

Министерство образования и науки Российской Федерации
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Е.А. Смирнов, Г.Н. Елманов, М.Г. Исаенкова

**СБОРНИК ЗАДАЧ ПО ФИЗИКЕ
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

*Рекомендовано УМО “Ядерные физика и технологии”
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений*

Москва 2012

УДК 538.9(075)
ББК 22.3я7
С50

Смирнов Е.А., Елманов Г.Н., Исаенкова М.Г. Сборник задач по физике конденсированного состояния: Учебное пособие. – М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 64 с.

Рассмотрены вопросы теории фаз в сплавах, электронного строения кристаллов, физических свойств твердых тел, а также диффузии в металлах и сплавах.

Каждый из приведенных разделов учебного пособия содержит краткое изложение используемых при решении задач теоретических основ, подробное рассмотрение методов решения типовых задач и задач повышенной сложности. Приведены ответы численных решений задач и справочные данные в объеме, достаточном для решения практических задач.

Пособие предназначено для студентов, обучающихся по специальности «Физика металлов».

Используется в дисциплинах «Физика конденсированного состояния», «Физические свойства твердых тел» и «Физическое материаловедение».

Рецензенты: канд. физ.-мат. наук Савченко А.Г.,
д-р физ.-мат. наук Шамаков А.А.

Подготовлено в рамках Программы создания и развития НИЯУ МИФИ.

ISBN 978-5-7262-1579-6

© *Национальный исследовательский
ядерный университет
«МИФИ», 2012*

СОДЕРЖАНИЕ

1. СТРОЕНИЕ ФАЗ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ	4
2. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ.....	11
3. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ.....	17
3.1. Тепловые и упругие свойства	17
3.2. Электрические свойства	26
3.3. Магнитные свойства	34
4. ДИФФУЗИЯ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ.....	38
Ответы.....	53
Список литературы	58
Приложения.....	59

1. СТРОЕНИЕ ФАЗ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

Основные формулы

- Молярный объем кристалла:

$$V_M = \frac{M}{\rho},$$

где M – молярная масса вещества; ρ – плотность кристалла.

- Объем элементарной ячейки в кристаллах:

а) при кубической сингонии $V = a^3$;

б) при гексагональной сингонии $V = \sqrt{3} \cdot a^2 \cdot c/2$, где a и c – параметры решетки. Если для гексагональной решетки принять теоретическое значение $c = 8a/3$, то $V = \sqrt{2} \cdot a^3$.

- Число элементарных ячеек в одном моле кристалла $Z_M = \frac{V_M}{V}$,

или $Z_M = \frac{kN_A}{n}$, где k – число одинаковых атомов в химической

формуле соединения (например, в кристалле AgBr число одинаковых атомов Ag или Br в химической формуле соединения равно единице); N_A – постоянная Авогадро; n – число одинаковых атомов, приходящихся на элементарную ячейку.

- Число Z элементарных ячеек в единице объема кристалла

$Z = \frac{Z_M}{V_M}$, или в общем случае $Z = \rho \frac{kN_A}{nM}$; для кристалла, состояще-

го из одинаковых атомов ($k = 1$), $Z = \rho \frac{N_A}{nM}$.

- Параметр a кубической решетки $a = \sqrt[3]{\frac{nM}{k\rho N_A}}$.

- Наименьшее расстояние d между соседними атомами в кубической решетке:

а) в гранцентрированной $d = a/\sqrt{2}$;

б) в объемно-центрированной $d = \sqrt{3}a/2$.

- Свободная энергия смешения для бинарного сплава:

$$\Delta G_K^M = \Delta H_K^M - T\Delta S_K^M = \Delta H_K^M - kT \ln W_K = N_{AB}\Omega - kT \ln(W^{(1)}W^{(2)}),$$

где ΔH_K^M – теплота смешения; ΔS_K^M – конфигурационная энтропия; $\Omega = [\epsilon_{AB} - 0,5(\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB})]$ – параметр взаимодействия; N_{AB} – количество пар атомов A - B (или число связей) на один г-атом раствора; W_K – вероятность состояния, в котором N_A атомов A и N_B атомов B распределены между «своими» (1) и «чужими» (2) узлами; вероятности $W^{(1)}$ и $W^{(2)}$, соответствующие числу способов распределения заданного числа и типа атомов на узлах первого и второго типа; ϵ_{AA} , ϵ_{BB} и ϵ_{AB} – энергии взаимодействия пар атомов A - A , B - B и A - B .

- Степень дальнего порядка в бинарном сплаве α характеризует упорядочение: $\alpha = \frac{P_A^{(1)} - x_A}{1 - v}$, где $P_A^{(1)}$ – вероятность замещения атомами A узлов первого типа, x_A – относительная концентрация атомов A в сплаве, v – относительная концентрация узлов первого типа.

Примеры решения задач

Задача 1. Определить число n узлов, приходящихся на одну элементарную ячейку в гранецентрированной кубической решетке.

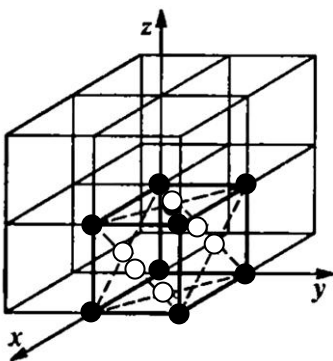


Рис. 1.1. Выделение элементарной ячейки: ● – узел A , ○ – узел B

Решение. Выделим элементарную ячейку в кубической решетке (рис. 1.1) и определим, скольким соседним элементарным ячейкам принадлежит тот или иной узел выделенной ячейки. В этой ячейке имеются узлы двух типов: A (находящиеся в вершинах куба) и B (находящиеся на гранях куба в точке пересечения диагоналей).

Узел A принадлежит одновременно восьми элементарным ячейкам. Следовательно, в данную ячейку узел A входит с долей $1/8$. Узел B входит одновременно только в две ячейки и, следовательно, в данную ячейку узел B входит с долей $1/2$. Если учесть, что число узлов типа A в ячейке равно восьми, а число узлов типа B равно

шести, т. е. числу граней, то общее число узлов, приходящихся на одну элементарную ячейку в гранецентрированной решетке,

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

Так как число узлов равно числу атомов, то в соответствующей структуре на элементарную ячейку приходится четыре атома.

Ответ: 4 атома.

Задача 2. Определить параметр a решетки и расстояние d между ближайшими соседними атомами кристалла кальция (решетка гранецентрированная кубической сингонии). Плотность ρ кристалла кальция равна $1,55 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

Решение. Параметр a кубической решетки связан с объемом элементарной ячейки соотношением $V = a^3$. С другой стороны, объем элементарной ячейки равен отношению молярного объема к числу элементарных ячеек в одном моле кристалла: $V = V_M/Z_M$. Приравняв правые части приведенных выражений для V , найдем

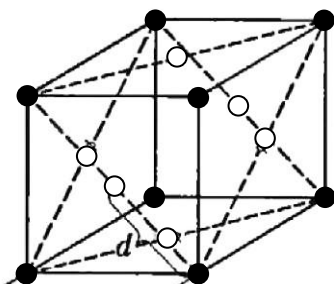


Рис. 1.2. Решетка гранецентрированная кубической сингонии

$$a^3 = \frac{V_M}{Z_M}.$$

Молярный объем кальция $V_M = M/\rho$, где ρ — плотность кальция; M — его молярная масса. Число элементарных ячеек в одном моле

$$Z_M = \frac{N_A}{n},$$

где n — число атомов, приходящихся на одну ячейку.

Следовательно, $a^3 = \frac{nM}{\rho N_A}$. Отсюда $a = \sqrt[3]{\frac{nM}{\rho N_A}}$.

После подстановки значений величин n , M , ρ и N_A в последнюю формулу и учитывая, что $n = 4$ (см. предыдущий пример), найдем параметр $a = 556 \text{ пм}$.

Наименьшее расстояние d между ближайшими соседними атомами находится из простых геометрических соображений:

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

Подставив в это выражение найденное ранее значение a , получим $d = 393$ пм.

Ответ: $a = 556$ пм, $d = 393$ пм.

Задача 3. Найти наименьший радиус одновалентного положительного иона, который может соседствовать в ионном кристалле с шестью одновалентными ионами фтора F^- с ионным радиусом $R = 0,133$ нм.

Решение. Радиус r октаэдрической поры, образованной ионами радиусом R , равен $r = 0,414R = 0,414 \cdot 0,133 = 0,055$ нм.

Это может быть ион лития Li^+ ($R = 0,059$ нм).

Ответ: $r = 0,055$ нм.

Задачи

- 1.1. Сколько атомов приходится на одну элементарную ячейку в:
 - а) примитивной кубической решетке;
 - б) объемно-центрированной кубической решетке;
 - в) гранецентрированной ромбической решетке;
 - г) базоцентрированной ромбической решетке;
 - д) примитивной гексагональной решетке;
 - е) гексагональной структуре с плотной упаковкой?
- 1.2. Определить число элементарных ячеек кристалла объемом $V = 1$ м³:
 - а) хлористого цезия (ОЦК-решетка);
 - б) меди (ГЦК-решетка);
 - в) кобальта (ГПУ).
- 1.3. Найти плотность ρ кристалла неона (при 20 К), характеризующегося ГЦК-решеткой. Постоянная a решетки при той же температуре равна 0,452 нм.
- 1.4. Найти плотность ρ кристалла стронция, если известно, что кристалл имеет ГЦК-решетку, а расстояние d между ближайшими соседними атомами равно 0,43 нм.

1.5. Определить относительную атомную массу A_r кристалла, если известно, что расстояние d между ближайшими соседними атомами равно 0,304 нм. Объемно-центрированная кубическая решетка. Плотность ρ кристалла равна 534 кг/м^3 .

1.6. Найти постоянную a решетки и расстояние d между ближайшими соседними атомами кристалла:

- а) алюминия (ГЦК);
- б) вольфрама (ОЦК).

1.7. Используя метод упаковки шаров, найти отношение параметров c/a в ГПУ-решетке. Указать причины отклонения этой величины в реальном кристалле от вычисленного.

1.8. Определить параметры a и c решетки кристалла магния, который представляет собой гексагональную структуру с плотной упаковкой. Плотность кристаллического магния $\rho = 1,74 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

1.9. Вычислить параметр a решетки кристалла бериллия, который представляет собой гексагональную структуру с плотной упаковкой. Параметр c решетки равен 0,359 нм. Плотность ρ кристалла бериллия равна $1,82 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

1.10. Найти плотность ρ кристалла гелия (при температуре $T = 2 \text{ К}$), который представляет собой гексагональную структуру с плотной упаковкой. Параметр a решетки, определенный при той же температуре, равен 0,357 нм.

1.11. Вычислить относительное изменение объема кристалла при переходе железа от гранцентрированной к объемно-центрированной кубической решетке, если межатомные расстояния в этих структурах соответственно $b_r = 0,254$ и $b_o = 0,248$ нм.

1.12. Найти плотность кремния, если длина связи между атомами равна 0,2351 нм.

1.13. Начертить структуру белого олова. Найти расстояние до его первых и вторых ближайших соседей и отношение этих расстояний.

1.14. Найти энергию связи атомов u_{AA} в кристалле меди из энергии сублимации $Q = 81 \text{ ккал/моль}$.

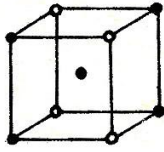
1.15. Найти числа связей n_{AA} и n_{AB} в зависимости от степени дальнего порядка s для сплавов типа: а) AuCu, б) AuCu₃.

1.16. Найти зависимости числа связей n_{AB} от концентрации для сплава типа а) AuCu, б) AuCu₃.

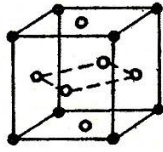
1.17. В приближении регулярных растворов с параметром взаимодействия $\Omega^{(B)} = 6934$ кал/г-ат (по Л. Кауфману) рассчитать критическую температуру купола расслоения для системы Zr-Nb. Построить купол расслоения и сравнить с экспериментальной диаграммой состояния.

1.18. В приближении субрегулярных растворов с $\Omega^{(B)} = 4010 + x_2 \cdot 1430$ кал/г-ат (по А.Г. Леснику) решить ту же задачу, а также рассчитать $x_{2(\text{кр})}$. Построить купол расслоения и сравнить с экспериментальной диаграммой состояния.

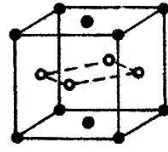
1.19. Установить стехиометрию (состав) и структуру (координационное число) приведенного на рис. 1.3 кристалла. В квазихимическом приближении вычислить свободную энергию этого упорядоченного твердого раствора. С помощью минимизации полученного выражения получить температурную зависимость степени дальнего порядка.



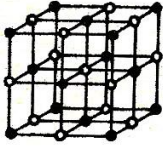
a



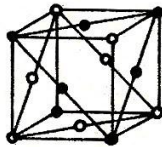
б



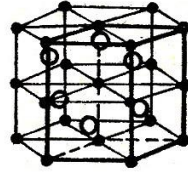
в



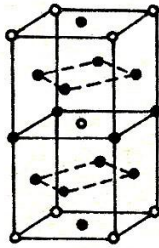
г



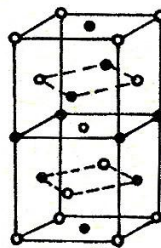
д



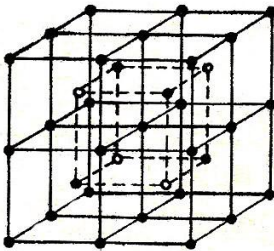
е



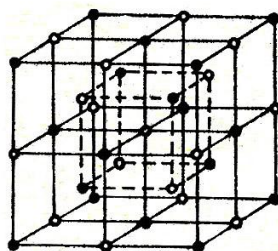
ж



з



и



к

Рис. 1.3. Структура кристаллов

2. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

- Распределение Ферми по энергиям для свободных электронов в металле:

$$\text{при } T \neq 0 \quad dn(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{E^{1/2} dE}{\exp[(E - E_F)/kT] + 1};$$

$$\text{при } T = 0 \quad dn(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} dE \quad (\text{при } E < E_F),$$

где $dn(E)$ — концентрация электронов, энергия которых заключена в интервале значений от E до $E + dE$; m и E — масса и энергия электрона; E_F — уровень (или энергия) Ферми.

- Плотности распределения по энергиям электронных состояний $N(E)$ и электронов $n(E)$:

$$n(E) = (4\pi/\hbar^3)(2m)^{3/2} \sqrt{E},$$

$$N(E) = (2\pi/\hbar^3)(2m)^{3/2} \sqrt{E}.$$

- Уровень Ферми в металле при $T = 0$:

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

- Температура $T_{кр}$ вырождения:

$$T_{кр} = \frac{2\pi\hbar^2}{km} n^{2/3}.$$

Пример решения задачи

Задача. Кусок металла объемом $V = 20 \text{ см}^3$ находится при температуре $T = 0$. Определить число ΔN свободных электронов, импульсы которых отличаются от максимального импульса p_{\max} не более чем на $0,1 p_{\max}$. Энергия Ферми $E_F = 5 \text{ эВ}$.

