

ÍNDICE

	Pág.
Introducción.....	3
1 Estructura cristalina.....	4
2 Celda unitaria.....	5
• 2.1 Características de la celda unitaria.....	5
3 Estructuras cristalinas de los metales.....	6
• 3.1 Estructura Cristalina Cúbica Centrada en las caras.....	7
• 3.2 Estructura Cristalina Cúbica Centrada en el cuerpo.....	7
• 3.3 Estructura Cristalina Hexagonal Compacta.....	8
4 Posiciones del átomo en Celdas Unitarias Cúbicas.....	8
5 Direcciones en las Celdas Unitarias Cúbicas.....	9
6 Índices de Miller para planos cristalográficos en celdas unitarias cúbicas.....	10
7 Planos Cristalográficos y Direcciones en la Estructura Cristalina Hexagonal.....	11
• 7.1 Índices para los planos cristalinicos en Celdas Unitarias HCP.....	13
• 7.2 Índices de dirección en las celdas unitarias HCP.....	15
8 Comparación de las estructuras cristalinas FCC, HCP y BCC.....	16
• 8.1 Estructuras Cristalinas FCC y HCP.....	16
• 8.2 Estructura Cristalina BCC.....	16
9 Cálculos de la densidad volumétrica, planar y lineal de las celdas unitarias...	17
• 9.1 Densidad teórica volumétrica de los metales.....	17
• 9.2 Densidad atómica planar.....	17
• 9.3 Densidad atómica lineal.....	17
10 Clasificación de defectos cristalinos.....	18
• 10.1 Defectos puntuales.....	24
• 10.2 Defectos de línea.....	27
• 10.3 Defectos de superficie.....	33
• 10.4 Interacciones entre defectos cristalinos.....	38

Introducción

En la realidad no existen cristales perfectos pues contienen varios tipos de defectos que afectan a muchas de las propiedades físicas y mecánicas, que a su vez afectan a muchas propiedades importantes de los materiales para ingeniería, como la conductividad eléctrica de semiconductores, la corrosión de los metales y la velocidad de migración de los átomos en aleaciones.

Las imperfecciones en la red cristalina se clasifican según su forma y geometría.

Los tres principales grupos son:

- Defectos puntuales o de dimensión cero
- Defectos de línea o de una dimensión (dislocaciones)
- Defectos de dos dimensiones o de superficie que incluyen superficies externas y superficies de límite de grano

Los defectos macroscópicos tridimensionales o de volumen pueden incluirse. Ejemplos de estos son poros y fisuras.

1 ESTRUCTURA CRISTALINA

El arreglo atómico juega un papel importante en la determinación de la microestructura y en el comportamiento de un material sólido. Por ejemplo, el arreglo atómico en el aluminio proporciona buena ductilidad, en tanto que en el hierro es la causa de una buena resistencia.

Los materiales sólidos se pueden clasificar según la regularidad con que se sitúan los átomos o iones. Si no se consideran las imperfecciones que aparecen en los materiales, entonces existen tres niveles de arreglo atómico

Sin orden: en gases como el argón, los átomos no tienen orden y llenan de manera aleatoria el espacio en el cual está confinado el gas

Orden de corto alcance: el arreglo especial de los átomos se extiende sólo a los vecinos más cercanos

Orden de largo alcance: el arreglo atómico especial se extiende por todo el material. Los metales, muchos cerámicos y ciertos polímeros adquieren estructuras cristalinas en condiciones normales de solidificación, es decir, tienen una estructura en la cual los átomos muestran tanto un orden de corto alcance como un orden de largo alcance

En una estructura cristalina, los átomos forman un patrón repetitivo, regular, en forma de red. La red es un conjunto de puntos, conocidos como puntos de red, que están organizados siguiendo un patrón periódico de forma que el entorno de cada punto en la red es idéntico. Uno o más átomos quedan asociados a cada punto de la red.

La red difiere de un material a otro tanto en tamaño como en forma, dependiendo del tamaño de los átomos y del tipo de enlace entre ellos.

Algunas propiedades de los sólidos cristalinos dependen de la estructura cristalina del material, es decir, de la ordenación espacial de átomos, iones y moléculas. Hay un número muy grande de estructuras cristalinas diferentes, que tienen, todas ellas, orden atómico de largo alcance. Estas estructuras varían desde las relativamente simples de los metales a las excesivamente complejas de los materiales cerámicos y poliméricos.

Al describir a la estructura cristalina se consideran los átomos (o iones) cómo esferas sólidas con diámetros muy bien definidos. Es el denominado modelo atómico de esferas rígidas en el cual las esferas representan átomos macizos en contacto.

2 CELDA UNITARIA

Al describir la estructura cristalina conviene dividirla en pequeñas entidades, que se repiten, llamadas celdas unitarias. La celda unitaria de la mayoría de las de las estructuras cristalinas son paralelepípedos o prismas con tres pares de caras paralelas. La celda unitaria se elige para representar la simetría de la estructura cristalina, de modo que las posiciones de los átomos en el cristal se puedan representar desplazando a distancias discretas la celda unitaria a lo largo de los ejes. De este modo, la celda unitaria es la unidad estructural fundamental y define la estructura cristalina mediante su geometría y por la posición de los átomos dentro de ella. Ordinariamente, la claridad aconseja que los vértices del paralelepípedo coincidan con los centros de las esferas rígidas que representan los átomos. Se identifican 14 tipos de celdas unitarias o redes de Bravais agrupadas en siete sistemas cristalinos. Los puntos de la red están localizados en las esquinas de las celdas unitarias y, en algunos casos, en cualquiera de las caras o en el centro de la celda unitaria.

2.1 CARACTERÍSTICAS DE LA CELDA UNITARIA

Parámetros de red. Describen el tamaño y la forma de la celda unitaria, incluyen las dimensiones de los costados del cubo para describir por completo la celda (se suponen ángulos de 90° , a menos que se especifique lo contrario). Esta longitud medida en la temperatura ambiente es el parámetro de red a_0 . A menudo la longitud se da en nanómetros (nm) o en Angstroms $\text{\AA}$.

Número de átomos por celda. Cada una de las celdas unitarias está definida por un número específico de puntos de red. Al contar el número de puntos de red que corresponden a cada celda unitaria, se deben identificar los puntos de la red que van a ser compartidos por más de una celda unitaria. Los vértices contribuyen con $1/8$ de un punto, las caras con $1/2$ y las posiciones en el centro del cuerpo contribuyen con todo un punto.

El número de átomos por celda unitaria es el producto del número de átomos por punto de red multiplicado por el número de puntos de red existentes en la celda unitaria.

Radio atómico comparado con el parámetro de red. Las direcciones en la celda unitaria a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo son las direcciones compactas. Al determinar geométricamente la longitud de la dirección, relativa a los parámetros de red y a continuación sumando los radios atómicos en esa dirección, es posible determinar la dirección deseada.

Número de coordinación. El número de átomos que tocan a otro en particular, es decir, el número de vecinos más cercanos, es una indicación de que tan estrecha y eficazmente están empaquetados los átomos.

Factor de empaquetamiento FEA. Es la fracción de espacio ocupada por átomos, suponiendo que los átomos son esferas sólidas. Su expresión general es:

$$FEA = \frac{\text{volumen de átomos de una celda unitaria}}{\text{Volumen total de la celda unitaria}}$$

3 ESTRUCTURAS CRISTALINAS DE LOS METALES

El enlace atómico de este grupo de materiales es metálico y de naturaleza no direccional. Por consiguiente, no hay restricciones en cuanto al número y posición de átomos vecinos más próximos, lo cual conduce, para la mayoría de los metales, a estructuras cristalinas con gran número de vecinos muy próximos y densamente empaquetados. Utilizando el modelo de esferas rígidas, cada esfera representa un catión en la estructura cristalina. La mayoría de los metales más corrientes cristaliza en una de las tres estructuras cristalinas siguientes:

- Estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC)
- Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC)
- Estructura cristalina hexagonal compacta (HCP)

3.1 ESTRUCTURA CRISTALINA CÚBICA CENTRADA EN LAS CARAS

La estructura cristalina que exige que muchos metales tengan una celda unitaria de geometría cúbica, con los átomos localizados en los vértices del cubo y en los centros de todas las caras del cubo. Es la denominada estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC). La longitud de la arista del cubo a y el radio atómico r se relacionan mediante la siguiente fórmula: $a = 2r\sqrt{2}$

En los cristales de estructura FCC, cada átomo del vértice es compartido con ocho celdas unitarias, mientras que los átomos centrados en las caras sólo son compartidos con dos celdas. Las posiciones de los vértices y de los centros de las caras son equivalentes, puesto que el desplazamiento de la celda unitaria desde el átomo del vértice original al átomo del centro de una cara no altera la estructura de la celda.

El número de coordinación es 12. El factor de empaquetamiento atómico es de 0.74, que es el máximo empaquetamiento posible para esferas rígidas del mismo tamaño. Los metales más característicos tienen factores de empaquetamiento atómico relativamente grandes, para maximizar el efecto pantalla de la nube de electrones libres.

3.2 ESTRUCTURA CRISTALINA CÚBICA CENTRADA EN EL CUERPO

Otra estructura cristalina común en los metales también es una celda unitaria cúbica que tiene átomos localizados en los ocho vértices y un átomo en el centro. Esta estructura cristalina se denomina cúbica centrada en el cuerpo (BCC). Los átomos del centro y de los vértices se tocan mutuamente a lo largo de las diagonales del cubo. La longitud a de la arista de la celda y el radio atómico r se relacionan mediante la siguiente fórmula: $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$.

Cada celda unitaria BCC tiene asociados dos átomos; un átomo equivalente a un octavo de cada uno de los ocho átomos de los vértices, que son compartidos con otras ocho celdas unitarias, y el átomo centrado en el cuerpo que no es compartido. El número de coordinación de la estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo es 8: cada átomo situado en el centro de la celda está rodeada por ocho átomos situados en los vértices debido a que el número de coordinación es menor a la estructura BCC que en la FCC, también el factor de empaquetamiento atómico es menor 'para BCC 0.68 frente a 0.74

3.3 ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL COMPACTA

No todos los metales tienen celdas unitarias con simetría cúbica. Las bases superior e inferior consisten en hexágonos regulares con sus átomos en los vértices y uno en el centro. Otro plano que provee de tres átomos adicionales a la celda unitaria está situado entre ambos planos hexagonales. Cada celda unitaria equivale a seis átomos: cada átomo situado en los 12 vértices superiores e inferiores contribuye con la sexta parte, los 2 átomos del centro de los hexágonos contribuyen con la mitad y los 3 átomos del plano central contribuyen enteramente. Las variables a y c representan las dimensiones corta y larga de la celda unitaria, la relación entre ambas es de 1.633 respectivamente; sin embargo, en algunos metales esta relación se desvía del valor ideal.

El número de coordinación y el factor de empaquetamiento atómico para los cristales de estructuras HCP son idénticos que para los FCC: 12 y 0.74.

4 POSICIONES DEL ÁTOMO EN CELDAS UNITARIAS CÚBICAS

Para localizar las posiciones atómicas en las celdas unitarias cúbicas se emplea un sistema de x , y , z . Las posiciones atómicas se localizan usando distancias unitarias a lo largo de los ejes x , y , z , como se indica en la Figura 4.1a. Como ejemplo se muestra la posición en coordenadas para los átomos de la celda unitaria BCC en

la Figura 3.41b. Las posiciones atómicas para los ocho átomos situados en los vértices de la celda unitaria BCC son:

$$\begin{array}{cccc} (0, 0, 0) & (1, 0, 0) & (0, 1, 0) & (0, 0, 1) \\ (1, 1, 1) & (1, 1, 0) & (1, 0, 1) & (0, 1, 1) \end{array}$$

El átomo central de la celda unitaria BCC tiene coordenadas $(1/2, 1/2, 1/2)$. Por simplicidad, a veces se especifican sólo dos posiciones atómicas de la celda unitaria BCC como son $(0,0,0)$ y $(1/2,1/2,1/2)$. Las posiciones atómicas restantes de la celda unitaria BCC se consideran sobreentendidas. Análogamente se pueden localizar las posiciones atómicas de la celda unitaria FCC.

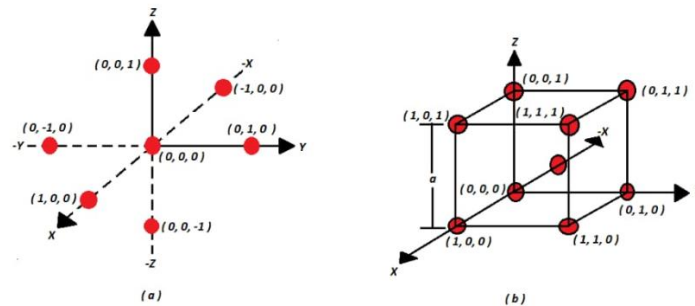


Figura 4.1 (a) Ejes rectangulares x, y, z, para la localización de las posiciones atómicas en celdas unitarias cúbicas. (b) Posiciones atómicas en una celda unitaria BCC

5 DIRECCIONES EN LAS CELDAS UNITARIAS CÚBICAS

Es necesario referirse a direcciones específicas de las redes cristalinas. Esto es especialmente importante para metales y aleaciones que tienen propiedades que varían con la orientación cristalográfica. Para cristales cúbicos los índices de direcciones cristalográficas son los componentes vectoriales de las direcciones resueltas a lo largo de cada eje de coordenadas a los enteros más pequeños.

Para indicar una dirección en una celda unitaria cúbica se deberá dibujar un vector de dirección desde el origen (normalmente un vértice de la celda cúbica) hasta que salga a la superficie del cubo (Figura 5.1). Las coordenadas de posición de la celda unidad donde el vector de dirección sale a la superficie del cubo después de ser convertidas a enteros son los índices de dirección. Los índices de dirección se encierran entre corchetes sin separación por comas.

Por ejemplo, las coordenadas de posición del vector de dirección OR en la Figura 5.1a donde sale a la superficie el cubo son $(1, 0, 0)$ y, así, los índices de dirección para el vector OR son $[100]$. La coordenadas de posición del vector de dirección OS (Figura 3.51a) son $(1, 1, 0)$ siendo los índices de dirección para OS $[110]$.

Las coordenadas de posición para el vector de dirección OT (Figura 5.1b) son (1, 1, 1) siendo los índices de dirección para OT [110].

