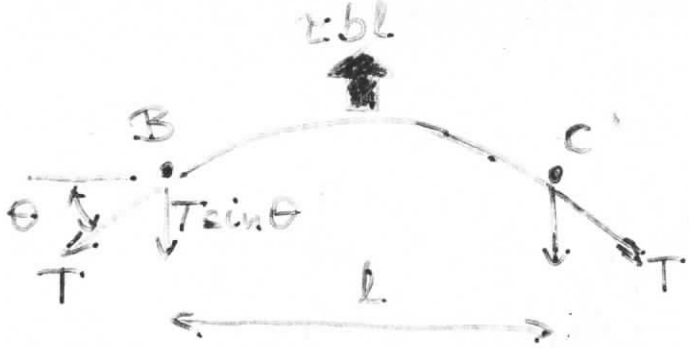
Orowan - feszültség



Diszl. felszakadt a B és C akadályoknál

l hosszú dl-ra τbl. erő

$$\tau bl = 2T\sin\theta$$

$$\tau = \frac{2T}{bl}\sin\theta \qquad T \approx \frac{1}{2} G b^2$$

$$\tau = \alpha \frac{Gb}{l}\sin\theta$$

$$\boxed{\tau_{max} = \alpha \frac{Gb}{l}}$$ Orowan-fesz.

Valójában a T vonalmenti feszültség függ a $(\underline{b}, d\underline{s})$ szögtől. Diszlokációs egyensúlyi alakjának kiszámítása variációs probléma

$$T(\beta_0) = \frac{Gb^2}{4\pi}\left(\ln\frac{R}{r_0}\right)\left(1 + \frac{2\nu}{1-\nu}\cos 2\beta_0 + \frac{\nu}{1-\nu}\sin^2\beta_0\right)$$

Diszlokációs - mérések: lépcsők keletkeznek, amelyek nehezen mozgathatók → alakítási keményedés egyik lényeges jármeléke

Diszlokáció-reakciók

Tetszőlegesen orientált dislokk $\underline{b}_1$ és $\underline{b}_2$.

Tegyük fel, hogy egyesülnek:

$$\underline{b}_1 + \underline{b}_2 = \underline{b}_3 = (\underline{b}_1 + \underline{b}_2)$$

Sajátenergia változása:

$$\nu\left[(\underline{b}_1+\underline{b}_2)^2 - \underline{b}_1^2 - \underline{b}_2^2\right] = 2\,\underline{b}_1\underline{b}_2$$

Vonzás v. taszítás $(\underline{b}_1\underline{b}_2) \gtrless 0$ szerint.

Egyesülést sokminden akadályozhatja.

Fordított folyamat: disszociáció

$\underline{b}_1 \rightarrow \underline{b}_2, \underline{b}_3$ Lépcsőrés lehetséges

Burgers-vektora disszociál.

Pl. dislokra disszociál:

$$\underline{b}_1 \rightarrow \underline{b}_2, \underline{b}_3$$

A lehetséges $\underline{b}$-k kristallográfiai irányokkal és atomtávolságokkal kapcsolatosak.

$[h, k, l]$ Miller-indexek.

Pl.: $a \rightarrow$ rácsáll. köbös kristály

$[h, k, l]$ irány; $c\,a\sqrt{h^2+k^2+l^2}$ nagyság

pl.: $c = \frac{1}{2}$ $\quad \frac{a}{2}[0, 1, 1]$ jelenti a

$[0, 1, 1]$ irányú; $\frac{a}{2}\sqrt{0^2+1^2+1^2}$ hosszú $\underline{b}$-t.

$$b^2 = c^2 a^2 (h^2 + k^2 + l^2)$$

<u>fcc kristály</u>: $\langle 1, 1, 0 \rangle$ elcsúszás

cikk-cakk úton valósul meg:

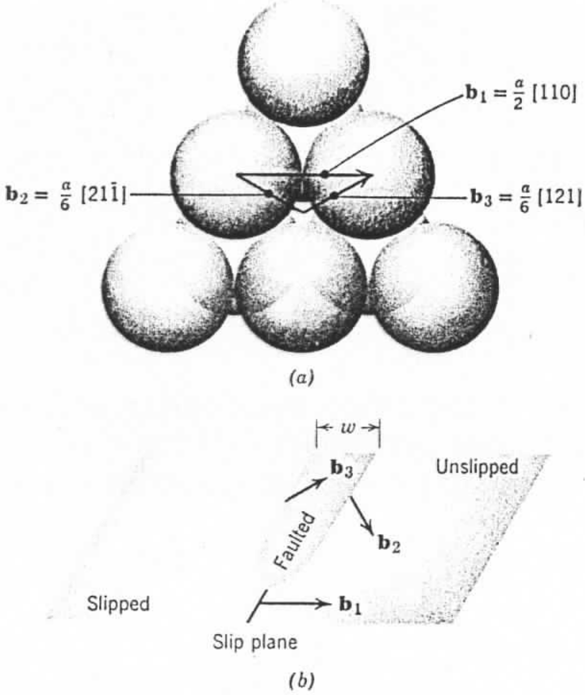
$$\underline{b}_1 = \frac{a}{2}[1, 1, 0] \qquad \underline{b}_2 = \frac{a}{6}[2, 1, \bar{1}]$$

$$\underline{b}_3 = \frac{a}{6}[1, 2, 1]$$

$\underline{b}_1 = \underline{b}_2 + \underline{b}_3$ <u>de</u>: $\underline{b}_2$ és $\underline{b}_3$ nem teljes diszlokációk: nem rácsvekt.

Mindhárom vektor az $(1, \bar{1}, 1)$ síkban van, $\underline{b}_2$ és $\underline{b}_3$ <u>parciális diszlokációk</u>

<u>rétegződési hibát</u> határolnak!



b_2 csak b_3 csak nélkül hcp rétegződésre vezet.

Figure 4.18 (*a*) ⟨110⟩ slip in FCC crystals. The unit slip vector of the complete dislocation, $\mathbf{b}_1$, is $a/2$ [110]: two partial slip vectors, the sum of which produces the same net motion as $\mathbf{b}_1$, are $\mathbf{b}_2$ and $\mathbf{b}_3$. (*b*) Faulted region of width *w* between the two partial dislocations $\mathbf{b}_2$ and $\mathbf{b}_3$.

$\underline{b}_1 \to \underline{b}_2 + \underline{b}_3$ energetikailag kedvező

A parc. disl.-k taszítják egymást: w egyensúly a taszító hatás és a RH energia között.

H.f.: $w = ?$ ha $\gamma_{R.H} = 0.02\ J/m^2$

fcc: teljes cs. disl. szabadon mozoghatna, disszociált csak a RH síkban, mert a parci-k éljellegűek.

Sík diszlokáció mozgás jellemző.

bcc: disszociáció nagyon kismértékű (${\gamma}_{RH}$ nagyon nagy → disz. a mag tartományon belül)

Hullámos dl. mozgás jellemző.

