

TEMA 3

IMPERFECCIONES CRISTALINAS

1. INTRODUCCIÓN

Se dice que los cristales se caracterizan porque sus átomos están situados en posiciones fijas, pero esto no es completamente cierto, ya que los átomos se mueven dentro de unos límites, de una posición a otra.

Son muy pocas las veces en que los cristales son perfectos. Estos contienen varios tipos de defectos e imperfecciones que afectan a la mayoría de las propiedades tanto físicas como mecánicas, eléctricas, electrónicas, etc. Por otra parte, estos defectos tienen influencia sobre el comportamiento de los materiales desde el punto de vista de ingeniería, tales como: velocidad de difusión, conductividad en semiconductores, corrosión o comportamiento mecánico entre otros.

Normalmente, el cristal no está compuesto por átomos idénticos situados en posiciones análogas sobre una red tridimensional que se repite regularmente, como se ha supuesto en el tema anterior, sino que contiene imperfecciones o defectos que alteran la estructura de la red espacial. Esta separación de la perfección es discreta y finita, pudiéndose considerar la red como una superposición de imperfecciones sobre una estructura cristalina perfecta. Se considera como imperfección cualquier desviación del modelo ideal de esferas rígidas que se ha considerado al estudiar las agrupaciones de los sólidos.

Al ser un concepto geométrico vamos a tratar separadamente cada uno de los tipos de imperfecciones. Según su geometría y forma se clasifican en: *Puntuales, Lineales, Superficiales y de Volumen*.

Los *defectos puntuales* están localizados en posiciones atómicas de la red, las vacantes, impurezas, la falta o exceso de electrones, son defectos de éste tipo.

Defectos lineales son aquellos que se extienden a lo largo de una línea del cristal, esta línea no es necesariamente recta puede ser curva, cerrada o incluso en forma de lazo. Aunque hay distintos tipos, se las conoce en general como dislocaciones.

Los *defectos bidimensionales o de superficie*, son los formados en el proceso de formación del cristal por errores de apilamiento de los planos (stacking fault), por agrupación de defectos lineales, o sirven de límite entre zonas ordenadas del cristal, siendo la región en la que se interrumpe el orden del mismo (bordes de grano).

Defectos de volumen son defectos a gran escala de tipo macroscópico y representan una inhomogeneidad en la masa del sólido. Grietas, poros, inclusiones etc. son defectos de éste tipo. Estos, debido a que se forman principalmente en el proceso de solidificación y ser macroscópicos se estudiarán al hablar de la solidificación.

En los sólidos amorfos se pueden también considerar imperfecciones en sus estructuras, sin embargo en estos materiales al tener un orden de corto alcance la consideración de los defectos es distinto a los sólidos cristalinos.

A efectos de comparación el tamaño de los distintos defectos puede variar desde 10^{-8} cm para los defectos puntuales, hasta varios cm para defectos superficiales, influyendo cada uno de ellos de forma muy importante en muchas propiedades de los sólidos. El comportamiento eléctrico de los semiconductores está controlado por las imperfecciones cristalinas. La conductividad del silicio se puede incrementar en varios miles de veces, añadiéndole pequeñas cantidades (0,01%) de arsénico, cada átomo de arsénico en este caso se ha convertido en un defecto puntual de la red del silicio. La existencia de estos defectos que alteran considerablemente la conductividad eléctrica de algunos materiales es la base de las aplicaciones de los semiconductores.

La presencia de los defectos de tipo lineal (dislocaciones) proporcionan un mecanismo que permite la deformación de los metales con gran facilidad permitiéndoles el cambio de forma permanente (plasticidad). También disminuyen drásticamente la resistencia mecánica de los sólidos cristalinos. Las dislocaciones, como se ve, juegan un papel importante en el comportamiento mecánico de los materiales.

La capacidad de los materiales ferromagnéticos (hierro, níquel, cobalto) para magnetizarse y desmagnetizarse, depende en gran parte de la existencia de imperfecciones superficiales conocidas como paredes de Bloch. Estas son los límites entre dos regiones del cristal con

diferente estado magnético.

Finalmente, la existencia de grietas inducen gran fragilidad en los materiales, disminuyendo bruscamente su resistencia pudiendo romper con tensiones aplicadas muy pequeñas.

2. IMPERFECCIONES PUNTUALES

Es una interrupción muy localizada en la regularidad de la red. Los defectos son de dimensiones atómicas y en general son debidos a: La ausencia de un átomo en la matriz, *vacancia*, a la presencia de *impureza* (átomos de distinta naturaleza que los que forman el cristal), o a la colocación incorrecta de un átomo en la red cristalina, *intersticio*. Figura 1.

Los procesos que originan este tipo de defecto suelen ser muy variados, y entre ellos podemos citar:

- 1.- La temperatura, el aumento de esta aumenta la amplitud de vibración de los átomos, permitiéndoles emigrar y cambiar sus posiciones en la red, produciendo defectos puntuales.
- 2.- Enfriamiento rápido, manteniendo los defectos existentes a temperaturas superiores.
- 3.- Procesos de deformación plástica, los movimientos relativos de planos cristalinos generan gran cantidad de defectos tanto puntuales como de otros ordenes.
- 4.- La irradiación con partículas de alta energía, produce desplazamientos puntuales de átomos y con ellos la creación de éste tipo de defectos

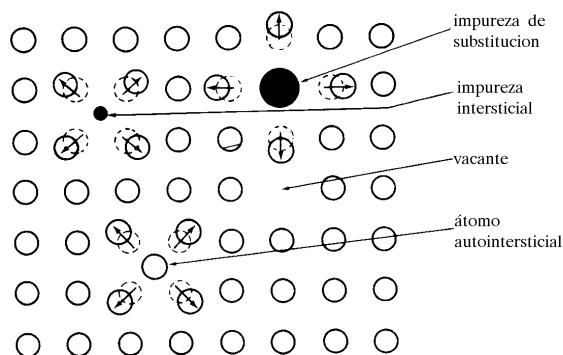


Figura 1

Cuando un átomo extraño ocupa una posición correspondiente a un átomo de la matriz se denomina átomo de *impureza substitucional*, y cualquier otro átomo extraño situado en un intersticio entre los de la red se llama átomo de *impureza intersticial*. La posición que tiende a ocupar en el hueco es función del tamaño atómico relativo de la impureza, pequeños átomos tienden a ser impurezas de inserción, mientras que grandes átomos son generalmente impure-

zas de substitución.

Los átomos en posiciones *intersticiales* suelen ser mayores que el hueco, y tienden a empujar a mayor distancia a los átomos vecinos produciendo una distorsión de los planos reticulares. Los intersticios pueden producirse por la severa distorsión local que se presenta durante la deformación plástica, así como, por irradiación etc.

