



## *2. ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ*

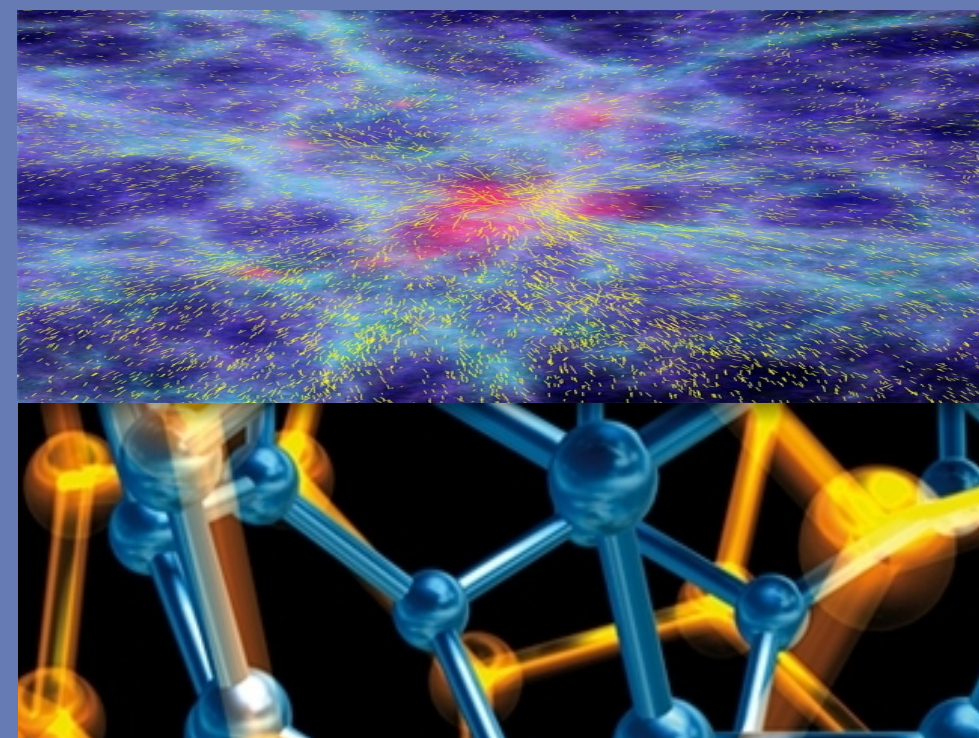
А. В. КОРОТУН, І. М. ТІТОВ,  
Ю. А. КУНИЦЬКИЙ, В. В. ПОГОСОВ

© ЗБІРНИК ЗАДАЧ. КОНДЕНСОВАНИЙ СТАН

А. В. КОРОТУН, І. М. ТІТОВ,  
Ю. А. КУНИЦЬКИЙ, В. В. ПОГОСОВ

## ЗБІРНИК ЗАДАЧ З ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ

### *1. СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ*



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ,  
МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ

Запорізький національний технічний університет  
Запорізький національний університет  
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

**А. В. Коротун, І. М. Тітов,  
Ю. А. Куницький, В. В. Погосов**

# **ЗБІРНИК ЗАДАЧ З ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ**

**В двох томах**

**Том 1**

**СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ**

*Рекомендовано Міністерством освіти і науки,  
молоді та спорту України як навчальний посібник для студентів  
вищих навчальних закладів*

Запоріжжя  
ЗНТУ  
2011

УДК 538.9 (076.1)  
ББК 22.37я73  
3 41

*Гриф надано Міністерством освіти і науки, молоді та спорту України  
(лист № 1/11-100 від 06.01.2011 р.)*

Рецензенти:

*С. П. Репецький*, доктор фізико-математичних наук, професор;  
*В. А. Татаренко*, доктор фізико-математичних наук, професор;  
*С. В. Лоскутов*, доктор фізико-математичних наук, професор

3 41      **Збірник** задач з фізики конденсованого стану : навчальний посібник. В 2 т. Т. 1 / А. В. Коротун, І. М. Тітов, Ю. А. Куницький, В. В. Погосов. – Запоріжжя : ЗНТУ, 2011. – 358 с.  
ISBN 978-617-529-033-0  
ISBN 978-617-529-034-7 (Т. 1)

Посібник призначений для студентів технічних і класичних вузів. Метою посібника є сприяння ефективній роботі студентів на практичних заняттях і під час самостійної роботи з основних розділів курсу фізики конденсованого стану і фізики маловимірних квантових систем.

Посібник побудовано з врахуванням положень кредитно-модульної системи організації навчального процесу. Кожний розділ супроводжується стислим викладом теоретичного матеріалу, надано приклади розв'язування задач, а потім пропонуються задачі для самостійної роботи.

Посібник призначений для студентів вищих навчальних закладів.  
Друкується в авторській редакції.

**УДК 538.9 (076.1)**  
**ББК 22.37я73**

ISBN 978-617-529-033-0  
ISBN 978-617-529-034-7 (Т. 1)

© Коротун А. В., Тітов І. М.,  
Куницький Ю. А.,  
Погосов В. В., 2011

© ЗНТУ, 2011

## ЗМІСТ

<b>Умовні позначення</b>	5
<b>Передмова</b>	8
<b>1. Природа сил міжатомної взаємодії</b>	9
Основні формули та визначення	9
Приклади розв'язування задач	13
Задачі для самостійного розв'язування	22
<b>2. Кристалічна структура твердих тіл</b>	25
Основні формули та визначення	25
Приклади розв'язування задач	36
Задачі для самостійного розв'язування	64
Елементарна комірка. Параметри ґратки	64
Індекси вузлів, напрямків та площин	67
Обернена ґратка	74
Рентгенівське випромінювання	76
<b>3. Дефекти структури кристалічної будови твердих тіл</b>	83
Основні формули та визначення	83
Приклади розв'язування задач	96
Задачі для самостійного розв'язування	114
Точкові дефекти	114
Лінійні дефекти	122
<b>4. Механічні властивості твердих тіл</b>	134
Основні формули та визначення	134
Приклади розв'язування задач	149
Задачі для самостійного розв'язування	182
Ізотропні тверді тіла	182
Анізотропні тверді тіла	187
Пружні властивості дислокацій	193
Пружні хвилі в кристалах	196
<b>5. Дифузія у твердому тілі</b>	200
Основні формули та визначення	200
Приклади розв'язування задач	207
Задачі для самостійного розв'язування	219
<b>6. Статистика електронів у твердому тілі. Розподіл Фермі-Дірака</b>	236
Основні формули та визначення	236
Приклади розв'язування задач	241

Задачі для самостійного розв'язування	255
<b>7. Зонна теорія. Зони Бриллюена. Динаміка електронів</b>	265
Основні формули та визначення	265
Приклади розв'язування задач	279
Задачі для самостійного розв'язування	305
<b>8. Динаміка атомів кристалічної ґратки. Фонони</b>	313
Основні формули та визначення	313
Приклади розв'язування задач	317
Задачі для самостійного розв'язування	329
Коливання атомів кристалічної ґратки	329
Модель Дебая	335
Ефект Мьосбауера	341
Рекомендована література	346
Додаток А. Кристалічні ґратки твердих тіл	349
Додаток Б. Кристалічні структури, густина та атомна концентрація твердих тіл	351
Додаток В. Дефекти кристалічної структури твердих тіл	353
Додаток Г. Механічні властивості твердих тіл	354
Додаток Д. Дифузія твердих тіл	356
Додаток Е. Теплові властивості твердих тіл	357

## Основні умовні позначення

$A$	– постійна величина
$a$	– стала кристалічної ґратки; радіус борівської орбіти; прискорення
$a_0$	– радіус першої борівської орбіти
$B$	– модуль вектора магнітної індукції; постійна величина
$b$	– ширина
$c$	– швидкість поширення електромагнітної хвилі; швидкість світла
$D$	– коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра; коефіцієнт дифузії
$E$	– енергія мікрочастинки
$e$	– заряд електрона
$e$	– основа натуральних логарифмів
$\mathcal{E}$	– напруженість електричного поля
$\mathcal{E}_a$	– напруженість поля при термоелектричному ефекті
$\varepsilon_F$	– енергія Фермі
$f$	– функція розподілу
$\hat{H}$	– оператор Гамільтона (гамільтоніан)
$h$	– стала Планка; товщина
$\hbar$	– стала Дірака
$I$	– сила струму
$i$	– уявна одиниця
$J$	– інтенсивність світла
$j$	– густина струму
$\mathbf{k}$	– хвильовий вектор носія заряду
$k$	– модуль хвильового вектора
$k_B$	– стала Больцмана
$L$	– лінійний розмір
$l$	– довжина
$m_e$	– маса електрона
$m^*$	– ефективна маса мікрочастинки
$N$	– число частинок; густина квантових станів
$N_A$	– стала Авогадро

$\aleph$	– уявний показник заломлення
$n$	– концентрація частинок; концентрація електронів в зоні провідності
$\bar{n}$	– дійсний показник заломлення середовища
$P$	– імпульс електрона
$R$	– електричний опір; коефіцієнт відбивання
$R_H$	– стала Холла
$r$	– радіус
$S$	– площа
$s$	– швидкість звуку
$T$	– температура; коефіцієнт пропускання
$t$	– час
$U$	– потенціальна енергія; висота потенціального бар'єру; напруга
$V$	– об'єм кристала
$v$	– швидкість
$v_g$	– групова швидкість
$v_{ph}$	– фазова швидкість
$W$	– імовірність
$w$	– густина ймовірності
$\alpha$	– абсолютна диференціальна термо-ЕРС
$\gamma$	– густина речовини; коефіцієнт поглинання
$\varepsilon$	– відносна діелектрична проникність
$\varepsilon_0$	– діелектрична стала вакууму
$\theta$	– азимутальний кут у сферичній системі координат
$k$	– число атомів в елементарній комірці; коефіцієнт теплопровідності
$\lambda$	– довжина хвилі; довжина вільного пробігу
$\mu$	– молярна маса; рухливість
$\nu$	– частота; число зіткнень
$\rho$	– питомий опір; густина заряду
$\sigma$	– питома електропровідність; ефективний переріз
$\tau$	– час життя; час релаксації
$\tau_M$	– максвеллівський час релаксації
$\phi$	– робота виходу

- $\Phi_k$  – контактна різниця потенціалів
- $\Psi$  – координатна хвильова функція
- $\omega$  – циклічна частота

## ПЕРЕДМОВА

Фізика конденсованого стану є одним з найбільших основних розділів сучасної фізики. Тверде тіло з його складними електричними, оптичними, тепловими і магнітними властивостями – традиційно привабливий об'єкт фундаментальних досліджень. Пояснення складних явищ і розуміння фізичних процесів у твердому тілі призводить до важливих застосувань, наприклад, у галузі обчислювальної техніки, техніки зв'язку, електроніки, при створенні нових матеріалів. Ідеї, що зародилися в надрах фізики конденсованого стану, є плідними для ядерної фізики, біофізики, фізики активних матеріалів, напівпровідників, діелектриків, металів тощо.

При вивченні університетського курсу фізики конденсованого стану або фізики твердого тіла значну увагу приділяють проблемам кореляцій між атомно-електронною структурою твердих тіл, їх складом і фізичними властивостями. Вирішенню цієї проблеми має сприяти не лише осмислене вивчення теоретичного матеріалу, але й закріплення отриманих знань і навичок у ході лабораторних робіт (експериментальне вивчення деяких законів і ефектів) та практичних занять (розв'язування задач та практичне застосування законів, правил і принципів). Разом із аналізом фізичного змісту, виділенням найбільш важливих чинників, які впливають на протікання різних процесів і явищ, важливим є обговорення меж застосовності отриманих співвідношень, порівняння нових результатів з отриманими й їхня фізична інтерпретація. Ці елементи сприяють ефективній роботі студентів як на практичних заняттях, так і під час самостійної роботи. Тому кожний розділ супроводжується досить детальним теоретичним матеріалом, великою кількістю прикладів розв'язання і чималою кількістю задач для самостійного розв'язування.

Особливістю цього навчального посібника є можливість його використання при проведенні практичних занять для студентів різних спеціальностей як технічних, так і класичних університетів.

# 1. Природа сил міжатомної взаємодії

## Основні формули та визначення

Можливість існування твердого стану речовини обумовлена виникненням сил взаємодії між структурними частинками при їх зближенні на достатньо малі відстані. Такими частинками можуть бути атоми, йони або молекули. Для виникнення стійкої структури твердого тіла необхідно, щоб між частинками діяли сили притягання, які перешкоджають віддаленню частинок, та сили відштовхування, які не дозволяють частинкам злитися. Ці сили мають електростатичну природу: притягання між протилежно зарядженими частинками (електронами та ядрами) і відштовхування між однойменно зарядженими частинками. Характер сил міжатомної взаємодії в першу чергу визначається будовою електронних оболонок атомів, що взаємодіють між собою.

Найбільш загальним видом зв'язку, що виникає між будь-якими атомами та молекулами, є *сили Ван-дер-Ваальса*. У загальному випадку ван-дер-ваальсівський зв'язок містить в собі дисперсійну, орієнтаційну та індукційну взаємодії. Сили зв'язку, які виникають внаслідок узгодженого руху електронів у сусідніх атомах, називаються *дисперсійними*. Якщо молекули мають постійний дипольний момент, тобто є полярними, то між ними виникає електростатична взаємодія, яка прагне розташувати молекули в строгому порядку. Така взаємодія називається орієнтаційною, в такому розташуванні енергія системи зменшується. Енергія системи, що визначається орієнтацією молекул, сильно залежить від температури. У полярних молекул, які мають високу поляризованість, може виникати наведений (індукційний) момент під дією поля постійних диполів сусідніх молекул. Така взаємодія називається *індукційною*, або *деформаційною*. В загальному випадку при зближенні двох молекул можуть виникати всі три види зв'язку, і енергія взаємодії складається із енергій дисперсійної, орієнтаційної та індукційної взаємодії.

*Ковалентний (гомеополярний) зв'язок* утворюється за рахунок взаємодії між двома електронами в умовах, коли ці електрони колективізовані парою сусідніх атомів.

*Йонний (полярний) зв'язок* утворюється в результаті кулонівської взаємодії між додатньо та від'ємно зарядженими йонами в йонних кристалах. Типовими представниками йонних кристалів є галогеніди лужних металів, наприклад, із структурою типу NaCl і CsCl.

*Металічний зв'язок* виникає при взаємодії атомів електрододатніх елементів, зовнішні валентні електрони яких зв'язані з ядром відносно слабо. Зв'язок у кристалічній ґратці металу виникає внаслідок взаємодії додатніх йонів з електронним газом.

*Водневий зв'язок* виникає у тому випадку, коли атом Гідрогену зв'язаний з дуже електронегативним атомом, наприклад атомом Оксигену, Флуору, Хлору тощо. Такий атом притягує електрони зв'язку і набуває негативного заряду; атом Оксигену, від якого відтягнуто електрон зв'язку, набуває позитивного заряду. Водневий зв'язок обумовлено електростатичним притягненням цих зарядів.

Характер міжатомних зв'язків іноді ставлять в основу класифікації твердих тел. Згідно цієї класифікації всі тверді тіла розділяють на чотири типи: металічні, ковалентні, йонні та молекулярні кристали. Кристали неорганічних речовин з водневим зв'язком (який за своїм характером є переважно йонним) часто виділяють в окремий тип.

*Енергія зв'язку* (або *енергія зчеплення*) кристалу – це енергія, яка необхідна для розділення тіла на нескінченно віддалені одна відносно іншої частини. При розрахунку енергії зчеплення молекулярних та йонних кристалів в силу того, що конфігурація електронів у цих кристалах не дуже відрізняється від їхньої конфігурації в ізольованих атомах чи йонах, обмежуються розрахунками класичної потенціальної енергії системи сферично симетричних частинок, які утворюють кристалічну структуру. Вважається, що повна потенціальна енергія системи залежить лише від відстані між частинками, що взаємодіють, які локалізовані у вузлах ґратки і кінетична енергія яких настільки мала, що нею можна знехтувати. **Повна потенціальна енергія ґратки** кристалу, який містить  $N$  частинок,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N U_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^{N-1} U(r_{ij}), \quad (1.1)$$

де  $U_i$  – енергія взаємодії  $i$ -ої частинки з усіма іншими частинками ґратки,  $U(r_{ij})$  – потенціальна енергія взаємодії між частинками у кристалі, відстань між якими дорівнює  $r_{ij}$ . **Повну потенціальну енергію взаємодії атомів** можна записати у вигляді суми енергії сил притягання (від’ємний доданок) та енергії сил відштовхування (додатній)

$$U(r) = U_{\text{пр}}(r) + U_{\text{від}}(r). \quad (1.2)$$

При деякому значенні  $r = r_0$  енергія  $U(r)$  мінімальна, що відповідає силі

$$F = - \left( \frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = 0. \quad (1.3)$$

У цьому випадку утворюється молекула з найбільш стабільною конфігурацією, при якій сила притягання урівноважена силою відштовхування  $F_{\text{пр}} = F_{\text{від}}$ .

Потенціал сил притягання задається у вигляді  $U_{\text{пр}} = -\frac{a}{r^m}$ , де  $a$  – додатна константа,  $m$  – додатній показник ступеня. При  $m = 1$  потенціал відповідає звичайній кулонівській взаємодії між протилежно зарядженими йонами, при  $m = 6$  – потенціалу притягання при взаємодії між атомами інертних газів. Потенціал сил відштовхування  $U_{\text{від}} = \frac{b}{r^n}$ , де  $b$  та  $n > 0$  – константи. Повна потенціальна енергія взаємодії двох атомів

$$U = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}. \quad (1.4)$$

При розрахунку енергії зчеплення показник ступеня  $n$  у виразі (1.4) зазвичай визначають із **стисливості кристалу**  $\kappa$ .

$$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dP}, \quad (1.5)$$

де  $V$  – об'єм кристалу,  $P$  – тиск.

**Об'ємний модуль пружності** є мірою жорсткості кристалу або мірою енергії, необхідної для створення даної деформації

$$B = \frac{1}{\kappa} = V \left( \frac{d^2U}{dV^2} \right). \quad (1.6)$$

Для описання взаємодії електрично нейтральних та неполярних молекул використовують **потенціал Леннарда – Джонса**:

$$U = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1.7)$$

де  $\varepsilon$  та  $\sigma$  – константи, пов'язані з  $a$  та  $b$  співвідношеннями:

$$\varepsilon = \left( \frac{b}{a} \right)^{\frac{1}{6}}; \quad \sigma = \frac{a^2}{4b}. \quad (1.8)$$

**Повна енергія кристалічної ґратки кристалу**, який складається з  $2N$  іонів, записується так:

$$U = -\frac{N\alpha_M q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right). \quad (1.9)$$

Величина  $-\frac{N\alpha_M q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}$  є **енергією Маделунга**,  $\alpha_M$  – стала Маделунга,

яка враховує внесок в енергію кристалу взаємодії даної молекули з її сусідами.

## Приклади розв'язування задач

**Приклад 1.1.** Кожний зв'язок С–С в алмазі має енергію  $E_{зв} = 3,7$  еВ. Скільки енергії потрібно витратити на випаровування 0,1 г алмазу?

*Розв'язання*

Кількість атомів в об'ємі речовини масою  $m$  дорівнює:

$$N = \frac{mN_A}{\mu}$$

Для алмазу

$$N = \frac{0,1 \cdot 10^{-3} \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{12 \cdot 10^{-3}} = 5 \cdot 10^{21}$$

Кожний атом Карбону в структурі алмазу має чотири ковалентні зв'язки, тому кількість зв'язків удвічі перевищує кількість атомів. Отже, енергія, необхідна для випаровування 0,1 г алмазу

$$E = 2NE_{зв} = 2 \cdot 5 \cdot 10^{21} \cdot 3,7 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 5920 \text{ Дж}.$$

*Відповідь:*  $E = 5920$  Дж.

**Приклад 1.2.** Доведіть, що показники ступеня у виразі для потенційної енергії атомів, які знаходяться в ґратці на відстані  $r$

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m},$$

задовольняють нерівності  $m > n$ .

*Розв'язання*

Хімічний зв'язок між атомами в ґратці буде стійким, якщо функція Грюнайзена – Мі має мінімум при нескінченному значенні відстані  $r$ . Умова мінімуму запишеться у вигляді двох співвідношень:

$$\left(\frac{dU}{dr}\right)_{r=r_0} = 0 \quad \text{і} \quad \left(\frac{d^2U}{dr^2}\right)_{r=r_0} > 0$$

або

$$\frac{n\alpha}{r_0^{n+1}} - \frac{m\beta}{r_0^{m+1}} = 0,$$

$$-\frac{n(n+1)\alpha}{r_0^{n+2}} + \frac{m(m+1)\beta}{r_0^{m+2}} > 0.$$

З першого рівняння знаходимо

$$r_0^{m-n} = \frac{m\beta}{n\alpha}.$$

Друге співвідношення запишемо у вигляді:

$$r_0^{m-n} - \frac{m(m+1)\beta}{n(n+1)\alpha} < 0,$$

звідки

$$\frac{m\beta}{n\alpha} - \frac{m(m+1)\beta}{n(n+1)\alpha} < 0$$

або

$$n(n+1) < m(m+1).$$

Звідси і маємо, що  $m > n$ .

*Відповідь:*  $m > n$ .

**Приклад 1.3.** Оцініть енергію зв'язку атома у ван-дер-ваальсівському кристалі Аргону, відстань між найближчими сусідами за температури  $T = 0$  К і температуру його плавлення, якщо потенціальна енер-

гія взаємодії між його атомами можна задати співвідношенням:

$$U(r) = \frac{c}{r^{12}} - \frac{b}{r^6}.$$

При розрахунках враховувати лише енергію взаємодії з найближчими сусідами і вважати, що структура Аргону – ГЦК ґратка.

*Розв'язання*

Енергія взаємодії атома з 12 найближчими сусідами в ГЦК ґратці можна задати співвідношенням

$$U(r) = 12 \left( \frac{c}{r^{12}} - \frac{b}{r^6} \right).$$

Дослідимо цей вираз на екстремум:

$$\frac{dU}{dr} = 72 \left( -\frac{2c}{r^{12}} + \frac{b}{r^6} \right);$$

$$\frac{dU}{dr} = \frac{72}{r_0^7} (br_0^6 - 2c) = 0;$$

$$r_0 = \sqrt[6]{\frac{2c}{b}}$$

– відстань між найближчими сусідами. Тоді енергія зв'язку атома:

$$E_{\text{зв}} = U(r_0) = 12 \left( \frac{c}{r_0^{12}} - \frac{b}{r_0^6} \right) = 12 \left( c \frac{b^2}{4c^2} - b \frac{b}{2c} \right) = -\frac{3b^2}{c}.$$

Оцінку температури плавлення отримаємо зі співвідношення:

$$E_{\text{зв}} = k_{\text{В}} T_{\text{пл}};$$

$$T_{\text{пл}} = \frac{E_{\text{зв}}}{k_{\text{В}}} = -\frac{3b^2}{k_{\text{В}} c}.$$

Відповідь:  $r_0 = \sqrt[6]{\frac{2c}{b}}$ ;  $E_{зв} = -\frac{3b^2}{c}$ ;  $T_{пл} = -\frac{3b^2}{k_B c}$ .

**Приклад 1.4.** Визначте енергію кристалічної ґратки NaCl за формулою Капустинського, якщо радіус іона Натрію  $0,98 \text{ \AA}$ , а йона Хлору  $1,81 \text{ \AA}$ .

*Розв'язання*

Енергія кристалічної ґратки сполуки типу  $A_m B_n$  з координаційним числом 6 за формулою А. Ф. Капустинського має вигляд (у ккал/моль):

$$E = 256,1 \frac{(a+b)z_A z_B}{r_A + r_B},$$

де  $a$  і  $b$  – число катіонів та йонів у молекулі;  $z_A$  і  $z_B$  – валентність аніона і катіона;  $r_A$  і  $r_B$  – радіуси аніона і катіона (в  $\text{\AA}$ ). Тоді

$$E = 256,1 \frac{(1+1) \cdot 1 \cdot 1}{1,81 + 0,98} = 183,57 \frac{\text{ккал}}{\text{моль}} = 43,86 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}.$$

Відповідь:  $E = 43,86 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ .

**Приклад 1.5.** Доведіть, що модуль всебічного стиснення кубічної кристалічної ґратки

$$K = \frac{r_0^2}{9V} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_{r=r_0},$$

де  $r_0$  – відстань між атомами в стані рівноваги;  $V$  – об'єм кристалу.

*Розв'язання*

Стискуваність твердого тіла в загальному випадку можна виразити через другу похідну від енергії за об'ємом:

$$\alpha = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dP} \quad \text{або} \quad K = \frac{1}{\alpha} = V \frac{\partial^2 U}{\partial V^2}.$$

Внаслідок того, що

$$\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} = \frac{\partial U}{\partial r} \frac{\partial^2 r}{\partial V^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \left( \frac{\partial r}{\partial V} \right),$$

і в стані рівноваги  $\left( \frac{\partial U}{\partial r} \right)_{r=r_0} = 0$ , маємо

$$\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_{r=r_0} \left( \frac{\partial r}{\partial V} \right)^2.$$

Для кубічної ґратки  $V = 2Nr^3$ , де  $N$  – повне число пар йонів.

Тоді

$$\frac{\partial V}{\partial r} = 6Nr^2, \quad \left( \frac{\partial r}{\partial V} \right)^2 = \frac{1}{36N^2r^4},$$

звідки

$$K = \frac{V}{36N^2r_0^4} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_{r=r_0} = \frac{1}{18Nr_0} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_{r=r_0} = \frac{r_0^2}{9V} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_{r=r_0}.$$

Відповідь:  $K = \frac{r_0^2}{9V} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_{r=r_0}.$

**Приклад 1.6.** Вважаючи, що сталі  $\lambda$  і  $n$  в законі Грюнайзена – Мі не змінюються при агрегатних перетвореннях, доведіть, що для молекули лужно-галогідної солі

$$\frac{U_{\Gamma}}{U_{\text{TB}}} = \frac{r_{\text{TB}}}{\alpha_{\text{M}} r_{\Gamma}} \quad \text{і} \quad \left( \frac{r_{\text{TB}}}{r_{\Gamma}} \right)^{n-1} = \frac{A_n}{\alpha_{\text{M}}},$$

де  $U_{\Gamma}$  і  $U_{\text{ТВ}}$  – енергія молекули відповідно в газоподібному і твердому станах;  $\alpha_{\text{М}}$  – стала Маделунга.

*Розв'язання*

Енергія молекули лужно-галоїдної сполуки в газоподібному стані

$$U_{\Gamma} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\Gamma}} + \frac{\lambda}{r_{\Gamma}^n},$$

де  $\lambda$  – деяка стала.

В стані рівноваги  $\frac{dU_{\Gamma}}{dr_{\Gamma}} = 0$ , тому

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\Gamma}^2} + \frac{n\lambda}{r_{\Gamma}^{n+1}} = 0,$$

звідки

$$\lambda = \frac{e^2 r_{\Gamma}^{n-1}}{4\pi\epsilon_0 n}.$$

Енергія молекули сполуки в газоподібному стані в положенні рівноваги

$$U_{\Gamma} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\Gamma}} + \frac{e^2 r_{\Gamma}^{n-1}}{4\pi\epsilon_0 n r_{\Gamma}^n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\Gamma}} \left( \frac{1}{n} - 1 \right) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\Gamma} n} (n-1).$$

Енергія молекули сполуки в твердому тілі

$$U_{\text{ТВ}} = -\frac{\alpha_{\text{М}} e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{ТВ}}} + \frac{\lambda A_n}{r_{\text{ТВ}}^n}.$$

З умови рівноваги  $\frac{dU_{\text{ТВ}}}{dr_{\text{ТВ}}} = 0$  знаходимо:

$$\lambda A_n = \frac{\alpha_{\text{М}} e^2 r_{\text{ТВ}}^{n-1}}{4\pi\epsilon_0 n}$$

або

$$U_{\text{TB}} = -\frac{\alpha_{\text{M}}e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{TB}}} + \frac{\alpha_{\text{M}}e^2 r_{\text{TB}}^{n-1}}{4\pi\epsilon_0 n r_{\text{TB}}^n} = -\frac{\alpha_{\text{M}}e^2}{4\pi\epsilon_0 n r_{\text{TB}}} (n-1),$$

звідки

$$\frac{U_{\Gamma}}{U_{\text{TB}}} = \frac{r_{\text{TB}}}{\alpha_{\text{M}} r_{\Gamma}}.$$

Крім того

$$r_{\Gamma}^{n-1} = \frac{4\pi\epsilon_0 \lambda n}{e^2} \quad \text{і} \quad r_{\text{TB}}^{n-1} = \frac{4\pi\epsilon_0 \lambda n A_n}{\alpha_{\text{M}} e^2},$$

тому

$$\left( \frac{r_{\text{TB}}}{r_{\Gamma}} \right)^{n-1} = \frac{A_n}{\alpha_{\text{M}}}.$$

Відповідь:  $\frac{U_{\Gamma}}{U_{\text{TB}}} = \frac{r_{\text{TB}}}{\alpha_{\text{M}} r_{\Gamma}}; \left( \frac{r_{\text{TB}}}{r_{\Gamma}} \right)^{n-1} = \frac{A_n}{\alpha_{\text{M}}}.$

**Приклад 1.7.** Розрахуйте сталу Маделунга для двомірної ґратки NaCl.

*Вказівка.* Оскільки ряд, що виникає при знаходженні суми, збігається не абсолютно, то знаходження суми потрібно проводити за послідовністю атомних рядів, кожний з яких включає електронейтральну групу атомів. Знаходження суми провести для атомів, які лежать на відстані  $4a$ .

*Розв'язання*

У кристалі NaCl кожний йон  $\text{Na}^+$  оточений шістьма найближчими сусідами  $\text{Cl}^-$  на відстані  $r_0$ , дванадцятьма йонами  $\text{Na}^+$ , що слідують за найближчими сусідами, на відстані  $\sqrt{2}r_0$ , вісьмома йонами  $\text{Cl}^-$  на відстані  $\sqrt{3}r_0$  тощо. Отже, повна кулонівська енер-

гія взаємодії центрального йону  $\text{Na}^+$  із вісьмома йонами кристалу  $\text{NaCl}$  дорівнює:

$$E = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left( 6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \dots \right) = -1,748 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} = -\frac{\alpha_M e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}, \quad (1)$$

де  $\alpha_M$  – стала Маделунга, яка залежить від типу ґратки.

Для більшості кристалічних структур знаходження сум типу (1) є досить ускладненим, внаслідок її повільної збіжності.

Евальдом та Евьеном був розроблений загальний метод знаходження сум типу (1). В основі цього методу лежить поділ простору навколо одного йону на зони, що знаходяться між послідовними багатогранниками. Поверхні багатогранників обирають так, щоб повний заряд кожної зони дорівнював нулю, а заряд йона, що знаходиться на межі між двома зонами, рівномірно розподіляється між ними. Цей метод дозволяє побудувати новий ряд, який швидко збігається.

На рис. 1.1 наведено квадратну ґратку гіпотетичного кристалу  $\text{NaCl}$ . Пунктирні лінії у формі квадратів є межами електронейтральних зон. Йон, що лежить на стороні квадрата, належить цьому квадрату лише на 50%. Йон, розташований у вершині квадрата, належить йому лише на 25%. Внесок пари йонів одного знаку в сталу Маделунга при побудові суми типу (1) від’ємний, а йонів різного знаку – додатний.

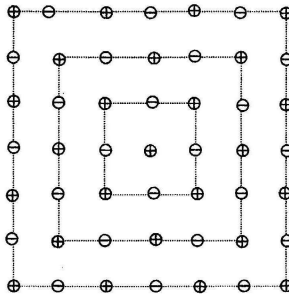


Рисунок 1.1 – Ґратка гіпотетичного кристалу  $\text{NaCl}$

Внесок у сталу Маделунга йонів першої зони дорівнює:

$$\alpha_{M_1} = \frac{1}{2} \cdot 4 - \frac{\frac{4}{\sqrt{2}}}{\sqrt{2}} \cdot 4 = 1,293.$$

Внесок у сталу Маделунга йонів другої зони дорівнює:

$$\alpha_{M_2} = \frac{1}{2} \cdot 4 - \frac{\frac{3}{\sqrt{2}}}{\sqrt{2}} \cdot 4 - \frac{\frac{1}{2}}{\sqrt{2}} \cdot 4 + \frac{\frac{1}{\sqrt{5}}}{\sqrt{5}} \cdot 8 - \frac{\frac{1}{\sqrt{8}}}{\sqrt{8}} \cdot 4 = 0,314.$$

$$\begin{aligned} \alpha_{M_3} &= -\frac{\frac{1}{2}}{4} \cdot 4 + \frac{\frac{1}{\sqrt{5}}}{\sqrt{5}} \cdot 8 - \frac{\frac{3}{\sqrt{8}}}{\sqrt{8}} \cdot 4 + \frac{\frac{1}{2}}{3} \cdot 4 - \frac{\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{10}} \cdot 8 + \frac{\frac{1}{\sqrt{13}}}{\sqrt{13}} \cdot 8 - \frac{\frac{3}{\sqrt{18}}}{\sqrt{18}} \cdot 4 = \\ &= 3,6 \cdot 10^{-3}. \end{aligned}$$

Внесок у сталу Маделунга йонів четвертої зони дорівнює:

$$\begin{aligned} \alpha_{M_4} &= -\frac{\frac{1}{2}}{4} \cdot 4 + \frac{\frac{1}{\sqrt{17}}}{\sqrt{17}} \cdot 8 - \frac{\frac{1}{\sqrt{20}}}{\sqrt{20}} \cdot 8 + \frac{\frac{1}{2}}{5} \cdot 8 - \frac{\frac{1}{\sqrt{32}}}{\sqrt{32}} \cdot 4 + \frac{\frac{1}{2}}{3} \cdot 4 - \frac{\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{10}} \cdot 8 + \\ &+ \frac{\frac{1}{\sqrt{13}}}{\sqrt{13}} \cdot 8 - \frac{\frac{3}{\sqrt{18}}}{\sqrt{18}} \cdot 4 = 2 \cdot 10^{-3}. \end{aligned}$$

Отже, при обмеженні чотирма зонами маємо для сталюї Маделунга:

$$\begin{aligned} \alpha_M &= \alpha_{M_1} + \alpha_{M_2} + \alpha_{M_3} + \alpha_{M_4} = 1,293 + 0,314 + 3,6 \cdot 10^{-3} + 2 \cdot 10^{-3} = \\ &= 1,613. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\alpha_M = 1,613.$

## Задачі для самостійного розв'язування

- 1.1. Визначте енергію зв'язку кристала кремнію в кілоджоулях на атом.
- 1.2. Залежність енергії взаємодії між двома атомами в молекулі від відстані описується виразом:

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}.$$

Міжатомна відстань в положенні рівноваги  $3 \text{ \AA}$ , енергія дисоціації молекули 4 еВ. Розрахуйте значення коефіцієнтів  $\alpha$  і  $\beta$ , якщо  $n = 2$ ,  $m = 10$ . Знайдіть сили, що прагнуть повернути атоми в положення рівноваги при зміні міжатомної відстані на 10%.

- 1.3. Розрахуйте значення сталої  $A_n$  в законі Грюнайзена – Мі

$$\varphi = \frac{\lambda A_n}{r^n} + \frac{\alpha e^2}{r},$$

враховуючи, що  $n = 10$ .

- 1.4. Використовуючи метод, запропонований Ев'єном, розрахуйте значення сталої Маделунга для кристала типу NaCl.
- 1.5. Розрахуйте значення  $\lambda$  в формулі

$$\varphi_i = \frac{\lambda}{r_i^n} \pm \frac{e^2}{r_{ij}}$$

для хлористого натрію, прийнявши  $n = 10$ ,  $A_{10} = 6,43$ ,  $r_0 = 2,81 \text{ \AA}$ .

- 1.6. Нехай у йонному кристалі простір між йонами заповнений однорідною рідиною з діелектричною проникністю  $\epsilon$ , при цьому потенціал відштовхування залишився незмінним, а кулонівська взаємодія зменшилася в  $\frac{1}{\epsilon}$  раз. Розрахуйте сталу ґратки хлористого натрію в описаних умовах, вважаючи, що

$\varepsilon = 81$  і  $n = 10$ . У скільки разів внаслідок цього зміниться енергія ґратки.

- 1.7. Обчисліть значення енергії кристалічної ґратки NaCl, якщо стала  $n$ , що характеризує потенціал сил відштовхування, дорівнює 9,4, а стала Маделунга 1,75.
- 1.8. Експериментальне значення енергії зчеплення KCl на молекулу дорівнює 6,62 еВ. Визначте  $n$ , вважаючи  $r_0 = 3,1 \text{ \AA}$ .
- 1.9. Обчисліть енергію сил відштовхування для KCl, якщо енергія дисоціації дорівнює  $-4,40$  еВ. Прийміть  $r_0 = 2,79 \text{ \AA}$ .
- 1.10. Розгляньте кристал з молярним об'ємом  $V_0$  і загальною енергією взаємодії між атомами  $U_0$ . Вважаючи, що енергія взаємодії між атомами може бути описана виразом

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

покажіть, що модуль всебічного стиснення кристала дорівнює

$$K = |U_0| \frac{mn}{9V_0}$$

- 1.11. Знайдіть стисливість кристала NaCl при 0 К, вважаючи що показник експоненти у співвідношенні Грюнайзена – Мі, що визначає величину сил відштовхування, дорівнює 9,4.
- 1.12. Визначте, у скільки разів зміниться стала ґратки, стисливість і енергія ґратки при збільшенні удвічі заряду йонів хлористого натрію, якщо вважати, що потенціал відштовхування залишається незмінним.
- 1.13. Замініти потенціал відштовхування  $\lambda r_{ij}^{-n}$  для йонів потенціалом виду  $Ae^{-\frac{r}{\rho}}$ . Визначте для цього випадку  $\rho$  для кристалів NaCl.
- 1.14. Використовуючи формулу Борна для енергії ґратки іонних кристалів, розрахуйте теоретичну міцність на розрив кристала NaCl.

- 1.15. Визначте значення сталої Маделунга для одновимірної ґратки, що складається з позитивних та негативних йонів, які чергуються.
- 1.16. Вважаючи міжатомну відстань  $r_0$  в кристалах Хе рівною  $4,35 \text{ \AA}$ , оцініть температуру плавлення цієї речовини.
- 1.17. Розрахуйте за допомогою методу Ев'єна значення сталої Маделунга для CsCl.
- 1.18. Вважаючи атоми жорсткими кулями, знайдіть залежність внутрішньої енергії від співвідношення радіусів додатних та від'ємних йонів у структурах типу NaCl, CsCl, та ZnS.
- 1.19. Як зміняться рівноважна відстань та енергія ґратки йонного кристала, якщо заряд йону збільшиться в  $m$  разів.
- 1.20. Знайдіть теоретичну міцність на розрив по відношенню до всебічного розтягнення кристала NaCl.
- 1.21. Відомо, що в кристалі, в якому зв'язки обумовлені силами Ван-дер-Ваальса, рівноважна міжатомна відстань  $r_0 = 1,50 \text{ \AA}$ , а енергія на 10 % менша, ніж у випадку, коли враховуються тільки сили притягання. Чому буде дорівнювати характерна довжина  $\rho$ , яка входить у вираз: 
$$U = -\frac{A}{r^6} + B e^{-\frac{r}{\rho}}$$
- 1.22. Відстань  $r_0$  між найближчими сусідами в КВґ дорівнює  $3,3 \text{ \AA}$ . КВґ має кристалічну ґратку типу NaCl (для якої  $\alpha = 1,748$ ). Стисливість цієї речовини  $\kappa = 6,8 \cdot 10^{-11} \frac{\text{М}^2}{\text{Н}}$ . Доведіть що характерна довжина потенціалу відштовхування  $\rho = 3,37 \cdot 10^{-11} \text{ м}$ , а енергія зв'язку, яка відліковується від енергії віддалених йонів,  $E_{\text{ривн}} = 6,85 \text{ еВ}$  на молекулу.
- 1.23. Розрахуйте коефіцієнт стисливості  $\kappa$  при  $0^\circ \text{C}$  і нульовому тиску для NaCl.
- 1.24. Розрахуйте модуль пружності для кристалу LiF, використовуючи експериментальні величини енергії зв'язку та відстані між найближчими сусідами.

- 1.25. Модель жорстких куль зручно застосувати до питання про рівноважну форму деяких простих молекул, що складаються з центрального йона типу А, оточеного декількома однаковими йонами типу В, пов'язаними з ним кулонівськими силами притягання. Відстань між центральним та оточуючими йонами типу В  $r_{AB} = r_A + r_B$ . Визначте рівноважні стійкі положення йонів у таких молекулах, якщо центральний іон оточений: а) 2; б) 3; в) 4 йонами.
- 1.26. При розрахунку сталості Маделунга за методом Ев'єна можна позбутися невизначеностей, якщо вибрати комірки Ев'єна так щоб на гранях не було ніяких зарядів. Знайдіть таку комірку, що містить „половину молекули в структурі CsCl. Обчисліть послідовні наближення сталості Маделунга для CsCl, підсумовуючи за йонами в концентричних ромбододекаедрах, що містить 4, 32 або 108 комірок Ев'єна.

## 2. Кристалічні структури твердих тіл

### Основні формули та визначення

#### Молярний об'єм кристала

$$V_{\mu} = \frac{\mu}{\rho}, \quad (2.1)$$

де  $\mu$  – молярна маса речовини;  $\rho$  – густина кристала.

#### Об'єм елементарної комірки в кристалах:

- ❖ при кубічній сингонії  $v = a^3$ ;
- ❖ при гексагональній сингонії  $v = \frac{\sqrt{3}a^2c}{2}$ ,

де  $a$  і  $c$  – параметри ґратки.

Якщо для гексагональної ґратки прийняти теоретичне значення  $c = \sqrt{\frac{8}{3}}a$ , то  $v = \sqrt{2}a^3$ .

**Кількість  $Z_\mu$  елементарних комірок в одному молі кристала**

$$Z_\mu = \frac{V_\mu}{v}, \quad \text{або} \quad Z_\mu = \frac{kN_A}{n_0}, \quad (2.2)$$

де  $k$  – кількість однакових атомів у хімічній формулі сполуки (наприклад, у кристалі AgBr кількість однакових атомів Ag чи Br у хімічній формулі сполуки дорівнює одиниці);  $N_A$  – стала Авогадро;

$n_0$  – кількість однакових атомів, що припадають на одну елементарну комірку.

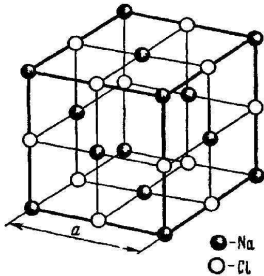


Рисунок 2.1

На рис. 2.1 наведено структуру NaCl; аналогічну структуру мають сполуки KBr, AgBr, MnO тощо.

**Кількість  $Z$  елементарних комірок в одиниці об'єму кристала**

$$Z = \frac{Z_\mu}{V_\mu}, \quad (2.3)$$

або в загальному випадку

$$Z = \rho \frac{k N_A}{n_0 \mu}; \quad (2.4)$$

Для кристала з однаковими атомами  $k = 1$ , тому

$$Z = \rho \frac{N_A}{n_0 \mu}. \quad (2.4, a)$$

## Параметр $a$ кубічної ґратки

$$a = \sqrt[3]{\frac{n_0 \mu}{k \rho N_A}}. \quad (2.5)$$

Відстань  $d$  між сусідніми атомами в кубічній ґратці:

- ❖ у гранецентрованій  $d = \frac{a}{\sqrt{2}}$ ;
- ❖ у об'ємноцентрованій  $d = \frac{\sqrt{3}}{2} a$ .

Для позначення вузлів, напрямків і площин у ґратці вводять спеціальні індекси.

**Індекси вузлів** записують у подвійних квадратних дужках  $[[mnp]]$ . Для від'ємних індексів над літерою ставиться риска, наприклад  $\bar{m}$  (рис. 2.2).

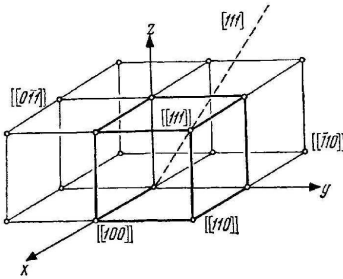


Рисунок 2.2

**Індекси напрямків** записують в одинарних квадратних дужках  $[mnp]$ . Індекс напрямку співпадає з індексом вузла, через який проходить пряма, якщо ця пряма одночасно проходить і через початок координат  $[[000]]$  (рис. 2.2).

Індекси напрямку задають не одну пряму в кристалі, а сімейство паралельних прямих. Зміна всіх індексів на протилежні за знаком  $[\bar{m}\bar{n}\bar{p}]$  означає той же напрямок у кристалі. Сукупність еквівалентних напрямків позначають  $\langle mnp \rangle$ . Наприклад, у кубічній системі координат сімейство еквівалентних напрямків  $\langle 110 \rangle$  включає напрямки  $[110]$ ,  $[\bar{1}10]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}0]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}0]$ ,  $[101]$ ,  $[\bar{1}01]$ ,  $[10\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}0\bar{1}]$ ,  $[011]$ ,  $[0\bar{1}1]$ ,  $[01\bar{1}]$  і  $[0\bar{1}\bar{1}]$ .

**Індекси площини (індекси Міллера)** записують у круглих дужках  $(hkl)$ . Зміна всіх індексів на протилежні за знаком  $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$  відповідає тому самому сімейству площин.

Індекси Міллера пов'язані з мінімальними відрізками, які відтинаються площиною на осях координат.

Для знаходження відрізків слід взяти протилежні за знаком значення індексів Міллера  $\left(\frac{1}{h}; \frac{1}{k}; \frac{1}{l}\right)$  і звести їх до найменшого цілого, кратного кожному з отриманих чисел. Отримані значення є найменшими відрізками, які відтинаються площиною  $(hkl)$  на осях координат.

Якщо відомі відрізки, які відтинаються площиною на осях координат, то аналогічно визначають індекси Міллера, які пропорційні напрямним косинусам вектора нормалі до даної площини. Тому індекси Міллера для деякого сімейства площин співпадають з індексами напрямків нормалі до цих площин.

Деякі площини, які розрізняють за індексами Міллера, є еквівалентними в кристалографічному і фізичному сенсі. Наприклад, еквівалентними в кубічній ґратці є грані куба  $(100)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$ ,  $(00\bar{1})$ . Кристалографічна еквівалентність їх проявляється в тому, що ці площини суміщаються одна з одною при повороті навколо однієї з осей координат на кут, кратний  $90^\circ$ . Фізична еквівалентність проявляється у тому, що всі ці площини мають однакову структуру в розміщенні вузлів ґратки, а отже, і однакові фізичні властивості. Сімейство еквівалентних площин позначається фігурними дужками  $\{hkl\}$ .

У кристалах гексагональної сингонії використовують індекси Міллера – Браве, які є видозміненими індексами Міллера відносно чотириосної системи координат. У базисній площині, додатково до осей  $x$  і  $y$ , які направлені відповідно уздовж  $\mathbf{a}$  і  $\mathbf{b}$ , уводять ще вісь  $u$ , направлену за вектором  $-(\mathbf{a} - \mathbf{b})$ . За головною віссю симетрії, спрямованою уздовж вектора  $\mathbf{c}$ , направлена вісь  $z$ . Сума перших трьох індексів Браве завжди дорівнює нулю.

Позначення напрямків за допомогою чотириосної системи координат складне і застосовується дуже рідко. Напрямки в гексагональній ґратці зазвичай позначають за допомогою трикомпонентної системи індексів.

**Міжплощинна відстань** для ґратки з довільною сингонією

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{1}{\xi^2} \left\{ \frac{h^2}{\left(\frac{a}{\sin \alpha}\right)^2} + \frac{k^2}{\left(\frac{b}{\sin \beta}\right)^2} + \frac{l^2}{\left(\frac{c}{\sin \gamma}\right)^2} \right\} + 2 \frac{hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + 2 \frac{lh}{ca} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) + 2 \frac{kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha), \quad (2.6)$$

де  $a$ ,  $b$ ,  $c$  – параметри ґратки;  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  – кути, а параметр  $\xi$  визначається формулою:

$$\xi^2 = 1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos^2 \alpha \cos^2 \beta \cos^2 \gamma. \quad (2.7)$$

Як окремий випадок, для кристалів кубічної сингонії

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}. \quad (2.8)$$

**Період ідентичності** – відстань між двома найближчими вузлами даного ряду

$$P_{id} = \sqrt{m^2 a^2 + n^2 b^2 + p^2 c^2 + 2mnab \cos \gamma + 2mpac \cos \beta + 2npbc \cos \alpha}, \quad (2.9)$$

де  $[mnp]$  – індекси вузлового ряду.

Для ортогональної ґратки період ідентичності вузлового ряду

$$P_{id} = \sqrt{m^2 a^2 + n^2 b^2 + p^2 c^2}, \quad (2.10)$$

для кубічної ґратки

$$P_{id} = a\sqrt{m^2 + n^2 + p^2}. \quad (2.11)$$

**Кут  $\varphi$  між прямими  $[m_1n_1p_1]$  та  $[m_2n_2p_2]$**  у кубічній гратці виражається формулою

$$\cos \varphi = \frac{m_1m_2 + n_1n_2 + p_1p_2}{\sqrt{m_1^2 + n_1^2 + p_1^2}\sqrt{m_2^2 + n_2^2 + p_2^2}}. \quad (2.12)$$

**Кут між площинами  $(h_1k_1l_1)$  і  $(h_2k_2l_2)$**  визначають за формулою

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}, \quad (2.13)$$

**а між прямою  $[mnp]$  і площиною  $(hkl)$**  – за формулою

$$\cos \varphi = \frac{hm + kn + lp}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}\sqrt{m^2 + n^2 + p^2}}. \quad (2.14)$$

Якщо в площині  $(hkl)$  лежать два напрямки  $[m_1n_1p_1]$  і  $[m_2n_2p_2]$ , то **індекси цієї площини** дорівнюють

$$\begin{cases} h = n_1p_2 - n_2p_1, \\ k = m_2p_1 - m_1p_2, \\ l = m_1n_2 - m_2n_1. \end{cases} \quad (2.15)$$

Аналогічно, **індекси напрямку  $[mnp]$** , вздовж якого перетинаються дві площини  $(h_1k_1l_1)$  і  $(h_2k_2l_2)$ , визначаються системою рівнянь

$$\begin{cases} m = k_1l_2 - k_2l_1, \\ n = h_2l_1 - h_1l_2, \\ p = h_1k_2 - h_2k_1. \end{cases} \quad (2.16)$$

Множина вузлових площин, паралельних деякому вузловому ряду, називається *зонною площиною*, а відповідний вузловий ряд – *віссю зони*. Площина  $(hkl)$  належить зоні з віссю, яка має індекси  $[mnp]$ . Індекси осі зони, якій належать дві площини  $(h_1k_1l_1)$  і  $(h_2k_2l_2)$ , також визначаються системою рівнянь (2.16).

**Умова зональності**, яка визначає зв'язок між індексами осі зони  $[mnp]$  й індексами  $(hkl)$  площин, які входять у дану зону, має вигляд

$$hm + kn + lp = 0. \quad (2.17)$$

Три вузлові площини  $(h_1k_1l_1)$ ,  $(h_2k_2l_2)$  і  $(h_3k_3l_3)$  належать до однієї зони, якщо виконується умова

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.18)$$

Повний набір елементів симетрії будь-якої елементарної фігури називають **групою симетрії** цієї фігури, яка визначає те чи інше фізичне явище в кристалах. Прийнято позначати площину симетрії літерою  $P$ , вісь симетрії  $k$ -го порядку –  $C_k$ , дзеркально-поворотну вісь  $k$ -го порядку –  $S_k$ ; центр симетрії (центр інверсії) –

$I$ . Порядок осі симетрії  $n = \frac{360^\circ}{\alpha}$ , де  $\alpha$  – кут найменшого повороту, який приводить фігуру до суміщення.

У багатьох випадках можна вважати, що кристал є системою твердих куль, які знаходяться в контакті. Мінімуму енергії буде відповідати така структура, в якій кулі найщільніше упаковані. **Щільність пакування** визначається відношенням об'єму частинок до об'єму елементарної комірки  $v$ . У випадку частинок одного сорту найкоротший період  $a$  і співвідношення між радіусом куль  $R$  і  $a$  визначається контактом сусідніх куль.

Кількість йонів протилежного знаку, що складають найближче оточення даного йону в кристалі, називається **координаційним**

**числом**  $K$ . Значення координаційного числа визначається величиною відношення радіусів йонів протилежного знаку  $\frac{r_A}{r_B}$ .

У структурному аналізі часто користуються поняттям **оберненої ґратки**, яка однозначно пов'язана з прямою ґраткою певними співвідношеннями. Якщо елементарна комірка прямої ґратки визначається векторами  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , а обернена ґратка векторами  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$ , то справедливі співвідношення

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}\mathbf{a}^*) &= (\mathbf{b}\mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}\mathbf{c}^*) = 1; \\ (\mathbf{a}^*\mathbf{b}) &= (\mathbf{b}^*\mathbf{c}) = (\mathbf{c}^*\mathbf{a}) = (\mathbf{a}^*\mathbf{c}) = 0. \end{aligned}$$

Це означає, що вектор  $\mathbf{a}^*$  нормальний до  $\mathbf{b}$  і  $\mathbf{c}$ , тобто нормальний до площини, в якій лежить  $\mathbf{b}$  і  $\mathbf{c}$ . Отже, для ортогональних ґраток можна записати:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \parallel \mathbf{a}^*, \quad \mathbf{b} \parallel \mathbf{b}^*, \quad \mathbf{c} \parallel \mathbf{c}^*, \\ |\mathbf{a}^*| = \frac{1}{|\mathbf{a}|}, \quad |\mathbf{b}^*| = \frac{1}{|\mathbf{b}|}, \quad |\mathbf{c}^*| = \frac{1}{|\mathbf{c}|}. \end{aligned}$$

У загальному випадку **вектори оберненої ґратки** пов'язані з векторами прямої ґратці кристала співвідношеннями

$$\mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{a(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{a(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \quad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{a(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \quad (2.19)$$

за якими можна побудувати обернену ґратку для кристала будь-якої кристалічної сингонії, якщо відомі сталі елементарної комірки прямої ґратки і навпаки. Самі ж параметри оберненої ґратки можна розрахувати за допомогою формул:

$$a^* = \frac{\sin \alpha}{a\xi}, \quad b^* = \frac{\sin \beta}{b\xi}, \quad c^* = \frac{\sin \gamma}{c\xi}, \quad (2.20)$$

де  $\xi$  визначається виразом (2.7).

Кутові параметри комірок прямої й оберненої ґраток пов'язані рівняннями

$$\begin{aligned}\cos \alpha^* &= \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, \\ \cos \beta^* &= \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{\sin \alpha \sin \gamma}, \\ \cos \gamma^* &= \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}.\end{aligned}\tag{2.21}$$

На рис. 2.3, *a* показано схематичну побудову двомірної оберненої ґратки з ортогональними, а на рис. 2.3, *б* – з косокутними осями. Отже, в оберненому просторі кожна площина кристалічної ґратки характеризується прямою в оберненому просторі, а переріз кристалографічних площин в оберненій ґратці відповідає перерізу двох прямих, тобто маємо точку з координатами  $hkl$ . Відстань між такими точками характеризується вектором оберненої ґратки  $\mathbf{H}_{hkl}$ , який в загальному випадку визначають так:

$$\mathbf{H}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*.$$

Обернена ґратка, кожна точка якої характеризується цим вектором, має деякі спеціальні властивості.

Наприклад, можемо одержати три скалярні добутки:

$$\mathbf{H}_{hkl} \frac{\mathbf{a}}{h} = 1, \quad \mathbf{H}_{hkl} \frac{\mathbf{b}}{k} = 1, \quad \mathbf{H}_{hkl} \frac{\mathbf{c}}{l} = 1$$

або

$$\mathbf{H}_{hkl} \left( \frac{\mathbf{a}}{h} - \frac{\mathbf{b}}{k} \right) = 0, \quad \mathbf{H}_{hkl} \left( \frac{\mathbf{a}}{h} - \frac{\mathbf{c}}{l} \right) = 0.\tag{2.22}$$

Це означає, що вектор  $\mathbf{H}_{hkl}$  перпендикулярний площині кристала, а отже, паралельний  $d_{hkl}$ . Тому можна записати:

$$|\mathbf{H}_{hkl}| d_{hkl} = 1, \quad |\mathbf{H}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}.\tag{2.23}$$

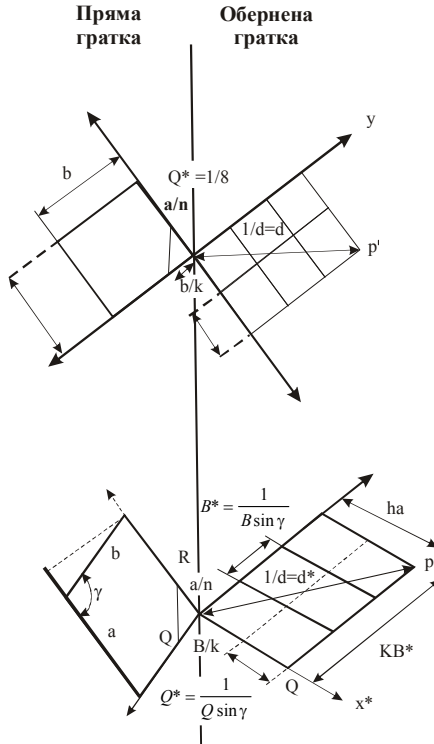


Рисунок 2.3

Абсолютне значення вектора  $|\mathbf{H}_{hkl}|$  позначають  $d_{hkl}^*$ . Тоді формула (2.23) набуває вигляду:

$$d_{hkl}^* = \frac{1}{d_{hkl}}$$

Для кубічного кристала

$$d_{hkl}^* = \frac{1}{d_{hkl}} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Основою для опису законів дифракційного розсіювання є умова Вульфа – Бреггів

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (2.24)$$

де  $n=1, 2, 3, \dots$  – ціле число, яке називають порядком дифракції,  $\lambda$  – довжина хвилі використовуваного випромінювання;  $d$  – відстань між сусідніми площинами родини кристалічних площин,  $\theta$  – кут ковзання падаючої та розсіяної хвиль відносно цих площин.

**Умови Лауе** для інтерференції

$$\begin{aligned} a(\cos \varphi - \cos \varphi_0) &= h\lambda, \\ b(\cos \psi - \cos \psi_0) &= k\lambda, \\ c(\cos \eta - \cos \eta_0) &= l\lambda \end{aligned} \quad (2.25)$$

пов'язують косинуси початкових кутів і косинуси кутів розсіяння.

**Структурний фактор розсіювання**

$$F_c = \sum_j f_j e^{i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)}, \quad (2.26)$$

де  $f_j$  – атомний фактор розсіювання;  $x_j, y_j, z_j$  – координати атомів у базисі.

Випромінювання рентгенівської трубки містить два спектри, які накладаються – суцільний і характеристичний.

**Короткохвильова межа** суцільного спектра

$$\lambda_0 = \frac{1,2395}{U}, \quad (2.27)$$

де  $\lambda_0$  виражають у нм;  $U$  – напруга на електродах трубки, кВ.

**Розподіл інтенсивності** за довжинами хвиль у спектрі задають формулою

$$J_\lambda = C_1 Z \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0 \lambda^3}, \quad (2.28)$$

де  $Z$  – атомний номер матеріалу аноду;  $C_1$  – коефіцієнт пропорційності.

**Основний закон послаблення** рентгенівських променів

$$J = J_0 e^{-\mu_l x}, \quad (2.29)$$

де  $J_0$  – інтенсивність падаючого пучка;  $J$  – інтенсивність пучка, що пройшов шар речовини товщиною  $x$ ;  $\mu_l$  – **лінійний коефіцієнт послаблення** випромінювання:

$$\mu_l = \mu_m \rho, \quad (2.30)$$

де  $\mu_m$  – **масовий коефіцієнт послаблення**. Якщо матеріал шару складається з декількох елементів, то

$$\mu_m = \sum_i w_i \mu_{mi}, \quad (2.31)$$

де  $w_i$  – вагова доля кожного елемента;  $\mu_{mi}$  – масовий коефіцієнт послаблення кожного елемента;

$$\mu_m = \tau_m + \sigma_m; \quad (2.32)$$

тут  $\sigma_m$  – масовий коефіцієнт розсіювання;  $\tau_m$  – масовий коефіцієнт поглинання,

$$\tau_m = \sum_i \tau_{mi}, \quad (2.33)$$

де  $\tau_{mi}$  – масовий коефіцієнт поглинання електронами  $i$ -го рівня ( $K$ -,  $L$ -,  $M$ -рівні тощо).

## Приклади розв'язування задач

**Приклад 2.1.** Визначте кількість  $n_0$  вузлів, що припадає на одну елементарну комірку в гранецентрованій кубічній ґратці.

### *Розв'язання*

Виділимо елементарну комірку в кубічній ґратці (рис. 2.4) і визначимо, скільком сусіднім елементарним коміркам належить той чи інший вузол виділеної комірки. У цій комірці є вузли двох

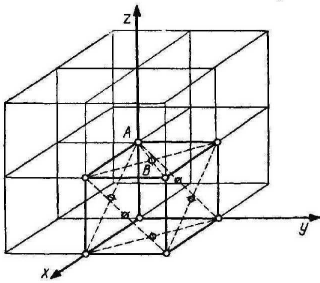


Рисунок 2.4

типів:  $A$  (містяться у вершинах куба) і  $B$  (містяться на гранях куба в точці перетину діагоналей).

Вузол  $A$  належить одночасно восьми елементарним коміркам. Отже, в дану комірку вузол  $A$  входить з часткою  $\frac{1}{8}$ . Вузол  $B$  входить одночасно лише у дві комірки й, отже, в дану комірку

вузол  $B$  входить з часткою  $\frac{1}{2}$ . Якщо врахувати, що кількість вузлів типу  $A$  в комірці дорівнює восьми, а кількість вузлів типу  $B$  дорівнює шести, тобто числу граней, то загальна кількість вузлів, що припадає на одну елементарну комірку в грацецентрованій гратці,

$$n_0 = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 1 + 3 = 4 \text{ вузли.}$$

Оскільки кількість вузлів дорівнює числу атомів, то у відповідній структурі на елементарну комірку припадає чотири атоми.

*Відповідь:* чотири вузли.

**Приклад 2.2.** Визначте параметр  $a$  гратки і відстань  $d$  між найближчими сусідніми атомами кристала кальцію (гратки грацецентрована кубічної сингонії). Густина

$$\rho \text{ кристала кальцію дорівнює } 1,55 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

*Розв'язання*

Параметр  $a$  кубічної гратки пов'язаний з об'ємом елементарної комірки співвідношенням  $v = a^3$ . З іншого боку, об'єм елементарної комірки дорівнює відношенню молярного об'єму до кількості

кості елементарних комірок в одному молі кристала:  $v = \frac{V_\mu}{Z_\mu}$ . Прирівнюючи праві частини наведених виразів для  $v$ , знайдемо

$$a^3 = \frac{V_\mu}{Z_\mu}. \quad (1)$$

Молярний об'єм кальцію  $V_\mu = \frac{\mu}{\rho}$ , де  $\rho$  – густина кальцію;  $\mu$  – його молярна маса. Кількість елементарних комірок в одному молі

$$Z_\mu = \frac{N_A}{n_0},$$

де  $n_0$  – кількість атомів, що припадає на одну комірку. Підставляючи в формулу (1) наведені вирази для  $V_\mu$  і  $Z_\mu$ , отримаємо:

$$a^3 = \frac{n_0 \mu}{\rho N_A}.$$

Звідси

$$a = \sqrt[3]{\frac{n_0 \mu}{k \rho N_A}}. \quad (2)$$

Підставляємо значення величин  $n$ ,  $\mu$ ,  $\rho$  і  $N_A$  у формулу (2) враховуючи, що  $k=1$ , а  $n_0=4$  (див. приклад 2.1). Виконавши розрахунки, маємо:

$$a = 556 \text{ пм}.$$

Відстань  $d$  між найближчими сусідніми атомами визначають з простих геометричних міркувань (див. з рис. 2.5):

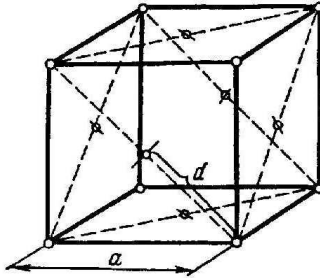


Рисунок 2.5

$$d = \frac{a}{\sqrt{2}}.$$

Підставляючи в цей вираз розраховане значення  $a$ , маємо:

$$d = 393 \text{ пм}.$$

*Відповідь:*  $a = 556 \text{ пм}$ ;  $d = 393 \text{ пм}$ .

**Приклад 2.3.** Відомо, що Алюміній кристалізується у гратці гранецентрованого куба з ребром  $a = 0,4041 \text{ нм}$ . Обчисліть концентрацію вільних електронів, припускаючи, що на кожний атом кристалічної ґратки припадає три електрона.

*Розв'язання*

У гратці гранецентрованого куба на одну елементарну комірку припадає чотири атоми. Тому кількість атомів в одиниці об'єму

$$n = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0,4041 \cdot 10^{-9})^3} = 6,06 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

Звідси концентрація електронів провідності

$$n_e = 3n = 3 \cdot 6,06 \cdot 10^{28} = 18,18 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

Відповідь:  $n_e = 18,18 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .

**Приклад 2.4.** Густина міді  $8885 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , атомна маса 63,57. Розрахуйте об'єм елементарної комірки для цього металу зі структурою ГЦК.

*Розв'язання*

Густина кристала дорівнює:

$$\rho = \frac{n_0 m_0}{v} = \frac{n_0 \mu}{v N_A}.$$

У ґратці гранецентрованого куба на одну елементарну комірку припадає чотири атоми ( $n_0 = 4$ ). Тоді

$$v = \frac{n_0 \mu}{\rho N_A} = \frac{4 \cdot 63,57 \cdot 10^{-3}}{8885 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}} = 4,75 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3.$$

Відповідь:  $v = 4,75 \cdot 10^{-29} \text{ м}^{-3}$ .

**Приклад 2.5.** Визначте індекси напрямку прямої, яка проходить через вузли  $[[100]]$  і  $[[001]]$  кубічної примітивної ґратки.

*Розв'язання*

Цю задачу можна розв'язати в два способи.

*1-й спосіб.* Зобразимо кубічну примітивну комірку, відмітимо на ній вузли з індексами  $[[100]]$  і  $[[001]]$ , і проведемо через ці вузли пряму (рис. 2.6, а).

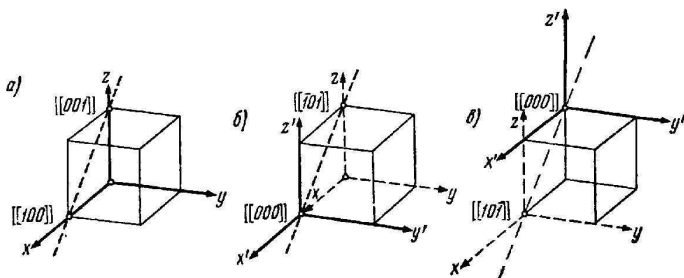


Рисунок 2.6

Якби пряма проходила через початок координат, то індекси її напрямку співпадали б з індексами вузла, найближчого до початку координат, через який проходить пряма.

Задана пряма не проходить через початок координат. Але цього можна досягти, якщо перенести початок координат в один із вузлів, через які проходить пряма.

Якщо перенести початок координат у вузол  $[[100]]$  (рис. 2.6, б), то вузол, який лежить на тій же прямій і найближчий до обраного початку координат, буде мати індекси  $[[101]]$ , а шуканий напрямок у цьому випадку буде визначатися індексами  $[[\bar{1}01]]$ .

Якщо ж початок координат перенести у вузол  $[[001]]$  (рис. 1.6, в), то відповідно індекси шуканого напрямку будуть  $[[10\bar{1}]]$ . Отже, індекси шуканого напрямку в кристалі будуть  $[[\bar{1}01]]$  або  $[[10\bar{1}]]$ .

*II-й спосіб.* Не завжди буває легко визначити, як зміняться індекси вузлів при перенесенні початку координат. Тому розглянемо аналітичний метод розв'язання.

Напишемо в загальному випадку рівняння прямої, яка проходить через дві точки у просторі, з індексами вузлів  $[m_1 n_1 p_1]$  і  $[m_2 n_2 p_2]$ :

$$\frac{x - m_1}{m_2 - m_1} = \frac{y - n_1}{n_2 - n_1} = \frac{z - p_1}{p_2 - p_1}. \quad (1)$$

Величини, які стоять у знаменнику, пропорційні напрямним косинусам прямої. Оскільки ці величини цілочисельні, то вони і будуть індексами напрямку.

Підставляючи у знаменник виразу (1) значення індексів вузлів  $m_1 = 1$ ,  $n_1 = 0$ ,  $p_1 = 0$  і  $m_2 = 0$ ,  $n_2 = 0$ ,  $p_2 = 1$ , отримаємо:

$$m_2 - m_1 = 0 - 1 = -1;$$

$$n_2 - n_1 = 0 - 0 = 0;$$

$$p_2 - p_1 = 1 - 0 = 1.$$

Отже, шукані індекси напрямку  $[[\bar{1}01]]$ .

Відповідь:  $[[\bar{1}01]]$ .

**Приклад 2.6.** Написати індекси Міллера для площини, яка містить вузли з індексами  $[[200]]$ ,  $[[010]]$  і  $[[001]]$ . Ґратка кубічна, примітивна.

*Розв'язання*

Можливі два способи розв'язання задачі.

*1-й спосіб* можна застосовувати у тих випадках, коли вузли, які належать площині, лежать одночасно і на осях координат (тобто відомі відрізки, які відтинаються площиною на осях координат).

У даному випадку вузли, які належать площині, лежать на осях координат, і відповідно відрізки (в одиницях сталої ґратки), які відтинаються на осях координат цією площиною, будуть 2, 1, 1 (рис. 2.7).

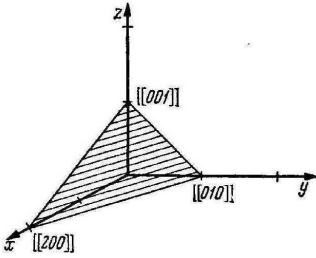


Рисунок 2.7

Відповідно до загального правила знаходження індексів Міллера запишемо обернені значення отриманих чисел  $\frac{1}{2}; \frac{1}{1}; \frac{1}{1}$  і приведемо їх до найменшого цілого кратного цих чисел. Для цього помножимо числа на два. Отримана сукупність значень у круглих дужках

і є шуканими індексами Міллера (1, 2, 2).

*II-й спосіб* (аналітичний) особливо зручний тоді, коли відомі вузли не лежать на осях координат. Цей спосіб є загальним і може застосовуватися в усіх випадках.

Відомо, що індекси Міллера дорівнюють найменшим цілочисельним коефіцієнтам при змінних у рівнянні площини. Тому розв'язання задачі визначення індексів Міллера зводиться, по суті, до відшукування рівняння площини.

Рівняння площини, яка проходить через три точки з координатами  $[[m_1 n_1 p_1]]$ ,  $[[m_2 n_2 p_2]]$ ,  $[[m_3 n_3 p_3]]$ , дається визначником третього порядку

$$\begin{vmatrix} x - m_1 & y - n_1 & z - p_1 \\ m_2 - m_1 & n_2 - n_1 & p_2 - p_1 \\ m_3 - m_1 & n_3 - n_1 & p_3 - p_1 \end{vmatrix} = 0.$$

У нашому випадку:  $m_1 = 2$ ,  $n_1 = 0$ ,  $p_1 = 0$ ;  $m_2 = 0$ ,  $n_2 = 1$ ,  $p_2 = 0$ ;  $m_3 = 0$ ,  $n_3 = 0$ ,  $p_3 = 0$ . Підставляючи значення індексів вузлів у визначник, отримаємо

$$\begin{vmatrix} x - 2 & y - 0 & z - 0 \\ 0 - 2 & 1 - 0 & 0 - 0 \\ 0 - 2 & 0 - 0 & 1 - 0 \end{vmatrix} = 0, \text{ або } \begin{vmatrix} x - 2 & y & z \\ -2 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0.$$

Розкладемо цей визначник за елементами першого рядка:

$$(x-2) \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - y \begin{vmatrix} -2 & 0 \\ -2 & 1 \end{vmatrix} + z \begin{vmatrix} -2 & 0 \\ -2 & 1 \end{vmatrix} = 0.$$

Розкриваючи визначник другого порядку, отримаємо:

$$(x-2)(+1) - y(-2) + z(+2) = 0, \text{ або } x + 2y + 2z = 2.$$

Виписавши коефіцієнти при  $x$ ,  $y$ ,  $z$  і заключивши їх у круглі дужки, отримаємо індекси Міллера  $(1, 2, 2)$ .

Ці значення індексів, як і слід очікувати, співпадають зі значеннями, отриманими першим способом.

*Відповідь:*  $(1, 2, 2)$ .

**Приклад 2.7.** Обчисліть, скільки атомів розміщується на  $1 \text{ мм}^2$  площин  $(100)$  і  $(111)$  у кристалічній ґратці Силіцію, якщо міжатомна відстань  $d = 0,2352 \text{ нм}$ .

*Розв'язання*

Силіцій кристалізується у ґратці типу алмазу, де міжатомна відстань дорівнює  $\frac{1}{4}$  великої діагоналі куба, тому період ґратки

$$a = \frac{4d}{\sqrt{3}} = \frac{4 \cdot 0,2352 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{3}} = 5,43 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

З рис. 2.8 випливає, що на площині  $(100)$  елементарної комірки розміщується два атоми силіцію (оскільки кожний кутовий атом одночасно належить чотирьом сусіднім коміркам):

$$n_0 = 4 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 2.$$

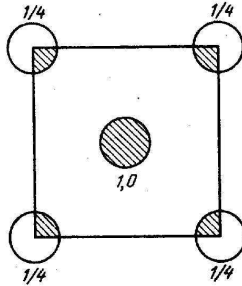


Рисунок 2.8

Звідси поверхнева густина атомів

$$N_s = \frac{n_0}{S} = \frac{n_0}{a^2} = \frac{2}{(5,43 \cdot 10^{-10})^2} = 6,78 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2} = 6,78 \cdot 10^{12} \text{ мм}^{-2}.$$

На рис. 2.9 показано розміщення атомів на площині (111).

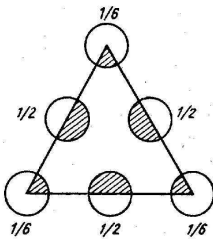


Рисунок 2.9

Рівнобічному трикутнику площею  $S = (a\sqrt{2})^2 \frac{\sqrt{3}}{4} = \frac{a^2\sqrt{3}}{2}$  належить у середньому два атоми:

$$n_0 = 3 \cdot \frac{1}{6} + 3 \cdot \frac{1}{2} = 2.$$

Поверхнева густина атомів у цій площині

$$N_s = \frac{2n_0}{a^2\sqrt{3}} = \frac{2 \cdot 2}{(5,43 \cdot 10^{-10})^2 \sqrt{3}} = 7,84 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2} = 7,84 \cdot 10^{12} \text{ мм}^{-2}.$$

Відповідь:  $6,78 \cdot 10^{12} \text{ мм}^{-2}$ ;  $7,84 \cdot 10^{12} \text{ мм}^{-2}$ .

**Приклад 2.8.** Покажіть, що кут між будь-якими двома лініями, які з'єднують вузол ґратки алмазу з його чотирма найближчими сусідами, дорівнює  $109^\circ 28'$ .

### Розв'язання

Умовну елементарну кубічну комірку для ґратки алмазу показано на рис. 2.10. Ґратка алмазу складається з двох взаємопроникних ГЦК ґраток, зсунутих уздовж просторової діагоналі кубічної

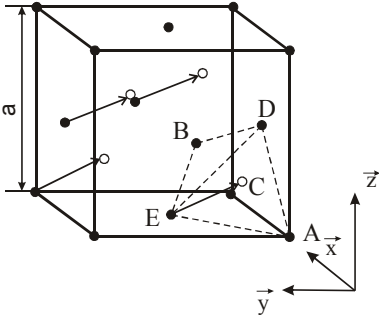


Рисунок 2.10

ґратки на чверть довжини цієї діагоналі. Вузли, які утворилися внаслідок такого зсуву, показано на рис. 2.10 світлими кружками (показано також вектори їх зміщення). Кожен вузол ґратки алмазу (наприклад, вузол С) має чотири найближчих сусіда, розміщених на вершинах тетраедра (вузли А, В, D, Е).

Визначимо кут між векторами  $\mathbf{CE}$  і  $\mathbf{CA}$ . З рис.2.10 визначимо координати вузлів:  $A(0;0;0)$ ,

$$C\left(\frac{a}{4}; \frac{a}{4}; \frac{a}{4}\right), E\left(\frac{a}{2}; \frac{a}{2}; 0\right).$$

Вектори  $\mathbf{CE}$  і  $\mathbf{CA}$  у проєкціях матимуть вигляд:

$$\mathbf{CE} = \left(\frac{a}{2} - \frac{a}{4}\right)\mathbf{i} + \left(\frac{a}{2} - \frac{a}{4}\right)\mathbf{j} + \left(0 - \frac{a}{4}\right)\mathbf{k} = \frac{a}{4}\mathbf{i} + \frac{a}{4}\mathbf{j} - \frac{a}{4}\mathbf{k};$$

$$|\mathbf{CE}| = \frac{a}{4}\sqrt{3};$$

$$\mathbf{CA} = \left(0 - \frac{a}{4}\right)\mathbf{i} + \left(0 - \frac{a}{4}\right)\mathbf{j} + \left(0 - \frac{a}{4}\right)\mathbf{k} = -\frac{a}{4}\mathbf{i} - \frac{a}{4}\mathbf{j} - \frac{a}{4}\mathbf{k};$$

$$|\mathbf{CA}| = \frac{a}{4}\sqrt{3}.$$

Для скалярного добутку векторів  $\mathbf{CA}$  і  $\mathbf{CE}$  маємо:

$$\mathbf{CA} \cdot \mathbf{CE} = |\mathbf{CA}||\mathbf{CE}|\cos(\widehat{\mathbf{CA}, \mathbf{CE}}) = -\frac{a^2}{16} - \frac{a^2}{16} + \frac{a^2}{16} = -\frac{a^2}{16};$$

звідки

$$\cos(\widehat{\mathbf{CA}, \mathbf{CE}}) = \frac{-\frac{a^2}{16}}{\frac{a}{4}\sqrt{3}\frac{a}{4}\sqrt{3}} = -\frac{1}{3}.$$

$$\text{Отже, } (\widehat{\mathbf{CA}, \mathbf{CE}}) = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 28'.$$

*Відповідь:*  $109^\circ 28'$ .

