

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА МЕТАЛУРГІЙНА АКАДЕМІЯ УКРАЇНИ

**РОБОЧА ПРОГРАМА,**  
**методичні вказівки та індивідуальні завдання**  
**з дисципліни «Дефекти кристалічної будови»**  
для студентів спеціальності  
7.090412 – термічна обробка металів

Затверджено  
на засіданні Вченої ради  
академії  
Протокол № 1 від 01.02.08

Дніпропетровськ НМетАУ 2008

УДК 669.017+539.2

Кривуша Л.С., Зайцева Т.О. Робоча програма, методичні вказівки та індивідуальні завдання з дисципліни “Дефекти кристалічної будови” для студентів спеціальності 7.090412 – термічна обробка металів. – Дніпропетровськ: НМетАУ, 2008. – 30 с.

Програму дисципліни складено у відповідності до вимог програми підготовки бакалаврів за напрямом 0904 (металургія) та кваліфікаційної характеристики спеціальності 090412 (термічна обробка металів). Може бути корисною студентам інших металургійних і машинобудівних спеціальностей.

Наведені мета і задачі вивчення дисципліни, знання та вміння, що повинні набути студенти при її вивченні; 25 варіантів індивідуальних завдань та приклади розв’язання типових задач, а також рекомендована література для вивчення дисципліни.

Друкується за авторською редакцією.

Автори: Л.С.Кривуша, канд. фіз.-мат. наук, доцент;  
Т.О.Зайцева, ст. викладач

Відповідальний за випуск Л.М.Дейнеко, д-р техн. наук, проф.

Рецензент Г.М.Воробйов, д-р фіз.-мат. наук, проф.,  
Придніпровська державна академія будівництва та  
архітектури

© Кривуша Л.С., 2008

© Зайцева Т.О., 2008

## В С Т У П

Дисципліна “Дефекти кристалічної будови” належить до циклу дисциплін професійно-практичної підготовки і є одною з базових для студентів спеціальності 7.090412 – термічна обробка металів.

Уявлення про будову досконалих кристалів (вона характеризується періодично повторюваним у просторі розташуванням частинок) дозволили не тільки поділити всі речовини на певні структурні типи, але й пояснити деякі фізичні властивості, зв'язавши їх з внутрішньою будовою кристалів.

Однак класичній кристалографії не вдалося створити теорію таких важливих механічних властивостей твердих тіл як пластичність, міцність, руйнування. Це змусило переглянути уявлення про ідеальність будови кристалів і ввести поняття про недосконалість структури реальних кристалів. Було виявлено істотний вплив дефектів кристалічної будови на деякі так звані структурно-чутливі властивості матеріалів. Виявилось, що їх пластичність обумовлюється рухливістю дислокацій, а міцність – їх гальмуванням (затриманням), що концентрація та рухливість вакансій (точкових дефектів) визначають механізм і кінетику дифузійних процесів, що проходять під час нагрівання. Точкові дефекти у вигляді домішкових атомів змінюють колір кристалів, електрофізичні властивості напівпровідників тощо.

Уявлення про дефекти реальних кристалів дозволили не тільки пояснити властивості існуючих матеріалів, але й надати рекомендації щодо можливого поліпшення їх механічних характеристик за рахунок оптимізації хімічного складу, режимів пластичної та термічної обробки. З'явилась можливість позначити шляхи створення нових високоміцних конструкційних матеріалів і жароміцних сплавів для підвищення границь тривалої міцності та плинності, що відповідає потребам сучасної техніки, таких її галузей як ракетно-космічна, атомна, обчислювальна техніка, радіоелектроніка та ін.

**Мета вивчення дисципліни** – одержати уявлення про будову реальних кристалів, основні види дефектів і їх роль у структурних перетвореннях, про механізми міцності та пластичності металевих матеріалів.

**Задачі вивчення дисципліни.** У відповідності до кваліфікаційної характеристики в результаті вивчення дисципліни “Дефекти кристалічної будови” студенти повинні

**знати:**

- основні поняття теорії дефектів кристалічної будови;
- причини появи рівноважних і надлишкових точкових дефектів;
- роль вакансій в само- та гетеродифузії;
- види дислокацій, механізм їх переміщення, вектор Бюргерса, порядок величини щільності дислокацій після різних режимів пластичної та термічної обробки;
- характер взаємодії паралельних дислокацій і таких, що перетинаються;
- характерні вектори повних і часткових дислокацій в типових структурах металів;
- походження дислокацій;
- взаємодію дислокацій з точковими дефектами та одна з одною;
- вплив дислокацій на пластичність і міцність металів;

**вміти:**

- оцінювати концентрацію і рухливість рівноважних точкових дефектів при заданій температурі, значення енергії їх утворення та міграції (переміщення);
- визначати енергію утворення та міграції точкових дефектів за результатами ділатометричних вимірювань і електроопору загартованих кристалів, а також за зміною електроопору при їх відпалі;
- аналізувати імовірність різних дислокаційних реакцій в типових структурах металів, використовуючи критерій Франка;
- аналізувати можливість переміщення дислокацій, що виникають у результаті перетинання або розщеплення ковзних дислокацій.

Успішному усвоєнню дисципліни “Дефекти кристалічної будови” допоможуть знання основних понять і законів кристалографії, одержані студентами раніше.

Знання та вміння, набуті студентами при вивченні дисципліни “Дефекти кристалічної будови”, будуть використовуватися на старших курсах, у дисциплінах спеціалізації: “Фізика металів”, “Термообробка”, “Теоретичні основи технологічних процесів термічної обробки металів”, “Структура і властивості металів”, “Методи дослідження та контролю структури” та ін.

# 1. РОБОЧА ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ “ДЕФЕКТИ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ”

Дисципліну “Дефекти кристалічної будови” студенти спеціальності 7.090412 вивчають на третьому курсі, у весняному семестрі, у відповідності до розподілу навчальних годин, наведеному в табл.1.1.

Таблиця 1.1

Розподіл навчальних годин при вивченні дисципліни  
“Дефекти кристалічної будови”

Найменування виду робіт	Кількість годин
Всього за навчальним планом	54
у тому числі: аудиторні заняття	12
з них: лекції	8
практичні заняття	4
Самостійна робота	42
Семестровий контроль	Контрольна робота
Підсумковий контроль	Іспит

Особливості будови реальних кристалів. Класифікація дефектів кристалічної будови твердих тіл.

## ***Точкові дефекти***

Види точкових дефектів. Викривлення ґратки довкола точкових дефектів. Термодинаміка точкових дефектів. Рівноважна концентрація точкових дефектів. Міграція (переміщення) вакансій, міжвузлових і домішкових атомів. Енергія активації самодифузії як сума енергій утворення та міграції вакансій. Джерела та стоки вакансій.

Комплекси точкових дефектів. Поведінка вакансій при гартуванні та відпалі. Можливі причини підвищення концентрації точкових дефектів. Радіаційні дефекти. Методи визначення концентрації вакансій, енергії їх утворення та міграції.

## ***Лінійні дефекти***

Основні типи дислокацій та їх рух. Кристалографія ковзання. Критичне сколювальне напруження. Порівняння теоретичної та реальної міцності кристалів на зсув.

Крайова дислокація, вектор Бюргерса, способи переміщення крайової дислокації.

Гвинтова дислокація, її основні характеристики, ковзання гвинтової дислокації.

Змішані та призматичні дислокації. Щільність дислокацій. Методи виявлення дислокацій.

