

# Diffrakciós spektrumok modellezése a mikroszerkezet tulajdonságai alapján

## Ribárik Gábor Ph.D. értekezése

(Rövid összefoglalás)

Kristályos anyagok számos fizikai tulajdonságát alapvetően meghatározza a mikroszerkezet. A mikroszerkezet szemléltetésének fontos módszere az elektronmikroszkópia. A legalapvetőbb mikroszerkezeti tulajdonságok a kristályhibák típusa, sűrűsége és eloszlása valamint a szemcse-, illetve krisztallit szerkezet. Az elektronmikroszkópia mellett az egyik legfontosabb alternatív módszer a röntgen vonalprofil analízis (RVPA). Ez a módszer alapvetően a következő mikroszerkezeti tulajdonságokról ad felvilágosítást: (i) krisztallitok méretéről és méreteloszlásáról, (ii) krisztallitok alak anizotrópiájáról, (iii) diszlokációk sűrűségéről, típusáról és eloszlásáról, valamint (iv) rétegződési hibák illetve iker határok sűrűségéről és típusáról. A disszertációban bemutatom a mikroszerkezet legfontosabb irodalomban fellelhető modelljeit, illetve eredményeimet melyek ezek továbbfejlesztésével kapcsolatosak, ismertetem a RVPA fontosabb módszereit a klasszikusaktól kezdve a legújabb irodalomban fellelhető módszerekig. Munkám legjelentősebb része a RVPA olyan módszereinek a kifejlesztése, amelyek a különböző kristályhibák fizikai tulajdonságai alapján modellezik a röntgendiffrakciós vonalprofilokat. Ezeknek a modellezett vonalprofiloknak a mérésekkel való összevetéséből, a kifejlesztett módszerek segítségével megkaphatjuk a vizsgált anyag mikroszerkezeti paramétereit. A kidolgozott módszerek alkalmazásával meghatározom számos különböző anyag illetve anyagcsalád mikroszerkezeti tulajdonságait, valamint azt, hogy ezek hogyan változnak meg különböző mechanikai vagy termikus kezelések hatására.

Ennek a munkának a során kapott főbb új tudományos eredményeim a következők: (i) Meghatároztam gömb- [S1], illetve forgási ellipszoid alakú, lognormális méreteloszlású koherens domének méretprofil függvényeit és azok Fourier transzformáltját [S4, S5, S6, S8]. (ii) Kidolgoztam a deformációs profil felhasználásának módszerét a diszlokációk Wilkens-féle modellje és az átlagos kontraszt faktorok modellje alapján [S4, S6, S14]. (iii) Az elméleti méret- és deformációs profilok alapján módszereket dolgoztam ki a mikroszerkezet paramétereinek meghatározására röntgendiffrakciós mérésekből: (a) a teljes Fourier transzformáltak, illetve teljes intenzitásprofilok együttes illesztésével (Multiple Whole Profile Fitting: MWP) [S4, S6], illetve (b) a teljes intenzitás spektrum konvolúciós illesztésével (Convolutional Multiple Whole Profile Fitting: CMWP) [S14]. (iv) Bárki számára elérhető programcsomagot fejlesztettem ki ezekhez a módszerekhez [S4, S6, S14]. (v) Az MWP eljárás alapján megmutattam, hogy: (a) erőteljesen alakított Ti-ban a diszlokációsűrűség  $10^{16} m^{-2}$  átlagos értéket ér el, összhangban az elektronmikroszkópos vizsgálatokkal; továbbá, hogy ilyen deformált állapotban döntően a  $\langle a \rangle$  és  $\langle c+a \rangle$  típusú csúszási rendszerek dominálnak [S11, S12, S22], (b) a PbS (galenit) őrlésével és hőkezelésével készült mikroszerkezeti állapotterkép alapján megállapítottam, hogy az ie. 3500 Egyiptomi Királyságokban használt kozmetikumok készítésekor csupán rövid idejű őrlést és 300 °C-nál nem magasabb hőmérsékletű hőkezeléseket alkalmaztak [S9]. (vi) A CMWP eljárás alapján megmutattam, hogy: (a) golyós malomban őrlött Al-Mg ötvözetben mind a diszlokáció sűrűség, mind pedig a szemcseméret 2 óra őrlés után telítődést mutat, továbbá az MWP és CMWP módszerekkel kapott eredményeket összehasonlítottam [S13, S16, S14], (b) golyós malomban őrlött alkáliföldfém fluoridokban kimutattam egy újszerű röntgen optikai interferencia effektus fellépését, amely első sorban akkor jelenik meg, ha a méreteloszlás jelentős hányadában a szemcseméret 5-10 nm, vagy annál kisebb [S17]. (vii) Nanokristályos  $Si_3N_4$  részecskéinek TEM és röntgen méreteloszlására igen jó egyezést kaptam [S1]. Számos esetben igazolódt, hogy az elektronmikroszkópos szubszemcse méret, diszlokációsűrűség, valamint diszlokáció típus kitűnően egyezik a vonalprofil analízis módszerével nyert értékekkel [S1–S22].

Munkám eredményeképpen előállt egy olyan koherens módszer együttes, amely alkalmas a legkülönbözőbb kristályos anyagok, nevezetesen, fémek, ötvözetek, kerámiák, kőzetek, illetve polimerek mikroszerkezetének jellemezésére a krisztallit és szemcseméret, a diszlokáció sűrűség, eloszlás és típus, illetve a rétegződési hibák alapján.