



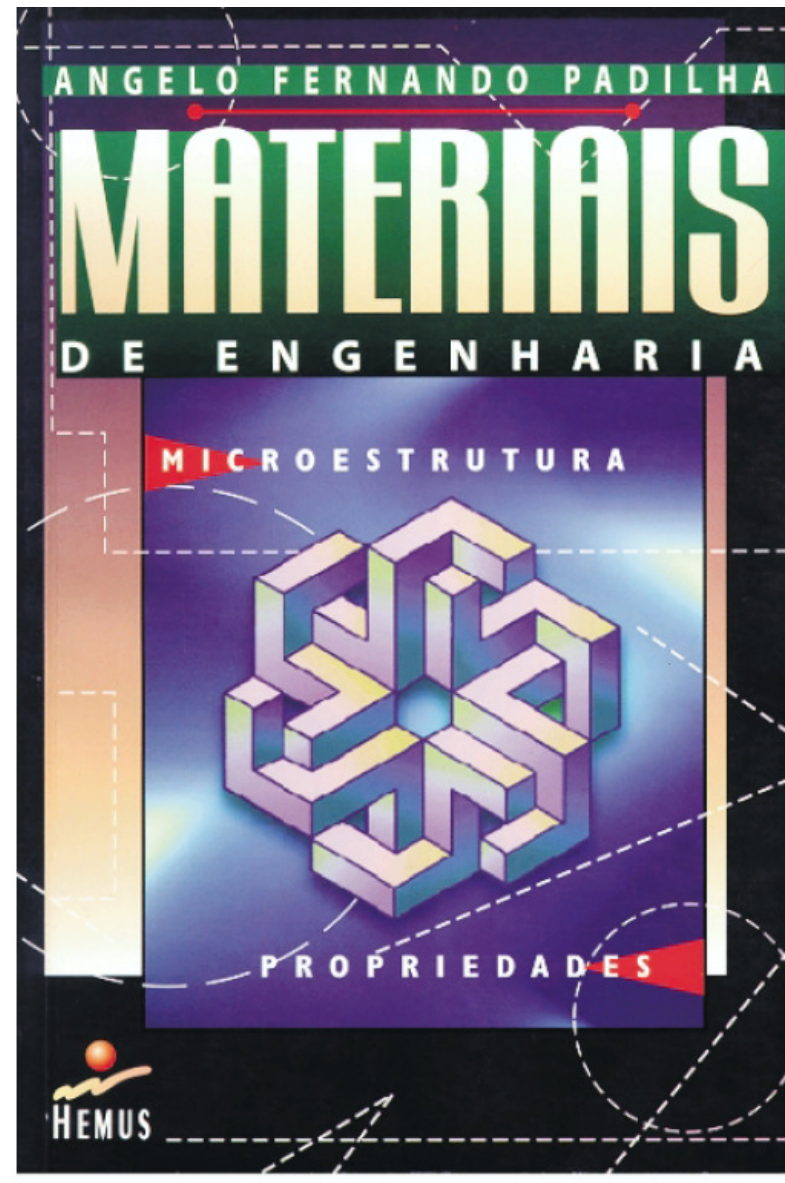
05

---

# CIÊNCIA DOS MATERIAIS

Engenharia Mecânica - Uninove

Prof. Luis Fernando



# Difusão

## Processos termicamente ativados

Numerosos fenômenos em ciência dos materiais ocorrem mais rapidamente quando a temperatura é aumentada. Em muitos casos, a dependência da velocidade de reação ou transformação ( $V$ ) segue uma equação do tipo Arrhenius (1859-1927):

$$V = c \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right)$$

onde:

$V$  é a velocidade da reação ou transformação;

