

Estructura cristalina y defectos en sólidos

MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS - CIENCIA DE MATERIALES

Curso especial: 1 materia

Docentes: Marcos Sade, Miguel Prado

Carga horaria: 8 horas semanales

Período: agosto-diciembre

1. Estructura cristalina de sistemas sólidos

Introducción a la tabla periódica.

Clasificación de los sólidos. Tipos de enlace. Sólidos moleculares, iónicos, covalentes y metálicos. Energía de Madelung en sólidos iónicos. Energía cohesiva en sólidos con uniones tipo Van der Waals.

Redes de Bravais. Red + base.

Aspectos cristalográficos de los diversos materiales. Estructuras periódicas: ejemplos de sistemas metálicos, cerámicos, estructuras compactas, sitios intersticiales. Operaciones de simetría, celdas primitiva y convencional. Convenciones para identificar planos y direcciones en diversas estructuras.

Cristalografía de sólidos iónicos: reglas de Pauling. Estructuras tipo cloruro de sodio, cloruro de cesio, fluorita y antiferroita, zincblenda. Estructura del diamante y cristobalita.

Red recíproca. Relaciones entre red directa y recíproca. Ley de Bragg. Relación entre red recíproca y condiciones de difracción de Bragg.

2. Defectos en cristales

Introducción a los tipos de defectos en sólidos: puntuales, lineales, bidimensionales y tridimensionales.

Defectos puntuales en cristales iónicos (cerámicos). Defectos de Schottky y de Frenkel.

Notación de Kröger-Vink. Reacción química de formación de defectos. Defectos intrínsecos y extrínsecos. Equilibrios simultáneos. Diagramas de Brower.

3. Visión macroscópica de la difusión y ecuaciones de difusión

Análisis macroscópico de la difusión. Primera ley de Fick. Difusión en el estado no estacionario. Segunda ley de Fick. Solución para coeficientes de difusión constante. Casos típicos. Problema de la lámina delgada. Unión de 2 sólidos semi-infinitos. Solución con la función error. Aplicación a otros problemas con distintas condiciones de contorno. Solución de $c(x,t)$ como combinación de senos y cosenos. Problema de homogeneizado.

Distintos coeficientes de difusión (trazadores, autodifusión, intrínsecos, de interdifusión).
Análisis de Boltzman-Matano.

4. Visión microscópica de la difusión en sistemas metálicos y defectos puntuales

Visión atomística de la difusión. Primera ley de Fick. Coeficiente de difusión en términos de frecuencia de salto atómica. Mecanismos de difusión. Problema del caminante al azar.

Dependencia del coeficiente de difusión con la temperatura. Concentración de equilibrio de defectos puntuales en sistemas metálicos (vacancias, intersticiales). Concepto de complejo activado y su relación con frecuencias de salto atómico. Defectos compuestos (ejemplo: bivacancias). Efectos de la presión sobre la difusión. Barreras energéticas en presencia de fuerzas aplicadas. Caso particular de fuerzas pequeñas. Relación entre flujo de una especie y frecuencias de salto en presencia de fuerzas aplicadas.

Difusión en gradientes de concentración. Experimento de Kirkendall: visiones alternativas en términos de movimiento de la red y de flujo de vacancias. Coeficiente de interdifusión. Fuerza motriz del traslado difusivo. Difusión y su relación con el gradiente de potencial químico.

Movilidad atómica. Relación entre coeficiente de difusión y movilidad. Difusión ascendente. Fuerza efectiva en una solución real.

5. Difusión en estructuras cerámicas

Difusión en cristales iónicos. Relación entre el coeficiente de difusión y de trazadores y el coeficiente de autodifusión. Difusión de impurezas asociadas a vacancias. Difusión en cristales dopados con elementos de valencia diferente al de la matriz (ejemplo: NaCl dopado con Ca, MgO dopado con Al, ZrO₂ dopado con Ca, etc.).

Fuerza motriz de la difusión por mol y por partícula. Movilidad química. Relación de Nernst-Einstein. Movilidad absoluta. Gradiente del potencial electroquímico como fuerza motriz. Relación entre coeficiente de difusión y conductividad eléctrica. Movilidad eléctrica. Número de transferencia.

6. Teoría de elasticidad en sólidos cristalinos

Deformación de un sólido. Campo de desplazamientos. Tensor de deformaciones. Tensor de tensiones. Ley de Hooke generalizada. Cambio de volumen asociado a una deformación elástica. Tensor de constantes elásticas. Ecuaciones de equilibrio mecánico. Ejemplo de un sólido con estructura cúbica. Caso isotrópico. Constantes de Lamé. Energía elástica.

