

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

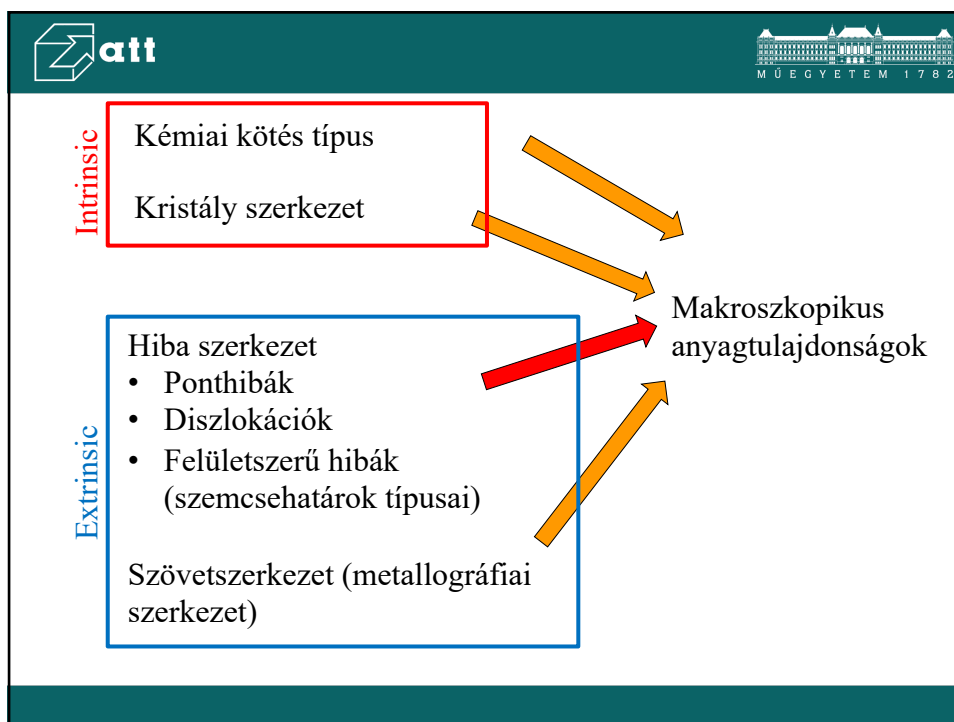
Anyagismeret

Reális kristályok, rácshibák

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

1

1



2


M Ü 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 Ü 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

Ponthibák

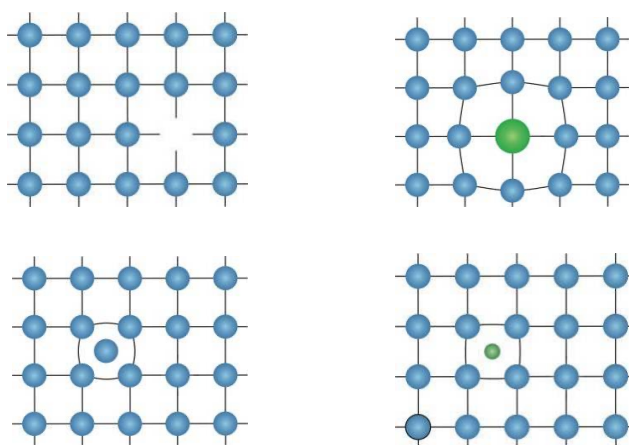
- Vakancia (üres rácshely)
- Saját intersziciós atomok
- Idegen atomok (intersztíciós, szubsztitúciós helyen)
- Ponthiba komplexek (di-, tri-vakancia, idegen atom-vakancia...)

Termikusan aktivált hibák

5

5

Ponthibák típusai



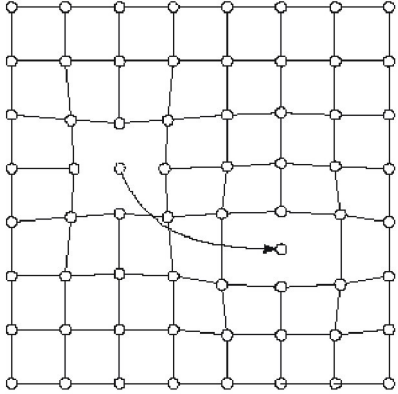
6

6




Ponthiba képződési mechanizmusok

Frenkel-mechanizmus



Frenkel hibapár

7

7




Termikus ponthibák egyensúlyi koncentrációja

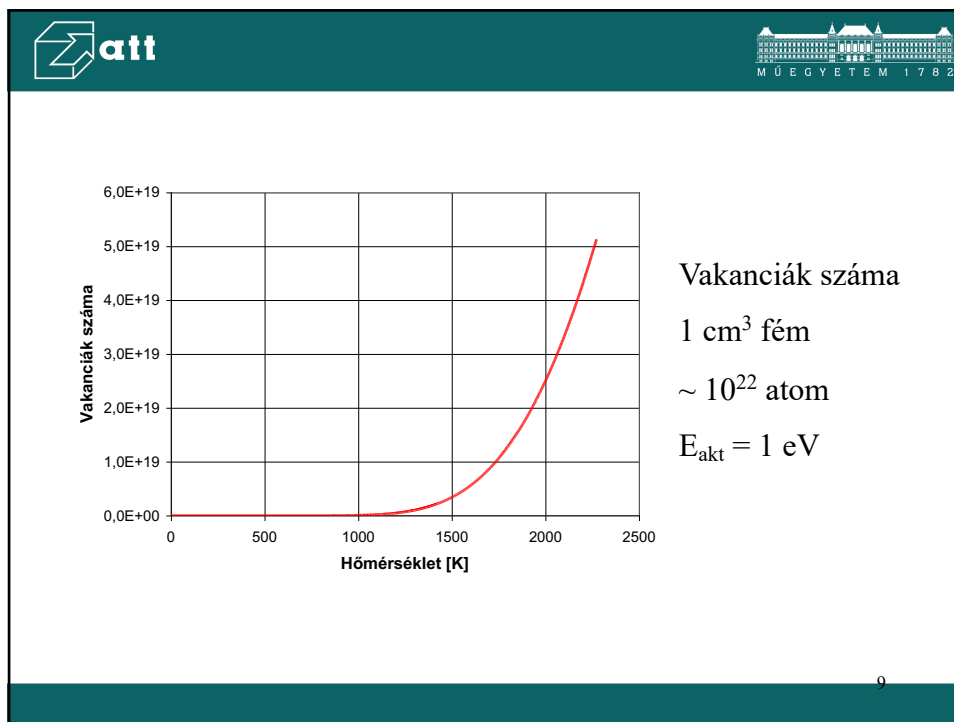
$$n = N \cdot e^{-\frac{E_{akt}}{kT}}$$

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

Rácstorzulás $\Leftrightarrow$ aktiválási energia

8

8



9

Termikus ponthibák egyensúlyi koncentrációja

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

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

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

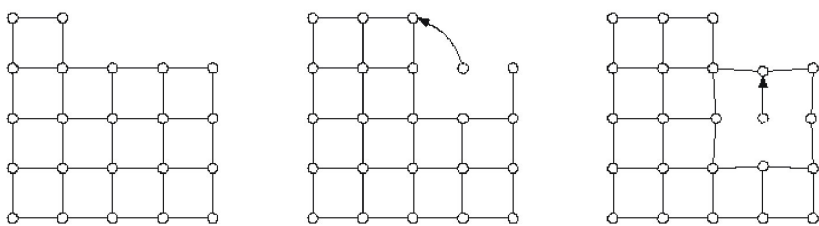
$$(1 \text{ eV}, 5 \text{ eV})$$

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

10




Wagner-Schottky mechanizmus



11

11




Ponthibák keletkezése

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

Termikus pont hibák eltűnése

diffúziós mozgás

- szemcsehatár
- éldiszlókáció extrasík (kúszás)

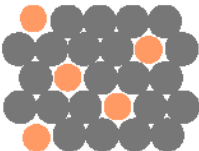
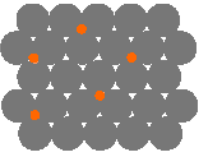
12

