

Defectos

Defectos cristalinos

Los defectos cristalinos son imperfecciones, deseables o indeseables, que se presentan al interior de un cristal. Generalmente se deben a procesos de conformado, tratamientos térmicos, o tratamientos termoquímicos, aunque también se pueden deber a las condiciones de operación (irradiación, por ejemplo). La presencia de estos defectos, y la interacción entre ellos, influye de manera muy importante en el comportamiento mecánico de los materiales. Se clasifican en:

Defectos de punto

Este tipo de defecto afecta a lugares aislados de la red cristalina. Se distinguen principalmente tres tipos:

Vacancias

Ocurren cuando debería de haber un átomo en una posición de la red, pero no lo hay. La concentración de este tipo de defecto juega un papel importante en la difusión. Se pueden observar en la Figura 1.

Soluto sustitucional y soluto intersticial

El primero se da cuando el átomo soluto ocupa una posición de la red cristalina del solvente. El segundo se da cuando el átomo soluto ocupa un lugar intersticial en la red. El que un átomo sea sustitucional o intersticial dependerá en gran medida del tamaño del soluto. Se pueden observar a ambos defectos en la Figura 1.

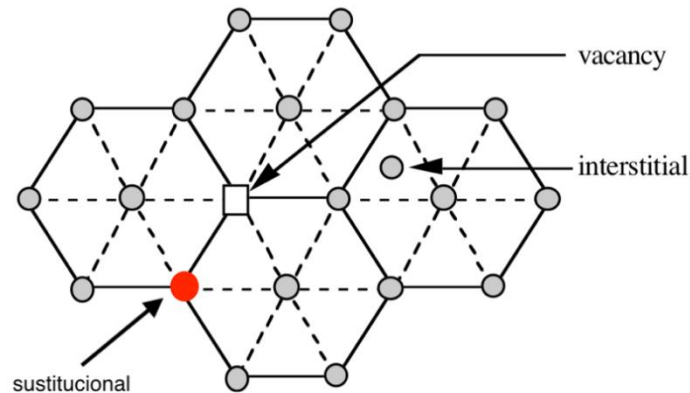


Figura 1. Distintos tipos de defectos puntuales

Los defectos de soluto sustitucional y soluto intersticial juegan un papel muy importante en el endurecimiento por solución sólida de un material.

Un ejemplo importante de solutos intersticiales se da en las aleaciones Hierro-Carbono, donde el carbono se coloca en los espacios octaédricos del Fe. Al ser los espacios octaédricos en FCC mayores que en BCC, se pierde solubilidad de carbono al pasar de austenita (FCC) a ferrita (BCC). Ese es justamente el principio físico del tratamiento térmico de solución sólida.

Otro ejemplo importante del papel de estos defectos consiste en que, a mayores concentraciones de C, y enfriamientos muy rápidos, los solutos tienden a acomodarse preferencialmente en uno de los espacios octaédricos de la celda BCC. Esto ocasiona que se distorsione la celda, haciéndola pasar de cúbica a tetragonal (la celda es elongada en uno de sus ejes). A esta nueva fase se le conoce como martensita.

Defectos de línea

El defecto de línea más importante son las dislocaciones, a través de las cuales se da la deformación plástica en la mayoría de los metales. La interacción entre dislocaciones, y entre dislocaciones y otros defectos cristalinos rige en gran medida el endurecimiento de los metales.

Las dislocaciones son “líneas” donde se interrumpe el ordenamiento que lleva la red. Para uno de los casos más simples, se pueden visualizar como la adición de medio plano cristalino a la red. Esto distorsiona la red ya que algunos átomos salen de su posición de equilibrio. También se presentan campos de esfuerzo de tracción y compresión (Figura 2).