Las coordenadas de posición para el vector de dirección OM (Figura 5.1c) son (1, 1/2, 0), y como los vectores de dirección han de ser enteros, estas posiciones tienen que ser multiplicadas por dos para obtener enteros. Así los índices de dirección para el vector de dirección OM pasan a ser 2(1, 1/2, 0)=[210]. Las coordenadas de posición del vector ON (Figura 5.1d) son (-1, -1, 0). Un índice negativo de dirección se escribe con una barra sobre el índice. Así, los índices de dirección para el vector ON son $[1\bar{1}0]$. Para dibujar la dirección ON dentro del cubo origen del vector dirección tiene que llevarse al vértice inferior derecho del cubo unidad (Figura 5.1d).

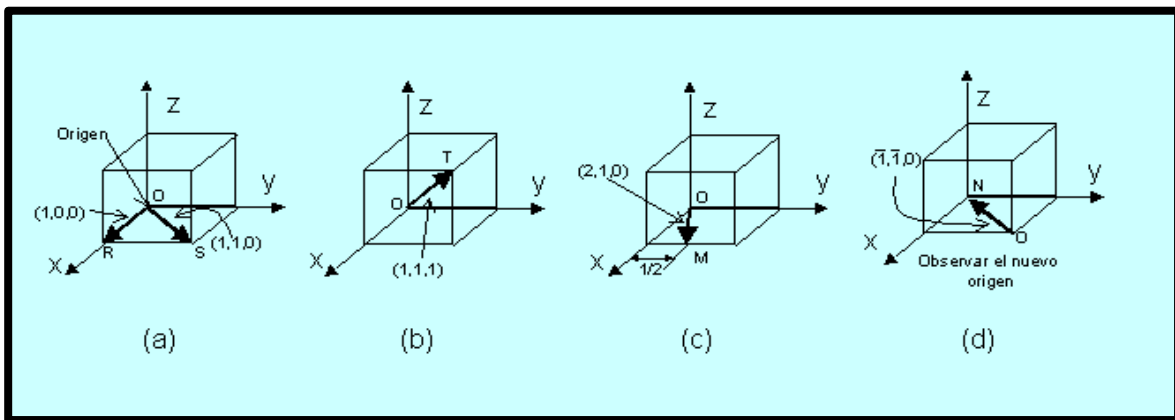


Figura 5.1 Se representan algunos ejemplos de la dirección

En general, se utilizan las letras u, v, w como índices de dirección en las direcciones x, y, z, respectivamente, y se escriben como [uvw] También es muy importante mencionar, que todos los vectores de dirección paralelos tienen el mismo índice de dirección.

6 ÍNDICES DE MILLER PARA PLANOS CRISTALOGRÁFICOS EN CELDAS UNITARIAS CÚBICAS

Algunas veces es necesario referirse a planos reticulares específicos de átomo dentro de una estructura cristalina o puede ser de interés conocer la orientación cristalográfica de un plano o grupo de planos de una red cristalina. En estructuras cristalinas cúbicas se utilizan el sistema de notación de Miller para identificar los planos cristalinos. Los índices de Miller de un plano cristalino se definen como los recíprocos de las intersecciones fraccionales de los planos hechos con los tres ejes cristalográficos x, y, z y las tres aristas no paralelas de la celda unitaria cúbica Las aristas del cubo de una celda unitaria representan longitudes unidad, y las intersecciones de os planos reticulares se miden en base a estas longitudes unidad.

El procedimiento para determinar los índices de Miller para un plano de un cristal cúbico es como sigue:

1. Se elige un plano que no pase por el origen en $(0, 0, 0)$.
2. Se determina las intersecciones del plano con los tres ejes cristalográficos x , y , z para un cubo unidad. Estas intersecciones pueden ser fracciones.
3. Se obtienen los recíprocos de estas intersecciones.
4. Se eliminan las fracciones y se determina el conjunto más pequeño de números enteros que estén entre sí en la misma relación que las intersecciones. Estos números enteros son los índices de Miller de un plano cristalográfico y se encierran entre paréntesis sin usar comas. Se utiliza la notación (hkl) para indicar índices de Miller en un sentido general, donde h , k y l son los índices de Miller de un plano de un cristal cúbico para los ejes x , y y z , respectivamente.

La 6.1 muestra tres de los más importantes planos cristalográficos de las estructuras cristalinas cúbicas. Consideremos primero el plano cristalográfico sombreado en la Figura 6.1a, el cual tiene intersecciones $1, \infty, \infty$ para los ejes x , y , y z , respectivamente. Tomamos recíprocos de estas intersecciones para obtener los índices de Miller que son entonces $1, 0, 0$. Como estos números no son fraccionarios, los índices de Miller para este plano son (100) que se lee como plano uno-cero-cero. Consideramos ahora el segundo plano mostrado en la Figura 6.1b. Las intersecciones de este plano son $1, 1, \infty$. Puesto que los recíprocos de estos números son $1, 1, 0$, que no involucran fracciones, los índices de Miller de este plano son (110) . Finalmente, el tercer plano (Figura 6.1c) tiene las intersecciones $1, 1, 1$ que nos da los índices de Miller (111) para este plano.

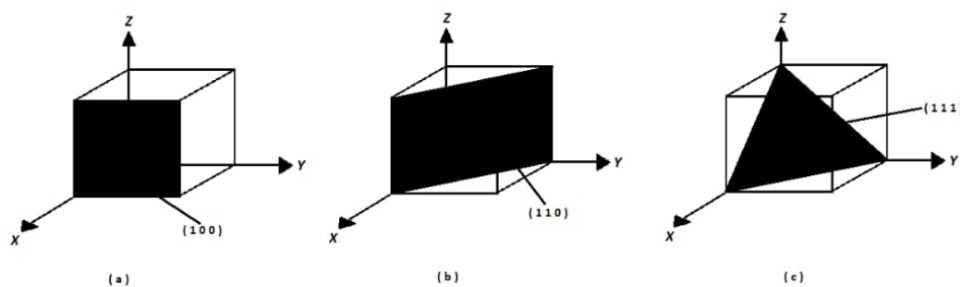
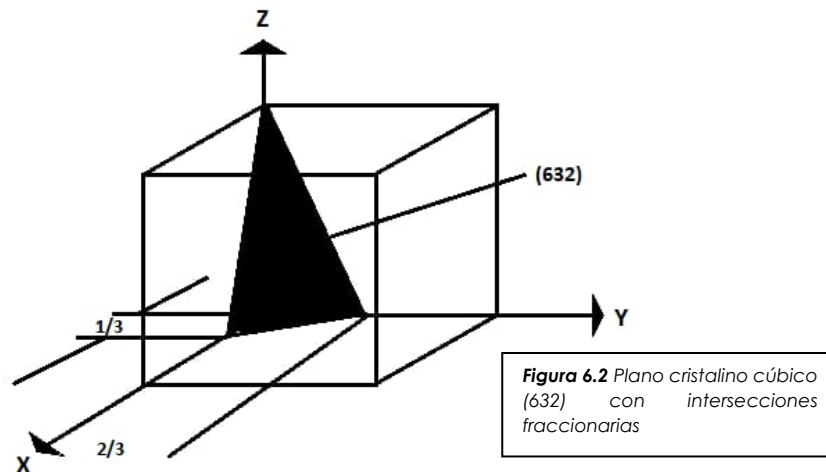


Figura 6.1 Imagen que muestra los planos principales

Consideremos ahora el plano cristalográfico mostrado en la Figura 6.2 que tiene las intersecciones $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$. Sus recíprocos son $3, \frac{3}{2}, 1$. Puesto que no están permitidas intersecciones fraccionarias tienen que ser multiplicadas por 2 para convertir la

fracción $\frac{3}{2}$ en un número entero. Así, la intersección recíproca se convierte en 6, 3, 2 y los índices de Miller son (632).



Si se considera que el plano cristalino pasa por origen de manera que una o más intersecciones son cero, el plano ha de ser desplazado hasta una posición equivalente en la misma celda unitaria de modo que el plano permanezca paralelo al plano origen. Esto es posible porque todos los planos paralelos equidistantes se denotan mediante los mismos índices de Miller.

Si grupos de planos reticulares equivalentes están relacionados por la simetría del sistema cristalino, se llaman *planos de una familia o forma*. Los índices de un plano de la familia son encerrados entre llaves, como $\{hkl\}$ para representar los índices de una familia de planos simétricos. Por ejemplo, los índices de Miller de los planos de la superficie del cubo (100), (010) y (001) se designan colectivamente como una familia o forma por la notación $\{100\}$.

7 PLANOS CRISTALOGRÁFICOS Y DIRECCIONES EN LA ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL

Dados un punto de la red representado por el vector Q que cumplen con la Ecuación (7-1), definimos la dirección de Q mediante los enteros u, v, w (en el caso que Q represente un punto de la red definido a partir de los vectores a, b y c de una celda primitiva) o u, v, w racionales (en el caso que Q esté definida a partir de vectores de una celda múltiple).

$$Q_{u,v,w} = ua + vb + wc \quad (7-1)$$

Reglas para definir un plano cristalográfico:

- El plano debe intersectar o ser paralelo a cualquier eje.

- Si no se cumple lo anterior, el plano debe trasladarse o se necesita un origen.
- Determinar los puntos de intersección del plano con los ejes cristalográficos en función de a , b , c , o infinito si es paralelo a alguno de los ejes.
- Determinar el recíproco ($1/a$ $1/b$ $1/c$ $1/\infty$).
- Reducir al menor número posible según factor común o mínimo común múltiplo.

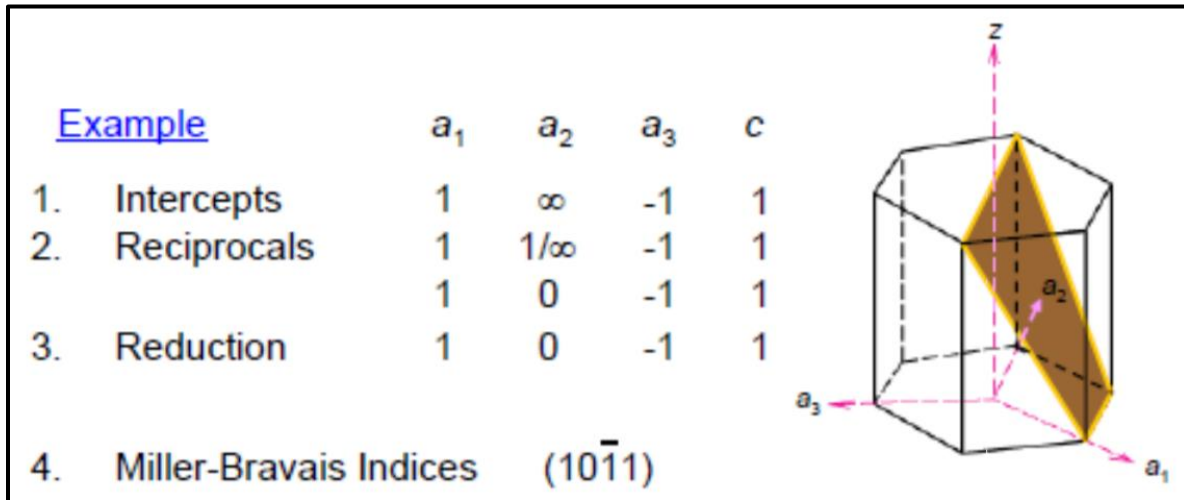


Figura 7.1 Ejemplos de planos cristalográficos para una estructura cúbica.

La distancia interpretada en el sistema cúbico entre dos planos paralelos con los mismos índices de Miller (h , k , l) se designa como (d, k, h) , igual a la distancia desde el origen elegido contenido en un plano y otro paralelo con los mismos índices que sea cercano a él.

7.1 ÍNDICES PARA LOS PLANOS CRISTALINOS EN CELDAS UNITARIAS HCP

Los Índices de Miller son un juego de números que permiten identificar a un conjunto de planos, los cuales son paralelos, los cuales son paralelos, equidistantes e indistinguibles entre sí. Los Índices de Miller representan a los recíprocos de las intersecciones de los planos con los ejes coordenados tomados como referencia dentro de una celda unitaria. Estos conjuntos de números se representan dentro de un paréntesis, y siempre son enteros. Los signos negativos que pudieran tener alguno de los índices se representan siempre por encima de los mismos.

Para el cálculo de los Índices de Miller en una celda unitaria HCP se siguen los siguientes pasos:

- 1) Se escoge un origen. El plano no debe pasar por el punto elegido como origen.
- 2) Se determinan las intersecciones del plano con cada uno de los ejes coordenados.

- 3) Se determinan los recíprocos de las intersecciones del plano con los ejes.
- 4) Se transforman las intersecciones a sus menores enteros en caso de las intersecciones sean números fraccionarios.
- 5) Se denotan los menores enteros dentro de un paréntesis, sin separarlos por medio de comas. De contar con signos negativos, se colocarán por encima de los números que conforman a los índices.

A pesar de que los índices de Miller son comúnmente representados en celdas cúbicas, estos pueden representarse en cualquier tipo de celda. Los índices de planos cristalinos hexagonales se denotan por las letras h k l , en donde h , k , e l representan los recíprocos de las intersecciones del plano con los ejes a_1 , a_2 y a_3 , mientras que el índice l representa el recíproco de la intersección con el eje c .

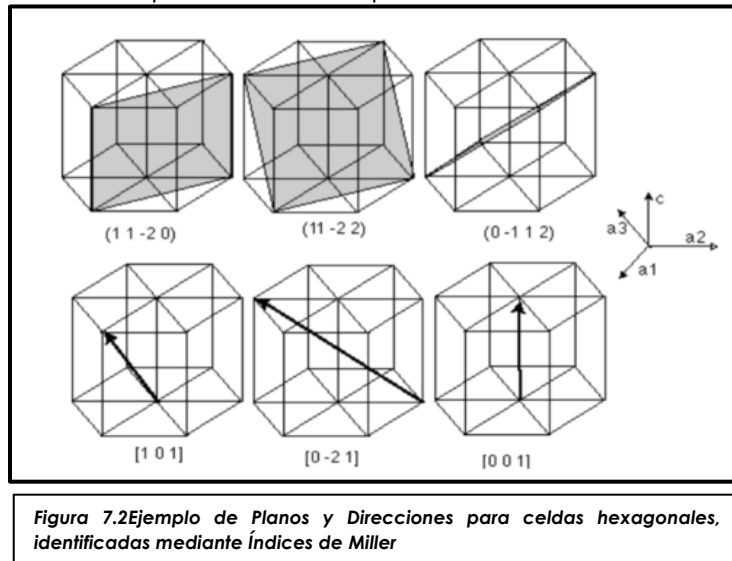


Figura 7.2 Ejemplo de Planos y Direcciones para celdas hexagonales, identificadas mediante índices de Miller

7.2 ÍNDICES DE DIRECCIÓN EN LAS CELDAS UNITARIAS HCP

Se le llama Celda Hexagonal Compacta (HCP) a aquella estructura cristalina en la cual los átomos se ordenan en arreglos hexagonales, empacados lo más juntos posible. Esta es una de las estructuras más comunes en las cuales cristalizan los sólidos, debido a que en ella los átomos se encuentran fuertemente unidos unos con otros, y la red es más estable (Figura 7.2).

