



IMPERFECCIONES - DIFUSIÓN

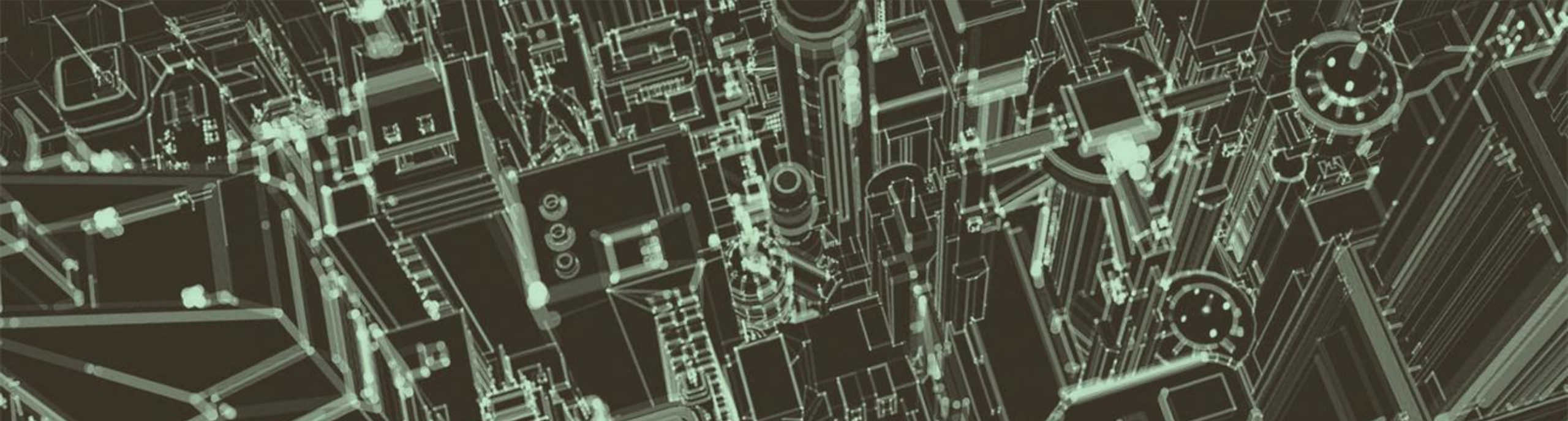
INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA DE MATERIALES

2023



Docente y bibliografía

- Docente: Mariana Silva
- Mail: msilva@fing.edu.uy
- BIBLIOGRAFÍA BÁSICA: “Introducción al a ciencia e ingeniería de los materiales”. W. Callister. Capítulo 4 (imperfecciones) y 5 (difusión)



Introducción a las imperfecciones en sólidos cristalinos



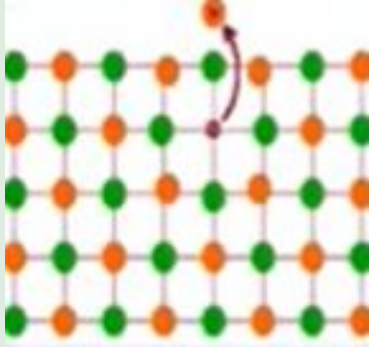
Contenido

- Generalidades
- Imperfecciones puntuales
- Imperfecciones lineales
- Imperfecciones interfaciales

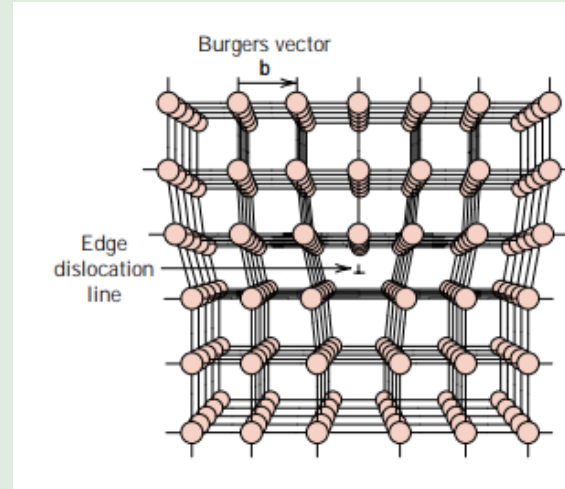
Generalidades

- Una imperfección es un apartamiento del patrón repetitivo perfecto de la red cristalina
- Las imperfecciones están presentes en todos los sólidos cristalinos

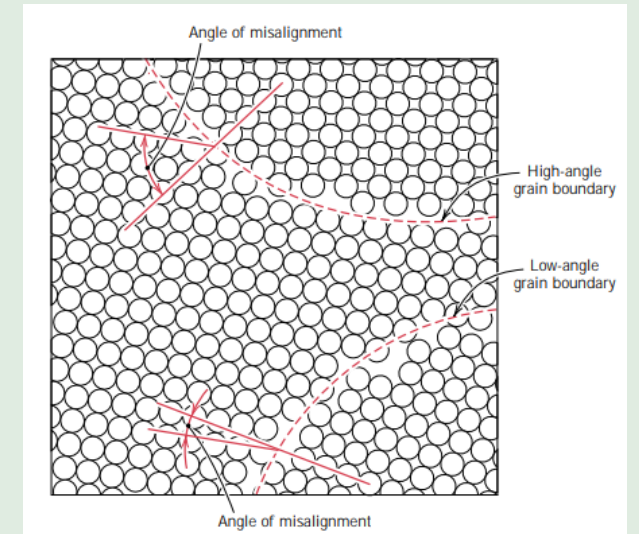
Clasificación



Imperfecciones puntuales



Imperfecciones lineales

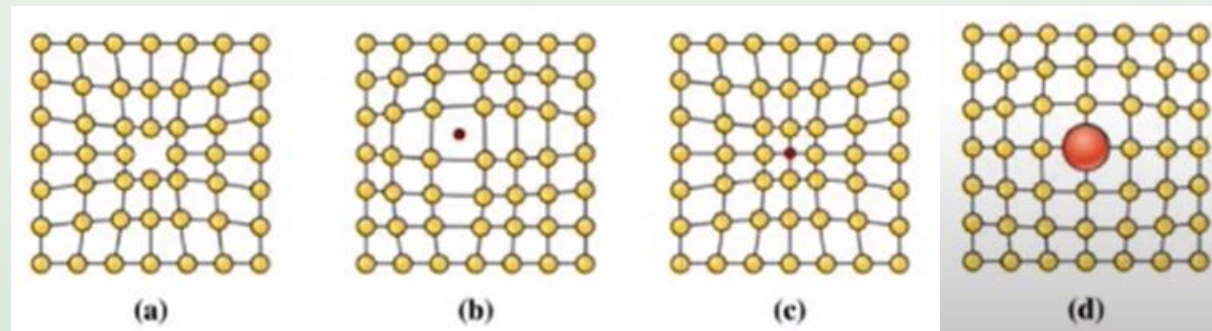
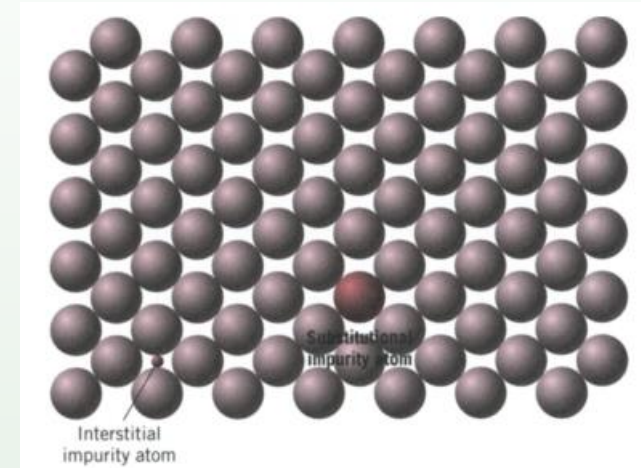
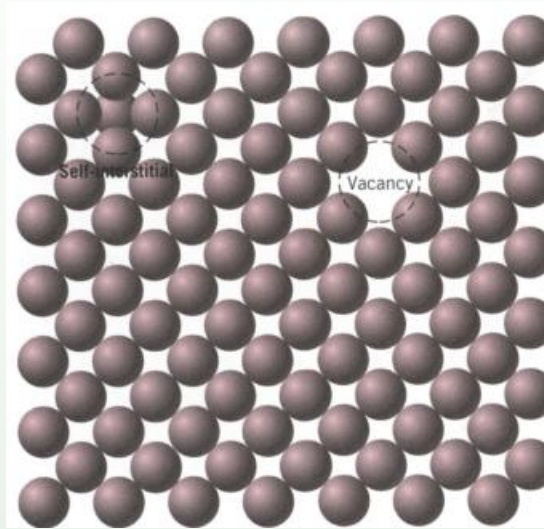