**Приклад 2.9.** Обчисліть період ідентичності  $P_{id}$  уздовж прямої  $[231]$  у ґратці NaCl, якщо густина кристала дорівнює  $2,17 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ . Ґратка ґранецентрована кубічна.

*Розв'язання*

Стала ґратки кристала NaCl згідно формули (2.5) дорівнює

$$a = \sqrt[3]{\frac{n_0 \mu}{k \rho N_A}}.$$

Для ґранецентрованої ґратки кількість вузлів в елементарній комірці  $n_0 = 4$ . Скориставшись таблицею Менделєєва, маємо:  $A_r(\text{Na}) = 23$ ,  $A_r(\text{Cl}) = 35$ . Отже,  $M_r(\text{NaCl}) = 58$ , звідки  $\mu = 58 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ . Підставивши числа у вираз для сталої ґратки, отримуємо:  $a = 5,62 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ .

Період ідентичності кристала вздовж прямої  $[231]$  визначають виразом (2.11):

$$P_{id} = a\sqrt{m^2 + n^2 + p^2} = 5,62 \cdot 10^{-10} \sqrt{2^2 + 3^2 + 1^2} = 13,3 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 1,33 \text{ нм}.$$

*Відповідь:*  $P_{id} = 1,33 \text{ нм}$ .

**Приклад 2.10.** Покажіть, що ґратка, обернена до простої гексагональної ґратки Браве, також є простою гексагональною ґраткою, причому для неї сталі ґратки дорівнюють  $\frac{2\pi}{c}$ ,  $\frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$  і вона повернута на  $30^\circ$  навколо осі  $c$  відносно прямої ґратки.

*Розв'язання*

Проста гексагональна ґратка Браве (рис. 2.11) являє собою складені „в ступку“ одна над одною двомірні трикутні ґратки.

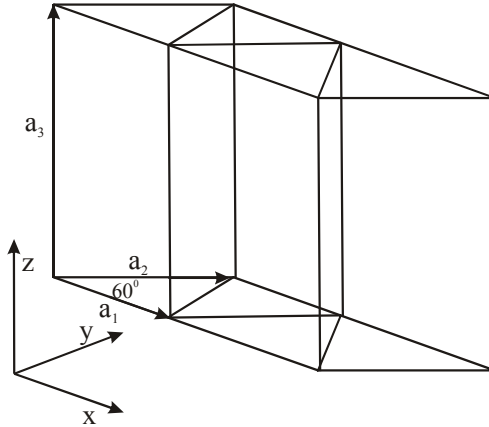


Рисунок 2.11

Основні її вектори мають вигляд:

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = c\mathbf{k}.$$

Визначимо основні вектори оберненої ґратки

$$1) \mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{a_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{\left(\frac{a}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\mathbf{j}\right) \times c\mathbf{k}}{a} = 2\pi \left(-\frac{1}{a\sqrt{3}}\mathbf{j} + \frac{1}{a}\mathbf{i}\right).$$

При знаходженні вектора  $\mathbf{b}_1$  враховано, що

$$v = \mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}.$$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \sqrt{\frac{1}{3a^2} + \frac{1}{a^2}} = 2\pi \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{a};$$

$$\cos(\hat{\mathbf{b}}_1, \hat{\mathbf{i}}) = \frac{b_{1x}}{|\mathbf{b}_1|} = \frac{2\pi \frac{1}{a}}{2\pi \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{a}} = \frac{\sqrt{3}}{2}; \quad \angle(\hat{\mathbf{b}}_1, \hat{\mathbf{i}}) = 30^\circ.$$

Аналогічно

$$\cos(\hat{\mathbf{b}}_1, \hat{\mathbf{j}}) = \frac{-2\pi \frac{1}{a\sqrt{3}}}{2\pi \frac{2}{a\sqrt{3}}} = -\frac{1}{2}; \quad \angle(\hat{\mathbf{b}}_1, \hat{\mathbf{j}}) = 120^\circ.$$

Отже, вектор  $\mathbf{b}_1$  лежить у площині  $(x, y)$  і створює з  $\mathbf{a}_1$  кут  $30^\circ$ , а з  $\mathbf{a}_2 - 90^\circ$ .

$$2) \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{ac\mathbf{j}}{v} = 2\pi \frac{2}{a\sqrt{3}} \mathbf{j};$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{2}{a\sqrt{3}} \mathbf{j} = \mathbf{b}_1.$$

Вектор  $\mathbf{b}_2$  направлений уздовж осі  $y$  і за модулем дорівнює  $\mathbf{b}_1$ .

$$3) \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi a^2 \sqrt{3}\mathbf{k}}{v};$$

$$b_3 = \frac{2\pi}{c}.$$

Вектор  $\mathbf{b}_3$  направлений паралельно осі  $z$  і за модулем дорівнює  $\frac{2\pi}{c}$ .

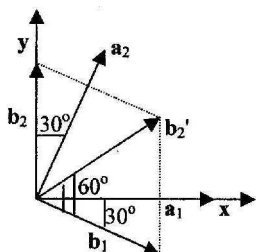


Рисунок 2.12

Орієнтація векторів  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  і  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  у площині  $xy$  зображена на рис. 2.12 (у довільному масштабі). Одержані напрямки  $\mathbf{b}_2$ ,  $\mathbf{b}_1$  не є оптимальними (зокрема, напрямок  $\mathbf{b}_2$ ). Більш зручно за другий основний вектор обрати

$\mathbf{b}'_2 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_1$ . Тоді обернена ґратка з основними векторами  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}'_2, \mathbf{b}_3$  є також простою гексагональною, повернутою за годинниковою стрілкою навколо осі  $c$  на  $30^\circ$  відносно прямої ґратки Браве.

$$b_1 = b'_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}, \quad b_3 = \frac{2\pi}{c}.$$

Відповідь:  $b_1 = b'_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}, \quad b_3 = \frac{2\pi}{c}$ .

**Приклад 2.11.** Нехай як примітивну елементарну комірку об'ємноцентрованої ґратки обрано тригональну елементарну комірку, побудовану на векторах:

$$\mathbf{a} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z); \quad \mathbf{b} = a_0(-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z);$$

$$\mathbf{c} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z),$$

де  $a_0 = \text{const}$ . Знайдіть довжини ребер тригональної елементарної комірки, кути між цими ребрами й об'єм елементарної комірки.

*Розв'язання*

Як відомо, для тригональної сингонії примітивну елементарну комірку характеризують лінійними параметрами  $a = b = c$  і ку-

тами  $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ . Довжини ребер елементарної комірки визначають за формулами:

$$a = |\mathbf{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}; \quad b = |\mathbf{b}| = \sqrt{b_x^2 + b_y^2 + b_z^2};$$

$$c = |\mathbf{c}| = \sqrt{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}.$$

Підставляючи дані з умови задачі, отримуємо довжини ребер:

$$a = b = c = \sqrt{\frac{3}{4}} a_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0.$$

Кут між векторами елементарної комірки визначають за допомогою формули скалярного добутку векторів. Наприклад,

$$(\mathbf{ab}) = |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos\gamma, \quad (\mathbf{bc}) = |\mathbf{b}||\mathbf{c}|\cos\alpha, \quad (\mathbf{ca}) = |\mathbf{c}||\mathbf{a}|\cos\beta.$$

Ґрунтуючись на даних умови задачі, отримуємо

$$\alpha = \beta = \gamma = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 110^\circ.$$

Об'єм елементарної комірки визначають за формулою:

$$v = (\mathbf{a}[\mathbf{bc}]).$$

Підставляючи дані з умови задачі, отримуємо

$$v = \frac{a_0^3}{2}.$$

Отримане співвідношення означає, що об'єм тригональної елементарної комірки складає половину об'єму елементарної комірки ОЦК ґратки з параметром комірки  $a_0$ . Пригадаємо, що кількість атомів, яка припадає на елементарну комірку, дорівнює одному у випадку примітивної елементарної комірки або двом у випадку ОЦК ґратки.

Відповідь:  $a = b = c = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 110^\circ$ ;  $v = \frac{a_0^3}{2}$ .

**Приклад 2.12.** Знайдіть відстань від площини з індексами Міллера  $(hkl)$  до початку координат у кристалі з кубічною кристалічною ґраткою і параметром елементарної комірки  $a$ .

*Розв'язання*

Вектори основних трансляцій кристалічної ґратки в оберненому просторі визначають формулами:

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{v} [bc]; \quad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{v} [ca]; \quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{v} [ab],$$

де  $v = (\mathbf{a} [bc])$  – об'єм елементарної комірки в прямому просторі.

Для кристала з кубічною елементарною коміркою  $v = a^3$ . Довжина вектора оберненої ґратки визначають так:

$$d_{hkl}^* = |\mathbf{H}_{hkl}| = \sqrt{(ha^*)^2 + (kb^*)^2 + (lc^*)^2} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}.$$

Переходячи в прямий простір, отримуємо для кубічної ґратки шукану відстань

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

Цю відстань також називають міжплощинною відстанню.

Відповідь:  $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ .

**Приклад 2.13.** Вектори основних трансляцій ОЦК ґратки мають вигляд

$$\mathbf{a} = \frac{a_0}{2} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z); \quad \mathbf{b} = \frac{a_0}{2} (-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z);$$

$$\mathbf{c} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z),$$

де  $a_0 = \text{const}$ . Визначте вектори основних трансляцій  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  в оберненому просторі.

*Розв'язання*

Вектори основних трансляцій кристалічної ґратки в оберненому просторі визначають формулами:

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{v}[\mathbf{bc}]; \quad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{v}[\mathbf{ca}]; \quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{v}[\mathbf{ab}],$$

Виконавши дії над векторами, визначимо  $v = \frac{a_0^3}{2}$  і

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a_0}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y); \quad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a_0}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z); \quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{a_0}(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x).$$

Зауважимо, що отримані вирази є векторами основних трансляцій ГЦК ґратки.

*Відповідь:*  $\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a_0}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y); \quad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a_0}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z); \quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{a_0}(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x).$

**Приклад 2.14.** Відстань між сусідніми площинами  $\{100\}$  у криста-

лі NaCl дорівнює  $2,82 \text{ \AA}$ . Для пучка рентгенівських променів, направлено на поверхню кристала, брегівське відбивання першого порядку спостерігається під кутом ковзання  $8^\circ 55'$ . Знайдіть довжину хвилі рентгенівського випромінювання і кут, який відповідає брегівському відбиванню другого порядку.

*Розв'язання*

Умову брегівського відбивання визначають виразом (2.24)

$$2d \sin \theta = n\lambda.$$

Для  $n = 1$  (відбивання першого порядку)

$$\lambda = 2d \sin \theta = 2 \cdot 2,820 \cdot \sin 8^\circ 55' = 0,842 \text{ \AA}.$$

Кут, що відповідає  $n = 2$ :

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} = \frac{2 \cdot 0,842}{2 \cdot 2,82} = 0,2985,$$

тобто  $\theta = 17^\circ 22'$ .

*Відповідь:*  $\lambda = 0,842 \text{ \AA}$ ;  $\theta = 17^\circ 22'$ .

**Приклад 2.15.** При дифракції рентгенівських променів (лінія  $\text{Cu}_{K_\alpha}$ ,  $\lambda = 1,542 \text{ \AA}$ ) на порошок речовини з кубічною симетрією спостерігалися лінії під такими бреггівськими кутами:  $12,3^\circ$ ;  $14,1^\circ$ ;  $20,2^\circ$ ;  $24,0^\circ$ ;  $25,1^\circ$ ;  $29,1^\circ$ ;  $32,2^\circ$ ;  $33,1^\circ$ . Визначте індекси Міллера, які відповідають цим лініям, розмір елементарної комірки і тип кристалічної ґратки.

*Розв'язання*

Відповідно до умови Вульфа – Бреггів (2.24) маємо:

$$\sin^2 \theta = \left( \frac{n\lambda}{2d} \right)^2 = \left( \frac{n\lambda}{2a} \right)^2 = \left( \frac{\lambda}{2a} \right)^2 (h^2 + k^2 + l^2).$$

Значення  $(h^2 + k^2 + l^2)$  пропорційні  $\sin^2 \theta$ , що, в свою чергу, пропорційно 3; 4; 8; 11; 12; 16; 19 і 20 для вищевказаних восьми ліній. Відповідно, індекси Міллера бреггівських площин дорівнюють (111); (200); (220); (311); (222); (400), (331) і (420). Це відповідає гранецентрованій кубічній ґратці. Для площини (111) маємо

$$\sin^2 \theta = \sin^2 12,3^\circ = \left( \frac{\lambda}{2a} \right)^2 (1^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{3\lambda^2}{4a^2},$$

ЗВІДКИ

$$a = \frac{\sqrt{3}\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{\sqrt{3} \cdot 1,542}{2 \cdot \sin 12,3^\circ} = 6,3 \text{ \AA}.$$

Відповідь: (111); (200); (220); (311); (222); (400), (331) і (420) – гранецентрована кубічна;  $a = 6,3 \text{ \AA}$ .

**Приклад 2.16.** Довжина хвилі характеристичного рентгенівського випромінення з мідного аноду дорівнює  $1,537 \text{ \AA}$ . Ці промені при попаданні на кристал викликають дифракцію від площин (111) під брегівським кутом  $19,2^\circ$ . Алюміній має ГЦК структуру, густину  $2,699 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$  і атомну масу  $A_r = 26,98$ . За цими даними розрахувати число Авогадро.

*Розв'язання*

На рис. 2.13 зображена умовна елементарна комірка ГЦК ґратки Алюмінію. ГЦК структуру можна розглядати як тришарове щільне пакування ...АВСАВС.... Напрямок, в якому здійснюється щільне пакування шарів, співпадає з просторовою діагоналлю куба [111]. З рис. 2.13 видно, що просторову діагональ куба поділено площинами А, В, С і А на три рівні частини:

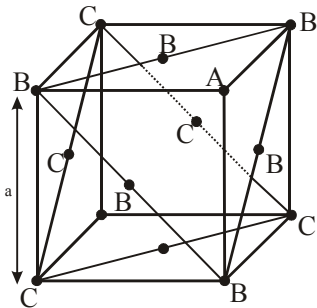


Рисунок 2.13

$$d = \frac{a\sqrt{3}}{3}. \quad (1)$$

За формулою Вульфа – Бреггів (2.24) при дифракції рентгенівських променів на кристалічній ґратці дифракційні максимуми

спостерігатимуться в напрямках, для яких виконується співвідношення (див. рис. 2.14):

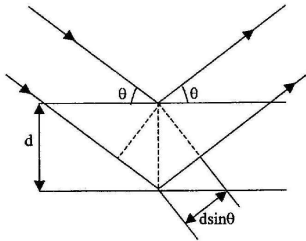


Рисунок 2.14

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (2)$$

де  $n$  – ціле число,  $\lambda$  – довжина хвилі падаючих променів,  $d$  – відстань між найближчими атомними площинами,  $\theta$  – кут падіння (відрахований від атомної площини).

Для кількості атомів в одиниці об'єму запишемо

$$n = \frac{\rho}{\mu} N_A, \quad (3)$$

де  $\rho$  – густина;  $\mu$  – молярна маса. З останнього виразу для числа Авогадро маємо:

$$N_A = n \frac{\mu}{\rho}. \quad (4)$$

Нехай  $n_0$  – кількість атомів в одній умовній елементарній комірці;  $v_0$  – об'єм умовної елементарної комірки. Тоді  $\frac{1}{v_0}$  – чис-

ло умовних елементарних комірок у  $1 \text{ м}^3$ ,  $n = n_0 \frac{1}{v_0}$  – кількість атомів у  $1 \text{ м}^3$ . Кількість атомів в умовній елементарній комірці для ГЦК структури  $n_0 = 4$ . Об'єм умовної елементарної комірки  $v = a^3$ , де  $a$  – стала ґратки.

Сталу ґратки  $a$  визначаємо за результатами експерименту з дифракції рентгенівських променів.

Підставляючи в формулу (2) значення  $d$  з формули (1)

$$2 \cdot \frac{a\sqrt{3}}{3} \sin \theta = n\lambda,$$

для  $n=1$  маємо:

$$a = \frac{\sqrt{3}\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{\sqrt{3} \cdot 1,537 \cdot 10^{-10}}{2 \sin 19,2^\circ} = 4,05 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Отже,

$$N_A = n_0 \frac{1}{a^3} \frac{\mu}{\rho} = 4 \cdot \frac{1}{(4,05 \cdot 10^{-10})^3} \cdot \frac{26,98 \cdot 10^{-3}}{2,699 \cdot 10^3} = 6,019 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}}.$$

Відповідь:  $N_A = 6,019 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ .

**Приклад 2.17.** Визначте розділення дублета  $\text{Cu}_{K_{\alpha_1}} - \text{Cu}_{K_{\alpha_2}}$  при кутах відбивання променів  $20^\circ$  і  $80^\circ$ , якщо зміні кута на  $0,75^\circ$  на півці відповідає 1 мм.

*Розв'язання*

З формули Вульфа – Бреггів (2.24)

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

диференціюванням отримаємо:

$$2d \cos \theta \delta\theta = n\delta\lambda,$$

або

$$\text{ctg } \theta \delta\theta = \frac{\delta\lambda}{\lambda}.$$

Для  $\text{Cu}_{K_{\alpha}}$  випромінення  $\frac{\delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{400}$ . Тому

$$\delta\theta_{20} = \frac{1}{400} \text{tg } 20^\circ \approx 0,091 \cdot 10^{-2} \text{ рад} \approx 0,052^\circ;$$

$$\delta\theta_{80} = \frac{1}{400} \text{tg } 80^\circ \approx 1,42 \cdot 10^{-2} \text{ рад} \approx 0,812^\circ$$

або при переході до лінійних розмірів

$$\delta l_{20} = \frac{0,052^\circ}{0,75^\circ} \cdot 1 = 0,0695 \text{ мм},$$

$$\delta l_{80} = \frac{0,812^\circ}{0,75^\circ} \cdot 1 = 1,0831 \text{ мм}.$$

*Відповідь:*  $\delta l_{20} = 0,0695 \text{ мм}$ ;  $\delta l_{80} = 1,0831 \text{ мм}$ .

**Приклад 2.18.** Визначте напрямні косинуси дифрагованого пучка при відбиванні від площини  $(hkl)$  при заданих напрямних косинусах для кубічної ґратки.

*Розв'язання*

Умови Лауе для інтерференції мають вигляд:

$$a(\cos \varphi - \cos \varphi_0) = h\lambda,$$

$$b(\cos \psi - \cos \psi_0) = k\lambda,$$

$$c(\cos \eta - \cos \eta_0) = l\lambda.$$

Тому  $\cos \varphi = \cos \varphi_0 + h \frac{\lambda}{a}$ ,  $\cos \psi = \cos \psi_0 + k \frac{\lambda}{b}$ ,  $\cos \eta = \cos \eta_0 + l \frac{\lambda}{c}$ ;

$$\cos^2 \varphi = \cos^2 \varphi_0 + \frac{h^2 \lambda^2}{a^2} + 2 \frac{h\lambda}{a} \cos \varphi_0;$$

$$\cos^2 \psi = \cos^2 \psi_0 + \frac{k^2 \lambda^2}{b^2} + 2 \frac{k\lambda}{b} \cos \psi_0;$$

$$\cos^2 \eta = \cos^2 \eta_0 + \frac{l^2 \lambda^2}{c^2} + 2 \frac{l\lambda}{c} \cos \eta_0.$$

Для кубічної ґратки  $a = b = c$ ,  $\cos^2 \varphi + \cos^2 \psi + \cos^2 \eta = 1$ . Відношення  $\frac{\lambda}{a}$  визначаємо з виразу:

$$1 = \cos^2 \varphi_0 + \cos^2 \psi_0 + \cos^2 \eta_0 + \frac{\lambda^2}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2) + 2 \frac{\lambda}{a} (h \cos \varphi_0 + k \cos \psi_0 + l \cos \eta_0).$$

Тоді шукані напрямні косинуси:

$$\cos \varphi = - \frac{2kh \cos \psi_0 + (h^2 - k^2 - l^2) \cos \varphi_0 + 2lh \cos \eta_0}{h^2 + k^2 + l^2};$$

$$\cos \psi = - \frac{2kh \cos \varphi_0 + (k^2 - h^2 - l^2) \cos \psi_0 + 2lk \cos \eta_0}{h^2 + k^2 + l^2};$$

$$\cos \eta = - \frac{2lh \cos \varphi_0 + (l^2 - h^2 - k^2) \cos \eta_0 + 2lk \cos \eta_0}{h^2 + k^2 + l^2}.$$

*Відповідь:* напрямні косинуси:

$$\cos \varphi = - \frac{2kh \cos \psi_0 + (h^2 - k^2 - l^2) \cos \varphi_0 + 2lh \cos \eta_0}{h^2 + k^2 + l^2};$$

$$\cos \psi = - \frac{2kh \cos \varphi_0 + (k^2 - h^2 - l^2) \cos \psi_0 + 2lk \cos \eta_0}{h^2 + k^2 + l^2};$$

$$\cos \eta = - \frac{2lh \cos \varphi_0 + (l^2 - h^2 - k^2) \cos \eta_0 + 2lk \cos \eta_0}{h^2 + k^2 + l^2}.$$

**Приклад 2.19.** При зйомці дебаєграми срібла при температурах  $18^\circ\text{C}$  і  $630^\circ\text{C}$  дифракційні лінії зафіксували на кутах: а)  $80^\circ 9'$ ; б)  $76^\circ 54'$ . Розрахуйте коефіцієнт термічного розширення срібла.

*Розв'язання*

Термічне розширення срібла практично ізотропне, тобто коефіцієнт термічного розширення  $\alpha_l$  можна розрахувати для будь-яких напрямків:

$$\alpha_l = \frac{1}{\Delta T} \frac{\Delta d}{d},$$

де  $\Delta T = T_2 - T_1$ ,  $\Delta d = d_2 - d_1$ ,  $d_1 = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_1}$ ,  $d_2 = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_2}$ . Тоді

$$\begin{aligned} \alpha_l &= \frac{\frac{\lambda}{2 \sin \theta_2} - \frac{\lambda}{2 \sin \theta_1}}{\frac{\lambda}{2 \sin \theta_1} (T_2 - T_1)} = \frac{\sin \theta_1}{T_2 - T_1} \left( \frac{1}{\sin \theta_2} - \frac{1}{\sin \theta_1} \right) = \\ &= \frac{\sin \theta_1 - \sin \theta_2}{(T_2 - T_1) \sin \theta_2} = \frac{\sin 80^\circ 9' - \sin 76^\circ 54'}{(903 - 291) \cdot \sin 76^\circ 54'} = 1,9 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\alpha_l = 1,9 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$ .

**Приклад 2.20.** Визначте товщину шару заліза ( $Z = 26$ ) та свинцю ( $Z = 82$ ), що послаблює у 100 разів інтенсивність рентгенівського випромінювання  $\text{Mo}_{K\alpha}$  ( $\lambda = 0,71 \text{ \AA}$ ;  $\rho_{\text{Fe}} = 7,86 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ ;  $\rho_{\text{Pb}} = 1,134 \cdot 10^4 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ ). Масові коефіцієнти послаблення випромінювання із вказаною довжиною хвилі складають: для Fe  $\mu_m = 3,91 \frac{\text{м}^2}{\text{кг}}$ , для Pb  $\mu_m = 13,0 \frac{\text{м}^2}{\text{кг}}$ .

*Розв'язання*

Послаблення інтенсивності рентгенівського випромінювання визначається співвідношенням

$$J = J_0 e^{-\mu_l x},$$

де лінійний коефіцієнт послаблення  $\mu_l = \mu_m \rho$ . Звідси

$$x = \frac{\ln \frac{J_0}{J}}{\mu_l} = \frac{\ln \frac{J_0}{J}}{\rho \mu_m}.$$

Для Fe :

$$x = \frac{\ln 100}{7,86 \cdot 10^3 \cdot 3,91} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ м};$$

для Pb :

$$x = \frac{\ln 100}{1,134 \cdot 10^4 \cdot 13,0} = 3,1 \cdot 10^{-5} \text{ м}.$$

Отже, товщини 100-кратного послаблення випромінювання з довжиною хвилі  $\lambda = 0,71 \text{ \AA}$  складають десяті і соті частки міліметру. При цьому Pb послаблює це випромінювання приблизно у 5 разів сильніше.

*Відповідь:*  $x_{\text{Fe}} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ м}; x_{\text{Pb}} = 3,1 \cdot 10^{-5} \text{ м}.$

**Приклад 2.21.** При прецизійному визначенні параметрів кристалічної ґратки  $\beta$ -стануму методом рентгенівської зйомки на  $\text{Cu}_{K\alpha}$ -випромінюванні ( $\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$ ) були отримані такі значення  $\theta$ :  $\theta_{503} = 79,017^\circ$  і  $\theta_{271} = 82,564^\circ$ . Знайдіть параметри ґратки.

*Розв'язання*

$\beta$ -станум належить до тетрагональної сингонії, тому його квадратична формула має вигляд:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2};$$

згідно із законом Вульфа – Бреггів (2.24)

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

і тому

$$\frac{4\sin^2 \theta}{\lambda^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}.$$

За умовою задачі  $h_1 = 5$ ;  $k_1 = 0$ ;  $l_1 = 3$  і  $h_2 = 2$ ;  $k_2 = 7$ ;  $l_2 = 1$ ,  
тому

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{4\sin^2 79,017^\circ}{(1,5405)^2} = \frac{25}{a^2} + \frac{9}{c^2}; \\ \frac{4\sin^2 82,564^\circ}{(1,5405)^2} = \frac{53}{a^2} + \frac{1}{c^2}, \end{array} \right. \quad \text{або} \quad \left\{ \begin{array}{l} 25x + 9y = 1,62435; \\ 53x + y = 1,65730, \end{array} \right.$$

де  $x \equiv \frac{1}{a^2}$ ,  $y \equiv \frac{1}{c^2}$ .

Розв'язуючи цю систему, отримуємо:  $a = 5,8316 \text{ \AA}$ ,  
 $c = 3,1811 \text{ \AA}$ .

*Відповідь:*  $a = 5,8316 \text{ \AA}$ ;  $c = 3,1811 \text{ \AA}$ .

**Приклад 2.22.** Визначте, які рентгенівські відбивання систематично гасяться у випадку гранецентрованої кубічної ґратки. Знайдіть спрощений вираз  $F^2$  для структури алмазу, визначте, які відбивання спостерігаються у цьому випадку. Ґратка алмазу кубічна, і положення атомів визначаються координатами:

$$0,0,0; \quad 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \quad \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \quad \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4};$$

$$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \quad \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}.$$

*Розв'язання*

Структурний фактор визначається виразом (2.26):

$$F_{hkl} = \sum_n f_n e^{2\pi i(hx_n + ky_n + lz_n)}.$$

Для ГЦК гратки:

$$F_c = f \left\{ 1 + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)} \right\},$$

де

$$e^{\pi i n} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } n - \text{парне;} \\ -1, & \text{якщо } n - \text{непарне.} \end{cases}$$

Якщо  $h, k, l$  різної парності, то дві з сум  $k+l, h+l, h+k$  непарні, а третя – парна. В цьому випадку  $F = 0$ . Якщо ж  $h, k, l$  – усі однакової парності, то  $F = 4f$ .

Для алмазу

$$F = f \left\{ 1 + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)} \right\} + f \left\{ e^{\frac{\pi i}{2}(h+k+l)} + e^{\frac{\pi i}{2}(h+3k+3l)} + e^{\frac{\pi i}{2}(3h+k+3l)} + e^{\frac{\pi i}{2}(3h+3k+l)} \right\},$$

звідки

$$F = f \left\{ 1 + e^{\frac{\pi i}{2}(h+k+l)} \right\} \left\{ 1 + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)} \right\}.$$

Якщо  $h, k, l$  різної парності, то вираз у других фігурних дужках дорівнює нулю і  $F = 0$ . Якщо  $h, k, l$  – усі однакової парності, то можливі два випадки:

а)  $h, k, l$  – усі непарні, тоді суми  $h+k+l$  – непарні і  $F = 4f(1 \pm i)$ , тому  $F^2 = FF^* = 32f^2$ ;

б)  $h, k, l$  – усі парні, тоді при непарних  $\frac{h+k+l}{2}$  перша дужка дорівнює нулю і  $F = 0$ , а при парних  $\frac{h+k+l}{2}$   $F = f \cdot 2 \cdot 4 = 8f$

Відповідь:  $F^2 = 32f^2$ .

## Задачі для самостійного розв'язування

### Елементарна комірка. Параметри ґратки

- 2.1. Скільки атомів припадає на одну елементарну комірку:
- 1) примітивної ґратки кубічної сингонії;
  - 2) об'ємноцентрованої ґратки ромбічної сингонії;
  - 3) гранецентрованої ґратки кубічної сингонії;
  - 4) базоцентрованої ґратки ромбічної сингонії;
  - 5) примітивної ґратки гексагональної сингонії;
  - 6) гексагональної структури із щільним пакуванням.
- 2.2. Визначте число елементарних комірок кристала об'ємом  $V = 1 \text{ м}^3$ .

№ варіанту	1	2	3	4	5	6	7
Кристал	CsCl	Cu	$\alpha$ -Co	Mo	Au	Y	Pt
Тип ґратки	ОЦК	ГЦК	ГЦК	ОЦК	ГЦК	ГЦУ	ГЦК
№ варіанту	8	9	10	11	12	13	14
Кристал	Ir	K	Cr	$\alpha$ -Tl	Cs	Pb	Re
Тип ґратки	ГЦК	ОЦК	ОЦК	ГЦУ	ОЦК	ГЦК	ГЦУ

- 2.3. Знайдіть густину  $\rho$  кристала Неону при  $T = 20 \text{ К}$ , якщо відомо, що ґратка гранецентрована кубічної сингонії. Стала  $a$  ґратки при тій самій температурі дорівнює  $0,452 \text{ нм}$ .
- 2.4. Знайдіть густину  $\rho$  кристала Стронцію, якщо відомо, що ґратка гранецентрована кубічної сингонії, а відстань  $d$  між найближчими сусідніми атомами дорівнює  $0,43 \text{ нм}$ .
- 2.5. Визначте відносну атомну масу  $A_r$  кристала, якщо відомо, що відстань  $d$  між найближчими сусідніми атомами дорівнює  $0,304 \text{ нм}$ . Ґратка об'ємноцентрована кубічної сингонії. Густина  $\rho$  кристала дорівнює  $534 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .

- 2.6. Знайдіть сталу  $a$  ґратки і відстань  $d$  між найближчими сусідніми атомами кристала: 1) Алюмінію (ґратка ґранецентрирована кубічної синґонії); 2) Вольфраму (ґратка об'ємноцентрирована кубічної синґонії).
- 2.7. Використовуючи метод упакування куль, знайдіть відношення  $\frac{c}{a}$  параметрів у гексагональній ґратці з найщільнішим пакуванням. Вкажіть причини відхилення цієї величини в реальному кристалі від розрахованого.
- 2.8. Визначте сталі  $a$  і  $c$  ґратки кристала Маґнію, яка має гексагональну структуру з щільним пакуванням. Густина  $\rho$  кристалічного маґнію дорівнює  $1,74 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .
- 2.9. Обчисліть сталу ґратки кристала берилію, який має гексагональну структуру із щільним пакуванням. Параметр  $a$  ґратки дорівнює 0,359 нм. Густина  $\rho$  кристала берилію дорівнює  $1,82 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .
- 2.10. Знайдіть густину  $\rho$  кристала Гелію при  $T = 2 \text{ К}$ , який має гексагональну структуру з щільним пакуванням. Параметр  $a$  ґратки, визначений при тій самій температурі, дорівнює 0,357 нм.
- 2.11. Молібден має об'ємноцентриовану кубічну ґратку. Обчисліть густину Молібдену і відстань між найближчими сусідніми атомами. Параметр ґратки дорівнює 0,315 нм, а молярна маса  $96 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ .
- 2.12. Визначте рентґенівську густину кремнію при  $T = 300 \text{ К}$ , якщо період ґратки дорівнює 0,357198 нм.
- 2.13. Обчисліть число Авоґадро, виходячи з даних: густина золота дорівнює  $19,3 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , Аурум кристалізується в ґранецентриованій кубічній системі, розмір елементарної комірки дорівнює 0,4078 нм.

- 2.14. Довжина ребра кубічної елементарної комірки металу, який містить два атоми, за даними рентгенографічних досліджень дорівнює  $3,16 \cdot 10^{-8}$  см. Густина металу  $19,35 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ . Обчисліть атомну масу елемента.
- 2.15. Знайдіть густину срібла, якщо відомо, що метал кристалізується в гранецентрованій кубічній формі, а відстань між найближчими сусідніми атомами дорівнює  $2,87 \text{ \AA}$ .
- 2.16. Сильвін (KCl) є кубічним кристалом з густиною  $1,98 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ . Знайдіть відстань між двома сусідніми атомами і мінімальну відстань між атомами одного сорту.
- 2.17. Комплексна сполука перхлорату срібла і бензолу  $\text{AgClO}_4 \cdot \text{C}_6\text{H}_6$  (молярна маса  $285 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ ) має ромбічну структуру з параметрами елементарної комірки  $a = 7,96$ ,  $b = 8,34$  і  $c = 11,7 \text{ \AA}$ . На кожну елементарну комірку припадає чотири молекули. Визначте густину кристалів.
- 2.18. Боргідрид літію  $\text{LiBH}_4$  у ромбічній структурі має чотири молекули на елементарну комірку. Параметри комірки  $a = 6,81$ ,  $b = 4,43$  і  $c = 7,17 \text{ \AA}$ . Розрахуйте густину цього кристалу.
- 2.19. Деяка органічна сполука кристалізується в ромбічній системі. Елементарна комірка має ребра  $12,05$ ,  $15,05$  і  $2,69 \text{ \AA}$ . На одну елементарну комірку припадає дві молекули. Густина кристала складає  $1,419 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ . Визначте молекулярну масу цієї сполуки.
- 2.20. Кількісною мірою щільності пакування в кристалічній структурі є ступінь пакування, який дорівнює відношенню об'єму, зайнятого атомами (твердими кулями) в елементарній комірці, до її об'єму. Обчисліть ступінь пакування для простої кубічної ґратки і гранецентрованої кубічної ґратки.
- 2.21. Йонні кристали добре описують моделлю куль, які торкаються. Обчисліть на базі цієї моделі період гранецентрованої ку-

бічної ґратки кухонної солі NaCl, виходячи з її густини  $\rho = 2,17 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$  і молярної маси  $\mu = 58,45 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ .

- 2.22. У деяких металах відбувається структурний перехід від об'ємноцентрованої до ґранецентрованої кубічної ґратки, що практично не супроводжується зміною об'єму тіла. Знайдіть відношення  $\frac{d_1}{d_2}$ , де  $d_1, d_2$  – найменші відстані між атомами в ґранецентрованій та об'ємноцентрованій ґратках.
- 2.23. Альфа-ферум має кубічну об'ємноцентровану структуру ( $a = 2,86 \text{ \AA}$ ), ґама-ферум – кубічну структуру з центрованими ґранями ( $a = 3,56 \text{ \AA}$ ). Як зміниться густина феруму при його переході з  $\alpha$  - у  $\gamma$  -модифікацію?
- 2.24. Метал 1 характеризується об'ємноцентрованою кубічною ґраткою з параметром  $a_1$ , а метал 2 – ґранецентрованою кубічною ґраткою з параметром  $a_2$ . Знайдіть відношення відстаней  $\frac{d_1}{d_2}$  між найближчими сусідніми атомами даних металів.
- 2.25. Відстань між найближчими сусідніми атомами в металах 1 і 2 дорівнює  $d_1$  і  $d_2$  відповідно. Метал 1 характеризується ґранецентрованою кубічною ґраткою, а метал 2 – об'ємноцентрованою кубічною ґраткою. Чому дорівнює відношення об'ємів елементарних комірок  $\frac{v_1}{v_2}$  даних металів?

### Індекси вузлів, напрямків і площин

- 2.26. Визначте індекси вузлів, відмічених на рис. 2.15 буквами  $A, B, C, D$ .

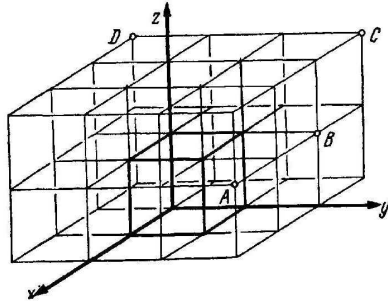


Рисунок 2.15

- 2.27. Напишіть індекси напрямку прямої, яка проходить у кубічній гратці через початок координат і вузол з кристалографічними індексами, у двох випадках: 1)  $[[242]]$ ; 2)  $[[112]]$ .
- 2.28. Визначте індекси напрямків прямих  $AB$ ,  $CD$ ,  $KL$ , зображених на рис. 2.16, а, б, в.

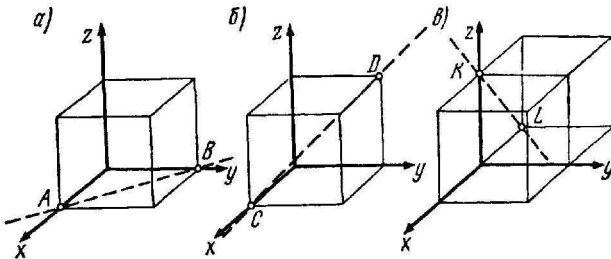


Рисунок 2.16

- 2.29. Напишіть індекси напрямку прямої, яка проходить через два вузла з кристалографічними індексами (у двох випадках): 1)  $[[123]]$  і  $[[321]]$ ; 2)  $[[121]]$  і  $[[201]]$ .
- 2.30. Доведіть, що напрямок  $[hkl]$  у кубічній кристалічній гратці нормальний до площини  $(hkl)$ .
- 2.31. Вкажіть кристалографічні напрямки в ромбічній гратці з розмірами елементарної комірки:  $a = 0,25$  нм;  $b = 0,58$  нм;  $c = 0,43$  нм:  $[2\bar{1}0]$ ,  $[112]$ ,  $[21\bar{1}]$ .

2.32. Обчисліть періоди ідентичності уздовж прямих  $[111]$  і  $[011]$  у гратці кристала, густина якого  $\rho$ . Гратка кубічного типу.

Таблиця 2.2 – Вихідні дані до задачі 2.31

№ варіанту	1	2	3	4	5	6	7
Кристал	AgBr	Ba	$\beta$ -Li	V	Au	Cs	Pt
Тип гратки	ГЦК	ОЦК	ГЦК	ОЦК	ГЦК	ОЦК	ГЦК
Густина, $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	6,5	3,59	0,53	6,11	19,32	1,873	21,45

№ варіанту	8	9	10	11	12	13	14
Кристал	Ir	Cr	Pb	Eu	Mo	Ni	Nb
Тип гратки	ГЦК	ОЦК	ГЦК	ОЦК	ОЦК	ГЦК	ОЦК
Густина, $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	22,6	7,19	11,3	5,243	10,2	8,9	8,57

№ варіанту	15	16	17	18	19	20	21
Кристал	Rb	Pd	$\alpha$ -Fe	Rh	Cu	Ta	W
Тип гратки	ОЦК	ГЦК	ОЦК	ГЦК	ГЦК	ОЦК	ОЦК
Густина, $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	1,53	12,0	7,87	12,41	8,96	16,65	19,3

2.33. Обчисліть період ідентичності  $P_{id}$  уздовж прямої  $[111]$  у гратці кристала NaCl, якщо густина  $\rho$  кристала дорівнює

$$2,17 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

2.34. Визначте період ідентичності уздовж напрямку  $[111]$  у гратках алмазу і сфалериту.

2.35. Визначте відношення періодів ідентичності уздовж напрямків  $[100]$ ,  $[110]$  і  $[111]$  для простої, об'ємно- і гранецентрованої кубічних граток.

2.36. Визначте, який з періодів ідентичності в примітивній кубічній гратці більший – період ідентичності уздовж прямої  $[111]$  або уздовж прямої  $[\bar{2}01]$ .

2.37. Обчисліть період ідентичності  $P_{id}$  уздовж прямої  $[mnp]$  у триклинній гратці з параметрами  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ .

№ варіанту	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$\alpha, ^\circ$	$\beta, ^\circ$	$\gamma, ^\circ$	$[mnp]$
1	10	17	20	90	90	110	$[111]$
2	5,5	6	10,5	100	91	103	$[100]$
3	5	7	10	100	90	104	$[\bar{2}01]$
4	6,5	7	9	95	95	105	$[110]$
5	5,3	6,4	10,1	102	90	100	$[011]$
6	7,2	10,6	13,5	90	95	105	$[13\bar{2}]$
7	6,2	15	14,5	92	97	100	$[101]$
8	8,4	16,5	14	93	97	99	$[111]$
9	9	15	19	99	90	105	$[121]$
10	8	14	18	90	100	107	$[120]$
11	7	15,5	20	91	96	103	$[101]$
12	8,6	16,1	19,5	94	101	106	$[201]$
13	7,6	18	15,5	97	98	104	$[\bar{1}01]$
14	11	13	17	100	95	108	$[111]$
15	10,1	15,2	17,5	91	101	102	$[201]$
16	10,3	16	19,7	96	100	104	$[\bar{1}0\bar{1}]$
17	8,9	14,2	17,7	90	107	110	$[\bar{1}\bar{2}1]$
18	6	12	15	100	95	105	$[102]$

19	7	13,5	19,2	92	98	103	$[1\bar{1}1]$
20	6,6	12	18,6	94	102	106	$[121]$
21	7,7	11	17,9	99	103	105	$[211]$
22	6	16	18	95	90	100	$[101]$
23	9,9	16,1	19,4	90	100	105	$[211]$
24	9,5	15,9	19,8	96	102	94	$[121]$
25	8,7	13	16,6	98	103	95	$[100]$

- 2.38. Площина проходить через вузли  $[[\bar{1}00]]$ ,  $[[010]]$ ,  $[[00\bar{1}]]$  кубічної ґратки. Напишіть індекси Міллера для цієї площини.
- 2.39. Визначте індекси Міллера для площини, яка проходить через вузли  $[[200]]$ ,  $[[010]]$ ,  $[[001]]$  примітивної кубічної ґратки.
- 2.40. Напишіть індекси Міллера для площин у примітивній кубічній ґратці, зображених на рис. 2.17,  $a - e$ .

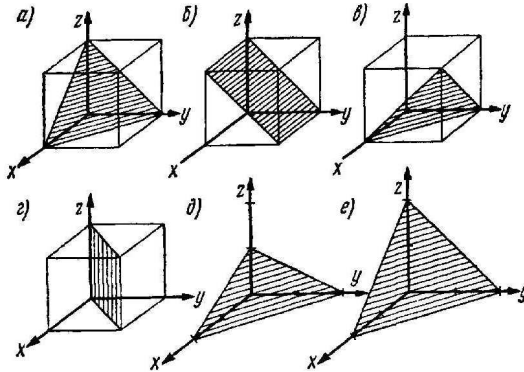


Рисунок 2.17

- 2.41. Систему площин у примітивній кубічній ґратці задано індексами  $(221)$ . Визначте найменші відрізки, які відтинає площина на осях координат, і зобразіть цю площину.

- 2.42. Напрямок нормалі до деякої площини в кубічній ґратці задано індексами  $[110]$ . Напишіть індекси Міллера для цієї площини і вкажіть найменші відрізки, які відтинає площина на осях.
- 2.43. Напишіть індекси Міллера для площин, які містять вузли з кристалграфічними індексами в двох випадках: 1)  $[[111]]$ ,  $[[\bar{1}\bar{1}2]]$ ,  $[[\bar{1}01]]$ ; 2)  $[[1\bar{1}\bar{1}]]$ ,  $[[010]]$ ,  $[[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]]$ . Визначте відрізки, які відтинаються цими площинами на осях координат.
- 2.44. Площина в кубічному кристалі перетинається з осями координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  у точках  $A(x,0,0)$ ,  $B(0,y,0)$  та  $C(0,0,z)$ . Визначте індекси Міллера даної площини, якщо:
- $x=0$ ;  $y=3$ ;  $z=1$ ;
  - $x=-2$ ;  $y=3$ ;  $z=1$ ;
  - $x=2$ ;  $y=3$ ;  $z=1$ ;
  - $x=-2$ ;  $y=0$ ;  $z=1$ .
- 2.45. Систему площин примітивної кубічної ґратки задано індексами  $(111)$ . Визначте відстань  $d$  між сусідніми площинами, якщо параметр  $a$  ґратки дорівнює 0,3 нм.
- 2.46. Визначте параметр  $a$  примітивної кубічної ґратки, якщо міжплощинна відстань  $d$  для системи площин, заданих індексами Міллера  $(212)$ , дорівнює 0,12 нм.
- 2.47. Три системи площин у примітивній кубічній ґратці задані індексами Міллера: а)  $(111)$ ; б)  $(110)$ ; в)  $(100)$ . Вкажіть, для якої системи міжплощинні відстані мінімальні, а для якої системи – максимальні. Визначте відношення міжплощинних відстаней  $d_{111} : d_{110} : d_{100}$ .
- 2.48. У триклинній ґратці кіаніту ( $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$ ) параметри  $a$ ,  $b$ ,  $c$  і кути  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  елементарної комірки відповідно дорівнюють 7,09; 7,72; 5,56 Å;  $90^\circ 55'$ ;  $101^\circ 2'$ ;  $105^\circ 44'$ . Визначте відстань між площинами  $(102)$ .

- 2.49. Обчисліть кут  $\varphi$  між двома напрямками в кубічній ґратці кристала, які задані кристалографічними індексами  $[110]$  і  $[111]$ .
- 2.50. Визначте кут між кристалографічними напрямками  $[102]$  і  $[\bar{2}13]$  у кристалі кубічної сингонії.
- 2.51. Обчисліть кут  $\varphi$  між нормаллями до площин (у кубічній ґратці), заданих індексами Міллера  $(111)$  і  $(1\bar{1}\bar{1})$ .
- 2.52. Дві площини в кубічній ґратці задані індексами Міллера  $(010)$  і  $(011)$ . Визначте кут  $\varphi$  між площинами.
- 2.53. Знайдіть кут між площинами, які характеризуються в кубічній кристалічній ґратці індексами Міллера  $(121)$  і  $(1\bar{2}\bar{1})$ .
- 2.54. Площини 1 і 2 задані в кубічній примітивній ґратці відповідно індексами Міллера  $(\bar{1}\bar{4}2)$  і  $(112)$ . Знайдіть кут між даними площинами.
- 2.55. Площини 1 і 2 задані в кубічній примітивній ґратці відповідно індексами Міллера  $(\bar{1}23)$  і  $(312)$ . Площини 3 і 4 характеризуються в тій самій ґратці відповідно індексами Міллера  $(431)$  і  $(\bar{1}01)$ . Визначте, кут між якими площинами менший – між 1 і 2 або між 3 і 4.
- 2.56. У кубічній ґратці напрямок прямої задано індексами  $[011]$ . Визначте кут  $\varphi$  між цією прямою і площиною  $(1\bar{1}\bar{1})$ .
- 2.57. Визначте в кубічній ґратці кут  $\varphi$  між прямою  $[111]$  і площиною  $(1\bar{1}\bar{1})$ .
- 2.58. У кристала ромбічного Сульфуру грань  $(hkl)$  лежить на перетині зон  $[\bar{2}30]$  і  $[0\bar{4}1]$ . Кути між гранями  $(100)$  і  $(hkl)$  –  $51^\circ 28'$ ; між гранями  $(010)$  і  $(hkl)$  –  $70^\circ 18'$ . Визначте індекси

грані  $(hkl)$ , кут між  $(001)$  і  $(hkl)$  й осьові відрізки  $a$  і  $c$ , якщо  $b = 12,94 \text{ \AA}$ .

- 2.59. Площину в кубічній гратці задано індексами Міллера  $(011)$ , напрямком прямої – індексами  $[111]$ . Визначте кут  $\phi$  між прямою і площиною.
- 2.60. Обчисліть кути між напрямками  $[001]$  і  $[111]$ ,  $[110]$  і  $[112]$  для кристала Mg.
- 2.61. Для кубічної сингонії напишіть індекси площини  $(hkl)$ , в якій знаходяться напрямки  $[011]$  і  $[102]$ .
- 2.62. Визначте, чи належать площини  $(111)$ ,  $(\bar{1}\bar{7}1)$ ,  $(2\bar{1}2)$  до однієї зони.
- 2.63. Визначте, чи належать площини  $(\bar{2}\bar{6}1)$ ,  $(4\bar{3}\bar{2})$ ,  $(\bar{4}\bar{2}2)$  до однієї зони.
- 2.64. Знайдіть серед перелічених п'ять площин такі, які належать до однієї зони:  $(111)$ ,  $(\bar{1}\bar{7}1)$ ,  $(312)$ ,  $(021)$ ,  $(3\bar{1}1)$ ,  $(515)$ ,  $(133)$ ,  $(113)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}0)$ ,  $(0\bar{1}1)$ .
- 2.65. Знайдіть три площини, які входять у дану зону або вісь зони  $[111]$ .

### Обернена гратка

- 2.66. Доведіть, що обернена гратка від оберненої гратки є пряма гратка.
- 2.67. Дано двомірну гратку, елементарною коміркою якої є ромб з гострим кутом  $60^\circ$ . Побудуйте обернену гратку і першу зону Бриллюена.
- 2.68. Елементарна комірка Магнію належить до гексагональної системи і має параметри  $a = 3,2 \text{ \AA}$  і  $c = 5,2 \text{ \AA}$ . Визначте вектори оберненої гратки.
- 2.69. Дві гратки є оберненими одна до одної. Покажіть, що добуток об'ємів їхніх елементарних комірок дорівнює одиниці.

- 2.70. Виразить кути між векторами оберненої ґратки через кути прямої ґратки.
- 2.71. Покажіть, що ґратка, обернена до кубічної об'ємноцентрованої, буде кубічною гранецентрованою.
- 2.72. Знайдіть вектори оберненої ґратки кристала кальциту ( $\text{CaCO}_3$ ), якщо  $a = 6,36 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 46^\circ 6'$ .
- 2.73. Знайдіть параметри й об'єм комірки оберненої ґратки, а також об'єм комірки кристала, якщо параметри ґратки:

№ варіанту	$a, \text{ \AA}$	$b, \text{ \AA}$	$c, \text{ \AA}$	$\alpha, ^\circ$	$\beta, ^\circ$	$\gamma, ^\circ$
1	10	17	20	90	90	110
2	5	7	10	100	90	104
3	6,64	8,31	11,18	64	46,3	77,4
4	5	6	11	99	91	105
5	5,5	6	10,5	100	91	103
6	6,5	7	9	95	95	105
7	6	7	9	93	97	104
8	7,5	10	15	90	90	100
9	8	12	16	93	93	99
10	7	9	11	90	95	100
11	5,3	6,4	10,1	102	90	100
12	5,7	7,7	9,3	100	95	97
13	6,4	9,5	12,1	85	105	110
14	7,2	10,6	13,5	90	95	105
15	5,1	5,8	11,1	95	100	105
16	5,9	7,3	8,8	94	90	105
17	6,8	7,7	10,3	105	95	90
18	9,3	17,1	19,5	93	97	100
19	8,6	16,5	20,4	95	98	104
20	9,8	17,3	20,1	100	100	95
21	10,3	16,4	19,8	102	97	105
22	9	16	21	95	104	108
23	9,5	17,5	20,2	91	95	101
24	7,8	15,1	20,6	104	93	96
25	11	16	20	92	94	105

- 2.74. Параметри комірки дорівнюють  $a = 5,2 \text{ \AA}$ ,  $b = 8,3 \text{ \AA}$ ,  $c = 12,1 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 76^\circ 50'$ ,  $\beta = 88^\circ 14'$ ,  $\gamma = 117^\circ 26'$ . Визначте параметри комірки оберненої ґратки.
- 2.75. Вектори основних трансляцій примітивної кубічної ґратки мають вигляд:  $\mathbf{a} = a_0 \mathbf{e}_x$ ;  $\mathbf{b} = a_0 \mathbf{e}_y$ ;  $\mathbf{c} = a_0 \mathbf{e}_z$ , де  $a_0 = \text{Const}$ . Визначте вектори основних трансляцій  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  в оберненому просторі.
- 2.76. Вектори основних трансляцій ґранецентрованої кубічної ґратки мають вигляд:  $\mathbf{a} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ ;  $\mathbf{b} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$ ;  $\mathbf{c} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z)$ , де  $a_0 = \text{Const}$ . Визначте об'єм елементарної комірки  $v^*$  і вектори основних трансляцій  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  в оберненому просторі.

### Рентгенівське випромінювання

- 2.77. Чому дорівнюватиме енергія протонів, для яких кристал зі сталою ґратки  $1 \text{ \AA}$  міг би відігравати роль дифракційної ґратки?
- 2.78. Металевий Натрій кристалізується в об'ємноцентровану ґратку. Покажіть, що серед рефлексів від його ґратки немає відбивань від площин куба.
- 2.79. Визначте правило згасання для кристалів з коміркою Браве примітивного типу.
- 2.80. Чому першими лініями на рентгенограмі об'ємноцентрованих та ґранецентрованих кубічних кристалів є лінії (110) і (111) відповідно, а не лінія (100)?
- 2.81. Визначте індекси перших десяти ліній об'ємноцентрованих та ґранецентрованих кубічних кристалів.
- 2.82. Знайдіть індекси перших п'яти ліній на рентгенограмі алмазу.
- 2.83. Вважаючи критичною величину  $10^4$  для ослаблення інтенсивності в берилієвому вікні рентгенівської трубки, визначте, чи

вийде з трубки  $W_{M_\alpha}$ -випромінення, що виникає при гальмуванні електронів у вольфрамовому аноді рентгенівської трубки, якщо товщина такого вікна дорівнює 500 мкм (або 50 мкм)? Масовий коефіцієнт ослаблення  $W_{M_\alpha}$ -випромінення

берилієм дорівнює  $\mu_m = 1,11 \cdot 10^{-2} \frac{M^2}{\text{кг}}$ , густина берилію

$$\rho = 1,85 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

- 2.84. Електронографічні дослідження гексагональної щільноупакованої фази  $W_2C$  показують, що найбільш інтенсивні лінії (002) і (110) мають міжплощинні відстані 0,235 і 0,177 нм. За цими даними оцініть значення параметрів  $a$  і  $c$  гексагональної щільноупакованої ґратки.
- 2.85. Рентгенівське випромінювання з частотою  $\nu = 1,1 \cdot 10^{18} \text{ с}^{-1}$ , яке падає на кубічний кристал [100], зазнає сильного брегівського розсіювання в напрямку [122]. Вважаючи, що кристал складається з однієї ГЦК ґратки і розсіювання, яке спостерігається, пов'язано з дифракцією 1-го порядку, знайдіть найменшу міжатомну відстань  $d$  у кристалі.
- 2.86. Визначте сталу ґратки кристала LiI, якщо відомо, що дзеркальне відбивання першого порядку рентгенівських променів з довжиною хвилі  $2,1 \text{ \AA}$  від природної грані цього кристала відбувається при значенні кута ковзання  $10^\circ 5'$ .
- 2.87. Кристали Купруму мають ГЦК ґратку. При кімнатній температурі ребро еквівалентного куба дорівнює  $3,608 \text{ \AA}$ . Монокристал Купруму вирізаний паралельно одній із граней елементарного куба. Нехай на поверхню кристала падає монохроматичний пучок рентгенівських променів із довжиною хвилі  $1,658 \text{ \AA}$ . Покажіть, що площини, паралельні поверхні, будуть відбивати рентгенівські промені, якщо кут між пучком і поверхнею кристала приблизно дорівнює  $27$  або  $67^\circ$ .

- 2.88. Для „фільтрації“ пучка повільних нейтронів з реактора від швидких нейтронів, які завжди присутні, він пропускається через блок пресованого графіту. При цьому всі нейтрони, яким відповідає довжина хвилі менше  $6,7 \text{ \AA}$ , зазнають інтерференційного відбивання. Визначте, якій максимальній температурі відповідає швидкість повільних нейтронів, які виходять з графіту, і чому дорівнює стала ґратки графіту.
- 2.89. Структурний фазовий перехід супроводжується зміною симетрії кристалічної ґратки. Вважаючи, що вихідною була проста кубічна ґратка, а при структурному переході кут між ребрами квадрату в основі ґратки змінюється на  $\theta = 3^\circ$  і він стає ромбом, визначте, як якісно зміниться спектр розсіяних на такій структурі нейтронів (від діагоналей). Яким має бути відносне кутове розрізнення детектора  $\left| \frac{\Delta\theta}{\theta} \right|$ , щоб помітити викривлення ґратки?
- 2.90. Визначте кут, під яким пучок рентгенівських променів з довжиною хвилі  $\lambda = 1,1 \text{ \AA}$  відбивається в максимальному порядку від системи кристалічних площин, відстань між якими  $d = 2,5 \text{ \AA}$ .
- 2.91. Визначте масовий коефіцієнт послаблення для  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  в  $\lambda$ - $\text{Co}_{K_\alpha}$ , якщо  $\left( \frac{\mu}{\rho} \right)_{\text{Fe}} = 59,5 \frac{\text{см}^2}{\text{г}}$ ;  $\left( \frac{\mu}{\rho} \right)_0 = 20,2 \frac{\text{см}^2}{\text{г}}$ .
- 2.92. Визначте лінійний коефіцієнт поглинання  $\text{Co}_{K_\alpha}$  випромінювання для сплаву з 30% мас. Cu і 70% мас. Al (густина сплаву  $\rho = 5,44 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ ).
- 2.93. Визначте лінійний коефіцієнт послаблення випромінювання від кобальтового аноду ( $\text{Co}_{K_\alpha}$ ) речовиною  $\text{Fe}_3\text{Co}_2\text{O}_4$ , якщо її густина  $\rho = 5,34 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ .

2.94. Алюміній ( $Fm\bar{3}m$ ) має ГЦК ґратку з періодом  $a = 4,049 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурні множники для відбиттів (200) та (400). За рахунок чого вони розрізняються? Чи будуть суттєвими відмінності у величині структурних множників для  $\text{Cu}_{K\alpha}$  і  $\text{Mo}_{K\alpha}$  випромінювання?

2.95.  $\text{Nb}_3\text{Ge}$  має ґратку  $\beta\text{-W}$  (A15) з кубічною елементарною коміркою, що має період  $a = 5,168 \text{ \AA}$ . Координати атомів базису:

$$\text{Ge} \left[ \left[ 000; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right] \right],$$

$$\text{Nb} \left[ \left[ \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}; \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}; 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; 0, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 0; \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, 0 \right] \right].$$

Розрахуйте структурну амплітуду для рефлексів (004) і (111).

2.96. Цирконій і цинк характеризуються ГЦУ структурою з координатами атомів базису  $\left[ \left[ 000; \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} \right] \right]$ . Розрахуйте структурний множник для відбиття (0002) обох речовин. Міжплщинні відстані  $d_{0002}$  складають  $2,56 \text{ \AA}$  (Zr) і  $2,46 \text{ \AA}$  (Zn). У чому причина відмінності у величині структурних множників?

2.97. Скандій характеризується поліморфізмом: за низьких температур він має ГЦК ґратку з періодом  $a = 4,543 \text{ \AA}$ , а при  $T > 293 \text{ K}$  – ГЦУ ґратку з періодами  $a = 3,3 \text{ \AA}$  і  $c = 5,24 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурну амплітуду і структурний множник для відбиттів (001), (002) і (101) обох ґраток. Поясніть отримані результати.

- 2.98. Кобальт характеризується поліморфізмом і за низьких температур має ГЦУ ґратку з періодами  $a = 2,51 \text{ \AA}$  і  $c = 4,105 \text{ \AA}$ , а при температурі  $T > 673 \text{ K}$  – ГЦК ґратку з періодом  $a = 3,55 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурну амплітуду і структурний множник для відбиттів (100), (002), (102) обох ґраток. Поясніть отримані результати.
- 2.99. Титан характеризується поліморфізмом: при низьких температурах він має ГЦУ ґратку з періодами  $a = 2,950 \text{ \AA}$  і  $c = 4,683 \text{ \AA}$ , а при  $T > 1153 \text{ K}$  – ОЦК ґратку з періодом  $a = 3,606 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурну амплітуду і структурний множник для відбиттів (001), (200) і (101) обох ґраток. Поясніть отримані результати.
- 2.100. За низької температури Ферум має ОЦК елементарну комірку (структурний тип  $A2$ ,  $Im\bar{3}m$ ,  $a = 2,8664 \text{ \AA}$ ). Розрахуйте величину структурного множника для відбиттів (100), (110) і (220) та поясніть причину їх відмінності, а також вкажіть, чи буде істотна різниця для  $Su_{K\alpha}$  і  $Fe_{K\alpha}$  випромінення.
- 2.101. Кальцій характеризується поліморфізмом: за низьких температур він має ОЦК елементарну комірку з періодом  $a = 5,56 \text{ \AA}$ , а при  $T > 723 \text{ K}$  переходить у ГЦУ з  $a = 3,94 \text{ \AA}$  і  $c = 6,46 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурну амплітуду і структурний множник інтенсивності для відбиттів (101) і (111) обох ґраток та поясніть отримані результати.
- 2.102. Лантан характеризується поліморфізмом: за низьких температур він має ГЦУ структуру з періодами ґратки  $a = 3,754 \text{ \AA}$  і  $c = 6,06 \text{ \AA}$ , а при температурі  $T > 293 \text{ K}$  – ГЦК структуру з періодом  $a = 5,30 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурну амплітуду і стру-

- ктурний множник інтенсивності для відбиттів (100), (002) і (101) обох ґраток та поясніть отримані результати.
- 2.103. Цирконій характеризується поліморфізмом: за низьких температур він має ГЦУ структуру з періодами ґратки  $a = 3,232 \text{ \AA}$  і  $c = 5,147 \text{ \AA}$ , а за температури  $T > 1113 \text{ K}$  – ОЦК структуру з періодом  $a = 3,62 \text{ \AA}$ . Розрахуйте структурну амплітуду і структурний множник інтенсивності для відбиттів (100), (002) і (101) обох ґраток та поясніть отримані результати.
- 2.104. Визначте при зйомці в  $\text{Cu}_{K_\alpha}$  випроміненні: а) кут дифракції для площини (220) кубічного кристалу з  $a = 4,0495 \text{ \AA}$ ; б) знайдіть максимальний кут дифракції та індекси відбиваючих площин ( $hkl$ ) при зйомці того ж кристалу.
- 2.105. Відбиття скількох порядків від площин (100) Si можна одержати при зйомці в  $\text{Cu}_{K_\alpha}$  випроміненні, якщо період ґратки кремнію  $a = 5,4307 \text{ \AA}$ , а  $\lambda_{\text{Cu}_{K_\alpha}} = 1,54273 \text{ \AA}$ ?
- 2.106. При зйомці кристалу гексагональної сингонії у випроміненні  $\text{Cu}_{K_\alpha}$  ( $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ ) отримані такі значення кутів дифракції  $2\theta$ , які дорівнюють: 16,15; 17,15; 18,30; 23,90; 28,80; 31,60; 35,10; 45,50°. Знайдіть значення періодів ґратки  $a$  і  $c$  з точністю до 0,01  $\text{ \AA}$ .
- 2.107. На дебаєграмі деякого кубічного кристала, знятої на випромінюванні  $\text{Cu}_{K_\alpha}$  ( $\lambda = 1,542 \text{ \AA}$ ), видно лінії під кутами Бреґга  $\theta$ : 12,3; 14,1; 20,2; 24,0; 25,1; 29,3; 32,2 і 33,1°. Проіндиціюйте ці лінії. Визначте, ця ґратка є примітивною, гранецентрованою чи об'ємноцентрованою, і обчисліть довжину ребра комірки. Густина цієї речовини дорівнює  $8,31 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ , молекуляр-

на маса 312. Визначте кількість атомів в одній кубічній елементарній комірці. Одиницю атомної маси прийміть за  $1,66 \cdot 10^{-27}$  кг.

- 2.108. Знайдіть формули розрахунку структурної амплітуди для модифікацій ZnS: а) сфалерит – кубічна комірka та б) вюрциту – гексагональна комірka. Кристалографічні координати атомів:

для ґратки сфалериту:

$$\text{Zn} - 000; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2};$$

$$\text{S} - \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}; \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}; \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4};$$

для ґратки вюрциту:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Zn} - \frac{1}{3} \frac{2}{3} 0; \frac{2}{3} \frac{1}{3} 0; \\ \text{S} - \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}; \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2} \end{array} \right\} + z, \text{ де } z = 0 \quad \text{і} \quad z = \frac{3}{8}.$$

- 2.109. Рентгеноґрама металевого порошку знята в рентгенівській камері Дебая – Шеррера на випроміненні  $\text{Mo}_{K\alpha}$  ( $\lambda = 0,7107 \text{ \AA}$ ).

Для перших шести ліній, що спостерігаються, дебаївські кути  $\theta$  виявилися рівними: 7,35; 7,82; 8,33; 10,7; 12,8; і 13,9°. Визначте тип ґратки та проіндицуйте ці лінії. Обчисліть атомну масу речовини, якщо її густина  $1,74 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ .

- 2.110. Знята рентгеноґрама обертання з тетрагонального монокристалу. Довжина хвилі рентгенівського випромінення дорівнює  $1,542 \text{ \AA}$ ; рентгенівський пучок перпендикулярний до осі обертання, що співпадає з віссю  $c$  цього кристалу. Радіус камери 3 см, довжина – 10 см. На нульовій шаровій лінії видно плями на відстанях 0,54; 0,75; 1,08; 1,19; 1,52; 1,63; 1,71 і 1,97 см від місця виходу прямого пучка, тобто від центра плівки. Відстань першої шарової лінії від нульової складає 0,66 см. Проіндицуйте плями, що спостерігаються, обчисліть параметри

комірки та відстань кожної лінії, яка спостерігається, від нульової лінії.

- 2.111. Розрахуйте кут Брегга  $\theta$  для лінії (300) на дебаєграмі піри-ту  $\text{FeS}_2$  (кубічна система,  $a = 5,42 \text{ \AA}$ ), знятої на випроміненні  $\text{Fe}_{K_\alpha}$ . Як пояснити той факт, що насправді на рентгенограмі лінія під таким кутом з'являється, тільки якщо випромінення не відфільтроване? (Довжини хвиль:  $\text{Fe}_{K_\alpha} - \lambda_1 = 1,937 \text{ \AA}$ ,  $\text{Fe}_{K_\beta} - \lambda_2 = 1,757 \text{ \AA}$ ).
- 2.112. При якому найменшому значенні кута Брегга буде розділено дублет  $\text{Cu}_{K_\alpha}$ , якщо дебаєграма деякої речовини знята в звичайній камері діаметром 6 см? Вважати, що ширина лінії дорівнює 0,03 см, а для того, щоб розділити дублети, необхідно вдвічі перевищити ширину розділення. (Довжини хвиль:  $\text{Cu}_{K_\alpha} - \lambda_1 = 1,5405 \text{ \AA}$ ,  $\text{Cu}_{K_\beta} - \lambda_2 = 1,5443 \text{ \AA}$ ).

### 3. Дефекти структури кристалічної будови твердих тіл

#### Основні формули і визначення

За звичайних умов кристалічні тіла складаються з великої кількості кристалів, які називають зернами. Ці зерна по-різному орієнтовані в просторі і утворюють полікристал. Поверхні розділу зерен називають **границями зерен**. Зерна в полікристалах не є „ідеальними“ кристалами. Реальні кристали мають різні види дефектів.

Існують точкові, лінійні, поверхневі й об'ємні структурні недосконалості кристалічної ґратки.

**Точковими дефектами** називають такі недосконалості кристалічної ґратки, розміри яких близькі до розмірів атома. До точко-

вих дефектів відносять вакансії (рис. 3.1, *a*), міжвузловинні і домішкові атоми (рис. 3.1, *б*, *в*).

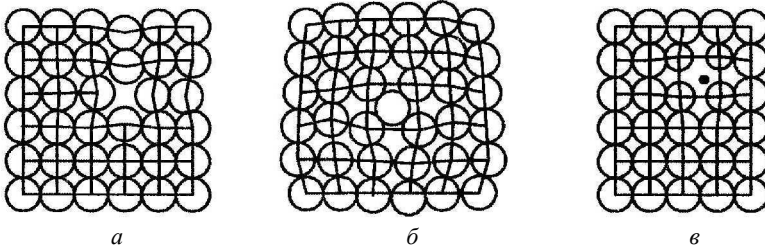


Рисунок 3.1 – Точкові дефекти в кристалічній ґратці: *a* – вакансія; *б* – міжвузловинний атом; *в* – домішковий атом впровадження

**Вакансії** – це незайняті атомами вузли кристалічної ґратки, а **міжвузловинні атоми** – це атоми, які вийшли з вузлів ґратки і розмістились між ними.

Домішкові атоми можуть або заміщувати атоми основного металу (домішки заміщення, рис. 3.2, *a*), або втілюватися у вільні місця ґратки (домішки впровадження, рис. 3.2, *б*).

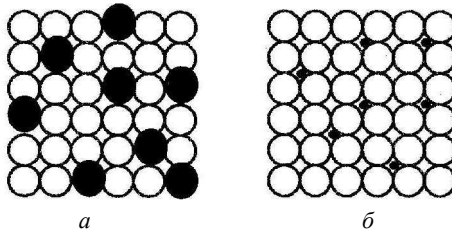


Рисунок 3.2. Схема атомно-кристалічної структури твердого розчину: *a* – заміщення; *б* – впровадження

Точкові дефекти навіть при незначній концентрації суттєво впливають на фізичні властивості кристалів. Наприклад, тисячні частки атомного відсотку деяких домішок можуть у  $10^5 - 10^6$  разів змінити питомий електроопір чистих напівпровідникових кристалів, хоча зміна їхніх механічних властивостей буде незначною.

**Рівноважну концентрацію вакансій** розраховують з виразу:

$$C_v = e^{\frac{S_0}{k_B}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}, \quad (3.1)$$

де  $C_v$  – атомна частка вакансій;  $S_0$  – коливальна ентропія;  $E_{0v}$  – енергія утворення вакансії.

У металах з ГЦК граткою член  $e^{\frac{S_0}{k_B}}$  близький до одиниці, тому при багатьох розрахунках користуються спрощеною формулою без врахування коливальної ентропії:

$$C_v = e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}. \quad (3.2)$$

Ця формула показує, що концентрація вакансій повинна сильно залежати від температури.

Аналогічно можна записати для **рівноважної концентрації міжвузловинних атомів**:

$$C_i = e^{-\frac{E_{0i}}{k_B T}}, \quad (3.3)$$

де  $C_i$  – атомна частка міжвузловинних атомів;  $E_{0i}$  – енергія утворення міжвузловинних атомів.

Атоми, які коливально рухаються, безперервно обмінюються енергією між собою. Через хаотичність теплового руху енергія нерівномірно розподілена між різними атомами. У деякий момент атом може одержати від сусідніх атомів такий надлишок енергії, якого буде достатньо для зайняття сусіднього положення в гратці, якщо воно буде вільним. Так здійснюється *міграція* (переміщення) атомів в об'ємі кристалів.

### Частота перескоків дефекту у нове положення в 1 с

$$\Gamma = \nu_0 e^{\frac{S_m}{k_B}} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} \quad (3.4)$$

де  $\nu_0$  – частота коливань атомів у напрямку перевальної точки, тобто „частота спроб“ переходу в сусідній вузол ( $\sim 10^{13} \text{ c}^{-1}$ );  $S_m$  і  $E_m$  – відповідно ентропія й енергія активації міграції вакансій.

У випадку вакансійного механізму дифузії коефіцієнт дифузії – це кількість атомів, які проходять через одиницю площі, отже

$$D = a^2 \Gamma C_v, \quad (3.5)$$

де  $a$  – період ґратки.

Підставляючи (3.3) в (3.4), отримаємо

$$D = \underbrace{a^2 v_0}_{D_0} e^{\frac{S_m}{k_B}} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}} = D_0 e^{-\frac{E_m + E_{0v}}{k_B T}} = D_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}}, \quad (3.6)$$

де  $E_a \equiv E_{0v} + E_m$  – енергія активації дифузії.

**Рівноважна концентрація дивакансій:**

$$C_{v_2} = A e^{-\frac{2E_0 - E_{зв}}{k_B T}}. \quad (3.7)$$

Унаслідок того, що  $E_0 > E_{зв}$ , відношення рівноважної концентрації дивакансій до концентрації моновакансій з підвищенням температури зростає.

Вакансії і міжвузловинні атоми можуть утворювати стійкі комплекси з домішковими атомами. Така взаємодія зумовлена, поперше, пружним притяганням, і по-друге, зменшенням енергії через перерозподіл електронів.

**Рівноважна концентрація комплексів „вакансія – домішковий атом“** визначається виразом

$$C_k = A C_d e^{-\frac{E_0 - E_{зв}}{k_B T}}, \quad (3.8)$$

де  $A$  – константа;  $C_d$  – концентрація домішки;  $E_0$  – енергія утворення моновакансії;  $E_{зв}$  – енергія зв'язку вакансії з домішковим атомом.

Чим вища температура і більша енергія зв'язку  $E_{зв}$ , тим вища рівноважна концентрація комплексів „вакансія – домішковий атом“.

Вираз для прямого визначення **концентрації вакансій**  $C_V$  із вимірювань (при нагріванні до заданої температури) зміни довжини зразка і періоду ґратки має вигляд:

$$C_V = 3 \left( \frac{\Delta L}{L} - \frac{\Delta a}{a} \right), \quad (3.9)$$

де  $\frac{\Delta a}{a}$  – відносне змінення періоду ґратки;  $\frac{\Delta L}{L}$  – відносне змінення довжини зразка.

Якщо відома рівноважна концентрація вакансій прирізних температур, легко обчислити енергію їх утворення.

**Приріст електроопору**  $\Delta \rho_v$ , обумовлений надлишковою концентрацією „заморожених“ при загартуванні вакансій

$$\Delta \rho_v = A e^{-\frac{E_0}{k_B T}}. \quad (3.10)$$

Лінійні дефекти мають незначні розміри у двох вимірах (їхні поперечні розміри не перевищують декількох міжатомних відстаней), а їхня довжина може досягати розмірів кристала. Ці недосконалості називають **дислокаціями**. Розрізняють крайову (лінійну) і гвинтову дислокації. Крайову дислокацію можна уявити (рис. 3.3) як край 3 півплощини (екстраплощини). Цей край (ядро дислокації) складається з ланцюжка атомів, розміщених перпендикулярно до поверхні рисунка, легко зміщується під дією незначних напружень, прикладених перпендикулярно до ядра дислокації, вправо (вліво), і може утворювати зв'язки з ланцюжком атомів 1.

При цьому сусідня атомна площина стає напівплощиною й утворює дислокацію вздовж ланцюжка атомів 2, а екстраплощина 3 стає площиною (дислокація перемістилась на одну міжатомну відстань). Необхідно пам'ятати, що сама екстраплощина не переміщується.

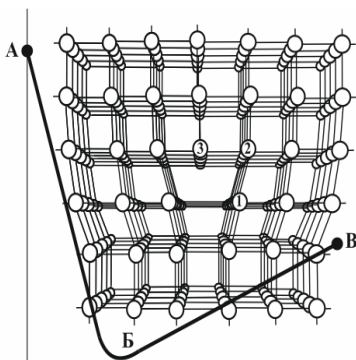


Рисунок 3.3 – Перспективне зображення розміщення атомів біля крайової дислокації. Крива АБВ відображає залежність міцності від густини дислокацій

приводити до зростання густини дислокацій до  $10^{10} \text{ см}^{-2}$ .

Лінійні дефекти дуже суттєво впливають як на механічні, так і фізичні властивості матеріалів. Залежність міцності кристалів від густини дислокацій виражена кривою АБВ на рис. 3.3. Теоретична міцність у бездефектного кристала (точка А, рис. 3.3), а найнижча – при густині дислокацій  $10^5 - 10^8$  (точка Б, рис. 3.3). В останньому випадку вони під дією незначних напружень легко переміщуються в кристалі (міцність кристала мінімальна). Зростання густини дислокацій викликає їх взаємне гальмування, і міцність матеріалу зростає (точка В, рис. 3.3).

Дислокація підвищує енергію кристала. Вона є центром поля внутрішніх напружень, які спадають зі збільшенням відстані від дислокації. Робота, виконана дотичними силами для створення зсуву  $b$ , дорівнює **енергії гвинтової дислокації**:

$$E_{\text{гв}} = \int \frac{\tau}{2} dsb, \quad (3.12)$$

де  $\tau$  – дотичні напруження, які викликають зсув на величину  $b$ .

Для визначення кількісного складу дислокацій в об'ємі металу вводять поняття **густини дислокацій**, під якою розуміють сумарну довжину всіх ліній дислокацій в одиниці об'єму металу:

$$\rho = \left( \frac{\sum L}{V} \right) \frac{1}{\text{см}^2}. \quad (3.11)$$

У відпалених литих металах густина дислокацій дорівнює  $10^6 \text{ см}^{-2}$ , а в стані металу, близькому до досконалого, прагне до нуля. Різні види обробок, наприклад, деформація, можуть

Для незначних зсувних деформацій справедливий закон Гука:  
 $\tau = \frac{Gb}{2\pi r}$  ( $G$  – модуль зсуву). Ці дотичні напруження діють на площинці  $ds = ldr$ . Тоді

$$E_{\text{гв}} = \int \frac{\tau}{2} dsb = \int \frac{Gb^2 l}{4\pi r} dr = \frac{Gb^2 l}{4\pi} \int_{r_0}^R \frac{dr}{r};$$

$$E_{\text{гв}} = \frac{Gb^2 l}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (3.13)$$

У цьому виразі  $G$  – модуль зсуву;  $\mathbf{b}$  – вектор Бюргерса дислокації;  $l$  – її довжина;  $r_0$  – радіус ядра дислокації (декілька між-атомних відстаней);  $R$  – відстань, на яку поширюється пружна деформація від дислокації.

Енергія дислокації та пов'язана з нею пружна енергію кристала, яка припадає на одиницю довжини дислокації, може бути записана у вигляді

$$E_{\text{гв}} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (3.13 a)$$

Енергія крайової дислокації

$$E_{\text{кр}} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\mu)} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (3.14)$$

де  $\mu$  – коефіцієнт Пуассона.

Прийнявши типове для металів значення  $\mu = \frac{1}{3}$ , отримаємо, що енергія крайової дислокації в 1,5 рази більше енергії гвинтової дислокації. Більшість дислокацій у реальних металах є змішаними.

