

A szilárdtestek kristályszerkezete. Kristályhibák



GIMNÁZIUMI TANKÖNYV

Juhász András—Kovács István

A szilárdtestek kristályszerkezete. Kristályhibák

**fakultatív tankönyv a gimnáziumok
IV. osztálya számára**

**A Művelődési Minisztérium megbízásából
kiadja a Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1985**

A 27/1965. Korm. sz. rendelet alapján a művelődési miniszter 21 661/1984. IX. sz. alatt jóváhagyta, bevezetését és alkalmazását az 1984/85. tanévtől engedélyezte.

Lektorok:

DR. ZSOLDOS LEHEL
FLÓRIK GYÖRGY

ISBN 963 10 6526 X

Kiadja a Műszaki Könyvkiadó
Felelős kiadó: Fischer Herbert igazgató
Felelős szerkesztő: Juhász Ágnes

VÁCI ÁFÉSZ SOKSZOROSÍTÓ ÜZEME 8556

Műszaki vezető: Kőrös Károly
Műszaki szerkesztő: Müller Károlyné

A könyv formátuma: B5 — Terjedelme: 7,5 (A5) ív — Ábrák száma: 70
Példányszám: 13 000 — Papír minősége: 80 g ofszet — Azonossági száma: 28 974/II-6
Kézirat lezárva: 1984. okt. 18.
Készült az MSZ 5601 és 5602 szerint

TARTALOM

1. Bevezetés	5
2. Az ideális kristály szerkezete	6
2.1. A kristályos anyag szabályos belső szerkezetére utaló jelenségek	6
2.2. A rácsszerkezet közvetlen kísérleti igazolása	9
2.3. A röntgendiffrakciós szerkezetkutatás alapjai	10
2.4. A térionmikroszkóp	13
2.5. A kristály geometriai szerkezete. A pontrács	15
2.6. A kristályszerkezetek jellemzése a kémiai kötés típusa alapján	18
2.6.1. Atomrácscok	19
2.6.2. Ionrácscok	20
2.6.3. A fémek kristályszerkezete	24
2.6.4. Molekularácscok	30
3. Eltérések az ideális kristályszerkezettől – kristályhibák	35
3.1. Ponthibák	36
3.1.1. Ponthibák keletkezése	36
3.1.2. Ponthibák hatása a fémek tulajdonságaira	38
3.1.3. Ponthibák ionkristályokban	39
3.1.4. Ponthibák atomrácscban	40
3.1.5. Ponthibák termodinamikai stabilitása	40
3.1.6. Diffúzió szilárdtestekben	43
3.1.7. Sugárzási károsodás	44
3.1.8. A ponthibák hatásának kísérleti vizsgálata	45
3.2. Szilárdtestek képlékeny alakváltozása. Diszlokációk	46

3.2.1. Rugalmas alakváltozás	47
3.2.2. Képlékeny alakváltozás	50
3.2.3. A tökéletes kristály képlékeny alakváltozása	51
3.2.4. A diszlokációk kvantitatív tulajdonságai	58
3.2.5. A képlékeny alakváltozás diszlokációs mechanizmusa és az alakítási keményedés	60
3.2.6. Diszlokációk hatása a kristály termikus egyensúlyára	62
3.3. Felületi hibák a kristályban. Szemcsehatárok	63
4. Függelék	65
4.1. Kristálynövesztés vizes oldatokból	65
4.1.1. Kristálymagok előállítása	66
4.1.2. Kristálymagok továbbnövesztése	66
4.2. Kristálynövekedés vizsgálata mikroszkóppal . . .	68
4.3. Kísérletek kristályokkal – a fizikai tulajdonságok anizotrópiája	72
4.3.1. Kísérletek csillámkristállyal	72
4.3.2. Az optikai anizotrópia szemléltetése mészpátkristállyal	74
4.3.3. Piezoelektromosság bemutatása sajátnövesztésű Seignette-só kristályokkal . . .	76
4.4. Vas allotróp átkristályosodásának bemutatása . .	78
4.5. Két-dimenziós kristálymodell	79

1. BEVEZETÉS

A környezetünkben található szilárd anyagok döntő többsége kristályos szerkezetű. Kristályos szerkezetről akkor beszélünk, ha az anyagot felépítő atomok (ionok, molekulák) a tér mindhárom irányában szigorú rendben ismétlődve kapcsolódnak egymáshoz. Egy évszázaddal ezelőtt csak olyan anyagokból felépülő testeket tekintettek kristályos szerkezetűnek, amelyek sík lapokkal határolt szabályos formát mutattak. Az elmúlt idők természettudósai a szabályos geometriai külső mögött már megsejtették a szabályos belső szerkezetet. Megfigyeléseikből levont következtetések máig helytállóak, gondolatmenetük sok tanulságot tartalmaz. A következőkben mi is először azokat az egyszerű kísérleti tapasztalatokat foglaljuk össze, amelyek már következtetni engednek a kristályok szabályos belső rendjére.

A kristályok rácsszerkezetének első közvetlen kísérleti bizonyítékát 1912-ben Max von Laue röntgendiffrakciós felvételei szolgáltatták. A diffrakciós kísérleti technika azóta a kristályszerkezetek vizsgálatának legfontosabb módszere.

Ebben a modulban a diffrakciós kísérleti módszer lényegének összefoglalása után az ideális kristályrács geometriai tulajdonságaival foglalkozunk. Az ideális kristály szerkezetének, és ezen keresztül a kristályos anyagok fizikai tulajdonságainak is, meghatározója a részecskék közti kölcsönhatás. Ezt kívánjuk hangsúlyozni, amikor a kristályokat a kémiai kötés típusa alapján csoportosítjuk és vizsgáljuk az egyes csoportok jellemző tulajdonságait.

Végül megvizsgáljuk azokat a rendellenességeket, amelyek a kristályrácsokban felléphetnek. Az ilyen, ún. kristályhibák jelentősen befolyásolhatják a kristály fizikai tulajdonságait.

2. AZ IDEÁLIS KRISTÁLY SZERKEZETE

2.1. A kristályos anyag szabályos belső szerkezetére utaló jelenségek

A Függelékben (4.1. szakasz) található utmutatás szerint növekszünk szabályos alakú kristályokat! Vizsgáljuk meg a kristályforma szimmetriatulajdonságait! Figyeljük meg mikroszkóp segítségével a kristályok növekedésének folyamatát! A kristálynövekedés mikroszkópos megfigyeléséhez szintén a Függelékben (4.2. szakasz) adunk segítséget.

A kristályok szabályos geometriai formájának vizsgálata, a kristályok növekedésének megfigyelése alapján a következőket állapíthatjuk meg:

– Egyazon anyagból, ugyanazon kísérleti körülmények között képződő kristályok alakja hasonló.

– Ideális esetben a kristályok jellemző szimmetriatulajdonságai azonosak. Gyakran előfordul azonban, hogy a kristály egyes részein a növekedést valami megzavarja, ilyenkor egyes kristálylapok mérete megnő, míg másoké lecsökken. A lapok méretarány-változása a kristály alakját külsőleg megváltoztatja, de a megfelelő kristálylapok által bezárt szög ilyen esetekben is az ideálisnak megfelelő. Ezt nevezik a „lapszögek állandósága” törvényének.

– A kristályok jellegzetes alakját az anyagi minőség mellett a kristálynövekedés körülményei is meghatározzák. Egyes esetekben a kristály alakjának módosulása az anyag belső rendezettségének a megváltozásából ered (allotrópia), gyakran azonban a kristály belső szerkezete változatlan és csak a külső alakjára jellemző szimmetriatulajdonságok változnak meg.

A kristályok szabályos belső rendezettségére következtethetünk egyszerű kísérletek, mérések tapasztalatai alapján is. A kristályok fizikai tulajdonságai a különböző irányokban lényeg-

gesen eltérőek lehetnek. (A különböző irányokat itt a kristály szabályos alakjához viszonyítva kell értenünk.) A kristályoknak ezt a sajátosságát anizotrópiának nevezzük.

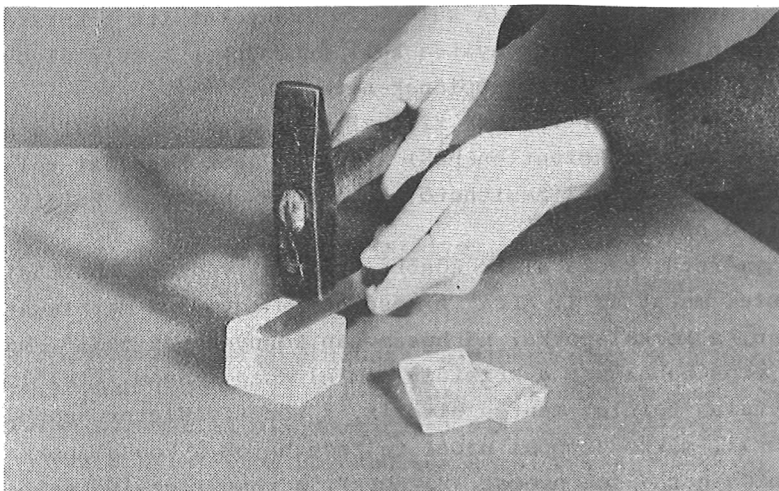
Az irány szerint változó fizikai tulajdonságok közül a belső szerkezetre legközvetlenebbül egyes anyagok hasadási tulajdonságai utalnak. Jól hasítható pl. a kősó (NaCl), a kalcit (CaCO_3), a csillám stb.

Nagyméretű, kocka alakú kősókristállyal végzett hasítási kísérletet mutat az 1. ábra. A kősó három egymásra merőleges irányban, a kockalapokkal párhuzamosan könnyen hasítható. Más irányu erős behatásra a kristály nem elhasad, hanem látszólag szabálytalan felület mentén eltörik. A töretfelületen azonban nagyítóval, mikroszkóppal újból felfedezhetők a kockalapokkal párhuzamos hasadások nyomai (2. ábra). A kősókristály hasításokkal apró kockákra darabolható. Érdeemes megemlíteni, hogy speciális körülmények között a kősó kocka helyett oktaéder formában kristályosodik, hasításkor azonban az ilyen test is a kockalapok mentén hasad.

A kristályok hasadási tulajdonságait megfigyelve René Just Haüy francia tudós már a XVIII. században következtetett a kristályok rácsszerkezetére. Haüy gondolatkísérlete a következő volt: Ha a kristályt hasítással egyre kisebb és kisebb, de mindig hasonló alakú darabra osztjuk, akkor előbb-utóbb el kell érkeznünk egy olyan „legkisebb” darabhoz, amely már nem osztható tovább anélkül, hogy az anyag kémiai tulajdonságai meg ne változnának. A kristály tehát végső soron ezeknek az apró „építő-kockáknak” szabályos egymás mellé illeszkedésével alakul ki.

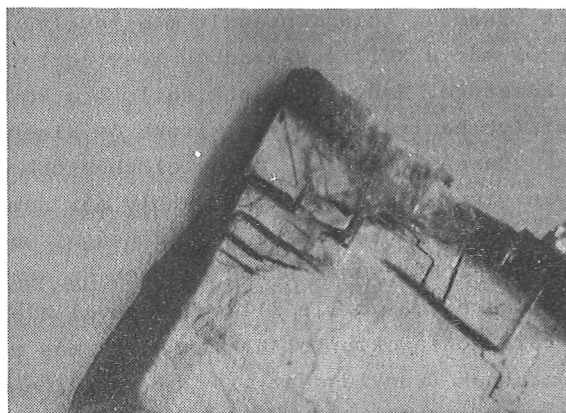
A hasadási tulajdonságokon túl a kristályok más mechanikai sajátosságai is mutatnak irányfüggést, így pl. a különböző irányokban mások a rugalmas állandók (pl. a rugalmassági modulus), más és más nagyságu feszültség kell a képlékeny alakváltozás megindításához a különböző irányokban stb. Igen érdekes egyes ionvegyület-kristályoknak az a sajátossága, hogy rugalmas deformáció a kristályt elektromosan polarizálja, azaz bizonyos kristálylapok között elektromos feszültség lép fel. Ezt a jelenséget nevezik piezoelektromosságnak.

A kristályszerkezetek anizotrópiája az anyag optikai tulajdonságaiban is jelentkezik. Az átlátszó kristályok legtöbbje



1. ábra

A kősókrisztály (NaCl) a kockalapok mentén könnyedén hasítható. A hasadási felületek simák, fényesek



2. ábra

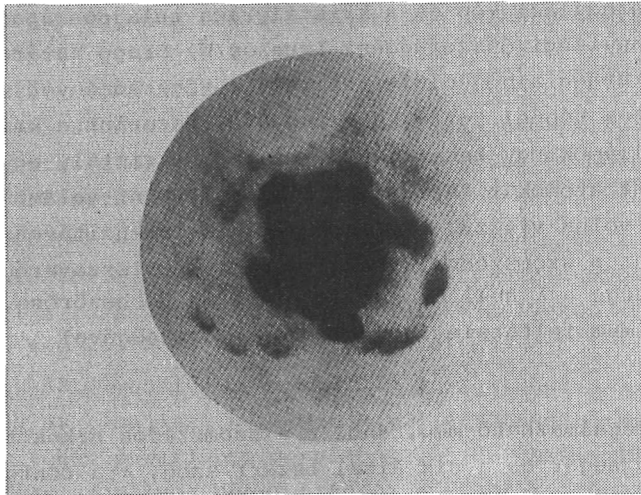
Az eltört NaCl felületén nagyítóval megfigyelhetők a derékszögű hasadási lépcsők

optikailag kettősen törő, azaz egy természetes fénynyaláb a kristályban két síkban polarizált, eltérő sebességű nyalábra bomlik. A fény terjedési sebessége a kristály különböző irányai-
ban más és más.

A kristályok irányfüggő fizikai tulajdonságait szemléltető néhány egyszerű kísérletet (a piezoelektricitás és kristályoptika köréből) a Függelékben (4.3. szakasz) ismertetünk.

2.2. A rácsszerkezet közvetlen kísérleti igazolása

A kristályok szabályos belső szerkezetét már a XVIII. század végén feltételezték, a rácsszerkezet létezésének egyértelmű kísérleti igazolását azonban csak a XX. század elején adta meg M. von Laue, W. Friedrich és P. Knipping. Kísérletük méltán sorolható a fizikatörténet legsikeresebb kísérletei közé. Max von Laue elméleti fizikusként számításokat végzett a feltételezett kristályszerkezet és az elektromágneses hullámok kölcsönhatására. Számítással kapott eredményeinek kísérleti megerősítéséhez kérte Friedrich és Knipping segítségét. A kísérleti szakemberek megkísérelték azt, hogy kristályt helyezve a röntgensugárzás útjába, kimutassák a diffrakciót. A kísérlet eredménye pozitív lett, észlelhető interferenciaképet kaptak (3. ábra). Friedrich és Knipping történeti jelentőségű kísérlete egyértelműen bizo-



3. ábra

Az első röntgendiffrakciós felvételt Max Laue és munkatársai készítették rézgálickristályról

nyitotta a kristályok rácsszerkezetét. A kísérlet másik jelentős eredménye az volt, hogy véglegesen eldöntötte azt a vitát, amely a röntgensugárzás hullámtermészetével kapcsolatban akkor még folyt.

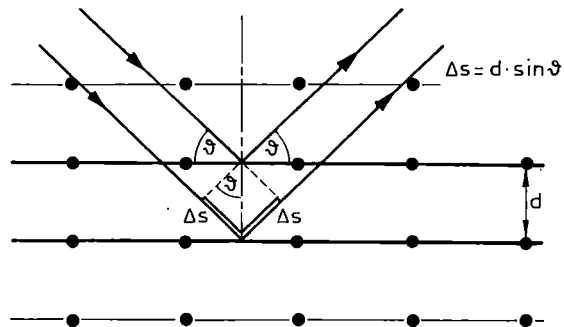
2.3. A röntgendiffrakciós szerkezetkutatás alapjai

A röntgendiffrakciós felvételek a kristályrács létének igazolásán túl lehetőséget adnak a különböző kristályok rácsszerkezetének pontos meghatározására is.

Az optikából ismeretes, hogy ha sok vonalat tartalmazó optikai rácsot monokromatikus fénnel átvilágítunk, akkor egy felfogóernyőn jellegzetes, sávos szerkezetű diffrakciós (elhajlási) képet kapunk. Az elhajlásról tanultak alapján tudjuk, hogy a diffrakciós kép intenzitásmaximumainak távolságait lemérve, a fény hullámhosszának, valamint az ernyő és a rács távolságának ismeretében egyszerű számolás után megmondhatjuk, hogy milyen periodicitású (milyen rácsállandóju) rács okozta a fényelhajlást. A röntgen-szerkezetvizsgálat lényegében hasonló feladat. Ennek a feladatnak a megoldását azonban jelentősen megnehezíti, hogy itt háromdimenziós, térbeli rácson következik be az elhajlás. Az elhajlási kép és a kristályrács tulajdonságait összekapcsoló mennyiségi összefüggést Laue és W. Bragg határozta meg először. Bragg a bonyolult számítások végeredményét egyszerű szemléletes képpel tette közérthetővé. Eszerint a kristályon elhajló hullámok úgy tekinthetők, mintha a kristály egy-egy meghatározott atomokat tartalmazó síkjáról, mint valami tükörről verődtek volna vissza. Az ernyőn fényes intenzitásmaximumot észlelünk, ha a szomszédos kristállysíkokról „visszaverődő” hullámok utkülönbsége a λ hullámhossz egész számu többszöröse. Az intenzitásmaximum feltétele így a 4. ábra segítségével

$$2d \sin \vartheta = n\lambda$$

alakban fogalmazható meg, ahol d a szomszédos síkok távolsága, ϑ a beeső sugár és a sík által bezárt szög, λ a röntgensugár hullámhossza és n pozitív egész szám ($n = 1, 2, 3, \dots$). A fenti összefüggést megfogalmazójának tiszteletére Bragg-egyenletnek nevezzük.



4. ábra

A röntgendiffrakció úgy értelmezhető, mintha a beeső röntgensugarak a kristály párhuzamos síkjairól tükrösen visszaverődnének (Bragg leírása)

A Bragg-egyenlet a röntgendiffrakciós vizsgálatok alapegyenlete, amelynek segítségével meghatározható a kristály rácsszerkezete. Az eljárás lényege a következő. Az elhajlási képről a berendezés paramétereinek ismeretében leolvasható a megvilágító sugár és valamely intenzitásmaximumot adó sugár által bezárt szög (2θ). A megvilágító sugár hullámhosszát ismerve az egyenlet felhasználásával meghatározható a „reflektáló” rácssíkok d távolsága. Hasonló módon a diffrakciós kép valamennyi intenzitásmaximumához egy-egy d érték rendelhető. A különböző síkok helyzete a beeső röntgensugár irányához viszonyítva ismert. A különböző helyzetű, meghatározott távolságra ismétlődő kristálysíkok seregének segítségével a kristály rácsszerkezete „kirajzolható”.

A röntgenfelvételekről a Bragg-egyenlet segítségével a kristály rácsszerkezete, az atomok rendeződésének geometriai szabályai határozhatók meg. A kristályszerkezet ismeretéhez azonban az is hozzátartozik, hogy tudjuk, milyen atomok, atomcsoportok foglalják el a rácsszerkezet által kijelölt helyeket. Erre a diffrakciós kép maximumainak intenzitásváltozásaiból lehet következtetni. Kétdimenziós optikai rácsok segítségével jól szemléltethetjük az elhajlási képeknek ezt a sajátosságát is.

Egy-egy fehér papírlapra gépeljünk „o” betűkkel, ill. + jelekkel egy-egy szabályos négyzetrácsot (5a ábra). Mennél több jel kerül egy-egy lapra, annál jobb lesz az eredmény. A gépelt rácsokat fotózással kicsinyítsük le annyira, hogy a negatívon kb. 10^{-2} cm legyen a jelek távolsága! (A fotózáshoz 36 mm-es „do-

```

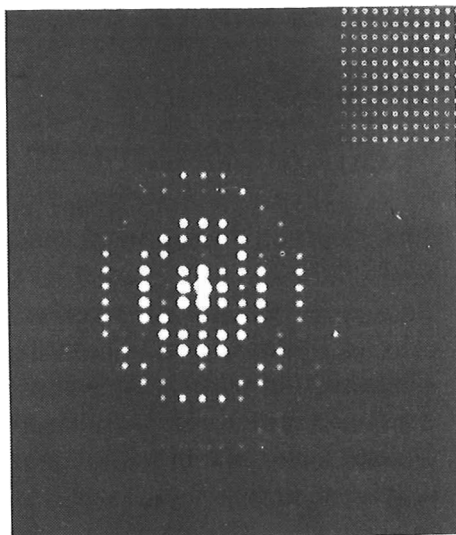
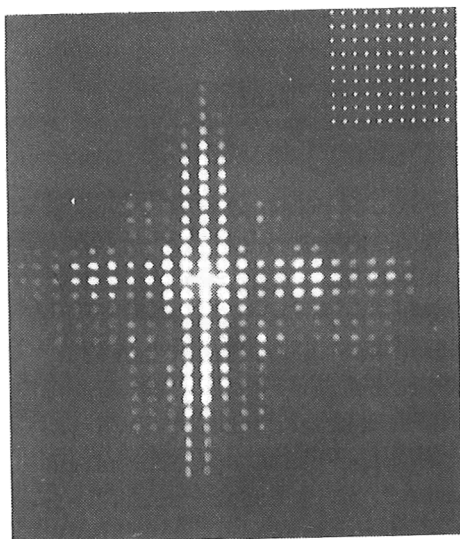
+ + + + + + + + +
+ + + + + + + + +
+ + + + + + + + +
+ + + + + + + + +
+ + + + + + + + +
+ + + + + + + + +
+ + + + + + + + +

```

```

o o o o o o o o
o o o o o o o o
o o o o o o o o
o o o o o o o o
o o o o o o o o
o o o o o o o o
o o o o o o o o

```



5. ábra

- a) Irógéppel készített kétdimenziós „kristályszerkezetek”.
 A szerkezet fotózással lekicsinyíthető annyira,
 hogy optikai rácsként szolgáljon
- b) Kétdimenziós optikai rácsok elhajlási képei

kufilmel" használjunk, esetleg 8 mm-es mozikamerával is készíthetjük a felvételt!) A fotonegativot optikai síkrácsként használjuk! A monokromatikus fényvel (pl. lézerrel) átvilágított rácsok diffrakciós képe az 5b ábrán látható. A két elhajlási képen a diffrakciós maximumok négyzetes elrendeződése a két rács hasonló geometriáját tükrözi. A maximumok eltérő intenzitásvizonyait a négyzethálóban elhelyezett rácspontok különbözősége okozza. A kétdimenziós optikai rács és diffrakciós képe között a kapcsolat rendkívül szembe-tűnő. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy a valódi kristályszerkezetek vizsgálata, a diffrakciós kép

kiértékelése sokkal nehezebb és hosszadalmasabb munka, mint amilyennek esetleg a fenti modellkísérlet alapján gondolnánk. Ugyancsak megjegyzendő, hogy az optikai síkrácsok elhajlási képét nem értelmezhetjük a Bragg-egyenlet segítségével. Bragg szemléletes képe csak a térbeli diffrakció esetén helytálló.