Deformación uniaxial. Deformación de corte o cizalladura.

7. Dislocaciones

Propiedades mecánicas de los sólidos. Mecanismos de deformación. Introducción al concepto de dislocación. Dislocaciones de hélice, de borde y mixtas. Lazos de dislocaciones. Movimiento de dislocaciones. Vector de Burgers. Convención de Weertman. Campo de deformaciones y de tensiones alrededor de una dislocación de hélice y de borde (caso isótropo). Energía de una dislocación. Fuerza sobre dislocaciones. Fuerza de Peach-Koehler. Interacción entre dislocaciones: de hélice paralelas, de hélice perpendiculares, de borde paralelas.

Deslizamiento de una dislocación. Arreglos de dislocaciones en equilibrio. Tensión mínima para mover una dislocación. Mecanismos de endurecimiento: por impurezas, por dislocaciones, por precipitados. Tensión de línea. Fuentes de dislocaciones. Dislocaciones parciales.

Dislocaciones en estructuras fcc. Reacciones entre dislocaciones. Ejemplos de dislocaciones que reaccionan en estructuras fcc. Vinculación con el tema de endurecimiento del material.

Fuerzas de trepado (climbing). Vinculación con concentración de defectos puntuales. Fallas de apilamiento en estructuras fcc. Intersección entre dislocaciones (jogs y kinks)

8. Comportamiento mecánico de materiales sin difusión

Comportamiento macroscópico de materiales en la zona no elástica. Relación entre la tensión de fluencia y la tensión de corte necesaria para mover dislocaciones. Extensión de esta relación a sistemas policristalinos.

Criterio energético para la fractura rápida. Fractura rápida para desplazamiento nulo. Fractura rápida para carga constante. Condición crítica para la fractura rápida. Conceptos de tenacidad a la fractura, energía crítica para formación de superficie de fisura y factor de intensidad de tensión. Micromecanismos para la propagación de fisuras, mecanismo con ductilidad en zona plástica, mecanismo de clivaje.

9. Comportamiento mecánico en presencia de difusión

Procesos de creep. Ensayos de creep y variación de la velocidad de deformación con la temperatura y con la tensión aplicada. Procesos de relajación por creep. Micromecanismos de creep, en particular por movimiento de dislocaciones y por interacción entre dislocaciones y precipitados. Diagramas de mecanismos de deformación. Mecanismo de creep por dislocaciones para bajas tensiones (exponente de la tensión = 1) y su vinculación con la frecuencia de salto atómico. Introducción al mecanismo de recristalización.

Bibliografía

- Introduction to Solid State Physics, C. Kittel
- Ciencia y Diseño de Materiales para Ingeniería, Schaffer, Saxena, Antlovich, Sanders, Warner
- Solid State Chemistry and its Applications, West
- Introduction to Solid State Physics, Ashcroft, Mermin
- Point defects in solids, Crawford, Slifkin
- Physical Ceramics, Principles for Ceramic Science and Engineering, Chiang, Birnie, Kingery
- Introduction to ceramics, Kingery
- Diffusion in solids, Shewmon, Mc.Graw Hill Series
- Elementary dislocation theory, Weertman, Weertman, Macmillan Series in Materials Science
- Engineering materials 1 and 2: An introduction to their properties and applications, Ashby, Jones
- Principios de Metalurgia Física, Reed, Hill
- Crystallography and crystal defects, Kelly, Groves, Longman Group Ltd.
- Dislocations and plastic flow, Cottrell, Oxford Univ. Press
- The stereographic projection and its applications, Johari, Thomas, Techniques of metals research, volume IIA
- Point defects in metals, Damask, Dienes, Gordon and Breach
- Strong materials, Martin, The Wykeham science series
- The elastic constants of crystals, Huntington, Academic Press
- Physical properties of crystals, Nye, Oxford at the C. Press
- Theory of dislocations, Hirth, Lothe, John Wiley and Sons
- Apuntes del curso "Defectos en el sólido", Ahlers (1989)
- Theory of elasticity, Landau
- Point Defects and diffusion, Flynn
- Defects and diffusion in solids, Mrowec
- Physical Metallurgy, Haasen
- Physical Metallurgy, V.1, Cahn
- Diffusion kinetics for atoms in crystals, Manning

Mecanismos de evaluación: exámen final