Атомные механизмы диффузии и дефекты кристаллов

ВЫПОЛНИЛА: Хорошильцева Оксана
студентка 554 группы.

- **Диффузия** — процесс переноса материи или энергии из области с высокой концентрацией в область с низкой.
- **Диффузия** представляет собой процесс на молекулярном уровне и определяется случайным характером движения отдельных молекул
- .Диффузия в кристаллах - это процесс, при котором атомы могут переходить из одного узла в другой.

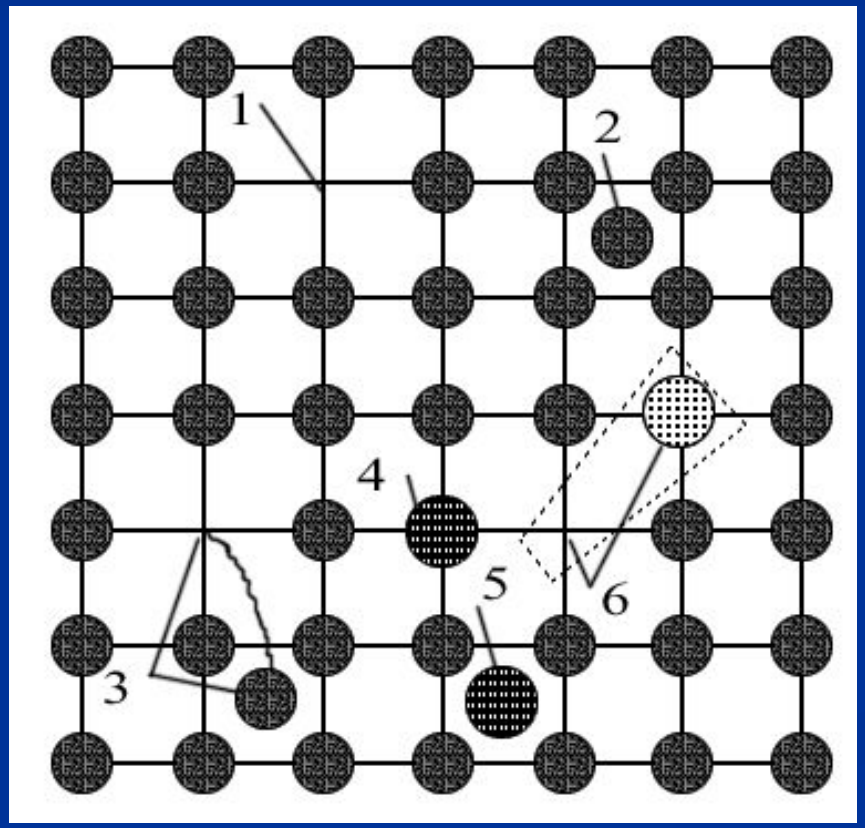
- Автоионная микроскопия – это метод прямого наблюдения кристаллической решетки металлов и сплавов с атомарным разрешением.

Диффузионные процессы в твердых телах заметно зависят от структуры данного кристалла и от дефектов кристаллического строения.

Дефекты, появляясь в веществе, или облегчают атомные перемещения, или затрудняют их, работая как ловушки для мигрирующих атомов.

Типы дефектов в кристаллах

- Вакансия
- Межузельный механизм диффузии
- Прыжковый механизм диффузии



1-вакансия;

2-межузельный атом;

3-дефект по Френкелю;

4-примесной атом замещения;

5-примесной атом внедрения;

6-атом замещения большой валентности

ДИФФУЗИЯ – ПРОЦЕСС СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ

Первый закон Фика:

$$J = -D\frac{\partial C}{\partial x}$$

Частота скачков атомов:
$n = n_0 e^{-Q/kT}$,
где Q - энергия активации диффузии,
k – постоянная Больцмана, n_0 – константа.

Коэффициент диффузии D зависит от температуры кристалла по закону Аррениуса:

$D = D_0 e^{-Q/kT}$

Энергия активации диффузии зависит как от энергии образования конкретного дефекта E_f , так и от энергии активации его миграции E_m :

$$Q = E_f + E_m .$$

АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ДИФФУЗИИ

- Механизм обмена атомов местами;
- кольцевой механизм;
- механизм прямого перемещения атомов по междоузлиям;
- механизм непрямого перемещения межузельной конфигурации;
- краудионный механизм;
- вакансионный механизм;
- дивакансионный механизм;
- механизмы диффузии по дислокациям;
- механизмы диффузии по границам зерен в поликристаллах.

ВАКАНСИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ

Энергия активации миграции по вакансионному механизму для таких металлов, как медь, серебро, железо и т.п., равна приблизительно эВ (тот же порядок величины имеет и энергия образования вакансии).

