

Diffusion

이동현상이론 (MSA0013)

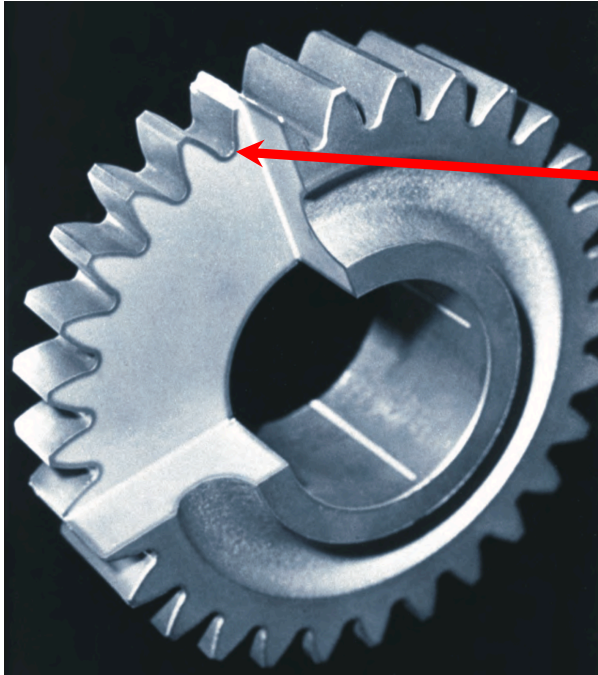
창원대학교 신소재공학부

정영웅



yjeong@changwon.ac.kr
<https://youngung.github.io>
<https://github.com/youngung>

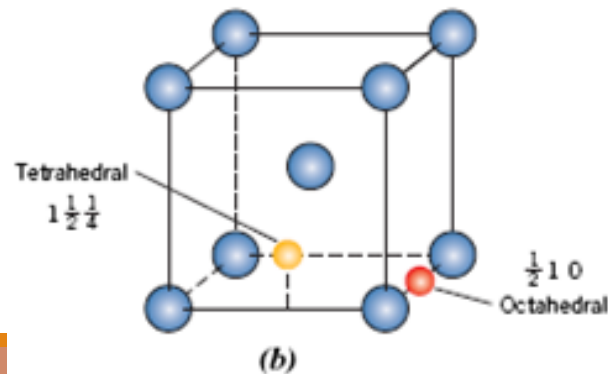
Case-hardening, Carburizing



기어의 섹션을 살펴보면,
어두운 레이어가 보인다.

고온에서 저탄소강을 탄소 농도가 높은
환경에 놓아 확산시키는 열처리 기법을
carburizing이라고 한다.

BCC 저탄소강의 Octahedral site에 탄소가
interstitial. 옆의 다른 사이트로 확산해 나갈
수 있다.



확산 intro

탄소 원자는 무질서 (random)하게 움직인다.

Q: 주어진 시간 동안 탄소 원자가 이동할 수 있는 거리는?

일차원적으로만 고려 (오른쪽, 왼쪽)
예를 들어, $x = 0$ 위치에서 무질서하게 이동하는 탄소 원자가 n 걸음을 걸은 후 예상되는 곳은 어디일까?

첫 걸음 후 위치를 x_1 , 따라서 n 걸음 후 위치를 x_n 이라 표기 할 때, n 걸음 후에 이동한 평균 거리 $\langle x \rangle$ 는?

$$\langle x \rangle = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_n}{n} = \frac{\sum_i^n x_n}{n} \rightarrow \langle x \rangle = 0$$

최종 위치는 평균적으로 제자리. 그렇다면 방향과 상관없이 이동한 거리를 구하려면?

$$\langle |x| \rangle \rightarrow \langle |x| \rangle = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \dots + x_n^2}{n}$$

보폭이 l 일 때, n 걸음 후 평균 제곱 이동 거리 $\langle x^2 \rangle$ 와 $n-1$ 걸음 후의 위치 x_{n-1} 의 관계?

$$x_n = x_{n-1} \pm l \quad x_n^2 = x_{n-1}^2 \pm 2l \cdot x_{n-1} + l^2$$

$$\langle x_n^2 \rangle = \frac{(x_{n-1}^2 + 2lx_{n-1} + l^2) + (x_{n-1}^2 - 2l \cdot x_{n-1} + l^2)}{2}$$