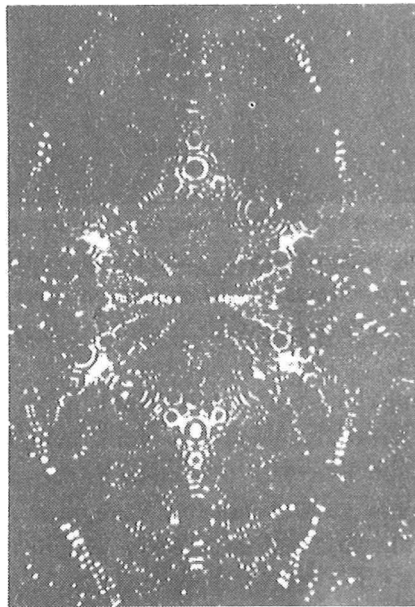
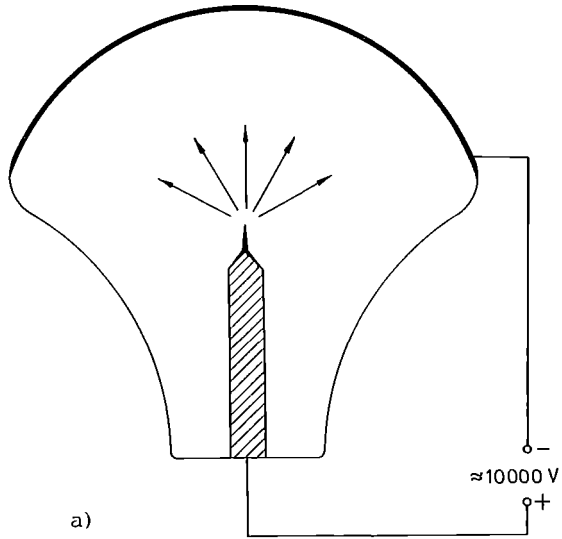
2.4. A térionmikroszkóp

A kristályszerkezet közvetlen vizsgálatára kezdetben kizárólag a röntgendiffrakciós vizsgálatok szolgáltak. A tudomány és a technika fejlődése azonban egyre újabb szerkezetvizsgálati módszerek kidolgozását tette lehetővé. Kialakult az elektron- és a neutrodiffrakciós eljárás, valamint a térion-mikroszkópia.

Az elektron- és a neutrodiffrakció a röntgenvizsgálatokhoz hasonló technika. Mivel a korpuszkuláris anyag is rendelkezik hullámtulajdonságokkal (de Broglie-hullámok), a kristályok az elektronokból, ill. a neutronokból álló sugárzást is elhajlítják. Az ezekben az esetekben kapható diffrakciós kép hasonlít a röntgensugárzással kapotthoz. Bár a röntgen, az elektron- és a neutronsugárzás kölcsönhatása a kristály atomjaival lényegesen különböző, a diffrakciós kép geometriai tulajdonságai mindhárom esetben azonosak.

A térion-mikroszkópia segítségével a kristályrácsba rendeződött egyedi atomok közvetlenül láthatóvá válnak. A térionmikroszkópnak különös jelentőséget ad az, hogy alkalmazásával a kristályhibák körüli atomi elrendeződés közvetlen megfigyeléssel is tanulmányozható.

A térionmikroszkóp elvi felépítését a 6a ábra mutatja. Félgömb alakú, fluoreszkálóanyaggal bevont üvegbura közepén helyezik el a vizsgálandó mintát. Lényeges feltétele a vizsgálatnak, hogy a mintát hegyes tüvé lehessen kiképezni. (A csucs hegyének görbületi sugara kb. $0,1 \mu\text{m}$ kell hogy legyen, ami fémek esetén valósítható meg jól.) A burából kiszivattyúzzák a levegőt, majd a vákuumba igen kevés héliumot juttatnak. Ha a bura ernyője és a középső kristálytü közé $10\ 000\ \text{V}$ nagyságrendű feszültséget kapcsolnak, akkor a fluoreszkálóernyőn világos és sötét foltok



6. ábra

- a) Teryonmikroszkóp elvi felépítése
 b) kristály teryonmikroszkópos képe

szabályos rendszere jelenik meg (6b ábra). A képen minden fénylő pont a kristály egy-egy atomjának „árnyképe”.

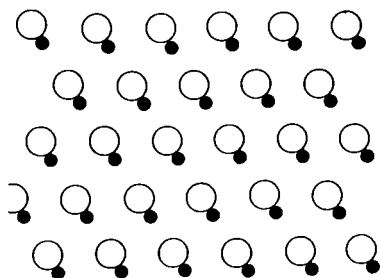
A térionmikroszkóp működésének alapja az elektrosztatikában megismert csucshatás. A hegyes, pozitívan töltött fémcsucs környezetében a térerősség olyan nagy, hogy a tühegy közvetlen közelében levő héliumatomokról elektront képes leszakítani. A pozitív töltésű héliumionok a sugárirányú elektromos erővonalak mentén felgyorsulva becsapódnak a fluoreszkálóernyőre. Az ernyő a becsapódás helyén világít. Mivel a fémtű felületének azon pontjai, ahol a kristályban atomok vannak, jobban ionizálnak, mint azok, ahol nincs atom, így a kristály felületén elhelyezkedő atomok elrendeződése az ernyőre vetitődik. A térionmikroszkóp nagyítása mintegy kétmilliószoros.*

2.5. A kristály geometriai szerkezete. A pontrács

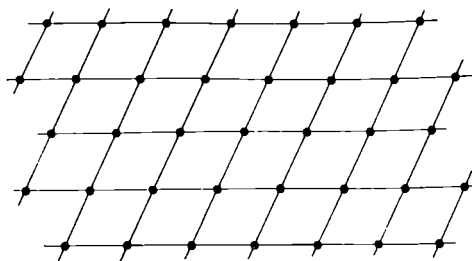
Diffrakciós szerkezetvizsgálatok segítségével meghatározható, hogy a kristályt alkotó atomok milyen geometriai törvények szerint illeszkednek egymás mellé. A következőkben a kristályszerkezetek geometriai tulajdonságainak leírásával foglalkozunk. Az atomok térbeli elrendeződését a kristályban az ún. „pontrács” jellemezzük. A pontrácsban a kristály szabályosan ismétlődő atomjait anyagi minőségüktől függetlenül egy-egy pont jelképezi. A pontok rendszere tükrözi a kristály geometriáját, de semmit sem mond arról, hogy milyen atomok, ionok, molekulák építik fel a kristályt. A 7. ábra két dimenzióban szemlélteti a pontrács és a kristályszerkezet kapcsolatát.

A pontrács rácspontjai a tér különböző irányjaiban szabályosan ismétlődnek. A szerkezet ismétlődése legegyszerűbben a következőképpen jellemezhető. Kiválasztjuk a pontrács egy tetszőleges pontját és ebből a legközelebbi három, nem egy síkban fek-

*Megjegyezzük, hogy a kristályok rácsszerkezetének hasonló megfigyelésére lehetőséget ad az ún. térelektron-mikroszkóp is. Ebben a He-ionok szerepét a nagy térerősség hatására a fémcsucsból kilépő elektronok veszik át. Ilyen esetben a fémcsucst negatív potenciálra kapcsolják, a negatív fémcsucsból az elektronok ún. „hidegemisszióval” lépnek ki.



Kristályszerkezet



Pontrács

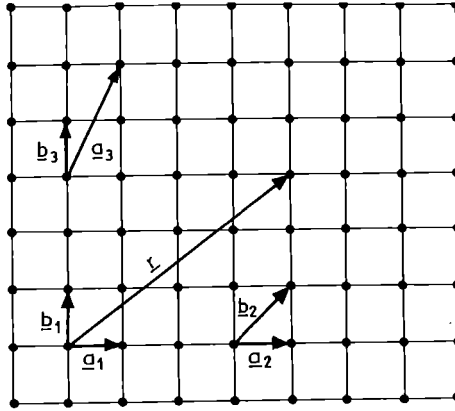
7. ábra

A kristályszerkezet és a pontrács kapcsolata

vő szomszédos rácspont felé egy-egy vektort irányítunk. (A vektorok által bezárt szög nem lehet nagyobb, mint 90° .) Az így meghatározott \underline{a} , \underline{b} , \underline{c} vektorokat a rácsszerkezet elemi rácsvektorainak nevezzük. Bármelyik ilyen vektor egész számú többszöröse ugyanis szintén rácspontba mutat, sőt a három elemi rácsvektor bármely egész számú többszörösének vektori eredője is rácspontot határoz meg. Ha egy ilyen vektor mentén a kristályt eltoljuk, akkor önmagával fedésbe kerül. Ezt a tulajdonságot a kristály eltolási vagy transzlációs szimmetriájának nevezzük.

Egy adott pontrács esetén az elemi rácsvektorok többféleképpen is kijelölhetők (8. ábra). A három elemi rácsvektor által meghatározott egyenesszakasz úgy is tekinthető, mint egy paralelepipedon egy sarokba összefutó három éle. Az így meghatározott paralelepipedont a kristály elemi cellájának nevezzük. Az elemi cella minden sarka egy-egy rácspontot jelöl. A rács a szoroson egymás mellé helyezett elemi cellákból mint „téglákból” építhető fel. Egy-egy adott pontrács természetesen többféle elemi cellából is felépíthető (9. ábra).

A rácspontok szabályos ismétlődésén túl a pontrács a szerkezet egyéb geometriai tulajdonságait is tükrözi. Ezek az un. tükör- és forgásszimmetriák. Tükörszimmetriája van a rácsnak akkor, ha található olyan sík, amelyre nézve a ketté osztott kristály mindkét fele egyben a másik tükörképe is. Forgásszimmetriáról beszélünk akkor, ha a rácsban kijelölhető olyan egyenes, amely körül mint tengely körül elforgatva a rácsot az eredeti helyzetével egyenértékű helyzetbe kerül, még mielőtt a teljes körforgatást elérnénk. Kristályszerkezetek esetén 60° , 90° ,



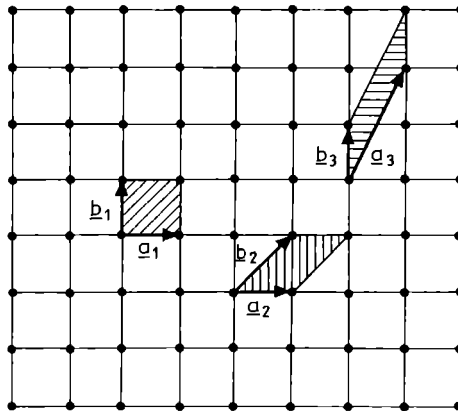
$$r = 4a_1 + 3a_3$$

$$r = a_2 + 3b_2$$

$$r = 4a_3 - 5b_3$$

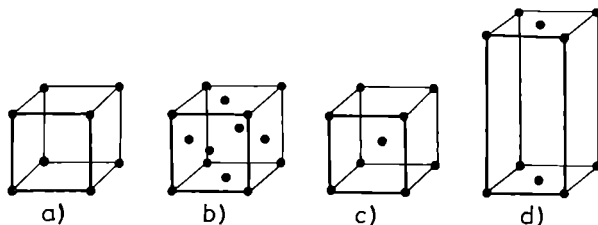
8. ábra

Adott kristályszerkezetben többféleképpen vehetők fel elemi rácsvektorok. Bármely rácspontból rácspontba mutató vektor előállítható az elemi rácsvektorok lineárkombinációjával



9. ábra

Adott rácsszerkezet esetén többféle elemi cella jelölhető ki



10. ábra

A leggyakrabban előforduló Bravais-cellák
 a) egyszerű köbös; b) lapon középpontos köbös;
 c) térben középpontos köbös; d) bázislapon középpontos

120, 180 fokos forgásszimmetria lehetséges. (A 60° -os esetben egy teljes körbefordulás alatt hatszor, 90° esetén négyszer stb. kerül eredeti helyzetével fedésbe a kristály.) Egy-egy kristályszerkezetet a translációs szimmetria, valamint a forgási és tükrözési szimmetriák összessége jellemez.

A rács elemi cellája rendszerint nem tükrözi a szerkezet jellemző szimmetriáit. Ezért célszerű a kristályban olyan egységet venni fel elemi cellaként, amely a tükrözési és forgatási szimmetriákat is mutatja. Az így választott elemi cellákkal jellemezhető kristályszerkezeteket Bravais-rácsoknak nevezzük. A leggyakrabban előforduló Bravais-rácsokat a 10. ábra mutatja.

2.6. A kristályszerkezetek jellemzése a kémiai kötés típusa alapján

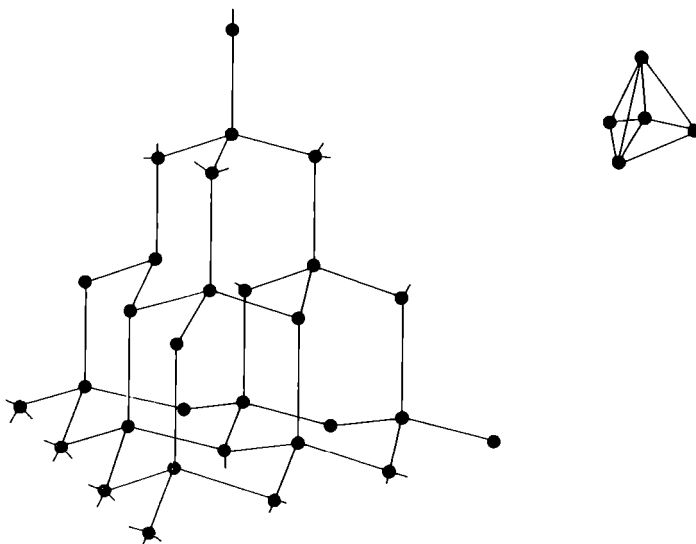
A kristály geometriai rendjét az atomok (ionok, molekulák) közti kölcsönhatás határozza meg. A továbbiakban a kristályt felépítő részecskék közti kémiai kötésekől kiindulva azt vizsgáljuk, hogy a kötés természete miként határozza meg a rács geometriáját, ill. a kristály jellemző fizikai tulajdonságait. A rácsot összetartó kémiai kötések szerint a kristályok négy csoportba sorolhatók: lehetnek atomrácsok, ionrácsok, fémcsok és molekularácsok.

2.6.1. Atomrácok

Atomrácstról beszélünk akkor, ha a kristály rácspontjaiban atomok helyezkednek el. Az atomokat kovalens kémiai kötések kapcsolják össze. A kovalens kötések térben irányított molekulapályák kialakulásával jönnek létre. A kötések irányítotttsága a kristály belső geometriáját is meghatározza. A kovalens kötés erőssége miatt az atomrácú kristályok nagy keménységűek és magas olvadáspontúak.

Az atomrác tipikus képviselője a gyémánt. A gyémánt a szén egyik kristályos módosulata (a másik a grafit). A kristály minden szénatomja négy másik szénatommal létesít kovalens kötést. A négy kötés egyenértékű, a térben tetraéderesen irányított. A szénatomok ilyen összekapcsolódása csak magas hőmérsékleten és különlegesen nagy nyomáson valósulhat meg. Közönséges körülmények között a szén grafitként kristályosodik. A gyémántrác térbeli szerkezete az atomok tetraéderes összekapcsolódásával jön létre, ezt szemlélteti a 11. ábra. A gyémánthoz hasonló szerkezetű a szilícium- és a germániumkristály is. Ez utóbbi két kristály a félvezető gyártás legfontosabb alapanyaga.

A gyémántrác nem jellemezhető egyetlen Bravais-rácscsal.



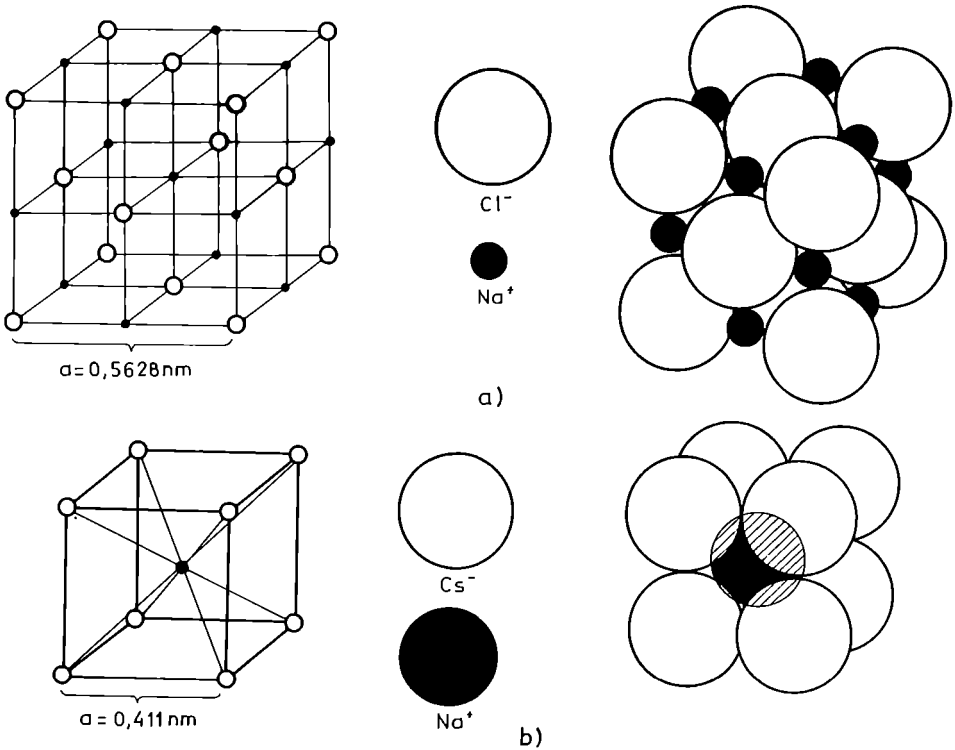
11. ábra
A gyémánt kristályszerkezete

2.6.2. Ionrácok

Ionrácstról akkor beszélünk, ha a rácspontokban váltakozva pozitív és negatív ionok foglalnak helyet. Az ionrácсу kristályok belső geometriáját három döntő tényező szabja meg.

a) Az ionrácst az ellentétes töltésű ionok közti Coulomb-vonzás tartja össze. Az elektrosztatikus vonzóerő a tér minden irányában egyformán hat. Az ionkristályokban tehát nincsenek ki-tüntetett kötési irányok, az ionok a rácspan ugy rendeződnek, hogy az ellentétes töltésű ionok mennél közelebb és mennél na-gyobb számban vehessék körbe egymást.

b) A különböző ionok mérete eltérő. Ez jelentősen befolyá-solja azt, hogy a különböző ionok hogyan helyezkednek el a leg-tömörebben egymás körül. A 12. ábra a NaCl és a CsCl (cézium-klorid) ionkristályok rácsszerkezetét mutatja. A kősó kristály-



12. ábra

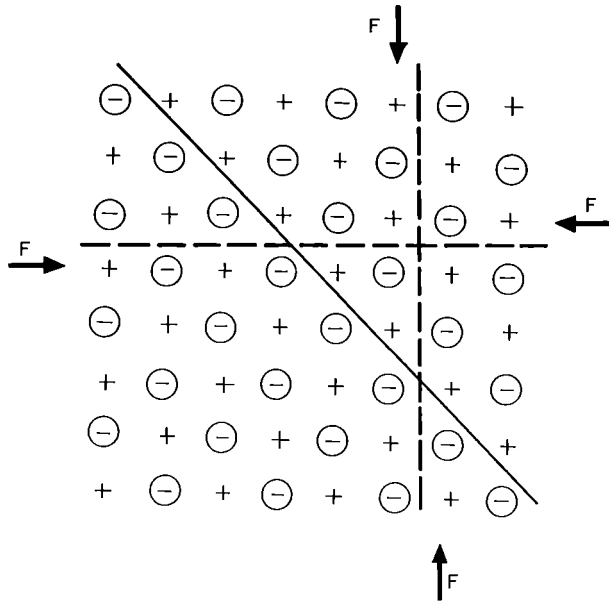
- a) A kősó (NaCl) kristályszerkezete;
b) a céziumklorid (CsCl) kristályszerkezete

rácsában a nagyméretű kloridionok közti térrészben foglalnak helyet a kicsi nátriumionok. Minden kloridionnak 6 nátriumion és minden nátriumionnak 6 kloridion a közvetlen szomszédja. A cézium-klorid kristályrácsát kloridionok és a nátriumnál jóval nagyobb céziumionok építik fel. A céziumionok nem férnek el a kloridionok között a kősóhoz hasonló szerkezetben. A cézium-klorid kristályrácsában minden kloridiont 8 cézium, ill. minden céziumiont 8 kloridion vesz körbe.

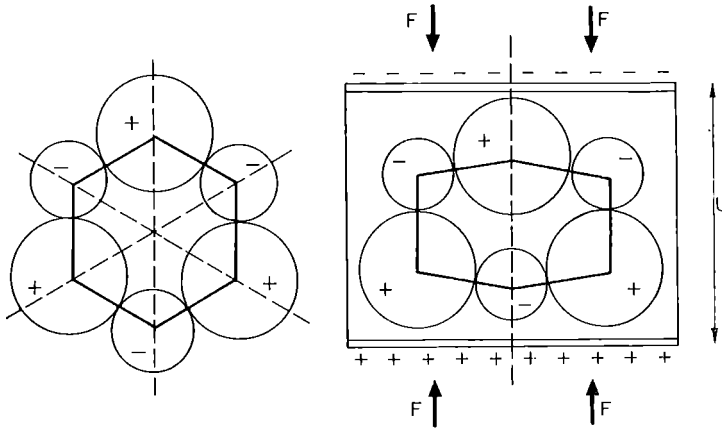
c) Az ionkristályok elektromosan semlegesek. Ez megköveteli, hogy a kristály ismétlődő alapegységét, az elemi cellát felépítő pozitív és negatív ionok összetöltése nulla legyen.

A kristályos anyagok jelentős része (általában a szeretlen vegyületek) ionrácsban kristályosodik. Az ionok közti erős elektrosztatikus vonzóerő miatt az ionkristályok kemények, magas olvadáspontúak. A legtöbb ionvegyület vízben jól oldódik. Ez a következőképp magyarázható. A víz molekulái elektromos dipólust hordoznak. A vízmolekulák dipólusuk ellentétes pólusával a kristály legszélső ionjai köré csoportosulnak. A vízmolekulák vonzása és a hőmozgás hatására egyre újabb és újabb ionok válnak le a kristályról. A rácsból kivált ionokat a víz molekulái azonnal körbeveszik, és ezáltal elektromosan annyira leárnyékolják, hogy az már nem épülhet be újból a kristályrácsba.

