



ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

DEFEITOS CRI STAL I N O S

**PMT 2100 - Introdução à Ciência dos Materiais para
Engenharia
2º Semestre de 2005**

Defeitos Cristalinos

Objetivo

- Apresentar os principais tipos de defeitos cristalinos dos materiais de engenharia.

Roteiro

- Defeitos puntiformes.
- Impurezas.
- Soluções sólidas.
- Defeitos de linha.
- Defeitos bidimensionais.
- Observação da Microestrutura

Defeitos Cristalinos

- **Defeito cristalino:** imperfeição do reticulado cristalino
- **Classificação dos defeitos cristalinos:**
 - Defeitos puntiformes (associados com uma ou duas posições atômicas): lacunas e átomos intersticiais.
 - Defeitos de linha (defeitos unidimensionais): discordâncias
 - Defeitos bidimensionais (fronteiras entre duas regiões com diferentes estruturas cristalinas ou diferentes orientações cristalográficas): contornos de grão, interfaces, superfícies livres, contornos de macla, defeitos de empilhamento.
 - Defeitos volumétricos (defeitos tridimensionais): poros, trincas e inclusões.

Defeitos puntiformes : Lacunas e Auto-Intersticiais

- Lacuna ("vacancy"): ausência de um átomo em um ponto do reticulado cristalino.
- Podem ser formadas durante a solidificação ou como resultado de vibrações atômicas.
- Existe uma concentração de equilíbrio de lacunas.

$$N_L = N \exp\left(-\frac{Q_L}{kT}\right)$$

onde: $N \equiv$ número total de posições atômicas

$N_L \equiv$ número de lacunas

$Q_L \equiv$ energia de ativação para formação de lacunas

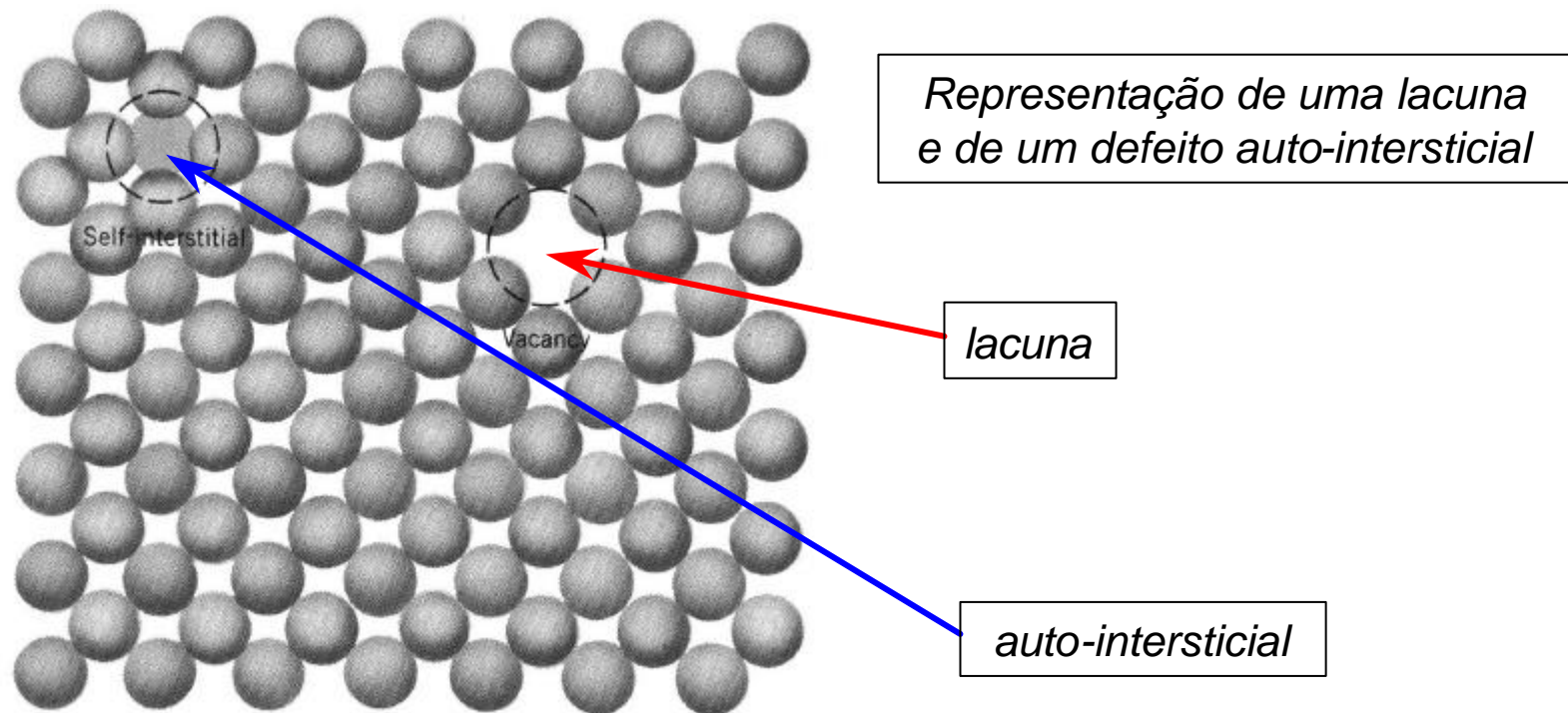
$k \equiv$ constante de Boltzmann

$T \equiv$ temperatura absoluta

Defeitos puntiformes :