Imperfecciones interfaciales

Imperfecciones puntuales

Tipos:

- Vacancias
- Átomos intersticiales
- Átomos sustitucionales



Imperfecciones puntuales

Vacancias

En el equilibrio el número de vacancias depende de la temperatura

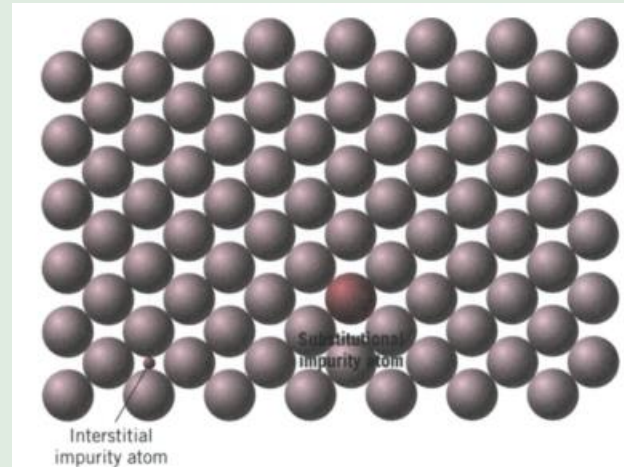
$$N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right)$$

- N_v : número de vacancias en el equilibrio
- N número total de lugares ocupados por átomos en una red perfecta por unidad de volumen
- Q_v energía de activación requerida para formar una vacancia
- k cte de Boltzmann

Imperfecciones puntuales

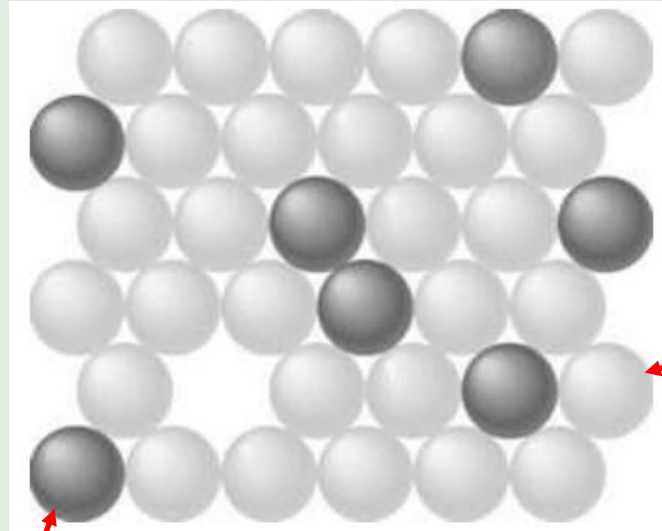
Soluciones sólidas: “Al adicionar átomos de soluto (componente en menor cantidad) a un disolvente/solvente (componente en mayor cantidad), la estructura cristalina se mantiene”

- Sólido sustitucional
- Sólido intersticial



Imperfecciones puntuales

**Soluciones sólidas
sustitucional**



soluto

solvente

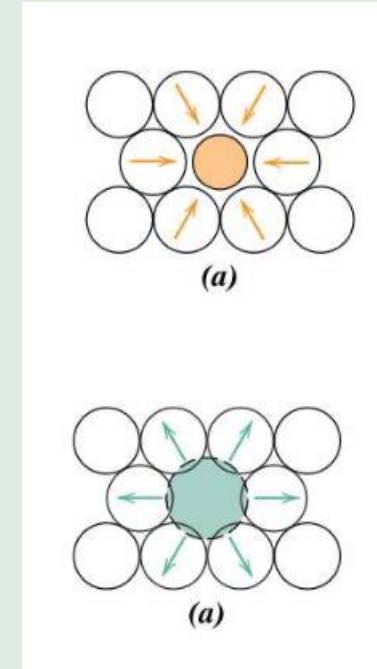
Plano (1 1 1) de FCC

Imperfecciones puntuales

Soluciones sólidas sustitucional

Depende de:

- tamaños atómicos similares (+- 15%)
- similar estructura cristalina permite alta solubilidad
- electronegatividad similar. Si un elemento es muy electropositivo y otro por electronegativo tenderán a formar enlaces covalentes y por lo tanto compuestos en lugar de formar soluciones
- Valencia. Si los dos elementos tienen una valencia similar se favorece la solubilidad en el estado sólido



Predecir la solubilidad relativa de los siguientes elementos en el cobre (Cu):

Zinc, plomo, silicio, níquel, aluminio, berilio

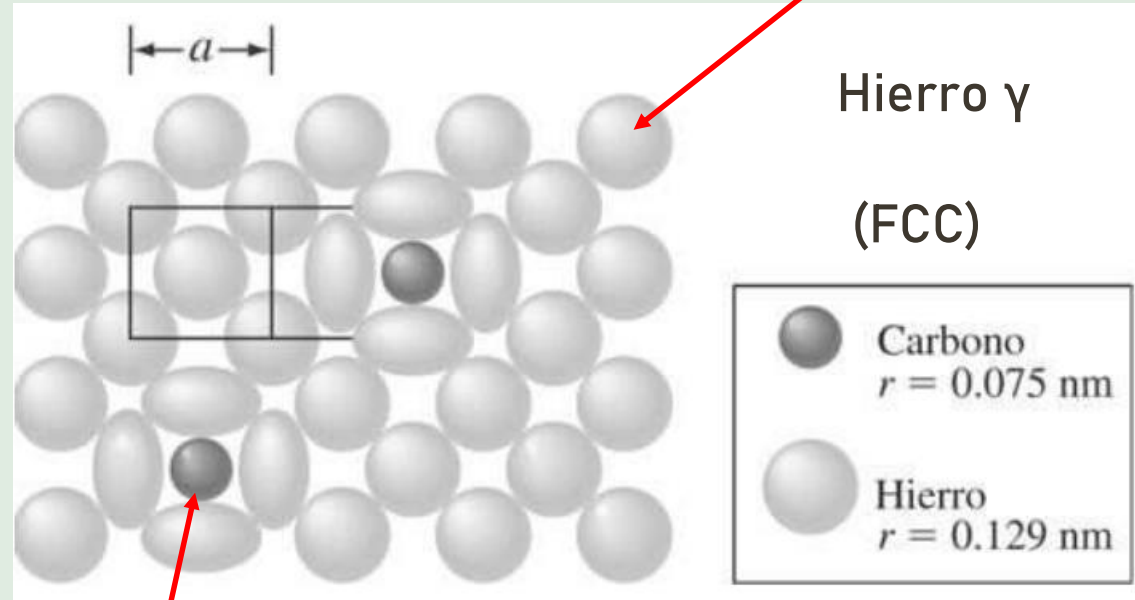
Elemento	Radio atómico (nm)	Estructura cristalina	Electro-negatividad	Valencia
Cobre	0.128	FCC	1.8	+2
Zinc	0.133	HCP	1.7	+2
Plomo	0.175	FCC	1.6	+2, +4
Silicio	0.117	Cúbica diamante	1.8	+4
Níquel	0.125	FCC	1.8	+2
Aluminio	0.143	FCC	1.5	+3
Berilio	0.114	HCP	1.5	+2

Sistema	Diferencia de radio atómico (%)	Diferencia de electronegatividad	Grado de solubilidad en estado sólido relativo previsto	Solubilidad máxima en el estado sólido observada (en %)
Cu-Zn	+3.9	0.1	Alta	38.3
Cu-Pb	+36.7	0.2	Muy baja	0.1
Cu-Si	-8.6	0	Moderada	11.2
Cu-Ni	-2.3	0	Muy baja	100
Cu-Al	+11.7	0.3	Moderada	19.6
Cu-Be	-10.9	0.3	Moderada	16.4

Imperfecciones puntuales

Soluciones sólidas intersticial

Átomos que suelen formar soluciones sólidas intersticiales: hidrógeno, carbono, nitrógeno, oxígeno



solvente

soluto

Imperfecciones puntuales

Soluciones sólidas intersticial.

