

TECNOLOGIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

AULA 07: IMPERFEIÇÕES NOS SÓLIDOS

Prof.: Gabriel Henrique Arruda Tavares de Lima

Uberlândia - MG

INTRODUÇÃO

IMPORTÂNCIA DAS IMPERFEIÇÕES

- As propriedades de alguns materiais são **significativamente influenciadas** pela presença de imperfeições.
- Conhecer os tipos de imperfeições que existem e dos papéis que elas desempenham ao afetar o comportamento dos materiais.
- As imperfeições podem produzir alterações benéficas (ou não) para a estrutura dos materiais, variando de acordo com o caso.

INTRODUÇÃO

EXEMPLO: Ligas metálicas, como o Latão, por exemplo.

- As propriedades mecânicas dos **metais puros** apresentam alterações significativas quando esses materiais são ligados (isto é, quando são adicionados átomos de impurezas).

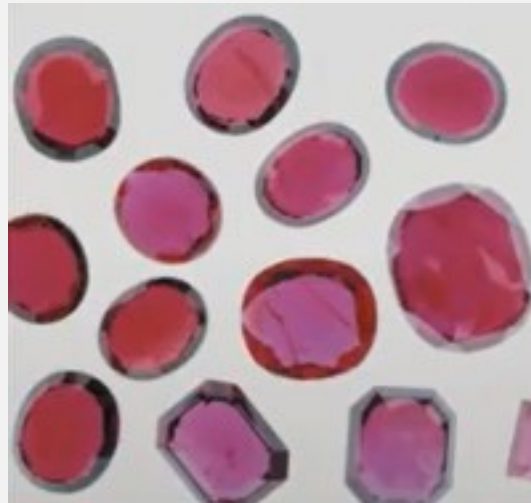
Ex.: o latão (70% cobre/30% zinco) é muito mais **duro e resistente** do que o cobre puro.



INTRODUÇÃO

EXEMPLO: A cor vermelha de um rubi.

- A adição de 1% de óxido de cromo (Cr_2O_3) na alumina (Al_2O_3) cria defeitos na estrutura cristalina. Uma transição eletrônica entre os níveis de defeito produz o cristal vermelho rubi.



IMPERFEIÇÕES

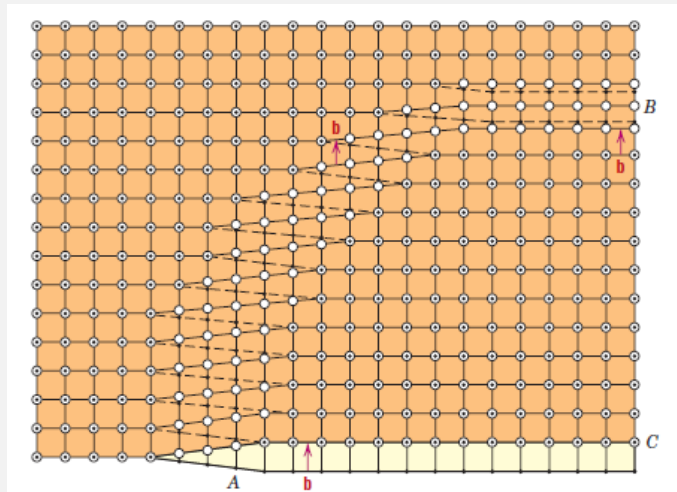
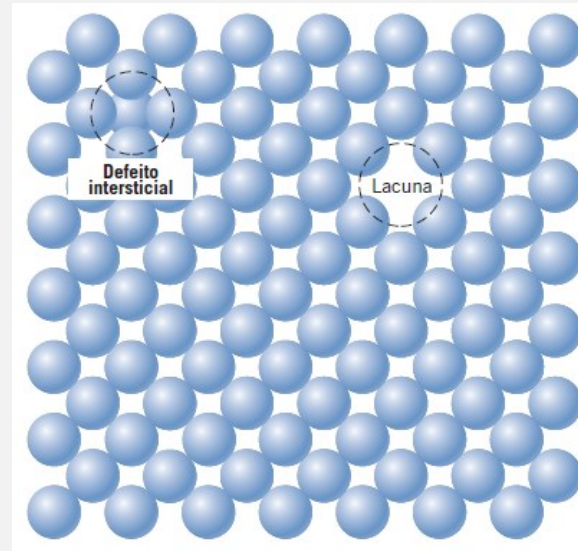
- Em uma escala atômica, existe uma **ordenação perfeita** por todo o material cristalino.
- Entretanto, esse tipo de sólido ideal **não existe**; todos os materiais contêm grande número de uma variedade de defeitos **ou imperfeições**.
- Muitas das propriedades dos materiais são profundamente sensíveis a desvios em relação à perfeição cristalina;
- Defeitos e imperfeições **não necessariamente trazem malefícios** aos materiais, muitas vezes eles são adicionados propositalmente e de forma controlada.

DEFEITOS CRISTALINOS

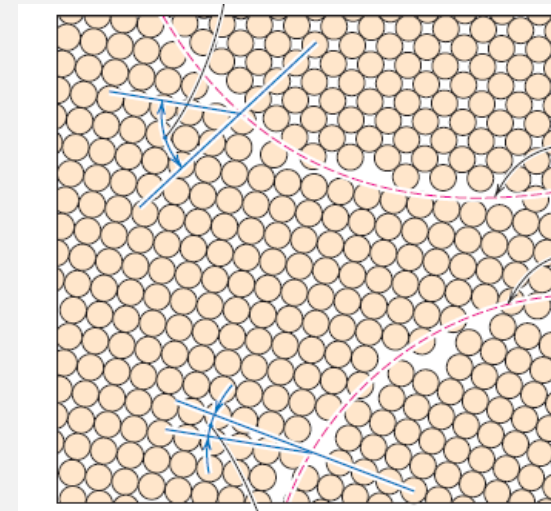
- **Defeito cristalino:** uma irregularidade na rede cristalina com uma ou mais das suas dimensões na ordem do diâmetro atômico.
- A classificação de imperfeições cristalinas é feita, frequentemente, de acordo com a **geometria** ou com a **dimensionalidade do defeito**.
- **Tipos de defeitos:**
 - Defeitos pontuais;
 - Defeitos lineares;
 - Defeitos interfaciais (ou contornos).

DEFEITOS CRISTALINOS

Defeitos pontuais



Defeitos lineares



Defeitos interfaciais (ou contornos)

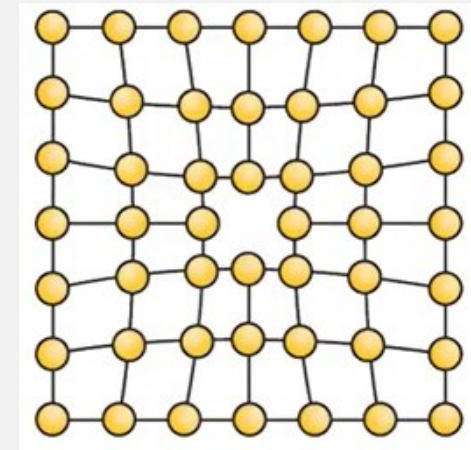
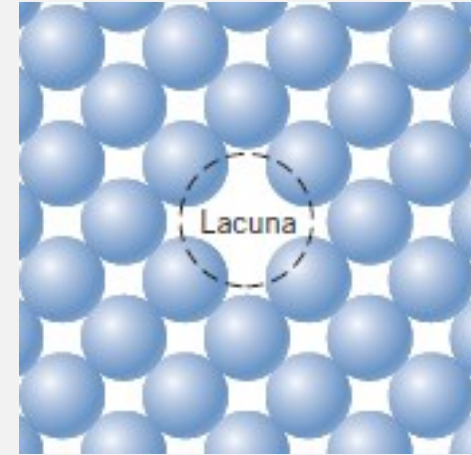
DEFEITOS PONTUAIS

- São aqueles associados a uma ou duas posições atômicas.
- Dentre os defeitos pontuais, temos:
 - Lacunas (Vacância);
 - Defeitos Intersticiais;
 - Impurezas.

