

Imperfeições na rede cristalina

Introdução ao estudo dos materiais

Estruturas dos sólidos cristalinos

Imperfeições na rede cristalina

Difusão em sólidos metálicos

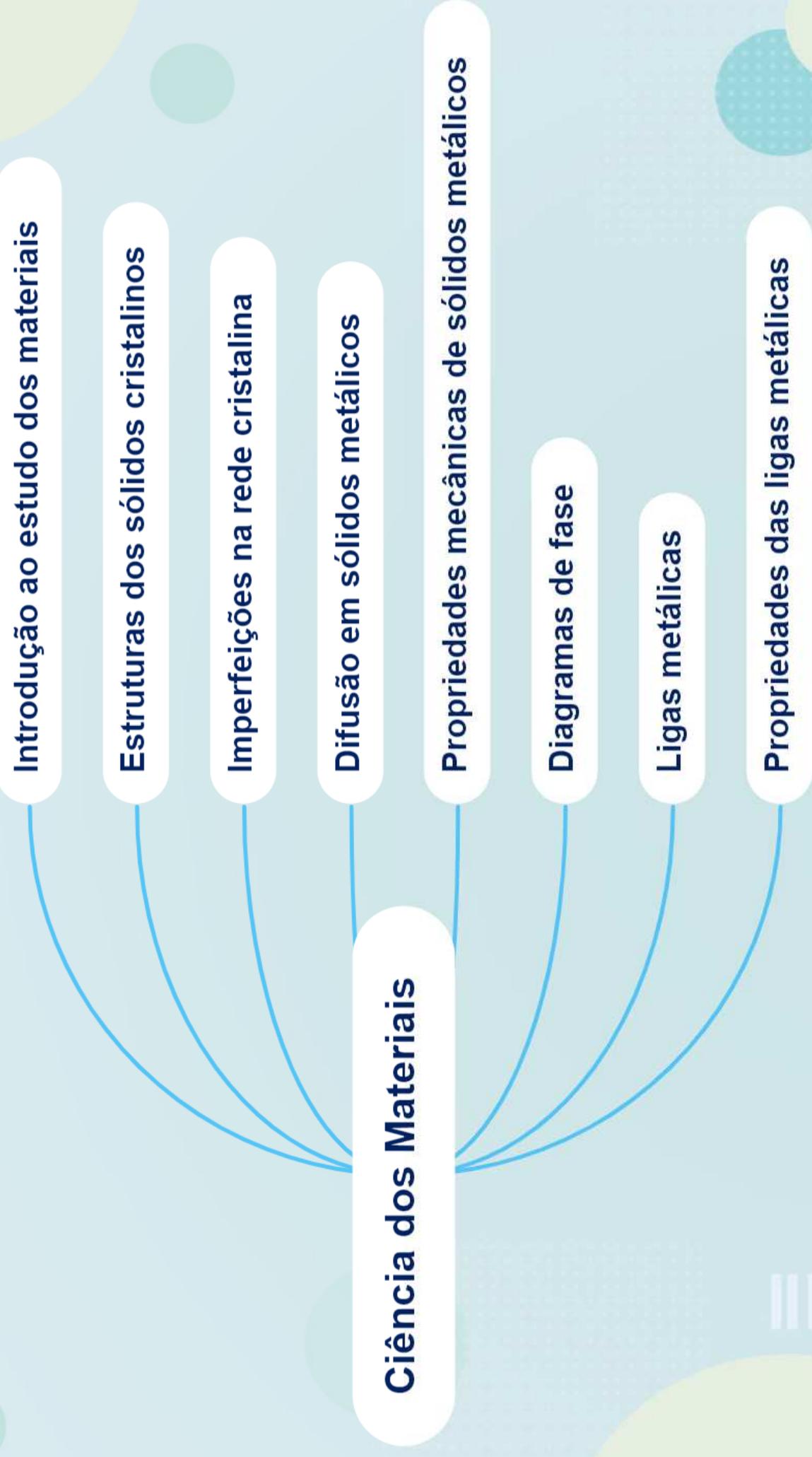
Propriedades mecânicas de sólidos metálicos

Diagramas de fase

Ligas metálicas

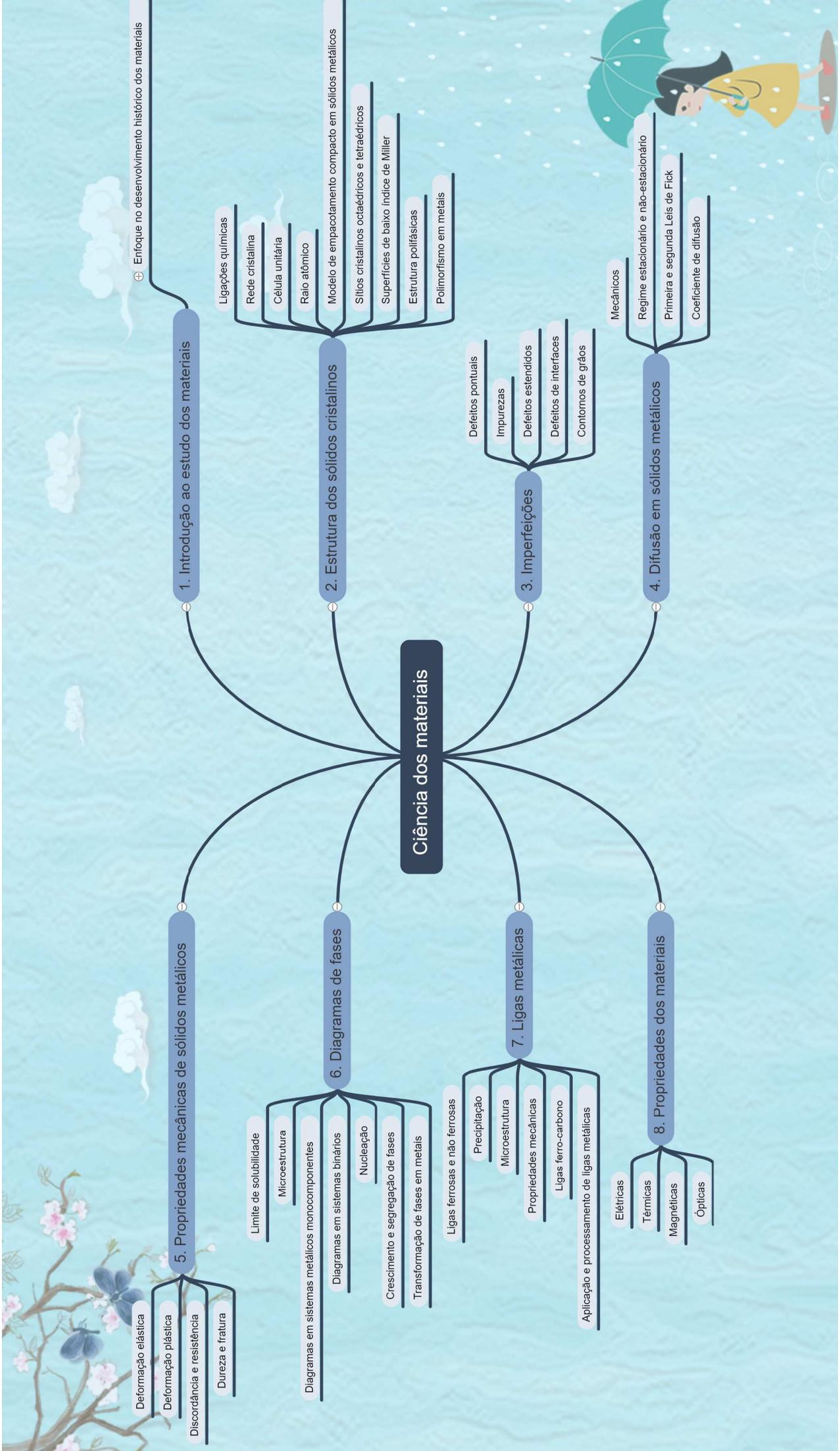
Propriedades das ligas metálicas

Ciência dos Materiais



```
graph TD; A[Ciência dos Materiais] --- B[Introdução ao estudo dos materiais]; A --- C[Estruturas dos sólidos cristalinos]; A --- D[Imperfeições na rede cristalina]; A --- E[Difusão em sólidos metálicos]; A --- F[Propriedades mecânicas de sólidos metálicos]; A --- G[Diagramas de fase]; A --- H[Ligas metálicas]; A --- I[Propriedades das ligas metálicas];
```





