



**BİYONANOTASARIM
LABORATUVARI**

BMM 205 Malzeme Biliminin Temelleri

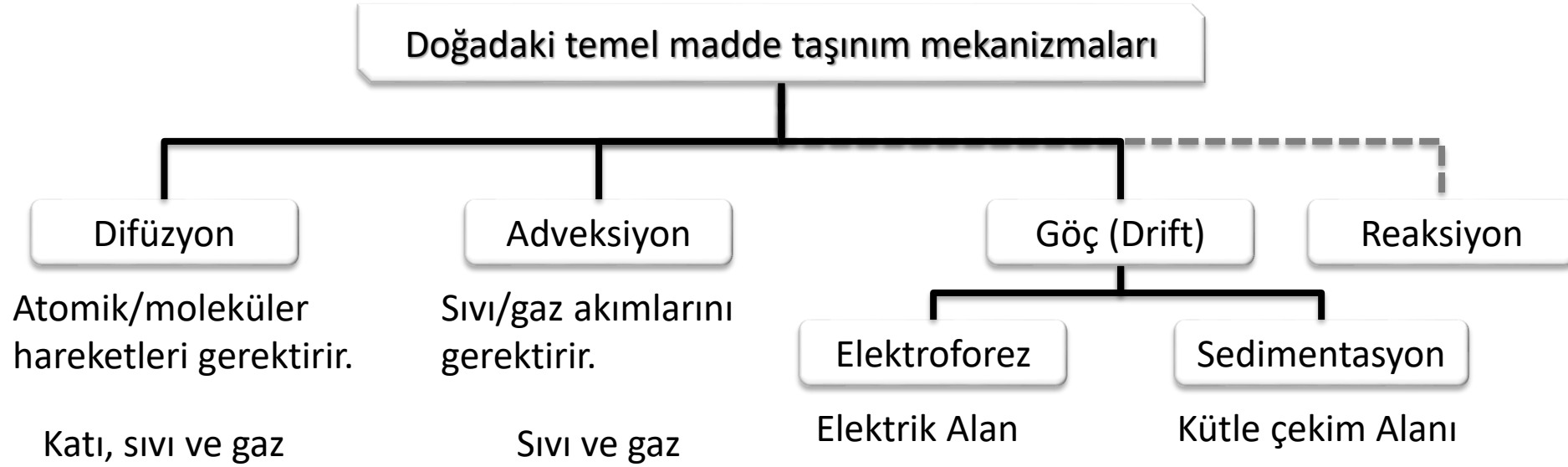
Katılarda Yayınım

Dr. Ersin Emre Ören

**Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği Bölümü**

**TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi
Ankara - TÜRKİYE**

eeoren@etu.edu.tr
<http://eeoren.etu.edu.tr>



Konveksiyon = Difüzyon + Adveksiyon

Difüzyon

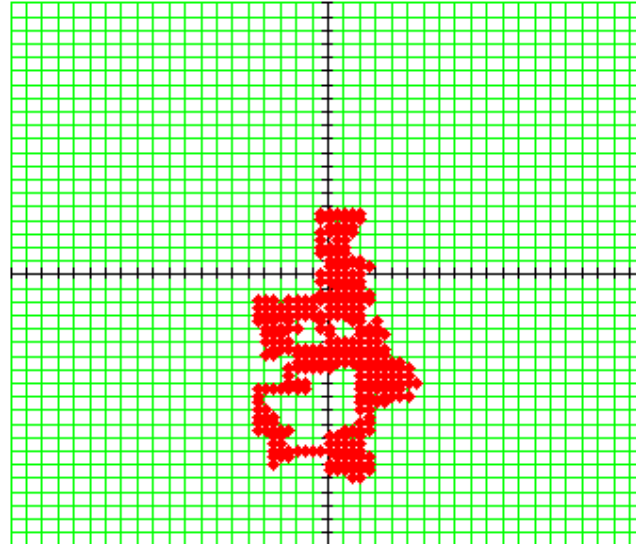
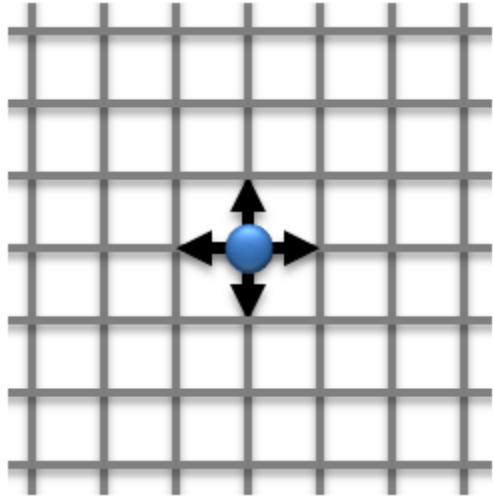
Atomik hareketler sonucu oluşan bir madde taşınımı mekanizmasıdır.

Latince “diffundere” kelimesinden gelir ve *yayılmak* (*to spread out*) anlamına gelir.

Atomlar katı malzemeler içerisinde nasıl hareket ederler?

Rasgele yürüyüş (Random Walk): Rastgele yürüyüş, stokastik (rastsal) süreçlerin gözlemlenen davranışları açıklamak için kullanılır.

ard arda rastgele adımlarla oluşan bir rotanın matematiksel tanımlanmasıdır.



