## 2. STRUCTURA CRISTALINA A MATERIALELOR METALICE

Aranjamentul atomilor in structura interna a unui material solid joaca un rol important in determinarea microstructurii si comportarii acestuia in diferite conditii de expolatare. Din acest punctde vedere se disting trei categorii de materiale:

- material cristaline;
- materiale amorfe;
- material intermediare, combinatii ale primelor doua tipuri de materiale.

**Starea cristalina:** aranjamentul spatial al atomilor in diferite retele tridimensional, nunite retele reticulare sau cristaline.

**Crristal perfect** (***ideal***): repetarea ordonata in spatiu a retelelor cristaline ideale Descrierea structurii cristaline se realizeaza cu ajutorul unor retele tridimensionale de puncte numite retele spatiale (**Fig. 2.1**).

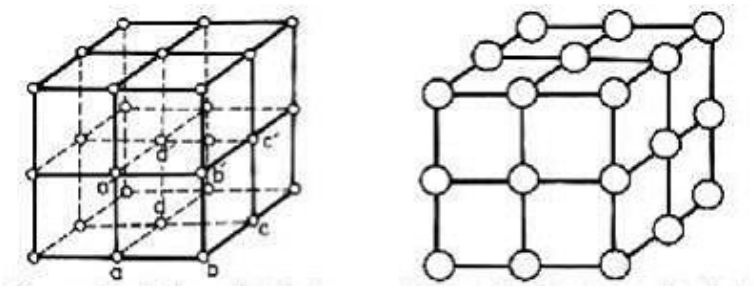

**Fig. 2.1**

**Punctele unei retele**: noduri, reprezentand pozitiile medii ale atomilor in oscilatie cu o mica amplitudine in jurul pozitiei de echilubru datorita agitatiei termice; nodurile unei retele sunt identice.

### 2.1. Celula elementara (*unitate*)

**Caracterizarea retelelor spatiale:** cu ajutorul unor corpuri geometrice simple, care mai pastreaza toate caracteristicile geometrice ale cristalului luat in ansamblu, numita **celula elementara** (**Fig. 2.2**).

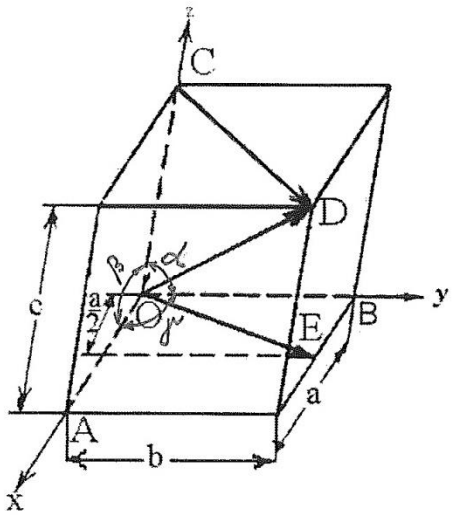


**Fig. 2.2**

**Celula primitiva:** celeula elementare cu noduri numai in colturi (varfuri).

**Retele spatiale**: repetarea unui numar nedefinit de celule elementare in spatiu.

**Reprezentarea generala a celulei elementare:** data de paralepipedul elementar, caracterizat prin parametrii liniari ***(a, b, si c)*** si unghiulari ***(α, β, si γ***), numiti si constantele retelei – **Fig. 2.2.**

**Deetrminarea constantelor de retea**: cu ajutorul difractie ***cu raze X***, folosind ***metoda Debye-Scherrer.***

## 2.2. Retele spatiale Bravais

**Definirea retelelor Bravais** – **Tab. 2.1**: reprezentate de cele ***7 sisteme cristaline*** principale - ***cubic, tetragonal, ortorombic, romboedric, hexagonal, monoclini si triclinic.***

**Tab. 2.1.** Sisteme si retele cristaline

| Sistemul cristalin | Parametrii retelei cristaline | Tipul retelei cristaline |
|---|---|---|
| Cubic | $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ | simpla, cu volum centrat, cu fete centrate |
| Tetragonal | $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ | simpla, cu volum centrat |
| Ortorombic | $a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ | simpla, cu volum centrat, cu baze centrate, cu fete centrate |
| Romboedrtic (trigonal) | $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$ | simpla |
| Hexagonal | $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90^0$, $\gamma = 120^0$ | simpla |
| Monoclinic | $a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$ | simpla, cu baze centrate |
| Triclinic | $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$ | simpla |

## 2.3. Indicii cristalografici

**Definire:** familiile de plane si drepte ce se pot trasa prin nodurile unei retele cristaline poarta denumirea de plane si directii cristalografice.

