

Løsningsforslag: Obligatorisk innlevering nr. 3 i MAS144

Oppgave 1

a) Egendiffusjon og interdiffusjon

- **Egendiffusjon:** Skjer i rene metaller der alle atomene er av samme type. Atomer bytter plass i krystallgitteret, men den kjemiske sammensetningen forblir uendret.
- **Interdiffusjon:** Skjer i legeringer (blanding av ulike metaller). Atomer beveger seg fra områder med høy konsentrasjon til områder med lav konsentrasjon, noe som fører til en netto transport av materiale og endring i kjemisk sammensetning over tid.

b) Mellomromsdiffusjon vs. vakansediffusjon

- **Vakansediffusjon:** Et atom flytter seg fra sin faste plass til en ledig plass (vakanse) i nabolaget. Dette krever at det finnes ledige vakanser i gitteret og at atomet har nok energi til å bryte bindinger.
- **Mellomromsdiffusjon (interstitiell):** Små atomer (som hydrogen, karbon, nitrogen) beveger seg mellom de ordinære gitterposisjonene i krystallstrukturen. De "snoer" seg gjennom hulrommene i gitteret.

c) Hvorfor mellomromsdiffusjon er hurtigere

1. Mellomromsatomene er betydelig mindre enn vertsatomsene og har derfor lettere for å bevege seg gjennom strukturen.
2. Det er langt flere ledige mellomromsplasser enn det er ledige vakanser i et krystallgitter, noe som gir atomene flere muligheter til å flytte på seg.

d) Betingelser for stasjonære betingelser (Steady-state)

For at diffusjon skal være stasjonær, må diffusjonsfluksen (J) være uavhengig av tid. Det betyr at konsentrasjonsprofilen er lineær og ikke endrer seg over tid ($dc/dt = 0$). Mengden stoff som går inn på den ene siden av platen må være nøyaktig lik mengden som kommer ut på den andre siden.

e) Drivkraften ved stasjonær diffusjon

Drivkraften bak stasjonær diffusjon er **konsentrasjonsgradienten** (dc/dx). Det er forskjellen i konsentrasjon over en gitt distanse som tvinger atomene til å bevege seg.

Oppgave 2: Diffusjon av Hydrogen gjennom Palladium

Vi bruker Ficks første lov for stasjonær diffusjon: $J = D(C_1 - C_2)/\Delta x$

Gitte verdier:

- Tykkelse (Δx): $5\text{mm} = 0,005\text{m}$
- Areal (A): $0,25\text{m}^2$
- Temperatur: 500°C
- Konsentrasjon side 1 (C_1): $2,4\text{kg} / \text{m}^3$
- Konsentrasjon side 2 (C_2): $0,6\text{kg} / \text{m}^3$
- Diffusjonskoeffisient (D): $1,0 \times 10^{-8}\text{m}^2 / \text{s}$

Beregning av fluks (J):

$$J = (1,0 \times 10^{-8}\text{m}^2 / \text{s}) \cdot (2,4 - 0,6)\text{kg} / \text{m}^3 / 0,005\text{m} = 3,6 \times 10^{-6}\text{kg} / (\text{m}^2 \cdot \text{s})$$

Beregning av masse per time (M): Vi har 3600 sekunder i en time. $Masse = J \cdot A \cdot tid$

$$Masse = (3,6 \times 10^{-6}\text{kg} / \text{m}^2\text{s}) \cdot (0,25\text{m}^2) \cdot (3600\text{s}) = 0,00324\text{kg} / \text{h}$$

Oppgave 3: Karbonisering i jern (FCC)

Her bruker vi sammenhengen $D \cdot t = \text{konstant}$. For karbon i γ -Fe (FCC) er standardverdier $Q_d = 148\text{kJ} / \text{mol}$ og $D_0 = 2,3 \times 10^{-5}\text{m}^2 / \text{s}$.