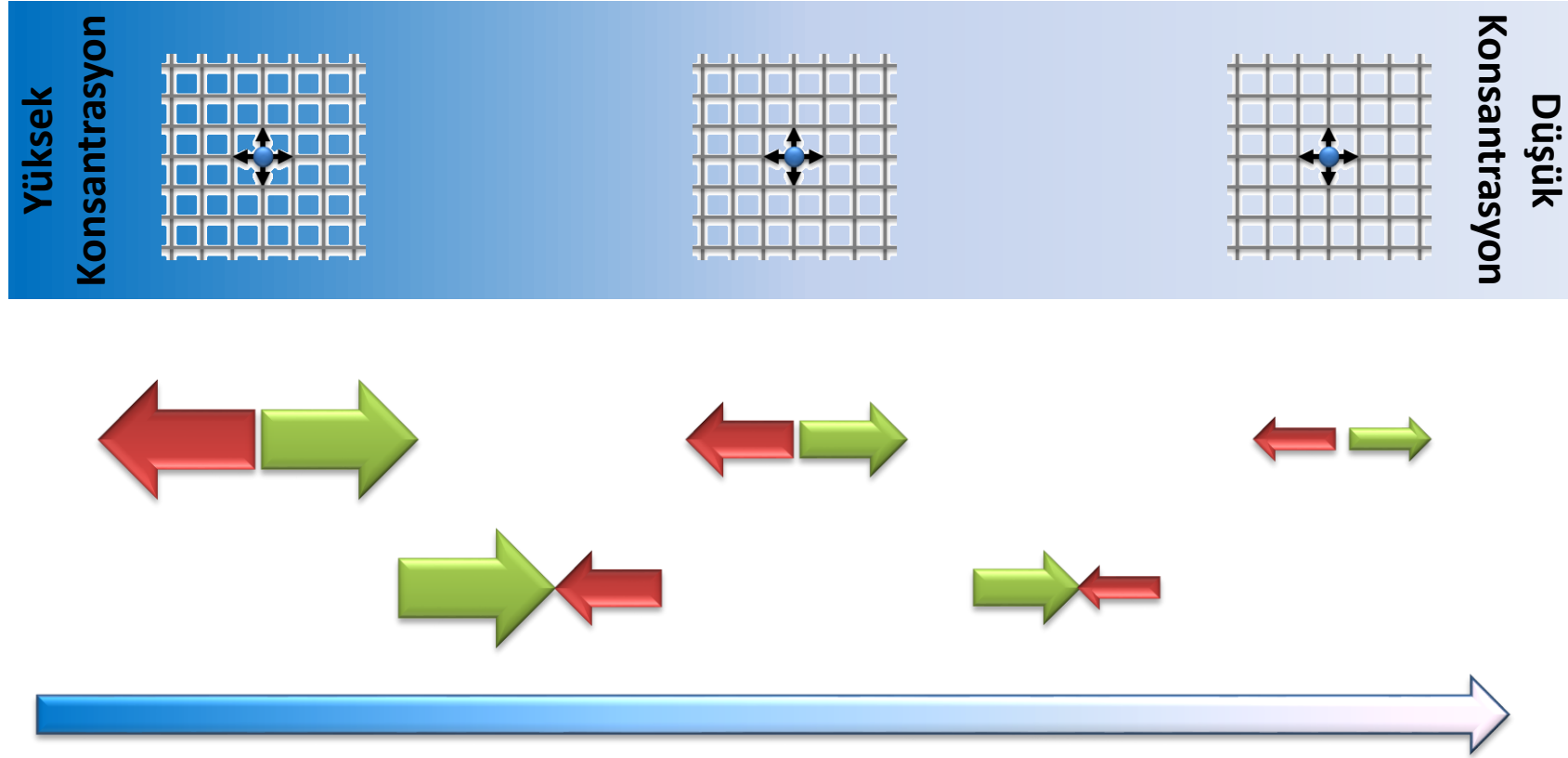
Karl Pearson
1857-1936



Quantum Cloud sculpture
in London, UK.

Difüzyon:

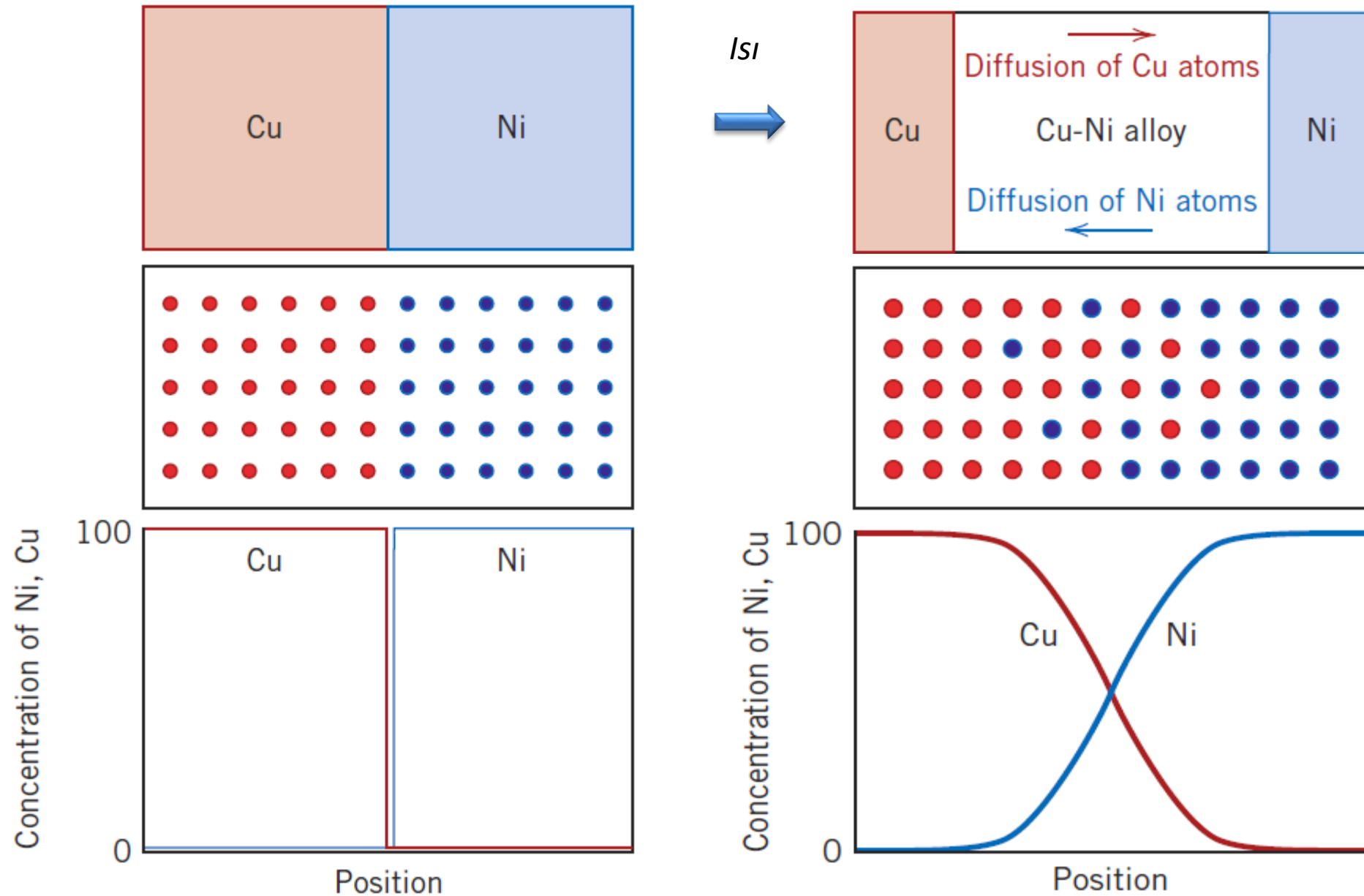
Atomların rastgele yürüyüşleri neden yüksek konsantrasyon bölgelerinden düşük konsantrasyon bölgelerine yönelik bir akı oluşturur?



