

CÁTEDRA: MATERIALES

GUIA DE PROBLEMAS

TEMA: DIFUSION Y DEFECTOS EN SÓLIDOS

- 1) El Cu tiene una estructura FCC con un parámetro de red de 0,3615 nm. Las direcciones compactas están en direcciones $\langle 110 \rangle$. Tener en cuenta que la distancia de repetición es la mitad de la diagonal de la cara. Calcule el vector de Burger en el cobre. Rta: $|b| = 0,51125 \text{ nm}$

Cu FCC

$a = 0,3615 \text{ nm}$

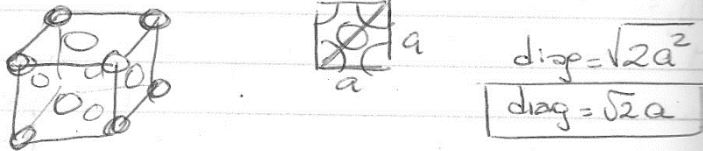
dir compacta $\langle 110 \rangle \rightarrow \text{repet} = 1/2 \text{ diagonal}$

$|b| = ?$

$|b| = \frac{1}{2} (\text{diag})$

Si tiene dir $[110] \Rightarrow \perp \begin{matrix} \text{plano} \\ \{110\} \end{matrix}$

dist entre ambos $(100) \text{ y } (010)$



$\text{diag} = \sqrt{2}a^2$

$\text{diag} = \sqrt{2}a$

$|b| = \sqrt{2} \cdot 0,3615 \text{ nm}$

$|b| = 0,51125 \text{ nm}$

el b tiene la dir $\langle 110 \rangle$ y long 0,280 nm

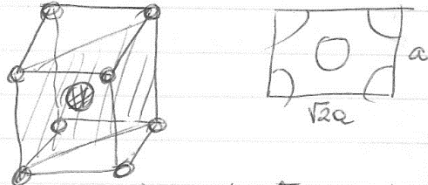
- 2) La densidad planar del plano (112) en el Fe BCC es $9,94 \cdot 10^{14} \text{ at/cm}^2$. Calcular la densidad planar en plano (110) y las distancias interplanares en ambos casos. Indique en que plano ocurriría un deslizamiento? Rta: $\delta_{pl(110)} = 1,72 \cdot 10^{25} \text{ at. cm}^{-3}$. Deslizo por Plano (110)

(2) $\delta_{(112)} = 9,94 \cdot 10^{14} \text{ at/cm}^2$

$a = 0,2866 \text{ nm}$

Fe BCC

$\delta_{(110)}$



$d_{110} = \frac{2,866 \text{ nm}}{\sqrt{2}} = 2,0266 \text{ nm} \rightarrow \text{+ compacto} \Rightarrow \text{desliza//}$

$d_{112} = \frac{2,866 \text{ nm}}{\sqrt{6}} = 1,17 \text{ nm}$

$\delta_{\text{planar}(110)} = \frac{\text{celda atomos}}{\text{Area}} = \frac{2}{\sqrt{2}a \cdot a} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot a^2}$

$\delta_{\text{planar}(110)} = 1,72 \cdot 10^{25} \text{ at/cm}^2$

$\delta_{(112)} = 9,94 \cdot 10^{14} \frac{\text{at}}{\text{cm}^2} \rightarrow \text{enunciado}$

- 3) Calcular la densidad de vacancias en m^{-3} para el aluminio a 500° , sabiendo que las vacancias existentes son de 9×10^{-4} . La Densidad de Al es $2,7 \cdot 10^3 kg/m^3$. El PM: 26,9 g/mol. Rta: $5,42 \cdot 10^{25} vac.m^{-3}$

③ densidad de vacancias (m^{-3})

Al

$T = 500^\circ C$

$\frac{n_v}{N} = 9 \cdot 10^{-4}$

$\rho_{Al} = 27 \cdot 10^3 kg/m^3$

PM = 26,9 g/mol

$$\rho_{atom} = \frac{\rho}{\frac{PM}{N_{Avog}}} = \frac{27 \cdot 10^6 g/m^3}{26,98 g / (6,02 \cdot 10^{23} at)}$$

$\rho_{at} = 6,022 \cdot 10^{28} atom/m^3$

$$\rho_{vac} = F_{vac} \cdot \rho_{at} = 9 \cdot 10^{-4} \cdot 6,022 \cdot 10^{28} at/m^3$$

$$= 5,42 \cdot 10^{25} vac/m^3$$

- 4) Determine el numero de vacancias para que una red de Fe BCC tenga una densidad de $7,8 g/cm^3$. Datos: Parametro de red del Fe = $2,86 \times 10^{-8} cm$. PM=55,58 g/mol. Rta: $1,23 \cdot 10^{20} vac$.

1º Análisis y comparo con ρ_{Fe} teorica

BCC \rightarrow 2 átomos x celda

$$\rho = \frac{at \cdot PM}{V \cdot N_{Av}}$$

$$\rho = \frac{2atm/celda (55,58 g/mol)}{(2,866 \cdot 10^{-8} cm)^3 \cdot (6,02 \cdot 10^{23} at/mol)} = 7,879/cm^3$$

$$\frac{at}{celda} \rightarrow \frac{7,879 g / (2,866 \cdot 10^{-8} cm)^3 \cdot (6,02 \cdot 10^{23} at/mol)}{55,84}$$

$$\frac{at}{celda} = 1,997$$

$as < 2 \Rightarrow \exists$ vacancias

$$\frac{n_v}{N} = 2 - 1,997 = 0,0029 vac/celda$$

$$\frac{n_v}{N} = \frac{0,0029 vac/celda}{(2,866 \cdot 10^{-8} cm)^3} = 1,23 \cdot 10^{20} vac$$