$$\langle x_n^2 \rangle = x_{n-1}^2 + l^2$$

$$\langle x_n^2 \rangle = nl^2$$

속도 $r (= \frac{n}{t})$ 을 사용해 표현하면, $n = rt$

$$\langle x_1^2 \rangle = x_0^2 + l^2 = l^2$$

$$\langle x_2^2 \rangle = x_1^2 + l^2 = 2l^2$$

$$\langle x_3^2 \rangle = x_2^2 + l^2 = 3l^2$$

$$\langle x_n^2 \rangle = nl^2 \rightarrow \langle x_n^2 \rangle = rtl^2$$

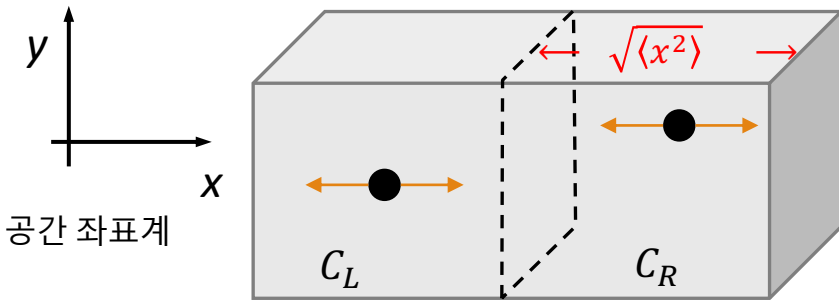
$$\langle x_n^2 \rangle \propto t$$

원자 이동한 평균 제곱 거리는 시간에 따라 선형적으로 증가.



확산 intro

원자 이동한 평균 제곱 거리는 시간에 비례하여 선형적으로 증가.



단면적이 1인 직육면체를 대상으로 탄소 원자의 이동을 더 살펴보자.

직육면체를 두 구역으로 구분하여 각각 C_L , C_R 의 입자 농도를 가졌다고 한다면...

두 구역의 관심있는 방향으로의 길이가 $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$ 인 조건을 설정.

왼쪽에서 오른쪽으로 (즉 $+x$ 방향) 발생하는 이동하는 전체 탄소 원자 수는?

$$\frac{1}{2} \times C_L \times \text{Volume} = \frac{1}{2} C_L \langle x^2 \rangle \times 1$$

\pm 방향 중 + 방향만 고려

시간당 왼쪽에서 오른쪽으로 이동하는 원자의 수는? (Flux)

$$J_{L \rightarrow R} = \frac{0.5 C_L \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{t}$$

시간당 오른쪽에서 왼쪽으로 이동하는 원자의 수는?

$$J_{R \rightarrow L} = \frac{0.5 C_R \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{t}$$

x 방향으로의 Net flux?

$$J_{net} = \sum J = J_{L \rightarrow R} - J_{R \rightarrow L} = \frac{0.5 C_L \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{t} - \frac{0.5 C_R \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{t}$$

$$J_{net} = \frac{0.5 (C_L - C_R) \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{t}$$

$$J_{net} = \frac{0.5 (C_L - C_R) \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{t} \times \frac{\sqrt{\langle x^2 \rangle}}{\sqrt{\langle x^2 \rangle}}$$

$$= \frac{0.5 (C_L - C_R) \langle x^2 \rangle}{\sqrt{\langle x^2 \rangle} \cdot t}$$

$$= \frac{-0.5 (C_R - C_L) \langle x^2 \rangle}{\sqrt{\langle x^2 \rangle} \cdot t}$$

$$= \frac{-0.5 \langle x^2 \rangle}{t} \frac{\Delta C}{\Delta x}$$

$$J_{net} \propto - \frac{dC}{dx}$$



Fick's 1st law (steady state)

$$J_{net} \propto -\frac{dC}{dx}$$

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

Fick의 확산 제 1법칙 (정상 상태)

J : net flux rate; 단위 면적당, 시간당 통과하는 물질의 량

J can be in various units:

- $[mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}]$, $[kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}]$...

