

Difusão em sólidos

Dependência da difusão com a temperatura e com a pressão

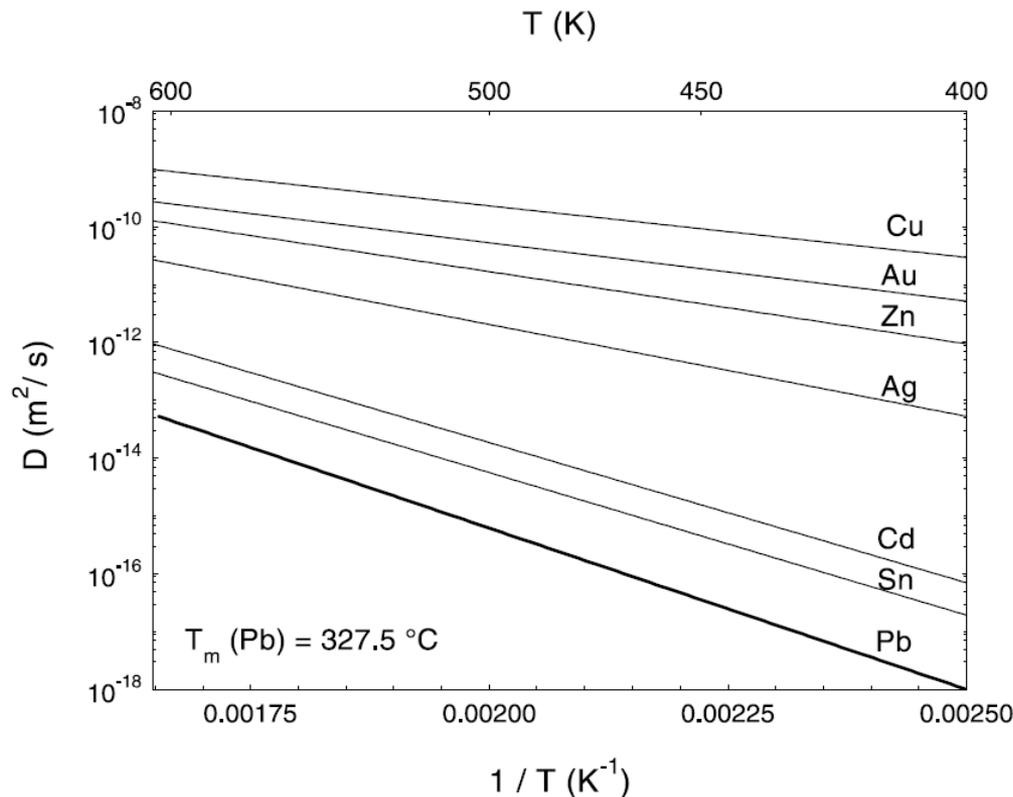
Prof. Rodrigo Perito Cardoso

Introdução

- Difusão -> Transporte de massa por “movimento térmico”, depende de variáveis termodinâmicas:
 - Temperatura (diagrama de Arrhenius $\ln D \times 1/T(K)$)
 - Pressão
 - Composição
- Em sólidos, forte dependência com a temperatura
- Menor influência da Pressão
- Influência “pequena a moderada” da concentração

Introdução

- Difusividade de vários elemento em Pb



- Grande variação de parâmetros de ativação
- D varia de várias ordens de grandeza (\uparrow Cu, \downarrow Pb (auto-difusão))
- Influência ainda mais forte em semi-condutores

Fig. 8.1. Arrhenius plot of diffusion for various elements in Pb; activation parameters from [1]

Introdução

- Ex: Dependência da pressão
 - Pequena dependência para pressões acessíveis em laboratório
 - D diminui de no máximo 10 vezes para 1GPa(10^4 bar \approx 10.000 atm)

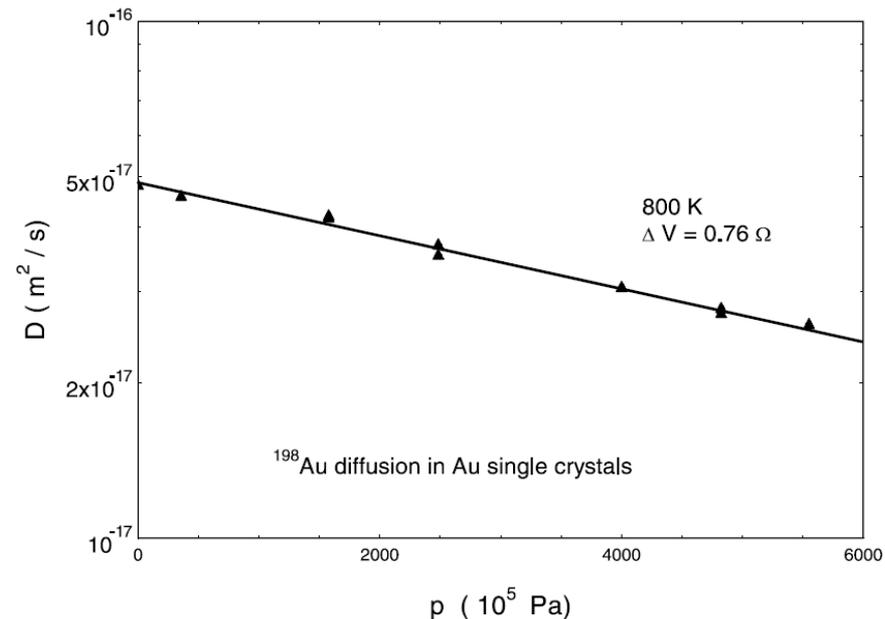
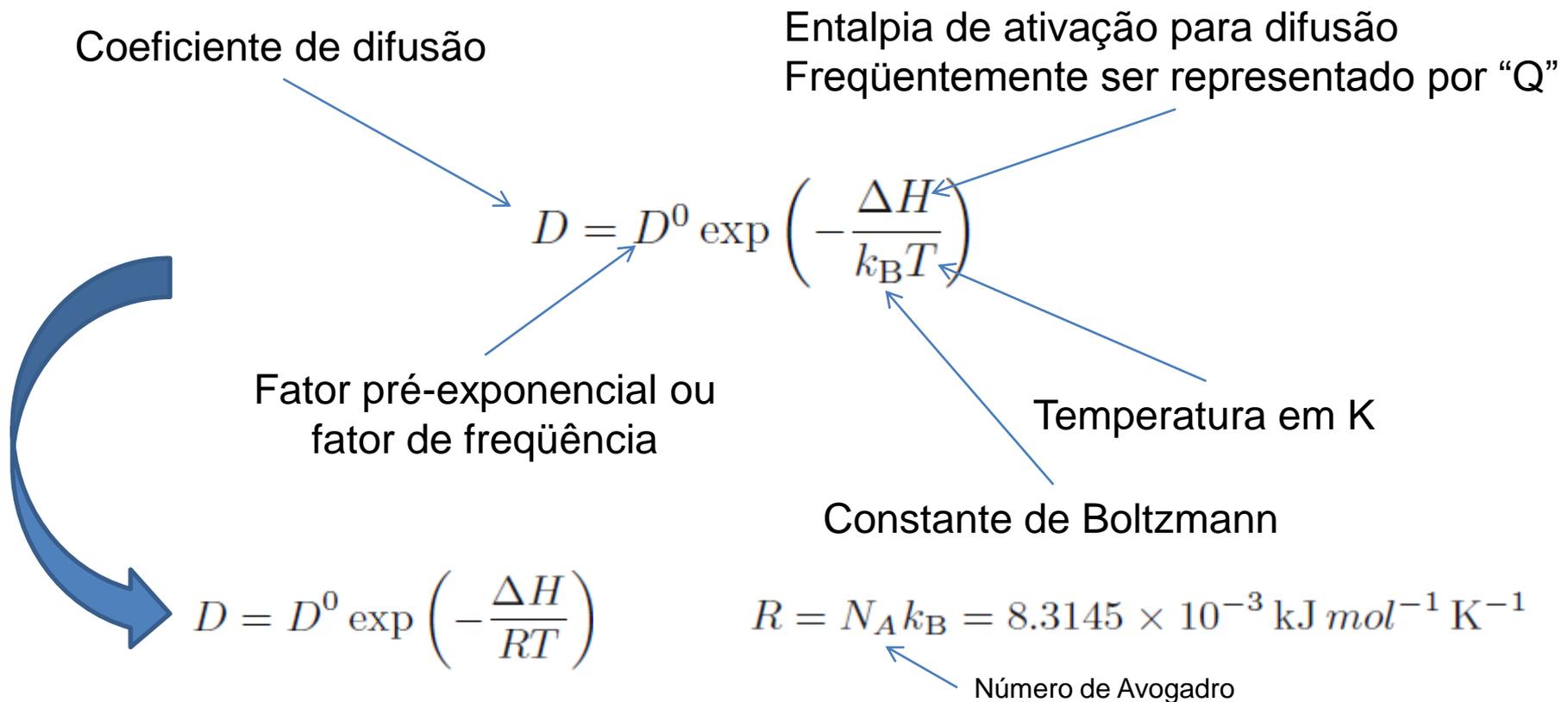


