozdul (kollektív mozgás)

56

56

## Polikristályok képlékeny alakváltozása



Minden szemcsében többszörös csúszás.



Alakítási keményedés intenzívebb.

I. szakasz hiányzik.

Mindig nagyobb feszültségek mint az egykristály esetén.

57

57

## Polikristályos test képlékeny alakváltozása

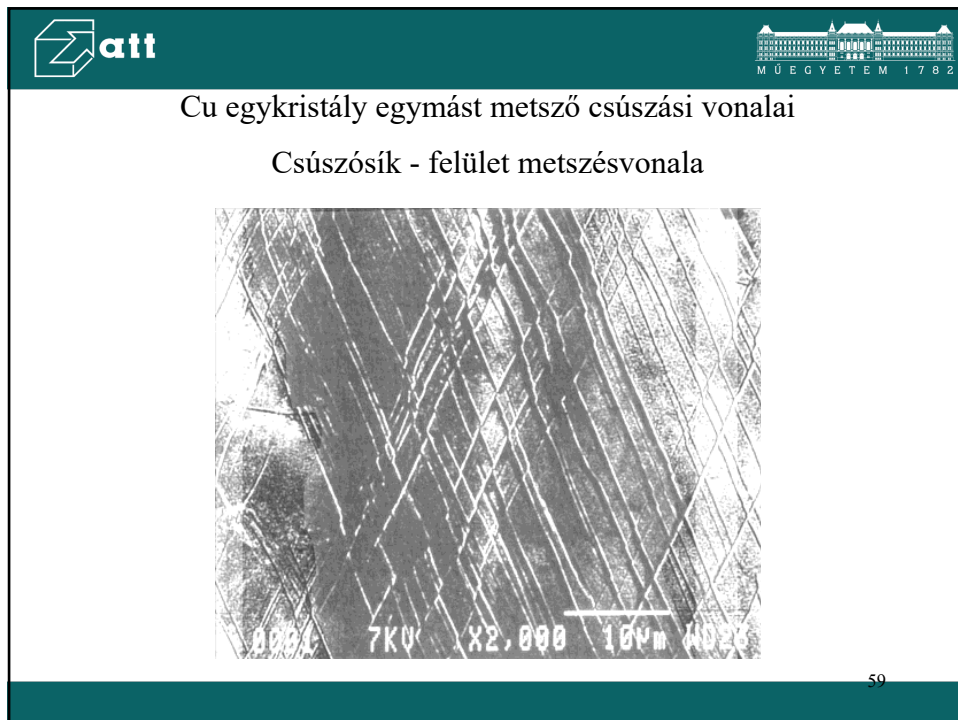
A polikristályos testek sok szemcséből állnak, amelyeknek különböző az orientációja. A test folytonossága az alakváltozás során megmarad, ezért fel kell tételezzük, hogy minden szemcsében több csúszási rendszer működik (*FKK és TKK 12-12 csúszási rendszer*).

Polikristályos test keményedése mindig intenzívebb, mint az egykristályé.

Taylor elmélete szerint a makroszkópikus alakváltozás teljesítménye kifejezhető az egyes csúszási rendszereken végzett képlékeny teljesítmények összegével.

58

58



59

Polikristályos anyagok alakítási keményedése

Hall-Petch egyenlet  
(alsó folyáshatár)

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

A határon felhalmozódó diszlokációk feszültségtete indítja meg az alakváltozást a szomszédos kristallitban.

Szemcseméret  $\uparrow \Rightarrow$  szemcsehatáron felhalmozódó diszlokációk száma  $\uparrow$

60

## Amorf ötvözetek alakváltó képessége

fémüveg, üvegfém

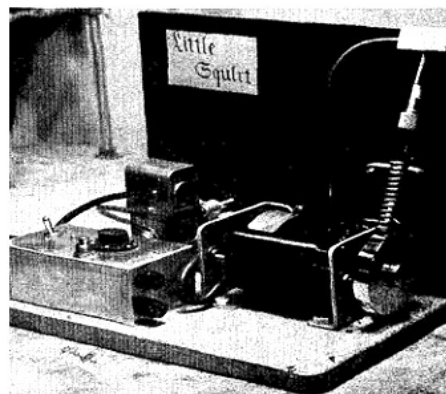
rugalmas ? képlékeny ?

Amorf fém?  
Gyorshűtés ( $10^5$  °C/sec) ?