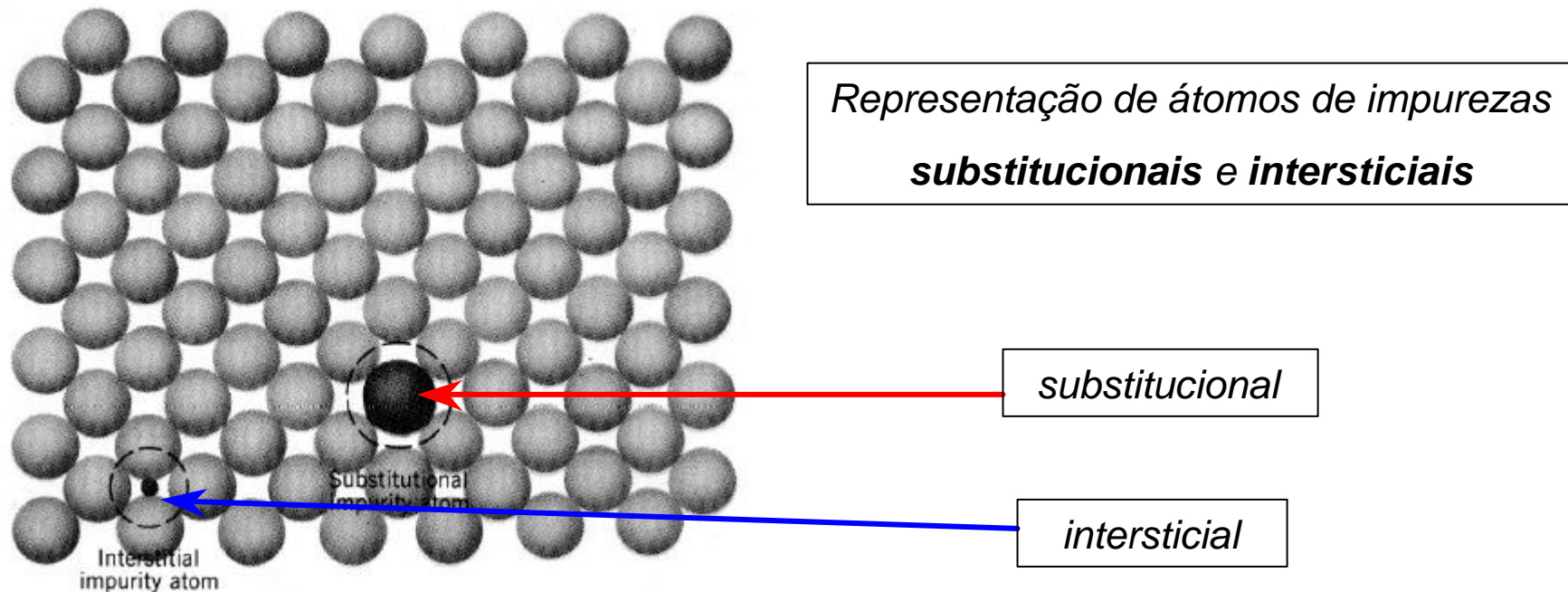
Lacunas e Auto-Intersticiais

- Auto-intersticial: é um átomo que ocupa um interstício da estrutura cristalina.
- Os defeitos auto-intersticiais causam uma grande distorção do reticulado cristalino a sua volta.



Impurezas

- É impossível existir um metal consistindo de um só tipo de átomo (metal puro).
- As técnicas de refino atualmente disponíveis permitem obter metais com um grau de pureza no máximo de 99,9999%.



Soluções Sólidas

7

- As ligas são obtidas através da adição de *elementos de liga* (átomos diferentes do metal-base). Esses átomos adicionados intencionalmente podem ficar em solução sólida e/ou fazer parte de uma segunda fase.
- Em uma liga, o elemento presente em menor concentração denomina-se soluto e aquele em maior quantidade, solvente.
- **Solução sólida**: ocorre quando a adição de átomos do soluto não modifica a estrutura cristalina nem provoca a formação de novas estruturas.
- Solução sólida substitucional: os átomos de soluto substituem uma parte dos átomos de solvente no reticulado.
- Solução sólida intersticial: os átomos de soluto ocupam os interstícios existentes no reticulado.

Especificação da composição de uma liga

- Concentração em massa (porcentagem em massa):

$$C_A = \frac{m_A}{m_A + m_B} \times 100\%$$

onde m é a massa (ou peso) dos elementos

- Concentração atômica (porcentagem atômica, %-at.):

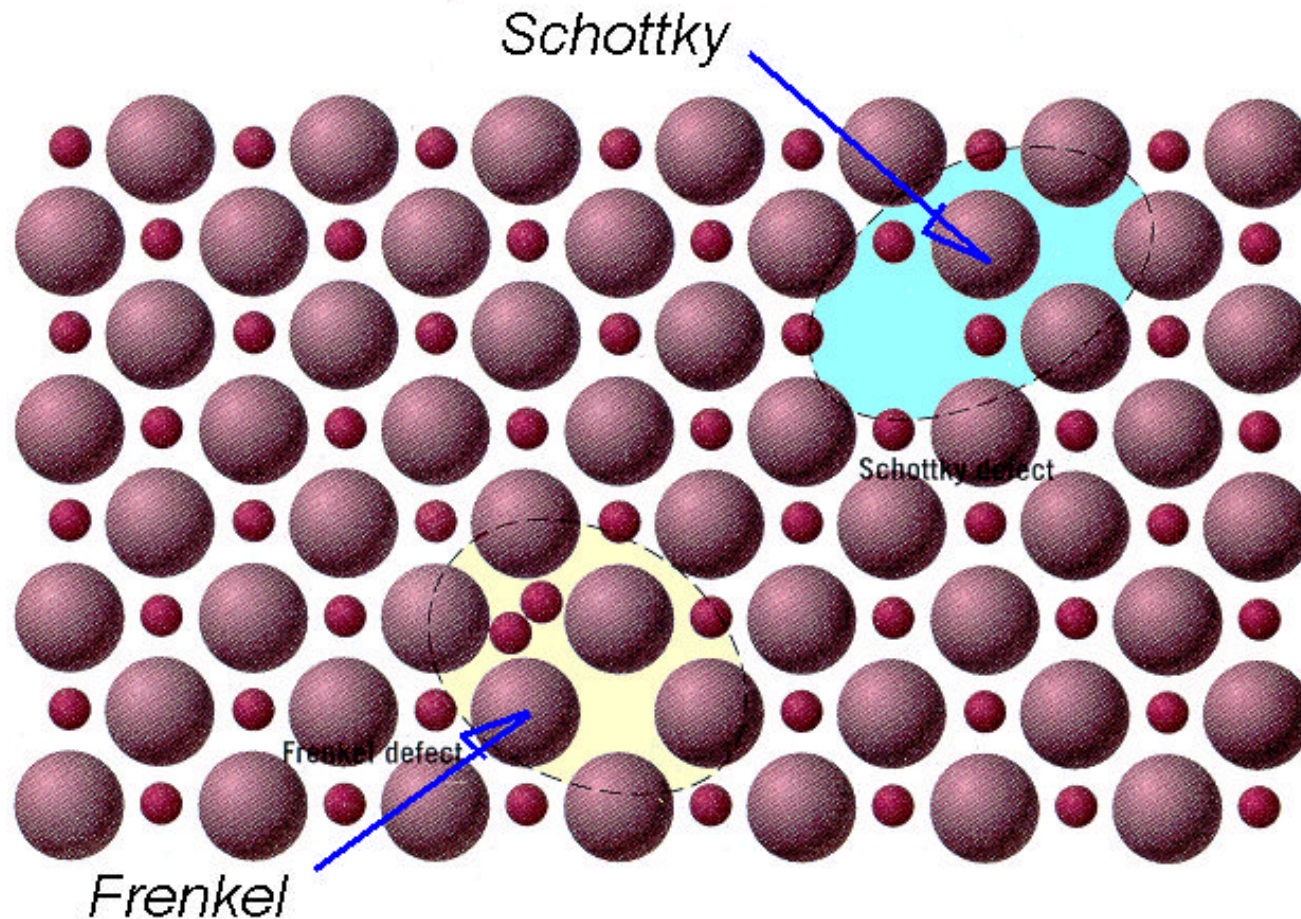
$$C_A^{at} = \frac{N_A}{N_A + N_B} \times 100\%$$

onde N_A e N_B são os números de moles dos elementos A e B.