### ***Пружні властивості дислокацій***

Енергія дислокації. Сили, що діють на дислокацію. Пружна взаємодія паралельних крайових дислокацій одного та різних знаків. Пружна взаємодія паралельних гвинтових дислокацій.

### ***Дислокації в типових структурах металів***

Розділення дислокацій на повні та часткові. Дислокаційні реакції. Енергетичний критерій дислокаційних реакцій (критерій Франка або “правило квадратів”).

Щільні упаковки та дефекти пакування в них.

Характерні повні та часткові дислокації в металах з гексагональною щільною упаковкою. Утворення розтягнутих дислокацій, їх ширина. Часткові дислокації Франка.

Повні та часткові дислокації в металах гранецентрованою кубічною граткою. Тетраедр Томпсона. Утворення вершинних дислокацій. Дислокації Ломер-Коттрелла та їх роль у деформаційному зміцненні.

Найважливіші повні та часткові дислокації в металах з об'ємноцентрованою кубічною граткою.

Поперечне ковзання та переповзання розтягнутих дислокацій. Дислокація, що двійникує.

Дислокації в упорядкованих сплавах, утворення антифазних границь і парних або надструктурних дислокацій.

### ***Перетинання дислокацій***

Перетинання одиничних крайових дислокацій. Утворення порогів – важливих елементів дислокаційної структури. Рух дислокацій з порогами.

Перетинання крайової та гвинтової дислокацій.

Перетинання гвинтових дислокацій. Рух дислокацій з порогами.

Перетинання розтягнутих дислокацій.

### ***Взаємодія дислокацій з точковими дефектами***

Взаємодія пружних полів дислокацій та домішкових атомів.

Атмосфери Коттрелла. Енергія зв'язку.

Ефект Снука. Взаємодія дефектів упаковки з домішковими атомами.

Взаємодія дислокацій з вакансіями та міжвузловими атомами.

### ***Утворення дислокацій та дисклінацій***

Первісне утворення дислокацій при переході з рідкого стану до твердого, при зрощуванні дендритних голок, за рахунок об'єднання вакансій, пружних напружень на границях двох твердих фаз, градієнта температур.

Можливі механізми розмноження дислокацій при пластичній деформації.

Дисклінації в безперервному пружному середовищі. Дисклінації клинові та кручення. Вектор повороту. Енергія. Диполь з клинових дисклінацій. Дисклінації в кристалах.

### ***Границі зерен та субзерен***

Границі зерен як двомірний дефект. Границі нахилу та кручення. Дислокаційна модель малокутових симетричних і асиметричних границь. Міграція границь. Полігонізація. Енергія малокутової границі.

Висококутові границі. Довільні та спеціальні границі. Зернограничні дислокації.

### ***Зміцнення – гальмування (затримання) дислокацій***

Сила Пайєрлса. Гальмування дислокацій при взаємодії з іншими дислокаціями. Роль границь зерен у зміцненні. Гальмування дислокацій в твердих розчинах, атмосферами домішкових атомів, дисперсними частинками.

### ***Практичні заняття***

Розв'язання задач за темою “Точкові дефекти”.

Аналіз дислокаційних реакцій, характерних для типових структур металів.

## **2. ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ**

Виконання та захист завдання – підсумкова перевірка засвоєння прочитаного матеріалу, можливість свідомого розв'язання задач і відповідей на поставлені питання.

Працюючи над завданням, слід використовувати не тільки конспект лекцій, але й відповідні розділи рекомендованих підручників і посібників. Наприкінці роботи необхідно навести список літератури, що була використана, а за текстом надати посилання на джерела.

Дослівне списування тексту без осмислювання відповіді на конкретно поставлене питання не допускається. Відповіді повинні бути по суті, чіткими, короткими та супроводжуватися рисунками, що пояснюють відповідь. Рисунки слід наводити після першого згадування про них у тексті або, якщо не

виходить, – на наступній сторінці. Рисунки повинні містити підписані написи. Складні рисунки можна скопіювати.

При розв'язанні задач (у залежності від їх умов) необхідно або надавати коментарі до окремих етапів розрахунків, або сформулювати та навести наприкінці задачі загальний висновок за результатами її розв'язання.

Одержавши перевірену роботу, необхідно уважно вивчити та проаналізувати зауваження рецензента.

Номер варіанту завдання відповідає порядковому номеру фамілії студента у списку групи.

### ВАРІАНТ № 1

1. Порівняйте рівноважну концентрацію точкових дефектів у  $\alpha\text{-Fe}$  (ОЦК) при кімнатній температурі та поблизу температури плавлення ( $0,95 \cdot T_{пл}$ ). Енергія утворення вакансій – 1,4 еВ; міжвузлових атомів – 5,0 еВ. Температура плавлення заліза – 1539 °С.

Розрахунок проводити з точністю до порядку величини. Ентропійний множник вважати близьким до одиниці.

2. Як змінюється внутрішня енергія, ентропія та вільна енергія кристала при утворенні точкових дефектів?

3. Що характеризує вектор Бюргерса? Наведіть найбільш характерні вектори Бюргерса повних дислокацій в металах з ГЦК ґраткою.

4. Доведіть, що сила взаємодії паралельних крайових і гвинтових дислокацій дорівнює нулю.

5. Що визначає критерій Франка? На чому він базується?

6. Що називають щільністю дислокацій? Наведіть її характерні значення для відпалених металів.

7. Запишіть реакцію розщеплення дислокації с вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} [10\bar{1}]$  у площині (111) на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, покажіть енергетичну можливість розщеплення. Що впливає на ширину розщепленої дислокації?

8. Які границі між кристалами відносять до спеціальних?

### ВАРІАНТ № 2

1. Зразок з міді нагрівають до температури 1050 °С, а потім різко охолоджують до кімнатної температури. Надайте оцінку пересиченню вакансіями



кристала міді (на скільки порядків), якщо при гартуванні вдалося ”заморозити” 10 % вакансій. Енергія утворення вакансій в міді дорівнює 1,12 еВ.

2. Які дефекти кристалічної будови відносять до термодинамічно стійких ?

3. Крайова дислокація, вектор Бюргерса. Ковзання та переповзання крайових дислокацій.

4. Які дислокації називають повними ?

5. Чому утворюються атмосфери Коттрелла ?

6. Як взаємодіють паралельні крайові дислокації одного знака, якщо  $X > Y$  ?

7. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації з вектором  $\frac{1}{3} [2\bar{1}\bar{1}0]$  у площині базису на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, надайте оцінку зміненню енергії при реакції. Обґрунтуйте характер взаємодії часткових дислокацій. Який дефект при цьому виникає ?

8. Границі зерен як двомірний дефект кристалічної будови. Границі нахилу.

### ВАРІАНТ № 3

1. Порівняйте рухливість вакансій та міжвузлових атомів в алюмінії при температурі 660 °С. Енергія міграції вакансій – 0,65 еВ; міжвузлових атомів – 0,12 еВ.

Розрахунок провести з точністю до першої значущої цифри. Ентропійний множник вважати близьким до одиниці.

2. Надайте перелік можливих причин підвищеної концентрації вакансій в кристалах.

3. Загальна характеристика гвинтової дислокації. Вектор Бюргерса, напрямок переміщення. Поперечне ковзання.

4. Якою є величина та напрямок сили, що діє на дислокацію з вектором Бюргерса  $b$  з боку зовнішнього зусилля  $\tau$  .

5. Як взаємодіють крайові паралельні дислокації різних знаків, якщо  $X < Y$  ?

