

1 Diffusione

E' un processo che avviene in funzione della temperatura.

Difetti reticolari sono alla base della diffusione, in particolare le vacanze

Sfruttato nella saldatura

Avviene tra due materiali adiacenti, nel/nei punti di contatto avviene la diffusione, ovvero parte del materiale A è andato ad occupare spazio nel materiale B e viceversa, è un processo che richiede molto tempo.

Dipende dalle dimensioni degli atomi dei due materiali, infatti il materiale con dimensioni più piccole è più propenso a diffondere nel materiale con atomi più grandi.

La vibrazione degli atomi all'interno del solido provoca uno spostamento di essi, crea quindi vacanze e permette a queste vacanze di potersi muovere, il processo di diffusione sfrutta questo principio, il risultato è quindi uno spostamento di atomi da A a B attraverso questi "vuoti" all'interno del solido.

La temperatura va ad agire sulla vibrazione degli atomi e quindi sulla velocità di spostamento di essi, quindi anche alla velocità del processo di diffusione.

Diagrammi che descrivono lo stato di un materiale date delle condizioni di contorno.

Analizzeremo sistemi binari, diagrammi binari, in funzione della variabile temperatura.

Confrontiamo la stabilità termodinamica di diverse fasi.

E' un'analisi indipendente dal tempo

1.1 Modello

Il primo modello è più semplice da analizzare è quello della diffusione stazionaria attraverso una lamina sottile.

La concentrazione delle due facce della lamina è costante nel tempo.

Prima legge di Fick descrive questo modello:

$$J = -D * dC/dx \quad (1)$$

Ovvero J è il flusso, (quantità di massa per quantità di area per unità di tempo) e dipende da:

D coefficiente di diffusione,

C concentrazione

x posizione

il segno "-" è perché il gradiente di concentrazione è negativo, per avere un flusso positivo serve quindi il segno "-"

Se il gradiente di concentrazione non è costante nel tempo la prima legge non è più utilizzabile e viene sostituita dalla

Seconda legge di Fick

E' un'equazione che dipende dal tempo:

$$dC/dt = D d^2C/dx^2 \quad (2)$$

Esempio

Il profilo di concentrazione è un grafico che per ascisse ha la posizione e per ordinate ha la concentrazione

Un profilo di concentrazione varia nel tempo, infatti la tempo t1 sarà un'iperbole molto schiacciata verso l'origine, man mano che il tempo passa, l'iperbole si allarga, la concentrazione di materiale diffuso aumenta.

n.b. la curva non è un'iperbole

La seconda equazione di Fick non è risolvibile analiticamente, può essere nel caso specifico.

Ad esempio nel caso della diffusione del carbonio nel ferro viene risolta come:

$$(Cx - C_0)/(C_s - C_0) = 1 - \text{erf}(x/2 * \sqrt{tD}) \quad (3)$$

Cx: concentrazione in x
C0: concentrazione corrispondente alla concentrazione iniziale e a distanza infinita
Cs: concentrazione in superficie
erf: "l'erfiano" funzione matematica

1.2 Erfiano

Funzione di errore gaussiana

1.3 Coefficiente di diffusione

E' quel parametro che descrive il comportamento della diffusione
Dipende dal materiale che diffonde e dal materiale in cui si diffonde
Dipende dalla temperatura
L'equazione è:

$$D = D_0 - \exp(-Q/(RT)) \quad (4)$$

Q: energia di attivazione del processo diffusivo, dipende dai due materiali
R: costante dei gas
T: temperatura in Kelvin

1.4 Vacanze Vs Interstiziali

Il processo di diffusione tramite vacanze sfrutta lo spazio creato dalle vacanze per accogliere atomi sostituiti.
Il processo di diffusione tramite interstizi avviene quando gli atomi dei due materiali hanno dimensioni molto diverse,
di conseguenza l'atomo con dimensione minore diffonde in quello di dimensione maggiore andando ad occupare gli spazi presenti nel reticolo cristallino.

Il coefficiente di diffusione varia in base alla temperatura, nel caso di diffusione tramite vacanze, il coefficiente di diffusione varia di molto rispetto ad una diffusione tramite interstizi. Questo avviene perché il numero di vacanze e la velocità di spostamento delle vacanze dipende dalla temperatura, invece il numero o la dimensione degli interstizi rimane più o meno invariato.

