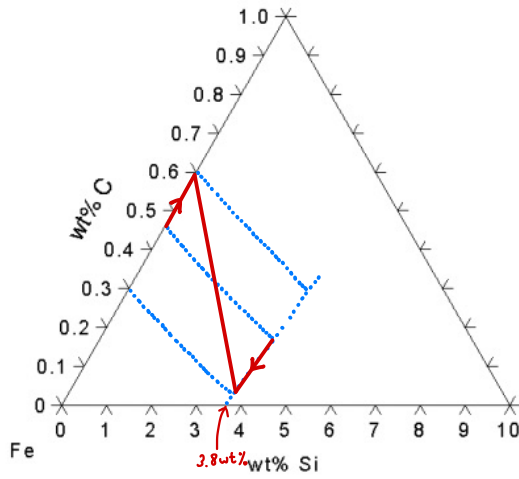
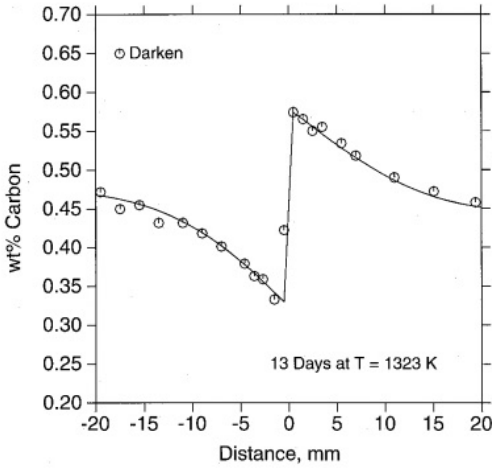
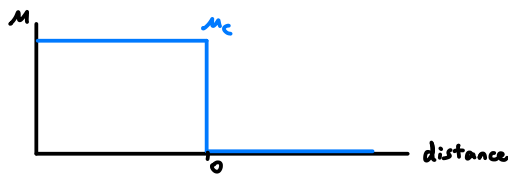
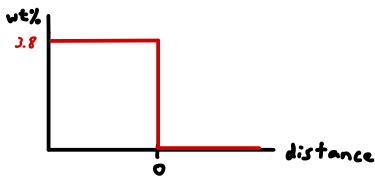


1. ①

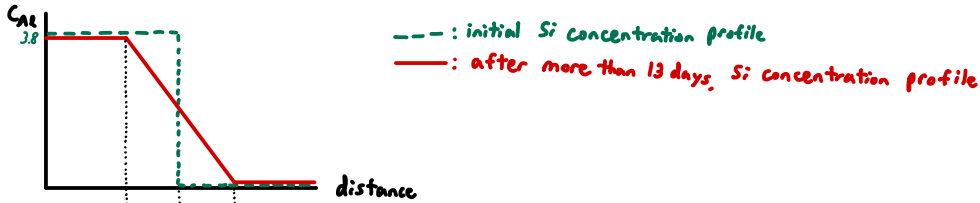


13 days 후, Si의 profile은 다음과 같다. (Fe-3.8Si-C system)

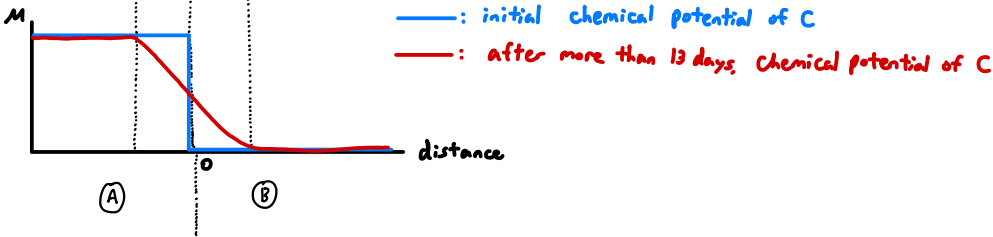


Si의 wt%가 증가할수록, C의 activity (Chemical potential)이 증가하기 때문에, diffusion이 잘 일어나지 않아, C의 wt%가 작다. 따라서 C의 diffusion path를 오른쪽의 isothermal part에 plot 하면, 위 그림과 같이 나타낼 수 있다.