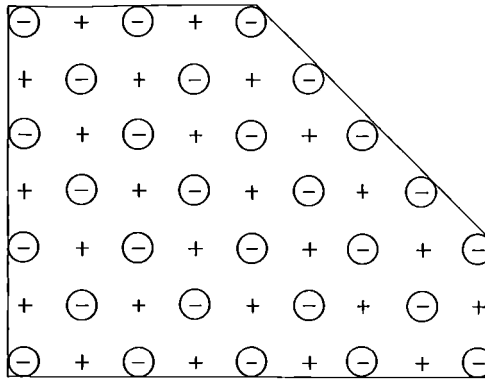
Az ionkristályok mechanikai tulajdonságai nagymértékben irányfüggők. Ennek egyik szemléletes bizonyítéka a kősókristályok könnyű hasadása a kockalapok mentén. A kősó hasadását a 13. ábra segítségével egyszerűen magyarázhatjuk. A vázlatos rajz a kősó egy kristálysíkjának szerkezetét szemlélteti. A síkban négyzethálóba rendezve pozitív és negatív ionok váltakozva helyezkednek el. A kristály a nyíllal jelölt irányu erőhatásra a szaggatott vonal mentén hasad. A hasadás akkor következik be, amikor a vonal két oldalán levő kristályfél éppen egy rácsállandónnyival elcsuszna egymáshoz képest. Ekkor ugyanis a vonal két oldalán éppen azonos töltésű ionok kerülnek szembe egymással, ezért az ionpárok közti taszítás következtében a kristály kettéválik. Érdemes megemlíteni, hogy az ábrán folytonos vonallal bejelölt sík mentén a kristály deformálható anélkül, hogy hasadna. A sík két oldalán ugyanis a töltések ellentétesek, így a sík mentén elcsuszó két kristályfél állandóan vonzza egymást.



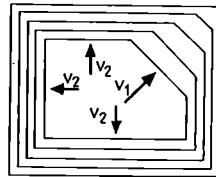
13. ábra
A kőso hasadási tulajdonságai
a rácsszerkezet alapján egyszerűen értelmezhetők



14. ábra
A piezoelektromosság értelmezése
Az F deformálóerő hatására a pozitív és negatív
töltésközéppont különválnak, a kristály polarizálódik



15. ábra
Az NaCl kristálycsira különböző lapjai
eltérő sebességgel növekszenek



16. ábra
A kristályok szabályos formáját
a leglassabb növekedési irányra merőleges
kristálylapok határozzák meg

Egyes ionkristályok, mint pl. a kvarc vagy a „házilag” is könnyen növeszthető Seignette-só, különösen érdekes tulajdonságot mutatnak, a piezoelektromosságot (l. a Függelékben a 4.3.3. pontot). A piezoelektromos kristályokban – deformációmentes állapotban – a pozitív és a negatív ionok töltésközéppontja egybeesik. Rugalmas deformáció esetén a pozitív ionok kimozdulása az egyensúlyi helyzetükből különböző mértékű, mint a negatív ionoké, ezért rugalmas deformáció hatására a kétféle töltés súlypontja különvált. Az így elektromosan polarizálódott kristály egyes lapjai közt elektromos feszültség jelenik meg (14. ábra).

Az ionvegyületek igen gyakran nagyméretű sík lapokkal határolt szabályos kristálylapokat képeznek. A kősó példáján egyszerűen érzékeltethető a kapcsolat a rácsszerkezet és a kristály

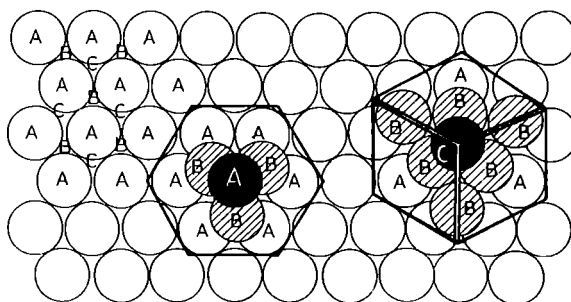
alakja között. A 15. ábra egy kristálycsira rácsszerkezetét mutatja. A kristály újabb és újabb nátrium- és kloridionok beépülésével egyre növekszik. A környező folyadékban „uszáló” nátrium- és kloridionok azokon a pontokon kötődnek meg a leggyakrabban, ahol a már rácsba rendeződött ellentétes töltésű ionok vonzóhatása a legerősebb. Az ábrán feltüntetett kristály ezért a „ferde” helyzetű kristálylap mentén jóval gyorsabban növekszik, mint a kockalapok irányában. Az egyenlőtlen ütemű növekedés következtében a kristály eredeti alakja változik. A 16. ábra sematikus rajza ezt a változást szemlélteti. A rajz a növekvő kristály körvonalait mutatja azonos időtartamok eltelté után. A kristálynövekedés során a gyors növekedési irányra merőleges kristálylapok mérete csökken, míg a lassu növekedési sebességgel mozgó lapok mérete fokozatosan nő. A kristály alakját a legkisebb növekedési sebesség irányára merőleges lapok határozzák meg. A kristálynövekedés tanulmányozásakor (l. a Függelék) tapasztalhatjuk, hogy a rendszerint egymással derékszöget bezáró kockalapokkal határolt kőskristály alakja már csekély szennyezőanyag hatására is változik, a kocka sarkai ferdén lecsapottakká válnak (oktaéderlapok). A jelenség magyarázatát a kristálynövekedés mechanizmusában találhatjuk meg. A tiszta só esetén az oktaéderlapok irányában a kristály sokkal gyorsabban növekszik, mint a kockalapok irányában, ezért ilyenkor csak a kockalapok figyelhetők meg. Az oldathoz adagolt kevés szennyező az oktaéderlap mentén lecsökkenti a növekedés sebességét, ezért a kristályon már ezek a lapok is jól megfigyelhetőkké válnak.

2.6.3. A fémek kristályszerkezete

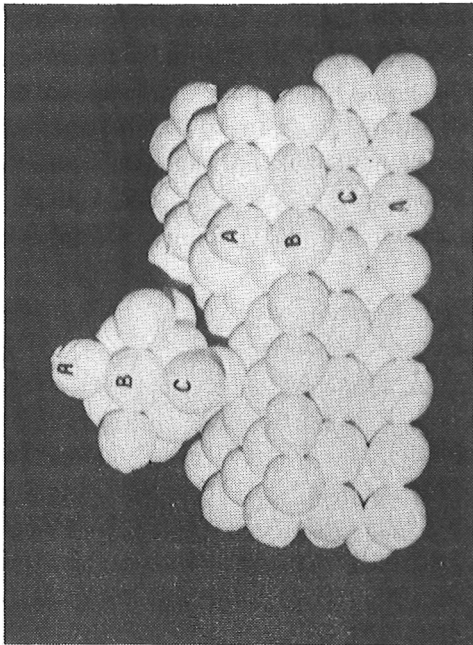
A fématomokat kristályrácsba rendező fémes kötés azáltal jön létre, hogy az atomok a legkülső elektronhéjukon levő elektronjaikat leadják. A leadott elektronok ezután a kristály valamennyi ionjához együttesen tartoznak és a pozitív töltésű fémionokat kristályrácsba rendezik. A kötés kialakulása csak a kvantummechanika segítségével értelmezhető. Eszerint a kristályt alkotó fématomok együttes energiája csökken, ha a fémionok rácsba ren-

deződnek, miközben a legkülső elektronok a kristály egészére kiterjedően helyezkednek el (delokalizálódnak). A fémes kötés nem tüntet ki egyetlen térirányt sem, így a legtöbb esetben a fém ionjai szorosan rendeződnek egymás mellé. A szoros térkitöltésű fémkristályok szerkezetével a gimnázium első osztályában már megismerkedtünk.

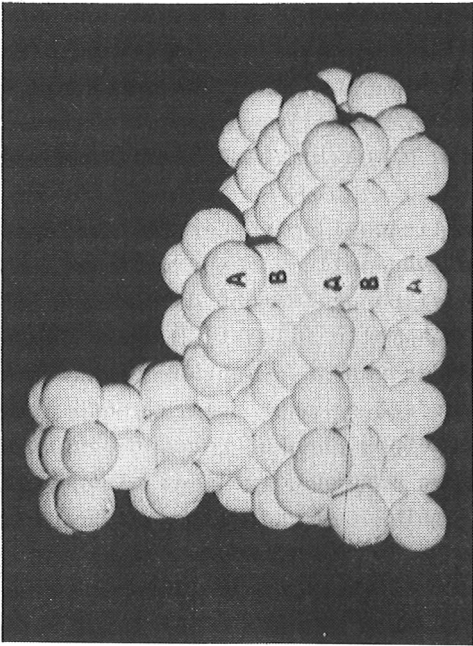
Ha a fématomokat jó közelítéssel golyóknak feltételezzük, könnyen megállapíthatjuk, milyen jellemző rend valósítja meg a tökéletes térkitöltést. Egy síkban a legtöbb golyót úgy tudjuk elhelyezni, ha szorosan egymás mellé illesztjük őket. Így minden golyónak 6 közvetlen szomszédja van. A legsűrűbb térkitöltésben az ilyen, ún. szoros illeszkedésű síkokat kell a legtömörebben egymásra rétegezni. Ezt elérhetjük, ha két réteget úgy illesztünk össze, hogy a felső réteg minden golyója az alsó réteg három érintkező golyója közti mélyedésbe kerüljön. Ha két ilyen réteget már elhelyeztünk és az atomok középpontját az első rétegben A, a másodikban B helyzetnek nevezzük, akkor a harmadik réteg atomjait vagy a legalsó réteg atomjai fölé ismét A, vagy egy újabb C helyzetbe illeszthetjük (17. ábra). A szoros illeszkedésű síkok egymásra rétegezésével tehát kétféleképpen is megvalósíthatjuk a tömör térkitöltést. Az első esetben a rétegek atomjai rendre ABAB... helyzetben illeszkednek egymás fölé. Ilyen sorrendben kristályosodik pl. a Zn és a Cd. Az elrendezést hatszöges szoros illeszkedésnek nevezzük. A második esetben az egymásra helyezett rétegek atomjai ABC ABC ABC... helyeket foglalják el. Ebben az elrendezésben kristályosodnak a lapon közép-



17. ábra
Szoros illeszkedésű kristálysíkok
kétféleképpen rétegezhetők egymásra



a)



b)

18. ábra
Laponközéppontos köbös kristály (a)
és hatszöges szoros illeszkedésű kristály (b)
modellje

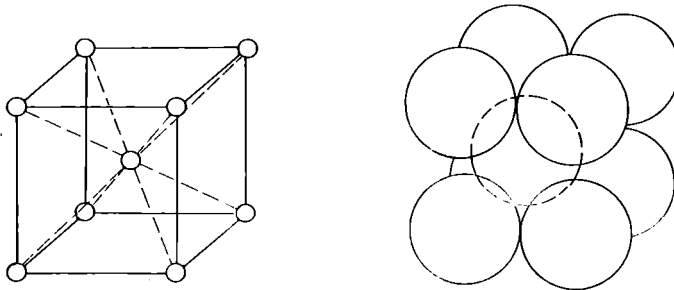
pontos (másnéven felületen centrált) köbös fémek, pl. Al, Cu, Ni, Ag, Au stb. A hatszöges szoros illeszkedésű és a lapon középpontos köbös fémek kristályrácsának elemi celláját a 18. ábra szemlélteti.

A fémek többsége a szoros térkitöltésű kristályszerkezetek valamelyikében kristályosodik, vannak azonban kivételek, amelyek rácsszerkezete a fentiekől eltérő. A legfontosabbak ezek közül a térben középpontos (vagy tércentrált) köbös rácsú fémek. A tércentrált köbös kristály szerkezetét a 19. ábra mutatja, az ionok egy kocka nyolc csucján és a kocka középpontjában helyezkednek el. Mivel a kocka térátlója mentén az ionok szinte érintkeznek egymással, az elemi cella a éle (a kocka éle) az ionok R sugarával

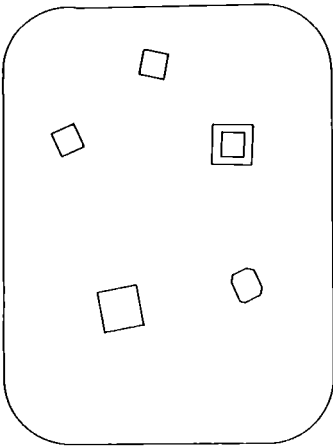
$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

alakban fejezhető ki. Térben középpontos köbös kristályszerkezetűek az alkálifémek (K, Na stb.), a magas olvadáspontú fémek (W, V, Cr stb.) és leggyakrabban a vas is. A vas érdekes tulajdonsága, hogy a hőmérséklettől függően kétféle kristályszerkezete lehetséges. Nem túl magas hőmérsékleteken (tiszta vas esetén 911 °C alatt) a vas térben középpontos köbös szerkezetű, ha azonban a kritikus hőmérsékleti határ fölé hevítjük, akkor a vas kristályszerkezete lapon középpontos köbössé alakul át. Az átkristályosodás egyszerű iskolai kísérlettel bemutatható (l. a Függelék 4.4. szakasz).

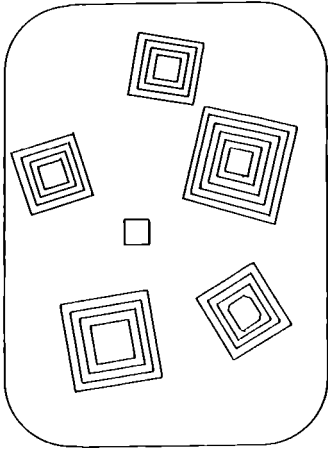
A fémek, bár kristályos szerkezetűek, mégsem mutatnak síklappal határolt szabályos kristályformát. A fémolvadék lehűlésekor az anyag megőrzi az öntőforma alakját. A fémtárgyak nagyon



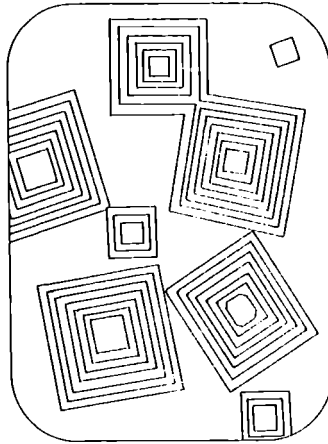
19. ábra
A térben középpontos kockarács elemi cellája



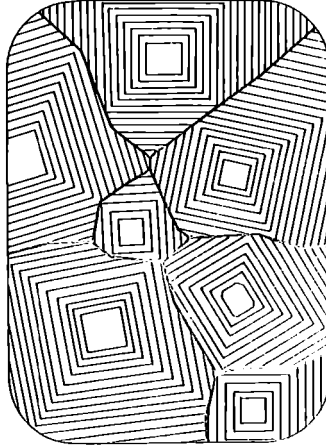
a)



b)

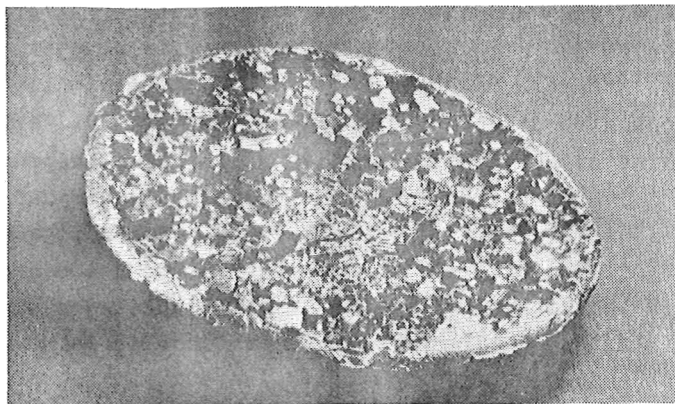


c)



d)

20. ábra
A polikristályos szerkezet kialakulásának
folyamata



21. ábra
Bi-olvadék kristályosítását megszakítva
szabályos alakú kristályok figyelhetők meg

sok, egymással szorosan összenőtt apró kristályból, un. „kristályszemcsékből” vagy „kristallitokból” állnak. Az ilyen anyagot polikristályos szerkezetűnek mondjuk. A 20. ábra a polikristályos szerkezet kialakulását szemlélteti. A dermedő olvadékban egymástól függetlenül kialakulnak kristálycsirák, amelyek aztán a növekedés törvényeinek megfelelően síklapok által határolva növekszenek egészen addig, míg egymást el nem érik. A szomszédos szemcsék találkozási pontján a növekedés megszűnik, de a kristallitok közti, még olvadékkal töltött tartományokban a kristálynövekedés tovább folytatódik, egészen addig, míg a kristályok rendszerint szabálytalan felület mentén illeszkednek egymáshoz. Sem a fémtárgy egésze, sem az egyes kristályok alakja nem tükrözi a belső szerkezet szabályosságát.

A fémolvadék kristályosodásának folyamata látványos kísérlettel szemléltethető. Analitikai tisztaságú bizmut (Bi) fémet tégelyben gázlángon megolvasztunk, majd az olvadékot hideg kvarc- vagy porcelán tégelybe öntjük. A hideg tégely falánál megindul a kristályosodás, de az edény falának rossz hővezetése

miatt a folyamat csak lassan halad előre. Néhány másodperc elteltével a tégelyből egy hirtelen mozdulattal leöntjük a még olvadt állapotban levő anyagot. Az edény alján mm-es nagyságu, szabályos formájú kristályokat figyelhetünk meg (21. ábra).

A fémek kristályszerkezetének és a fizikai tulajdonságainak kapcsolatát vizsgáló szakembereknek gyakran olyan mintákra van szükségük, amelyek nem polikristályos szerkezetűek, hanem egyetlen kristallitnak tekinthetők. Az ilyen fémeket „fém-egykristály”-nak nevezik. Fém-egykristályok előállítására nem egyszerű feladat, különleges tisztaságu anyagokat és speciális berendezéseket igényel.

2.6.4. Molekularácsok

Molekularácsról (molekulakristályról) akkor beszélünk, ha a kristály semleges molekulák szabályos egymás mellé rendeződésével alakul ki. A molekulák maguk is összetettek, atomokból épülnek fel, amelyeket erős kovalens kötés tart össze. A zárt elektronszerkezetű, alacsony energiájú molekulák közt erős kémiai kötés már nem jöhet létre, a molekulák ún. másodlagos kötések következtében rendeződnek kristályrácsba. A másodlagos kötések közül a Van der Waals-kötés és a hidrogénhidkötés a legfontosabb.

Van der Waals-kötésű kristályok

A legtöbb vegyület molekulájában az elektronok térbeli elrendeződése nem egyenletes, az atommagok pozitív és az elektronok negatív töltésközéppontja nem esik egybe. Az ilyen molekulák mint elektromos dipólusok ellentétes töltésű pólusaikkal vonzódnak egymáshoz. A dipólusok közt kialakuló kötés gyenge, ezért a molekularácsos anyagok puhák, alacsony olvadáspontúak és illékonyak. Molekularácsban kristályosodik a legtöbb szerves vegyület. Tipikus molekularácsos vegyület a szilárd széndioxid („szárazjég”).

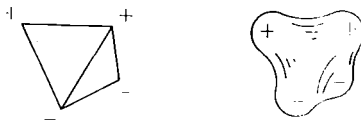
Nagyon alacsony hőmérsékleteken a nemesgázok is kristályos állapotúak. Ezek a kristályok szintén a molekularácsok közé sorolhatók. A nemesgázok atomjai egyenletes töltéseloszlásúak, ezért a köztük ébredő dipólus-kölcsönhatás első pillanatra nehezen érthető. A nemesgázok atommagját gömbszimmetrikus elektron-

felhő veszi körül. Ez a gömbszimmetria azonban csak hosszabb idő átlagában jellemzi az elektronok eloszlását és nem zárja ki azt, hogy egy-egy időpillanatban az elektronfelhő alakja a gömbtől eltérő legyen. Az atom ezért pillanatszerűen rendelkezhet elektromos dipólusnyomatékkal. A pillanatról pillanatra változó dipólusnyomaték hosszabb időtartamra vett átlaga zérus. A kristályrácsba rendeződött nemesgázatomok pillanatnyi dipólusjellegük miatt kötődnek egymáshoz. A szomszédos atomok dipólusnyomatékának iránya pillanatról pillanatra összehangoltan változik, így az atomok közti vonzóerő állandó marad.

A Van der Waals-kötéssel összekapcsolódó atomok a lehető legszorosabb térkitöltésre törekszenek. A kristályos nemesgázok rendszerint lapcentrált köbös szerkezetűek. A molekuláris geometriai szerkezetét a molekulák mérete, alakja döntően befolyásolja.

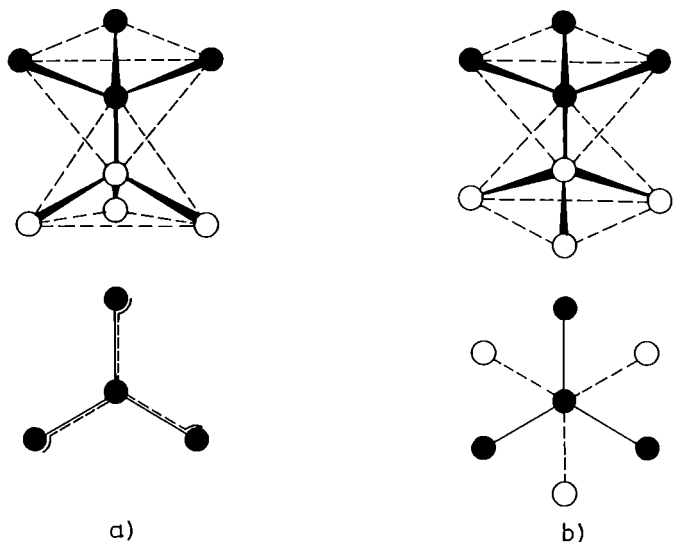
Hidrogénhidkötésű kristály – a jég szerkezete

A jégkristályban minden vízmolekula 4 másik vízmolekulához kapcsolódik. A molekulákat H-hidkötések tartják össze. A H-hidkötés kialakulását a víz molekulaszervezetéből kiindulva magyarázhatjuk. A vízmolekula egy oxigén- és két hidrogénatom összekapcsolódásával képződik. A hidrogénatomok 105° -os szöget bezáró irányokból kovalens kötéssel kapcsolódnak az oxigénatomhoz. Az oxigén erősen elektronvonzó tulajdonságu, ezért a kovalens kötés elektronjai a hidrogénatomok magját csak kevésbé árnyékolják le, így a molekulának ezen részei lokálisan pozitív töltést mutatnak. A vízmolekulának van két, elektronban különösen „gazdag” és ezért lokálisan negatív töltésű pólusa is. A pozitív és negatív pólusok tetraédes irányokban helyezkednek el, ahogy azt a 22. ábra szemlélteti. Az egyenetlen töltéselosztás miatt a vízmolekulák között kötések jönnek létre. A molekulák ellentétes pólusaikkal fordulnak egymás felé, majd a kevésbé árnyékolt hid-



22. ábra

A vízmolekulában tetraédes elrendezésben két pozitív és két negatív elektromos pólus van

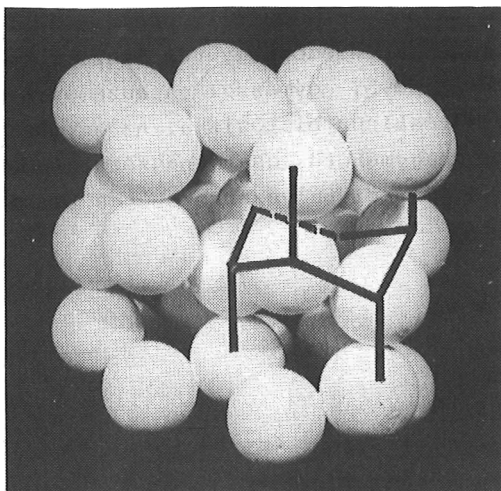


23. ábra
 Vizmolekulákból kialakult tetraéderek egymáshoz viszonyított elhelyezkedésének két lehetséges módja (A körök vizmolekulákat jelölnek.)