Fig. 8.2. Pressure dependence of ^{198}Au diffusion in Au single crystals at constant temperature according to WERNER AND MEHRER [11]. Ω denotes the atomic volume of Au

Dependência da Temperatura

- Relação de Arrhenius (“Lei de Arrhenius”)
 - Normalmente aplicável (mas não sempre)



Dependência da Temperatura

- Parâmetros de Ativação da difusão (atenção com as unidades: /mol, /atomo, etc)

Parâmetros de
Ativação da difusão

$$D = D^0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right)$$

$$\Delta H = -k_B \frac{\partial \ln D}{\partial (1/T)}$$

Inclinação negativa da diagrama de Arrhenius

$$\text{Inclinação} = -\Delta H/k_B$$

$$T^{-1} \Rightarrow 0 \quad D^0$$

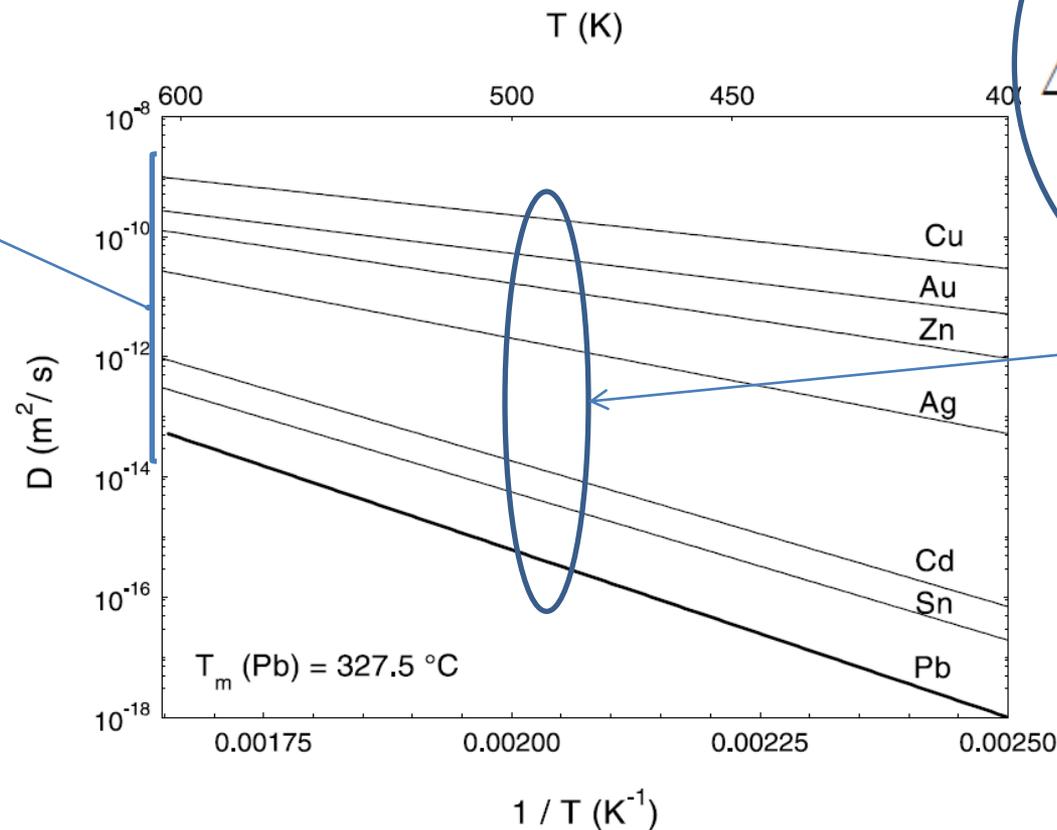
Intersecção

Dependência da Temperatura

- Parâmetros de Ativação da difusão

$$T^{-1} \Rightarrow 0$$

$$D^0$$



Inclinação

$$-\Delta H/k_B$$

$$\Delta H = -k_B \frac{\partial \ln D}{\partial (1/T)}$$

Fig. 8.1. Arrhenius plot of diffusion for various elements in Pb; activation parameters from [1]

Dependência da Temperatura

Se relacionarmos com parâmetros atômicos

Energia livre de Gibbs de ativação

$$D = D^0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)$$

$$D = \underbrace{gf\nu^0 a^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right)}_{\text{Fator geométrico}} \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right) = gf\nu^0 a^2 \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right)$$

Fator pré-exponencial ou fator de freqüência
Entropia de difusão

$$D^0 = gf\nu^0 a^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right)$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$$\frac{\partial \Delta H}{\partial T} = T \frac{\partial \Delta S}{\partial T}$$

Da termodinâmica ΔS e ΔH são acoplados -> se um deles é independente da temperatura o outro também

Parâmetros tabelados -> válidos para uma faixa de temperatura

Exemplo

Table 5.2 A Tabulation of Diffusion Data

<i>Diffusing Species</i>	<i>Host Metal</i>	$D_0(m^2/s)$	<i>Activation Energy Q_d</i>		<i>Calculated Values</i>	
			<i>kJ/mol</i>	<i>eV/atom</i>	<i>T(°C)</i>	<i>D(m²/s)</i>
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.