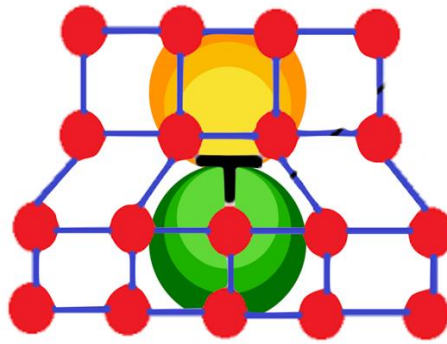
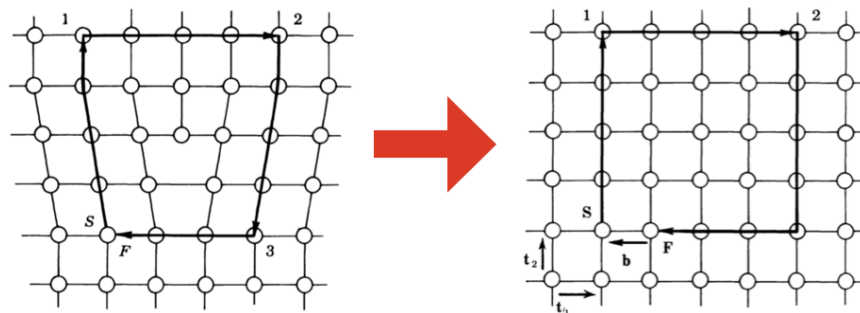


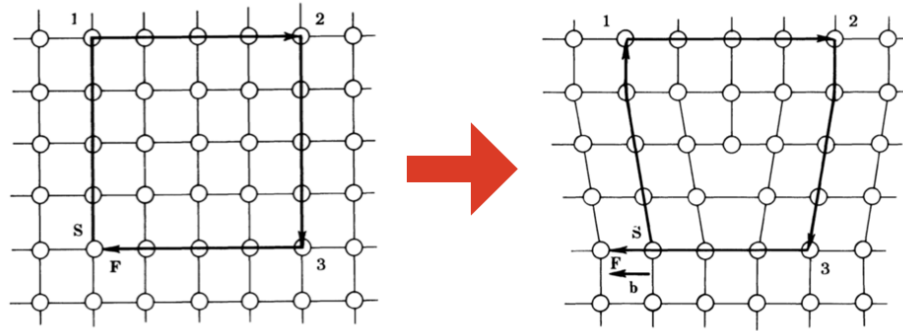
Figura 2. Distorsión de la red cristalina debido a la presencia de una dislocación.

También se observan los campos de esfuerzos (verde: compresión) y (anaranjado: tracción) Para describir una dislocación se emplean dos vectores \mathbf{b} y ξ

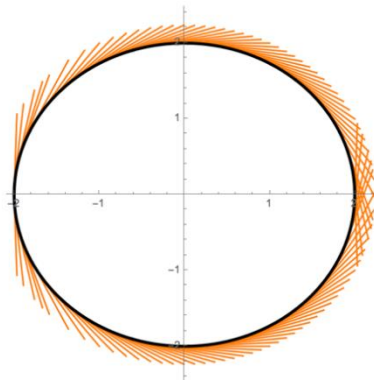
- \mathbf{b} (vector de Burgers o vector de desplazamiento): Para su definición se hace uso del circuito de Burgers, el cual puede tener dos convenciones (figuras de los circuitos provenientes de (Hirth & Lothe, 1967).
- **Convención FS-RH.** Se traza un circuito alrededor de una dislocación pasando por zonas sin afectar del cristal. Se repite el mismo circuito en un cristal perfecto. El segmento que cierra el segundo circuito es b



- **Convención RS-F.** Se traza un en un cristal perfecto. Se repite el mismo circuito alrededor de una dislocación pasando por zonas sin afectar del cristal. El segmento “sobra” en el segundo circuito es b



- ξ (vector de línea de dislocación): Es un vector unitario trazado tangente a la línea de dislocación (en anaranjado en la figura)



Las dislocaciones rectas se clasifican en dos:

- Dislocación de tornillo: donde \mathbf{b} y ξ son paralelas (Figura 3a)
- Dislocación de borde: donde \mathbf{b} y ξ son perpendiculares (Figura 3b)