61



61

Little squirt

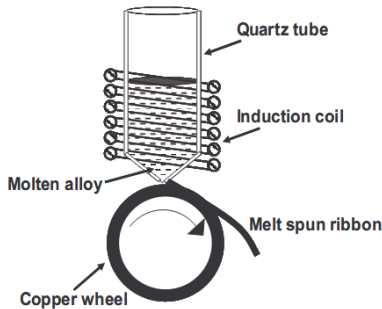
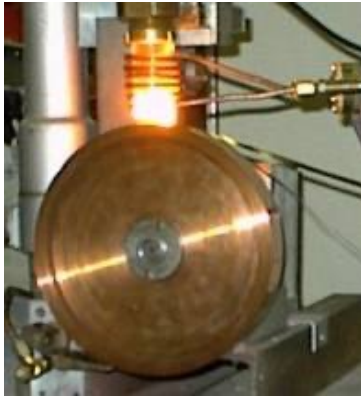


Harold Liebermann (1976) első fémüveg szalag öntő berendezése

62

### Melt spinning, rapid solidification

Finemet  
 $\text{Fe}_{74}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{15}\text{B}_7$

63




**“A képlékeny alakváltozás nem más, mint a diszlokációk mozgása.”**  
*Prof. Gillemot László*

64

64







65

## Felületszerű hibák (2D)

- Makrofelület
- Szemcsehatár (nagyszögű, kisszögű)
- Fázishatár (inkoherens, szemikoherens, koherens)
- Ikersík (ikerhatár)
- Rétegződési hiba

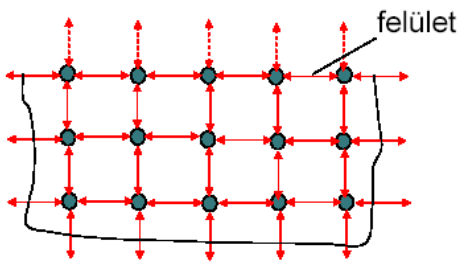
66

66



## Makroszkópikus felület

- A kristály felületén az atomok energiája nagyobb, mint a kristály belsejében.
- A felület energiaszintje csökken, ha a felülethez újabb atomok kapcsolódnak.
- Oxidrétegek kialakulása.
- Kémiai reakciók.

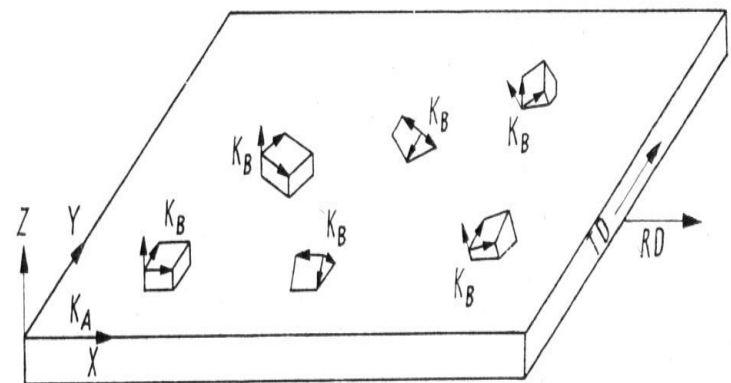


67

67

## Orientáció jelentése

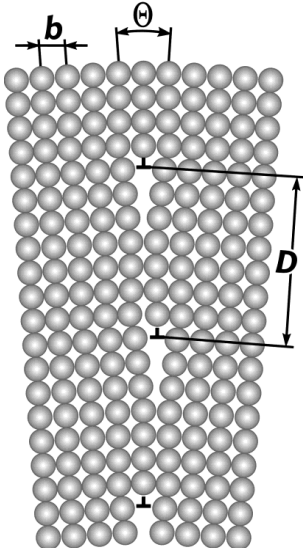


68

68

**zatt** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Szemcsehatár



Csak orientáció eltérés.  
Nagyszögű  
Kisszögű ( $\theta < 5^\circ$ )

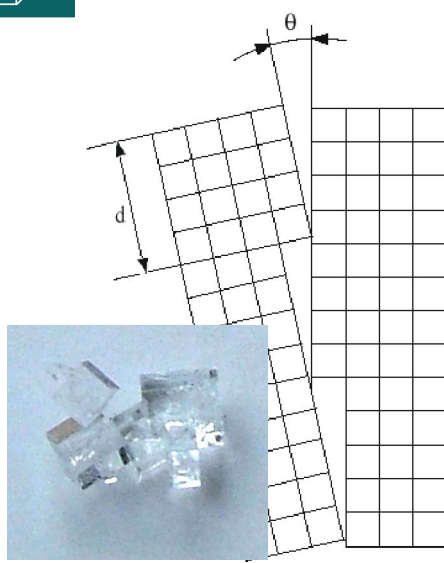
$$\Theta \approx \text{tg}\Theta = \frac{b}{D}$$

69

69

**zatt** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Nagyszögű szemcsehatár



A dermedés során véletlen orientációjú kristálycsírák összenőnek.  
Az egyes szemcsék csak orientációjukban különböznek.

