



Τμήμα Μηχανολόγων  
Μηχανικών

Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

# Τεχνολογία Υλικών Ι

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών  
Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

**Δρ. Σκλήρη Ευαγγελία**

# Διάχυση στα Στερεά

## Γιατί μελετάμε τη διάχυση

Πολλά υλικά βελτιώνουν τις ιδιότητές τους μέσω θερμικών κατεργασιών.

Οι περισσότερες θερμικές κατεργασίες βασίζονται στη διάχυση ατόμων μέσα στο στερεό.

Η διάχυση καθορίζει:

- την ταχύτητα μεταφοράς μάζας

- την κατανομή στοιχείων μέσα στο υλικό.

Παράδειγμα εφαρμογής:

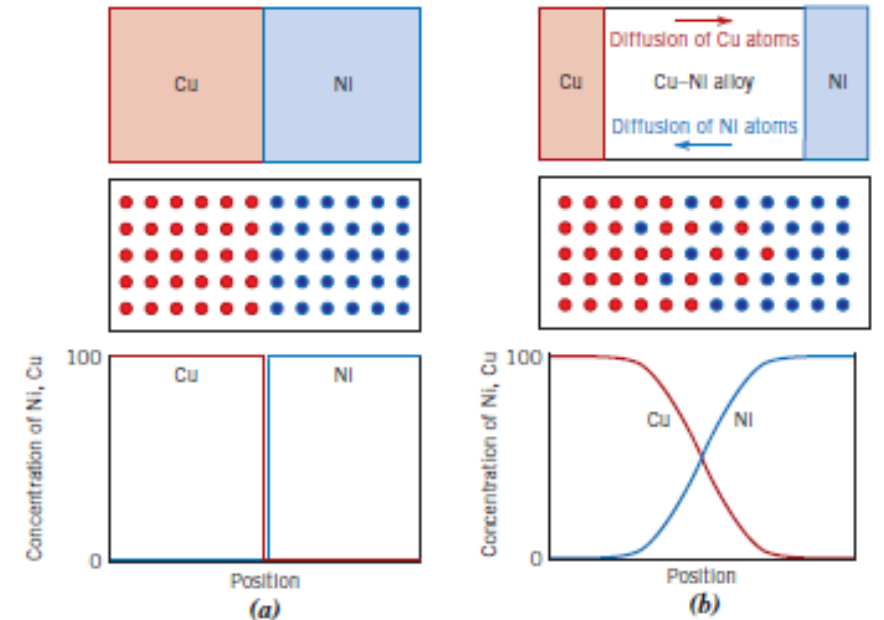
Εμπλουτισμός επιφάνειας χάλυβα με άνθρακα (C) ή άζωτο (N) για αύξηση σκληρότητας.

# Διάχυση στα Στερεά

- Η διάχυση είναι η μετακίνηση ατόμων μέσα σε ένα υλικό.
- Οφείλεται στη θερμική ενέργεια των ατόμων.

Η θερμική ενέργεια στα μέταλλα είναι η ενέργεια που προκαλεί τις ταλαντώσεις των ατόμων στο κρυσταλλικό πλέγμα και αυξάνεται με τη θερμοκρασία, διευκολύνοντας φαινόμενα όπως η διάχυση.

- Τα άτομα μετακινούνται συνήθως από: περιοχές υψηλής συγκέντρωσης → περιοχές χαμηλής συγκέντρωσης
- Το φαινόμενο αυτό οδηγεί σε εξισορρόπηση της συγκέντρωσης.



**Figure 5.1** Comparison of a copper–nickel diffusion couple (a) before and (b) after a high-temperature heat treatment. The three diagrams for both parts (a) and (b) represent the following: top—nature of the diffusion couple; center—schematic representations of the distributions of Cu (red circles) and Ni (blue circles) atom positions within the couple; and bottom—concentrations of copper and nickel as a function of position across the couple.

# Διάχυση στα Στερεά

❑ Ενώνουμε δύο μέταλλα:  
καθαρός χαλκός (Cu)  
καθαρό νικέλιο (Ni)

❑ Μετά από θέρμανση (σε θερμοκρασία χαμηλότερη από την θερμοκρασία τήξης) τότε:

άτομα Cu διαχέονται στο Ni

άτομα Ni διαχέονται στο Cu

Αρχικά:

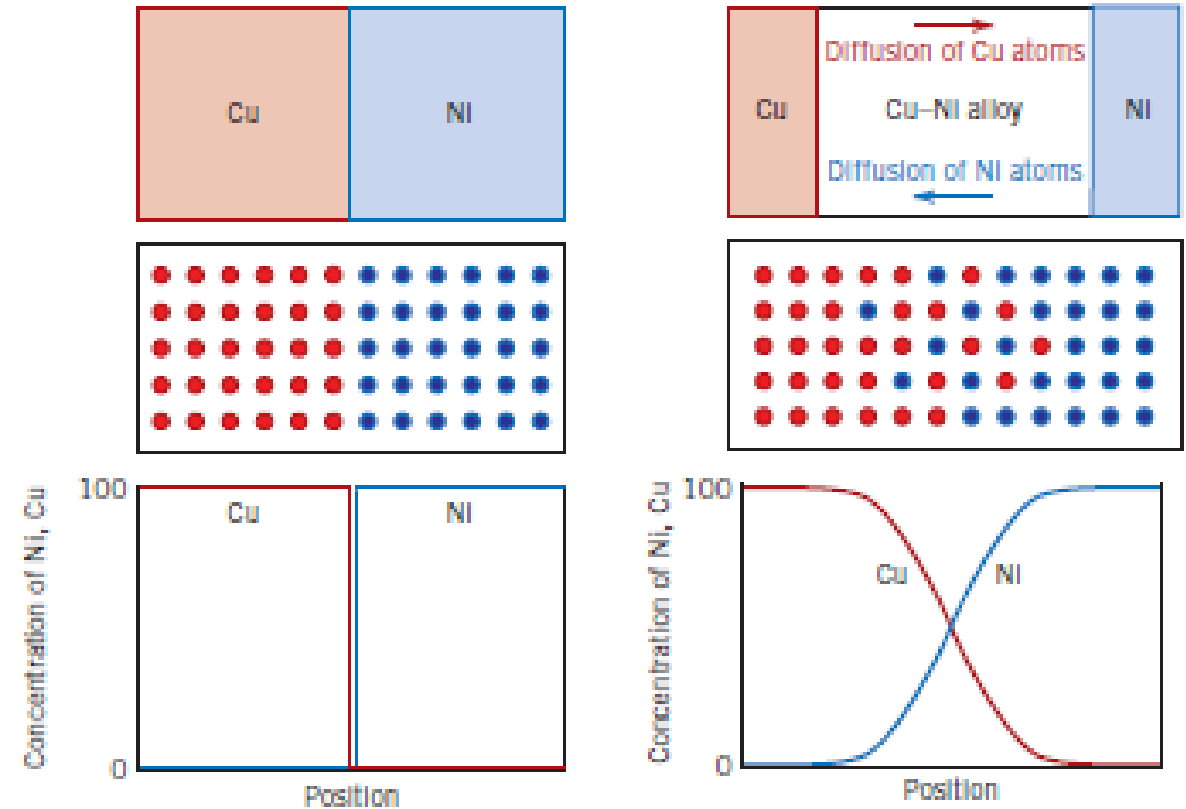
**υπάρχει απότομη μεταβολή συγκέντρωσης στο όριο.**

Τελικά:

**δημιουργείται ομαλή κατανομή συγκέντρωσης.**

❑ Η διαδικασία διάχυσης ατόμων ενός μετάλλου μέσα σε ένα άλλο άτομο αποκαλείται **αλληλοδιάχυση ή διάχυση προσμίξεων.**

❑ Αυτοδιάχυση: είναι η μετακίνηση ατόμων ενός στοιχείου μέσα στο δικό του κρυσταλλικό πλέγμα.



# Μηχανισμοί Διάχυσης

☐ Η διάχυση σε στερεά γίνεται με **διαδοχικές μετακινήσεις ατόμων** σε θέσεις πλέγματος.

Για να μετακινηθεί ένα άτομο χρειάζονται:

- **Κενή γειτονική θέση**
- **Επαρκής ενέργεια για μετακίνηση**

Η θερμοκρασία αυξάνει:

- τη δόνηση των ατόμων
- την πιθανότητα μετακίνησης.

☐ Τα πιο επικρατέστερα μοντέλα για την περιγραφή της διάχυσης με όρους ατομικών μετακινήσεων είναι :

- **Διάχυση οπών**
- **Διάχυση παρεμβολής**

# Μηχανισμοί Διάχυσης

## □ Διάχυση μέσω κενών (Vacancy diffusion)

- ένα άτομο μετακινείται σε κενή θέση πλέγματος (vacancy).