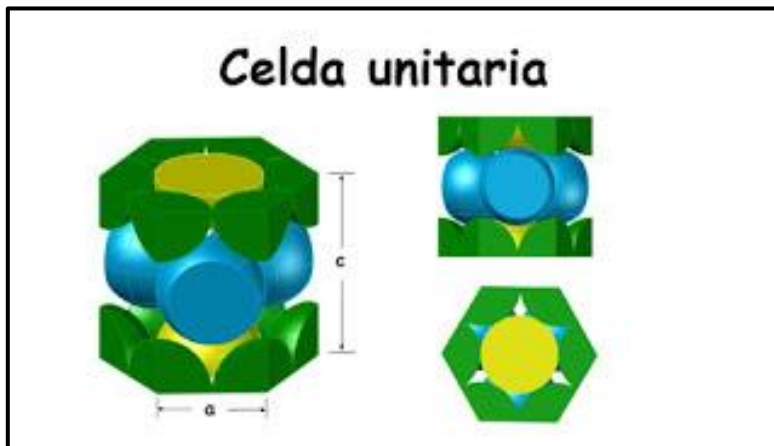


Figura 7.3 Representación tridimensional de una celda HCP con vistas isométrica, lateral y superior.

Para la indicación de direcciones en una celda HCP, generalmente se utilizan cuatro índices u , v , t y w encerrados entre corchetes. Los índices u , v y t son la dirección del vector en la red de direcciones coordenadas a_1 , a_2 y a_3 , mientras que el índice w es una red en vector reticular en la dirección de c .

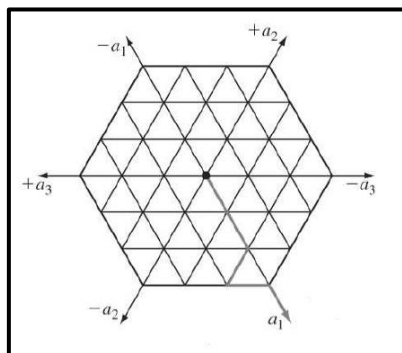


Figura 7.4 Diagrama en vista superior de una celda HCP sobre los ejes para realizar indexaciones

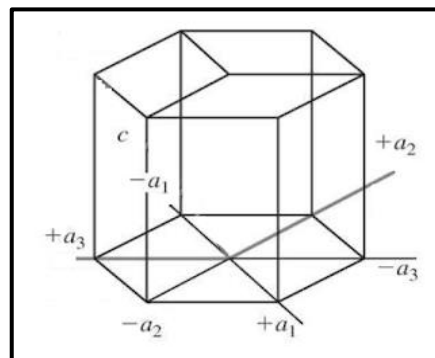


Figura 7.5 Representación isométrica de los ejes a utilizar para indexar en una celda HCP.

8 COMPARACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS CRISTALINAS FCC, HCP Y BCC

8.1 ESTRUCTURAS CRISTALINAS FCC Y HCP

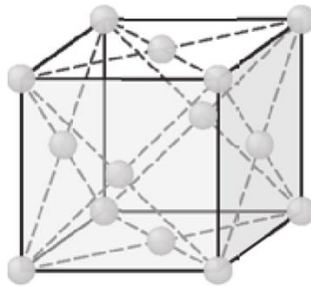


Figura 8.1. Representación de la familia de planos compactos de una FCC (Ilustración adaptada de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

De acuerdo a lo explicado anteriormente, sabemos que las estructuras cristalinas FCC y HCP son estructuras compactas, es decir, sus elementos de la base (que pueden aproximarse a elementos esféricos) están empaquetados lo más juntos posible de tal manera que el factor de empaquetamiento es de 0.74.

El plano de empaquetamiento compacto de la estructura cristalina FCC es la (111), tal como se muestra en la figura 8.1, dicho orden de empaquetamiento es idéntico al de los planos (0001) de la estructura HCP.

8.2 Estructura cristalina BCC

Como se revisó anteriormente, se sabe que la estructura cristalina BCC no es de empaquetamiento compacto, es decir, su empaquetamiento no es el mejor con un factor del 0.68.

Al no ser una estructura compacta no presenta planos de empaquetamiento compacto como los planos (111) en el caso de la estructura FCC y los planos (0001) en la estructura HCP. A pesar de no existir un plano de empaquetamiento compacto en esta estructura, la familia de planos con mayor densidad es la (110). Sin embargo, los átomos de la estructura BCC tienen direcciones de empaquetamiento compacto en las diagonales del cubo, cuyas direcciones de empaquetamiento compacto en las diagonales del cubo, cuyas direcciones son (111).

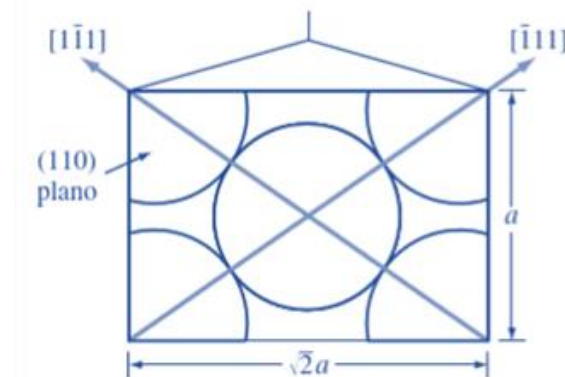


Figura 1.8.2. Representación esquemática de la sección cortada por el plano (110) en una estructura BCC. Observar que no se trata de una estructura compacta, sin embargo las diagonales con direcciones compactas (Ilustración adaptada de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

9 CÁLCULOS DE LA DENSIDAD VOLUMÉTRICA, PLANAR Y LINEAL DE LAS CELDAS UNITARIAS

9.1 DENSIDAD TEÓRICA VOLUMÉTRICA DE LOS METALES

Para poder obtener un valor teórico de la densidad volumétrica de un metal es necesario aplicar el modelo de esferas rígidas para la estructura cristalina de la celda unitaria, conocer el radio atómico del metal obtenido a partir de un análisis de difracción de rayos X y aplicar la siguiente ecuación:

$$\text{Densidad volumétrica} = \rho = \frac{n A}{V_c N_A}$$

Donde:

n = número de átomos asociados a cada celda unitaria

A = peso atómico en g/mol

V_c = Volumen de la celda unitaria

N_A = número de Avogadro

9.2 DENSIDAD ATÓMICA PLANAR

En ocasiones es necesario determinar la densidad atómica en los planos cristalinos. Para ello se calcula la densidad atómica planar aplicando la siguiente relación:

$$\text{Densidad planar} = PD = \rho_p = \frac{\text{No. de átomos cortados por el plano seleccionado}}{\text{Área del plano seleccionado}}$$

Por conveniencia se utilizan planos que corten a los átomos de tal manera que sean fáciles de contabilizar y el área sea más fácil de calcular.

9.3 DENSIDAD ATÓMICA LINEAL

Algunas veces es importante determinar la densidad atómica en algunas direcciones de las estructuras cristalinas, Para esto se calcula la densidad atómica lineal a partir de la relación:

$$\text{Densidad lineal} = LD = \rho_L = \frac{\text{No. de radios cortados por el plano seleccionado}}{\text{Longitud de la dirección seleccionada}}$$

10 CLASIFICACIÓN DE LOS DEFECTOS CRISTALINOS

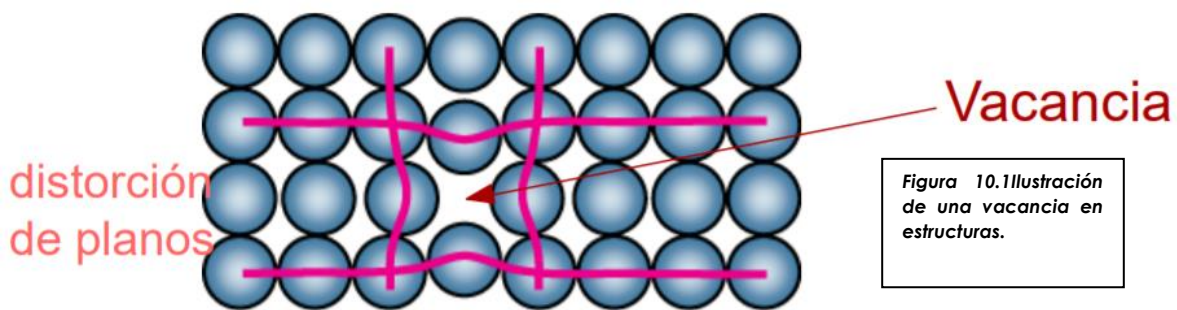
Un defecto cristalino es cualquier perturbación en la periodicidad de la red de un sólido cristalino. El cristal perfecto es un modelo ideal, en el que las diferentes especies (ya sean moléculas, iones u átomos neutros) están colocados de forma periódica y regular, extendiéndose hasta el infinito. En la realidad, cualquier cristal presenta defectos en este modelo ideal, empezando por el hecho de que no hay cristales infinitos.

Son estos defectos cristalinos los que dan las propiedades más interesantes de la materia, como la deformación plástica, la resistencia a la rotura, la conductividad eléctrica, el color, la difusión...

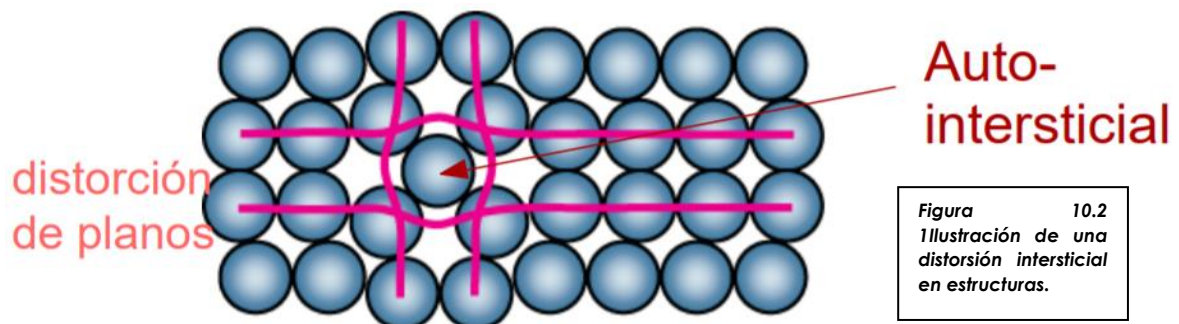
De acuerdo a su dimensión, se clasifican en:

Puntuales:

- Vacantes: Sitios atómicos vacantes en una estructura.



- Autointersticiales: Se forma un defecto intersticial cuando se inserta un átomo adicional en una posición normalmente desocupada dentro de la estructura cristalina. Los átomos intersticiales, mucho más pequeños que los átomos localizados en los puntos de la red, son mayores que los sitios intersticiales que ocupan; en consecuencia, la red circundante aparece comprimida y distorsionada.



- Sustitucional: Se crea un defecto sustitucional cuando se reemplaza un átomo por otro de un tipo distinto. El átomo sustitucional permanece en la posición original. Cuando estos átomos son mayores que los normales de la red, los átomos circundantes se comprimen; si son más pequeños, los átomos circundantes quedan en tensión.

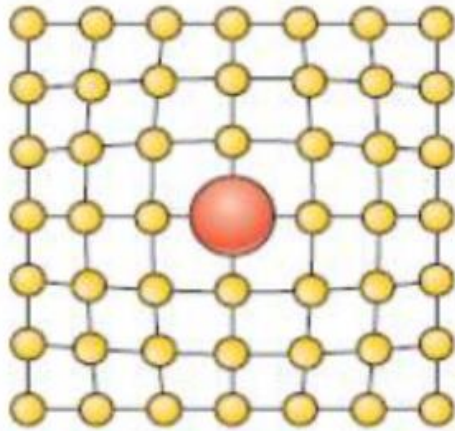


Figura 10.3 Ilustración de una distorsión sustitucional con una partícula mayor en estructuras.

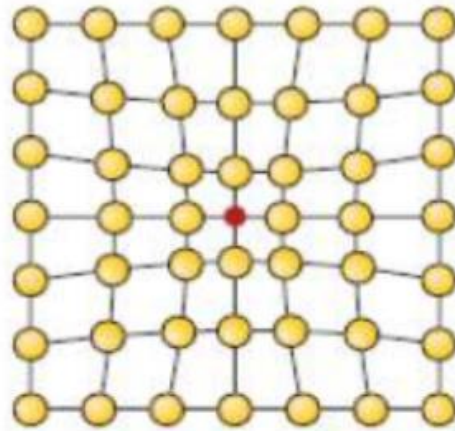


Figura 10.4 Ilustración de una distorsión sustitucional con una partícula menor en estructuras.

- Defecto de Frenkel: un par de defectos, intersticio-vacancia formado cuando un ion salta de un punto normal de la red a un sitio intersticial, dejando detrás una vacancia.

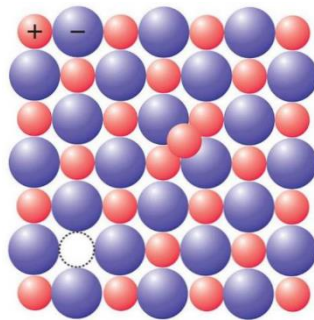


Figura 10.5 Ilustración de un defecto de Frenkel en una estructura atómica ordenada.

- Defecto Schottky: Es un par de vacancias en un material de enlace iónico; deben faltar tanto un anión como un catión de la red si se ha de preservar la neutralidad eléctrica del cristal.

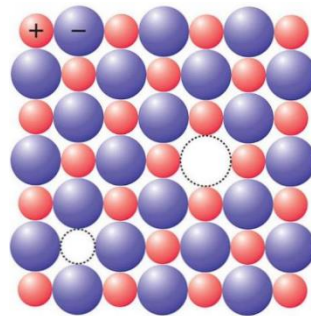


Figura 10.6 Ilustración de un defecto de Schottky en una estructura atómica ordenada.

Defectos de Línea: Un defecto lineal o dislocación se refiere al cambio abrupto en la estructura de átomos a lo largo de una línea llamada línea de dislocación. Ocurren en densidades altas e influyen fuertemente en las propiedades mecánicas del material. Para describir una dislocación hacemos uso del vector de Burgers. Este, describe el tamaño y la dirección de la distorsión.

