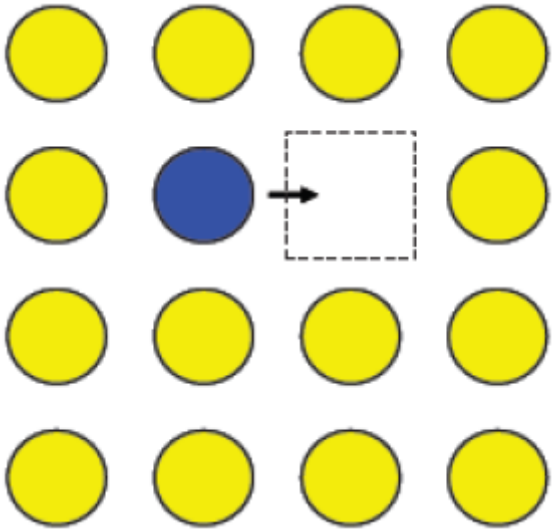
Metallurgia Fisica



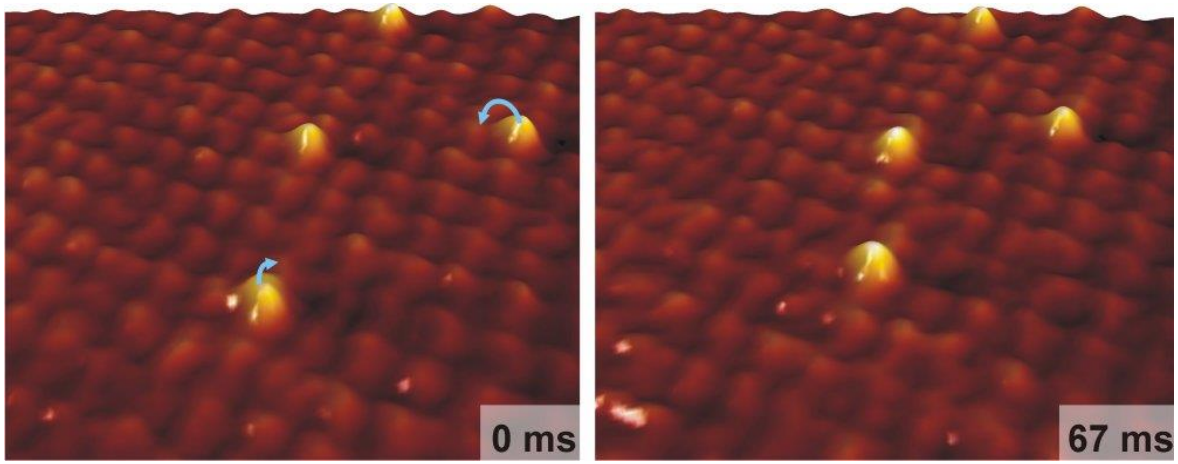
Lezione 8:

La diffusione

Le figure provengono dal Callister, Boniardi e Casaroli,

La diffusione

- Cos'è la diffusione?
- Diffusione lacunare
- Diffusione di atomi interstiziali
- Le leggi di Fick
- Cementazione e nitrurazione



Diffusione di inchiostro in acqua



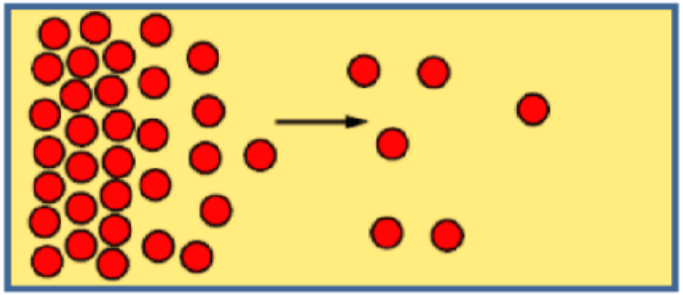
calda fredda

La diffusione

- **Definizione:** La diffusione è il trasporto di massa dovuto al movimento atomico in presenza di energia termica ed un gradiente di concentrazione

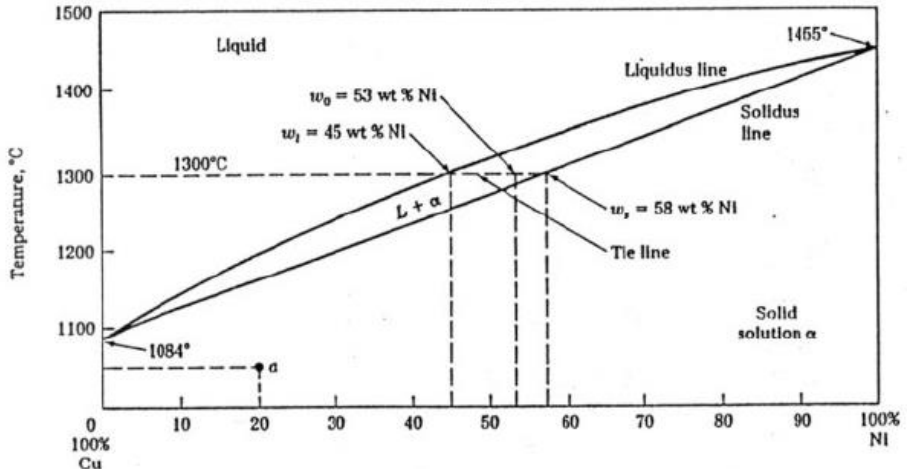
- Se la diffusione avviene da un materiale ad un altro si chiama interdiffusione (inter-diffusion) altrimenti autodiffusione (self-diffusion).

- Gli atomi devono avere sufficiente energia vibrazionale da rompere i legami e deformare il cristallo durante lo spostamento



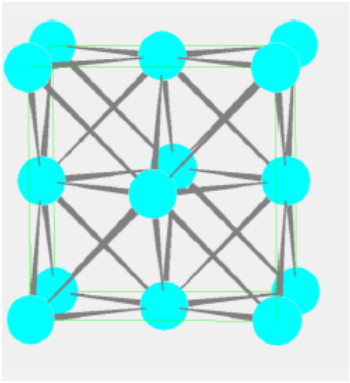
Molto importante in metallurgia!
Formazione di nuove fasi, meccanismi di nucleazione e accrescimento dei grani, ricristallizzazione, trattamenti superficiali (carbocementazione, nitrurazione)

Lega a miscibilità completa: Cu-Ni

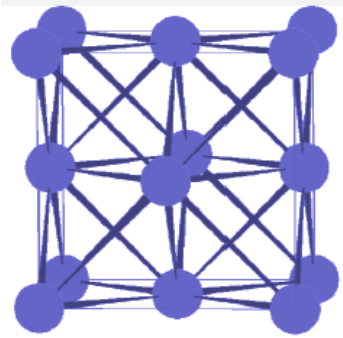


System		Crystal structure	Radius of atoms (Å)	Valency	Electronegativity
Cu-Ni	Cu	FCC	1.28	1	1.9
	Ni	FCC	1.25	2	1.8