6. Що називають дефектами пакування ? Наведіть приклади дефектів проникнення та вилучення в гексагональній щільній упаковці атомів.

7. Допишіть реакцію та визначте енергетичний ефект реакції. У якій площині ковзання можлива така реакція ?

$$\frac{a}{2} [110] = \frac{a}{6} [121] + \dots?$$

8. Які границі зерен називають малокутовими границями нахилу ?

## ВАРІАНТ № 4

1. Енергія активації самодифузії міді дорівнює 2,08 еВ, а енергія міграції – 1,08 еВ. Як зміниться концентрація вакансій при підвищенні температури від 500 до 1000 °С ?
2. Проведіть зіставлення енергій утворення вакансій та міжвузлових атомів і на цій підставі порівняйте між собою концентрації рівноважних точкових дефектів при будь-яких температурах твердого стану.
3. Опишіть можливі механізми переміщення крайових дислокацій.
4. Які дислокації називають повними ? Визначте найбільш характерний вектор Бюргерса повних дислокацій в металах з ОЦК ґраткою ?
5. Як взаємодіють паралельні крайові дислокації одного знака, якщо  $X < Y$  ?
6. Що називають щільністю дислокацій ? Наведіть її характерні значення для деформованих полікристалів.
7. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації з вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} [01\bar{1}]$  у площині (111) на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, покажіть енергетичну можливість такого розщеплення, використовуючи критерій Франка. Що впливає на ширину дефекту упаковки, що виникає ?
8. Які границі зерен називають границями кручення ?

## ВАРІАНТ № 5

1. Визначте (з точністю до порядку величини) частоту переміщень вакансій у сріблі при температурі, що дорівнює  $0,95 \cdot T_{пл}$ . Енергія активації самодифузії  $E_{СД} = 1,93$  еВ; енергія утворення вакансій  $E_0 = 1,10$  еВ. Температура плавлення срібла 960 °С.
2. Що називають комплексами точкових дефектів ?
3. Наведіть схему розміщення атомів довкола негативної крайової дислокації, вкажіть взаємне розташування лінії, вектора Бюргерса та напрямку її можливого переміщення.
4. Чи взаємодіють паралельні крайові та гвинтова дислокації ?
5. Визначте енергію поля пружних викривлень, викликаних утворенням дислокації.
6. Як впливає на механічні властивості металів утворення атмосфер домішкових атомів ?

7. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації з вектором  $\frac{1}{3}[\bar{2}110]$  у площині базису на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, надайте оцінку зміни енергії при реакції. Обґрунтуйте характер взаємодії часткових дислокацій. Який дефект при цьому виникає?

8. Надайте короткий опис можливих двовірних дефектів. Границі нахилу та кручення.

### ВАРІАНТ № 6

1. Визначте концентрацію вакансій в алюмінії, якщо поблизу температури плавлення різниця між відносним збільшенням лінійних розмірів зразка ( $\Delta L/L$ ) та відносною зміною параметра кристалічної ґратки ( $\Delta a/a$ ) склала  $9,4 \cdot 10^{-4}$ . Опишіть суть цього методу визначення концентрації вакансій, його переваги та недоліки.

2. Порівняйте між собою можливі значення концентрації рівноважних вакансій та міжвузлових атомів при різних температурах.

3. Загальне уявлення про дислокації як одновимірні дефекти. Найважливіша характеристика дислокацій – вектор Бюргерса.

4. Як взаємодіють паралельні крайові дислокації одного знака, якщо  $X = Y$ ?

5. Дислокаційні реакції. Критерій Франка.

6. Які пороги утворюються при перетинанні крайових дислокацій з перпендикулярними векторами Бюргерса?

7. Допишіть реакцію  $\frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}0] + \frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0] = ..?..$ . Виконайте рисунок, визначте енергетичний ефект реакції.

8. Вплив границь зерен на ковзання дислокацій.

### ВАРІАНТ № 7

1. Визначте енергію утворення вакансій в золоті, якщо приріст електроопору  $\Delta\rho$ , обумовлений гартуванням від температури  $t_{зак}$ , склав:

$t_{зак}, ^\circ\text{C}$	550	650	750	850
$\Delta\rho, \text{Ом}\cdot\text{см}$	$5,0 \cdot 10^{-10}$	$2,2 \cdot 10^{-9}$	$6,5 \cdot 10^{-9}$	$2,0 \cdot 10^{-8}$

Для розв'язання задачі побудуйте графік залежності  $\ln \Delta\rho$  від  $T^{-1}$ .

2. Чому є можливим утворення стійких комплексів “вакансія – домішковий атом” ?
3. Покажіть розміщення атомів при утворенні гвинтової дислокації.
4. Що характеризує вектор Бюргерса ? Наведіть вектори Бюргерса найбільш характерних дислокацій в металах з гексагональною щільною упаковкою атомів.
5. Які дислокації називають змішаними ?
6. Що називають щільністю дислокацій ? Як вона змінюється при нагріванні деформованих металів ?
7. Проаналізуйте можливість розщеплення гвинтової дислокації  $\frac{a}{2} [\bar{1} 1 1]$  у трьох лощинах ковзання типу  $\{110\}$ , що перетинаються. Виконайте рисунок. Як це впливає на деформаційне зміцнення металів і сплавів ?
8. Границі зерен як двомірні дефекти кристалічної будови. Малокутові границі.

#### ВАРІАНТ № 8

1. Визначте, як змінюється концентрація вакансій в  $\alpha\text{-Fe}$  при підвищенні температури від 500 до 900 °С. Енергія утворення вакансій в  $\alpha\text{-Fe}$  – 1,6 еВ.
2. За яким законом змінюється рухливість точкових дефектів з підвищенням температури ? За яким методом можна визначити енергію міграції вакансій ?
3. Опишіть схему утворення крайової дислокації.
4. Як взаємодіють ліва та права паралельні гвинтові дислокації ?
5. Можливі причини виникнення дислокацій у кристалах.
6. Які пороги утворюються при перетинанні крайових дислокацій ?
7. Проаналізуйте взаємодію двох повних дислокацій  $\frac{a}{2} [111]_{(\bar{1}01)}$  та  $\frac{a}{2} [\bar{1}\bar{1}1]_{(101)}$  у площинах ковзання, що перетинаються. Виконайте рисунок. Надайте характеристику дислокації, що утворюється. Чи буде вона ковзною ?
8. Чим можна загальмувати дислокації ?

#### ВАРІАНТ № 9

1. До якого типу дефектів кристалічної будови належать комплекси “вакансія – домішковий атом” ? Чому такі утворення можуть бути стійкими ?

2. Визначте (з точністю до порядку величини) частоту стрибків (перемішень) вакансій в залізі при нагріванні до температури  $0,95 \cdot T_{пл}$ , якщо енергія активації самодифузії  $E_{сд} = 2,8$  еВ, а енергія утворення вакансій  $E_0 = 1,5$  еВ. Температура плавлення заліза –  $1539$  °С.

3. Загальна характеристика крайових дислокацій. Вектор Бюргерса.

4. Як взаємодіють дислокації з домішковими атомами ?

5. Як впливає деформація на щільність дислокацій ?

6. Які пороги утворюються при перетинанні гвинтових дислокацій ? Рух дислокацій з порогами.

7. Запишіть реакцію розщеплення дислокації з вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} [\bar{1}01]$  у площині (111) на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, покажіть енергетичну можливість розщеплення. Що впливає на ширину розщепленої дислокації ?

8. Як впливають дисперсні включення на переміщення дислокацій ?

