

第一章第三节

扩散的微观机制

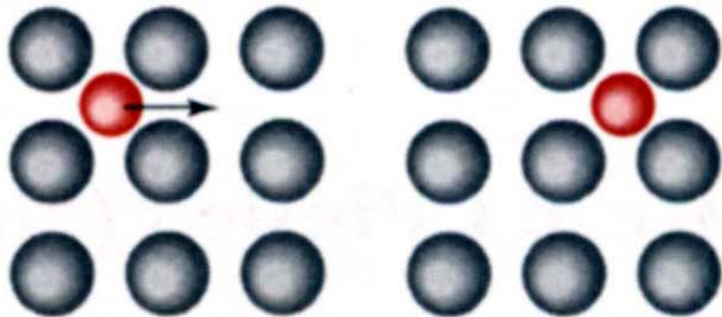
《材料科学基础》第四章

一、扩散的微观机制

1. 间隙机制

在间隙固溶体中溶质原子的扩散是从一个间隙位置跳到近邻的另一间隙位置，发生间隙扩散。

跳动时必须把阵点上相邻位置处的原子挤开，晶格发生局部瞬时畸变，畸变能是溶质原子发生间隙扩散必须克服的能量势垒。如，H，N，O，C等原子在金属中的扩散机制。



间隙机制

一、扩散微观机制

2. 填隙机制

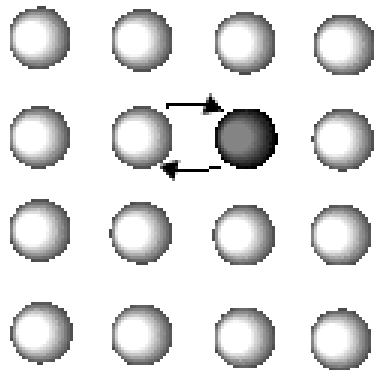
间隙(位置处的)原子将阵点上的原子挤到间隙位置, 自己进入阵点位置。

共线跳动

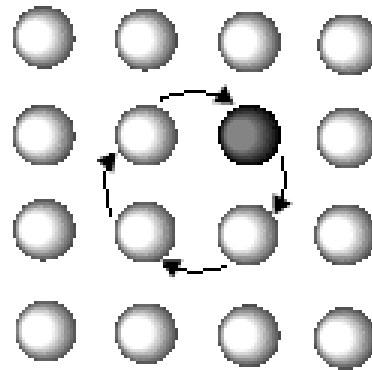
非共线跳动

3. 互换机制