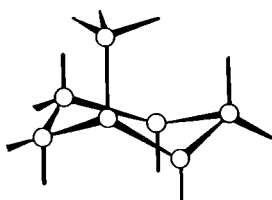
rogénatommag a szomszéd molekula elektronfelhőjét is többé-kevésbé magára huzza. A két szomszédos molekula a hidrogénatommag hatására az egyszerű dipólus-kölcsönhatásnál jóval erősebb kötéssel kapcsolódik össze. A hidrogén „közvetítésével” kialakult kötést nevezzük „H-hidkötésnek”. A hidrogénhidkötések tetraéderes irányokban kapcsolják össze a szomszédos molekulákat. A jégkristály rácsszerkezetét a hidrogénhidkötések tetraéderes irányítottsága határozza meg.

Két tetraéderes kötésben levő vizmolekula összekapcsolódásának energetikailag kedvező változatait szemlélteti a 23. ábra.

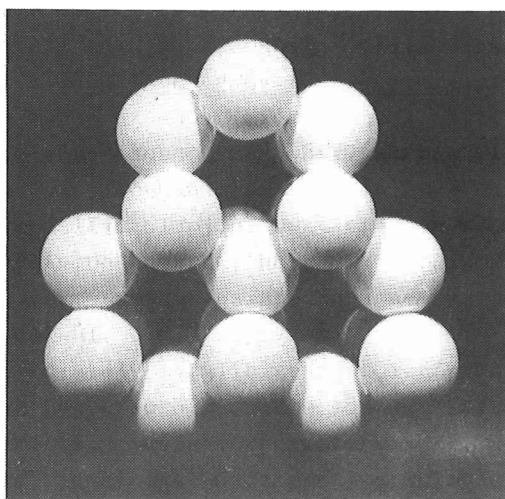
A 23a ábrán látható szerkezet tükörszimmetrikus a két vizmolekula kötésirányára merőleges síkra. A 23b ábrán bemutatott alakzat nem rendelkezik tükörsíkkal, a két egymás fölötti molekula tetraéderes kötésirányai nem fedik egymást, hanem un. „közti” helyzetben vannak. A 0°C és -30°C hőmérséklet határok között stabil jégkristályban a kötések 3/4-ét ez utóbbi kötéstípus alkotja. Ezzel a kötéssel a vizmolekulák hattagu gyűrűket alkotnak, a gyűrűk atomjai a tetraéderes kötésirányokból adódóan felváltva a gyűrű síkja alatt és felett helyezkednek el. A jég-



a)



b)



c)

24. ábra

A jég kristályszerkezete

- a) A jégkristály golyómodellje (egy-egy gömb egy-egy vízmolekulának felel meg);
 b) a jég térszerkezete; c) a modell felülnézetből (jól láthatók a jégkristály csatornaszerű üregei)

kristályban a hattagu gyűrűk szabályosan egymás fölé rendeződnek. Az egymás fölé rendeződött gyűrűk összekapcsolódását a kötések egynegyedét kitevő, egymással párhuzamosan rendeződő tükörszimmetrikus kötéstípus biztosítja. Az egymás fölé rendeződő gyűrűk viszonylag nagyméretű, csatornaszerű üregeket képeznek a jégkristályban. A jég kristályszerkezetét a 24. ábra szemlélteti.

3. ELTÉRÉSEK AZ IDEÁLIS KRISTÁLYSZERKEZETTŐL – KRISTÁLYHIBÁK

Az előzőekben a szilárdtestek kristályszerkezetére vonatkozó alapvető ismereteket úgy tártuk fel, hogy a szerkezetet hibátlannak tekintettük. A kristályok sok fizikai tulajdonsága megérthető ennek alapján (ilyen pl. a fahő hőmérsékletfüggése alacsony hőmérsékleten). Sok esetben megfigyelhetünk azonban olyan fizikai tulajdonságokat is, amelyeket más természetűnek várnánk, vagy amelyek egyáltalán nem is léteznének, ha a valódi anyagok kristályszerkezete valóban hibátlan lenne. Ezért a valódi anyagok tulajdonságainak megértéséhez feltétlenül szükséges a kristályokban előforduló hibák részletes tanulmányozása is. A következőkben a legfontosabb kristályhibákkal és az ezekkel kapcsolatos fizikai tulajdonságokkal foglalkozunk.

Egy kristályt ideálisnak vagy tökéletesnek nevezünk, ha minden atomja vagy ionja az adott szerkezet (kristályrács) által meghatározott helyen (rácspontban) helyezkedik el. A kristályos testek tulajdonságai azonban csak részben értelmezhetők a tökéletes kristály modellje alapján. Sok jelenség csak akkor magyarázható, ha figyelembe vesszük, hogy a kristályok szerkezetét jellemző rend a természetben szinte soha nem valósul meg több-kevesebb hiba nélkül.

A tökéletes kristály ideális rendjétől történő eltéréseket kristályhibáknak vagy rácshibáknak nevezzük. Kristályhibák rendszerint már a kristályosodás során keletkeznek, de a kristályt érő külső hatások is hibákat okozhatnak a belső szerkezetben. Rácshibák esetén a kristályban egy kisebb vagy nagyobb tartományban megszűnik az atomok szabályos rendje, a szomszédos atomok egymáshoz viszonyított elhelyezkedése az ideálistól eltérő lesz. Minden hiba egy sajátos atomelrendeződést jelent.

A kristályhibák leírásának közvetlen útja az lehetne, hogy megadnánk minden atomnak az ideális helyzettől való eltérését. Ez azt jelentené, hogy nagyon sok, egymással bonyolult kölcsönhatásban álló részecske helyzetének leírásával kellene foglalkoznunk. Ez az út általában járhatatlan. Ezért a hibákat tartalmazó, un. reális kristályok tulajdonságait úgy vizsgáljuk, hogy a bonyolult atomelrendeződést jelentő egyedi hibaszerkezeteket jellegzetes közös tulajdonságaik szerint csoportosítjuk, majd az egyes hibákat a kristály tulajdonságait módosító jellemzőiken keresztül írjuk le.

A kristályhibákat legegyszerűbben kiterjedésük szerint csoportosíthatjuk. Ennek alapján az alábbi hibákat különböztetjük meg:

ponthibák (rácslukak, intersticiális és szennyezőatomok),
vonalhíák (diszlokáció),
felületi hibák (rétegződési hiba, szemcsehatár),
térfogati hibák (idegen anyagrészek).

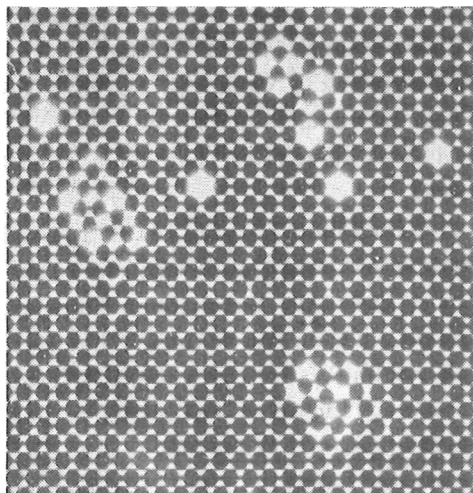
3.1. Ponthibák

Ponthiba keletkezhet úgy, hogy a kristály szabályos szerkezetéből következő egyes rácshelyek üresen maradnak. Az ilyen ponthibát nevezzük üres rácshelynek vagy vakanciának. A 25. ábra merev golyókból álló kétdimenziós modellrácsban szemlélteti a vakanciát.

Előfordul, hogy a kristály saját atomjai vagy az anyagban levő idegen (szennyező-) atomok nem a rácsszerkezet által meghatározott rácspontban helyezkednek el, hanem a rácspontok közti helyeket foglalják el. Az ilyen atomokat rácsközi vagy intersticiális atomoknak nevezzük.

3.1.1. Ponthibák keletkezése

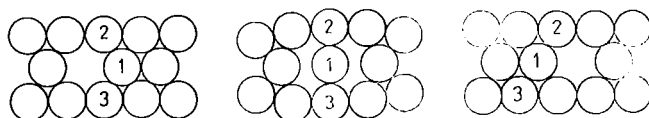
A vakanciák keletkezését a rácspontokban ülő atomok termikus mozgása teszi lehetővé. A termikus energiaingadozások következtében egyes atomok időnként akkora energiára tehetnek szert,



25. ábra
 Vakanciák és jellegzetes vakanciacsoportok
 merev golyókból készített modellkristályban

hogy környezetük vonzóhatását legyőzve elhagyják helyüket, ahol egy rácsluk, vakancia marad vissza. A vakanciák kialakulása leggyakrabban a kristály felületének környezetében indul meg, a határ mentén levő atomok ugyanis viszonylag könnyen elhagyhatják eredeti helyüket. Ha az így keletkezett hibahellyel szomszédos atomok valamelyike rendelkezik elegendő energiával ahhoz, hogy elhagyva saját helyét az üres rácshelyre ugorjon át, akkor a vakancia elmozdul a kristály belseje felé. Sorozatos ilyen helycserékkal a vakancia a kristály belsejébe „vándorol”. A folyamatot a 26. ábra szemlélteti.

Az előzőek szerint egy vakanciát gondolatban úgy hozhatunk létre, hogy egy atomot a kristály belsejéből a felületére viszünk. Nyilvánvaló, hogy ez a folyamat energiabefektetést igényel. Egy vakancia létrehozásához szükséges E_f energiát képződési energiának nevezzük. Ez az energia gyakorlatilag a kristály belső energiáját növeli meg. Ez azt jelenti, hogy a kristály



26. ábra
 Vakancia elmozdulása szoros illeszkedésű rácsban

térfogatnövekedésével járó munkavégzés elhanyagolhatóan kicsiny. A vakanciák képződési energiája általában 1-2 eV (0,16–0,32 aJ).

Egy szomszédos atomnak a vakancia helyére történő ugrásához, a vakancia „mozgásához” szükséges E_M energiát a vakancia mozgási aktiválási energiájának nevezzük, nagysága közel megegyezik a képződési energiával.

A vakanciák kialakulásának fent leírt folyamatánál lényegesen nagyobb energiabefektetést igényel, de ritkán mégis előfordul, hogy egy atom a kristály belsejében hagyja el a helyét és hagy vissza vakanciát. Ilyen esetekben a helyéről kilépő atom számára nincs üres rácshely és így rácsközi (intersticiális) helyzetbe szorul. Az egyidejűleg keletkezett vakancia – intersticiális párokat Frenkel-hibáknak nevezzük.

A vakanciák elvileg bármilyen kristályban felléphetnek. Az intersticiális atomok azonban csak ott tudnak elhelyezkedni, ahol ehhez elegendő hely van. Ez pedig a kristályt alkotó atomok térbeli elrendeződésétől függ. Az intersticiális helyek térfogata a rácspan általában jóval kisebb az atom vagy ion térfogatánál, ezért ahhoz, hogy egy atom intersticiális helyzetbe kerüljön, a rács szomszédos tartományait jelentősen deformálni kell helyet szorítania magának. Az intersticiális atomok képződési energiája ezért lényegesen, mintegy háromszor-öttször nagyobb a vakanciáénál.

3.1.2. Ponthibák hatása a fémek tulajdonságaira

A vakanciák, az intersticiálisok körül levő atomok eredeti helyükhöz képest elmozdulva kerülnek új egyensúlyi helyzetbe. A rács eredeti szerkezetének deformálódása rugalmas feszültséget ébreszt a kristályban. A ponthibákat és ezáltal belső feszültségeket tartalmazó kristály mechanikai tulajdonságai megváltoznak, az anyag keményebbé, nehezebben alakíthatóvá válik (l. még a 3.2. szakaszt).

A gyakorlatban felhasznált fémek többnyire ötvözetek. Az ötvöző atomok, amelyek rendszerint az alapfémtől eltérő kémiai tulajdonságaik és méretük, nem tudnak zavartalanul beépülni a kristályrácsba. Ezért az ötvözőket tartalmazó fém tulajdonságai

lényegesen eltérhetnek az alapfém tulajdonságaitól (mechanikai tulajdonságokban, elektromos vezetőképességben stb.). Bizonyos esetekben a fémhez adagolt ötvözők, ha atomi méretük engedi, a kristályrács intersticiális helyeit foglalják el (pl. a Fe-C ötvözetben a C atomok).

3.1.3. Ponthibák ionkristályokban

Bármely típusu kristályban csak olyan ponthibák keletkezhetnek, amelyeknél a kristály elektromos egyensulya nem bomlik meg. Az ionkristályokban ezért nem keletkezhet csak egy negatív, vagy csak egy pozitív ion helyén vakancia, mert ez az elektromos egyensulyt megbontaná; ionrácsban egyidejűleg mindig két vakancia keletkezik, egyik egy negatív, a másik egy pozitív ion helyén. Az ilyen vakanciapárost Schottky-hibának nevezzük.

A következőkben egy érdekes példán mutatjuk be a ponthibák hatását.

Az optikailag átlátszó ionkristályok, pl. KCl , KBr , $NaCl$, tiszta állapotban teljesen színtelenek, azonban ha alkálifém vagy halogén elem gőzében hevítik vagy ionizáló, pl. röntgensugárzásnak teszik ki őket, színesekké válnak. A jelenséget olyan kristályhibák létrejöttével értelmezhetjük, amelyek jelenléte a kristály látható fényre vonatkozó abszorpciós sávjában új elektronállapotok kialakulását eredményezi. Az ilyen kristályhibákat szincentrumoknak nevezzük.

A legjobban ismert szincentrum az un. F-centrum. Ha alkáli-halogenid kristályokat alkálifémek gőzében hevítenek, majd sötétben tartva szobahőmérsékletre hűtenek, a kristályban F-centrumok keletkeznek. A korábban színtelen $NaCl$ kristály F-centrumok hatására sárgásbarnára, a KCl kékre színeződik.

Az F-centrumok a következőképpen alakulnak ki: A magas hőmérsékletű hevítéskor a fémgőzből alkáliatomok lépnek be a kristályba, ahol alkáliionhelyre kerülve elektront adnak le a kristálynak. A kristályban a negatív ionok hiányából adódó un. negatívion-vakanciák negatívöltés-hiányt, azaz pozitív töltést képviselnek és így befogadják az alkáliatom által leadott elektront. Az elektron azonban nincs erősen lokalizálva a vakanciára, hanem jelentős kölcsönhatásban van a környező pozitív ionok-

kal is. Az elektron és a pozitív töltést képviselő vakancia kölcsönhatását a hidrogénatom elektronfelhő – proton kölcsönhatásához hasonlíthatjuk. A hidrogén 1s alapállapotához hasonlítható elektronállapot fényabszorpcióval a 2p hidrogénállapotnak megfelelő energiaszintre gerjeszthető. A kristály tehát a látható szinkép egyes hullámhosszait elnyeli és így színesnek látszik.

A jelenség kísérleti megvalósításával egy másik modul foglalkozik részletesen.

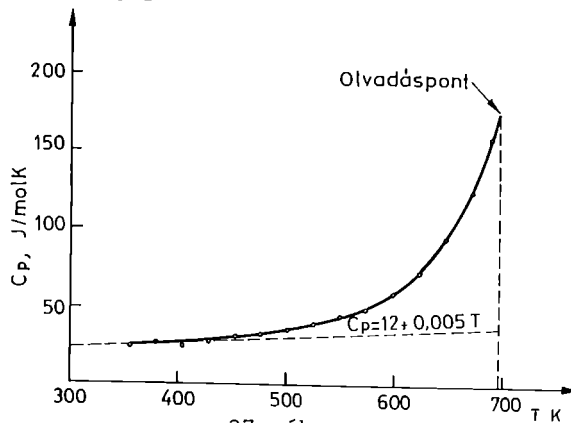
3.1.4. Ponthibák atomrácsban

Ponthibák atomrácsu kristályokban különösen az elektromos vezetési tulajdonságokat befolyásolják. Ezen hatások pontos ismerete a félvezetők tulajdonságainak vizsgálatában különösen fontos feladat.

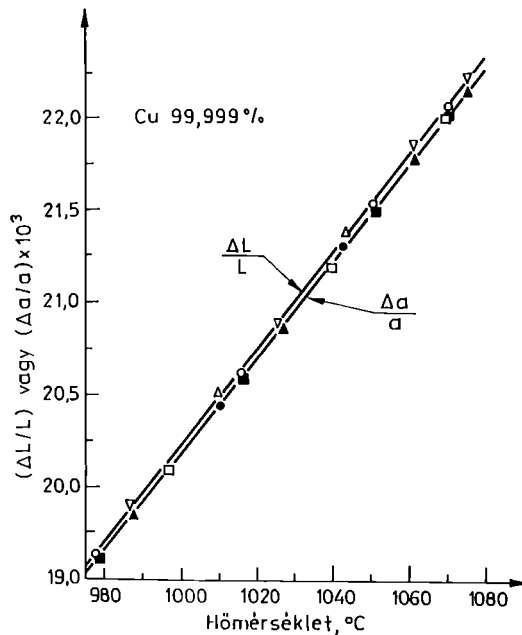
3.1.5. Ponthibák termodinamikai stabilitása

A szilárd anyagok olvadásponthoz közeli viselkedése több olyan sajátos vonást mutat, amely arra utal, hogy hőmérséklet-növekedéskor folytonosan hibák keletkeznek az anyagban. Ilyenek pl. a következők:

1. A fajhő hőmérséklettel való növekedése az olvadáspont előtt jelentősen meggyorsul (27. ábra).



27. ábra
AgBr mólhője az olvadáspont környezetében
(A szaggatott vonallal rajzolt egyenes
a hibamentes kristály mólhője)



28. ábra
Réz makroszkopikus hőtágulásának
és rácsállandójának változása
a hőmérséklet függvényében

2. A makroszkopikus hőtágulás nagyobb mértékű, mint a rácsparaméter növekedése (28. ábra).

Ezek a jelenségek könnyen értelmezhetők, ha fellépésüket a hőmérséklettel egyre növekvő egyensúlyi ponthiba-koncentrációnak tulajdonítjuk. Ez az egyensúlyi koncentráció számítással is viszonylag egyszerűen meghatározható.

A részletes számítással nem foglalkozunk, de egy rövid megfontolást érdemes tennünk annak érdekében, hogy belássuk, miért szükséges a termikus egyensúlyhoz vakanciák jelenléte a kristályban. A statisztikus fizika elemeiből tudjuk azt, hogy egy nagy számú részecskéből álló rendszer adott makroállapotának kialakulása annál valószínűbb, mennél nagyobb számú mikroállapottal valósítható meg. Tekintsünk most egy kristályt, amely N azonos atomból épül fel. Tegyük fel, hogy az N atom tökéletesen betölti az N rácspontból álló kristályrácsot (tehát a kristályban nincs üres rácspont). Nyilvánvaló, hogy ez az állapot csak egyetlen mikroállapottal valósítható meg, hiszen pl. két azonos

atom felcserélése két adott rácsponton nem eredményez új mikroállapotot. Hozzunk most létre gondolatban egy vakanciát, azaz álljon most a kristály $N+1$ rácspontból. Ekkor a lehetséges mikroállapotok száma már $N+1$, mert bármelyik rácspont lehet az üres rácshely. Mivel pl. egy molnyi anyagban $\approx 6 \cdot 10^{23}$, tehát nagyon nagy számú atom van, ezért egy makroszkopikus méretű kristályban a vakanciák jelenléte miatt a lehetséges mikroállapotok száma nagyon nagy mértékben megnő. Ez az oka annak, hogy bár a vakanciák növelik a kristály belső energiáját, a termikus egyensúlyban mégis kedvező bizonyos számú vakancia jelenléte.

Az egyensúlyhoz tartozó vakanciák számát az a határeset jelöli ki, amikor a mikroállapotok számának növekedéséből adódó kedvező hatást a belső energia növekedéséből adódó kedvezőtlen hatás kiegyensúlyozza. Ez a határeset a statisztikus fizika módszereivel egyértelműen meghatározható.

Egy közelítő becslést mi is végezhetünk az egyensúlyi vakanciák számára vonatkozóan. Tudjuk azt, hogy a kristály rácspontjaiban levő atomok nincsenek nyugalomban, hanem a hőmozgás következtében az egyensúlyi helyzetük körül rezgőmozgást végeznek. Az ehhez tartozó átlagos energia T hőmérsékleten $3kT$ (k a Boltzmann-állandó). Ez az energia meglehetősen kicsiny, szobahőmérsékleten mindössze kb. $0,08$ eV ($0,00128$ aJ). Ez azonban csak az átlagos energia, ami nem zárja ki azt, hogy nullától különböző valószínűséggel legyenek olyan atomok, amelyek energiája egy adott időpillanatban ennél lényegesen nagyobb.

Vakanciák olyan atomok helyén keletkezhetnek, amelyek energiája nagyobb vagy egyenlő, mint a képződési energia. Az ilyen atomok száma a Boltzmann-statisztika szerint:

$$n = Ne^{-\frac{E_F}{kT}}. \quad (1)$$

Eredményünk jó közelítéssel megadja a vakanciák számát a tapasztalattal is megegyezésben. Ha bevezetjük a $c = n/N$ definícióval a vakanciakoncentrációt, akkor eredményünket a következő alakban is felírhatjuk:

$$c = e^{-\frac{E_F}{kT}}. \quad (2)$$

Mivel a hőmérséklet a negatív értékű kitevő nevezőjében van, ezért a vakanciakonzentráció növekvő hőmérséklettel rohamosan nő. Ha E_F értékét közelítőleg 1 eV-nak, a hőmérsékletet 1000 K-nek (627 °C-nak) vesszük, akkor a koncentrációra $c \approx 10^{-5}$ értéket kapunk. Ebből látható, hogy bár a vakanciák száma nagyon nagy lehet, a relatív hányaduk az atomok (ionok) által elfoglalt rácspontok számához viszonyítva csak igen kicsi. A maximális vakanciakonzentráció pl. fémekben az olvadáspont közelében néhány-szor 10^{-4} körüli értékű.

3.1.6. Diffúzió szilárdtestekben

A szilárdtestben végbemenő atom- (ion) vándorlást diffúzió-nak nevezzük. Egy atom elmozdulása egy adott rácspontból több-féle mechanizmussal (pl. két szomszédos atom helycseréjével) elképzelhető, de gyakorlatilag csak az az eset valósul meg, amikor egy atom egy szomszédos vakancia helyére ugrik (l. a 26. ábrát). Röviden azt mondhatjuk, hogy szilárdtestekben a diffúzió (az atomok mozgása a kristályrácsban) a vakanciák mozgásával megy végbe. Világos, hogy ha vakanciák mozognak (áramlanak) egy adott irányban, akkor az ellenkező irányban atomok mozognak (áramlanak).