#### ВАРІАНТ № 10

1. Алюміній нагрівають до температури  $650$  °С, а потім різко охолоджують до кімнатної температури. Дайте оцінку ступеня пересичення кристала вакансіями (на скільки порядків), якщо гартуванням удалося "заморозити"  $10$  % вакансій. Енергія утворення вакансій в алюмінії  $E_0 = 0,75$  еВ.

2. Надайте коротку характеристику видам точкових дефектів.

3. Загальна характеристика гвинтових дислокацій.

4. Від чого залежить швидкість переповзання крайових дислокацій ?

5. Що називають дефектами упаковки ?

6. Як змінюється щільність дислокацій при деформації кристалів ?

7. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації з вектором  $\frac{1}{3} [11\bar{2}0]$  у площині базису на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, надайте оцінку зміни енергії при реакції. Обґрунтуйте характер взаємодії часткових дислокацій. Який дефект при цьому виникає ?

8. Наведіть можливі способи підвищення міцності металів за рахунок затримання ("гальмування") дислокацій.

## ВАРІАНТ № 11

1. Визначте кількість рівноважних вакансій в одному молі заліза при температурі 900 °С. Енергія утворення вакансій  $E_0 = 1,5$  еВ.
2. Енергія утворення яких точкових дефектів має найбільше значення: вакансій, міжвузлових атомів або пар Френкеля ?
3. Чому точкові дефекти називають нульвимірними ?
4. Як взаємодіють крайові дислокації одного знака, що ковзають в одній площині ?
5. Що характеризує вектор Бюргерса ? Як він орієнтований відносно лінії гвинтової дислокації ?
6. Вплив атмосфер домішкових атомів на рухливість дислокацій.
7. Проаналізувати взаємодію двох повних дислокацій  $\frac{a}{2} [1 \bar{1} 1]_{(\bar{1} 01)}$  та  $\frac{a}{2} [\bar{1} 1 1]_{(101)}$  у площинах ковзання, що перетинаються. Виконайте рисунок. Надайте характеристику дислокації, що утворюється. Чи буде вона ковзною ?
8. Які пороги утворюються при перетинанні гвинтових дислокацій ?

## ВАРІАНТ № 12

1. Чи однаковою є вірогідність утворення вакансій та міжвузлових атомів: при нагріванні ? при опроміненні ?
2. Визначте енергію міграції вакансій у попередньо загартованому дуже тонкому золотому дроті, якщо надлишковий електроопір має однакове значення після ізотермічних відпалів протягом 130 хвилин при температурі 118 °С та 34 хвилин – при 140 °С.
3. Які дефекти відносять до лінійних ?
4. Як взаємодіють крайові дислокації різних знаків, що ковзають в одній площині ?
5. Що характеризує вектор Бюргерса ? Наведіть характерні значення векторів Бюргерса повних і часткових дислокацій металів з ГЦК ґраткою.
6. Що характеризує напруження Пайєрлса ?
7. Запишіть реакцію розщеплення дислокації з вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} [\bar{1} 0 \bar{1}]$  у площині  $(11 \bar{1})$  на часткові дислокації Шоклі. Виконайте рисунок, покажіть енергетичну можливість розщеплення. Що впливає на ширину розщепленої дислокації ?

8. Яким є вплив границь зерен на ковзання дислокацій ?

### ВАРІАНТ № 13

1. У чому суть утворення вакансій за Шотткі ?

2. Визначте приріст внутрішньої енергії, обумовленої утворенням вакансій в одному молі золота при 900 °С, якщо енергія утворення вакансій  $E_0 = 0,95$  еВ.

3. Чим визначається швидкість переповзання крайової дислокації ?

4. Визначте силу пружної взаємодії паралельних крайової та гвинтової дислокацій.

5. Від чого залежить енергія пружних викривлень ґратки, обумовлених утворенням дислокацій ?

6. Змішані дислокації. Вектор Бюргерса.

7. Допишіть реакцію  $\frac{a}{2} [101] = \frac{a}{6} [112] + ..?..$ , визначте енергетичний ефект розщеплення. Виконайте рисунок. У якій площині можлива така реакція ?

8. Чому утворення дислокацій Ломер-Коттрелла є найважливішою причиною деформаційного зміцнення ГЦК металів ?

### ВАРІАНТ № 14

1. Де утворюються вакансії при нагріванні кристала та куди вони “стікають” при його охолодженні ?

2. Порівняйте рухливість вакансій в  $\alpha$ - і  $\beta$ -цирконії при температурі поліморфного перетворення  $\alpha$  (ГП)  $\leftrightarrow$   $\beta$  (ОЦК) – 862 °С. Енергія міграції  $E_M^{\alpha-Zr} = 0,6$  еВ та  $E_M^{\beta-Zr} = 1,6$  еВ. Задачу розв’яжуйте з точністю до першої значущої цифри.

3. Призматичні дислокації. Як вектор Бюргерса орієнтований відносно лінії призматичної дислокації ?

4. Що називають щільністю дислокацій ? Наведіть її характерні значення для монокристалів.

5. Ковзання гвинтових дислокацій.

6. Утворення атмосфер Снука.

7. Проаналізуйте взаємодію двох повних дислокацій  $\frac{a}{2} [11\bar{1}]_{(011)}$  та  $\frac{a}{2} [\bar{1}11]_{(0\bar{1}1)}$  у площинах ковзання, що перетинаються. Виконайте рисунок. Надайте характеристику дислокації, що утворюється. Чи буде вона ковзною ?

8. Які границі називають спеціальними ?

### ВАРІАНТ № 15

1. Визначте (з точністю до порядку величини) концентрацію вакансій в молібдені при нагріванні до температури  $0,95 \cdot T_{пл}$ , якщо енергія активації самодифузії  $E_{CD} = 4,53$  еВ, а енергія міграції  $E_M = 1,53$  еВ. Температура плавлення молібдену  $2620$  °С.

2. Як змінюється внутрішня енергія, ентропія та вільна енергія при утворенні точкових дефектів ?

3. Механізми ковзання та переповзання крайових дислокацій.

4. Як взаємодіють паралельні гвинтові дислокації одного знака ?

5. Які пороги виникають при перетинанні крайових дислокацій з паралельними векторами Бюргерса ?

6. Назвіть можливі причини виникнення дислокацій.

7. Опишіть розщеплення повної гвинтової дислокації з вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} [1 \bar{1} \bar{1}]$  у трьох площинах ковзання типу  $\{110\}$ , що перетинаються. Виконайте рисунок, надайте оцінку енергії дислокацій та можливості ковзання дислокаційної конфігурації, що виникає при розщепленні.

8. Зміцнення металів – результат гальмування дислокацій. Наведіть можливі способи підвищення міцності металів.

### ВАРІАНТ № 16

1. Надайте коротку характеристику всім точковим дефектам кристалів.

2. Визначте енергію міграції вакансій в попередньо загартованому дуже тонкому золотому дроті, якщо надлишковий електроопір має однакове значення після ізотермічних відпалів протягом 100 хвилин при температурі  $118$  °С та 28 хвилин – при  $140$  °С.

3. Загальна характеристика гвинтової дислокації.

4. Наведіть приклади металів з ОЦК граткою. В елементарній комірці покажіть вектори Бюргерса, що відповідають тотожній трансляції. Який з них характеризується найменшою енергією ?

5. Що являє собою дефект упаковки в структурі металів з гексагональною щільною упаковкою ?