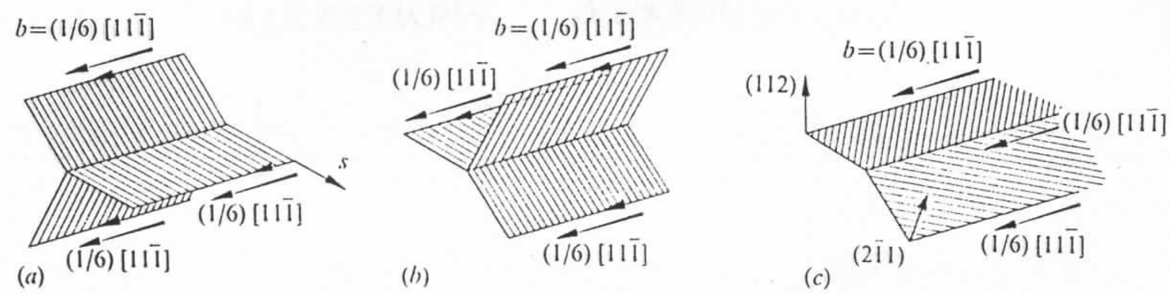


Fig. 11.16. Dissociated screw dislocation in the bcc lattice. The forms (*a*), (*b*), (*c*) have different symmetries and therefore need different forces to move them, e.g. to the right in the horizontal (112) plane.

Kereszt-csúszás

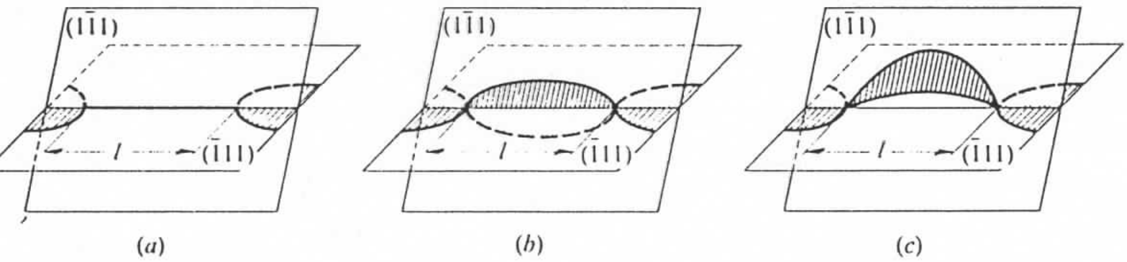


Fig. 11.17. Cross-slip by a dissociated screw dislocation in the fcc lattice after [11.5]. In stage (*a*) a constriction of length *l* forms in ($\bar{1}$11), in (*b*) and (*c*) extends on ($\bar{1}$11).

Rögzült konfigurációk (sessile)

FCC

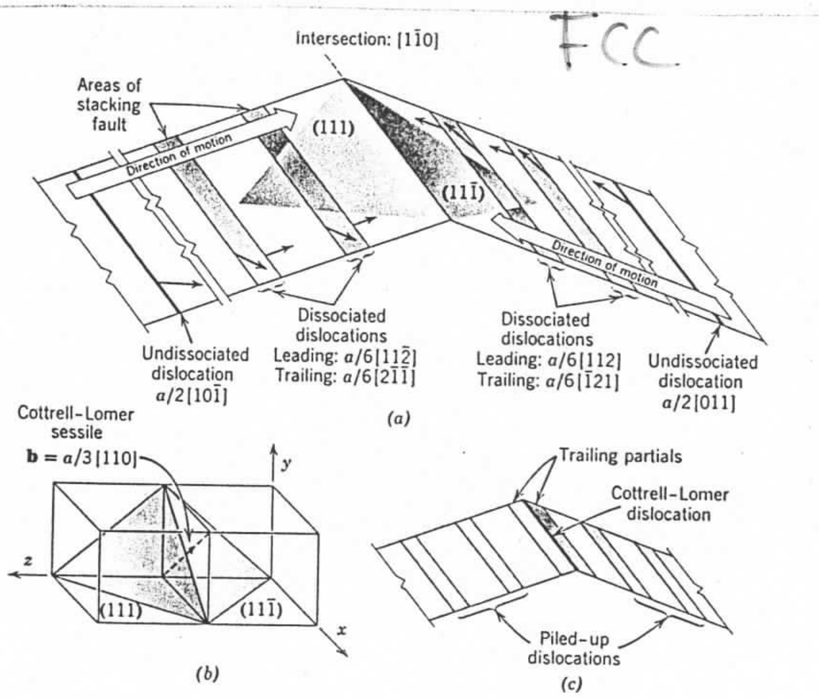


Figure 4.19 Formation of a sessile dislocation. (*a*) The motion of dissociated dislocations on two intersecting slip planes, (111) and (11$\bar{1}$); (*b*) the relative orientation of the two intersecting planes in (*a*), and (*c*) the combination of leading partial dislocations moving on the two intersecting planes to produce a sessile dislocation whose Burgers vector lies in neither plane—see (*b*).

A két vezető parc. $b = \frac{a}{3}[1,1,0]$ -ba egyesül → a [illegible] lapja nem csúszik az fcc rácsban!

Lomer-Cottrell-akadály

(alakítási keményedés)

Hogyan keletkeznek diszlokációk?

Források → Frank-Read-forrás

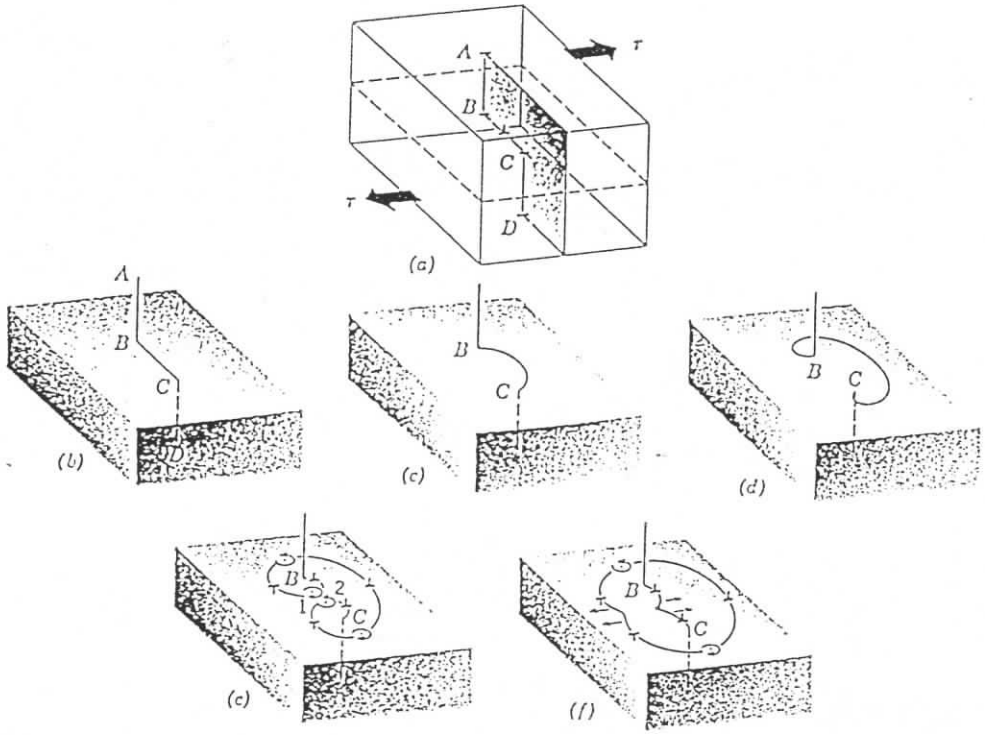


Figure 4.21 The Frank-Read dislocation source. (*a*) A crystal containing an edge dislocation with a half-plane jog; (*b*) the line representing the dislocation core. The dislocation is pinned at points *B* and *C*. The subsequent parts of the illustration show the sequence of events as the dislocation line bulges through between the pinning points, swings around them, and meets on the far side to make a complete dislocation loop and reform the initial line segment *BC*.