Χαρακτηριστικά:

- συνηθισμένος μηχανισμός σε μέταλλα
- απαιτεί ύπαρξη κενών θέσεων

ισχύει για:

αυτοδιάχυση

διάχυση υποκατάστατων ατόμων

Motion of a host or  
substitutional atom



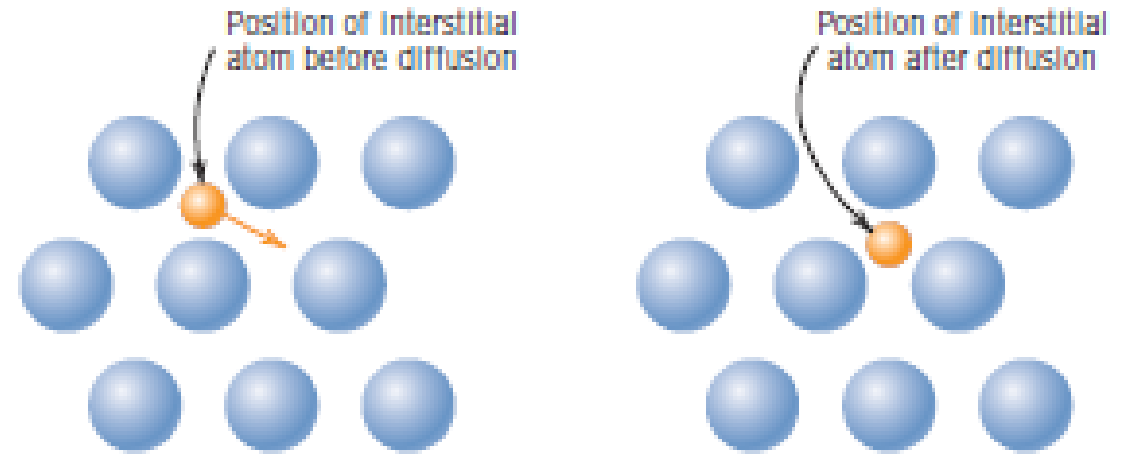
## □ Διάχυση μέσω ενδοπλεγματικών θέσεων

- μικρά άτομα μετακινούνται μεταξύ ενδοπλεγματικών θέσεων.

Παραδείγματα ατόμων:

H,C,N, O

- Η διάχυση μέσω ενδοπλεγματικών θέσεων γίνεται πολύ ταχύτερα από τη διάχυση μέσω κενών επειδή τα άτομα είναι μικρά και υπάρχουν πολλές ενδοπλεγματικές θέσεις.



# Πρώτος Νόμος του Fick – Διάχυση Σταθερής Κατάστασης

## □ Ροή διάχυσης

Η **ροή διάχυσης (diffusion flux)** δείχνει:

πόση μάζα περνά από μια επιφάνεια ανά μονάδα χρόνου δηλαδή πόσο γρήγορα πραγματοποιείται η διάχυση

Ορίζεται ως:

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

όπου:

**J** = ροή διάχυσης ( $\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$  ή  $\text{atoms}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$ )

**M** = ποσότητα που διαχέεται

**A** = επιφάνεια

**t** = χρόνος

# Πρώτος Νόμος του Fick – Διάχυση Σταθερής Κατάστασης

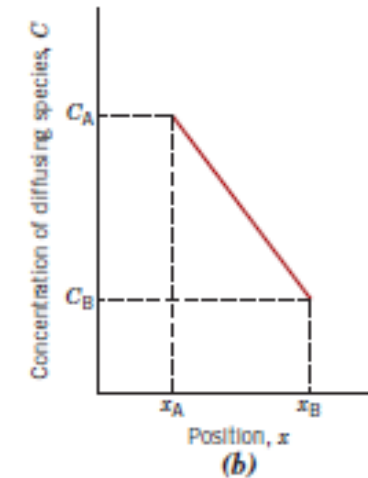
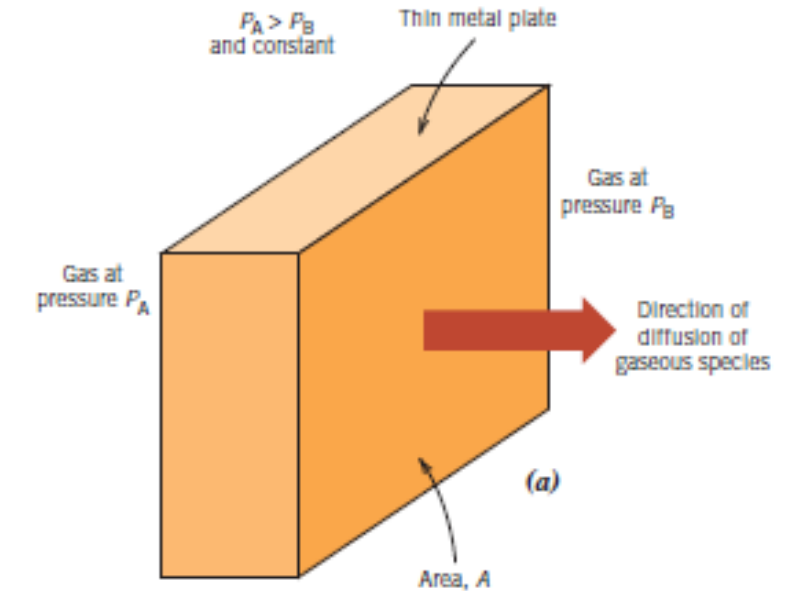
Το μαθηματικό υπόβαθρο για την διάχυση σταθερής κατάστασης προς μία μόνο διεύθυνση (έστω  $x$ )

□ Η ροή διάχυσης είναι ανάλογη της **κλίσης συγκέντρωσης**.

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

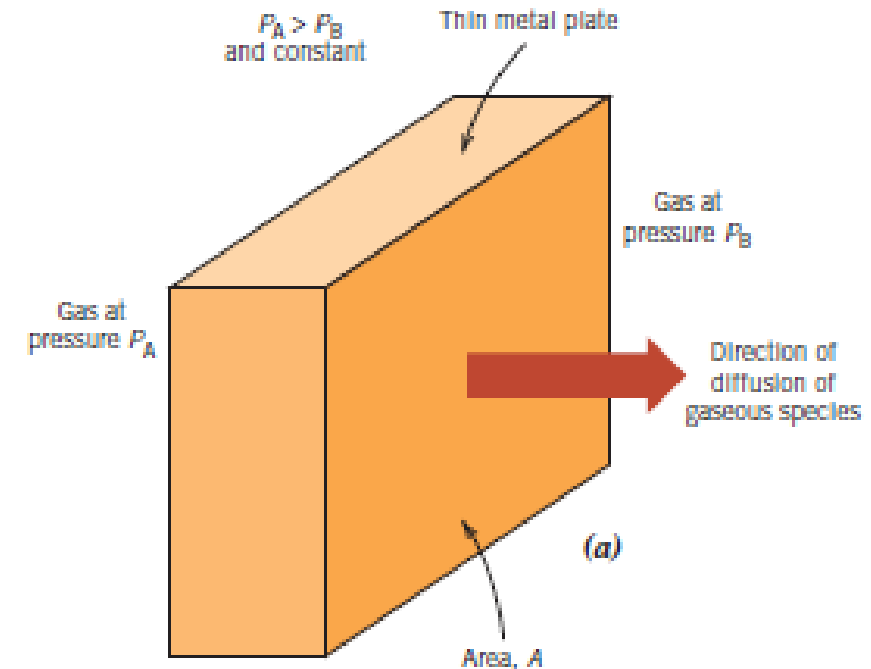
όπου:

- $D$  = συντελεστής διάχυσης
- $dC/dx$  = βαθμίδα συγκέντρωσης
- Το **αρνητικό πρόσημο** δείχνει ότι η διάχυση γίνεται από την υψηλή συγκέντρωση στην χαμηλή συγκέντρωση.



# Πρώτος Νόμος του Fick – Διάχυση Σταθερής Κατάστασης

- Το παράδειγμα δείχνει διάχυση αερίου σταθερής κατάστασης μέσα από μια λεπτή μεταλλική πλάκα.
- Η πλάκα χωρίζει δύο περιοχές όπου υπάρχει διαφορετική πίεση ή συγκέντρωση ενός αερίου ( $P_A > P_B$ ).
- Τα άτομα ή μόρια του αερίου διαχέονται μέσα από το μέταλλο.
- Η διάχυση γίνεται από την πλευρά υψηλής συγκέντρωσης → προς την πλευρά χαμηλής συγκέντρωσης.
- Διάχυση σταθερής κατάστασης  
Μετά από κάποιο χρόνο:  
η ροή διάχυσης γίνεται σταθερή  
η ποσότητα αερίου που μπαίνει από τη μία πλευρά είναι ίση με την ποσότητα που βγαίνει από την άλλη.
- Η **κινητήρια δύναμη (driving force)** είναι ο παράγοντας που προκαλεί και κατευθύνει μια διεργασία.