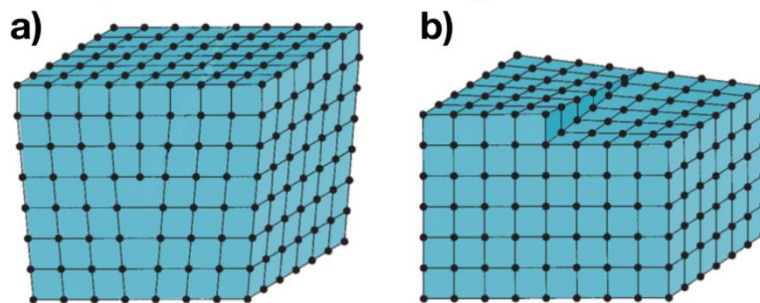


Figura 3. Dislocaciones rectas a) de borde y b) de tornillo

En realidad, las dislocaciones son aros que cambian de carácter totalmente tornillo/totalmente borde a lo largo de la línea de dislocación (Figura 4). Esto se debe

a que una dislocación no puede empezar o terminar en una zona perfecta del cristal, y el vector de Burgers se mantiene constante.

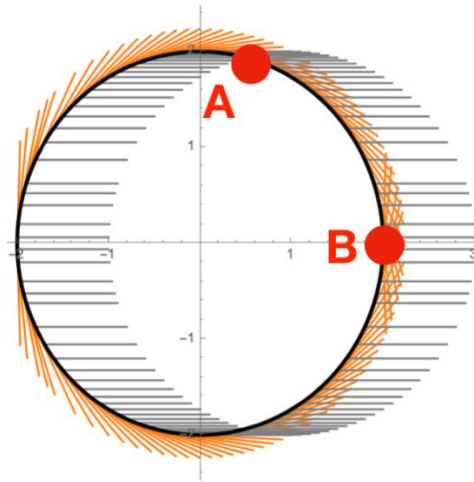
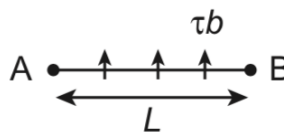


Figura 4. ξ (anaranjado) y \mathbf{b} (gris) en un aro de dislocación. Obsérvese cómo la dislocación varía de carácter totalmente tornillo en punto A, a totalmente borde en punto B

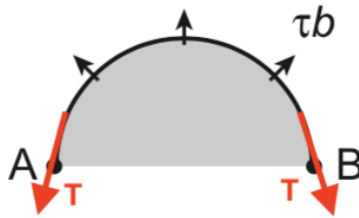
Las dislocaciones se originan en los procesos de conformado o durante la deformación plástica. En este segunda se tienen las fuentes de Frank-Read, las cuales son fuentes regenerativas de dislocaciones.

Su funcionamiento es el siguiente:

1. Se tiene un segmento de dislocación atrapado entre dos obstáculos



2. Al aplicar un esfuerzo cortante esta dislocación “bows out” adquiriendo cierta curvatura. La tensión de línea (T) se opone a que aumente el radio de curvatura de la dislocación (G : Módulo Cortante, α : constante empírica)



