

# Eötvös Loránd Tudományegyetem

ELŐADÁS JEGYZET

# Rácshibák I

Gubicza Jenő azonos című tárgya és kézirata alapján szerkesztette Vida Ádám.

# Tartalomjegyzék

1.	Ponthibák 3				
	1.1.	Ponthibák típusai			
		1.1.1. Vakanciák			
		1.1.2. Intersticiális-, szubsztitúciós atom			
		1.1.3. Helvezkedési hiba - antisite deffect			
	1.2.	Vakanciák termikus egyensúlyban			
		1.2.1. Vakanciakoncentráció kísérleti meghatározása			
	1.3.	Rácshiba párok			
2.	Diff	úzió 10			
	2.1.	Vakanciamechanizmus esetén			
	2.2.	Intersticiális mechanizmus esetén			
	2.3.	Ondiffúzió			
	2.4.	Szubsztitúciós atom diffúziója			
	2.5.	Kirkendall-effektus			
	2.6.	Diffúzió rácshibák jelenlétében			
2	Diszlokóciók 18				
J.	2 1	Frankal modell 18			
	0.1. 2.9	Digglokágiók általánog dofinígiája Voltorra kongtrukció			
	ე.∠. ეე	Diszlokaciók altalallos definiciója - volteria-konstrukció			
	ა.ა. ე_4				
	3.4.	A diszlokacio energiaja $\ldots \ldots \ldots$			
	3.5.	Diszlokaciora hato erok			
	3.6.	Kolcsonhatasok diszlokaciók között			
	3.7.	Diszlokációk sokszorozódása: Frank-Read forrás			
	3.8.	Diszlokációk sűrűsége			
	3.9.	Diszlokáció reakciók			
	3.10	Nem konzervatív diszlokáció mozgás			
	3.11.	Diszlokáció csúszási rendszerek hexagonális szerkezsetű kristályokban 27			
4.	Med	hanikai tulaidonságok 28			
1.	4 1	Egytengelyű nyújtóvizsgálat 28			
	<u>1.1</u> .	Bugalmas anizotrónia			
	4.3.	Polikristálvos minta húzása			
5.	Rét	egződési hibák szorosilleszkedésű kristályszerkezetben (fcc, hcp) 36			
	5.1.	1 szorosilleszkedésű réteg			
	5.2.	Hibás rétegződés fcc-ben			
		5.2.1. Első eset $\ldots \ldots 36$			
		5.2.2. Második eset $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 37$			
		5.2.3. Harmadik eset			

6.	Részdiszlokációk (parciális diszlokációk) fcc rácsban		
	6.1. Első eset	37	
	6.2. Második eset	38	
	6.3. Harmadik eset	38	
7.	Kiterjedt diszlokációk (dissociated dislocations)		
	7.1. Feszültség hatása a kiterjedt diszlokációkra	42	
	7.1.1. Ha az eredeti diszlokáció csavar volt	42	
	7.1.2. Ha az eredeti diszlokáció él volt	42	
	7.2. Deformációs ikresedés	43	
	7.3. A szemcseméret hatása a parciális diszlokációk távolságára $\ldots \ldots \ldots$	43	
8.	. Ikresedés hexagonális kristályokban	45	
	8.1. Méréstechnika	50	
9.	Szilárdoldatos keményedés		
	9.1. Mérethatás	51	
	9.1.1. Elsőrendű mérethatás	51	
	9.1.2. Másodrendű mérethatás	52	
	9.2. Moduluszhatás	52	
	9.3. Az oldott idegen atomok folyáshatár növelő hatása $\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	53	
10	0.Megújulás és újrakristályosodás	<b>54</b>	
	10.1. Megújulás és újrakristályosodás eredménye	55	
	10.2. Megújulás	55	
	10.3. Újrakristályosodás	56	
	10.4. Primer újrakristályosodás:	57	
	10.5. Szekunder újrakristályosodás	58	

## 1. Ponthibák

### 1.1. Ponthibák típusai

A tárgyalást a rácshibák osztályozásával kezdjük, amely többnyire a dimenziójuk szerint történik. A rácshibákat azért nevezzük *hibáknak*, mert a rács tökéletes periodicitását megbontják. Az atomok nem azokon a helyeken lesznek, melyet a tökéletes rács megkívánna, ezért mondjuk, hogy a rács a hiba helyén torzul. A hiba dimenziója arról árulkodik, hogy hány olyan irány van, aminél a rácstorzulás hosszútávú (akár a kristály egészén átívelő is lehet).

**0 dimenziós hibák** Nincs hosszútávú rendetlenség a hiba körül, csak néhány atomnyi torzulás. A ponthibák deformációs tere  $\varepsilon \sim \frac{1}{r^3}$ , azaz gyorsan lecseng.

1 dimenziós hibák Egyik irányban hosszútávon romlik el a rend. Ezeket a hibákat vonalhibáknak nevezzük, ez azonban nem jelenti, hogy egyenesnek kell lenniük. A vonalhibákat diszlokációknak is nevezhetjük. A diszlokáció vonalában tehát hosszútávú a torzulás, az erre merőleges irányban<sup>1</sup>  $\varepsilon \sim \frac{1}{r}$ . Ez is egy gyors lecsengés, de nem annyira, mint a ponthibáknál. Bizonyos esetekben ez a különbség (a ponthibák és vonalhibák lecsengésének különbsége) fontos - pl. a diffrakciónál.



1. ábra. Ponthiba

2. ábra. Vonalhiba

A vonalhiba persze lehet görbe vonalú is (sőt, általában az), a diszlokációk között nem is nagyon találunk egyeneset.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Hiszen a deformáció tenzormennyiség.

Ha görbült diszlokációról van szó, akkor mindig az érintő \*bizonyos tartományon belül) az az irány, ahol nem cseng le gyorsan a rácstorzító hatás. Az erre merőleges irányban pedig igen.



3. ábra. Diszlokációhurok

**2D és 3D hibák** Az előzőekből kiindulva itt már kettő, illetve három olyan irány van, amelyre a rácstorzító hatás hosszútávon érvényesül. A 3 dimenziós hibáknál annyi különbség van, hogy belefutva egy ilyenbe már szerkezeti változás van (pl. kiválások).

### 1.1.1. Vakanciák

A rácspontból hiányzik egy atom. A vakancia mindig a kristály valamelyik felületén keletkezik (tehát sűrűségük a felületen a legnagyobb), majd bediffundál az anyag belsejébe.

0 9 0 0 0 Rablyunk ( wakanga

4. ábra. Vakancia

### 1.1.2. Intersticiális-, szubsztitúciós atom

A kialakult tökéletes kristályban nincs akkora hely az atomok között, hogy közéjük egy új bűntetlenül beférjen, ezért ha odakerül, feszíteni fogja a rácsot. Saját intersticiális atom is létezhet, bár ez nem annyira preferált mechanizmus. Inkább a szennyezők vagy ötvözők kerülnek ilyen helyekre<sup>2</sup>. Ami az alapanyag atomjához képest kicsi, az rácsközi

 $<sup>^2 \</sup>mathrm{Szennyező},$ ha nem akartuk, hogy az anyagban legyen. Ötvöző, ha igen.

helyre szokott kerülni (pl. Fe(C), Fe(P)), ami nagy, az pedig szubsztitúciós helyre kerül, azaz az alap anyag atomját helyettesíti (pl. Cu(Zn), Fe(Ni)). Minkét esetben rácstorzulás keletkezik.



5. ábra. Idegen atomok

### 1.1.3. Helyezkedési hiba - antisite deffect

Csak ötvözetekben fordul elő, mégpedig a rendezett ötvözetekben (pl.  $Cu_3Au$ ). Azért rendezett, mert nem akárhogyan helyezkednek el az atomok, hanem a sarkokon, vagy lapközepeken, ill testátlók metszéspontjában. Ha egy ilyen rácsban egy meghatározott



6. ábra. Rendezett ötvözet

helyen nem az van, aminek lennie kellene, torzulás alakul ki. Hogy a rendezett ötvözet mennyire rendezett, azt (például a  $Cu_3Au$  ötvözetre) a következőképpen definiálhatjuk:

$$q = \frac{P_{Cu} - 3P_{Au}}{P_{Cu} + 3P_{Au}},$$

ahol q a rendezettség mértéke. Ha értéke 1, akkor rendezett, ha 0, akkor nem, értéke tehát 0 és 1 között mozoghat.  $P_{Cu}$  jelentése, hogy a réz helyén réz található, a  $P_{Au}$  pedig azt jelenti, hogy a réz helyén arany van.

### 1.2. Vakanciák termikus egyensúlyban

A vakanciamozgás nagyon fontos a szilárd testekben lezajló diffúziós folyamatok szempontjából, hiszen ez az az alapmechanizmus, mely hatására a diffúzió lejátszódhat. Sok esetben az ötvözést is csak úgy tudjuk elérni, hogy az ötvöző atomokat a vakanciamozgással juttatjuk be az alapmátrix belsejébe.

Minden hiba torzítja maga körül a kristályrácsot, mely révén az anyagban rugalmas energia jelenik meg, ami megnöveli annak belső energiáját. Ez termodinamikailag kedvezőtlen állapotot jelent, hiszen következtében nem érjük el a minimális szabadentalpiát.

**Állítás.** Egy minimális számú vakancia  $(C_V)$  jelenléte megkívánt az anyagban, hiszen csak így lehet elérni a szabadentalpia minimumát. Ezek termikusan stabil hibák, azaz a hőmérséklet növelésével nem tűnnek el az anyagból. Fémekben szobahőmérsékleten a számuk durván  $10^{-20}$  körül van, ez növekszik a hőmérséklet növelésével és maximálisan az olvadáspontnál éri el a  $10^{-4}$ -t, azaz minden 10000 atomra jut egy vakancia. Ez láthatóan egy nagyon kicsi szám, az atomokhoz képest szinte elenyésző, ám mivel a makroszkopikus tárgyakat rengeteg, több száz mólnyi atom alkotja, a kézzel fogható tárgyakban a számuk már elég nagy. Ez szerencsés, hiszen ez a sok vakancia teszi lehetővé az anyagáramokat.

Határozzuk meg, hogy mennyi a vakanciák egyensúlyi koncentrációja! Ideális kristályunk atomjait jelöljük N-nel, melyek közé keverjünk n vakanciát. Ezek, mint megbeszéltük, a felületen keletkeznek. Ez azt jelenti, hogy a felületre kilép N-ből n atom. Így a szóba jöhető rácspontok száma, melyre atomot, vagy vakanciát tehetünk N + n lett. Nézzük a szabadentalpiát!

$$G = E - TS + pV$$

A G felírható a következő képpen

$$G = G_t + ng_F - TS_k,$$

ahol  $G_t$  a tökéletes kristály szabadentalpiája,  $ng_F$  1-1 vakancia képződési entalpiája (F=forming),  $TS_k$  a konfigurációs entrópia (a mikroállapotok figyelembevétele, ez lesz az a tényező, ami miatt bizonyos vakanciakoncentrációnál érjük el a minimumot). Ezeket felhasználva pedig

$$g_F = E_F + pV_F - TS_F,$$

ahol  $E_F$  a vakanciaképződési energia, ami durván 1 eV nagyságrendileg (abból ered, hogy a vakancia létrehozásához egy atomnak ki kell szakadni a helyéről, ott kötéseket kell szétszakítani),  $V_F$  a vakanciaképződés térfogata (~ 0.5  $\Omega$ , hiszen a rácstorzulás miatt ott kisebb térfogat alakul ki, mintha alapatom maradt volna ott),  $TS_F \sim 2 - 3k$  (k a Boltzmann állandó).

