

O CRISTAL REAL

Defeitos na Estrutura Cristalina

Livro Texto - Capítulo 4



Defeitos na Estrutura Cristalina

- Os cristais descritos até agora são todos ideais ou seja, não possuem defeitos.
- Os cristais reais apresentam inúmeros defeitos, que são classificados por sua “dimensionalidade”.
 - Defeitos Pontuais (dimensão zero)
 - Vacâncias
 - Impurezas intersticiais e substitucionais
 - Defeitos Lineares (dimensão um)
 - Discordâncias (dislocations)
 - Defeitos Planares (dimensão dois)
 - Interfaces e fronteiras de grão
 - Defeitos Volumétricos (dimensão três)
 - Vazios, fraturas, inclusões e outras fases.

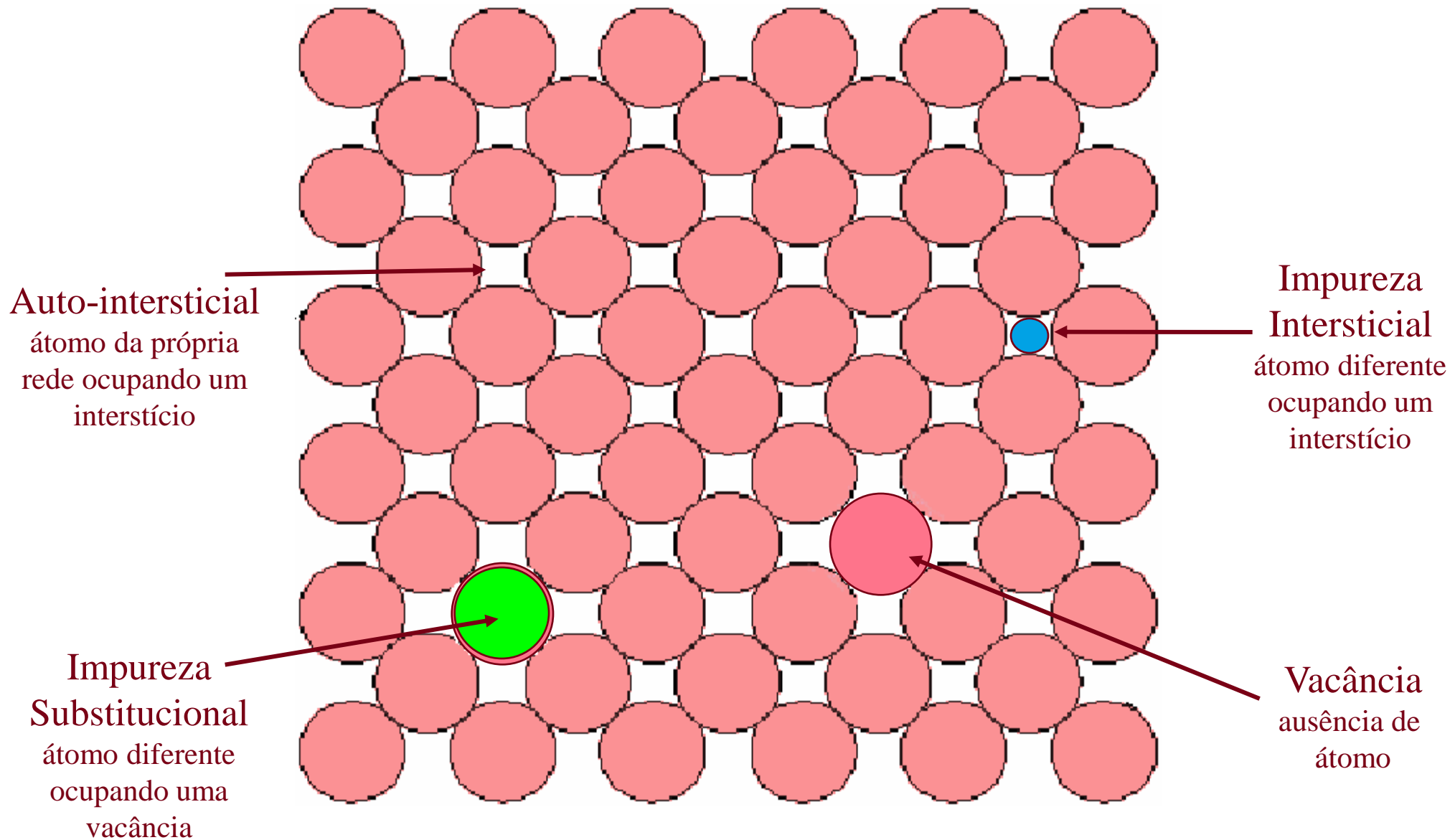


Defeitos Pontuais

- Devido à agitação térmica, os átomos de um cristal real estão sempre vibrando.
- Quanto maior a energia térmica (ou temperatura), maior será a chance de átomos saírem de suas posições, deixando um vazio (vacância) em seu lugar.