Incompressible fluid 의 경우

$$\tau_{yx} = -\eta \frac{dv_x}{dy}$$

$$\tau_{yx} = -\nu \frac{d(\rho v_x)}{dy}$$

일정한 밀도, 열용량

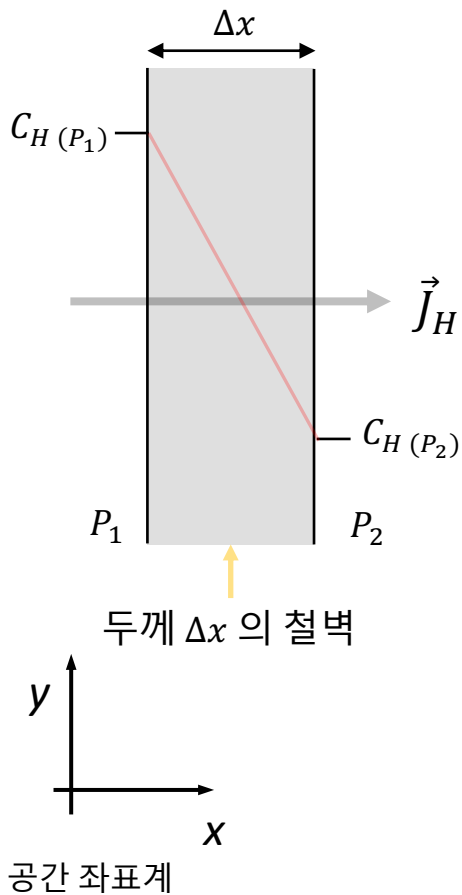
$$q'_x = -k \frac{dT}{dx}$$

$$q'_x = -\alpha \frac{d(\rho C_p T)}{dx}$$

물질전달, 운동량 전달, 열전달 모두
관련된 물리량의 구배의 반대방향으로
발생한다.



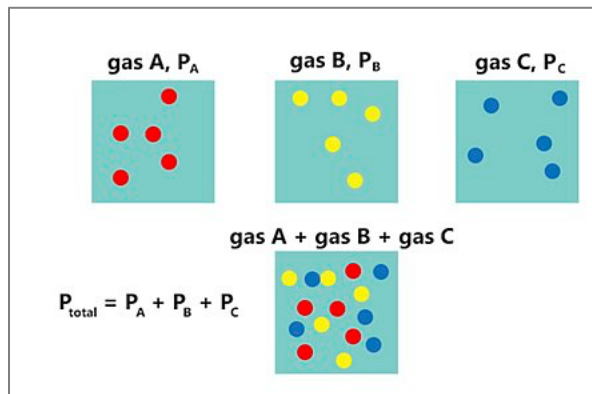
평평한 철벽을 통한 수소의 확산 (예제 10.1)



양편의 평형 수소 분압이 P_1, P_2 로 유지되는 (즉 확산에서의 정상상태) 철판 사이에서 수소의 확산 속도:

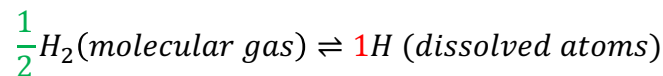
$$\vec{J}_H = -D_H \frac{dC}{dx} \approx -D_H \frac{\Delta C}{\Delta x} \approx -D_H \frac{(C_{H(P_1)} - C_{H(P_2)})}{\Delta x}$$

\vec{J}_H : H의 Flux
 D_H : H의 확산계수 (Diffusivity)

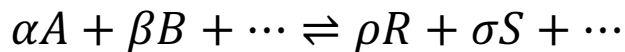


$C_{H(P_1)}$: 철벽 왼편 바깥의 수소 분압 P_1 과 평형을 이루는 철내의 수소 농도.
 $C_{H(P_2)}$: 철벽 오른편 바깥의 수소 분압 P_2 과 평형을 이루는 철내의 수소 농도.

고체내 녹아 있는 수소와 기체내 존재하는 수소 분자들 사이에 평형을 이루고 있으므로,



$$\text{평형 상수} = \frac{(C_{H \text{ atom}})^1}{(P_{H \text{ molecule}})^{1/2}}$$

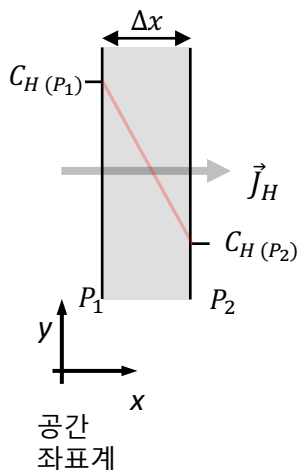


이 반응의 평형 상수 K는?

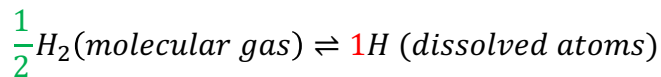
$$K = \frac{\{R\}^\rho \{S\}^\sigma \dots}{\{A\}^\alpha \{B\}^\beta \dots}$$



평평한 철벽을 통한 수소의 확산 (예제 10.1)



고체내 녹아 있는 수소와 기체내 존재하는 수소 분자들 사이에 평형을 이루고 있으므로,



$$\text{평형 상수} = \frac{(C_{H \text{ atom}})^1}{(P_{H \text{ molecule}})^{1/2}}$$

- 400 °C에서의 수소 압력은 $1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$. 철판내의 수소 고용한계는 3[ppm].
 - $P_1: 1.013 \times 10^5 \text{ [Pa]}$; $P_2: 0 \text{ [Pa]}$
 - 400 °C 에서 철의 밀도: $7730 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$.

$$K = \frac{(C_{H \text{ atom}})^1}{(P_{H \text{ molecule}})^{1/2}} = \frac{3 \text{ [ppm]}}{(1.013 \times 10^5 \text{ [Pa]})^{0.5}} = 9.43 \times 10^{-3} \frac{\text{[ppm]}}{\text{[Pa]}^{0.5}}$$