12




Ponthibák ötvözetekben

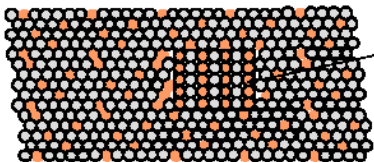
- Szilárd oldat: alapfém (A) + oldott atom (B)


vagy


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

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

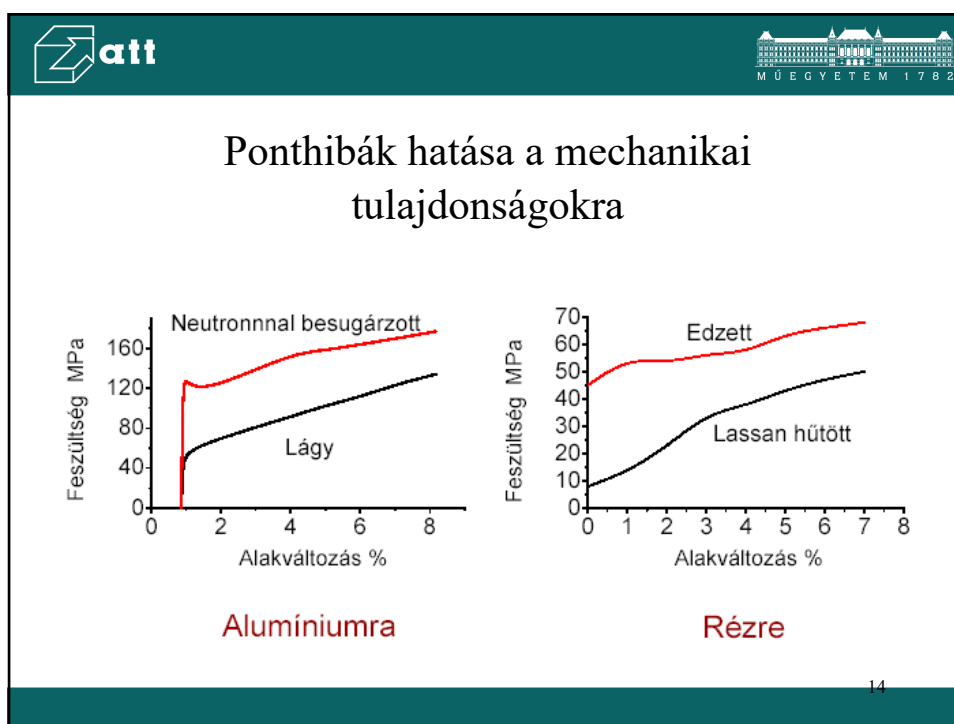
- Szilárd oldatban (A + B) új második fázis is keletkezhet



Második fázisú részecske

- különböző összetétel
- különböző szerkezet

13



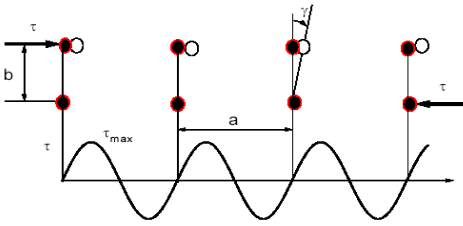
14

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-modellel 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




1934: Fransis Taylor, Orován Emil, Polányi Mihály

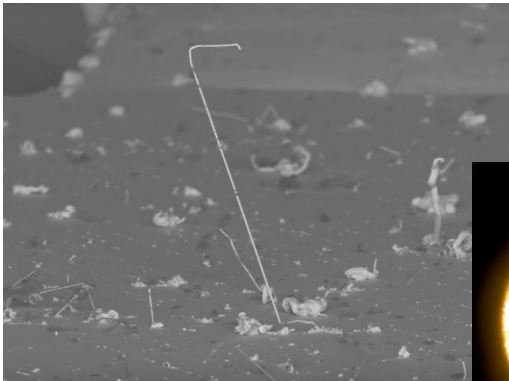
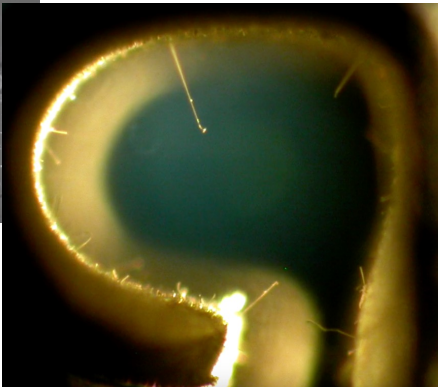
1950: Zn tűkristály (whisker) kondenzátor fegyverzetén
 $d = 0,1 - 0,001 \mu\text{m}$

1960: TEM képek diszlokációkról

17

17



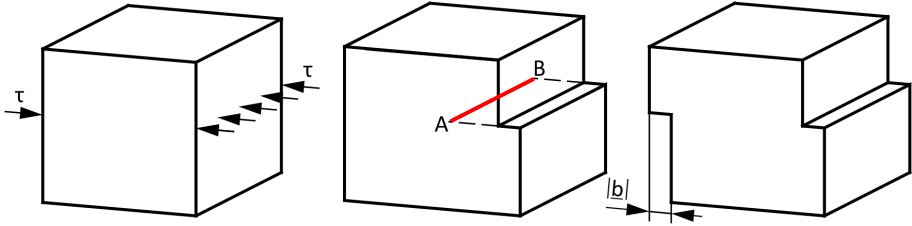
18

18





1 dimenziós hibák vonalszerű hibák, diszlokációk



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

19

19





- 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 határolóvonala.

Éldiszlokáció

Csavardiszlokáció

Vegyes diszlokáció

Teljes (perfekt) diszlokáció

Parciális diszlokáció

21

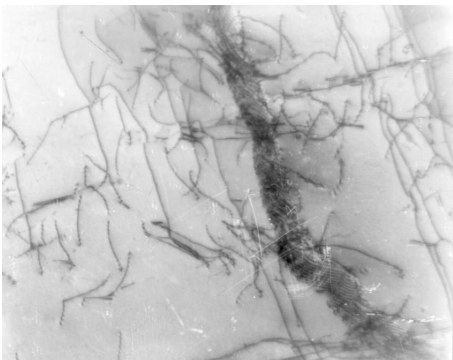
21



TEM diszlokáció kép 40.000x



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

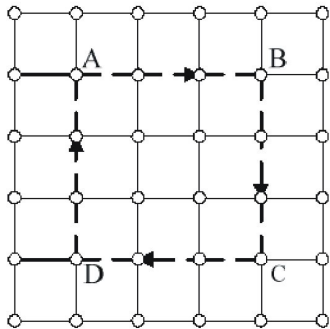
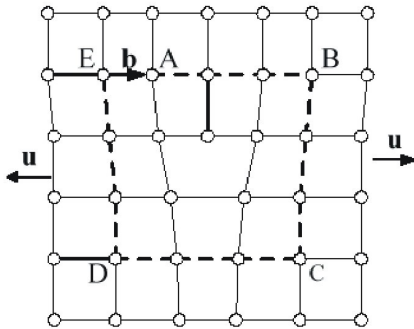



