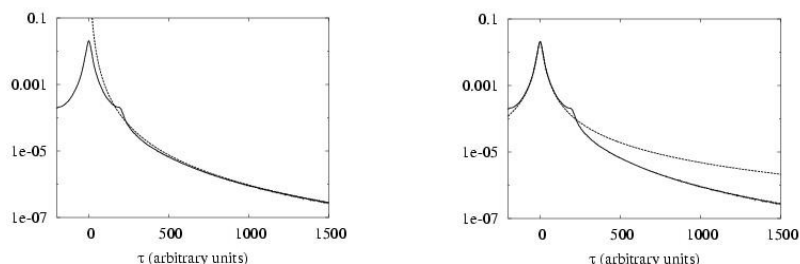


Részletes szakmai beszámoló

1. Diszlokációk kollektív tulajdonságainak elméleti vizsgálata

1.1 Belső feszültség eloszlásfüggvénye

A diszlokációk kollektív tulajdonságainak megértéséhez igen fontos az általuk generált belső feszültségtér statisztikus tulajdonságainak meghatározása. Korábbi eredményeink alapján már ismert volt, hogy a belső feszültség eloszlásfüggvénye az aszimptotikus tartományban a feszültség köbével cseng le. Ez a tulajdonság független a diszlokációk aktuális elrendeződésétől. Természetesen azt, hogy ez az aszimptotikus viselkedés milyen feszültségeknél “kezdődik” a diszlokáció eloszlás jelentősen befolyásolja. Mivel numerikus szimulációk tapasztalata szerint a vizsgált párhuzamos éldiszlokáció rendszerben relaxált állapotban a diszlokációk döntő többsége dipólokba rendeződik, megvizsgáltuk a dipólok által keltett feszültségtér eloszlásfüggvényét. Elméleti számításokkal sikerült megmutatni, hogy az eloszlásfüggvény központi része Lorentz eloszlású, majd ez átvált a korábban ismert köbös lecsengésre [3] (a hivatkozási számok a közlemények listájában szereplő sorszámoknak felelnek meg). Az eredmények a 1. ábrán láthatók. Fontos kihangsúlyozni, hogy az elméletileg kapott görbék nem tartalmaznak illesztési paramétert. Megjegyezzük, hogy a munka Csikor Ferenc 2004-ben megvédett doktori munkájának része volt.



Szimulációval meghatározott belsőfeszültség eloszlás. Az aszimptotikus tartományának köbös lecsengése, ill. a központi rész Lorentz eloszlása. A két analitikusan számolt görbe nem tartalmaz illesztési paramétert.

Az előzőekben ismertetett vizsgálatokban nem alkalmaztunk külső feszültséget. Érdekes kérdés, hogy ez hogyan befolyásolja az eloszlásfüggvényt. A legfontosabb különbség az, hogy ekkor az eloszlásfüggvény már nem szimmetrikus. Megmutattuk, hogy az antiszimmetrikus rész a lecsengő tartományban a feszültség negyedik hatványával csökken és első közelítésben arányos az alkalmazott feszültséggel [17]. A problémakör Ispánovity Péter PhD munkájának részét képezi.

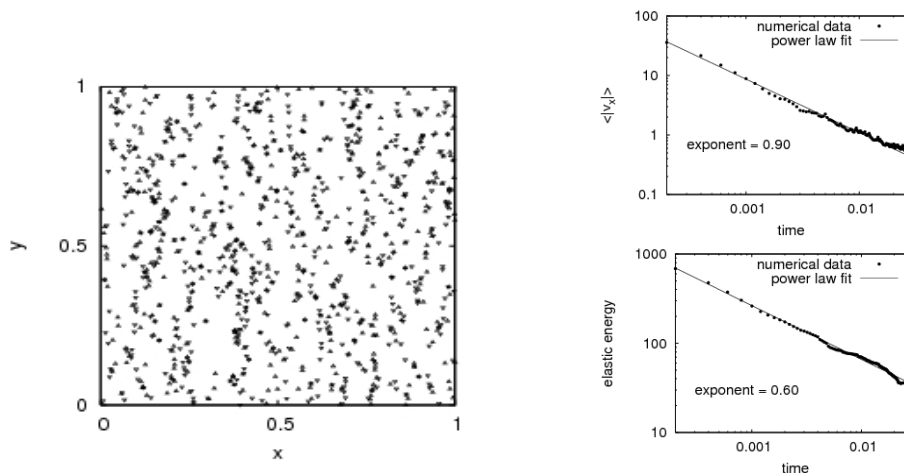
A pályázat munkatervének egyik pontja az eloszlásfüggvény időfejlődésének modellezése volt. Ezért diszlokációdinamikai szimulációval részletesen tanulmányoztuk az eloszlásfüggvény különböző paramétereinek időfejlődését. Kiderült, hogy ez a problémakör az eredetileg vártnál sokkal több, a diszlokációk kollektív viselkedését alapvetően befolyásoló kérdést vet fel. Az eredményekkel a következőkben részletesen foglalkozunk.