Решение. Для того чтобы установить распределение свободных электронов в металле по импульсам, воспользуемся распределением Ферми для свободных электронов при $T = 0$:

$$dn(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} dE.$$

Так как $dn(E)$ есть число электронов в единице объема, энергии

которых заключены в интервале значений от E до $E + dE$ ($E < E_F$), то оно должно быть равно числу электронов $dn(p)$ в единице объема, заключенных в интервале значений импульса от p до $p + dp$, т. е.

$$dn(p) = dn(E).$$

При этом должно соблюдаться следующее условие. Данной энергии E соответствует определенный импульс p и интервалу энергии dE отвечает соответствующий ему интервал импульсов dp :

$$dE = \frac{p}{m} dp.$$

Заметив, что $E^{1/2} = p/(2m)^{1/2}$, можно получить

$$dn(p) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{p}{(2m)^{1/2}} \cdot \frac{p}{m} dp = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} p^2 dp.$$

Число электронов в единице объема, импульсы которых заключены в интервале от $p_{\max} - 0,1p_{\max}$ до p_{\max} , найдем интегрированием:

$$\Delta n = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \int_{0,9p_{\max}}^{p_{\max}} p^2 dp = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} p_{\max}^3 (1 - (0,9)^3) = \frac{0,271}{3\pi^2} \cdot \frac{p_{\max}^3}{\hbar^3}.$$

Учитывая, что максимальный импульс p_{\max} и максимальная энергия электронов E_F в металле (при $T = 0$) связаны соотношением $p_{\max}^2 = 2m E_F$, найдем искомое число ΔN свободных электронов в металле:

$$\Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2 \hbar^3} (2mE_F)^{3/2} V = \frac{0,271}{3\pi^2} \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} V.$$

Подставив значения величин π , m , E_F , \hbar и V и произведя вычисления ($5 \text{ эВ} = 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$), получим $\Delta N = 2,9 \cdot 10^{23}$ электронов.

Ответ: $\Delta N = 2,9 \cdot 10^{23}$ электронов.

Задачи

2.1. Определить концентрацию n свободных электронов в металле при температуре $T = 0$ К. Энергию Ферми E_F принять равной 1 эВ.

2.2. Определить отношение концентраций n_1/n_2 свободных электронов при $T = 0$ К в литии и цезии, если известно, что энергии Ферми в этих металлах равны $E_{F,1} = 4,72$ эВ, $E_{F,2} = 1,53$ эВ.

2.3. Определить число свободных электронов, которое приходится на один атом натрия при температуре $T = 0$ К. Энергия Ферми E_F для натрия равна 3,12 эВ. Плотность натрия $\rho = 970$ кг/м³.

2.4. Во сколько раз число свободных электронов, приходящихся на один атом металла при $T = 0$, больше в алюминии, чем в меди, если энергии Ферми равны $E_{F,1} = 11,7$ эВ, $E_{F,2} = 7,0$ эВ соответственно?

2.5. Определить вблизи уровня Ферми интервал энергий ΔE (в эВ) между соседними энергетическими уровнями электронов в кристалле цезия объемом $V = 1$ мм³ при температуре $T = 0$ К. При расчетах принять, что на каждый атом цезия приходится один свободный электрон.

2.6. Вычислить среднюю кинетическую энергию \bar{E} электронов в металле при температуре $T = 0$ К, если уровень Ферми $E_F = 7$ эВ.

2.7. Металл находится при температуре $T = 0$ К. Определить, во сколько раз число электронов с кинетической энергией от $E_F/2$ до E_F больше числа электронов с энергией от 0 до $E_F/2$.

2.8. Электроны в металле находятся при температуре $T \sim 0$ К. Найти относительное число $\Delta N/N$ свободных электронов, кинетическая энергия которых отличается от энергии Ферми не более чем на 2%.

2.9. Оценить температуру $T_{кр}$ вырождения для калия, если принять, что на каждый атом приходится по одному свободному электрону. Плотность калия $\rho = 860$ кг/м³.

2.10. Определить отношение концентрации n_{max} электронов в металле (при $T = 0$ К), энергия которых отличается от максимальной не более чем на ΔE , к концентрации n_{min} электронов, энергии которых не превышают значения $E = \Delta E$. Считать $\Delta E = 0,01E_F$.

2.11. Зная распределение $dn(E)$ электронов в металле по энергиям, установить распределение $dn(p)$ электронов по импульсам. Найти частный случай распределения при $T = 0$ К.

2.12. По функции распределения $dn(p)$ электронов в металле по импульсам установить распределение $dn(v)$ по скоростям: 1) при любой температуре T ; 2) при $T = 0$ К.

2.13. Определить максимальную скорость v_{\max} электронов в металле при $T = 0$ К, если уровень Ферми $E_F = 5$ эВ.

2.14. Выразить среднюю скорость \bar{v} электронов в металле при $T = 0$ К через максимальную скорость v_{\max} . Вычислить \bar{v} для металла, уровень Ферми E_F которого при $T = 0$ К равен 6 эВ.

2.15. Металл находится при температуре $T = 0$ К. Определить, во сколько раз число электронов со скоростями от $v_{\max}/2$ до v_{\max} больше числа электронов со скоростями от 0 до $v_{\max}/2$.

2.16. Выразить среднюю квадратичную скорость $\langle v_{\text{кв}} \rangle = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$ электронов в металле при $T = 0$ К через максимальную скорость v_{\max} электронов. Функцию распределения электронов по скоростям считать известной.

2.17. Зная распределение $dn(v)$ электронов в металле по скоростям, выразить $\langle 1/v \rangle$ через максимальную скорость v_{\max} электронов в металле. Металл находится при $T = 0$ К.

2.18. Считая, что в одновалентных металлах число свободных электронов в единице объема равно числу атомов, вычислить концентрацию свободных электронов в меди при 20°C , если плотность меди $\rho = 8,89 \cdot 10^3$ кг/м³, а ее атомная масса $A = 63,5 \cdot 10^{-3}$ кг/моль.

2.19. Найти максимальную энергию электронов T_{\max} в серебре при $T = 0$ К. Концентрация свободных электронов серебра равна $5,8 \cdot 10^{28}$ м⁻³.

2.20. Концентрация свободных электронов натрия $2,5 \cdot 10^{28}$ м⁻³. Определить температуру Ферми и скорость электронов на уровне Ферми.

2.21. Вычислить плотность состояний электронов на уровне Ферми при $T = 0$ К для 1 м³ и 1 моля натрия. Почему эти величины различаются? Какая доля (в %) 3s-электронов обладает энергией в

интервале kT вблизи уровня Ферми при комнатной температуре? (Плотность $\rho = 0,975 \cdot 10^3$ кг/м³, атомная масса $A = 23 \cdot 10^{-3}$ кг/моль.)

2.22. Медь имеет ГЦК-структуру с параметром кристаллической решетки $3,61 \cdot 10^{-10}$ м, валентная оболочка атома Cu имеет структуру $4s^1$:

а) доказать, что сфера Ферми не достигает границы первой зоны Бриллюэна;

б) отношение числа свободных электронов в металле к числу атомов называется отношением « e/a ». По мере замещения атомов меди в ГЦК латуни атомами цинка (имеющими валентную оболочку $4s^2$) отношение « e/a » возрастает от 1 для чистой меди. При каком составе сплава Cu – Zn произойдет касание сферой Ферми границы первой зоны Бриллюэна?

в) Показать, что поверхность Ферми коснется граней зоны Бриллюэна ОЦК-решетки, когда $e/a = 1,48$.

2.23. Атомная масса одновалентного металла равна 0,039 кг/моль, вероятность нахождения электронов в состоянии с энергией $E = 5,5$ эВ составляет 10^{-5} . Найти: а) среднюю энергию свободного электрона при температуре 27 °С; б) концентрацию свободных электронов; в) удельную массу металла.

2.24. Рассчитать энергию Ферми E_F при $T = 0$ К для Cu и Nb, выразив число свободных электронов через число атомов в элементарной ячейке Z и объем элементарной ячейки a^3 (Cu – структура ГЦК, $a = 3,61 \cdot 10^{-10}$ м; Nb – структура ОЦК, $a = 3,30 \cdot 10^{-10}$ м).

2.25. Объяснить качественно (используя зависимость плотности числа состояний $f(E)$ от энергии) слабое изменение химического потенциала E_F металла при изменении температуры. На сколько (в %) происходит это изменение при увеличении температуры серебра от 0 до 300 К? ($A_{Ag} = 109,7 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\rho = 10,5 \cdot 10^3$ кг/м³.)

2.26. Для первой зоны Бриллюэна в случае примитивной кубической решетки сравнить энергии свободного электрона для волнового вектора углов зоны и центров граничных поверхностей зоны.

2.27. Показать, что для случая одномерной решетки существование энергетических разрывов на границе зоны Бриллюэна эквивалентно условию брэгговского отражения электронных волн.

2.28. Пусть N – число атомов в объеме металла, имеющего форму куба с ребром L , и каждый атом имеет ν валентных электронов. Получить выражение для радиуса сферы Ферми (в k -пространстве) в приближении свободных электронов.

2.29. Медь – одновалентный металл со сферической поверхностью Ферми ($\rho = 8,89 \cdot 10^3$ кг/м³, $A = 63,5 \cdot 10^{-3}$ кг/моль).

Рассчитать:

- а) энергию Ферми при $T = 0$ К и температуру Ферми;
- б) радиус k_F сферы Ферми в k -пространстве;
- в) скорость электронов на поверхности Ферми;
- г) среднюю длину свободного пробега электронов проводимости при комнатной температуре, если удельное сопротивление равно $1,6 \cdot 10^{-8}$ Ом·м;
- д) длину ребра кубической элементарной ячейки;
- е) длину векторов первых двух координационных сфер в k -пространстве;
- ж) объем первой зоны Бриллюэна.

2.30. Найти функцию распределения Ферми для:

- а) $E \leq E_F$ и $T = 0$ К;
- б) $E - E_F = 0$, $T > 0$ К;
- в) $E - E_F = +kT$, $-kT$;
- г) $E - E_F = +4kT$, $-4kT$.

2.31. Найти индексы плоскостей, ограничивающих первую зону Бриллюэна для кристалла, имеющего ГПУ-структуру. Указание: использовать плоское сечение обратной решетки для плоскостей зоны [001] и [100]; первая зона Бриллюэна образуется плоскостями, соответствующими ближайшим к началу координат узлам обратной решетки (проводятся через середины радиус-векторов обратной решетки).

3. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

3.1. Тепловые и упругие свойства

Основные формулы

- Сила $f(x)$, возвращающая частицу в положение равновесия при ангармонических колебаниях, определяется выражением

$$f(x) = -ax + bx^2,$$

где a – коэффициент гармоничности $a = r_0 E$, b – коэффициент ангармоничности, который по порядку величины $b \cong \frac{1}{2} \frac{a}{r_0}$.

- Коэффициент линейного расширения $\alpha = \frac{1}{l} \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_p$.

Он выражается как $\alpha = \frac{bk}{a^2 r_0}$, или приближенно $\alpha = \frac{1}{2} \frac{k}{a r_0^2}$.

- Коэффициент линейного расширения металла:

$$\alpha = \frac{1}{3DV} \left[\gamma C_V^{\text{реш}} + \frac{2}{3} C_V^{\text{эл}} \right],$$

где $C_V^{\text{реш}}$ и $C_V^{\text{эл}}$ – решеточная и электронная молярная теплоемкости; γ – постоянная Грюнрайзена ($\gamma = 1,5 \div 2,5$).

- Связь молярных теплоемкостей твердого тела при постоянном давлении C_p и постоянном объеме C_V :

$$C_p = C_V + \frac{\beta^2 T V_M}{K},$$

где $\beta \equiv \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$ – коэффициент объемного термического расширения;

$K \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = 1/D$ – коэффициент всестороннего сжатия;

D – модуль всестороннего сжатия; V_M – молярный объем.

- Максимальная частота колебаний атомов в цепочке:

$$\omega_{\max} = 2\pi\nu/\lambda_{\min} = \pi v_{\text{зв}}/a,$$

где $v_{\text{зв}}$ – скорость распространения волн (звука) в цепочке;

λ_{\min} – длина волны; a – период цепочки.

- Закон Дюлонга и Пти. Молярная теплоемкость химически простых твердых тел:

$$C_V = 3R.$$

- Закон Неймана-Коппа. Молярная теплоемкость химически сложных твердых тел с числом атомов в молекуле n :

$$C_V = n \cdot 3R.$$

- Средняя энергия квантового осциллятора, приходящейся на одну степень свободы, в квантовой теории Эйнштейна:

$$\bar{E} = \frac{h\nu_E}{2} + \frac{h\nu_E}{e^{h\nu_E/kT} - 1}.$$

- Молярная теплоемкость кристалла в теории Эйнштейна:

$$C_V = \frac{\partial U_{\text{реш}}}{\partial T} = \frac{\partial(3N\bar{E})}{\partial T} = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2};$$

при низких температурах ($T \ll \theta_E$) $C_V = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/T}$.

- Функция распределения колебаний по частотам в теории Дебая при частотах $\nu \leq \nu_{\max}$:

$$g(\nu) = \frac{9N}{\nu_{\max}^3} \nu^2.$$

- Характеристическая температура Дебая: $\theta_D = \frac{h\nu_{\max}}{k}$.

- Молярная внутренняя энергия кристалла в теории Дебая:

$$U_{\text{реш}} = \frac{9Nk\theta_D}{8} + 9NkT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

где $x = \frac{h\nu}{kT}$, $x_{\max} = \frac{h\nu_{\max}}{kT} = \frac{\theta_D}{T}$.

- Молярная теплоемкость кристалла в теории Дебая:

$$C_V = \frac{\partial U_{\text{реш}}}{\partial T} = 9R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_{\text{max}}} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2},$$

при низких температурах ($T \ll \theta_D$)

$$C_V = \frac{\partial U_{\text{реш}}}{\partial T} = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3.$$

- Характеристическая температура: $\theta_D = \frac{h}{k} \left(\frac{3N_A}{4\pi A} \right)^{1/2} \rho^{1/2} v_{\text{зв}}$.
- Эмпирическая формула Линдемана:

$$\theta_D = 137 \sqrt{\frac{T_{\text{пл}}}{AV_M^{2/3}}},$$

где $T_{\text{пл}}$ – температура плавления; A – атомная масса, а.е.м.;

V_M – молярный объем металла, см³/моль.

