

Aula 6

DIFUSÃO

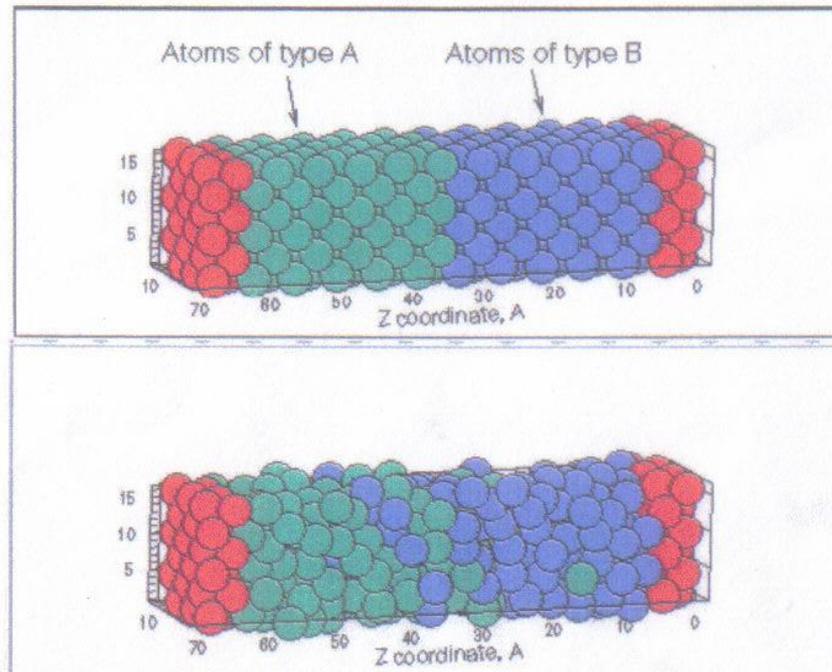
Difusão

Transferência de massa

**Movimento de 1 grupo de átomos (soluto)
dentro de um outro grupo (hospedeiro)**

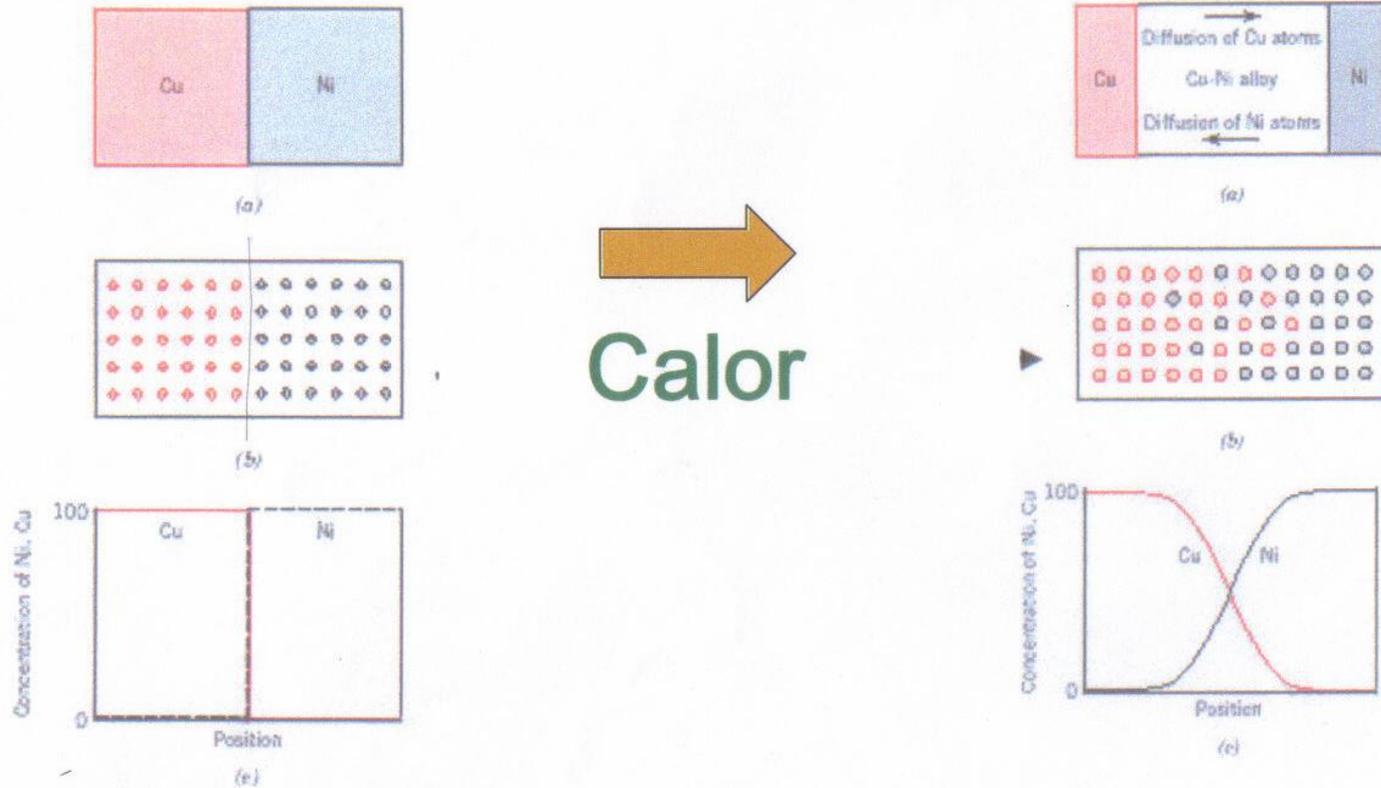
DIFUSÃO

➤ Transporte de massa por movimento atômico



Os materiais, em geral, podem ser homogeneizados por difusão. Para ocorrer o processo de difusão, a temperatura deve ser alta o suficiente para superar barreiras de energia ao movimento atômico.