22

22




Burgers-kör

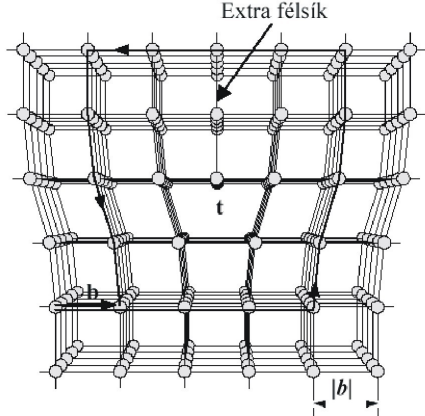



23

23




Éldiszlókáció



Diszlókáció vonala: **l**

Csúszósík adott
 $\Rightarrow$ nem mozgékony

Extra sík

Burgers vektor: **b**

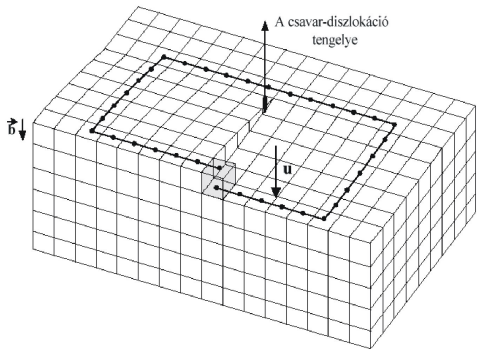
$b \perp l$

24

24




Csavardiszlókáció



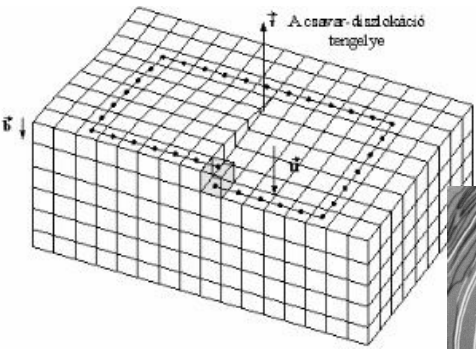
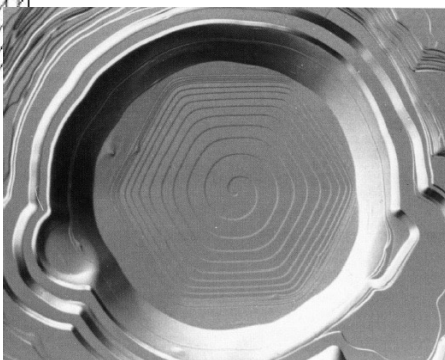

Nincs egyértelmű csúszósík $\Rightarrow$ mozgékony
Extra sík nincs !

$b \parallel l$

25

25



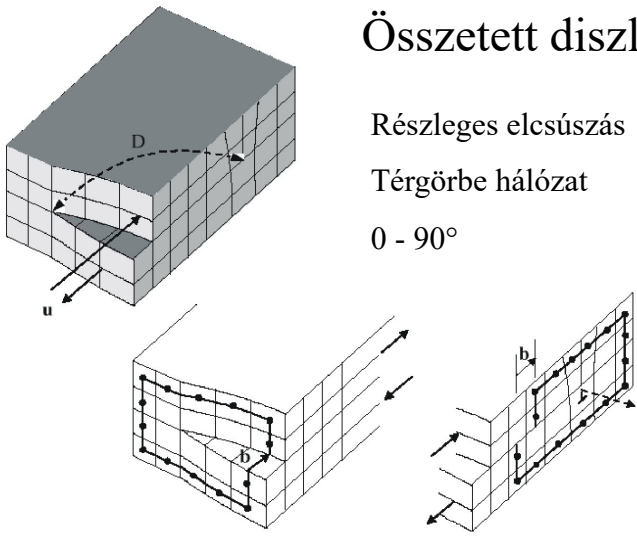




26

26




Összetett diszlokáció



Részleges elcsúszás

Térgörbe hálózat

$0 - 90^\circ$

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

Diszlokációk energiája

Feszültség (nyomó , húzó)

Energiatöbblet

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

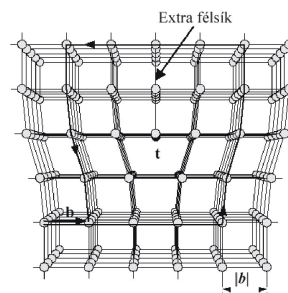
$$W_{cs} = Gb^2l$$

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

$$W_{él} = \frac{Gb^2l}{1-\nu}$$

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

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

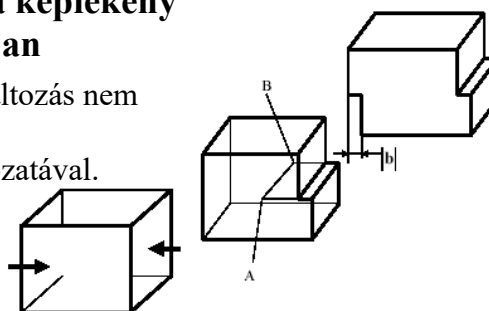


29

29

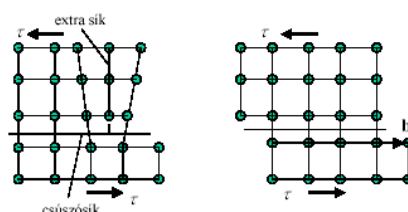
Diszlokációk szerepe a képlékeny alakváltozásban

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



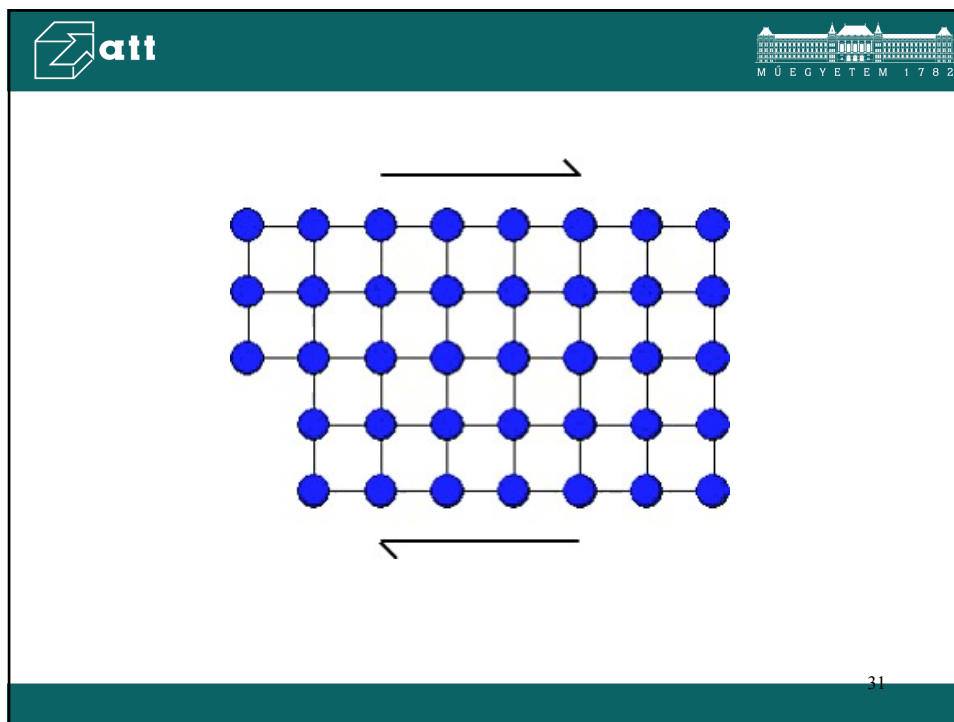
“A képlékeny alakváltozás nem más, mint a diszlokációk mozgása.”