- Dislocación de Arista o Dislocación de Taylor Orowan: Es un defecto en el cual un semiplano adicional de átomos es introducido en medio del cristal, distorsionando los planos de átomos cercanos. en la bibliografía se suele representar con una T invertida. Consiste en un semiplano extra de átomos que provoca una distorsión local de la red, que es más acusada cerca de la línea de dislocación (de color azul en la imagen de la derecha). El vector de Burgers es perpendicular a la línea de dislocación. Matemáticamente es caracterizada por un vector de Burgers perpendicular a la línea de dislocación, como se muestra en la siguiente figura:

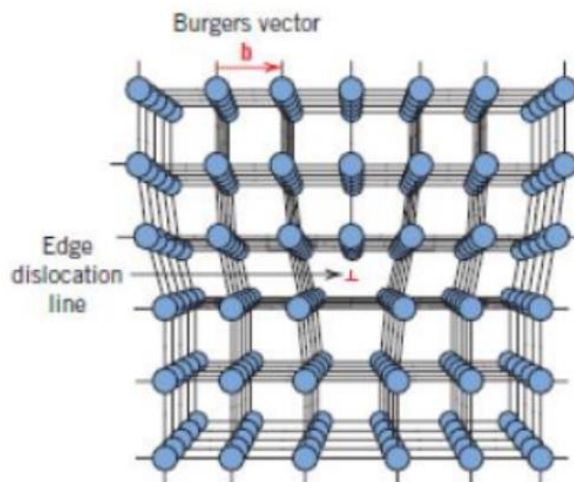


Figura 10.7 Dislocación de Arista de tipo Taylor Orowan.

- Dislocación helicoidal o de tornillo: Los planos atómicos trazan un camino espiral o helicoidal al redor de la línea de dislocación. Este tipo de dislocación es más difícil de visualizar. Esta dislocación es como si se cortara el cristal perfecto parcialmente y luego se le aplicara un esfuerzo cortante para causar una distorsión, como se ilustra a continuación. Para una dislocación helicoidal, la caracterización matemática es que el vector de Burgers es paralelo a la línea de dislocación.

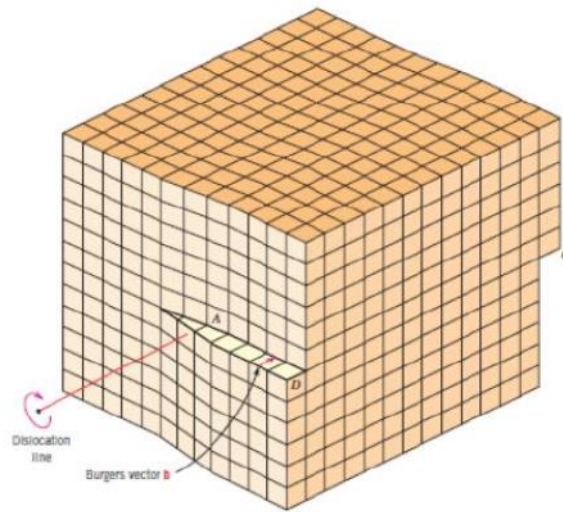


Figura 10.8 Dislocación Helicoidal en una estructura atómica cristalina ordenada.

- Dislocación Mixta: Para el caso de las dislocaciones mixtas, se dice que son dislocaciones que tienen componentes de las dislocaciones ya mencionadas en los puntos anteriores. La realidad es que, en la mayoría de los cristales, no se encontrarán dislocaciones puramente de arista o puramente helicoidales si no una mezcla de los dos. Este tipo de dislocación es ilustrada a continuación:

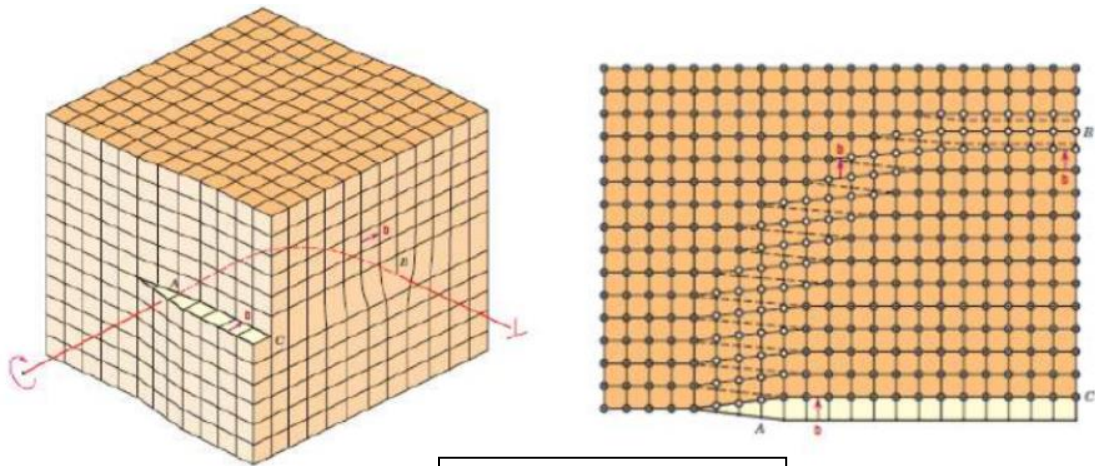


Figura 10.9 Dislocación Mixta en una estructura atómica cristalina ordenada.

- **Dislocaciones Parciales:** Las dislocaciones en ciertos materiales pueden descomponerse en dislocaciones parciales para facilitar el movimiento a través de redes cristalinas. Estas dislocaciones se mueven por mecanismos de formación de pliegues activados térmicamente y por propagación.

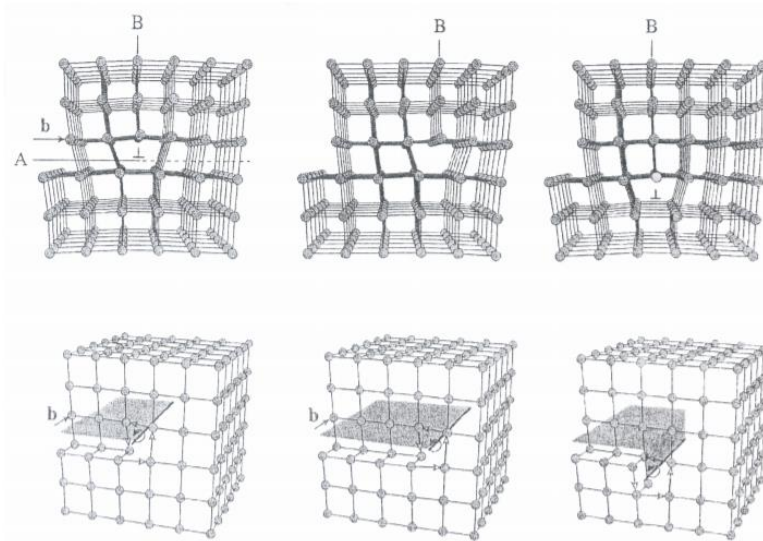


Figura 10.10
Dislocación Parcial
en una estructura
atómica cristalina.

- **Movimiento de las Dislocaciones:** Para entender el movimiento de las dislocaciones es necesario primero definir el concepto de plano de deslizamiento. Se define plano de deslizamiento al plano que contiene al vector de Burgers y la línea de dislocación. Si se aplica un esfuerzo cortante suficientemente grande en la misma dirección que la del vector de Burgers entonces la dislocación puede deslizarse a lo largo del plano mencionado, esto se conoce como deslizamiento. La dirección paralela al vector de Burgers es la dirección de deslizamiento. La combinación de tanto la dirección de deslizamiento como el plano de deslizamiento se conoce como sistema de deslizamiento. El cristal hace movimiento de la dislocación naturalmente porque este es energéticamente favorable. Siempre que se mueve una dislocación estamos pasando de una localización de equilibrio de la dislocación a otra localización de equilibrio. Se define el

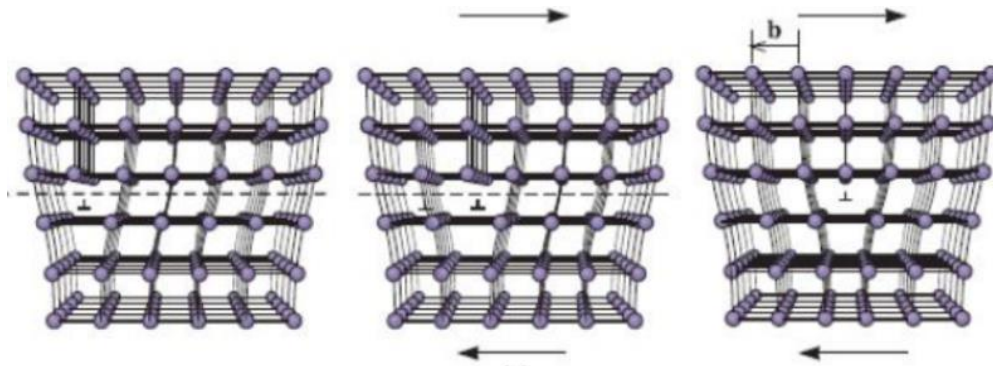


Figura 10.11
Desplazamiento
de una
dislocación
Helicoidal
a través
del
tiempo.

esfuerzo de Peierls-Navarro como el esfuerzo necesario para mover una dislocación de una posición de equilibrio a otra.

Defectos de superficie: Son las fronteras o planos que separan un material en regiones de la misma estructura cristalina pero con orientaciones cristalográficas distintas.

Superficie del material: En las superficies externas del material la red termina de manera abrupta. Cada átomo de la superficie ya no tiene el mismo número de coordinación y se altera el enlace atómico. Asimismo, la superficie puede ser muy áspera y contener pequeñas muescas.

- Fronteras de grano: La microestructura de la mayor parte de los materiales está formada por muchos granos. Un grano es una porción del material dentro del cual el arreglo atómico es idéntico.

Sin embargo, la orientación del arreglo atómico, o de la estructura cristalina, es distinta para cada grano. La frontera de grano, que es la superficie que separa los granos, es una zona estrecha en la cual los átomos no están correctamente espaciados. Esto quiere decir que, en algunos sitios, los átomos están tan cerca unos de otros en la frontera de grano que crean una región de compresión y en otras áreas están tan alejados que crean una región de tensión.

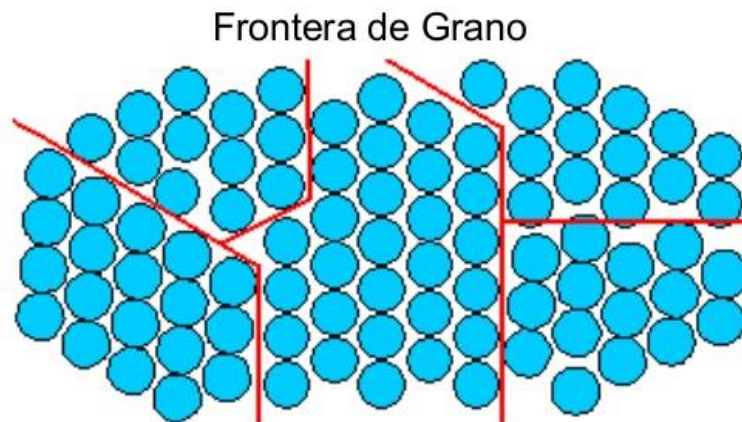


Figura 10.12
Ilustración de una frontera de grano para una estructura atómica cristalina

Una frontera de grano es la interferencia entre dos regiones cristalinas, cada región o grano tiene una diferente orientación con respecto a un eje arbitrario perpendicular a un plano de la red

- Bordes de macla: Un límite de macla es un tipo especial de límite de grano a través del cual existe una simetría de red especular; esto es, los átomos de un lado del límite son como imágenes especulares de los átomos del otro lado. La región de material entre estos límites se denomina macla. Las maclas se generan por desplazamientos atómicos producidos al aplicar fuerzas mecánicas cizallantes (maclas mecánicas) y también durante tratamientos térmicos de recocido posteriores a la deformación (maclas de recocido). Los bordes de macla interfieren con el proceso de deslizamiento incrementando la resistencia del metal.

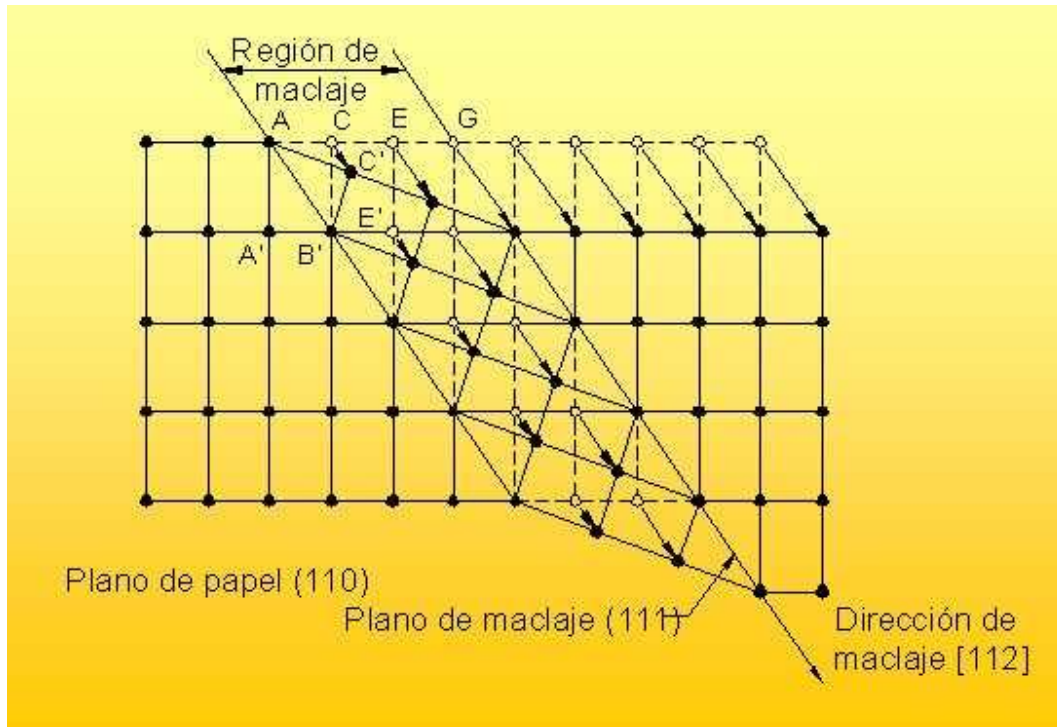


Figura 10.13
Ilustración de un
borde de macla
para un límite
de grano
simétrico en una
red especular.

