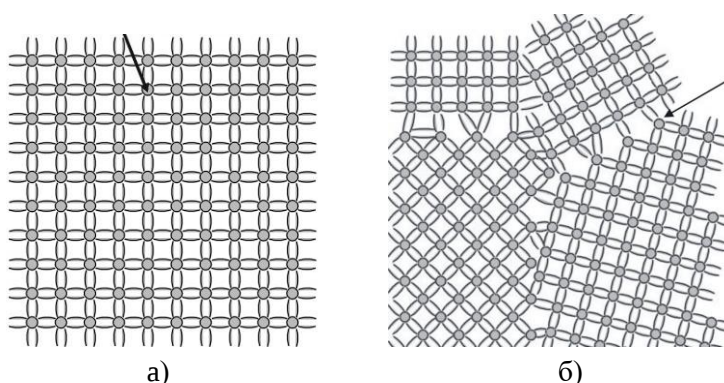


3. ПОЛИКРИСТАЛНИ МАТЕРИЈАЛИ

Већина неорганских супстанци, као што су стене, лед, метали и њихове легуре, многи керамички и други материјали имају поликристалну структуру. Већина предмета који се користе су ретко у облику монокристала са изузетком, на пример, монокристалног силицијума у електронској индустрији, одређене врсте монокристалних влакана, појединих супер легура на бази никла итд. У пракси се, дакле, материјали најчешће појављују у облику поликристала, који су састављени од великог броја појединачних ситних монокристала.

3.1. СТРУКТУРА ПОЛИКРИСТАЛА

Током процеса кристализације долази до прелаза неуређеног или приближно уређеног стања у потпуно уређено стање карактеристично за кристалну структуру. Када се правилност распореда атома простире по целој запремини чврстог тела, онда се тај материјал назива монокристал и он се карактерише анизотропијом физичких својстава и прелазом из чврсте у течну фазу на константној температури. На слици 3.1.а) је дат шематски приказ монокристала силицијума Si, где је сваки атом повезан са четири најближа суседна атома.



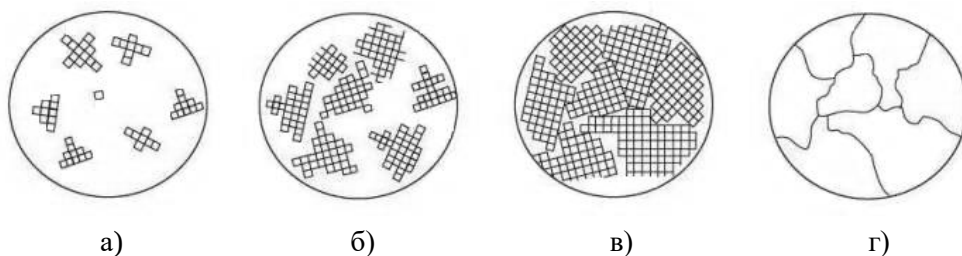
Слика 3.1. Шематски приказ структуре: а) монокристала силицијума, б) поликристала силицијума.

У случају да се правилан распоред атома успоставља у малом делу запремине материјала, али се појављује на великом броју места и

различно је оријентисан, онда се сматра да је такав материјал поликристалан. Поликристални материјал састављен је од великог броја међусобно спојених ситних или крупних монокристала, који се називају **кристална зрна** или кристалити, као што је приказано на слици 3.1.б), где је дат шематски приказ поликристалног силицијума. За поликристалне материјале карактеристична је њихова тзв. квази изотропност физичких својстава, због великог броја кристала различито оријентисаних у простору. Поликристални материјали, слично кристалним, прелазе из чврсте у течну фазу на константној температури, односно имају тачно дефинисану тачку топљења.

3.1.1. Процес формирања поликристала

Стварање поликристалног материјала, може се приказати на примеру процеса кристализације растопа метала или легура. Приликом хлађења, у растопу долази до нуклеације, односно образовања стабилних клица чврсте фазе, тзв. језгара кристализације, која су међусобно различито кристалографски оријентисана (слика 3.2.а). Раст кристалних зрна се одвија тако да се за клицу везују стално нови атоми течног метала уз задржавање правилног геометријског облика (слика 3.2.б). Зрна настављају свој раст све док не наиђу на друге кристалите (слика 3.2.в) Процес се одвија све док не нестане течна фаза, односно до потпуне кристализације, када се добија кристални материјал састављен од пуно међусобно спојених малих монокристала/кристалита, који се назива поликристал (слика 3.1.б), односно 3.2.г). Образовање клица може да се јави и као спонтани процес при већим степенима потхлађења или на честицама примеса које се налазе у течној фази, када се кристализација може одвијати и при незнатном потхлађењу.



Слика 3.2. Формирање поликристала.

Како поликристални материјали настају из великог броја центара кристализације, оријентација кристалних решетки суседних зрна је различита, тако да су прелазни слојеви између суседних зрна, области са изразитим нарушавањем кристалне грађе. Ове прелазне области називају се **границе зрна**.