Вектор Бюргерса змішаної дислокації можна розкласти на крайову і гвинтову компоненти:  $b_{\text{кр}} = b_{\text{зм}} \sin \varphi$ ,  $b_{\text{гв}} = b_{\text{зм}} \cos \varphi$ . Використовуючи формули (3.13 a) і (3.14), запишемо енергію змішаної дислокації як суму енергій крайової і гвинтової дислокацій із зазначеними векторами Бюргерса:

$$E_{\text{зм}} = E_{\text{кр}} + E_{\text{гв}} = \frac{Gb_{\text{зм}}^2 \sin^2 \varphi}{4\pi(1-\mu)} \ln \frac{R}{r_0} + \frac{Gb_{\text{зм}}^2 \cos^2 \varphi}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}.$$

Звідси одержуємо

$$E_{\text{зм}} = \frac{Gb_{\text{зм}}^2}{4\pi} \frac{1-\mu \cos^2 \varphi}{1-\mu} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (3.15)$$

При  $\varphi = 0^\circ$  цей вираз переходить у формулу (3.13 а), а при  $\varphi = 90^\circ$  – у формулу (3.14). Отже, залежно від кута нахилу вектора Бюргерса до лінії змішаної дислокації, її енергія є проміжною між значеннями енергії крайової і гвинтової дислокацій.

Енергія дислокації залежить від відстані  $R$ , на яку від неї поширюється пружна деформація. Якщо в кристалі є лише одна дислокація, то за  $R$  приймають найменшу відстань від дислокації до вільної поверхні. При більшій кількості дислокацій  $R$  вважають рівним половині середньої відстані між сусідніми дислокаціями. Енергія дислокації слабо залежить від величини  $R$ . Для найбільш типових інтервалів значень  $R$ ,  $r_0$  і  $\mu$  формули (3.13 а), (3.14) і (3.15) набувають вигляду, дуже зручного при оцінках енергії дислокації будь-якого типу:

$$E = \alpha Gb^2, \quad (3.16)$$

де  $\alpha = 0,5 \div 1,0$ .

Енергія дислокації залежить від вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$ , який характеризує ступінь викривлення ґратки, і від модуля зсуву  $G$ , який є характеристикою сил міжатомного зв'язку. Чим більше  $G$ , тим сильніше міжатомні сили протидіють зсувам атомів, тобто тим більше накопичується пружна енергія викривлення ґратки. Для різних твердих тіл енергія гвинтової дислокації знаходиться в межах від 3 до 10 еВ у розрахунку на одну міжатомну відстань уздовж лінії дислокації.

При збільшенні довжини дислокації її пружна енергія зростає. Тому лінія дислокації поводить себе як пружна нитка, яка завжди прагне випрямитися, щоб скоротити свою довжину. Енергію дис-

локації, яка приходить на одиницю її довжини, називають **лінійним натягом дислокації**.

$$T = \alpha Gb^2 . \quad (3.17)$$

У загальному випадку на дислокацію діють сили різного походження: зовнішні сили, прикладені до поверхні кристалу, внутрішні сили від дії поля напружень навколо сусідніх дислокацій, сторонніх атомів й інших недосконалостей.

Сила  $f$ , яка діє на одиницю довжини дислокації, дорівнює:

$$f = b\tau . \quad (3.18)$$

У полі напружень навколо крайової дислокації в точці з координатами  $x$  і  $y$  дотичні напруження в площині, паралельній площині ковзання, мають вигляд:

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi(1-\mu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} , \quad (3.19)$$

де  $x$  – координата в напрямку вектора Бюргерса;  $y$  – координата в напрямку, перпендикулярному площині ковзання.

З урахуванням виразів (3.18) – (3.19) для сили взаємодії паралельних крайових дислокацій одного знака можна записати:

$$f = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\mu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} . \quad (3.20)$$

Якщо однойменні дислокації знаходяться в одній площині ковзання, тобто  $y = 0$ , то формула (3.20) набуває вигляду:

$$f = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\mu)x} . \quad (3.21)$$

Для різнойменних дислокацій вирази (3.20) і (3.21) переписуються у вигляді:

$$f = -\frac{Gb^2}{2\pi(1-\mu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (3.20, a)$$

$$f = -\frac{Gb^2}{2\pi(1-\mu)x} \quad (3.21, a)$$

Всі основні типи дислокацій розглядалися нами на прикладі простої кубічної ґратки, в якій атоми знаходяться тільки у вершинах елементарної кубічної комірки. При цьому щоразу після пробігу дислокації в зоні зсуву цілком відновлювалась вихідна конфігурація атомів у просторі. Вектор Бюргерса такої дислокації є одним із трансляційних векторів ґратки, що характеризують *тотожну трансляцію* – перенесення ґратки таким чином, що кінцеве її положення не можна відрізнити від початкового.

Дислокації з вектором Бюргерса, який не є вектором тотожної трансляції, називають *неповними* або *частковими*.

Повна дислокація може розщеплюватися (дисоціювати) на часткові ( $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$ ); часткові дислокації можуть об'єднуватися в повну ( $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3$ ). Одні часткові дислокації можуть рекомбінувати, утворюючи інші часткові дислокації ( $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4$ ). Можливі й інші варіанти дислокаційних реакцій. Однак, у будь-якому випадку *сума векторів Бюргерса вихідних дислокацій повинна дорівнювати сумі векторів Бюргерса дислокацій, що утворюються у результаті реакції*.

Основне правило, якому підкоряються дислокаційні реакції, це *критерій Франка*: реакція можлива у тому випадку, якщо сума квадратів векторів Бюргерса вихідних дислокацій більше суми квадратів векторів Бюргерса дислокацій, які утворюються в результаті реакції. Легко зрозуміти, що критерій Франка (правило квадратів) ґрунтується на двох положеннях:

- 1) енергія дислокації пропорційна квадрату вектора Бюргерса;
- 2) реакція повинна приводити до зменшення енергії системи.

Пружні поля напружень дислокації і домішкового атома взаємодіють між собою, і домішковий атом відчуває з боку

дислокації силу притягання. Причину цього притягання легко зрозуміти, розглядаючи будову кристала в області крайової дислокації і розподіл пружних напружень навколо неї. З одного боку від площини ковзання розташована область гідростатичного (всебічного) стиснення, а з іншого боку — гідростатичного розтягнення. Атоми елемента, розчиненого способом впровадження, притягуються до області гідростатичного розтягнення і розміщуються в ній (під краєм екстраплощини). Тут їм легше розміститися, ніж у досконалій області ґратки, де такі атоми створюють поле значних напружень. Якщо атоми елемента, розчиненого заміщенням, за своїми розмірами більші атомів основного металу, то вони притягуються до області гідростатичного розтягнення. Якщо атоми елемента, розчиненого заміщенням, мають менший розмір, ніж атоми основного металу, вони притягуються до області гідростатичного стиснення і розміщуються у ній (над краєм екстраплощини). Таке їх розміщення дає вигравш в енергії.

Енергія зв'язку позитивної крайової дислокації з домішковим атомом (різниця між значеннями енергії домішкового атома у положеннях поблизу дислокації і на нескінченно великій відстані від неї):

$$E = \frac{GbR_0^3 \varepsilon \sin \theta}{r}, \quad (3.22)$$

де  $r$  і  $\theta$  – циліндричні координати домішкового атома відносно лінії дислокації ( $\theta = 0^\circ$  в напрямку вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$ );  $G$  – модуль зсуву;  $\varepsilon = \frac{R_d - R_0}{R_0}$ ;  $R_d$  – радіус домішкового атома;  $R_0$  – радіус атома матриці у випадку розчину заміщення, а у випадку розчину впровадження – радіус такої жорсткої кулі, яка при внесенні у те місце ґратки, де розташований домішковий атом, не викликає об'ємних спотворень.

Чим більший фактор розмірної невідповідності  $\varepsilon$ , тим більшою є енергія пружної взаємодії дислокації з домішковим атомом.

Енергія зв'язку крайової дислокації з домішковими атомами обумовлена не лише пружною (коттреллівською) взаємодією, але й електричною взаємодією.

Область розтягання поблизу краю екстраплощини через надлишок електронів має слабкий негативний заряд, а область стиску – позитивний заряд. Крайова і змішана дислокації є слабким електричним лінійним диполем. Тому існує електрична взаємодія між дислокацією і домішковими атомами, що мають заряд. Домішкові атоми впровадження значно сильніше притягуються до дислокації, ніж атоми заміщення.

Притягання атомів домішок, викликане різними причинами, призводить до „осадження“ цих атомів у вигляді ланцюжка уздовж краю екстраплощини. Такий ланцюжок сторонніх атомів називається *атмосферою Коттрелла*. Гвинтова дислокація не створює областей гідростатичного стиснення і розтягнення і тому не здатна утворювати такі атмосфери.

В умовах термодинамічної рівноваги за температури  $T$  у точці, для якої характерна енергія зв'язку  $E$ , концентрація домішкових атомів біля дислокації

$$C_E = C_0 e^{\frac{E}{k_B T}}, \quad (3.23)$$

де  $C_0$  – середня концентрація домішки у металі.

**Температура конденсації**  $T_{\text{конд}}$ , нижче якої коттреллівська атмосфера стає насиченою визначається виразом:

$$T_{\text{конд}} = \frac{E_{\text{max}}}{k_B \ln \frac{1}{C_0}}. \quad (3.24)$$

**Концентрація домішкових атомів**, розташованих у вигляді безупинних одноатомних ланцюжків уздовж ліній дислокацій, визначається як:

$$C = \rho a^2, \quad (3.25)$$

де  $\rho$  – густина дислокацій;  $a$  – міжатомна відстань.

Дислокації, що ковзають по кристалу, завжди гальмуються, часто аж до самої зупинки, під дією різноманітних факторів. З гальмуванням дислокацій прямо пов'язані найважливіші механічні властивості і, насамперед, міцність металів. Навіть у кристалі, вільному від інших дефектів, ковзання дислокацій перешкоджають сили „тертя“, обумовлені періодичним полем ґратки. Основну гальмуючу дію на ковзну дислокацію справляють інші дислокації, точкові і поверхневі дефекти, що у величезній кількості знаходяться в реальних металевих кристалах.

**Сила Пайєрлса** – сила, необхідна для того, щоб дислокація пододала потенціальний бар'єр, який розділяє два сусідніх її положення в енергетичних ямах:

$$f_{\Pi} = b\tau_{\Pi}, \quad (3.26)$$

де  $\tau_{\Pi}$  – **напруження Пайєрлса**:

$$\tau_{\Pi} = \frac{2G}{1-\mu} e^{-\frac{2\pi a}{1-\mu b}}, \quad (3.27)$$

де  $G$  – модуль пружності при зсуві;  $\mu$  – коефіцієнт Пуассона;  $a$  – відстань між сусідніми атомними площинами, в яких відбувається ковзання;  $b$  – міжатомна відстань у напрямку ковзання.

Чим більші сили міжатомного зв'язку, характеристикою яких є модуль зсуву, тим більше  $\tau_{\Pi}$ . Критичне напруження зменшується

зі зростанням відношення  $\frac{a}{b}$ . Для площин і напрямків з найщільнішим пакуванням це співвідношення є максимальним.

У показник ступеня виразу (3.27) входить важлива характеристика – *ширина дислокації*

$$\omega = \frac{a}{1-\mu}. \quad (3.28)$$

Отже, вираз (3.27) можна переписати у вигляді:

$$\tau_{\Pi} = \frac{2G}{1-\mu} e^{-\frac{2\pi\omega}{b}}. \quad (3.29)$$

У зв'язку з тим, що між сильно і слабо викривленими ділянками ґратки навколо лінії дислокації немає різкої границі, то поняття її ширини є умовним. Під *шириною дислокації* прийнято розуміти ширину області в площині ковзання й у напрямку ковзання, у якій зміщення атомів із рівноважних положень досконалої ґратки перевищують половину максимального зміщення атомів.

---

### Приклади розв'язування задач

**Приклад 3.1.** Оцініть енергію утворення вакансії в ГЦК-металі, якщо експериментально визначена рівноважна концентрація вакансій при температурі 927 °С дорівнює  $10^{-5}$ .

*Розв'язання*

За формулою (3.2) енергія утворення вакансії

$$E_{0v} = -k_B T \ln C_v.$$

Підставляючи чисельні дані, матимемо:

$$E_{0v} = -1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1200 \cdot \ln 10^{-5} = 5 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1200 \cdot \ln 10 \approx \\ \approx 200 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} = 1,1 \text{ еВ}.$$

*Відповідь:* 1,1 еВ.

**Приклад 3.2.** Для створення вакансій в Алюмінії потрібна енергія приблизно 0,75 еВ. Скільки існує вакансій при кімнатній температурі в стані термодинамічної рівноваги? При 550 °С? Для створення міжвузловинного дефекту в Алюмінії потрібна енергія приблизно 3 еВ. Визначте відношення  $\frac{n_i}{n_v}$  при кімнатній температурі; при 550 °С.

### Розв'язання

Концентрацію вакансій у стані термодинамічної рівноваги оцінимо за формулою (3.2):

$$C_v = e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}. \quad (1)$$

З іншого боку

$$C_v = \frac{n_v}{n_a}, \quad (2)$$

де  $n_v$  і  $n_a$  – відповідно концентрація вакансій і атомів.

Алюміній має ГЦК ґратку, тому

$$n_a = \frac{4}{a^3}, \quad (3)$$

де  $a$  – стала ґратки (для Алюмінію  $a = 4,05 \cdot 10^{-10}$  м). З формул (1) – (3) виходить:

$$n_v = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}. \quad (4)$$

Підставляючи числові значення величин, маємо для кімнатної температури

$$n_v = \frac{4}{(4,05 \cdot 10^{-10})^3} e^{-\frac{0,75 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}} \approx 1,6 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}.$$

Аналогічно знаходимо для 550 °С

$$n_v \approx 1,6 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}.$$

Для оцінки концентрації міжвузловинних атомів використаємо формулу (3.3). Тому аналогічно з формулами (1) – (3) для вакансій отримаємо

$$n_i = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{E_{0i}}{k_B T}}. \quad (5)$$

З формул (4) – (5) маємо

$$\frac{n_i}{n_v} = e^{\frac{E_{0v} - E_{0i}}{k_B T}}. \quad (6)$$

Для кімнатної температури маємо

$$\frac{n_i}{n_v} = e^{\frac{(0,75-3) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{23} \cdot 300}} \approx 1,7 \cdot 10^{-38}.$$

Аналогічно для температури 550 °С:

$$\frac{n_i}{n_v} \approx 1,71 \cdot 10^{-14}.$$

Відповідь:  $n_v \approx 1,6 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ ;  $n_v \approx 1,6 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$ ;  $\frac{n_i}{n_v} \approx 1,7 \cdot 10^{-38}$ ;

$$\frac{n_i}{n_v} \approx 1,71 \cdot 10^{-14}.$$

**Приклад 3.3.** Енергія зв'язку атомів Силіцію і Аргентуму з вакансіями в Алюмінії відповідно дорівнює 0,07 і 0,01 еВ. Нехтуючи різницею в ентропійному факторі, визначте відношення концентрацій комплексів „вакансія – Силіцій“ і „вакансія – Аргентум“ в Алюмінії при 27 °С і однакової концентрації цих домішок у розведеному розчині.

*Розв'язання*

Концентрація комплексу „вакансія – домішковий атом“ визначається виразом (3.8). Отже, записуючи його для комплексу „вакансія – силіцій“, маємо:

$$C_{\text{к}_{v-\text{Si}}} = AC_{\text{Si}} e^{\frac{E_0 - E_{\text{зв } v-\text{Si}}}{k_B T}}, \quad (1)$$

для комплексу „вакансія – аргентум“:

$$C_{K_{v-Ag}} = AC_{Ag} e^{-\frac{E_0 - E_{зв\ v-Ag}}{k_B T}}, \quad (2)$$

і поділивши вираз (1) на (2), отримаємо:

$$\begin{aligned} \frac{C_{K_{v-Si}}}{C_{K_{v-Ag}}} &= \frac{AC_{Si} e^{-\frac{E_0 - E_{зв\ v-Si}}{k_B T}}}{AC_{Ag} e^{-\frac{E_0 - E_{зв\ v-Ag}}{k_B T}}} = e^{-\frac{E_0 - E_{зв\ v-Si}}{k_B T} - \left(-\frac{E_0 - E_{зв\ v-Ag}}{k_B T}\right)} = e^{\frac{E_{зв\ v-Ag} - E_{зв\ v-Si}}{k_B T}} = \\ &= e^{\frac{(0,01-0,07) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}} = 2,3. \end{aligned}$$

*Відповідь:* 2,3.

**Приклад 3.4.** Розрахуйте, наскільки атом має розсунути своїх сусідів при розміщенні його в міжвузловинному просторі гранецентрованої кубічної ґратки.

*Розв'язання*

Якщо довжина ребра куба ГЦК ґратки дорівнює  $a$ , то відстань від центра міжвузловини до найближчих сферичних частинок, що займають вузли ґратки та центри граней куба, складає

$$\frac{a}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right).$$

Відношення об'єму порожнини до об'єму одного атому з радіусом  $\frac{a\sqrt{2}}{4}$  дорівнює

$$\kappa = \left[ \frac{\frac{a}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)}{\frac{a\sqrt{2}}{4}} \right]^3 = \left[ \sqrt{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \right]^3 = (\sqrt{2} - 1)^3 \approx 0,07.$$

Отже, при розміщенні атому в міжвузловинному просторі він має розсунути найближчих сусідів на

$$p = (1 - \kappa) \cdot 100\% = 93\%$$

свого об'єму.

*Відповідь:*  $p = 93\%$ .

**Приклад 3.5.** Розрахуйте рівноважну концентрацію в кристалі а) дефектів Шотткі; б) дефектів Френкеля.

*Розв'язання*

а) Дефект Шотткі – це вакансія, що утворюється, коли атом залишає своє місце в ґратці і виходить на зовнішню поверхню кристала. Нехай  $U$  – енергія, необхідна для утворення дефекту Шотткі,  $n$  – кількість вакантних вузлів ґратки,  $N$  – кількість вузлів ґратки, зайнятих атомами. Тоді сумарна енергія, необхідна для утворення  $n$  дефектів, дорівнює

$$E = nU.$$

Ентропія системи  $S = k_B \ln w$ , причому ймовірність визначається як

$$w = \frac{(N+n)!}{n!N!}.$$

Звідси, якщо скористатись наближенням Стірлінґа  $\ln x! = x \ln x - x$  для випадку  $x \gg 1$ , випливає, що

$$\begin{aligned} \ln w &= \ln \frac{(N+n)!}{n!N!} = \ln(N+n)! - \ln n! - \ln N! = (N+n) \ln(N+n) - N - \\ &\quad - n - n \ln n + n - N \ln N + N = (N+n) \ln(N+n) - n \ln n - N \ln N. \end{aligned}$$

Тому вільна енергія

$$F = E - TS = nU - k_B T [(N+n) \ln(N+n) - n \ln n - N \ln N].$$

При рівновазі  $\frac{\partial F}{\partial n} = 0$  або

$$U - k_B T [\ln(N+n) + 1 - \ln n - 1] = U - k_B T \ln \frac{N+n}{n} = 0,$$

звідки

$$\frac{n}{n+N} = C = e^{-\frac{U}{k_B T}},$$

де  $C$  – концентрація дефектів у розрахунку на кількість атомних вузлів. Для металів зазвичай  $U \approx 1$  еВ, тому рівноважна концентрація вакансій за кімнатної температури порядку  $10^{-5}$ . Якщо  $n \ll N$ , то число дефектів

$$n = Ne^{-\frac{U}{k_B T}}.$$

б) Дефект Френкеля – вакансія, що утворюється, коли атом залишає своє місце в ґратці і переходить у міжвузловинне положення. Нехай  $U$  – енергія, необхідна для впровадження одного атому,  $N$  – загальна кількість вузлів ґратки,  $N'$  – кількість можливих міжвузловинних положень,  $n$  – кількість міжвузловинних положень, зайнятих атомами. Ймовірність  $w$  дорівнює

$$w \approx \frac{N!}{n!(N-n)!} \frac{N'!}{n!(N'-n)!};$$

$$\begin{aligned} \ln w &= \ln N! + \ln N'! - 2 \ln n! - \ln(N-n)! - \ln(N'-n)! = N \ln N - \\ &- N + N' \ln N' - N' - 2n \ln n + 2n - (N-n) \ln(N-n) + \\ &+ N - n - (N'-n) \ln(N'-n) + N' - n = N \ln N + N' \ln N' - \\ &- 2n \ln n - (N-n) \ln(N-n) - (N'-n) \ln(N'-n). \end{aligned}$$

Вільна енергія

$$\begin{aligned} F &= E - TS = nU - k_B T [N \ln N + N' \ln N' - \\ &- 2n \ln n - (N-n) \ln(N-n) - (N'-n) \ln(N'-n)]. \end{aligned}$$

У стані рівноваги  $\frac{\partial F}{\partial n} = 0$  або

$$\begin{aligned}
 & U - k_B T [-2 \ln n + \ln(N - n) + \ln(N' - n) - 2 + 1 + 1] = \\
 & = U - k_B T \ln \frac{(N - n)(N' - n)}{n^2},
 \end{aligned}$$

тому

$$\frac{n^2}{(N - n)(N' - n)} = e^{-\frac{U}{k_B T}};$$

якщо  $n \ll N, N'$ , то маємо

$$\frac{n}{\sqrt{NN'}} = e^{-\frac{U}{2k_B T}}.$$

Для кубічного кристалу  $N = N'$ , тому рівноважна концентрація дефектів Френкеля дорівнює

$$C = \frac{n}{N} = e^{-\frac{U}{2k_B T}},$$

або

$$n = Ne^{-\frac{U}{2k_B T}}.$$

*Відповідь:*  $n = Ne^{-\frac{U}{k_B T}}$ ;  $n = Ne^{-\frac{U}{2k_B T}}$ .

**Приклад 3.6.** За температури, що на 10 К менша від температури плавлення алюмінію ( $T_{\text{пл}} = 933 \text{ К}$ ), на долю вакансій припадає 0,08 % місць у кристалічній ґратці, а за  $484 \text{ }^\circ\text{C}$  – лише 0,01 %. Чому дорівнює енергія утворення вакансій  $E_{0v}$ ? Скільки вакансій знаходиться в  $1 \text{ см}^3$  при  $527 \text{ }^\circ\text{C}$ , якщо припустити, що більшість вакансій утворилася внаслідок переходу атомів до поверхні?

*Розв'язання*

Для розрахунків використаємо формулу (3.1):

$$C_v = e^{\frac{S_0}{k_B}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}},$$

або

$$\ln C_v = \frac{S_0}{k_B} - \frac{E_{0v}}{k_B T}.$$

Тоді можна записати

$$\begin{cases} \ln C_{v_1} = \frac{S_0}{k_B} - \frac{E_{0v}}{k_B T_1}; \\ \ln C_{v_2} = \frac{S_0}{k_B} - \frac{E_{0v}}{k_B T_2}, \end{cases}$$

де за умовою задачі  $T_1 = 923 \text{ К}$ ,  $T_2 = 757 \text{ К}$ ,  $C_{v_1} = 8 \cdot 10^{-4}$ ,  $C_{v_2} = 10^{-4}$ .

Розв'язуючи цю систему відносно невідомих  $E_{0v}$  та  $S_0$ , знаходимо

$$\begin{aligned} E_{0v} &= \frac{k_B T_1 T_2}{T_1 - T_2} \ln \frac{C_{v_1}}{C_{v_2}} = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 923 \cdot 757}{923 - 757} \cdot \ln \frac{8 \cdot 10^{-4}}{10^{-4}} = 1,2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = \\ &= 0,75 \text{ еВ}; \end{aligned}$$

$$S_0 = 2,3 k_B.$$

Враховуючи отримані значення  $E_{0v}$  та  $S_0$ , для  $527 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $800 \text{ К}$ ), отримаємо

$$C_v = e^{\frac{S_0}{k_B}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}} = e^{\frac{2,3 k_B}{k_B} - \frac{1,2 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 800}} = 1,8 \cdot 10^{-4}.$$

У перерахунку на  $1 \text{ см}^3$  це складає

$$n_v = C_v N_A \frac{\rho}{\mu} = 1,8 \cdot 10^{-4} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \cdot \frac{2,7}{27} = 1,1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}.$$

Відповідь:  $E_{0v} = 0,75$  еВ;  $n_v = 1,1 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup>.

**Приклад 3.7.** При охолодженні нікелю з постійною швидкістю  $w$  рівноважна (з точністю до порядку) концентрація вакансій  $C_v^0$  підтримується до тих пір, доки швидкість її зміни  $\frac{dC_v^0}{dt}$  не стане більшою від швидкості стікання  $\frac{C_v^0}{\tau}$ . При  $T \rightarrow 0$  нерівноважна концентрація вакансій відповідає рівноважній  $C_v^0$  для „температури заморожування“  $T_0$ . Знайдіть співвідношення між температурою заморожування, швидкістю охолодження  $w$  і радіусом стікання вакансій  $R$ . За якої швидкості охолодження  $w$  можливо заморозити вакансії від точки плавлення у стрічці товщиною  $d = 2R = 20$  мкм ?

*Розв'язання*

Введемо безрозмірні величини: енергію вакансії  $\varepsilon_v = \frac{E_{0v}}{k_B T_{пл}}$ ,

енергію активації міграції вакансій  $\varepsilon_m = \frac{E_m}{k_B T_{пл}}$ , температуру

$\theta = \frac{T}{T_{пл}}$ . Підставляючи в умову

$$\left| \frac{dC_v^0}{dt} \right| \geq \frac{C_v^0}{\tau}$$

значення  $C_v^0$  з виразу (3.2),  $\tau$  і  $D_v$ , запишемо:

$$C_v^0 = e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}; \quad \tau = \frac{R^2}{D_v}; \quad D_v = D_0 e^{-\frac{E_m}{k_B T}};$$

з урахуванням того, що

$$\frac{d}{dT} = \frac{dT}{dt} \frac{d}{dT} = w \frac{d}{dT},$$

отримаємо

$$\frac{C_v^0}{\tau} = \frac{D_v}{R^2} C_v^0 = \frac{D_0}{R^2} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}.$$

Тоді

$$\left| \frac{dC_v^0}{dt} \right| = \left| w \frac{dC_v^0}{dT} \right| = \left| w \frac{d}{dT} \left( e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}} \right) \right| = \frac{w E_{0v}}{k_B T^2} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}.$$

Отже, можна записати

$$\frac{w E_{0v}}{k_B T^2} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}} \geq \frac{D_0}{R^2} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}},$$

або

$$\frac{w E_{0v}}{k_B T^2} \geq \frac{D_0}{R^2} e^{-\frac{E_m}{k_B T}};$$

$$\frac{E_m}{k_B T} = \frac{T_{пл}}{T} \frac{E_m}{k_B T_{пл}} = \frac{\varepsilon_m}{\theta},$$

$$\frac{w E_{0v}}{k_B T^2} = \frac{E_{0v}}{k_B T_{пл}} \frac{w T_{пл}^2}{T_{пл} T^2} = \frac{w \varepsilon_v}{T_{пл} \theta^2}.$$

Таким чином, остаточно можна записати

$$\frac{w \varepsilon_v}{\theta^2 T_{пл}} \geq \frac{D_0}{R^2} e^{-\frac{\varepsilon_m}{\theta}}.$$

Критична умова

$$\theta^2 e^{-\frac{\varepsilon_m}{\theta}} \leq \frac{w \varepsilon_v R^2}{D_0 T_{пл}}.$$

Для оцінки швидкості охолодження при „заморожуванні“ вакансій ( $T = T_{\text{пл}}$ ,  $\theta = 1$ ) скористаємось експериментальними даними для

нікелю:  $D_0 = 10^{-6} \frac{\text{М}^2}{\text{с}}$ ,  $T_{\text{пл}} = 1726 \text{ К}$ ,  $E_m \approx E_{0v} = 1,6 \text{ еВ}$ .

$$w \approx \frac{D_0 T_{\text{пл}}}{\varepsilon_v R^2}, \quad \varepsilon_m \approx \varepsilon_v = \frac{E_{0v}}{k_B T_{\text{пл}}} = \frac{1,6}{8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 1726} \approx 10.$$

Тоді

$$w \approx \frac{10^{-6} \cdot 1726}{10 \cdot (10^{-5})^2} e^{-10} \approx 78,4 \frac{\text{К}}{\text{с}}.$$

Відповідь:  $\theta^2 e^{-\frac{\varepsilon_m}{\theta}} \approx \frac{w \varepsilon_v R^2}{D_0 T_{\text{пл}}}$ ;  $w \approx 78,4 \frac{\text{К}}{\text{с}}$ .

**Приклад 3.8.** У мідній фользі після ядерного опромінення з'явилися дислокаційні петлі кількістю  $10^{15} \text{ см}^{-3}$  і середнім діаметром 40 нм. Оцініть концентрацію точкових дефектів, які виникли у міді при опроміненні і конденсація яких спричинила утворення дислокаційних петель.

*Розв'язання*

При ядерному опроміненні виникає підвищена концентрація точкових дефектів (вакансій і міжвузловинних атомів). Завдяки значній рухливості вакансії об'єднуються в плоскі скупчення, що знижує енергію кристала (рис. 3.4). Ці плоскі скупчення вакансій зазвичай містяться в площинах  $\{111\}$  ГЦК ґратки.

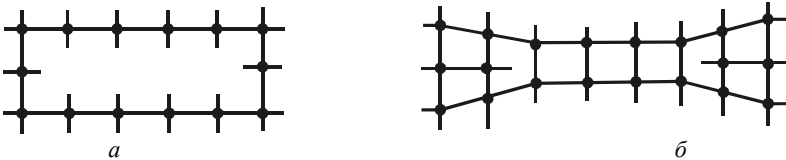


Рисунок 3.4

На рис. 3.4 зображено переріз нерелаксованої (а) і релаксованої (б) конфігурацій плоского скупчення вакансій. При досить великому радіусі плоского скупчення завдяки притягання протилежних „берегів“ вакансійного диску, він „схлопується“ (виникає рівноважна конфігурація б). При цьому відновлюється нормальна

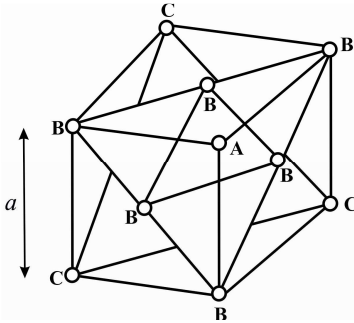


Рисунок 3.5

структура кристала за виключенням країв вакансійного диску, де є значні деформації, які мають макроскопічну протяжність уздовж краю диска. Цей дефект кристалічної ґратки називають крайовою дислокацією.

На рис. 3.5 показані атомні площини  $\{111\}$  в об'ємі однієї умовної комірки (площини А, В і С).

Кількість атомів, яка наприклад припадає на площину В, дорівнює:

$$n_0 = \frac{1}{6} \cdot 3 + \frac{1}{2} \cdot 3 = 2.$$

Для поверхневої густини  $n_s$  атомів в площині  $\{111\}$  маємо:

$$n_s = \frac{n_0}{s} = \frac{2}{\frac{1}{2} a^2 \sqrt{3}} = \frac{4}{a^2 \sqrt{3}}.$$

Кількість вакансій на одиницю об'єму, які спричинили появу дислокаційних петель, дорівнює:

$$n_v = n_s S_l n_l = \frac{4}{a^2 \sqrt{3}} \frac{\pi d_l^2}{4} n_l = \frac{\pi d_l^2}{a^2 \sqrt{3}} n_l,$$

де  $S_l$  – площа, обмежена дислокаційною петлею,  $n_l$  – концентрація дислокаційних петель;  $d_l$  – діаметр дислокаційної петлі. Концентрація атомів, як впливає з рис. 3.5, дорівнює:

$$n_a = \frac{4}{a^3}.$$

Отже, концентрація вакансій, які спричинили появу дислокаційних петель, дорівнює:

$$C_v = \frac{n_v}{n_a} = \frac{\pi d_l^2 a}{4\sqrt{3}} n_l = \frac{3,14 \cdot (40 \cdot 10^{-9})^2 \cdot 3,61 \cdot 10^{-10}}{4\sqrt{3}} \cdot 10^{21} \approx 3 \cdot 10^{-4}.$$

*Відповідь:*  $C_v \approx 3 \cdot 10^{-4}$ .

**Приклад 3.9.** Калориметричним методом встановлено, що енергія, яка з'явилася в алюмінієвому зразку внаслідок пластичної деформації, дорівнює  $0,63 \cdot 10^3 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$ . Оцініть густину дислокацій у цьому зразку.

*Розв'язання*

При пластичній деформації в зразку накопичується енергія, зумовлена, переважно, зростанням густини дислокацій. Під енергією дислокації розуміють пружну енергію кристала, яка припадає на одиницю довжини дислокації. Для оцінок скористаємось формулою (3.16).

Густину дислокацій можна визначити як кількість дислокацій, які перетинають одиницю площі металографічного шліфа.

Для Алюмінію  $G = 27,6 \text{ ГПа}$ . Алюміній має ГЦК ґратку, стала ґратки  $a = 4,05 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ . Отже,  $b \approx \frac{a\sqrt{2}}{2} = 2,86 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ . Маємо, що енергія дислокації (на одиницю довжини) дорівнює:

$$T = \alpha G b^2 = 1 \cdot 27,6 \cdot 10^9 \cdot (2,86 \cdot 10^{-10})^2 = 2,26 \cdot 10^{-9} \frac{\text{Дж}}{\text{м}}.$$

З даних в умові задачі визначаємо, що пружна енергія в одиниці об'єму алюмінієвого зразка дорівнює:

$$E = \varepsilon \rho = 0,63 \cdot 10^3 \cdot 2,7 \cdot 10^3 = 1,7 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}.$$

З двох останніх виразів визначаємо густину дислокацій:

$$\rho = \frac{E}{T} = \frac{1,7 \cdot 10^6}{2,26 \cdot 10^{-9}} = 7,5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}.$$

*Відповідь:*  $\rho = 7,5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ .

**Приклад 3.10.** Кожного разу, коли дислокація переповзає, поглинаючи точковий дефект, вивільнюється деяка енергія величиною порядку утворення точкового дефекту  $E_0$ . Тому, якщо маємо перенасичення точковими дефектами, то існує тенденція до перепозання дислокацій, а з боку надлишкових точкових дефектів на дислокацію діють напруження. Розрахуйте зміну вільної енергії по відношенню до поглинутого точкового дефекту, доведіть, що це напруження

$$\sigma = \frac{k_B T}{b^3} \ln \frac{C}{C_0},$$

де  $C$  та  $C_0$  – відповідно дійсна та рівноважна концентрація точкових дефектів. Оцініть величину цього напруження для алюмінію, загартованого від  $600^\circ\text{C}$  до кімнатної температури та порівняйте її з границею плинності за кімнатної температури.

*Розв'язання*

Для вакансії енергія утворення значно менша, ніж для міжвузловинного атому, тому будемо розглядати лише дефекти Шотткі.

Нехай  $E_0$  – енергія, необхідна для утворення дефекту Шотткі, тоді зміна вільної енергії, обумовлена тим, що вакансія перейшла до дислокації

$$\frac{\partial F}{\partial n} = E_0 + k_B T \ln C.$$

Рівноважна концентрація вакансій  $C_0$  визначається виразом (3.2), тому можна записати, що

$$\frac{\partial F}{\partial n} = k_B T \ln \frac{C}{C_0}.$$

Напруження, необхідне для того, щоб змусити дислокацію переповзати, дорівнює зміні вільної енергії на одиницю об'єму

$$\sigma = \frac{\partial F}{\partial V} = \frac{k_B T}{b^3} \ln \frac{C}{C_0}.$$

Для кристалу, загартованого від високої температури  $T_2$  і тому за температури  $T_1$ , пересичений вакансіями,

$$\sigma = \frac{E_{0v}}{b^3} \left( 1 - \frac{T_1}{T_2} \right).$$

Для алюмінію  $E_{0v} \approx 0,7$  еВ, тому загартування від  $600$  °С до кімнатної температури створює напруження  $\sigma \approx 3$  ГПа, що практично на два порядки перевищує границю плинності за кімнатної температури.

У реальному кристалі  $\sigma < 3$  ГПа, оскільки надлишкова концентрація точкових дефектів суттєво знижується внаслідок коалесценції (конденсації точкових дефектів на дислокації з їх подальшим „випаровуванням“).

*Відповідь:*  $\sigma = \frac{k_B T}{b^3} \ln \frac{C}{C_0}$ ;  $\sigma \approx 3$  ГПа.

**Приклад 3.11.** Енергія кристала, пересиченого вакансіями може зменшитися, якщо надлишкові вакансії коалесцює, утворюючи пору. Покажіть, що така пора повинна зароджуватися у формі сфери, а потім, коли вона досягне критичного розміру, її енергія зменшиться, якщо вона зможе перетворитися на диск та схлоп-

нутися, утворивши призматичну дислокаційну петлю.

*Розв'язання*

Енергія сферичної порожнини із  $n$  вакансій складає

$$E_s \sim \gamma b^2 n^{\frac{2}{3}},$$

де  $\gamma$  – питома поверхнева енергія.

Енергія призматичної дислокаційної петлі, що утворюється з диска, який складається з  $n$  вакансій,

$$E_1 \sim Gb^3 \sqrt{n} \ln \sqrt{n},$$

де  $G$  – модуль зсуву.

Відношення цих двох енергій

$$\frac{E_s}{E_1} \sim \frac{\gamma}{Gb} n^f \quad \text{при} \quad f < \frac{1}{6}.$$

Для малих  $n$  енергія сфери менша, ніж енергія дислокаційної петлі, а для великих  $n$  навпаки. Сфера стає нестійкою по відношенню до петлі, якщо кількість вакансій у скупченні складає

$$n_c \approx \left( \frac{Gb}{\gamma} \right)^h \quad \text{при} \quad h > 6.$$

Якщо  $n_c \geq 10$ , то для переходу від сфери до петлі скупчення має пройти через форми з більшими енергіями. Відбудеться ця зміна, чи ні, залежить від величини питомої поверхневої енергії  $\gamma$ .

*Відповідь:*  $n_c \approx \left( \frac{Gb}{\gamma} \right)^h$  при  $h > 6$ .

**Приклад 3.12.** У деяких матеріалах випадіння дислокаційних дисків відбувається на трансляційних двійниках, тому що скорочення двійника призводить до вивільнення надлишкової енергії. Призматичні дислокаційні

петлі, що при цьому утворилися, стримують ковзання часткових дислокацій, які закінчуються на трансляційних двійниках. Отримайте вираз для величини опору ковзання.

*Розв'язання*

Якщо вектор Бюргерса дислокаційної петлі перпендикулярний до вектора Бюргерса часткової дислокації, що ковзає, то при реакції, утворюється дислокація з вектором Бюргерса, нахиленим до площини трансляційного двійника.

Для того, щоб ковзання тривало у площині трансляційного двійника, результуюча дислокація повинна і ковзати і переповзати. Тому необхідно, щоб точкові дефекти, які конденсуються на трансляційному двійнику „випаровувалися“. Для цього на одиницю довжини часткової дислокації потрібно витратити енергію

$$E = \frac{\pi r^2 N_s}{b^2} E_{0v} + \pi r^2 N_s \gamma - 2\pi r N_s \frac{Gb^2}{4\pi(1-\mu)} \ln \frac{r}{b},$$

де  $N_s$  – кількість дислокаційних петель на одиницю площі;  $r$  – середній радіус петлі.

Відповідно сила опору буде дорівнювати:

$$F = \frac{dE}{dr} = \frac{2\pi r N_s}{b^2} E_{0v} + 2\pi r N_s \gamma - \frac{Gb^2 N_s}{2(1-\mu)} \left( \ln \frac{r}{b} + 1 \right).$$

*Відповідь:*  $F = \frac{2\pi r N_s}{b^2} E_{0v} + 2\pi r N_s \gamma - \frac{Gb^2 N_s}{2(1-\mu)} \left( \ln \frac{r}{b} + 1 \right).$

**Приклад 3.13.** Розрахуйте рівноважну відстань між двома частковими дислокаціями в ГЦК металі. Доведіть, що на дві часткові дислокації, поєднані дефектом пакування, однорідне напруження може діяти з протилежними силами, а щоб повністю розділити дві часткові дислокації, це однорідне напруження повинне мати величину



З рисунку знаходимо:

$$\frac{a}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}21] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}].$$

У цих часткових дислокацій однакові крайові компоненти  $\frac{a}{4}[\bar{1}10]$ , а гвинтові компоненти  $\frac{a}{12}[\bar{1}\bar{1}2]$  і  $\frac{a}{12}[\bar{1}1\bar{2}]$  протилежні за знаком (хоча повна дислокація розділилася на часткові, так само визначаємо крайові та гвинтові компоненти по відношенню до вектора Бюргера повної дислокації). Дотичне напруження  $\tau$ , напрямком якого співпадає з  $[\bar{1}12]$ , діє на ці дві гвинтові компоненти з силами, рівними за величиною, але протилежними за напрямком. Крайові компоненти складають з  $[\bar{1}\bar{1}2]$  прямий кут, тому не зазнають дії сили. Сила  $F$  на одиницю довжини, яка розштовхує часткові дислокації, дорівнює

$$F = b\tau,$$

де  $b = \frac{a}{12}[\bar{1}12]$ , тому

$$F = \frac{a\tau}{2\sqrt{6}}.$$

Часткові дислокації зовсім розійдуться, коли  $F = \gamma$ , тобто

$$\tau = 2\sqrt{6} \frac{\gamma}{a}.$$

Відповідь:  $\tau = 2\sqrt{6} \frac{\gamma}{a}$ .

## Задачі для самостійного розв'язування

### Точкові дефекти

- 3.1. Розташуйте елементи Al, Nb, Ni і Sn у ряд у порядку зростання енергії утворення вакансій. Дайте необхідні пояснення.
- 3.2. При температурі поблизу точки плавлення рівноважна концентрація вакансій у Магнії дорівнює  $7,2 \cdot 10^{-4}$ . Оцініть рівноважну концентрацію вакансій у Магнії за кімнатної температури.
- 3.3. На скільки зміниться рівноважна концентрація вакансій у металі при підвищенні температури від 600 до 1 000 °С, якщо при 600 °С ця концентрація дорівнює  $9,1 \cdot 10^{-6}$ .
- 3.4. Експериментально визначено, що відносна концентрація вакансій у Купрумi дорівнює  $8 \cdot 10^{-5}$  при 980 °С і  $16 \cdot 10^{-5}$  при 1 060 °С. За цими даними розрахуйте енергію утворення й ентропію утворення вакансій у Купрумi.
- 3.5. Нехтуючи ентропією утворення вакансій, визначте їхню рівноважну концентрацію  $C_V$  в Аргентумi в інтервалі температур від 200 до 1 200 К з кроком 200 К. Побудуйте графік  $C_V(T)$ .
- 3.6. Оцініть внутрішню енергію, зумовлену наявністю вакансій в одному молі при 27 і 1 027 °С.
- 3.7. Рівноважна концентрація вакансій у ГЦК-металі при кімнатній температурі дорівнює  $10^{-20}$ . Оцініть, на скільки порядків концентрація гартівних вакансій при різкому охолодженні з 927 °С буде більшою їхньої рівноважної концентрації при кімнатній температурі.
- 3.8. У Купрумi, загартованому з 600 °С, міститься  $1,1 \cdot 10^{-5}$  % (ат.) вакансій. Яку температуру загартування необхідно обрати, щоб концентрація вакансій зросла на два порядки?
- 3.9. Оцініть рівноважну концентрацію вакансій в Аргентумi у точці плавлення 961 °С, якщо модуль зсуву  $G = 2,8 \cdot 10^{10}$  Па і період ґратки  $a = 4,078 \text{ \AA}$ .
- 3.10. Оцініть середні відстані між рівноважними вакансіями в Алюмінії при 27 °С і між гартівними вакансіями при тій самій

температурі після загартування з 627 °С (за умови, що всі високотемпературні моновакансії „заморожуються“ і розподілені статистично рівномірно).

- 3.11. У полікристалі зерно розміром  $d_0 = 10$  мкм містить надлишок вакансій  $\Delta C_v = 10^{-4}$ . Оцініть переміщення  $\Delta x$  меж, якщо всі вакансії стечуть на межі. Гратка ГЦК з періодом  $a = 4 \cdot 10^{-8}$  см. Вважайте зерно кулею.
- 3.12. Метал містить 0,1% (ат.) рівномірно розподіленої домішки заміщення. Визначте середню відстань між домішковими атомами в одиницях періоду ГЦК і ОЦК граток.
- 3.13. Приймавши енергію утворення міжвузловинного атому в міді 3 еВ, оцініть відношення кількості вакансій і міжвузловинних атомів в умовах термодинамічної рівноваги при кімнатній температурі і при 1 000 °С.
- 3.14. У скільки разів розрізняються частоти перескоків вакансій в Алюмінії і Платині при 500 °С? Вважайте, що  $\frac{S_m}{k_B} \approx 1$ .
- 3.15. Енергія активації міграції вакансій у нікелі дорівнює 1,5 еВ, а енергія активації самодифузії 3,03 еВ. Визначте відношення рівноважної концентрації вакансій при 1 027 °С до рівноважної концентрації при 27 °С.
- 3.16. Енергія активації самодифузії у міді дорівнює 2,04 еВ, а енергія активації міграції вакансій дорівнює 1,08 еВ. Визначте відношення рівноважної концентрації вакансій при 1 000 °С до рівноважної концентрації вакансій при 500 °С.
- 3.17. Оцініть найбільший можливий вклад рівноважної концентрації дивакансій  $C_{2v}$  в дифузію, якщо енергія її зв'язку  $E_{v-v} = \frac{E_{0v}}{z}$  ( $z$  – координаційне число, рівне 12), а енергії активації міграції моновакансії  $E_m$  і дивакансії  $E_m^{2v}$  відносяться як 6:1).
- 3.18. Припустимо, що дивакансія в ГЦК металі складається із двох сусідніх вакантних вузлів. Визначте число можливих положень дивакансії в одній елементарній комірниці ГЦК гратки.

Далі покажіть, що при рівновазі число дивакансій, які припадають на число вузлів ґратки, дорівнює

$$\frac{n_2}{N} = 6e^{-\frac{2E_{0v}-E_{zv}}{k_B T}}$$

Знехтувати ентропією, яку дивакансія може внести в кристал внаслідок її впливу на коливання оточуючих атомів.

- 3.19. Кристал Ауруму охолоджується від температури плавлення до 500°C. Визначте відношення числа дивакансій до числа вакансій в кристалі при 500°C, якщо припустити, що підтримується повна рівновага.
- 3.20. Кристал Ауруму охолоджується від температури плавлення до 500 °C. Обчисліть відношення кількості вакансій до числа дивакансій у кристалі при 500 °C спочатку в припущенні, що сумарне число вакантних вузлів залишається постійним, але вакансії і дивакансії досягають рівноваги між собою. Прийміть енергію утворення вакансії рівною 0,98 еВ, енергію зв'язку дивакансії – 0,3 еВ, а відношення числа вакансій до числа дивакансій при температурі плавлення 1 063 °C рівним 20.
- 3.21. Енергія утворення вакансії в чистому алюмінії  $E_{0v}$ . Енергія зв'язку вакансії з домішковим атомом цинку  $E_{v-A}$ . Знайдіть домішкову рівноважну концентрацію вакансій  $C_v$  у розбавленому розчині з концентрацією цинку  $C_A$ . Дослідіть залежність  $C_v(C_A)$ . Знайдіть відношення концентрацій вакансій в чистому алюмінії та в сплаві з 1% (ат.) Zn при 500 °C якщо  $E_{v-A} = 0,1$  еВ.
- 3.22. Чому дорівнює енергія зв'язку вакансій у Купрумi з домішковими атомами Германію, якщо температурна залежність концентрації комплексів „вакансія – Германій“ характеризується енергією активації 1,03 еВ?
- 3.23. Оцініть відношення концентрації комплексів „вакансія – Силіцій“ до концентрації вільних вакансій в Алюмінії, який містить 0,01% (ат.) Si при 27 °C. Енергія зв'язку в комплексі 0,07 еВ. Ентропійний фактор приблизно дорівнює одиниці.

Припустіть, що концентрації вільних і зв'язаних вакансій незалежні (це справедливо для сильно розведених розчинів).

- 3.24. Сіммонс і Баллуффі спостерігали, що коли срібний стрижень нагрівається до температури плавлення, то відносно збільшення довжини стрижня перевищує відносно збільшення його параметра ґратки в  $5,6 \cdot 10^{-5}$  разів. Вважаючи, що єдиними дефектами в стрижні є ізольовані вакансії, і приймаючи ентропію утворення вакансій рівною  $1,5k_B$ , обчисліть енергію утворення вакансії  $E_{0v}$ .
- 3.25. У дослідях з паралельного вимірювання довжини і періоду ґратки стрижня з алюмінію концентрація вакансій при  $655^\circ\text{C}$  дорівнювала  $4,9 \cdot 10^{-4}$ , а при  $620^\circ\text{C}$   $3,7 \cdot 10^{-4}$ . Визначте енергію й ентропію утворення вакансій в алюмінії.
- 3.26. При нагріванні срібного стрижня до температури плавлення  $961^\circ\text{C}$  відносно збільшення його довжини перевищує відносно збільшення періоду ґратки Аргентуму на  $5,6 \cdot 10^{-3} \%$ . Вважаючи, що вакансійні комплекси відсутні, і вважаючи  $\frac{S_0}{k_B} = 1,5$ , визначте енергію утворення вакансій  $E_{0v}$ .
- 3.27. При температурі, близькій до точки плавлення, у стрижні із золота рівноважна концентрація вакансій складає  $7,2 \cdot 10^{-4}$ . При загартуванні ці вакансії виявились „замороженими“. Під час відпалу, який відновлює рівноважну дуже низьку концентрацію вакансій, відносно скорочення стрижня складає  $1,1 \cdot 10^{-4}$ . Як змінюється період ґратки в процесі цього відпалу?
- 3.28. При нагріванні металевого стрижня до деякої температури відносно збільшення його довжини перевищує відносно збільшення періоду ґратки металу на  $\beta \%$ . Вважаючи, що вакансійні комплекси відсутні і величини  $\frac{S_0}{k_B}$  та  $E_{0v}$  відомі, визначте цю температуру.

№ варіанту	Матеріал	$\frac{S_0}{k_B}$	$E_{0v}, \text{eV}$	$\beta, \%$
1.	Срібло	1,5	1,13	$6,73 \cdot 10^{-4}$
2.	Вольфрам	2	3,6	$3,25 \cdot 10^{-3}$
3.	Мідь	2,4	1,28	$7,83 \cdot 10^{-3}$
4.	Алюміній	0,7	0,67	$4,38 \cdot 10^{-4}$
5.	Золото	0,7	0,95	$5,27 \cdot 10^{-4}$
6.	Срібло	1,5	1,13	$1,38 \cdot 10^{-4}$
7.	Вольфрам	2	3,6	$3,55 \cdot 10^{-3}$
8.	Мідь	2,4	1,28	$1,25 \cdot 10^{-3}$
9.	Алюміній	0,7	0,67	$3,29 \cdot 10^{-3}$
10.	Золото	0,7	0,95	$2,25 \cdot 10^{-3}$
11.	Срібло	1,5	1,13	$3,48 \cdot 10^{-3}$
12.	Вольфрам	2	3,6	$1,15 \cdot 10^{-3}$
13.	Мідь	2,4	1,28	$4,65 \cdot 10^{-3}$
14.	Алюміній	0,7	0,67	$5,23 \cdot 10^{-3}$
15.	Золото	0,7	0,95	$6,55 \cdot 10^{-3}$
16.	Срібло	1,5	1,13	$3,83 \cdot 10^{-4}$
17.	Вольфрам	2	3,6	$2,75 \cdot 10^{-3}$
18.	Мідь	2,4	1,28	$5,73 \cdot 10^{-3}$
19.	Алюміній	0,7	0,67	$3,67 \cdot 10^{-4}$
20.	Золото	0,7	0,95	$1,82 \cdot 10^{-4}$
21.	Срібло	1,5	1,13	$2,28 \cdot 10^{-3}$
22.	Вольфрам	2	3,6	$3,94 \cdot 10^{-3}$
23.	Мідь	2,4	1,28	$7,25 \cdot 10^{-3}$
24.	Алюміній	0,7	0,67	$4,49 \cdot 10^{-3}$
25.	Золото	0,7	0,95	$5,75 \cdot 10^{-3}$

- 3.29. При загартованні з 700 і 950 °С електроопір Ауруму при 78 К стає більшим, ніж у добре відпаленому стані відповідно на 0,7 і 9,0 %. Визначте за цими даними рівноважну концентрацію вакансій в Аурумі при 827 °С, нехтуючи ентропійним фактором.
- 3.30. При температурі  $T_1$  коефіцієнт самодифузії міді  $D_1$ , а при температурі  $T_2 - D_2$ . Після різкого загартовування з температурою  $T_3$  питомий електричний опір при кімнатній температурі  $\rho_3$ , а при загартовуванні з температури  $T_4 - \rho_4$ , тоді як повільне охолодження з будь-якої температури дає електричний опір  $\rho_0$ . Припускаючи, що всі відмінності  $\rho$  обумовлені наявністю вакансій і пропорційне їхній концентрації, знайдіть енергію активації міграції вакансій у міді  $E_m$ .
- 3.31. Після різкого охолодження алюмінію від температури поблизу точки плавлення під час вилежування за кімнатної температури густина зразка змінюється. Оцініть максимально можливе значення цієї зміни.
- 3.32. Знайдіть залежність замороженої концентрації вакансій  $C_v$  від швидкості охолодження  $w$ . Порівняйте швидкості охолодження, достатні для заморожування усіх вакансій при загартовуванні від температури  $T_{пл}$  та  $0,8T_{пл}$ . Яка температура загартовування  $T_3$  і швидкість  $w$  достатні, щоб отримати після загартовування  $C_v \sim 10^{-6}$ ?
- 3.33. При якій швидкості нагрівання  $w$  концентрація вакансій в стрічці товщиною  $2R = 0,2$  мм може поблизу  $T_{пл}$  виявитися на два порядки нижче рівноважної, якщо вважати, що вакансії породжуються від вільної поверхні? Яка густина дислокацій  $\rho$  ( $\text{см}^{-2}$ ) необхідна, щоб це припущення виконалося? (прийняти за радіус джерела  $r_0$  радіус ядра дислокації  $r_y \approx 3b \sim 10 \text{ \AA}$ ). За який час  $\tau$  відновиться рівноважна концентрація поблизу  $T_{пл}$ ?

- 3.34. Сплав, загартований від температури  $T_1$ , має надлишкову концентрацію вакансій  $\Delta C_v^0$ . Після ізотермічної витримки при температурі  $T_2$  ця концентрація змінюється за законом  $\Delta C_v(t) = \Delta C_v^0 e^{-\frac{t}{\tau}}$ . Оцініть, на протязі якого часу після загартування  $t_0$  середній коефіцієнт дифузії при  $T_2$  буде на порядок вищий рівноважного при цій самій температурі, якщо в початковий момент є сторазове пересичення вакансіями. Вкажіть, як впливає температура загартування  $T_1$  на час  $t_0$ .
- 3.35. Надлишок точкових дефектів  $y$  в ізотермічних умовах стікає зі швидкістю  $y' = \frac{dy}{dt} = -\frac{qy}{\tau}$ , де стала часу  $\tau = Ae^{-\frac{E_m}{k_B T}}$ . При якій температурі  $T_0$  буде максимум швидкості стікання  $y'$  при нагріванні від  $T = 0$  зі сталою швидкістю  $w = \frac{dT}{dt}$ ? Яка ширина піку швидкості  $y' \left( \frac{1}{T} \right)$  на половині його висоти?
- 3.36. За температури  $100^\circ \text{C}$  концентрація вакансій, що виникають внаслідок загартувань, у сріблі зменшується за експоненціальним законом зі сталою часу  $\tau_1$ , яка визначається енергією активації міграції вакансії  $E_m$ :  $\tau = \tau_0 e^{-\frac{E_m}{k_B T}}$ . Знайдіть, у скільки разів зменшиться початкова швидкість стікання вакансій за температури  $60^\circ \text{C}$  та енергію активації міграції вакансій.
- 3.37. Велика надлишкова концентрація вакансій  $C_v$  знищується в ГЦК гратці стіканням у границі зерна на відстань  $\frac{d}{b} = 10^5$ . При випадкових блуканнях вакансія проходить шлях  $x$  в одному напрямку за  $n = \left( \frac{x}{b} \right)^2$  стрибків. Вакансії поєднуються в групу, зустрівшись на відстані  $2b$ . При якій початковій кон-

центрації більше половини вакансій залишаться в нерухомих три вакансіях?

- 3.38. Загартовуванням утворено пересичення вакансіями

$$q = \frac{\Delta c_v(0)}{c_v^0}. \text{ Вакансії стікають на крайову дислокацію із зони}$$

радіусом  $R$  і середня швидкість стікання  $\frac{d\bar{c}_v}{dt} = \Delta c_v(0)e^{-\frac{t}{\tau}}$ .

Знайдіть швидкість переповзання дислокації  $v_n$ . Як зміниться швидкість переповзання, якщо дислокація змішана і вектор Бюргерса складає з її віссю кут  $\varphi = 10^\circ$ ?

- 3.39. Частинка високої енергії передає гратці при кожному зіткненні одну й ту саму частину  $q$  своєї енергії. Пошкодження гратки припиняється, коли енергія, що передається, стане нижчою  $U_2$ . Знайдіть залежність глибини пошкодження  $L$  від первинної енергії частинок  $U_1$ , якщо пробіг між зіткненнями  $l$ .

- 3.40. Нейтрон з енергією  $U_0 = 2 \text{ MeV}$  при центральному пружному зіткненні з атомом у гратці передає йому енергію  $U$ , яка, розподіляючись між його сусідами, викликає „локальне плавлення“ групи із  $N$  атомів. Через  $10^{-11}$  с цей об'єм твердне. Припускаючи, що „заморожена“ в цій зоні концентрація вакансій приблизно дорівнює концентрації в точці плавлення ( $C_v = 2 \cdot 10^{-4}$ ), знайдіть кількість вакансій  $N_v^1$ , що утворюється при одному зіткненні.

### Лінійні дефекти

- 3.41. Визначте кристалографічні індекси напрямку уздовж лінії крайової дислокації ГЦК кристалу з вектором Бюргерса уздовж  $[110]$ , що ковзає по одній з площин  $\{111\}$ .
- 3.42. Визначте кристалографічні індекси напрямку уздовж лінії крайової дислокації ОЦК кристалу з вектором Бюргерса уздовж  $[111]$ , що ковзає по одній з площин  $\{112\}$ .

- 3.43. Визначте вектори Бюргерса дислокацій Шоклі після розщеплення повної гвинтової дислокації, що ковзає по площині  $(1\bar{1}\bar{1})$  ГЦК кристалу.
- 3.44. Визначте вектори Бюргерса дислокацій Шоклі після поперечного ковзання і розщеплення повної гвинтової дислокації, що ковзає по площині  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$  ГЦК кристалу.
- 3.45. Напишіть всі можливі реакції між дислокаціями  $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$  в ОЦК гратці. Відберіть із них енергетично вигідні.
- 3.46. Вкажіть усі можливі площини ковзання для дислокації  $\frac{a}{2}[\bar{1}11]$  в ОЦК гратці.
- 3.47. Напишіть для дислокації  $\frac{a}{2}[110]$   $(\bar{1}11)$  в ГЦК гратці всі енергетично вигідні реакції з дислокаціями інших систем ковзання.
- 3.48. Запишіть енергетичний баланс реакції між дислокаціями  $\frac{a}{2}[110]$   $(1\bar{1}\bar{1})$  та  $\frac{a}{2}[\bar{1}10]$   $(111)$  в ГЦК гратці з урахуванням орієнтування векторів Бюргерса відносно осі перетину площин ковзання.
- 3.49. Користуючись правилом Франка розгляньте реакції між стійкими повними дислокаціями в об'ємноцентрованому тетрагональному кристалі. З'ясуйте, як впливає на ці реакції відношення  $\frac{c}{a}$ .
- 3.50. Покажіть, що вектор Бюргерса прямолінійного ланцюжка міжвузловинних атомів, розміщений у напрямку  $\langle 100 \rangle$  кубічної гратки, дорівнює нулю.
- 3.51. У зразку Алюмінію після різкого охолодження у воді з'явилися дислокаційні петлі, кількість яких дорівнює  $10^{-15} \text{ см}^{-3}$ , а середній діаметр 30 нм. Оцініть концентрацію вакансій при температурі, з якої охолоджувався зразок.

- 3.52. Після різкого охолодження Алюмінію у воді з 630 °С усередині зерен з'являється безліч призматичних петель, які лежать у площинах  $\{111\}$ , причому в зонах шириною близько 1 мкм з обох боків границь зерен зазначені петлі не виникають. Чим зумовлене існування таких зон і як має впливати швидкість охолодження з 630 °С на їхню ширину?
- 3.53. Оцініть мінімальну кількість дислокацій, пробіг яких через кристал Ніколу спричинює утворення сідців на поверхні кристала, помітних у світловому мікроскопі (роздільна здатність мікроскопа 0,2 мкм).
- 3.54. Надлишок вакансій  $\Delta C_v = 10^{-4}$  з монокристалічної пластинки Алюмінію товщиною  $h = 1$  мм виноситься дислокаціями на поверхню, внаслідок чого у точках виходу дислокацій утворюються пірамідальні ямки з огранкою по площинам найщільнішого пакування  $\{111\}$ . При якій густині  $\rho$  точок виходу дислокацій на грань (111) монокристала ямки будуть чітко розрізнені в світловому мікроскопі (діагональ ямки досягне  $d_0 = 3$  мкм)?
- 3.55. Визначте густину утворених дислокацій, якщо концентрація вакансій в Алюмінії при температурі плавлення складає  $9,4 \cdot 10^{-4}$ , а після загартування Алюмінію від температури плавлення вакансії конденсуються в диски на щільноупакованих площинах і утворюють петлі Франка радіусом: а) 5 нм; б) 50 нм.
- 3.56. Представивши густину пружної енергії в полі крайової дислокації як функцію полярних координат  $(\rho, \theta)$ , знайдіть відношення енергії крайової і гвинтової дислокацій (енергією ядра дислокації знехтувати).
- 3.57. Енергія на одиницю довжини гвинтової дислокації

$$U_{\text{гв.д.}} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_{\text{я}}}\right), \quad \text{а на одиницю крайової} -$$

$$U_{\text{кр.д.}} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\mu)} \ln\left(\frac{R}{r_{\text{я}}}\right). \quad \text{Знайдіть енергію змішаної дислока-}$$

ції, у якої вектор Бюргерса  $\mathbf{b}$  складає кут  $\varphi$  з віссю дислокації.

- 3.58. В кристалі з густиною дислокацій  $\rho = 10^9 \text{ см}^{-2}$  є надлишок вакансій  $\Delta C_v = 10^{-4}$ . Яке середнє переміщення дислокацій  $x$  при їхньому стіканні на дислокації, якщо вважати всі дислокації крайовими?
- 3.59. Гвинтова дислокація, поглинаючи вакансії із зони радіусом  $R$ , скручується в гелікоїд з радіусом спіралі  $r$  і кроком  $h$ . Який можливий крок спіралі, якщо радіус стікання  $R = r$  і пересичення  $\Delta C_v = 10^{-4}$ ? Які розміри спіралі, якщо  $r = h$ ?

- 3.60. Надлишок вакансій  $\Delta C_v$  стікає з зони радіусом  $R$  за час  $\tau = \frac{R^2}{D_v}$ . Яку частину від  $R$  складає за цей час шлях  $x$  дифузії

домішки заміщення з урахуванням її прискорення нерівноважними вакансіями? Як залежить шлях  $x$  від густини дислокацій  $\rho$ , якщо стікання іде лише на дислокації, а пересичення  $\Delta C_v$  створено генерацією вакансій при деформації  $\lambda \sim 1$ .

- 3.61. Опромінення міді потоком швидких нейтронів  $j = 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  генерує  $n = 200$  пар вакансія – міжвузловинний атом на один співудар при пробігу нейтрона  $l = 5 \text{ см}$ . Їхнє стікання на дислокації густиною  $\rho$  викликає переповзання.

Переміщення дислокацій на відстань  $x = \rho^{-\frac{1}{2}}$  призводить до перебудови дислокаційної структури. Оцінити нижню межу сталої часу перебудови  $\tau$  у процесі, що встановився (коли генерація дорівнює стіканню) у припущенні, що вакансії та міжвузловинні атоми стікають на різні дислокації, та інші процеси стікання неможливі).

- 3.62. Знайдіть поле дотичних напружень двох паралельних різноіменних крайових дислокацій із загальною площиною ковзання, якщо відстань між ними  $2a$ . Порівняйте закон зменшення напружень із відстанню  $r$  від центра цієї системи і одиночної дислокації  $r \gg a$  вздовж осей  $x = 0$ ,  $y = 0$  і уздовж променя  $\theta = \text{const}$ .

- 3.63. В площині  $y=0$  уздовж осі  $x=0$  лежить гвинтова дислокація 1 з вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , а в площині  $y=h$  рухається паралельна їй крайова дислокація 2 з таким же вектором Бюргерса. Знайдіть, в якій точці  $x$  сила взаємодії між дислокаціями максимальна. Вкажіть зовнішнє напруження, необхідне для того, щоб дислокація 2 пройшла через цю точку.
- 3.64. В площині  $z=0$  уздовж осі  $x=0$  лежить гвинтова дислокація 1, в площині  $z=h$  уздовж осі  $x=y$  – крайова дислокація 2. Знайдіть силу взаємодії  $F_{12}$ . Як залежать величина і положення максимуму  $F_{12}(x)$  від відстані між площинами ковзання?
- 3.65. Випишіть усі можливі площини поперечного ковзання для гвинтової дислокації  $\frac{a}{2} [111] (\bar{2}11)$  в ОЦК гратці. Знайдіть сили, що діють на цю дислокацію в різних площинах ковзання, якщо зовні прикладено дотичне напруження  $\tau$  в площині  $(211)$  у напрямку  $[111]$ .
- 3.66. Продиференціювавши енергію поля двох гвинтових дислокацій по відстані між ними  $\xi$ , покажіть, що сила взаємодії між ними  $F_{12}$  дорівнює силі, з якою діє на дислокацію 2 одиночне напруження, що створюється дислокацією 1 на осі дислокації 2.
- 3.67. Гвинтова дислокація з вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_2$  уздовж осі  $z$  рухається в полі нерухомої паралельної однойменної гвинтової дислокації з координатами  $x=0$ ,  $y=0$  по рівнодіючій двох сил: від сталого напруження  $\sigma_{yz}$  та від сили відштовхування дислокацій  $F_{12}$ . Знайдіть траєкторію руху, якщо на початку (при  $x=-\infty$ ) площиною ковзання була  $y=h$ . На яку висоту  $H = y(+\infty) - y(-\infty)$  підніметься дислокація в результаті подвійного поперечного ковзання? Від чого залежить ця висота?

*Вказівка:* диференційне рівняння траєкторії перетворити до вигляду  $x(u)$ , де  $u = \frac{y}{x}$ .

- 3.68. Чому дорівнює сила пружної взаємодії дислокаційної петлі, яка ковзає у площині  $(111)$  ГЦК ґратки, та сидячої дислокації Франка в цій площині?
- 3.69. Визначте силу, що діє на гвинтову дислокацію з вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , яка має напрямок  $[111]$ , якщо: а) на кристал у площині  $(001)$  діють дотичні напруження  $\tau$ , що мають напрямок  $[1\bar{1}0]$ ; б) на кристал діють розтягуючі напруження  $\sigma$ , які мають напрямок, співпадаючий з віссю  $[010]$ ; в) на кристал у площині  $(001)$  діють дотичні напруження  $\tau$ , що мають напрямок  $[100]$ .
- 3.70. Визначте силу, що діє на крайову дислокацію з вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , що має напрямок  $[110]$ . На кристал діють розтягуючі напруження  $\sigma$ , що мають напрямок  $[111]$ .
- 3.71. Крайова дислокація в кристалі NaCl паралельна напрямку  $[001]$ , а її вектор Бюргерса дорівнює  $\frac{a}{2}[110]$ . Розрахуйте об'єм матеріалу (на  $l$  довжини лінії дислокації), який необхідно додати до краю цієї екстраплощини або прибрати з нього, якщо вона просувається на  $L$  у напрямку  $[100]$ .
- 3.72. Визначте силу взаємодії між двома однойменними крайовими дислокаціями, які мають напрямок  $[001]$ , вектори Бюргерса яких мають напрямок  $[100]$ . Відстань між дислокаціями  $r$ . Визначте умови, при яких сила взаємодії дорівнює нулю.
- 3.73. Визначте силу взаємодії між паралельними крайовою та правогвинтовою дислокаціями. Крайова дислокація має напрямок  $[001]$ , а вектор Бюргерса –  $[100]$ .
- 3.74. Для гвинтової дислокації  $\frac{a}{2}[111](\bar{2}11)$  в ґратці ОЦК випишіть усі можливі площини поперечного ковзання. Знайдіть кути між цими площинами і первинною площиною ковзання  $(\bar{2}11)$ . Накресліть схему. Знайдіть сили, що діють на цю дислокацію в різних площинах поперечного ковзання, якщо зовні

приклали дотичне напруження  $\tau = 50$  МПа у площині  $(\bar{2}11)$  в напрямку  $[111]$ .

3.75. Розгляньте дві паралельні крайові дислокації А та В з векторами Бюргера, які знаходяться під кутом  $\alpha$ . Припустіть, що дислокація А знаходиться на початку координат і що обидві дислокації весь час залишаються паралельними.

а) Виразіть точно силу взаємодії як функцію  $R$ ,  $\theta$  і  $\alpha$ .

б) Чи існує положення рівноваги для дислокації В? Якщо існує, то де?

в) Покажіть, що при  $R = \text{const}$  величина  $F(\theta)$  прямує до

$$\text{нуля, коли } \theta \rightarrow \frac{\alpha}{2}.$$

3.76. Порівняйте графічно силу взаємодії двох коаксіальних дислокаційних петель, співвіднесу до одиниці довжини, яка є функцією від  $z$ , для випадку  $a = 200b$  із силою взаємодії (теж на одиницю довжини) двох паралельних крайових дислокацій, розташованих в одній площині ковзання, залежної від відстані між ними. В якому випадку сила взаємодії зменшується ще швидше зі збільшенням відстані? Чому?

3.77. Визначте локальну силу взаємодії двох перпендикулярних гвинтових дислокацій як функцію положення елементів на дислокаціях. Одна з дислокацій є правогвинтовою, а інша – лівогвинтовою і вони знаходяться в однорідному полі зовнішніх напружень, яке зсуває ці дислокації. Визначте якісно конфігурацію цих дислокацій у випадку, коли сила взаємодії між ними компенсує силу зовнішніх напружень.

3.78. Визначте силу локальної взаємодії гвинтової і перпендикулярної до неї крайової дислокації; вектор Бюргера крайової дислокації паралельний лінії найменшої відстані між ними. Покажіть, що вектори сил, діючих на ці дислокації, перпендикулярні, в результаті чого дія і протидія не компенсують одна іншу. Обсудіть це, на перший погляд, грубе порушення закону Ньютона.

3.79. Розгляньте чотири паралельні крайові дислокації, які знаходяться в одній площині ковзання, за відсутності зовнішнього напруження, але закріплені на обох кінцях на відстані  $L$

бар'ерами, обумовленими дуже короткодійчими, відштовхуючими силами, діючими на відстані порядку атомних розмірів. Визначте рівноважну конфігурацію ряду таких дислокацій в припущенні, що переповнення неможливе.

- 3.80. Розгляньте прямолінійну гвинтову дислокацію, паралельну жорсткій поверхні, тобто деформація цієї поверхні неможлива. Покажіть, що дислокація відштовхується від цієї поверхні з силою, еквівалентною силі з боку дислокації зображення того ж знаку і з тим же вектором Бюргерса. (Цей приклад відповідає випадку дислокації, паралельної поверхні, яка покрита жорстким шаром окису).
- 3.81. Використовуючи результат, отриманий у попередній задачі, визначте рівноважний радіус  $r_0$  порожньої дислокації. Вважайте поверхневу енергію  $\gamma$  порожньої всередині трубки рівною поверхневій енергії масивного зразку. Якої величини необхідний вектор Бюргерса для отримання порожньої дислокації радіусом  $r_0 = 10 \text{ \AA}$  в міді з  $\gamma = 1,7 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$ .
- 3.82. Монокристал заліза розтягується вздовж осі  $[100]$  напруженням  $\sigma = 50 \text{ МПа}$ . Дислокація  $\frac{a}{2}[111]$  ковзає по площині  $(10\bar{1})$ . Вкажіть площину типу  $\{211\}$ , найбільш вигідну для поперечного ковзання. Оцініть мінімальну довжину ділянки дислокації з гвинтовим орієнтуванням, достатню для розмноження дислокацій шляхом поперечного ковзання. Прийміть вектор Бюргерса  $b = 2,5 \text{ \AA}$ ,  $G = 80 \text{ ГПа}$ .
- 3.83. У гвинтовій дислокації в кристалі міді з густиною дислокацій  $\rho$  при русі з'являються сходинок, які в подальшому генерують вакансії. Знайдіть обумовлений генерацією опір ковзанню в залежності від пройденого шляху  $x$ . Вважається, що дислокації рівномірно розподілені між усіма системами ковзання, а сходинок генерують лише вакансії.

Знайдіть граничний пробіг дислокації при  $\frac{\tau}{G} = 10^{-3}$ ;

$\rho = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ;  $b = 2,5 \text{ \AA}$  (злиттям і анігіляцією частинок знехтувати).

- 3.84. При ковзанні дислокацій на них встановлюється рівноважна густина сходинок, що генерують вакансії  $\frac{1}{l} = \sqrt{\rho}$  ( $\rho$  – густина дислокацій). Робота генерації вакансій сходинками рівносліжна додатковому опору ковзанню  $\tau'$ . Порівняйте опір ковзанню від генерації вакансії  $\tau'$  та від полів дислокацій

$$\tau'' = \frac{Gb}{2\pi} \sqrt{\rho}.$$

- 3.85. Уздовж гвинтової дислокації з вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  розміщені сходинок висотою  $b$  з середнім кроком  $l$ . Дотичне напруження в площині ковзання дорівнює  $\tau$ , а в площині ковзання сходинок відсутнє. Напруження  $\tau$  спотворює дислокацію, і дві її гілки відходять від сходинок під кутами  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$  з віссю  $\mathbf{b}$ , які можуть бути нерівними внаслідок випадкових флуктуацій кроку  $l$ . При  $\alpha_1 \neq \alpha_2$  рівнодіюча  $F$  натягу двох гілок викликає ковзання сходинок уздовж  $\mathbf{b}$ , що рівнослічне дії в площині ковзання сходинок дотичного напруження  $\tau'$ . Опишіть залежність сили  $F$  від співвідношення кроків  $\frac{l_1}{l_2}$  при  $l_1 + l_2 = 2\bar{l} = \text{const}$ . Знайдіть залежність найбільшого і середнього за всіма  $\frac{l_1}{l_2}$  відношення  $\frac{\tau'}{\tau}$  від середнього кроку  $\bar{l}$ .

- 3.86. Який стаціонарний крок сходинок на дислокації, якщо швидкість їхнього ковзання уздовж дислокації  $v_k$  дорівнює швидкості ковзання дислокації  $v_d$ , а густина сукупності дислокацій  $\rho$ .

- 3.87. Знайдіть опір ковзанню крайової дислокації в алюмінію, обумовлений утворенням сходинок, якщо густина дислокацій  $\rho$ , і

вони рівномірно розподілені між усіма можливими площинами ковзання. Вектор Бюргерса  $b = 2,86 \text{ \AA}$ , модуль зсуву  $G = 27 \text{ ГПа}$ .

- 3.88. Крайова дислокація, що рухається зі швидкістю  $v_d$ , може потягнути за собою домішок, якщо швидкість дрейфу домішки під дією градієнта тиску дорівнює  $v_d$ . При якій швидкості  $v_d$  можливе захоплення карбону і водню в  $\alpha$ -залізі при температурі 300 К в радіусі  $\frac{r}{b} = 10$ ? Модуль зсуву  $G = 80 \text{ ГПа}$ ,

період ґратки  $a = 2,86 \text{ \AA}$ , парціальні об'єми  $v_c = 5,6 \frac{\text{см}^3}{\text{моль}}$ ;

$v_H = 2 \frac{\text{см}^3}{\text{моль}}$ ; в  $\alpha$ -залізі для дифузії карбону  $D_0 = 0,02 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,

$E_a = 82 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ , для водню при низьких температурах

$D_0 = 0,12 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,  $E_a = 32 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ .

- 3.89. Для того, щоб сходинка на дислокації генерувала вакансії, рухомі її гілки дислокації мають складати досить великий кут  $\alpha$  з її напрямком ковзання. При даному напруженні  $\tau$  дугу дислокації з кутом  $\alpha$  в основі сегменту можна отримати лише при достатньо великій відстані  $l_{кр}$  між сходинками – точками закріплення. Тому сходинки не будуть генерувати вакансії до тих пір, поки їх ковзання й анігіляція не збільшать крок сходинок до величини  $l_{кр}$ . Який мінімально можливий крок «одноатомних» сходинок, які рухаються неконсервативно при напруженні  $\tau$ ? Як залежить гранично можлива концентрація вакансій  $C_v$  від напруження  $\tau$ ? Яка швидкість ковзання сходинок  $v_c$  дозволяє підтримати крок  $l_{кр}$  при швидкості дислокації  $v_d$ ?

- 3.90. Якщо взаємодія атома домішки з полем напружень викликана збуренням модуля пружності  $\Delta G$ , то найбільша енергія її вза-

ємодії з крайовою дислокацією  $\Delta U_A^k$  на відстані  $|\mathbf{r}|$  від неї залежить від кута  $\theta$  між  $\mathbf{r}$  і площиною ковзання. При якому  $\theta_0$  досягається максимум  $\Delta U_A^k$ , якщо коефіцієнт Пуассона  $\mu = \frac{1}{3}$ ? Як зміниться положення максимуму  $\theta_0$  і значення  $\Delta U_A^k$  в максимумі, якщо коефіцієнт Пуассона змінюється від  $\frac{1}{4}$  до  $\frac{1}{2}$ ?

