

 Anyagtudomány és Technológia Tanszék 

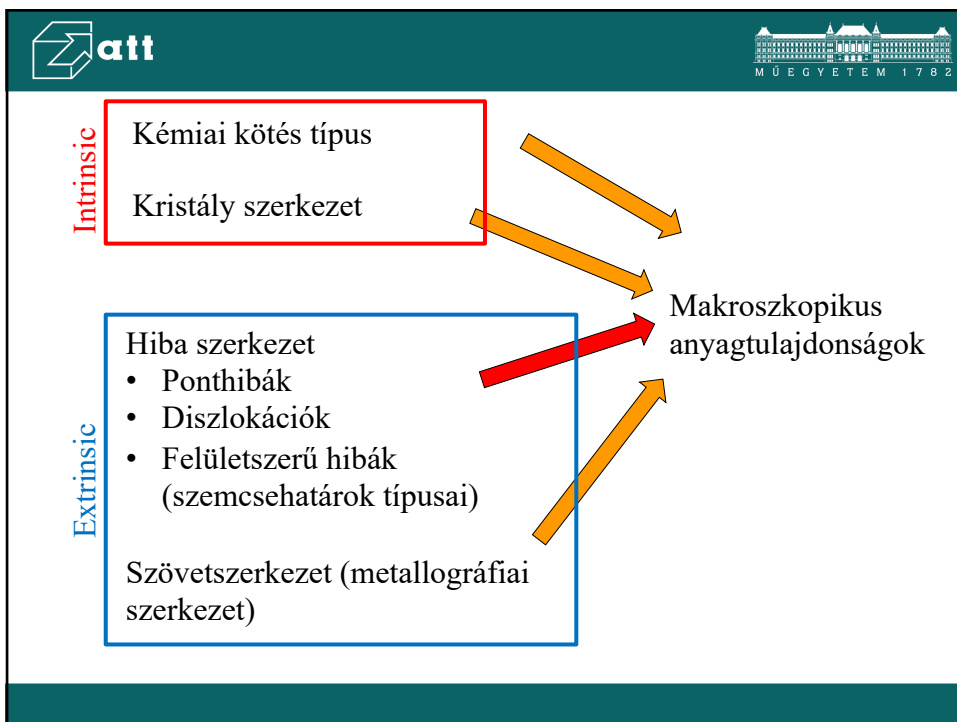
Anyagismeret

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...)

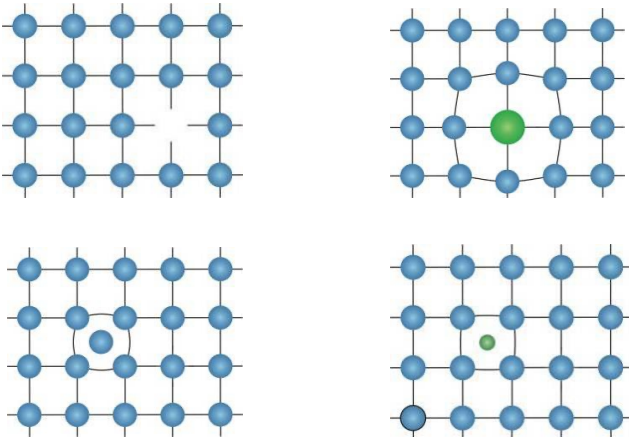
Termikusan aktivált hibák

5

5



 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Ponthibák típusai



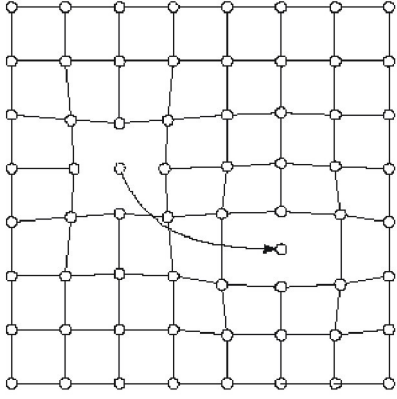
6

6

Ponthiba képződési mechanizmusok



Frenkel-mechanizmus



Frenkel hibapár

7

7

Termikus ponthibák egyensúlyi koncentrációja

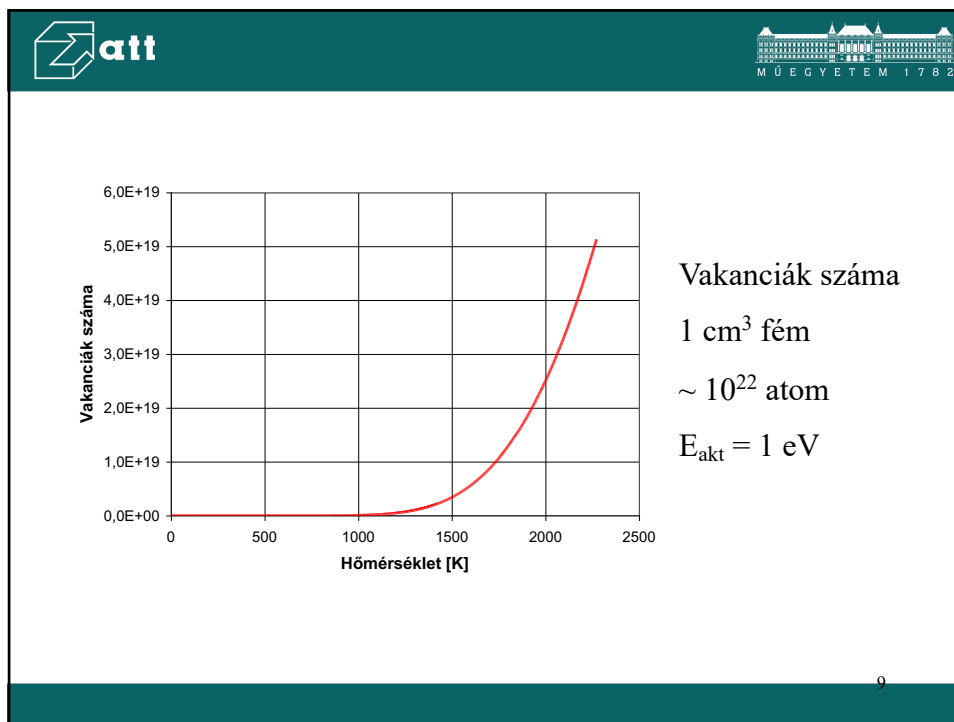
$$n = N \cdot e^{-\frac{E_{akt}}{kT}}$$

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

Rácstorzulás \Leftrightarrow aktiválási energia

8

8



9

Termikus ponthibák egyensúlyi koncentrációja

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



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

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

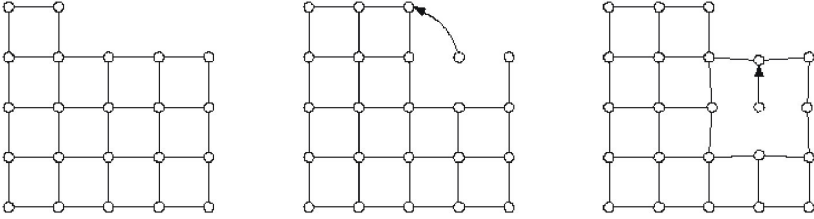
$$(1 \text{ eV}, 5 \text{ eV})$$

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

10



  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)