Figura 2

Las *vacantes* son defectos puntuales de la red cristalina y consisten en la ausencia de átomos en algunos lugares normalmente ocupados. Si un átomo de la propia red cristalina ocupa una posición intersticial el defecto se conoce autointersticial Fig. 2.

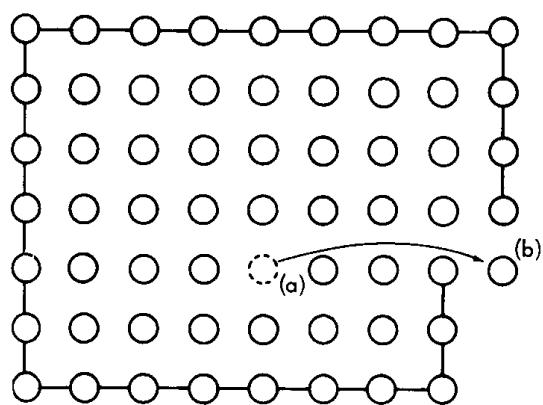
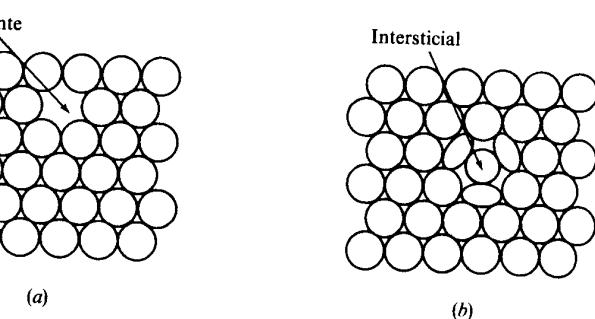


Figura 3



(a) Vacante
(b) Intersticial

Una vacante se puede crear por desplazamientos de átomos internos a la superficie como vemos en la figura 3, o por irradiación. Posteriormente otros átomos pueden ir saltando al hueco dejado libre, permitiendo un movimiento fácil de las vacantes. La existencia de estos defectos en los sólidos son importantes, pues favorecen y controlan el movimiento de soluto dentro de una estructura cristalina.

En los cristales iónicos, la necesidad de mantener una neutralidad de carga eléctrica implica que la formación de una vacante de un signo este asociada con otra vacante de signo contrario, o con un intersticio del mismo signo. Este tipo de defectos se conocen como defecto de Schottky (pareja de vacantes) o de Frenkel (vacante-intersticio) fig. 4a. La existencia de autointersticios en los cristales iónicos es muy superior a los existentes en los metales puros, esto es debido a la existencia de grandes huecos disponibles que permiten la fácil introducción de los iones. La geometría espacial de las estructuras iónicas está condicionada tanto a las cargas como al tamaño de los iones, quedando muchas veces posiciones o huecos vacíos.

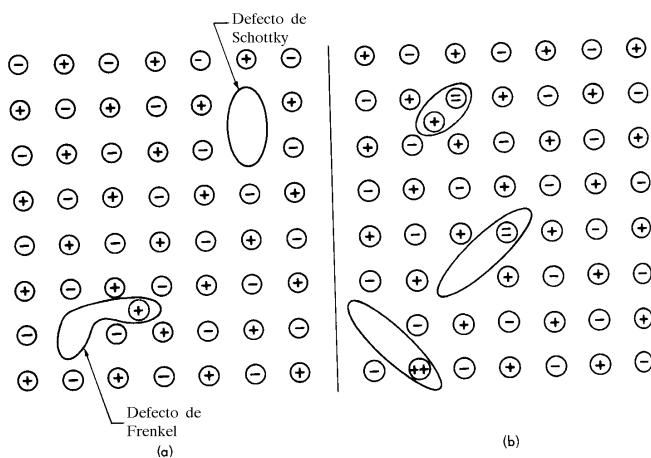


Figura 4

Los átomos extraños intersticiales condicionan según la carga los defectos de la red. En un cristal con iones monovalentes la existencia de impurezas bivalentes necesitará estar acompañada de más vacantes o autointersticios para mantener la neutralidad eléctrica, fig. 4b.

En cristales covalentes las impurezas de substitución, cuando son de distinto grupo de la tabla periódica que los átomos de la matriz, inducen la introducción de un electrón o hueco electrónico de más. La substitución de un átomo del grupo V en un cristal de silicio produce la aparición de un electrón muy poco enlazado. De los cinco electrones de la capa exterior del átomo de impureza, cuatro forman enlaces covalentes con los cuatro átomos de silicio adyacentes, quedando el quinto sin implicar en ningún enlace covalente, teniendo por tanto una movilidad similar a los electrones libres en los metales. La adición por tanto de pequeñas cantidades de impurezas al silicio aumentan notablemente la conductividad eléctrica del mismo. De una forma similar, las impurezas del grupo III en matrices del grupo IV suponen dejar sin completar un enlace de un átomo de la matriz. Esta falta de enlace o hueco electróni-

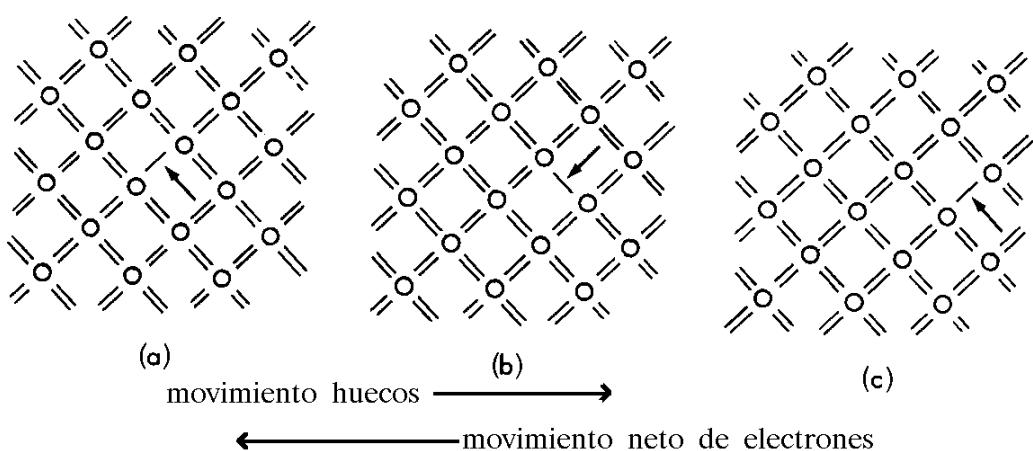


Figura 5

co permite el movimiento de algún enlace próximo para formar el que estaba incompleto fig. 5, permitiendo por tanto la movilidad electrónica y como consecuencia la conductividad eléctrica, al permitir un movimiento neto de carga en presencia de un campo eléctrico. Vemos por tanto, que los defectos de tipo puntual en algunos cristales covalentes controlan la conductividad eléctrica en los mismos y son la base de los semiconductores.