- 3.91. Який напрямок в точці  $(x, y)$  має найбільше розтягуюче напруження  $\sigma_{11}$  в полі гвинтової дислокації з віссю  $z$ ? Яка його величина?
- 3.92. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації в ГЦК гратці на дві часткові дислокації Шоклі.
- 3.93. Запишіть реакцію об'єднання дислокації Шоклі та дислокації Франка в ГЦК гратці з утворенням повної дислокації.
- 3.94. Запишіть реакцію взаємодії двох часткових дислокацій Шоклі в ГЦК гратці з утворенням вершинної дислокації.
- 3.95. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації в ГЦУ гратці на дві часткові дислокації Шоклі.
- 3.96. Порівняйте кількість атомів, у яких порушене найближче оточення (тобто оточення стало таким, як у атома в ГЦУ структурі замість атома в ГЦК структурі) для дефектів пакування типу впровадження і типу вакансії в ГЦК металах. Яка структура утвориться, якщо обидві часткові дислокації Шоклі в бар'єрі Ломер – Котрелла змусити ковзати до протилежних сторін вершинної дислокації?
- 3.97. Скільки різних бар'єрів Ломер – Котрелла може утворитися, якщо вважати, що одна з дислокацій, які утворюють цей бар'єр, відповідає лише одній визначеній площині ковзання і одному напрямку ковзання? Для системи ковзання  $(111)$   $[\bar{1}01]$  наведіть вектори Бюргерса кожної частинної дислокації у всіх можливих бар'єрах Ломер – Котрелла.

- 3.98. Оцініть рівноважну відстань між вершинною дислокацією  $\frac{a}{6}[011]$  та частковою дислокацією Шоклі  $\frac{a}{6}[211]$  в дислокації Ломер – Котрелла в золоті (без урахування орієнтації векторів Бюргерса відносно дислокаційних ліній).
- 3.99. Запишіть реакцію розщеплення повної дислокації на дві часткові дислокації Франка в ГЦУ гратці.
- 3.100. Вважаючи середовище пружно ізотропним, розрахуйте ширину розщеплення на часткові дислокації Шоклі для гвинтової дислокації в Ag, Al та Au. Вважайте для Ag  $G = 2,8 \cdot 10^{10}$  Па,  $\mu = 0,38$ ; для Al  $G = 2,6 \cdot 10^{10}$  Па,  $\mu = 0,34$ ; для Au  $G = 2,8 \cdot 10^{10}$  Па,  $\mu = 0,42$ .
- 3.101. Розрахуйте ширину розтягнутої крайової дислокації в золоті, прийнявши коефіцієнт Пуассона  $\mu = 0,42$ .
- 3.102. Розрахуйте енергію дефекту пакування в сріблі, якщо ширина розтягнутої дислокації в ньому дорівнює 3,4 нм. Коефіцієнт Пуассона для срібла  $\mu = 0,38$ .
- 3.103. Визначте відношення ширини розщепленої крайової дислокації до ширини розщепленої гвинтової дислокації, прийнявши коефіцієнт Пуассона  $\mu = \frac{1}{3}$ .
- 3.104. Оцініть ширину розтягнутих дислокацій в міді.
- 3.105. Поле напружень навколо розщепленої гвинтової дислокації взаємодіє з домішками. Чи виникає у такому випадку логарифмічна розбіжність? Виведіть формулу для гальмування атмосферою Котрелла для цього випадку.
- 3.106. Розгляньте гальмування крайової дислокації атмосферою Котрелла у сплаві A–B, який не є розбавленим розчином. Який коефіцієнт дифузії потрібно використовувати в цьому випадку.
- 3.107. З'ясуйте якісно вплив енергії зв'язку між домішками в ядрі на відрив дислокацій від цих домішок.
- 3.108. З'ясуйте вклад різних факторів в енергію зв'язку дислокації з іншою фазою, розташованою у вигляді трубки на дислокації. Розрахуйте енергію зв'язку в залежності від зміщення у випадку порожнього ядра дислокації.

- 3.109. Розгляньте можливість блокування атмосфери Сузукі вакансіями розщеплених дислокацій в чистих металах.
- 3.110. Оцініть порядок величини енергії зв'язку між розчиненою речовиною та дислокацією, яка забезпечує спонтанне утворення дислокацій у пересиченому твердому розчині.
- 3.111. Знайдіть контури сталого гідравлічного тиску  $P = \text{const}$  в полі крайової дислокації, що відповідають постійному рівню сегрегації Коттрелла  $C_A = \text{const}$ . Де знаходяться точки найбільшої, найменшої і нульової зміни концентрації домішки заміщення на окружності  $r = \text{const}$ ?
- 3.112. Оцініть температуру конденсації атмосфер Коттрелла в залізі з 0,01% (за масою) N, якщо енергія взаємодії крайової дислокації з атомом нітрогену  $U = 0,5$  еВ. Як зміниться ця температура після очищення заліза до 0,001% (за масою) N?
- 3.113. В наклепаному залізі з 0,002% (за масою) C, сегрегації Коттрелла конденсуються за добу при 20 °С. При яких температурах за той же час конденсуються сегрегації водню, якщо в 100 г заліза міститься 10 см<sup>3</sup> водню (при 300 К)? В  $\alpha$ -залізі для дифузії карбону  $D_0 = 0,02 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,  $E_a = 82 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ , для гідрогену при низьких температурах  $D_0 = 0,12 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,  $E_a = 32 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ .

#### 4. Механічні властивості твердих тіл

##### Основні формули і визначення

**Деформацією** твердого тіла називають змінення його розмірів і об'єму, яке найчастіше супроводжується зміненням форми тіла. Інколи (всебічне стиснення або розтягнення) форма тіла зберігається. Деформацію спричиняють змінення температури або дії зовнішніх сил. Під час деформації частинки, які знаходяться у вузлах кристалічних ґраток твердих тіл, зсуваються з початкових по-

ложень рівноваги в нові. Цьому перешкоджають сили взаємодії між частинками, внаслідок чого в деформованому тілі виникають внутрішні **пружні сили**, які врівноважують зовнішні сили, прикладені до тіла.

**Пружно** називають деформацію, яка зникає після припинення дії сили, що її викликала. При цьому частинки зсуваються з нових положень рівноваги в кристалічній ґратці у вихідні. **Непружні** деформації твердого тіла, які супроводжуються незворотною перебудовою його кристалічної ґратки, називають **пластичними**.

**Ізотропні тверді тіла.** Напруженням  $\sigma$  називають фізичну величину, рівну пружній силі  $F_{\text{пр}}$ , яка припадає на одиницю площі  $S$  перерізу тіла:

$$\sigma = \frac{dF_{\text{пр}}}{dS}. \quad (4.1)$$

Напруження називають **нормальним**, якщо сила  $dF_{\text{пр}}$  нормальна поверхні, і **дотичним**, якщо сила дотична до цієї поверхні.

Мірою деформації є **відносна деформація**  $\varepsilon$ , яка дорівнює відношенню абсолютної деформації  $\Delta x$  до початкового значення величини  $x_0$ , що характеризує розміри або форму тіла

$$\varepsilon = \frac{\Delta x}{x_0}. \quad (4.2)$$

**Закон Гука:** напруження при пружній деформації тіла пропорційне відносній деформації:

$$\sigma = K\varepsilon = K \frac{\Delta x}{x_0}, \quad (4.3)$$

де  $K$  – модуль пружності, рівний напруженню, яке виникає при відносній деформації, що дорівнює одиниці.

Величину  $a = \frac{1}{K}$  називають **коефіцієнтом пружності**. Закон

Гука справедливий в певних межах деформацій. Напруження, при якому порушується пропорційність між величиною напруження і деформацією називають **границею пропорційності**.

**Однобічне, або поздовжнє, розтягання (стискання)** полягає у збільшенні (зменшенні) довжини тіла під дією сили  $F$ , що розтягує (стискає). Пружне розтягнення (стиснення) припиняється за умови  $F_{\text{пр}} = F$ , де  $F_{\text{пр}}$  – пружна сила. Мірою деформації є **відносне**

**подовження (стискання)** –  $\frac{\Delta l}{l_0}$ . У цьому випадку  $K = E$ ; величину

$E$  називають **модулем Юнга**. При цьому  $\frac{\Delta x}{x_0} = \frac{\Delta l}{l_0}$ . За законом Гу-

ка

$$\Delta l = \frac{Fl_0}{ES}, \quad (4.4)$$

де  $l_0$  – початкова довжина тіла,  $\Delta l$  – змінення довжини при навантаженні  $F$ . При  $\Delta l = l_0$  модуль Юнга дорівнює напруженості, яке виникає в зразку при збільшенні (зменшенні) його довжини вдвічі

за незмінних умов:  $E = \frac{F}{S} = \sigma$ .

Відносне поздовжнє розтягнення (стиснення) зразка супроводжується його **відносним поперечним звуженням (розширенням)**

$\frac{\Delta d}{d_0}$ , де  $d_0$  – поперечний розмір зразка. Коефіцієнтом Пуассона  $\mu$  називають відношення відносного поперечного звуження

(розширення)  $\frac{\Delta d}{d_0}$  до відносного поздовжнього видовження (стис-

кання)  $\frac{\Delta l}{l_0}$ :

$$\mu = \frac{\Delta d}{d_0} : \frac{\Delta l}{l_0}. \quad (4.5)$$

Після досягнення границі пропорційності (точка А на діаграмі розтягнення, рис. 4.1) подовження зростає швидше, ніж напруження. **Границею пружності**  $\sigma_{\text{пруж}}$  (точка А') називають мак-

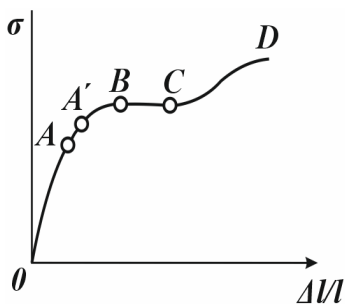


Рисунок 4.1

симальне напруження, при якому ще немає залишкових деформацій (залишаються в тілі після зняття напруження). **Границя плинності**  $\sigma_{\text{плин}}$  (точка B) характеризує стан деформованого тіла, після якого подовження зростає без збільшення діючої сили (горизонтальна ділянка BC). **Границею міцності**  $\sigma_{\text{міцн}}$  (точка D) називають напруження при найбільшому навантаженні, яке тіло витримує перед руйнуванням.

При багаторазових деформаціях, що відповідають переходу за границю пружності, з подальшим вивільненням зразка від деформуючих сил пружність тіла зростає, і границя пропорційно збільшується (*загартування*, або *наклеп*, матеріалу).

**Запасом міцності** називають відношення границі міцності до припустимого напруження (напруження, якому піддають матеріал в процесі роботи)

$$n = \frac{\sigma_{\text{міцн}}}{\sigma_{\text{прип}}} . \quad (4.6)$$

Об'ємну густину потенціальної енергії тіла при розтягненні (стисненні) визначають питомою роботою  $A_{\text{пр}}$  з подолання пружних сил (розрахованою на одиницю об'єму тіла). В області, де справедливий закон Гука,

$$w_{\sigma} = A_{\text{пр}} = \frac{\sigma^2}{2E} . \quad (4.7)$$

**Деформація всебічного розтягнення (стиснення)** – це збільшення (зменшення) об'єму тіла без зміни його форми під впливом рівномірно розподілених по всій поверхні тіла розтягуючих (стискаючих) сил. За законом Гука

$$\sigma = K \frac{\Delta V}{V_0} , \quad (4.8)$$

де  $\frac{\Delta V}{V_0}$  – відносне збільшення (зменшення) об'єму тіла під дією

напруження  $\sigma$ . Величину  $K$  називають **модулем всебічної об'ємної пружності**, вона має зміст напруження, при якому відносне збільшення (зменшення) об'єму дорівнює одиниці:

$$K = \frac{E}{3(1-2\mu)}. \quad (4.9)$$

**Зсувом** називають деформацію, при якій всі плоскі шари твердого тіла, паралельні деякій площині (**площині зсуву**), не викривляючись і не змінюючись у розмірах, зміщуються паралельно один одному (рис. 4.2). Зсув відбувається під дією сили  $F$ , прикладеної дотично до грані  $BC$ , паралельній площині зсуву. Грань  $AD$  закріплена нерухомо.

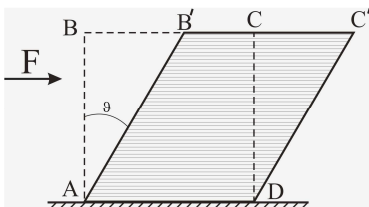


Рисунок 4.2

Мірою деформації  $\frac{\Delta x}{x}$  є кут зсуву  $\theta$  (відносний зсув), виражений у радіанах. Для малих деформацій

$$\theta \approx \text{tg}\theta = \frac{\Delta x}{x},$$

де  $\Delta x = CC'$  – абсолютний зсув.

За законом Гука відносний зсув пропорційний дотичному („сколюючому“) напруженню  $\tau$ :

$$\tau = \frac{F}{S} = G\theta, \quad (4.10)$$

де  $G$  – модуль зсуву, рівний дотичному напруженню, яке викликає одиничний відносний зсув. Він пов'язаний з модулем Юнга  $E$  і коефіцієнтом Пуассона  $\mu$  співвідношенням

$$G = \frac{E}{2(1+\mu)}. \quad (4.11)$$

Об'ємна густина потенціальної енергії деформованого тіла під час зсуву дорівнює

$$w_s = \frac{\sigma_\tau^2}{2G}. \quad (4.12)$$

**Крученням** називають деформацію зразка з одним закріпленим кінцем під дією пари сил, що лежать у площині, перпендикулярній осі зразка. Момент  $M_k$  цієї пари називають крутильним. Кручення – це відносний оберт паралельних один одному перерізів, проведених перпендикулярно до осі зразка. У разі кручення круглого циліндричного тіла перерізи, перпендикулярні до його осі, обертаються довкола осі тіла, зберігаючи свою форму і залишаючись паралельними один одному. Якщо  $\varphi$  – кут повороту,  $z$  – виміряна по осі зразка відстань від закріпленого кінця, то різниця кутів повороту двох нескінченно близьких перерізів (віддалених один від одного на  $dz$ ) дорівнює

$$d\varphi = \frac{d\varphi}{dz} dz = \theta' dz,$$

де  $\theta' = \frac{d\varphi}{dz}$  – відносний кут кручення, який є мірою деформації. Повний оберт даного перерізу пропорційний його відстані від початку координат:

$$\varphi = \theta' z.$$

**Закон Гука для кручення:**

$$\theta' = \frac{M_k}{GJ_p}, \quad (4.13)$$

де  $M_k$  – крутильний момент,  $G$  – модуль зсуву,  $J_p$  – полярний момент інерції перерізу. Для кругового перерізу радіусом  $R$  величина  $J_p = \frac{\pi R^4}{2}$ .

Кут повороту між крайніми перерізами зразка довжиною  $L$  дорівнює

$$\varphi = \frac{M_{\kappa} L}{GJ_p}, \quad \text{або} \quad M_{\kappa} = \frac{GJ_p}{L} \varphi. \quad (4.14)$$

Крутильний момент, тобто момент, який закручує на кут  $\varphi$  однорідний круглий стрижень довжиною  $L$  і радіусом  $R$  дорівнює:

$$M_{\kappa} = \frac{\pi G R^4}{2 L} \varphi. \quad (4.15)$$

Об'ємна густина потенціальної енергії деформованого круглого циліндра дорівнює

$$w_{\kappa} = \frac{M_{\kappa}^2 r^2}{2GJ_p^2}, \quad (4.16)$$

де  $r$  – відстань від осі циліндра.

Якщо до нижнього кінця закріпленого циліндричного дроту прикріплено тіло з моментом інерції  $J$  відносно осі дроту, то диференціальне рівняння крутильних коливань, які виникають при крученні, має вигляд

$$J \frac{d^2 \varphi}{dt^2} = - \frac{GJ_p}{L} \varphi. \quad (4.17)$$

Його розв'язок дозволяє обчислити період крутильних коливань.

**Анізотронні тверді тіла.** Стан тіла з однорідними напруженнями називають **однорідним напруженим станом**, що задається симетричним тензором другого рангу  $\sigma_{ij}$ , компоненти якого  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$  називаються **нормальними напруженнями**, решта – **дотичними напруженнями** або **зсувовими компонентами напружень**. Симетричний тензор  $\sigma_{ij}$  можна привести до головних осей, при цьому зсувові компоненти напружень зникають і залишаються **головні напруження**  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $\sigma_3$ .

Основними видами деформації є поздовжня (видовження та скорочення) та деформація зсуву. **Видовження (скорочення)** ви-

значають як відношення зміни довжини тіла (відрідка) до його вихідної довжини:

$$e_{11} = \frac{\Delta u_1}{\Delta x_1}. \quad (4.18)$$

**Деформацією зсуву** називають відносне зміщення однієї частини тіла відносно іншої вздовж деякої площини. Величина деформації зсуву визначається як відношення переміщення до відстані до цієї площини

$$e_{12} = \frac{\Delta u_1}{\Delta x_2} = \operatorname{tg} \theta. \quad (4.19)$$

Іншими словами, зсув можна розглядати як міру змінення кута між двома прямими лініями, довільно орієнтованими у деформірованому тілі.

Деформація в точці визначається виразом

$$e = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{du}{dx}, \quad (4.20)$$

звідки  $du = edx$ .

Розглянемо деформацію відрідка в площині. Нехай відрідок  $PQ$ , що лежить у площині  $(x_1, x_2)$ , після деформації перетворюється у відрідок  $P'Q'$ . Координати точки  $P$  –  $(x_1, x_2)$ , а точки  $P'$  –  $(x_1 + u_1, x_2 + u_2)$ . Компоненти вектора зміщення точки  $P$  –  $\mathbf{u} = \mathbf{PP}' = (u_1, u_2)$ . Координати точки  $Q$  –  $(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2)$ . Компоненти вектора зміщення точки  $Q$  –  $\mathbf{QQ}' = (u_1 + \Delta u_1, u_2 + \Delta u_2)$ . Легко бачити, що

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2, \quad (4.21)$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2. \quad (4.22)$$

Вводячи позначення,  $\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \equiv u_{11}$ ,  $\frac{\partial u_1}{\partial x_2} \equiv u_{12}$ ,  $\frac{\partial u_2}{\partial x_1} \equiv u_{21}$ ,  $\frac{\partial u_2}{\partial x_2} \equiv u_{22}$ ,

можна записати (4.21) і (4.22) у загальному вигляді

$$\Delta u_i = u_{ij} \Delta x_j. \quad (4.23)$$

Оскільки  $\Delta u_i$  і  $\Delta x_j$  – вектори, то коефіцієнти  $u_{ij}$ , що зв’язують їх, утворюють полярний тензор 2-го рангу, який називають **тензором кінцевих деформацій**, або **тензором пружної дисторсії**.

Представимо тензор кінцевих деформацій у вигляді суми симетричного та антисиметричного тензорів:

$$u_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji}) + \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji}) = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}. \quad (4.24)$$

Тепер  $\varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji})$  визначає полярний тензор, який називають

**тензором деформації**, а  $\omega_{ij} \equiv \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji})$  – аксіальний тензор, який називають **тензором поворотів**. Геометрична інтерпретація рівняння (4.24) наведена на рис. 4.3

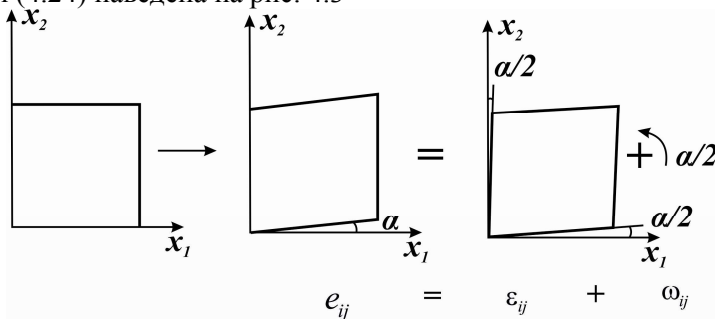


Рисунок 4.3 – Геометрична інтерпретація рівняння (4.24)

Внаслідок симетричності тензора  $\varepsilon_{ij}$  його можна привести до головних осей:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}, \quad (4.25)$$

де  $\varepsilon_{11}$ ,  $\varepsilon_{22}$ ,  $\varepsilon_{33}$  – компоненти тензора стискання або розтягання, а решта  $\varepsilon_{ij}$  – компоненти деформації зсуву;  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  – головні деформації.

Тензор поворотів  $\omega_{ij}$  має вигляд

$$\begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

його компоненти визначають аксіальний вектор повороту  $\boldsymbol{\omega}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ .

З використанням тензорів напруження і деформації закон Гука (4.3) в узагальненій формі має вигляд:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (4.27)$$

або

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad (4.28)$$

де коефіцієнти пружної жорсткості  $c_{ijkl}$  та пружної піддатливості  $s_{ijkl}$  є тензорами четвертого рангу, які в загальному випадку мають 81 компоненту. Проте в силу симетричності тензорів  $c_{ijkl}$  та  $s_{ijkl}$  по відношенню до перестановки індексів замість 81 коефіцієнта пружності лишається 21 коефіцієнт.

Наявність тієї чи іншої симетрії кристала призводить до появи залежностей між різними компонентами тензора  $c_{ijkl}$  (або  $s_{ijkl}$ ), так що кількість його незалежних компонентів виявляється меншою, ніж 21:

триклинна	18
моноклинна	12
ромбічна	9
тетрагональна	6
ромбоедрична	6
гексагональна	5
кубічна	3

Коефіцієнти пружності  $c_{ijkl}$  і  $s_{ijkl}$  в (4.27) і (4.28) зручніше записати за допомогою матричних позначень замість тензорних.

Тензорні позначення:	11	22	33	23	32	31	13	12	21
Матричні позначення:	1	2	3	4		5		6	

Тепер (4.27) і (4.28) можна записати як

$$\sigma_j = c_{ij} \varepsilon_i \quad (4.29)$$

і

$$\varepsilon_j = s_{ij} \sigma_i, \quad (4.30)$$

де  $i, j = \overline{1,6}$ . Матриці  $c_{ij}$  і  $s_{ij}$  є взаємно оберненими, тобто  $c_{ij} s_{jk} = \delta_{ik}$ , де  $\delta_{ik}$  – одинична матриця. Внаслідок симетрії кристала деякі з компонентів  $c_{ij}$  і  $s_{ij}$  стають рівними нулю або рівними один одному, а кількість незалежних серед ненульових коефіцієнтів зменшується.

Матриці коефіцієнтів пружності для кристалів кубічної сингонії мають вигляд:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 & s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 & s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 & s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

а для кристалів гексагональної сингонії

$$\begin{array}{cccccc}
c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\
c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\
c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})
\end{array} \tag{4.32, a}$$

$$\begin{array}{cccccc}
s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\
s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\
s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(s_{11} - s_{12})
\end{array} . \tag{4.32, б}$$

Якщо використати більш звичні величини:  $E$  – модуль Юнга,  $G$  – модуль зсуву і  $\mu$  – коефіцієнт Пуассона, отримаємо

$$s_{11} = \frac{1}{E}, \quad s_{12} = -\frac{\mu}{E}, \quad s_{44} = \frac{1}{G}.$$

В кубічних кристалах вводять параметр пружної анізотропії

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} = \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}}.$$

Щоб визначити модуль Юнга в довільному напрямку, яке задається напрямними косинусами  $l_1, l_2, l_3$ , потрібно перетворити систему координат так, щоб вісь  $x'_1$  розташовувалась уздовж вибраного напрямку, тоді  $E(l_1, l_2, l_3) = \frac{1}{s'_{11}}$ .

Для кубічних кристалів

$$s'_{11} = \frac{1}{E_{l_1 l_2 l_3}} = s_{11} - 2 \left( s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{44} \right) (l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_1^2 l_3^2), \quad (4.33)$$

для гексагональних кристалів

$$s'_{11} = \frac{1}{E_{l_1 l_2 l_3}} = (1 - l_3^2)^2 s_{11} + l_3^4 s_{33} + l_3^2 (1 - l_3^2) (2s_{13} + s_{44}). \quad (4.34)$$

Відмітимо, що для кубічної сингонії модуль Юнга не є ізотропним. Для ГЦК кристалів модуль Юнга збільшується при русі від  $\langle 100 \rangle$  до  $\langle 111 \rangle$ , тоді як в ОЦК кристалів модуль Юнга при русі від  $\langle 100 \rangle$  до  $\langle 111 \rangle$  зменшується. З точки зору пружної анізотропії найбільш ізотропним є молібден, а серед ГЦК кристалів – алюміній.

Для ізотропних матеріалів параметр пружної анізотропії  $A = 1$ , звідки впливає співвідношення (4.11) і пружні властивості ізотропного тіла характеризують усього два коефіцієнти пружності  $c_{11}$  і  $c_{12}$  або  $s_{11}$  і  $s_{12}$ .

**Пружні властивості дислокації.** Утворення дислокації в кристалі характеризується викривленнями кристалічної ґратки. Викривлення, що виникають при утворення дислокації можна розбити на дві області: **ядро дислокації** (для  $r < r_0$ ,  $r_0$  – радіус ядра дислокації), де зміщення атомів з положень рівноваги порядку міжатомних відстаней і не виконуються закони пружності; та область  $r > r_0$ , що характеризується пружними викривленнями.

Для опису пружних властивостей дислокації також користуються поняттями тензора напружень та деформації. Тензор напружень пов'язує між собою вектор сили, що діє на одиницю площі, та орієнтацію цього елемента площі в напруженому тілі. Тензор деформації пов'язує зміщення точки в деформованому тілі з положенням цієї точки.

За визначенням дислокація створює таке поле зміщень  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , що для контуру Бюргерса будь-якого радіусу  $\oint d\mathbf{u} = \mathbf{b}$ . Тоді очевидно, що зміщення  $\mathbf{u}$  зі збільшенням відстані  $r$  від осі дислокації

спадають і для великих  $r$  поле зміщень можна досліджувати за допомогою лінійної теорії пружності. Повним описом поля буде тензор деформацій

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

що задовольняє основному рівнянню теорії пружності в переміщеннях

$$(1 - 2\mu)\Delta \mathbf{u} + \nabla(\nabla \mathbf{u}) = 0$$

та визначенню дислокації  $\oint d\mathbf{u} = \mathbf{b}$ . Із закону Гука для анізотропного середовища:

$$\sigma_{ij} = 2G\varepsilon_{ij}, \quad \sigma_{ii} = 2G \left( \varepsilon_{ii} + \frac{\mu}{1-2\mu} \varepsilon_{ll} \right), \quad (4.35)$$

де  $\varepsilon_{ll} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$  – дилатація (відносна зміна об'єму).

**Пружні хвилі в кристалах.** Поширення пружних хвиль в анізотропному середовищі, тобто в кристалах визначається загальними рівняннями руху:

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k},$$

де  $\sigma_{ik}$ , в свою чергу, визначається загальним співвідношенням:

$$\sigma_{ik} = c_{iklm} u_{lm}.$$

Підставляючи  $\sigma_{ik}$  в рівняння руху, отримаємо

$$\rho \ddot{u}_i = c_{iklm} \frac{\partial u_{lm}}{\partial x_k} = \frac{c_{iklm}}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial u_l}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m}{\partial x_l} \right) = \frac{1}{2} c_{iklm} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_m} + \frac{1}{2} c_{iklm} \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_k \partial x_l}.$$

Оскільки тензор  $c_{iklm}$  симетричний за індексами  $l$  та  $m$ , то, змінюючи в другому члені позначення індексів підсумовування  $l$  та  $m$

на зворотні, знаходимо, що перший та другий члени тотожні. Отже, отримуємо рівняння руху у вигляді

$$\rho \ddot{u}_i = c_{iklm} \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_k \partial x_l}. \quad (4.36)$$

Розглянемо монохроматичну пружну хвилю в кристалі. Для цього будемо шукати розв'язок рівнянь руху у вигляді

$$u_i = u_{0i} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

( $u_{0i}$  – сталі), причому співвідношення між хвильовим вектором  $\mathbf{k}$  та частотою  $\omega$  має бути визначене так, щоб записана функція задовольняла рівнянню (4.36). Диференціювання  $u_i$  за часом призводить до множення на  $-i\omega$ , а диференціювання за  $x_k$  – до множення на  $-ik_k$ . Тому рівняння (4.36) після підстановки перетворюється в

$$\rho \omega^2 u_i = c_{iklm} k_k k_l u_m.$$

Записавши  $u_i = \delta_{im} u_m$ , перепишемо цю рівність у вигляді

$$\left( \rho \omega^2 \delta_{im} - c_{iklm} k_k k_l \right) u_m = 0. \quad (4.37)$$

Це – система трьох однорідних рівнянь першого ступеня відносно невідомих  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$ . Як відомо, така система має відмінні від нуля розв'язки лише за умови рівності нулю визначника коефіцієнтів рівнянь

$$\left| c_{iklm} k_k k_l - \rho \omega^2 \delta_{im} \right| = 0. \quad (4.38)$$

Цим рівнянням визначається залежність частоти хвилі від хвильового вектора; про цю залежність кажуть як про **закон дисперсії** хвиль, а рівняння, що його визначає, називають **дисперсійним**. Рівняння (4.38) – рівняння третього ступеня по  $\omega^2$ . Воно має три різні корені  $\omega^2 = \omega_j^2(\mathbf{k})$  – три гілки закону дисперсії. Підставляючи по черзі кожен з цих коренів в рівняння (4.37) та розв'язавши їх, знайдемо напрямки вектора зміщення  $\mathbf{u}$  у цих хвилях, – напрямки їх **поляризації**. Напрямки поляризації трьох хвиль

з одним і тим самим хвильовим вектором  $\mathbf{k}$  взаємно перпендикулярні. Це твердження випливає з того, що рівняння (4.38) можна розглядати як рівняння, яке визначає головні значення симетричного тензора другого рангу  $c_{iklm}k_k k_l$ ; рівняння ж (4.37) визначають головні значення цього тензора, які, як відомо, взаємно перпендикулярні.

**Швидкість поширення хвилі** (її **групова швидкість**) визначається похідною

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}. \quad (4.39)$$

### Приклади розв'язування задач

**Приклад 4.1.** Під час розтягування мідного дроту (поперечний переріз  $S = 1,5 \text{ мм}^2$ ) початок залишкової деформації спостерігався під дією сили  $F = 44,1 \text{ Н}$ . Визначте границю міцності матеріалу дроту.

*Розв'язання*

Використовуючи вираз (4.1), отримуємо для границі міцності мідного дроту:

$$\sigma_{\text{міцн}} = \frac{F}{S} = \frac{44,1}{1,5 \cdot 10^{-6}} = 29,4 \text{ МПа}.$$

*Відповідь:*  $\sigma_{\text{міцн}} = 29,4 \text{ МПа}$ .

**Приклад 4.2.** Чому дорівнює видовження латунного стрижня довжиною 4 м, який має площу поперечного перерізу  $0,4 \text{ см}^2$ , під дією сили 1 кН? Модуль Юнга латуні дорівнює  $E = 0,9 \cdot 10^{11} \text{ Па}$ .

*Розв'язання*

Згідно закону Гука (4.4) абсолютне видовження тіла

$$\Delta l = \frac{Fl_0}{ES} = \frac{10^3 \cdot 4}{0,9 \cdot 10^{11} \cdot 4 \cdot 10^{-5}} = 1,1 \cdot 10^{-3} \text{ м} = 1,1 \text{ мм}.$$

*Відповідь:*  $\Delta l = 1,1 \text{ мм}$ .

**Приклад 4.3.** Мідний дріт площею поперечного перерізу  $S$ , довжиною  $l_1$  і сталевий дріт такої самої площі і довжиною  $l_2$  з'єднали між собою так, що загальна довжина дроту  $l = l_1 + l_2$ . Яку силу  $F$  потрібно прикласти до цього дроту, щоб збільшити його довжину на  $\beta$  відсотків? Модуль Юнга для міді  $E_1$ , для сталі –  $E_2$ .

*Розв'язання*

Відносне видовження дроту

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} \cdot 100\% = \beta,$$

де  $l = l_1 + l_2$ . Абсолютне видовження дроту  $\Delta l = \Delta l_1 + \Delta l_2$ ,  $\Delta l_1$  і  $\Delta l_2$  – абсолютне видовження відповідно мідного і сталевго дроту.

Відносне видовження кожного з дротів відповідно дорівнює:

$$\varepsilon_1 = \frac{\Delta l_1}{l_1} = \frac{F}{E_1 S} \quad \text{і} \quad \varepsilon_2 = \frac{\Delta l_2}{l_2} = \frac{F}{E_2 S},$$

звідки випливає:

$$\Delta l_1 = \frac{Fl_1}{E_1 S}, \quad \Delta l_2 = \frac{Fl_2}{E_2 S}.$$

Тоді

$$\Delta l = \Delta l_1 + \Delta l_2 = \frac{Fl_1}{E_1 S} + \frac{Fl_2}{E_2 S} = \frac{F}{S} \left( \frac{l_1}{E_1} + \frac{l_2}{E_2} \right),$$

а

$$\beta = \frac{\Delta l}{l} = \frac{F}{S(l_1 + l_2)} \left( \frac{l_1}{E_1} + \frac{l_2}{E_2} \right) = \frac{F}{S} \frac{(E_2 l_1 + E_1 l_2)}{E_1 E_2 (l_1 + l_2)}.$$

Звідси визначимо  $F$  :

$$F = \frac{\beta S E_1 E_2 (l_1 + l_2)}{E_2 l_1 + E_1 l_2}.$$

Відповідь:  $F = \frac{\beta S E_1 E_2 (l_1 + l_2)}{E_2 l_1 + E_1 l_2}.$

**Приклад 4.4.** До резинового шнура прикріплено кульку масою 50 г. На скільки видовжиться шнур при обертанні кульки зі швидкістю  $180 \frac{\text{об}}{\text{хв}}$ ? Довжина шнура у нехв розтягнутому стані 30 см. Розтягнення вважати пропорційним прикладеній силі. Під впливом сили  $F = 10 \text{ Н}$ , шнур розтягується на 1 см.

*Розв'язання*

Згідно закону Гука  $F_{\text{пр}} = -k\Delta l$ , де  $k$  – жорсткість пружного тіла,  $\Delta l$  – видовження шнура. Сила пружності надає кульці доцентрового прискорення  $a_{\text{ц}} = -\frac{v^2}{l + \Delta l}$ . Тоді

$$k\Delta l = \frac{mv^2}{l + \Delta l},$$

де  $v = \omega(l + \Delta l) = \frac{2\pi n(l + \Delta l)}{t}$ . Отже, остаточно маємо

$$\begin{aligned} k\Delta l &= \frac{mv^2}{l + \Delta l} = \frac{m}{l + \Delta l} \left( \frac{2\pi n(l + \Delta l)}{t} \right)^2 = \frac{m}{l + \Delta l} \frac{4\pi^2 n^2 (l + \Delta l)^2}{t^2} = \\ &= \frac{4\pi^2 n^2 m (l + \Delta l)}{t^2}. \end{aligned}$$

Звідси

$$\Delta l = \frac{4\pi^2 n^2 ml}{kt^2 - 4\pi^2 n^2 m} = \frac{4 \cdot 3,14^2 \cdot 180^2 \cdot 50 \cdot 10^{-3} \cdot 0,3}{10^3 \cdot 60^2 - 4 \cdot 3,14^2 \cdot 180^2} = 5,5 \cdot 10^{-3} \text{ м.}$$

Відповідь:  $\Delta l = 5,5 \cdot 10^{-3} \text{ м.}$

**Приклад 4.5.** Однорідний пружний стрижень довжиною  $l_0 = 20 \text{ см}$ , масою  $m = 300 \text{ г}$ , площею поперечного перерізу  $S = 50 \text{ мм}^2$  і модулем Юнга  $E = 7,2 \cdot 10^{10} \text{ Па}$ , рівномірно обертається з кутовою швидкістю  $\omega = 100 \frac{\text{рад}}{\text{с}}$  навколо осі, перпендикулярній стрижню і проходить через один з його кінців. Знайдіть розподіл натягів  $T$  у стрижні та його видовження  $\Delta l$ . При підрахунку натягів знехтувати деформаціями. При підрахунку лінійної деформації вважати поперечний переріз незмінним і видовження незначним.

*Розв'язання*

Запишемо рівняння другого закону Ньютона для елементу стрижня довжиною  $dx$ , що знаходиться на відстані  $x$  від осі обертання:

$$\frac{m\omega^2 x dx}{l_0} = -dT.$$

Щоб визначити натяг у перерізі з координатою  $x$  проінтегруємо останній вираз:

$$\int_x^{l_0} \frac{m\omega^2 x dx}{l_0} = -\int_T^0 dT.$$

Остаточно отримуємо:

$$T = \frac{m\omega^2}{2l_0} (l_0^2 - x^2).$$

Використовуючи формулу (3.4) для абсолютного видовження  $\Delta l$ , зробимо розрахунки:

$$\Delta l = \frac{Tl_0}{ES} = \frac{m\omega^2(l_0^2 - x^2)}{2l_0 ES} \cong \frac{m\omega^2 l_0^2}{2ES} = \frac{0,3 \cdot 100^2 \cdot 0,2^2}{2 \cdot 7,2 \cdot 10^{10} \cdot 50 \cdot 10^{-6}} \approx 1,1 \cdot 10^{-5} \text{ м.}$$

*Відповідь:*  $\Delta l = 1,1 \cdot 10^{-5}$  м.

**Приклад 4.6.** Визначте потенціальну енергію пружної деформації сталевого дроту, розтягнутого на  $\Delta l = 0,01$  м. Площа поперечного перерізу дроту  $S = 3 \text{ мм}^2$ , початкова довжина  $l_0 = 2$  м. Модуль Юнга  $E = 2 \cdot 10^{11}$  Па.

*Розв'язання*

Потенціальна енергія пружної деформації

$$\Pi = \frac{k\Delta l^2}{2},$$

де  $k$  – жорсткість сталі.

Із закону Гука  $k = \frac{F}{\Delta l}$ . Відносне видовження дроту  $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{F}{ES}$ .

Тоді

$$\Pi = \frac{ES\Delta l^2}{2l_0} = \frac{2 \cdot 10^{11} \cdot 3 \cdot 10^{-6} \cdot 0,01^2}{2 \cdot 2} = 15 \text{ Дж.}$$

*Відповідь:*  $\Pi = 15$  Дж.

**Приклад 4.7.** На нижньому кінці кварцової нитки, закріпленої у верхній точці, підвішена кулька масою  $m = 3$  г і радіусом  $r = 0,25$  см. Продовження нитки проходить через центр кульки. Кулька під дією моменту пружних сил кручення нитки здійснює гармонічні коливання з періодом  $T = 4$  с навколо вертикальної осі.

Визначте коефіцієнт пружності  $G$  нитки під час кручення.

*Розв'язання*

Рівняння обертального руху кульки навколо вертикальної осі можна записати у вигляді

$$J \frac{d^2\varphi}{dt^2} = -G\varphi,$$

де  $J = \frac{2}{5}mr^2$  – момент інерції кульки відносно осі, що проходить через центр,  $\varphi$  – кут закручування нитки.

Оскільки кулька здійснює гармонічні коливання, то

$$\varphi = \varphi_0 \cos(\omega t + \delta),$$

де  $\omega = \frac{2\pi}{T}$  – частота і, отже,

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} = -\varphi_0\omega^2 \cos(\omega t + \delta).$$

Підставивши вирази для  $\varphi$  і  $\frac{d^2\varphi}{dt^2}$  у рівняння руху, отримаємо

$J\omega^2 = G$ , або остаточно

$$G = \frac{2}{5}mr^2\omega^2 = \frac{8\pi^2mr^2}{5T^2} = \frac{8 \cdot 3,14^2 \cdot 0,003 \cdot (0,25 \cdot 10^{-2})^2}{5 \cdot 4^2} = 2 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Дж}}{\text{град}}.$$

*Відповідь:*  $G = 2 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Дж}}{\text{град}}$ .

**Приклад 4.8.** Об'єм пружного круглого стрижня довжиною  $l_0 = 1$  м під дією навантаження  $F = 200$  Н змінився на  $\Delta V = 0,38$  мм<sup>3</sup>. Визначте коефіцієнт Пуассона  $\mu$  матеріалу стрижня, якщо модуль Юнга дорівнює  $E = 2,1 \cdot 10^{11}$  Па.

*Розв'язання*

Оскільки змінення об'єму  $\Delta V$  – незначна величина, то можна записати

$$\Delta V = S\Delta l - l_0\Delta S,$$

де  $S$  і  $\Delta S$  площа і змінення площі поперечного перерізу стрижня.

Після простих перетворень отримуємо

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{\Delta l}{l_0}(1 - 2\mu).$$

Беручи до уваги закон Гука, можна записати

$$\frac{\Delta l}{l_0} = \frac{F}{ES},$$

отже

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{F}{ES}(1 - 2\mu),$$

або

$$\Delta V = \frac{Fl_0}{E}(1 - 2\mu),$$

звідки

$$\mu = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E\Delta V}{Fl_0} \right) \approx 0,3.$$

*Відповідь:*  $\mu \approx 0,3$ .

**Приклад 4.9.** Знайдіть компоненти тензорів деформації та напруження гвинтової дислокації в прямокутній декартовій та циліндричній системах координат.

*Розв'язання*

Для знаходження поля деформацій гвинтової дислокації скористаємося визначенням  $\oint d\mathbf{u} = \mathbf{b}$  у циліндричних координатах  $(r, \varphi, z)$ . Розглянемо зміщення  $u_z$  на колі  $r = \text{const}$ . Внаслідок симетрії задачі, його зміна  $\frac{du_z}{d\varphi}$  не повинна залежати від вибору початку відліку  $\varphi$ . Тому  $u_z(\varphi) \sim \varphi$ , а з умови  $\oint du_z = b$  впливає

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \varphi.$$

Оскільки  $\varphi = \arctg \frac{y}{x}$  в прямокутних координатах, отримуємо вирази для компонент тензора деформації:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

або

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = 0;$$

$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial x} = \frac{b}{4\pi} \frac{\partial}{\partial x} \left( \arctg \frac{y}{x} \right) = -\frac{b}{4\pi} \frac{y}{x^2 + y^2};$$

$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial y} = \frac{b}{4\pi} \frac{\partial}{\partial y} \left( \arctg \frac{y}{x} \right) = -\frac{b}{4\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}$$

для компонент тензора напружень:

$$\sigma_{ij} = 2G\varepsilon_{ij}, \quad \sigma_{ii} = 2G \left( \varepsilon_{ii} + \frac{\mu}{1-2\mu} \varepsilon_{ii} \right),$$

або

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0;$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = -\frac{Gb}{4\pi} \frac{y}{x^2 + y^2};$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = -\frac{Gb}{4\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}.$$

Оскільки вибір напрямку  $r$  несуттєвий, будемо вважати, що  $r = x$ ,  $y = 0$ . Тоді маємо:

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\phi\phi} = \sigma_{zz} = \sigma_{r\phi} = \sigma_{\phi r} = 0;$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{zr} = 0;$$

$$\sigma_{\phi z} = \sigma_{z\phi} = -\frac{Gb}{2\pi r},$$

тобто існує всього лише одна пара відмінних від нуля компонент тензора напружень – дотичне  $\sigma_{\phi z}$  уздовж осі дислокації в площині, що проходить через цю вісь, і парне до нього – по колу в площині, перпендикулярній до осі.

*Відповідь:*  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = 0;$   $\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = -\frac{b}{4\pi} \frac{y}{x^2 + y^2};$

$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = -\frac{b}{4\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}; \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0;$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = -\frac{Gb}{4\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}; \quad \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = -\frac{Gb}{4\pi} \frac{x}{x^2 + y^2};$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\phi\phi} = \sigma_{zz} = \sigma_{r\phi} = \sigma_{\phi r} = 0; \quad \sigma_{rz} = \sigma_{zr} = 0;$$

$$\sigma_{\phi z} = \sigma_{z\phi} = -\frac{Gb}{2\pi r}.$$

**Приклад 4.10.** Для прямолінійної гвинтової дислокації в ізотропному середовищі знайдіть вільну енергію, що припадає на одиницю довжини.

*Розв'язання*

Для прямолінійної гвинтової дислокації (приклад 4.9):

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \varphi; \quad \varepsilon_{z\varphi} = \frac{b}{4\pi r}; \quad \sigma_{z\varphi} = \frac{Gb}{2\pi r}.$$

Вільна енергія задається інтегралом

$$F = \frac{1}{2} \int 2\varepsilon_{z\varphi} \sigma_{z\varphi} dV = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 dz \int \frac{b}{4\pi r} \frac{Gb}{2\pi r} r dr = \frac{Gb^2}{4\pi} \int \frac{dr}{r},$$

який є логарифмічно розбіжним на обох межах. Як нижню межу візьмемо величину порядку атомних відстаней ( $\sim b$ ), на яких деформація велика і макроскопічну теорію застосовувати не можна. Верхня межа визначається розмірами порядку довжини дислокації  $L$ . Тому

$$F = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{L}{b}.$$

Енергію деформації ядра дислокації поблизу її осі (в області з площею перерізу  $\sim b^2$ ) можна оцінити як  $\sim Gb^2$ . При  $\ln \frac{L}{b} \gg 1$  ця енергія мала порівняно з енергією поля пружної деформації. Ці оцінки мають загальний характер і справедливі за порядком величини для будь-якої (не лише гвинтової) дислокації. Фактично значення  $\ln \frac{L}{b}$  зазвичай настільки великі, що енергія ядра складає помітну частину повної енергії дислокації

Відповідь:  $F = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{L}{b}.$

**Приклад 4.11.** Знайдіть поле деформацій крайової дислокації у прямокутній декартовій та циліндричній системах координат.

*Розв'язання*

Для знаходження поля деформації крайової дислокації використаємо єдину перевагу задачі: умову плоскої деформації  $\varepsilon_{zz} = 0$  (вісь  $z$  співпадає з напрямком осі дислокації, вісь  $y$  – з напрямком

вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$ ;  $z = \text{const}$  – єдина площина симетрії поля зміщень).

Тоді маємо дві умови рівноваги:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0; \quad \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

та одну умову сумісності деформацій:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2} = 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y}, \quad (2)$$

яке випливає з умови неперервності зміщень  $\mathbf{u}$  (похідні  $\mathbf{u}$  не повинні залежати від порядку диференціювання):

$$\frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial x} + \frac{\partial^3 u_y}{\partial y \partial x^2} = \frac{\partial^3 u_x}{\partial x \partial y^2} + \frac{\partial^3 u_y}{\partial x \partial y \partial x}.$$

Замінюючи у виразі (2) деформації напруженнями

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\sigma_{xx} - \mu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})}{E}; \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\sigma_{yy} - \mu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})}{E};$$

$$\varepsilon_{zz} = \mu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

та, враховуючи необхідність рівноваги (1), перепишемо умову сумісності (2) у вигляді

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = 0. \quad (3)$$

Рівняння (1) – (3) є системою рівнянь плоскої теорії пружності. Приведемо її до одного рівняння більш високого порядку. будемо шукати таку „функцію напружень“  $\chi$ , щоб було  $\sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial y}$  (функція Ейрі). З умови рівноваги (1)

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} = -\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = \frac{\partial^3 \chi}{\partial x \partial y^2},$$

звідки (з точністю до сталої величини)  $\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}$  та  $\sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}$ , тобто

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \Delta \chi. \quad (4)$$

З урахуванням цього умова сумісності (3) набуває вигляду

$$\Delta(\Delta \chi) = 0. \quad (5)$$

Отже, для визначення усіх компонентів тензора напружень достатньо знайти одну скалярну функцію  $\chi(x, y)$ .

Поле крайової дислокації, створене зсувом по напівплощині  $y = 0$ ;  $x > 0$  є граничним випадком задачі про згин кільця з розрізом: зовнішній радіус кільця прямує до нескінченності, а внутрішній – до нуля.

Прикладена до розрізу кільця сила  $F$  створює в ньому згинаючий момент  $F \sin \theta$ . Усі напруження пропорційні моменту. Тому  $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \sim \sin \theta$ . У полярних координатах

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (6)$$

Диференціюючи в (4)  $\sin \theta$  двічі, ми не отримаємо інших функцій кута, окрім  $\sin \theta$ . Тому  $\chi(r, \theta) \sim \sin \theta$  і функцію напружень шукаємо у вигляді:

$$\chi(r, \theta) = f(r) \sin \theta. \quad (7)$$

Продиференціювавши (7), отримаємо

$$\Delta \chi = \sin \theta \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \right) f,$$

або

$$\Delta^2 \chi = \Phi(r) \sin \theta = 0,$$

де

$$\Phi(r) = \frac{d^4 f}{dr^4} + \frac{2}{r} \frac{d^3 f}{dr^3} - \frac{3}{r^2} \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{3}{r^3} \frac{df}{dr} - \frac{3}{r^4} f.$$

Отже, вдалося отримати звичайне лінійне диференціальне рівняння для радіальної частини функції напружень  $\Phi(r) = 0$ , яке після підстановки  $r = e^t$  ( $\frac{d}{dr} = \frac{1}{r} \frac{d}{dt}$ ) може бути зведене до рівняння зі сталими коефіцієнтами

$$\frac{d^4 f}{dt^4} - 4 \frac{d^3 f}{dt^3} + 2 \frac{d^2 f}{dt^2} + 4 \frac{df}{dt} - 3f = 0. \quad (8)$$

Підставивши  $f = e^{st}$ , одержимо характеристичне алгебраїчне рівняння

$$s^4 - 4s^3 + 2s^2 + 4s - 3 = 0,$$

яке має розв'язки  $s_1 = s_2 = 1$ ,  $s_3 = -1$ ,  $s_4 = 3$ .

Якщо характеристичне рівняння має корені кратності  $\lambda_k$ , то загальний розв'язок будь-якого диференціального рівняння з постійними коефіцієнтами має вигляд:

$$f(t) = \sum_k P_{\lambda_{k-1}}(t) e^{s_k t},$$

де  $P_{\lambda_{k-1}}(t)$  – довільний поліном ступеня  $\lambda_{k-1}$ . Отже, загальний розв'язок рівняння (8) має вигляд:

$$f(t) = (A_1 t + A_2) e^t + A_3 e^{-t} + A_4 e^{3t},$$

або, якщо повернутися до змінної  $r$ ,

$$f(r) = A_1 r \ln r + A_2 r + \frac{A_3}{r} + A_4 r^3.$$

Після диференціювання одержимо

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \Delta\chi = \left( \frac{2A_1}{r} + 8A_4r \right) \sin\theta.$$

Зрозуміло, що  $A_4 = 0$ , інакше напруження будуть необмежено зростати на великій відстані від дислокації. Тому загальний розв'язок має вигляд  $\chi(r, \theta) = Ar \ln r \sin\theta$ , або у прямокутних координатах:

$$\chi(x, y) = By \ln(x^2 + y^2). \quad (9)$$

Визначимо сталу  $B$  з умови, що залишилася – визначення дислокації через контурний інтеграл

$$\oint d\mathbf{u} = \mathbf{b}.$$

Виберемо за контур інтегрування прямокутник  $y = \pm\delta$ ,  $x = \pm H$  та покладемо  $H \rightarrow \infty$ ,  $\delta \rightarrow 0$  (контур у вигляді нескінченної щілини уздовж осі  $x$ ). Оскільки при  $x \rightarrow \infty$  усі  $\varepsilon_{ij} \rightarrow 0$  контурний інтеграл можна замінити інтегралами уздовж прямих  $y = \pm\delta$ , так що при  $\delta \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} b &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u_x(x, \delta)}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u_x(x, -\delta)}{\partial x} dx \right] = \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{xx}(x, \delta) dx - \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{xx}(x, -\delta) dx \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Продиференціювавши функцію напружень (9), знайдемо

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} = 2By \frac{3x^2 + y^2}{(x^2 + y^2)^2}; \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = 2By \frac{y^2 - x^2}{(x^2 + y^2)^2};$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{\sigma_{xx} - \mu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})}{E} = \frac{(1 - \mu^2)\sigma_{xx} - \mu(1 + \mu)\sigma_{yy}}{E} = \\ &= \frac{2By}{E} \left[ \frac{\alpha}{x^2 + y^2} - \frac{\beta y^2}{(x^2 + y^2)^2} \right], \end{aligned}$$

де  $\alpha \equiv 2(1 - \mu^2) + (1 + \mu)$ ,  $\beta \equiv 2(1 + \mu)$ , так що

$$\int \varepsilon_{xx} dx = \frac{B}{E} \left[ -\frac{2\beta xy}{x^2 + y^2} + (2\alpha - \beta) \operatorname{arctg} \frac{x}{y} \right].$$

У межах  $(-\infty, \infty)$  перший доданок у дужках дає нуль, і від (10) залишається

$$b = \frac{B}{E} (2\alpha - \beta) \left[ \operatorname{arctg} \frac{x}{\delta} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \operatorname{arctg} \frac{x}{-\delta} \Big|_{-\infty}^{\infty} \right] = -\frac{2\pi B}{E} (2\alpha - \beta).$$

Оскільки  $2\alpha - \beta = 4(1 - \mu^2)$ , а модуль зсуву  $G = \frac{E}{2(1 + \mu)}$ ;

звідси випливає, що  $2B = -\frac{Gb}{2\pi(1 - \mu)}$ , і компоненти поля напружень

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1 - \mu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1 - \mu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1 - \mu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \end{cases} \quad (11)$$

Найпростіший вигляд має гідростатичне напруження:

$$\sigma_{ll} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = (1 + \mu)(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

та з (11) тиск

$$P = -\frac{\sigma_{ll}}{3} = \frac{Gb(1 + \mu)}{3\pi(1 - \mu)} \frac{\sin \theta}{r}.$$

Уздовж кожного променя ( $\theta = \text{const}$ , тобто  $\frac{y}{x} = \text{const}$ ) кожна з компонент напруження монотонно зменшується як  $\frac{1}{r}$ , однак їх залежність від кута  $\theta$  така, що вздовж прямої  $y = \text{const}$  або  $x = \text{const}$  вони можуть неодноразово змінювати знак.

**Приклад 4.12.** При пружній деформації кристалічного зразка у формі куба  $1 \times 1 \times 1 \text{ см}^3$  мають місце такі зміщення його точок:

$$u_1 = (4x_1 + 3x_2 - 5x_3) \cdot 10^{-6} \text{ м};$$

$$u_2 = (7x_1 - 13x_2 + 4x_3) \cdot 10^{-6} \text{ м};$$

$$u_3 = (9x_1 - 2x_2 + 4x_3) \cdot 10^{-6} \text{ м}.$$

Знайдіть зміну кутів між ребрами куба та зміну його об'єму при деформації.

*Розв'язання*

Тензор малих зміщень, тензор деформацій і тензор поворотів відповідно дорівнюють:

$$u_{ij} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & -5 \\ 7 & -13 & 4 \\ 9 & -2 & 4 \end{pmatrix} \cdot 10^{-4}; \quad \varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 \\ 5 & -13 & 1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \cdot 10^{-4};$$

$$\omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -2 & -7 \\ 2 & 0 & 3 \\ 7 & -3 & 0 \end{pmatrix} \cdot 10^{-4},$$

оскільки  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ ,  $\omega_{ij} = \omega_{ji}$ ,  $\varepsilon_{ij} = \frac{u_{ij} + u_{ji}}{2}$ ,  $\omega_{ii} = 0$ ,  $\varepsilon_{ii} = u_{ii}$ ,

$$u_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}.$$

Зміна кутів між ребрами куба одиничних розмірів визначається недиагональними компонентами тензора  $\varepsilon_{ij}$  (тобто  $\varepsilon_{12}$ ,  $\varepsilon_{13}$ ,  $\varepsilon_{23}$ ). Кут між ребрами, паралельними осям  $x_1$  та  $x_2$  буде дорівнювати  $\frac{\pi}{2} - 2\varepsilon_{12}$ . Зміна кута буде  $2\varepsilon_{12}$ . Тому зміни кутів між ребрами паралельними осям  $x_1$  і  $x_2$ ,  $x_1$  і  $x_3$ ,  $x_2$  і  $x_3$  відповідно дорівнюють:

$$2\varepsilon_{12} = 10^{-3}; \quad 2\varepsilon_{13} = 4 \cdot 10^{-4}; \quad 2\varepsilon_{23} = 2 \cdot 10^{-4}.$$

Відносна зміна об'єму

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = (4 - 13 + 4) \cdot 10^{-4} = -5 \cdot 10^{-4}.$$

*Відповідь:*  $2\varepsilon_{12} = 10^{-3}$ ;  $2\varepsilon_{13} = 4 \cdot 10^{-4}$ ;  $2\varepsilon_{23} = 2 \cdot 10^{-4}$ ;  $\frac{\Delta V}{V} = -5 \cdot 10^{-4}$ .

**Приклад 4.13.** Визначте відносні деформації кристала кубічної сингонії з відомими модулями пружності  $c_{ij}$  у випадку всебічного стискання, коли кристал вміщений у рідину, що знаходиться під тиском  $P$ . Виразіть модуль всебічного стискання  $K$  через модулі пружності  $c_{ij}$

#### *Розв'язання*

У системі координат, осі якої паралельні ребрам кубічної елементарної комірки, тензор механічних напружень можна записати у вигляді:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Закон Гука в матричній формі набуває вигляду:

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^6 c_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta}, \quad (2)$$

де  $\alpha = \overline{1, 6}$ . Враховуючи кубічну симетрію кристала і вид матриці (1), співвідношення (2) можна записати так:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -P \\ -P \\ -P \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

З формули (3) випливає, що деформація кристала виражається через гідрстатичний тиск  $P$  формулами:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = -\frac{P}{c_{11} + 2c_{12}}; \quad \varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = 0.$$

Відносне змінення об'єму кристала за даної деформації дорівнює

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3, \quad (4)$$

тобто

$$\frac{\Delta V}{V} = -\frac{3P}{c_{11} + 2c_{12}}.$$

Шуканий модуль всебічного стиснення кристала

$$K = -\frac{P}{\left(\frac{\Delta V}{V}\right)} = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}.$$

Відмітимо, що у наближена рівність (4) має сенс у випадку малих деформацій даного кристала

*Відповідь:*  $K = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}.$

**Приклад 4.14.** Стан пружної деформації кристала задається у вигляді:

$$\begin{pmatrix} 0,001 & 0 & 0 \\ 0 & -0,004 & 0 \\ 0 & 0 & 0,008 \end{pmatrix}.$$

Визначте вигляд характеристичної поверхні деформацій, а також поверхні, в яку переходить сфера одиничного радіусу внаслідок заданих деформацій.

*Розв'язання*

Тензор деформацій приведений до головних осей. Відповідне рівняння характеристичної поверхні набуває більш простого вигляду

$$\varepsilon_{11}x_1^2 + \varepsilon_{22}x_2^2 + \varepsilon_{33}x_3^2 = 1.$$

Підставляючи чисельні значення  $\varepsilon_{ij}$  з умови задачі, отримаємо рівняння

$$0,001x_1^2 - 0,004x_2^2 + 0,008x_3^2 = 1. \quad (1)$$

Аналіз інваріантів рівняння (1) дозволяє встановити, що характеристична поверхня деформацій є однопорожнинним гіперболоїдом.

Сфера одиничного радіусу в недеформованому кристалі задається рівнянням

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1.$$

В результаті деформації  $x_j \rightarrow x'_j$  утворюється нова поверхня з координатами

$$x'_1 = x_1 + u_1; \quad x'_2 = x_2 + u_2; \quad x'_3 = x_3 + u_3,$$

де  $u_j = \varepsilon_{jj}x_j$  характеризують зміщення точок поверхні вихідної сфери. Отже, координати  $x'_j$  визначаються так:

$$x'_1 = (1 + \varepsilon_{11})x_1; \quad x'_2 = (1 + \varepsilon_{22})x_2; \quad x'_3 = (1 + \varepsilon_{33})x_3. \quad (2)$$

З урахуванням співвідношень (2) рівняння деформованої поверхні набуває вигляду:

$$\frac{x_1'^2}{(1 + \varepsilon_{11})^2} + \frac{x_2'^2}{(1 + \varepsilon_{22})^2} + \frac{x_3'^2}{(1 + \varepsilon_{33})^2} = 1. \quad (3)$$

Підставляючи чисельні значення  $\varepsilon_{jj}$  в (4), отримаємо рівняння

$$\frac{x_1'^2}{1,001^2} + \frac{x_2'^2}{0,996^2} + \frac{x_3'^2}{1,008^2} = 1,$$

яке є канонічним рівнянням еліпсоїда з напівосями 1,001; 0,996; 1,008.

*Відповідь:*  $0,001x_1^2 - 0,004x_2^2 + 0,008x_3^2 = 1$ , однопорожнинний гіперболоїд;  $\frac{x_1'^2}{1,001^2} + \frac{x_2'^2}{0,996^2} + \frac{x_3'^2}{1,008^2} = 1$ , еліпсоїд.

**Приклад 4.15.** Механічні напруження деякого кристала в прямокутній системі координат  $(X_1, X_2, X_3)$  задаються матрицею

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \cdot 10^3 \text{ Па}.$$

Визначте найбільше за абсолютною величиною механічне напруження в головних осях.

*Розв'язання*

Симетричний тензор, представлений матрицею  $\sigma_{ij}$ , може бути приведений до головних осей. Головні осі тензора механічних напружень характеризуються важливою особливістю – на площадках, перпендикулярних цим осям, дотичні напруження перетворю-

ються в нуль. Значення діагональних компонент тензора напружень  $\lambda$  (у головних осях) визначаються із секулярного рівняння

$$\det|\sigma_{ij} - \lambda\delta_{ij}| = 0, \quad (1)$$

де  $\delta_{ij}$  – символ Кронеккера. З урахуванням даних умови рівняння (1) набуває вигляду

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 & 0 \\ -1 & 3-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -2-\lambda \end{vmatrix} = 0,$$

а його корені дорівнюють

$$\lambda_1 = \frac{5+\sqrt{5}}{2}; \quad \lambda_2 = \frac{5-\sqrt{5}}{2}; \quad \lambda_3 = -2.$$

Отже, механічні напруження в головних осях характеризуються матрицею

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{5+\sqrt{5}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{5-\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \cdot 10^3 \text{ Па}. \quad (2)$$

Порівняння діагональних елементів матриці (2) показує, що найбільше за абсолютною величиною механічне напруження є розтягуючим і дорівнює

$$\sigma_{\max}^{(0)} = \frac{5+\sqrt{5}}{2} \cdot 10^3 \text{ Па} = \frac{5+\sqrt{5}}{2} \text{ кПа}.$$

*Відповідь:*  $\sigma_{\max}^{(0)} = \frac{5+\sqrt{5}}{2} \text{ кПа}.$

**Приклад 4.16.** Пружна деформація кристала тетрагональної сингонії задається в прямокутній системі координат  $(X_1 X_2 X_3)$  тензором

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 0 & \frac{\varepsilon_0}{4} \\ 0 & -2\varepsilon_0 & 0 \\ \frac{\varepsilon_0}{4} & 0 & 3\varepsilon_0 \end{pmatrix},$$

де  $\varepsilon_0 > 0$ . Матриця модулів пружності цього кристала має вигляд

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix}.$$

Визначте ненульові компоненти тензора механічних напружень  $\sigma_{ij}$ , що виникають у кристалі, та об'ємну густину пружної енергії  $w_\sigma$ .

*Розв'язання*

В одноіндексній формі запису деформації  $\varepsilon_{ij}$  дорівнюють

$$\varepsilon_j = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 0 & \frac{\varepsilon_0}{2} \\ 0 & -2\varepsilon_0 & 0 \\ \frac{\varepsilon_0}{2} & 0 & 3\varepsilon_0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

При записі матриці (1) враховано, що недіагональні компоненти тензора деформацій задовольняють умові

$$\varepsilon_5 = 2\varepsilon_{13} = \frac{\varepsilon_0}{2}.$$

Підставляючи елементи матриць  $C_{ij}$  та  $\varepsilon_j$  у вираз для компонентів тензора механічних напружень, отримаємо

$$\sigma_{11} = \sigma_1 = c_{11}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{13}\varepsilon_3 = (c_{11} - 2c_{12} + 3c_{13})\varepsilon_0;$$

$$\sigma_{22} = \sigma_2 = c_{21}\varepsilon_1 + c_{22}\varepsilon_2 + c_{23}\varepsilon_3 = (c_{12} - 2c_{11} + 3c_{13})\varepsilon_0;$$

$$\sigma_{33} = \sigma_3 = c_{31}\varepsilon_1 + c_{32}\varepsilon_2 + c_{33}\varepsilon_3 = (-c_{13} + 3c_{13})\varepsilon_0;$$

$$\sigma_{13} = \sigma_5 = c_{55}\varepsilon_5 = \frac{c_{44}\varepsilon_0}{2}; \quad \sigma_{12} = \sigma_6 = 0; \quad \sigma_{23} = \sigma_4 = 0.$$

Об'ємна густина пружної енергії кристала дорівнює

$$w_\sigma = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 c_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j.$$

З урахуванням пружної деформації даного кристала отримуємо

$$\begin{aligned} w_\sigma &= \frac{1}{2} (c_{11}\varepsilon_1^2 + c_{22}\varepsilon_2^2 + c_{33}\varepsilon_3^2 + 2c_{12}\varepsilon_1\varepsilon_2 + 2c_{13}\varepsilon_1\varepsilon_3 + 2c_{23}\varepsilon_2\varepsilon_3 + c_{55}\varepsilon_5^2) = \\ &= \frac{1}{2} \left( c_{11}\varepsilon_0^2 + 4c_{11}\varepsilon_0^2 + 9c_{33}\varepsilon_0^2 - 4c_{12}\varepsilon_0^2 + 6c_{13}\varepsilon_0^2 - 12c_{13}\varepsilon_0^2 + \frac{c_{44}}{2}\varepsilon_0^2 \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left( 5c_{11} - 4c_{12} - 6c_{13} + 9c_{33} + \frac{c_{44}}{4} \right) \varepsilon_0^2. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\sigma_{11} = (c_{11} - 2c_{12} + 3c_{13})\varepsilon_0; \quad \sigma_{22} = (c_{12} - 2c_{11} + 3c_{13})\varepsilon_0;$

$\sigma_{33} = (-c_{13} + 3c_{13})\varepsilon_0; \quad \sigma_{13} = \frac{c_{44}\varepsilon_0}{2}; \quad \sigma_{12} = \sigma_{23} = 0;$

$w_\sigma = \frac{1}{2} \left( 5c_{11} - 4c_{12} - 6c_{13} + 9c_{33} + \frac{c_{44}}{4} \right) \varepsilon_0^2.$

**Приклад 4.17.** Доведіть, що коли середовище деформується за сталого значення ентропії, то згідно теорії нескінченно малих деформацій

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl},$$

де  $c_{ijkl} = \rho_0 \left( \frac{\partial^2 U}{\partial u_{ij} \partial u_{kl}} \right)_S$  – адиабатичний коефіцієнт

жорсткості;  $U$  – внутрішня енергія одиниці маси;  $u_{ik}$  – тензор кінцевих деформацій.

*Розв'язання*

Основним співвідношенням теорії пружності є залежність між термодинамічним потенціалом (наприклад, внутрішньою енергією на одиницю маси) з одного боку та параметрами стану, тобто ентропією та компонентами тензора деформації, – з іншого.

Оскільки компоненти тензора деформації малі, то співвідношення між  $U$  та цими компонентами запишемо у вигляді розкладання в ряд Тейлора за сталої ентропії

$$U = U_0 + \left( \frac{\partial U}{\partial u_{ij}} \right)_S u_{ij} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial u_{ij} \partial u_{kl}} \right)_S u_{ij} u_{kl} + \dots$$

Члени, лінійні за деформаціями, дорівнюють нулю, внаслідок того, що стан нульових деформацій є станом рівноваги і енергія його мінімальна.

При нескінченно малій деформації у членах другого порядку можна  $u_{ij}$  замінити на  $\varepsilon_{ij}$  і отримати вираз

$$\rho_0 U = \rho_0 U_0 + \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}.$$

За умови сталості ентропії основне рівняння термодинаміки  $dU = TdS + dA$  зводиться до  $dU = dA$ . Тоді для нескінченно малих деформацій одержимо

$$\rho dU = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij},$$

або

$$\sigma_{ij} = \rho \left( \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_S.$$

Розкладаючи  $U$  в ряд, отримаємо  $\rho_0 \left( \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_S = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}$  (внаслідок того, що кожна деформація входить у вираз двічі і за означенням  $c_{ijkl} = c_{klij}$ ), тобто

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \frac{\rho}{\rho_0}.$$

Оскільки

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{V_0}{V} = \frac{1}{1 + \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}},$$

і більш високими ступенями  $\varepsilon_{ij}$  ми вже знехтували, то у першому порядку можна записати

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}.$$

Отже, у даному наближенні залежність між напруженнями і деформаціями лінійна.

*Відповідь:*  $\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}$ .

**Приклад 4.18.** Доведіть, що швидкість хвилі зсуву, яка поширюється вздовж напрямку  $[110]$ , коли частинки коливаються в напрямку  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , у кубічному кристалі дорівнює

$$v = \sqrt{\frac{c_{11} - c_{12}}{2\rho}}.$$

*Розв'язання*

Швидкості поширення пружних хвиль у кубічному кристалі визначаються з рівняння:

$$\begin{aligned} &(\rho v^2 - c_{44})^3 - (c_{11} - c_{44})(\rho v^2 - c_{44})^2 + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})(c_{11} + c_{12}) \times \\ &\quad \times (l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_1^2 l_3^2)(\rho v^2 - c_{44}) - (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})^2 (c_{11} + 2c_{12} + c_{44}) \times \\ &\quad \times l_1^2 l_2^2 l_3^2 = 0, \end{aligned}$$

де  $l_1, l_2, l_3$  – напрямні косинуси напрямку, в якому поширюється хвиля.

При поширенні хвилі в напрямку  $[110]$

$$l_1 = l_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad l_3 = 0.$$

Тоді вихідне рівняння можна переписати у вигляді:

$$(\rho v^2 - c_{44})^3 - (c_{11} - c_{44})(\rho v^2 - c_{44})^2 + \frac{1}{4}(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})(c_{11} + c_{12}) = 0,$$

яке має розв'язки:

$$\begin{aligned} \rho v^2 - c_{44} &= \frac{c_{11} - c_{44}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(c_{11} - c_{44})^2 - (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})(c_{11} + c_{12})} = \\ &= \frac{c_{11} - c_{44}}{2} \pm \frac{c_{12} + c_{44}}{2}; \end{aligned}$$

звідки маємо

$$\rho v^2 = \frac{c_{11} + c_{44}}{2} \pm \frac{c_{12} + c_{44}}{2}.$$

Для хвилі зсуву:

$$v = \sqrt{\frac{c_{11} + c_{44} - c_{12} - c_{44}}{2\rho}} = \sqrt{\frac{c_{11} - c_{12}}{2\rho}}.$$

Відповідь:  $v = \sqrt{\frac{c_{11} - c_{12}}{2\rho}}$ .

**Приклад 4.19.** Знайдіть співвідношення між модулями пружності та пружними піддатливостями кубічного кристала.

*Розв'язання*

Співвідношення між модулями пружності та пружними піддатливостями в загальному випадку визначаються так:

$$s_{qr} = \frac{\Delta c_{qr}}{\Delta c} \quad \text{або} \quad c_{qr} = \frac{\Delta s_{qr}}{\Delta s},$$

де

$$\Delta c = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{vmatrix},$$

$$\Delta s = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{51} & s_{52} & s_{53} & s_{54} & s_{55} & s_{56} \\ s_{61} & s_{62} & s_{63} & s_{64} & s_{65} & s_{66} \end{vmatrix},$$

$\Delta c_{qr}$  та  $\Delta s_{qr}$  – мінори, які можна отримати з визначників  $\Delta c$  і  $\Delta s$  викреслюванням  $q$ -ої строки та  $r$ -го стовпчика.

Внаслідок того, що для кубічних кристалів

$$\Delta c = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{vmatrix},$$

маємо

$$s_{44} = \frac{\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{vmatrix}} = \frac{1}{c_{44}};$$

$$s_{11} = \frac{\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{vmatrix}} = \frac{c_{44}^3 (c_{11}^2 - c_{12}^2)}{c_{44}^3 (c_{11}^3 + 2c_{12}^3 - 3c_{12}^2 c_{11})} =$$

$$= \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + c_{12})}{(c_{11} - c_{12})^2 (c_{11} + 2c_{12})} = \frac{(c_{11} + c_{12})}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}.$$

Аналогічно

$$s_{12} = -\frac{c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}.$$

Відповідь:  $s_{44} = \frac{1}{c_{44}}$ ;  $s_{11} = \frac{(c_{11} + c_{12})}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}$ ;

$$s_{12} = -\frac{c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}.$$

**Приклад 4.20.** Покажіть, що розв'язок рівняння Ламе, який описує рух частинок ізотропного пружного середовища, можна представити як суму розв'язків двох хвильових рівнянь, що містять різні швидкості поширення хвиль.

*Розв'язання*

Виходячи з того, що будь-які векторні поля можна представити у вигляді суми потенціальної та вихрової частини і таке представлення лише одне, запишемо зміщення у вигляді

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_t, \quad (1)$$

де  $\mathbf{u}_l$  та  $\mathbf{u}_t$  такі, що  $\operatorname{div} \mathbf{u}_l = 0$ ,  $\operatorname{rot} \mathbf{u}_l = 0$ , тобто  $\mathbf{u}_l = \operatorname{rot} \boldsymbol{\psi}$ ,  $\mathbf{u}_t = \nabla \varphi$ . Функції  $\varphi$  та  $\boldsymbol{\psi}$  називають скалярним та векторним потенціалами. Підстановка (1) у рівняння Ламе

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \nabla \cdot \nabla \mathbf{u} + \mu \Delta \mathbf{u}$$

дає

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} + \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \nabla \cdot \nabla (\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_t) + \mu \Delta (\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_t). \quad (2)$$

Застосовуючи до рівняння (2) операцію  $\operatorname{div}$  та враховуючи співвідношення  $\operatorname{div} \mathbf{u}_l = 0$ , отримаємо

$$\operatorname{div} \left( \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - (\lambda + 2\mu) \Delta \mathbf{u}_l \right) = 0. \quad (3)$$

З іншого боку, оскільки  $\operatorname{rot} \mathbf{u}_l = 0$ , запишемо

$$\operatorname{rot} \left( \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - (\lambda + 2\mu) \Delta \mathbf{u}_l \right) = 0. \quad (4)$$

Рівняння (3) і (4) справедливі разом лише за умови, що векторний вираз у дужках тотожно дорівнює нулю:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - (\lambda + 2\mu) \Delta \mathbf{u}_l = 0. \quad (5)$$

Застосовуючи до рівняння (2) операцію  $\operatorname{rot}$  з урахуванням співвідношення  $\operatorname{rot} \mathbf{u}_l = 0$ , отримаємо:

$$\operatorname{rot} \left( \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - \mu \Delta \mathbf{u}_t \right) = 0. \quad (6)$$

Зі співвідношення  $\operatorname{div} \mathbf{u}_t = 0$  також випливає, що

$$\operatorname{div} \left( \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - \mu \Delta \mathbf{u}_t \right) = 0. \quad (7)$$

В результаті для  $\mathbf{u}_t$  з (6) та (7) отримуємо хвильове рівняння

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - \mu \Delta \mathbf{u}_t = 0. \quad (8)$$

З (5) видно, що швидкість поширення потенціальних збурень визначається виразом  $v_l = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}$ . Вихрові збурення, як випливає

з (8), поширюються зі швидкістю  $v_t = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ .

*Відповідь:*  $v_l = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}; v_t = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ .

**Приклад 4.21.** Визначте вигляд матриці пружних модулів поперечно ізотропного тіла та розрахуйте анізотропію швидкості поширення в ньому об'ємних акустичних хвиль.

#### *Розв'язання*

Будемо вважати, що віссю симетрії є вісь  $z$ . Поворот системи координат навколо осі  $z$  на  $180^\circ$  можна розглядати як інверсію всіх осей з наступною інверсією осі  $z$ . Оскільки при інверсії всіх осей тензор пружних модулів як тензор парного (четвертого) рангу не змінюється, то площина, перпендикулярна до осі поперечної ізотропії, є для тензора  $c_{ij}$  площиною симетрії. Це означає, що частина пружних модулів дорівнює нулю.

Розглянемо тепер поворот на кут  $\pm 90^\circ$  навколо осі  $z$ . При цьому одна з двох осей ( $x$  та  $y$ ) займе місце іншої. Така операція з урахуванням поперечної ізотропії еквівалентна інверсії однієї з цих осей. Тому осі  $x$  та  $y$  є нормальними до площин симетрії. Це вимагає рівності нулю ще деяких пружних модулів. Оскільки напрямки  $x$  та  $y$  еквівалентні, матриця  $c_{ijkl}$  повинна бути також симетричною відносно перестановки індексів  $1 \leftrightarrow 2$ . З урахуванням цього матриця  $c_{ij}$  запишеться у вигляді

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Така матриця відповідає кристалам тетрагональної сингонії.

Для поперечно ізотропних за лінійними пружними властивостями кристалів потрібна ще одна умова на пружні модулі. Для її знаходження використаємо співвідношення

$$\rho c_1^2 = \Gamma_3, \quad \rho c_{2,3}^2 = \frac{\Gamma_1 + \Gamma_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\Gamma_1 - \Gamma_2)^2}{4} + \Gamma_6}. \quad (2)$$

Швидкості об'ємних хвиль, що поширюються в площині симетрії, перпендикулярної до осі  $z$ , визначаються компонентами тензора Кристоффеля  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_6$ , які для матриці (1) мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= c_{11} \cos^2 \varphi + c_{66} \sin^2 \varphi, \\ \Gamma_2 &= c_{66} \cos^2 \varphi + c_{11} \sin^2 \varphi, \\ \Gamma_3 &= c_{44}, \\ \Gamma_6 &= (c_{12} + c_{66}) \sin \varphi \cos \varphi. \end{aligned} \quad (3)$$

Підставляючи (3) в (2), отримаємо:

$$\rho c_1^2 = c_{44},$$

$$\rho c_{2,3}^2 = \frac{c_{11} + c_{66}}{2} \pm \sqrt{\frac{(c_{11} - c_{66})^2}{4} + (c_{11} + c_{12})(c_{12} - c_{11} + 2c_{66}) \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi}. \quad (4)$$

З (4) випливає, що для ізотропії швидкості у площині, ортогональній до осі  $z$ , потрібно, щоб

$$c_{66} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2}. \quad (5)$$

Другий можливий варіант ( $c_{11} + c_{12} = 0$ ) відкинута як такий, що не задовольняє граничному переходу до ізотропного середовища. Матриця (1), якщо виконується (5), відповідає гексагональним кристалам.