两个相邻原子互换了位置。4个原子同时交换, 其所涉及到的能量远小于直接交换。



双原子互换



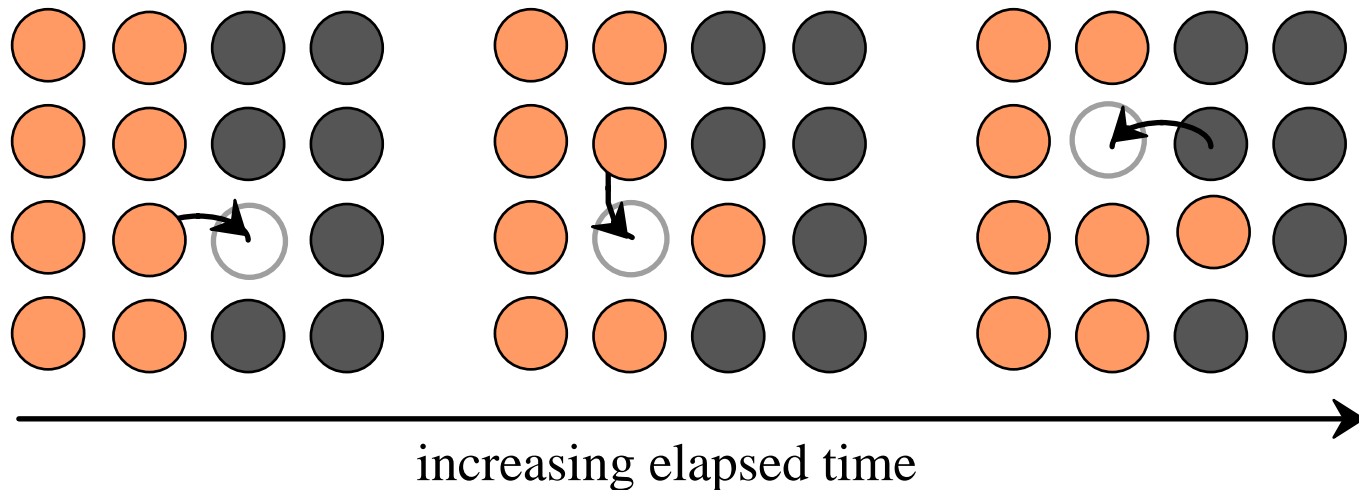
四原子互换

一、扩散微观机制

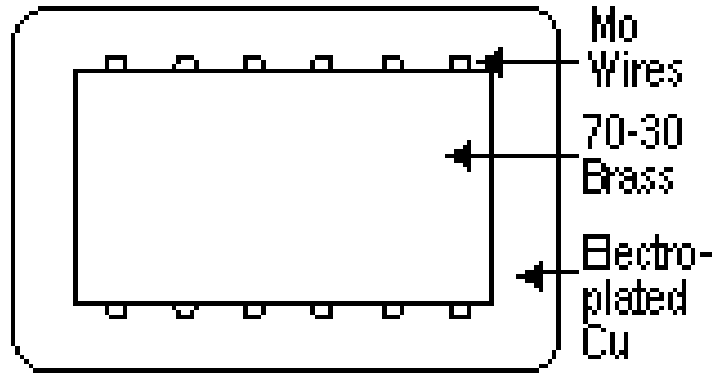
4. 空位机制

在置换固溶体中，一个处于阵点上的原子通过与空位交换位置而迁移，又叫做空位扩散。

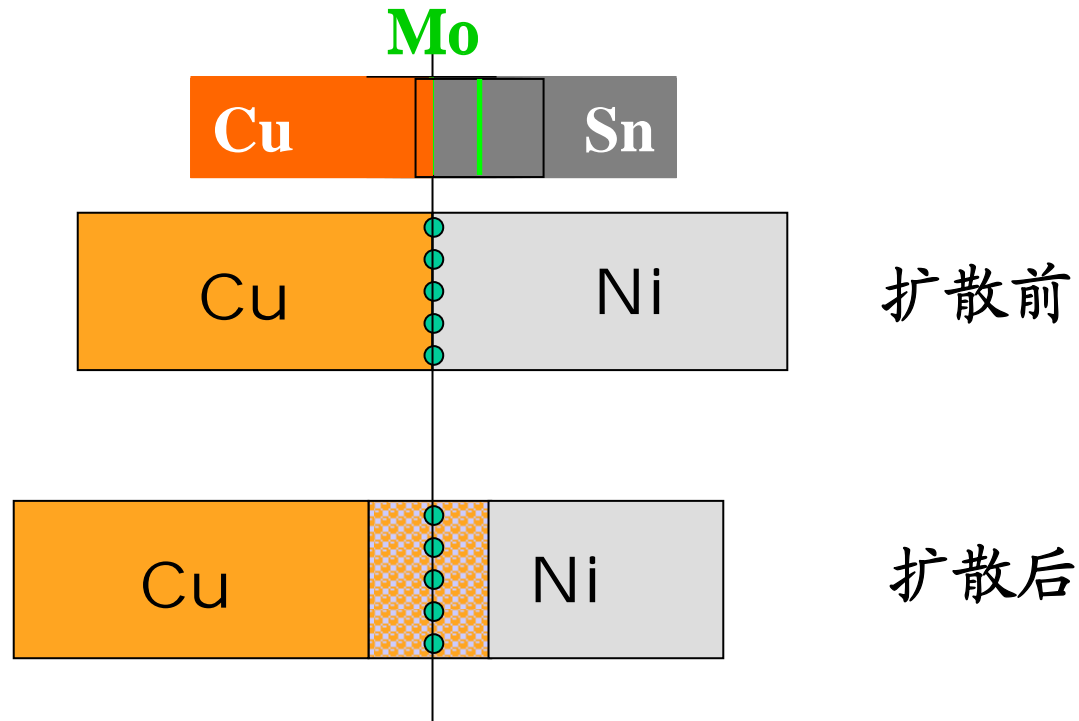
纯金属中的自扩散机制



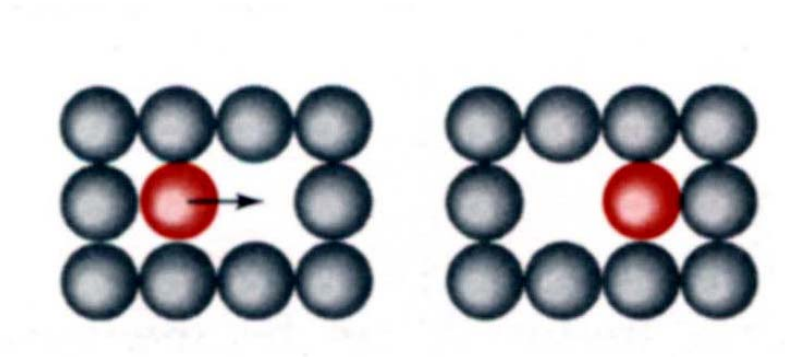
柯肯达尔效应 (Kirkendall effect)



Ernest Kirkendall

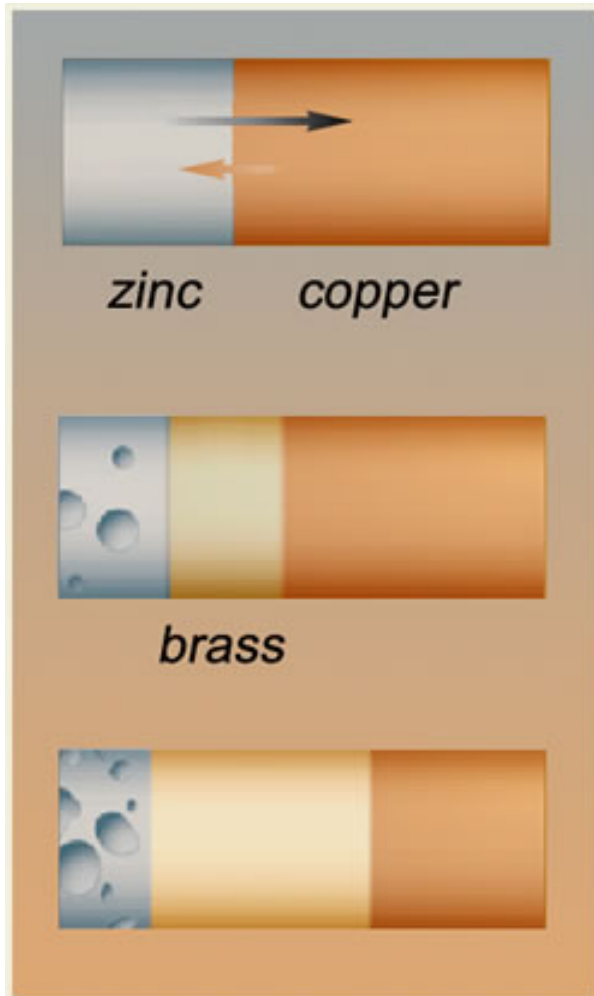


空位扩散机制



用空位机制解释柯肯达尔效应

<http://www.tms.org/pubs/journals/JOM/9706/Nakajima-9706.html>



<http://www.lbl.gov/Science-Articles/Archive/sb/May-2004/02-MSD-hollow-nanocrystals.html>

二、原子的无规行走及相关效应

原子的振动和跳动

在大量原子作无规跳动且跳动次数巨大的情况下，研究原子无规跳动与原子迁移平均距离之间的关系，称无规行走问题。

以间隙固溶体为例，溶质原子的扩散一般是从一个间隙位置跳跃到其近邻的另一个间隙位置。

在跳跃时，必须把晶面上下两侧的相邻原子推开，从而使晶格发生局部的瞬时畸变，晶格畸变能是间隙原子跳跃时所必须克服的能垒。因此，只有那些自由能超过一定值的间隙原子才能发生跳跃。