- Por outro lado, dentro da rede cristalina existem inúmeros interstícios, espaços vazios entre os átomos, nos quais é possível alojar outros átomos.
- Finalmente, é praticamente impossível obter um material infinitamente puro. Sempre haverá impurezas presentes na rede cristalina.



Visualização de Defeitos Pontuais



Concentração de defeitos

- Para formar defeitos é necessário dispor de energia.
- Normalmente esta energia é dada na forma de energia térmica. Isto quer dizer que quanto maior a temperatura, maior será a concentração de defeitos.
- Para muitos tipos de defeitos vale o seguinte:

$$C_D = \frac{N_D}{N} = \exp\left(\frac{-Q_D}{kT}\right)$$

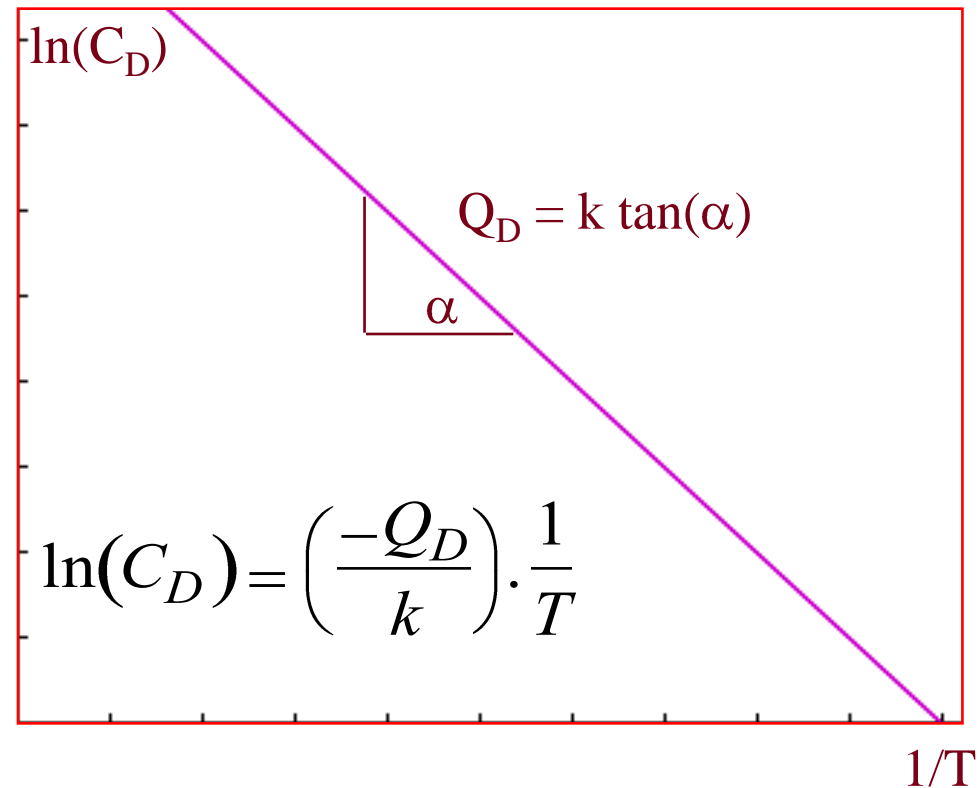
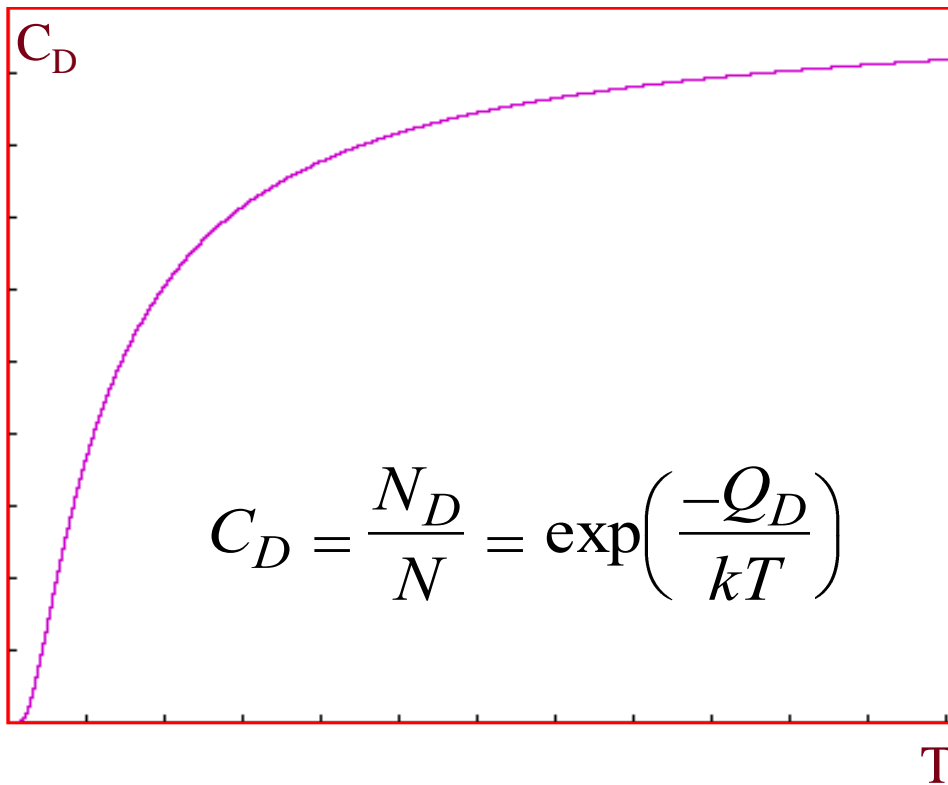
- onde C_D é a concentração de defeitos
- Q_D é a energia de ativação para o defeito
- k é a constante de Boltzmann
- T é a temperatura absoluta em Kelvin