DEFEITOS PONTUAIS - LACUNAS

LACUNAS (VACÂNCIA)

- O defeito pontual mais simples é a **lacuna**, ou um sítio vago na rede cristalina que normalmente deveria estar ocupado, mas no qual está faltando um átomo.
- Todos os sólidos cristalinos contêm lacunas e, na realidade, não é possível criar um material que esteja livre desse tipo de defeito.



DEFEITOS PONTUAIS - LACUNAS

- O número de lacunas em equilíbrio N_l para uma dada quantidade de material (**geralmente por metro cúbico**) depende da **temperatura** e aumenta em função desse parâmetro, conforme a expressão:

$$N_l = N \cdot e^{\left(-\frac{Q_l}{K \cdot T}\right)}$$

- N : é o número total de sítios atômicos (m^3);
- Q_l : é a energia necessária para a formação de uma lacuna (J/mol, eV/átomo);
- T : é a temperatura em kelvin ($K = ^\circ C + 273$);
- K : é a constante de Boltzmann ($k = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{atomo \cdot K}$; $k = 8,62 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{atomo \cdot K}$);

DEFEITOS PONTUAIS - LACUNAS

O número total de sítios atômicos (N) é obtido através da expressão:

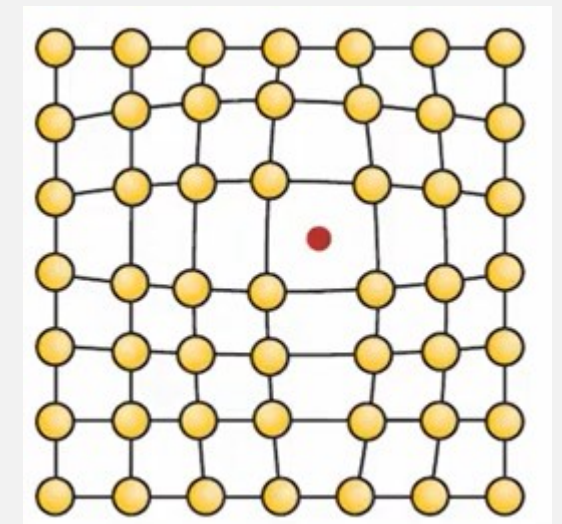
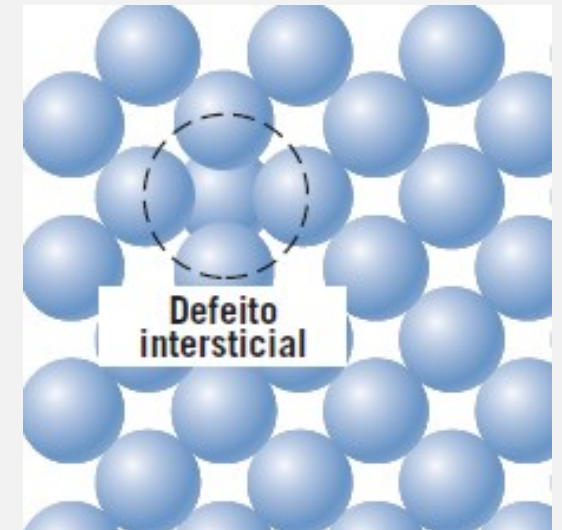
$$N = \frac{N_A \cdot \rho}{A}$$

- N : é o número total de sítios atômicos (m^3);
- N_A : é a constante de Avogrado ($N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \frac{\text{atomos}}{\text{mol}}$)
- ρ : é a massa específica (densidade), em (g/cm^3);
- A : é o peso atômico ($\frac{\text{g}}{\text{mol}}$);

DEFEITOS PONTUAIS – DEFEITO INTERSTICIAL

DEFEITO INTERSTICIAL

- É quando **um átomo** do cristal se encontra comprimido em um sítio intersticial.
- **Nos metais**, um defeito intersticial introduz distorções relativamente grandes em sua vizinhança na rede cristalina, pois o átomo é substancialmente maior que a posição intersticial em que ele está localizado.
- A formação desse defeito não é muito provável.



DEFEITOS PONTUAIS – IMPUREZAS NOS SÓLIDOS

IMPUREZAS NOS SÓLIDOS

- Um metal puro formado apenas por um tipo de átomo é simplesmente impossível;
- Impurezas ou átomos diferentes estarão sempre presentes, e alguns existirão como defeitos pontuais nos cristais.
- A maioria dos metais mais familiares não são altamente puros, ao contrário, eles são **ligas**, em que **intencionalmente** foram adicionados átomos de impurezas para conferir características específicas ao material.
- Comumente, a formação de ligas é utilizada em metais para aumentar a resistência mecânica e a resistência à corrosão.

DEFEITOS PONTUAIS – IMPUREZAS NOS SÓLIDOS

EXEMPLO: IMPUREZA NOS SÓLIDOS (PRATA DE LEI)

- Prata de lei:
 - É uma liga composta por **92,5% de prata e 7,5% de cobre**.
 - Sob condições ambientes normais, a prata pura é altamente resistente à corrosão, mas também é muito macia.
 - A formação de uma liga com o cobre **aumenta** significativamente sua resistência mecânica, sem diminuir de maneira apreciável sua resistência à corrosão.



DEFEITOS PONTUAIS - EXERCICIOS

Calcule o número de lacunas em equilíbrio, por metro cúbico de cobre, a 1000°C. A energia para a formação de uma lacuna é de 0,9 eV/átomo; o peso atômico e a massa específica (a 1000°C) para o cobre são de 63,5 g/mol e 8,4 g/cm³, respectivamente.