Розглянемо тепер поширення об'ємних хвиль під кутом  $\theta$  до осі  $z$ . Оскільки вибір орієнтацій осей  $x$  та  $y$  в площині поперечної ізотропії довільний, розглянемо випадок  $n_2 = 0$ . Компоненти тензора Кристоффеля при цьому дорівнюють

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= c_{11} \sin^2 \theta + c_{44} \cos^2 \theta, \\ \Gamma_2 &= c_{66} \sin^2 \theta + c_{44} \cos^2 \theta, \\ \Gamma_3 &= c_{44} \sin^2 \theta + c_{33} \cos^2 \theta, \\ \Gamma_4 &= \Gamma_6 = 0, \\ \Gamma_6 &= (c_{13} + c_{44}) \cos \theta \sin \theta, \end{aligned} \quad (6)$$

що відповідає рівнянню Кристоффеля вигляду

$$\begin{vmatrix} \Gamma_1 - \rho c^2 & 0 & \Gamma_5 \\ 0 & \Gamma_2 - \rho c^2 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_3 - \rho c^2 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{vmatrix} = 0. \quad (7)$$

З рівнянь (5) – (7) знаходимо:

$$\rho c_1^2 = c_{44} + \frac{(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \sin^2 \theta}{2}, \quad (8)$$

$$\rho c_{2,3}^2 = \frac{1}{2} \left[ c_{44} + c_{11} \sin^2 \theta + c_{33} \cos^2 \theta \pm \sqrt{((c_{11} - c_{44}) \sin^2 \theta - (c_{33} - c_{44}) \cos^2 \theta)^2 + 4(c_{13} + c_{44})^2 \cos^2 \theta \sin^2 \theta} \right]. \quad (9)$$

Такі ж самі вирази маємо й у випадку коли площина, утворена хвильовим вектором та віссю  $z$ , повернена на довільний кут навколо  $z$  відносно осей  $x$  та  $y$ . Хвиля зі швидкістю, що визначається співвідношенням (8), є поперечною та поляризованою перпендикулярно вказаній площині.

Відмітимо, що ця задача є єдиною, для якої при довільному напрямку поширення хвиль та довільному співвідношенні пружних модулів дисперсійне рівняння факторизується та вдається знайти точні явні формули для швидкостей об'ємних акустичних хвиль.

---

## Задачі для самостійного розв'язування

### Ізотропні тверді тіла

- 4.1. На скільки витягнеться залізний стрижень, підвішений за один кінець, під дією власної ваги? На скільки при цьому зміниться його об'єм?
- 4.2. Стрижень поперечного перерізу  $S$  розтягують силою  $F$ , паралельною до його осі. Під яким кутом  $\alpha$  до осі нахилена переріз, в якому тангенціальне напруження  $\tau$  максимальне? Знайдіть це напруження.
- 4.3. На дроті довжиною  $l$  підвішений вантаж  $P$ . Дріт склали вдвічі і підвісили той же вантаж. Порівняйте абсолютне і відносне видовження.

- 4.4. Як зміниться абсолютне видовження дроту, якщо, не змінюючи навантаження, замінити його дротом з того ж матеріалу, але вдвічі більшої довжини і вдвічі більшого діаметру?
- 4.5. Який найбільший вантаж може нести залізний стрижень перерізом  $8,3 \text{ см}^2$ , не даючи залишкової деформації, якщо необхідний подвійний запас міцності.
- 4.6. Сталевий канат, який витримує вагу нерухомої кабіни ліфту, має діаметр 8 мм. Ліфт під час роботи при раптовій зупинці отримує прискорення  $8g$ . Визначте, скільки таких канатів слід з'єднати паралельно при установці ліфта.
- 4.7. Яким має бути граничний діаметр сталевих тросів, щоб він витримав навантаження  $F = 9,8 \text{ кН}$ ?
- 4.8. Під дією якої сили, направленої вздовж осі стрижня, в ньому виникає напруження  $150 \text{ МПа}$ ? Діаметр стрижня дорівнює 4 мм.
- 4.9. Якого діаметру потрібно взяти сталевий стрижень, щоб при навантаженні  $25 \text{ кН}$  розтягуюче напруження дорівнювало  $6 \cdot 10^7 \text{ Па}$ ?
- 4.10. Яку розтягуючу силу потрібно прикласти до сталевих тросів довжиною  $3,6 \text{ м}$  і площею поперечного перерізу  $1 \text{ мм}^2$  для видовження її на  $2 \text{ мм}$ ?
- 4.11. Для вимірювання глибини моря з пароплаву спустили гирю на сталевому тросі. Яку найбільшу глибину  $h_{\text{max}}$  можна виміряти таким способом? Густина морської води  $\rho = 1,03 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ . Маса гирі, порівняно з масою тросу, знехтувати.
- 4.12. З даху будинку звисає сталевий дріт довжиною  $l_0 = 40 \text{ м}$  і діаметром  $d = 2 \text{ мм}$ . Яке навантаження  $F$  може витримати цей дріт? На скільки видовжиться цей дріт, якщо на ньому повишне людина масою  $m = 70 \text{ кг}$ ? Чи буде спостерігатися залишкова деформація, коли людина відпустить дріт? Границя міцності сталі  $\sigma_{\text{міцн}} = 294 \text{ МПа}$ .

4.13. Знайдіть довжину  $l_0$  вертикально підвішеного дроту, який починає рватися під дією власної сили тяжіння. Дріт виготовлено з:

№ варіанту	Матеріал	$\rho, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	№ варіанту	Матеріал	$\rho, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
1.	Мідь	8 960	11.	Срібло	10 500
2.	Свинець	11 350	12.	Алюміній	2 698
3.	Молибден	10 220	13.	Тантал	16 654
4.	Вольфрам	19 300	14.	Хром	7 190
5.	Титан	4 540	15.	Ванадій	6 110
6.	Ніобій	8 570	16.	Золото	19 320
7.	Залізо	7 874	17.	Паладій	12 020
8.	Кобальт	8 900	18.	Платина	21 450
9.	Магній	1 738	19.	Іридій	22 560
10.	Нікель	8 902	20.	Родій	12 410

- 4.14. Яка сила необхідна, щоб сталевий стрижень довжиною 1 м і площею поперечного перерізу  $1 \text{ см}^2$  видовжити на 1 мм? При якому найменшому навантаженні  $F_{\min}$  стрижень розірветься, якщо границя міцності сталі  $\sigma_{\text{міцн}} = 7,85 \cdot 10^8 \text{ Па}$ ? Модуль Юнга сталі  $E = 2 \cdot 10^{11} \text{ Па}$ .
- 4.15. Стрижень із поперечним перерізом  $S$  розтягують силою  $F$ , паралельною до його осі. Під яким кутом  $\alpha$  до осі нахилена переріз, в якому тангенціальне напруження  $\tau$  максимальне?
- 4.16. Сталеву стрічку шириною 16 см і товщиною 12 мм розтягують силою 200 кН. З яким запасом міцності працює стрічка, якщо границя міцності сталі, з якої вона виготовлена, дорівнює  $\sigma_{\text{міцн}} = 420 \text{ МПа}$ ?
- 4.17. Який вантаж можна підвісити на сталевому тросі діаметром 3 см при запасі міцності, рівному 10, якщо границя міцності  $\sigma_{\text{міцн}} = 700 \text{ МПа}$ ?

- 4.18. Яким має бути найменший переріз сталевго дроту довжиною  $l_0$ , щоб забезпечити запас міцності, рівний  $n$ ? Границя міцності сталі  $\sigma_{\text{міцн}} = 400 \text{ МПа}$ .

№ варіанту	$l_0, \text{ м}$	$n$	№ варіанту	$l_0, \text{ м}$	$n$
1	3,1	4	11	5,6	8
2	4,2	5	12	3,8	5
3	6,7	8	13	2,5	9
4	2,5	3	14	6,9	2
5	4,6	7	15	5,4	6
6	6,2	4	16	2,8	10
7	3,4	5	17	3,6	3
8	4,8	6	18	7,3	7
9	2,8	9	19	6,1	4
10	4,7	5	20	5,2	8

- 4.19. Тонке свинцеве кільце обертається відносно нерухомої осі, що проходить через центр мас, перпендикулярно площині кільця. Визначте максимальне значення лінійної швидкості при обертанні.
- 4.20. До залізного дроту довжиною 50 см і діаметром 1 мм прив'язано гирю масою 1 кг. З якою частотою можна рівномірно обертати у вертикальній площині такий дріт з вантажем, щоб він не розірвався?
- 4.21. Визначте найменшу товщину стінок скляної циліндричної трубки, якщо тиск усередині трубки може збільшуватися до  $p_b = 7 \cdot 10^5 \text{ Па}$ , не викликаючи руйнування. Зовнішній тиск  $p_3 = 10^5 \text{ Па}$ , внутрішній діаметр трубки  $d = 0,1 \text{ м}$ .
- 4.22. До сталевго дроту довжиною  $l_0 = 1 \text{ м}$  і радіусом  $r = 1 \text{ мм}$  підвісили вантаж масою  $m = 100 \text{ кг}$ . Знайдіть роботу  $A$  розтягнення дроту.
- 4.23. Монокристал германію піддається одновісному пружному розтягненню при кімнатній температурі. Розрахуйте величину напруження  $\sigma$ , яке необхідно прикласти до монокристалу ге-

рманію (модуль Юнга 100 ГПа) для досягнення деформації  $10^{-6}$ .

- 4.24. Монокристал кремнію, який представляє собою циліндр довжиною 5 см, піддається одновісному пружному розтягненню. Розрахуйте величину напруження  $\sigma$ , яке необхідно прикласти до монокристалу кремнію (модуль Юнга кремнію 130 ГПа) для досягнення деформації, що дорівнює  $5 \cdot 10^{-6}$ . Вкажіть величину, на яку зміниться довжина монокристалу після зняття напруження.
- 4.25. Відносна зміна об'єму стрижня при поздовжній деформації дорівнює нулю. Визначте коефіцієнт Пуассона матеріалу стрижня.
- 4.26. Знайдіть відносну зміну густини циліндричного мідного дроту під дією на нього тиску  $P_0 = 9,8 \cdot 10^7$  Па. Коефіцієнт Пуассона для міді  $\mu = 0,34$ .
- 4.27. Залізний дріт довжиною  $l_0 = 5$  м висить вертикально. На скільки зміниться об'єм дроту, якщо до нього прикріпити гирю масою  $m = 10$  кг? Коефіцієнт Пуассона заліза  $\mu = 0,3$ .
- 4.28. Визначте максимальний тиск води при замерзанні. Густина льоду  $\rho = 0,917 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ , модуль Юнга  $E = 2,8 \cdot 10^{11}$  Па, коефіцієнт Пуассона  $\mu = 0,3$ .
- 4.29. Знайдіть момент пари сил  $M$ , необхідний для закручування дроту довжиною  $l_0 = 10$  см і радіусом  $r = 0,1$  мм на кут  $\varphi = 10'$ . Модуль зсуву матеріалу дроту  $G = 4,9 \cdot 10^{10}$  Па.
- 4.30. Дзеркальце гальванометра підвішене на дроті довжиною  $l_0 = 10$  см і діаметром  $d = 0,01$  мм. Знайдіть момент  $M$ , необхідний для закручування дроту, що відповідає відхиленню зайчика на величину  $a = 1$  мм на шкалі, віддаленій на відстань  $L = 1$  м від дзеркальця. Модуль зсуву матеріалу дроту  $G = 4 \cdot 10^{10}$  Па.

- 4.31. Знайдіть потенціальну енергію П дроту довжиною  $l_0 = 5$  см і діаметром  $d = 0,04$  мм, закрученого на кут  $\varphi = 10'$ . Модуль зсуву матеріалу дроту  $G = 5,9 \cdot 10^{10}$  Па .

### Анізотропні тверді тіла

- 4.32. Задано плоский деформований стан з деформаціями  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\varepsilon_{xy}$ . Якими будуть деформації в системі координат, розташованій під кутом  $\varphi$  відносно загальної осі  $z$  ?
- 4.33. Задано плоский деформований стан, в якому відмінні від нуля тільки деформації  $\varepsilon_{xz}$  та  $\varepsilon_{yz}$ . Якими будуть деформації в системі координат, яка розташована під кутом  $\varphi$  відносно загальної осі  $z$  ?
- 4.34. Чи можливо для повороту відносно осі  $z$  на кут  $\varphi$  додати перетворення, про які йде мова у двох попередніх задачах, для того, щоб отримати перетворення для загального випадку деформації?
- 4.35. Запишіть загальний вигляд матриці пружних сталих у тому випадку, коли існує перпендикулярна до осі  $z$  площина відбивання.
- 4.36. Доведіть, що матриця  $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  складається з симетричної та антисиметричної складових – матриці деформацій  $\varepsilon_{ij}$  та матриці обертань  $\omega_{ij}$ .
- 4.37. Для ізотропної речовини отримайте співвідношення напруження – деформація, деформація – зміщення та напруження – зміщення в полярних координатах.
- 4.38. У системі координат з перпендикулярною до поверхні віссю  $z$  знайдіть діючу на поверхню силу, викликану напруженням загального вигляду  $\sigma_{ij}$ .
- 4.39. Знайдіть зсувові напруження в системах ковзання: первинної, спряженої, вторинної, критичної, – для металевго монокрис-

тала з ГЦК граткою, що піддається одновісному розтягненню під дією напруження вздовж  $[123]$ .

- 4.40. Для металевго монокристалу з ГЦК граткою, що зазнав одновісного розтягнення під дією напруження  $\sigma$  вздовж  $[1\bar{3}2]$ , знайдіть зсувові напруження  $\tau$  в системах ковзання: первинній, спряженій, поперечній, критичній.
- 4.41. Для металевго монокристалу з ОЦК граткою, що зазнав одновісного розтягнення під дією напруження  $\sigma$  вздовж  $[\bar{1}\bar{1}2]$ , знайдіть зсувові напруження  $\tau$ , які визначають кристаліграфічне і некристаліграфічне ковзання.
- 4.42. Знайдіть зсувові напруження, що визначають кристаліграфічне та некристаліграфічне ковзання, для металевго монокристалу з ОЦК граткою, що піддається одновісному розтягненню під дією напруження  $\sigma$  вздовж  $[123]$ .
- 4.43. Якщо в ГЦК кристалі діє первинна система ковзання  $(111)[10\bar{1}]$ , то які індекси має поперечна система ковзання?
- 4.44. Знайдіть вираз для напруження зсуву  $\tau$  в площині  $(1\bar{1}\bar{1})$  вздовж  $[101]$  кубічного кристала для двовісного напруженого стану ( $\sigma_1$  – уздовж  $[\bar{1}\bar{1}0]$ ,  $\sigma_2$  – уздовж  $[110]$ ).
- 4.45. Знайдіть вираз для напруження зсуву  $\tau$  по площині  $(1\bar{1}\bar{1})$  вздовж  $[10\bar{1}]$  кубічного кристалу для двовісного напруженого стану ( $\sigma_1$  – уздовж  $[100]$ ,  $\sigma_2$  – уздовж  $[001]$ ).
- 4.46. Знайдіть вираз для напруження зсуву  $\tau$  по площині  $(1\bar{1}0)$  вздовж  $[111]$  кубічного кристалу для двовісного напруженого стану ( $\sigma_1$  – уздовж  $[101]$ ,  $\sigma_2$  – уздовж  $[1\bar{2}\bar{1}]$ ).
- 4.47. Визначте напруження зсуву  $\tau_{(111)[\bar{1}10]}$ , що виникає внаслідок гвинтової дислокації з вектором Бюргерса  $b = \frac{a}{2}[101]$ .

- 4.48. Визначте напруження зсуву  $\tau_{(110)[\bar{1}11]}$ , що виникає внаслідок крайової дислокації з вектором Бюргерса  $b = \frac{a}{2}[111]$ .
- 4.49. Знайдіть вираз для напруження зсуву  $\tau$  в площині  $(10\bar{1}1)$  вздовж  $[11\bar{2}1]$  гексагонального кристала, що піддається одно-вісному розтягненню під дією напруження  $\sigma$  вздовж  $[0001]$ .
- 4.50. Знайдіть вираз для напруження зсуву  $\tau$  в площині  $(11\bar{1})$  вздовж  $[101]$  кубічного кристала для двовісного напруженого стану ( $\sigma_1$  – уздовж  $[100]$ ,  $\sigma_2$  – уздовж  $[010]$ ).
- 4.51. Кубічний кристал піддається розтягненню в напрямку  $[100]$ . Знайдіть вираз для коефіцієнта Пуассона через пружні сталі.
- 4.52. Кристал міді вздовж осі  $[100]$  зазнає впливу розтягуючого напруження  $\sigma_{xx}$ . Знайти дотичні напруження, що діють у напрямках ковзання в кожній із площин ковзання. Відберіть площини ковзання, що діють при такому орієнтуванні.
- 4.53. Монокристал молібдену розтягується по осі  $[321]$ . Напишіть тензор напружень у координатах ґратки. Перерахуйте в порядку спадання наведеного дотичного напруження діючі системи ковзання із сімейств  $\langle 111 \rangle$   $\{110\}$  та  $\langle 111 \rangle$   $\{211\}$ .
- 4.54. Піддатливості нікелю  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  і  $s_{44}$  за кімнатної температури дорівнюють відповідно  $0,799 \cdot 10^{-11}$ ,  $-0,312 \cdot 10^{-11}$  і  $0,84 \cdot 10^{-11}$  Па відповідно. Визначте модуль Юнга та модуль зсуву нікелю в напрямку  $[210]$ .
- 4.55. Визначте модулі Юнга  $E$  для монокристалу Cu вздовж напрямків  $[0\bar{1}0]$ ,  $[10\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}1]$  (для Cu константи жорсткості  $c_{11} = 168$  ГПа,  $c_{12} = 121$  ГПа,  $c_{44} = 76$  ГПа).

4.56. Визначте модулі Юнга  $E$  для монокристалу Nb вздовж напрямків  $[100]$ ,  $[1\bar{1}0]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$  (для Nb константи жорсткості  $c_{11} = 246$  ГПа,  $c_{12} = 134$  ГПа,  $c_{44} = 29$  ГПа).

4.57. Визначте модулі Юнга  $E$  для монокристалу Ве вздовж напрямків  $[\bar{2}110]$ ,  $[1\bar{1}00]$ ,  $[\bar{1}011]$  (для Ве константи жорсткості  $c_{11} = 292$  ГПа,  $c_{12} = 27$  ГПа,  $c_{13} = 14$  ГПа,  $c_{33} = 336$  ГПа,  $c_{44} = 162$  ГПа,  $c_{66} = 133$  ГПа, відношення  $\frac{c}{a} = 1,57$ ).

4.58. Стан пружної деформації кристала задається у вигляді:

$$\begin{pmatrix} 0,0001 & 0 & 0 \\ 0 & 0,001 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Визначте вигляд характеристичної поверхні деформацій, а також поверхні, в яку переходить сфера одиничного радіусу внаслідок заданих деформацій.

4.59. Визначте характеристичну поверхню пружних деформацій, що задаються тензором

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix} \cdot 10^{-4}.$$

4.60. Тензор механічних напружень деякого кристала в прямокутній системі координат  $(X_1 X_2 X_3)$  має такі ненульові компоненти:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0,5 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0,5 & 0 & 4 \end{pmatrix} \cdot 10^5 \text{ Па}.$$

Визначте найменше за модулем механічне напруження, що зазнає кристал в системі головних осей.

4.61. При пружній деформації кристалічного зразка у формі куба  $1 \times 1 \times 1 \text{ см}^3$  мають місце такі зміщення його точок  $\mathbf{u}(u_1, u_2, u_3)$ .

№ варіанту	$u_1, 10^{-6} \text{ м}$	$u_2, 10^{-6} \text{ м}$	$u_3, 10^{-6} \text{ м}$
1.	$5x_1 + 2x_2 - 3x_3$	$8x_1 - 10x_2 - 2x_3$	$6x_1 - x_2 + 3x_3$
2.	$3x_1 - 4x_2 + 5x_3$	$6x_1 - 2x_2 + 7x_3$	$5x_1 - 3x_2 + 8x_3$
3.	$2x_1 + 6x_2 - 3x_3$	$5x_1 - 3x_2 + 9x_3$	$3x_1 - 5x_2 - 4x_3$
4.	$4x_1 - 3x_2 + x_3$	$2x_1 - 7x_2 + 6x_3$	$8x_1 - 5x_2 + 3x_3$
5.	$2x_1 + 4x_2 - x_3$	$4x_1 + 3x_2 + 7x_3$	$x_1 + 2x_2 - x_3$
6.	$6x_1 - x_2 + 3x_3$	$2x_1 + 3x_2 + x_3$	$4x_1 + 6x_2 - 3x_3$
7.	$3x_1 + 2x_2 - x_3$	$5x_1 + 2x_2 - 3x_3$	$2x_1 - 3x_2 + 5x_3$
8.	$4x_1 + 3x_2 + 5x_3$	$3x_1 + 5x_2 - 2x_3$	$8x_1 - 10x_2 - 2x_3$
9.	$6x_1 + 4x_2 + 7x_3$	$x_1 + 3x_2 + 2x_3$	$2x_1 + 3x_2 - 7x_3$
10.	$x_1 + 7x_2 + 5x_3$	$4x_1 - 3x_2 + 5x_3$	$3x_1 - 7x_2 + 6x_3$
11.	$4x_1 - 3x_2 + 6x_3$	$3x_1 + 4x_2 + x_3$	$7x_1 + 6x_2 + x_3$
12.	$3x_1 - 2x_2 + 5x_3$	$4x_1 + 3x_2 + 5x_3$	$-5x_1 + 7x_2 + 4x_3$
13.	$3x_1 - 5x_2 + 7x_3$	$8x_1 - 4x_2 + 3x_3$	$x_1 + 5x_2 + 6x_3$
14.	$4x_1 + 3x_2 + 7x_3$	$x_1 + 5x_2 + x_3$	$4x_1 + 4x_2 + 3x_3$
15.	$-x_1 + 4x_2 + 3x_3$	$3x_1 + 2x_2 - x_3$	$8x_1 + 4x_2 - 6x_3$
16.	$8x_1 - 10x_2 - 2x_3$	$3x_1 + 4x_2 + 6x_3$	$6x_1 - 3x_2 + x_3$
17.	$8x_1 + 5x_2 + 3x_3$	$3x_1 - 5x_2 + 4x_3$	$x_1 - 6x_2 + 7x_3$
18.	$x_1 - x_2 + 4x_3$	$3x_1 + 3x_2 - 2x_3$	$5x_1 + 2x_2 - 3x_3$
19.	$2x_1 + 5x_2 + 4x_3$	$4x_1 + 3x_2 - 3x_3$	$7x_1 + 5x_2 - 4x_3$
20.	$3x_1 - 5x_2 + 6x_3$	$2x_1 - x_2 + 5x_3$	$3x_1 + 3x_2 + 2x_3$
21.	$7x_1 + 5x_2 - 4x_3$	$6x_1 - x_2 + 3x_3$	$x_1 + 2x_2 + 5x_3$
22.	$-5x_1 + 7x_2 + 4x_3$	$6x_1 + 4x_2 + 5x_3$	$4x_1 + 3x_2 + 2x_3$
23.	$6x_1 - 7x_2 + 3x_3$	$3x_1 + 4x_2 + x_3$	$4x_1 + 7x_2 - 2x_3$
24.	$x_1 + 5x_2 - 3x_3$	$3x_1 + 6x_2 + x_3$	$3x_1 + 2x_2 + 2x_3$
25.	$2x_1 - 4x_2 + 4x_3$	$4x_1 + x_2 + x_3$	$x_1 + x_2 + 2x_3$

Знайдіть компоненти тензора деформацій та дилатацію кристала при деформації.

4.62. Деформація кристала кубічної сингонії з модулями пружності

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}$$

характеризується тензором

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 0 & \frac{\varepsilon_0}{8} \\ 0 & -2\varepsilon_0 & 0 \\ \frac{\varepsilon_0}{8} & 0 & \frac{\varepsilon_0}{3} \end{pmatrix},$$

де  $\varepsilon_0 > 0$ . Знайдіть компоненти тензора механічних напружень  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$  та об'ємну густину пружної енергії  $w_\sigma$  даного кристала.

4.63. Механічно напружений стан кристала тетрагональної сингонії характеризується тензором напружень з ненульовими компонентами:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 2\sigma_0 & 0,2\sigma_0 & 0 \\ 0,2\sigma_0 & -3\sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & 4\sigma_0 \end{pmatrix},$$

де  $\sigma_0 > 0$ . Пружні піддатливості цього кристала задаються матрицею

$$s_{ij} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}.$$

Визначте ненульові компоненти тензора деформацій  $\varepsilon_{ij}$ , що виникають у кристалі, та представте їх у вигляді матриці.

### Пружні властивості дислокацій

- 4.64. Дислокація протискується між малими частинками іншої фази, які розташовуються уздовж однієї прямої на відстані  $l$  одна від іншої. Визначте силу, що діє на кожну частинку, як функцію дотичного напруження  $\tau$ , що діє на площині ковзання дислокації паралельно вектору Бюргерса  $b$ , та оцініть максимальну силу, яка може діяти на кожну частинку.
- 4.65. В міді між двома частинками оксиду цирконію проштовхується дислокація, що ковзає. Оцініть максимальну силу, діючу на кожну з частинок.
- 4.66. Із рівняння сферично симетричного поля зміщень  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  від центру дилатації  $\nabla(\nabla\mathbf{u})=0$  знайти розподіл радіальних зміщень  $u_r(r)$  поблизу вакансії. Оцініть радіус „ядра дефекту“ (область нелінійних зміщень з деформацією  $\varepsilon_{rr} \geq 0,1$ ) та енергію його поля поза ядром.
- 4.67. Знайдіть радіус ядра гвинтової дислокації, вважаючи, що істотне відхилення від закону Гука з'являються при пружній деформації 5%.
- 4.68. Розрахуйте рівноважну відстань між перегинами, що утворюють парний перегин для чисто гвинтової дислокації при зсувовому напруженні  $\sigma = 10^{-5} \mu$ .

- 4.69. Оцініть ширину перегинів на гвинтових дислокаціях у алюмінії (прийняти  $\sigma_{\Pi} = 10^{-3} \mu$ ).
- 4.70. Розгляньте три перегини одного знаку на крайовій дислокації, що накопичилися у точці закріплення, яка затримала перший перегин. Прикладене напруження  $\sigma = 10^{-4} \mu$ . Які відстані між перегинами?
- 4.71. Розрахуйте дальнодіюче поле напружень дислокаційного диполя, що складається з двох паралельних крайових дислокацій з різними за величиною але протилежними за напрямком векторами Бюргерса, при умові, що відстань між площинами ковзання дорівнює  $2b$  та є незмінною. Використайте силу, що діє на елемент як „індикатор“ напруження.
- 4.72. Порівняно з окремим випадком згинання товстого розрізного кільця впливає, що функція напружень (функція Ейрі) для поля крайової дислокації має в полярних координатах вигляд  $\chi(r, \theta) = f(r) \sin \theta$ . З основного рівняння плоскої задачі теорії пружності  $\nabla^4 \chi = 0$  отримайте звичайне диференціальне рівняння для визначення  $f(r)$ .
- 4.73. Використовуючи результат попередньої задачі знайдіть радіальну складову  $f(r)$  функції напружень  $\chi(r)$  для крайової дислокації.
- 4.74. Яке напруження необхідно, щоб розчепити дислокації з векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{2}[111]$  та  $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ , виконуючи розтягнення по осі  $[110]$ .
- 4.75. В площині  $(111)$  монокристалу алюмінію у напрямку  $[01\bar{1}]$  прикладено дотичне напруження, яке дорівнює 20 МПа. Чому буде дорівнювати сила, діюча на одиницю довжини гвинтової дислокації  $\frac{a}{2}[\bar{1}10]$  при її ковзанні в площині  $(111)$ ?
- 4.76. У площині  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$  монокристалу міді у напрямку  $[10\bar{1}]$  прикладено дотичне напруження, яке дорівнює 30 МПа. Чому бу-

де дорівнювати сила, діюча на одиницю довжини гвинтової дислокації  $\frac{a}{2}[\bar{1}01]$  при її ковзанні в площині  $(\bar{1}1\bar{1})$ ?

- 4.77. Оцініть, яку частку модуля зсуву складає критичне дотичне напруження, необхідне для початку пластичної деформації, якщо дислокаційна сітка у відпаленому кристалі складається із відрізків довжиною порядку  $10^4$  векторів Бюргерса.
- 4.78. Оцініть критичне напруження течії для міді з рівномірно розподіленими в ній частинками  $\text{SiO}_2$  радіусом 10 нм при об'ємній частці цих частинок, рівній 0,1 %.
- 4.79. При пластичній деформації кристалу з густиною дислокацій  $\rho$  половина перетину дислокацій породжує сходинки. Із них  $\frac{1}{2}$  при подальшому русі генерує вакансії і одночасно ковзає вздовж дислокації із швидкістю  $v_c$  до анігіляції із сходинками протилежного знаку. Знайдіть неконсервативний пробіг сходинки  $x$  до анігіляції і концентрації вакансій  $C_v$ , створених деформацією  $\gamma$  при швидкості дислокацій  $v_d$ . Яка верхня границя  $c_v$ , якщо  $v_c \leq v_d$ ?
- 4.80. У гратці ОЦК концентраційне розширення від домішки впровадження за трьома осями куба різне:  $u_{11} \neq u_{33}$ . Робота зміни об'єму  $\Omega$  при впровадженні атома  $A = u_{ij} \sigma_{ij} \Omega$ . Як залежить енергія домішки в полі  $\sigma_{ij}$  від гідростатичного тиску  $P = \frac{1}{3}(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})$ ?
- 4.81. Сфера об'єму  $V$  всередині твердого тіла, що знаходиться під однорідним напруженням  $\sigma_{ij}$ , збільшується на  $\Delta V$ . Знайдіть роботу переміщення її поверхні  $A$  проти сил поля. Що означає співпадіння  $A$  з роботою розширення пухирця в рідині?
- 4.82. При швидкості деформації  $\dot{\gamma}$  стаціонарна концентрація вакансій  $C_v$  така ж, як після деформації  $\gamma = t_0 \dot{\gamma}$ , де  $t_0$  – стала часу стоку. Яка швидкість деформації збереже всі вакансії, якщо

стікання йде на дислокації з густиною  $\rho$ , а коефіцієнт дифузії вакансій  $D_v$ ? Яка величина цієї стаціонарної концентрації?

- 4.83. Локальні зміни модулів пружності  $\Delta G$  та  $\Delta E = 2(1+\mu)\Delta G$  в об'ємі  $V$  змінюють енергію поля деформацій  $\varepsilon_{ij}$  на величину

$$\Delta U = \frac{\varepsilon_{ij}\Delta\sigma_{ij}}{2},$$

де зміни напружень  $\Delta\sigma_{ij} = \varepsilon_{ij}\Delta G$  для дотичних ( $i \neq j$ ) та  $\Delta\sigma_{ij} = \varepsilon_{ii}\Delta E$  – для нормальних напружень. Поклавши  $\Delta V = \Omega$  (об'єм одного атому), оцініть, як змінюється енергія поля гвинтової та крайової дислокації при заміщенні в точці  $(r, \theta)$  одного атому домішковим, якщо  $\Delta G = \alpha_G G$  (дорівнює концентраційній зміні модуля  $G$  при  $c_A \rightarrow 1$ ).

### Пружні хвилі в кристалах

- 4.84. Виведіть рівняння, що описують поширення поздовжніх і поперечних хвиль у твердому тілі. Напишіть дисперсійні співвідношення. Визначте швидкості поширення сигналів.
- 4.85. З експерименту відомо, що швидкість  $v$  поширення поздовжніх деформацій у твердому тілі залежить від модуля Юнга та густини матеріалу  $\rho$ . Використовуючи метод розмірностей, знайдіть вираз для залежності  $v$  від вказаних параметрів матеріалу.
- 4.86. Визначте закон дисперсії пружних хвиль у кубічному кристалі, що поширюються в кристалографічній площині (001) – площині грані куба.
- 4.87. Визначте закон дисперсії пружних хвиль у кубічному кристалі, що поширюються в кристалографічному напрямку [111] – напрямку діагоналі куба.
- 4.88. Визначте закон дисперсії пружних хвиль у кристалі гексагональної системи.
- 4.89. Визначте фазову швидкість поздовжньої пружної хвилі, що поширюється в кубічному кристалі густиною  $\rho$  в таких кристалографічних напрямках: а) [001]; б) [111].

4.90. Визначте модулі пружності  $c_{22}$ ,  $c_{44}$ ,  $c_{66}$ ,  $c_{46}$  моноклінного кристала за значеннями поширення ультразвукових хвиль, наведеними в табл. Густина кристала  $\rho = 1160 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .

Напрямок поширення хвилі	Напрямок зміщення в хвилі	Швидкість звуку, $s, \frac{\text{м}}{\text{с}}$
[010]	[010]	2 890
[100]	[010]	1 450
[001]	[010]	1 680
[010]	[100]	1 400
[010]	[001]	1 510

4.91. Визначте фазові швидкості пружних хвиль, що поширюються в кристалі ромбічної сингонії густиною  $\rho$ :

- поздовжньої в кристалографічному напрямку [001];
- поперечної в кристалографічному напрямку [001];
- поздовжньої в кристалографічному напрямку [101];
- поздовжньої в кристалографічному напрямку  $[\bar{1}01]$ ;
- поперечної в кристалографічному напрямку  $[10\bar{1}]$ ;
- поздовжньої в кристалографічному напрямку [111].

4.92. Визначте фазові швидкості пружних хвиль, що поширюються в кристалі тетрагональної сингонії густиною  $\rho$ :

- поздовжньої в кристалографічному напрямку [001];
- поперечної в кристалографічному напрямку [001];
- поздовжньої в кристалографічному напрямку [101];
- поздовжньої в кристалографічному напрямку  $[\bar{1}01]$ ;

- 4.93. Визначте відношення фазових швидкостей поздовжніх пружних хвиль, що поширюються в кристалі ромбічної сингонії в напрямках  $[\bar{1}22]$  і  $[211]$ . Використовуючи отриманий результат, знайдіть аналогічне відношення фазових швидкостей поздовжніх пружних хвиль, що поширюються в кристалі кубічної сингонії.
- 4.94. Знайдіть відношення фазових швидкостей поздовжньої і поперечної пружних хвиль, що поширюються в кристалі тетрагональної сингонії в напрямку  $[\bar{1}\bar{1}2]$ .
- 4.95. Розв'яжіть рівняння поширення пружних хвиль нескінченно малої амплітуди для п'єзоелектричного твердого тіла кубічної симетрії, якщо напрямок поширення: а)  $[100]$ ; б)  $[110]$ .
- 4.96. Для швидкості акустичних хвиль у кристалі InSb були отримані такі результати:

Напрямок поширення хвилі	Напрямок поляризації	Швидкість, $s, \frac{m}{c}$
$[110]$	$[110]$	$3,7664 \pm 0,0003$
$[110]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$	$1,6251 \pm 0,0002$
$[110]$	$[001]$	$2,2862 \pm 0,0002$
$[100]$	$[100]$	$3,4068 \pm 0,0003$
$[100]$	$[010]$	$2,2864 \pm 0,0002$

Покажіть, що хоча InSb не є п'єзоелектриком, наведені результати узгоджуються в межах експериментальної похибки з результатом, який можна очікувати від п'єзоелектричного кристала. Визначте три пружні сталі, які характеризують цей матеріал. Густина кристалу InSb  $\rho = 5774,7 \frac{kg}{m^3}$ ).

- 4.97. Покажіть, що довільне хвильове поле в пружному середовищі можна представити як суму поздовжніх і поперечних зміщень, що описуються рівняннями

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - c_l^2 \Delta \mathbf{u}_l = 0 \quad \text{і} \quad \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - c_t^2 \Delta \mathbf{u}_t = 0 .$$

Визначте швидкості поздовжніх і поперечних зміщень в залежності від модуля всебічного стиснення  $K$  і модуля зсуву  $G$ .

- 4.98. Покажіть, що швидкість поздовжньої хвилі, яка поширюється в напрямку  $[111]$  в кубічному кристалі, дорівнює

$$v_l = \sqrt{\frac{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}{3\rho}} .$$

- 4.99. Покажіть, що швидкість поперечної хвилі, яка поширюється в напрямку  $[111]$  в кубічному кристалі, дорівнює

$$v_t = \sqrt{\frac{c_{11} - c_{12} + c_{44}}{3\rho}} .$$

- 4.100. Виходячи із загальних динамічних рівнянь теорії пружності, виведіть рівняння Ламе, яке описує поле вектора зміщень у твердому тілі.
- 4.101. Знайдіть поляризацію плоских об'ємних гармонічних хвиль в ізотропному твердому середовищі, рух частинок якої описується векторним рівнянням Ламе.
- 4.102. З динамічних рівнянь теорії пружності виведіть закон збереження енергії в диференціальній формі і знайдіть вираз для густин кінетичної та потенціальної енергії і потоку енергії (вектор Умова – Пойтінга).
- 4.103. В зразку із плавленого кварцу поширюється об'ємна поздовжня хвиля з частотою  $\nu = 30$  МГц та амплітудою деформацій порядку  $10^{-9}$ . Розрахуйте швидкість поширення, довжину хвилі, амплітуду зміщення, амплітуду коливальної швидкості та інтенсивність.
- 4.104. Доведіть, що об'ємні акустичні хвилі, що поширюються в кристалі в одному і тому ж напрямку з різними швидкостями, мають взаємно ортогональні поляризації.

- 4.105. Які пружні модулі кристала дорівнюють нулю, якщо площина  $z = \text{const}$  є площиною симетрії. Розрахуйте анізотропію швидкості об'ємних хвиль, що поширюються в цій площині.
- 4.106. Кристал, який має три взаємно ортогональні площини симетрії, вирізаний у формі паралелепіпеда з ребрами, паралельними кристалографічним осям. Для кожної з трьох ортогональних граней зразку виміряні швидкості трьох об'ємних акустичних хвиль, що поширюються в напрямку нормалі до грані. Визначте загальну кількість незалежних пружних модулів кристала та дослідіть можливість їх обчислення за відомою густиною і даними акустичних вимірювань.
- 4.107. Визначте вигляд матриці пружних модулів кубічних кристалів, що характеризується наявністю трьох взаємно ортогональних площин симетрії та інваріантністю при перепозначенні осей кристалографічного базису. Покажіть, що сума квадратів фазових швидкостей трьох різних об'ємних хвиль, які можуть поширюватися в одному і тому ж напрямку кубічного кристала, для всіх напрямків однакова.

## 5. Дифузія в твердому тілі

### Основні формули та визначення

Теплові коливання атомів у твердих тілах зводяться в основному до коливань з малою амплітудою, які вони здійснюють біля середніх положень рівноваги. Однак кінетична енергія атомів внаслідок їхньої взаємодії з сусідніми атомами не залишається сталою. Навіть у тому випадку, коли середня кінетична енергія атомів мала, згідно максвеллівському закону розподілу швидкостей, в кристалі завжди знайдеться деяке число атомів, кінетична енергія яких достатньо велика. Такий атом може зірватися зі свого положення рівноваги і, подолавши потенційний бар'єр, створений оточуючими атомами, перейти в деяке нове вільне положення рівноваги. При цьому атом втрачає надлишкову енергію, віддаючи її атомам крис-

талічної ґратки. Через деякий час атом знову може набрати достатню енергію, щоб вирватися із нового оточення і перейти в сусіднє. Такі переміщення атомів, обумовлені тепловим рухом, і складають основу дифузійних процесів в твердих тілах. Дифузію, обмежену переміщенням атомів одного елементу в ґратці іншого, називають *атомною*. Простим випадком атомної дифузії є *власна дифузія* – переміщення атомів елементів у власній кристалічній ґратці. В ідеальній кристалічній ґратці, в якій атоми здійснюють лише коливальний рух навколо своїх положень рівноваги, процеси дифузії малоймовірні. Дифузійне переміщення домішкових атомів або власних атомів ґратки завжди пов’язане з наявністю в ній простих дефектів – вакансій, міжвузловинних атомів, дивакансій та інших більш складних дефектів – дислокацій, меж поділу, вакансійних та домішкових кластерів. Внаслідок теплового руху при будь-якій температурі відбувається безперервне „перемішування“ атомів, які складають тверде тіло. Швидкість „перемішування“ при наявності у ґратці вакантних вузлів, що виражається **ймовірністю переходу атому** із одного положення рівноваги в інше, внаслідок статистичного характеру процесу змінюється з температурою за експоненціальним законом:

$$P_m \approx \nu_0 e^{-\frac{E_m}{k_B T}}, \quad (5.1)$$

де  $E_m$  – висота потенційного бар’єру (енергія міграції вакансії), який повинен подолати атом, щоб перейти із одного положення рівноваги в інше;  $\nu_0 \sim 10^{13} \text{ c}^{-1}$  – власна частота коливань атому. При даній температурі ймовірність  $P_m$  визначається значенням  $E_m$ , яке залежить від міцності зв’язку атомів у ґратці. Ймовірність переходу атома із вузла у вакансію повинна бути обернено пропорційною **часу „осідлого“ життя атому** (вакансії) у вузлі:

$$\tau = \frac{1}{P_m} = \tau_0 e^{\frac{E_m}{k_B T}}, \quad (5.2)$$

де  $\tau_0$  – період власних коливань атому, який відповідає максимальній частоті в акустичному спектрі, і за порядком величини дорів-

нює  $10^{-13}$  с. Чим вищою є температура тіла, тим менший час знаходження атому в вузлі. Середня швидкість, із якою вакансія рухається у кристалі

$$\langle v \rangle = \frac{\delta}{\tau} = \frac{\delta}{\tau_0} e^{-\frac{E_m}{k_B T}}. \quad (5.3)$$

Концентрація вакансій залежить від температури

$$C_v = \frac{n}{N} = e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}}, \quad (5.4)$$

де  $E_{0v}$  – енергія утворення вакансії. Коефіцієнт дифузії вакансій  $D$  у кристаллах

$$D = \frac{1}{3} \langle v \rangle \langle \lambda \rangle = \frac{1}{3} \frac{\langle \lambda^2 \rangle}{\tau}, \quad (5.5)$$

де  $\langle \lambda \rangle$  – середня довжина вільного пробігу частинки;  $\tau$  – час між двома зіткненнями. Якщо елементарні переміщення у твердому тілі мають одні й ті самі значення  $\delta$ , то

$$D = \frac{\delta^2}{6\tau_0} e^{-\frac{E_m}{k_B T}}. \quad (5.6)$$

Це відноситься і до переміщень атомів по міжвузловинам. Переміщення атому з однієї міжвузловини в сусідню відбувається з великою швидкістю, оскільки бар'єри між міжвузловинами знижені порівняно з бар'єрами між атомами, які сидять у вузлах, і завжди поруч з дифундуючим атомом є готова незайнята міжвузловина.

**Повна ймовірність**  $P$  того, що одночасно поруч із атомом виявиться вакансія і атом здійснить стрибок у цю вакансію, дорівнює добутку ймовірностей:

$$P = P_m P_v = \frac{1}{\tau_0} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} e^{-\frac{E_{0v}}{k_B T}} = \frac{1}{\tau_0} e^{-\frac{E_a}{k_B T}}, \quad (5.7)$$

де  $E_a = E_m + E_{0v}$  – енергія активації процесу самодифузії.

## Коефіцієнт дифузії атому по вакансіям

$$D = D_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}}, \quad (5.8)$$

де передекспоненційний множник  $D_0 = \frac{\delta^2}{6\tau_0}$ . У реальній ситуації

процеси дифузії протікають набагато складніше і одночасно може діяти не один, а відразу декілька механізмів. А. Фік для якісного методу розрахунку дифузії використав рівняння теплопровідності, яке одержав Фур'є. Він виходив з гіпотези, що в ізотропному середовищі кількість  $\mathbf{J}$  дифундуючої речовини, що проходить за одиничний час через одиничну площу поперечного перерізу, пропорційна градієнту концентрації  $c$ , який вимірювався по нормалі до цього перерізу:

$$\mathbf{J} = -D \text{grad } C = -D \nabla C. \quad (5.9)$$

Це **перший закон Фіка** для стаціонарного потоку. Тут  $J$  – густина течії дифундуючих атомів;  $C$  – їхня концентрація;  $\nabla$  – оператор градієнту. У загальному випадку, дифузія анізотропна і коефіцієнт дифузії  $D_{ij}$  – тензор другого рангу

$$D_{ij} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Для одномірної дифузії та ізотропного середовища рівняння Фіка має вигляд  $J_x = -D \frac{\partial C}{\partial x}$ . Оскільки  $C$  характеризує кількість речовини в одиничному об'ємі, то коефіцієнт дифузії має розмірність  $\frac{\text{см}^2}{\text{с}}$  або  $\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ . Для нестаціонарного потоку другий закон Фіка одержимо виходячи із наступного: швидкість накопичення дифундуючої речовини в даному елементі об'єму є різницею між прибуваючими і вибуваючими потоками за одиничний час. Розглянемо дві паралельні площини, площа кожної з яких дорівнює одиниці, а від-

стань між ними складає  $dx$ . Потік через першу площину дорівнює:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x}, \quad \text{а потік через другу площину:}$$

$$J + \frac{\partial J}{\partial x} = -D \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad \text{Тоді різниця потоків:}$$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad \text{Але } \frac{\partial J}{\partial x} \text{ дорівнює взятій з протилежним знаком}$$

швидкості зміни концентрації, тобто  $-\frac{\partial C}{\partial t}$ . Таким чином:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (5.11)$$

При умові, що коефіцієнт дифузії не залежить від концентрації, тобто є сталою величиною, отримано **другий закон Фіка** для одномірної дифузії в диференційній формі

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (5.12)$$

де  $C = C(x, t)$  – залежить від часу  $t$  і глибини дифузії  $x$ . Для дифузії у трьох вимірах в ізотропному середовищі:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (5.13)$$

Основним джерелом інформації про параметри дифузії в твердих тілах є експеримент. На практиці експериментального дослідження процесів дифузії домішок у твердих тілах використовують розв'язки рівняння другого закону Фіка для одномірного випадку при визначених для конкретної фізичної задачі початкових і граничних умовах.

Всі викладені вище уявлення відносилися до випадку, коли коефіцієнт дифузії вважали не залежним від координат, а значить і від концентрації.

В іншому випадку необхідно розв'язувати друге рівняння Фіка у формі

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (5.13)$$

Для визначення концентраційної залежності коефіцієнта дифузії найчастіше використовують **метод Больцмана – Матано**.

Математичний зміст методу полягає у тому, що коли початкові та граничні умови, яким задовольняє рівняння дифузії, можна

виразити через  $\lambda = \frac{x}{\sqrt{t}}$ , то отримане рівняння також представляє

собою функцію тільки  $\frac{x}{\sqrt{t}}$  і є єдиним.

Цей метод дозволяє розрахувати залежність коефіцієнта взаємної дифузії  $\tilde{D}(C)$  від концентрації по залежності  $C(x)$  (експериментальній концентраційній кривій) у випадку неперервного початкового розподілу. Інакше кажучи, складові частини зразку мають бути достатньо великими, так щоб завжди залишалися на краях ділянки, в яких дифузія не є суттєвою. У цьому випадку будь-яка площа зразка переміщається при дифузії таким чином, що її координата  $x$  пропорційна квадратному кореню із часу дифузії.

Оскільки відповідно до умов застосовності методу координата  $x$  площини з довільною концентрацією пропорційна  $\sqrt{t}$ , можна

ввести нову змінну  $\lambda = x t^{-\frac{1}{2}}$  та виконати перетворення Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = t^{-\frac{1}{2}} \frac{df}{d\lambda} \quad \text{і} \quad \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\lambda}{2t} \frac{df}{d\lambda}.$$

Це дозволяє перейти в рівнянні (5.13) від частинних похідних до повних, що принципово полегшує його розв'язок. Підставляючи похідні у рівняння (5.13), отримаємо

$$-\frac{\lambda}{2} \frac{dC}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} \left( \tilde{D} \frac{dC}{d\lambda} \right). \quad (5.14)$$

Тепер, щоб розрахувати  $\tilde{D}$  в деякій площині  $x$  – такій, що  $C_1 < C(x) < C_2$ , достатньо проінтегрувати рівняння (5.14) по  $C$  від  $C = C_1$  до  $C$ :

$$-\frac{1}{2} \int_{C_1}^C \lambda dC = \tilde{D} \frac{dC}{d\lambda} \Big|_{C_1} \quad (5.15)$$

і перейти у виразі (5.15) назад до змінних  $x, t$ :

$$-\frac{1}{2t} \int_{C_1}^C x dC = \tilde{D} \frac{dC}{dx} \Big|_C - \tilde{D} \frac{dC}{dx} \Big|_{C_1} = \tilde{D} \frac{dC}{dx} \Big|_C. \quad (5.16)$$

Остання рівність випливає із того, що  $\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{C_1} = 0$ .

Рівняння (5.16) дозволяє легко розрахувати  $\tilde{D}$ , якщо знати, звідки відраховувати  $x$  під знаком інтегралу в множинику  $\int x dC$ .

Скористаємося тим, що  $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$  як при  $C = C_1$ , так і при  $C = C_2$ .

Тому

$$-\frac{1}{2t} \int_{C_1}^{C_2} x dC = 0. \quad (5.17)$$

Рівняння (5.17) визначає площину початку відліку. Насправді, із нього випливає, що існує площина  $x = x_m$  – така, що  $\int_{C_1}^{C_m} x dC = - \int_{C_m}^{C_2} x dC$ . Цю площину називають **площиною Матано**, і в загальному випадку вона не співпадає з початковою границею розділу ( $x = 0$ ). Можна побачити, що площина Матано – це площина, через яку проходять однакові потоки речовини у протилежних напрямках.

Із рівнянь (5.16) та (5.17) випливає, що

$$\tilde{D}(C) = -\frac{1}{2t} \frac{\partial x}{\partial C} \Big|_C \int_{C_1}^C x dC. \quad (5.18)$$

Знак „мінус“ у рівнянні (5.18) пов'язаний із тим, що  $\tilde{D} > 0$ , оскільки завжди  $\int_{C_1}^C x dC < 0$ .

Метод Матано є графічним і похибка при його використуванні сильно збільшується на кінцях концентраційної кривої, поблизу концентрацій  $C_1$  і  $C_2$ . Тому визначення  $\tilde{D}$  при малій концентрації одного із компонентів за допомогою методу Матано стає практично неможливим.

---

## Приклади розв'язування задач

**Приклад 5.1.** Виведіть закони Фіка.

*Розв'язання*

Розглянемо потоки частинок:  $J = J_{\text{ліворуч}} - J_{\text{праворуч}}$

$$J = -[C(x + \Delta x)v - C(x - \Delta x)v], \quad (1)$$

де

$$v = f \Delta x \quad (2, a)$$

– швидкість переміщення атомів внаслідок дифузії;

$$\Delta x = a; \quad (2, б)$$

– параметр ґратки;  $f$  – частота зіткнень.

З урахуванням (2, а) і (2, б) вираз (1) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} J &= -f \Delta x [C(x + \Delta x) - C(x - \Delta x)] = \\ &= -\frac{f \Delta x^2 [C(x + \Delta x) - C(x - \Delta x)]}{\Delta x} = -\frac{f a^2 [C(x + a) - C(x - a)]}{a} = \\ &= -D \frac{\partial C}{\partial x}. \end{aligned}$$

Отже, остаточно маємо

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (3)$$

Розглянемо виведення другого закону. Як відомо, рівняння неперервності має вигляд:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div} J = 0. \quad (4)$$

Підставляючи (3) в (4), отримаємо:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div} \left( -D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 0 \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 0,$$

або остаточно

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (5)$$

Відповідь:  $J = -D \frac{\partial C}{\partial x}; \quad \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right).$

**Приклад 5.2.** Оцініть величину коефіцієнта дифузії радіоактивного Натрію в звичайному Натрії за кімнатної температури, якщо висота потенційного бар'єру, який потрібно подолати атому, щоб перейти в нове положення рівноваги, дорівнює 0,5 еВ. Частота коливань атома  $10^{12}$  Гц.

*Розв'язання*

Коефіцієнт дифузії атомів Натрію знайдемо зі співвідношення

$$D = a^2 \nu e^{-\frac{E_a}{k_B T}},$$

де  $a = 4,282 \cdot 10^{-10}$  м – параметр ґратки Натрію. Після розрахунків отримаємо:

$$D = (4,282 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 10^{12} \cdot e^{-\frac{0,5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}} \approx 10^{-15} \frac{\text{М}^2}{\text{с}}.$$

Відповідь:  $D \approx 10^{-15} \frac{\text{М}^2}{\text{с}}$ .

**Приклад 5.3.** Дифузійні сталі Літію в Силіції складають

$D_0 = 2,3 \cdot 10^{-7} \frac{\text{М}^2}{\text{с}}$  та  $E_a = 0,65 \text{ еВ}$ . Розрахуйте температуру, за якої атом літію, розчинений в Силіції, буде виконувати один стрибок за секунду.

*Розв'язання*

Коефіцієнт дифузії можна розрахувати за допомогою співвідношення (5.8):

$$D = D_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}} \quad \text{або} \quad D = \frac{\Gamma d^2}{6},$$

де  $\Gamma$  – частота переміщення атома (за умовою задачі  $\Gamma = 1 \text{ с}^{-1}$ );  $d$  – відстань між найближчими атомами в ґратці ( $d = 5,43 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ). Тоді

$$D_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}} = \frac{\Gamma d^2}{6},$$

звідки

$$T = \frac{E_a}{k_B \ln \frac{6D_0}{\Gamma d^2}} = \frac{0,65 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot \ln \frac{6 \cdot 2,3 \cdot 10^{-7}}{1 \cdot (5,43 \cdot 10^{-10})^2}} \approx 260 \text{ К}$$

Відповідь:  $T \approx 260 \text{ К}$ .

**Приклад 5.4.** Для підвищення зносостійкості поверхні сталевих деталей проводиться цементація. Коефіцієнт дифузії Карбону в сталі визначається виразом:

$$D = 1,2 \cdot 10^{-5} e^{-\frac{133984}{RT}} \frac{\text{М}^2}{\text{с}}.$$

Скільки потрібно часу для утворення цементованого шару товщиною 0,5 мм на сталевій пластині при температурі дифузійного відпалу 927 °С?

*Розв'язання*

Розрахуємо коефіцієнт дифузії за температури 927 °С (1 200 К):

$$D = 1,2 \cdot 10^{-5} e^{-\frac{133984}{8,31 \cdot 1200}} = 1,77 \cdot 10^{-11} \frac{\text{М}^2}{\text{с}}.$$

Час цементації знайдемо з рівняння:

$$x^2 = 2D\tau,$$

звідки

$$\tau = \frac{x^2}{2D} = \frac{(5 \cdot 10^{-4})^2}{2 \cdot 1,77 \cdot 10^{-11}} \approx 7,06 \cdot 10^3 \text{ с} \approx 1,96 \text{ год}.$$

*Відповідь:*  $\tau \approx 1,96 \text{ год}.$

**Приклад 5.5.** Поверхня нікелевої пластинки складається з 50 %  $^{63}\text{Ni}$  та 50 % нерадіоактивного нікелю. На відстані 4 мкм від цієї поверхні відношення атомних концентрацій  $^{63}\text{Ni}$  та  $\text{Ni}$  складає 48:52. Вважається, що між цими точками концентрація змінюється за лінійним законом. За даними експериментів коефіцієнт дифузії нікелю в нікелі при 1 000 °С дорівнює  $1,6 \cdot 10^{-9} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ . Визначте потік атомів нікелю через площину, що знаходиться на відстані 2 мкм від по-

верхні. Період ґратки нікелю при 1 000 °С дорівнює 3,6 Å.

*Розв'язання*

Внаслідок того, що на одну елементарну комірку в ГЦК ґратці припадає 4 атоми, концентрації атомів <sup>63</sup>Ni на поверхні пластини та на глибині 4 мкм дорівнюють відповідно:

$$C_1 = \frac{4w_1}{a^3} = \frac{4 \cdot 0,5}{(3,6 \cdot 10^{-10})^3} = 4,3 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3};$$

$$C_2 = \frac{4w_2}{a^3} = \frac{4 \cdot 0,48}{(3,6 \cdot 10^{-10})^3} = 4,1 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

Оскільки зміна концентрації між цими точками лінійна, потік атомів через будь-яку площину на цій відстані буде постійним та буде визначатися з першого закону Фіка

$$J = -D \frac{dC}{dx} = -D \frac{\Delta C}{\Delta x} = -D \frac{C_2 - C_1}{x_2 - x_1} = -1,6 \cdot 10^{-13} \cdot \frac{4,1 \cdot 10^{28} - 4,3 \cdot 10^{28}}{4 \cdot 10^{-6}} \approx \approx 8,0 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}.$$

*Відповідь:*  $J \approx 8,0 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ .

**Приклад 5.6.** В експерименті отримані такі дані про коефіцієнт власної дифузії міді: при 500 °С  $D = 10^{-14} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ; при 1 000 °С –  $D = 10^{-8,8} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ . Розрахуйте енергію активації для власної дифузії міді.

*Розв'язання*

Логарифмуючи рівняння  $D = D_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}}$  (враховуючи, що  $\frac{1}{\lg e} \approx 2,3$ ), отримаємо:

$$\lg D = \lg D_0 - \frac{E_a}{2,3k_B T}.$$

Отже:

$$\text{при } 1000^\circ\text{C (1273 K)} - \quad -8,8 = \lg D_0 - \frac{E_a}{2,3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1273};$$

$$\text{при } 500^\circ\text{C (773 K)} - \quad -14 = \lg D_0 - \frac{E_a}{2,3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 773}.$$

Виключаючи з обох рівнянь  $\lg D_0$ , будемо мати:

$$5,2 = \frac{E_a}{2,3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} \left( \frac{1}{773} - \frac{1}{1273} \right),$$

звідки

$$E_a = \frac{2,3 \cdot 5,2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1273 \cdot 773}{1273 - 773} = 3,25 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 2,03 \text{ еВ}.$$

*Відповідь:*  $E_a = 2,03 \text{ еВ}$ .

**Приклад 5.7.** Бор дифундує із тонкого шару з концентрацією  $N_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$  в масивний зразок кремнію при  $T = 1100^\circ\text{C}$  на протязі двох годин. Визначте концентрацію бора на глибині 2 мкм. Енергія активації дифузії бора в кремнію  $E_a = 5,76 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ,  $D_0 = 7 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ .

*Розв'язання*

Визначимо коефіцієнт дифузії бора в кремнію при даній температурі за допомогою виразу (5.8):

$$D = D_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}} = 7 \cdot e^{-\frac{5,76 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1373}} = 4,39 \cdot 10^{-13} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}.$$

Оскільки дифузія йде із тонкого шару (обмежене джерело), розрахунок здійснимо наступним чином  $N = N_0 e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$ :

$$N = 10^{18} \cdot e^{-\frac{(2 \cdot 10^{-4})^2}{4 \cdot 4,39 \cdot 10^{-13} \cdot 2 \cdot 3600}} = 4,23 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}.$$

*Відповідь:*  $N = 4,23 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

**Приклад 5.8.** Пік внутрішнього тертя, пов'язаний із дифузією Карбону в  $\alpha$ -Ферумі, спостерігається при  $13^\circ\text{C}$  (період коливань – 17,8 с) і  $48^\circ\text{C}$  (0,476 с). Розрахуйте енергію активації процесу та коефіцієнт дифузії Карбону в  $\alpha$ -Ферумі при  $13^\circ\text{C}$ . Період гратки  $\alpha$ -Феруму  $2,9 \text{ \AA}$ .

#### *Розв'язання*

Появі піка на кривій внутрішнього тертя відповідає умова  $\omega\tau = 1$ , де  $\omega$  – частота коливань,  $\tau$  – час релаксації. Оскільки

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{E_a}{RT}},$$

де  $\tau_0$  – деяка стала;  $E_a$  – енергія активації процесу, то

$$\ln \frac{\tau_1}{\tau_2} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right).$$

Звідси маємо

$$E_a = \frac{RT_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \frac{\tau_1}{\tau_2} = \frac{8,31 \cdot 286 \cdot 321}{321 - 286} \cdot \ln \frac{17,8}{0,476} = 78,978 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}.$$

Коефіцієнт дифузії знайдемо з виразу

$$a^2 = 6D\tau,$$

звідки

$$D = \frac{a^2}{6\tau} = \frac{(2,9 \cdot 10^{-10})^2}{6 \cdot 17,8} = 7,87 \cdot 10^{-18} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}.$$

Відповідь:  $E_a = 78,978 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ ;  $D = 7,87 \cdot 10^{-18} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ .

**Приклад 5.9.** Для поля концентрацій вакансій  $C_v(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r})e^{-\frac{t}{\tau}}$  отримайте з другого закону Фіка диференціальне рівняння для визначення сталої часу стікання  $\tau$ .

*Розв'язання*

Згідно з другим законом Фіка

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = D_v \Delta C_v,$$

де  $\Delta$  – оператор Лапласа.

Оскільки

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} f(\mathbf{r})e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad \Delta C_v = e^{-\frac{t}{\tau}} \Delta f(\mathbf{r}),$$

маємо

$$-\frac{1}{\tau} f(\mathbf{r})e^{-\frac{t}{\tau}} = e^{-\frac{t}{\tau}} D_v \Delta f(\mathbf{r}).$$

Скоротивши останній вираз на  $e^{-\frac{t}{\tau}}$ , отримаємо остаточно диференціальне рівняння для визначення часу стікання

$$\Delta f(\mathbf{r}) + \frac{f(\mathbf{r})}{D_v \tau} = 0.$$

Відповідь:  $\Delta f(\mathbf{r}) + \frac{f(\mathbf{r})}{D_v \tau} = 0.$

**Приклад 5.10.** У сталь впроваджують Карбон із газової фази при  $1000^\circ\text{C}$ . У газовій фазі відбувається реакція



Розгляньте два випадки: константа швидкості реакції  $k_1 = 10^{-6} \frac{\text{см}}{\text{с}}$  та  $k_2 = 10^{-4} \frac{\text{см}}{\text{с}}$ . Вважайте, що коефіцієнт дифузії Карбону не залежить від концентрації і дорівнює  $D = 3 \cdot 10^{-7} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ . Розчинність вуглецю

в сталі  $c_1 = 1,4\%$  (за масою) при  $1000^\circ\text{C}$ . Розрахуйте кількість вуглецю, що проникла в зразок через 5 хв після початку процесу та через 1 год.

*Розв'язання*

Розв'язуючи друге рівняння Фіка (5.12):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

з початковою умовою  $C(x, 0) = C_0$  та граничними умовами

$$C|_{x \rightarrow \infty} = 0, \quad -D \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = k(C_1 - C),$$

маємо загальну кількість вуглецю в зразку

$$q(t) = 2C_1\rho\sqrt{\frac{Dt}{\pi}}F\left(k\sqrt{\frac{t}{D}}\right), \quad (1)$$

де  $\rho = 7,8 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$  – густина.

Вираз (1) можна записати у вигляді:

$$q(t) = q_d F(s), \quad (2)$$

де

$$F(s) \equiv 1 - \frac{\sqrt{\pi}}{2s} \left\{ 1 - (1 - \operatorname{erfc} s) e^{-s^2} \right\},$$

а  $s \equiv k \sqrt{\frac{t}{D}}$  визначає відносний внесок дифузії та хімічної реакції в загальне проникнення.

Через 5 хв при  $k_1 = 10^{-4} \frac{\text{см}}{\text{с}}$ :  $s = 3,1$  і  $q = 0,82 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ; при  $k_2 = 10^{-6} \frac{\text{см}}{\text{с}}$ :  $s = 0,031$  і  $q = 0,032 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ;  $q_d = 1,16 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ .

Через 1 год при  $k_1 = 10^{-4} \frac{\text{см}}{\text{с}}$ :  $s = 0,11$  і  $q = 4,0 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ; при  $k_2 = 10^{-6} \frac{\text{см}}{\text{с}}$ :  $s = 0,011$  і  $q = 0,48 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ;  $q_d = 0,4 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ .

*Відповідь:*  $q = 0,82 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ;  $q = 0,032 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ;  $q = 4,0 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ ;  $q = 0,48 \frac{\text{мг}}{\text{см}^2}$ .

**Приклад 5.11.** На поверхню мідного дроту діаметром 2 мм нанесли шар нікелю такої товщини, щоб після гомогенізації отримати сплав з 1 % (за масою) Ni. Для одержання такого сплаву зразок відпалювали при постійній температурі; коефіцієнт взаємної дифузії  $D = 10^{-9} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ . Розрахуйте час, необхідний для досягнення повної ( $\pm 0,5\%$ ) гомогенізації.

*Розв'язання*

Для умов задачі розв'язок рівняння дифузії має вигляд:

$$C(r, t) = \frac{2C_0h}{r_0} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{r}{r_0} \alpha_n\right)}{J_0(\alpha_n)} e^{-\frac{\alpha_n^2 D t}{r_0^2}} \right], \quad (1)$$

де  $h$  – товщина нанесеного шару;  $r_0$  – радіус дроту;  $\alpha_n$  – корені рівняння  $J_1(\alpha_n) = 0$ ;  $J_0, J_1$  – функції Бесселя нульового та першого роду.

Оскільки нулі функції Бесселя утворюють швидко зростаючу послідовність, достатньо обмежитися нульовим та першим членами формули (1), тобто прийняти

$$C(r, t) \approx \frac{2C_0h}{r_0} \left( 1 + \frac{J_0\left(\frac{r}{r_0}\alpha_1\right)}{J_0(\alpha_1)} e^{-\frac{\alpha_1^2 Dt}{r_0^2}} \right).$$

Умова гомогенізації має вигляд

$$e^{-\frac{\alpha_1^2 Dt}{r_0^2}} \leq 5 \cdot 10^{-3},$$

звідки

$$t \geq \frac{5,3r_0^2}{\alpha_1^2 D}.$$

Внаслідок того, що

$\alpha_1 \approx 3,7$ , маємо

$$t \geq \frac{5,3 \cdot (10^{-3})^2}{3,7^2 \cdot 10^{-13}} = 430 \text{ год}$$

*Відповідь:*  $t \geq 430$  год.

**Приклад 5.12.** Речовина, нанесена на поверхню напівобмеженого зразка, дифундує всередину (одномірною задачею). Знайдіть значення  $x$ , при якому дорівнює нулю кривизна на концентраційній кривій – залежності  $c(x)$ , та порівняйте це значення з величиною середньоквадратичного зміщення атомів за той самий

час ( $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ ). Оцініть частку (від початково нанесеної) речовини, яка продифундує за час  $t$  на відстань більшу за подвійне середньоквадратичне зміщення.

*Розв'язання*

Розподіл речовини визначається розв'язком крайової задачі:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (0 \leq t \leq \infty, 0 \leq x \leq \infty);$$

$$c(x, 0) = 0, \quad c(x, t)|_{x \rightarrow \infty} = 0, \quad -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = q_0,$$
(1)

який має вигляд

$$c(x, t) = \frac{q_0}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}.$$
(2)

Значення  $x$ , при якому кривизна концентраційної кривої дорівнює нулю, знаходимо з умови

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0.$$
(3)

Підставляючи (2) в (3) матимемо  $x = \sqrt{2Dt}$ . Звідси випливає, що  $x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ .

Оцінимо частку речовини, що продифундувала за час  $t$  на відстань, більшу за подвійне середньоквадратичне зміщення:

$$q = \int_{2\sqrt{2Dt}}^{\infty} c(x, t) dx = q_0 \operatorname{erfc} \sqrt{2}.$$

Отже,

$$\frac{q}{q_0} = \operatorname{erfc} \sqrt{2} \approx 0,045.$$

Відповідь:  $x = \sqrt{2Dt} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ ;  $\frac{q}{q_0} = \operatorname{erfc} \sqrt{2} \approx 0,045$ .

---

### Задачі для самостійного розв'язування

- 5.1. Знайдіть передекспоненційний множник  $D_0$  для самодифузії в ГЦК-гратці в напрямку [111], виразивши міжплощинну відстань  $d_{hkl}$ , об'єм, що припадає на один атом  $v$ , і щільність пакування через найкоротшу міжатомну відстань.
- 5.2. Під дією градієнта концентрації з дифузійного шару товщиною  $x$  виноситься на границю розділу фаз потік вакансій  $j_v$ . З якою абсолютною та відносною ( $\dot{\epsilon}$ ) швидкістю відбувається збільшення шару?
- 5.3. Тонку плівку радіоактивного Купруму нанесли на поверхню мідного зразку. Після відпалу при сталій температурі на протязі 20 годин зразок розділили на шари, паралельні поверхні ( $x$  - координата середини шару), та виміряли радіоактивність  $J$  кожного шару. Ці величини склали:

$x$ , мкм	100	200	300	400	500
$J$ , імп/хв	5012	3981	2512	1413	525

Знайдіть коефіцієнт власної дифузії Купруму, вважаючи зразок напівнескінченним, а радіоактивність, пропорційною концентрації ізотопу. Вважаючи, що для власної дифузії Купруму

$$D_0 = 0,2 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}, \text{ а } E_a = 197,16 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}},$$

визначте температуру відпалу та коефіцієнти власної дифузії при температурах: 800, 900, 1 000 °С.

- 5.4. Відпал дифузійної пари, що складається з чистого металу  $A$  та розбавленого розчину  $B$  в  $A$  з постійною початковою концентрацією  $B$ , що дорівнює  $C_0$ , був проведений на протязі 16 год при декількох температурах. Потім виміряли відстань

$x$  між початковою площиною розділу та площиною, в якій  $C(x) = 0,3C_0$ . Ці відстані складають 0,125; 0,156; 0,21; 0,321 мм при 800; 850; 900 та 1 000 °С відповідно. Вважаючи, що коефіцієнт дифузії  $D$  не залежить від концентрації, визначте значення  $D$  для всіх температур (в  $\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ ) і визначте  $E_a$

(в  $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$  та еВ) та  $D_0$ . Напишіть рівняння температурної залежності коефіцієнтів дифузії.

- 5.5. В рамках теорії дефектів кристалічної ґратки отримайте температурну залежність коефіцієнта дифузії  $D$ . Розрахуйте параметри дифузії  $E_a$  (в  $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ ) та  $D_0$ . Оцініть значення суми енергії й ентропії утворення та міграції вакансій, вважаючи механізм дифузії вакансійним. При цьому використайте наступні експериментальні дані:

а)	$D, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$10^{-12}$	$10^{-13}$	$10^{-14}$	$10^{-15}$
	$T, \text{К}$	1 350	1 100	950	800
б)	$D, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$2,24 \cdot 10^{-13}$	$4,5 \cdot 10^{-14}$	$10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-15}$
	$T, \text{К}$	1 250	1 110	1 000	910
в)	$D, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$9,55 \cdot 10^{-14}$	$1,55 \cdot 10^{-14}$	$2,5 \cdot 10^{-15}$	$4 \cdot 10^{-16}$
	$T, \text{К}$	1 250	1 110	1 000	910
г)	$D, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$3,5 \cdot 10^{-14}$	$3,9 \cdot 10^{-15}$	$4 \cdot 10^{-16}$	$4,4 \cdot 10^{-17}$
	$T, \text{К}$	1 250	1 110	1 000	910

- 5.6. Розрахуйте  $\Gamma$  для мічених атомів в чистому металі з ГЦК та ОЦК ґраткою, якщо  $D = \Gamma a^2 \omega N_v$ , де  $N_v$  – частка вакантних місць. Розрахуйте також  $\Gamma$  для дифузії по міжвузловинам у

розбавленому сплаві з ОЦК граткою для різних положень впровадженого атома.

- 5.7. Розрахуйте температуру, за якої атоми Карбону при дифузії в  $\alpha$ -залізі здійснюють 1 000 стрибків за секунду. Параметри дифузії Карбону:  $D_0 = 0,2 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,  $E_a = 109,28 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ . Період

гратки  $\alpha$ -заліза  $2,9 \text{ \AA}$ . Розрахуйте також ентропію міграції атома Карбону в ОЦК  $\alpha$ -залізі, вважаючи що частота коливань атома Карбону дорівнює  $10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

- 5.8. Розрахуйте температуру, за якої атоми Натрію при власній дифузії здійснюють один стрибок за секунду. Скористатися наступними параметрами власної дифузії:  $D_0 = 0,2 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,

$E_a = 43,53 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ . Параметр гратки ОЦК  $N_a$  складає  $4,3 \text{ \AA}$ .

- 5.9. Тонку плівку радіоактивного заліза нанесли на поверхню залізного зразку. Після відпалу при температурах: а)  $800^\circ\text{C}$  на протязі 10 годин; б)  $900^\circ\text{C}$ , 5 годин; в)  $1000^\circ\text{C}$ , 2 години; г)  $1100^\circ\text{C}$ , 1 година, – зразок розділили на шари, паралельні поверхні ( $x$  – координата середини шару) та виміряли радіоактивність  $J$  кожного шару. Ці величини складають:

а)	$x$ , мкм	0,4	0,8	1,2	1,6	2,0
	$J$ , імп/хв	964	862	717	553	396
б)	$x$ , мкм	1	2	3	4	5
	$J$ , імп/хв	960	845	685	510	350
в)	$x$ , мкм	1,5	3,0	4,5	6,0	7,5
	$J$ , імп/хв	970	882	755	606	460
г)	$x$ , мкм	3	6	9	12	15
	$J$ , імп/хв	956	836	670	490	328

Визначте коефіцієнт самодифузії Феруму, вважаючи зразок напівнескінченним, а радіоактивність – пропорційною концентрації ізоотопу. Використовуючи результати задач, визначте

параметри самодифузії Феруму  $E_a$  (в  $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ ) та  $D_0$  ( $\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ ) та запишіть рівняння температурної залежності коефіцієнтів самодифузії.

5.10. Речовина, нанесена тонким шаром на поверхню напівнескінченного зразка, дифундує всередину. Розрахуйте координату точки перегину концентраційного профілю.

5.11. Радіоактивний елемент дифундує із тонкого шару в масивний зразок на протязі 7,2 годин при сталій температурі. Після закінчення процесу виміряли радіоактивність  $J$  двох шарів, які знаходяться на відстані  $x_1 = 100$  мкм і  $x_2 = 500$  мкм від поверхні зразку. Встановлено, що  $J(x_1) = 5000 \frac{\text{імп}}{\text{хв} \cdot \text{м}^2}$ , а

$J(x_2) = 500 \frac{\text{імп}}{\text{хв} \cdot \text{м}^2}$ . Розрахуйте коефіцієнт самодифузії елемента.

5.12. Сталь з вихідним вмістом вуглецю  $N_{\text{вих}} = 0,1\%$  насичують вуглецем методом дифузії при  $T = 927^\circ \text{C}$  до концентрації  $N_x = 0,45\%$  на глибині 0,05 см. На поверхні зразка концентрація вуглецю стала і складає 1%. Вважаючи зразок напівнескінченим, розрахуйте час процесу. Коефіцієнт дифузії визначається виразом  $D = 0,15 e^{-\frac{133900}{RT}} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ .

5.13. Оцініть температуру, за якої атоми Купруму при самодифузії здійснюють один стрибок за секунду. Мідь має ГЦК ґратку з періодом  $a = 0,36$  нм. Коефіцієнт дифузії міді визначається виразом  $D = 0,2 e^{-\frac{197100}{RT}} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ .

5.14. Коефіцієнти дифузії кисню в Танталі виражаються у вигляді:  
 $D_0 = 10,5 \cdot 10^{-7} e^{-\frac{110,4 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}}{RT}} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ . Період ґратки Тантала  $3,3 \text{ \AA}$ .

Якщо середня частота коливань атому Оксигену в ґратці дорі-

внює  $10^{12} \text{ с}^{-1}$ , розрахуйте ентропію міграції для дифузії атомів Оксигену.

- 5.15. Розрахуйте температуру, за якої атоми Молібдену при власній дифузії здійснюють один стрибок за секунду. Скористайтеся наступними параметрами власної дифузії:  $D_0 = 0,1 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,

$$E_a = 385,95 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}. \text{Період ґратки Мо складає } 3,15 \text{ \AA}.$$

- 5.16. Розрахуйте температуру, за якої атоми Ніколю при власній дифузії здійснюють один стрибок за секунду. Скористайтеся наступними параметрами власної дифузії:  $D_0 = 0,5 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ,

$$E_a = 275,44 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}. \text{Період ґратки Ні складає } 3,5 \text{ \AA}.$$

- 5.17. Розгляньте потоки уздовж осі  $X$  для речовини, яка входить і виходить із елемента об'єму  $\Delta x$ , і виведіть рівняння балансу

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial J_i}{\partial x},$$

де  $C_i$  – концентрація, а  $J_i$  – потік компонента  $i$ .

- 5.18. Знайдіть стаціонарний розв'язок одномірного рівняння другого закону Фіка зі змінним коефіцієнтом дифузії  $D(x)$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x) \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

для зразка довжиною  $L$  при різних концентраціях у кінцевий момент часу.

- 5.19. Покажіть, що у стаціонарному випадку рівняння другого закону Фіка зі сталим коефіцієнтом дифузії в циліндричних координатах має вигляд:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} = 0.$$

Отримайте загальний розв'язок цього рівняння.

5.20. Знайдіть розв'язок рівняння дифузії

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

для напівнескінченного зразка при початковій умові  $C(x, t = 0) = 0$  і граничній умові

$$\int_0^t J(x=0) dt = Q_0 (1 - e^{-\lambda t}).$$

Однією із відповідей є наступна:

$$C(x, t) = Q_0 \lambda \int_0^t \frac{e^{-\left[\lambda(t-\tau) + \frac{x^2}{4D\tau}\right]}}{\sqrt{\pi D \tau}} d\tau.$$

5.21. В теорії хімічних зв'язків фігурує наступна система диференціальних рівнянь, що зачіпляються.

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_0}{\partial t} &= D_0 \frac{\partial^2 C_0}{\partial x^2} - \lambda C_0; \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} &= D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \lambda C_0. \end{aligned}$$

Покажіть, що при  $C_0(x, t = 0) = Q_0 \delta(x)$  розв'язок першого з цих рівнянь має наступний вигляд:

$$C_0 = \frac{Q_0}{\sqrt{\pi D_0 t}} e^{-\left(\lambda t + \frac{x^2}{4D_0 t}\right)}.$$

5.22. В умовах попередньої задачі, припускаючи, що  $C_i(x, t = 0) = 0$

та  $D_i \gg D_0$ , так що  $\frac{D_0}{D_i} \rightarrow 0$ , знайдіть розв'язок другого рів-

няння, використовуючи розв'язок першого рівняння в якості заданого. Вигляд розв'язку може бути наступним:

$$C_i = Q_0 \lambda \int_0^t e^{-\left[\lambda(t-\tau) + \frac{x^2}{4D_i\tau}\right]} \frac{d\tau}{\sqrt{\pi D_i \tau}}.$$

- 5.23. Розгляньте дифузію на поверхні, атоми якої впорядковані у квадратну ґратку. Приведіть тензор коефіцієнтів дифузії до головних осей, довівши, що у цьому випадку  $D_{12} = D_{21} = 0$ ,  $D_{11} = D_{22}$ .
- 5.24. Методом зняття шарів було отримано дані з дифузії тонкого шару радіоактивного срібла, напиленого на циліндричний зразок із алюмінію та підданого відпалу протягом 25 годин.