Interdifusão e autodifusão

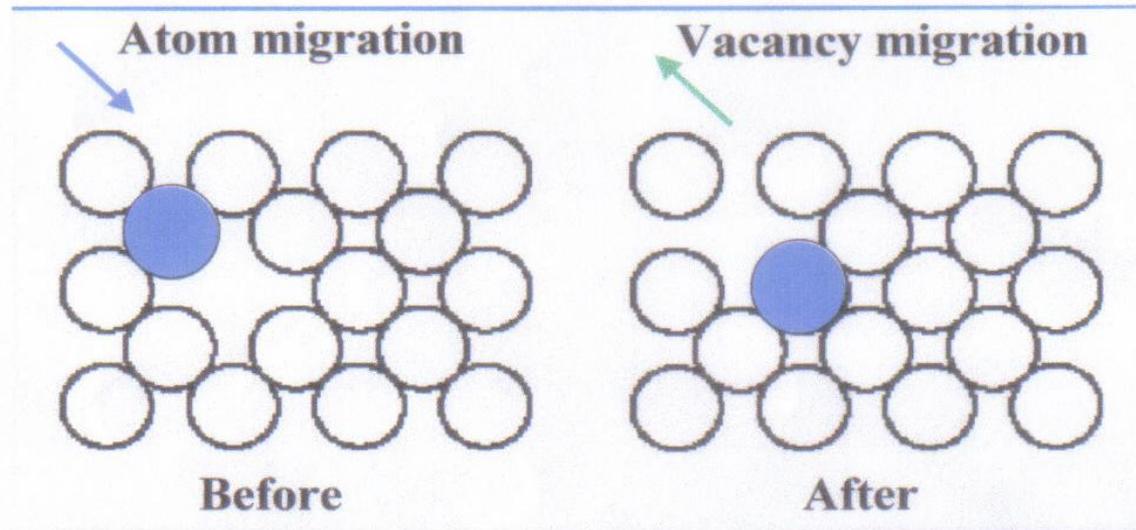


Antes

Depois

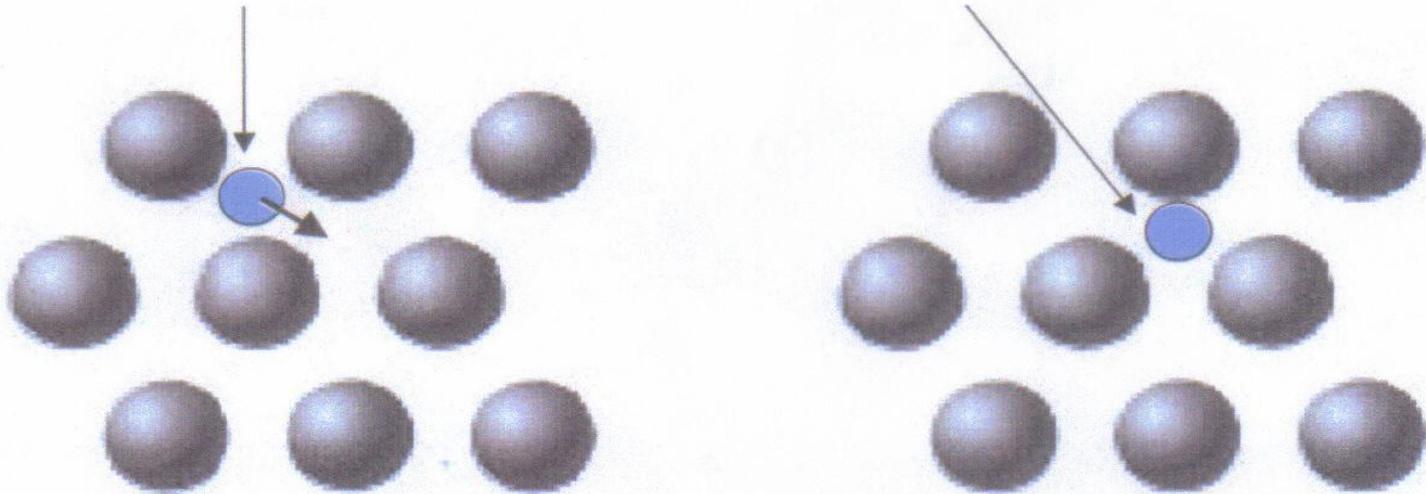
Mecanismos de difusão

- Difusão por lacuna



- Para passar de um sítio a outro, na rede, os átomos necessitam de energia suficiente para romper ligações com seus vizinhos e causar alguma ~~distorção a rede cristalina durante o salto~~. Essa energia é de natureza vibracional.

Difusão intersticial



