نفوذ (Diffusion)

در این فصل یکی از پدیده هایی را بررسی می کنیم که از نتایج رابطه بین خواص و ساختار است و نقش بسیار مهمی در بسیاری از پدیده ها دارد

Shahrood University of Technology

نفوذ در جامدات (Diffusion in solids)

- نفوذ : حرکت اتم ها در داخل ماده در میاس اتمي

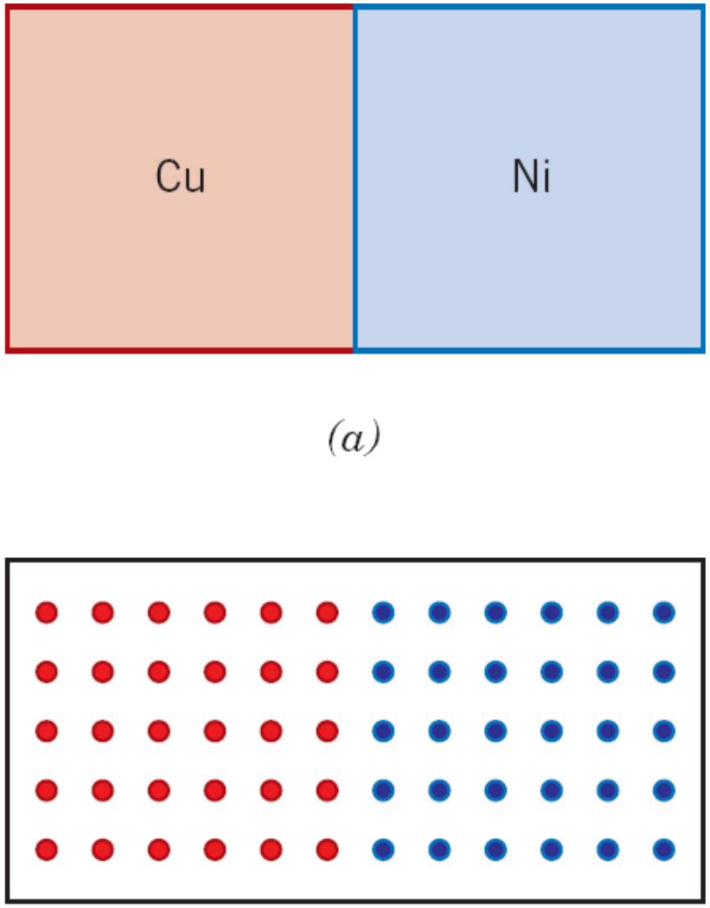
- مطالب مورد بررسی
- 1- معرفی پدیده

2- انواع یا مکانیزم های نفوذ

- 3- نیروی محرکه و انرژی اکتیواسیون نفوذ
- 4- معادلات نفوذ

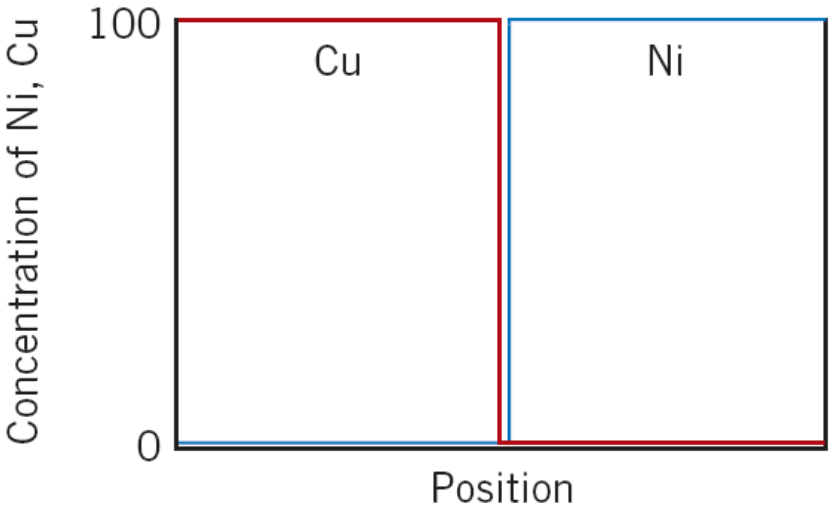
Shahrood University of Technology

معرفی پدیده

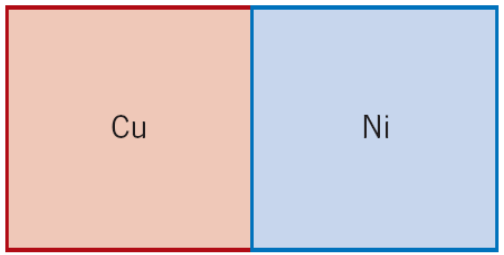


اتم ها تمایل دارند از جایی که غلضتشان زیاد تر است به جایی بروند که غلضت ان اتم کمتر است

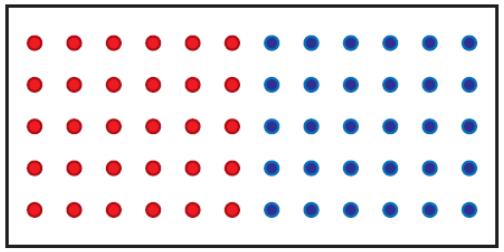
Shahrood University of Technology



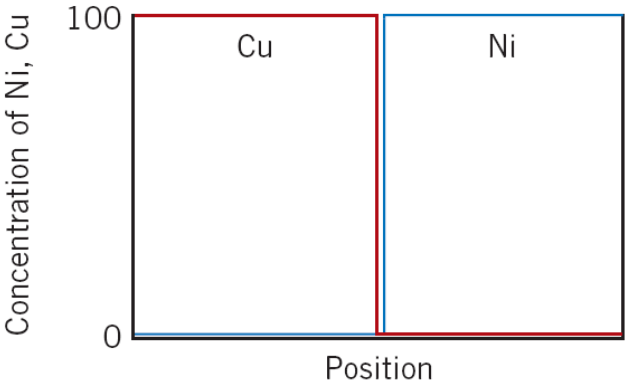
Shahrood University of Technology



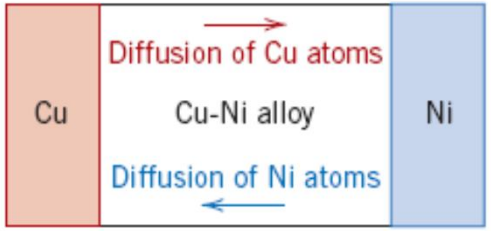
(a)