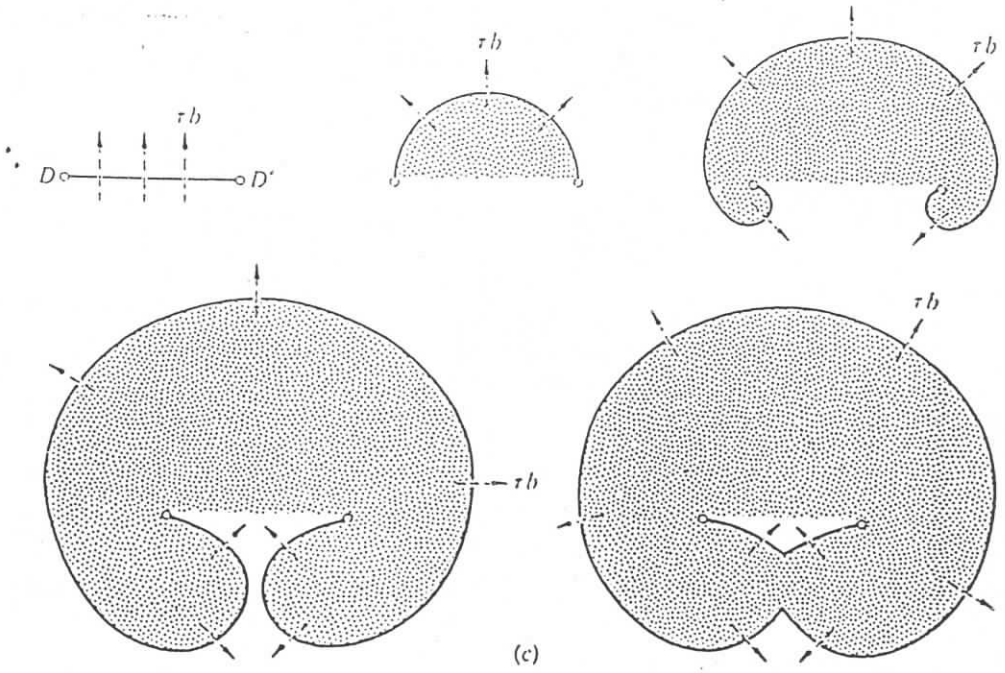


Fig. 11.11. (*a*) Curved dislocation line; (*b*) dislocation segment $\overline{DD'}$ becomes unstable under the force τb and joins with $\overline{D'D''}$ leaving a loop round D'; (*c*) Frank–Read source of length $l = DD'$ produces a dislocation loop and reproduces itself.

A Frank-Read - forrás működésének megindításához $\tau_{kritikus}$ kell:

$$\tau_{krit} \approx \alpha \frac{Gb}{l} \quad ; \quad \alpha \approx 1$$

Tapasztalat: $\tau_{krit} \approx 10^{-4} G \rightarrow l = 10^4 b$

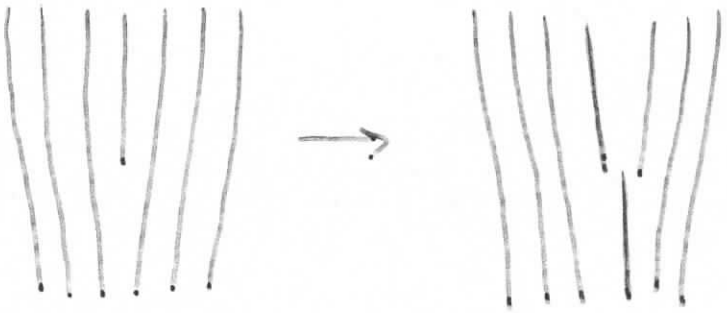
Az eltávolodó hurok visszahat a forrásra

$$\tau_{emit} \sim \log n$$

n ↑ emittált diszl. száma

↑ Lassan növekvő fesz.

Diszlokáció kristályban: (eddig kontinuum-mod.)



Továbbmozdításhoz is periódikusan vált. fesz. szükséges.

τ_{PN} – (Peierls-Nabarro)

$$\tau_{PN} = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi\xi}{b}\right)$$ ← mag méretének

Erősen lokalizált hibák kristályban ξ kicsi!

hcp, fcc $\quad \xi \approx 2b \rightarrow \tau_{PN} \approx 10^{-5} G$

Ge, Si $\quad 10^{-2} G$

bcc fémekben a keltő feszültség:

↑ kettőshézagok $\quad \tau_{kink} \ll \tau_{PN}$

Alakítási keményedés

Diszlokációk felfedezése → miért nem nő a deformációs a CRSS-mellett ω-ig?

Dinl. kölcsönhatás

a) Pl. ph. éldinl. között

Elhalmozódási fen.:

$$\tau_p = \frac{Gb}{8\pi(1-\nu)z_0}$$

N dinl. sűrűség: $z_0 \sim N^{-1/2}$

$$\tau_p = \alpha_1 Gb\sqrt{N}$$

b) Merőleges dinl. metsződése

(forest cutting)

Az „erdő" fáinak távolsága:

$$l \sim N_F^{-1/2}$$

Orowan-feszültség az áthaladáshoz:

$$\tau_l = \alpha_2 Gb\sqrt{N_F}$$

$$N_F \sim N$$

$$\boxed{\tau = \alpha Gb\sqrt{N}}$$

Diml. termikus egyensúlyban?

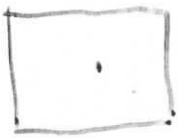
$G = U - TS + pV$

U: rugalmas en. (tárolt energia) növén nő.

S: rendezetlenséggel nő

U: rug. def. tér járuléka a döntő:

$\sim$ 1 - 10 eV / atom

S_{konfig}:  dl. bármelyik atom

A felület $n = \frac{A}{a^2}$

$S_{konfig} = k \log n$

$T S_{konfig}$ / atom: $\frac{a}{L} T k \log \frac{A}{a^2}$

$L \simeq \sqrt{A} \simeq 1$ cm

$T S_{konfig} \approx 10^{-6} kT$

$S_{vibr} \leq S_{vibr}^{vak} \approx k$

$\Rightarrow TS \ll U$ normál T-ken.

$\Delta G \simeq \Delta U$

NEM ES-i RÁCSHIBA!

- Mitől van olyan nagy?
- Mechanikai módszerek: TEM; mangán, deformáció, ötf.

FELÜLETI HIBÁK

Típusai: - Rétegződési hiba (Stacking fault)
- Külső határfelületek
- Belső határfelületek
  - Fázishatár: kémiailag és/vagy szerkezetileg eltérő tartományok között
  - Szemcsehatárok: azonos áll.

