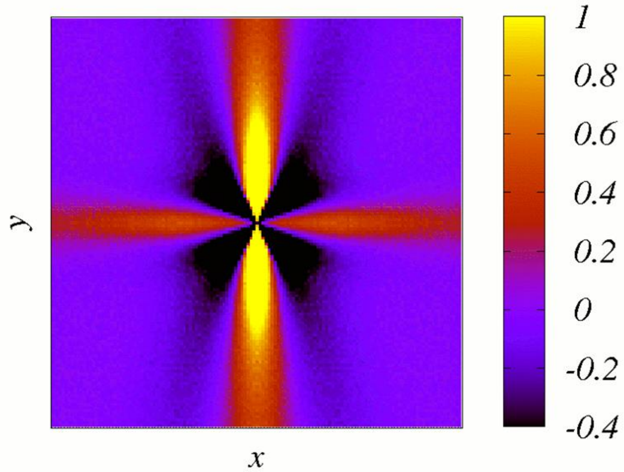
GYÖRGYI GÉZA:

DISZLOKÁCIÓK KOLLEKTÍV VISELKEDÉSE: ÁRNYÉKOLÁS ÉS MINTÁZATKÉPZŐDÉS

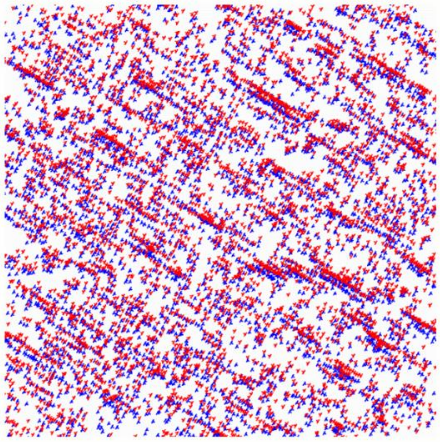
Szilárd anyagok képlékeny, azaz plasztikus alakváltozása az anyagtudomány egyik sokat vizsgált és nagy gyakorlati jelentőségű területe. Évezredek óta ismert jelenség, hogy fémek alakítással keményíthetők, a földműves tudta, hogy kaszája éltartóbbá tehető, ha kikalapálja, s a damaszkuszi penge tartósságának kulcsa is az ismételt alakítás volt. 1934-ben Orován, Polányi és Taylor felfedezték, hogy plasztikus deformáció során nagyszámú, örvényre emlékeztető, vonalszerű objektum keletkezik és mozdul el. Ezen elemi deformációkat diszlokációknak nevezték el. A hagyományos fémkezelési eljárások lényege éppen diszlokációk keltése, melyek egymáson és szennyezőkön megakadva keményedést okoznak. Nyilvánvaló tehát, hogy a diszlokációk elhelyezkedésének és mozgásának leírása kulcsfontosságú a képlékeny alakítás megértése szempontjából. A három dimenziós alakváltozásokon túl a diszlokációk fontos szerepet játszanak kétdimenziós rendszerekben, így a kétdimenziós olvadás problémájában, kisülési csövekben megvalósuló „poros plazma" rácsokban, és magashőmérsékletű szupravezető filmek mágneses fluxusrácsának viselkedésében. A diszlokációkra nemcsak az alkalmazott külső feszültségből közvetlenül származó erő hat, hanem diszlokációk maguk is létrehoznak feszültségteret, amely más diszlokációkra erőt gyakorol. Ezen erők lassan, a távolsággal fordított arányosság szerint csengenek le, szokásos elnevezéssel élve végtelen hatótávolságúak, ezért a diszlokációkat erősen kölcsönható objektumokból álló rendszernek tekinthetjük. A diszlokációrendszereket a végtelen hatótávú, irányfüggő kölcsönhatásuk miatt nehéz elméletileg leírni, kollektív viselkedésüket mindmáig nem tudjuk kielégítően magyarázni.

