



Aula 5 – Parte 1 Imperfeições em Sólidos Cristalinos

Kelly Benini



O que veremos nessa aula?



- ✓ Introdução às Imperfeições Cristalinas (Defeitos)
- ✓ Classificação dos Defeitos
 - Pontuais (0 dimensão)
 - Lineares (1 dimensão)
 - Superficiais (2 dimensões)



Imperfeições Cristalinas (Defeitos)

Introdução

Introdução – Imperfeições Cristalinas

Os cristais não são perfeitos e contém vários tipos de **imperfeições** os quais afetam suas propriedades físicas e mecânicas.

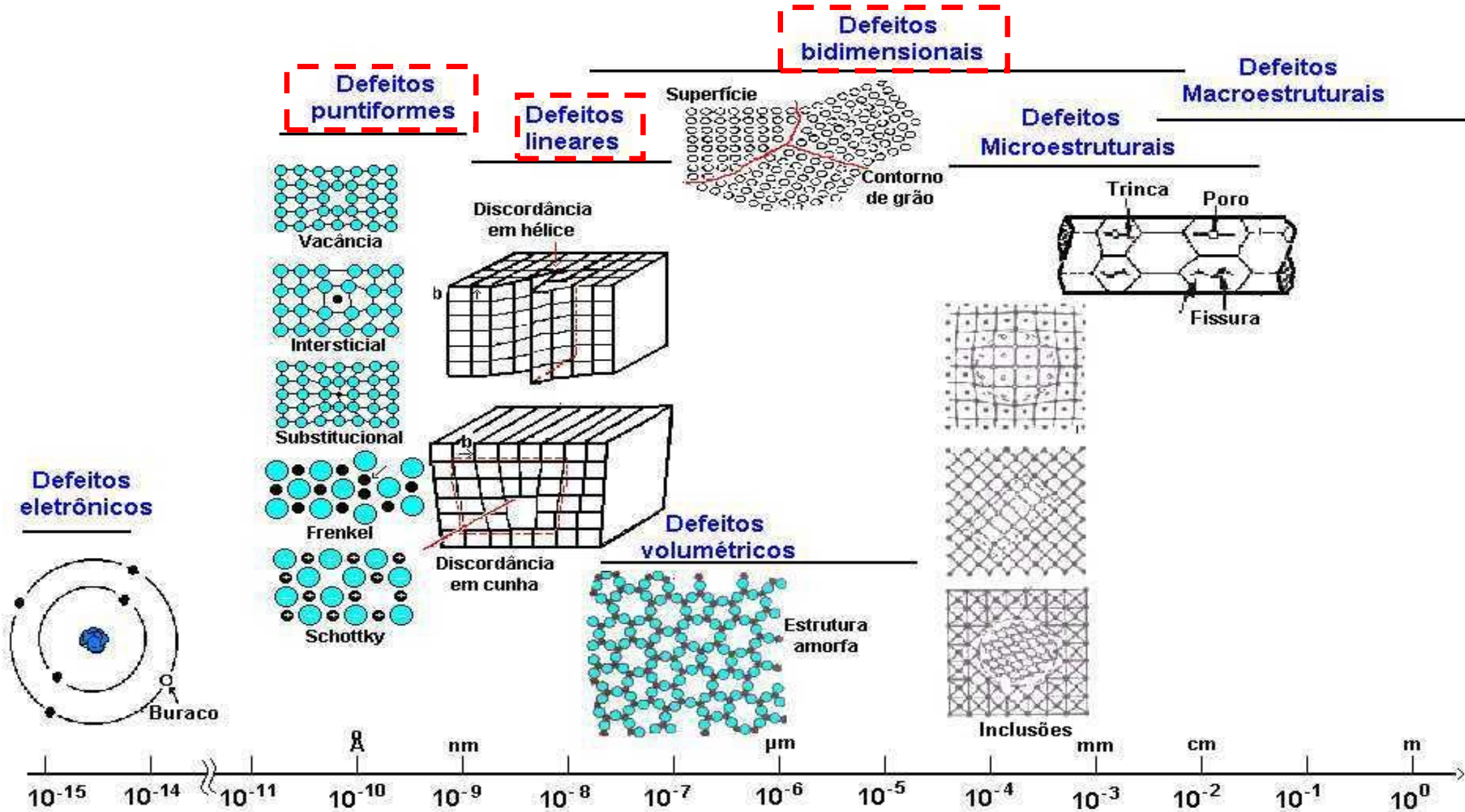
Defeito Cristalino: É uma irregularidade da rede cristalina em uma ou mais direções.

Esta irregularidade pode ser:

- na **posição** dos átomos ou
- 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.

Introdução - Defeitos





Imperfeições Cristalinas (Defeitos)

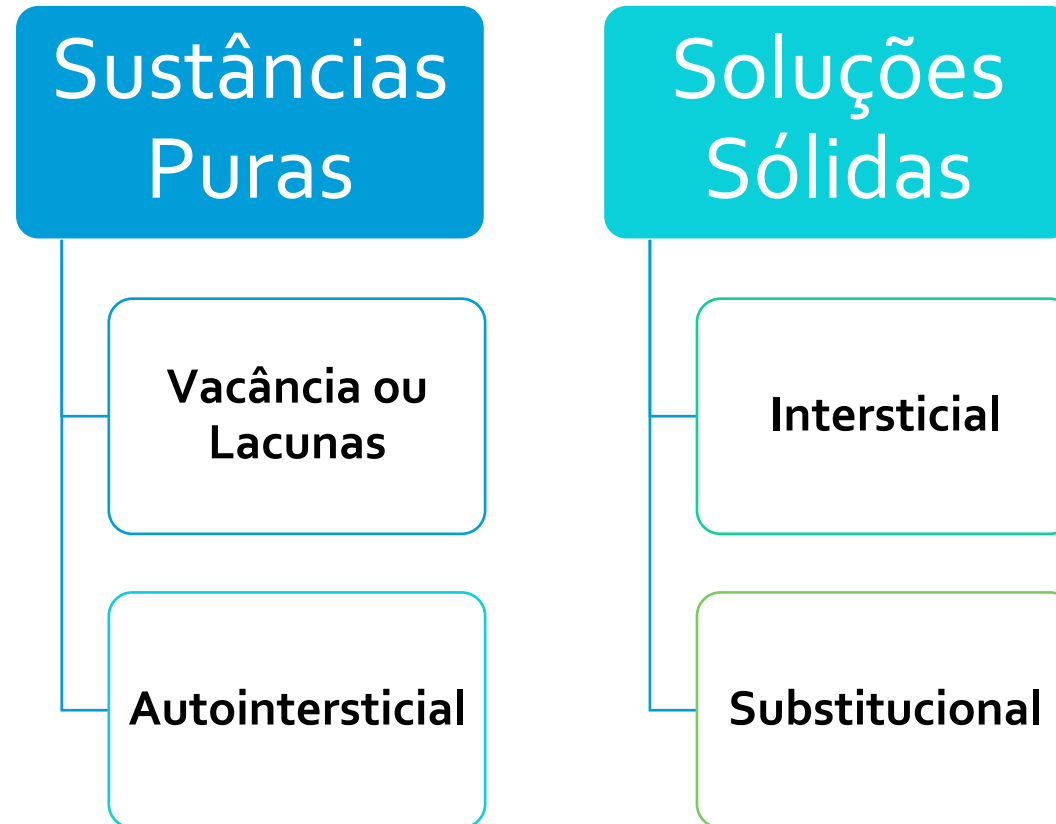
Classificação dos Defeitos

Classificação dos Defeitos

- Defeitos Pontuais;
- Defeitos Lineares;
- Defeitos Superficiais

Defeitos Pontuais

São descontinuidades localizadas nos arranjos atômicos de uma estrutura cristalina - associados a **uma ou duas posições atômicas**.



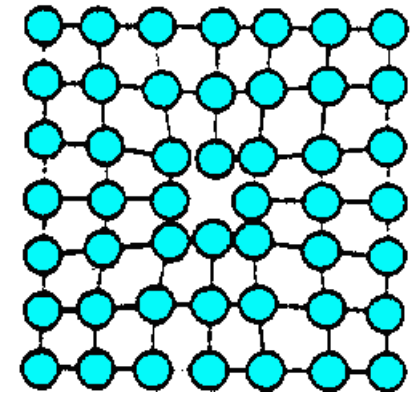
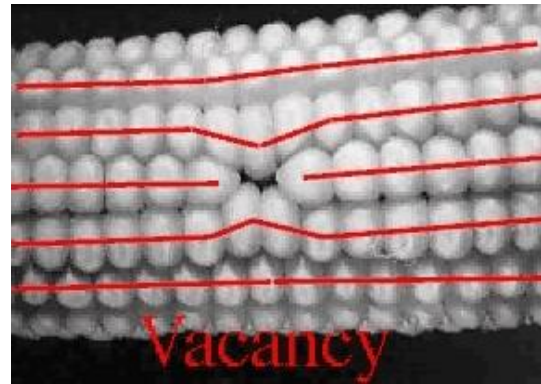
Defeitos Pontuais

São descontinuidades localizadas nos arranjos atômicos de uma estrutura cristalina - associados a **uma ou duas posições atômicas**.

