

MT-1113

Materiales

Defectos en sólidos cristalinos. Defectos puntuales,
defectos lineales y defectos superficiales

Departamento de Ciencia de los Materiales

Universidad Simón Bolívar

Clasificación de los Defectos en sólidos cristalinos

Defectos Puntuales o de dimensión cero. (0-D):

Vacancias, defecto de Shottky, defecto de Frenkel, Átomos ajenos sustitucionales, átomos ajenos intersticiales, átomos autointersticiales

Defectos de Línea o de dimensión 1. (1-D):

Dislocaciones de Borde, dislocaciones de tornillo, Dislocaciones mixtas

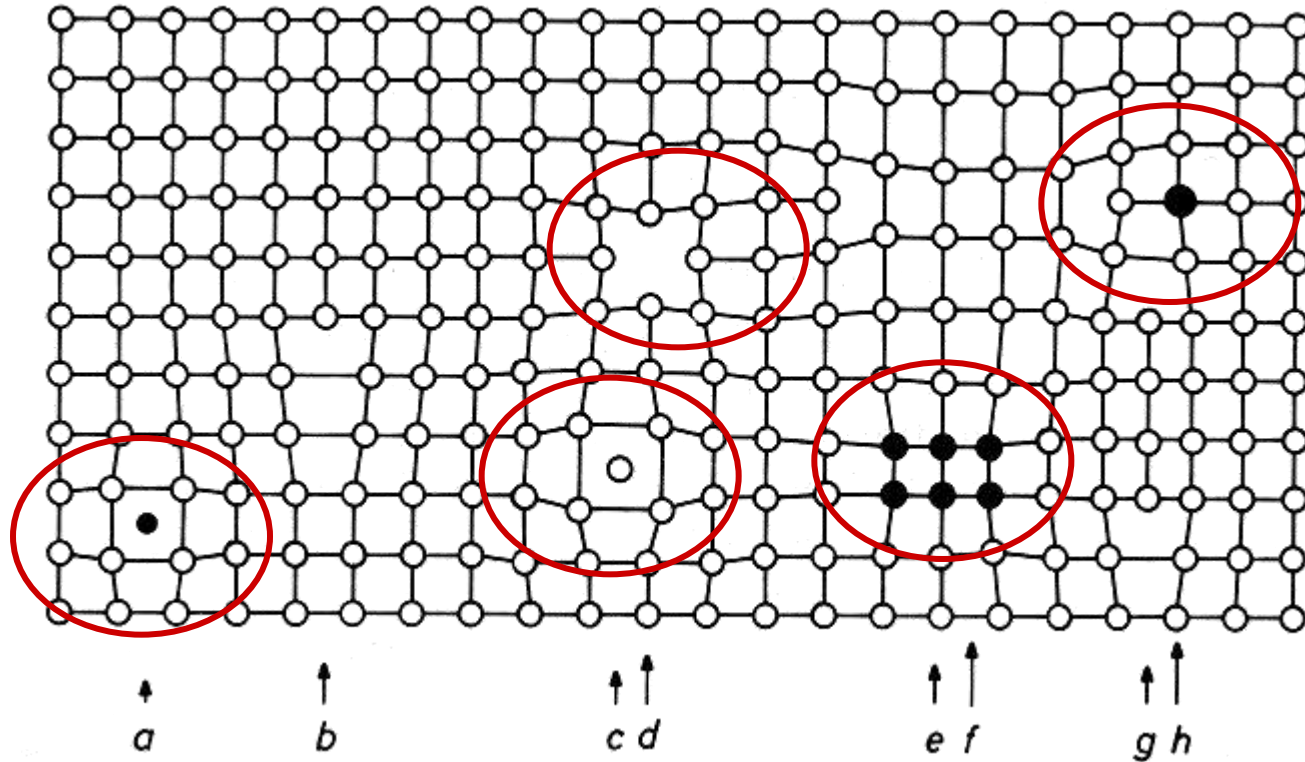
Defectos Planares o de dimensión 2. (2-D):

Superficies externas, Fallas de apilamiento, maclas, bordes de grano

Defectos macroscópicos o de dimensión 3. (3-D):

Precipitados de átomos ajenos, poros, regiones amorfas

Algunos defectos puntuales en la red de un metal



a) Átomo de impureza (o aleante) intersticial, c) Átomo autointersticial, d) Vacancia, e) Precipitado de átomos de impureza (o aleante), h) átomo de impureza (o aleante) sustitucional.

Defectos Lineales (1-D)

¿Por qué se sabe que existen?

- Para poder deslizar dos planos cristalográficos entre sí se necesitaría teóricamente la tensión ideal ($\tau_c \cong G/2\pi$).
- Experimentalmente la tensión realmente necesaria es varios ordenes de magnitud menor porque los cristales contienen dislocaciones que reducen la tensión necesaria para producir el deslizamiento

TABLE 2.1 Theoretical and Experimental Yield Strengths in Various Materials²

Material	$G/2\pi$		Experimental Yield Strength		
	GPa	10^6 psi	MPa	psi	τ_m/τ_{exp}
Silver	12.6	1.83	0.37	55	$\sim 3 \times 10^4$
Aluminum	11.3	1.64	0.78	115	$\sim 1 \times 10^4$
Copper	19.6	2.84	0.49	70	$\sim 4 \times 10^4$
Nickel	32	4.64	3.2–7.35	465–1,065	$\sim 1 \times 10^4$
Iron	33.9	4.92	27.5	3,990	$\sim 1 \times 10^3$
Molybdenum	54.1	7.85	71.6	10,385	$\sim 8 \times 10^2$
Niobium	16.6	2.41	33.3	4,830	$\sim 5 \times 10^2$
Cadmium	9.9	1.44	0.57	85	$\sim 2 \times 10^4$

G es el módulo de corte

Defectos Lineales (1-D)

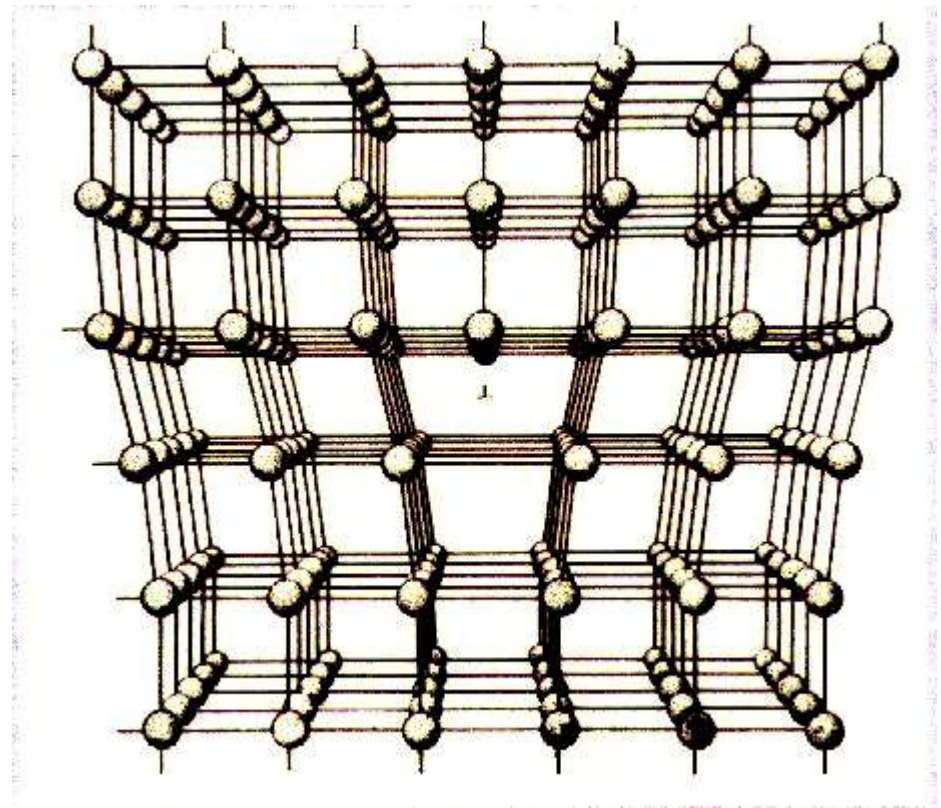
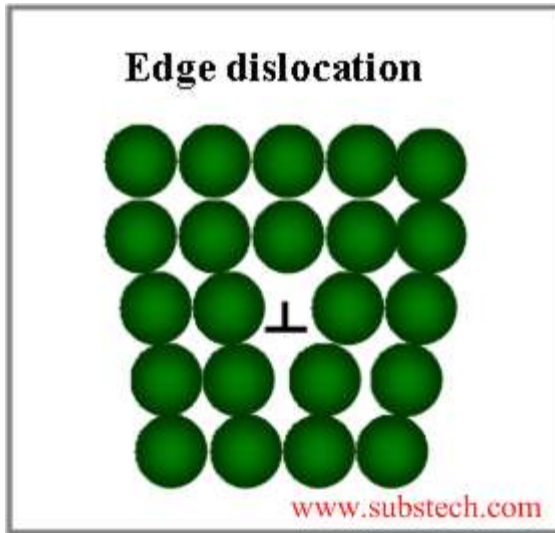
Son defectos que confieren al cristal una distorsión que siempre se encuentra centrada alrededor de una línea. Reciben el nombre de Dislocaciones

Las dislocaciones se forman durante la solidificación de los materiales (cristalización) y también surgen como consecuencia de la deformación plástica, por desajuste de tamaños de los átomos de soluto y solvente en una disolución sólida y por coalescencia (conjunción) de vacancias.

Existen tres clases:

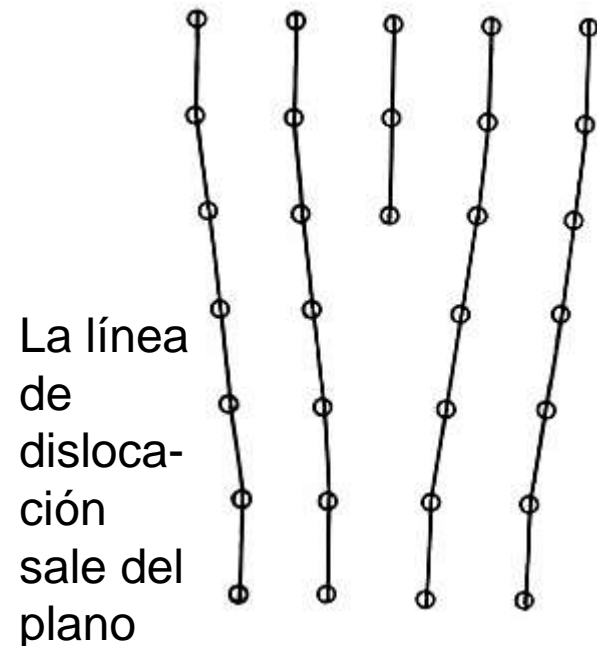
- Dislocaciones de borde (ó arista): se entienden como la inclusión de un plano extra en el cristal.
- Dislocaciones de tornillo (ó helicoidales): se entienden como una torsión desplazada del cristal.
- Combinadas o mixtas

Defectos Lineales (1-D)



La dislocación de borde ocurre por la incorporación de medio plano extra en el cristal si la inclusión es por encima del plano se dice que la dislocación es positiva y se denota por : \perp

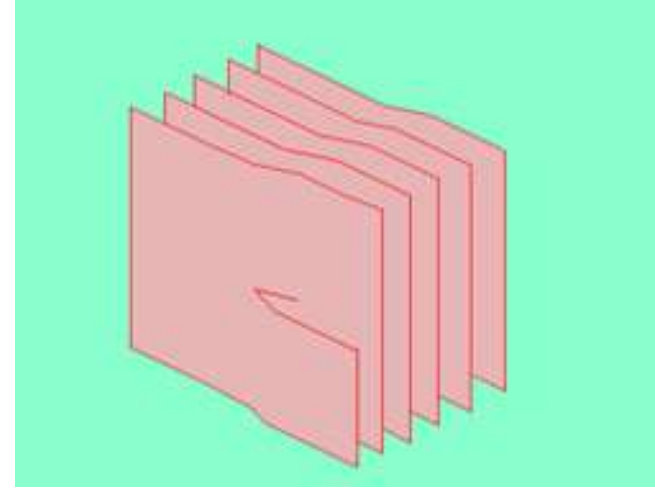
Si es por debajo, se dice que es negativa y se señala como: \top