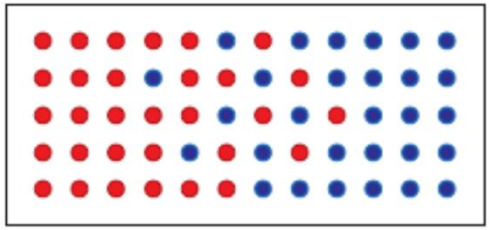
(b)



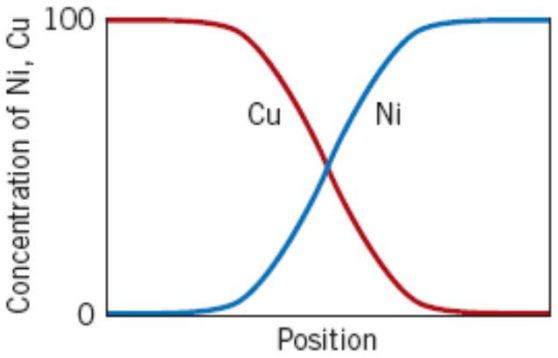
(c)



(a)

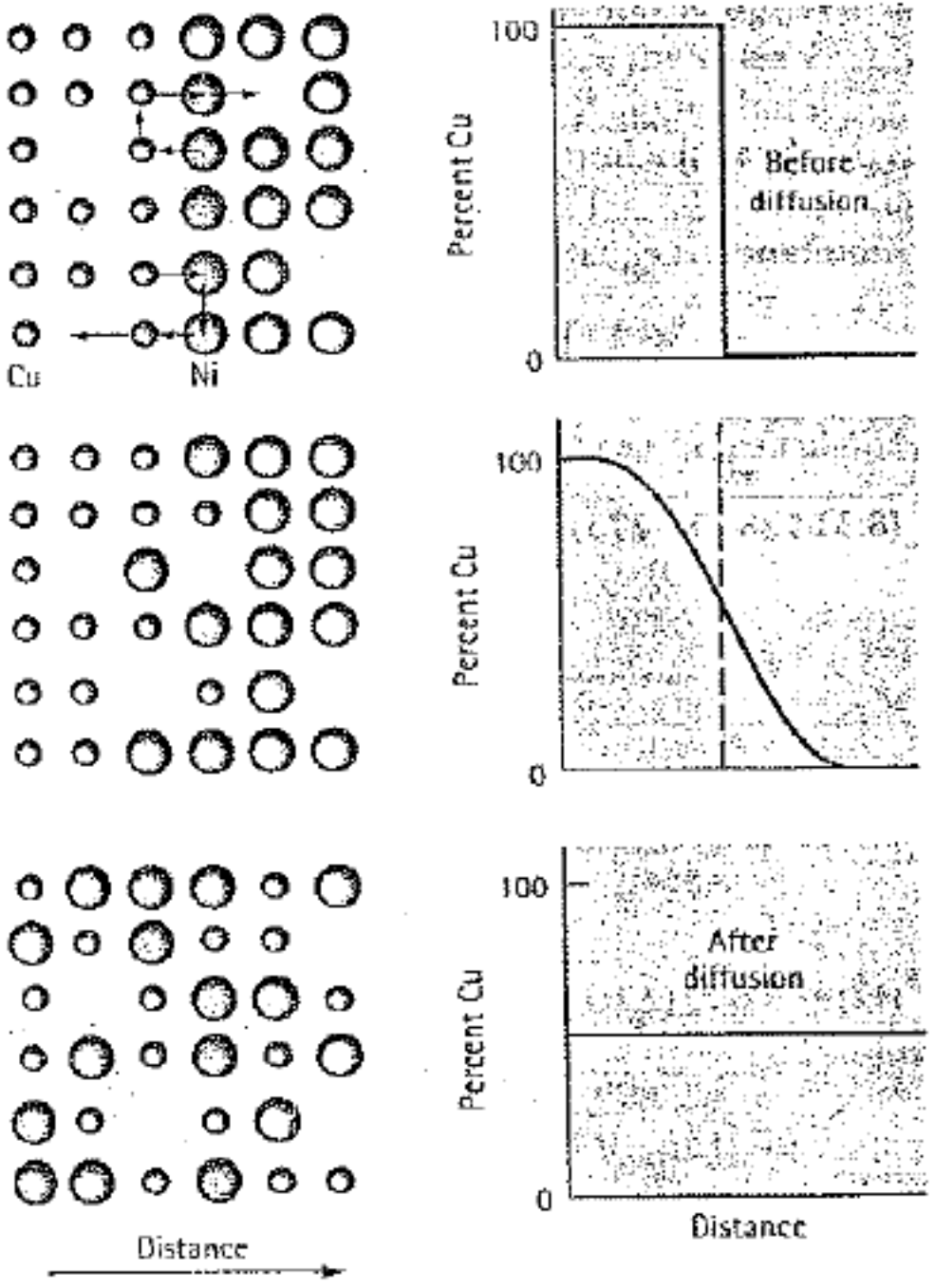


(b)



(c)

Shahrood University of Technology


Cu
Ni
Distance
Percent Cu
100
0
Before diffusion
Percent Cu
100
0
Percent Cu
100
0
After diffusion
Distance

