

# IMPERFEIÇÕES NOS SÓLIDOS CRISTALINOS



# Imperfeições nos Sólidos

*Por que estudar defeitos nos sólidos cristalinos?*

- As **propriedades** de alguns materiais são **influenciadas** pela **presença** de **imperfeições**:
- As **propriedades mecânicas** dos **metais puros** apresentam **alterações significativas** quando são adicionados átomos de **impurezas**;



- **Por exemplo:** o **latão (70% cobre e 30% zinco)** é muito **mais duro** e **resistente** do que o **cobre puro**

# O QUE É UM DEFEITO CRISTALINO?

- É uma **imperfeição** ou uma **irregularidade** no reticulado cristalino da ordem de **um** ou **mais diâmetros atômicos**.

A **classificação** é feita de acordo com a:

- A **geometria** dos defeitos;
- A **dimensão** dos defeitos.

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

# Classificação dos Defeitos

- **Defeitos Pontuais** → associados com 1 ou 2 posições atômicas: **lacunas** e átomos **intersticiais**;
- **Defeitos Lineares** → defeitos **unidimensionais**: **discordâncias**;
- **Defeitos Planos** ou **Interfaciais** → defeitos **bidimensionais**: contornos de grão, superfícies externas, contornos de maclas (tipo de contorno), defeitos de empilhamento;
- **Defeitos Volumétricos** → defeitos **tridimensionais**: poros, trincas, partículas de segunda fase e inclusões.

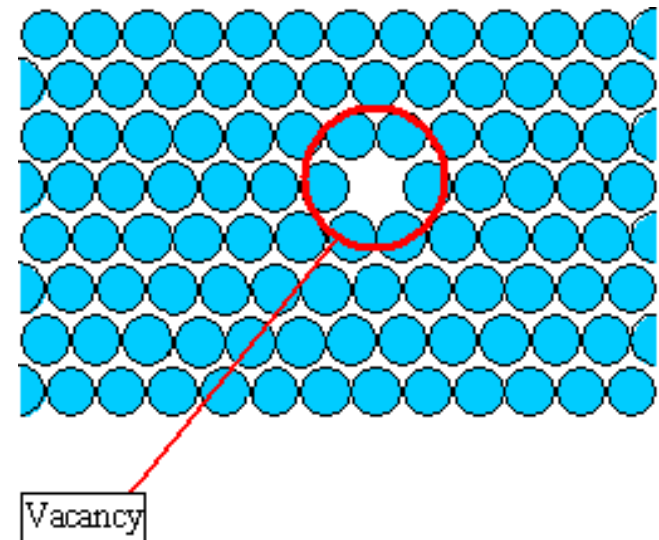
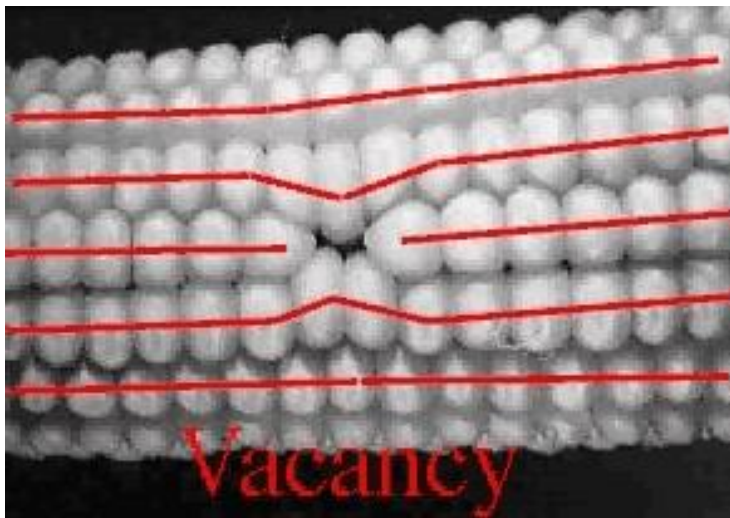
# Dimensões dos Defeitos

Classificação	Dimensionalidade	Tipos de Defeitos	Escalas	Faixas de dimensão (m)	Técnicas de Caracterização
<b>Defeitos Pontuais</b>	unidimensionais	lacunas e átomos intersticiais	<b>Nanoestrutura</b>	Menores de $10^{-9}$	MET de alta resolução
<b>Defeitos Lineares</b>	unidimensionais	discordâncias	<b>Microestrutura</b>	$10^{-6}$ a $10^{-9}$	MEV e MET
<b>Defeitos Planos ou Interfaciais</b>	bidimensionais	contorno de grão, contorno de macla, superfícies externas e defeitos de empilhamento	<b>Mesoestrutura</b>	$10^{-3}$ a $10^{-6}$	Microscopia óptica e MEV
<b>Defeitos Volumétricos</b>	tridimensionais	poros, trincas, partículas de segunda fase e inclusões	<b>Macroestrutura</b>	$10^{-1}$ a $10^{-4}$	Microscopia óptica e Inspeção visual

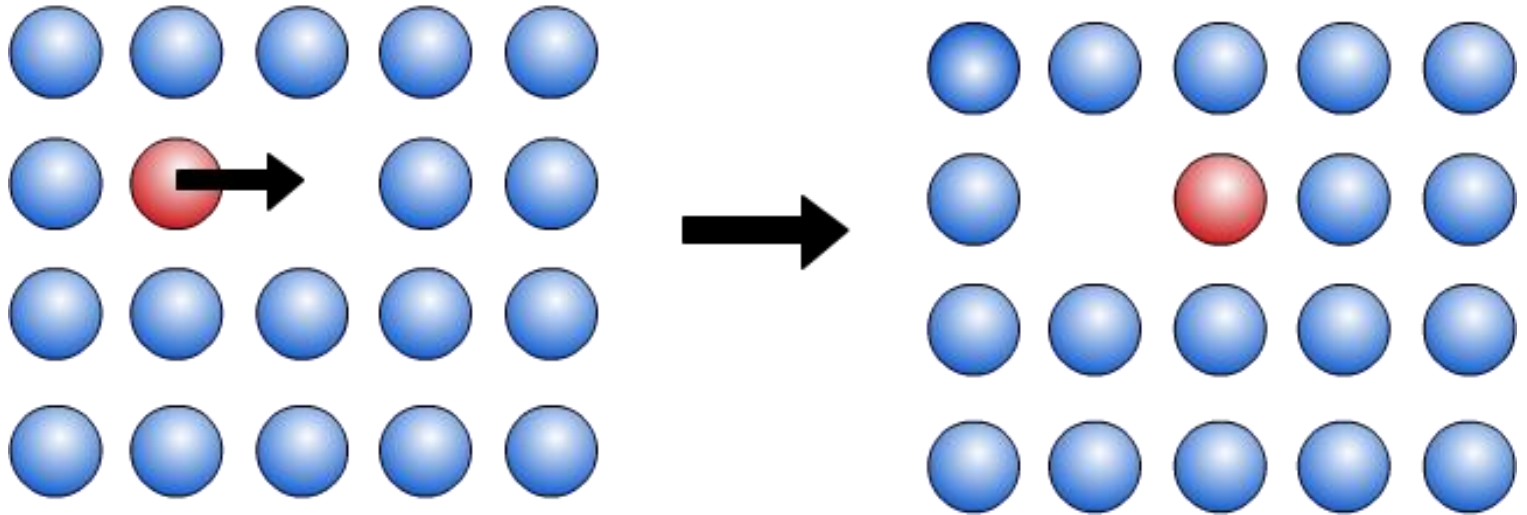
\* MEV: Microscópio eletrônico de Varredura/ MET: Microscópio eletrônico de Transmissão. 5

# Defeitos Pontuais: Lacunas

- **Lacuna** (“vacancy”): **ausência** de um **átomo** ou um **sítio vago** na **rede cristalina**;
- **Todos** os **sólidos cristalinos** contém **lacunas**;
- Podem ser **formadas** durante a **deformação plástica** ou como resultado das **vibrações atômicas**;
- As **vacâncias** podem **mudar** de **posição**, caso haja suficiente **agitação térmica** entre os átomos