70

70

**Kis- és nagyszögű határ összehasonlítása**

Határfelületi energia

30  $\theta$

Kisszögű szemcsehatár  $\theta < 5^\circ$       Nagyszögű szemcsehatár  $\theta > 15^\circ$

71

71



**Fázishatár**

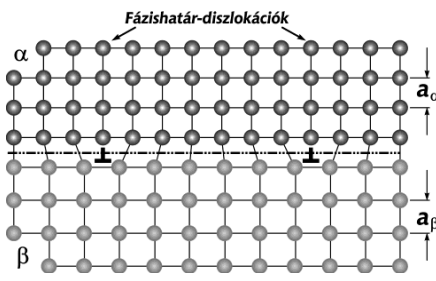
Inkoherens  
Szemikoherens  
Koherens

Inkoherens

72

72



$\alpha$

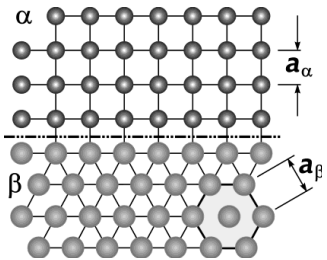
$\beta$

$a_0$

$a_\beta$

Fázishatár-diszlokációk

Szemikoherens  
Misfit diszlokációk



$\alpha$

$\beta$



$a_\alpha$

$a_\beta$

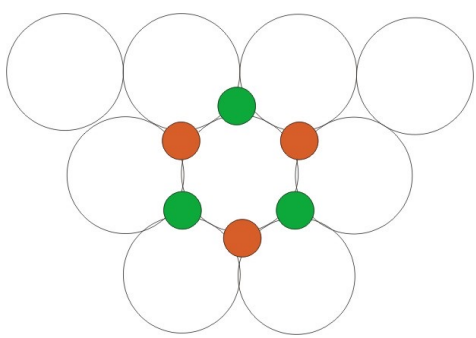
Koherens  
(Heteroepitaxia)

73

73

### FKK (111) szoros síkok lehetséges elrendeződései





ABCABC     FKK

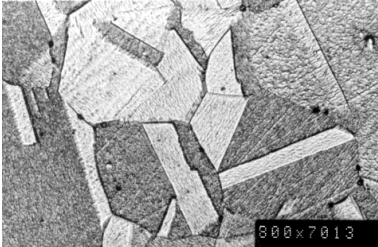
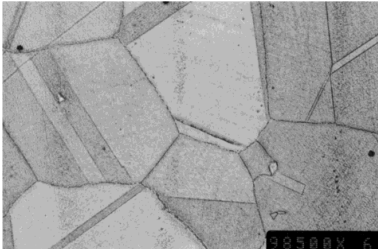
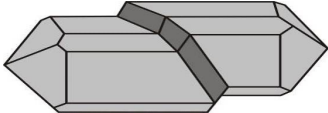
ABABAB     HCP

74

74

   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Ikerhatár



FKK

ABCABCBACBA

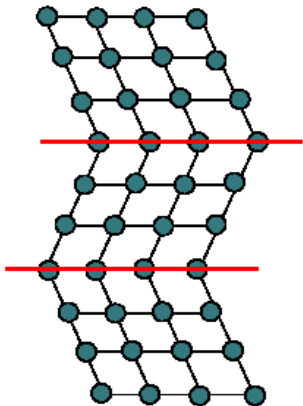
Párhuzamos vonal

75

75

   
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Ikerhatár



- Koherens határ, mindkét oldalon azonos fázis van
- A határ két oldala egymás tükörképe
- Keletkezhethet kristályosodás és képlékeny alakváltozás során.
- Alakítási ikek: TKK
- Újrakristályosítási ikek: FKK, HCP

76

76

**Rétegződési hiba**

ABCABCABABCABCAB  
FKK - HCP - FKK  
Zárt görbe

77

77

**Teljes (perfekt) diszlokációk**

Az olyan diszlokációkat amelyeknek **Burgers-vektorát két szomszédos atom határozza meg**, teljes vagy perfekt diszlokációknak nevezzük.

$$|\vec{b}| = d$$

Köbös rácsban az  $[100]$ ,  $[110]$  és  $[111]$  irányú teljes diszlokációk vannak.

Legrövidebb teljes diszlokációk

78

78

**att** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Shockley-féle parciális diszlokáció  $|\bar{b}| < a$

(111) f.k.k.

A  
B  
C

$\frac{a}{2} [10\bar{1}]$   
 $\frac{a}{6} [11\bar{2}]$   
 $\frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$

79

79

**att** M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Rétegződési hiba

$$\frac{a}{2} [10\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6} [11\bar{2}] + \frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$$

$$b^2 = \frac{a^2}{2} > b_1^2 + b_2^2 = \frac{a^2}{6} + \frac{a^2}{6} = \frac{a^2}{3}$$

Energia

Elmozdulás  $[10\bar{1}]$

C  
B  
A  
C  
B  
A  
C  
B  
A



A  
C  
B  
A  
C  
B  
A

C  
B  
A  
C  
B  
A

80

80



  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Térfogati (3 dim.) hibák

- Üregek
- Zárványok
- Kiválások
- Gázbuborékok

81

81

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

## Kúszási üregek a szemcsehatárok mentén



Acc.V Spot Magn Det WD Exp |-----| 10 µm  
25.0 kV 4.5 2000x BSE 10.1 15' BME-MTAT b09

82

82