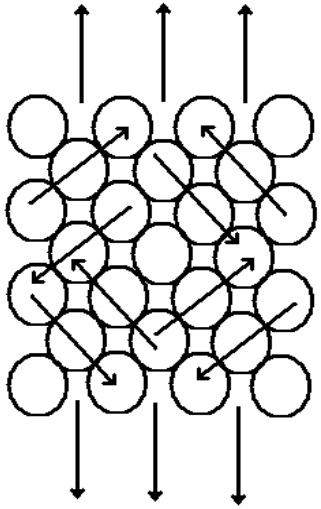
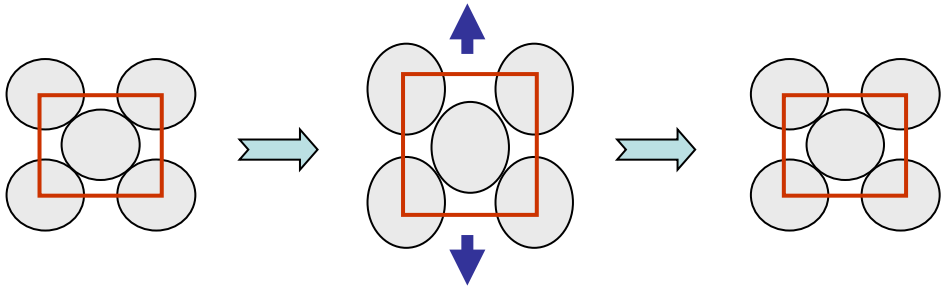
Universidade de São Paulo

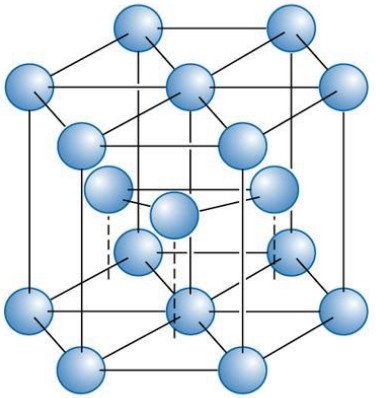
Escola de Engenharia de Lorena

Departamento de Engenharia de Materiais



Sólidos Cristalinos





Introdução à Ciência dos Materiais

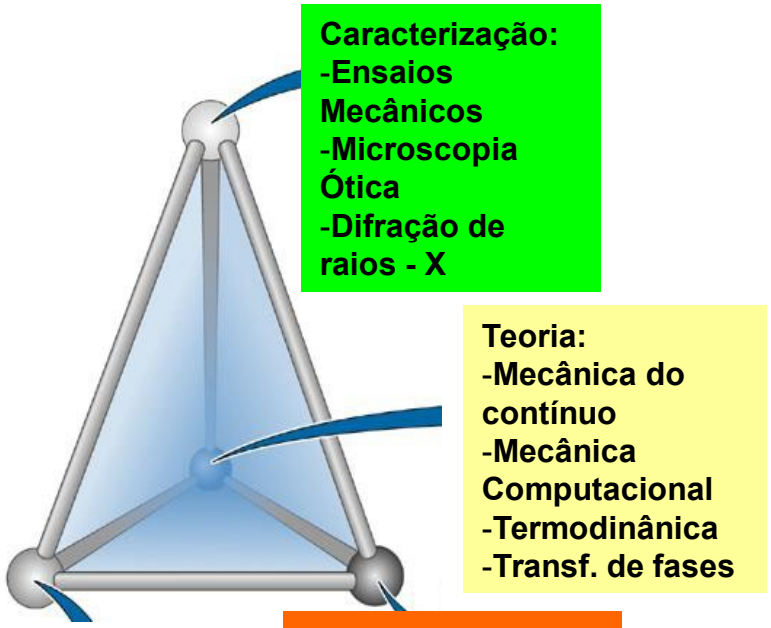
Prof. Dr. Cassius O.F.T. Ruchert, Professor Associado

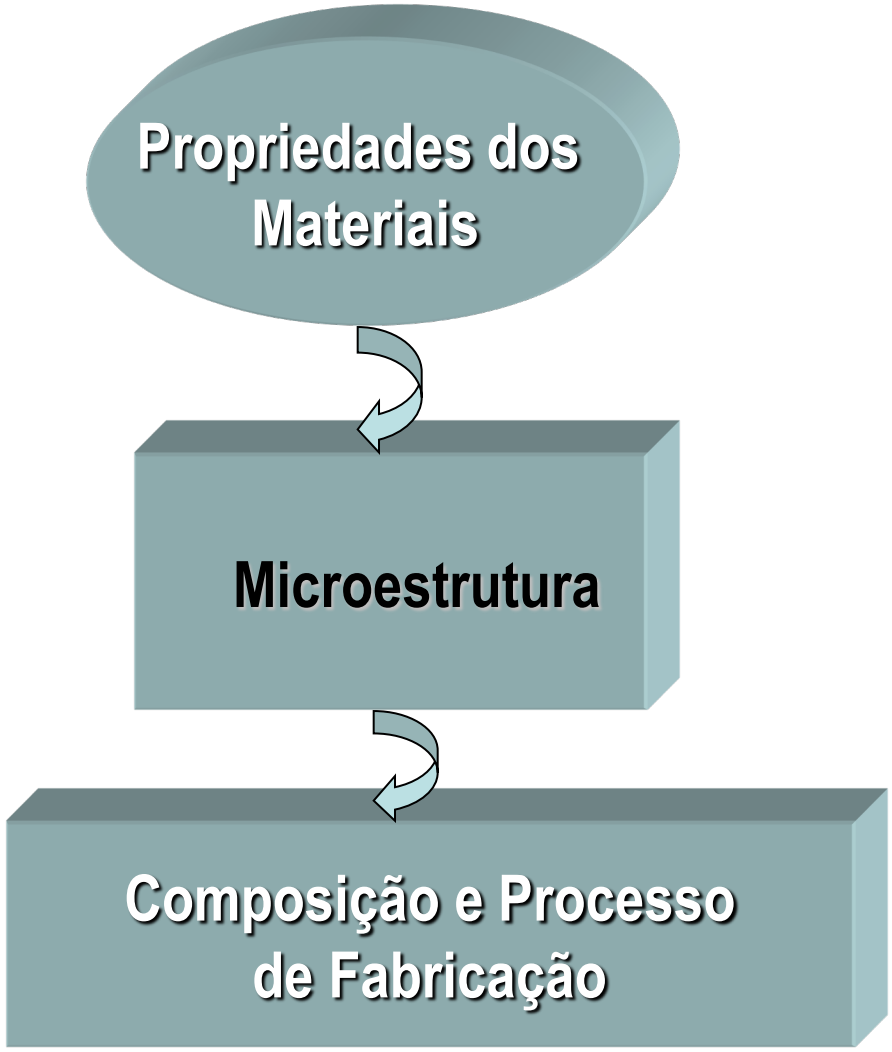
Scopo

- Estrutura Atômica e Ligação Inter-atômica
- Estrutura dos Metais
- Imperfeições nos Sólidos

Estrutura e Deformação nos Materiais

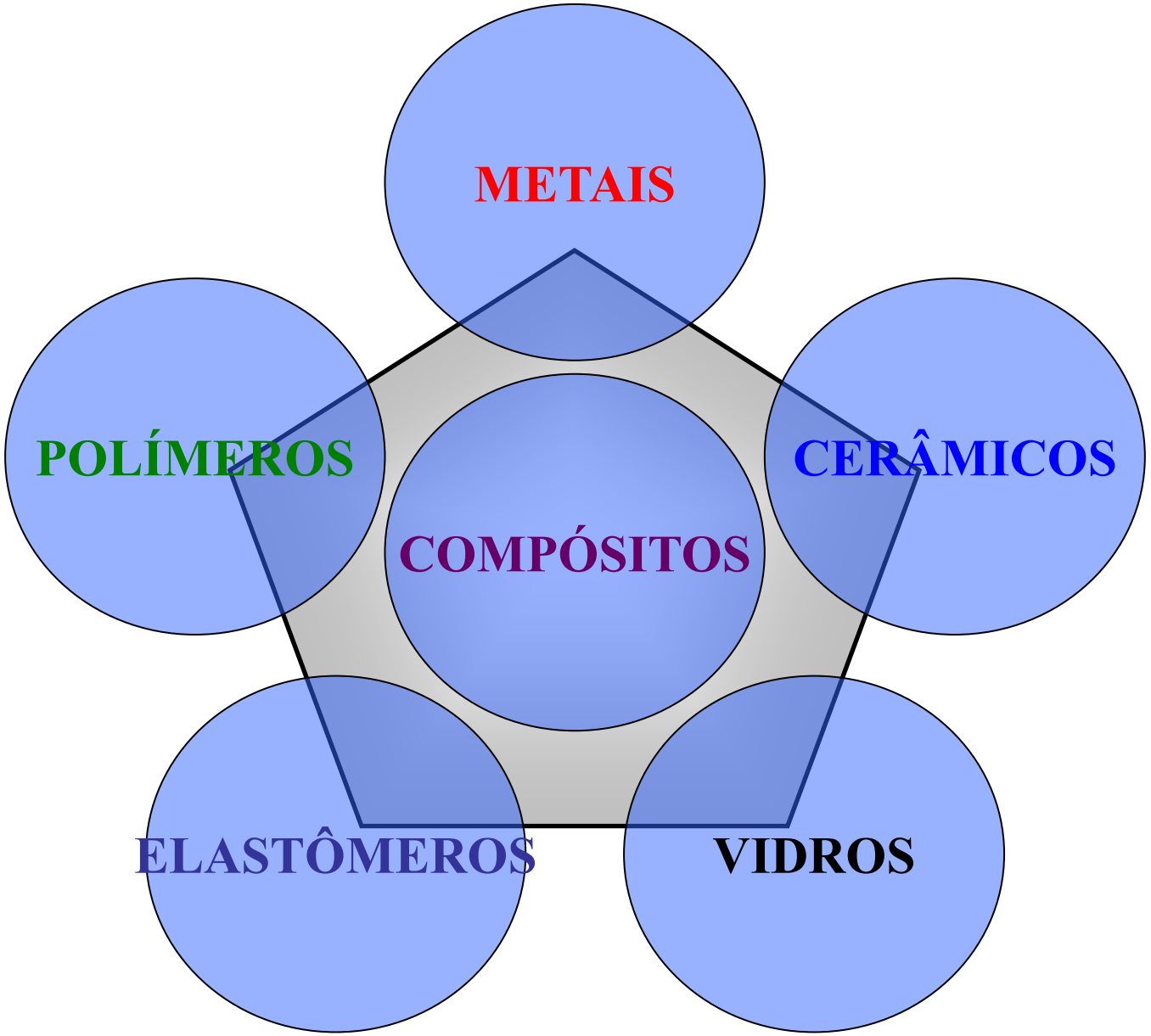
- **Uma grande variedade de materiais podem ser usados em aplicações onde resistência a carregamentos mecânicos são necessários.**
- **O sucesso da utilização dos materiais exige que eles satisfaçam conjunto de propriedades**
  - **Térmicas, óticas, mecânicas, físicas, químicas e nuclear.**
- **Estas estão intimamente ligadas a microestrutura do material. A microestrutura é por sua vez resultado da síntese e processamento.**




Propriedades dos Materiais
Microestrutura
Composição e Processo de Fabricação

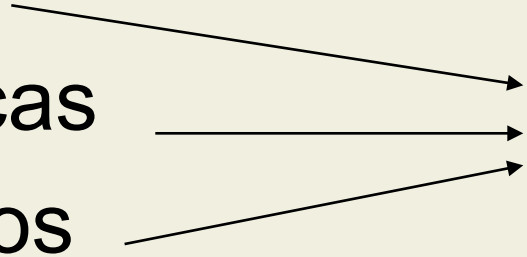
ENGENHARIA

FAMÍLIAS DE MATERIAIS DE ENGENHARIA



CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Metais
- Cerâmicas
- Polímeros
- Compósitos
- Semicondutores (ex. Circuitos integrados)
- Biomateriais (Mat. Biocompatíveis)



Classificação tradicional

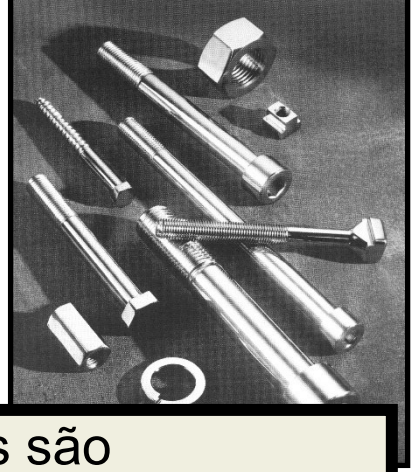
QUANTOS MATERIAIS DIFERENTES EXISTEM ?

Entre 40000 e 80000
diferentes, contando as variantes
de tratamento térmico e composição
de cada material

REPRESENTAÇÃO DA RESISTÊNCIA DAS VÁRIAS CATEGORIAS DE MATERIAIS

PROPRIEDADE	METAIS	CERÂMICAS	POLÍMEROS
Densidade (g/cm^3)	2 a 20	1 a 14	1 a 2,5
Condutividade Elétrica	Alta	Low	Low
Condutividade Térmica	Alta	Low	Low
Dutilidade (%)	4 - 40	<1	2 – 400
Lim de Resist a Tração (MPa)	100 – 1500	100 – 400	-
Lim de Resist. a Compr (MPa)	100 – 1500	1000 – 5000	-
Tenacidade à Fratura ($MNm^{-3/2}$)	10 – 30	1 – 10	2 – 8
Temp Máxima de Trabalho ^oC	1000	1800	250
Resistência a Corrosão	B a M	S	M
Tipo de Ligação	Metálica	Iônica ou Cov.	Covalente
Estrutura	CCC, CFC, HC	Crist. Compl.	Amorfa ou Semi

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS



- Metais



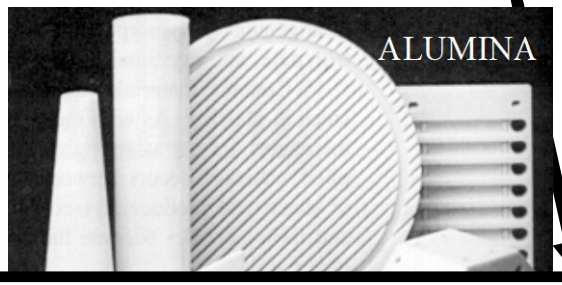
***Vantagens*: resistência mecânica, rigidez, tenacidade à fratura, temperatura e ambiente de uso, formabilidade/ductilidade, condutividade térmica e elétrica, reciclagem;**
***Desvantagens*: processamento, corrosão, reatividade, densidade (propriedades específicas)**



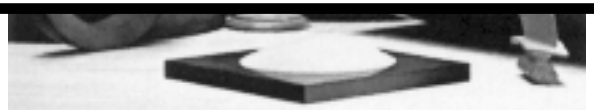
- Materiais metálicos são geralmente uma combinação de elementos metálicos.
- Os elétrons não estão ligados a nenhum átomo em particular e por isso são bons condutores de calor e eletricidade
- Não são transparentes à luz visível
- Têm aparência lustrosa quando polidos
- Geralmente são resistentes e deformáveis
- São muito utilizados para aplicações estruturais

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Cerâmicas



Vantagens: **resistência à compressão, rigidez, temperatura e agressividade do ambiente de serviço, densidade (propriedades específicas), isolantes térmicos e elétricos;**
Desvantagens: **resistência à tração, tenacidade à fratura (frágeis), processamento, custo, reciclagem**



- Materiais cerâmicos são geralmente uma combinação de elementos metálicos e não-metálicos.
- Geralmente são óxidos, nitretos e carbetos
- São geralmente isolantes de calor e eletricidade
- São mais resistêntes à altas temperaturas e à ambientes severos que metais e polímeros
- Com relação às propriedades mecânicas as cerâmicas são duras, logo frágeis
- Em geral são leves

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Polímeros



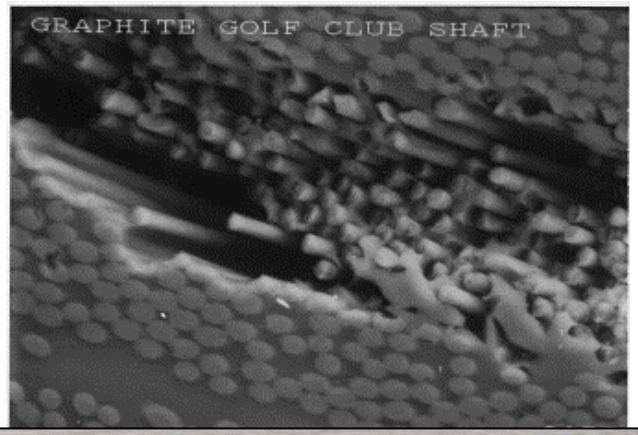
***Vantagens*: custo, processabilidade/fabricação, resistência à corrosão, densidade (propriedades específicas), isolantes térmicos e elétricos, ductilidade dos termo-plásticos, reciclagem;**
***Desvantagens*: resistência mecânica, rigidez, temperatura e meio de aplicação (UV e solventes), fragilidade dos termo-rígidos**



- Materiais poliméricos são geralmente compostos orgânicos baseados em carbono, hidrogênio e outros elementos não-metálicos.
- São constituídos de moléculas muito grandes (macro-moléculas)
- Tipicamente, esses materiais apresentam baixa densidade e podem ser extremamente flexíveis
- Materiais poliméricos incluem plásticos e borrachas

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Compósitos

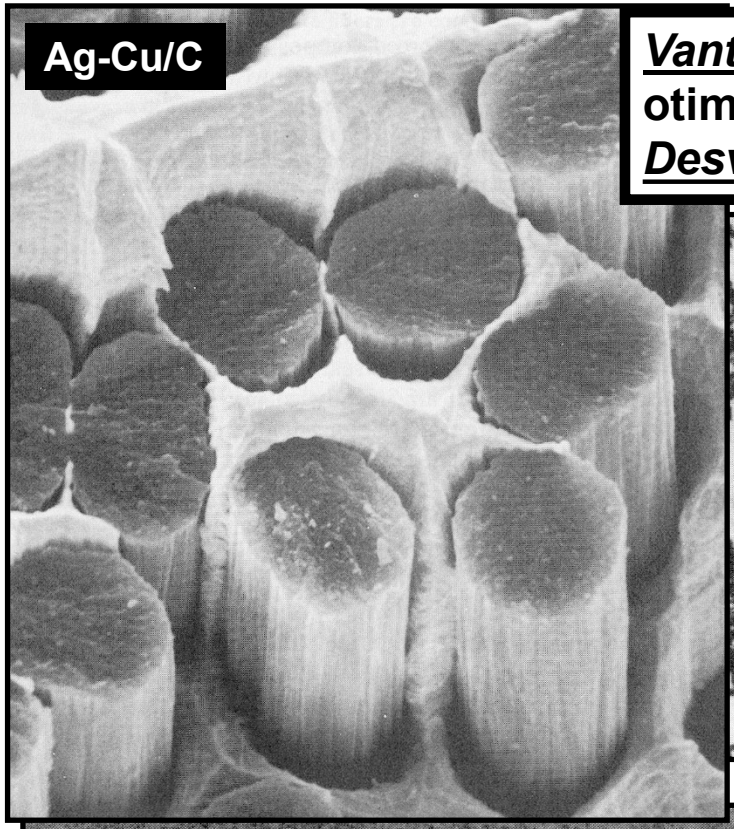


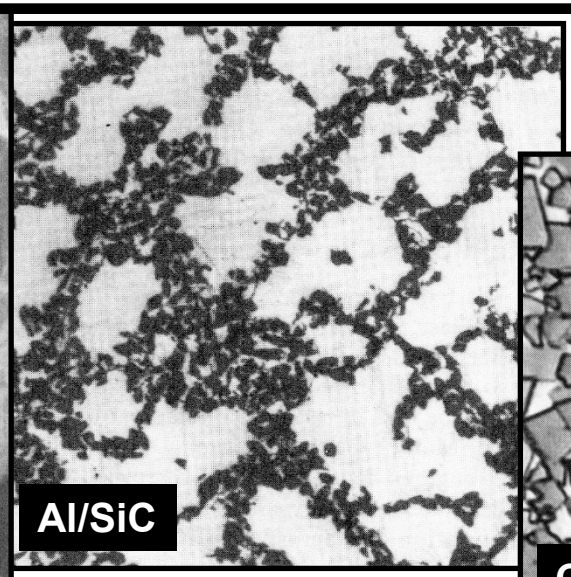


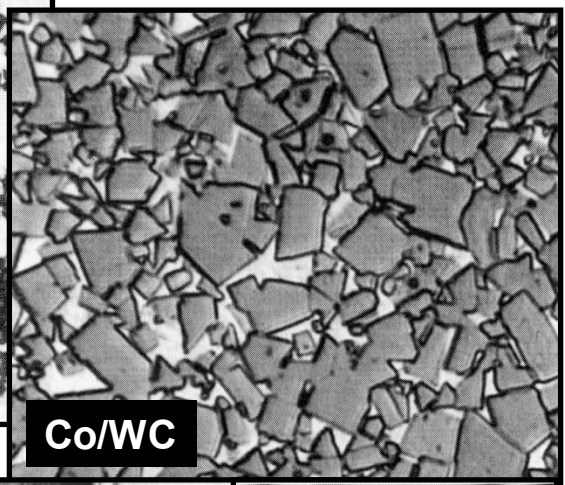
- Materiais compósitos são constituídos de mais de um tipo de material insolúveis entre si.
- Os compósitos são “desenhados” para apresentarem a combinação das melhores características de cada material constituinte
- Muitos dos recentes desenvolvimento em materiais envolvem materiais compósitos
- Um exemplo classico é o compósito de matriz polimérica com fibra de vidro. O material compósito apresenta a resistência da fibra de vidro associado a flexibilidade do polímero

