

# ***ESTRUTURA E PROPRIEDADES DOS MATERIAIS***

## ***ESTRUTURA CRISTALINA***



***Prof. Rubens Caram***

# POR QUE CRISTAL?

- Antigos gregos: pedaços de quartzo encontrados em regiões frias era um tipo especial de gelo - **Krystallos**
- Krystallos eram congelados de maneira tão forte que não se fundiam mais



# CRISTAL x ESTRUTURA INTERNA

- Termo “cristal”: também aplicado a outros minerais com características geométricas definidas.
- Diversas substâncias formadas por cristais, com faces planas e ângulos definidos entre uma face e outra.
- 1660, Nicolaus Steno: cristais preservam tais ângulos ao crescerem e tal crescimento ocorre com a adição de camadas externas de átomos ou moléculas e não através de um crescimento interno.
- Forma geométrica externa: consequência do **arranjo interno** dos átomos ou moléculas.



Vanadinita



Rutilo



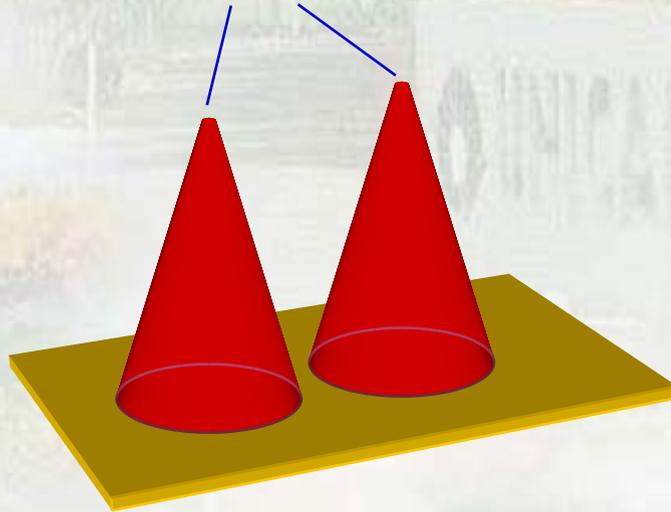
Magnetita



# ARRANJO CRISTALINO EXISTE?

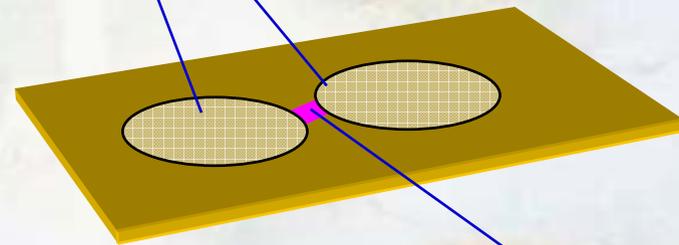
- Estrutura atômica pode ser observada através de microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução
- Experimento com folha delgada de ouro no LNLS

Feixe de elétrons



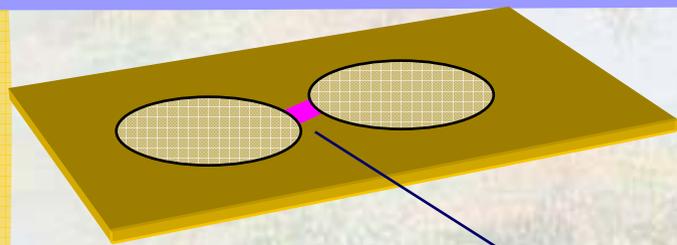
Folha delgada de  
ouro (3-5 nm)