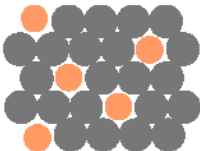
12

12

zatt M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

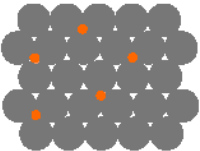
Ponthibák ötvözetekben

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



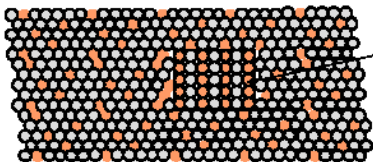
Szubsztitúciós szilárd oldat
(pl. Ni-alapfém + Cu-ötvöző)

vagy



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

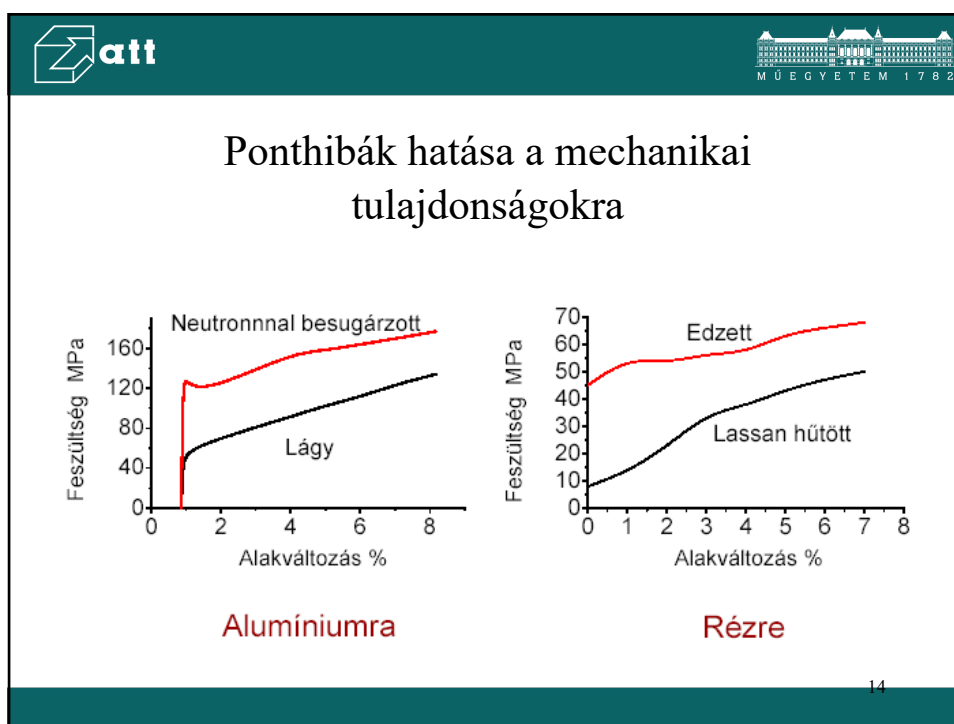
- Szilárd oldatban (A + B) új második fázis is keletkezhet





Második fázisú részecske

- különböző összetétel
- különböző szerkezet

13

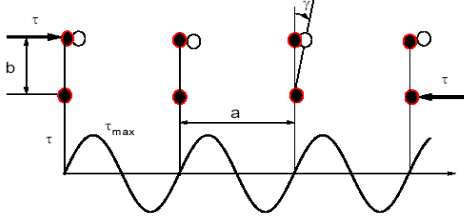


14

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-moddellel 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

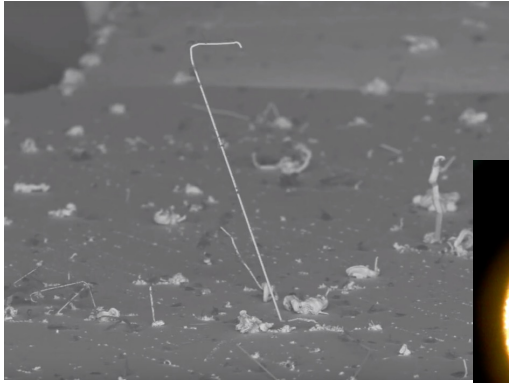
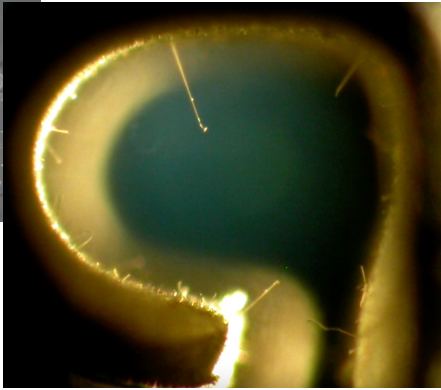
1950: Zn tűkristály (whisker) kondenzátor fegyverzetén
 $d = 0,1 - 0,001 \mu\text{m}$

1960: TEM képek diszlokációkról

17



17

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

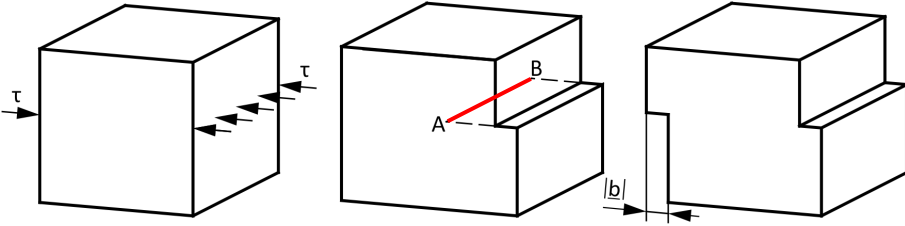



18

18



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 határolóvonalala.

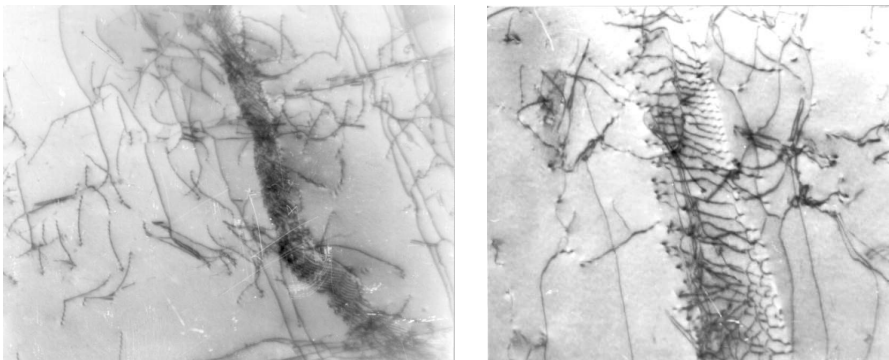
Éldiszlokáció
Csavardiszlokáció
Vegyes diszlokáció

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

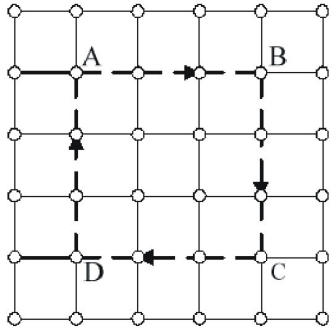
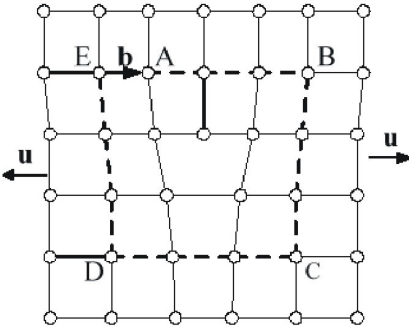