- Geralmente, a difusão intersticial ocorre mais rapidamente:
- a) os átomos intersticiais são menores e, portanto, mais móveis
- b) há mais posições intersticiais vazias do que lacunas (ou vacâncias)

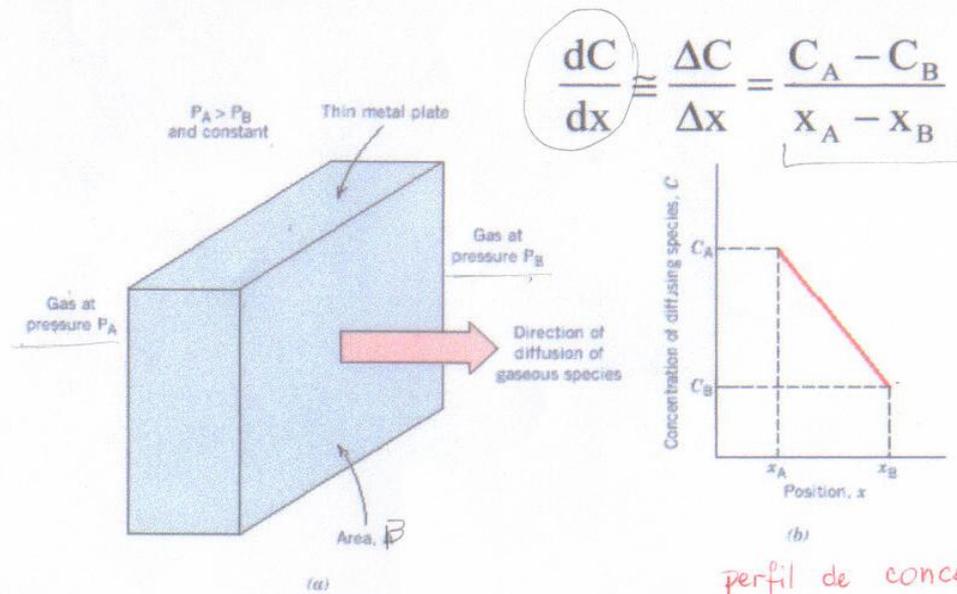
Difusão em estado estacionário

- A difusão é um processo que depende do tempo. Por isso, podemos definir uma taxa de transferência de massa, ou melhor definindo, um fluxo de difusão.