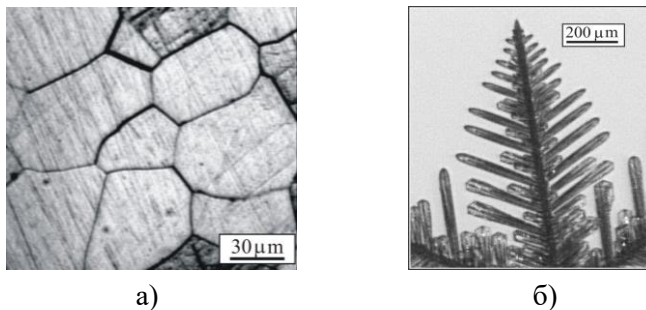
3.1.2. Кристална зрна

Структура и састав поликристалних материјала су неједнородни. Ова неједнородност је, најчешће, микроскопског карактера, тако да се одговарајућа разноликост унутрашње структуре поликристалних материјала назива микроструктуром. Геометријски, микроструктуру карактерише величина, облик и оријентација зрна. Односом количине зрна присутних фаза карактерише се састав поликристалног материјала.

Једна од веома значајних карактеристика поликристалних материјала је **величина зрна**, која зависи од броја центара за кристализацију и брзине раста кристала. Што се већи број центара за кристализацију образује, утолико ће се у посматраној запремини формирати већи број ситних кристалних зрна и обрнуто, ако се иницијално створи мали број центара за кристализацију, број зрна по завршетку процеса кристализације ће бити мали, а зрна ће бити крупнија.

Степен потхлађења утиче на број центара за кристализацију, а самим тим и на величину кристалних зрна. Наиме, што је степен потхлађења већи, створиће се и већи број центара за кристализацију, односно добиће се поликристал са ситнијим зрнима. Да би се добила ситнија кристална зрна, при кристализацији се могу користити тзв. модификатори, веома ситне честице тешко растворљивих материјала које служе као допунски центри за кристализацију.

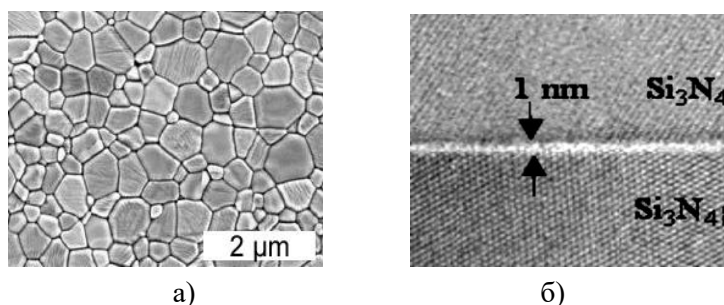
Степен потхлађења не утиче само на број центара за кристализацију и величину насталих зрна, већ и на њихов **облик**. У случају веома малих степена потхлађења образују се кристална зрна правилних геометријских облика тзв. полигонална зрна, приказана на слици 3.3.а), док се за велики степен потхлађења, образују кристална зрна другачијих облика, на пример тзв. дендритног облика (облик кристала налик крошњи стабла јеле или налик гранчици папрати), који је приказан на слици 3.3.б). За настанак дендритног облика кристалног зрна је карактеристично да се раст клица у процесу кристализације одвија неравномерном брзином.



Слика 3.3. Кристална зрна: а) полигоналног облика, б) дендритног облика.

Дакле, у случају када би се посебним методама за добијање кристала постигло формирање само једног језгра кристализације, које би након тога расло у процесу кристализације, добио би се монокристал. Међутим, приликом хлађења растопа, у принципу се појављује више језгара кристализације што доводи до стварања поликристала. Проблем код стварања поликристала настаје уколико се желе добити поликристали нанодимензија са зрнима одређених и по могућности једнаких димензија, што захтева коришћење посебних техника.

На слици 3.4.а) је дата SEM слика поликристалног узорка корунда (Al_2O_3), на којој се уочава да границе кристалита у принципу нису равне, већ закривљене и да се кристалити углавном спајају на местима тзв. тројног споја (енг. triple junction). Слика 3.4.б) приказује HRTEM слику ускоугаоне границе зрна између два кристалита у узорку силицијум нитрида (Si_3N_4), где је видљива ширина границе зрна око 1 nm у којој се не уочава кристална структура.



Слика 3.4. а) SEM снимак поликристалног узорка корунда,
б) HRTEM снимак споја два кристалита у узорку силицијум нитрида.

Границе зрна се могу померати, па једно кристално зрно може да расте на рачун другог. Овај процес подразумева транспорт материјала, односно дифузију и дешава се на високим температурама. Битна разлика, дакле, између монокристала и поликристала су управо међукристалитне односно међуфазне границе, које се одликују мањом густином паковања атома и нарушеном уређеношћу кристалне структуре, што нарочито долази до изражаја код наноматеријала.