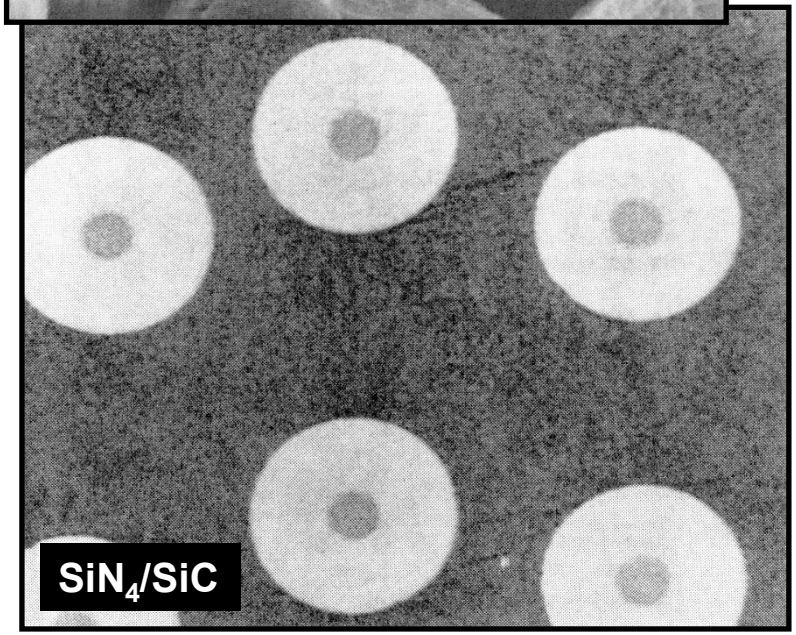
COMPÓSITOS

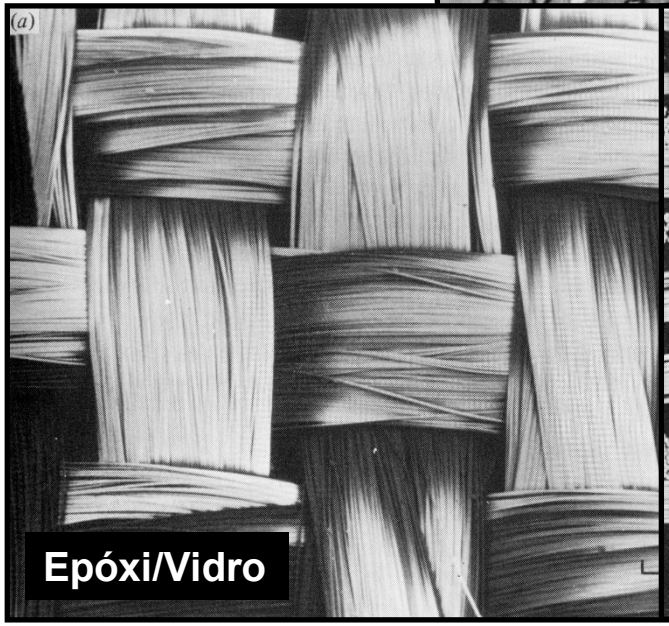
Vantagens: adequação ao uso (compatibilização-otimização de propriedades individuais);
Desvantagens: processamento, custo, reciclagem

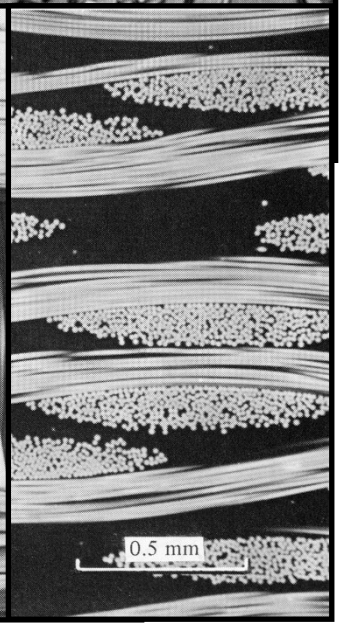






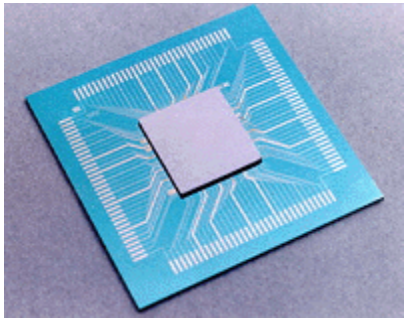


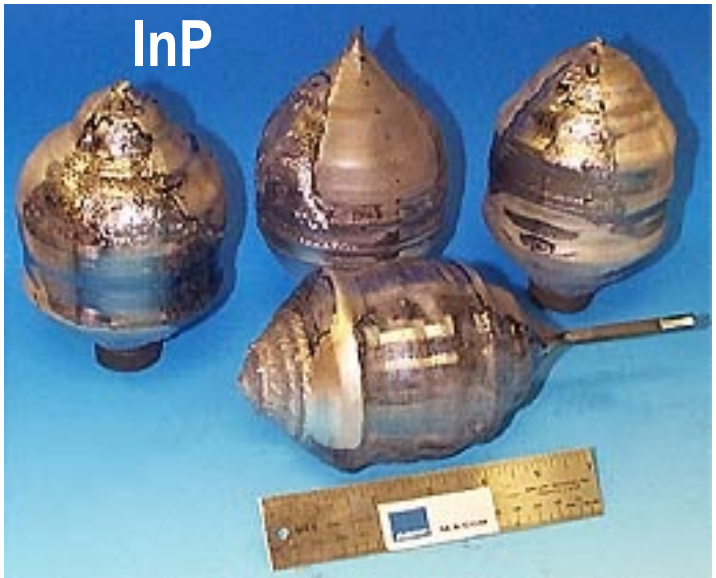




CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Semicondutores



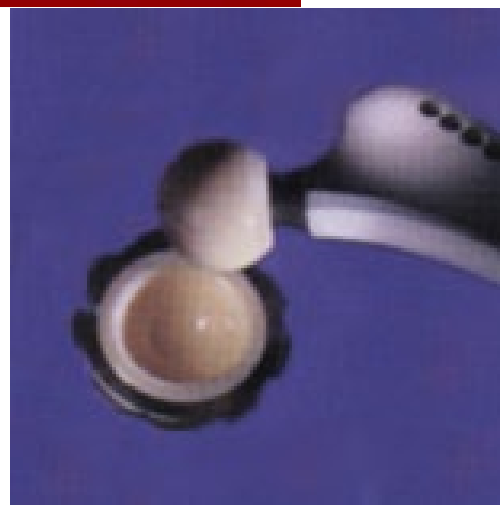


- Materiais semicondutores apresentam propriedades elétricas que são intermediárias entre metais e isolantes
- Além disso, as características elétricas são extremamente sensíveis à presença de pequenas quantidades de impurezas, cuja concentração pode ser controlada em pequenas regiões do material (para formar as junções p-n)
- Os semicondutores tornaram possível o advento do circuito integrado que revolucionou as indústrias de eletrônica e computadores
- Ex: Si, Ge, GaAs, InSb, GaN, CdTe..

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Biomateriais





- Biomateriais são empregados em componentes para implantes de partes em seres humanos
- Esses materiais não devem produzir substâncias tóxicas e devem ser compatíveis com o tecido humano (isto é, não deve causar rejeição).
- Metais, cerâmicos, compósitos e polímeros podem ser usados como biomateriais.

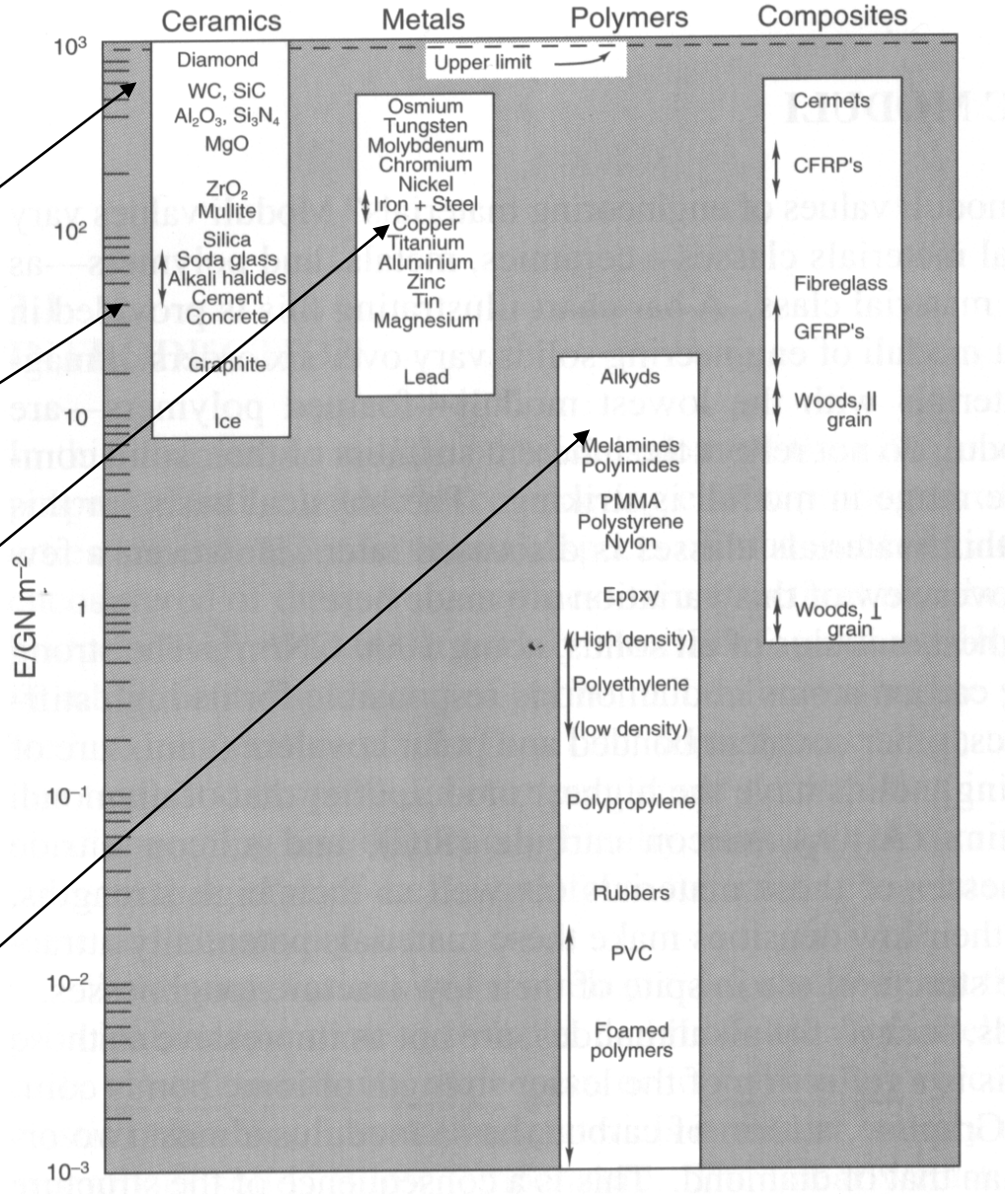
Propriedades Elástica dos Materiais

Forte ligações covalentes

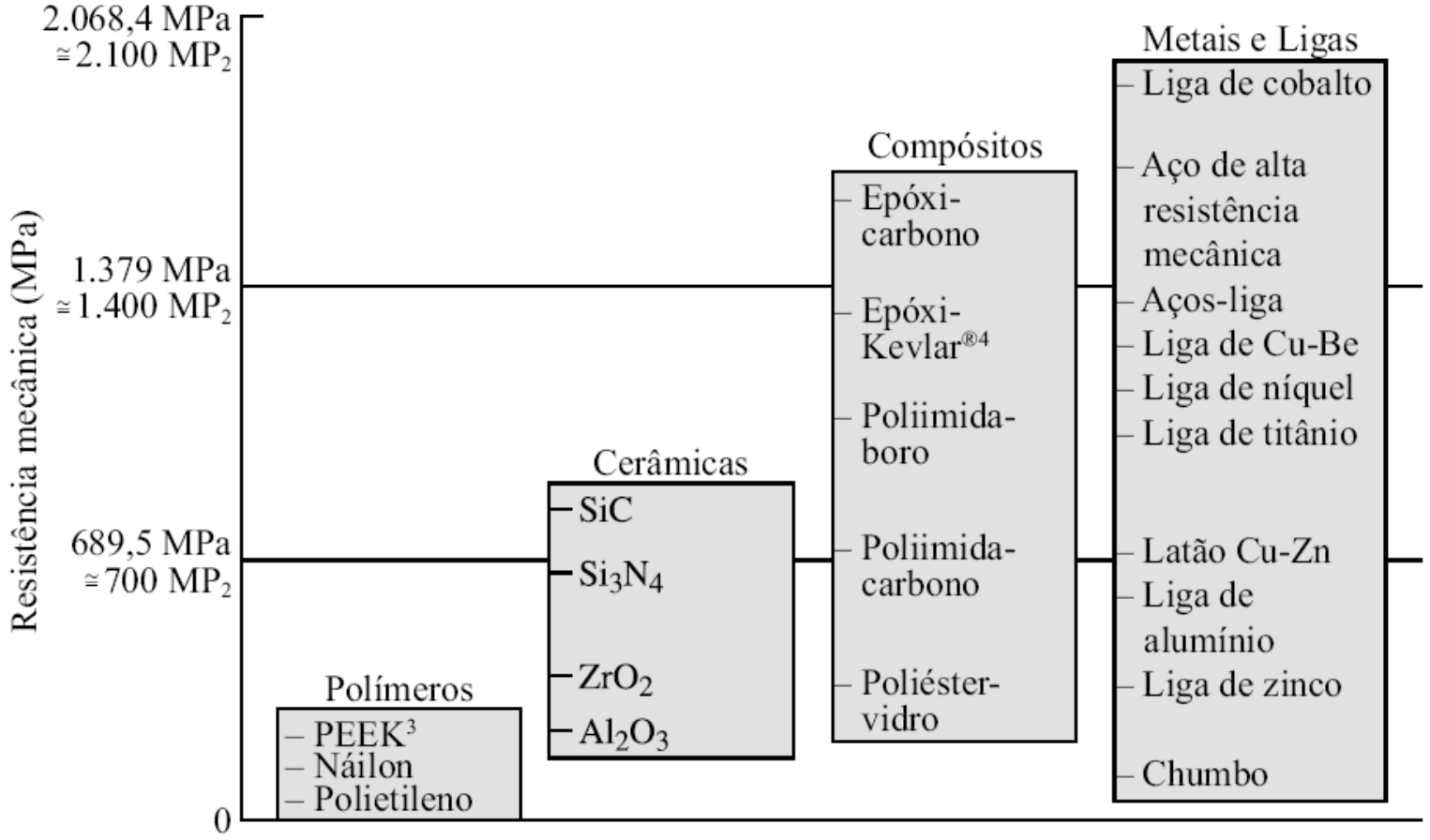
As ligações iônicas não são tão fortes quanto as covalentes.

As ligações metálicas são fortes, mas não tanto quanto as covalentes. Os metais refratários possuem os maiores Módulos de Elasticidade. Existe uma correlação com o ponto de fusão.

Os maiores valores de E para os polímeros são parecidos com os mais baixos dos metais.



REPRESENTAÇÃO DA RESISTÊNCIA DAS VÁRIAS CATEGORIAS DE MATERIAIS



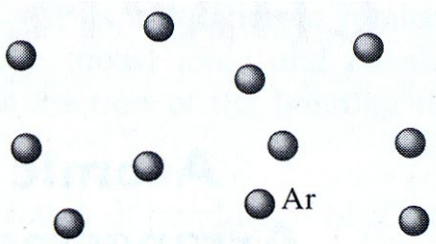
ESTRUTURA DOS MATERIAIS

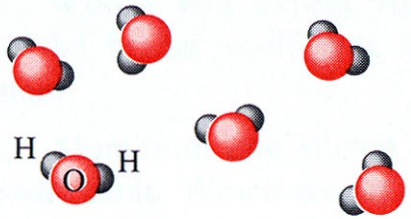
- A cristalinidade de uma estrutura não existe em gases ou líquidos.
- Os metais, cerâmicas e os polímeros podem ou não exibi-la.

  – Os metais são normalmente cristalinos, mas se resfriados em uma taxa muito alta eles podem ter uma estrutura amorfa.
  – Cerâmica pode ser amorfa SiO_2 (silica fundida) ou como cristal (cristobalita)
  – Polímeros consistem de uma cadeia molecular e pode possuir diferentes graus de cristalinidade.

ESTRUTURA DOS SÓLIDOS CRISTALINOS

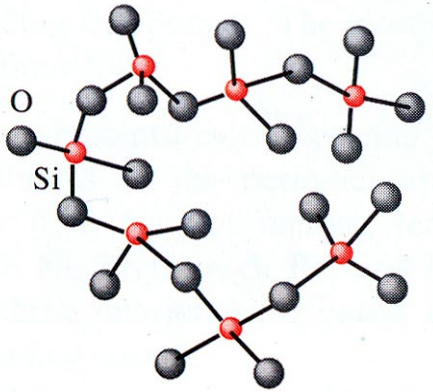
(1)

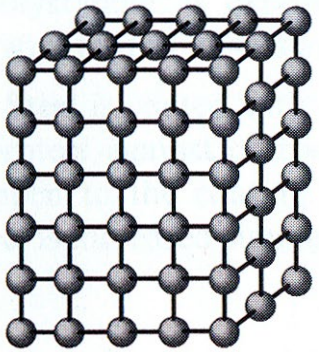




(2)

(2)





(3)

ARRANJOS ATÔMICOS (MOLECULARES)

ORDENAMENTOS DE CURTO E LONGO ALCANCE

1 - GASES NOBRES (Ar) = NENHUM ARRANJO ESPACIAL DEFINIDO (PREENCHEM TOTALMENTE O ESPAÇO DE CONFINAMENTO)

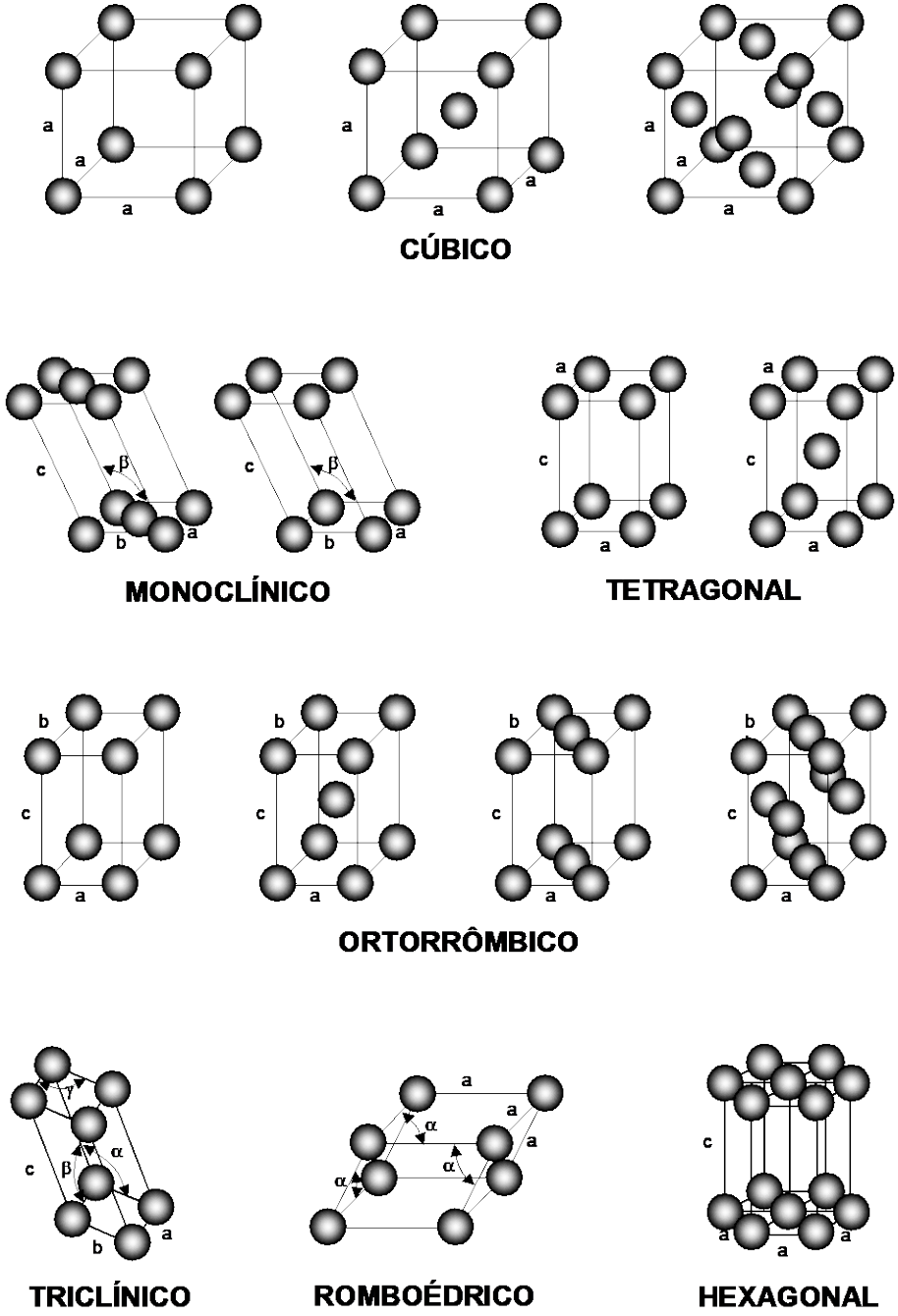
2 - VAPORES, LÍQUIDOS E SÓLIDOS AMORFOS (VIDRO) = ARRANJO ORDENADO DE CURTO ALCANCE (DA ORDEM DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS VIZINHAS)

3 - VIRTUALMENTE TODOS OS METAIS, MUITOS CERÂMICOS E POLÍMEROS = ARRANJO ORDENADO DE LONGO ALCANCE = ESTRUTURA CRISTALINA

Redes de Bravais

Uma célula unitária é definida como a menor porção do cristal que ainda conserva as propriedades originais do mesmo. Existem células unitárias de diversos tipos. Em meados do século passado, o cientista francês **Bravais** descreveu 14 células unitárias. as quais englobariam qualquer tipo de estrutura cristalina conhecida. Na figura 3.1 são apresentados as células unitárias de Bravais.

Uma avaliação mais aprofundada dos arranjos cristalinos de Bravais revela que as estruturas cúbica de corpo centrado (CCC), cúbica de face centrada (CFC) e hexagonal compacta (HC) são aquelas que permitem maior grau de empacotamento atômico.

