

TM336

Introdução aos Materiais

Aula 5 – Difusão

Prof. Rodrigo Perito Cardoso

Onde estamos?

- Comportamento mecânico:
 - Mecanismos de endurecimento
 - Resistência mecânica e dureza
 - Impacto
 - Fadiga
 - Fluência
- Mecanismos de deformação
- Recozimento de recristalização
- Metalurgia da conformação
- Diagramas de fase
- Solidificação
- Metalurgia da fundição

Introdução e
conceitos básicos

É importante lembrar (cap 3)

- **Definições:**
 - **Materiais cristalinos e amorfos**
 - **Célula unitária**
 - **FEA (densidades e frações de empacotamento linear e planar)**
 - **Índices de planos e direções**
- **Estrutura mais comuns nos metais**
- **Anisotropia (monocristal x policristal)**

O que era importante lembrar da aula anterior

- **Todo material tem imperfeições**
- **Classificação dos defeitos (quais são eles?)**
- **Condições para solução sólida (4)**
- **Para que serve e como funciona o microscópio e o que pode ser observado com ele.**

Prova dia 14/08
(Falta uma semana!)

Roteiro da aula

- Introdução
- Mecanismos de difusão
- Difusão em regime permanente
- Difusão em regime transiente
- Fatores que influenciam a difusão

Introdução

- O que é difusão?
 - Fenômeno de transporte de matéria na própria matéria através do movimento de átomos
- Necessidade de tratamento térmico (melhorar propriedades)
- Necessidade de controlar a difusão



Engrenagem cementada

Introdução

- Tungstênio (sinterização)

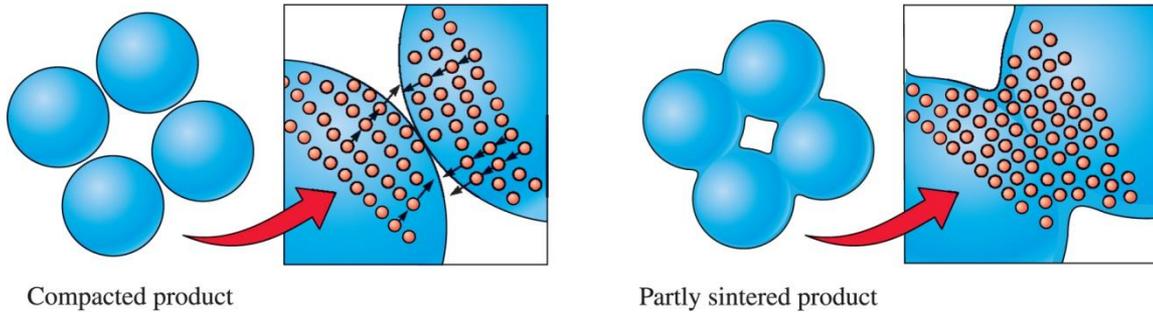
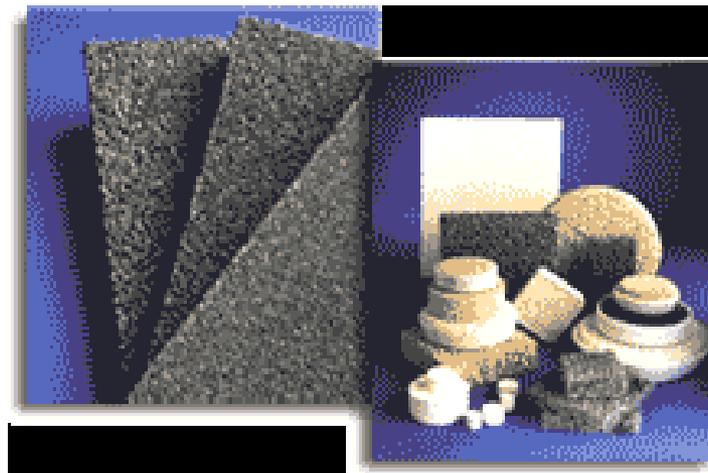


Figure 5-20 Diffusion processes during sintering and powder metallurgy. Atoms diffuse to points of contact, creating bridges and reducing the pore size.

