Министерство науки и высшего образования Российской Федерации НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан физического факультета

С.Н. Филимонов

«15» an

апреля

2021 г.

Рабочая программа дисциплины

ДЕФЕКТЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки: «Фундаментальная физика»

Форма обучения Очная

Квалификация **Бакалавр**

Год приема **2021**

Код дисциплины в учебном плане Б1.В.ДВ.01.07.14

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

Уши О.Н. Чайковская

Председатель УМК

О.М. Сюсина

Томск - 2021

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий;
- ОПК-2. Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- ИПК 1.1. Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования;
- ИОПК 2.2. Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования.

2. Задачи освоения дисциплины

- Изложение представлений об основных типах и классификации дефектов кристаллического строения.
- Рассмотрение термодинамики точечных дефектов кристаллов. Использование методов механики сплошной среды для оценки энергии образования точечных дефектов в кристаллах.
- Описание экспериментальных методов и результатов исследования образования, подвижности и аннигиляции точечных дефектов.
- Теоретический анализ взаимосвязи диффузионных процессов с точечными дефектами в кристаллах

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в модуль по выбору "Физика металлов".

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине Семестр 7, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для изучения и понимания материала данной дисциплины обучающийся должен владеть основными представлениями и понятиями из курсов: Рентгеноструктурный анализ; Кристаллография; Физика твердого тела; Математический анализ; Дифференциальные уравнения.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часа, из которых:

- лекции: 32 ч.;
- практические занятия: 16 ч.;
- в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Классификация дефектов в кристаллах.

Доказательство существования дефектов в кристаллах. Типы и классификация дефектов решетки. Точечные, линейные и плоские дефекты. Вакансии, межузельные атомы и их комплексы. Дислокация. Атомная модель дислокаций. Ядро дислокаций. Вектор Бюргерса. Типы дислокаций. Дисклинации. Типы дисклинаций. Дефекты упаковки. Атомная модель дефекта упаковки в ГЦК и ГПУ кристаллах. Понятие о динамических дефектах.

Тема 2. Термодинамика точечных дефектов.

Термодинамика точечных дефектов. Энергия и энтропия образования точечных дефектов и их комплексов. Вакансии в упруго-изотропной среде. Расчет поля смещений, энергии и объема вакансии. Оценка энергии образования вакансий по температуре плавления и модулям упругости. Оценка энергии образования межузельного атома.

Тема 3. Экспериментальные методы измерения энергии образования и движения вакансий.

Подвижность избыточных вакансий. Закалка избыточных вакансий. Экспериментальные методы измерения энергии активации образования и миграции вакансий. Кинетика выхода вакансий на стационарные и переменные стоки.

Тема 4. Радиационные дефекты в кристаллах.

Радиационные дефекты. Каскады столкновений. Структура каскадов. Кластеры точечных дефектов. Межузельные атомы. Гантельная конфигурация межузельных атомов. Явления неупругости и гистерезиса. Сравнительная оценка энергий активаций образования и миграции точечных дефектов различного типа.

Тема 5. Диффузия в кристаллах.

Диффузия в кристаллах. Уравнения Фика. Механизмы диффузии. Диффузия вакансий. Задача выхода вакансий из тонкой пластины Сток вакансий на дислокации. Вакансионный механизм самодиффузии. Связь параметров диффузии с плотностью и подвижностью вакансий. Эффект Киркенделла. Диффузионная пористость.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения заданий по материалам курса (выступление и работа на практических занятиях), и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом): посещаемость — максимальный балл 10, выполнение заданий по материалам курса — 40. Контрольная точка проводится не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в седьмом семестре проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

На промежуточную аттестацию планируется не более 50 баллов.

Итоговая оценка по дисциплине складывается из суммы баллов, полученных по итогам текущего контроля и промежуточной аттестации.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Экзаменационная оценка определяется исходя из результатов экзамена и текущей аттестации в течение семестра и согласуется с принятым соответствием с 5-ти балльной

шкалой оценивания: 100-86 – «отлично»; 85-66 – «хорошо»; 65-50 – «удовлетворительно», менее 50 – «неудовлетворительно».

Экзаменационный билет включает 2 вопроса из списка контрольных вопросов по курсу (приведен в разделе 11), проверяющих сформированность компетенции ПК-1 в соответствии с индикаторами ИПК-1.1 и ИПК-1.2. Ответы даются в развернутой форме.

Пример экзаменационного билета:

БИЛЕТ № 1

Вопрос 1. Подвижность вакансий. Время оседлой жизни вакансий.

Вопрос 2. Микроскопические механизмы диффузии в кристаллах. Расчет коэффициента самодиффузии при вакансионном механизме диффузии.

Дополнительные и/или уточняющие вопросы по основным темам и содержанию курса (разделы 8, 11), позволяющие оценить уровень освоения всей программы. Ответ на уровне формулировки основных определений и/или краткого изложения физики явления и соответствующих представлений.