Ciência dos materiais

1. Introdução ao estudo dos materiais

⊕ Enfoque no desenvolvimento histórico dos materiais

2. Estrutura dos sólidos cristalinos

- Ligações químicas
- Rede cristalina
- Célula unitária
- Raio atômico
- Modelo de empacotamento compacto em sólidos metálicos
- Sítios cristalinos octaédricos e tetraédricos
- Superfícies de baixo índice de Miller
- Estrutura polifásicas
- Polimorfismo em metais

3. Imperfeições

- Defeitos pontuais
- Impurezas
- Defeitos estendidos
- Defeitos de interfaces
- Contornos de grãos

4. Difusão em sólidos metálicos

- Mecânicos
- Regime estacionário e não-estacionário
- Primeira e segunda Leis de Fick
- Coefficiente de difusão

5. Propriedades mecânicas de sólidos metálicos

- Deformação elástica
- Deformação plástica
- Discordância e resistência
- Dureza e fratura

6. Diagramas de fases

- Limite de solubilidade
- Microestrutura
- Diagramas em sistemas metálicos monocomponentes
- Diagramas em sistemas binários
- Nucleação
- Crescimento e segregação de fases
- Transformação de fases em metais

7. Ligas metálicas

- Ligas ferrosas e não ferrosas
- Precipitação
- Microestrutura
- Propriedades mecânicas
- Ligas ferro-carbono
- Aplicação e processamento de ligas metálicas

8. Propriedades dos materiais

- Elétricas
- Térmicas
- Magnéticas
- Ópticas

Ciências dos Materiais

3. Imperfeições nos sólidos

Defeitos pontuais

Impurezas

Defeitos estendidos

Defeitos de interfaces

Contornos de grãos

Defeitos em Cristais

Não existe cristal perfeito.

Tipos de defeitos:

Pontuais

Lineares

Planares

Volumétricos

Imperfeições na rede cristalina: Defeitos pontuais

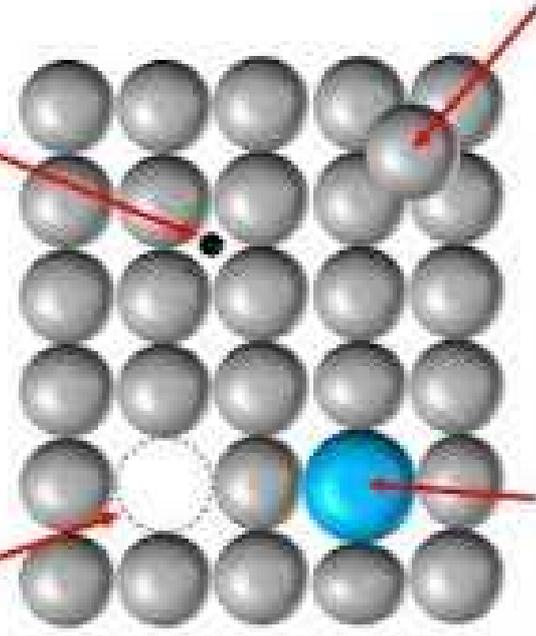
Ciências dos Materiais

3. Imperfeições nos sólidos

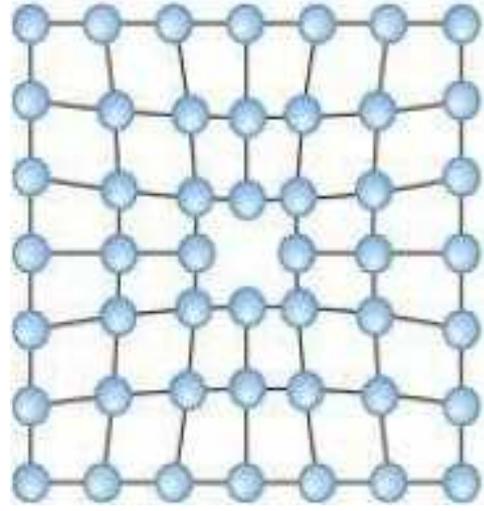
Defeitos pontuais

```
graph TD; A[Ciências dos Materiais] --- B[3. Imperfeições nos sólidos]; B --- C[Defeitos pontuais];
```

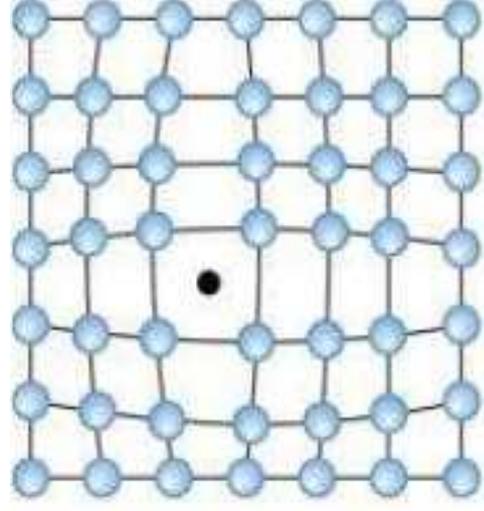
Vacância ou lacuna *Átomo de impureza intersticial*