② 13 days 이상일 경우, interface 부근에서 Si의 concentration이 변하게 된다.

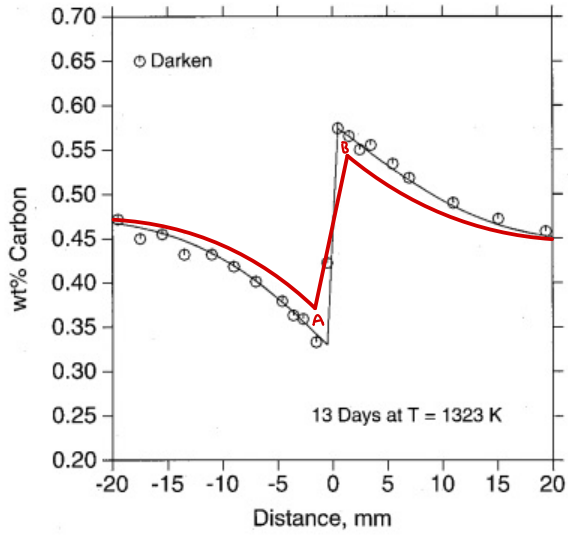


이때, C의 chemical potential (activity)를 plot 하면, Si concentration이 변화함에 따라, M\_C도 변화한다.

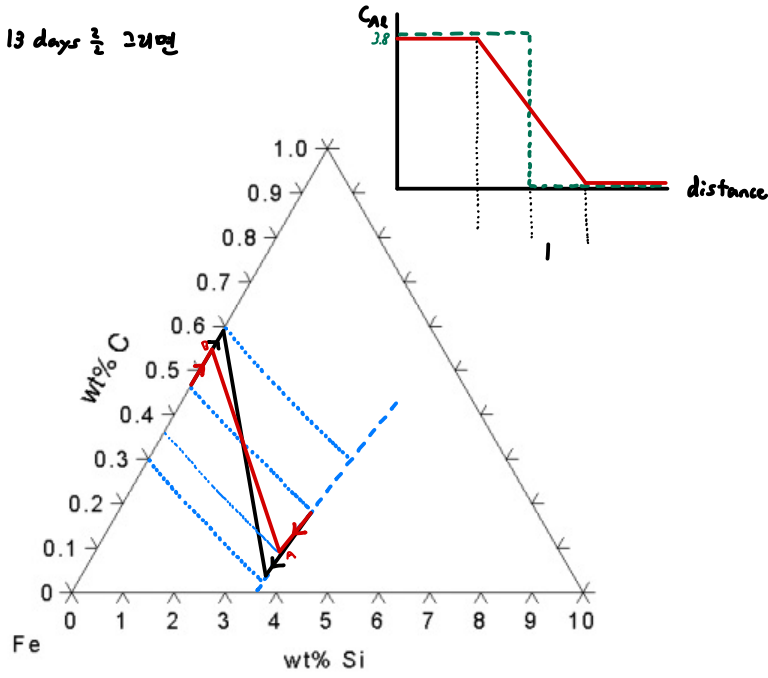


즉, (A)에서는 M\_C가 감소하는 부분이 있으면 (B)에서는 M\_C가 증가하는 부분이 있다. 따라서 M\_C가 감소한 영역에서는 C의 diffusion이 잘 일어나, C의 concentration이 증가하고, M\_C가 감소하는 영역에서는 C의 diffusion이 방해받아서 C의 concentration이 감소하여, 0점 기준으로 전체적인 C의 농도차가 감소할 것이다.