انواع یا مکانیزم های نفوذ

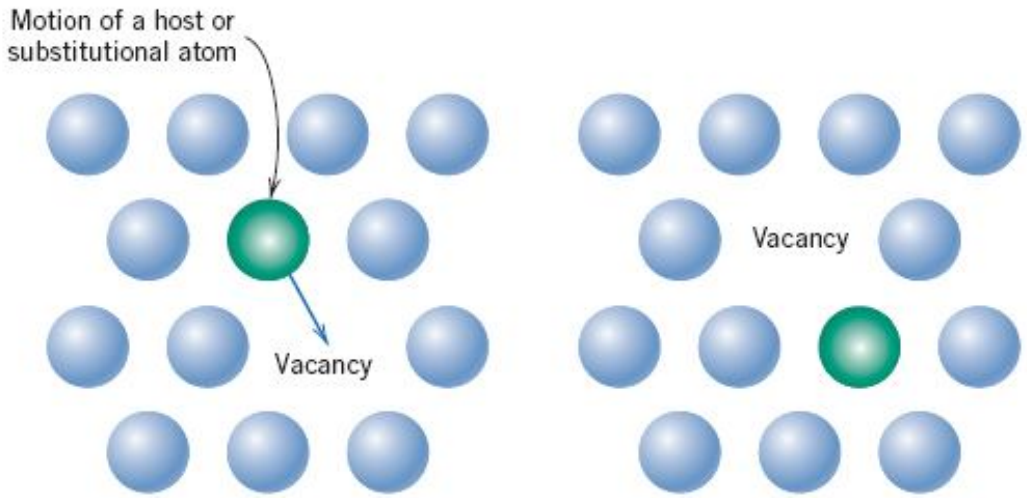
- در مقیاس اتمی نفوذ حرکت اتم ها از یک مکان اتمی به مکان اتمی دیگر است .

- برای این حرکت حداقل دو شرط لازم است
- 1- مکانی برای رفتن اتم وجود داشته باشد
- 2- اتم توانایی حرکت از مکان خود به مکان جدید را داشته باشد.

Shahrood University of Technology

در کل دو مکانیزم کلی برای نفوذ در جامدات قابل تصور است

- 1- نفوذ از طریق جاهای خالی



در این مکانیزم اتم جای خود را با Vacancy کنار خود عوض می کند

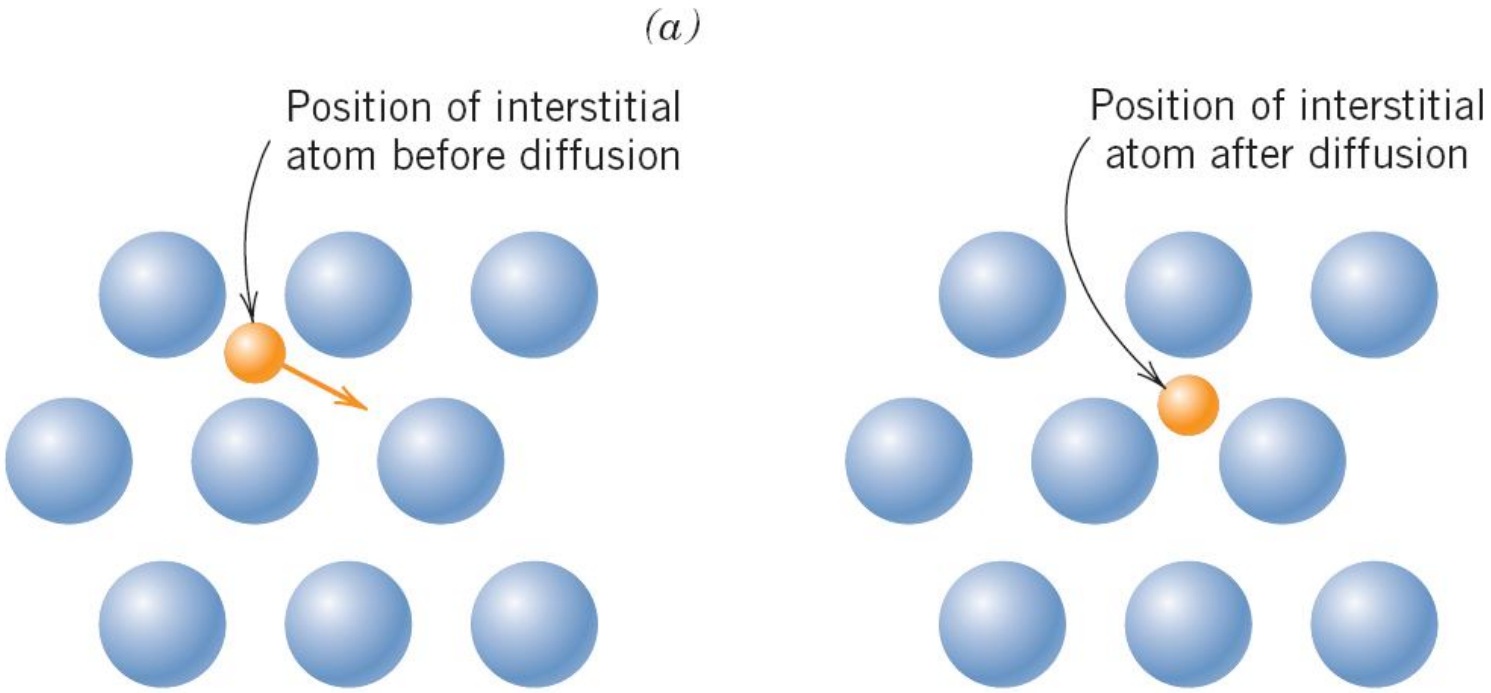
Shahrood University of Technology

- طبق این مکانیزم
- اولا: باید جای خالی وجود داسته باشد و
- دوم : اتم باید توانایی کنده شدن از مکان اولیه و پیوند های ان و پرش به مکان ثانویه را داشته باشد.