Keressük meg hol lesz a G minimuma. Ennek érdekében nézzük meg az n szerinti deriváltját állandó nyomás és hőmérséklet mellett.

$$\frac{\partial G}{\partial n}\Big|_{T,p} = 0$$
$$g_F - T\frac{\partial S_K}{\partial n}\Big|_{T,p} = 0$$

A kérdés tehát az, hogy mi lesz az  $S_k$  *n* szerinti deriváltja. Írjuk fel a konfigurációs entrópiát.

$$S_K = k \ln W = k \ln \frac{(N+n)!}{N!n!}$$

Természetesen most is a Stirling-formulát (ln  $n! = n \ln n - n$ ) használjuk, hogy könnyebb legyen a dolgunk (és ez megtehető, hiszen N és n is nagy). Behelyettesítve, egyszerűsítések után és a logaritmikus azonosságokat kihasználva eljutunk a következőig:

$$C_V = e^{-\frac{g_F}{kT}}$$

amely szétválasztható hőmérsékletfüggő és független tagokra

$$C_V = e^{\frac{S_F}{k}} e^{-\frac{E_F + pV_F}{kT}}$$

Légkörön a  $pV_f$  durván nulla, így a végleges alak:

$$C_V = A \cdot e^{-\frac{E_F}{kT}}$$

A preexponenciális tag a C végtelenre extrapolált értéke. Ez nyilván nem hordoz fizikai információt, csak megemlítettük. A képletből láthatjuk, hogy a vakanciák tehát termikusan stabil hibák, ha a hőmérséklet nő, a vakanciakoncentráció is nő. Vajon milyen nyomáson válik nem elhanyagolhatóvá a  $pV_F$  tag, melyet az előbb elhagytunk? Ha a nyomás 10 GPa, a  $pV_F$  már fél elektronvolt. 300 K hőmérsékleten  $10^{-9}$ -ed részére csökken a  $C_V$  a szobához képest. Úgy 1200 K-en viszont már csak  $10^{-2}$ -od részére csökken a szobához képest, ezért kijelenthetjük, hogy a hőmérséklet növelésével az extra nyomás jelentősége csökken.

### 1.2.1. Vakanciakoncentráció kísérleti meghatározása

Vakanciák keletkeznek az anyag képlékeny deformációja közben, illetve ionbesugárzás következtében is. Azt is tudjuk, hogy ha az anyagot felmelegítjük, a vakanciák száma megnő. Hirtelen lehűtés esetén befagyaszthatunk bizonyos számú vakanciát, ami azt jelenti, hogy a hűtés olyan gyors volt, hogy nem hagytunk időt a vakanciáknak arra, hogy az anyagból távozni tudjanak (ami szintén a felületeken történik), így pedig az egyensúlyinál nagyobb számban lesznek jelen az anyagban, adott hőmérsékleten<sup>3</sup>. Szeretnénk mondani valamit arról, hogy számszerűleg mennyi található belőlük. Erre több módszerünk is van.

**Differenciális dilatometria.** Az anyag hőmérsékletét változtatva mérjük annak hosszváltozását. Ebben a hosszváltozásban két tényező játszik: a vakanciakoncentráció és a hőtágulás (utóbbi járulékát szeretnénk kiküszöbölni), melyet a rácsparaméter mérésével tudunk kiszámolni. A vakanciakoncentrációra

$$C_V = 3\left(\frac{\Delta l}{l} - \frac{\Delta a}{a}\right)$$

A hármas abból ered, hogy egy vakancia a tér három irányába okoz változást (hiszen térfogata van), ezt azonban a lineáris hosszváltozásnál korrigálni kell<sup>4</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Természetesen ismételt felfűtéssel a befagyasztott vakanciák újraaktiválhatók és lassabb hűtéssel újra kitessékelhetők az anyagból.

 $<sup>^4\</sup>mathrm{A}$ lineáris és térfogati méretváltozás között egy hármas faktor van.



7. ábra. Differenciális dilatometria kiértékelése

**Elektromos ellenállásmérés.** Szinte ugyanaz a történet, mint az előbb, ugyanis a vakanciák növelik az anyag elektromos ellenállását (ahogy minden rácshiba). Az ellenállás növekedése tehát arányos a vakanciák koncentrációjával.

$$\Delta \rho \sim C_V \sim e^{-\frac{E_F}{kt}}$$

Itt is az a probléma, hogy vakanciák nélkül is van a rácsnak egy bizonyos alapellenállása, melyet ismernünk kell, hogy járulékát küszöbölni tudjuk. Erre egy befagyasztási trükköt használnak, mely mér egy adott hőmérsékleten egyensúlyi és ugyanezen (de egy magasabbról történő befagyasztás utáni) nem egyensúlyi vakanciakoncentrációt. A kettő viszonyából a rács alapellenállása kiszámolható.



8. ábra. Ellenállásmérés kiértékelése

Pozitron annihilációs spektroszkópia Igen, ezt majd be kell írni.

**Intersticiális atomok** Nagyobb képződési energiájuk van, mint a vakanciáknak, ezért nehezebben hozhatók létre termikusan.

### 1.3. Rácshiba párok

Ionkristályban a ponthibák keletkezésekor meg kell hogy maradjon a lokális töltéssemlegesség, különben a nagy Coulomb-energia miatt kedvezőtlen lenne a konfiguráció. Hibapárok keletkeznek pozitív és negatív töltéssel.



#### 9. ábra. Shottky-hiba

Ilyen pl. a NaCl. A koncentráció meghatározásánál a töltéssemlegességet is figyelembe kell venni.

$$\sum_{j} q_j n_j = 0,$$

ahol  $q_j$  a j. ion töltése.

$$G + \lambda \sum_{j} q_j n_j = \min_{j \in \mathcal{I}} q_j n_j$$

Itt  $\lambda$  a Lagrange-multiplikátor. Továbbá

$$n_+ = n_- = N e^{\frac{-\varepsilon_0}{kT_2}}$$

Az ionkristályban a töltéssel rendelkező hibák elektront tudnak befogni, ezt nevezzük színcentrumnak (F-centrum).



### 10. ábra. Színcentrum

Az elektron a pozitív potenciálban hidrogénszerű pályákra kerülhet. Fény hatására (bizonyos hullámhosszra) gerjesztődik.

## 2. Diffúzió

Szilárd testben. Atomi diffúzió: az atomok néhány Å távolságra kiterjedő véletlen mozgása, amely egy eredő anyagáramlást eredményez. Átalában a diffúzió a magasabb koncentrációjú helytől az alacsonyabb felé irányul. Vegyük például a kétkomponensű rendszerben értelmezett B atomok diffúzióját az A atomból álló apalanyagba. Hogy matematikai leírást adhassunk, érdemes lenne az atomok koncentrációját valahogy kvantifikálni, ezért legyen

$$c_B = N_v \nu_B,$$

ahol  $c_B$  a *B* atomok száma/térfogat, az  $N_v$  az összes atomok száma/térfogat a  $\nu_B$  pedig a *B* atomok atomkoncentrációja<sup>5</sup>.

Lehetséges diffúziós mechanizmusok



11. ábra. Közvetlen és ciklikus helycsere

A közvetlen helycseréhez nagy rácstorzulás lenne szükséges, ez tehát nem nagyon preferált. A ciklikusnál nem szükséges nagy hely, de túl sok cserének kellene egyszerre teljesülnie. Emiatt valószínűsége kicsi.



12. ábra. Intersticiális helyzetbe kerülés, majd egy távolabbi vakanciába ugrás  $\overline{}^{5}$ Pl.: 100 atomból 10 db B atom =0,1 vagy 10%.

Egy távolabbi vakanciába akar ugrani a besatírozott atom - ez is jelentős rácstorzulást igényel. Hogy tovább léphessünk, valahogy azt kell belátnunk, hogy a B atomok árama hogy függ azok koncentrációjától. Nézzük meg az utolsó lehetőséget:



13. ábra. Vakanciával való közvetlen helycsere

Ez a leggyakrabban bekövetkező mechanizmus. A következőkben gondoljuk végig a diffúzió két alapegyenletét, tehát Fick első és második törvényét. Képzeljünk el egy anyagot, illetve azon belül néhány kiszemelt síkot, ahol az atomok koncentrációit jelöljük c-vel.



14. ábra. A diffúzzió leírása

Az első síkon lévő B atomok száma (egységnyi felületen):  $n_1 = c_{B1} \cdot d$ , a második síkon pedig  $n_2 = c_{B2} \cdot d$ . Legyen  $\gamma$  az átlagos atom-vakancia helycsere frekvenciája, a megfigyelési idő legyen elég hosszú  $\delta t \gg \frac{1}{\gamma}$ . Az első síkon x irányba ugró B atomok száma

$$N_1 = n_1 \gamma \delta t \frac{1}{6}$$

a másodikon pedig

$$N_2 = n_2 \gamma \delta t \frac{1}{6}.$$

Az  $\frac{1}{6}$ a hat lehetséges célhelyből származik. Írjuk fel az atomáramot az xirányban^6

$$j_B = \frac{N_1 - N_2}{\delta t} = \frac{1}{6}\gamma(n_1 - n_2) = \frac{1}{6}\gamma d(c_{B1} - c_{B2})$$

 $c_{B2} = c_{B1} + d \frac{\partial c_B}{\partial x}$  kifejezéssel  $j_B = -\frac{1}{6} \gamma d^2 \frac{\partial c_B}{\partial x}$ . Ha a parciális előtti tagot elnevezzük mondjuk  $D_B$ -nek, megkapjuk Fick első törvényét, miszerint

$$j_B = -D_B \frac{\partial c_B}{\partial x}$$

A koncentrációkülönbség hatására atomáram indul meg a nagyobb koncentrációjú helyről a kisebb koncentrációjú felé.  $j_B$  függ a helytől és az időtől is.

 $<sup>^6 \</sup>mathrm{Egységnyi}$ idő alatt, egységnyi felületen az xirányba átugrálóBatomok száma.



15. ábra.

Az atomi ugrások koncentráció gradiens nélkül is zajlanak. Az eredő atomáram csak azért lép fel, mert a magasabb koncentrációjú első síkról több *B* atom ugrik a másodikra, mint a kisebb koncentrációjú másodikról az elsőre. A  $D_B$  dimenziója  $\frac{m^2}{s}$ , értéke pedig  $D_B = \frac{1}{6}\gamma d^2$ .

## 2.1. Vakanciamechanizmus esetén

A *B* atom elmozdulásának két feltétele van. Az első, hogy legyen a szomszédban vakancia, a másik, hogy legyen elég energiája az ugráshoz. Hogy definiáltuk a gammát?

$$\gamma = c_V \nu,$$

ahol $c_V$ a vakanciakon<br/>centráció atomszáza-

lékban<sup>7</sup>,  $\nu$  pedig az adott atom ugrási frekvenciája. Az atom termikus rezgéseinek frekvenciája (a Debye-frekvencia)  $\nu_0 = 10^{13}$ Hz körüli érték. Az átugráshoz szükséges  $G_{VM}$  szabadentalpiát a termikus fluktuációk fedezik.