예제 24-11 C의 diffusion profile 과 diffusion path after more than 13 days 를 그리면



— : diffusion profile after more than 13 days



— : diffusion path after more than 13 days

2. (a) 1173K 에서의 diffusion coefficient  $D$  를 계산하면

$$D = 4.529 \times 10^{-7} \times \exp \left[ \frac{-1497237}{8.31446 \text{ J/K.mol} \times 1173 \text{ K}} \right] \text{ m}^2/\text{s}$$

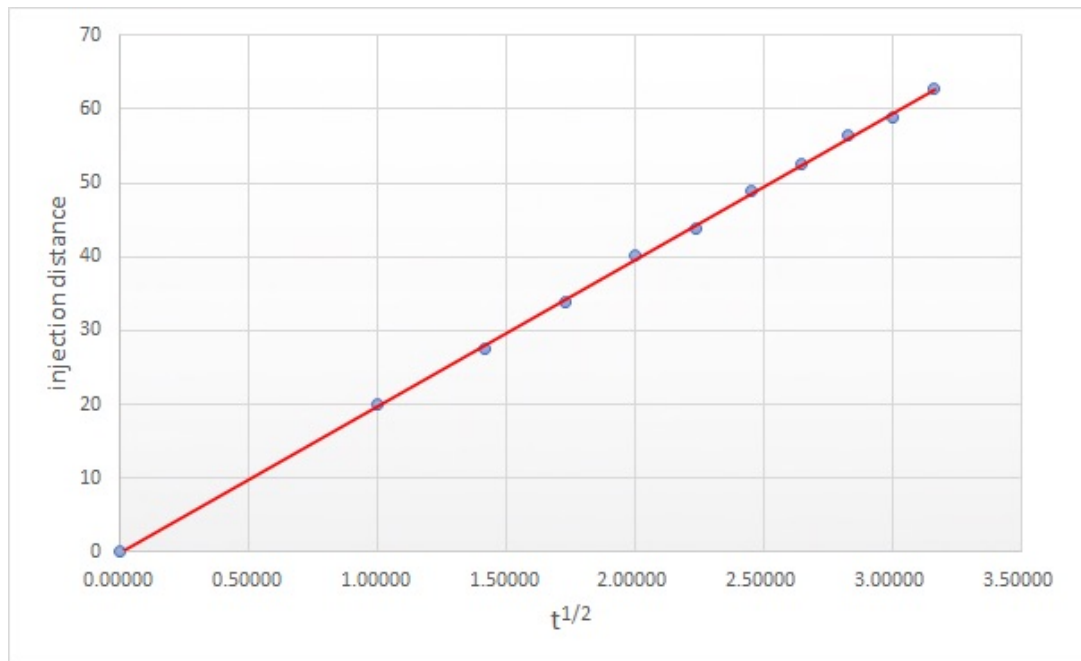
$$= 1.19648 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$= 1.19648 \times 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s} \quad \therefore D = 1.19648 \times 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s} \quad (1173 \text{ K})$$

이 때, (length of simulation) = 500  $\mu\text{m}$ , (reaction time) = 36000 sec (10hr), (number of grid) = 400 이고 simulation; 돌리면 다음과 같은 값을 얻을 수 있다.

시간 (sec)	시간(hr)	(시간) <sup>1/2</sup>	injection distance
0	0	0.00000	0
3599.443908	1	1.00000	20.05
7198.887815	2	1.41421	27.57
10798.33172	3	1.73205	33.83
14397.77563	4	2.00000	40.1
17997.21954	5	2.23607	43.86
21596.66345	6	2.44949	48.87
25196.10735	7	2.64575	52.63
28795.55126	8	2.82843	56.39
32394.99517	9	3.00000	58.9
35994.43908	10	3.16228	62.66