5 adat írja le:

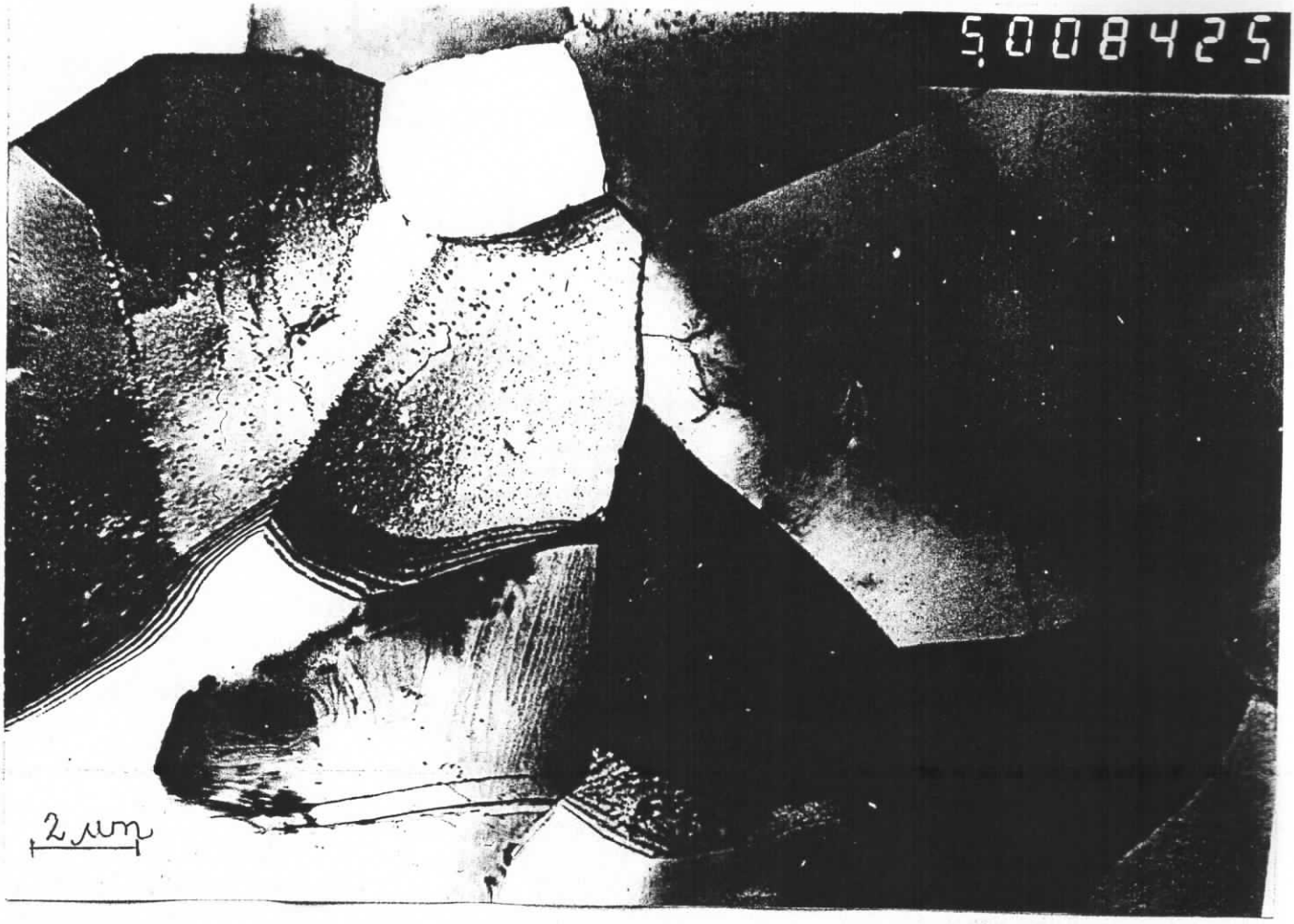
θ: forgatási szög, amellyel elforgatva a két kristály egymásra forgatható (1)

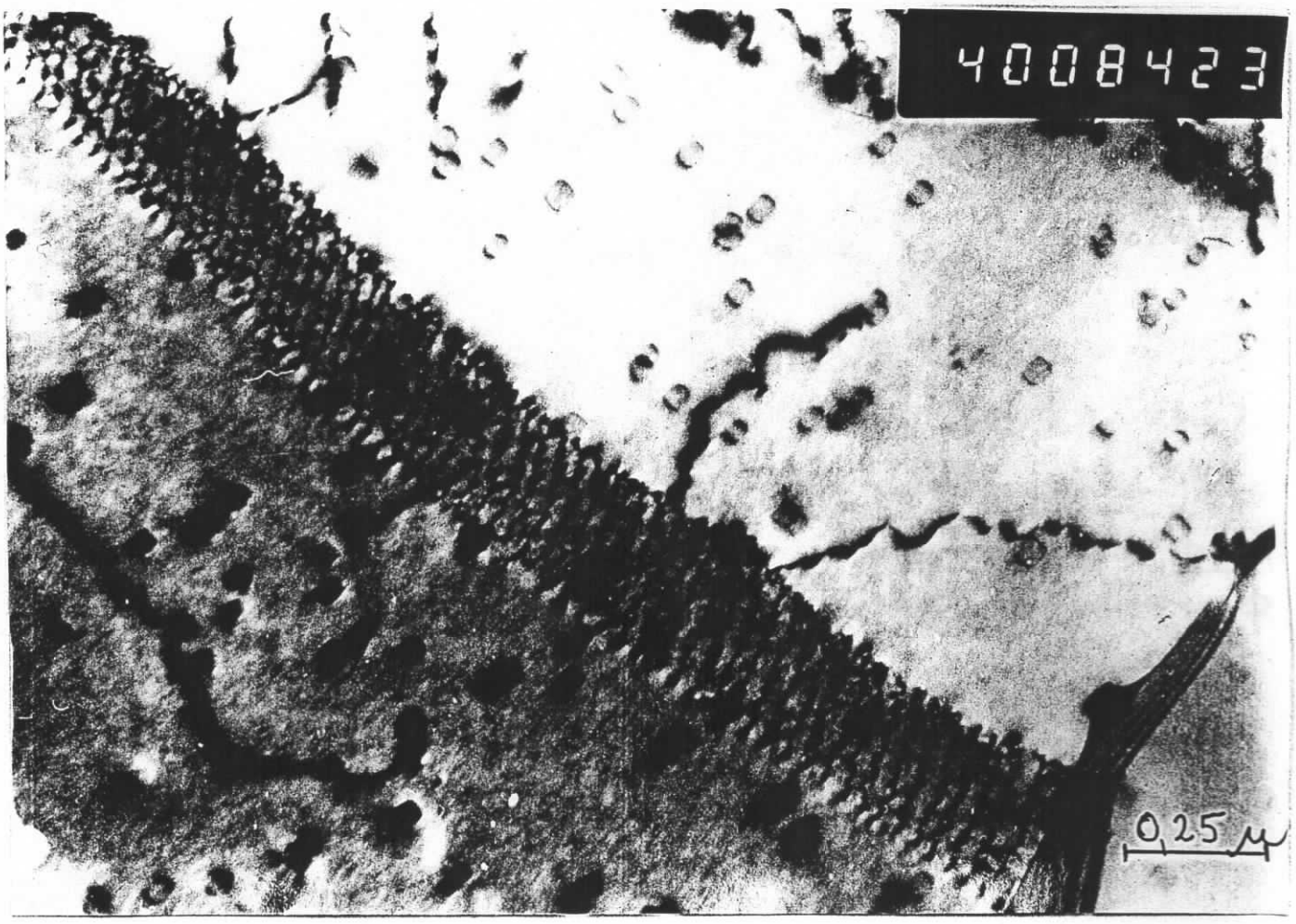
$\underline{u}$: a forgatás tengelyének ir. vektora (2)

$\underline{n}$: felületelemre $\perp$ vektor (2)

Kristallitokat elválasztó távolság $\approx$ atomtáv., így a határ mentén átmeneti szerkezet.

