



**ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**  
**Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais**

## *DIFUSÃO*

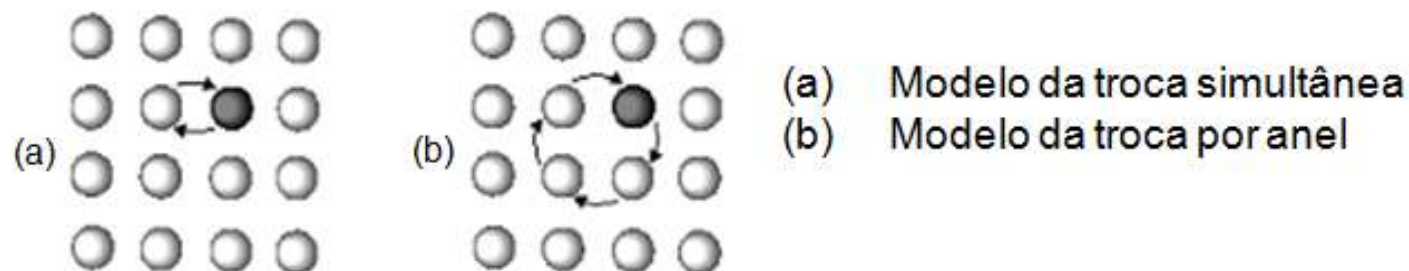
PMT 3110 - Introdução à Ciência dos Materiais para Engenharia

## Roteiro da Aula

- Histórico
- Conceito de difusão
- Par de difusão
- Mecanismos de difusão
- Fluxo de difusão
- Interpretação do gradiente de um campo escalar
- Efeito Kirkendall
- Difusão em estado estacionário - Primeira lei de Fick
- Difusão em estado não-estacionário - Segunda lei de Fick
- O coeficiente de difusão
- Fatores que influenciam na difusão
- Caminhos de difusão
- Aplicações

## Difusão: história

- Robert Boyle (1627-1691) foi o primeiro a reportar que um sólido (zinco) penetrou em uma moeda de cobre e formou um material dourado (latão = liga cobre-zinco)
- O fenômeno da difusão em sólidos foi formalmente comunicado em 1896 por Sir Roberts-Austen\*, estudando a difusão do ouro em chumbo. Ele determinou o coeficiente de difusão do Au no Pb e a difusividade do ouro em função do inverso da temperatura.
- Mecanismos que explicavam o fenômeno da difusão no passado (até aproximadamente 1950): a troca simultânea de átomos ou o modelo da troca por anel (não existia ainda o conceito de lacuna).



\* A fase austenita nos aços carbono foi batizada com o seu nome.

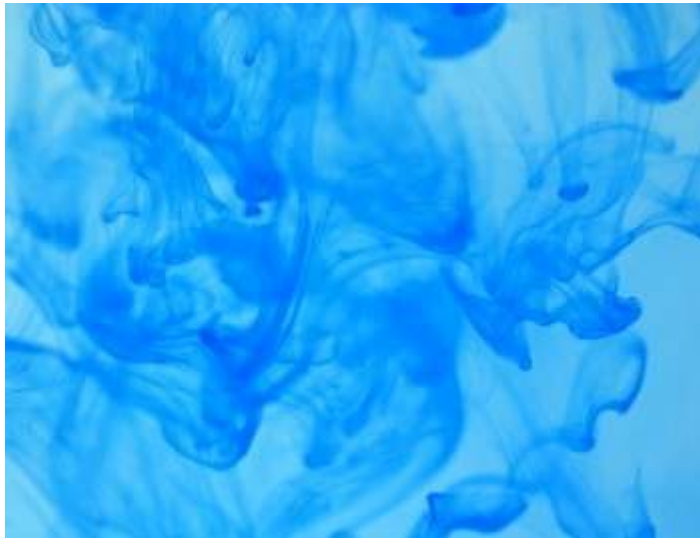
## Conceito de difusão: transporte de massa

Da mesma forma que a **corrente elétrica** está associada ao **transporte de cargas** elétricas através de um fio condutor quando este está sujeito a uma diferença de potencial elétrico, a **DIFUSÃO** está associada ao **transporte de massa** que ocorre em um sistema quando nele existe diferença de **potencial termodinâmico** (que pode ser proporcional à diferença de **concentração química**, quando o sistema está em equilíbrio térmico).

## Conceito de difusão: estados da matéria

5

Governada por diferentes mecanismos e manifestando-se com magnitudes bastante distintas, a difusão ocorre no interior de **sólidos**, **líquidos** e **gases**. Uma gota de tinta que se dilui na água, é um exemplo de difusão no interior de um líquido\*. O odor de um perfume que se espalha por uma sala, é um exemplo de transporte de massa (convecção e difusão) no interior de um gás\*.



Tinta difundindo em água

\* Nestes exemplos, a convecção tem um papel maior que a difusão no transporte de massa dos fenômenos citados. Se fosse somente difusão levaríamos muito mais tempo para perceber o perfume ou colorir a água. Nos sólidos não existe a convecção e pode-se afirmar que o transporte de massa é tipicamente por difusão.

## Conceito de difusão: materiais sólidos

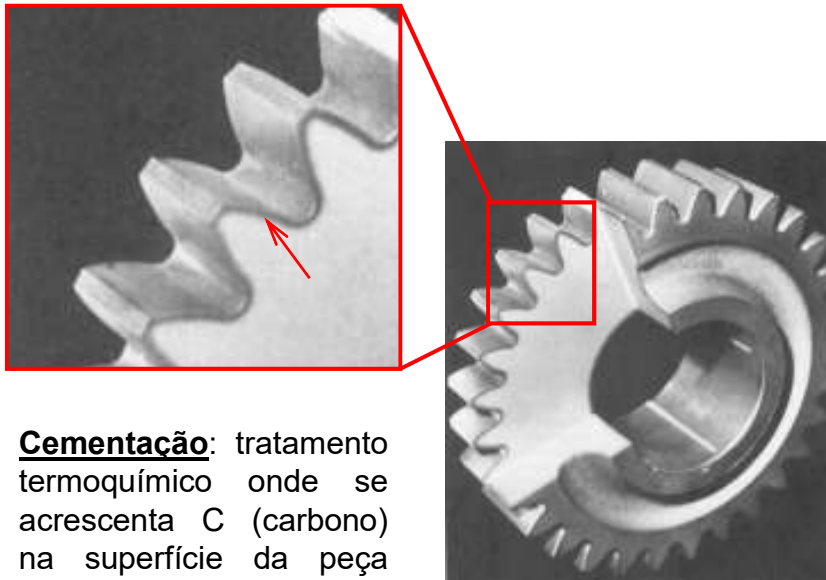
6

- No interior dos sólidos, a difusão ocorre por movimentação atômica (no caso de metais), de cátions e ânions (no caso de cerâmicas) e de macromoléculas (no caso de polímeros).
- Daremos aqui atenção especial ao caso da difusão em materiais metálicos sólidos e reticulados cristalinos cúbicos.

## Conceito de difusão: aplicações

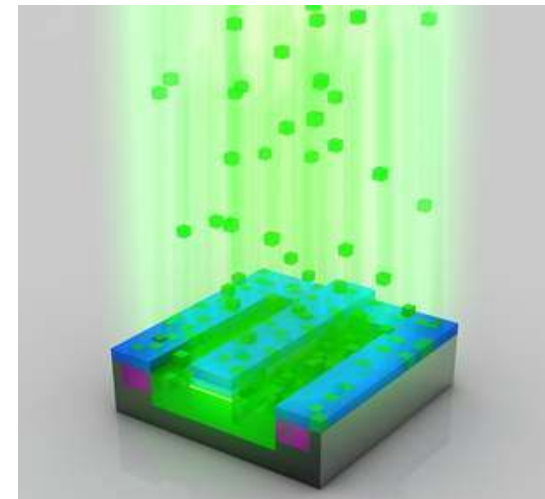
7

A presença da difusão em nosso cotidiano não é tão rotineira, mas é grande sua importância para a fabricação de componentes ou estruturas de engenharia.