Átomo de impureza substitucional *Átomo auto intersticial*

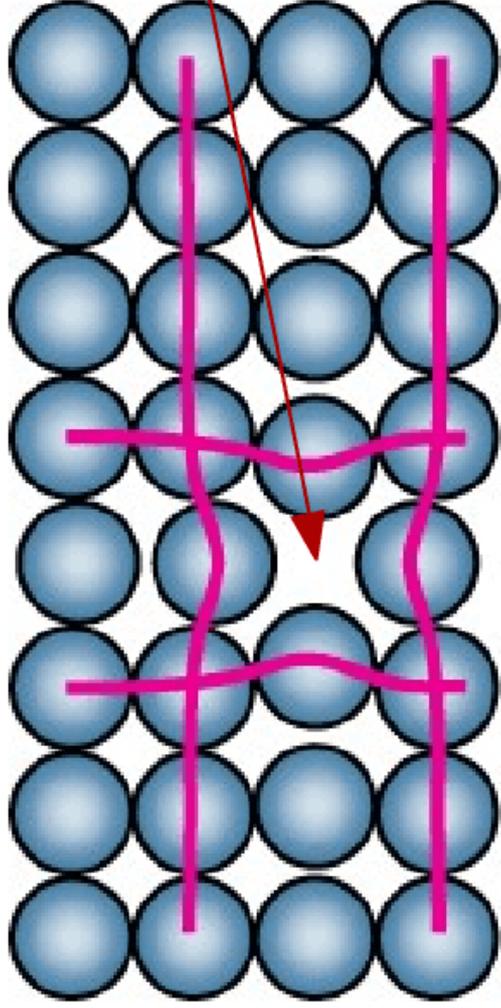


vacancy

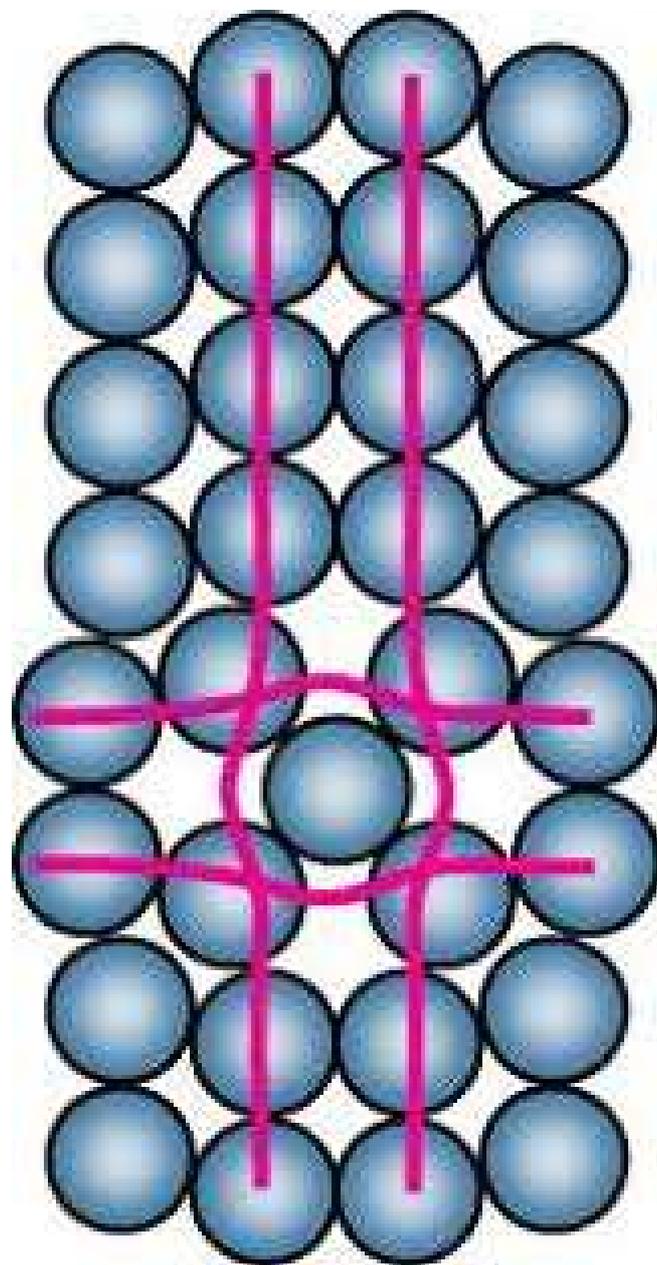


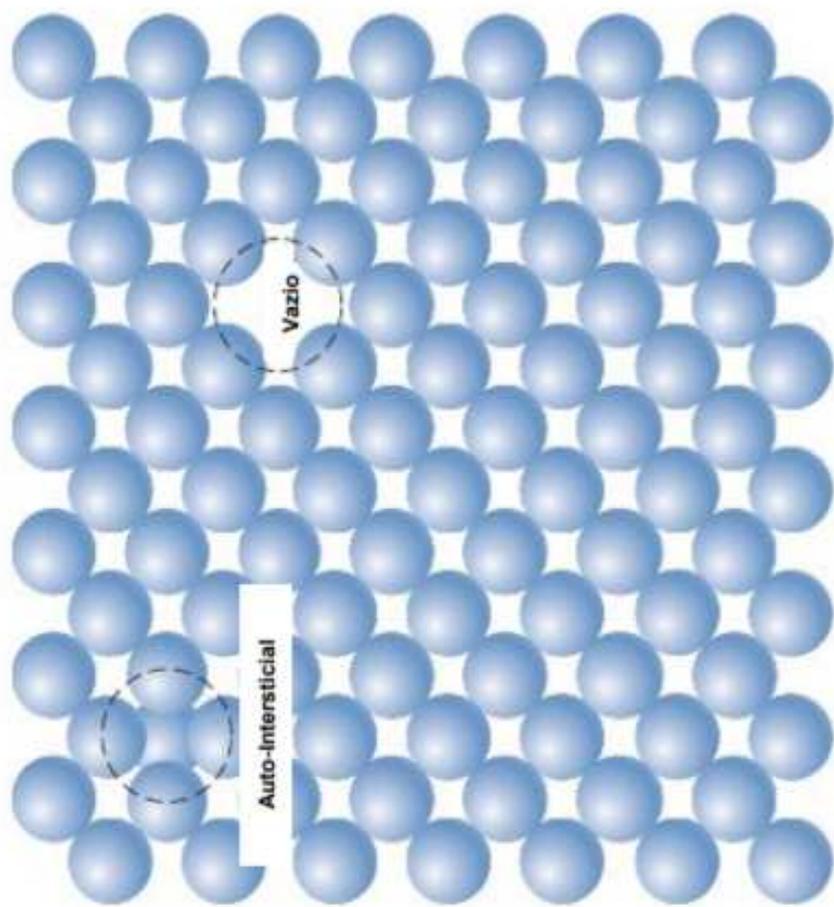
interstitial atom

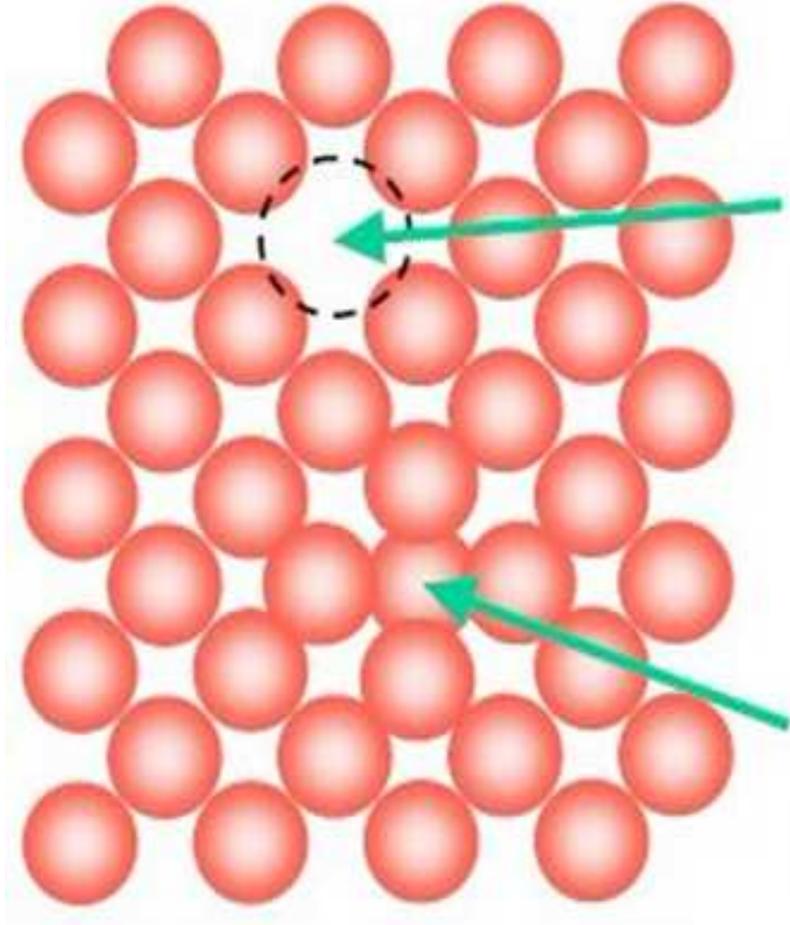
Lacuna



distorção
de planos



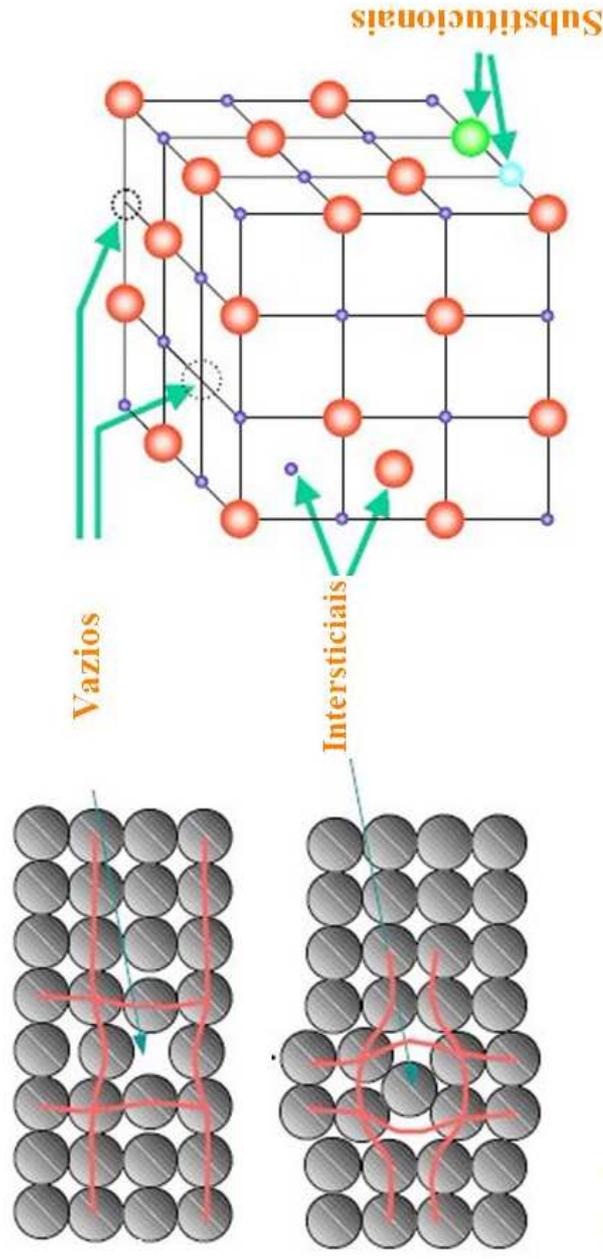




Vacância

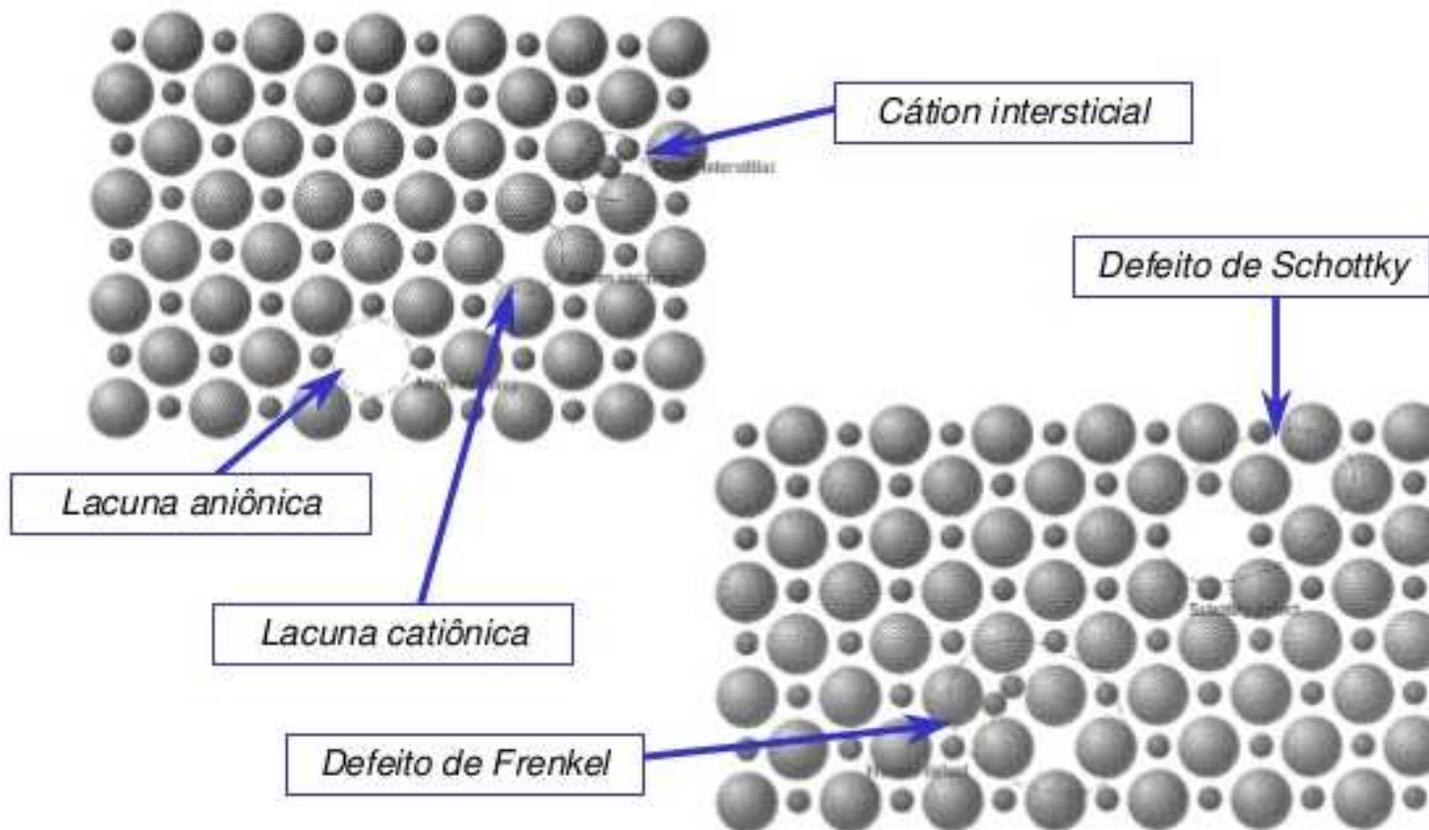
Átomo/íon em uma
posição intersticial

Vazios e Intersticiais



- Vazios: sítios atômicos vagos na estrutura cristalina
- Intersticiais: átomos extras ocupando posições entre os sítios atômicos
- Substitucionais: átomos de elementos "estranhos" inseridos na rede cristalina

Lacunas e defeitos intersticiais em sólidos iônicos