- حالا در مورد اثر دما بر نفوذ فکر کنید؟

Shahrood University of Technology

2- مکانیزم دوم نفوذ : نفوذ بین نشینی

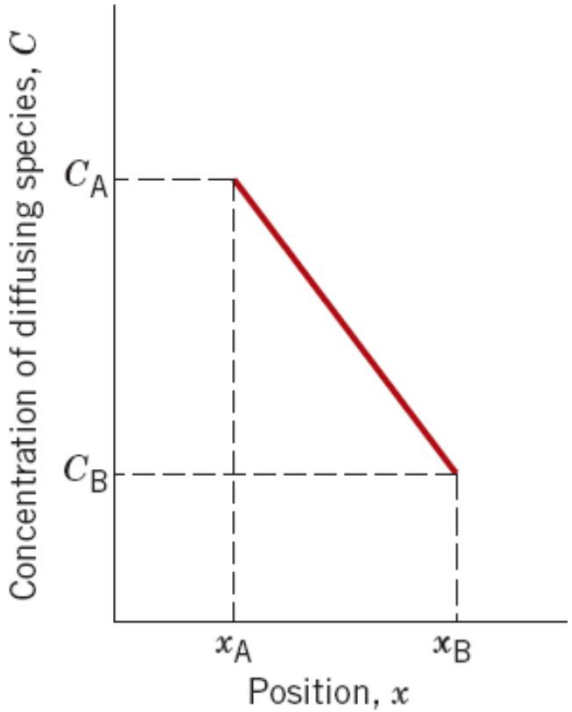


در این حالت اتم نفوذ کننده از یک مکان بین نشین به مکان بین نشین دیگر می رود

Shahrood University of Technology

ترمودینامیک و کینتیک نفوذ

- نیروی محرکه نفوذ : تفاوت غلظت است. (ابته با کمی مسامحه). بنابر این اتمها تمایل دارند از جایی که غلظت انها زیاد است به جایی بروند که غلظت ان کمتر است



Shahrood University of Technology

کینتیک یا مانع سر راه نفوذ اتمها

- مقدار انرژی سر راه نفوذ اتم ها به عوامل متعددی مربوط می شود
- 1- نوع و اندازه اتم نفوذ کننده
- هر چه اندازه اتم نفوذ کننده بزرگتر باشد نفوذ درشرایط یکسان مشکل تر می شود

- 2- تمایل شیمیایی اتم های نفوذ کننده به اتم های زمینه

Shahrood University of Technology

- 3- نوع و خصوصیات اتم های شبکه
- مثل قدرت پیوند بین اتم های شبکه
- میزان فشردگی اتمها در ساختار اتمی
- اندازه جاهای خالی و بین نشینی
- تعداد مکان های موجود در همسایگی یک اتم برای پرش اتم به انها
- فاصله بین مکان های اتمی که اتم باید بین انها پرش کند

Shahrood University of Technology

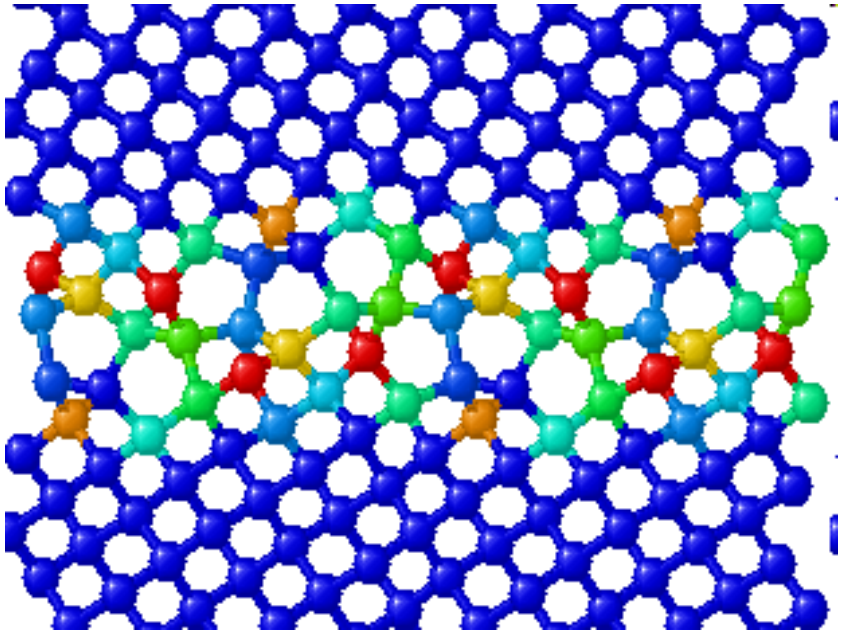
- 4- میزان انرژی جنبشی اولیه اتمها که برای پرش به ان احتلاج دارند. یا **دما**

- 5- مسیر حرکت اتمها
- ایا پرش اتمی در درون دانه ها است
- ایا پرش اتمی در درون مرز دانه ها است
- ایا پرش اتمی در امتداد سطح ازاد است