**Cementação:** tratamento termoquímico onde se acrescenta C (carbono) na superfície da peça para aumento de dureza.

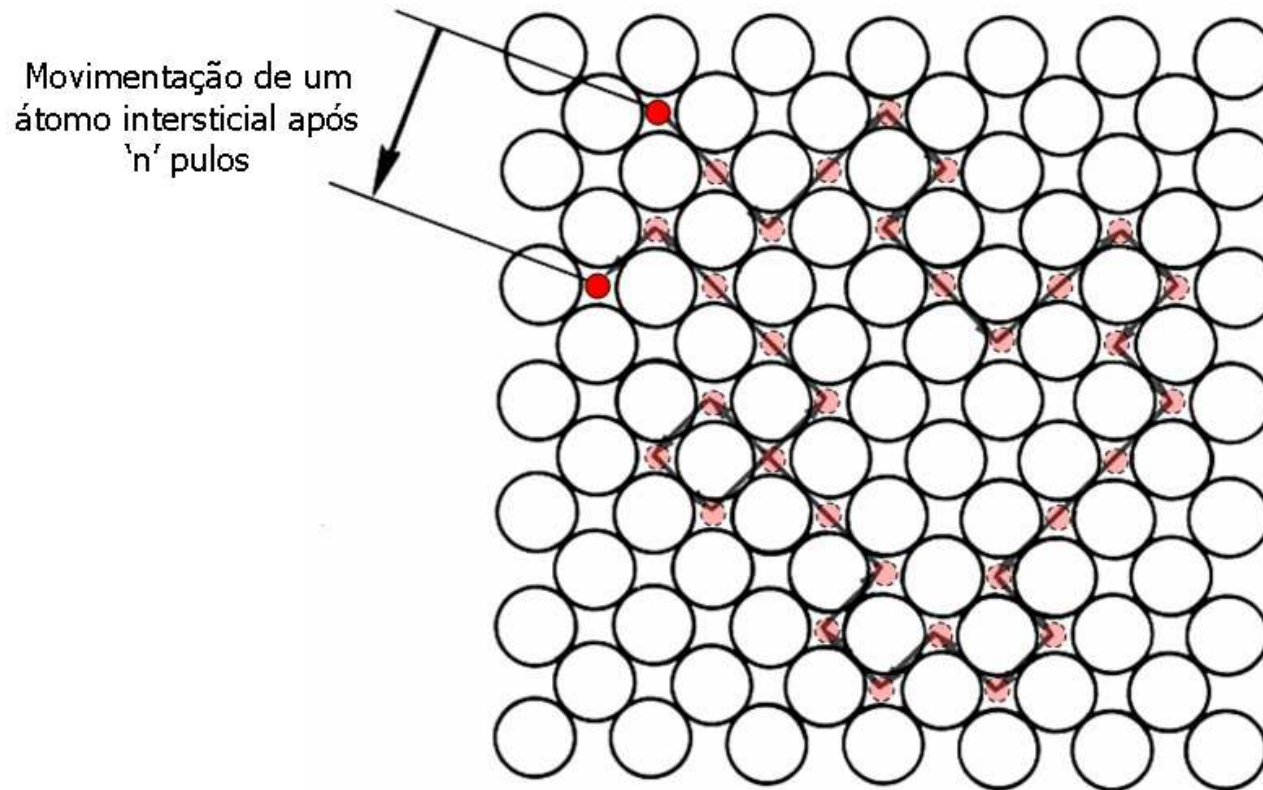
Corte de uma engrenagem cementada



Esquema da dopagem de boro (verde) no silício (cinza escuro)

## Conceito de difusão: movimentação dos átomos 8

- A movimentação de cada átomo pode ser descrita como sendo um caminho aleatório (random-walk) no espaço. Por simplicidade será assumido uma movimentação unidimensional.

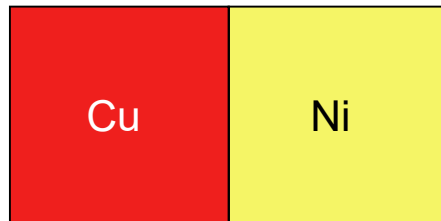




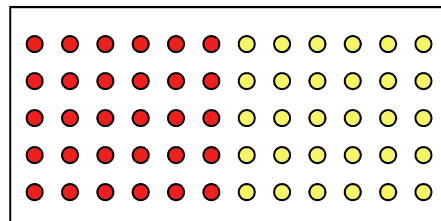
# Par de difusão

9

Uma visão idealizada do fenômeno da difusão pode ser obtida com o auxílio do **PAR DE DIFUSÃO**. O par de difusão é formado quando as superfícies de duas barras de materiais metálicos distintos são colocadas em contato íntimo e aquecidas por um dado tempo.



Um par de difusão cobre-níquel *antes de ser submetido a um tratamento térmico a temperatura elevada.*



Representações esquemáticas das localizações dos átomos de Cu (círculos à esquerda) e Ni (círculos à direita) no interior do par de difusão.

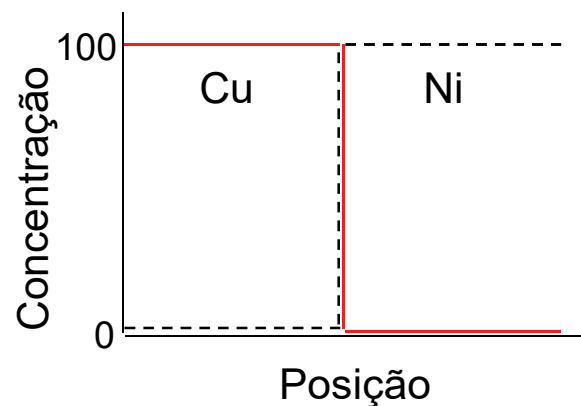
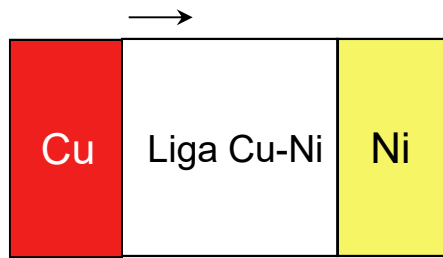


Gráfico das concentrações do cobre e do níquel em função da posição ao longo do par de difusão. A linha sólida representa a concentração do Cu e a linha pontilhada a do Ni.

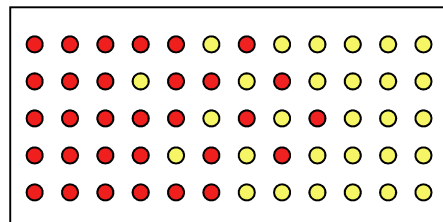
# Par de difusão

10

Difusão dos átomos de Cu

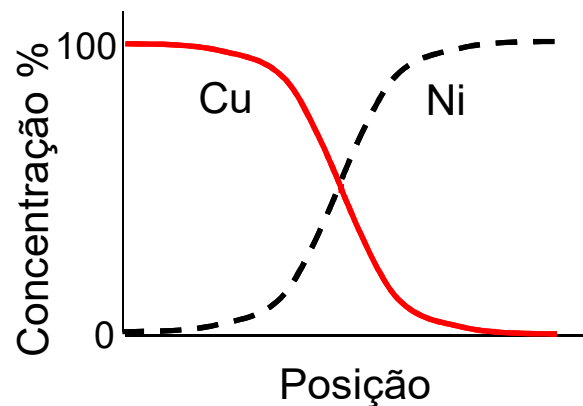


Difusão dos átomos de Ni



Um par de difusão cobre-níquel *após ser submetido a um tratamento térmico a temperatura elevada*, mostrando a zona de difusão com formação de liga.

Representação esquemática das localizações dos átomos de Cu (círculos vermelhos) e Ni (círculos amarelos) no interior do par de difusão, *após tratamento térmico*.



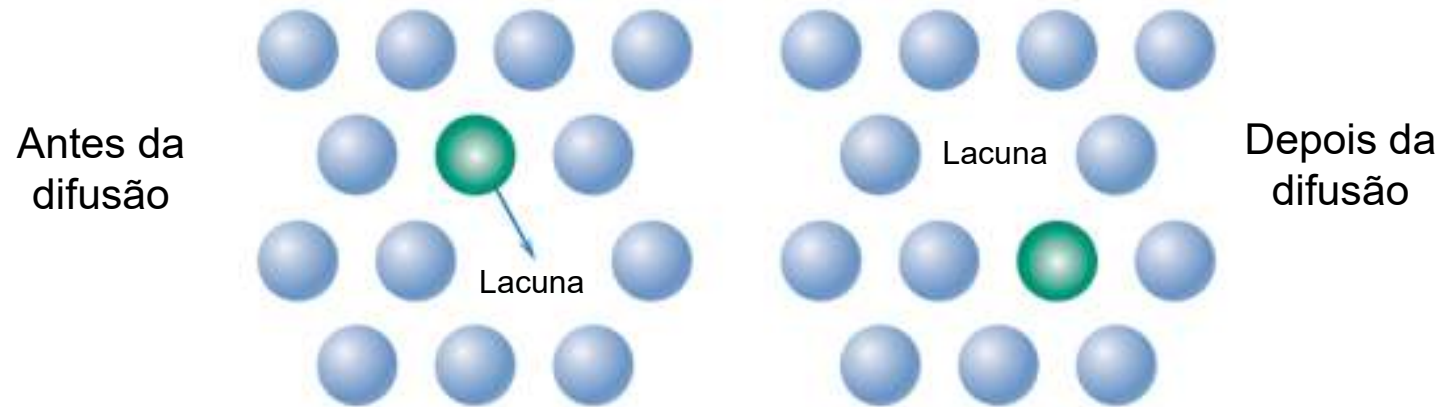
Concentrações de cobre e níquel em função da posição ao longo do par de difusão, *após tratamento térmico*. A linha preta tracejada representa a concentração de Ni e a linha vermelha a de Cu.