$$\underline{J} = \underline{M} / \underline{At} \cong (1/A) (dM/dt) \text{ (Kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}\text{)}$$

Difusão no estado estacionário

- Dá-se o nome de difusão no estado estacionário quando o processo de difusão é controlado por um fluxo difusivo que não varia com o tempo.



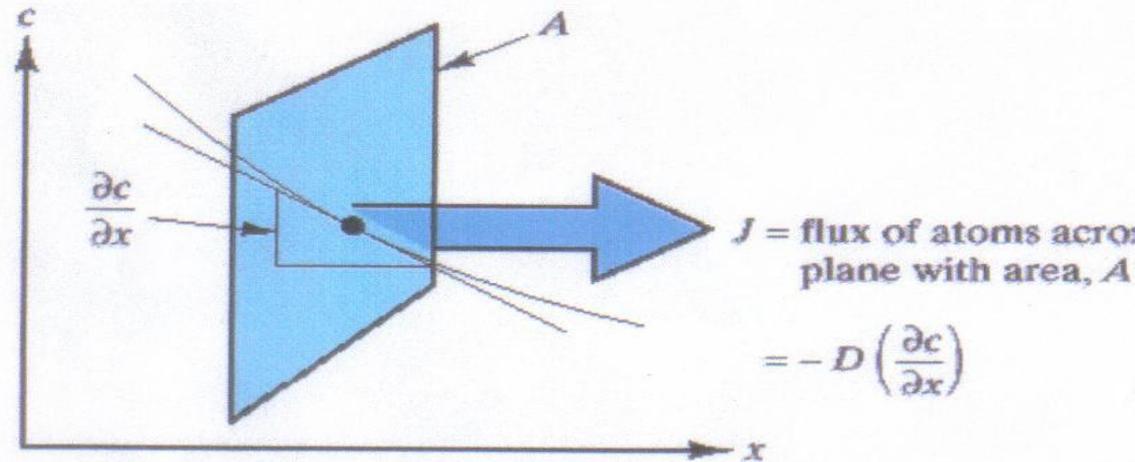
- O gradiente de concentração é dado pela inclinação da curva (Concentração X posição) em uma dada posição em particular.

Difusão no estado estacionário

Primeira lei de Fick

$$\underline{J} = -D \frac{dC}{dx}$$

D - coeficiente de difusão (m^2/s)