22

22

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

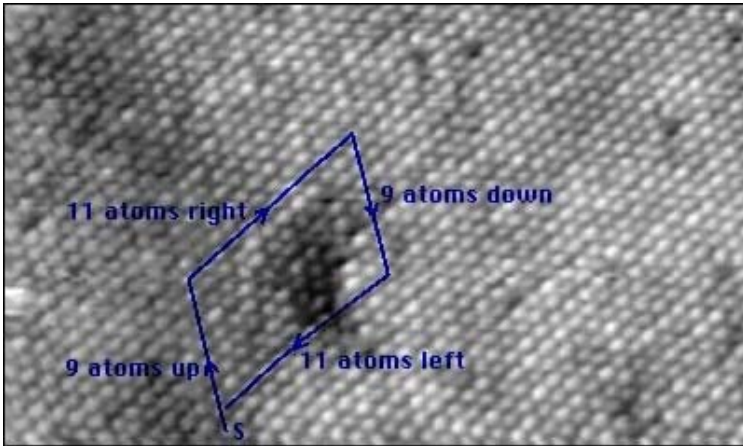
Burgers-kör

23



23

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

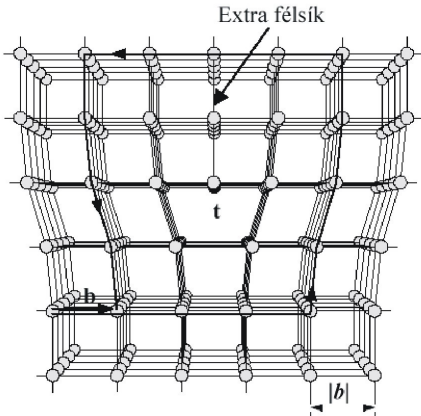


24

24

Éldiszlókáció



Diszlókáció vonala: **l**

Csúszósík adott
⇒ nem mozgékony



Extra sík

Burgers vektor: **b**

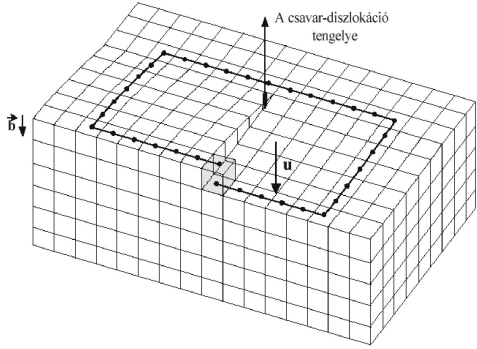

b ⊥ **l**

25

25

Csavardiszlókáció

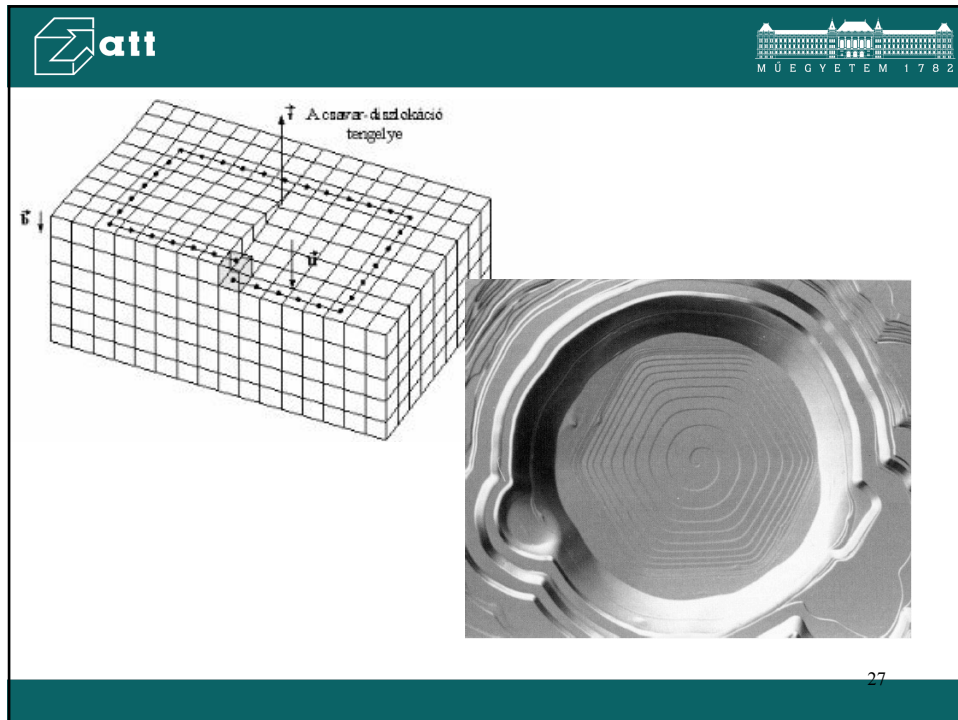
Nincs egyértelmű csúszósík ⇒ mozgékony

Extra sík nincs !

b || **l**

26



26



27

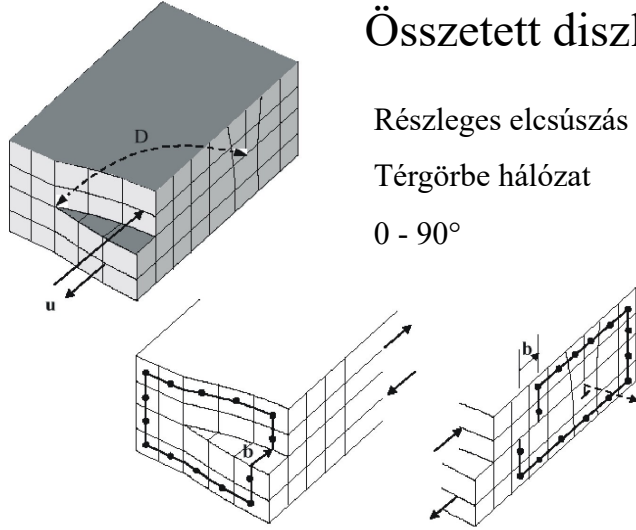


28



Összetett diszlokáció

Részleges elcsúszás
Térgörbe hálózat
 $0 - 90^\circ$



29

29

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.