1º) CÁLCULO DO NUMERO DE SÍTIOS ATOMICOS

$$N = \frac{N_A \rho}{A_{\text{Cu}}}$$

$$= \frac{(6,022 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})(8,4 \text{ g/cm}^3)(10^6 \text{ cm}^3/\text{m}^3)}{63,5 \text{ g/mol}}$$

$$= 8,0 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3$$

DEFEITOS PONTUAIS - EXERCICIOS

2º) CÁLCULO DO NUMERO DE LACUNAS

Dessa forma, o número de lacunas a 1000°C (1273 K) é igual a

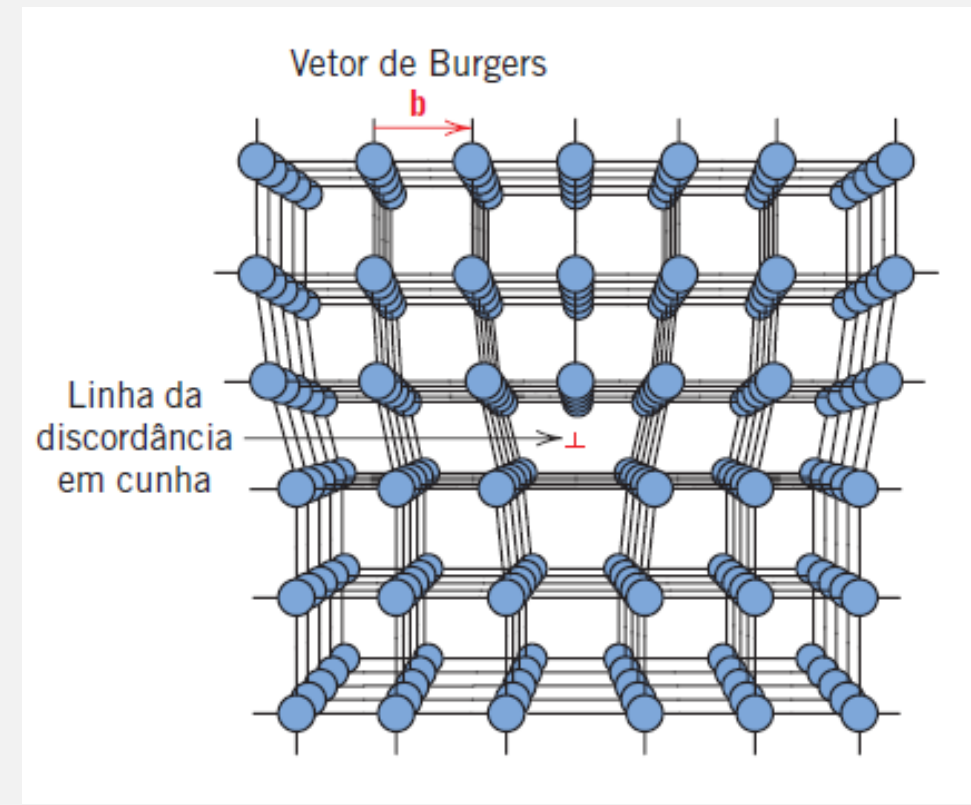
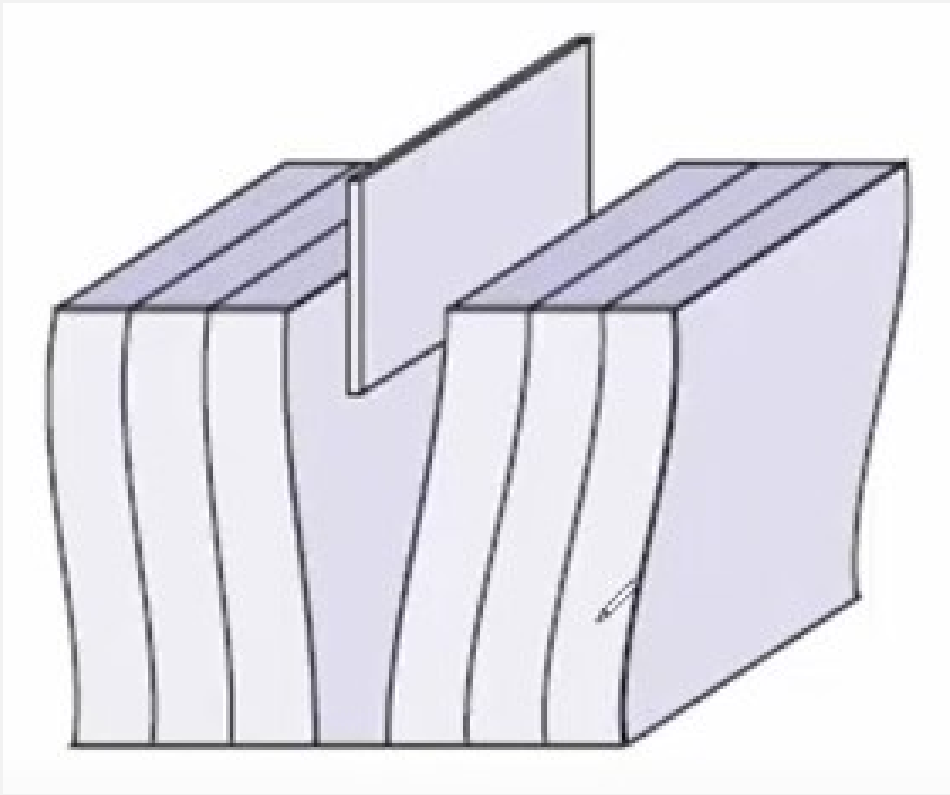
$$\begin{aligned} N_l &= N \exp\left(-\frac{Q_l}{kT}\right) \\ &= (8,0 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3) \exp\left[-\frac{(0,9 \text{ eV})}{(8,62 \times 10^{-5} \text{ eV/K})(1273 \text{ K})}\right] \\ &= 2,2 \times 10^{25} \text{ lacunas/m}^3 \end{aligned}$$

DEFEITOS LINEARES – DISCORDÂNCIAS

- **Discordâncias** são defeitos lineares em um cristal perfeito, em todo do qual alguns átomos estão desalinhados;
- São introduzidos em um cristal durante a solidificação do material ou quando o material é deformado permanentemente;
- Embora as discordâncias estejam presentes em todos os materiais, incluindo cerâmicas e polímeros, eles são particularmente úteis para explicar a deformação e o aumento da resistência em materiais metálicos.