Ejemplo: aleaciones de hierro - carbono

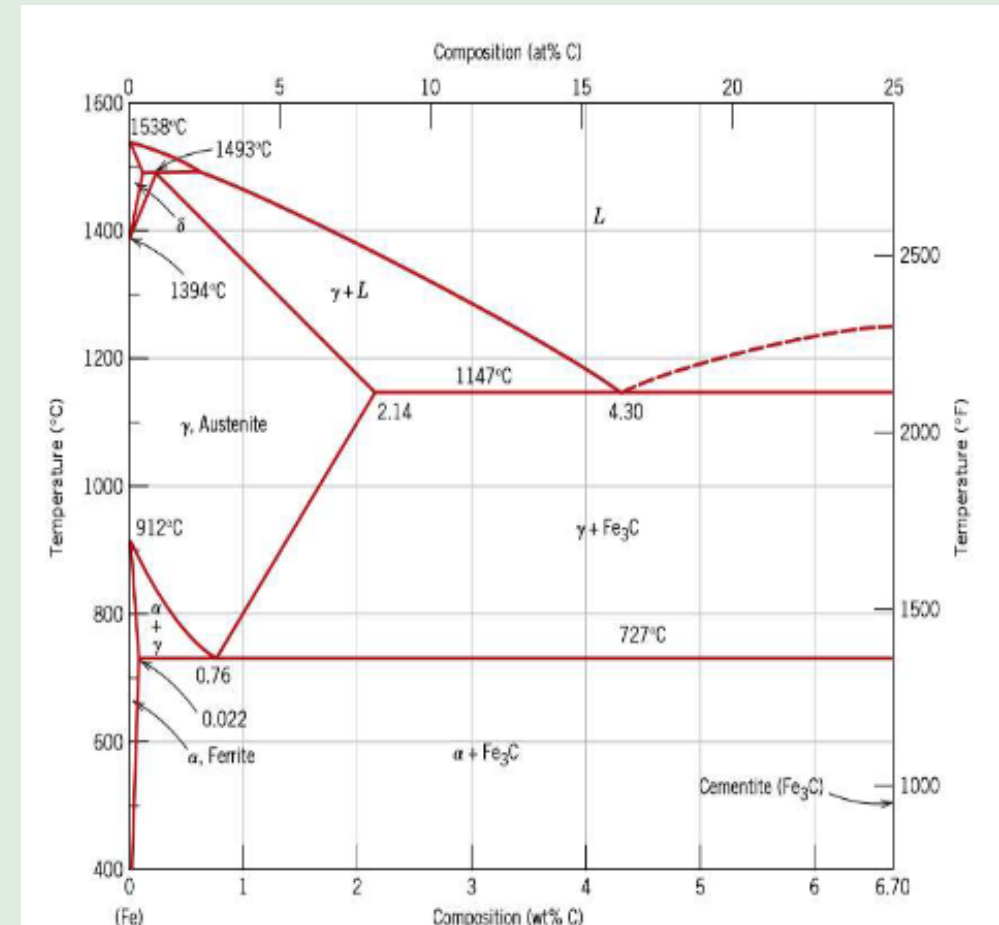
Radio del átomo de carbono es de 0.075 nm

Radio del mayor hueco intersticial en el hierro γ (FCC) es de 0.053 nm

Solubilidad máxima del carbono en hierro γ es 2.14% (aprox)

Radio del hueco intersticial en el hierro α (BCC) es de 0.036 nm

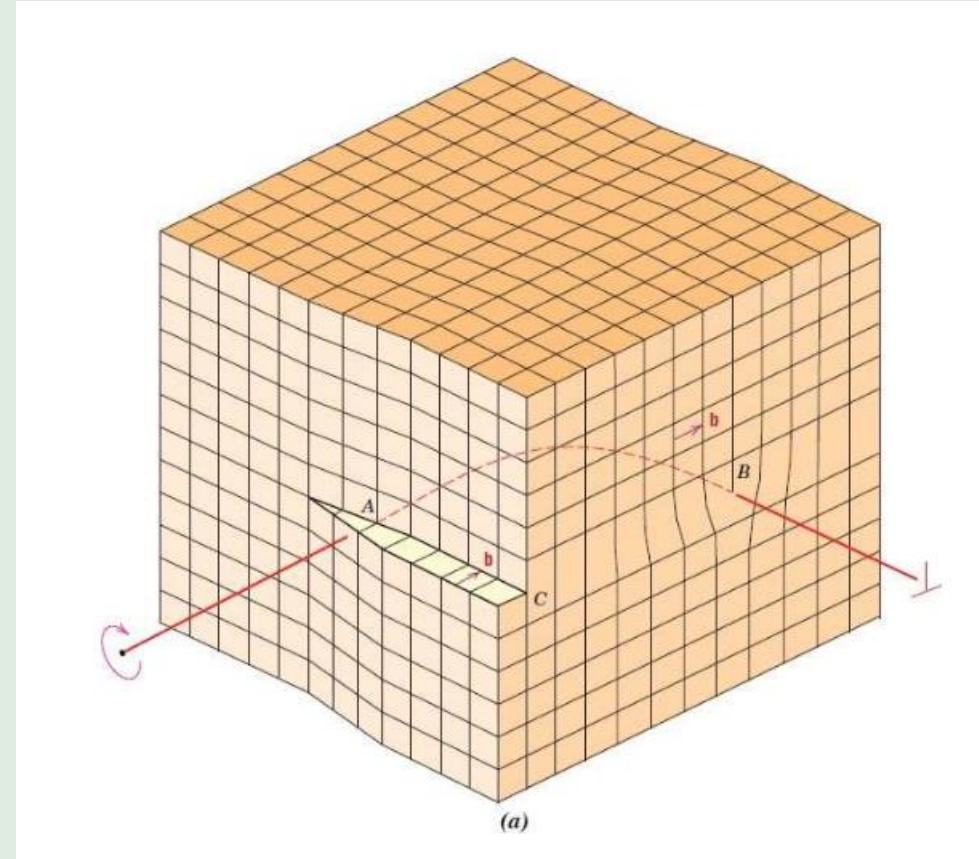
Solubilidad máxima del carbono en hierro α es 0.022% (aprox)