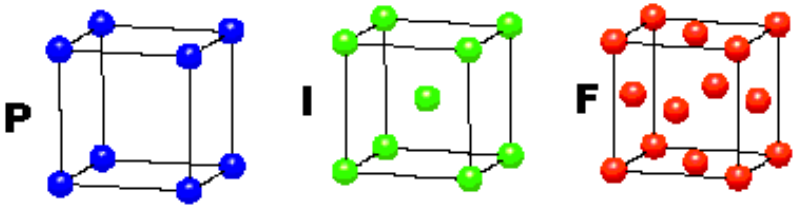


Redes de Bravais

CUBIC

$a = b = c$

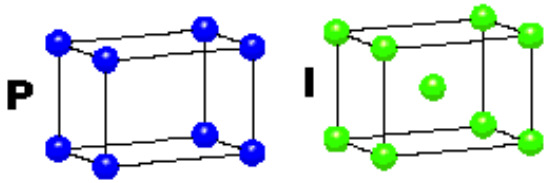
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



TETRAGONAL

$a = b \neq c$

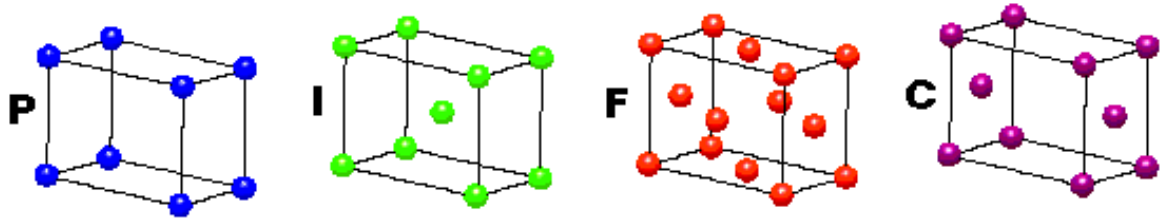
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



ORTHORHOMBIC

$a \neq b \neq c$

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

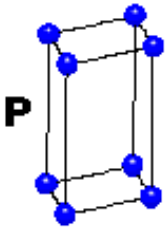


HEXAGONAL

$a = b \neq c$

$\alpha = \beta = 90°$

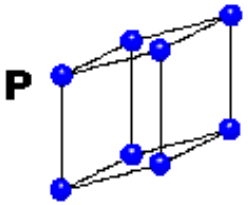
$\gamma = 120°$



TRIGONAL

$a = b = c$

$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$

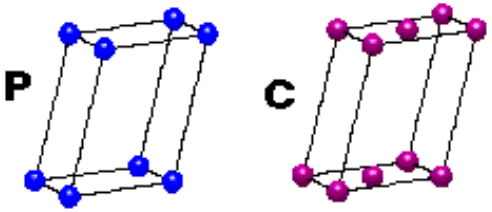


MONOCLINIC

$a \neq b \neq c$

$\alpha = \gamma = 90°$

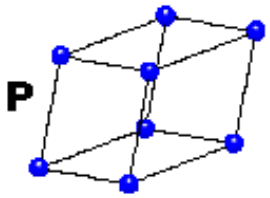
$\beta \neq 120°$



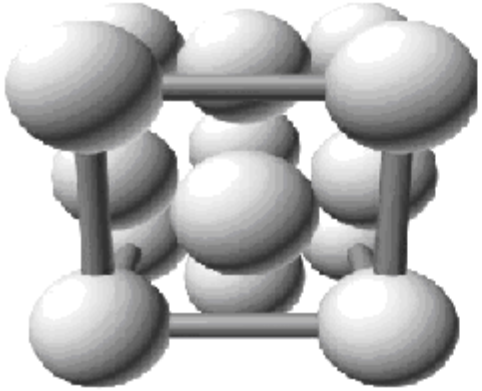
TRICLINIC

$a \neq b \neq c$

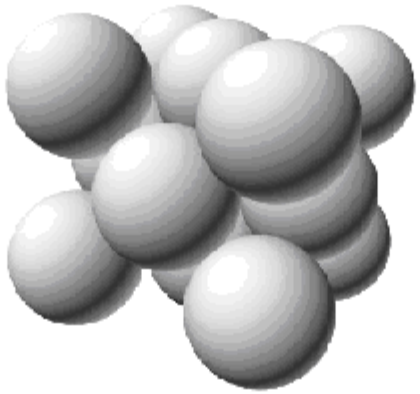
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$



4 Types of Unit Cell
P = Primitive
I = Body-Centred
F = Face-Centred
C = Side-Centred
+
7 Crystal Classes
→ 14 Bravais Lattices



a)

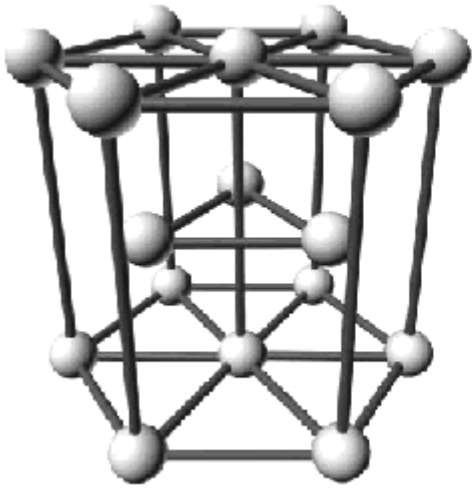


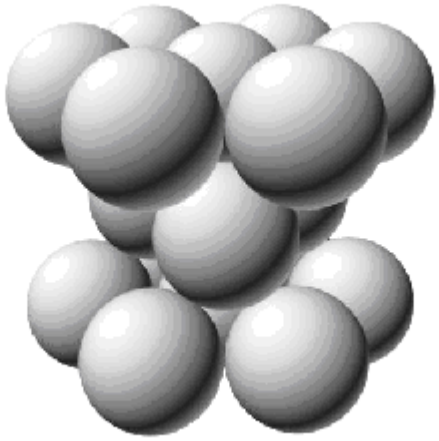
b)

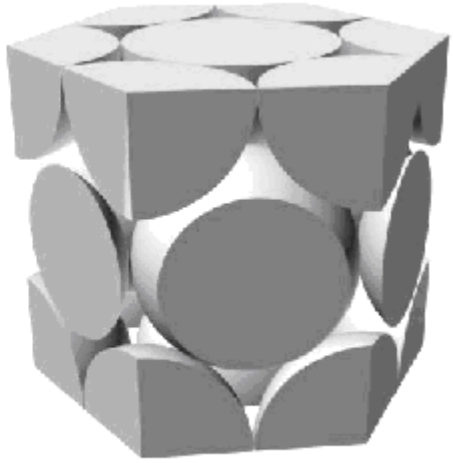


c)

Representação esquemática de uma célula unitária CFC: (a) posições atômicas; (b) arranjo atômico; (c) átomos dentro da célula unitária.

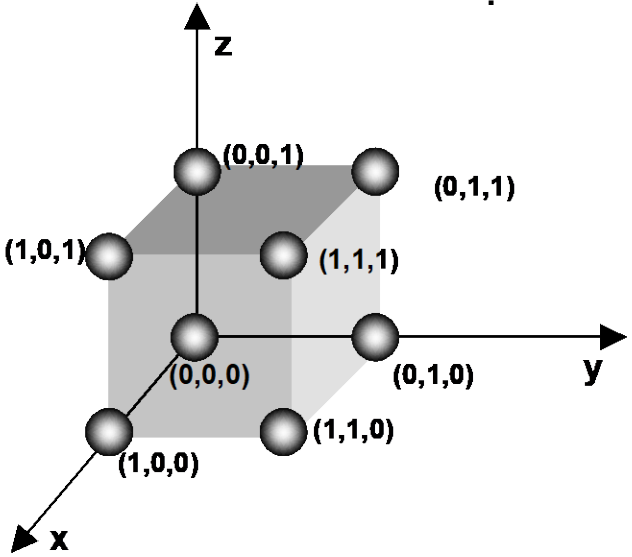






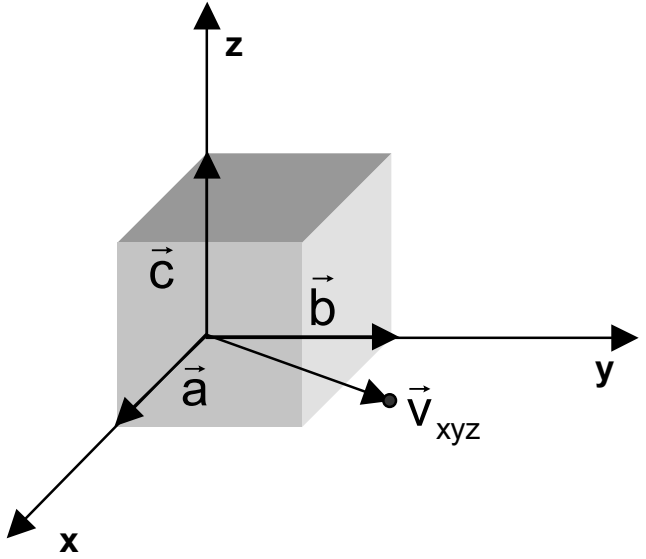
Índices de Miller

- Definem planos e direções cristalinas;
- Os índices de um plano são definidos como o conjunto dos menores números inteiros do recíproco dos interceptos dos planos com os eixos principais;
- Os índices de uma direção são a distância percorrida em cada eixo, também representada como o conjunto de menores números inteiros que a compõe.

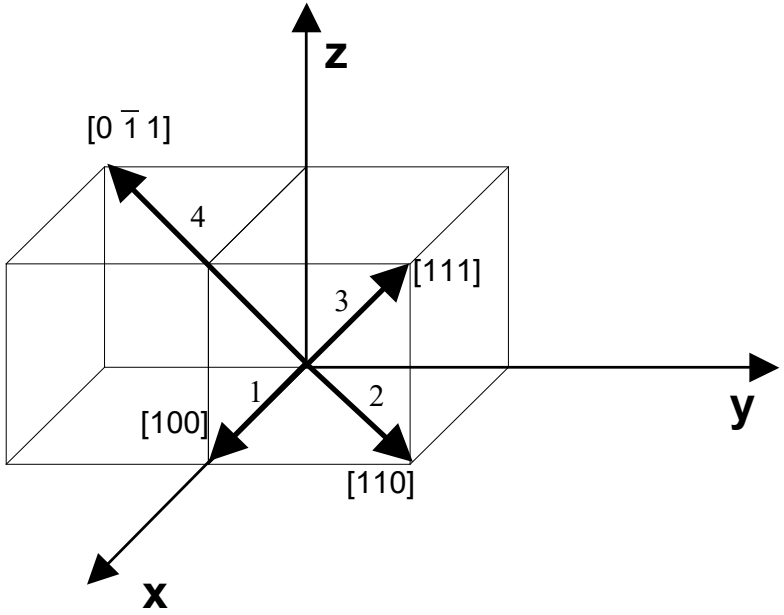


A existência de propriedades dependentes da orientação cristalográfica resulta na necessidade de se determinar direções e planos em um cristal.

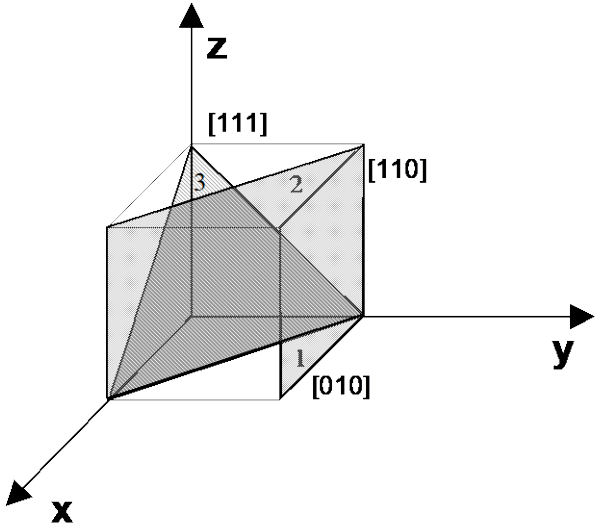
Posições atômicas em uma célula unitária da estrutura C.S



Uma direção em uma célula unitária é determinada a partir de um vetor que parte da origem e atinge a posição definida pelas coordenadas consideradas.

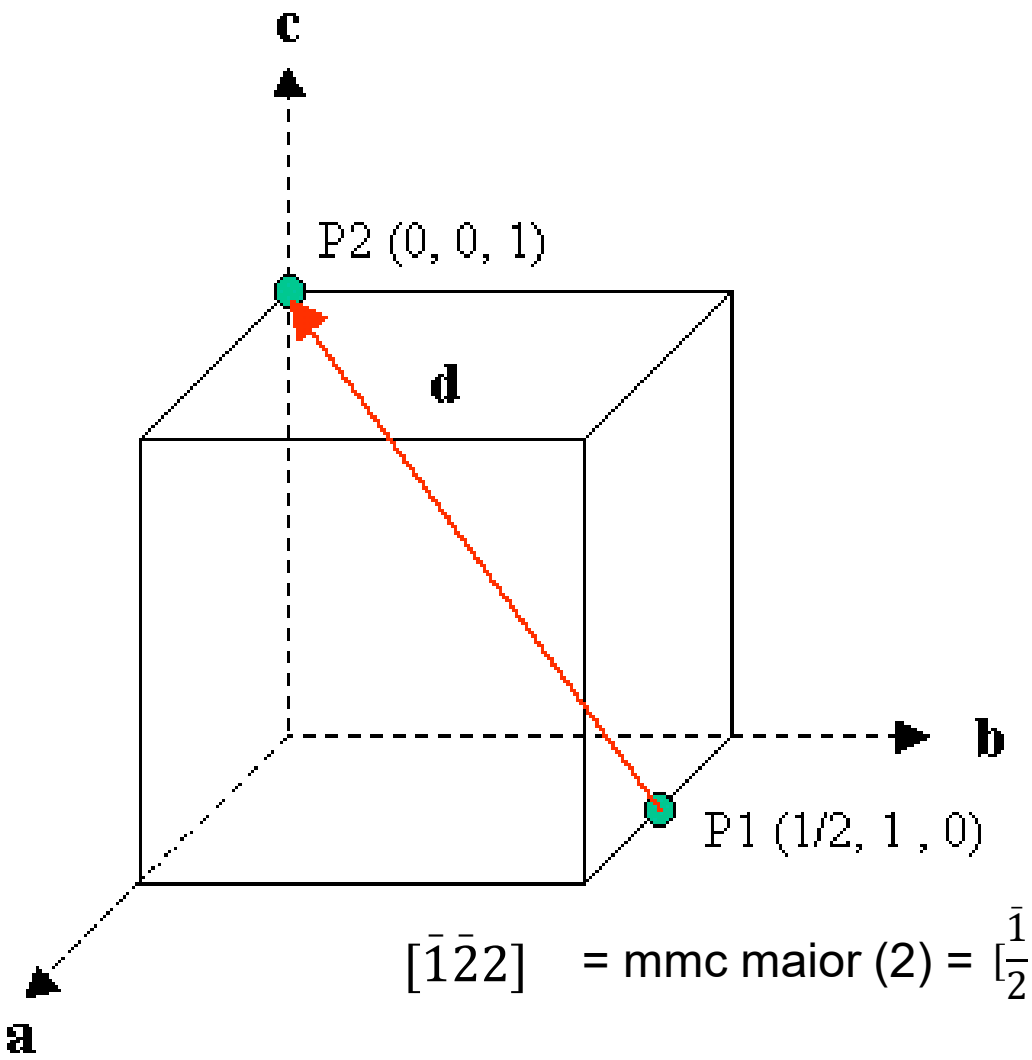


Direções em uma célula unitária cúbica.



Planos cristalográficos em estruturas cúbicas.

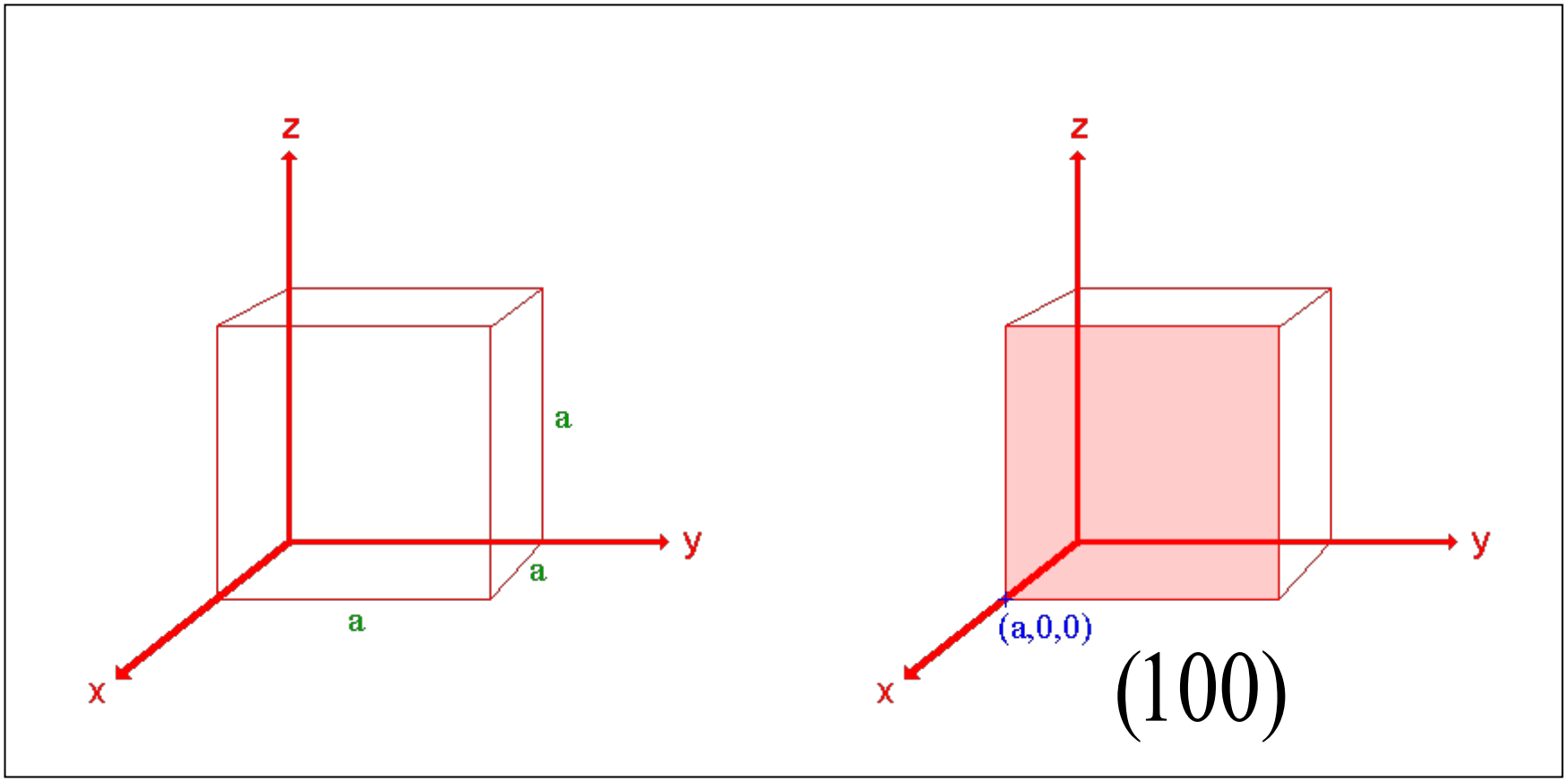
Índices de Miller



$[\bar{1}\bar{2}2]$ = mmc maior (2) = $[\frac{\bar{1}}{2}\bar{1}1]$

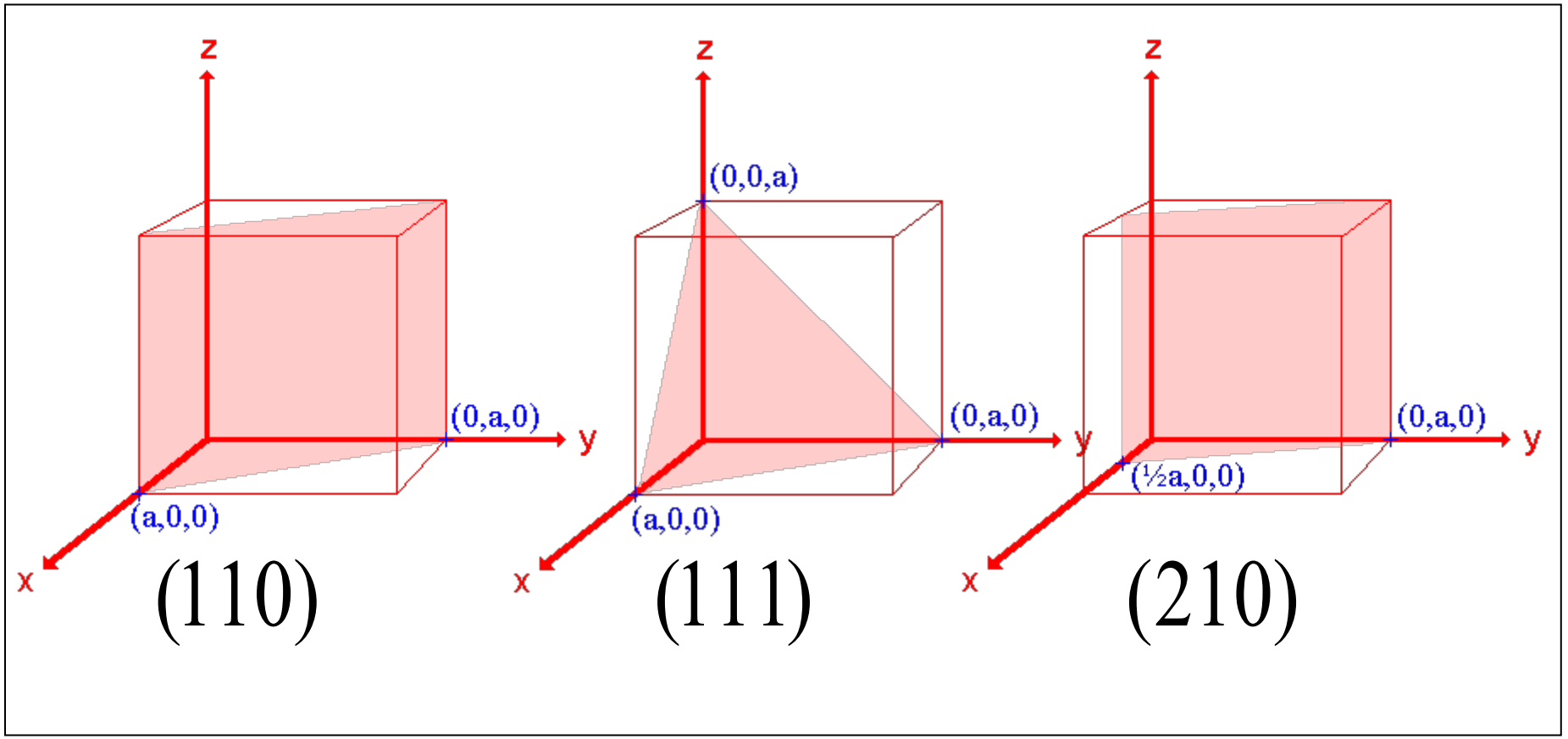
Fonte: http://www.resmat.com/Course/chapter1/Miller.html