Diffúzióval kapcsolatos atomi mozgások minden hőmérsékleten vannak a szilárdtestben. Azonban a diffúzió sebessége, amit az időegység alatt bekövetkező atomi ugrások számával jellemezhetünk, erősen függ a hőmérséklettől. Az eddigiek alapján ezt a hőmérséklet-függést könnyen meg is határozhatjuk. Világos ugyanis, hogy az időegységenkénti atomi ugrások száma arányos egyrészt a kristályban levő vakanciák számával (ennyi helyre ugorhat át atom), másrészt arányos annak a valószínűségével, hogy a vakanciák melletti atomok rendelkeznek akkora energiával, amekkora a vakancia helyére történő ugráshoz szükséges. Ez utóbbit neveztük a vakancia E_M mozgási aktiválási energiájának, amivel a kérdéses valószínűséget az (1) alattihoz hasonló, E_M -et is tartalmazó kifejezéssel adhatjuk meg. A diffúzió sebességét (azaz az egységnyi idő alatt bekövetkező atomi ugrások számát)

jellemző D mennyiséget mindezek alapján a következő formában írhatjuk fel:

$$D = D_0 e^{-\frac{E_F}{kT}} \cdot e^{-\frac{E_M}{kT}} = D_0 e^{-\frac{E_F + E_M}{kT}}, \quad (3)$$

ahol D_0 arányossági tényező, amely független a hőmérséklettől. A D mennyiséget diffúziós együtthatónak, míg a

$$Q = E_F + E_M$$

energiát a diffúzió aktiválási energiájának nevezzük.

A Q értéke pl. a fémek egy jelentős részénél kb. 2 eV. Szobahőmérsékleten a (3)-ban szereplő exponenciális tényező olyan kicsiny, hogy a diffúzió sebessége ekkor gyakorlatilag nulla. Ha azonban a hőmérsékletet megnöveljük, akkor a diffúzió sebessége olyan rohamosan nő, hogy pl. 500 °C-on már óra nagyságrendű idő alatt makroszkopikus távolságu atomi elmozdulások jönnek létre.

A szilárdtestek adott hőmérsékletre történő felhevitését és adott időtartamig magas hőfokon való tartását hőkezelésnek nevezzük. A hőkezelések alapvetően fontosak ipari termékek előállításakor. Hőkezeléssel, ill. az ennek során létrejövő diffúzióval érhető el pl. az, hogy ötvözetekből készülő termékekben az ötvözők eloszlása egyenletes legyen.

3.1.7. Sugárzási károsodás

Ha egy szilárdtestbe nagy kinetikus energiájú atomi részecske (elektron, proton, neutron stb.) lép be, akkor rövidebb vagy hosszabb ut befutása után szükségképpen beleütközik egy rácspontban levő atomba (vagy ionba), s azt a helyéről kilökve intersticiális atom – vakancia pár keletkezését eredményezi. Az ilyen folyamatokat sugárzási károsodásnak nevezzük.

Ezek a folyamatok alapvetően fontosak pl. az atomreaktorok üzemelése során. Az atomreaktorok szerkezeti elemei ugyanis elkerülhetetlen sugárzási károsodásnak vannak kitéve. Mivel a keletkező kristályhibák a szerkezeti elemek fizikai tulajdonsága-

it jelentősen megváltoztathatják, ezért a reaktorok biztonságos üzemeltetése megköveteli a hibakeltési folyamatok pontos ismeretét.

A sugárzási károsodás szempontjából a legfontosabb folyamat a részecske rugalmas ütközése az anyag atomjaival vagy ionjaival. Az ennek során átadott energia a mechanikában megismert módon határozható meg. Legyen az anyagba beérkező részecske tömege m , a sebessége v , akkor a kinetikus energiája

$$E_k = \frac{1}{2} mv^2. \quad (4)$$

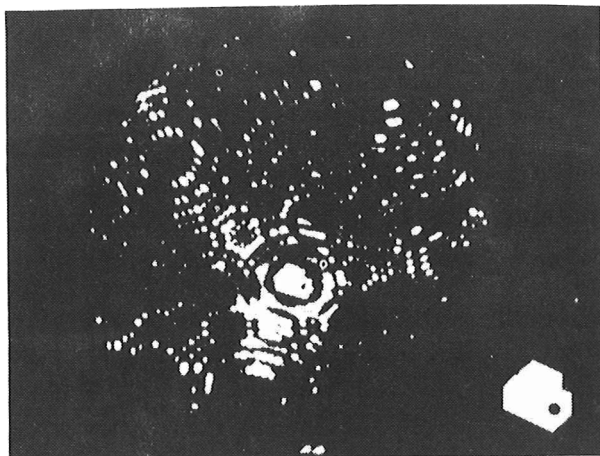
Egy ütközés eredményeként akkor lökődhet ki egy atom rácsközi helyre, ha az átadott energia kb. 30 eV vagy ennél nagyobb. Ennek alapján meghatározható, hogy a beérkező részecskének mekkora minimális energiával kell rendelkeznie ahhoz, hogy hibát hozzon létre.

A tényleges sugárzási károsodási folyamatokban a részecskék energiája általában sokkal nagyobb, mint az előbbi minimális energia. Pl. az atomreaktorban nagy számu olyan neutron lép be a szerkezeti elemekbe, amelyek energiája 1 MeV vagy nagyobb. Az ilyen nagy energiájú részecskékkel való ütközés olyan nagy energiát ad a kilökött atomnak, hogy az maga is képes hibát kelteni és így tovább. Ennek eredményeként egy hibakeltési sorozat alakul ki mindaddig, amíg az utoljára kilökött atom által átadható energia a 30 eV küszöbérték alá csökken.

A besugárzás eredményeként kialakuló végső hibaszerkezet még sok további tényezőtől függ. Pl. a hőmérséklettől függő sebességgel diffúzió lép fel, amelynek során a hibák átrendeződnek, vagy meg is szűnhetnek (pl. ha egy intersticiális atom üres rácshelyre ugrik). Az ilyen folyamatok vizsgálata a modern fizika egy fontos kutatási területét képezi.

3.1.8. A ponthibák hatásának kísérleti vizsgálata

A ponthibák hatásának kísérleti vizsgálata minden olyan fizikai tulajdonság tanulmányozásával lehetséges, amelyben mérhető változás lép fel a hibák hatására. Két ilyen lehetőséget már em-



29. ábra

Térionmikroszkópban a valódi kristálybeli vakancia is láthatóvá válik. A vakancia környezetének képét a jobb alsó sarokban kinagyítva láthatjuk

litettünk. Ezek a makroszkopikus hőtágulás és a rácsparaméter egyidejű mérése, valamint a fajhőmérés.

Egy további jól alkalmazható vizsgálati módszer az elektromos ellenállás mérése. A hibák hatására a fémek elektromos ellenállása megnövekszik, s a növekedés mértékéből meghatározható a hiba koncentrációja.

Mennyiségi analízisre ugyan nem alkalmas, de nagyon fontos vizsgálati módszer a vakanciák közvetlen megfigyelése. Ez a térionmikroszkóp segítségével valósítható meg. Egy térionmikroszkópos felvételt mutat a 29. ábra. Az ilyen vizsgálatok közvetlen kísérleti bizonyítékot szolgáltatnak a vakanciák létezésére.

3.2. Szilárdtestek képlékeny alakváltozása.

Diszlokációk

Már korán felismerték, hogy pl. a fémek viszonylag egyszerű eszközökkel változatos formájúvá alakíthatók, sőt ugyancsak egyszerű folyamatokkal – pl. az acél izzításával, majd vízben való gyors lehűtésével, más szóval edzésével – igen nagy szilárdságúvá tehetők.

Mindenki hajlítgatott már drótot, és tapasztalta, hogy az egymás utáni hajlítgatások egyre nagyobb erőt igényelnek. A drót a hajlítgatások hatására keményedik. Közismert tapasztalat az is, hogy ha egy ilyen megkeményedett drótot felizzítunk, akkor az kilágyul, újra kis erővel hajlíthatóvá válik.

Ezen egyszerű tapasztalatok felvetnek egy sor kérdést. Vajon milyen változások mennek végbe az anyagban a fenti folyamatok során? Miért van az, hogy pl. egy U alakúra meghajlított vasrud megtartja az alakját és nem egyenesedik ki? Miért keményedik az anyag alakításkor, és miért lágyul ki izzitáskor?

Érdekes, hogy bár ősi tapasztalatokról van szó, mégis a fenti kérdések megválaszolásához vezető első lépés csak 1934-ben történt meg. Azóta e problémakör vizsgálata óriási méretűvé vált és jelenleg is a világ tudományos kutatásának jelentős részét alkotja. Ma már számos alapvető ismerettel rendelkezünk, amelyek lehetővé teszik a szilárd anyagok mechanikai tulajdonságainak tudatos befolyásolását, pl. kis fajsúlyu és nagy szilárdságu, ill. magas hőmérsékleten is nagy szilárdságu anyagok létrehozását stb. Számos nyitott kérdés megválaszolása pedig a jövő kutatásának a feladata.

A problémakör alapvető jelenségeinek megismeréséhez célszerű a szilárdtestek legfontosabb mechanikai tulajdonságait röviden áttekintenünk.

3.2.1. Rugalmas alakváltozás

Külső erők hatására a szilárdtestek alakja megváltozik. Az ilyen alakváltozásoknak vagy más szóval deformációknak a vizsgálata alapvető fontosságú a szilárdtestek gyakorlati felhasználása szempontjából. Az alakváltozások vizsgálata során a feladat annak meghatározása, hogy ha adott külső erőhatásokkal terhelünk egy testet, hogyan módosul az alakja a terheletlen állapotához képest.

Valamely test alakváltozása két jellegzetes részre osztható. Az egyik rész a külső terhelés megszüntetése után megszűnik, míg a másik rész azután is fennmarad. Nem nagyon kis deformáció esetén a kétfajta alakváltozás mindig együttesen jelenik meg. Az

alakváltozásnak a maradó vagy másnéven képlékeny része igen sok paraméter bonyolult függvénye, mert a reális szilárdtestek alakváltozásában szerepet játszó hatások rendkívül összetettek.

A jelenség vizsgálata nagymértékben egyszerűsíthető különböző idealizált tulajdonságu testek fogalmának bevezetésével. Az idealizálást az teszi jogossá, hogy bizonyos körülmények között a valóságos testek jól megközelítik az ideális test viselkedését. Tökéletesen rugalmasnak nevezzük pl. azt a testet, amely az alakváltozást előidéző erők megszűnése után teljesen visszanyeri az eredeti alakját úgy, hogy a folyamat során mechanikai energiaveszteség nem lép fel. Ilyen test a valóságban nincs, de ha a reális testeken csak nagyon kis alakváltozást idézünk elő (pl. egy fémdrótot néhány tized %-kal megnyújtunk), akkor ennek maradó része, valamint az energiaveszteség gyakorlatilag nulla lesz. Elég kicsiny alakváltozás esetén ezért bármely szilárdtest tökéletesen rugalmasnak tekinthető.

A szilárdtestek rugalmas tulajdonságainak vizsgálata a XVII., XVIII. században kezdődött Robert Hooke, Johann Bernoulli, Leonard Euler és mások munkássága révén. A XIX. és XX. században sok neves matematikus és fizikus munkája nyomán születtek meg a rugalmasságtan alapelvei.

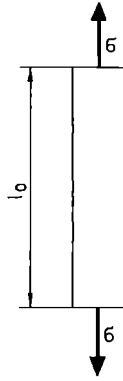
Az általános kérdések részletei helyett idézzünk fel két egyszerű, de igen fontos alapesetet!

A legegyszerűbb rugalmas deformációk a homogén nyújtás és a homogén nyírás. Homogén nyújtásról beszélünk akkor, ha egy egyenletes keresztmetszetű homogén anyagu rudra – két véglapja mentén – a véglapra merőleges és egymással ellentétes irányu erőhatást gyakorolunk (30. ábra). Az erőhatás és az alakváltozás (a relativ megnyulás) között az összefüggést Hooke törvénye adja meg, amely szerint

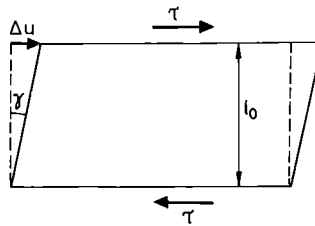
$$\frac{\Delta l}{l_0} = \frac{F}{EA}, \quad (5)$$

ahol l_0 a rud eredeti hossza, Δl a megnyulása, A a keresztmetszete és E az un. rugalmassági modulus. A $\sigma = F/A$ mennyiséget nyújtó- vagy normális feszültségnek nevezzük. Ezzel a fenti összefüggés

$$\sigma = E \epsilon \quad (6)$$



30. ábra
Homogén rud rugalmas nyújtása



31. ábra
Homogén test rugalmas nyírása

alakban írható, ahol az $\epsilon = \Delta l / l_0$ mennyiség a nyulási deformáció mértékére jellemző.

A másik egyszerű deformáció a homogén nyírás. Ez akkor jön létre, ha pl. egy téglalakú testre lapjával párhuzamos erőhatást gyakorolunk (31. ábra). Ennek hatására a téglalakat az ábrán látható alakot veszi fel. A deformáció mértéke most a

$$\gamma = \frac{\Delta u}{l_0}$$

nyírás szöggel jellemezhető. Legyen az erővel párhuzamos felületek nagysága A . Bevezetve a $\tau = F/A$ definícióval az ún. nyírás feszültséget, a Hooke-törvény most a következőképpen adható meg:

$$\tau = \mu \gamma, \quad (7)$$

ahol μ a nyírás (csusztatási) rugalmassági modulus (fémekre E és μ egyaránt 10 GPa nagyságrendű mennyiség).

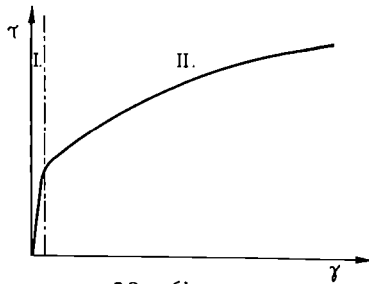
3.2.2. Képlékeny alakváltozás

Növekvő deformáció során az alakváltozás mind nagyobb része maradó lesz. Azt a legkisebb feszültséget, amelynek alkalmazásakor képlékeny alakváltozás lép fel, folyáshatárnak nevezik. Ez általában nem egyértelmű adat, mert az alakváltozás képlékeny része fokozatosan nő. Ezért a gyakorlatban a folyáshatárt a 0,2%-os deformációhoz rögzítik.

A folyáshatárnál nagyobb feszültségeknél igen nagy mértékű maradó alakváltozások léphetnek fel.

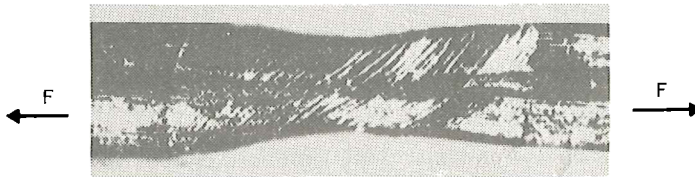
A valódi testek képlékeny alakváltozása során a további alakításhoz egyre nagyobb feszültségek szükségesek (32. ábra). Ezt a jelenséget alakítási keményedésnek nevezzük.

A kristályszerkezet szerepe a képlékeny alakváltozásban jól érzékelhető az egyetlen kristályból álló test (egykristály) képlékeny alakváltozásának vizsgálatakor. Az ilyen testek esetében az alakváltozás mindig jól definiált síkok mentén, jól meghatározott irányokban megy végbe (33. ábra). Világos, hogy ezen sí-



32. ábra

Valódi testek feszültség – deformáció összefüggése
(I. rugalmas, II. képlékeny alakváltozás)



33. ábra

Zn egykristály képlékeny nyújtásakor az alakváltozás nem homogén. Egyes síkok mentén az elcsuszás nagysága lényegesen nagyobb, mint a síkok közötti részeken

kok és irányok a kristály szerkezetével kell, hogy összefüggjenek.

A következőkben a kristályos testek alakváltozásának mechanizmusát tekintjük át. Célunk azoknak a folyamatoknak a meghatározása, amelyek alapján megérthetjük a szilárdtestek mechanikai tulajdonságait. Összefoglalva az előzőeket, a következő kérdésekre keresünk választ:

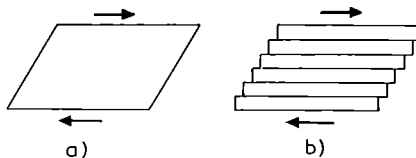
1. A képlékeny alakváltozás folyáshatárának meghatározása a kristályszerkezet figyelembevételével.
2. Az egykristályok inhomogén alakváltozásának mibenléte.
3. Az alakítási keményedés fellépésének és a hőkezelés során bekövetkező lágyulásnak az oka.

3.2.3. A tökéletes kristály képlékeny alakváltozása

Az egyszerűség kedvéért a következőkben csak az egyszerű köbös kristály tárgyalására szorítkozunk, a kapott eredmények azonban általános érvényűek.

A tökéletes kristály maradó alakváltozásakor az egyes atom-síkok csuszának el egymás mentén, kártyalapok egymáson való elcsuszásához hasonlóan (34. ábra). Azokat a síkokat, amelyek mentén a csuszás fellép, csuszási síkoknak nevezzük. Az elcsuszás irányát és nagyságát megadó vektor a csuszásvektor.

Ha megkíséreljük a kristályos anyagok képlékeny alakváltozását a tökéletes kristály modelljével leírni, akkor számos ellentmondásra jutunk. Világos pl., hogy a csuszás nagyságát azonosnak kell feltételeznünk a különböző párhuzamos csuszási síkok mentén, mert tökéletes kristály esetén egyetlen sík sincs kitüntetve a többihez képest. Ez azonban ellentmond a tapasztalatnak, mert az egykristályok alakváltozásakor mindig találunk kitün-



34. ábra

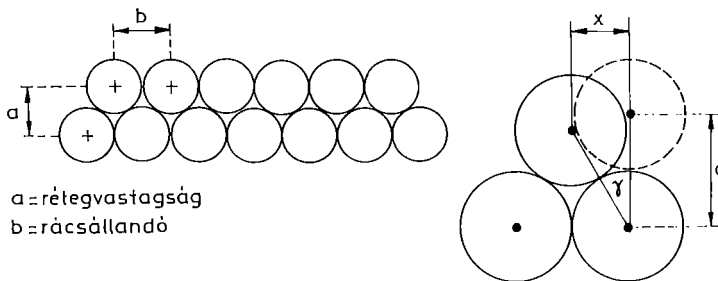
Kristályok maradó (képlékeny) alakváltozása nem homogén nyírás által megy végbe (a), hanem egyes atomsíkok mentén történő elcsuszással (b)

tett csuszási síkokat, amelyek mentén az elcsuszás lényegesen nagyobb a többihez képest (33. ábra).

Még nagyobb ellentmondást találunk, ha a tökéletes kristály modellje alapján akarjuk meghatározni a képlékeny alakváltozás megindításához szükséges kritikus nyirási feszültséget. Kritikus nyirási feszültségnek nevezzük a jól hőkezelt anyagok tiszta nyiráshoz tartozó folyáshatárát. A tapasztalat szerint ennek értéke a különböző anyagokra $(10^{-4} \dots 10^{-5}) \mu$, ahol μ a (7) összefüggésben már szerepelt nyirási rugalmassági modulus.

A 35. ábra mutatja egy köbös kristály két atomsíkjának merőleges metszetét. Ha a két atomsíkot egymáshoz képest kissé elmozdítjuk, akkor az atomok közti erők következtében az elmozdítóerővel ellentétes irányu erő lép fel. Ez az erő a két atomsík eredeti helyzetét akarja visszaállítani. Ez a hatás mindaddig bekövetkezik, amíg az elmozdulás az atomtávolság felét ($b/2$) el nem éri. Szimmetriakokkból itt az atomoktól származó eredő erő nulla. Ha az elmozdulás $b/2$ -nél nagyobb, akkor az erők eredője ellenkező irányu lesz. Ha a két sík egymáshoz képest egy atomtávolsággal, azaz b -vel mozdul el, akkor új egyensúlyi helyzet áll elő, egy atomtávolsággal való maradé elcsuszás, azaz képlékeny alakváltozás alakul ki. Egy ilyen elcsuszás akkor történhet meg, ha le tudjuk győzni a legnagyobb visszatérítő erőhatást, amely a két sík $x \leq b/2$ elmozdulása során lép fel.

Nagyságrendi becslést szeretnénk nyerni a fentiek alapján a kritikus nyirási feszültségre. Meggondolásunkból következik, hogy az atomsíkok között működő erő az elmozdulás függvényében b szerint periodikus. Első megközelítésben a periodicitást szí-



35. ábra
Köbös kristály kritikus nyirási feszültségének meghatározása

nuszosnak tételezhetjük fel. Ezért az atomok közti erőhatásból származó visszatérítő feszültség a következő alakban vehető fel:

$$\tau = B \cdot \sin \left(\frac{2\pi}{b} x \right). \quad (8)$$

B értékét abból a feltételből határozhatjuk meg, hogy kicsiny elmozdulások esetén $|\sin(\frac{2\pi}{b}x) \approx \frac{2\pi}{b}x|$ a Hooke-törvény érvényes, és így (7) felhasználásával:

$$\mu \frac{x}{a} = B \frac{2\pi}{b} x.$$

Ebből $B = \mu b / (2\pi a)$, tehát tetszőleges x -re

$$\tau = \frac{\mu b}{2\pi a} \sin \left(\frac{2\pi}{b} x \right).$$

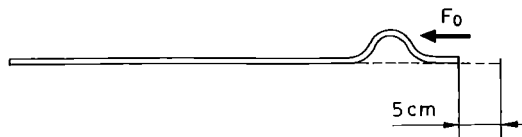
Ennek maximuma a tökéletes kristály kritikus csusztatófeszültsége, azaz $\tau_{kr} \approx \mu / (2\pi)$, mivel $a \approx b$. Ez több nagyságrendnyi eltérést jelent a tapasztalathoz képest. Az eltérés nem a (8) egyenletben megadott erőtvény helytelenségéből származik, mert a tökéletes kristály kritikus nyirási feszültségére pontos számításokból is $\mu/30$ adódik, amely még mindig sokkal nagyobb a tapasztalati értékeknél.

Világos, hogy a tökéletes kristály modellje az alakítási kémenyedésre sem adhat magyarázatot. Mivel a két félsiknek b -vel való elcsuszása után a kiindulási helyzet az eredetivel megegyezik, ezért tökéletes kristály esetén növekvő alakváltozással változatlan folyási (csusztató-) feszültségre volna szükség, ellentétben a tapasztalattal.

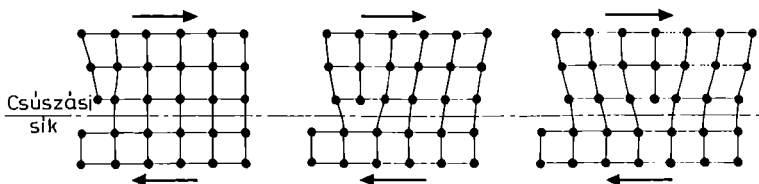
Az említett ellentmondások nyilvánvalóan abból származnak, hogy a valódi kristályok nem lehetnek tökéletesek, hanem tartalmazniuk kell olyan rendellenességeket (kristályhibákat), amelyek a képlékeny alakváltozás mechanizmusában alapvető szerepet játszanak.