Dependência da Temperatura

- Sistema com mais de um mecanismo de difusão (aparente discordância com Arrhenius)
 - Mono-vacâncias, Divacâncias, auto-intersticial
 - Em volume, em contorno de grão, discordâncias

$$\left. \begin{array}{l} D_I, D_{II}, \dots \\ \Delta H_I, \Delta H_{II}, \dots \\ D_I^0, D_{II}^0, \dots \end{array} \right\} D = D_I + D_{II} + \dots = D_I^0 \exp\left(-\frac{\Delta H_I}{k_B T}\right) + D_{II}^0 \exp\left(-\frac{\Delta H_{II}}{k_B T}\right) + \dots$$

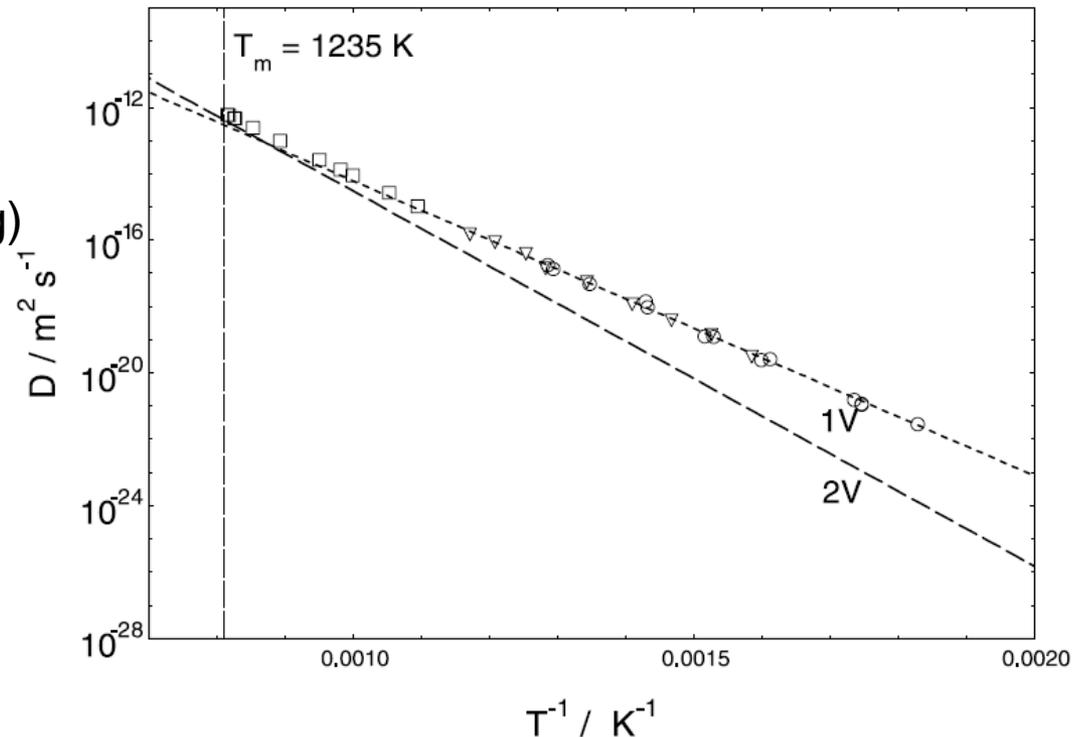
Dependência da Temperatura

- “Desvio” de Arrhenius “para cima” para temperaturas elevadas se o processo é de maior energia de ativação (fenômeno ganha importância)

Ex: Mono e Divacâncias (Ag)

$$\Delta H_{1V} = 1.76 \text{ eV}$$

$$\Delta H_{2V} = 2.24 \text{ eV}$$



Dependência da Temperatura

- Se considerarmos apenas um mecanismo teremos uma energia de ativação efetiva ou aparente

$$\Delta H_{eff} = \Delta H_I \frac{D_I}{D_I + D_{II} + \dots} + \Delta H_{II} \frac{D_{II}}{D_I + D_{II} + \dots} + \dots$$

Média ponderada

Exemplos de parâmetros de ativação (interpretação física)

- Difusão intersticial ($f=1$) (H, N, C, O)

Em ligas diluídas \rightarrow "Random walk" (interstício sempre disponível)

Parâmetro de rede

$$D = ga^2\omega = ga^2\nu^0 \exp\left(-\frac{G^M}{k_B T}\right)$$

Fator geométrico
Frequência de saltos efetivos

$$G^M = H^M - TS^M$$

$$D = D^0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right)$$

Por comparação $\Delta H \Rightarrow H^M$ and $\Delta S \Rightarrow S^M$

Fenômeno rápido pois não necessita de energia de formação de defeitos

Exemplos de parâmetros de ativação

- Auto Difusão -> Mediada por defeito

Fator de correlação Parâmetro de rede

$$D = f g a^2 \Gamma$$

Fator geométrico

Freqüência de saltos efetivos

$$\Gamma = C_D^{eq} \omega = g_D \exp\left(-\frac{G_D^F}{k_B T}\right) \omega$$

P/ monovacâncias

$$C_D^{eq} \hat{=} C_{1V}^{eq}$$

Exemplos de parâmetros de ativação

- Auto Difusão -> Mediada por defeito

$$G^M = H^M - TS^M$$

$$\omega = \nu^0 \exp\left(-\frac{G^M}{k_B T}\right) = \nu^0 \exp\left(\frac{S^M}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{H^M}{k_B T}\right)$$

$$\Delta H \Rightarrow H_D^F + H_D^M$$

$$\Delta S \Rightarrow S_D^F + S_D^M$$

} parâmetros de ativação

Exemplos de parâmetros de ativação

- Difusão de átomos substitucionais em ligas diluídas -> Mediada por defeito

Fator de correlação Parâmetro de rede

$$D_2 = f_2 g a^2 \Gamma_2$$

Sub-escrito 2
represente o soluto

Fator geométrico Frequência de saltos efetivos

Energia livre de ligação

Energia livre de
formação de defeito
próximo ao soluto

$$\Gamma_2 = p\omega_2 = C_D^{eq} \exp\left(\frac{G^B}{k_B T}\right) \omega_2 = g_D \exp\left(-\frac{G_D^F - G^B}{k_B T}\right) \omega_2$$

$(G^B > 0)$ Mais disponibilidade
(atrativo)

$(G^B < 0)$ Menos disponibilidade
(repulsivo)

Exemplos de parâmetros de ativação

- Difusão de átomos substitucionais em ligas diluídas -> Mediada por defeito

$$G^B = H^B - TS^B$$

$$G_2^M = H_2^M - TS_2^M$$

$$\omega_2 = \nu_2^0 \exp\left(-\frac{G_2^M}{k_B T}\right) = \nu_2^0 \exp\left(\frac{S_2^M}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{H_2^M}{k_B T}\right)$$

$$\Delta H_2 \Rightarrow H_D^F - H^B + H_2^M + C$$

$$C = -k_B \frac{\partial \ln f_2}{\partial (1/T)}$$

Da variação do fator de correlação com a temperatura

Dependência da pressão

- Efeito de uma pressão hidrostática (até agora desprezada)

De uma maneira mais precisa: $\Delta H = \Delta E + p\Delta V$

Energia de ativação (energia interna)

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = \Delta E - T\Delta S + p\Delta V$$