30

30

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Diszlokációk energiája

Feszültség (nyomó , húzó)

Energiatöbblet

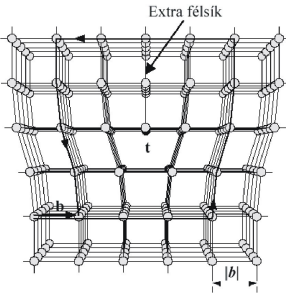
$$W_{cs} = Gb^2l$$

$$W_{él} = \frac{Gb^2l}{1-\nu}$$

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

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

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

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


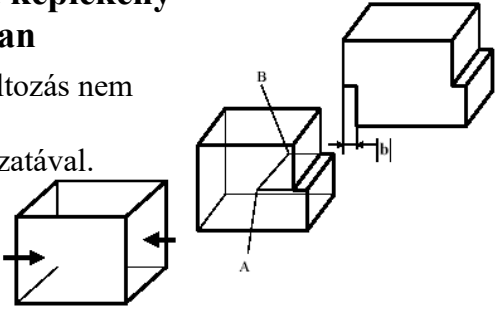
31

31

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

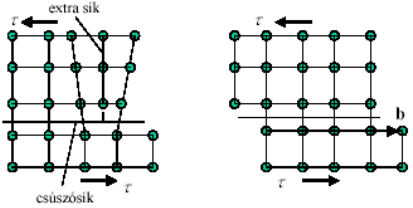
Diszlokációk szerepe a képlékeny alakváltozásban

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)



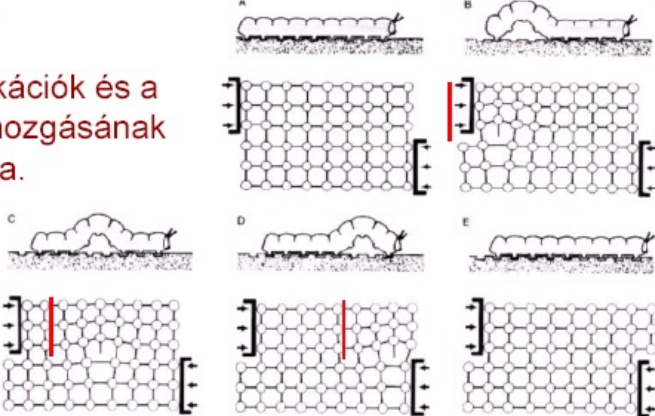
32

32



Diszlokációk mozgása

A diszlokációk és a hernyó mozgásának analógiája.



33

33

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**

34

34

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.

35



35

Lehetséges elcsúszások, FKK (111)

36

36



 
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

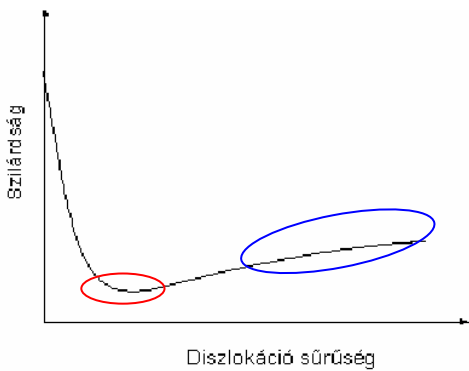
37

37

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Diszlokációsűrűség változása képlékeny alakváltozás során

Definíciók
 Lágýtott: 10^{10} - 10^{11} m⁻²
 Alakított: 10^{14} - 10^{16} m⁻²
 (alakítási keményedés)




Folyáshatár – diszlokáció sűrűség

38

38

zatt MŰEGYETEM 1782




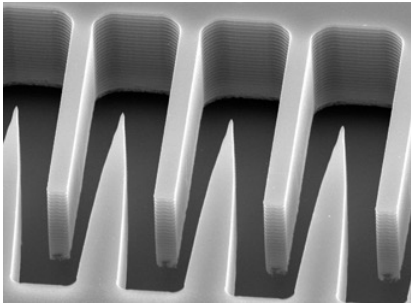
$$D_{single} = \frac{D_{poli}}{\sqrt{440}} = \frac{40 \text{ cm}}{21} = 1,9 \text{ cm} \quad ?$$

39

39



zatt MŰEGYETEM 1782

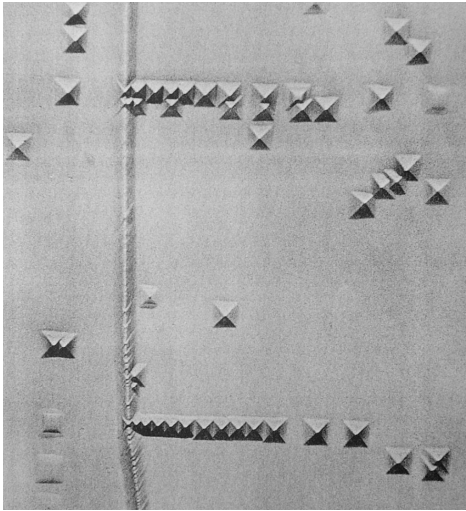
Micromechanical Systems MEMS

40

40





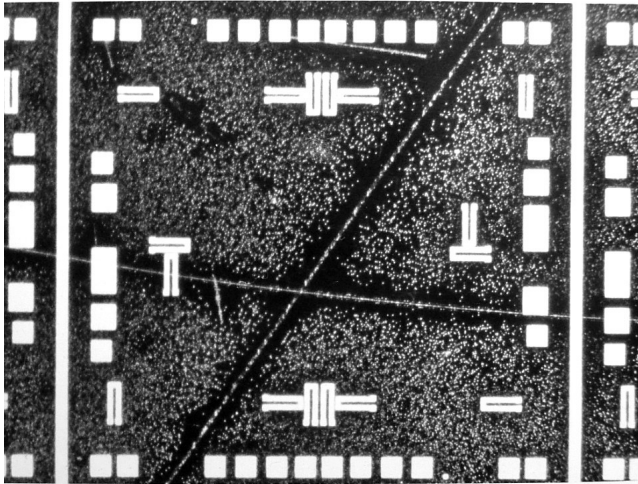
Diszlokáció sűrűség mérése

LiF egykristály (100), etch pits

41

41



 



Si egykristály (111), maratott felület, diszlokációk

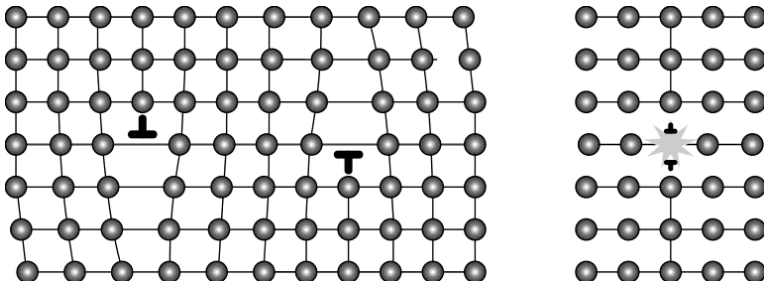
42

42



Diszlokációk kölcsönhatása 1.

Ellentétes előjelű él-, sodrású csavardiszlokációk kioltják egymást.



43

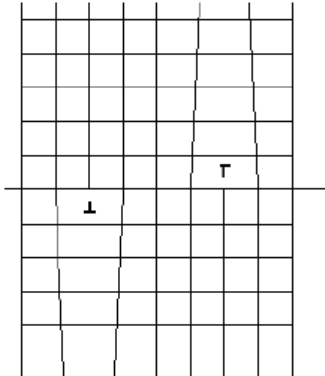
43

Diszlokációk kölcsönhatása 2.



Ellentétes előjelű diszlokációk kölcsönhatása:

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



44

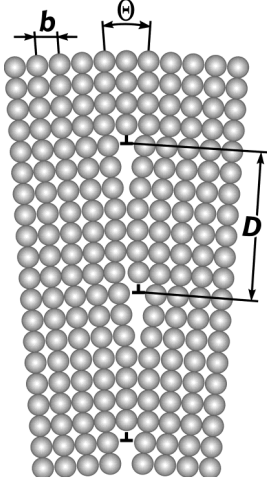
44

Diszlokációk kölcsönhatása 3.