Ezeket a kristályhibákat Orován Jenő és Polányi Mihály magyar, valamint G. J. Taylor angol kutatók ismerték fel egy, az előbbitől lényegesen különböző deformációs mechanizmus feltételezésével 1934-ben.

Gondolatmenetük megértéséhez nézzünk egy egyszerű példát! Azt a feladatot kapjuk, hogy mindössze 5 cm-rel huzzunk arrébb egy igen hosszú és nehéz futószőnyeget. A feladat megoldásának



36. ábra
Nehéz szőnyeg elmozdítása kis F_0 erővel



37. ábra
Diszlokáció kialakulása köbös kristályban

egyik módja az, hogy a szőnyeg végét megfogva nagy erő befektetésével az egész szőnyeget egyszerre huzzuk el 5 cm-rel (ez a megoldás analóg a fent elvégzett számításunkkal). Lehetséges azonban egy másik megoldás is; toljuk el a szőnyeg egyik végét 5 cm-rel, akkor a szőnyegen egy gyűrődés keletkezik (36. ábra). Ha az így keletkezett gyűrődést végigtoljuk a szőnyeg másik végéig, akkor az egész szőnyeget sikerül végül is elmozditanunk, és ez az első „direkt” megoldáshoz képest csak minimális erőbefektetést igényel.

Orován, Polányi és Taylor elméletének az alapját az képezi, hogy a csuszás lokális folyamat; a képlékeny alakváltozás bizonyos elcsuszott tartományok fokozatos kiterjedése révén, nem pedig a csuszási síkok egyidejű, homogén elcsuszásával megy végbe. Ebből pedig nyilvánvaló, hogy a csuszási síkban létezniük kell bizonyos határoknak, amelyek a már elcsuszott és a még el nem csuszott tartományokat határolják. Ezeket a határokat nevezzük diszlokációknak és a csuszási folyamatot (az elcsuszott tartományok kiterjedését) a diszlokációk mozgásának.

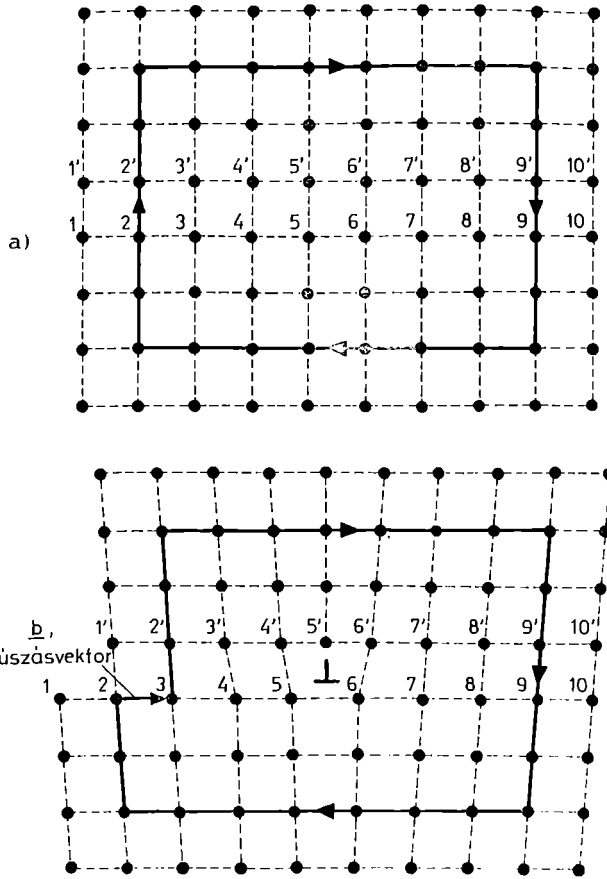
Vizsgáljuk meg, hogy a csuszásnak ez a mechanizmusa milyen rendellenességeket okoz a kristályrácsban! A deformálóerő hatására a kristály legszélső rácspontjait elfoglaló atomok az erőhatás következtében a rács következő rétegeire torlódhatnak, azt beljebb taszítják és eredeti helyükhöz képest egy rácsállandónyival elmozdulva újra egyensúlyi helyzetbe kerülnek (37. ábra).

Ezzel azonban a következő réteg atomjai jutnak kedvezőtlen „rácsközi” helyzetbe, és azok ismét csak további szomszédok ki-szorításával tudnak közelítőleg rácspontra kerülni. Az ilyen módon megkezdett folyamatban „sűrűsödés” vonul végig a csuszató-feszültség hatására az elmozduló kristályfélen (l. a 37. ábrát). A „sűrűsödést” okozó, rácsközi helyzetbe ékelődött atomsík és a csuszási sík metszéspontja (az elcsuszott és el nem csuszott kristálytartományok határa a csuszási síkban) a diszlokáció. A diszlokációvonal mentén az egyes atomok körüli szomszédok el-helyezkedése jelentősen eltér az egyszerű köbös elrendezéstől. Ha a diszlokáció végigmozog a csuszósíkon (a kristály egyik ol-dalától a másikig), akkor a kristályon egy atomtávolságnyi ma-radandó alakváltozás lép fel. A képlékeny alakváltozást tehát jellegzetes hibavonalak – diszlokációk – mozgásával értelmezhet-jük.

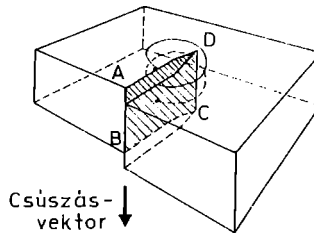
A diszlokáció közvetlen környezetétől kicsit távolabb az atomok rendje kicsiny rugalmas nyirásoktól eltekintve nem válto-zott. Az ilyen anyagot „jó” anyagnak nevezzük. A 38. ábrán hi-bátlan, ideális rácsban vettünk fel egy „atomi lépésekből” álló zárt görbét, majd diszlokációt hoztunk létre a kristályban úgy, hogy a korábban felvett atomi lépésekből álló görbe továbbra is jó anyagban haladjon. A diszlokáció létrehozásával azonban a görbe korábbi zártsága megszűnt, s a záródási hiány épp az el-csuszás vektorával egyenlő. Az ilyen módon definiált zárt görbét Burgers-körnek, a csuszás \underline{b} vektorát pedig Burgers-vektornak ne-vezzük. Ez utóbbi a diszlokáció jellemző paramétere.

A 38. ábrával szemléltetett diszlokációvonal éppen a rács-közi helyzetbe ékelődött többletatomsík éle mentén, a papír sík-jára merőlegesen húzódik. Az ilyen diszlokációkat éldiszloká-cióknak nevezzük. Az éldiszlokáció vonala és a csuszást jellemző Burgers-vektor merőlegesek egymásra.

A 39. ábra egy olyan elcsusztatást szemléltet, amely esetén az elcsuszott és a még el nem csuszott tartományok határa – a diszlokációvonal – és az elcsuszást jellemző Burgers-vektor pár-huzamosak egymással. Az ilyen elcsuszás eredményeként a kristály diszlokációvonalhoz közeli atomjai csavarvonal mentén helyezked-nek el, ezért az ilyen típusú diszlokációkat csavardiszlokációk-nak nevezzük.



38. ábra
 a) Tökéletes kristály; b) éldiszlókációs
 köbös kristályban (a \perp szimbólum a diszlókációvonal
 helyét jelöli)



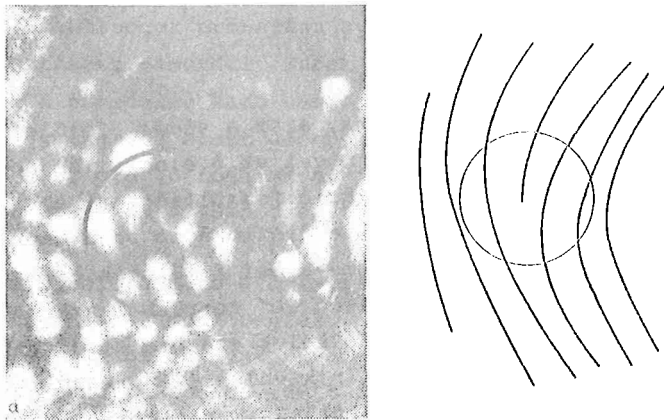
39. ábra
 Csavardiszlókáció modellje (az elcsuszott ABCD terület
 CD határvonala a diszlókáció)

Az olyan diszlokációvonalat, amely sem nem tiszta él-, sem nem tiszta csavarjellegű, „kevert” diszlokációnak nevezzük. Ez akkor keletkezik, ha az elcsuszás irányát jellemző Burgers-vektor valamilyen 0 -tól és $\pi/2$ -től különböző szöget zár be az elcsuszott terület határvonalával, és úgy tekinthető, mintha él- és csavarkomponensekből tevődne össze.

A kristályban általában a diszlokációvonalak nem egyenesek, az elcsuszott tartományt határoló görbe érintője minden pontban más szöget zár be a csuszás irányával, tehát a diszlokáció folyamatosan változtathatja a jellegét. Az él- vagy csavarjelleg ezért általában nem egy egész diszlokáció tulajdonsága.

A képlékeny alakítás diszlokációs mechanizmusa kezdetben csupán feltételezés, az elméletet a gyakorlattal összhangba hozó munkahipotézis volt. A korszerű elektronmikroszkópia fejlődésével azonban a diszlokációk létezése és alapvető szerepe a képlékeny deformáció folyamatában közvetlenül megfigyelhetővé vált. A 40. ábra térionmikroszkópban megfigyelt diszlokációról készült fényképfelvételt mutat.

A szilárdtestek képlékeny alakítási mechanizmusának ismerete a nemfémek anyagok esetén is alapvető. Pl. a kősótelepeken előforduló csuszamlások a NaCl -kristály képlékeny alakváltozására vezethetők vissza. Az ionkristályok képlékeny alakváltozása is a fémekéhez hasonlóan, az egyes rétegek elcsuszását eredményező



40. ábra
Diszlokáció valódi kristályban
(térionmikroszkópos felvétel)

diszlokációmozgás révén értelmezhető. Elektrosztatikus erőkkel összetartott ionrács esetén azonban a diszlokációs mechanizmus tárgyalása jóval bonyolultabb, mint a szoros térkitöltésű fémek esetén.

3.2.4. A diszlokációk kvantitatív tulajdonságai

A diszlokációk a kristályban rugalmas feszültségeket ébresztenek. Ez energiateljesítményként eredményez a diszlokáció körül és más feszültségterekkel kölcsönhatásra vezet. Ezen tulajdonságok kvantitatív ismerete alapvetően fontos a diszlokációk és a képlékeny alakváltozás kapcsolatának vizsgálatában. A diszlokációk ilyen kvantitatív tulajdonságai legegyszerűbben úgy határozhatók meg, hogy a diszlokációt gondolatban rugalmas kontinuumban (folytonos tömegeloszlású testben) hozzuk létre, és a rugalmasságon segítségével írjuk le a kialakuló deformációkat, ill. feszültségeket.

Rugalmas kontinuumban a diszlokációvonal, korábbi definícióknak megfelelően, továbbra is a b -vel elcsuszott, ill. a még el nem csuszott tartományok határvonala. Képzeljük el, hogy a rugalmas kontinuumot egy darabon felvágjuk, majd a vágási felület két oldalát elmozdítjuk egymáshoz képest mindenütt b -vel, utána a vágási felület mentén az anyagot ismét összeragasztjuk! Nyilvánvaló, hogy a vágási felület határvonala alkotja most a diszlokációt.

A diszlokációk energiája

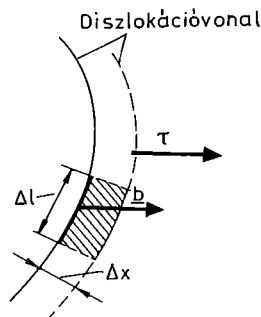
A diszlokáció létrehozásához, azaz a vágási felület két oldalának egymáshoz viszonyított b -vel való elmozdításához munkát kell végeznünk, amely a diszlokáció feszültségterében rugalmas energiaként halmozódik fel. Ezt a diszlokáció sajátenergiájának nevezzük. Nyilvánvaló, hogy ha a vágási felületek elmozdításakor már van az anyagban egy valamilyen „A” forrásból származó feszültségter, akkor a diszlokáció keletkezésére fordított munkának a diszlokáció sajátenergiáján kívül az „A” feszültségek ellen végzett munkát is fedeznie kell. E munka révén felhalmozódó energiát a diszlokáció és az „A” feszültségter kölcsönhatási energiájának nevezzük.

A képlékeny alakváltozás megindításához szükséges feszültség nagysága jelentősen függ a diszlokációk és az ötvözőatomok kölcsönhatásától. Az ötvözőatomok mérete általában különbözik az alapanyag atomjaitól, ezért az ötvözőatomok körül is feszültségtér alakul ki. Emiatt a diszlokációk és ötvözőatomok között kölcsönhatás jön létre, amely azt eredményezi, hogy ha a diffúzió elegendően gyors, akkor a diszlokációk körül az ötvözőatom-koncentráció nagyobb lesz, mint máshol. Ennek az okát könnyen megérthetjük, ha arra gondolunk, hogy egy nagy méretű ötvözőatom elhelyezkedése kedvező a diszlokáció körüli lazább elrendezésű atomok között, míg egy kis méretű atom elhelyezkedése a diszlokáció körüli tömörebb atomok között előnyös. Ezért az éldiszlokáció körül bármilyen típusú ötvözőatomok feldusulnak, ha a diffúzió ezt lehetővé teszi.

Diszlokációra ható erő

Külső feszültség hatására a kristályon a diszlokációmozgás következményeként, tehát meghatározott atomcsoportok kollektív mozgása és nagyszámú atom kölcsönhatásának eredményeként alakul ki maradandó alakváltozás. Ennek a folyamatnak a közvetlen menynyiségi vizsgálata nyilvánvalóan nagy nehézségekkel járna. Leegyszerűsödik azonban a leírás, ha a bonyolult atomi mozgások helyett a diszlokációvonal elmozdulását tárgyaljuk. A szemléletesség kedvéért ilyenkor azt mondhatjuk, hogy külső hatástól származó feszültségek erőhatást gyakorolnak a diszlokációra és az ennek hatására elmozdul. Ennek az erőnek a fogalma azonban különbözik a tömegekre ható newtoni erő fogalmától. Ez az erő a kristály egy meghatározott geometriai struktúrája miatt lép fel, amelyet a diszlokáció fogalmával jellemezünk. Ezért a diszlokációra ható erőt nem szabad összetévesztetni az atomokra ható erővel.

A diszlokációra ható erő fogalmát úgy alapozhatjuk meg, hogy megvizsgáljuk azt a munkavégzést, ami ahhoz szükséges, hogy a diszlokációvonal Δl darabja a vonalra merőlegesen Δx -szel elmozduljon (41. ábra). Az elcsuszott terület ekkor $\Delta l \Delta x$ -szel növekszik. Az ehhez szükséges munkavégzést könnyen meghatározhatjuk. Legyen a diszlokáció csuszósíkjában, a csuszás irányában működő



41. ábra
A diszlokációvonal Δl darabjának elmozdításakor
(az elcsuszott terület növelésekor)
munkát kell végeznünk

nyirófeszültség τ . Akkor a feszültség definíciója szerint a $\Delta l \Delta x$ területű felületen $\tau (\Delta l \Delta x)$ erő működik, amely a b -vel való elmozdulás során $(\tau \Delta l \Delta x) b$ munkát végez. Ha ezt a szorzatot átrendezzük a $(\tau b \Delta l) \Delta x = \Delta F \Delta x$ alakba, akkor eredményünket úgy értelmezhetjük, hogy ez az a munka, amit a diszlokációvonal Δl szakaszára merőlegesen ható ΔF erő a Δx elmozdulás során végez. Ennek alapján definiálhatjuk a diszlokáció hosszegységnyi szakaszára merőlegesen ható erőt:

$$F_0 = \frac{\Delta F}{\Delta l} = \tau b.$$

A diszlokációra ható erő fogalmának segítségével egyszerűen megfogalmazhatjuk a képlékeny alakváltozás feltételét. Képlékeny alakváltozás akkor következik be, ha a diszlokációkra ható erő valamely csuszási síkban eléri a diszlokáció mozgatásához szükséges értéket.

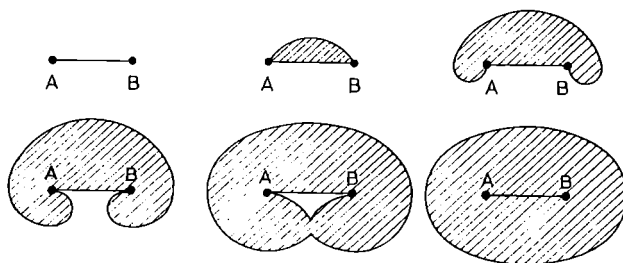
3.2.5. A képlékeny alakváltozás diszlokációs mechanizmusa és az alakítási keményedés

A kristályokban már a kristályosodás során alakulnak ki diszlokációk. A képlékeny alakváltozást megindító külső feszültség ezekre az anyagban már meglévő diszlokációkra hat és mozgásba hozza őket. Igen gyakran előfordul, hogy a csuszási síkban mozgó diszlokáció egy-egy darabja áthatolhatatlan akadályba üt-

közük és megakad. Ilyen akadályok lehetnek pl. idegen (ötvező-) atomokból kialakult kis térfogatrészek, un. kiválások, amelyek tulajdonságai jelentősen eltérhetnek az alapanyagétól. Különösen érdekes azonban, hogy épp az ily módon megakadt diszlokáció egy sajátos mechanizmusú forrásként működve újabb diszlokációk sokaságát termeli. Az ilyen igen gyakori diszlokációforrásokat Frank – Read-forrásoknak nevezik. A 42. ábra a Frank – Read-források diszlokációsokszorozó mechanizmusát szemlélteti. A és B pontok jelölik a diszlokációmozgás akadályait, a közéjük rajzolt szakasz pedig a megakadt diszlokációt. A diszlokációra ható erő a két végén rögzített diszlokációdarabot egyre iveltetebbre görbíti ki, miközben a diszlokációvonal által surolt, a rajzon be-satirozott területen a csuszási sík két oldala b Burgers-vektor-nyit elcsuszlik. Az erő hatására egyre jobban kihajlott, sőt spirálisan visszagörcbült diszlokációvonal két darabja zárt görbévé – diszlokációhurokká – egyesül, miközben a diszlokációvonalnak az ennek kialakításában részt nem vevő része a kiindulási helyzetbe, azaz az AB pontok közé húzódik vissza. A külső feszültség hatására a keletkező diszlokációhurok egyre távolul és a görbe által surolt terület mentén bekövetkezik a Burgers-vektornyit elcsuszás.

Régi megfigyelés, hogy a fémek képlékeny alakítása eleinte könnyen, viszonylag kis feszültségek hatására megindul, de a deformáció fokozódásával egyre nagyobb és nagyobb erő befektetésére van szükség a további alakításhoz. Ezt a jelenséget nevezzük alakítási keményedésnek.

Ennek magyarázata az, hogy az alakítás folyamán a diszlokációforrások működésének következményeként a kristály diszloká-



42. ábra
Diszlokációhurokokat kibocsátó forrás működése

ciótartalma egyre nő. A diszlokációk mozgását azonban nemcsak a deformálóerő által keltett feszültség, hanem a többi diszlokáció által kialakított feszültségtér is befolyásolja. Amíg a külső deformálófeszültség a diszlokációt mozgatni igyekszik, a kristályban levő többi diszlokáció feszültségtere a mozgást akadályozza. A deformáció előrehaladtával ezért egyre nagyobb külső erőre van szükség ahhoz, hogy a közben egyre szaporodó többi diszlokáció feszültségtere ellenében a mozgást továbbra is fenntartsa, azaz, hogy a képlékeny alakítást tovább folytassa.

3.2.6. Diszlokációk hatása a kristály termikus egyensúlyára

A ponthibák (vakancia, intersticiális atom) tárgyalása során kitűnt, hogy a termikus egyensúly megköveteli bizonyos, a hőmérséklettől függő számú ponthiba létezését.

A diszlokációk termikus stabilitásának vizsgálatához számba kell vennünk, hogy milyen hatással van egy diszlokáció a kristály egyensúlyára. Ez kétféleképpen nyilvánul meg:

1. a rugalmas energia révén a diszlokáció a kristály belső energiáját növeli;
2. a diszlokációk által okozott rendezetlenség növeli a lehetséges mikroállapotok számát.

Ezeknek a hatásoknak a részletes vizsgálata arra az eredményre vezet, hogy a rugalmas energia növekedését a mikroállapotok számának növekedése alig kompenzálja, ezért a diszlokációk termodinamikailag nem stabil hibák. A diszlokációknak ezt a tulajdonságát használják ki évszázadok óta, amikor a hidegen alakított, felkeményedett fémeket utólagos hőkezeléssel kilágyítják, vagy az alakítási keményedés hatását azáltal kerülik el, hogy a fémeket melegen, izzó állapotban alakítják. Mindkét esetben az történik, hogy magas hőmérsékleten a kristály termikus stabilitását csökkentő diszlokációk jelentős része eltűnik az anyagból.

Egyszerű kísérlettel szemléltethetjük a fémek alakítási keményedését. 3-4 mm átmérőjű lágy vörösréz huzal igen könnyen de-

formálható. Ha azonban egy néhány centiméter hosszú drótdarab egyik végét satuba, a másik végét egy villanyfurógép tokmányába fogjuk és furógéppel a drótot megcsavartatjuk, az annyira keménnyé válik, hogy akár mint szeget üthetjük be egy deszkába. A diszlokációknak azt a tulajdonságát, hogy termodinamikailag nem stabil hibák, szintén bemutatjuk. A csavarással felkeményített rézdrótot gázlángban izzítsuk ki, a fém újból lágy, könnyen alakítható lesz.

Eddigi ismereteink alapján kvalitatív magyarázatot adhatunk a fejezet bevezetésében említett edzés hatására is. Ha pl. kb. 0,1%, vagy ennél kevesebb szénatomot tartalmazó Fe-C ötvözetet (acélt) magas hőmérsékletre hevítünk, akkor a szénatomok gyakorlatilag egyenletesen oszlanak el a vas kristályban. Ezt az alacsony hőmérsékleten nem egyensúlyi állapotot gyors lehűtéssel (edzéssel) „befagyasztjuk”. Ha ezután egy közbűlső hőmérsékleten (kb. 200 °C) ún. megeresztő hőkezelést alkalmazunk, akkor a szénatomok a 3.2.4. pontban tárgyalt kölcsönhatás miatt a diszlokációk közelébe diffundálnak. A szénatom-feldusulás a diszlokációkra rögzítő hatást gyakorol, ezért egy ilyen kezelés után a képlékeny alakváltozás megindításához szükséges feszültség megnövekszik. Röviden ezt úgy fejezhetjük ki, hogy az eljárással az anyag szilárdságát megnöveltük.