Shahrood University of Technology

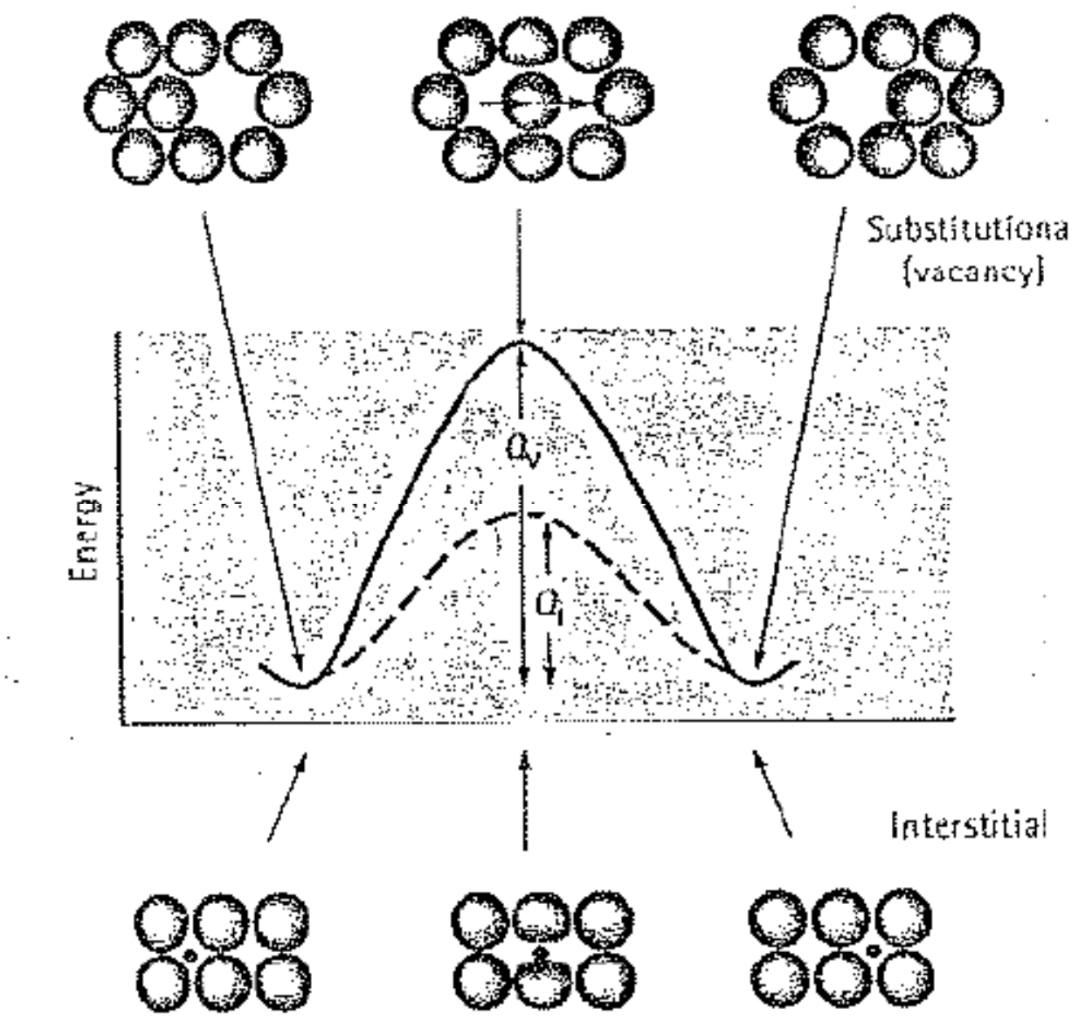
نقوذ در امتداد کدام مسیر سریعتراست و چرا ؟

Shahrood
University of
Technology

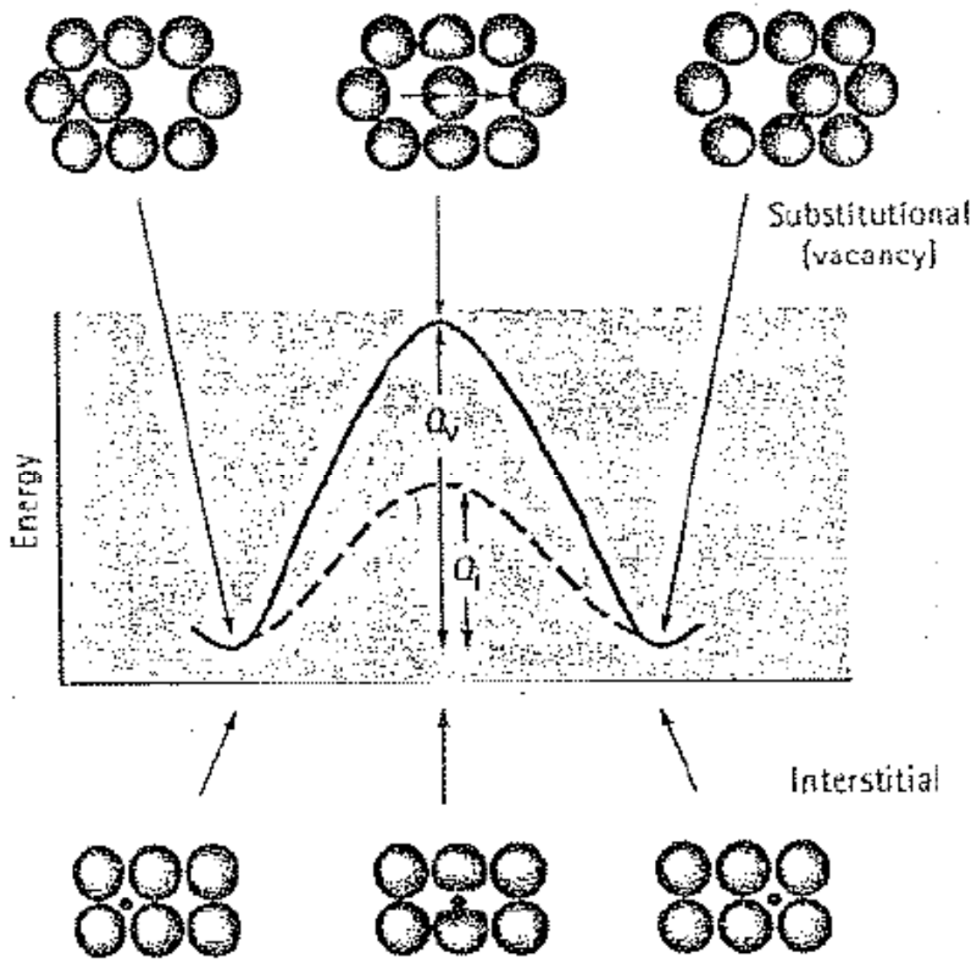


Shahrood
University of
Technology

مانع سر راه نفوذ



Shahrood
University of
Technology



Shahrood
University of
Technology

قوانين ومعادلات نفوذ : بررسي قوانين نفوذ دو حالت مورد بررسي است

- **1-نفوذ در حالت Steady State**

- حالت Steady Stateحالتی است که در ان شرایط با گذشت زمان تغییر نمی کند بهعنوان مثال شیب غلظتي موجود در جسم همواره ثابت است

- پدیده نفوذ به زمان وابسته است به عنوان مثال مقدار ماده ای که داخل جسم جابجا می شود به زمان وابسته است.