Número de lacunas em equilíbrio (N_l)

$$N_l = N \cdot \exp\left(-\frac{Q_l}{kT}\right)$$

onde: N é o número total de sítios atômicos, $N = \frac{N_A \cdot \rho}{A_{elemento}}$

Q_l é a energia necessária para a formação de uma lacuna

T é a temperatura absoluta em kelvin

k é a constante de Boltzmann

$$(k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/átomo K} = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/átomo K} = 1,987 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}})$$

$$\frac{N_l}{N} \approx 10^{-4} \text{ (próximo da temperatura de fusão, em cada } 10.000 \text{ sítios um se encontra vazio)}$$

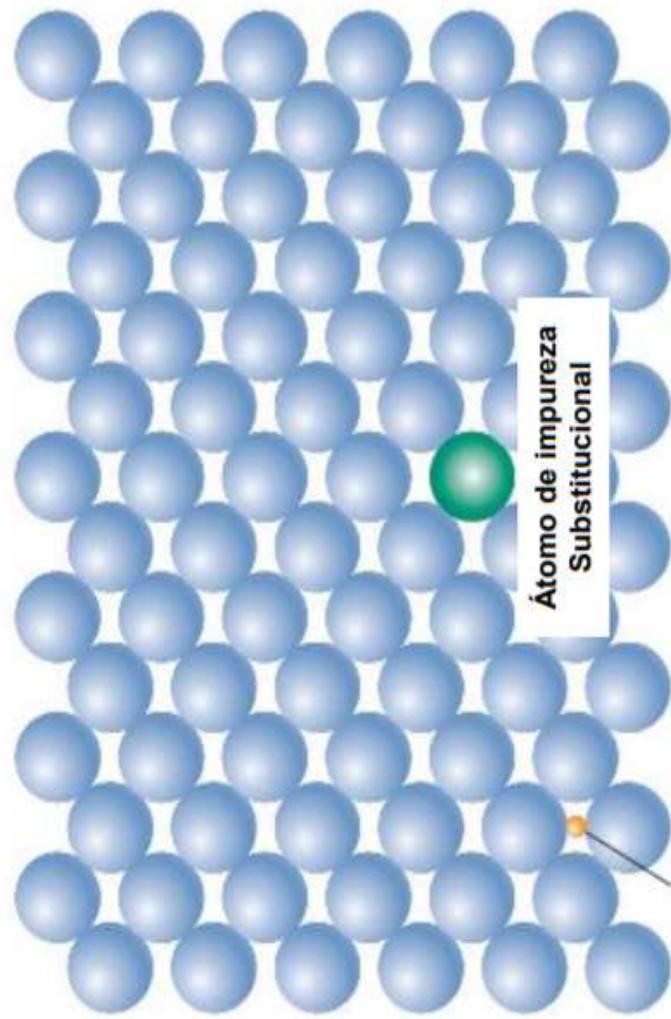
Imperfeições na rede cristalina: Impurezas