- Электронная теплоемкость :

$$C_V^{\text{эл}} = \pi^2 Nk \frac{kT}{2E_F} = \gamma T,$$

где N – число свободных электронов.

- Концентрация фононов зависит от температуры по закону

$$n_{\text{ф}} \sim \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

- Коэффициент теплопроводности решетки:

$$\lambda_{\text{реш}} = l_{\text{ф}} c_V v_{\text{зв}} / 3,$$

где c_V – теплоемкость единицы объема кристалла, $v_{\text{зв}}$ – скорость звука, $l_{\text{ф}}$ – длина свободного пробега фононов.

- Коэффициент теплопроводности электронного газа:

$$\lambda_{\text{эл}} = c_{\text{эл}} v_F l_{\text{эл}} / 3 = \frac{\pi^3}{3} \frac{Mk^2}{mv_F} l_{\text{эл}} T,$$

где $c_{\text{эл}}$ – теплоемкость единицы объема газа, v_F – фермиевская скорость электронов, $l_{\text{эл}}$ – длина свободного пробега электронов.

- Скорости распространения продольных (v_l) и (v_τ) поперечных волн в кристалле:

$$v_l = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \text{ и } v_\tau = \sqrt{\frac{G}{\rho}},$$

где E – модуль нормальной упругости (Юнга); G – модуль сдвига.

- Усредненное значение скорости звука $v_{зв}$:

$$\frac{3}{v_{зв}^3} = \frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_\tau^3}.$$

Пример решения задачи

Задача. Определить количество теплоты ΔQ , необходимое для нагревания кристалла NaCl массой $m = 20$ г на $\Delta T = 2$ К, в двух случаях, если нагревание происходит от температуры: 1) $T_1 = \theta_D$; 2) $T_2 = 2$ К. Характеристическую температуру Дебая θ_D для NaCl принять равной 320 К.

Решение. Количество теплоты ΔQ , подводимое для нагревания тела от температуры T_1 до T_2 , может быть вычислено по формуле

$$\Delta Q = \int_{T_1}^{T_2} C dT,$$

где C – теплоемкость тела (системы).

Теплоемкость тела связана с молярной теплоемкостью C_m , соотношением $C = (m/M)C_m$, где m – масса тела; M – молярная масса.

В общем случае C_m является функцией температуры, поэтому за знак интеграла ее выносить нельзя. Однако в первом случае изменением теплоемкости по сравнению с ее значением при температуре T_1 можно пренебречь и считать ее на всем интервале температур ΔT постоянной и равной $C_m(T_1)$. Поэтому можно считать

$$\Delta Q = (m/M)C_m(T_1) \Delta T.$$

Молярная теплоемкость в теории Дебая с учетом закона выражается через сложный интеграл, поэтому при проведении расчетов обычно используют табулированные значения отношения $C_v/3nk$ для различных приведенных температур T/θ_D . Соответствующая таблица приведена в приложении 3. Из нее следует, что при

$T/\theta_D = 1$ отношение $C_V/3nk = 0,952$. С учетом закона Неймана-Коппа для молярной теплоемкости химически сложных твердых тел окончательно для NaCl получим

$$\Delta Q = (m/M) \cdot 2.3R \cdot 0,952 \cdot \Delta T = 32,5 \text{ Дж.}$$

Во втором случае ($T \ll \theta_D$) нахождение ΔQ облегчается тем, что можно воспользоваться предельным законом Дебая, согласно которому теплоемкость пропорциональна T^3 .

В этом случае теплоемкость сильно изменяется в пределах заданного интервала температур и ее нельзя выносить за знак интеграла при расчете ΔQ . Тогда

$$\Delta Q = 2 \cdot \frac{m}{M} \frac{12\pi^4}{5} \frac{R}{\theta_D^3} \int_{T_2}^{T_2+\Delta T} T^3 dT = \frac{m}{M} \frac{24\pi^4}{5} \frac{R}{\theta_D^3} \left(\frac{(T_2 + \Delta T)^4}{4} - \frac{T_2^4}{4} \right).$$

С учетом того, что $T_2 + \Delta T = 2T_2$, получим

$$\Delta Q = \frac{m}{M} \frac{6\pi^4}{5} \frac{R}{\theta_D^3} 15T_2^4 = 2,44 \text{ мДж.}$$

Задачи

3.1. Найти коэффициент объемного расширения β для анизотропного кристалла, коэффициенты линейного расширения которого по трем взаимно перпендикулярным направлениям составляют $\alpha_1 = 1,25 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$; $\alpha_2 = 1,10 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$; $\alpha_3 = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$.

3.2. Каково максимальное изменение $\Delta P_{\text{макс}}$ потенциальной энергии атомов в кристаллической решетке твердого тела при гармонических колебаниях, если амплитуда тепловых колебаний составляет 5 % от среднего межатомного расстояния? Среднее расстояние r_0 между атомами принять равным 0,3 нм, модуль Юнга $E = 100 \text{ ГПа}$.

3.3. Показать, что если смещение частиц в кристаллической решетке твердого тела подчиняется закону Гука $F(x) = -ax$, то теплового расширения отсутствует.

3.4. Вычислить для железа коэффициент ангармоничности b в уравнении $f(x) = -ax + bx^2$, если температурный коэффициент линейного расширения $\alpha = 1,2 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, модуль Юнга $E = 200 \text{ ГПа}$, межатомное расстояние $r_0 = 0,25 \text{ нм}$.

3.5. Показать, считая коэффициент Грюнайзена $\gamma = 1$, что электронный вклад в тепловое расширение металла становится существенным только при очень низких температурах – порядка 10 К.

3.6. Оценить значение коэффициента линейного расширения α вольфрама при 100 К, если $\theta_D = 400$ К, $\alpha = 4,6 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ при 298 К. Считать, что в указанном интервале сжимаемость вольфрама не зависит от температуры. К какому результату приведет учет температурной зависимости модуля всестороннего сжатия?

3.7. Удельные теплоемкости свинца и алюминия при постоянном объеме и температуре 20 °С составляют соответственно 126 и 896 Дж/(кг·К). Вычислить теплоемкость килограмм-моля (C_V) для каждого из этих металлов и сравнить со значениями, получаемыми по закону Дюлонга и Пти.

3.8. Определить с учетом нулевой энергии:

1) среднюю энергию \bar{E} линейного одномерного квантового осциллятора при температуре $T = \theta_E$ ($\theta_E = 200$ К);

2) энергию U системы, состоящей из $N = 10^{25}$ квантовых трехмерных независимых осцилляторов, при температуре $T = \theta_E$ ($\theta_E = 300$ К).

3.9. Найти частоту ν колебаний атомов серебра по теории теплоемкости Эйнштейна, если характеристическая температура металла $\theta_E = 165$ К.

3.10. Во сколько раз изменится средняя энергия \bar{E} квантового осциллятора, приходящаяся на одну степень свободы, при повышении температуры от $T_1 = \theta_E/2$ до $T_2 = \theta_E$? Учесть нулевую энергию.

3.11. Определить отношение \bar{E}/\bar{E}_T средней энергии квантового осциллятора к средней энергии теплового движения молекул идеального газа при температуре $T = \theta_E$.

3.12. Используя квантовую теорию теплоемкости Эйнштейна, вычислить изменение ΔU_M молярной внутренней энергии кристалла при нагревании его на $\Delta T = 2$ К от температуры $T = \theta_E/2$.

3.13. Найти количество теплоты Q , необходимое для нагревания одного моля кристалла золота от температуры $T_1 = \theta_E$ до температуры $T_2 = 2\theta_E$. Расчеты выполнить, используя классическую теорию теплоемкости (закон Дюлонга и Пти) и квантовую теорию Эйнштейна. Характеристическая температура Эйнштейна $\theta_E = 125$ К. Найти относительную погрешность, даваемую расчетами по классической теории в указанном температурном интервале.

3.14. При не слишком низких температурах квантовая теория теплоемкости Эйнштейна достаточно хорошо согласуется с экспериментом. Определить по Эйнштейну изменение ΔU внутренней энергии кристалла германия массой $m = 30$ г при его нагревании от температуры $T_1 = (1/4) \theta_E$ до $T_2 = (1/2) \theta_E$, где $\theta_E = 280$ К. Во сколько раз полученное значение ΔU меньше рассчитанного по классической теории (закон Дюлонга и Пти)?

3.15. Теплоемкость серебра при 10 К равна 199 Дж/(кмоль·К). Определить характеристическую температуру.

3.16. Определить приближенную скорость звука в алмазе, зная, что $\theta_D = 1860$ К и $d = 0,154$ нм.

3.17. Найдите характеристическую температуру меди по формуле Линдемана, если $T_{пл} = 1356$ К.

3.18. Найти значение разностей теплоемкостей $C_p - C_v$ для висмута при 300 К ($\alpha = 40 \cdot 10^{-6}$ К $^{-1}$; коэффициент всестороннего изотермического сжатия $K = 2,97 \cdot 10^{-11}$ м 2 /Н; $\rho = 9,8 \cdot 10^3$ кг/м 3).

3.19. Определить максимальную частоту ω_{max} собственных колебаний в кристалле золота по теории Дебая. Характеристическая температура $\theta_D = 180$ К.

3.20. Вычислить максимальную частоту ω_{max} собственных колебаний в кристалле серебра, если молярная теплоемкость серебра при $T = 20$ К равна $C = 1,7$ Дж/(моль·К).

3.21. Используя квантовую теорию теплоемкости Дебая, вычислить изменение ΔU_m молярной внутренней энергии кристалла при нагревании его на $\Delta T = 2$ К от температуры $T = \theta_D / 2$.

3.22. Кристалл хрома массой $m = 104$ г имеет при температурах $T_1 = 50$ К и $T_2 = 60$ К теплоемкости $C_1 = 1,94$ Дж/К и $C_2 = 3,36$ Дж/К. Найти характеристическую температуру θ_D и молярную теплоемкость C_m хрома при температуре $T = 30$ К.

3.23. Определить изменение ΔU внутренней энергии кристалла никеля массой $m = 50$ г при его охлаждении от температуры $T_1 = 45$ К до $T_2 = 30$ К. Характеристическая температура Дебая $\theta_D = 450$ К.

3.24. Кристалл бериллия массой $m = 20$ г помещен в калориметр. Определить количество теплоты Q , подведенное к кристаллу, если его температура изменилась с $T_1 = 72$ К до $T_2 = 96$ К. Характеристическая температура Дебая $\theta_D = 1440$ К.

3.25. Вычислить электронную теплоемкость $C_V^{\text{эл}}$ меди при 2 К и 1000 К и сравнить ее с теплоемкостью решетки $C_V^{\text{реш}}$ при тех же температурах ($\theta_D = 316 \text{ К}$; $\gamma = 7,28 \cdot 10^{-4} \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{град}^2)$).

3.26. Показать, что при низких температурах коэффициенты термического расширения α кристаллов стремятся к нулю.

3.27. По экспериментальным данным по молярной теплоемкости сплава V + 90 % Cr, приведенным в табл. 3.1, построить график зависимости C_V / T от T^2 и показать, что температурная зависимость теплоемкости описывается уравнением $C_V = \gamma T + \beta T^2$. Определить константы γ и β .

Таблица 3.1

$T, \text{ К}$	$C_V \cdot 10^5$ Дж/(моль·К)	$T, \text{ К}$	$C_V \cdot 10^5$ Дж/(моль·К)	$T, \text{ К}$	$C_V \cdot 10^5$ Дж/(моль·К)
1,407	3,05	2,106	4,68	3,489	8,20
1,450	3,17	2,523	5,69	3,637	8,61
1,500	3,32	2,994	6,90	3,848	9,20
1,618	3,58	3,236	7,52	4,073	9,87
1,824	4,05				

3.28. Известно, что электронная теплоемкость металла изменяется с температурой линейно, а решеточная – по закону Дебая. Используя экспериментальные данные для сплава V + 80 % Cr, приведенные на рис. 3.1, определить: а) две температуры, при которых электронная теплоемкость равна решеточной; б) какую часть полной теплоемкости при комнатной температура составляет электронная теплоемкость.

3.29. Найти энергию ε фонона, соответствующего максимальной частоте ω_{max} Дебая, если характеристическая температура Дебая $\theta_D = 250 \text{ К}$.

3.30. Вычислить усредненную скорость $v_{\text{зв}}$ фононов (скорость звука) в серебре. Модули продольной E и поперечной G упругости, а также плотность ρ серебра считать известными.

3.31. Характеристическая температура Дебая для вольфрама равна $\theta_D = 310 \text{ К}$. Определить длину волны $l_{\text{ф}}$ фононов, соответствующих частоте $\nu = 0,1\nu_{\text{max}}$. Усредненную скорость звука в вольфраме вычислить. Дисперсией волн в кристалле пренебречь.

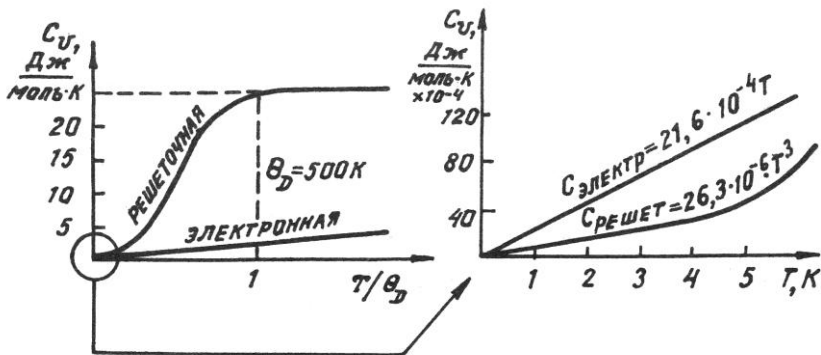


Рис. 3.1. Зависимость решеточной и электронной составляющих теплоемкости металла от температуры

3.32. Определить усредненную скорость v звука в кристалле, характеристическая температура которого $\theta_D = 300$ К. Межатомное расстояние d в кристалле равно $0,25$ нм.

3.33. Вычислить среднюю длину свободного пробега фононов в кварце l_ϕ при некоторой температуре, если при той же температуре теплопроводность $\lambda = 13$ Вт/(м·К), молярная теплоемкость кварца $C = 44$ Дж/(моль·К) и усредненная скорость звука $v = 5$ км/с. Плотность кварца $\rho = 2,65 \cdot 10^3$ кг/м³.

3.34. Оценить значение отношения электронной и решеточной составляющих теплопроводности чистого металла при температуре 298 К, считая $c_{эл}/c_V \cong 0,01$, $v_{зв} \cong 5 \cdot 10^3$ м/с, $v_F \cong 10^6$ м/с, $l_\phi \cong 10^{-9}$ м, $l_{эл} \cong 10^{-8}$ м.

3.35. Резонансная частота цилиндрического никелевого стержня длиной $0,1$ м и диаметром $0,442$ см равна 1880 Гц. Определить модуль Юнга, если плотность никеля равна $8,8 \cdot 10^3$ кг/м³.