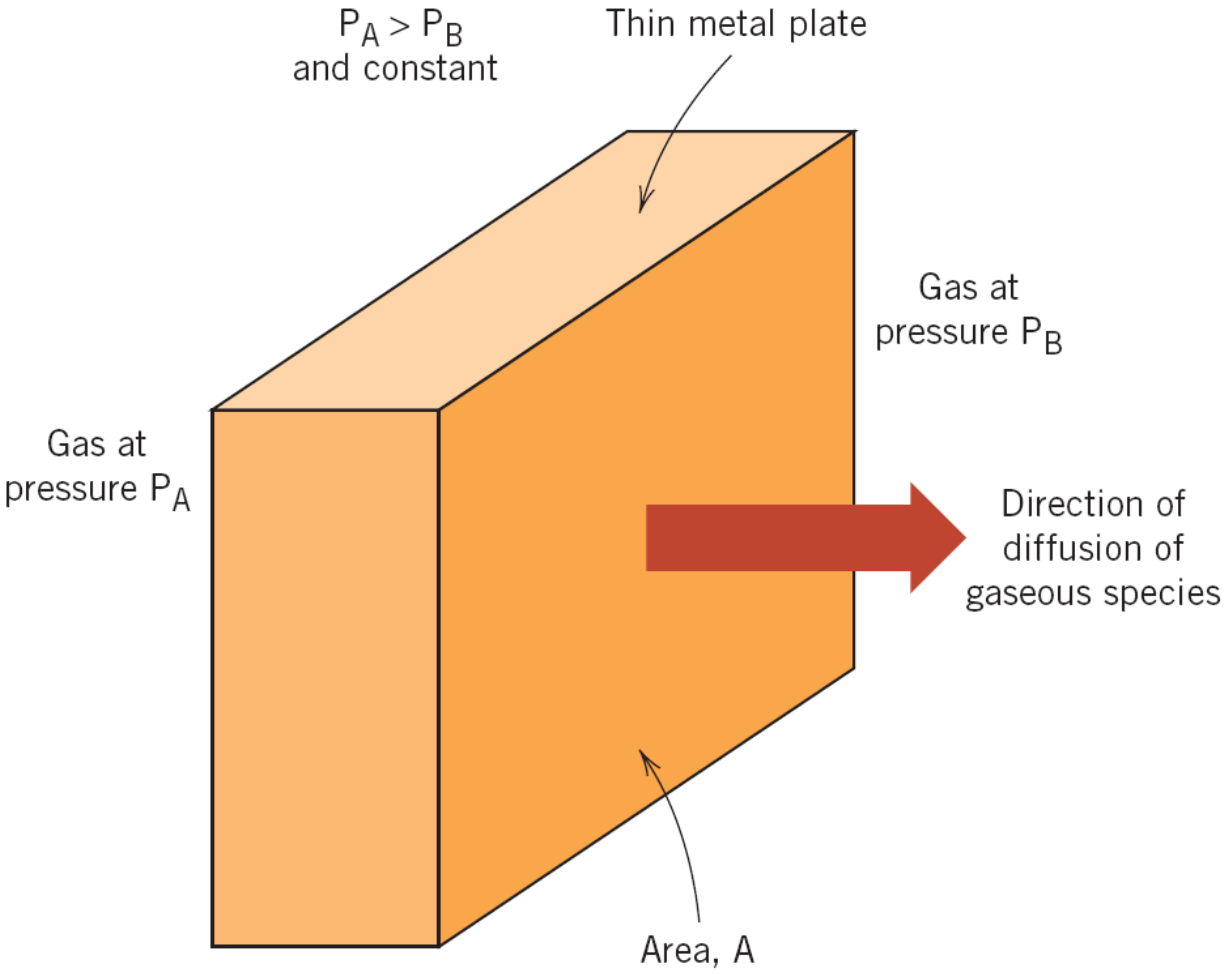
Shahrood University of Technology

تعرف فلاکس نفوذ

- فلاکس نفوذ (Diffusion Flux): تعداد اتمها (مقدار جرمی) که از واحد سطح در واحد سطح در داخل ماده عبور می کند