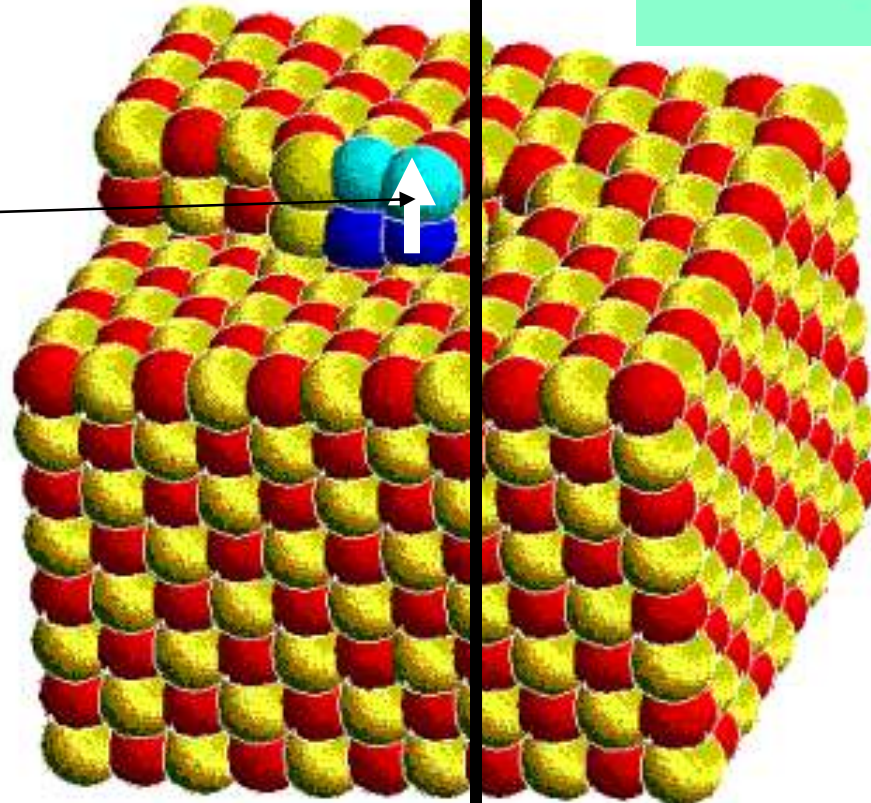
Defectos Lineales (1-D)

Dislocación de tornillo o helicoidal

Torsión



Vector de Burgers



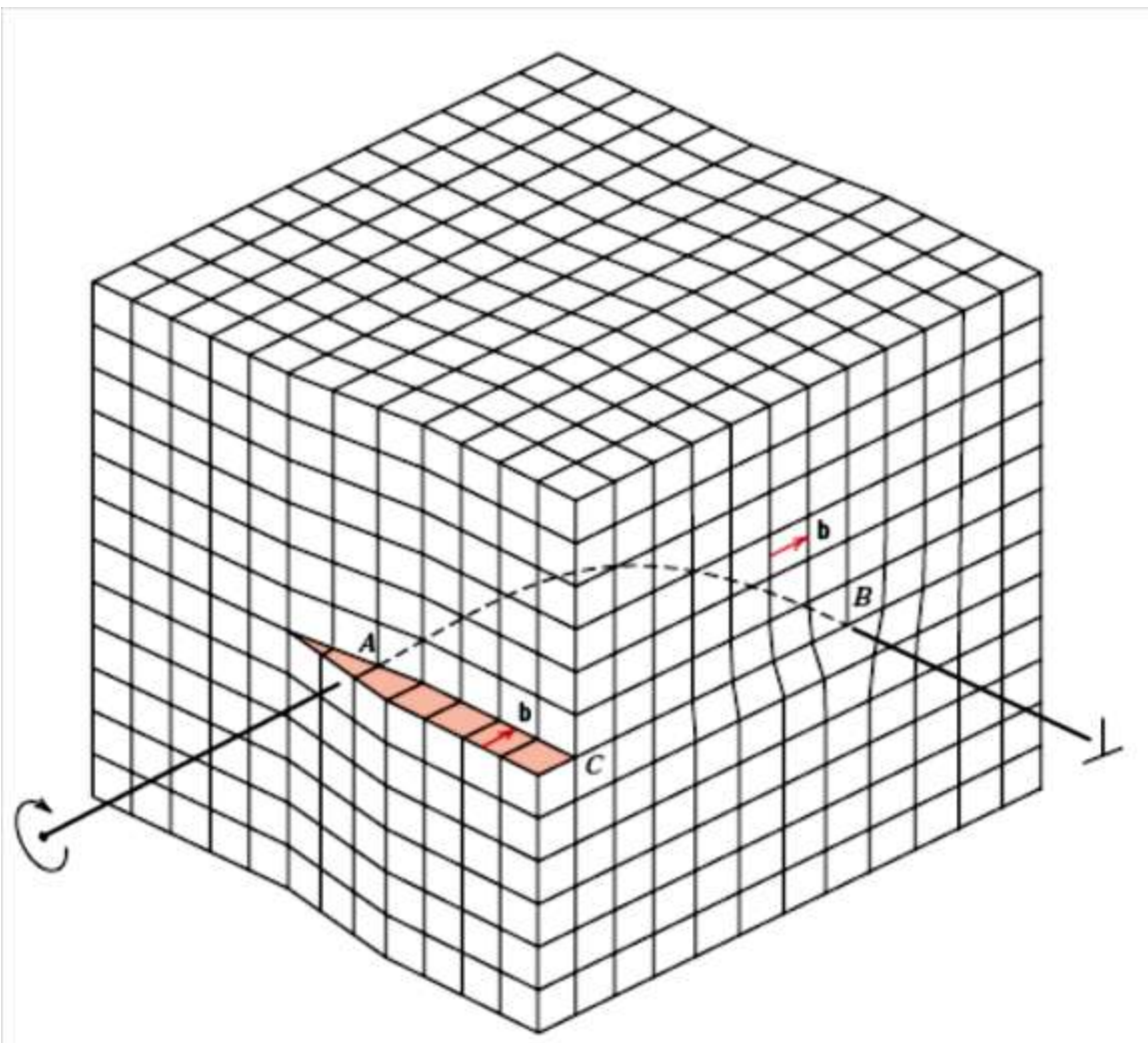
El vector de Burgers
cuantifica la distorsión en el
cristal

Línea de Dislocación

Defectos Lineales (1-D)

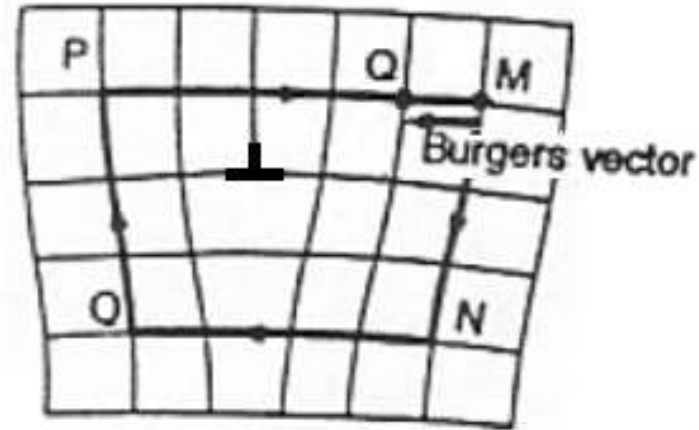
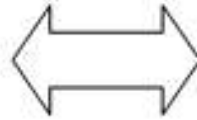
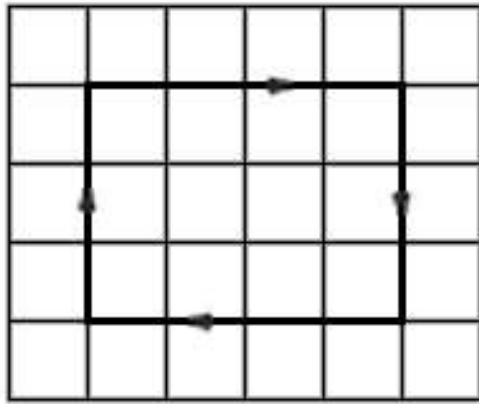
Dislocación mixta o combinada

Posee componentes de Borde y de tornillo

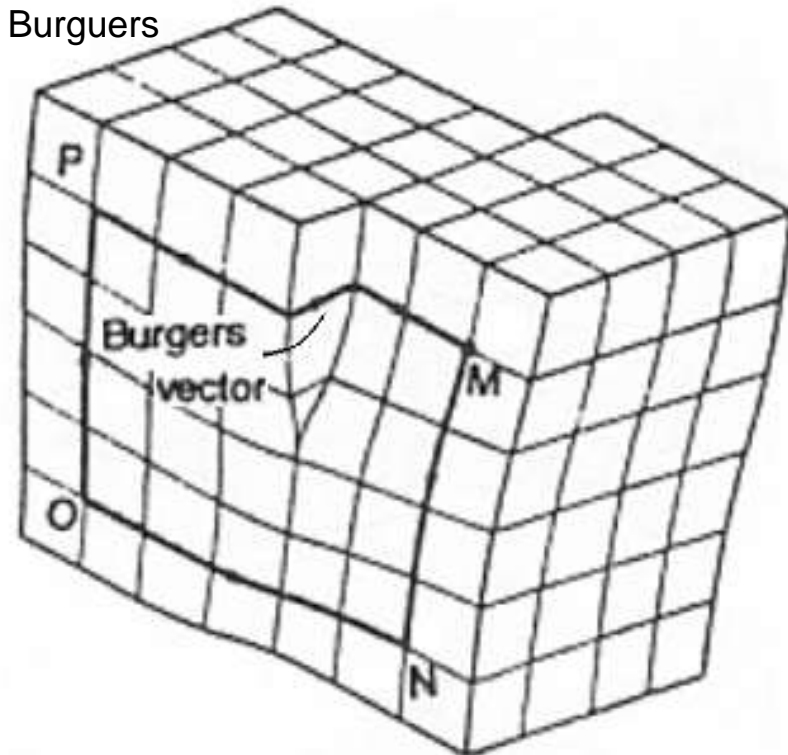
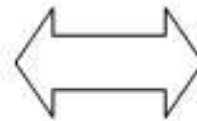
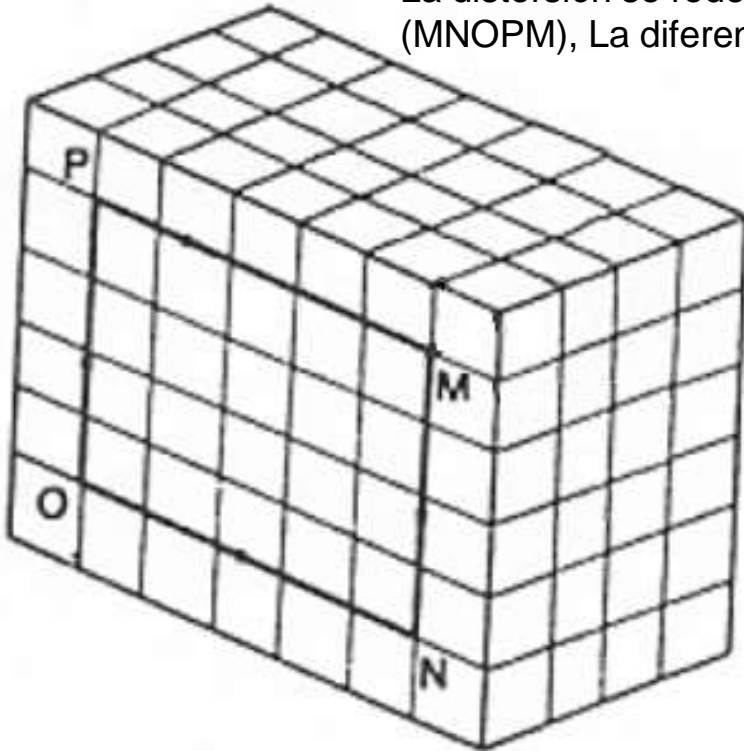


Defectos Lineales (1-D)