## Mecanismos de difusão

- De uma perspectiva atômica, a difusão é a migração passo a passo dos átomos de determinadas posições do reticulado cristalino para outras.
- Para ocorrer a movimentação de átomos são necessárias duas condições:
  - (1) deve existir um espaço livre adjacente ao átomo;
  - (2) o átomo deve possuir energia suficiente para quebrar as ligações químicas que o une a seus átomos vizinhos; causar uma distorção no reticulado cristalino durante seu deslocamento para a nova posição e formar ligações químicas com os átomos de sua nova vizinhança.
- Foram propostos vários mecanismos diferentes para explicar o movimento atômico durante a difusão; deles, dois são dominantes para a *difusão em metais*, a **DIFUSÃO POR LACUNAS** (ou **DIFUSÃO SUBSTITUCIONAL**) e a **DIFUSÃO INTERSTICIAL**.

## Difusão por lacunas (Difusão substitucional)

- Na **DIFUSÃO POR LACUNAS** um átomo (hospedeiro ou substitucional) se desloca de uma posição normal da rede cristalina para um sítio vago, ou lacuna, adjacente.

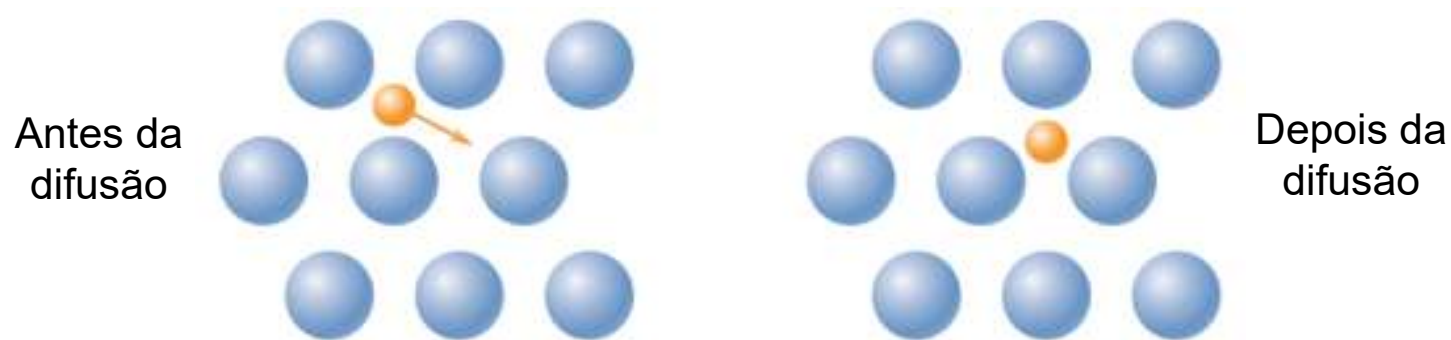


- A movimentação dos átomos ocorre em uma direção e a das lacunas ocorre na mesma direção em sentido oposto.
- A extensão segundo a qual a difusão por lacunas pode ocorrer é função da concentração de lacunas presente no metal.
- A concentração de lacunas aumenta com a temperatura.
- Quando átomos hospedeiros se difundem, ocorre o processo de **AUTODIFUSÃO** e quando átomos de impurezas substitucionais se difundem, ocorre o processo de **INTERDIFUSÃO**.

# Difusão intersticial

13

- Na **DIFUSÃO INTERSTICIAL** átomos intersticiais migram para posições intersticiais adjacentes não ocupadas do reticulado.



- Em metais e ligas, a difusão intersticial é um mecanismo importante para a difusão de impurezas de raio atômico pequeno em relação aos do hospedeiro.
  - ✓ Exemplos: hidrogênio, carbono, nitrogênio e oxigênio no aço.
- Geralmente, a difusão intersticial é muito mais rápida que a difusão por lacunas.
  - ✓ Exemplo: No caso do Fe- $\alpha$  a 500°C, a difusão dos átomos de carbono é quase  $10^9$  vezes mais rápida do que a autodifusão dos átomos de ferro.

## Fluxo de difusão

- Para quantificar a rapidez com que o fenômeno da difusão se processa no tempo usamos o **FLUXO DE DIFUSÃO (J)**.
- O Fluxo de Difusão é definido como sendo a massa (ou, de forma equivalente, o número de átomos)  $M$  que se difunde por unidade de tempo através de uma área unitária perpendicular à direção do movimento da massa,

$$J = \frac{M}{At}$$

$A$  representa a área através da qual a difusão está ocorrendo e  $t$  é o intervalo de tempo de difusão decorrido.

- Em forma diferencial,

$$J = \frac{1}{A} \frac{dM}{dt}$$

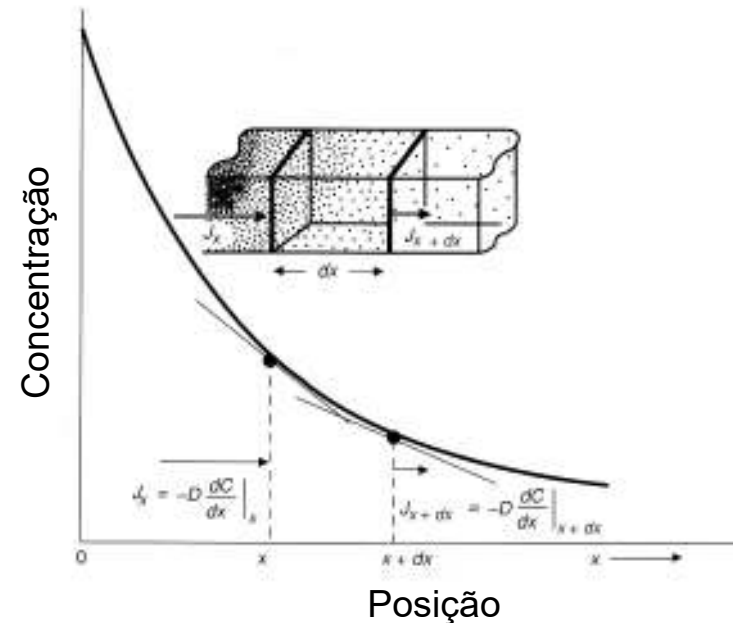
- No Sistema Internacional (SI), as unidades para  $J$  são quilogramas (ou átomos) por metro quadrado por segundo ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$  ou  $\text{átomos}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ )

# Fluxo de difusão

15

- No caso da difusão unidimensional, a concentração  $C$  dos átomos que se difundem é função da posição  $x$  no interior do sólido e do tempo  $t$  de difusão. Assim, em geral,  $C = f(x, t)$ .
- A curva ao lado, que representa  $C$  em função da posição  $x$  no interior de um sólido num dado instante de tempo  $t$ , é denominada **PERFIL DE CONCENTRAÇÃO**.
- Para cada  $t$ , o **FLUXO DE DIFUSÃO** num dado  $x$  é proporcional ao valor do gradiente  $dC/dx$  em  $x$

$$J_x = -D \left. \frac{dC}{dx} \right|_x$$

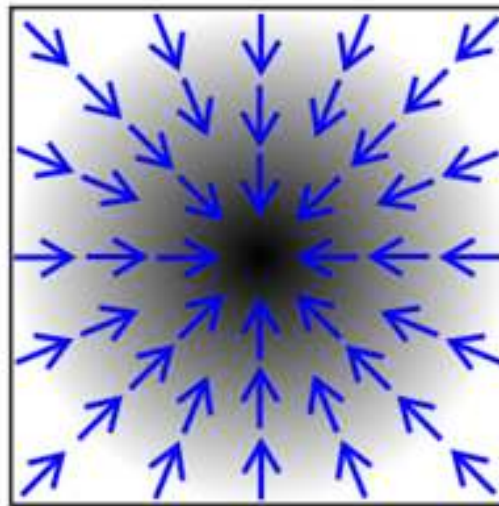


- A constante de proporcionalidade  $D^*$  é chamada de **COEFICIENTE DE DIFUSÃO**, e é expressa em  $m^2/s$ .

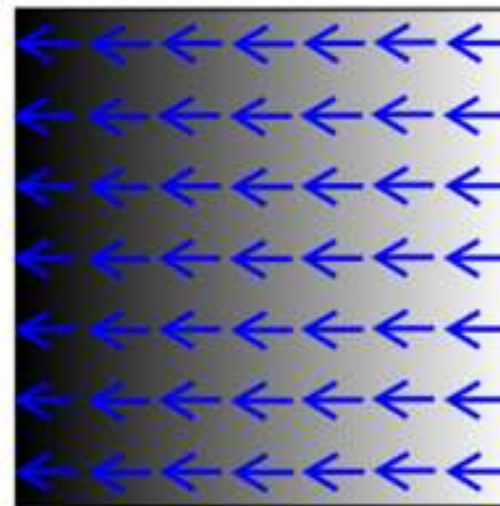
\* $D$  não é necessariamente constante: pode variar de ponto a ponto com a composição química.