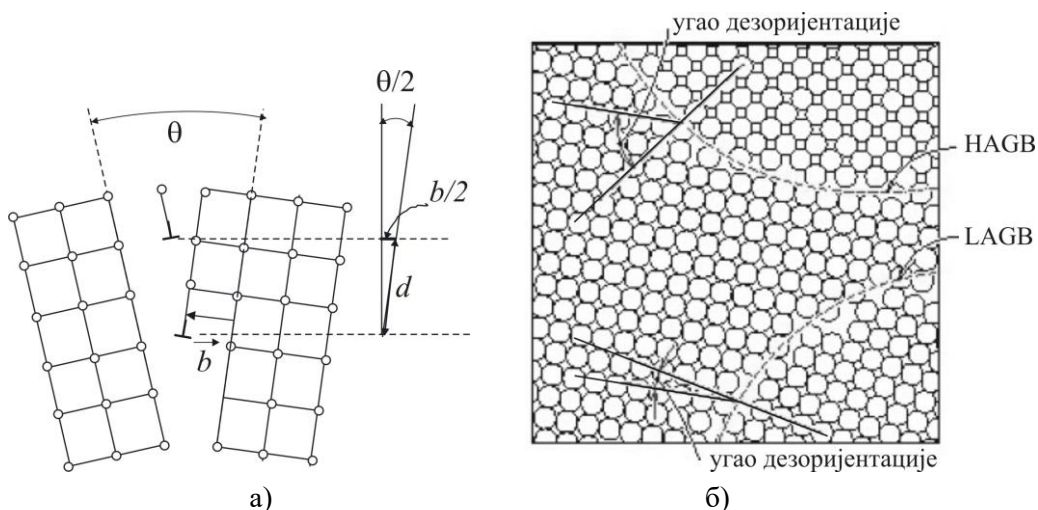
3.1.3. Границе зрна

Једну од најзначајних карактеристика поликристалних материјала представљају унутрашње границе између појединих зрна поликристала. Оне представљају оштре границе унутрашње структуре ових материјала, независно од тога да ли су то границе између различито оријентисаних зрна једне фазе или између зрна различитих фаза. Ако се ради о

кристалним зрнима различитог материјала онда се границе зову међуфазне (енг. interphase boundaries).

Границе између зрна су основни предзнак постојања поликристалног материјала и могу се представити као површински дефекти у кристалној структури. На слици 3.5.а), дат је шематски приказ границе зрна са углом θ , где се образују ивичне дислокације на растојањима d .

Разликујемо **широкоугаоне границе** зрна (енг. high-angle grain boundaries-HAGB) када је угао већи од 15° и **ускоугаоне границе** зрна (енг. low-angle grain boundaries-LAGB) када је угао мањи од 15° . Шематски приказ дат је на слици 3.5.б), где се може уочити већа неуређеност распореда атома код широкоугаоних граница.



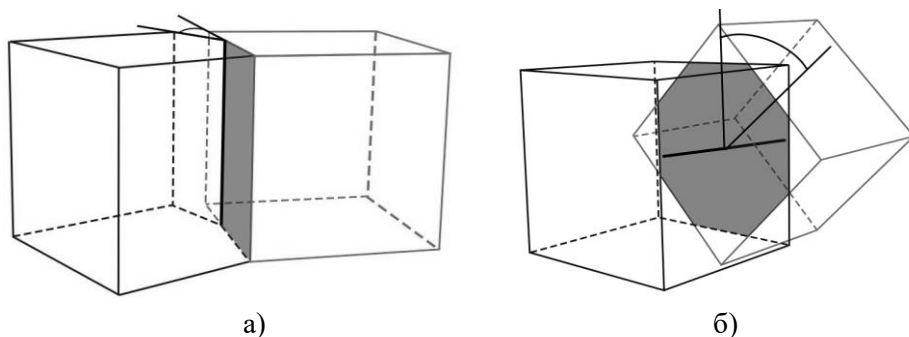
Слика 3.5. Шематски приказ: а) границе зрна са углом θ , б) широкоугаоне-HAGB и ускоугаоне-LAGB границе зрна.

Ускоугаоне границе су састављене од низа дислокација и њихова својства и структура зависе од угла дезоријентисаности. За разлику од њих, својства широкоугаоних граница су обично независна од дезоријентисаности. Међутим, постоје и посебне границе са одређеним оријентацијама, чије су међуповршинске енергије знатно ниже од оних карактеристичних за широкоугаоне границе.

Најједноставнија граница је тзв. нагибна (енг. tilt), која настаје ротацијом око осе паралелне са равни границе (слика 3.6.а). Може се претпоставити да се ова граница формира из једног кристалног зрна, на које делује нека спољашња сила. Енергија повезана са еластичним савијањем кристалне решетке може се смањити уметањем дислокације, која је у суштини половина равни која делује као клин, који ствара сталну

разоријентисаност између две стране. Ако се зрно савија даље, све више дислокација се мора увести како би се смањила енергија деформисања, што доводи до раста зида дислокација, односно стварања ускоугаоне границе. Зрно се дакле дели на два субзрна са одговарајућом кристалном структуром али различитом оријентацијом.

Друга врста је обртна (енг. twist) граница која настаје ротацијом око осе нормалне на раван границе (слика 3.6.б). Ови концепти нагибне и обртне границе представљају идеализацију, јер већина граница су мешовитог типа и садрже дислокације различитих типова, како би се остварио минимум енергије између суседних зрна.



Слика 3.6. Шематски приказ: а) нагибне границе зрна, б) обртне границе зрна.

Уколико дислокације у граници остају изоловане, граница се може сматрати ускоугаоном. Ако се деформисање наставља, густина дислокација ће се повећати и тако смањити размак између суседних дислокација. На крају може доћи до преклапања дислокација и нарушавања структуре границе. У том случају граница се може сматрати широкоугаоном и почетно зрно ће бити подељено на два потпуно одвојена зрна.