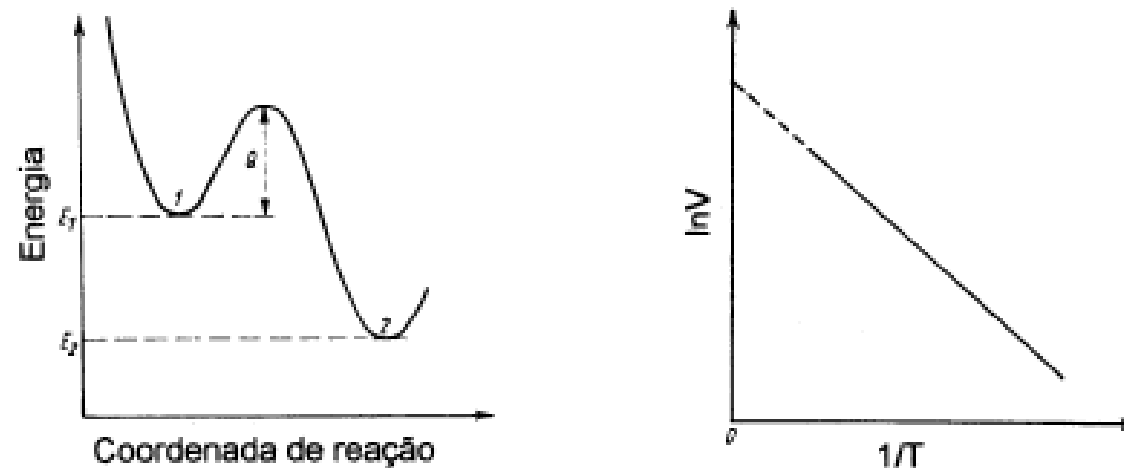
$c$  é uma constante;

$Q$  é a energia de ativação;

$R$  é a constante dos gases e

$T$  é a temperatura absoluta.

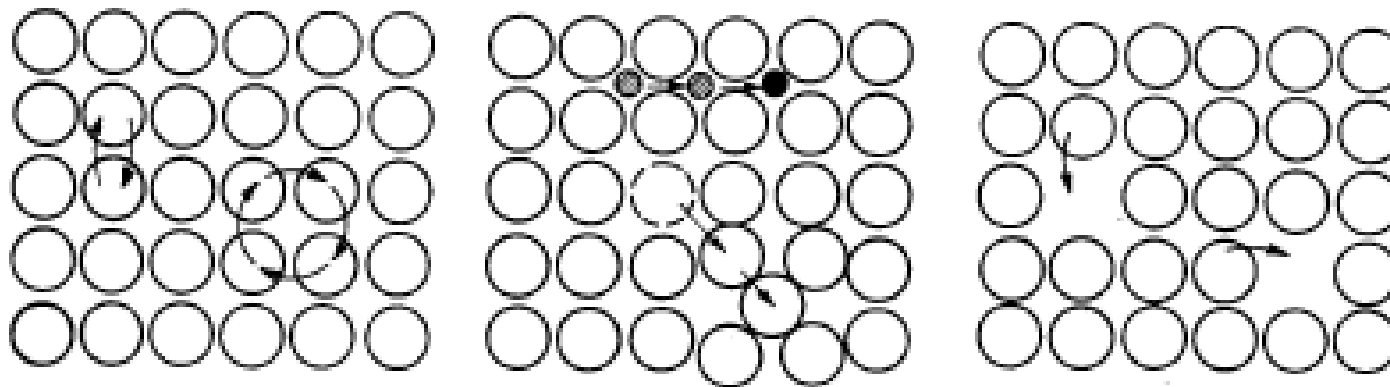
# Difusão



**Figura 8.1** — (a) Representação esquemática de um processo termicamente ativado. (b) Apresentação da equação de Arrhenius em escalas convenientes.

# Difusão

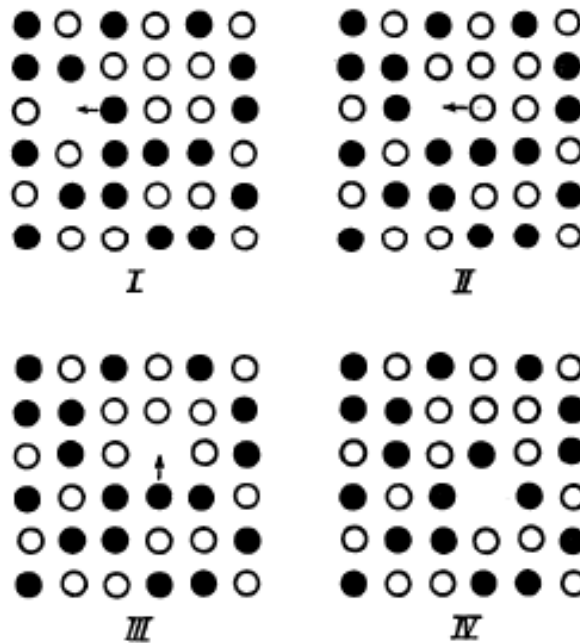
Autodifusão (difusão de um elemento em seu próprio reticulado)



