



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



FACULTAD
DE INGENIERÍA

IMPERFECCIONES CRISTALINAS

CIENCIAS DE LOS MATERIALES

Ing. Claudio Careglio

PLAN DE LA PRESENTACIÓN

- Imperfecciones Cristalinas
 - Imperfecciones Puntuales
 - Imperfecciones Lineales
 - Imperfecciones Superficiales
 - .

Imperfecciones Cristalinas

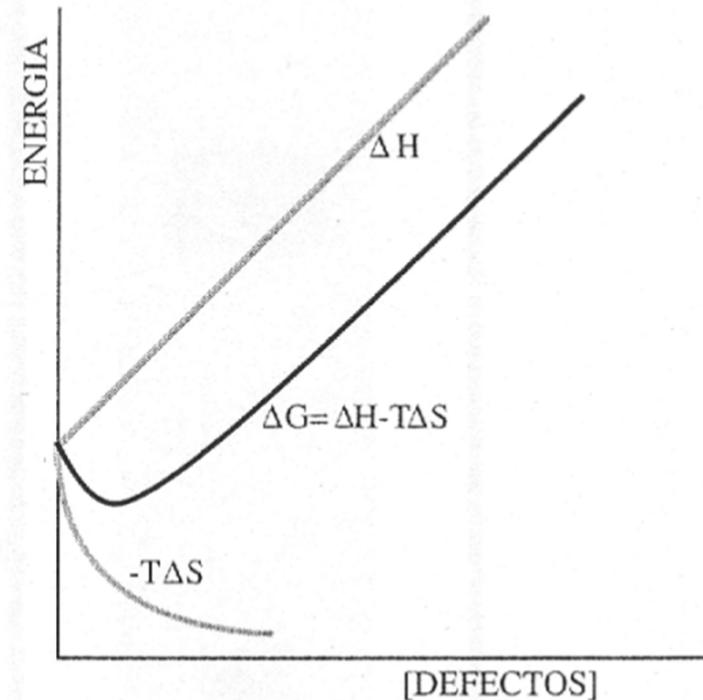
- Los materiales en general contienen varios tipos de imperfecciones que afectan sus propiedades.
- Imperfecciones de la red cristalina se clasifican de acuerdo a su geometría y forma:
 - 1) Defectos puntuales o de dimensión cero
 - 2) Defectos de línea o de una dimensión (dislocación)
 - 3) Defectos de dos dimensiones (superficies externas, bordes de grano internos, macla)

Imperfecciones Cristalinas

- La existencia de defectos en los cristales (hasta cierta concentración) origina una disminución de la energía libre G.
- Creación de un defecto requiere una cierta cantidad de energía ΔH y supone aumento de la entropía (dado el gran número de posiciones que ese defecto puede ocupar y al desorden que el efecto induce en las posiciones vecinas de la red).
- Consecuentemente, la energía libre, dada por:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

disminuye y el cristal gana estabilidad.

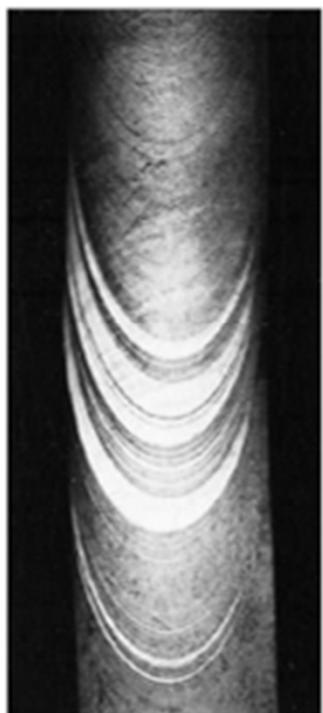


Algunos conceptos útiles antes de estudiar imperfecciones cristalinas

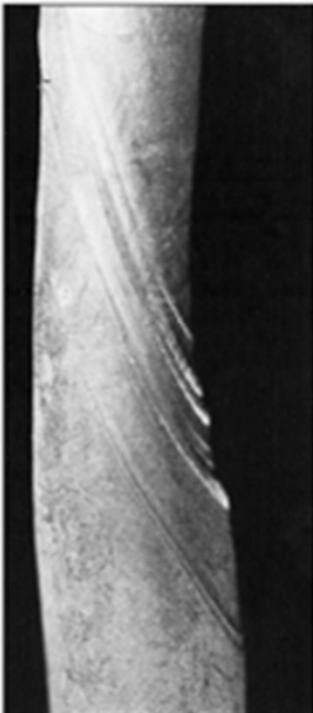
- Deformación permanente.
- **Deslizamiento:** Movimiento de unos átomos sobre otros durante la deformación permanente de un material.
- Bandas de deslizamiento: Líneas marcadas sobre la superficie de debido al deslizamiento causado por deformación permanente.
- **Sistema de deslizamiento:** Combinación de un plano de deslizamiento y una dirección de deslizamiento.

Algunos conceptos útiles antes de estudiar imperfecciones cristalinas

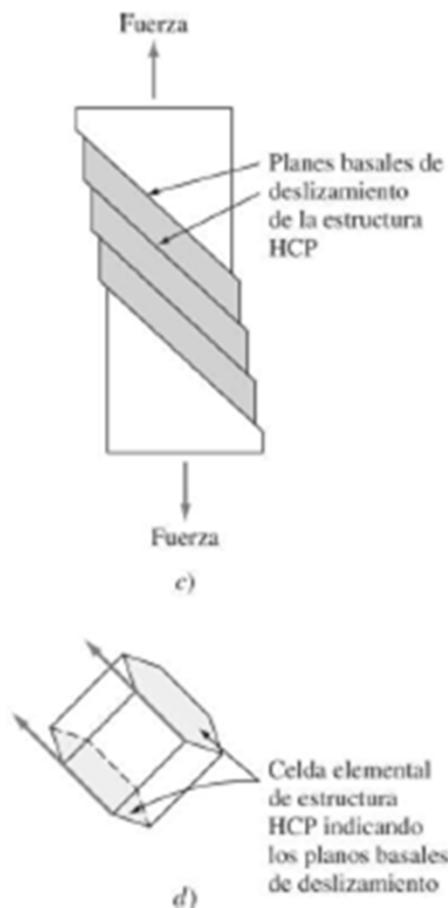
- Deformación plástica de un monocrystal:
 - (a) y (b) Cristal real,
 - (c) Planos de deslizamiento,
 - (d) Celda unidad y planos de deslizamiento



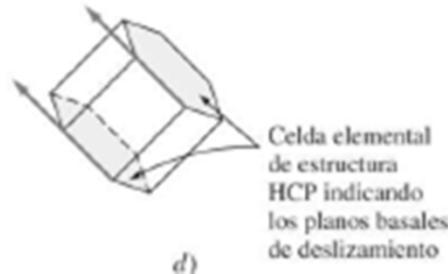
a)



b)

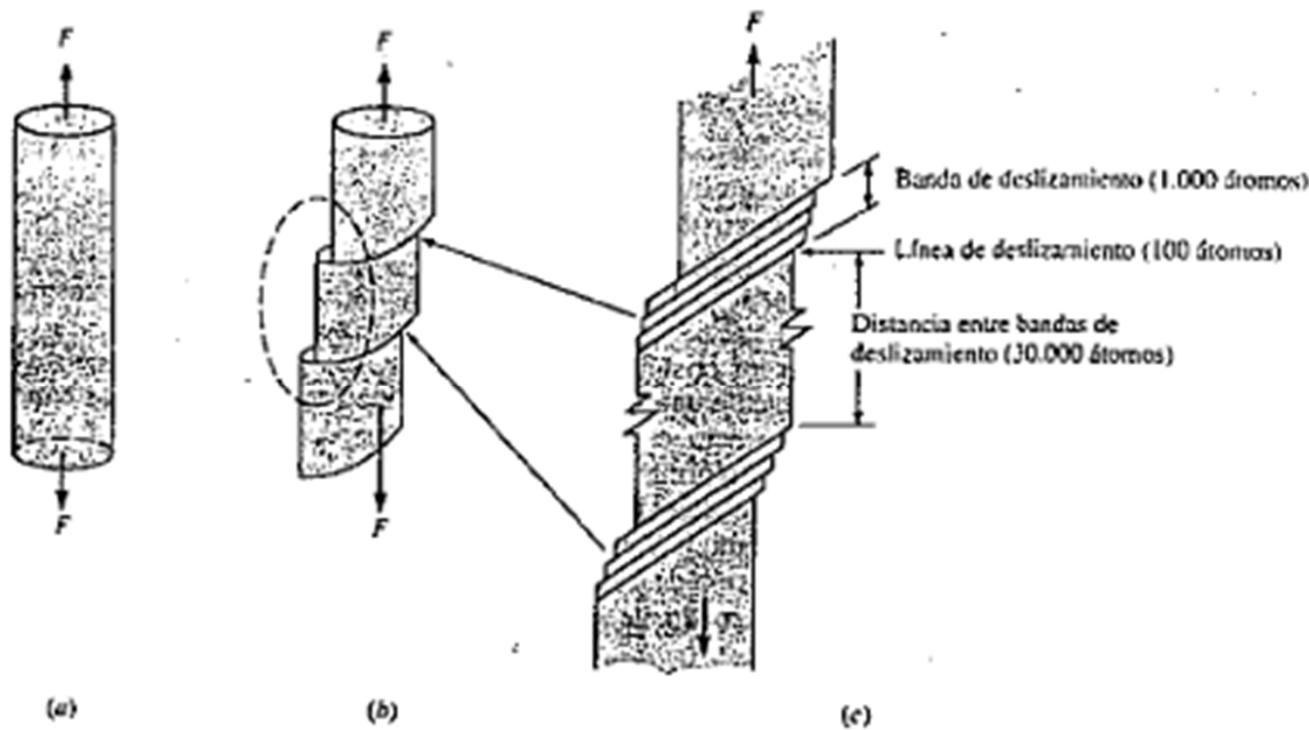


c)



Algunos conceptos útiles antes de estudiar imperfecciones cristalinas

- Formación de líneas de deslizamiento y bandas de deslizamiento durante la deformación plástica de un monocrystal
 - (a) Barra metal monocristalino
 - (b) Deslizamiento por deformación plástica,
 - (c) Zoom: líneas de deslizamiento contenidas en las bandas de deslizamiento.



Imperfecciones Cristalinas

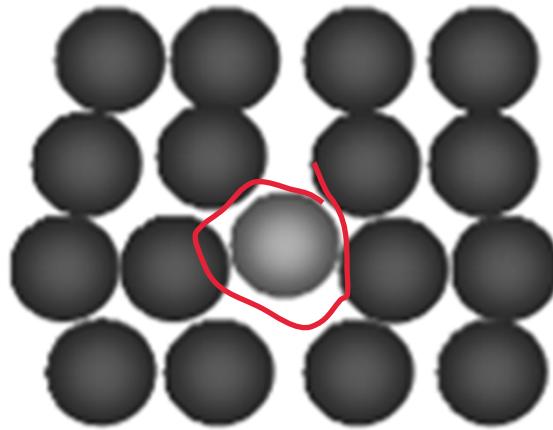
Defectos Puntuales

- Referidos a los puntos reticulares cristalinos

Vacante



Defecto intersticial o autointersticial



- Vacante: Imperfección puntual en una red cristalina para la cual un átomo ha desaparecido de un sitio atómico.
- Interstitial /autointerstitial : Imperfección puntual en una red cristalina donde un átomo de la misma especie se posiciona en un sitio intersticial.