- Filtros metálicos (sinterização)



Introdução

- Solda por difusão

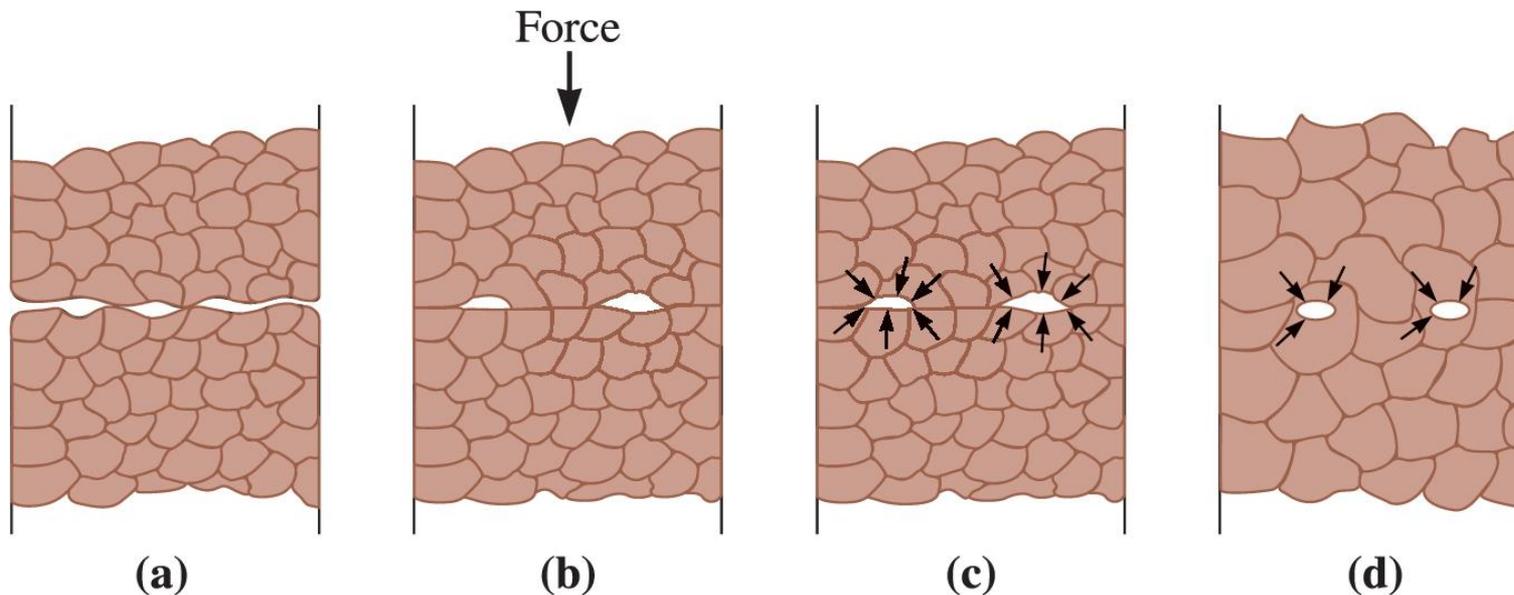
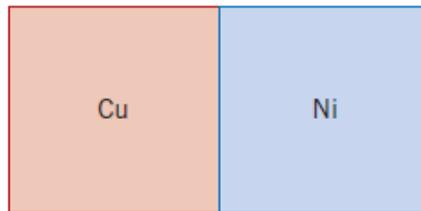


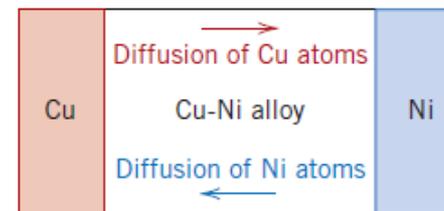
Figure 5-24 The steps in diffusion bonding: (a) Initially the contact area is small; (b) application of pressure deforms the surface, increasing the bonded area; (c) grain boundary diffusion permits voids to shrink; and (d) final elimination of the voids requires volume diffusion.

Exemplo

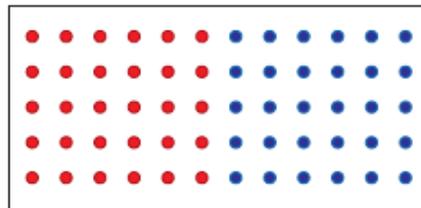
- Par de difusão



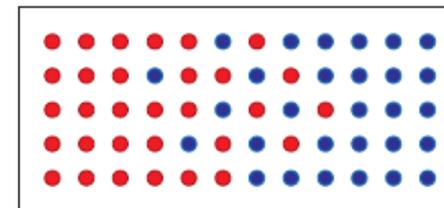
(a)