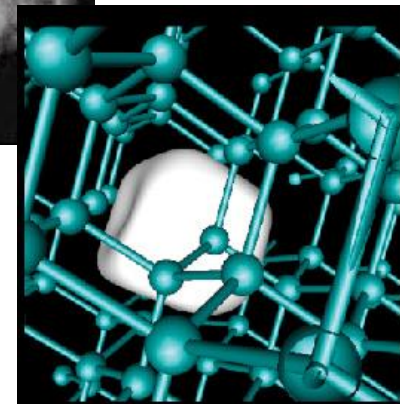
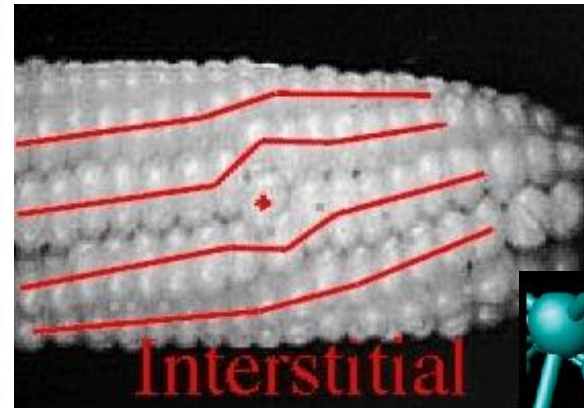
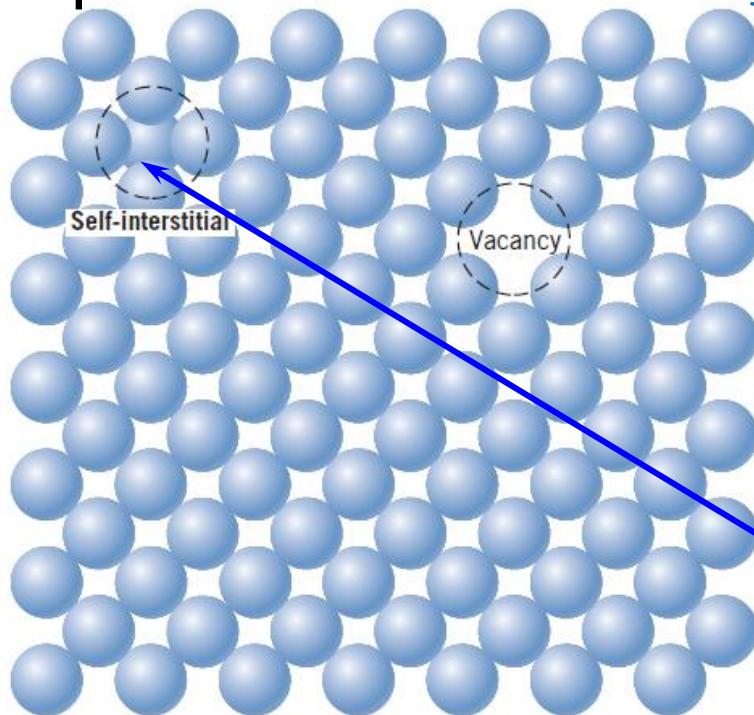
# Defeitos Pontuais: Lacunas



- **Mudança** de **posição** de **vacâncias** é equivalente à **mudança** de **posição** dos **átomos**. *Esta é a base do processo de difusão atômica em redes cristalinas!*
- Este **processo** necessita da **presença** de **lacunas**.
- Existe uma **concentração** de **lacunas** em **equilíbrio**.

# Defeitos Pontuais: Interstício

- **Auto-intersticial**: é um **átomo** da própria **rede** que se encontra **comprimido** em um **sítio intersticial** (pequeno espaço vazio) que não é uma posição típica da rede;
- Os defeitos **auto-intersticiais** causam uma grande **distorção** do **reticulado cristalino** a sua volta e aparecem em **concentrações reduzidas**.



auto-intersticial

# Impurezas nos Sólidos

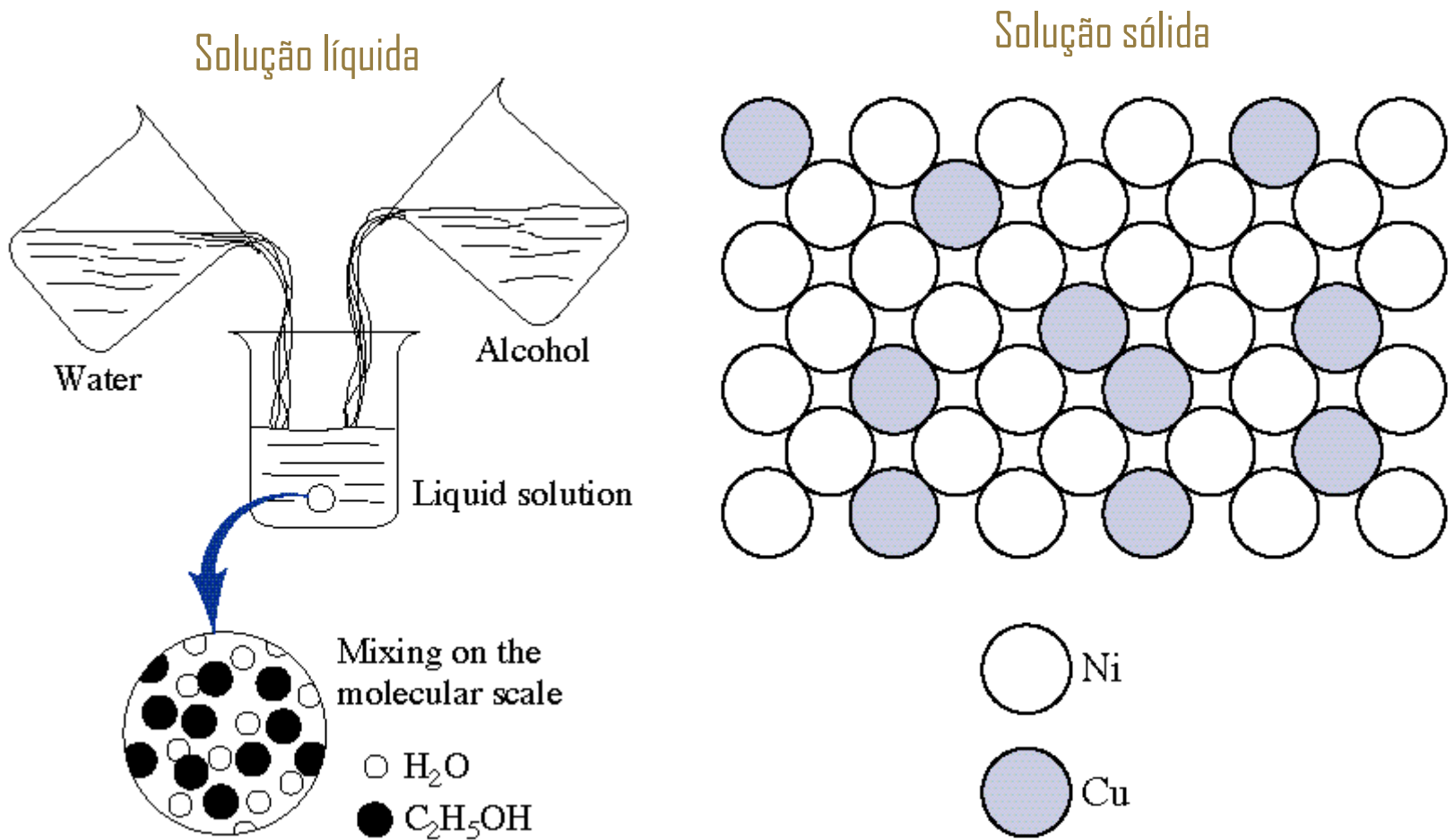


As **impurezas** (chamadas **elementos de liga**) são **adicionadas intencionalmente** com a finalidade:

- **Aumentar a resistência mecânica;**
  - **Aumentar a resistência à corrosão;**
  - **Aumentar a condutividade elétrica;** etc.
- 
- **Por exemplo:** a **prata de lei** é uma liga composta de **92,5%** de **prata** e **7,5%** de **cobre**. A **prata pura** é altamente **resistente à corrosão**, mas também é **mole**;
  - A formação de uma **liga** com o **cobre aumenta** significativamente a **resistência mecânica** sem diminuir a **resistência à corrosão**.

# Defeitos Pontuais: Impurezas

- A **presença** de **impurezas** gera uma **mistura** entre os átomos das **impurezas** e os do **material**, gerando uma **solução sólida** onde a **estrutura cristalina é mantida**.



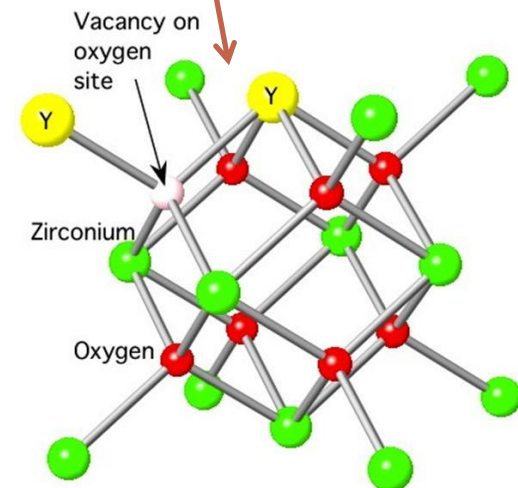
# Defeitos Pontuais: Impurezas

- A **adição** de **átomos** de **impurezas** a um **metal** irá formar uma **solução sólida** ou uma **segunda fase** que também é possível para os materiais cerâmicos.