6. Як утворюється дислокація Франка ? Чому дорівнює її вектор ?



7. Проаналізуйте зустріч двох розщеплених дислокацій, що ковзають у площинах, які перетинаються. Вектори повних дислокацій  $\frac{a}{2} [10\bar{1}]$  та  $\frac{a}{2} [0\bar{1}1]$ , площини ковзання відповідно  $(\bar{1}1\bar{1})$  і  $(111)$ . Який дефект називають вершинною дислокацією, дислокацією Ломер-Коттрелла? Як вони впливають на пластичність металів?

8. Взаємодія дислокацій з домішковими атомами. Атмосфери Коттрелла.

#### ВАРІАНТ № 17

1. Визначте частку внутрішньої енергії, обумовленої вакансіями в одному молі срібла при  $950^\circ\text{C}$ , якщо енергія їх утворення  $E_0 = 1,10$  еВ.

2. Що може бути причиною надлишкової концентрації точкових дефектів?

3. Утворення гвинтової дислокації.

4. Від чого залежить і куди спрямована сила, що діє на дислокацію?

5. Як взаємодіють паралельні крайові дислокації одного знака, розташовані так, що  $X = Y$ ?

6. Як змінюється щільність дислокацій при деформації кристалів?

7. Запишіть реакцію розщеплення дислокації з вектором Бюргерса  $\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}20]$  у площині базису на часткові дислокації Шоклі. Надайте оцінку змінню енергії. Як взаємодіють часткові дислокації?

8. Які границі зерен і субзерен називають границями кручення?

#### ВАРІАНТ № 18

1. Порівняйте рівноважну концентрацію вакансій та міжвузлових атомів у платині (ГЦК) при кімнатній температурі та поблизу температури плавлення ( $0,95 \cdot T_{пл}$ ). Енергія утворення вакансій – 1,5 еВ; міжвузлових атомів – 3,5 еВ. Температура плавлення платини –  $1773^\circ\text{C}$ .

Розрахунок виконуйте з точністю до порядку величини. Ентропійний множник вважайте близьким до одиниці.

2. Наведіть приклади комплексів точкових дефектів.

3. Покажіть схему зсуву в кристалах, що приводить до утворення правої та лівої гвинтових дислокацій.

4. Енергія дислокації як робота з її утворення в кристалах.

5. Наведіть приклади металів з ОЦК граткою. Який з можливих векторів дислокацій відповідає тотожній трансляції та характеризується найменшою енергією?

6. Яким є рівноважне розташування паралельних крайових дислокацій різних знаків?

7. Виконайте рисунок і надайте опис розщеплення повної дислокації з вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} [\bar{1} 1 \bar{1}]$  на часткові у площині (110) ОЦК гратки.

Покажіть енергетичний ефект цієї реакції. Чи є конфігурація, що утворилася, ковзною або ні?

8. Поверхневі (двовимірні) дефекти кристалічної будови.

### ВАРІАНТ № 19

1. Порівняйте рухливість вакансій та міжвузлових атомів у вольфрамі при кімнатній температурі та поблизу температури плавлення ( $0,95 \cdot T_{пл}$ ). Енергія утворення вакансій – 2,0 еВ; міжвузлових атомів – 0,08 еВ. Температура плавлення вольфраму – 3370 °С.

Задачу розв'яжуйте з точністю до першої значущої цифри. Ентропійний множник вважайте близьким до одиниці.

2. За яким законом змінюється концентрація рівноважних точкових дефектів при підвищенні температури?

3. Покажіть схему деформації, що приводить до утворення крайових дислокацій у кристалі.

4. Що впливає на величину енергії дислокації, створеної у кристалах?

5. Наведіть приклади металів з ОЦК граткою та покажіть в їх елементарній комірці найбільш характерний вектор Бюргерса, що відповідає дислокаціям з найменшою енергією.

6. Покажіть рівноважне розташування крайових дислокацій одного знака, що ковзають у паралельних площинах.

7. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації з вектором  $\frac{a}{2} [101]$  у площині  $(11\bar{1})$  металів зі структурним типом ГЦК на часткові дислокації Шоклі. За критерієм Франка надайте оцінку можливості розщеплення. Який ще дефект виникає при розщепленні?

8. Зміцнення металів – гальмування дислокацій. Наведіть можливі способи підвищення міцності матеріалів.

## ВАРІАНТ № 20

1. Залізо нагрівають до температури 900 °С, а потім різко охолоджують до кімнатної температури (проводять гартування). Надайте оцінку ступеня пересичення заліза вакансіями (на скільки порядків), якщо при гартуванні вдалося “заморозити” 10 % вакансій. Енергія утворення вакансій у залізі – 1,6 еВ.

2. За яким законом змінюється рухливість точкових дефектів з підвищенням температури? За яким методом можна визначити енергію міграції вакансій?

3. Покажіть розташування атомів довкола негативної крайової дислокації.

4. Що називають щільністю дислокацій? Як вона змінюється при відпалі деформованих металів?

5. Яким є рівноважне розташування крайових дислокацій одного знака, що ковзають у паралельних площинах?

6. Виникнення порогів при перетинанні гвинтових дислокацій.

7. Проаналізуйте взаємодію двох повних дислокацій з векторами  $\frac{a}{2} [11\bar{1}]$  (101) та  $\frac{a}{2} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  (10 $\bar{1}$ ), що ковзають у взаємно перпендикулярних площинах металів з ОЦК ґраткою. Виконайте рисунок, запишіть реакцію взаємодії, визначте її енергетичний ефект. Надайте характеристику дислокації, що виникла. Як це впливає на механічні властивості металу?

8. Границі зерен як двовимірний дефект.

## ВАРІАНТ № 21

1. Під час відпалу міді при температурі 910 °С концентрація вакансій склала  $10^{-5}$ , а при 1060 °С –  $4 \cdot 10^{-5}$ . Визначте енергію утворення вакансій в міді.

2. Чому є можливим утворення стійких комплексів ”вакансія – домішковий атом”?

3. Загальне уявлення про дислокації.

4. Покажіть вектори повних дислокацій в металах з гексагональною щільною упаковкою. Який з векторів належить до дислокації з найменшою енергією викривлення кристалічної ґратки?

5. Для металів з ОЦК ґраткою проаналізуйте розщеплення гвинтової дислокації з вектором  $\frac{a}{2} [11\bar{1}]$  у трьох площинах ковзання типу {110}, що перетинаються. Виконайте рисунок, надайте оцінку енергії, можливості

ковзання конфігурації, що утворилася, та її значення для деформаційного зміцнення.

6. Що називають поперечним ковзанням? Для якого типу дислокацій воно є характерним?

7. Як взаємодіють паралельні крайові дислокації різних знаків, якщо  $X > Y$ ?

8. Зміцнення металів – гальмування дислокацій. Чим можна загальмувати дислокації?

### ВАРІАНТ № 22

1. Які дефекти кристалічної будови називають точковими (або нуль-вимірними)?

2. Визначте середню тривалість перебування вакансій в одному вузлі кристалічної ґратки нікелю при температурі, що дорівнює  $0,9 \cdot T_{пл}$ . Енергія активації самодифузії – 2,80 еВ, енергія утворення вакансій – 1,60 еВ. Температура плавлення нікелю – 1455 °С.

3. Що однозначно визначає площину ковзання крайової дислокації?

4. Доведіть, що паралельні крайова та гвинтова дислокації не взаємодіють.

5. Покажіть вектори можливих повних дислокацій в металах з гексагональною щільноупакованою ґраткою. Утворення яких дислокацій (з яким вектором Бюргерса) є найбільш імовірним?