Volume de ativação

Assim, uma descrição completa do processo tem 3 parâmetros de ativação:

ΔE , ΔS , and ΔV

$$\Delta H = \Delta E + p\Delta V$$

$p\Delta V$

Significativo a pressões elevadas
Desprezível a pressão atmosférica (sólidos)

$$\Delta E \approx \Delta H$$

Dependência da pressão

$$D = gf\nu^0 a^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right) = gf\nu^0 a^2 \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right)$$

$$\Delta V = \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial p}\right)_T$$

$$\Delta V = -k_B T \cdot \left(\frac{\partial \ln D}{\partial p}\right)_T + \underbrace{k_B T \cdot \frac{\partial \ln (fa^2\nu^0)}{\partial p}}_{\text{corr. term}}$$

$$\text{corr. term} \approx k_B T \kappa_T \gamma_G$$

Normalmente o termo de correção é pequeno e pode ser desconsiderado frente à precisão das medidas

0.01 to 0.03 Ω

Pequeno se comparado a $\Delta V = 0.76 \Omega$

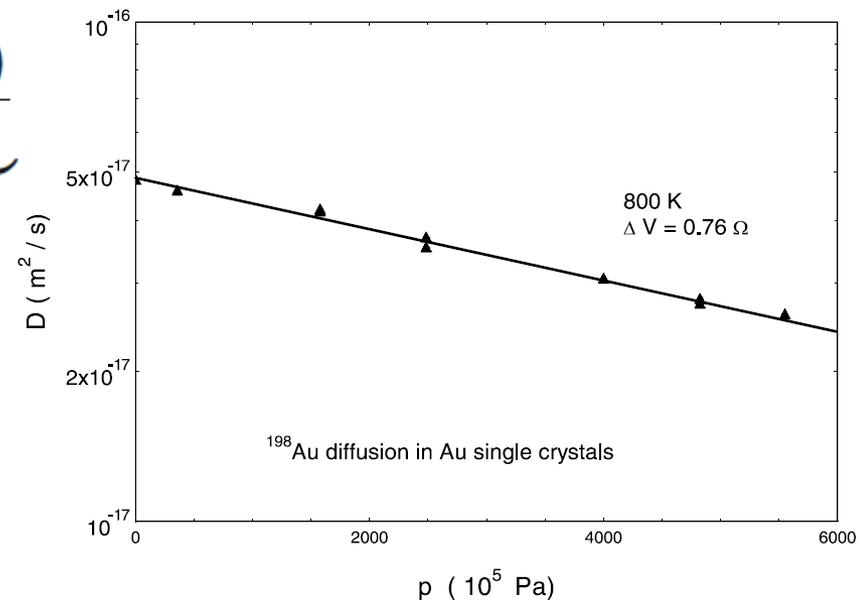


Fig. 8.2. Pressure dependence of ^{198}Au diffusion in Au single crystals at constant temperature according to WERNER AND MEHRER [11]. Ω denotes the atomic volume of Au

Dependência da pressão

- Se existe mais de um mecanismo

$$\Delta V_{eff} = \Delta V_I \frac{D_I}{D_I + D_{II} + \dots} + \Delta V_{II} \frac{D_{II}}{D_I + D_{II} + \dots} + \dots$$

Média ponderada, similar ao caso da energia de ativação

ΔV_{eff} Depende de P e T

- Porque estudar efeito de pressão?
 - Entendimento profundo do processo difusivo
 - ΔV é sensível ao mecanismo de difusão

Dependência da pressão

Table 8.1. Activation volumes of diffusion and ionic conduction; in units of the atomic volume Ω for elements; in units of the molar volume V_m for compounds.

Diffusion process	$\Delta V/\Omega$ or $\Delta V/V_m$	Reference
Cu self-diffusion	+0.93 to +1.09	Beyeler and Adda [8]
Ag self-diffusion	+0.66 to +0.88	Beyeler and Adda [8], Rein and Mehrer [9]
Au self-diffusion	+0.72 to +0.75	Dickerson et al. [10], Beyeler and Adda [8] Werner and Mehrer [11], Rein and Mehrer [9]
Na self-diffusion	+0.4 to +0.75	Mundy [12]
Ge diffusion in silicon	-0.68 to -0.28	Södervall et al. [15], Aziz et al. [16]
N in α -iron	+0.05	Bosman et al. [13]
C in α -iron	-0.08 to -0.02	Bosman et al. [14]
Al self-diffusion	+1.29	Beyeler and Adda [8]
Ge in Al	+1.16 to + 1.24	Thürer et al. [17]
Zn in Al	+0.74 to +1.09	Erdelyi et al. [18]
Mn in Al	+1.67	Rummel et al. [19]
Co in Al	+1.64 to 1.93	Rummel et al. [19]
Schottky pair formation: V_{SP}^F	1.63 for KBr 2.04 for NaCl 1.23 for KBr 1.37 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Cation migration: V_{VC}^M	0.21 for KCl 0.26 for NaCl 0.25 for KBr 0.25 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Intrinsic conduction: $V_{VC}^M + V_{SP}^F/2$	1.03 for KCl 1.28 for NaCl 0.87 for KBr 0.93 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Ag ion conduction α -AgI	≈ 0	Mellander [23]

Dependência da pressão

- Interpretação do volume de ativação na auto-difusão

$$\Delta G = G_D^F + G_D^M$$

Volume de ativação de formação

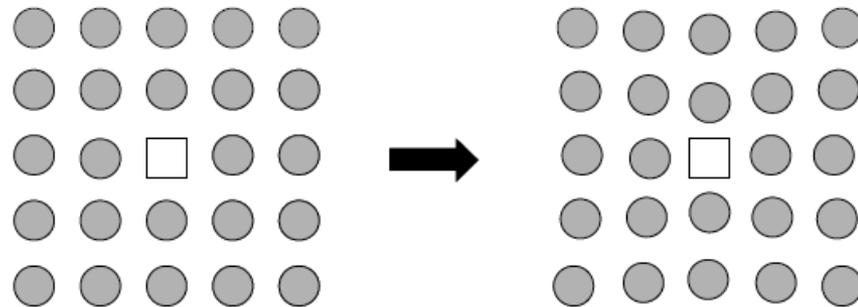
$$\Delta V = V_D^F + V_D^M$$

Volume de ativação de migração

- Volume de formação de monovacâncias

$$V_{1V}^F = +\Omega - V_{rel,1V}$$

Normalmente positivo e menor que 1



Rigid lattice

Relaxed lattice

Dependência da pressão

- Volume de formação de divacâncias

$$V_{2V}^F = +2\Omega - V_{rel,2V}$$

$$V_{2V}^F > V_{1V}^F \quad \text{Volume é maior para divacâncias}$$

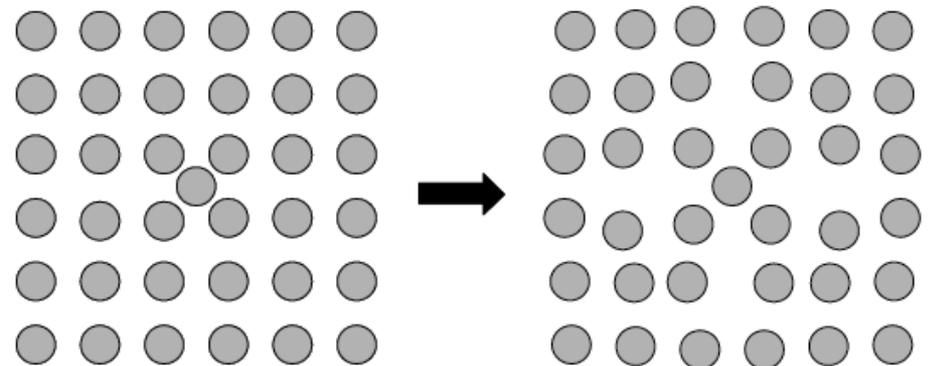
- Volume de formação de auto-intersticiais