Ciências dos Materiais

3. Imperfeições nos sólidos

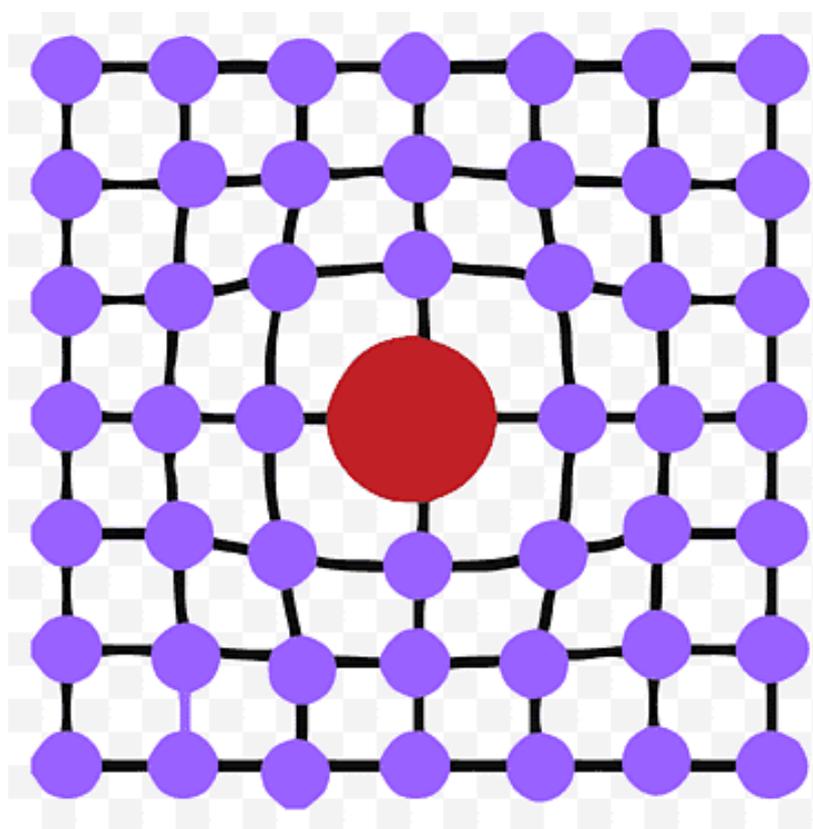
Impurezas

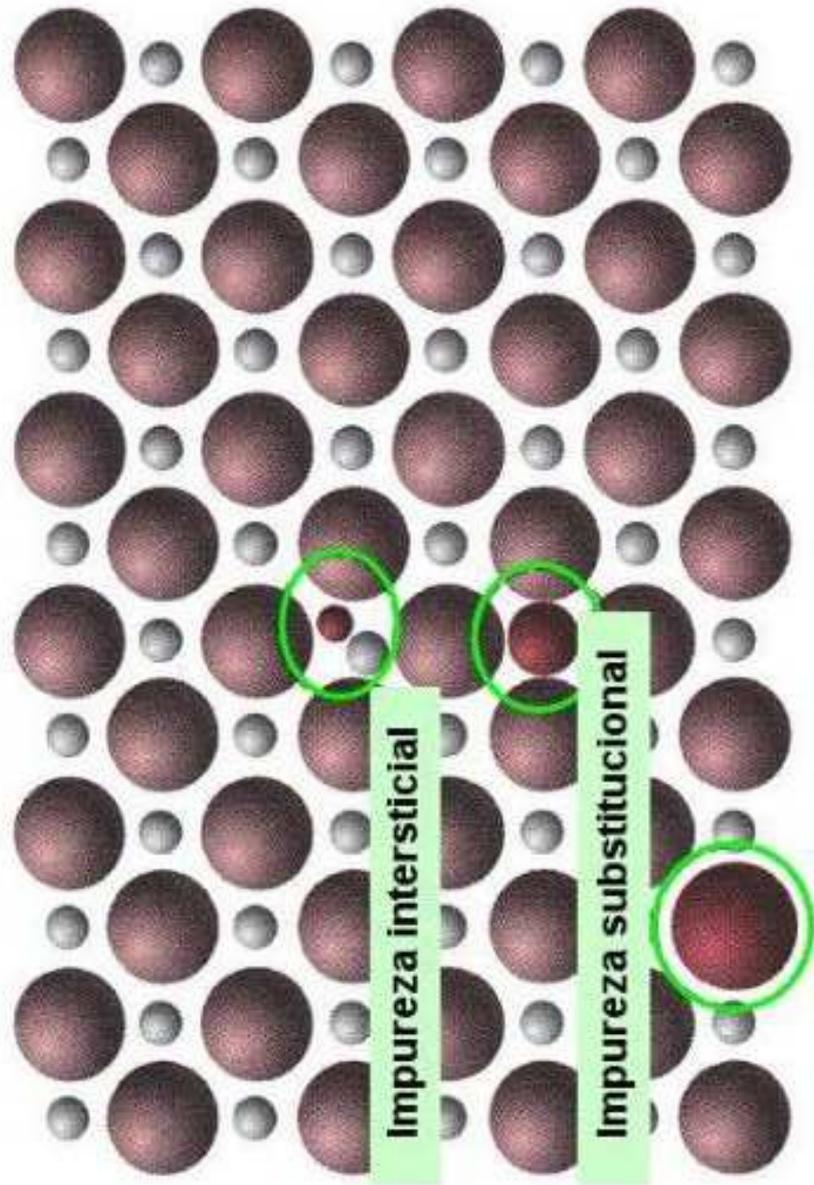
```
graph TD; A[Ciências dos Materiais] --- B[3. Imperfeições nos sólidos]; B --- C[Impurezas];
```