Sustâncias Puras

Vacância ou
Lacunas

Autointersticial



- ✓ É a falta de um átomo na rede cristalina;
- ✓ Pode resultar do empacotamento imperfeito na **solidificação inicial**, ou do decorrer de **vibrações térmicas** dos átomos em temperaturas elevadas;
- ✓ Todos os sólidos cristalinos contém lacunas;
- ✓ Presença de lacunas aumenta a entropia.

Defeitos Pontuais

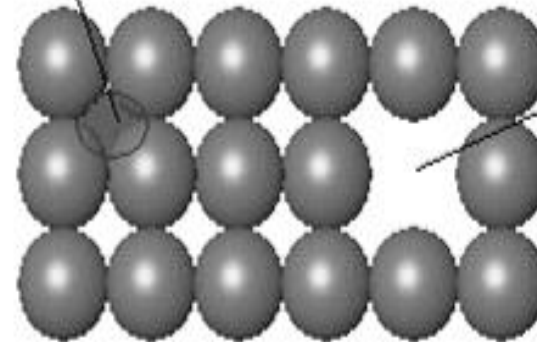
São descontinuidades localizadas nos arranjos atômicos de uma estrutura cristalina - associados a **uma ou duas posições atômicas**.

Sustâncias
Puras

Vacância ou
Lacunas

Autointersticial

Autointersticial

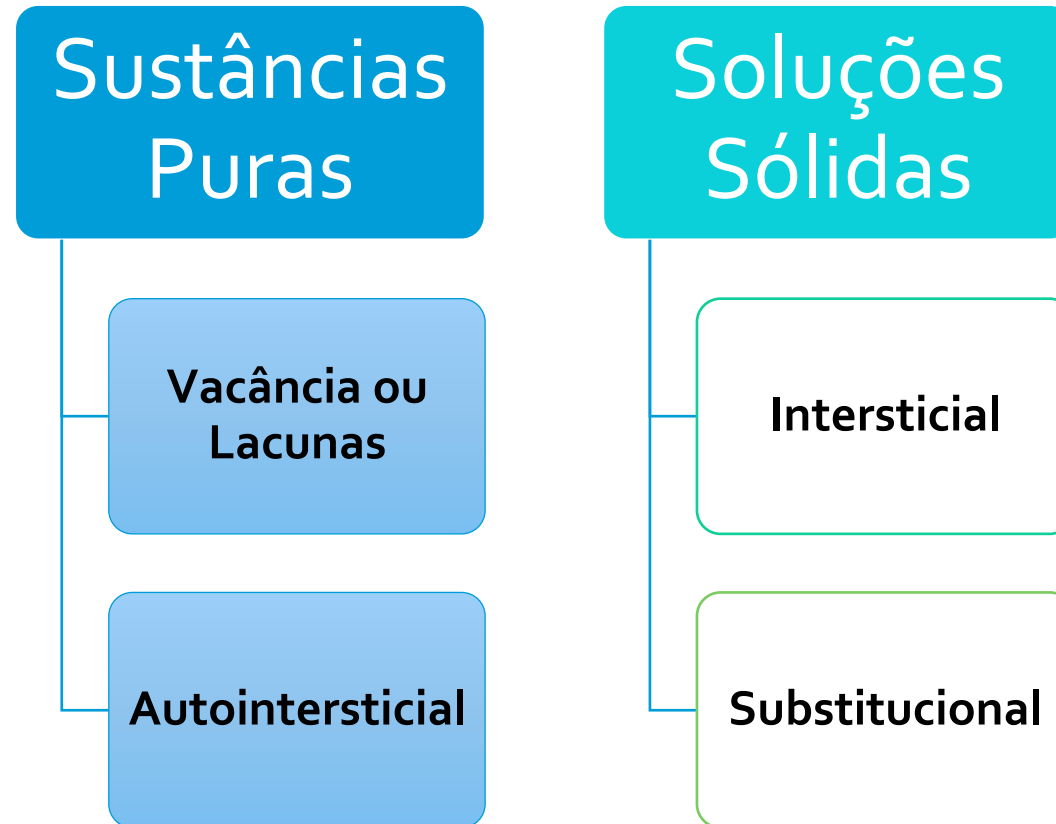


Lacuna

Nos **metais** um autointersticial provoca **distorções relativamente grandes** na rede cristalina, pois o átomo é consideravelmente maior que o interstício, por isso é pouco provável de acontecer.

Defeitos Pontuais

São descontinuidades localizadas nos arranjos atômicos de uma estrutura cristalina - associados a **uma ou duas posições atômicas**.



Impureza nos Sólidos

Impossível obter um metal formado apenas por um tipo de átomo



Átomos de **impureza ou elementos de liga** são adicionados nos metais para formação de **Ligas**



Soluções Sólidas

OU

Segunda Fase

Temperatura;

Tipo de impureza;

Concentração da impureza.

Soluções Sólidas

A estrutura cristalina do material que atua como matriz é mantida e não formam-se novas estruturas;

Solução
Sólida



Solvente: elemento ou composto em maior quantidade



Soluto: elemento ou composto em menor quantidade

As soluções sólidas formam-se mais **facilmente** quando o soluto e o solvente apresentam **estrutura cristalina e dimensões eletrônicas semelhantes.**

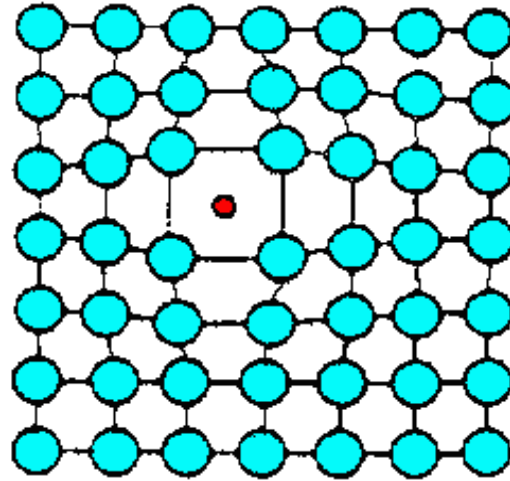
Solução Sólida

A solubilidade do soluto no solvente, **ocupando posições substitucionais**, dependem de algumas regras (Regras de *Hume-Rothery*):

- 1) **Fator do tamanho atômico**: ocorre quando a **diferença entre os raios atômicos é menor do que aprox. 15%**, caso contrário o átomo do soluto cria distorções na rede cristalina e uma nova fase é formada;
- 2) **Estrutura Cristalina**: para boa solubilidade a estrutura cristalina dos sólidos devem ser as mesmas;
- 3) **Eletronegatividade**: quanto maior a diferença de eletronegatividade maior a tendência de formação de composto ao invés de solução sólida;
- 4) **Valência**: um metal tem maior tendência de dissolver um outro de menor valência.

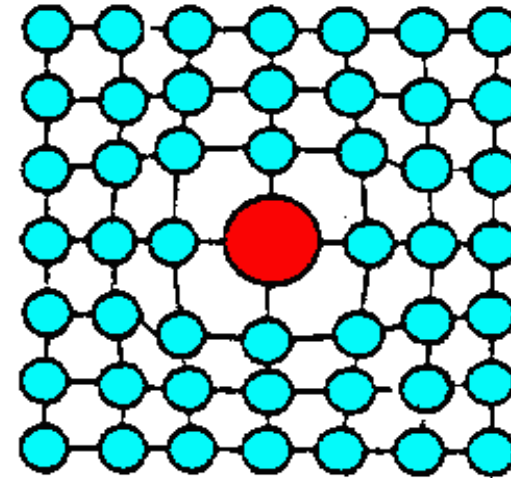
Soluções Sólidas – Defeitos Pontuais

Intersticial

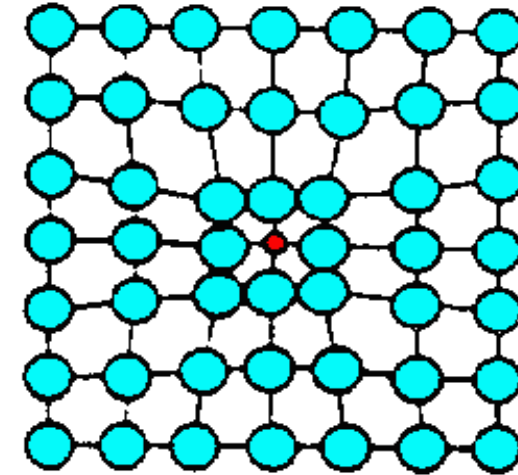


- ✓ Ocorre quando a impureza apresenta **raio atômico bem menor** que o hospedeiro;
- ✓ Como os metais tem geralmente FEA alto as posições intersticiais são relativamente pequenas.