수소 기체 분압 1 Pa 당, 9.43×10^{-3} [ppm]의 농도로 철벽 속에 수소가 존재
(철벽 속 수소의 수소 기체 분압 의존)

수소 기체 분압 $P_{H \text{ molecule}}$ 이고, Pa 단위를 가질 때, 철속의 H (무게) 농도는?
 $\frac{9.43 \times 10^{-3}}{(P_{H \text{ molecule}})^{0.5}} \text{ [ppm]}$

철속의 농도는 수소 기체 분압에 따라 달라짐
 $\frac{9.43 \times 10^{-3}}{(P_{H \text{ molecule}})^{0.5}} \text{ [ppm]}$

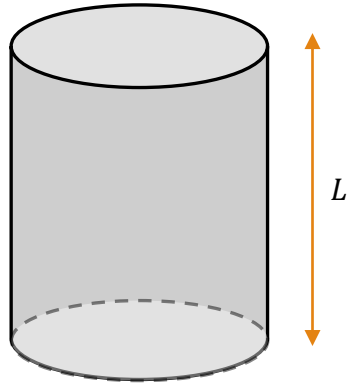
철의 무게 농도 C_H ?
철 10^6 [g] 당 수소는 [ppm] [g] 만큼 존재.
수소 무게 농도는 수소 부피 농도 \times 밀도.

[ppm] 은 million 당.
예를 들어 Million의 철 단위당 수소가 얼마나 많이 같은 단위로 존재하는지...
즉 철 10^6 g 당 수소 [ppm H] g

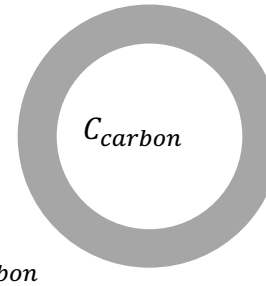


예제 10.2

속이 빈 원통형 철(Fe)통



Carburizing을 위해
고온의 탄화 기체가
가득찬 탱크 속에 넣어둠.



빈통의 안팎으로 탄소
농도가 C_{carbon} 인 상태로
평형을 이루고 있음

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

Here in this example, J is in $\left[\frac{kg}{s}\right]$, A in $[m^2]$, and D is in $\left[\frac{m^2}{s}\right]$.
Therefore, $\frac{dC}{dx}$ should be in $\left[\frac{kg}{m^4}\right] = \left[\frac{kg}{m^3} \cdot \frac{1}{m}\right]$

We are interested in the flux along radial direction so the above should be in the below form:

$$J_r = -A_r \cdot D \cdot \frac{dC}{dr}$$

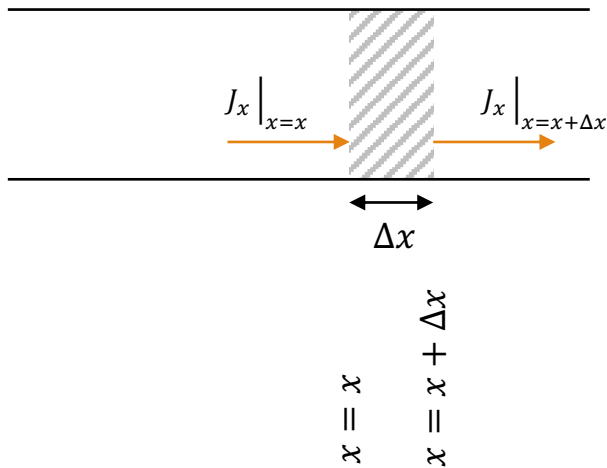
$$J_r = -2\pi r L \cdot D \cdot \frac{dC}{dr}$$

$$J_r = -2\pi L \cdot D \cdot \frac{1}{r} \frac{dC}{dr}$$

$$J_r = -2\pi L \cdot D \cdot \frac{dC}{d \ln(r)}$$



Fick's 2nd law (non-steady state)



검사체적(빔금)내의 물질 수지 방정식:
 검사체적 내 i 종의 축적률
 = (i 종 x 에서 입) - (i 종 $x + \Delta x$ 에서 출)

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} \times V = \frac{\partial C_i}{\partial t} \Delta x \times 1 = J_i|_{x=x} - (J_i|_{x=x+\Delta x})$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{J_i|_{x=x} - (J_i|_{x=x+\Delta x})}{\Delta x}$$

With $\Delta x \rightarrow 0$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{J_i|_{x=x} - (J_i|_{x=x+\Delta x})}{\Delta x} = - \frac{\partial J_i}{\partial x}$$

Fick의 확산 제 1법칙 (정상 상태:
 C=constant; not change with time)

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

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial \left(D \frac{dC}{dx} \right)}{\partial x}$$

If D is insensitive to x, (i.e., constant D)

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

Fick의 확산 제 2법칙 (비정상
 상태: C changes with time)



반 무한 일차원계와 오차 함수

반 무한 (semi-infinite system) 1차원계?