- **Solução sólida**  $\longrightarrow$   $<$  limite de solubilidade
- **Segunda fase**  $\longrightarrow$   $>$  limite de solubilidade



## A solubilidade depende:

- **Temperatura;**
- **Tipo de impureza;**
- **Concentração da impureza.**



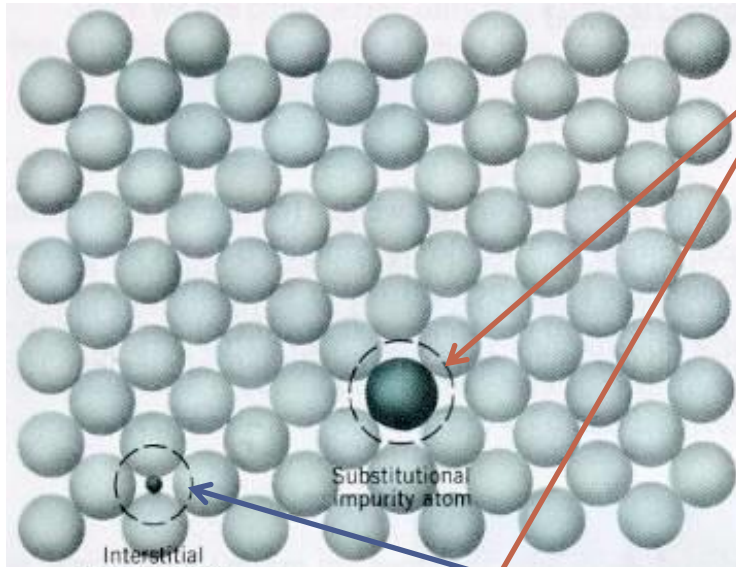
# Defeitos Pontuais: Impurezas

## *Termos usados às soluções sólidas:*

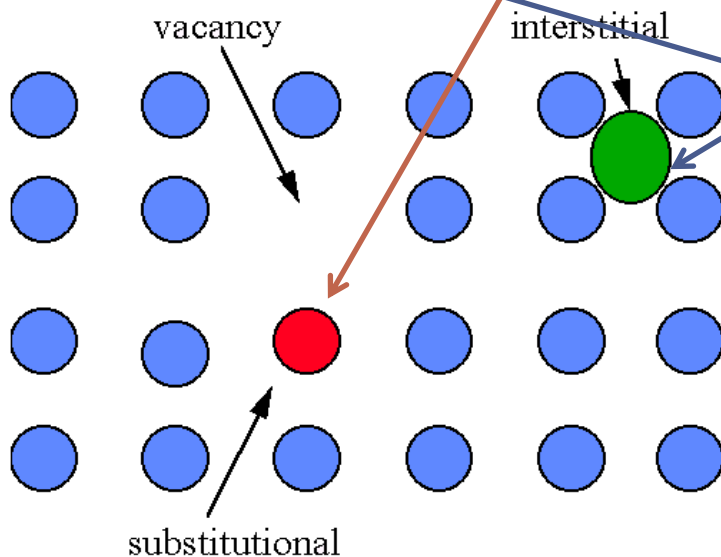
- Elemento de liga  ***soluto*** ou ***impureza***  
(átomos < quantidade)
  - Matriz  ***solvente*** ou ***hospedeiro***  
(átomos > quantidade)
- Uma ***solução sólida*** também é homogênea em termos de composição; os ***átomos*** de ***impurezas*** estão ***distribuídos aleatória*** e ***uniformemente*** no sólido.

# Defeitos Pontuais: Impurezas

Nas **soluções sólidas** as **impurezas** podem ser:



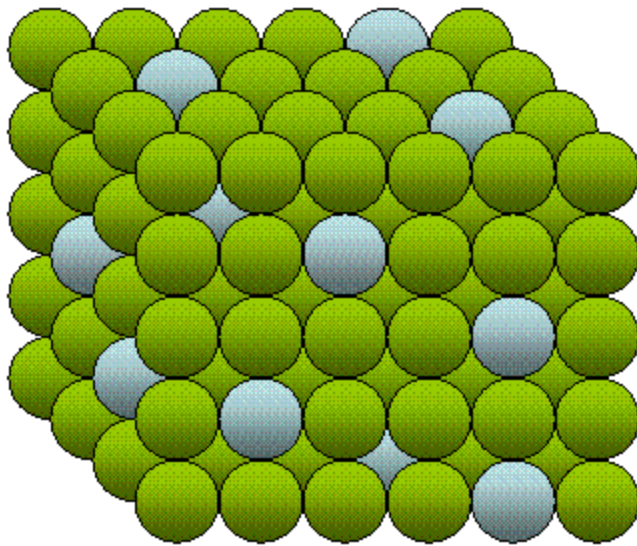
**Substitucional:** Os **átomos** de **soluto substituem** átomos de **solvente** no reticulado. **Átomos de soluto** apresentam **tamanho ~ igual** aos átomos do **solvente**. Ex: latão (Cu/Zn), bronze (Cu/Sn).



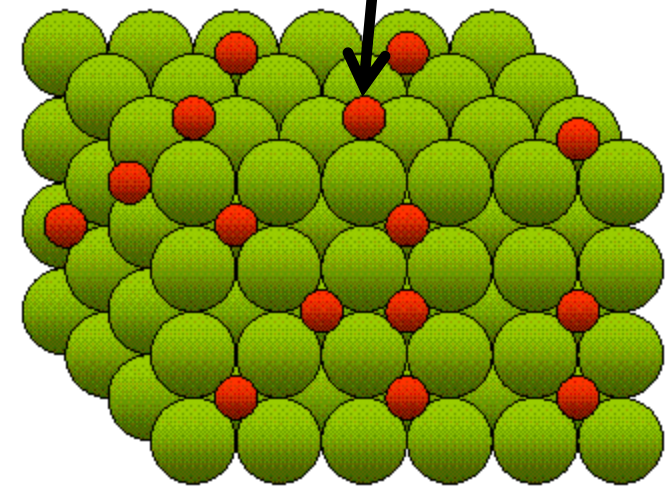
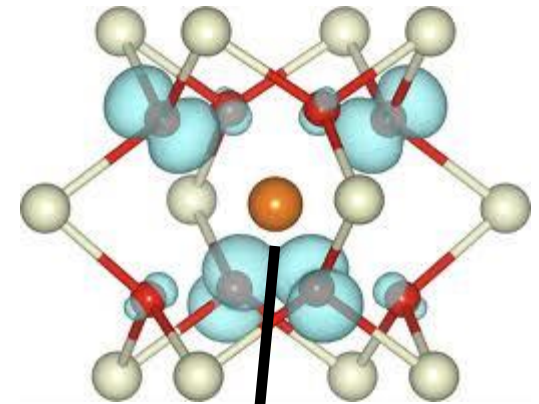
**Intersticial:** Os **átomos** de **soluto** ocupam os **interstícios** existentes no reticulado. **Átomos de soluto** são muito **menores** que os de **solvente**. Ex: carbono em ferro (aço).

# Soluções Sólidas

Há **dois tipos** de **soluções sólidas**:



- **Solução Sólida Substitucional**  
→ os átomos de impureza ocupam posições regulares da rede cristalina.



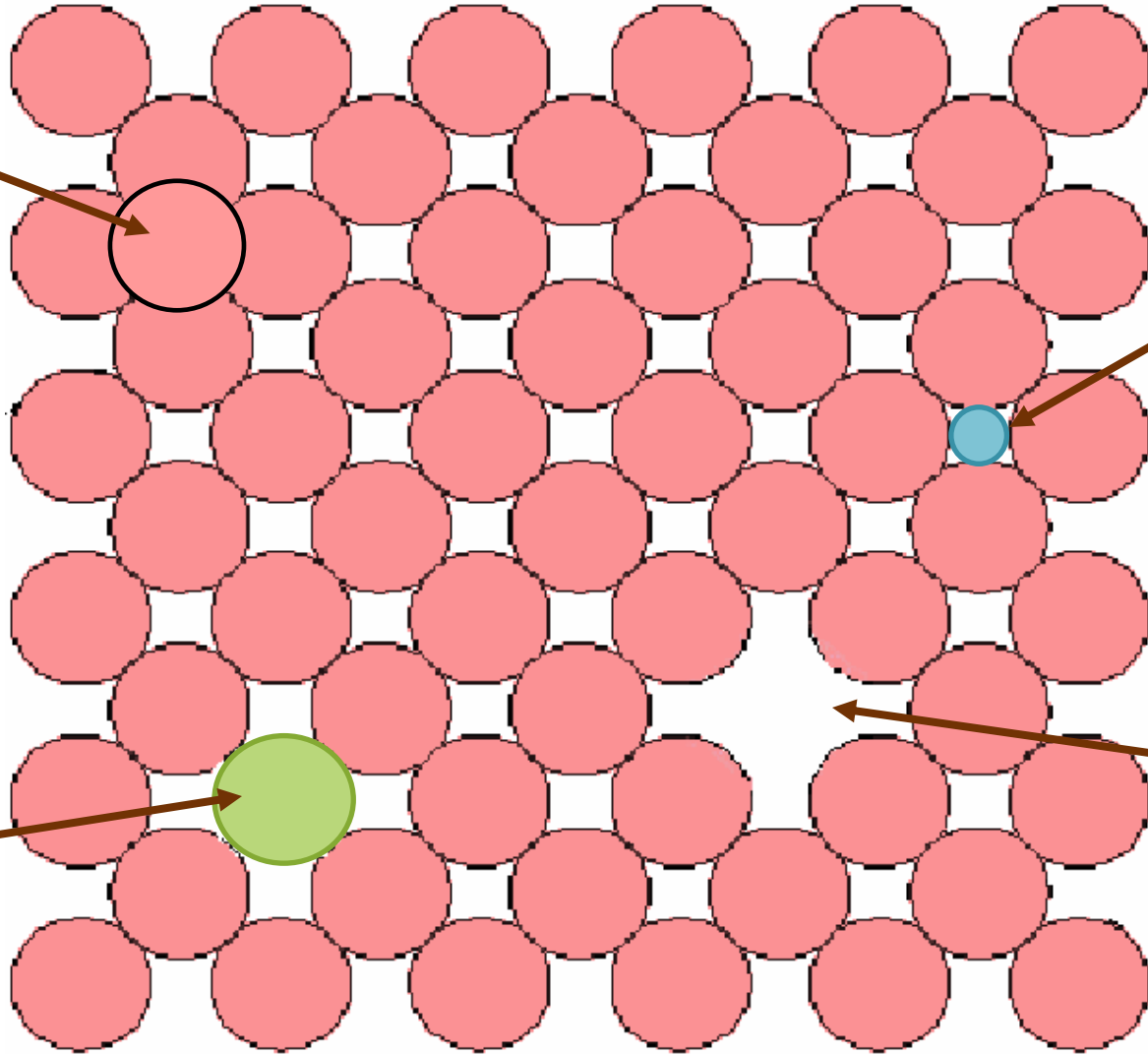
- **Solução Sólida Intersticial**  
→ os elementos em solução ocupam os interstícios da rede cristalina.