Végtelen hatótávolságú erők által jellemzett, közismert fizikai rendszerek a magas hőmérsékletű plazmák, amelyekben a negatív töltésű elektronok és a pozitív töltésű ionok között, továbbá elektrolitok, amelyekben az ionok között Coulomb kölcsönhatás érvényesül. A múlt század első felében Debye és Hückel kimutatták, hogy ezen rendszerekben a töltések egymást árnyékolják, azaz egy kiszemelt részecske körül feldúsulnak az ellenkező, és ritkulnak az azonos előjelű töltések. A töltések közötti effektív kölcsönhatást így véges hossz jellemzi és az egy részecskére eső energia nagy rendszerre is véges marad. Az energia méretfüggése a végtelen hatótávolságú erőkkel kölcsönható rendszerek nevezetes problémája, ugyanis ismeretes, hogy véletlen elhelyezkedésű részecskék között a méretnél gyorsabban növekszik a teljes energia, azaz „szuperextenzív". A kísérletek azonban ilyet nem mutatnak ki, az energia extenzív, melynek magyarázatát a véges árnyékolási hossz adja. Az árnyékolási elmélet a korrelációk mellett a külső elektrosztatikus potenciál hatására történő polarizációról, azaz a töltésmegosztásról is számot ad. Hasonló jelenséget intuitív alapon várnánk diszlokációk rendszerében is, e kérdést azonban meglepő módon eddig nem vizsgálták.

Régóta ismert a plasztikus deformációk ún. méreteffektusa (ld. Hall-Petch hatás), amely szerint kicsiny, egy mikron alatti méretskálán a plasztikus deformáció megindulását jellemző folyásfeszültség a méret csökkenésével nő. Ettől látszólag független jelenség az, hogy noha a diszlokációk végtelen hatótávolságú kölcsönhatásban vesznek részt, nagy méretek mellett nem növekszik a folyásfeszültség, továbbá, az egy diszlokációra jutó energia sem növekszik a mérettel, azaz extenzív. Érdekes módon ezen jelenségek magyarázata közös, éspedig a diszlokációk közötti korrelációban keresendő, melyet kvantitatíven a közelmúltban sikerült kétdimenziós, egyetlen tengely irányában mozogni képes éldiszlokáció-rendszerre leírnunk [1,2]. Az elmélet formális hasonlóságot mutat a Coulomb kölcsönhatás Debye árnyékolásával.



1. ábra: Diszlokációk korrelációs függvénye, általában gyorsan cseng le a távolsággal. (A Burgers vektor, azaz a csúszási tengely (1,0)).

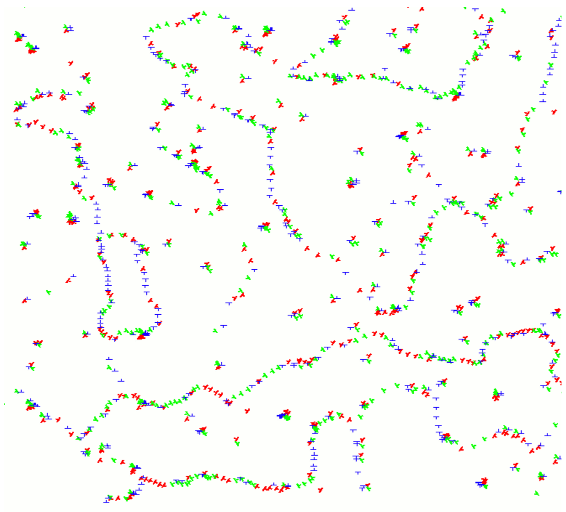


2. ábra: (1,√3) irányban kötött mozgású, eredően semleges éldiszlokáció-rendszer egyensúlyi konfigurációja.

A diszlokáció árnyékolás különlegessége, hogy a diszlokációk a saját energiaskálájukon közel zérus hőmérsékletű, „hideg” rendszert képeznek, azaz a plazma magas hőmérsékletének megfelelője az első pillantásra hiányzik. Mivel azonban a diszlokációk a csúszási tengelyekhez kötöttek, ellentétes diszlokációk általában nem kerülhetnek közel egymáshoz és ezért nem semlegesíthetik egymást, más szóval nem annihilálódhatnak. Érdekes módon az árnyékolási elméletben a diszlokációk távoltartását egymástól éppen olyan empirikus paraméter fejezi ki, amely effektív hőmérsékletként értelmezhető. Sejtésünk, hogy ez az effektív hőmérséklet a torziómodulus energiaskáláján minden kétdimenziós, szoros pakolású rácsra azonos, az anyagi minőségtől függetlenül. Azt találtuk továbbá, hogy hasonlóan a plazmához, a diszlokációk árnyékolására is jellemző az a fontos tulajdonság, mely szerint külső diszlokáció által keltett töltésmegosztás egyben a diszlokációk közötti korrelációt is megadja. Az 1. ábrán a korrelációs függvény szimulációval kapott képét mutatjuk be, a *Burgers vektor* itt „x” irányú. A zérushoz közeli, kék értékek a gyors lecsengést, azaz a véges árnyékolási hosszat jelzik, összhangban az elméleti jóslattal. A legerősebb korreláció a Burgers vektorra merőleges (itt “y”) tengelyen látható, mely azonos diszlokációkból álló falak létére utal. Ilyen falak markánsan megjelennek a 2. ábrán, amely az „x” tengelytől 60 (vörös) ill. 240 (kék) fokkal elfordított Burgers vektorú diszlokációk egyensúlyi, relaxált konfigurációját mutatja be.