Prof. Gillemot László (1912-1977)

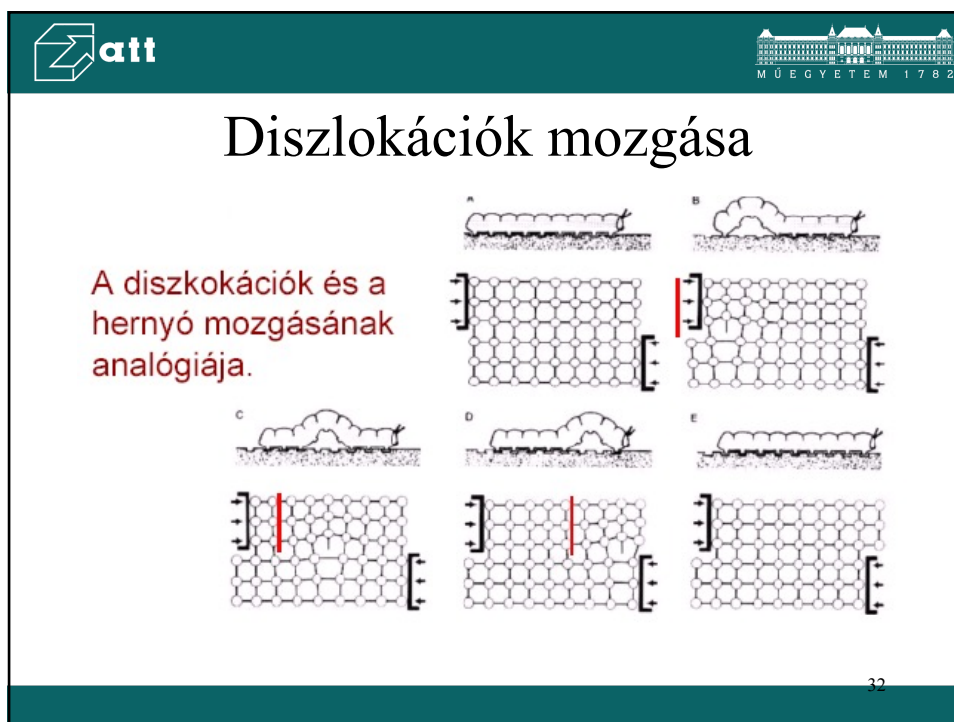


30

30



31



32

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**

33

33

Csúszási rendszerek

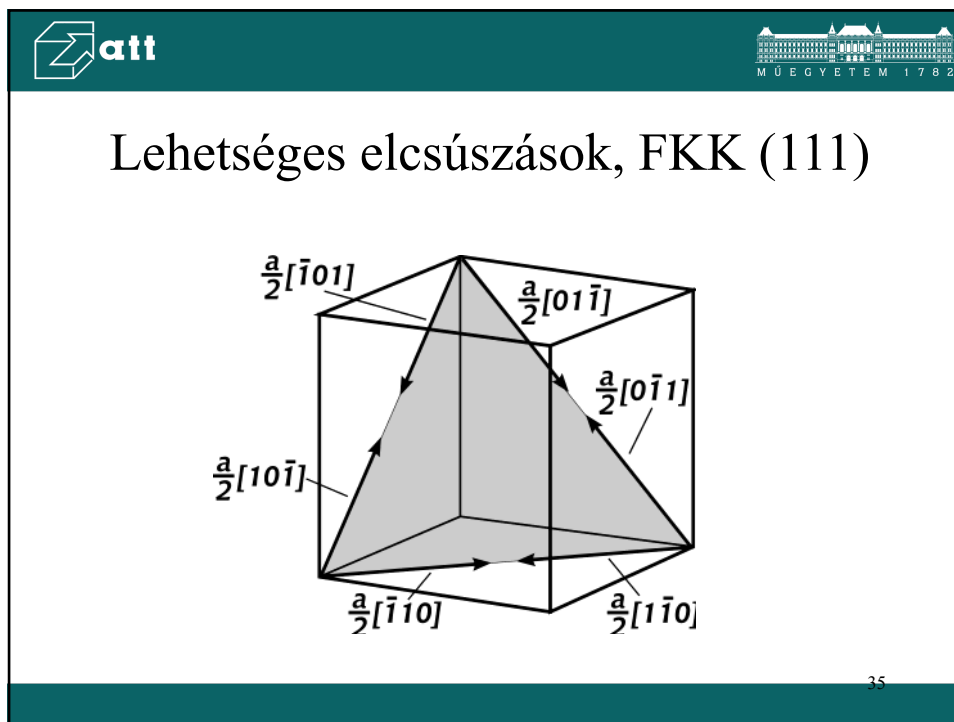
Csúszási rendszer : csúszó sík+ irány

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

Minden csúszási rendszerhez azonos kritikus csúsztatófeszültség tartozik.

34

34



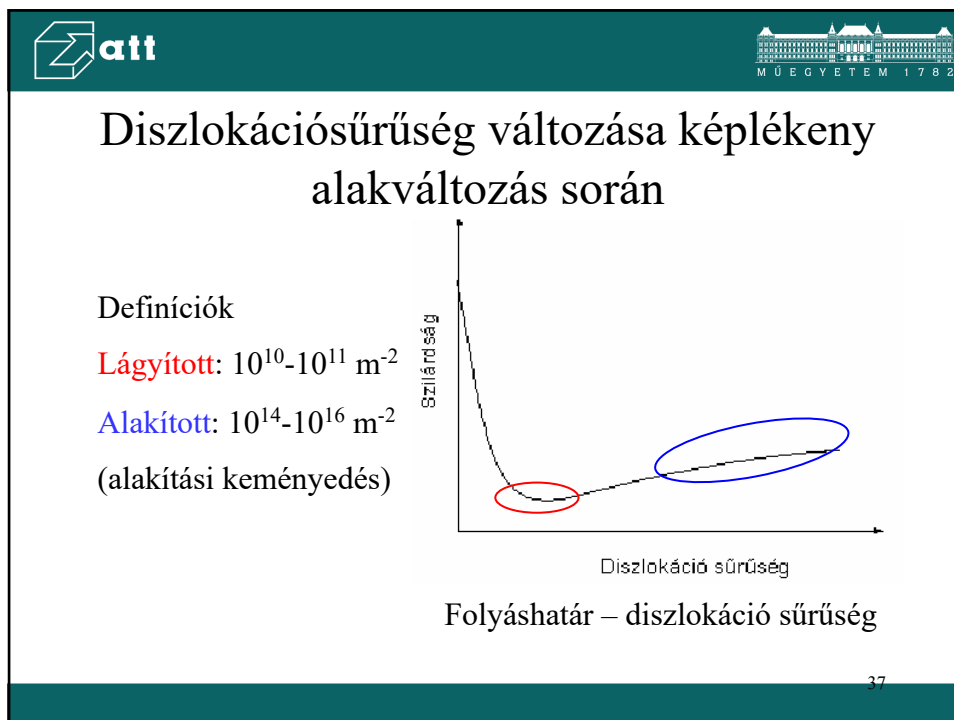
35

Diszlokációk mozgásának szabályai 2.
nem-konzervatív diszlokáció mozgás

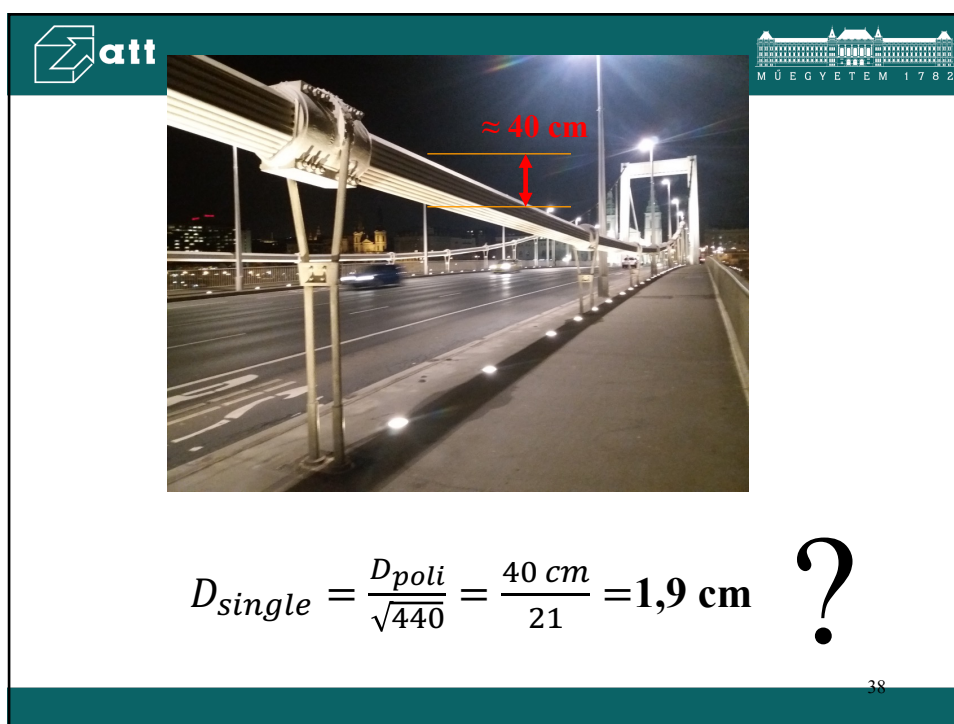
Csúszósík váltás
 Csavar → keresztcsúszás
 Él → mászás → kúszás (tartós folyás, creep) → üregek a szemcsehatáron

