

CAPÍTULO 4

NOÇÕES DE CRISTALOGRAFIA

Sumário

Objetivos deste capítulo	74
4.1 Introdução	74
4.2 Posições atômicas em células unitárias cúbicas.....	74
4.3 Direções em células unitárias cúbicas	75
4.4 Índices de Miller de planos cristalográficos em células unitárias cúbicas	78
4.5 Cálculo de densidades volúmicas, planares e lineares em células unitárias.....	82
4.5.1 Densidade volúmica	82
4.5.2 Densidade atômica planar	83
4.5.3 Densidade atômica linear	86
4.6 Referências bibliográficas do capítulo	87
Exercícios.....	88

4 NOÇÕES DE CRISTALOGRAFIA

Objetivos deste capítulo

Finalizado o capítulo o aluno será capaz de:

- descrever a geometria, as posições atômicas, os planos e direções cristalográficas;
- calcular a densidade volumétrica, linear e planar dos sólidos metálicos.

4.1 Introdução

O estudo de planos e direções atômicas é importante para:

- a determinação da estrutura cristalina: Os métodos de difração medem diretamente a distância entre planos paralelos de pontos do reticulado cristalino. Esta informação é usada para determinar os parâmetros do reticulado de um cristal. Os métodos de difração também medem os ângulos entre os planos do reticulado. Estes são usados para determinar os ângulos interaxiais de um cristal.
- analisar o comportamento da deformação plástica: A deformação plástica (permanente) dos metais ocorre pelo deslizamento dos átomos, escorregando uns sobre os outros no cristal. Este deslizamento tende a acontecer, preferencialmente, ao longo de planos e direções específicos do cristal.
- auxiliar na compreensão das propriedades de transporte: Em certos materiais, o transporte de elétrons de condução é maior em determinados planos e reduz-se em planos distantes destes.

Exemplo 1: Na grafita, a condução de calor é mais rápida nos planos unidos covalentemente sp_2 do que nas direções perpendiculares a esses planos.

Exemplo 2: Nos supercondutores a base de $YBa_2Cu_3O_7$, alguns planos contêm somente Cu e O. Estes planos conduzem pares de elétrons (chamados pares de Cooper) que são os responsáveis pela supercondutividade. Estes supercondutores são eletricamente isolantes em direções perpendiculares aos dos planos Cu-O.

4.2 Posições atômicas em células unitárias cúbicas

Um aspecto importante da natureza das estruturas cristalinas é que uma posição reticular dada é estruturalmente equivalente à posição em qualquer outra célula da mesma estrutura, essas posições estão conectadas por meio de translações que são múltiplos inteiros das constantes reticulares ao longo das direções paralelas aos eixos cristalográficos.

Para localizar as posições atômicas em células unitárias cúbicas, usam-se os eixos ortogonais x , y e z . Em cristalografia, o sentido positivo do eixo x tem geralmente a direção que sai do papel, o sentido positivo do eixo y aponta para a direita do papel, e o sentido positivo do eixo z aponta para cima (Figura 4.1). Os sentidos negativos são os opostos aos que acabamos de descrever.

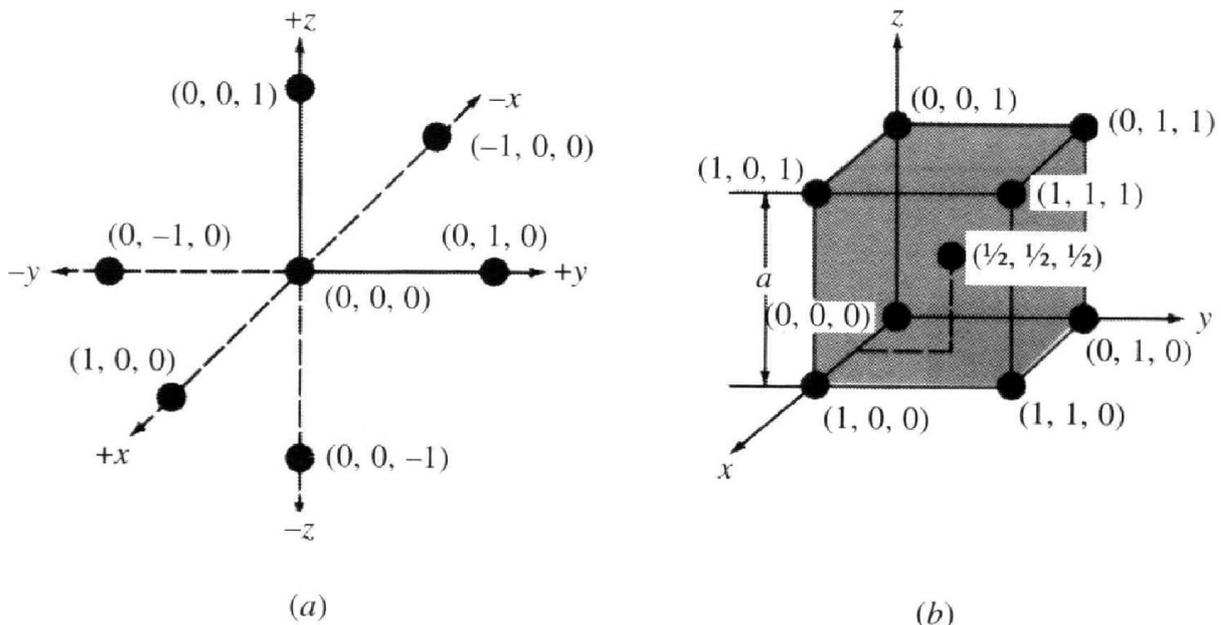


Figura 4.1 - (a) Eixos ortogonais x , y , z utilizados para localizar as posições dos átomos nas células unitárias cúbicas. (b) Posições atômicas numa célula unitária CCC.

As posições dos átomos nas células unitárias são localizadas por meio das distâncias unitárias ao longo dos eixos x , y e z , conforme se indica na Figura 4.1a. A notação empregada $(0,0,0)$ para designar posições na realidade descreve frações das dimensões da célula. As coordenadas dos átomos na célula unitária CCC estão indicadas na Figura 4.1b. As posições dos oito átomos que se encontram nos vértices da célula unitária CCC são $(0,0,0)$ $(1,0,0)$ $(0,1,0)$ $(0,0,1)$ $(1,1,1)$ $(1,1,0)$ $(1,0,1)$ $(0,1,1)$

O átomo no centro da célula unitária CCC tem as coordenadas $(1/2, 1/2, 1/2)$. Para simplificar, algumas vezes apenas são especificadas duas posições atômicas da célula unitária CCC, que são $(0, 0, 0)$ e $(1/2, 1/2, 1/2)$. Considera-se que as restantes posições atômicas da célula unitária CCC estão subentendidas. De igual modo, podem-se localizar as posições atômicas da célula unitária CFC.