3.3. Felületi hibák a kristályban. Szemcsehatárok

A környezetünkben található fémtárgyak nagyon sok mozaikszerűen egymás mellé illeszkedő fémkristályból épülnek fel. A szorosan egymáshoz illeszkedő mikroszkopikus méretű kristályokat kristályszemcséknek vagy krisztallitoknak nevezzük, az általuk felépített tárgyat polikristályos szerkezetűnek mondjuk. A polikristályos szerkezetű fémek kristályszemcséi általában csak megfelelő kémiai kezelés (maratás) után válnak mikroszkópban megfigyelhetőkké. Előfordul azonban, hogy a kristályszemcsék néhány mm átmérőjűre is megnőnek. Ilyenkor, mivel a szomszédos krisztallitok másként verik vissza a rájuk eső fényt, a fém jellegzetes mozaikszerkezete szabadszemmel is látható. Közismert példa erre egyes ónozott bádoglemezből készült tárgyak felülete. Az

atomok egymáshoz illeszkedése, tehát a kristályrács geometriája mindegyik szemcsében ugyanaz. Két szomszédos szemcse hasonló geometriájú kristályrácsa azonban egymáshoz képest elforgatott helyzetben van. Az atomok tehát a két szemcsében a tér más-más irányai mentén rendeződtek, így érthető, hogy a két kristályszemcse találkozása, mint valami „senki földje” jellegzetes felületi hibája a polikristályos szerkezetnek. A szemcsehatárok mentén elhelyezkedő atomok gyengébben kötődnek a szomszédaihoz, ezért viszonylag könnyen, már kis energiabefektetéssel elhagyják helyüket. A határsáv lazább szerkezete miatt a diffúzió itt sokkal intenzívebb, mint az egyes krisztallitokban. A szemcsehatár gyengébben kötődő – magasabb energiaszinten levő – atomjai kémiai reakcióba is sokkal könnyebben lépnek, mint az egyes szemcsék belsejében helyet foglaló társaik. A fémtárgyak így bekövetkező, igen sok problémát jelentő károsodását szemcsehatár menti korrózióknak nevezzük. A szemcsehatárok jelenléte az anyag mechanikai tulajdonságait is erősen befolyásolja. A képlékeny alakváltozás során a krisztallitokban mozgó diszlokációk a szemcsehatárokon nem tudnak keresztülhaladni, és így a határon feltorlódhatnak, a feltorlódó diszlokációk feszültségtere gátolja a további diszlokációmozgást, ezért jelentősen fokozódik a polikristályos szerkezetű anyagok alakítási keményedése.

A szemcsehatárok mint nagy energiájú belső határfelületek termodinamikailag instabil hibák. A polikristályos fémek melegítésekor a szemcsehatárok relatív mennyisége az anyagban fokozatosan csökken, vagyis a szerkezet átlagos szemcsemérete nő. A szemcsehatárok fentebb említett tulajdonságait figyelembe véve érthető, hogy ilyen hőkezelésekkel az anyag tulajdonságai jelentősen megváltozhatnak.

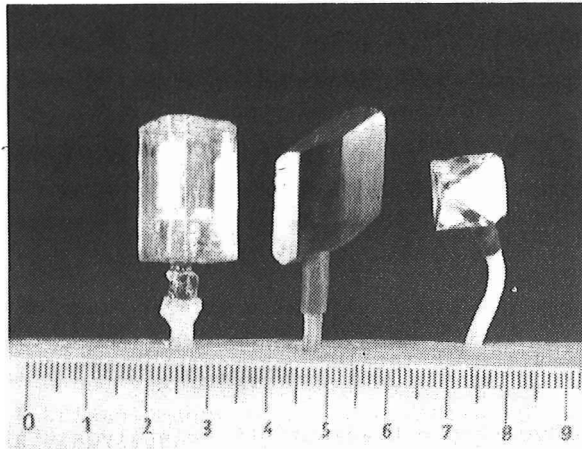
A fémek kristályszerkezetének tárgyalásakor láttuk, hogy a szoros térkitöltésű atomi elrendezést szoros illeszkedésű síkok kétféle egymásra rétegezésével lehet megvalósítani. Könnyen elképzelhető, hogy adott rétegezési sorrend (pl. AB AB...) esetén egy oda nem illő réteg is bekerül. Ilyenkor a kristályban egy speciális felületi, ún. rétegződési hiba keletkezik. Ezek részleteivel azonban nem foglalkozunk.

4. FÜGGELEK

4.1. Kristálynövesztés vizes oldatokból

Nagyméretű, szabályos alaku kristályok előállítása általában nem egyszerű feladat. Gondoskodni kell a kiindulási anyagok és a kristályosító edények tisztaságáról, biztosítani kell az állandó hőmérsékletet gyakran több napon keresztül is. Vannak anyagok, amelyek rendkívül kényesek a kristályosítás körülményeire, ezekből iskolai körülmények között nemigen állíthatók elő szép kristályok. Az iskolai vagy otthoni kristálynövesztésre a timsót (KAlSO_4), a Seignette-sót (K-Na-tartarát), esetleg a rézgálicot (CuSO_4) ajánljuk. (A rézgálic esetén külön figyelniük kell arra, hogy az anyag mérgező!)

A kristálynövesztés eljárása két egymást követő szakaszra osztható. Először apró hibátlan kristályokat, ún. „kristálymago-



43. ábra

„háziilag” növesztett kristályok. Balról jobbra:
Seignette-só, rézgálic, timsó

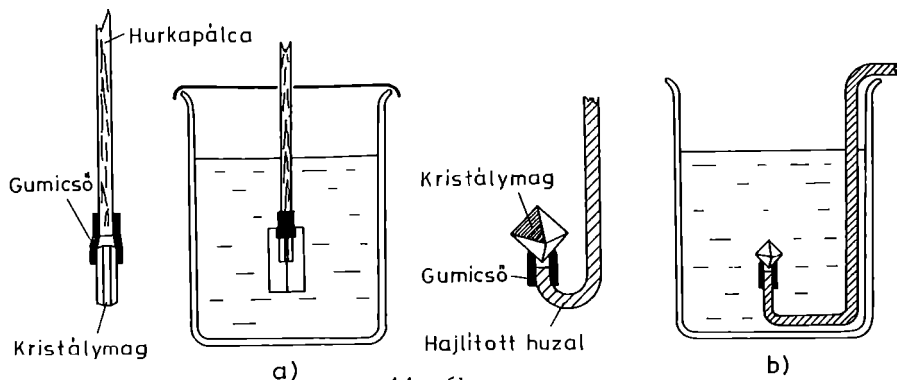
kat" állítunk elő, majd a második lépésben egy-egy kiválasztott kristálymagot növesztünk meg nagyméretű kristállyá (43. ábra).

4.1.1. Kristálymagok előállítás

Tiszta üvegedényben készítsünk kb. 40 °C hőmérsékletű telített oldatot a kristályosításra kiválasztott vegyszerből! Az oldást a timsó és Seignette-só esetén csapvizben, rézgalic esetén desztillált vízben végezzük. Az oldat akkor tekinthető telítettnek, ha az edény alján gyakori keverés mellett hosszabb idő után is marad még feloldatlan szilárd anyag. Az oldás lassu folyamat, ezért külön figyelniük kell a hőmérséklet állandó értéken tartására. Ez legegyszerűbben úgy oldható meg, ha az edényt, amiben az oldást végezzük, egy nagyobb méretű, néhány fokkal melegebb vizet tartalmazó másik edénybe állítjuk. A meleg telített oldatot tölcsérbe helyezett szűrőpapíron (itatóspapíron) tiszta edénybe szűrjük (ezt is célszerű meleg vízbe állítani). A leszűrt oldatot tartalmazó edényt a külső meleg vizes edénnyel együtt rázkódásmentes helyre tesszük félre, és türelmesen megvárjuk, amíg az néhány óra alatt szobahőmérsékletűre hül le. A lehűtés következtében az oldat tultelített lesz. A tultelített oldatból a felesleges oldott só az edény alján apró kristályok formájában válik ki. Ha tisztán dolgoztunk és ügyeltünk arra, hogy az oldat rázkódásmentes helyen nagyon lassan hüljön ki, akkor az edény alján néhány szabályos alaku, több mm nagyságu viztiszta átlátszó kristály képződik. A kristályokról leöntjük az oldatot (tiszta edénybe, esetleg át is szűrjük), majd az edény alján maradt kristályok közül kiválasztjuk a legszebb példányokat, amelyeket majd tovább fogunk növeszteni.

4.1.2. Kristálymagok továbbnövesztése

A továbbnövesztésre kiválasztott kristályokat a leszűrt, szobahőmérsékletű telített oldatba helyezük vissza. A lassu párolgás miatt (az edény nem zárt!) a telített oldatból az anyag a behelyezett kristálymagra válik ki, a kristály lassan növekszik.



44. ábra
 Kristálymagok rögzítése és továbbnövesztése

Ezzel az eljárással egy közel állandó hőmérsékletű helyiségben néhány nap, esetleg hét alatt pár centiméter nagyságu, átlátszóan tiszta szabályos kristályokat kaphatunk. Lényeges feltétele a szabályos kristályforma kialakulásának az, hogy a növekedést az edény fala vagy más kristályok ne akadályozzák. Ha a kristálymagot egyszerűen a telített oldatot tartalmazó edény aljára helyezük, akkor az akadálytalan növekedés feltétele rendszerint nem teljesül. Az oldatból kiváló anyag ugyanis nem kizárólag az általunk behelyezett kristálymagra rakódik ki, hanem egyidejűleg az edény alján új kristályokat is képez és ezek akadályozhatják az általunk továbbnövesztésre kiválasztott kristály fejlődését. A kristálymagot legjobb az edény falától távol, a telített oldat „közepébe” belógatni. A hosszukás alakú Seignette-só és rézgalic kristálymagok egyszerűen rögzíthetők a 44a ábrán bemutatott módon. Hurkapálca végére egy kb. 8-10 mm hosszú szelepgumi darabkát húzunk. A kiválasztott kristálymagokat a szelepgumi szabad végébe húzzuk be. A hurkapálcára így rögzített kristályt az oldat közepére lógatjuk be. A timsókristály ilyen rögzítése a kristály alakja miatt nehéz, ezért itt a szelepgumit vastagabb, műanyag szigetelésű alumíniumhuzal végére húzzuk fel. A drótot a 44b ábrán látható módon meghajlítva helyezzük az oldatba, majd a kiválasztott kristálymagot egyszerűen ráültetjük a szelepgumitartóra. A párolgás miatt az oldat szintje fokozatosan csökken, ezért ügyeljünk arra, hogy a növekvő kristály mindig kb. egy cm-rel a felszín alatt maradjon.

4.2. Kristálynövekedés vizsgálata mikroszkóppal

Készítsünk szobahőmérsékleten telített oldatokat a következő anyagok felhasználásával:

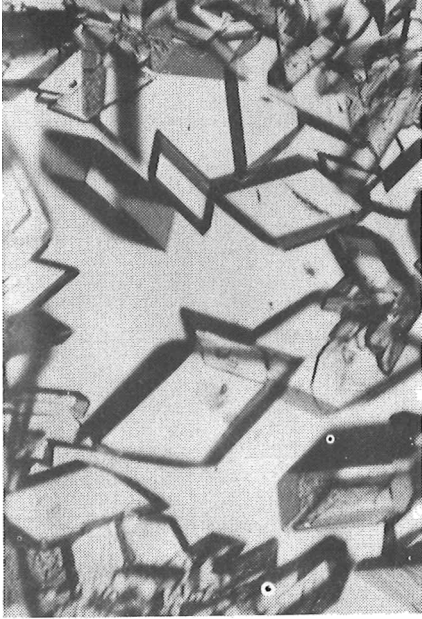
- NaCl (kősó),
- KBr (kálium-bromid),
- CuSO₄ (rézgálic),
- K₂Cr₂O₇ (kálium-likromát),
- CdJ₂ (kadmium-jodid).

Az oldatokat tiszta edényben, néhány ml desztillált vizet használva készítjük el. Az oldatot szűrőpapíron szűrjük meg. A tiszta telített oldatból helyezünk egy cseppet mikroszkóp-tárgylemezre (fedőlemez nem szükséges!). A kristályosodás megfigyelésére bármely iskolai mikroszkóp alkalmas, amelynek tárgyasztala vízszintesre állítható. A megfigyeléshez kis, kb. 5-10-szeres (nagy gyújtótávolságú) objektivet és 10-15-szörös szemlencsét használhatunk.

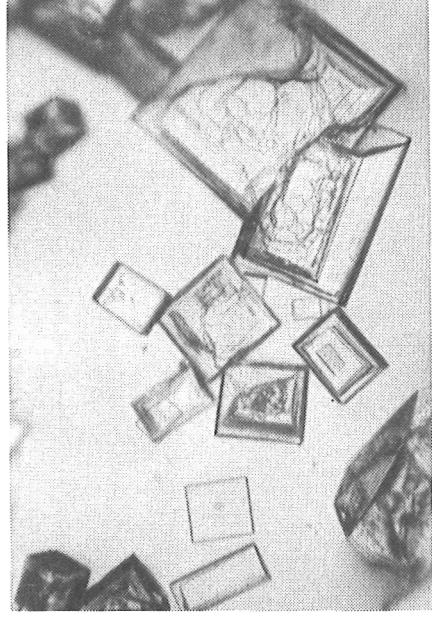
A tárgylemezre helyezett oldatcsepp térfogatához képest nagy szabad felülettel rendelkezik, ezért jelentős párolgás lép fel. A víz elpárolgása következtében a kezdetben telített oldat hamarosan tultelítetté válik, és megindul az oldott anyag kristályosodása. Az apró kristályok megjelenése és növekedése a mikroszkópon keresztül jól megfigyelhető. A 45. ábra a fenti oldatokból képződött kristályokat mutatja be.

A mikrofényképeken jól megfigyelhetők a különböző anyagi minőségre jellemző kristályformák. Érdeemes meggyőződni arról, hogy bár egy adott anyag esetén az egyes kristályok mutatnak több-kevesebb eltérést (pl. a NaCl vagy a KBr kristályai közt kocka és hasáb alakúak egyaránt megfigyelhetők), a jellemző kristálylapok által bezárt szög mindig szigorúan állandó. A mikroszkópban jól látható a kristályok növekedése. Megfigyelhető, hogy egyes irányokban a növekedés gyors, míg más irányokban lényegesen lassabb. (Igy pl. a kálium-dikromát kristályok először hosszú vékony tüket képeznek, amelyek aztán lassan hasábokká vastagodnak.)

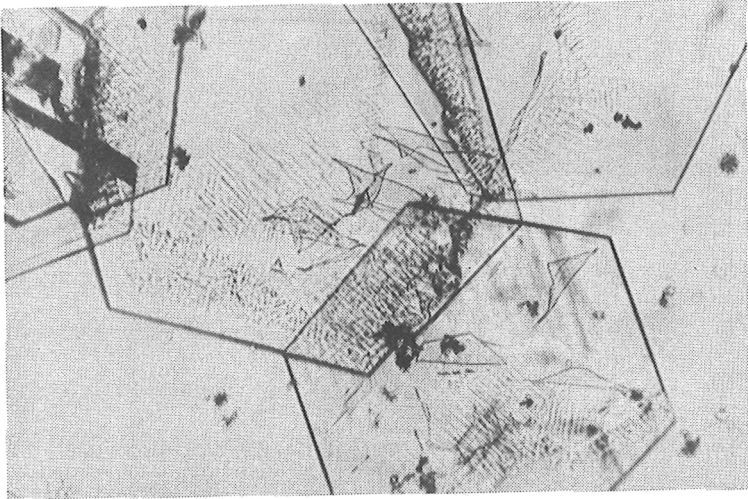
Érdekes megfigyelést tehetünk, ha összehasonlítjuk a tiszta NaCl oldatból képződött derékszögű hasáb alakú kristályokat és a PbCl₂-vel szennyezett NaCl oldatból képződött kristályok alak-



a)



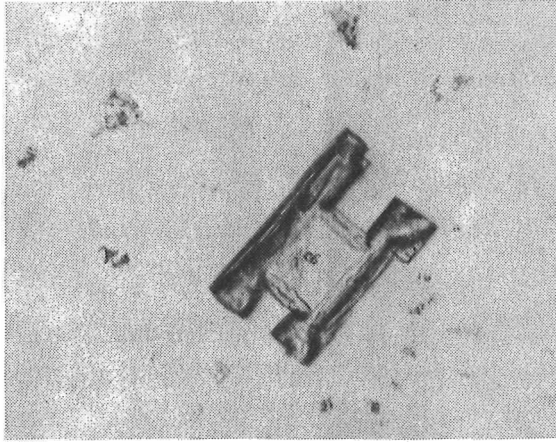
b)



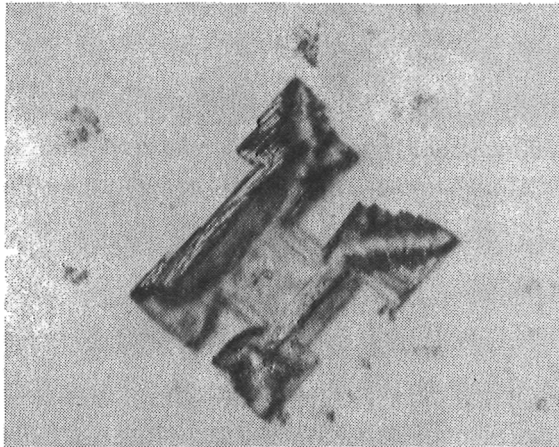
c)

45. ábra

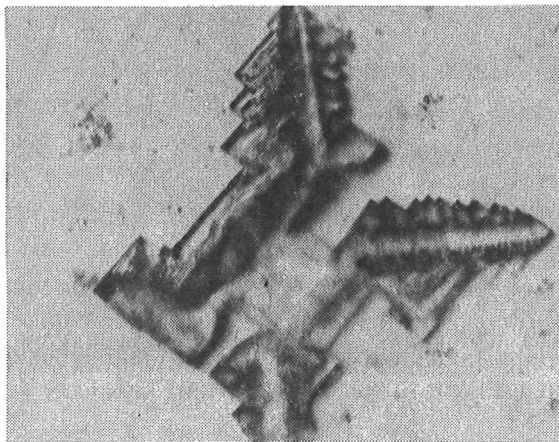
Kristálynövekedés megfigyelése mikroszkóppal
a) rézszulfát (CuSO_4), b) kősó (NaCl), c) kadmiumjodid
(CdI_2), d) e) f) növekvő KBr kristály



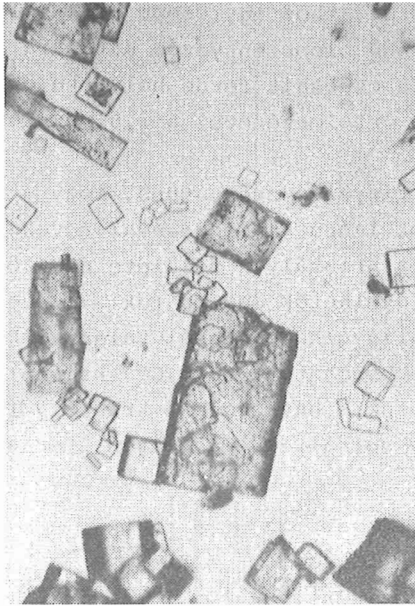
d)



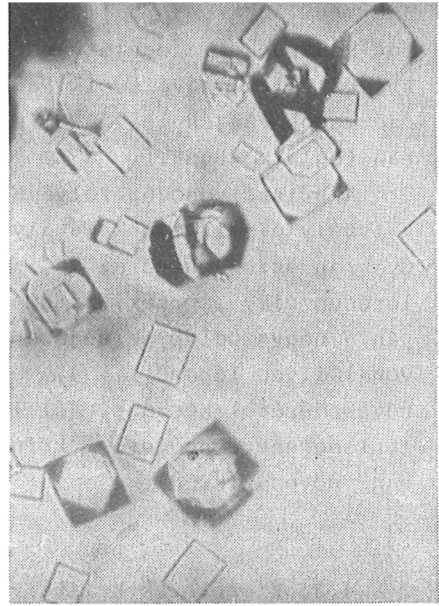
e)



f)



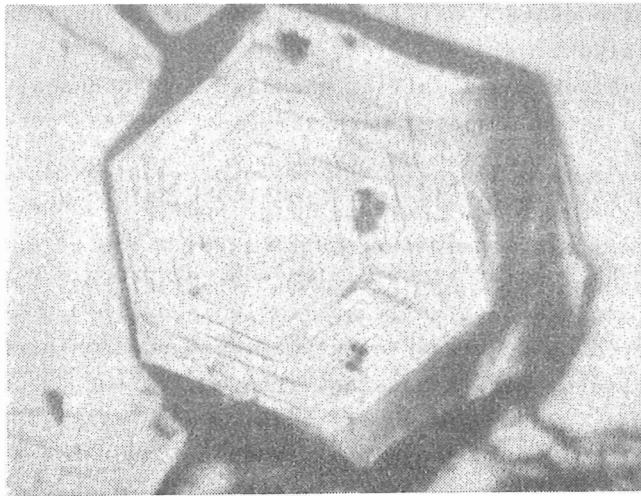
a)



b)

46. ábra

A kristály külső formáját a kristályosodás körülményei, az anyag tisztasága határozzák meg
a) tiszta NaCl , b) PbCl_2 -vel szennyezett NaCl



47. ábra

Spirálfelület mentén növekvő CdI_2 kristály

ját (46. ábra). (A telített NaCl oldathoz egy csepp $PbCl_2$ oldatot keverünk.) A csekély mennyiségű ólomszennyezés hatására a kristályalak megváltozik, a kocka csucsait ferde helyzetű oktaéderlapok vágják le. (A jelenség értelmezésével a 2.6. szakaszban foglalkoztunk.)

A kristályosodás folyamatát figyelve szembevetődő, hogy a kristály a jellemző kristálylapok lassu kitolódásával növekszik. Gyakran észrevehető az is, hogy a kristályok felülete nem tökéletesen sík, lépcsők, rétegek figyelhetők meg rajtuk. (A 45e ábrán a négyzetglap belsejében megfigyelhető szabálytalan alakú vonal ilyen lépcső.) A 47. ábrán bemutatott fotó CdJ kristály növekedéséről készült. Jól láthatók a hatszögletű kristály felületi egyenetlenségei. A kristály spirálfelület mentén „teraszosan” növekszik.