Уколико се граница зрна посматра геометријски као веза између два дела кристала од којих је један заротиран у односу на други, потребно је увести пет променљивих за дефинисање границе зрна. Прве две су јединични вектори који дефинишу осу ротације, трећа дефинише угао ротације зрна, а преостале две променљиве одређују раван границе зрна, односно јединични вектор нормале на дату раван.

Уобичајено је да се граница описује само као оријентациони однос два суседна зрна. Ради једноставнијег описивања изузима се из разматрања оријентација равни границе зрна, коју је јако тешко одредити. Релативна оријентација два зрна је описана коришћењем матрице ротације:

$$R = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

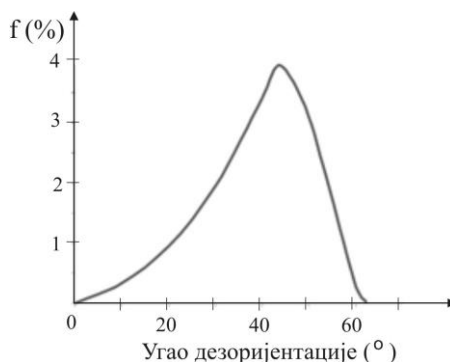
Користећи овај систем за ротациони угао θ се добија:

$$2 \cos \theta + 1 = a_{11} + a_{22} + a_{33} \quad (3.2)$$

док је правац $[uvw]$ осе ротације:

$$[(a_{32} - a_{23}), (a_{13} - a_{31}), (a_{21} - a_{12})] \quad (3.3)$$

Природа кристалне структуре укључује ограничења дезоријентисаности границе. Поликристали са потпуно случајном дезоријентацијом имају карактеристичну расподелу угла дезоријентације граница. Пример такве расподеле за случајно оријентисан материјал са кубном симетријом приказан је на слици 3.7. Међутим, такви материјали су ретки и већина поликристалних материјала има расподелу која мање или више одступа од идеалне.



Слика 3.7. Карактеристична расподела дезоријентација граница у потпуно случајно оријентисаном материјалу са кубном симетријом.

3.1.4. Енергија границе зрна

Енергија границе кристалних зрна γ_s може се одредити помоћу **Бургерсовог модела дислокација** за ускоугаоне границе зрна који је и експериментално потврђен. Наиме, Бургерс полази од претпоставке да се границе, са малим углом дезоријентације између кристалних зрна која се додирују, састоје од низова дислокација.

Једноставан пример овог модела приказан је на слици 3.5.а), где граница заузима положај (010) равни у простој кубичној решетки и дели кристал на два дела за које је оса [001] заједничка. Таква граница се назива

простом закошеном границом, а дезоријентација се описује ротацијом за мали угао θ око осе [001] једног дела кристала у односу на други. Закошена граница се представља као низ ивичних дислокација међусобног размака d .

Даље су Рид и Шокли¹ извели теорију слободне енергије границе зрна као функције угла дезоријентације, која се јако добро слаже са експерименталним резултатима. Област еластичне дисторзије, у близини границе зрна, не продире далеко у два гранична кристалита, већ је ограничена на слој чија је дебљина једнака размаку дислокација d . Свака од дислокација је окружена својим сопственим пољем деформација и пољима деформација која потичу од дислокација изнад и испод ње. Деформације које потичу од дислокација изнад и испод се скоро сасвим међусобно поништавају, пошто су једнаке по величини, а супротне по знаку, тако да деформациона енергија у близини сваке дислокације потиче у највећој мери од њеног сопственог поља деформација.

Еластична енергија деформације по јединици дужине код ивичне дислокације може се израчунати помоћу израза:

$$W(R) = - \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{b_0} \quad (3.4)$$

где је b - апсолутна вредност Бургерсовог вектора дислокација, μ - модуо смицања и ν - Поасонов однос. За R се може узети да је приближно једнак размаку између дислокација d , односно $R = b/\theta$, а $b_0 = b/4$.

Како је за мале углове $\theta = b/d$ (слика 3.5.а), то значи да је број дислокација по јединичној дужини $n = 1/d$ односно $n = \theta/b$.

Укупна енергија границе зрна је онда, једнака производу броја дислокација по јединичној дужини и еластичне енергије ивичне дислокације по јединици дужине:

$$\gamma_s = n W(R) \quad (3.5)$$

односно

$$\gamma_s = \frac{\theta}{b} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{4}{\theta} \quad (3.6)$$

Из задњег израза се може закључити да енергија границе зрна зависи од угла θ на сложен начин. Она је једнака нули када је угао θ једнак нули и

¹W.T. Read and W. Shockley, Phys. Rev. 78, 275 (1950).

расте са једним вертикалним почетним нагибом са повећањем угла. Међутим, са даљим порастом угла θ , енергија границе зрна спорије расте достижући своју максималну вредност γ_{sm} након које почиње да пада. Слагање теоријских и експерименталних резултата је веома добро све до вредности углова од 30° , што превазилази интервал углова за који је предвиђено важење модела.

Ситуација код граница зрна са великим углом је сложенија и емпиријски резултати показују да је зависност енергије границе зрна од угла дезоријентације знатно компликованија.