Cómo determinamos el vector de Burgers?: Circuito de Burgers

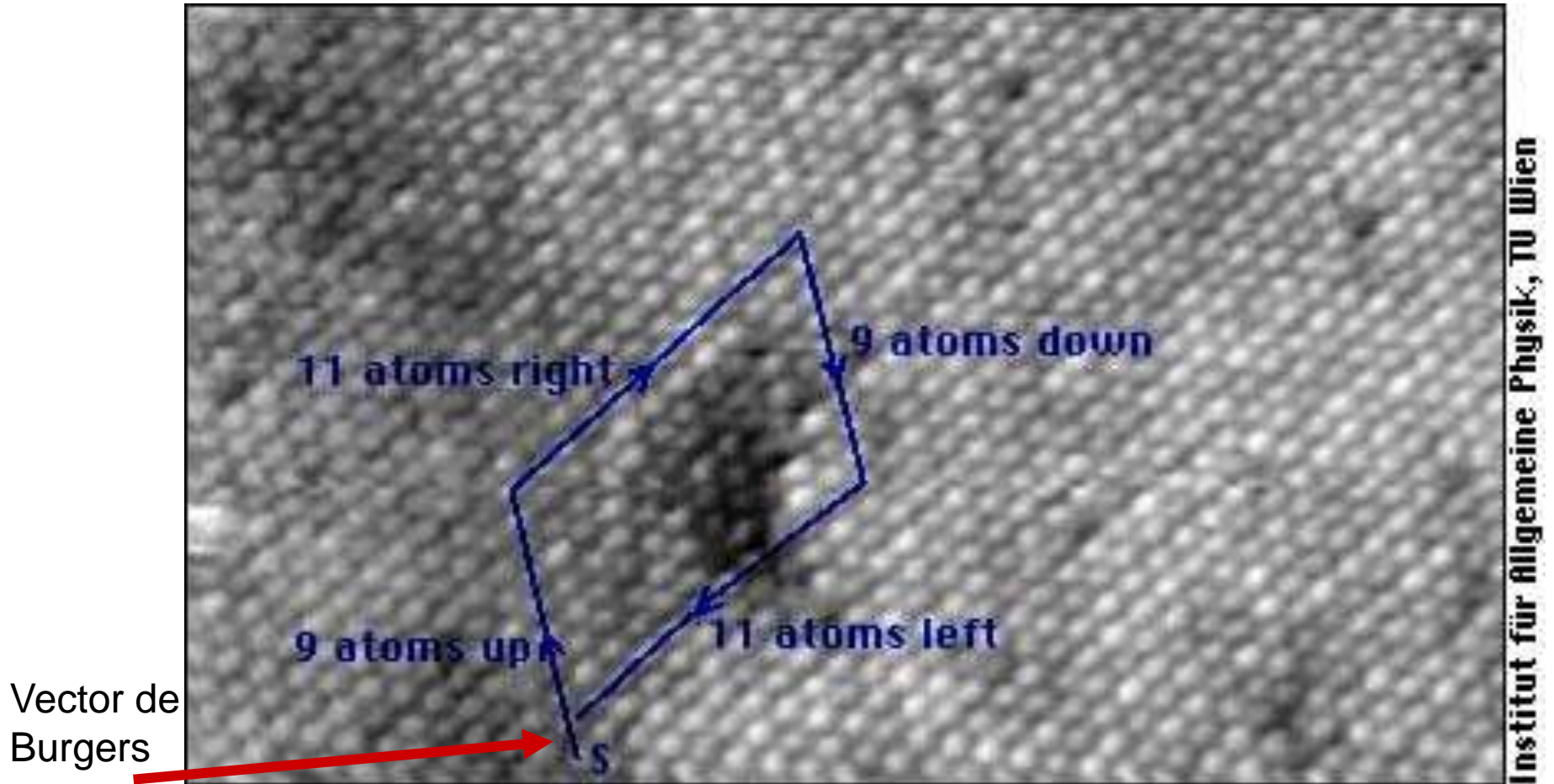


La distorsión se rodea en sentido horario (MNOPM), La diferencia es el vector de Burgers



Defectos Lineales (1-D)

Cómo determinamos el vector de Burgers?: Circuito de Burgers



Fotografía real (HRTEM) de la superficie de un material dónde se observa la trayectoria de una dislocación de borde. El vector de Burgers es una distancia interatómica

Defectos Lineales (1-D)

Propiedades del vector de Burgers

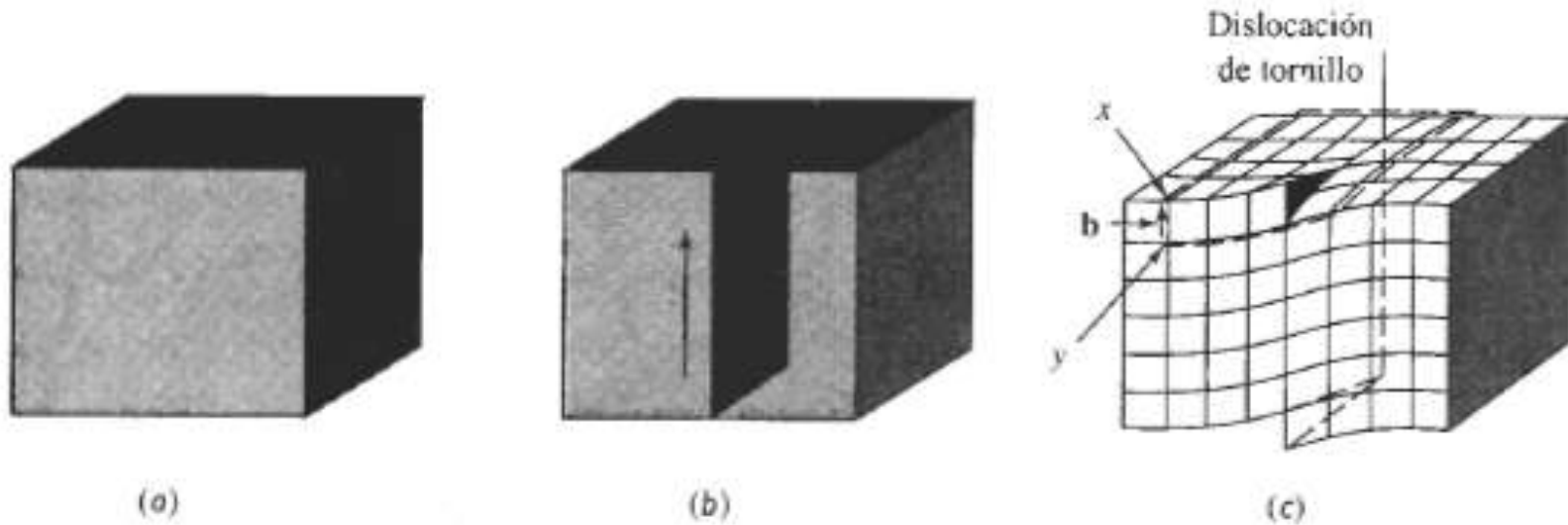


FIGURA 4-1 El cristal perfecto (a) es cortado y deformado una distancia igual a un espaciamento atómico, (b) y (c). La línea a lo largo de la cual ocurre este corte es una dislocación de tornillo. Se requiere de un vector de Burgers \mathbf{b} para cerrar la trayectoria de espaciamentos atómicos alrededor de la dislocación de tornillo.

En la dislocación de tornillo el vector de Burgers es paralelo a la línea de dislocación

Defectos Lineales (1-D)

Propiedades del vector de Burgers

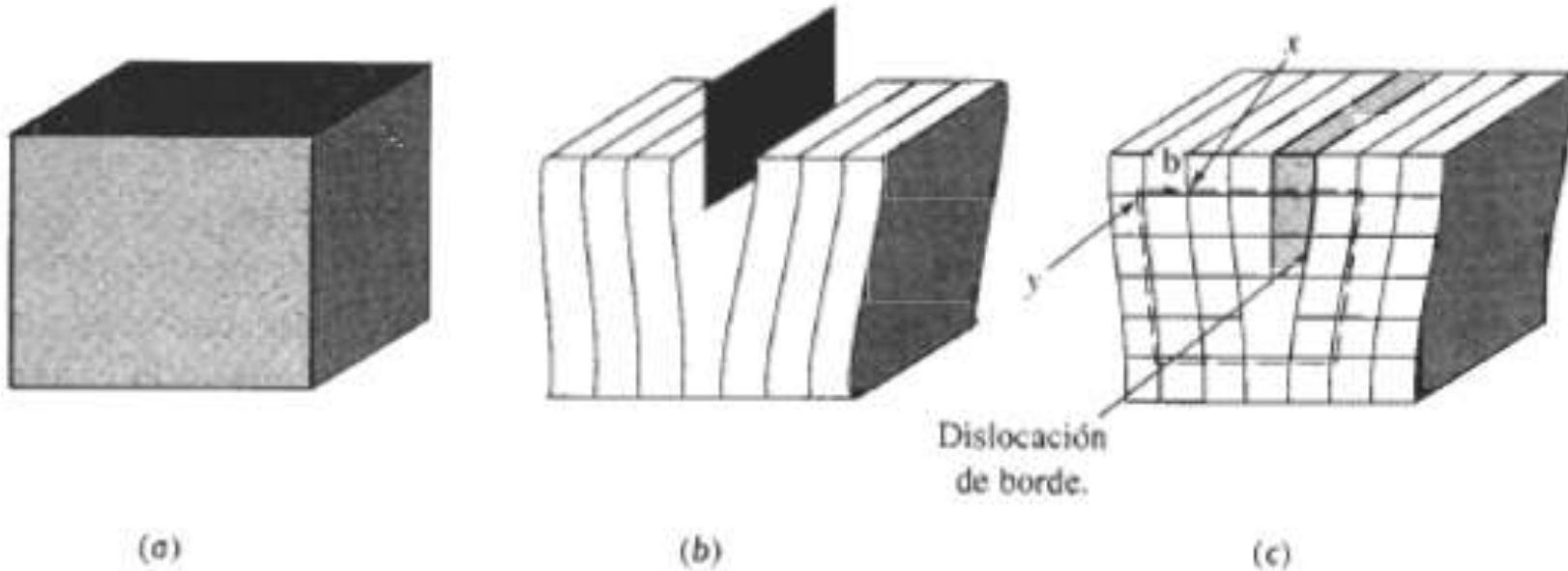
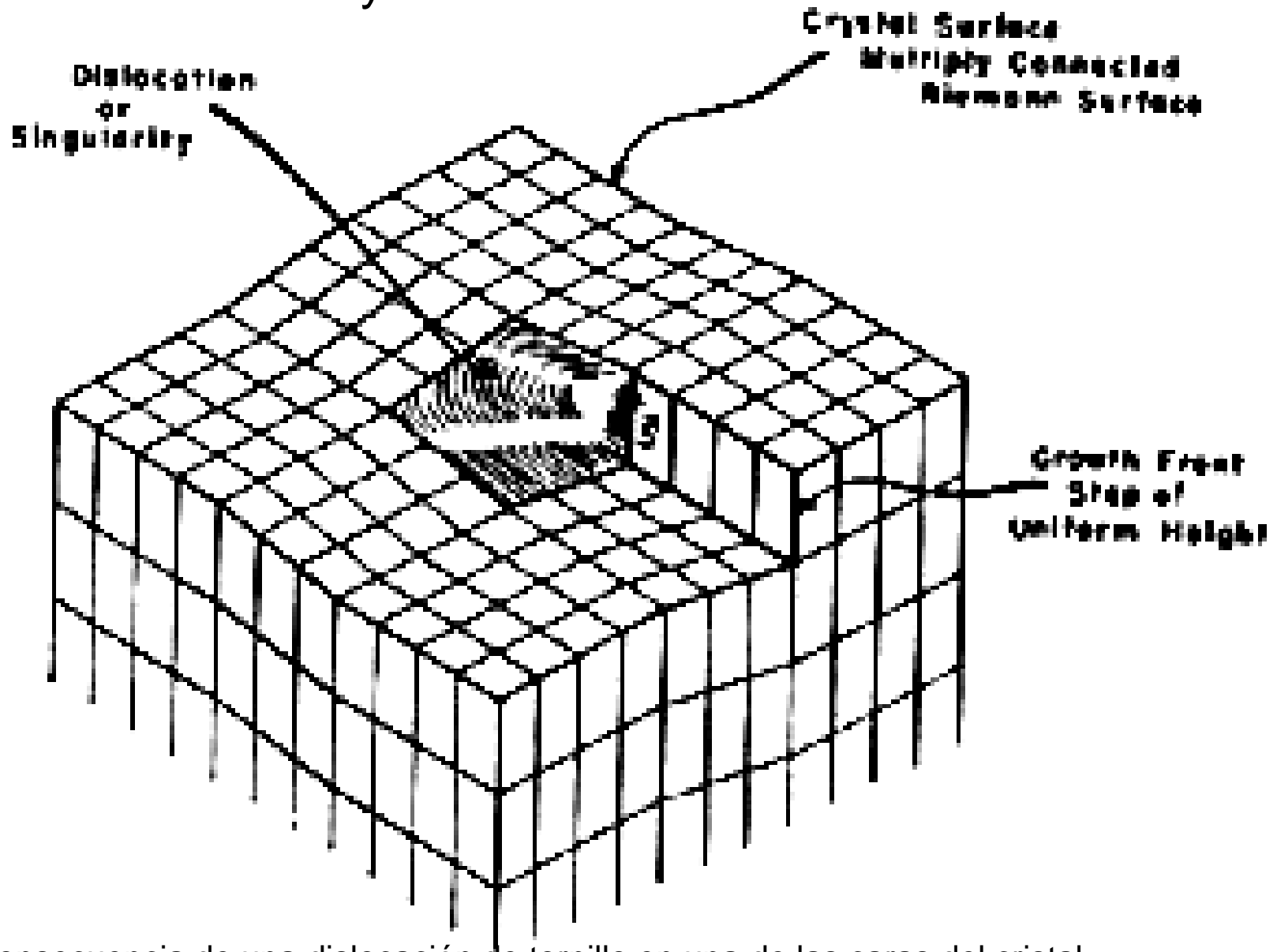


FIGURA 4-2 El cristal perfecto (a) es cortado y un plano adicional de átomos es insertado (b). El borde inferior del plano adicional es la dislocación de borde (c). Se requiere de un vector de Burgers **b** para cerrar un círculo de igual cantidad de espaciamentos atómicos alrededor de la línea de dislocación.