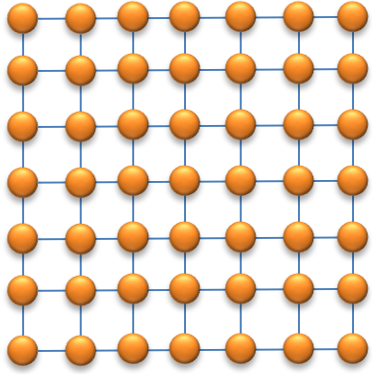
Sonuç olarak, soldan sağa net bir akı vardır.

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

Difüzyon Çifti (Diffusion couple)

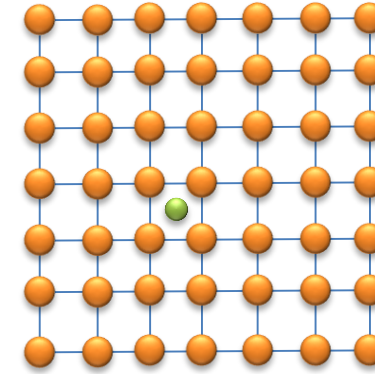


Difüzyon Mekanizmaları:



Boşluk (Vacancy) Difüzyon

Boşluk  **Atom**



Arayer Atomu (Interstitial) Diffusion

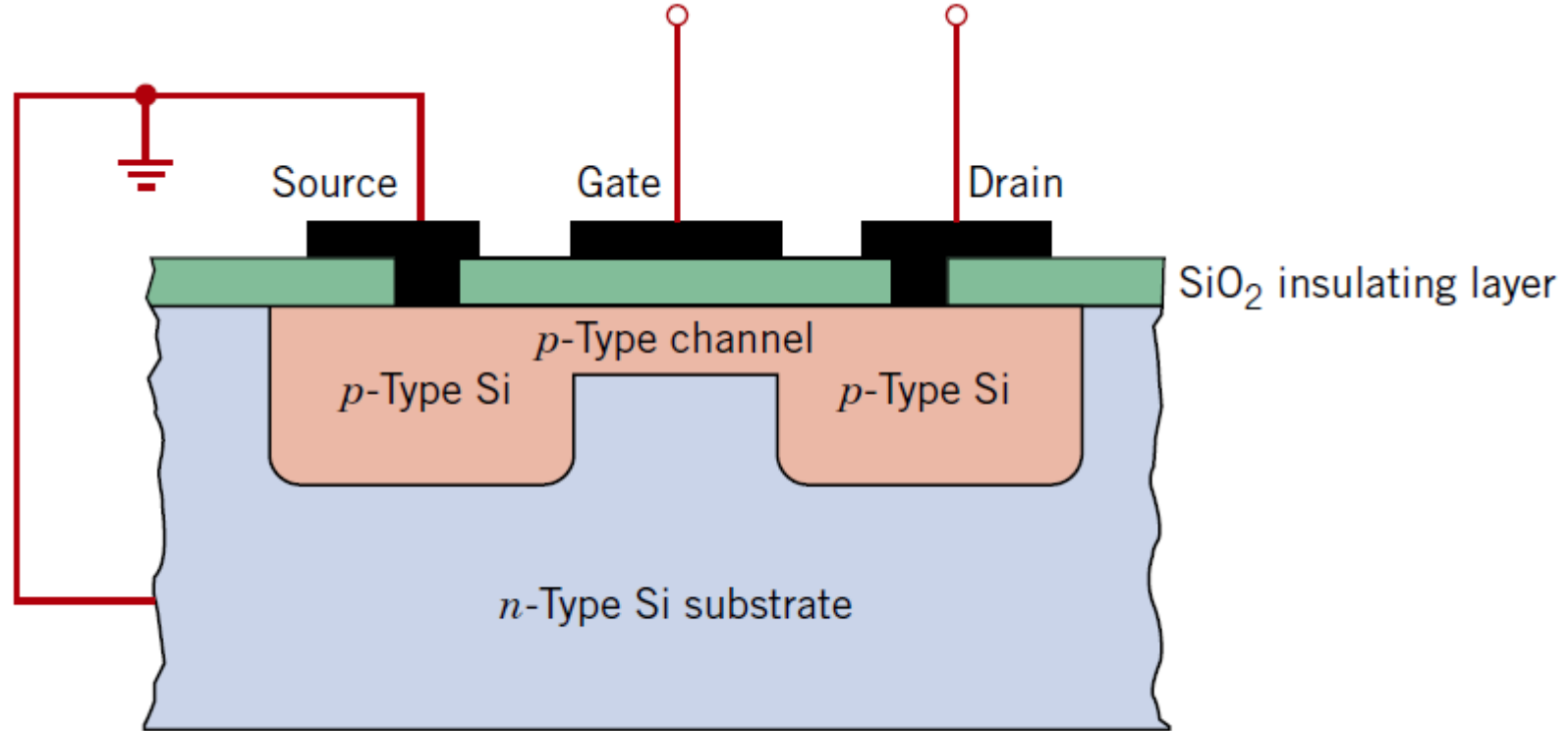
Bir atomun bu şekilde hareket edebilmesi için şu iki koşulun yerine getirilmesi gerekir:

1. atoma komşu bir kafes noktasında boşluk olmalıdır,
2. atomun komşu atomlarla olan bağını kırabilecek ve kafes yapısında bozulma oluşturabilecek kadar enerjiye sahip olmalıdır.