Imperfecciones lineales

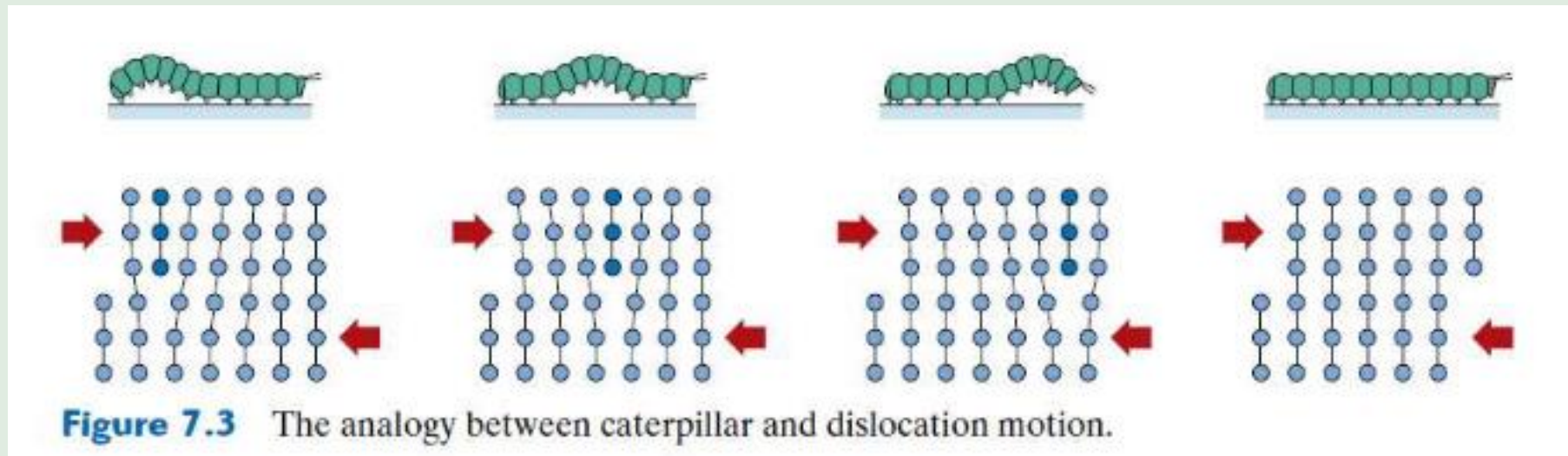
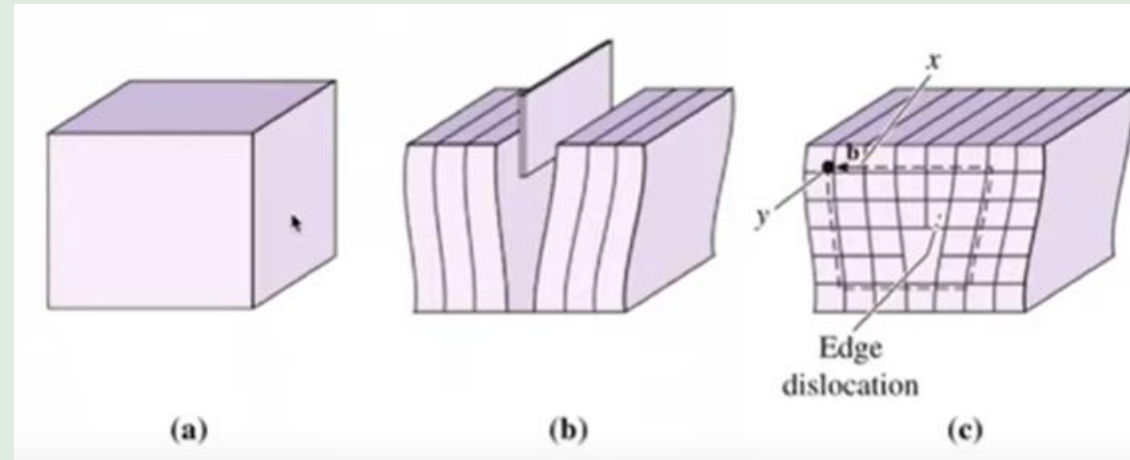
Tipos:

- De línea o borde
- Tornillo o helicoidal
- Mixtas



Imperfecciones lineales

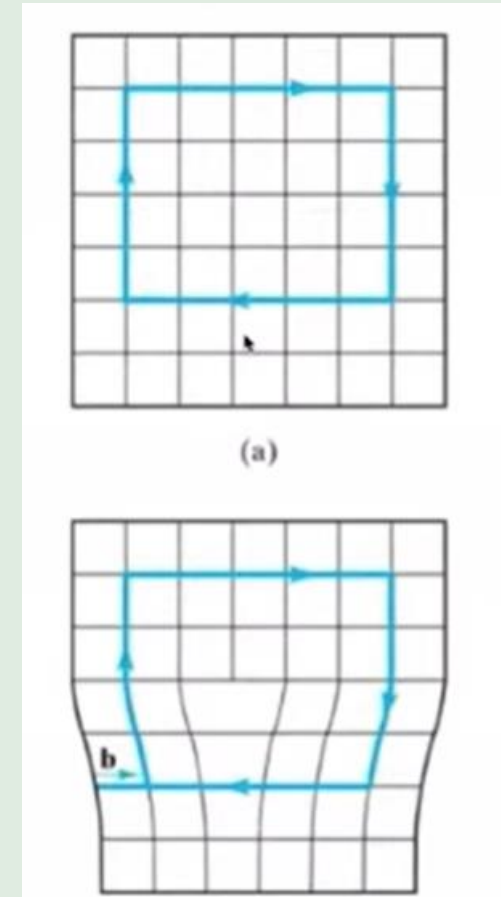
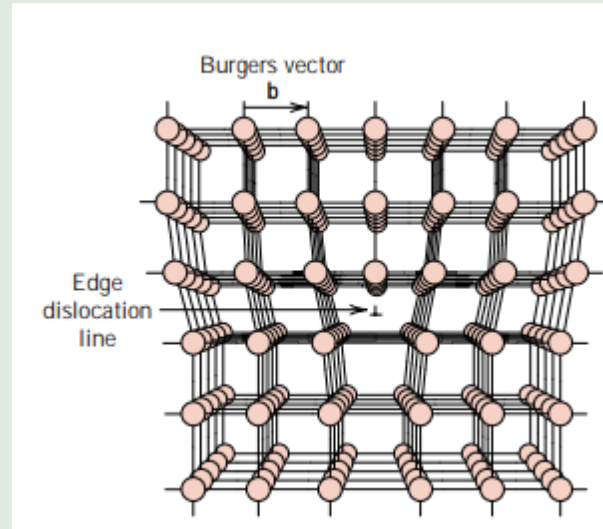
De línea