3.36. Пики внутреннего трения, связанные с диффузионным перемещением атомов кислорода по междоузлиям в ниобии, наблюдались при 130 °С (резонансная частота $0,45$ Гц) и при 260 °С (резонансная частота 2096 Гц). Определить коэффициенты диффузии D кислорода в ниобии при этих температурах и температурную зависимость D .

3.2. Электрические свойства

Основные формулы

- Подвижность носителей заряда:

$$\mu = v_{\text{др}} / E = e\tau_p / m^*,$$

где $v_{\text{др}}$ – скорость дрейфа, E – напряженность поля, τ_p – время релаксации, m^* – эффективная масса заряда.

- Электропроводность металлов:

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2}{m^*} \tau_p = \frac{ne^2 l_F}{m^* v_F},$$

где τ_p – время релаксации; l_F – средняя длина свободного пробега электронов; m^* – эффективная масса электронов.

- Удельная электропроводность собственных полупроводников:

$$\sigma = en(\mu_n + \mu_p),$$

где μ_n и μ_p – подвижности электронов и дырок; e – заряд электрона; n – концентрация носителей заряда.

- Напряжение U_x на гранях образца при эффекте Холла:

$$U_x = R_x B l j,$$

где R_x – постоянная Холла; B – индукция магнитного поля; l – ширина пластины; j – плотность тока.

- Постоянная Холла для полупроводников типа алмаза, обладающих носителями одного типа:

$$R_x = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en}.$$

Примеры решения задач

Задача 1. Вычислить для металлического натрия: а) время релаксации τ_p при $T = 300$ К; б) среднюю длину свободного пробега $l_{\text{ср}}$ при 300 К; в) дрейфовую скорость $v_{\text{др}}$ в поле $E = 100$ В/м.

Электропроводность натрия $\sigma = 2,17 \cdot 10^7$ Ом⁻¹·м⁻¹. Считать, что отношение эффективной массы электрона к массе свободного электрона $m^*/m = 1,2$; параметр ОЦК-решетки натрия $a = 4,3 \cdot 10^{-10}$ м; энергия Ферми $E_F = 3,16$ эВ.

Решение. Из теории электропроводности свободных электронов

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_p}{m^*} = \frac{ne^2\tau_p}{1,2m}.$$

В выражении для электропроводности n – концентрация электронов в Na. На элементарную кубическую ячейку Na приходится по два атома натрия и, следовательно, по два свободных электрона, поскольку этот металл одновалентен. Таким образом, концентрация электронов

$$n = \frac{2}{a^3} = \frac{2}{4,3^3 \cdot 10^{10}} = 2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

а) Вычислим время релаксации τ_p , воспользовавшись формулой для σ : $\tau_p = \frac{1,2\sigma m}{ne^2} = 3,7 \cdot 10^{-14} \text{ с}.$

б) Для вычисления средней длины свободного пробега l_{cp} необходимо знать среднее время между столкновениями τ и среднюю скорость электронов. При рассеянии электронов на высокоэффективных центрах рассеяния (например, на высокочастотных фонах, когда электрон теряет скорость направленного движения в единичном акте рассеяния) за среднее время между столкновениями τ можно принимать время релаксации τ_p . Поскольку средняя скорость электронов в металле, ответственных за электронную проводимость, равна скорости Ферми, то

$$l_{cp} = \tau v_F \approx \tau_p \sqrt{\frac{2E_F}{m^*}} = 3,7 \cdot 10^{-14} \cdot 0,96 \cdot 10^6 = 3,55 \cdot 10^{-8} \text{ м}.$$

в) Дрейфовую скорость электрона $v_{др}$ вычислим по формуле равноускоренного движения

$$v_{др} = \frac{eE}{m^*} \tau_p = 0,54 \text{ м/с}.$$

Задача 2. Вычислить, при каком соотношении концентраций электронов n и дырок p в примесном германии эдс Холла становится равной нулю, если подвижности электронов и дырок соответственно $\mu_n = 3900 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и $\mu_p = 1900 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

Решение. Запишем выражение для холловского напряжения U_x в виде $U_x = R_x B l j$, где R_x – постоянная Холла; B – индукция магнитного поля; l – ширина пластины; j – плотность тока.

Распишем постоянную Холла для полупроводника с носителями заряда обоих типов:

$$R_x = \frac{A \mu_p^2 p - \mu_n^2 n}{e \mu_p p + \mu_n n}.$$

Из приведенного выражения вытекает, что постоянная Холла, а следовательно, и эдс Холла обращаются в нуль при условии

$$\mu_p^2 p - \mu_n^2 n = 0.$$

Окончательно получим

$$\frac{n}{p} = \frac{\mu_p^2}{\mu_n^2} = 0,273.$$

Ответ: $n/p = 0,273$.

Задача 3. Построить графики концентрационной зависимости электросопротивления при комнатной температуре для сплавов, подвергнутых различным видам термической обработки:

а) Zr-Nb, закаленных с температуры 1700 °С, и после длительного отжига при 600 °С;

б) Fe-V, закаленных с температуры 1400 °С, и после длительного отжига при 900 °С.

Диаграммы состояний этих систем приведены на рис. 3.2.

Решение. В обеих системах в высокотемпературных областях, из которых производится закалка, сплавы образуют непрерывные ряды твердых растворов замещения, которые фиксируются в результате закалки. Поскольку все рассматриваемые металлы являются переходными и имеют сходное электронное строение, то величина электросопротивления твердых растворов этих металлов определяется главным образом длиной свободного пробега электронов. В свою очередь длина свободного пробега зависит от степени искажения кристаллической решетки, которая максимальна при одинаковом содержании металлов в твердом растворе.

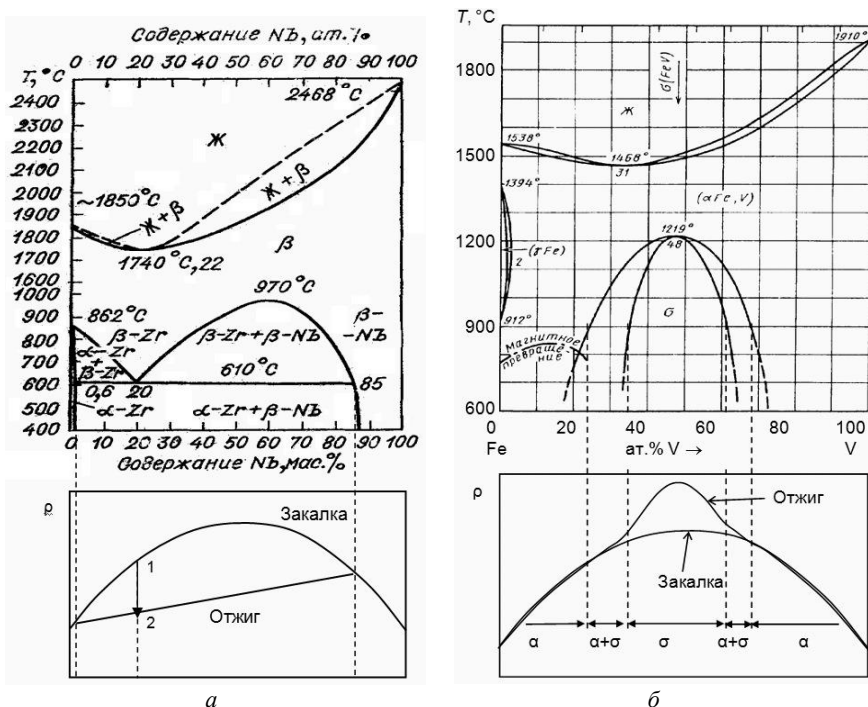


Рис. 3.2. Диаграммы состояний систем Zr-Nb (а) и Fe-V (б), а также концентрационные зависимости изменения электросопротивления ρ этих сплавов после различных термических обработок

В итоге концентрационная зависимость электросопротивления закаленных сплавов носит параболический характер с максимумом при 50 ат.%.
 В результате отжига сплавов системы Zr-Nb, содержащих (0,6 – 85,0) мас.% Nb, из однофазных сплавов образуется механическая смесь двух фаз α -Zr + β .

Поскольку электрическая проводимость сплава, состоящего из двух и более фаз, аддитивно складывается из проводимостей фаз, то концентрационная зависимость электросопротивления сплавов Zr-Nb в указанной области концентраций должна носить практически линейный характер.

Таким образом, отжиг закаленных сплавов, приводящий к распаду твердого раствора, будет сопровождаться заметным уменьшением электросопротивления (точки 1 и 2 на рис. 3.2, а). В областях

твердых растворов, прилегающих к чистым металлам, кривые представляют собой отрезки параболы.

В системе Fe-V отжиг однофазных закаленных сплавов с примерно одинаковым количеством металлов приводит к образованию промежуточной σ -фазы, для которой характерно наличие как металлической, так и ковалентной типов связей. При образовании ковалентной связи, которая обуславливает и хрупкость σ -фазы, уменьшается концентрация свободных электронов, а значит возрастает величина электрического сопротивления. В однофазных областях твердого раствора как закаленных, так и отожженных сплавов системы Fe-V концентрационная зависимость носит параболический характер.

Следует отметить, что поскольку отжиг сопровождается уменьшением дефектности кристаллической решетки, то из-за некоторого уменьшения средней длины свободного пробега при отжиге происходит небольшое снижение величины электросопротивления (не более нескольких десятых долей процента).

Задачи

3.37. По медному проводнику с площадью поперечного сечения $0,2 \text{ см}^2$ протекает ток $I = 1 \text{ А}$. Чему равна добавка к скорости электрона в направлении поля (скорость дрейфа) $v_{\text{др}}$?

3.38. Чему равна подвижность μ электронов натрия при $0 \text{ }^\circ\text{C}$, если его электропроводность $\sigma = 0,23 \cdot 10^8 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$, а концентрация носителей зарядов $n = 2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$?

3.39. Отношение электропроводности Ag и Cu при некоторой температуре равно $6,12/5,76$. Вычислить отношение подвижностей электронов в этих металлах.

3.40. Электропроводность одновалентной меди при температуре $0 \text{ }^\circ\text{C}$ $\sigma = 6 \cdot 10^7 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$. Найдите время релаксации электрона.

3.41. Удельное сопротивление серебряного провода при комнатной температуре равно $1,54 \cdot 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{м}$. Вычислить скорость дрейфа электронов при напряженности электрического поля 1 В/см , считая, что в 1 м^3 серебра имеется $5,8 \cdot 10^{28}$ электронов проводимости. Определите подвижность и время релаксации электронов.

3.42. Вычислить скорость дрейфа $v_{др}$ электрона меди при $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ и напряженности электрического поля 100 В/м . Электропроводность меди при этой температуре $\sigma = 6 \cdot 10^7\text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$. Чему равно отношение скорости дрейфа к скорости Ферми, если энергия Ферми для меди равна 7 эВ ?

3.43. Наличие вакансий в меди приводит к возрастанию удельного сопротивления приблизительно на $1 \cdot 10^{-8}\text{ Ом} \cdot \text{м}$ при увеличении числа вакантных мест в кристаллической решетке на 1% . Предположим, что медь закалили от точки плавления ($T_{пл} = 1083\text{ }^{\circ}\text{C}$) до температуры жидкого воздуха ($T = -190\text{ }^{\circ}\text{C}$) так быстро, что равновесная концентрация вакансий, существующая при $T_{пл}$, осталась зафиксированной в образце. Приведет ли избыток вакансий к заметному возрастанию удельного сопротивления по сравнению с соответствующим равновесному состоянию при $-190\text{ }^{\circ}\text{C}$? Энергия образования вакансии меди $\sim 1\text{ эВ}$.

3.44. Собственный полупроводник (германий) имеет при некоторой температуре удельное сопротивление $\rho = 0,48\text{ Ом} \cdot \text{м}$. Определить концентрацию носителей n заряда, если подвижности электронов и дырок равны соответственно $\mu_n = 0,36$ и $\mu_p = 0,16\text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

3.45. Удельная проводимость σ кремния с примесями равна 112 См/м . Определить подвижность μ_p дырок и их концентрацию n_p , если постоянная Холла $R_X = 3,66 \cdot 10^{-4}\text{ м}^3/\text{Кл}$. Принять, что полупроводник обладает только дырочной проводимостью.

3.46. Постройте графики концентрационной зависимости электросопротивления и коэффициента теплопроводности для сплавов:

а) Fe-Ni, закаленных с температур $1300\text{ }^{\circ}\text{C}$ и $750\text{ }^{\circ}\text{C}$, а также после длительного отжига при $340\text{ }^{\circ}\text{C}$;

б) Fe-Ti после отжига и закалки с температуры $930\text{ }^{\circ}\text{C}$, а также после длительного отжига при $580\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Диаграммы состояний этих систем приведены на рис. 3.3 - 3.4.