4.3 Direções em células unitárias cúbicas

Fazer referência a direções específicas nas redes cristalinas é particularmente importante no caso dos metais e ligas com propriedades que variam com a orientação cristalográfica. Para os cristais cúbicos, os índices das direções cristalográficas são os componentes do vetor-direção segundo cada um dos eixos coordenados, após redução aos menores inteiros. Para indicar esquematicamente uma direção numa célula unitária cúbica, desenha-se um vetor-direção a partir de uma origem, que é geralmente um vértice da célula cúbica, até que saia da superfície do cubo (Figura 4.2). As coordenadas do ponto da célula unitária em que o vetor-direção emerge da superfície do cubo, após conversão em inteiros, são os índices da direção. Os índices de uma direção são colocados entre parênteses retos, sem vírgulas a separá-los.

Exemplo 3: Obter os índices das direções. As coordenadas do ponto onde o vetor-direção OR da Figura 4.2a emerge da superfície do cubo são (1,0,0), assim os índices da direção do vetor OR são [100]. As coordenadas de posição do vetor-direção OS (Figura 4.2a) são (1,1,0); os índices da direção OS são [110]. As coordenadas de posição do vetor-direção OT (Figura 4.2b) são (1,1,1), os índices da direção OT são [111].

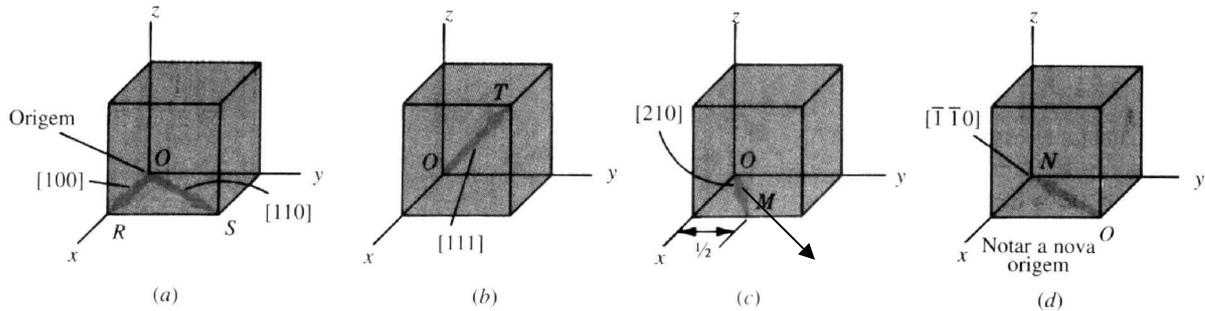


Figura 4.2 - Diversas direções em células unitárias cúbicas.

Roteiro para indexar a direção na célula da Figura 4.2c:

1. Determine as projeções do vetor em cada um dos eixos em termos de parâmetros a, b, c (OM por exemplo (1, 1/2, 0))

x	y	z
1a	1/2b	0c

2. Reduzir a inteiros: dado que os índices de uma direção têm de ser números inteiros, estas coordenadas têm de ser multiplicadas por 2 para obter números inteiros :210

3. Representa-se entre colchetes [210].

Indica-se que o índice de uma direção é negativo, colocando-se uma barra sobre o índice, as coordenadas de posição do vetor ON (Figura 4.2d) são (-1, -1, 0) e o índice da direção $[\bar{1}, \bar{1}, 0]$.

Usam-se as letras u, v, w para indicar, de um modo geral, os índices segundo os eixos x, y e z, respectivamente, e escreve-se [u v w]. É também importante salientar que todas as direções paralelas têm os mesmos índices (perguntar). As direções dizem-se cristalograficamente equivalentes se, ao longo dessas direções, o espaçamento entre os átomos for o mesmo. Por exemplo, as seguintes direções, correspondentes às arestas do cubo, são cristalograficamente equivalentes:

$$[1\ 0\ 0], [0\ 1\ 0], [0\ 0\ 1], [0\ 1\ 0], [0\ 0\ 1], [1\ 0\ 0] \equiv \langle 100 \rangle$$

Direções equivalentes designam-se por índices de uma família ou forma. Utiliza-se a notação $\langle 100 \rangle$ para indicar todas as direções correspondentes às arestas do cubo. Outros exemplos são: as diagonais do cubo, que pertencem à forma $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$, e as diagonais das faces do cubo, que pertencem à forma $\langle 110 \rangle$.

Exemplo 4: Desenhe os seguintes vetores-direção, em células unitárias cúbicas: (a) [100] e [110]; (b) [112]; (c) $[\bar{1}10]$ e (d) $[\bar{3}2\bar{1}]$

Resolução:

- a) As coordenadas de posição da direção $[100]$ são $(1,0,0)$ (Figura 4.3a). As coordenadas de posição da direção $[110]$ são $(1,1,0)$ (Figura 4.3a).
- b) As coordenadas de posição da direção $[112]$ são obtidas dividindo os índices da direção por 2, de modo a que caiam dentro do cubo. Assim, obtém-se $(1/2, 1/2, 1)$ (Figura 4.3b).
- c) As coordenadas de posição da direção $[1\ 1\ 0]$ são $(-1,1,0)$ (Figura 4.3c). Note que a origem do vetor-direção tem de ser deslocada para o vértice inferior esquerdo da face frontal do cubo.
- d) As coordenadas de posição da direção $[\bar{3},2,\bar{1}]$ são obtidas dividindo todos os índices por 3, que é o índice maior. Obtém-se, para coordenadas do ponto de saída da direção $[3\ 2\ 1]$, os valores $-1, 2/3, -1/3$, conforme se mostra na Figura 4.3d.

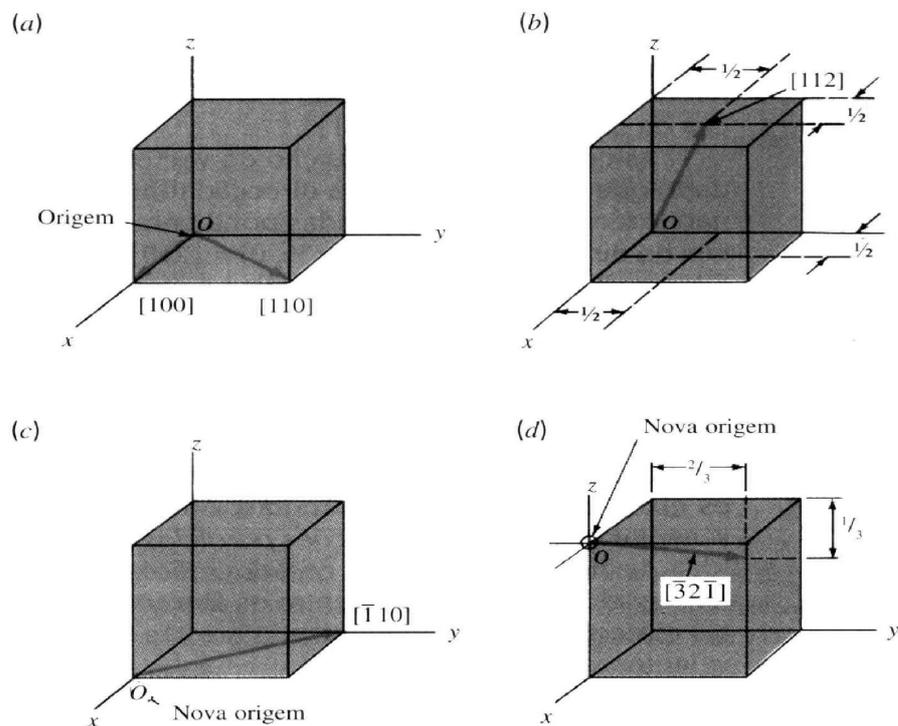


Figura 4.3 - Vetores-direção em células unitárias cúbicas.

