Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
IPEN-CNEN/SP

Disciplina TNM 5737
Defeitos Estruturais em Materiais

DISCORDÂNCIAS E CONTORNOS DE GRÃO

DISCORDÂNCIAS E CONTORNOS DE GRÃO

Capítulos anteriores tratamos de Defeitos Puntiformes

Neste Capítulo

– Defeitos de Dimensão 1 (Lineares) - **Discordâncias**

– Defeitos de Dimensão 2 (Planares) - **Contornos de Grão**

1º Ponto – A concentração de Vacâncias, de Intersticiais, etc. foi calculada para o Equilíbrio Termodinâmico (E.T.). Para os defeitos tratados neste capítulo, não existe estado de ET. As suas Energias de Formação >> S_{mis} (configuracional) com que contribuem para a ENERGIA LIVRE.

PRODUÇÃO

1) Formação do Cristal a partir da Fusão. Podem ser evitados (Métodos cuidadosos – Crescimento Monocristais)

2) Deformação Plástica do Material
Estes defeitos não são eliminados por recozimento a Altas Temperaturas

RESPOSTAS DE UM SÓLIDO A TENSÕES EXTERNAS

Elástica(Anelástica)
(Reversível)

Tensões Pequenas – Sólido volta à forma original
Deformação Elástica

Plástica
(Irreversível)

Tensões Elevadas
Deformações Permanentes
Deformação Plástica

As PPDS do sólido que governam sua Resposta Mecânica ao modo de Deformação Elástica são determinadas pelas **PPDS Atômicas Microscópicas** do CRISTAL PERFEITO. (Módulo de Volume – Bulk Modulus – 2ª derivada E (E_{coe}).

As Discordâncias são, em grande parte, responsáveis pelas PPDS Plásticas dos Sólidos.

DESLIZAMENTO EM MONOCRISTAIS

Conceito de discordância – Inventado cerca de 20 anos antes de sua observação. Por que? Foi proposto para explicar a discrepância de várias ordens de grandeza entre a **Tensão de Cisalhamento** num **Monocristal** e o valor esperado por Cálculos Teóricos.