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{G_{VM}}{kT}}$$
$$G_{VM} = H_{VM} - TS_{VM} = E_{VM} + pV_{VM} - TS_{VM}$$

A  $PV_{VM}$  tag nagyon kicsi. A  $\nu$  szétbontható egy hőmérsékletfüggő és független tagra.

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{S_{VM}}{k}} e^{-\frac{E_{VM}}{kT}}$$

A vakanciakoncentrációra  $c_V = c_{\infty}e^{-\frac{E_{VF}}{kT}}$ , amellyel  $D_B = \frac{1}{6}d^2\nu'_0c_{\infty}e^{-\frac{E_{VF}+E_{VM}}{KT}}$ . a konstansokat kigyűjtve és egy állandóban csoportosítva ismerősebb alakhoz jutunk, miszerint

$$D_B = D_0 e^{-\frac{Q}{kT}}$$

### 2.2. Intersticiális mechanizmus esetén

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>annak a valószínűsége, hogy ha az atom ugrik, akkor vakancia van mellette.

$$Q = E_M$$

Nem szükséges vakancia jelenléte. Ez azért nem jelentős mechanizmus, mert a nagy képződési energiája miatt általában kevés az intersticiális atom.

### 2.3. Öndiffúzió

Saját atom diffúziója (tehát A-ban A). Ahhoz, hogy ezt nyomon lehessen követni, az A atom izotópját használják (A\*). Mikor ez elbomlik, a keletkező  $\beta$  vagy  $\gamma$  sugárzás



16. ábra. Intersticiális mechanizmus

intenzitásából következtetnek az A\* koncentrációjára az adott helyen.

$$D_{A*} = D_0 e^{-\frac{Q}{k!}}$$

Köbös fémekre  $Q \sim T_m$ ,  $D_0 \approx 10^{-5} \frac{m^2}{s}$  és  $Q \approx 2 \text{eV}$ .



17. ábra. Az öndiffúziós együttható Arrhenius-plotban, az egyenes meredekségéből az aktiválási energiát (Q) kapjuk.

### 2.4. Szubsztitúciós atom diffúziója

Ehhez a mechanizmushoz mindenképpen vakancia szükséges. Nézzük hogy aránylanak a különböző aktiválási energiák

Ennek oka, hogy a vakanciák megtalálási valószínűsége a szubsztitúciós atom körül nagyobb, mint az alapanyag atomjai körül.

A szubsztitúciós atom diffúziója tehát gyorsabb folyamat, mint az öndiffúzió.



### 18. ábra. Szubsztitúciós atom

## 2.5. Kirkendall-effektus



Ezt tartjuk a vakanciamechanizmus kísérleti bizonyítékának

19. ábra. A Kirkendall-effektus

Mintánkban a cink atomárama nagyobb a rézénél, emiatt a rá vonatkoztatott diffúziós együttható is nagyobb. Ha közvetlen cink-réz helycsere történne, akkor a két diffúziós állandónak meg kellene egyeznie. Ez igazolja, hogy a diffúzió elsősorban atom-vakancia helycserével megy végbe (azaz bizonyíték a vakanciamechanizmusra). Az atomáram a vakanciaárammal ellentétes irányú. A 19. ábra bal alsó sarkában látható kép bal oldalán az egyensúlyinál több vakancia, a jobb oldalán pedig az egyensúlyinál kevesebb vakancia helyezkedik el, ezt a vakancianyelők és források elnyelik, illetve pótolják. A Cu-Zn-ben a többletvakanciák üreget is alkothatnak, ez pedig már nem lesz mobilis, a jelenséget Kirkendall-porozitásnak nevezzük.

Ezt figyelembe kell venni minden olyan esetben, mikor az anyaghasználat során magas hőmérsékleten azonos alapanyagú, de eltérő ötvözőtartalmú anyagrészek érintkeznek. Pl.: Ni-Al-Ti ötvözet a repülőgép hajtóműben. A réteget korrózióvédelem miatt hordják fel, de a folyamatos hőhatás miatt kialakuló pórusok meggyengítik és felpattogzik a felület.

A valóságban a diffúziós együttható függ a koncentrációtól.

### 2.6. Diffúzió rácshibák jelenlétében

Szemcsehatárok, diszlokációk, repedés, szabadfelület mentén gyorsabb a diffúzió. Oka: az atomok lazábban helyezkednek el, emiatt könnyebb az atomi mozgás. Ez a jelenség főleg alacsony hőmérsékleten számottevő.



20. ábra. Diffúziós együtthatók Arrhenius-plotban

 $\begin{aligned} Q_L: Q_{GB}: Q_S = 4:2:1\\ Q_{GB} \approx Q_{diszl}\\ D_L << D_{GB} \approx D_{diszl} << D_S \end{aligned}$ 

Vizsgáljuk meg hogy változik a koncentráció a diffúzió hatására.





Nézzük a Batomok számának változását a két sík között $dx\cdot A$ térrészben $\Delta t$ idő alatt:

$$\Delta c_B \cdot dx \cdot A = [j_B(x_1) - j_B(x_1 + dx)] \Delta tA$$

Itt [dxA] egy térfogat, a  $\Delta c_B$  pedig a térfogategységben lévő B atomok számának változása. Fick első törvényét felhasználva és tudván, hogy A = 1, amiből  $\frac{\Delta c_B}{\Delta t} = \frac{\partial c_B}{\partial t} = \frac{\partial j_B(x_1)}{\partial x} dx$ 

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_B \frac{\partial c_B}{\partial x} \right)$$

Ha $D_B{\rm a}$ helytől (koncentrációtól) független, akkor megkapjuk a második Fick-törvényt, amely szerint

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 c_B}{\partial x^2}$$

A gyakorlatban legtöbbször Fick második törvényét kell megoldani a megfelelő kezdeti és határfeltételekkel. Nézzünk erre néhány példát, a leggyakoribb megoldásmódokat

**Vékonyréteg megoldás** Az összes *B* atom egy vékony rétegben helyezkedik el. Kezdeti feltétel:

$$c_B(x,0) = \delta(x)$$

Tehát kezdetben a koncentráció Dirac-delta szerű, ez folyik szét az időben. Fontos, hogy itt a koncentráció egy rögzített érték.

$$c_B(x,t) = \frac{m_B}{2\sqrt{\pi D_B t}} e^{-\frac{x^2}{4D_B}t},$$

ahol $m_B$ az atomok száma az anyagban, azaz a $c_B$ teljes térre vett integrálja.

### Végtelen féltér megoldás

$$0 < x < \infty$$
$$-\infty < y < \infty$$
$$-\infty < z < \infty$$

Határfeltételek:  $c_B = c_0$ , ha t = 0 és  $0 < x < \infty$ , valamint  $c_B = c_S$ , ha x = 0 és  $0 < t < \infty$ . Fontos különbsége az előzőhöz képest, hogy itt a  $c_S$  koncentráció az időben állandó, tehát a forrást kimeríthetetlennek tartjuk.



22. ábra. Végtelen féltér és megoldása

Megoldása

$$c_B(x,t) = c_0 + (c_S - c_0) \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_B t}}\right) \right],$$

ahol *erf* a hibafüggvény. Ez a formula véges méretű mintára is jó, ha  $x >> 2\sqrt{D_B t}$ . Ha az adott koncentráció behatolási mélységét növelni akarjuk, akkor érdemesebb a hőmérsékletet növelni, mint az időt, hiszen ha T=áll, akkor  $D_B$ =áll, így  $x \sim \sqrt{t}$ , ha viszont az idő állandó, akkor  $x \sim \sqrt{D_B}$ .

## 3. Diszlokációk

Egykristályok alakítása (pl. nyújtása) során észrevették, hogy egy bizonyos feszültség felett maradandó alakváltozást szenved a minta. Az alakváltozás során a kristály bizonyos síkok mentén jól meghatározott irányokba elcsúszik (ezek a bizonyos síkok pedig jól meghatározott kristálytani síkok). Számoljuk ki a képlékeny alakváltozás megindításához szükséges kritikus feszültséget, mégpedig egy neves modell segítségével.

### 3.1. Frenkel-modell

A legegyszerűbb modell az elméleti kritikus nyírófeszültség számolásra. Azt feltételezi, hogy van két egymás fölötti atomsor, melyek egymáson elmozdulnak egy  $\tau$  nyírófeszültség hatására. Ehhez az kell, hogy a felső atomsor atomjai egy szomszédos egyensúlyi pozícióba átkerüljenek. Az alakváltozás egy darabig rugalmas, ezért a leírásnál induljunk ki a Hooke-törvényből. Azt várjuk, hogy a függvény, amivel a nyírófeszültséget fogjuk jellemezni, teljesítse a kis szögekre a Hooke-törvényt, valamint azt, hogy az x függvényében legyen periodikus (atomtávolságnyi periódushosszal).



23. ábra. Frenkel-modell

Ez a modell szemléletes ugyan, de sajnos nem a kísérletekkel egyező jóslatokat tesz. Gondolhatunk arra is, hogy túl sok volt az elhanyagolás, de a közelítő módszerek pontosításával sem érkezett javulás. Felvetődött tehát a kérdés: hogy lehet két kristálysíkot egymáson elcsúsztatni kisebb feszültséggel? **Futószőnyeg analógia** Ha az egész szőnyeget egyszerre akarjuk elhúzni, akkor az egész szőnyeg mentén le kell győzni a tapadási súrlódási erőt. Könnyebb viszont eltolni a szőnyeget, ha csak egy kis szakaszát mozgatjuk egyszerre. Ezt úgy érhetjük el, hogy gyűrődést keltünk, majd ezt a rövid, gyűrt szakaszt (magát a hibát) mozgatjuk a szőnyegen. Kristályban a kötések csak kis térfogatban szakadnak fel egyszerre, ahogy a következő



24. ábra. Futószőnyeg analógia

ábrán is láthatjuk. Ez maga a rácshiba és ez mozog a kristályban a külső feszültségnek megfelelő irányban. Ha kiér az anyag túloldalán, egy atom távolságnyi képlékeny nyírás következett be. **Ezt a vonalmenti hibát diszlokációnak nevezzük.** 1934-ben Taylor, Orován és Polányi (utóbbi 2 magyar) egymástól függetlenül jöttek rá arra, hogy a képlékeny deformáció diszlokációk mozgásával magyarázható. Azokat a síkokat melyekben a diszlokáció mozog, csúszósíkoknak nevezzük. A képlékeny alakváltozás alapmechanizmusa a diszlokáció csúszása a csúszósík mentén.

### 3.2. Diszlokációk általános definíciója - Volterra-konstrukció

Ebben az előállításban az anyagot felvágjuk egy felület mentén egy darabig, eltoljuk egy atomtávolsággal, majd összeragasztjuk.



25. ábra. Volterra-konstrukció

Ha diszlokáció<sup>8</sup> mozog, akkor növekszik az elcsúszott tartomány (vágási felület). A szóban forgó diszlokáció jellemezhető a vonalvektorával l, ennek csak az iránya érdekes, lehetne egységvektor is és az elcsúszás vektorával (ez viszont rácsvektor kell, hogy legyen = Burgers vektor). A Burgers vektor definícióját a Burgers körrel végezzük el. Szemeljünk ki egy atomot a rácsban és járjuk körbe. Egyetlen szabály van: fel-lefelé ugyanannyit és jobbra-balra is ugyanannyit kell lépnünk, tehtá mondjuk lépjünk négyet fel, ötöt balra, négyet le és ötöt jobbra. Ha ugyanoda értünk vissza, akkor a kör által határolt területben nincs rácshiba. Ha nem, akkor van és a végpontot a kezdőponttal összekötő vektor a Burgers-vektor. Irányát pl. a jobbkézszabály segítségével határozhatjuk meg.