Exemplo 5: Desenhe dentro de uma célula unitária cúbica as seguintes direções cristalográficas:

- $[\bar{1}10]$; mudar a origem
- $[\bar{1}21]$; mudar a origem
- $[0\bar{1}2]$;
- $[1\bar{3}3]$;
- $[\bar{1}\bar{1}1]$;
- $[\bar{1}22]$;
- $[1\bar{2}3]$;
- $[\bar{1}03]$;

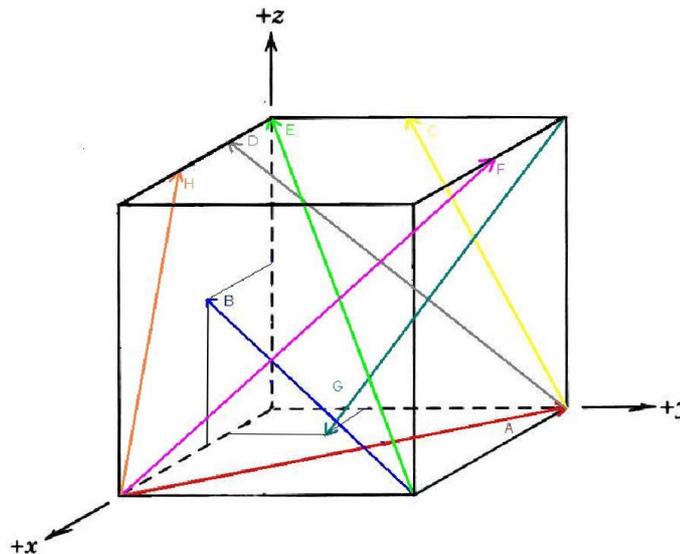


Figura 4.4 - Vetores-direção em células unitárias exemplo 3.

4.4 Índices de Miller de planos cristalográficos em células unitárias cúbicas

Numa estrutura cristalina é, por vezes, necessário fazer referência a determinados planos de átomos, ou pode haver interesse em conhecer a orientação cristalográfica de um plano ou conjunto de planos de uma rede cristalina. Para identificar planos cristalográficos, numa estrutura cristalina cúbica, usa-se o sistema de notação de Miller. Os índices de Miller de um plano cristalográfico são definidos como os inversos das interseções fracionárias (com as frações reduzidas ao mesmo denominador) que o plano faz com os eixos cristalográficos x , y e z coincidentes com três arestas não paralelas da célula unitária cúbica. As arestas da célula unitária representam comprimentos unitários; e as interseções do plano são medidas em termos destes comprimentos unitários.

O procedimento a seguir ilustra como determinar os índices de Miller de um plano num cristal cúbico.

Exemplo 6: Determine os índices de Miller para os planos num cristal cúbico mostrado na Figura 4.5.

Roteiro para indexar planos:

- Escolher um plano que não passe pela origem $(0,0,0)$.
- Determinar as interseções do plano com os eixos cristalográficos x , y e z do cubo unitário. Essas interseções podem ser números fracionários

x	y	z
$1/3a$	$2/3b$	$1c$

3. Obter os inversos destas interseções (o recíproco) $(3 \ 3/2 \ 1)$

4. Reduzir as frações, dado que não são permitidas interseções fracionárias, estas terão de ser multiplicadas por 2 de modo a eliminar a fração $3/2$. Por isso, os inversos das interseções passam a ser 6, 3, 2 e os índices de Miller são (632) .

Estes números inteiros são os índices de Miller do plano cristalográfico e são colocados entre parênteses, sem vírgulas entre eles. Genericamente, num cristal

cúbico, usa-se a notação (hkl) para indicar índices de Miller, sendo h , k e l os índices de Miller de um plano, referentes aos eixos x , y e z , respectivamente.

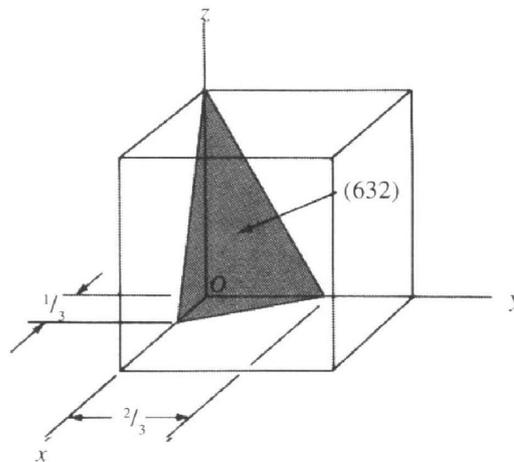


Figura 4.5 - Plano (632) num cristal cúbico, que tem interseções fracionárias.

Na Figura 4.6, estão representados três dos mais importantes planos cristalográficos em estruturas cristalinas cúbicas. Consideremos, em primeiro lugar, o plano cristalográfico sombreado da Figura 4.6a, que intercepta os eixos x , y e z às distâncias 1 , ∞ , ∞ , respectivamente.

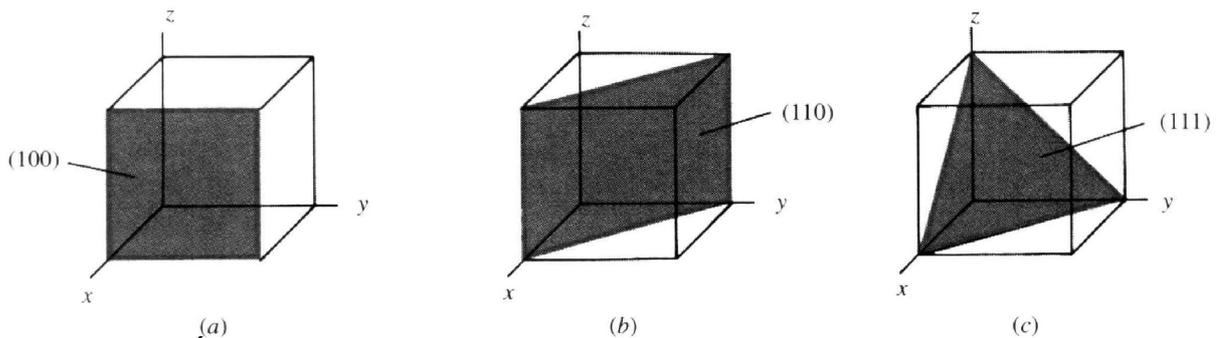


Figura 4.6 - Índices de Miller de alguns planos importantes, em cristais cúbicos: (a) (100) , (b) (110) e (c) (111) .