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

Shahrood
University of
Technology



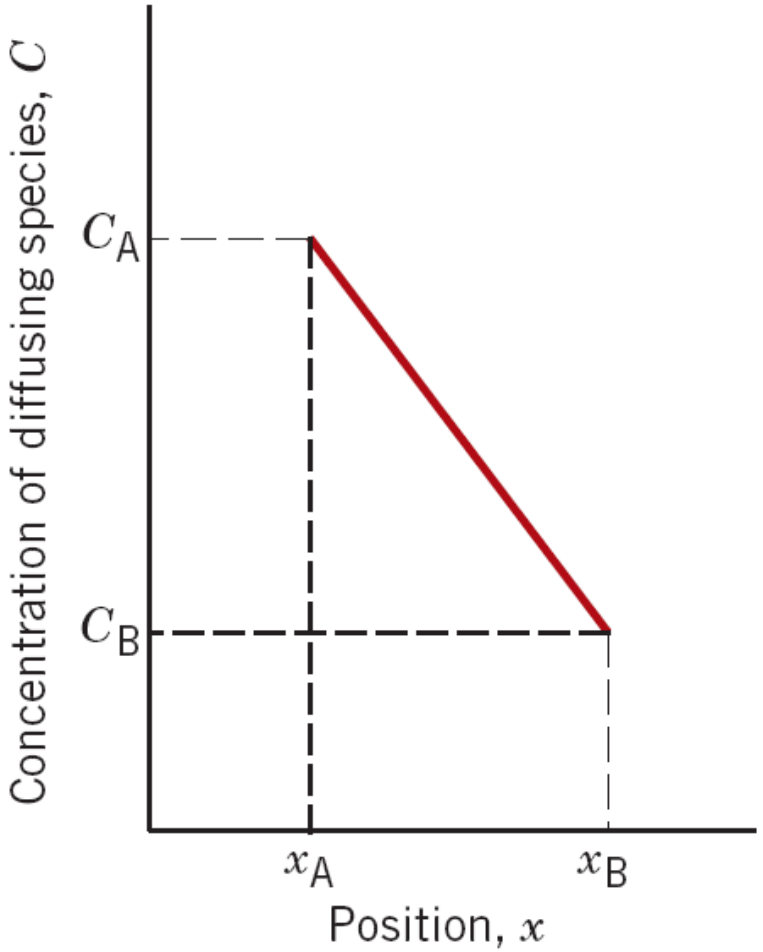
Shahrood
University of
Technology

- در حالت steady State فلاکس نفوذ با گذشت زمان تغییر نمی کند.

- همان طور که قبلا گفته شد وقتی تفاوت غلظت بین دو نقطه وجود دارد اتم ها از مکان با غلظت بیشتر به طرف مکان با غلظت کمتر می روند.

Shahrood University of Technology

اگر بین دو نقطه A,Bشیب غلظتی مانند شکل زیر وجود داشته باشد :



Shahrood University of Technology

- انگاه در شرایط Steady State
- J: Diffusion Flux: $\text{kg/m}^2\text{-s}$ $\text{atoms/m}^2\text{-s}$
-

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

Shahrood University of Technology

شیب غلظتی : واحد های مختلفی دارند

$$\text{concentration gradient} = \frac{dC}{dx}$$

$$\text{concentration gradient} = \frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_A - C_B}{x_A - x_B}$$

Shahrood University of Technology

ضریب نفوذ (D) : Diffusion Coefficient

- ضریب نفوذ از نظر ریاضی ضریب تناسب معادله است اما از نظر فیزیکی معنای ان چیست؟

- در واقع تقریبا تمام عوامل موثر بر نفوذ که قبلا بحث شد در D خلاصه شده است : معادله کلی ضریب نفوذ و وابستگی ان به دما به صورت زیر است

Shahrood University of Technology

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

- D_0 :. عدد ثابت غیر وابسته به دما (m^2/s)
- Q: انرژی اکتیواسیون نفوذ J/mol or eV/atom

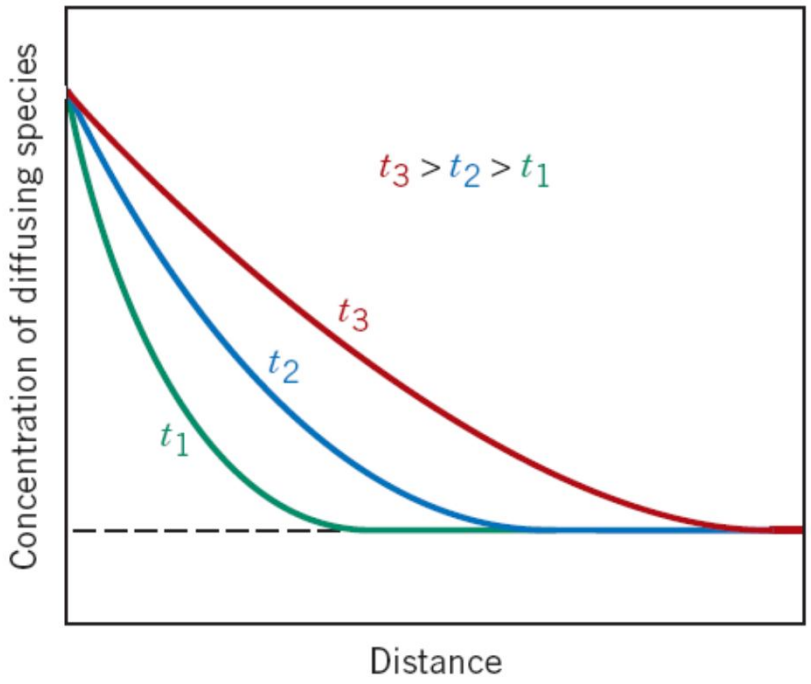
R: ثابت گاز ها 8.31 J/mol-K

T: دما (K)

Shahrood University of Technology

نفوذ در حالت غير پايا
(Nonsteady state Diffusion)

- در حالت واقعي نفوذ اغلب به صورت Steady State نيست و فلاكس و شيب غلظتي با گذشت زمان تغيير مي كند.



Shahrood University of Technology

معادلات در حالت non steady state

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

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

اگر ضریب نفوذ به غلظت وابسته نباشد

Shahrood University of Technology

اين معادله در شرايط متفاوت مسئله و شرايط مرزي متفاوت به حل ها گوناگوني منجر مي شود.

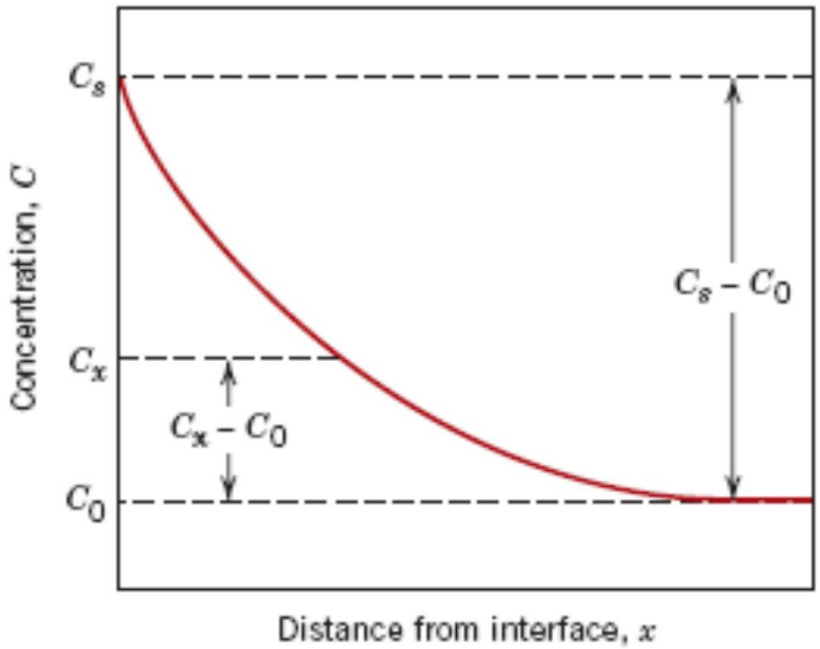
- يكي از مهمترين اين شرايط كه كاربرد زيادي دارد به صورت زير است