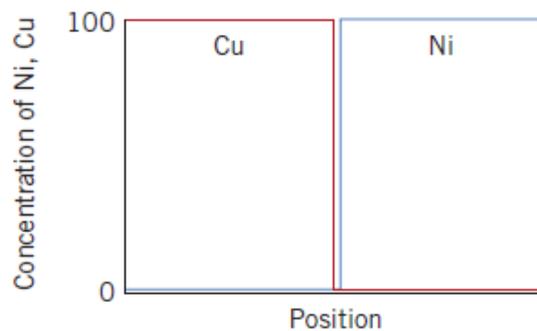
(a)



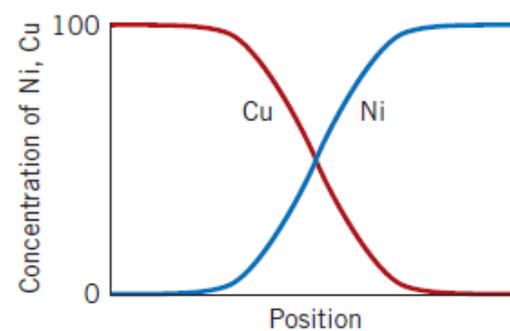
(b)



(b)



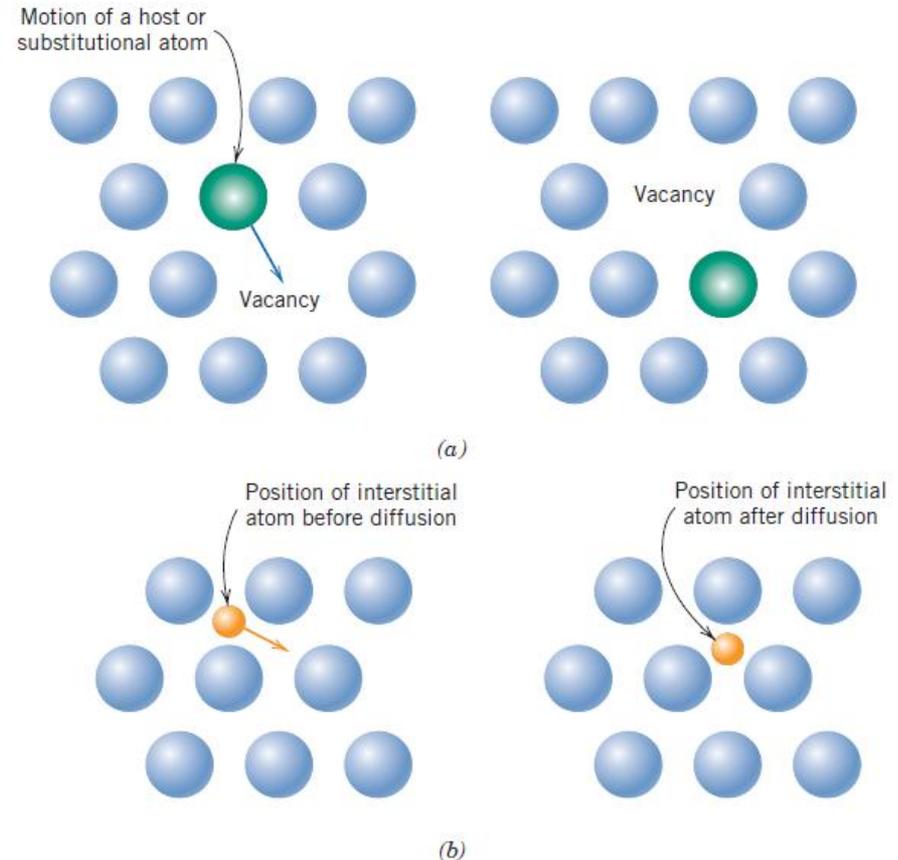
(c)



(c)