Para obter os índices de Miller, tomamos os inversos destas interseções, que são 1 , 0 , 0 . Já que estes números não são fracionários, os índices de Miller deste plano são (100) , lendo-se "plano um-zero-zero". Consideremos, seguidamente, o segundo plano representado na Figura 4.6b. As interseções deste plano são 1 , 1 , ∞ . Uma vez que os inversos destes números são 1 , 1 , 0 , que são números não fracionários, os índices de Miller deste plano são (110) . Finalmente, as interseções do terceiro plano (Figura 4.6c) são 1 , 1 , 1 , obtendo-se para os índices de Miller deste plano (111) .

Se o plano cristalográfico considerado passar pela origem, fazendo com que uma ou mais interseções sejam zero, o plano terá de ser deslocado para uma posição equivalente, dentro da célula unitária, mantendo-se paralelo ao plano inicial. Isto é possível porque todos os planos paralelos, de igual espaçamento, têm os mesmos índices de Miller.

Se conjuntos de planos cristalográficos equivalentes estiverem relacionados pela simetria do sistema cristalográfico, designam-se por planos de uma família ou

forma. Para representar uma família de planos simétricos, isto é de uma mesma família, os índices de um dos planos da família são colocados entre chaves, $\{h k l\}$. Por exemplo, os índices de Miller dos planos (100), (010) e (001), correspondentes às faces do cubo, representam-se coletivamente como uma família ou forma pela notação $\{100\}$.

Exemplo 7: Determine os índices de Miller para os planos mostrados na célula unitária abaixo:

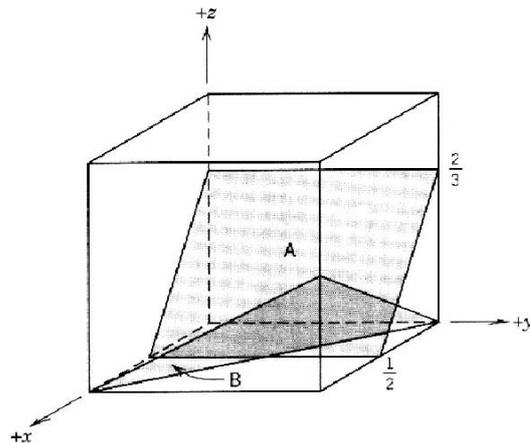


Figura 4.7 - Índices de Miller dos planos A e B

Resolução: Para determinar os índices de Miller para um plano devemos determinar as coordenadas onde o plano intercepta os 3 eixos x,y e z, fazer o recíproco e obter os índices em números inteiros.

PLANO A

Coordenadas de intersecção: $(1/2, \infty, 2/3)$
 Fazendo o recíproco: $(2/1, 1/\infty, 3/2) = (2, 0, 3/2)$
 Multiplicando por 2: $(4, 0, 3)$
 Assim temos o plano cristalográfico (hkl): (403)

PLANO B

Coordenadas de intersecção: $(-1, -1, 1/2)$
 Fazendo o recíproco: $(-1, -1, 2)$

Assim temos o plano cristalográfico de índices hkl: $(\bar{1} \bar{1} 2)$

Exemplo 8: Desenhe os seguintes planos cristalográficos de células unitárias cúbicas: a) (101); b) $(1\bar{1}0)$; c) (221) e d) Numa célula unitária CCC, desenhe o plano (110) e indique as coordenadas de posição dos átomos cujos centros são intersectados por este plano.

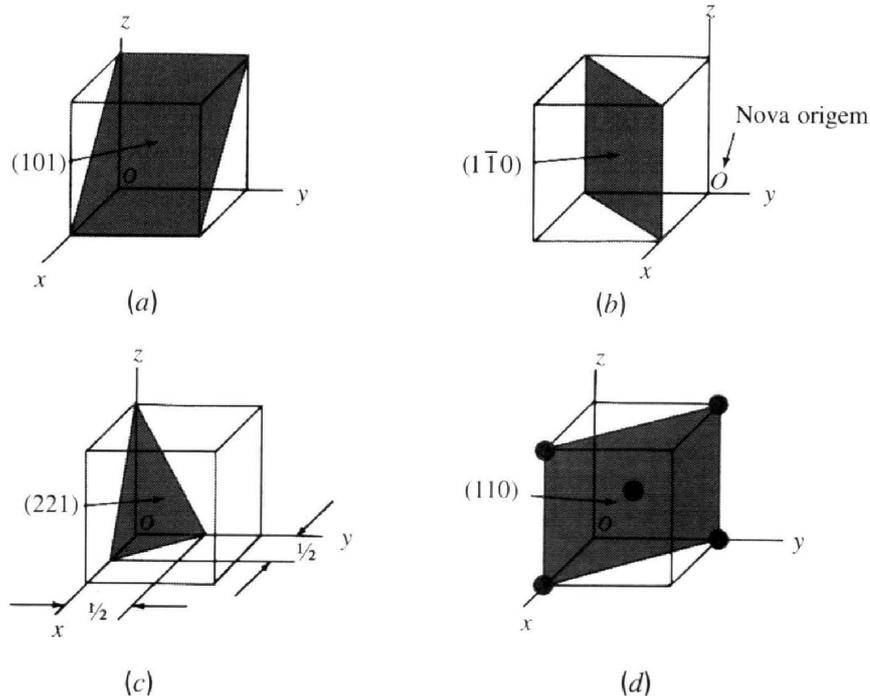


Figura 4.8 - Planos cristalográficos de alguns índices de Miller

a) Em primeiro lugar, determinam-se os inversos dos índices de Miller do plano (101). Obtém-se 1, ∞ , 1. O plano (101) tem de intersectar (interceptar) os eixos do cubo unitário às distâncias $x=1$ e $z=1$ e ser paralelo ao eixo y .

b) Em primeiro lugar, determinam-se os inversos dos índices de Miller do plano (1 $\bar{1}$ 0). Obtém-se 1, -1, ∞ . O plano (1 $\bar{1}$ 0) tem de interceptar os eixos do cubo unitário às distâncias $x=1$ e $y=-1$ e ser paralelo ao eixo z . Note que a origem dos eixos tem de ser deslocada para o vértice inferior direito da face posterior do cubo.

c) Em primeiro lugar, determinam-se os inversos dos índices de Miller do plano (221). Obtém-se $1/2$, $1/2$, 1. O plano (221) tem de interceptar os eixos do cubo unitário às distâncias $x = 1/2$ $y= 1/2$ e $z=1$.

d) As coordenadas dos átomos cujos centros são intersectados pelo plano (110) são (1,0,0), (0,1, 0), (1,0, 1), (0, 1, 1) e (1/2, 1/2, 1/2). Estas posições estão indicadas pelos círculos em negro.

Uma relação importante no sistema cúbico, e apenas no sistema cúbico, é que os índices de uma direção perpendicular a um plano cristalográfico são iguais aos índices de Miller desse plano. Por exemplo, a direção [100] é perpendicular ao plano cristalográfico (100).