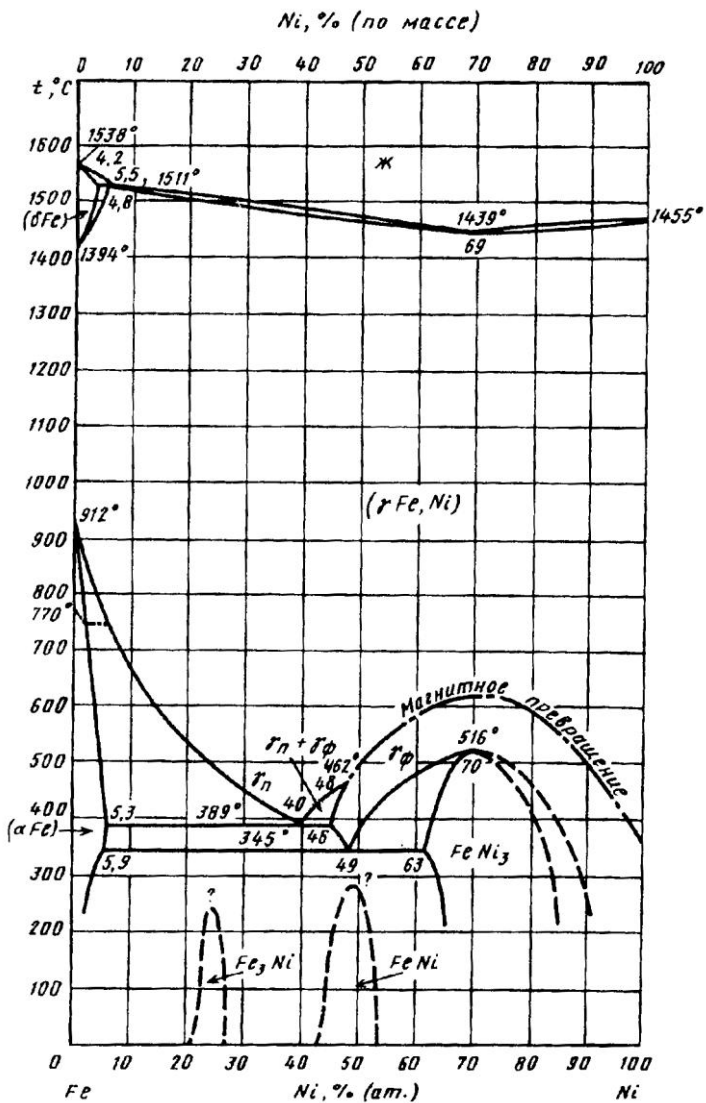


Рис. 3.3. Диаграмма состояний системы Fe-Ni

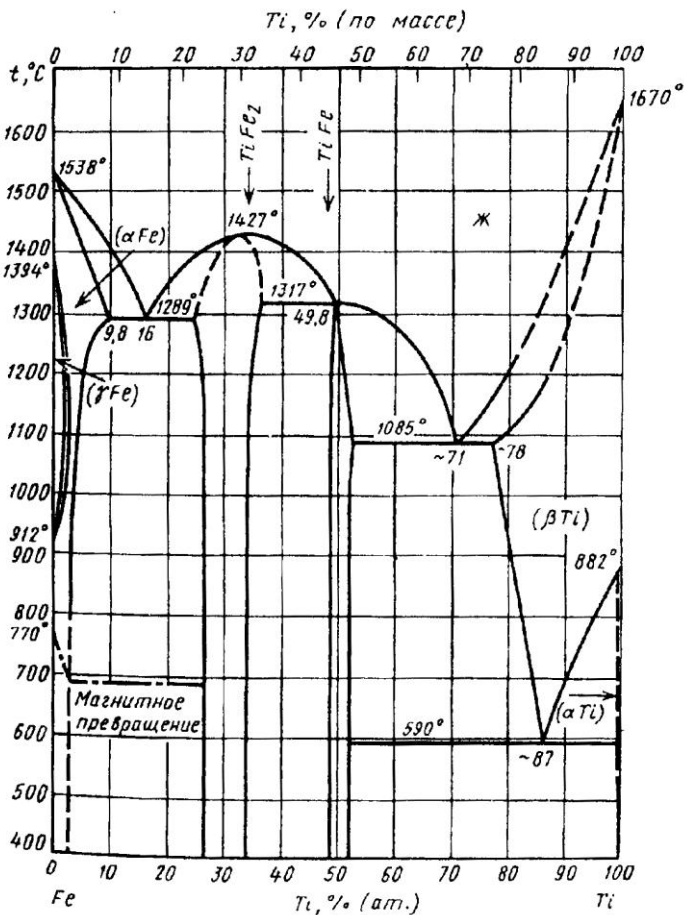


Рис. 3.4. Диаграмма состояний системы Fe-Ti

3.3. Магнитные свойства

Основные формулы

- Магнитная восприимчивость единицы объема:

$$\chi = \frac{I}{H},$$

где I – намагниченность (суммарный магнитный момент единицы объема); H – напряженность поля.

- Магнитная индукция в изотропных материалах:

$$B = \mu_0(H + I) = \mu_0 \mu H,$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м – магнитная проницаемость вакуума;

$\mu = 1 + \chi$ – относительная магнитная проницаемость вещества.

- Атомная магнитная восприимчивость (для одного моля):

$$\chi_a = \chi V_M,$$

где V_M – молярный (атомный) объем.

- Атомная диамагнитная восприимчивость химического элемента:

$$\chi_a = -\frac{\mu_0 n z e^2 \langle r^2 \rangle}{6m} \approx (-2,8z \cdot 10^{-9}) \cdot \frac{4\pi}{V_M},$$

где n – число атомов в единице объема; z – порядковый номер элемента; e , m – заряд и масса электрона; $\langle r^2 \rangle$ – среднее значение квадрата радиуса электронных орбит.

- Закон Кюри (для паров металлов и солей):

$$\chi_a = \frac{I}{H} = \frac{n\mu_0 M_{ат}^2}{3kT},$$

где $M_{ат}$ – магнитный момент атома; n – число атомов в единице объема.

- Закон Кюри–Вейсса (для твердых парамагнитных металлов):

$$\chi_a = \frac{C}{T - \theta},$$

где C – постоянная Кюри; θ – парамагнитная температура Кюри (в ферромагнетиках она несколько выше точки Кюри θ_K).

Примеры решения задач

Задача 1. Найти значения намагниченности I и индукции B для куска Ge, помещенного в поле напряженностью $H = 10^6$ А/м. Определить изменение индукции ΔB при помещении Ge в вакуум. Магнитная восприимчивость германия $\chi = -1,26 \cdot 10^{-6}$.

Решение. Намагниченность образца I можно вычислить следующим образом:

$$I = \chi H = -1,26 \cdot 10^{-6} \cdot 10^6 = -1,26 \text{ А/м.}$$

Индукция магнитного поля определяется соотношением

$$B = \mu_0(H + I) = 4\pi \cdot 10^{-7} (10^6 - 1,258) = (1,258 - 1,576 \cdot 10^{-6}) \text{ Тл.}$$

Таким образом, изменение индукции при внесении Ge в вакуум составляет $\Delta B = -1,576 \cdot 10^{-6}$ Тл.

Ответ: $I = 1,26$ А/м, $\Delta B = -1,576 \cdot 10^{-6}$ Тл.

Задача 2. Предположим, что никель парамагнитен при всех температурах T и его восприимчивость подчиняется закону Кюри–Вейсса с критической температурой $T_k = 0$ К. Допустим далее, что приближенное соотношение для намагниченности

$$I = \frac{nBM_{\text{ат}}^2}{3kT}$$

справедливо вблизи насыщения (закон Кюри–Вейсса). Здесь $M_{\text{ат}}$ – магнитный момент атома; n – число атомов в единице объема; k – постоянная Больцмана.

Вычислить индукцию внешнего магнитного поля B , необходимую для того, чтобы создать в этом парамагнитном металле при температуре $T = 300$ К ту же намагниченность $I_{\text{нас}} = 0,44 \cdot 10^6$ А/м, которая спонтанно существует при этой температуре в ферромагнитном никеле.

Решение. Поскольку образец намагничен почти до насыщения, то приближенно положим

$$I_{\text{нас}} = nM_{\text{ат}}.$$

Подставив это выражение в закон Кюри–Вейсса, получим

$$I_{\text{нас}} = \frac{I_{\text{нас}}^2 B}{3nkT}.$$

Отсюда для индукции магнитного поля B получим выражение

$$B = \frac{3kTn}{I_{\text{нас}}} = \frac{3kT\rho N_A}{I_{\text{нас}} A}.$$

Здесь ρ – плотность никеля; N_A – число Авогадро; A – атомная масса никеля. Подставив значения массы $A = 58,7 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, плотности $\rho = 9,8 \cdot 10^3$ кг/м³, получим $B = 2,6 \cdot 10^6$ Тл.

Ответ: $B = 2,6 \cdot 10^6$ Тл.

Задачи

3.47. Оценить, во сколько раз атомная диамагнитная восприимчивость χ_a ионов бария превосходит χ_a кальция.

3.48. Показать, что магнитная восприимчивость α -железа выше точки Кюри подчиняется закону Кюри–Вейсса.

Найти константу θ и эффективное число магнетонов Бора на атом. Значения $1/\chi$ для α -Fe для температур выше точки Кюри приведены в табл. 3.2.

Таблица 3.2

T, K	$(1/\chi) \cdot 10^{-4}$	T, K	$(1/\chi) \cdot 10^{-4}$
1097	1,425	1157	4,29
1111	2,09	1167	4,66
1130	3,07	1177	5,03
1145	3,62	1182	5,40
1148	3,84		

3.49. Найти значение намагниченности I и индукцию B для ниобия в поле $H = 10^6$ А/м, если $\chi = 1,88 \cdot 10^{-5}$. Как изменится величина B в присутствии Nb по сравнению с индукцией в вакууме при том же значении напряженности поля?

3.50. Известно, что в изотропном магнетике плотность энергии магнитного поля $W = \mu_0 \mu H^2 / 2$. Доказать, что парамагнетик втягивается в магнитное поле, а диамагнетик – выталкивается.

3.51. Атом водорода помещен в магнитное поле 10^5 А/м. Найти магнитный момент атома, если среднее значение квадрата радиуса электрона $\langle r^2 \rangle = \frac{2}{3} r_1^2$, где $r_1 = 0,053$ нм – радиус первой боровской орбиты.

3.52. Атомная магнитная восприимчивости окиси хрома Cr_2O_3 при температуре $T = 300$ К $\chi_a = 5,8 \cdot 10^{-5}$ м³/кмоль.

Рассчитать магнитный момент одной молекулы Cr_2O_3 , выраженной в магнетонах Бора $M_B = 0,92 \cdot 10^{-23}$ А·м².

3.53. Рассчитать магнитный момент атома железа и выразить его в магнетонах Бора $M_B = 0,92 \cdot 10^{-23}$ А·м², если в состоянии насыщения магнитная восприимчивость равна $1,57 \cdot 10^6$ А/м.

Считать $A = 56 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\rho = 7,9 \cdot 10^3$ кг/м³.

3.54. Рассчитать намагниченность насыщения никеля, если известно, что число электронов, находящихся на незаполненной $3d$ -оболочке, равно 0,6.

Считать $A = 58,7 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\rho = 9,8 \cdot 10^3$ кг/м³.

3.55. Объяснить, почему алюминий проявляет парамагнитные свойства, а висмут и сурьма – диамагнитные.

3.56. Объяснить, почему висмут обладает заметно большей диамагнитной восприимчивостью по сравнению со свинцом.

3.57. Объяснить, почему переходные металлы являются парамагнетиками.

4. ДИФФУЗИЯ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

Основные формулы

- Линейные феноменологические уравнения потоков:

$$J_i = \sum_{k=1}^n L_{ik} X_{ik} \quad (i = 1, 2, \dots, n),$$

где J_i – потоки; X_k – термодинамические силы.

- Теорема Онзагера (соотношение взаимности): $L_{ik} = L_{ki}$.
- Скорость роста энтропии в необратимом процессе:

$$\sigma = \frac{\partial(\Delta S)}{\partial t} = \frac{1}{T} \sum_i J_i X_i,$$

где $J_i = \frac{\partial \alpha_i}{\partial t}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), $X_i = \frac{\partial(\Delta S)}{\partial \alpha_i}$,

α_i – флуктуации известных параметров состояния системы.

- Нестационарное решение для бесконечно тонкого слоя диффундирующего вещества:

$$C(x, t) = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right),$$

где t – время; x – расстояние по нормали к исходному слою диффузанта толщиной h ; D – коэффициент диффузии; $\alpha = C_0 h$.

- Термодинамическая сила диффузии:

$$X_i = -\text{grad} \mu_i,$$

где μ_i – химический потенциал i -го компонента.

- Формула Даркена для взаимной диффузии в бинарной системе:

$$\tilde{D} = (C_1 D_2^* + C_2 D_1^*) \left(1 + \frac{\partial \ln f_1}{\partial \ln C_1} \right),$$

где D_1^* – парциальные коэффициенты самодиффузии компонентов; f_i – коэффициент термодинамической активности i -го компонента.

- Первый закон диффузии Фика: $J_i = -D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}$.

- Второй закон Фика: $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$.

а) Решение для бесконечного тонкого слоя диффундирующего вещества:

$$C(x, t) = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right), \text{ где } \alpha = C_0 h.$$

б) Решение для полубесконечных твердых тел:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right],$$

где функция ошибок (интеграл Гаусса) $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\eta^2) d\eta$.

- Температурная зависимость коэффициентов диффузии:

$$D^* = D_0 \exp\left(\frac{-Q}{KT}\right),$$

где Q – энергия активации; $Q = E_f + E_m$ – сумма энергий образования и миграции точечных дефектов.

- Соотношение Эйнштейна: $D^* = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle X^2 \rangle}{2\tau}$.

- Поправка Маннинга к формуле Даркена:

$$S = 1 + \frac{2C_1 C_2 (D_1^* - D_2^*)^2}{M_0 (C_1 D_1^* + C_2 D_2^*) (C_1 D_2^* + C_2 D_1^*)},$$

где структурный коэффициент M_0 равен 7,15 для ГЦК и 5,33 – для ОЦК-структур.

- Решение Фишера для зернограничной диффузии:

$$C(x, y, t) = C_0 \exp\left[-(4D_l / \pi t)^{1/4} y / (2aD_g)^{1/2}\right] \operatorname{erf} C(x / 2\sqrt{D_l t}),$$

$$C'(y, t) = C_0 \exp\left[-(4D_l / \pi t)^{1/4} y / (2aD_g)^{1/2}\right].$$

Примеры решения задач

Задача 1. В табл. 4.1 приведены результаты измерений радиоактивности изотопа ^{63}Ni в зависимости от глубины проникновения. В начале опыта изотоп ^{63}Ni был нанесен бесконечно тонким слоем на поверхность образцов никеля. Диффузионный отжиг проведен при температуре 1200°C в течение 20 ч.

Таблица 4.1

Расстояние от поверхности x , мкм	100	200	300	400	500
Радиоактивность I , импульсов/мин·м ²	5012	3981	2512	1413	525

Определить коэффициент самодиффузии никеля.

Решение. Поскольку радиоактивность пропорциональна концентрации меченных атомов никеля, а зависимость концентрации от глубины проникновения выражается как

$$C(x,t) = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right),$$

$$\text{то } \ln I = \ln A + \ln \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi Dt}} - \frac{x^2}{4Dt},$$

где A – коэффициент пропорциональности между радиоактивностью и концентрацией.

Так как это выражение является уравнением прямой вида

$$\ln I = a + bx^2, \text{ где } b = -\frac{1}{4Dt},$$

то, построив график зависимости $\ln I$ (x^2), можно методом наименьших квадратов определить тангенс наклона прямой:

$$b = \text{tg } \varphi = -\frac{1}{4Dt} = -9,4 \cdot 10^6 \text{ м}^2.$$

Окончательно получим

$$D = -\frac{1}{4t \cdot \text{tg } \varphi} = \frac{1}{4 \cdot 7,2 \cdot 10^4 \cdot 9,4 \cdot 10^6} = 3,7 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}.$$

Ответ: $D = 3,7 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}.$

Задача 2. Рассчитать диффузионный путь атома за сутки для коэффициентов диффузии $D = 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$ и $D = 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

Решение. Считая, что диффузионный путь – это среднеквадратичное смещение частицы за время t и $X_{\text{дифф}} = \sqrt{2Dt}$, получаем:

для $D = 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$

$$X_{\text{дифф}} = \sqrt{2 \cdot 10^{-12} \cdot 24 \cdot 3600} \cong 4 \cdot 10^{-4} = 0,4 \text{ мм};$$

для $D = 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$

$$X_{\text{дифф}} = \sqrt{2 \cdot 10^{-7} \cdot 24 \cdot 3600} \cong 1,3 \cdot 10^{-1} = 13 \text{ см}.$$

Ответ: для $D = 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$ $X_{\text{дифф}} = 0,4 \text{ мм}$,

для $D = 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ $X_{\text{дифф}} = 13 \text{ см}$.