Hogy függ ez az átm. szer. az 5 adattól:


5.008425
2 мкм


4008423
0,25 μ

Kisszögű szemcsehatár $\Theta << 1$

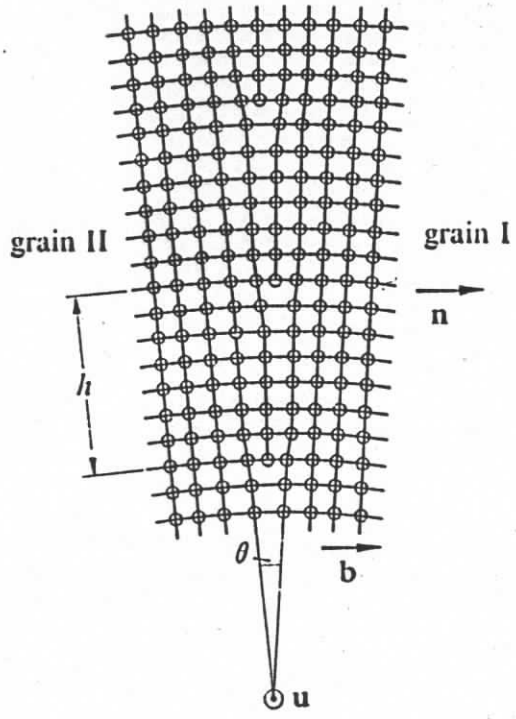
Ez a legegyszerűbb.

Szimmetrikus dőlt határ (symm. tilt boundary)

Párhuzamos éldislokációkból álló hálózat

Szimm. dőlt határ

(Symm. tilt boundary)



Burgers-vektor

$$h = \frac{b}{\Theta}$$

↑ disl.-k távolsága

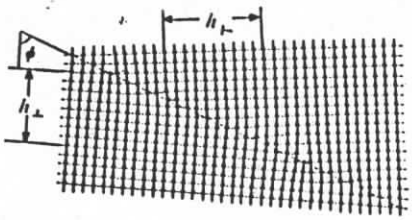
$n \perp u$

Aszimmetrikus dőlt határ

Határfelület ϕ szöget zár be a szimm. síkkal

2 sorozat éldislokáció, egymásra $\perp$ Burgers-vektorokkal:

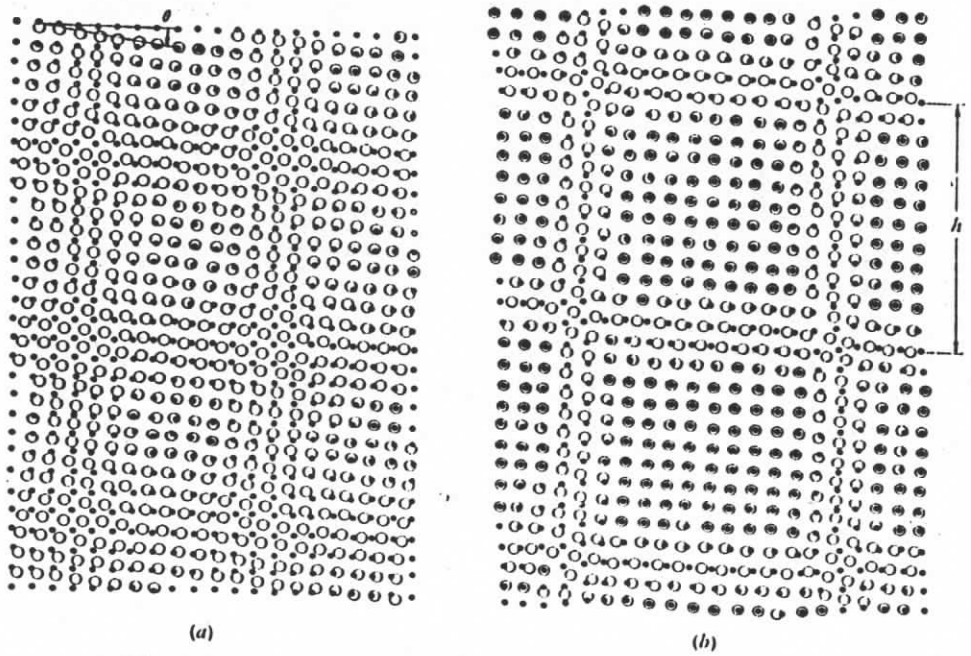
Aszimm. dőlt



$$h_{\parallel} = \frac{b}{\Theta \sin\phi} \qquad h_{\perp} = \frac{b}{\Theta \cos\phi}$$

Fig. 3.4. Asymmetrical tilt boundary made up of two sorts of edge dislocations with mutually perpendicular Burgers vectors.

Szimmetrikus csavart határ
(symmetrical twist boundary)



$\underline{n} \parallel \underline{u}$

$h = \frac{b}{\Theta}$

csavardislokációs hálózat

Fig. 3.5. Two lattice planes rotated with respect to one another (open and full circles) (*a*) and the resulting quadratic network of screw dislocations (separation *h*) (*b*).

Nagyszögű szemcsehatárok ($\Theta \gtrsim 20°$)

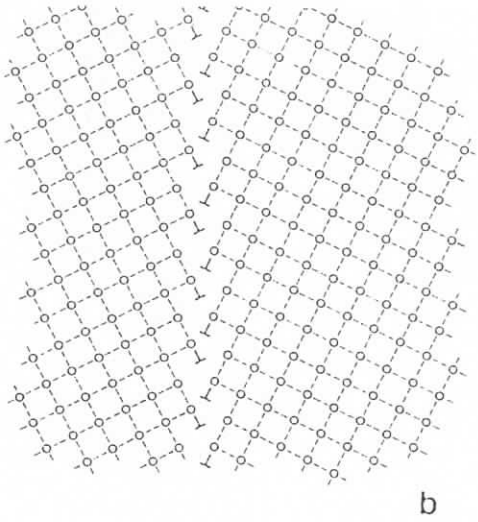
Ezek a „szokásos" szemcsehatárok.

Diszlokáció-modellek — atomisztikus modellek

— elvi alapon nem éles

Dislokációk: egyensúlyi állapotai a legalacsonyabb energia — ez csak speciális geometriai feltételek mellett lehetséges:

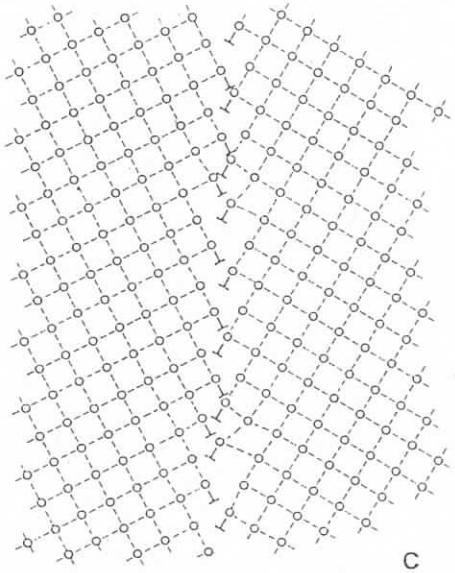
53° = Θ



b

Θ = 53° kötés nélkül h távolságon belül éppen egésznégyzet rácsvektor képződik ($tg\frac{\Theta}{2} = 0.5$)

60° = Θ



c

Fenti + szuperponált $\Theta' = \Theta - 53°$ kisz. szh.