Nas estruturas cristalinas cúbicas, a distância interplanar de dois planos paralelos sucessivos, com os mesmos índices de Miller, designa-se por d_{hkl} , em que h , k e l são os índices de Miller dos planos. Este espaçamento representa a distância entre o plano que passa pela origem e o plano paralelo, com os mesmos índices, mais próximo do primeiro. Por exemplo, a distância d_{110} , entre os planos 1 e 2 de índices (110) representados na Figura 4.9 é AB. De igual modo, a distância entre os planos 2 e 3 de índices (110) é d_{110} , igual ao comprimento BC na Figura 4.9. Por simples geometria, pode mostrar-se que nas estruturas cristalinas cúbicas

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (4.1)$$

em que d_{hkl} é a distância interplanar entre dois planos de índices de Miller h , k e l , sucessivos, a é o parâmetro de rede (comprimento da aresta do cubo unitário) e h , k e l são os índices de Miller dos planos considerados.

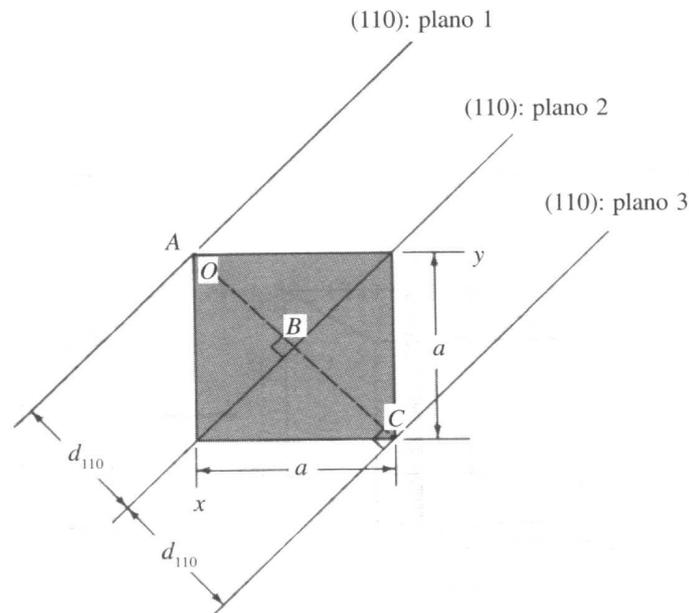


Figura 4.9 - Vista de topo de uma célula unitária cúbica, mostrando a distância entre planos cristalográficos (110), d_{110} .

4.5 Cálculo de densidades volúmicas, planares e lineares em células unitárias

4.5.1 Densidade volúmica

Usando o modelo atômico de esferas rígidas para a célula unitária da estrutura cristalina de um metal e um valor para o raio atômico do metal, determinado por difração de raios-X, pode obter-se a densidade volúmica de um metal usando a equação

$$\text{densidade volúmica do metal} = \rho_v = \frac{n \cdot A}{V \cdot N_{Av}} \quad (4.2)$$

n : número de átomos por célula unitária;
 A : massa atômica do material;
 V : volume da célula unitária do material;
 N_{Av} : número de Avogrado ($6,02 \times 10^{23}$).

Exemplo 9: O cobre tem estrutura cristalina CFC e raio atômico 0,1278 nm. Considerando que os átomos são esferas rígidas que se tocam ao longo das diagonais das faces da célula unitária CFC, calcule o valor teórico da densidade do cobre, em megagramas por metro cúbico. A massa atômica do cobre é 63,54 g/mol.

Resolução: Na célula unitária CFC, existem quatro átomos/célula unitária. Cada átomo de cobre tem a massa de $(63,54 \text{ g/mol}) / (6,02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})$. Assim, a massa m dos átomos de Cu na célula unitária CFC é

$$m = \frac{(4 \text{ átomos})(63,54 \text{ g/mol})}{6,02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}} \left(\frac{10^{-6} \text{ Mg}}{\text{g}} \right) = 4,22 \times 10^{-28} \text{ Mg}$$

O volume V da célula unitária do cobre é

$$V = a^3 = \left(0,361 \text{ nm} \times \frac{10^{-9} \text{ m}}{\text{nm}} \right)^3 = 4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3$$

Por conseguinte, a densidade do cobre é

$$\rho_v = \frac{m}{V} = \frac{4,22 \times 10^{-28} \text{ Mg}}{4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3} = 8,98 \text{ Mg/m}^3 = 8,98 \text{ g/cm}^3$$

Neste problema, obteve-se para a densidade do cobre o valor $8,98 \text{ Mg/m}^3$ ($8,98 \text{ g/cm}^3$). O valor experimental Tabelado para a densidade do cobre é $8,96 \text{ Mg/m}^3$ ($8,96 \text{ g/cm}^3$). O valor ligeiramente mais baixo da densidade experimental pode ser atribuído à ausência de átomos em algumas posições atômicas (lacunas), a defeitos lineares e ao desajustamento dos átomos em limites de grão (fronteiras entre grãos). Estes defeitos cristalinos serão abordados nas próximas aulas. Outra causa da discrepância pode ser devida ao fato de os átomos não serem esferas perfeitas.

4.5.2 Densidade atômica planar

Por vezes, é importante determinar as densidades atômicas de alguns planos cristalográficos. Para isso, calcula-se uma quantidade designada por densidade atômica planar, ρ_p , usando a relação:

$$\rho_p = \frac{\text{n}^\circ \text{ efetivo de átomos cujos centros são intersectados pela área selecionada}}{\text{área selecionada}} \quad (4.3)$$

Por conveniência, é costume usar, nestes cálculos, a área do plano que intercepta a célula unitária, como se exemplifica na Figura 4.10 para o plano (110) da célula unitária CCC. Nestes cálculos, para que a área de um átomo seja contada, o plano considerado terá de interceptar o centro do átomo. No exemplo 11 o plano (110) intercepta o centro de cinco átomos, mas conta-se apenas o equivalente a dois átomos (número efetivo), já que apenas um quarto de cada um dos quatro átomos dos vértices fica contido na área da célula unitária.

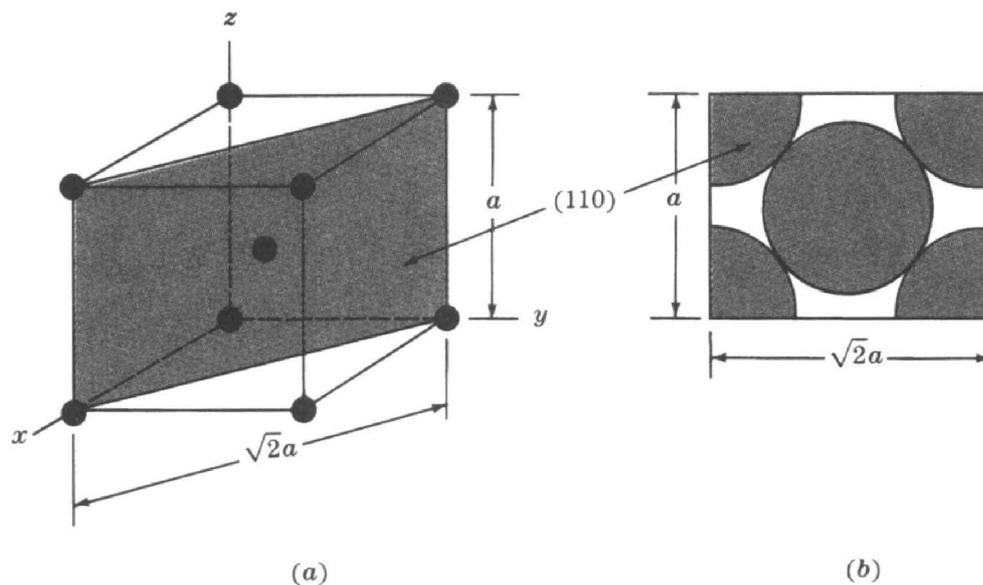


Figura 4.10 - (a) Célula unitária CCC com as posições atômicas, indicando-se, em sombreado, um plano (110). (b) Áreas dos átomos cortados pelo plano (110) numa célula unitária CCC.