Arayer atom difüzyonu genellikle boşluk difüzyonundan daha hızlıdır.

Kafes yapılarındaki ara yerlere (interstitial sites) sığacak küçük safsızlık (interstitial) atomları (örneğin C, H, O) gerektirir.

MOSFET (metal-oxide-semiconductor field-effect transistor)



<https://www.youtube.com/watch?v=jh2z-g7GJxE>
<https://youtu.be/UvluuAliA50?t=283>

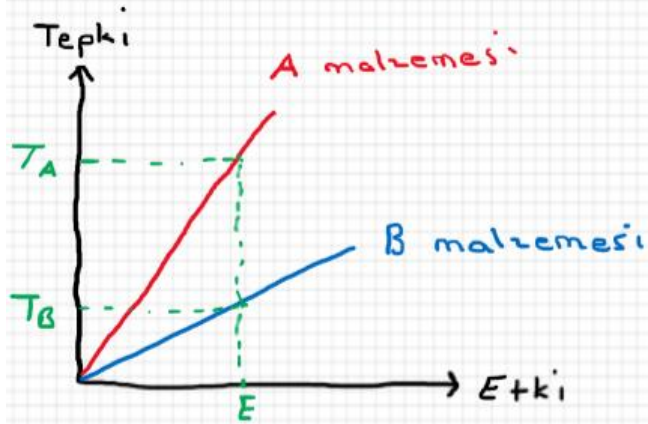
Bilgisayar: 0 ve 1 yani iki farklı duruma ihtiyacımız var.

iletken (conducting) / yalıtkan (nonconducting)
on / off

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

$$T \propto E$$

\downarrow Tepki \downarrow Etki



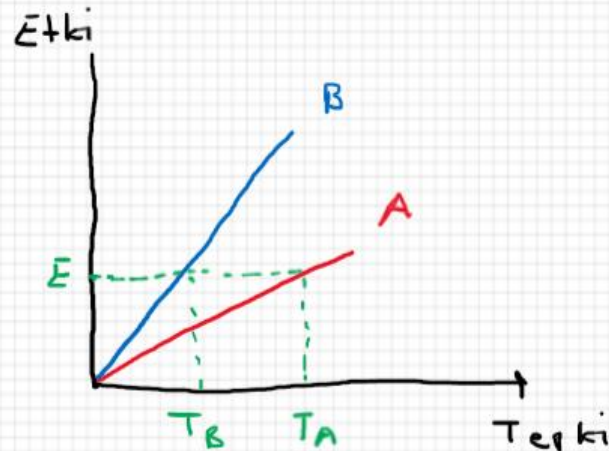
$$T = \alpha E$$

\downarrow
 Alınganlık
 (Susceptibility)

Örnek:

$$\Delta l = \alpha \cdot \Delta T$$

\downarrow
 Isıl genleşme
 katsayısı



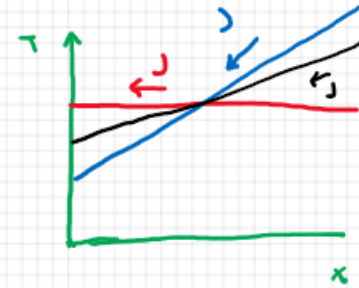
$$E = \beta T$$

\downarrow
 Direnc.
 (Resistivity)

Örnek:

$$F = m a$$

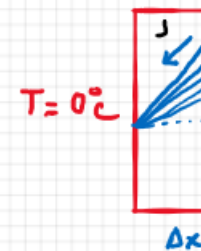
$$V = R I$$



$$J \propto \frac{dT}{dx}$$

$$J = -D \cdot \frac{dT}{dx}$$

\nearrow Yoğunluk
 veya
 \nearrow Sıcaklık



$$J = -D \cdot \frac{\Delta T}{\Delta x}$$

$\nearrow 24 \text{ K}$

$$\frac{\partial J}{\partial t} = 0 \qquad \frac{\partial J}{\partial t} \neq 0$$

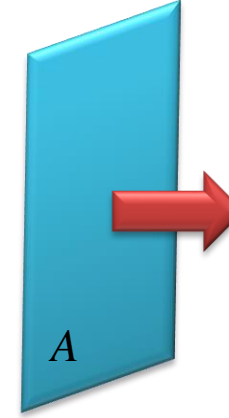
KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

Difüzyon: Difüzyon zamana bağlı bir işlemdir ve makroskopik olarak bir elementin başka bir element içerisindeki taşınımı zamanın bir fonksiyonudur.

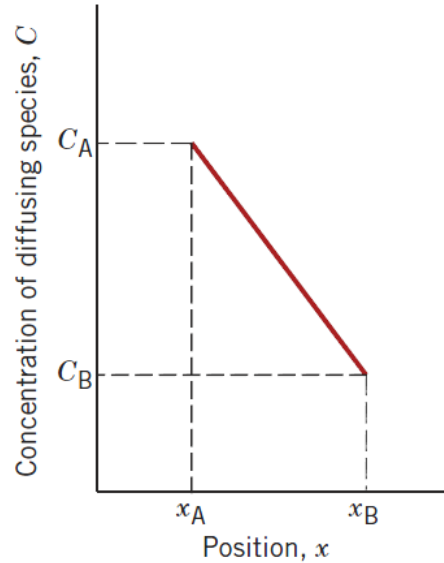
Akı (Flux) J : birim alandan birim zamanda geçen madde miktarıdır.