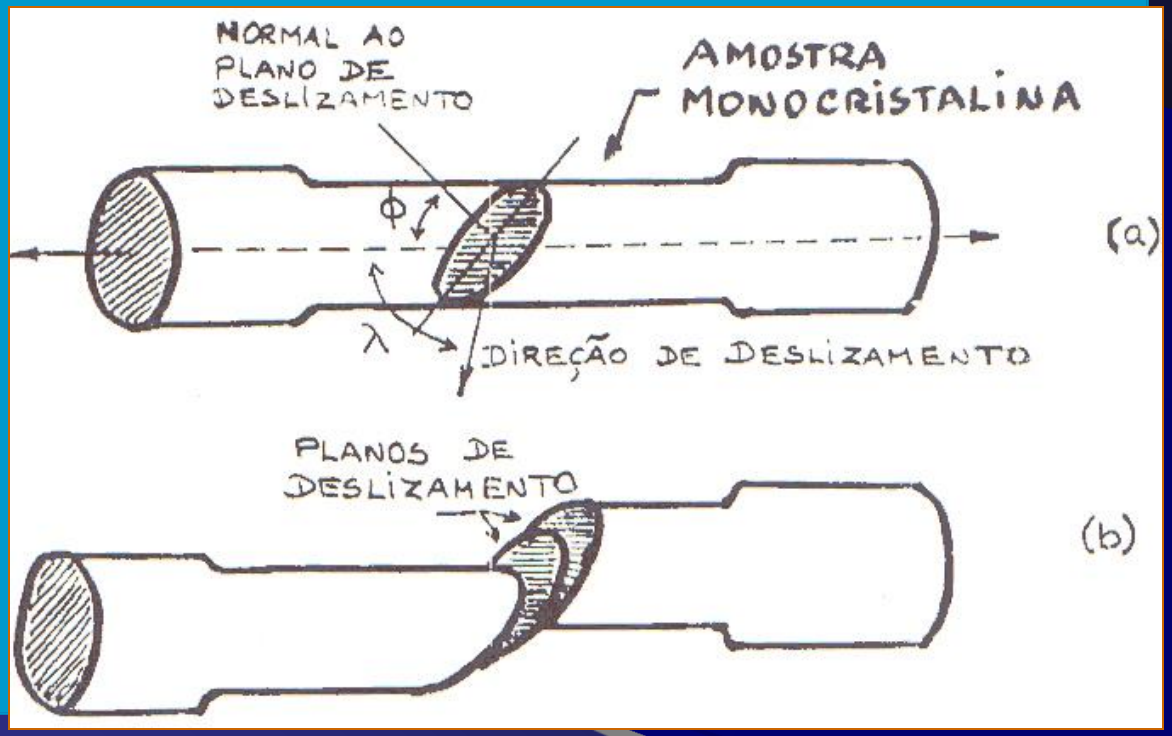


Fig. 0 – Método para medir a Tensão de Cisalhamento

Tração do Monocristal – Quando $\sigma \rightarrow \sigma_c$, o cristal desliza num Plano Cristalográfico particular chamado **Plano de Deslizamento**.

A direção em que este ocorre **NÃO** é a direção do Componente de Tensão de Cisalhamento Máxima, mas na **Direção de Deslizamento**.

O Deslizamento ocorre rapidamente para uma força **F**.

O componente desta força é **Fcos**λ.

A área do Plano de Deslizamento sobre a qual esta força é distribuída **é** A **/ cos**ϕ. Assim:

$$\sigma_c = \frac{F^*}{A^*} = \frac{F\cos\lambda}{A/\cos\phi} = \frac{F}{A}\cos\lambda\cos\phi \qquad (1)$$

Experiências deste tipo, servem também para identificar:

1) Planos de Deslizamento

e **2) Direções de Deslizamento**

DESLIZAMENTO

Cristais CFC

{111} <110>

{111} Planos +Compactos

<110> Direções + Compactas

$$b = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

Cristais CCC

{110} {112} {123} <111>

{110} Planos + Compactos

$$b = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$

O vetor de Burgers que define uma Discordância

$$\vec{b} = c\,\vec{a}_0\,[\,i\ j\ k\,]$$

Direção [i j k]

Comprimento $b = ca_0\sqrt{i^2 + j^2 + k^2}$

com este simbolismo

$$b_{cfc} = \frac{a_0}{2}[110]$$

$$b_{ccc} = \frac{a_0}{2}[111]$$

CÁLCULO TEÓRICO

O valor teórico da Tensão de Cisalhamento Crítica (TCC) para o Deslizamento ou Deformação Plástica

pode ser

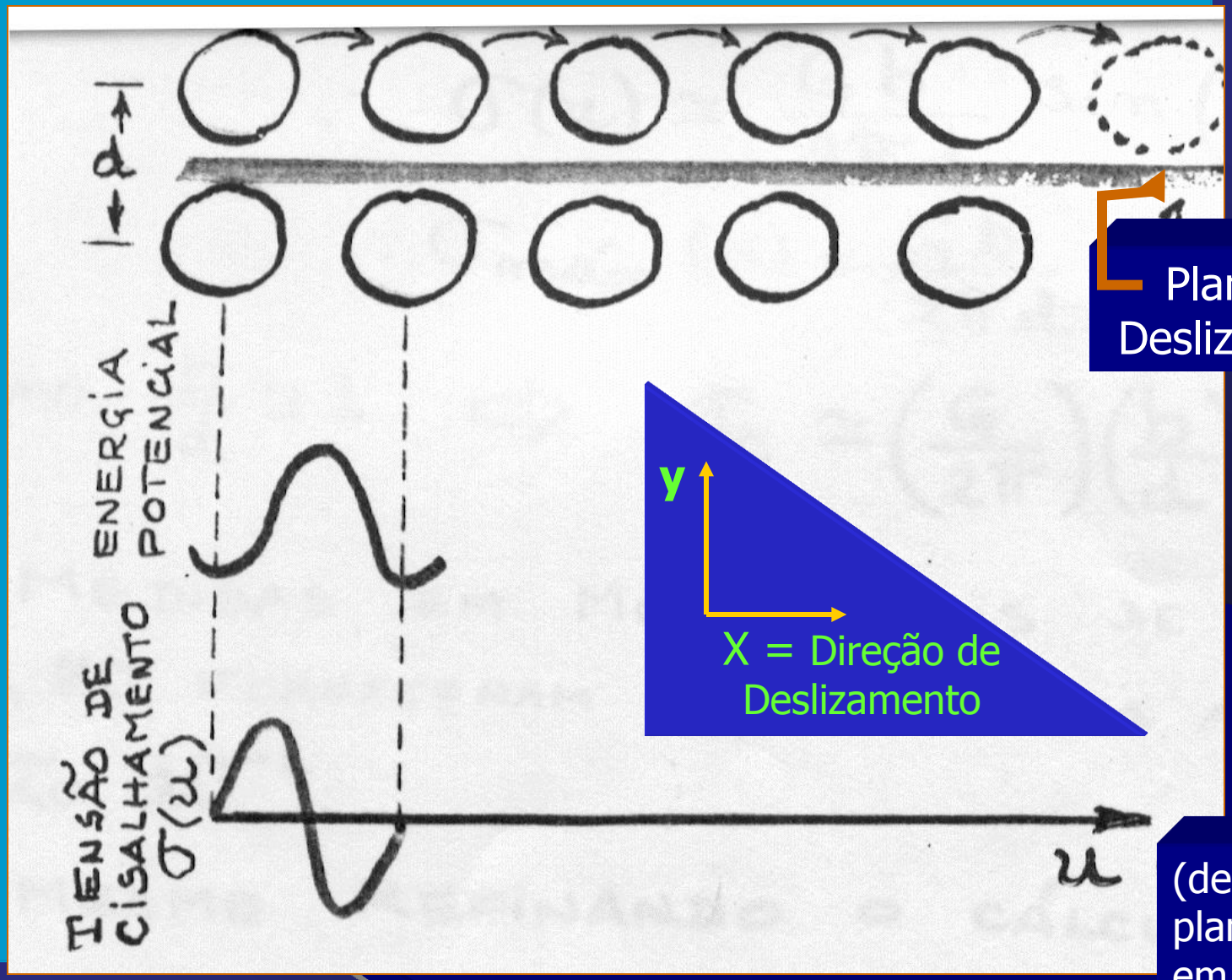
Ao valor dado pela experiência, analisado de acordo com a Equação 1.