$$V_I^F = -\Omega + V_{rel,I}$$

Pode ser negativo ou positivo

Positivo -> estrutura compacta

Negativo -> estrutura pouco compactas



Rigid lattice

Relaxed lattice

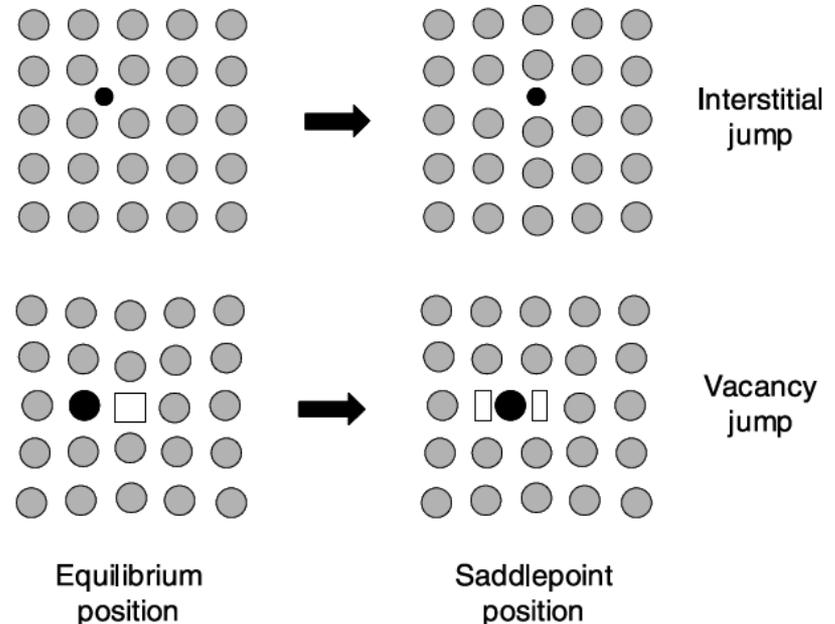
Dependência da pressão

- Volume de migração
 - Mudança máxima de volume no movimento (ponto de sela)

Pequeno para estruturas compactas

$$V^M = 0.15 \Omega \quad \text{Au}$$

Assim, para difusão mediada por vacância a maior parte do volume de ativação é devido ao volume de formação



Dependência da pressão

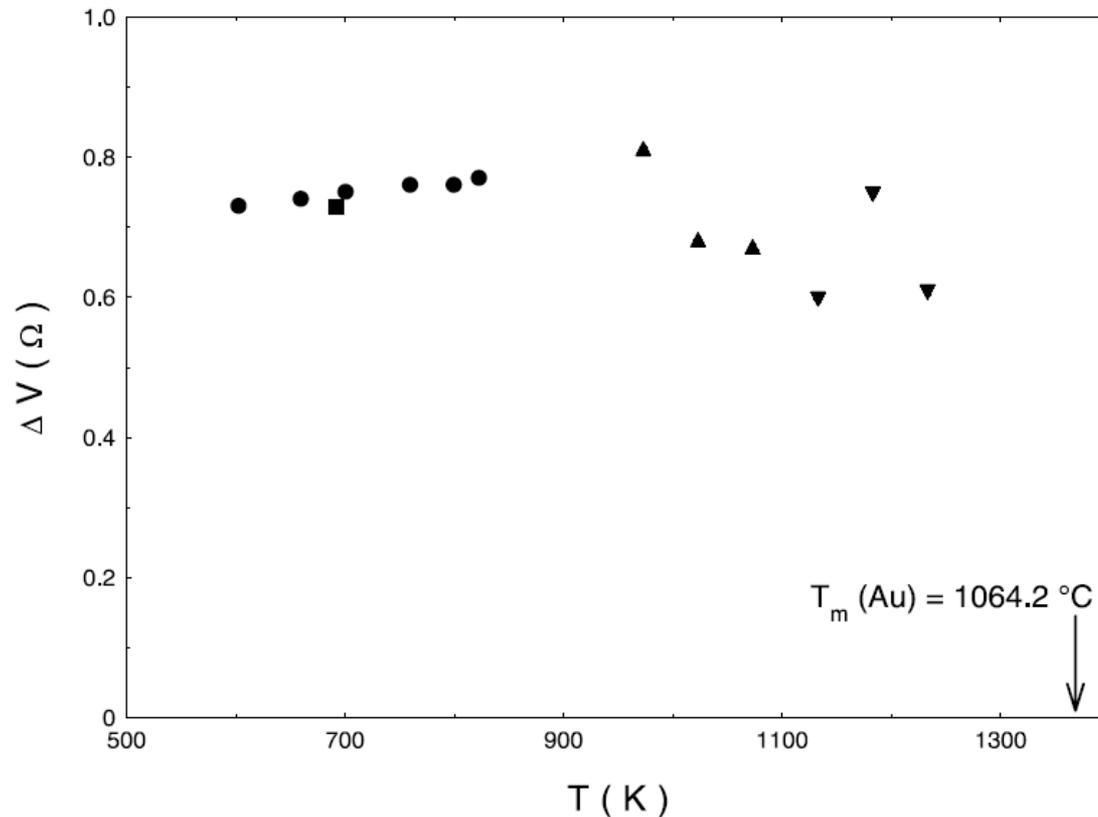


Fig. 8.6. Activation volumes for self-diffusion in Au *versus* temperature: *triangles* [8], *square* [9], *full circles* [11]