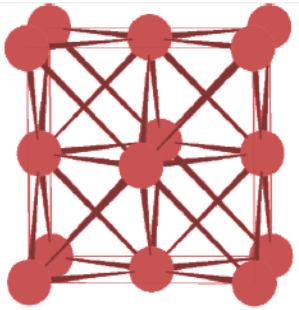
Cu



a= 3.61 A



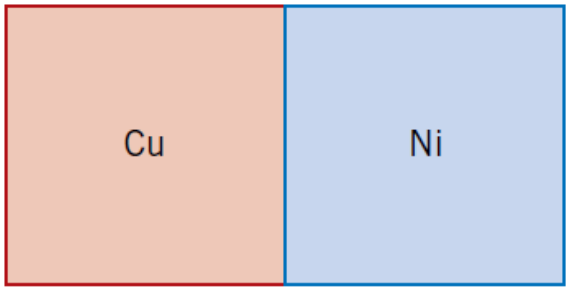
a= 3.52-3.61A

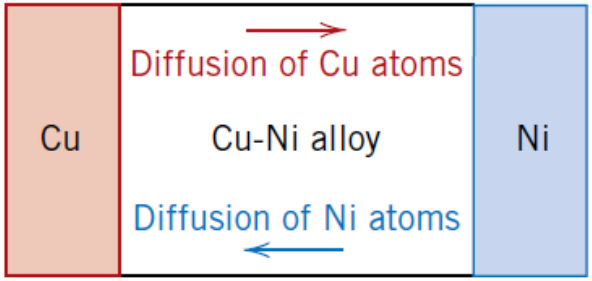


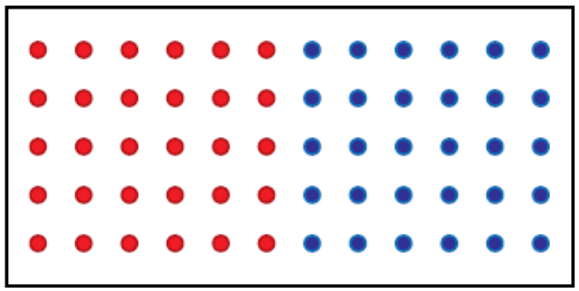
Ni

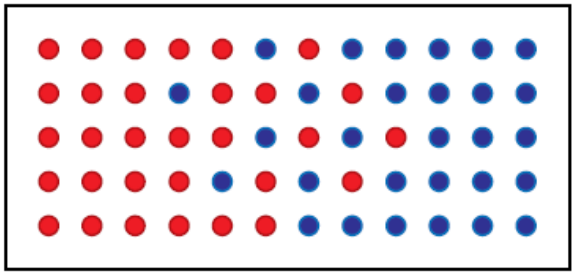
a= 3.52A

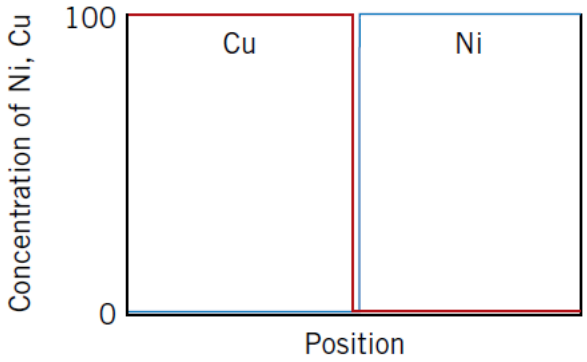
La coppia rame-nichel

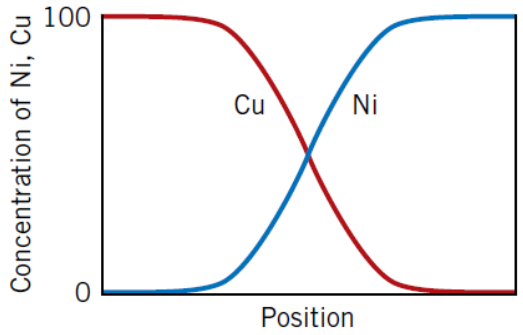








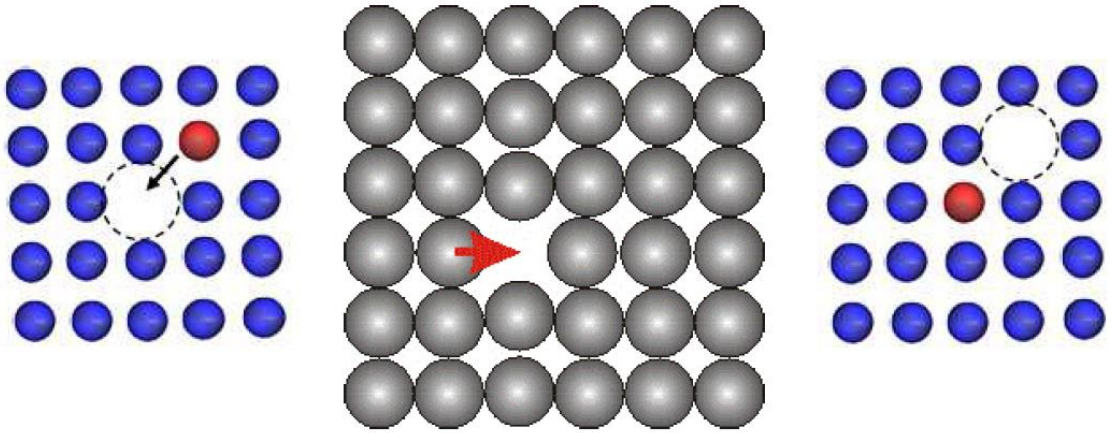




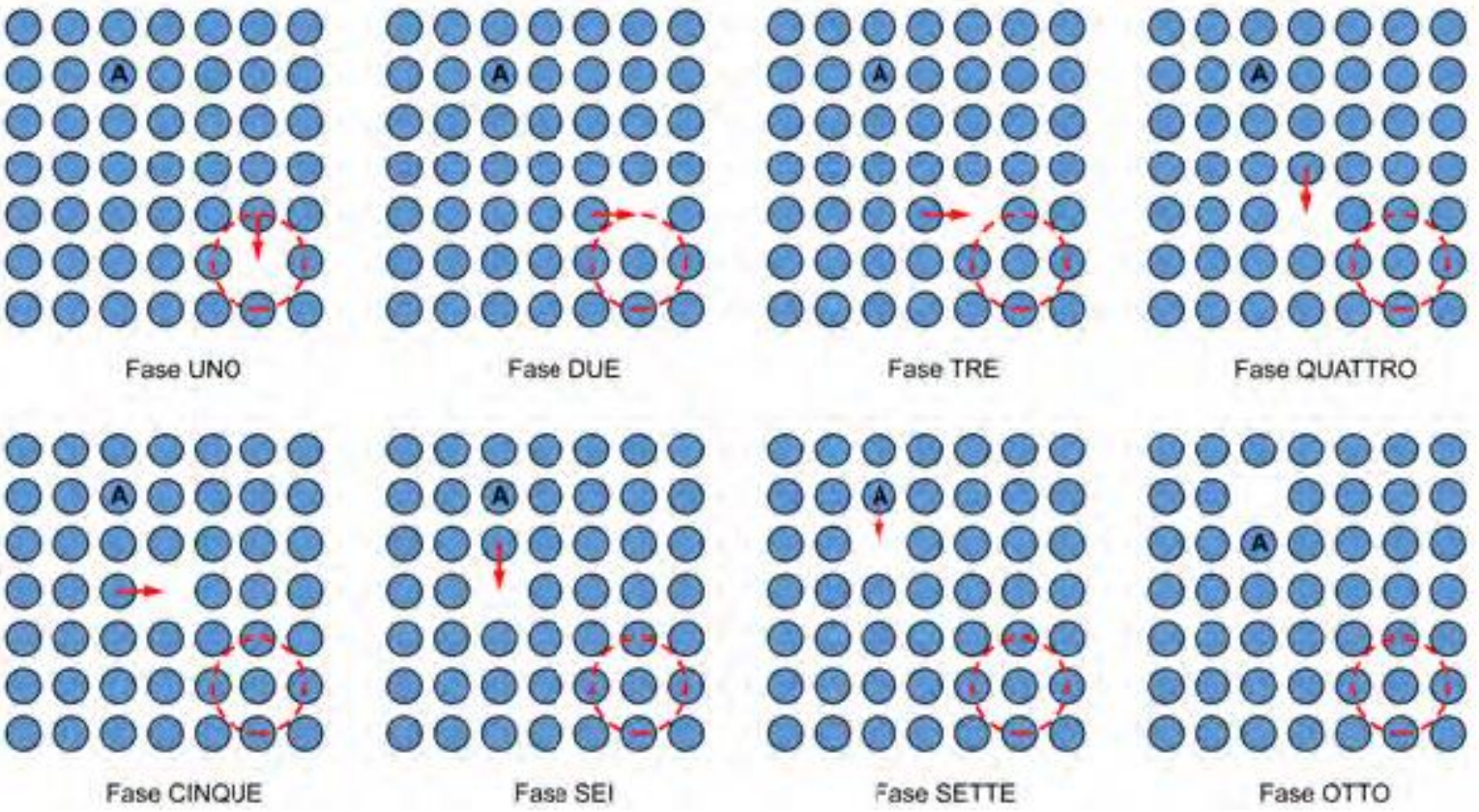
Callister

Meccanismi di diffusione di lacune

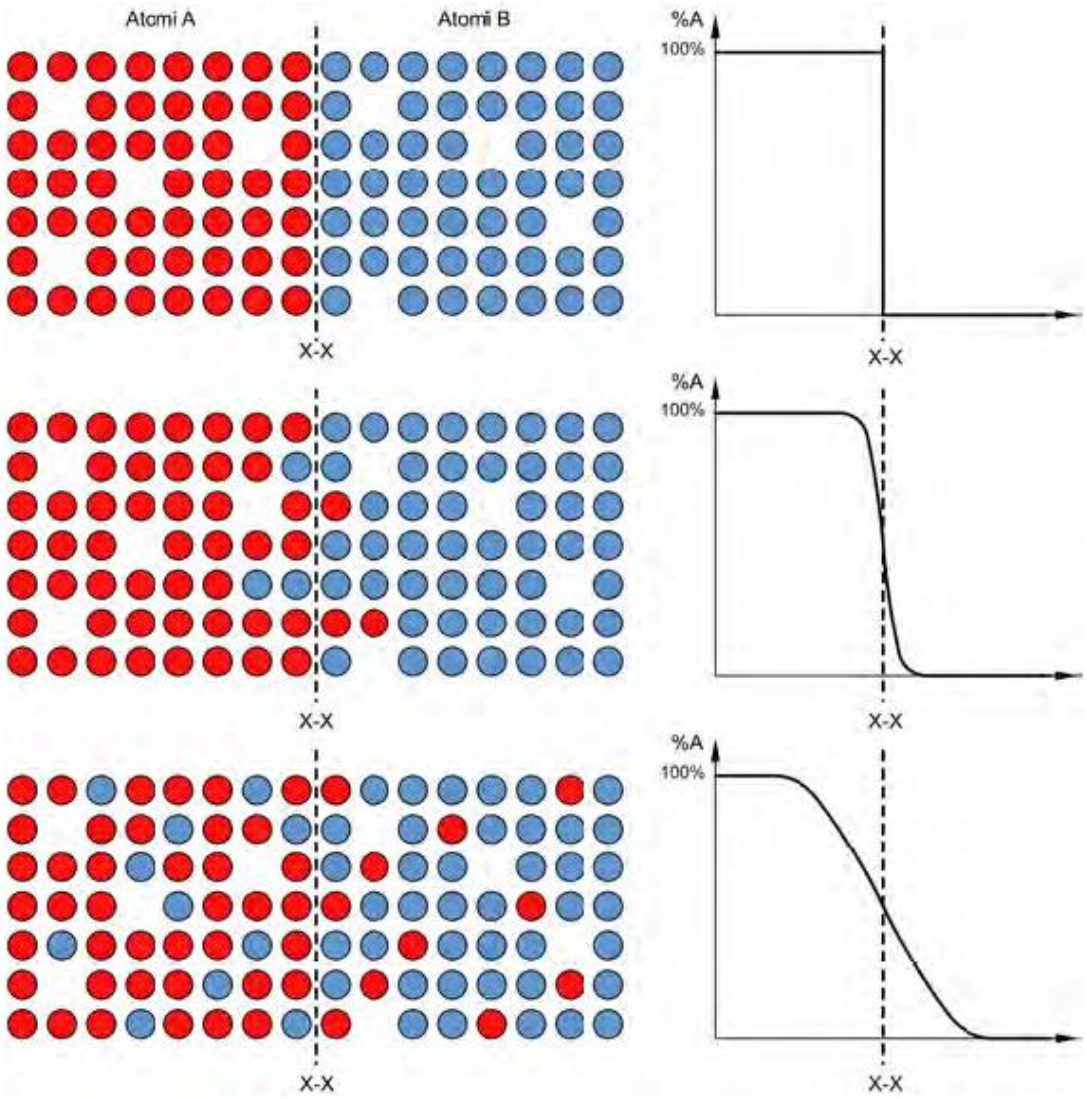
- L’atomo scambia posizione con una lacuna, per cui il flusso di lacune è opposto a quello degli atomi
- L’atomo che migra può essere della stessa specie degli altri o un atomo sostituzionale
- Quando si raffredda un metallo velocemente la velocità di diffusione è alta per via delle numerose lacune che si creano



L’autodiffusione

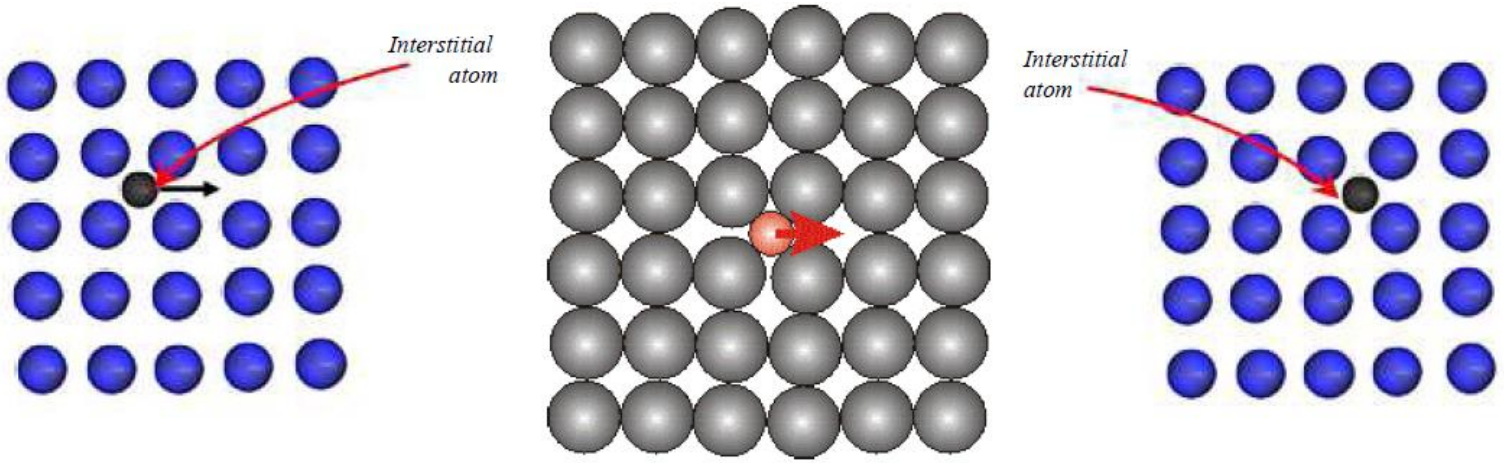


L’interdiffusione

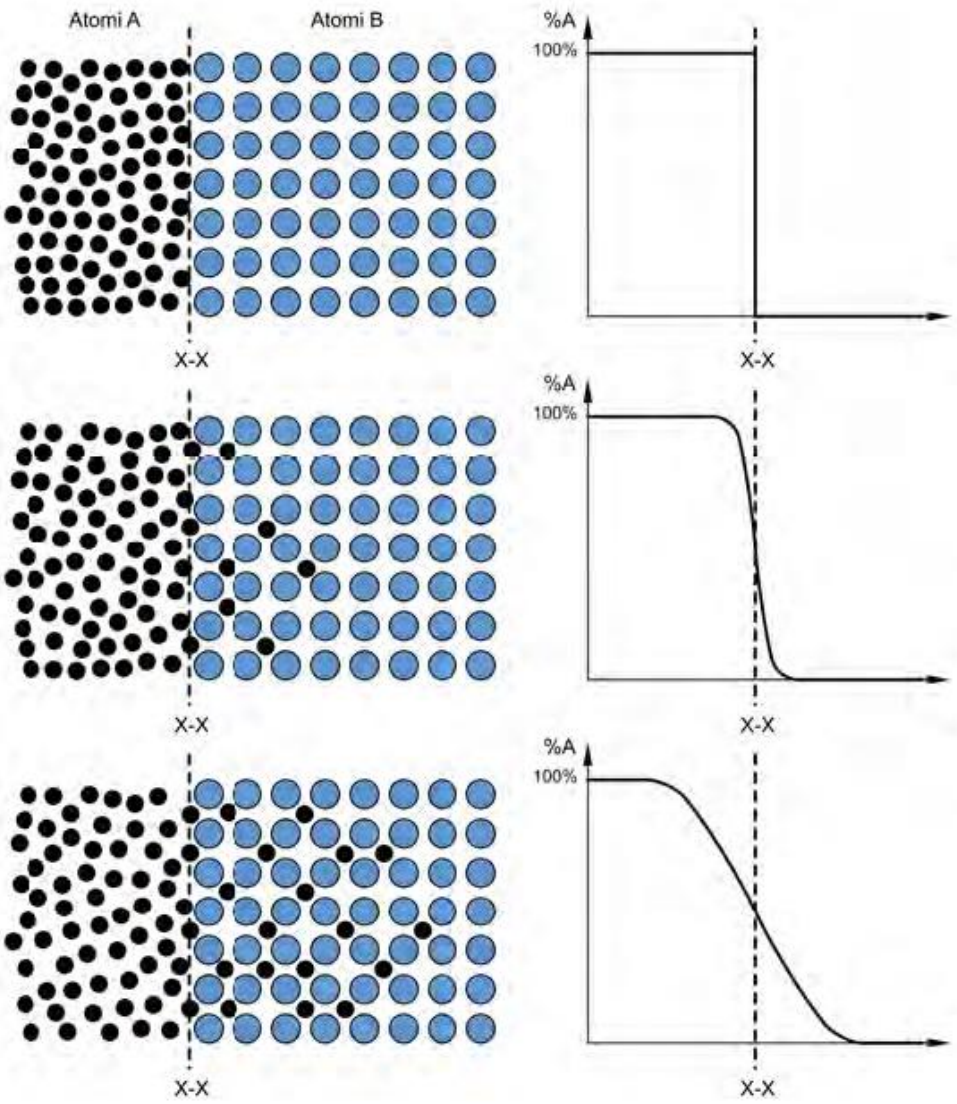


Diffusione di atomi interstiziali

- La solubilità di atomi interstiziali è generalmente bassa per cui è facile che un atomo interstiziale trovi un sito interstiziale non occupato dove migrare
- È un meccanismo prevalente per interstiziali quali l'idrogeno, il carbonio, l'azoto e l'ossigeno. Altre impurità hanno scarsissima mobilità