1

$$2 T \sin[\theta] = \tau L b$$

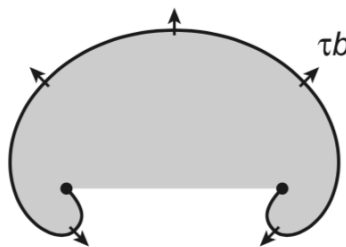
2

$$2 \alpha G b^2 \sin[\theta] = \tau L b$$

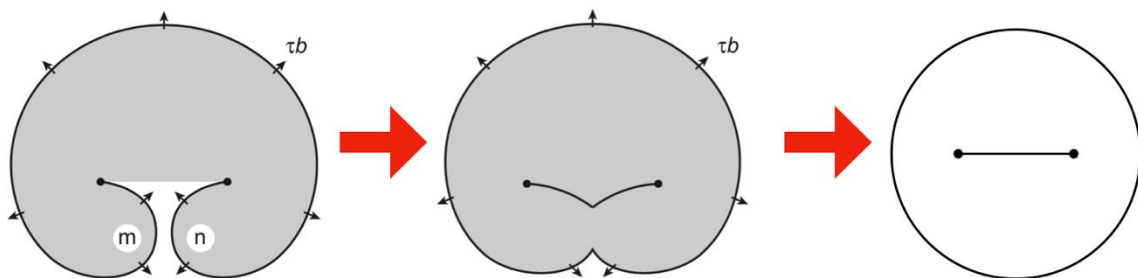
3

$$\tau = \frac{\alpha G b \sin[\theta]}{L}$$

3. Llega un punto donde el esfuerzo cortante es máximo y la dislocación se vuelve inestable ($\theta = \pi/2$)



4. Los segmentos n y m se disocian por regla de Frank y se obtiene un aro de dislocación nuevo.



5. La fuente puede seguir generando aros de dislocación.

$$\tau = \frac{\alpha G b}{L}$$

Cuando las dislocaciones no están obstaculizadas se suelen deslizar libremente por sistemas de deslizamiento. Estos sistemas varían según el tipo de material que se tenga:

- FCC: planos $\{111\}$ y direcciones $\langle 110 \rangle$ contenidas en estos planos
- BCC: planos $\{110\}$ y direcciones $\langle 111 \rangle$ contenidas en estos planos, y otros sistemas

Es importante resaltar que un material con más sistemas de deslizamiento **NO** se deforma más fácilmente que un material con menos sistemas de deslizamiento. La cantidad necesaria de sistemas de deslizamiento para llevar a cabo la deformación plástica se obtiene de los modelos micro mecánicos de Taylor y la hipótesis de Mises. Ninguno de los dos temas se discutirá en estos apuntes, sin embargo, bastan 5 sistemas de deslizamiento activos para llevar a cabo procesos de deformación plástica por movimiento de dislocaciones.

El esfuerzo cortante y su relación con el deslizamiento de un monocristal se encuentra descrito en la Ley de Schmid (Figura 5)

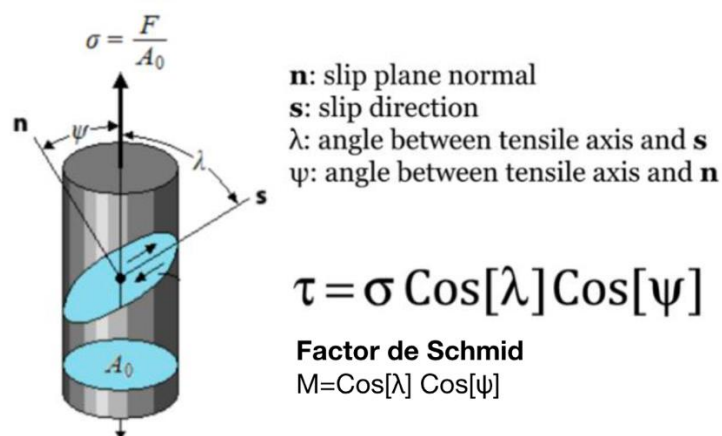


Figura 5. Ley de Schmid

El sistema de deslizamiento que se active primero será aquel con mayor factor de Schmid.

Para casos más complejos que tracción uniaxial se tiene la formulación tensorial de la ley de Schmid.

5 y 6

$$\tau^{(s)} = \mathbf{M}^{(s)} : \mathbf{s}$$

$$\mathbf{M}^{(s)} = \frac{1}{2} [\mathbf{b}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)} + \mathbf{n}^{(s)} \mathbf{b}^{(s)}]$$

Ejercicio. Encuentra el sistema de deslizamiento que se activará en un monocristal FCC para un esfuerzo uniaxial en la dirección [100].

Adicionalmente, las dislocaciones se pueden mover por mecanismos de cross-slip y climb:

- **Cross-slip:** la dislocación con cierto \mathbf{b} y un plano de deslizamiento cambia a otro plano de deslizamiento que contenga a \mathbf{b}
- **Climb:** debido al movimiento de vacancias la dislocación es susceptible de trepar y salirse de su plano de deslizamiento. Debido a que no toda la dislocación se desplaza, se pueden formar jogs, que su vez pueden jugar un papel en la creación de nuevas dislocaciones.