ΔV -> Quase independente da temperatura indicando um único mecanismo ativo

Dependência da pressão

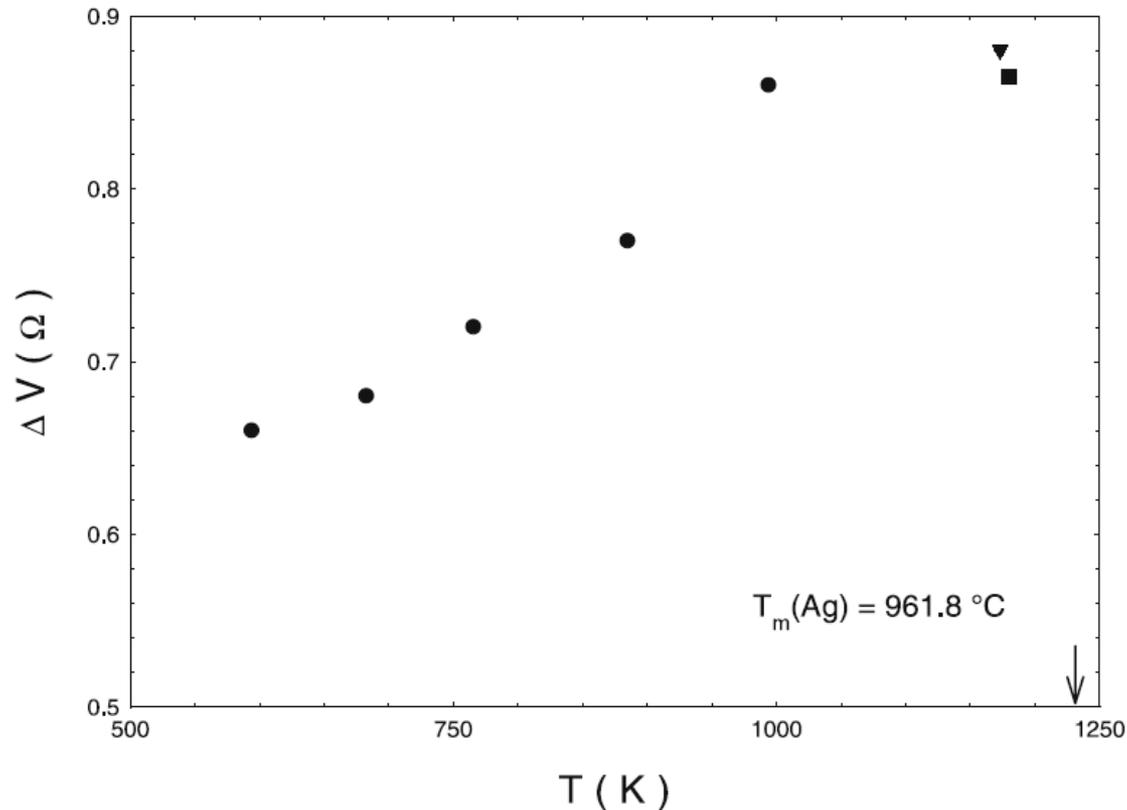


Fig. 17.5. Effective activation volumes, ΔV_{eff} , of Ag self-diffusion *versus* temperature in units of the atomic volume Ω of Ag: *triangle, square* [21], *circles* [22]

ΔV -> dependente da temperatura indicando mais de um mecanismos

Dependência da pressão

Table 8.1. Activation volumes of diffusion and ionic conduction; in units of the atomic volume Ω for elements; in units of the molar volume V_m for compounds.

Diffusion process	$\Delta V/\Omega$ or $\Delta V/V_m$	Reference
Cu self-diffusion	+0.93 to +1.09	Beyeler and Adda [8]
Ag self-diffusion	+0.66 to +0.88	Beyeler and Adda [8], Rein and Mehrer [9]
Au self-diffusion	+0.72 to +0.75	Dickerson et al. [10], Beyeler and Adda [8] Werner and Mehrer [11], Rein and Mehrer [9]
Na self-diffusion	+0.4 to +0.75	Mundy [12]
Ge diffusion in silicon	-0.68 to -0.28	Södervall et al. [15], Aziz et al. [16]
N in α -iron	+0.05	Bosman et al. [13]
C in α -iron	-0.08 to -0.02	Bosman et al. [14]
Al self-diffusion	+1.29	Beyeler and Adda [8]
Ge in Al	+1.16 to + 1.24	Thürer et al. [17]
Zn in Al	+0.74 to +1.09	Erdelyi et al. [18]
Mn in Al	+1.67	Rummel et al. [19]
Co in Al	+1.64 to 1.93	Rummel et al. [19]
Schottky pair formation: V_{SP}^F	1.63 for KBr 2.04 for NaCl 1.23 for KBr 1.37 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Cation migration: V_{VC}^M	0.21 for KCl 0.26 for NaCl 0.25 for KBr 0.25 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Intrinsic conduction: $V_{VC}^M + V_{SP}^F/2$	1.03 for KCl 1.28 for NaCl 0.87 for KBr 0.93 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Ag ion conduction α -AgI	≈ 0	Mellander [23]

vacância

$$V_{1V}^F = +\Omega - V_{rel,1V}$$

Auto-interstitial

$$V_I^F = -\Omega + V_{rel,I}$$

intersticial

Dependência da pressão

- Volume de ativação para difusão de soluto
 - Intersticial (sem formação de defeito)

$$\Delta V = V^M$$

Pouco dependente da pressão
(ΔV pequeno)

- Substitucional (caso do mecanismo de vacâncias)

$$D_2 = ga^2\nu_0 \exp\left(-\frac{G_{1V}^F - G^B}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{H_2^M}{k_B T}\right) f_2$$

$$\Delta V_2 = \underbrace{V_{1V}^F - V^B}_{\text{Volume de formação (par vacância soluto)}} + V_2^M - \underbrace{k_B T \frac{\partial \ln f_2}{\partial p}}_{C_2}$$

Volume de formação
(par vacância soluto)

Volume de migração do complexo soluto vacância

Dependência da pressão

Table 8.1. Activation volumes of diffusion and ionic conduction; in units of the atomic volume Ω for elements; in units of the molar volume V_m for compounds.

Diffusion process	$\Delta V/\Omega$ or $\Delta V/V_m$	Reference
Cu self-diffusion	+0.93 to +1.09	Beyeler and Adda [8]
Ag self-diffusion	+0.66 to +0.88	Beyeler and Adda [8], Rein and Mehrer [9]
Au self-diffusion	+0.72 to +0.75	Dickerson et al. [10], Beyeler and Adda [8] Werner and Mehrer [11], Rein and Mehrer [9]
Na self-diffusion	+0.4 to +0.75	Mundy [12]
Ge diffusion in silicon	-0.68 to -0.28	Södervall et al. [15], Aziz et al. [16]
N in α -iron	+0.05	Bosman et al. [13]
C in α -iron	-0.08 to -0.02	Bosman et al. [14]
Al self-diffusion	+1.29	Beyeler and Adda [8]
Ge in Al	+1.16 to +1.24	Thürer et al. [17]
Zn in Al	+0.74 to +1.09	Erdelyi et al. [18]
Mn in Al	+1.67	Rummel et al. [19]
Co in Al	+1.64 to 1.93	Rummel et al. [19]
Schottky pair formation: V_{SP}^F	1.63 for KBr 2.04 for NaCl 1.23 for KBr 1.37 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Cation migration: V_{VC}^M	0.21 for KCl 0.26 for NaCl 0.25 for KBr 0.25 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Intrinsic conduction: $V_{VC}^M + V_{SP}^F/2$	1.03 for KCl 1.28 for NaCl 0.87 for KBr 0.93 for NaBr	Yoon and Lazarus [22]
Ag ion conduction α -AgI	≈ 0	Mellander [23]

simulares
Interação repulsiva
soluto-vacância

Variação
considerável
entre
elementos

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- Ponto de fusão, calor latente e módulo de elasticidade estão relacionados à energia de ligação, logo, não seria surpresa eles estarem relacionados com a difusão
- Entretanto a difusão continua sendo uma propriedade cinética (não depende somente de parâmetros termodinâmicos)
- Relações importante para um “chute inicial” (obtenção da ordem de grandeza)-> empírico