# Visualização dos Defeitos Pontuais

Auto-

Intersticial

Átomo da própria rede ocupando um interstício.



Impureza Intersticial

Átomo diferente ocupando um interstício.

Vacância

Ausência de um átomo.

Impureza

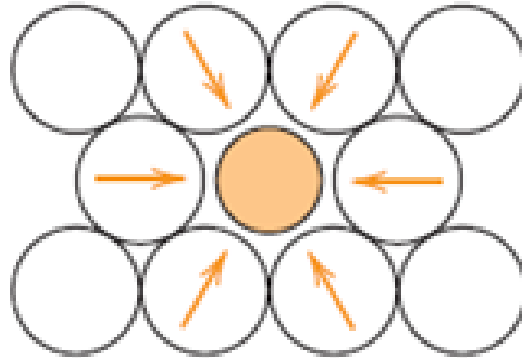
Substitucional

Átomo diferente ocupando uma vacância.

# Defeitos Pontuais: Impurezas

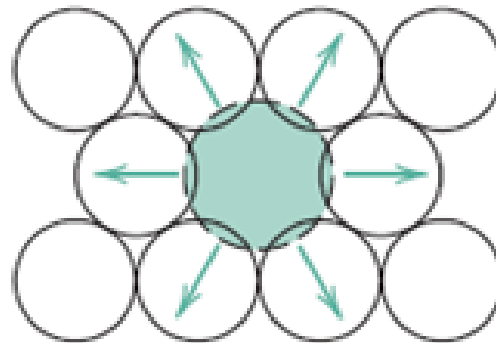
Nas ***soluções sólidas***, ***campos de tensão*** (deformação) são gerados por ***átomos de impurezas*** sobre os ***átomos vizinhos***.

**Tração:**



Átomos de ***impureza substitucional menor*** que o solvente → exerce ***deformação de tração*** sobre a ***rede cristalina*** vizinha.

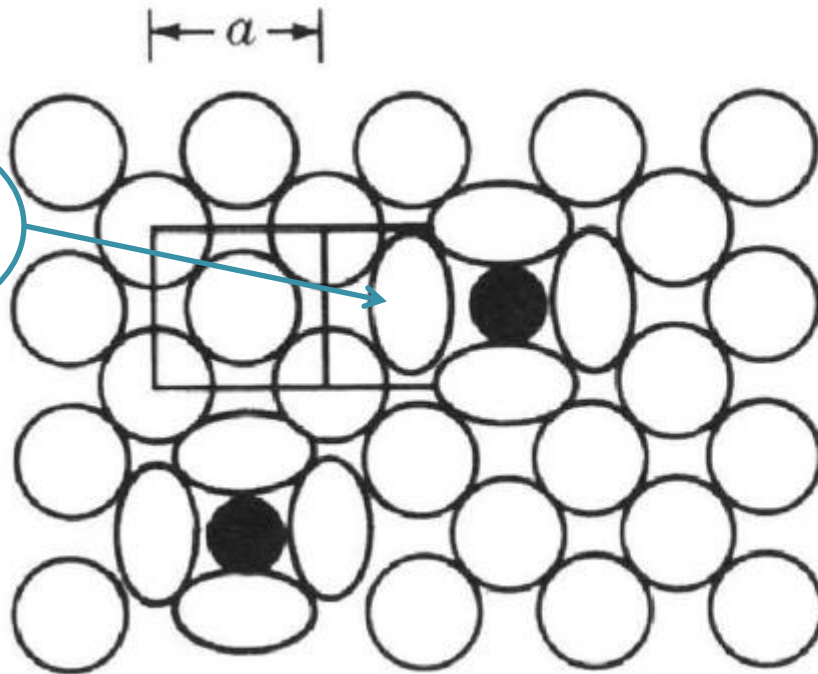
**Compressão:**



Átomo ***substitucional maior*** que o solvente → exerce ***deformação compressiva*** sobre a ***rede cristalina*** vizinha.

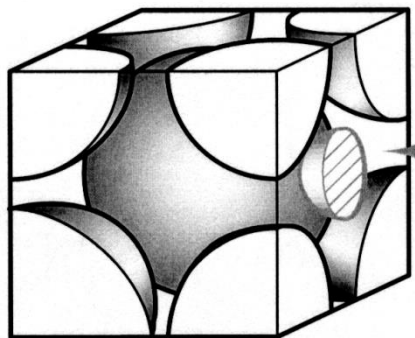
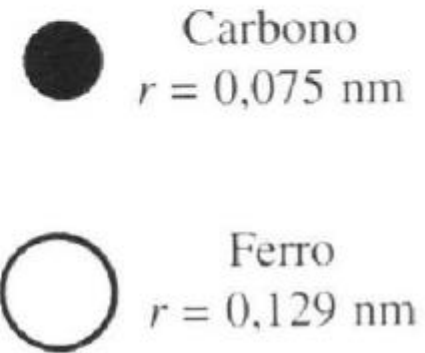
# Defeitos Pontuais: Impurezas

## Solução Sólida Intersticial:



Tensão local exercida

Nota-se a **distorção** dos **átomos de ferro** em volta dos átomos de **carbono**!

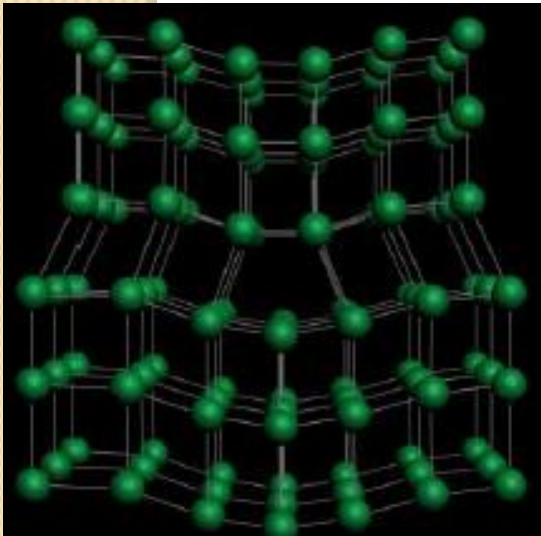


Solução intersticial de **carbono** em **ferro** – **aço** (**concentração máxima de 2%**);

# Defeitos Lineares: Discordâncias

## Definição:

Defeito *unidimensional* no qual alguns *átomos estão desalinhados* conseqüentemente provocam uma *distorção* na *estrutura cristalina*.

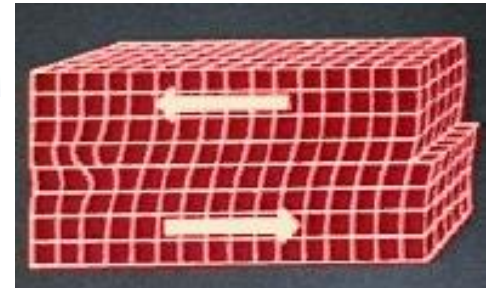


## Classificação:

- ✓ Discordância em cunha ou aresta
- ✓ Discordância em hélice ou espiral
- ✓ Discordância mista

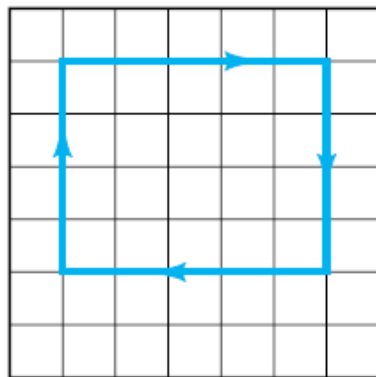
# Defeitos Lineares: Discordâncias

- A **movimentação** de **discordâncias** é o principal fator envolvido na **deformação plástica** de **metais** e **ligas**;
- Todos os **metais** e **ligas** contêm algumas **discordâncias** que foram **introduzidas** durante:
  - A **solidificação**;
  - A **deformação plástica** (durante a deformação o número de discordâncias aumentam drasticamente);
  - E como uma consequência das **tensões térmicas** que resultam de um **resfriamento rápido**.

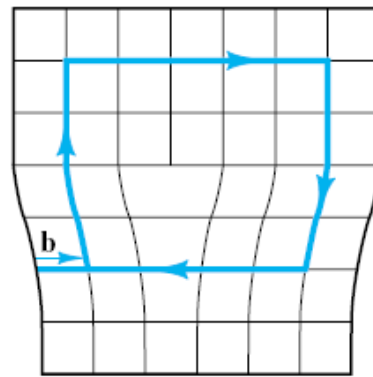


# DISCORDÂNCIA EM CUNHA

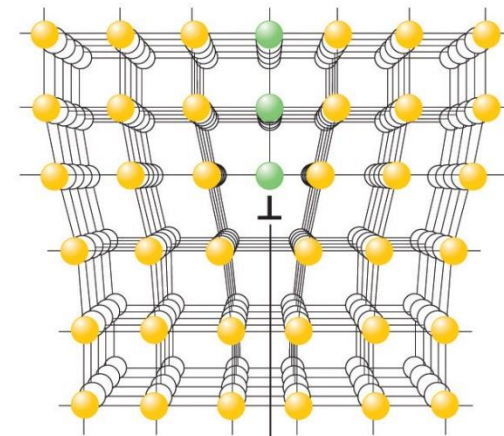
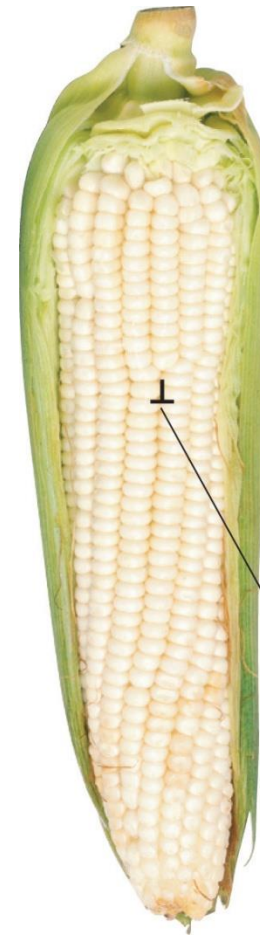
- Envolve um *semi-plano extra* de *átomos*, cuja aresta termina no interior do cristal.