Ha a szóban forgó  $b \parallel l$ , akkor éldiszlokációról, ha  $b \perp l$ , akkor csavardiszlokációról beszélünk<sup>9</sup> Az anyagokban általában kevert diszlokációk találhatók (nem tiszta él és nem tiszta csavar).

A diszlokáció lehet egy zárt görbe is az anyagban, a Volterra konstrukció miatt azonban nem végződhet az anyag belsejében, tehát vagy az anyag egyik végétől a másikig ér, vagy zárt görbe az anyagon belül, illetve az utolsó lehetőség, hogy több diszlokáció találkozásánál csomópont alakul ki.

### 3.3. Diszlokációk feszültségtere

Ha a vonalvektorokat a csomópont felé irányítjuk, akkor  $\sum_i b_i = 0$ . A diszlokáció maga körül rugalmasan deformálja a kristályt, tehát rugalmas feszültségek keletkeznek. A csavardiszlokációk feszültségterének vizsgálatához ismerjük meg a Volterra-modellt.



26. ábra. Volterra-modell

A leíráshoz lineáris rugalmasságtant, izotóp kontinuumot feltételezünk. Mivel az elmozdulások  $\approx b$  nagyságúak, egy belső magot elhagyhatunk a számolásból (így kikerülve a

 $<sup>^{8}\</sup>mathrm{Az}$ elcsúszott és el nem csúszott tartományok határa.

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Az elnevezés abból ered, hogy egymás utáni Burgers-köröket leírva azok csavarvonal mentén haladnak.

kellemetlen végtelen megjelenését). Az elmozdulásra:  $u_x = u_y = 0$ , tehát x és y irányban nincs elmozdulás.  $u_z = b$ , ha  $\Theta = 2\pi$  és  $u_z = 0$ , ha  $\Theta = 0$ .

$$u_z = \frac{b\Theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$$

 $\varepsilon$ és  $\sigma$ értékeire felírhatjuk, hogy

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xz} = 0$$
  
 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xz} = 0$ 

A nem nulla komponensekre

$$\varepsilon_{xz} = -\frac{b}{4\pi} \frac{\sin\Theta}{r}$$
$$\varepsilon_{yz} = \frac{b}{4\pi} \frac{\cos\Theta}{r}$$

És ugyanígy a szigma komponenseire

$$\sigma_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{\sin\Theta}{r}$$
$$\sigma_{yz} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{\cos\Theta}{r}$$

Tehát nincs összenyomás vagy nyújtás, **csak nyírás.** Ennek következtében nincsen térfogatváltozás sem.

$$\sigma \sim \frac{1}{r} \Rightarrow r \to 0 : \sigma \to \infty$$

Azért, hogy használható legyen a kontinuummechanikai modell, bevezetünk egy belső levágási sugarat  $(r_0)$ , amelynél kisebb távolságban már nem használjuk a feszültségi formulákat. A valóságban az anyag atomos felépítése miatt amúgy sincs értelme a diszlokációhoz nagyon közel vizsgálni a feszültségeket.

Éldiszlokáció feszültségtere

$$\sigma_{xx} = \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\Theta(3\cos^2\Theta + \sin^2\Theta)}{r}$$
$$\sigma_{yy} = \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\Theta(\cos^2\Theta + \sin^2\Theta)}{r}$$
$$\sigma_{xy} = \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos\Theta(\cos^2\Theta + \sin^2\Theta)}{r}$$
$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xz} = 0$$

Az éldiszlokációk feszültségterében már vannak nyomó, húzó és nyírókomponensek is, ezért térfogatváltozás is van az anyagban a hiba körül, ez pedig jó egyezést mutat a kvalitatív képpel. A csúszósík fölötti részben, ahol az extra sík megtalálható, összenyomott zóna található, alatta pedig nyújtott.

### 3.4. A diszlokáció energiája

Csavardiszlokáció esetében bontsuk fel a vizsgált hengernyi részt héjakra



27. ábra. Vizsgált térrész

Hosszegységre  $dE = \pi 2r \left(\frac{b}{4\pi r} \frac{Gb}{2\pi r}\right) dr$ . Tehát

$$E_{cs} = \frac{Gb^2}{2\pi} \int_{r_0}^{R} \frac{1}{r} dr = \frac{Gb^2}{4\pi} ln \frac{R}{r_0}$$

Az integrálás nem mehet a végtelenig, mert akkor az energia is addig menne, ezért alkalmazzuk a belső és külső levágási sugarakat. A valóságban a kristály mérete megfelel egy véges R-nek, vagy a közelben lévő ellentétes b vektorú diszlokációk leárnyékolják egymás feszültségterét.

Az éldiszlokáció energiája

$$E_{\rm \acute{e}l} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{R}{r_0}$$

### Következmények

 Az éldiszlokáció energiája nagyobb, hiszen fémekben a ν, azaz a Poisson-szám egy 0.3 körüli érték. Az éldiszlokáció mentén az összenyomott és nyújtott tartományok jelentős deformációs energiával bírnak. Vegyes diszlokációk jobban járnak, minél nagyobb a csavarkomponensük.

- A diszlokáció energiája arányos annak hosszával  $(E \sim l)$ , tehát ha a végei rögzítettek, energetikailag az a legkedvezőbb neki, ha egyenes.
- Az energia csak *kicsit* érzékeny a levágási sugárra.
- Mivel  $E \sim b^2$ , ezért ha a *b* vektor nem a legkisebb rácsvektor, energetikailag kedvező, ha a diszlokációk szétválnak. Ilyenkor természetesen  $b = b_1 + b_2$  lesz és  $b_2^2 > b_1^2 + b^2$ , a szétvált diszlokációk *b* vektorai által bezárt szög hegyesszög lesz (azaz kisebb, mint 90°). Ennek következménye, hogy általában a legkisebb rácsvektorok a *b* vektorok és a csúszósík a legszorosabb illeszkedésű sík (pl.: fcc-nél az {111}).
- A nyomás és hőmérséklet állandósága mellett

$$G = E + pV - TS,$$

ahol G a szabadentalpia, TS-ben az S a konfigurációs + rezgési entrópia. A kristály belső energiáját (E) növeli a diszlokáció. A diszlokáció keletkezésekor  $\Delta G > 0$ , tehát a ponthibákkal ellentétben ez egy termodinamikailag instabil hiba. Akkor mégis hogyan keletkezik? Erre két mód van: vagy a kristálynövekedés során, vagy képlékeny deformáció közben a már meglévő diszlokációk sokszorosodnak.

### 3.5. Diszlokációra ható erők

Egyenes diszlokációra:  $\tau$  a csúszósíkban b irányába ható nyírófeszültség (ez pedig származhat külső feszültségtől vagy más diszlokációktól). Ha a diszlokáció a kristály egyik oldaláról a másikra mozog, a végzett munka

$$W = \tau A b$$

Egy kis mértékű csúszás során a végzett munkában fellépő növekmény:

$$dW = W \frac{ds \cdot dl}{A} = \tau A \frac{ds \cdot dl}{A}$$
$$f = \tau b$$

Itt f az egységnyi vonalhosszra, a dl vonalra merőlegesen ható erő. Mi történik, ha egy egyenes diszlokáció szakasz megakad egy kiváláson vagy egy másik diszlokáción?

A feszültség hatására elkezd kihajolni, de van visszahúzó erő is, hiszen a diszlokáció hossza növekszik, azaz a saját energiája is megnő.  $R \approx 10 - 100nm$ ,  $T = \frac{1}{2}Gb^2$ . T az egységnyi hosszra jutó energia, erő dimenziójú mennyiség. Ez a diszlokáció hosszát rövidíteni akarja. A folyamat hasonló, mint a folyadékhártyáknál a felületi feszültség. Elnevezése: vonalmenti feszültség.



28. ábra. Elakadt diszlokáció

Egyensúlyban:  $\tau bl = 2T \sin \Theta$ , ebből pedig  $\tau = \frac{Gb}{l} \sin \Theta$ , az Orowan-feszültség pedig  $\tau_{max} = \frac{Gb}{l}$ 

Görbült diszlokáció csak külső feszültség vagy rögzítő idegen atomok hatására lehet egyensúlyban.

### 3.6. Kölcsönhatások diszlokációk között

A diszlokációk feszültségterük révén egymásra erővel hatnak. A legalapvetőbb kölcsönhatásokat vizsgáljuk az éldiszlokációk területén. Azonos előjelűek ugyanazon csúszósíkban taszítják egymást, párhuzamos csúszósíkokban egymás fölött (azaz 0°-ban) van az egyensúly. Ellentétes előjelűek azonos csúszósíkban annihilálódnak, stabil egyensúly pedig 45°nál van. Párhuzamos csavardiszlokációk úgy viselkednek mint a ponttöltés, azaz a + + taszít, + - vonz. A csavardiszlokációknak nincs meghatározott csúszósíkjuk és csavar és éldiszlokáció nem hat kölcsön.



29. ábra. Diszlokációk kölcsönhatása

### 3.7. Diszlokációk sokszorozódása: Frank-Read forrás

A forrás működését az alábbi ábrán mutatjuk be.



30. ábra. Frank-Read forrás

### 3.8. Diszlokációk sűrűsége

Alapvetően két módon szokták definiálni a mennyiséget, az adott felületen történő döfések számával, illetve a meghatározott térfogatban található diszlokációvonalak összhosszával. A két definíció csak speciális körülmények között ekvivalens.



31. ábra. Diszlokációsűrűség definiálása

### 3.9. Diszlokáció reakciók

Ha két diszlokáció találkozik, ezek reakcióba léphetnek és létrehozhatnak egy harmadikat.

$$b_1, b_2 \to b_3 = b_1 + b_2.$$

Természetesen mivel vektorokról van szó, teljesülnie kell a következőnek is  $b_3^2 = b_1^2 + b_2^2 + 2 \cos b_1 b_2$ . Energetikailag ez a szétválás akkor lesz kedvező, ha az  $E_3 < E_1 + E_2$ . Mivel azonban  $E \sim b^2$ , a burgers-vektorokra is teljesül  $b_3 < b_1 + b_2$ . Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy a  $b_1$  és  $b_2$  hegyesszöget zár be. Ha az előbbi egyenlőtlenség nem teljesül, akkor a

 $b_3$  spontán két új b vektorra szakad. Ha esetleg a  $b_1$  és  $b_2$  merőleges egymásra, akkor a diszlokációk helyén a rugalmas viszonyok és a rugalmas anizotrópia dönt.

**Lomer-Cottrel akadály** Legyen az  $S_1$  és  $S_2$  egy {111} típusú sík fcc-ben. A  $b_1$  nem párhuzamos AB szakasszal és a  $b_2$  sem. Találkozásukkor létrejön a  $b_3$  vektor, mert energetikailag ez kedvezőbb<sup>10</sup>, azonban a keletkezett  $b_3$  már nem fekszik sem  $S_1$ , sem  $S_2$  síkban (azaz egyetlen könnyű csúszást lehetővé tévő síkban), tehát mozgásképtelenné válik. Ez a rögzült vektor visszahat a többiekre, azokat is rögzíti.