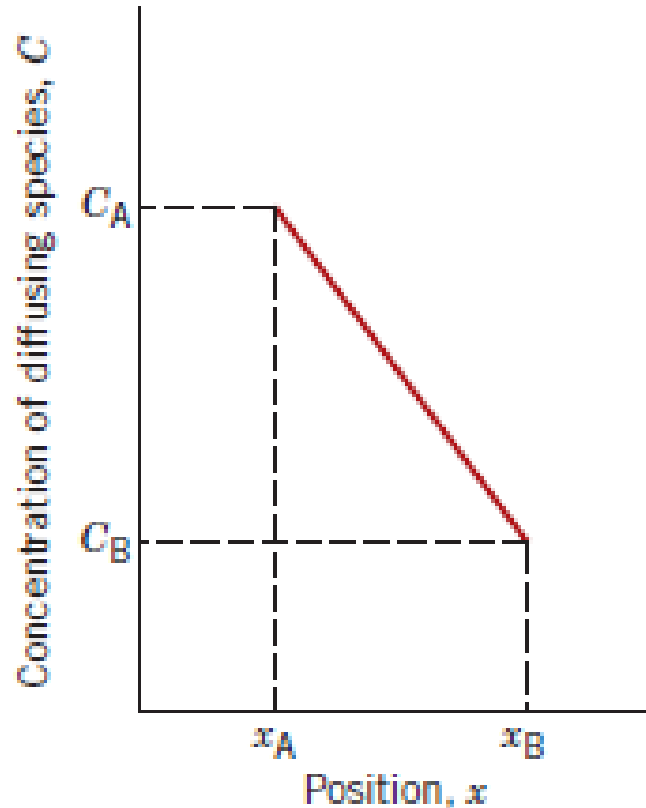
# Πρώτος Νόμος του Fick – Διάχυση Σταθερής Κατάστασης

- Η γραφική παράσταση της συγκέντρωσης  $C$  ως συνάρτηση της θέσης  $x$  εντός ενός στερεού (απόσταση από την επιφάνεια), υποδεικνύει την κατανομή του διαχεόμενου είδους και αναφέρεται ως **προφίλ συγκέντρωσης**.
- Η κλίση σε οποιοδήποτε σημείο αντιστοιχεί στην **βαθμίδα συγκέντρωσης**

$$\frac{dC}{dx} = \frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_A - C_B}{x_A - x_B}$$

$C_A$  → συγκέντρωση στο σημείο  $x_A$  πλευρά A.

$C_B$  → συγκέντρωση στο σημείο  $x_B$  πλευρά B



Η κόκκινη ευθεία δείχνει ότι:  
η συγκέντρωση μειώνεται γραμμικά από  $C_A$  προς  $C_B$ .

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

Στις περισσότερες πραγματικές περιπτώσεις διάχυσης:

- η συγκέντρωση μεταβάλλεται με τον χρόνο
- η ροή διάχυσης δεν είναι σταθερή

Αυτό σημαίνει ότι η συγκέντρωση ενός στοιχείου μέσα σε ένα στερεό αλλάζει συνεχώς με το βάθος και τον χρόνο.

Η διάχυση μη σταθερής κατάστασης περιγράφεται από τον **2ο νόμο του Fick**:

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

όπου:

**C** → συγκέντρωση

**t** → χρόνος

**x** → θέση στο υλικό

**D** → συντελεστής διάχυσης

Η εξίσωση δείχνει ότι η μεταβολή της συγκέντρωσης με τον χρόνο εξαρτάται από τη χωρική μεταβολή της συγκέντρωσης.

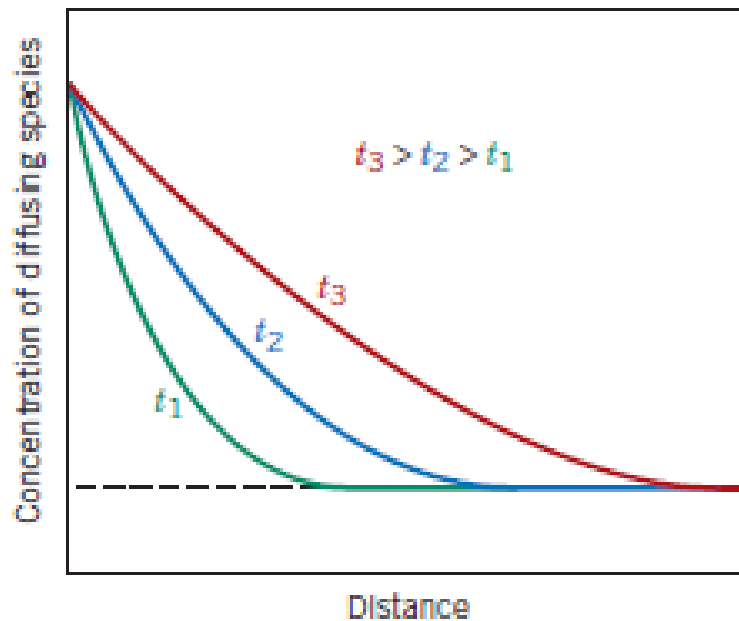
Αν ο συντελεστής διάχυσης δεν εξαρτάται από τη συγκέντρωση, η εξίσωση γίνεται:

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

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

□ Ο 2ος νόμος του Fick περιγράφει:

- πώς αλλάζει η συγκέντρωση ενός στοιχείου μέσα σε ένα υλικό με το πέρασμα του χρόνου.
- δείχνει πώς εξελίσσεται η διάχυση μέσα στο υλικό.
- Στη μη σταθερή διάχυση η κατανομή συγκέντρωσης μεταβάλλεται συνεχώς.



- Καθώς ο χρόνος αυξάνεται το στοιχείο που διαχέεται εισχωρεί βαθύτερα στο υλικό.
- Η συγκέντρωση μεταβάλλεται σε μεγαλύτερη απόσταση από την επιφάνεια δηλαδή η διάχυση προχωρά προς το εσωτερικό του στερεού.
- Η διακεκομμένη γραμμή δείχνει τη συγκέντρωση στο εσωτερικό του υλικού πριν αρχίσει η διάχυση (αρχική συγκέντρωση  $C_0$ ).

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

## □ Περίπτωση ημι-άπειρου στερεού

Υποθέσεις:

- Πριν τη διάχυση η συγκέντρωση είναι **ομοιόμορφη ( $C_0$ )**.
- Στην επιφάνεια η συγκέντρωση **κρατιέται σταθερή ( $C_s$ )**.
- Το  $x = 0$  είναι η επιφάνεια του στερεού.
- Το  $x$  αυξάνεται προς το εσωτερικό.

**Αρχική συνθήκη**

$$C = C_0 \text{ για } t = 0$$

**Οριακές συνθήκες**

$$C = C_s \text{ στην επιφάνεια } (x = 0)$$

$$C = C_0 \text{ σε μεγάλο βάθος } (x \rightarrow \infty)$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

## □ Περίπτωση ημι-άπειρου στερεού

Με αυτές τις συνθήκες η λύση του 2ου νόμου του Fick είναι:

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

όπου:

**C<sub>x</sub>** είναι η συγκέντρωση σε βάθος *x*

**C<sub>s</sub>** είναι η συγκέντρωση στην επιφάνεια

**C<sub>0</sub>** είναι η αρχική συγκέντρωση

**x** είναι το βάθος

**t** είναι ο χρόνος

**D** είναι ο συντελεστής διάχυσης

Η συνάρτηση **erf** είναι η **error function**.

Ορίζεται ως:

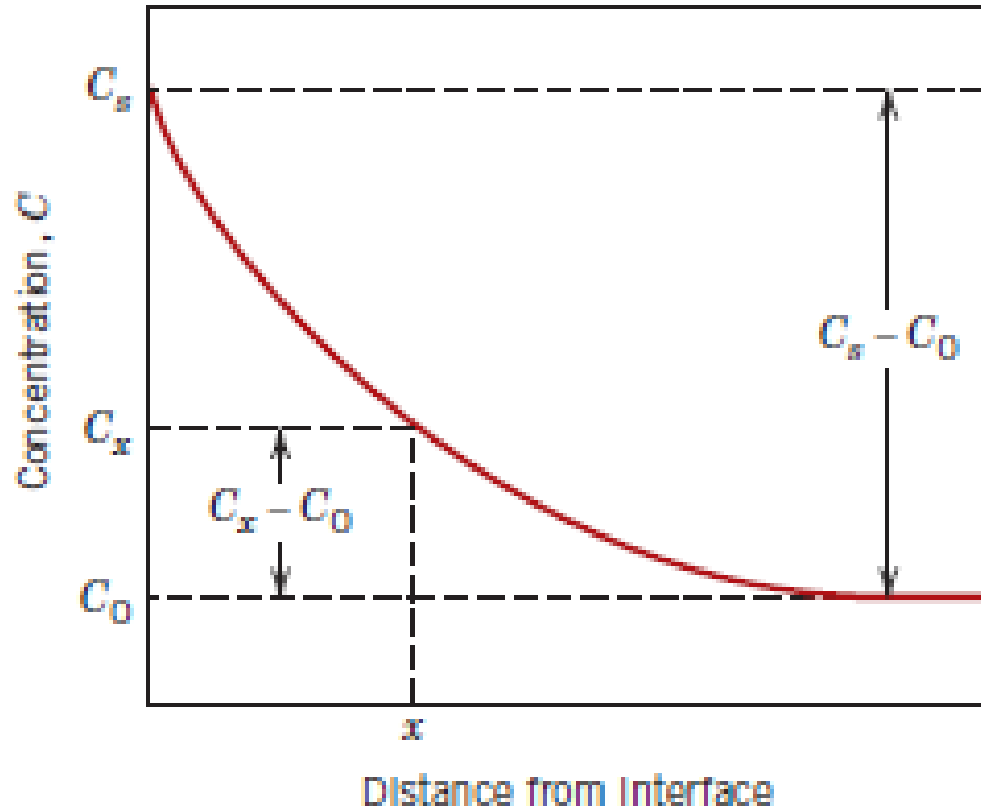
$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy$$

Επειδή το ολοκλήρωμα αυτό δεν λύνεται αναλυτικά:  
οι τιμές του βρίσκονται από **πίνακες erf(z)**.

