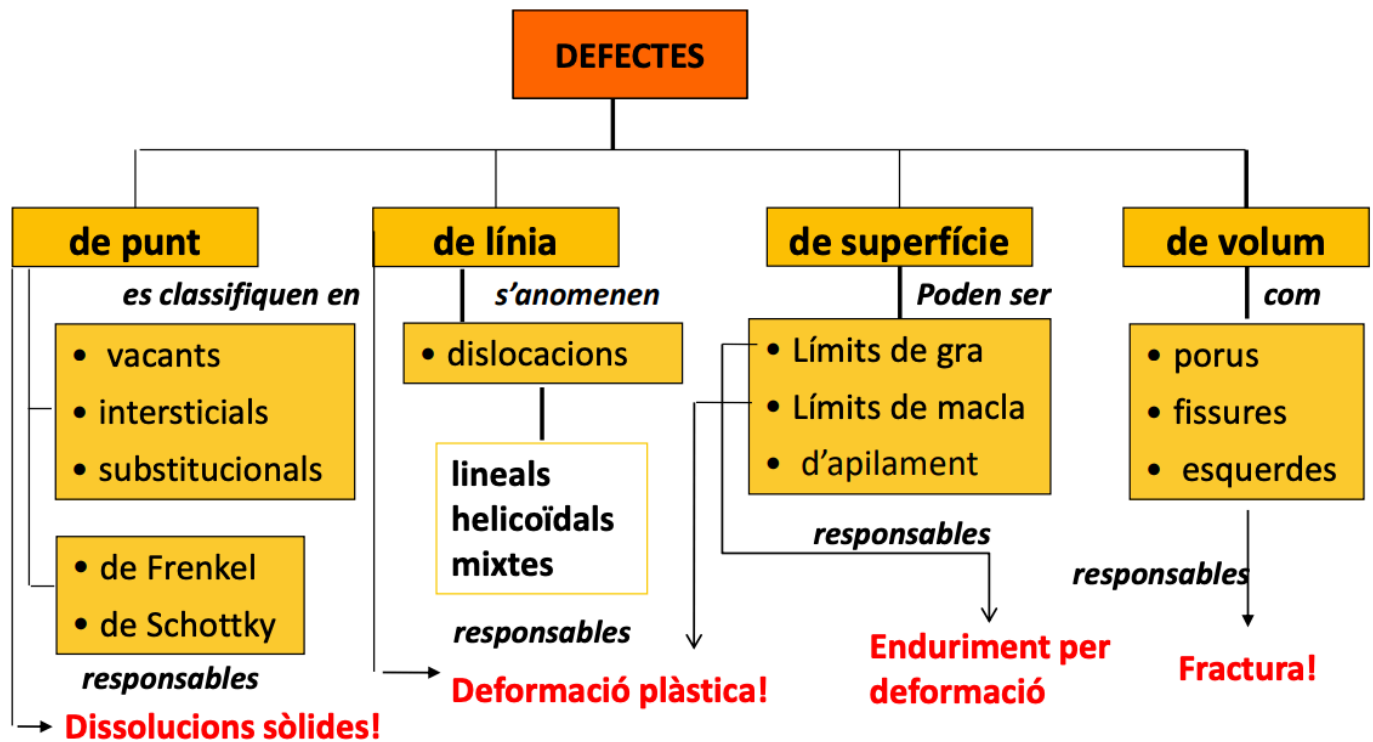


Capítol 3 – DEFECTES EN SÒLIDS CRISTAL·LÍNS

Un **defecte cristal·lí** és qualsevol pertorbació en la periodicitat de la xarxa d'un sòlid cristal·lí. Un sòlid ideal és un sòlid perfecte en el qual els àtoms (molècules o ions) estan col·locats de manera periòdica i regular, estenent-se fins l'infinit. Els defectes són els responsables d'algunes de les propietats més importants dels sòlids, com la deformació plàstica, el color, la difusió...