**Figura 8.2** — Mecanismos de difusão em um metal.

# Difusão

Difusão em soluções sólidas substitucionais



**Figura 8.3** — Mecanismo de difusão em uma solução sólida por troca de lugar com lacunas.

# Difusão

Difusão em soluções sólidas intersticiais

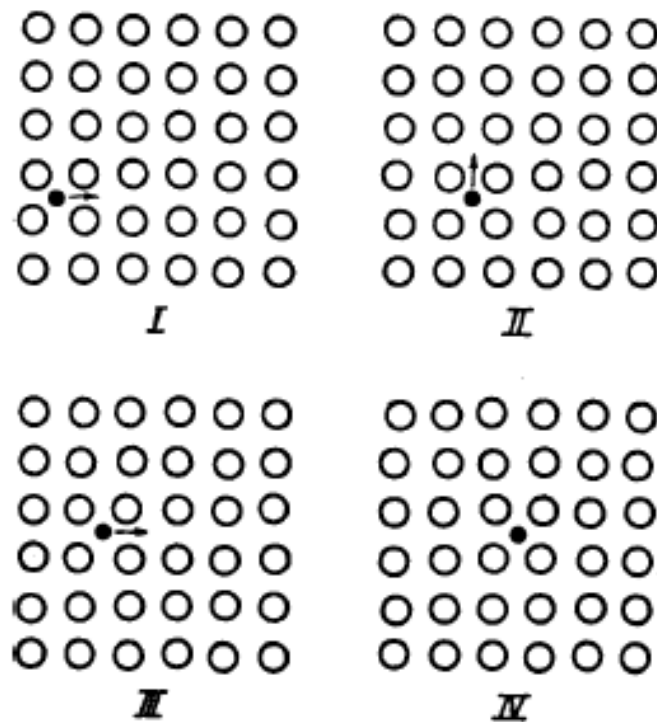
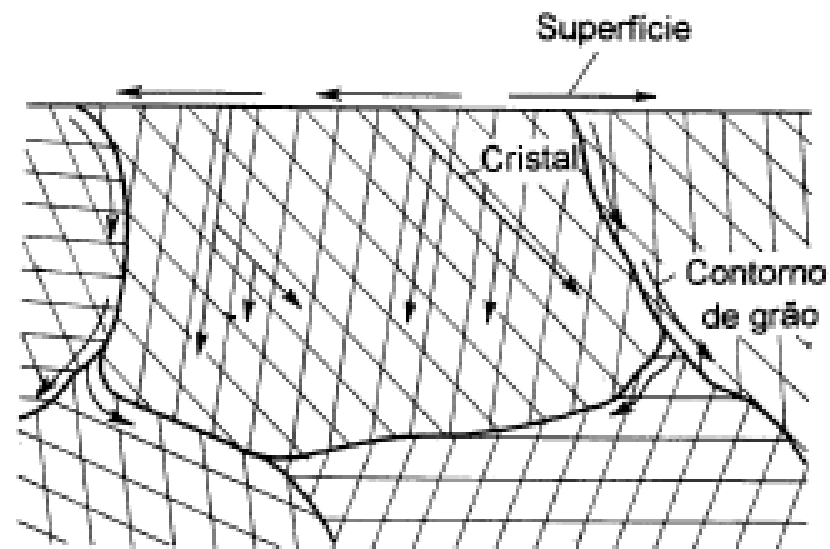


Figura 8.4 — Mecanismo de difusão intersticial.