CÁLCULO TEÓRICO – O Modelo Microscópico mais óbvio para o tipo de movimento necessário para produzir o Deslizamento (Fig. 1) é aquele no qual o Deslizamento ocorre entre dois Planos Cristalográficos.

SUPOSIÇÃO – O plano atômico superior, inteiro, e todos os átomos acima deste plano, se movem como um bloco na Direção do Deslizamento, sobre a porção do Cristal situada abaixo do Plano de Deslizamento, que permanece fixa.

A E_p do sistema, quando o bloco superior se movimenta de uma **PE** (no Deslocamento $u = 0$), para a NOVA **PE** (em $u = b$, $\vec{b}$ Vetor de Burgers) está mostrada na Fig. 1. Máximo $\rightarrow u = b/2$.

A derivada da curva da E_p é a força (Tensão de Cisalhamento), que atua no Plano Atômico para manter o Deslocamento relativo entre os Planos Superiores e Inferiores.



Plano de Deslizamento

(deslocamento do plano superior em relação ao inferior)

Fig. 1 – Deslizamento Simultâneo de Planos Cristalográficos Adjacentes num Cristal.

A Força de Cisalhamento será máxima quando $\partial U/\partial u$ for máxima, ou seja, para $u = b/4$. Se o modelo no qual a Fig. 1 se baseia for correto, então a Tensão de Cisalhamento, para este valor do Deslocamento, deverá ser a Tensão de Cisalhamento Crítica Resolvida (TCCR), da equação 1.

$$\sigma\left(\frac{b}{4}\right) \equiv \sigma_c = \frac{F}{A}\cos\phi\cos\lambda$$

Para calcular σ_c a partir deste modelo, precisamos aproximar a Curva da Tensão de Cisalhamento $\sigma(u)$ mostrada na Fig. 1.