## Interpretações de gradiente

- O cálculo vetorial define o gradiente de um campo escalar como sendo um campo de vetores que apontam na **direção** da maior taxa de aumento da grandeza escalar, e cuja **grandeza** é a da maior taxa de variação.



(a) gradiente circular



(b) gradiente linear

Nas figuras acima o campo escalar está representado por tons de cinza, sendo as regiões mais escuras de valores mais altos. Os valores de gradiente correspondentes estão representados pelas setas azuis.



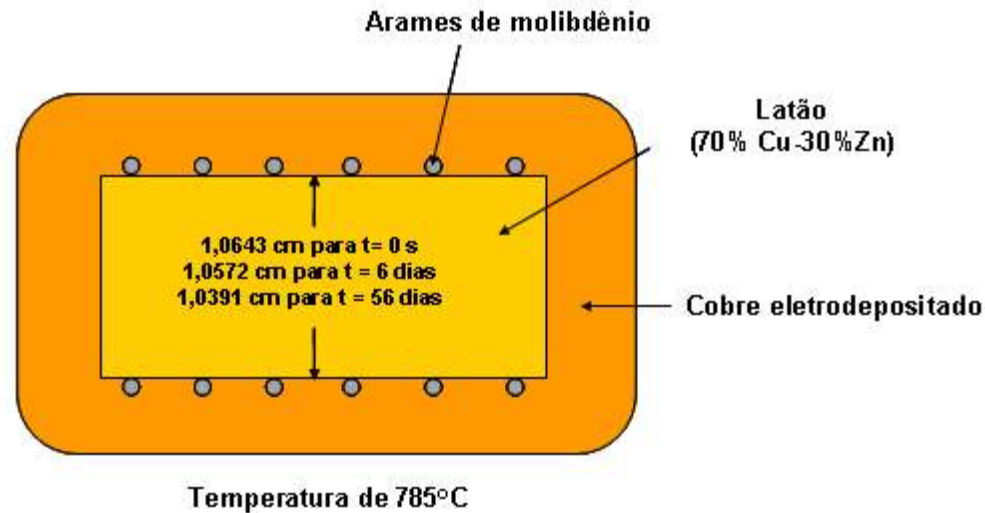
# Efeito Kirkendall: história

17



Ernest Kirkendall

- Ernest Kirkendall (1914-2005) reportou em 1947 o efeito da interdifusão de cobre e zinco em latão (liga Cu-Zn).
- Mostrou que o volume de latão sofre uma contração em função do tempo, para uma temperatura constante.



- Como o fim da Segunda Guerra, o financiamento da pesquisa nos EUA foi deslocado para a ciência básica. Havia muito dinheiro disponível e um grande interesse no fenômeno da difusão.
- O fenômeno descoberto por Kirkendall foi definitivo, porém sofreu forte oposição na academia.
- Kirkendall não foi promovido a Professor Livre-Docente na “Wayne State University”, como era seu desejo. Deixou a carreira acadêmica para ser Secretário da AIME (The American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers).
- O brasileiro Luiz Coelho Corrêa da Silva, na época professor do PMT da POLI, foi para os EUA para estudar o efeito e acabou por confirmar a universalidade do mesmo.

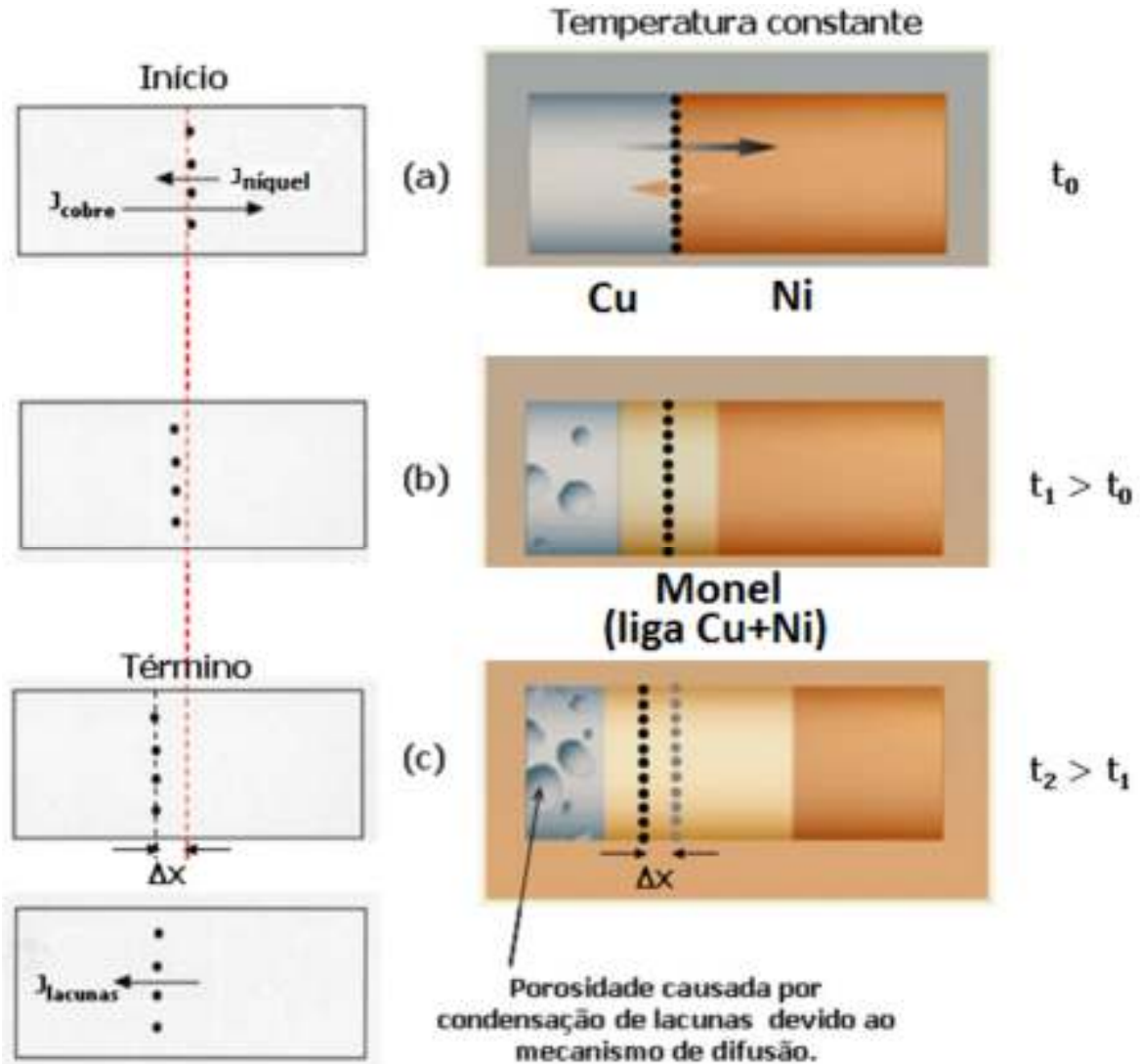
# Efeito Kirkendall: explicação em termos de fluxos e defeitos atômicos