# Difusão

Difusão através de defeitos cristalinos



**Figura 8.6** — Representação esquemática da difusão no reticulado e ao longo de defeitos.



# 1ª Lei de Fick

O fluxo ( $J$ , em  $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ ) de matéria ( $M$ , em  $\text{kg}$ ) que se difunde através de uma unidade de área ( $A$ , em  $\text{m}^2$ ) na unidade de tempo ( $t$ , em  $\text{s}$ ) é definido como:

$$J = \frac{M}{At}; \text{ ou na forma diferencial como } J = \frac{1}{A} \left( \frac{dM}{dt} \right).$$

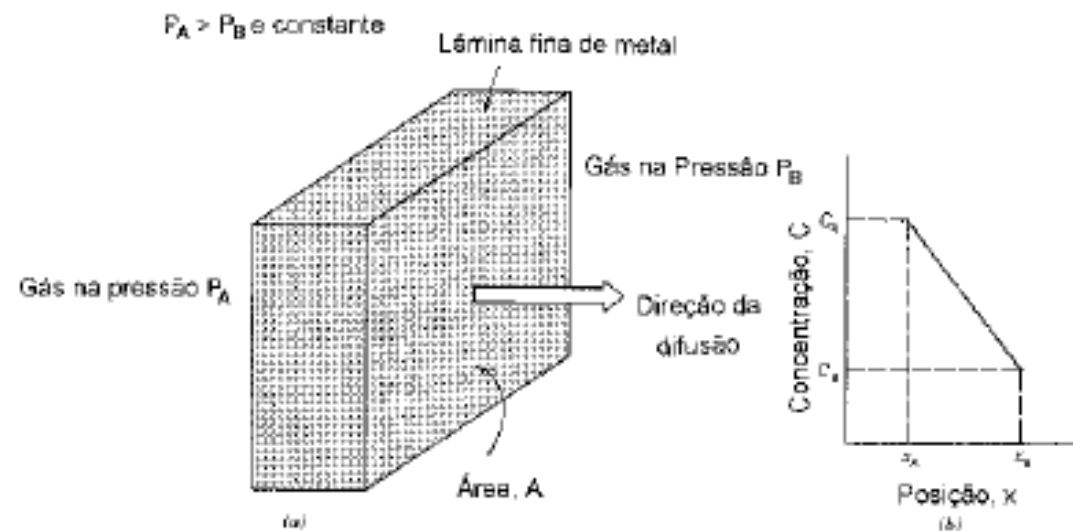
# 1ª Lei de Fick

O fluxo ( $J$ , em  $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ ) de matéria ( $M$ , em  $\text{kg}$ ) que se difunde através de uma unidade de área ( $A$ , em  $\text{m}^2$ ) na unidade de tempo ( $t$ , em  $\text{s}$ ) é definido como:

$$J = \frac{M}{At}; \text{ ou na forma diferencial como } J = \frac{1}{A} \left( \frac{dM}{dt} \right).$$

Válida para condições estacionárias

# 1ª Lei de Fick



**Figura 8.6** — (a) Difusão em estado estacionário através de uma placa. (b) Perfil linear de concentração na placa.

# 1ª Lei de Fick

A primeira lei de Fick define o fluxo  $J_x$  através da placa como sendo:

$$J_x = -D \left( \frac{dC}{dx} \right)$$

O gradiente de concentração  $dC/dx$  é neste caso igual a

$$\frac{C_A - C_B}{X_A - X_B}$$

A constante de proporcionalidade  $D$  é denominada *coeficiente de difusão* e sua unidade é  $m^2/s$ .

# 1ª Lei de Fick

## O coeficiente de difusão

O coeficiente de difusão ou difusividade  $D$  da maioria dos materiais obedece a equação de Arrhenius:

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

onde

$D_0$  é o fator pré-exponencial independente da temperatura ( $\text{m}^2/\text{s}$ );

$Q$  é a energia de ativação para difusão ( $\text{J/mol}$ ;  $\text{cal/mol}$  ou  $\text{eV/átomo}$ );

$R$  é a constante dos gases ( $8,31 \text{ J/mol K}$ ;  $1,987 \text{ cal/mol K}$  ou  $8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/átomo}$ ) e

$T$  é a temperatura absoluta (K).

