



Факультет химии

Базовая кафедра неорганической химии
и материаловедения института общей и
неорганической химии имени
Н. С. Курнакова

Москва 2022

Диффузии и ионная проводимость в твердых телах

Аспирант 1 г/о Курзина Е.А.



Твердые тела

Кристаллические

Обладают дальним порядком

Все атомы располагаются в узлах
геометрически правильной решетки
– кристаллической решетки

Наименьший структурный элемент,
составляющий кристалл –
элементарная ячейка

Аморфные

Обладают ближним порядком

Могут существовать либо в
стеклообразном состоянии,
либо в жидком

Полимеры

Состоят из элементарных
фрагментов – мономерных звеньев

Чаще всего аморфные, но могут быть
кристаллическими

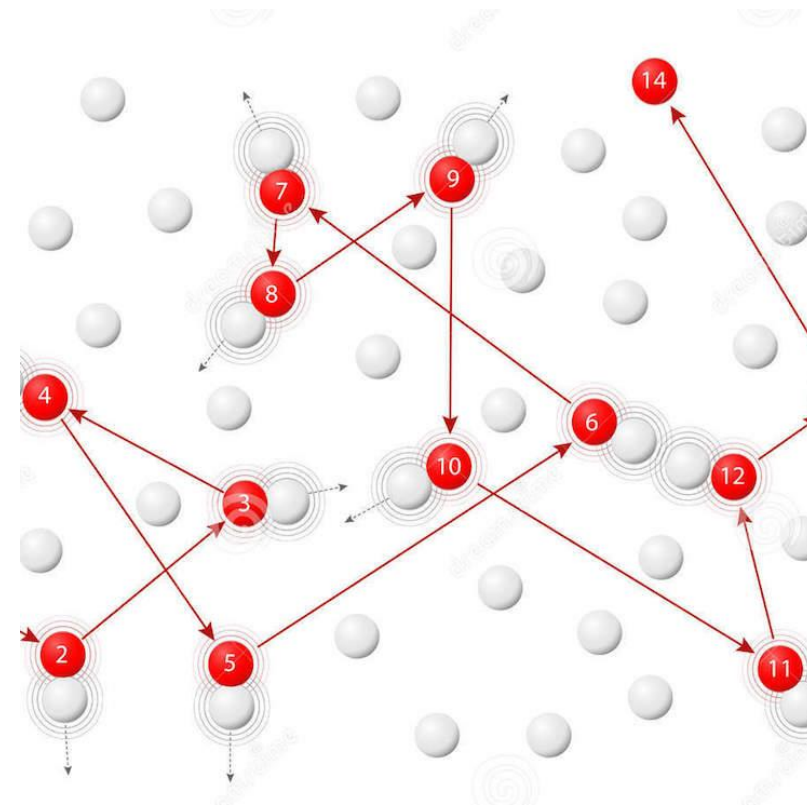
Могут быть линейными или
разветвленными



Диффузия

Диффузия - неравновесный процесс перемещения (молекул и атомов в газах, ионов в плазме, электронов в полупроводниках и тому подобное) вещества из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией, приводящий к самопроизвольному выравниванию концентраций по всему занимаемому объёму.

Диффузия в твердых телах происходит крайне медленно.