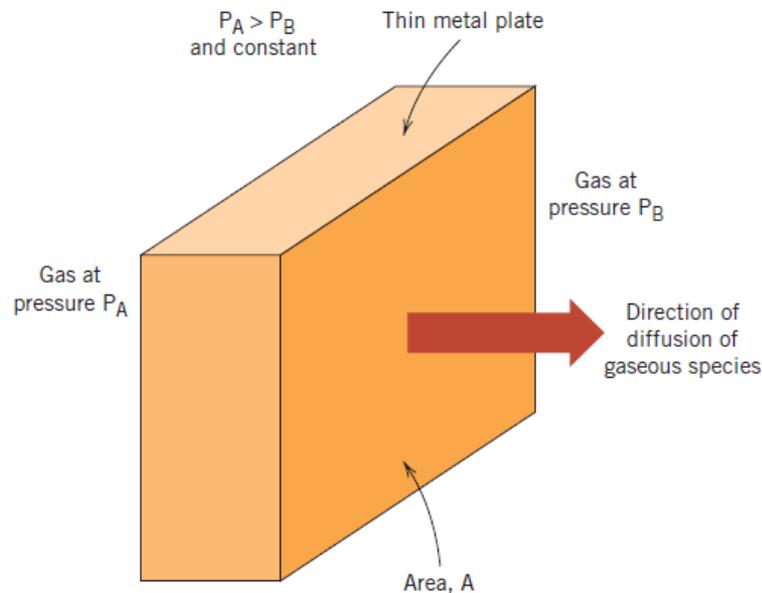
Mecanismos de difusão

- Ponto de vista atômico: Movimento de átomos em etapas
- Átomos estão em movimento constante
- Condições
 - Sítio adjacente vazio
 - Energia suficiente
- Energia Vibracional: depende da temperatura
- Dois mecanismos principais
 - Por lacunas (impureza ou autodifusão)
 - Intersticial (mais rápida)

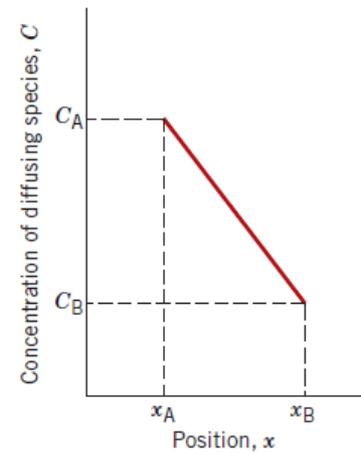


Difusão em estado estacionário

- Taxa de transporte de massa \rightarrow constante
- Ex: Gás através de uma placa (purificação do hidrogênio - paládio)



(a)



(b)

Difusão em estado estacionário

- Força motriz -> gradiente de concentração (potencial químico)
- Primeira lei de Fick (considera o contínuo)

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

J = fluxo de massa [kg/(m²s) ou átomos/(m²s)]

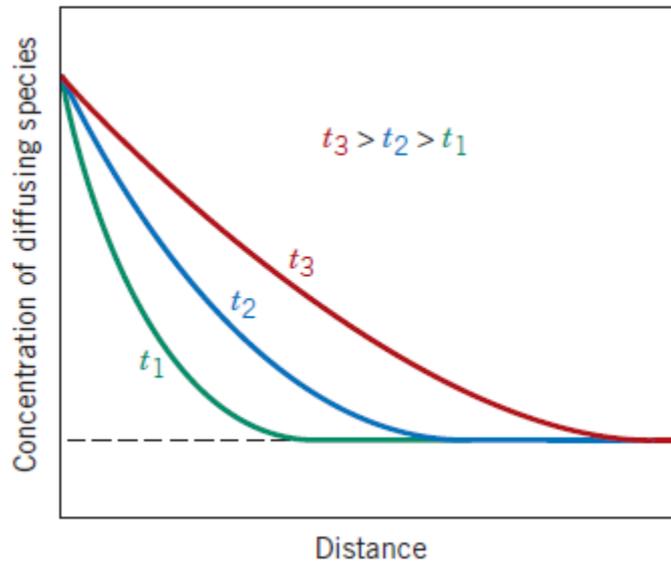
D = coeficiente de difusão [m²/s]

C = concentração [kg/m³ ou átomos/m³]

E a auto difusão???

Difusão em regime transiente

- Maioria dos casos práticos
- Acumulo de massa



Segunda Lei de Fick

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

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

Difusão em regime transiente

- Uma solução (sólido semi-infinito)

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

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

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

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

Table 5.1 Tabulation of Error Function Values

z	$\operatorname{erf}(z)$	z	$\operatorname{erf}(z)$	z	$\operatorname{erf}(z)$
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