A témához tartozó további eredmény, hogy sikerült meghatározunk a diszlokációk helyén fellépő feszültségek eloszlásának néhány fontos tulajdonságát is. (Az eddigi eredmények a diszlokációt nem tartalmazó pontbeli feszültségeloszlásra vonatkoztak.)

1.2 A diszlokációrendszer időbeli fejlődése.

Számítógépes szimulációval kiterjedten vizsgáltuk az egyenes éldiszlokációkból álló rendszer relaxációs tulajdonságait. Tekintettel a diszlokációk közötti hosszú hatótávolságú kölcsönhatásra a probléma numerikus kezelése nagy számítógép kapacitást igényel. Ehhez 2003-ban jelentősen fejlesztettük a PC klaszterünket. Majd 2006-ban EU-s forrásokat is felhasználva egy 2x16 processzorból álló új szuperszámítógépet szereztünk be.

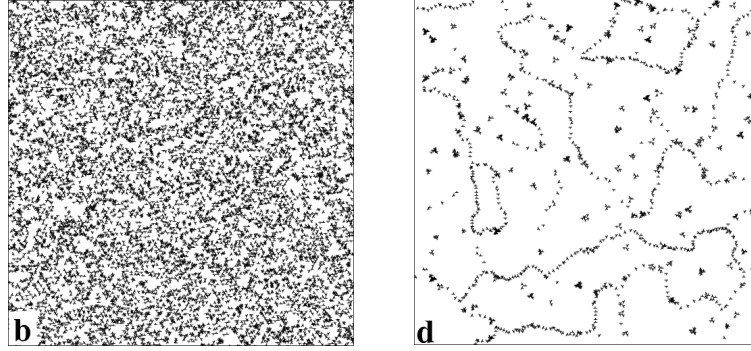
A numerikus szimulációk első igen fontos eredménye az volt, hogy a rendszer különböző makroszkopikus paraméterei, mint pl. diszlokációk átlagsebessége, deformáció sebesség, energia relaxációja nem exponenciális hanem az idő különböző hatványfüggvényével cseng le (lásd 2. ábra)[15].



2. ábra Relaxált diszlokáció konfiguráció, valamint a sebesség abszolút értékének átlaga és az energia az idő függvényében.

Ez indukálta azt a sejtésünket, hogy a diszlokációrendszer üvegszerű viselkedést mutathat. Ezért egy új szimulációs módszert dolgoztunk ki amely lehetővé tette az eddigieknél nagyobb számú diszlokációt (kb. 10000) tartalmazó 2D rendszer tanulmányozását. A módszer alapja egy gyors Fourier transzformáláson alapuló átlagtér közelítés. A kezdetben teljesen véletlenszerűen elhelyezett diszlokációk relaxációját két különböző esetben vizsgáltuk. Az egyikben a korábbi szimulációkkal azonos módon a diszlokációknak csak a Burgers vektor irányába történő elmozdulását (csúszás), míg a másik esetben az erre merőleges elmozdulást (climb) is megengedtük. (Tekintettel arra, hogy a climb makroszkopikus atomi mozgásokat igényel ebben az irányban a mozgékonyt egy nagyságrenddel kisebbnek vettük.) Emellett climb esetében ha két ellentétes Burgers vektorú diszlokáció elég közel került egymáshoz megengedtük azok annihilációját. Mindkét szimulációban három egymással 60° -os szöget bezáró csúszósíkot vettünk fel.