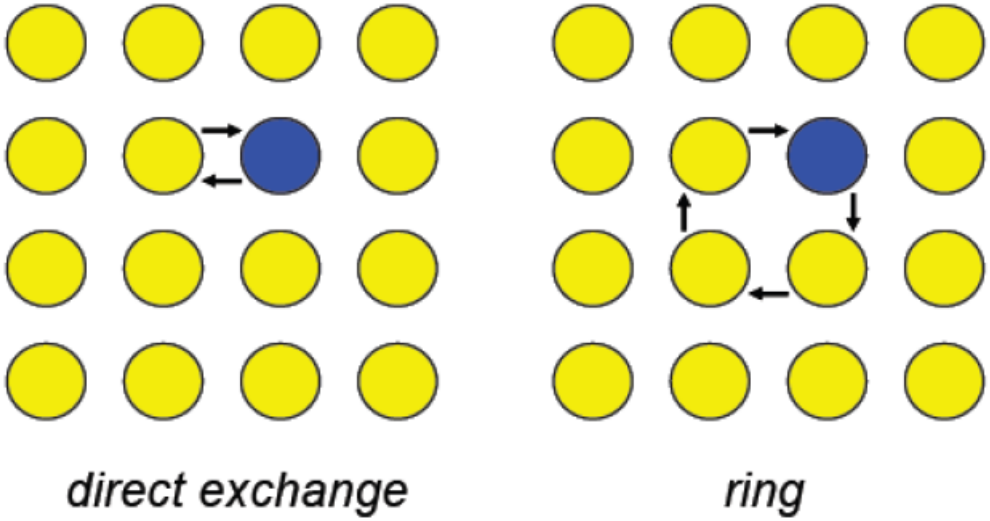


Diffusione di un gas in un solido



Diffusione per scambio atomico

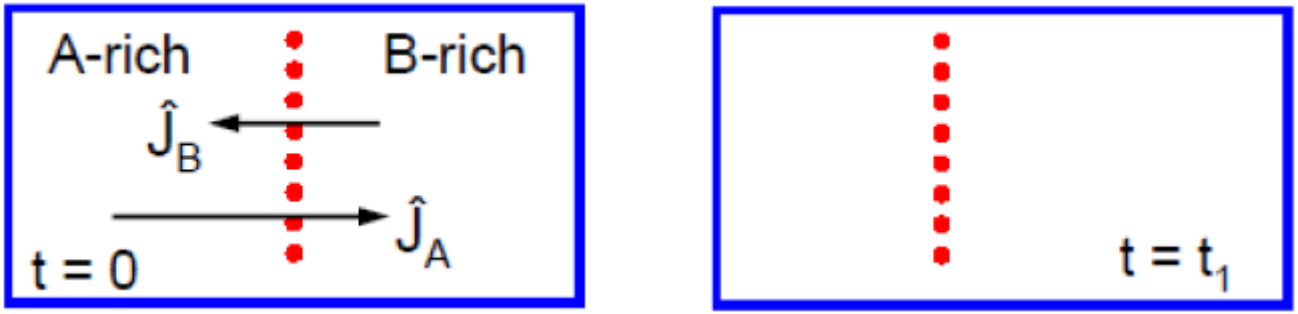
- È stato osservato sperimentalmente anche lo scambio diretto tra due atomi e lo scambio ciclico tra 4, ma la barriera energetica di diffusione è molto alta perché richiede una forte deformazione del reticolo



Kirkendall effect

Legge di Kirkendall (1914-2005): se la velocità di diffusione dei due elementi è diversa, l'interfaccia si muove verso l'elemento che diffonde più velocemente

$\hat{J}_A > \hat{J}_B$

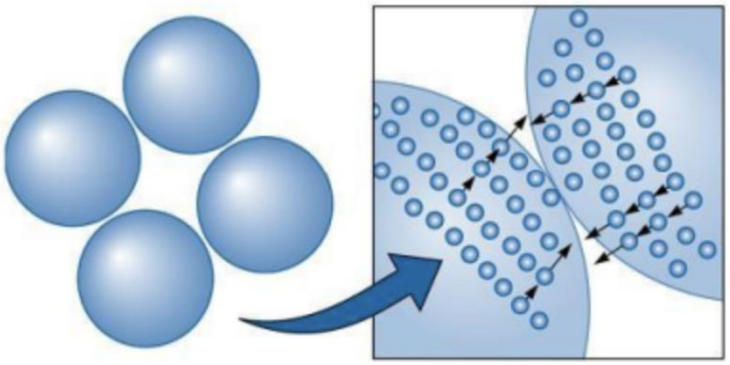


IL Cu diffonde più velocemente del Ni, mentre lo Zn più del Cu

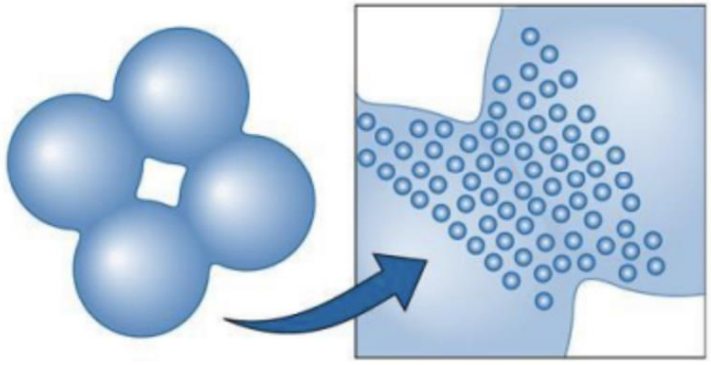


Processi di sinterizzazione

Nella metallurgia delle polveri il processo di diffusione consente la creazione di un solido continuo. Il potenziale chimico nelle zone convesse è maggiore e facilita la creazione di nuovi punti di contatto ed unione. La riduzione della porosità iniziale conferisce poi al metallo solido le proprietà meccaniche richieste.



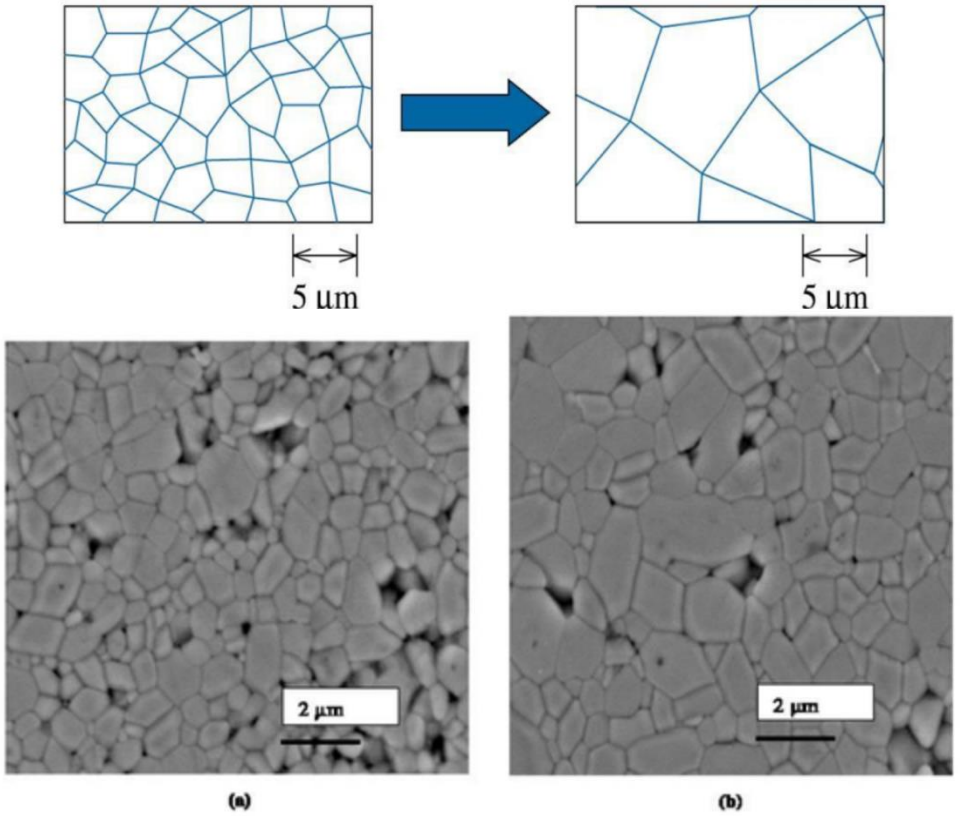
Compacted product



Partly sintered product

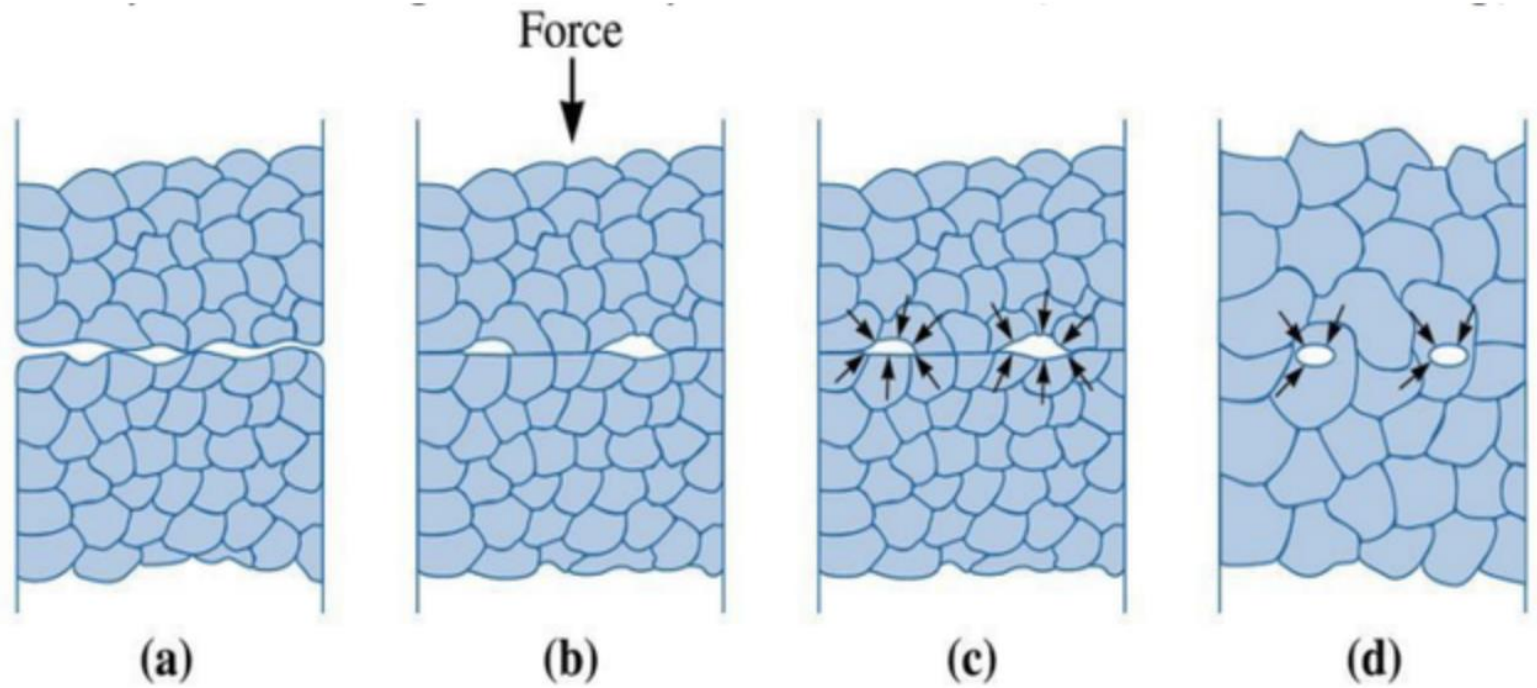
Crescita della grana cristallina

La crescita della grana cristallina facilitata dalla temperatura è dovuta alla diffusione. Il risultato è una grana cristallina più duttile e meno resistente.