En la dislocación de borde el vector de Burgers es perpendicular a la línea de dislocación

Dislocaciones de tornillo y crecimiento cristalino

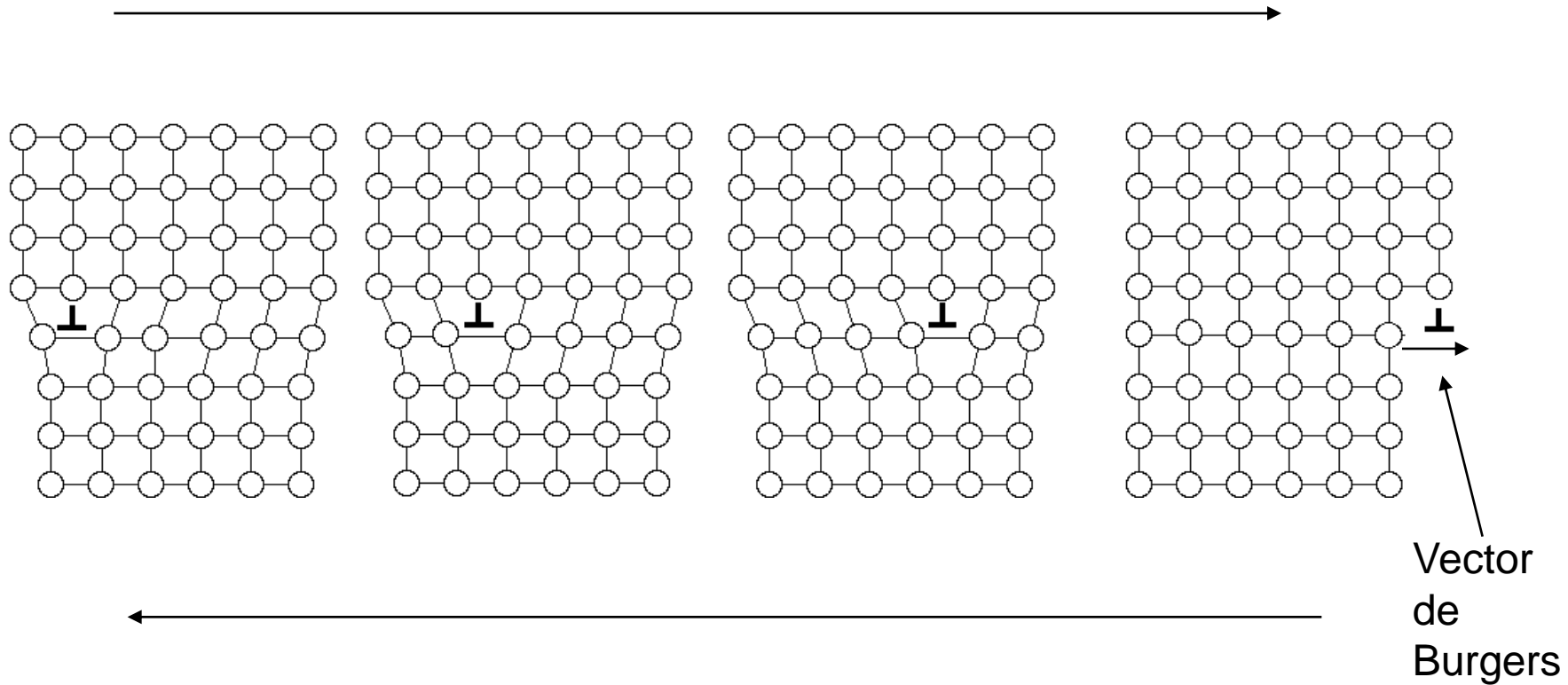


Como consecuencia de una dislocación de tornillo en una de las caras del cristal surge un escalón que brinda un frente de crecimiento cristalino en espiral que extiende la Superficie del cristal.

Defectos Lineales (1-D)

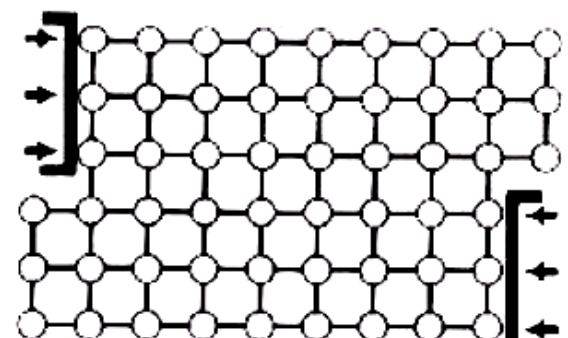
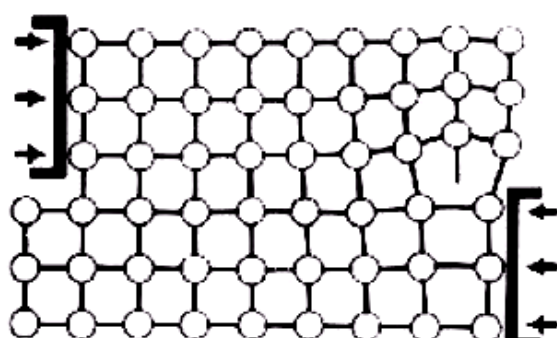
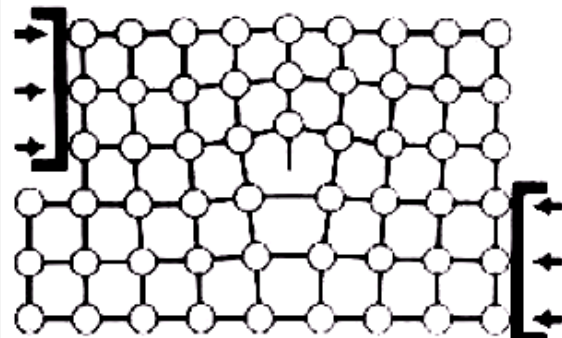
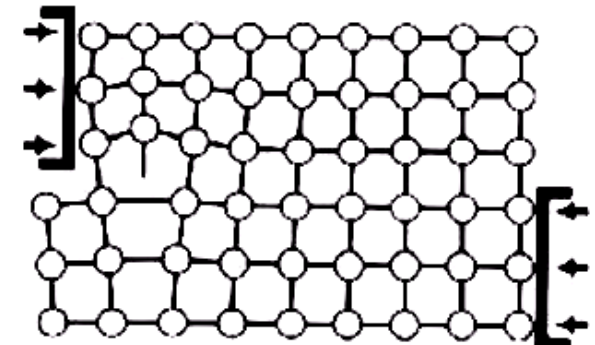
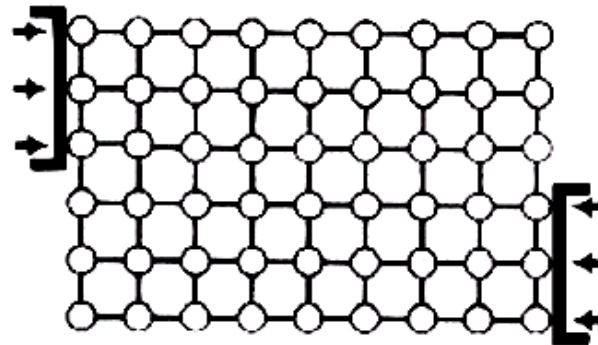
Relación entre la deformación plástica y las dislocaciones de borde

Esfuerzo de corte

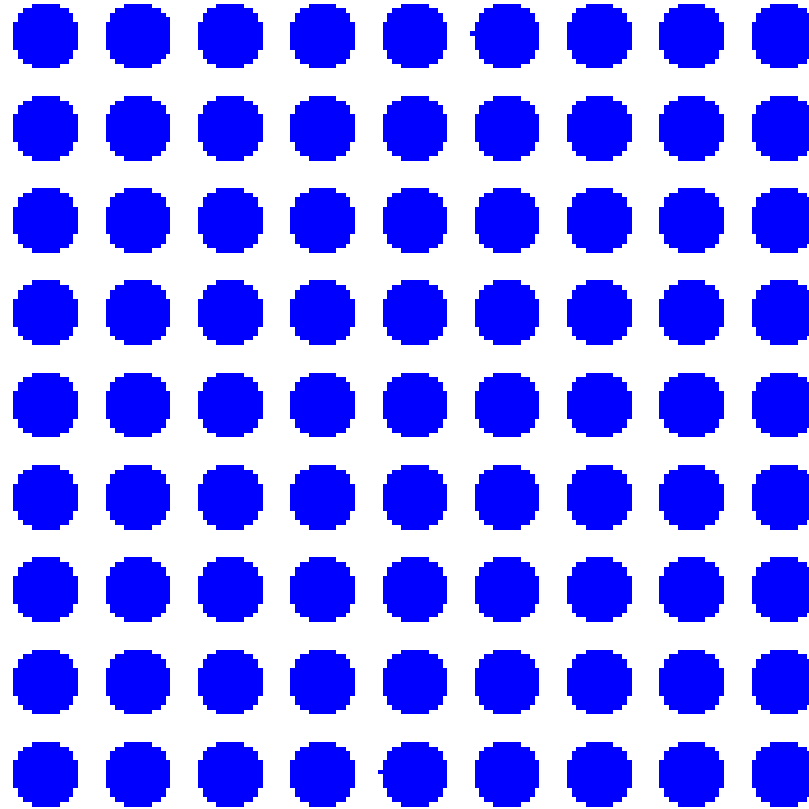


Relación entre la deformación plástica y las dislocaciones de borde

The low stress level required to provoke dislocation motion is a consequence of the fact that the disturbance is spread out over many atomic diameters, the strain being appreciable only at the central region, known as the core. In a sort of reverse tug-of-war, the atoms ahead of the core oppose the motion while those behind promote it. The consecutive movement of the core, from site to site along the slip plane, is analogous to the crawling of a caterpillar, which eases the burden of movement by having only a few legs off the ground at any instant.



Defectos Lineales (1-D)



Relación entre la deformación plástica y las dislocaciones de borde

Planos y direcciones compactas. Sistemas de deslizamiento cristalino y movimiento de dislocaciones de borde

El movimiento de las dislocaciones en cristales metálicos cúbicos ocurre con mucha mayor facilidad (y con preferencia) en direcciones compactas y sobre planos compactos de la red cristalina.

La conjunción de planos compactos y direcciones compactas se denomina “sistema de deslizamiento”

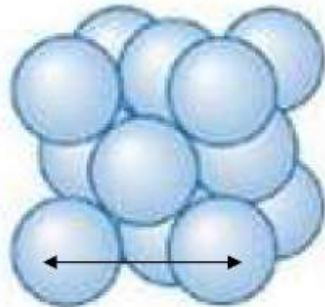
Planos y direcciones compactas. Sistemas de deslizamiento cristalino y movimiento de dislocaciones de borde

Estructura cristalina	Plano de deslizamiento	Dirección de deslizamiento
Metales BCC	{110} {112} {123}	$\langle 111 \rangle$
Metales FCC	{111}	$\langle 110 \rangle$
Metales HCP	{0001}	$\langle 100 \rangle$
	{11 $\bar{2}$ 0}	$\langle 110 \rangle$
	{10 $\bar{1}$ 0}	or $\langle 11\bar{2}0 \rangle$
	{10 $\bar{1}$ 1}	
	} Ver Nota	
MgO, NaCl (iónicos)	{110}	$\langle 110 \rangle$
Silicio (covalente)	{111}	$\langle 110 \rangle$

Nota: Estos planos se activan en algunos metales y aleaciones y a temperaturas elevadas

Planos y direcciones compactas. Sistemas de deslizamiento cristalino y movimiento de dislocaciones de borde

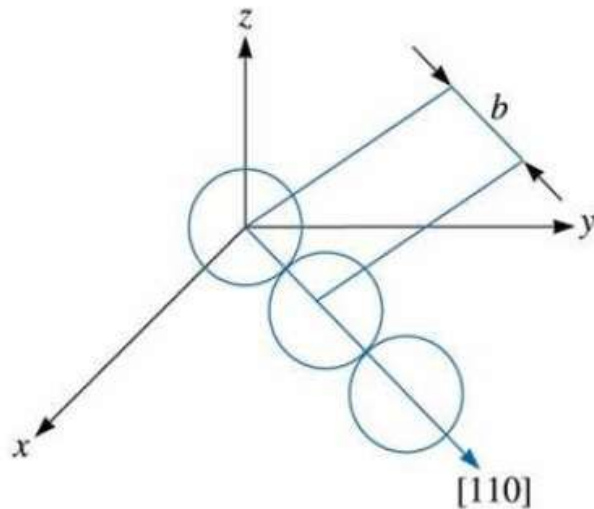
Calcular la magnitud del vector de Burger del Cobre



0,36151 nm.