Например:

Вопрос 1. Дефект упаковки в ГЦК кристаллах.

Вопрос 2. Стадии отжига точечных дефектов в облученных кристаллах.

Вопрос 3. Экспериментальные доказательства вакансионного механизма диффузии в металлах.

Вопрос 4. Опыты Киркендалла.

Ит.д.

11. Учебно-методическое обеспечение

- a) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=21855
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Перечень вопросов, выносимых на экзамен.

- 1. Подвижность вакансий. Время оседлой жизни вакансий.
- 2. Микроскопические механизмы диффузии в кристаллах. Расчет коэффициента самодиффузии при вакансионном механизме диффузии.
- 3. Микроскопические механизмы диффузии в кристаллах. Расчет коэффициента самодиффузии при вакансионном механизме диффузии.
- 4. Опыты Симмонса-Баллуффи по измерению энергии образования вакансий в экспериментах по измерению температурной зависимости размеров кристаллов и параметра решетки.
- 5. Избыточные вакансии. Измерение энергии образования вакансий в закаленных кристаллах.
- 6. Комплексы вакансий. Равновесная концентрация простейших комплексов.
- 7. Термодинамика точечных дефектов. Равновесная концентрация при произвольной температуре.
- 8. Подвижность вакансий. Частота прыжков вакансий по узлам решетки.
- 9. Отжиг вакансий. Методы экспериментального определения энергии активации миграции вакансий.
- 10. Самодиффузия в кристаллах. Феномелогические уравнения самодиффузии. Коэффициент и энергия активации самодиффузии.
- 11. Оценка вибрационной энтропии вакансий.
- 12. Формирование вакансионных кластеров при отжиге закаленных кристаллов. Особенности кинетики отжига вакансий с образованием переменных стоков.
- 13. Феномелогические уравнения диффузии (Уравнения Фика). Задача о самодиффузии в полубесконечном стержне.

- 14. Явления упругого последействия в кристаллах с межузельными атомами.
- 15. Задача об отжиге вакансий в тонкой пластине. Кинетика отжига вакансий в тонкой пластине.
- 16. Стадии отжига точечных дефектов в облученных кристаллах. Сравнительные оценки энергии миграции вакансий и межузельных атомов.
- 17. Оценка изменения объема при образовании вакансий в модели упруго-изотропного кристалла.
- 18. Кинетика отжига вакансий с образованием парных вакансий.
- 19. Дефект упаковки в ГЦК кристаллах.
- 20. Механизм образования вакансий. Радиационные дефекты в каскадах столкновений.
- 21. Оценка энергии образования вакансий в модели упруго-изотропного кристалла (смещение в полости $U=\delta_0 \, r_0^2/r^2$).
- 22. Гантельная конфигурация межузельных атомов. Экспериментальное доказательство гантельной конфигурации в облученных кристаллах.
- 23. Оценка энергии образования межузельного атома в модели упруго-изотропного твердого тела.
- 24. Закалка вакансий. Влияние скорости закалки и плотности стоков.
- 25. Модель вакансии в упруго-изотропном твердом теле. Решение уравнения для поля смещений вакансии в упруго-изотропном твердом теле.
- 26. Экспериментальные доказательства вакансионного механизма диффузии в металлах. Опыты Киркендалла.
- 27. Понятие дефекта в кристаллической решетке. Типы дефектов (классификация). Типы точечных дефектов.
- 28. Понятие дислокации. Определение дислокаций через контур Бюргерса. Ядро дислокации
- 29. Расчет плотности упругой энергии W_0 в модели изотропного упругого твердого тела. Энергия кристалла через энергию связи атомов.
- 30. Экспериментальные доказательства существования дефектов. Природа переменных стоков дефектов. Вывод конфигурационной энтропии для п вакансий
- 31. Дефект упаковки в ГЦК кристаллах.
- 32. Уравнения Фика и их вывод. Уравнение диффузии. Механизмы диффузии. Пути ускорения диффузии. Механизм диффузии в чистых кристаллах
 - в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.
- 1. Практическое занятие № 1. «Представления об основных дефектах кристаллической решетки, структурных моделях их строения и основных свойствах».
- 2. Практическое занятие № 2. «Методы и способы экспериментального измерения энергии активации образования и миграции вакансий и межузельных атомов. Экспериментальные методы изучения точечных дефектов».
- 3. Практическое занятие № 3. «Радиационная повреждаемость и каскады атомных соударений».
 - г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов. Самостоятельная работа студента включает:
- углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к лекционным и практическим занятиям;
- подготовку к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет;
 - подготовку к экзамену.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
- 1. .Б. Дудникова, В.С. Урусов, Е.В. Жариков Точечные дефекты и их кластеры в кристаллах форстерита. Изучение компьютерными методами и компьютерное моделирование. Изд-во ЛАМБЕРТ, 2013.
- 2. Сапарова А.С. Аникина В.И. Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения. Практикум Изд-во "Проспект", 2015, 146с.
- 3. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах. М: Мир, 1996. С. 288. Гл. 1,2,3,4.
- 4. Орлов А. Н. Дефекты // Физическая энциклопедия / Гл. ред. А. М. Прохоров. М.: Советская энциклопедия, 1988. Т. 1. С. 595—597. 704 с..,
- 5. Штремель М. А. Прочность сплавов. Ч. I Дефекты решетки. М.: Изд. МИСиС, 1999. С. 383. Гл. 2, 4.