A közműltba GaAs kristályokon kapott kísérlet eredményekkel teljes egyezésben azt tapasztaltuk, hogy ha a climb nincs megengedve a relaxáció után egy rendezetlen dipólókból álló szerkezet alakul ki, míg climb bekapcsolásával markáns cellaszerkezet képződik (lásd 3. ábra). Az idő előrehaladtával a cellaméret a diszlokációk átlagos távolságával arányosan növekszik [11]. (A diszlokációk száma az annihiláció következtében folyamatosan csökken.) Kísérletileg ilyen cellaképződést több valódi 2D kristályban is megfigyelték.



3. ábra Diffúz diszlokáció mintázat climb jelenléte nélkül (b), ill. cellaszerkezet climb bekapcsolása esetén (d).

Az eddig felsorolt eredmények még természetesen nem igazolnák, hogy a diszlokációrendszer üvegszerű viselkedést mutat. Azonban a szimulációk során különböző várakozási idők mellett meghatároztuk az ezen időtől mért átlagos négyzetes elmozdulást. Ez egyértelműen azt mutatta, hogy megjelenik az üvegeknél ismert ún. ageing jelensége, tehát különböző fizikai mennyiségek mint pl. az átlagos négyzetes elmozdulás függ a várakozási időtől [27]. Ez korábban nem volt ismert. (Természetesen a diszlokációrendszer sok tekintetben alapvetően különbözik más klasszikus üvegszerű viselkedést mutató rendszertől.)

1.3 Diszlokációk kontinuum elmélete egy csúszósík esetén

A pályázat megvalósítása során legnagyobb figyelmet az egyszeres csúszásra korábban kidolgozott 2D diszlokáció kontinuum elmélet általánosítására fordítottuk. Egyelőre továbbra is 2D esetről maradtunk, de szeretnénk volna az egyszeres csúszásra vonatkozó elméletet többszörös csúszásra általánosítani. Kezdetből fogva nyilvánvaló volt, hogy a korábbi mikroszkopikus elméleten alapuló lokális átlagolási eljárás nem keresztülvihető többszörös csúszás esetén. Ez annak következménye, hogy az ott alkalmazott skálázási megfontolások itt már nem érvényesek. Ezért az általánosításnak fenomenologikus elveken kell nyugodnia.

Első lépésként sikerült megmutatni, hogy a korábbi elmélet a fázistér elméletben szokásos módszerekkel származtatható az alábbi funkcionálból

$$F(\rho_p, \rho_m, \chi) = \int \left\{ -\frac{D}{2} \Delta^2 \chi + b \chi \partial_y \kappa + \frac{T_{eff}}{\rho} \kappa^2 \right\} d^2 r$$

ahol χ az ún. feszültségpotenciál, ρ_p ill. ρ_m a pozitív és negatív diszlokációk sűrűsége, $\kappa = \rho_p - \rho_m$ az ún. geometriailag szükséges diszlokációsűrűség (GND), $\rho = \rho_p + \rho_m$ a teljes diszlokációsűrűség, b a Burgers vektor, D a rugalmas állandókból képzett konstans és T_{eff} egy diszkrét diszlokációdinamikai szimulációból meghatározandó a diszlokáció-diszlokáció korrelációktól függő csatolási állandó. Ekkor a feszültségpotenciálra vonatkozó egyenlet a $\delta F / \delta \chi = 0$ feltételből

$$D \Delta^4 \chi = b \partial_y \kappa$$

adódik, amely a 2D diszlokációrendszerek jól ismert egyenlete. Ugyanakkor a diszlokációsűrűségek időfejlődésére (a diszlokációk számának megmaradását feltételezve) nyilván teljesül a