Exemplo 10: Calcule a densidade atômica planar ρ_p , em átomos por milímetro quadrado, no plano (110) do ferro- α , cuja rede é CCC. O parâmetro de rede do ferro- α é 0,287 nm.

Resolução:

$$\rho_p = \frac{\text{n}^\circ \text{ efetivo de átomos cujos centros são intersectados pela área selecionada}}{\text{área selecionada}}$$

O número efetivo de átomos intersectados pelo plano (110), em termos da área interior à célula unitária CCC, está representada na Figura 4.10, e é

$$1 \text{ átomo no centro} + 4 \times \frac{1}{4} \text{ átomos nos quatro vértices do plano} = 2 \text{ átomos}$$

A área do plano (110) interior à célula unitária (área selecionada) é

$$(\sqrt{2}a)(a) = \sqrt{2}a^2$$

Assim, a densidade atômica planar é

$$\rho_p = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}(0,287 \text{ nm})^2} = \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} = \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \times \frac{10^{12} \text{ nm}^2}{\text{mm}^2} = 1,72 \times 10^{13} \text{ átomos/mm}^2$$

Exemplo 11: Calcule e compare a densidade planar dos planos (100) e (111) para FCC.

A Figura 4.11 mostra a área ocupada pelos átomos numa seção do plano (111) da rede FCC.

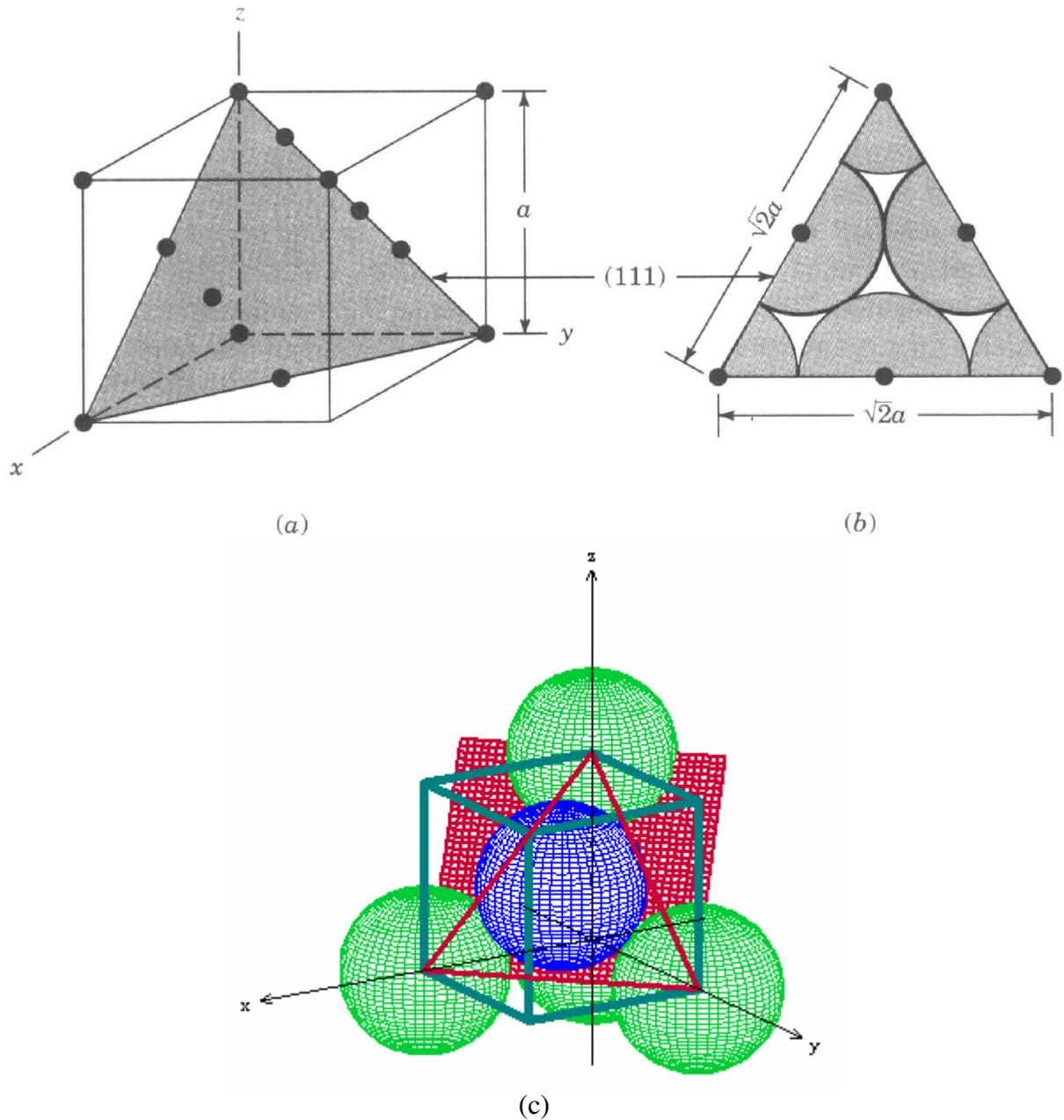
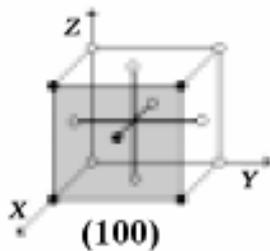


Figura 4.11 - (a) Célula unitária CFC com as posições atômicas, mostrando-se, na área sombreada, um plano (111). (b) Áreas dos átomos cortados pelo plano (111) numa célula unitária CFC. (c) Representação tridimensional do plano (111).