Законы диффузии

1 закон Фика

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

J – плотность потока вещества

C – концентрация вещества

x – координата

D – коэффициент диффузии

2 закон Фика

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

C – концентрация вещества

x – координата

t - время

Микроскопическая теория диффузии

$$D = fZa^2v_0 \exp\{A\} \exp\{-B\}/6,$$

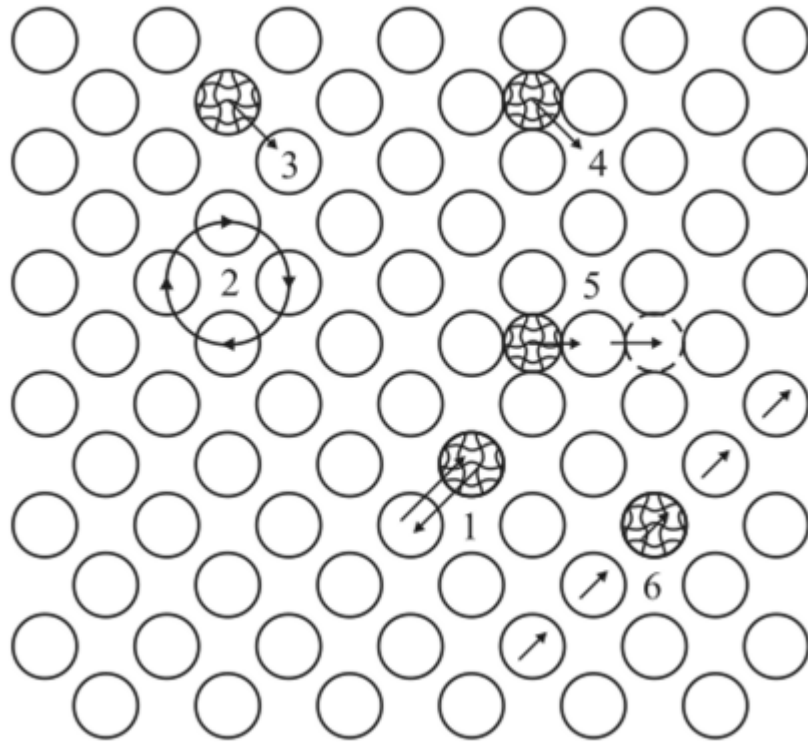
$$A = (S_{\text{ш}}/M + Si)/R$$

$$B = (H_{\text{ш}}/M + H_i)/RT$$

$$D = D_0 \exp(-E_a/MRT)$$

E_a – энергия активации

Механизмы диффузии в твердых телах



- 1 – обмен ионов местами
- 2 – кольцевой
- 3 – вакансионный
- 4 – междоузельный
- 5 – эстафетный
- 6 – перемещение краудионов



Ионная проводимость

Ионная проводимость – (в отличие от самодиффузии) перенос ионов вещества под действием внешнего электрического поля.

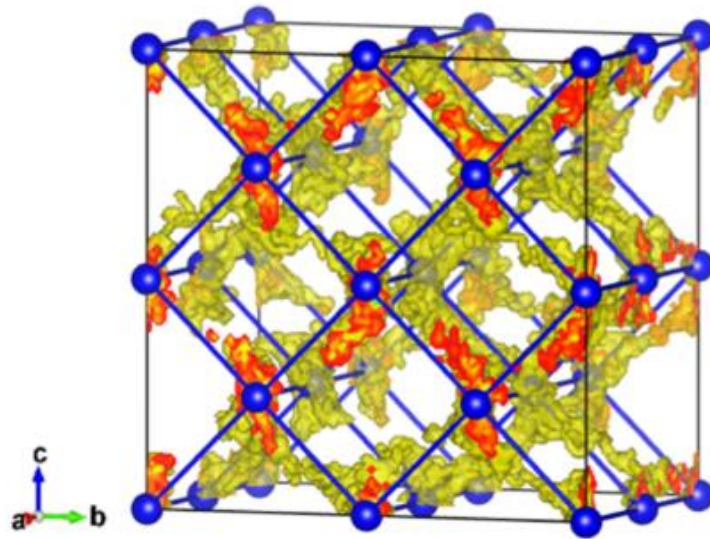
$$\sigma_{\text{ион}} = \sum c_i \cdot e_i \cdot \mu_i$$

$\sigma_{\text{ион}}$ – ионная проводимость, c_i - концентрация носителей заряда, e_i - заряд иона, μ_i – подвижность иона