б) дополнительная литература:

- 1. Гегузин Я. Е. Диффузионная зона. М.: Наука, 1979. С. 343. Гл. 1-7.
- 2. Зайт В. Диффузия в металлах. М.: Изд. И. Л., 1958. С. 372
- 3. Орлов А. Н., Трушин Ю. В. Энергия точечных дефектов в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1985. Гл. 1-3.
- 4. Зеленский В. Ф., Неклюдов И. М., Черняева Т. П. Радиационные дефекты и распухание металлов. Киев: Научная мысль, 1988. С. 293. Гл. 1-4.
- 5. Баллуфи Р. В., Кинг А. Г. Стоки для точечных дефектов в металлах и сплавах. Сб. Фазовые превращения при облучении. Челябинск: Изд. Металлургия, 1989. С. 118-150.
- 6. Томпсон Т. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М.: Мир, 1971. С. 366. Гл. 1, 5.
- 7. Кирсанов В. В., Суворов А. А., Трушин Ю. В. Процессы радиационного дефектообразования в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1985. С. 210.
- 8. Келли А., Гровз Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: Мир, 1974.
- 9. Рогман С. Дж. Влияние облучения на диффузию в металлах и сплавах. Сб. Фазовые превращения при облучении. Челябинск: Изд. Металлургия, 1989. С. 151-167.
- 10. J.E.Bauerle, J.S. Koehler Quenched-in Lattice Defects in Gold / Phys. Rev V.107, N6.- 1957. P. 1493- 1498.
- 11. R.O.Simmons, R.W. Balluffi Measurements of equilibrium vacancy concentrations in aluminum / Phys Rev V. 117 N1 P. 52-61.
- 12. Границы зерен и свойства металлов. Кайбышев О. А., Валиев Р. 3. М.:Металлургия, 1987. 214 с.
- 13. Ehrhart, P. (1991) Properties and interactions of atomic defects in metals and alloys, volume 25 of Landolt-Börnstein, New Series III, chapter 2, p. 88, Springer, Berlin
- 14. Hong, J.; Hu, Z.; Probert, M.; Li, K.; Lv, D.; Yang, X.; Gu, L.; Mao, N.; Feng, Q.; Xie, L.; Zhang, J.; Wu, D.; Zhang, Z.; Jin, C.; Ji, W.; Zhang, X.; Yuan, J.; Zhang, Z. (2015). "Exploring atomic defects in molybdenum disulphide monolayers". Nature Communications 6: 6293.
- 15. Mayr, S.; Ashkenazy, Y.; Albe, K.; Averback, R. (2003). "Mechanisms of radiation-induced viscous flow: Role of point defects". Phys. Rev. Lett. 90 (5): 055505.
- 16. Ashkenazy, Yinon; Averback, Robert S. (2012). "Irradiation Induced Grain Boundary Flow—A New Creep Mechanism at the Nanoscale". Nano Letters 12 (8): 4084–9.
- 17. M. Murayama, J. M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki. Atomic-Level Observation of Disclination Dipoles in Mechanically Milled, Nanocrystalline Fe. Science 29 (2002) 2433. DOI:10.1126/science.1067430

в) ресурсы сети Интернет:

1. https://ru.wikipedia.org/wiki/Дефекты кристалла

- 2. http://frrc.itep.ru/rus/media/presentations/feb2012/Zaluzhnuy.pdf
- 3. http://twt.mpei.ru/ochkov/TM/lection1.htm

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook); системы компьютерной вёрстки LaTex;
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
 - б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index
 - ЭБС Лань http://e.lanbook.com/
 - ЭБС Консультант студента http://www.studentlibrary.ru/
 - Образовательная платформа Юрайт https://urait.ru/
 - ЭБС ZNANIUM.com https://znanium.com/
 - _ 3 GC IPRbooks http://www.iprbookshop.ru/

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате, оснащенные системой «Актру».

Все виды материально-информационной базы Научной библиотеки ТГУ.

Мультимедийное оборудование физического факультета ТГУ.

Программное обеспечение курсов, предшествующих изучению представленной дисциплины.

15. Информация о разработчиках

Дмитриев Андрей Иванович, доктор физико-математических наук, доцент, кафедра физики металлов физического факультета ТГУ, профессор.