**Identificare:** cu ajutorul unor sisteme de numere - ***indici cristalografici***.

**Utilitatea identificarii indicilor cristalografici:** planele de atomi influenteaza proprietatile si comportamentul materialelor, iar o serie de proprietati sunt directionate (orientate), depindzand ca intensitatea de directia in care se considera (anizotropie).

**Indicii planelor cristalografice** (indici Miller): definiti de un set de trei numere intregi, cele mai mici **–** ***h,k*** si ***l*** **(hkl)**. Identificare lor se realizeaza urmand pasii de mai jos:

**a.** se identifica punctele in care planele intercepteaza axele **x**, **y** si **z**, interceptii exprimate in termenii numarului de parametrii ai retelei cuprinsi in segmentele determinate/inreceptate; daca planul trece prin origine axelor de coordonat, acesta poate fi deplasat convenabil;

**b.** se iau reciprocele (inversele) acestor interceptii;

**c.** fractiile se reduc la cele mai mici numere intregi;

**d.** numerele rezultate se includ in paranteze rotunde **(hkl**); numerele negative vor fi scrise cu o bara deasupra ( $\overline{\mathbf{111}}$ ).

**Indicii directiilor cristalografice** (indici Miller): se definiesc prin componentele vectoriale ale directiilor respective rezolvate de-a lungul axelor de coordonate, reduse la cele mai mici trei numere intergi. Practic, acesti indici sunt definiti de coordonatele oricarui punct situat pe o dreapta paralela cu directia considerata si care trece prin originea sistemului de coordonate. Se noteaza prin punerea acestor numere intre paranteze patrate **– [uvw]** – numerele negative fiind scrise cu o bara deasupra – $[\overline{111}]$.

**Indicii Miller-Bravais in sistemul hexagonal**, spre deosebire de sistemul cubic, se defines printr-un set de 4 numere intregi, cele mai mici, scrise intre paranteze rotunde pentru plane **(hkil**), respectiv intre paranteze patrate pentru directii **[hkil]** – **Fig. 2.3**, unde:

$$\mathbf{i = (h + k)}$$

**Reprezentare grafica a indicilor Miller-Bravais**: se adopta fie 4 axe de coordonate - ***3 in planul bazal (a1, a2 si a3) si una (c), dupa perpendiculara pe planul bazal*** - fie 3 axe, ***doua in planul bazal (a1 si a2) si cea de-a treia (c) dupa directia normala la planul bazal,*** doar trei indici fiind independenti **(h, k** si **l).**
**Indicii Miller-Bravais pentru un plan cristalografic:**dati de reciprocele segentelor determinate pe cele 4 axe de intersectia planului respective cu acestea.
**Idicii Miller-Bravais pentru directiile cristalografice**: dati de componentele vectoriale ale directiei respective, rezlovate in lungul fiecarei din cele 4 axe de coordonate, reduse la cele mai mici numere intregei.

Planele si directiile reciproc perpendicular au aceiasi indici cristalografici ca valoare.