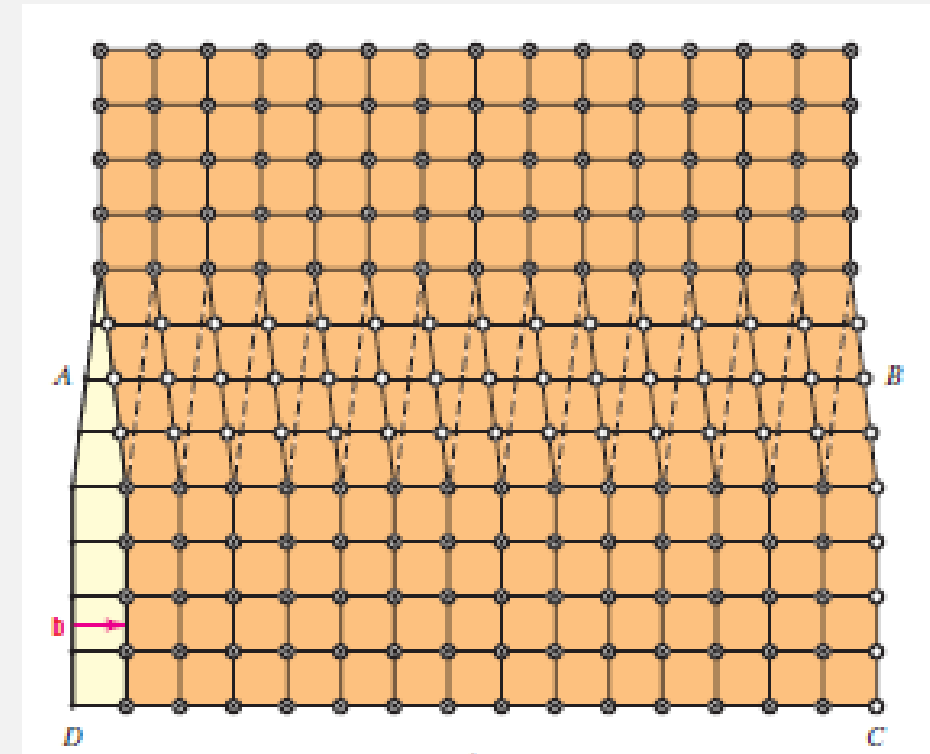
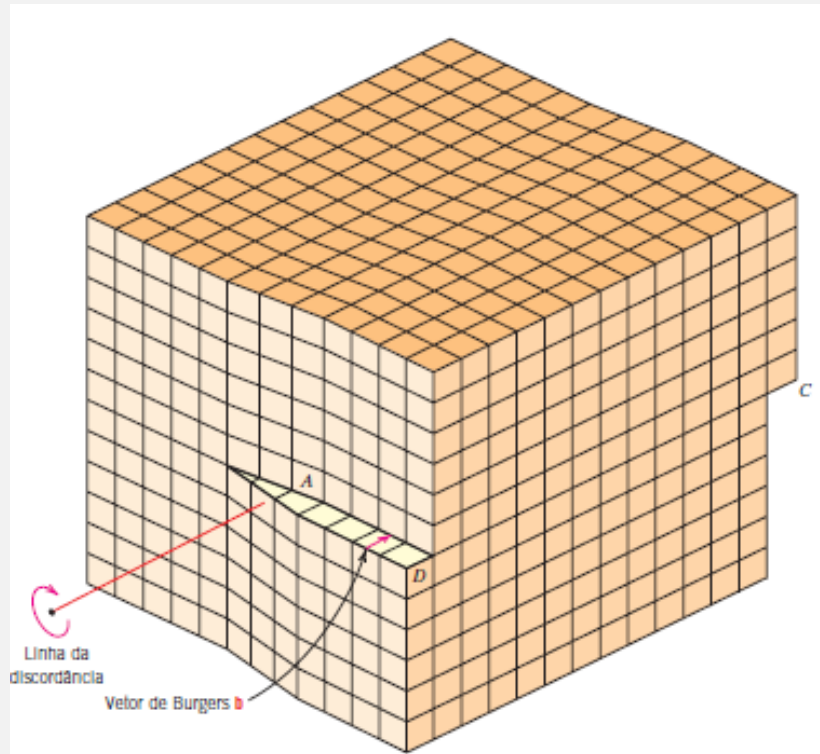
DEFEITOS LINEARES – DISCORDÂNCIAS

- É possível identificar três tipos de discordâncias:
 - ❑ Discordância em aresta (ou cunha)



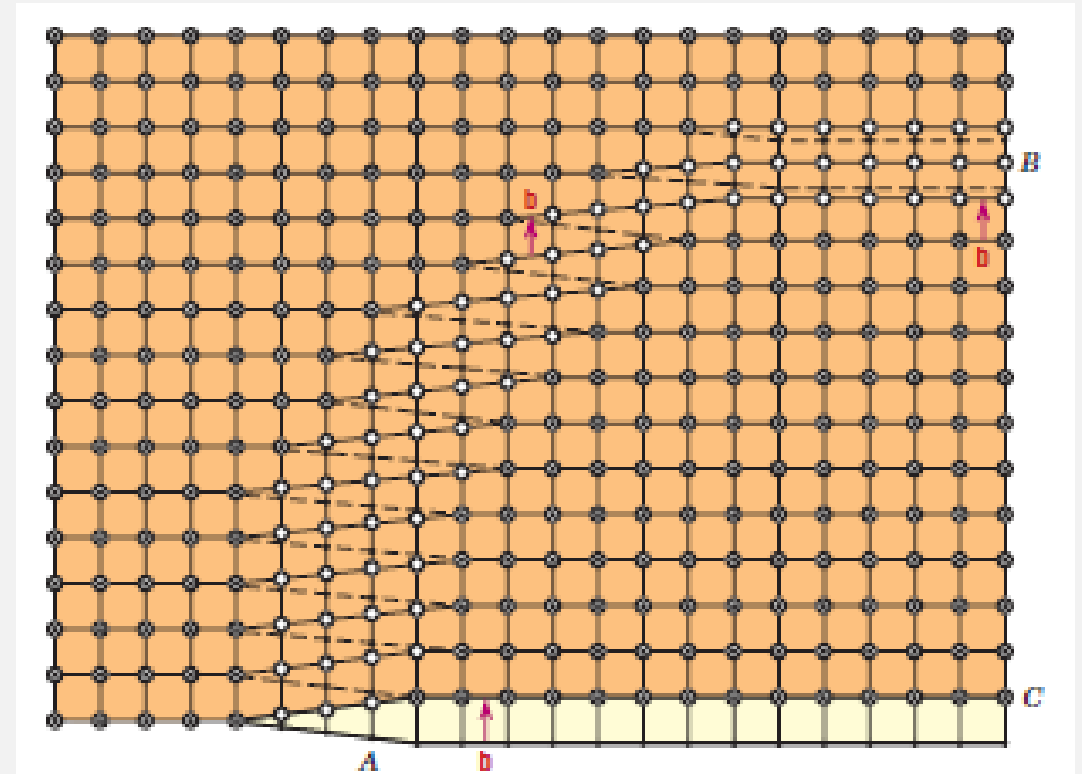
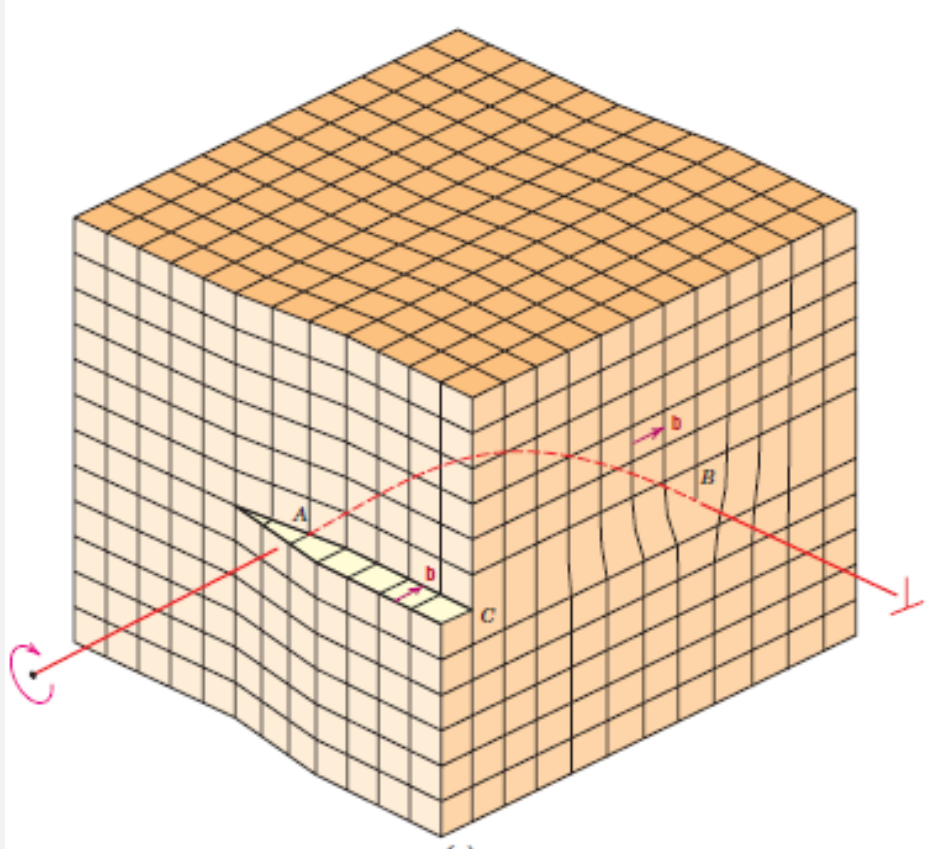
DEFEITOS LINEARES – DISCORDÂNCIAS