Los defectos puntuales en sólidos amorfos son considerados por separado en estructuras de cadenas de tipo polimérico y en estructuras de red. En estos últimos consideramos el caso del SiO_2 en el que existe un agrupamiento aleatorio de tetraedros de sílice. En estado puro cada átomo de silicio está enlazado covalentemente con cuatro átomos de oxígeno, y cada oxígeno con dos de silicio, es decir el oxígeno sirve como puente entre dos silicios. Las imperfecciones surgen cuando se añaden impurezas en la red tridimensional de la sílice. Añadiendo por ejemplo NaO_2 , los iones Na^+ pueden acomodarse en los huecos de la estructura fig. 6, mientras que el exceso de oxígeno va a causar la rotura de algún puente $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$, tanto más cuanto mayor sea el exceso del mismo, fig. 6. En el caso en que la relación O/Si sea cuatro se formaría una estructura de tipo cristalino con iones discretos SiO_4^{4-} , un ion Si en el centro de un tetraedro con átomos de oxígeno en los vértices. De esta manera desaparecen enlaces covalentes fuertes y la temperatura de fusión disminuye. Estos elementos son denominados modificadores y al ser añadidos a los vidrios permiten su fabricación a más bajas temperaturas.

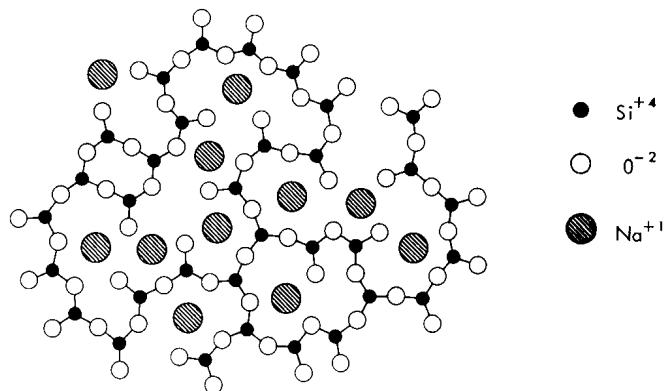


Figura 6

En los materiales poliméricos se pueden considerar como defectos puntuales las variaciones en la linealidad de las cadenas. En este contexto un defecto muy común es la ramificación de los polímeros lineales, fig. 7, esta ramificación condiciona el comportamiento mecánico, al dificultar el deslizamiento de las moléculas de unas sobre otras.

Hemos visto como el comportamiento de los sólidos está regulado por la existencia de defectos en la estructura, el tipo de unión y de defecto dan lugar a veces a comportamientos útiles desde el punto de vista de ingeniería.

La cantidad de defectos por número de átomos totales a temperatura ambiente es pequeña, del orden de uno cada 10^8 átomos,

pero estos se incrementan rápidamente con la temperatura. La cantidad de defectos en equilibrio en los cristales se puede calcular a partir de consideraciones energéticas. La energía libre de un cristal será igual a la energía libre del cristal perfecto ΔG_o más el incremento producido por la creación de n defectos nE_d (donde E_d es la energía asociada a la formación de un defecto), menos $T\Delta S$, estando T dado en grados Kelvin.

$$\Delta G = \Delta G_o + n E_d - T\Delta S \quad (1)$$

El término de entropía función del desorden del sistema, favorece la estabilidad del mismo en cuanto contribuye a la disminución de la energía libre. Este término está determinado por las posibles formas diferentes en que pueden ser agrupadas las distintas imperfecciones del cristal, siendo:

$$\Delta S = k \ln W \quad (2)$$

donde k es la constante de Boltzmann ($k = 1.38 \cdot 10^{-23} J/K = 8.3 \text{ Kcal/mol } ^\circ K$) y W es el número de formas distintas en que se pueden agrupar las imperfecciones. En un cristal que contiene N átomos o posiciones, un defecto puntual tiene N posibles lugares diferentes donde formarse. Si hay dos defectos, el primero tiene N posibles lugares donde acomodarse, quedando $N-1$ posiciones para el segundo. Luego el número total de distintas posibilidades de agrupamiento será $N(N-1)/2$. La división por dos proviene del hecho que la colocación del defecto 1 en el lugar i y el defecto dos en el lugar j, es la misma situación que la colocación del defecto 1 en el lugar j y el dos en el i. Siguiendo este razonamiento, se puede demostrar que cuando existen n defectos el número de posibles situaciones distintas será:

$$W = \frac{N(N-1)(N-2)\dots(N-n+1)}{n!} \quad (3)$$

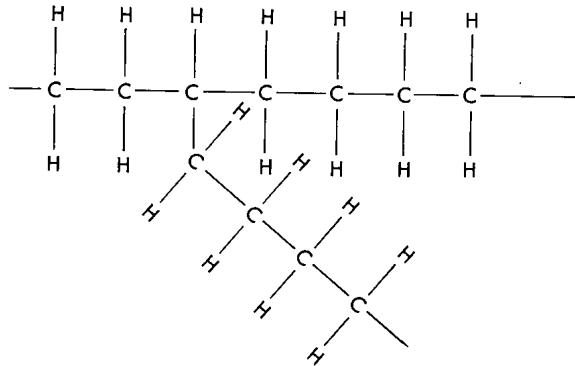


Figura 7

multiplicando numerador y denominador por $(N-n)!$, queda $W=N!/(n!(N-n)!)$, substituyendo esto en la ecuación (2) y operando la ecuación (1) queda:

$$\Delta G = \Delta G_o + n E_d - kT \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (4)$$

Esta expresión representa la energía libre del sistema en función del número de defectos de un cierto tipo. El equilibrio se encontrará cuando este valor sea mínimo, matemáticamente cuando $\partial G/\partial n = 0$. Integrando la ecuación (4) se obtiene para el equilibrio a una temperatura la siguiente expresión:

$$\frac{n_i}{N} = \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right) \quad (5)$$

La ecuación (5) permite, conociendo la energía de activación E_d para un defecto, determinar el número de estos en equilibrio. E_d es distinto para la formación de una vacante, que para un intersticio etc.

Nótese que la energía libre del sistema disminuye con la existencia de defectos al aumentar el término $T\Delta S$ ecuación (1), lógicamente también se incrementa nE_d , existiendo por tanto un equilibrio para cada temperatura donde se alcanza un mínimo para ΔG .

3. IMPERFECCIONES LINEALES

Al deformarse un metal plásticamente, se comprueba que el esfuerzo realizado es muy inferior al límite elástico teórico, esto nos lleva a la conclusión de que el deslizamiento no se produce en los átomos por un simple movimiento de una capa de átomos con respecto a otra; si no que debe existir algún tipo de debilidad mecánica en los cristales reales que sea la causa de que el deslizamiento se produzca aún con la aplicación de pequeños esfuerzos.