# Coeficientes de difusão

Espécie Difusível	Metal Hospedeiro	Do (m <sup>2</sup> /s)	Energia de ativação Qd		Valores calculados	
			kJ/mol	eV/átomo	T (°C)	D (m <sup>2</sup> /s)
Fe	Fe-α (CCC)	2,8.10 <sup>-4</sup>	251	2,60	500	3,0.10 <sup>-21</sup>
					900	1,8.10 <sup>-15</sup>
Fe	Fe-γ (CFC)	5,0.10 <sup>-5</sup>	284	2,94	900	1,1.10 <sup>-17</sup>
					1100	7,8.10 <sup>-16</sup>
C	Fe-α	6,2.10 <sup>-7</sup>	80	0,83	500	2,4.10 <sup>-12</sup>
					900	1,7.10 <sup>-10</sup>
C	Fe-γ	2,3.10 <sup>-5</sup>	148	1,53	900	5,9.10 <sup>-12</sup>
					1100	5,3.10 <sup>-11</sup>
Cu	Cu	7,8.10 <sup>-5</sup>	211	2,19	500	4,2.10 <sup>-19</sup>
Zn	Cu	2,4.10 <sup>-5</sup>	189	1,96	500	4,0.10 <sup>-18</sup>
Al	Al	2,3.10 <sup>-4</sup>	144	1,49	500	4,2.10 <sup>-14</sup>
Cu	Al	6,5.10 <sup>-5</sup>	136	1,41	500	4,1.10 <sup>-14</sup>
Mg	Al	1,2.10 <sup>-4</sup>	131	1,35	500	1,9.10 <sup>-13</sup>
Cu	Ni	2,7.10 <sup>-5</sup>	256	2,65	500	1,3.10 <sup>-22</sup>

# Coeficientes de difusão

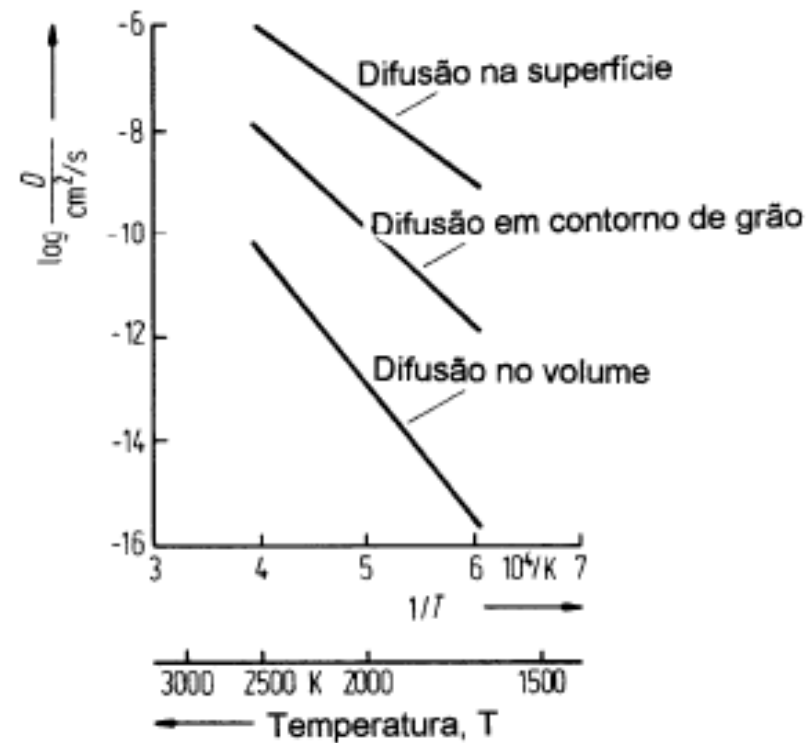
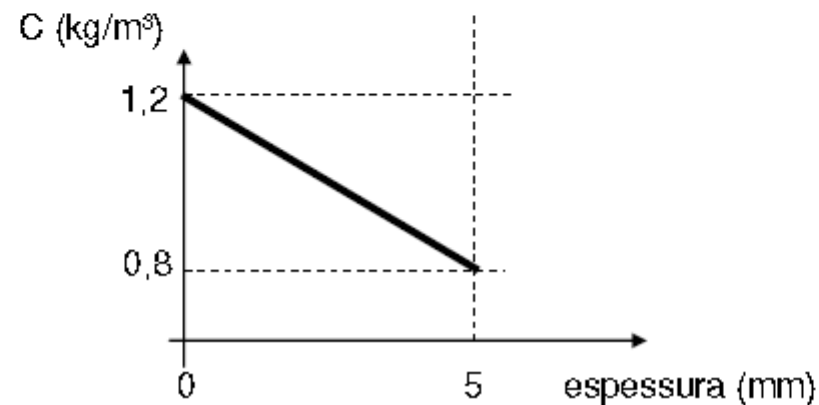