Substitucional



(a)



(b)

Quando um átomo ou um íon é substituído por um tipo diferente de átomo ou íon, pode:

(a) aproximar os átomos da rede
ou

(b) separar os átomos da rede

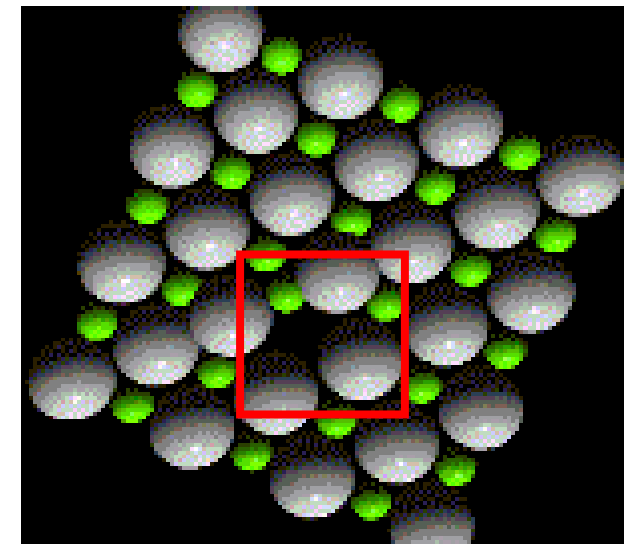
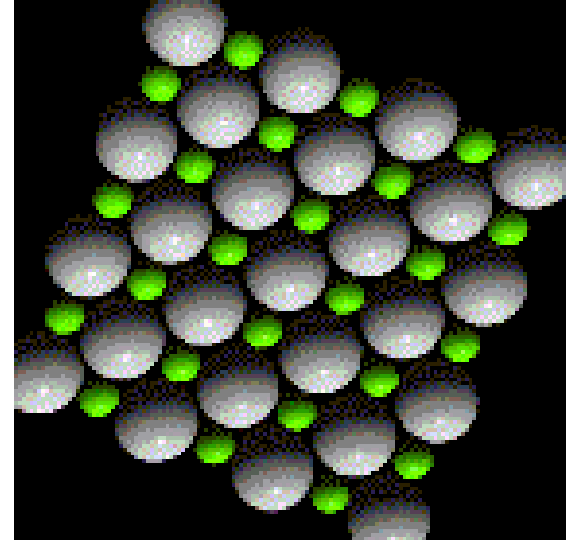
Soluções Sólidas

Intersticial

Substitucional

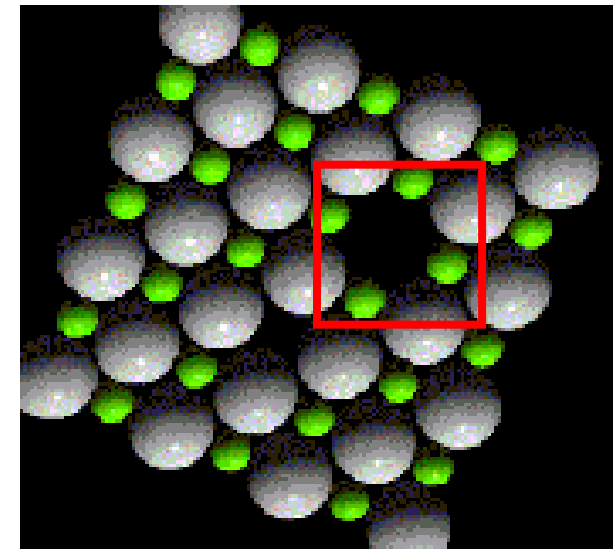
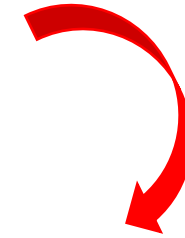
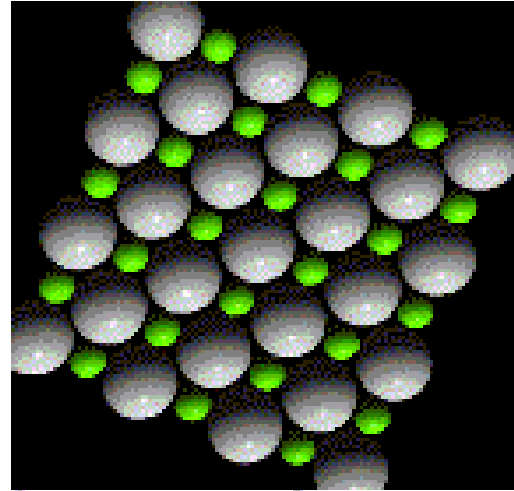
Defeitos Pontuais em sólidos iônicos - Frenkel

- ✓ Par lacuna-interstício;
- ✓ Ocorre quando um **íon** sai de sua posição normal e vai para um **interstício**.
- ✓ Ocorre em **sólidos iônicos** mas pode também ocorrer em metais e em materiais com ligações covalente;



Defeitos Pontuais em sólidos iônicos - Schottky

- ✓ Exclusivo de materiais iônicos;
- ✓ Normalmente encontrados em cerâmicas;
- ✓ Envolve a **falta de um ânion e/ou um cátion.**



Classificação dos Defeitos

- Defeitos Pontuais;
- **Defeitos Lineares;**
- Defeitos Planos ou Interfaciais

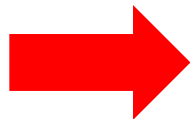
Defeitos Lineares

Discordâncias são imperfeições lineares em cristais em torno da qual os átomos estão desalinhados

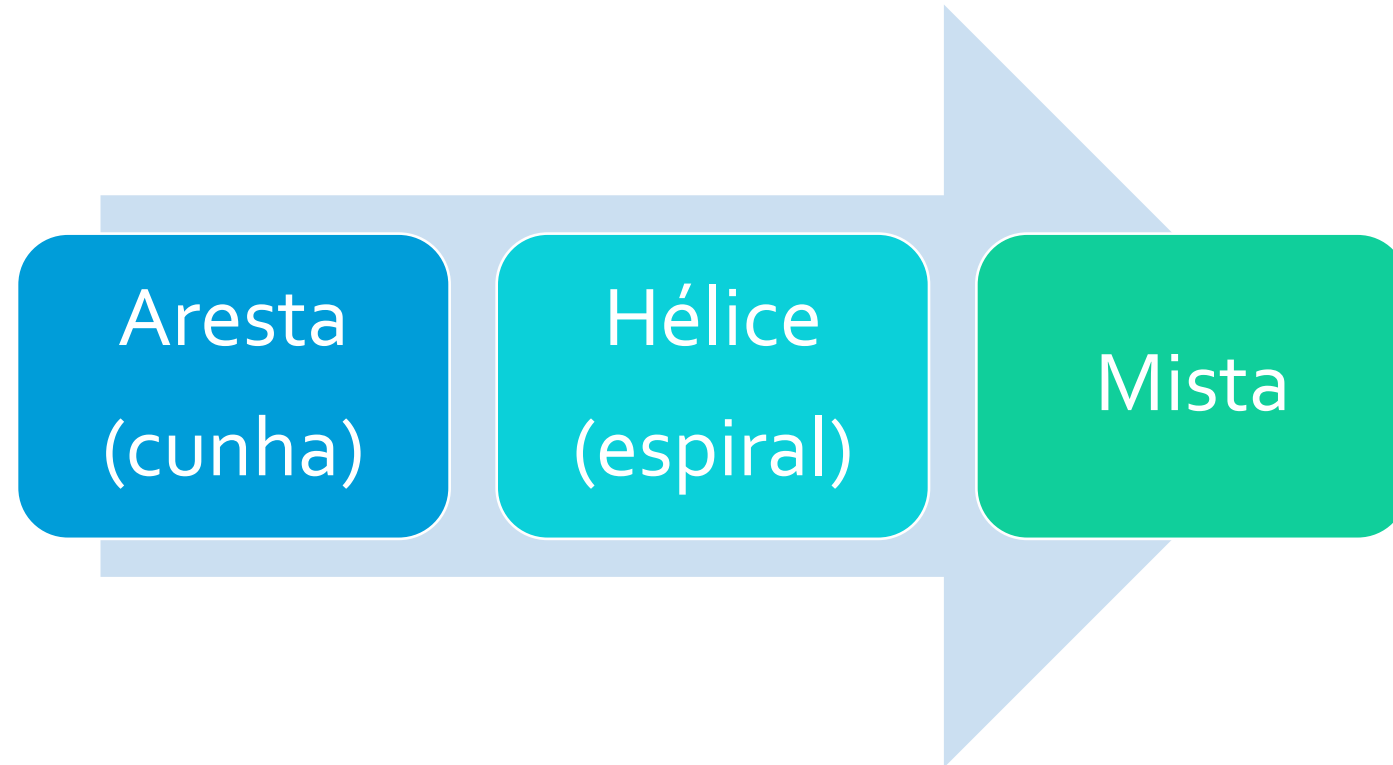
Ocorrem durante a solidificação ou quando o material é deformado de modo permanente

Quantidade e movimento das discordâncias podem ser controlados pelo grau de deformação (conformação mecânica) e/ou por tratamentos térmicos