계가 충분히 길어서, 어떠한 시간 범위내에서도 (무한대의 시간이 흘러도) 한쪽 끝의 농도가 유지되는 시스템

농도의 시간, 공간에 대한 분포?

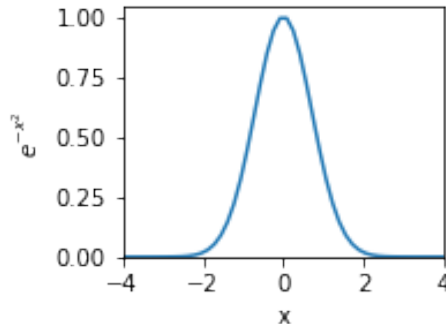
Fick's 2nd law

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial \left(D \frac{dC}{dx} \right)}{\partial x}$$

오차함수 (Error function)를 사용하여 풀이

Bell 모양 곡선

$$y(x) = e^{-x^2}$$



$$y(0) = e^{-0^2} = 1$$

$$x \rightarrow \pm\infty, y \rightarrow 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Error function; erf.

$$\text{erf}(x) = \frac{\int_0^x e^{-x^2} dx}{\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx$$

$$\text{erf}(x) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{3x}{x^2 + 3}$$

$$\text{erfc}(x) \approx 1 - \text{erf}(x)$$



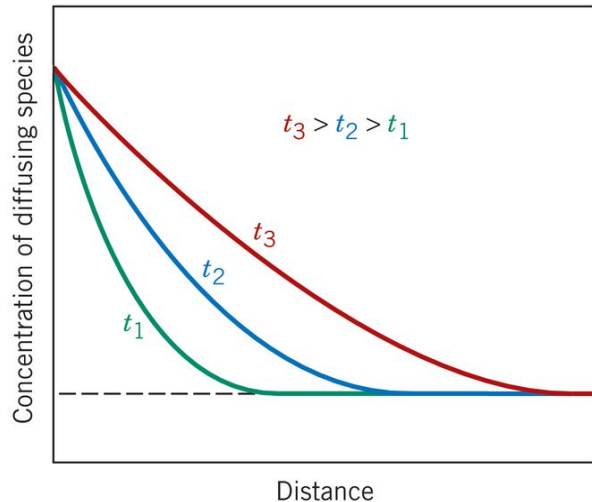
반무한대 고체 (semi-infinite solid)

앞서 비정상 상태 확산을 Fick's 2nd law로 설명하고, 이를

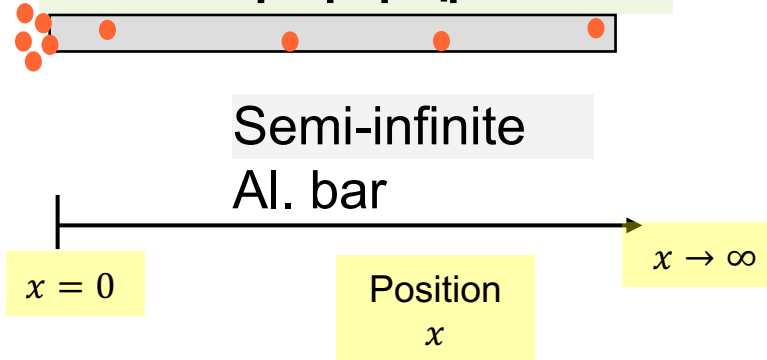
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)$$

로 표현하고 이는 적절한 경계조건이 주어졌을 때 활용할 수 있다고 했다.

반무한대 고체 예제를 통해 이를 다뤄보겠다.



무한히 긴 알루미늄 막대 한쪽 끝에서 확산해 오는 구리의 예.



초기 조건 (t=0)

$$C = C_0 \text{ (at } 0 \leq x \leq \infty \text{)}$$

경계조건 (t>0)

$$C = C_s \text{ at } x = 0$$

$$C = C_0 \text{ at } x = \infty$$

경계 조건을 적용하면 위치 x에 해당하는 농도 C(x) 를 시간에 대한 함수로 구할 수 있다.