Índices de Miller



Fonte: http://www.chem.qmw.ac.uk/surfaces/scc/scat1_1b.htm

Índices de Miller

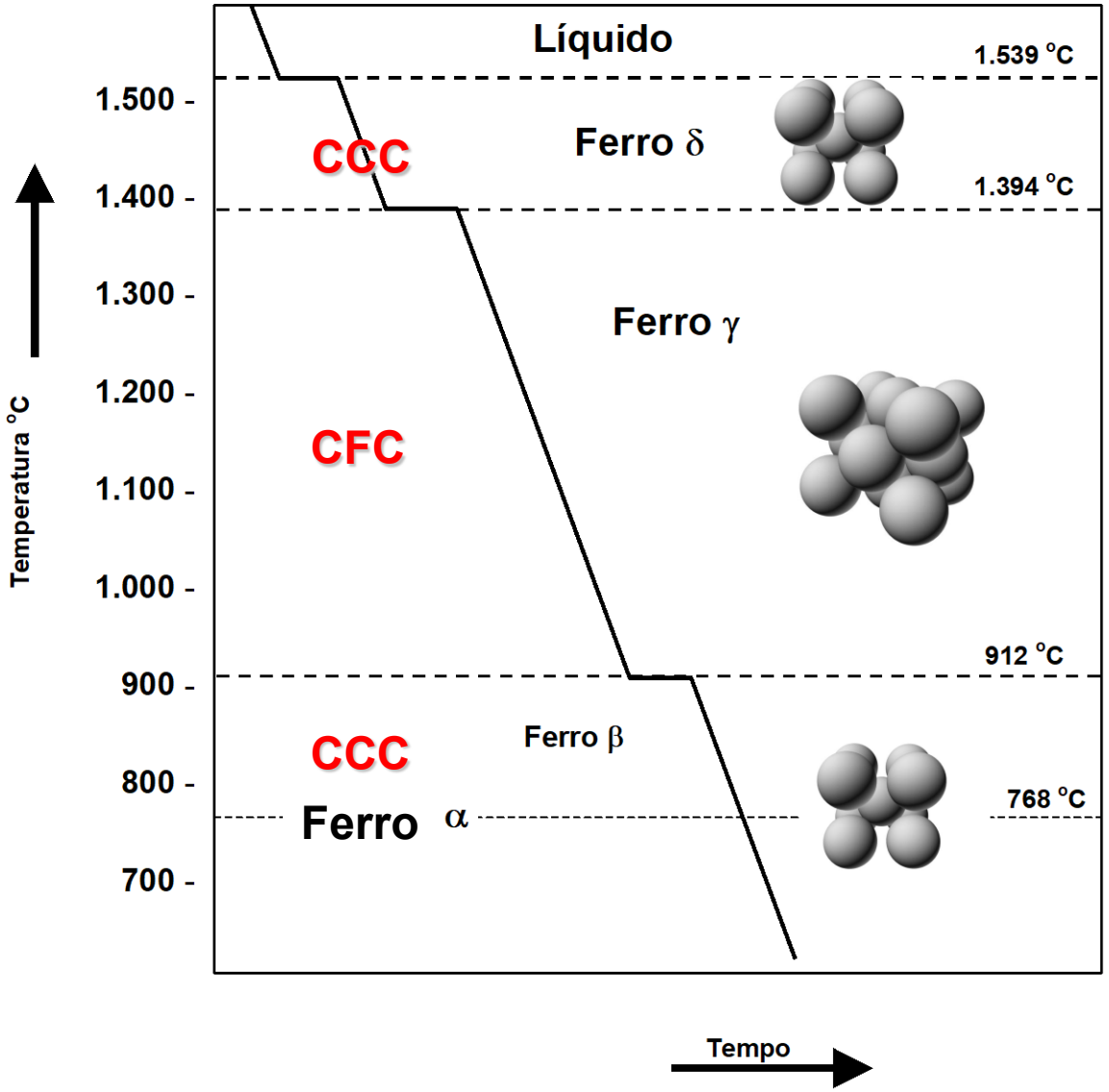


Fonte: http://www.chem.qmw.ac.uk/surfaces/scc/scat1_1b.htm

Estrutura cristalina e propriedades de alguns elementos.

Elemento	Símbolo	Número Atômico	Massa Atômica (g/mol)	Densidade à 20 ^{o}C (g/m^{3})	Estrutura Cristalina à 20 ^{o}C	Raio Atômico (nm)
Alumínio	Al	13	26,98	2,70	CFC	0,143
Ferro	Fe	26	55,85	7,87	CCC	0,124
Chumbo	Pb	82	207,20	11,36	CFC	0,175
Cobalto	Co	27	58,93	8,83	CCC	0,125
Cobre	Cu	29	63,54	8,93	CFC	0,128
Cromo	Cr	24	51,99	7,19	CCC	0,125
Enxofre	S	16	32,06	2,07	Ortorrômbica	0,104
Platina	Pt	78	195,09	21,45	CFC	0,139
Magnésio	Mg	12	24,30	1,74	HC	0,160
Manganês	Mn	25	54,94	7,47	Cúbica	0,112
Mercúrio	Hg	80	200,59	13,55	Romboédrica	0,155
Molibdênio	Mo	42	95,94	10,22	CCC	0,136
Nióbio	Nb	41	92,90	8,57	CCC	0,143
Níquel	Ni	28	58,69	8,90	CFC	0,124
Titânio	Ti	22	47,88	4,51	HC	0,148
Tungstênio	W	74	183,85	19,25	CCC	0,137
Urânio	U	92	238,03	19,05	Ortorrômbica	0,138
Vanádio	Va	23	50,94	6,10	CCC	0,132
Zinco	Zn	30	65,38	7,13	HC	0,133
Zircônio	Zr	40	91,22	6,51	HC	0,159

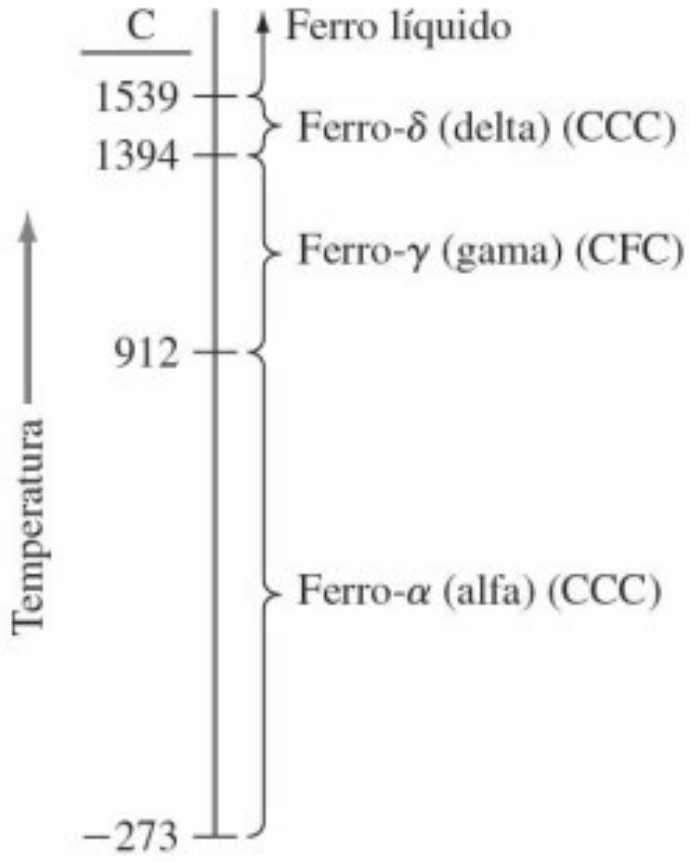
Nas mudanças polimórficas há normalmente uma alteração da densidade e de outras propriedades físicas



ALOTROPIA OU POLIMORFISMO (alguns metais e não metais podem ter mais de uma estrutura cristalina)

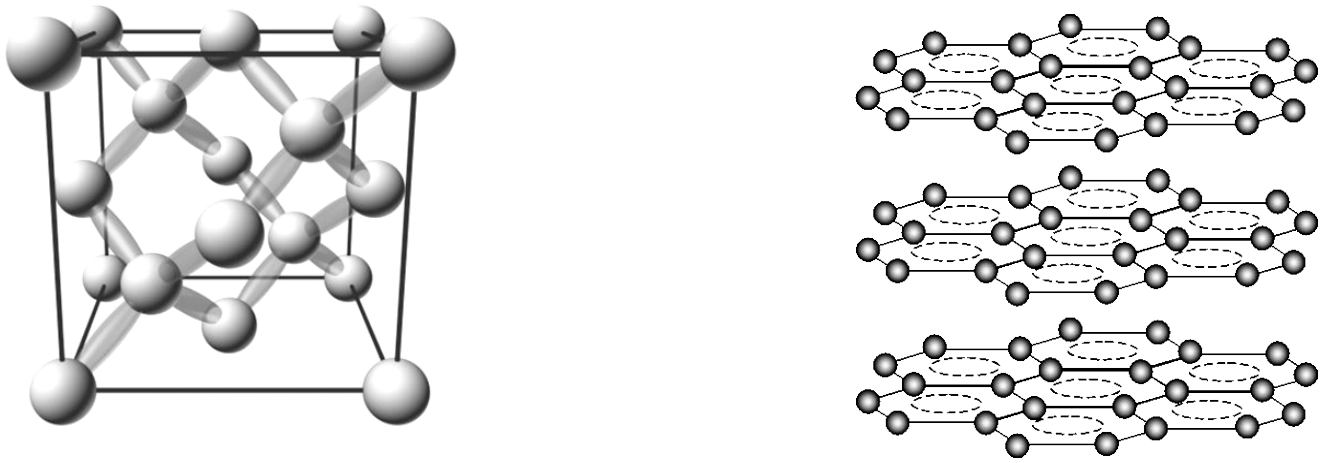
Depende da temperatura e pressão

Alotropia



Metais	Estrutura cristalina em temperatura ambiente	Demais temperaturas
Ca	CFC	CCC (> 447 °C)
Co	HC	CFC (> 427 °C)
Hf	HC	CCC (> 1.742 °C)
Fe	CCC	CFC (912–1.394 °C) CCC (> 1.394 °C)
Li	CCC	HC (> –193 °C)
Na	CCC	HC (> –233 °C)
Tl	HC	CCC (> 234 °C)
Ti	HC	CCC (> 883 °C)
Y	HC	CCC (> 1.481 °C)
Zr	HC	CCC (> 872 °C)

Diamante X Grafite (CARBONO)

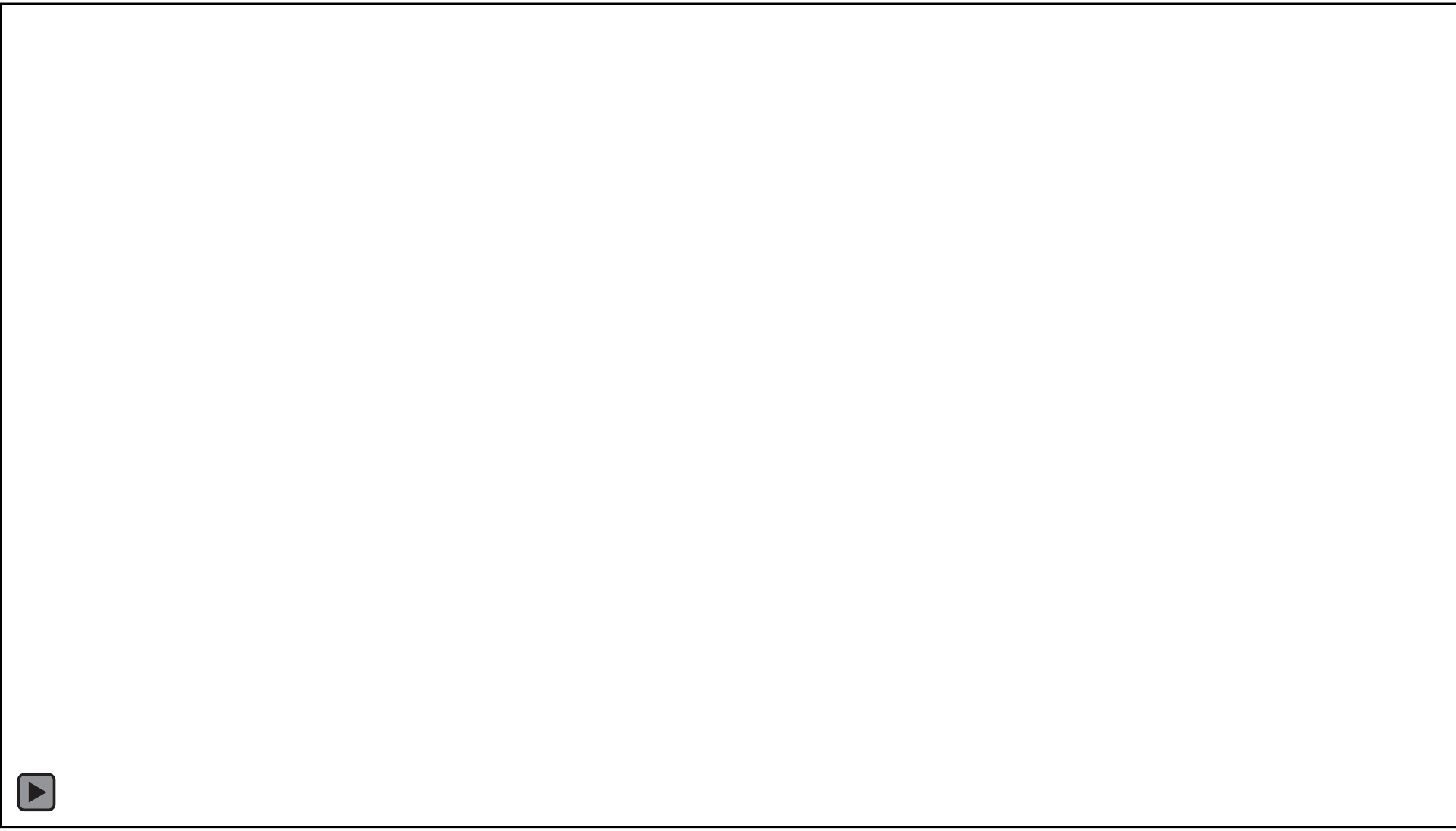


(a) Diamante (b) Grafite

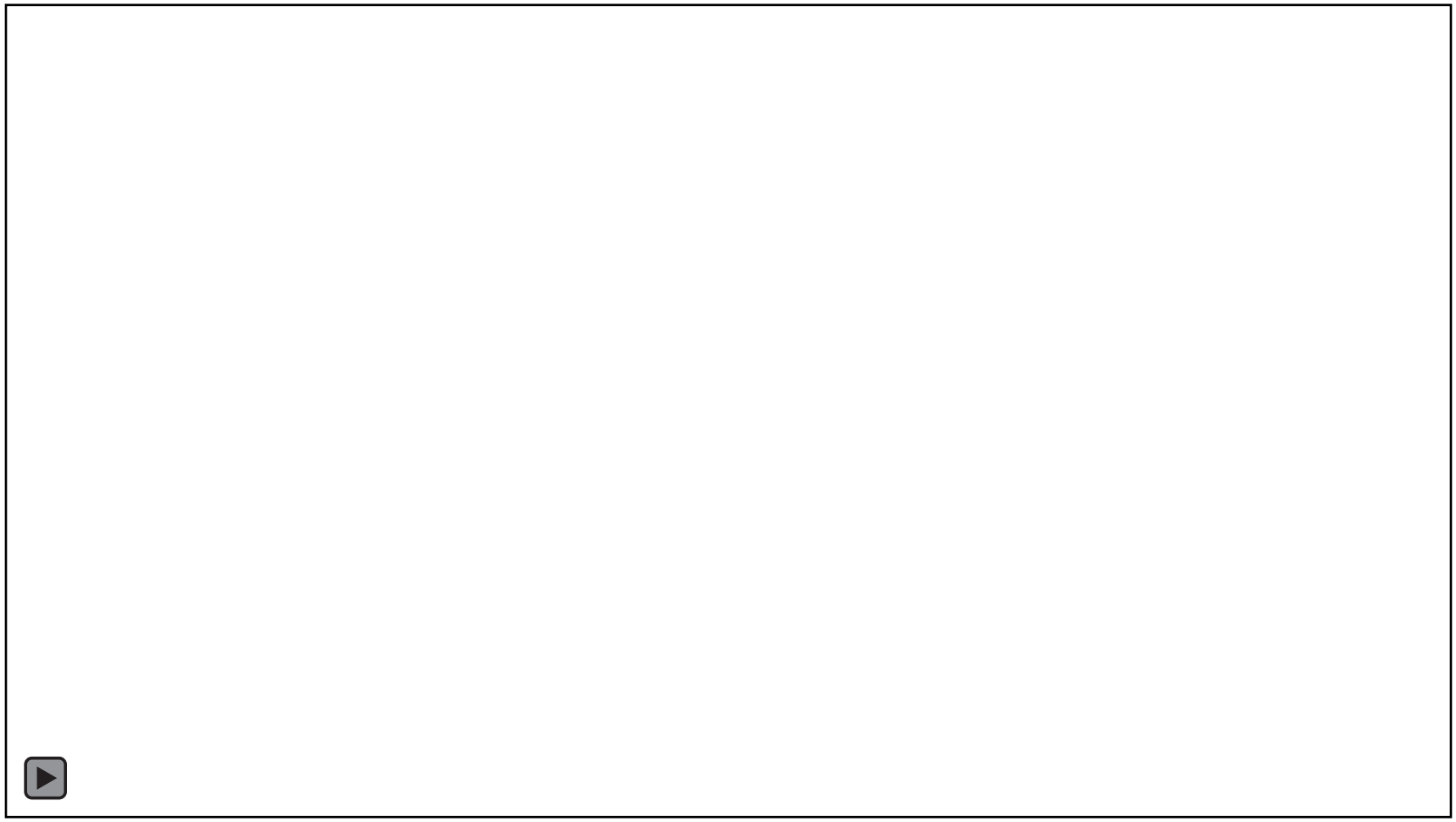
Figura 3.9. Estruturas cristalinas do carbono nas variações alotrópicas "diamante" e "grafite".

A grafita é o polimorfo estável nas condições ambientes, enquanto o diamante é formado a pressões extremamente elevadas.

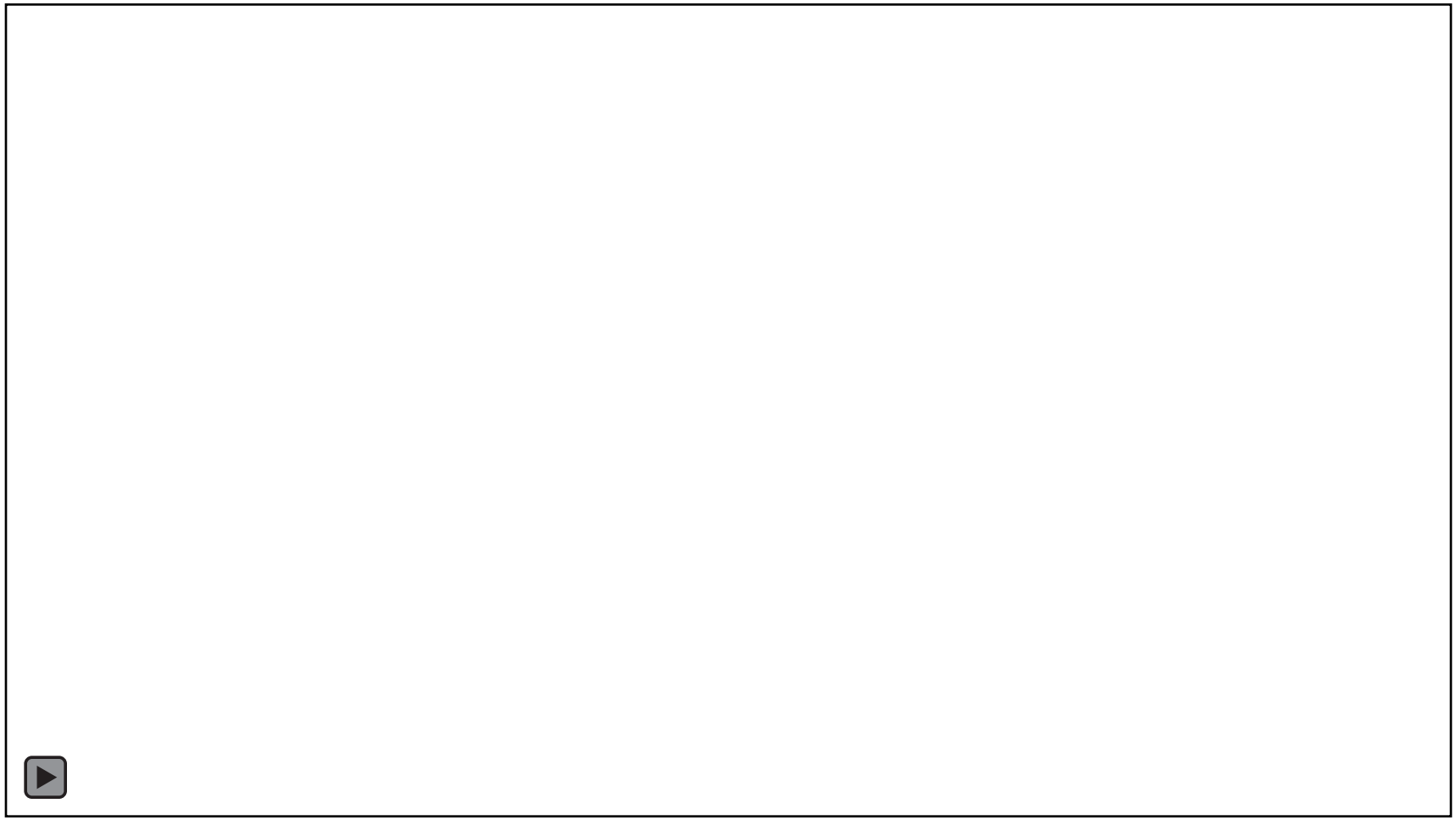
Direções Cristalográficas (IM)