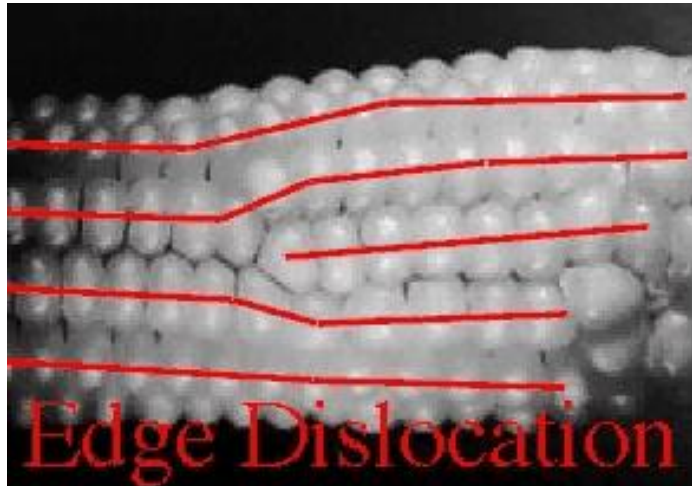
São particularmente úteis no entendimento da deformação e no aumento da resistência mecânica dos metais



Defeitos Lineares - Discordâncias

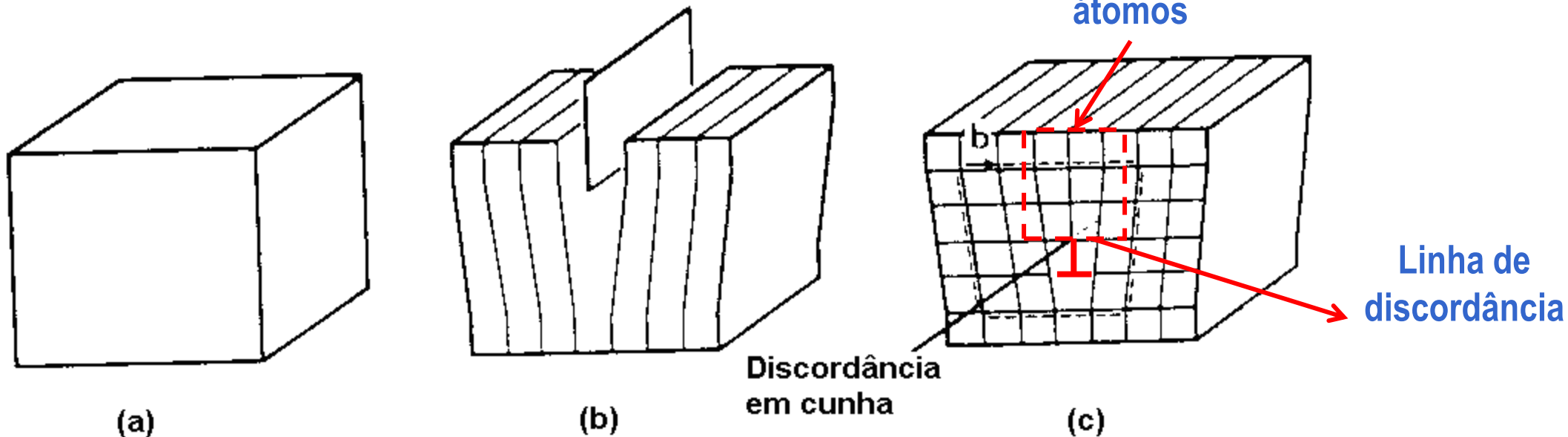


Defeitos Lineares - Aresta



Vista superior da discordância

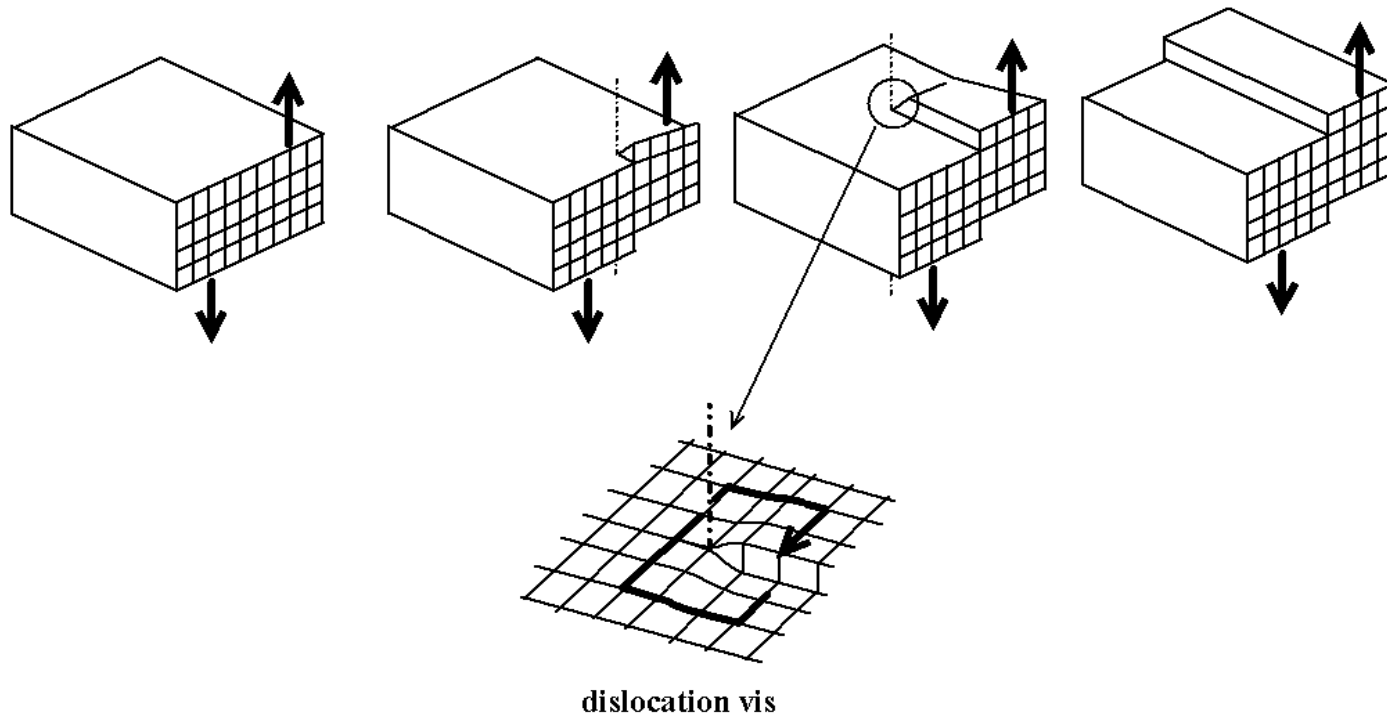
- ✓ Ilustrada pelo corte de um cristal perfeito, afastando as duas partes e preenchendo o corte com um semiplano de átomos;
- ✓ Envolve zonas de compressão e tração;



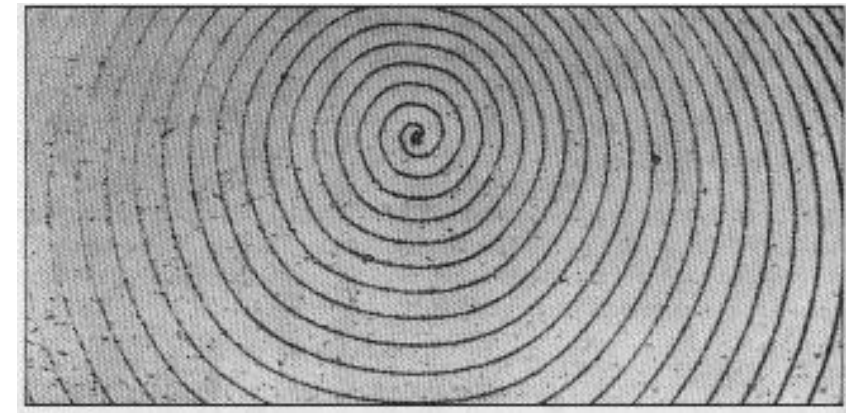
Defeitos Lineares - Espiral

- ✓ Consequência da tensão cisalhante aplicada para produzir uma distorção, de forma que a região superior do cristal é deslocada uma distância atômica para a direita com relação à porção inferior

CALLISTER JR., W. D. Fundamentos da Ciência e Engenharia de Materiais: Uma abordagem integrada, 2ª ed, Rio de Janeiro: LTC, 2006.