Задача 3. В табл. 4.2 приведены результаты исследования температурной зависимости коэффициентов самодиффузии меди.

Рассчитать параметры температурной зависимости: предэкспоненциальный множитель D_0 и энергию активации самодиффузии Q .

Таблица 4.2

$T, \text{ }^\circ\text{C}$	660	760	860	960	1060
$D, \text{ м}^2/\text{с}$	$2,7 \cdot 10^{-16}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$1,6 \cdot 10^{-14}$	$9,1 \cdot 10^{-14}$	$3,7 \cdot 10^{-13}$

Решение. В соответствии с уравнением Арениуса можно построить линейную зависимость между логарифмом коэффициентов диффузии и обратной температурой. Данные для построения графика и расчета параметров температурной зависимости приведены в табл. 4.3.

Таблица 4.3

$T, \text{ К}$	933	1033	1133	1233	1333
$10^3/T, \text{ К}^{-1}$	1,06	0,97	0,88	0,81	0,75
$\ln D$	-35,8	-33,8	-31,7	-30,0	-28,6

Расчет методом наименьших квадратов дает значение тангенса угла наклона зависимости $\ln D$ от T^{-1} равное:

$$\text{tg} \alpha = -23,7 \cdot 10^3 \text{ К}.$$

Согласно уравнению Арениуса

$$\operatorname{tg} \alpha = -\frac{Q}{R},$$

и, следовательно,

$$Q = -R \cdot \operatorname{tg} \alpha = 8,3 \text{ Дж/г-ат} \cdot \text{К} \cdot 23,7 \cdot 10^3 \text{ К} = 197 \text{ кДж/моль}.$$

Предэкспоненциальный множитель находится как значение $\ln D$ при $T^{-1} = 0$ из полученного линейного уравнения температурной зависимости и равен: $\ln D_0 = -10,8$, откуда $D_0 = 2 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$.

Таким образом, температурная зависимость коэффициентов самодиффузии меди имеет следующий вид:

$$D = 2 \cdot 10^{-5} \exp\left(-\frac{197 \text{ кДж/моль}}{RT}\right), \text{ м}^2/\text{с}.$$

$$\text{Ответ: } D = 2 \cdot 10^{-5} \exp\left(-\frac{197 \text{ кДж/моль}}{RT}\right), \text{ м}^2/\text{с}.$$

Задача 4. За какое время серебро пройдет на глубину 1 мкм в медь (в объем и по границам зерен) при 200 °С?

Коэффициент объемной диффузии серебра в меди при этой температуре D составляет $3,2 \cdot 10^{-24} \text{ м}^2/\text{с}$. Параметры температурной зависимости коэффициентов граничной диффузии: ширина границы $\delta = 5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$; $D'_0 = 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$; $Q' = 96 \text{ кДж/г-ат}$.

Решение. В соответствии с моделью Фишера глубина проникновения по границам зерен:

$$X' = \left(\frac{\delta D' \sqrt{\pi \cdot t}}{2\sqrt{D}}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Глубина объемного проникновения

$$X' = \sqrt{D \cdot t},$$

следовательно,

$$t = \frac{x^2}{2 \cdot D} = \frac{10^{-12}}{6,4 \cdot 10^{-24}} = 1,5625 \cdot 10^{11} \text{ с} \approx 5000 \text{ лет}.$$

Для проникновения по границе из формулы Фишера следует, что

$$t \cong \frac{D \cdot (X')^4}{(\delta \cdot D')^2}.$$

При 200 °С

$$\delta D' = \delta D_0 \exp\left(\frac{-Q'}{R \cdot 473}\right) \cong 10^{-25} \text{ м}^3/\text{с},$$

и, соответственно,

$$t = \frac{3,2 \cdot 10^{-24} \cdot 10^{-24}}{10^{-50}} = 320 \text{ с} = 5,3 \text{ мин.}$$

Ответ: 5,3 мин.

Задача 5. Вещество, нанесенное бесконечно тонким слоем на поверхность полуограниченного образца, диффундирует внутрь (одномерная задача).

Найти значение X , при котором кривизна на концентрационной кривой $C(x)$ равна нулю, и сравните это значение с величиной среднеквадратичного смещения атомов за это же время ($\langle X^2 \rangle = 2Dt$).

Оценить долю (от первоначально нанесенного количества) вещества, которое продиффундирует за время t на расстояние, большее, чем удвоенное среднеквадратичное.

Решение. Используя соответствующее решение уравнения Фика

$$C(x, t) = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right),$$

получаем из условия $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0$, что $X = \sqrt{2 \cdot D \cdot t}$.

Доля продиффундирующего вещества для $X = 2\sqrt{2 \cdot D \cdot t}$:

$$C(x, t) = \int_{2\sqrt{2Dt}}^{\infty} C(x, t) dx = C_0 \operatorname{erfc} \sqrt{2},$$

Окончательно имеем $\frac{C}{C_0} = \operatorname{erfc} \sqrt{2} \approx 0,045$.

Ответ: $X = \sqrt{2 \cdot D \cdot t}$, $\frac{C}{C_0} = 0,045$.

Задача 6. Был проведен отжиг в течение 16 ч диффузионной пары, состоящей из чистого металла А и разбавленного раствора В в А с постоянной начальной концентрацией В, равной C_0 , при нескольких температурах.

Затем было измерено расстояние x между первоначальной плоскостью раздела и плоскостью, в которой $C(x) = 0,3C_0$. Это расстояние составляют 0,125; 0,156; 0,21 и 0,321 мм при 800, 850, 900 и 1000 °С соответственно.

Полагая, что коэффициент диффузии не зависит от концентрации, найти значение коэффициентов диффузии D для всех указанных температур и вычислите Q и D_0 .

Решение. Для указанных условий эксперимента решение уравнения Фика

$$C(x, t) = \frac{C}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2 \sqrt{D \cdot t}}.$$

Поскольку в соответствии с условием задачи при всех температурах $C/C_0 = 0,3$, то с помощью табулированных значений функции ошибок (интеграла Гаусса) можно найти, что

$$\frac{x}{2 \sqrt{D \cdot t}} = 0,37.$$

Отсюда определяемые значения коэффициентов диффузии равны:

$$4,95 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 800 \text{ °С);}$$

$$7,71 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 850 \text{ °С);}$$

$$1,40 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 900 \text{ °С);}$$

$$3,24 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 1000 \text{ °С).}$$

Построив зависимость $\lg D$ от T^{-1} методом наименьших квадратов, находим параметры температурной зависимости коэффициентов диффузии:

$$Q = 26 \text{ ккал/моль (1,13 эВ) и } D_0 \approx 9,7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}.$$

Ответ: $4,95 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$ (при 800 °С);

$$7,71 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 850 \text{ °С);}$$

$$1,40 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 900 \text{ °С);}$$

$$3,24 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с} \text{ (при } 1000 \text{ °С);}$$

$$Q = 1,13 \text{ эВ и } D_0 = 9,7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}.$$

Задача 7. Полуограниченный образец из сплава железо-углерод, содержащий вначале 1 масс.% C, отжигали в течение 20 ч при постоянной температуре в вакууме, в результате чего он потерял 0,376 г углерода.

Вычислить коэффициент диффузия углерода и его концентрацию на глубине 100 мкм от поверхности, если диффузия происходит перпендикулярно поверхности (80 см²) и концентрация углерода на этой поверхности равна нулю. Плотность образца равна плотности чистого железа (7,8 г/см³).

Решение. Решение выражается уравнением

$$C(x, t) = C_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}},$$

а для потерянного количества вещества справедливо уравнение:

$$q = \int_0^t J dt = -D \int_0^t \left(\frac{dC}{dx} \right)_{x=0} dt = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \right) C_0 \sqrt{Dt}.$$

Подставляя численные значения, получим

$$D = 4 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с} \text{ и } C/C_0 \approx 0,1.$$

Таким образом, получим $C \approx 0,1$ масс %.

Ответ: $D = 4 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с}; C \approx 0,1$ масс %.

Задача 8. Показать, что соотношение взаимности Онзагера выполняется при наличии линейной зависимости между потоками

$$\sum_{k=1}^{m-1} b_k J_k = 0, \text{ где } b_k - \text{коэффициенты.}$$

Решение. Если $b_k \neq 0$, то

$$J_m = - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{b_k}{b_m} J_k$$

и скорость роста энтропии σ трансформируется к виду

$$\sigma = \sum_{k=1}^{m-1} J_k \left(X_k - \frac{b_k}{b_m} X_m \right) \geq 0.$$

В этом представлении X_k и J_k образуют независимые системы переменных и могут быть сформулированы независимые линейные законы Онзагера в форме

$$J_k = \sum_{j=1}^{m-1} L'_{kj} X'_j; \quad X'_j = X_j - \frac{b_j}{b_m} X_m \quad (j=1;2;\dots;m-1),$$

где $L'_{ik} = L'_{ki}$ ($k=1; 2;\dots;m-1$), т.е. соотношение взаимности удовлетворяется.

Сравнивая линейные законы, можно установить связь между феноменологическими коэффициентами:

$$L_{kj} = L'_{ki}; \quad L_{km} = -\sum_{j=1}^{m-1} \frac{b_j}{b_m} L'_{kj}; \quad L_{mk} = -\sum_{j=1}^{m-1} \frac{b_j}{b_m} L'_{jk}; \quad L_{mn} = -\sum_{k,j=1}^{m-1} \frac{b_k b_j}{b_m^2} L'_{kj}.$$

Откуда, так как $L'_{ik} = L'_{ki}$, следует

$$L_{kj} = L_{jk}, \quad L_{km} = L_{mk} \quad (k, j=1; 2;\dots;m-1).$$

Задача 9. Сдвиг меток при исследовании эффекта Киркендалла в системе Ag-Au при 940 °С за 100 ч составила 0,029 см. Коэффициент взаимной диффузии в плоскости, где расположены метки ($N_{Ag} = 0,635$, $\partial N_{Ag}/\partial x = 7,2 \text{ см}^{-1}$), равен $3,7 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$.

Рассчитать парциальные коэффициенты диффузии серебра и золота.

Решение. Скорость сдвига меток

$$v = \frac{x}{2t} = \frac{0,029}{3,6 \cdot 10^5} \frac{\text{см}}{\text{с}} = 4 \cdot 10^{-8} \frac{\text{см}}{\text{с}}.$$

Следовательно, необходимо решить систему уравнений:

$$\begin{cases} 4 \cdot 10^{-8} = (D_{Ag} - D_{Au}) \cdot 7,2, \\ 3,7 \cdot 10^{-9} = D_{Ag} \cdot 0,365 + D_{Au} \cdot 0,635. \end{cases}$$

Решение дает

$$D_{Ag} = 1,7 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с} \text{ и } D_{Au} = 7,3 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}.$$

Таким образом, метки сдвигаются в сторону серебра.

Ответ: $D_{Ag} = 1,7 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$ и $D_{Au} = 7,3 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$.

Задачи

4.1. Неравновесная система характеризуется скоростью роста энтропии вида

$$\sigma T = J_1 X_1 + J_2 X_2 \geq 0,$$

а линейные законы Онзагера выражаются как

$$J_1 = L_{11}X_1 + L_{21}X_2, J_2 = L_{21}X_1 + L_{22}X_2 \text{ и } J_1 + J_2 = 0.$$

Показать, что для этих условий $L_{12} = L_{21}$.

4.2. Для случая одномерной диффузии получить форму решения второго уравнения Фика для пары полубесконечных твердых тел с использованием функции ошибок (интеграла Гаусса) $\operatorname{erf} z$ при условии: $\operatorname{erf}(0) = 0$, $\operatorname{erf}(\infty) = 1$, $\operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}(z)$.

4.3. Показать справедливость «обратных» соотношений взаимности Онзагера $L_{ik}^{-1} = L_{ki}^{-1}$ для бинарной системы при условии:

$$\sigma = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^2 J_i X_i, J_i = \sum_{k=1}^2 L_{ik} X_k \quad (i=1,2), \sum_{i=1}^2 J_i = 0, \sum_{k=1}^2 X_k = 0.$$

Указание: записать линейные соотношения Онзагера в виде

$$X_k = \sum_{j=1}^2 L_{kj}^{-1} J_j.$$

4.4. Показать, что соотношение взаимности Онзагера $L_{ik} = L_{ki}$ является частным случаем более общих соотношений вида

$$\frac{\partial J_i}{\partial x_k} = \frac{\partial J_k}{\partial x_i}.$$

4.5. Тонкую пленку радиоактивной меди нанесли на поверхность медного образца. После отжига при постоянной температуре в течение 20 ч образец разделили на слои, параллельные поверхности (x – координата середины слоя), и измерили радиоактивность J каждого слоя. Эти величины приведены в табл. 4.4.

Таблица 4.4

x , мкм	100	200	300	400	500
J , имп/мин	5012	3981	2512	1413	525

Найти коэффициенты самодиффузии меди, считая образец полубесконечным, а радиоактивность – пропорциональной концентрации изотопа. Считая, что для самодиффузии меди $D_0 = 0,2 \text{ см}^2/\text{с}$,

а $Q = 47,1$ ккал/г-ат., определить температуру отжига и коэффициенты самодиффузии при температурах 800, 900 и 1000 °С.

4.6. Известно, что диффузионные параметры лития в кремнии равны $D_0 = 2,3 \cdot 10^{-7}$ см²/с и $Q = 0,65$ эВ. Рассчитать температуру, при которой атом лития, растворенный в кремнии, будет совершать один прыжок в секунду. Параметр решетки кремния $a = 5,43 \cdot 10^{-10}$ м.

4.7. Оценить величину коэффициента диффузии D радиоактивного натрия в обычном натрии при комнатной температуре, если $Q = 0,5$ эВ, $\nu = 10^{12}$ Гц и параметр решетки $a = 4,282 \cdot 10^{-10}$ м.

4.8. Для повышения износостойкости стальных деталей производится цементация. Коэффициент диффузии углерода в сталь

$$D = 0,12 \cdot 10^{-4} \exp\left(\frac{-32000}{RT}\right) \text{ м}^2/\text{с}.$$

Сколько нужно времени для образования цементированного слоя толщиной 0,5 мм на стальной пластине при температуре диффузионного отжига 927 °С?

4.9. В рамках теории дефектов кристаллической решетки получить температурную зависимость коэффициента диффузии D . Вычислить параметры диффузии Q (в кДж/г-ат.) и D_0 .

