

DEFECTOS CRISTALINOS

EFECTO SOBRE

- FORMACIÓN DE SOLUCIONES SÓLIDAS
- DIFUSIÓN DE ÁTOMOS
- DEFORMACIÓN PLÁSTICA

Defectos cristalinos que veremos hoy (hay más)

- Defectos puntuales (orden 0)
 - Vacancias
 - Autointersticiales
 - Impurezas disueltas
- Defectos unidimensionales (orden 1)
 - Dislocaciones
- Defectos superficiales (orden 2)
 - Bordes de grano

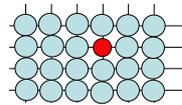
(Nuestra unidad básica de medida de distancia es la dimensión atómica).

- Relación entre formación de soluciones sólidas y defectos puntuales:
 - Átomos sustitucionales
 - Átomos intersticiales

Cuando se agrega un soluto a un solvente, se puede o no formar una solución. Analicemos los casos en que sí se forma una solución. (También podría ésta no formarse)

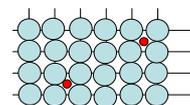
Existen 2 posibilidades para formar soluciones sólidas, dependiendo de la pareja soluto-solvente:

Solución Sustitucional



e.g., Ni en Cu

Solución Intersticial



e.g., C en Fe

Soluciones sólidas.

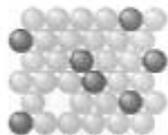


Fig. 1 Solución sólida de sustitución

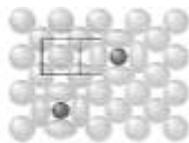
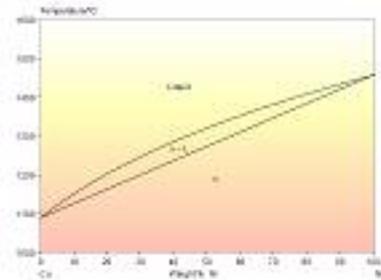


Fig. 2 Solución sólida de interstición

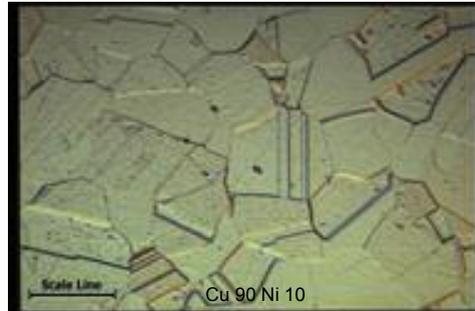
Reglas de Hume-Rothery para formar soluciones sólidas sustitucionales con rango amplio de solubilidad

- Factor tamaño: diferencia de radios atómicos $< 15\%$
- Estructura cristalina: igual
- Valencia: igual
- Electronegatividad: similar

Solución sólida alfa Cu-Ni: solubilidad sustitucional total (bajo 1090 °C)



Micrografía óptica de un policristal de aleación Cu-10% peso Ni.

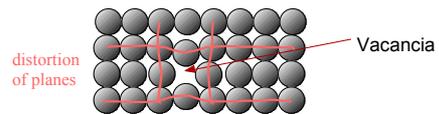


DIFUSIÓN ATÓMICA

- Es posible gracias a la presencia de **defectos puntuales**
- Vacancias
- Átomos intersticiales

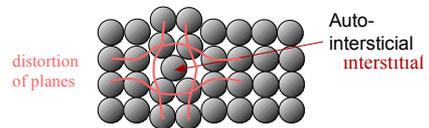
Algunos defectos puntuales

- **Vacancias:** Sitios vacantes en un cristal.