$$\partial_t \rho_{p,m} + \partial_x j_{p,m} = 0$$

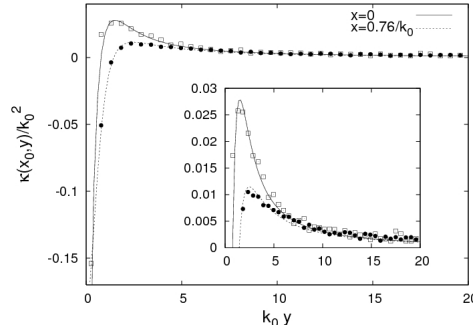
megmaradási feltétel ahol kihasználtuk, hogy a diszlokációk csak a csúszósíkban (x irány) mozoghatnak (a climb-ot itt kizártuk). A fázistér elméletek szokásos eljárása szerint az áramok arányosak az F megfelelő sűrűségek szerinti funkcionális deriváltjának gradiensével. Megmutattuk, hogy a

$$j_{p,n} = -B \rho_{p,m} \partial_x \frac{\delta F}{\delta \kappa}$$

választással (ahol B a diszlokáció mobilitás) pontosan a korábbi mikroszkopikus elméletből levezetett diszlokáció evolúciós egyenletet kapjuk vissza [28].

Érdeemes kiemelni, hogy egyáltalán nem nyilvánvaló, hogy a fázistér elméletek formalizmusa alkalmazható egy olyan egyáltalán nem termodinamikai rendszerre mint amelyet a diszlokációk képviselnek. Ugyanakkor a mikroszkopikus megfontolásokon alapuló elmélettel való összehasonlítás ezt igazolja.

Az elmélet lehetőséget teremtett egy régóta kutatott problémakör vizsgálatára, nevezetesen arra, hogy a diszlokációk képek-e és hogyan a külső feszültség leámyékolására. Részletesen megvizsgáltuk, hogy egy a rendszerhez hozzáadott extra diszlokáció feszültségtere hogyan változik az indukált GND hatására (Debye screening). A problémára sikerült analitikus megoldást találni [24]. A kapott GND eloszlást összehasonlítottuk diszkrét diszlokációdinamikai szimulációvak kapott eloszlásokkal (4. ábra). Amint az látható kitűnő egyezés adódott.



4. ábra A kontinuum elmélet alapján számolt (vonal) és a diszkrét szimulációval (négyzetek) kapott indukált GND egy extra diszlokáció körül két a Burgers vektorra merőleges metszetben [24].

A fent ismertetett fázistér elmélet megközelítés lehetőséget ad fenomenológikus megfontolások alapján az elmélet különböző irányokba történő általánosítására. Az egyik igen fontos kérdés a több csúszósík esete. Az előző F függvény természetes általánosítása két csúszósík esetére

$$F = \int \left\{ -\frac{D}{2} \Delta^2 \chi + b \chi \nabla \cdot (\vec{n}_1 \kappa_1 + \vec{n}_2 \kappa_2) + \frac{T^{eff}}{\rho} (\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + A \kappa_1 \kappa_2) \right\} d^2 r$$

ahol $\vec{n}_{1,2}$ a két csúszósíkra merőleges egységvektor A pedig egy a két csúszósík közötti szögtől függő állandó. (Megjegyezzük, hogy T_{eff} értéke nem ugyanaz mint egyszeres csúszásnál.) A feszültségfüggvényre ill. a megfelelő diszlokációsűrűségekre vonatkozó egyenletek az egyszeres csúszáshoz teljesen hasonlóan állíthatók elő [28]. Az elmélet jóslatainak diszkrét diszlokációdinamikai szimulációval történő ellenőrzésén még jelenleg is dolgozunk. Előzetes eredmények azonban jó egyezést mutatnak.