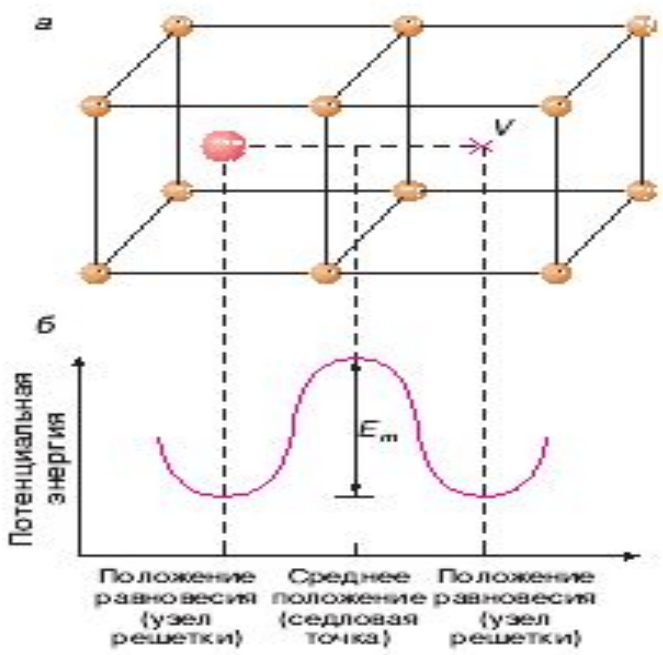


Рис. 1. Скачок мигрирующего атома (красный кружок) в соседний вакантный узел в кристалле альфа-железа (*а*) и зависимость потенциальной энергии мигрирующего атома от его расположения (*б*). E_m – энергия активации миграции

Простейшим вакансионным кластером является объединение двух вакансий – бивакансия (2V).

Энергия, необходимая для такого перемещения, часто оказывается меньшей, чем одной вакансии.

МЕЖУЗЕЛЬНЫЕ МЕХАНИЗМЫ

- Появление межузельных атомов в кристаллах может быть обусловлено способом приготовления или эксплуатации материала.
- Межузельные атомы можно разделить в кристаллах на собственные и примесные (инородные) межузельные атомы.
- Инородные (примесные) атомы также в большинстве случаев образуют с собственными атомами гантели, но их называют смешанными.
- Изобилие межузельных конфигураций порождает изобилие механизмов миграции с помощью межузельных атомов.

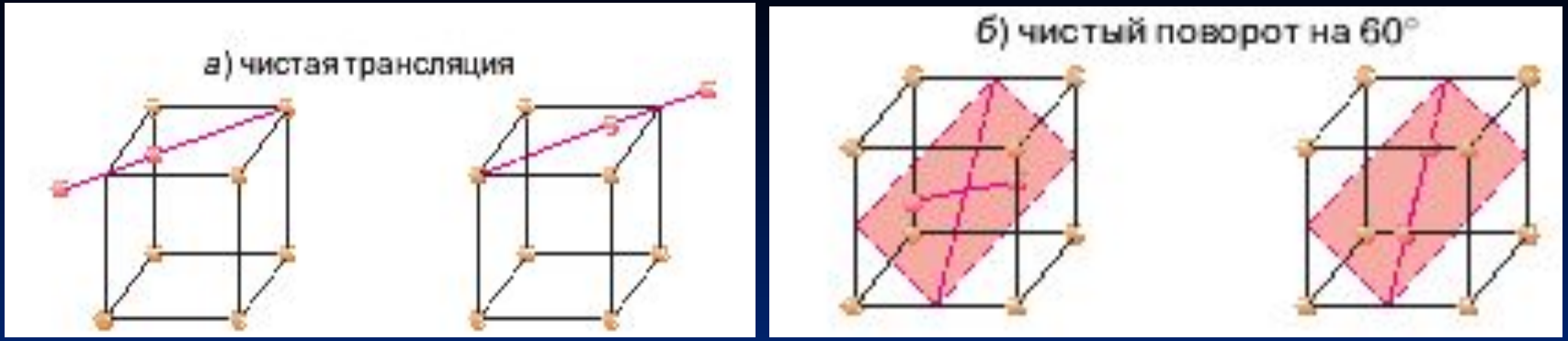


Рис. 2. Способы диффузионного перемещения межузельного атома в кристаллической решетке альфа-железа

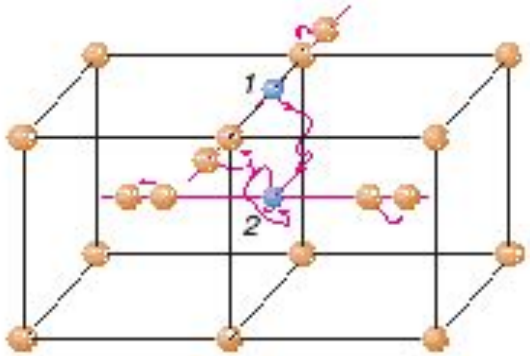


Рис. 3. Акт миграции примесного атома He (синий кружок) в кристаллической решетке альфа-железа из положения *1* в эквивалентное положение *2*. Показаны траектория диффузионного прыжка примесного атома и траектории движения атомов ближайшего окружения. Тепловое движение остальных атомов не показано