三、原子尺度的扩散系数表达式

扩散发生时，原子的定向迁移微观机制：

从1晶面跳到2晶面的溶质原子数为

$$N_1 = n_1 P \Gamma \Delta t$$

n_1 ：溶质原子总数， **P** ：成功跳动几率， **Γ** ：跳动频率， **Δt** ：时间间隔

从2晶面跳到1晶面的溶质原子数为

$$N_2 = n_2 P \Gamma \Delta t$$

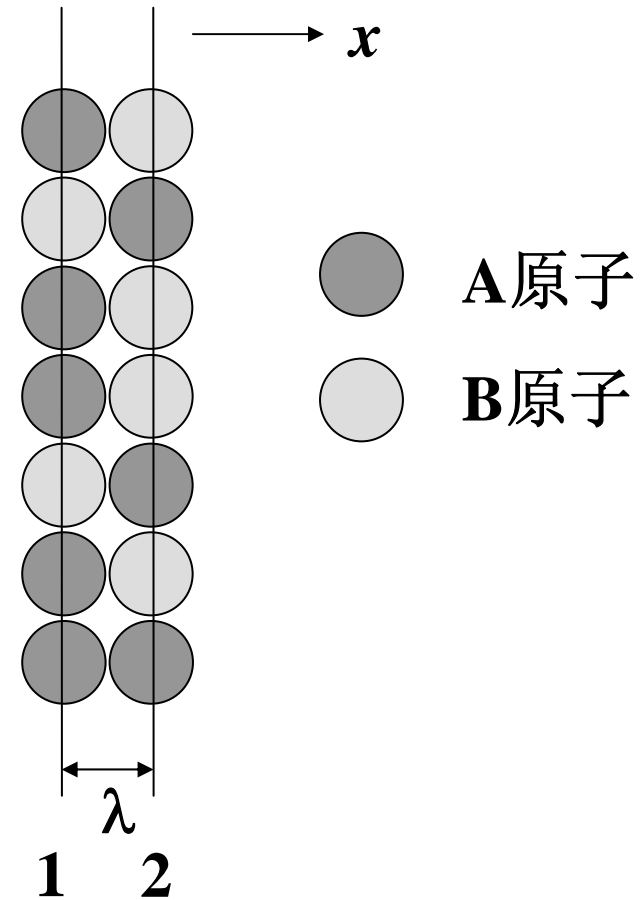
2晶面的净增溶质原子数为

$$J \Delta t = (n_1 - n_2) P \Gamma \Delta t$$

则， $J = (n_1 - n_2) P \Gamma$ (J 的单位为原子个数/($m^2 s$))

原子浓度：

$$C_1 = n_1 / \lambda, C_2 = n_2 / \lambda = C_1 + \lambda \frac{\partial C}{\partial x}$$



$$\text{即, } n_1 - n_2 = -\lambda^2 \frac{\partial C}{\partial x}$$

$$D = \lambda^2 P\Gamma$$

$$\text{则 } J = -\lambda^2 \frac{\partial C}{\partial x} P\Gamma$$

扩散系数的微观表达式

表明扩散系数与原子的跃迁频率 Γ 成正比。 Γ 是温度的强函数，所以 D 必是强烈依赖于温度的。 P 与扩散机制和点阵类型有关， λ 为晶面间距，取决于固溶体的结构，不同晶向上的扩散系数不同。

在一定外加条件下，如，温度梯度、浓度梯度，或一定的缺陷密度分布，扩散是可以定向发生的。工程上正是利用扩散的定向性，来改善材料的成分，相组成从而提高它们的物理或机械性能。

本节重点:

一、概念和术语:

扩散的微观机制（四种）、原子尺度的扩散系数、柯肯达尔效应

二、本章重点及难点

扩散系数的物理本质及其决定性因素