$$J = \frac{M}{At}$$

$$J = \frac{1}{A} \frac{d}{dt} M$$



Akı birimi:
kg/m²s veya atoms/m²s

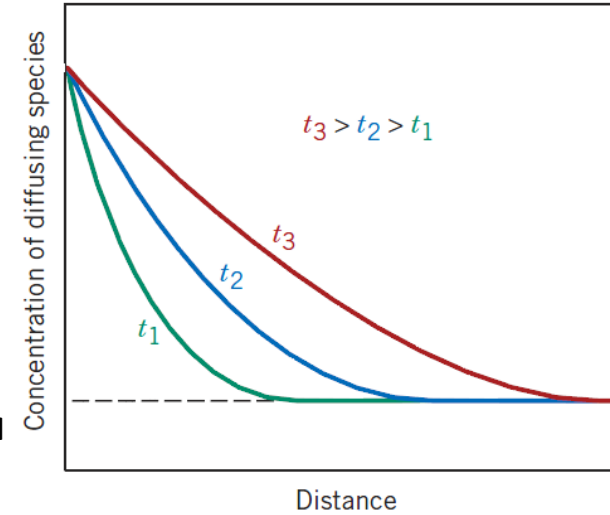


Kararlı Hal (Steady-State) Difüzyonu

$$\frac{d}{dt} J = 0$$

Kararsız Hal (Nonsteady-State) Difüzyonu

$$\frac{d}{dt} J \neq 0$$



Kararlı Hal (Steady-State) Difüzyonu:

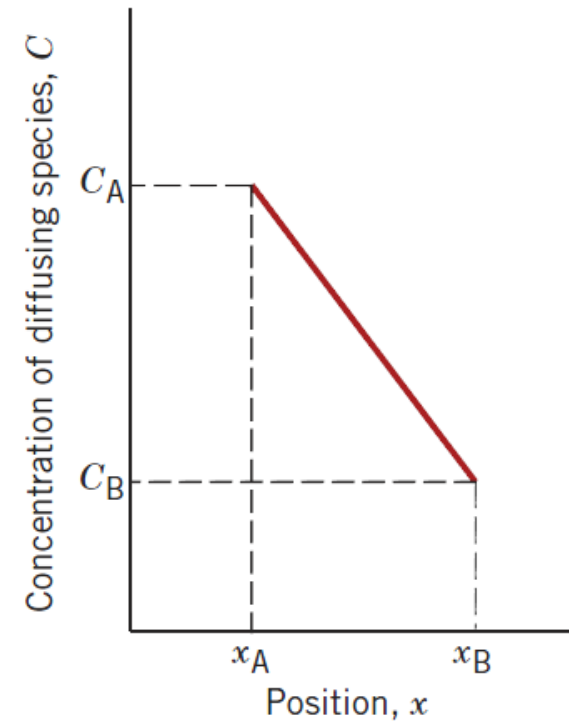
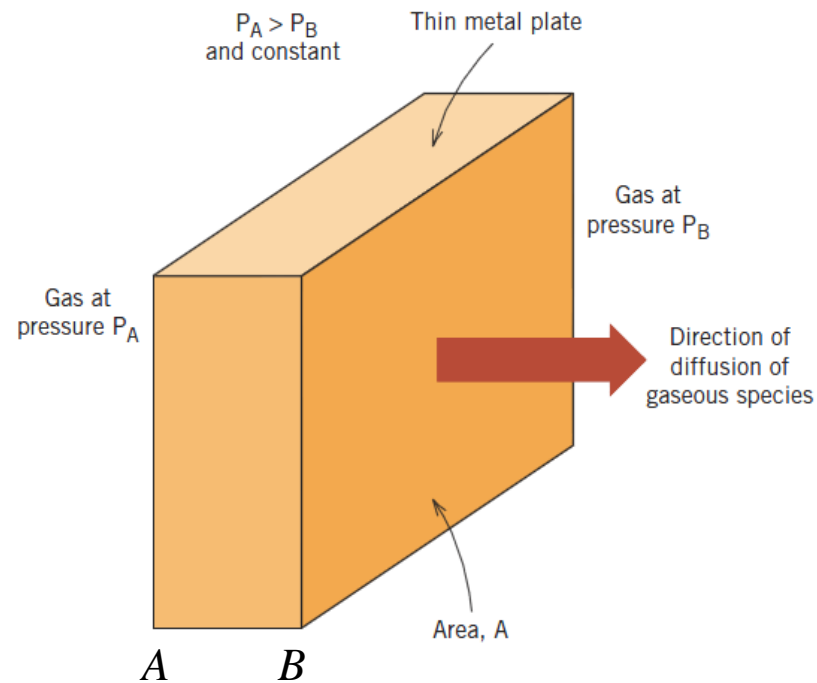
$$\frac{d}{dt} J = 0$$

Difüzyon akısı zamanla değişmez ise, sistemde kararlı bir durum oluşur.

Konsantrasyon Gradienti:

$$\frac{dC}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta C}{\Delta x}$$

$$\frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_B - C_A}{x_B - x_A}$$

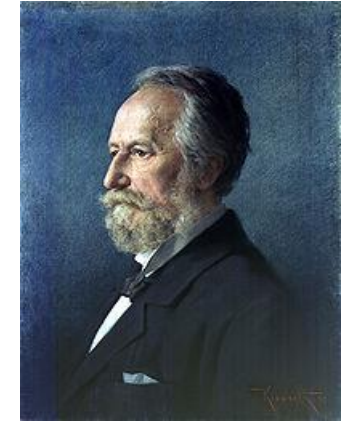


Fick'in 1. Kanunu (1855):

Yüksek konsantrasyondan düşük konsantrasyona doğru bir madde akışı oluşur.

Bu akının büyüklüğü konsantrasyon gradienti ile orantılıdır ve orantı sabitine **difüzyon katsayısı (diffusivity)** denir.

$$J \propto \frac{dC}{dx}$$



Adolf Eugen Fick
(1829-1901)

eksi işaret difüzyonun yüksek yoğunluktan düşük yoğunluğa doğru olduğunu belirtir

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



J : difüzyon akısı

C : konsantrasyon

D : difüzyon katsayısı

itici güç (driving force)

mekanistik anlamda bir kuvvet değildir

Birim Analizi:

$$\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} = -D \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$D = \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

Soru

Demir bir plaka bir tarafından karbürleme (karbonca zengin) diğer tarafından ise karbonsuzlaştırıcı (karbonca fakir) bir atmosfere maruz bırakılmıştır. Eğer difüzyonun kararlı hale (steady state) ulaşmışsa aşağıda verilen bilgileri kullanarak karbonun yayınım akısını bulunuz.