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Puntuales

- Número de vacancias:

$$N_v = N e^{-Q/(RT)}$$

N_v : número de vacancias por m^3

N : número de átomos por m^3

Q : energía requerida para producir un mol de vacancias

R : constante de los gases, $R=8,314 \text{ J}/(\text{mol K})$

T : temperatura en K

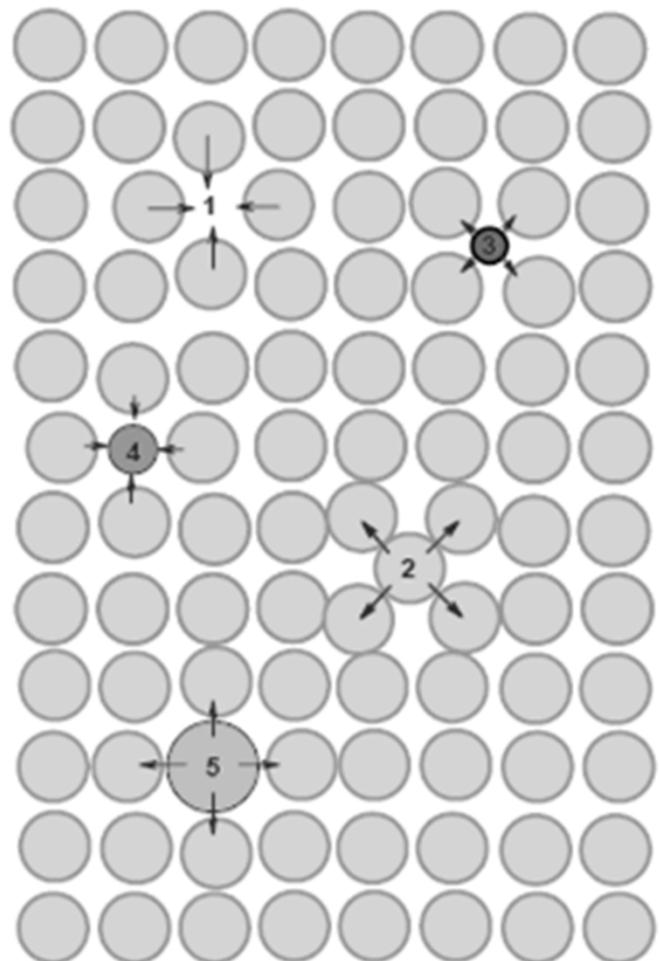
Imperfecciones Cristalinas

Defectos Puntuales

- Representación esquemática de diferentes defectos puntuales en un cristal:

- (1) vacancia
- (2) autointersticial
- (3) impureza intersticial
- (4),(5) impurezas sustitucionales

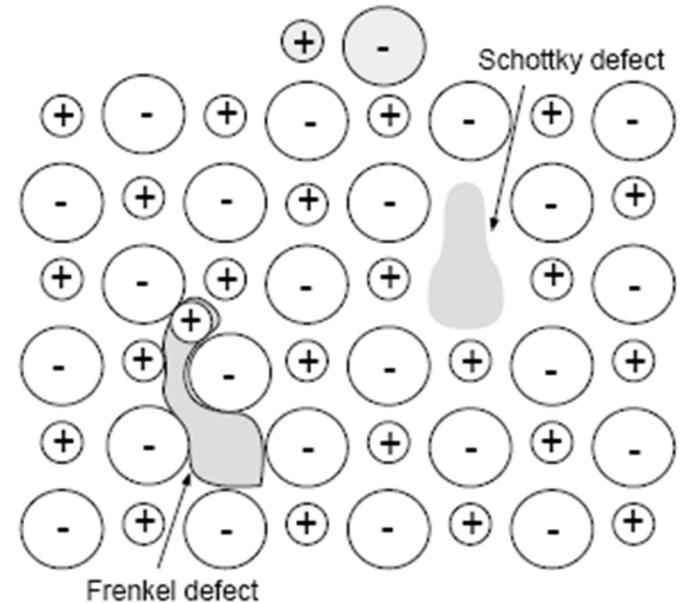
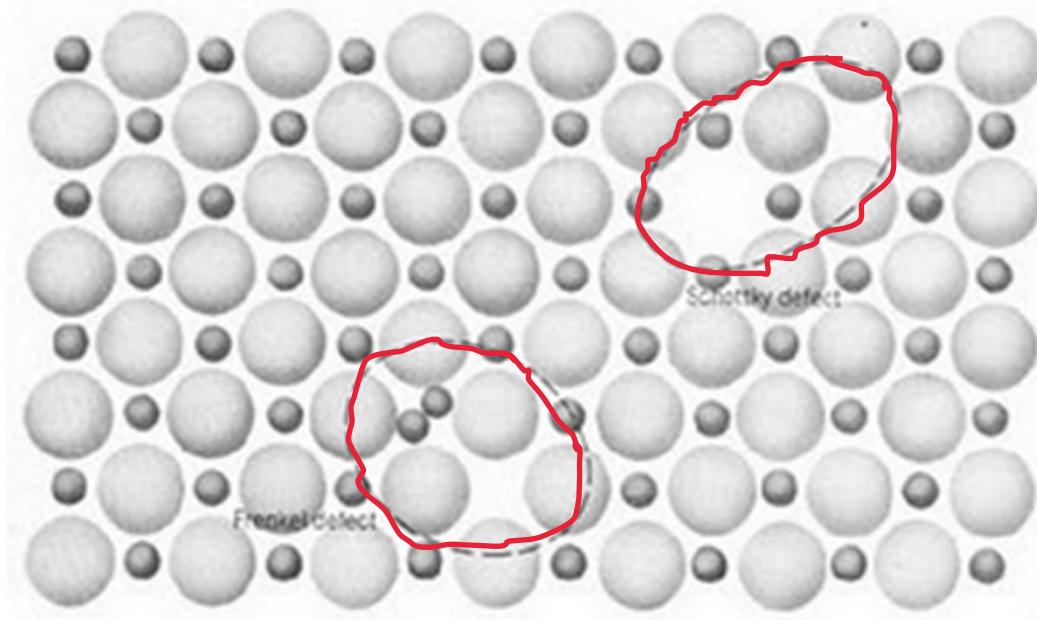
Las flechas indican las tensiones locales introducidas por los defectos puntuales.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Puntuales

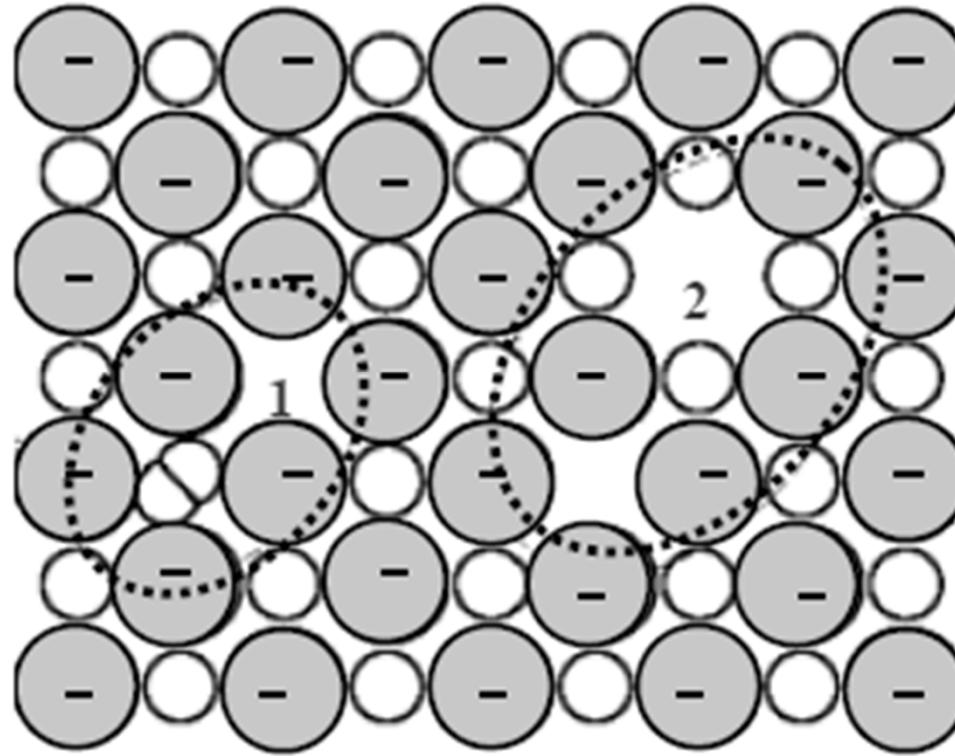
- Cristales iónicos



- Defecto de Frenkel
 - Imperfección puntual en un cristal iónico en la que una vacante catiónica está asociada con un catión intersticial.
- Defecto de Schottky
 - Imperfección puntual en un cristal iónico en la que una vacante catiónica está asociada con una vacante aniónica.

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Puntuales



- Representación esquemática de:
 - (1) defecto de Frenkel (par vacancia-intersticial),
 - (2) defecto de Schottky (vacancias de un par catión-anión).

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

- Defectos Lineales o Dislocaciones:

- Son defectos que dan lugar a una distorsión de la red centrada alrededor de una línea.
- Se pueden formar:
 - Durante la solidificación del sólido cristalino
 - También por deformación plástica o permanente del cristal
 - Por condensación de vacantes
 - Etc.
- Los materiales amorfos (es decir sin estructura cristalina):
 - No pueden contener dislocaciones

Imperfecciones Cristalinas

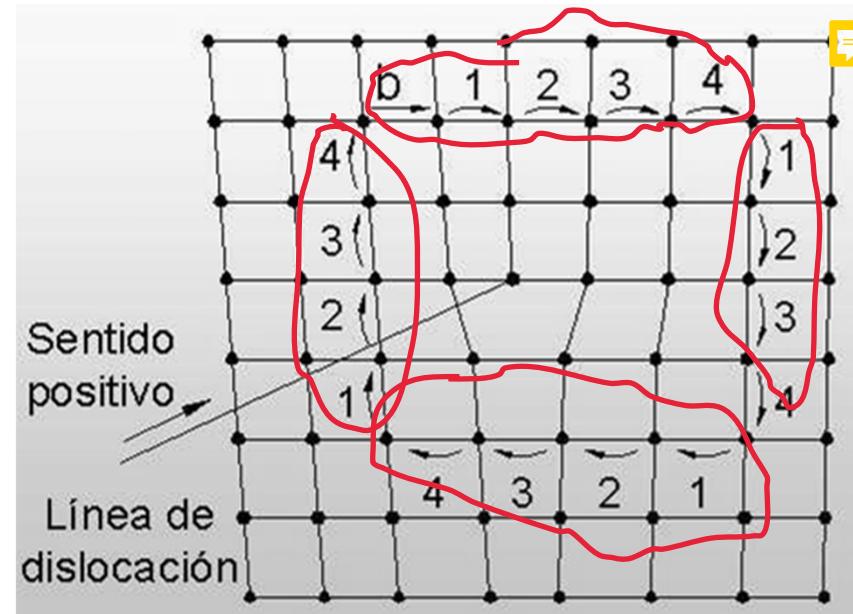
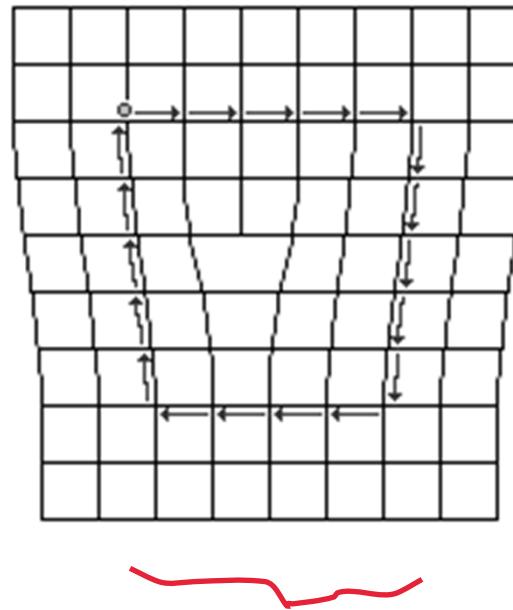
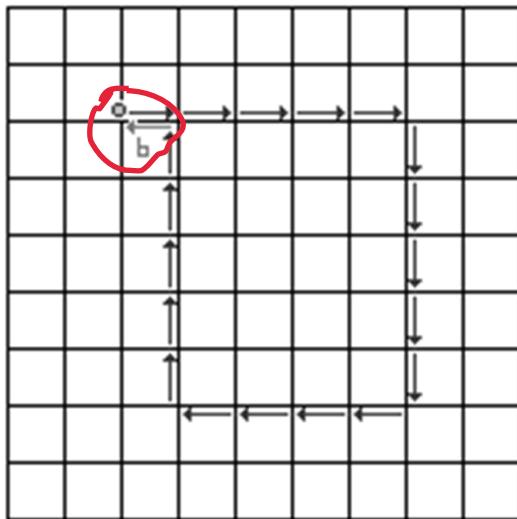
Defectos Lineales o Dislocaciones

- Vector de Burgers
 - Deslizamiento o vector de Burgers: Vector de la red cristalina que indica la dirección y magnitud del desplazamiento que sufren los átomos de la red con el paso de una dislocación.
En forma más sencilla: el vector de Burgers es simplemente el vector desplazamiento necesario para cerrar un circuito realizado paso a paso alrededor del defecto (En un cristal perfecto con $m \times n$ pasos atómicos se cierra en el punto inicial del circuito). Puede considerarse como un indicador de la “magnitud” del defecto estructural.