Metal	Temperatura de Fusão (°C)*
Níquel	1453
Cobre	1085

\* Proporcional a energia de ligação do metal

Metal	Energia de formação de lacuna (eV/átomo)**
Níquel	1,28
Cobre	0,90

\*\* Facilidade para criar lacunas no metal



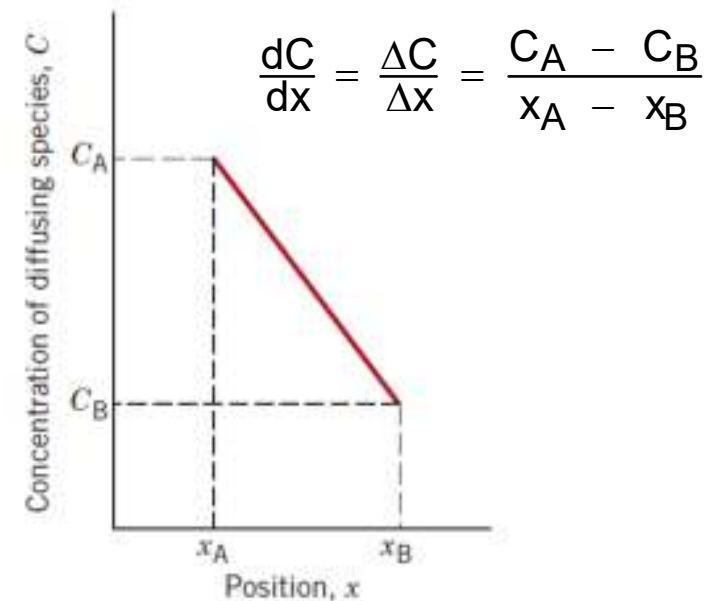
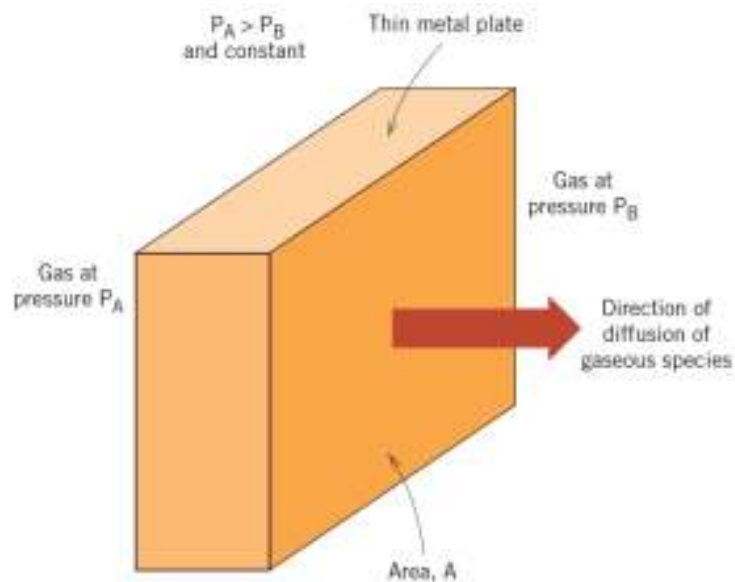
## Algumas aplicações

- Filtros para purificação de gases
- Homogeneização de ligas com segregação
- Modificação superficial de peças por alteração de composição química
- Dopagem de semicondutores
- Processadores de microcomputadores
- Sinterização

## Difusão em estado estacionário

- Quando  $J$  não varia com o tempo ( $C$  também não varia com o tempo) e temos a **DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO** (ou **DIFUSÃO EM REGIME PERMANENTE**).
- Para que  $J$  não varie com o tempo é necessário que  $J$  também não varie com a posição. Assim, para o eixo  $x$ ,

$$\frac{dC}{dx} = \text{cte} \Rightarrow C = f(x) \text{ é uma função linear de } x.$$



## Primeira lei de Fick

- Para processos de *difusão em estado estacionário*, a equação que correlaciona o fluxo de difusão  $J$  com o gradiente de concentração  $dC/dx$  é chamada de **PRIMEIRA LEI DE FICK**,

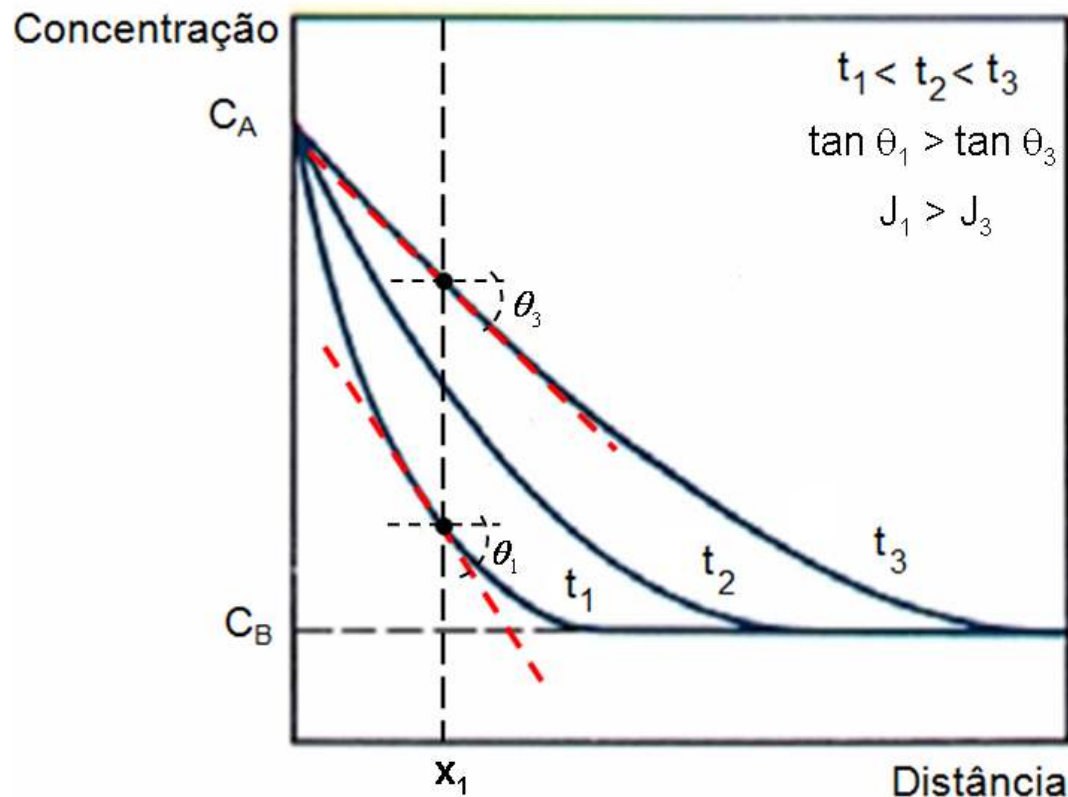
$$J = -D \frac{dC}{dx}$$

- O sinal negativo na equação acima indica que o fluxo ocorre na direção contrária à do gradiente de concentração, isto é, no sentido das concentrações altas para as concentrações baixas.
- Na primeira lei de Fick, o **POTENCIAL TERMODINÂMICO** ou **FORÇA MOTRIZ** ("driving force") para que ocorra o fenômeno de difusão é o gradiente de concentração.

# Difusão em estado não-estacionário

22

- A maioria das situações práticas envolvendo difusão ocorre em condições de **ESTADO NÃO-ESTACIONÁRIO** (ou **REGIME TRANSITÓRIO** ou **CONDIÇÕES TRANSIENTES**).
- Na difusão em estado não-estacionário tanto o fluxo de difusão, quanto o gradiente de concentração, numa dada posição  $x$ , variam com o tempo  $t$ . Como resultado, ocorre um acúmulo ou esgotamento líquido do componente que se encontra em difusão.



Concentração em três instantes de tempo diferentes do processo de difusão em estado não-estacionário.

## Segunda lei de Fick

- Para descrever a *difusão em estado não-estacionário* unidimensional, é utilizada a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

conhecida por **SEGUNDA LEI DE FICK**.

- Se o coeficiente de difusão não depende da composição (portanto, da posição), a segunda lei de Fick se simplifica para

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

- Quando são especificadas condições de contorno correspondentes a um fenômeno físico, é possível se obter soluções para segunda lei de Fick. Essas soluções são funções  $C = f(x,t)$  que representam as concentrações em termos tanto da posição quanto do tempo.

## Exemplo: Solução da segunda lei de Fick para filme fino em uma extremidade de um sólido semi-infinito\* (aplicada para dopar semicondutores)

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

### Condição inicial:

$t = 0$ ;  $C = 0$ ; exceto em  $x = 0$  onde  $C = bC_0$

onde:

$b$  = espessura do filme fino

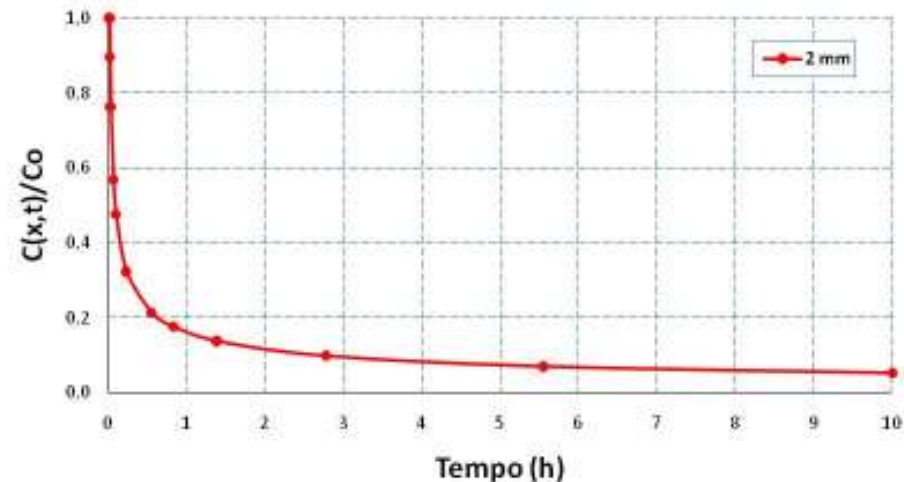
$C_0$  = concentração do filme fino

### Condição de contorno:

$C = 0$ ; quando  $x \rightarrow +\infty$  para  $t > 0$



$$c(x,t) = \left( \frac{bC_0}{\sqrt{\pi Dt}} \right) e^{\left( \frac{-x^2}{2\sqrt{Dt}} \right)}$$