3.1.5. Миграција границе зрна

Током премештања граница зрна, степен миграција зависи од угла између два суседна зрна. Уколико је угао мали (LAGB), степен миграције зависи од дифузије ваканција између дислокација и миграције омогућавају појаву процеса рекристализације. За велики угао дезоријентације (HAGB) између два суседна зрна степен миграције зависи од прелаза атома са једног зрна на суседно растуће зрно и утиче на процесе рекристализације и раст зрна.

Брзина премештања границе зрна је директно пропорционална притиску који делује на њу, при чему се константа пропорционалности назива покретљивост границе. **Покретљивост границе зрна M** јако зависи од температуре, што је дато Аренијусовом (Arrhenius) релацијом:

$$M = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (3.7)$$

где је Q - привидна активациона енергија која се може довести у везу са топлотно побуђеним атомским процесима који се дешавају током премештања граница. Опште је прихваћено да је покретљивост граница са малим углом много мања него код граница са великим углом, што значи да покретљивост границе расте са повећањем угла дезоријентације. Могу се истаћи следећа запажања која важе у великом броју случајева:

- Кретање граница са малим углом може се објаснити теоријом дислокација по којој је највероватнији механизам, на основу експерименталних резултата, пењање дислокација. Покретљивост границе са малим углом је пропорционална притиску који делује на њу.
- Кретање граница са великим углом настаје преносом атома између суседних зрна. Покретљивост зависи од структуре границе, кристалне структуре зрна, примесних атома и температуре. Могуће је и да

поједини облици недифузионих механизма могу утицати на кретање граница у одређеним условима, као и неке несавршености границе.

Пошто границе зрна немају правилну кристалну структуру и карактеришу се мањом густином у односу на кристална зрна, постоји одређени део слободног простора где растворени атоми могу имати мању енергију. Као резултат тога, граници могу бити придружени растворени атоми који ће спречавати њено кретање. Кретање граница са малим или великим угловима ће бити успорено услед присуства честица због тзв. Зенер пининг ефекта². Овај ефекат се често користи код комерцијалних легура како би се смањила или спречила рекристализација или раст кристалних зрна.

3.2. КЛАСИФИКАЦИЈА ПОЛИКРИСТАЛНИХ МАТЕРИЈАЛА

Уобичајена класификација поликристалних материјала врши се на основу величине кристалних зрна, која може да варира од неколико нанометара до неколико милиметара, тако да разликујемо:

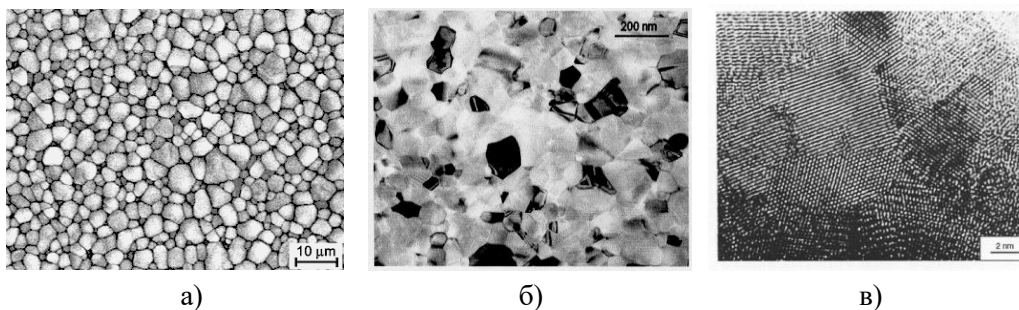
- микрокристалне, са величином кристалних зрна $(1 - 1000) \mu\text{m}$,
- ситнозрнасте, са величином зрна $(0.25 - 1) \mu\text{m}$ и
- нанокристалне материјале са величином зрна $(1 - 250) \text{nm}$.

Микрокристални узорци могу се посматрати оптичким металографским микроскопом, док се за посматрање ситнозрнастих поликристалних узорака користи конвенционална трансмисиона електронска микроскопија-СТЕМ (енг. Conventional Transmission Electron Microscopy). Када се ради о посматрању кристалита нанометарских величина неопходно је користити трансмисиони електронски микроскоп високе резолуције-HRTEM (енг. High Resolution Transmission Electron Microscopy).

На слици 3.8.а) приказан је снимак структуре поликристалног узорка тетрагоналног цирконијум оксида (енг. tetragonal zirconium polycrystal-TZP) са микрокристалним зрнима реда величине неколико μm , који је добијен оптичким металуршким микроскопом. Снимак структуре поликристалног узорка алуминијума са кристалним зрнима величине $(50 - 200) \text{nm}$, који је добијен класичним трансмисионим електронским

²**Zener pinning ефекат** се заснива на утицају дисперзије финих честица на кретање граница зрна са малим или великим угловима дезоријентације кроз поликристални материјал. Мале честице утичу на спречавање кретања таквих граница, због додатног притиска који поништава силу која делује на кретање границе.

микроскопом, приказан је на слици 3.8.б), док је снимак структуре поликристала паладијума са нанокристалним зрнима величине $(2-8)\text{ nm}$, добијен трансмисионим електронским микроскопом високе резолуције - HRTEM, приказан на слици 3.8.в).