Активність одного шару, імпульс/с	Товщина шару, мкм
5010	101
3986	112
2498	99
1369	96
563	110

Визначте концентрацію (у відносних одиницях) як функцію глибини дифузії  $x$ . Обробіть отримані дані за допомогою методу найменших квадратів і визначте  $D_K^*$  за тангенсом кута нахилу графіка залежності  $\ln c$  від  $x^2$ .

- 5.25. У твердому тілі з одиничним поперечним перерізом відбувається одновірною дифузія атомів домішки уздовж осі  $x$ . Покажіть, що швидкість зміни концентрації  $c$  в елементарному шарі товщиною  $dx$  визначається рівнянням:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$

- 5.26. Рівняння дифузії Цинку в германії має вид:

$$D = 4 \cdot 10^{-5} e^{\frac{2,5(\text{eВ})}{k_B T}}.$$

Знайдіть коефіцієнт дифузії за кімнатної температури та при 500 К.

5.27. Оцініть величину коефіцієнта дифузії радіоактивного Натрію в звичайному Натрії за кімнатної температури, якщо висота потенційного бар'єру, який необхідно подолати атому, щоб перейти у нове положення рівноваги, дорівнює 0,5 еВ. Частота коливань атому  $10^{12} \text{ c}^{-1}$ .

5.28. Число частинок, що проходять через одиницю площі, яка перпендикулярна до градієнту концентрації  $\frac{dc}{dx}$ , за 1 с, дорівнює:

$$J = -D \frac{dc}{dx},$$

де  $D$  – коефіцієнт дифузії;  $c$  – концентрація частинок. Припустимо, що електрони знаходяться в області простору, в якій присутнє електричне поле  $\mathcal{E}_x$ , їхня концентрація дорівнює  $c(x)$  і досягнуто стійкого стану. При цьому число електронів, які рухаються зліва направо і в протилежному напрямку, однакове. Згідно статистики Больцмана  $c_x = c_0 e^{-\frac{ex\mathcal{E}_x}{k_B T}}$ . Покажіть, виходячи з цього, що

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_B T}{e}$$

де  $\mu$  – рухливість електронів. Це співвідношення називається співвідношенням Ейнштейна.

5.29. Скільки необхідно часу для утворення шару товщиною 1 мм при дифузії Карбону в сталь при температурі відпалу 840 К. Коефіцієнт дифузії визначається формулою

$$D = 0,12 \cdot 10^{-4} e^{-\frac{50000}{2T}}.$$

- 5.30. Розрахуйте наскільки повинен розсунути своїх сусідів атом при переміщенні його в октаедричну міжвузловину ОЦК- ґратки, якщо довжина ребра куба дорівнює  $a$ .
- 5.31. Розрахуйте наскільки повинен розсунути своїх сусідів атом при переміщенні його в міжвузловину з тетраедричною симетрією типу  $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$  ГЦК- ґратки.
- 5.32. Визначте товщину шару, що утворився в результаті дифузії атомів Цинку в Германій за 1 с при температурі відпалу 600 К, якщо висота потенційного бар'єру, який необхідно подолати атому, щоб перейти в нове положення рівноваги дорівнює 3,8 еВ, якщо  $D_0 = 5,7 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ .
- 5.33. На скільки відрізняється глибина дифузії Фосфору та Купруму в кремній за температури 1000 °С за однаковий проміжок часу?
- 5.34. Всередину твердого тіла дифундує речовина, нанесена на його поверхню у вигляді тонкого шару (випаровуванням із розчину). Покажіть, що по проходженні часу  $t$  залежність концентрації  $c$  домішкових атомів у твердому тілі від відстані  $x$  від поверхні описується виразом:

$$c = \frac{A}{\sqrt{t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}.$$

Побудуйте графік цього рівняння. Знайдіть значення  $x$ , за якого дорівнює нулю кривина графіка залежності  $c(x)$ . Оцініть відносну кількість атомів, що продифундували на подвоєну дифузійну відстань.

- 5.35. Визначте коефіцієнт дифузії  $D$  за даними про дифузію радіоактивного срібла в сплав срібла з індієм (16,7 % In). Дифузійний відпал проводився при 728,5 °С на протязі  $5,9 \cdot 10^4$  с.

Глибина проникнення, $10^{-4}$ м	Питома радіо-активність, до-вольні одиниці	Глибина проникнення, $10^{-4}$ м	Питома радіо-активність, до-вольні одиниці
0	600	3,29	88
0,84	540	3,76	50
1,32	450	4,25	25
1,83	360	4,70	12
2,30	250	5,20	5
2,79	160	5,68	2

5.36. На основі експериментальних даних були визначені значення коефіцієнтів дифузії Цинку в монокристалах чистої міді:

$T, \text{K}$	1 322	1 253	1 176	1 007	878
$D, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$10^{-12}$	$4 \cdot 10^{-13}$	$1,1 \cdot 10^{-13}$	$4 \cdot 10^{-15}$	$1,6 \cdot 10^{-16}$

За цими даними розрахуйте енергію активації  $E_a$  і частотний фактор  $D_0$ .

5.37. Товщина шару оксиду, який утворився на плоскому металевому зразку, зростає на протязі часу. Припустимо, що в атмосфері концентрація кисню  $c_0$  така ж, як і в поверхневому шарі оксиду, а концентрація кисню на межі оксид – метал весь час має менше значення  $c_i$ . Нехай швидкість витовщення оксидного шару визначається швидкістю дифузії кисню в цьому шарі. Покажіть, що за цих умов  $x$  залежить від часу  $t$  як

$$x = B\sqrt{t},$$

де  $B$  – стала. Знехтувати кількістю кисню, що утворює в металі твердий розчин.

5.38. Розрахуйте температуру, за якої атом Літію, розчинений у твердому германії, здійснюватиме один стрибок за секунду. Порівняйте її з такою температурою для Бору, розчиненого в германії. Енергія активації і частотний фактор для Літію в германії і Бора в германії взяти з додатку Д.

- 5.39. Дослідіть методом статистичної механіки поведінку домішки впровадження в ГЦК ґратці розбавленого бінарного розчину. Нехтуючи можливістю утворення пар, визначте хімічний потенціал домішки.
- 5.40. Застосовуючи статистичну механіку до розбавленого бінарного розчину заміщення з ГЦК ґраткою, визначте хімічні потенціали домішки і розчинника. Нехай концентрація домішки настільки мала, що утворення домішкових пар не має місця; присутність вакансій не враховуйте.
- 5.41. Градієнт Соре – це дальнодіючий стаціонарний градієнт концентрації, виникаючий внаслідок наявності в сплаві градієнта температури. Припускаючи розподіл домішки в розчині заміщення рівномірним, отримайте градієнт Соре для домішки впровадження за відсутності електричного поля.
- 5.42. При ізотропній дифузії в кристалі, тобто при дифузії в кубічній ґратці,

$$D_K^* = \frac{1}{6} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle R_n^2 \rangle}{t_n},$$

де  $R_n$  – абсолютне значення зміщення міченого атома за  $n$  стрибків. Поклавши  $\tau = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{t_n}$  і використовуючи вищезазначену формулу, вивести рівність

$$D_K^* = \frac{\lambda^2}{6} \tau f,$$

де  $f$  – кореляційний множник, а  $\lambda$  – абсолютне значення зміщення за один стрибок. При цьому розгляньте ґратку, в якій є лише одне значення  $\lambda$ . Покажіть, що кореляційний множник можна представити у вигляді

$$f = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ 1 + \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{n-j} \frac{\langle R_i R_{i+j} \rangle}{\lambda^2} \right\}.$$

- 5.43. Визначте кореляційний множник для поверхневої дифузії уздовж базисної площини ГЩУ кристала.
- 5.44. Розгляньте дві дивакансійні конфігурації при дифузії в ГЦК гратці в напрямку  $\langle 100 \rangle$ , які відрізняються. Нехай енергія зв'язку вакансій з міченим атомом нескінченна. Покажіть, що часткові кореляційні множники дорівнюють  $\pm \frac{1}{3}$ .
- 5.45. Обсудіть умови, за яких можна знехтувати наявністю дислокацій при описанні дифузії домішок впровадження. З'ясувати аналітичний вигляд впливу на процес дифузії структури кристалу.
- 5.46. З'ясувати аналітичний вигляд впливу на процес дифузії температури.
- 5.47. З'ясувати аналітичний вигляд впливу на процес дифузії діючого дотичного напруження.
- 5.48. На поверхнях порожнистої сфери (внутрішній радіус дорівнює  $a$ , зовнішній  $b$ ) підтримують сталу концентрацію домішки:  $c_1 = 0,089 \frac{\Gamma}{\text{см}^3}$  і  $c_2 = 0,445 \frac{\Gamma}{\text{см}^3}$ , відповідно. Знайдіть кількість домішки, яка знаходиться всередині сфери (між  $a$  і  $b$ ) в стаціонарному стані:  $a = 0,5 \text{ см}$ ;  $b = 1 \text{ см}$ .
- 5.49. Напівобмежений зразок із сплаву залізо-вуглець, який містить спочатку 1 % (за масою) С, відпалювали на протязі 20 годин при сталій температурі, у вакуумі, після чого він втратив 0,376 г вуглецю. Розрахуйте коефіцієнт дифузії вуглецю і його концентрацію на глибині 100 мкм від поверхні, якщо дифузія відбувається перпендикулярно поверхні ( $80 \text{ см}^2$ ) і концентрація вуглецю на цій поверхні дорівнює нулю. Густина зразка дорівнює густині чистого заліза ( $7,8 \frac{\Gamma}{\text{см}^3}$ ).
- 5.50. Речовина А дифундує з тонкого шару в напівнескінченний зразок речовини В на протязі часу  $\tau$  при температурі  $t$ . Початкова концентрація речовини А складає  $N_0$ . На якій гли-

бині концентрація А буде дорівнювати  $N(x)$ . Відповідь дайте в мікрометрах. Дані для розрахунку наведені в таблиці.

№ вар.	A	B	$\tau$ , год.	$t$ , °C	$N_0$ , см <sup>-3</sup>	$N(x)$ , см <sup>-3</sup>
1.	Au	Si	1	1000	$6 \cdot 10^{17}$	$6 \cdot 10^{15}$
2.	B	Ge	1,2	800	$4 \cdot 10^{17}$	$4 \cdot 10^{15}$
3.	Al	Si	1,3	1100	$4 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{16}$
4.	In	Ge	1,5	750	$1 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{16}$
5.	P	Si	1	1050	$2 \cdot 10^{17}$	$4 \cdot 10^{15}$
6.	As	Ge	0,9	780	$5 \cdot 10^{17}$	$2 \cdot 10^{16}$
7.	Sb	Si	0,8	1100	$9 \cdot 10^{17}$	$3 \cdot 10^{15}$
8.	Al	Ge	1,4	810	$8 \cdot 10^{17}$	$2 \cdot 10^{15}$
9.	B	Si	1,3	1150	$4 \cdot 10^{17}$	$4 \cdot 10^{15}$
10.	P	Ge	1,2	790	$3 \cdot 10^{17}$	$7 \cdot 10^{15}$
11.	Au	Si	2	1050	$5 \cdot 10^{17}$	$9 \cdot 10^{15}$
12.	B	Ge	1,6	1000	$2 \cdot 10^{17}$	$3 \cdot 10^{15}$
13.	Al	Si	2,4	970	$4,5 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{15}$
14.	In	Ge	1,7	1010	$9 \cdot 10^{17}$	$3,6 \cdot 10^{15}$
15.	P	Si	0,9	880	$4,6 \cdot 10^{17}$	$5,7 \cdot 10^{15}$
16.	As	Ge	1	930	$5 \cdot 10^{17}$	$3,9 \cdot 10^{15}$
17.	Sb	Si	2,5	960	$1,1 \cdot 10^{17}$	$6 \cdot 10^{15}$
18.	Al	Ge	2	1070	$8,1 \cdot 10^{17}$	$6,6 \cdot 10^{15}$
19.	B	Si	1,7	995	$6,9 \cdot 10^{17}$	$4,4 \cdot 10^{15}$
20.	P	Ge	1,9	925	$3,2 \cdot 10^{17}$	$7,8 \cdot 10^{15}$
21.	Au	Si	2,2	890	$8,6 \cdot 10^{17}$	$6,4 \cdot 10^{15}$
22.	B	Ge	2,3	1020	$7,3 \cdot 10^{17}$	$4,8 \cdot 10^{15}$
23.	Al	Si	1,6	860	$2 \cdot 10^{17}$	$2,3 \cdot 10^{15}$
24.	In	Ge	1,1	920	$8 \cdot 10^{17}$	$5 \cdot 10^{15}$
25.	P	Si	1,3	940	$6 \cdot 10^{17}$	$7,4 \cdot 10^{15}$

- 5.51. Бічна поверхня латунного  $[\text{Cu} + 1,0\%(\text{ат.})\text{Zn}]$  диска хромова, щоб попередити випаровування цинку. Прийmemo, що дифузія цинку відбувається у напрямку, перпендикулярному торцям диску. Площа кожного торця складає  $50 \text{ см}^2$ , коефіцієнт дифузії цинку при температурі досліду  $D = 10^{-10} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$  і  $\sqrt{Dt}$  значно менше товщини диску. Розрахуйте кількість (у грамах) цинку, що випарувався за 16 год відпалу.
- 5.52. Мідний циліндр з'єднаний з латунним (70,6% Cu і 29,4% Zn). Після відпалу при сталій температурі на протязі 360 год була виміряна концентрація цинку на різних відстанях від краю зразка.

$x, \text{ мм}$	$c, \% (\text{ат.})$
5	0,3
4,81	1,5
4,65	4,4
4,50	8,8
4,31	14,7
3,96	20,6
3,65	23,5
3,40	25,0
3,07	26,5
2,51	27,9
1,89	28,8
1,50	29,1

Знайдіть положення площини Матано і розрахуйте коефіцієнт взаємної дифузії  $\bar{D}$  на площині, в якій  $c = 10$  і 25% (ат.) Zn.

- 5.53. Зразок із сталі, що містить 0,1% C, зазнає науглецювання при  $930^\circ \text{C}$ . Концентрація вуглецю після відпалу на протязі часу  $t_1$  складає 0,45% на глибині 0,05 см. На поверхні під-

тримували сталу концентрацію вуглецю (1 % при всіх  $t > 0$ ).

Коефіцієнт дифузії вуглецю  $D = 0,15e^{-\frac{133760}{RT}}$ . Розрахуйте час навуглецювання  $t_1$  і час  $t_2$ , необхідний для того, щоб збільшити вдвічі кількість вуглецю, введеного у зразок при тій самій температурі (задача одномірна, зразок напівнескінченний).

5.54. Визначте час, на протязі якого можна при відпалі видалити 90 % водню із залізної пластинки товщиною 0,2 см. На поверхні пластини підтримували нульову концентрацію  $H_2$ . Коефіцієнт дифузії водню  $D = 10^{-4} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$  (задача одномірна).

5.55. На поверхню пластини товщиною 0,1 мм, виготовленої із металу А, нанесли шар металу В і піддали цю пару дифузійному відпалу при  $700^\circ\text{C}$  на протязі 20 год. Вважаючи, що коефіцієнт дифузії не залежить від концентрації,  $D = 0,04 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$  і

$E_a = 162276 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ , розрахуйте товщину шару В, необхідну для того, щоб концентрація цього металу склала 24% (за масою) (з точністю до 10%) на відстані 10 мкм від початкової поверхні контактів. Відмінністю густин можна знехтувати.

5.56. Розрахуйте ентропію переміщення атому Карбону в ґратці  $\alpha$ -заліза. Частоту коливаний атому Карбону прийміть рівною  $10^{13} \text{с}^{-1}$ , період ОЦК-ґратки  $\alpha$ -заліза  $2,9 \text{Å}$ , коефіцієнт дифузії  $D_0 = 0,2 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ .

5.57. Надлишкові (загартовані) вакансії піддаються відпалу в золоті при  $40^\circ\text{C}$ . Ентальпія активації переміщення вакансії  $\Delta H_v^m$  дорівнює 0,82 еВ. Час релаксації  $\tau_v$  вакансій при цій температурі складає 200 год. Розрахуйте коефіцієнт дифузії  $D_v$  і середню відстань  $L$  між стоками. Обговоріть припущення, зроблені під час розрахунку.

- 5.58. Ефект Кіркендала вивчали в системі Ag – Au при 940 °С. Зсув міток за 100 годин склав 0,029 см. Коефіцієнт взаємної дифузії в площині, де розташовані мітки, ( $N_{\text{Ag}} = 0,635$ ,  $\nabla N_{\text{Ag}} = 7,2 \text{ см}^{-1}$ ) дорівнює  $3,7 \cdot 10^{-9} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ . Розрахуйте власні коефіцієнти дифузії срібла і золота.
- 5.59. Хром дифундує в залізо при 1000 °С. Концентрація хрому на поверхні дорівнює 50%. Система Fe – Cr має замкнену  $\gamma$ -область. При 1000 °С максимальний вміст хрому в  $\gamma$ -фазі складає 12%, а мінімальний вміст в  $\alpha$ -фазі 13%. Розрахуйте положення площини, де спостерігається стрибок концентрації після дифузійного відпалу на протязі 50 годин. Вважайте систему необмеженою. Коефіцієнт дифузії хрому описується наступними рівняннями:  $D_{\alpha} = 3 \cdot 10^4 e^{-\frac{342760}{RT}} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$  в  $\alpha$ -фазі і  $D_{\gamma} = 1,8 \cdot 10^4 e^{-\frac{405460}{RT}} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$  в  $\gamma$ -фазі.
- 5.60. Вивчається сублімація магнію із сплаву Al + 2% (за масою) Mg за температури 325 °С і кімнатної. Коефіцієнт дифузії магнію  $D = 1,05 e^{-\frac{28500}{RT}} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ ; пружність пари при даних температурах 1 і  $10^{-6}$  мм рт. ст., відповідно. Знайдіть час, коли кінетичний контроль змінюється дифузійним. Зразок вважайте необмеженим.
- 5.61. Сталь, що містить 0,1% С, має піддатися цементації при 930 °С. При цьому концентрація вуглецю на глибині 0,05 мм має досягнути 0,45%. Карбюризатор забезпечує сталю концентрацію вуглецю 1% на поверхні насичення на протязі всього часу насичення. Визначте час цементації, якщо  $D = 1,4 \cdot 10^{-7} \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$ .

5.62. Визначте час, на протязі якого при відпалі можна видалити 90 % вуглецю із залізної пластинки товщиною 0,175 см. На поверхні пластинки концентрація водню дорівнює нулю,

$$D = 10^{-4} \frac{\text{см}^2}{\text{с}} .$$

5.63. Мідний прут з'єднаний із прутом зі сплаву 29,4% Zn + 70,6% Cu. Після відпалу на протязі 360 годин дані про залежність вмісту Zn на певній відстані від площини стику оброблені методом найменших квадратів.

Zn, ат.%	$\bar{x}, 10^{-2}$ см	Zn, ат.%	$\bar{x}, 10^{-2}$ см
0,3	50,05	23,5	36,55
1,5	48,15	25,0	34,05
4,4	46,45	26,5	30,75
8,8	44,95	27,9	25,15
14,7	43,15	28,8	18,95
20,6	39,65	29,1	14,95

Знайдіть положення площини Матано і розрахуйте  $D(c)$  через кожні 5 % Zn.

5.64. Хром дифундує в залізо при 1000 °С. Його концентрація на поверхні заліза 50 %. Система Fe–Cr має замкнуту  $\gamma$ -область. При 1000 °С максимальний вміст хрому в  $\gamma$ -області 12 %, а його мінімальний вміст в  $\alpha$ -фазі 13 %. Коефіцієнт дифузії хрому в  $\alpha$ -фазі більший, ніж в  $\gamma$ -фазі. Покажіть схематично залежність концентрації хрому від глибини його проникнення.

## 6. Статистика електронів у твердому тілі. Розподіл Фермі – Дірака

### Основні формули і визначення

**Статистика електронів у металах.** У моделі вільних електронів вважають, що метал містить вільні електрони, здатні перемішуватися по всьому об'єму (газ вільних електронів). В основному стані найнижчі одноелектронні рівні заповнені аж до деякої енергії, яка дорівнює

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}. \quad (6.1)$$

Тут  $m_e$  – маса електрона;  $k_F$  – максимальне значення хвильового вектора електронів, яке визначають за формулою

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n_e}, \quad (6.2)$$

де  $n_e = \frac{N}{V}$  – густина електронів. Відповідно **рівень Фермі** або **енергія Фермі**  $\varepsilon_F$  – максимальна енергія електронів, відрахована від нульової кінетичної енергії, задається виразом

$$\varepsilon_F = \varepsilon_F^0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F^0} \right)^2 \right], \quad \varepsilon_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{\frac{2}{3}}, \quad (6.3)$$

де  $\varepsilon_F^0$  – рівень Фермі за  $T = 0$  К, а **ферміївський імпульс** (максимальний імпульс електронів)

$$p_F = \sqrt[3]{3\pi^2 \hbar^3 n_e}. \quad (6.4)$$

**Швидкість Фермі** визначають за формулою

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e} = \frac{\hbar \sqrt{3\pi^2 n_e}}{m_e}. \quad (6.5)$$

**Середнє значення енергії електронів**

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F^0. \quad (6.6)$$

Температуру, яка відповідає енергії Фермі, називають **температурою виродження**

$$T_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e k_B} n_e^{\frac{2}{3}}. \quad (6.7)$$

**Концентрація вільних електронів** з енергією в інтервалі  $(\varepsilon; \varepsilon + d\varepsilon)$  при температурі  $T \neq 0$

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\sqrt{2m_e^3}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}} + 1}, \quad (6.8)$$

де  $f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}} + 1}$  – функція Фермі – Дірака;  $g(\varepsilon)$  – густина станів.

При температурі  $T = 0$  вираз (6.8) набуває вигляду:

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\sqrt{2m_e^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon}d\varepsilon. \quad (6.9)$$

**Статистика носіїв заряду в напівпровідниках.** У стані термодинамічної рівноваги за будь-якої температури існує певний розподіл електронів за квантовими станами. В результаті в кристалі напівпровідника встановлюється певна концентрація вільних електронів  $n$  у зоні провідності та концентрація вільних дірок  $p$  у валентній зоні. Крім того, у кристалі, що містить локальні рівні енергії (домішкові атоми і структурні дефекти), можуть бути ще негативно заряджені акцептори й позитивно заряджені донори, на яких

у кожній одиниці об'єму можуть знаходитися зв'язані електрони й дірки.

Обчислення концентрацій вільних і зв'язаних носіїв заряду є основна задача статистики електронів і дірок у кристалах. Задача розпадається на дві частини: чисто квантовомеханічну – знаходження числа можливих квантових станів у зонах – і статистичну – визначення фактичного розподілу електронів за цими квантовими станами при термодинамічній рівновазі.

Число квантових станів в інтервалі енергій  $d\varepsilon$ , розраховане на одиницю об'єму  $V$  кристала,  $dZ$ , а  $N(\varepsilon) = \frac{dZ}{d\varepsilon}$  – це густина станів у цьому інтервалі енергій.

Для  $k$ -простору  $dZ$  дорівнює

$$dZ = \frac{dV_k}{8\pi^3}, \quad (6.10)$$

де  $dV_k = 4\pi k^2 dk$ .

Для сферичної ізоенергетичної поверхні з  $\varepsilon_{\min}$  у центрі зони Бриллюена:

$$\varepsilon(k) = E_c + \frac{(\hbar k)^2}{2m^*} = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \quad (6.11)$$

для напівпровідника  $n$ -типу:

$$N(\varepsilon) = 2\pi \left( \frac{2m_n^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon - E_c}; \quad (6.12)$$

для напівпровідника  $p$ -типу:

$$N(\varepsilon) = 2\pi \left( \frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - \varepsilon}. \quad (6.13)$$

**Сферичні ізоенергетичні поверхні з мінімумом енергії в точках  $k_0$ :**

$$\varepsilon(k) = E_c + \frac{\hbar^2 (k - k_0)^2}{2m^*}; \quad (6.14)$$

для  $n$ -типу:

$$N(\varepsilon) = 2\pi\kappa \left( \frac{2m_n^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon - E_c}; \quad (6.15)$$

для  $p$ -типу:

$$N(\varepsilon) = 2\pi\kappa \left( \frac{2m_n^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - \varepsilon}, \quad (6.16)$$

де  $\kappa$  – число сфер.

**Еліпсоїдальні ізоенергетичні поверхні:**

$$\varepsilon(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_1^*} + \frac{k_y^2}{m_2^*} + \frac{k_z^2}{m_3^*} \right); \quad (6.17)$$

для  $n$ -типу:

$$N(\varepsilon) = \frac{2\pi}{\hbar^3} \kappa \sqrt{8m_1^* m_2^* m_3^*} \sqrt{\varepsilon - E_c}; \quad (6.18)$$

$\kappa$  – число сфер (для Ge  $\kappa = 4$ ; для Si  $\kappa = 6$ );  $m_1^*$ ,  $m_2^*$ ,  $m_3^*$  – компоненти маси (у головних осях).

Ефективна маса для густини станів:

$$M^2(m_1^*, m_2^*, m_3^*) = m_d^{*3}.$$

**Концентрація електронів та дірок:**

$$n = 2 \int_{E_c}^{\infty} f_0(\varepsilon, T) N(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}} \Phi_{\frac{1}{2}}(\xi), \quad (6.19)$$

де  $f_0(\varepsilon, T)$  – функція Фермі – Дірака для рівноважних станів, яка дорівнює:

для електронів

$$f_{0_n}(\varepsilon, T) = \frac{1}{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T} + 1}; \quad (6.20)$$

для дірок:

$$f_{0_p}(\varepsilon, T) = 1 - f_{0_n}(\varepsilon, T) = \frac{1}{\frac{\varepsilon_F - \varepsilon}{k_B T} + 1}; \quad (6.21)$$

### Ефективна густина станів

в зоні провідності:

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_{dn}^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}; \quad (6.22 a)$$

у валентній зоні:

$$N_v = 2 \left( \frac{2\pi m_{dp}^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}; \quad (6.22 б)$$

$$\Phi_{\frac{1}{2}}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\xi^{\frac{1}{2}} d\xi}{e^{\xi - \eta} + 1}; \quad (6.23)$$

– інтеграл Фермі;

$$\xi = \frac{\varepsilon - E_c}{k_B T}; \quad \eta = -\frac{E_c - \varepsilon_F}{k_B T}. \quad (6.24)$$

$$\Phi_{\frac{1}{2}}(\eta) = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\eta}, & -\infty < \eta < -1; \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{0,25 + e^{-\eta}}, & -1 < \eta < 5; \\ \frac{2}{3} \eta^{\frac{3}{2}}, & 5 < \eta < \infty. \end{cases} \quad (6.25)$$

Область  $-\infty < \eta < -1$  відповідає статистиці Больцмана, напівпровідник є **невиродженим**, рівень Фермі лежить у забороненій зоні, нижче дна зони провідності не менше ніж на  $k_B T$ .

Якщо рівень Фермі лежить у зоні провідності вище  $E_c$  більше ніж на  $5k_B T$ , то такий напівпровідник цілком **вироджений**. Це відповідає області  $5 < \eta < \infty$ .

Область  $-1 < \eta < 5$  відповідає перехідному випадку. Для невиродженого напівпровідника  $n$ -типу:

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \varepsilon_F}{k_B T}} = 2 \left( \frac{2\pi m_{dn}^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_c - \varepsilon_F}{k_B T}}. \quad (6.26)$$

Для виродженого напівпровідника  $n$ -типу:

$$n = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}} \Phi_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{2m_{dn}^*}{h} \right)^{\frac{3}{2}} (\varepsilon_F - E_c)^{\frac{3}{2}} \quad (6.27)$$

і ця концентрація не залежить від температури.

## Приклади розв'язування задач

**Приклад 6.1.** Визначте концентрацію вільних електронів у металі при температурі  $T = 0$  К, якщо відомо, що їхня середня енергія дорівнює 1,5 еВ.

*Розв'язання*

Концентрацію вільних електронів визначимо за формулою (6.3) для енергії Фермі, яка пов'язана з середньою енергією вільних електронів співвідношенням (6.6). Після перетворень отримаємо:

$$n_e = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2m\varepsilon_F^0}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \left( \frac{10m\varepsilon}{3} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Після розрахунку маємо:

$$n_e = \frac{1}{3 \cdot 3,14^2 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34})^3} \left( \frac{10 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{3} \right)^{\frac{3}{2}} =$$

$$= 2,1 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

*Відповідь:*  $n_e = 2,1 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .

**Приклад 6.2.** Визначте температуру виродження  $T_0$  для Калію, якщо на кожний атом припадає по одному вільному електрону. Густина калію  $\rho = 860 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .

*Розв'язання*

Температура виродження  $T_0$ , згідно квантової теорії електронів у металі, визначається виразом (6.7):

$$T_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e k_B} n_e^{\frac{2}{3}}. \quad (1)$$

Згідно умови концентрація електронів  $n_e$  дорівнює концентрації  $n$  атомів, яка визначається виразом

$$n = \frac{\rho N_A}{\mu}. \quad (2)$$

Вважаючи  $n_e = n$  і підставляючи вираз (2) у формулу (1), остаточно маємо:

$$T_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e k_B} \left( \frac{\rho N_A}{\mu} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{3,14^2 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} \left( \frac{860 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{39 \cdot 10^{-3}} \right)^{\frac{2}{3}} =$$

$$= 3,12 \cdot 10^4 \text{ К}.$$

*Відповідь:*  $T_0 = 3,12 \cdot 10^4 \text{ К}$ .

**Приклад 6.3.** Визначте положення рівня Фермі і сумарну кінетичну енергію вільних електронів в  $1 \text{ см}^3$  Аргентуму при температурі поблизу абсолютного нуля, вважаючи, що число вільних електронів дорівнює числу атомів Аргентуму.

*Розв'язання*

Концентрація вільних електронів дорівнює концентрації атомів ( $n_e = n$ ), тому

$$n_e = \frac{\rho N_A}{\mu}$$

Енергію Фермі знайдемо з виразу

$$\begin{aligned} \varepsilon_F^0 &= \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( 3\pi^2 \frac{\rho N_A}{\mu} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \times \\ &\times \left( 3 \cdot 3,14^2 \cdot \frac{10,5 \cdot 10^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{108 \cdot 10^{-3}} \right)^{\frac{2}{3}} = 8,8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 5,5 \text{ еВ}. \end{aligned}$$

Сумарна кінетична енергія вільних електронів

$$\begin{aligned} K &= V \int_0^{\varepsilon_F^0} \varepsilon dn = \frac{2V \sqrt{2m_e^3}}{5\pi^2 \hbar^3} \varepsilon_F^{0 \frac{5}{2}} = \\ &= \frac{2 \cdot 10^{-6} \cdot \sqrt{2 \cdot (9,1 \cdot 10^{-31})^3}}{5 \cdot 3,14^2 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34})^3} \cdot (8,8 \cdot 10^{-19})^{\frac{5}{2}} = 3,08 \cdot 10^{-4} \text{ Дж}. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\varepsilon_F^0 = 5,5 \text{ еВ}$ ;  $K = 3,08 \cdot 10^{-4} \text{ Дж}$ .

**Приклад 6.4.** Оцініть середню енергетичну відстань  $\delta\varepsilon$  між дозволеними енергетичними рівнями зони провідності в

кристалі Аргентуму об'ємом  $V = 1 \text{ см}^3$ , якщо енергія Фермі  $\epsilon_F^0 = 5,5 \text{ еВ}$ .

*Розв'язання*

Середня енергетична відстань між дозволеними рівнями  $\delta\epsilon = \frac{\epsilon_F^0}{N}$ , де  $N$  – число рівнів, заповнених електронами.

Концентрація вільних електронів пов'язана з енергією Фермі виразом

$$n_e = \frac{1}{3} \frac{(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \epsilon_F^{0\frac{3}{2}}.$$

Усі рівні, які лежать нижче рівня Фермі, практично повністю заповнені електронами, причому згідно принципу Паулі на кожному рівні знаходиться два електрони. Звідси виходить, що

$$\begin{aligned} \delta\epsilon &= \frac{2\epsilon_F^0}{nV} = \frac{6\hbar^3}{(2m_e)^{\frac{3}{2}} V \epsilon_F^{0\frac{1}{2}}} = \frac{6 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34})^3}{(2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31})^{\frac{3}{2}} \cdot 10^{-6} (8,8 \cdot 10^{-19})^{\frac{1}{2}}} = \\ &= 3 \cdot 10^{-42} \text{ Дж} = 1,88 \cdot 10^{-23} \text{ еВ}. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\delta\epsilon = 3 \cdot 10^{-42} \text{ Дж} = 1,88 \cdot 10^{-23} \text{ еВ}$ .

**Приклад 6.5.** Відомо, що в системі за температури  $T$  в стані з енергією  $6,35852 \text{ еВ}$  середня кількість електронів  $N = 0,2$ , а в стані з енергією  $5,64148 \text{ еВ}$  середня кількість електронів  $N = 0,8$ . Знайдіть температуру  $T$  і рівень Фермі  $\epsilon_F$ .

*Розв'язання*

Середня кількість електронів у стані з енергією  $\epsilon$  визначається функцією Фермі – Дірака:

$$N(\epsilon) = f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_B T}} + 1}.$$

Отже, в нашому випадку можна записати:

$$N(6,35852) = \frac{1}{e^{\frac{11600(6,35852 - \varepsilon_F)}{T}} + 1} = 0,2 ;$$

$$N(5,64148) = \frac{1}{e^{\frac{11600(5,64148 - \varepsilon_F)}{T}} + 1} = 0,8 ,$$

звідки

$$\frac{6,38562 - \varepsilon_F}{T} = \frac{1,3863}{11600} , \quad \frac{5,64148 - \varepsilon_F}{T} = -\frac{1,3863}{11600} ,$$

$$\frac{6,38562 - \varepsilon_F}{5,64148 - \varepsilon_F} = -1 ,$$

або

$$12 - 2\varepsilon_F = 0 ,$$

звідки

$$\varepsilon_F = 6 \text{ eВ} , \quad T = 3000 \text{ К} .$$

*Відповідь:*  $\varepsilon_F = 6 \text{ eВ} ; T = 3000 \text{ К} .$

**Приклад 6.6.** Знайдіть положення рівня Фермі у власному германії за температури  $T = 300 \text{ К}$  , якщо відомо, що ширина його забороненої зони  $\Delta E_g = 0,665 \text{ eВ}$  , а ефективні маси густини станів  $m_{dp}^* = 0,388m_e$  ,  $m_{dn}^* = 0,55m_e$  .

*Розв'язання*

Положення рівня Фермі у власному напівпровіднику визначається виразом:

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = E_i + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} ,$$

де  $E_i$  – рівень, що відповідає середині забороненої зони;

$$N_v = \frac{2(2\pi m_{dp}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}; \quad N_c = \frac{2(2\pi m_{dn}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

– ефективна густина станів для дірок валентної зони і для електронів зони провідності відповідно. В нашому випадку

$$N_v = \frac{2 \cdot (2 \cdot 3,14 \cdot 0,388 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300)^{\frac{3}{2}}}{(6,63 \cdot 10^{-34})^3} = 6,04 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3},$$

$$N_c = \frac{2 \cdot (2 \cdot 3,14 \cdot 0,55 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300)^{\frac{3}{2}}}{(6,62 \cdot 10^{-34})^3} = 1,02 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}.$$

Отже,

$$E_F - E_i = \frac{8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 300}{2} \ln \frac{6,04 \cdot 10^{24}}{1,02 \cdot 10^{25}} = -6,78 \cdot 10^{-3} \text{ eВ}$$

або

$$\begin{aligned} E_F - E_v &= E_i - E_v + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = \frac{\Delta E_g}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = \\ &= \frac{0,665}{2} - 6,78 \cdot 10^{-3} = 0,326 \text{ eВ}, \end{aligned}$$

тобто рівень Фермі у власному германії за кімнатної температури знаходиться на 6,78 меВ нижче середини забороненої зони, але на 326 меВ вище стелі валентної зони. Результати свідчать про те, що зі зростанням температури рівень Фермі наближається до тієї зони, яка має меншу густина станів і тому заповнюється швидше.

*Відповідь:*  $E_F - E_i = -6,78 \cdot 10^{-3} \text{ eВ}$ , або  $E_F - E_v = 0,326 \text{ eВ}$ .

**Приклад 6.7.** Знайдіть енергію Фермі для власного напівпровідника, вважаючи, що статистика Максвелла – Больцма-

на може бути застосована як до зони провідності, так і до валентної зони.

*Розв'язання*

Для власного напівпровідника  $n = p = n_i$ . Концентрації електронів і дірок

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \varepsilon_F}{k_B T}}; \quad p = N_v e^{-\frac{\varepsilon_F - E_v}{k_B T}}.$$

Ефективна густина станів

$$N_c = \frac{2(2\pi m_{dn}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}; \quad N_v = \frac{2(2\pi m_{dp}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}.$$

Тому

$$N_c e^{-\frac{E_c - \varepsilon_F}{k_B T}} = N_v e^{-\frac{\varepsilon_F - E_v}{k_B T}},$$

або

$$\frac{N_v}{N_c} = e^{-\frac{E_c + E_v - 2\varepsilon_F}{k_B T}}.$$

Звідки випливає

$$\varepsilon_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*} \right)^{\frac{3}{2}},$$

або остаточно

$$\varepsilon_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*}.$$

Звідси зрозуміло, що при  $m_{dn}^* = m_{dp}^*$  рівень Фермі знаходиться посередині забороненої зони; якщо  $m_{dn}^* < m_{dp}^*$ , то він зміщується вгору з цього положення, якщо  $m_{dn}^* > m_{dp}^*$ , то він зміщується вниз.

Оскільки зазвичай  $k_B T \ll \Delta E_g$ , то навіть якщо одна ефективна маса набагато більша за іншу, зміщення рівня Фермі від середнього положення між зонами (порівняно з шириною забороненої зони) буде не дуже великим.

Відповідь: 
$$\varepsilon_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*}.$$

**Приклад 6.8.** Знайдіть положення рівня Фермі і концентрацію електронів у власному напівпровіднику з параболічними зонами за температури  $T = 600$  К, якщо відомо, що ширина забороненої зони за таких температур змінюється згідно із законом  $\Delta E_g = 0,26 - 2,7 \cdot 10^{-4} T$  еВ. Оцініть похибку, яка вноситься, якщо не враховувати виродження електронного газу в зоні провідності. Використовуйте значення ефективних мас  $m_{dn}^* = 0,1m_e$ ,  $m_{dp}^* = 0,02m_e$  і скористайтеся наближеним виразом для інтеграла Фермі, вважаючи виродження не дуже сильним.

*Розв'язання*

З умови нейтральності  $n = p$  можна записати

$$N_c \Phi_{\frac{1}{2}}(\eta) = N_v e^{\frac{E_v - \varepsilon_F}{k_B T}},$$

оскільки дірковий газ у валентній зоні вважається неvirодженим.

Вважаючи  $\eta = \frac{\varepsilon_F - E_c}{k_B T} < 1,3$ , скористаємось наближеним значенням інтеграла Фермі

$$\Phi_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{t}{1 + 0,27t}$$

де  $t \equiv e^{\eta}$ . В результаті отримаємо рівняння для  $t$ :

$$t^2 - 0,27At - A = 0, \quad A \equiv \left( \frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\Delta E_g}{k_B T}}.$$

Розв'язок цього рівняння має вигляд

$$t = 0,135A + \sqrt{0,0182A^2 + A}.$$

Без урахування виродження ми б отримали  $t_{\text{невир}} = \sqrt{A}$ .

Положення рівня Фермі

$$\frac{\varepsilon_F - E_c}{(\varepsilon_F - E_c)_{\text{невир}}} = \frac{\ln(0,135A + \sqrt{0,0182A^2 + A})}{\ln \sqrt{A}}.$$

Концентрація електронів і дірок

$$n = p = N_v e^{-\frac{\Delta E_g}{k_B T}} e^{-\frac{\varepsilon_F - E_v}{k_B T}}.$$

За  $T = 600$  К маємо:  $\Delta E_g = 0,098$  еВ;  $A = 4,74$ ;  $t = 2,91$ ;

$$t_{\text{невир}} = 2,18; \quad \frac{\varepsilon_F - E_c}{(\varepsilon_F - E_c)_{\text{невир}}} = 1,37; \quad \frac{n}{n_{\text{невир}}} = \frac{t_{\text{невир}}}{t} = 0,75.$$

Звідси

$$n = \frac{N_v}{t} e^{-\frac{\Delta E_g}{k_B T}} = \frac{2 \cdot (2 \cdot 3,14 \cdot 0,02 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 600)^{\frac{3}{2}}}{(6,62 \cdot 10^{-34})^3} \times e^{-\frac{0,098}{8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 600}} = 3,3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}.$$

$$\text{Відповідь: } \frac{\varepsilon_F - E_c}{(\varepsilon_F - E_c)_{\text{невир}}} = 1,37; \quad n = 3,3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}.$$

**Приклад 6.9.** Шматок металу об'ємом  $V = 20$  см<sup>3</sup> перебуває при температурі  $T = 0$  К. Визначте число  $\Delta N$  вільних

електронів, імпульси яких відрізняються від максимального імпульсу  $p_{\max}$  не більше ніж на  $0,1p_{\max}$ .

Енергія Фермі  $\varepsilon_F^0 = 5 \text{ eV}$ .

### Розв'язання

Щоб визначити розподіл вільних електронів у металі за імпульсами, скористаємось розподілом Фермі для вільних електронів при  $T = 0 \text{ K}$  (6.9):

$$dn(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m_e^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon. \quad (1)$$

Оскільки  $dn(\varepsilon)$  - число електронів в одиниці об'єму, енергії яких лежать в інтервалі значень від  $\varepsilon$  до  $\varepsilon + d\varepsilon$  ( $\varepsilon < \varepsilon_F$ ), то воно має дорівнювати кількості електронів  $dn(p)$  в одиниці об'єму, які містяться в інтервалі значень імпульсу від  $p$  до  $p + dp$ , тобто

$$dn(p) = dn(\varepsilon). \quad (2)$$

При цьому даній енергії  $\varepsilon$  має відповідати певний імпульс  $p$  ( $\varepsilon = \frac{p^2}{2m_e}$ ), а інтервалу енергії  $d\varepsilon$  - інтервал імпульсів  $dp$  ( $d\varepsilon = \frac{p}{m_e} dp$ ). Помітивши, що  $\sqrt{\varepsilon} = \frac{p}{\sqrt{2m_e}}$ , підставляємо в праву частину рівності (2) замість  $dn(\varepsilon)$  вираз (1) із заміною  $\varepsilon$  на  $p$  і  $d\varepsilon$  на  $dp$  відповідно з отриманими співвідношеннями, тобто

$$dn(p) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}} \right)^3 \frac{p}{\sqrt{2m_e}} \frac{p}{m_e} dp.$$

Після скорочень отримаємо розподіл вільних електронів у металі за імпульсами при  $T = 0 \text{ K}$ :

$$dn(p) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} p^2 dp.$$

Кількість вільних електронів в одиниці об'єму з імпульсами в інтервалі від  $p_{\max} - 0,1p_{\max}$  до  $p_{\max}$  визначимо інтегруванням у відповідних межах:

$$\Delta n = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \int_{0,9p_{\max}}^{p_{\max}} p^2 dp = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} p_{\max}^3 \left(1 - (0,9)^3\right),$$

або

$$\Delta n = \frac{0,271}{3\pi^2} \frac{p_{\max}^3}{\hbar^3}.$$

Враховуючи, що максимальний імпульс електронів  $p_{\max}$  і максимальна енергія електронів у металі пов'язані співвідношенням  $p_{\max}^2 = 2m_e \varepsilon_F$ , знайдемо кількість  $\Delta N$  вільних електронів у металі:

$$\Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2} \frac{\left(\sqrt{2m_e \varepsilon_F}\right)^3}{\hbar^3} V,$$

або

$$\Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2} \left(\frac{\sqrt{2m_e \varepsilon_F}}{\hbar^2}\right)^3 V = \frac{0,271}{3 \cdot 3,14^2} \left(\frac{\sqrt{2 \cdot 9,31 \cdot 10^{-31} \cdot 8 \cdot 10^{-19}}}{(1,05 \cdot 10^{-34})^2}\right)^3 \times \\ \times 20 \cdot 10^{-6} = 2,9 \cdot 10^{23}.$$

*Відповідь:*  $\Delta N = 2,9 \cdot 10^{23}$ .

**Приклад 6.10.** Визначте тиск газу електронів, які описуються статистикою Фермі – Дірака. Розрахуйте величину тиску для випадку Купруму.

*Розв'язання*

Середню енергію, яка припадає на один електрон, виражають через енергію Фермі за допомогою співвідношення (6.6):

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F^0 = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} n_e^{\frac{2}{3}},$$

де  $n_e$  – концентрація електронів.

Повна енергія дорівнює:

$$E = N\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F^0 = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{N^{\frac{5}{3}}}{V^{\frac{2}{3}}}.$$

Звідси для тиску електронного газу отримуємо:

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{5} \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{5}{3}} = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{5} \frac{\hbar^2}{m_e} n_e^{\frac{5}{3}}.$$

У моделі вільних електронів концентрацію електронів визначають за формулою:

$$n_e = \frac{N}{V} = \frac{z\rho_m}{\mu} N_A,$$

де  $\rho_m$  – масова густина;  $z$  – кількість вільних електронів у кристалі, внесених одним атомом (валентність).

Для Купруму:

$$\rho_m = 8,96 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}; \quad \mu = 63,55 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}; \quad z = 1.$$

Тоді концентрація вільних електронів

$$n_e = \frac{1 \cdot 8,96 \cdot 10^3}{63,55 \cdot 10^{-3}} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 8,49 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3},$$

а тиск електронного газу

$$P = \frac{(3 \cdot 3,14^2)^{\frac{2}{3}}}{5} \cdot \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2}{9,1 \cdot 10^{-31}} \cdot (8,49 \cdot 10^{28})^{\frac{5}{3}} \approx 40 \cdot 10^9 \text{ Па} = 40 \text{ ГПа}.$$

Відповідь:  $n_e = 8,49 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ ;  $P = 40 \text{ ГПа}$ .

**Приклад 6.11.** Доведіть, що у двомірному випадку густина рівнів вільних електронів  $g(\varepsilon)$  має постійне значення, яке не залежить від  $\varepsilon$  при  $\varepsilon > 0$  і дорівнює нулю при  $\varepsilon < 0$ . Знайдіть це постійне значення.

*Розв'язання*

У наближенні незалежних електронів енергія електронного газу дорівнює сумі добутків  $\varepsilon(\mathbf{k})$  ( $\varepsilon(\mathbf{k})$  – енергія одноелектронного стану) на середню кількість електронів у даному одноелектронному стані. Враховуючи, що середня кількість електронів у одноелектронному стані дорівнює значенню функції Фермі  $f(\varepsilon(\mathbf{k}))$ , для енергії одноелектронного газу маємо вираз:

$$U = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) f(\varepsilon(\mathbf{k})), \quad (1)$$

де „2“ перед знаком суми означає, що кожному дозволеному значенню  $\mathbf{k}$  відповідає два одноелектронні стани (по одному для кожного значення проекції спіну електрона).

У двомірному випадку елемент „об'єму“  $k$ -простору, який припадає на одне дозволене значення  $\mathbf{k}$ , запишемо у вигляді:

$$\Delta \mathbf{k} = \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2, \quad (2)$$

де  $L$  – сторона двомірного об'єкту у вигляді квадрата. За допомогою виразу (2) вираз (1) запишемо у вигляді:

$$U = \frac{L^2}{4\pi^2} 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) f(\varepsilon(\mathbf{k})) \Delta \mathbf{k}. \quad (3)$$

Переходячи до інтегральної форми в формулі (3), одержимо для густини енергії електронного газу:

$$u = \frac{U}{L^2} = \frac{1}{2\pi^2} \int \varepsilon(\mathbf{k}) f(\varepsilon(\mathbf{k})) d\mathbf{k} = \frac{1}{2\pi^2} \int F(\varepsilon(\mathbf{k})) d\mathbf{k}, \quad (4)$$

де  $F(\varepsilon(\mathbf{k}))$  - введено для скорочення запису.

Далі

$$\frac{1}{2\pi^2} \int F(\varepsilon(\mathbf{k})) d\mathbf{k} = \int \frac{2\pi k dk}{2\pi^2} F(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \int \frac{m_e}{\hbar^2} F(\varepsilon) d\varepsilon,$$

де використано  $d\mathbf{k} = 2\pi k dk$  і  $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$  (звідки  $k dk = \frac{m_e}{\hbar^2} d\varepsilon$ ).

В отриманому виразі

$$\frac{1}{2\pi^2} \int F(\varepsilon(\mathbf{k})) d\mathbf{k} = \frac{1}{\pi} \int \frac{m_e}{\hbar^2} F(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Перейдемо знову до сум:

$$2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta \mathbf{k}}{4\pi^2} F(\varepsilon(\mathbf{k})) = \sum_{\varepsilon} \frac{m_e}{\pi \hbar^2} F(\varepsilon) \Delta \varepsilon.$$

Уведемо в лівій частині останньої рівності додатковий індекс підсумовування за спіновим квантовим числом  $m_s$  і, відповідно, опустимо множник „2“ перед знаком суми. Покладемо також у цій рівності  $\frac{\Delta \mathbf{k}}{4\pi^2} = \frac{1}{L^2}$  (що виходить з виразу (2)). Тоді останнє рівняння набуває вигляду:

$$\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}, m_s} F(\varepsilon(\mathbf{k})) = \sum_{\varepsilon} \frac{m_e}{\pi \hbar^2} F(\varepsilon) \Delta \varepsilon. \quad (5)$$

Рис. 6.1 ілюструє зміст підсумовування в лівій і правій частинах цього рівняння. На цьому рисунку точками умовно позначені дозволені значення  $\mathbf{k}$ , які лежать в інтервалі  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ . Кожній такій точці в лівій частині рівняння (5) відповідає два доданки (і два одноелектронних стани). Значення  $F(\varepsilon(\mathbf{k}))$  при малих значеннях  $\Delta \varepsilon$  для кожної точки практично співпадають.

У правій частині рівності (5)  $F(\varepsilon)$  для всіх указаних точок приймаємо однаковим, й інтервалу  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$  відповідає лише один доданок. Звідси випливає, що

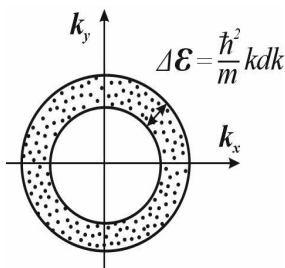


Рисунок 6.1

густина рівнів

$$g(\varepsilon) = \frac{m_e}{\pi \hbar^2}$$

не залежить від енергії  $\varepsilon$  на відміну від тримірного випадку.

У моделі вільних і незалежних електронів енергія електрона  $\varepsilon$  приймає лише додатні значення. Тому густину одноелектронних станів  $g(\varepsilon)$  при  $\varepsilon < 0$  приймаємо рівною нулю.

$$\text{Відповідь: } g(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{m_e}{\pi \hbar^2}, & \varepsilon > 0; \\ 0, & \varepsilon < 0. \end{cases}$$

---

### Задачі для самостійного розв'язування

- 6.1. Визначте за допомогою співвідношення невизначеностей кількість вільних електронів з енергіями в інтервалі  $(\varepsilon; \varepsilon + d\varepsilon)$  у металі при температурі  $T = 0$  К. Метал має форму прямокутного паралелепіпеда об'ємом  $V$ . При визначенні кількості квантових станів електрона в даному інтервалі енергій вважати, що фізично розрізними є лише ті стани, в яких проекції

імпульсу відрізняються не менше ніж на  $\Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{l_x}$ ,  $l_x$  – ребро паралелепіпеда об'ємом  $V$  (аналогічно для  $\Delta p_y$ ,  $\Delta p_z$ ).

- 6.2. Обчисліть густину станів  $g(\varepsilon)$  для системи вільних електронів, що не взаємодіють. Розгляньте випадки одновимірного, двовимірного та тривимірного руху електронів.
- 6.3. Покажіть, що інтеграли, які містять функцію розподілу Фермі – Дірака, можуть бути обчислені так (за умови, що підінтегральний вираз не має особливостей при  $\varepsilon = \varepsilon_F$ )

$$\int_0^{\infty} H(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} H(\varepsilon) d\varepsilon + \sum_{m=0}^{\infty} a_m (k_B T)^{2m} \left. \frac{d^{2m-1}}{d\varepsilon^{2m-1}} H(\varepsilon) \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F},$$

$$\int_0^{\infty} K(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = -K(\varepsilon_F) - \sum_{m=0}^{\infty} a_m (k_B T)^{2m} \left. \frac{d^{2m}}{d\varepsilon^{2m}} K(\varepsilon) \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F},$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T} + 1},$$

$$a_m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^{2m}}{(2m)!} \left( -\frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1} \right) dx, \quad a_1 = \frac{\pi^2}{6}, \quad a_2 = \frac{7}{4} \frac{\pi^4}{90}.$$

- 6.4. Для системи з фіксованою кількістю частинок, визначте температурну залежність рівня Фермі  $\varepsilon_F(T)$  для системи вільних електронів, що не взаємодіють. Переконайтесь, що ця залежність підкоряється виразу (6.3):

$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_F^0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F^0} \right)^2 \right].$$

- 6.5. Узагальніть результати попередньої задачі для системи фермі-частинок із довільною залежністю густини станів від енергії.
- 6.6. Покажіть, що за  $T \neq 0$  середня енергія газу вільних електронів, що не взаємодіють, може бути знайдена так:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F^0 \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F^0} \right)^2 \right].$$

- 6.7. Виведіть розподіл Фермі – Дірака, розглядаючи зіткнення частинок з урахуванням принципу Паулі.
- 6.8. Обчисліть ентропію фермі-газу за низьких температур.
- 6.9. Виведіть рівняння стану фермі-газу за низьких температур.
- 6.10. Нехай  $\varepsilon = \varepsilon_F + \delta\varepsilon$ . Покажіть, що для будь-якого  $\delta\varepsilon$  величина

$$f(\delta\varepsilon) = 1 - f(-\delta\varepsilon),$$

де під  $f(\delta\varepsilon)$  розуміють функцію Фермі – Дірака, обчислена при  $\varepsilon = \varepsilon_F + \delta\varepsilon$ . Аналогічна рівність справедлива для  $f(-\delta\varepsilon)$ .

- 6.11. Наскільки наближеним є запис функції Фермі у вигляді

$$f(\varepsilon) \approx e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}}$$

при  $\delta\varepsilon = 2k_B T$  і при  $\delta\varepsilon = 10k_B T$  ?

- 6.12. Покажіть, що

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = -1,$$

де  $f$  – функція Фермі.

- 6.13. Визначте хвильове число  $k_F$ , імпульс  $p$  електрона та енергію електрона, який знаходиться на поверхні Фермі металічного натрію, при  $T = 0$  К для  $m = m_e$ .
- 6.14. Визначте ширину смуги зайнятих енергетичних станів у валентній зоні кристала натрію (енергію Фермі  $\varepsilon_F$ ), якщо відомо, що смуга м'якого рентгенівського випромінювання кристала натрію при переході електрона  $3s \rightarrow 2p$  лежить в інтервалі довжин хвиль 35 – 38 нм.
- 6.15. Оцініть за температури, близької до  $T = 0$  К, кінетичну енергію електрону, який знаходиться на поверхні Фермі натрію.

- 6.16. Дайте визначення зони Бриллюена. Розгляньте побудову першої зони Бриллюена для металів, розташованих у ІА та ІВ підгрупі. Розрахуйте ємність першої зони Бриллюена у Na .
- 6.17. Визначте при  $T = 0$  К для міді енергію Фермі ( $\epsilon_F$ ) та хвильове число ( $k_F$ ) електрону, який знаходиться на поверхні Фермі, якщо відомо  $a = 0,3608$  нм,  $m = m_e$ .
- 6.18. Визначте частку вільних електронів у Літії за температури  $T = 0$  К, швидкість яких менша половини максимального значення.
- 6.19. Визначте температуру, при якій імовірність знаходження електрона з енергією  $\epsilon = 0,5$  еВ вище рівня Фермі в металі дорівнює 1%.
- 6.20. Визначте кількість електронних станів в одиниці об'єму металу з енергією  $0,3 - 0,4$  еВ.
- 6.21. Які ймовірності того, що за кімнатної температури ( $k_B T = 0,025$  еВ) електрон займе стани, що лежать на  $0,1$  еВ вище і на  $0,1$  еВ нижче рівня Фермі?
- 6.22. Яка ймовірність того, що електрон у металі матиме енергію, рівну енергії Фермі?
- 6.23. Визначте температуру, при якій середня кінетична енергія молекул ідеального газу дорівнює середній енергії вільних електронів у Купрумі при температурі  $T = 0$  К.
- 6.24. За абсолютного нуля рівень Фермі для Купруму  $7,04$  еВ. Визначте значення рівня Фермі при  $T = 20$  К.
- 6.25. Експериментальне значення енергії Фермі для літію за температури  $T = 0$  К дорівнює  $3,5$  еВ. Яке значення ефективної маси електрона слід підставити у формулу, щоб отримати узгодження між теоретичними та експериментальними значеннями енергії Фермі?
- 6.26. Визначте, яка частина електронів провідності в металі при  $T = 0$  К має кінетичну енергію, більшу  $0,5\epsilon_F^0$ .
- 6.27. При якій температурі ймовірність знайти в провіднику електрон з енергією  $0,5$  еВ над рівнем Фермі дорівнює 2%?

- 6.28. Чому дорівнює ймовірність того, що в металі в квантовому стані з енергією, рівною хімічному потенціалу, буде знаходитися вільний електрон?
- 6.29. Яка частина вільних електронів в Алюмінії при температурі  $T = 0$  К має кінетичну енергію, яка перевищує половину максимальної?
- 6.30. Обчисліть мінімальну довжину хвилі де Бройля для вільних електронів у мідному провіднику, де енергія Фермі складає 7 еВ.
- 6.31. Визначте сумарну кінетичну енергію вільних електронів у  $1 \text{ см}^3$  металу при температурі  $T = 0$  К, якщо цей метал:

№ варіанту	Метал	№ варіанту	Метал
1.	Алюміній Al	16.	Калій K
2.	Аурум Au	17.	Кальцій $\alpha$ -Ca
3.	Барій Ba	18.	Молибден Mo
4.	Берилій $\alpha$ -Be	19.	Натрій $\alpha$ -Na
5.	Ванадій V	20.	Нікол Ni
6.	Вольфрам W	21.	Ніобій Nb
7.	Гадоліній $\alpha$ -Gd	22.	Станум $\alpha$ -Sn
8.	Гафній $\alpha$ -Hf	23.	Осмій Os
9.	Гольмій $\alpha$ -Ho	24.	Паладій Pd
10.	Германій Ge	25.	Платина Pt
11.	Європій Eu	26.	Реній Re
12.	Ферум $\alpha$ -Fe	27.	Родій Rh
13.	Іридій Ir	28.	Рубідій Rb
14.	Ітрій $\alpha$ -Y	29.	Талій $\alpha$ -Tl
15.	Кадмій $\alpha$ -Cd	30.	Тантал Ta

- 6.32. Оцініть відношення середньої потенціальної енергії взаємодії двох електронів до енергії Фермі для металу, електрони якого наполовину заповнюють зону провідності. Концентрація атомів  $n = 3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ , ефективну масу електронів вважайте рівною масі вільного електрона.
- 6.33. При якій концентрації вільних електронів у кристалі температура виродження електронного газу в ньому дорівнює  $0 \text{ }^\circ\text{C}$ ?

- 6.34. Визначте відношення концентрацій вільних електронів  $\frac{n_{e_1}}{n_{e_2}}$  при  $T = 0$  К в Літії та Цезії, якщо відомо, що рівні Фермі в цих металах відповідно дорівнюють  $\varepsilon_{F_1}^0 = 4,72$  еВ і  $\varepsilon_{F_2}^0 = 1,53$  еВ.
- 6.35. Обчисліть енергію Фермі при температурі  $T = 0$  К для Алюмінію. Вважайте, що на кожний атом Алюмінію припадає три вільні електрони.
- 6.36. Визначте концентрацію  $n_e$  вільних електронів у металі при температурі  $T = 0$  К, енергія Фермі якого  $\varepsilon_F^0$  дорівнює:

№ варіанту	Метал	$\varepsilon_F^0$ , еВ	№ варіанту	Метал	$\varepsilon_F^0$ , еВ
1.	Натрій	3,24	13.	Залізо	11,1
2.	Калій	2,12	14.	Марганець	10,9
3.	Рубідій	1,85	15.	Цинк	9,47
4.	Мідь	7,00	16.	Кадмій	7,47
5.	Срібло	5,49	17.	Ртуть	7,13
6.	Золото	5,53	18.	Алюміній	11,7
7.	Берилій	14,3	19.	Галій	10,4
8.	Магній	7,08	20.	Індій	8,63
9.	Кальцій	4,69	21.	Талій	8,15
10.	Стронцій	3,93	22.	Олово	10,2
11.	Барій	3,64	23.	Свинець	9,47
12.	Ніобій	5,32	24.	Вісмут	9,90

- 6.37. На якій висоті (в електронвольтах) від дна зони провідності розміщений рівень Фермі в одновалентному Натрії, який містить  $n = 2,5 \cdot 10^{23}$  м<sup>-3</sup> атомів. Вважати температуру  $T = 0$  К.
- 6.38. Визначте різницю енергій (в одиницях  $k_B T$ ) між електроном, який перебуває на рівні Фермі, та електронами, які знаходяться на рівнях, імовірності заповнення яких дорівнюють 0,20 і 0,80.

- 6.39. Яка ймовірність заповнення електронами в металі енергетичного рівня, розміщеного на 0,001 еВ нижче рівня Фермі при температурі 18 °С?
- 6.40. Як і у скільки разів зміниться ймовірність заповнення електронами енергетичного рівня в металі, якщо рівень розміщений на 0,01 еВ нижче рівня Фермі і температура змінюється від 200 до 300 К?
- 6.41. Електрони, які містяться в тонкому приповерхневому шарі напівпровідника, можуть за певних умов розглядатися як двомірний електронний газ. Визначте фермівський імпульс таких електронів, якщо їхня концентрація в розрахунку на одиницю поверхні  $n_e^S = 10^{17} \text{ м}^{-2}$ .
- 6.42. Обчисліть у моделі вільних електронів при  $T = 0 \text{ К}$  густину електронів поблизу рівня Фермі  $\varepsilon_F^0 = 3 \text{ еВ}$ .
- 6.43. Визначте інтервал (в еВ) між сусідніми рівнями вільних електронів у металі при  $T = 0 \text{ К}$  поблизу верхнього заповненого рівня (енергії Фермі), якщо об'єм металу дорівнює  $1 \text{ см}^3$ , а концентрація вільних електронів  $n_e = 2 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .
- 6.44. Який зв'язок між концентрацією електронів і енергією Фермі при  $T = 0 \text{ К}$ .
- 6.45. Визначте кількість вільних електронів на атом Купруму і Алюмінію, граничні енергії для яких відповідно дорівнюють 7,04 і 11,7 еВ.
- 6.46. Обчисліть тиск електронного газу металу за температури при  $T = 0 \text{ К}$ , якщо густина металу  $\rho$ , а молярна маса  $\mu$ .

№ варіанту	Матеріал	$\rho$ , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	№ варіанту	Матеріал	$\rho$ , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
1.	Мідь	8 960	11.	Срібло	10 500
2.	Свинець	11 350	12.	Алюміній	2 698
3.	Молібден	10 220	13.	Тантал	16 654
4.	Вольфрам	19 300	14.	Хром	7 190
5.	Титан	4 540	15.	Ванадій	6 110
6.	Ніобій	8 570	16.	Золото	19 320
7.	Залізо	7 874	17.	Паладій	12 020

8.	Кобальт	8 900	18.	Платина	21 450
9.	Магній	1 738	19.	Іридій	22 560
10.	Нікель	8 902	20.	Родій	12 410

- 6.47. Тиск електронного газу є одним з основних чинників, який визначає стисливість металів. Визначте стисливість і тиск електронного газу для Купруму при температурі  $T = 0$  К, якщо концентрація електронів провідності  $n_e = 8,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ . Ефективну масу вважайте рівною масі вільного електрона.
- 6.48. Стисливість лужних металів близька до стисливості електронного газу. Чому дорівнює коефіцієнт стисливості металевого Натрію при  $T = 0$  К, якщо концентрація вільних електронів у цьому металі  $n_e = 1,3 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .
- 6.49. Концентрація електронів у Аргентумі  $n_e = 5,8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ . визначте середню енергію електронного газу при  $T = 50$  К.
- 6.50. Для електронів з квадратичним законом дисперсії знайдіть зв'язок між їх середньою енергією і ферміївською енергією при температурі  $T = 0$  К.
- 6.51. Обчисліть середню кінетичну енергію вільних електронів в Алюмінії при  $T = 0$  К, якщо відомо, що їх максимальна енергія дорівнює 11,7 еВ.
- 6.52. Металевий Натрій при кристалізації утворює кубічну об'ємноцентровану ґратку з відстанню між найближчими атомами  $a = 3,7 \text{ \AA}$ . У моделі вільних електронів визначте середню кінетичну енергію електронів провідності в цій ґратці.
- 6.53. В деякій системі за температури  $T = 2520$  К в стані з енергією 5 еВ середня кількість електронів дорівнює 0,0909. Знайдіть енергію Фермі.
- 6.54. Оцініть значення енергії Фермі для електронів провідності в кристалі молібдену при  $T = 2000$  К, якщо відомо, що густина кристалу  $\rho = 10,2 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , атомна маса  $A_r = 96$ , кількість вільних електронів на атом  $z = 1$ , ефективна маса електронів провідності дорівнює масі вільного електрона у вакуумі.

- 6.55. Оцініть середню кількість електронів в стані з енергією 7 eV при  $T = 3000 \text{ K}$  в зоні провідності кристалу вольфраму, якщо відомо, що густина кристалу  $\rho = 19,3 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , атомна маса  $A_r = 184$ , кількість вільних електронів на атом  $z = 1$ , ефективна маса електронів провідності дорівнює масі вільного електрона у вакуумі.
- 6.56. Оцініть значення температури виродження електронів провідності в кристалах вольфраму та цезію, якщо відомо, що при  $T \rightarrow 0$  концентрація електронів провідності в кристалі вольфраму  $n_w = 6,35 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ , а в кристалі цезію  $n_{cs} = 9,0 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ .
- 6.57. Визначте ймовірність заповнення електронами енергетичного рівня, розташованого на  $10k_B T$  вище рівня Фермі. Як зміниться ймовірність заповнення цього рівня електронами, якщо температуру збільшити вдвічі?
- 6.58. Рівень Фермі напівпровідника знаходиться на 0,01 eV вище верхнього рівня валентної зони. Розрахуйте:
- а) можливість появи дірки на верхньому рівні валентної зони за  $T = 300 \text{ K}$  і  $T = 50 \text{ K}$  ;
  - б) можливість перебування електрона на дні зони провідності за  $T = 300 \text{ K}$  при ширині забороненої зони напівпровідника, що дорівнює 0,67 eV.
- 6.59. При зближенні атомів можливий тунельний перехід зовнішніх електронів одного атома до іншого, що призводить до уширення рівнів (утворення зон у твердому тілі). Вважаючи, що електрон знаходиться в прямокутній потенціальній ямі шириною  $a = 2a_0 \approx 1 \text{ \AA}$  на глибині, що дорівнює енергії йонізації  $U_0 = 10 \text{ eV}$ , а ширина бар'єра  $d$  дорівнює середній відстані між атомами, оцініть енергетичне уширення в кристалі з  $d = 1 \text{ \AA}$ .
- 6.60. Хоча для простих власних напівпровідників енергія Фермі практично не залежить від температури, невеликий за величиною поправочний член потрібно вводити. Покажіть, що енергія Фермі може бути записана у вигляді

$$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \alpha T,$$

де  $E_c$  і  $E_v$  – енергії дна зони провідності і стелі валентної зони відповідно, а  $\alpha$  – константа. Вважайте, що густини станів у смугах дозволених значень енергії електронів мають залежність  $A\sqrt{E - E_c}$  і  $B\sqrt{E - E_v}$  відповідно.

- 6.61. Обчисліть значення енергії Фермі для власного напівпровідника – германію. На скільки електрон-вольт рівень Фермі зміщений відносно середини забороненої зони? В якому напрямку?
- 6.62. Знайдіть положення рівня Фермі у власному напівпровіднику відносно середини забороненої зони за кімнатної температури ( $T = 300$  К), якщо ефективна маса електрона у 2 рази більша ефективної маси дірки.
- 6.63. Обчисліть положення рівня Фермі у власному кремнії за температури 77, 300, 500 і 800 К.
- 6.64. Знайдіть ширину забороненої зони і положення рівня Фермі для власного напівпровідника, в якому концентрація електронів провідності за температури  $T = 300$  К дорівнює  $1,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , а стала  $G = 4,83 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3} \cdot \text{К}^{\frac{3}{2}}$ .
- 6.65. Знайдіть зв'язок між концентрацією зонних електронів  $n_n$  і дірок  $n_p$  в невідродженому напівпровіднику при довільному положенні рівня Фермі. Ширина забороненої зони  $\Delta E_g$ , температура напівпровідника  $T$ .

## 7. Зонна теорія. Зони Бриллюена. Динаміка електронів

### Основні формули і визначення

Електронні оболонки атомів у кристалі сильно взаємодіють одна з одною, в результаті чого вже неможна вести мову про енергетичні рівні окремих атомів, а лише про рівні сукупності електронних оболонок усіх атомів тіла в цілому. Характер електронного енергетичного спектра різний для різних типів твердих тіл.

*Хвильова функція електрона в періодичному полі.* Розглянемо загальні властивості одноелектронної хвильової функції, які впливають з того, що потенціал у рівнянні Шредінгера є періодичною функцією координат.

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}), \quad (7.1)$$

де

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + U(\mathbf{r}). \quad (7.2)$$

Гамільтоніан  $\hat{H}$  інваріантний відносно зсуву ґратки на період ґратки:  $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$ ,  $\mathbf{a}_n$  – будь-який вектор ґратки. Замінивши в (7.1)  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}_n$ , отримаємо, що  $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$  задовольняє тому ж рівнянню, що і  $\psi(\mathbf{r})$ . Якщо  $\psi(\mathbf{r})$  – невідроджений стан, то

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = C(\mathbf{a}_n)\psi(\mathbf{r}). \quad (7.3)$$

В силу умови нормування  $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$  і (7.3),  $\psi(\mathbf{r})$  може відрізнитися від періодичної функції лише фазовим множником

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\varphi(\mathbf{r})}u(\mathbf{r}); \quad C(\mathbf{a}_n) = e^{i[\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) - \varphi(\mathbf{r})]}. \quad (7.4)$$

Оскільки  $\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n + \mathbf{a}_m) = \varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_m)$ , а з іншого боку

$$\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n + \mathbf{a}_m) = C(\mathbf{a}_n)C(\mathbf{a}_m)\varphi(\mathbf{r}), \quad (7.5)$$

З (7.4) і (7.5) випливає

$$e^{i[\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n + \mathbf{a}_m) - \varphi(\mathbf{r})]} = C(\mathbf{a}_n + \mathbf{a}_m) = C(\mathbf{a}_n)C(\mathbf{a}_m) = e^{i[\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) + \varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_m) - 2\varphi(\mathbf{r})]}.$$

Звідси видно, що  $\varphi(\mathbf{r})$  – лінійна функція ( $\varphi(\mathbf{r}) = i\hbar\mathbf{k}\mathbf{r}$ ). Величина  $\hbar\mathbf{k}$  є квантовим числом і носить назву **квазіімпульсу**. Отже, хвильова функція електрона в періодичному полі має вигляд

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (7.6)$$

Співвідношення (7.6) називають **теоремою Блоха**. Теорема Блоха доводиться і для вироджених станів, але при цьому замість (7.3) – (7.4) слід мати справу з лінійними суперпозиціями хвильових функцій для станів з однаковою енергією.

*Спектр електронів у твердому тілі.* Хвильова функція одноелектронного стану має вигляд

$$\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad (7.7)$$

де  $\mathbf{p}$  – квазіімпульс;  $m$  – інші квантові числа (номер зони);  $u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  – періодична функція координат  $\mathbf{r}$  з періодом кристалічної ґратки. З (7.7) випливає, що електрон у кристалі не має визначеного імпульсу. Дійсно, стан із заданим імпульсом описується плоскою хвилею  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , а (7.7) можна розкласти в ряд Фур'є

$$\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_n u_{G_n} e^{iG_n\mathbf{r}} = \sum_n u_{G_n} e^{i(\mathbf{k} + G_n)\mathbf{r}}, \quad (7.8)$$

де  $u_{G_n}$  – коефіцієнти розкладання  $u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  у трьохвимірний ряд Фур'є.

Отже, відповідно до (7.8), блохівських електрон є суперпозицією станів з імпульсами, що відрізняються на величину векторів оберненої ґратки.

Функції Блоха мають задовольняти **періодичним граничним умовам Борна – Кармана**:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r} + N_i a_i) = e^{iN_i k a_i} \psi_{nk}(\mathbf{r}).$$

Таким чином,  $e^{iN_i k a_i} = 1$  і припустимими значеннями  $k \in$

$$k = \left\{ \frac{m_i}{N_i} \frac{2\pi}{a_i} \right\}.$$

Оскільки різниця між сусідніми значеннями  $k$  мала, порядку  $\frac{1}{N_i}$ , підсумовування по  $k$  можна замінити інтегруванням

$$\sum_i \rightarrow \frac{1}{V} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

**Модель майже вільних електронів.** Вивчимо, який вигляд має енергетичний спектр електронів та його основні властивості на прикладі найпростіших моделей.

Розглянемо електрони в слабкому періодичному потенціалі  $U(\mathbf{r})$ , який можна врахувати за теорією збурень.

За відсутності взаємодії, коли електрон вільний, його енергія та хвильова функція мають вигляд

$$\varepsilon^0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (7.9)$$

Відмітимо, що  $\psi(\mathbf{r})$  в (7.9) можна розглядати як таку, що задовольняє теоремі Блоха ( $u(\mathbf{r}) = 1$ ).

За теорією збурень, за потенціалом  $U(\mathbf{r})$  спектр описується у вигляді

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^0(\mathbf{k}) + \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k} \rangle + \sum_{k'} \frac{|\langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}' \rangle|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{k}'}^0} = \varepsilon^0(\mathbf{k}) + U^0 + \sum_{G \neq 0} \frac{|U_{\mathbf{G}}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^0}, \quad (7.10)$$

де враховано, що  $\langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k} \rangle = \int U(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d\mathbf{r} \neq 0$

лише, коли  $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$  дорівнює одному з векторів оберненої ґратки.

З (7.10) випливає, що навіть при найменшому потенціалі  $U$  поправка другого порядку розбігається при  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^0$ , тобто при  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k} - \mathbf{G}|$ . Тому потрібно використовувати теорію збурень для вироджених станів. Шукатимемо хвильову функцію у вигляді

$$\psi_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\mathbf{r}}. \quad (7.11)$$

Підставимо (7.11) у гамільтоніан

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}} = \varepsilon(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}},$$

Помножимо рівняння Шредінґера спочатку на  $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , а потім на  $e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\mathbf{r}}$  та про інтегруємо. Отримаємо два рівняння для коефіцієнтів  $a$ :

$$\begin{cases} [\varepsilon^0(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k})] a_{\mathbf{k}} + U_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0; \\ U_{-\mathbf{G}} a_{\mathbf{k}} + [\varepsilon^0(\mathbf{k} - \mathbf{G}) - \varepsilon(\mathbf{k})] a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0. \end{cases} \quad (7.12)$$

Розв'язок існує, коли визначник (7.12) дорівнює нулю.

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon^0(\mathbf{k}) - \varepsilon^0(\mathbf{k} - \mathbf{G})] \pm \frac{1}{2} \sqrt{[\varepsilon^0(\mathbf{k}) - \varepsilon^0(\mathbf{k} - \mathbf{G})]^2 + 4|U_{\mathbf{G}}|^2}. \quad (7.13)$$

На рис. 7.1 наведено спектр для 1D-випадку. При малих  $U_{\mathbf{G}}$  далеко від межі зони Бриллюена  $\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \varepsilon^0(\mathbf{k})$ , а поблизу межі, внаслідок брегівського відбивання, виникає заборонена зона (енергетична щілина) шириною  $2U_{\mathbf{G}}$ . Енергетична щілина виникає на межі усіх зон Бриллюена. Можна обмежитися описом спектра лише в межах першої зони Бриллюена, змістивши шматки, що відповідають наступним зонам на відповідний вектор оберненої ґратки (рис. 7.1).

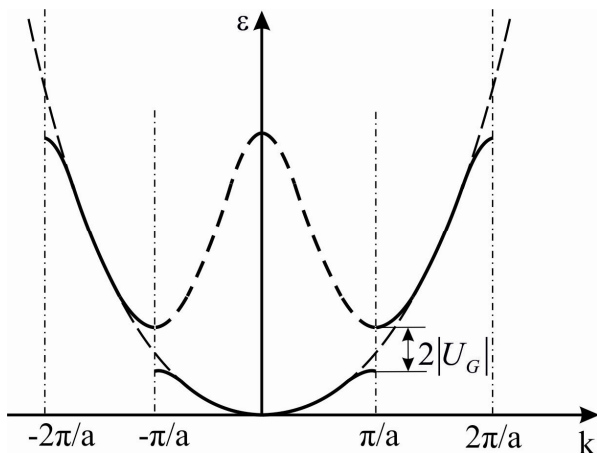


Рисунок 7.1 – Електронний спектр у наближенні слабого зв'язку для 1D-випадку

**Наближення сильного зв'язку** застосовується у випадках, коли перекривання атомних хвильових функцій у кристалі досить мале, тобто коли поблизу атома хвильова функція кристала мало відрізняється від атомної (застосовне для діелектриків та частково заповнених  $d$ -оболонки перехідних металів).