❑ Discordância helicoidal (ou espiral)



DEFEITOS LINEARES – DISCORDÂNCIAS

❑ Discordância mista

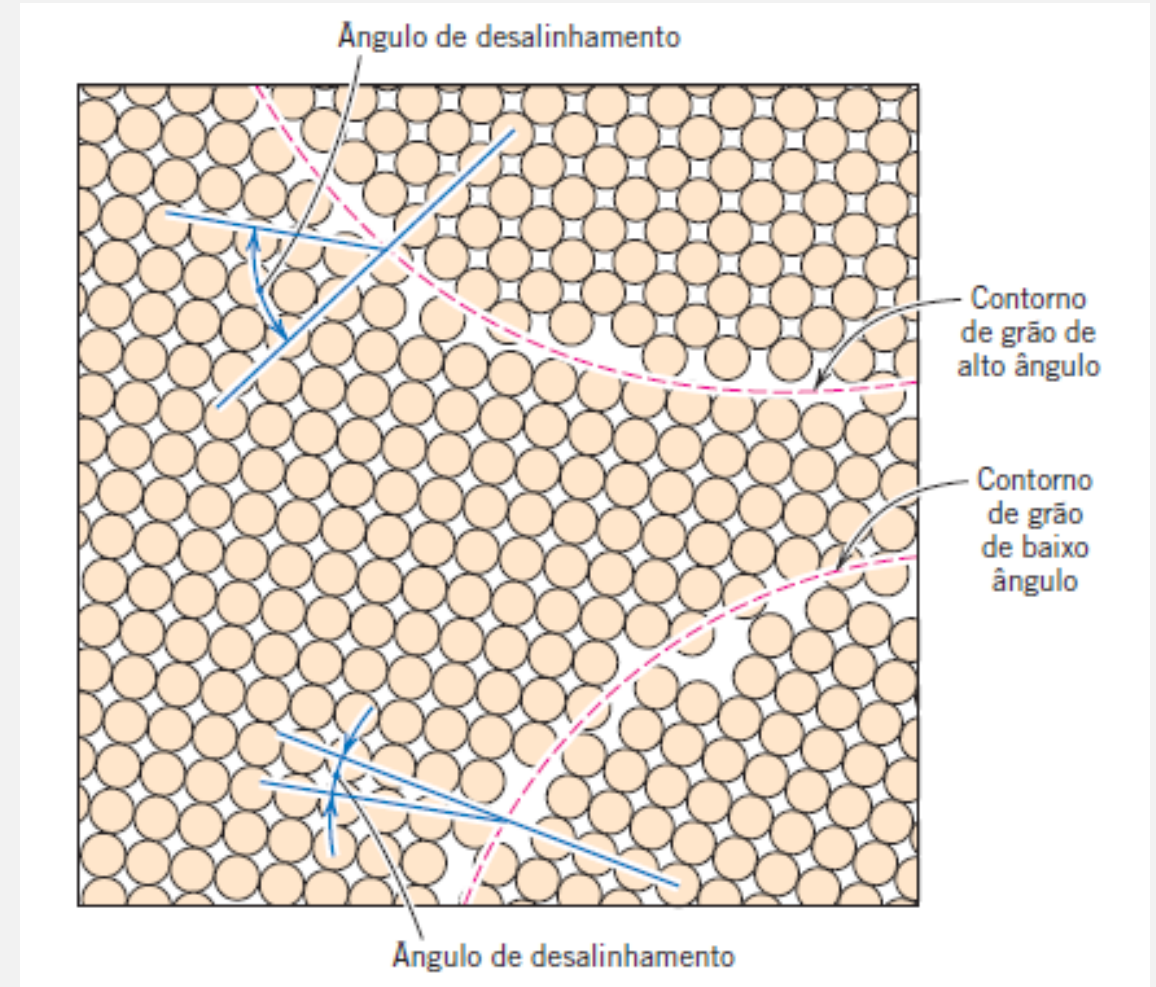


DEFEITOS INTERFACIAIS

- São contornos que têm duas dimensões e que normalmente separam regiões dos materiais que possuem estruturas cristalinas e/ou orientações cristalográficas diferentes;
- Os principais exemplos de imperfeições interfaciais são:
 - ❑ Contornos de grão;
 - ❑ Contornos de fase;
 - ❑ Contornos de macla.
- Outros exemplos de defeitos interfaciais são: superfícies externas e falhas de empilhamento.

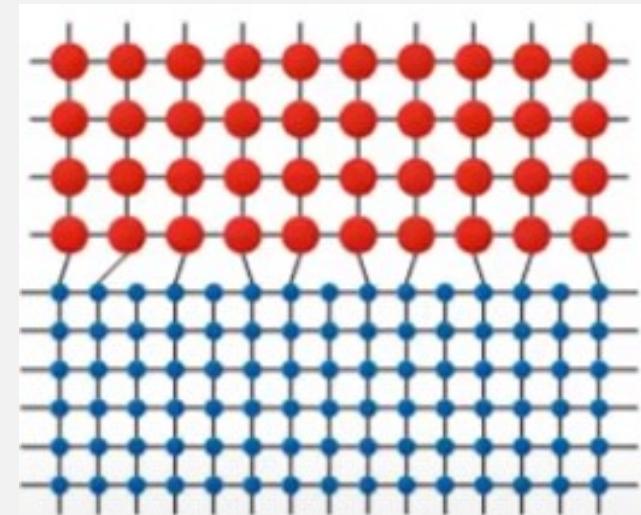
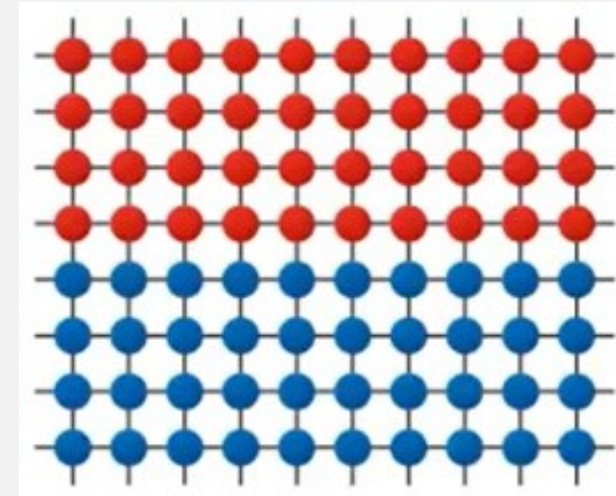
DEFEITOS INTERFACIAIS – CONTORNO DE GRÃO

- ❑ **Contorno de grão:** contorno que separa dois pequenos grãos ou cristais com diferentes orientações cristalográficas nos materiais policristalinos.