**Exemple de identificare si noare** a indicilor planelor si dierctiilor cristalografice: ***sistemul cubic*** si ***hexagonal*** **– Fig. 2.3 .**

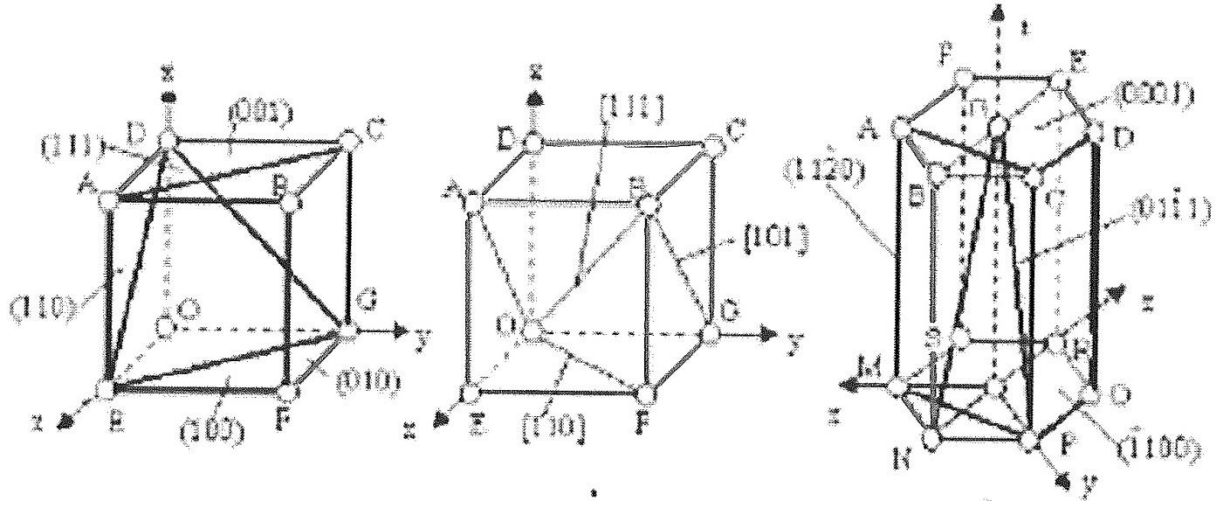


**Fig. 2.3**

## 2.4. Sistemele cristaline ale metalelor

**Sisteme cristaline pentru metale**: cubic cu volum centrat (***CVC***) si cubic cu fete centrate (***CFC***), respectiv in sistemul hexagonal compact (***HC***) – **Fig. 2.4.**

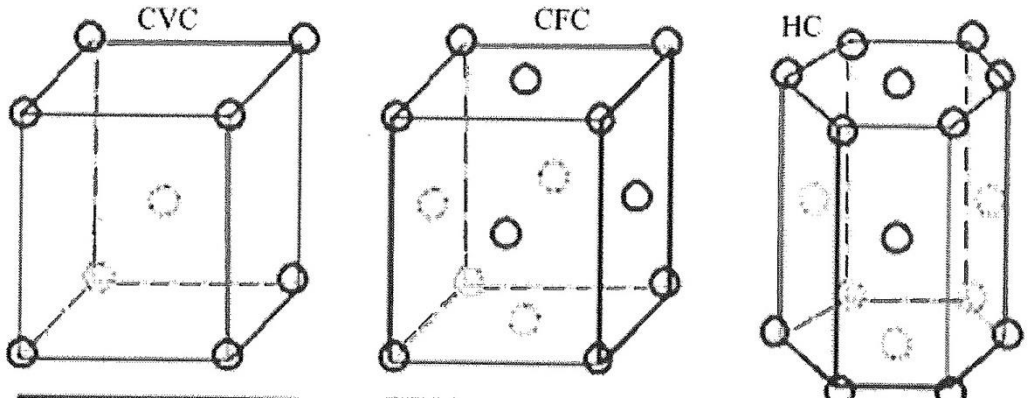


**Fig. 2.4**

Numarul de atomi (**N**) ce revin unei celule elementare:

**a.** sistemul cubic: $\mathbf{N_c = N_i + N_f/2 + N_v/8}$ atomi/celula;
**b**. sistemul hexagonal: $\mathbf{N_h = N_i + N_f/2 + N_v/6}$ atomi/celula

unde**:** $\mathbf{N_i}$ – numarul atomilor din interiorul celulei; $\mathbf{N_f}$ – numarul atomilor din centrul fetelor celulei si $\mathbf{N_v}$ – numarul atomilor din varfurile celulei.