Слика 3.8. Структура поликристала: а) TZR са микрокристалним зрнима, б) алуминијума са ситнозрнастим микрокристалима, в) паладијума са зрнима реда величине неколико нанометара.

На задњем снимку, на коме су приказана кристална зрна паладијума, може се уочити да су кристали међусобно различите оријентације, а могу се видети, чак и кристалне равни у појединим кристалним зрнима. У техници HRTEM, се у том случају каже да постоји линијско, односно тачкасто раздвајање.

3.3. ОСОБИНЕ ПОЛИКРИСТАЛНИХ МАТЕРИЈАЛА

Монокристални и поликристални материјали разликују се по својим физичким особинама: механичким, електричним, магнетним, оптичким, транспортним, дифузионим, површинским својствима итд. Ова разлика је углавном последица постојања граница зрна, које најчешће утичу на побољшање особина поликристалних материјала. Границе зрна су, такође, важне и за многе од механизма пузања.

Особине поликристалних материјала, осим од састава кристалних зрна, зависе и од њихове величине и просторне расподеле, као и од дефеката у њима. Основни типови дефеката код поликристалних материјала су: запремински дефекти (поре, микропукотине), површински дефекти (границе између зрна), тачкасти дефекти (дефекти унутар зрна-Шоткијеви и Френклејеви дефекти) и линијски дефекти (дефекти унутар зрна-дислокације).

3.3.1. Механичке особине поликристала

Величина зрна утиче на механичке особине поликристалних материјала, тако да се чврстоћа, тврдоћа и жилавост материјала повећавају са смањењем величине зрна, односно материјали са ситнијим зрнима имају боље механичке особине у односу на крупнозрнасте материјале. Величина кристалних зрна зависи од: типа решетке, међуатомских сила, растојања између атома, као и густине самих атома.

Веза између механичких карактеристика поликристалног материјала и величине кристалног зрна је дата Хол-Печовом релацијом³:

$$\sigma_0 = \sigma_i + k d^{-1/2} \quad (3.8)$$

где је σ_0 - граница попуштања или напон течења (енг. yield strength), d - средња величина кристалног зрна, а σ_i и k су константе које карактеришу одређени материјал.

Што су кристална зрна мања, то је више граница зрна, односно већа је површина коју заузимају границе зрна по јединичној запремини. Како деформације у кристалима настају кретањем дислокација, то значи да границе зрна представљају препреке кретању дислокација. Дакле, што је више граница зрна, односно финија структура поликристала, то ће бити већи отпор деформацији и већа чврстоћа материјала.

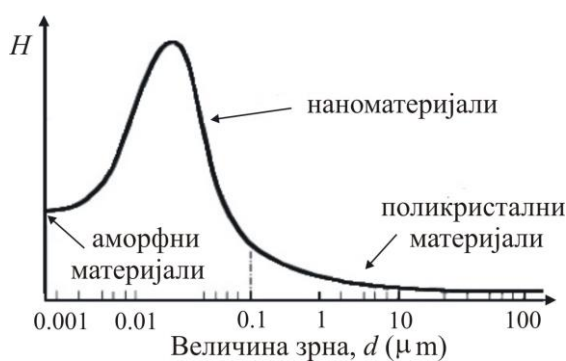
Слична релација важи и за тврдоћу H поликристалног материјала:

$$H = H_0 + k d^{-1/2} \quad (3.9)$$

где је H_0 - тврдоћа монокристалног узорка датог материјала. На слици 3.9. је приказана зависност тврдоће материјала од величине зрна, где се уочава повећање тврдоће са смањењем величине зрна, посебно за вредности од $1\mu\text{m}$ до 10nm . Након тога тврдоћа нагло опада до вредности која је карактеристична за аморфни материјал.

³Хол-Печова релација (Hall-Petch Relation) заснована је на механизму гомилања дислокација (pile up) на границама кристалита, што подразумева да би она морала важити до величине кристалних зрна од 30nm . Наиме, за мања зрна, механизам гомилања дислокација се више не опажа и границе кристалита би требало да утичу на вредности чврстоће и тврдоће материјала. Може се уочити одступање од очекиване линеарности како се величина кристалита смањује испод 30nm . Одступање постаје све израженије како се величине кристалита приближавају димензијама од око 5nm (што одговара нанокристалним материјалима о којима ће касније бити више речи). У литератури се ово одступање најчешће назива "breakdown of Hall-Petch scaling"

Сматра се да разлика у оријентацији два суседна кристална зрна представља основни разлог због којег дислокације не могу да пређу из једног у друго зрно. Наиме, када се дислокација приближи граници зрна јављају се привлачне силе које изазива сама граница и одбојне силе које изазива решетка суседног зрна. Распоред атома у граници зрна је већ веома неправилан па се енергија границе не повећава када се нова дислокација угради у границу зрна. Према томе сама граница привлачи дислокације јер се укупна енергија система смањује када дислокације из унутрашњости зрна пређу у границу. Међутим, кристална решетка суседног зрна одбија дислокације због тога што се правац и раван клизања мењају на граници зрна.



Слика 3.9. Зависност тврдоће материјала од величине зрна.