Azonos előjelű diszlokációk kölcsönhatása:
sorba rendeződnek \Rightarrow kisszögű szemcsehatár

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



45

45

Diszlokációk kölcsönhatása 4.

Egyesülhetnek, felbomolhatnak
(Energetikai feltétel)

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



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

$\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 < 0$ (tompaszög) \Rightarrow a két diszlokáció egyesül

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

46

46



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
$a/2 [1\underline{0}1] + a/2 [0\underline{1}1] \leftarrow a/2 [\underline{1}1\underline{2}]$	instabil, bomlás

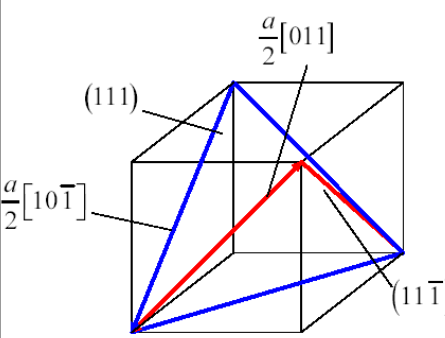
$\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 < 0$ (tompaszög) \Rightarrow stabil diszlokáció jön létre
 $\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 > 0$ (hegyesszög) \Rightarrow instabil diszlokáció jön létre, ami komponensekre bomlik

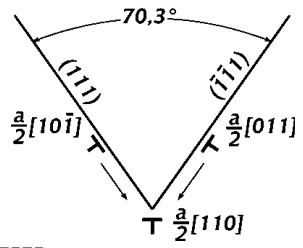
47

47

Cottrell-Lomer gát







FKK
 Elcsúszás két síkon
 Eredő diszlok.: metszésvonal
 Stabil
 Éldiszlokáció
 Nincs csúszósíkban
 Mozgásképtelen

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

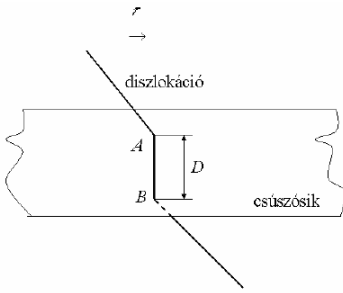
48

48

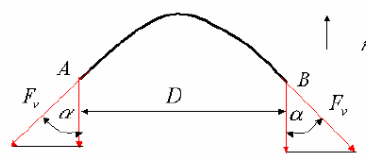
Diszlokációk keletkezése

Frank-Read mechanizmus/forrás



diszlokáció

csúszósík



Félkörív

labilis

zárt hurok



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

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

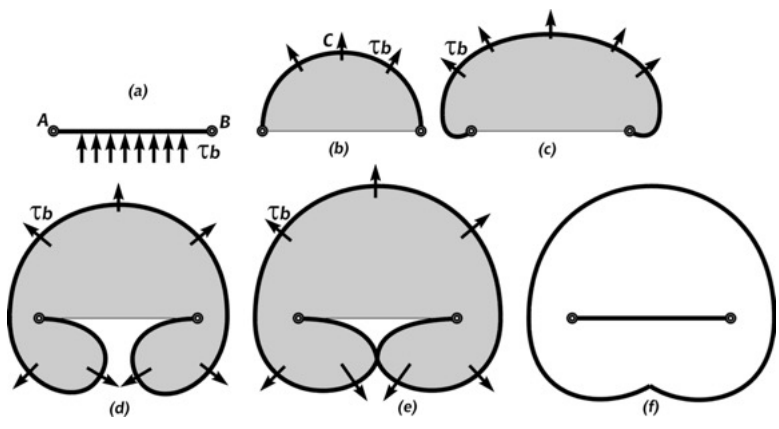
$$\alpha = 0$$

49

49






Frank-Read forrás működése

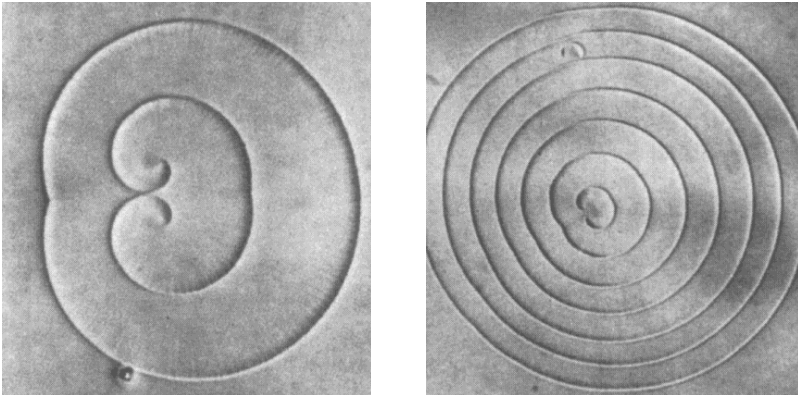


50

50



 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Frank-Read forrás TEM képe (Al)



51

51

 
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.

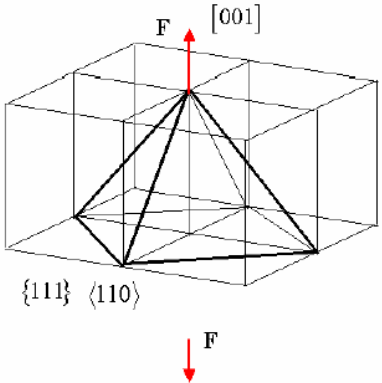
52

52

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

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

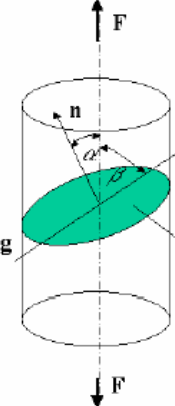
53

53

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Egykristályok képlékeny alakváltozása

Alakváltozás: csúszósíkok a csúszási irányok mentén elcsúsznak egymáson.



csúszási irány
 csúszósík

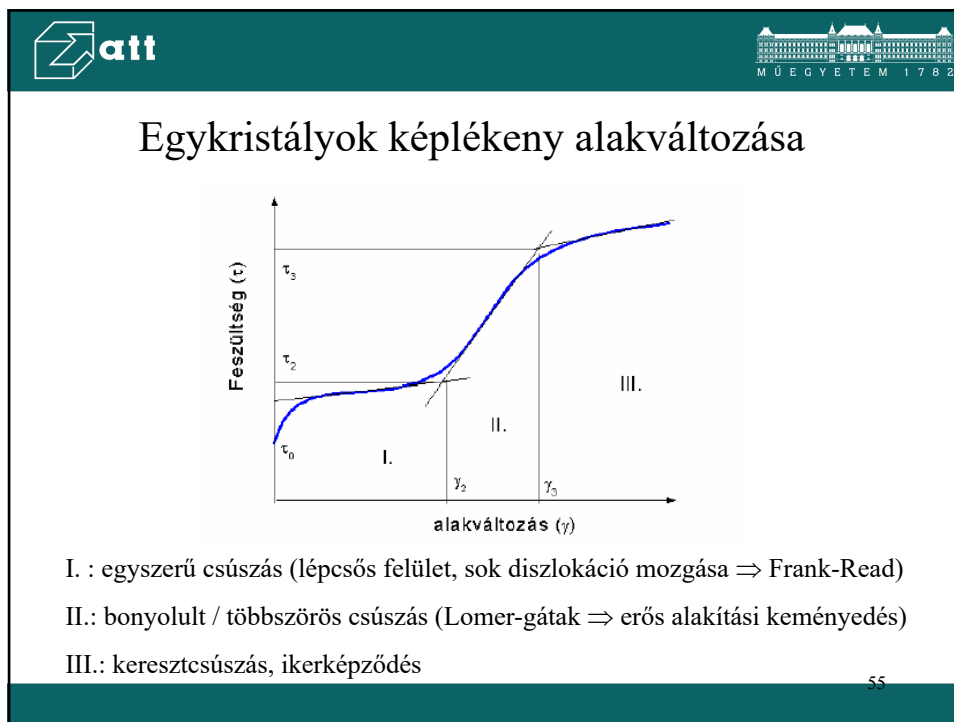
$$\tau = \frac{F \cos \beta}{A} = \sigma \cos \alpha \cos \beta = \sigma \sin \beta \cos \beta = \sigma m$$