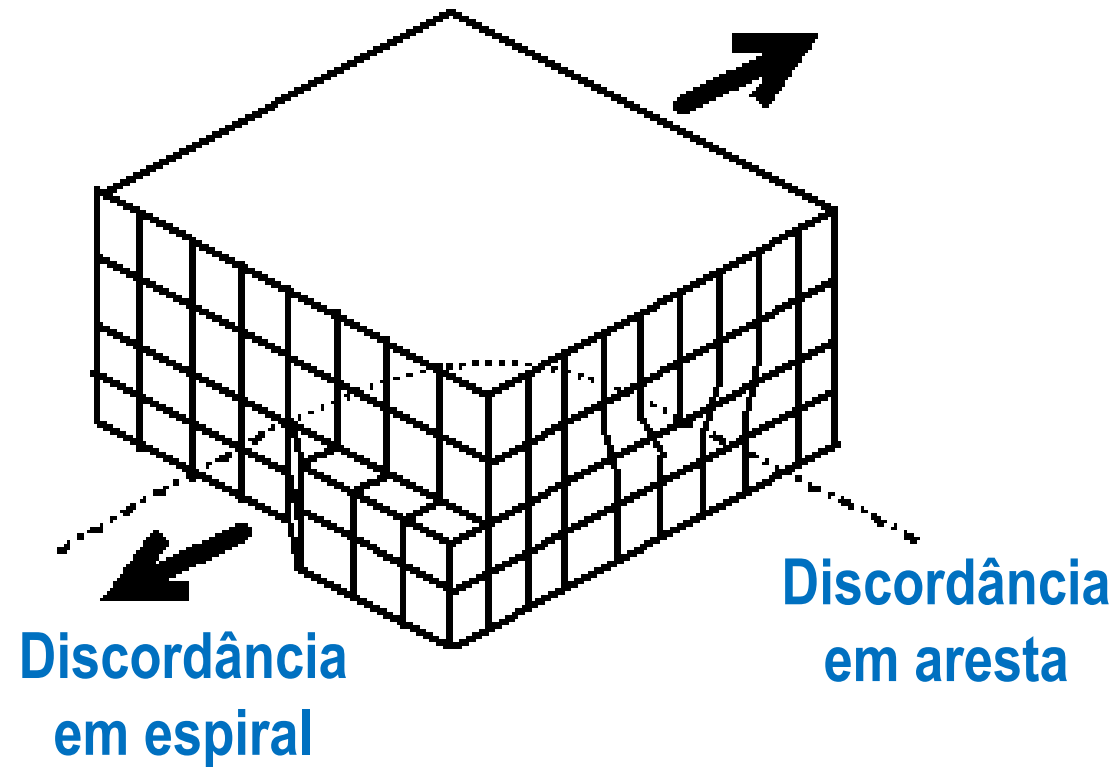
- ✓ Ilustrada pelo corte parcial de um cristal perfeito, deslocando a rede de um espaçamento atômico ;



Discordância em espiral na superfície de um monocristal de SiC. As linhas escuras são degraus de escorregament superficiais. (Fig. 5.3-2 em Schaffer et al.).

Defeitos Lineares - Mista

Em um cristal pode ocorrer os dois tipos de discordância



Classificação dos Defeitos

- Defeitos Pontuais;
- Defeitos Lineares;
- **Defeitos Planos ou Interfaciais**

Defeitos Planos ou Interfaciais

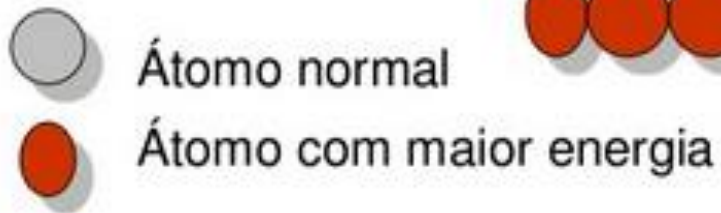
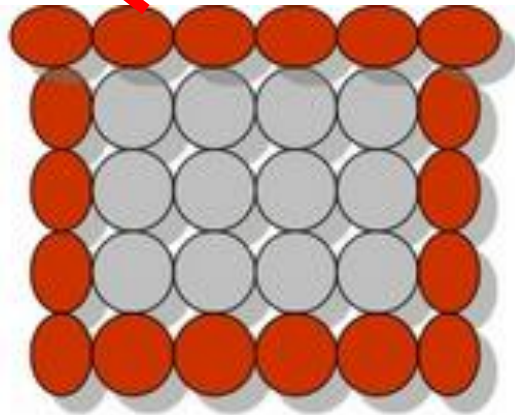
Envolvem fronteiras, ou seja, são contornos que possuem duas dimensões e que normalmente separam regiões dos materiais com estrutura cristalina e/ou orientações cristalográficas diferentes;

- ✓ **Superfícies Externas;**
- ✓ **Contorno de Grão;**
- ✓ **Contornos de Macla**

Defeitos Planos ou Interfaciais

Superfície Externa, Contorno de Grão e Macla

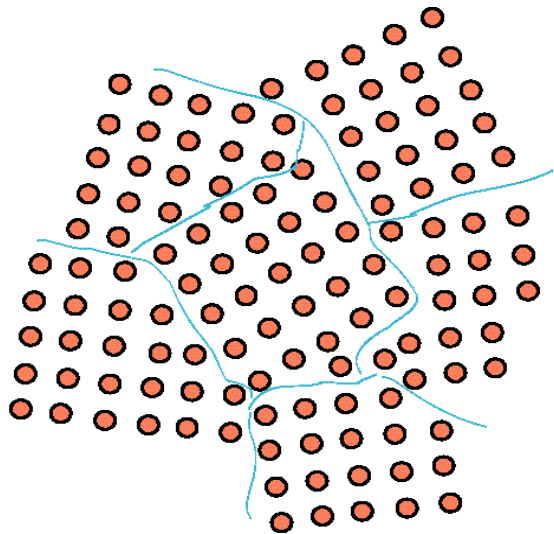
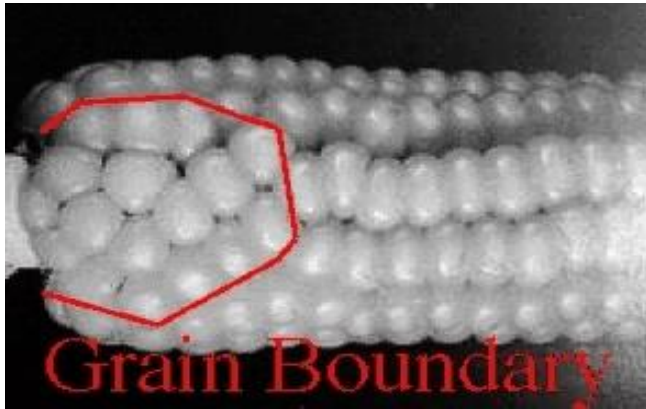
Ligações
incompletas geram
uma energia
superficial



- ✓ Mais evidente dos defeitos de superfície devido a descontinuidade;
- ✓ O estado energia dos átomos na superfície é maior que no interior do cristal;
- ✓ Os átomos tendem a minimizar esta energia diminuindo a área total da superfície.

Defeitos Planos ou Interfaciais

Superfície Externa, Contorno de Grão e Macla

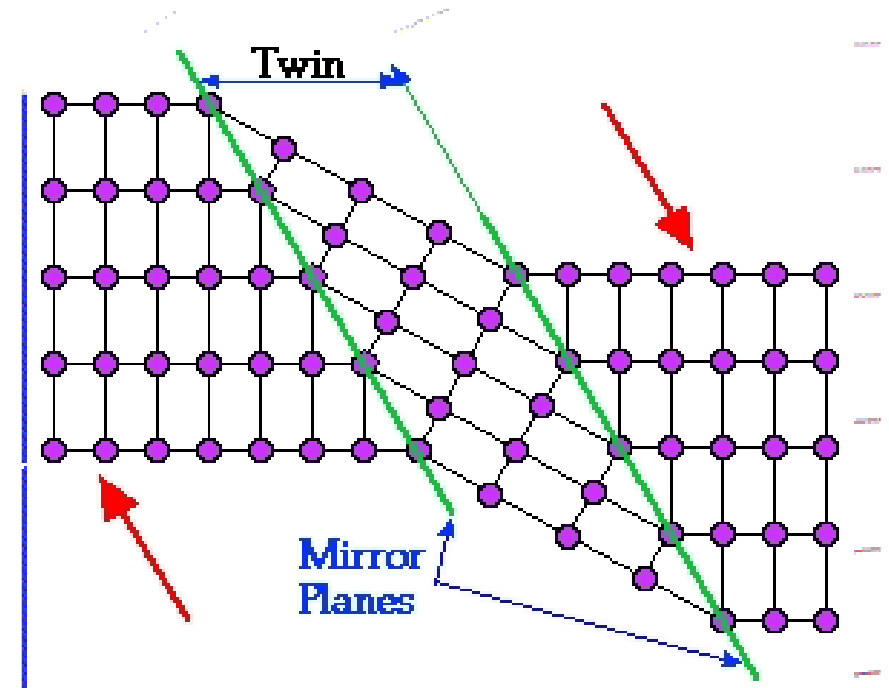


- ✓ Microestrutura de metais e outros materiais sólidos consistem de muitos grãos;
- ✓ **Grão:** são formados por vários cristais com orientação cristalográfica própria;
- ✓ Contorno de grão: fronteira entre os grãos, região de descontinuidade;
- ✓ Os contornos de grão são arranjos de discordâncias e, portanto, é uma região de maior energia em relação ao interior do cristal.