32. ábra. Lomer-Cottrel akadály kialakulása

### 3.10. Nem konzervatív diszlokáció mozgás

Vizsgáljuk meg hogyan tudja átugrani a diszlokáció az akadályokat?



33. ábra. Mászás

 $<sup>^{10}</sup>$ Jegyezzük meg azonban azt is, hogy az energia nő is - mégpedig amiatt, hogy a diszlokáció vonala megnő.

**Mászás éldiszlokáció esetén** Példánkban az anyagban jelen van egy LC akadály. Diszlokációnknak fel vagy le kellene mozdulnia, hogy ne akadjon el az LC-ben.

$$b \cdot dF \neq 0$$

Két feltétel teljesülése szükséges:

- Feszültség, amely segíti a diszlokáció kúszást.
- Az egyensúlyinál több vakancia.

A diszlokáció lefelé is kúszhat intersticiális elnyeléssel vagy vakancia emisszióval. A kúszás sebességét a vakanciadiffúzió határozza meg, magas hőmérsékleten könnyebben megy.

Csavardiszlokáció esetén Ez már konzervatív mozgásfajta.



34. ábra. Mászás csavardiszlokáció esetén

Legyen az  $S_1, S_2$  {111} típusú sík. Diszlokáció kúszással és keresztcsúszással kikerülhetőt a csúszással szembeni akadályok. A két mechanizmus segíti a diszlokáció annihilációt.

## 3.11. Diszlokáció csúszási rendszerek hexagonális szerkezsetű kristályokban

Csoportosításuk a Burgers-vektor szerint történik. Létezik a, c és a + c típusú.



35. ábra. Hexagonális csúszási rendszerek

## 4. Mechanikai tulajdonságok

### 4.1. Egytengelyű nyújtóvizsgálat

Más néven szakítás. Egy F erő hatására a minta  $\Delta l$  hosszúsággal megnyúlik.  $\Delta l$  függ F-től,  $A_0$ ,  $l_0$ -tól és az anyag tulajdonságaitól is.

 $\frac{F}{A_0}$ 

Vezezzük be a mérnöki feszültséget,

és a mérnöki deformációt

$$\frac{\Delta l}{l_0}$$

Ezek az értékek csak nagyon kis nyújtások esetén jók. Nagyobb megnyúlásra figyelembe kell venni a keresztmetszet csökkenését és hossz növekedését is.



36. ábra. Hengeres minta nyújtása kis, majd nagy erők esetén

$$\Delta l = l - l_0$$

A valódi feszültség

$$\sigma = \frac{F}{A}$$

és a valódi deformáció

$$l \to l + dl$$
$$d\varepsilon = \frac{dl}{l}$$

Ha  $l_0 \rightarrow l : \varepsilon = \int_{l_0}^{l} d\varepsilon = \ln \frac{l}{l_0}$ . Képlékeny alakváltozás esetén a térfogat nem változik, tehát

$$l_0 A_0 = lA \to A = \frac{A_0 l_0}{l},$$

így elég megmérnünk az Fés <br/> lértékeket, ezekből $\sigma$ és <br/>  $\varepsilon$ számolható. A deformáció kezdete rugalmas, de ennek tartománya általában kicsi.

Hooke-törvény Nyújtás és összenyomás esetén a nyírás

$$\tau = G\gamma,$$

ahol ${\cal G}$ a nyírási modulusz, valamint

 $\sigma=E\varepsilon,$ 

ahol E a Young-modulusz. Fémekre általában igaz, hogy

$$E \approx 2, 6G$$

### 4.2. Rugalmas anizotrópia

E értéke függ attól, hogy a kúszási tengely milyen kristálytani irányban van. Pl. az alumínium csak kicsit anizotróp (azaz kis különbség van az 100 és 111 irányban mért Young-modulusz értékek között, a rézben azonban durván háromszor akkora az 111 az 100-hoz képest, tehát az nagyon anizotróp.)

A képlékeny alakváltozás akkor indul meg, amikor a külső feszültségek hatására valamely csúszósíkban a nyírófeszültség eléri a diszlokációcsúszáshoz szükséges kritikus értéket.

$$\tau_{\text{kills}\sigma} = \tau_{CRSS}$$
$$\tau = \frac{F \cdot \cos \beta}{A/\cos \alpha} = \frac{F}{A_0} \cos \alpha \cos \beta = \sigma m$$

37. ábra. Csúszási sík hengeres mintában

Itt *m*-mel a Schmid-faktort jelöltük. Minél nagyobb értéke van, annál könnyebben megy végbe a csúszás. Maga a faktor egy 0 és 90 fok között változó érték, melynek 45°-nál maximuma van.  $\tau$  értéke nagyon függ a csúszási irány és a csúszósík tengelyhez viszonyított irányától (azaz *m*-től). A csúszási irány + csúszósík együttest csúszási rend-szernek nevezzük. Vizsgáljuk meg FCC-ben hány csúszási rendszer van.



38. ábra. Thomson-tetraéder

Ennek vizsgálatára a Thompson-tetraédert szokták felrajzolni.

Ebből kiderül, hogy az FCC-ben 12 csúszási rendszer van. Vannak olyan helyzetek, mikor a kristályorientáció olyan, hogy először csak egyetlen csúszási rendszerben éri el a nyírófeszültség a kritikus csúsztató feszültséget (a többiben a kritikus még nagyobb érték, mint az éppen aktuális), így ebben az egy rendszerben megindul a csúszás. Ezt egyszeres csúszásnak nevezzük és ez tapasztalható a képlékeny alakváltozás kezdetén.

Ha több síkon indul megy egyszerre a diszlokációmozgás, akkor többszörös csúszásról beszélünk.

Egyszeres csúszásra orientált FCC egykristály húzási görbéje Ha a ható F erő párhuzamos az 123 síkkal, az első szakaszban egy csúszási rendszer működik. A minta elcsúszik egy felület mentén, mivel azonban a gép befogópofái a minta két végét fixen tarják, nem tud kialakulni a lépcsőződés, a csúszási síkok befordulnak a mintatengely irányába, miközben a Schmid-faktor csökken, tehát nagyobb külső feszültség kell a további deformációhoz. Ez vezet a keményedéshez az első szakaszban. Ugyanakkor egy másik rendszer Schmid-faktora nő, többszörös csúszás indul meg és eljutunk a második szakaszhoz. A különböző síkokon mozgó diszlokációk találkoznak és LC akadályokat képeznek, ez pedig nagymértékű keményedéshez vezet.



39. ábra. Húzási görbe

Alakítási keményedés  $\rightarrow \frac{d\sigma}{d\varepsilon} =$  konst. Ha a húzó<br/>erő párhuzamos az 100 síkkal, akkor rögtön a második szakasszal kezdő<br/>dik a görbe.

Nagy feültszégeknél a diszlokációk keresztcsúszással átmehetnek egy másik csúszósíkra és ott annihilálódhatnak (megsemmisülnek) egy másikkal való reakcióban, ez a görbe harmadik szakasza. Ennek következtében a  $\frac{d\sigma}{d\varepsilon}$  lecsökken, azaz kisebb alakítási keményedéshez jutunk. A diszlokációképződés fő mechanizmusa a Frank-Reads forrásban történő keletkezés. Nagy feszültségeknél a keletkezés és az annihiláció nagyjából egyensúlyba kerül, a  $\frac{d\sigma}{d\varepsilon}$  állandó (kicsi értékkel). Ez a görbe negyedik szakasza. Ezt követően  $\sigma$  telítésbe jut és elérkezünk az ötödik szakaszhoz<sup>11</sup>.

### 4.3. Polikristályos minta húzása

Az ilyen mintákban sok véletlenszerűen irányított, azonos kristályszerkezetű szemcse található. A szakítóvizsgálatnál mindig szabványos húzó próbatestet használunk.

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Ez általában összenyomással vagy csavarással érhető el, mert húzásnál az anyag többnyire a harmadik szakasznál eltörik.



40. ábra. Szabvány próbatest és a polikristályos anyagszerkezet sematikus ábrázolása. A jobb oldali ábrán a henger belsejében lévő szemcsék teljesen random irányítottságúak akartak lenni, csak nem sikerültek.

Nagy feszültségek hatására a diszlokációlépcsők kúsznak, vakanciák keletkeznek, melyek üregekké állhatnak össze, az effektív keresztmetszet pedig lecsökken, aminek hatására megnő a feszültség. Ahol ez megtörténik, ott lokálisan gyorsabb lesz a deformáció, a többi helyen pedig lelassul a dolog. A befűződésnél egyre kisebb lesz a keresztmetszet, ami miatt csökkenni fog a szükséges erő (állandó keresztfej sebesség mellett)és később törés alakul ki a befűződésnél.



41. ábra.

Beszéljünk meg néhány kifejezést.

• Folyáshatár:  $\sigma_y$ a képlékeny alakváltozás megindulásához szükséges valódi feszültség.

- Szakítószilárdság:  $R_m = \frac{F_m}{A_0}$ , a homogén deformáció végén mért mérnöki feszültség.
- Törőfeszültség:  $R_n = \frac{F_n}{A_n}$ , a töréskor érvényes valódi feszültség.
- Egyenes nyúlás:  $\frac{\Delta l_m}{l_0}$ .
- Teljes nyúlás:  $\frac{\Delta l_n}{l_0}$ .
- A szakítódiagram függ a deformáció sebességétől ( $\dot{\varepsilon}$ ) és a hőmérséklettől.

Egy eleve deformált anyag folyáshatára nagyobb, mert $\sigma_y$  függ az anyag előéletétől.



42. ábra. Alakítási keményedés

Ha $\varepsilon$ nő,  $\sigma_y$ is <br/>nő, mert a diszlokációk akadályozzák egymás mozgását. A diszlokációt előre mozgató erő

$$\tau bl = 2\tau \sin \Theta = 2\frac{Gb^2}{4\pi A} \ln \frac{R}{r_0} \sin \Theta$$

Az A éldiszlokációban  $1 - \nu$ , csavarban pedig A = 1. Hogy ne kelljen ennyit írni, az állandókat besűrítjük egy  $\alpha$  arányossági tényezőbe, amivel

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



43. ábra.

Tegyük fel, hogy a diszlokáció eloszlás egyenletes. Ilyenkor diszlokáció erdőhöz jutunk.



44. ábra. Diszlokáció erdő

$$\frac{1}{\rho}$$
az egy diszlokációra jutó terület  $(l^2),$ így  $l=\frac{a}{\sqrt{\rho}}.$ 

$$\tau = \alpha G b \sqrt{\rho}$$

Ha nincsen akadályozó diszlokáció, akkor is feszültség kell a mozgatáshoz ( $\tau_0$ ).

$$\tau = \tau_0 + \alpha G b \sqrt{\rho}$$

Polikristályos anyagban  $\sigma = M\tau$ , ahol M a Schmid-faktor reciprokának átlaga (durván 3 körüli szám).

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha M G b \sqrt{\rho}$$

Minél nagyobb a sűrűség, annál nagyobb a folyáshatár. Tehát deformáxióval lehet az anyag keménységét növelni.