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

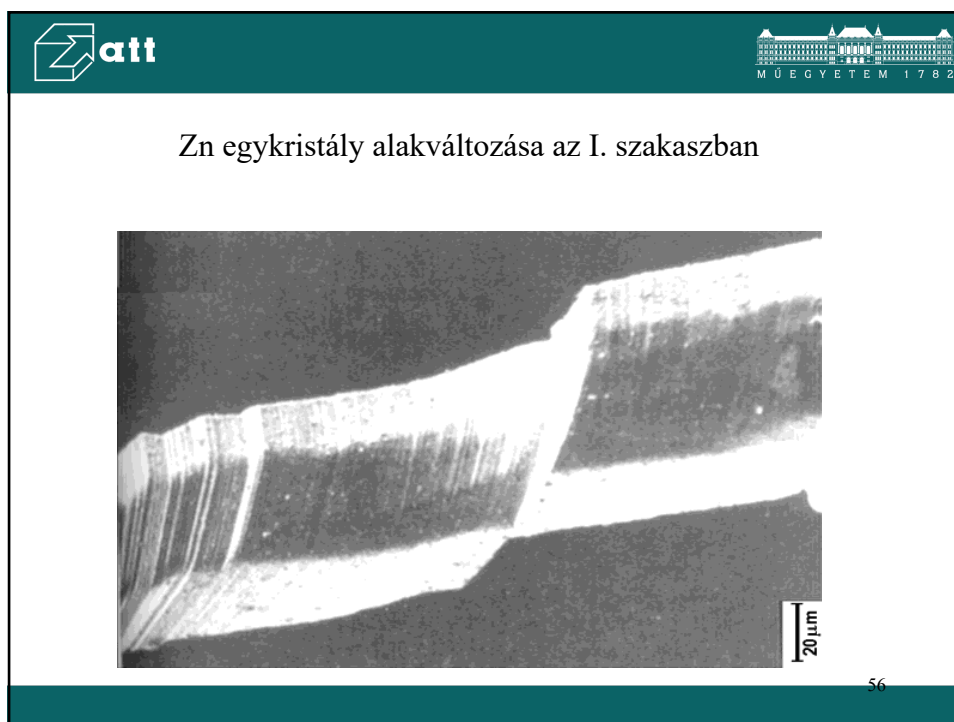
A képlékeny alakváltozás abban a csúszási rendszerben indul meg, aminek a Schmid-tényezője a legnagyobb.

54



54



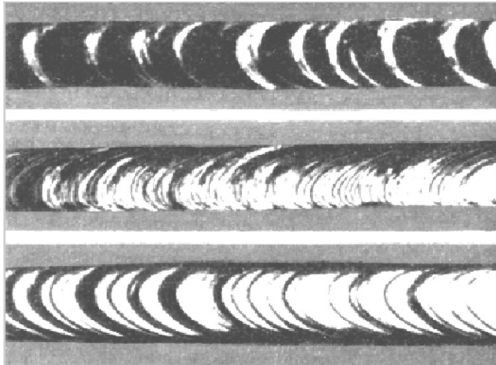
55



56



Egykristályok makroszkópikus alakváltozása szakítás hatására



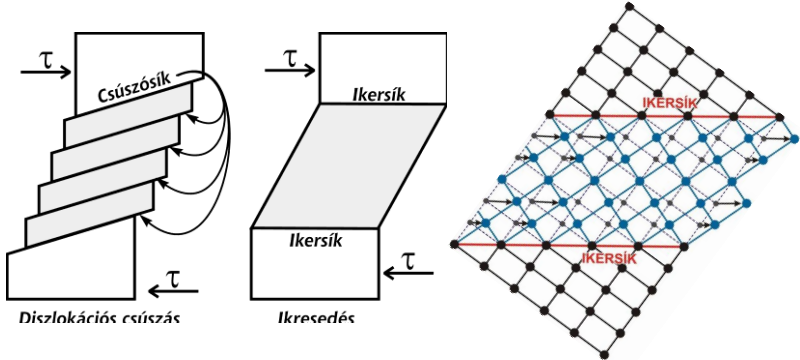
Ón
Bizmut
Horgany

57

57



Ikerképződéssel járó képlékeny alakváltozás



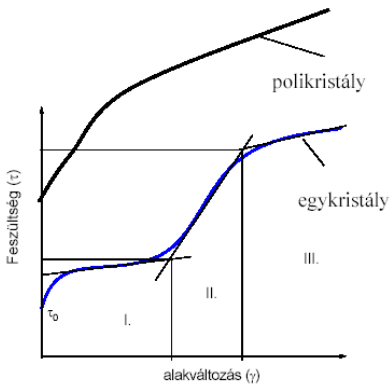
Diszlokációs csúszás: elmozdulás csak néhány csúszósíkon
Ikeresedés: az ikertartomány valamennyi síkja egyszerre elmozdul (kollektív mozgás)

58

58

Polikristályok képlékeny alakváltozása



Minden szemcsében többszörös csúszás.



Alakítási keményedés intenzívebb.

I. szakasz hiányzik.

Mindig nagyobb feszültségek mint az egykristály esetén.