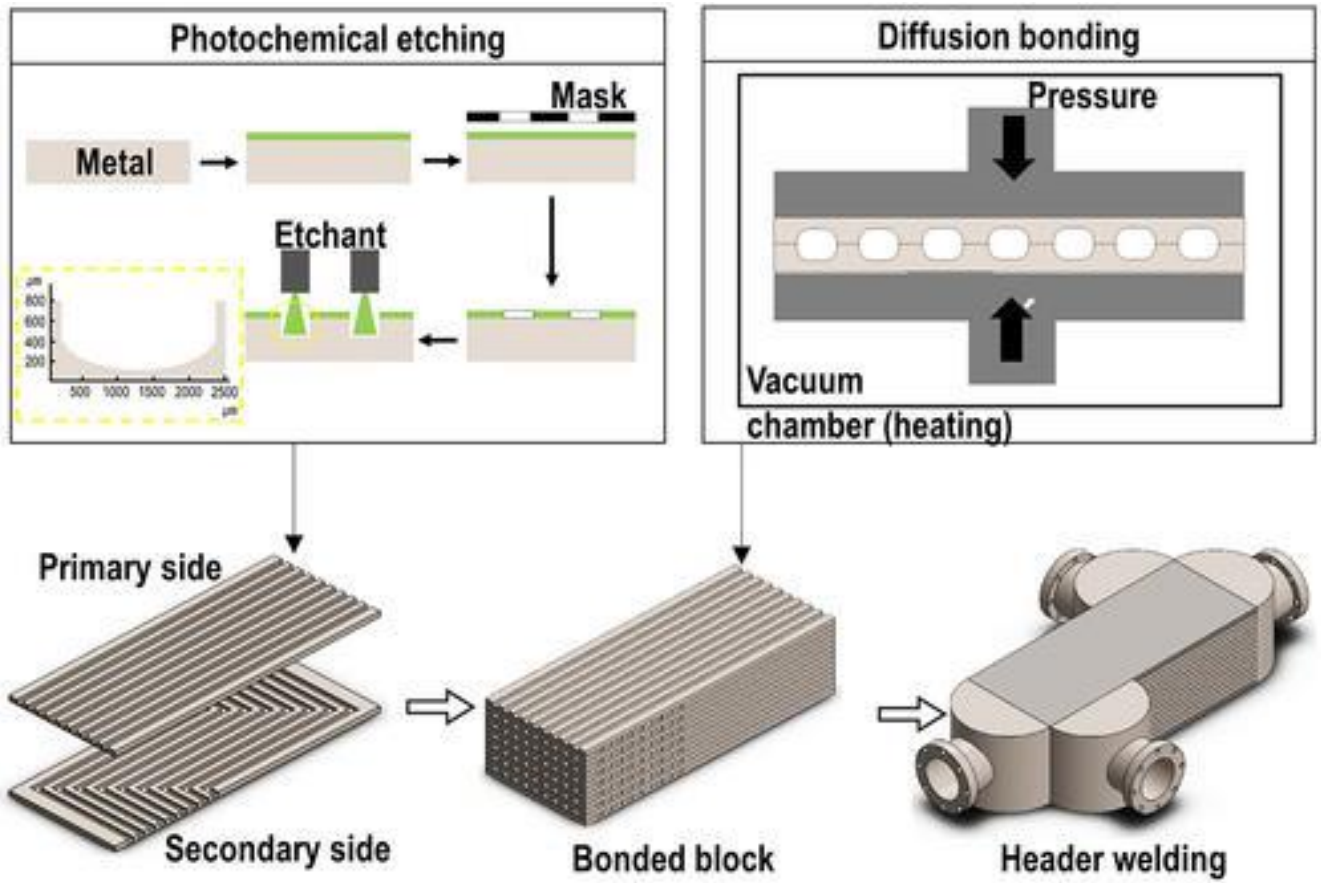
Giunzione per diffusione

Diffusion bonding: viene applicate una forza in presenza di una temperatura che non dà fusione e risolidificazione del metallo ma solo diffusione.



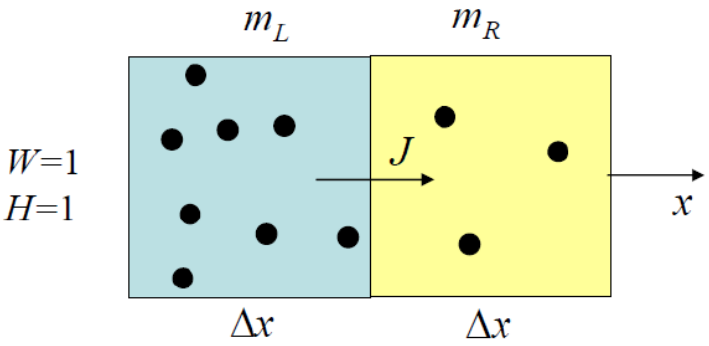
(a) Area di contatto piccola
(b) Forza per aumentare contatto
(c) Diffusione con riduzione dei pori
(d) Chiusura dei pori

Applicazione della giunzione per diffusione



Scambiatori di calore compatti, ottenuti unendo piastre metalliche con canali incisi

Leggi della diffusione



P = probabilità che la massa *m* attraversi l'interfaccia in un tempo *Δt*

$$J_L = \frac{1}{1\times 1}\frac{p}{\Delta t} m_L$$

$$J_R = \frac{1}{1\times 1}\frac{p}{\Delta t} m_R$$

$$J = \frac{1}{1\times 1}\frac{p}{\Delta t}\left(m_L - m_R\right)$$

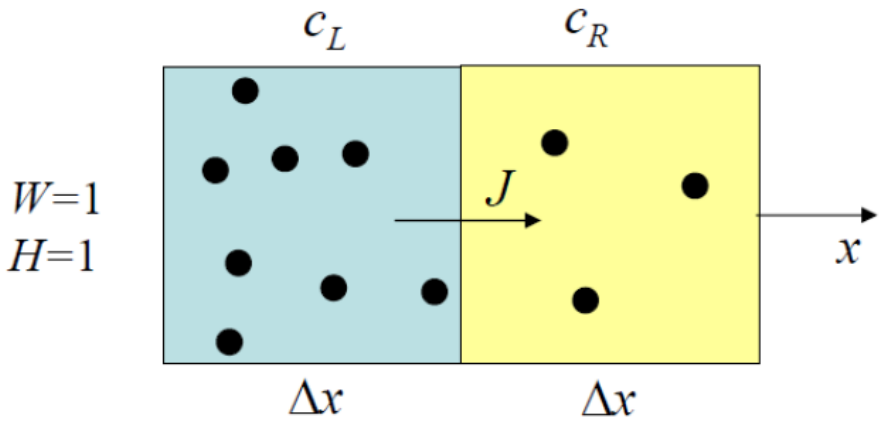
Flusso netto

[*J*]=massa per unità di tempo per unità di area

La prima legge di Fick

$$c = \frac{m}{V} \qquad m = cV \qquad J = \frac{1}{1 \times 1}\frac{p}{\Delta t}\left(m_L - m_R\right)$$

$$J = \frac{1}{1 \times 1}\frac{p}{\Delta t}\underbrace{\left(c_L - c_R\right)}_{=-\Delta c} \cdot \underbrace{\Delta x \times 1 \times 1}_{=V}$$



La prima legge di Fick

$$c = \frac{m}{V}$$

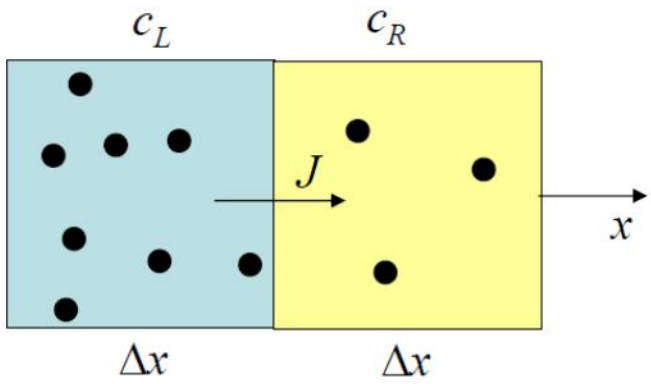
$$J = \frac{1}{\cancel{1\times 1}}\frac{p}{\Delta t}\underbrace{(c_L - c_R)}_{=-\Delta c}\cdot\underbrace{\Delta x \times \cancel{1\times 1}}_{=V}$$

Concentration gradient

$$J = -\frac{p}{\Delta t}\Delta c\Delta x = -\frac{p}{\Delta t}\Delta x^2\frac{\Delta c}{\Delta x}$$

expand Δx

$W=1$
$H=1$



La prima legge di Fick

$$c = \frac{m}{V}$$

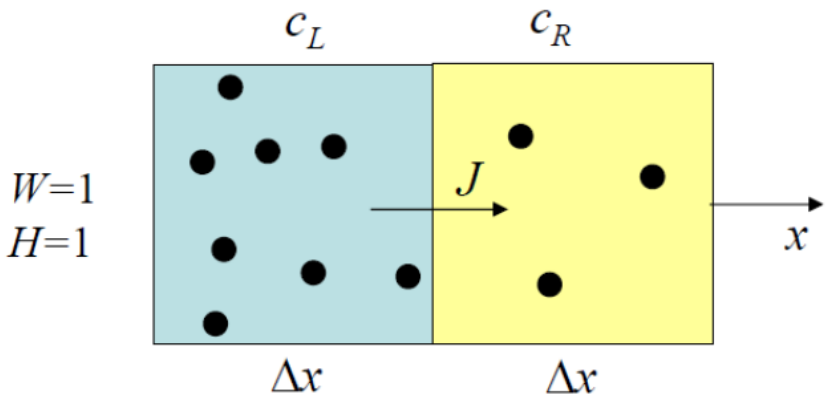
$$J = \frac{1}{1\times 1}\frac{p}{\Delta t}\underbrace{(c_L - c_R)}_{=-\Delta c}\cdot\underbrace{\Delta x \times 1 \times 1}_{=V}$$

Concentration gradient

$$J = -\frac{p}{\Delta t}\Delta c\Delta x = -\frac{p}{\Delta t}\Delta x^2\frac{\Delta c}{\Delta x}$$

$$J = -\frac{p}{\Delta t}\Delta x^2\frac{dc}{dx} = -D\frac{dc}{dx}$$

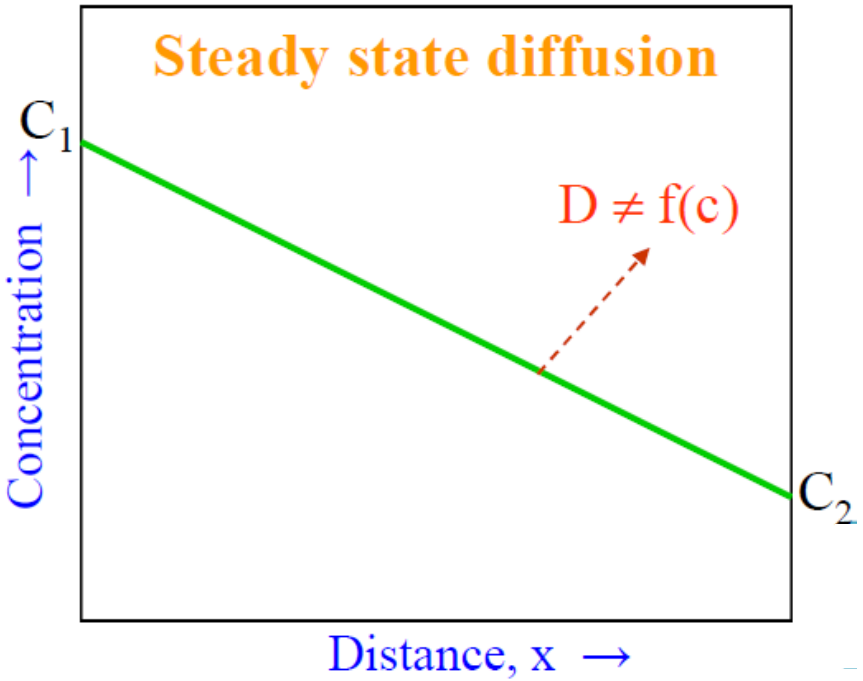
$$D = p\frac{\Delta x^2}{\Delta t}$$



Il coefficiente di diffusione *D* ha dimensioni $[\frac{L^2}{t}]$ si misura quindi in m^2/s

La prima legge di Fick

$$J \propto \frac{dc}{dx} \rightarrow J = -D\frac{dc}{dx} \rightarrow J = \frac{1}{A}\frac{dn}{dt} = -D\frac{dc}{dx}$$

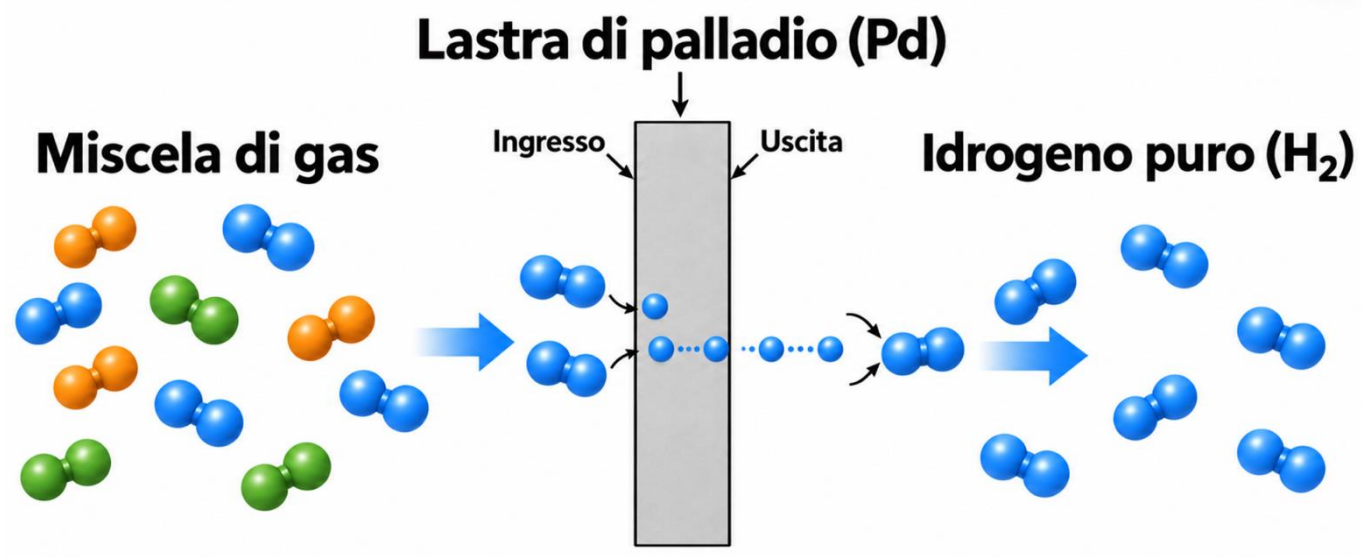


Numero di atomi che attraversano la sezione dell'elemento nel tempo. È costante in un **processo stazionario**.