Shahrood University of Technology

For $t = 0$, $C = C_0$ at $0 \leq x \leq \infty$

For $t > 0$, $C = C_s$ (the constant surface concentration) at $x = 0$

$C = C_0$ at $x = \infty$



Shahrood
University of
Technology

در این حالت حل معادله به صورت زیر در می آید

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

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

Shahrood University of Technology

Table 5.1 Tabulation of Error Function Values

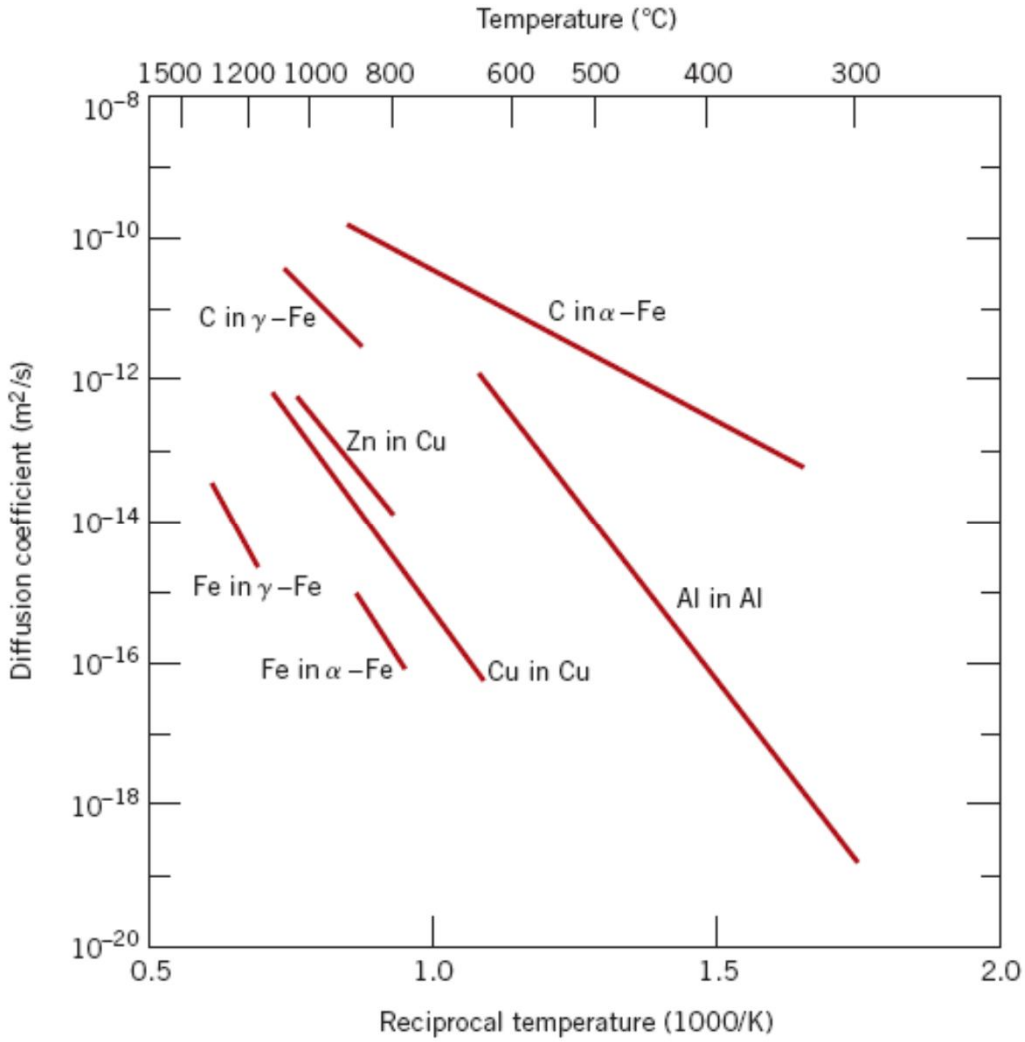
z	$erf(z)$	z	$erf(z)$	z	$erf(z)$
0	0	0.55	0.5633	1.3	0.9340
0.025	0.0282	0.60	0.6039	1.4	0.9523
0.05	0.0564	0.65	0.6420	1.5	0.9661
0.10	0.1125	0.70	0.6778	1.6	0.9763
0.15	0.1680	0.75	0.7112	1.7	0.9838
0.20	0.2227	0.80	0.7421	1.8	0.9891
0.25	0.2763	0.85	0.7707	1.9	0.9928
0.30	0.3286	0.90	0.7970	2.0	0.9953
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

Table 5.2 **A Tabulation of Diffusion Data**

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

Source: E. A. Brandes and G. B. Brook (Editors), *Smithells Metals Reference Book*, 7th edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1992.

Shahrood University of Technology



Shahrood University of Technology

چند سوال پاياني :

- ايا وجود شيب غلظتي همواره به نفوذ منجر مي شود؟
- 2- ايا ممكن است در ماده خالص هم نفوذ داشته باشيم؟

Shahrood University of Technology