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

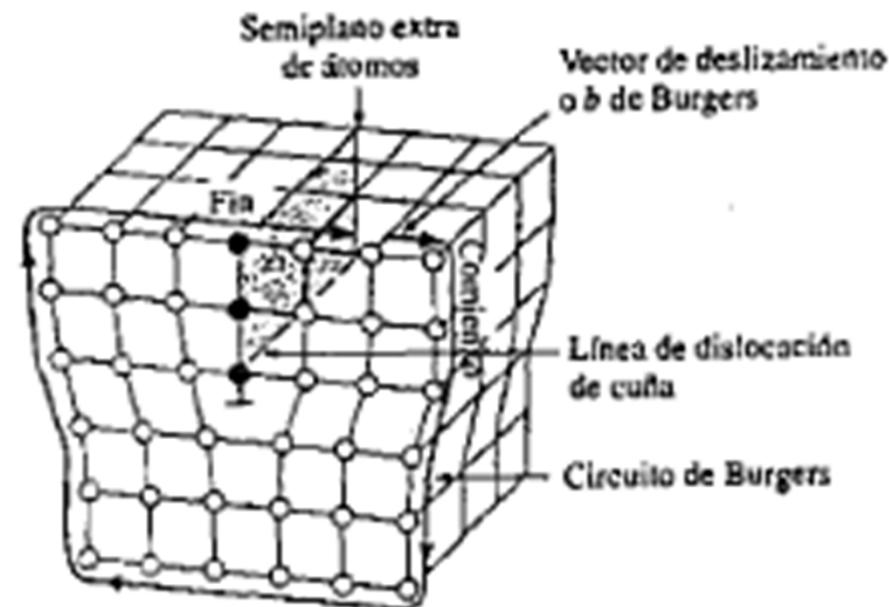
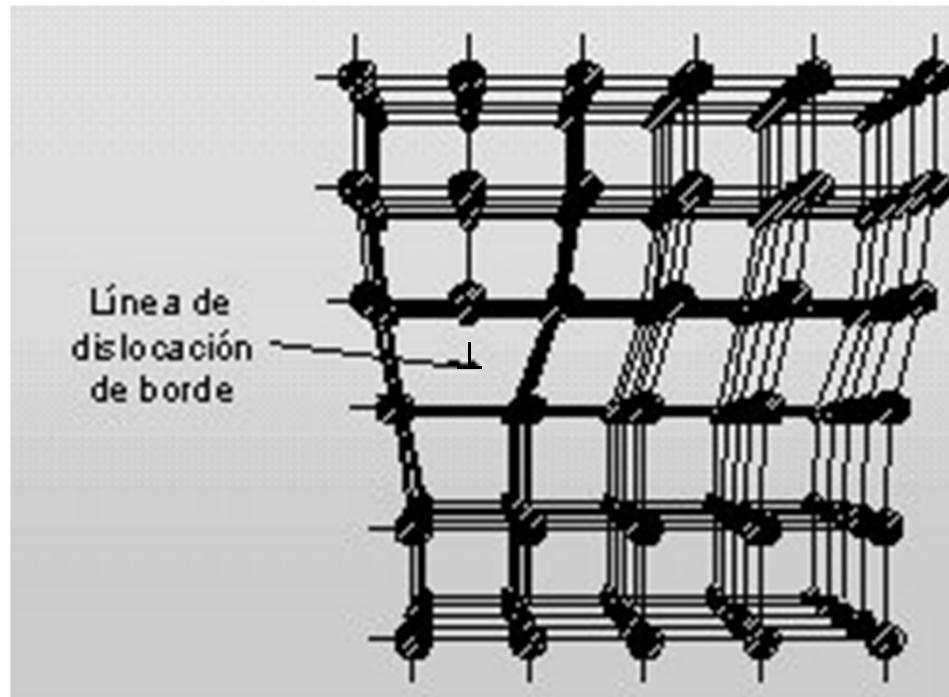
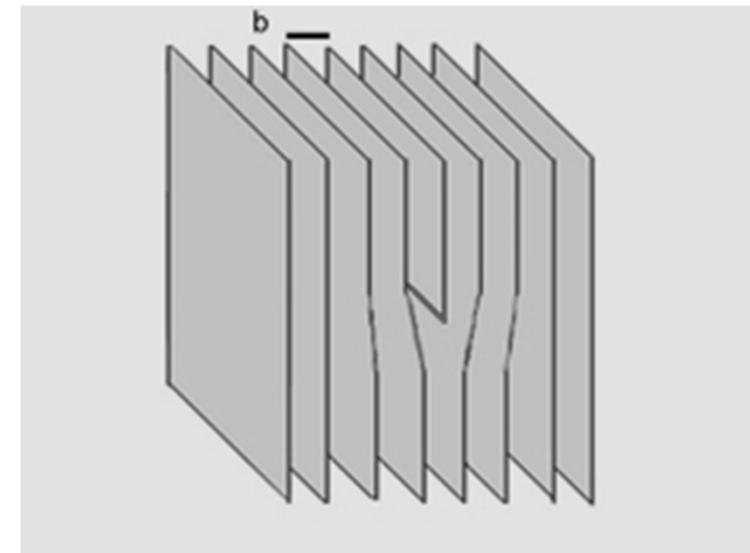
- Vector de Burges
 - Pasos a seguir para calcular el vector de Burgers
 - Primero se traza una línea cerrada alrededor de la dislocación
 - La misma línea se traza en una zona de red perfecta
 - El vector necesario para cerrar esta última se corresponde con el vector de Burgers



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

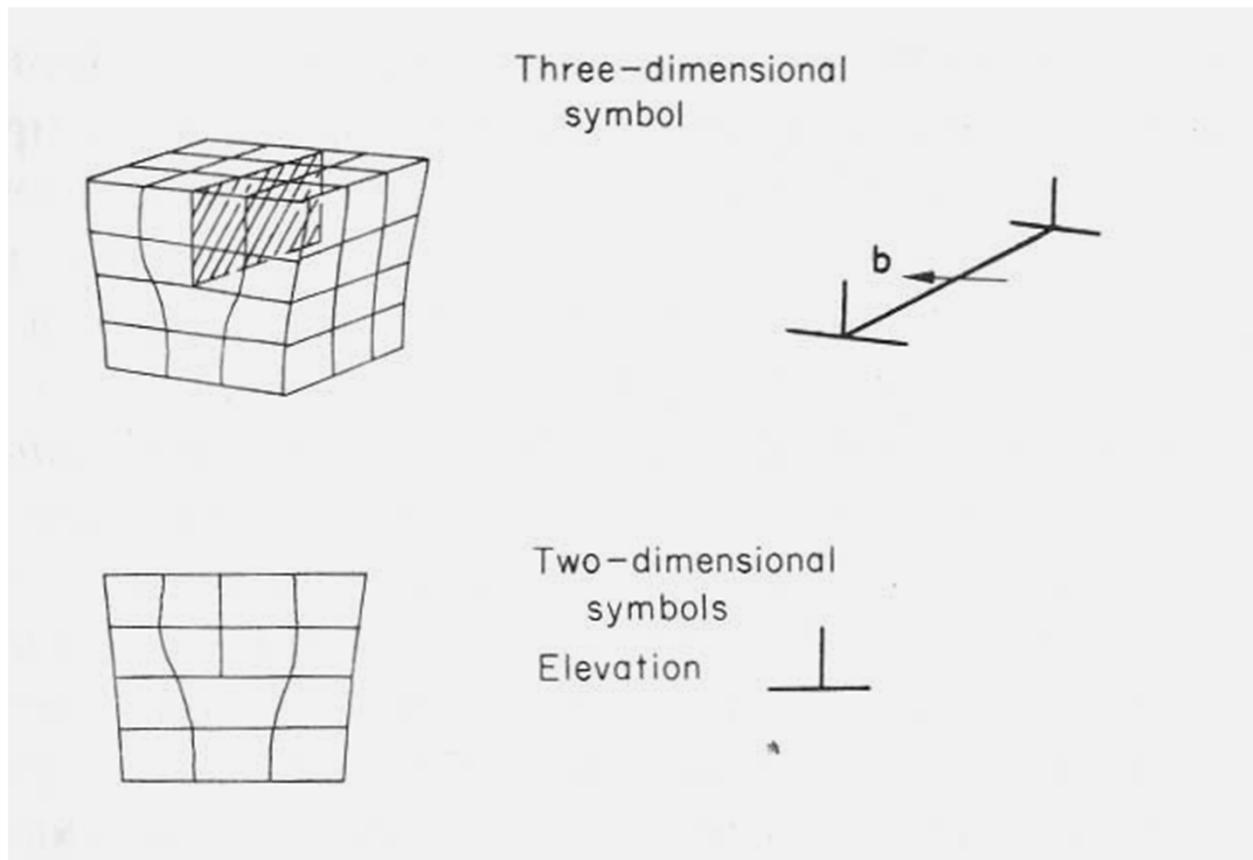
- Dislocación de borde, cuña o arista
 - Se genera en un cristal por la inserción de un semiplano adicional de átomos
 - El deslizamiento o vector de Burgers es perpendicular a la línea de dislocación



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

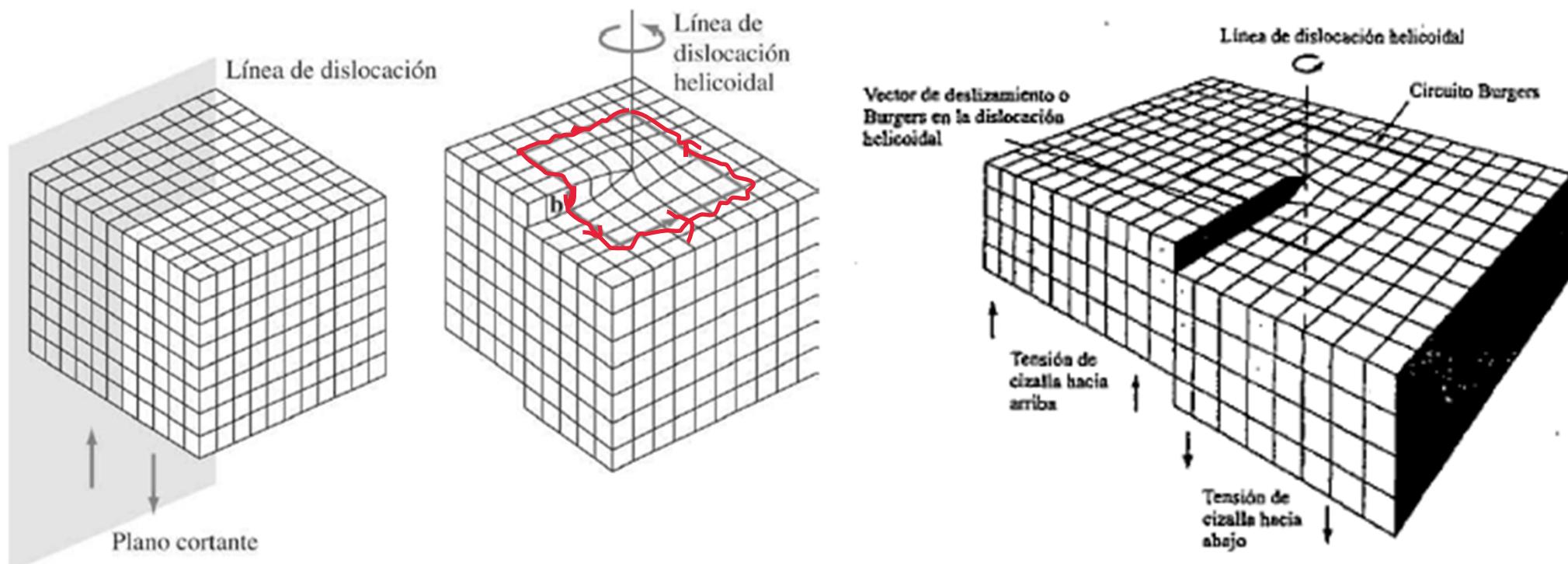
- Nomenclatura para dislocaciones de borde
 - La *T* invertida indica una dislocación de borde positiva (plano extra de átomos está sobre el plano de deslizamiento)
 - La *T* derecha indica una dislocación de borde negativa (el plano extra de átomos está bajo el plano de deslizamiento)



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

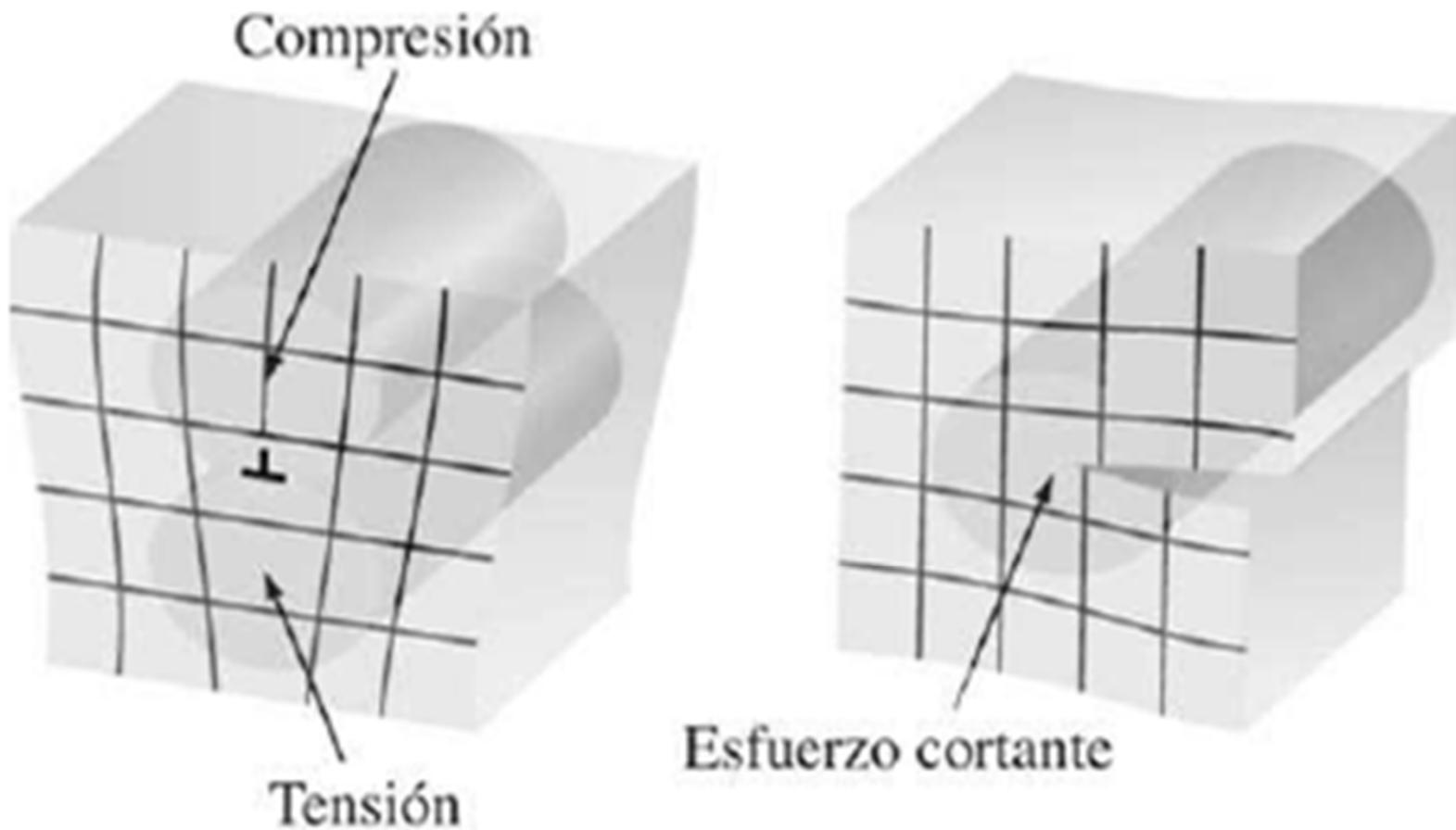
- **Dislocación de tornillo o helicoidal**
 - Se puede formar en un cristal perfecto por esfuerzos cortantes aplicados en las zonas separadas por un plano cortante.
 - El deslizamiento o vector de Burgers es paralelo a la línea de dislocación.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