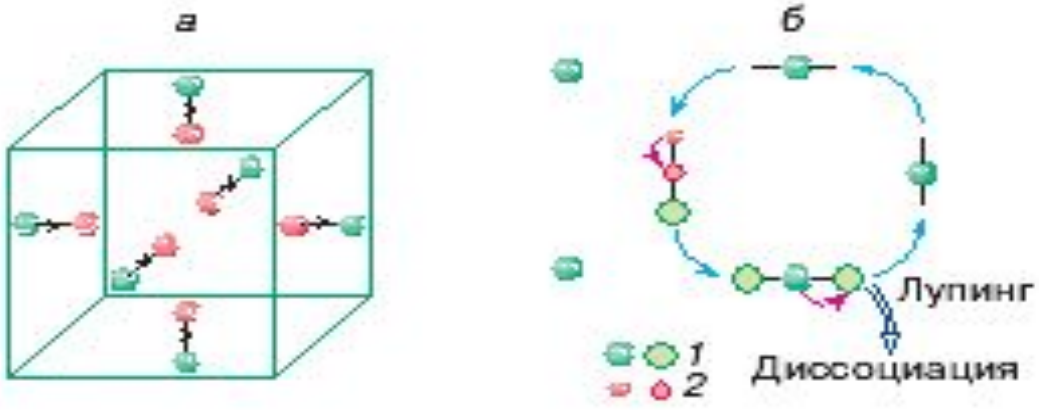


Рис. 4. *а* – кейджинг-эффект в кристаллической решетке меди. Показаны позиции, занимаемые смешанной гантелью при легкой миграции примеси (красный кружок) в клетке (элементарной ячейке кристалла Cu); *б* – лупинг-эффект в кристалле меди. Последовательно показаны развал смешанной гантели и скачок атома меди в соседний узел, образование нового гантельного внедрения, обход собственным межузельным атомом элементарной ячейки кристалла Cu и его возвращение к примеси с другой стороны. *1* – атомы меди, *2* – атомы примеси

ТРУБОЧНАЯ ДИФФУЗИЯ

- Этот термин обычно применяют при рассмотрении облегченной диффузии вдоль линейных дефектов в кристаллах – дислокаций.

- Простейшие дислокации представляют собой дефект в виде незавершенной внутри кристалла атомной полуплоскости.

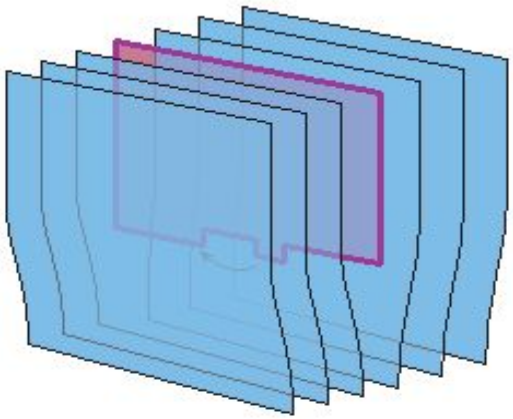


Рис. 5. Структура краевой дислокации в кристалле. Показаны полуплоскость, образующая дислокацию, и деформация кристаллических плоскостей, ее окружающих. Стрелкой указано направление миграции межузельного атома (выступ на краю полуплоскости) вдоль линии дислокации

- Вакансия должна притягиваться в область сжатия над крайним атомным рядом лишней полуплоскости, а межузельный атом – в область расширения, расположенную снизу полуплоскости.

Диффузия по дефектным местам в кристаллах имеет специфические особенности.

- Прежде всего она идет более легко, чем диффузия по бездефектным механизмам.
- Но ее источники небезграничны: концентрации дефектов в процессе диффузии практически всегда убывают за счет аннигиляции разноименных дефектов, ухода дефектов на так называемые стоки.
- Но если концентрация дефектов велика, их роль в диффузии настолько возрастает, что приводит к так называемой ускоренной диффузии, ускоренным фазово-структурным превращениям в материалах, ускоренной ползучести материалов под нагрузкой и т.п. эффектам.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перечень механизмов миграции по дефектным местам в кристаллах постоянно пополняется по мере все более углубленного изучения дефектов кристаллического строения вещества. Включение того или иного механизма в процесс диффузии зависит от многих условий: от подвижности данного дефекта, его концентрации, температуры кристалла и других факторов.