(a)



(b)

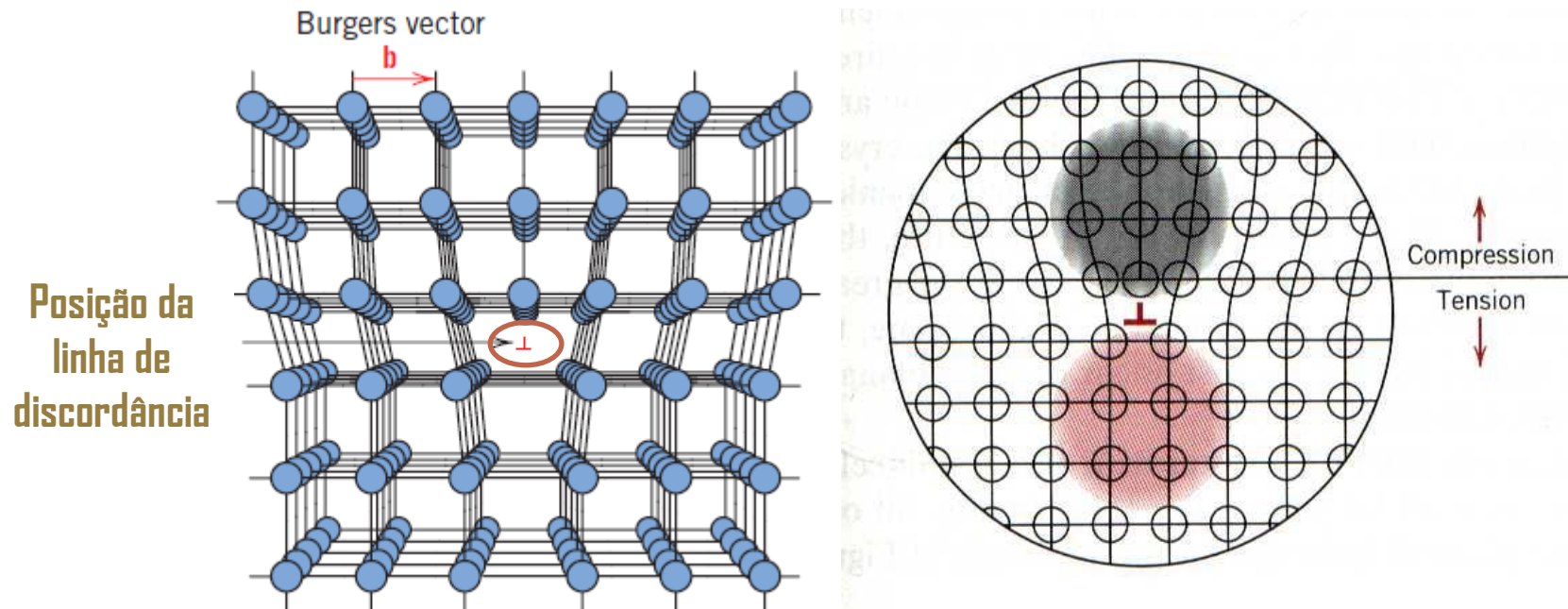


Origin of edge dislocation

- Um cristal perfeito;
- Um plano extra é inserido no cristal (a).

# DISCORDÂNCIA EM CUNHA

- A **linha de discordância** é definida na **borda do plano extra** (**defeito centralizado a redor da linha**);
- Ao redor da linha de discordância existe uma **distorção localizada da rede**: zonas de **tração** e **compressão**;
- Ligeira **curvatura** dos **planos** verticais de átomos.