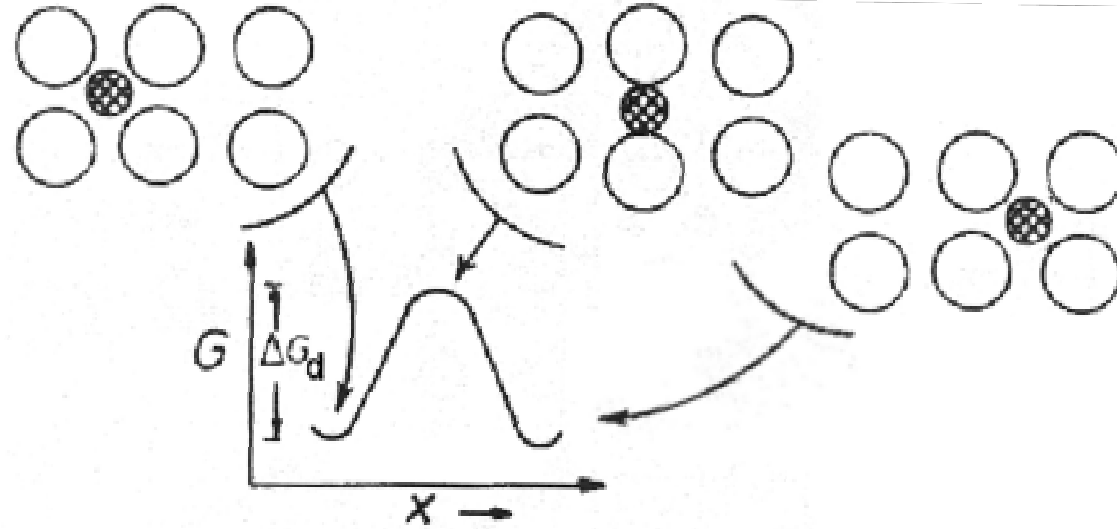


\*Um sólido é considerado semi-infinito se nenhum dos átomos em difusão é capaz de atingir a extremidade oposta da barra durante o tempo de procedimento da difusão. Uma barra de comprimento  $L$  pode ser considerada semi-infinita na prática quando  $L > 10 (Dt)^{1/2}$ , dependendo da espessura da chapa, da temperatura, do tempo, do tipo de espécie que se difunde e o meio onde ocorre a difusão.



## Efeito da temperatura – ATIVAÇÃO TÉRMICA

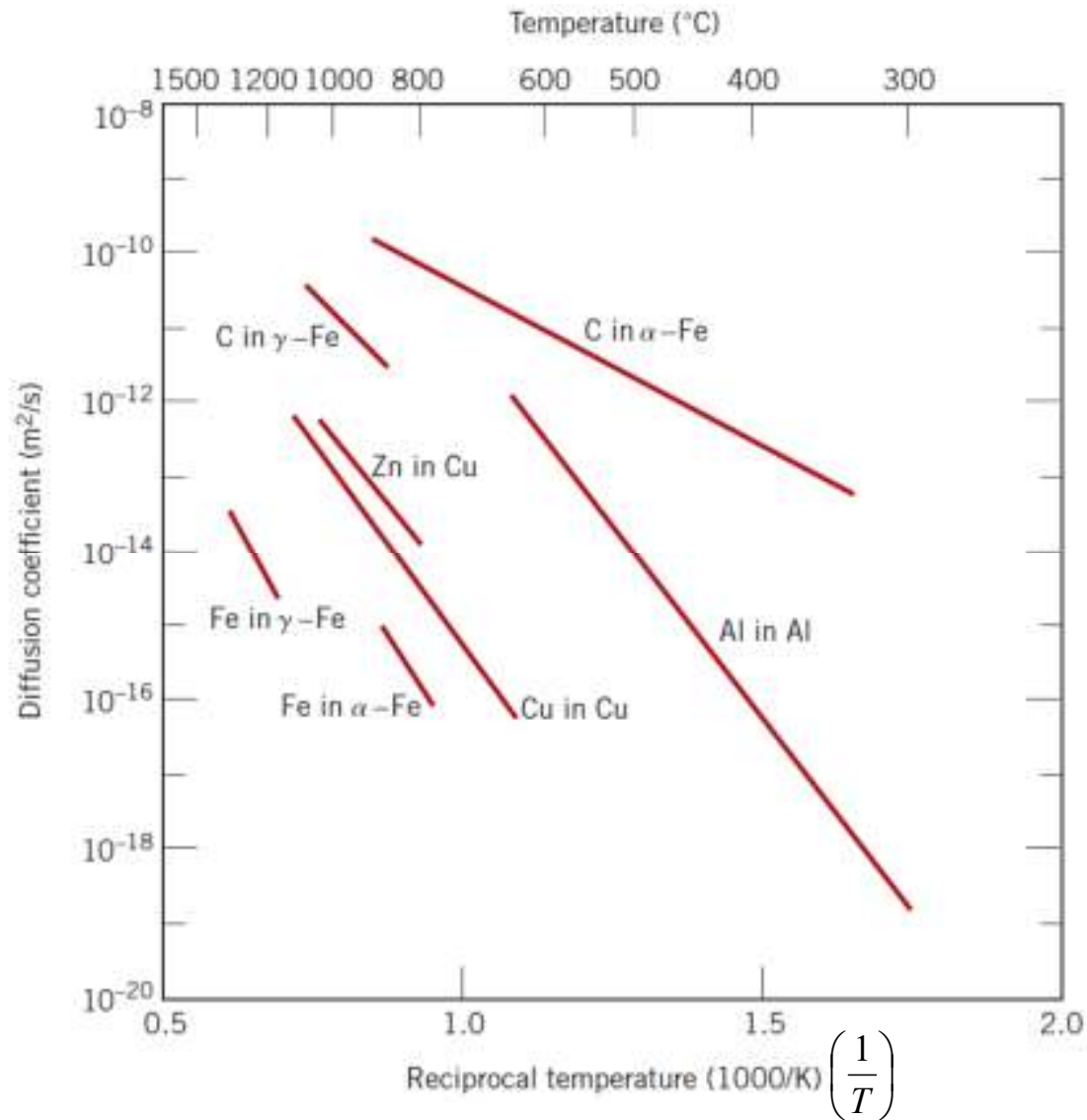
25



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

onde:  $D_0$  é uma constante ( $\text{m}^2/\text{s}$ ),  $\Delta G_d$  é a energia de ativação para difusão ( $\text{J/mol}$ ),  $R$  é a constante universal dos gases ( $8,31 \text{ J/mol.K}$ ) e  $T$  é a temperatura absoluta ( $\text{K}$ ).

# Efeito da temperatura – ATIVAÇÃO TÉRMICA



Para linearizar:

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

Aplica-se o ln:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{\Delta G_d}{R} \left(\frac{1}{T}\right)$$

# Coeficiente de Difusão

27

## Fatores que influem no Coeficiente de Difusão (D):

- Espécie que se difunde
- Meio onde ocorre a difusão
- Temperatura

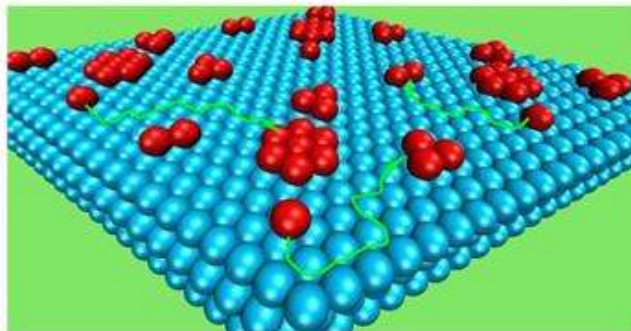
Exemplos de constantes de difusão típicas

<i>Diffusing Species</i>	<i>Host Metal</i>	$D_0(m^2/s)$	<i>Activation Energy <math>Q_d</math></i>		<i>Calculated Values</i>	
			<i>kJ/mol</i>	<i>eV/atom</i>	<i>T(°C)</i>	<i>D(m<sup>2</sup>/s)</i>
Fe	$\alpha$ -Fe (BCC)	$2.8 \times 10^{-4}$	251	2.60	500	$3.0 \times 10^{-21}$
					900	$1.8 \times 10^{-15}$
Fe	$\gamma$ -Fe (FCC)	$5.0 \times 10^{-5}$	284	2.94	900	$1.1 \times 10^{-17}$
					1100	$7.8 \times 10^{-16}$
C	$\alpha$ -Fe	$6.2 \times 10^{-7}$	80	0.83	500	$2.4 \times 10^{-12}$
					900	$1.7 \times 10^{-10}$
C	$\gamma$ -Fe	$2.3 \times 10^{-5}$	148	1.53	900	$5.9 \times 10^{-12}$
					1100	$5.3 \times 10^{-11}$
Cu	Cu	$7.8 \times 10^{-5}$	211	2.19	500	$4.2 \times 10^{-19}$
Zn	Cu	$2.4 \times 10^{-5}$	189	1.96	500	$4.0 \times 10^{-18}$
Al	Al	$2.3 \times 10^{-4}$	144	1.49	500	$4.2 \times 10^{-14}$
Cu	Al	$6.5 \times 10^{-5}$	136	1.41	500	$4.1 \times 10^{-14}$
Mg	Al	$1.2 \times 10^{-4}$	131	1.35	500	$1.9 \times 10^{-13}$
Cu	Ni	$2.7 \times 10^{-5}$	256	2.65	500	$1.3 \times 10^{-22}$