Demir plakanın karbonca zengin taraftaki yüzeyine göre 5 ve 10 mm içerideki karbon (C) yoğunlukları:

$$C_{5mm} = 1.2 \text{ kg/m}^3$$

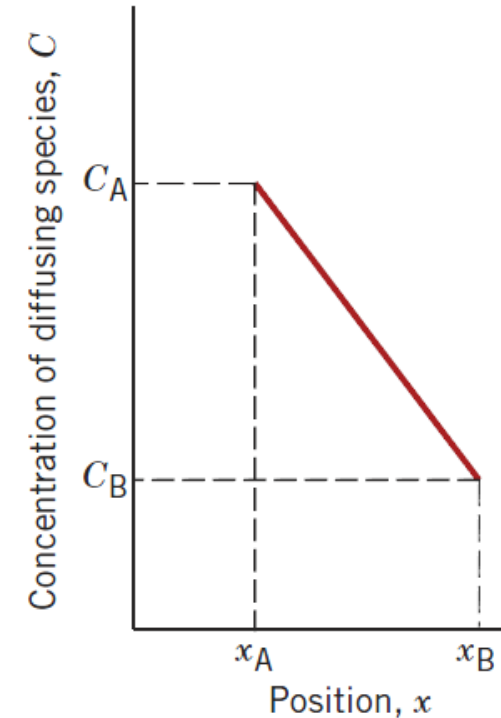
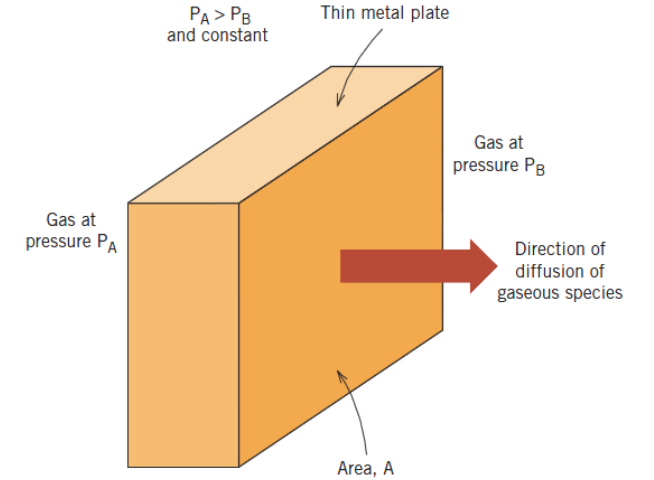
$$C_{10mm} = 0.8 \text{ kg/m}^3$$

$$D = 3 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$J = -D \frac{dC}{dx} = -D \frac{\Delta C}{\Delta x} = -D \frac{C_B - C_A}{x_B - x_A}$$

$$J = -3 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s} \frac{0.8 \text{ kg/m}^3 - 1.2 \text{ kg/m}^3}{10 \times 10^{-3} \text{ m} - 5 \times 10^{-3} \text{ m}}$$

$$J = 2.4 \times 10^{-9} \text{ kg/m}^2\text{s}$$



Kararsız Hal (Nonsteady-State) Difüzyonu:

$$\frac{d}{dt} J \neq 0 \quad J = \frac{1}{A} \frac{d}{dt} M$$

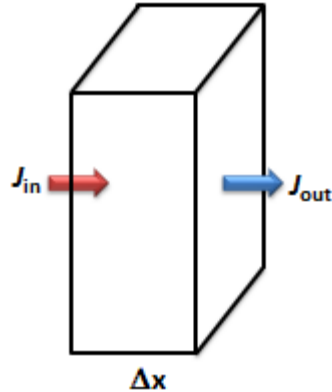
Birçok gerçek durumda konsantrasyon profili ve konsantrasyon farkı zamanla değişir.



Adolf Eugen Fick
(1829-1901)

Fick'in 2. Kanunu (1855): Konsantrasyon profilinin zamanla değişimini tanımlar.

Süreklilik denklemi (Kütlenin Korunumu): İzole bir sistem içerisinde, kimyasal reaksiyonlar veya fiziksel dönüşümler ile kütle oluşturulamaz veya yok edilemez.



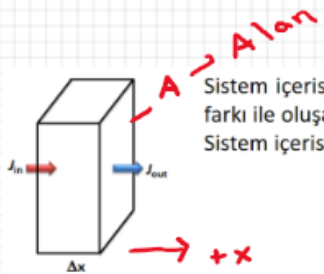
Sistem içerisindeki madde artışı/azalışı sadece içeriye giren ve çıkan akıların farkı ile oluşabilir.

Sistem içerisindeki madde artışı: $\frac{J_{in} - J_{out}}{\Delta x}$

$$\frac{d}{dx} J = \frac{d}{dx} \left(-\frac{1}{A} \frac{d}{dt} M \right) = -\frac{1}{A \Delta x} \frac{d}{dt} M = -\frac{1}{V} \frac{d}{dt} M = -\frac{d}{dt} \frac{M}{V} \Rightarrow \frac{d}{dx} J = -\frac{d}{dt} C$$

$$\frac{d}{dx} \left(-D \frac{dC}{dx} \right) = -\frac{d}{dt} C \quad \frac{d}{dt} C = D \frac{d^2 C}{dx^2}$$

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)



Sistem içerisindeki madde artışı/azalışı sadece içeriye giren ve çıkan akıların farkı ile oluşabilir.
Sistem içerisindeki madde artışı:

$$\frac{J_{in} - J_{out}}{\Delta x} = - \frac{\partial J}{\partial x}$$

$$\frac{dJ}{dx} = 0$$

$$\frac{dJ}{dx} = \frac{d}{dx} J = \frac{d}{dx} \left(-\frac{1}{A} \cdot \frac{dm}{dt} \right)$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \cdot \left(-\frac{1}{A} \frac{dm}{dt} \right)$$