***In sistemul CVC cristalizeaza 15 metale***: **Cr, Mo, W, V, Ti** s.a., caracterizate prin duritae si rezistenta mecanica ridicata, plasticitate moderata.

***In sistemul CFC cristalizeaza 15 metal***: **Al, Cu, Ni, $Fe_\gamma$, Ag, Au, Pb** s.a., caracterizate prin duritate si si rezistenta mai scazuta, plasticitate ridicata.

***In sitemul HC cristalizeaza 25 de metale:*** **Mg, Be, Zn, $Co_\alpha$, Cd** s.a., caracterizate printr-un grad redus de simetrie, fragilitate ridicata si plasticitate scazuta.

***Compactitaea unei retele cristaline:*** data de factorul de impachetare sau gradul de compactitate **(PF),** definit prin raportul:

**PF = vol. efectiv ocupat de atomii unei celeule elementare/volumul geometric al celulei elementare**:

$$\mathbf{PF_{CVC} = 68\%,\ PF_{CFC} = 74\%,\ PF_{HC} = 74\%.}$$

### 2.5. Structura cristalelor reale

Cristalele din natura prezinta o serie de abateri apreciabile de la dispunerea ordonata , riguros geometrica a atomilor - ***defecte sau imperfectiuni structurale***; cristalele care le contin numindu-se ***cristale reale***.

Defectele de retea influenteaza proprietatile mecanice, electrice, magnetice, frecarea interna, transformarile de faza in aliaje, difuzia, s.a.

#### 2.5.1. Clasificarea defectelor de retea

C**riteriul de baza de clasificare**: marimea si localizarea defecterlor in spatiu:

**a. defect punctiforme sau zero dimensionale**, localizate in vecinatatea a numai a catorva atomi, cum sunt ***vacantele*** (lacune), ***atomii interstitiali proprii*** retelei cristaline, ***atomii straini de substitutie*** si ***atomii straini interstitiali*** – **Fig. 2.5.**

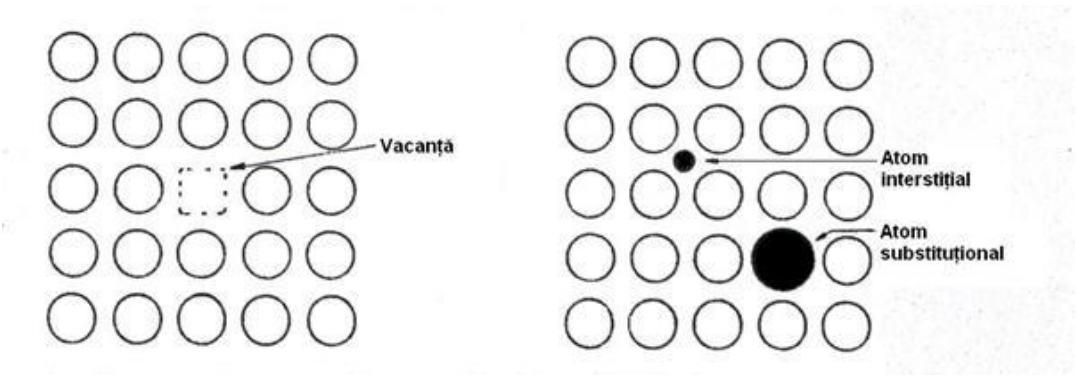


**Fig. 2.5**

**Vacantele:** pozitii atomice ale retelei cristaline (noduri) neocupate de catre atomi; formarea lor se datoreaza impachetarii atomice imperfecte, rezultata in urma solidificarii si vibratiei termice a retelei cristaline la temperature ridicate.

***Concentratia de echilibru termic a vacantelor***:

$$\mathbf{n = N \cdot exp(-E_v/kT);}$$

unde: **n** – nr. de vacante in echilibru la teperatura **T**; **N** – nr. total de noduri al retelei; $\mathbf{E_v}$ – energia de formare a unei vacante; **k** – cst. lui Boltzmann.

Numarul vacantelor poate fi marit prin deformare plastic la rece, respectiv bombardarea materialului cu particule nucleare de energie mare (neutroni rapizi).