Átomos del mismo tipo del cristal, pero en intersticios. Poco probables en cristales densos

- **Auto-Intersticial:**



Difusión atómica en sólidos

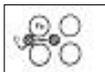
Los átomos son transportados a través de la materia

Mecanismos de difusión en estructuras cristalinas:

a) **Movimiento atómico por vacancias:** importante en cristales puros densos y en soluciones sólidas sustitucionales



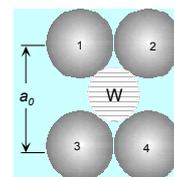
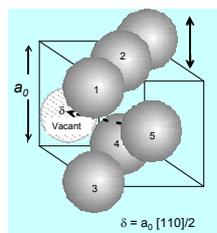
b) **Movimiento atómico por intersticios:** importante en soluciones sólidas de inserción



Difusión asistida por Vacancias.

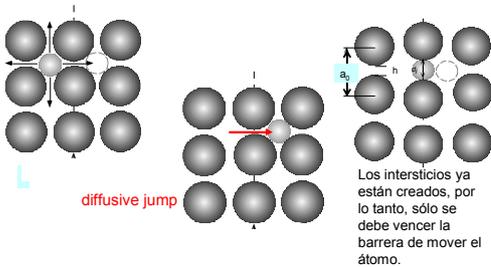
El ejemplo corresponde a difusión en un cristal metálico CCC, un cristal denso:

Un átomo en el centro de una cara (átomo 5) salta según $\delta = a_0 [110]/2$ a una vacancia próxima, ubicada en el centro de otra cara.



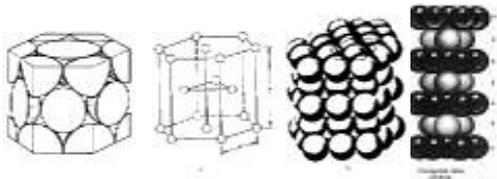
Vista en planta

Difusión Intersticial:



DEFORMACIÓN PLÁSTICA y DISLOCACIONES (un defecto lineal)

Deformación de cristales, por deslizamiento de planos cristalinos densos

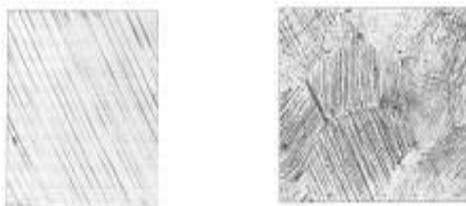


- Estructura cristalina hexagonal compacta (HC) de metales, y sus planos cristalinos densos.
- El Zinc es HC.

El mecanismo más importante de: Deformación plástica en metales.

- Tracción.
- Deformación plástica (irreversible) de un monocristal de Zinc, apropiadamente orientado.
- El mecanismo de deformación es por deslizamiento de los planos más densos del cristal.
- Bandas de deslizamiento.

Bandas de deslizamiento en superficies planas pulidas de probetas deformadas plásticamente por tracción



Cu (fcc) monocristalino

Al (fcc) policristalino

Mismo mecanismo de deformación plástica por deslizamiento que en la anterior probeta de Zn. Tal mecanismo se da en todos los metales.

Deformación por deslizamiento de planos cristalinos densos

Mecanismo atómico del deslizamiento de planos cristalinos densos :

- No es en *bloque*. Esfuerzo **teórico** demasiado elevado, hasta unas 10.000 veces mayor que el real.
- Es por deslizamiento de defectos cristalinos llamados **dislocaciones**.

Cálculo de la resistencia teórica, modelo en bloque

$$\tau = \tau_{\max} \sin\left(\frac{2\pi x}{b}\right)$$

$$\tau_{\max} = \frac{G b}{2\pi a}$$

$$\tau_{\max} \cong \frac{G}{30}$$

Límites de fluencia teóricos y experimentales de metales seleccionados

Material	$\tau_t (=G/30)$ (GPa)	τ_{exp} (MPa)	τ_{exp}/τ_t
Ag	1.0	0.37	0.000037
Al	0.9	0.78	0.000087
Cu	1.4	0.49	0.000035
Ni	2.6	3.2	0.007
α -Fe	2.6	27.5	0.011

¿Por qué el límite de fluencia real es mucho menor (~10⁵ veces) que el teórico?