36

36



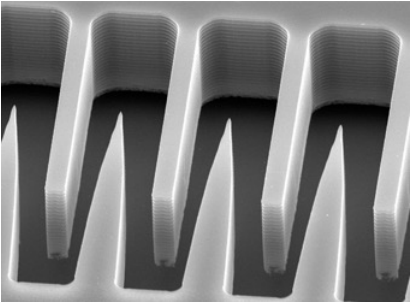
37



38

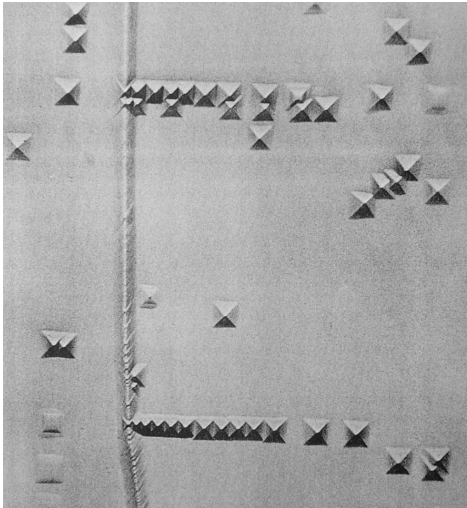



Micromechanical Systems MEMS

39



Diszlokáció sűrűség
mérése

LiF egykristály (100), etch pits

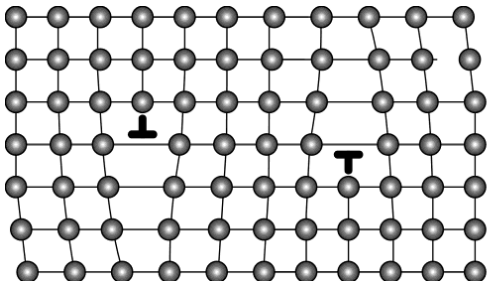
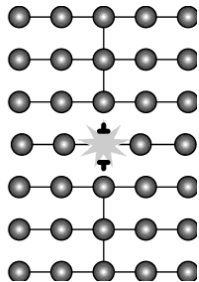
40

40




Diszlokációk kölcsönhatása 1.

Ellentétes előjelű él-, sodrású csavardiszlokációk kioltják egymást.

41

41



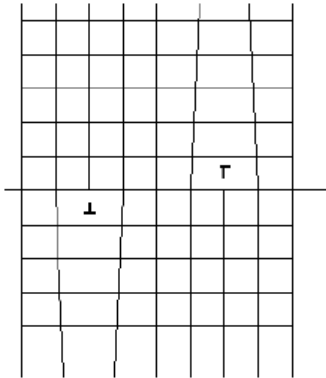

Diszlokációk kölcsönhatása 2.

Ellentétes előjelű diszlokációk kölcsönhatása:

$\theta = 45^\circ$ egyensúly

$\theta < 45^\circ$ taszítás

$\theta > 45^\circ$ vonzás



42

42

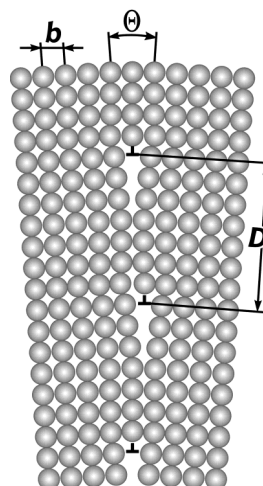
Diszlokációk kölcsönhatása 3.

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

Példák diszlokáció reakciókra

$a/2 [\underline{1}10] + a/2 [1\underline{1}0] \rightarrow 0$	kioltás
$a/2 [\underline{1}10] + a/2 [10\underline{1}] \rightarrow a/2 [011]$	stabil
$a/2 [\underline{1}01] + a/2 [0\underline{1}1] \leftarrow a/2 [\underline{1}\underline{1}2]$	instabil, bomlás

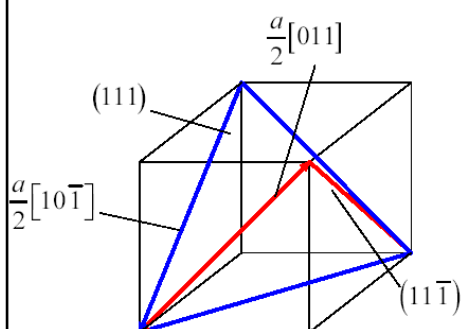
$b_1 b_2 < 0$ (tompaszög) $\Rightarrow$ stabil diszlokáció jön létre

$b_1 b_2 > 0$ (hegyesszög) $\Rightarrow$ instabil diszlokáció jön létre, ami komponensekre bomlik

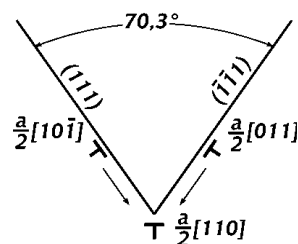
45

45

Cottrell-Lomer gát



$$\frac{a}{2} [10\bar{1}]_{(111)} + \frac{a}{2} [011]_{(11\bar{1})} \rightarrow \frac{a}{2} [110]_{(001)}$$



FKK

Elcsúszás két síkon

Eredő diszlok.: metszésvonal

Stabil

Éldiszlokáció

Nincs csúszósíkban

Mozgásképtelen

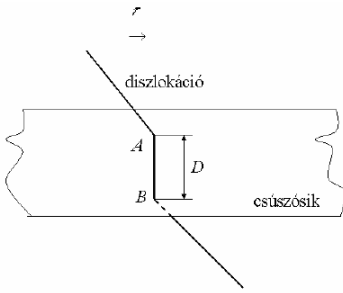
46

46

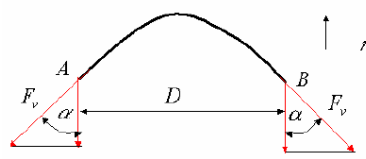



Diszlokációk keletkezése

Frank-Read mechanizmus/forrás



Félkörív
labilis
zárt hurok



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

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

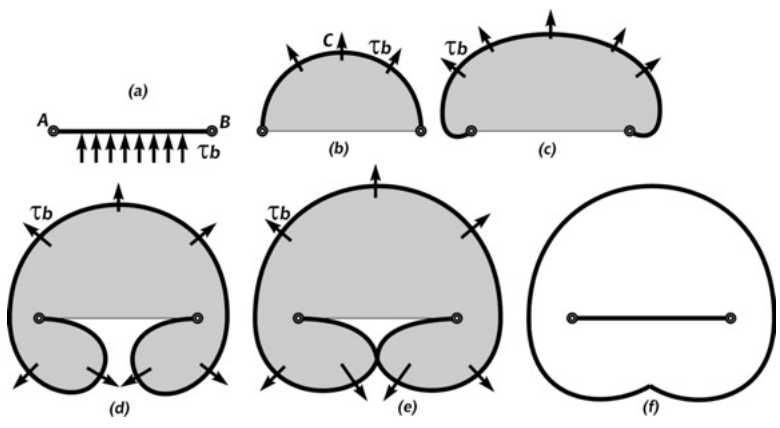
$$\alpha = 0$$

47

47



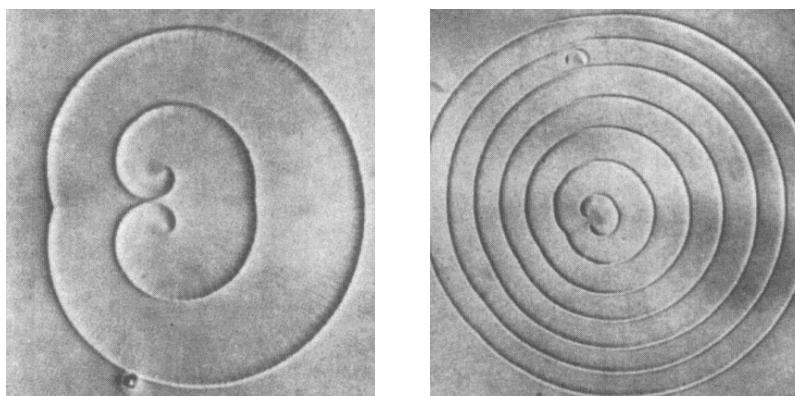

Frank-Read forrás működése



48

48

Frank-Read forrás TEM képe (Al)



49

49

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 $[\underline{1} \ 2 \ \underline{1}]$ irányú éldiszlokáció van. Adjuk meg a diszlokáció Burgers vektorát.