Szemcsehatárok is akadályozhatják a diszlokáció mozgását.

Az ábrán szereplő d most a szemcseátmérőt jelöli. Az A szemcse olyan irányű, hogy ott indul meg először a csúszás egy síkon, a FR diszlokációkat termel, amik fennakadnak B határán. A feltorlódott diszlokációk feszültségtere többszörös csúszást indít meg B-ben és ekkor megindul a makroszkopikus plasztikus deformáció.



45. ábra. Szemcsék

Adott  $\tau$  esetén a feltorlódott diszlokációk száma:  $n \sim \tau d$ . Minél nagyobb a d, annál több diszlokáció fér el a forrás és a szemcsehatár között (a feltorlódott diszlokációk taszítják egymást). Az A szemcsében feltorlódott diszlokációktól származó feszültség a B-ben  $\sigma^* \sim n\tau$ , ahol n a darabszám,  $\tau$  pedig attól függ, a diszlokációk milyen messze vannak egymáshoz (és a határhoz). Mivel tudjuk, hogy  $n \sim \tau d$ , ezzel  $\sigma^* \sim \tau^2 d$ , tehát  $\tau \sim d^{-\frac{1}{2}}$  és a  $\sigma$  úgyszintén. Ezzel már eljutunk a Hall-Petch összefüggésig

$$\sigma = \sigma_0 + K d^{-\frac{1}{2}}$$

Ez tehát azt mondja, hogy minél kisebb a szemcseméret, annál nagyobb a folyáshatár.

# 5. Rétegződési hibák szorosilleszkedésű kristályszerkezetben (fcc, hcp)

### 5.1. 1 szorosilleszkedésű réteg

A rácspontok (atomok), mint merev gömbök szerepelnek a modellben. Lerakunk egy rétegnyit ezekből az atomokból, a következő réteg B vagy C pozícióba kerülhet, ha az atomok az A réteg üregeibe kerülnek (szorosilleszkedés 3D-ben). Kétféle rétegződés jöhet szóba, ha azt akarjuk, hogy a szerkezet transzlációs szimmetriával rendelkezzen, azaz kristály legyen.

- ABC/ABC/ABC ez az fcc rácsra jellemző
- AB/AB/AB hcp rácsra jellemző

### 5.2. Hibás rétegződés fcc-ben

### 5.2.1. Első eset

Ahogy azt az előzőkben megbeszéltük, az ABC/ABC/ABC típusú rétegződés lenne a hibátlan, vizsgáljunk megy egy hibást, mely ABC/ACA/BCA típusú. Ez a hiba úgy

keletkezik, hogy valamely {111} sík mentén a rácsot eltoljuk  $\frac{1}{6} < 11\overline{2} >$  vektorral. Ezzel a művelettel  $B \rightarrow C, C \rightarrow A, A \rightarrow B$  eltolást kapunk, azaz minden réteg eltolódik egy pozícióval. Ezen hiba úgy jelenik meg, mintha egy réteget (előbbi példánk szerint a B réteget) kivettük volna a rácsból. Az ilyen típusú hibát **I. típusú rétegződési hibának** (intrinsic stacking fault) nevezzük.

### 5.2.2. Második eset

A hiba úgy keletkezik, hogy egymás utáni két {111} sík mentén megörténnek az  $\frac{1}{6} < 11\overline{2} >$  vektorral történő eltolások. A hiba az {111} irányban is véges kiterjedésű (egy rétegvastagságnyi). Olyan, mintha egy réteget (a példánkban C) toltunk volna bele a rácsba. Ezt II. típusú rétegződési hibának (extrinsic stacking fault) nevezzük.

Hibátlan:	ABC/ABC/ABC
Hibás:	ABC/ACA/BCA
	ABC/ACB/CAB

### 5.2.3. Harmadik eset

Az inkoherens ikerhatár. A hiba típusát az alábbi kép alapján érthetjük meg.





## 6. Részdiszlokációk (parciális diszlokációk) fcc rácsban

Ha a rétegződési hiba nem határfelülettől határfelületig (pl. szemcsehatár) terjed, hanem a kristályban végződik, akkor azt egy részdiszlokáció (parciális diszlokáció) határolja. Vizsgáljunk meg néhány esetet.

### 6.1. Első eset

A felső kristályt toljuk el  $\frac{1}{6} < 11\overline{2} >$ -vel. A vágási felületen egy I. típusú rétegződési hiba keletkezik, aminek a határvonala egy parciális diszlokáció.

$$b_p=\frac{1}{6}<11\bar{2}>$$



47. ábra.

Az ilyet Shockley-féle parciális diszlokációnak nevezzük. A diszlokáció vonala és a Burgersvektor a rétegződési hiba síkjában van. A diszlokáció síkgörbe és nem térgörbe! A parciális diszlokáció mozgása is a rétegződési hiba síkjában történik, ezzel növelve vagy csökkentve a rétegződési hiba területét.

### 6.2. Második eset

Ha egy réteg egy részét távolítjuk el:





$$b_p = \frac{1}{3} < 111 >$$

Negatív Frank-féle részdiszlokáció. A  $b_p$  és l által kijelölt sík a csúszási sík. Mivel a rétegződési hiba nem tud a szomszédos síkra átugrani, ez egy rögzült (sessile) diszlokáció. Ez vakancia emisszióval vagy abszorpcióval mozoghat a rétegződési hiba síkjában.

### 6.3. Harmadik eset

Ha egy réteget egy darabig betolunk a rácsba.

$$b_p = \frac{1}{3} < 111 >$$

Ez második típusú rétegződési hiba, **pozitív Frank-féle részdiszlokáció.** Hasonló tulajdonságú, mint a negatív Frank diszlokáció. A Frank-diszlokációk nem elcsúszás miatt



49. ábra.

keletkeznek, hanem rácslyukak (vakanciák) vagy intersticiális atomok kondenzációja révén  $\rightarrow$  diszlokáció gyűrű. Ha az anyagot nagyenergiás ionokkal bombázzuk vagy magas hőmérsékletről hűtjük le  $\rightarrow$  csúszással nem távolíthatók el (rögzültté válnak)  $\rightarrow$  akadályt jelentenek más mozgó diszlikációk számára.

## 7. Kiterjedt diszlokációk (dissociated dislocations)

Az alábbiakban az fcc esetre szorítkozunk.



50. ábra.

$$\frac{1}{2}[\bar{1}10] = \frac{1}{6}[\bar{2}12] + \frac{1}{6}[\bar{1}21]$$

Mivel a két parciális Burgers vektora közötti szög hegyes (60°), ezért energetikailag megéri a teljes diszlokáció felbomlása két parciálisra. A két parciális között egy I. típusú rétegződési hiba alakul ki, amelynek létrehozásához energiabefektetés kell, amit a szétválás energianyeresége fedez.

$$|b_0| = \frac{a\sqrt{2}}{2} \to b = \frac{a}{\sqrt{2}}$$



51. ábra.

$$|b_p^A| = |b_p^B| = \frac{a\sqrt{6}}{6} = \frac{a}{\sqrt{6}}$$
$$\frac{b}{b_p} = \sqrt{3}$$

Számoljuk ki az "A" feszültségtere által "B" egységnyi hosszára ható taszítóerőt. Tudjuk, hogy  $b_p^B = (b_{px}^B; 0; b_{pz}^B)$ , valamint  $F = (\hat{\sigma}^A b_P^B) \times n^B$ , ahol  $n_B$  a B irányú egységvektor, értéke (0,0,1).

$$F_x = \sigma^A_{xy} b^B_{px} + \sigma^A_{yz} b^B_{pz}$$

Felhasználva a szigma tenzor megfelelő komponenseit, azaz

$$\sigma_{xy}^A = \frac{Gb_{px}^A}{2\pi(1-\nu)d}$$

 $\acute{\mathrm{es}}$ 

$$\sigma_{yz}^A = \frac{Gb_{pz}^A}{2\pi d}$$

Ezeket beírva a megfelelő helyre, valamint felhasználva, hogy

$$b_{px}^{A} = b_{p} \sin(\phi - 30^{\circ})$$
$$b_{py}^{A} = b_{p} \cos(\phi - 30^{\circ})$$
$$b_{px}^{B} = b_{p} \sin(\phi + 30^{\circ})$$
$$b_{py}^{B} = b_{p} \cos(\phi + 30^{\circ}),$$

és egyszerűsítések, trigonometriai azonosságok felhasználásával eljuthatunk a következőig

$$F_x \frac{Gb_p^2}{8\pi d(1-\nu) \cdot [2-\nu-2\nu\cos 2\phi]} = \frac{Gb_p^2(2-\nu)}{8\pi d(1-\nu)} \cdot \left[1 - \frac{2\nu}{2-\nu}\cos 2\phi\right]$$



52. ábra.

$$F_{\rm vonz \acute{o}} = \frac{\Delta E}{\Delta d} = \frac{\gamma \Delta d}{\Delta d} = \gamma$$

Itt $\gamma$ a rétegződési hiba<br/>energia (stacking fault energy), értéke

$$\gamma = \frac{Gb_p^2(2-\nu)}{8\pi d(1-\nu)} \left[ 1 - \frac{2\nu}{2-\nu} \cos\phi \right]$$

Ebből pedigdkifejezhető

$$d = \frac{Gb^2(2-\nu)}{24\pi\gamma(1-\nu)} \left[1 - \frac{2\nu}{2-\nu}\cos\phi\right]$$

### 7.1. Feszültség hatása a kiterjedt diszlokációkra

### 7.1.1. Ha az eredeti diszlokáció csavar volt

Tudjuk, hogy a diszlokációra ható erőt a következő formulából számíthatjuk ki

 $f = (\hat{\sigma}b) \times dl$ 

53. ábra.

### 7.1.2. Ha az eredeti diszlokáció él volt

A csavardiszlokáció kiterjedtsége miatt a csavardiszlokáció esetén is az (111) sík a csúszási sík és a keresztcsúszáshoz is termikus aktiváció kell.



54. ábra.

A két csúszósík metszésvonalánál a kiterjedt diszlokáció összeugrik termikus fluktuációk révén, majd a keresztcsúszás után az új csúszási síkban ismét szétválik. A diszlokáció szétválás az éldiszlokáció kúszást is nehezíti. A feszültségek növelhetik, vagy csökkenthetik *d*-t.

Összefoglalásul: ha éldiszlokációról beszélünk, akkor a diszlokációmozgás (és ez által a LC akadályok kikerülése) vakanciamechanizmussal történik a vakanciák diffúziója révén,

így tud az extra sík feljebb kerülni. Ez nem konzervatív folyamat, hiszen a befagyott vakanciaklaszterek miatt üregek képződnek, azaz megnövekszik a minta térfogata. A csavardiszlokációk esetében keresztcsúszás történik. Minél nagyobb két parciális diszlokáció közti távolság, annál nehezebb mozgatni a konstrukció. Ha van egy anyagunk, melyben kicsi a rétegződési hibaenergia, abban nagy lesz a réteghiba szalag szélessége.

### 7.2. Deformációs ikresedés





Induljunk ki abból, hogy egy szemcsén belül van egy diszlokáció feltorlódás. Itt a feszültségek hatására<sup>12</sup> egy diszlokáció szétválik egy csúszásképes Shockley-parciálisra és egy rögzült Frank-diszlokációra. Ha a feltorlódásban egymás melletti csúszósíkokban ({111}) megtörténik a szétválás és a Shockley parciálisok elcsúsznak, akkor deformációs ikresedés történik (két ikerhatár jön létre). Az ikerlamella szemcsehatártól határig tart (kivéve, ha a pile up a szemcsén belül van) és a világos látóterű TEM képen sötét sávként jelenik meg.