Defectos de área o superficie

Se pueden distinguir tres tipos:

Superficies libres

Son aquellas donde el sólido termina e interactúa con otro sólido, líquido, o vapor. Las zonas de la red cercana a estas superficies libres siempre serán un poco diferentes debido a que los átomos sólo están enlazados de un lado. Adicionalmente, los enlaces en estos extremos son capaces de adsorber átomos a la red que probablemente la distorsionen aún más [Figura 6]

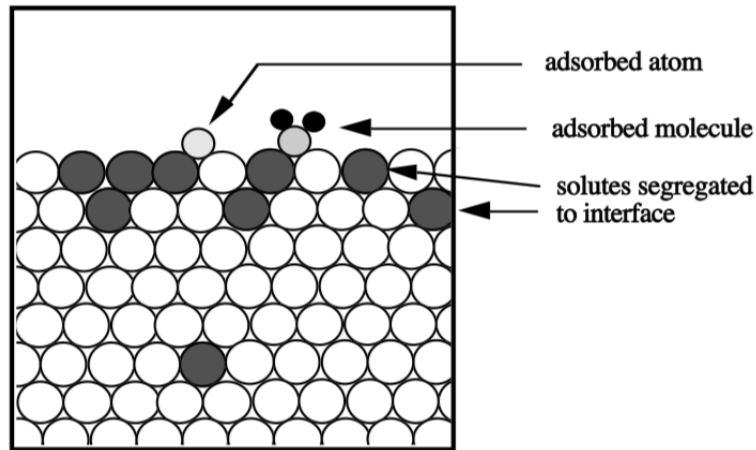


Figura 6. Adición de átomos ajenos a la red en superficies libres del material

Generalmente las superficies libres de los metales son paralelas a los planos más densamente empaquetados.

Fronteras intercristalinas

Fronteras que dividen dominios al interior del cristal. Se tienen aquellas que separan fases, y aquellas que separan granos. A estas últimas se les conoce como fronteras de grano y suelen separar dos cristales con orientaciones diferentes [Figura 7].

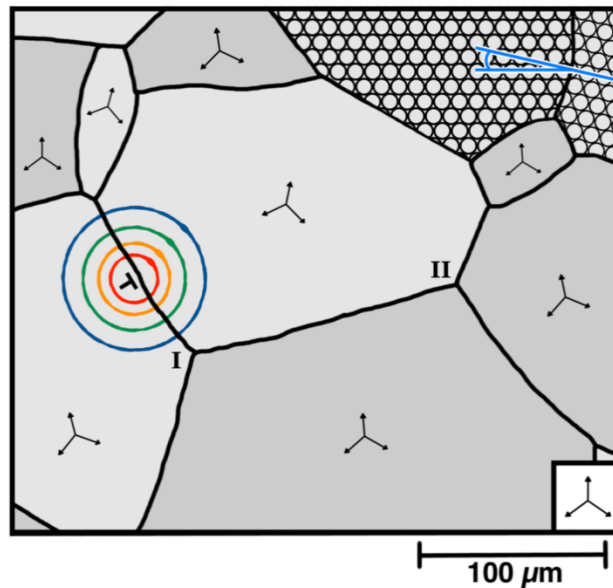
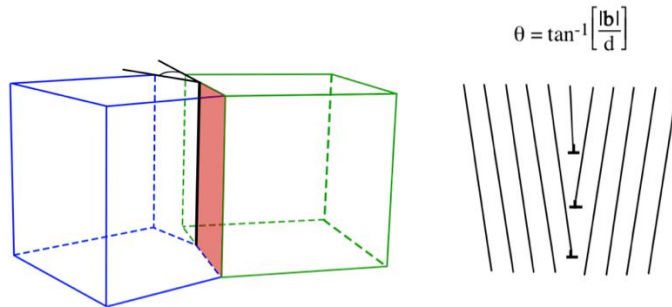


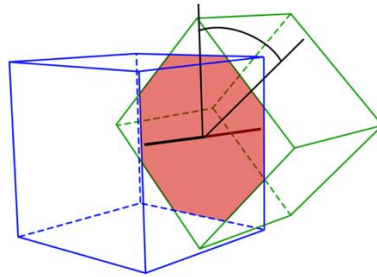
Figura 7. Un policristal se divide en regiones de distinta orientación. En la imagen se muestra el ángulo de desorientación entre dos granos (azul).