50

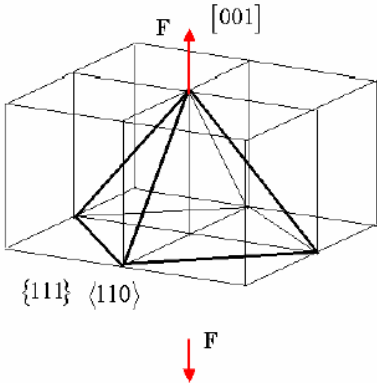
50




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

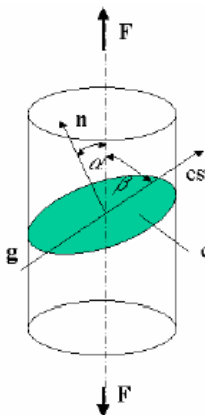
51

51




Egykristályok képlékeny alakváltozása

Alakváltozás: csúszósíkok a csúszási irányok mentén elcsúsznak egymáson.



csúszási irány

csúszósík

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

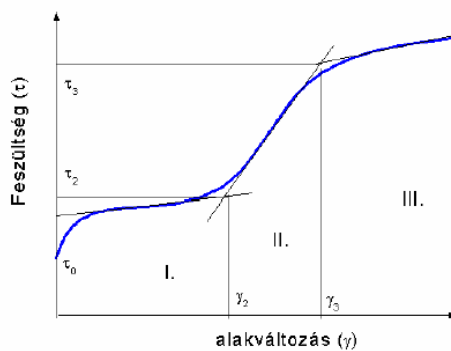
$m = \cos \alpha \cos \beta$ m: Schmid-tényező

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

52

52

Egykristályok képlékeny alakváltozása

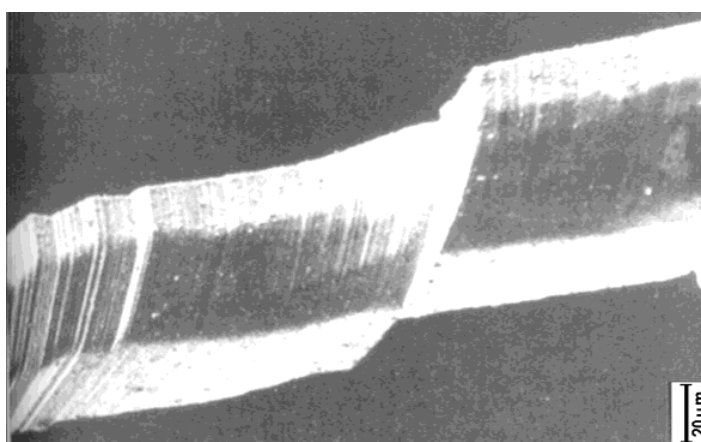


- I. : egyszerű csúszás (lépcsős felület, sok diszlokáció mozgása $\Rightarrow$ Frank-Read)
 II.: bonyolult / többszörös csúszás (Lomer-gátak $\Rightarrow$ erős alakítási keményedés)
 III.: keresztcsúszás, ikerképződés

53

53

Zn egykristály alakváltozása az I. szakaszban

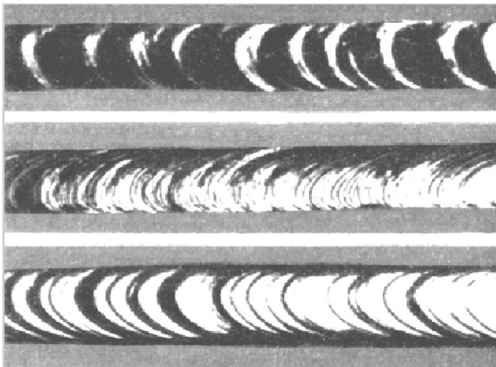


54

54

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Egykristályok makroszkópikus alakváltozása szakítás hatására



Ón

Bizmut

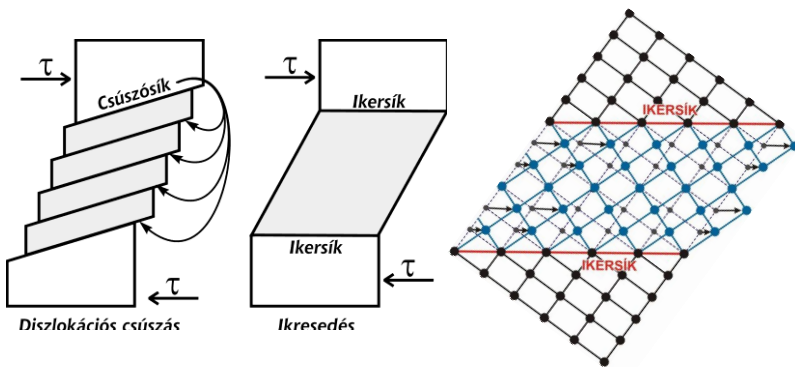
Horgany

55

55

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Ikerképződéssel járó képlékeny alakváltozás



Diszlokációs csúszás

Csúszósík

Ikersík

Ikeresedés

IKERSÍK

IKERSÍK

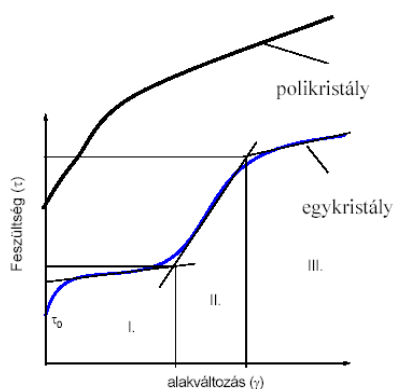
Diszlokációs csúszás: elmozdulás csak néhány csúszósíkon

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*).

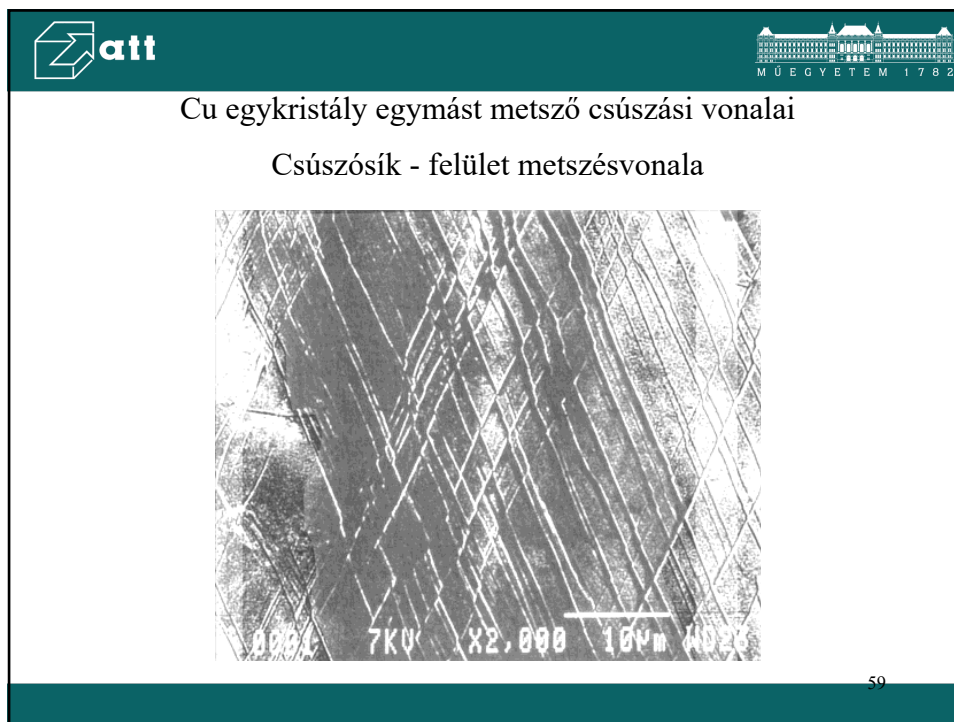
Polikristályos test keményedése mindig intenzívebb, mint az egykristályé.

