

# Атомные механизмы диффузии и дефекты кристаллов

*ВЫПОЛНИЛА:* Хорошильцева Оксана  
студентка 554 группы.

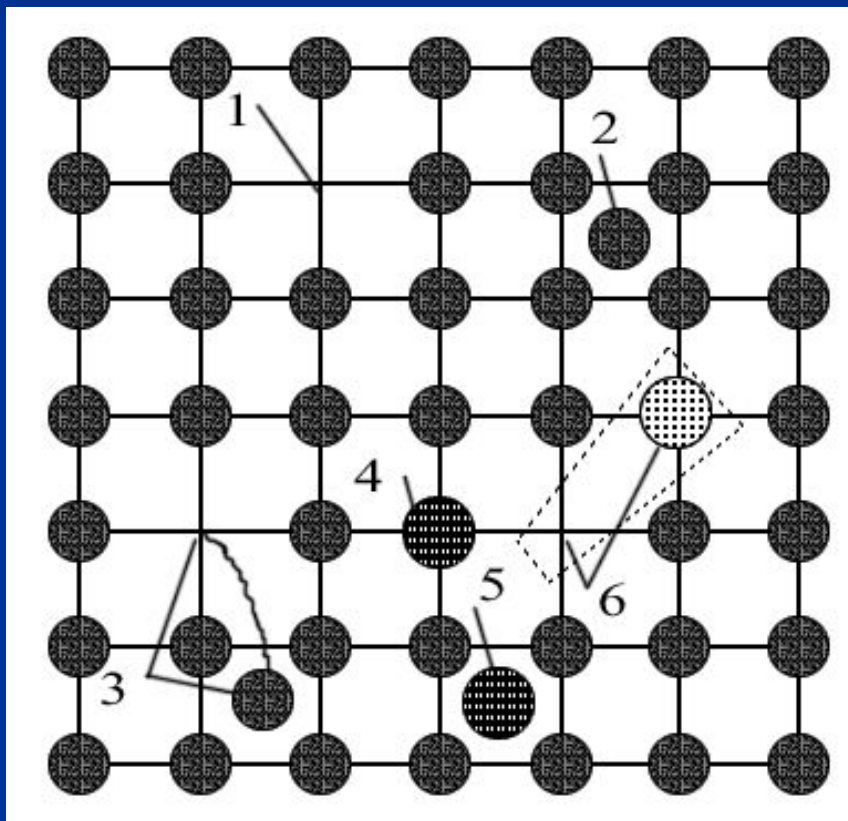
- **Диффузия** — процесс переноса материи или энергии из области с высокой концентрацией в область с низкой.
- **Диффузия** представляет собой процесс на молекулярном уровне и определяется случайным характером движения отдельных молекул
- **Диффузия в кристаллах - это процесс, при котором атомы могут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

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

Коэффициент диффузии  $D$  зависит от температуры кристалла по закону Аррениуса:

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

Частота скачков атомов:

$$n = n_0 e^{-Q/kT},$$

где  $Q$  - энергия активации диффузии,

$k$  – постоянная Больцмана,  $n_0$  – константа.

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;
- краудинный 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).

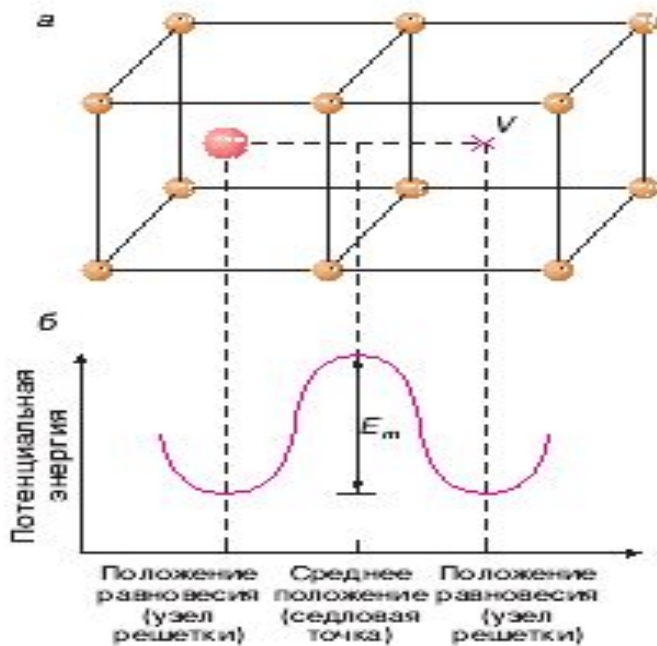


Рис. 1. Скачок мигрирующего атома (красный кружок) в соседний вакантный узел в кристалле альфа-железа (а) и зависимость потенциальной энергии мигрирующего атома от его расположения (б).  $E_m$  – энергия активации миграции