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- Difusividade X temperatura de fusão
 - $D(T_m)$ -> aproximadamente constante para uma dada estrutura e um dado tipo de ligação

Na temperatura de fusão:

$$D(T_m) = D^0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T_m}\right) = g f a^2 \nu^0 \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T_m}\right)$$

Se $D(T_m)$ -> Aproximadamente constante

D^0 and $\Delta H/(k_B T_m)$ Aproximadamente constante

“Fusão local” na migração

$$\frac{\Delta H}{k_B T_m} \approx \alpha \frac{H_s}{k_B T_m} + \beta \frac{H_m}{k_B T_m}$$

Migração -> desordem temporária

$$S_m = H_m / T_m$$

$$S_s = H_s / T_m$$

Aproximadamente constantes para uma estrutura e tipo de ligação

↳ “Sublimação” com na formação de vacância
-> rompimento da metade das ligações

Propriedades termodinâmicas X

coeficiente de difusão

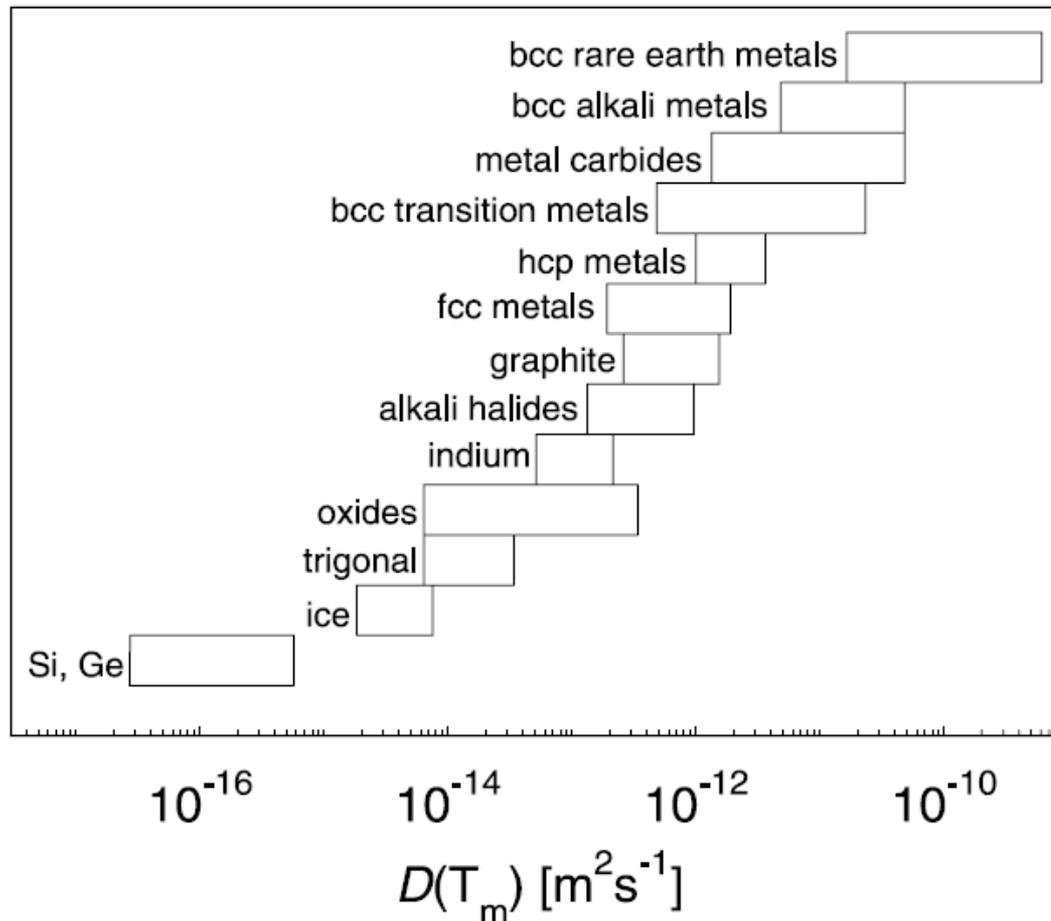


Fig. 8.7. Self-diffusivities at the melting point, $D(T_m)$, for various classes of crystalline solids according to BROWN AND ASHBY [24]

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- Energia de ativação X temperatura de fusão

$$\Delta H / (k_B T_m)$$

Para diferentes classe de
materiais cristalinos

$$\Delta H \approx K_1 T_m$$

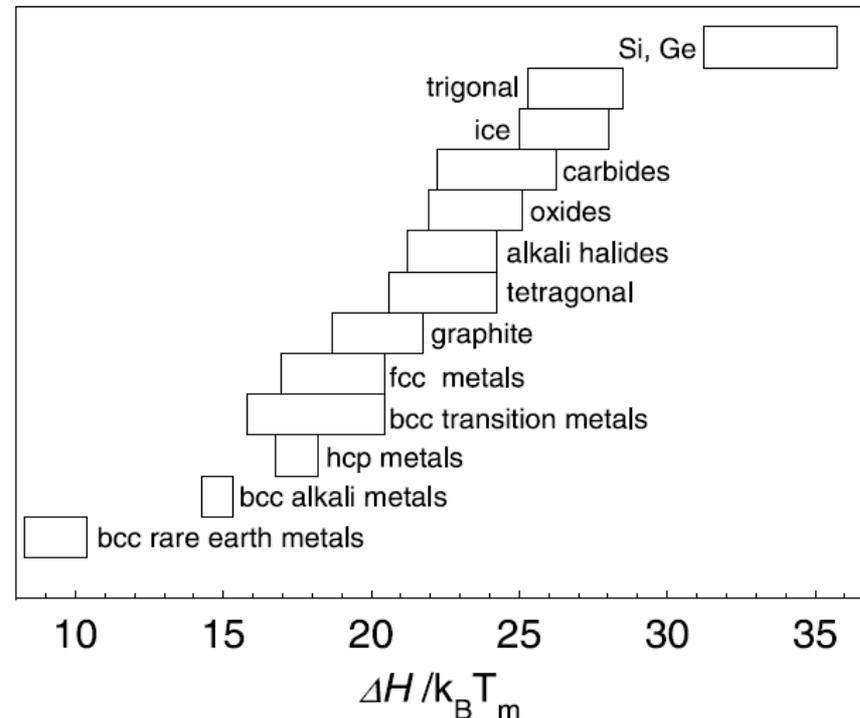


Fig. 8.8. Normalised activation enthalpies of self-diffusion, $\Delta H / (k_B T_m)$, for classes of crystalline solids according to BROWN AND ASHBY [24]