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

58

58

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 alakváltozó képessége

fémüveg, üvegfém

rugalmas ? képlékeny ?

Amorf fém?
Gyorshűtés (10^5 °C/sec) ?

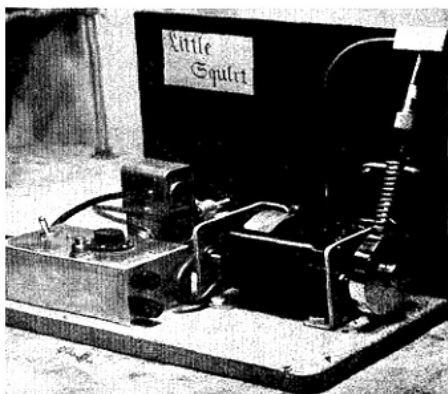
61

61





Little squirt



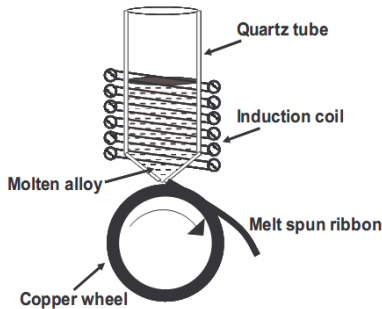
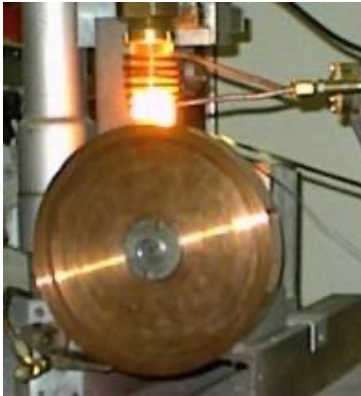
Harold Liebermann (1976) első fémüveg szalag öntő berendezése

62

62



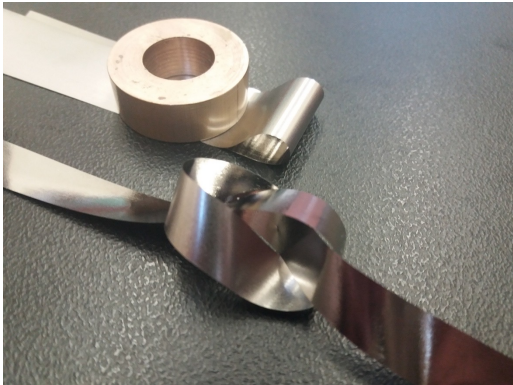

Melt spinning, rapid solidification

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



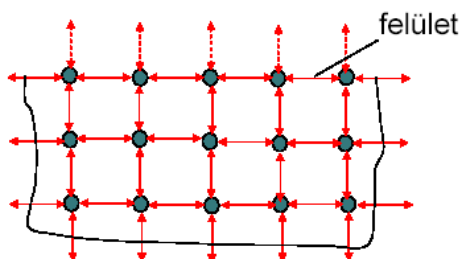

Felületszerű hibák (2D)

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

66

Makroszkópikus felület

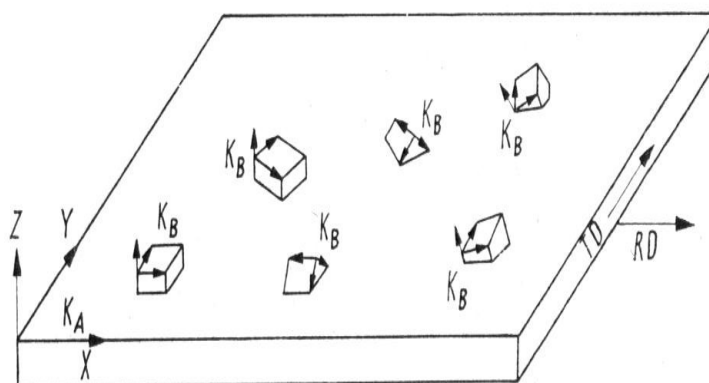
- A kristály felületén az atomok energiája nagyobb, mint a kristály belsejében.
- A felület energiaszintje csökken, ha a felülethez újabb atomok kapcsolódnak.
- Oxidrétegek kialakulása.
- Kémiai reakciók.



67

67

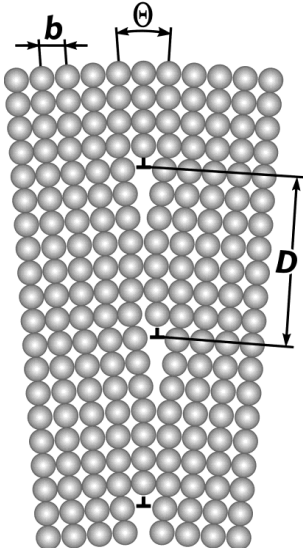
Orientáció jelentése



68

68



Szemcsehatár

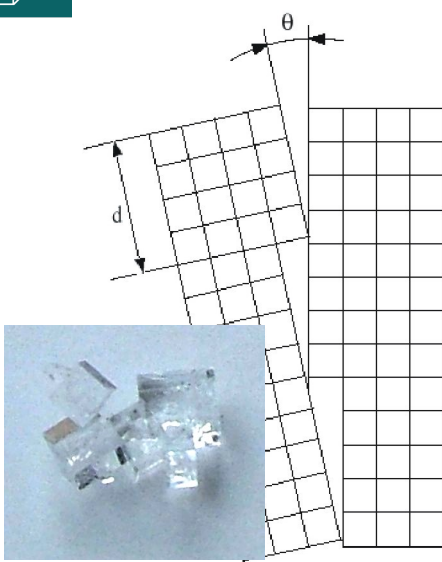
Csak orientáció eltérés.
Nagyszögű
Kisszögű ($\theta < 5^\circ$)

$$\Theta \approx \tan \Theta = \frac{b}{D}$$

69

69



Nagyszögű szemcsehatár

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

70

70

zatt MŰEGYETEM 1782

Kis- és nagyszögű határ összehasonlítása

Kisszögű szemcsehatár $\theta < 5^\circ$

Nagyszögű szemcsehatár $\theta > 15^\circ$

Határfelületi energia

30 θ

71

71

zatt MŰEGYETEM 1782

Fázishatár

α

β

a_0

a_1

a_2

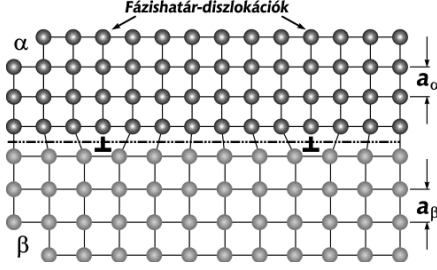
Inkoherens
Szemikoherens
Koherens

Inkoherens

72

72



α

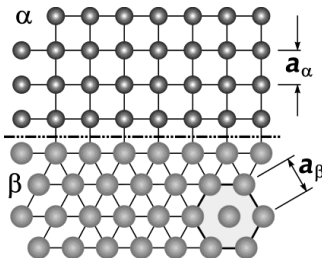
β

a_α

a_β

Szemikohereus

Misfit diszlokációk



α

β

a_α

a_β

Kohereus

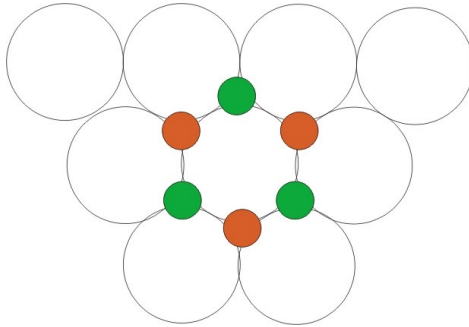
(Heteroepitaxia)