1º Requisito - $\sigma(u)$ periódica na unidade de deslizamento, b.

$$\sigma(u) \cong c^{te}.\mathrm{sen}\left(\frac{2\pi u}{b}\right)$$

2º Requisito – Para $u \rightarrow o$ $\sigma(u)\ \alpha\ \in$

$$\left.\begin{array}{l}\sigma_{ij} = 2\mu \in_{ij} \\ G = \mu\end{array}\right\} \sigma(u) = 2G \in_{xy} = G\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) \approx G\left(\frac{u}{d}\right)$$

Igualando as duas fórmulas, no limite para **u** pequeno

$$c^{\underline{te}}.\frac{2\pi u}{b} = G\left(\frac{u}{d}\right) \quad \Rightarrow \quad c^{\underline{te}} = \frac{Gb}{2\pi d}$$

$$\therefore \sigma(u) \cong \frac{Gb}{2\pi d} \operatorname{sen}\left(2\pi \frac{u}{b}\right)$$

$$\sigma_{máx}(u) = \frac{Gb}{2\pi d} = \sigma_c$$

Como $\frac{b}{d} \cong 1$ ➡ $\sigma_c \cong \left(\frac{G}{2\pi}\right)\left(\frac{b}{d}\right) \cong 0{,}1G$

Medidas em Monocristais de muitos materiais, como os da Fig. 0, forneceram valores para as TCCR ~ 10^{-4} a 10^{-3} de G e não 10^{-1}.

Mesmo refinando o Cálculo Teórico (forma verdadeira das Forças Intermoleculares, p. ex.), não obtemos valores menores do que 0,03 G.

DISCORDÂNCIAS

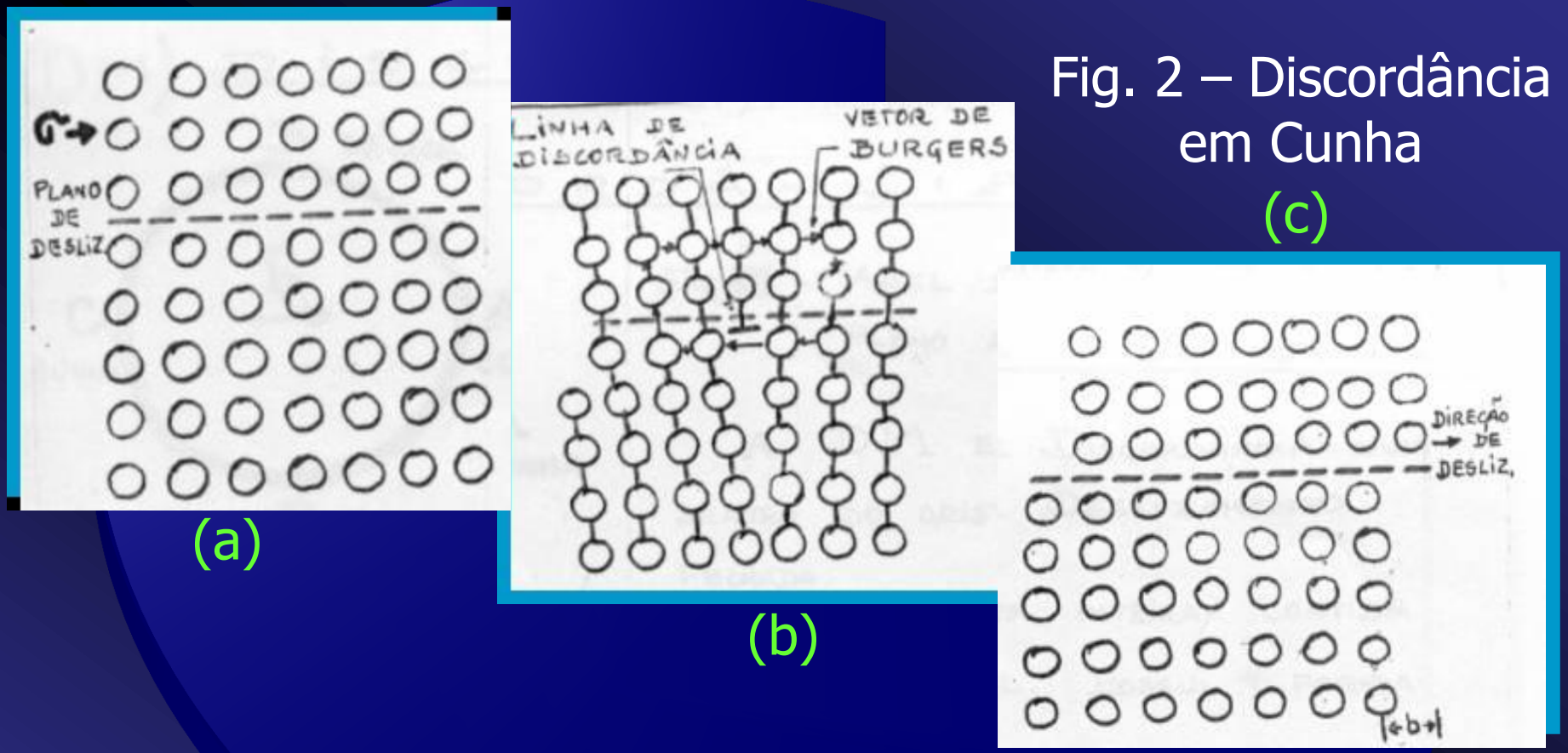
A discrepância de três ordens de grandeza, entre a Teoria e a Experiência, significa que o modelo da Fig. 1 é uma descrição incorreta do mecanismo pelo qual ocorre o Deslizamento em Cristais Sólidos.