10.1 DEFECTOS PUNTUALES

En los materiales reales, se encuentran distintos defectos estructurales que son independientes a las impurezas químicas del material. Cuando dichos defectos involucran elementos de la base, se dice que tenemos *defectos puntuales*, también llamados *defectos de dimensión cero*. Los defectos puntuales mas usuales que nos encontramos en los materiales son las vacancias, los átomos intersticiales y los átomos sustitucionales.

Una **vacancia** se produce cuando falta un átomo en un sitio normal de la estructura cristalina. Las vacancias se crean en el cristal durante la solidificación a altas temperaturas como consecuencia de daños por radiación. A temperatura ambiente aparecen muy pocas vacancias, pero éstas incrementan de manera

exponencial conforme va aumentando la temperatura. Lo anterior se expresa en la siguiente ecuación, llamada ecuación de Arrhenius:

$$nv = n \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right)$$

Donde:

nv = # de vacancias por cm^3

n = # de puntos de red por cm^3

Q = Energía requerida para producir una vacante

R = Constante de los gases

Cuando se inserta un átomo adicional en una posición normalmente desocupada dentro de la estructura cristalina, se dice que se tiene un **átomo intersticial**. Los átomos intersticiales, aunque mucho más pequeños que los átomos localizados en los puntos de la red, aún así son mayores que los sitios intersticiales que ocupan; en consecuencia, la red circundante aparece comprimida y distorsionada. Los átomos intersticiales como el hidrógeno a menudo están presentes en forma de impurezas; los átomos de carbono se agregan al hierro para producir acero. Una vez dentro del material, el número de átomos intersticiales en la estructura se mantiene casi constante, incluso al cambiar la temperatura.

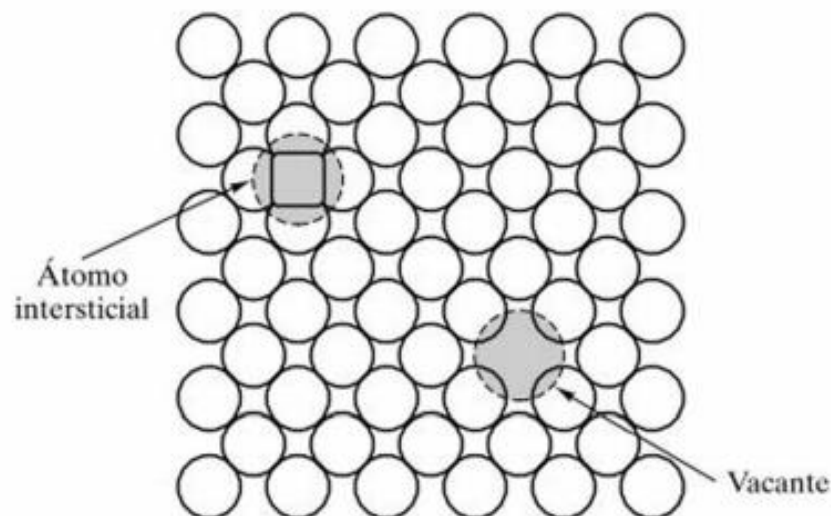


Figura 10.14 Ilustración de las vacancias y los átomos intersticiales.

Otro tipo de defecto puntual son los **átomos sustitucionales**. Se crea un defecto sustitucional cuando se reemplaza un átomo por otro de un tipo distinto. El átomo sustitucional permanece en la posición original. Cuando estos átomos son mayores que los normales de la red (Fig. 10.15 derecha), los átomos circundantes se comprimen; si son más pequeños (Fig. 10.15 izquierda), los átomos circundantes quedan en tensión. En cualquier caso, el defecto sustitucional distorsiona la red circundante. Igualmente, se puede encontrar el defecto sustitucional como una impureza o como un elemento aleante agregado deliberadamente y, una vez introducido, el número de defectos es relativamente independiente de la temperatura.

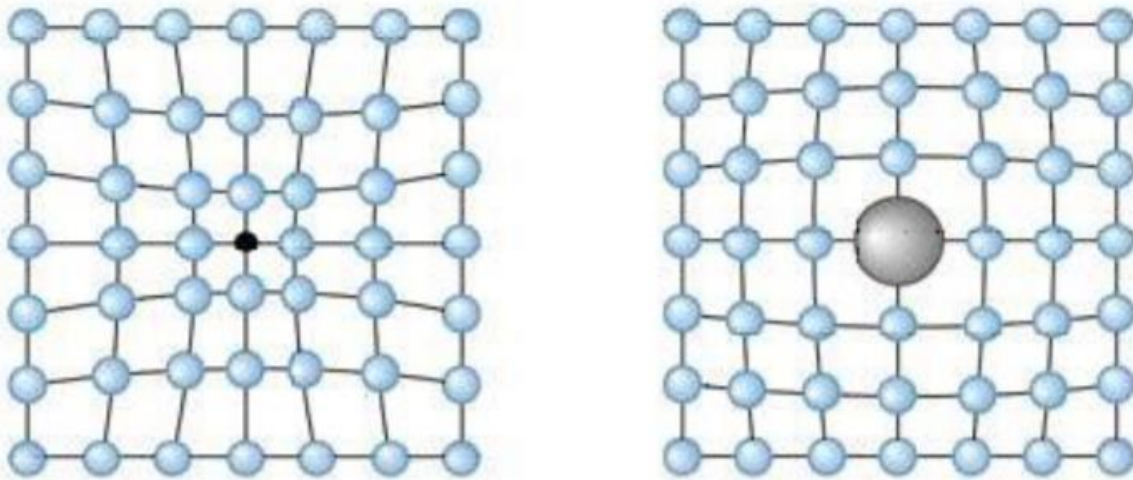


Figura 10.15 Los átomos sustitucionales son más pequeños o grandes que los átomos originales de la base..

Existen otros tipos de defectos puntuales, como los defectos Frenkel y Schottky.

El defecto de Schottky consiste en un par vacantes de iones de carga opuesta. Es necesaria la ausencia del par para mantener localmente la neutralidad de carga dentro de la estructura cristalina del compuesto. Este defecto es muy común en materiales cerámicos de enlace iónico.

Se crea un intersticio cuando un átomo idéntico a los de los puntos normales de la red se coloca en un lugar intersticial. Estos defectos aparecen con mayor frecuencia en redes con un factor de empaquetamiento bajo.

El defecto Frenkel es un par de defectos. intersticio-vacancia formado cuando un ion salta de un punto normal de la red a un sitio intersticial, dejando detrás una vacancia.

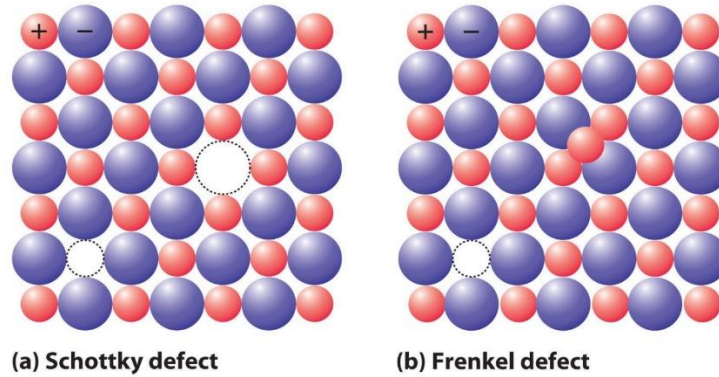


Figura 10.16 Ilustración que ejemplifica los defectos Schottky y Frenkel.

10.2 Defectos de línea

Los defectos de línea o dislocaciones, en sólidos cristalinos son defectos que dan lugar a una distorsión de la red centrada en torno a una línea. Las dislocaciones se crean durante la solidificación de los sólidos cristalinos. También se pueden formar por deformación plástica del sólido cristalino, por condensación de vacantes y por emparejamientos atómicos incorrectos en soluciones sólidas.

Los dos principales tipos de dislocaciones son el tipo de *cuña* y el tipo *helicoidal*. También puede darse una combinación de las dos, *dislocación mezcla*, que tiene componentes de cuña y helicoidales. Una dislocación de cuña se crea en un cristal por inserción de un semiplano adicional de átomos, como se muestra en la Figura 10.16 justo sobre el símbolo $\perp$. Una "te" invertida $\perp$, indica una dislocación de cuña positiva, mientras que una "te" derecha T indica una dislocación de una cuña negativa.

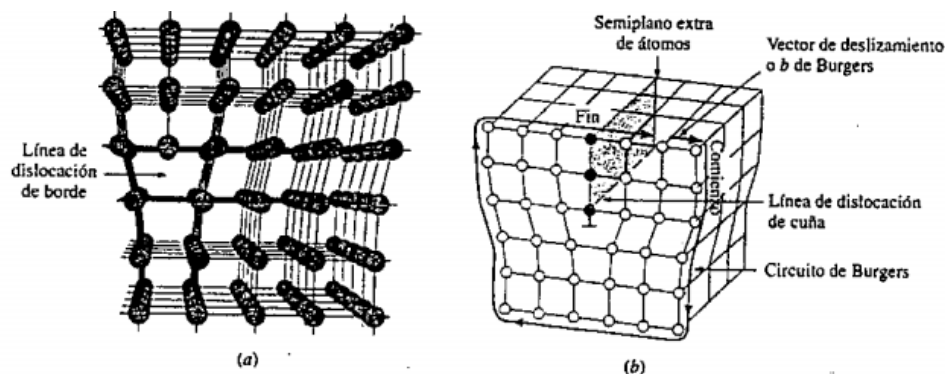


Figura 10.17 (a) Dislocación de cuña positiva en una red cristalina. El defecto de línea está colocado justo encima de la "te" invertida $\perp$ donde está insertado un semiplano extra de átomos (Según A.G. Guy, "Essentials of Materials Science", McGraw-Hill, 1976, pág-153) (b) Dislocación de cuña que indica la orientación de su vector de deslizamiento b de Burger (Según M. Eisenstadt, "Introduction to Mechanical Properties of Materials", Macmillan, 1971, pág. 117).

La distancia de desplazamiento de los átomos en torno a una dislocación se denomina deslizamiento o vector b de Burgers y es perpendicular a la línea de la dislocación de cuña (Figura 10.18 b). Las dislocaciones son defectos de desequilibrio y almacenan energía en la región distorsionada en la red del cristal en torno a la dislocación. La dislocación de cuña tiene una zona de esfuerzo de compresión donde se encuentra el semiplano adicional de átomos y tiene una región de esfuerzo de tensión por debajo del semiplano de átomos (Fig. 10.18 a).

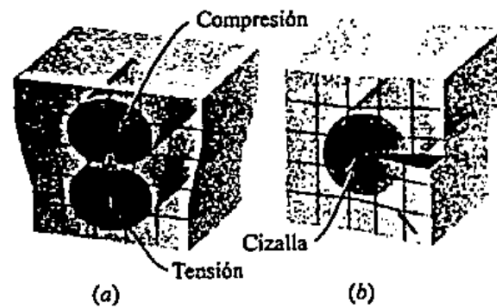


Figura 10.18 Campo de fuerzas alrededor de (a) una dislocación de cuña, (b) una dislocación helicoidal. (Según John Wulff et al., "The Structure and Properties of Materials", vol. 3: "Mechanical Behavior", Wiley, 1965, pág. 69.)

La dislocación helicoidal puede formarse en un cristal perfecto por aplicación de esfuerzos de cizalladura en las regiones de un cristal perfecto que han sido separadas por un plano cortante, como se muestra en la Figura 10.19. Estos esfuerzos de cizalladura introducen en la red una región de distorsión en forma de espiral o rampa helicoidal que los planos atómicos trazan alrededor de la línea de dislocación. La región de distorsión del cristal no está bien definida pero alcanza al menos de ancho el diámetro de varios átomos. En torno a la dislocación helicoidal se crea una región de tensión de cizalla en la que se almacena energía (Fig. 10.18b). El deslizamiento o vector de Burgers de la dislocación helicoidal es paralelo a la línea de dislocación, como se muestra en la Figura 10.19.

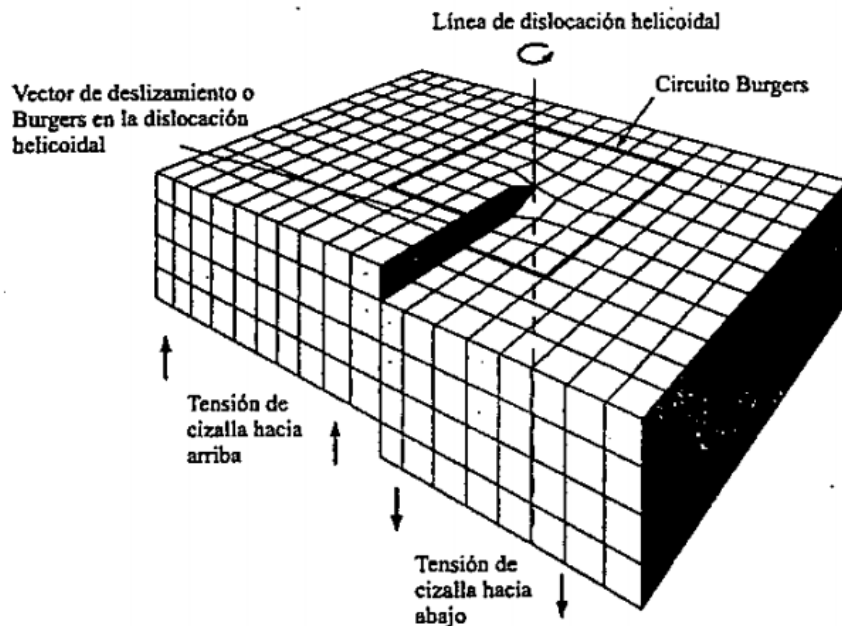


Figura 10.19 Dislocación helicoidal en una red cristalina cúbica. La dislocación helicoidal está creada por un plano cortante que sufre tensión de cizalla hacia arriba y hacia abajo. Se forma una rampa de átomos en espiral, el circuito Burgers de esta dislocación está representado por una línea oscura. La extensión de la dislocación afecta a unos pocos átomos. El vector de deslizamiento en la dislocación helicoidal es paralelo a la línea de dislocación. (Según W. T. Read, "Dislocations in Crystals", McGraw-Hill, 1953.)

La mayor parte de las dislocaciones de los cristales son una mezcla de ambas, tienen componentes de cuña y helicoidal. En la línea curva de dislocación AB es la Figura 10.20 la dislocación es del tipo Helicoidal puro en la parte izquierda cuando entra en el cristal y es del tipo de cuña puro en la parte derecha cuando sale del cristal. Dentro del cristal la dislocación es del tipo mixto, con componentes de cuña y helicoidal.