Defeitos puntiformes em sólidos iônicos

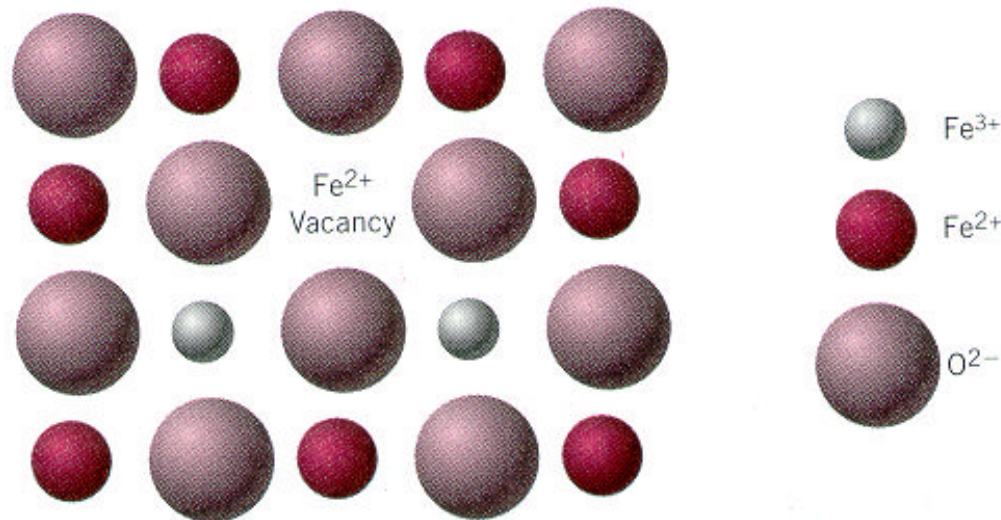
9

- *A neutralidade elétrica tende a ser respeitada.*
- *Defeito de Schottky : lacuna aniônica + lacuna catiônica*
- *Defeito de Frenkel : cátion intersticial + lacuna catiônica*



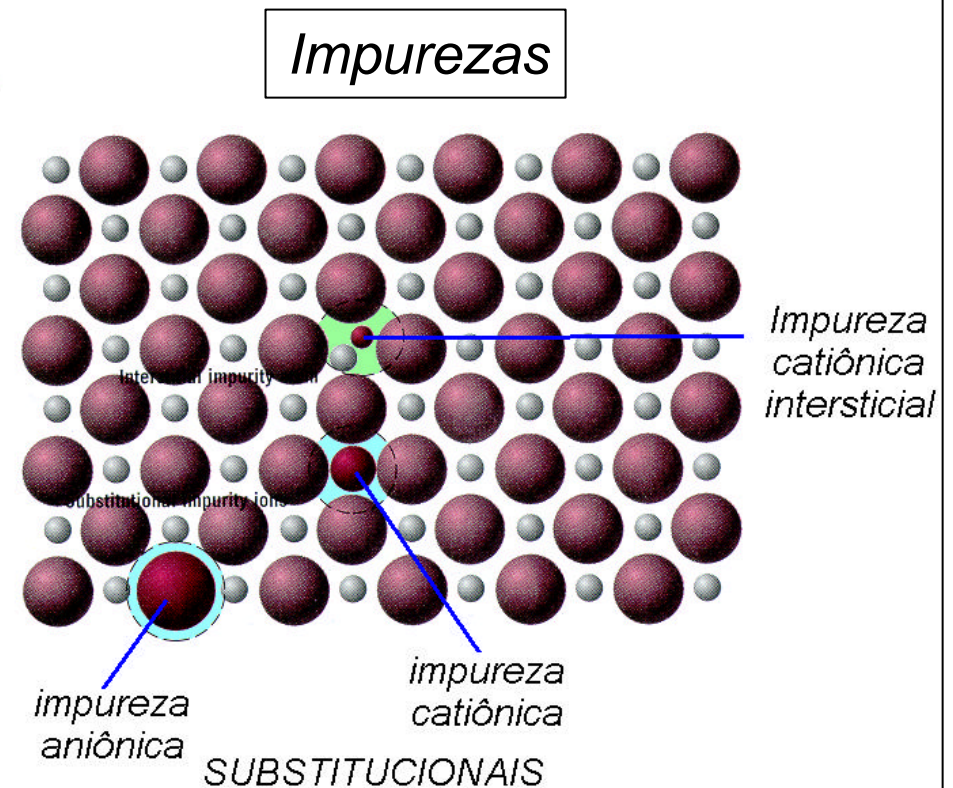
Defeitos puntiformes em sólidos iônicos

10



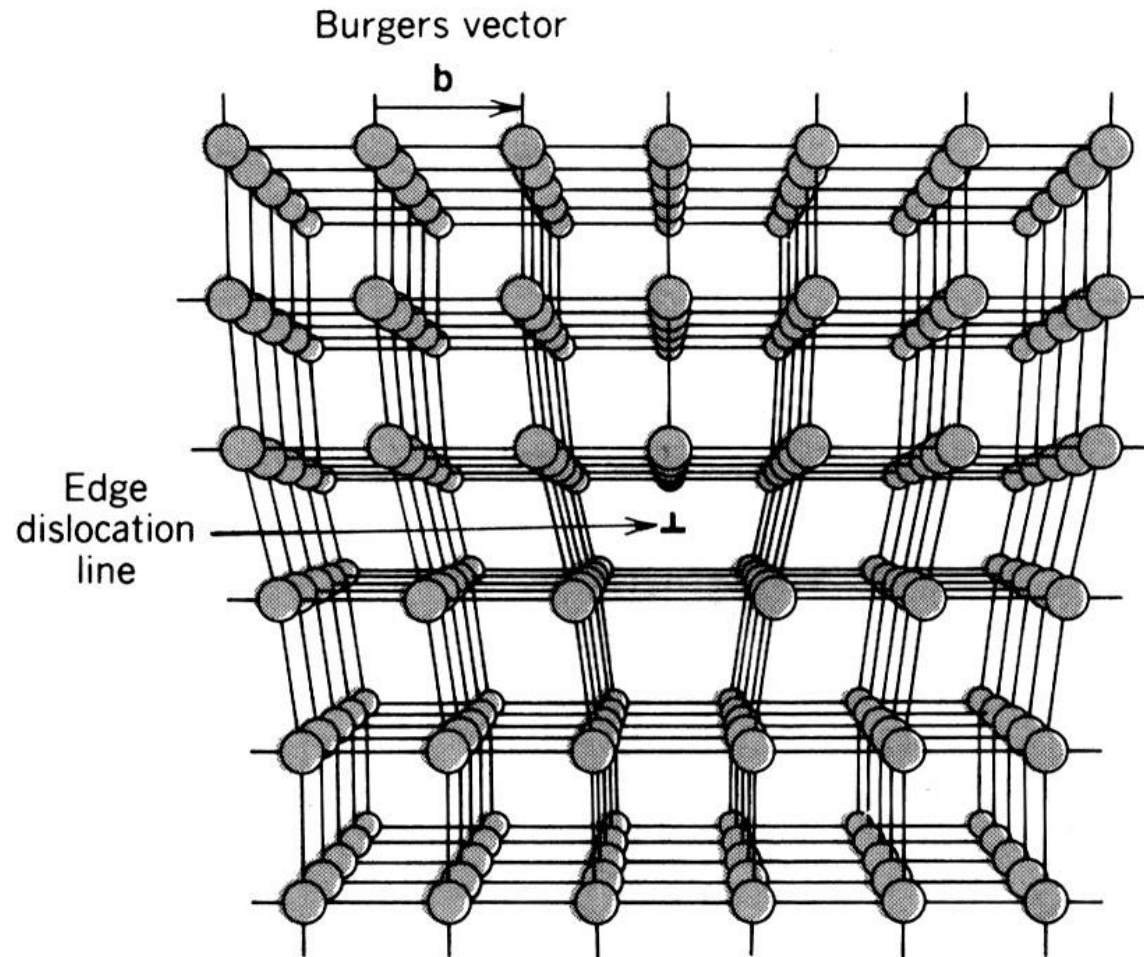
Não-estequiometria

- Exemplos de aplicação
 - Resistências de fornos elétricos (condutividade elétrica de cerâmicas em alta temperatura).
 - Sensores de gases.
 - Materiais com propriedades magnéticas interessantes.