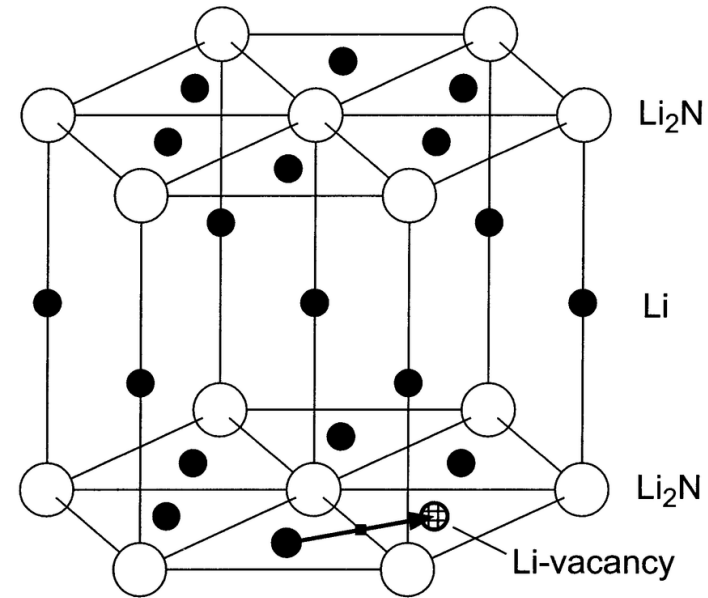
$$\sigma_{\text{общ}} = \sigma_{\text{ион}} + \sigma_{\text{электр}}$$

$\sigma_{\text{электр}}$ - электронная проводимость

Ионная проводимость кристаллических веществ

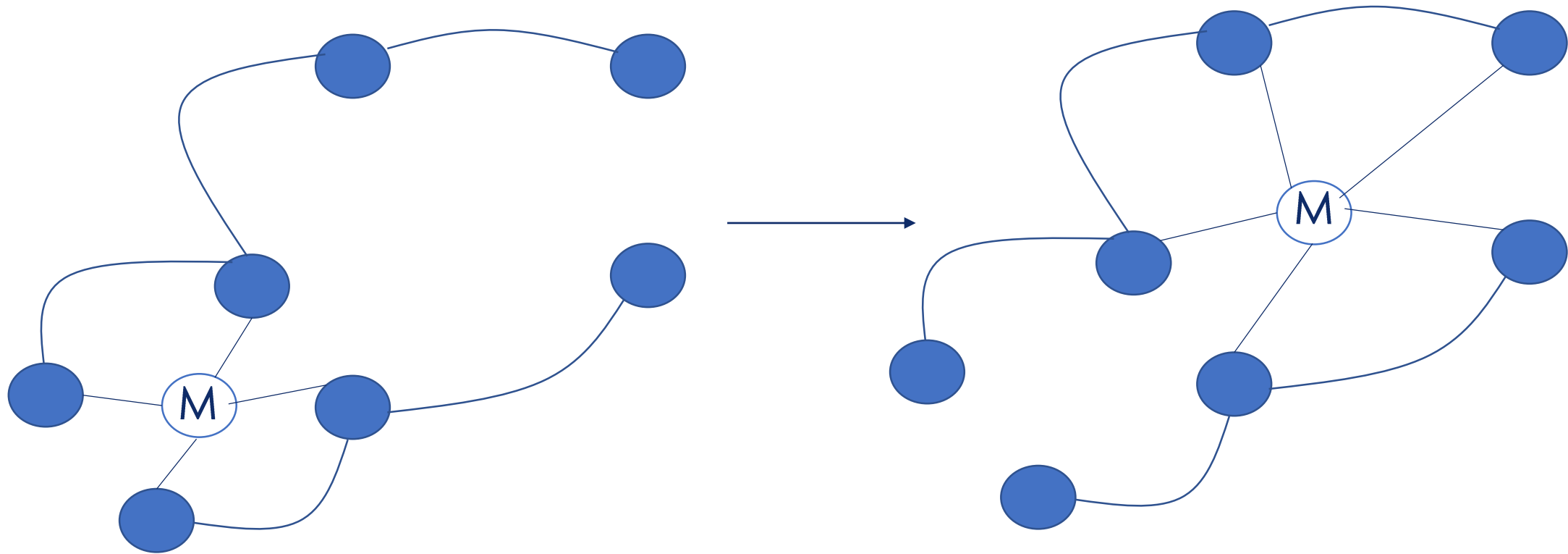


Соединение со структурой NASICON. Пути передачи ионов Li^+ в кристаллической структуре



Li_3N . Проводимость осуществляется за счет передвижения ионов лития в слое

Ионная проводимость полимеров



Перколяционная модель проводимости полимерных материалов



Спасибо за внимание