Defeitos Planos – Contornos de macla

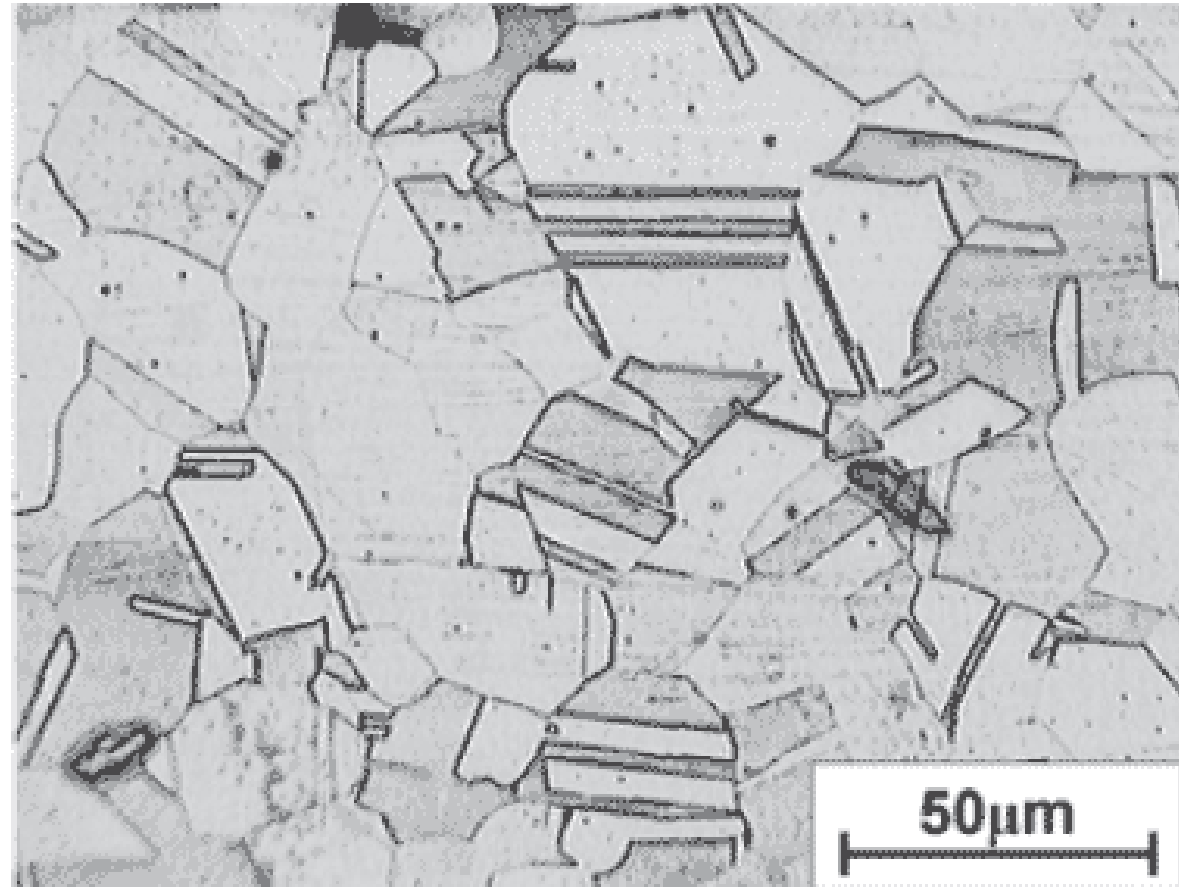
Superfície Externa, Contorno de Grão e Macla

- ✓ É um tipo especial de contorno de grão;
- ✓ Os átomos de um lado do contorno são **imagens simétricas em espelho** dos átomos do outro lado do contorno;
- ✓ A macla ocorre num **plano definido** e numa **direção específica**, dependendo da estrutura cristalina;
- ✓ O seu aparecimento está geralmente associado com a presença de:
 - tensões térmicas e mecânicas
 - impurezas, etc



Maclas de Deformação
Maclas de Recozimento

Defeitos Planos – Contornos de macla

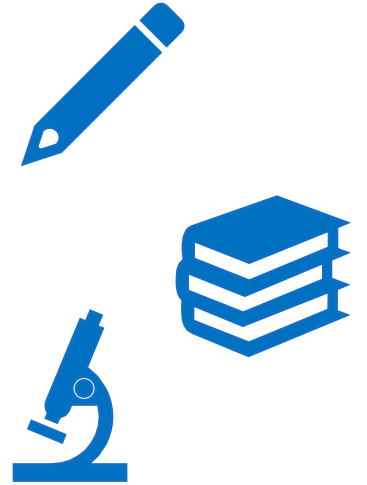


Micrografia ótica do aço inoxidável austenítico como recebido: grãos austeníticos maclados

Atividade para ser entregue até a próxima aula

Quais são as técnicas de microscopia mais utilizadas no estudo das estruturas dos materiais?

Buscar na literatura imagens de microscopia que evidenciem a presença de defeitos lineares e planos.



REFERÊNCIAS E BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

- CALLISTER JR., W. D. **Fundamentos da Ciência e Engenharia de Materiais: Uma abordagem integrada**, 2ª ed, Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- VAN VLACK, H. L. **Princípios de Ciência dos Materiais**, São Paulo: Cengage Learning, 2008.
- ASKELAND, D. R. e PHULÉ, P. P. **Ciência e Engenharia dos Materiais**, São Paulo: Edgar Blucher, 1970.
- Notas de aula Prof. C.P. Bergmann - DEMAT - EE – UFRGS.
- PADILHA, A. F. **Materiais de engenharia: microestrutura e propriedades**. São Paulo: Hemus Editora, 1997.
- ASHBY, M. F.; Jones, D. R. H. **Engenharia de materiais**, 2 vol. Rio de Janeiro: Elsevier Editora, 2007.



***Muito
obrigada!***



Aula 5 – Parte 2 Imperfeições em Sólidos Cristalinos

Kelly Benini





Discordâncias x Propriedades Mecânicas

Imperfeições em Sólidos Cristalinos



Defeitos

✓ Pontuais;

✓ Lineares (Discordâncias);

✓ Planos.

A movimentação deste tipo de defeito pela estrutura está relacionado com a **Deformação Plástica**

Portanto, a capacidade de um material se deformar está relacionada com a habilidade das discordâncias se movimentarem

Movimentação de Discordâncias

Conceitos Principais

Escorregamento: Processo pelo qual uma discordância se move para causar uma deformação.

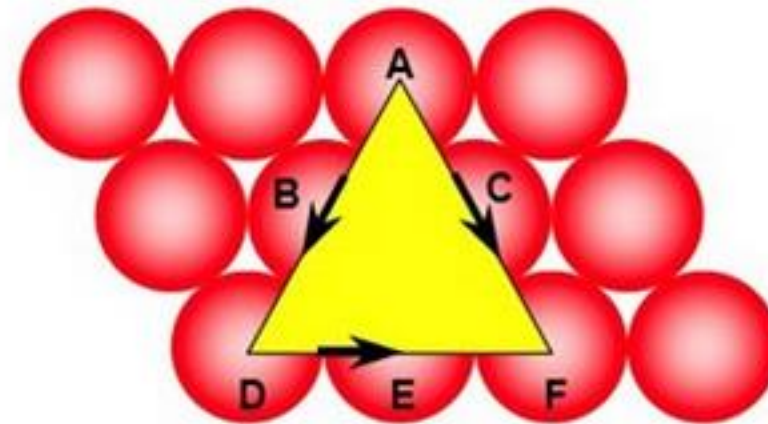
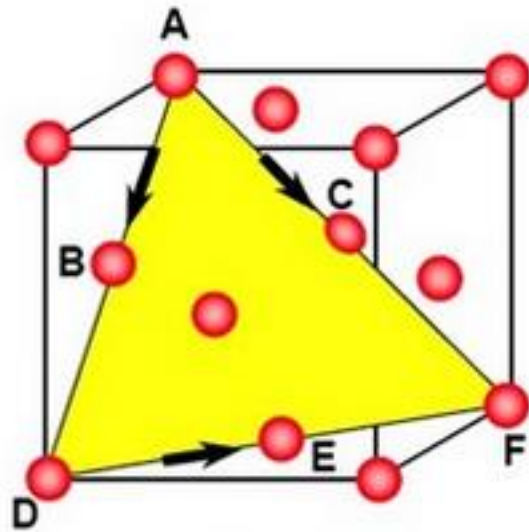
Plano de Escorregamento: Plano cristalográfico ao longo do qual a linha de discordância se move.

Densidade de Discordância: Total de discordância por unidade de volume.

Tensão de Cisalhamento: Os materiais podem ser solicitados por tensões de tração, compressão e cisalhamento, porém em geral são menos resistentes ao cisalhamento.