A diszlokációk mobilitása, vagyis hogy mennyire könnyen mozgathatók különböző irányokban, jelentősen befolyásolja az általuk formálható alakzatok jellegét, a morfológiát. A szakterület jelenleg legnagyobb méretű, diszkrét diszlokáció dinamikai szimulációjával vizsgáltuk két dimenzióban a mobilitás, a dinamikai tulajdonságok, és a morfológia kapcsolatát [3]. A 2. ábra mutat tipikus konfigurációt olyan esetben, amikor csak a Burgers vektor mentén, azaz a könnyű csúszás irányában tudnak elmozdulni a diszlokációk. A térbeli szerkezet véletlenszerű, noha kivehetők a fent említett falak. Drámaian különböző alakzatokat kapunk azonban, ha a diszlokációk a Burgers vektorra merőlegesen is el tudnak mozdulni, ezt nevezik „climb”-nak. Ekkor az ellentétes Burgers vektorú diszlokációk a könnyű csúszás tengelyéből kilépve meg tudják egymást közelíteni és végül annihilálódhatnak. Ezért hosszabb ideig csak a helyileg egynemű alakzatok maradnak fenn, melyek falakba rendeződnek. A 3. ábra mutat ilyen konfigurációt, amelyen cellaszerkezetet láthatunk. Itt hatféle, egymástól 60 fokkal elfordult Burgers vektorú diszlokáció szerepel; előjeltől függetlenül a 60 fokos egyenesbe esőeket vörös, az „x” tengelyűek kék, és a -60 fokosak pedig zöld színnel van jelölve. A falak kialakulása mechanizmusának felderítése minden irányú mobilitás esetén folyamatban levő munka. Itt azt az újonnan észlelt jelenséget emeljük ki, mely szerint – noha egyetlen falszakasz önmagában instabil, mivel hosszirányban nyúlik – több fal egymást stabilizálhatja. Filmek szemléltetik, hogyan hoz létre egy diszlokáció fal további falakat véletlenszerű kiindulási helyzetekből (eredően *semleges* ill. *polarizált* diszlokáció eloszlás mellett). Itt a kezdetben is meglevő fal mesterségesen rögzített volt, ha azonban minden irányban mobil diszlokációkból állna, az általa létrehozott falak őt is stabilizálnák hasonlóan ahhoz, ahogy ő stabilizálta a hozzá kapcsolódó falakat a filmeken látható módon.

A 3. ábrán látható cellaszerkezet csupán ideiglenesen áll fenn, az ellentétes diszlokációk idővel ugyanis “megtalálják” egymást, asszimilálódnak. (Ez gyakran hurkok kollapszusa révén következik be, melyet *film* demonstrál egy hatszög különös összeroppanása példáján.) A diszlokációk száma tehát az idő előrehaladtával csökken, miközben növekszik az átlagos cellaméret. Ez a jelenség a fizika számos területén doménnövekedés néven ismert, s különlegessége, hogy az üvegek igen lassú, az időeltolási szimmetriát sértő dinamikai tulajdonságait mutatják. Kiterjedt numerikus vizsgálataink eredményeképpen megállapíthatjuk, hogy a diszlokációrendszerek dinamikája is hasonlatos az üvegekéhez. Az analógia úgy értendő, hogy míg a közönséges üvegekben az atomok elmozdulását követjük, addig a kristályban a diszlokációk mozgása üvegszerű.



3. ábra: Minden irányban mobil diszlokációk által kialakított cellaszerkezet.

További kutatási irány a bonyolultabb, valósághűbb díszlokációrendszerek árnyékolási tulajdonságainak felderítése. A diszlokációk kontinuumelméletének fejlesztésével márpedig a szerkezetek, különösen a falak kialakulását egyszerűbb matematikai eszközökkel írhatjuk le, mely a későbbiekben a nagyskálájú szimulációk hatékonyságát is lényegesen javíthatja.