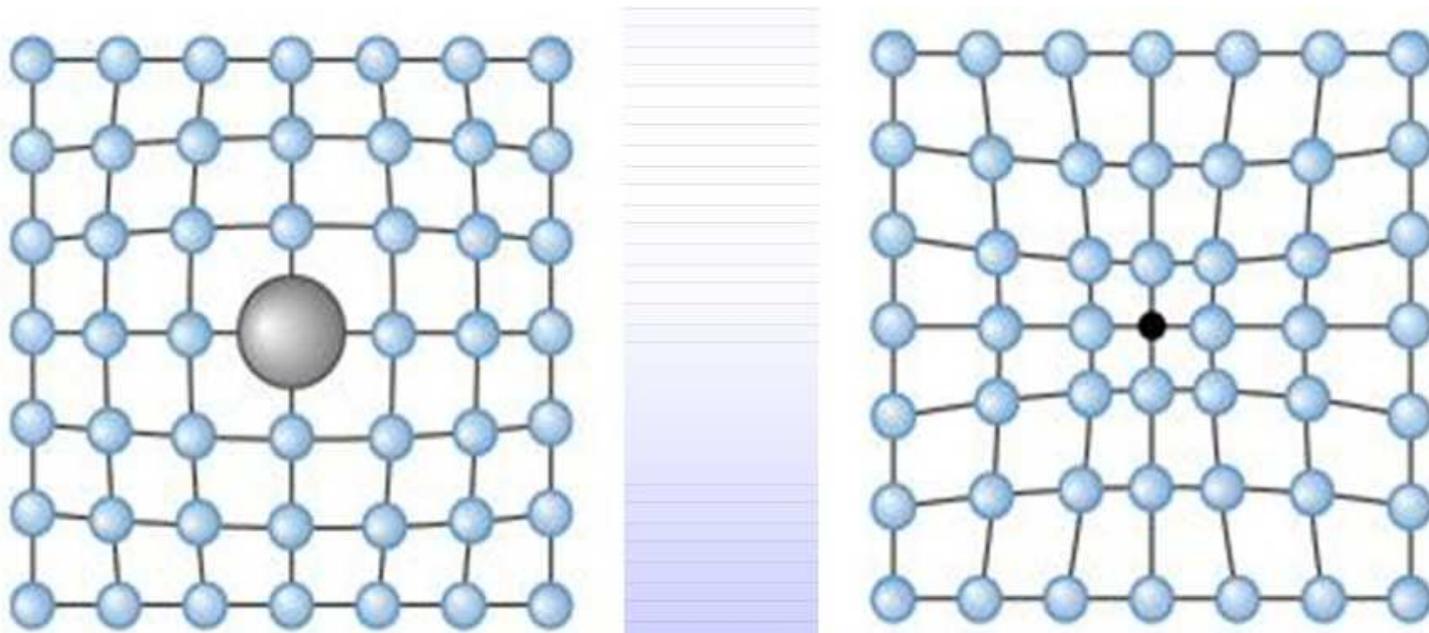
Átomo de impureza
Substitucional

Átomo de impureza
Intersticial



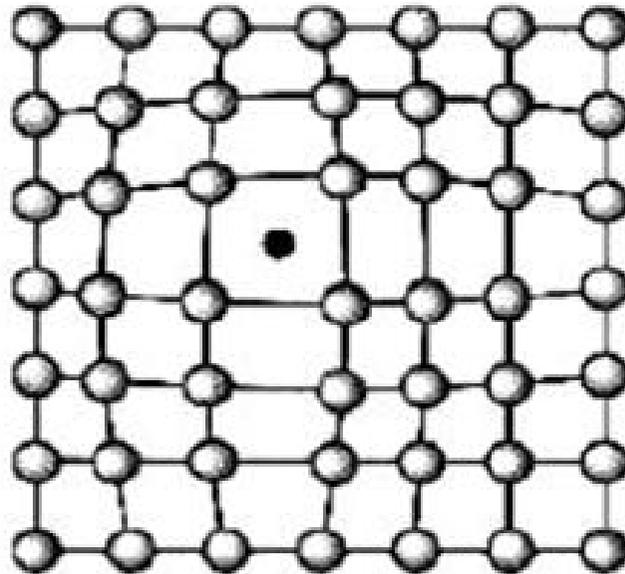


Impurezas substitucionais

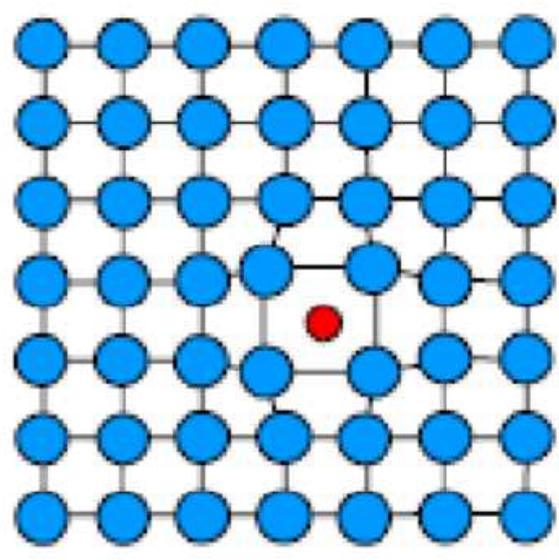
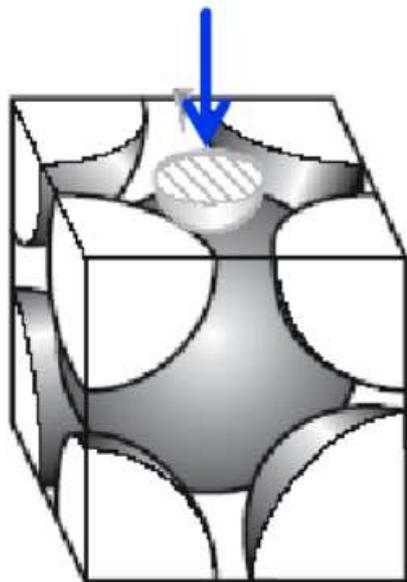


Um defeito intersticial introduz distorções relativamente grandes em sua vizinhança, na rede cristalina, especialmente se o átomo for maior que a posição intersticial onde ele for introduzido. Conseqüentemente, a formação deste tipo de defeito ocorre em concentrações muito reduzidas e são significativamente menores que as de lacunas. Entretanto, Um metal altamente puro, 99,999 %, apresenta impurezas da ordem de 10^{22} a 10^{23} átomos de impureza por metro cúbico do material.

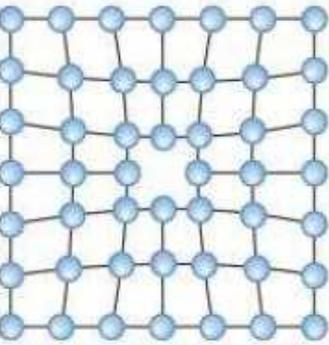
Impurezas intersticiais



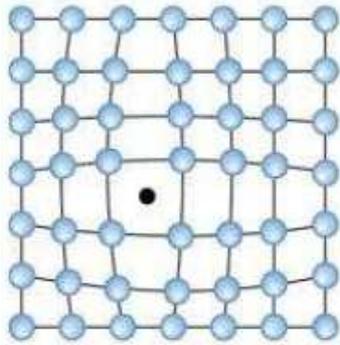
Átomo de carbono
(C) dissolvido
intersticialmente na
estrutura ccc (cúbica
de corpo centrado) de
um Fe α .