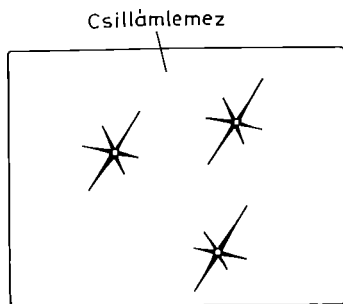
4.3. Kísérletek kristályokkal – a fizikai tulajdonságok anizotrópiája

4.3.1. Kísérletek csillámkristállyal

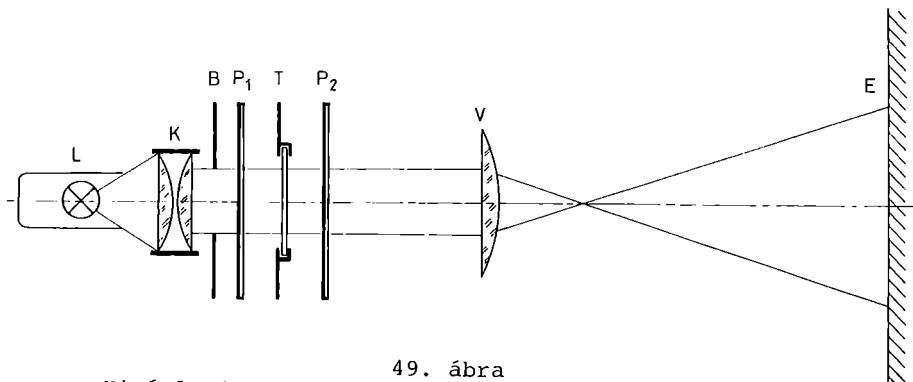
Az elektromos szigetelőként használt csillámlemezeket (pl. régi vasalóbetétet) csillámkristályból hasítják, tehát önmaguk is kristályok.

Vizsgáljuk meg a csillám hasadási tulajdonságait! A csillámlemezek a lemez síkjával párhuzamosan könnyedén rétegekre hasíthatók szét. A hasítást borotvapengével vagy egyszerűen körmünk segítségével végezhetjük el. A hasított felületek tükörsimák, fényesek.

Üssünk lyukakat a csillámlemezen egy szög vagy vastagabb varrótű segítségével! A lyukak szélén a csillámlemez jellegzetesen bereped, a sugarasan elhelyezkedő 6 repedés három hasadási irányt határoz meg. A hasadási irányok 120° -os szöget zárnak be. A hasadási irányok nem egyenértékűek, erre utal az, hogy a hat repedés közül kettő (egymással szemben fekvő) hosszabb, mint a többi. Figyeljük meg, hogy valamennyi lyuk esetén a repedések iránya azonos (48. ábra).



48. ábra
Átlyukasztott csillámlemez



49. ábra
Kísérleti összeállítás a kettőstörés vizsgálatához

Vizsgáljuk a csillám optikai tulajdonságait!

Állítsuk össze a 49. ábrán bemutatott optikai rendszert!

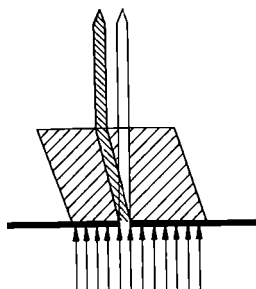
A lámpa (L) fényét a kondenzor (K) párhuzamossá teszi. A nyaláb egy kb. 3 cm átmérőjű lyukblendén (B) majd két polárszűrő (P_1 , P_2) közé helyezett forgatható diakereten (T), végül egy vetítőlencsén (V) halad át. A vetítőlencse a diatartó síkját képezi le a vetítőernyőre. (Az élesre állítást párhuzamos polárszűrők közt végezzük oly módon, hogy a diakeret síkjába pl. egy ceruzahegyet helyezünk és azt képezzük le az ernyőre.) Keresztezzük a P_1 és P_2 polárszűrők állását (az ernyő elsötétedik), majd helyezzük a diatartóba a több helyen átlyukasztott csillámlemezt! A csillámlemez behelyezésekor a sötét ernyő kivilágosodik. Forgassuk most lassan körbe a keretbe fogott csillámlemezt, egy teljes körbefordulás alatt a képernyő négyszer sötétedik el és világosodik ki. Figyeljük meg, hogy az ernyő akkor sötét, ha va-

lamelyik polárszűrő polarizációs iránya és a csillámra ütött lyukak peremén megfigyelhető hosszabb repedés iránya megyezik!

A kísérlet egyértelműen bizonyítja, hogy a kristályok optikai tulajdonságai a különböző irányokban eltérőek. A legtöbb kristály, köztük a csillám is, optikailag anizotróp. A kristályra eső természetes fény két egymásra merőleges síkban poláros sugárra bomlik. A fény polarizációs síkját a kristály szerkezete határozza meg, csakugy mint a hasadási tulajdonságokat. A csillámkristályban az egyik polarizációs irány megyezik a kiténtett hasadási iránnyal, a másik erre az irányra merőleges. (Megjegyezzük, hogy a polarizáció és a kettőstörés jelenségkörével a „Kísérletek a fizikai fénytan köréből” c. III. osztályos fakultatív tankönyv részletesen foglalkozik.)

4.3.2. Az optikai anizotrópia szemléltetése mészpátkristállyal

A viztiszta átlátszó kalcit- (CaCO_3) kristályok érdekes optikai tulajdonságot mutatnak, az un. „kettőstörést”. A kalcit a kősóhoz hasonlóan jól hasítható kristály. A hasadási felületek mindig romboéderformát határoznak. (A romboéder olyan paralelepipedon, amelynek minden lapja rombusz. A rombuszlapok oldalai 71° , ill. 109° -os szögeket zárnak be.) A kristály különleges optikai tulajdonságairól a legegyszerűbben úgy győződhetünk meg, ha a kristályt egyik lapjával egy olyan fehér papírlapra helyezük, amelyre előzőleg tollal vagy ceruzával egy kb. félmilliméter átmérőjű pontot tettünk. Az átlátszó kristályon keresztül nézve két pontot látunk. Forgassuk most el a kristályt! Az egyik pont egy helyben marad, míg a másik a kristállyal együtt elfordul. Az érdekes jelenség magyarázata a következő. Az alsó kristálylapon merőleges irányból belépő fény a kristályban két sugárra bomlik. Az egyik sugár követi az üvegprizmák esetén megismert törési törvényt, azaz merőleges beesés esetén irányváltoztatás nélkül halad tovább az anyagban és lép ki a felső kristálylapon. Az így haladó fénysugarak a papírra rajzolt pontot a kristály helyzetétől függetlenül változatlan helyen mutatják.



50. ábra
A fény haladása a kalcitkristályban

A kristályba belépő fény másik része nem engedelmeskedik az egyszerű törési törvénynek. A merőleges beesés ellenére megtörve, ferdén folytatja utját a kristályban, majd a felső lapon ismét megtörve a felületre merőlegesen, az első sugártól eltolódva lép ki a kristályból. Ez a különösen viselkedő sugárnyaláb a pontot eredeti helyzetétől eltolt helyzetben mutatja (50. ábra). A fény sajátos „ferde irányu” terjedése a kristályban a szabályos rács szerkezet következménye, ezért ha a kristályt forgatjuk, a különösen viselkedő sugarak haladási iránya a kristállyal együtt elfordul. Ez magyarázza, hogy a pont második képe körbefordul az állandó helyzetű pont körül.

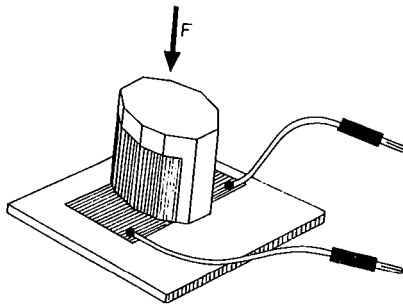
A kísérlet írásvetítő készülék segítségével is egyszerűen bemutatható. Takarjuk le az írásvetítő felületét fekete kartonpapírral, amelyre előzőleg kb. egy mm nagyságu lyukat vágunk! A kálcitromboédert ráfektetjük a lyukra és a lyuk kettőzött képét az ernyőn élesre állítjuk. A kristályt elforgatva az ernyőn az egyik folt egy helyben marad, míg a másik elfordul körülötte. Még érdekesebbé tehető a kísérlet, ha a lyukra először egy fényképezésnél használt polárszűrőt helyezünk és erre rakjuk a kristályt. Forgassuk el a romboédert! Az ernyőn a foltok fényessége változik, hol az egyik erősödik meg és a másik halványul el, hol fordítva. A kristály egy teljes körbeforgása alatt négy olyan helyzetet találhatunk, amikor csak egyetlen folt látható az ernyőn, a másik teljesen elsötétül. Ha kiindulunk abból a helyzetből, hogy a helyben maradó folt maximálisan világos és a másik sötét, 90° -ot elforgatva a kristályt a helyzet megfordul, a helyben maradó folt sötétedik el és az elforduló kivilágoso-

dik. Ujabb 90° -os elfordulás esetén ismét a kiindulási helyzet áll elő, és így tovább. Az egyszerű, látványos kísérlet a kristály különleges fénytörési tulajdonságán túl azt is kimutatja, hogy a kristályban a fény polarizálódik. Az irány szerint különvált két sugárnyaláiban a fénysugarak polarizációs síkja merőleges egymásra.

4.3.3. Piezoelektromosság bemutatása sajátnövesztésű Seignette-só kristályokkal

A Seignette-só kristályok igen érdekes tulajdonsága az ún. „piezoelektromosság”. A kristály erőhatás, ill. az ennek következtében fellépő rugalmas deformáció hatására elektromosan polarizálódik. Az elektromosan polarizálódott kristály egyes kristálylapjai közt elektromos feszültség jelenik meg. A rugalmas deformáció és az elektromos polarizáció kapcsolata fordított értelemben is fennáll. Ha a kristály megfelelő oldallapjaira elektromos feszültséget kapcsolunk, a kristály ennek hatására rugalmasan deformálódik. Saját növesztésű Seignette-só kristályokkal mindkét jelenség egyszerűen bemutatható.

Válasszunk ki egy szépen fejlett, átlátszóan tiszta, hibátlan kristályt, és az 51. ábrán bemutatott módon ragasszunk átellenes oldalaira vékony alumínium vagy vörösréz fóliát! (A ragasztáshoz UHU vagy Araldit ragasztót használhatunk.) A felragasztandó fémfóliát célszerű úgy kivágni, hogy az nagyobb legyen, mint a kristály beborítandó felülete. A lemez kristályról



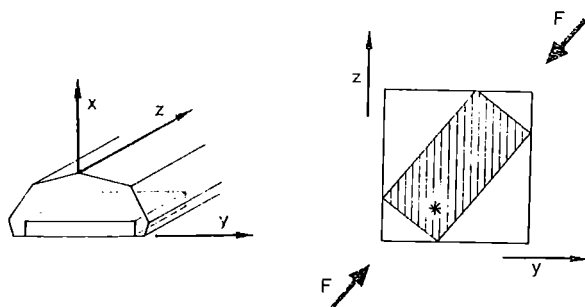
51. ábra
A piezoelektromosság bemutatásához használt
Seignette-só kristály lapjaira vékony fémhálót
ragasztunk

„lelógó” részét visszahajtjuk, így ez az elektromos csatlakozásra szolgálhat. Kísérleteinket az így előkészített kristállyal végezzük.

a) Csatlakoztassuk a kristályra ragasztott két fémfóliát egy magnetofon elektromos bemenetére! A magnót „felvétel” üzemmódba kapcsoljuk, majd a kristályt felülről ritmusosan megkopogtatjuk. A magnószalagról a kopogás visszahallgatható, bizonyítva ezzel, hogy a lökésszerűen deformálódó kristály lökésszerű elektromos jeleket adott át a magnetofonnak. Hasonló elven működik a kristálymikrofon és a lemezjátszó tüben végződő érzékelő feje is.

b) Ismételjük meg előbbi kísérletünket, de most a magnetofon helyett a kristályra ragasztott két fémlémez egy oszcilloszkóp függőleges eltérítőlemezeire csatlakoztassuk. A kristályra kopantva jellegzetes, gyorsan csillapodó jel végigfutása figyelhető meg az oszcilloszkóp képernyőjén. A több éles „tűskéből” álló gyorsan csillapodó jel arra utal, hogy a kristály az egyszerű koppantás hatására nem pillanatszerűen deformálódott, hanem gyorsan csillapodó rezgésbe jött.

c) Kapcsoljuk kristályunkat hanggenerátor nagyellenállású kimenetére! Elektromos feszültség hatására a piezoelektromos kristály rugalmasan deformálódik. A hanggenerátor gyorsan változó feszültségének hatására a kristály kényszerrezgésbe jön és hangot ad. Változtatva a generátor frekvenciáját, megkereshető a rezonanciafrekvencia, ilyenkor „sipol” a legintenzívebben a kristály. Érdeemes megemlíteni, hogy a rezonanciafrekvenciát (a kristály rugalmas sajátrezgéseit) a kristály méretei határozzák meg.



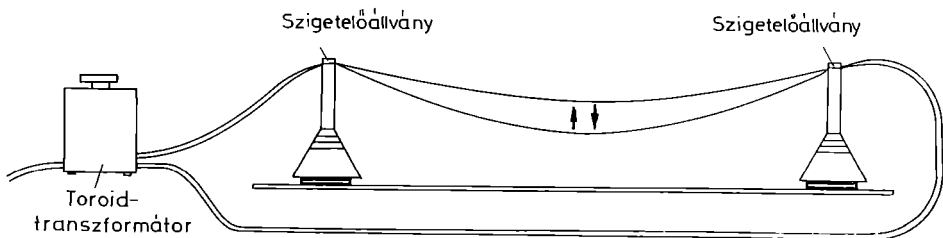
52. ábra
Kedvező orientációjú szelet kivágása a Seignette-só kristályból

A piezoelektromosság erősen irányfüggő tulajdonsága a kristálynak. Seignette-só kristályok esetén a legerősebb hatást akkor kaphatjuk, ha a természetes alakú kristályból az 52. ábrán bemutatott módon egy téglatestet vágunk ki. A téglatest *-gal megjelölt oldallapjaira kell ragasztanunk a fémfóliát és a nyílal jelölt irányból kell erőt kifejtenünk a kristálylemezre.

4.4. Vas allotróp átkristályosodásának bemutatása

A vas $911\text{ }^{\circ}\text{C}$ hőmérséklet alatt térben középpontos, a fölött lapon középpontos köbösrácsban kristályosodik. Fokozatosan hevítve a vasat, $911\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on a tércentrált szerkezet lapcentrált szerkezetté alakul át. A térben középpontos szerkezetben az atomok kb. 9 %-kal több térfogatot foglalnak el, mint a szoros illeszkedésű lapon középpontos kockarácsban. A $911\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on bekövetkező kristályszerkezet-változás ezért az anyag térfogatának megváltozásával jár együtt. Az átkristályosodás, ill. az azt kísérő térfogatváltozás a következő egyszerű kísérlettel mutatható be.

Mintegy másfél méter hosszú, vékony vasdrótot szigetelőállványok közé kifeszítünk, majd a dróton toroidtranszformátorról szabályozható áramot vezetünk keresztül (53. ábra). A toroid lassu „feltekerésével” az áram fokozatosan növekszik, a vasdrót a hőtágulás miatt egyre jobban megereszkedik és izzásba jön. Ha az áramerősség növelésével a huzal hőmérséklete meghaladja a $911\text{ }^{\circ}\text{C}$ -t, akkor a vasatomok a tércentrált szerkezetből tömörebb térkitöltésű lapközépen centrált köbös rácsba rendeződnek át. A szerkezetváltozás miatt a huzal térfogata csökken, ezért a megereszkedett acéldrót hirtelen újból megfeszül. Az áramerősség



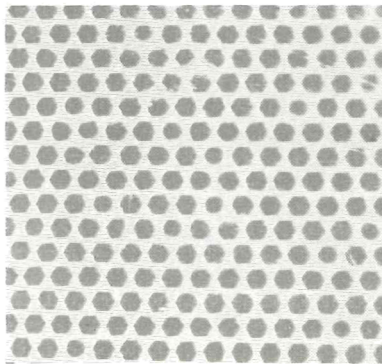
53. ábra
Kísérleti összeállítás a vas allotrop
átkristályosodásának bemutatásához

további fokozására az átalakult szerkezet hőtágul és a huzal ismét megereszkedik. Az áram hirtelen kikapcsolásával a drót gyorsan hül és egyre inkább megfeszül. A lapcentrált szerkezet visszaalakulását tércentrált köbös ráccsá a huzal átmeneti megereszkedése jelzi.

4.5. Kétdimenziós kristálymodell

A modellek nagymértékben segíthetik a kristályok szerkezetére, a kristályhibákra, a szilárdtestben lezajló folyamatokra vonatkozó helyes szemléletünk kialakulását. Az alábbiakban ismertetett modellkristály jól látható jelenségei közvetlenül érzékeltek a valóságban is hasonlóknak feltételezett szerkezeti jelenségeket, kristályfizikai folyamatokat.

A modell keretbe foglalt két plexilap között elhelyezett mintegy 5000 db apró acélgolyóból áll. A plexilapok távolsága olyan, hogy a golyók csak egy rétegben helyezkednek el, és ebben a síkban akadálytalanul, könnyen mozognak. Ha modellünket vízszintes helyzetéből kicsit megdöntjük, a golyók a lejtő alján jellegzetes rendbe – kristályrácsba tömörülnek. Ideális esetben minden „golyóatomnak” a rácsban 6 közvetlen szomszédja van. Kétdimenziós kristálymodellünk szerkezete a szoros illeszkedést megvalósító fémkristályok egy rétegéhez hasonló (54. ábra).



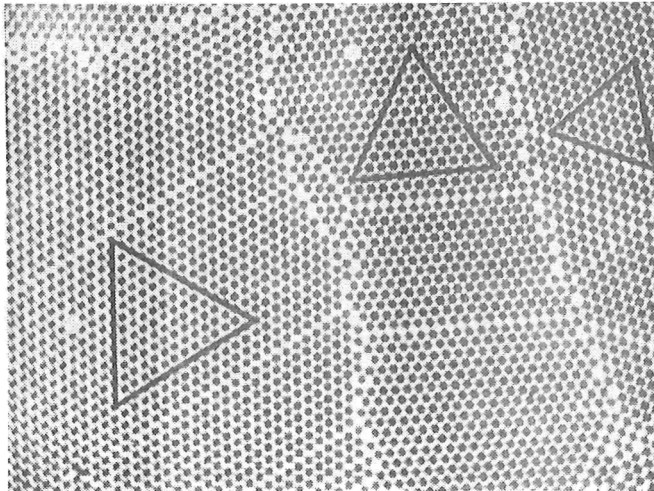
54. ábra
Kétdimenziós kristálymodell „rácsszerkezete”

Kristálymodellünkben az „összetartó erő” (a nehézségi erő lejtő menti komponense) hatására tömörülő golyók számára a tökéletes szoros illeszkedés a legkedvezőbb elrendeződés, de a rend mégsem valósul meg tökéletesen.

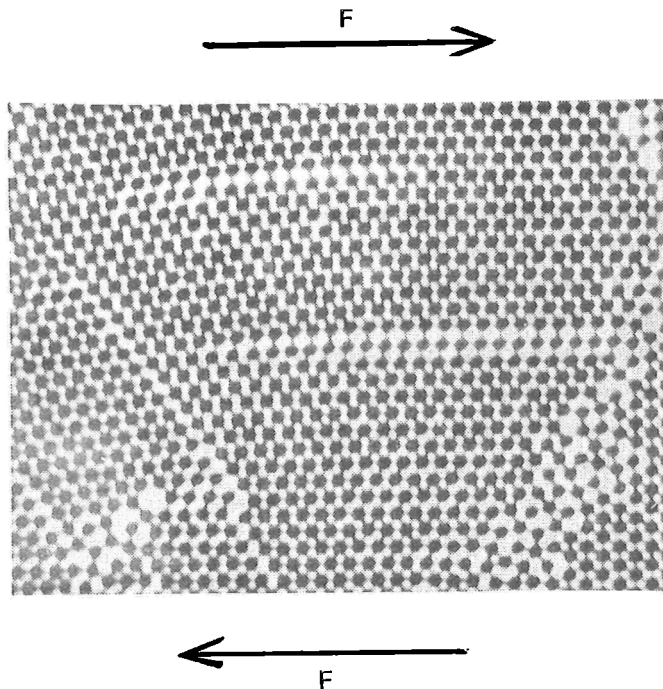
Az 55. ábrán kétdimenziós kristálymodellünk polikristályos szerkezetet mutat. A fényképfelvételen az egyes rendezett tartományok képezik most a kristályszemcséket, amelyekbe berajzoltuk a szoros illeszkedési irányokat, így a szomszédos szemcsék orientációkülönbsége könnyen megfigyelhető. A rendezett tartományokat elválasztó sávokban, az ún. „szemcsehatárokon” a golyók többé-kevésbé rendezetlenül helyezkednek el. A polikristályos fémek kristályszemcséi közt huzódó határtartományok szerkezete a valóságban hasonló a modellkristályéhoz.

A kétdimenziós golyókristályban jól megfigyelhetők a golyók rendeződése során spontán képződő rácslukak.

A modellkristály a valósághoz hasonlóan, a kristály két tartományának egymáshoz viszonyított elcsuszásával deformálódik. Az 56. ábra a csuszás közben készült pillanatfelvétel. A fotón nyilak jelzik a kristályt deformáló erők irányát. A felvételen látható jellegzetes, elhalványodóan egyenes vonalú rácshibák az elmozduló és a változatlan helyzetű rácstartományok határán levő



55. ábra
Polikristályos állapot modellje. A szoros illeszkedés irányai a szomszédos szemcsékben különböznek



56. ábra
Jellegzetes „csuszási hibavonalak” a golyómodellben

golyósorok mozgása során jöttek létre. A valódi kristályok diszlokációinak merev modellünkben ezek a jellegzetes hibák felelnek meg.

Kétdimenziós merevgolyó-modellünkben a térbeli kristályok rétegződésihiba-felületének egy-egy szemcsén keresztülhuzódó egyenes hibavonal felel meg, azaz itt két golyósor illeszkedik hibásan egymáshoz. A két sorban a golyók rendre egymás fölött helyezkednek el.

A kristályokban az idegen atomok, szennyezők is jellegzetes kristályhibák forrásai. Modellünkben a szennyezőket eltérő méretű golyók jelenthetik. A méretkülönbség miatt ezek a golyóatomok nem illeszkednek a rácsba, körülöttük a kristályszerkezet kisebb-nagyobb körzetben hibás.

A sztatikus modell dinamikussá tehető, ha a golyókat tartalmazó keretet vibrátorhoz (pl. masszirozógéphez) szorítjuk. A vibrátor rezgései biztosítják a golyóatomok hőmozgását. A ma-

gasabb hőmérsékletű állapotot egyre több energia betáplálásával, azaz a vibrálás intenzitásának fokozásával valósíthatjuk meg. A golyók „hőmozgása” lehetővé teszi, hogy olyan folyamatokat is szemléltessünk, mint pl. a kristályhibák mozgása, ujrakristályosodás, olvadás.

A csapágygolyókból álló kristálymodell sok szempontból a valóságos kristályokhoz hasonló, de lényeges eltéréseket is mutat. A modell fogyatékosága, hogy az acélgolyók merevek, nem deformálhatók. Ezért a diszlokációk hibaszerkezete, a diszlokációk mozgása a modellben különbözik a valóságtól. Ugyancsak a golyók merevsége az oka annak, hogy rácslukak nem képződhetnek a hőmozgás hatására, így a rácslukak számának változása a hőmérséklettel és a diffúzió folyamata a modellel nem mutatható be.

JEGYZET

JEGYZET

Ára: 5,— Ft

28 974/II-6