<i>z</i>	<i>erf(z)</i>	<i>z</i>	<i>erf(z)</i>	<i>z</i>	<i>erf(z)</i>
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

$$\frac{z - z_1}{z_2 - z_1} = \frac{\operatorname{erf}(z) - \operatorname{erf}(z_1)}{\operatorname{erf}(z_2) - \operatorname{erf}(z_1)}$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης



- $C_s$  είναι η συγκέντρωση στην επιφάνεια του στερεού. παραμένει σταθερή κατά τη διάρκεια της διάχυσης.
- $C_0$  είναι η αρχική συγκέντρωση στο εσωτερικό του υλικού πριν αρχίσει η διάχυση.
- $C_x$  είναι η συγκέντρωση σε κάποιο βάθος  $x$  μέσα στο υλικό μετά από χρόνο  $t$ .

Η καμπύλη δείχνει πώς μειώνεται η συγκέντρωση όσο απομακρυνόμαστε από την επιφάνεια:

- κοντά στην επιφάνεια  $\rightarrow$  συγκέντρωση  $C_s$
- βαθύτερα στο υλικό  $\rightarrow$  συγκέντρωση πλησιάζει την  $C_0$

$C_s - C_0 \rightarrow$  η συνολική μεταβολή συγκέντρωσης μεταξύ επιφάνειας και εσωτερικού.

$C_x - C_0 \rightarrow$  η μεταβολή συγκέντρωσης σε συγκεκριμένο βάθος  $x$ .

# Διάχυση στα Στερεά

**Άσκηση:** Εξηγήστε σύντομα τη διαφορά μεταξύ αυτοδιάχυσης και αλληλοδιάχυσης.

**Απάντηση:**

Αυτοδιάχυση είναι η μετακίνηση ατόμων του ίδιου στοιχείου μέσα στο ίδιο υλικό.

Αλληλοδιάχυση είναι η μετακίνηση ατόμων διαφορετικών στοιχείων μεταξύ τους.

**Άσκηση:** (α) Συγκρίνετε τους μηχανισμούς διάχυσης μέσω παρεμβολής και διάχυσης οπών

(β) Αναφέρετε δύο λόγους για τους οποίους η ενδοπλεγματική διάχυση είναι συνήθως ταχύτερη από τη διάχυση μέσω κενών θέσεων.

**Απάντηση:**

(α) Διάχυση οπών: άτομα μετακινούνται σε κενές θέσεις του πλέγματος.

Ενδοπλεγματική διάχυση όταν μικρά άτομα μετακινούνται μεταξύ ενδοπλεγματικών θέσεων.

(β) Η ενδοπλεγματική διάχυση είναι ταχύτερη επειδή τα άτομα είναι μικρότερα και υπάρχουν περισσότερες διαθέσιμες ενδοπλεγματικές θέσεις.

# Πρώτος Νόμος του Fick – Διάχυση Σταθερής Κατάστασης

**Άσκηση:** Εξηγήστε εν συντομία την έννοια της σταθερής κατάστασης, όπως χρησιμοποιείται στην διάχυση.

**Απάντηση:**

Η σταθερή κατάσταση (steady-state) στη διάχυση είναι η κατάσταση κατά την οποία η ροή διάχυσης παραμένει σταθερή με τον χρόνο. Η συγκέντρωση σε κάθε σημείο του υλικού δεν μεταβάλλεται με το χρόνο αλλά αλλάζει με τη θέση στο υλικό.

**Άσκηση: (a)** Εξηγήστε σύντομα την έννοια της κινητήριας δύναμης (driving force).

**(b)** Ποια είναι η κινητήρια δύναμη για διάχυση σε σταθερή κατάσταση (steady-state diffusion);

Απάντηση:

(α) Η κινητήρια δύναμη (driving force) είναι ο παράγοντας που προκαλεί και κατευθύνει μια διεργασία ή μεταβολή σε ένα σύστημα.

(β) Η κινητήρια δύναμη για τη διάχυση σε σταθερή κατάσταση είναι η κλίση συγκέντρωσης (concentration gradient).

Δηλαδή η διαφορά συγκέντρωσης μεταξύ δύο περιοχών, η οποία προκαλεί τη μετακίνηση ατόμων από την περιοχή υψηλής συγκέντρωσης προς την περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης.

# Πρώτος Νόμος του Fick – Διάχυση Σταθερής Κατάστασης

**Άσκηση:** Ένα έλασμα σιδήρου εκτίθεται από τη μία πλευρά σε περιβάλλον ενανθράκωσης (πλούσιο σε άνθρακα) και από την άλλη πλευρά σε περιβάλλον απανθράκωσης (φτωχό σε άνθρακα, σε θερμοκρασία 700°C (1300°F)). Υποθέτοντας ότι έχει επιτευχθεί κατάσταση σταθερής διάχυσης (steady-state), να υπολογιστεί η ροή διάχυσης του άνθρακα στο έλασμα, εάν η συγκέντρωση άνθρακα σε θέσεις 5 mm και 10 mm ( $5 \cdot 10^{-3}$  m και  $10^{-2}$  m) από την επιφάνεια της πλευράς ενανθράκωσης είναι 1.2 και 0.8 kg/m<sup>3</sup>, αντίστοιχα. Να θεωρηθεί ότι ο συντελεστής διάχυσης σε αυτή τη θερμοκρασία είναι  $3 \cdot 10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s.

Απάντηση:

Εφόσον έχουμε διάχυση σταθερής κατάστασης, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον **πρώτο νόμο του Fick** για τον υπολογισμό της ροής διάχυσης.

$$J = -D \frac{C_A - C_B}{x_A - x_B} = -\left(3 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right) \frac{(1.2 - 0.8) \text{kg/m}^3}{(5 \cdot 10^{-3} - 10^{-2}) \text{m}} = 2.4 \cdot 10^{-9} \text{kg/m}^2 \text{s}$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

**Άσκηση:** Δίνεται τεμάχιο χάλυβα (Fe-C) που αρχικά έχει ομοιόμορφη συγκέντρωση άνθρακα 0.25 wt% και πρόκειται να κατεργαστεί στους 950°C (1750°F). Αν η συγκέντρωση άνθρακα στην επιφάνεια αυξηθεί ξαφνικά και διατηρηθεί στα 1.20 wt%, πόσος χρόνος θα χρειαστεί για να επιτευχθεί συγκέντρωση 0.80 wt% σε βάθος 0.50 mm από την επιφάνεια;

Ο συντελεστής διάχυσης του άνθρακα στον σίδηρο σε αυτή τη θερμοκρασία είναι:

$$D = 1.6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

Να θεωρηθεί ότι το στερεό είναι ημι-άπειρο.

**Απάντηση:**

Επειδή πρόκειται για μη σταθερή διάχυση (non-steady state) και η συγκέντρωση στην επιφάνεια παραμένει σταθερή, χρησιμοποιούμε τη λύση του **2ου νόμου του Fick**:

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

$$C_0 = 0.25 \text{ wt}\%$$

$$C_s = 1.20 \text{ wt}\%$$

$$C_x = 0.80 \text{ wt}\%$$

$$x = 0.50 \text{ mm} = 5 \times 10^{-4} \text{ m}$$

$$D = 1.6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

## Απάντηση:

Επειδή πρόκειται για **μη σταθερή διάχυση (non-steady state)** και η συγκέντρωση στην επιφάνεια παραμένει σταθερή, χρησιμοποιούμε τη λύση του **2ου νόμου του Fick**:

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

## Δεδομένα :

$$\begin{aligned}\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} &= \frac{0.80 - 0.25}{1.20 - 0.25} \\ &= \frac{0.55}{0.95} = 0.579\end{aligned}$$

## Άρα:

$$\begin{aligned}0.579 &= 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \\ \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) &= 0.421\end{aligned}$$

Από τον πίνακα:

$z$	$\operatorname{erf}(z)$
0.35	0.3794
$z$	0.4210
0.40	0.4284

$$\frac{z - 0.35}{0.40 - 0.35} = \frac{0.4210 - 0.3794}{0.4284 - 0.3794}$$
$$z = 0.392$$

Λύνουμε ως προς χρόνο:

$$\begin{aligned}z &= \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \\ 0.392 &= \frac{5 \times 10^{-4}}{2\sqrt{(1.6 \times 10^{-11})t}}\end{aligned}$$

$$\frac{62.5}{\sqrt{t}} = 0.392$$

$$t = \left(\frac{62.5}{0.392}\right)^2$$

$$t = 25\,400 \text{ s}$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

**Άσκηση:** Ένα κράμα σιδήρου–άνθρακα (FCC) που αρχικά περιέχει 0.35 wt% C εκτίθεται σε ατμόσφαιρα πλούσια σε οξυγόνο στους 1400 K (1127°C). Υπό αυτές τις συνθήκες, ο άνθρακας διαχέεται από το κράμα και αντιδρά στην επιφάνεια με το οξυγόνο της ατμόσφαιρας. Έτσι, η συγκέντρωση άνθρακα στην επιφάνεια διατηρείται ουσιαστικά 0 wt% C. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται απανθράκωση (decarburization). Να υπολογιστεί σε ποια απόσταση από την επιφάνεια η συγκέντρωση άνθρακα θα είναι 0.15 wt% μετά από 10 ώρες κατεργασίας. Δίνεται ότι ο συντελεστής διάχυσης στους 1400 K είναι:

$$D = 6.9 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

Απάντηση:

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = \frac{0.15 - 0.35}{0 - 0.35} = 0.5714 = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Δεδομένα:

$$C_0 = 0.35 \text{ wt}\%$$

$$C_s = 0$$

$$C_x = 0.15 \text{ wt}\%$$

$$t = 10 \text{ h} = 36000 \text{ s}$$

$$D = 6.9 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

Thus,

$$\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = 0.4286$$

Using data in Table 5.1 and linear interpolation

$z$	$\operatorname{erf}(z)$
0.40	0.4284
$z$	0.4286
0.45	0.4755

Εξίσωση 2<sup>ου</sup> νόμου Fick

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

$$\frac{z - 0.40}{0.45 - 0.40} = \frac{0.4286 - 0.4284}{0.4755 - 0.4284}$$

And,

$$z = 0.4002$$

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

Which means that

$$\frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 0.4002$$

And, finally

$$\begin{aligned}x &= 2(0.4002)\sqrt{Dt} = (0.8004)\sqrt{(6.9 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s})(3.6 \times 10^4 \text{ s})} \\ &= 1.26 \times 10^{-3} \text{ m} = 1.26 \text{ mm}\end{aligned}$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

❑ Ο ρυθμός διάχυσης των ατόμων σε ένα στερεό εξαρτάται κυρίως από:

- το είδος του ατόμου που διαχέεται
- το υλικό μέσα στο οποίο γίνεται η διάχυση
- τη θερμοκρασία

Η παράμετρος που εκφράζει την ταχύτητα διάχυσης είναι ο **συντελεστής διάχυσης (D)**.

Μεγαλύτερη τιμή του D σημαίνει ότι τα άτομα μετακινούνται γρηγορότερα μέσα στο υλικό.

❑ **Επίδραση του είδους του ατόμου (diffusing species)**

Ο συντελεστής διάχυσης εξαρτάται έντονα από το είδος του ατόμου που μετακινείται.

Παράδειγμα:

Η διάχυση άνθρακα στον σίδηρο είναι πολύ πιο γρήγορη από τη διάχυση σιδήρου στον ίδιο τον σίδηρο.

Αυτό συμβαίνει επειδή:

- ο άνθρακας διαχέεται ενδοπλεγματικά (interstitial diffusion)
- ο σίδηρος διαχέεται μέσω κενών (vacancy diffusion)

Η ενδοπλεγματική διάχυση είναι γενικά πολύ ταχύτερη.

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## ❑ Επίδραση θερμοκρασίας

Η θερμοκρασία επηρεάζει σημαντικά τον συντελεστή διάχυσης.

Όσο αυξάνεται η θερμοκρασία:

- αυξάνεται η κινητικότητα των ατόμων
- αυξάνεται πολύ γρήγορα ο συντελεστής διάχυσης

Παράδειγμα:

Η αυτοδιάχυση του Fe αυξάνεται περίπου κατά 6 τάξεις μεγέθους όταν η θερμοκρασία αυξηθεί από 500°C σε 900°C.

## ❑ Σχέση συντελεστή διάχυσης και θερμοκρασίας

Η εξάρτηση δίνεται από τη σχέση:

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}$$

όπου:

- $D_0$  είναι μια προεκθετική σταθερά ( $m^2/s$ ), ανεξάρτητη από την θερμοκρασία
- $Q_d$  είναι η ενέργεια ενεργοποίησης της διάχυσης ( $J/mol$  ή  $eV/άτομο$ )
- $R$  είναι η παγκόσμια σταθερά αερίων,  $8.31 J/mol \cdot K$  ή  $8.62 \cdot 10^{-5} eV/άτομο \cdot K$
- $T$  = απόλυτη θερμοκρασία (K)

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## □ Ενέργεια ενεργοποίησης διάχυσης

Η ενέργεια ενεργοποίησης ( $Q_d$ ) είναι η ενέργεια που χρειάζονται τα άτομα για να μετακινηθούν στο πλέγμα.

- Μεγάλη  $Q_d$  → δύσκολη διάχυση
- Μικρή  $Q_d$  → εύκολη διάχυση
- Μεγάλη ενέργεια ενεργοποίησης οδηγεί σε μικρό συντελεστή διάχυσης.

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}$$

<i>Diffusing Species</i>	<i>Host Metal</i>	$D_0$ ( $m^2/s$ )	$Q_d$ (J/mol)
<b>Interstitial Diffusion</b>			
$C^b$	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$1.1 \times 10^{-6}$	87,400
$C^c$	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$2.3 \times 10^{-5}$	148,000
$N^b$	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$5.0 \times 10^{-7}$	77,000
$N^c$	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$9.1 \times 10^{-5}$	168,000
<b>Self-Diffusion</b>			
$Fe^c$	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$2.8 \times 10^{-4}$	251,000
$Fe^c$	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$5.0 \times 10^{-5}$	284,000
$Cu^d$	Cu (FCC)	$2.5 \times 10^{-5}$	200,000
$Al^c$	Al (FCC)	$2.3 \times 10^{-4}$	144,000
$Mg^c$	Mg (HCP)	$1.5 \times 10^{-4}$	136,000
$Zn^c$	Zn (HCP)	$1.5 \times 10^{-5}$	94,000
$Mo^d$	Mo (BCC)	$1.8 \times 10^{-4}$	461,000
$Ni^d$	Ni (FCC)	$1.9 \times 10^{-4}$	285,000
<b>Interdiffusion (Vacancy)</b>			
$Zn^c$	Cu (FCC)	$2.4 \times 10^{-5}$	189,000
$Cu^c$	Zn (HCP)	$2.1 \times 10^{-4}$	124,000
$Cu^c$	Al (FCC)	$6.5 \times 10^{-5}$	136,000
$Mg^c$	Al (FCC)	$1.2 \times 10^{-4}$	130,000
$Cu^c$	Ni (FCC)	$2.7 \times 10^{-5}$	256,000
$Ni^d$	Cu (FCC)	$1.9 \times 10^{-4}$	230,000

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## □ Εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης από τη θερμοκρασία (Arrhenius)

Η διάχυση στα στερεά είναι **θερμικά ενεργοποιημένη διεργασία** και περιγράφεται από την εξίσωση Arrhenius.

Η εξάρτηση δίνεται από τη σχέση:

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}$$

όπου:

- $D_0$  είναι μια προεκθετική σταθερά ( $m^2/s$ ), ανεξάρτητη από την θερμοκρασία
- $Q_d$  είναι η ενέργεια ενεργοποίησης της διάχυσης ( $J/mol$  ή  $eV/άτομο$ )
- $R$  είναι η παγκόσμια σταθερά αερίων,  $8.31 J/mol \cdot K$  ή  $8.62 \cdot 10^{-5} eV/άτομο \cdot K$
- $T$  = απόλυτη θερμοκρασία (K)