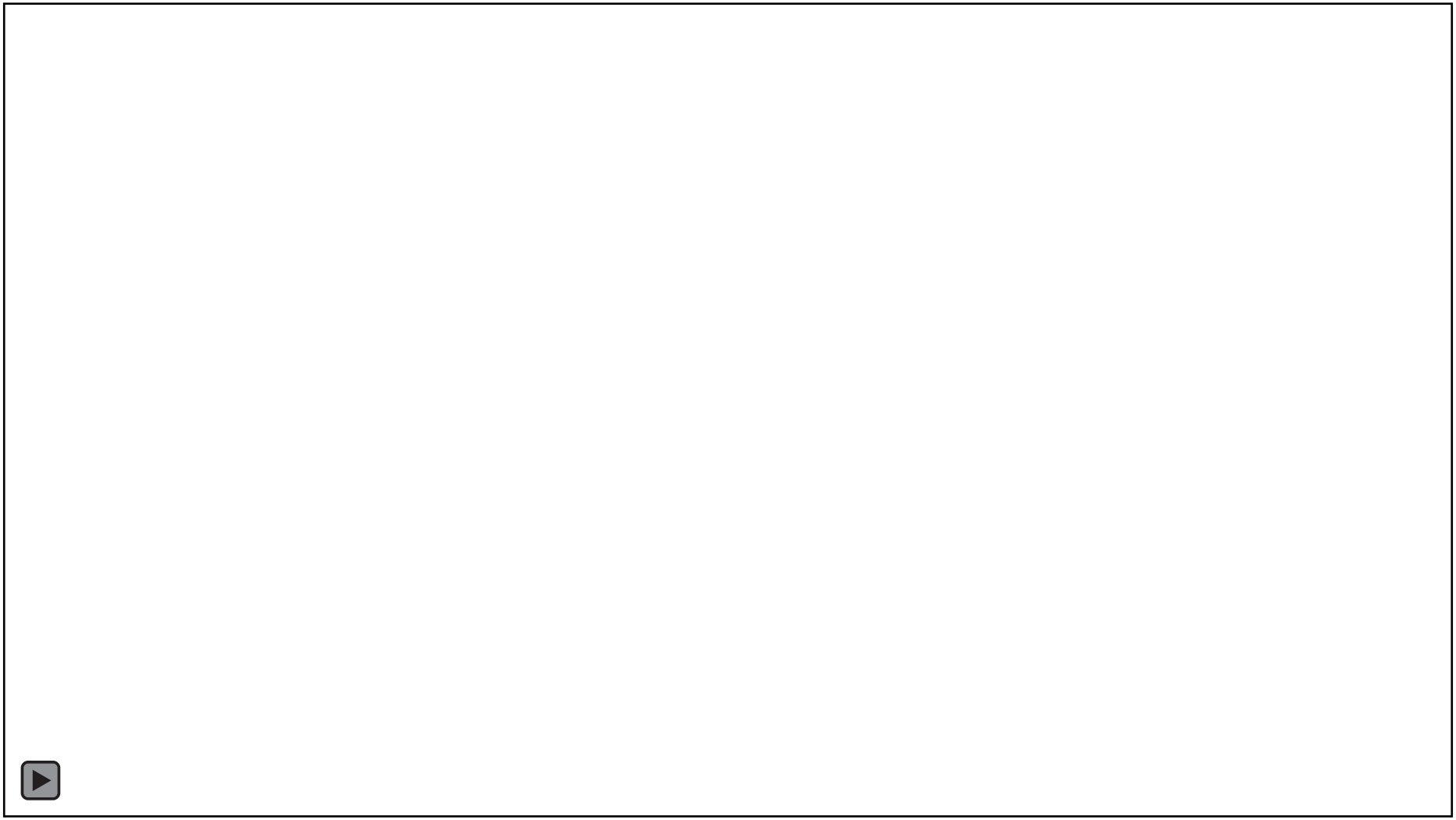
Direções Cristalográficas (IM)



Planos Cristalográficos (IM)

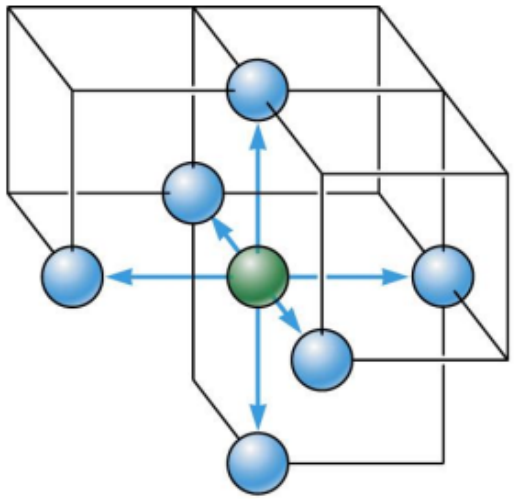


Planos Cristalográficos (IM)

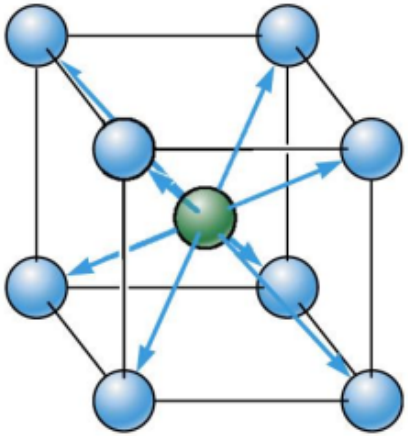


Numero de Coordenação

Nos metais, todos os átomos possuem o mesmo número de vizinhos mais próximos ou átomos em contato, o que é chamado de número de coordenação



(a)



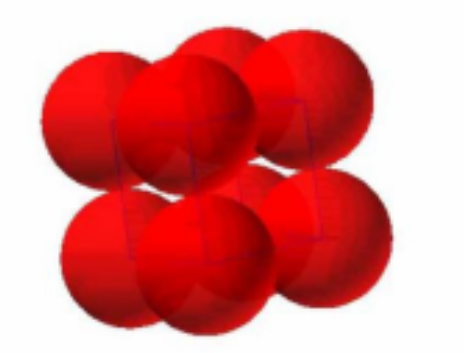
(b)

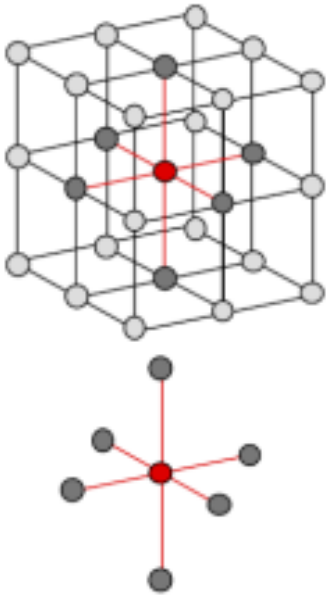
Coordenações em células unitárias CS (a) e CCC (b). Seis átomos se tocam na esturuta CS e oito átomos estão em contato na célula unitária CCC.

Estrutura Cúbica Simples (CS)

Rara devido ao baixo fator de empacotamento (apenas o Polônio possui esta estrutura);

Alinhamento dos centros dos átomos em todas as camadas – Ocupação de 52% do espaço.





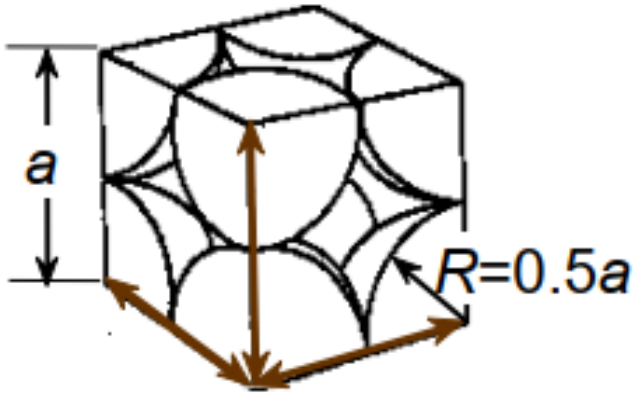
FEA = Fator de empacotamento atômico
(APF - atomic packing factor)

$$FEA = \frac{Volume(átomos)}{Volume(célula)} = \frac{N(átomos)V(1átomo)}{a^3} = \frac{N(átomos)\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$$

Número de átomos na célula unitária
Na= 8x(1/8) = 1

NC (numero de vizinhos) = 6

Estrutura Cúbica Simples



Direção compacta

contém 8 x 1/8 =

1 Átomo/célula

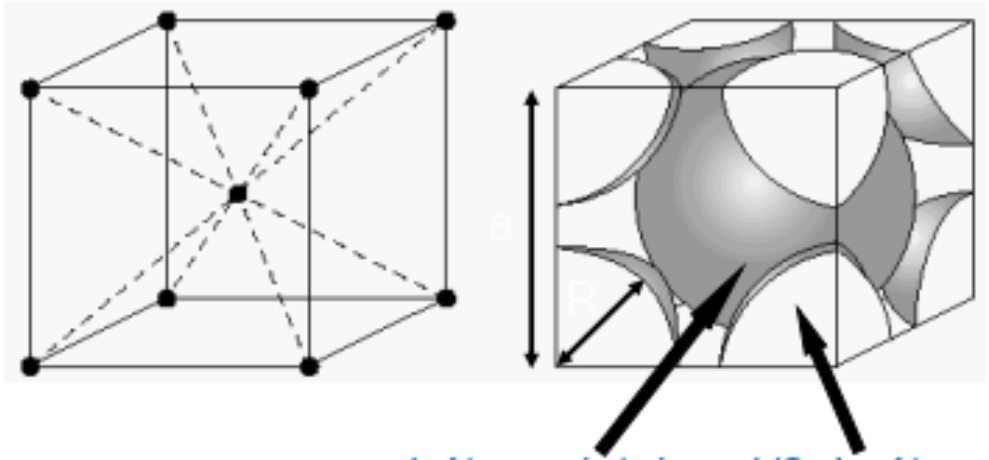
$$FEA = \frac{\frac{\text{atomos}}{\text{célula}} \rightarrow 1 \; \frac{4}{3}\pi\,(\,a/2\,)^3 \leftarrow \frac{\text{volume}}{\text{átomo}}}{a^3 \leftarrow \frac{\text{volume}}{\text{célula}}}$$

- Fator de empacotamento da Cúbica Simples = 0,52.

A rede ccc

A rede cúbica de corpo centrado é uma rede cúbica na qual existe um átomo em cada vértice e um átomo no centro do cubo. Os átomos se tocam ao longo da diagonal.

FEA = Fator de empacotamento atômico
(APF - atomic packing factor)



1 átomo inteiro 1/8 de átomo

$$FEA = \frac{Volume(átomos)}{Volume(célula)} = \frac{N(átomos)V(1átomo)}{a^3} = \frac{N(átomos)\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$$

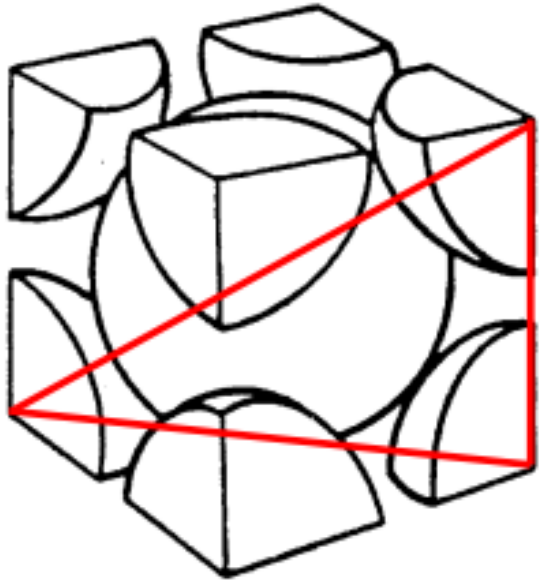
Número de átomos na célula unitária

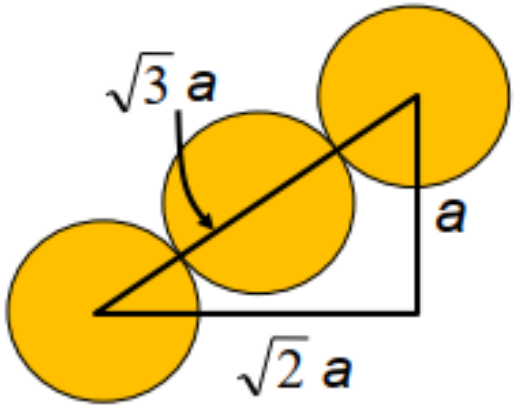
Na= 1 + 8x(1/8) = 2

NC = 8

$$FEA_{ccc} = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi R^3}{\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0{,}68$$

Estrutura Cúbica de Corpo Centrado - CCC





Direções compactas:

Comprimento = $4R = \sqrt{3}\,a$

Célula unitária contém:

1 + 8 x 1/8

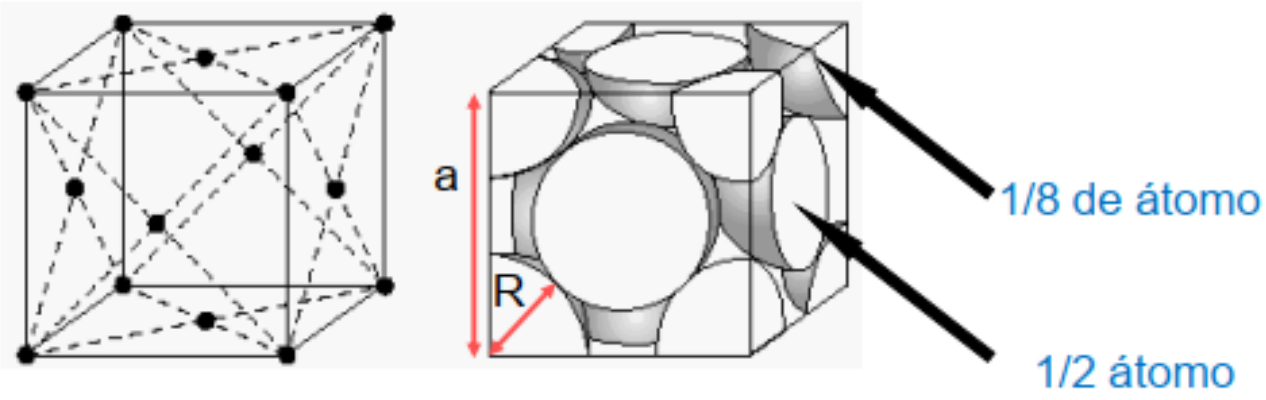
= 2 átoms/célula

$$FEA = \frac{\dfrac{\text{átomos}}{\text{célula}} \rightarrow 2\,\dfrac{4}{3}\pi(\sqrt{3}a/4)^3 \leftarrow \dfrac{\text{volume}}{\text{átomo}}}{a^3 \leftarrow \dfrac{\text{volume}}{\text{célula}}}$$

- Fator de empacotamento da CCC = 0,68.

A rede cfc

A rede cúbica de face centrada é uma rede cúbica na qual existe um átomo em cada vértice e um átomo no centro de cada face do cubo. Os átomos se tocam ao longo das diagonais das faces do cubo.



Número de átomos na célula unitária

Na= 6x1/2 + 8x(1/8) = 4

Relação entre a e r

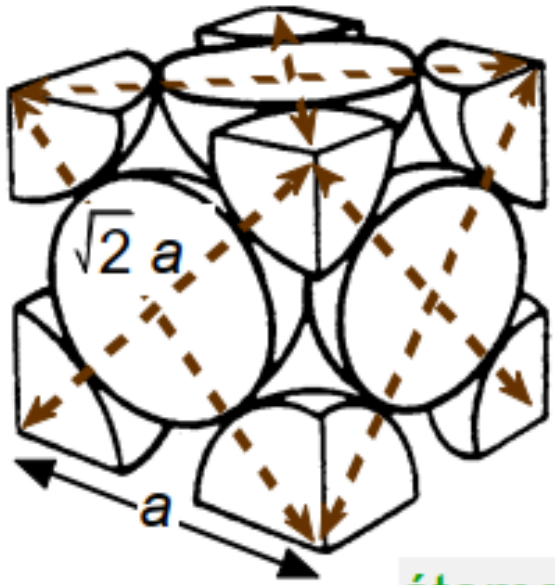
4R = a√2 => a = 2R√2 **NC = 12**

Fator de empacotamento atômico

$FEA_{cfc} = \frac{\text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula}} = 0.74$

A rede cfc é a mais compacta

Estrutura Cúbica de Face Centrada - CFC



Direções compactas:

comprimento = $4R = \sqrt{2}\,a$

Célula unitária contém:

6 x 1/2 + 8 x 1/8

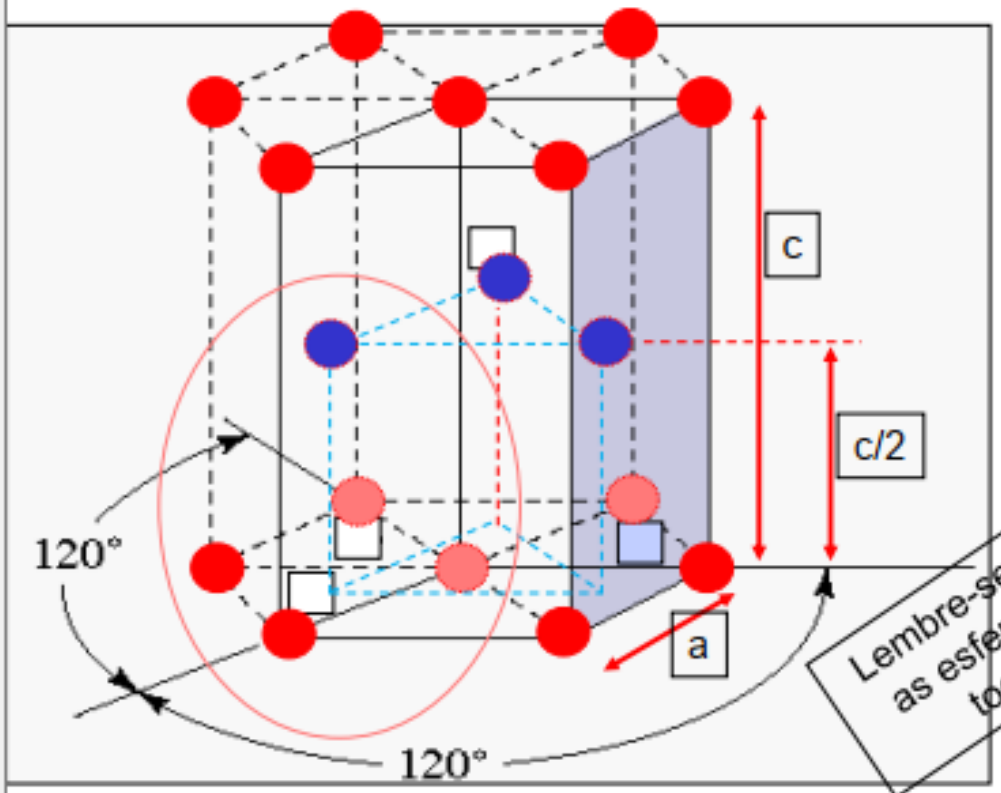
= 4 atoms/célula

$$FEA = \frac{\dfrac{\text{átomos}}{\text{célula}} \rightarrow 4\ \dfrac{4}{3}\pi(\sqrt{2}a/4)^3 \leftarrow \dfrac{\text{volume}}{\text{átomo}}}{a^3 \leftarrow \dfrac{\text{volume}}{\text{célula}}}$$

- Fator de empacotamento da CFC = 0,74
  (valor máximo de fator de empacotamento)

A rede hexagonal compacta

A rede hc pode ser representada por um prisma com base hexagonal, com átomos na base e topo e um plano de átomos no meio da altura.



Número de átomos na célula unitária

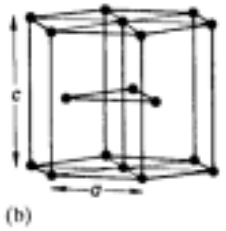
Na= 12x1/6 + 2x(1/2) + 3 = 6

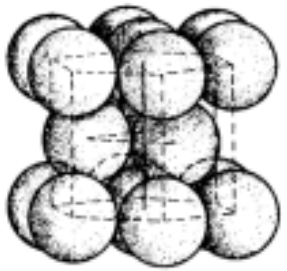
Relação entre a e r

2R = a

FEA = 0.74 **NC** =12

A rede hc é tão compacta quanto a cfc





Resumo estrutura cristalina metais

Características de estrutura cristalina de alguns metais

Structure	a_0 versus r	Atoms per Cell	Coordiantion Number	Packing Factor	Examples
Simple cubic (SC)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Polonium (Po), α-Mn
Body-centered cubic (BCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Zr, Cr
Face-centered cubic (FCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Au, Pt, Ag, Pb, Ni
Hexagonal close-packed (HCP)	$a_0 = 2r$ $c_0 \approx 1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd

Densidade Teórica

$$\text{Densidade} = \rho = \frac{Massa\ de\ átomos\ por\ celula\ unitária}{Volume\ total\ da\ celula\ unitária}$$

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

n= número de átomos/cel. unit.
A= massa atômica
V_c = volume da cela unit. = a^3 para as cúbicas
N_A= numero de Avogadro

Ex: Cr (CCC)

A = 52.00 g/mol

R = 0.125 nm

n = 2 átomos/célula

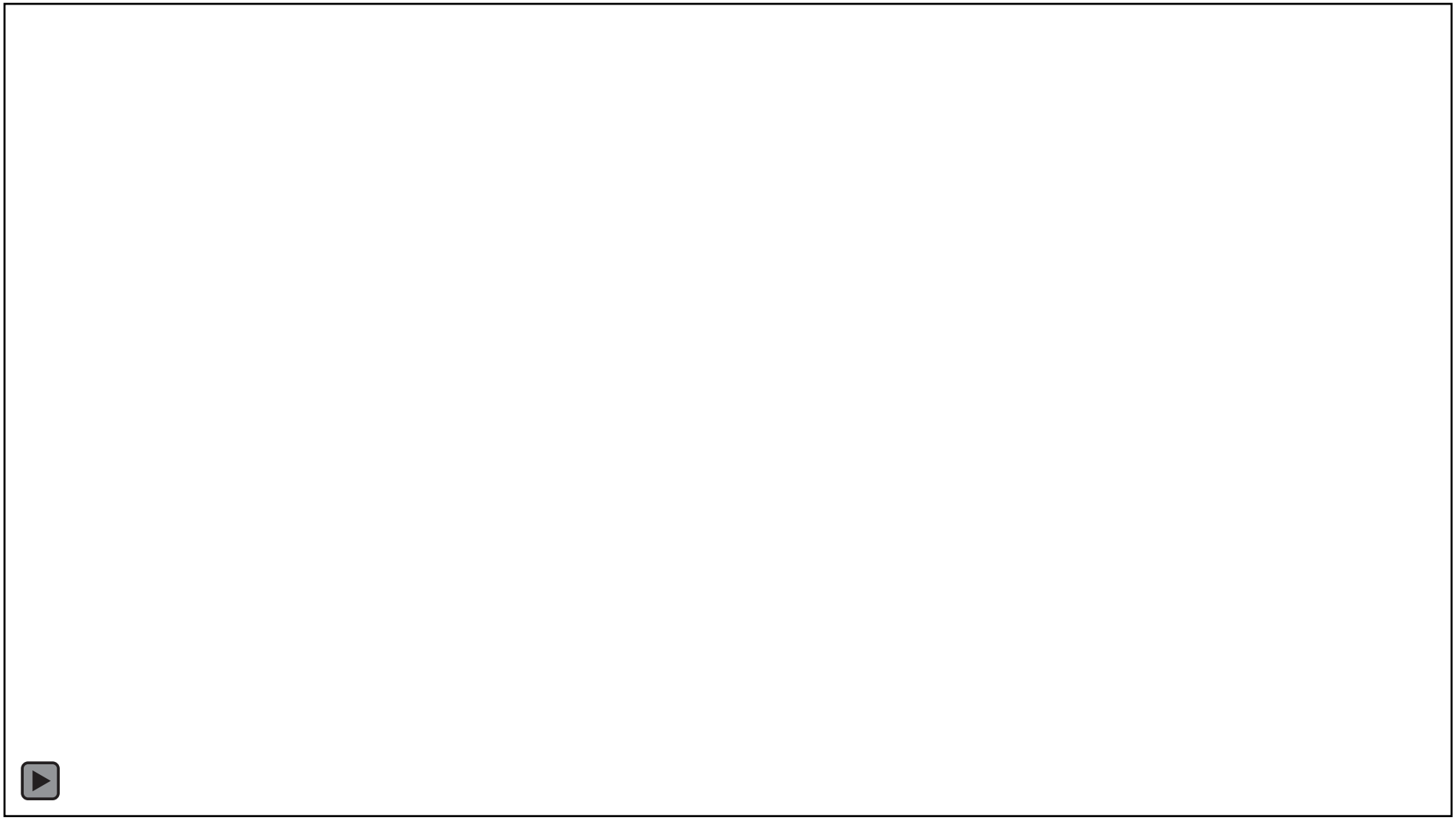
$a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887$ nm