Esta diferencia entre las fuerzas de deformación aparente y real, se produce por el hecho de que los cristales reales no son perfectos, sino que contienen defectos de línea, dislocaciones, que implican planos extras en la red y facilitan el desplazamiento, produciendo una distorsión en la red centrada alrededor de una línea. Estas se pueden formar de muchas maneras, en el proceso de solidificación, por deformación permanente, por acumulación de vacantes o intersticios, etc., y están presentes siempre en los cristales reales.

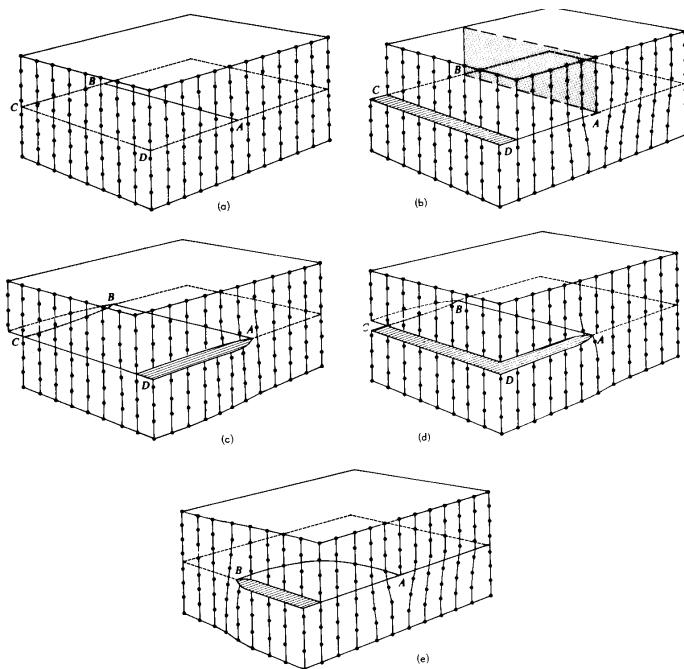


Figura 8

Si el desplazamiento es un giro, se obtiene una dislocación helicoidal, fig. 8c y 8d, por último, si el desplazamiento es formando un ángulo con la línea AB se obtiene una dislocación mixta, mezcla una de borde y una helicoidal, fig. 8e. Se observa según lo anterior, que las dislocaciones son alteraciones de la red cristalina en la ordenación de los planos cristalográficos, localizándose la interfase del defecto a lo largo de una línea no necesariamente recta, a lo largo de la cual, los átomos no guardan las posiciones y distancias que les corresponderían en un cristal perfecto, con los átomos vecinos. A continuación se van a analizar cada tipo de dislocación con algo más de detalle, y los efectos que producen en el comportamiento mecánico de los sólidos.

En general existen tres tipos de dislocaciones. Consideremos un cristal perfecto Fig. 8a, y permitámosle que ocurra un deslizamiento a lo largo del plano ABCD, este plano es llamado plano de deslizamiento. Supongamos que se ha cortado el cristal por este plano y que se fuerza a desplazar la parte por encima del corte una cantidad igual a un espaciado reticular. Este desplazamiento se realiza paralelo al plano ABCD y al borde del cristal, Fig. 8b. El resultado es lo que se conoce como una dislocación de borde.

La dislocación de borde se puede entender como la existencia de un semiplano extra en una parte del cristal. En la figura 9 se muestra con más detalle este tipo de defecto. Como se puede observar, alrededor del extremo del plano se producen una zona de tensiones de tracción y compresión, según se esté por debajo o por encima del plano de deslizamiento. Esto es debido a que los átomos están a una distancia menor o mayor que la del equilibrio, mientras que a los lados de la dislocación la red se mantiene esencialmente perfecta. Por convenio cuando el semiplano extra queda por encima, se denomina dislocación positiva y se representa por ζ , cuando el plano está por debajo se dice que es negativa y se representa por τ .

Las dislocaciones helicoidales no están asociadas a ningún semiplano extra y son producidas por un movimiento cortante de las zonas de un cristal que fueron separadas por un corte. La zona de distorsión se produce alrededor de la línea de dislocación extendiéndose a

varias filas de átomos. Esta deformación produce una superficie espiral, formada por los planos atómicos alrededor de la línea de dislocación y a través del cristal, cuyo eje es la propia línea de dislocación, fig. 10. Las dislocaciones helicoidales pueden ser de mano derecha o de mano izquierda según sea el sentido de giro de la espiral.

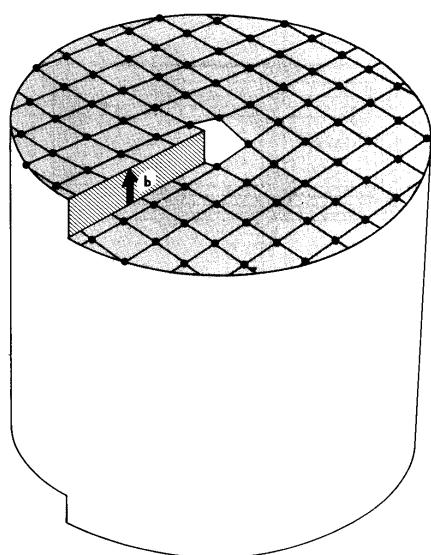


Figura 10

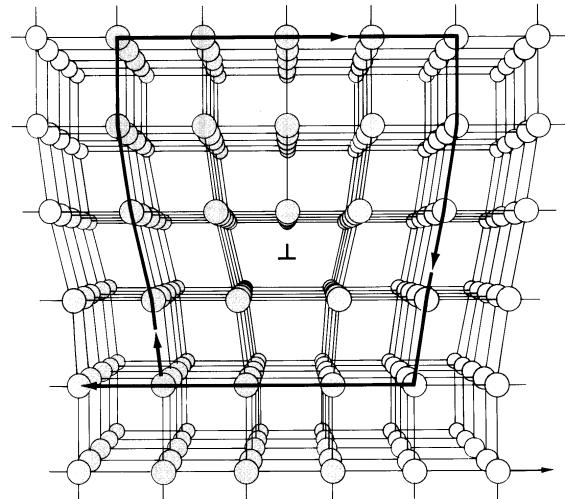


Figura 9

La agrupación de átomos alrededor de una dislocación mixta se muestra en la figura 11. Cuando el desplazamiento de los átomos es casi paralela a la línea de dislocación el defecto es predominantemente helicoidal, por el contrario cuando el desplazamiento es perpendicular la dislocación es predominantemente de borde. En

las zonas intermedias hay mezcla de ambas. La cantidad de cada tipo depende del ángulo entre la línea de dislocación y la dirección del desplazamiento.