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

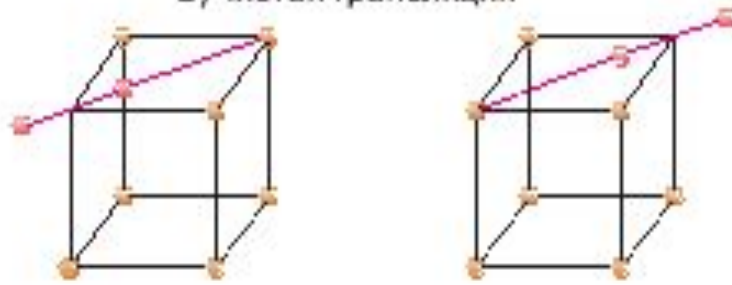
Энергия, необходимая для такого перемещения, часто оказывается меньшей, чем одной вакансии.

# 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.



а) чистая трансляция



б) чистый поворот на  $60^\circ$

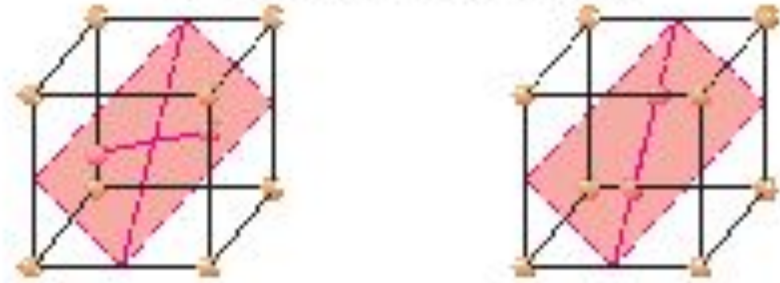


Рис. 2. Способы диффузионного перемещения междоузельного атома в кристаллической решетке альфа-железа

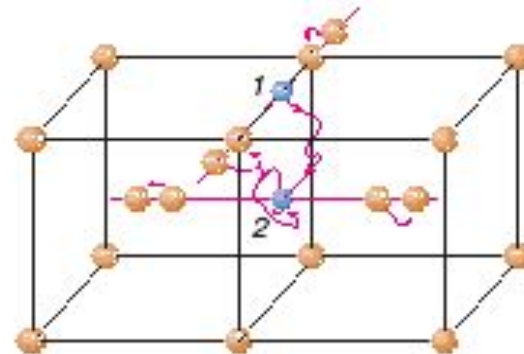
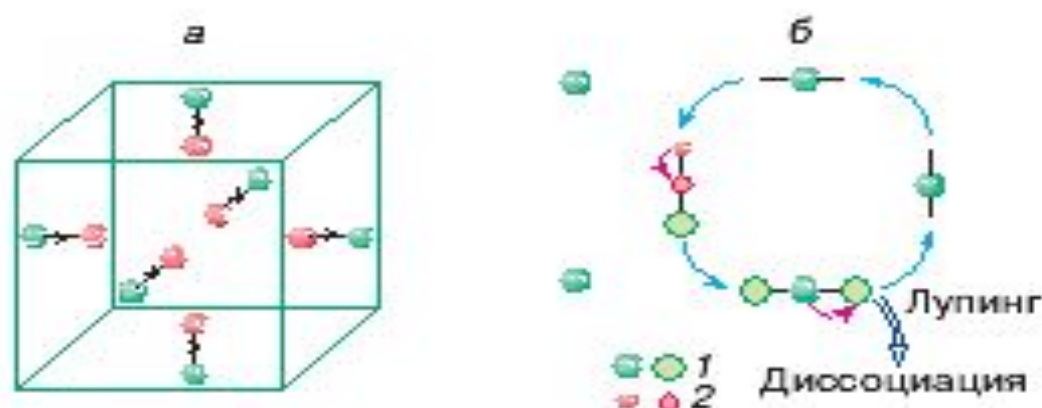


Рис. 3. Акт миграции примесного атома He (синий кружок) в кристаллической решетке альфа-железа из положения 1 в эквивалентное положение 2. Показаны траектория диффузионного прыжка примесного атома и траектории движения атомов ближайшего окружения. Тепловое движение остальных атомов не показано



**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.
- 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.