- 5) Determinar la proporción de sitios vacantes para el LiCl a $25^\circ C$, sabiendo que el $\Delta H = 3,4 \cdot 10^{-19} J$

LiCl $\Delta H = 3,4 \cdot 10^{-19} J$

$$\frac{n_v}{N} = e^{\left(\frac{-\Delta H}{RT}\right)}$$

- 6) Un aluminio contiene el 0,19 % de átomos de cobre en su superficie y el 0,18% a 1,2 mm por debajo de ella. ¿Cuál será el flujo de átomos de cobre desde la superficie hacia el interior a 500°C si la estructura del Al es C.C.C. con una constante reticular $a=0,4049\text{nm}$? DATOS: Constante de Boltzman = $13,8 \cdot 10^{-24} \text{ J/at K}$; $D_0 = 0,15 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$. Energía de activación del Cu en Al: $E = 0,21 \cdot 10^{-18} \text{ J/at}$. Rta: $J=2,11 \cdot 10^{14} \text{ at}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$

6) Al FCC

$C_s = 0,19\% \text{ Cu}$
 $C_i = 0,18$
 $x = 1,2(\text{mm})$
 $J = ?$
 $T = 500^\circ\text{C} = 773\text{K}$
 $a = 0,4049 \text{ nm}$
 $k = 13,8 \cdot 10^{-24} \text{ J/at} \cdot \text{K}$
 $D_0 = 0,15 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
 $\text{Cu} \rightarrow \text{Al}$
 $E_a = 0,21 \cdot 10^{-18} \text{ J/at}$

1) Det. $\frac{n \cdot \text{at}}{\text{Vol}} \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial x}$

$\frac{n \text{ cel}}{\text{Vol}} = \frac{4}{(0,4049 \text{ nm})^3} = 6,02 \cdot 10^{28} \text{ at}/\text{m}^3$

$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{6,02 \cdot 10^{28} \text{ at}}{\text{m}^3} \cdot \left(\frac{0,18}{100} - \frac{0,19}{100} \right)$

$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{6,02 \cdot 10^{28} \text{ at}}{\text{m}^3} \cdot \frac{-0,01}{100}$

$\frac{\partial C}{\partial x} = -6,02 \cdot 10^{25} \text{ at}/\text{m}^4$

$D = 0,15 \cdot 10^{-4} \text{ e}^{-\frac{0,21 \cdot 10^{-18}}{13,8 \cdot 10^{-24} \text{ J/at} \cdot \text{K}}} = 4,23 \cdot 10^{-14} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$

$J = -4,23 \cdot 10^{-14} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \cdot (-6,02 \cdot 10^{25} \frac{\text{at}}{\text{m}^4}) \Rightarrow$

$J = 2,55 \cdot 10^{14} \frac{\text{at}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$

$J = 2,11 \cdot 10^{14} \frac{\text{at}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$

- 7) A 400°C la fracción de vacancias en una red de aluminio es de $2,29 \cdot 10^{-5}$. Calcule la densidad de vacancias en m^3 . Rta: $1,4 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$.

7) Red. Aluminio

$T = 400^\circ\text{C}$
 $x_v = 2,29 \cdot 10^{-5}$
 $\rho_v (\text{m}^3) = 2,7 \text{ Mg}/\text{m}^3$
 $P_M = 26,98 \text{ g/mol}$

$\rho_{\text{at}} = \frac{\rho}{\text{masa Atom}} = \frac{2,7 \cdot 10^6 \text{ g}/\text{m}^3}{26,98 \text{ g/mol} \cdot (6,02 \cdot 10^{23})}$

$\rho_{\text{at}} = 6,02 \cdot 10^{28} \text{ at}/\text{m}^3$

$\Rightarrow \rho_{\text{vac}} = 2,29 \cdot 10^{-5} \text{ at}^{-1} \cdot 6,02 \cdot 10^{28} \text{ at}/\text{m}^3$

$\rho_{\text{vac}} = 1,38 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$

- 8) La fracción de vacantes en la red de Al es de $2,29 \cdot 10^{-5}$ a una $T=400^\circ\text{C}$. Calcule la fracción a 660°C . Datos: E° para formar una vacancia= $0,76 \text{ eV}$. Cte Boltzman= $86,2 \cdot 10^{-6} \text{ eV/K}$. Rta: $8,8 \cdot 10^{-4}$

$X_v = 2,29 \cdot 10^{-5} \rightarrow 400^\circ\text{C} = 673\text{K}$ $V_{or}^{54} E_v = 0,76\text{eV}$
 $X_{v_2} =$ $\frac{n_v}{N} = e^{-\frac{E_v}{RT}}$
 $T = 660^\circ\text{C} = 933\text{K}$
 $K = 862 \cdot 10^6 \text{ eV/K}$ $C = \frac{n_v}{N} = e^{-\frac{E_v}{KT}}$

- 9) Si la fracción de vacantes en equilibrio térmico en el aluminio es de 1.29×10^{-5} a 500°C , calcular la fracción a 25°C y 900°C ($T_{\text{fusión}} = 961^\circ\text{C}$). Expresar la concentración de vacantes en términos de n° de vacantes/ cm^3 . Calcular las densidades correspondientes a esas tres temperaturas, teniendo en cuenta la fracción de vacantes. ¿Cómo afectaría a la densidad si la fracción de vacantes fuese del 1%? Datos del Al: $P_{\text{molar}} = 26,98 \text{ g/mol}$, estructura FCC con parámetro de red $a = 4,0496 \text{ \AA}$.
Rta $\rho = 2,673 \text{ g/cm}^3$ la densidad disminuyó.