# Caminhos para a Difusão

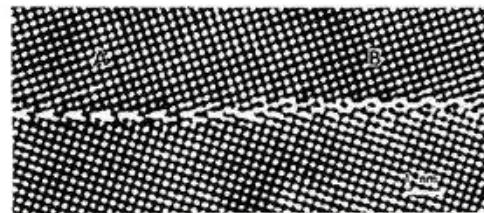
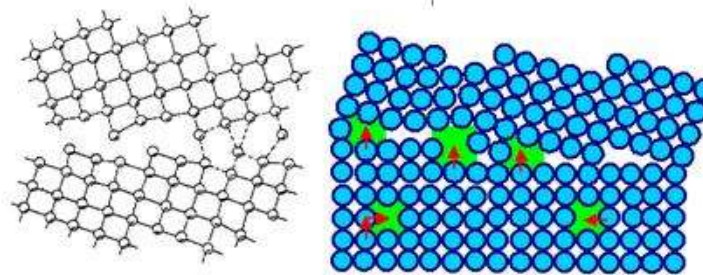
- A movimentação de átomos pode ocorrer:
  - 1) No volume do material
  - 2) Ao longo de defeitos lineares: discordâncias
  - 3) Ao longo de defeitos bidimensionais: contornos de grão, superfícies externas.
- A movimentação de átomos pelos defeitos cristalinos é muito mais rápida que pelo volume.
- Em alguns casos, a contribuição do fluxo de átomos através dos defeitos cristalinos é insignificante (os seus volumes são muito pequenos em comparação com o resto do cristal isento de defeitos).

Difusão superficial



[http://iramis.cea.fr/Images/astimg008\\_1.jpg](http://iramis.cea.fr/Images/astimg008_1.jpg)

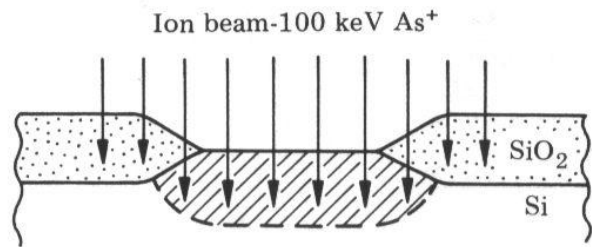
Difusão em contorno de grão



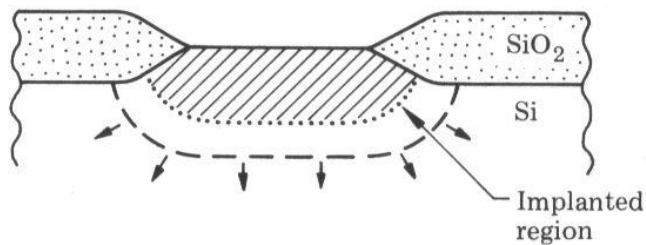
Microscopia de ultra alta resolução

<http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/ame/egypte/conf2/theory.html>

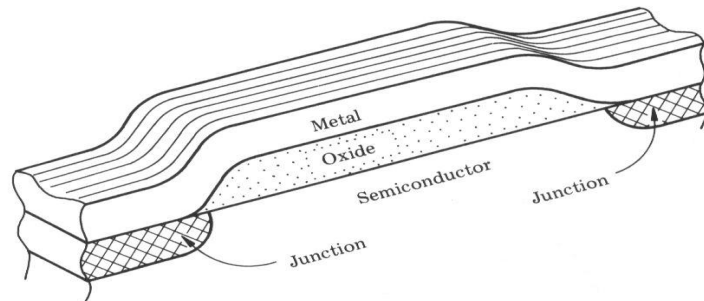
# APLICAÇÃO: produção de circuitos integrados



(a) Ion implantation of dopants (As)



(b) Drive-in diffusion-950-1050°C

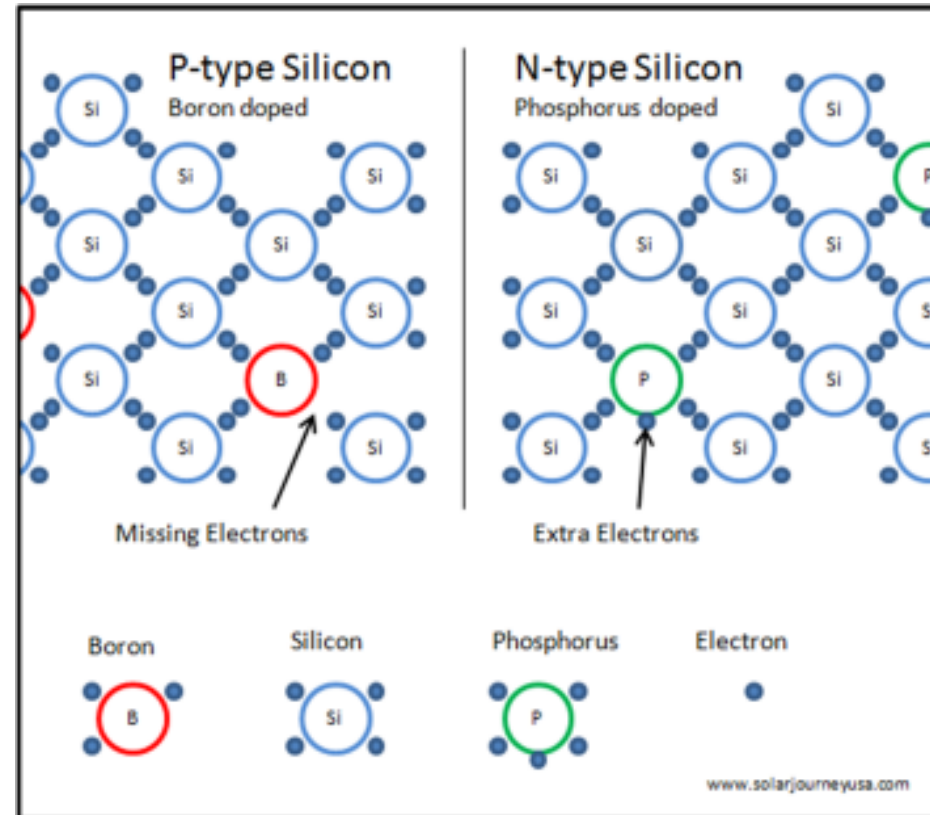


**ESQUEMA DA CONEXÃO ENTRE DUAS JUNÇÕES E UMA CONEXÃO METÁLICA**

•Junção tipo **n**:  
 $\text{Si}^{4+} + (\text{P}^{5+} \text{ ou } \text{As}^{5+} \text{ ou } \text{Sb}^{5+})$

•Junção tipo **p**:

•  $\text{Si}^{4+} + (\text{Al}^{3+} \text{ ou } \text{B}^{3+} \text{ ou } \text{Ga}^{3+})$



- A Difusão descreve o transporte de massa através de um sólido utilizando duas Equações: **1ª Lei de Fick (estado estacionário)** e **2ª Lei de Fick (estado não-estacionário)**.
- No **estado estacionário** o perfil da concentração em função da posição (distância da superfície) **NÃO varia com o tempo**. No **estado não-estacionário** o perfil da concentração em função da posição **VARIA com o tempo**.
- A Difusão depende de vários fatores: **a espécie que se difunde, o meio de difusão e a temperatura**.
- A movimentação de átomos pode ocorrer: (1) através do volume do material, (2) ao longo de defeitos lineares (discordâncias) e (3) ao longo de defeitos bidimensionais (contornos de grão, superfícies externas).
- Embora a movimentação dos átomos através dos defeitos seja mais rápida, a sua contribuição na Difusão no material como um todo é pequena.
- A dopagem de silício para produção de circuitos integrados é um exemplo de aplicação tecnológica da Difusão.

- **Capítulos do Callister (7<sup>a</sup> ed., 2008)**

- Capítulo 5 completo.

**Aplicações** : maiores informações sobre dopagem do silício e produção de circuitos integrados se encontram no Capítulo 18 do Callister e no Capítulo 17 de Shackelford.

- Outras referências importantes

- Callister – 5<sup>a</sup>ed. Capítulo 5 completo.

- Shackelford, J. F. – Ciência dos Materiais, 6<sup>a</sup> ed., 2008. Cap. 5

- Van Vlack, L. - Princípios de Ciência dos Materiais, 3<sup>a</sup> ed.