- Campos de tensiones en dislocaciones

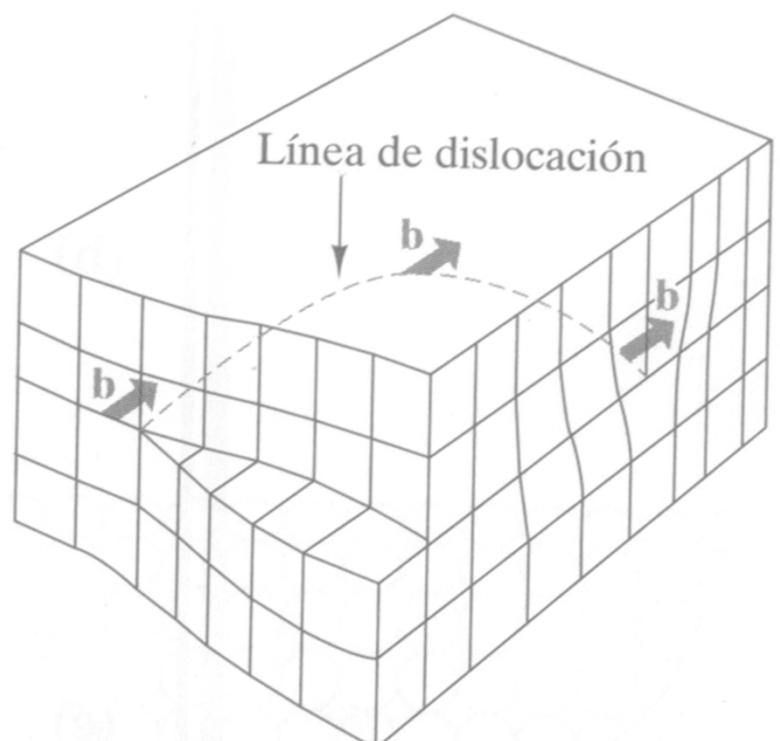
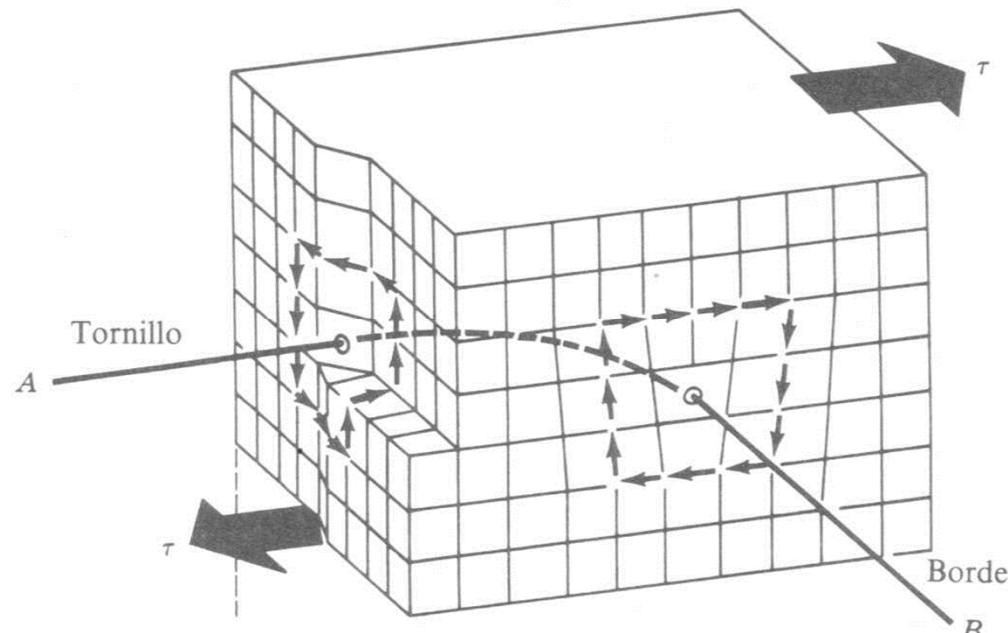


Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

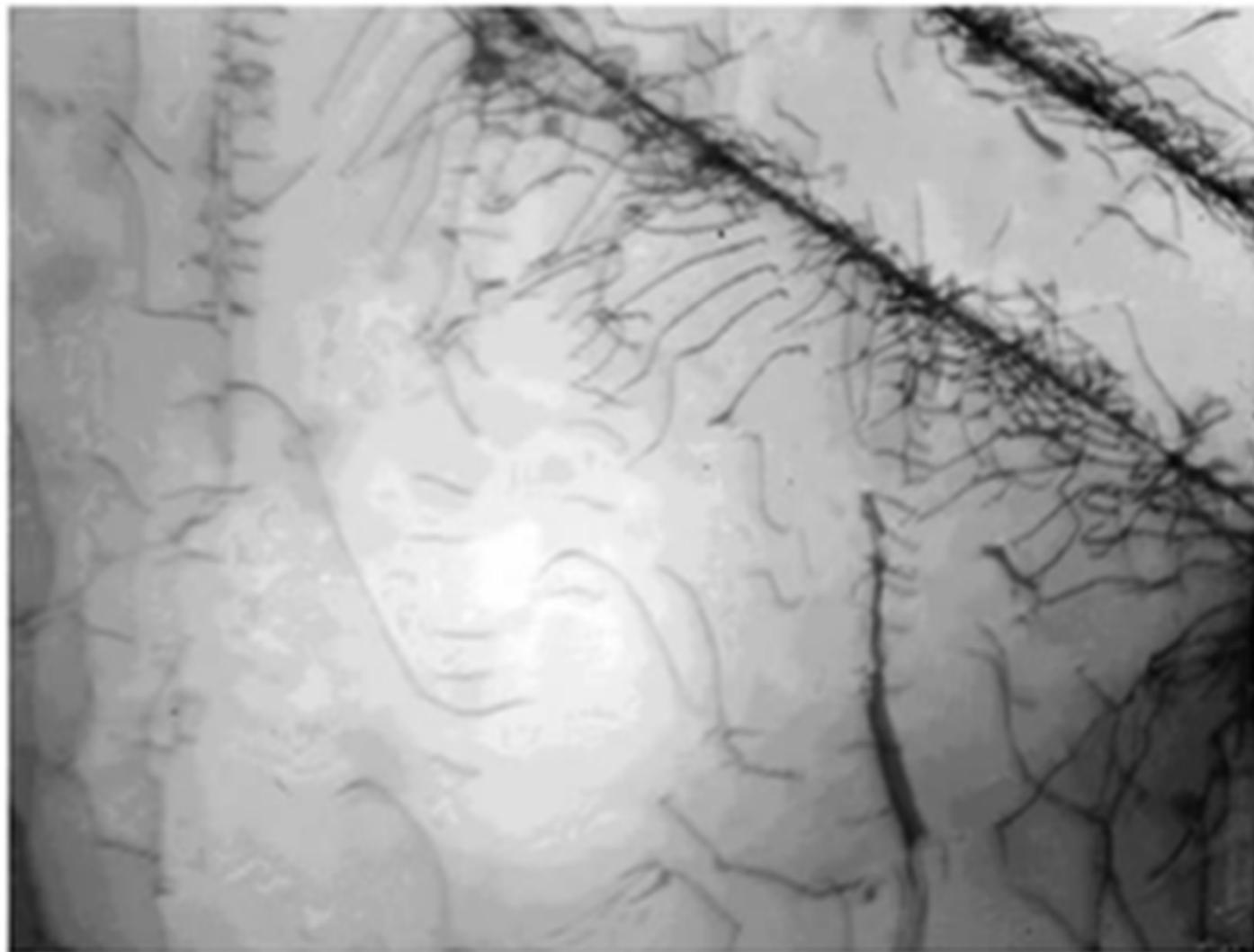
■ Dislocación mixta

- Es una combinación de los dos tipos de dislocaciones anteriores
- En la línea curva de dislocación AB:
 - Es únicamente de tornillo a la izquierda
 - Es únicamente de borde a la derecha
 - Dentro del cristal es mixta



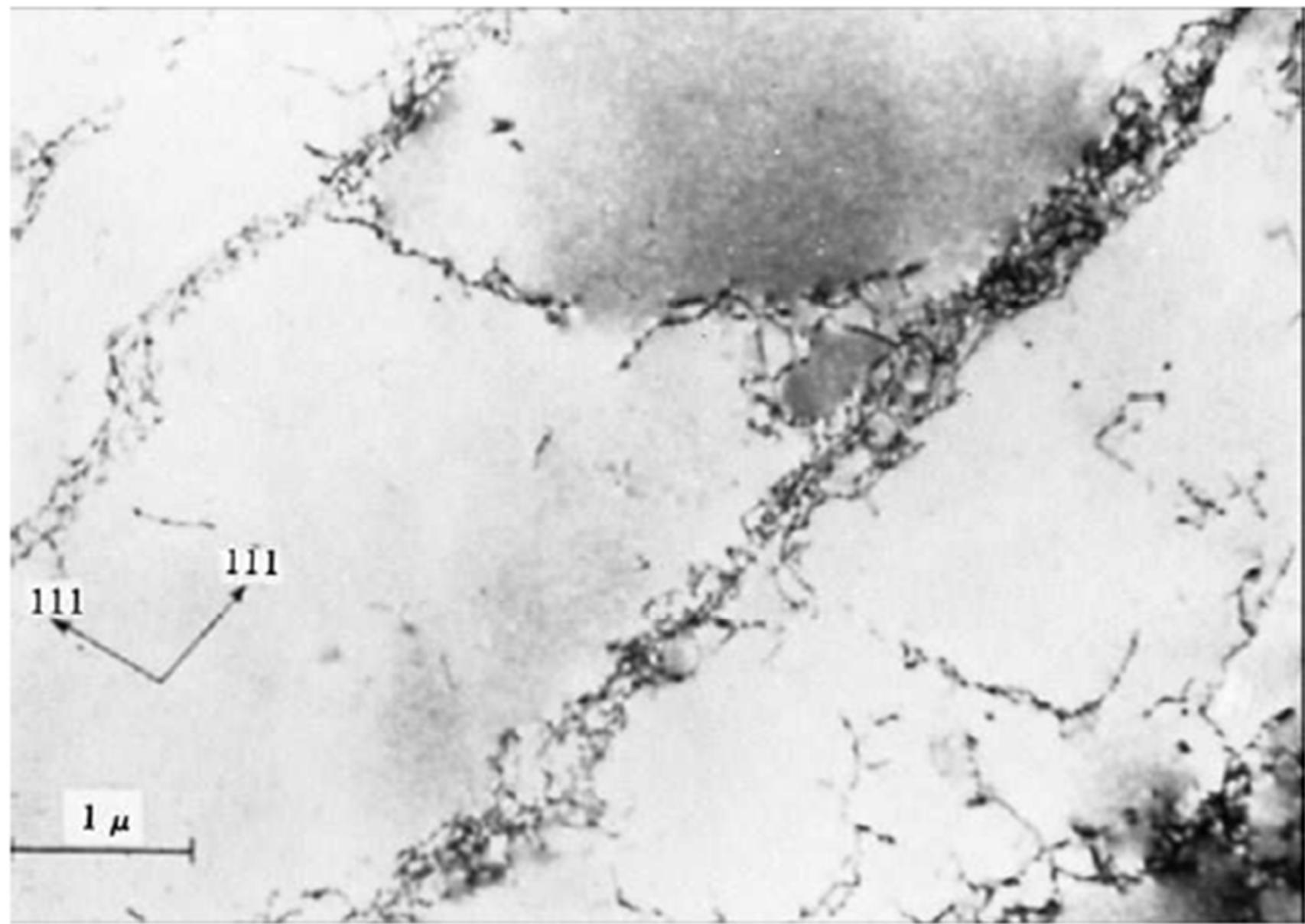
Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones



Imperfecciones Cristalinas

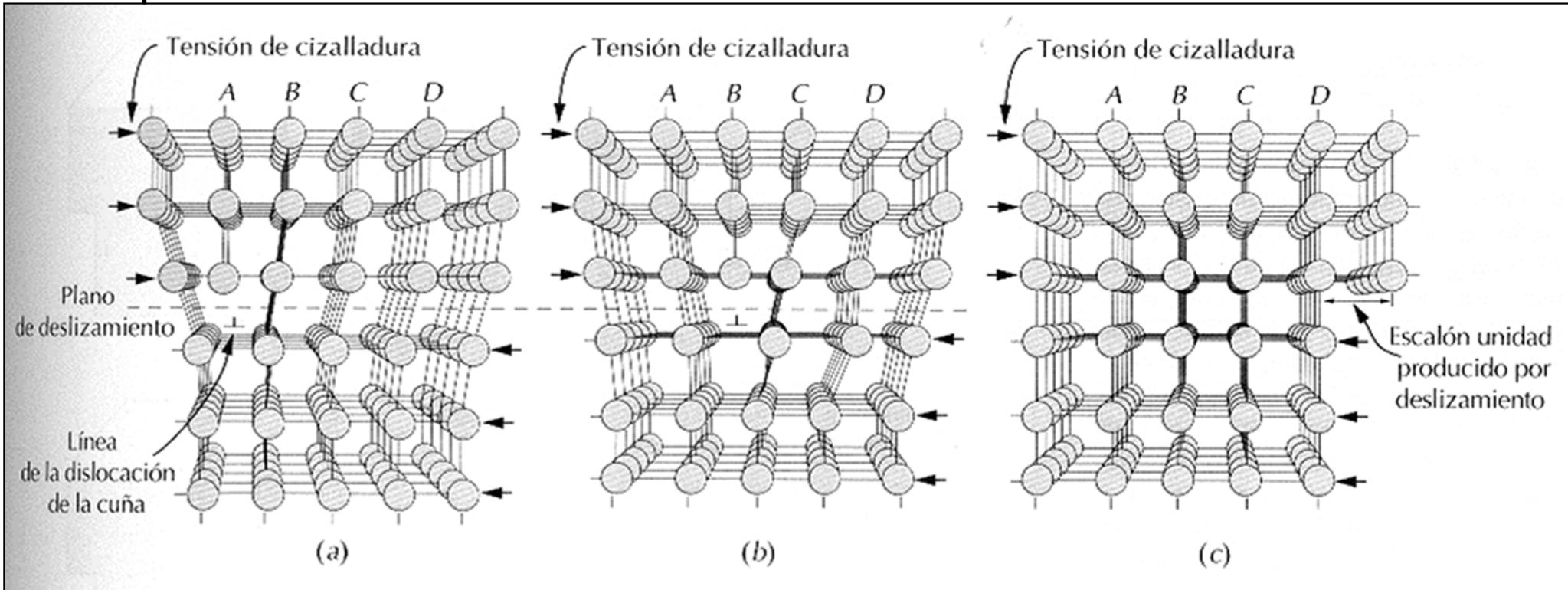
Defectos Lineales o Dislocaciones



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

- Movimiento de la dislocación de borde a través de un cristal debido a la aplicación de una tensión de cizalladura.

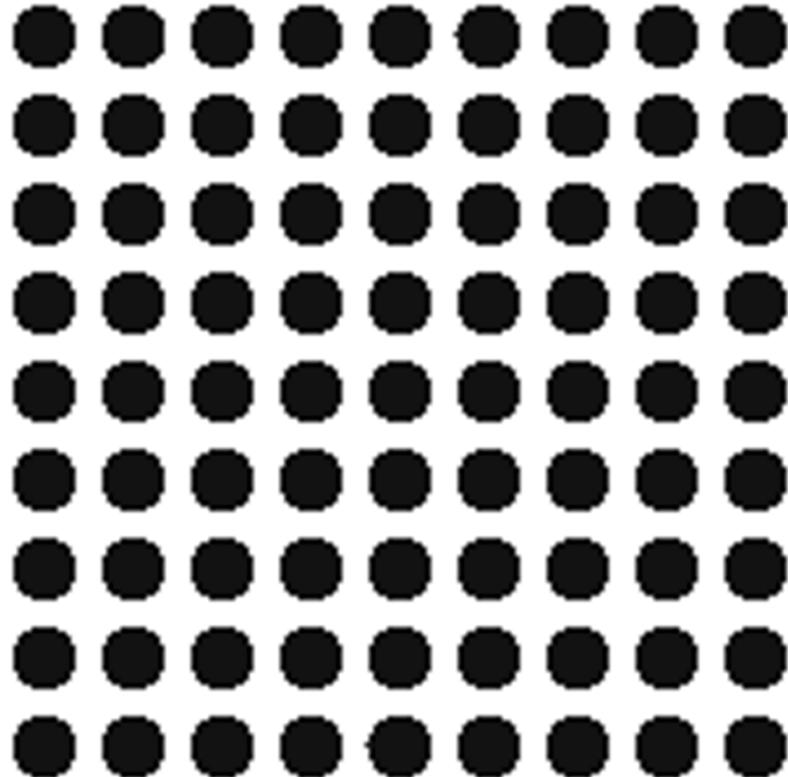


- Semiplano adicional de átomos se indica por A.
- La dislocación se mueve una distancia interatómica hacia la derecha a medida que A se une con el semiplano inferior de B; en el proceso el semiplano superior de B se convierte en el semiplano adicional.
- Se forma un escalón sobre la superficie del cristal a medida que el semiplano adicional llega a la superficie.

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

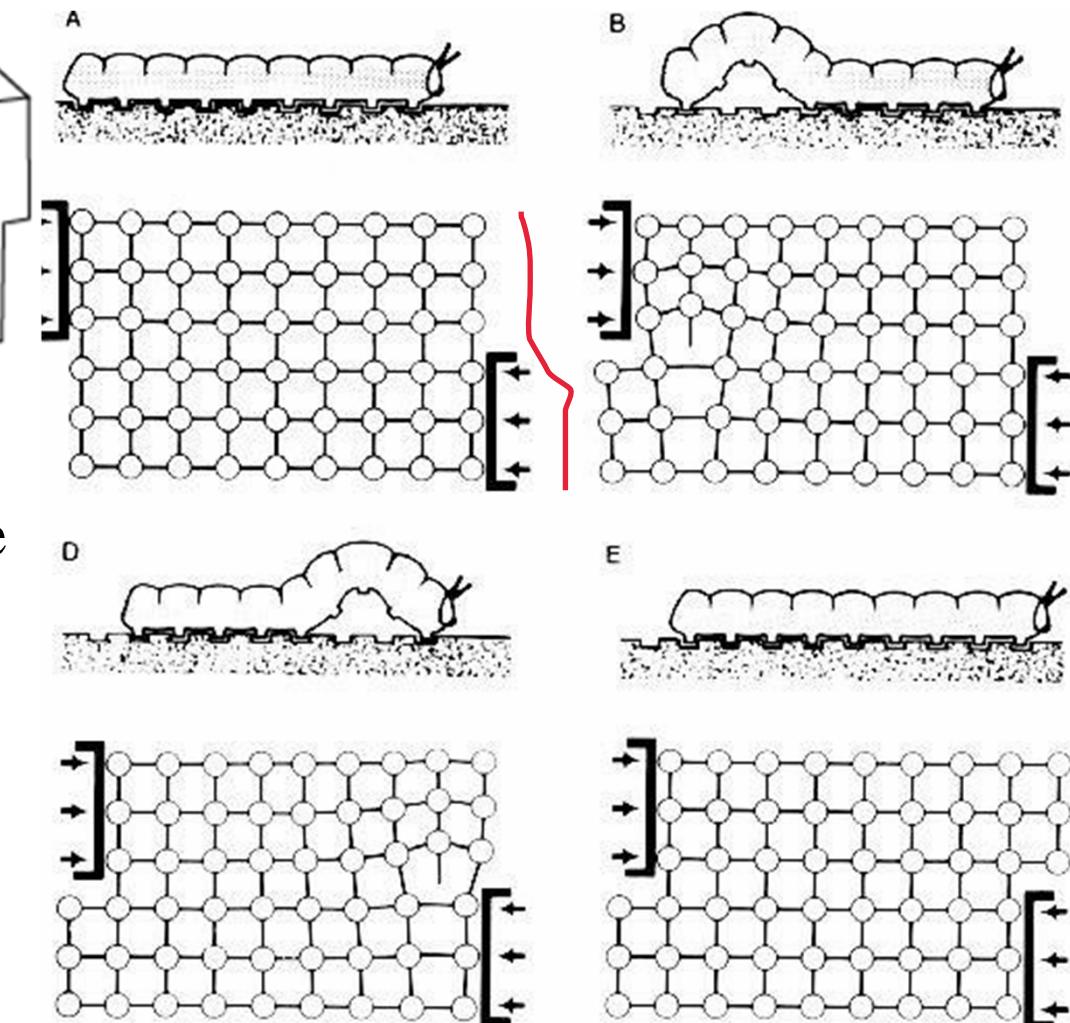
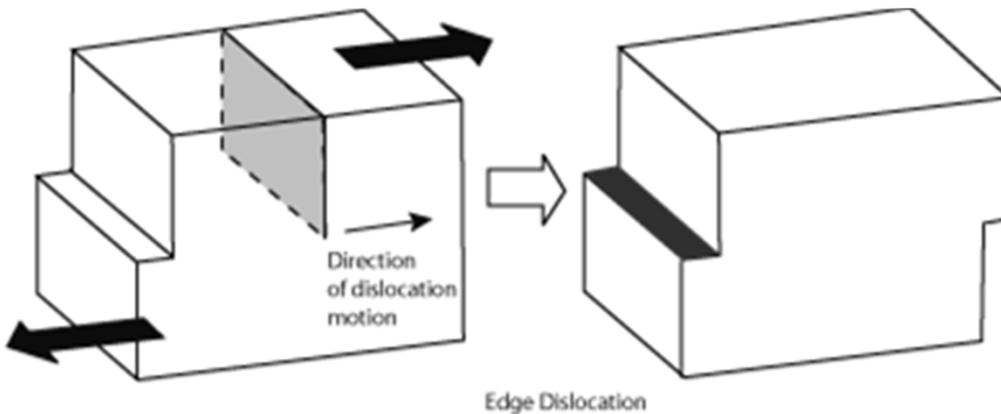
- Movimiento de la dislocación de borde a través de un cristal debido a la aplicación de una tensión de cizalladura (continuación...)



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

- Formación de un escalón sobre la superficie de un cristal
 - Por medio de una dislocación de borde: La línea de la dislocación se mueve en la dirección de la tensión de cizalladura aplicada.



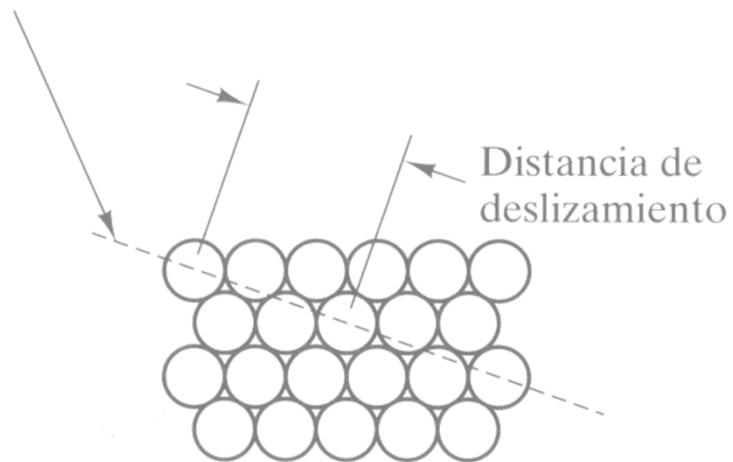
- Analogía del movimiento de un gusano durante la deformación plástica.

Imperfecciones Cristalinas

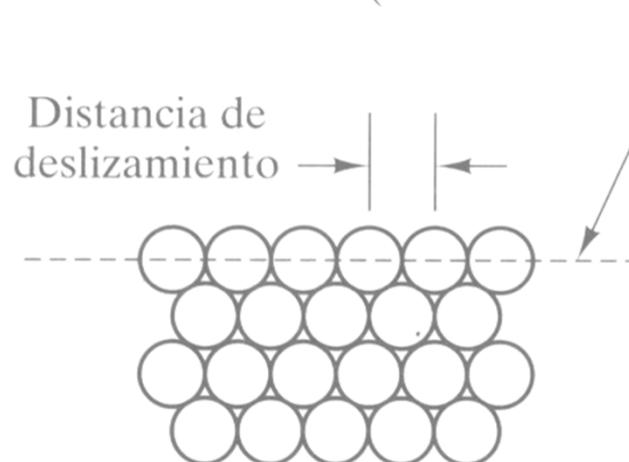
Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

- El mecanismo fundamental de deformación plástica es la distorsión y reconstrucción de enlaces atómicos. Las dislocaciones tienen un rol fundamental en la deformación plástica.
- Mecanismo de deslizamiento:
 - más difícil que se produzca cuando se incrementa la distancia entre los átomos individuales. Entonces:
 - el deslizamiento es más dificultoso sobre un plano de baja densidad que sobre un plano de alta densidad atómica.