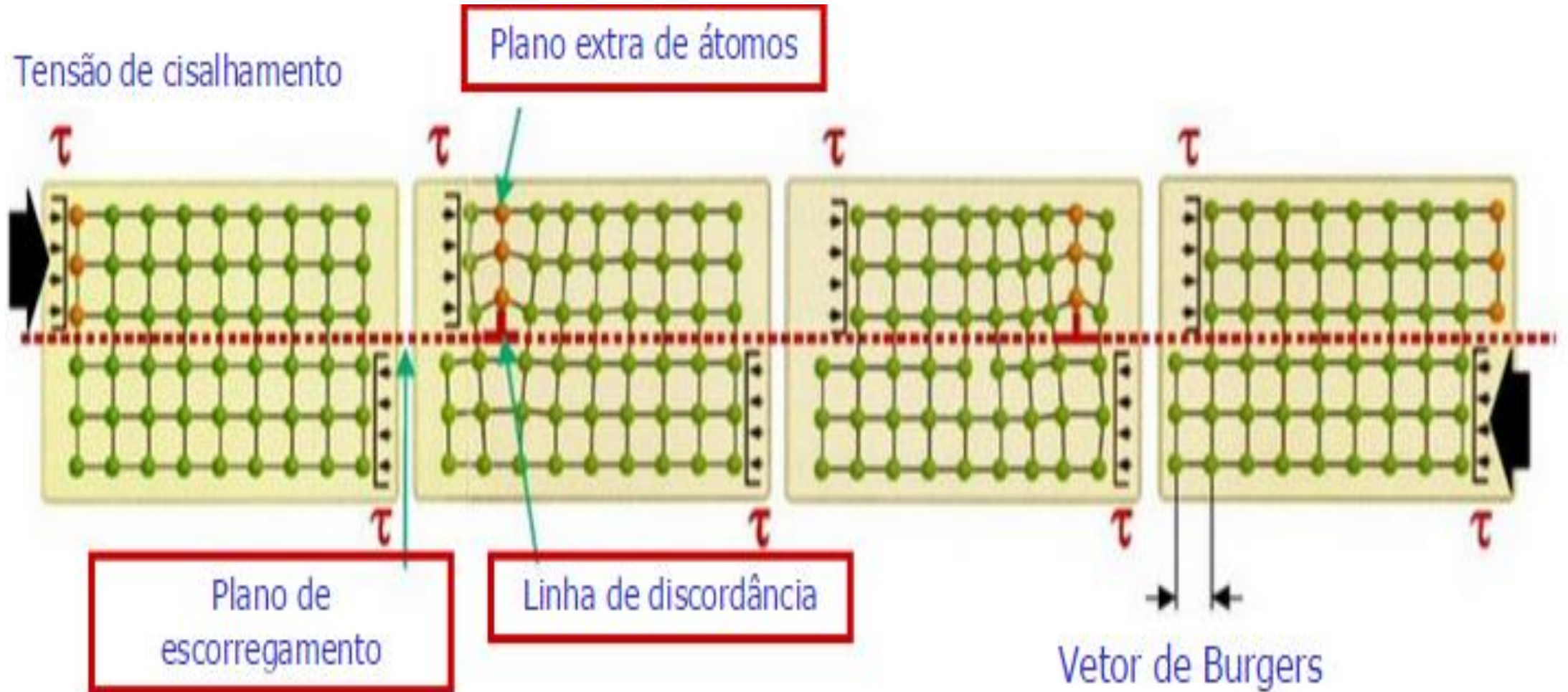
Sistemas de Escorregamento

É a combinação do **Plano** e **Direção de Escorregamento** preferenciais na qual as discordâncias se movimentam com maior facilidade



Movimentação de Discordâncias

Escorregamento de Planos → Movimentação de discordâncias

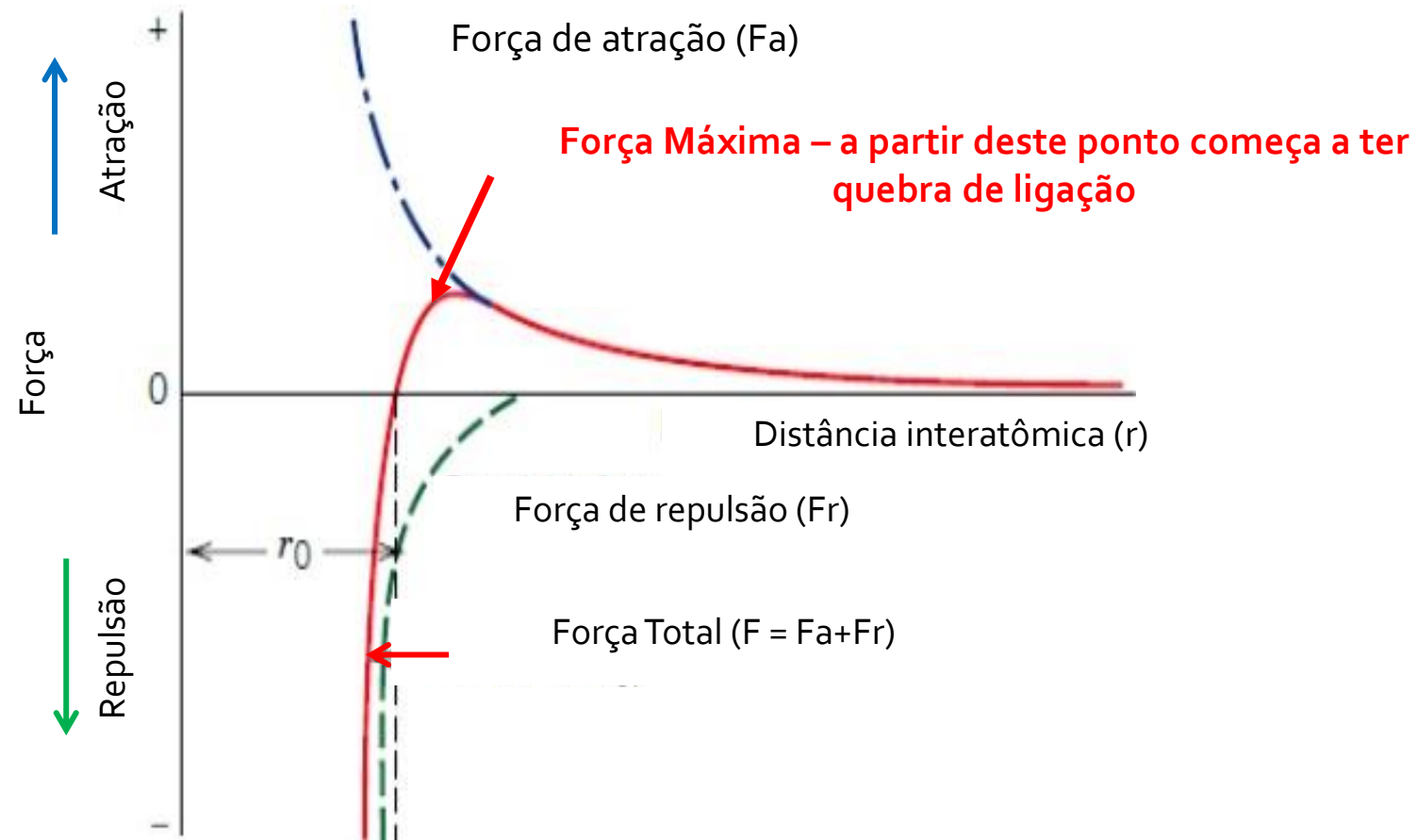


Sistemas de Escorregamento

Metais	Escorregamento		
	Plano	Direção	Nº de Sistemas
Cúbico de Face Centrada (CFC)			
Cu, Al, Ni, Ag, Au	{111}	<1-10>	12
Cúbico de Corpo Centrado (CCC)			
Fe-alfa, W, Mo	{111}	<-111>	12
Fe-alfa, W	{211}	<-111>	12
Fe-alfa, K	{321}	<-111>	24
Hexagonal Compacta (HC)			
Cd, Zn, Mg, Ti, Be	{0001}	<11-20>	3
Ti, Mg, Zr	{10-10}	<11-20>	3
Ti, Mg	{10-11}	<11-20>	6

Geralmente, metais com maior número de sistemas de escorregamento são mais dúcteis. Por isso, metais com estruturas dos tipos CFC e CCC são dúcteis e metais com estrutura HC são frágeis.