Ao invés de um Deslizamento ocorrendo simultaneamente em todo o Plano de Deslizamento, o Deslizamento se inicia numa região particular do plano e se propaga através do cristal.

Dito de outra forma, os baixos Valores Experimentais observados para a Resistência de Cisalhamento, não podem ser explicados sem a presença de imperfeições, capazes de agir como fonte de debilidade mecânica em Cristais Reais.

Sabe-se atualmente que, imperfeições cristalinas especiais, denominadas Discordâncias, existem em quase todos os tipos de cristais, e seu movimento é responsável pelo Deslizamento para Tensões Aplicadas muito baixas.

DISCORDÂNCIAS EM CUNHA



(a) (b) (c)

Fig. 2 – Discordância em Cunha

O modelo acima permite a Propagação do Escorregamento para Tensões de Cisalhamento **<< 0,1 G.**

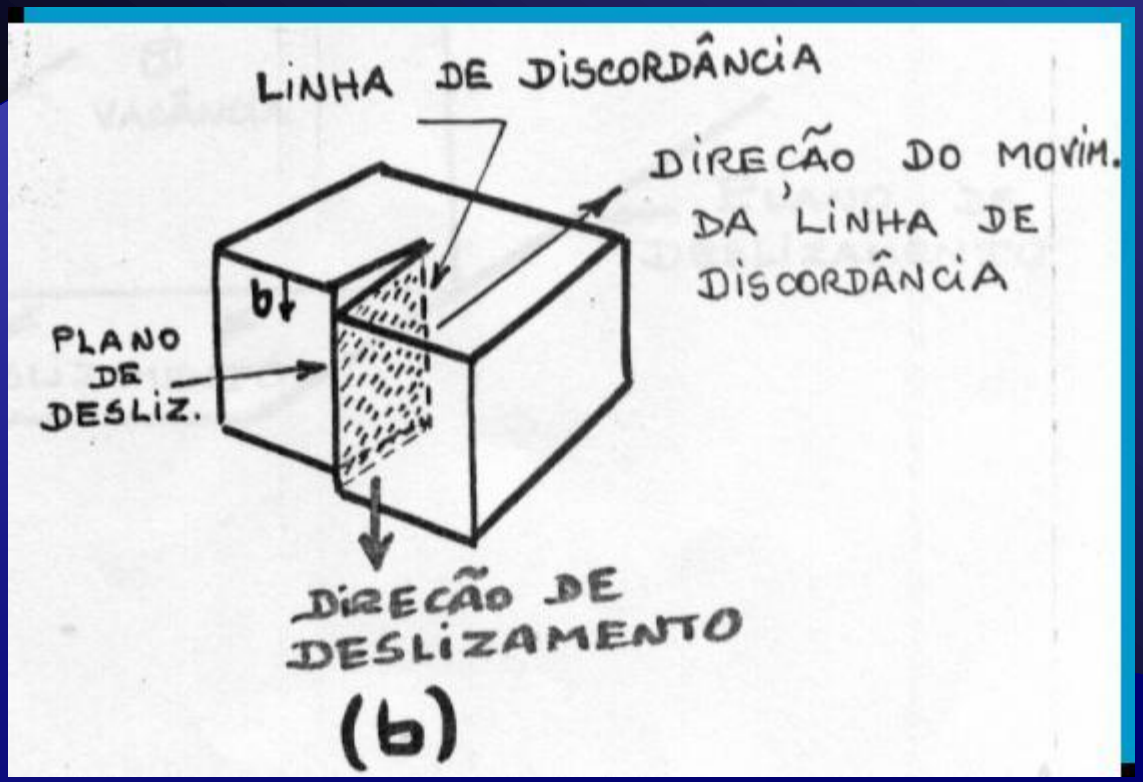
Vetor de Burgers – Indicado na Fig. 2b e 2c.