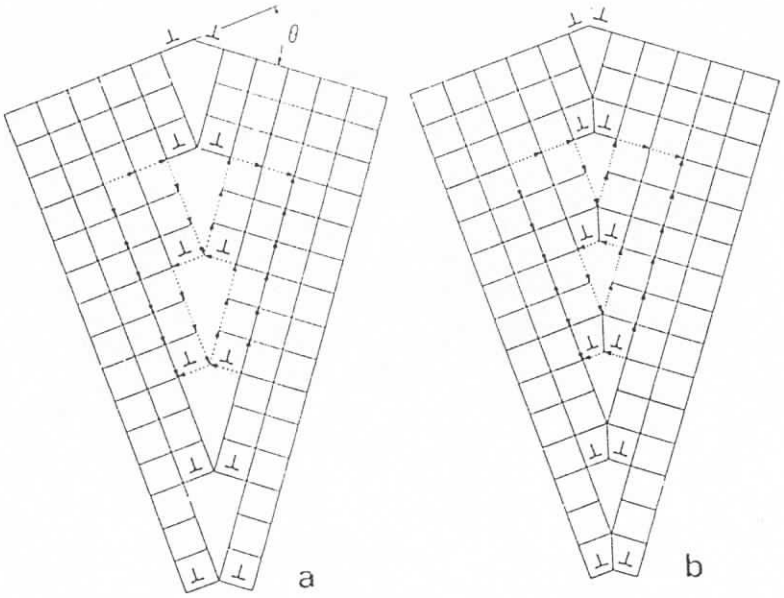
Fig. 1. Dislocation models of symmetrical tilt boundaries in a simple cubic structure: (a) low-angle boundary; (b) 53° (high-angle) boundary; (c) 60° boundary.

Problematikus: túl kicsi a magok közötti távolság.

Ha $h \approx r_0 \approx b$, akkor a magrekeszt átalakul, kiterjed ⇒ egész nemcsehatár egy réteg „mag".

Nincs mód szh. nem jól írható le rácsdiszl.-kal!

Példa a magnerkezet átalakulására:



36.9° dölt határ

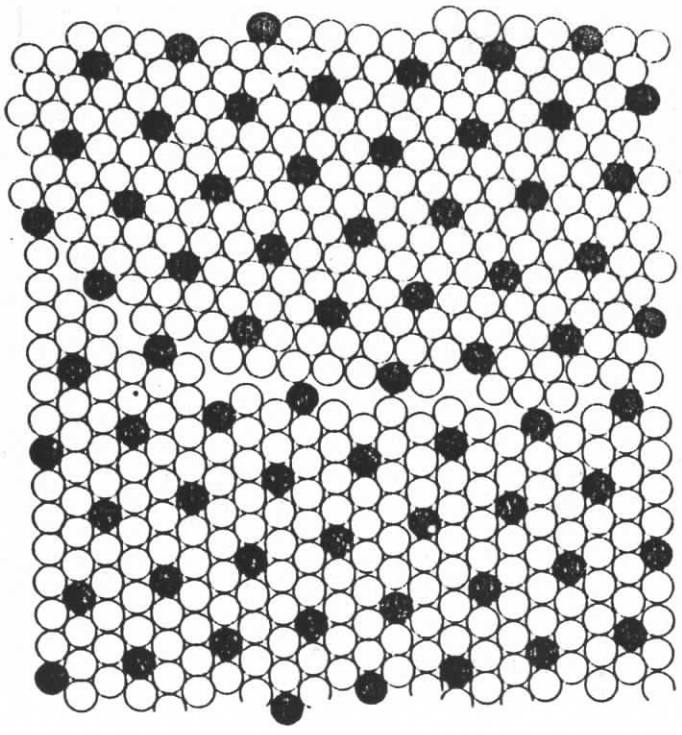
Relaxálatlan állapotban nagy üregek, ezek felületi energiája nagy.

Fig. 2. Unrelaxed tilt-type symmetric 36,9° grain boundary (a) and a partially coalesced modification of this boundary (b) (after MARCINKOWSKI and JAGANNADHAM [1976]).

Atomi illeszkedési modellek – koincidencia-rács

Mindkét rácsba jól illeszkedő atomok, ha a rácson túl is folytathatók a rácsot.

Pl.: fcc-rácsban; minden 7. atom „jó" helyen van.



Koincidencia rács

38.2° <11>

(⊥ az ábrára)

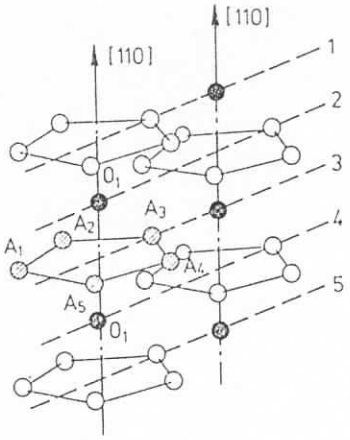


Fig. 6. Schematic diagram of the arrangement of the atoms in a 40° ⟨110⟩ tilt boundary in tungsten, derived from a sequence of field ion microscopy images. The position of the ⟨110⟩ common tilt axis in the two grains is indicated. Numbers 1–5 indicate subsequent layers of the boundary. Letters A_1–A_5 label one of the polyhedral rings proposed by POTAPOV *et al.* [1971].

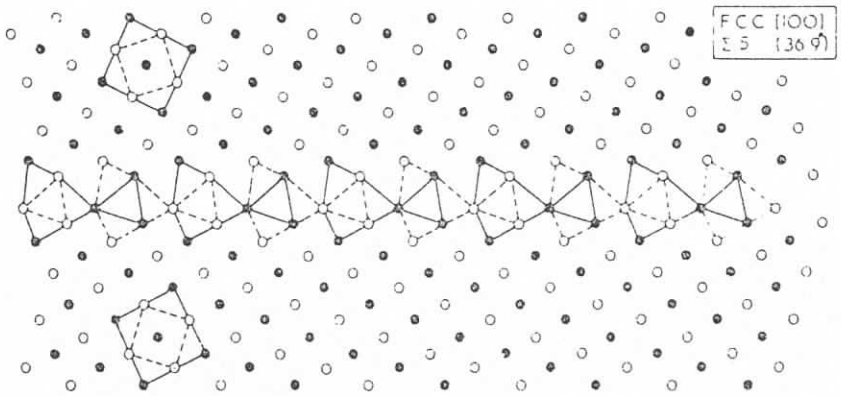
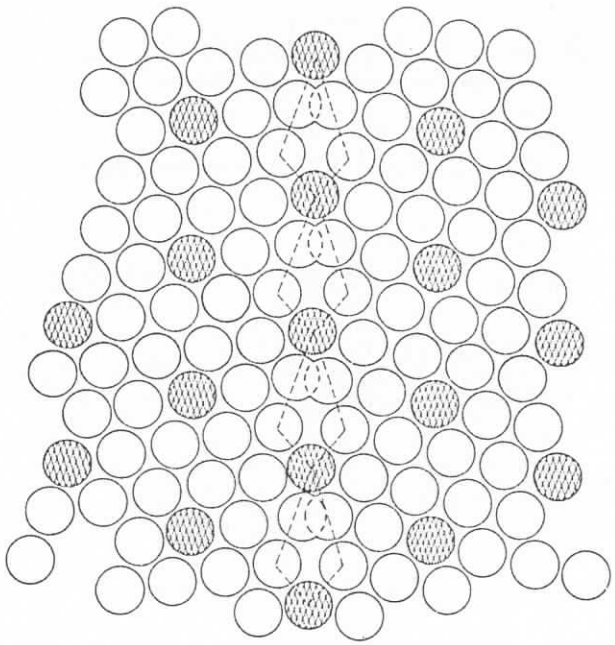


