

## Homework 2

1) on prend eq 1.55 du chapitre 2

$$D_A = D_0 \exp \left( - \frac{Q_A}{RT} \right)$$

on a donc  $D_A = 2 \cdot 10^{-5} \exp \left( - \frac{142 \cdot 10^3}{8,314 \cdot (927 + 273,15)} \right)$

$$D_A = 1,3197 \cdot 10^{-11} \quad \leftarrow \text{diffusion du carbone dans le fer}$$

2) Même principe

$$D_A = 7,7 \cdot 10^{-5} \exp \left( - \frac{280 \cdot 10^3}{8,314 \cdot (1100 + 273,15)} \right)$$

$$D_A = 1,717 \cdot 10^{-15} \quad \leftarrow \text{diffusion du nickel dans le fer}$$

Carbone  $\rightarrow$  diffuse interstitiellement

Nickel  $\rightarrow$  diffusion <sup>de</sup> substitution (prend la place d'un atome de fer)

c'est pour ça qu'on a une diffusion du carbone qui est plus grande que la diffusion du Nickel. De plus l'énergie d'activation est plus grande pour le Nickel ce qui explique ce résultat.

3)

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

$$\ln(D) - \ln(D_0) = - \frac{\Delta H}{RT}$$

$$\ln(D) - \ln(D_0) = - \frac{\Delta H}{RT}$$

$$\ln(D_2) - \ln(D_1) = \ln(D_0) - \ln(D_0) - \frac{\Delta H}{RT_2} + \frac{\Delta H}{RT_1}$$

$$\ln \left( \frac{D_2}{D_1} \right) = \frac{\Delta H}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$R \cdot \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)^{-1} \ln \left( \frac{D_2}{D_1} \right) = \Delta H$$

$$\Delta H = 182,6 \text{ kJ/mol}$$

4) Pareil

$$\begin{aligned} \Delta H &= R \cdot \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)^{-1} \ln \left( \frac{D_2}{D_1} \right) \\ &= 8,314 \cdot \left( \frac{1}{673,15} - \frac{1}{1573,15} \right)^{-1} \ln \left( \frac{1,5 \cdot 10^{-14}}{1,5 \cdot 10^{-15}} \right) \\ &= 22,525 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

5) Fick's Law:

$$J = -D \cdot \nabla C$$

$$D = v \cdot a^2 = 1,963 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$$

concentration gradient:  $\nabla C = \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right) = -\frac{J}{D} = -\frac{4 \cdot 10^{-14}}{1,963 \cdot 10^{-12}} = -2,04 \cdot 10^{-2}$

concentration  $\Delta C$ :

$$\Delta C = \nabla C \cdot 10 \cdot 10^{-6} = -2,04 \cdot 10^{-2}$$

6)

$$\begin{aligned} D &= D_0 \cdot e^{-\frac{\Delta H}{RT}} \\ &= 10^{-5} \cdot e^{-\left( \frac{134 \cdot 10^3}{8,314 \cdot 1173,15} \right)} \end{aligned}$$

$$D = 1 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D_2 = 2D = 2 \cdot 10^{-11}$$

$$\ln \left( \frac{D_2}{D_0} \right) = -\frac{\Delta H}{RT_2}$$

$$\ln \left( \frac{2D_0 e^{-\frac{\Delta H}{RT}}}{D_0} \right) = -\frac{\Delta H}{RT_2}$$

$$\ln(2) - \frac{\Delta H}{RT} = -\frac{\Delta H}{RT_2}$$

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T} - \frac{\ln(2)R}{\Delta H}$$

$$T_2 = 1235 \text{ K}$$