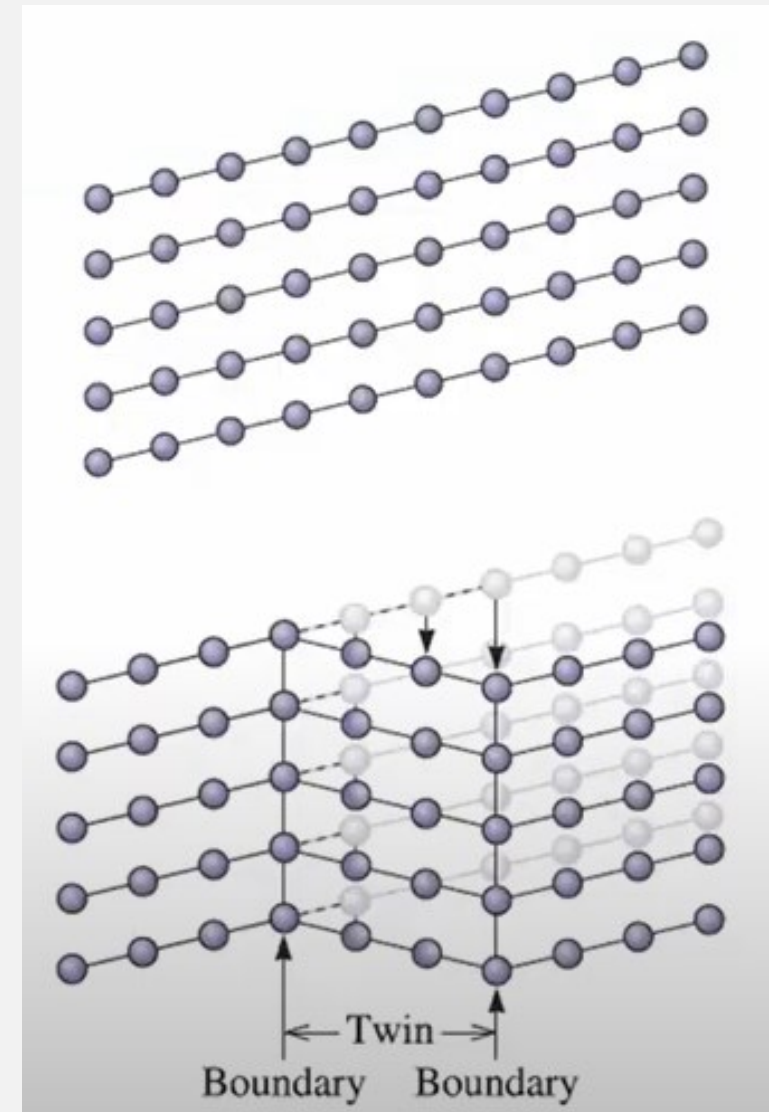
DEFEITOS INTERFACIAIS – CONTORNO DE FASE

- ❑ **Contorno de fase:** Os contornos de fase existem nos materiais multifásicos nos quais há uma fase diferente em cada lado do contorno;
- ❑ Cada uma das fases constituintes possui suas próprias características físicas e/ou químicas distintas.



DEFEITOS INTERFACIAIS – CONTORNO DE MACLA

- ❑ **Contorno de macla:** é um tipo especial de contorno de grão, por meio do qual existe uma específica **simetria** em espelho da rede cristalina;
- ❑ Os átomos em um dos lados do contorno estão localizados em posições de imagem em espelho em relação aos átomos no outro lado do contorno.



DIFUSÃO:

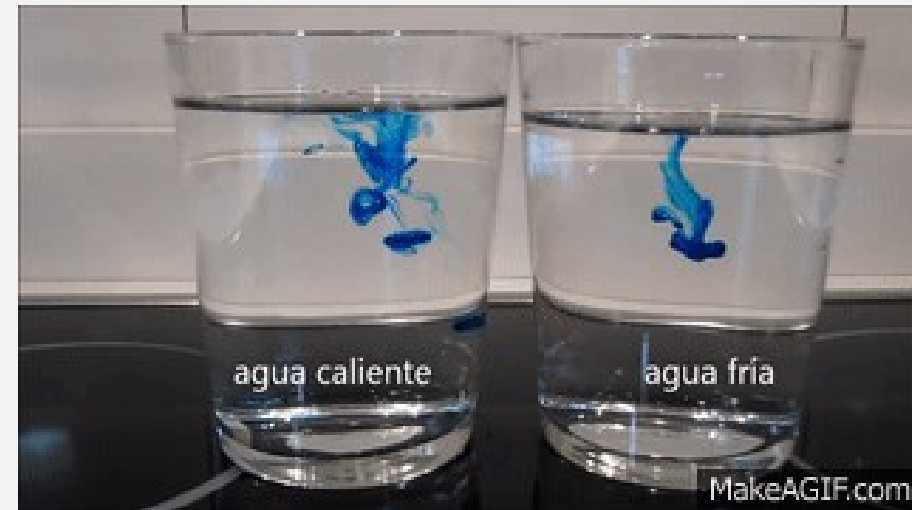
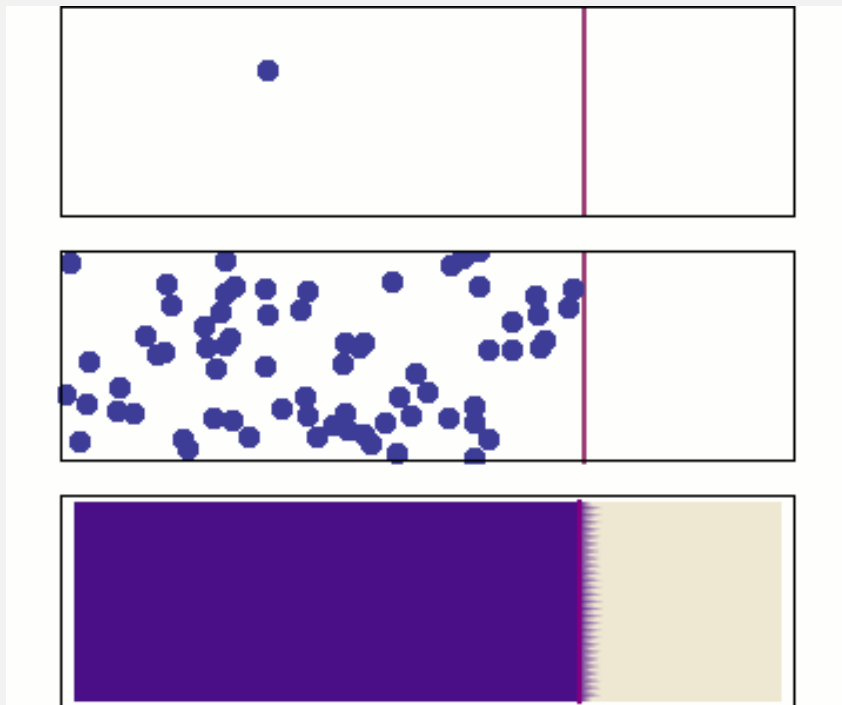
INTRODUÇÃO E MECANISMOS DE DIFUSÃO