Оценить значение суммы энергии и энтропии образования и миграции вакансий, считая механизм диффузии вакансионным. При расчетах использовать экспериментальные данные, приведенные в табл. 4.5.

Таблица 4.5

D , см ² /с	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}	10^{-11}
T , К	1350	1100	950	800
D , см ² /с	$2,24 \cdot 10^{-9}$	$4,5 \cdot 10^{-10}$	10^{-10}	$2 \cdot 10^{-11}$
T , К	1250	1110	1000	910
D , см ² /с	$9,55 \cdot 10^{-10}$	$1,55 \cdot 10^{-10}$	$2,5 \cdot 10^{-11}$	$4 \cdot 10^{-12}$
T , К	1250	1110	1000	910
D , см ² /с	$3,5 \cdot 10^{-10}$	$3,9 \cdot 10^{-11}$	$4 \cdot 10^{-12}$	$4,4 \cdot 10^{-13}$
T , К	1250	1110	1000	910

4.10. Тонкую пленку радиоактивного железа нанесли на поверхность железного образца. После отжига при температурах:

- а) 800 °С в течение 10 ч;
- б) 900 °С, 5 ч;
- в) 1000 °С, 2 ч;
- г) 1100 °С, 1 ч –

образец разделили на слои, параллельные поверхности (x – координата середины слоя), и измерили радиоактивность J каждого слоя. Эти величины представлены в табл. 4.6.

Определить коэффициент самодиффузии железа, считая образец полубесконечным, а радиоактивность – пропорциональной концентрации изотопа. Используя результаты задач, определить параметры самодиффузии железа Q (в кДж/г-ат.) и D_0 (в м²/с) и записать уравнение температурной зависимости коэффициентов самодиффузии.

Таблица 4.6

а	x , мкм	0,4	0,8	1,2	1,6	2,0
	J , имп/мин	964	862	717	553	396
б	x , мкм	1	2	3	4	5
	J , имп/мин	960	845	685	510	350
в	x , мкм	1,5	3,0	4,5	6,0	7,5
	J , имп/мин	970	882	755	606	460
г	x , мкм	3	6	9	12	15
	J , имп/мин	956	836	670	490	328

4.11. Сто шариков размещены вдоль некоторой линии и могут перекатываться только в перпендикулярном направлении. Длина скачка 0,25 см. Через 12 ч измерено расстояние каждого шарика от линии. Сумма квадратов расстояний, деленная на 100, равна 90 см². Вычислить частоту скачков и коэффициент диффузии шариков.

4.12. Вычислить γ для меченных атомов в чистом металле ГЦК- и ОЦК-решеткой, если $D = \gamma a^2 \omega N_g$, где N_g – доля вакантных.

Вычислить также γ для диффузии по междоузлиям в разбавленном сплаве с ОЦК-решеткой для различных положений внедренного атома.

4.13. Коэффициент диффузии кислорода в тантале выражается в виде:

$$D = 10,5 \cdot 10^{-7} \exp\left(\frac{-110,4 \text{ кДж/моль}}{RT}\right) \text{ м}^2/\text{с}.$$

Вычислить энтропию миграции для диффузии атомов кислорода, если средняя частота колебаний атома кислорода в решетке равна 10^{12} с^{-1} , а период кристаллической решетки – $3,3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

4.14. Вычислить температуру, при которой атомы меди при самодиффузии совершают один скачок в секунду.

Воспользоваться следующими параметрами самодиффузии: $D_0 = 0,2 \text{ см}^2/\text{с}$, энергия активации $Q = 47,1 \text{ ккал/г-ат}$. Период решетки ГЦК Cu составляет $3,6 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

4.15. Вычислить температуру, при которой атомы молибдена при самодиффузии совершают один скачок в секунду.

Воспользоваться следующими параметрами самодиффузии: $D_0 = 0,1 \text{ см}^2/\text{с}$, энергия активации $Q = 92,2 \text{ ккал/г-ат}$. Период решетки ОЦК Mo составляет $3,15 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

4.16. Вычислить температуру, при которой атомы никеля при самодиффузии совершают один скачок в секунду.

Воспользоваться следующими параметрами самодиффузии: $D_0 = 0,5 \text{ см}^2/\text{с}$, энергия активации $Q = 65,8 \text{ ккал/г-ат}$. Период решетки ГЦК Ni составляет $3,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

4.17. Вычислить температуру, при которой атомы натрия при самодиффузии совершают один скачок в секунду.

Воспользоваться следующими параметрами самодиффузии: $D_0 = 0,2 \text{ см}^2/\text{с}$, энергия активации $Q = 10,4 \text{ ккал/г-ат}$. Период решетки ОЦК Na составляет $4,3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

4.18. Вычислить температуру, при которой атомы углерода при диффузии в α -железе совершают 1000 скачков в секунду.

Параметры диффузии углерода: $D_0 = 0,2 \text{ см}^2/\text{с}$, $Q = 24,6 \text{ ккал/г-ат}$. Период решетки α -железа $2,9 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Вычислить также энтропию миграции атомов углерода в ОЦК α -железе, принимая частоту колебания атомов углерода равной 10^{13} с^{-1} .

4.19. С помощью нижеприведенных экспериментальных данных по избыточной свободной энергии G^E системы «железо-никель» рассчитать значение термодинамического множителя m_i для заданной температуры и выбранных составов:

$G^E = -9,169 - 11,543 \cdot N_{\text{Ni}} + (2,724 + 1,83N_{\text{Ni}})(1 - N_{\text{Ni}}) \cdot N_{\text{Ni}} \cdot T$ (кДж/моль),
где N_{Ni} – мольная доля никеля.

По формуле Даркена с использованием рассчитанных значений m_i и приведенных ниже экспериментальных данных по коэффициентам диффузии компонентов D_i^* рассчитать для заданной температуры и выбранных составов значения коэффициентов взаимной диффузии \tilde{D} (1100 °C; 10...90 ат. %, через 10 ат.%):

$$\lg D_{\text{Fe}}^* = -0,142 - \frac{14961}{T} + N_{\text{Ni}} \left(1,106 - \frac{993}{T} \right);$$

$$\lg D_{\text{Ni}}^* = 0,537 - \frac{15152}{T} + N_{\text{Fe}} \left(\frac{340}{T} - 0,488 \right).$$

Рассчитать поправку Маннинга для полученных значений и проанализировать вклад потока вакансий и применимость теории Даркена.

4.20. Найти значения Q и A для самодиффузии золота по измерениям А. Загрубского (табл. 4.7).

Таблица 4.7

$T, ^\circ\text{C}$	800	900	1000
$D, \text{см}^2/\text{сутки}$	$1,3 \cdot 10^{-7}$	$5,0 \cdot 10^{-7}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$

4.21. Уравнение самодиффузии свинца

$$D = 5,76 \cdot 10^5 \cdot \exp\left(\frac{-28050}{RT}\right).$$

а) Найти коэффициент самодиффузии свинца при комнатной температуре, при $T = 165$ °C и вблизи температуры плавления;

б) при $T = 165$ °C оценить время, необходимое для проникновения радиоактивного свинца, находящегося в контакте с обычным свинцом, на глубину 0,1 мм.

4.22. Медный цилиндр соединен с латунным (70,6%Cu и 29,4% Zn). После отжига при постоянной температуре в течение 360 ч измерена концентрация цинка на различных расстояниях от края образца. Концентрация цинка составила: на расстоянии 5 мм – 0,3 ат.%; 4,81 мм – 1,5 ат.%; 4,65 мм – 4,4 ат.%; 4,50 мм – 8,8 ат.%; 4,31 мм – 14,7 ат.%; 3,96 мм – 20,6 ат.%; 3,65 мм – 23,5 ат.%; 3,40 мм – 25,0 ат.%; 3,07 мм – 26,5 ат.%; 2,51 мм – 27,9 ат.%; 1,89 мм – 28,8 ат.%; 1,50 мм – 29,1 ат.%.

Найти положение плоскости Матано и рассчитать коэффициент взаимной диффузии (\tilde{D}) для плоскости, в которой концентрация $C = 10$ и 25 ат.% Zn.

4.23. Образец из стали, содержащий 0,1 % С, подвергли науглероживанию при 930 °С. Концентрация углерода после отжига в течение времени t_1 составляет 0,45 % на глубине 0,05 см. На поверхности поддерживали постоянную концентрацию углерода (1 % при всех $t > 0$). Коэффициент диффузии углерода:

$$D = 0,15 \exp\left(\frac{-32000}{RT}\right).$$

Рассчитать время науглероживания (t_1) и время (t_2), необходимое для того, чтобы удвоить количество углерода, введенного в образец при той же температуре (задача одномерная, образец полужограниченный).

4.24. Определить время, в течение которого при отжиге можно удалить 90 % водорода из железной пластинки толщиной 0,2 см. На поверхности пластины поддерживали нулевую концентрацию H_2 . Коэффициент диффузии водорода в железе $D = 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$.

4.25. Найти предэкспоненциальный множитель D_0 для самодиффузии в ГЦК в направлении [111], выразив межплоскостное расстояние d_m , объем на один атом Ω и плотность укладки через кратчайшее межатомное расстояние b . Учесть, что возможных направлений перехода несколько.

Сравнить с диффузией вдоль [100] в простой кубической и вдоль [110] – в решетке ОЦК.

4.26. Выразить коэффициент диффузии D_V в простой кубической решетке через частоту колебаний атомов ν и энергию миграции вакансий U_V^m . Сравнить с коэффициентом самодиффузии D . Найти соотношение D_V / D .

4.27. Зная, что энергия активации самодиффузии Q в меди равна 2,04 эВ, а энергия миграции вакансий E_m^V равна 1,08 эВ, определить отношение равновесной концентрации вакансий при 500 °С к концентрации при 1000 °С.

4.28. Используя решение уравнения Фишера, найти среднюю концентрацию диффундирующего вещества $\langle C \rangle$ в данном сечении.

ОТВЕТЫ

1.1. а) 1; б) 2; в) 4; г) 2; д) 1; е) 2.

1.2. 1) $1,44 \cdot 10^{28}$; 2) $2,1 \cdot 10^{28}$; 3) $4,54 \cdot 10^{28}$.

1.3. $1,46 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

1.4. $2,6 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

1.5. 6,95 (литий).

1.6. а) 0,404 нм; 0,286 нм; б) 0,316 нм; 0,274 нм.

1.7. 1,63. Отклонение обусловлено тем, что в реальном кристалле атомы не обладают сферической симметрией.

1.8. 0,320 нм, 0,521 нм.

1.9. 0,23 нм.

1.10. 207 кг/м^3 .

1.11. 0,99.

1.12. $2,33 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$.

1.13. 0,95.

1.14. 0,6 эВ.

1.15. а) $n_{AA} = n_{BB} = 1/12 n(1 - s^2)$; $n_{AB} = 1/6 n(3 + s^2)$;

б) $n_{AA} = 1/16 n(9 - s^2)$; $n_{BB} = 1/16 n(1 - s^2)$; $n_{AB} = 1/8 n(3 + s^2)$.

1.16. а) $n_{AB} = 2/3 n c_A(3 - 2c_A)$; б) $n_{AB} = 8/3 n c_A(1 - c_A)$.

1.17. для $x_{2(\text{кр})} = 0,5$ $T_{\text{кр}} \cong 1745 \text{ К}$.

1.18. $x_{2(\text{кр})} = 0,537$; $T_{\text{кр}} \cong 1196 \text{ К}$.

2.1. $4,57 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$.

2.2. 5,41.

2.3. 0,9.

2.4. В 3 раза.

2.5. $\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{(3\pi^2 n)^{1/3}} \cdot \frac{\Delta N}{V} = 2,37 \cdot 10^{-19} \text{ эВ}$, где $n = \rho \frac{A}{N_A}$; $\Delta N = 2$

(два электрона с противоположно направленными спинами на каждом энергетическом уровне).

2.6. $\bar{E} = \frac{3}{5} E_F = 4,2 \text{ эВ}$.

2.7. В 1,83 раза.

2.8. 0,03.

2.9. $31,2 \cdot 10^3 \text{ К}$

2.10. В 14,9 раз.

$$2.11. dn(p) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{p^2 dp}{\exp\left(\frac{p^2/2m - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{при } T \neq 0 \text{ К});$$

$$dn(p) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} p^2 dp \quad (\text{при } T = 0 \text{ К}).$$

$$2.12. 1) dn(v) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \frac{v^2 dv}{\exp\left(\frac{mv^2 - 2E_F}{2kT}\right)} \quad (\text{при } T \neq 0 \text{ К});$$

$$2) dn(v) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} v^2 dv \quad (\text{при } T = 0 \text{ К}).$$

$$2.13. v_{\max} = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} = 1,32 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

$$2.14. \bar{v} = \frac{3}{4} v_{\max} = 1,09 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

2.15. В 7 раз.

$$2.16. \langle v_{\text{кв}} \rangle = \frac{3}{5} v_{\max}.$$

$$2.17. \langle 1/v \rangle = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{v_{\max}}.$$

$$2.18. 8,4 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

2.19. 5,4 эВ.

$$2.20. 3,6 \cdot 10^4 \text{ К}; \sim 10^6 \text{ м/с}.$$

$$2.21. 1,21 \cdot 10^{45} \text{ Дж}^{-1}; 2,85 \cdot 10^{43} \text{ Дж}^{-1}; 0,8 \text{ \%}.$$

2.22. 36 % Zn.

$$2.23. \text{а) } 4,99 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}; \text{б) } 5,45 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}; \text{в) } 3,53 \cdot 10^3 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}.$$

$$2.24. 11,3 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}; 1,41 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

$$2.25. 1,9 \cdot 10^{-3} \text{ \%}.$$

$$2.26. E_1/E_2 = 3.$$

$$2.28. k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}.$$

$$2.29. \text{а) } 11,3 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}; 8,17 \cdot 10^4 \text{ К}; \text{б) } 1,37 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}; \text{в) } 1,57 \cdot 10^6 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}; \\ \text{г) } 8,22 \cdot 10^{-8} \text{ м}; \text{д) } 0,3614 \text{ нм}; \text{е) } 1,50 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}; 1,74 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}; \text{ж) } 2,1 \cdot 10^{31} \text{ м}^{-3}.$$

2.30. а) $f(E)=1$; б) $f(E)=0,5$; в) 0,269 и 0,731; г) 0,018 и 0,982.

2.31. Первая зона Бриллюэна для кристалла с ГПУ-структурой ограничена 20 плоскостями, образованными тремя совокупностями кристаллографических плоскостей (или плоскостей интерференции): шестью гранями совокупности $\{100\}$, двумя – $\{002\}$ и двенадцатью – $\{101\}$.

3.1. $3,40 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$.

3.2. $3,4 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$.

3.3. Среднее смещение \bar{x} обращается в нуль при чисто гармонических колебаниях.