Il coefficiente di diffusione dipende dalle specie e dalla temperatura a cui avviene il processo

Purificazione dell'idrogeno

Purificazione dell'idrogeno dall'ossigeno, azoto e vapore acqueo attraverso una lamina di palladio. Una delle facce di Pd viene investita dal gas ad alta pressione, l'altra si trova a contatto con una bassa, ma costante, pressione di idrogeno.



Il palladio è un metallo raro, di aspetto bianco-argenteo simile al Pt
I suoi usi più comuni sono nell'industria, come catalizzatore, e in gioielleria. Non si ossida all'aria, è duttile, ma aumenta molto la sua resistenza e durezza se viene lavorato a freddo (incrudito). Il Pd riesce a contenere alte quantità di H, formando un idruro, il Pd_4H_3.

Permeazione dell’idrogeno

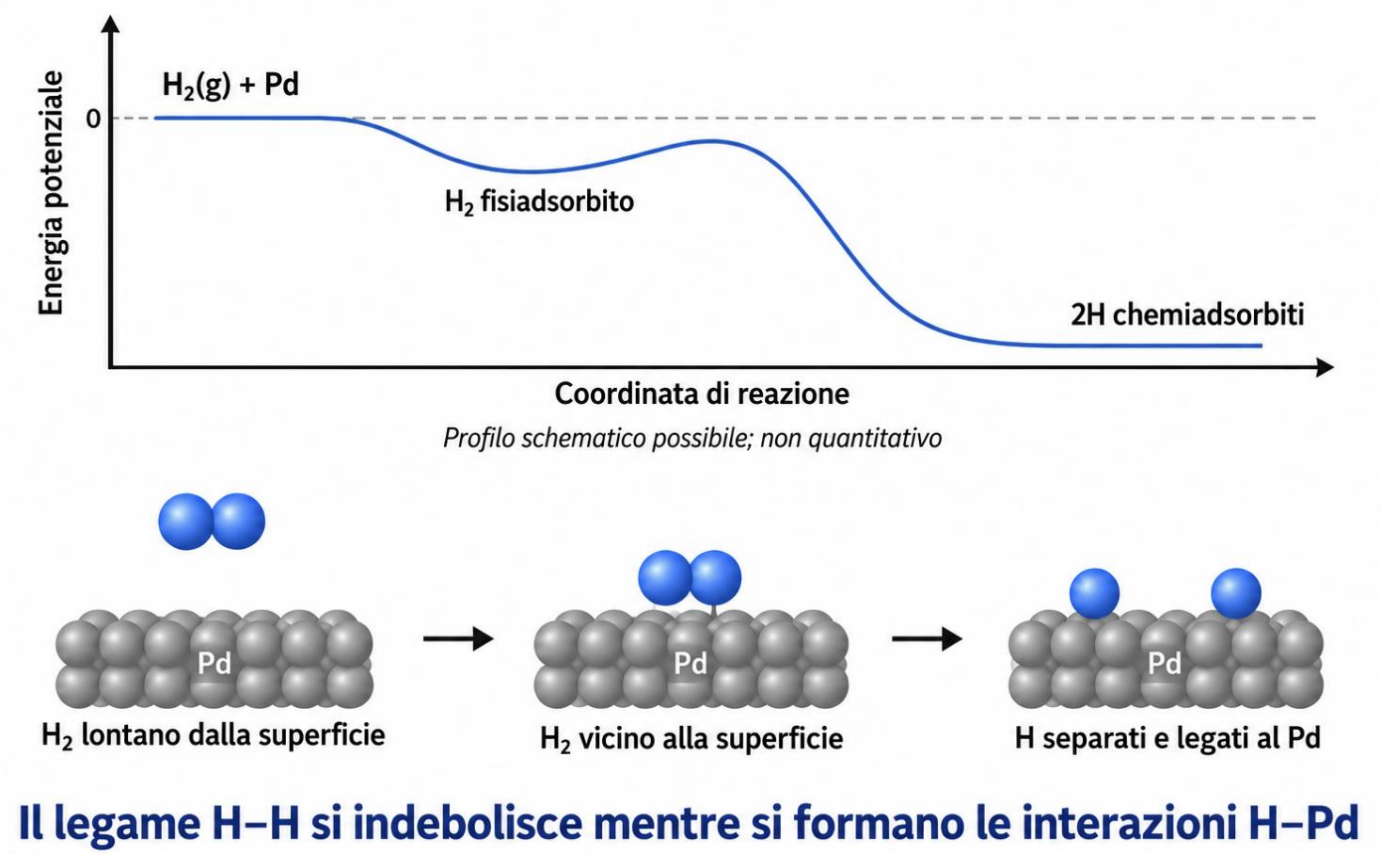
Adsorbimento superficiale: Fisisorbimento reversibile guidato da deboli forze di Van der Waals+ **chemisorbimento** tra Pd e H2 dovuti ad attrazione elettronica.

Dissociazione catalitica Il chemisorbimento indebolisce il legame covalente abbassando drasticamente l'energia di attivazione necessaria per la sua rottura.

Permeazione dell'idrogeno

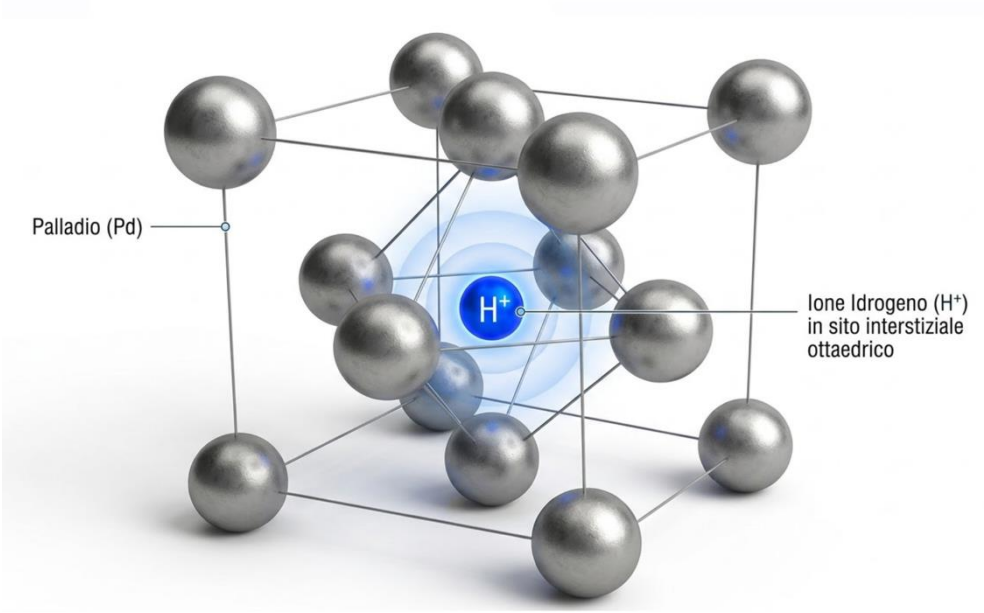
Adsorbimento superficiale: Fisisorbimento reversibile guidato da deboli forze di Van der Waals+ **chemisorbimento** tra Pd e H2 dovuti ad attrazione elettronica.

Dissociazione catalitica Il chemisorbimento indebolisce il legame covalente abbassando significativamente l'energia di attivazione necessaria per la sua rottura.



Diffusione reticolare

Diffusione reticolare (meccanismo interstiziale): Avendo un raggio atomico estremamente ridotto, le specie atomiche generate H_{ads} si solubilizzano all'interno del reticolo CFC del palladio, occupandone i siti interstiziali (tipicamente quelli ottaedrici). Il trasporto di materia lungo lo spessore della membrana avviene tramite un meccanismo termicamente attivato di *hopping* (salto) da un sito interstiziale vuoto all'altro. La forza spingente (driving force) macroscopica di questo flusso netto è il gradiente di potenziale chimico tra il lato retentato e il lato permeato, modellizzabile macroscopicamente attraverso la Legge di Fick.

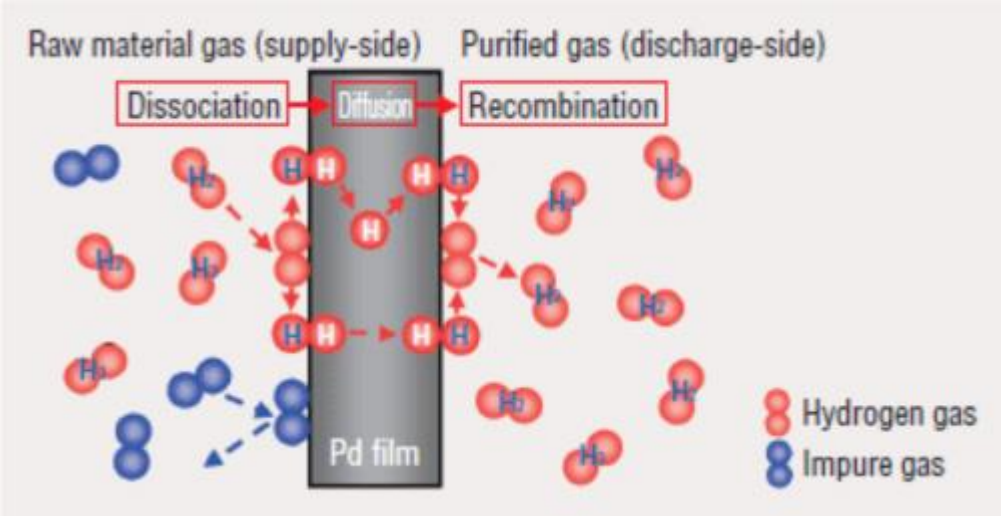


Ricombinazione e desorbimento

Ricombinazione e Desorbimento: Raggiunta l'interfaccia opposta (a minor pressione), gli atomi di idrogeno riemergono dal *bulk* metallico ai siti attivi superficiali dove due atomi di idrogeno adsorbiti si ricongiungono

$$2H_{ads} \rightarrow H2$$

ripristinando il legame covalente. La molecola formatasi vince infine l'energia di chemisorbimento e si desorbe in fase gas. La selettività (idealmente infinita) della membrana è garantita dall'ingombro sterico e dall'assenza di un'analoga reazione catalitica di dissociazione per molecole contaminanti quali CO,CO2 o CH4 , che non possono pertanto penetrare il reticolo metallico.



La cementazione dell'acciaio

Il processo di cementazione o carbocementazione dell'acciaio (carburising) è un trattamento in cui l'acciaio è sottoposto a carburazione della superficie ad alta temperatura al fine di aumentare la sua **durezza superficiale**, mantenendo la tenacità interna. Il metallo così trattato si presenta molto resistente all'usura e agli agli urti.

Si effettua principalmente su pezzi che in esercizio si muovono a contatto con altri e rischiano di usurarsi velocemente, come gli organi di trasmissione degli autoveicoli, gli ingranaggi con denti, gli alberi a camme, i perni…

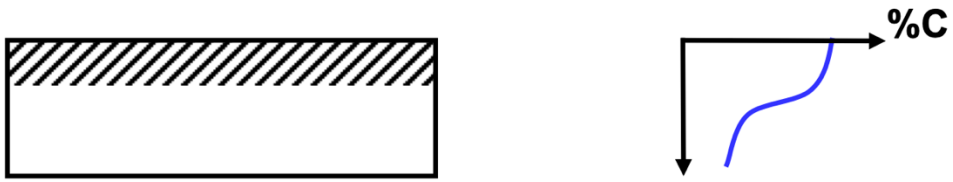
Si esegue su acciai con basso tenore di carbonio <0.2%

Perché?

Perché acciai dolci?

- **per far coesistere in un acciaio le due proprietà superficie dura e resistente all'usura + cuore tenace e resistente agli urti**

- **per favorire la diffusione del C nell'acciaio serve un gradiente di concentrazione di C tra superficie - cuore**



Esercizio: la cementazione

Una lamina di acciaio dolce è sottoposta a carburazione da un lato (atmosfera ricca di C) e decarburazione (atmosfera povera di C) dall'altro a 700°C. Si raggiunge uno stato di diffusione stazionaria.

Calcolare il flusso di carbonio, sapendo che la concentrazione a 5 e 10 mm sotto la superficie di carburazione è 1.4 kg/m^3 e 0.6 kg/m^3 , rispettivamente. Il coefficiente di diffusione a 700°C è $3x10^{-11} m^2/s$.

Esercizio: la carburazione

Una lamina di acciaio dolce è sottoposta a carburazione da un lato (atmosfera ricca di C) e decarburazione (atmosfera povera di C) dall'altro a 700°C. Si raggiunge uno stato di diffusione stazionaria.