➡ **Dislocaciones**

Analogía de un deslizamiento a menor esfuerzo que por deslizamiento en bloque. Se necesita un “defecto”.

Fig. 9.6 The “carpet-rug” analogy of an edge dislocation.

Linear Defects: Dislocations

Dislocaciones en acero inoxidable 304

La microscopía electrónica de transmisión (TEM) permite observar las dislocaciones en cristales.

Las dislocaciones aparecen como líneas oscuras en las imágenes

Analogía del avance de una cunquera para introducir el concepto de deslizamiento de dislocaciones. Se ilustra el deslizamiento de una dislocación de borde.

Dislocaciones

- Defectos lineales
- Encargados de producir deformación plástica en materiales cristalinos
- “Portadores de la deformación”

Flujo plástico = movimiento de dislocaciones

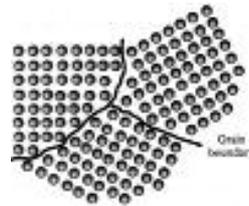
- Límite de fluencia experimental está íntimamente ligado al esfuerzo necesario para hacer mover una dislocación

LIMITES DE GRANO (un defecto planar)

- Su tamaño afecta la resistencia a la deformación plástica:
 - Al disminuir el tamaño del grano, aumenta el esfuerzo de fluencia

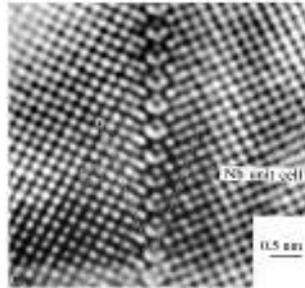
Bordes de grano

- La mayoría de los materiales de ingeniería son "policristalinos"
 - Grano = Cristal



Estructura Atómica de los Bordes de Grano

- Los Bordes de Grano
 - Presentan un orden atómico diferente al del cristal
 - Son defectos planos (dimensión 2)

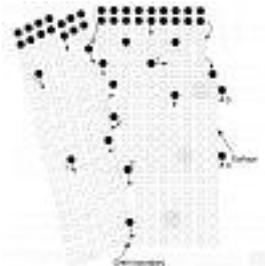


Observación TEM →

Algunos ejemplos del efecto de los Bordes de Grano

Algunos ejemplos:

- Son caminos rápidos de difusión atómica, en comparación con la difusión por dentro del grano.
- Limitan el movimiento de las dislocaciones, por lo que contribuyen a endurecer el material.



Efecto de impurezas en solución sólida sobre las propiedades mecánicas

- Las impurezas en solución siempre distorsionan la red, en mayor o menor medida. De modo que las impurezas disueltas endurecen la red, al hacer más difícil el deslizamiento de las dislocaciones.
- Para un mismo número relativo de átomos disueltos, las impurezas en inserción endurecen más que las en sustitución.

RESUMEN TIPOS DE DEFECTOS

Orden	Dimensione	Ejemplos
0	Puntuales, Ver Fig. 1	Vacancias Autointersticiales Impurezas disueltas: sustitucionales o intersticiales y de inserción Efectos atómicos
1	Líneas	Dislocaciones de borde, tornados y cuerdas
2	Superficiales	Bordes de grano (en policristalinos) Muclos Estructuras cristalinas Superficies libres
3	Tridimensionales	Fases Fracturas de una segunda fase

Finalmente, ¿por qué nos interesan los defectos cristalinos?

- Porque son elementos de la estructura y, como tales, afectan el comportamiento del material.
- Estos defectos no son necesariamente dañinos para las aplicaciones ingeniería, a veces nos convienen.
- Hay que conocerlos y controlarlos para optimizar la propiedad de nuestro interés.

- Ejemplo: los semiconductores tecnológicos se hacen a partir de monocristales bastante puros de Si, los que deben ser dopados con algunas partes por millón de impurezas sustitucionales adecuadas (B, P, etc.)