Para la mayoría de los metales y otros sistemas de apilamiento compacto, la magnitud del vector de Burger es la misma que el espacio interplanar del material, ya que la red cristalina es normalmente compensada por una unidad. El vector de Burger y la línea de dislocación forman un ángulo recto en las dislocaciones de cuña y son paralelos entre sí en las dislocaciones helicoidales.

Las dislocaciones se forman a partir de tres fuentes principales:

1. *Nucleación homogénea.* Enlaces en la ruptura de la espina de la red cristalina, y la red cristalina se recorta, creando dos planos de dislocación enfrentados en direcciones opuestas.
2. *Fronteras de grano.* Los pasos y las salientes presentes en las separaciones entre los granos adyacentes se propagan durante las etapas tempranas de deformación.
3. *Interacciones de red cristalina/superficie.* Los pasos localizados en la superficie del cristal concentran la tensión en pequeñas regiones haciendo más propensa la propagación de la dislocación.

La nucleación homogénea requiere de una tensión concentrada para fracturar los enlaces de la red cristalina y rara vez ocurre espontáneamente; la iniciación de las fronteras de grano y la iniciación de superficie son más fáciles y más comunes.

Movimiento de la dislocación

Cuando se explica el movimiento de las dislocaciones, es necesario referirse al concepto de esfuerzo. El esfuerzo tiene unidades de lb/pulg² conocidas como psi (libras por pulgada cuadrada) o N/m² conocidas como pascal (Pa). Se origina un esfuerzo normal cuando la fuerza aplicada actúa perpendicular al área de interés. Se origina un esfuerzo cortante τ cuando la fuerza actúa en una dirección paralela al área de interés.

Considerando la dislocación de cuña mostrada en la Figura 10.20 a. A un plano que contiene la línea de dislocación y al vector de Burgers se le conoce como **plano de deslizamiento**. Cuando se aplica un esfuerzo cortante lo suficientemente grande actuando paralelo al vector de Burgers a un cristal que contiene una dislocación, ésta puede moverse a través de un proceso conocido

como **deslizamiento**. Los enlaces atraviesan el plano de deslizamiento entre los átomos en la columna a la derecha de la dislocación se muestran como rotos. Los átomos en la columna a la derecha de dislocación debajo del plano del deslizamiento se desplazan ligeramente por lo que establecen enlaces con los átomos de la dislocación de arista. De esta manera, la dislocación se ha desplazado a la derecha (Figura 10.20 b). Si el proceso continúa, la dislocación se mueve a través del cristal (Figura 10.20 c) hasta que se produce un escalón en el exterior del cristal (Figura 10.20 d) en la **dirección del deslizamiento** (la cual es paralela al vector de Burgers). La combinación de un plano de deslizamiento y una dirección del deslizamiento comprende un **sistema de deslizamiento**.

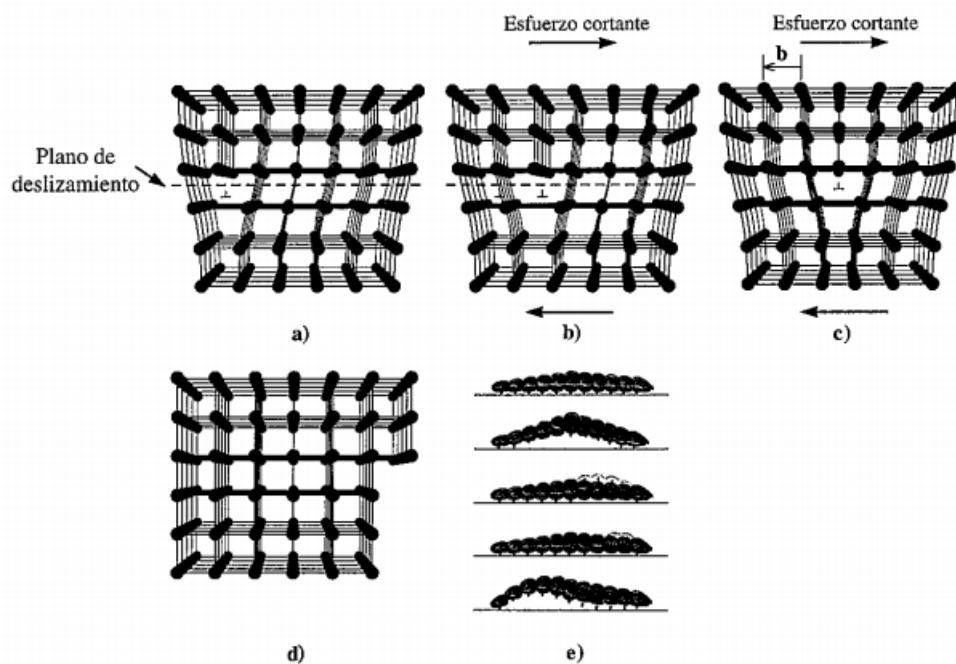


Figura 10.20 a) Cuando se aplica un esfuerzo cortante a la dislocación en a), los átomos se desplazan, b) ocasionando que la dislocación se mueva un vector de Burgers en la dirección de deslizamiento. c) El movimiento continuo de la dislocación con el tiempo crea un escalón d) y el cristal se deforma. (Adaptado de A. G. Guy, *Essentials of Materials Science*, McGraw-Hill, 1976.) e) El movimiento de una oruga es análogo al movimiento de una dislocación

La mitad superior del cristal ha sido desplazada un vector de Burgers con relación a la mitad inferior; el cristal se ha deformado de manera plástica (o permanente). La deformación plástica de los metales es principalmente el resultado de la propagación de las dislocaciones.

Este proceso de rompimiento y reformación de enlaces de manera progresiva requiere mucho menos energía que la que se requeriría para romper de manera instantánea todos los enlaces que atraviesan el plano del deslizamiento. El cristal se deforma por medio de la propagación de las dislocaciones debido a que es un proceso energéticamente favorable.

En la Figura 3.35 a) es un diagrama esquemático de una dislocación de arista que está sujeta a un esfuerzo cortante τ que actúa en forma paralela al vector de Burgers y de manera perpendicular a la línea de dislocación. En el esquema, la dislocación de cuña se está propagando en una dirección opuesta a la dirección de la propagación mostrada en la figura 10.20 a). Una componente del esfuerzo cortante debe actuar en forma paralela al vector de Burgers para que la dislocación se mueva. La línea de dislocación se mueve en una dirección paralela al vector de Burgers. La Figura 10.21 b) muestra una dislocación helicoidal. Para una dislocación helicoidal, una componente del esfuerzo cortante debe actuar en forma paralela al vector de Burgers (y por tanto a la línea de dislocación) para que la dislocación se mueva. La dislocación se mueve en una dirección perpendicular al vector de Burgers y el escalón del deslizamiento que se produce es paralelo al vector de Burgers. Dado que el vector de Burgers de una dislocación helicoidal es paralelo a la línea de la dislocación, la especificación del vector de Burgers y la línea de la dislocación no definen un plano de deslizamiento para una dislocación helicoidal.

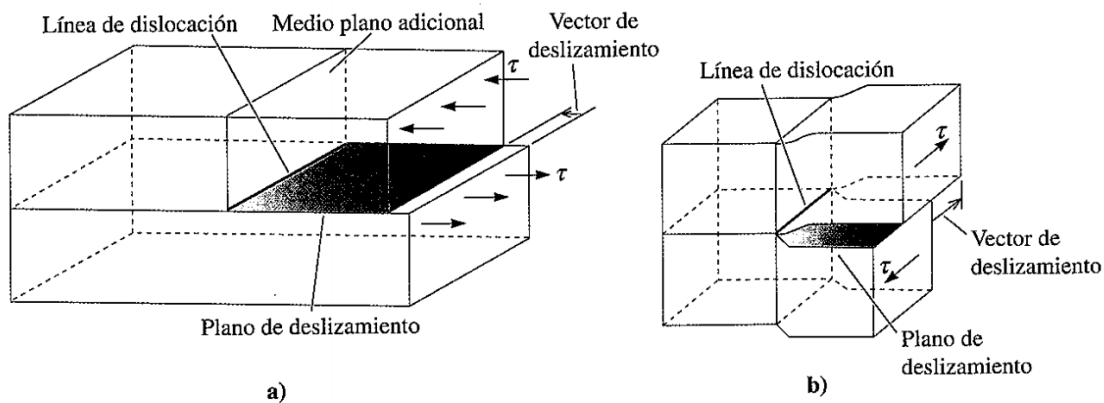


Figura 10.21 Esquema de la línea de dislocación, del plano de deslizamiento y del vector de deslizamiento (Burgers) para a) una dislocación de cuña y b) una dislocación helicoidal. (Adaptado de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

Durante el deslizamiento, una dislocación se mueve de un conjunto de entornos a un conjunto de entornos idéntico. Se requiere el **esfuerzo de Peierls-Nabarro** (ecuación 10-1) para mover la dislocación de una localización de equilibrio a otra.

$$\tau = c e^{-\frac{kd}{b}} \quad (10-1)$$

dónde τ es el esfuerzo cortante requerido para mover la dislocación, d es el espaciado interplanar entre los planos del deslizamiento adyacentes, b es la magnitud del vector de Burgers y c y k son constantes para el material. La dislocación se mueve en un sistema de deslizamiento que requiere el gasto de energía mínimo. Varios factores importantes determinan los sistemas de deslizamiento más probables de ser activos:

1. El esfuerzo requerido para ocasionar que la dislocación se mueva aumenta de manera exponencial con la longitud del vector de Burgers. Por tanto, la dirección de deslizamiento debe tener una distancia repetitiva pequeña o una distancia lineal alta. Las direcciones compactas en los metales y aleaciones cumplen este criterio y son las direcciones de deslizamiento comunes.
2. El esfuerzo requerido para ocasionar que la dislocación se mueva disminuye de manera exponencial con el espaciado interplanar de los planos del deslizamiento. El deslizamiento se lleva a cabo de manera más fácil entre los planos de átomos que son llanos (por lo que hay "colinas o valles" más pequeños sobre la superficie) y entre los planos que están muy alejados (o tienen un espaciado interplanar relativamente grande). Los planos con una densidad planar alta cumplen este requerimiento. Por tanto, los planos de deslizamiento por lo regular son planos compactos o lo más compactos posibles. En la tabla 10-1 se resumen los sistemas de deslizamiento comunes en varios materiales.
3. Las dislocaciones no se mueven con facilidad en materiales como el silicio, los cuales tienen enlaces covalentes. Debido a la fuerza y direccionalidad de los enlaces, los materiales por lo regular fallan de una manera quebradiza antes de que la fuerza sea lo suficientemente alta para ocasionar un deslizamiento apreciable. Las dislocaciones también desempeñan una función relativamente menor en la deformación de los polímeros. La mayoría de los polímeros contienen una fracción de volumen sustancial del material que es morfo y, por tanto, no contienen dislocaciones. La deformación permanente de los polímeros involucra sobre todo el estiramiento, la rotación, y el desenredado de las moléculas de cadena larga.
4. Los materiales con enlace iónico, incluyendo muchas cerámicas como el MgO , también son resistentes al deslizamiento. El movimiento de una dislocación afecta el balance de la carga alrededor de los aniones y cationes, requiriendo que se rompan los enlaces entre los aniones y cationes. Durante el deslizamiento, los iones con carga similar también deben pasar cerca unos de otros, lo que ocasiona repulsión. Por último, la distancia repetitiva a lo largo de la dirección de deslizamiento, o del vector de Burgers, es mayor que en los metales y aleaciones. De nuevo, la falla quebradiza de los materiales cerámicos ocurre por lo general debido a la presencia de desperfectos tales como poros pequeños antes de que el nivel de esfuerzo aplicado sea el suficiente para ocasionar que las dislocaciones se muevan. La ductilidad en las cerámicas puede obtenerse por medios de

- a) Transformaciones de fase (conocidas como plasticidad de transformación, un ejemplo es la zirconia estabilizada por completo);
- b) El maclado mecánico;
- c) Movimiento en la dislocación, y
- d) Deslizamiento de los límites de granos

TABLA 10-1 Planos y direcciones de deslizamiento en estructuras metálicas		
Estructura cristalina	Plano de deslizamiento	Dirección de deslizamiento
Metales CCCu	$\{110\}$ $\{112\}$ $\{123\}$	$\langle 111 \rangle$
Metales CCCa	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$
Metales CH	$\{0001\}$ $\{11\bar{2}0\}$ $\{11\bar{1}0\}$ $\{11\bar{1}1\}$	$\langle 110 \rangle$ $\langle 100 \rangle$ o $\langle 10\bar{2}0 \rangle$
MgO, NaCl (iónico)	$\{110\}$	$\langle 110 \rangle$
Silicio (covalente)	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$

Nota: Estos son planos activos en algunos metales y aleaciones o a temperaturas elevadas

10.3 Defectos de superficie

Defectos de superficie (planares)

Los defectos de superficie son aquellas imperfecciones que significan una discontinuidad en la estructura del material; dichos defectos incluyen **superficies externas, límites de grano, maclas, bordes de ángulo cerrado, bordes de ángulo abierto y fallas de apilamiento**.

Superficies externas

La superficie libre o externa de cualquier material es el tipo de defecto planar más común. Las superficies externas se consideran defectos debido a que los átomos de la superficie están enlazados a otros átomos solo por un lado. Por lo tanto, los átomos de la superficie al tener menor número de enlaces, como resultado estos átomos tienen un mayor estado de energía en comparación a los átomos situados dentro del cristal.

La superficie exterior también puede ser muy áspera, contener muescas diminutas y ser mucho más reactivas que la mayor parte del material

Es importante resaltar que entre mayor sea la energía asociada con los átomos de la superficie de un material hace a la superficie susceptible a la erosión y a

reaccionar con los elementos del ambiente. Este es un claro ejemplo que muestra la importancia de los defectos en el desempeño de los materiales.

Límites de grano

La solidificación de los metales y aleaciones es un proceso de gran importancia dado que la mayoría de los metales se funden para moldearlos como productos semi acabados o acabados.

En general, la solidificación de un metal o aleación puede dividirse en las siguientes etapas:

1. Formación de núcleos

Cuando un material cristalino solidifica, este lo hace de forma gradual, de la misma forma que lo hace el agua.

La nucleación tiene lugar en el líquido fundido cuando el metal proporciona por sí mismo los átomos que se requieren para formar los núcleos. Consideremos un metal puro solidificando. Cuando un metal líquido puro se enfría lo suficiente por debajo de su temperatura de equilibrio de solidificación, se crean numerosos núcleos homogéneos mediante el movimiento lento de los átomos que se unen entre sí.