Plano de deslizamiento (baja densidad atómica)



Plano de deslizamiento (alta densidad atómica)



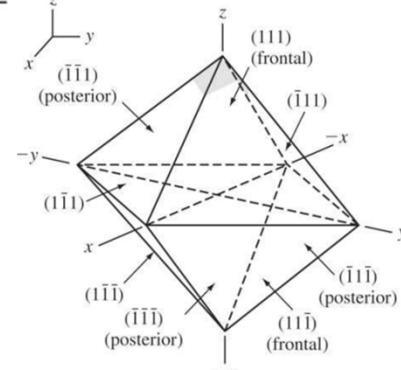
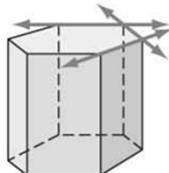
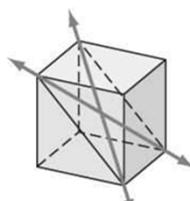
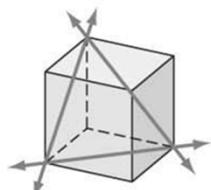
Recordemos: Un sistema de deslizamiento es la combinación de un plano de deslizamiento y una dirección de deslizamiento.

Imperfecciones Cristalinas

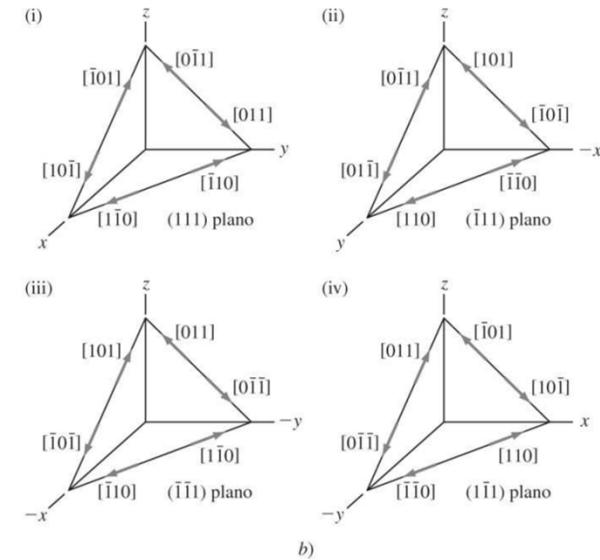
Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

- Sistemas de deslizamiento (ejemplos)

Estructura	Plano de deslizamiento	Dirección de deslizamiento	Número de sistemas de deslizamiento
FCC: Cu, Al, Ni, Pb, Au, Ag, γ Fe, ...	{111}	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	$4 \times 3 = 12$
BCC: α Fe, W, Mo, β latón	{110}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	$6 \times 2 = 12$
HCP: Cd, Zn, Mg, Ti, Be, ...	{0001}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$1 \times 3 = 3$



a)

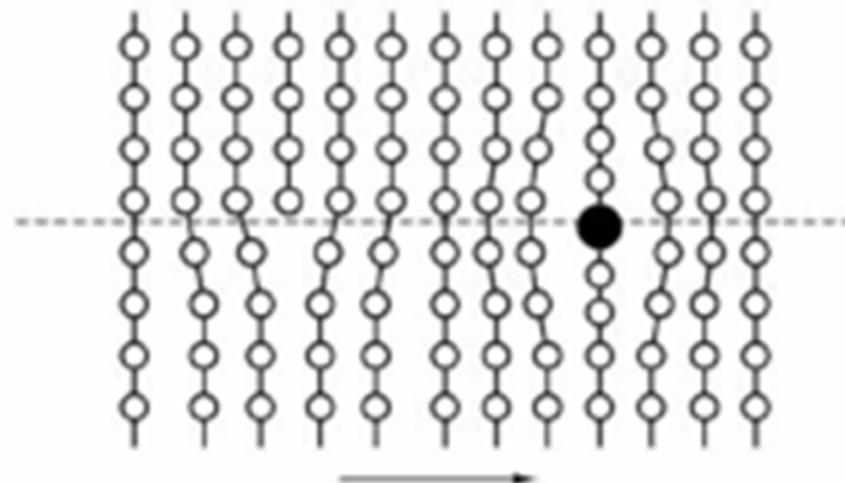


b)

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

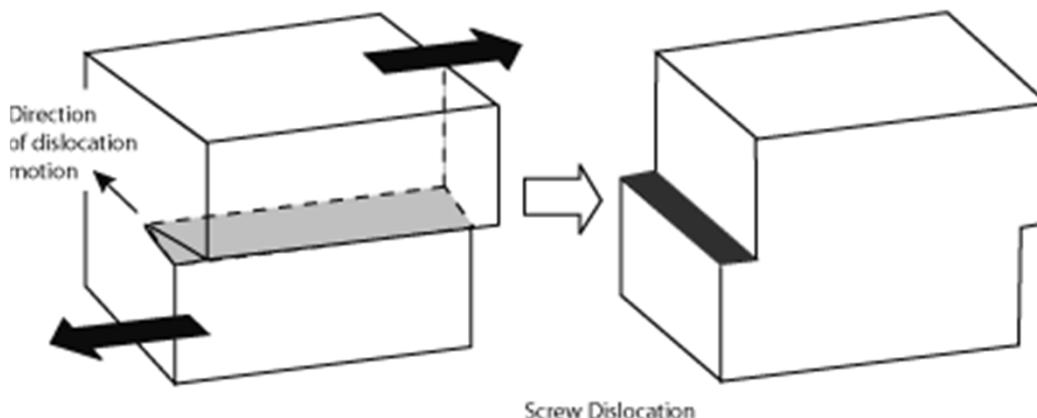
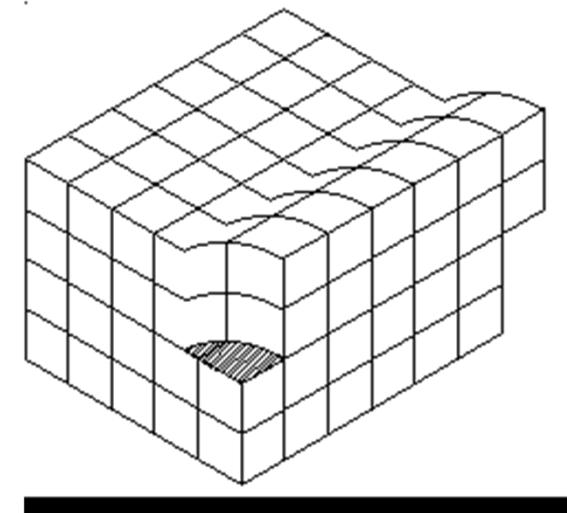
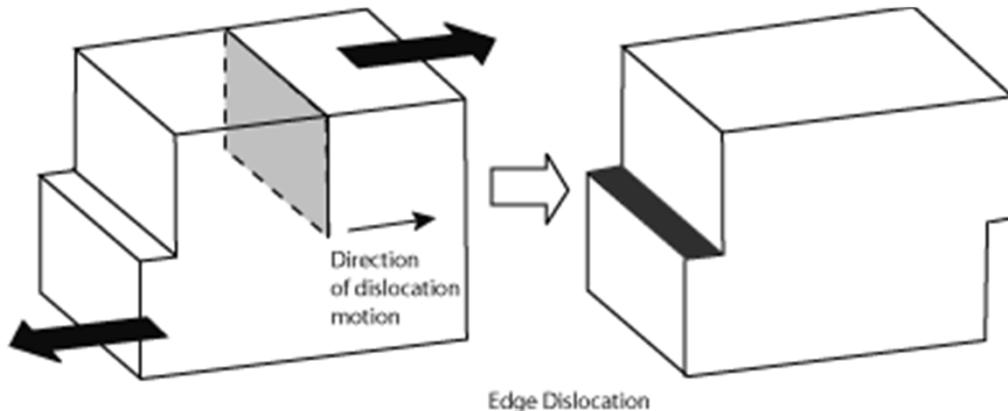
- Deformación en frío:
 - por ejemplo a medida que un metal se deforma se vuelve cada vez más difícil deformarlo,
 - esto se debe (micromecánicamente) a que una dislocación impide el movimiento de otra.
- Endurecimiento por solución
 - Impureza y campo de deformación, obstaculizando el movimiento de dislocaciones.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones: ¿Cómo se mueven?

- Formación de un escalón sobre la superficie de un cristal (continuación...)
- Por medio de una dislocación de tornillo: El movimiento de la línea de la dislocación es perpendicular a la dirección de la tensión.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

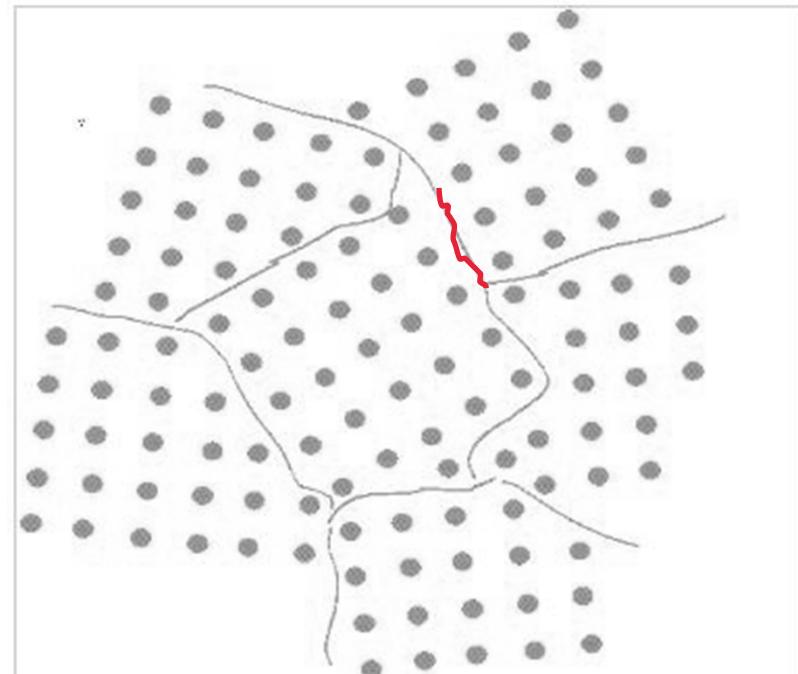
- Superficies externas
 - La superficie de los materiales se considera un defecto porque representa el fin brusco de la estructura cristalina.
- Defectos de apilamiento
 - Ejemplo: secuencia de apilamiento de capas
$$\text{ABCABCABC} \Rightarrow \text{ABCABABC}$$

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

- **Borde de Grano**

- Superficie que separa cristales (granos) individuales de diferentes orientaciones cristalográficas en materiales policristalinos.
- En los metales los límites de grano se crean durante la solidificación (cristales formados a partir de diferentes núcleos crecen y se encuentran unos con otros)
- Los átomos no están uniformemente separados (hay átomos que están muy cercanos causando compresión y otros están separados causando tensión).
- Son áreas de alta energía, haciendo una región mas favorable para la nucleación y el crecimiento de precipitados



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

- Borde de Grano (continuación...)
 - Partículas precipitadas serán obtáculos para el movimiento de las dislocaciones.
 - Borde de grano limita el flujo plástico, dificultando el movimiento de las dislocaciones.
 - Tamaño de grano: si es pequeño aumenta el área de los límites de grano y la reactividad; dificulta la propagación de las dislocaciones aumentando la resistencia.

Imperfecciones Cristalinas

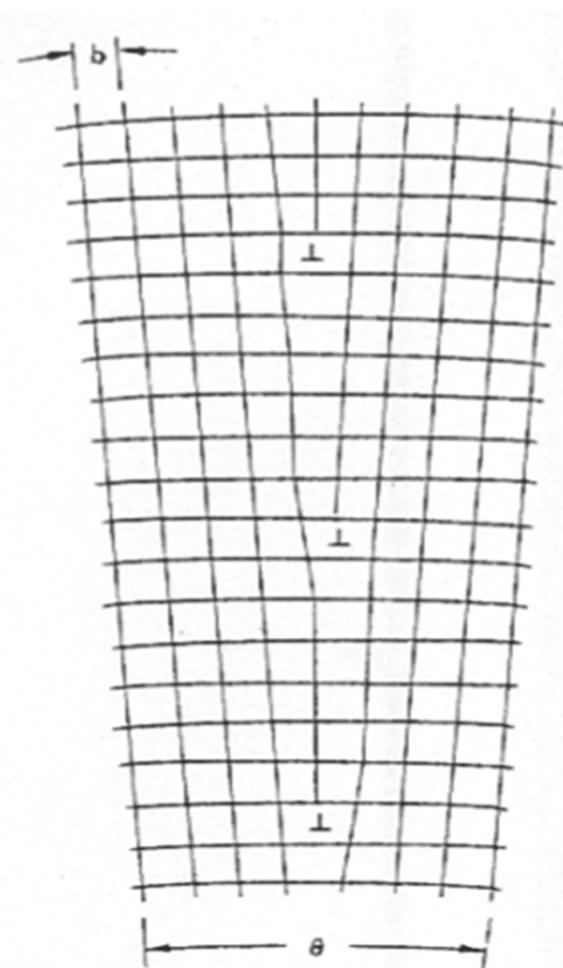
Defectos Bidimensionales o de Superficie

- **Borde de Grano (continuación...)**

- Otro factor a tener en cuenta:

ángulo entre los diferentes granos (mayor ángulo mayor incremento de energía de la región fronteriza).