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

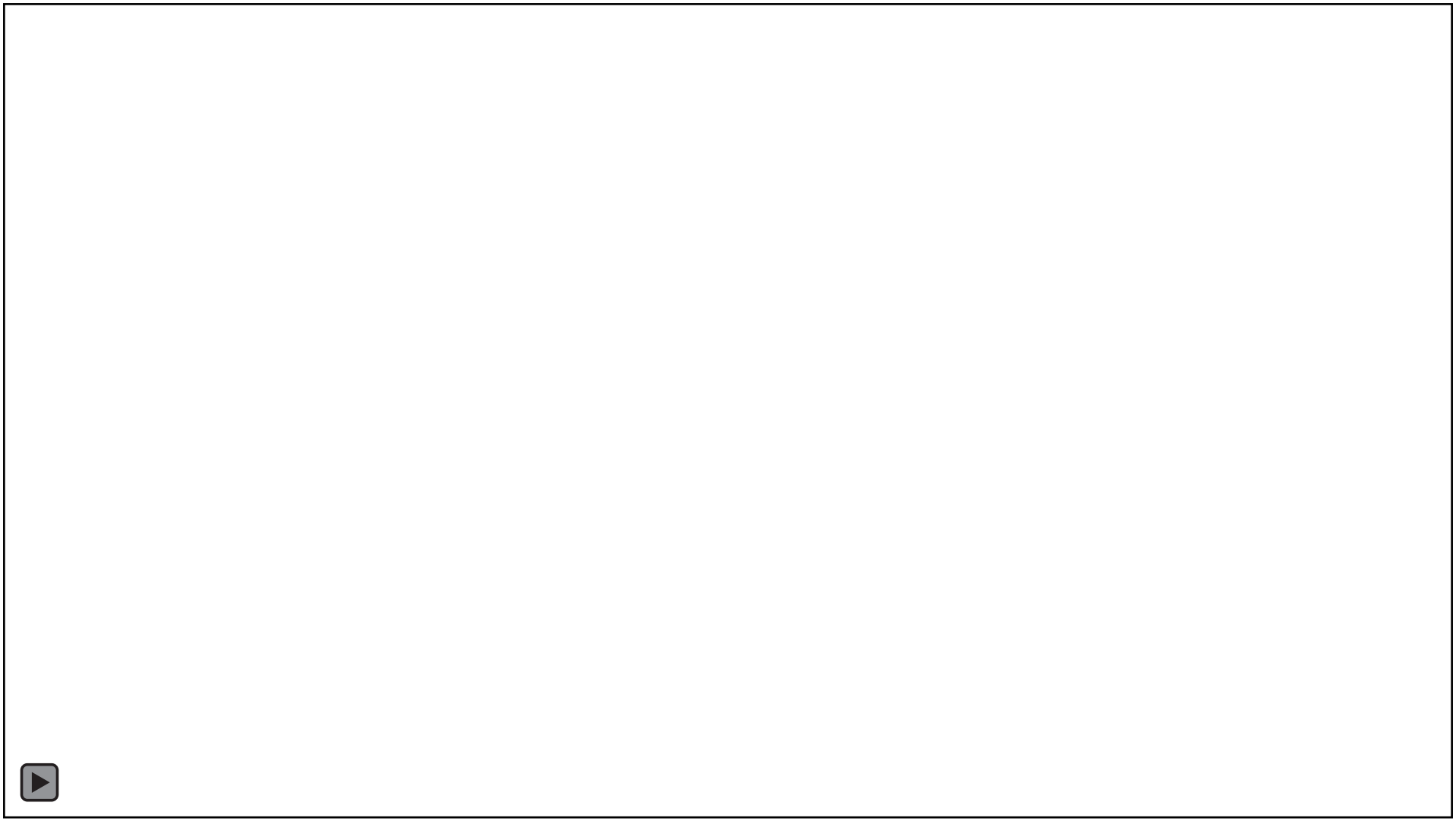
$$\rho = \frac{\dfrac{\text{átomos}}{\text{célulal}} \cdot \dfrac{\text{g}}{\text{mol}}}{\dfrac{\text{volume}}{\text{célula}} \cdot \dfrac{\text{átomos}}{\text{mol}}} = \frac{2 \cdot 52.00}{a^3 \cdot 6.022 \times 10^{23}}$$

$\rho_{teórica}$	= 7,18 g/cm^3
ρ_{real}	= 7,19 g/cm^3

Célula CS



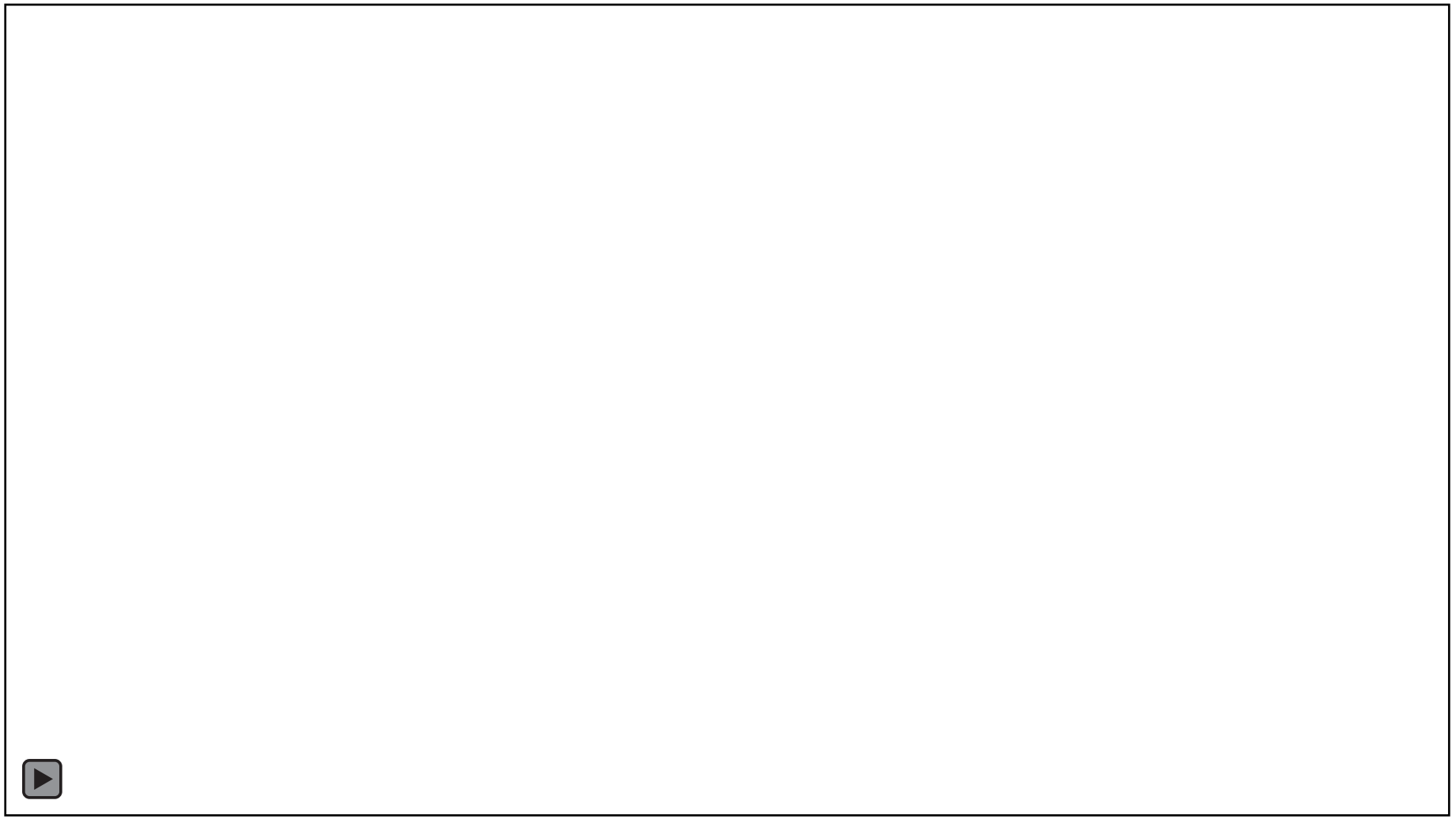
Célula CCC



Célula CFC



Célula HC



DEFEITOS CRISTALINOS
O QUE É UM DEFEITO?

É uma imperfeição ou um "erro" no arranjo periódico regular dos átomos em um cristal.
Podem envolver uma irregularidade

· na posição dos átomos

· no tipo de átomos

O tipo e o número de defeitos dependem do material, do meio ambiente, e das circunstâncias sob as quais o cristal é processado.

Tipos de defeitos

·**Defeitos Pontuais**: irregularidades que se estendem sobre somente alguns átomos (0-D)

·**Defeitos Lineares**: irregularidades que se estendem através de uma única fileira de átomos (1-D)

·**Defeitos Planares (superfície)**: irregularidades que se estendem através de um plano de átomos (2-D)

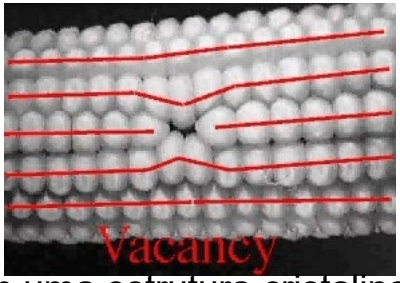
·**Defeitos Volumétricos**: irregularidades que se estendem sobre o conjunto 3-D dos átomos na estrutura

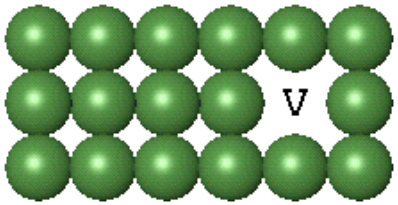
Por que os defeitos são importantes?

Os defeitos, mesmo em concentrações muito pequenas, podem causar uma mudança significativa nas propriedades de um material.
Sem a presença de defeitos:
· os dispositivos eletrônicos do estado sólido não existiriam
· os metais seriam muito mais resistentes
· os cerâmicos seriam muito mais tenazes
· os cristais não teriam nenhuma cor

DEFEITOS PONTUAIS

Vazios (Lacunas ou Vacâncias) e Intersticiais
Impurezas nos Sólidos
Impurezas Substitucionais





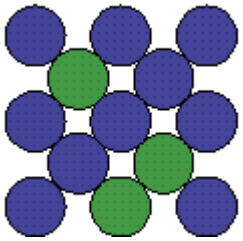
Vazios (Lacunas ou Vacâncias) e Intersticiais

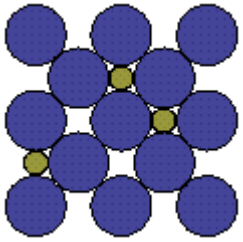
·**Vazios** = ausência de um átomo da sua posição normal em uma estrutura cristalina perfeita
A presença de um vazio significa que as ligações atômicas na vizinhança do defeito não foram satisfeitas

·**Intersticiais** = ocorrência de um átomo em uma posição que não pertence à estrutura do cristal perfeito, como um vazio intersticial
· · A presença de um intersticial significa uma distorção na estrutura devido ao desajuste causado pela presença deste átomo

“Impurezas nos Sólidos”: TERMINOLOGIA

· cristal matriz = solvente
· átomos de impureza = soluto





O cristal matriz contendo impurezas é chamado uma solução sólida, porque os átomos de impureza ocupam posições aleatórias no cristal, similarmente a um soluto em um líquido.

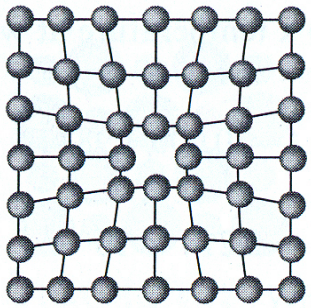
Tipos de Soluções Sólidas

· soluções sólidas **Substitucionais** :os átomos de impureza estão localizados em posições normalmente ocupadas pelos átomos do cristal matriz. Eles "substituem" os átomos do cristal matriz.

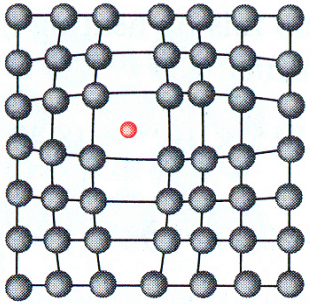
· soluções sólidas **Intersticiais** os átomos de impureza estão localizados nos interstícios da estrutura cristalina matriz. Normalmente tem um pequeno tamanho quando comparadas aos átomos da matriz.

IMPERFEIÇÕES EM SÓLIDOS CRISTALINOS

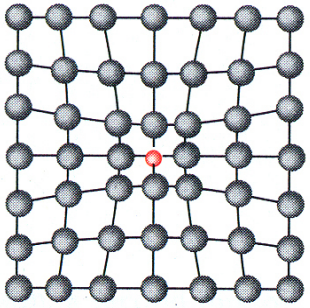
i) DEFEITOS PUNTUAIS



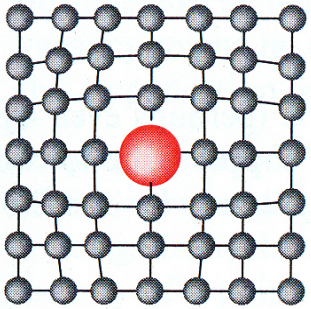
(a)



(b)

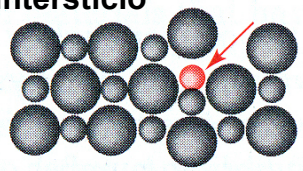


(c)



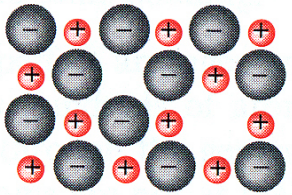
(d)

Movimento de um cátion numa posição normal para um interstício



(e)

Lacuna de cátion e lacuna de ânion



(f)

AUSÊNCIA OU PRESENÇA DE ÁTOMOS

(a) Vacância, (b) Átomo intersticial, (c) Pequeno átomo substitucional, (d) Grande átomo substitucional, (e) Defeito Frenkel, (f) Defeito Schottky. Todos estes defeitos destroem localmente o arranjo cristalino perfeito dos átomos vizinhos.

DEFEITOS EM LINHA NOS MATERIAIS CRISTALINOS
O que são

· Os defeitos em linha são imperfeições em uma estrutura cristalina nas quais uma **linha** de átomos tem uma estrutura local que difere da estrutura circunvizinha.

· ° eles são criados devido às condições de **processamento** (a forma usada na fabricação do material) e por forças mecânicas que atuam sobre o material.

° estão quase sempre presentes nos cristais reais.

° em um material típico, aproximadamente **5 de cada 100 milhões de átomos** (0.000005%) pertencem a um defeito de linha.

· Veremos que os defeitos em linha, que são chamados **discordâncias**, têm uma forte influência sobre as propriedades mecânicas dos metais e de alguns cerâmicos.

A tensão de cisalhamento correspondente ao início da fase plástica em um monocristal é surpreendentemente pequena quando comparada à resistência ao cisalhamento de um cristal perfeito (calculada em termos de forças coesivas entre os átomos).

Em outras palavras, o cristal se deforma plasticamente com tensões 1/10.000 de sua resistência teórica. Analogamente, os cristais reais de outros metais se deformam sob tensões que são frações pequenas de suas resistências teóricas (1/1.000 a 1/10.000).

A explicação para a discrepância entre os limites de escoamento calculado e real reside no fato de que os cristais não são perfeitos, pois contem defeitos, sendo que as discordâncias são o tipo de defeito responsável por este fato.

Discordâncias

· discordâncias são defeitos 1D em um cristal.

· o tipo mais simples de discordância pode ser visto como um semi-plano atômico extra, inserido na estrutura, o qual termina em qualquer lugar do cristal.

· a extremidade do meio plano é a discordância, conforme mostra a figura ao lado.



discordâncias deste tipo são chamadas **discordâncias em aresta ou em cunha** e são representadas pelo símbolo ^ :

· a discordância é mostrada em verde

· podemos desenhar um vetor, t, tangente à discordância, que define sua direção

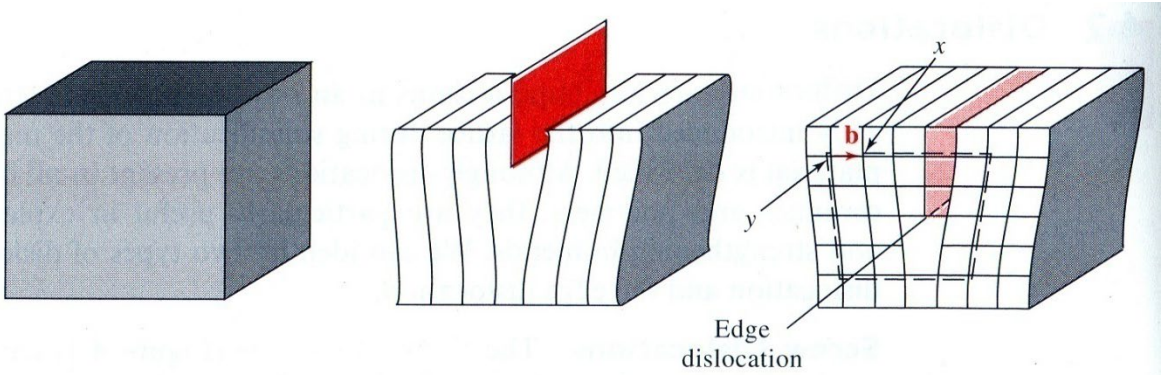
Consideremos agora o semiplano extra que está dentro do cristal. Um exame da figura abaixo (esquema tridimensional de uma discordância em aresta) mostra claramente que o cristal está distorcido onde o semiplano atinge o plano de escorregamento

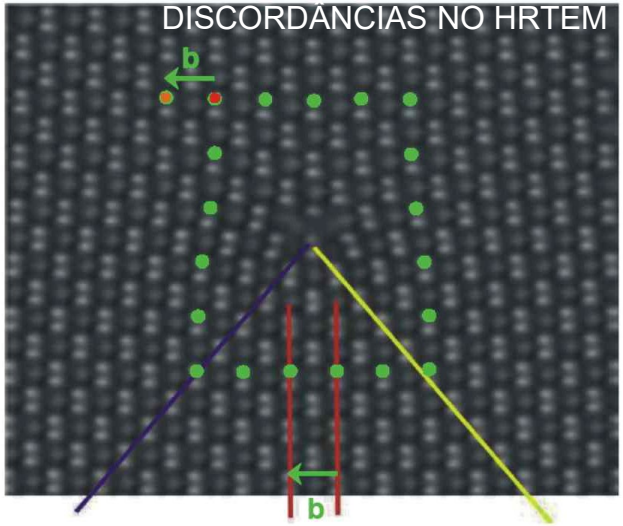


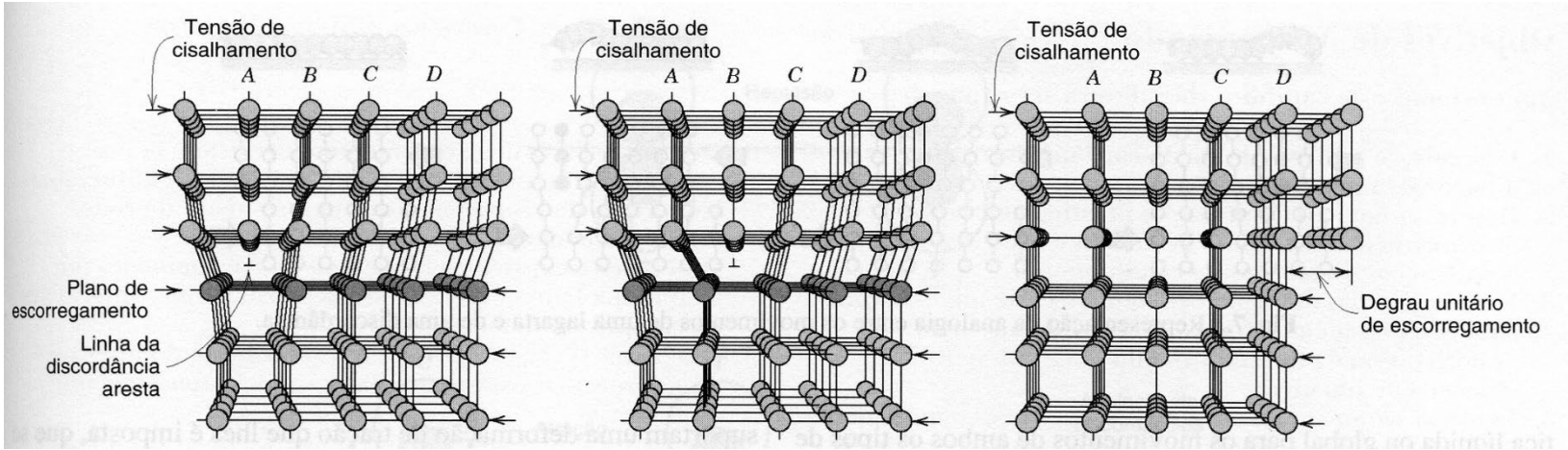
Pode-se também deduzir que a distorção diminui de intensidade quando se caminha em sentido oposto à aresta do semiplano, porque a grandes distâncias dessa aresta, os átomos tendem a rearranjar-se como em um cristal perfeito.