1.5 Drive In

Pre-deposizione: fase iniziale in cui aspettiamo che si diffonda la quantità di materiale desiderata
Fase nel processo di diffusione secondaria alla fase pre-deposizione in cui il profilo di concentrazione si appiattisce, significa che il materiale diffuso si espande verso l'interno del materiale.
In questa fase la quantità di materiale diffuso non aumenta, cambia invece la profondità a cui lo troviamo.
In generale in questa fase viene aumentata ulteriormente la temperatura per velocizzare il processo.

1.6 Semiconduttori

Semiconduttore è silicio o silicio-germaio, è necessario introdurre delle impurità che sono essenziali per raggiungere le proprietà elettriche desiderate.

Ad esempio la diffusione può avvenire tra metallo e gas, in cui il sistema viene portato ad una temperatura di 900-1000 K.

Per creare interconnessioni nei microprocessori viene tenuto conto anche del processo diffusivo.

Le interconnessioni sono i collegamenti tra componenti in silicio drogato, servono solo per trasportare corrente, +non agiscono attivamente.

La scelta del materiale che viene utilizzato per un'interconnessione dipende dal fatto che durante il processo di creazione di un microprocessore nella fase di creazione di interconnessioni, la temperatura deve rimanere inferiore ai 500°C.

A questa temperatura i metalli diffondono, l'esigenza è che il silicio rimanga puro/impuro come prima di iniziare la creazione di interconnessioni, verrà quindi scelto il metallo con coefficiente di diffusione più basso.

Dati a 500 °C

Cu in Si $\rightarrow 4 \cdot 10^{-13}$

Au in Si $\rightarrow 2.5 \cdot 10^{-15}$

Ag in Si $\rightarrow 4.2 \cdot 10^{-17}$

Al in Si $\rightarrow 2.5 \cdot 10^{-21}$

Diventa evidente che l'alluminio diventa il materiale scelto, nonostante non sia un buon conduttore come gli altri.

2 Diagrammi di Stato

E' un processo che avviene in funzione della temperatura.

Difetti reticolari sono alla base della diffusione, in particolare le vacanze

Sfruttato nella saldatura

Avviene tra due materiali adiacenti, nel/nei punti di contatto avviene la diffusione, ovvero parte del materiale A è andato ad occupare spazio nel materiale B e viceversa, è un processo che richiede molto tempo.

Dipende dalle dimensioni degli atomi dei due materiali, infatti il materiale con dimensioni più piccole è più propenso a diffondere nel materiale con atomi più grandi.

La vibrazione degli atomi all'interno del solido provoca uno spostamento di essi, crea quindi vacanze e permette a queste vacanze di potersi muovere, il processo di diffusione sfrutta questo principio, il risultato è quindi uno spostamento di atomi da A a B attraverso questi "vuoti" all'interno del solido.

La temperatura va ad agire sulla vibrazione degli atomi e quindi sulla velocità di spostamento di essi, quindi anche alla velocità del processo di diffusione.

Diagrammi che descrivono lo stato di un materiale date delle condizioni di contorno.

Analizzeremo sistemi binari, diagrammi binari, in funzione della variabile temperatura.

Confrontiamo la stabilità termodinamica di diverse fasi.

E' un'analisi indipendente dal tempo

2.1 Fase

Una fase è una porzione di materiale omogenea dal punto di vista chimico e fisico anche a livello microscopico.

Sono fasi diverse due materiali solidi uguali con struttura cristallina diversa.

Ad esempio Diamante e Grafite, stessa composizione ma struttura diversa.

Sono fasi diverse Acqua e Ghiaccio.

Dono fasi diverse Acqua e Olio.

Sono Fasi uguali Acqua e Alcool, infatti è una soluzione omogenea.

I metalli allo stato liquido sono sempre perfettamente solubili, qualunque sia la combinazione.

l'interfase è uno stato in cui coesistono più fasi contemporaneamente,
corrisponde alla linea di separazione tra le due fasi nel diagramma di stato

Esempio

Diagramma di stato di composto binario acqua-zucchero.

E' una fase quando la soluzione non è satura, appena lo diventa, allora sono distinte le due fasi, solida e liquida.

Il valore di saturazione dipende dalla temperatura, ecco che viene introdotta la variabile che ci permette di descrivere un andamento.