$$= -\frac{1}{V} \cdot \frac{dm}{dt}$$

$$= -\frac{d}{dt} \left(\frac{m}{V} \right) C$$

$$\frac{dJ}{dx} = - \frac{dC}{dt}$$

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

1. Kanun

$$-\frac{dC}{dt} = \frac{d}{dx} \left(-D \cdot \frac{dC}{dx} \right)$$

$$\frac{dC}{dt} = D \cdot \frac{d^2C}{dx^2}$$

$C(x,t) = ?$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

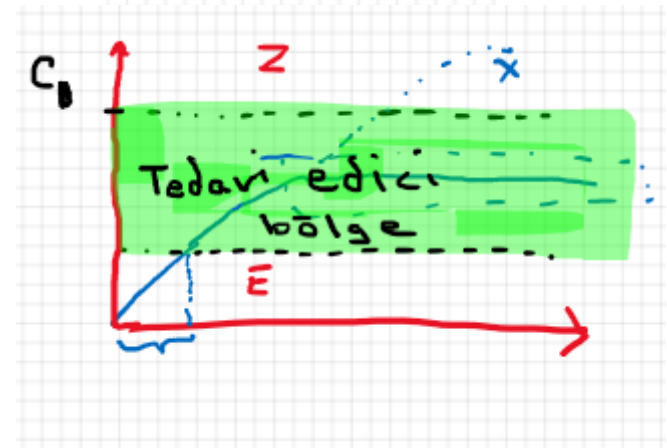
2. Kanun

$$C(x,y,z,t)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$



İlac salım sistemleri



KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

Fick'in 2. Kanunu:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

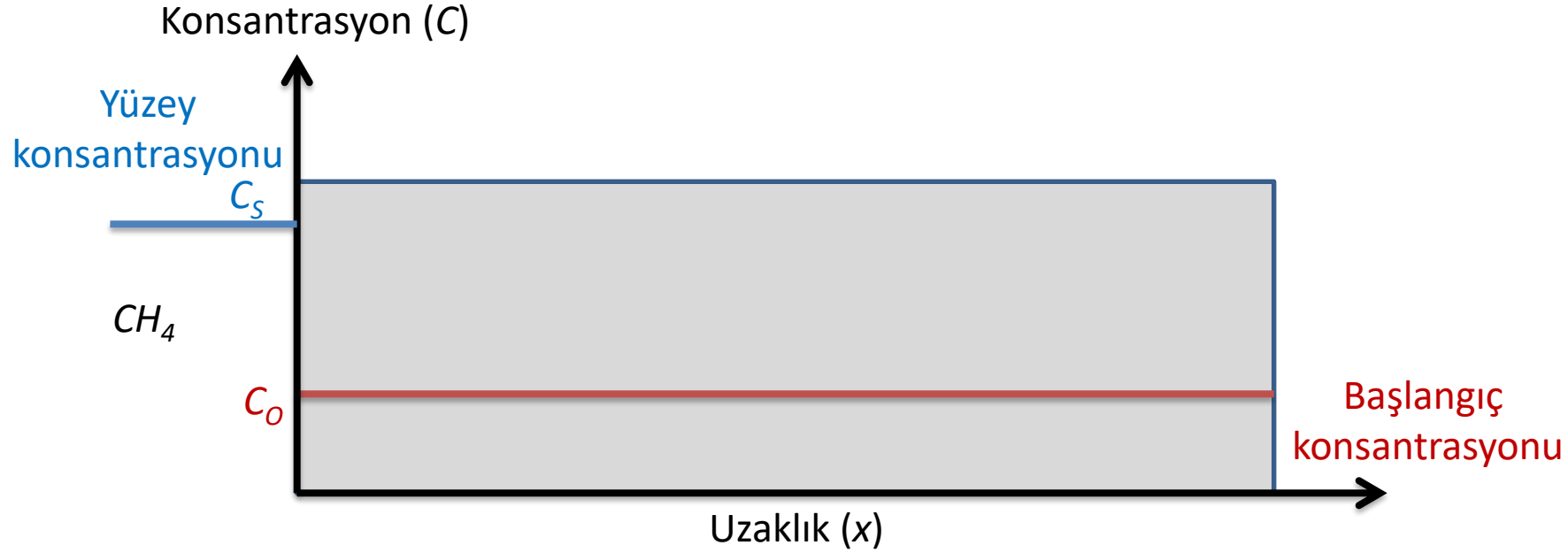


Analitik

Çözüm

Sayısal

Yarı-sonsuz katı için çözüm: Katı bir çubuk eğer yayınımları yapan atomlar yayınımları süresince çubuğun sonuna ulaşamıyorlarsa yarı sonsuz kabul edilir.



Başlangıç ve Sınır Koşulları:

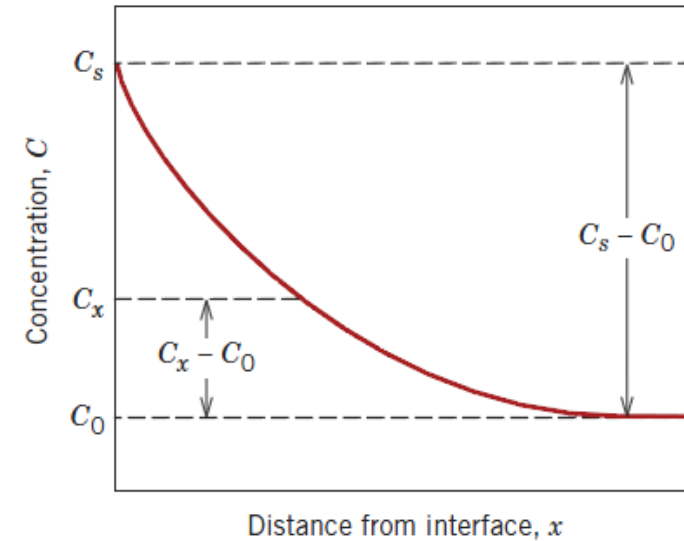
$$t = 0 \text{ anında, } C = C_0 \quad 0 \leq x \leq \infty \quad t > 0 \text{ anında } \begin{cases} C = C_s & x = 0 \\ C = C_0 & x = \infty \end{cases}$$

Yarı-sonsuz katı için çözüm:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \underbrace{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)}$$

