

§ 19. Диффузия и полная проводимость

Кинетика дефектов кристаллической решетки важна в вопросе о диффузии и полной проводимости. Дефекты занимают в кристалле положения равновесия. Вакансии суть отсутствующие атомы решетки. Внедренные атомы расположены в потенциальных ямах между узлами кристаллической решетки. При их перемещении по кристаллу дефекты перескакивают из одного положения равновесия в соседнее. Ниже мы прежде всего рассмотрим вероятность перехода для отдельного процесса. Отсюда следуют затем параметры, определяющие диффузию и полную проводимость.

В качестве модели рассматриваем кристалл с кубической структурой положений равновесия дефектов внедрения. Последующие соображения равным образом применимы и к вакансиям. Пусть кристалл простирается в направлении x на длину $L = Na$ (a — расстояние между двумя потенциальными ямами в направлении x). Ставим вопрос о числе дефектов внедрения, проходящих за время t через плоскость $x = x'$, расположенную между двумя плоскостями x_0 и x_1 . Если в среднем в потенциальных ямах в каждой плоскости имеется m дефектов внедрения, то это число равно mtw , где w есть вероятность отдельного перескока.

Функция Гамильтона для внедренного атома и окружающих его ионов решетки имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2M} + T(P) + \Phi(r, Q). \quad (2.74)$$

здесь r , p и M — координата, импульс и масса внедренного атома. Q и P обозначают все координаты и импульсы ионов решетки, T — кинетическая энергия ионов решетки, а Φ — зависящая от расположения всех частиц потенциальная энергия.

В течение времени dt плоскость $x = x'$ пересекнут слева направо все те внедренные атомы, которые имеют положительную составляющую скорости v_x и которые находятся в пределах расстояния $dx = v_x dt$ слева от x' . Число таких атомов равно

$$n dx \frac{\int \exp(-H/k_B T) dp_y dp_z dy dz dP dQ}{\int \exp(-H/k_B T) d\tau_p d\tau_r dP dQ}, \quad (2.75)$$

где n — полное число дефектов внедрения ($n = Nm$). Посредством интегрирования по всем положительным значениям составляющей скорости v_x и используя (2.74), получаем

$$mw dt = dt \int_0^\infty dv_x n v_x \frac{\int \exp(-H/k_B T) dp_y dp_z dy dz dP dQ}{\int \exp(-H/k_B T) d\tau_p d\tau_r dP dQ} =$$