Las direcciones compactas, las del vector de Burgers, son de la forma $\langle 110 \rangle$. La distancia de repetición a lo largo de las direcciones $\langle 110 \rangle$ es la mitad de la diagonal de la cara.

$$\text{diagonal} = \sqrt{2}a_0 = 0.51125 \text{ nm}$$



La longitud del vector de Burgers, es decir, la distancia de repetición es:

$$b = \frac{1}{2} (0,51125 \text{ nm}) = 0,25563 \text{ nm}$$

Defectos Planares (2-D)

En esta clase de defectos la distorsión reticular recorre un área ó superficie (región bidimensional. Suelen endurecer al material y contribuir en la deformación plástica, pero pueden también constituir puntos débiles frente al ambiente o a las altas temperaturas

- Superficies externas del cristal
- Límites o bordes de grano
- Maclas
- Fallas de apilamiento

Entre éstos tenemos:

Defectos Planares (2-D)

Superficies externas:

¿Por qué considerar una superficie externa un defecto?

Por la sencilla razón que si el cristal es matemáticamente perfecto, repetitivo e infinito.... Sus superficies externas rompen su continuidad !!!!

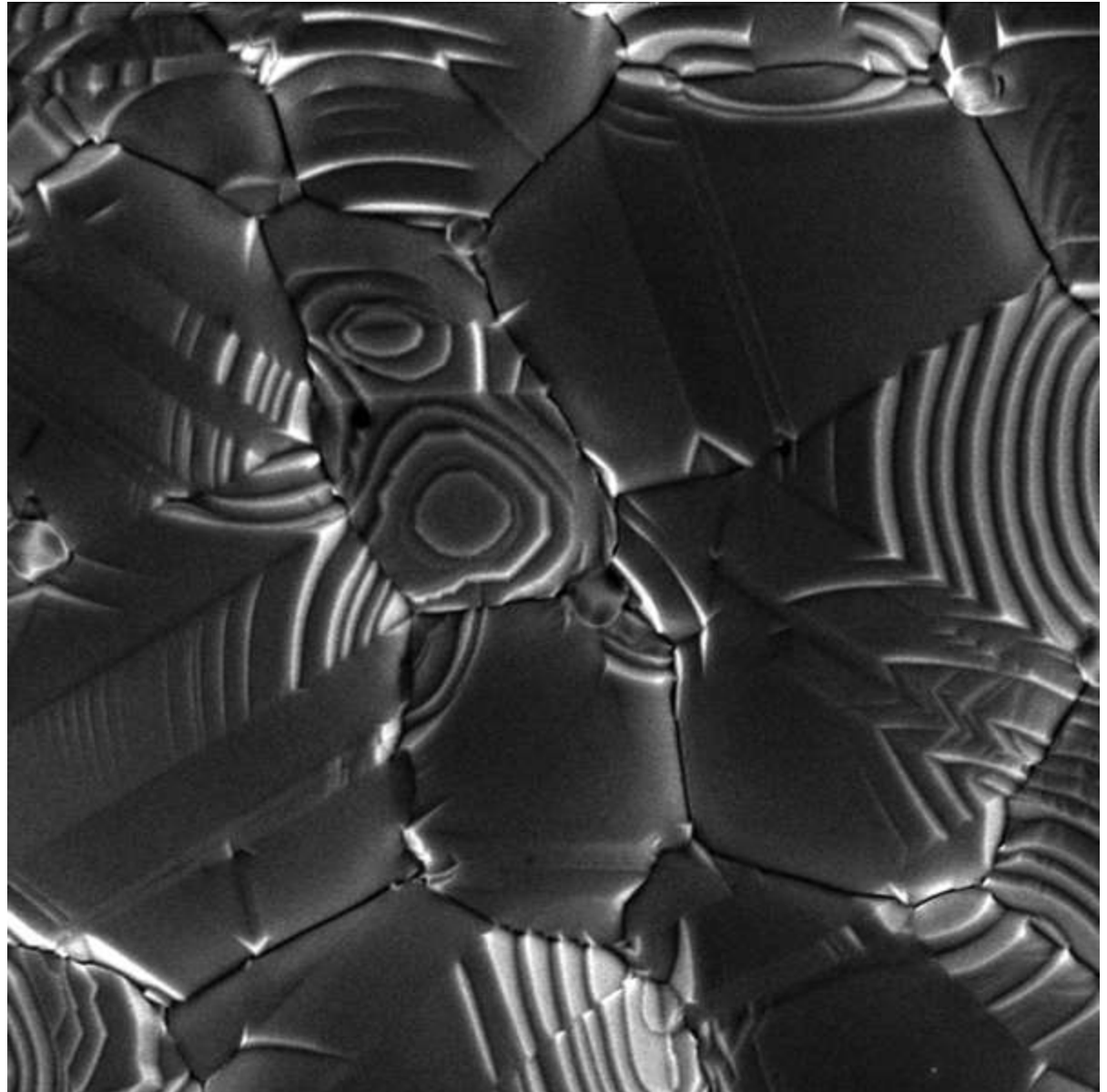
Desde un punto de vista práctico, en las superficies hay átomos enlazados por un solo lado !..... Mientras dentro del cristal todos los átomos están rodeados de vecinos. Y esto implica:

- alta energía “extra” superficial
- desequilibrio químico superficial
- ELEVADA TENDENCIA A REACCIONAR QUÍMICAMENTE CON EL ENTORNO
- Susceptibilidad a la EROSIÓN

Defectos Planares (2-D)

Superficies externas:

Superficie externa de una muestra de Plata de alta pureza imagen de Microscopio Electrónico de Barrido.



Defectos Planares (2-D)

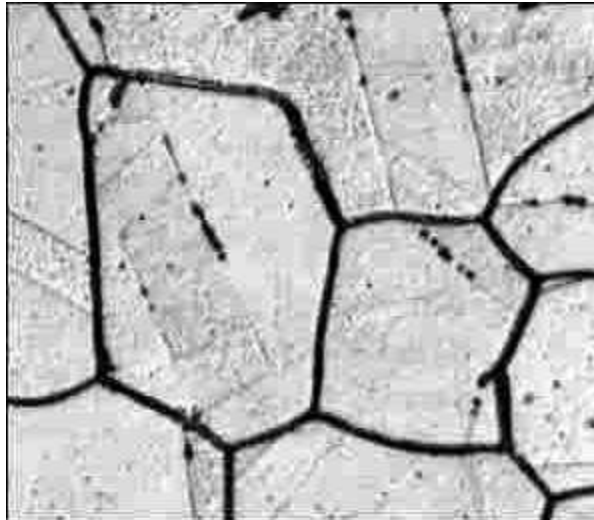
Límites o bordes de grano:

Los bordes de grano son defectos planares generalizados que separan regiones con diferente orientación cristalina (denominadas granos dentro de un material policristalino). Son regiones inestables pues concentran mucha energía.

En el Borde de Grano los átomos no se encuentran en arreglos cristalinos perfectos, tienden a ser más bien zonas “amorfas” y son el resultado de Condiciones de cristalización no homogéneas a partir del fundido.

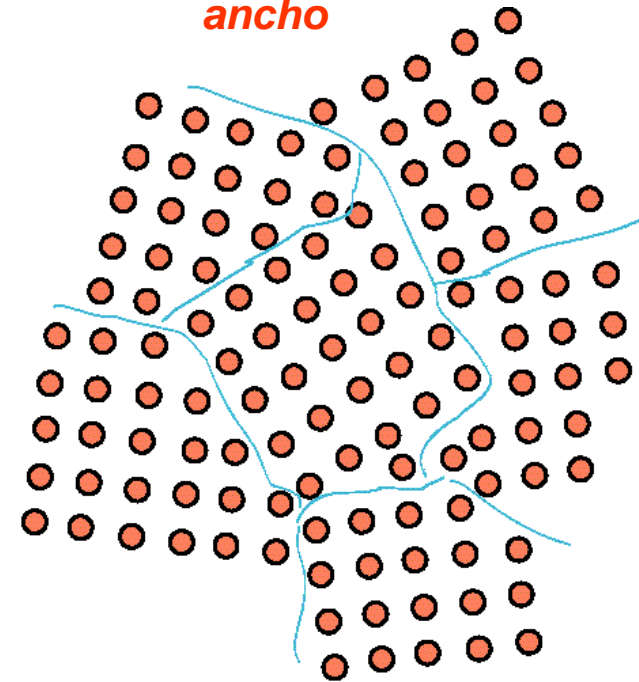
El tamaño de los granos en los materiales de ingeniería es variable y un rango típico está entre 1 micrómetro y 1000 micrómetros, aunque pueden encontrarse granos del rango de centímetros

*Las impurezas
tienden a
concentrarse en los
bordes de grano del
material afectando
sus propiedades*



Acero Inox. Sensibilizado

**2 a 5 diámetros
atómicos de
ancho**

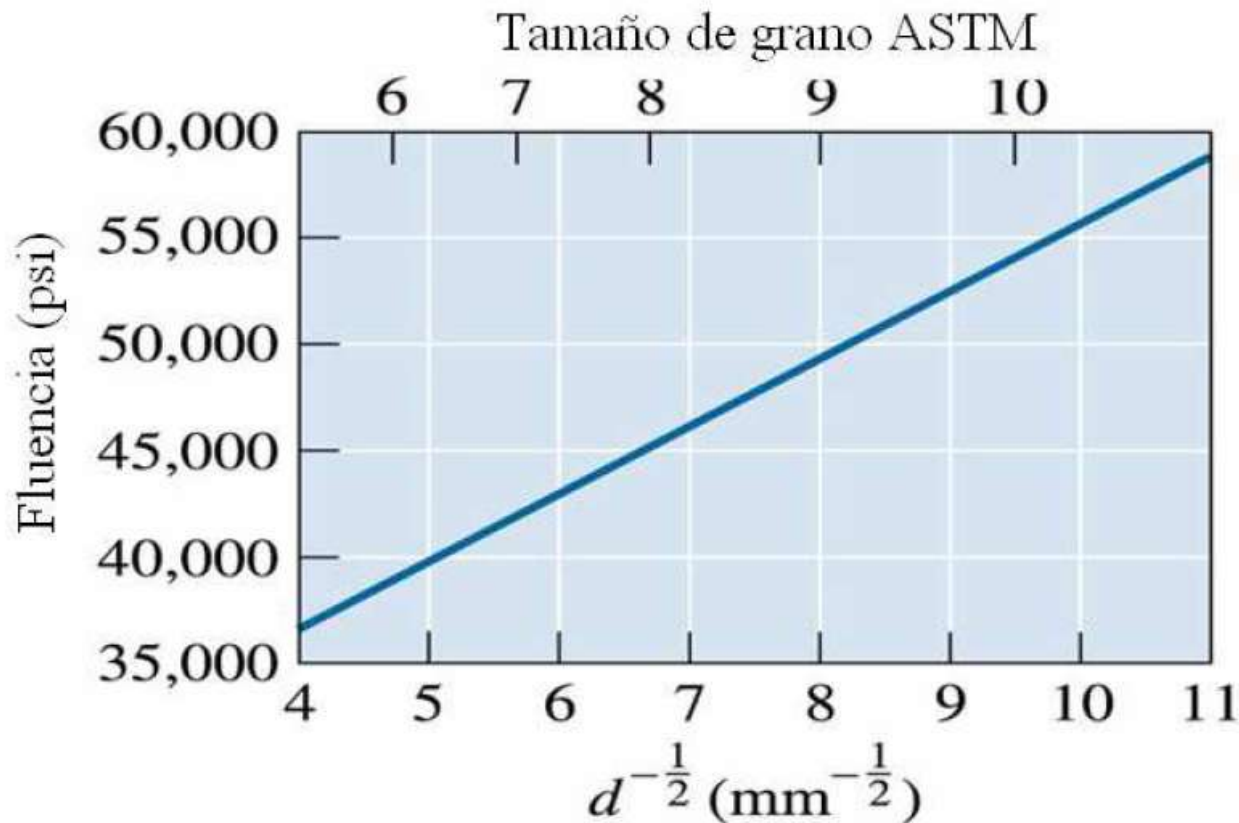


Defectos Planares (2-D)

Límites o bordes de grano: Son causa de endurecimiento en materiales policristalinos