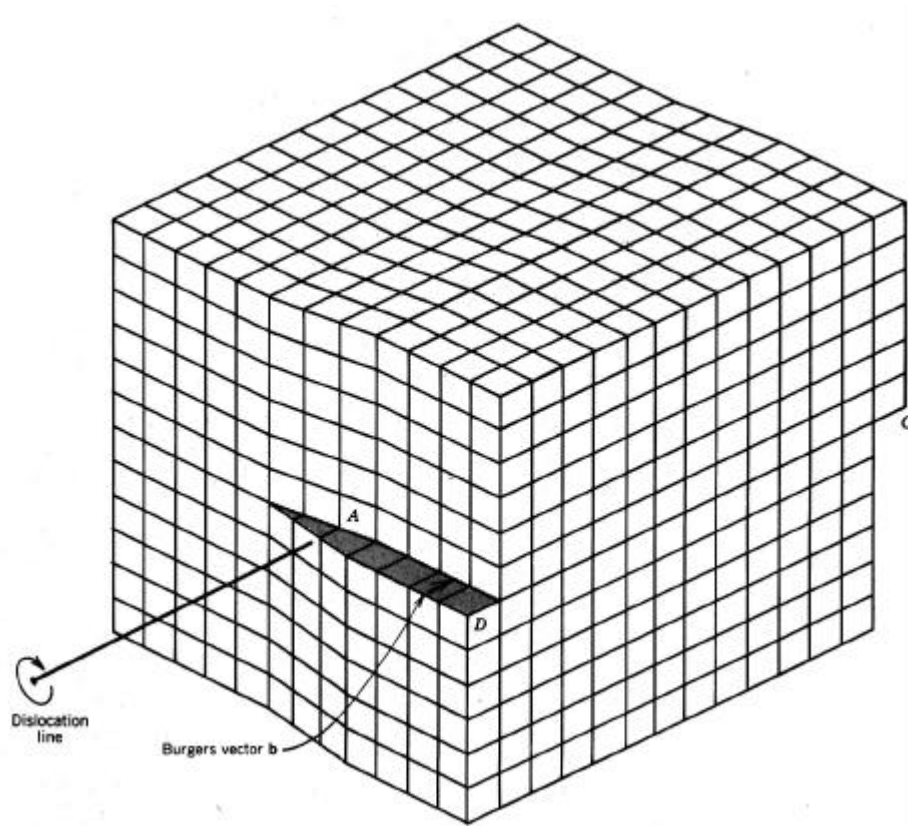
DEFEITOS DE LINHA : Discordância em Cunha

11

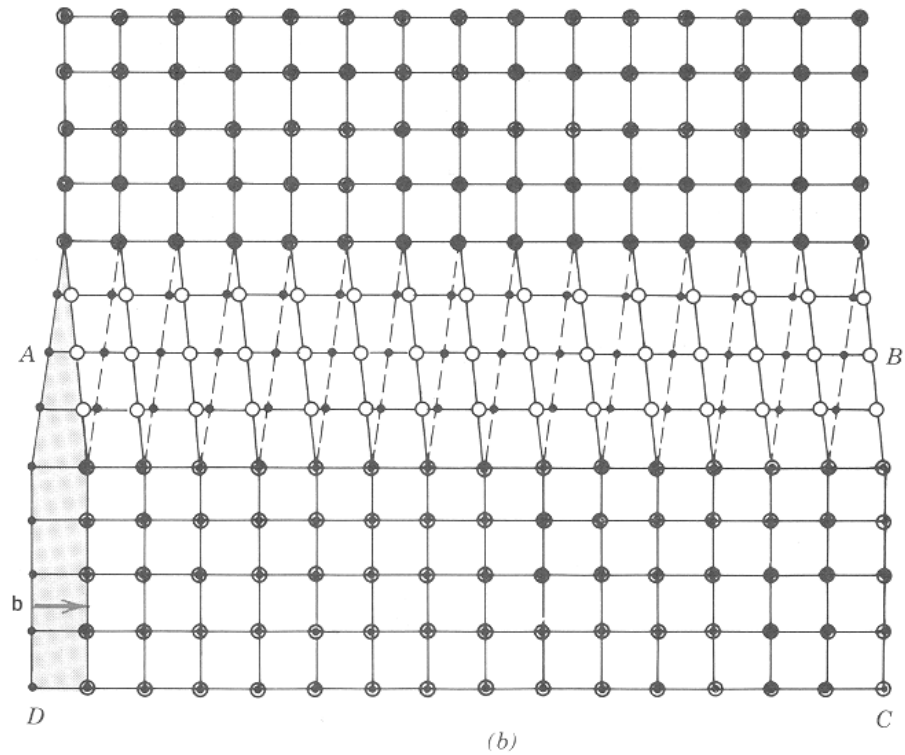


Arranjo dos átomos em torno de uma discordância em cunha ("edge dislocation")