6. Які дислокації називають частковими?

7. Наведіть приклади металів з ГЦК ґраткою. Виконайте рисунок і допишіть реакцію:  $\frac{a}{2} [101] + \frac{a}{2} [\bar{1}01] = ..?..$ . Визначте, повним чи частковим дислокаціям відповідають вектори. Чи є можливою ця реакція?

8. Спеціальні або особливі границі зерен.

### ВАРІАНТ № 23

1. Які дефекти кристалічної будови називають точковими?

2. Визначте кількість рівноважних вакансій в одному молі срібла при температурі 930 °С. Енергія утворення вакансій у сріблі складає 1,10 еВ.

3. Можливі механізми переміщення крайової дислокації.

4. Наведіть найбільш характерні системи ковзання (площини та напрямки) у металах з ОЦК ґраткою.

5. Утворення порогів – результат перетинання крайових дислокацій.

6. Як змінюється щільність дислокацій при деформації?

7. Наведіть приклади металів з ГЦК граткою. Виконайте рисунок і допишіть реакцію:  $\frac{a}{2} [\bar{1}01] + \frac{a}{2} [\bar{1}0\bar{1}] = \dots?$  Визначте, повним чи частковим дислокаціям відповідають вектори. Чи можлива дисоціація?

8. Будова малокутових границь зерен.

#### ВАРІАНТ № 24

1. Як і де можуть утворюватися вакансії?

2. Визначте середню відстань (у параметрах комірки) між домішковими атомами (точковими дефектами) у металі з ОЦК граткою, якщо концентрація домішок складає  $2 \cdot 10^{-3}$ .

3. Які дефекти кристалічної будови відносять до лінійних?

4. Як утворюється дислокація Франка? Чому дорівнює її вектор?

5. Наведіть приклади металів з гексагональною щільною упаковкою атомів і покажіть у призмі характерні вектори Бюргерса повних і часткових дислокацій.

6. Що являє собою дефект пакування в металах з ГЦК граткою?

7. Запишіть реакцію розщеплення дислокації з вектором  $\frac{a}{2} [\bar{1}01]$  у площині (111) ГЦК гратки на часткові дислокації Шоклі. За критерієм Франка визначте можливість розщеплення. Який дефект виникає при розщепленні? Що впливає на ширину розщепленої дислокації?

8. Які границі зерен і субзерен називають границями нахилу?

#### ВАРІАНТ № 25

1. Надайте коротку характеристику точковим дефектам.

2. Визначте середню відстань (у параметрах комірки) між вакансіями у металі з ГЦК граткою, якщо їх концентрація складає  $4 \cdot 10^{-4}$ . Параметр комірки  $a = 0,4$  нм.

3. Загальне уявлення про лінійні дефекти кристалічної будови. Вектор Бюргерса.

4. Наведіть найбільш характерні системи ковзання (площини та напрямки) дислокацій в гексагональній щільноупакованій гратці.

5. Як взаємодіють паралельні крайові дислокації одного знака, що ковзають в одній площині?

6. Що являють собою дефекти пакування типу проникнення ?

7. Запишіть реакцію розщеплення дислокації з вектором  $\frac{a}{2} [110]$  на часткові дислокації Шоклі в площині  $(\bar{1}1\bar{1})$  у металах з ГЦК граткою. За критерієм Франка визначте можливість розщеплення. Що впливає на ширину розщепленої дислокації ?

8. Гальмування дислокацій дисперсними частинками.

### 3. МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ

#### 3.1. Короткі теоретичні відомості та приклади розв'язання задач за темою “Точкові дефекти”

До точкових дефектів кристалічної гратки, що мають мікроскопічні розміри в усіх трьох вимірах, відносять вакансії, міжвузлові атоми, домішкові атоми, що розчиняються в кристалах за типом заміщення та проникнення, а також деякі комплекси точкових дефектів.

Концентрація точкових дефектів  $C$  – відношення кількості дефектів в одиниці об'єму  $n$  до кількості атомів (або вузлів) у цьому об'ємі  $N$ . Кожній температурі відповідає своя рівноважна концентрація точкових дефектів, яка забезпечує мінімум вільної енергії або ентальпії:

$$C = \frac{n}{N} = \exp\left(\frac{S_0}{\kappa}\right) \exp\left(-\frac{E_0}{\kappa T}\right), \quad (3.1)$$

де  $S_0$  – ентропія утворення точкових дефектів, еВ/К або Дж/К;

$E_0$  – енергія утворення точкових дефектів, еВ або Дж;

$\kappa$  – стала Больцмана ( $\kappa = 8,62 \cdot 10^{-5}$  еВ/К =  $1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К);

$T$  – температура, К.

Якщо концентрацію точкових дефектів визначають з точністю до порядку величини, ентропійним показником нехтують (тобто вважають ентропійний множник  $\exp(S_0/\kappa)$  близьким до одиниці). Тоді

$$C = \frac{n}{N} = \exp\left(-\frac{E_0}{\kappa T}\right). \quad (3.2)$$

Атоми в кристалах коливаються довкола положення рівноваги, безперервно обмінюючись енергією між собою. При цьому атом може отримати енергію, достатню для переходу з свого вузла до сусіднього вакантного, – енергію міграції  $E_M$ . Таким чином переміщуються (або мігрують) точкові дефекти. Кількість переходів до нового положення, яке здійснює дефект за одну секунду ( $\Gamma$ ), визначається за формулою:

$$\Gamma = \nu_0 \exp\left(\frac{S_M}{\kappa}\right) \exp\left(-\frac{E_M}{\kappa T}\right), \quad (3.3)$$

де  $\nu_0$  – частота теплових коливань у напрямку вакансії,  $10^{13} \text{ с}^{-1}$ ;

$S_M$  – ентропія міграції точкових дефектів, еВ/К або Дж/К;

$E_M$  – енергія міграції точкових дефектів, еВ або Дж.

Якщо частоту стрибків визначають з точністю до порядку величини, ентропійним показником часто нехтують, тобто вважають  $\exp(S_M/\kappa) \rightarrow 1$ , тоді:

$$\Gamma = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_M}{\kappa T}\right). \quad (3.4)$$

Швидкість самодифузії атомів визначається концентрацією та рухливістю вакансій, а енергія активації самодифузії  $E_{CD}$  складається з двох доданків:

$$E_{CD} = E_0 + E_M. \quad (3.5)$$

Енергії утворення  $E_0$  та міграції  $E_M$  вакансій визначають експериментально, а для міжвузлових атомів ці характеристики обчислюють за допомогою фізичних моделей.

Точкові дефекти впливають на фізичні властивості металів, тому визначаючи змінення об'єму, електричного опору, внутрішньої енергії, можна оцінити  $E_0$  та  $E_M$ .

Як відомо, з підвищенням температури об'єм металу збільшується. Відносне збільшення лінійних розмірів зразка  $(\Delta L/L)$  відбувається як за рахунок відносного збільшення міжатомної відстані  $(\Delta a/a)$ , так і з причини виходу атомів на поверхню металу та утворення на ній нових атомних шарів. При цьому всередині кристала виникають вакансії, концентрація яких у цьому випадку визначається як

$$C = 3 \cdot \left( \frac{\Delta L}{L} - \frac{\Delta a}{a} \right). \quad (3.6)$$

Множник 3 доданий для переходу від збільшення лінійних розмірів твердого тіла до змінення його об'єму. Значення  $\Delta L/L$  визначають за методом ділатометрії (від лат. *dilato* – розширення),  $\Delta a/a$  – за методами рентгеноструктурного аналізу.