Нехай зв'язані стани атомного гамільтоніан сильно локалізовані:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \quad (7.14)$$

Повний гамільтоніан відрізняється від атомного

$$\hat{H} = \sum_n \hat{H}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) + \Delta U(\mathbf{r}), \quad \hat{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad (7.15)$$

де  $\Delta U(\mathbf{r})$  – різниця між потенціалом атома та періодичним потенціалом. Величина  $\Delta U(\mathbf{r})$  мала в області локалізації  $\psi_n$  з (7.14), а там, де потенціал  $\Delta U(\mathbf{r})$  великий, малі  $\psi_n$ , тому його матричні елементи на  $\psi_n$ , локалізованих на різних атомах, малі. використовуючи цю обставину, можна побудувати теорію збурень.

Нехтуючи перекириванням хвильових функцій, можна вважати, що спектр складається з  $N$ -кратно вироджених рівнів із хвильовими функціями  $\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ , де  $N$  – кількість атомів у кристалі.

Згідно із теорією збурень, для вироджених станів функції нульового наближення слід шукати у вигляді лінійної комбінації атомних функцій:

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi_{nk}(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad \{a_m\} \rightarrow \{\mathbf{R}_m\} \quad (7.16)$$

Функцій (7.16) всього  $N$  штук (за кількістю припустимих значень  $\mathbf{k}$ ). Вираз (7.16) задовольняє умові Блоха:

$$\begin{aligned} \Psi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Psi_{nk}(\mathbf{r}); \\ \Psi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}'} \psi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R} - \mathbf{R}') = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{R}}} \psi_{nk}(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{R}}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Psi_{nk}(\mathbf{r}); \\ \tilde{\mathbf{R}} &= \mathbf{R} - \mathbf{R}'. \end{aligned}$$

Взагалі кажучи, будь-яку блохівську функцію можна представити у вигляді (7.16), а саме

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (7.17)$$

Ця формула відповідає розкладанню функції від  $\mathbf{R}$  у періодичний ряд Фур'є по  $\mathbf{k}\mathbf{R}$ , де  $\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  є коефіцієнтами розкладання, які можна знайти зі звичайної формули перетворення:

$$\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{1}{V_0} \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Psi_{nk}(\mathbf{r}) \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{V_0} \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} u_{nk}(\mathbf{r}) \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (7.18)$$

Функції  $\phi_n(\mathbf{r})$  називають **функціями Ваньє**. Безпосереднім інтегруванням можна показати, що функції Ваньє ортонормовані (отже, утворюють повну систему функцій)

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}') d^3\mathbf{r} = \delta_{nm} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

Функції Ваньє локалізовані. Це випливає з (7.18), оскільки при великих  $|\mathbf{r} - \mathbf{R}|$  останній інтеграл містить швидко осцилюючу функцію від  $\mathbf{k}$  і тому малий. Природно, функції  $\phi_n$  можна розкласти в ряд за атомними функціями:

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \sum_m b_m \psi_n(\mathbf{r}). \quad (7.19)$$

З формули (7.16) випливає, що в нульовому наближенні по взаємодії між атомами функція Ваньє співпадає з атомною функцією.

Помножимо тепер рівняння (7.15) на  $\psi_m^*(\mathbf{r})$ , проінтегруємо за всіма  $\mathbf{r}$  та скористаємось обставиною, що

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{H} \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \int \left[ \hat{H} \psi_m(\mathbf{r}) \right]^* \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = E_m \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}.$$

Отримаємо

$$(\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m) \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (7.20)$$

Підставляючи (7.17) та (7.19) у (7.20) та використовуючи ортонормованість атомних хвильових функцій

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn},$$

приходимо до задачі на власні значення

$$\begin{aligned} (\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m) b_m = & -(\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m) \sum_n \left( \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{kR}} d^3 \mathbf{r} \right) b_n + \\ & + \sum_n \left( \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{kR}} d^3 \mathbf{r} \right) b_n + \\ & + \sum_n \left( \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{kR}} d^3 \mathbf{r} \right) b_n. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Видно, що перший і третій інтеграли в правій частині (7.21) малі, оскільки містять інтеграли, в які входять хвильові функції, що належать до різних атомів. Другий інтеграл малий, оскільки містить

потенціал  $\Delta U(\mathbf{r})$ , який не є малим лише в тій частині простору, де малі  $\psi_n(\mathbf{r})$ . Отже, ліва частина  $(\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m)b_m$  завжди мала. Тобто малим є або  $\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m$ , або  $b_m$ . Іншими словами, якщо енергія  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  близька до енергії атомного рівня, то  $b_m$  можуть бути не малі. Якщо  $\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m$  великі, то відповідні  $b_m$  можна відкинути через їх малість. Отже, відкидаючи  $b_m$  з  $m \neq n$ , отримуємо, що в методі сильного зв'язку функції Ваньє заміняються на атомні функції.

В результаті отримуємо енергію

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_n - \frac{\sum_{\mathbf{R}} \gamma(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} + \beta}{1 + \sum_{\mathbf{R}} \alpha(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}, \quad (7.22)$$

де

$$\beta \equiv -\int \Delta U(\mathbf{r}) |\psi_n(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}; \quad \alpha(\mathbf{R}) \equiv \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3\mathbf{r};$$

$$\gamma(\mathbf{R}) \equiv \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3\mathbf{r}; \quad \alpha(\mathbf{R}) = \alpha(-\mathbf{R}).$$

Взявши в (7.22)  $\mathbf{R}$ , що відносяться до найближчих сусідів отримаємо результат у наближенні сильного зв'язку. Наприклад, нехтуючи малими поправками з  $\alpha$ , отримаємо

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_n - \beta - \sum_{\mathbf{R}} \gamma(\mathbf{R}) \cos \mathbf{k}\mathbf{R}. \quad (7.23)$$

Спектр  $\varepsilon(\mathbf{k})$  в (7.23) залежить від структури кристала. Наприклад, для простої кубічної ґратки, сума в (7.23) включає 6 атомів

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_n - \beta - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (7.24)$$

В об'ємноцентрованій кубічній ґратці, підсумовуючи внески від усіх найближчих сусідів, отримаємо з (7.23)

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_n - \beta - 8\gamma \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}. \quad (7.25)$$

Звернемо увагу, що спектр  $\varepsilon(\mathbf{k})$  має ту ж симетрію, що і сам кристал. Наприклад, якщо кристал має центр симетрії, то виконується співвідношення  $\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{k})$ . Як видно, з (7.23), а також з наближення слабкого зв'язку (7.13), закон дисперсії має нульовий нахил  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}}$  поблизу межі зони Бриллюена.

Висновок з двох протилежних підходів до обчислення спектра однаковий:

- ❖ в наближенні сильного зв'язку, при зближенні атомів, атомні рівні розщеплюються в дозволені енергетичні зони;
- ❖ в наближенні слабкого зв'язку з'являються заборонені зони енергії, що відокремлюють дозволені зони.

Отже, енергетичний спектр має зонний характер: чергуються заборонені зони енергії та дозволені зони енергії з законом дисперсії  $\varepsilon(\mathbf{k})$ . Відмінності спектрів у двох розглянутих граничних випадках є не якісними, а лише кількісними: при слабкому зв'язку дозволені зони виявляються більше заборонених, а в границі сильного зв'язку, навпаки, дозволені зони менше заборонених.

**Динаміка блохівських електронів.** З'ясуємо тепер, як пов'язана швидкість електрона  $\langle \dot{\mathbf{r}} \rangle$  зі спектром  $\varepsilon(\mathbf{k})$ .

Обчислимо спочатку вигляд оператора  $\hat{\mathbf{r}}$  в імпульсному уявленні, для чого розкладемо довільну функцію  $\psi$ , на яку діє оператор  $\hat{\mathbf{r}}$ , за блохівськими функціями,  $\psi = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \psi_{s\mathbf{k}} d^3\mathbf{k}$ .

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \hat{\mathbf{r}} \psi_{s\mathbf{k}} d^3\mathbf{k} = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \left( -i \frac{\partial \psi_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\partial u_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right) d^3\mathbf{k}. \quad (7.26)$$

Потім перший член проінтегруємо по частинам, а в другому розкладемо періодичну функцію  $\frac{\partial u_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$  по  $u_{s'\mathbf{k}}$  з тим же  $\mathbf{k}$ :

$$\frac{\partial u_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = -i \sum_{s'} \langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle u_{s'\mathbf{k}}.$$

Тоді

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int \left[ i \frac{\partial c_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + \sum_{s'} \langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle c_{s'\mathbf{k}} \right] \psi_{s\mathbf{k}} d^3\mathbf{k}. \quad (7.27)$$

Оскільки за визначенням

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int (\mathbf{r}c_{s\mathbf{k}}) \psi_{s\mathbf{k}} d^3\mathbf{k},$$

то

$$\hat{\mathbf{r}} \equiv i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \hat{\Omega}, \quad (7.28)$$

де  $\hat{\Omega}$  задається матрицею  $\langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle$ . Оператор  $\hat{\Omega}$  діагональний за  $\mathbf{k}$ , тому комутує з  $\hat{\mathbf{k}}$ .

Обчислимо оператор швидкості:  $\hat{\mathbf{v}} = -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H} \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H} \right]$ . Обчислюючи комутатор, отримуємо:

$$\hat{\mathbf{v}} = -\frac{i}{\hbar} \left( \varepsilon_s(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \varepsilon_s(\mathbf{k}) \right) + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon_s(\mathbf{k}) - \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})] \langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle. \quad (7.29)$$

Перший член дає  $\frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}}$ , другий перетворюється в нуль при  $s = s'$ . Отже, середня швидкість в зоні  $s$ , що описується діагональним матричним елементом, має вигляд

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} = \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{p}}, \quad (7.30)$$

як в класичній фізиці. Більш того, в квазікласичній границі, у (7.29)  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$  велике, оскільки характерні зміни хвильового вектора  $\Delta \mathbf{k}$  малі у випадку плавних та повільних збурень, що не викликають між-атомні переходи. Тобто  $\hat{\Omega}$  можна відкинути порівняно з  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$ . У

результаті в квазікласичній границі отримуємо для блохівського електрона такий же зв'язок квазіімпульсу з координатою, як для імпульсу з координатою для звичайного електрона. Звідси, також впливають правила комутації як в звичайній квантовій механіці і можливість розглядати  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  як оператор. В  $\mathbf{r}$ -просторі кінетична енергія має вигляд  $\varepsilon_n(-i\nabla)$ , а рівняння Шредінгера:

$$[\varepsilon_n(-i\nabla) + U(\mathbf{r})]\psi = E\psi. \quad (7.31)$$

Зауважимо, що формула (7.31) справедлива тоді і лише тоді, коли  $U(\mathbf{r})$  – плавна функція, що мало змінюється на міжатомних відстанях.

Можна врахувати й вплив слабкого магнітного поля (такого, що радіус циклотронної орбіти  $\gg a$ ). Відомо, що при градієнтних перетвореннях векторного потенціалу  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f$ , змінюється

хвильова функція  $\psi \rightarrow \psi e^{i\frac{e}{\hbar}f}$ . У слабкому магнітному полі  $\mathbf{H}$  повільно змінюється в просторі  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ . В границі  $\mathbf{H} \rightarrow 0$   $\mathbf{A} = \text{const} \equiv \mathbf{A}_0$ . Перехід від  $\mathbf{A} = 0$  до  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$  відповідає перетворенню з  $f = \mathbf{A}_0 \mathbf{r}$ , тому з функції  $\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  отримуємо

$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}_0\right)\mathbf{r}}$ . Величину  $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}_0$  можна назвати *узагальненим квазіімпульсом*. Отже, хвильові функції мають вигляд

$\psi_{s, \mathbf{K} - \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}_0} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}$ , а відповідні ним значення енергії  $\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s\left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right)$ .

При постійному, але плавному  $\mathbf{A}$ , такі  $\psi$  є хвильовими функціями нульового наближення по  $\mathbf{H}$ , причому  $u_{s\mathbf{k}}$  через  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  вже не періодичні. Енергії  $\varepsilon_s\left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right)$  можна розглядати як оператор, який

утворює гамільтоніан в  $\mathbf{K}$ -уявленні:

$$\hat{H} = \varepsilon_s\left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right) + U(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{r}} = i\frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}$$

або в  $\mathbf{r}$ -уявленні:

$$\hat{H} = \varepsilon_s \left( i\hbar \nabla - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) + U(\mathbf{r}), \quad \hbar\omega \ll \Delta E_g. \quad (7.32)$$

Оператори  $\hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}$  і  $\hat{\mathbf{K}} \equiv \mathbf{K}$  мають ті ж самі правила комутації, що і координати, і узагальнені імпульси вільних частинок. Тому зберігаються всі звичайні правила комутації, наприклад,

$$\hbar \hat{\mathbf{K}} = - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{\mathbf{r}}}, \quad \hat{\mathbf{r}} = - \frac{\partial \hat{H}}{\hbar \partial \hat{\mathbf{K}}} \quad (7.33)$$

і в квазікласичній границі має сенс поняття траєкторії частинки, а також імпульсу та енергії, які залежать від координат. У цьому випадку справедливі звичайні рівняння руху:

$$\hbar \dot{\mathbf{K}} = \mathbf{p} = \mathbf{F}, \quad \mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}. \quad (7.34)$$

**Ефективна маса.** У металах, де зона заповнена на величину порядку половини зони, відіграють роль електрони поблизу енергії, що відповідає межі між заповненими та незаповненими станами в зоні – енергії Фермі. Характерна величина  $\varepsilon_F$  – порядку атомних енергій  $\sim 1 \div 10 \text{ eV} \rightarrow 10^5 \text{ K}$ . Електронний розподіл Фермі

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}} + 1} - \text{сходінка, розмита на величину порядку } T$$

$(T < 10^3 \text{ K} \ll \frac{\varepsilon_F}{k_B})$  (рис. 7.2).

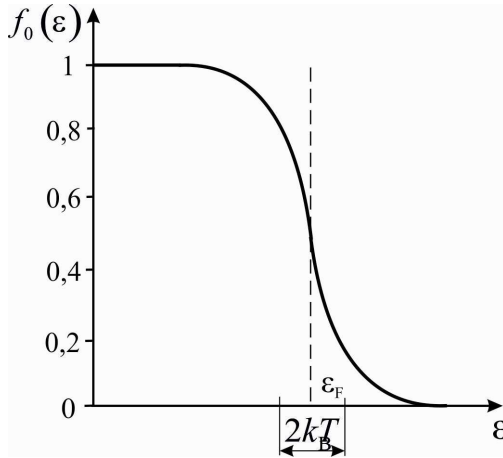


Рисунок 7.2 – Функція розподілу Фермі

Тому всі цікаві процеси, в тому числі провідність, відбуваються за рахунок електронів поблизу  $\epsilon_F$  і можна забути про наявність інших зон. Саме поблизу  $\epsilon_F$  добре визначені квазічастинки і працює теорія фермі-рідини Ландау. В цьому причина того, що дуже часто якісно добре працює і модель вільних електронів Зоммерфельда, в якій метал розглядають як газ, що складається з вільних, але не взаємодіючих електронів. Відхилення від моделі Зоммерфельда, пов'язані із взаємодією квазічастинок, не включеними в наближення самоузгодженого поля, призводять до таких ефектів, як надпровідність.

У напівпровідниках є невелика кількість зайнятих і (або) пустих максимумів поблизу екстремуму зони Бриллюена. Тому важливу роль у процесах переносу відіграє саме ця область енергій. Але поблизу екстремуму, в не виродженій зоні,  $E(\mathbf{p})$  можна розкласти в ряд:

$$E_n(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{\partial^2 E_n}{\partial p_{\alpha}^2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_{0\alpha}), \quad m_{\alpha\beta}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}_{\alpha} \partial \mathbf{p}_{\beta}} \Big|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0}. \quad (7.35)$$

Коефіцієнти розкладання  $m_{\alpha\beta}^{-1}$  утворюють тензор ефективної маси. Поблизу екстремуму в головних осях ця формула набуває більш простого вигляду:

$$E_n(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}_0) = \sum_{\alpha} \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{0\alpha})^2}{2m_{\alpha}},$$

а швидкість електрона визначається як  $v_{\alpha} = \frac{\partial E}{\partial p_{\alpha}} = \frac{p_{\alpha}}{m_{\alpha}}$ .

Ефективну масу можна обчислити і зв'язати з шириною забороненої зони. Це робиться за допомогою підходу, який називають **кп**-методу.

Запишемо рівняння Шредінгера для блохівської хвильової функції у вигляді рівняння для періодичної функції  $u_{pn}(\mathbf{r})$ :

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + \mathbf{p})^2 u_{pn}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u_{pn}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{p})u_{pn}(\mathbf{r}). \quad (7.36)$$

Рівняння для хвильової функції  $u_{0n}(\mathbf{r})$ , що відноситься до екстремуму енергетичної зони, має вигляд

$$\left[ \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{0n}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{p})u_{0n}(\mathbf{r}). \quad (7.37)$$

Формула (7.36) відрізняється від (7.37) членами  $\frac{-i\hbar\nabla\mathbf{p}}{m} + \frac{p^2}{2m}$ , які поблизу екстремумів малі й їх можна обчислити за теорією збурень.

У другому порядку теорії збурень з рівняння (7.36) маємо

$$E_n(\mathbf{p}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_m \frac{|\mathbf{p}\langle u_{m0} | -i\hbar\nabla | u_{n0} \rangle|^2}{E_n(0) - E_m(0)}. \quad (7.38)$$

Оскільки за визначенням ефективної маси

$$E_n(\mathbf{p}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} m_{\alpha\beta}^{-1} p_{\alpha} p_{\beta}, \quad (7.39)$$

з рівняння (7.38) знаходимо

$$m_{\alpha\beta}^{-1} = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_l \frac{\langle u_{n0} | -i\hbar\nabla_\alpha | u_{l0} \rangle \langle u_{l0} | -i\hbar\nabla_\beta | u_{n0} \rangle}{E_n(0) - E_l(0)}. \quad (7.40)$$

## Приклади розв'язування задач

**Приклад 7.1.** Відношення кількості електронів у металі до кількості атомів називають відношенням „ $\frac{e}{a}$ “. Покажіть, що сферична поверхня Фермі торкається граней зони Бриллюена гранецентрованого кубічного кристала, якщо відношення  $\frac{e}{a} = 1,36$ .

### Розв'язання

Для гранецентрованої кубічної ґратки зі сталою ґратки  $a$  оберненою ґраткою є об'ємноцентрована ґратка, стала якої дорівнює  $\frac{4\pi}{a}$ .

На рис. 7.3 наведено перетин меж першої зони Бриллюена (шестикутник) і сферичної поверхні Фермі (коло) площиною ABCD умовної елементарної комірки оберненої ОЦК-ґратки.

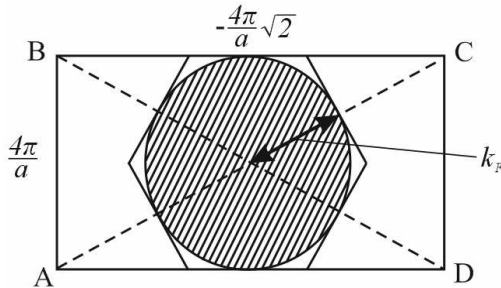


Рисунок 7.3 – Перетин меж першої зони Бриллюена поверхнею Фермі

З рис. 7.3 видно, що ферміївський радіус

$$k_F = \frac{4\pi}{a} \cdot \sqrt{3} \cdot \frac{1}{4} = \frac{\pi\sqrt{3}}{a}.$$

Тоді об'єм  $k$ -простору, обмежений поверхнею Фермі, дорівнює

$$V_F = \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{4}{3} \pi \left( \frac{\pi}{a} \right)^3 3^{\frac{3}{2}}.$$

На кожне дозволене значення  $\mathbf{k}$  припадає елемент об'єму  $k$ -простору

$$\Delta \mathbf{k} = \left( \frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{8\pi^3}{V},$$

де  $V$  – об'єм кристала. Оскільки з кожним дозволеним вектором  $\mathbf{k}$  пов'язані два одноелектронні стани (по одному для кожного значення проекції спіна), то при розміщенні всередині сфери Фермі  $N$  електронів виконуватиметься умова

$$N = 2 \frac{4}{3} \pi k_F^3 \frac{V}{8\pi^3} = \frac{4}{3} \pi \left( \frac{\pi}{a} \right)^3 3^{\frac{3}{2}} \frac{V}{8\pi^3}.$$

Звідси концентрація вільних електронів

$$n_e = \frac{8}{3} 3^{\frac{3}{2}} \frac{\pi}{8a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{a^3}. \quad (1)$$

На об'єм однієї умовної елементарної комірки ГЦК-гратки із сталою гратки  $a$  припадає 4 атоми. Звідси концентрація атомів дорівнює

$$n = \frac{4}{a^3}. \quad (2)$$

З виразів (1) і (2) маємо:

$$\frac{e}{a} = \frac{n_e}{n} = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} = 1,36.$$

Відповідь:  $\frac{e}{a} = 1,36$ .

**Приклад 7.2.** Отримайте рівняння для коефіцієнтів розкладання хвильової функції за плоскими хвилями в періодичному потенціалі.

*Розв'язання*

Періодичний потенціал  $U(x) = \sum_G U_G e^{iGx}$ , де  $G$  – вектор оберненої ґратки.

Хвильову функцію  $\psi(x)$  можна представити рядом Фур'є, у вигляді суми за всіма значеннями хвильового вектора, дозволеним граничною умовою

$$k = \frac{2\pi n}{L},$$

а саме у вигляді

$$\psi(x) = \sum_k C_k e^{ikx}. \quad (1)$$

Визначимо коефіцієнти  $C_k$  в розкладанні Фур'є. Підставимо розкладання для хвильової функції (1) в рівняння Шредінґера:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (3)$$

де

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_G U_G e^{iGx}.$$

Отже,

$$\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) \right] \psi(x) = E\psi(x),$$

або

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k (-k^2) C_k e^{ikx} + \sum_G \sum_k U_G e^{iGx} C_k e^{ikx} &= E \sum_k C_k e^{ikx} ; \\
\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 C_k e^{ikx} + \sum_G \sum_k U_G C_{k+G} e^{i(k+G)x} &= E \sum_k C_k e^{ikx} . \quad (4)
\end{aligned}$$

Скористаємось умовою ортогональності різних Фур'є-компонент:

$$\int e^{-ik'x} e^{ikx} dx = L \delta_{kk'} .$$

Помножимо обидві частини рівняння (4) на  $e^{-ik'x}$  та проінтегруємо по  $dx$ :

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 C_k \int e^{-ik'x} e^{ikx} dx + \sum_G \sum_k U_G C_{k+G} \int e^{-ik'x} e^{ikx} e^{iGx} dx &= \\
= E \sum_k C_k \int e^{-ik'x} e^{ikx} dx .
\end{aligned}$$

Тоді наше рівняння запишеться у вигляді:

$$\frac{\hbar^2}{2m} k'^2 C_{k'} + \sum_G U_G C_{k'-G} = E C_{k'} . \quad (5)$$

Вводячи параметр  $\lambda_k \equiv \frac{\hbar^2}{2m} k^2$  та підставляючи його в рівняння (5), отримаємо:

$$(\lambda_k - E) C_k + \sum_G U_G C_{k-G} = 0 . \quad (6)$$

З виразу (6) нескладно виразити коефіцієнти розкладання хвильової функції за плоскими хвилями в періодичному потенціалі:

$$C_k = \frac{\sum_G U_G C_{k-G}}{E - \lambda_k} .$$

Відповідь: 
$$C_k = \frac{\sum_G U_G C_{k-G}}{E - \lambda_k}.$$

**Приклад 7.3.** Покажіть, що середня швидкість електронів у періодичному потенціалі на рівні, заданому номером зони  $n$  та хвильовим вектором  $\mathbf{k}$  визначається виразом:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}),$$

тобто не залежить від часу. Визначте тензор ефективних мас.

*Розв'язання*

Знайдемо спочатку похідні  $\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i}$ ,  $\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j}$ , помічаючи, що вони

є коефіцієнтами при лінійному та квадратичному по  $q$  членам розкладання:

$$\varepsilon_n(k+q) = \varepsilon_n(k) + \sum_i \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i} q_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + O(q^3), \quad (1)$$

а  $\varepsilon_n(k+q)$  – власне значення оператора  $\hat{H}_{k+q}$ . З теорії збурень

$$\hat{H}_{k+q} = \hat{H}_k + \frac{\hbar^2}{m} q(-i\nabla + k) + \frac{\hbar^2}{2m} q^2.$$

Якщо  $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}$  і нормовані власні вектори, а також власні значення визначаються рівнянням

$$\hat{H}^0 \Psi_n = E_n^0 \Psi_n,$$

то з точністю до другого порядку по  $\hat{V}$  оператор  $\hat{H}$  має такі власні значення:

$$E_n = E_n^0 + \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\mathbf{r} + \sum_{n' \neq n} \frac{\int \psi_n^* \hat{V} \psi_{n'} d\mathbf{r}}{E_n^0 - E_{n'}^0} + \dots \quad (2)$$

З (1) і (2) випливає, що

$$\sum_i \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i} q_i = \sum_i \int u_{nk}^* \frac{\hbar^2}{m} q_i (-i\nabla + k) u_{nk} d\mathbf{r},$$

де інтегрування ведеться по одній елементарній комірниці. Отже,

$$\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{m} \int u_{nk}^* (-i\nabla + k) u_{nk} d\mathbf{r}.$$

Якщо виразити останній результат через функції Блоха

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

отримаємо:

$$\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k} = -i \frac{\hbar^2}{m} \int \psi_{nk}^* \nabla \psi_{nk} d\mathbf{r}.$$

Оскільки величина  $-i \frac{\hbar}{m} \nabla$  представляє собою оператор швидкості,

то величина  $\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})$  є середньою швидкістю електрона на блохівському рівні, що задається номером зони  $n$  та хвильовим вектором  $\mathbf{k}$ :

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}). \quad (4)$$

Знайдемо тензор ефективних мас. Для цього обчислимо  $\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j}$ . Рівняння (1) і (2) дають:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \int u_{nk}^* \frac{\hbar^2}{m} q (-i\nabla + k) u_{n'k} d\mathbf{r} \right|^2}{\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k}}. \quad (5)$$

Використовуючи вираз (3), перепишемо (5) у вигляді:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \langle nk | -i\nabla \frac{\hbar^2}{m} q | n'k \rangle \right|^2}{\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k}};$$

$$q^2 = \sum_{i,j} q_i q_j \delta_{ij}.$$

Отже,

$$\sum_{i,j} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j} q_i q_j \delta_{ij} + \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^2 \times$$

$$\times \sum_{n' \neq n} \frac{\langle nk | -i\nabla_i | n'k \rangle \langle n'k | -i\nabla_j | nk \rangle + \langle nk | -i\nabla_j | n'k \rangle \langle n'k | -i\nabla_i | nk \rangle}{\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k}}.$$

Таким чином, для тензора ефективних мас будемо мати:

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{2m} \delta_{ij} + \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \times$$

$$\times \sum_{n' \neq n} \frac{\langle nk | -i\nabla_i | n'k \rangle \langle n'k | -i\nabla_j | nk \rangle + \langle nk | -i\nabla_j | n'k \rangle \langle n'k | -i\nabla_i | nk \rangle}{\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k}}.$$

*Відповідь:* середня швидкість електронів у періодичному потенці-

алі:  $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})$ ; тензор ефективних мас:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{2m} \delta_{ij} + \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \times \\ \times \sum_{n' \neq n} \frac{\langle nk | -i\nabla_i | n'k \rangle \langle n'k | -i\nabla_j | nk \rangle + \langle nk | -i\nabla_j | n'k \rangle \langle n'k | -i\nabla_i | nk \rangle}{\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k}}.$$

**Приклад 7.4.** Покажіть, що у випадку, коли рух електрона в кристалі можна розглядати як поширення плоскої хвилі  $e^{ikr}$ , квант  $\hbar\mathbf{k}$  відповідає імпульсу. Доведіть, що коли на кристал діє зовнішнє електричне поле, швидкість зміни імпульсу в залежності від часу така, що електрон можна розглядати як частинку, обернена маса якої є тензорною величиною з компонентами

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}.$$

#### Розв'язання

Якщо плоска хвиля  $e^{i(\omega t - kx)}$  поширюється у розсіюючому середовищі, її фазова швидкість  $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$ , а групова швидкість  $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$ . Хвильова механіка дозволяє інтерпретувати те ж саме явище в термінах локалізованих частинок за умови, що таку частинку ми розглядаємо як хвильовий пакет; локалізація у просторі досягається, якщо вважати хвильовий пакет суперпозицією багатьох плоских хвиль, а середня швидкість частинки при цьому ідентична груповій швидкості хвиль.

Для тривимірного випадку вищенаведене співвідношення для групової швидкості набуває вигляду

$$\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega.$$

Для плоскої хвилі імпульс визначається співвідношенням

$$\hbar\mathbf{k} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} e^{-i(\omega t - kx)},$$

а енергія

$$E = \hbar\omega .$$

Швидкість хвильового пакету може бути записана у вигляді

$$\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{p}} E = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E .$$

Якщо зонна структура кристалу повністю відома, тобто відомі всі значення  $E$  для кожного  $\mathbf{k}$ , то, використовуючи вищенаведену формулу у випадку стаціонарного стану можна отримати середню швидкість.

Якщо електрон знаходиться у зовнішньому електричному полі  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ , то

$$\frac{dE}{dt} = e\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{v} = e\boldsymbol{\mathcal{E}} \left( \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \right) ;$$

$$dE = e\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{v} = e\boldsymbol{\mathcal{E}} \left( \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \right) dt = e \nabla_{\mathbf{k}} E \cdot d\mathbf{k} ;$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e\boldsymbol{\mathcal{E}} .$$

Останній результат вказує на те, що реакція на дію зовнішньої сили така, ніби електрон має імпульс  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ .

Вираз для прискорення має вигляд

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \left( \frac{dE}{dt} \right) = \frac{e}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}} (\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} E) .$$

Порівнюючи цей результат із рівнянням руху, можна записати компоненти прискорення у вигляді

$$\frac{dv_i}{dt} = e \sum_{j=1}^3 \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} E_j ,$$

де компоненти тензора ефективних мас дорівнюють

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}.$$

Відповідь:  $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}.$

**Приклад 7.5.** Нижня межа зони провідності вісмуту характеризується тензором обернених ефективних мас

$$\begin{pmatrix} \alpha_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ 0 & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{pmatrix}.$$

Знайдіть компоненти цього тензора і визначте характер енергетичних поверхонь поблизу нижньої межі зони провідності.

*Розв'язання*

За умовою задачі  $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \alpha_{ij}$ . Тому

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} m_{ij}^* = E = \alpha_{ij} m_{ij},$$

де

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ — одинична матриця.}$$

Тоді компоненти тензора ефективних мас  $m_{ij}^* = \alpha_{ij}^{-1}$ , де  $\alpha_{ij}^{-1}$  — обернена матриця

$$m_{ij}^* = \alpha_{ij}^{-1} = \frac{1}{\|\alpha_{ij}\|} \begin{pmatrix} \alpha'_{xx} & \alpha'_{xy} & \alpha'_{xz} \\ \alpha'_{yx} & \alpha'_{yy} & \alpha'_{yz} \\ \alpha'_{zx} & \alpha'_{zy} & \alpha'_{zz} \end{pmatrix}; \quad \|\alpha_{ij}\| = \alpha_{xx} (\alpha_{yy} \alpha_{zz} - \alpha_{yz} \alpha_{zy});$$

$$\alpha'_{xx} = \alpha_{yy} \alpha_{zz} - \alpha_{yz} \alpha_{zy}; \quad \alpha'_{xy} = \alpha'_{xz} = \alpha'_{yx} = \alpha'_{zx} = 0;$$

$$\alpha'_{yy} = \alpha_{xx} \alpha_{zz}; \quad \alpha'_{zz} = \alpha_{xx} \alpha_{yy}; \quad \alpha'_{yz} = \alpha_{xx} \alpha_{zy}; \quad \alpha'_{zy} = \alpha_{xx} \alpha_{yz}.$$

Тому

$$m_{xx} = \frac{1}{\alpha_{xx}}; \quad m_{yy} = \frac{\alpha_{zz}}{\alpha_{yy} \alpha_{zz} - \alpha_{yz} \alpha_{zy}}; \quad m_{zz} = \frac{\alpha_{yy}}{\alpha_{yy} \alpha_{zz} - \alpha_{yz} \alpha_{zy}};$$

$$m_{xy} = m_{xz} = m_{yx} = m_{zx} = 0;$$

$$m_{yz} = \frac{\alpha_{zy}}{\alpha_{yy} \alpha_{zz} - \alpha_{yz} \alpha_{zy}}; \quad m_{zy} = \frac{\alpha_{yz}}{\alpha_{yy} \alpha_{zz} - \alpha_{yz} \alpha_{zy}}$$

Щоб визначити вид енергетичних поверхонь, потрібно розкласти  $E(\mathbf{k})$  за степенями  $\mathbf{k}$  у ряд Тейлора в нижній частині зони

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} k_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} k_i k_j.$$

Припустимо, що енергія відрховується від нижнього краю зони ( $E_0 = 0$ ). Тоді  $\sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} k_i = 0$ , оскільки  $E(k)$  в загальному випадку є парною функцією. Внаслідок того, що

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = \hbar^2 \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \hbar^2 \alpha_{ij},$$

можна записати

$$E = \frac{1}{2} \hbar^2 (\alpha_{xx} k_x^2 + \alpha_{yy} k_y^2 + \alpha_{zz} k_z^2 + \alpha_{yz} k_y k_z + \alpha_{zy} k_z k_y).$$

Отже, поверхні постійної енергії мають форму еліпсоїдів.

$$\text{Відповідь: } m_{xx} = \frac{1}{\alpha_{xx}}; \quad m_{yy} = \frac{\alpha_{zz}}{\alpha_{yy}\alpha_{zz} - \alpha_{yz}\alpha_{zy}}; \quad m_{zz} = \frac{\alpha_{yy}}{\alpha_{yy}\alpha_{zz} - \alpha_{yz}\alpha_{zy}};$$

$$m_{xy} = m_{xz} = m_{yx} = m_{zx} = 0; \quad m_{yz} = \frac{\alpha_{zy}}{\alpha_{yy}\alpha_{zz} - \alpha_{yz}\alpha_{zy}};$$

$m_{zy} = \frac{\alpha_{yz}}{\alpha_{yy}\alpha_{zz} - \alpha_{yz}\alpha_{zy}}$ ; поверхні постійної енергії мають форму еліпсоїдів:

$$E = \frac{1}{2}\hbar^2 (\alpha_{xx}k_x^2 + \alpha_{yy}k_y^2 + \alpha_{zz}k_z^2 + \alpha_{yz}k_yk_z + \alpha_{zy}k_zk_y).$$

**Приклад 7.6.** Знайдіть розриви на краях зон Бриллюена у спектрі енергії електрона лінійного одновимірного кристала в наближенні слабого зв'язку.

*Розв'язання*

Рівняння Шредінгера для електрона лінійного атомного ланцюжка з періодом  $a$  і завдовжки  $L = Na$  має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \quad (1)$$

де  $U(x)$  – енергія електрона у внутрішньокристалічному полі.

В наближенні слабого зв'язку при  $U(x) = 0$  (нульове наближення теорії збурень) електрон вважається вільним. Тоді розв'язки рівняння (1) будуть

$$\psi_{1,2}^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm ikx}; \quad E^{(0)}(\pm k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}.$$

Тому хвильова функція нульового наближення записується як лінійна комбінація функцій  $\psi_{1,2}^{(0)}(x)$ .

$$\Psi^{(0)}(x) = C_1 \Psi_1^{(0)}(x) + C_2 \Psi_2^{(0)}(x).$$

Рівень енергії  $E^{(0)}(\pm k)$  двократно вироджений. Отже, в першому порядку теорії збурень енергія електрона  $E$  визначається з характеристичного рівняння:

$$\begin{vmatrix} E^{(0)} - E & U_{12} \\ U_{21} & E^{(0)} - E \end{vmatrix} = (E^{(0)} - E)^2 - |U_{12}|^2 = 0, \quad (2)$$

де

$$U_{12} = \int \Psi^{(0)*} U(x) \Psi^{(0)} dx = \frac{1}{Na} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-2ikx} U(x) dx.$$

Записавши координату  $x$  у вигляді  $x = na + \rho$ , де  $na$  – координата ядра атому з номером  $n$ , а  $\rho$  – координата електрона відносно ядра, отримаємо

$$U_{12} = \frac{1}{Na} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-2ik(na+\rho)} U(na+\rho) d\rho = \frac{1}{Na} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} e^{-2ikan} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-2ik\rho} U(\rho) d\rho.$$

Враховуючи, що

$$\frac{1}{N} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} e^{-2igan} = \begin{cases} 1, & q = g = \frac{2\pi m}{a}, m \in \mathbb{Z}; \\ 0, & q \neq g, \end{cases}$$

знаходимо

$$U_{12} = \begin{cases} \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} e^{-2ik\rho} U(\rho) d\rho \neq 0, & 2k = g = \frac{2\pi m}{a}, m \in \mathbb{Z}; \\ 0, & 2k \neq g. \end{cases}$$

Отже,  $U_{12} \neq 0$  при  $k = \frac{g}{2} = \frac{\pi m}{a}$ , тобто на краях зон Бриллюєна. Із (2) випливає, що

$$E = E^{(0)} \pm \sqrt{|U_{12}|^2}.$$

Таким чином, на краях зони Бриллюєна енергія електрона має розрив завширшки  $\delta E = \sqrt{|U_{12}|^2}$ . Це свідчить про зонну структуру спектра енергії електрона в одновимірному кристалі.

*Відповідь:*  $\delta E = \sqrt{|U_{12}|^2}$ .

**Приклад 7.7.** Нехай електрон рухається в періодичному потенціалі, утвореному  $\delta$ -функціями Дірака

$$U(x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na),$$

де  $a$  – період ґратки;  $\Omega$  – сталий коефіцієнт.  
Знайдіть дозволені енергетичні зони.

*Розв'язання*

Хвильова функція знаходиться з рівняння Шредінґера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi = E \psi,$$

яке зручно переписати у вигляді

$$\psi'' + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0. \quad (1)$$

Розв'язками цього рівняння є функції Блоха

$$\psi(x+a) = e^{iKa} \psi(x). \quad (2)$$

Розглянемо рівняння (1) на інтервалі  $0 < x < a$ . На цьому інтервалі  $U = 0$  і розв'язок має вигляд:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}. \quad (3)$$

На інтервалі  $a < x < 2a$  вигляд розв'язку знаходимо за допомогою (2):

$$\psi(x) = e^{iKa} \left( Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)} \right). \quad (4)$$

Для знаходження коефіцієнтів  $A$  і  $B$  необхідно скористатися умовами на межі  $x = a$ , які мають вигляд:

$$\begin{aligned} \psi(a+0) &= \psi(a-0), \\ \psi'(a+0) &= \psi'(a-0) + 2\Omega\psi(a). \end{aligned} \quad (5)$$

Перша з цих умов визначає неперервність хвильової функції на межі поділу, а друге – величину стрибка похідної.

Походження другої граничної умови в (5) можна пояснити так. Вважаючи функцію  $\psi(x)$  обмеженою, проінтегруємо рівняння (1) за інтервалом  $a - \xi < x < a + \xi$ , де величина  $\xi$  в подальшому буде прямувати до нуля. Це дає

$$\psi'(a + \xi) - \psi'(a - \xi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[ 2\xi E - \frac{\hbar^2 \Omega}{m_e} \right] \psi(a) = 0.$$

Звідси випливає, що при  $\xi \rightarrow 0$  маємо другу умову з (5).

Підставляючи вирази (3) та (4) у співвідношення (5), отримаємо лінійну однорідну систему двох алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів  $A$  і  $B$ :

$$\begin{cases} e^{iKa} (A + B) = (Ae^{ika} + Be^{-ika}); \\ iKe^{iKa} (A - B) = ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) + 2\Omega(Ae^{ika} + Be^{-ika}). \end{cases} \quad (6)$$

Перепишемо систему рівнянь (6) у більш зручному вигляді:

$$\begin{cases} (e^{iKa} - e^{ika}) + (e^{iKa} - e^{-ika})B = 0; \\ (iKe^{iKa} - ike^{ika} - 2\Omega e^{iKa})A + (-iKe^{iKa} + ike^{-ika} - 2\Omega e^{-iKa})B = 0. \end{cases}$$

Умова сумісності цих рівнянь дає рівняння для знаходження характеристичного показника  $K$  :

$$\cos Ka = \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka .$$

Це рівняння визначає зв'язок показника  $K$  з енергією стану  $E$  , яка відповідно до (3) дорівнює

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} (ka)^2 ,$$

тобто визначає залежність  $E = E(k)$ . Внаслідок того, що

$$|\cos Ka| \leq 1$$

Енергетичний спектр складається з серії дозволених зон, що відокремлюються забороненими зонами.

*Відповідь:*  $\cos Ka = \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka .$

**Приклад 7.8.** Дослідіть рух електронів у одновимірному періодичному потенціалі. Розглянути випадок сильної та слабкої проникності бар'єра.

*Розв'язання*

Нехай йони знаходяться в стані спокою в точках мінімуму одновимірному періодичного потенціалу  $U(x)$ , що визначають нульове значення енергії (рис. 7.4)

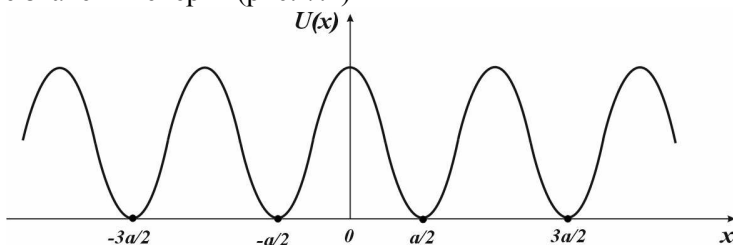


Рисунок 7.4 – Одновимірний періодичний потенціал  $U(x)$

Будемо розглядати періодичний потенціал як суперпозицію потенціальних бар'єрів  $v(x)$  завширшки  $a$ , центри яких знаходяться в точках  $x = \pm na$  (рис. 7.5):

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x - na). \quad (1)$$

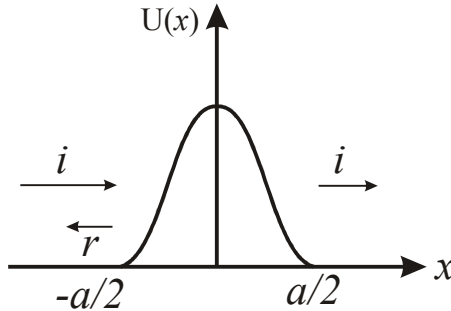


Рисунок 7.5 – Частинки, що падають ліворуч на один із бар'єрів, що відокремлюють один від одного сусідні йони в періодичному потенціалі

На рис. 7.5 хвилі, що падає, проходить та відбивається позначені стрілками, паралельними напрямкам поширення, причому їх довжина пропорційна відповідним амплітудам.

Нехай  $U(x) = U(-x)$ . Розглянемо електрон, що падає зліва на потенціальний бар'єр та має енергію

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}.$$

Внаслідок того, що  $v(x) = 0$  при  $|x| \geq \frac{a}{2}$ , в цих областях хвильова функція  $\psi_l(x)$  матиме вигляд:

$$\psi_l(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x \leq -\frac{a}{2}; \\ te^{ikx}, & x \geq \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (2)$$

Через парність потенціалу  $U$  функція  $\psi_r(x) = \psi_l(-x)$  також буде розв'язком рівняння Шредінгера з енергією  $\varepsilon$ . З (2) випливає, що функція  $\psi_r(x)$  має вигляд (описує частинку, що падає на бар'єр праворуч):

$$\psi_r(x) = \begin{cases} te^{-ikx}, & x \leq -\frac{a}{2}; \\ e^{-ikx} + re^{ikx}, & x \geq \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (3)$$

Оскільки  $\psi_l(x)$  та  $\psi_r(x)$  – два незалежні розв'язки рівняння Шредінгера для випадку одного бар'єру, що відповідають однако- вій енергії будь-який інший розв'язок для тієї ж самої енергії буде їх лінійною комбінацією:

$$\psi(x) = A\psi_l(x) + B\psi_r(x), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}. \quad (4)$$

Врахуємо також, що відповідно до теореми Блоха (7.6) функ- цію  $\psi$  можна обирати так, щоб для деякого  $k$  виконувалося спів- відношення:

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= e^{iKa} \psi(x), \\ \psi'(x+a) &= e^{iKa} \psi'(x). \end{aligned} \quad (5)$$

Тоді при  $x = -\frac{a}{2}$  з (2) – (5) отримуємо:

$$\cos Ka = \frac{t^2 - r^2}{2t} e^{ika} + \frac{1}{2t} e^{-ika}. \quad (6)$$

Нехай  $t = |t|e^{i\delta}$ , де  $\delta$  – фазовий зсув (зміна фази хвилі, що пройшла, відносно падаючої хвилі). З умови збереження кількості електронів випливає, що сума ймовірностей проходження та відбивання повинна дорівнювати одиниці:

$$|t|^2 + |r|^2 = 1; \quad (7)$$

$$r = \pm i|r|e^{i\delta}. \quad (8)$$

Підставляючи (7) – (8) в рівняння (6), отримаємо

$$\cos Ka = \frac{\cos(ka + \delta)}{|t|}. \quad (9)$$

Оскільки  $|t| < 1$  завжди, але при великих  $k$   $|t| \rightarrow 1$ , права частина виразу (9), що розглядається як функція  $k$  поводить себе так, як зображено на рис. 7.6. Для даного  $K$  дозволені значення  $k$  (і відповідно дозволені енергії  $\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ ) визначаються перетином кривої на рис. 7.6 з горизонтальною лінією, проведеною на висоті  $\cos Ka$ . Зазначимо, що значення  $k$ , розташовані поблизу тих, в яких виконується умова

$$ka + \delta = \pi n \quad (10)$$

дають

$$\frac{|\cos(ka + \delta)|}{|t|} > 1,$$

тому вони заборонені для будь-яких  $K$ .

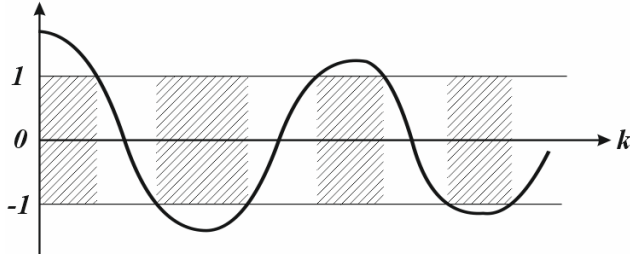


Рисунок 7.6 – Характерний вигляд функції  $\frac{|\cos(ka + \delta)|}{|t|} > 1$  (області заборонених значень  $k$  заштриховані)

У випадку, коли бар'єр є дуже слабким:  $|t| \approx 1$ ,  $|r| \approx 0$ ,  $\delta \approx 0$ .  
Тоді

$$ka = \pi n, \quad k = \frac{\pi n}{a}, \quad \cos Ka = \frac{\cos ka}{|t|}.$$

Знайдемо ширину забороненої зони:

$$\frac{\cos ka}{|t|} = 1, \quad k = \frac{1}{a} \arccos|t| + \frac{\pi n}{a}.$$

$$\Delta \varepsilon_g = \left[ \frac{\hbar^2 \left( \frac{1}{a} \arccos|t| + \frac{\pi n}{a} \right)^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \left( \frac{\pi n}{a} \right)^2}{2m_e} \right] \cdot 2 = \frac{2\pi n \hbar^2}{m_e a^2} \arccos|t|.$$

У випадку, коли бар'єр дуже сильний, тобто  $|t| \approx 0$ ,  $|r| \approx 1$ :  
 $t \rightarrow 0$ , ліва частина лежить у межах  $[-1; 1]$  лише при

$$k \sim \frac{\pi}{2a} \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

тобто ширина забороненої зони велика.

Відповідь:  $\frac{|\cos(ka + \delta)|}{|t|} > 1$ .

**Приклад 7.9.** Розгляньте рух електрона в періодичному потенціалі, що має вигляд (модель Кроніга – Пенні):

$$U = \begin{cases} U_0, & -b \leq x \leq 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq d-b \end{cases} \quad U(x+d) = U(x).$$

Знайдіть енергетичні зони.

*Розв'язання*

В області I (потенціальна яма) рівняння Шредінгера має розв'язок

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx},$$

де  $k \equiv \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}$ .

В області II (потенціальний бар'єр) хвильова функція

$$\psi_2(x) = B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x},$$

де  $\kappa \equiv \frac{\sqrt{2m_e (U_0 - E)}}{\hbar}$ .

Ці функції будуть власними функціями оператора Гамільтона при додатних значеннях  $E$ , тому величина  $k$  є дійсною; але величина  $\kappa$  може бути як дійсною, так і уявною.

Значення  $E$  визначаються граничними умовами при  $x=0$ , де хвильова функція та її похідна повинні бути неперервними, а також вимогою обмежитися класом розв'язків типу блохівських функцій:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_2(-b) = e^{-ikd} \psi_1(d-b),$$

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0}, \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=-b} = e^{-ikd} \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=d-b}.$$

Ці умови дають сумісне рівняння для  $E$  та  $k$  :  
 для  $U_0 > E$  :

$$\cos 2\pi kd = \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \operatorname{sh} \kappa b \sin k(d-b) + \operatorname{ch} \kappa b \cos k(d-b);$$

для  $U_0 < E$  :

$$\cos 2\pi kd = -\frac{|\kappa|^2 + k^2}{2k|\kappa|} \operatorname{sh} |\kappa| b \sin k(d-b) + \operatorname{ch} |\kappa| b \cos k(d-b).$$

*Відповідь:*

$$\cos 2\pi kd = \begin{cases} \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \operatorname{sh} \kappa b \sin k(d-b) + \operatorname{ch} \kappa b \cos k(d-b), & U_0 > E \\ -\frac{|\kappa|^2 + k^2}{2k|\kappa|} \operatorname{sh} |\kappa| b \sin k(d-b) + \operatorname{ch} |\kappa| b \cos k(d-b), & U_0 < E. \end{cases}$$

**Приклад 7.10.** Отримайте вираз для циклотронної ефективної маси з рівняння руху блохівського електрона поблизу мінімуму енергетичної зони:

$$M \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

де  $M$  – діагональний тензор маси.

*Розв'язання*

За наявності взаємно перпендикулярних однорідних і постійних полів  $\mathbf{E}$  і  $\mathbf{B}$  траєкторії блохівських електронів (між зіткненнями) у реальному просторі є „гвинтовими“ лініями (з поздовжньою віссю, паралельною  $\mathbf{B}$ ), які дрейфують у напрямку, перпендикулярному  $\mathbf{E}$  і  $\mathbf{B}$ . У  $k$ -просторі (розглядається випадок замкнутих орбіт) траєкторії блохівських електронів лежать в площині, перпендикулярній до вектора індукції  $\mathbf{B}$ . Причому ці траєкторії практично співпадають із траєкторіями при  $\mathbf{E} = 0$ , тобто включення поля  $\mathbf{E}$  практично не змінює траєкторію блохівського електро-

на в  $k$ -просторі. Ця обставина дає змогу вважати в рівнянні руху блохівського електрона  $\mathbf{\epsilon} = 0$ :

$$M \frac{d\mathbf{v}(\mathbf{k})}{dt} = -e\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}. \quad (1)$$

З (1) маємо:

$$M_{xx} \frac{dv_x}{dt} = -ev_y B; \quad (2)$$

$$M_{yy} \frac{dv_y}{dt} = -ev_x B; \quad (3)$$

Продиференціювавши рівняння (2), отримаємо:

$$M_{xx} \frac{d^2 v_x}{dt^2} = -eB \frac{dv_y}{dt} \quad (2a)$$

( $M_{xx}$  – одна з констант матеріалу, яка не залежить від  $t$ ).

Підставляючи у вираз (2a)  $\frac{dv_y}{dt}$  з виразу (3), одержимо:

$$\frac{d^2 v_x}{dt^2} + \frac{e^2 B^2}{M_{xx} M_{yy}} v_x = 0. \quad (4)$$

Одержане диференціальне рівняння є відомим рівнянням гармонічних коливань змінної  $v_x$  із частотою

$$\omega = \frac{eB}{\sqrt{M_{xx} M_{yy}}} = eB \sqrt{\frac{M_{zz}}{|M|}}, \quad (5)$$

де  $|M|$  – детермінант матриці  $M$  тензора ефективної маси. Частота  $\omega$  з виразу (5) є частотою руху блохівського електрона по замкнутій траєкторії в  $k$ -просторі (або частота обертання по „гвинтовій“ лінії в реальному просторі).

Циклотронна частота для вільного електрона визначається співвідношенням:

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e}. \quad (6)$$

Частота  $\omega$  для блохівських електронів із виразу (5) співпадає за формою із циклотронною частотою  $\omega_c$  для вільних електронів із виразу (6), якщо для блохівських електронів увести поняття циклотронної ефективної маси:

$$m^* = \sqrt{\frac{|M|}{M_{zz}}}.$$

Відповідь:  $\omega = \frac{eB}{m^*}$ , де  $m^* = \sqrt{\frac{|M|}{M_{zz}}}$ .

**Приклад 7.11.** Для вільних електронів  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ . За наявності магнітного поля  $\mathbf{B}$  електрон рухається в  $k$ -просторі по коловій орбіті, перпендикулярною до вектора  $\mathbf{B}$ , з площею кола  $S(\varepsilon, k_z)$  ( $\varepsilon$  і  $k_z$  зберігаються за такого руху). Розрахуйте  $\frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon}$  і покажіть, що загальна формула для періоду руху блохівського електрона в магнітному полі по замкнутій орбіті будь-якої форми

$$T(\varepsilon, k_z) = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon}$$

призводить до виразу  $T = \frac{2\pi m_e}{eB}$ .

*Розв'язання*

Колова орбіта в  $k$ -просторі з постійними  $\varepsilon(\mathbf{k})$  і  $k_z$  ( $\mathbf{B} \parallel \mathbf{k}_z$ ) у випадку вільних електронів лежить на сферичній поверхні (рис. 7.7). Площа, яку охоплює ця орбіта (на рис. 7.7 ця площа заштрихована), дорівнює

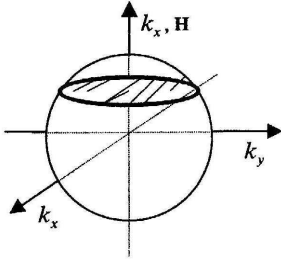


Рисунок 7.7

$$S = \pi(k_x^2 + k_y^2), \quad k_z = \text{const.} \quad (1)$$

Із співвідношень

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2; \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

для  $S$  отримаємо вираз

$$S = \pi(k^2 - k_z^2) = \pi\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\varepsilon - k_z^2\right),$$

Звідки

$$\frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon} = \pi \frac{2m_e}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Підставляючи вираз (2) у загальну формулу для періоду руху блохівського електрона в магнітному полі

$$T(\varepsilon, k_z) = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon},$$

отримаємо:

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \pi \frac{2m_e}{\hbar^2} = \frac{2\pi m_e}{eB} = \frac{2\pi}{\omega_c},$$

де  $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_e}$  – циклотронна частота.

Відповідь:  $T = \frac{2\pi}{\omega_c}; \quad \omega_c \equiv \frac{eB}{m_e}.$

**Приклад 7.11.** Покажіть, що умова квантування Онзагера

$$S(\varepsilon_\nu(k_z), k_z) = (\nu + \lambda) \frac{2\pi eB}{\hbar},$$

де  $S$  – площа, яку охоплює орбіта електрона при дозволеному значенні енергії  $\varepsilon_v$  і постійному значенні  $k_z$ , для вільних електронів безпосередньо дає їх енергетичні рівні

$$\varepsilon_v(k_z) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_z^2 + \left( v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c,$$

якщо прийняти  $\lambda = \frac{1}{2}$ .

### Розв'язання

Умова квантування Онзагера визначає дозволені орбіти блохівських електронів у  $k$ -просторі за наявності магнітного поля:  $S$  – площа, яку охоплює орбіта блохівського електрона;  $\varepsilon_v(k_z)$  – енергія електрона на цій орбіті;  $k_z$  – компонента хвильового вектора, паралельна зовнішньому магнітному полю  $\mathbf{B}$  (є постійною величиною для орбіти);  $v$  – квантове число, яке приймає всі цілі невід'ємні значення;  $\lambda$  – константа, яка не залежить від  $v$ ,  $k_z$ ,  $\mathbf{B}$ .

У випадку вільних електронів дозволені умовою Онзагера орбіти зводяться до колових орбіт, які лежать на поверхні прямого циліндра, – трубки Ландау (рис. 7.8). Зі збільшенням квантового числа  $v$  діаметр трубки Ландау збільшується.

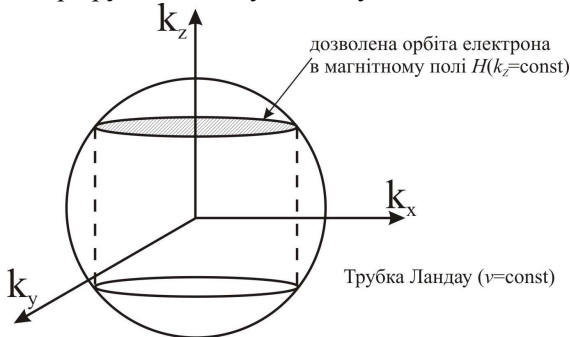


Рисунок 7.8

З виразу для енергії вільного електрона

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

маємо:

$$S = \pi (k_x^2 + k_y^2) = \frac{2\pi m_e \varepsilon}{\hbar^2} - \pi k_z^2.$$

Застосуємо умову Онзагера для знайденого значення  $S$ :

$$\frac{2\pi m_e \varepsilon}{\hbar^2} - \pi k_z^2 = \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi e B}{\hbar}.$$

Звідси визначимо енергію електрона на дозволених орбітах:

$$\varepsilon_\nu(k_z) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_z^2 + \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c,$$

де  $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_e}$  – циклотронна частота.

Отриманий вираз  $\varepsilon_\nu(k_z)$  для вільних електронів співпадає з відомим із квантової механіки виразом для енергетичних рівнів вільного електрона за наявності магнітного поля.

*Відповідь:*  $\varepsilon_\nu(k_z) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_z^2 + \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$ ;  $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_e}$ .

### Задачі для самостійного розв'язування

- 7.1. Доведіть, що функція Ван'є та власні функції оператора імпульсу правильної тримірної ґратки можна одержати одну з одної перетворенням Фур'є. Доведіть також, що функції Ван'є для атомів різних вузлів ґратки ортогональні.
- 7.2. Використовуючи наближення сильного зв'язку, доведіть, що лінійний ланцюжок атомів з одним вільним кінцем може мати

рівні у забороненій зоні, тобто у щілині між нормальними зонами (у тримірному випадку це відповідає врахуванню атомів на поверхні).

- 7.3. Розгляньте енергетичні рівні та поверхневі стани системи, що описана у попередній задачі у випадку, коли поверхневий атом є домішковим.
- 7.4. Доведіть теорему Блоха для тривимірної ґратки.
- 7.5. Для першої зони Бриллюена у випадку примітивної кубічної ґратки порівняйте енергії вільного електрона для хвильового вектора кутів зони та центрів граничних поверхонь зони.
- 7.6. Покажіть, що існування енергетичних розривів на межі зони Бриллюена еквівалентно умові бреггівського відбивання електронних хвиль (розглянути випадок двократного наближеного виродження для вільних електронів поблизу бреггівської площини).
- 7.7. Розглянути різницю між металом, напівпровідником та діелектриком з точки зору структури їхніх енергетичних зон. Схематично зобразіть поверхню Фермі двовимірного кубічного кристала, який має невелику кількість носіїв ефективних зарядів на атом (напівметал).
- 7.8. Покажіть, що для будь-якого стану абсолютно вільного електронного газу групова швидкість вдвічі перевищує фазову. Визначте групову і фазову швидкості в системі, в якій швидкості сферично симетричні, а співвідношення між  $\varepsilon$  та  $\mathbf{k}$  має вигляд:

$$\varepsilon = Ak^2 - Bk^4,$$

і покажіть, що групова і фазова швидкості співпадають, якщо

$$\varepsilon = \frac{2A^2}{9B}.$$

- 7.9. Обчисліть густину енергетичних станів для двовірної системи із законами дисперсії

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n},$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y}.$$

7.10. Обчисліть ефективне число енергетичних станів для двовимірної системи з квадратичним законом дисперсії. Оцініть  $N_c$  за температури  $T = 300$  К, вважаючи, що  $m_x$  та  $m_y$  дорівнюють масі вільного електрона.

7.11. Обчисліть густину станів  $N(\varepsilon)$  та  $N_c$  в одновимірному невідродженому електронному газі з законом дисперсії

$$\varepsilon(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

7.12. Закон дисперсії для електронів ізотропний, але непараболічний

$$\varepsilon(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} (1 - \alpha^2 k^2).$$

Знайдіть  $N(\varepsilon)$  в цьому випадку.

7.13. Обчисліть ферміївську швидкість носіїв заряду в металі з одним електроном на елементарну комірку і „одномірним“ законом дисперсії  $\varepsilon = \varepsilon_0 \cos k_z a$ , де  $\varepsilon_0 = 0,5$  еВ,  $a = 3 \text{ \AA}$ .

7.14. Поблизу дна зони провідності електрони підкоряються квадратичному закону дисперсії  $\varepsilon = Ak^2$ , де константа  $A = 5 \cdot 10^{-37}$  Дж  $\cdot$  м<sup>2</sup>. Яка величина ефективної маси електронів?

7.15. Обчисліть при  $T = 0$  К ферміївську енергію, імпульс і швидкість електронів для металу з ізотропним квадратичним законом дисперсії електронів, ефективна маса яких дорівнює 0,8 маси вільного електрона, а концентрація  $10^{29}$  м<sup>-3</sup>.

7.16. Як зміниться інтервал  $\delta\varepsilon$  між сусідніми рівнями енергії вільних електронів у металі, якщо об'єм кристала зменшиться у 10 разів?

- 7.17. Експериментально встановлено, що максимальна енергія електронів провідності в кристалі Літію дорівнює 4,2 еВ. На основі уявлень про вільні електрони визначте ефективну масу носіїв заряду, якщо на кожний атом кристалічної ґратки припадає один електрон. Густина Літію прийміть рівною  $\rho = 533 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .
- 7.18. У наближенні вільних електронів визначте мінімальну відстань від поверхні Фермі до межі зони Бриллюена для одновалентних металів, атоми яких розміщені у вузлах ОЦК і ЦЦК ґраток. В якому випадку відношення цієї відстані до імпульсу Фермі більше?
- 7.19. Нехай  $N$  – кількість атомів в об'ємі металу, що має форму куба з ребром  $l$ , і кожний атом має  $\zeta$  вільних електронів. Отримайте вираз для радіусу сфери Фермі (в  $k$ -просторі) в наближенні вільних електронів.
- 7.20. Нехай  $\mathbf{a} = a_0(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ ;  $\mathbf{b} = a_0(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$ ;  $\mathbf{c} = a_0(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z)$  – вектори основних трансляцій деякої кристалічної ґратки,  $a_0 = \text{const}$ . Визначте радіус сфери Фермі, об'єм якої співпадає з об'ємом першої зони Бриллюена.
- 7.21. Використовуючи розкладання хвильової функції в ряд за плоскими хвилями, знайдіть вигляд детермінантного рівняння для визначення власних значень енергії  $\varepsilon(k)$  у випадку одновимірного кристала. Знайдіть власні значення енергії в три- та п'ятихвильовому наближенні, якщо в такому кристалі потенціал має вигляд

$$U(x) = -3 - 2 \cos 2x.$$

Дослідіть профіль хвильових функцій за різних значень квазіімпульсу для двох нижніх дозволених енергетичних зон.

- 7.22. Скориставшись наближенням слабкого зв'язку, знайдіть зонний спектр та хвильові функції для електрона в одновимірній ґратці з потенціалом

$$U(x) = -3 - 2 \cos 2x$$

(включаючи стани поблизу межі зони Бриллюена).

- 7.23. Використовуючи наближення сильного зв'язку для опису електронів у простій, гранецентрованій та об'ємноцентрованій кубічних ґратках і вважаючи при цьому, що  $s$ -функції можуть бути взяті як електронні атомні хвильові функції, знайдіть залежність  $\varepsilon(k)$  для нижньої дозволеної енергетичної зони. Покажіть, що енергетичні поверхні в таких системах при  $k=0$  мають сферичну симетрію. Визначте ефективну масу електронів поблизу  $k \rightarrow 0$ .
- 7.24. Для деякого ізотропного напівпровідника закон дисперсії для електрона в зоні провідності має вигляд

$$\varepsilon(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta E_g^2 + Bk^2} - \frac{1}{2} \Delta E_g,$$

де  $E_c$  – енергія дна зони провідності;  $\Delta E_g$  – ширина забороненої зони;  $m_e$  – маса вільного електрона у вакуумі;  $B > 0$  – стала величина.

Визначте ефективну масу електрона поблизу значення  $k$ .

- 7.25. Виведіть рівняння напівкласичної динаміки електронів у твердому тілі

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e \left[ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right],$$

з рівнянь Гамільтона,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  – локальне електричне поле,  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  – локальне магнітне поле.

- 7.26. Для металів, у яких на межі зони Бриллюена щілина між енергетичними зонами мала, існує ймовірність переходу електронів крізь цю щілину, якщо до неї прикладене магнітне поле; це явище називають магнітним пробієм. Покажіть, що магнітний пробій має місце за умови

$$\frac{\hbar\omega_c \varepsilon_F}{\Delta E_g^2} > 1,$$

де  $\varepsilon_F$  – енергія Фермі;  $\Delta E_g$  – ширина енергетичної щілини;  $\omega_c$  – циклотронна частота.

- 7.27. Розглянемо задачу про екстремальну циклотронну орбіту в площині  $k_x k_y$ , поверхні Фермі для анізотропного твердого тіла. Вираз для енергії Фермі має вигляд  $\varepsilon = \alpha k_x^2 + \beta k_y^2$ . Нехай на тіло діє індукція  $B_z$ . Знайдіть швидкість, з якою змінюється  $k$  при русі по орбіті, якщо  $\alpha \neq \beta$ . Знайдіть орбіту, що описує електрон у реальному просторі для цього випадку.
- 7.28. У наближенні сильного зв'язку знайдіть ефективну масу електрона для лінійного ланцюжка йонів, у якому потенціальна енергія  $U(x)$  складається з атомних потенціалів у вигляді  $\delta$ -функцій.
- 7.29. Розглянемо електрон у натрії. Енергія електрону дорівнює енергії Фермі, а його початкова швидкість лежить у площині  $xy$ . Доведіть, що магнітна індукція  $B_z = 1$  Тл викличе циклотронний рух з радіусом орбіти 6 мкм. В якому співвідношенні знаходяться площа орбіти в реальному просторі (в  $\text{м}^2$ ) з площею орбіти, яка описується у  $\mathbf{k}$ -просторі (в  $\text{м}^{-2}$ )?
- 7.30. Розгляньте одномірний кристал, в якому залежність від хвильового вектора має вигляд

$$E = E_1 + (E_2 - E_1) \sin^2 \frac{ak_x}{2}.$$

Помістіть у цю зону один електрон, вважаючи, що він не розсіюється. Розгляньте поведінку ефективної маси електрону, його швидкості і положення електрону в реальному просторі під дією незалежного від часу електричного поля, вважаючи, що відбивання Брегга відбувається на зонних границях. Якщо  $a = 1 \text{ \AA}$ , то на протязі якого часу має бути прикладене поле

$100 \frac{\text{В}}{\text{м}}$ , щоб електрон міг здійснити одне повне коливання у

просторі? Якщо ширина зони складає 1 eВ, то який діапазон відстаней, що покривається в цьому коливанні?

7.31. Розгляньте зону і електрон із попередньої задачі. Опишіть поведінку електрону в синусоїдально модульованому електричному полі. Спочатку розмістіть електрон біля дна зони, а потім розгляньте дію синусоїдального поля на електрон, розташований у середній за енергією точці зони.

7.32. Покажіть, що у випадку малої магнітної індукції підсумову-

вання у формулі  $g(E) = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{p=0}^{p_{\max}} \frac{\hbar\omega_c}{\sqrt{E - \left(p + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c}}$  мо-

жна замінити інтегруванням за нескінченно великим інтервалом, що дає звичайну густину квантових станів

$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}$ . Таким же чином покажіть, що у гра-

ниці слабкого поля вираз

$$n = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{p=0}^{p_{\max}} \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega_c dE}{\left[ 1 + e^{\frac{E - \varepsilon_F}{k_B T}} \right] \sqrt{E - \left(p + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c}}$$

переходить у вираз

$$n = \int_0^{\infty} f(E) g(E) dE = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E} dE}{1 + e^{\frac{E - \varepsilon_F}{k_B T}}}$$

7.33. Електрон рухається в одномірному періодичному потенціальному полі, яке утворюється атомами, що знаходяться на відстані  $d$  один від іншого. Покажіть, що хвильові функції електронів можуть мати вигляд  $u(x)e^{ikx}$ , де  $u(x)$  – функція тієї ж періодичності, що і потенціал. Вважаючи, що в тримірному

випадку хвильова функція має аналогічний вигляд:  $u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , визначте значення хвильового вектора  $\mathbf{k}$  для гранецентрованої кубічної ґратки.

- 7.34. Покажіть, що на межах першої зони Бриллюена хвильові функції вільного електрона в одновірній періодичній ґратці з періодом  $d$  вироджені. Покажіть, що якщо кожен атом вносить мале збурення, то в першому наближенні за збуренням хвильові функції на межі зони пропорційні

$$\sin \frac{n\pi x}{d} \quad \text{та} \quad \cos \frac{n\pi x}{d} \quad (n - \text{ціле число}).$$

- 7.35. Розгляньте енергетичні рівні в одновірній ґратці з періодом  $d$ , де потенціальна енергія має вигляд

$$\begin{aligned} U &= U_0 \quad \text{при} \quad -b \leq x \leq 0, \\ U &= 0 \quad \text{при} \quad 0 \leq x \leq d - b, \\ U(x + d) &= U(x). \end{aligned}$$

Визначте значення енергії для верхнього краю першої зони і нижнього краю другої зони на межі зон, якщо  $U_0 = 0,1$ ;  $d = 8$  і  $b = 3$  ат. од.

- 7.36. Покажіть, що рівняння Шредінґера для хвильової функції  $\psi_{nk}(\mathbf{r})$  можна записати у вигляді

$$\left( \frac{(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) u_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r}),$$

де індекс  $n$  відноситься до  $n$ -ї енергетичної смуги, а функція  $u_{nk}(\mathbf{r})$  має періодичність ґратки.

Визначте залежність  $E_n(\mathbf{k})$  поблизу краю зони ( $\mathbf{k} = 0$ ), виразивши праву частину через  $E_n(0)$  і матричні елементи імпульсу з функціями  $u_{i0}(\mathbf{r})$  для всіх енергетичних смуг  $i$ . Отримайте звідси компоненти тензора ефективних мас (через матричні елементи імпульсу). Покажіть, що при врахуванні

взаємодії електронів двох різних енергетичних смуг ефективна маса дірки, що відповідає нижній смузі, і ефективна маса електрона, що відповідає краю верхньої смуги, будуть однаковими за величиною.

- 7.37. Використовуючи розкладення хвильової функції електрона в ряд за плоскими хвилями, знайдіть вигляд детермінантного рівняння для визначення власних значень енергії у випадку одномірного кристала. Знайдіть власні значення енергії для послідовних наближень, які можна отримати при збільшенні числа плоских хвиль в розкладенні, якщо у такому кристалі потенціал з періодом  $\pi$  має вигляд  $U(x) = -3 - 2 \cos 2x$ .
- 7.38. Використовуючи для електронів атомів в об'ємноцентрованій кубічній ґратці наближення сильного зв'язку і вважаючи при цьому, що  $s$ -функції можуть бути взяті як електронні атомні хвильові функції (атомні орбіталі), покажіть, що енергетичні поверхні такої системи при  $\mathbf{k} = 0$  мають сферичну симетрію. Визначте ефективну масу поблизу краю зони (поблизу  $\mathbf{k} = 0$ ).
- 7.39. Користуючись наближенням сильного зв'язку, знайдіть власні значення енергії нижнього краю зони для випадку одномірної ґратки з періодом  $\pi$ , якщо її потенціал має вигляд  $U(x) = -3 - 2 \cos 2x$ .

Вважайте, що атомні хвильові функції такі ж самі, як і у простого гармонічного осцилятора,

$$\psi(x) = e^{-ax^2},$$

де  $a$  – параметр підгонки, який вибирається так, щоб енергія що відповідає станам  $\psi(x)$  була мінімальною.

## 8. Динаміка атомів кристалічної ґратки. Фонони

### Основні формули і визначення

Коливання кристалічної ґратки є одним з основних видів внутрішнього руху в твердому тілі, коли структурні частинки (атоми, молекули, йони), які його утворюють, коливаються навколо положень рівноваги – вузлів кристалічної ґратки. Амплітуда цих коливань збільшується зі зростанням температури, але завжди залишається значно меншою просторового періоду ґратки. Коли температура досягає деякого критичного значення, кристалічна ґратка руйнується, починається процес плавлення.

При розрахунку енергії кристалічної ґратки П. Дебай врахував, що коливання атомів не є незалежними. Складний рух  $N$  пружно зв'язаних між собою атомів, які мають  $3N$  ступені вільності і слабо коливаються поблизу своїх рівноважних положень, можна уявити як суперпозицію  $3N$  різних незалежних один від одного хвилюподібних рухів атомів ґратки – пружних коливань, які називають *нормальними модами*. Відповідно до висновків квантової механіки енергія кожної моди з частотою  $\omega$  може мати лише дискретні значення

$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (8.1)$$

де  $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$ , а величина  $\frac{1}{2} \hbar \omega$  характеризує енергію нульових коливань. Квант енергії пружних коливань  $\varepsilon = \hbar \omega$  називають *фононом*. Між пружними хвилями в кристалах і електромагнітними хвилями у вакуумі є глибока аналогія. Квазіімпульс фонона

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}. \quad (8.2)$$

Швидкість фонона є груповою швидкістю звукових хвиль у кристалі

$$u = \frac{d\varepsilon}{dp}.$$

При малих значеннях енергії фонона дисперсією хвиль можна знехтувати і тоді групова і фазова швидкості співпадуть:

$$u = v = \frac{\varepsilon}{p}.$$

Середню кількість фононів в одній моді з частотою  $\omega$  визначають за формулою:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\frac{\hbar\omega}{e^{k_B T}} - 1}. \quad (8.3)$$

З урахуванням формул (8.1) і (8.3) запишемо для середнього значення енергії моди з частотою  $\omega$ :

$$\langle \varepsilon(\omega) \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (8.4)$$

Спектральну густину фононних мод визначають за формулою:

$$D(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 s^2} \omega^2, \quad (8.5)$$

де поправний множник  $\frac{3}{2}$  враховує, що в твердому тілі, крім поперечних хвиль двох поляризацій можуть поширюватися ще і поздовжні хвилі.

Швидкості повздовжніх ( $v_l$ ) і поперечних ( $v_t$ ) коливань у кристалі визначають за формулами:

$$v_l = \sqrt{\frac{E}{\rho}}, \quad v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}}, \quad (8.6)$$

де  $E$  і  $G$  - модулі повздовжньої і поперечної пружності.

Середнє значення швидкості звуку  $s$  пов'язано з  $v_l$  і  $v_t$  співвідношенням

$$\frac{3}{s^3} = \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3}. \quad (8.7)$$

Закон дисперсії для гармонічних коливань одновимірної ґратки, яка складається з однакових атомів масою  $m$ , описують співвідношенням

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad (8.8)$$

де  $\gamma$  – жорсткість зв'язків у ґратці. У довгохвильовому наближенні ( $k \rightarrow 0$ ) сусідні атоми коливаються синфазно, а закон дисперсії має вигляд

$$\omega(k) = sk, \quad s = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}}. \quad (8.9)$$

У короткохвильовому наближенні ( $k \rightarrow \frac{\pi}{a}$ ,  $\lambda = \frac{2\pi}{k} \rightarrow 2a$ ) сусідні атоми коливаються у протифазах, а

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} = \frac{2s}{a}. \quad (8.10)$$

Якщо в одновимірному ланцюжку є два сорти атомів, тобто він складається з розміщених по черзі на відстані  $a$  частинок масою  $m$  і  $M$ , то дисперсійне рівняння матиме вигляд:

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left( 1 \pm \sqrt{1 - \alpha^2 \sin^2 \frac{ka}{2}} \right), \quad (8.11)$$

де  $\omega_0^2 = \frac{4\gamma}{\mu}$ ,  $\mu = \frac{2mM}{m+M}$ ,  $\alpha^2 = \frac{4mM}{(m+M)^2}$ . У спектрі коливань

з'являються дві гілки: низькочастотна, яка відповідає знаку „–“, її називають *акустичною*, вона повністю аналогічна коливанням лінійного ланцюжка з однакових частинок, і високочастотна – *оптична*. При малих значеннях  $k$  ( $ka \ll 1$ ) вирази для акустичної й оптичної частот коливань набувають вигляду:

$$\omega_1'^2 = \frac{2\gamma}{m+M} (ka)^2, \quad \omega_2'^2 = \frac{2\gamma}{\mu}. \quad (8.12)$$

У так званому *дебайвському наближенні* припускають, що для фоновів лінійний закон дисперсії справедливий в усьому діапазоні  $\omega$  і  $k$ .

На відміну від електромагнітних хвиль спектр фоновних мод обмежений зверху деякою максимальною величиною  $\omega_D$ , яку називають *дебайвською частотою*. Зміст цього обмеження стає зрозумілим, якщо врахувати, що в кристалах не можуть існувати пружні хвилі, довжина яких менша відстані між сусідніми атомами. За умови рівності загальної кількості ступенів вільності  $3N$ , значення  $\omega_D$  розраховують за формулою:

$$\omega_D = s\sqrt[3]{6\pi^2 n}, \quad (8.13)$$

де  $n$  – концентрація атомів.

Дебайвській частоті ставиться у відповідність *характеристична температура – температура Дебая*  $\Theta_D$ , яку визначають за співвідношенням:

$$\hbar\omega_D = k_B \Theta_D \quad \Rightarrow \quad \Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}. \quad (8.14)$$

**Відносна зміна частоти**, зумовлена ефектом Доплера,

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{v}{c} \cos\theta \quad (v \ll c), \quad (8.15)$$

де  $v$  – швидкість атома;  $c$  – швидкість поширення електромагнітного випромінювання;  $\theta$  – кут між вектором  $\mathbf{v}$  і напрямком спостереження (від атома до спостерігача).

**Енергія віддачі ядра** при випусканні  $\gamma$ -фотона

$$W = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m_\alpha c^2}, \quad (8.16)$$

де  $\hbar\omega$  – енергія  $\gamma$ -фотона;  $m_\alpha$  – маса ядра.