Fig. 7. Structure of a 36.9° ⟨100⟩ tilt boundary between fcc crystals, in terms of polyhedral units. The boundary is composed of stacks of capped trigonal prisms.

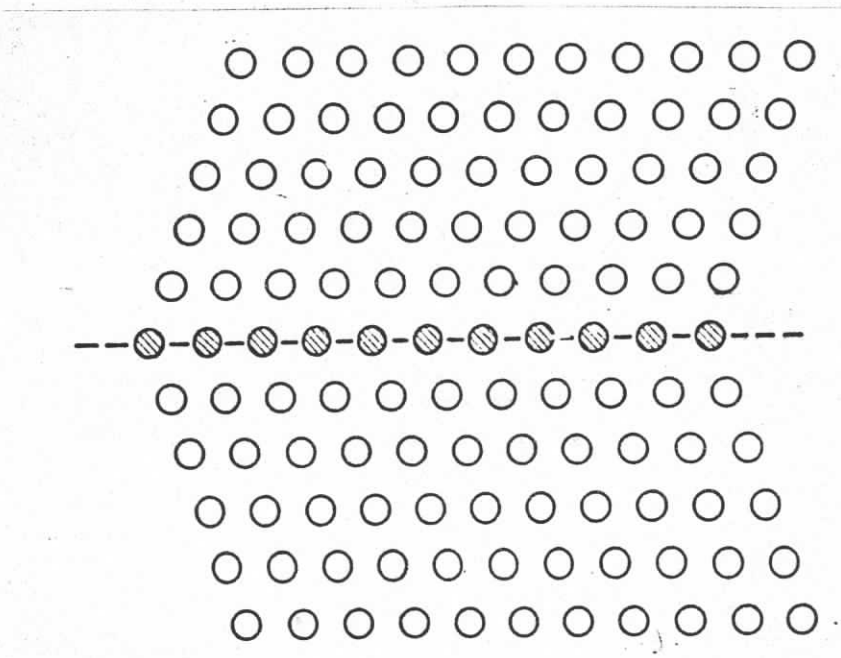


18° dölt határ

Fig. 4. Lattice-coincidence model of a 18° tilt-type grain boundary between two hexagonal arrays of atoms. The atoms at coincidence sites are indicated by cross-hatching. The "surfaces" of the two crystals are marked by dashed lines.

Szh. energia kicsi, ha az atomok nagy hánypada koincidencia-hlyen van.

Szélső eset: koherens ikerhatár:



minden atom koinc. helyen,

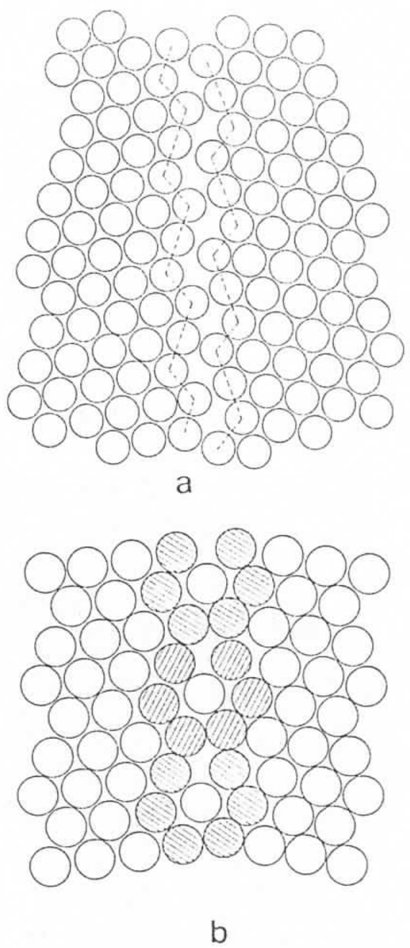
(2 kristály tükör képe egymásnak)

$\tilde{E}_t \approx 20\,mJm^{-2}$

Fig. 3.9. Coherent twin boundary.

Rétegrödés: ABCABCBACBA

Numerikus modellezés: a fenti speciális szk.-szerkezetekből indulhatunk ki, és ezután az érintett atomok kh.-i energiáját minimalizáljuk. Megengedhető relaxációt és transzlációt is.



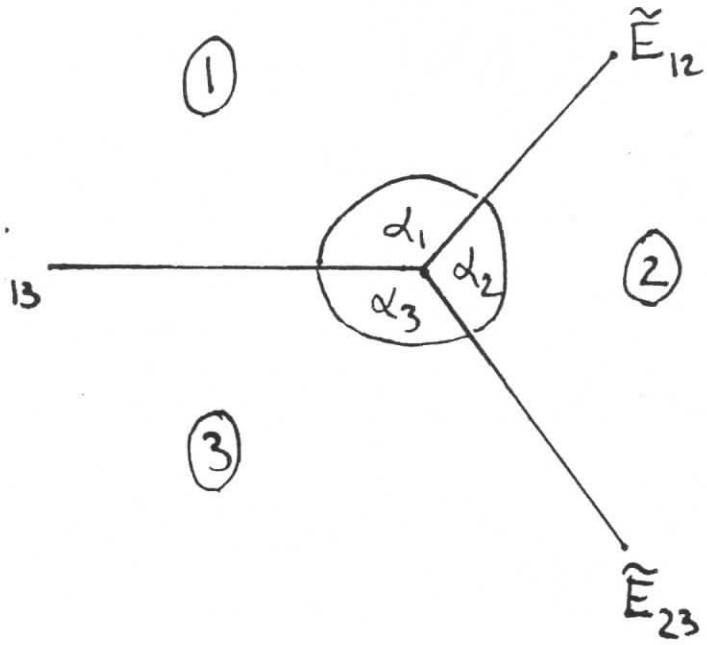
Pl. Au ; T = 0 K

$\tilde{E} = 0.9 \ J m^{-2}$

$(\tilde{E}_s = 2 \ J m^{-2})$

Fig. 5. Structure of the boundary shown in fig. 4 after a "rigid-body relaxation" of the two hexagonal arrays of atoms in order to remove large interatomic repulsion or attraction forces (a) and subsequent relaxation of individual atoms into positions of minimum energy (b). The interaction potential assumed between the atoms corresponds to gold.