$\vec{b}$ paralelo à Direção de Deslizamento para qualquer Discordância

DISCORDÂNCIAS EM HÉLICE

O Escorregamento pode propagar-se também pelo movimento de uma Discordância em Hélice. O resultado final é exatamente o mesmo que o produzido pelo Escorregamento de uma Discordância em Cunha.

Fig. 3 – Discordância em Hélice



A Discordância em Hélice pode praticar o Escorregamento Cruzado (Cross Slip): mudança planos com mesmo { h, k, l }

(DM) DISCORDÂNCIA MIXTA

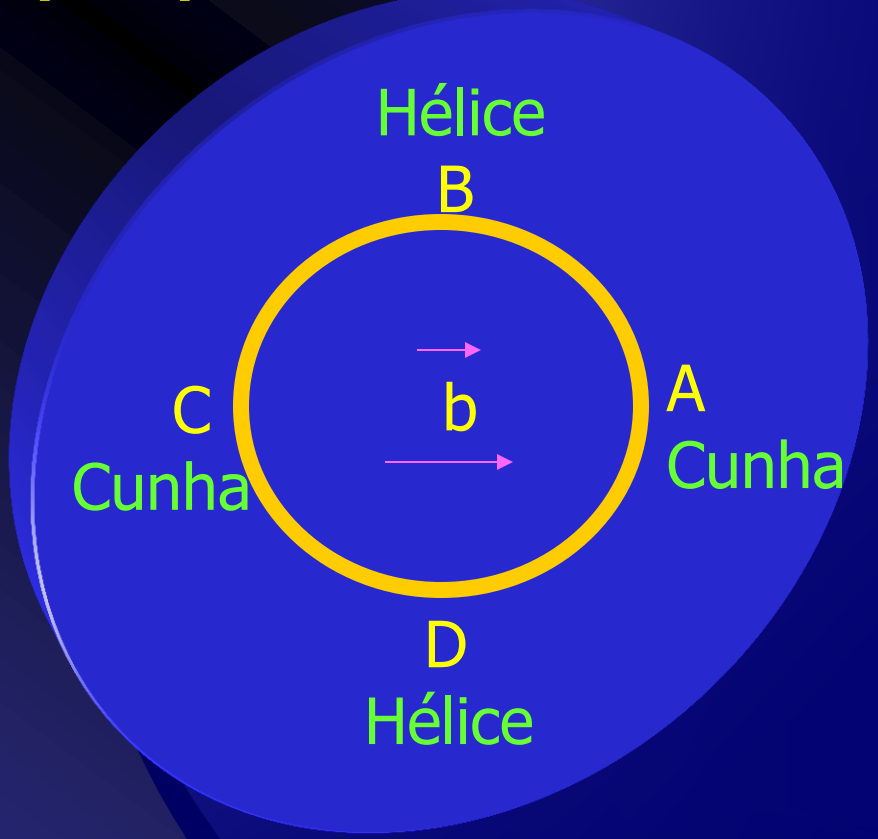


Fig. 4 – Anel de Discordância num Plano de Deslizamento

A DM está inteiramente contida dentro do Cristal. Possui qualquer forma fechada.