Resolução:

Densidade planar para o plano (100):

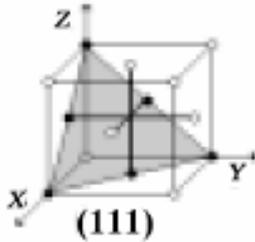


$$A_p = a^2 = (2.R.\sqrt{2})^2 = 8.R^2$$

$$A_C = 2 \cdot (\pi R^2)$$

$$\rho_P = \frac{A_C}{A_P} = \frac{2 \cdot \pi R^2}{8 R^2} \Rightarrow \rho_P(100)_{fcc} \approx 0,79$$

Densidade planar para o plano (111):



$$\rho_P(111)_{fcc} = A_C / A_P$$

$$A_P = \frac{1}{2} b \cdot h$$

$$b = a\sqrt{2};$$

$$h = (a\sqrt{2})^2 - \left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2$$

$$h = \frac{a\sqrt{2}\sqrt{3}}{2}$$

Logo:

$$A_P = \frac{1}{2} \cdot a \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{a\sqrt{2}}{2} \cdot \sqrt{3}\right)$$

$$A_P = \frac{1}{2} \cdot a^2 \cdot \sqrt{3}$$

Substituindo a pelo parâmetro de rede da fcc, $a = 2R\sqrt{2}$

$$A_P = 4R^2 \cdot \sqrt{3}$$

Sendo

$$A_C = \left(3 \cdot \frac{1}{6} + 3 \cdot \frac{1}{2}\right) (\pi R^2)$$

$$A_C = 2(\pi R^2)$$

Logo:

$$\rho_P = \frac{A_C}{A_P} = \frac{2 \cdot \pi R^2}{4 R^2 \sqrt{3}}$$

$$\rho_{P(111)_{fcc}} = 0,91$$

4.5.3 Densidade atômica linear

Por vezes, é importante determinar as densidades atômicas em determinadas direções das estruturas cristalinas. Para isso, calcula-se uma quantidade designada por densidade atômica linear, ρ_L , usando a relação:

$$\text{densidade atômica linear} = \rho_L = \frac{\text{número de diâmetros atômicos intersectados por uma linha com a direção considerada e com um comprimento determinado}}{\text{comprimento da linha selecionada}} \quad (4.4)$$

O problema resolvido 3.13 mostra como se pode calcular a densidade atômica linear na direção [110] da rede cristalina do cobre puro.

Exemplo 13: Calcule a densidade atômica linear ρ_L na direção [110] da rede cristalina do cobre, em átomos por mm. O cobre é CFC e o parâmetro de rede é 0,361 nm.

Resolução: Os átomos cujos centros são intersectados pela direção [1 1 0] estão indicados na Figura 3.29.

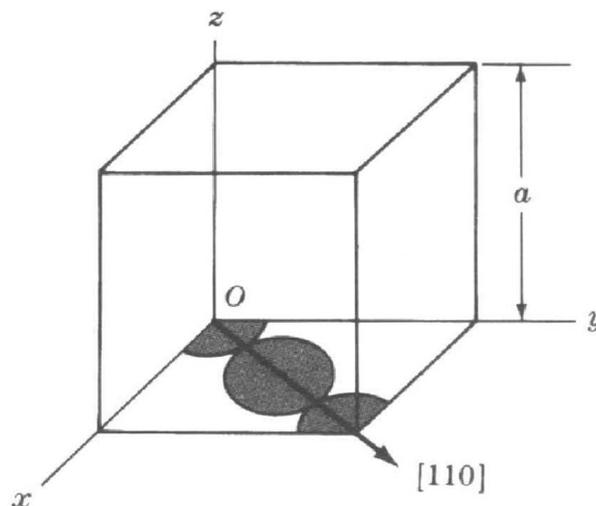


Figura 4.12 - Esquema para determinação da densidade atômica linear na direção [110], numa célula unitária CFC.

Selecionemos, como comprimento de referência, o comprimento da diagonal da face da célula unitária CFC, que é $\sqrt{2}a$. O número de diâmetros atômicos intersectados por este comprimento de referência é $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2$ átomos. Assim, a densidade atômica linear é

$$\rho_L = \frac{2\text{átomos}}{\sqrt{2}} = \frac{2\text{átomos}}{\sqrt{2}(0,361\text{nm})} = \frac{3,92\text{átomos}}{\text{nm}} = \frac{3,92\text{átomos}}{\text{nm}} \times \frac{10^6\text{nm}}{\text{mm}} = 3,92 \times 10^6 \text{átomos/mm}$$

4.6 Referências bibliográficas do capítulo

CALLISTER JR., W. D. **Materials science and engineering**: an introduction. 4. ed. New York: J. Wiley & Sons, 1997.

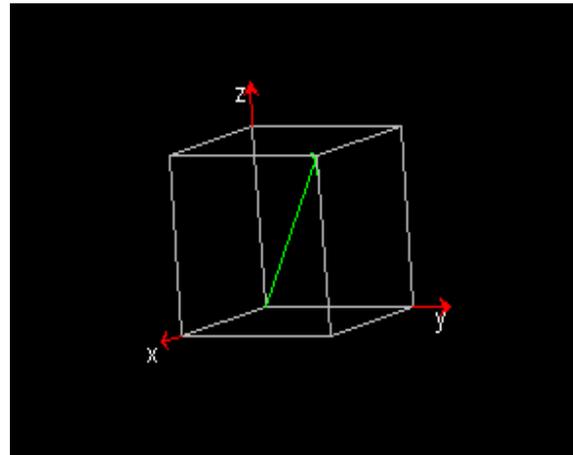
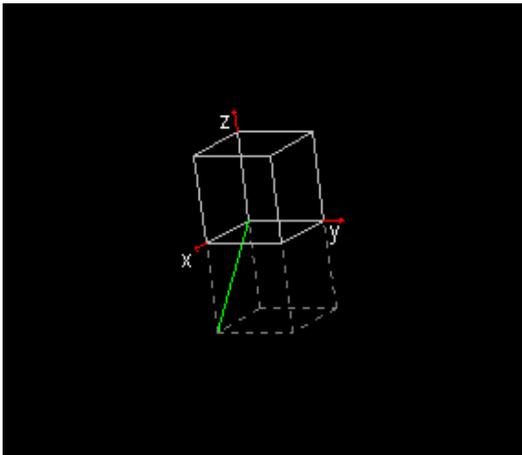
PADILHA, A. F. **Materiais de engenharia**. São Paulo: Hemus, 1997.

SMITH, W. F. **Princípio de ciência e engenharia dos materiais**. 3 ed. Portugal: McGraw-Hill, 1998.

VAN VLACK, L. H. **Princípio de ciência dos materiais**. Edgar Blucher, 1984.