Cuando los ángulos son muy pequeños (límites de grano de bajo ángulo): defectos que se originan por dislocaciones de arista o helicoidales consecutivas alineadas en una determinada dirección.

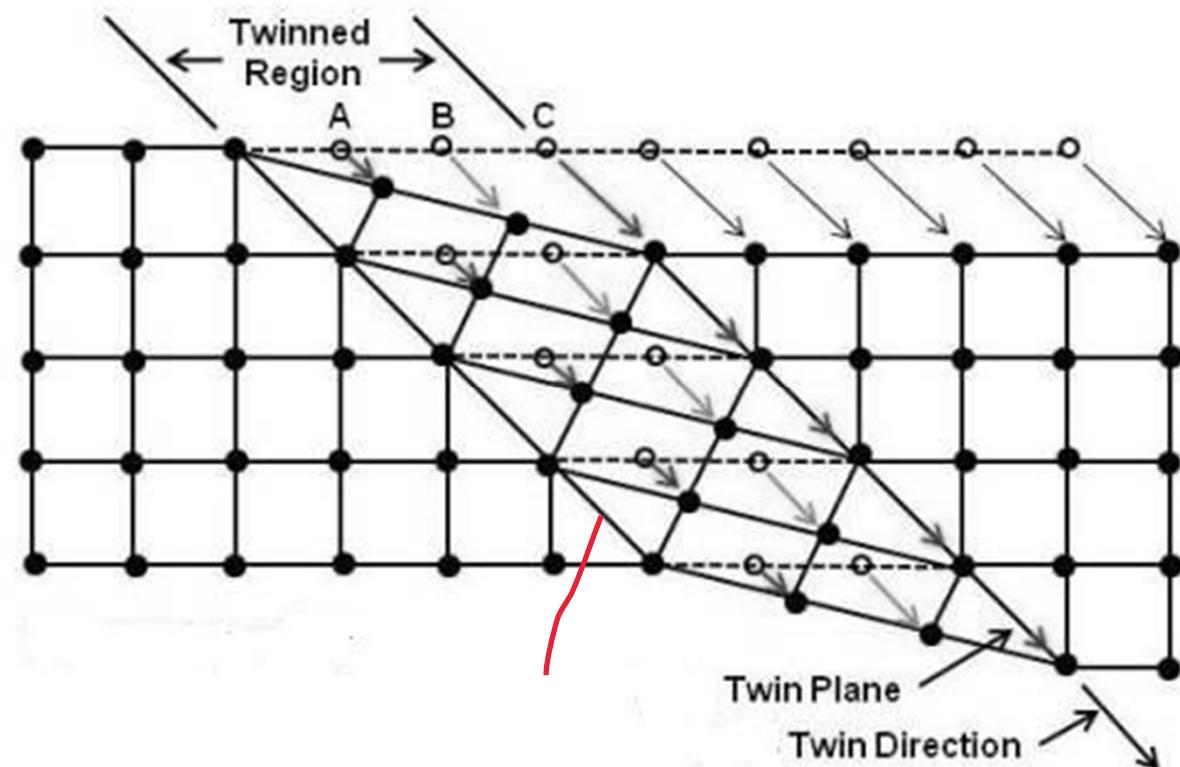


Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

- Maclas

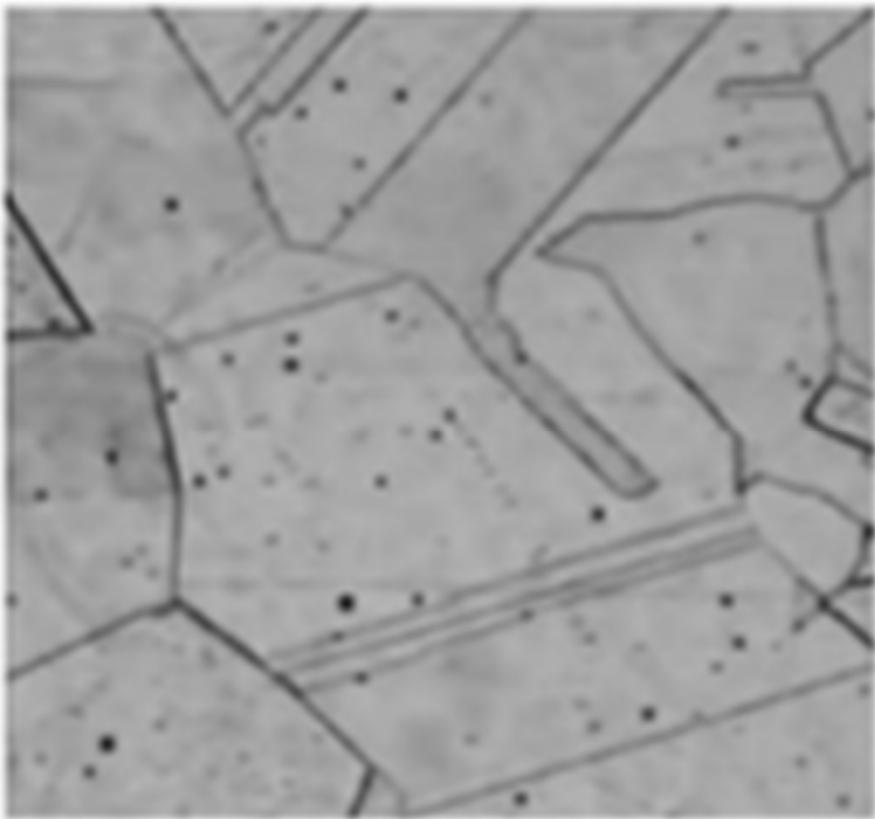
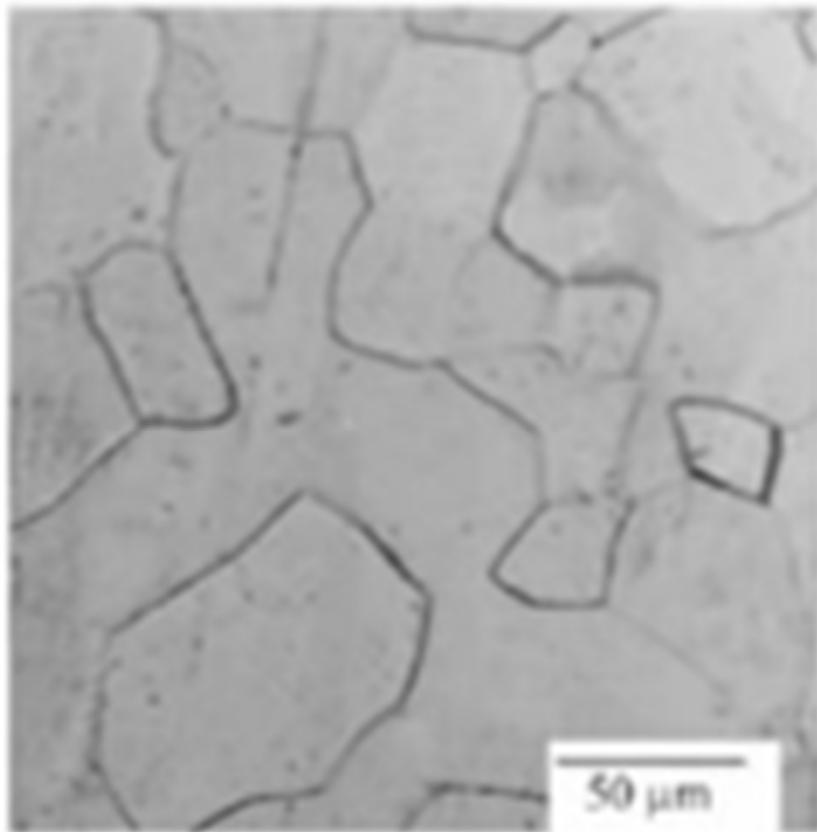
- Es un tipo especial de límite de grano en el cual los átomos de un lado del límite están localizados en una posición que es la imagen especular de los átomos del otro lado (un gran grupo de átomos son desplazados juntos formando una imagen especular)
- Maclas Mecánicas, producidas al aplicar fuerzas mecánicas cizallantes (por ejemplo en metales BCC y HCP)
- Maclas de Recocido (por ejemplo en metales FCC)
- Influye sobre la resistencia mecánica.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Lineales o Dislocaciones

- Borde de grano y límite de macla



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

- En el deslizamiento: todos los átomos de un lado del plano de deslizamiento se mueven distancias iguales.
- En el maclado: los átomos se mueven distancias proporcionales a su distancia del plano de maclado
- Superficie de un metal deformado después de:
 - a) deslizamiento
 - b) maclado

Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

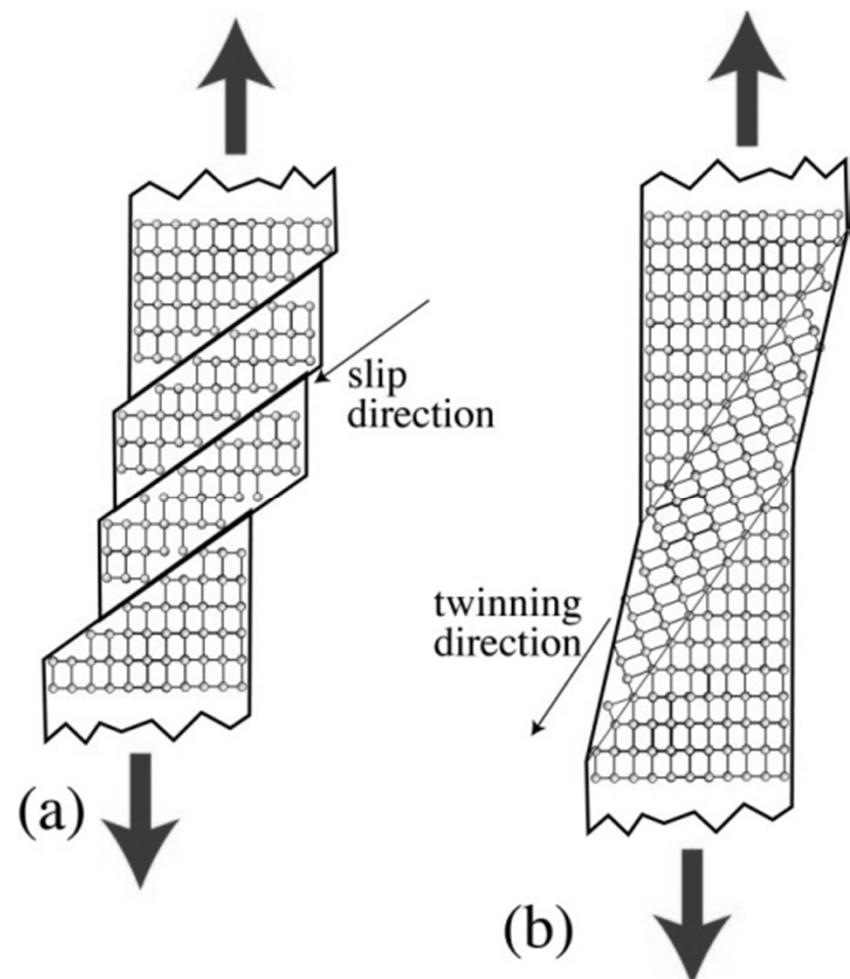
- Deslizamiento:

Tiene lugar por el paso repetido de las dislocaciones .

Ocurre entre planos con el menor vector de Burgers, con una gran densidad atómica y separación interplanar.

Para un solo cristal , en las primeras etapas (tal como se representa aquí) , el deslizamiento tiene lugar en un solo sistema (plano de deslizamiento y dirección de deslizamiento) , con poca o ninguna interferencia entre las dislocaciones individuales .