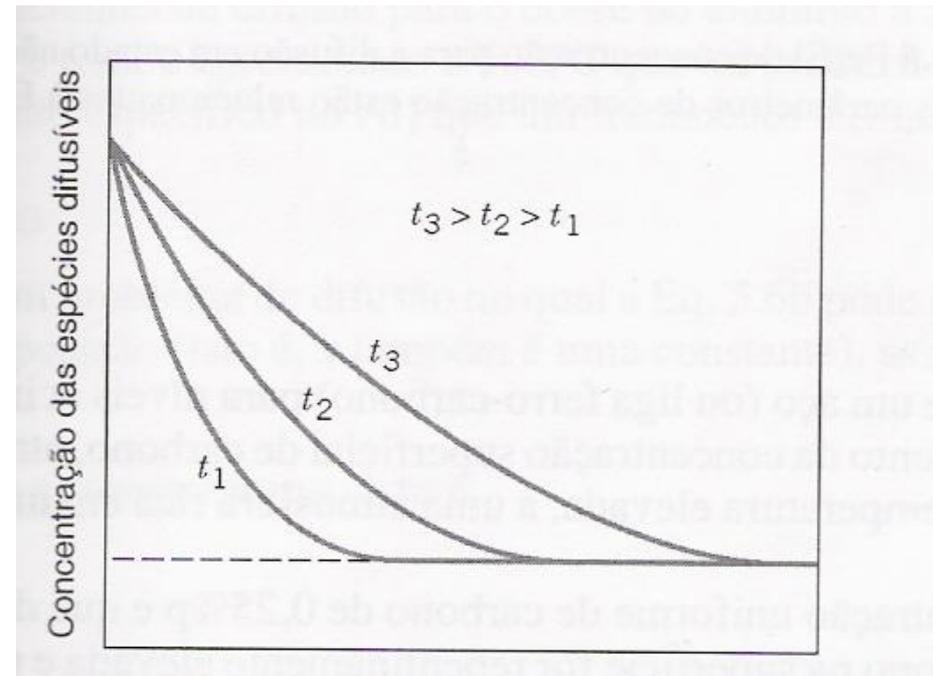


- A força-motriz para difusão é o gradiente de concentração.
- O sinal de menos indica que a difusão se dá no sentido da região de maior concentração para a de menor concentração

Difusão no estado não-estacionário

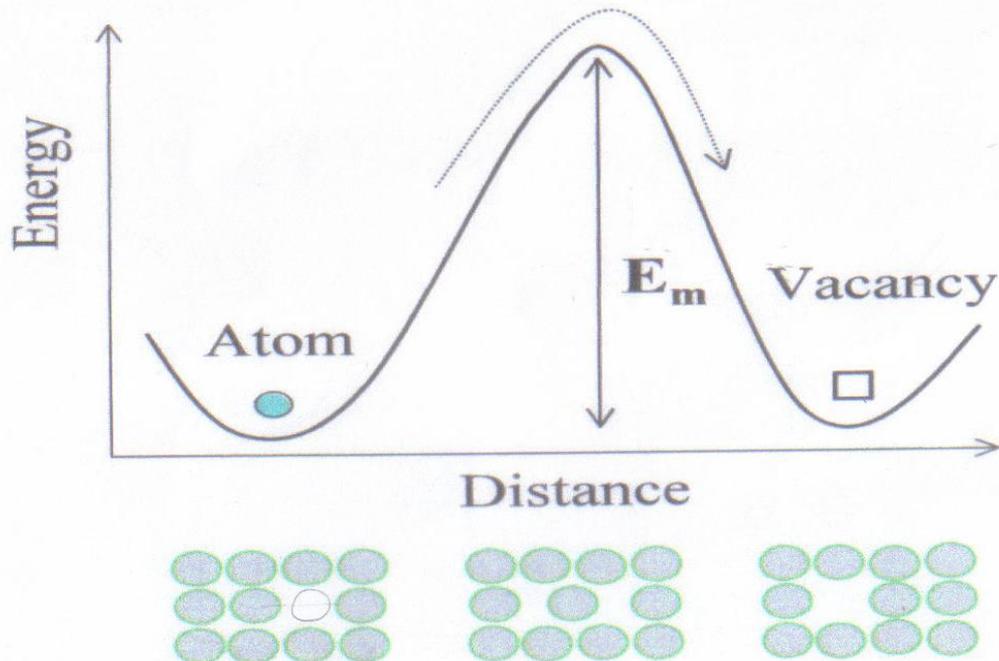
- Nesse caso, o perfil de concentração, ou seja, a concentração de átomos, em função da posição no interior da amostra é não-linear.
- Segunda Lei de Fick:

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



Influência da temperatura

Processo ativado termicamente



- Para a difusão controlada por lacunas, a probabilidade de que um átomo se difunda no cristal é o produto da probabilidade de se encontrar um vacância nas vizinhanças

$$P = C_v N \exp\left(-\frac{Q_v}{k_B T}\right)$$

energia de ativação

- pela probabilidade de obter o nível de flutuação térmica necessária para se superar a barreira energética para movimento dessa vacância:

$$R_j = R_0 \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right)$$

Influência da temperatura

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-Q_v}{RT}\right)$$

onde D é uma constante pré-exponencial,

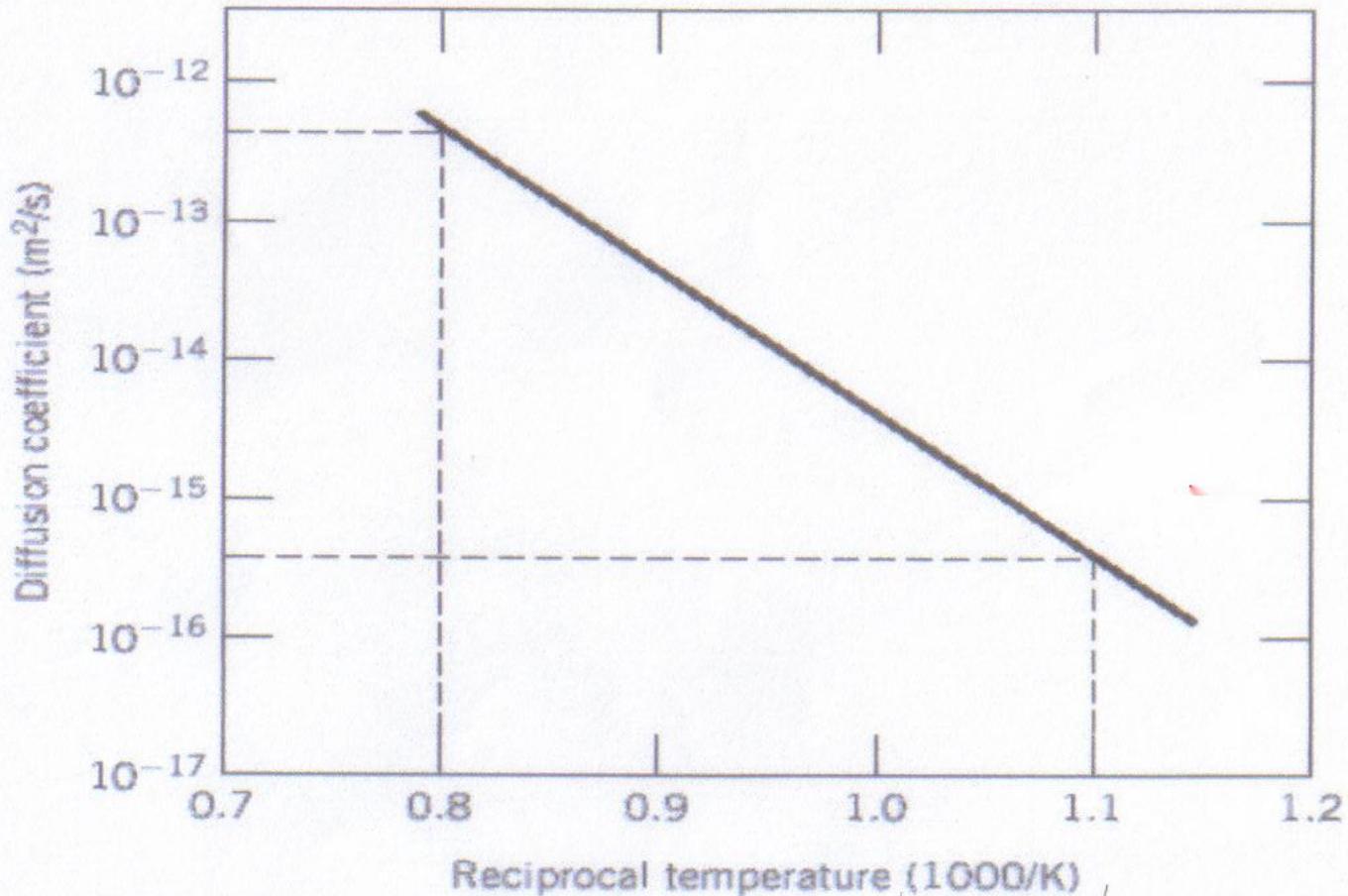
Q_v = energia de ativação para difusão

R = constante dos gases

(8,31 J/mol.K ou $8,62 \cdot 10^{-5}$ eV/átomo ou 1,987 cal/mol.k)

T = temperatura absoluta

Influência da temperatura



Graph of $\log D$ vs. $1/T$ has slope of $-Q_d/2.3R$,
intercept of $\ln D_0$

Influência da microestrutura

