

К. А. ОСИПОВ

О РАЗМЕРЕ ОБЛАСТИ РЕЛАКСАЦИИ ВОКРУГ МИГРИРУЮЩЕЙ МОНОВАКАНСИИ В КРИСТАЛЛАХ

(Представлено академиком Н. В. Агеевым 16 V 1972)

Теоретические значения активационных энергий миграции точечных дефектов в кристаллах зависят от размеров областей, релаксирующих вокруг этих дефектов. В случае равновесного точечного дефекта внутри кристалла область релаксации может распространяться на весь кристалл. Однако в качестве эффективной области релаксации, в случае, например, моновакансий в металлах, иногда принимают область, включающую от 25 до 140 соседних атомов ⁽¹⁾ или от 50 до 258 атомов ⁽²⁾. При расчетах активационной энергии миграции моновакансий в меди для этой области было принято 176 атомов ⁽³⁾.

В работах ^(4, 5) высказано предположение, что число атомов, релаксирующих вокруг точечного дефекта, можно оценить по расстоянию, на которое распространяется возникающая при этом упругая волна за время одного атомного прыжка.

Для расчетов радиуса R области релаксации вокруг моновакансии в металлах с г.ц.к.- и о.ц.к.-решетками было предложено ⁽¹⁾ уравнение

$$R = \frac{1}{v_D} \sqrt{\frac{B}{\rho}}, \quad (1)$$

где v_D — дебаевская частота, B — объемный модуль, ρ — плотность материала.

Рассчитанные ⁽¹⁾ с использованием уравнения (1) значения активационных энергий миграции моновакансий для ряда металлов плохо согласуются с экспериментальными значениями этих энергий. Одной из причин расхождения может быть то, что уравнение (1) дает заниженные размеры области релаксации.

Автор данной статьи предлагает оценивать эффективный объем области релаксации вокруг мигрирующего точечного дефекта, например, вокруг моновакансии, по уравнению

$$E_m = \frac{V\tau^2}{2\mu}, \quad (2)$$

где E_m — энергия активации миграции моновакансии, V — эффективный объем области релаксации, μ — модуль сдвига, $\tau = \mu / 30$ — теоретическое напряжение сдвига ^(5, 6).

Правая часть уравнения (2) представляет собой максимально возможную в объеме V кристаллической решетки энергию упругой деформации сдвига, обусловленную флуктуациями тепловой энергии. Величина E_m , как показано автором ⁽⁷⁾, также представляет собой максимально возможную энергию деформации сдвига, при достижении которой кристаллическая решетка в малых объемах будет «локально расплавлена» или перейдет из низкотемпературной в высокотемпературную модификацию.

Выражение, подобное правой части уравнения (2), было использовано ^(8, 9) при рассмотрении активационных процессов в металлах.

Принимая, например, для α -Fe значения $E_m = 0,51$ эв $= 0,51 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}$ дин·см ^(7, 10, 11), $\mu = 8,3 \cdot 10^{11}$ дин/см² ⁽¹²⁾, $\tau = \mu / 30$ дин/см² ⁽⁵⁾,

по уравнению (2) получим $V = 1,8 \cdot 10^{-21}$ см³. По этому объему, с учетом атомного объема для α -Fe $1,2 \cdot 10^{-23}$ см³, найдем число N атомов в эффективной области релаксации, равное для железа $1,5 \cdot 10^2$. Рассчитанный объем V хорошо соответствует активационному объему $2,2 \cdot 10^{-21}$ см³, полученному (¹³, ¹⁴) из низкотемпературной зависимости текучести α -Fe, когда эффективная (термическая) компонента приложенного напряжения равнялась нулю.

Таблица 1

Металл	Ат. объем $\times 10^{23}$, см ³ (¹²)	$\mu \cdot 10^{-11}$, дин/см ² (¹²)	E_m , эв (⁷ , ¹⁰)	$V \cdot 10^{21}$, см ³	$N \cdot 10^{-2}$
Ag	1,71	2,67	0,72	7,80	4,6
Al	1,66	2,45	0,34	4,00	2,4
Au	1,69	2,77	0,85	8,80	5,2
Cr	1,20	1,09·10	1,22	3,20	2,7
Cu	1,18	4,37	0,69	4,55	3,8
α -Fe	1,20	8,30	0,51	1,80	1,5
Li	2,2	$9,8 \cdot 10^{-1}$	0,06	1,80	0,82
Mo	1,56	$1,35 \cdot 10$	2,00	4,30	2,8
Na	4,00	$4,80 \cdot 10^{-1}$	0,11	6,60	1,6
Ni	1,09	7,50	0,99	3,80	3,5
Pb	3,03	$7,10 \cdot 10^{-1}$	0,35	1,40	4,6
Pt	1,50	6,41	1,47	6,60	4,4
W	1,58	$1,51 \cdot 10$	2,81	5,40	3,4

Результаты расчетов, выполненных по уравнению (2) для некоторых металлов, приведены в табл. 1. Полученные значения N в большинстве случаев хорошо согласуются с максимальными значениями релаксирующих атомов, принятыми в работах (¹, ²).

Институт металлургии им. А. А. Байкова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
10 V 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ P. Wynblatt, J. Phys. Chem. Solids, **29**, 2, 215 (1968). ² J. M. Torrens, M. Gerl, Phys. Rev., **187**, 3, 912 (1969). ³ M. Doyama, R. M. J. Collieritt, Lattice Defects and their Interactions, N. Y.—London—Paris, 1967, p. 79. ⁴ P. Wynblatt, Acta Metallurgica, **15**, 9, 1453 (1967). ⁵ J. K. Mackenzie, N. F. Mott, Proc. Phys. Soc., **63**, 411 (1950). ⁶ А. Х. Коттрел, Дислокации и пластическое течение в кристаллах, М., 1958, стр. 22. ⁷ К. А. Осипов, Некоторые активируемые процессы в твердых металлах и сплавах, Изд. АН СССР, 1962, стр. 29, 82. ⁸ R. Becker, Phys. Zs., **26**, 919 (1925). ⁹ К. А. Осипов, Вопросы теории жаропрочности металлов и сплавов, Изд. АН СССР, 1960, стр. 25. ¹⁰ К. А. Осипов, Phil. Mag., **23**, 181, 167 (1971). ¹¹ D. H. Tsai, R. Bullough, R. C. Perrin, J. Phys., Ser. C, **3**, 10, 2022 (1970). ¹² J. W. Mellor, A Comprehensive Treatise on Inorganic and Theoretical Chemistry, 1952—1953. ¹³ J. Harding, Acta Metallurg., **17**, 8, 949 (1969). ¹⁴ H. Conrad, The Relation between the Structure and Mechanical Properties of Metals, **2**, 1963, p. 476. ¹⁵ Metals Handbook, American Society for Metals, 1948, p. 19.