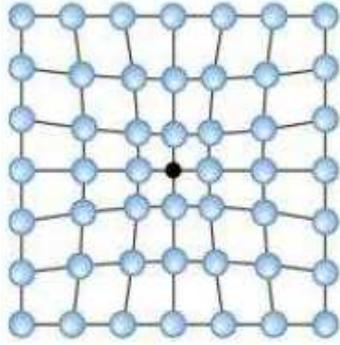
SUMMARY OF POINT DEFECTS



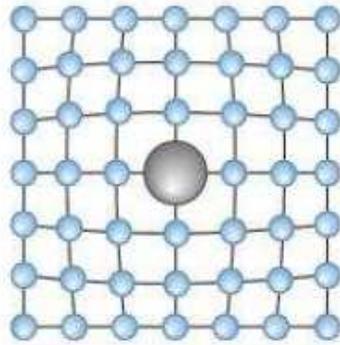
vacancy



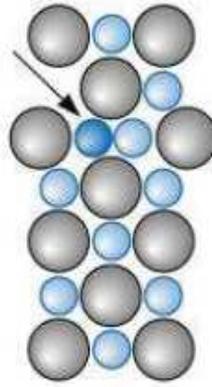
interstitial atom



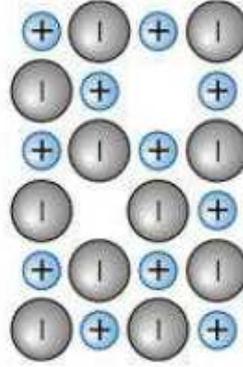
small substitutional atom



large substitutional atom



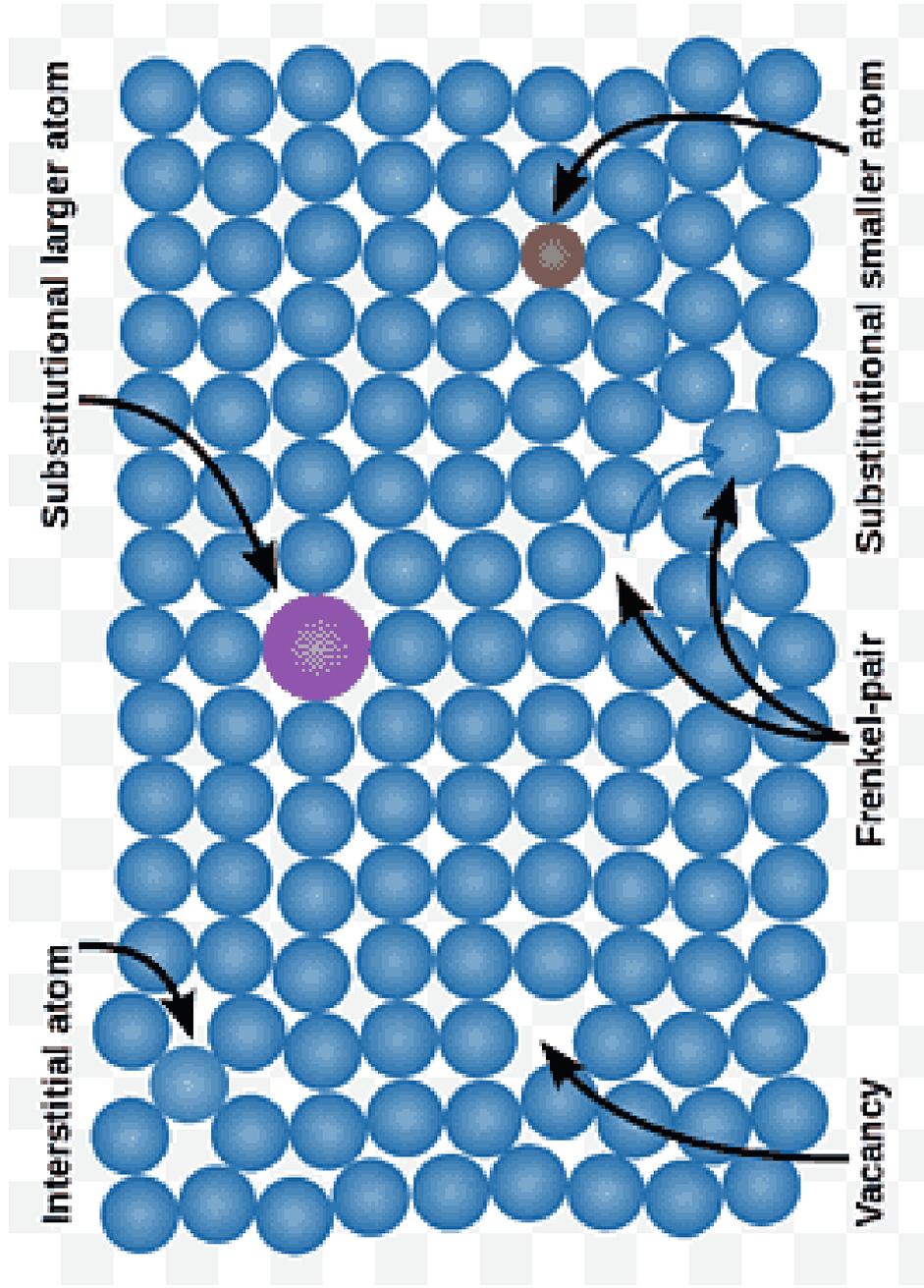
Frenkel defect



Schottky defect

a cation–vacancy and a
cation– interstitial pair.

a cation vacancy– anion vacancy pair



Imperfeições na rede cristalina: Soluções sólidas e ligas metálicas

Ligas metálicas

- Impurezas são adicionadas intencionalmente com a finalidade:
 - aumentar a resistência mecânica
 - aumentar a resistência à corrosão
 - Aumentar a condutividade elétrica

Exemplo de liga: 92,5 % de Ag e 7,5 % de Cu

- A adição de átomos de impurezas a um metal irá resultar a formação de:
 - Soluções sólidas < limite de solubilidade
 - Segunda fase > limite de solubilidade
- A solubilidade depende :
 - Temperatura
 - Tipo de impureza
 - Concentração da impureza

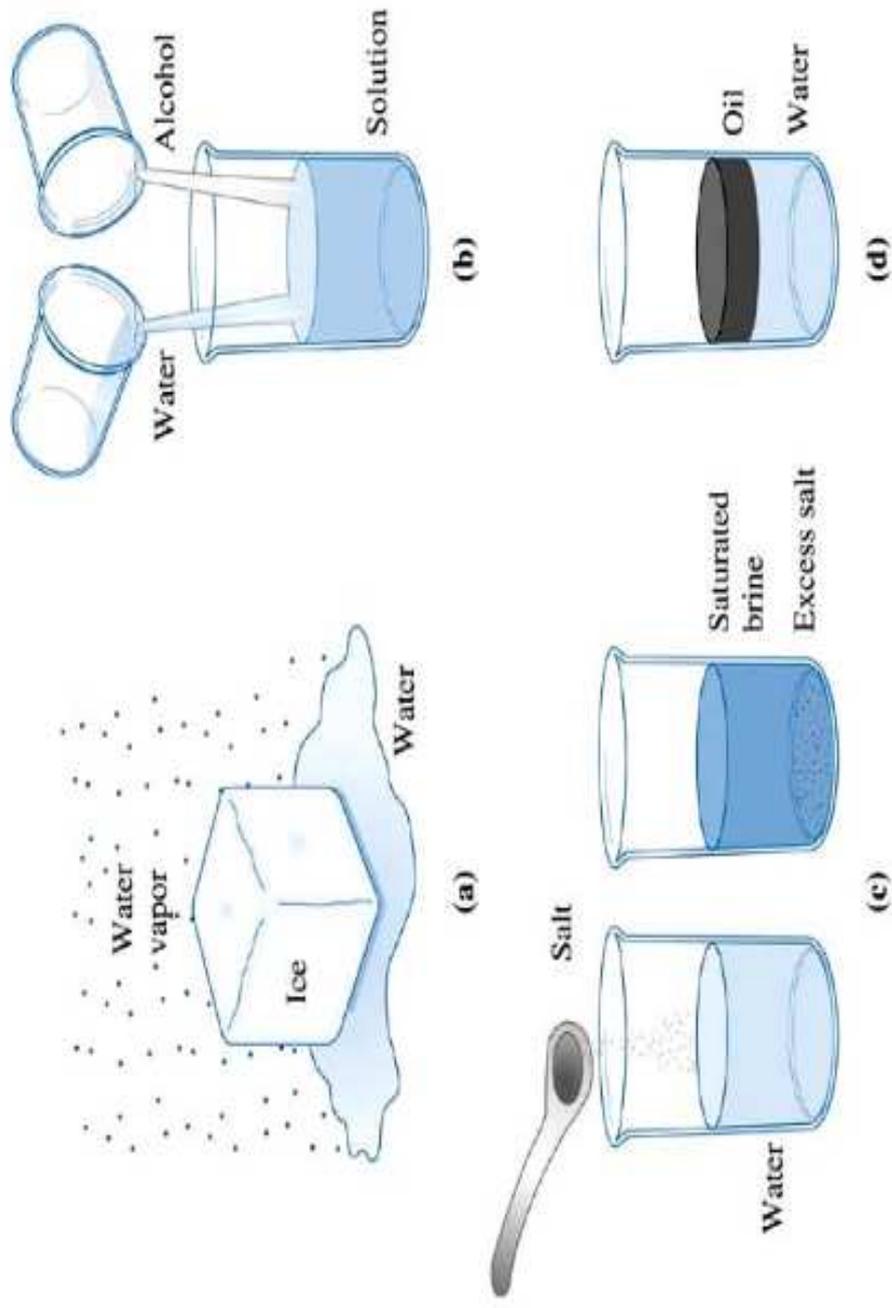


Ilustração de fases e solubilidade: (a) As três formas da água: sólida, líquida e gasosa; (b) água e álcool têm solubilidade ilimitada; (c) Sal e água possuem solubilidade limitada; (d) Água e óleo não possuem solubilidade.