Gaussian error function



Gaussian error function:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy$$

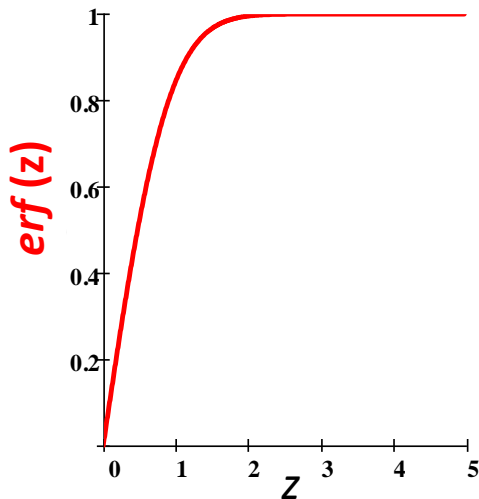


Table 5.1 Tabulation of Error Function Values

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

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

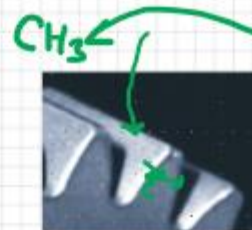
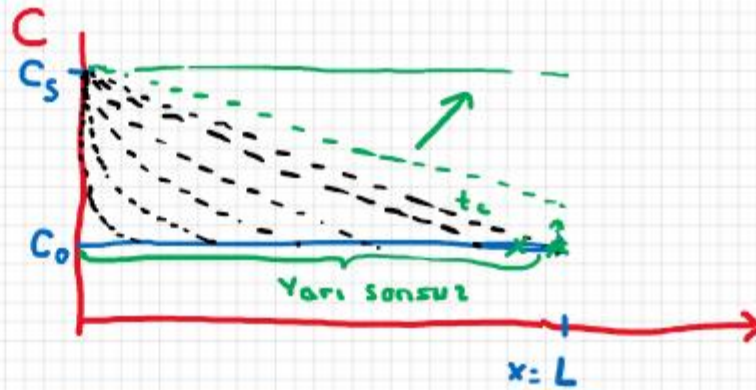
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$$C(x,t) = \checkmark$$

$$C(x,0) = C_0$$

$$t > 0 \quad c(0,t) = C_s$$

$$c(L,t) = C_0$$



$$\frac{C(x,t) - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy$$

Ağırlıkça Oran



Fe + C

$$m_T = m_{Fe} + m_C$$

$$\text{wt\% C} = \frac{m_C}{m_T}$$

Soru

Bazı uygulamalar için çelik (demir-karbon alaşımı) plakaların yüzeylerinin iç bölgelere göre daha sert olması gerekir. Bunu karbürleme işlemi ile yapılabilir. Karbürleme işleminde çelik parça yüksek sıcaklıkta belirli bir süre karbonca zengin (metan, CH₄) bir atmosfere maruz bırakılır.

Eğer difüzyon kararsız halde (nonsteady state) ise aşağıda verilen bilgileri kullanarak karbonun yüzeyden 0.5 mm içeride ağırlıkça 0.80 % olması için 950 °C'de gereken zamanı hesaplayınız.

$$C_o = 0.25 \text{ wt } \% C \quad C_s = 1.20 \text{ wt } \% C \quad D = 1.6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/s \quad x = 0.5 \text{ mm} \quad C_x = 0.80 \text{ wt } \% C$$

$$\frac{C_x - C_o}{C_s - C_o} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad \frac{0.80 - 0.25}{1.20 - 0.25} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{5 \times 10^{-4} \text{ m}}{2\sqrt{1.6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/s \times t}}\right)$$

$$0.4210 = \operatorname{erf}\left(\frac{62.5 \text{ s}^{1/2}}{\sqrt{t}}\right)$$

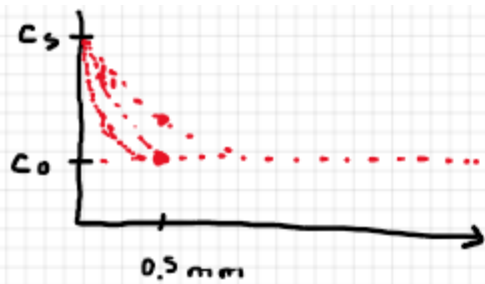
$z = 0.392$

z	$\operatorname{erf}(z)$
0.35	0.3794
0.40	0.4284

$$\frac{z - 0.35}{0.40 - 0.35} = \frac{0.4210 - 0.3794}{0.4284 - 0.3794}$$

$$0.392 = \frac{62.5 \text{ s}^{1/2}}{\sqrt{t}} \Rightarrow t = 25400 \text{ s} = 7.1 \text{ saat}$$

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)



$$C(0.5, 0) = ? C_0$$

$$C(0.5, t_1) = C_0$$

$$C(0.5, t) = 0.8 \text{ wt\% C}$$

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$\frac{0.8 - 0.25}{1.2 - 0.25} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{0.5 \text{ mm}}{2\sqrt{1.6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s} \cdot t}}\right)$

$$z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$$

$$\frac{0.55}{0.95} = 0.5790 =$$

$$\operatorname{erf}(z) = 0.421 \rightarrow$$

Table 5.1 Tabulation of Error Function Values

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

$$\frac{z - 0.35}{0.4 - 0.35} = \frac{0.4210 - 0.3794}{0.4284 - 0.3794}$$

$$\Rightarrow \boxed{z = 0.392} = \frac{0.5 \times 10^{-3} \text{ m}}{2\sqrt{Dt}} \Rightarrow t = 25400 \text{ s} = 7.1 \text{ saat}$$

Soru

Bakırın alüminyum içerisindeki difüzyon katsayısı 500 ve 600 °C için:

$$D_{500^{\circ}C} = 4.8 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D_{600^{\circ}C} = 5.3 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$$

Bu değerleri kullanarak, 500 °C'de ne kadar bir süre beklenmelidir ki 600 °C'de 10 saatlik ısı işlem sonucunda ulaşılan difüzyon durumuna ulaşılsın?

$$\frac{C_x - C_o}{C_s - C_o} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = \text{sabit} \quad \Rightarrow \quad \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = \text{sabit} \quad \Rightarrow \quad \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = \text{sabit}$$

$$\Rightarrow Dt = \text{sabit}$$

$$D_{500^{\circ}C} t_{500^{\circ}C} = D_{600^{\circ}C} t_{600^{\circ}C}$$

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

Önümüzdeki Ders Saatinde

Ders Kitabımızın 5. Bölümündeki

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

adlı konuya devam edeceğiz!

ve

Ders Kitabımızın 6. Bölümündeki

MALZEMELERİN MEKANİK ÖZELLİKLERİ

adlı konuya başlayacağız!