Difusão em regime transiente

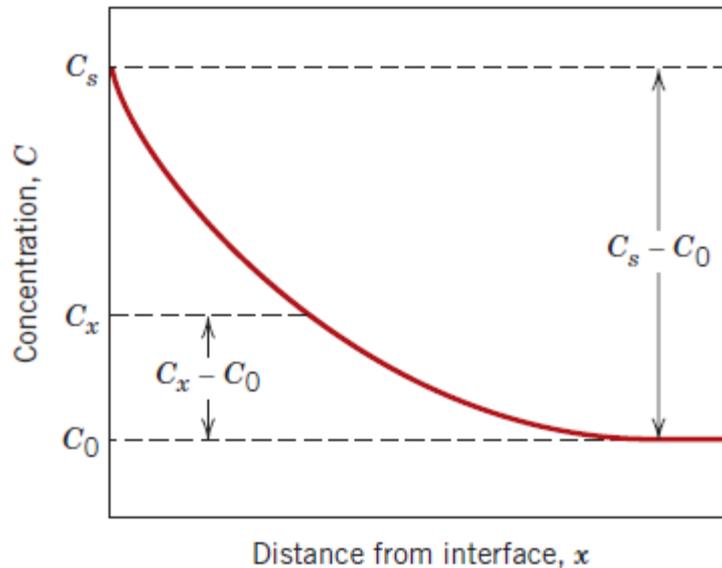
- Uma solução (sólido semi-infinito)

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

$$\frac{C_1 - C_0}{C_s - C_0} = \text{constant}$$

$$\frac{x}{2\sqrt{Dt}} = \text{constant}$$

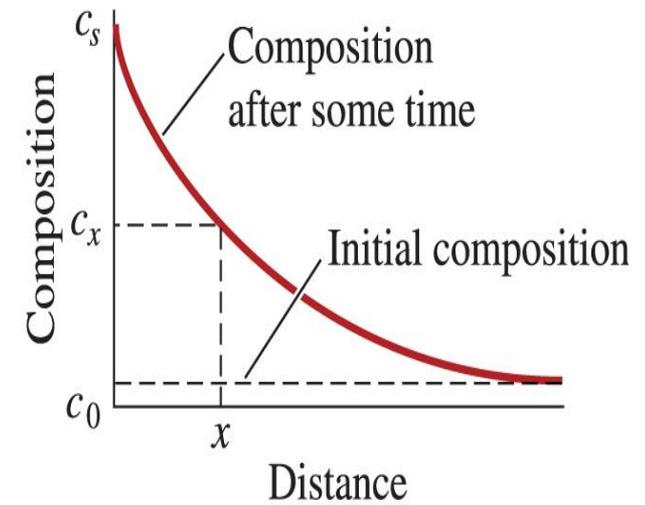
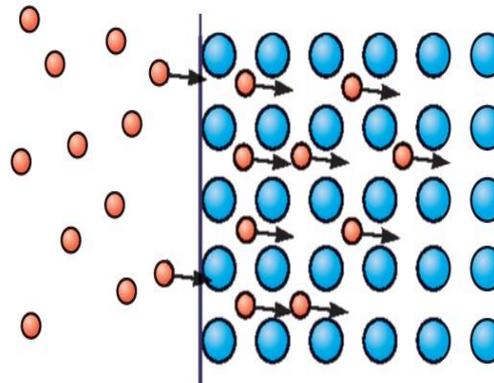
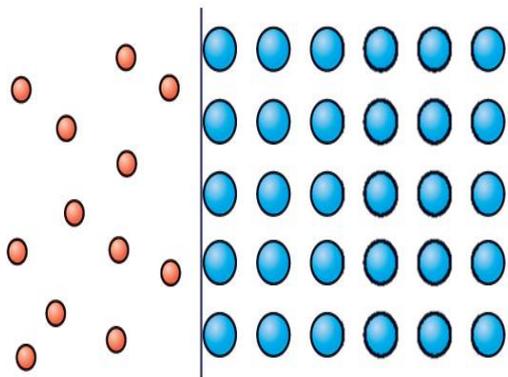
$$\frac{x^2}{Dt} = \text{constant}$$



Fenômeno proporcional a

$$\sqrt{Dt}$$

Difusão em regime transiente



Fatores que influencia a Difusão

- D - > indicativo da taxa de difusão (depende do átomo difundido e da rede em que difunde)

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	$eV/atom$	$T(^{\circ}C)$	$D(m^2/s)$
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^{-10}
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.