Imperfecciones lineales

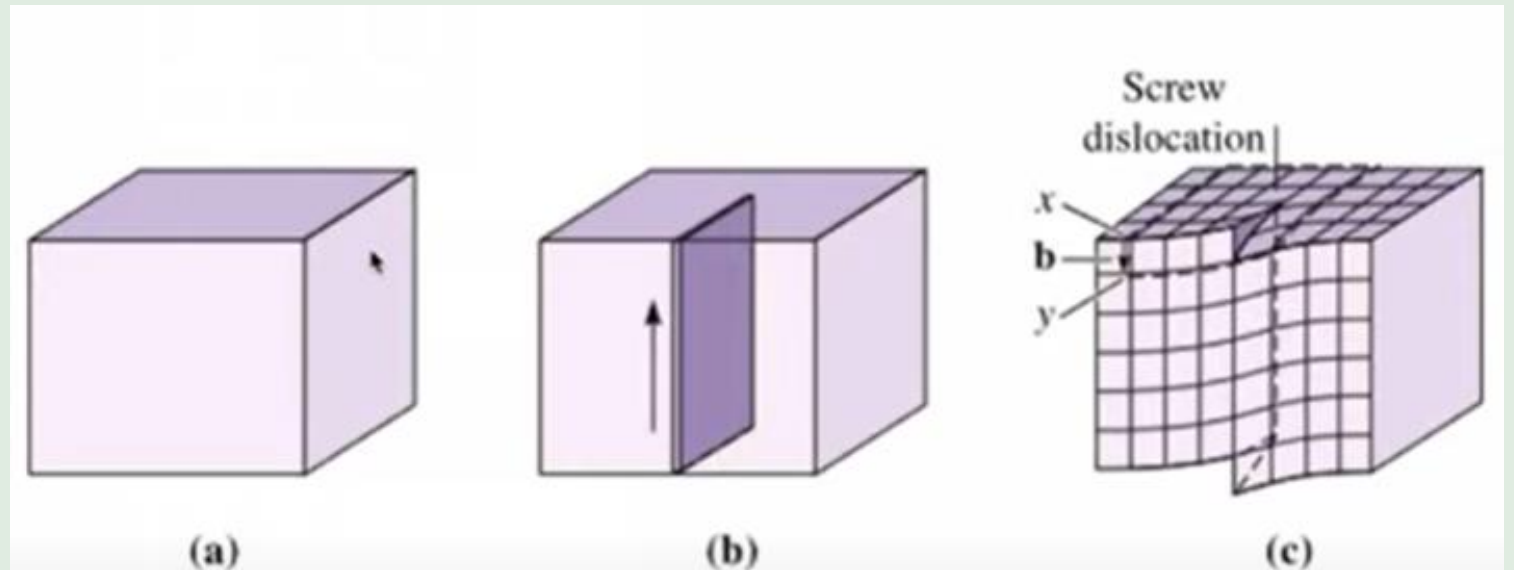
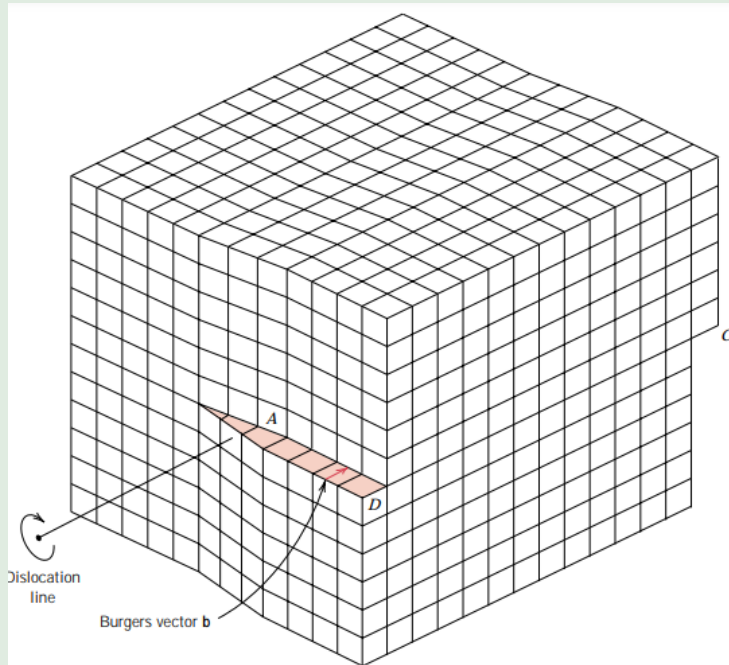
De línea

- La dislocación se referencia como una línea por debajo de la fila de átomos extras
- El vector de Burgers es perpendicular a la línea de la dislocación.



Imperfecciones lineales

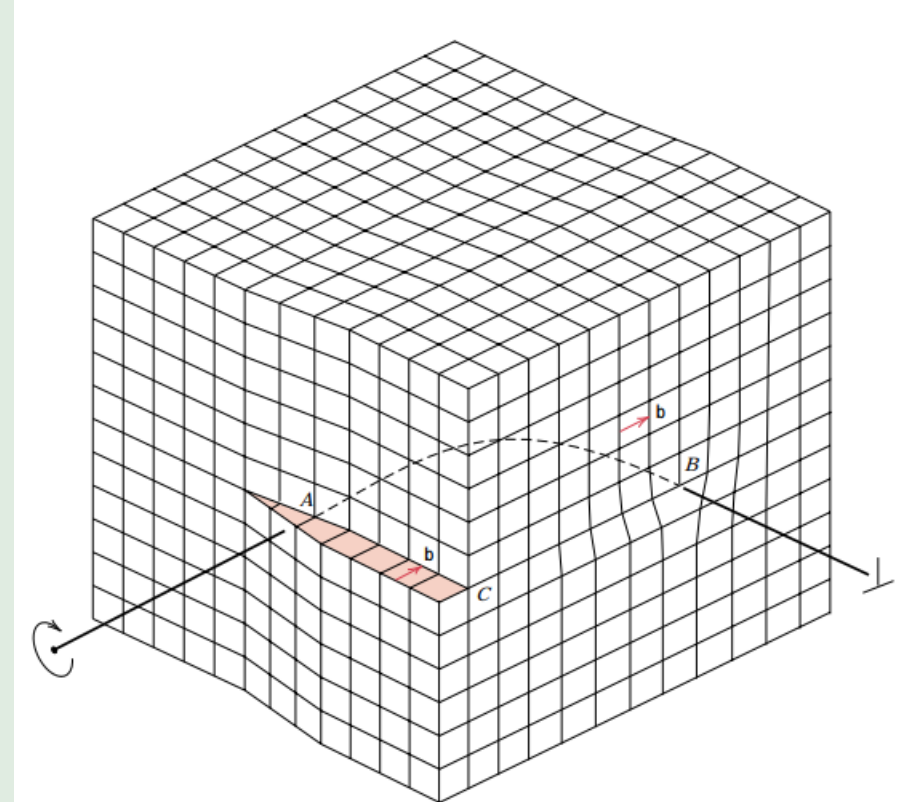
De tornillo



Imperfecciones lineales

Mixtas

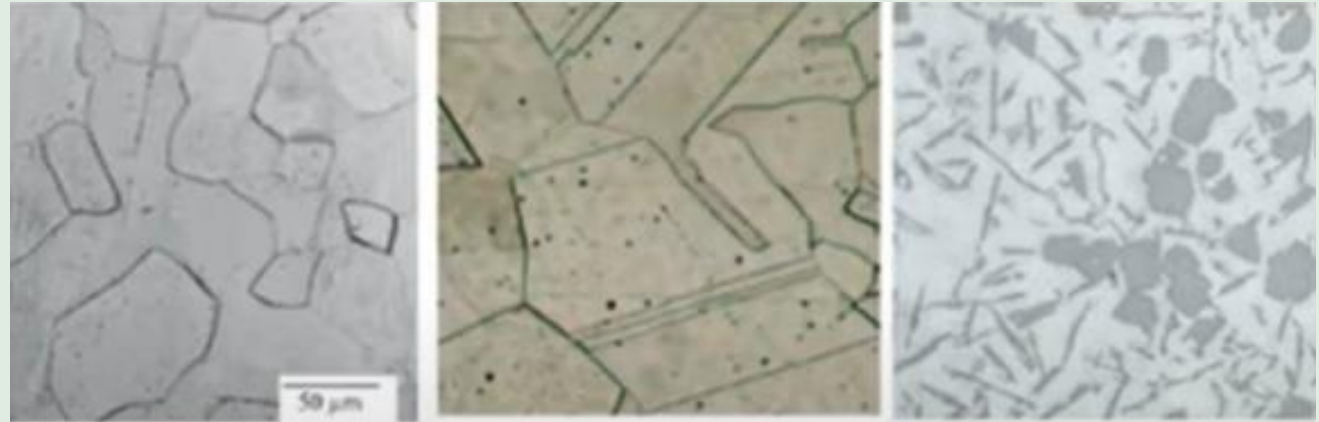
- Combinación de las anteriores
- En materiales reales siempre son combinaciones, no siendo perfectamente línea ni tornillo



Imperfecciones interfaciales

Tipos:

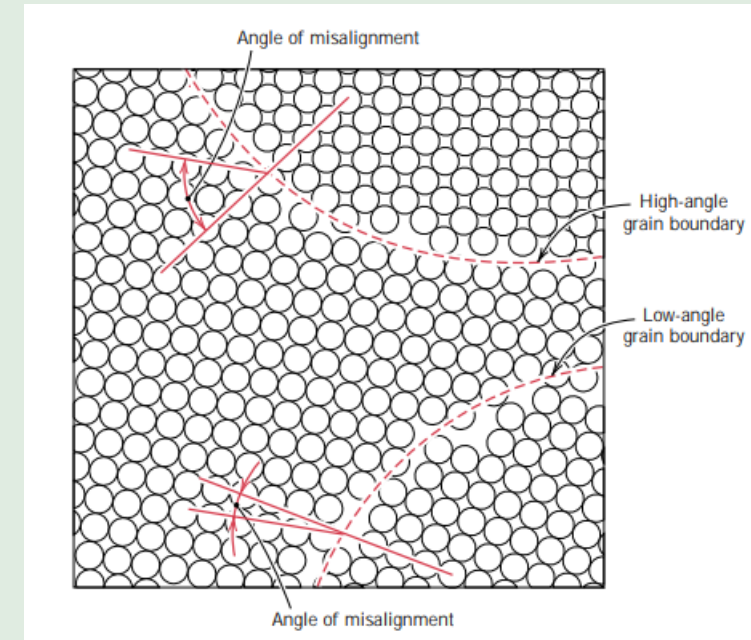
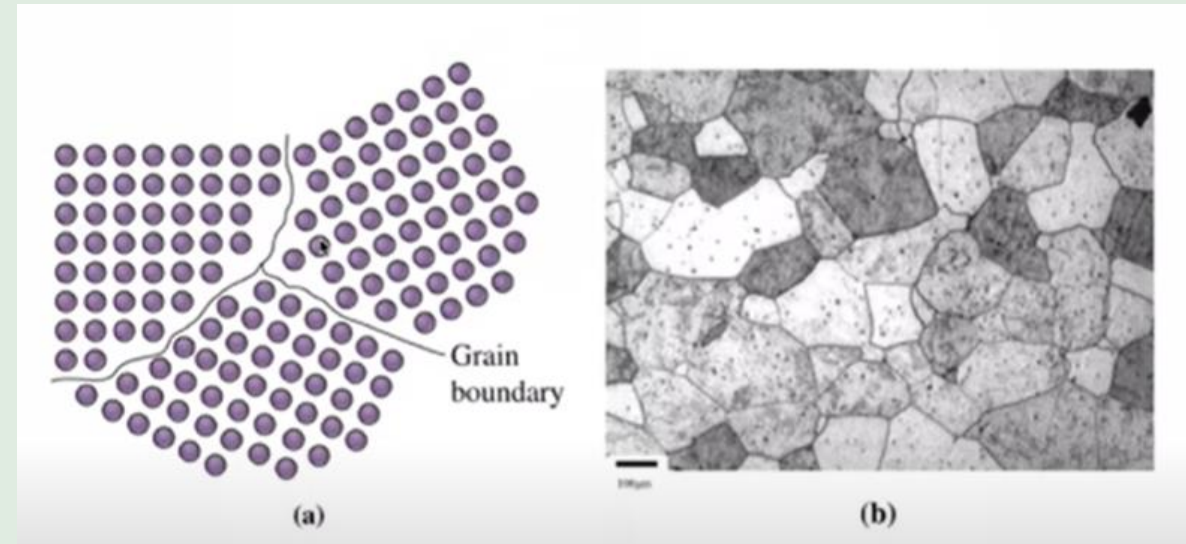
- Superficie externa
- Límite de grano
- Borde de macla
- Límite de fase



Imperfecciones interfaciales

Límite de grano

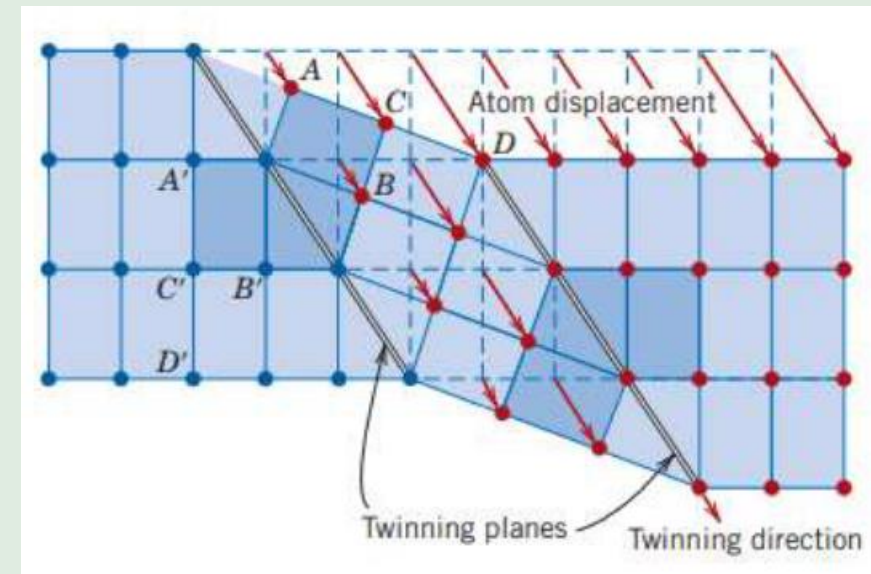
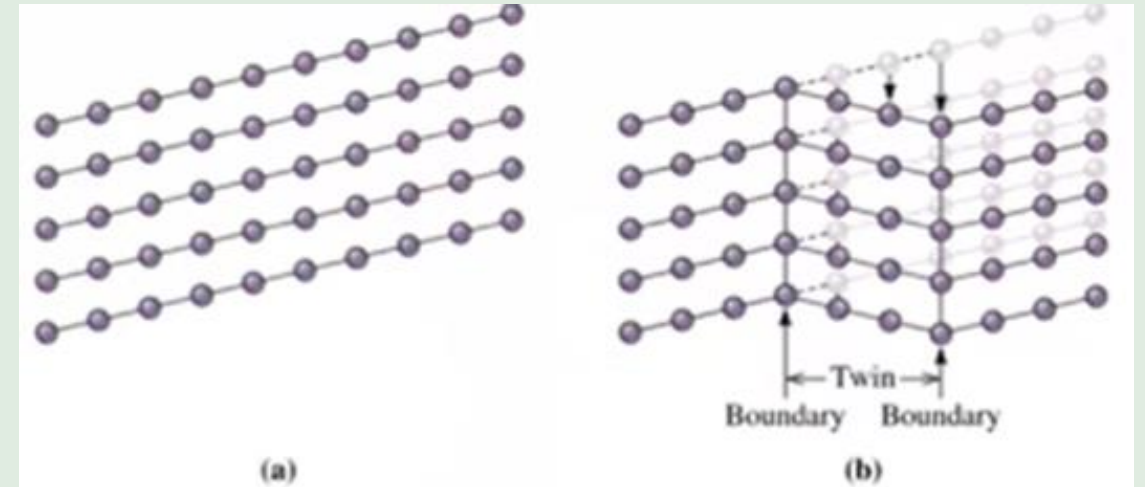
- Zonas de altas distorsión
- Orientación cristalográfica distinta a cada lado
- Existe una energía asociada al límite de grano. Cuanto mayor sea el desorden, mayor será la energía



Imperfecciones interfaciales

Borde de macla

- “El cristal se desvía y vuelve a su ordenamiento”
- Existe una simetría a ambos lados de la línea
- La formación de maclas se debe a deformaciones rápidas del material, activadas térmica o mecánicamente