Conc. de defeitos (cont.)

- Ex: Concentração de vacâncias em cobre a 200°C e a 1080°C ($T_f = 1084^\circ\text{C}$)
 - Dados: $Q_D = 0.9 \text{ eV/atom}$ (1 elétron-volt = $1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$)
 $k = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/atom-K}$
 - $T_1 = 200 + 273 = 473 \text{ K}$
 $C_D = \exp(-0.9 / 8.62 \times 10^{-5} \times 473) = 2.59 \times 10^{-10}$
 - $T_2 = 1080 + 273 = 1353 \text{ K}$
 $C_D = \exp(-0.9 / 8.62 \times 10^{-5} \times 1353) = 0.445 \times 10^{-3}$
ou $\approx 1/2$ vacância para cada 1000 átomos no volume
ou $\approx 1/2$ vacância para cada 10 átomos em cada direção.

O Gráfico de Arrhenius

- Gráfico de C_D versus T

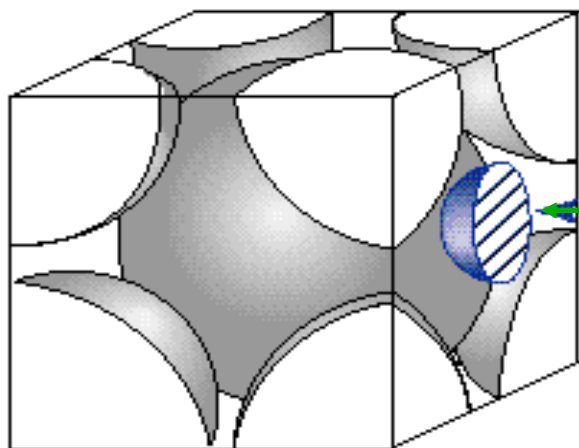


A partir de um gráfico experimental de $\ln(C_D)$ versus $1/T$ é possível determinar a energia de ativação.



Impurezas

- Impurezas poderão assumir dois tipos de posição na rede cristalina de outro material
 - Interstícios - espaços vazios na rede – impureza intersticial
 - Substituindo um átomo do material – impureza substitucional
- Impureza intersticial - um exemplo fundamental
 - Carbono em α -Ferro (aço)



Átomo de Carbono ocupando um interstício na estrutura ccc do Ferro

$$R_{\text{int}} = a/2 - R_{\text{Fe}} \quad a = 4R_{\text{Fe}}/\sqrt{3}$$

$$R_{\text{Fe}} = 0.124 \text{ nm} \quad R_{\text{int}} = \mathbf{0.0192 \text{ nm}}$$