## □ Μορφή με φυσικό λογάριθμο (ln)

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

Αν σχεδιάσουμε **ln D vs 1/T** παίρνουμε ευθεία γραμμή

- **κλίση (slope)** =  $-Q_d/R$
- **τομή (intercept)** =  $\ln D_0$

## □ Μορφή με δεκαδικό λογάριθμο (log)

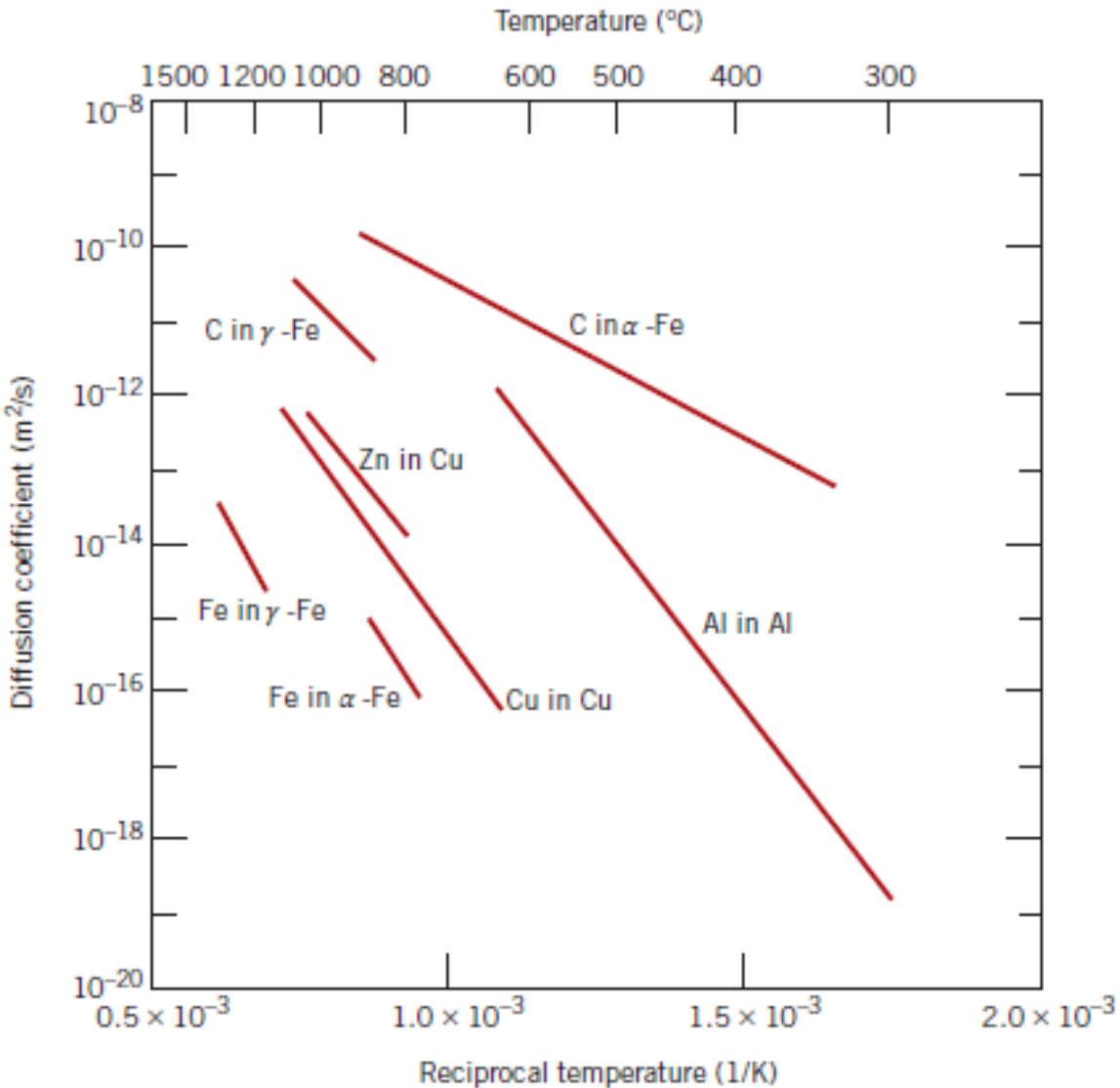
$$\log D = \log D_0 - \frac{Q_d}{2.3R} \left( \frac{1}{T} \right)$$

Αν σχεδιάσουμε **log D vs 1/T** παίρνουμε επίσης ευθεία γραμμή

- **κλίση (slope)** =  $-Q_d/2.3R$
- **τομή (intercept)** =  $\log D_0$

Άρα και οι δύο μορφές είναι ισοδύναμες, απλώς χρησιμοποιούν διαφορετική βάση λογαρίθμου.

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση



$$\log D = \log D_0 - \frac{Q_d}{2.3R} \left( \frac{1}{T} \right)$$

Όσο πιο ψηλά βρίσκεται μια γραμμή:

- τόσο μεγαλύτερος είναι ο συντελεστής διάχυσης
- τόσο πιο γρήγορη είναι η διάχυση

$\text{C in Fe} \rightarrow$  πολύ γρήγορη διάχυση

$\text{Fe in Fe} \rightarrow$  πολύ πιο αργή

$$\text{Κλίση} = -Q_d/2.3R$$

Άρα από την κλίση βρίσκουμε την ενέργεια ενεργοποίησης διάχυσης ( $Q_d$ ).

- μεγάλη κλίση  $\rightarrow$  μεγάλη ενέργεια ενεργοποίησης  $\rightarrow$  δυσκολότερη διάχυση
- μικρή κλίση  $\rightarrow$  ευκολότερη διάχυση

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Άσκηση:

Ταξινομήστε κατά φθίνουσα σειρά μέτρου, τους συντελεστές διάχυσης για τα ακόλουθα συστήματα υλικών:

N in Fe at 700°C

Cr in Fe at 700°C

N in Fe at 900°C

Cr in Fe at 900°C

Αιτιολογείστε την απάντησή σας. Η κρυσταλλική δομή των Fe και Cr είναι BCC. Η ατομική ακτίνα των Fe, Cr και N είναι 0.124, 0.125 και 0.065 nm, αντίστοιχα.

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Απάντηση:

Ο συντελεστής διάχυσης είναι

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}$$

Άρα όταν αυξάνεται η θερμοκρασία → αυξάνεται ο συντελεστής διάχυσης D.

Για το Cr:  $D(900^\circ\text{C}) > D(700^\circ\text{C})$

Για το N:  $D(900^\circ\text{C}) > D(700^\circ\text{C})$

Άζωτο (N)

ατομική ακτίνα: 0.065 nm

είναι πολύ μικρό → διαχέεται ενδοπλεγματικά → πολύ γρήγορη διάχυση.

Χρώμιο (Cr)

ατομική ακτίνα: 0.125 nm

ατομική ακτίνα Fe: 0.124 nm

άρα διαχέεται μέσω κενών θέσεων στο πλέγμα → πολύ πιο αργή διάχυση

$$\mathbf{N(900^\circ\text{C}) > N(700^\circ\text{C}) > Cr(900^\circ\text{C}) > Cr(700^\circ\text{C})}$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Άσκηση:

Σε ποια θερμοκρασία ο συντελεστής διάχυσης χαλκού σε νικέλιο έχει την τιμή  $6.5 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}$ ? Χρησιμοποιήστε τα δεδομένα του Πίνακα.

<i>Diffusing Species</i>	<i>Host Metal</i>	<i>D<sub>0</sub> (m<sup>2</sup>/s)</i>	<i>Q<sub>d</sub> (J/mol)</i>
<b>Interstitial Diffusion</b>			
C <sup>b</sup>	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$1.1 \times 10^{-6}$	87,400
C <sup>c</sup>	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$2.3 \times 10^{-5}$	148,000
N <sup>b</sup>	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$5.0 \times 10^{-7}$	77,000
N <sup>c</sup>	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$9.1 \times 10^{-5}$	168,000
<b>Self-Diffusion</b>			
Fe <sup>c</sup>	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$2.8 \times 10^{-4}$	251,000
Fe <sup>c</sup>	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$5.0 \times 10^{-5}$	284,000
Cu <sup>d</sup>	Cu (FCC)	$2.5 \times 10^{-5}$	200,000
Al <sup>c</sup>	Al (FCC)	$2.3 \times 10^{-4}$	144,000
Mg <sup>c</sup>	Mg (HCP)	$1.5 \times 10^{-4}$	136,000
Zn <sup>c</sup>	Zn (HCP)	$1.5 \times 10^{-5}$	94,000
Mo <sup>d</sup>	Mo (BCC)	$1.8 \times 10^{-4}$	461,000
Ni <sup>d</sup>	Ni (FCC)	$1.9 \times 10^{-4}$	285,000
<b>Interdiffusion (Vacancy)</b>			
Zn <sup>c</sup>	Cu (FCC)	$2.4 \times 10^{-5}$	189,000
Cu <sup>c</sup>	Zn (HCP)	$2.1 \times 10^{-4}$	124,000
Cu <sup>c</sup>	Al (FCC)	$6.5 \times 10^{-5}$	136,000
Mg <sup>c</sup>	Al (FCC)	$1.2 \times 10^{-4}$	130,000
Cu <sup>c</sup>	Ni (FCC)	$2.7 \times 10^{-5}$	256,000
Ni <sup>d</sup>	Cu (FCC)	$1.9 \times 10^{-4}$	230,000

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

Απάντηση:

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

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

and using the data from Table 5.2 for the diffusion of Cu in Ni (i.e.,  $D_0 = 2.7 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$  and  $Q_d = 256,000 \text{ J/mol}$ ), we get

$$T = - \frac{256,000 \text{ J/mol}}{(8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K}) \left[ \ln (6.5 \times 10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}) - \ln (2.7 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}) \right]}$$
$$= 1152 \text{ K} = 879^\circ\text{C}$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Άσκηση:

Δίνονται οι συντελεστές διάχυσης σιδήρου σε νικέλιο για δύο διαφορετικές θερμοκρασίες.

T(K)	D (m <sup>2</sup> /s)
1273	$9.4 \cdot 10^{-16}$
1473	$2.4 \cdot 10^{-14}$

(α) Υπολογίστε τις τιμές  $D_0$  και την ενέργεια ενεργοποίησης  $Q_d$ .

(β) Ποιο είναι το μέγεθος του D στους 1100°C?