Fora do Anel – Região não Escorregada

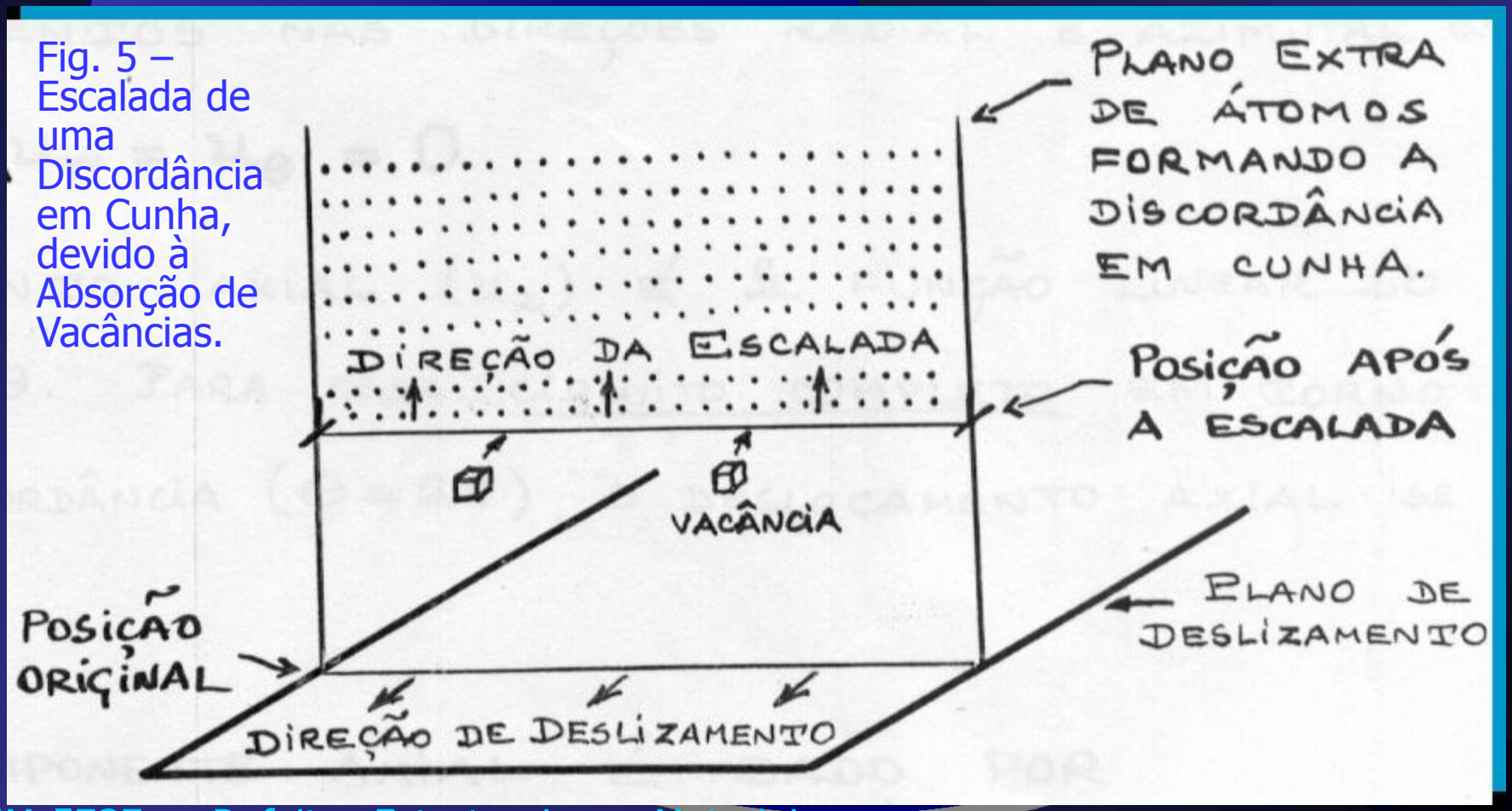
Dentro do Anel – Região Escorregada ($\vec{b}$)

$\vec{b}$ pertence ao Plano do Anel. Este é chamado Anel de Cisalhamento porque pode crescer facilmente no seu Plano de Escorregamento, sob a ação de uma Tensão de Cisalhamento Aplicada.

ESCALADA (CLIMB)

Movimento perpendicular ao Plano de Deslizamento da Discordância em Cunha, pela Coleta ou Emissão, de Vacâncias ou Intersticiais do Volume do Sólido.

Fig. 5 – Escalada de uma Discordância em Cunha, devido à Absorção de Vacâncias.



ENERGIA DE DEFORMAÇÃO DAS DISCORDÂNCIAS

Consideremos uma Discordância em Hélice, **Reta** e **Infinita**, na direção do eixo z, de um Sistema de Coordenadas Cilíndricas.

A Teoria da Elasticidade pode descrever o **Campo dos Deslocamentos** em regiões suficientemente afastadas do coração da Discordância, onde a Lei de Hooke pode ser aplicada (para $r>r_0 \cong 5b$).