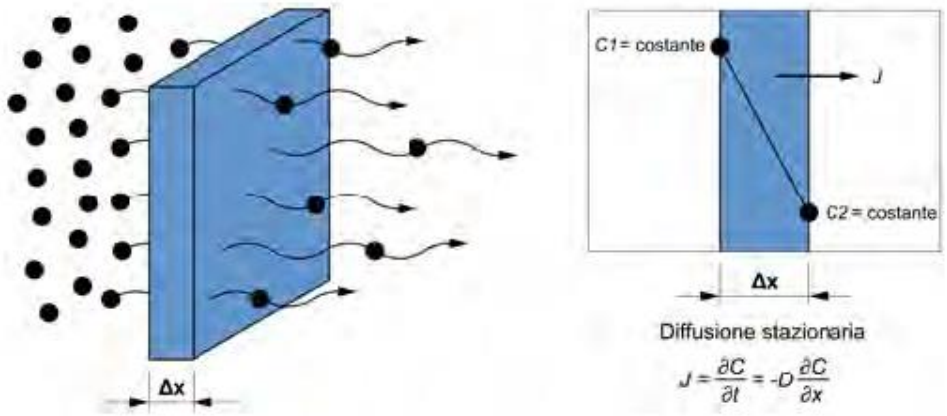
Calcolare il flusso di carbonio, sapendo che la concentrazione a 5 e 10 mm sotto la superficie di carburazione è 1.4 kg/m^3 e 0.6 kg/m^3 , rispettivamente. Il coefficiente di diffusione a 700°C è 3x10^{-11}m^2/s.

$$J = -D\,\frac{C_A - C_B}{x_A - x_B} = -3\times10^{-11}\ m^2/s\ \frac{(1.4-0.6)\ kg/m^3}{(5\times10^{-3} - 10\times10^{-3})\ m}$$

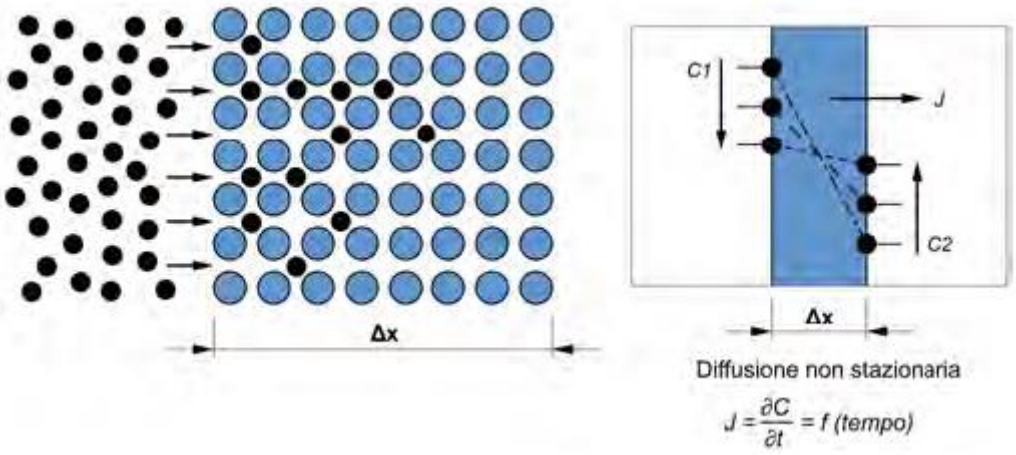
$$= 3\times10^{-11}\ m^2/s\ \frac{0.8\ kg/m^3}{5\times10^{-3}\ m}$$

$$= 0.48\times10^{-8}\ \frac{kg}{m^2\cdot s}$$

Diffusione stazionaria e non stazionaria



In regime stazionario il flusso entrante è compensato dal flusso uscente



In regime non stazionario il flusso entrante non è compensato dal flusso uscente

Il signor Fick

Laurea in matematica e fisica, dottorato in medicina



Adolf Fick
(1829-1901)

Le leggi di Fick sulla diffusione

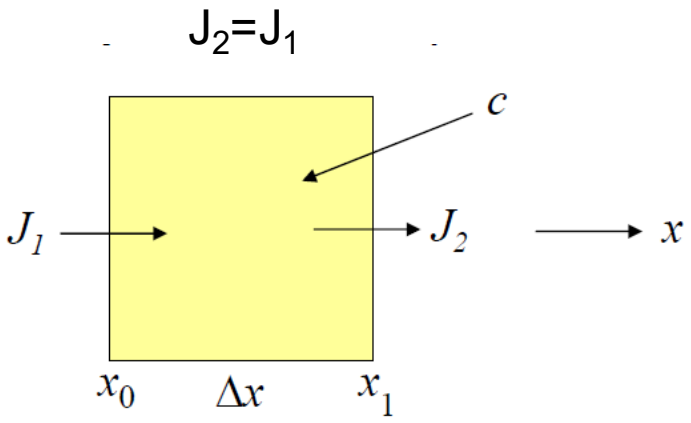
$$J = -D\frac{dc}{dx}$$

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

Prima legge di Fick

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

1st Fick's law



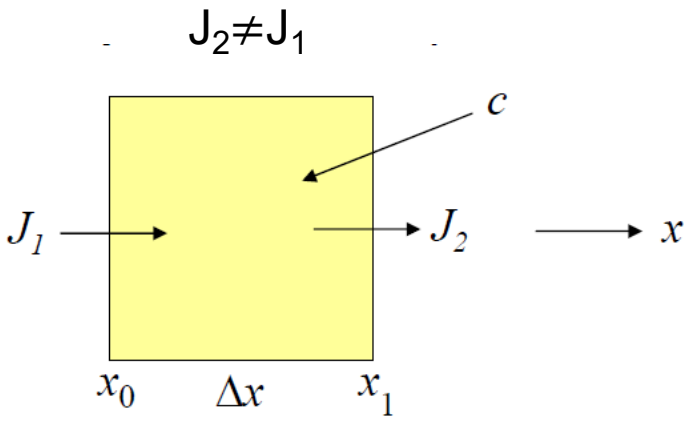
Il flusso di materia dalla concentrazione maggiore a quella minore è proporzionale ad una costante, il coefficiente di diffusione.

- La prima legge di Fick descrive la diffusione in regime stazionario, cioè quando il flusso è costante nel tempo.

NOTA: A rigore la prima legge di Fick vale solamente per una diffusione unidirezionale stazionaria, nel caso di un sistema binario monofasico, isotropo, isotermo e isobaro.

Seconda legge di Fick

2nd Fick's law



La concentrazione cambia nel tempo, il flusso è diverso a destra e a sinistra dell'elemento

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{J_1 - J_2}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x}\left(-D\frac{dc}{dx}\Big|_{x=x_0} - \left[-D\frac{dc}{dx}\Big|_{x=x_1} \right] \right)$$

assumendo che D sia costante

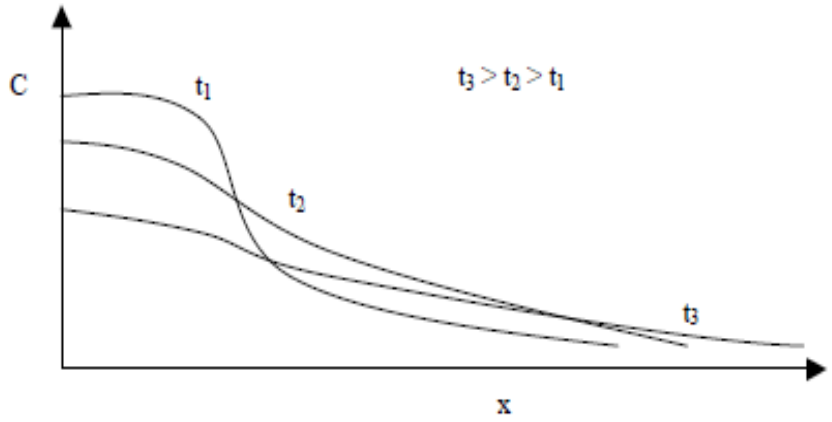
$$J_1 = J(x = x_0) = -D\frac{dc}{dx}\Big|_{x=x_0}$$

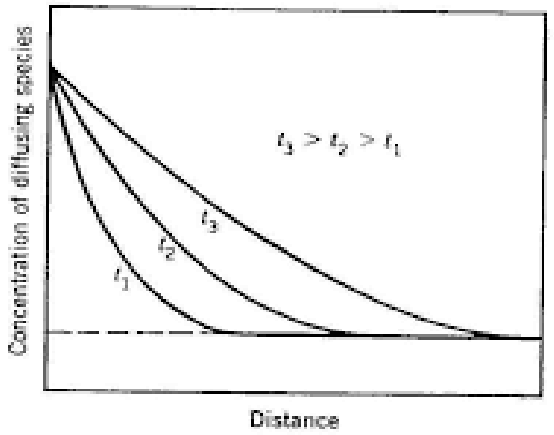
$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right) = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Soluzioni legge di Fick

La soluzione dell'equazione di Fick dà la concentrazione nello spazio a istanti diversi.

Questi due grafici rappresentano due processi di diffusione. Che processi potrebbero rappresentare? Uno dei due è stazionario? In cosa differiscono?

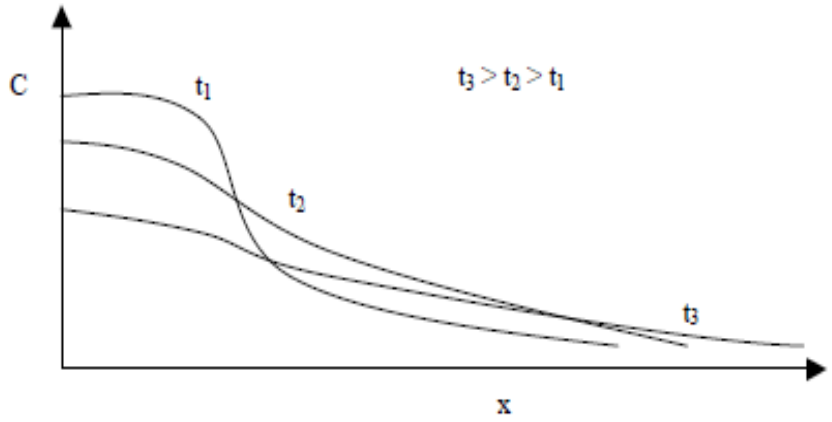


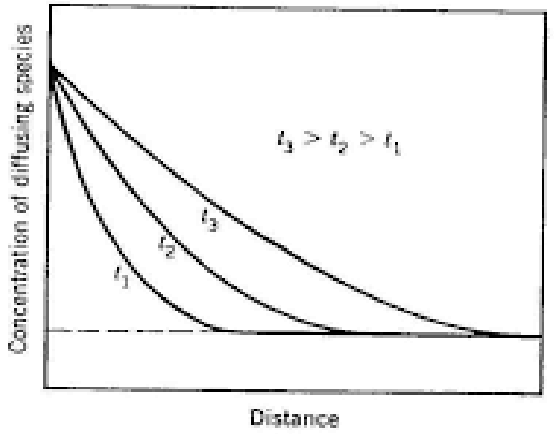


Soluzioni legge di Fick

La soluzione dell'equazione di Fick dà la concentrazione nello spazio a istanti diversi.

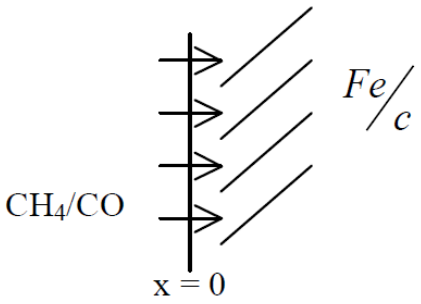
Questi due grafici rappresentano due processi di diffusione. Che processi potrebbero rappresentare? Uno dei due è stazionario? In cosa differiscono?





Potrebbero rappresentare un processo di cementazione o di nitrurazione. Differiscono per le condizioni al contorno: nel primo caso il processo avviene con una quantità fissa di dopante, nel secondo a concentrazione costante di dopante.