La figura muestra el desplazamiento de partes de la red , en relación con otras partes , creado por el paso de las dislocaciones

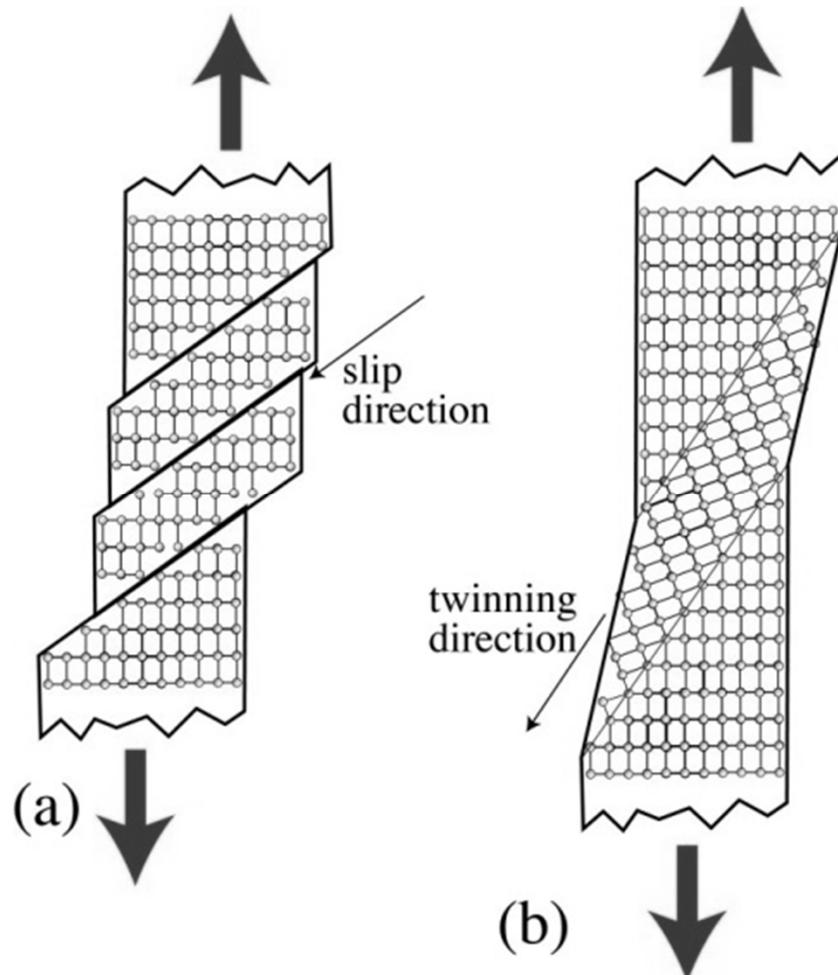


Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

- Macla de deformación:

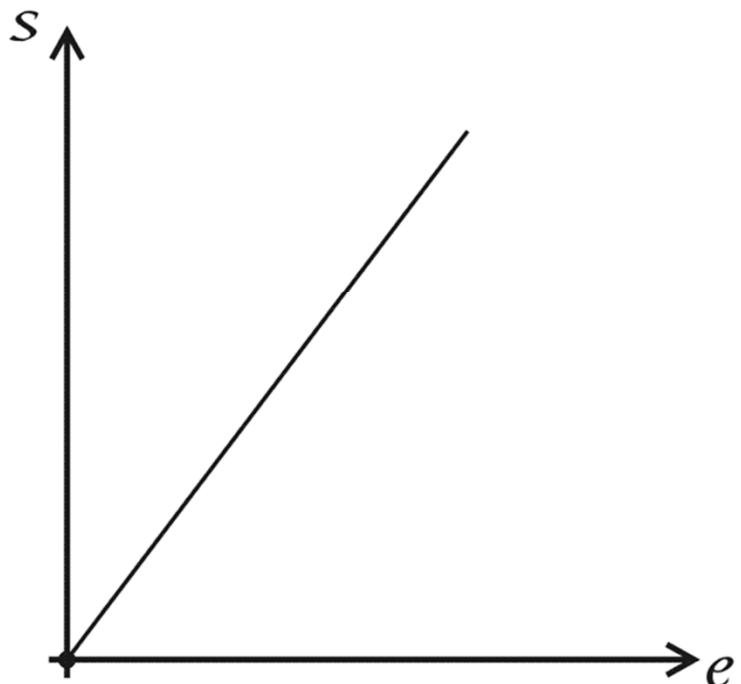
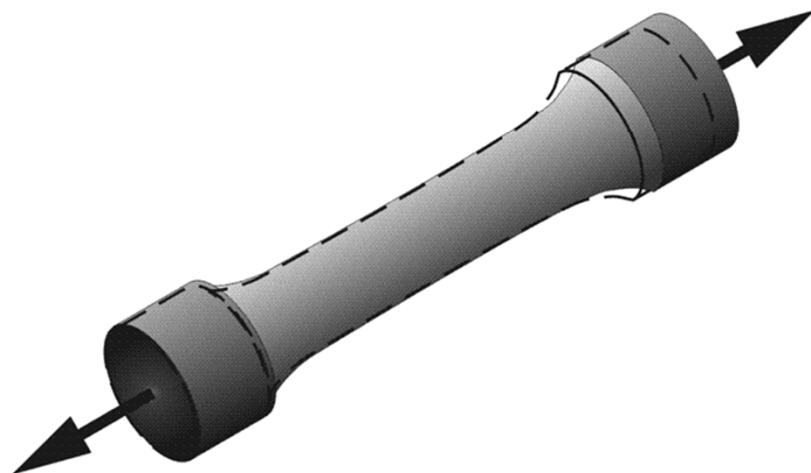
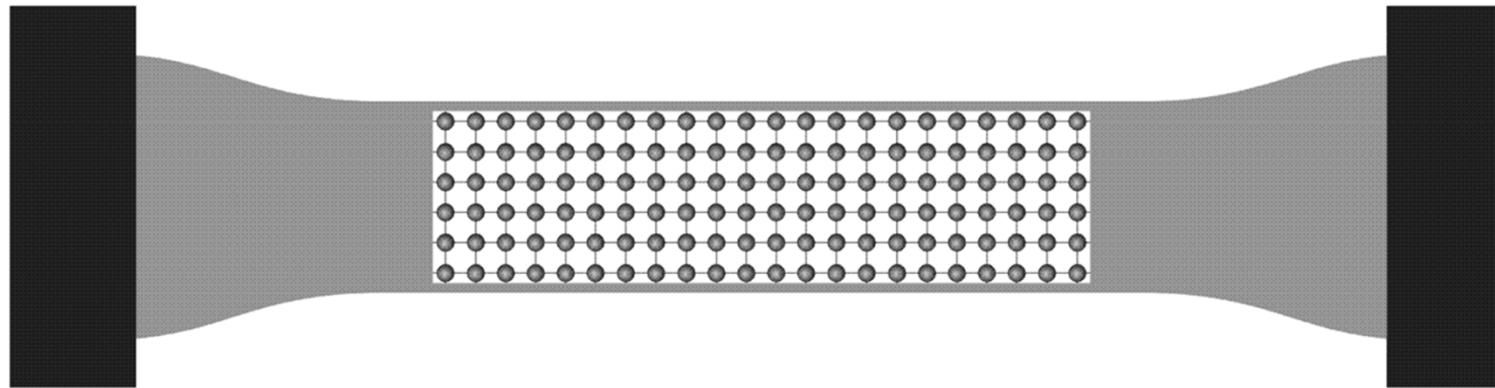
El rápido desplazamiento simultáneo, de un gran número de átomos vecinos, todos en la misma dirección, también crea un desplazamiento (cizalladura) de la red, aunque en este caso la región cizallada tiene una orientación diferente. De hecho, la estructura es una imagen especular de la matriz, que se refleja a través del plano de maclado.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

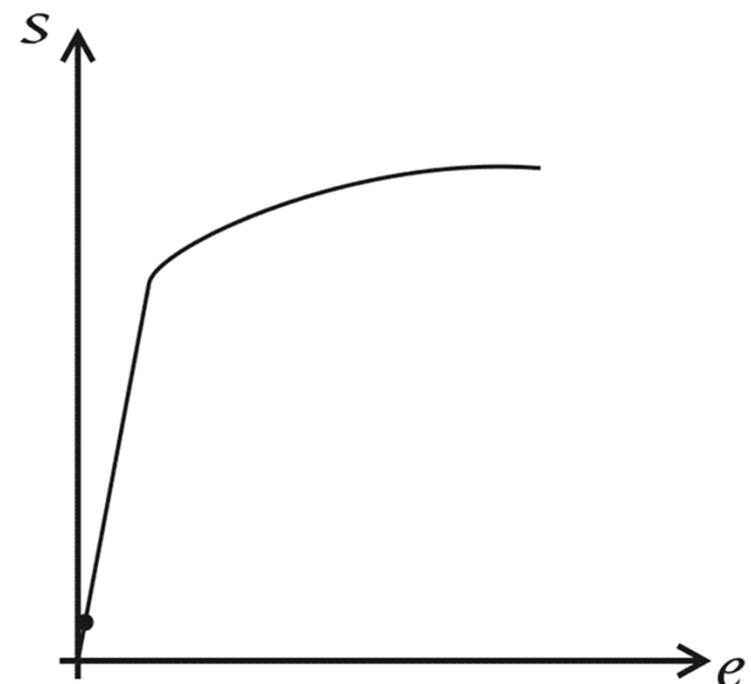
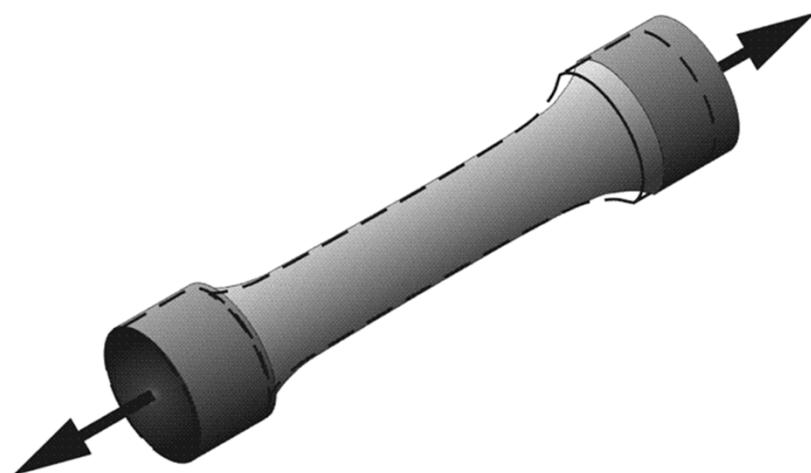
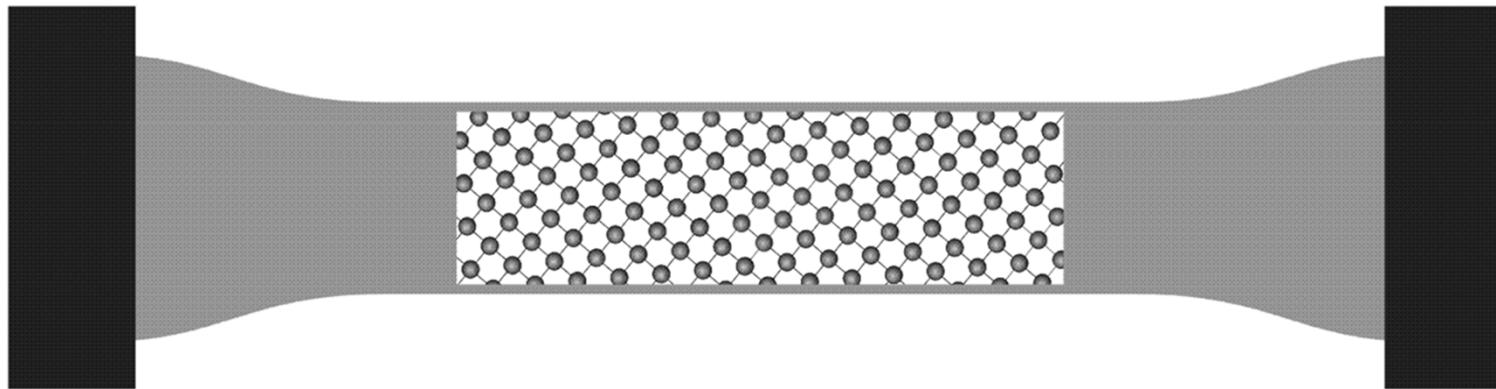
- Animación esquemática de la deformación elástica en un ensayo de tensión uniaxial.



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

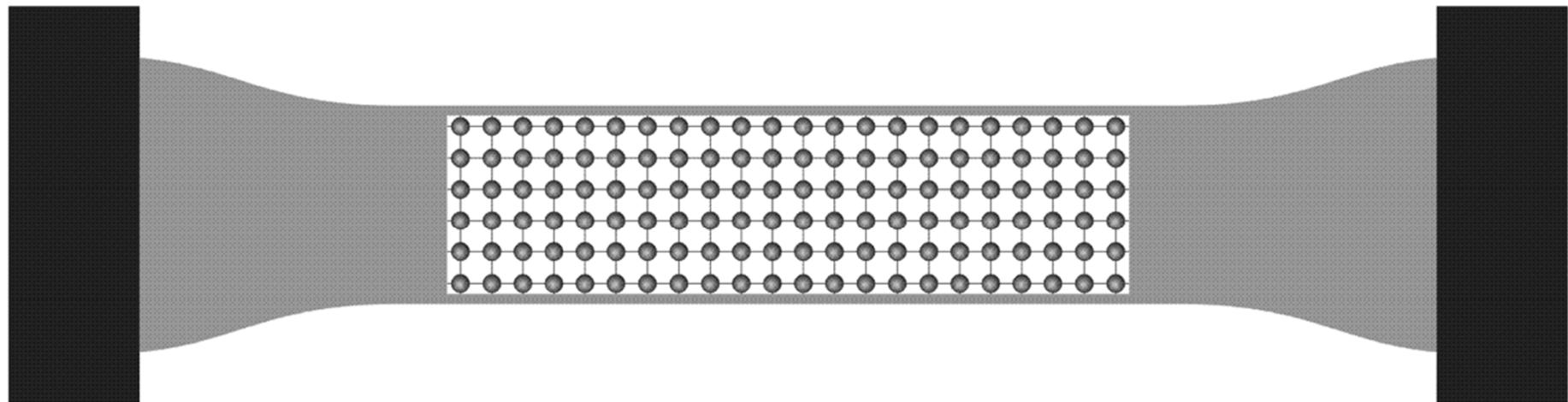
- Animación esquemática del movimiento de dislocaciones de borde y la aparición de escalones de deslizamiento en la superficie en un ensayo de tensión uniaxial



Imperfecciones Cristalinas

Defectos Bidimensionales o de Superficie

- Animación esquemática de la formación de maclas de deformación en un ensayo de tensión uniaxial



© D. M. Kochmann (2009)