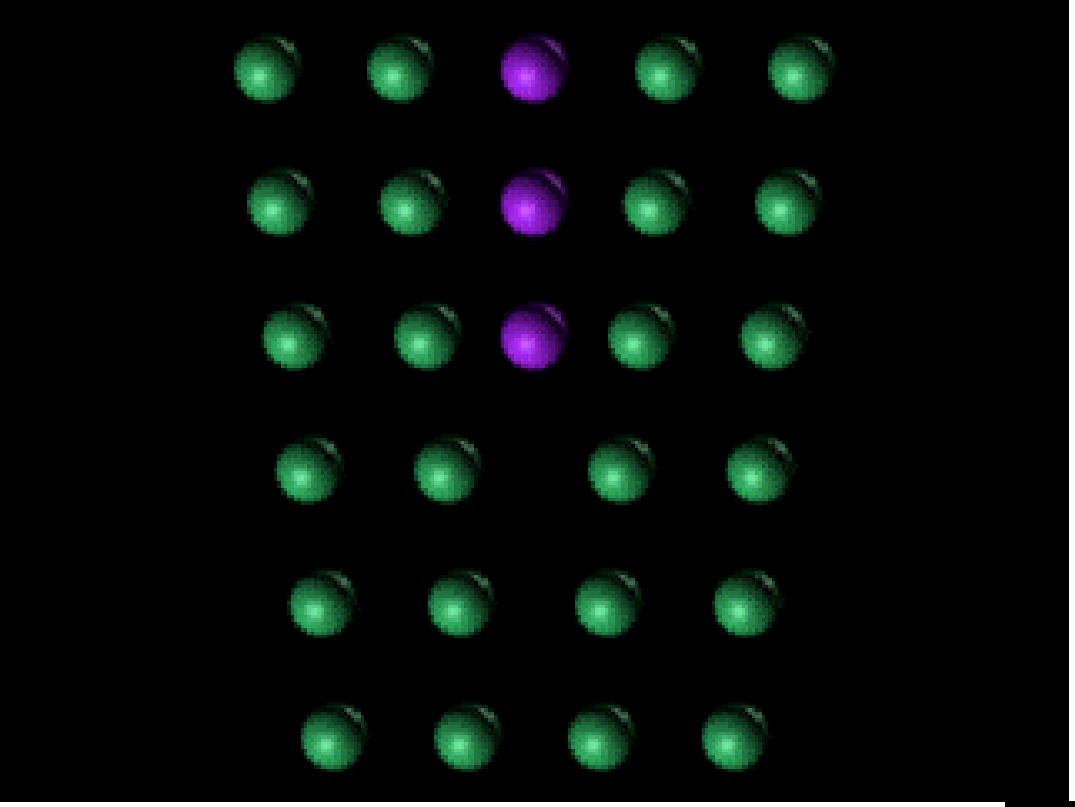
A distorção do cristal é, pois, centrada em torno da aresta do plano extra.

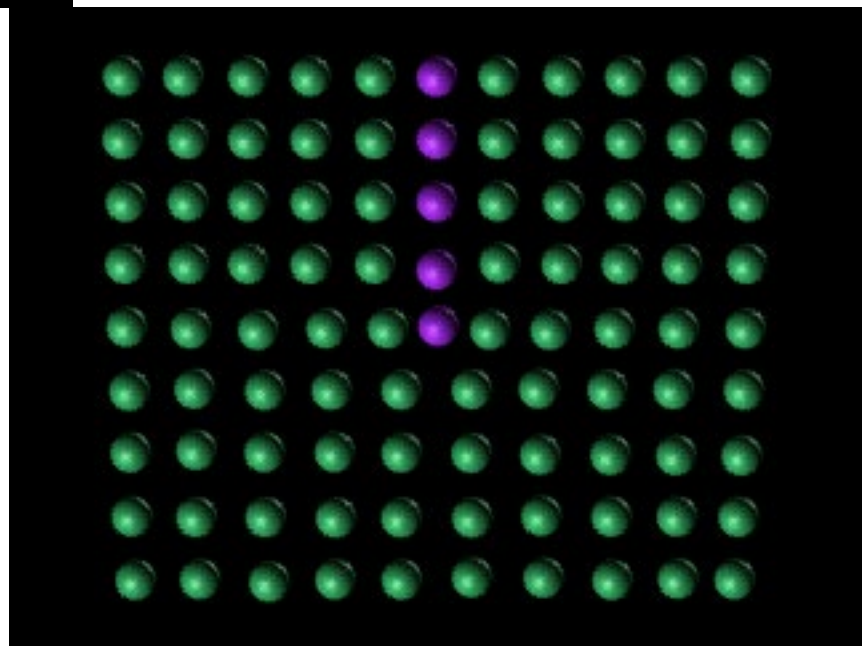
iii) DEFEITOS LINEARES (DISCORDÂNCIAS)





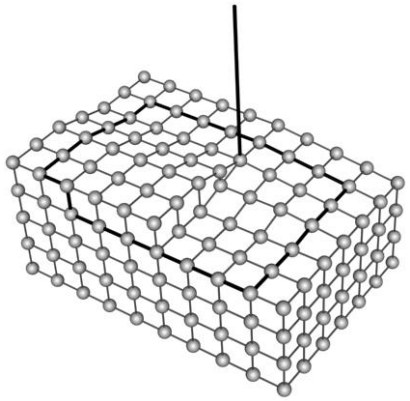


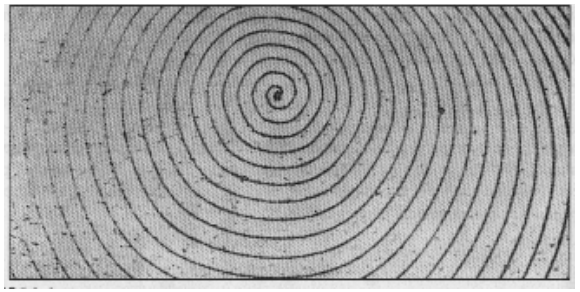




DISCORDÂNCIA EM HÉLICE

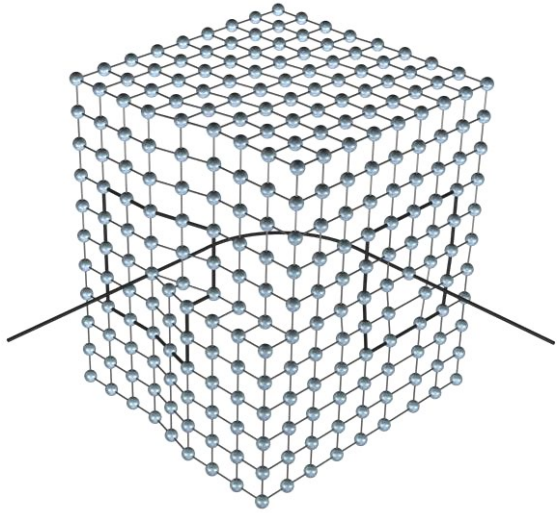
Uma discordância é em hélice quando o empilhamento dos planos atômicos é feito como uma mola.



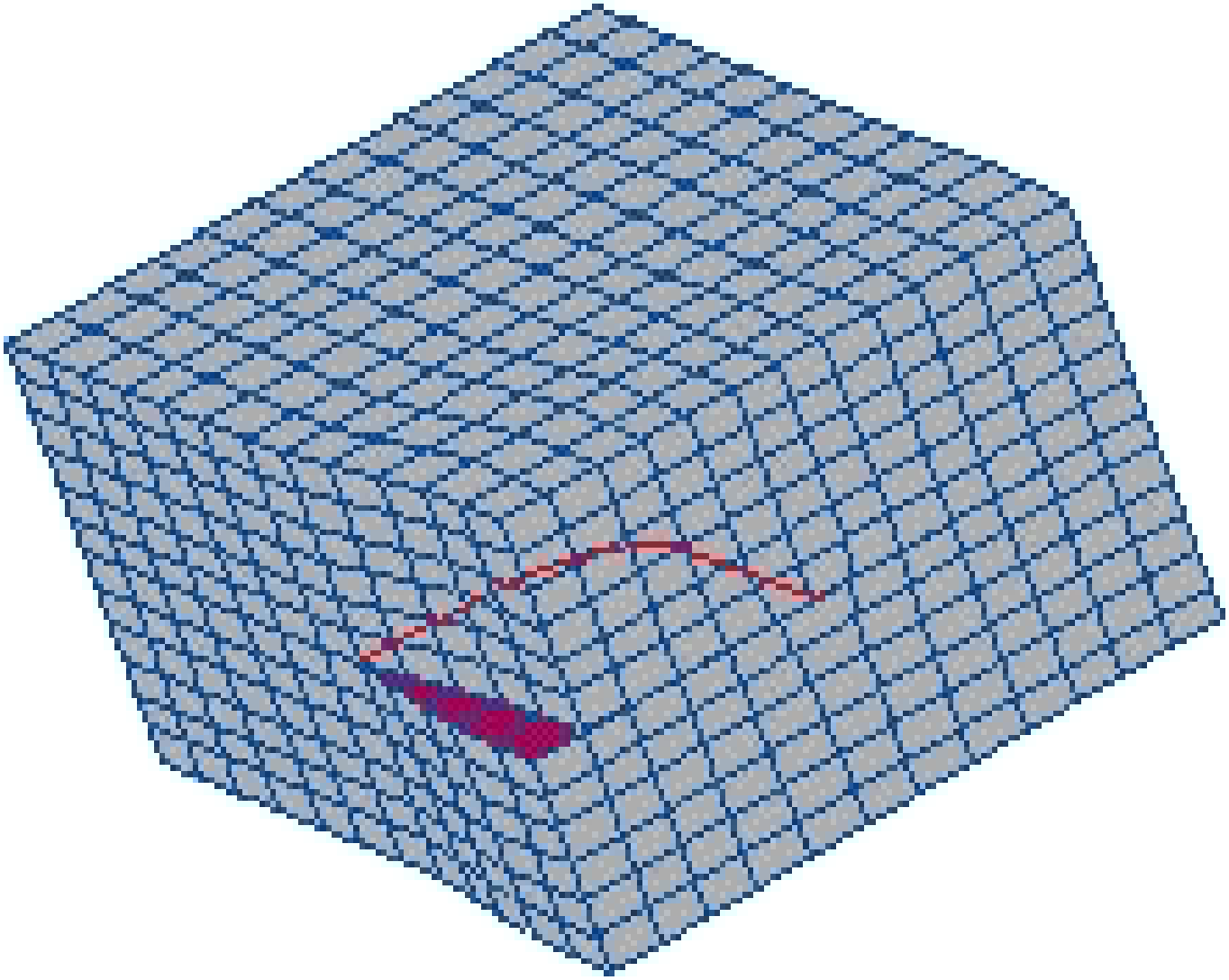


DISCORDÂNCIA MISTA

As discordâncias são produzidas durante solidificação do material ou quando é aplicada uma tensão cisalhante sobre a estrutura cristalina. Em geral, uma discordância em cunha está associada a uma discordância em hélice, o que forma uma discordância mista e neste caso, a linha de discordância é única para as duas discordâncias, como ilustra a figura abaixo.



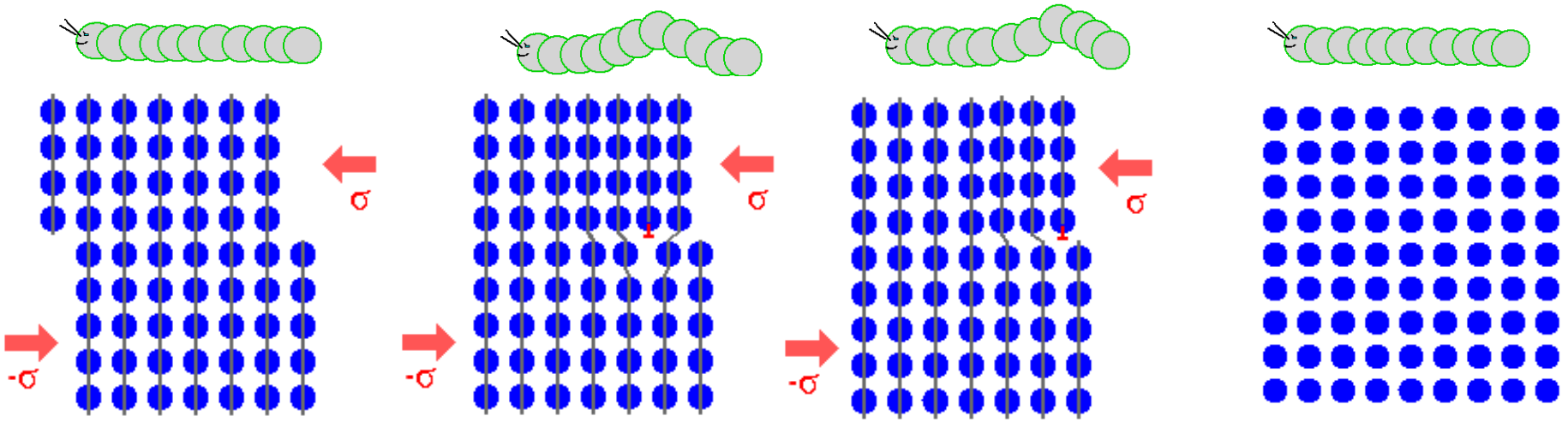
DISCORDÂNCIA MISTA



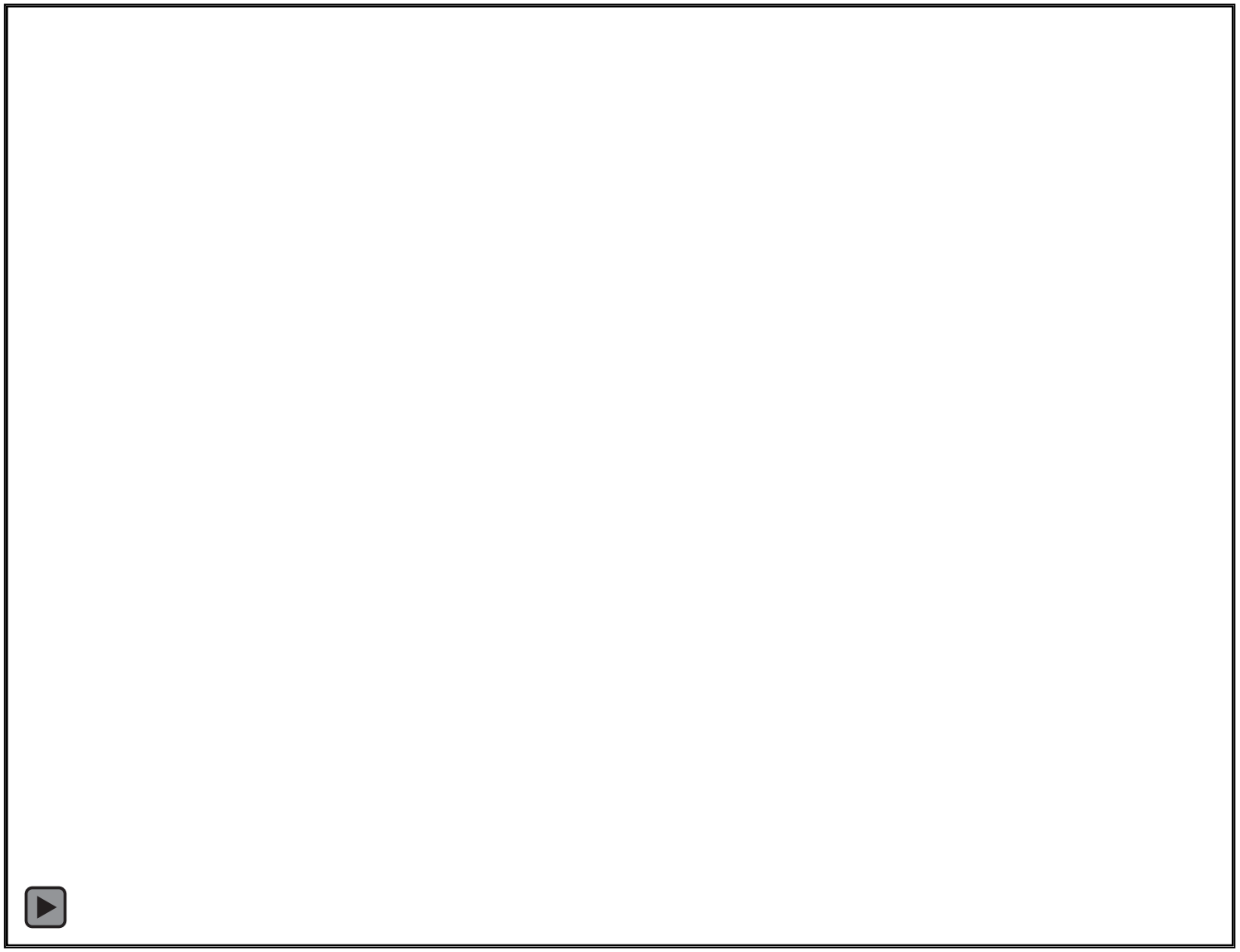
Discordância e Vetor de Burger (circuito burger, deformação plástica)



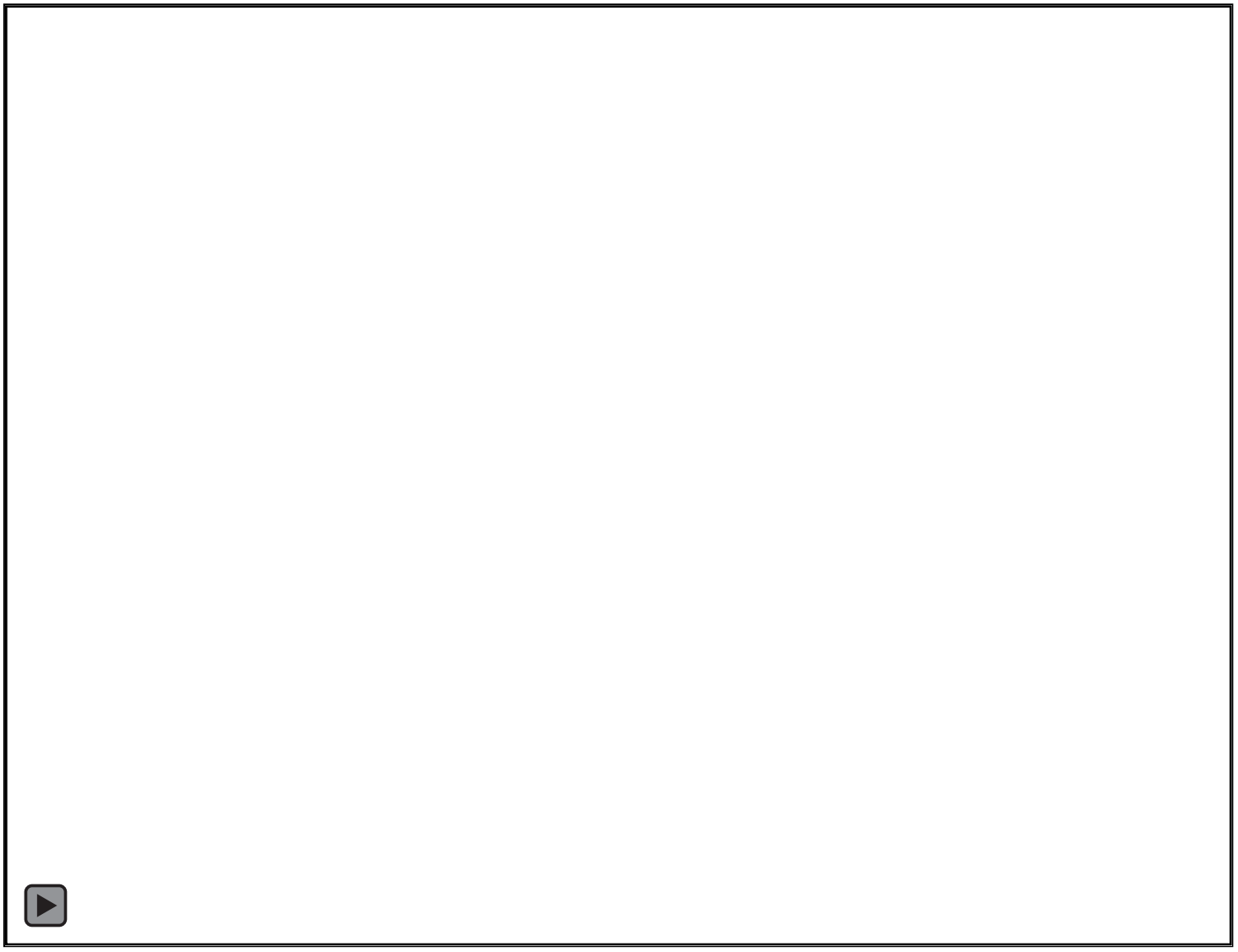
Movimento das Discordâncias



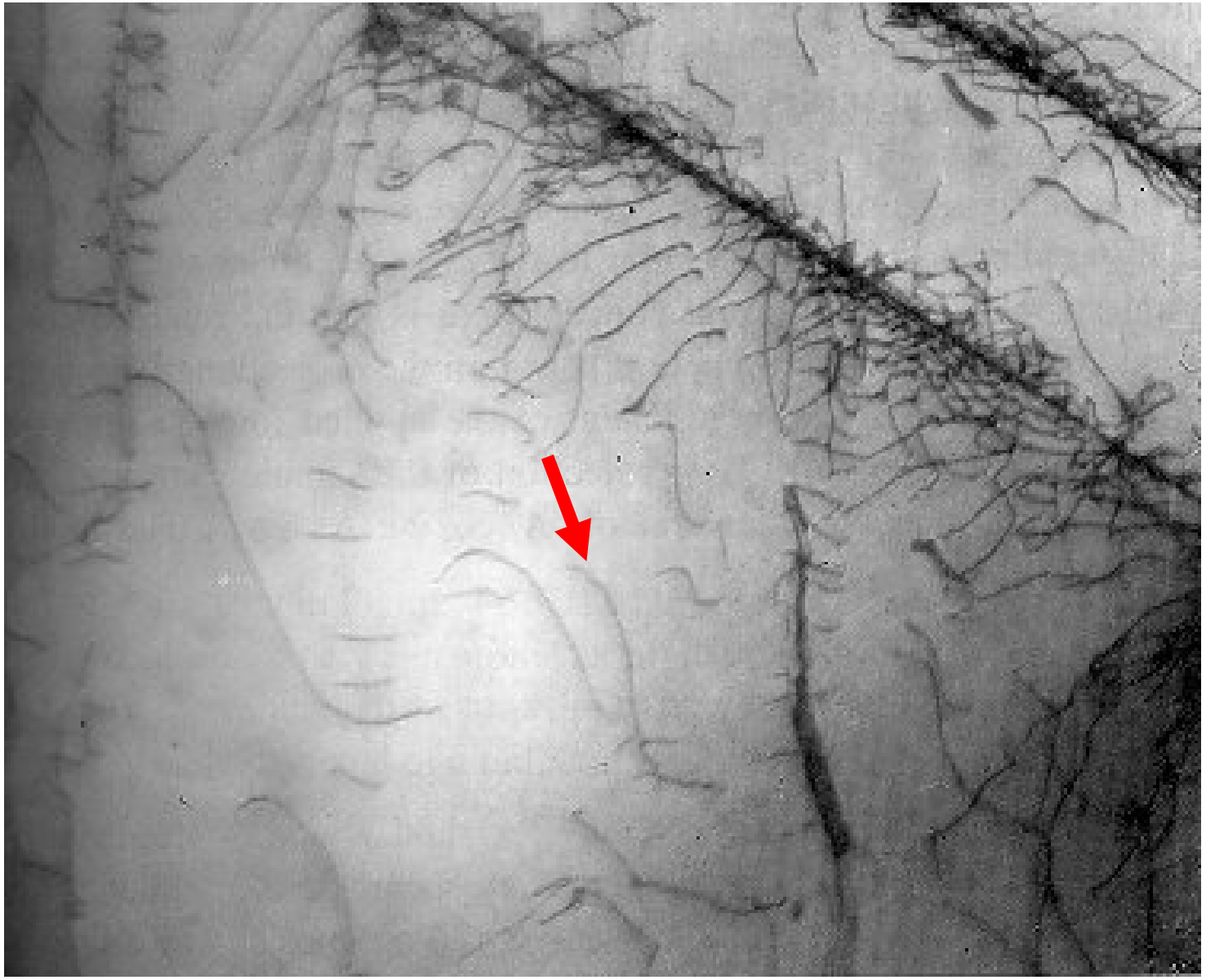
Interação entre uma discordância e um obstáculo (precipitado)