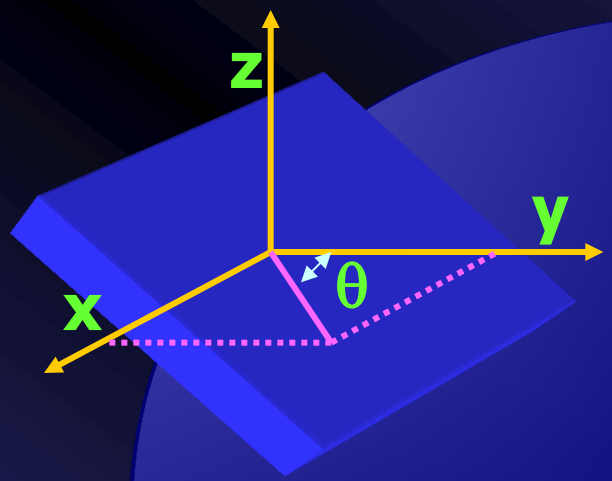
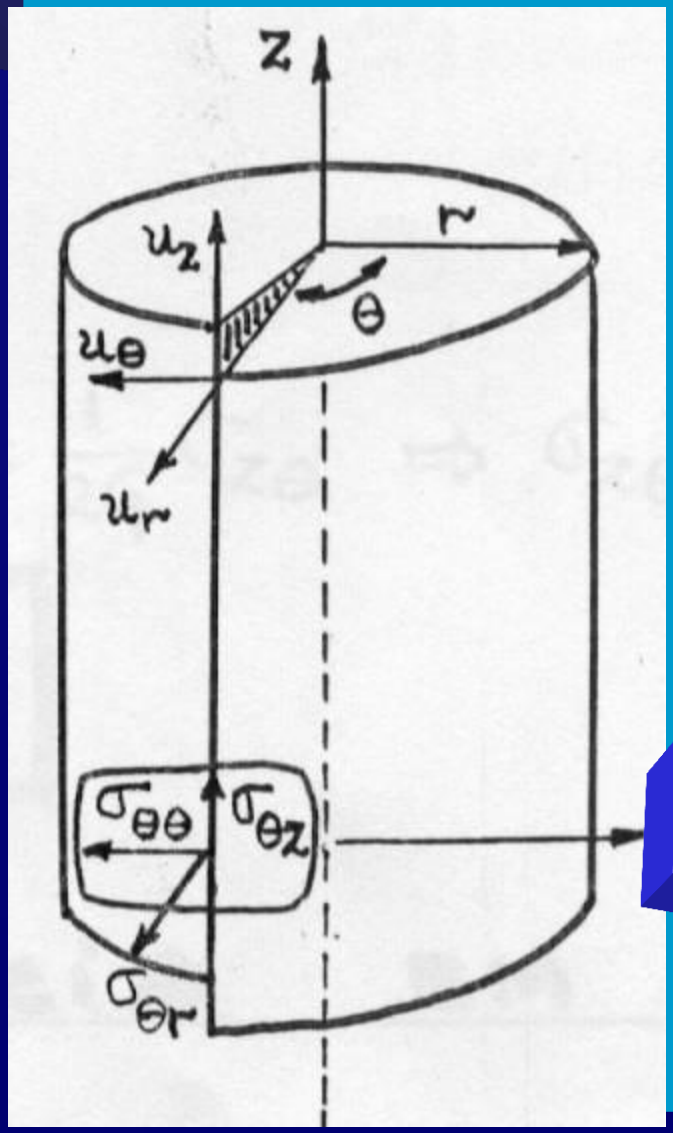


Fig. 6 – Discordância em Hélice Reta e Infinita



Elemento do Plano r-z.

Não existem Deslocamentos nas direções Radial e Azimutal, ou

$$u_r = u_\theta = 0$$

O Deslocamento Axial (u_z) é uma função função Linear do Ângulo Azimutal θ. Para cada Circuito Completo em torno da Linha da Discordância ($\theta = 2\pi$), o Deslocamento Axial se iguala a b.

Assim, o componente Axial é dado por

$$u_z = b\frac{\theta}{2\pi}$$

$$\omega = \frac{b}{2\pi} tg^{-1}\frac{x}{y}$$

COMPONENTES DO TENSOR DE DEFORMAÇÃO

$$\in_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} \qquad \in_{\theta\theta} = \frac{u_r}{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \qquad \in_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

A.32

$$\in_{r\theta} = \in_{\theta r} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial \mu_\theta}{\partial r} - \frac{\mu_\theta}{r}\right)$$

$$\in_{rz} = \in_{zr} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}\right)$$

A.33

$$\in_{z\theta} = \in_{\theta z} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_z}{\partial \theta}\right)$$