3.4. 540 ГПа.

3.6. $2,5 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$, приводит к небольшому уменьшению α .

3.7. Pb: $C_V = 26,1 \text{ кДж}/(\text{кмоль} \cdot \text{К})$; Al: $C_V = 24,17 \text{ кДж}/(\text{кмоль} \cdot \text{К})$.

3.8. 1) $2,99 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$; 2) 134 кДж.

3.9. 3,44 ТГц.

3.10. 3,74.

3.11. 1,16.

3.12. 36,1 Дж/моль.

$$3.13. Q_{\text{кв}} = 3R\theta_E \left(\frac{1}{e^{\theta_E/T_2} - 1} - \frac{1}{e^{\theta_E/T_1} - 1} \right) = 2,99 \text{ кДж};$$

$$Q_{\text{кл}} = 3R\theta_E = 3,12 \text{ кДж}; \quad \frac{Q_{\text{кл}} - Q_{\text{кв}}}{Q_{\text{кв}}} = 0,043.$$

$$3.14. \Delta U = \frac{m}{A} \cdot 3R\theta_E \left(\frac{1}{e^{\theta_E/T_2} - 1} - \frac{1}{e^{\theta_E/T_1} - 1} \right) = 396 \text{ Дж};$$

$$\Delta U_{\text{кл}} / \Delta U_{\text{кв}} = 1,81.$$

3.15. 213 К.

3.16. $11,4 \cdot 10^3 \text{ м/с}$.

3.17. 329 К.

3.18. 345 Дж/(кмоль·К).

3.19. $2,36 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$.

3.20. $2,75 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$.

3.21. $\Delta U_M = 2,49R\Delta T = 41,4 \text{ Дж/моль}$.

$$3.22. \theta_D = \left(\frac{m}{A} \cdot \frac{12\pi^4 R}{5C_1} \right)^{1/3} T_1 = 630 \text{ К, так как } \frac{C_2}{C_1} = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^3;$$

$$C_M = \frac{12\pi^4 R}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 = 0,21 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}).$$

3.23. $\Delta U = \frac{m}{A} \frac{3\pi^4 R}{5\theta_D^3} \cdot (T_2^4 - T_1^4) = -14,9 \text{ Дж}.$

3.24. $Q = \frac{m}{A} \frac{3\pi^4 R}{5\theta_D^3} \cdot (T_2^4 - T_1^4) = 21,0 \text{ Дж}.$

3.25. $C_V^{\text{эл}} = 14,56 \cdot 10^{-4}$ и $7,28 \cdot 10^{-1} \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К});$
 $C_V^{\text{реш}} = 4,8 \cdot 10^{-4}$ и $24,96 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}).$

3.27. 2,158; $1,58 \cdot 10^{-2}.$

3.28. 9,06 К; 11650 К; 2,5 %.

3.29. $3,45 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}.$

3.30. 1,50 км/с.

3.31. 4,8 нм.

3.32. 3,13 км/с.

3.33. 4,0 нм.

3.34. $\lambda_{\text{реш}}/\lambda_{\text{эл}} \cong 5 \cdot 10^{-2}.$

3.35. $20 \cdot 10^{10} \text{ Н}/\text{м}^2.$

3.36. $D_1 = 9 \cdot 10^{-21} \text{ м}^2/\text{с}; D_2 = 4 \cdot 10^{-17} \text{ м}^2/\text{с}; D_0 = 9 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с};$
 $Q = 117 \text{ кДж}/\text{г} \cdot \text{ат}.$

3.37. $3,7 \cdot 10^{-6} \text{ м}/\text{с}.$

3.38. $5,6 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$

3.39. 1,5.

3.40. $2,5 \cdot 10^{-14} \text{ с}.$

3.41. 0,69 м/с; $7 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); 4 \cdot 10^{-14} \text{ с}.$

3.42. 45 м/с; $2,25 \cdot 10^{-5}.$

3.44. $2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}.$

3.45. $3,5 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); 2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}.$

3.47. 2,8.

3.48. 1061,5; 0,36 $M_B.$

3.49. 1,21 Тл; $2,36 \cdot 10^{-5} \text{ Тл}.$

3.51. $8,77 \cdot 10^{-25} \text{ А} \cdot \text{м}^2.$

3.52. 3,34 $M_B.$

3.53. 2,07 $M_B.$

- 3.54. $0,44 \cdot 10^6$ А/м.
- 4.5. $800 \text{ }^\circ\text{C}$: $5,1 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$; $900 \text{ }^\circ\text{C}$: $3,3 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$; $1000 \text{ }^\circ\text{C}$: $1,6 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$.
- 4.6. 260 К.
- 4.7. $10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$.
- 4.8. $6,3 \cdot 10^3 \text{ с}$.
- 4.8. а) 113,75 кДж/Г-ат.; б) 130,88 кДж/Г-ат.;
в) 151,85 кДж/Г-ат.; г) 185,27 кДж/Г-ат.
- 4.10. а) $3 \cdot 10^{-17} \text{ м}^2/\text{с}$; б) $3,3 \cdot 10^{-16} \text{ м}^2/\text{с}$; в) $2,5 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$; г) $1,4 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$;
 $D_0 = 5 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$; $Q = 251,21 \text{ кДж/Г-ат}$.
- 4.11. $3,33 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$; $1,04 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.
- 4.13. 41,9 Дж/(К·Г-ат.).
- 4.14. 725,6 К.
- 4,15. 1439,1 К.
- 4.16. 984,3 К.
- 4.17. 162 К.
- 4.18. 427,4 К.
- 4.20. $Q = 64,6 \text{ ккал/Г-ат.}$; $D_0 = 8,9 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{сут} = 10^3 \text{ см}^2/\text{с}$.
- 4.21. $D, \text{ см}^2/\text{сут.}$:
 $1,8 \cdot 10^{-15}$ при 300 К; $5 \cdot 10^{-9}$ при 438 К; $5,8 \cdot 10^{-5}$ при 600 К.
- 4.22. $X_m = 4,08 \text{ мкм}$;
 $D(10 \%) = 6,7 \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$; $D(25 \%) = 4,5 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$.
- 4.23. $t_1 = 2,33 \text{ ч}$; $t_2 = 4t_1$.
- 4.24. $t = 2,09 \cdot l^2/\pi^2 D = 84,5 \text{ с}$.
- 4.27. $3,5 \cdot 10^{-3}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физическое материаловедение. Учебник. – Т 1. – Физика твердого тела (учебник) / Под ред. Б. А. Калина. М.: МИФИ, 2007.
2. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачник по физике. М.: Изд-во Физматлит, 2001.
3. Сборник задач по физике металлов. Учебное пособие / Под ред. Г. Б. Федорова. М.: МИФИ, 1988.
4. Жданов Г.С. Физика твердого тела. Учебник. М.: МГУ, 1961.
5. Уманский Я.С., Скаков Ю.А. Физика металлов. Учебник. М.: Атомиздат, 1978.
6. Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах. Учебник. М.: Metallurgia, 1978.
9. Смирнов Е.А. Применение термодинамики необратимых процессов к анализу диффузионных явлений в реакторных материалах. Учебное пособие. М.: МИФИ, 1984.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Основные физические постоянные

Абсолютный нуль температуры	$0 \text{ К} = -273,15 \text{ }^\circ\text{С}$
Атомная единица массы	$1 \text{ а.е.м.} = 1,6605655 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$
Магнитный момент протона	$\mu_p = 1,4106171 \cdot 10^{-26} \text{ Дж/Тл}$
Магнитный момент электрона	$\mu_e = 9,28483 \cdot 10^{-24} \text{ Дж/Тл}$
Магнетон Бора	$M_B = e\hbar / 2m_e = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ А/м}^2$
Магнитная проницаемость вакуума	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Гн/м}$
Масса покоя нейтрона	$m_n = 1,6749543 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$
Масса покоя протона	$m_p = 1,6726485 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$
Масса покоя электрона	$m_e = 9,109534 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$
Постоянная Авогадро	$N_A = 6,022045 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$
Постоянная Больцмана	$k = 1,380662 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$
Постоянная Планка	$h = 6,626176 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$
Постоянная Стефана-Больцмана	$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К}^4)$
Скорость света в вакууме	$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ м/с}$
Универсальная газовая постоянная	$R = 8,31441 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}$
Элементарный заряд	$e = 1,6021892 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$
Удельный заряд электрона	$e/m = 1,76 \cdot 10^{11} \text{ Кл/кг}$
Электрическая постоянная	$\epsilon_0 = 8,85418783 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Единицы физических величин

Количество теплоты	$1 \text{ кал} = 4,19 \text{ Дж}$
Энергия	$1 \text{ Дж} = 6,24 \cdot 10^{18} \text{ эВ} = 0,239 \text{ кал}$ $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$
Давление	$1 \text{ атм} = 1,01 \cdot 10^5 \text{ Па}$ $1 \text{ мм.рт.ст.} = 133 \text{ Па}$
Напряженность магнитного поля	$1 \text{ А/м} = 1,26 \cdot 10^{-2} \text{ Э}$
Магнитная индукция	$1 \text{ Тл} = 10^4 \text{ Гс}$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Дебаевская теплоемкость в зависимости
от приведенной температуры

T/θ_D	$C_V/3Nk$	T/θ_D	$C_V/3Nk$	T/θ_D	$C_V/3Nk$
0,00	0	0,35	0,687	0,70	0,905
0,05	0,00974	0,40	0,746	0,75	0,917
0,10	0,0758	0,45	0,791	0,80	0,926
0,15	0,213	0,50	0,825	0,85	0,934
0,20	0,369	0,55	0,852	0,90	0,941
0,25	0,503	0,60	0,874	0,95	0,947
0,30	0,608	0,65	0,891	1,00	0,952

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Экспериментальные значения коэффициентов
электронной теплоемкости и температур Дебая металлов

Металл	$\gamma \cdot 10^4$, Дж/(моль·К ²)	θ_D , К	Металл	$\gamma \cdot 10^4$, Дж/(моль·К ²)	θ_D , К
Be	2,3	1440	La	67,0	142
Mg	13,6	406	Ti	33,5	420
Na	18,0	158	Zr	28,9	291
Cu	6,9	343	V	92,1	380
Ag	6,1	225	Cr	15,9	630
Au	7,3	165	Fe	50,2	470
Zn	5,4	327	Nb	87,9	275
Cd	7,1	209	Mo	21,3	450
Pb	31,4	105	W	14,6	400

ПРИЛОЖЕНИЕ 5

Температуры Кюри ферро- и ферримагнетиков

Материал	T_K, K	Материал	T_K, K	Материал	T_K, K
Co	1388	Cu ₂ MnAl	630	MnOFe ₂ O ₃	573
Fe	1043	Ni	627	Y ₃ Fe ₅ O ₁₂	560
Fe ₂ B	1015	CuOFe ₂ O ₃	728	CrO ₂	386
FeOFe ₂ O ₃	858	MgOFe ₂ O ₃	713	MnAs	318
NiOFe ₂ O ₃	858	Cu ₂ MnAl	630	Gd	292
CuOFe ₂ O ₃	728	Ni	627	Au ₂ MnAl	200
MgOFe ₂ O ₃	713	MnB	578	Dy	88

ПРИЛОЖЕНИЕ 6

Атомная восприимчивость металлов

Металл	$\chi_a \cdot 10^8, \text{м}^3/\text{моль}$	Металл	$\chi_a \cdot 10^8, \text{м}^3/\text{моль}$	Металл	$\chi_a \cdot 10^8, \text{м}^3/\text{моль}$
Li	+30,9	Ti	+202,2	Cu	-6,8
Na	+26,9	Zr	+152,0	Au	-37,2
K	+20,3	W	+69,1	Pb	-31,1
Mg	+16,7	Nb	+266,3	Sb	-134,4
Al	+21,0	Cr	+201,6	Bi	-357,8

Таблица Д.И. Менделеева

Периоды	Группы элементов													
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII						
I	1 H 1,008													2 He 4,003
II	3 Li 6,941	4 Be 9,012	5 B 10,812	6 C 12,011	7 N 14,007	8 O 15,999	9 F 18,998							10 Ne 20,179
III	11 Na 22,990	12 Mg 24,305	13 Al 26,982	14 Si 28,086	15 P 30,974	16 S 32,06	17 Cl 35,453							18 Ar 39,948
IV	19 K 39,098	20 Ca 40,08	21 Sc 44,956	22 Ti 47,90	23 V 50,942	24 Cr 51,996	25 Mn 54,938	26 Fe 55,847	27 Co 58,93	28 Ni 58,70				36 Kr 83,80
V	37 Rb 85,468	38 Sr 87,62	39 Y 88,906	40 Zr 91,22	41 Nb 92,906	42 Mo 95,94	43 Tc 98,906	44 Ru 101,07	45 Rh 102,91	46 Pd 106,4				54 Xe 131,30
VI	47 Ag 107,87	48 Cd 112,41	49 In 114,82	50 Sn 118,69	51 Sb 121,75	52 Te 127,60	53 I 126,90							78 Pt 195,09
VII	55 Cs 132,91	56 Ba 137,33	57 La 138,9	72 Hf 178,49	73 Ta 180,95	74 W 183,85	75 Re 186,207	76 Os 190,2	77 Ir 192,22	78 Pt 195,09				86 Rn 222
	79 Au 196,97	80 Hg 200,59	81 Tl 204,37	82 Pb 207,2	83 Bi 208,9	84 Po 209	85 At 210							
	87 Fr 223	88 Ra 226,0	89 Ac 227											

58 Ce 140,1	59 Pr 140,9	60 Nd 144,2	61 Pm 145	62 Sm 150,4	63 Eu 151,9	64 Gd 157,3	65 Tb 158,9	66 Dy 162,5	67 Ho 164,9	68 Er 167,3	69 Tm 168,9	70 Yb 173,0	71 Lu 174,9
90 Th 232,0	91 Pa 231,0	92 U 238,0	93 Np 237	94 Pu 244	95 Am 243	96 Cm 247	97 Bk 247	98 Cf 251	99 Es 252	100 Fm 257	101 Md 258	102 No 259	103 Lr 262

Евгений Александрович Смирнов
Геннадий Николаевич Елманов
Маргарита Геннадьевна Исаенкова

СБОРНИК ЗАДАЧ
ПО ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Учебное пособие

Редактор Е.К. Коцарева
Оригинал-макет подготовлен Г.Н. Елмановым

Подписано в печать 15.11.2011. Формат 60x84 1/16.
Печ.л. 4,0 Уч.-изд.л. 4,0 Тираж 100 экз.
Изд. № 1/32. Заказ № 27.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».
115409, Москва, Каширское ш., 31.

ООО «Полиграфический комплекс «Курчатовский».
144000, Московская область, г. Электросталь, ул. Красная, д. 42

ДЛЯ ЗАМЕТОК