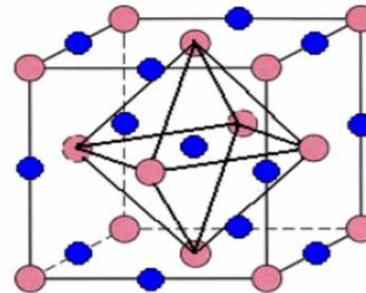
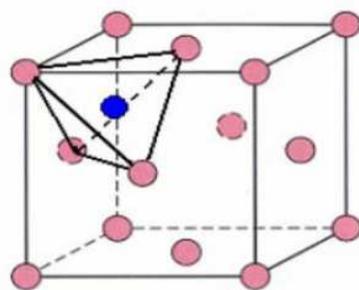
- Elemento de liga ou Impureza → **soluto**
($<$ quantidade)
- Matriz ou Hospedeiro → **solvente**
($>$ quantidade)

Soluções Sólidas

- A estrutura cristalina do material que atua como matriz é mantida e não formam-se novas estruturas
- As soluções sólidas formam-se mais facilmente quando o elemento de liga (impureza) e matriz apresentam estrutura cristalina e dimensões eletrônicas semelhantes
- Nas soluções sólidas as impurezas podem ser:
 - Intersticial
 - Substitucional

Nas soluções sólidas intersticiais, os átomos de impurezas preenchem os espaços vazios ou interstícios. Para as estruturas CCC e CFC existem dois tipos de sítios intersticiais, tetraédrico e octaédrico. Para a estrutura CFC, há dois tipos de sítios octaédricos com coordenadas $0, \frac{1}{2}, 1$ e $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. As coordenadas do único sítio tetraédrico são $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$. Para a estrutura CCC, as respectivas coordenadas dos sítios octaédricos e tetraédricos são $\frac{1}{2}, 1, 0$ e $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$.

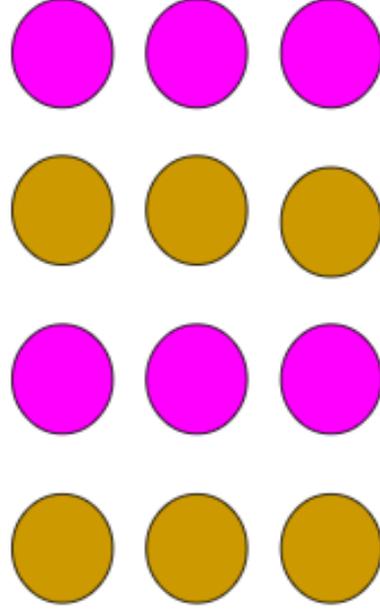
CFC:



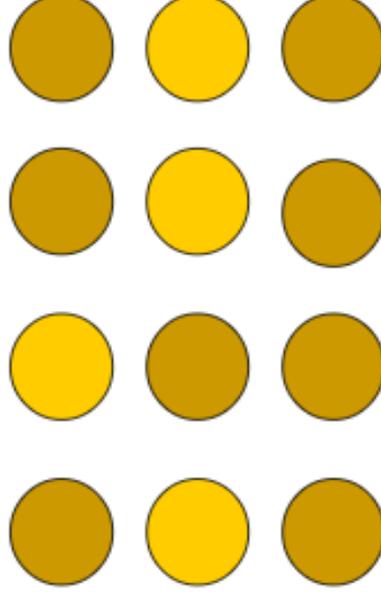
Soluções Sólidas Substitucionais

- Os átomos do soluto ou átomos de impurezas tomam o lugar dos átomos hospedeiros ou os substituem

SUBSTITUCIONAL
ORDENADA



SUBSTITUCIONAL
DESORDENADA



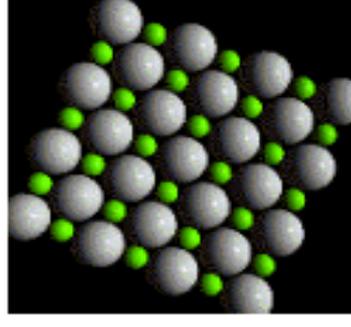
Fatores que influem na formação de soluções sólidas substitucionais

- **Raio atômico** → deve ter uma diferença de no máximo 15%, caso contrário pode promover distorções na rede e assim formação de nova fase
- **Estrutura cristalina** → mesma
- **Eletronegatividade** → próximas
- **Valência** → mesma ou maior que a do hospedeiro

Cu + Ni → são solúveis em todas as proporções

	Cu	Ni
Raio atômico	0,128nm=1,28 A	0,125 nm=1,25A
Estrutura	CFC	CFC
Eletronegatividade	1,9	1,8
Valência	+1 (as vezes +2)	+2

Soluções Sólidas Intersticiais



- Os átomos de impurezas ou os elementos de liga ocupam os espaços dos interstícios
- Ocorre quando a impureza apresenta **raio atômico bem menor** que o hospedeiro
- Como os materiais metálicos tem geralmente fator de empacotamento alto as posições intersticiais são relativamente pequenas
- **Geralmente, no máximo 10% de impurezas são incorporadas nos interstícios**

Exemplo de Solução Sólida Intersticial

- Fe + C → solubilidade máxima do C no Fe é 2,1% a 910 C (Fe CFC)

O C tem raio atômico bastante pequeno se comparado com o Fe



$$r_C = 0,071 \text{ nm} = 0,71 \text{ \AA}$$

$$r_{Fe} = 0,124 \text{ nm} = 1,24 \text{ \AA}$$

A composição de uma liga pode ser dada em *porcentagem em peso* e *porcentagem atômica*. Para dois elementos hipotéticos 1 e 2, a *porcentagem em peso* (%p) é o peso de um dos elemento (1) em relação ao peso total da liga:

$$C_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot 100$$

A *porcentagem atômica* (%a) é o número de mols de um dos elemento (1) em relação ao número total de mols de todos elementos na liga:

$$C'_1 = \frac{n_{m1}}{n_{m1} + n_{m2}} \cdot 100$$

$$\text{onde: } n_{m1} = \frac{m_1}{A_1}$$

Como converter *porcentagem em peso* para *porcentagem atômica*.

A *porcentagem em peso* (%p) é o peso de um dos elemento (1) em relação ao peso total da liga:

$$C'_1 = \frac{C_1 A_2}{C_1 A_2 + C_2 A_1} \cdot 100$$

$$C'_2 = \frac{C_2 A_1}{C_1 A_2 + C_2 A_1} \cdot 100$$

$$C_1 = \frac{C'_1 A_1}{C'_1 A_1 + C'_2 A_2} \cdot 100$$

$$C_2 = \frac{C'_2 A_2}{C'_1 A_1 + C'_2 A_2} \cdot 100$$

Onde : A_1 e A_2 são os pesos atômicos dos elementos 1 e 2

Converter *porcentagem em peso* (%p) para Kg/m^3 (C''):

$$C_1'' = \frac{C_1}{\frac{C_1}{\rho_1} + \frac{C_2}{\rho_2}} \cdot 10^3$$

$$C_2'' = \frac{C_2}{\frac{C_1}{\rho_1} + \frac{C_2}{\rho_2}} \cdot 10^3$$

onde ρ_1 e ρ_2 são as massas específicas em g/cm^3

Representação em termos da massa específica média:

$$\rho_{med} = \frac{100}{\frac{C_1}{\rho_1} + \frac{C_2}{\rho_2}}$$

$$\rho_{med} = \frac{C'_1 A_1 + C'_2 A_2}{\frac{C'_1 A_1}{\rho_1} + \frac{C'_2 A_2}{\rho_2}}$$

Representação em termos de peso atômico médio:

$$A_{med} = \frac{100}{\frac{C_1}{A_1} + \frac{C_2}{A_2}}$$

$$A_{med} = \frac{C'_1 A_1 + C'_2 A_2}{100}$$

No desenvolvimento de todas as equações foi considerado que o volume total da liga é exatamente igual a soma dos volumes dos seus elementos individuais, o que pode levar a erros não significativos.

