

6.2.4 Merkpunkte zu Kapitel 6.2: Atomare Betrachtung der Diffusion

Fremdatome (**FA**) springen entweder als Zwischengitteratome ("i") direkt, oder als substitutionelle **FA** indirekt über Leerstellen ("**V**"). Was für substitutionelle oder interstitielle **FA** gilt, muss aber automatisch auch für die "normalen" Gitteratome gelten; man spricht dann von "Selbstdiffusion".

- Die zu überwindende Energiebarriere heißt $E_M = \text{Wanderungsenergie}$ (oder Migrationsenergie) des betrachteten Teilchens; die jeweiligen Sprungraten r sind damit gegeben.
- Der Vorfaktor D enthält im wesentlichen die Anlauffrequenz ν und die "Wanderungsentropie" S_M . Der Term $\exp(-S_M/k)$ ist aber ≈ 1
- In r_V für *alle* Atome steckt auch die **Konzentration** der Leerstellen, da die Wahrscheinlichkeit des Sprungs eines **Gitteratoms** das Produkt der Sprungwahrscheinlichkeit und der Wahrscheinlichkeit, eine Leerstelle als Nachbar zu haben, ist. (Es springen immer genau so viele Atome wie Leerstellen).

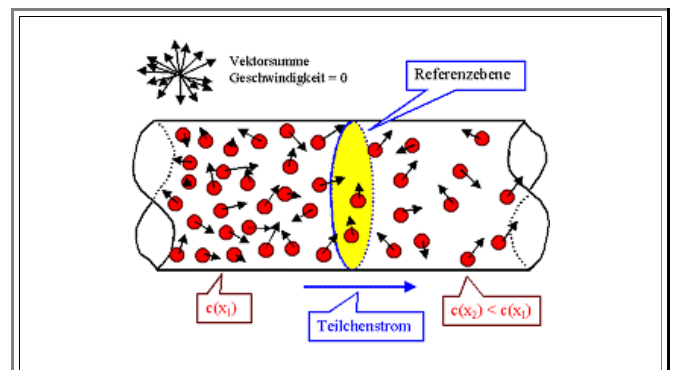
$$r_i(\text{ein i}) = \nu \cdot \exp\left(-\frac{S_{M,i}}{k}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_{M,i}}{kT}\right) = D_i \cdot \exp\left(-\frac{E_{M,i}}{kT}\right)$$

$$r_V(\text{alle V}) = D_V \cdot \exp\left(-\frac{E_{M,V}}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_{F,V}}{kT}\right)$$

Typische Wanderungsenergien
 $\approx 0,5 \text{ eV}$ für die Zwischengitteratome
 $\approx 1 \text{ eV}$ für Leerstellen.

Wichtig ist die **Diffusionsstrom(dichte)** j_{Diff} = Zahl der Teilchen, die pro Sekunde durch die Einheitsfläche A springen.

- $[j_{\text{Diff}}] = \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$
- Wichtig ist die Unterscheidung zwischen **Partialstrom** (nur links \Rightarrow rechts oder rechts \Rightarrow links) und **Nettostrom** = Differenz der Partialströme.
- Nettostrome können = 0 sein trotz großer Partialströme!



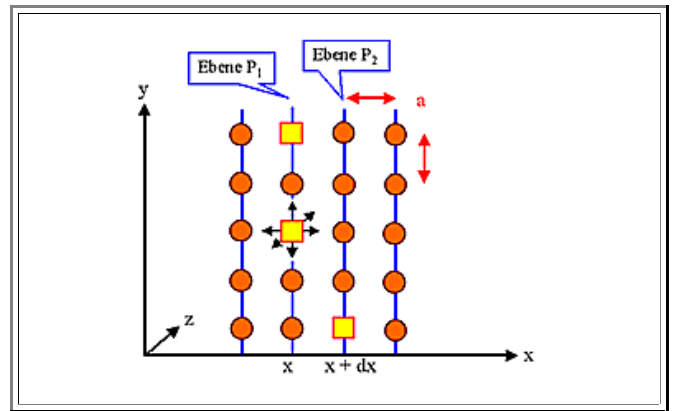
Die beiden empirisch gefundenen **Fickschen Diffusionsgesetze** beschreiben:

- Den **Nettoddiffusionsstrom** als Konsequenz eines Konzentrationsgradientens $\nabla c(r)$
 - Die zeitliche Änderung der Konzentration in einem Volumenelement bei r aus der Bilanz des Zu- und Abflusses; sie ist proportional zur 2. Ableitung der Konzentration.
- In beiden Gleichungen taucht dieselbe Proportionalitätskonstante auf, sie heißt **Diffusionskoeffizient**.
- Die vermeintlich simplen Differentialgleichungen haben i.d.R. komplizierte Lösungen, die typischerweise statistische Funktionen enthalten.

$$j(r) = -D \cdot \nabla c(r)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) = D \cdot \Delta c$$

Berechnet man den Diffusionsstrom atomar, erhält man eine Beziehung zwischen dem phänomenologisch definierten Diffusionskoeffizienten D und den atomaren Größen Gitterkonstante a und Sprungrate r (und eine Begründung der empirischen Fickschen Gesetze).



$$j_x = - \frac{a^2 \cdot r}{6} \cdot \frac{c(x+dx) - c(x)}{dx} = - \frac{a^2 \cdot r}{6} \cdot \frac{dc(x)}{dx}$$

$$D := \frac{a^2 \cdot r}{6}$$