### 7.3. A szemcseméret hatása a parciális diszlokációk távolságára

Szorítkozzunk FCC esetre. Minél kisebb a szemcse, annál inkább nincs benne pile up. Legyen a vizsgált kicsi szemcsénkben egy FR forrás. Ha kicsi a krisztalit, nem fér el benne sok diszlokáció, hiszen azok taszítják egymást. A kibocsájtott diszlokációk a szemcsehatárokon megakadnak. Ha a szemcse túl kicsi, addig nem emittálható új diszlokáció,

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup>Tehát nem az energianyereség miatt.

amíg az előző ki nem lép a szemcsehatáron. A kilépéssel lépcső képződik, ezt a szomszéd szemcsének is engednie kell.





Az XC és DY határokon a két parciálist az egész diszlokációt mozgató nyírófeszültség "egymáshoz nyomja", így azok teljes diszlokációknak foghatók fel. Ha ezek a szakaszok nem lennének, akkor EF és CD a korábban kiszámolt egyensúlyi távolságra lenne egymástól (d).

$$\gamma D = \frac{Gb^2(2-3\nu)}{24\pi(1-\nu)d} D \to d = \frac{Gb^2(2-3\nu)}{24\pi(1-\nu)}$$

Ha az EF szakasz rögzítve van, akkor a CD szakasz C'D' helyzetben lenne található. Mivel C'X és D'Y szakaszok léteznek, ezért csökken az egész diszlokáció energiája, ha a C'C és D'D szakaszokon teljes diszlokáció helyett parciális van, azaz a  $b_2$  diszlokáció C'D' helyett CD-ben van. Ekkor a parciálisok távolsága  $d_{eff}$  lesz.

A vonzó  $(\gamma D)$  és taszító erők egyensúlya

$$\gamma D = \frac{Gb^2(2-3\nu)}{24\pi d_{eff}(1-\nu)}D + 2(E_f - E_p)$$

Az utolsó tag a teljes diszlokáció parciálisokra történő cseréje miatti energianyereség egységnyi diszlokációhosszra vetítve ( $E_f$  a full szóból - a teljes éldiszlokáció egységnyi hosszra vett energiája,  $E_p$  pedig a parciálisból ered -  $b_1$  Burgers vektorral a CX határ mentén).

$$|b_1| = b_p$$

$$E_{p} = E_{p \text{ csavarkomp}} + E_{p \text{ élkomp}} = \frac{Gb_{p \frac{1}{4}}^{2}}{4\pi} \ln \frac{D}{b} + \frac{Gb_{p \frac{3}{4}}^{2}}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{D}{b}$$

A számolásokat elvégezve eljutunk a következőig

$$d = \frac{Ga^2(2-3\nu)}{45\pi\gamma(1-\nu)}$$

ebből pedig

$$\gamma = \frac{Ga^2(2 - 3\nu)}{45\pi d(1 - \nu)}$$

Itt a a rácsparaméter. Írjuk fel tehát a  $d_{eff}$  értéket.

$$d_{\text{eff}} = \frac{\gamma}{\gamma - \frac{Ga^2(8+\nu)}{48\pi(1-\nu)D}\ln\frac{D\sqrt{2}}{a}}d$$

Ne feledjük, hogy  $E \sim b^2$  és  $b_p^2 \sim \frac{1}{3}b^2$ . Ugyanakkor a rétegződési hibának is van energiája, ezzel is számolni kell. Ez a két járulék harcol egymással és az egyensúlyuk fogja eldönteni az új elrendezést. *FCC-ben az ikerhatár energia kb. fele a rétegződési hiba energiájának.* 





Van egy kritikus szemcseméret, ami alatt az anyagokban már csak parciálisok mozognak.

## 8. Ikresedés hexagonális kristályokban

Ahogy a múltkor megbeszéltük, a HCP rétegződés AB/AB/AB... típusú, szorosan pakolt. Vizsgáljuk meg hogyan írhatnánk le az ikresedést az ilyen kristályrendszerekben! Az ikresedés nyírójellegű folyamat, a parciális diszlokációk csúszásával magyarázható a párhuzamos kristálysíkokban.



Figure 2.7: Crystallographic elements of twinning, cf. Christian & Mahajan (1995)

 $\kappa_1$ : the invariant plane of shear

 $\eta_1$ : shear direction

 $\kappa_2$ : remains undistorted during twinning (conjugate plane)

s: plane of shear which contains the shear vector  $\boldsymbol{\eta}_1$  and it is normal to both invariant and conjugate planes

 $\eta_2$ : conjugate shear direction (intersection between s and  $\kappa_2$ )

 $\lambda_{Twin}\!\!:$  the amplitude of the twinning shear strain which depends on the crystal axial ratio  $r\!=\!c/a$ 

### 58. ábra.

A  $\lambda_{\text{Twin}}$  a szükséges nyírófeszültség, melyre  $\gamma = \frac{x}{l} = \frac{\lambda l}{l} = \lambda$ . A képen szereplő  $\kappa_1$ a nyírás szempontjából invariáns sík. Az eredeti kristályrészeket nevezzük szülőnek, ami elcsúszott, azt pedig ikresedett tartománynak. A kappa tehát ugyanaz lesz a szülőben és az ikresedett részben is. Míg az FCC kristályokban mindig a szorosan pakolt az invariáns, a HCP-ben soha nem a szorosan pakolt az.

Az indexelésről HCP-ben. A HCP rendszerben 3 helyett 4 Miller indexet használunk a kristálytani síkok jellemzésére. Ezeknek szerkezete (h,k,-(h+k),l). Látható, hogy sorrendben a harmadik index az első kettőből kiszámítható, ezért sokszor ki sem írják őt, csak egy ponttal jelölik a helyét. Tehát egy  $\{01\overline{1}1\}$  jelölhető  $\{01.1\}$ -ként is. A kettő ugyanazt jelenti. Van azonban különbség! Mint az FCC esetben megbeszéltük, a Miller indexek permutációjából ekvivalens kristálytani síkokat kapunk és a permutációval **az** összes síkot megkapjuk. Ha a 4 indexes módszert használjuk a HCP esetben, ez továbbra is igaz. Ha a 3 indexeset választjuk, akkor az első két index permutációval szintén ekvivalens síkokat kapunk, ám nem az összeset.

Rajzoljuk fel az ikresedésnél fontos szerepet játszó kristálytani irányokat HCP-ben.



Figure 2.11: Geometrical illustration of frequently reported crystallographic slip planes and directions in a single crystal magnesium

### 59. ábra.

Ebben a kristályrácstípusban négyféle ikresedés játszódhat le, de mi csak a két legfontosabbal fogunk foglalkozni.



### 60. ábra.

A táguló és az összenyomódó ikresedésnél tehát rendre megnő, illetve lecsökken ac vektor.





A magnézium táguló ikresedése esetén a kristálytani c vektor az ikresedés végére 86°-os szöggel elfordul. Az ábrán jelölve van csúszás iránya és az invariáns sík.





Összenyomódási ikresedésnél a szülő és az ikerkristály közötti szög 56° lesz. A következőkben vizsgáljuk meg a lehetséges elcsúszási helyzeteket (?). Ezek majd attól függenek, hogy a feszültség iránya hogyan viszonyul a c vektor irányához.





Az ábra alján a lehetséges irányok láthatók, hiszen minden kristálytani irányhoz hat lehetséges mozgás tartozik (ez a permutációkból és az ekvivalens síkokból ered).





A 64. ábra jobb oldalán látható gömbök azt jelképezik, hogy ahol a Schmid faktor a feszültséghez képest a zöld tartományban lesz, ott létrejön az ikresedés. A piros tartományokban nem. Látható, hogy összenyomás esetén sokkal nagyobb az ikresedés esélye. Ezek a kijelentések csak a magnézium esetében igazak.



65. ábra.

A szülőben c vektor irányú b vektorral rendelkező diszlokáció esik szét parciálisokra és ez okozza az ikresedést. Az ikresedett kristályban is megmarad egy diszlokáció, ami az ábrán bejelölt irányú.

## 8.1. Méréstechnika

Legkézenfekvőbb módszer a neutronszórás. Az ikresedett rész miatt a relatív intenzitások változni fognak, hiszen új síkok jelennek meg, régiek pedig eltűnnek. A méréshez két detektort használnak, hogy egyértelmű legyen a jel, ezzel a módszerrel pedig megmérhető az ikresedett rész térfogata is.



66. ábra.

A diszlokációk, repedések mozgása közben akusztikus hullámok terjednek az anyagban. Ezt megfigyelve is lehet következtetni az ikresedésre. Húzás esetében a teljes deformációnál történik az ikresedés. Összenyomásnál csak a deformáció elején, hiszen a későbbiekben már a szalag szélesedése történik.





Végezetül néhány szót a szemcseméret hatásáról: ha a szemcseméret kicsi, nincs ikresedés.(...)

## 9. Szilárdoldatos keményedés

Azt vizsgáljuk, milyen lehet a szennyezők hatása a diszlokációk mozgására. Milyen kölcsönhatások léphetnek fel egy diszlokáció és egy ötvöző atom között?

### 9.1. Mérethatás

Az alapanyag atomjánál nagyobb atomok a diszlokáció dilatációs zónájában, a kisebbek pedig a komprimáltban helyezkednek el, így csökkentve a kristály deformációs energiáját  $\rightarrow$  Cottrel-felhők.

### 9.1.1. Elsőrendű mérethatás

Az oldott atom és a diszlokáció körüli rugalmas elmozdulástér eredménye. Az alapanyagtól eltérő méretű oldott atomot gömbiszmmetrikus dilatációs centrumnak nevezzük. 1 atom helyettesítésével  $\Delta V$ -vel változik. Ez a gömbszimmetrikus dilatációs centrum csak hidrosztatikus komponenssel hat kölcsön. Egy idegen atomra

$$E_k = \Delta V \sigma \frac{1-\nu}{1+\nu} 3,$$

ahol $\sigma$ a hidrosztatikus feszültség, értéke

$$\sigma \frac{Gb}{3\pi r} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sin \alpha$$

Ezzel pedig az

$$E_k = \frac{Gb}{\pi} \frac{\sin \alpha}{r} \Delta V = \frac{Gb}{\pi} \Delta V \frac{z}{z^2 + y^2}$$

A csúszási irányba ható erő (x irányú)

$$F_{max} = \frac{Gb}{\pi} \frac{\sin \alpha}{r} \Delta V = \frac{Gb}{\pi} \Delta V \frac{2 \cdot z}{z^2 + y^2}$$

A szóban forgó z, ami a szomszédos (111) sík távolsága,  $z = \frac{a}{\sqrt{3}}$ , amivel pedig

$$F_{max} = 0.32 \cdot \frac{G\Delta V}{b}$$

Ezek a képletek FCC anyagra érvényesek abban az esetben, ha az ötvöző a szomszédos (111) síkon van. A következő lépésben számoljuk ki milyen térfogatváltozást okoztunk az anyagban.

$$\Delta V = 2\Omega\delta.$$

ahol $\delta = \frac{d \ln a}{d \ln c}$ és a hármas azért kell a képletbe, mert a deltában szereplő a rácsparaméter egy irányban értendő, azonban a térfogat tér jellegű mennyiség,  $\Omega$  pedig az alapanyagbeli atomtérfogat  $\Omega \approx b^3$ . Ezzel a maximális csúsztatóerő

$$F_{max} \approx Gb^2 \delta$$

Mivel a csavardiszlokációk esetében  $\sigma = 0$ , rájuk nincs elsőrendű mérethatás.