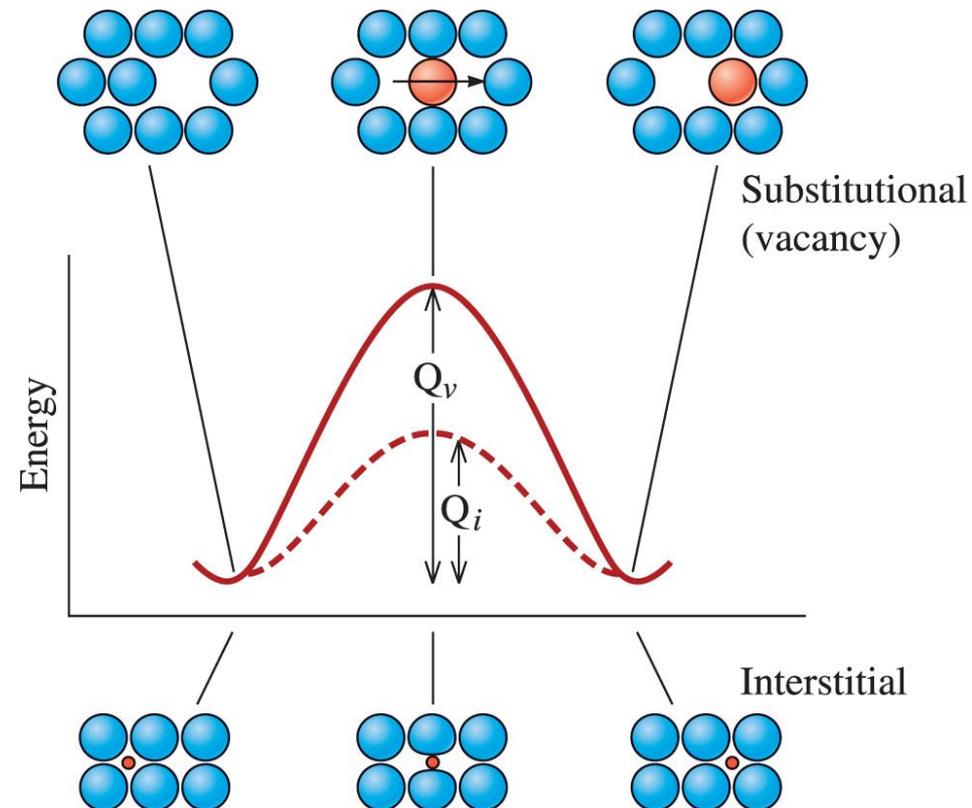


Fatores que influencia a Difusão

- Temperatura (vibração, lacunas)