La manera en que esto sucede es que se van a comenzar a formar celdas cristalinas dependiendo de la estructura con la cual va a solidificar el material (FCC, BCC, hexagonal, tetraédrico, etc.). Hay que tener presente que la nucleación suele requerir de un nivel alto de subenfriamiento que puede llegar a ser de varios cientos de grados centígrados. *Figura 10.22 a)*

2. Crecimiento de los núcleos para formar cristales

Para que un núcleo pueda transformarse en un cristal debe alcanzar un tamaño *crítico*.

Una vez que se generan las primeras estructuras (núcleos), el resto va a comenzar a solidificar alrededor de las mismas, pero no solo de forma un núcleo, estos se generan en todo el volumen. Las estructuras que se forman alrededor de un núcleo van a adoptar la misma orientación, es decir, van a estar alineadas con la celda que tomo el lugar de núcleo.

Una agrupación de átomos enlazados entre sí con un tamaño menor al tamaño crítico se le llama embrión, mientras que si es mayor al crítico se la llama núcleo. A causa de la inestabilidad de los embriones que se llegan a formar, estos se re disuelven constantemente en el metal fundido debido a la agitación de los átomos.

Es evidente que no todos los núcleos van a tener la misma orientación, es decir, hay desorientación entre cada núcleo y por consiguiente entra las estructuras formadas a sus alrededores. *Figura 10.22 b)*

3. Formación de una estructura granular

Una vez que se llega al tamaño crítico, los núcleos formados ya se consideran cristales. En cada cristal los átomos están ordenados de forma regular. Cuando finalmente concluye la solidificación del metal, los cristales se juntan unos con otros en diferentes orientaciones y forman límites cristalinos en los que los **cambios de orientación** representan un defecto, a esta separación se le llama **límite de grano**. Figura 10.22 c)

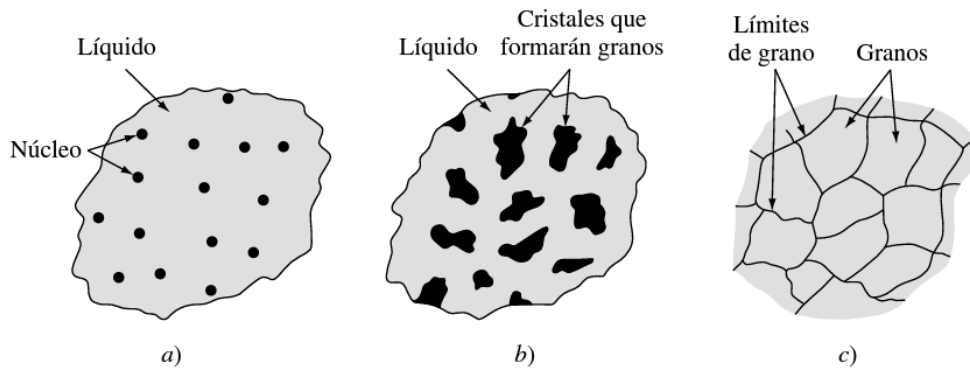


Figura 10.22. Representación esquemática de la solidificación de un metal: a) formación de los núcleos; b) crecimiento de los núcleos para formar cristales; c) unión de los cristales para formar granos y por consecuencia límites de granos (Adaptado de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

Los límites de grano son los defectos de superficie que señalan y separan a los granos (cristales) de diferentes orientaciones. En los metales, los límites de grano se originan durante la solidificación cuando los cristales formados desde diferentes núcleos crecen simultáneamente juntándose unos con otros. La forma de los límites de grano está determinada por la restricción impuesta por el crecimiento de los granos vecinos tal como se observa en la figura 10.23.

Cabe resaltar que en los límites de grano existe un aumento de energía, entre mayor sea esta energía y su estructura sea más abierta, éstos se convertirán en una región más favorable para la nucleación y el crecimiento de precipitados.

A temperatura ordinaria, los límites de grano disminuyen la plasticidad dificultando el movimiento de dislocación en la región del límite.

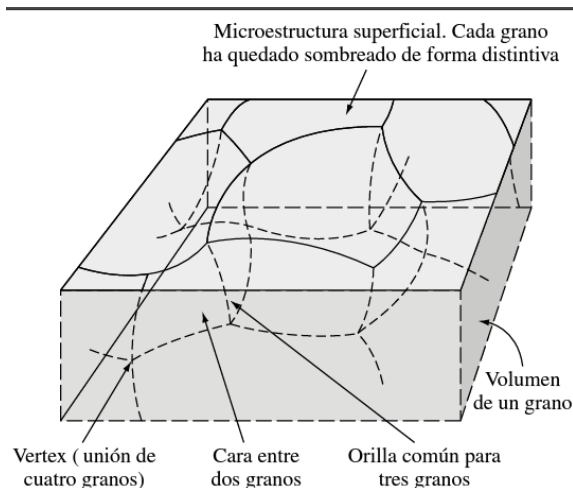


Figura 10.23. Representación esquemática de los límites de grano en un material cristalino y las redes tridimensionales (Adaptado de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

Maclas o bordes de macla

Son otro ejemplo de defecto superficial. Una macla se define como una región en la que existe una réplica tipo espejo de la estructura a través de un plano o un borde. Los bordes gemelos se forman cuando un material se deforma permanentemente o de manera plástica (maclas de deformación).

Las maclas se crean dentro de los granos y solo representan un cambio o error de apilamiento en cristales con una misma orientación. También puede aparecer durante el proceso de recristalización en el que los átomos se vuelven a situar en un cristal deformado (macla de templado), pero esto solo ocurre en algunas aleaciones FCC.

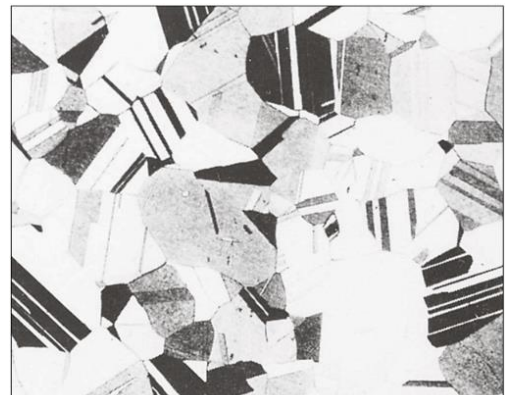


Figura 10.24 Maclas en una estructura granular de latón. (Adaptado de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

A menor energía de error de apilamiento, mayor facilidad de que se formen maclas.

De manera similar a las dislocaciones, los bordes de macla tienden a reforzar a un material.}

Bordes de ángulo agudo y abierto

Cuando en un arreglo de dislocaciones de borde éstas se orientan en un cristal de manera tal que dos regiones del cristal parecen desorientarse o inclinarse, se forma un defecto de superficie llamado límite de inclinación en ángulo agudo.

Puede ocurrir un fenómeno similar cuando una red de dislocaciones helicoidales crea un límite de torsión en ángulo agudo.

El ángulo de desorientación de un límite de ángulo agudo suele ser menor a 10 grados. A medida que aumenta la densidad de las dislocaciones, en los límites en ángulo agudo aumenta el ángulo de desorientación. Si el ángulo es mayor a 20 grados, el límite ya no se caracteriza como ángulo agudo, sino como un límite general de grano.

De manera similar a las dislocaciones y las maclas, los bordes de ángulo agudo son regiones de alta energía debido a las distorsiones locales de la red y tienden a endurecer a un metal.

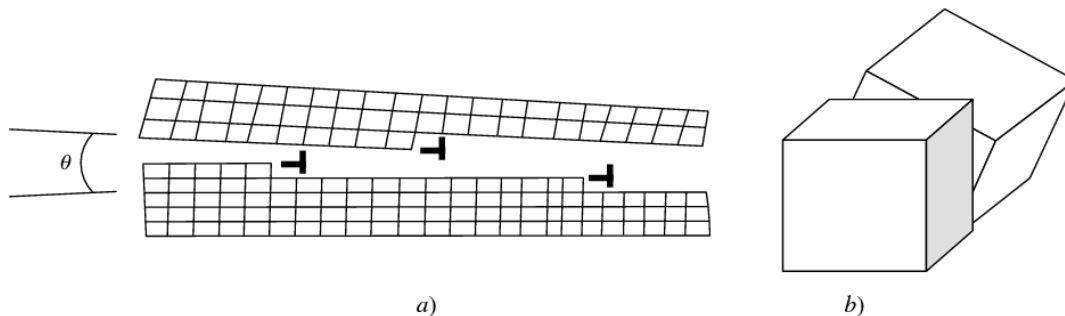


Figura 10.25. a) dislocaciones de borde que forman un límite inclinado pequeño; b) Esquema de límite doblado de ángulo (Adaptado de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

Errores de apilamiento

Las fallas de apilamiento representan un error en la secuencia de apilamiento de los planos compactos. En ocasiones durante el crecimiento de un material cristalino, en el colapso de un grupo de átomos vacantes, o en la interacción de dislocaciones, pueden faltar uno o más planos de apilamiento, lo que da lugar al defecto superficial mencionado.

La formación de estructuras cristalinas FCC se lleva a cabo mediante el apilamiento de los planos atómicos. Se sabe que la secuencia de apilamiento es ABCABABC..., la falla de apilamiento ABCAB**AACB**ABC es típica. Donde los planos resaltados indican la falla.

Las fallas de apilamiento también tienden a endurecer el material.

Es importante señalar que en términos generales, de los defectos de superficie expuestos, los límites de grano son los más eficaces para endurecer a un

metal. Sin embargo, las fallas de apilamiento, los límites de macla y los límites de ángulo agudo sirven para un propósito similar.



Figura 10.26 Representación esquemática de errores de apilamiento en una estructura cristalina. (Adaptado de J.D. Verhoeven, *Fundamentals of Physical Metallurgy*, Wiley 1975.)

Defectos Volumétricos

Los defectos volumétricos o tridimensionales se forman cuando un grupo de átomos o de defectos puntuales se unen para formar un vacío tridimensional, o poro. De manera inversa, un grupo de átomos de alguna impureza puede unirse para formar un precipitado tridimensional.

El tamaño de un defecto volumétrico puede variar desde unos cuantos nanómetros hasta centímetros.

10.4 INTERACCIONES ENTRE DEFECTOS CRISTALINOS

La difusión es el movimiento de los átomos en un material. Los átomos se mueven de una manera predecible, tratando de eliminar diferencias de concentración y de producir una composición homogénea y uniforme. El movimiento de los átomos es necesario para muchos de los tratamientos que llevamos a cabo sobre los materiales, por ejemplo:

- Tratamiento térmico de los materiales
- Manufactura de materiales cerámicos
- Solidificación de los materiales
- Fabricación de transistores y celdas solares
- Conductividad eléctrica

Existen defectos en la red cristalina. Sin embargo, estas imperfecciones, e incluso los átomos que ocupan los puntos de red, no son estables ni están en reposo. En vez de ello, los átomos poseen energía térmica y se mueven. Los átomos pueden moverse: de un sitio normal de la red a una vacancia, de un sitio intersticial a otro, incluso pueden saltar a través de un borde de grano haciendo que dicho borde se mueva.

El fenómeno de la difusión se puede demostrar mediante el par difusor, que es un ordenamiento de dos metales (A y B) puestos en contacto a través de las dos caras. Este par se calienta a elevada temperatura (por debajo de la temperatura de fusión de ambos metales) durante un largo periodo de tiempo y luego se enfría a temperatura ambiente. El análisis químico revela una condición donde en los extremos opuestos a las intercaras se encuentra el material puro (de cada metal respectivamente) y al centro, en la unión una región de aleación. La composición de ambos metales varía con la distancia, el resultado indica que los átomos del metal A han emigrado o difundido dentro del metal B y que el metal B se ha difundido dentro del metal A. Este proceso en que los átomos de un metal se difunden en el otro, se denomina interdifusión o difusión de impurezas.

Desde el punto de vista macroscópico, la interdifusión se presenta como el cambio de concentración que ocurre con el tiempo y existe un claro transporte de átomos desde las regiones de elevada concentración. También ocurre la difusión en metales puros, donde los átomos del mismo tipo intercambian posiciones y se denomina auto difusión. En el auto difusión no podemos encontrar cambios de composición.

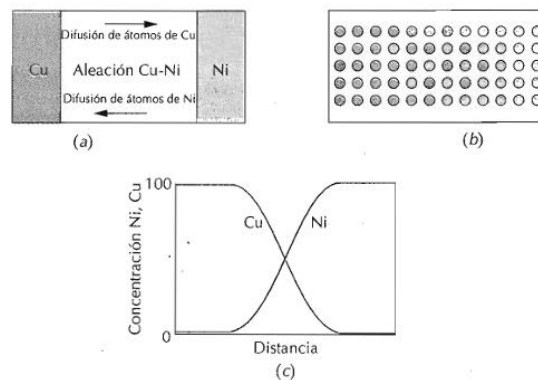


Figura 10.27 a) Zona de aleación por difusión del par difusivo cobre-níquel después de tratado térmicamente a elevada temperatura b) Representación esquemática de las localizaciones de los átomos dentro del par difusor c) Concentraciones de cobre y de níquel en función de la distancia en el par (Según Callister, W. "Ciencia e Ingeniería de los Materiales". Reverté, S.A. 2007. pág.97)

MECANISMOS DE DIFUSIÓN

La movilidad atómica exige dos condiciones:

- 1) Un lugar vacío
- 2) El átomo debe tener suficiente energía como para romper los enlaces con los átomos vecinos y distorsionar la red durante el desplazamiento.

Esta energía es de naturaleza vibratoria. Los átomos en un sólido vibran/oscilan sobre sus posiciones con una frecuencia $f = 10^{13} [Hz]$. La frecuencia de vibración normalmente está definida por la red cristalina. A una temperatura T , la energía media (potencial cinética) de vibración es de $3 kT$ (donde k es la constante de Boltzmann $k = 1.38 \times 10^{-23} \left[\frac{J}{atom K} \right]$). Pero es sólo la energía media ya que los átomos (o moléculas) se encuentran vibrando y chocan entre sí, por lo que la energía continuamente se transfiere de uno en uno.

DIFUSIÓN POR VACANTES

Implica el cambio desde una posición reticular normal a una vacante o lugar reticular vacío. Por descontado que este proceso necesita la presencia de vacantes, y las posibilidades de la difusión de las vacantes en función del número de defectos que existan. A elevada temperatura el número de vacantes de un metal es significativo. Puesto que en el movimiento difusivo los átomos y las vacantes intercambian posiciones, el movimiento de los átomos y las vacantes intercambian posiciones, el movimiento de los átomos en la difusión va en sentido opuesto al de las vacantes, la auto difusión y la interdifusión ocurren mediante este mecanismo; en la interdifusión los átomos de soluto sustituyen a los átomos de disolvente.