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- Energia de ativação X temperatura de fusão

$$\Delta H \approx K_1 T_m$$

Trouton's rule

$$S_m = H_m / T_m \approx 2.3 \text{ cal/mol}$$

$$\Delta H \approx \frac{K_1}{S_m} H_m \equiv K_2 H_m$$

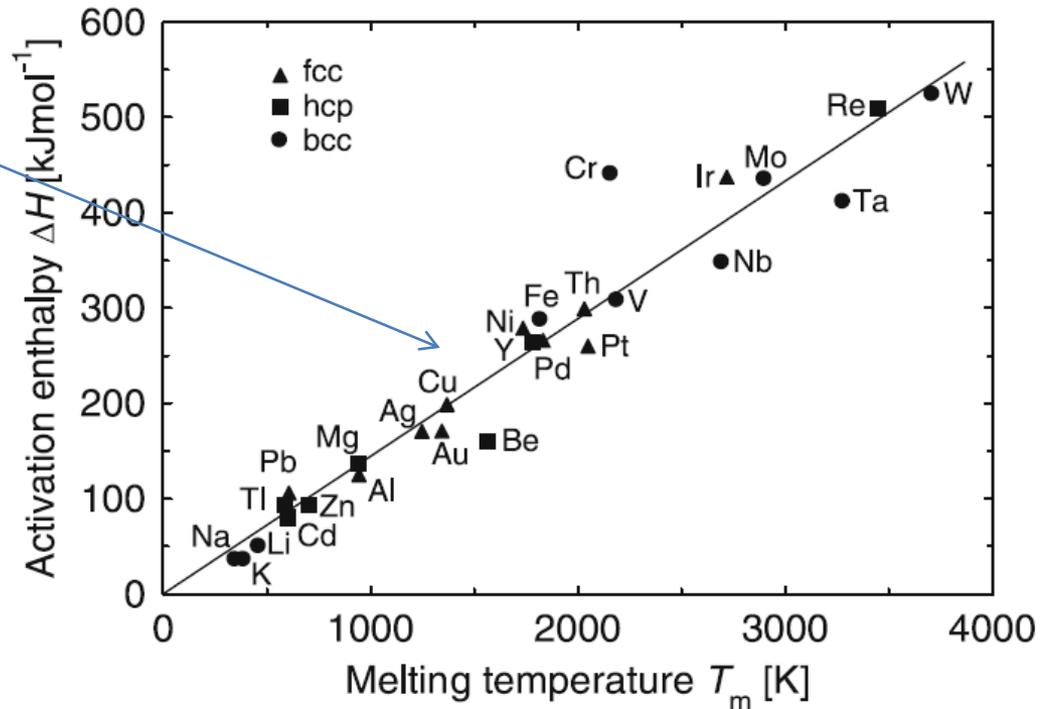


Fig. 8.9. Activation enthalpies of self-diffusion in metals, ΔH , versus melting temperatures, T_m , according to TIWARI ET AL. [25]

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- Energia de ativação X temperatura de fusão

$$\Delta H \approx \frac{K_1}{S_m} H_m \equiv K_2 H_m$$

$$K_1 = 146 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$K_2 = 14.8$$

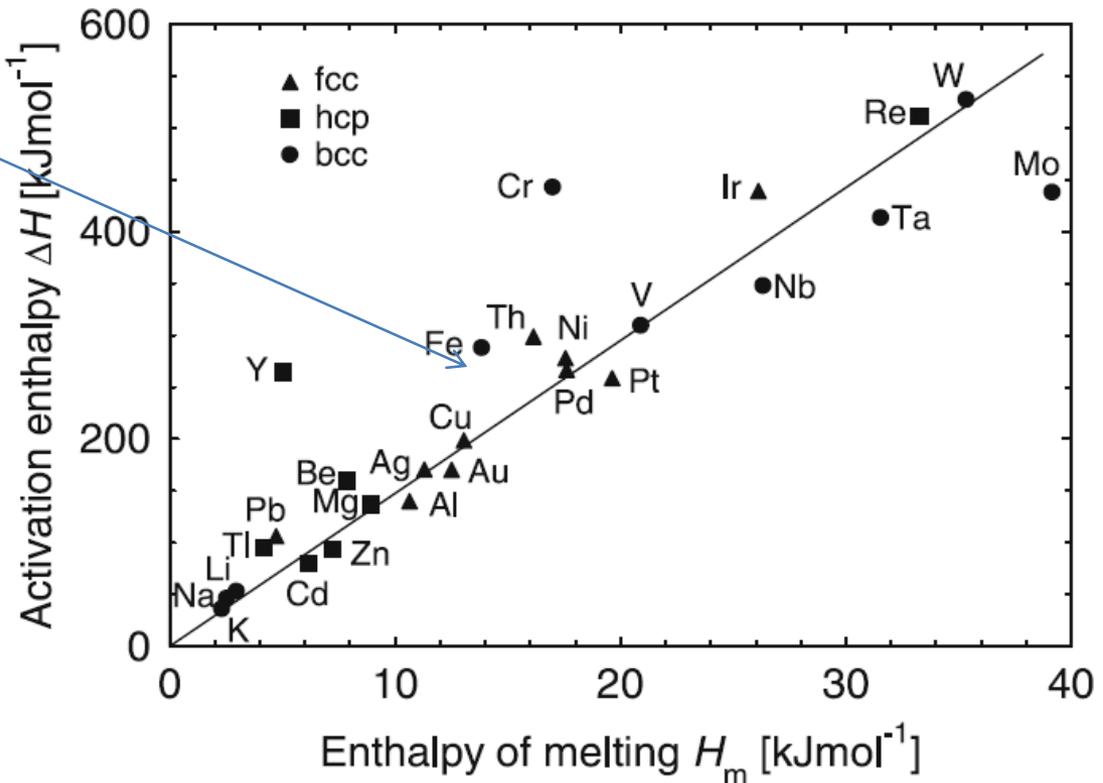


Fig. 8.10. Activation enthalpies of self-diffusion in metals, ΔH , versus melting enthalpies, H_m , according to TIWARI ET AL. [25]

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- **Atenção:**
 - Relações válidas para auto-difusão
 - Para átomos “estranhos” (soluto) a relação é mais complexa e depende da interação entre o átomo “estranho” (soluto) e os átomos da rede

Propriedades termodinâmicas X coeficiente de difusão

- Volume de ativação X temperatura de fusão
 - $D(T_m)$ Independente de $p \rightarrow p$ aumenta T_m idem

$$\frac{d[\ln D(T_m)]}{dp} = 0$$

É possível mostrar que :

$$\Delta V = \frac{\Delta H(p=0)}{T_m(p=0)} \frac{dT_m}{dp}$$

Não funciona para todos os casos

Correlação de propriedades do material e coeficiente de difusão

- Parâmetros de ativação e constante elástica
 - Migração deforma elasticamente a rede

$$\frac{\partial(G^M / G_0^M)}{\partial T} = \frac{\partial(\mu / \mu_0)}{\partial T} \rightarrow \text{Módulo elástico}$$

observação de Zener, H^M e S^M independente da temperatura se μ varia linearmente com T , caso contrário H^M e S^M dependentes de T

$$\Delta S = \lambda \Theta \frac{\Delta H}{T_m} \quad D^0 = f g a^2 \nu^0 \exp \left(\lambda \Theta \frac{\Delta H}{T_m} \right)$$

$$\Theta \equiv \frac{\partial(\mu / \mu_0)}{\partial(T / T_m)}$$

Uso das Correlações

- Útil para estimar parâmetros quando valores experimentais não são disponíveis.
 - Lembrar que erros importantes estão previstos
 - Correlações para auto difusão, entretanto para substitucionais:
 - Difusividade normalmente não difere por mais de 100
 - A energia de ativação está normalmente em 25%
 - Não vale para intersticiais

VFI Atomic Radii