Figura 8.11 — Coeficientes de difusão do tório no tungstênio.

# Exercício

Uma placa de ferro  $\alpha$  com 5 mm de espessura, sob  $700^\circ\text{C}$ , é exposta numa das faces a uma atmosfera rica em carbono (chamada carbonetante) que lhe garante uma concentração de  $1,2 \text{ kg/m}^3$  de carbono nesta face. Sua face oposta é mantida sob atmosfera descarbonetante, que mantém a concentração de carbono desta em  $0,8 \text{ kg/m}^3$ . O perfil de composições de carbono entre as faces é linear. Considerando-se atingido um estado constante de difusão, qual o fluxo de carbono pela placa?





# Exercício

Primeiro, deve-se calcular o coeficiente de difusão do carbono no Fe- $\alpha$  a 700°C.

$$D = D_0 \times e^{\frac{-Q_D}{R.T}}$$

$$D_{C \rightarrow Fe-\alpha} = 6,2 \cdot 10^{-7} \times e^{\frac{-80000}{8,31 \cdot (700+273)}} = 3,1 \cdot 10^{-11} \frac{m^2}{s}$$

# Exercício

Segundo, calcula-se o fluxo de difusão.

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

$$J = -3,1 \cdot 10^{-11} \times \frac{1,2 - 0,8}{(0 - 5) \cdot 10^{-3}} = 2,5 \cdot 10^{-9} \frac{kg}{m^2 \cdot s}$$

## 2ª Lei de Fick

Na maioria dos casos, a difusão não ocorre em condições estacionárias mas sim em condições transitórias. Em outras palavras, o perfil de concentração não é constante e varia com o tempo, conforme ilustra a figura 8.7.

Para as condições da figura 8.7, vale a seguinte equação:

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

Se considerarmos o coeficiente de difusão  $D$  independente da composição, a expressão acima se transforma em:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)$$

A equação acima é conhecida como *segunda lei de Fick*.

## 2ª Lei de Fick

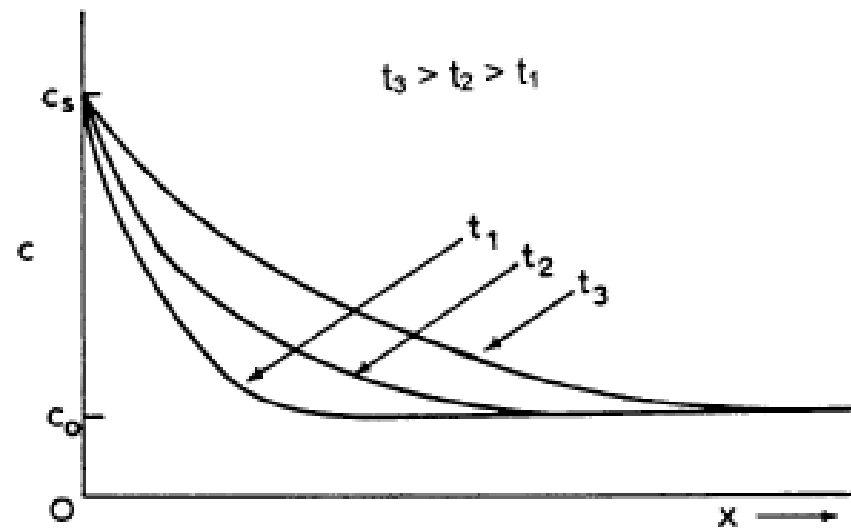


Figura 8.7 — Perfis de concentração para condições transitórias.