이들 (시간)<sup>1/2</sup> vs injection distance 를 plot 하면



$\therefore$  (injection distance)  $\propto \sqrt{\text{injection time}}$

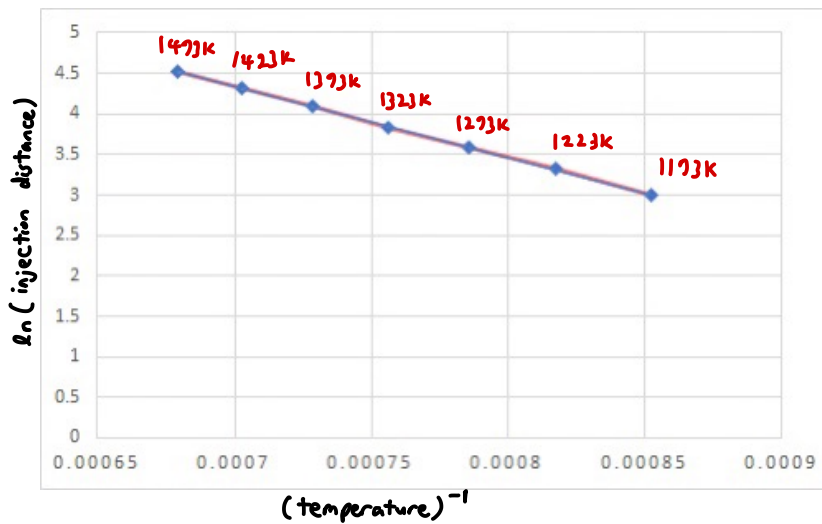
(b) 온도에 따른 diffusion coefficient를 구하면, 다음과 같다.

temperature	diffusion coefficient
1173	1.19648E-09
1223	2.22247E-09
1273	3.93227E-09
1323	6.66377E-09
1373	1.08671E-08
1423	1.71229E-08
1473	2.61601E-08

이를 이용하여 1 hour 즉 injection distance를 온도에 따라 simulation으로 구하면

temperature (K)	injection distance after 1 hr	1/T	ln(distance)
1173	20.05	0.000852515	2.998229154
1223	27.57	0.000817661	3.316728225
1273	36.34	0.000785546	3.592919063
1323	46.37	0.000755858	3.836652698
1373	60.15	0.000728332	4.096841442
1423	75.19	0.000702741	4.320018243
1473	92.73	0.000678887	4.529692045

구한 값을  $1/T$  vs  $\ln(\text{injection distance})$ 로 plot 하면



$\therefore \ln(\text{injection distance}) \propto -\frac{1}{T}$  관계를 보인다.

(c) 앞서 (a)에서 injection distance  $l$ 은  $l \propto \sqrt{Dt}$  이다.  $D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$  에서  $T_1 = 1173\text{K}$ ,  $T_2 = 1273\text{K}$  일때, 같은 시간  $t = 3600\text{s}$  이라고

$l$ 을 구하면

$$\frac{l(1173\text{K})}{l(1273\text{K})} = \frac{\sqrt{\exp\left(-\frac{Q}{RT_1}\right)}}{\sqrt{\exp\left(-\frac{Q}{RT_2}\right)}} = \sqrt{\exp\left(-\frac{Q}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right)}$$

$$l(1173\text{K}) = 20.05\ \mu\text{m}, \quad l(1273\text{K}) = 36.34\ \mu\text{m} \text{ 이다.}$$

$$\frac{20.05\ \mu\text{m}}{36.34\ \mu\text{m}} = \sqrt{\exp\left(-\frac{Q}{R}\left(\frac{1}{1173\text{K}} - \frac{1}{1273\text{K}}\right)\right)}$$

$$\exp\left(-\frac{Q}{R}\left(\frac{1}{1173\text{K}} - \frac{1}{1273\text{K}}\right)\right) = \left(\frac{20.05}{36.34}\right)^2$$

$$\therefore Q = \frac{-2R \ln\left(\frac{20.05}{36.34}\right)}{\left(\frac{1}{1173\text{K}} - \frac{1}{1273\text{K}}\right)} \leftarrow R = 8.31446\text{J/K.mol}$$

$$= 147666.2\text{J}$$

$\therefore$  (activation energy)  $Q = 147666.2\text{J}$