○ Defectes de punt:

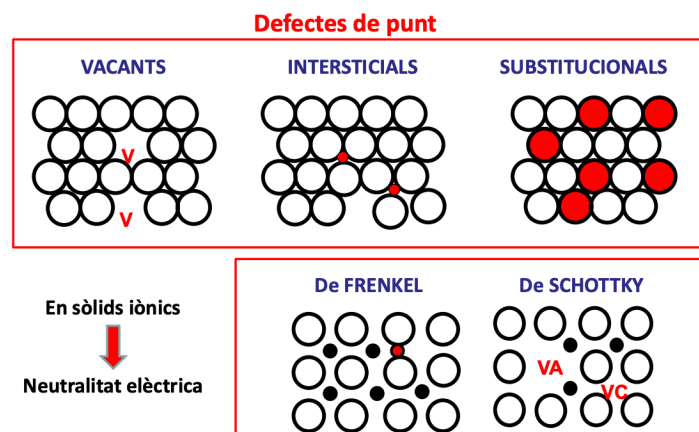
Una **vacant** és un forat on hauria d'haver-hi un àtom però no hi ha cap. $N_v = N \cdot e^{\left(\frac{-Q_v}{k \cdot T}\right)}$

Un defecte de punt **intersticial** es dona quan un àtom addicional es col·loca en un forat o interstici, habitualment desocupat, de la xarxa cristal·lina. Els àtoms que estan als intersticis són més grans que els buits que ocupen i provoquen una distorsió de la xarxa.

Un defecte de punt **substitucional** consisteix en substituir un àtom de la xarxa cristal·lina per un de diferent. L'àtom nou, que es col·locarà en una vacant, només pot introduir-se a la xarxa si la diferència entre el seu radi i el de l'anterior element és menor o igual al 15% i si ambdós elements formen la mateixa estructura cristal·lina.

Un defecte **de Frenkel** és un tipus de defecte intersticial produït pel salt d'un ió a una posició intersticial deixant una vacant. (catió fora de lloc)

Un defecte de **Schottky** es dona quan un anió deixa una vacant i, per mantenir l'electronegativitat, també deixa un interstici un catió.



○ Solubilitat i solucions sòlides:

La **solubilitat** és la quantitat d'un element o compost que es pot dissoldre en un altre sense separar-se en una altra fase. Una **fase** és una regió homogènia del sistema que difereix en estructura i/o composició d'una altra regió. En tota fase s'ha de mantenir l'ordenació atòmica, la composició i l'estructura. Un **límit de fase** és la superfície que separa dues fases diferents.

Quan la solubilitat entre dos compostos és parcial, apareix una segona fase quan se sobrepassa la solubilitat. Com més gran és la temperatura major és la solubilitat perquè hi ha més moviment d'àtoms i, per tant, més vacants.

Una **solució sòlida** és una dissolució en estat sòlid que consta de dos o més elements dispersos atòmicament en una estructura de fase única. La proporció d'àtoms que es dissolen pot arribar a ser del 100% (= totalment solubles). Les **regles d'Hume-Rothery** ens indiquen com de soluble són dos o més elements:

- 1) Tenen radis semblants (diferència no més gran del 15%).
 - 2) Tenen la mateixa estructura cristal·lina.
 - 3) Tenen la mateixa valència i electronegativitats semblants.
- ↑ + important
↓ - important

Podem distingir dos tipus de solucions sòlides: les **solucions intersticials** i les **substitucionals**.