De acuerdo con el grado de desorientación entre los ellos se suelen clasificar en:

- **LAGB (fronteras de ángulo bajo):** Desorientación menor de 10° . Suelen separar subestructuras al interior de un grano. Algunos las modelan como arreglos de dislocaciones, distinguiendo:
 - tipo tilt: Arreglo de dislocaciones de borde



- tipo twist: Arreglo de dislocaciones de tornillo



- **HAGB (fronteras de ángulo alto):** Desorientación mayor de 10° - 15° . Se consideran a veces como obstáculos infranqueables para el movimiento de dislocaciones.

Fronteras de grano

Son aquellas que aparecen al interior de un cristal. Una de las más importantes es el defecto de error de apilamiento. Estos se pueden encontrar en estructuras compactas y se conceptualizan como un rompimiento en el patrón de apilamiento de los planos atómicos. Por ejemplo, para FCC los planos están acomodados como ABCABCABC el error de apilamiento se da cuando la secuencia se ve modificada a ABCBABCABC (un plano extra B). Se muestra otro ejemplo de error de apilamiento en la Figura 8.

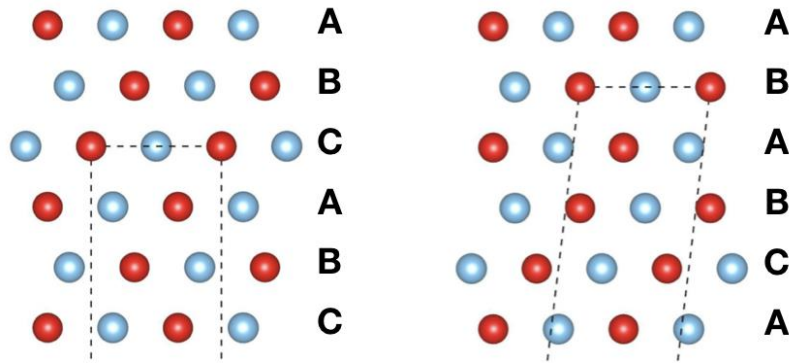


Figura 8. Error de apilamiento en FCC. Del lado derecho falta el plano C [Adaptado de Dumitraschkewitz, Clemens, Mayer & Holec, 2017]

La energía de error de apilamiento (SFE) está asociada a este defecto cristalino, y, entre otras cosas, influye en el movimiento de dislocaciones.

Defectos de volumen

Son defectos que interrumpen el orden del cristal en 3D, generalmente sobre un volumen varias veces mayor que el de una celda unitaria. Se dividen en:

- **Precipitados (fracciones de micra):** Son partículas, conjuntos de átomos, que son introducidos en la red cristalina por distintos medios. Actúan como obstáculo al movimiento de dislocaciones ocasionando endurecimiento del material.
- **Inclusiones (de algunas micras a milímetros):** Son partículas ajenas a la red, o precipitados muy grandes. Generalmente no son deseables ya que pueden actuar como sitios preferenciales de falla.
- **Poros:** Son sitios vacíos o huecos en el material que se dan por evaporación de gases, o defectos de llenado, durante procesos de fundición. Son indeseables ya que actúan como sitios preferenciales de falla.

Resumen

Los defectos cristalinos al interior del material juegan un papel fundamental en el comportamiento de éste. Los defectos se pueden clasificar según su tamaño y la perturbación que tengan en la red. Quizá el defecto más importante es el de las dislocaciones, las cuales intervienen en la deformación plástica permitiendo que el esfuerzo cortante para deslizar el cristal sea mucho menor que el necesario para mover el cristal completo.

Referencias

- Morris, J. *Materials Science* [PDF] (pp. 76-107). University of California, Berkeley. Retrieved from <https://www.mse.berkeley.edu/groups/morris/MSE205/Extras/defects.pdf>
- Hirth, J., & Lothe, J. (1967). *Theory of dislocations [by] John Price Hirth [and] Jens Lothe*. New York: McGraw-Hill.
- Hull, D., & Bacon, D. (2011). *Introduction to dislocations*. Amsterdam: Butterworth-Heinemann.