Gitt:

- $t_1 = 15\text{h}$ ved $T_1 = 900^\circ\text{C} (1173\text{K})$
- $t_2 = 2\text{h}$ ved $T_2 = ?$

$$\text{Siden } D_1 t_1 = D_2 t_2, \text{ får vi: } e^{-Q_d / RT_1 \cdot t_1} = e^{-Q_d / RT_2 \cdot t_2} \ln(t_1 t_2) = Q_d / R (1/T_2 - 1/T_1)$$

$$\text{Setter inn verdier } (R = 8,314\text{J} / \text{mol} \cdot \text{K}): \ln(152) = 148000 / (8,314(T_2 - 1173))$$

$$2,015 = 17795,3 \cdot (1/T_2 - 0,0008525) \quad 1/T_2 = 0,0001132 + 0,0008525 = 0,0009657$$

$$T_2 = 1035,5\text{K} = 762,5^\circ\text{C}$$

Oppgave 4: Cu-Ni legering

Her er C_x og overflatekonsentrasjon de samme, så argumentet x^2Dt må være konstant. Gitt $t_1 = t_2 = 700h$, forenkles dette til: $x_1^2D_1 = x_2^2D_2$

Gitt:

- $x_1 = 3mm$ ved $T_1 = 1100^\circ C (1373K)$
- $x_2 = 2mm$ ved $T_2 = ?$
- For Cu i Ni: $D_0 = 2,7 \times 10^{-4} m^2 / s$ og $Q_d = 256 kJ / mol$

$$\begin{aligned}
 x_1^2 D_0 e^{-Q_d/RT_1} &= x_2^2 D_0 e^{-Q_d/RT_2} \\
 (x_1/x_2)^2 &= e^{-Q_d/RT_1} / e^{-Q_d/RT_2} = e^{Q_d/R(1/T_2 - 1/T_1)} \\
 \ln(3/2)^2 &= 2560008,314(1/T_2 - 1/1373) \\
 0,8109 &= 30791,4 \cdot (1/T_2 - 0,0007283) \\
 1/T_2 &= 0,00002634 + 0,0007283 = 0,00075464 \\
 T_2 &= 1325,1K = 1052,1^\circ C
 \end{aligned}$$

Oppgave 5: Nitrogenherding av stålaksling

Gitte data:

- $C_0 = 0,002 wt$
- $C_s = 0,50 wt$
- $C_x = 0,10 wt$
- $x = 0,45 mm = 4,5 \times 10^{-4} m$
- $D_0 = 3 \times 10^{-7} m^2 / s$
- $Q_d = 76150 J / mol$

Beregning av feilfunksjon: $C_x - C_0 / C_s - C_0 = 1 - erf(z)$

$0,10 - 0,002 / 0,50 - 0,002 = 0,1968$ $erf(z) = 1 - 0,1968 = 0,8032$ Fra tabell for feilfunksjoner finner vi z når $erf(z) = 0,8032$: $z \approx 0,91$

Ligning for tid t som funksjon av T : $z = x^2Dt \Rightarrow t = x^2 / (4 \cdot z^2 \cdot D)$ Siden $D = D_0 e^{-Q_d/RT}$:

$$t(T) = (4,5 \times 10^{-4})^2 / (4 \cdot (0,91)^2 \cdot 3 \times 10^{-7} \cdot e^{-76150 / (8,314 \cdot T)})$$

$$t(T) = 0,2042 e^{9159,25/T}$$

Tabell over varmebehandlingstider:

Temperatur ($^{\circ}C$)	Temperatur (K)	Tid (s)	Tid (timer)
475 $^{\circ}C$	748K	42078	11,7h
525 $^{\circ}C$	798K	19901	5,5h
575 $^{\circ}C$	848K	10237	2,8h
625 $^{\circ}C$	898K	5653	1,6h

En passende behandlingstid vil være ca. **5,5 timer ved 525°C**.