DEFEITOS DE LINHA : Discordância em Hélice



*Discordância em hélice
("screw dislocation")*

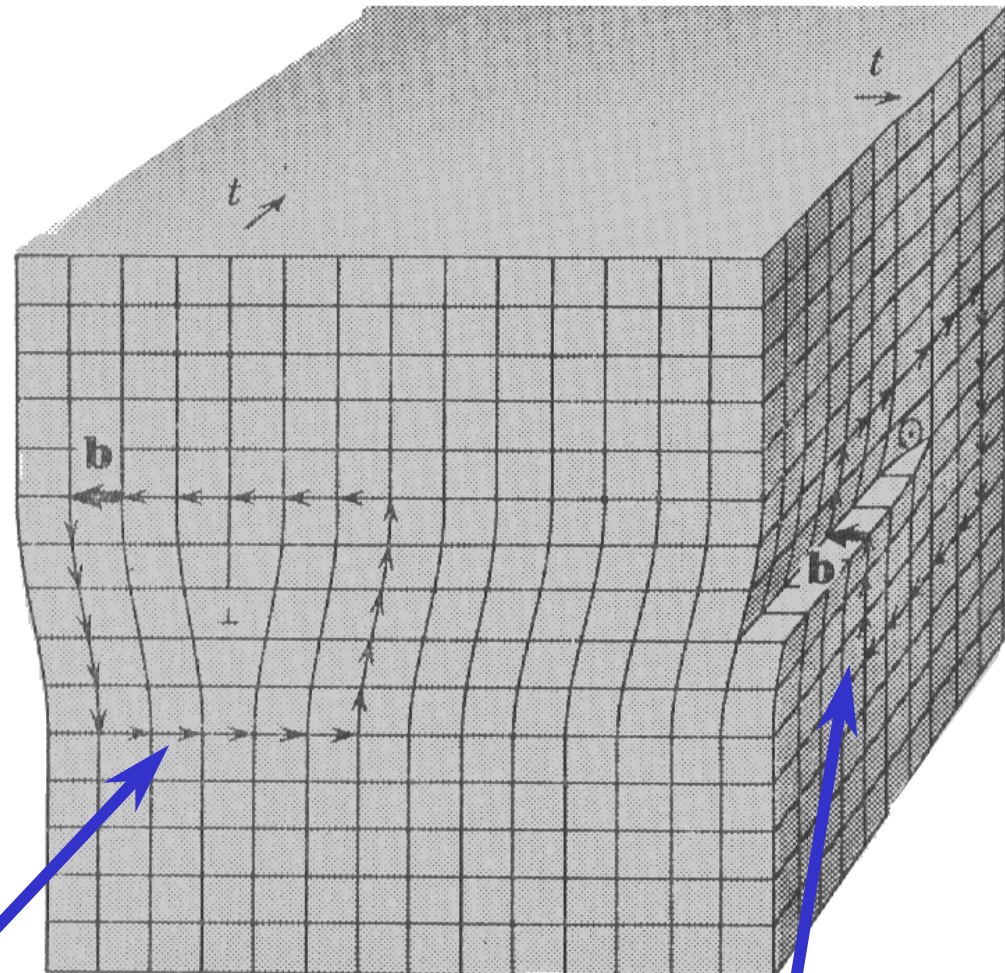


*Arranjo dos átomos em torno de uma
discordância em hélice*

Defeitos de Linha

13

- A magnitude e a direção da distorção do reticulado associada a uma discordância podem ser expressas em termos do **vetor de Burgers, b** .
- O vetor de Burgers pode ser determinado por meio do **circuito de Burgers**.



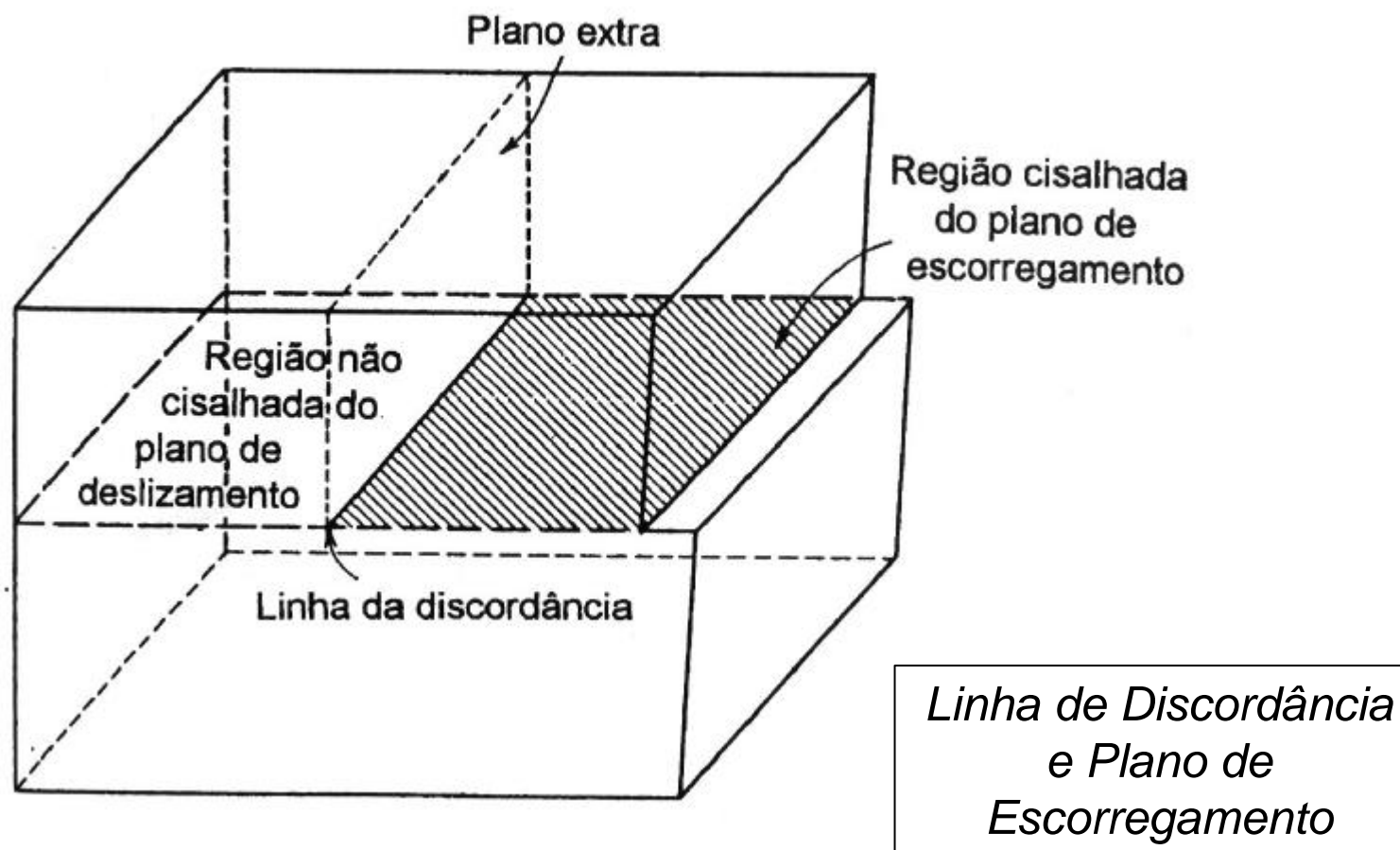
*Circuito de Burgers
Discordância em Cunha*

*Circuito de Burgers
Discordância em Hélice*

Defeitos de Linha

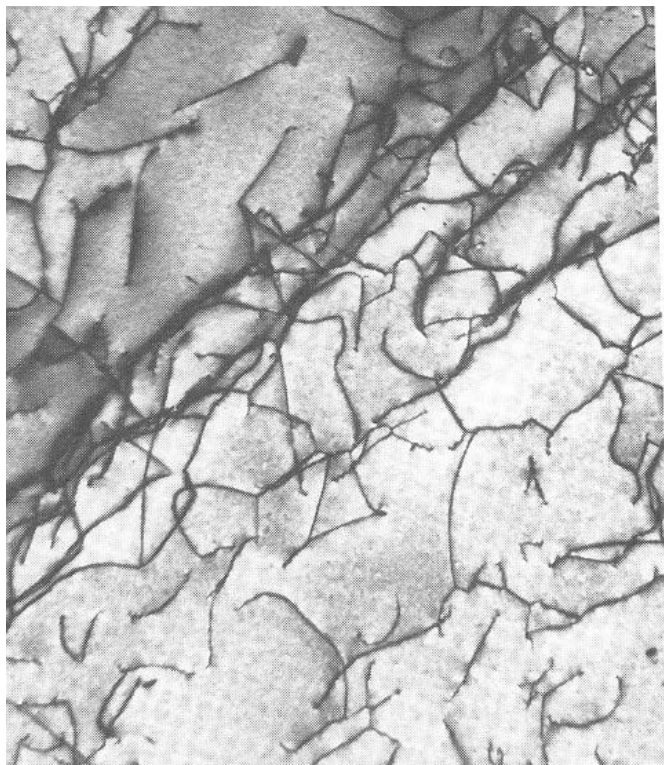
14

- A linha de discordância delimita as regiões cisalhada e não cisalhada.
- Uma discordância não pode terminar no interior de um cristal.