***Principala proprietate a vacantelor***: se pot deplasa cu usurinta prin reteaua cristalina odata cu cresterea temperaturii (agitatiei termice) materialului; se realizeaza printr-o suita de permutari intre vacanta si atomul vecin; ea sta la baza proceselor de difuzie.

**Atomii interstitiali proprii:** atomi de aceiasi natura cu cei ai retelei cristaline de baza, ocupand pozitii interstitiale ale structurii ideale; provoaca distorsionarea retelei si pot fi produsi prin deformare plastica la rece, respectiv prin bombardare cu neutroni rapizi.

**Atomii straini de substitutie si interstitiali** (patrundere): atomi de natura chimica diferita fata de cei ai metalului (retelei cristaline) de baza, inlocuindu-i pe acestia, respectiv ocupand pozitiile interstiale ale retelei de baza; produc deformarea retelei cristaline din vecinatatea lor.

**b. defecte liniare sau unidimensionale:** doua dintre dimesiuni sunt de ordinal unei distante interatomice iar cea de a treia de mii dori mai mare;

***Defect liniar reprezentaiv*: dislocatia marginala** sau ***pana***, materializata printr-un sir de atomi ai retelei cristaline cu o coordinatie anormala; sta la baza explicarii mecanismului de deformare plastica prin alunecare a monocristalelor (cristalelor reale); exista si dislocatii elecoidale sau in surb, atomii fiind dispusi dupa o elice (in spirala).
**Dislocatia marginala** sau ***pana*** (**Fig. 2.6 si 2.7**) poate fi descrisa considerand alunecarea care se produce intr-un element de cristal, intr-un plan cristalografic, dupa o directie determinata de actiunea componentei tangentiale a unei forte exterioare aplicata cristalului.
Dislocatia marginala (linia de dislocatie ***AB***) se caracterizeaza prin vectorul (directia) de alunecare **($\vec{b}$),** cantitatea alunecata **b** (parametrul retelei) si planul sau de alunecare (***ABCD***). Linia si vectorul de alunecare sunt continute in planul de alunecare, fiind reciproc perpendiculare.

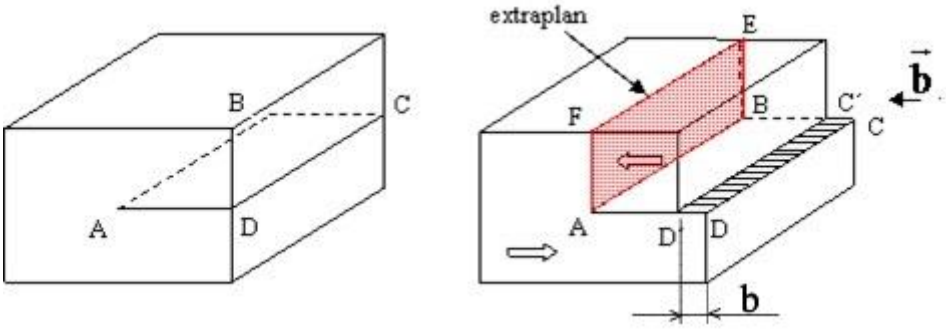


**Fig. 2.6**

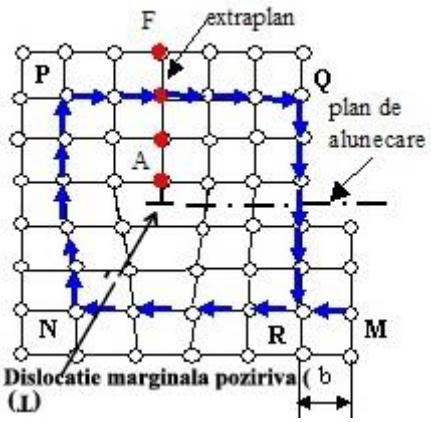


**Fig.2.7**

**Dislocatii elicoidale** (in surub): rezultaul unei forfecari pure produsa intr-u element de cristal, intr-un plan de forfecare/alunecare (***ABD'***). Vectorul de alunecare ($\vec{b}$), este paralel cu lina dsilocatie (***AB***), amadoua fiind continute de palnul de alunecare – **Fig. 2.8.**