Las dislocaciones son de gran importancia en el comportamiento de los sólidos y son las responsables de la deformación de los materiales cristalinos. Una tensión cortante aplicada a ambos lados de la dislocación permite el movimiento de la misma con gran facilidad, este movimiento se produce sobre el plano de deslizamiento. El resultado de la deformación es un movimiento relativo de las partes del cristal a ambos lados del plano de deslizamiento. Cuando la dislocación ha pasado a través del cristal se produce un cambio de forma permanente (un escalón), habiéndose desplazado un espaciado atómico una parte con respecto a la otra, fig. 12. Esto ocurre para cualquier tipo de dislocación.

El movimiento de las dislocaciones es relativamente fácil y se produce por pequeños reajustes de los enlaces alrededor del defecto. Si no existiera la dislocación, para producir una deformación plástica en el cristal como la de la figura 12, habría sido necesario que se hubiera deslizado una parte del cristal sobre la otra, esto implica el tener que vencer al mismo tiempo

las fuerzas de todos los enlaces de los átomos del plano cristalográfico que se mueve, necesitando un gran esfuerzo para ello. La existencia de dislocaciones produce el mismo efecto con un esfuerzo considerablemente menor ($10^2 - 10^4$ veces) al producir el movimiento con pequeños reajustes de los enlaces alrededor del defecto. Esta propiedad de las dislocaciones tiene una gran importancia en la plasticidad y nos diferencia claramente las dislocaciones de cualquier otro tipo de defecto reticular, siendo las responsables en los metales de la gran facilidad de conformado mediante deformación plástica.

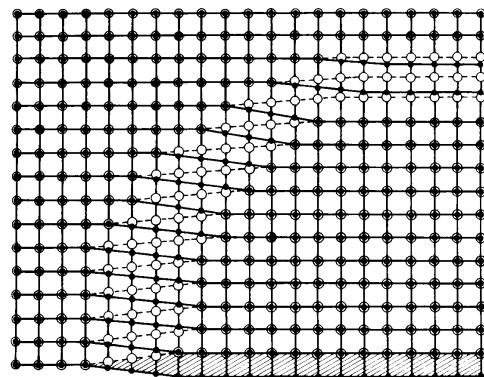


Figura 11

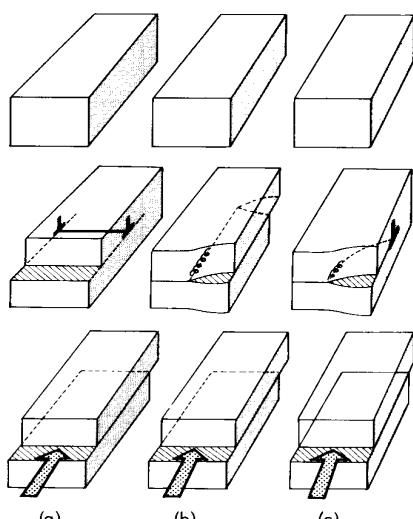


Figura 12

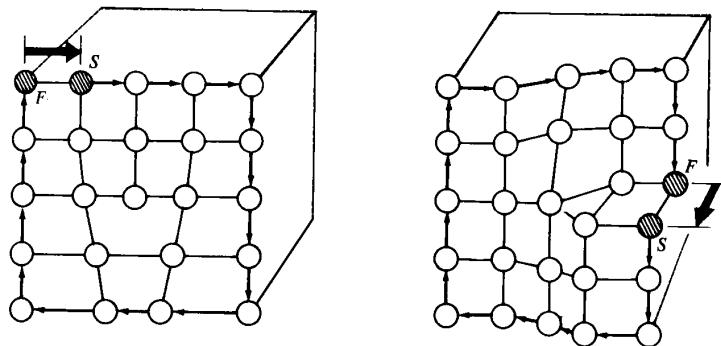


Figura 13

Para el estudio de las dislocaciones se utiliza el denominado vector de Burgers (**b**), fig. 13, que representa la dirección y cantidad del deslizamiento asociado a la misma. Para determinar este vector se utiliza el denominado circuito de Burgers, fig. 13, este consiste en marcar un circuito alrededor de una línea de dislocación, el circuito se realiza por traslación de átomo a átomo, desplazándose el mismo número de escalones en cada lado del circuito. Si no hubiera defecto el circuito cerraría. Al existir una dislocación el cierre no se produce y el vector de Burgers **b** será el vector que se necesita para cerrar el circuito.

Nótese que en una dislocación de borde **b** es perpendicular a la línea de dislocación, y paralelo al movimiento del defecto. En una dislocación helicoidal **b** es paralelo a la línea de deslizamiento y perpendicular a su movimiento.

La concentración de dislocaciones se mide como su longitud por unidad de volumen en m^{-2} , o por el número de líneas de dislocación que intersectan una unidad de superficie, la unidad de medi-

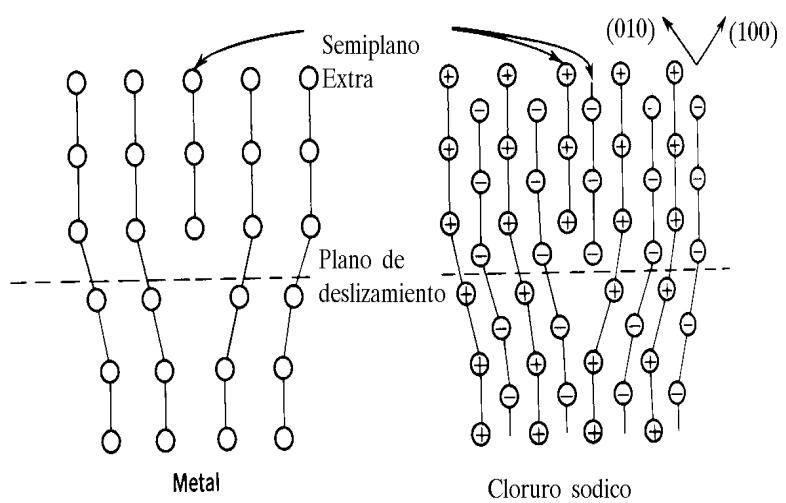


Figura 14

da sigue siendo m^2 . La densidad de dislocaciones depende mucho del proceso seguido por el material en su obtención y procesado, (tratamiento térmico, grado de deformación, etc.). En un cristal preparado con cuidado puede haber del orden de 10^2 líneas de dislocación por centímetro cuadrado, si se deforma plásticamente puede llegar a tener 10^{10} a 10^{11} dislocaciones/cm².

En los cristales iónicos las dislocaciones son más complejas que en los sistemas metálicos, pues hay que mantener la neutralidad de carga y la regularidad de apilamiento por problemas de atracciones y repulsiones electrostáticas, esto lleva a la necesidad de tener dos semiplanos extras asociados a cada dislocación. Fig. 14, su movimiento y comportamiento está influenciado por la existencia de iones de distinto signo en la estructura.