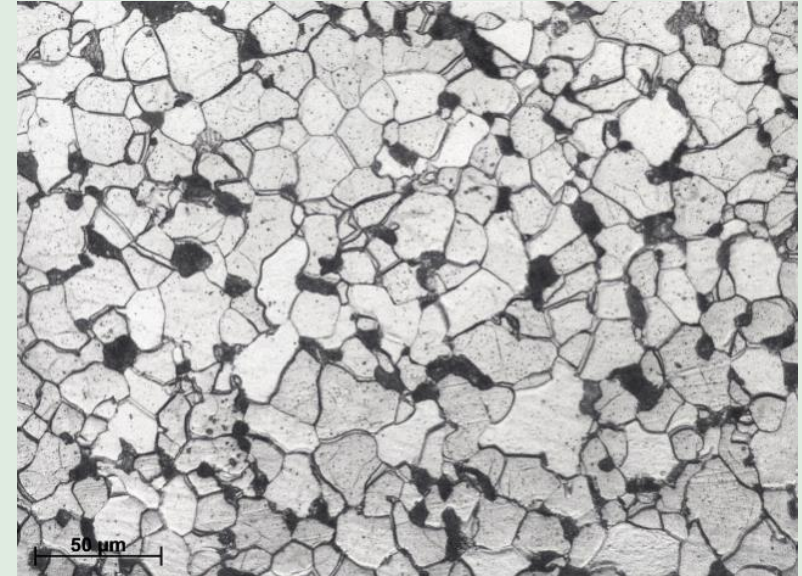


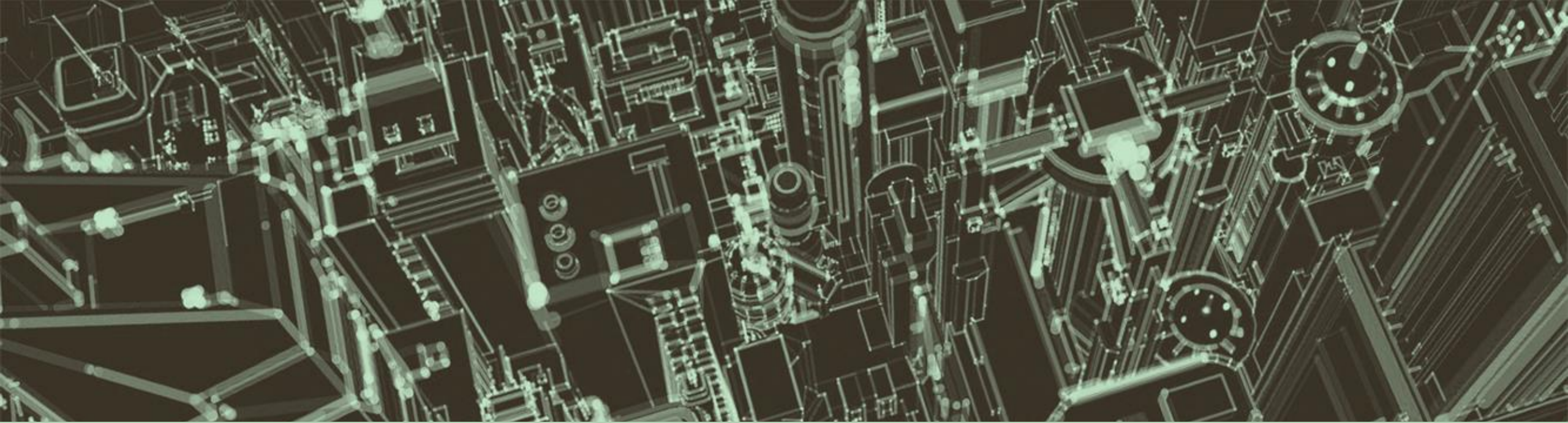
Imperfecciones interfaciales

Límites de fase

- Similar al borde de grano. Son granos de diferentes compuestos

Luego de pulida la superficie, se ataca con reactivos químicos. Este ataque es preferencial en zonas con alta energía generando un relieve que provoca cambios en la reflexión de la luz





Introducción a la difusión en sólidos



Contenido

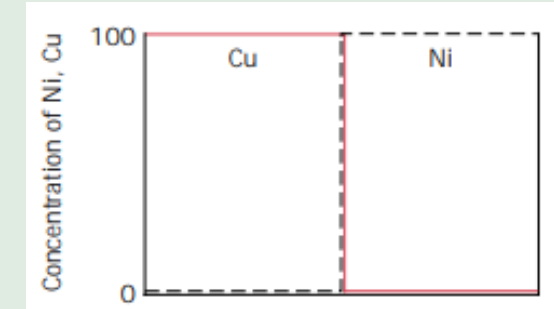
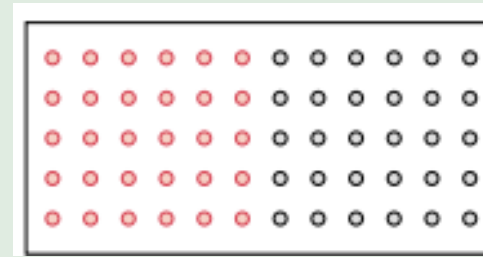
- Generalidades
- Mecanismos de difusión
- Difusión en estado estacionario y no estacionario
- Dependencia de coeficiente de difusión

Generalidades

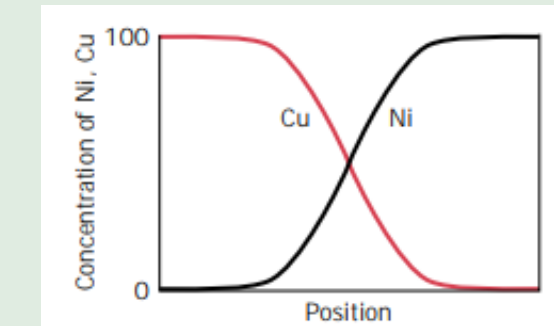
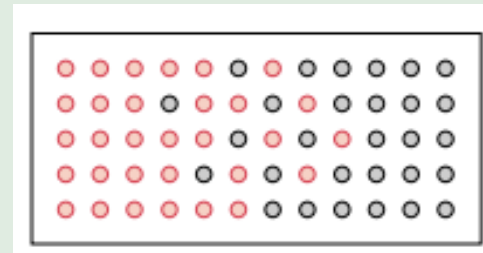
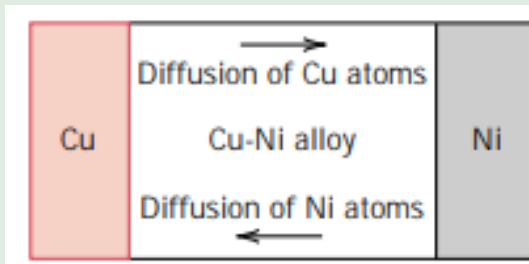
- La difusión es el fenómeno de transporte de materia por movimiento atómico (movilidad de átomos o moléculas)
- Ocurre en gases, líquidos y sólidos
- En el estado sólido este mecanismo es más lento vs los otros estados