Egy másik igen régóta nyitott probléma a diszlokációk kollektív viselkedése oldott atomok jelenlétében. Kísérleti eredmények tanulsága szerint ez plasztikus instabilitások megjelenéséhez vezet (PLC effect). A fenti F kifejezésben az oldott atomok egyszerűen figyelembe vehetők két tag hozzáadásával

$$F = \int \left\{ -\frac{D}{2} \Delta^2 \chi + b \chi \partial_y \kappa + \frac{T_{eff}}{\rho} \kappa^2 + \alpha c^2 + \beta c \Delta \chi \right\} d^2 r$$

ahol α és β állandók és c az egyensúlyi oldott atom koncentrációtól való eltérés. A fenti F -ben az utolsó tag az oldott atom és a rugalmas feszültségtér (nyomás) közötti kölcsönhatást veszi figyelembe. A koncentráció időfejlődésére a

$$\partial_t c = \nabla \left[M \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right]$$

alakot használva egy szokásos diffúziós egyenletet kapunk amelyben azonban F negyedik tagjának következtében a nyomás gradiense is hajtóerőként jelenik meg. Természetesen a feszültségfüggvény egyenlete is módosul, megjelenik benne a $\beta \Delta c$ extra tag.

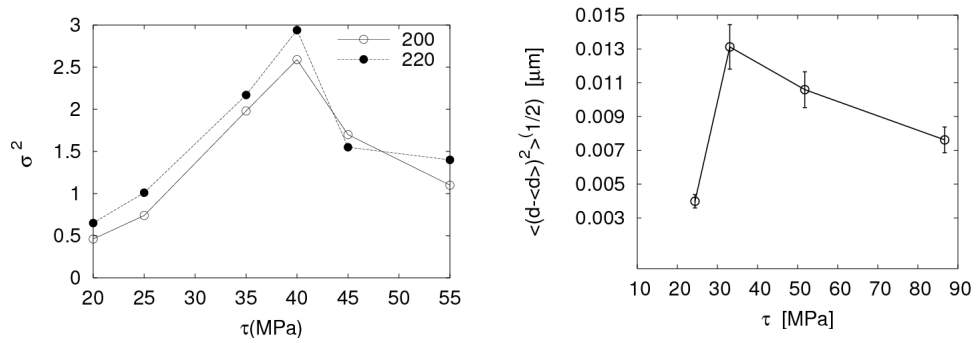
Rövid számolással megmutatható, hogy az elmélet a diszlokációk körül kialakuló oldott atom eloszlásra visszaadja az ún. Cottrell felhőt. Emellett megvizsgáltuk, hogy egy diszlokációt adott sebességgel mozgatva az indukált GND eloszlás mekkora fékezőerőt eredményez. Sikerült kimutatni, hogy a paraméterek bizonyos tartományában a sebesség-fékezőerő reláció N alakú görbe, amely instabilitások megjelenését eredményezi. Ezt korábban csak fenomenológikus megfontolások alapján feltételezték.

2. Diszlokációk térbeli eloszlásának kísérleti vizsgálata.

Az elméleti vizsgálatok mellett a munkatervnek megfelelően méréseket végeztünk az erősen inhomogén diszlokációszerkezetek statisztikus tulajdonságainak kísérleti meghatározására. A méréseket az MIT-ből kapott nagyméretű igen kis (10^{12}m^{-2}) diszlokációsűrűségű Cu egykristályokon végeztük.

Korábbi röntgen vonalprofil mérések tanulsága szerint a diszlokációsűrűség relatív fluktuációja a deformáció függvényében éles maximumot mutat (lásd 5.ábra). Kíváncsiak voltunk arra, hogy más fizikai mennyiségek esetében is fellép-e ez a jelenség. Erre a Tanszéken a közelmúltban beszerzett nanoindenter adott lehetőséget. Azonos alkalmazott nyomóerő mellett több 100 benyomást végeztünk a minta különböző pontjain és meghatároztuk a benyomódási mélység fluktuációját. Megjegyezzük, hogy az alkalmazott nyomóerőt úgy állítottuk be, hogy a benyomódási mélység 100nm nagyságrendű legyen, ami kb tized akkora mint az átlagos cellaméret. Amint az a 5. ábrán látható hasonlóan a diszlokációsűrűséghez a benyomódási mélység,

így a nanokeménység fluktuációja is rendelkezik egy jól meghatározott maximummal [16,26].



5.ábra A diszlokációsűrűség (bal ábra) ill. a benyomódási mélység (jobb ábra) relatív fluktuációja az alkalmazott feszültség függvényében ideálisan többszörös csúszásra orientált Cu egykristály esetén.