73

73




FKK (111) szoros síkok lehetséges elrendeződései



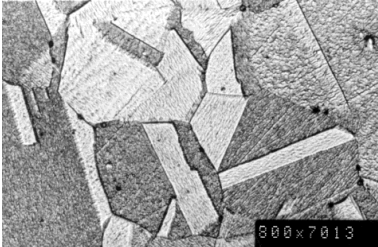
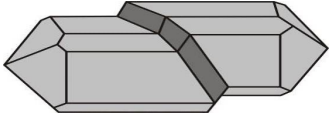
ABCABC	FKK
ABABAB	HCP

74

74




Ikerhatár

FKK

ABCAB**C**BACBA

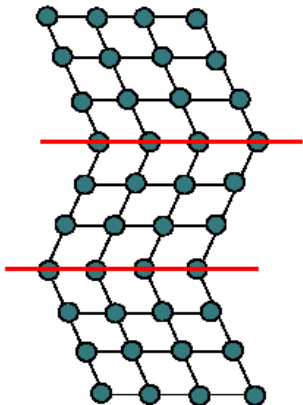
Párhuzamos vonal

75

75




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

A

B

C

A

B

C

A

B

C

A

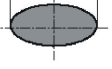
B

C

A

B

C



ABCABCABABCABCAB

FKK - HCP - FKK

Zárt görbe

77

77

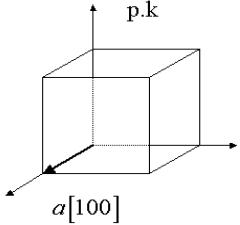



Teljes (perfekt) diszlokációk

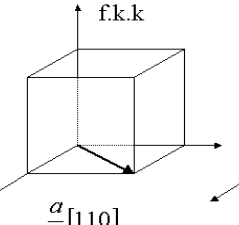
Az olyan diszlokációkat amelyeknek **Burgers-vektorát két szomszédos atom határozza meg**, teljes vagy perfekt diszlokációknak nevezzük.

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

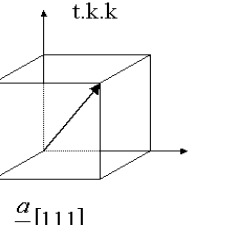
Köbös rácsban az $[100]$, $[110]$ és $[111]$ irányú teljes diszlokációk vannak.



$a[100]$



$\frac{a}{2}[110]$



$\frac{a}{2}[111]$

Legrövidebb teljes diszlokációk

78

78

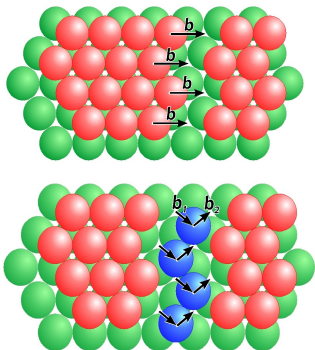




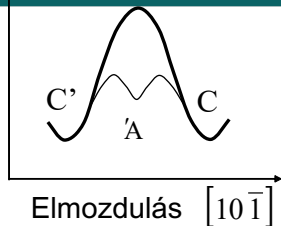
Rétegződési hiba

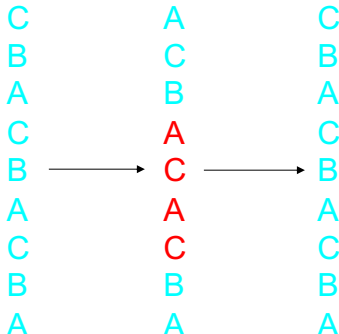
$$\frac{a}{2}[10\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[11\bar{2}] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$$

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



Energia





80


M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Térfogati (3 dim.) hibák

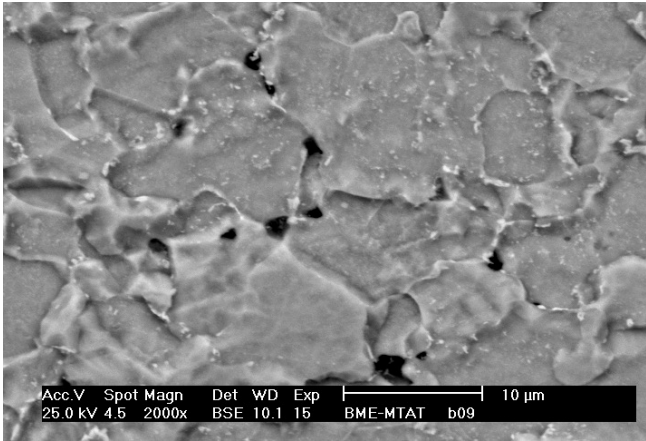
- Üregek
- Zárványok
- Kiválások
- Gázbuborékok

81

81


M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Kúszási üregek a szemcsehatárok mentén



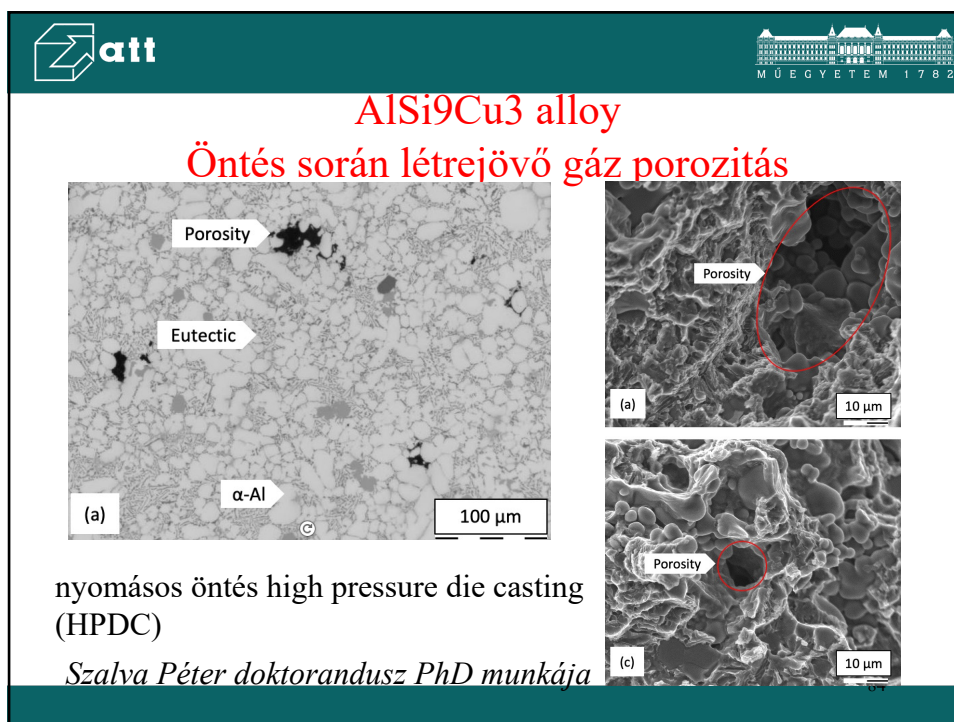
Acc.V Spot Magn Det WD Exp | 10 μm
25.0 kV 4.5 2000x BSE 10.1 15 BME-MTAT b09

82

82



83



84

„Betűfém”
Ólom-antimon-ón (Pb Sb Sn)
fajtérfogat növekedés a megszilárdulás során



85