Граница попуштања или напон течења састоји се из две компоненте:

- напона, који је потребно применити да се савлада трење кристалне решетке и изазове клизање у унутрашњости зрна и
- напона, који је потребно применити да се савлада отпор границе зрна и клизање пренесе из једног у суседно зрно.

Једна група теоријских модела зависност границе попуштања од величине зрна објашњава нагомилавањем дислокација на границама зрна услед чега се јавља висока концентрација напрезања, која активира изворе дислокација у суседном зрну у близини саме границе или у самој граници зрна.

На основу вредности k за поједине метале закључује се да метали са запремински центрираном кубном решетком и хексагонално компактно пакованом решетком показују већу зависност σ_0 од величине зрна у односу на метале са површински центрираном кубном решетком, што је и експериментално показано.

Ширине граница зрна углавном износе само неколико нанометара. Код уобичајених материјала, кристали су довољно велики да границе

зрна чине мали део материјала. Међутим, у нанокристалним материјалима величине зрна су јако мале, тако да границе зрна заузимају значајан запремински део материјала. То има јако велики утицај на особине, као што су дифузија и пластичност, таквих материјала. Када се запремински удео граница зрна приближава 100%, материјал нема кристални карактер.

Миграција граница зрна, односно њихово премештање, игра важну улогу у многим механизмима пузања⁴. То значи да ситнозрнасти материјали имају лошу отпорност на пузање у односу на крупнозрнасте, посебно на високим температурама, јер мања зрна садрже више атома у границама. Границе зрна, такође, могу да узрокују деформацију јер се могу јавити као извори и понори тачкастих дефеката. Празнине у материјалу имају тенденцију да се окупљају у границама зрна, и уколико се то деси у критичној мери, може доћи до пуцања материјала.

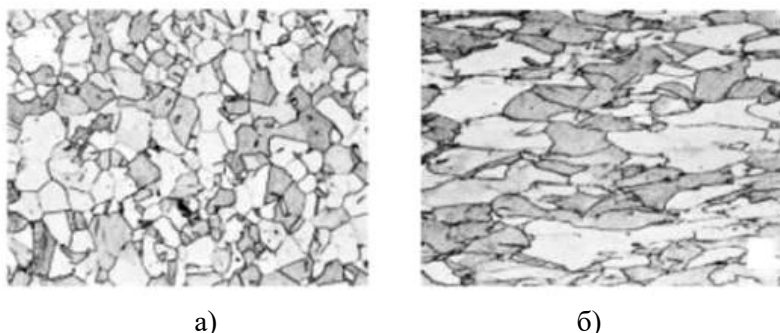
Пластична деформација поликристалних материјала

Пластична деформација поликристалних материјала може се објаснити клизањем, аналогно деформацији кристала, али је процес знатно сложенији. Основни разлог је постојање великог броја различито оријентисаних кристалних зрна, тако да се пластична деформација поликристала одвија клизањем сваког посебног кристалног зрна. Због њихове различите оријентисаности, пластична деформација се не изводи истовремено и једнако по целој запремини.

На слици 3.10.а) приказан је узорак поликристала пре пластичне деформације, где кристална зрна имају полигонални облик, приближно истих димензија у свим правцима. Иако је свако појединачно зрно анизотропно, поликристални материјал у целини је изотропан. После појединачне деформације сваког зрна, она мењају облик и постају издужена у правцу дејства силе образујући оријентисану, односно влакнасту структуру, која чини материјал анизотропним (слика 3.10.б). Истовремено са изменом облика кристалних зрна, унутар њих се формирају субзрна, са већим међусобним углом разоријентисаности.

Равни и правци клизања су различити код различитих кристала. Такође је и компонента напона смицања у равни клизања различита за различите кристале, тако да ће кристал са највећим напоном смицања имати и најранију појаву течења.

⁴Пузање је појава поступног растезања материјала услед дуготрајног деловања неке константне (статичке) силе. Пузање се може зауставити уколико материјал при растезању примерено очврсне, у супротном долази до лома материјала. Ова појава у великој мери зависи од температуре.



Слика 3.10. Поликристални узорак: а) пре и б) после пластичне деформације.

Дислокације се најчешће посматрају у металима и легурама код којих је лакше кретање дислокација због неусмерених веза и густо пакованих праваца за клизање. Тако, на пример за површински центриране кубне кристале, који имају изражену неусмерену металну везу, карактеристичне су **широке дислокације** реда величине 10 међуатомских растојања. Такве врсте дислокација су врло покретљиве и због тога ПЦК кристали поседују високу способност пластичне деформације.

За разлику од њих, материјали са веома усмереном ковалентном и јонском везом (керамика, јонски кристали) имају **уске дислокације**, које су знатно мање покретљиве, па су ти материјали знатно мање пластични. Метали са запремински центрираном кубном решетком су између ове две групе јер њихову металну везу прати изражен степен усмерености. Због тога они у односу на ПЦК кристале имају већу чврстоћу а мању пластичност. Хексагонално компактно паковани кристали као и ПЦК кристали имају широке дислокације али њихова пластичност осим од ширине дислокација зависи и од геометрије клизања.