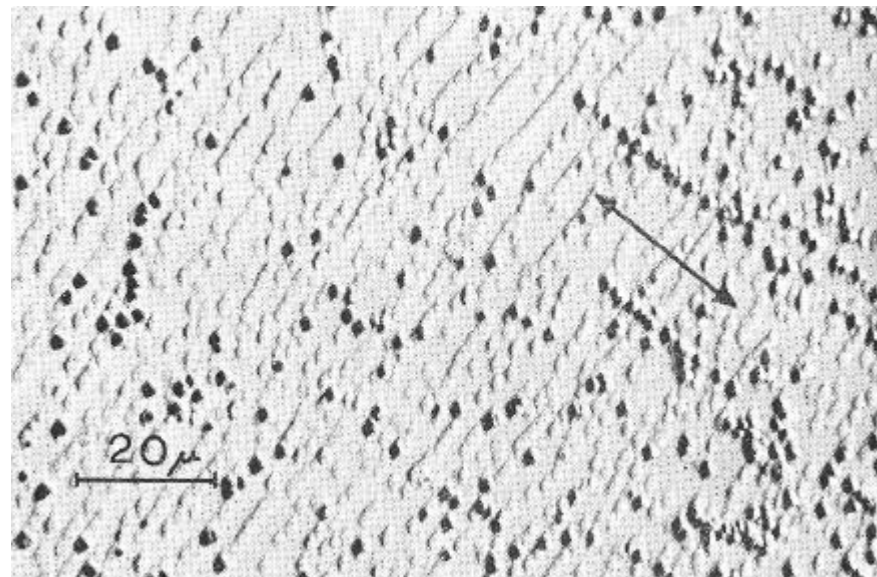


Defeitos de Linha

15



Microscopia eletrônica de transmissão de uma lâmina fina de uma liga metálica contendo discordâncias



Microscopia óptica de uma liga de cobre. Observam-se pites de corrosão, nos locais onde as discordâncias interceptam a superfície

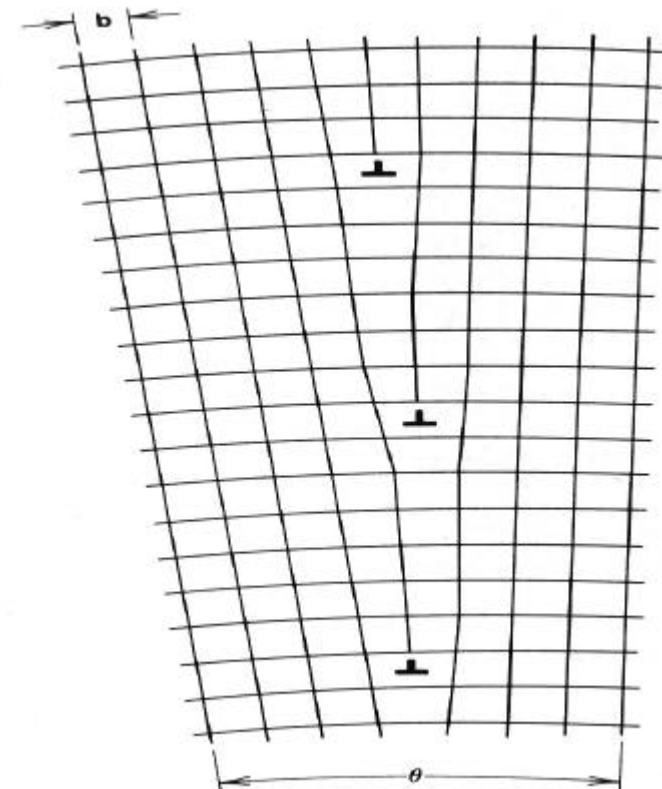
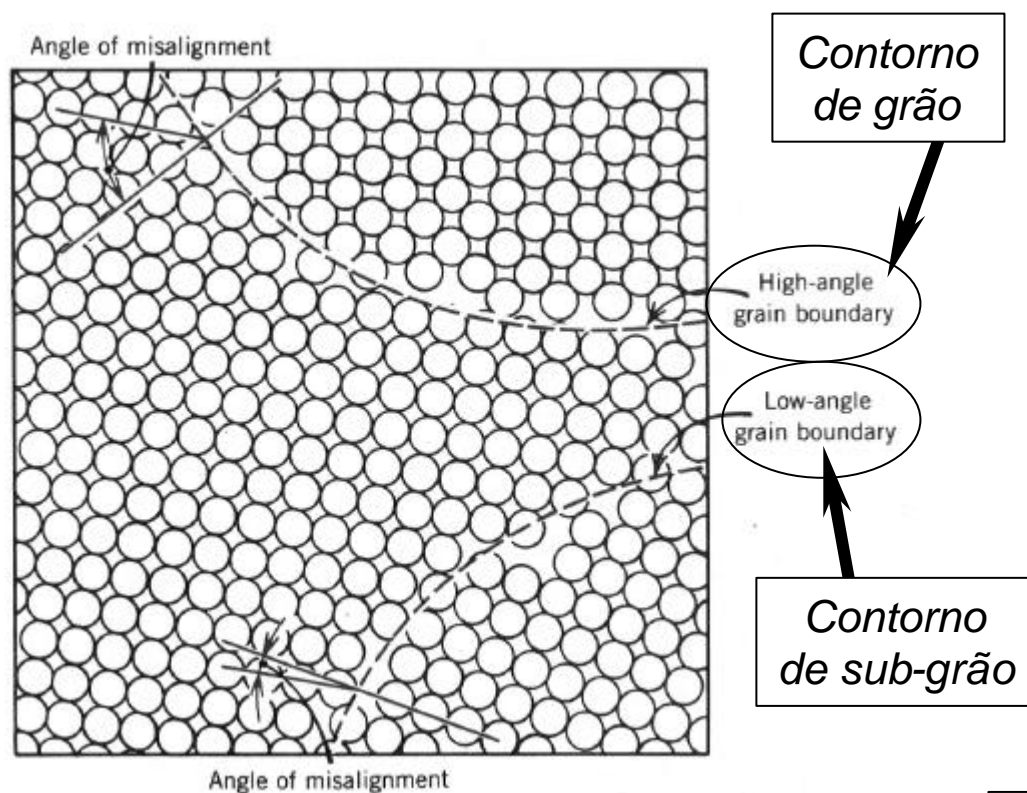
Defeitos Bidimensionais

- Interface: contorno entre duas fases diferentes.
- Contornos de Grão: contornos entre dois cristais sólidos da mesma fase.
- Superfície Externa: superfície entre o cristal e o meio que o circunda
- Contorno de Macla: tipo especial de contorno de grão que separa duas regiões com uma simetria tipo "espelho".
- Falhas de Empilhamento: ocorre nos materiais quando há uma interrupção na seqüência de empilhamento, por exemplo na seqüência ABCABCABC.... dos planos compactos dos cristais CFC.