Cementazione a concentrazione costante



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

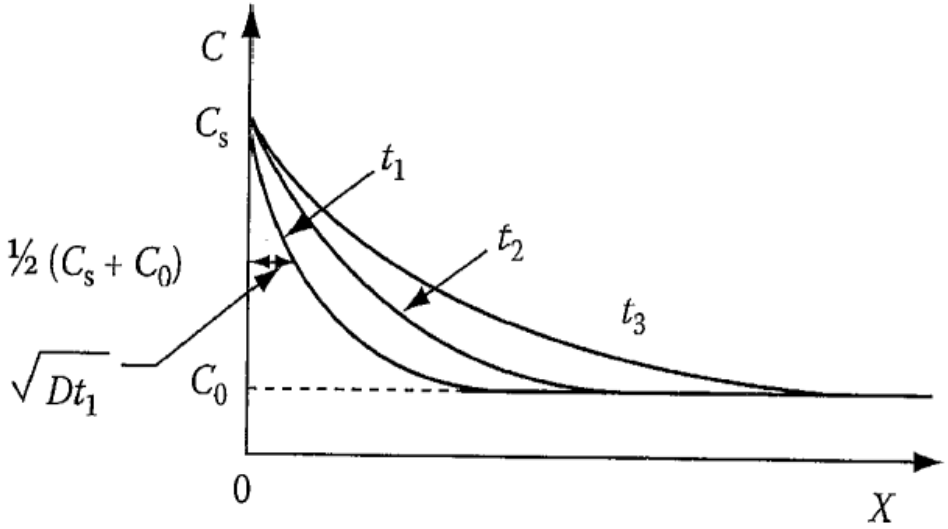
Si risolve l'equazione differenziale per alcune geometrie e condizioni al contorno semplici, ad esempio la diffusione in un corpo semi-infinito (assunzione valida se la sua lunghezza è >10 $\sqrt{Dt}$)

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

For t > 0, $C = C_s$ at $x = 0$

$C = C_o$ at $x = \infty$

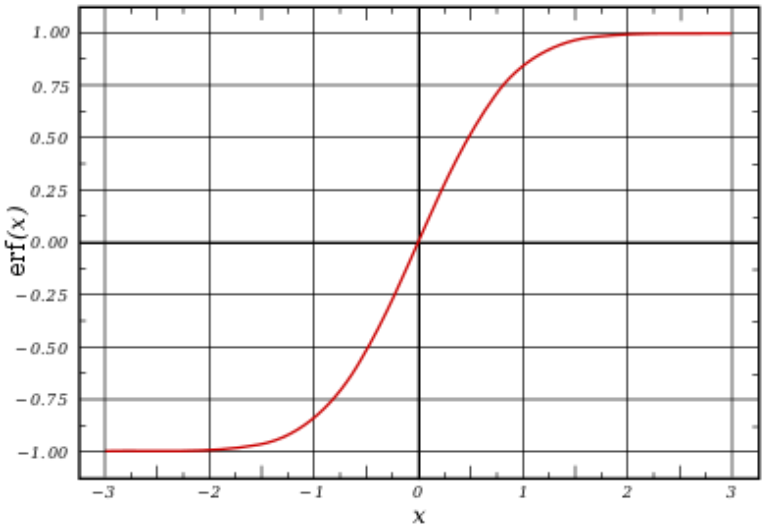
$$c(x,t) = c_s - (c_s - c_0)\,\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$



Spessore di cementazione=1/2(C_s+C_0)

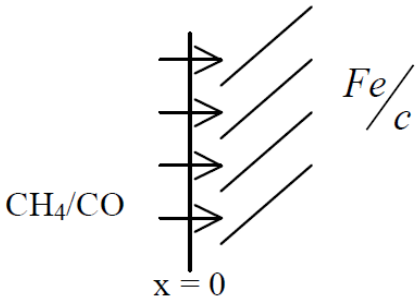
La funzione errore

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$



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

Cementazione a dopante costante



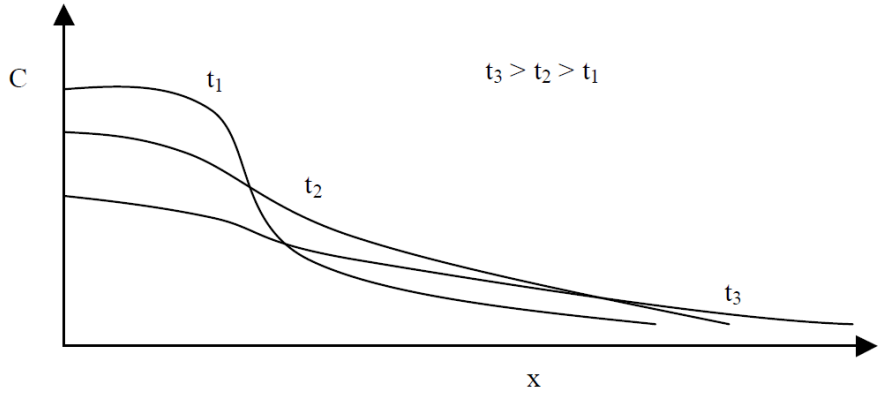
$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right) = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

$$c(x,t) = \frac{\alpha}{\sqrt{t}} e^{-x^2/4Dt}$$

Ora è la quantità di dopante ad essere costante

$$\int_0^\infty c(x,t)dx = N$$

$$c(x,t) = \frac{N}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}$$



La cementazione

OBIETTIVO: ottenere componenti in acciaio che abbiano uno strato superficiale ad elevata durezza e il cuore meno duro ma tenace.

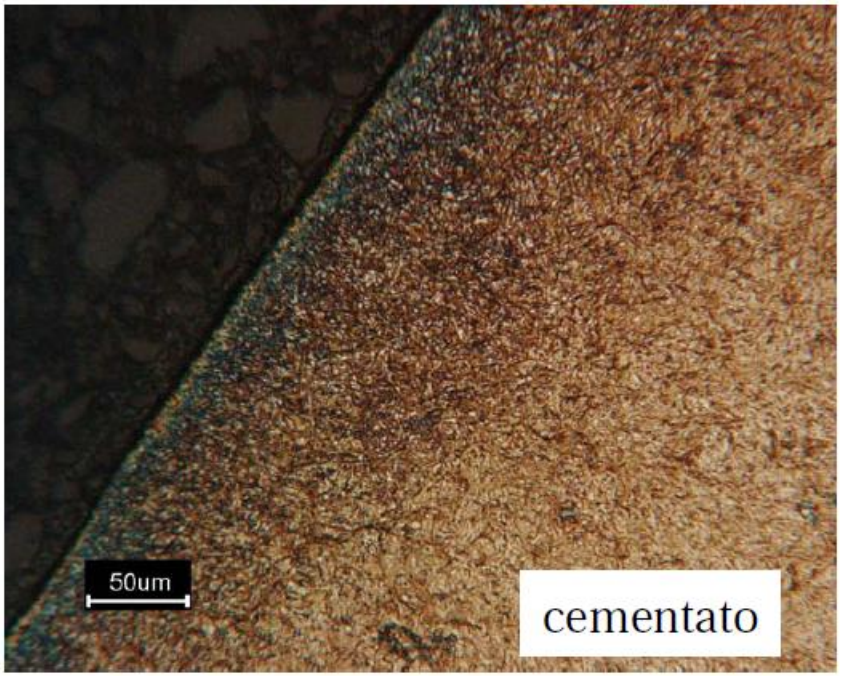
Si è osservato che qualsiasi sia il trattamento termico eseguito sull'acciaio la sua resistenza meccanica, durezza e fragilità cresce al crescere del tenore di carbonio.

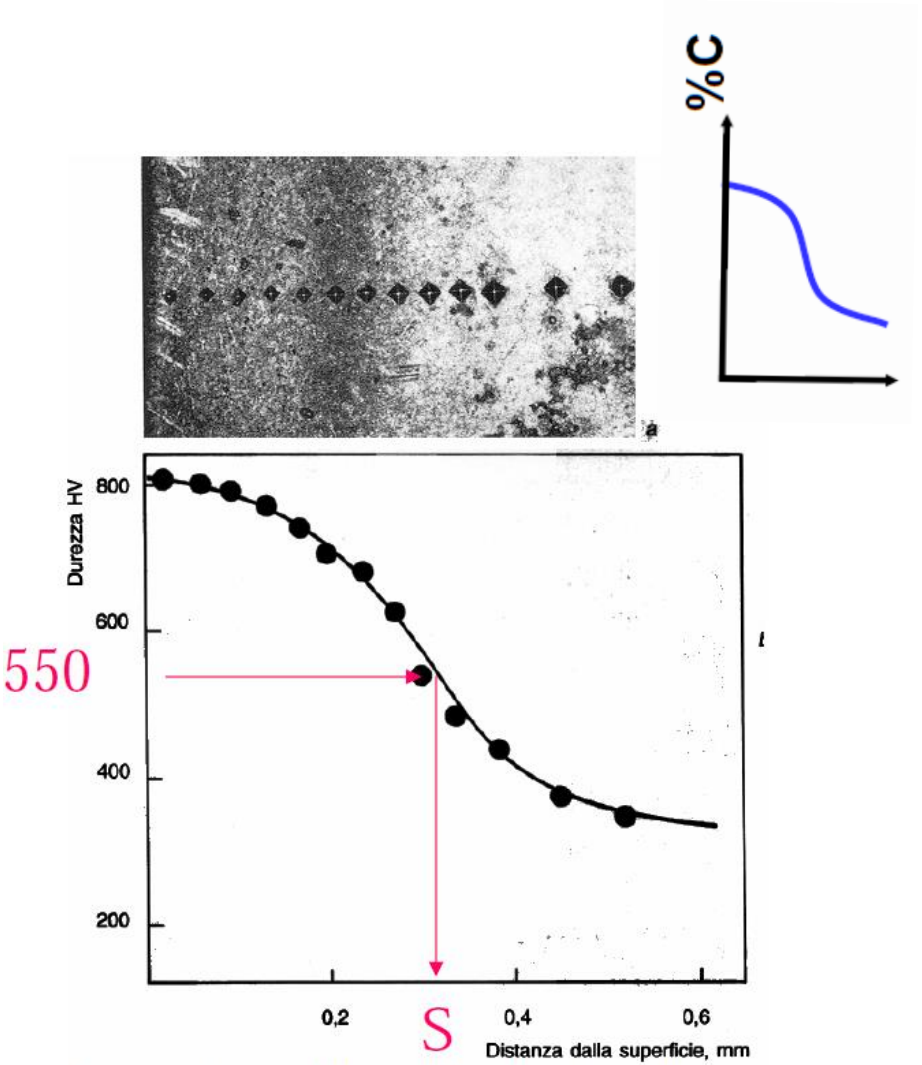


Gli acciai da cementazione hanno C<0.2%
In superficie si arriva a 0.8%

La cementazione è influenzata dalla presenza di alcuni elementi in lega:
(a) favorita dalla presenza di elementi che formano carburi (Cr, W, Mo)
(b) sfavorita dalla presenza di elementi che formano soluzioni solide (Ni, Si, Al)

Profilo di durezza

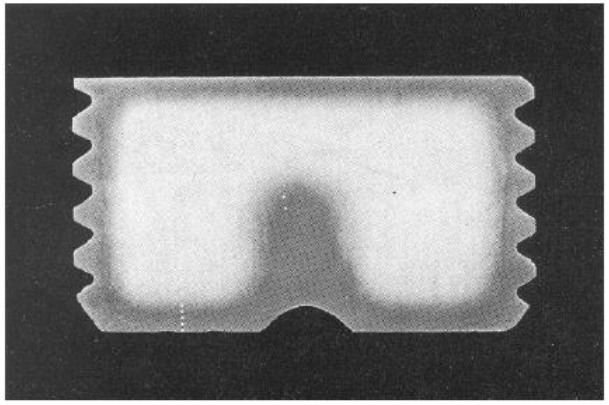




Costruzione del profilo di microdurezza

Profondità di cementazione

Profondità di cementazione: da qualche decimo a qualche mm



sezione ingranaggio cementato
profondità di cementazione 0,8 mm



Durezza max raggiungibile: ~ 800 HV (dopo tempra)

Pezzi cementati

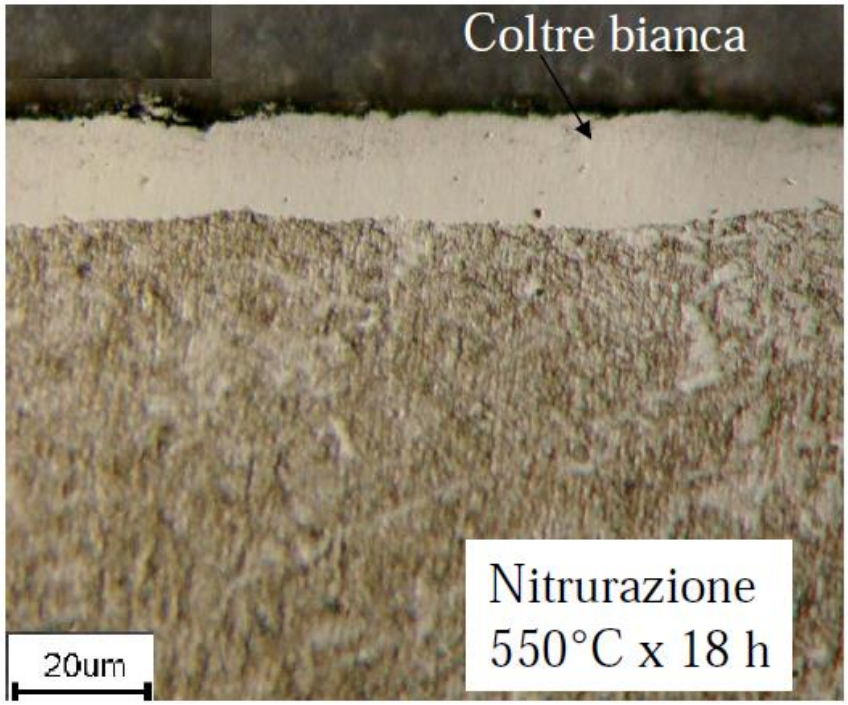
- Elementi di fissaggio (es. viti autofilettanti, bulloni, dadi e rondelle)
- Pezzi per l'industria automobilistica
- Sedi per cuscinetti, sfere, aghi e guide
- Utensili per tranciare
- Catene, perni e rulli
- Utensili a mano, lame per sega, cacciaviti
- Aghi da cucito e da maglia
- .....