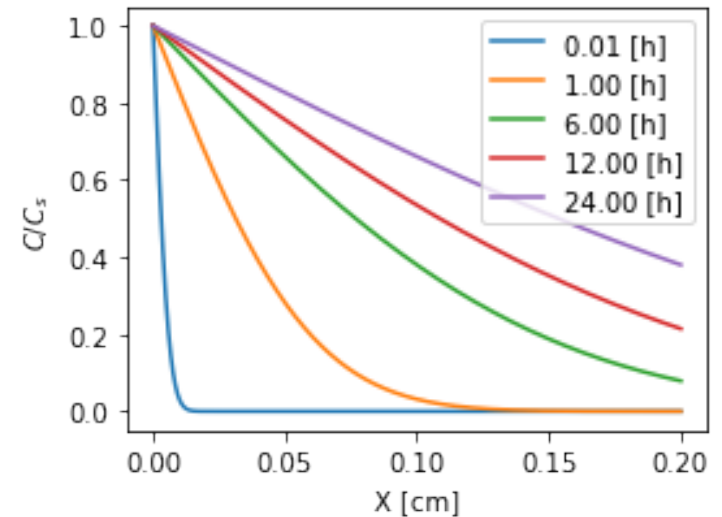
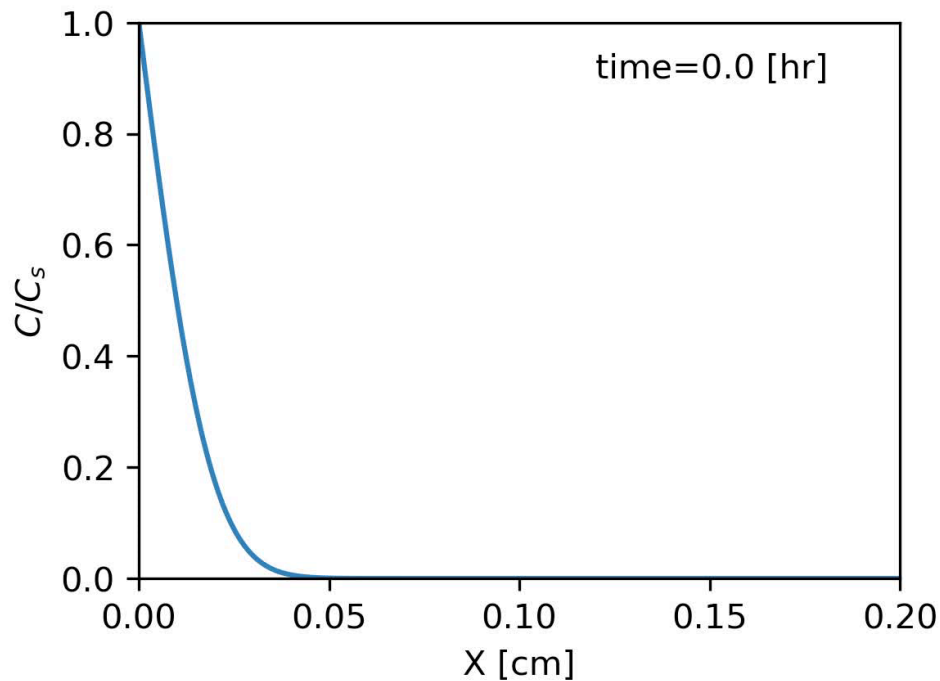
$$\frac{C(x, t) - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$$



예제 10.3; Carburizing

- 100 °C 에서 순수한 철을 탄화기체 (CO, CO₂)와 접촉시켜 초기 탄소농도를 C_s 로 올린 침탄 공정
- $D: 3.0 \times 10^{-11} m^2/s$
- $D(x=0, t=0) = 0$

$D(x, t)$ 를 $t = 0.01, 1, 6, 12, 24$ [h]에서 나타내면...



예제 10.3; Carburizing

- 100 °C 에서 순수한 철을 탄화기체 (CO, CO₂)와 접촉시켜 초기 탄소농도를 C_s로 올린 침탄 공정
- D: 3.0 × 10⁻¹¹ m²/s
- D(x = 0, t = 0) = 0

(a) x=0.5 mm 인 지점의 1시간 후의 C/C_s 값?

$$\frac{C(x,t)-C_0}{C_s-C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \text{ 에서}$$
$$C_0 = C(x, t = 0) = 0$$

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

$$\frac{C(x = 0.05 \text{ [mm]}, t = 1 \text{ [hr]})}{C_s} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{0.5 \text{ [mm]}}{2\sqrt{3.0 \times 10^{-11} \text{ [m}^2 \text{ /s]} \cdot 1 \text{ [hr]}}}\right)$$

$$= 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{0.0005 \text{ [m]}}{2\sqrt{3.0 \times 10^{-11} \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right] \cdot 3600 \text{ [s]}}}\right) = 1 - \operatorname{erf}(0.76072..)$$

$$\frac{C(x, t)}{C_s} = 0.282$$



예제 10.3; Carburizing

- 100 °C 에서 순수한 철을 탄화기체 (CO, CO₂)와 접촉시켜 초기 탄소농도를 C_s 로 올린 침탄 공정
- $D: 3.0 \times 10^{-11} m^2/s$
- $D(x = 0, t = 0) = 0$