Defeitos Bidimensionais : Contorno de Grão

17

- Quando o desalinhamento entre os grãos vizinhos é grande (maior que $\sim 15^\circ$), o contorno formado é chamado contorno de grão de alto ângulo.
- Se o desalinhamento é pequeno (em geral, menor que 5°), o contorno é chamado contorno de pequeno ângulo, e as regiões que tem essas pequenas diferenças de orientação são chamadas de subgrãos.



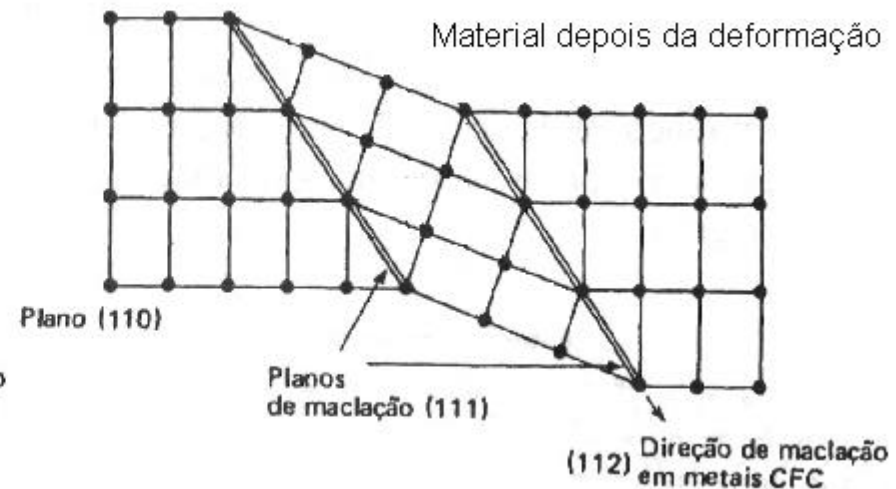
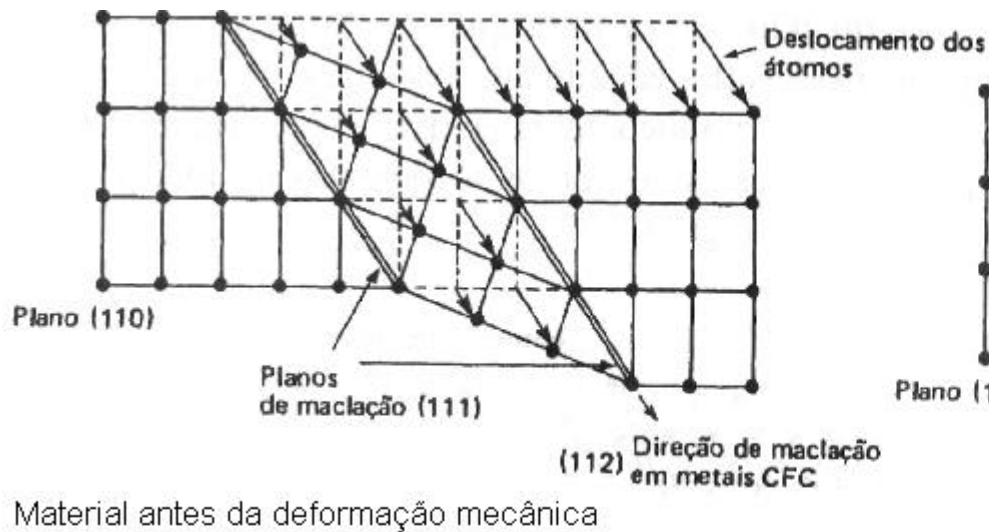
Contorno de pequeno ângulo resultante do alinhamento de discordâncias em cunha

Defeitos Bidimensionais : Contornos de Macla

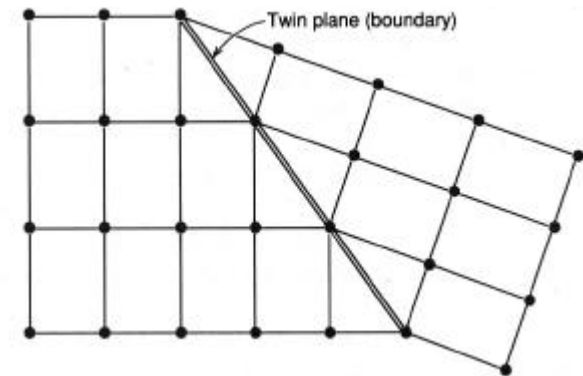
18

- A **macla** é um tipo de defeito cristalino que pode ocorrer durante a solidificação, deformação plástica, recristalização ou crescimento de grão.
- Tipos de macla: maclas de recozimento e maclas de deformação.
- A maclação ocorre em um plano cristalográfico determinado segundo uma direção cristalográfica específica. Tal conjunto plano/direção depende do tipo de estrutura cristalina.

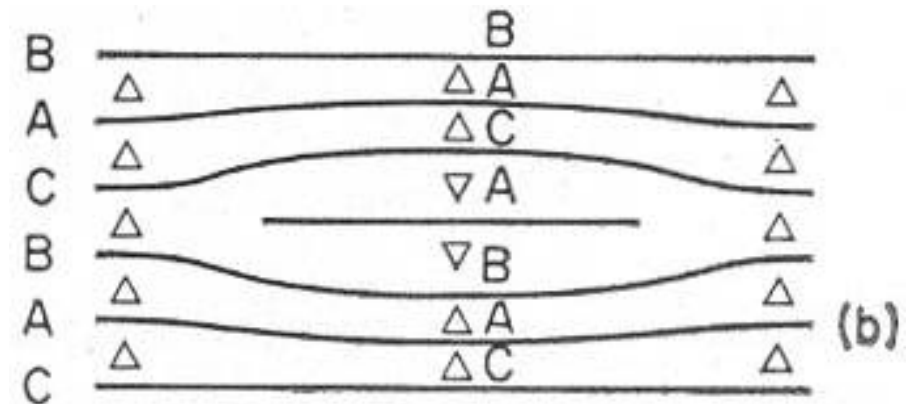
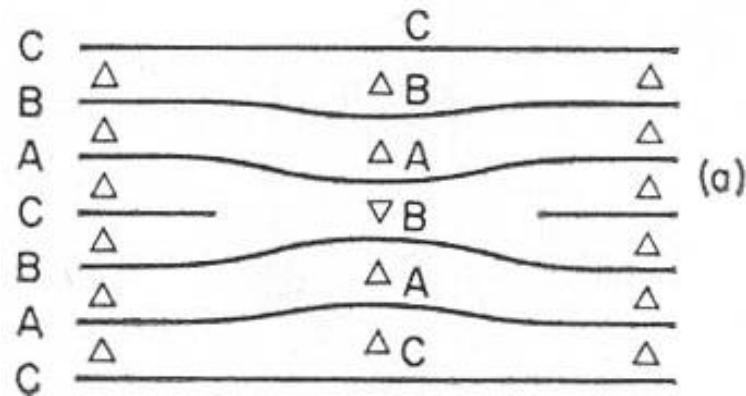
Maclação mecânica em metais CFC



Contorno de macla



- Outros defeitos bidimensionais são possíveis:
 - **Falhas de empilhamento** (encontradas em metais CFC)



Defeitos em Volume

- Além dos defeitos apresentados nas transparências anteriores, os materiais podem apresentar outros tipos de defeitos, que se apresentam em escalas muito maiores.
- Esses defeitos normalmente são introduzidos nos processos de fabricação, e podem afetar fortemente as propriedades dos produtos.
- Exemplos: inclusões, poros, trincas, precipitados .