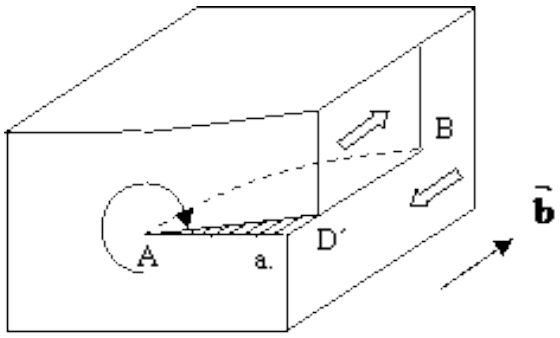


**Fig. 2.8**

**c. defecte de suprafata** (bidimensionale): una dintre dimesiuni este de ordinul unei distante interatomice iar celelalte doua mult mai mari.

**Tipuri de defectede de suprafata:**: limite de garunti (la unghiuri mari), limite de subgraunti (la unghiuri mici), sublimite de graunti (structura blocurilor de mozaic) si defecte de impachetare.

***Limitele de graunti*** (la unghiuri mari**):** zona de separatie dintre doi graunti cristalini adiacenti (vecini) in care reteaua ideala este perturbata pe spatiul restrans al catorva diametre atomice. Grauntii vecini au dezorientarti de marimea zecilor de grade (**θ**) − **Fig. 2.9**; zone de energie libera mare, locuri preferentiale unde se initiaza transformarile de faza, difuzia si reactiile de precipitare in materialele metalice; sunt prezente retele complexe de defecte de tipul dislocatiilor, vacantelor si atomilor straini (de impuritati).

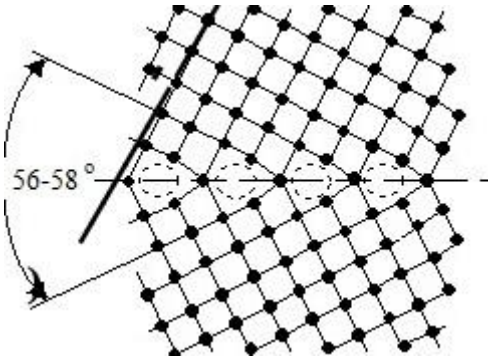


**Fig.2.9**

***Limitele de subgraunti:*** au un grad de dezorientare reciproca a grauntilor cristalini (**θ**) de ordinul gradelor.

***Structura blocurilor de mozaic:*** studiata cu ajutorul difractiei ***cu raze X***; evidentiaza existenta in interiorul grauntilor cristalin, chiar in lipsa unor subgraunti, a unor abateri de la regularitatea retelei cristaline ideale (**Fig. 2.10**); locurile unde apar aceste nepotriviri de orientare, de ordinal fractiunilor de grad, sunt denumite blocuri de mozaic (cca 1000 de celule elementare).

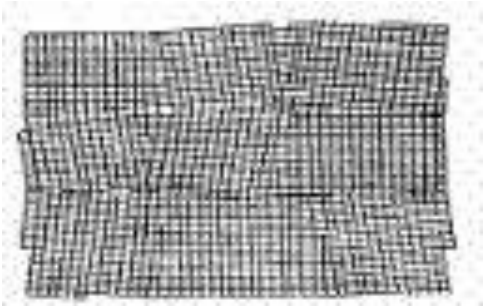

Fig. 2.10

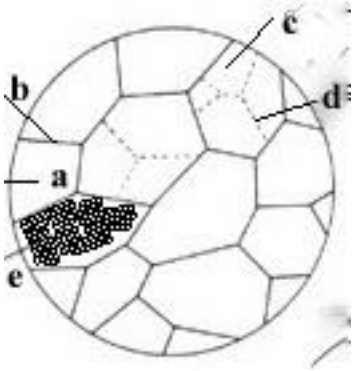


Fig. 2.11

**Microstructura unui policristal –** ***Fig. 2.11: (a) - graunte cristalin; (b) – limita de graunte; (c) – subgraunte*****; (d) –** ***sublimita*****; (e) –** ***blocuri de mozaic***.