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

**Απάντηση:**

(a)

$$\ln D_1 = \ln D_0 - \frac{Q_d}{R} \left( \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\ln D_2 = \ln D_0 - \frac{Q_d}{R} \left( \frac{1}{T_2} \right)$$

Now, solving for  $Q_d$  in terms of temperatures  $T_1$  and  $T_2$  (1273 K and 1473 K) and  $D_1$  and  $D_2$  ( $9.4 \times 10^{-16}$  and  $2.4 \times 10^{-14}$  m<sup>2</sup>/s), we get

$$Q_d = -R \frac{\ln D_1 - \ln D_2}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}$$

$$= - (8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K}) \frac{[\ln (9.4 \times 10^{-16}) - \ln (2.4 \times 10^{-14})]}{\frac{1}{1273 \text{ K}} - \frac{1}{1473 \text{ K}}}$$

$$= 252,400 \text{ J/mol}$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

Απάντηση:

(a)

$$D_0 = D_1 \exp\left(\frac{Q_d}{RT_1}\right)$$

$$= (9.4 \times 10^{-16} \text{ m}^2/\text{s}) \exp\left[\frac{252,400 \text{ J/mol}}{(8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K})(1273 \text{ K})}\right]$$

$$= 2.2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

(b) Using these values of  $D_0$  and  $Q_d$ ,  $D$  at 1373 K is just

$$D = (2.2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}) \exp\left[-\frac{252,400 \text{ J/mol}}{(8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K})(1373 \text{ K})}\right]$$

$$= 5.4 \times 10^{-15} \text{ m}^2/\text{s}$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Άσκηση:

Χρησιμοποιώντας δεδομένα από τον Πίνακα, υπολογίστε τον συντελεστή διάχυσης μαγνησίου σε αλουμίνιο, σε θερμοκρασία 550°C.

<i>Diffusing Species</i>	<i>Host Metal</i>	<i>D<sub>0</sub> (m<sup>2</sup>/s)</i>	<i>Q<sub>d</sub> (J/mol)</i>
<b>Interstitial Diffusion</b>			
C <sup>b</sup>	Fe (α or BCC) <sup>a</sup>	1.1 × 10 <sup>-6</sup>	87,400
C <sup>c</sup>	Fe (γ or FCC) <sup>a</sup>	2.3 × 10 <sup>-5</sup>	148,000
N <sup>b</sup>	Fe (α or BCC) <sup>a</sup>	5.0 × 10 <sup>-7</sup>	77,000
N <sup>c</sup>	Fe (γ or FCC) <sup>a</sup>	9.1 × 10 <sup>-5</sup>	168,000
<b>Self-Diffusion</b>			
Fe <sup>c</sup>	Fe (α or BCC) <sup>a</sup>	2.8 × 10 <sup>-4</sup>	251,000
Fe <sup>c</sup>	Fe (γ or FCC) <sup>a</sup>	5.0 × 10 <sup>-5</sup>	284,000
Cu <sup>d</sup>	Cu (FCC)	2.5 × 10 <sup>-5</sup>	200,000
Al <sup>c</sup>	Al (FCC)	2.3 × 10 <sup>-4</sup>	144,000
Mg <sup>c</sup>	Mg (HCP)	1.5 × 10 <sup>-4</sup>	136,000
Zn <sup>c</sup>	Zn (HCP)	1.5 × 10 <sup>-5</sup>	94,000
Mo <sup>d</sup>	Mo (BCC)	1.8 × 10 <sup>-4</sup>	461,000
Ni <sup>d</sup>	Ni (FCC)	1.9 × 10 <sup>-4</sup>	285,000
<b>Interdiffusion (Vacancy)</b>			
Zn <sup>c</sup>	Cu (FCC)	2.4 × 10 <sup>-5</sup>	189,000
Cu <sup>c</sup>	Zn (HCP)	2.1 × 10 <sup>-4</sup>	124,000
Cu <sup>c</sup>	Al (FCC)	6.5 × 10 <sup>-5</sup>	136,000
Mg <sup>c</sup>	Al (FCC)	1.2 × 10 <sup>-4</sup>	130,000
Cu <sup>c</sup>	Ni (FCC)	2.7 × 10 <sup>-5</sup>	256,000
Ni <sup>d</sup>	Cu (FCC)	1.9 × 10 <sup>-4</sup>	230,000

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Απάντηση:

Ο συντελεστής διάχυσης είναι

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}$$

Για το σύστημα μαγνησίου σε αλουμίνιο με βάση τον Πίνακα είναι:

$$D_0 = 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$Q_d = 131 \text{ KJ/mol}$$

$$\text{Άρα } D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}} = (1.2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}) \exp\left[-\frac{(130000 \frac{\text{J}}{\text{mol}})}{(8.31 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}})(550+273 \text{ K})}\right] = 6.7 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

## Άσκηση:

Ζητείται να βελτιωθεί η αντοχή στη φθορά ενός χαλύβδινου οδοντωτού τροχού, μέσω ισχυροποίησης της επιφάνειάς του. Για τον σκοπό αυτό θα χρησιμοποιηθεί ελεγχόμενη διάχυση, προκειμένου να αυξηθεί η περιεκτικότητα σε άνθρακα σε ένα επιφανειακό στρώμα του χάλυβα. Η διεργασία διάχυσης θα πραγματοποιηθεί σε ατμόσφαιρα εμπλουτισμένη με άνθρακα από αέρια πηγή σε υψηλή αλλά σταθερή θερμοκρασία. Η αρχική περιεκτικότητα του χάλυβα σε άνθρακα είναι 0.20 %κ.β., ενώ η επιφανειακή συγκέντρωση θα πρέπει να διατηρηθεί σταθερή σε 1.0 %κ.β. Για να είναι επιτυχής η διεργασία, θα πρέπει να επιτευχθεί περιεκτικότητα άνθρακα 0.60 %κ.β. σε βάθος 0.75 mm από την επιφάνεια του χάλυβα.

Προσδιορίστε τις κατάλληλες παραμέτρους (χρόνο και θερμοκρασία) για αυτή τη διεργασία, υπό την προϋπόθεση ότι πρέπει να διεξαχθεί στο θερμοκρασιακό εύρος μεταξύ 900°C και 1050°C, χρησιμοποιώντας τα δεδομένα διάχυσης του άνθρακα στο  $\gamma$ -Fe (Πίνακας 5.2).

$z$	$erf(z)$	$z$	$erf(z)$	$z$	$erf(z)$
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

<i>Diffusing Species</i>	<i>Host Metal</i>	$D_0$ ( $m^2/s$ )	$Q_d$ (J/mol)
<b>Interstitial Diffusion</b>			
C <sup>b</sup>	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$1.1 \times 10^{-6}$	87,400
C <sup>c</sup>	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$2.3 \times 10^{-5}$	148,000
N <sup>b</sup>	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$5.0 \times 10^{-7}$	77,000
N <sup>c</sup>	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$9.1 \times 10^{-5}$	168,000
<b>Self-Diffusion</b>			
Fe <sup>c</sup>	Fe ( $\alpha$ or BCC) <sup>a</sup>	$2.8 \times 10^{-4}$	251,000
Fe <sup>c</sup>	Fe ( $\gamma$ or FCC) <sup>a</sup>	$5.0 \times 10^{-5}$	284,000
Cu <sup>d</sup>	Cu (FCC)	$2.5 \times 10^{-5}$	200,000
Al <sup>c</sup>	Al (FCC)	$2.3 \times 10^{-4}$	144,000
Mg <sup>c</sup>	Mg (HCP)	$1.5 \times 10^{-4}$	136,000
Zn <sup>c</sup>	Zn (HCP)	$1.5 \times 10^{-5}$	94,000
Mo <sup>d</sup>	Mo (BCC)	$1.8 \times 10^{-4}$	461,000
Ni <sup>d</sup>	Ni (FCC)	$1.9 \times 10^{-4}$	285,000
<b>Interdiffusion (Vacancy)</b>			
Zn <sup>c</sup>	Cu (FCC)	$2.4 \times 10^{-5}$	189,000
Cu <sup>c</sup>	Zn (HCP)	$2.1 \times 10^{-4}$	124,000
Cu <sup>c</sup>	Al (FCC)	$6.5 \times 10^{-5}$	136,000
Mg <sup>c</sup>	Al (FCC)	$1.2 \times 10^{-4}$	130,000
Cu <sup>c</sup>	Ni (FCC)	$2.7 \times 10^{-5}$	256,000
Ni <sup>d</sup>	Cu (FCC)	$1.9 \times 10^{-4}$	230,000

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

**Απάντηση:**

Δεδομένα:

$$C_0 = 0.20\% \text{ κ.β.}$$

$$C_s = 1.00\% \text{ κ.β.}$$

$$C_x = 0.60\% \text{ κ.β. για } x = 0.75 \text{ mm}$$

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \rightarrow \frac{0.60 - 0.20}{1.00 - 0.20} = 1$$

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

$$\rightarrow 0.5 = 1 - \operatorname{erf}(z) \rightarrow \operatorname{erf}(z) = 0.5$$

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

$$\frac{z - 0.45}{0.50 - 0.45} = \frac{0.5 - 0.4755}{0.5205 - 0.4755}$$

$$z = 0.48$$

$$z = \frac{x}{\sqrt{Dt}}$$

άρα

$$0.48 = \frac{0.75 \times 10^{-3}}{2\sqrt{Dt}}$$

Λύνοντας:

$$\sqrt{Dt} = 7.8 \times 10^{-4} \text{ m}$$

$$D \cdot t = 6.24 \times 10^{-7} \text{ m}^2$$

# Παράγοντες που επηρεάζουν την διάχυση

Απάντηση:

Συντελεστής διάχυσης

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}$$

Για C in  $\gamma$ -Fe (από τον πίνακα):

$$D_0 = 2.3 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$Q_d = 148000 \text{ J/mol}$$

Άρα

$$D \cdot t = (D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}}) \cdot t = 6.24 \times 10^{-7} \text{ m}^2$$

$$(2.3 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}) \exp \left[ -\frac{148000 \text{ J/mol}}{\left(8.31 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}\right)(T)} \right] t = 6.24 \times 10^{-7} \text{ m}^2$$

$$t = \frac{0.0271}{\exp\left(-\frac{17810}{T}\right)}$$

<i>Temperature</i> (°C)	<i>Time</i>	
	<i>s</i>	<i>h</i>
900	106,400	29.6
950	57,200	15.9
1000	32,300	9.0
1050	19,000	5.3

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

## Άσκηση:

Για ένα κράμα χάλυβα έχει υπολογιστεί ότι η θερμική επεξεργασία σε περιβάλλον εμπλουτισμένο με άνθρακα για 10 ώρες αυξάνει τη συγκέντρωση άνθρακα σε 0.45% κ.β. σε ένα σημείο που απέχει 2.5 mm από την επιφάνεια.