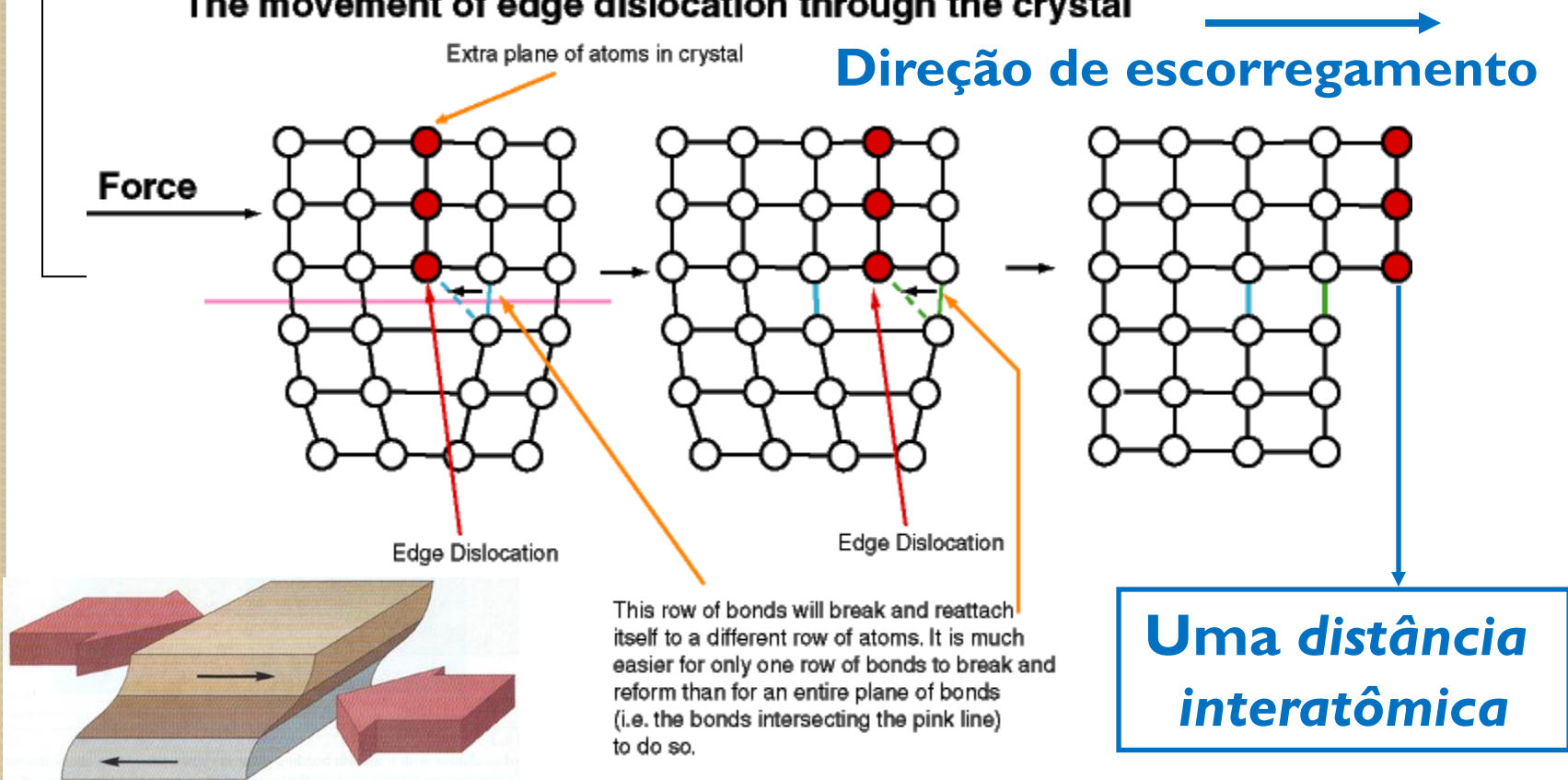


# MOVIMENTO DE DISCORDÂNCIAS

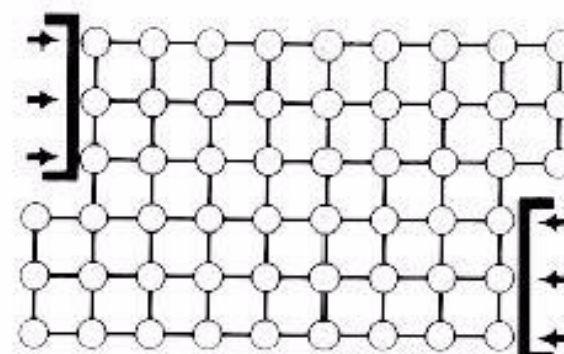
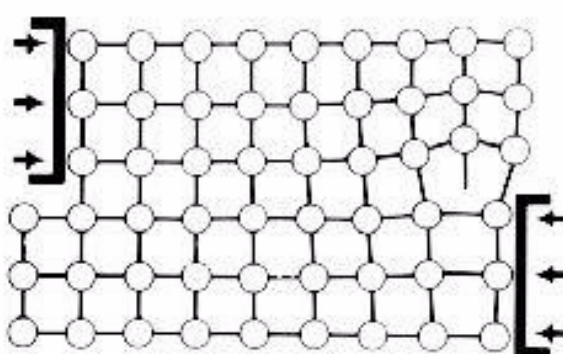
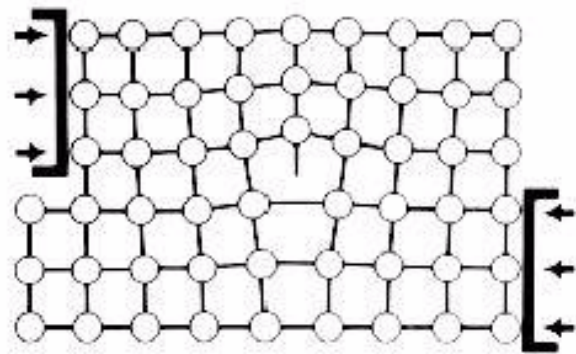
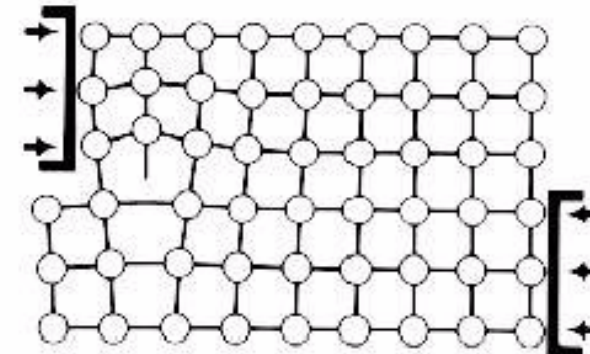
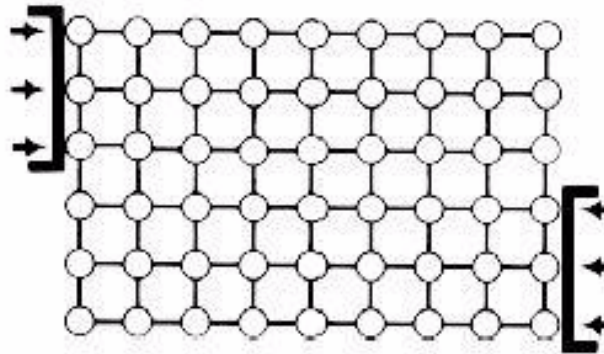
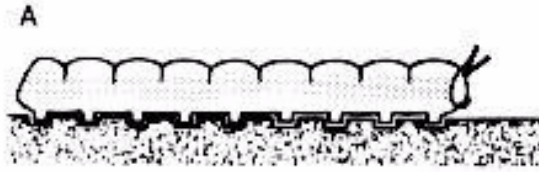
Rearranjos atômicos que acompanham o **movimento** de uma **discordância** em **cunha** na medida que ela se move em **resposta** à aplicação de uma **tensão de cisalhamento**:

Plano de escorregamento

The movement of edge dislocation through the crystal

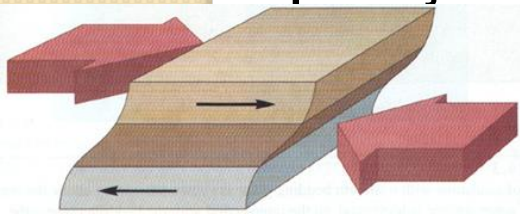


- O **movimento** de uma **discordância** é **análogo** ao **modo** de **locomoção** de uma **lagarta**:

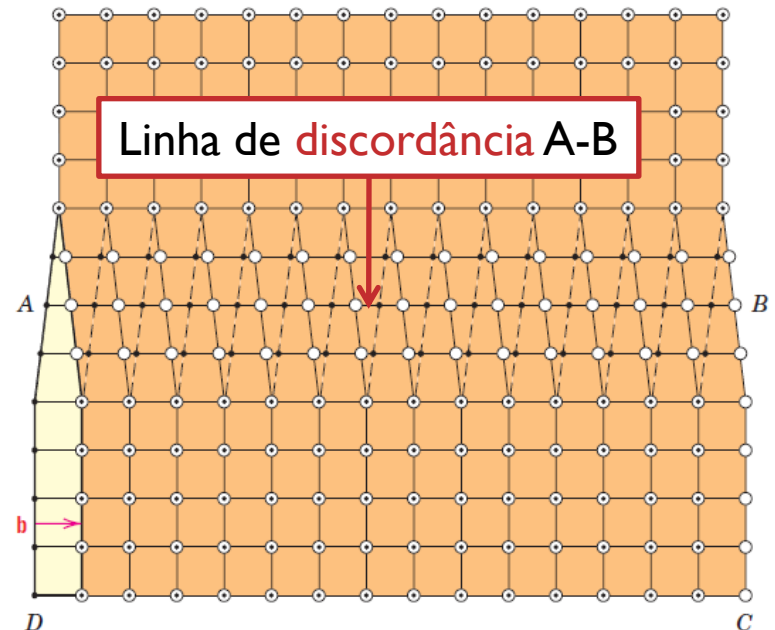
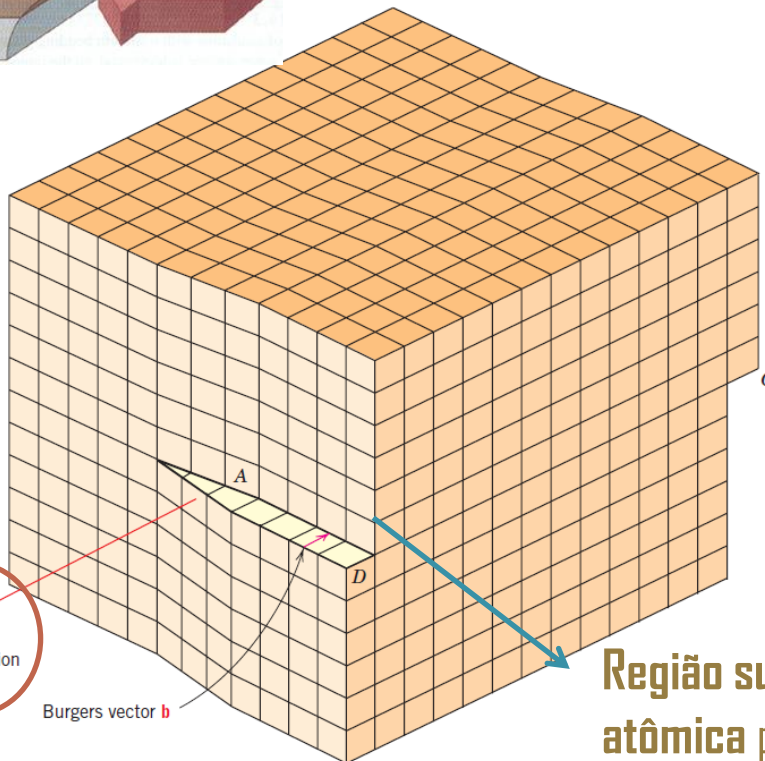


# DISCORDÂNCIA EM HÉLICE

- A **discordância em hélice** pode ser entendida como sendo a **distorção** ou **deslocamento** resultante da aplicação de uma **tensão de cisalhamento**.



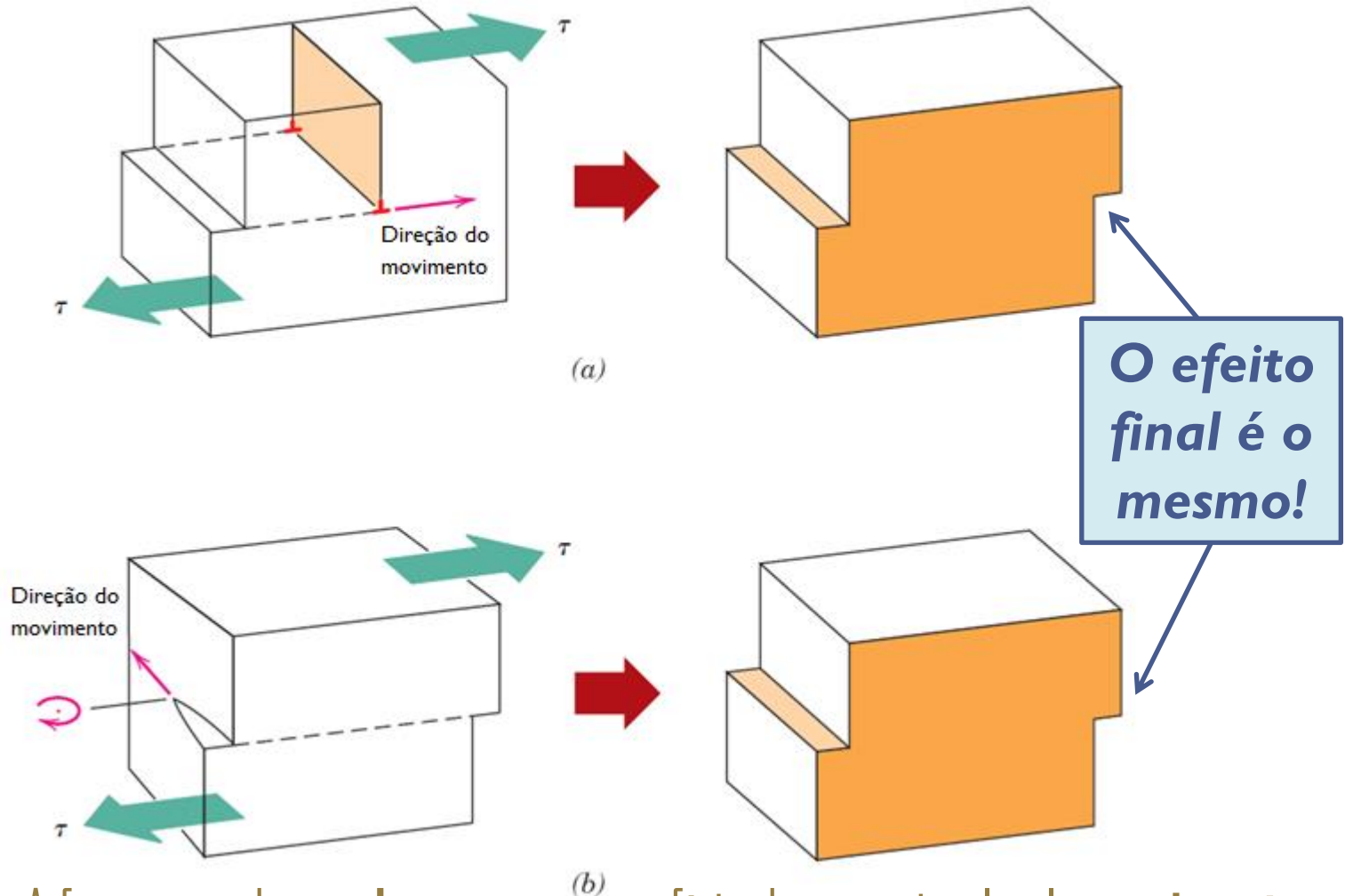
Arranjo dos átomos em torno de uma discordância em hélice vista de cima:



Região superior é deslocada uma **distância atômica** para a **direita** em relação a **parte inferior**.



# MOVIMENTO DE DISCORDÂNCIAS EM CUNHA E EM HÉLICE



A formação de um **degrau** na superfície de um cristal pelo **movimento de discordâncias** (a) em **cunha** e (b) em **hélice**.

# DEFEITOS PLANOS OU INTERFACIAIS

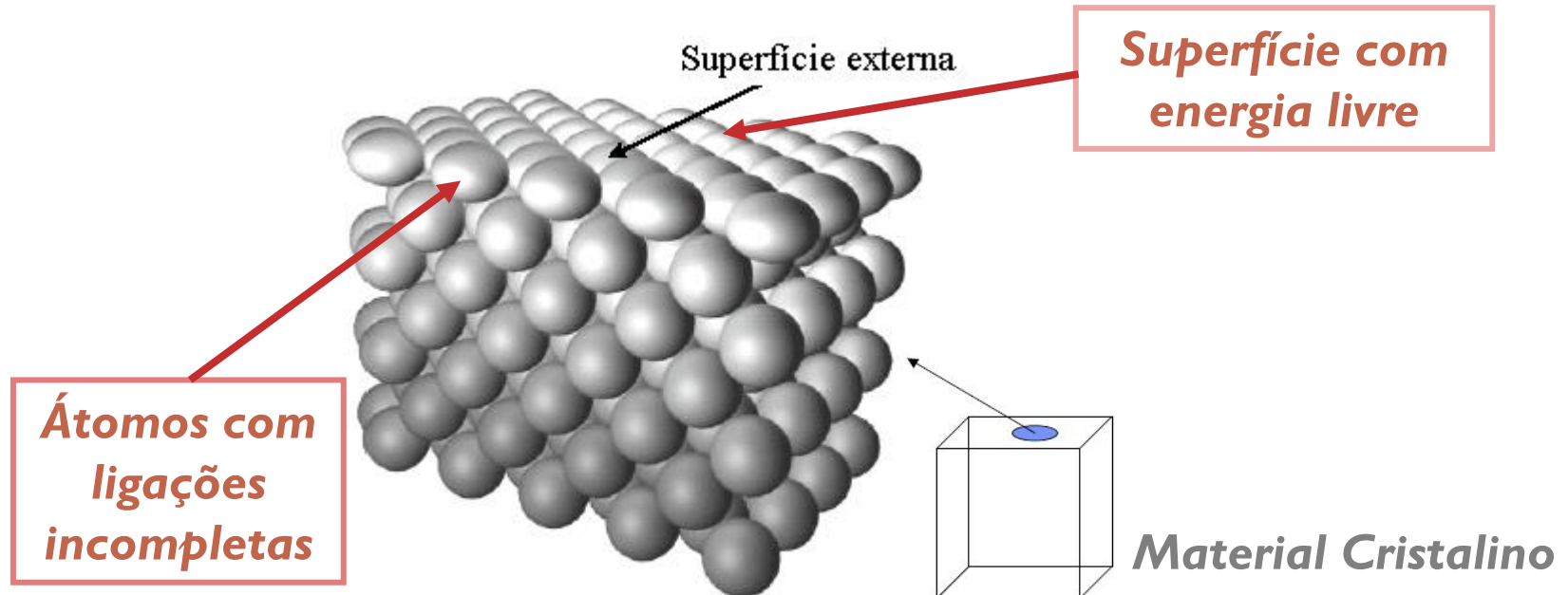
São **defeitos bidimensionais** ou interfaciais que compreendem regiões do material com **diferentes estruturas cristalinas** ou **diferentes orientações cristalográficas**.

## **Estes defeitos incluem:**

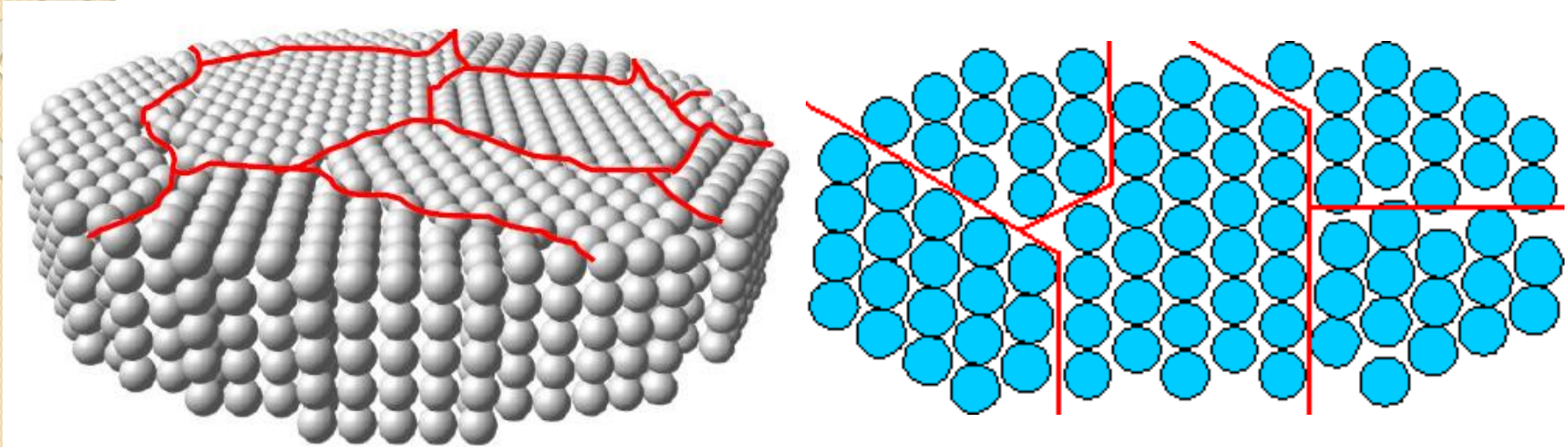
- Superfícies externas;
- Contornos de grão;
- Contornos de macla;
- Defeitos de empilhamento e;
- Contornos de fase.

# SUPERFÍCIE EXTERNA

- Átomos na superfície, onde **termina** a **estrutura do cristal**;
- Átomos **não têm todas** as **ligações satisfeitas** e possuem **energia maior** que os **átomos interiores**;
- As **ligações insatisfeitas** dos átomos da superfície dão origem a uma **energia superficial** ou energia **interfacial**.



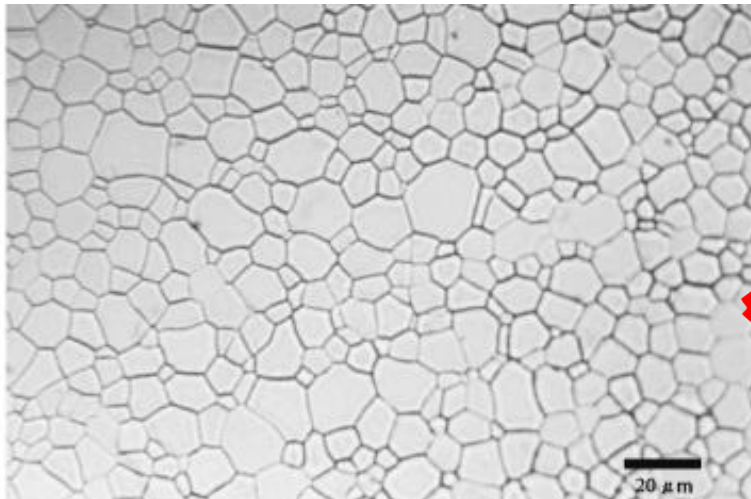
# CONTORNO DE GRÃO



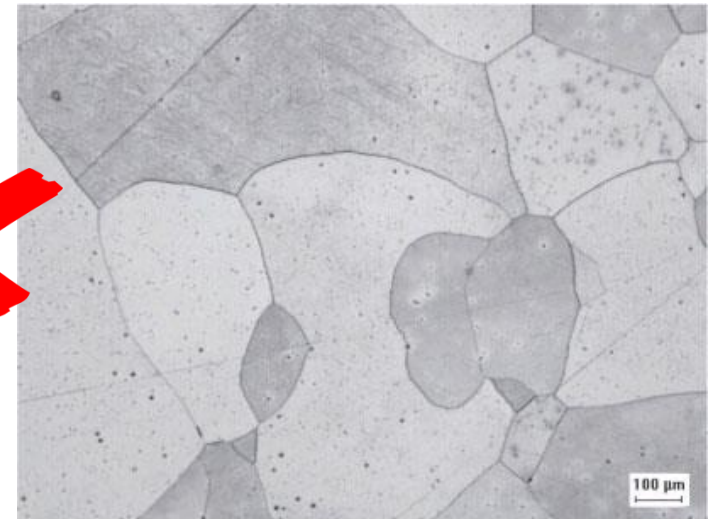
- Corresponde à **região** que **separa dois** ou **mais cristais** de **diferentes orientações cristalográficas**;
- **Interfaces** entre os vários **cristais** que compõem o **material policristalino**;
- Na **região de contorno**, existe algum **desalinhamento cristalográfico** entre os **grãos adjacentes** (transição da orientação cristalina).