4. DEFECTOS SUPERFICIALES

Se deben a imperfecciones localizadas en dos dimensiones, debidas a las alteraciones en el apilamiento de los planos atómicos a través de un límite, tienen gran importancia en el comportamiento mecánico de materiales. La existencia de estos defectos aumenta la dificultad de movimiento de las dislocaciones, debido a las barreras que supone la presencia de dichos defectos. Los defectos bidimensionales más frecuentes que se suelen presentar son: a) Superficies libres, b) errores de apilamiento, c) Interfases entre cristales de una misma o distinta fase pero con diferente orientación cristalina en el agrupamiento de átomos, o/y con diferente composición química a través de la unión, son los llamados límites de grano, y c) las maclas.

Superficies libres:

Es evidente que los átomos de la superficie de un cristal no pueden estar sometidos a las mismas fuerzas que las del interior, ya que cada uno de estos va a recibir las acciones de todos los átomos que los están rodeando, mientras que los de la superficie reciben solo la energía de sus vecinos de un solo lado por lo tanto deben tener mayor contenido de energía que los del interior, Figura 15. El parámetro de la red de los átomos superficiales es ligeramente superior que el de los átomos del interior. Esta situación lleva asociada un aumento de energía, en forma de energía superficial del sólido. Este aumento está definido como incremento de energía en la creación de nuevas superficies, y depende de la orientación cristalográfica, los planos más compactos son los que tienen asociados más baja energía superficial. El aumento de energía sé produce debido a la rotura o falta de enlaces de un átomo en la superficie libre, con respecto a los que tendría en el interior. Cuanto más compacto sea el plano, menos enlaces se romperán y más serán los átomos vecinos a uno dado, y menor la diferencia de situación y la

variación de energía.

Una disminución energética se producirá si se completan algunos de los enlaces rotos. Por este motivo la adsorción de átomos o moléculas extrañas para completar algunos enlaces tiende a producirse, siendo casi imposible mantener atómicamente limpia las superficies. Como consecuencia las propiedades superficiales como: reactivación química, emisión electrónica, etc. varían grandemente según sean las impurezas adsorbidas.

Defectos de apilamiento:

Los defectos o fallos de apilamiento (*stacking fault*) son defectos producidos en una zona local del cristal donde se interrumpe la secuencia normal de ordenación de planos. Este defecto se produce en estructuras con apilamientos compactos en las que se pueden presentar secuencias del tipo ABCABC... en estos casos, se puede producir un error en la formación del cristal, por ejemplo una secuencia de apilamiento ABCABABC..., aparece un plano tipo A en vez de uno C, debido a este error en la secuencia de apilamiento, en el cristal aparece una pequeña región exagonal en vez de cubica centrada en las caras. Los *stacking fault* interfieren en los procesos de deformación del material.

Cada uno de estos defectos lleva asociado una energía por unidad de superficie, siendo generalmente mayor para las fallas extrínsecas que para las intrínsecas.

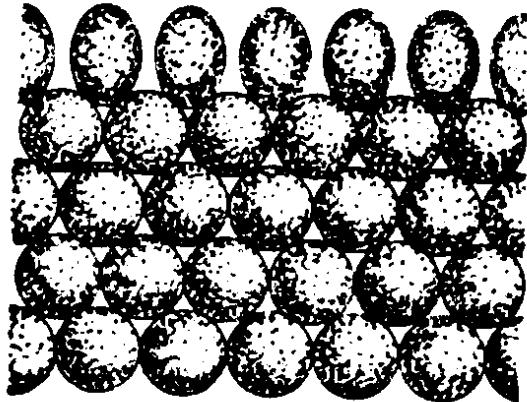


Figura 15

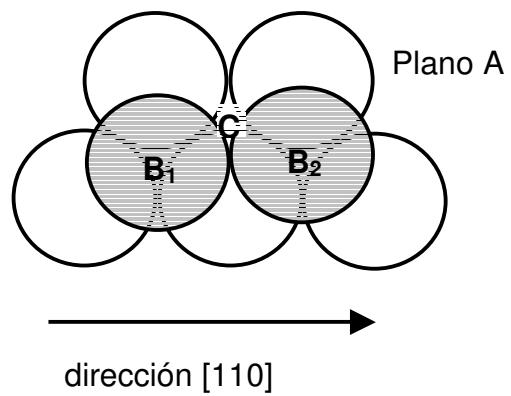


Figura 16

La existencia de estos defectos se ve favorecido por la formación de las denominadas *dislocaciones parciales*, son denominadas así porque su vector de Burgers no es un espacio interatómico. En los planos compactos el movimiento de una dislocación en una dirección de

deslizamiento se ve muy dificultado por el apilamiento de los átomos siendo más fácil el movimiento en zig-zag, descomponiéndose una dislocación completa en dos parciales. En una red ccc por ejemplo, figura 16, se puede observar que el movimiento de una dislocación en la dirección [110] para pasar un átomo desde la posición *B*₁ a *B*₂ está geométricamente muy dificultado dado que tendría que pasar sobre los átomos de la capa *A*, mientras que si el movimiento lo realiza primero a la posición *C* que está libre y desde aquí a *B*₂ el movimiento es físicamente más factible por pasar a través de los “valles” formados en el apilamiento de los planos. A estas dislocaciones se las denomina *dislocaciones de Shockley*. La energía de una dislocación es proporcional al cuadrado de su vector de Burgers, se puede demostrar fácilmente que el desdoblamiento de una dislocación en dos parciales conduce a un estado con un nivel energético inferior, lo que hace que se produzcan estas formando *defectos de apilamiento*. En la figura 17 se puede observar como una dislocación en una dirección <110> se desdobra moviéndose los átomos del plano tipo *C* a posiciones tipo *A*, produciendo un error de apilamiento de un espacio atómico de espesor,

Figura 17

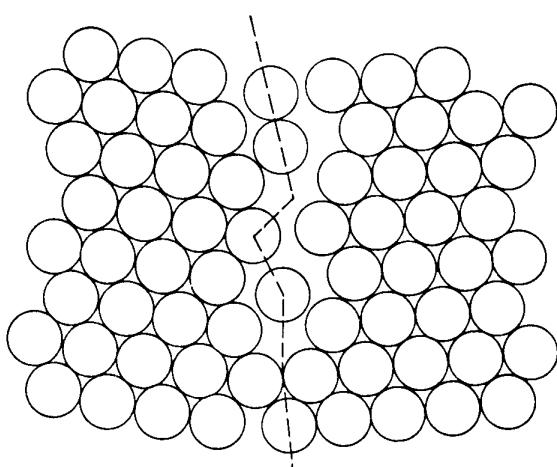
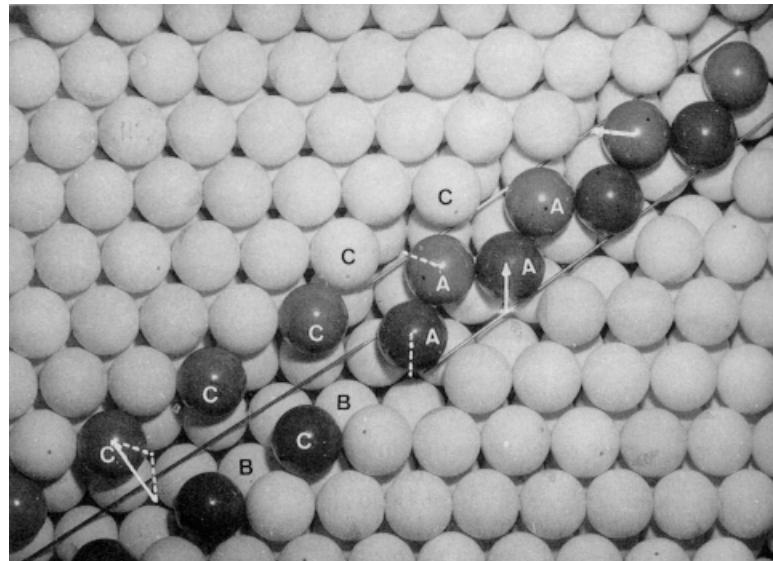