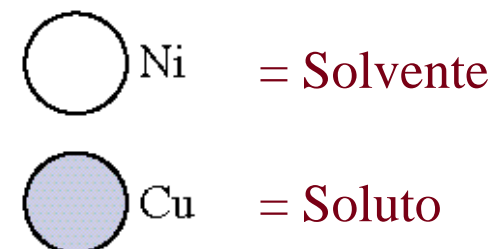
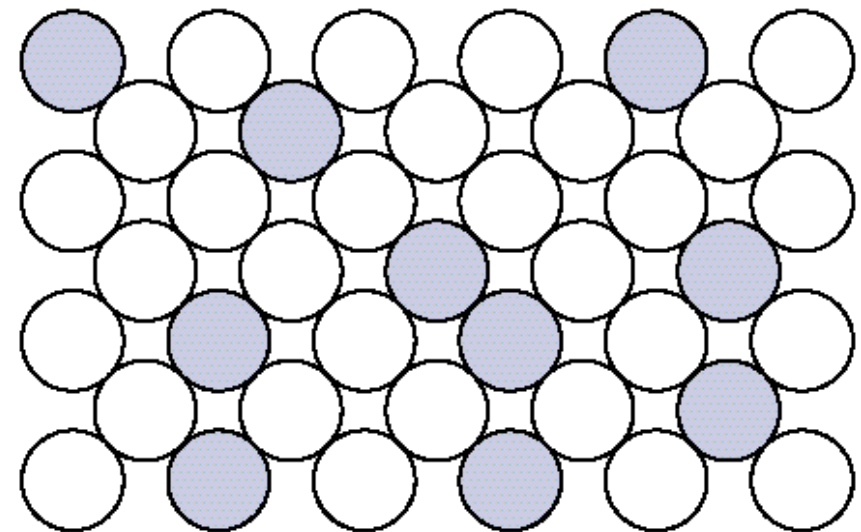
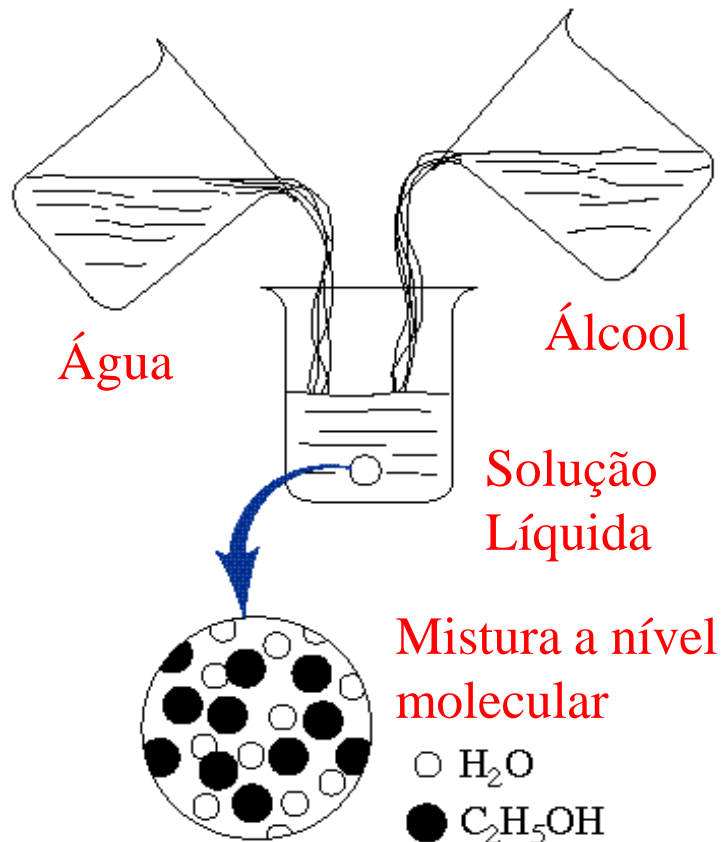
Mas $R_{\text{C}} = 0.077 \text{ nm} \Rightarrow$

$$R_{\text{C}} / R_{\text{int}} = 4.01$$

Ou seja, o C está altamente comprimido nesta posição, o que implica em baixíssima solubilidade (< 0.022 at %)

Soluções Sólidas

- A presença de impurezas substitucionais gera uma mistura entre os átomos das impurezas e os do material, gerando uma *solução sólida*.



As regras de Hume-Rothery

- Para que haja total miscibilidade entre dois metais, é preciso que eles satisfaçam as seguintes condições
 - Seus raios atômicos não difiram de mais de 15%
 - Tenham a mesma estrutura cristalina
 - Tenham eletronegatividades similares
 - Tenham a mesma valência