Prof.: Gabriel Henrique Arruda Tavares de Lima

Uberlândia - MG

DIFUSÃO

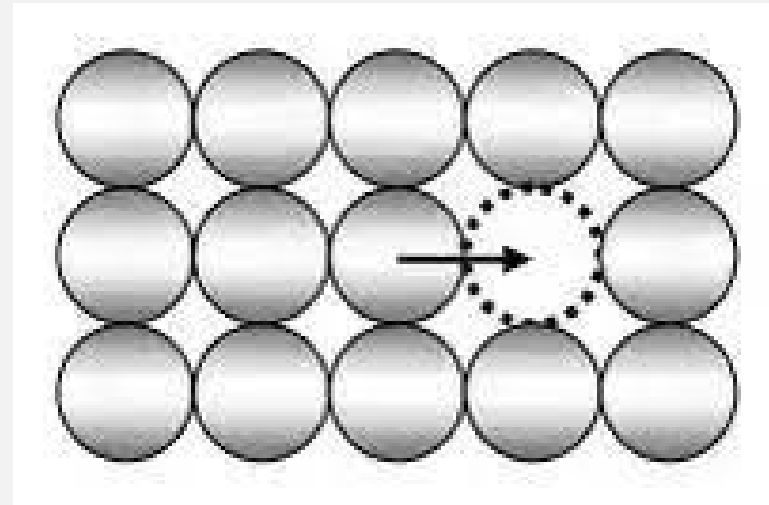
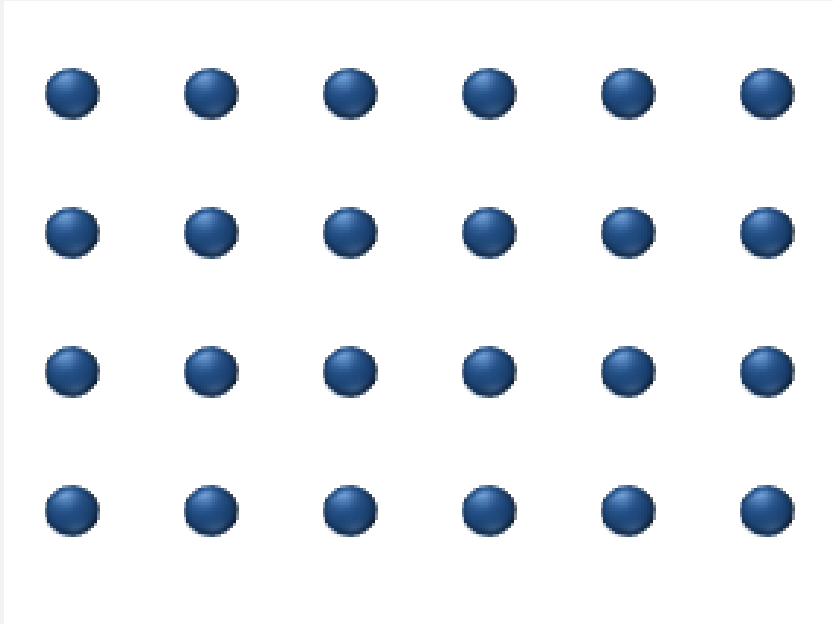
DIFUSÃO: É o fenômeno de transporte de matéria por movimento atômico. Ocorre um fluxo de átomos ou outras espécies químicas devido à **gradiente de concentração**, sendo **dependente da temperatura**.



DIFUSAO

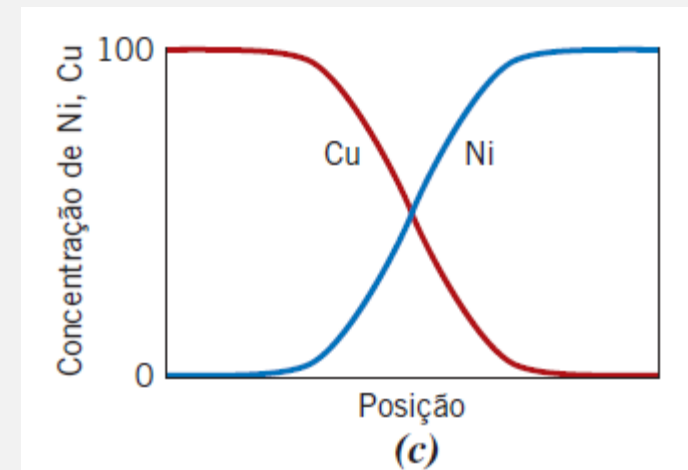
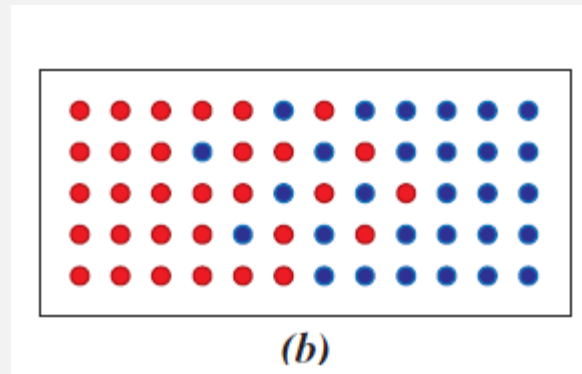
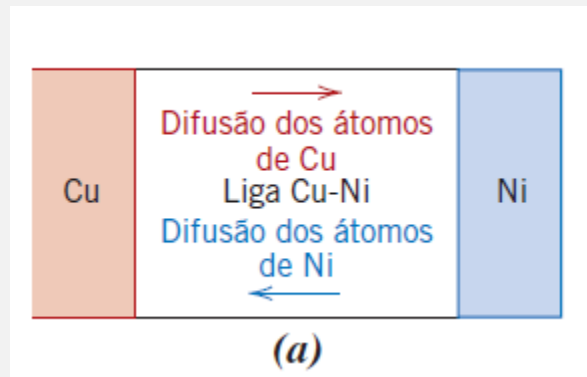
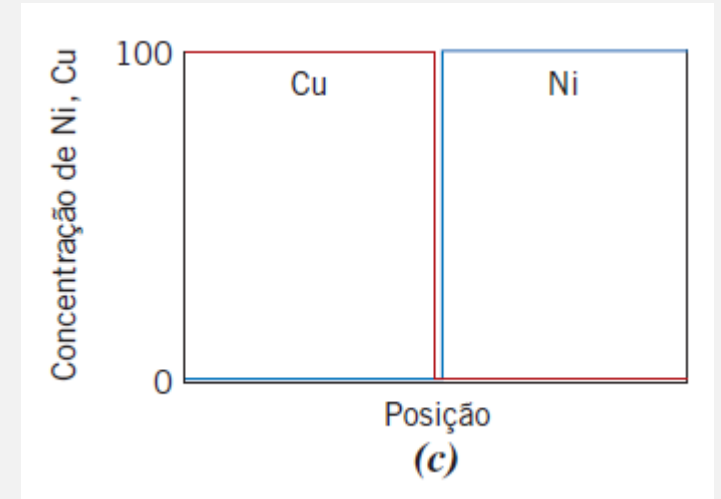
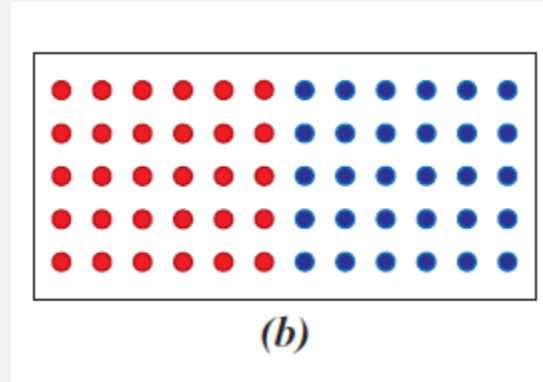
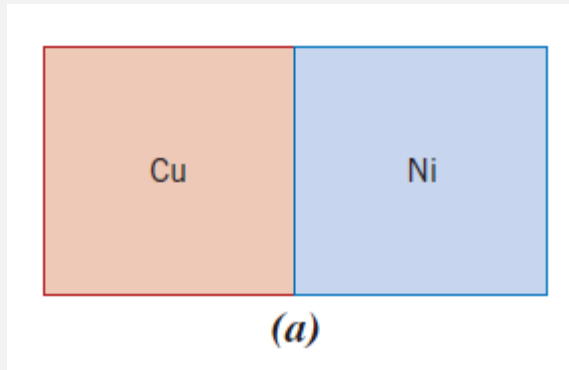
- A **difusão** para ocorrer necessita de:
 - ❑ Existir uma posição adjacente vazia;
 - ❑ Possuir energia para quebrar as ligações atômicas com seu vizinho e causar alguma distorção na rede durante seu deslocamento;
- Quando ocorre a difusão em metais puros, onde os átomos trocam de posição, chamamos de **Autodifusão**.