La nitrurazione

OBIETTIVO: ottenere elevata resistenza all'usura e migliorare la resistenza a fatica sfruttando il fenomeno di indurimento per precipitazione di nitruri o carbonitruri nello strato di diffusione.

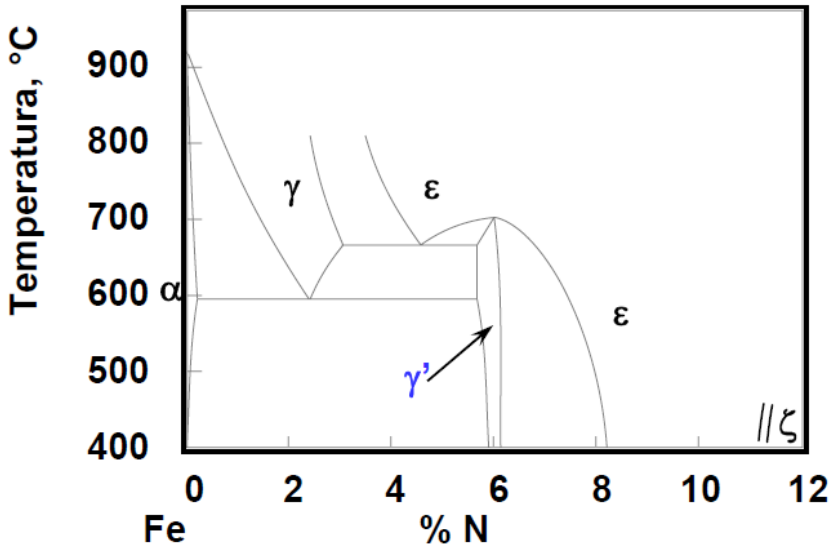
Trattamento di diffusione con azoto su materiali ferrosi (ghise o acciai) a temperature comprese tra 450ºC e 590ºC.

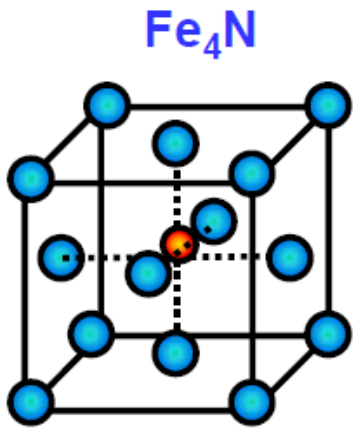


Si trattano per nitrurazione acciai già bonificati (temprati e rinvenuti), è l'ultimo trattamento e dà poca distorsione

Sono acciai legati con elementi che hanno maggior affinità verso l'azoto del Fe. In questo modo si formano nitruri complessi poco fragili

Il nitruro di ferro



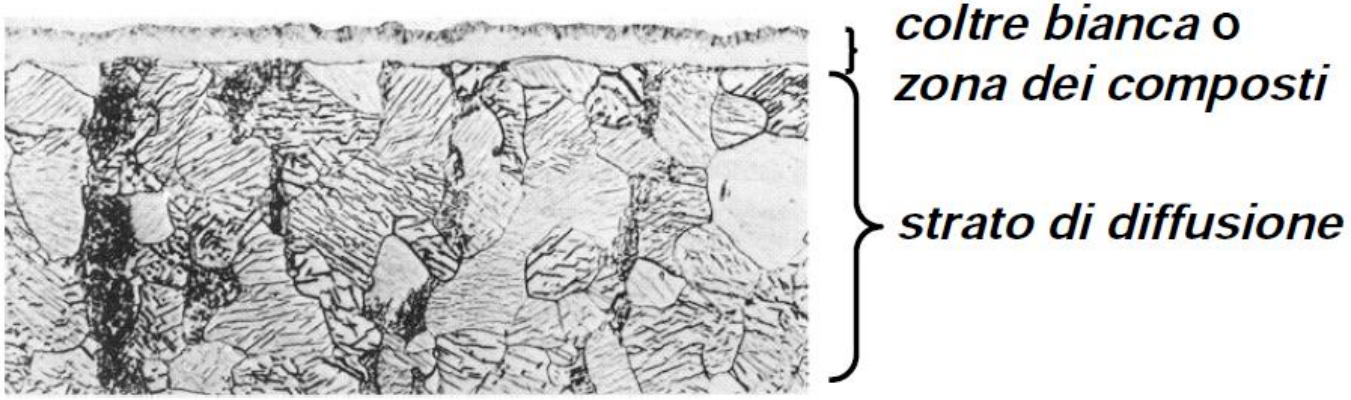


Fase α: soluzione solida di azoto in Feα, con % max di azoto ~ 0,1% a T= 590 °C
Fase γ: soluzione solida di azoto in Feγ e caratteristiche morfologiche dell'austenite, con % max di azoto ~ 3%
Fase γ': composto interstiziale Fe_4N (% azoto ~ 6%) ⇒ nitruro molto duro (~750 HB)
Fase ε: soluzione solida a struttura esagonale con % max di azoto ~ 11% ⇒ nitruro molto duro
Fase ζ: soluzione solida a struttura esagonale Fe_2N, con % di azoto ∈ (11% ÷ 11,3%) ⇒ nitruro molto duro ma molto fragile indesiderato
A 590 °C e a 2,35% di N ⇒ composto eutettoidico (braunite) molto fragile indesiderato
⇒ $T_{nitrurazione}$ < 590 °C

La nitrurazione

COLTRE BIANCA: max 35-40 μm di nitruri $(Fe, Al, Cr)_2N$ o carbonitruri a cristallizzazione tetragonale

STRATO DI DIFFUSIONE: 0.1÷0.8 mm con precipitazione di nitruri (principalmente Fe_4N ma anche nitruri ε in matrice metallica)

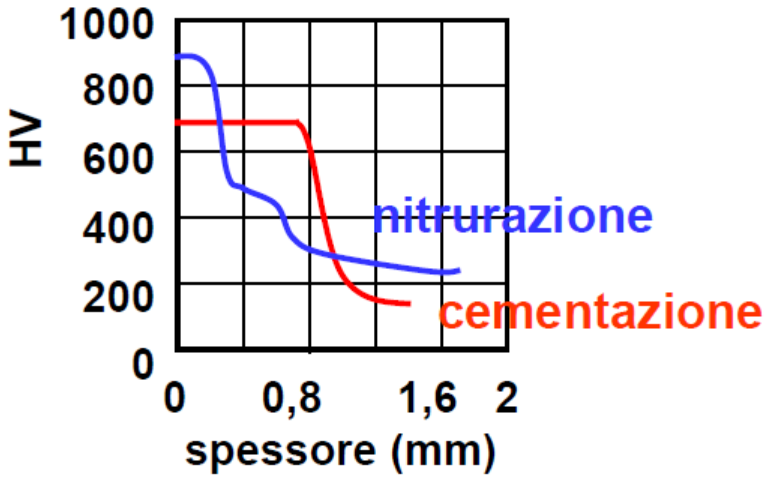


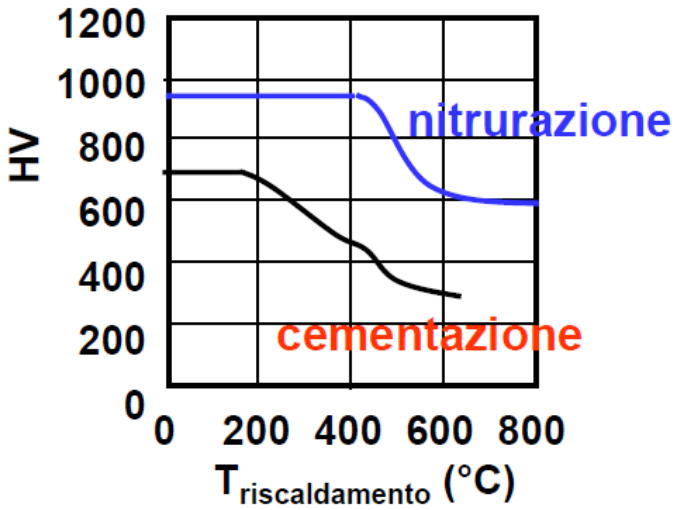
UTILIZZO: ingranaggi, stampi per materie plastiche e pressocolata di leghe leggere, cilindri per la lavorazione della carta (resistenza ad usura)

Cementazione e nitrurazione a confronto

VANTAGGI NITRURAZIONE: durezza più elevata, durezza costante fino a 500ºC, è un trattamento finale, non induce ossidazione, deformazione, ingrossamento della grana

VANTAGGI CEMENTAZIONE: strato indurito più spesso, resiste a carichi maggiori, ciclo di produzione più corto ed economico, gli acciai di base necessitano di meno elementi in lega e sono quindi meno costosi





Esercizio: diffusione non stazionaria

Il coefficiente di diffusione del Cu nell'Al è 4.8×10^{-14} m^2/s a 500°C e $5.3 \times 10^{-13} m^2/s$ a 600°C. Si determini quanto tempo ci vuole per ottenere a 500°C la stessa diffusione di Cu nell'Al (la stessa concentrazione di Cu ad una certa distanza) che si ottiene in 10h a 600°C.

$$c(x, t) = c_s - (c_s - c_0)\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Esercizio: diffusione non stazionaria

Il coefficiente di diffusione del Cu nell'Al è $4.8 \times 10^{-14} m^2/s$ a 500°C e $5.3 \times 10^{-13} m^2/s$ a 600°C. Si determini quanto tempo ci vuole per ottenere a 500°C la stessa diffusione di Cu nell'Al (la stessa concentrazione di Cu ad una certa distanza) che si ottiene in 10h a 600°C.

$$c(x,t) = c_s - (c_s - c_0)\,\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Dt=costante

$$t_{500} = \frac{D_{600}t_{600}}{D_{500}} = \frac{(5.3 \times 10^{-13} m^2/s)(10h)}{4.8 \times 10^{-14} m^2/s} = 110.4\text{h}$$

Diffusione interstiziale e sostituzionale

È più veloce la diffusione interstiziale o sostituzionale?

Diffusione interstiziale e sostituzionale

È più veloce la diffusione interstiziale o sostituzionale?

La diffusione interstiziale è tra i 4 e i 6 ordini di grandezza più veloce che la diffusione sostituzionale (non serve spostare atomi del reticolo).

Esempio: il coefficiente di diffusione del C nell'austenite a 1000°C è 3 x 10^{-11} m^2/s, mentre il coefficiente di diffusione del Ni nell'austenite a 1000°C è 2 x $10^{-16} m^2/s$.

Esercizio: diffrazione

Viene eseguita una misura di diffrazione su un provino di plutonio *bcc* con dei raggi X di lunghezza d'onda λ = 70.930 pm. Il picco relativo al piano 321 viene misurato ad un angolo 2θ = 42.808°. Determinare parametro di cella, raggio atomico e densità del materiale. Determinare inoltre il numero di atomi per cm^3.
(peso atomico Pu = 244 g/mol)

$$\lambda = 2d\sin(\theta)$$

Esercizio

$$\lambda = 2d\sin(\theta) \qquad \Rightarrow \qquad d = \frac{\lambda}{2\sin(\theta)} = \frac{70.930}{2\sin\left(\frac{42.808}{2}\right)}\, pm = 97.18\, pm$$

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \qquad \Rightarrow \qquad a_0 = d_{hkl}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 97.18\sqrt{3^2 + 2^2 + 1^2}\, pm = 363.614\, pm$$

a_0 = 363.6 pm

La cella, dal testo del problema, è *bcc* e quindi gli atomi si toccano lungo la diagonale principale

$$4r = a_0\sqrt{3} \qquad r = \frac{a_0\sqrt{3}}{4} = 363.6\frac{\sqrt{3}}{4}\, pm = 157.5\, pm$$

Esercizio

Per il calcolo della densità devo conoscere massa e volume della cella. La massa è quella di 2 atomi di Pu, il volume è il parametro di cella al cubo:

$$m = 2\frac{AW_{Pu}}{N} \qquad V = a_0^3$$

$$\rho = \frac{m}{V} = 2\frac{AW_{Pu}}{Na_0^3} = 2\frac{244}{6.023\cdot 10^{23}\left(360.3\cdot 10^{-12}\right)^3}\, g/m^3 = 1.68\cdot 10^7\, g/m^3 = 16.8\, kg/dm^3$$

$$n = \frac{2at}{\left(360.6\cdot 10^{-10}\, cm\right)^3} \approx 4.2\cdot 10^{22}\,\frac{at}{cm^3}$$

Take home messages

- La diffusione è il trasporto di massa dovuto al movimento atomico in presenza di energia termica ed un gradiente di concentrazione. Il gradiente di concentrazione puo' essere costante o variabile.

- La prima legge di Fick descrive la diffusione in regime stazionario (flusso costante), la seconda legge di Fick in regime non-stazionario (flusso variabile).

- I fattori che influenzano la diffusione sono la temperatura, la dimensione dell'atomo diffondente, la struttura cristallina della specie in cui diffonde, la presenza di difetti, la concentrazione.

- La diffusione lungo bordi grano, dislocazioni, superfici è maggiore che all'interno di un grano.