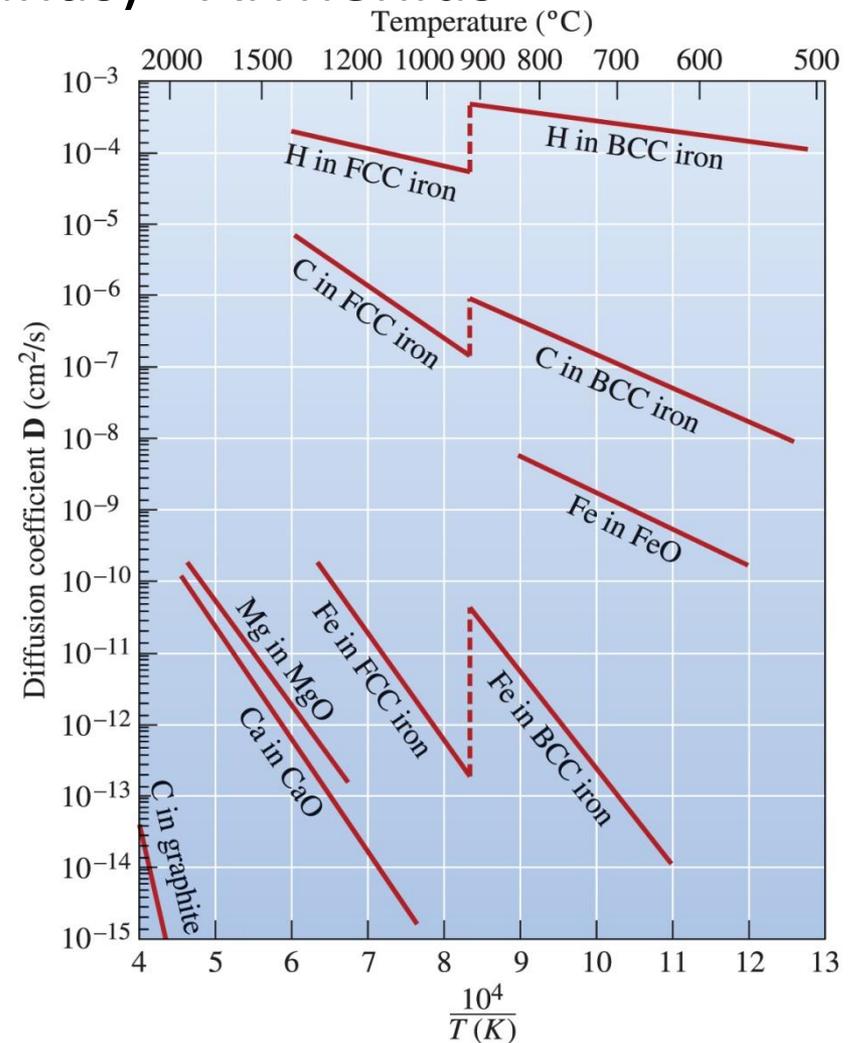
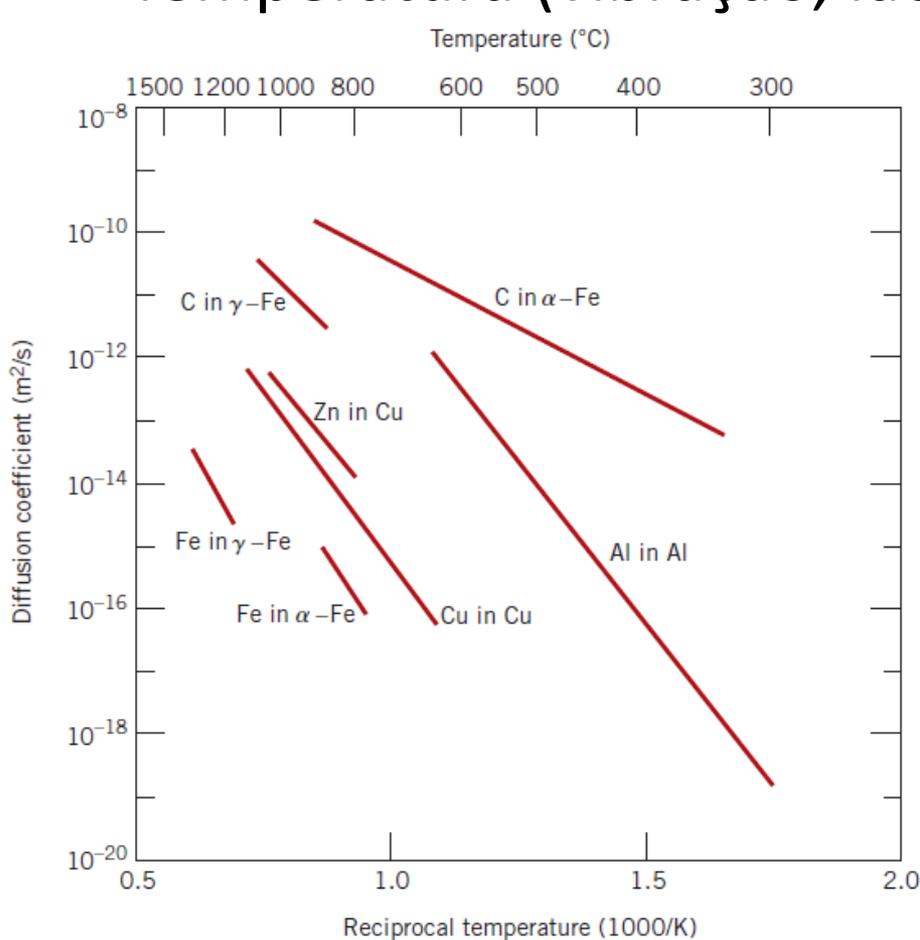
$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q_d}{RT}\right)$$

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



Fatores que influencia a Difusão

- Temperatura (vibração, lacunas) - Arrhenius



Fatores que influencia a Difusão

- Outros fatores
 - Discordâncias
 - Contornos de grão
 - Superfície
- Normalmente insignificante pela área reduzida