### 9.1.2. Másodrendű mérethatás

Ha a rugalmas deformáció és a feszültségek közötti összefüggéseket a lineárisnál magasabb tagokkal írjuk le. Ez már csavardiszlokációra is érvényes, azaz a csavardiszlokáció kölcsön tud hatni az oldott atommal. A kölcsönhatási energia nagysága összemérhető az elsőrendűnél kapottal, de csak a díszlokáció közelében tapasztalható ez az erőhatás, mert itt már az  $E \sim \frac{1}{r^2}$ , míg az elsőrendűnél  $\sim \frac{1}{r}$ .

### 9.2. Moduluszhatás

Az idegen atom környezetében megváltoznak a rugalmas állandók, így a díszlokáció közelében megváltozik a deformációs térben tárolt rugalmas energia.

$$E_k = E_{SV} \Omega \eta,$$

ahol  $E_{SV}$  az r pontban (tehát az idegen atom helyén) a térfogategységre eső rugalmas energia, amely a díszlokációtól származik,  $\eta = \frac{d \ln G}{d \ln c}$ . Ha behelyettesítjük a megfelelő értékeket, a kölcsönhatási energia értékére

$$E_k = \frac{Gb^2\Omega\eta}{8\pi^2(1-\nu)^2r^2}$$

értéket kapunk éldiszlokációra. Látható tehát az energia  $\frac{1}{r^2}$ -es függése.

### 9.3. Az oldott idegen atomok folyáshatár növelő hatása

Az eddigiekben egy oldott atom kölcsönhatásait vizsgáltuk egy diszlokációval. Egy átlagos anyag azonban nem ilyen. Vizsgáljuk meg hogyan közelíthetnénk a valós viselkedéseket. KÉP

Az ábrán látható elrendezésben y az egy oldott atomra jutó diszlokáció hossza. Erre a szakaszra a külső feszültség  $\tau by$  erővel hat. A leszakadáshoz szükséges erő tehát  $F_{max} = \tau by$ . Tegyük fel, hogy a  $\tau$  feszültség annyira ki tudja görbíteni az  $\overline{AC}$  diszlokációszakaszt, hogy az elérhessen a  $\overline{B}$  idegen atomig (az ábrán szereplő atomok mind idegen atomok!), amely rögzíti azt, tehát újabb stabil helyzetbe kerülhet. Ha az idegen atomok potenciáltere sokkal hamarabb lecseng, mint x érték (azaz a szilárdoldat híg), akkor a Batom elhagyása után a  $\tau$  feszültség már csak az  $\overline{AC}$  szakasz kihajlását eredményezi. Ha T a vonal menti feszültség, akkor

$$T = \frac{1}{2}Gb^2.$$

Az ábrából

$$\tau b2y = 2T\sin\Theta,$$

ahol $\sin\Theta=\frac{y}{R}.$ Néhány<br/>(jogos) közelítés figyelembevételével és elhanyagolásokkal a csúsztatóf<br/>eszültségre kapott összefüggés

$$\tau = \frac{F_{max}^{3/2}}{(2T)^{1/2}b^2}c^{1/2} = G\delta^{3/2}c^{1/2}$$

Ha nem teljesül, hogy a szilárdoldat híg, akkor egyszerre több idegen atomról szakad le a mozgó diszlokáció. Ilyenkor a koncentrációfüggés más,

$$\tau \sim c^{2/3}$$
.

A hőmérséklet növekedésével termikus aktiváció segíti az idegen atomoktól való leszakadást, ezért  $\tau$  csökken és c kitevője nő.

KÉP

Minél nagyobb az alapanyag atomjának és az idegen atom sugarának különbsége, a szilárdító hatás annál nagyobb.

$$F_{max} \sim \frac{\Delta r}{r}$$
$$\tau \sim \left(\frac{\Delta r}{r}\right)^{3/2}$$

Említsük meg, hogy az oldott atomok csak egy makroszkopikusan mérhető folyásfeszültség növekedést adnak az egyébként is meglévőhöz képest!

## 10. Megújulás és újrakristályosodás

A deformált anyagok nagy mennyiségű kristályhibát tartalmaznak, melyek növelik a szabadenergiát. Ezek a hibák lehetnek

- Az egyensúlyinál nagyobb számú vakanciák
- Diszlokációk
- Szemcsehatárok

Ahhoz, hogy elérhesse a minimális szabadenergiájú állapotot, a rendszernek csökkenteni kell a hibák számát, tehát aktiválódnak a hibaeltüntető folyamatok. Alacsony hőmérsékleten a nem egyensúlyi hibák eltűnésének valószínűsége kicsi ~  $e^{-\frac{Q}{kT}}$ , ahol Q az (minden folyamatra más) aktiválási energia. Hőkezeléskor azonban ez a valószínűség folyamatosan nő a hőmérséklet növelésével és sorban lezajlanak előbb a kisebb, majd a nagyobb aktiválási energiát igénylő folyamatok.

A hőmérséklet növelésével tehát sorban

- Ponthibák (intersticiális, vakancia) eltűnése nyelőkön (szemcsehatár, diszlokáció). Ne felejtsük el, hogy szemcsehatárokon a diffúzió gyorsabb, mint a szemcsék belsejében, ezért a szennyező atomok ott gyorsabban kidiffundálnak az anyagból.
- Ellenkező Burgers vektorú diszlokációk annihilációja. Ha nem azonos csúszósíkban voltak, vakanciadiffúzió révén át tudnak ugrani egymás csúszósíkjába és így annihilálni egymást.
- Diszlokációk átrendeződése alacsonyabb energiájú konfigurációkba (poligonalizálódás) - az előző pontban megismert annihilációk után megmarad néhány azonos előjelű diszlokáció. Ez a pont rájuk vonatkozik.
- Új, hibamentes szemcsék keletkezése és növekedése (primer újrakristályosodás)
- Nagy szemcsék keletkezése (szemcsehatár csökkenés) = szekunder újrakristályosodás

Az ellentétes előjelűek megszűnnek, maradék poligonalizálódik szituációt nevezzük megújulásnak. A diszlokációk közti adott irányítottságú területek rácshibáktól mentesek lesznek.

### 10.1. Megújulás és újrakristályosodás eredménye



68. ábra. A folyáshatár- és elektromos ellenállás csökkenése a hőmérséklet növekedésével.

A folyáshatár változás a kisebb diszlokációsűrűség (Taylor-formula) és a kevesebb szemcsehatár (Hall-Petch formula) miatt jelentkezik. Az elektromos ellenállás mérésével megállapíthatjuk az átalakulások fajtáit a hőmérséklet függvényében. A csökkenés annak köszönhető, hogy az elektronokat szóró rácshibák koncentrációja csökken.

### 10.2. Megújulás

Az  $R_0$  a hibamentes kristály ellenállása,  $R_0 + A$  pedig a hibamentes kristály és a hibák rendszerének ellenállása.

$$t = 0: \frac{(R_0 + A) - R}{A} = 0$$

 $t=\infty$ esetében pedig értéke 1, ezért

$$\frac{(R_0 - A) - R}{A} = 1 - e^{-Bt}$$
$$R = R_0 + Ae^{-Bt}$$



69. ábra.

Ha a megújulás egyetlen rácshibatípus eltűnésének eredménye, akkor

$$B \sim e^{-\frac{Q}{kT}}$$

Ha ügyesek vagyunk, jól megválasztott T esetén a Q csak 1 folyamat aktiválási energiája.



70. ábra. Az aktiválási energia kimérése

## 10.3. Újrakristályosodás

Ahogy az ábrán látható, fellép egy inkubációs idő, amit könnyen megértünk, ha az egyszerű kristályosodásra gondolunk. Először is meg kell várni a poligonizációt, másrészt a túl kicsi csírák visszaolvadnak, hogy megmaradhassanak, meg kell ütniük egy kritikus csíraméretet. Ahogy a hőmérséklet nő, kevesebb idő kell az újrakristályosodáshoz. A megújulás rögtön elkezdődik és a folyamat elején a legnagyobb az értéke.



71. ábra.

Az újrakristályosodott térfogatra felírható az Avrami-egyenlet:

$$V = 1 - e^{-B(t-\tau)^n},$$

ahol  $B = B_0 e^{-\frac{Q}{kT}}$  és  $n \approx 2 - 3$ .

**Definíció:** az újrakristályosodási hőmérséklet az a hőmérséklet, melyen az anyag egy óra alatt teljesen újrakristályosodik (ez általában az olvadáspont fele fémekre). Ennél kisebb hőmérsékleten is van újrakristályosodás, csak hosszabb ideig tart.

### 10.4. Primer újrakristályosodás:

A deformált anyaghoz képest hibamentes tartományok (csírák) alakulnak ki (szabadenergiájuk kicsi), amelyeket nagyszögű ( $\Theta > 15^{\circ}$ ) szemcsehatár választ el a környezetétől, majd ez a határ elmozdul a deformált tartományok felé (ebből indul ki a csíranövekedés).

A nukleáció a megújulás utolsó szakaszának felel meg, amikor a diszlokációk rendeződésével diszlokációmentes tartományok alakulnak ki. A növekedés hajtóereje a szabadenergia csökkenése.



72. ábra.

A határ elmozdulásával a hibamentes kristály növekszik<sup>13</sup>, az egész anyag szabadenergiája csökken. Egységnyi hosszú diszlokációszakasz energiája  $\approx Gb^2$ . Az egységnyi térfogatban lévő diszlokációk hossza:  $\rho$  (diszlokációsűrűség). A határ elmozdulásával a szabadenergianyereség térfogati egységben

$$\Delta F_1 \approx G b^2 \rho$$

A szemcsehatár energia csökkenése

$$\Delta F_2 = \frac{GD^2\gamma}{2D^3} = \frac{3\gamma}{D}$$





A képletben szereplő gamma a határfelületi energia. Az összes nyereség térfogategységenként

$$\Delta F = \Delta F_1 + \Delta F_2 = Gb^2\rho + \frac{3\gamma}{D}$$

A folyamat végén egyenletes szemcseszerkezetű, hibamentes krisztalitok keletkeznek.

### 10.5. Szekunder újrakristályosodás

Hajtóereje a szemcsehatárenergia csökkentése, ezért a folyamat végén a szemcseméret növekszik. Fellépnek azonban a megújulást és újrakristályosodást akadályozó jelenségek is.

- Ötvöző atomok (szennyezők)
- Második fázisú részecskék (zárványok).

Ezek ketten gátolják a diszlokációk és szemcsehatárok mozgását. Ezzel pedig a févél végéhez érkeztünk.

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>A határ növekedése ugyan növeli az anyag belső energiáját, de ezt a térfogati nyereségek (melyek a hibamentességnek köszönhetők) bőven fedezik. A határ energiája sok mindentől függ (FCC, BCC)