Observação Microestrutural

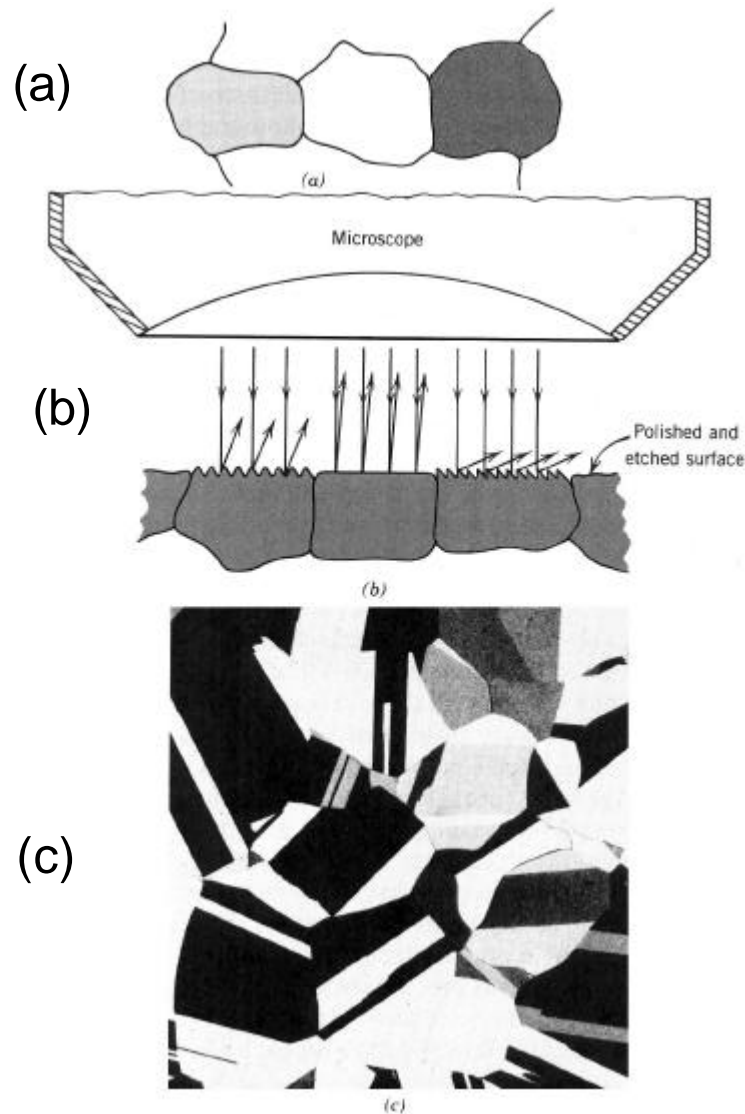
20

- Observação estrutural: macroestrutura e microestrutura.
- Observação da macroestrutura: a olho nu ou com baixos aumentos (até ~10X).
- Observação da microestrutura: microscopia óptica e microscopia eletrônica.

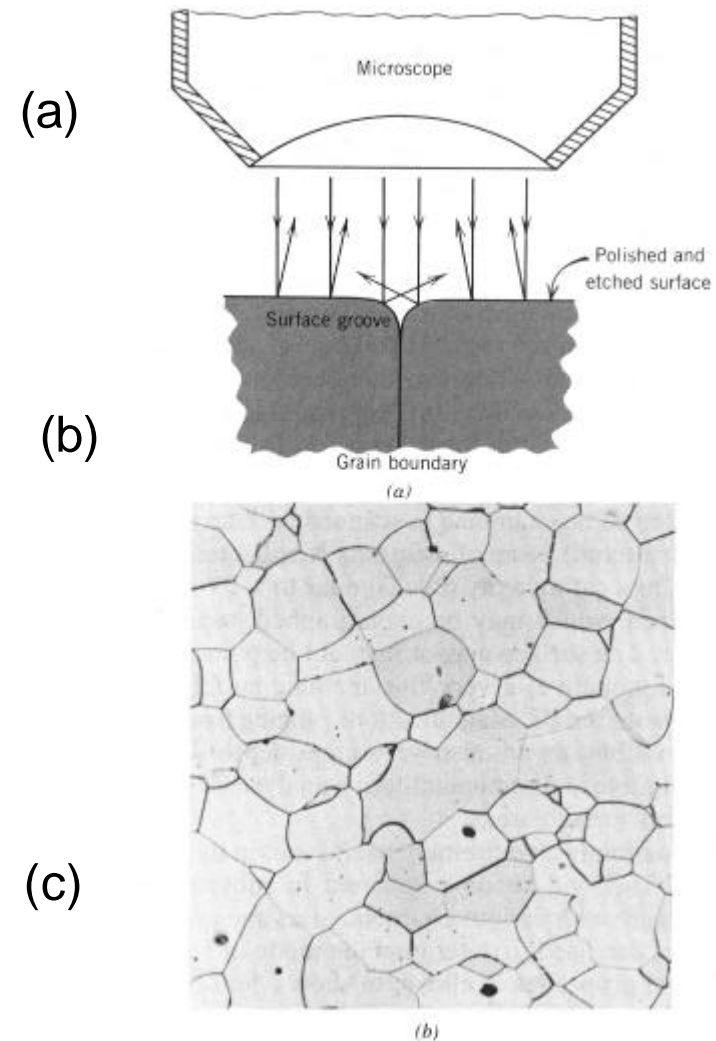


Macroestrutura de um lingote de chumbo apresentando os diferentes grãos.

Observação Microestrutural (microscopia óptica)



(a) e (b) Formação do contraste entre grãos.
(c) Micrografia óptica de um latão (Cu-Zn) policristalino. Aumento: 60X.



(a) e (b) Formação da imagem dos contornos de grão.
(c) Micrografia óptica de uma liga Fe-Cr. Aumento: 100X.

- Capítulos do Callister tratados nesta aula
 - Capítulo 4 : completo
 - Capítulo 7 : Maclas, item 7.7 .
 - Capítulo 13: Defeitos em sólidos iônicos, item 13.5 .

- Outras referências importantes
 - Van Vlack , L. - Princípios de Ciência dos Materiais, 3^a ed.
 - Capítulo 4 : itens 4-1 a 4-9
 - Padilha, A.F. – Materiais de Engenharia. Hemus. São Paulo. 1997.
 - Capítulos 9 e 10.