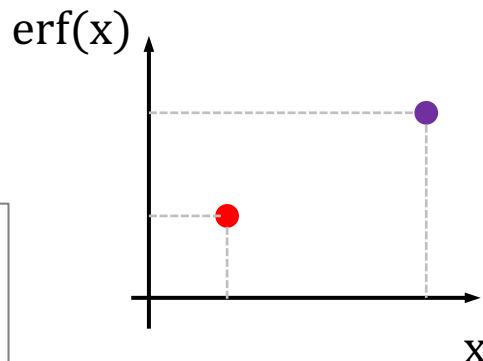
(b) 얼마후에 $x=8mm$ 지점에서 $\frac{C(x,t)}{C_s} = 0.5$ 가 되는가?

$$1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = 0.5$$

$$1 - \operatorname{erf}\left(\frac{0.8 \text{ [mm]}}{2\sqrt{3.0 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s}\right] t}}\right) = 0.5$$

$$\operatorname{erf}\left(\frac{0.8 \text{ [mm]}}{2\sqrt{3.0 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s}\right] t}}\right) = 0.5$$

$$\frac{0.8 \text{ [mm]}}{2\sqrt{3.0 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s}\right] t}} = 0.477$$



$$y = \text{slope} \times (x - x_0) + y_0$$

$$y = \frac{0.5205 - 0.4755}{0.50 - 0.45} \times (x - 0.45) + 0.4755$$

$$0.5 = 0.9 \times (x - 0.45) + 0.4755$$

$$x \approx 0.477$$

z	$\operatorname{erf}(z)$	z	$\operatorname{erf}(z)$	z	$\operatorname{erf}(z)$
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

$$\operatorname{erf}(0.477) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{3 \times 0.477}{0.477^2 + 3} = 0.5$$

확산 거리

반 무한 고체내의 일방향 비정상 확산을 설명하는데 유용한 erf

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

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

로 표기할 때, 확산 거리 x 는 $\eta = 0.5$ 일 때의 x 값,
즉 $x = \sqrt{Dt}$ 로 정의한다.

몇몇 특정한 η 값에 대해 알아보자.

$$\frac{C}{C_s} = \operatorname{erfc}(0.5) \approx 0.48$$

따라서, $\frac{x}{\sqrt{Dt}} = 1$ 일 때, (즉 $\eta = 0.5$) 일 때,
표면 보다 약 반($0.48, \frac{C}{C_s} \approx 0.48 \approx 0.5$)으로 농도가 줄어든다.

$D = 3 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s} \right]$ 의 확산종의 확산 거리(x)가 0.1cm가 되기
위해 필요한 시간은 얼마인가?

확산거리를 다음을 만족해야 한다: $\sqrt{Dt} = x$

$$\text{따라서, } Dt = x^2 \rightarrow 3 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s} \right] \times t = \{0.001 [m]\}^2$$

$$3 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s} \right] \times t = 0.001^2 [m^2]$$

$$t = \frac{0.001^2}{3 \times 10^{-11}} [sec] \approx 3333 [sec]$$



평균 제곱근 거리

$$J = \frac{-0.5\langle x^2 \rangle}{t} \frac{dC}{dx}$$

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

$$\langle x^2 \rangle = 2 \cdot Dt$$

$\langle x^2 \rangle$ 확산하는 입자의 평균 제곱 이동 거리.

$\sqrt{\langle x^2 \rangle}$ 는 Dt와 어떤 관계?

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{2 \cdot Dt}$$

erf(η) is used for non-steady state diffusion, where $\eta = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$

$$\eta = \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0.707$$

$$\text{erf}(0.707) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{3 \times 0.707}{0.707^2 + 3} \approx 0.683$$

$$1 - \text{erf}(0.707) \approx 0.32$$

$$\frac{C(x, t)}{C_s} = 0.32$$

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

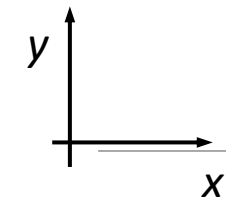
평균 제곱근 거리는 t만큼 시간이 흐른 후 농도비($\frac{C(x,t)}{C_s}$)가 1/3 정도가 되었을 때의 거리.