Interação entre a Ponta de uma trinca e uma discordância



DISCORDÂNCIAS NO TEM

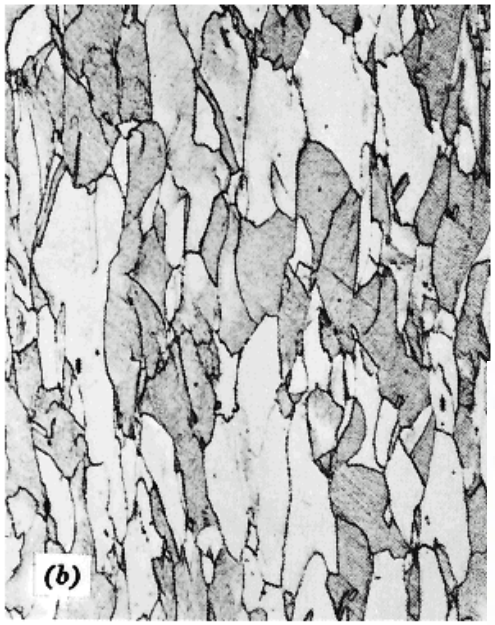


MOVIMENTO DAS DISCORDÂNCIAS NO TEM

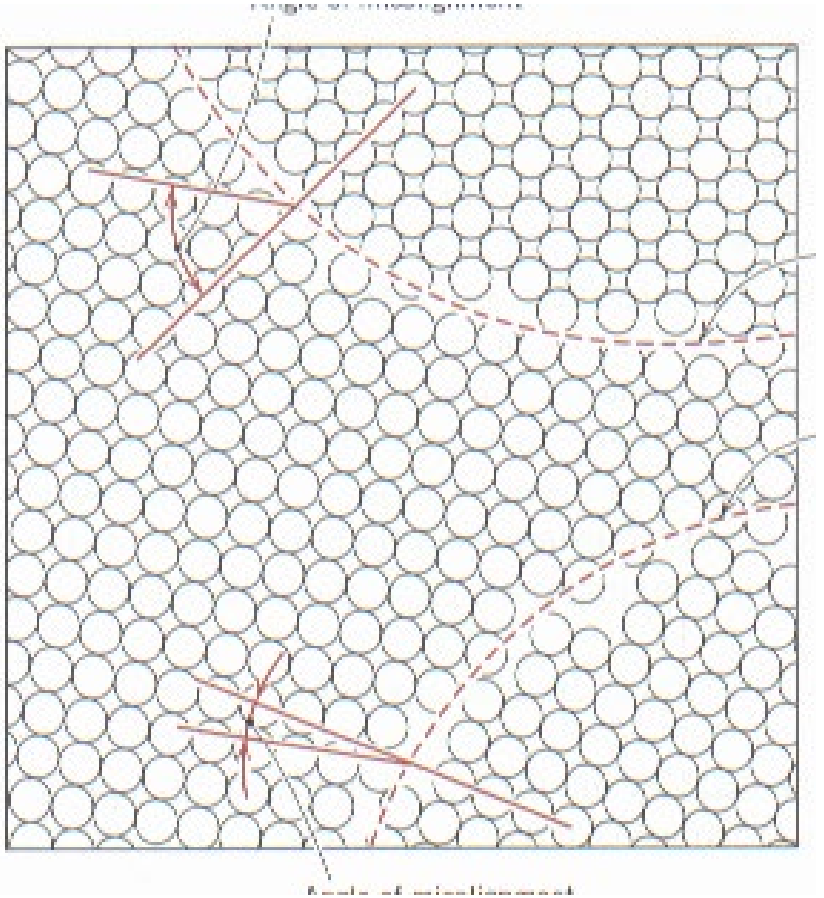


Defeitos Cristalinos



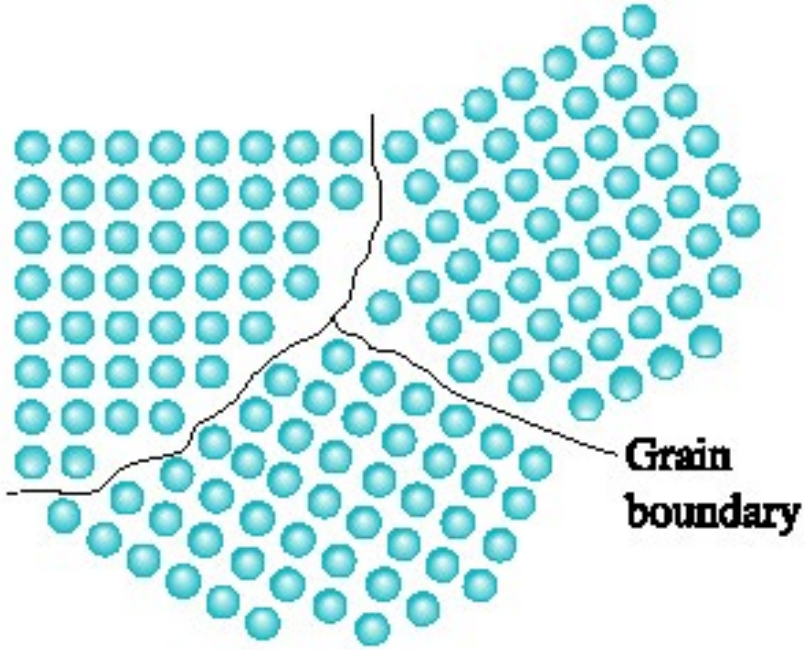


Cerâmica e metais podem ser compostos por grãos.

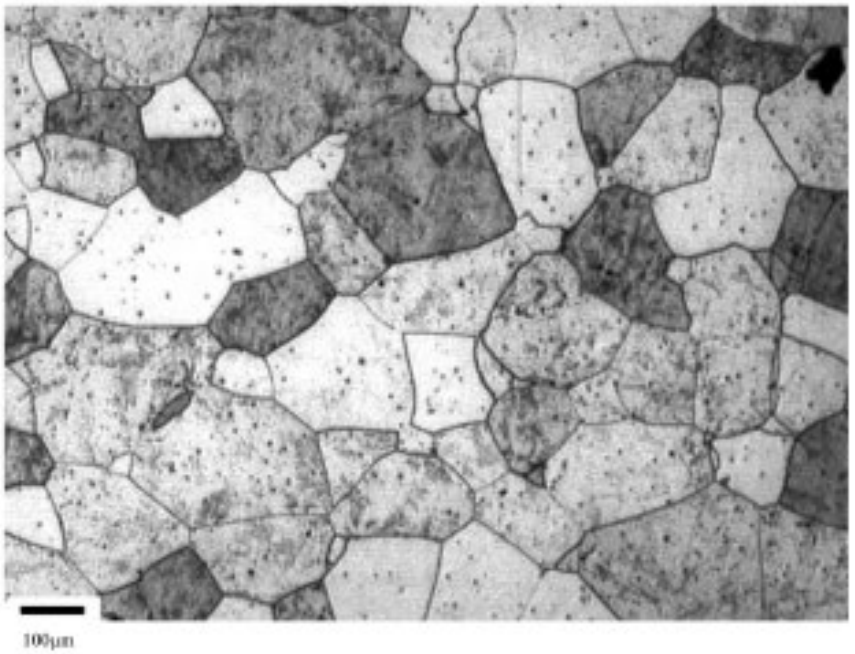


Os contornos podem ser de baixo ou de alto ângulo

Defeitos tipo Superfície



(a)

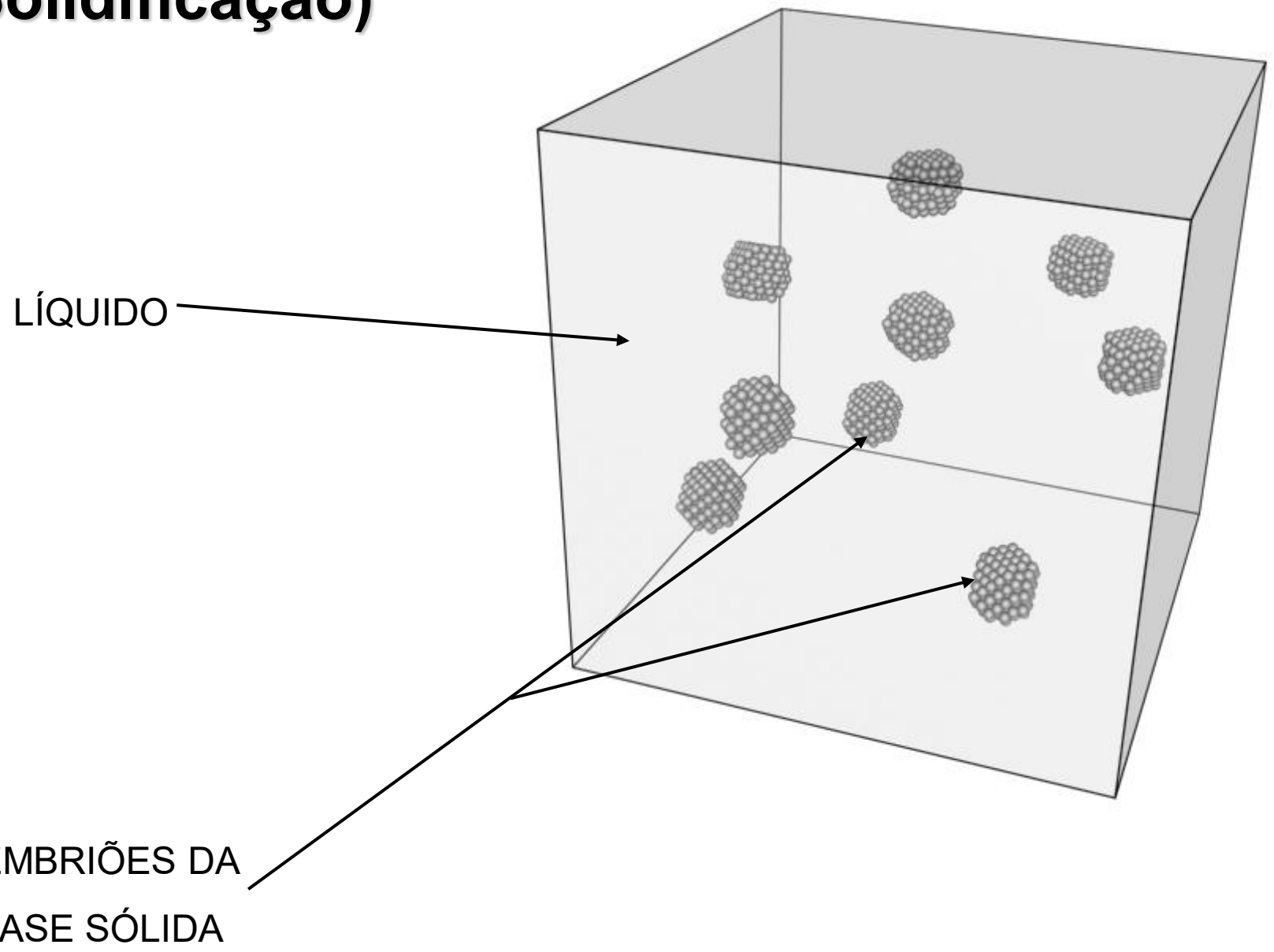


(b)

Defeitos Volumétricos

- **Inclusões** ⇒ Impurezas estranhas
- **Precipitados** ⇒ são aglomerados de partículas cuja composição difere da matriz
- **Porosidade** ⇒ origina-se devido a presença ou formação de gases
- **Fases** ⇒ devido à presença de impurezas (ocorre quando o limite de solubilidade é ultrapassado)

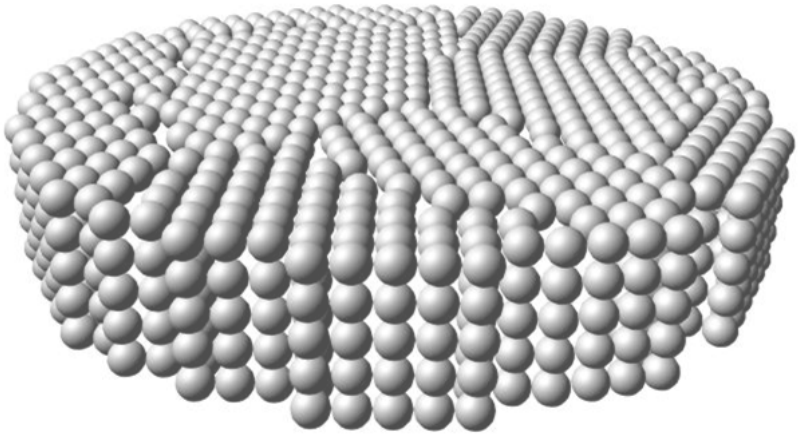
Formação dos grãos cristalinos (Solidificação)



Esses embriões, com a evolução da transformação, são transformados em núcleos da nova fase, como mostra a figura 1)

Na etapa de nucleação, os núcleos surgem de forma aleatória, cada um com orientação cristalográfica própria, porém, em um mesmo núcleo, seus átomos têm a mesma orientação cristalográfica e assim se define tal região como grão cristalino.

Na fase seguinte à nucleação, denominada de crescimento, esses núcleos crescem e entram em contato com seus núcleos vizinhos, formando nesses pontos de contato uma região conhecida como “contorno de grão”.
Devidos ao caráter tridimensional da estrutura atômica, o contato dos vários grãos com diferentes orientações gera superfícies de contornos de grão.



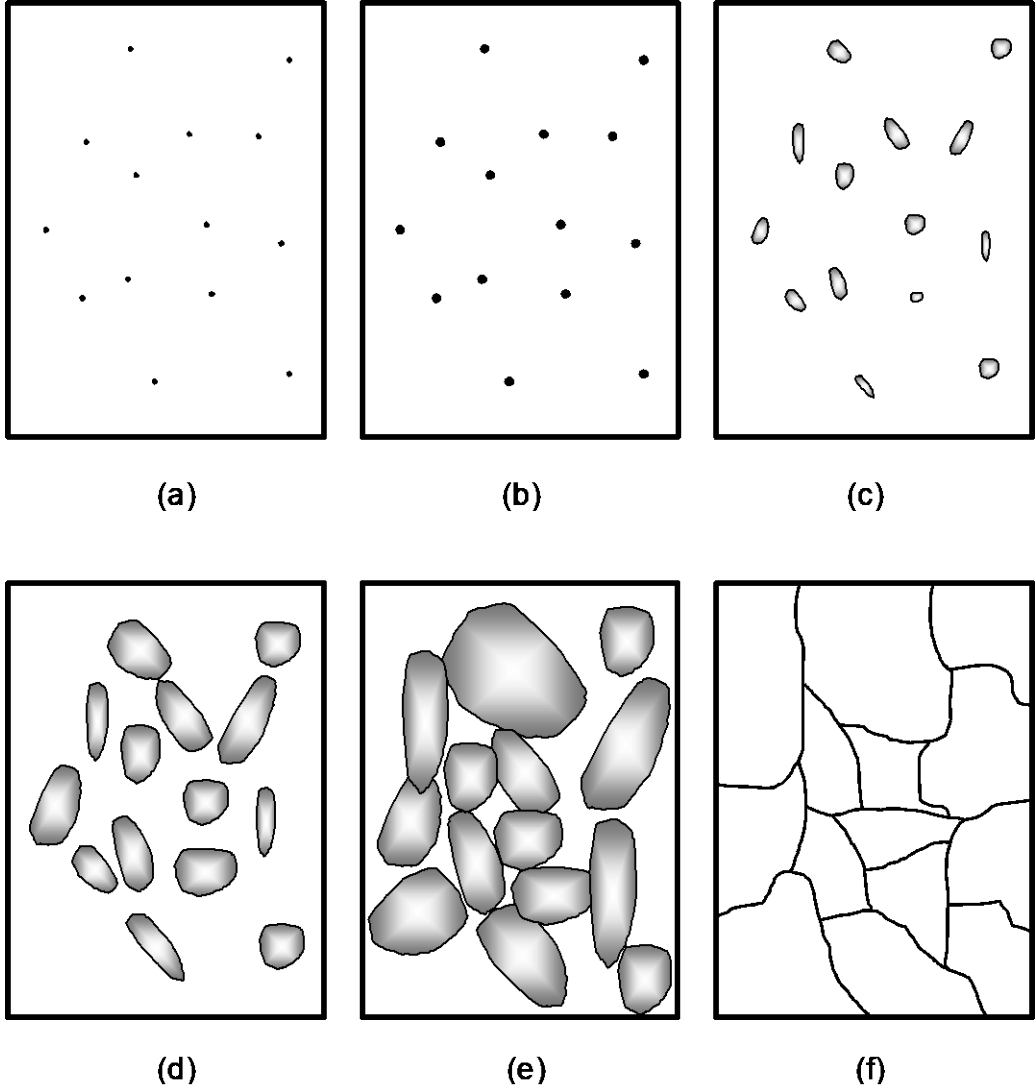
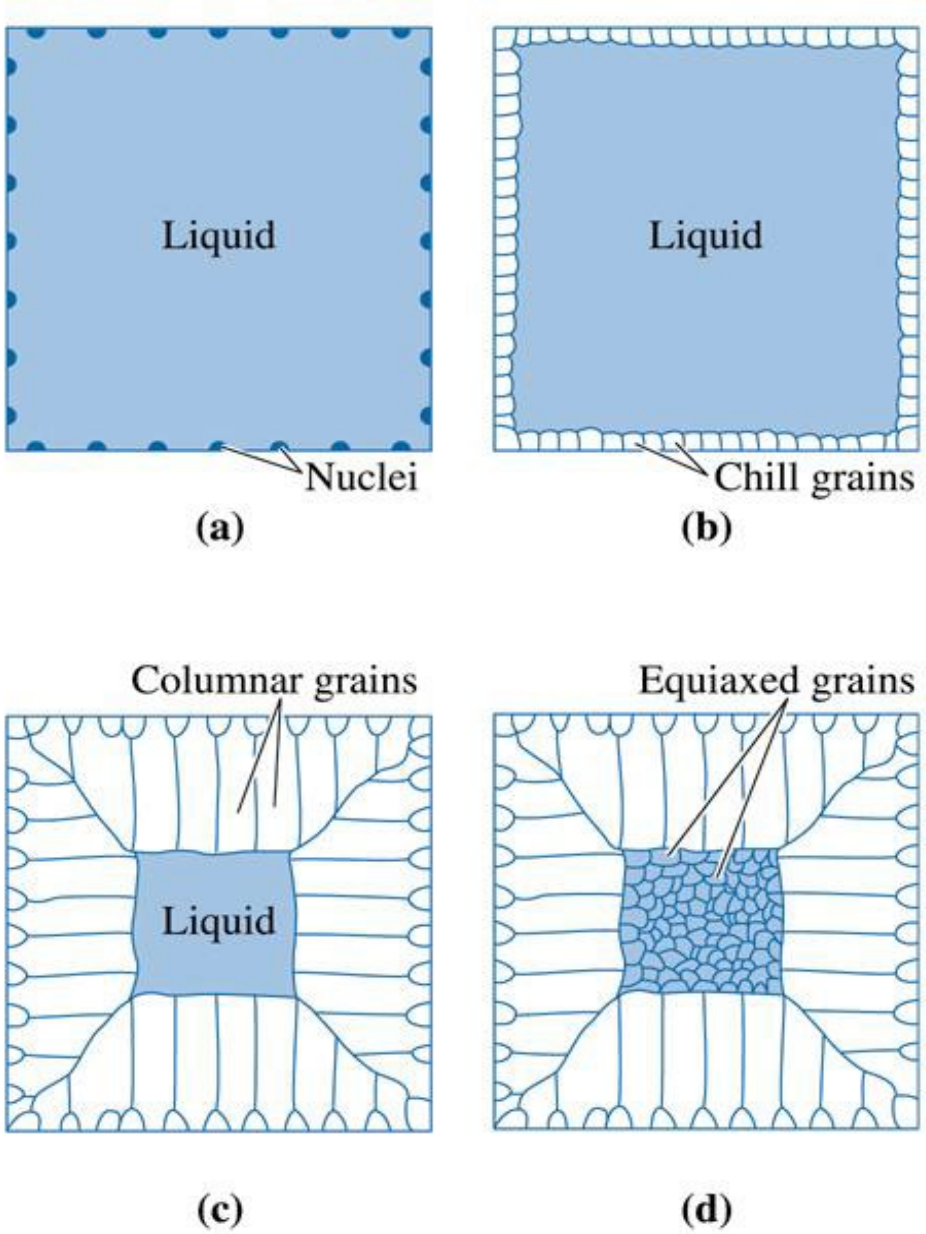


Figura 1) Formação de um material policristalino:
(a) Presença de embriões;
(b) Embriões transformam-se em núcleos;
(c) Crescimento dos núcleos;
(d) Núcleos dão origem aos grãos cristalinos;
(e) Encontro dos grãos cristalinos com seus vizinhos e
(f) Contornos dos grãos cristalinos.

Desenvolvimento da estrutura cristalina em um lingote fundido durante o processo de fundição



(a) Começo da nucleação;

(b) Zonas coquilhadas ;

(c)Crescimento preferencial produz uma zona de grãos colunares;

(d)Nucleação adicional criando uma zona equiaquixial.

Crescimento dendrítico de uma estrutura bruta de fusão (real)

Crescimento dendrítico de uma estrutura bruta de fusão (Modelo)