Ecuación de Hall-Petch: Relaciona el tamaño de grano con el esfuerzo de fluencia

$$\sigma_y = \sigma_0 + Kd^{-1/2}$$

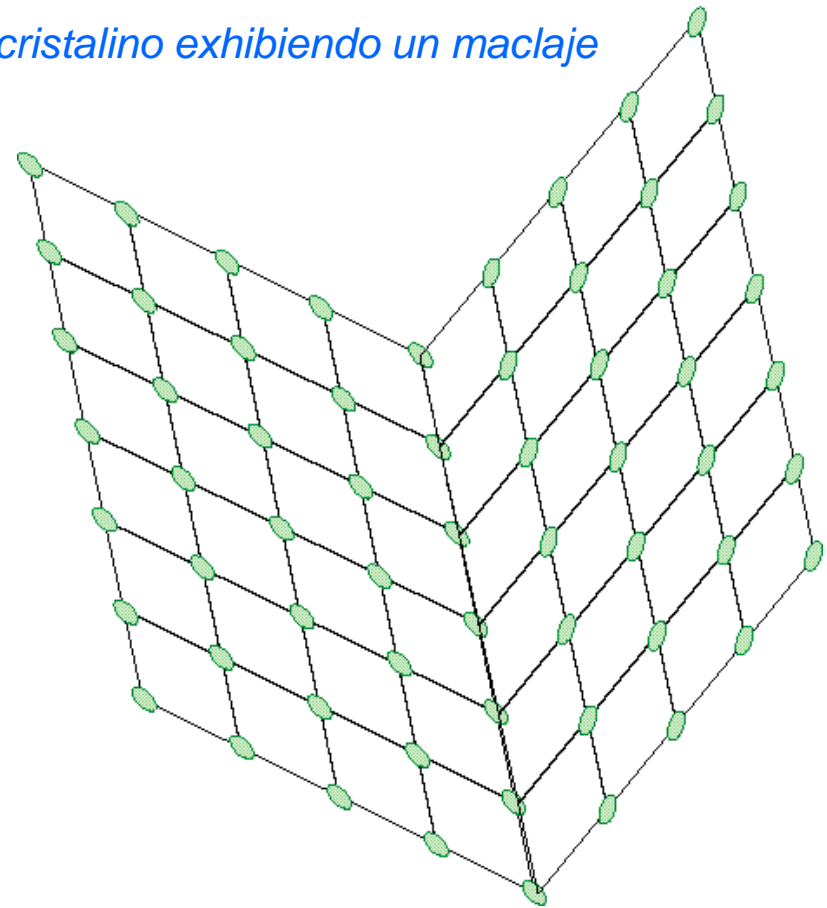
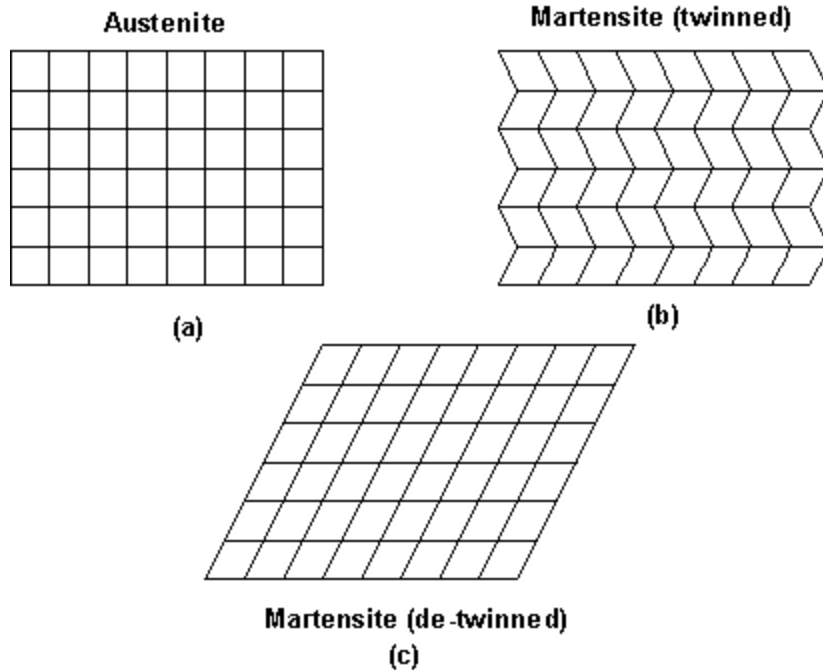


Defectos Planares (2-D)

Maclas:

Es una región del cristal en la que existe una imagen de espejo de la estructura a través de un plano o borde. No existe región amorfa en el borde de macla, eso la diferencia del borde de grano

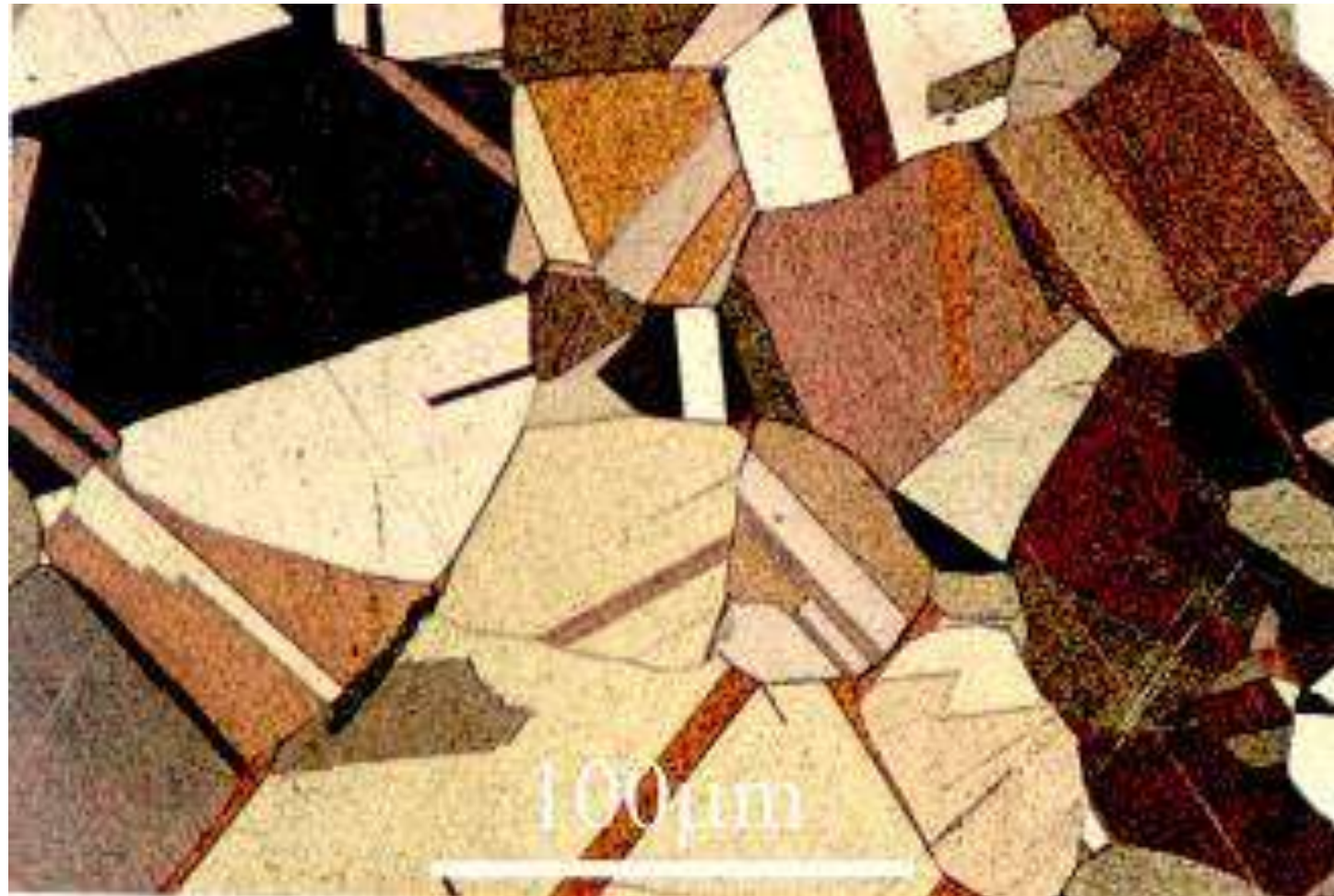
Arreglo cristalino exhibiendo un maclaje



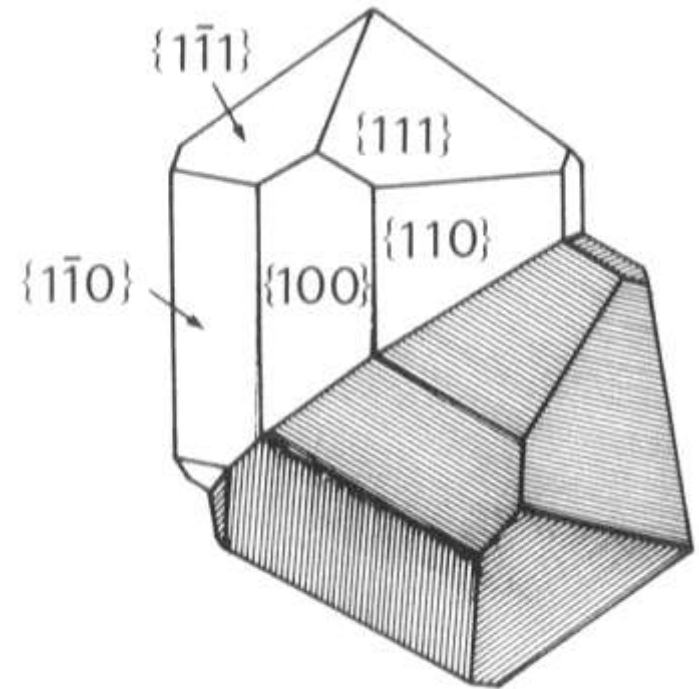
Defectos Planares (2-D)

Maclas: En metales como las aleaciones de cobre y aceros inoxidables son visibles al microscopio. Se producen por deformación plástica o calentamiento sobretodo en aleaciones FCC

Microestructura de un Bronce (Cu-Sn) Deformado y Recocido



Defectos Planares (2-D)



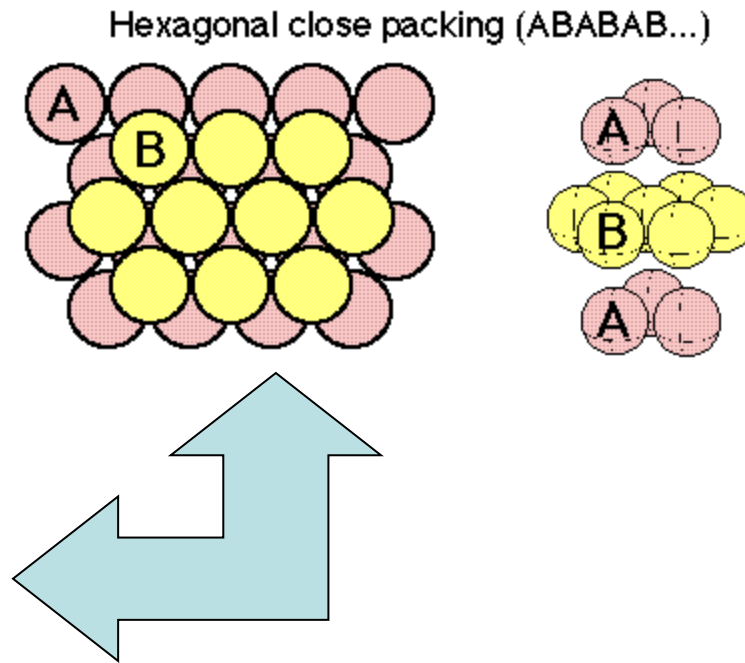
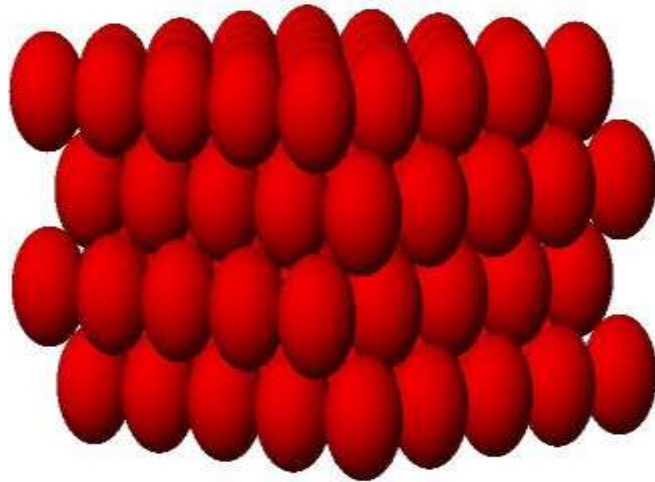
Cristales Gemelos ó “clústers” cristalinos de Cuarzo (SiO_2). Son producto de la formación de maclas durante el proceso de cristalización



Defectos Planares (2-D)

Fallas de apilamiento:

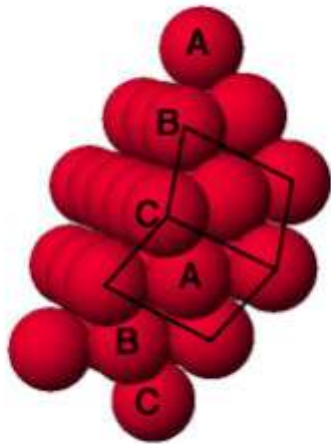
Definir mejor antes que es el apilamiento atómico... Secuencia de planos atómicos que se superponen para formar la estructura cristalina



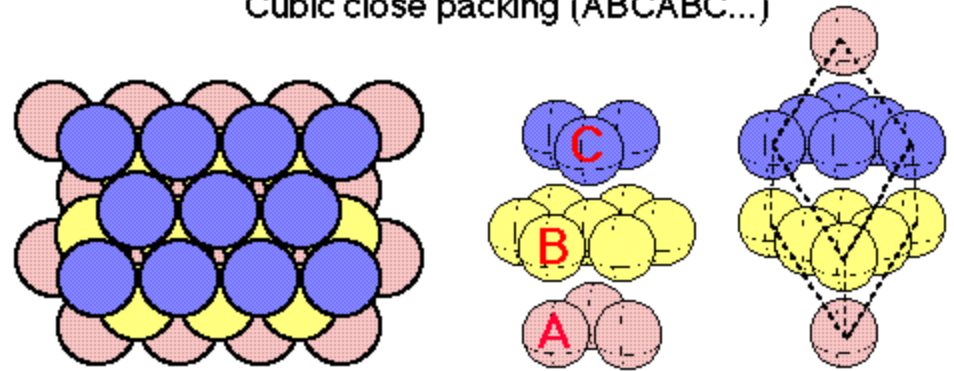
Defectos Planares (2-D)

Fallas de apilamiento:

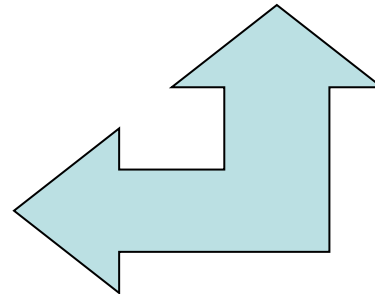
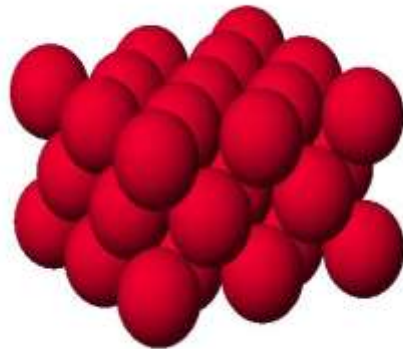
Definir mejor antes que es el apilamiento atómico... Secuencia de planos atómicos que se superponen para formar la estructura cristalina



Cubic close packing (ABCABC...)



Al reorientarse, es la celda FCC



Defectos Planares (2-D)

Fallas de apilamiento:

Entonces una falla de apilamiento es son “errores” en la secuencia de apilamiento de los planos COMPACTOS dentro de un cristal. Tienden a endurecer al cristal Y OCURREN EN CRISTALES FCC Y HCP.

Hexagonal Compacta (HCP): secuenciaABABAB...

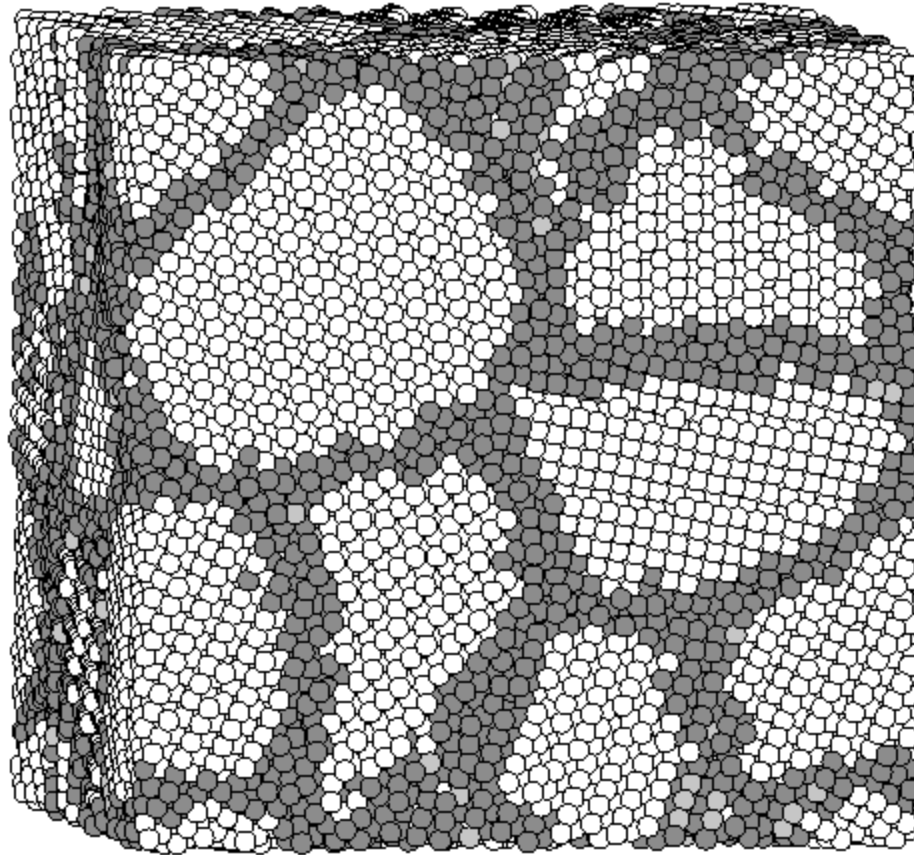
Cúbica centrada en las caras (FCC): secuencia ...ABCABCABC....

Una falla de apilamiento en el cristal FCC sería la inclusión de una secuencia hexagonal dentro del FCC del tipo:

...ABCABABABC...

Defectos Planares (2-D)

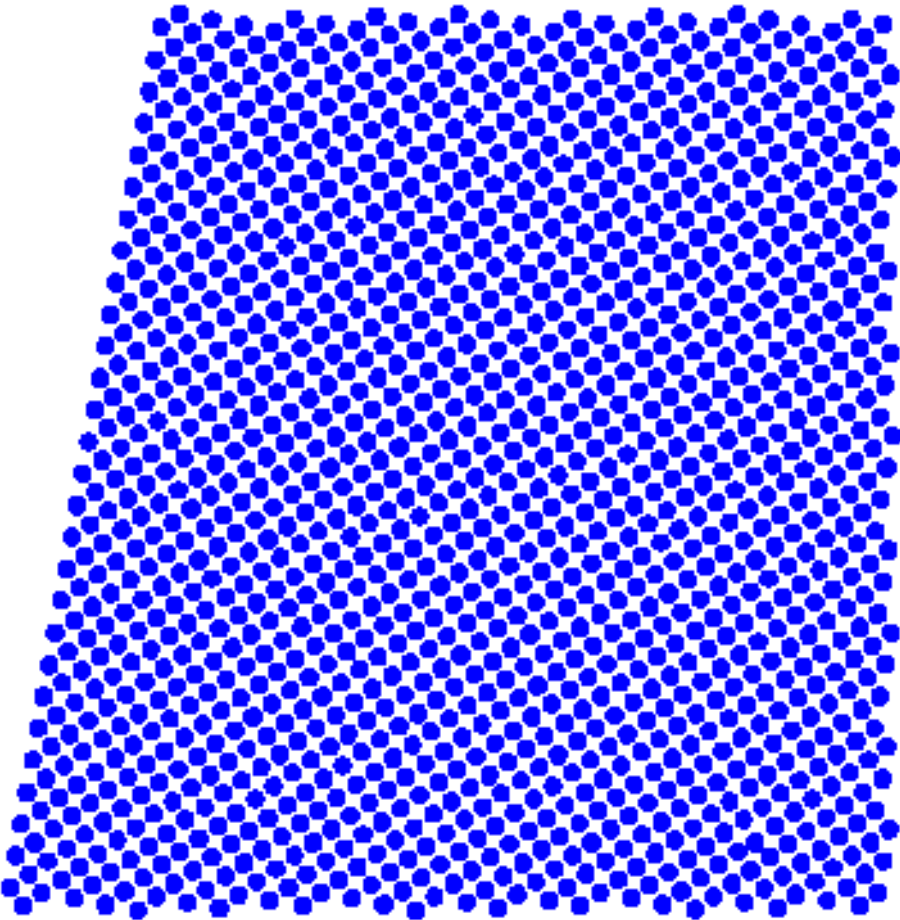
Deslizamiento de bordes de grano: un grano pasa sobre otros durante la deformación



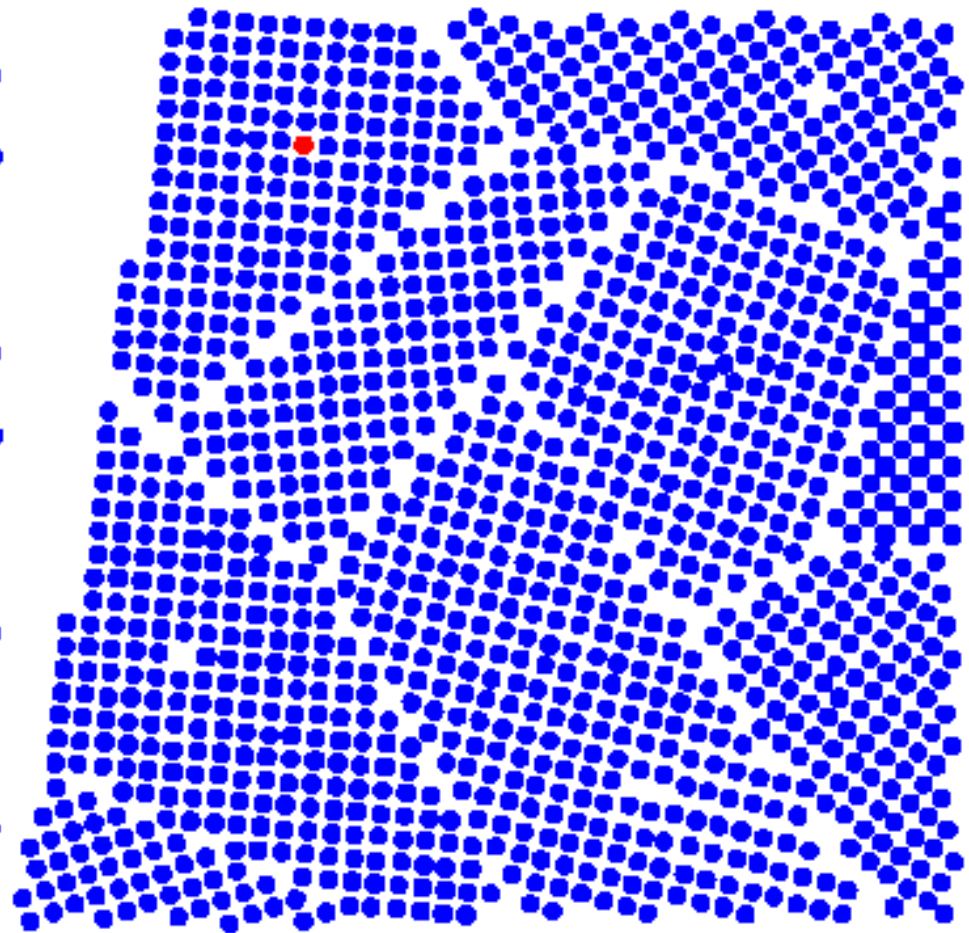
Deformación plástica de un cristal de Cu FCC. Note el desorden en la zona del B. G. (gris oscura) los granos perfectos (blancas), las fallas de apilamiento y maclas (gris claro)