DIFUSIÓN INTERSTICIAL

El segundo tipo de difusión implica a átomos que van desde una posición intersticial a otra vecina desocupada. El mecanismo tiene lugar por interdifusión de solutos tal como el hidrógeno, carbono, nitrógeno y oxígeno, que tienen átomos pequeños, idóneos para ocupar posiciones intersticiales. Los átomos de soluto sustitucionales raramente ocupan posiciones intersticiales y no difunden este mecanismo. Este fenómeno se denomina difusión intersticial.

En la mayoría de las aleaciones, la difusión intersticial ocurre más rápidamente que la difusión por vacantes y tienen mayor movilidad. Teniendo en cuenta que hay más posiciones intersticiales vacías que vacantes, la probabilidad del movimiento atómico intersticial es mayor que la difusión por vacantes.

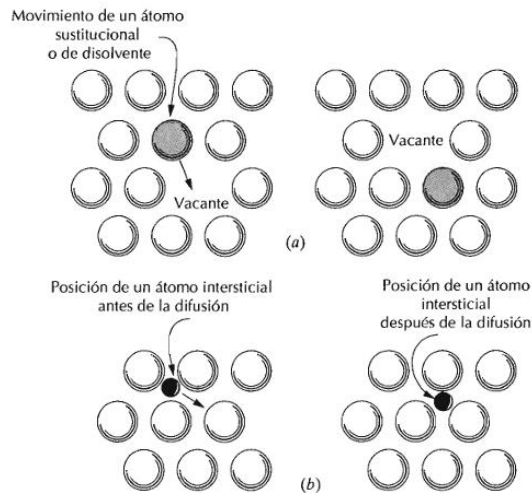


Figura 10.28 Representación esquemática de una difusión a) por vacantes y b) intersticial (Según Callister, W. "Ciencia e Ingeniería de los Materiales". Reverté, S.A. 2007. pág. 98)

ENERGÍA PARA LA ACTIVACIÓN

Un átomo que se difunde debe oprimir a los átomos circundantes para llegar a su nuevo sitio. Para que esto ocurra, deberá proporcionarle energía a fin de que llegue a su nueva posición. El átomo originalmente está en una ubicación de baja energía y relativamente estable. A fin de pasar a un nuevo sitio, el átomo debe vencer una barrera energética llamada energía de activación Q . El calor le proporciona al átomo la energía que requiere para vencer la barrera.

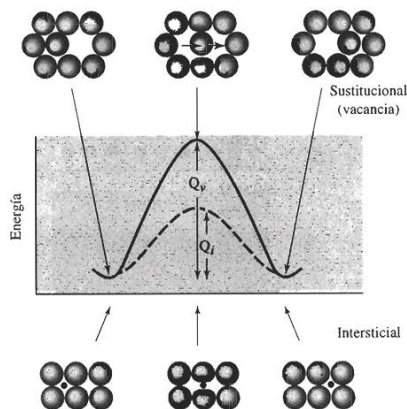


Figura 10.28 Energía de activación para una difusión vacante e intersticial (Según Askeland, D. "Ciencia e Ingeniería de los Materiales". International Thomson Editores. 1999. pág. 109)

La capacidad de los átomos y de las imperfecciones para difundirse aumenta conforme aumenta la temperatura, o los átomos aumentan su energía térmica. La razón de este movimiento está relacionada con la temperatura o energía térmica, mediante la ecuación de Arrhenius.

$$\text{Razón de movimiento} = c_0 e^{-Q/RT}$$

Donde c_0 es una constante, R es la constante de los gases ($1.987 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol K}} \right]$), T es la temperatura absoluta y Q (cal/mol) la energía de activación requerida para que una imperfección se mueva

El coeficiente de difusión está relacionado con la temperatura a través de una ecuación de Arrhenius:

$$D = D_0 e^{-Q/RT}$$

D_0 es una constante para un sistema de difusión dado.

Cuando se incrementa la temperatura de un material, también se incrementa el coeficiente de difusión y el flujo de átomos. A temperaturas más altas, la energía térmica suministrada a los átomos en difusión permite que estos venzan la barrera de energía de activación y se muevan con gran facilidad a nuevos sitios de red. A bajas temperaturas, aproximadamente $0.4 T_m$ del material, la difusión es muy baja y puede no ser significativa. Por esta razón, el tratamiento térmico de metales y el procesamiento de cerámicos se efectúa a altas temperaturas., así los átomos se mueven rápidamente para completar reacciones o para llegar a un estado de equilibrio.

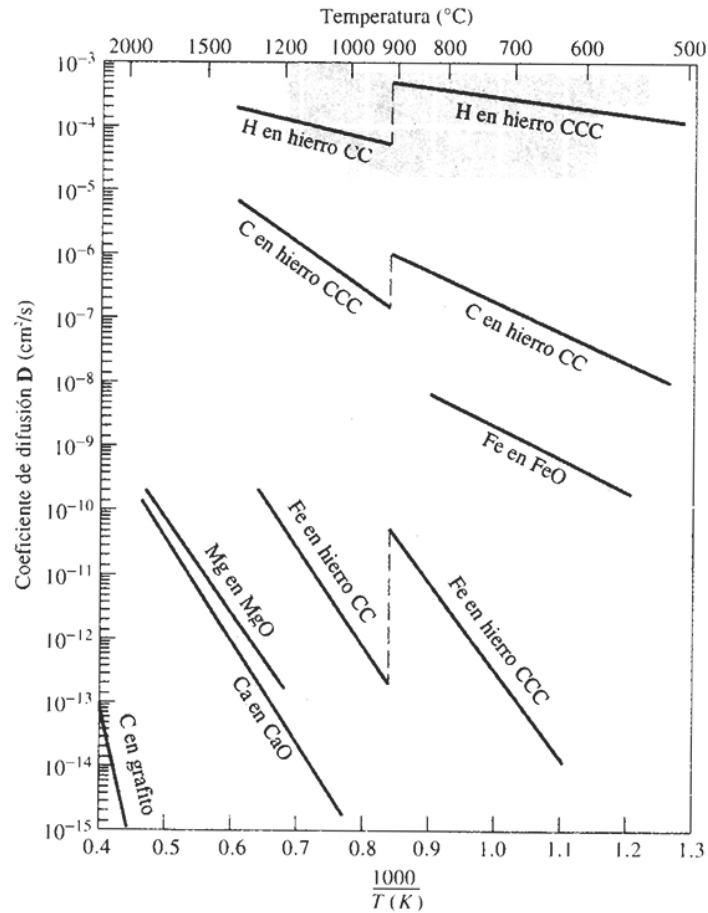


Figura 10.29 Coeficiente de difusión D de algunos metales y cerámicos (una pendiente mayor significa una energía de activación elevada (Según Askeland, D." Ciencia e Ingeniería de los Materiales". International Thomson

DIFUSIÓN EN ESTADO ESTACIONARIO

Desde el punto de vista macroscópico, la difusión es un proceso que depende del tiempo: la cantidad de un elemento transportado dentro de otro es una función del tiempo. Muchas veces es necesario conocer a qué velocidad ocurre la difusión, o la velocidad de transferencia de masa. Normalmente esta velocidad se expresa cómo un flujo de difusión (J), definido como la masa (o número de átomos) M que difunden perpendicularmente a través de la unidad de área de un sólido por unidad de tiempo. La expresión matemática se puede representar por:

$$J = \frac{M}{At}$$

Donde A es el área de la cual ocurre la difusión y t el tiempo que dura la difusión. El flujo de difusión (J) se expresa en kilogramos o átomos por metro cuadrado por segundo $\left[\frac{Kg}{m^2s}\right]$ o $\left[\frac{atomos}{m^2s}\right]$.

La condición para que exista estado estacionario es que el flujo de difusión no cambie con el tiempo. La expresión matemática de la difusión en estado estacionario en una dirección (x) es relativamente sencilla. El flujo es proporcional al gradiente de concentración:

$$J = -D \frac{dC}{dx}$$

$$\text{donde } \rightarrow \text{ gradiente de concentraciòn} = \frac{dC}{dx} = \frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_A - C_B}{x_A - x_B}$$

$C \rightarrow$ concentracion de sustancias difusivas

$x \rightarrow$ direccion

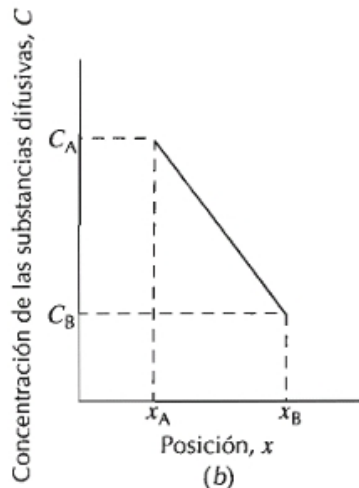


Figura 10.30 Perfil lineal de concentración de las sustancias difusivas (El gradiente de concentración muestra la forma en que la composición del material varía con la distancia. El gradiente puede crearse al poner en contacto dos materiales de composición distinta) (Según Callister, W. "Ciencia e Ingeniería de los Materiales". Reverté, S.A. 2007. pág. 100)

La constante de proporcionalidad D se denomina coeficiente de difusión y se expresa en metros cuadrados por segundo. El signo negativo de esta expresión indica que la dirección de difusión es contraria al gradiente de concentración: va desde elevada concentración a baja concentración. La ecuación también es llamada primera ley de Fick

A veces se utiliza el término fuerza impulsora para denominar a aquello que obliga a realizar una reacción. En las reacciones de difusión existen varias de este tipo, pero si la reacción transcurre cuando el flujo es proporcional al gradiente de concentración, el gradiente será la fuerza impulsora.

DIFUSIÓN EN ESTADO NO ESTACIONARIO

La mayoría de las situaciones prácticas de difusión son en estado no estacionario. En una zona determinada del sólido, el flujo de difusión y el gradiente de difusión varían con el tiempo, generando acumulación o agotamiento de las sustancias que difunden. En condiciones no estacionarias se recomienda utilizar la siguiente ecuación en derivadas parciales:

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

Dicha ecuación también es llamada segunda ley de Fick, si el coeficiente de difusión es independiente de la composición entonces

$$\frac{\delta C}{\delta t} = \left(D \frac{\delta^2}{\delta x^2} \right) C$$

Una solución a esta ecuación es:

$$\frac{C_s - C_x}{C_s - C_0} = \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

donde C_s es la concentración constante de los átomos a difundir en la superficie del material, C_0 es la concentración inicial en el material de los átomos a difundir y C_x es la concentración del átomo en difusión en una posición x por debajo de la superficie después de un tiempo t . A la función *erf* se le conoce como función de error.

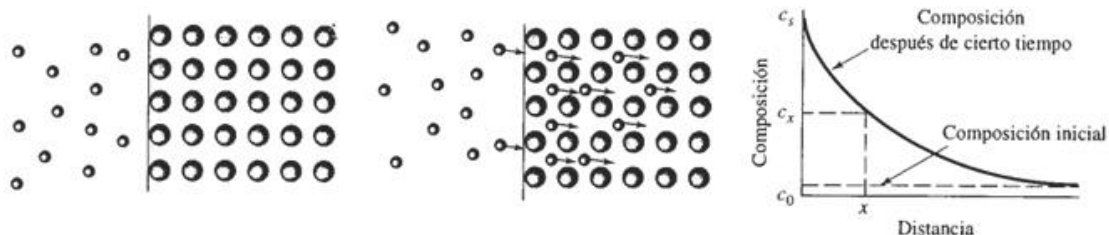


Figura 10.31 Difusión de átomos en la superficie de un material (Según Askeland, D." Ciencia e Ingeniería de los Materiales". International Thomson Editores. 1999. pág. 119)

La segunda ley de Fick nos permite calcular la concentración de una de las especies de difusión cerca de la superficie del material en función del tiempo y la distancia, siempre y cuando D , C_0 y C_s se mantienen sin modificación. También puede ayudarnos a diseñar una diversidad de técnicas de procesamiento de materiales.

OTROS TIPOS DE DIFUSIÓN

- Difusión volumétrica. Los átomos se mueven a través del cristal de un sitio de red, o de un sitio intersticial a otro. Debido a la presencia de los átomos adyacentes la energía de activación es grande y la velocidad de difusión relativamente lenta
- Difusión en los bordes de grano. En estos la compactación atómica no es buena. Debido a que los átomos pueden pasar con mayor facilidad a través del borde de grano mal organizado, la energía de activación es baja.
- Difusión en superficies. Es aún más fácil porque en las superficies existen incluso menos restricciones para los átomos a difundir.

Estos tipos de difusión a veces se denominan difusión "en corto circuito" ya que ocurre a una velocidad mucho mayor que la difusión a través del volumen. Sin embargo, en la mayoría de las situaciones, la contribución de la difusión en cortocircuito es insignificante comparada con el flujo total de difusión porque el área de la sección a cruzar es extraordinariamente pequeña.

DIFUSIÓN Y TRATAMIENTOS DE LOS MATERIALES

Algunas propiedades de los materiales experimentan alteraciones y mejoras como consecuencia de los procesos y transformaciones que implican difusión atómica. Para realizar estos tratamientos en un tiempo razonable ordinariamente se trabaja a elevada temperatura, a fin de que la velocidad de difusión sea relativamente rápida. Estos procedimientos a elevada temperatura se denominan tratamientos térmicos y se aplican en las últimas etapas de la producción de la mayoría de los metales, cerámicos y polímeros. Por ejemplo, la resistencia de algunos aceros se consigue mediante un tratamiento térmico idóneo.

Referencias:

- Askeland, D. (1999). Ciencia e Ingeniería de los Materiales. México: International Thomson Editores.
- Ashby, M., & Jones, D. (2012). Engineering Materials 1: An Introduction to Properties, Applications, and Design . Oxford : Elsevier.
- Callister, W. (2007). Ciencia e Ingeniería de los Materiales. Universidad de Utah: Reverté, S.A.
- Donald, R. A., Pradeep, P. P., & Wendelin, J. W. (2003). The science and engineering of materials. John Wiley, New York.
- Newell, J. (2010). Ciencia de materiales-aplicaciones en ingeniería. Alfaomega Grupo Editor.
- Shackelford, J. F. (2016). Introducción a la ciencia de materiales para ingenieros (6.a ed.). PRENTICE HALL/PEARSON.
- Smith, W. F., Hashemi, J., Cázares, G. N., & González-Caver, P. A. (2006). Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales (pp. 1032-1032). México, DF: McGraw-Hill.