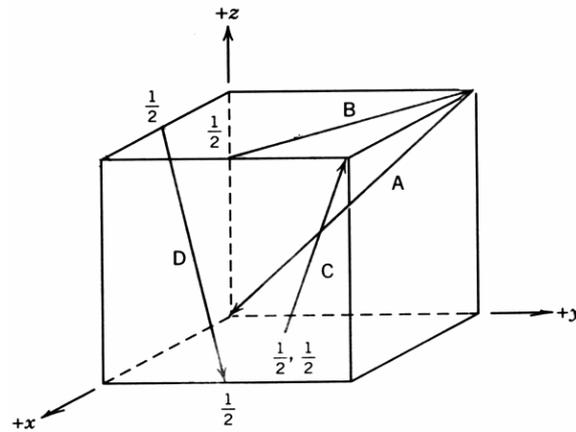
Exercícios

- 1.) a) Da Figura 3.6.1 do Van Vlack, calcule o ângulo entre as direções [110] e [112] e entre as direções [110] e [111], no sistema cúbico.
Resposta: $\text{Tan}\alpha=35,3^\circ; =2c/(a^2+b^2)^{1/2}$
- b) Quais os pontos de rede que estão contidos na direção [110] das células FCC e FCO?
- c) Desenhar os planos (110) e (111) e as direções [110] e [111].
- 2.) As direções são as Linha entre dois pontos ou um vetor, identificadas por []. Indique os índices das direções cristalográficas mostradas nas Figuras abaixo:

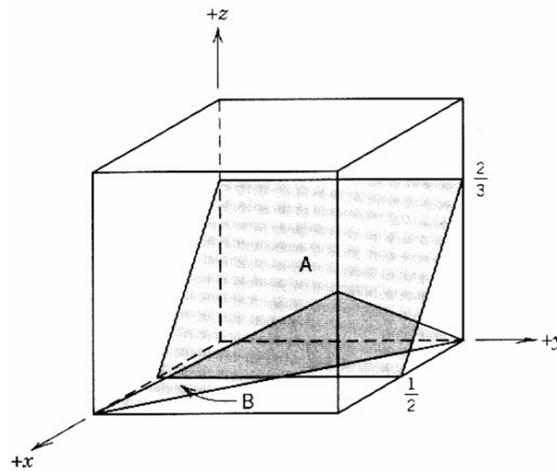


- 3.) O tungstênio (W) apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), sendo o parâmetro da rede $a=3,16 \text{ \AA}$. A sua densidade é $19,3 \text{ Mg/m}^3$.
- Faça um esboço da célula estrutural do W.
 - Calcule a massa atômica do W.
 - (No esboço feito na alínea a) Indique o plano (110).
 - Indique uma das direções mais compactas do plano (110) e escreva os respectivos índices.
- 4.) O titânio (Ti) sofre, ao ser arrefecido, uma transformação alotrópica ao atingir-se a temperatura de 882°C , passando a estrutura cristalina de cúbica de corpo centrado (CCC) para hexagonal compacta (HC). A 882°C , o parâmetro da rede da célula unitária CCC é $a=0,332 \text{ nm}$, e a célula unitária HC tem $a=0,2950 \text{ nm}$ e $c=0,4683 \text{ nm}$. O peso atômico do Ti é $47,88 \text{ g/mol}$.
- Defina transformação alotrópica e aplique este conceito ao caso do Ti.
 - Faça um esboço da célula estrutural do Ti à temperatura ambiente. Calcule a densidade teórica do Ti a uma temperatura ligeiramente inferior a 882°C .

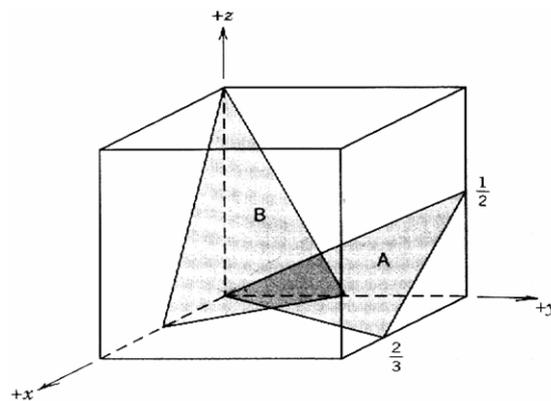
- c) Calcule a percentagem de variação do volume que ocorre quando a estrutura cristalina do Titânio passa de CCC para HC.
- d) Indique os índices de Miller-Bravais dos planos de máxima compactidade da estrutura cristalina do Ti à temperatura ambiente.
- 5.)** Inscreva um tetraedro num cubo de modo que os vértices do tetraedro coincidam com quatro dos vértices do cubo. Mostre que a razão crítica dos raios para coordenação tetraédrica é 0,225.
- 6.)** Para os arranjos cristalinos cúbico simples, cúbico de corpo centrado e estrutura cúbica de face centrada responda: Indique qual o Plano mais compacto.
- 7.)** O tungstênio (W) apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), sendo o parâmetro da rede $a=3,16 \text{ \AA}$. A sua densidade é $19,3 \text{ Mg/m}^3$.
- a) Faça um esboço da célula estrutural do W.
- b) Calcule a massa atômica do W.
- c) (No esboço feito na alínea a) Indique o plano (110).
- d) Indique uma das direções mais compactas do plano (110) e escreva os respectivos índices.
- 8.)** O titânio (Ti) sofre, ao ser arrefecido, uma transformação alotrópica ao atingir-se a temperatura de 882°C , passando a estrutura cristalina de cúbica de corpo centrado (CCC) para hexagonal compacta (HC). A 882°C , o parâmetro da rede da célula unitária CCC é $a=0,332 \text{ nm}$, e a célula unitária HC tem $a=0,2950 \text{ nm}$ e $c=0,4683 \text{ nm}$. O peso atômico do Ti é $47,88 \text{ g/mol}$.
- a) Defina transformação alotrópica e aplique este conceito ao caso do Ti.
- b) Faça um esboço da célula estrutural do Ti à temperatura ambiente. Calcule a densidade teórica do Ti a uma temperatura ligeiramente inferior a 882°C .
- c) Calcule a percentagem de variação do volume que ocorre quando a estrutura cristalina do Titânio passa de CCC para HC.
- d) Indique os índices de Miller-Bravais dos planos de máxima compactidade da estrutura cristalina do Ti à temperatura ambiente.
- 9.)** O óxido de magnésio (MgO) é um cerâmico que apresenta a estrutura cristalina do cloreto de sódio (NaCl). Os raios iônicos do $\text{Mg}^{2(+)}$ e do $\text{O}^{2(-)}$ são, respectivamente, $0,078 \text{ nm}$ e $0,132 \text{ nm}$. Os pesos atômicos do Mg e do O são, respectivamente, $24,31 \text{ g/mol}$ e $16,00 \text{ g/mol}$.
- a) Determine o parâmetro da rede (a) do MgO.
- b) Calcule o fator de compactidade iônica do MgO.
- c) Calcule a densidade teórica do MgO.
- 10.)** Desenha os planos (110) e (11) e as direções [110] e [111]:
- a) numa cela unitária tetragonal.
- b) numa cela unitária ortorrômbica.
- 11.)** Desenha os planos (110) e (111) e as direções [110] e [111]:
- a) Numa cela unitária tetragonal.
- b) Numa cela unitária ortorrômbica.
- 12.)** Determine os índices de Miller para as direções mostradas na célula cúbica unitária abaixo:



13.) Determine os índices de Miller para os planos mostrados na célula unitária abaixo:



14.) Determine os índices de Miller para os planos mostrados na célula unitária abaixo:



15.) Calcule e compare a densidade linear das direções [100], [110] e [111] para FCC.

16.) Calcule e compare a densidade linear das direções [110] e [111] para BCC.

- 17.)** Calcule e compare a densidade planar dos planos (100) e (111) para FCC.
- 18.)** Calcule e compare a densidade planar dos planos (100) e (110) para BCC.