Να εκτιμηθεί ο χρόνος που απαιτείται ώστε να επιτευχθεί η ίδια συγκέντρωση άνθρακα σε βάθος 5.0 mm σε ένα ίδιο κράμα χάλυβα και στην ίδια θερμοκρασία ενανθράκωσης.

# Δεύτερος Νόμος του Fick – Διάχυση Μη Σταθερής Κατάστασης

Απάντηση:

Εξίσωση 2<sup>ου</sup> νόμου Fick

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

Στην άσκηση ζητάει ίδια συγκέντρωση (0.45% κ.β. σε διαφορετικά βάθη και στη ίδια θερμοκρασία (άρα  $D$  ίδιο)

Οπότε  $\frac{x}{\sqrt{Dt}} = \text{σταθερό}$

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

But since the temperature is constant, so also is  $D$  constant, and

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

or

$$\frac{x_1^2}{t_1} = \frac{x_2^2}{t_2}$$

Thus,

$$\frac{(2.5 \text{ mm})^2}{10 \text{ h}} = \frac{(5.0 \text{ mm})^2}{t_2}$$

from which

$$t_2 = 40 \text{ h}$$

# Διάχυση σε Ημιαγώγιμα Υλικά

Η διάχυση χρησιμοποιείται ευρέως στην κατασκευή:

- **ημιαγωγών**
- **ολοκληρωμένων κυκλωμάτων (ICs)**

Με τη διαδικασία αυτή εισάγονται ελεγχόμενες ποσότητες προσμίξεων στο **πυρίτιο** ώστε να δημιουργηθούν περιοχές διαφορετικής αγωγιμότητας.

## Στάδια διάχυσης σε ημιαγωγούς

Η διαδικασία γίνεται συνήθως σε δύο στάδια:

- **Προεναπόθεση (Predeposition)**

Εισαγωγή προσμίξεων από αέρια φάση.

Η συγκέντρωση στην επιφάνεια παραμένει σταθερή.

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

- **Διάχυση εισχώρησης (Drive-in diffusion)**

Τα άτομα μετακινούνται βαθύτερα μέσα στο πυρίτιο ώστε να δημιουργηθεί το επιθυμητό προφίλ συγκέντρωσης.

# Διάχυση σε Ημιαγώγιμα Υλικά

Κατανομή συγκέντρωσης κατά τη διάχυση εισχώρησης

$$C(x, t) = \frac{Q_0}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Δίνει τη συγκέντρωση προσμίξεων σε βάθος  $x$  και χρόνο  $t$  κατά τη διαδικασία της διάχυσης εισχώρησης

$D$ : συντελεστής διάχυσης

$Q_0$ : συνολική ποσότητα προσμίξεων που εισήχθησαν

$x$ : βάθος στο υλικό

Συνολική ποσότητα προσμίξεων

$$Q_0 = 2C_s \sqrt{\frac{Dt_p}{\pi}}$$

Η συνολική ποσότητα προσμίξεων ανά μονάδα επιφάνειας που εισήχθησαν κατά το στάδιο της προεναπόθεσης

$C_s$ : συγκέντρωση προσμίξεων στην επιφάνεια

$t_p$ : χρόνος predeposition

$D$ : συντελεστής διάχυσης

# Διάχυση σε Ημιαγώγιμα Υλικά

## Βάθος επαφής (junction depth)

Είναι το σημείο όπου η συγκέντρωση προσμίξεων γίνεται ίση με τη συγκέντρωση υποβάθρου στο υλικό. Το βάθος αυτό καθορίζει τις ηλεκτρικές ιδιότητες της διάταξης.

## Υπολογισμός βάθους επαφής

$$x_j = \left[ 4D_d t_d \ln \left( \frac{Q_0}{C_B \sqrt{\pi D_d t_d}} \right) \right]^{1/2}$$

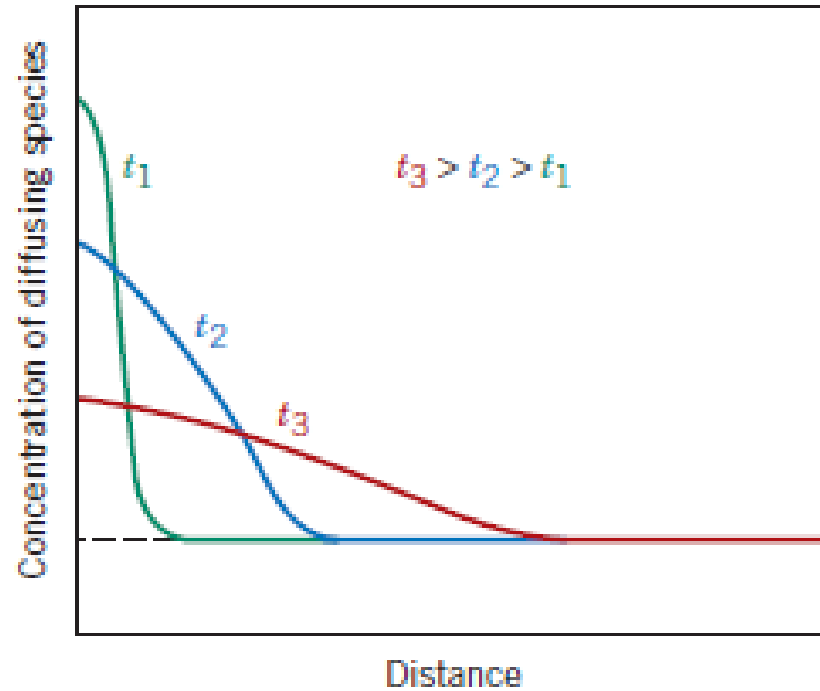
Δίνει το βάθος ένωσης  $x_j$  μετά το στάδιο διάχυσης εισχώρησης.

$C_B$  : συγκέντρωση υποβάθρου

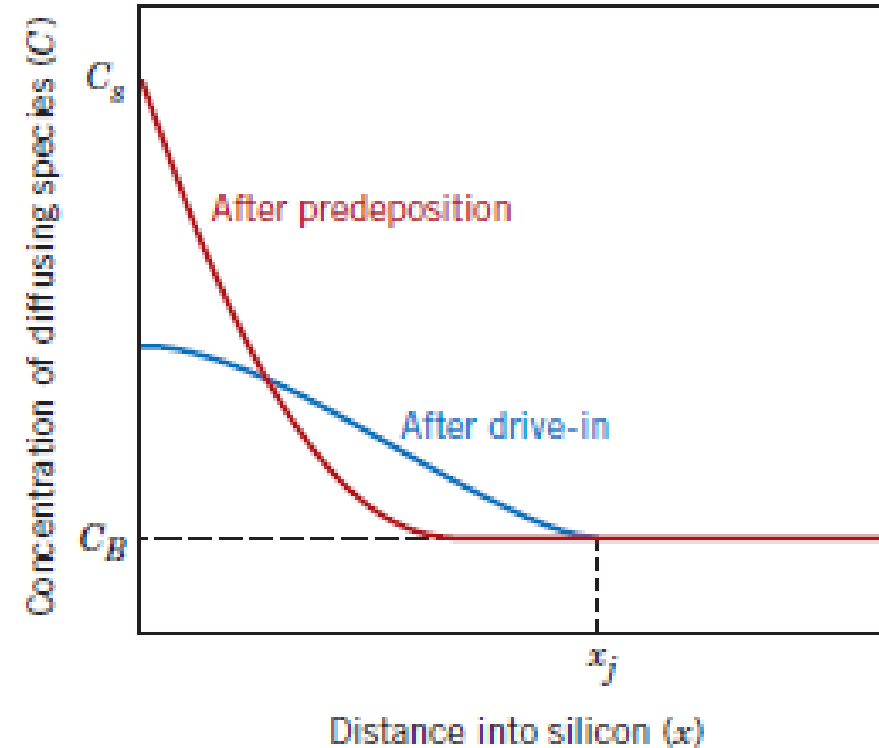
$D_d$  : συντελεστής διάχυσης στο drive-in

$t_d$  : χρόνος drive-in

# Διάχυση σε Ημιαγώγιμα Υλικά



**Figure 5.8** Schematic concentration profiles for drive-in diffusion of semiconductors at three different times,  $t_1$ ,  $t_2$ , and  $t_3$ .



**Figure 5.9** Schematic concentration profiles taken after (1) predeposition and (2) drive-in diffusion treatments for semiconductors. Also shown is the junction depth,  $x_j$ .