Термічна обробка металопродукції будь-якого вигляду та призначення полягає у нагріванні виробів до певної температури, витримці при цій температурі та подальшому охолодженні з різними швидкостями.

При нагріванні металу концентрація точкових дефектів у ньому збільшується. Якщо після витримки метал охолоджувати з великими швидкостями (провести гартування), точкові дефекти, що виникли у ньому під час нагрівання, не встигають прийти до рівноваги з граткою. В результаті утворюється надлишкова концентрація вакансій. З урахуванням особливості процесу їх утворення (великі швидкості охолодження) такі вакансії часто називають "замороженими".

Підвищена концентрація "заморожених" при гартуванні вакансій обумовлює приріст електроопору  $\Delta\rho$ , пропорційний до цієї концентрації та такий, що змінюється за експонентою:

$$\Delta\rho = A \cdot \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \quad \text{або} \quad \ln \Delta\rho = \ln A - \frac{E_0}{k} \cdot \frac{1}{T}, \quad (3.7)$$

де  $A$  – стала величина для даного твердого тіла.

Якщо визначити приріст електроопору зразків, загартованих від двох температур нагріву ( $T_1$  і  $T_2$ ), то енергію утворення вакансій можна визначити за формулою:

$$E_0 = k \frac{(\ln \Delta\rho_1 - \ln \Delta\rho_2)}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}}. \quad (3.8)$$

Якщо гартування проведено від трьох і більшої кількості значень температур, можна скористатися графічним методом визначення  $E_0$  – за тангенсом кута нахилу прямої, побудованої в координатах " $\ln \Delta\rho - 1/T$ ":



$$E_0 = \kappa \frac{\Delta(\ln \Delta \rho)}{\Delta \frac{1}{T}}. \quad (3.9)$$

Знаючи  $E_0$ , легко визначити  $C$  при будь-яких температурах твердого стану речовини.

Для експериментального визначення енергії міграції  $E_M$  використовують низку методів. Якщо кінетика процесу відпалу точкових дефектів характеризується сталим значенням енергії активації, то швидкість змінення концентрації "заморожених" дефектів  $dn/d\tau$  можна навести у вигляді:

$$\frac{dn}{d\tau} = -F(n) \cdot k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{\kappa T}\right), \quad (3.10)$$

де  $F(n)$  – неперервна функція концентрації дефектів;

$k_0$  – коефіцієнт перед експонентою.

Для визначення  $E_M$  необхідно одержати ізотерми якої-небудь властивості, змінення якої пропорційна зміненню концентрації вакансій, наприклад, електроопору (рис.3.1).

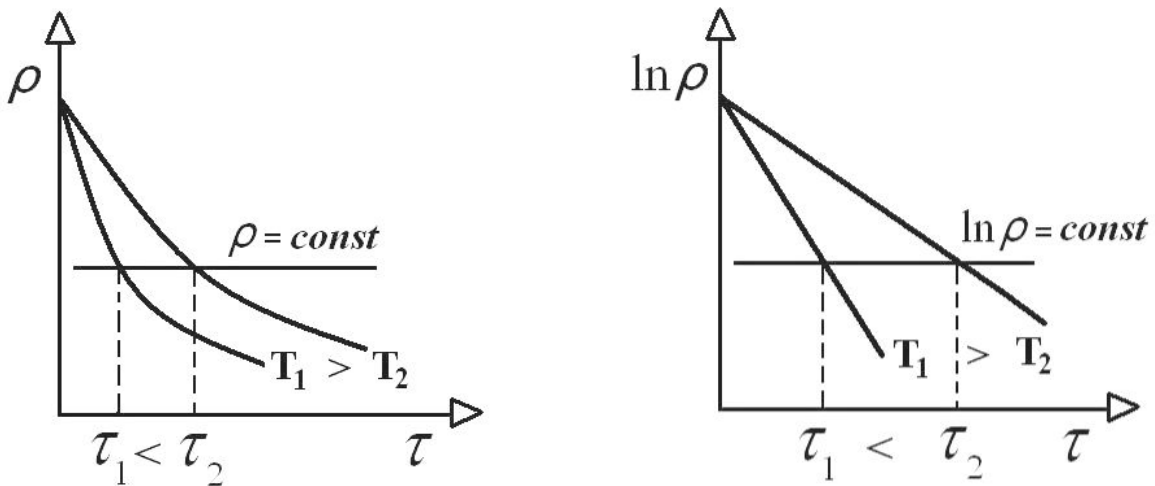


Рис.3.1. Залежність електроопору  $\rho$  загартованого металу від тривалості ізотермічного відпалу при різних температурах

Потім на графіках слід провести горизонтальну лінію (метод перетину). Це означає, що після відпалу у зразках металу залишилася однакова кількість "заморожених" вакансій. Як впливає з графіків (див. рис.3.1), для досягнення

заданого рівня властивостей – концентрації вакансій – при різних температурах відпалу необхідно затратить різний час. З урахуванням цього можна записати:

$$\tau_1 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{kT_1}\right) = \tau_2 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{kT_2}\right) = const \quad (3.11)$$

або

$$\ln \frac{\tau_1}{\tau_2} = \frac{E_M}{k} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right),$$

звідки

$$E_M = k \frac{\ln(\tau_1 / \tau_2)}{(1/T_1 - 1/T_2)}. \quad (3.12)$$

### 3.2. Приклади розв'язання задач

**Задача № 1.** Як змінюється концентрація вакансій та міжвузлових атомів при підвищенні температури алюмінію від кімнатної до температури, що наближається до температури плавлення (660 °С). Енергія утворення вакансій в алюмінії дорівнює 0,75 еВ, а міжвузлових атомів – 3,0 еВ. Ентропійний множник можна вважати близьким до одиниці. Розрахунок вести з точністю до порядку величини.

#### *Розв'язання.*

При формулюванні "кімнатна температура" у розрахунках зазвичай приймають значення  $t = 20$  °С. Тоді, визначаючи концентрацію вакансій  $C_{\text{вак.}}$  та міжвузлових атомів  $C_{\text{м.ат.}}$  за формулою (3.2), одержуємо:

$$C_{\text{вак.}} = e^{-\frac{0,75}{8,62 \cdot 10^{-5} \times 293}} = e^{-29,7} = 10^{-12,9} \approx 10^{-13},$$

$$C_{\text{м.ат.}} = e^{-\frac{3,0}{8,62 \cdot 10^{-5} \times 293}} = e^{-118,8} = 10^{-51,6} \approx 10^{-52}.$$

При визначенні концентрації точкових дефектів поблизу температури плавлення можна врахувати, що її абсолютне значення (933 К) майже в три рази перевищує кімнатну ( $933 : 293 = 3,18$ ). З цієї причини значення показника ступеня при розрахунку  $C_{\text{вак.}}$  і  $C_{\text{м.ат.}}$  зменшаться відповідно майже в 3 рази:

$$C_{\text{вак.}} \approx 10^{-4}, \quad C_{\text{м.ат.}} \approx 10^{-17}.$$

### **Висновки:**

1. Оскільки енергія утворення вакансій у декілька разів менша за енергію утворення міжвузлових атомів, концентрація рівноважних вакансій при будь-яких температурах твердого стану на багато порядків перевищує концентрацію міжвузлових атомів. З підвищенням температури ця різниця зменшується, але залишається достатньо істотною.