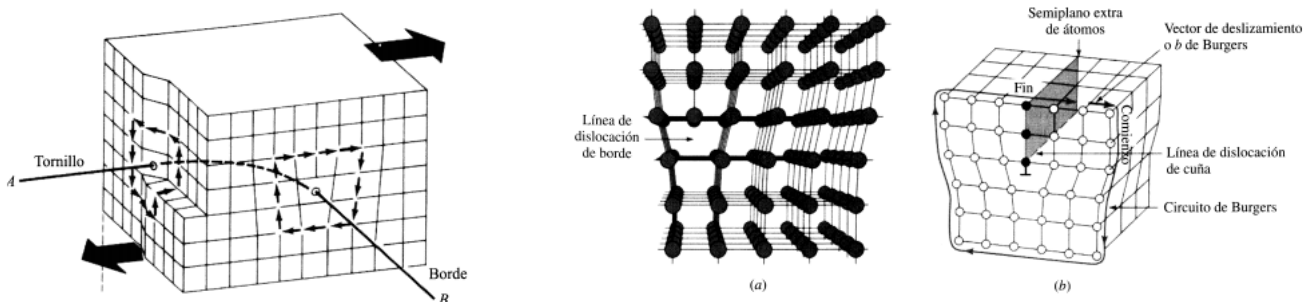
○ Defectes lineals:

Els defectes lineals es deuen a àtoms desalineats que quan es mouen causen el lliscament entre plans cristal·lins produint una deformació plàstica. Aquests defectes s'estenen en una direcció i afecten a una filera de punts de xarxa.

Una **dislocació lineal o d'aresta** es dona quan s'introdueix un pla d'àtoms addicional en un material. La xarxa es distorsiona i els àtoms contigus estan comprimits mentre que els altres s'expandeixen.

Una **dislocació helicoidal** té lloc quan parts contigües del material són sotmesos a esforços tallants paral·lels de sentits contraris (cisalla). La xarxa es distorsiona perquè es forma un esglaó a la línia de dislocació.

Les **dislocacions mixtes** són una barreja de les dues anteriors. Els enllaços a través dels plans de lliscament es trenquen i es refan successivament.



○ Defectes superficials:

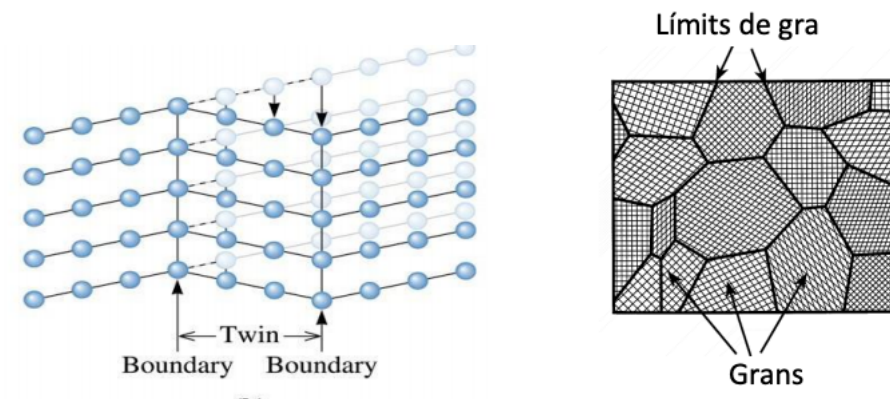
Els defectes superficials s'estenen en dues dimensions.

Els defectes **superficials externs** es donen quan els àtoms de la superfície no estan units al màxim nombre d'àtoms veïns, sinó que hi ha una discontinuïtat abrupta de l'estructura regular cristal·lina i s'altera el nombre de coordinació i l'enllaç atòmic dels elements de la superfície.

El defecte de **límit de gra** és una frontera que separa dos cristalls que tenen diferents orientacions cristal·logràfiques en materials policristal·lins. Els límits de gra són zones de poc empaquetament on no tots els àtoms estan units amb els seus veïns. Perquè es consideri un límit de gra les desalineacions han de ser de més de 15°.

Els **límits de macla** són límits de grans on s'ha produït un canvi bruscat a causa del canvi d'orientació de l'estructura. Un primer canvi en l'orientació provoca un segon canvi més endavant l'estructura per retornar a la normalitat. El resultat és una imatge especular de dues xarxes respecte el pla de la macla.

Un **límit d'apilament** es pot presentar en estructures FCC en què s'ha produït un error en la seqüència de les capes de plans compactes. Aquests defectes dificulten els processos de lliscament de les dislocacions.



! Els **defectes de volum** (porus, fissures, esquerdes) normalment es generen durant els processos de fabricació).