# CONTORNO DE GRÃO

*Qual granulação apresenta maior energia interfacial?*



*Granulação fina*

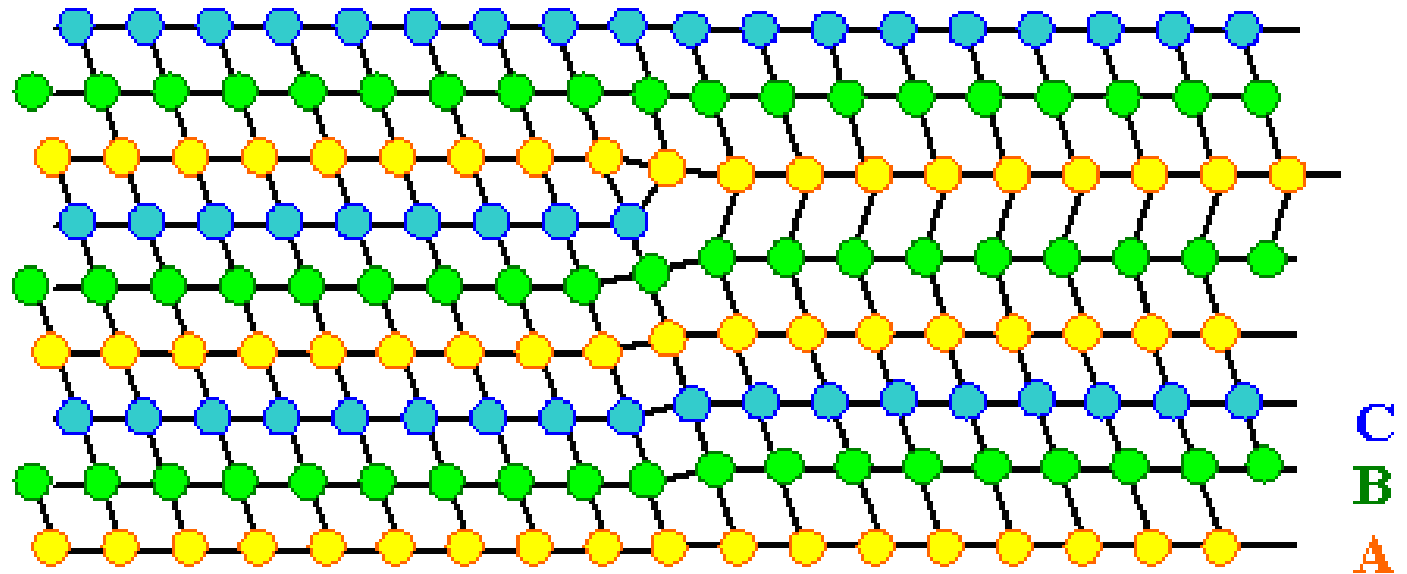
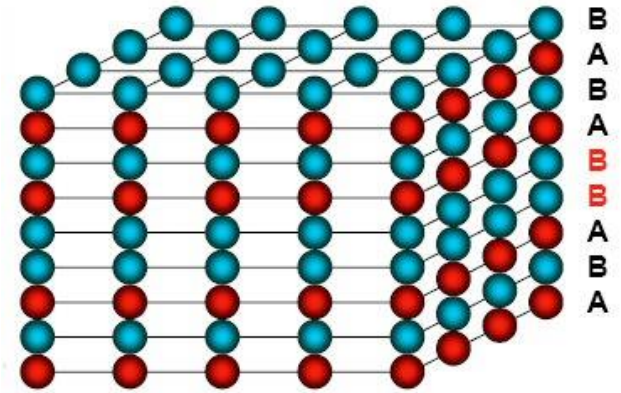


*Granulação grosseira*

- Um material com **granulação fina** (possui pequenos grãos) é **mais reativo** do que um material com uma **granulação grosseira**, pois possui uma **área maior de contorno total**.




# DEFEITO DE EMPILHAMENTO

- Defeito bidimensional que corresponde a *interrupção* de uma *sequência* regular de *empacotamento* de *planos* em uma rede cristalina.



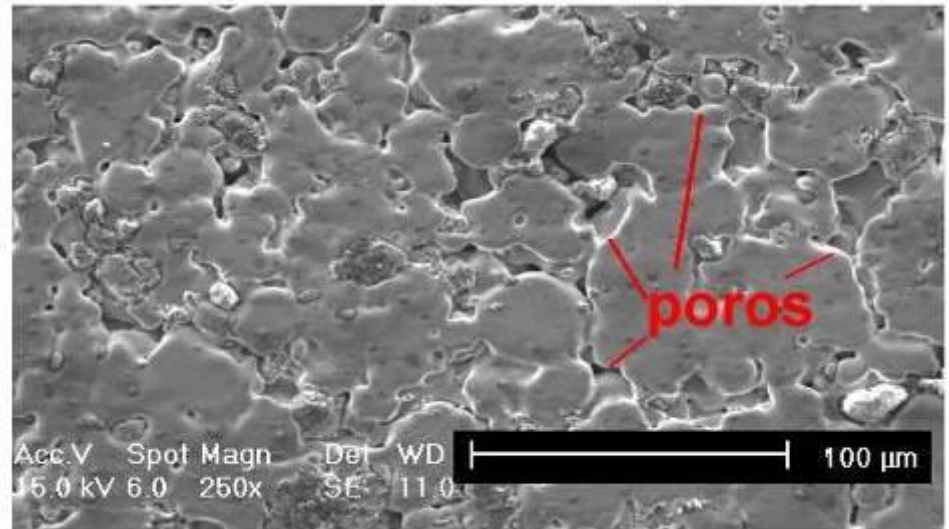
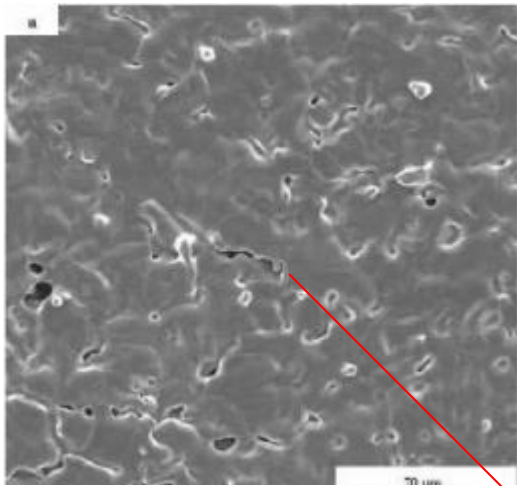
Ocorreu uma **falha** na **sequência de empilhamento** ABCABCA... que foi alterada para a sequência defeituosa ABC**A**BABCA... Agora os planos A e C- tornam-se vizinhos na configuração mudada.

# IMPERFEIÇÕES VOLUMÉTRICAS

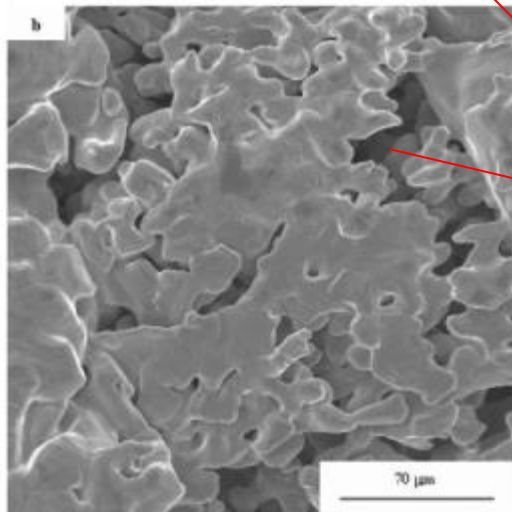
- **Defeitos tridimensionais** que se apresentam em **escalas** muito **maiores**;
  - São **introduzidos** no **processamento** do **material**, e podem **afetar** fortemente suas **propriedades**.
- **Inclusões**  Impurezas estranhas;
  - **Fases**  forma-se devido à presença elementos de liga (ocorre quando o limite de solubilidade é ultrapassado)
  - **Poros**  são vazios no material e origina-se devido a presença ou formação de gases.

# IMPERFEIÇÕES VOLUMÉTRICAS

As figuras abaixo apresentam a superfície de amostras **pós-sinterização** por **metalurgia do pó**.



*MEV de amostras de ferro puro.*



*Poros*

*MEV de amostras de titânio puro.*