2. Рівноважна концентрація вакансій навіть при температурах, близьких до температури плавлення, не перевищує  $10^{-4}$  (або 0,01 %), що відповідає одній вакансії на 10000 атомів.

**Задача № 2.** Використовуючи умови задачі № 1, визначте кількість точкових дефектів в одному молі алюмінію.

#### **Розв'язання.**

Кількість точкових дефектів в одному молі визначаємо за формулою:

$$n = C \cdot N_A,$$

де  $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$  1/моль – число Авогадро – кількість частинок (атомів) в одному молі речовини.

Значення концентрації точкових дефектів візьмемо з задачі № 1:

– при кімнатній температурі  $C_{\text{вак.}} \approx 10^{-13}$ ,  $C_{\text{м.ат.}} \approx 10^{-52}$ ;

– при 660 °С  $C_{\text{вак.}} \approx 10^{-4}$ ,  $C_{\text{м.ат.}} \approx 10^{-17}$ .

Тоді кількість точкових дефектів в одному молі алюмінію складатиме:

– при кімнатній температурі  $n_{\text{вак.}} \approx 6 \cdot 10^{10}$ ,  $n_{\text{м.ат.}} \approx 6 \cdot 10^{-29}$ ;

– при 660 °С  $n_{\text{вак.}} \approx 6 \cdot 10^{19}$ ,  $n_{\text{м.ат.}} \approx 6 \cdot 10^6$ .

**Висновок:** імовірність утворення власних рівноважних міжвузлових атомів при всіх температурах твердого стану близька до нуля.

**Задача № 3.** Визначте підвищення внутрішньої енергії  $\Delta U$  одного молу алюмінію, що обумовлено рівноважними вакансіями при  $t = 660$  °С.

#### **Розв'язання.**

Підвищення енергії, що обумовлено рівноважними вакансіями, знаходимо як добуток енергії утворення однієї вакансії (див. задачу № 1) на кількість вакансій в одному молі (див. задачу № 2.):

$$\Delta U = E_0 \cdot n = 0,75 \text{ eV} \times 6 \cdot 10^{19} = 4,5 \cdot 10^{19} \text{ eV} = 7,2 \text{ Дж}.$$

**Задача № 4.** Надайте оцінку рухливості вакансій в міді при температурі 1000 К. Відомо, що енергія активації самодифузії складає 2,08 еВ, а енергія утворення вакансії – 1,08 еВ.

**Розв'язання.**

Рухливість вакансій (або частоту стрибків) знайдемо, використовуючи формули (3.3) і (3.4):

$$\Gamma = 10^{13} \times e^{-\frac{2,08-1,08}{8,62 \cdot 10^{-5} \times 1000}} \approx 10^{13} \cdot 10^{-5} \approx 10^8 \text{ 1/с,}$$

тобто один стрибок на  $10^8$  коливань.

**Задача № 5.** Визначте середню відстань між вакансіями (в параметрах елементарної комірки  $a$ ) у металах з ГЦК ґраткою, якщо концентрація вакансій під час відпалу складає  $10^{-4}$ .

**Розв'язання.**

Припустимо, що вакансії в ґратці розподілені рівномірно. Тоді з умови задачі випливає, що одна вакансія припадає у середньому на  $10^4$  атомів або на 2500 елементарних комірок (1000 атомів : 4 атома в комірці). Об'єм кожної комірки складає  $a^3$ , де  $a$  – параметр кристалічної ґратки, що дорівнює довжині ребра куба.

Якщо вказані 2500 елементарних комірок об'єднати в один великий куб з ребром  $A$ , то середня відстань між вакансіями буде дорівнювати цьому ребру:

$$A = \sqrt[3]{A^3} = \sqrt[3]{2500 \cdot a^3} = 13,7 \cdot a \approx 14 \cdot a.$$

**Висновок:** середня відстань між вакансіями складає майже 14 параметрів елементарної комірки.

**Задача № 6.** Експериментальні значення концентрації вакансій в алюмінії при нагріванні від 300 К до 700 К збільшуються від  $5 \cdot 10^{-13}$  до  $8 \cdot 10^{-6}$ . Визначте енергію та ентропію утворення вакансій в алюмінії.

**Розв'язання.**

Використовуючи рівняння (3.1), не можна визначити обидві шукані величини  $S_0$  і  $E_0$  одночасно при одній температурі. Тому запишемо в загальному вигляді відношення концентрацій вакансій при двох заданих температурах  $T_1$  і  $T_2$ :

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{\exp\left(\frac{S_0}{\kappa}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_0}{\kappa T_2}\right)}{\exp\left(\frac{S_0}{\kappa}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_0}{\kappa T_1}\right)}.$$

Скоротивши співмножник  $\exp(S_0/\kappa)$  як такий, що не залежить від температури, запишемо відношення концентрацій:

$$\frac{C_2}{C_1} = \exp\left[\left(\frac{E_0}{\kappa}\right) \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right].$$

Прологарифмуємо одержане рівняння та розв'яжемо його відносно до  $E_0$ :

$$E_0 = \frac{\kappa \ln\left(\frac{C_2}{C_1}\right)}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)}.$$

Підставивши чисельні значення, одержимо:

$$E_0 = \frac{8,62 \cdot 10^{-5} \times \ln\left(\frac{8 \cdot 10^{-6}}{5 \cdot 10^{-13}}\right)}{\left(\frac{1}{300} - \frac{1}{700}\right)},$$

$$E_0 = \frac{8,62 \cdot 10^{-5} \times 16,6}{19 \cdot 10^{-3}} = 0,75 \text{ eB}.$$

Тепер можна визначити ентропію утворення вакансій, використовуючи вираз (3.1), для будь-якої з заданих температур:

$$5 \cdot 10^{-13} = \exp\left(\frac{S_0}{\kappa}\right) \cdot \exp\left(-\frac{0,75}{8,62 \cdot 10^{-5} \times 300}\right),$$

звідки

$$\exp\left(\frac{S_0}{\kappa}\right) = \frac{5 \cdot 10^{-13}}{2,5 \cdot 10^{-13}} = 2,$$

$$\frac{S_0}{\kappa} = 0,69, \quad \text{тоді} \quad S_0 = 0,69 \cdot \kappa.$$

**В и с н о в о к:** з наведених експериментальних даних енергія утворення вакансій в алюмінії складає 0,75 еВ, а ентропія утворення  $S_0$  – 0,69 сталої Больцмана.

## ЛІТЕРАТУРА

### Основна

1. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки: Учеб. пособие для вузов. – Изд. 4-е. – М.: Металлургия, 1990. – 330 с.
2. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов: Учеб. пособие для вузов. – Изд. 3-е. – М.: Металлургия, 1983. – 232 с.

### Допоміжна

3. Кривуша Л.С., Зайцева Т.А. Методические указания к выполнению индивидуальных заданий по дисциплине “Дефекты кристаллического строения”. – Днепропетровск: НМетАУ, 2006. – 72 с.
4. Новиков Н.Н. Структура и структурно-чувствительные свойства реальных кристаллов: Учеб. пособие. – К.: Вища школа, 1983. – 264 с.

Підписано до друку 13.10.08. Формат 60×84 1/16. Папір типогр. Друк плоский.  
Облік.-вид. арк. 1,76. Умов. друк. арк. 1,73. Тираж 50 пр. Замовлення № .

Національна металургійна академія України  
49600, м. Дніпропетровськ-5, пр. Гагаріна, 4

---

Редакційно-видавничий відділ НМетАУ