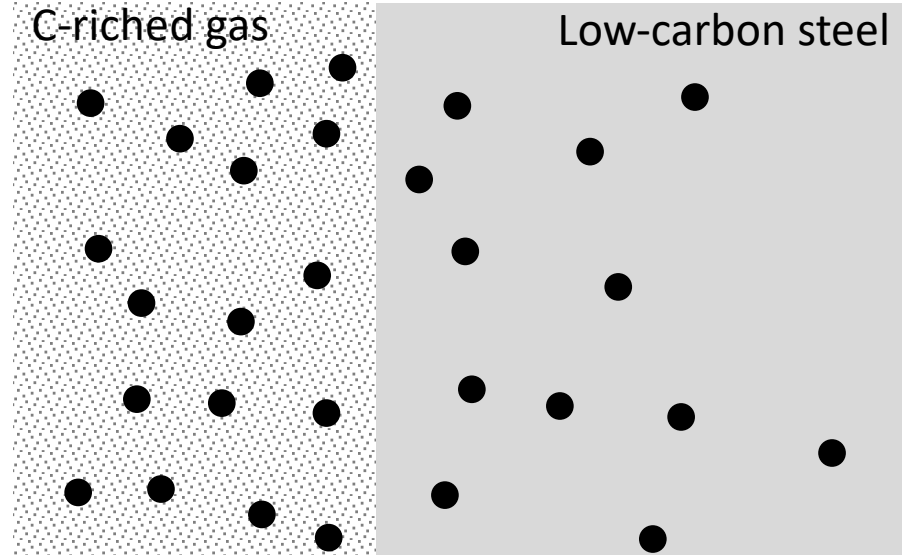
실리콘 웨이퍼 P 도핑



Flux at interface



공간 좌표계



$x = 0$

$$J(x = 0) = -D \frac{\partial C}{\partial x} (x = 0)$$

$$\frac{C(x, t) - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \text{erf}(\eta)$$

With $C_0 \rightarrow 0$

$$C(x, t)/C_s = 1 - \text{erf}(\eta)$$

$$\frac{C(x, t)}{C_s} = 1 - \text{erf}(\eta) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\eta^2} d\eta$$

$$C(x, t) = C_s - \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\eta^2} d\eta \quad \frac{w}{2\sqrt{Dt}} = \eta$$

$$C(x, t) = C_s - \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\left(\frac{w}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} d\left(\frac{w}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$$C(x, t) = C_s - \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \frac{1}{2\sqrt{Dt}} e^{-\left(\frac{w}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} dw$$

$$F(x) = \int_a^x f(t) dt$$

$$\frac{\partial \left\{ \int_0^x e^{-\left(\frac{w}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} dw \right\}}{\partial x} = e^{-x^2}$$

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x} = f(x)$$

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} = -\frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{2\sqrt{Dt}} e^{-\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} \right]$$

$$J \Big|_{x=0} = -D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{2DC_s}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{2\sqrt{Dt}} e^0 \right]$$

$$J \Big|_{x=0} = \frac{\sqrt{D} C_s}{\sqrt{\pi t}}$$



무한 확산쌍

무한히 긴 carbon steel (C+Fe)과 무한히 긴 순수한 철 (Fe)이 접한 상태에서, Carbon steel속의 Carbon interstitial 들이 Pure Fe로 이동하는 확산

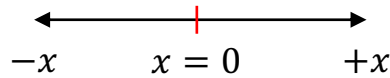
Carbon steel의 탄소 농도는 C_0 이다. 두 금속이 모두 길이가 무한히 길고, 양쪽 끝의 농도는 변하지 않는다고 가정하자.

Carbon Steel



Pure Fe.

$-\infty \leftarrow x$



$x \rightarrow +\infty$

경계조건?

$$C(x, t) \begin{cases} 0 & \text{at } 0 \leq x \leq +\infty, & t = 0 \\ C_0 & \text{at } -\infty \leq x \leq 0, & t = 0 \end{cases}$$



$$\int_{C_0}^{C_1} dC = A \int_{\eta_0}^{\eta_1} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$\int_0^{C_0} dC = A \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$\int_0^{C_0} dC = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$C_0 = A\sqrt{\pi}$$

$$A = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}}$$

$\eta = +\infty$ (즉, $\eta = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = +\infty$) 인 조건은 $t=0$ 이며, $x > 0$ 공간에서 $C = C_0$.

$\eta = -\infty$ (즉, $\eta = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = -\infty$) 인 조건은 $t=0$ 이며, $x < 0$ 공간에서 $C = 0$.

$$\int_0^C dC = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\eta} \exp(-\eta^2) d\eta + \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\eta}^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$\int_0^C dC = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\eta}^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta + \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\eta}^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$\int_0^C dC = \frac{2C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\eta}^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$\int_0^C dC = \frac{2C_0}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \exp(-\eta^2) d\eta - \frac{2C_0}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} \exp(-\eta^2) d\eta$$

$$\frac{1}{C_0} \int_0^C dC = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \text{erf}(\eta)$$