Materiales monocristalinos Vs. materiales policristalinos

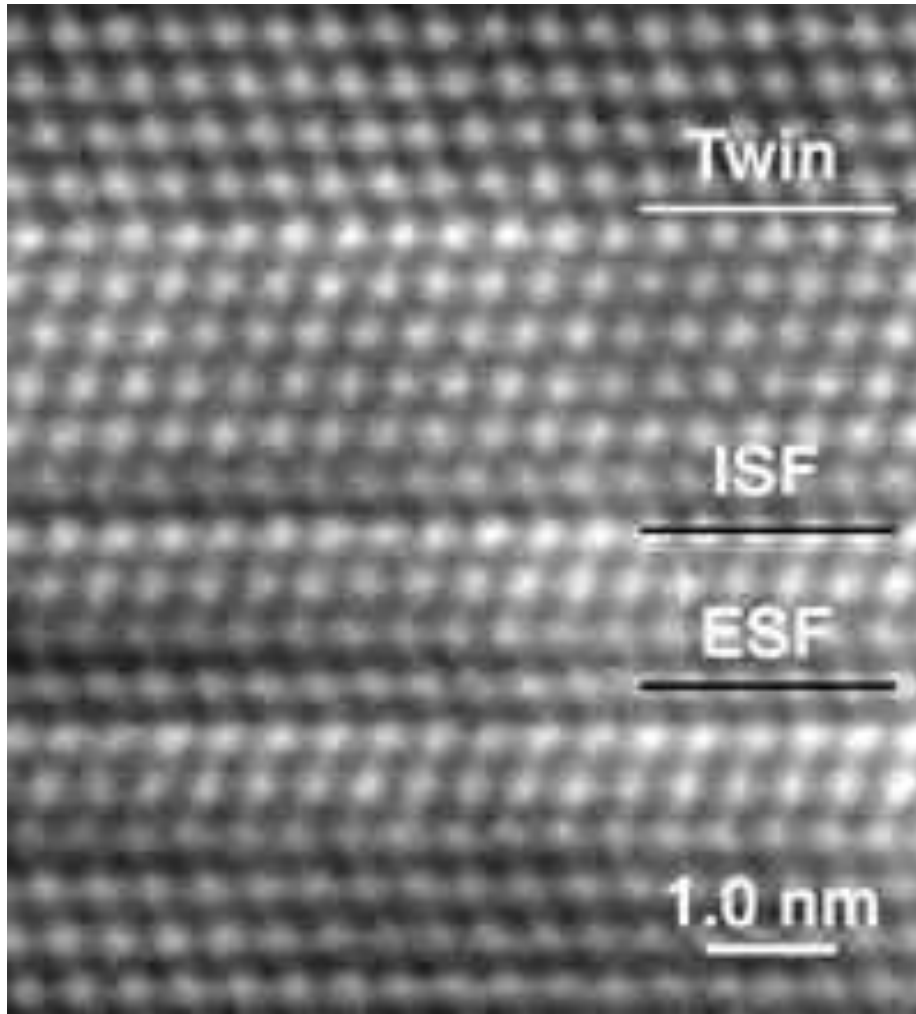
Monocristal ideal



Material policristalino con incluyendo defectos



Defectos Planares (2-D)



This is a HRTEM (high-resolution TEM) image. The image shows the atomic structure of planar defects in thin-film silicon: a twin defect (in which the upper layers are rotated 180° from the lower layers), an intrinsic stacking fault (ISF—in which adjacent layers are shifted slightly), and an extrinsic stacking fault (ESF—in which there is an intervening layer between two layers slightly shifted from each other)

Defectos Volumétricos o Macroscópicos (3-D)

En esta clase de defectos la distorsión reticular ocupa un volumen y puede llegar a ser de tipo macroscópica. (la distorsión es tridimensional)

- Microporosidades
- Macroporosidades y rechupes
- Precipitados
- Grietas
- Regiones amorfas en un material policristalino

Entre éstos tenemos:

Defectos Volumétricos o Macroscópicos (3-D)

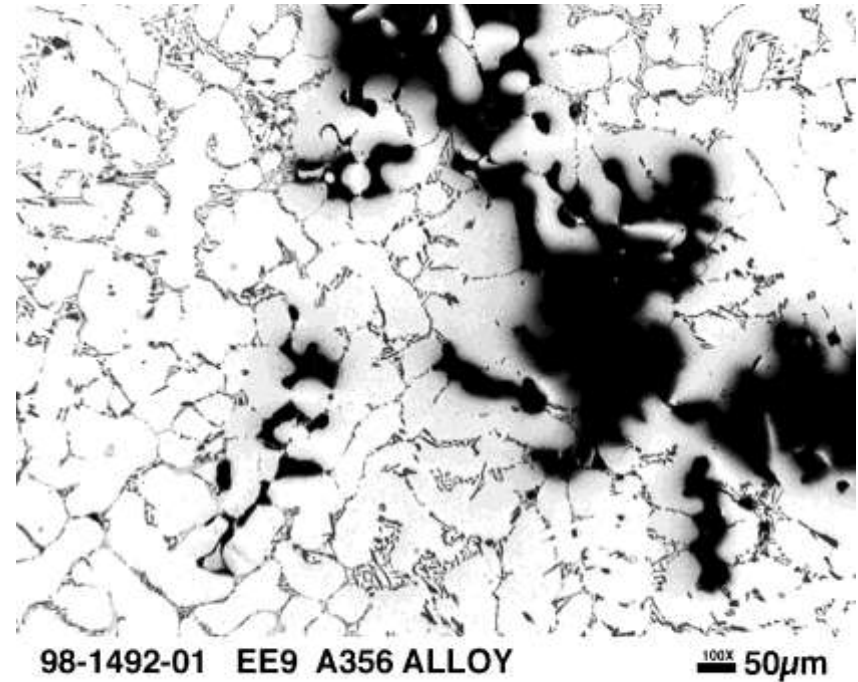
En esta clase de defectos la distorsión reticular ocupa un volumen y puede llegar a ser de tipo macroscópica. (la distorsión es tridimensional)

Microporosidades:

Ocurren por la coalescencia (conjunción) de vacancias.

Macroporosidades o rechupes:

Ocurren por falta de llenado de metal líquido durante la solidificación o por el atrapamiento de gases durante la solidificación.

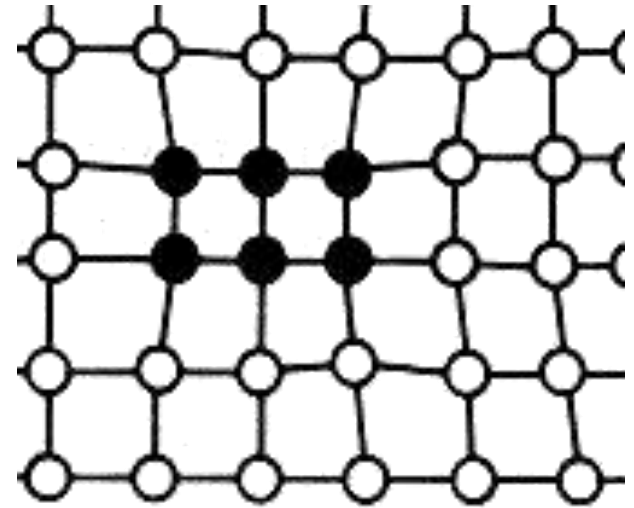


Defectos Volumétricos o Macroscópicos (3-D)

En esta clase de defectos la distorsión reticular ocupa un volumen y puede llegar a ser de tipo macroscópica. (la distorsión es tridimensional)

Precipitados:

Es un conjunto de átomos ajenos (de aleación o impurezas) que se organizan en una región determinada de la red cristalina del solvente. Generan distorsión y endurecimiento del cristal

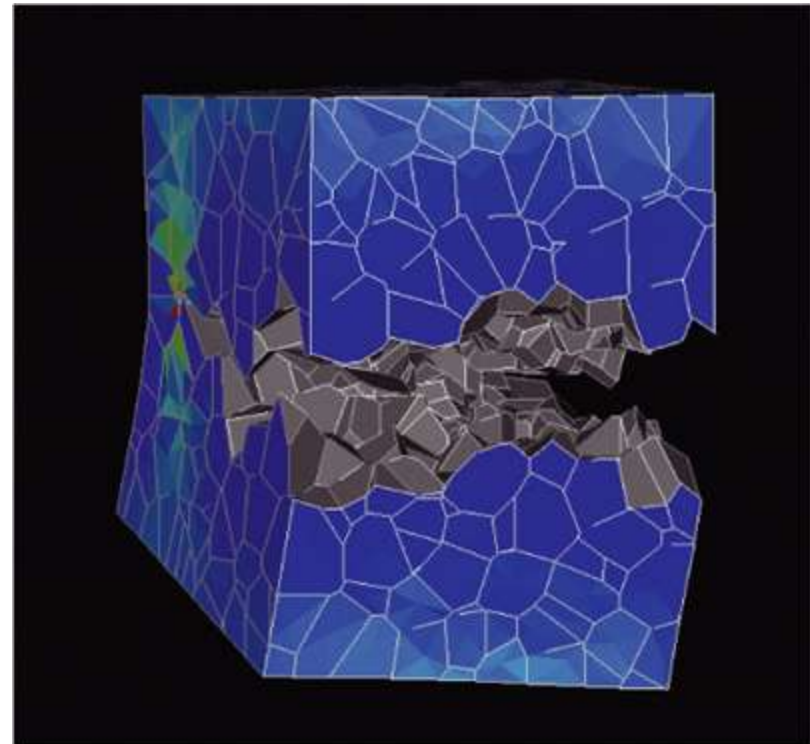
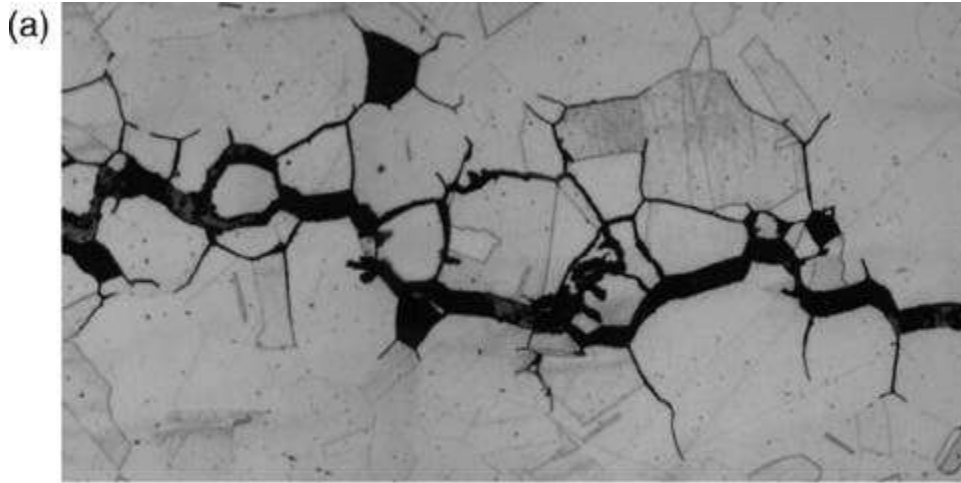


Defectos Volumétricos o Macroscópicos (3-D)

En esta clase de defectos la distorsión reticular ocupa un volumen y puede llegar a ser de tipo macroscópica. (la distorsión es tridimensional)

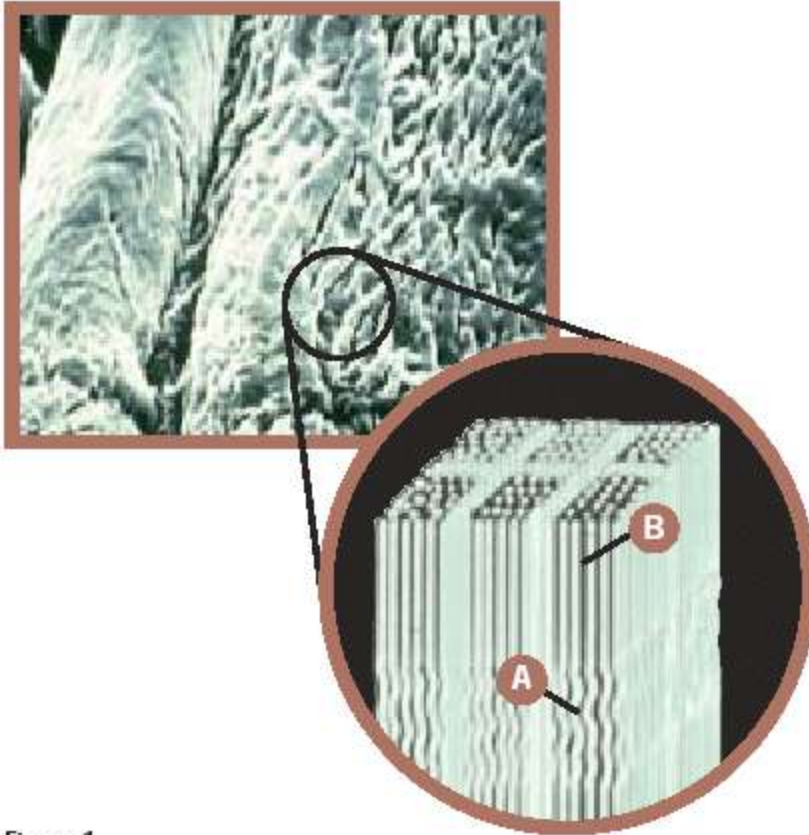
Grietas:

Es la separación (a través de los granos ó de los bordes de grano) de la microestructura del material



Defectos Volumétricos o Macroscópicos (3-D)

En esta clase de defectos la distorsión reticular ocupa un volumen y puede llegar a ser de tipo macroscópica. (la distorsión es tridimensional)



Regiones amorfas:

Son regiones sin orden de largo alcance que se ubican dentro del material. Suelen presentarse en materiales poliméricos

Figure 1

A. The **paracrystalline region**, an amorphous flexible mass of cellulose chains, and

B. The crystalline region, which is composed of tight **bundles of microfibrils** in a rigid linear arrangement.