**Природна ширина спектральної лінії**

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}, \quad (8.17)$$

де  $\tau$  – середній час життя ядра (атома) у збудженому стані.

---

### Приклади розв'язування задач

**Приклад 8.1.** Визначте число власних коливань струни довжиною  $l$  в інтервалі частот  $(\omega, \omega + d\omega)$ , якщо швидкість поширення коливань дорівнює  $v$ .

*Розв'язання*

Власні поперечні коливання струни є стоячими хвилями, їхня довжина задовольняє вимозі

$$\frac{2l}{\lambda_n} = n, \quad (1)$$

де  $l$  – довжина струни;  $\lambda_n$  – довжина хвилі;  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Формула (1) є умовою того, що на довжині струни  $l$  має поміститися напівціла кількість довжин хвиль. Враховуючи, що

$$\lambda_n = \frac{2\pi v}{\omega_n},$$

де  $v$  – швидкість поширення поперечних коливань уздовж струни, маємо:

$$n = \frac{l}{\pi v} \omega_n. \quad (2)$$

З формули (2) видно, що кількість власних коливань струни в інтервалі частот від  $\omega$  до  $\omega + d\omega$  визначається виразом

$$dn_\omega = \frac{l}{\pi v} d\omega.$$

*Відповідь:*  $dn_\omega = \frac{l}{\pi v} d\omega$ .

**Приклад 8.2.** Швидкість поширення пружних поперечних хвиль у сріблі дорівнює 1 590, а поздовжніх –  $3600 \frac{\text{М}}{\text{с}}$ . Визначте температуру Дебая для срібла, густина якого  $\rho = 10,5 \cdot 10^3 \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$ , а молярна маса  $\mu = 0,108 \frac{\text{КГ}}{\text{Моль}}$ .

*Розв'язання*

Скориставшись виразом (8.14) для визначення  $\Theta_D$ , запишемо:

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B},$$

де значення  $\omega_D$  визначимо за формулою (8.13), значення швидкості звуку  $s$  в сріблі – за формулою (8.7), а концентрацію атомів Аргентуму – зі співвідношення

$$n = \frac{N_A \rho}{\mu}.$$

Отже, остаточно маємо:

$$\begin{aligned} \Theta_D &= \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar s \sqrt{6\pi^2 n}}{k_B} = \frac{\hbar s}{k_B} \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N_A \rho}{\mu}} = \frac{\hbar}{k_B} \sqrt[3]{\frac{18\pi^2 N_A \rho}{\mu \left( \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right)}} = \\ &= \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \sqrt[3]{\frac{18 \cdot 3,14^2 \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \cdot 10,5 \cdot 10^3}{0,108 \cdot \left( \frac{2}{1590^3} + \frac{1}{3600^3} \right)}} = 206 \text{ К}. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\Theta_D = 206 \text{ К}$ .

**Приклад 8.3.** Розрахуйте довжину хвилі фононів у свинці, яка відповідає частоті  $\omega = 0,1\omega_D$ , якщо густина Плюмбуму

$$\rho = 11,3 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \text{ а молярна маса } \mu = 207 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}.$$

*Розв'язання*

Частота Дебая (максимальна частота коливань кристалічної ґратки) визначається виразом (8.13).

Концентрацію атомів у кристалі можна знайти за формулою

$$n = \frac{N_A \rho}{\mu}.$$

Якщо знехтувати дисперсією звука в кристалі, то

$$\lambda_{\text{ph}} = \frac{2\pi s}{\omega},$$

або, згідно умови задачі,

$$\lambda_{\text{ph}} = \frac{20\pi s}{\omega_D}.$$

Остаточно, користуючись формулою (8.13) і виразом для концентрації, маємо:

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{ph}} &= \frac{20\pi s}{s \sqrt[3]{6\pi^2 n}} = 20\pi \sqrt[3]{\frac{\mu}{6\pi^2 N_A \rho}} = 20 \cdot 3,14 \times \\ &\times \sqrt[3]{\frac{207 \cdot 10^{-3}}{6 \cdot 3,14^2 \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \cdot 11,3 \cdot 10^3}} = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 5 \text{ нм}. \end{aligned}$$

*Відповідь:*  $\lambda_{\text{ph}} = 5 \text{ нм}$ .

**Приклад 8.4.** Визначте середню кількість фононів у моді пружних коливань кристалічної ґратки, для якої спектральна густина кількості фононів максимальна. Вважати виконаною умову  $T < \Theta_D$ .

*Розв'язання*

Визначимо частоту моди, яка відповідає максимальній спектральній густині кількості фононів. Функцію спектральної густини

кількості фононів  $f(\omega)$  отримаємо, перемноживши спектральну густину фононних мод  $D(\omega)$  на середню кількість фононів у моді  $\bar{n}$ :

$$f(\omega) = D(\omega)\bar{n} = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2s^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}.$$

Для спрощення наступних перетворень зробимо заміну  $\frac{\hbar\omega}{k_B T} = x$ . Тоді

$$f(x) = D(\omega)\bar{n} = \frac{3V(k_B T)^2}{2\pi^2s^3\hbar^2} \frac{x^2}{e^x - 1} = a \frac{x^2}{e^x - 1},$$

де  $a \equiv \frac{3V(k_B T)^2}{2\pi^2s^3\hbar^2}$ . При  $x \rightarrow 0$  і  $x \rightarrow \infty$  ця невід'ємна функція прагне до нуля. Отже, між нулем і нескінченністю має бути максимум функції  $f(x)$ . Продиференціюємо отриманий вираз за  $x$  і прирівняємо результат до нуля:

$$\frac{2x(e^x - 1) - x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} = 0 \quad \text{або} \quad \frac{x}{(e^x - 1)^2} (2e^x - 2 - xe^x) = 0.$$

Значення  $x = 0$  і  $x = \infty$  відповідають мінімумам функції  $f(x)$ . Запишемо умову максимуму

$$2e^x - 2 - xe^x = 0 \quad \text{або} \quad x = 2(1 - e^{-x}).$$

Розв'яжемо це рівняння методом послідовних наближень і отримаємо  $x_{\max} = 1,59$ . Виконавши зворотну заміну, знаходимо частоту моди  $\omega_{\max}$ , яка відповідає максимуму функції спектральної густини кількості фононів  $f(\omega)$ :

$$\omega_{\max} = \frac{1,59k_B T}{\hbar}.$$

Тоді шукане середнє число фононів у цій моді визначимо за формулою (8.3):

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B T}} - 1} = \frac{1}{e^{1,59} - 1} \approx 0,26.$$

*Відповідь:*  $\langle n \rangle \approx 0,26$ .

**Приклад 8.5.** Ядро  $^{67}\text{Zn}$  з енергією збудження  $\Delta E = 93$  кеВ перейшло в основний стан, випустивши  $\gamma$ -фотон. Знайдіть відносну зміну  $\frac{\Delta\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_\gamma}$  енергії  $\gamma$ -кванта, що виникає внаслідок віддачі вільного ядра.

*Розв'язання*

Енергія віддачі ядра при випусканні  $\gamma$ -кванта згідно (8.16) дорівнює

$$W = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m_{\text{я}} c^2},$$

енергія фотона дорівнює енергії збудження ядра  $^{67}\text{Zn}$ :

$$\Delta E = \hbar\omega,$$

тому

$$\hbar\omega = \varepsilon_\gamma = \Delta E$$

і

$$W = \frac{\varepsilon_\gamma^2}{2m_{\text{я}} c^2}.$$

Зміна енергії  $\gamma$ -кванта внаслідок віддачі вільного ядра дорівнює енергії віддачі ядра

$$\Delta\varepsilon_\gamma = W = \frac{\varepsilon_\gamma^2}{2m_\gamma c^2},$$

тому відносна зміна енергії  $\gamma$ -кванта

$$\frac{\Delta\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_\gamma} = \frac{\varepsilon_\gamma}{2m_\gamma c^2} = \frac{9,3 \cdot 10^4}{2 \cdot 67 \cdot 9,315 \cdot 10^8} = 7,45 \cdot 10^{-7}.$$

*Відповідь:*  $\frac{\Delta\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_\gamma} = 7,45 \cdot 10^{-7}.$

**Приклад 8.6.** Отримайте спектр поляризаційних фононів у масивних напівпровідникових кристалах в моделі діелектричного континууму.

*Розв'язання*

Будемо вважати, що іонний кристал складається з елементарних комірок, кожна з яких містить два іони з ефективними зарядами  $(+e)$  і  $(-e)$  та масами  $m_+$  і  $m_-$  відповідно. Оскільки внаслідок трансляційної симетрії рух іонів у кристалі відбувається синхронно в усіх комірках, то достатньо розглянути рух пари іонів у одній з них.

Введемо вектори зміщень іонів з положень рівноваги  $\mathbf{u}_+$  і  $\mathbf{u}_-$ . Для знаходження цих векторів скористаємось класичними рівняннями руху:

$$m_+ \frac{d^2 \mathbf{u}_+}{dt^2} = -\gamma(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + e\mathbf{E}_{\text{loc}}, \quad (1)$$

$$m_- \frac{d^2 \mathbf{u}_-}{dt^2} = -\gamma(\mathbf{u}_- - \mathbf{u}_+) - e\mathbf{E}_{\text{loc}}. \quad (2)$$

При цьому, як видно з формул (1) і (2), сили, що діють на іони, складаються з двох доданків: близькодіючої (перший доданок),

яка виникає завдяки взаємному зміщенню розглянутої пари іонів (коефіцієнт пружності  $\gamma$ ), та далекодіючої (другий доданок) внаслідок дії локального електричного поля  $\mathbf{E}_{\text{loc}}$ . Напруженість локального поля  $\mathbf{E}_{\text{loc}}$  містить як зовнішні поля, що діють на кристал, так і поля всіх іонів кристала, крім того, що знаходиться в розглянутій парі. Вводячи відносні зміщення пари іонів

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_- \quad (3)$$

та зведену ефективну масу цієї пари

$$\mu = \frac{m_+ m_-}{m_+ + m_-}, \quad (4)$$

з двох рівнянь (1) і (2) отримуємо рівняння для  $\mathbf{u}$  :

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = -\gamma \mathbf{u} + e \mathbf{E}_{\text{loc}}. \quad (5)$$

З електродинаміки суцільних середовищ відомо, що напруженість локального поля в кристалі з кубічною симетрією пов'язана співвідношенням

$$\mathbf{E}_{\text{loc}} = \mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P} \quad (6)$$

з вектором поляризації  $\mathbf{P}$  елементарної комірки та напруженістю електричного поля  $\mathbf{E}$ , що фігурує в рівняннях Максвелла для середовища. Вектор поляризації зумовлений відносним зміщенням пари іонів і поляризованістю кожного з них

$$\mathbf{P} = Z \left[ e(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + \alpha_+ \mathbf{E}_{\text{loc}} + \alpha_- \mathbf{E}_{\text{loc}} \right], \quad (7)$$

де  $Z$  – кількість елементарних комірок у одиниці об'єму кристала, а  $\alpha_+$  і  $\alpha_-$  – поляризованості відповідних іонів. Увівши поляризованість пари іонів  $\alpha = \alpha_+ + \alpha_-$ , для  $\mathbf{P}$  отримуємо вираз

$$\mathbf{P} = Z (e\mathbf{u} + \alpha \mathbf{E}_{\text{loc}}). \quad (8)$$

Вилучивши з рівнянь (8) і (9)  $\mathbf{E}_{\text{loc}}$ , отримаємо

$$\mathbf{P} = \frac{Z}{1-\beta} (e\mathbf{u} + \alpha\mathbf{E}), \quad (9)$$

де

$$\beta \equiv \frac{1}{3\varepsilon_0} Z\alpha. \quad (10)$$

Оскільки поляризованість  $\alpha$  не вимірюється безпосередньо в експерименті, то і  $\alpha$  і  $\beta$  варто виразити через вимірювані величини. Для цього зручно скористатися тим, що згідно з електродинамікою суцільних середовищ

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 (\varepsilon(\omega) - 1)\mathbf{E}, \quad (11)$$

де

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega^2 - \omega_l^2}{\omega^2 - \omega_t^2}. \quad (12)$$

У формулі (12)  $\varepsilon_\infty$  – високочастотна діелектрична проникність;  $\omega_l$  і  $\omega_t$  – частоти повздовжніх і поперечних коливань поля поляризації кристала;  $\omega$  – частота електромагнітних хвиль.

З введенням діелектричної проникності  $\varepsilon(\omega)$ , яка характеризує кристал вже як суцільне середовище, а не як конденсоване середовище, що складається з окремих елементарних комірок, фактично здійснено перехід від дискретної до континуальної моделі.

У високочастотному полі ( $\omega \rightarrow \infty$ ) іони не встигають зміщуватися з положень рівноваги, тому  $\mathbf{u}_{\omega \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ . Отже, згідно з (9)

$$\mathbf{P}_{\omega \rightarrow \infty} = \frac{Z\alpha}{1-\beta} \mathbf{E}, \quad (13)$$

а згідно з (11) і (12)

$$\mathbf{P}_{\omega \rightarrow \infty} = \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - 1)\mathbf{E}. \quad (14)$$

Отже, з останніх двох рівнянь випливає, що

$$\beta = \frac{\varepsilon_{\infty} - 1}{\varepsilon_{\infty} + 2}. \quad (15)$$

З урахуванням (15) для  $\mathbf{P}$  з (9) одержуємо

$$\mathbf{P} = \frac{Ze(\varepsilon_{\infty} + 2)}{3} \mathbf{u} + \varepsilon_0(\varepsilon_{\infty} - 1) \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (16)$$

Підставляючи (16) в (7), а  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{loc}}$  із (6) в рівняння (5) та вводячи позначення

$$\omega_0^2 \equiv \frac{\gamma}{\mu} - \frac{Ze^2}{9\varepsilon_0\mu}(\varepsilon_{\infty} + 2), \quad (17)$$

отримаємо рівняння для  $\mathbf{u}$  у вигляді

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = -\mu \omega_0^2 \mathbf{u} + \frac{e(\varepsilon_{\infty} + 2)}{3} \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (18)$$

Далі зручно перейти від  $\mathbf{u}$  до нормованого вектора зміщення

$$\mathbf{w} = \sqrt{Z\mu} \mathbf{u}, \quad (19)$$

для якого з (18) маємо рівняння:

$$\frac{d^2 \mathbf{w}}{dt^2} = -\omega_0^2 \mathbf{w} + \sqrt{\frac{Z}{\mu}} \frac{e(\varepsilon_{\infty} + 2)}{3} \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (20)$$

а вектор поляризації  $\mathbf{P}$ , згідно з (16) і (19) визначається співвідношенням

$$\mathbf{P} = \sqrt{\frac{Z}{\mu}} e \frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{3} \mathbf{w} + \varepsilon_0(\varepsilon_{\infty} - 1) \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (21)$$

У двох останніх формулах фігурує експериментально вимірювана величина ефективного заряду, яка входить у вигляді множника  $e\sqrt{\frac{Z}{\mu}}$ . Для визначення цього множника можна скористатися такими міркуваннями. В статичному полі, коли  $\omega \rightarrow 0$  із (12) ви-

пливає, що статична діелектрична проникність  $\varepsilon$  пов'язана з високочастотною проникністю  $\varepsilon_\infty$

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega = 0) = \varepsilon_\infty \left( \frac{\omega_l}{\omega_t} \right)^2. \quad (22)$$

Тоді з рівності статичних векторів поляризації, що визначаються формулами (11) і (12), випливає

$$\mathbf{w}_0 \sqrt{\frac{Z}{\mu}} e^{\frac{\varepsilon_\infty + 2}{3}} = \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - 1) \mathbf{\varepsilon}_0. \quad (23)$$

Оскільки статичне поле викликає статичне зміщення, то  $\frac{d^2 \mathbf{w}}{dt^2} = 0$ , і згідно з (20) отримуємо вираз для  $\mathbf{w}_0$ :

$$\mathbf{w}_0 = \sqrt{\frac{Z}{\mu}} e^{\frac{\varepsilon_\infty + 2}{3\omega_0^2}} \mathbf{\varepsilon}_0. \quad (24)$$

Тепер з формул (23) і (24) маємо потрібне співвідношення

$$\sqrt{\frac{Z}{\mu}} e = \frac{3\omega_0}{\varepsilon_\infty + 2} \sqrt{\varepsilon_0 (\varepsilon - \varepsilon_\infty)}. \quad (25)$$

Враховуючи (25), рівняння для  $\mathbf{w}$  і  $\mathbf{P}$  згідно з (20) – (21) набувають вигляду

$$\frac{d^2 \mathbf{w}}{dt^2} = -\omega_0^2 \mathbf{w} + \omega_0 \sqrt{\varepsilon_0 (\varepsilon - \varepsilon_\infty)} \mathbf{\varepsilon}, \quad (26)$$

$$\mathbf{P} = -\omega_0 \sqrt{\varepsilon_0 (\varepsilon - \varepsilon_\infty)} \mathbf{w} + \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - 1) \mathbf{\varepsilon}. \quad (27)$$

Останнє рівняння, що пов'язує вектори  $\mathbf{\varepsilon}$  та  $\mathbf{P}$  і робить систему замкненою, випливає з того, що оскільки в кристалі немає вільних зарядів, то згідно з рівнянням Максвелла  $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ , отже,

$$\operatorname{div} \mathbf{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon_0} \operatorname{div} \mathbf{P} = 0. \quad (28)$$

Розв'язок системи (26) – (28) будемо шукати у вигляді

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}_l + \mathbf{w}_t, \quad (29)$$

де потенціальний вектор  $\mathbf{w}_l$  визначається умовою

$$\operatorname{div} \mathbf{w}_l = 0, \quad (30)$$

а соленоїдальний вектор  $\mathbf{w}_t$  – умовою

$$\operatorname{rot} \mathbf{w}_t = 0. \quad (31)$$

Для розв'язування системи (26) – (28) підставимо (29) у (27), а (27), з урахуванням (30) і (31), – у (28). В результаті отримаємо зв'язок вектора напруженості  $\boldsymbol{\varepsilon}$  з потенціальною компонентою вектора нормованого зміщення

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\frac{\omega_0}{\varepsilon_\infty} \sqrt{\frac{\varepsilon - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0}} \mathbf{w}_l. \quad (32)$$

Підставляючи (29) і (32) у рівняння (26) і враховуючи ортогональність векторів  $\mathbf{w}_t$  і  $\mathbf{w}_l$ , отримаємо такі рівняння для цих векторів:

$$\frac{d^2 \mathbf{w}_t}{dt^2} = -\omega_0^2 \mathbf{w}_t, \quad (33)$$

$$\frac{d^2 \mathbf{w}_l}{dt^2} = -\omega_0^2 \frac{\varepsilon}{\varepsilon_\infty} \mathbf{w}_l. \quad (34)$$

Розв'язок рівнянь (33) і (34) шукатимемо у вигляді плоских хвиль

$$\mathbf{w}_t = \mathbf{A}_t e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_t t)}, \quad (35)$$

$$\mathbf{w}_l = \mathbf{A}_l e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_l t)}, \quad (36)$$

де  $\mathbf{q}$  – хвильовий вектор;  $\mathbf{A}_t$ ,  $\mathbf{A}_l$  – амплітуди;  $\omega_t$ ,  $\omega_l$  – частоти цих хвиль. Підставляючи  $\mathbf{w}_t$  і  $\mathbf{w}_l$  у (33) і (34), отримаємо значення частот:

$$\omega_l = \omega_0, \quad (37)$$

$$\omega_l = \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_\infty}}. \quad (38)$$

Щоб з'ясувати, як поширюються обидві хвилі необхідно підставити (35) у (31), а (36) у (30). Відповідно отримуємо

$$(\mathbf{q}\mathbf{A}_l) = 0, \quad (39)$$

$$[\mathbf{q}\mathbf{A}_l] = 0. \quad (40)$$

Оскільки з умов (39) – (40) випливає, що  $\mathbf{A}_l \perp \mathbf{q}$ , а  $\mathbf{A}_l \parallel \mathbf{q}$ , то відповідні хвилі називають поперечною і повздовжньою. Взявши відношення  $\omega_l$  до  $\omega_l$  з формул (38) і (37), отримуємо співвідношення Ліддена – Сакса – Теллера:

$$\frac{\omega_l}{\omega_l} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_\infty}}. \quad (41)$$

*Відповідь:*  $\omega_l = \omega_0$ ;  $\omega_l = \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_\infty}}$ .

## Задачі для самостійного розв'язування

### Коливання атомів кристалічної ґратки

8.1. Знайдіть фазову і групову швидкості хвиль як функції хвильового числа  $k$  в одновимірному ланцюжку, який складається з атомів масою  $m$ , середня відстань між якими дорівнює  $a$ . Атоми взаємодіють з найближчими сусідами за законом

$$\frac{\gamma(x_{n+1} - x_n)^2}{2}, \text{ де } x_n \text{ – координата } n\text{-го атому.}$$

- 8.2. Одномірне дисперсійне рівняння для фоновів має вигляд  $\omega(k) = C \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$ . Чому дорівнює константа  $C$ , якщо швидкість звуку дорівнює  $5000 \frac{\text{М}}{\text{с}}$ ? Які значення фазової  $v$  і групової  $u$  швидкостей для значень хвильового вектора  $k = \frac{\pi}{2a}$ ,  $-\frac{\pi}{2a}$ ,  $\frac{\pi}{a}$ ,  $\frac{3\pi}{2a}$ ? Які з наведених значень хвильового вектора відповідають еквівалентним фононам?
- 8.3. Як зміниться відносна частота коливань одновимірного ланцюжка, побудованого з однакових атомів, якщо зсув фази між коливаннями сусідніх атомів змінився від  $\frac{\pi}{3}$  до  $\pi$ ?
- 8.4. В одновимірному ланцюжку, побудованому з однакових атомів, швидкість звуку дорівнює  $s = 2 \cdot 10^3 \frac{\text{М}}{\text{с}}$ , а стала ґратки  $a = 0,3 \text{ нм}$ . За якої частоти коливань  $\omega$  зсув фаз між двома атомами, відстань між якими  $10a$ , буде складати  $\frac{\pi}{2}$ ?
- 8.5. Замкнувши ланцюжок з  $N$  однакових атомів у кільце, обчисліть кількість різних біжних хвиль. Розгляньте випадки поздовжніх і поперечних коливань (зсуви атомів вздовж ланцюжка і перпендикулярно до нього). Порівняйте з кількістю ступенів вільності системи.
- Вказівка.* При  $N \gg 1$  замикання ланцюжка практично не впливає на спектр його коливання.
- 8.6. Визначте кількість власних коливань у прямокутній мембрані площею  $S$ , перпендикулярних до її площини, в інтервалі частот  $(\omega, \omega + d\omega)$ , якщо швидкість поширення коливань дорівнює  $v$ .
- 8.7. Для зразка твердого тіла довжиною  $L$  найбільша довжина хвилі фонуна  $\lambda_{\text{max}}$  визначається співвідношенням  $\lambda_{\text{max}} = 2L$ . У фонуна з мінімальною довжиною хвилі її значення визнача-

ється як  $\lambda_{\min} = \frac{c}{\nu}$ , де  $c$  – швидкість звуку в твердому тілі,  $\nu$  – частота Ейнштейна коливань кристалічної ґратки. Розрахуйте наближене значення мінімальної довжини хвилі для типового металу. Порівняйте знайдене значення із середньою міжатомною відстанню у твердому тілі, що приблизно дорівнює  $3 \text{ \AA}$ .

- 8.8. У кристалі кухонної солі максимум поглинання світла припадає на довжину хвилі  $\lambda = 61 \text{ мкм}$ . Покажіть, що цей максимум відповідає збудженню фонона в центрі зони Бриллюена. Для NaCl пружна константа (жорсткість ланцюжка)  $\gamma = 15 \frac{\text{Н}}{\text{м}}$ .
- 8.9. Визначте максимальну частоту пружних коливань у лінійному одноатомному кристалі, якщо концентрація атомів дорівнює  $5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-3}$ , а швидкість звуку  $10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ .
- 8.10. Визначте максимальну частоту фонона, який може народитися в рідині під дією світла з довжиною хвилі  $\lambda = 4000 \text{ \AA}$ . Показник заломлення середовища  $n = 1,5$ , швидкість звуку в рідині  $s = 5 \cdot 10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ .
- 8.11. Спектрометром аналізується світло від лазера з довжиною хвилі  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ , розсіяне під кутом  $\varphi = 90^\circ$  у воді ( $n = 1,5$ ). Якою має бути роздільна здатність спектроскопа, щоб розрізнити лінії, які відповідають непружному розсіюванню світла з випусканням або поглинанням фонона? Швидкість звуку у воді  $s = 1,5 \cdot 10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ .
- 8.12. В експерименті з непружного розсіюванню нейтронів на кристалі KBr виявлено, що максимальна частота фононів, які відповідають акустичним поперечним коливанням атомів ребер його кубічної ґратки, складає  $\omega = 7,85 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ . Оцініть у рамках моделі коливань одновимірного ланцюжка швидкість

поперечних звукових коливань уздовж цього напрямку. Густина кристалу  $\rho = 2,75 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ .

- 8.13. Яка відносна зміна частоти коливань одномірного ланцюжка, побудованого з однакових атомів масою  $m$ , якщо зсув фази між коливаннями сусідніх атомів змінився від  $\frac{\pi}{3}$  до  $\pi$ ?
- 8.14. В одномірному ланцюжку, побудованому з однакових атомів, швидкість звуку дорівнює  $s = 2 \cdot 10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ , а стала ґратки  $a = 0,3 \text{ нм}$ . За якої частоти коливань  $\omega$  зсув фаз між двома атомами, відстань між якими  $10a$ , буде складати  $\frac{\pi}{2}$ ?
- 8.15. Визначте закон дисперсії  $\omega(k)$  для повздовжніх фононів у нескінченному ланцюжку, який містить у елементарній комірниці два атоми масами  $m_1$  і  $m_2$ . Відстань між сусідніми атомами дорівнює  $a$ , а жорсткість зв'язків між ними  $\gamma$ . Побудуйте графік отриманої залежності. Прослідкуйте граничний перехід до одноатомного ланцюжка при  $\frac{m_1}{m_2} \rightarrow 1$ .
- 8.16. Лінійний одноатомний кристал побудовано з атомів масою  $10^{-25} \text{ кг}$ , а рівноважна відстань між сусідніми атомами становить  $200 \text{ пм}$ . Визначте пружну сталу, якщо швидкість звуку в кристалі дорівнює  $10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ .
- 8.17. Будемо вважати атоми в кристалі кульками, зв'язаними між собою пружинами. Нехай атом Купруму на пружині, що має коефіцієнт жорсткості, еквівалентний частоті коливань  $10^{13} \text{ с}^{-1}$ , перебуває в положенні максимального віддалення від зв'язаного з ним іншого атома Купруму. Знайдіть значення „нульової“ амплітуди коливань. З умови задачі випливає, що атоми в реальному кристалі ніколи не знаходяться у вузлах ґратки навіть за нульової температури, а беруть участь у ви-

падковому русі, джерелом яких є дія принципу невизначеності.

- 8.18. Виходячи з умови попередньої задачі, знайдіть співвідношення між коефіцієнтом жорсткості пружини й масою атома, таке, щоб амплітуда „нульових коливань“ за порядком величини дорівнювала параметру кристалічної ґратки  $4 \text{ \AA}$ . Тверде тіло такого роду не зможе зберігати свою ґратчасту структуру і навіть при температурі абсолютного нуля залишиться в рідкому стані. До таких речовин відноситься гелій. Атоми гелію мають малу масу, сила хімічного зв'язку між атомами слабка; навіть при температурах, близьких до абсолютного нуля, амплітуда „нульових коливань“ близька за величиною до відстані між атомами.
- 8.19. Знайдіть закон дисперсії фононів  $\omega(k)$  лінійного ланцюжка атомів з потенціальною енергією взаємодії:

$$U = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ K_1 (u_n - u_{n+1})^2 + K_2 (u_n - u_{n+2})^2 \right\}.$$

Дослідіть умови на силові константи  $K_1$  і  $K_2$ , за яких дисперсійні криві не є монотонно зростаючими при  $0 \leq k \leq \frac{\pi}{a}$  ( $a$  – стала ґратки).

- 8.20. Знайдіть спектр нормальних коливань лінійного ланцюжка атомів з потенціальною енергією взаємодії:

$$U = \frac{1}{4} \sum_{n,n'} A e^{-\lambda|n-n'|} (u_n - u_{n'})^2.$$

Масу атома ланцюжка  $M$ , період ланцюжка  $a$ , силову сталу  $A$  і параметр  $\lambda$  вважайте заданими. Визначте швидкість звуку  $s$ .

*Вказівка.* Скористатися формулою підсумовування для геометричної прогресії.

- 8.21. Закон дисперсії фононних коливань у лінійному одноатомному ланцюжку (період  $a$ , маса атома  $M$ ) описується періоди-

чною функцією  $\omega = \Omega(k)$ , де  $\Omega\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = \Omega(k)$ . Знайдіть ви-

раз для потенціальної енергії взаємодії вузлів ланцюжка як функцій їх зміщень відносно положень рівноваги.

- 8.22. Знайдіть умову існування (співвідношення між силовими константами  $K$  і  $K'$ ) локалізованих фононних коливань у напівнескінченному лінійному ланцюжку атомів із закріпленим кінцем, при врахуванні взаємодії лише з найближчими сусідами (рис. 8.1). Визначте частоту цих коливань  $\omega$  і просторовий масштаб їх згасання  $l$ . Масу атома ланцюжка  $M$  і період ланцюжка  $a$  вважайте заданими.

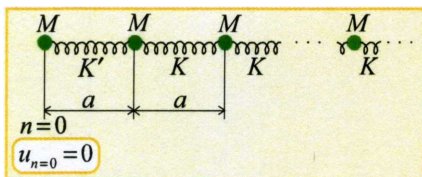


Рисунок 8.1

- 8.23. У наближенні взаємодії з найближчими сусідами дослідіть поведінку фононних дисперсійних залежностей  $\omega = \omega(k)$  для лінійного двоатомного ланцюжка (рис. 8.2) з  $K_1 = K_2 = K$  і  $M \neq m$  при граничному переході  $\delta \equiv M - m \rightarrow 0$ :

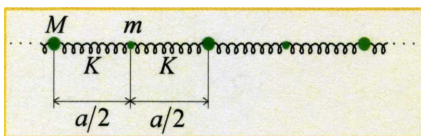


Рисунок 8.2

- Вкажіть, що відбувається з оптичною гілкою при  $\delta \rightarrow 0$ ;
- Обчисліть границі  $\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{ka \rightarrow \pi} \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)$  і  $\lim_{ka \rightarrow \pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)$ .

- 8.24. Знайдіть формули для густини станів при  $D = 1, 2, 3$  ( $D$  – розмірність системи) для

- 1) акустичних фононів у довгохвильовій границі ( $\omega = sk$ , де  $s$  – швидкість звуку);
- 2) вільних електронів ( $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m_e}$ ,  $m_e$  – маса електрона).
- 8.25. Знайдіть формулу для густини станів  $\rho(\omega)$  акустичних фононів у всій першій зоні Бриллюена одноатомного ланцюжка ( $D=1$ ) у наближенні взаємодії з найближчими сусідами (силова стала  $K$ , маса атома  $M$ ). Побудуйте відповідний графік.
- 8.26. Знайдіть формулу для густини станів  $\rho(\omega)$  електронів у всій першій зоні Бриллюена ( $|p| \leq \frac{\pi\hbar}{a}$ ) одномірного кристала, якщо закон дисперсії електронних збуджень має вигляд

$$\omega(p) = \omega_0 \sin\left(\frac{(pa)^2}{2\pi\hbar^2}\right).$$

- Вважайте, що задані стала ґратки  $a$  і значення ефективної маси  $m^*$  у центрі зони Бриллюена (частота  $\omega_0$  має бути виражена через ці параметри). Побудуйте відповідний графік.
- 8.27. Статичні діелектричні проникності йонних кристалів NaF і NaBr, зумовлені поляризацією ґратки, дорівнюють 5,1 і 6,4, а їхня густина – відповідно  $2,84 \cdot 10^3$  та  $3,18 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ . Оцініть відношення частот оптичних фононів цих кристалів.
- 8.28. Визначте поляризованість  $\alpha(\omega)$  (у розрахунку на одну елементарну комірку) для ланцюжка, який містить у комірці два різномасових однозарядних йона масами  $m_1$  і  $m_2$ . Відстань між сусідніми атомами дорівнює  $a$ , а жорсткість зв'язків між ними  $\gamma$ . Електричний вектор збуджуючої електромагнітної хвилі з частотою  $\omega$  орієнтований уздовж ланцюжка.

### Модель Дебая

- 8.29. Визначте енергію  $\varepsilon$  фонона, яка відповідає максимальній частоті  $\omega_D$  Дебая, якщо характеристична температура  $\Theta_D$  Дебая дорівнює 250 К.
- 8.30. Оцініть максимальні значення енергії й імпульсу фонона в зразку міді з параметром елементарної комірки  $a = 30$  нм при швидкості поширення коливань кристалічної ґратки  $4 \frac{\text{км}}{\text{с}}$ .
- 8.31. Яка максимальна енергія фононів (в еВ) у кристалі свинцю, якщо його температура Дебая  $\Theta_D = 94$  К ?
- 8.32. Обчисліть середню швидкість  $s$  фононів (швидкість звуку) у сріблі. Модулі поздовжньої  $E$  і поперечної  $G$  пружностей, а також густину  $\rho$  срібла вважати відомими.
- 8.33. Швидкість звуку в стрижні з дюралюмінію  $s = 5,1 \cdot 10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ , густина речовини  $\rho = 2,7 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ . Визначте модуль Юнга.
- 8.34. Визначте усереднену швидкість звуку в кристалі, характеристична температура якого дорівнює 300 К. Міжатомна відстань у кристалі дорівнює 25 нм.
- 8.35. Визначте швидкість звуку в кристалі алмаза, якщо температура Дебая алмаза дорівнює 1860 К, а середня відстань між атомами становить  $1,54 \text{ \AA}$ .
- 8.36. Довжина хвилі  $\lambda$  фонона, яка відповідає частоті  $\omega = 0,01\omega_D$ , дорівнює 52 нм. Знехтувавши дисперсією звукових хвиль, визначте характеристичну температуру  $\Theta_D$  Дебая, якщо усереднена швидкість  $s$  звуку в кристалі дорівнює  $4,8 \frac{\text{км}}{\text{с}}$ .
- 8.37. Покажіть, що за високих температурах квантовий вираз для середньої енергії гармонічного осцилятора переходить у класичний.

- 8.38. Характеристична температура золота дорівнює 170 К, густина –  $19,3 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ , параметр кристалічної ґратки – 30 нм. Визначте модуль поздовжньої пружності кристала (модуль Юнга).
- 8.39. Оцініть швидкість поширення акустичних коливань у кристалічній ґратці Алюмінію, характеристична температура якого становить 396 К.
- 8.40. Характеристична температура  $\Theta_D$  Дебая для Вольфраму дорівнює 310 К. Визначте довжину хвилі  $\lambda$  фононів, яка відповідає частоті  $\nu = 0,1\nu_D$ . Обчисліть усереднену швидкість звуку у вольфрамі. Дисперсією хвиль у кристалі знехтувати.
- 8.41. Визначте максимальне значення імпульсу фонуна для срібла, густина якого  $\rho = 10,5 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , а молярна маса  $\mu = 0,108 \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ .
- 8.42. Визначте квазіімпульс  $p$  фонуна, який відповідає частоті  $\omega = 0,1\omega_D$ . Усереднена швидкість  $s$  звуку в кристалі дорівнює  $1380 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ , характеристична температура Дебая  $\Theta_D = 100 \text{ К}$ . Дисперсією звукових хвиль у кристалі знехтувати.
- 8.43. Оцініть максимальні значення енергії й імпульсу фононів в алюмінії, у якого температура Дебая  $\Theta_D = 375 \text{ К}$ , а елементарною коміркою його кристалічної ґратки є гранецентрований куб із ребром  $a = 4,04 \text{ \AA}$ .
- 8.44. Обчисліть температуру Дебая заліза, в якому швидкості поздовжніх і поперечних коливань дорівнюють відповідно  $5850$  і  $3230 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ .
- 8.45. Визначте температуру Дебая для тримірного одноатомного кристала з концентрацією  $n = 1,25 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ , якщо швидкості

поперечних і поздовжніх коливань однакові й дорівнюють

$$v = 3000 \frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

- 8.46. Обчисліть частоту Дебая в кристалі золота. Для золота температура Дебая 180 К.
- 8.47. Обчисліть мінімальну довжину хвилі Дебая в титані, якщо його характеристична температура дорівнює 280 К, а швидкість звуку в ньому  $s = 6 \cdot 10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ .
- 8.48. Обчисліть довжину хвилі фононів у металі, яка відповідає частоті  $\omega = 0,1\omega_D$ , якщо густина металу  $\rho$ .

№ варіанту	Матеріал	$\rho, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	№ варіанту	Матеріал	$\rho, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
1	Мідь	8 960	11	Срібло	10 500
2	Свинець	11 350	12	Алюміній	2 698
3	Молібден	10 220	13	Тантал	16 654
4	Вольфрам	19 300	14	Хром	7 190
5	Титан	4 540	15	Ванадій	6 110
6	Ніобій	8 570	16	Золото	19 320
7	Залізо	7 874	17	Паладій	12 020
8	Кобальт	8 900	18	Платина	21 450
9	Магній	1 738	19	Іридій	22 560
10	Нікель	8 902	20	Родій	12 410

- 8.49. Період  $a$  ґратки одновимірного кристала дорівнює 0,3 нм. Визначте максимальну енергію  $\varepsilon_{\text{max}}$  фононів, які поширюються вздовж цього ланцюжка атомів. Усереднена швидкість  $s$  звуку в кристалі дорівнює  $5 \frac{\text{км}}{\text{с}}$ .
- 8.50. Германій і Кремній кристалізуються у ґратках з близькими параметрами і мають майже однакові модулі пружності. Оцініть відношення їхніх дебаївських температур.
- 8.51. Визначте відношення кількості фононів з дебаївською частотою  $\omega_D$  до кількості фононів з частотою  $\frac{\omega_D}{2}$  у кристалі, який

описується моделлю Дебая, при температурах  $T_1 = \Theta_D$  і

$$T_2 = \frac{\Theta_D}{10}.$$

- 8.52. Визначте усереднену швидкість  $s$  звуку в кристалі, характеристична температура  $\Theta_D$  якого дорівнює 300 К. Міжатомна відстань  $a$  у кристалі дорівнює 0,25 нм.
- 8.53. Визначте середню кількість фононів у моді пружних коливань кристалічної ґратки з дебайвською частотою при температурі  $T_1$  для заданого матеріалу.

№ варіанту	Матеріал	Температура плавлення $T_{пл}$ , К	Температура Дебая $\Theta_D$ , К	$\frac{T_1}{T_{пл}}$	$\mu, 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$
1	Літій	454	344	0,5	6,9
2	Натрій	371	158	0,3	23,0
3	Алюміній	933	428	0,3	27,0
4	Калій	336	91	0,2	39,1
5	Титан	1941	420	0,15	47,9
6	Ванадій	2163	380	0,15	50,9
7	Хром	2176	630	0,2	52,0
8	Залізо	1808	470	0,2	55,8
9	Кобальт	1765	445	0,2	58,9
10	Вольфрам	3683	400	0,1	183,9
11	Мідь	1356	343	0,2	63,5
12	Реній	3453	430	0,1	186,2
13	Ніобій	2760	275	0,1	92,9
14	Молибден	2898	450	0,15	95,9
15	Родій	2233	480	0,15	102,9
16	Паладій	1825	274	0,15	106,4
17	Срібло	1234	225	0,15	107,9
18	Іридій	2716	420	0,1	192,2
19	Платина	2042	240	0,1	195,1
20	Гафній	2500	252	0,1	178,5
21	Цирконій	2128	291	0,1	91,2
22	Золото	1336	165	0,1	197,0
23	Свинець	600	105	0,1	207,2

24	Тантал	3269	240	0,05	180,9
25	Нікель	1726	450	0,2	58,7

- 8.54. Оцініть, яку частку сталої ґратки  $a = 5,8 \text{ \AA}$  твердого криптону ( $\mu = 84 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ ) складає амплітуда коливань атомів при температурі плавлення  $T_{\text{пл}} = 117 \text{ К}$ . Дебаївська температура криптону  $\Theta_D = 57 \text{ К}$ .
- 8.55. Зі збільшенням всебічного стискання положення рівня Фермі в металі змінюється на 0,1%. Оцініть, яке при цьому відносне змінення дебаївської температури кристала  $\Theta_D$ . Швидкість звуку  $s$  вважайте сталою.
- 8.56. Обчисліть фононний тиск  $P$  у свинці за температури  $T = 42,5 \text{ К}$ . Характеристична температура  $\Theta_D$  Дебая свинцю дорівнює 85 К.
- 8.57. Визначте фононний тиск  $P$  у міді за температури  $T = \Theta_D$ , якщо  $\Theta_D = 320 \text{ К}$ .
- 8.58. Енергія оптичного фонона  $\hbar\omega_0$ , де  $\omega_0$  – деякий характеристичний розмір. Оптичні коливання збуджуються лише за температури  $\Theta_D$ , коли  $\hbar\omega = k_B T$ . Як правило, вона змінюється в межах від 15 К до 600 К (для кремнію  $\Theta_D = 732 \text{ К}$ ). Оцініть діапазон зміни енергії оптичних фононів для вказаного інтервалу температур. При розсіюванні на оптичних фононах енергія носія завжди змінюється на однакову, досить значну величину  $E_R$  (енергія раманівського фонона<sup>1</sup>):  $E_R = k_B \Theta_D$ . Енергія раманівського фонона складає: у кремнії  $E_{R_{\text{Si}}} = 0,063 \text{ еВ}$ ; у германії  $E_{R_{\text{Ge}}} = 0,037 \text{ еВ}$ ; в арсеніді галію  $E_{R_{\text{GaAs}}} = 0,036 \text{ еВ}$ . Визначте, чи виникне розсіювання на оптичних фононах за таких вихідних даних: а) у кремнії при  $T = 400 \text{ К}$  і при  $T = 800 \text{ К}$ ;

---

<sup>1</sup> Раманівський фонон – це подовжній фонон у центрі зони Бриллюена

б) у германії при  $T = 540 \text{ K}$  і при  $T = 600 \text{ K}$ ; в) у арсеніді галію при  $T = 300 \text{ K}$  і при  $T = 400 \text{ K}$ ?

- 8.59. Оцініть у процентному співвідношенні зміну енергії носія при одному зіткненні з тепловими коливаннями кристалічної ґратки, якщо домінує розсіювання на акустичних фонах. Температура  $T = 300 \text{ K}$ . При оцінці скористайтеся формулою

$$\frac{\hbar\omega_{\text{ак}}}{E} = 4 \frac{s}{v},$$

де  $\hbar\omega_{\text{ак}}$  – енергія фонуна;  $E$  – енергія носія;  $s$  – швидкість звуку в кристалі;  $v$  – теплова швидкість носія заряду. Прийміть, що за кімнатної температури  $v = 10^7 \frac{\text{см}}{\text{с}}$ .

### Ефект Мьосбауера

- 8.60. Виходячи із законів збереження енергії й імпульсу при випусканні фотона атомом, який рухається, отримайте формулу доплерівського зсуву  $\frac{\Delta\omega}{\omega}$  для нерелятивістського випадку.
- 8.61. Обчисліть енергію, яку набуває атом внаслідок віддачі, у трьох випадках: 1) при випромінюванні у видимій частині спектру ( $\lambda = 500 \text{ нм}$ ); 2) при рентгенівському випромінюванні ( $\lambda = 0,5 \text{ нм}$ ); 3) при  $\gamma$ -випромінюванні ( $\lambda = 5 \cdot 10^{-3} \text{ нм}$ ). Масу  $m_a$  в усіх випадках вважати однаковою і рівною  $100 \text{ а. о. м.}$
- 8.62. Уширення спектральної лінії випромінювання атома зумовлено ефектом Доплера і співвідношенням невизначеностей. Крім того, внаслідок віддачі атома, зсувається спектральна лінія. Оцініть для атома Гідрогену відносні змінення  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$  довжини хвилі випромінювання, зумовлені кожною з трьох причин. Середню швидкість  $\langle v \rangle$  теплового руху атома прийміть

рівною  $3 \frac{\text{км}}{\text{с}}$ , час  $\tau$  життя атома в незбудженому стані 10 нс, енергію  $\varepsilon$  випромінювання атома 10 еВ.

- 8.63. При випусканні  $\gamma$ -фотона вільним ядром спектральна лінія зсувається і уширюється. Уширення зумовлене ефектом Доплера і співвідношенням невизначеностей, а зсув – явищем віддачі. Оцініть для ядра  $^{57}\text{Fe}$  відносні змінення  $\frac{\Delta\nu}{\nu}$  частоти випромінювання, зумовлені кожною з трьох причин. При розрахунках прийміть середню швидкість  $\langle v \rangle$  ядра (зумовлену тепловим рухом) рівною  $300 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ , час  $\tau$  життя ядра у збудженому стані – 100 нс, енергію  $\varepsilon_\gamma$   $\gamma$ -випромінювання рівною 15 кеВ.
- 8.64. Визначте енергію збудження  $\Delta E$  вільного ядра, яке знаходилося у спокої, масою  $m_\gamma$ , яку воно набуває в результаті захвату  $\gamma$ -фотону з енергією  $\varepsilon_\gamma$ .
- 8.65. Оцініть, яке за кімнатної температури уширення (в електрон-вольтах) лінії  $\gamma$ -випромінювання олова-119 за рахунок теплового руху, якщо ядро, що випромінює, є вільним.
- 8.66. Вільне ядро іридію-131, яке знаходилося у спокої, переходить зі збудженого стану з енергією  $\Delta E = 129$  кеВ в основний, випускаючи  $\gamma$ -квант. Знайдіть енергію випромінюваного  $\gamma$ -кванту  $\varepsilon_\gamma$  і енергію віддачі  $W$  ядра. Розрахуйте зміну енергії випромінюваного кванта, якщо ядро знаходиться у кристалічній ґратці масою  $m_\kappa = 1$  г, яка повністю сприймає імпульс віддачі ядра (ефект Мьосбауера).
- 8.67. У мьосбауерівській спектроскопії широко використовується ядро  $^{57}\text{Fe}$ , що випромінює  $\gamma$ -кванти з енергією 14,4 кеВ. Оцініть, яке в такого вільного ядра за кімнатної температури відношення доплерівської ширини до зсуву лінії за рахунок енергії віддачі.

8.68. Вільне ядро  $^{40}\text{K}$  випустило  $\gamma$ -фотон з енергією  $\varepsilon_\gamma = 30 \text{ кеВ}$ .

Визначте відносний зсув  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$  спектральної лінії, спричинений віддачею ядра.

8.69. Енергія зв'язку  $E_{\text{зв}}$  атома, що знаходиться у вузлі кристалічної ґратки, складає  $20 \text{ еВ}$ . Маса  $m_a$  атома дорівнює  $80 \text{ а. о. м}$ . Визначте мінімальну енергію  $\varepsilon_\gamma$   $\gamma$ -фотона, при випусканні якого атом внаслідок віддачі може бути вирваний із вузла ґратки.

8.70. Час життя  $\tau$  першого збудженого стану в ядра  $^{119}\text{Sn}$  дорівнює  $3 \cdot 10^{-8} \text{ с}$ . За якої температури в цього вільного ядра доплерівське уширення буде порядку природної ширини лінії  $\gamma$ -випромінювання?

8.71. При кімнатній температурі приблизно  $f = 20\%$   $\gamma$ -розпадів  $^{119}\text{Sn}$  у сполуці  $\text{BaSnO}_3$  відбувається без віддачі (ефект Мьосбауера). Оцініть, якою має бути товщина джерела, щоб в ньому не відбувалося помітного поглинання мьосбауерівських  $\gamma$ -квантів. Густина  $\text{BaSnO}_3$   $\rho = 3 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , вміст ізотопу  $^{119}\text{Sn}$  у природній суміші  $\beta = 8$ , енергія  $\gamma$ -квантів  $\varepsilon_\gamma = 24 \text{ кеВ}$ .

8.72. Природна ширина лінії першого збудженого стану з енергією  $22,4 \text{ кеВ}$  у ядра  $^{119}\text{Sn}$  дорівнює  $\Delta E_1 = 3 \cdot 10^{-8} \text{ еВ}$ . Якою має бути швидкість джерела відносно поглиначя, щоб при спостереженні ефекту Мьосбауера інтенсивність рахунку  $\gamma$ -квантів, що пройшли, зменшилася вдвічі? Вважайте, що ядра джерела та поглиначя знаходяться в ідентичних умовах і за однакової температури, тобто максимум інтенсивності відповідає нульовій швидкості.

8.73. Якою має бути швидкість джерела відносно поглиначя, щоб змінення енергії випромінювання вільним радіоактивним нуклідом  $^{119}\text{Sn}$  через віддачу скомпенсувати за рахунок доплерівського зсуву? Відстань між основним і першим збудженим рівнем у Стануму-119 дорівнює  $\Delta E_0 = 28,3 \text{ кеВ}$ .

- 8.74. Енергія збудження ядра  $^{191}\text{Ir}$  дорівнює 129 кеВ. За якої швидкості  $v$  зближення джерела та поглинача (що містить вільні ядра  $^{191}\text{Ir}$ ) можна внаслідок ефекту Доплера компенсувати зсув смуг поглинання та випускання, обумовлених віддачею ядер?
- 8.75. Джерело та поглинач містять вільні ядра  $^{83}\text{Kr}$ . Енергія збудження  $\Delta E$  ядер дорівнює 9,3 кеВ. Визначте швидкість  $v$  зближення джерела та поглинача, за якої буде відбуватися резонансне поглинання  $\gamma$ -фотона.
- 8.76. Джерело та поглинач містять ядра  $^{161}\text{Dy}$ . Енергія збудження  $\Delta E$  ядер дорівнює 26 кеВ, період напіврозпаду  $T_{1/2} = 28$  нс. За якої мінімальної швидкості  $v_{\min}$  зближення джерела та поглинача порушується мьосбауерівське поглинання  $\gamma$ -фотона?
- 8.77. При швидкості  $v$  зближення джерела та поглинача (що містять вільні ядра  $^{153}\text{Er}$ ), яка дорівнює  $10 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$ , порушується мьосбауерівське поглинання  $\gamma$ -фотона з енергією  $\epsilon_{\gamma} = 98$  кеВ. Оцініть за цими даними середній час  $\tau$  життя збуджених ядер  $^{153}\text{Er}$ .
- 8.78. Джерело  $\gamma$ -фотонів розташоване над детектором-поглиначем на відстані  $l = 20$  м. З якою швидкістю  $v$  необхідно переміщати вгору джерело, щоб у місці розташування детектора була повністю скомпенсована зміна енергії  $\gamma$ -фотонів, обумовлена їх гравітаційною взаємодією із Землею?
- 8.79. При випроміненні  $\gamma$ -кванту ядром, що знаходиться в кристалічній ґратці, енергія віддачі переходить у збудження фононів, тобто набір осциляторів, що відповідає власним коливанням кристала. Згідно із квантовою механікою, існує кінцева ймовірність  $f$  осциляторам залишитися в не збудженому стані, і цей процес відповідає випромінюванню без віддачі (ефект Мьосбауера), що визначається виразом

$$f = e^{-\frac{4\pi^2 \langle x^2 \rangle}{\lambda}}$$

де  $\langle x^2 \rangle$  – середньоквадратичне зміщення ядер в процесі теплових коливань ґратки (у напрямку вильоту  $\gamma$ -кванту);  $\lambda$  – довжина хвилі  $\gamma$ -випромінювання. Скориставшись співвідношенням невизначеностей, отримайте для ймовірності ефекту Мьосбауера в залежності від розкиду імпульсу осцилюючого ядра, здійснивши тим самим перехід від хвильової картини процесу до корпускулярної.

- 8.80. Скориставшись виразом для ймовірності ефекту Мьосбауера, наведеним у попередній задачі, оцініть її величину для ядра  $^{119}\text{Sn}$ , що знаходиться в кристалічній ґратці стану му за температури, що дорівнює його температурі Дебая  $\Theta_D = 195 \text{ K}$ . Енергія випромінюваних  $\gamma$ -квантів  $\epsilon_\gamma = 23,8 \text{ кеВ}$ .

## РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Задачи по физике твердого тела [Текст] / под ред. Г. Дж. Голдсмида. Пер. с англ. под ред. А. А. Гусева и М. П. Шаскольской. – М.: Наука, 1976. – 432 с.
2. **Варикаш, В. М.** Избранные задачи по физике твердого тела [Текст] / В. М. Варикаш, Ю. М. Хачатрян. – Минск: Высшая школа, 1969. – 272 с.
3. **Жметко, Д. М.** Посібник для розв'язування задач з фізики твердого тіла [Текст] / Д. М. Жметко. – Запоріжжя: ЗДУ, 1999. – 52 с.
4. **Антипов, Б. Л.** Материалы электронной техники: Задачи и вопросы [Текст] / Б. Л. Антипов, В. С. Сорокин, В. А. Терехов. – СПб.: Лань, 2001. – 208 с.
5. **Ашкрофт, Н.** Физика твердого тела [Текст]: в 2 т. / Н. Ашкрофт, Н. Мермин; т. 1. – М.: Мир, 1979. – 400 с.
6. **Ашкрофт, Н.** Физика твердого тела [Текст]: в 2 т. / Н. Ашкрофт, Н. Мермин; т. 2. – М.: Мир, 1979. – 424 с.
7. **Киттель, Ч.** Введение в физику твердого тела [Текст] / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1978. – 792 с.
8. **Блейкмор, Дж.** Физика твердого тела [Текст] / Дж. Блейкмор. – М.: Мир, 1988. – 608 с.
9. **Уэрт, Ч.** Физика твердого тела [Текст] / Ч. Уэрт, Р. Томсон. – М.: Мир, 1969. – 560 с.
10. **Анималу, А.** Квантовая теория кристаллических твердых тел [Текст] / А. Анималу. – М.: Мир, 1981. – 576 с.
11. **Киттель, Ч.** Квантовая теория твердых тел [Текст] / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1967. – 492 с.
12. **Харрисон, У.** Теория твердого тела [Текст] / У. Харрисон. – М.: Мир, 1972. – 616 с.
13. **Хакен, Х.** Квантовополевая теория твердого тела [Текст] / Х. Хакен. – М.: Наука, 1980. – 341 с.
14. **Зиненко, В. И.** Основы физики твердого тела [Текст] / В. И. Зиненко, Б. П. Сорокин, П. П. Турчин. – М.: Физматлит, 2001. – 336 с.
15. **Перлин, Е. Ю.** Физика твердого тела. Оптика полупроводников, диэлектриков, металлов [Текст] / Е. Ю. Перлин,

- Т. А. Вартамян, А. В. Федоров. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2008. – 216 с.
16. **Винтайкин, Б. Е.** Физика твердого тела [Текст] / Б. Е. Винтайкин. – М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006. – 360 с.
  17. **Елманов, Г. Н.** Физика твердого тела [Текст] / Е. Н. Елманов, А. Г. Залужный, В. И. Скрытный, Е. А. Смирнов, В. Н. Яльцев. – М.: МИФИ, 2007. – 636 с. – (Физическое материаловедение: в 6 т. / Под общей ред. Б. А. Калина; т. 1).
  18. **Горбачев, В. В.** Физика полупроводников и металлов [Текст] / В. В. Горбачев, Л. Г. Спицына. – М.: Metallургия, 1976. – 368 с.
  19. **Най, Дж.** Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц [Текст] / Дж. Най. – М.: ИЛ, 1960. – 386 с.
  20. **Белонучкин, В. Е.** Задачи по общей физике [Текст] / В. Е. Белонучкин, Д. А. Заикин, А. С. Кингсеп, Г. Р. Локшин, Ю. М. Ципенюк. – М.: Физматлит, 2001. – 336 с.
  21. **Чертов, А. Г.** Задачник по физике [Текст] / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. – М.: Физматлит, 2007. – 640 с.
  22. **Иродов, И. Е.** Задачи по квантовой физике [Текст] / И. Е. Иродов. – М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001. – 216 с.
  23. **Лиопо, В. А.** Сборник задач по структурной физике твердого тела [Текст] / В. А. Лиопо. – Гродно: ГрГУ, 2001. – 117 с.
  24. **Венгер, Є. Ф.** Збірник задач з квантової механіки [Текст] / Є. Ф. Венгер, В. М.Грибань, О. В. Мельничук. – К.: Вища школа, 2003. – 230 с.
  25. **Козел, С. М.** Сборник задач по физике [Текст] / С. М. Козел, Э. И. Рашба, С. А. Славатинский. – М.: Наука, 1987. – 304 с.
  26. **Новиков, С. М.** Сборник заданий по общей физике [Текст] / С. М. Новиков. – М.: Оникс: Мир и образование, 2006. – 512 с.
  27. **Переломова, Н. В.** Задачник по кристаллофизике [Текст] / Н. В. Переломова, М. М. Тагиева. – М. Наука, 1972. – 192 с.
  28. **Новиков, И. И.** Дефекты кристаллического строения металлов [Текст] / И. И. Новиков. – М.: Metallургия, 1983. – 232 с.
  29. **Штремель, М. А.** Дефекты решетки [Текст] / М. А. Штремель. – М.: Metallургия, 1982. – 280 с. – (Прочность сплавов: в 2 ч. / М. А. Штремель; ч. 1).

30. **Келли, А.** Кристаллография и дефекты в кристаллах [Текст] / А. Келли, Г. Гровс. – М.: Мир, 1974. – 496 с.
31. **Ландау, Л. Д.** Теория упругости [Текст] / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2007. – 264 с. – (Теоретическая физика: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц; т. 7).
32. **Бокштейн, Б. С.** Диффузия в металлах [Текст] / Б. С. Бакштейн. – М.: Metallurgia, 1978. – 248 с.
33. **Ландау, Л. Д.** Статистическая физика. Ч. 1. [Текст] / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2005. – 616 с. – (Теоретическая физика: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц; т. 5).
34. **Лифшиц, Е. М.** Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния [Текст] / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – М.: Физматлит, 2002. – 496 с. – (Теоретическая физика: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц; т. 9).
35. **Кубо, Р.** Статистическая механика [Текст] / Р. Кубо. – М.: Мир, 1967. – 452 с.
36. **Шиллинг, Г.** Статистическая физика в примерах [Текст] / Г. Шиллинг. – М.: Мир, 1976. – 431 с.
37. Задачи по термодинамике и статистической физике [Текст] / под ред. П. Ландсберга. – М.: Мир, 1974. – 640 с.
38. **Флюгге, З.** Задачи по квантовой механике [Текст]: в 2 т. / З. Флюгге; т. 1. – М.: Едиториал УРСС, 2008. – 344 с.

ДОДАТОК А  
Кристалічні ґратки твердих тіл

Таблиця А.1 – Характеристики кубічних ґраток

Характеристика	Тип ґратки		
	Проста	ОЦК	ГЦК
Об'єм елементарної комірки	$a^3$	$a^3$	$a^3$
Число точок ґратки на одну комірку	1	2	4
Об'єм примітивної комірки	$a^3$	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
Число точок ґратки на одиницю об'єму	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
Число найближчих сусідів	6	8	12
Відстань між найближчими сусідами	$a$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a = 0,866a$	$\frac{a}{\sqrt{2}} = 0,707a$
Число сусідів, що слідує за найближчими	12	6	6
Відстань до сусідів, що слідує за найближчими	$a\sqrt{2}$	$a$	$a$

Таблиця А.2 – Тип кристалічної ґратки і густина  $\rho$  деяких металів за  $T = 293 \text{ K}$

Метал	Тип кристалічної ґратки	$\rho$ , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	Метал	Тип кристалічної ґратки	$\rho$ , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
Алюміній Al	ГЦК	2 698	Молибден Mo	ОЦК	10 220
Барій Ba	ОЦК	3 594	Натрій $\alpha$ -Na	ГЦУ	971
Берилій $\alpha$ -Be	ГЦУ	1 848	Нікол Ni	ГЦК	8 902
Ванадій V	ОЦК	6 110	Ніобій Nb	ОЦК	8 570
Вольфрам W	ОЦК	19 300	Станум $\alpha$ -Sn	ПК	5 750
Гадоліній $\alpha$ -Gd	ГЦУ	7 900	Осмій Os	ГЦУ	22 590
Гафній $\alpha$ -Hf	ГЦУ	13 310	Паладій Pd	ГЦК	12 020
Гольмій $\alpha$ -Ho	ГЦУ	8 795	Платина Pt	ГЦК	21 450
Германій Ge	ПК	5 323	Реній Re	ГЦУ	21 020
Європій Eu	ОЦК	5 243	Родій Rh	ГЦК	12 410
Ферум $\alpha$ -Fe	ОЦК	7 874	Рубідій Rb	ОЦК	1 532
Аурум Au	ГЦК	19 320	Плюмбум Pb	ГЦК	11 350
Іридій Ir	ГЦК	22 560	Аргентум Ag	ГЦК	10 500
Ітрій $\alpha$ -Y	ГЦУ	4 465	Скандій $\alpha$ -Sc	ГЦУ	2 989
Кадмій $\alpha$ -Cd	ГЦУ	8 650	Стронцій $\alpha$ -Sr	ГЦК	2 540
Калій K	ОЦК	862	Талій $\alpha$ -Tl	ГЦУ	11 850
Кальцій $\alpha$ -Ca	ГЦК	1 550	Тантал Ta	ОЦК	16 654
Кобальт $\alpha$ -Co	ГЦК	8 900	Титан $\alpha$ -Ti	ГЦУ	4 540
Лантан $\alpha$ -La	ГЦУ	6 145	Хром Cr	ОЦК	7 190
Літій $\beta$ -Li	ГЦК	534	Цезій Cs	ОЦК	1 873
Магній Mg	ГЦУ	1 738	Цинк Zn	ГЦУ	7 133
Манган $\alpha$ -Mn	ОЦК	7 440	Цирконій $\alpha$ -Zr	ГЦУ	6 506
Купрум Cu	ГЦК	8 960	Ербій $\alpha$ -Er	ГЦУ	9 066

## ДОДАТОК Б

Кристалічні структури, густина та атомна концентрація твердих тіл

<b>H<sup>1</sup></b> 1K hcp 3,75 6,12																	<b>He<sup>4</sup></b> 2K hcp 3,57 5,83																											
<b>Li</b> 78K bcc 3,491	<b>Be</b> hcp 2,27 3,59											<b>B</b> rhomb. 3,567	<b>C</b> diamond 5,66 (N <sub>2</sub> )	<b>N</b> 20K cubic 5,66 (N <sub>2</sub> )	<b>O</b> complex (O <sub>2</sub> )	<b>F</b>	<b>Ne</b> fcc 4,46																											
<b>Na</b> 5K bcc 4,225	<b>Mg</b> hcp 3,21 5,21	<i>Кристалічна структура</i> <i>Стала ґратки a, Å</i> <i>Стала ґратки c, Å</i>																<b>Al</b> fcc 4,05	<b>Si</b> diamond 5,430	<b>P</b> complex	<b>S</b> complex	<b>Cl</b> complex (Cl <sub>2</sub> )	<b>Ar</b> 4K fcc 4,31																					
<b>K</b> 5K bcc 5,225	<b>Ca</b> fcc 5,58	<b>Sc</b> hcp 3,31 5,27	<b>Ti</b> hcp 2,95 4,68	<b>V</b> bcc 3,03	<b>Cr</b> bcc 1,88	<b>Mn</b> cub-c complex	<b>Fe</b> bcc 2,87	<b>Co</b> hcp 2,51 4,07	<b>Ni</b> fcc 3,52	<b>Cu</b> fcc 3,61	<b>Zn</b> hcp 2,66 4,95	<b>Ga</b> complex	<b>Ge</b> diamond 5,658	<b>As</b> rhomb.	<b>Se</b> hex. chains	<b>Br</b> complex (Br <sub>2</sub> )	<b>Kr</b> 4K fcc 5,64																											
<b>Rb</b> 5K bcc 5,585	<b>Sr</b> fcc 6,08	<b>Y</b> hcp 3,65 5,73	<b>Zr</b> hcp 3,23 5,15	<b>Nb</b> bcc 3,30	<b>Mo</b> bcc 3,15	<b>Tc</b> hcp 2,74 4,40	<b>Ru</b> hcp 2,71 4,82	<b>Rh</b> fcc 3,80	<b>Pd</b> fcc 3,89	<b>Ag</b> fcc 4,09	<b>Cd</b> hcp 2,98 5,62	<b>In</b> tetr. 3,25 4,95	<b>Sn (a)</b> diamond 6,49	<b>Sb</b> rhomb.	<b>Te</b> hex. chains	<b>I</b> complex (I <sub>2</sub> )	<b>Xe</b> 4K fcc 6,13																											
<b>Cs</b> 5K bcc 6,045	<b>Ba</b> bcc 5,02	<b>La</b> hex. 3,77 AЕАС	<b>Hf</b> hcp 3,19 5,05	<b>Ta</b> bcc 3,30	<b>W</b> bcc 3,16	<b>Re</b> hcp 2,76 4,46	<b>Os</b> hcp 2,74 4,32	<b>Ir</b> fcc 3,84	<b>Pt</b> fcc 3,92	<b>Au</b> fcc 4,08	<b>Hg</b> rhomb.	<b>Tl</b> hcp 3,46 5,52	<b>Pb</b> fcc 4,95	<b>Bi</b> rhomb.	<b>Po</b> sc 3,34	<b>At</b> —	<b>Rn</b> —																											
<b>Fr</b> —	<b>Ra</b> —	<b>As</b> fcc 5,31	<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; text-align: center;"> <tr> <td><b>Ce</b> fcc 5,16</td> <td><b>Pr</b> hex. 3,67 AЕАС</td> <td><b>Nd</b> hex. 3,66</td> <td><b>Pm</b> —</td> <td><b>Sm</b> complex</td> <td><b>Eu</b> bcc 4,58</td> <td><b>Gd</b> hcp 3,63 5,78</td> <td><b>Tb</b> hcp 3,60 5,70</td> <td><b>Dy</b> hcp 3,59 5,65</td> <td><b>Ho</b> hcp 3,58 5,62</td> <td><b>Er</b> hcp 3,56 5,59</td> <td><b>Tm</b> hcp 3,54 5,56</td> <td><b>Yb</b> fcc 5,48</td> <td><b>Lu</b> hcp 3,50 5,55</td> </tr> <tr> <td><b>Th</b> fcc 5,08</td> <td><b>Pa</b> tetr. 3,92 3,24</td> <td><b>U</b> complex</td> <td><b>Np</b> complex</td> <td><b>Pu</b> complex</td> <td><b>Am</b> hex. 3,64 AЕАС</td> <td><b>Cm</b> —</td> <td><b>Bk</b> —</td> <td><b>Cf</b> —</td> <td><b>Es</b> —</td> <td><b>Fm</b> —</td> <td><b>Md</b> —</td> <td><b>No</b> —</td> <td><b>Lw</b> —</td> </tr> </table>														<b>Ce</b> fcc 5,16	<b>Pr</b> hex. 3,67 AЕАС	<b>Nd</b> hex. 3,66	<b>Pm</b> —	<b>Sm</b> complex	<b>Eu</b> bcc 4,58	<b>Gd</b> hcp 3,63 5,78	<b>Tb</b> hcp 3,60 5,70	<b>Dy</b> hcp 3,59 5,65	<b>Ho</b> hcp 3,58 5,62	<b>Er</b> hcp 3,56 5,59	<b>Tm</b> hcp 3,54 5,56	<b>Yb</b> fcc 5,48	<b>Lu</b> hcp 3,50 5,55	<b>Th</b> fcc 5,08	<b>Pa</b> tetr. 3,92 3,24	<b>U</b> complex	<b>Np</b> complex	<b>Pu</b> complex	<b>Am</b> hex. 3,64 AЕАС	<b>Cm</b> —	<b>Bk</b> —	<b>Cf</b> —	<b>Es</b> —	<b>Fm</b> —	<b>Md</b> —	<b>No</b> —	<b>Lw</b> —
<b>Ce</b> fcc 5,16	<b>Pr</b> hex. 3,67 AЕАС	<b>Nd</b> hex. 3,66	<b>Pm</b> —	<b>Sm</b> complex	<b>Eu</b> bcc 4,58	<b>Gd</b> hcp 3,63 5,78	<b>Tb</b> hcp 3,60 5,70	<b>Dy</b> hcp 3,59 5,65	<b>Ho</b> hcp 3,58 5,62	<b>Er</b> hcp 3,56 5,59	<b>Tm</b> hcp 3,54 5,56	<b>Yb</b> fcc 5,48	<b>Lu</b> hcp 3,50 5,55																															
<b>Th</b> fcc 5,08	<b>Pa</b> tetr. 3,92 3,24	<b>U</b> complex	<b>Np</b> complex	<b>Pu</b> complex	<b>Am</b> hex. 3,64 AЕАС	<b>Cm</b> —	<b>Bk</b> —	<b>Cf</b> —	<b>Es</b> —	<b>Fm</b> —	<b>Md</b> —	<b>No</b> —	<b>Lw</b> —																															

Позначення структур: bcc – ОЦК; fcc – ГЦК; hex – гексагональна; tetr – тетрагональна; hcp – гексагональна щільно упакована; diamond – структура типу алмазу; rhomb – ромбічна; chains – ланцюжкова; complex – складна; cubic – кубічна; sc – проста кубічна

Рисунк Б.1 – Кристалічні структури твердих тіл

H 4K 0,088																	He 2K 0,205 (at 37 atm)
Li 78K 0,542 4,700 3,023	Be											B 2,47 13,00	C 3,516 17,6 1,54	N 20K 1,03	O	F	Ne 4K 1,51 4,36 3,16
Na 5K 1,013 2,652 3,023	Mg	← Густина, $g/cm^3$ →										Al 2,70 6,02 2,86	Si 2,33 5,00 2,35	P	S	Cl 93K 2,03 2,02	Ar 4K 1,77 2,66 3,76
← Концентрація, $10^{23} cm^{-3}$ ( $10^{23} m^{-3}$ ) →																	
← Відстань між найближчими сусідами, $\text{Å}$ →																	
K 5K 0,910 1,402 4,525	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br <sup>123K</sup> 2,36	Kr 4K 2,17 4,00
Rb 5K 1,629 1,148 4,837	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe 4K 3,78 1,64 4,34
Cs 5K 1,997 0,905 5,235	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg 22K 3,01	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	As 10,07 2,66 3,75	Ce 6,77 2,91 3,65	Pr 6,78 2,92 3,63	Nd 7,00 2,93 3,66	Pm -	Sm 7,54 3,03 3,59	Eu 5,25 2,04 3,96	Gd 7,89 3,02 3,58	Tb 8,27 3,22 3,52	Dy 8,53 3,17 3,51	Ho 8,80 3,22 3,49	Er 9,04 3,26 3,47	Tm 9,32 3,32 3,54	Yb 6,97 3,02 3,88	Lu 9,84 3,39 3,43	
			Th 11,72 3,03 3,60	Pa 15,37 4,01 3,21	U 19,05 4,80 2,75	Np 20,45 5,20 2,62	Pu 19,81 4,26 3,1	Am 11,87 2,96 3,61	Cm -	Bk -	Cf -	Es -	Fm -	Md -	No -	Lw -	

Рисунок Б.2 – Густина та атомна концентрація елементів

## ДОДАТОК В

### Дефекти кристалічної структури твердих тіл

Таблиця В.1 – Експериментальні значення енергії  $E_{0v}$  та ентропії  $S_0$  утворення моновакансій, енергії міграції моновакансій  $E_m$  та енергії активації  $E_a$  самодифузії в різних металах

Метал	$E_{0v}$ , еВ	$\frac{S_0}{k_B}$	$E_m$ , еВ	$E_{0v} + E_m$ , еВ	$E_a$ , еВ
ГЦК-гратка					
Au	0,95	0,7	0,83	1,78	1,76
Ag	1,13	1,5	0,66	1,79	1,76
Cu	1,28	2,4	0,71	1,99	2,07
Al	0,67	0,7	0,62	1,29	1,28
Pt	1,51	–	1,43	2,94	2,9
ОЦК-гратка					
W	~3,6	2	1,7	~5,3	<5,7
Mo	~3,2	–	1,3	~4,5	~4,5

Таблиця В.2 – Період гратки  $a$  і модуль зсуву  $G$  деяких металів

Параметр	Метал				
	Ag	Au	Cu	Al	Ni
$a$ , нм	0,408	0,407	0,361	0,404	0,352
$G$ , ГПа	28	28	42,4	27,6	73

ДОДАТОК Г  
Механічні властивості твердих тіл

Таблиця Г.1 – Пружні характеристики деяких кубічних монокристалів

Метал	$c_{11}$ , ГПа	$c_{12}$ , ГПа	$c_{44}$ , ГПа	$E_{001}$ , ГПа	$E_{011}$ , ГПа	$E_{111}$ , ГПа	$E_{ср}$ , ГПа	$A$
Al	108	61	28	63	72	76	70	1,23
Cu	168	121	75	67	130	191	127	3,21
Ag	124	93	46	43	83	120	81	3,04
Au	186	157	42	43	81	116	78	2,87
Ni	246	147	125	130	223	294	214	2,54
Pb	50	42	15	11	24	40	24	4,12
V	228	119	43	146	124	117	128	0,78
Nb	246	139	29	152	92	82	105	0,51
Ta	267	161	82	142	191	215	183	1,58
Cr	350	67	101	328	266	250	280	0,71
Mo	460	176	110	344	326	316	327	0,91
W	501	198	151	420	414	412	415	0,98
UO <sub>2</sub>	395	121	64	338	199	175	230	0,47
$\alpha$ -Fe	231	135	116	132	220	283	211	2,41

Таблиця Г.2 – Пружні характеристики деяких гексагональних монокристалів

Метал	$c_{11}$ , ГПа	$c_{12}$ , ГПа	$c_{13}$ , ГПа	$c_{33}$ , ГПа	$c_{44}$ , ГПа	$c_{66}$ , ГПа	$E_{ср}$ , ГПа	$\frac{c}{a}$
Re	613	270	206	683	162	171	462	1,62
Ti	162	92	69	181	47	35	114	1,59
Be	292	27	14	336	162	133	311	1,57
Cd	114	40	60	51	20	38	63	1,62
Co	307	165	105	36	76	71	216	1,62
Hf	181	77	66	197	56	52	143	1,58
Mg	53	26	21	61	16	17	44	1,62
Zn	165	31	50	62	40	67	102	1,86
$\alpha$ -Zr	144	73	66	165	32	36	97	1,59
BeO	470	168	119	494	153	151	394	1,58

Таблиця Г.3 – Значення границі міцності  $\sigma_{\text{міцн}}$  деяких твердих тіл за температури  $T = 293 \text{ К}$

Речовина	Границя міцності, МПа
Алюміній	120
Берилій	300
Ванадій	420
Залізо	360
Магній	120
Мідь	240
Молібден	490
Натрій	14
Нікель	390
Ніобій	350
Олово	36
Свинець	28
Срібло	180
Тантал	620
Титан	750

ДОДАТОК Д  
Дифузія твердих тіл

Таблиця Д.1 – Параметри дифузії домішок у кремнії та германії

Елемент	$D_0, \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$		$E_a, \text{еВ}$	
	в Si	в Ge	в Si	в Ge
Li	$2,3 \cdot 10^{-7}$	$1,3 \cdot 10^{-8}$	0,66	0,5
Cu	$4 \cdot 10^{-6}$	$1,9 \cdot 10^{-8}$	1,0	0,18
Ag	$2,7 \cdot 10^{-7}$	$4,4 \cdot 10^{-6}$	1,59	1,0
Au	$2,3 \cdot 10^{-7}$	$2,15 \cdot 10^{-6}$	1,11	2,5
Zn	$1,1 \cdot 10^{-7}$	$5,7 \cdot 10^{-6}$	1,4	2,48
B	$7,7 \cdot 10^{-4}$	$1,6 \cdot 10^{-13}$	3,6	4,6
Al	$6,4 \cdot 10^{-7}$	$5,0 \cdot 10^{-6}$	3,3	2,7
Ga	$3,6 \cdot 10^{-4}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	3,8	2,82
In	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$3,0 \cdot 10^{-6}$	3,9	2,33
Sn	$3,2 \cdot 10^{-3}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$	4,25	1,9
P	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$2,5 \cdot 10^{-4}$	3,7	2,48
As	$3,2 \cdot 10^{-5}$	$5,8 \cdot 10^{-4}$	3,6	2,37
Sb	$5,6 \cdot 10^{-4}$	$5,8 \cdot 10^{-4}$	3,92	2,37
Fe	$6,2 \cdot 10^{-7}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$	1,1	11

ДОДАТОК Е  
Теплові властивості твердих тіл

Таблиця Е.1 – Температури Дебая  $\Theta_D$  та температури плавлення  $T_{пл}$  деяких речовин

Матеріал	Температура плавлення $T_{пл}$ , К	Температура Дебая $\Theta_D$ , К
Літій	454	344
Натрій	371	158
Алюміній	933	428
Калій	336	91
Титан	1941	420
Ванадій	2163	380
Хром	2176	630
Залізо	1808	470
Кобальт	1765	445
Вольфрам	3683	400
Мідь	1356	343
Реній	3453	430
Ніобій	2760	275
Молибден	2898	450
Родій	2233	480
Паладій	1825	274
Срібло	1234	225
Іридій	2716	420
Платина	2042	240
Гафній	2500	252
Цирконій	2128	291
Золото	1336	165
Свинець	600	105
Тантал	3269	240
Нікель	1726	450

*Навчальне видання*

**КОРОТУН Андрій Віталійович  
ТИТОВ Ігор Миколайович  
КУНИЦЬКИЙ Юрій Анатолійович  
ПОГОСОВ Валентин Вальтерович**

**ЗБІРНИК ЗАДАЧ  
З ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ  
В двох томах**

Том 1  
**СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ**

Технічний редактор *Рибіна Ю. А.*  
Комп'ютерне верстання *Коротун А. В., Титов І. М.*  
Коректор *Куницький Ю. А.*  
Графіка *Коротун А. В.*  
Обкладинка *Погосов В. В.*

Підписано до друку 21.03.2011. Формат 60×84/16. Ум. друк. арк. 20,8.  
Тираж 300 прим. Зам. № 555.

Запорізький національний технічний університет  
Україна, 69063, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 64  
Тел.: (061) 769–82–96, 220–12–14

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи  
до державного реєстру видавців, виготівників  
і розповсюджувачів видавничої продукції  
від 27.12.2005 р., серія ДК № 2394