- Capítulo 4 : itens 4-10 a 4-14. Sinterização : item 13-6

**Exemplo: Solução da segunda lei de Fick para um sólido semi-infinito\*, mantendo-se constante na superfície a concentração da espécie em difusão no sólido (aplicada para o tratamento termo-químico de cementação)**

- Uma solução da segunda lei de Fick  $C = f(x,t)$  importante na prática é aquela para um sólido semi-infinito\* em que a concentração do soluto  $C_S$  na superfície é mantida constante durante a difusão. Assume-se também que os átomos do soluto presentes no interior do sólido, antes do processo de difusão, estão uniformemente distribuídos com concentração  $C_0$ .
- Tomando  $x = 0$  na superfície e  $x > 0$  no interior do sólido e considerando  $t = 0$  o instante de tempo imediatamente anterior ao início do processo de difusão, as condições de contorno acima podem ser representadas por:

$$\text{Para } t = 0 \Rightarrow C = f(x,0) = C_0 \text{ em } 0 \leq x \leq \infty.$$

$$\text{Para } t > 0 \Rightarrow C = f(0,t) = C_S.$$

$$\text{Para } t \geq 0 \Rightarrow C = f(t,x) = C_0 \text{ em } x = \infty.$$

\*Um sólido é considerada semi-infinito se nenhum dos átomos em difusão é capaz de atingir a extremidade oposta da barra durante o tempo de procedimento da difusão. Uma barra de comprimento  $L$  pode ser considerada semi-infinita na prática quando  $L > 10 (Dt)^{1/2}$ , dependendo da espessura da chapa, da temperatura, do tempo, do tipo de espécie que se difunde e o meio onde ocorre a difusão



## Solução da segunda lei de Fick para cementação

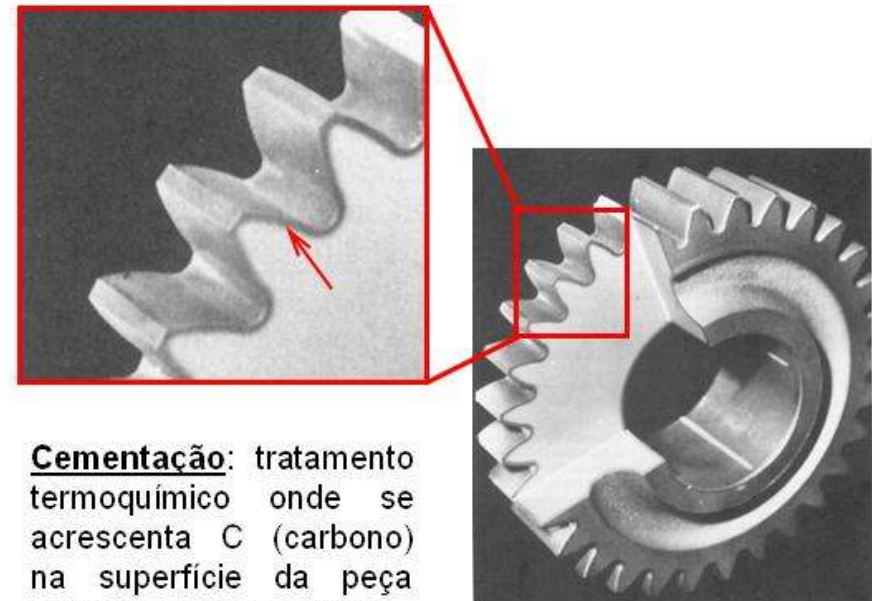
- Com as condições de contorno consideradas na transparência anterior, a solução da segunda lei de Fick resulta

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right), \quad \text{onde } C_x = C = f(x,t).$$

- A função  $\operatorname{erf}(z)$  representa a Função Erro de Gauss e é dada por:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy.$$

- A solução acima se aplica, por exemplo, para processos de cementação (ou carbonetação) de chapas de aço (ou seja, chapas de ligas ferro-carbono). Processos de cementação são utilizados para endurecer as superfícies de peças de aços.

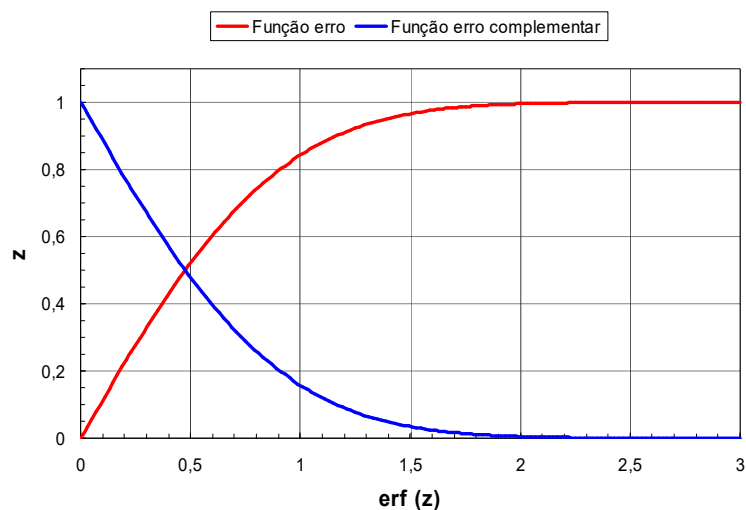


**Cementação:** tratamento termoquímico onde se acrescenta C (carbono) na superfície da peça para aumento de dureza.

Corte de uma engrenagem cementada

# Função Erro de Gauss

- A Função Erro de Gauss [ $\text{erf}(z)$ ] pode ser encontrada tabelada nos livros.
- Note que a função erro para  $z = 0,5$  é aproximadamente igual a 0,5.
- Esta aproximação costuma ser utilizada para resolução mais simples de problemas de difusão.



Função erro complementar

$$\text{erfc}(z) = 1 - \text{erf}(z)$$

Tabela da Função Erro de Gauss

$z$	$\text{erf}(z)$	$z$	$\text{erf}(z)$	$z$	$\text{erf}(z)$
0	0	0.55	0.5633	1.3	0.9340
0.025	0.0282	0.60	0.6039	1.4	0.9523
0.05	0.0564	0.65	0.6420	1.5	0.9661
0.10	0.1125	0.70	0.6778	1.6	0.9763
0.15	0.1680	0.75	0.7112	1.7	0.9838
0.20	0.2227	0.80	0.7421	1.8	0.9891
0.25	0.2763	0.85	0.7707	1.9	0.9928
0.30	0.3286	0.90	0.7970	2.0	0.9953
0.35	0.3794	0.95	0.8209	2.2	0.9981
0.40	0.4284	1.0	0.8427	2.4	0.9993
0.45	0.4755	1.1	0.8802	2.6	0.9998
0.50	0.5205	1.2	0.9103	2.8	0.9999

## Distâncias de difusão

- Consideremos a solução da segunda lei de Fick:

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

e suponhamos que desejamos atingir uma determinada concentração de soluto  $C_1$ , em uma liga.

- Para  $C_x = C_1 = \text{cte}$ ,

$$\frac{C_1 - C_0}{C_s - C_0} = \text{cte} \Rightarrow \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = \text{cte} \Rightarrow x \propto \sqrt{Dt} .$$

- Se  $C_1 = (C_s + C_0) / 2$ ,

$$\frac{C_1 - C_0}{C_s - C_0} = \frac{1}{2} \Rightarrow \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cong 0,5$$

portanto,  $x \cong \sqrt{Dt}$  .

## Exemplo: cementação de aço

36

- Consideremos uma peça de aço com concentração de carbono inicial  $C_0 = 0,25\%$  (porcentagem mássica de carbono). Em um tratamento de cementação, a concentração de carbono na superfície ( $C_s$ ) foi subitamente aumentada para  $1,20\%$ , e mantida nesse valor. Depois de quanto tempo a concentração de carbono atingirá um valor de  $0,80\%$  numa posição situada a  $0,5\text{mm}$  abaixo da superfície?
- **Dados:** O coeficiente de difusão do carbono no ferro é considerado constante na temperatura de tratamento, e vale  $D = 1,6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$  e

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Para a resolução desse exemplo com os dados apresentados, é necessário saber a temperatura em que acontece o tratamento? Em caso afirmativo, onde ela é considerada?

Tabela da Função  
Erro de Gauss

$z$	$\operatorname{erf}(z)$
0	0
0.025	0.0282
0.05	0.0564
0.10	0.1125
0.15	0.1680
0.20	0.2227
0.25	0.2763
0.30	0.3286
0.35	0.3794
0.40	0.4284
0.45	0.4755
0.50	0.5205

A partir dos valores numéricos dados

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 0,579 \Rightarrow \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = 0,421.$$

Por interpolação linear,

$$\operatorname{erf}(z) = 0,421 \Rightarrow z = 0,392.$$

Portanto,

$$\frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 0,392 \Rightarrow t = 7,1 \text{ h}$$