59

59

Polikristályos test képlékeny alakváltozása

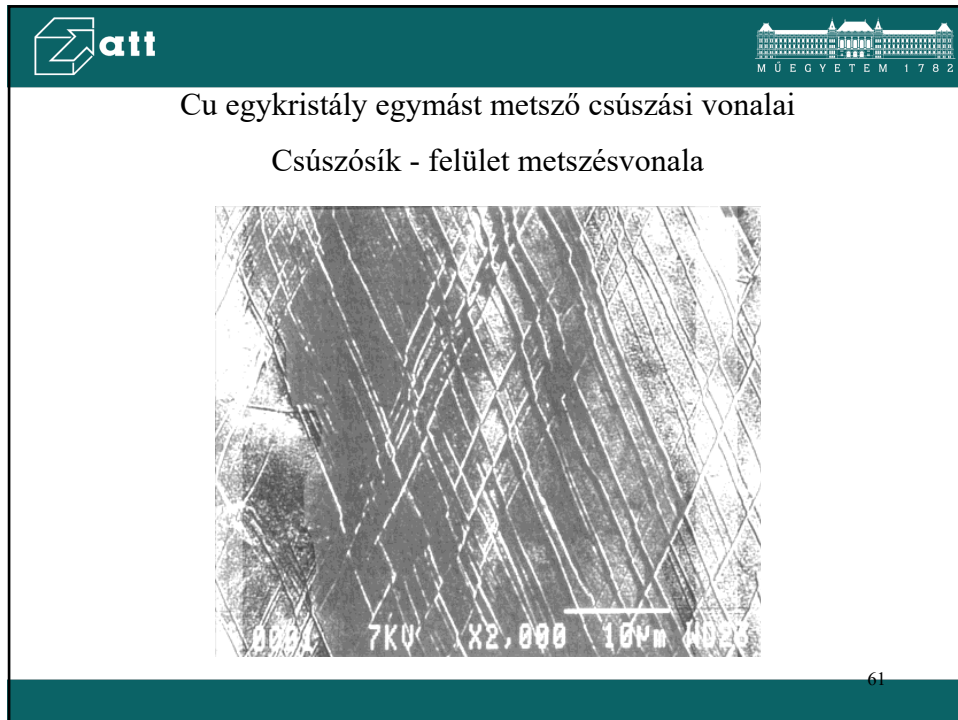
A polikristályos testek sok szemcséből állnak, amelyeknek különböző az orientációja. A test folytonossága az alakváltozás során megmarad, ezért fel kell tételezzük, hogy minden szemcsében több csúszási rendszer működik (*FKK és TKK 12-12 csúszási rendszer*).

Polikristályos test keményedése mindig intenzívebb, mint az egykristályé.

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

60

60



61

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

62

Amorf ötvözetek alakváltó képessége

fémüveg, üvegfém

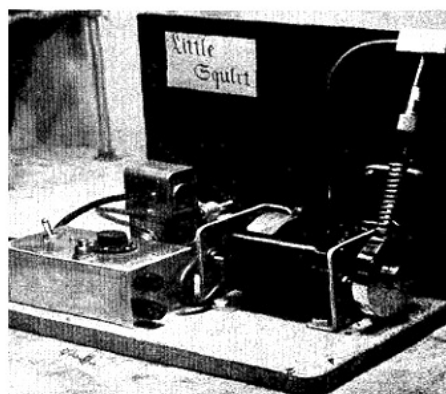
rugalmas ? képlékeny ?

Amorf fém?
Gyorshűtés (10^5 °C/sec) ?

63



63

Little squirt

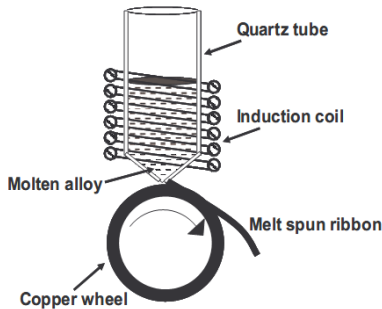
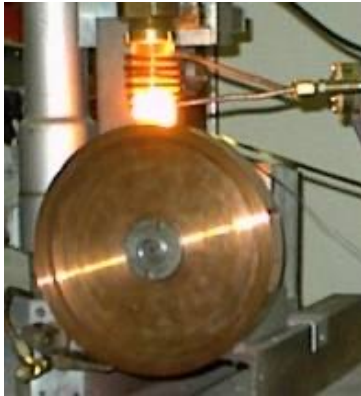


Harold Liebermann (1976) első fémüveg szalag öntő berendezése

64

Melt spinning, rapid solidification

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

65






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

66

66





67

Felületszerű hibák (2D)

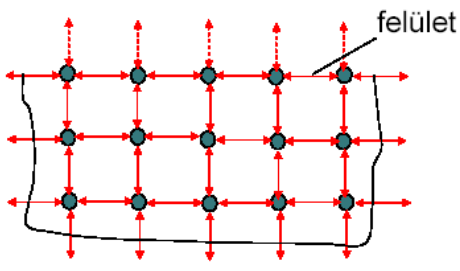
- Makrofelület
- Szemcsehatár (nagyszögű, kisszögű)
- Fázishatár (inkoherens, szemikoherens, koherens)
- Ikersík (ikerhatár)
- Rétegződési hiba

68

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



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.

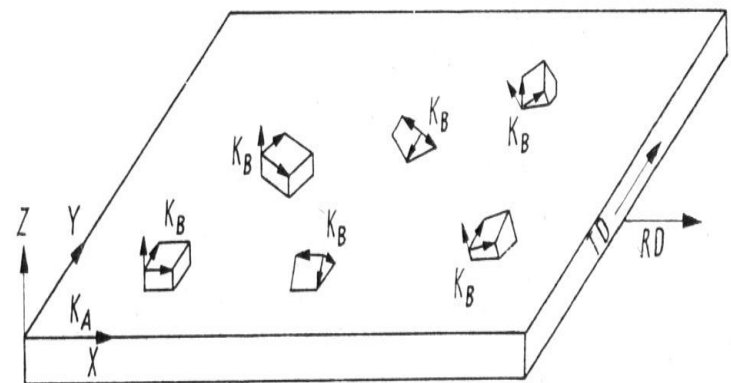


69

69



 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Orientáció jelentése

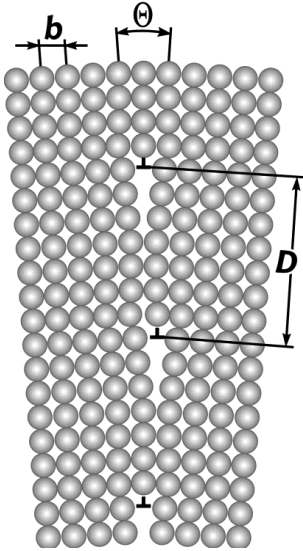


70

70

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Szemcsehatár





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

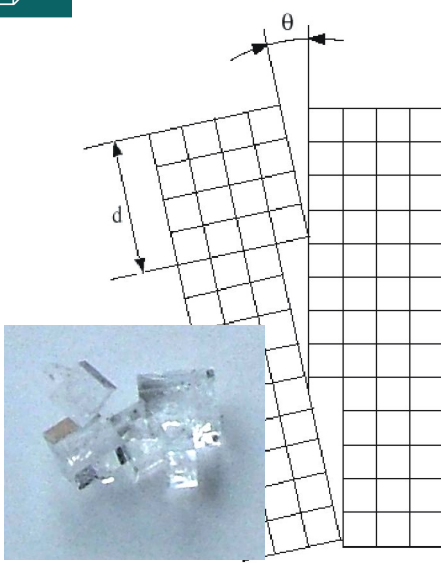
$$\Theta \approx \text{tg}\Theta = \frac{b}{D}$$

71

71

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Nagyszögű szemcsehatár



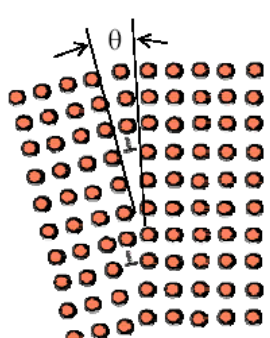
A dermedés során véletlen orientációjú kristálycsírák összenőnek.
Az egyes szemcsék csak orientációjukban különböznek.