Deformação Plástica

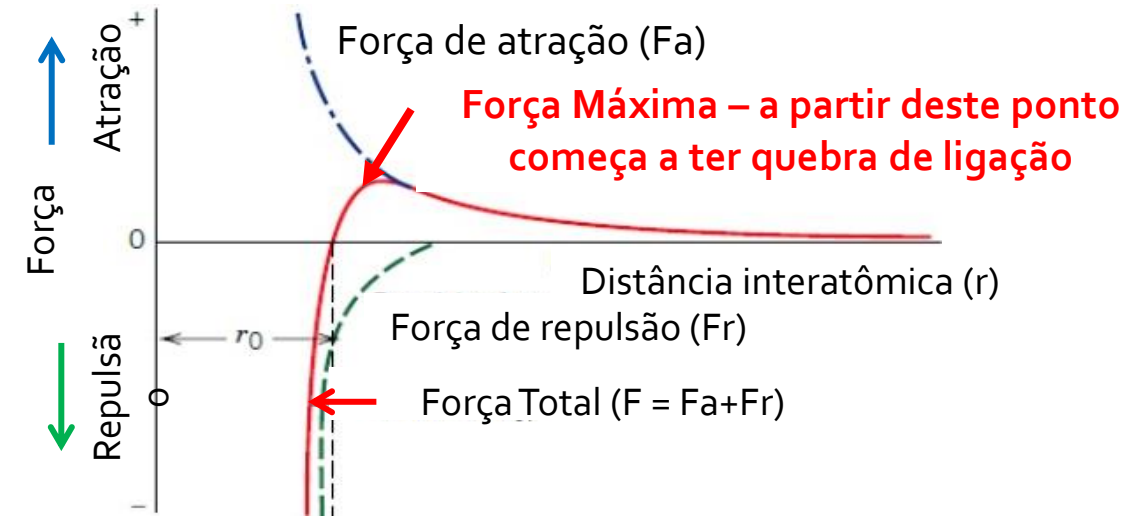
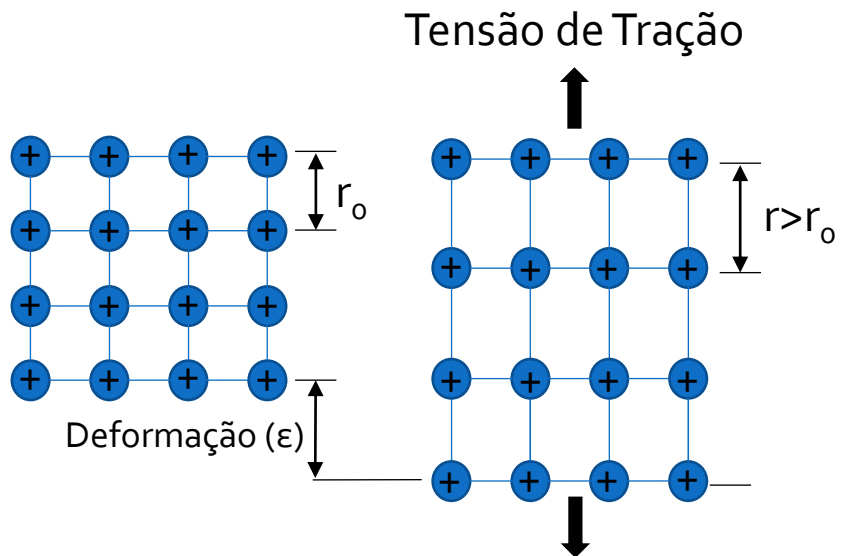
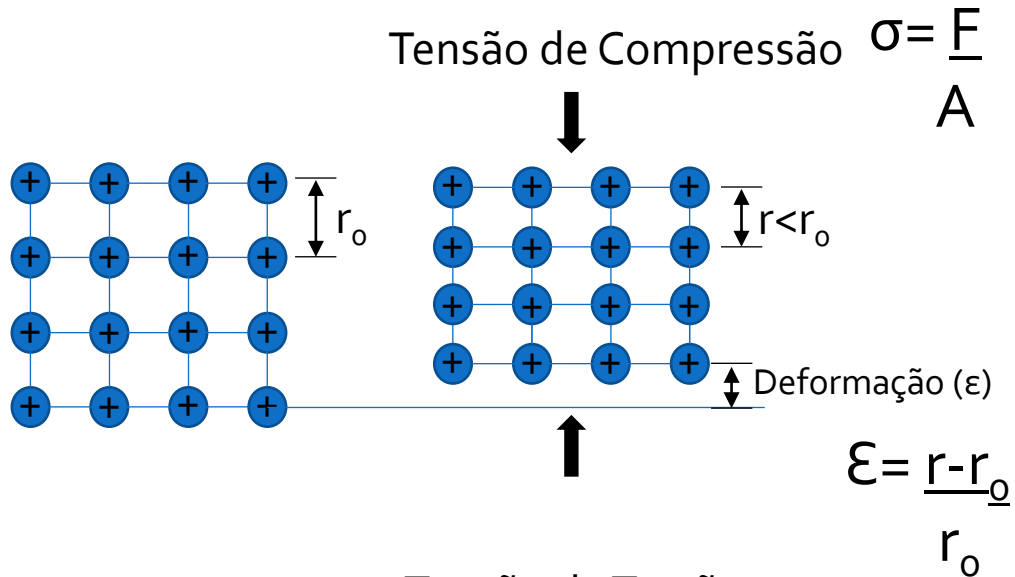


Se a força aplicada for maior que $f_{\text{máxima}}$ ocorre quebra das ligações químicas e formação de novas ligações com átomos de posições vizinhas, ocorrendo então a deformação plástica.



A deformação plástica portanto é irreversível

Deformação Elástica



Está associada a um estiramento sem a quebra das ligações químicas entre os átomos de um sólido.



Ocorre uma variação entre as distâncias interatômicas, que quando acumuladas em uma peça é chamada de **deformação elástica**.

Módulo Elástico

Resistência à deformação elástica do material e está intimamente relacionada à força de ligação química.

Ligações Primárias: Resultam em valores elevados do módulo de elasticidade

Material	Ligação	E (GPa)
Diamante	Ligação Covalente	1000
Aço	Ligação Metálica	200
Polímeros	Ligações Covalentes Presença de ligações secundárias entre as cadeias	3,3 - PVC 2,4 - Epoxy 1,1 - Polietileno

Resistência Teórica

O valor da resistência teórica de um sólido pode ser obtido usando a física do estado sólido para estimar a tensão necessária para romper as ligações químicas primárias.

$$\tau_{teórica} = \frac{F_{MAX}}{A_{SECÃO\ TRANSV.}}$$

Considera a força de ligação entre os átomos em um cristal perfeito!

$$\tau_{teórica} \gg \gg \tau_{medida}$$

Discordância e Mecanismo de aumento de resistência



Resistência Medida x Resistência Teórica

(baseada na força de ligação
de um cristal perfeito)



Porque os metais deformam elasticamente e plasticamente?



Porque a deformação plástica resulta em alterações das propriedades mecânicas?

Discordância e Mecanismo de aumento de resistência



Resistência Medida x Resistência Teórica

(baseada na força de ligação
de um cristal perfeito)

↓
Presença de defeitos
(Discordâncias)

Movimentação das discordâncias

Deformação Plástica é facilitada

↓
Cristal perfeito não tem discordância

A força pra deformar plasticamente o
material deve ser maior

Discordância e Mecanismo de aumento de resistência



Resistência Medida x Resistência Teórica

(baseada na força de ligação
de um cristal perfeito)

Porque os metais deformam elasticamente e plasticamente?

Porque quando é solicitado mecânicamente as discordâncias se movem, de forma que ocorre uma variação entre as distâncias interatômicas (deformação elástica) ou rompimento de ligações e formação de novas ligações entre átomos adjacentes (deformação plástica).



Discordância e Mecanismo de aumento de resistência



Resistência Medida x Resistência Teórica

(baseada na força de ligação
de um cristal perfeito)



Porque os metais deformam elasticamente e plasticamente?

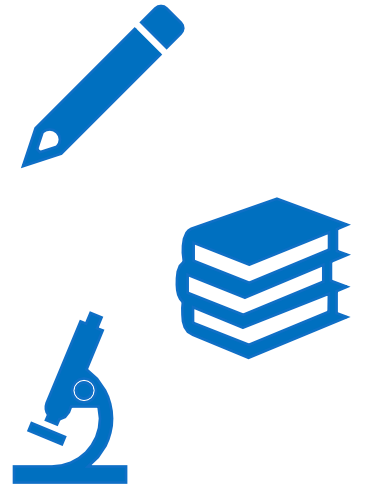


Porque a deformação plástica resulta em alterações das propriedades mecânicas?

A deformação plástica aumenta a densidade de discordância, de forma que uma discordância barra a movimentação da outra. Assim a restrição à movimentação de discordâncias é o que torna um material mais resistente a um determinado esforço mecânico

Atividade para ser entregue até a próxima aula

Relacionar Ligações, Defeitos e Resistência Mecânica



REFERÊNCIAS E BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

- CALLISTER JR., W. D. **Fundamentos da Ciência e Engenharia de Materiais: Uma abordagem integrada**, 2ª ed, Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- VAN VLACK, H. L. **Princípios de Ciência dos Materiais**, São Paulo: Cengage Learning, 2008.
- ASKELAND, D. R. e PHULÉ, P. P. **Ciência e Engenharia dos Materiais**, São Paulo: Edgar Blucher, 1970.
- Notas de aula Prof. C.P. Bergmann - DEMAT - EE – UFRGS.
- PADILHA, A. F. **Materiais de engenharia: microestrutura e propriedades**. São Paulo: Hemus Editora, 1997.
- ASHBY, M. F.; Jones, D. R. H. **Engenharia de materiais**, 2 vol. Rio de Janeiro: Elsevier Editora, 2007.



***Muito
obrigada!***