Par Cu-Ni

Estado inicial



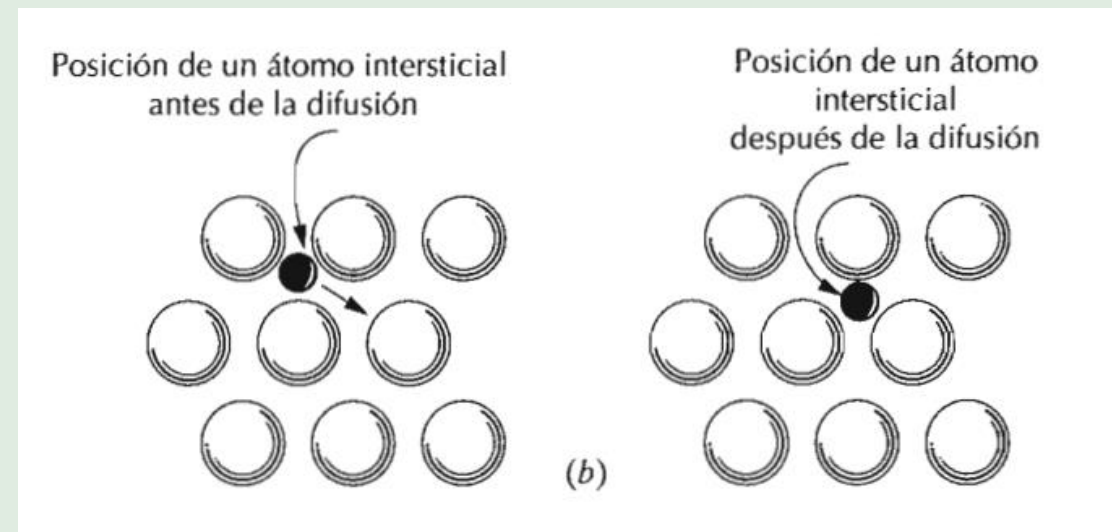
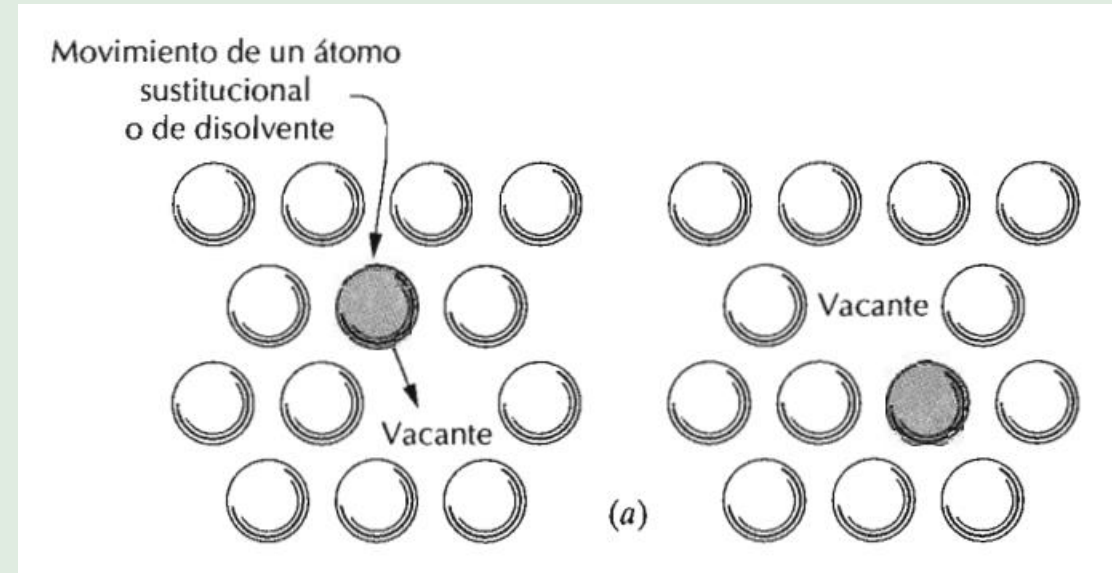
Estado final



También ocurre la autodifusión

Mecanismos de difusión

- Difusión por vacantes
- Difusión intersticial



Flujo de difusión (J)

Flujo de difusión: átomos que atraviesan una superficie determinada en una unidad de tiempo

$$J = \frac{M}{A \cdot t}$$

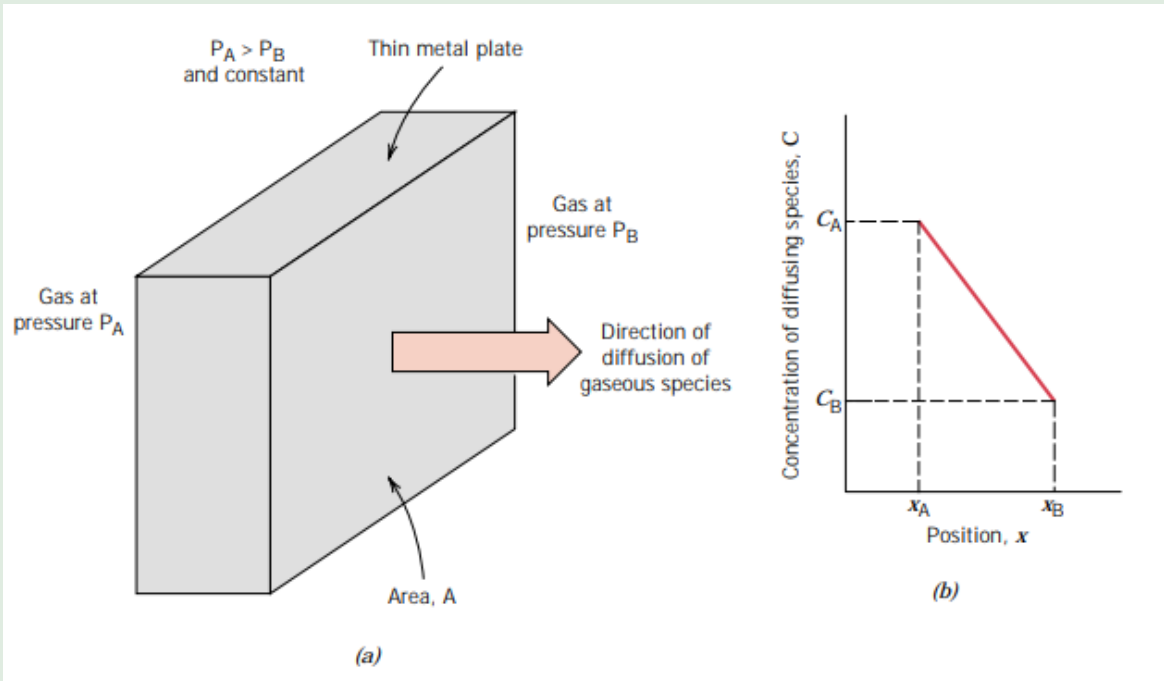
$$J = \frac{1}{A} \frac{dM}{dt}$$

J: flujo de difusión (kg/m²s o átomos/m²s)

M: masa que difunde (kg o átomos)

A: área de difusión

Difusión en estado estacionario



En estado estacionario, J no cambia con el tiempo.

$$J = -D \frac{dC}{dx} \quad \text{PRIMERA LEY DE FICK}$$

D : coeficiente de difusión (m^2/s)

Difusión en estado NO estacionario

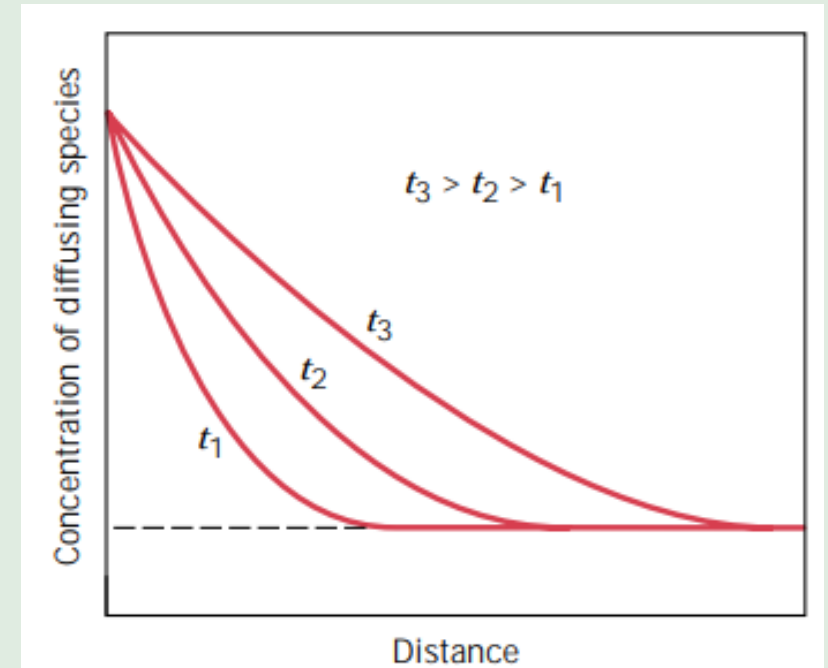
La concentración en un punto varía con el tiempo

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

SEGUNDA LEY DE FICK

Si D no depende de la concentración:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$



Coeficiente de difusión D

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q_d}{RT}\right)$$

D_0 factor de frecuencia
 Q_d energía de activación
para la difusión
 R cte de los gases

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{Q_d}{R} \left(\frac{1}{T}\right)$$