Figura 18

Límites de grano:

Los sólidos cristalinos en general están formados no por un único cristal, sino por una gran cantidad de pequeños cristales orientados al azar y unidos entre ellos por fuerzas de enlace. Esta situación se produce en el proceso de solidificación formándose los denominados materiales policristalinos. A

cada cristal individual se le denomina grano. Las superficies que separan cristales de diferente orientación dentro de un agregado policristalino son zonas de defectos en cuanto los átomos no guardan posiciones atómicas determinadas, sino que se acoplan al hueco existente para servir de puente de enlace entre granos adyacentes, son los denominados límites de grano. Como se puede apreciar en la figura 18 los átomos del límite entre dos granos (cristales) están orientados al azar, no pueden tener un acoplamiento perfecto en cuanto a átomos vecinos; por tanto, aparece una región de transición donde el empaquetamiento atómico es imperfecto, cuando esto ocurre los átomos están fuera de sus posiciones de equilibrio y por tanto tendrán mayor energía potencial que los del interior de los cristales que están en equilibrio.

Cuando la diferencia de orientación entre dos cristales adyacentes es pequeña, los límites entre ellos pueden ser considerados como una agrupación en cascada de dislocaciones de borde, fig. 19, o helicoidales si la diferencia de orientación es un pequeño giro entre dos superficies alrededor de un eje perpendicular a las mismas. A partir de este modelo se puede determinar el ángulo formado por los planos equivalentes mediante la expresión:

$$\theta = b / D \quad (6)$$

donde b es el vector de Burgers y D la distancia media entre dislocaciones. Esta expresión es válida para ángulos pequeños, alrededor de 10° , cuando el ángulo es mayor la distancia D se hace muy pequeña, perdiéndose la identidad de las dislocaciones.

En la zona límite, una región estrecha de pocos diámetros atómicos de espesor, los átomos están mal colocados no guardando las distancias de equilibrio y rompiendo por tanto la periodicidad de la red, estando en general a mayor distancia. Estas zonas de más alta energía hacen que sean fácilmente visibles al ser atacadas preferentemente en una preparación metalográfica. La observación al microscopio de los sólidos se realiza puliendo la superficie del material de manera que refleje la luz incidente. Posteriormente se ataca esta superficie con un ácido diluido, produciéndose un ataque diferenciado en las zonas de más energía (límites de grano) o distinta orientación cristalográfica o composición química etc., de esta forma se revela en la superficie una topografía, manifestada por distintas

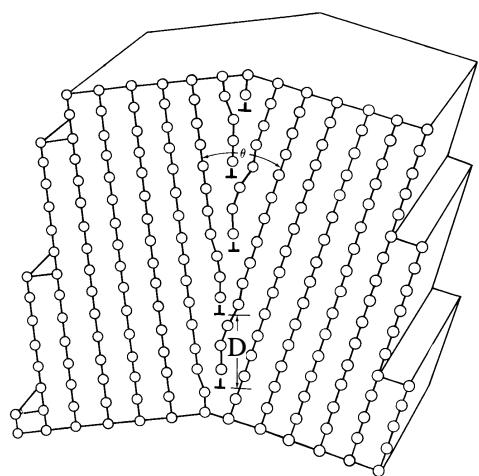


Figura 19

tonalidades que aparecen en la observación descubriendo la estructura granular del sólido, fig. 20. Los límites de grano también son zonas favorables de nucleación y crecimiento de precipitados, favoreciéndose la difusión y aumentando la resistencia mecánica. Como consecuencia de lo anteriormente expuesto, podemos decir que: en un medio corrosivo el ataque es más intenso a lo largo del límite de grano que en el interior, por tanto esto nos sirve para poner de manifiesto los granos. La fusión se inicia en los límites de grano a menor temperatura que en el cristal, los cambios de fase se inician en los límites de grano, las impurezas insolubles se van a acumular en los límites de los granos etc. La existencia de estos límites tienen una influencia muy acentuada en el comportamiento del cristal. A medida que los granos son más pequeños, más límites habrá, siendo por tanto el tamaño de los mismos decisivo en muchos comportamientos de los sólidos.

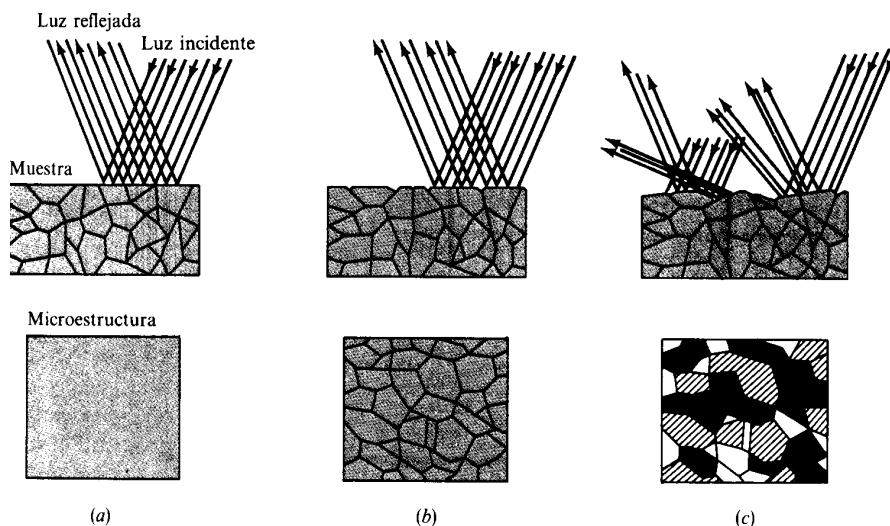


Figura 20

El tamaño medio de los cristales (granos) es importante en los metales, siendo de gran influencia en el comportamiento de los mismos. A medida que el tamaño disminuye, aumentan los límites existiendo más zonas de alta energía y más barreras a la deformación a la conducción eléctrica, térmica etc. Esta influencia está también condicionada por la temperatura.