Експерименти су показали да се дислокације крећу малим, а понекад и врло малим брзинама. Чак и у савршеној решетки без других дефеката осим једне дислокације, појављује се нека врста силе трења, која узрокује да се дислокације крећу константном брзином, која зависи од примењеног напрезања и кристалне структуре. Ова сила трења, које представља интеракцију између решетке и дислокације зове се **Пејерлсова сила** (Peierls).

Пејерлсова сила настаје јер се атомске везе између атома око дислокације морају прекинути и поново успоставити да би се дислокација могла померити. У енергетском смислу то значи да дислокација лежи у локалном енергетском минимуму из којег се мора подићи преко енергетске баријере да би дошло до њеног померања. Енергија која је потребна да дислокација савлада баријеру појављује се у облику топлоте (нпр. метал се загрева приликом пластичне деформације).

Пејерлсова сила је велика у кристалима где су везе јако усмерене као што је случај код ковалентних кристала (Si и Ge), па је такве материјале практично немогуће пластично деформисати. У металима где постоји интеракција између атома преко квази слободних електрона, међуатомске везе нису усмерене и лако се кидају, тако да се дислокације врло лако крећу и они су врло пластични.

Методе ојачавања поликристала

Једна од важних механичких особина поликристала је чврстоћа, која у зависности од тога на који се начин оптерећује материјал може бити: затезна чврстоћа, притисна чврстоћа, чврстоћа на савијање и чврстоћа на увијање. То је особина материјала која показује колика оптерећења (силе или момента сила) може издржати неки део.

За примену поликристалних материјала од изузетне је важности повећање њихове чврстоће. Методе које се користе за ојачавање поликристала заснивају се на отежавању кретања дислокација и најчешће се користе следећи поступци:

- Смањење величине зрна које доприноси порасту дезоријентисаности кристала. Што је већи број ситнијих зрна, то је више граница зрна које су препрека за клизање чиме се повећава чврстоћа.

- Чврсти раствори у којима атоми укључака изобличују решетку и стварају напоне који представљају препреке кретању дислокација. На пример, код ојачавања чврстим раствором у бакру (Cu), затезна чврстоћа и напон течења расту са процентуалним уделом никла (Ni).

- Таложeње тврдиx материјала који су отпорнији на смицање. На пример, таложeње керамике у металима (силицијум карбид SiC у гвожђу или алуминијуму).

- Обрада на хладно при чему се хладним деформисањем дислокације преплићу и њихово кретање постаје отежано.

3.3.2. Електричне и магнетне особине поликристала

Границе зрна, као површински дефекти у кристалној структури, имају тенденцију да смање електричну проводност материјала. Најчешће се срећу у полупроводничким поликристалним материјалима.

Изучавање утицаја границе зрна на електрична својства полупроводничких поликристалних материјала је од великог значаја, посебно у оптоелектроници и микроелектроници. Границе зрна могу битно да утичу, на пример, на специфичну електричну проводност поликристалних полупроводника. Енергетска стања, чија енергија лежи у

забрањеној енергетској зони граничних кристала, сагласно моделу електронске потенцијалне баријере на наелектрисаној граници, попуњена су електронима у материјалу n -типа, што изазива деформацију енергетске зоне близу границе раздвајања, где се опажа и осиромашење основним носиоцима наелектрисања. Оваква специфична енергетска стања могу да буду последица изобличења или раскидања хемијских веза у граничним областима. Она могу да буду везана и за граничне дислокације. Осим тога, легирање или одгревање поликристалног полупроводничког материјала у атмосфери неког гаса може да утиче на механизам миграције граница између зрна.

За испитивање поликристалних полупроводничких слојева често се користи нееластично расејање светлости на оптичким фононима, тзв. комбинационо расејање. Чак и степен кристаличности материјала, односно информација о томе да ли се ради о аморфном, кристалном или мешовитом стању, може да се добије на основу комбинационог расејања. Основни принцип ове методе је активност само оптичких фонона у централној зони, приликом комбинационог расејања, о чему сведочи изразити пик у спектру расејања на одређеној фреквенцији.

Еластично расејање светлости (без губитака) узрок је свих ефеката, који доводе до локалне или временске промене индекса преламања светлости. Ефекти могу бити унутрашњег порекла (везани за флукуацију температуре) или су резултат деловања спољашњих чинилаца, међу којима су сви облици запреминских или површинских несавршености поликристалног материјала (границе између зрна, дефекти паковања, дислокације, кристалографски двојници).

Границе зрна су такође присутне у магнетним доменима код магнетних материјала. Хард диск компјутера, на пример, направљен је од тврдог феромагнетног материјала, који садржи засебне области атома чији магнетни моменти могу бити оријентисани индуктивним пољем. Магнетизација варира од једне области до друге, и различита оријентација између ових области формира границе које су кључ за складиштење података. Оријентација магнетних момената ових домена се може мерити и читавати као "1" или "0". Ови битови представљају податке који се читају. Величина зрна је важна у овој технологији, јер ограничава број битова који стају на једном хард диску. Што је мања величине зрна, то је више података који могу бити сачувани.

Већ је истакнуто да се у пракси материјали најчешће појављују у облику поликристала. Ту спадају метали и њихове легуре, многи керамички материјали, наноматеријали итд. Више о особинама и

примени ових материјала биће речено у наредним поглављима која се односе на поједине класе материјала.