72

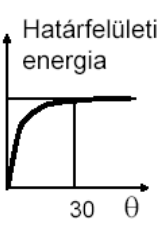
72

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Kis- és nagyszögű határ összehasonlítása

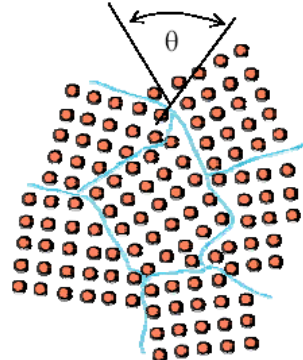


Kisszögű szemcsehatár
 $\theta < 5^\circ$



Határfelületi energia

30 θ



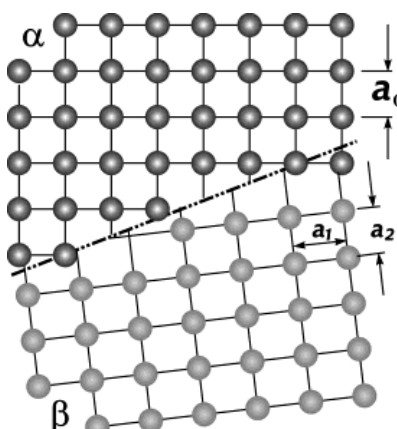
Nagyszögű szemcsehatár
 $\theta > 15^\circ$

73

73

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Fázishatár



Inkoherens
Szemikoherens
Koherens

Inkoherens

74

74

att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Fázishatár-diszlokációk

α a_α
 β a_β

Szemikohereus
Misfit diszlokációk

α a_α
 β a_β

Koherens
(Heteroepitaxia)

75

75



att M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

FKK (111) szoros síkok lehetséges elrendeződései

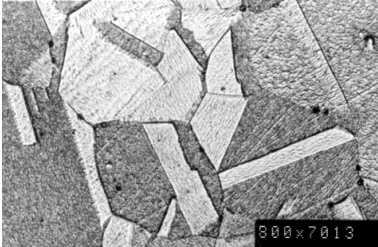
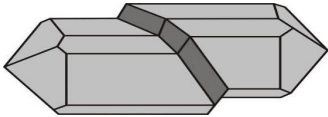
ABCABC FKK
ABABAB HCP

76

76

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Ikerhatár



FKK

ABCABCBACBA

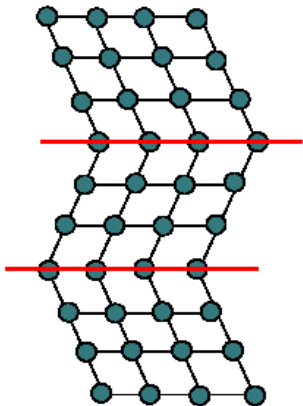
Párhuzamos vonal

77

77

  M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



Ikerhatár



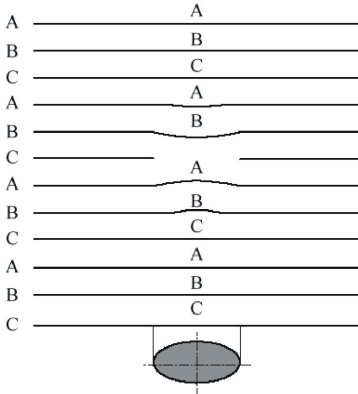
- Koherens határ, mindkét oldalon azonos fázis van
- A határ két oldala egymás tükörképe
- Keletkezhet kristályosodás és képlékeny alakváltozás során.
- Alakítási ikrek: TKK
- Újrakristályosítási ikrek: FKK, HCP

78

78

Rétegződési hiba



A
B
C
A
B
C
A
B
C
A
B
C
A
B
C



ABCABCABABCABCAB

FKK - HCP - FKK

Zárt görbe

79

79

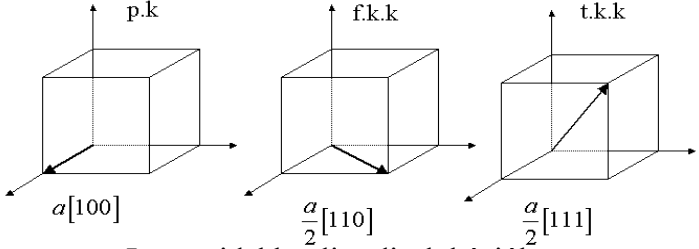
 

Teljes (perfekt) diszlokációk

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.



p.k
f.k.k
t.k.k

$a[100]$
 $\frac{a}{2}[110]$
 $\frac{a}{2}[111]$

Legrövidebb teljes diszlokációk

80

80

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

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

81

81

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

82

82

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Térfogati (3 dim.) hibák

- Üregek
- Zárványok
- Kiválások
- Gázbuborékok

83

83

 
M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Kúszási üregek a szemcsehatárok mentén



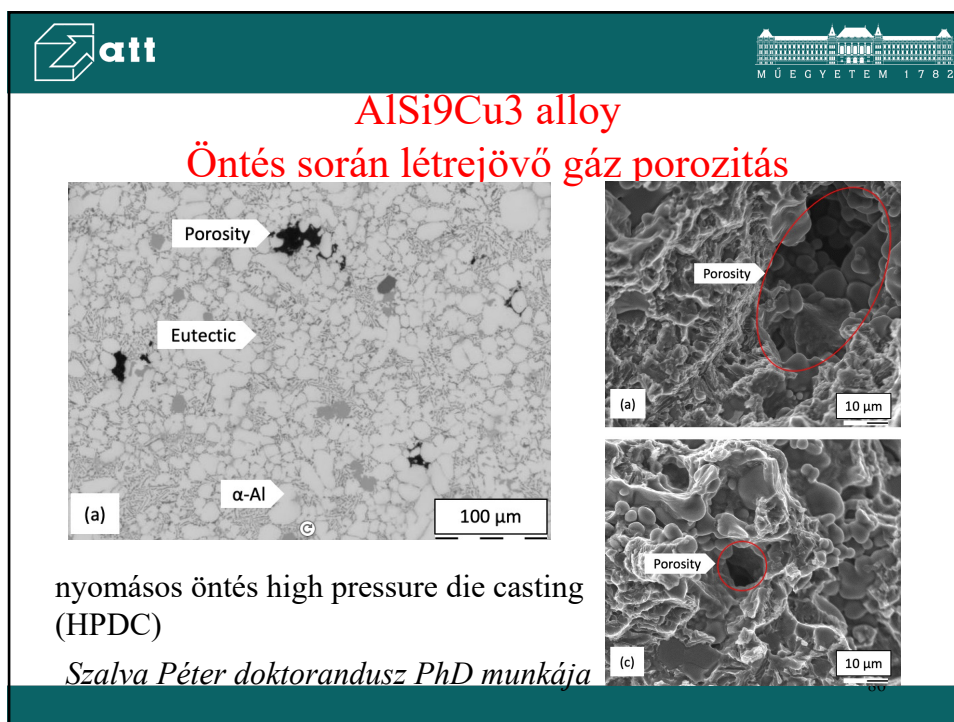
Acc.V Spot Magn Det WD Exp |-----| 10 µm
25.0 kV 4.5 2000x BSE 10.1 15' BME-MTAT b09

84

84



85



86

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