DIFUSÃO



INTERDIFUSÃO (DIFUSÃO DE IMPUREZAS)

- Processo no qual átomos de um metal se difundem para o interior de outro metal.

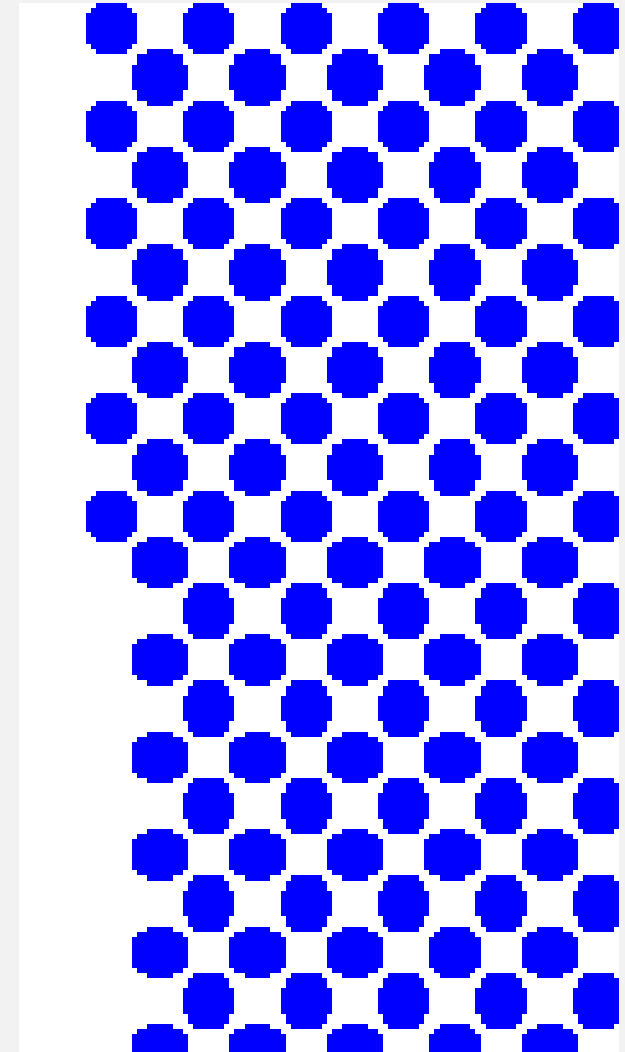
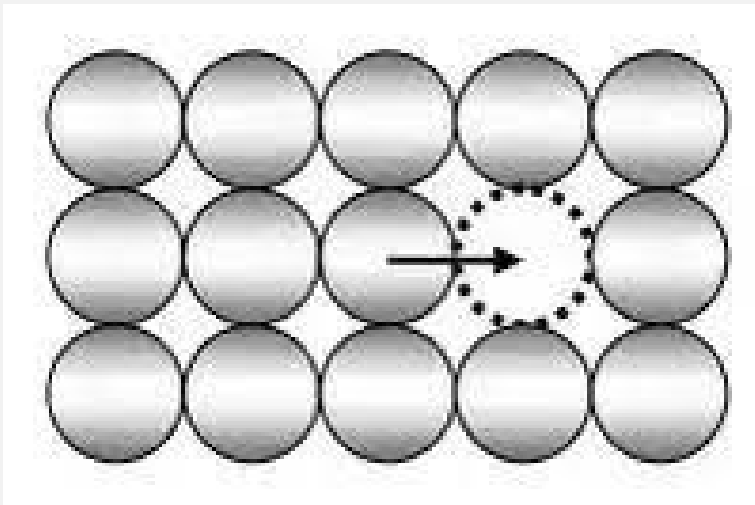


MECANISMOS DE DIFUSÃO

- De uma perspectiva **atômica**, a difusão consiste simplesmente na migração passo a passo dos átomos de uma posição para outra na rede cristalina.
- Foram propostos vários modelos diferentes para esse movimento dos átomos; entre essas possibilidades, duas são dominantes para a difusão nos metais:
 - ❑ Difusão por lacunas;
 - ❑ Difusão intersticial;

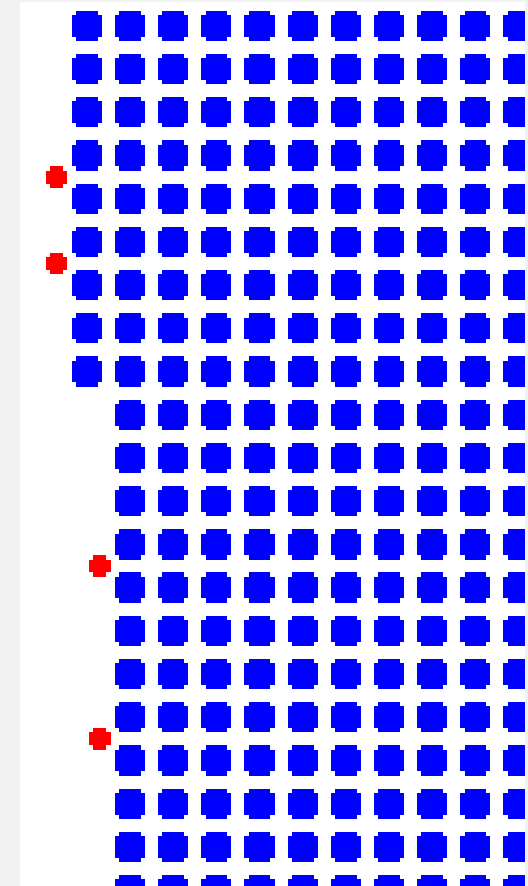
DIFUSÃO POR LACUNAS

- Quando um átomo deixa seu ponto de rede para preencher uma lacuna próxima.
- Há um contra fluxo entre átomos e lacunas. A autodifusão e interdifusão o correm por esse mecanismo;



DIFUSÃO INTERSTICIAL

- Átomos que migram de uma posição intersticial para uma intersticial vizinha que esteja vazia.
- Muito comum em impurezas como Hidrogênio, Carbono, Oxigênio e outros átomos pequenos.



BARREIRA ENERGÉTICA

- Na maioria dos metais a probabilidade de um movimento intersticial é maior que um substitucional (lacunas)