Kiszögűre: a dinl. határ saját + kh.-i energiája $\tilde{E} \sim \frac{1}{h} \sim \Theta$



Mechanikai egyensúly:

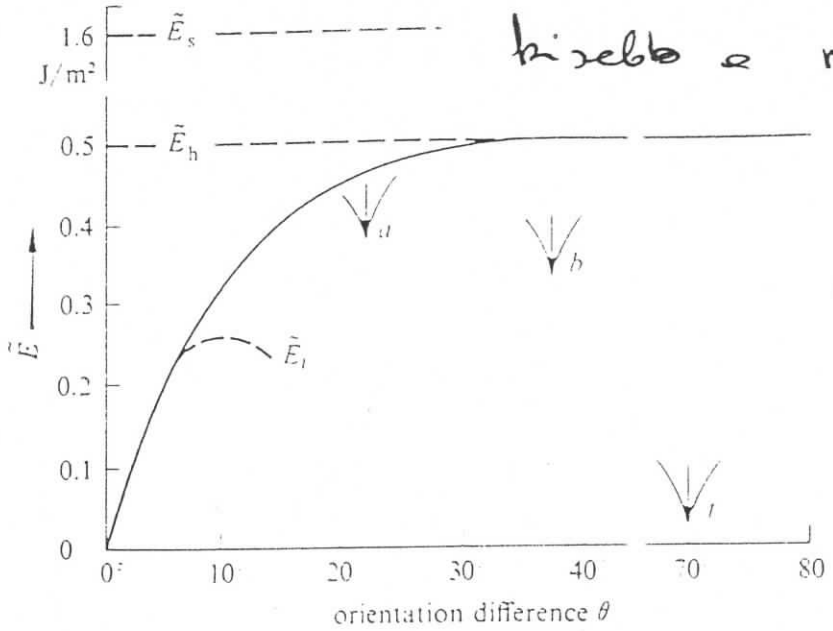
$$\frac{\tilde{\tilde{E}}_{12}}{\sin\alpha_3} = \frac{\tilde{\tilde{E}}_{23}}{\sin\alpha_1} = \frac{\tilde{\tilde{E}}_{13}}{\sin\alpha_2}$$

Relatív mérés lehetséges

(Nem veszi figyelembe az $\tilde{\tilde{E}}$ orientáció-függését!)

Nemcsak érintő-irányú erők, hanem $\partial\tilde{\tilde{E}}/\partial\alpha$ forg. nyomatékok is felléphetnek.

Akkor fontos, ha valamelyik $\tilde{E}_{ij}$ sokkal kisebb a másik szettőnél.



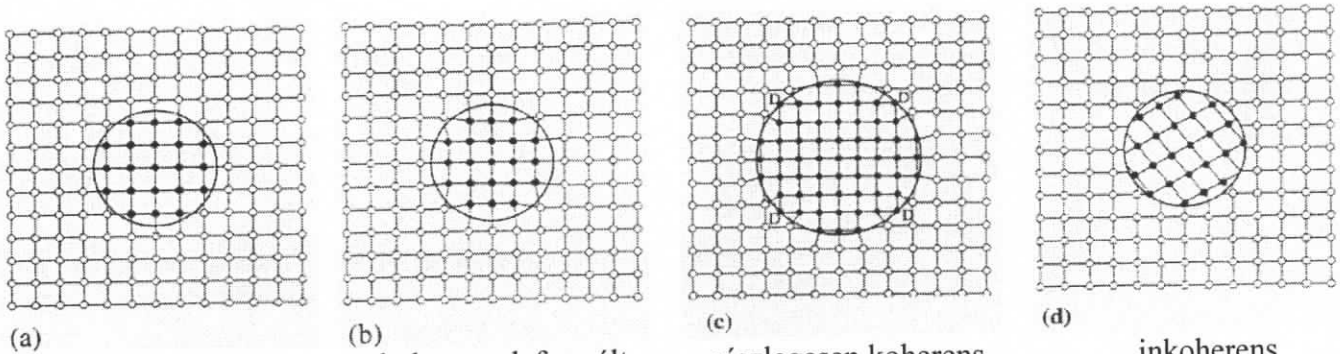
Cu

Fig. 3.14. Dependence of the boundary energy $\tilde{E}$ on the a between the grains shown schematically for copper after [Limiting values are given for low-angle grain boundaries (angle grain boundaries ($\tilde{E}_h$) and surfaces ($\tilde{E}_s$). *a* and *b* shc position of special low energy boundaries and *t* of coherer boundaries.

Határfelületek vizsgálati módszerei

- Makro — optikai mikroszkóp : metallográfia
- TEM
  - Direktmód — bikristályok közötti határ
- Textúra — rtg.

FÁZISHATÁROK



(a) koherens

(b) koherens deformált

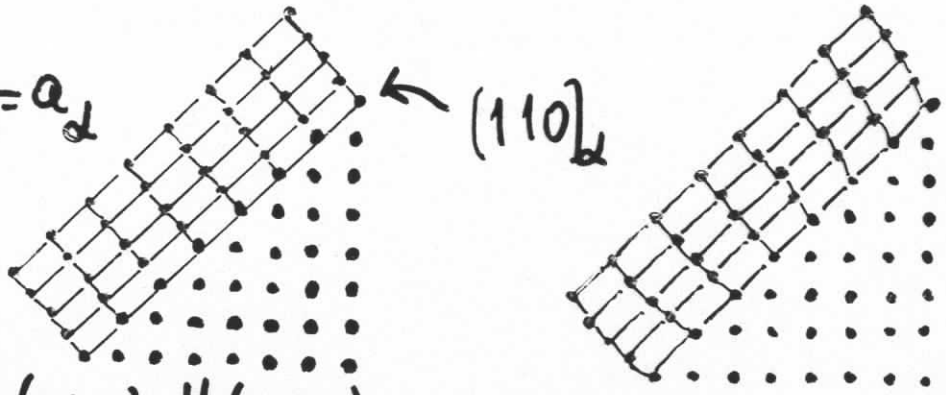
(c) részlegesen koherens (szemikoherens)

(d) inkoherens

Határfelület - illeszkedés

$a_\beta = a_\alpha$

$(110)_\alpha$

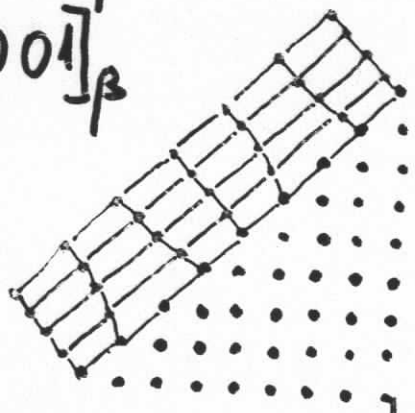


$(110)_\alpha \parallel (010)_\beta$

$[001]_\alpha \parallel [001]_\beta$

koherens

$$\delta = \frac{a_\beta - a_\alpha}{a_\beta} = 0.1$$



$\delta = 0.3$

szemikoherens

	γ (mJ/m²)
koherens	0 - 200
szemikoherens	200 - 500
inkoherens	500 - 2000

Koherencia elvész: $\alpha n^{2/3} \gamma_{ink} <$ koh. def. en.