Caso: conexão de Al em circuitos integrados

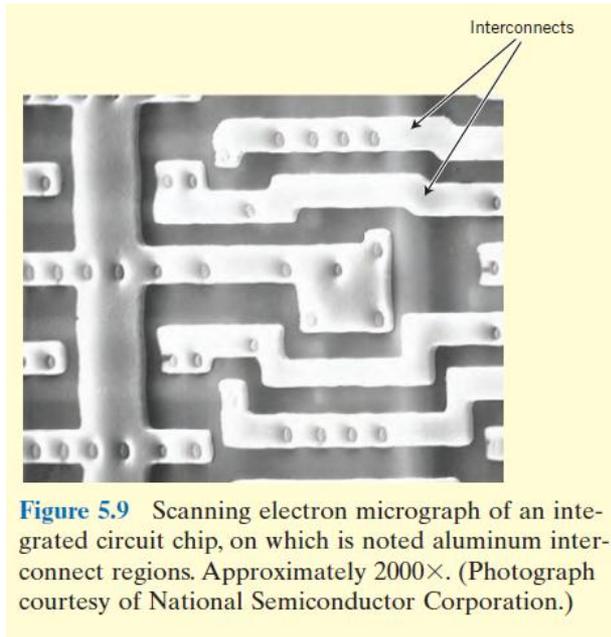


Figure 5.9 Scanning electron micrograph of an integrated circuit chip, on which is noted aluminum interconnect regions. Approximately 2000 \times . (Photograph courtesy of National Semiconductor Corporation.)

Table 5.3 Room-Temperature Electrical Conductivity Values for Silver, Copper, Gold, and Aluminum (the Four Most Conductive Metals)

Metal	Electrical Conductivity [(ohm-meters) ⁻¹]
Silver	6.8×10^7
Copper	6.0×10^7
Gold	4.3×10^7
Aluminum	3.8×10^7

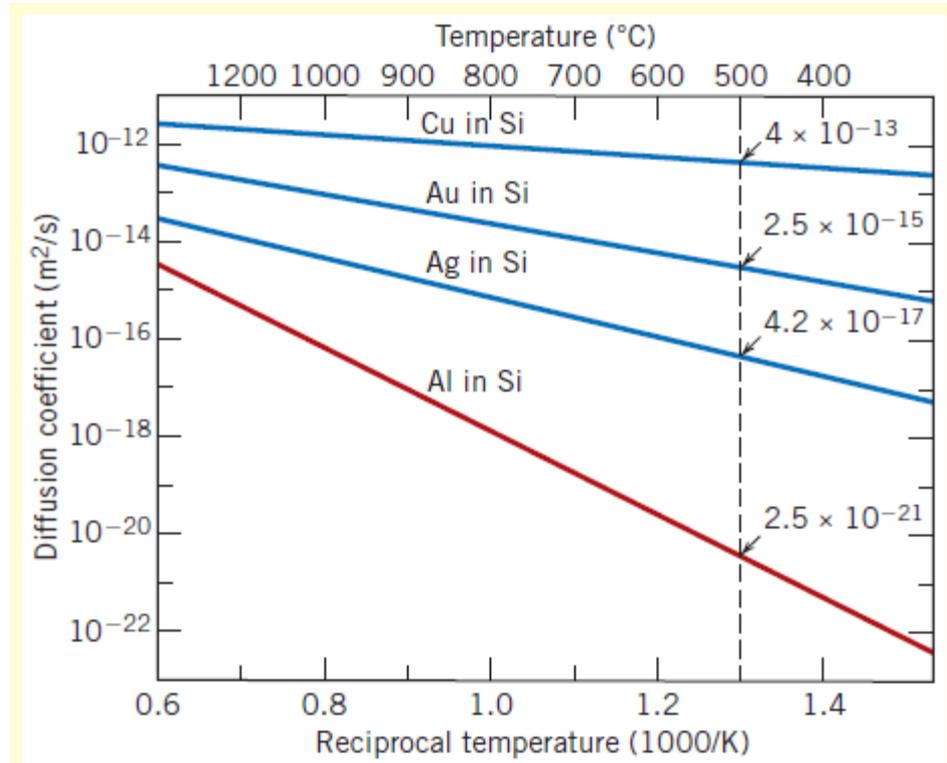


Figure 5.10 Logarithm of D -versus- $1/T$ (K) curves (lines) for the diffusion of copper, gold, silver, and aluminum in silicon. Also noted are D values at 500 $^{\circ}\text{C}$.

É importante lembrar

- **Primeira Lei de Fick**
- **Segunda Lei de Fick**
- **Fatores**
 - **Átomo e rede**
 - **Temperatura**
 - **Caminhos de difusão**

$$\sqrt{Dt}$$