2.2 Rame-Nichel

Diagramma di stato, ha come variabili temperatura e concentrazione di Nichel.

Ascisse: Concentrazione percentuale.

Ordinate: Temperatura °C 1000-1600

Retta che parte da T: 1085 e %=0 e arriva a T: 1435 e %=100. Viene definita come: Curva di Solidus.

Curva sopra alla retta che parte da T: 1085 e %=0 e arriva a T: 1435 e %=100. Viene definita come: Curva di Liquidus.

Al di sopra della curva vi è la fase liquida.

Al di sotto della retta vi è la fase solida.

Tra la curva e la retta (simile ad una lente) vi è la coesistenza tra le due fasi solido e liquido della lega.

Per qualsiasi punto posizionato tra retta e curva possiamo determinare le concentrazioni delle due fasi.

Per calcolare questo punto si comincia disegnando una linea isoterma, quindi una linea orizzontale, che va quindi ad intersecare

la curva di liquidus e la curva di solidus. I punti di intersezione corrispondono alla composizione della fase liquida e alla

composizione della fase solida. Questa non è ancora una quantità di fasi, definisce solo la composizione delle due fasi.

Per arrivare alla quantità delle due fasi è necessario applicare una formula che mette in relazione le concentrazioni.

Viene sfruttato il fatto che la concentrazione totale delle due fasi non cambia, quindi se a 1000 °C (ovvero monofasico solido) la

concentrazione era 65-35, anche a 1250°C la concentrazione dovrà rimanere 65-35.

W_a e W_l sono le quantità percentuali delle due fasi, rispettivamente solida e liquida

$$W_a + W_l = 1 \quad (5)$$

La somma delle percentuali devono dare 100%

$$W a * C a + W l * C l = C 0 \quad (6)$$

$C 0$ è la concentrazione iniziale ad esempio nello stato monofasico solido

Le formule seguenti ci permettono quindi di calcolare la quantità delle fasi
Viene chiamata regola della leva

$$W l = (C a - C 0) / (C a - C l) \quad (7)$$

$$W a = (C 0 - C l) / (C a - C l) \quad (8)$$

2.3 Rame Nickel Solidificazione

Lega Rame-Nichel 65-35

Punto b appena sotto alla linea di liquidus ovvero è appena cominciato il processo di Solidificazione
Presenza di due fasi: composizione della fase liquida è circa 65-35, la composizione del solido sarà 46% Nickel.
La temperatura di fusione del Nickel è più alta di quella del rame, di conseguenza abbassando la temperatura si solidificherà per primo.

Punto c al di sotto del punto b, si trova quindi ad una temperatura più bassa.
In questo punto anche il rame avrà cominciato a sciogliersi, quindi la composizione sarà nella fase liquida 32% Nickel e nella fase solida 43% Nickel.

Punto d appena prima della solidificazione completa.
In questo punto ci sarà pochissima quantità di fase liquida e questa avrà una concentrazione molto alta di rame, infatti nella fase liquida la composizione sarà 24% Nickel.
La fase solida avrà una composizione molto simile alla composizione originale ovvero 35% Nickel.

2.4 Andamento della Solidificazione

diagramma che rappresenta l'andamento della frazione volumetrica di materiale trasformata in funzione del logaritmo del tempo
condotta a temperatura costante.

E' un andamento a sigmoide infatti ha una forma a "S" schiacciata

Tempo di nucleazione, tempo necessario perché la nucleazione inizi, tempo in cui si creano gli embrioni, termina quando dagli embrioni si creano i nuclei.

Da questo tempo comincia la crescita che continua fino al 100%

Il punto di completa trasformazione è complicato da calcolare, infatti la trasformazione ha un andamento asintotico.

E più semplice determinare il tempo al 50% della trasformazione.

2.5 Riscristallizzazione

I cristalli si formano nella Solidificazione, ma in funzione della temperatura è possibile che durante lo stato solido si formino altri cristalli.

Ad esempio in seguito a deformazioni si creano dislocazioni e il processo di ricristallizzazione permette al metallo di rimuovere queste deformazioni ricristallizzando il metallo.

Questo processo dipende dalla temperatura, infatti a 135 °C comincia dopo un paio di secondi e termina dopo circa 30,

a 34°C comincia dopo un decina di minuti e termina in una decina di ore.