Es importante el tener alguna norma a la que nos podamos referir, para poder comparar estos tamaños. El método más utilizado es el propuesto por ASTM (American Society for Testing and Materials), según la cual el índice de tamaño de grano "n" se mide por:

$$N = 2^{n-1}$$

donde N es el número de granos por pulgada cuadrada que existen sobre una muestra, observada ésta a 100 aumentos. Así, para un índice 1 habrá un grano en una pulgada cuadrada, y para un tamaño cuatro N=8. A medida que el índice "n" aumenta el tamaño del grano disminuye. En la tabla I se listan los valores de N que corresponderían en mm².

TABLA I

Indice del tamaño de grano	Número de granos	
	Por mm ² x 1	Por Pulgada cuadrada x 100
1	15,5	1,0
2	31,0	2,0
3	62,0	4,0
4	124,0	8,0
5	248,0	16,0
6	496,0	32,0
7	992,0	64,0
8	1980,0	128,0
9	3970,0	256,0
10	7940,0	512,0

La medición del tamaño de grano se hace tanto en superficie media como en diámetro, obteniéndose valores medios. La medición del índice ASTM, puede realizarse mediante plantillas que se superponen en el microscopio sobre la estructura que se está observando a 100 aumentos y por comparación determinar el tamaño de grano. También se puede determinar mediante medición a partir de una micrografía de la que se conocen los aumentos a los que esta realizada. En este caso se marca una superficie, ya sea rectangular o circular, sobre la micrografía y se cuentan el número de granos que están dentro de esta superficie. Hay que tener en cuenta que los granos que están completa-

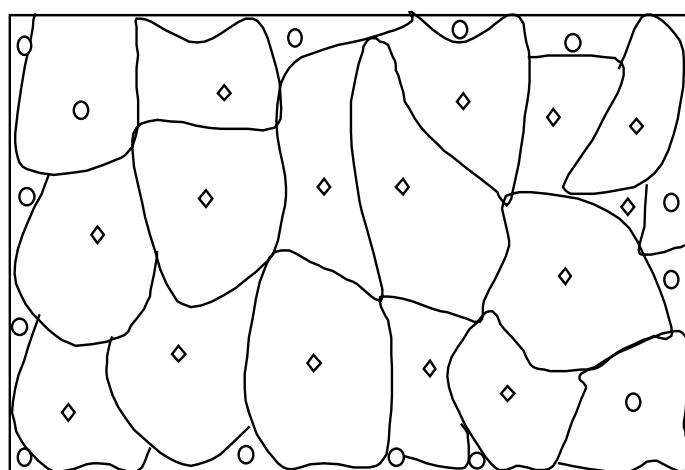


Figura 21

mente dentro de la zona marcada cuentan como uno y los que no se encuentran completamente dentro cuentan como medio. De esta forma el tamaño medio de un grano será: $T = \frac{S}{A^2 n}$,

donde T es el tamaño medio en las mismas unidades que esté S , A son los aumentos totales de la micrografía y n el número de granos contados en la zona marcada, figura 21. La medición del diámetro se hace de la misma manera solamente que en este caso se marcan diversas líneas sobre la micrografía y se cuentan cuantos granos hay en una longitud determinada.

Maclas

Otro tipo de defecto superficial son las maclas, formadas por el desplazamiento de átomos de sus posiciones de equilibrio formando planos de simetría en el cristal. Figura 22.

En el interior de los cristales la estructura es continua y aparece cambio de orientación solo en los bordes de grano, en cambio en las maclas cristalinas se aprecian cambios en dicha orientación y, sin embargo, son un monocristal por haberse producido el movimiento relativo de los planos de manera homogénea.

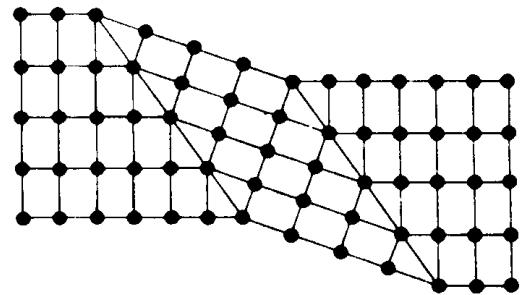


Figura 22

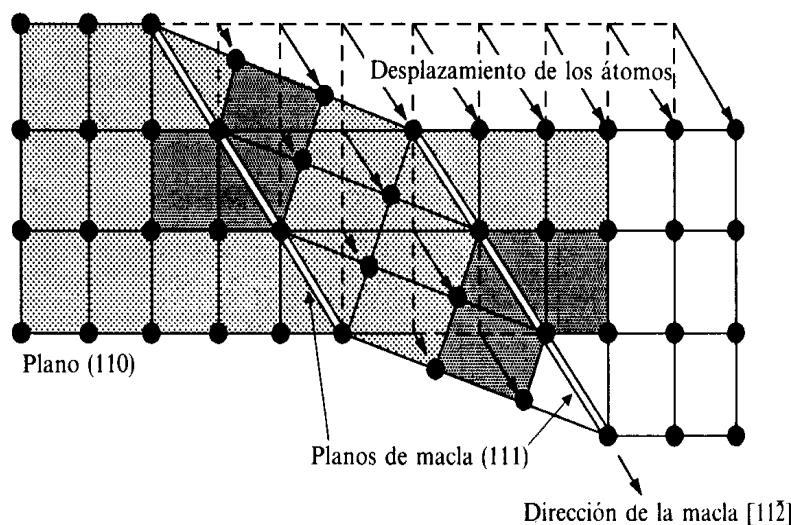


Figura 23

Como se puede apreciar en la figura los bloques adyacentes son simétricos con respecto al plano de maclado, y tienen los mismos ejes cristalográficos, pero cada retículo es la reproducción del otro en un espejo. Figura 23.

El maclaje es un movimiento de planos de átomos en la red, paralelo a un plano específico (de maclaje) de manera que la

red se divide en dos partes simétricas differentemente orientadas. La cantidad de movimiento de cada plano de átomos en la región maclada es proporcional a su distancia del plano de maclaje, de manera que se forma una imagen especular a través del plano de maclaje.

La formación de las maclas es debida a esfuerzos cortantes que pueden ser producidos por tratamiento térmico o procesos de deformación. Las maclas pueden interferir con los planos de deslizamiento produciendo un aumento de resistencia en el material. El aumento de resistencia se produce por el bloqueo de las dislocaciones siendo el efecto tanto mayor cuanto mayor sea la energía asociada al defecto. Las energías superficiales de los límites de grano son superiores a las de los errores de apilamiento y de las maclas, siendo por tanto su efecto reforzante superior a los otros defectos de tipo superficial.