Buracos

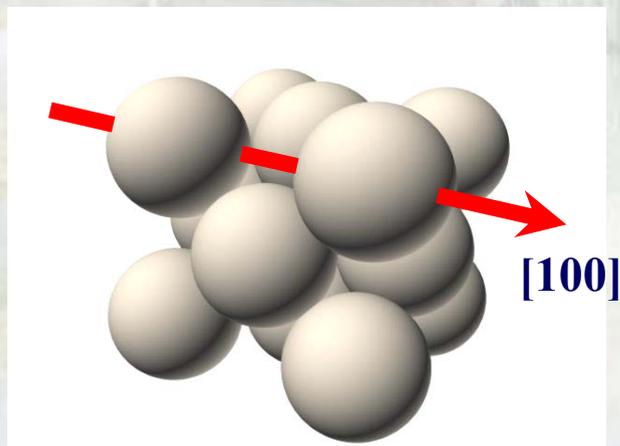
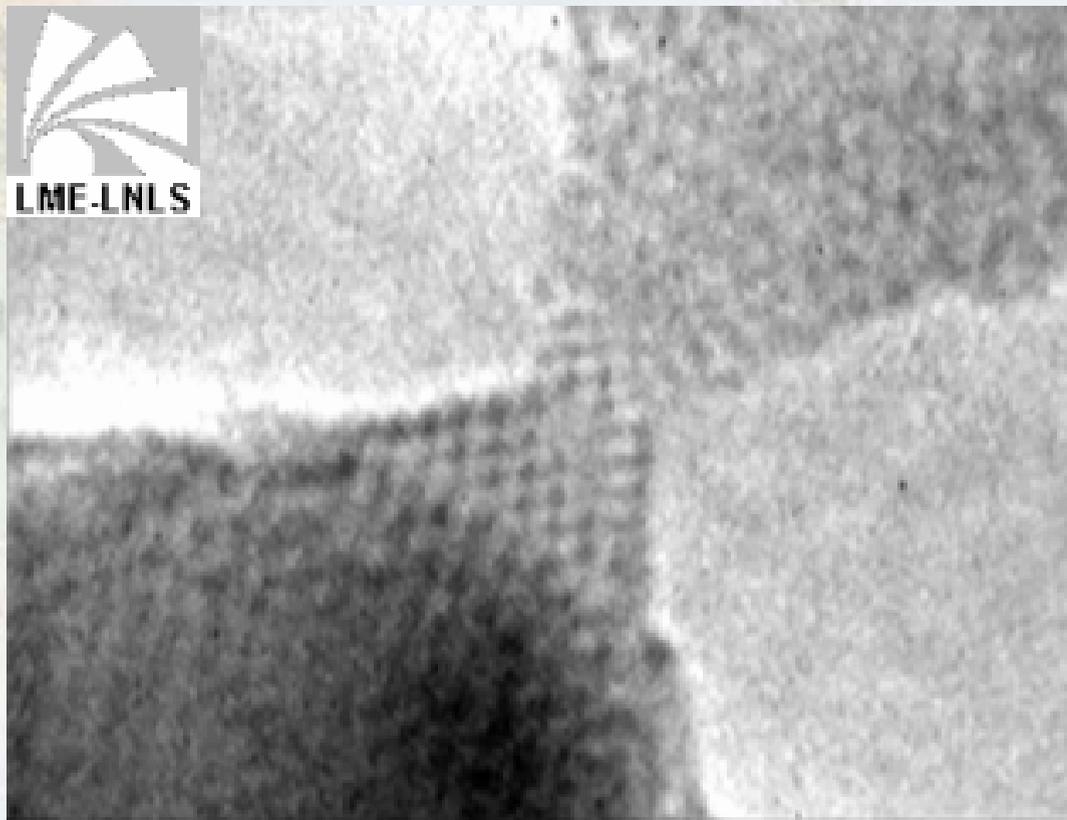


Nanofio

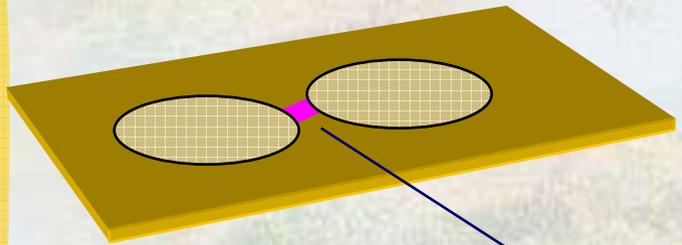
# ARRANJO CRISTALINO EXISTE?



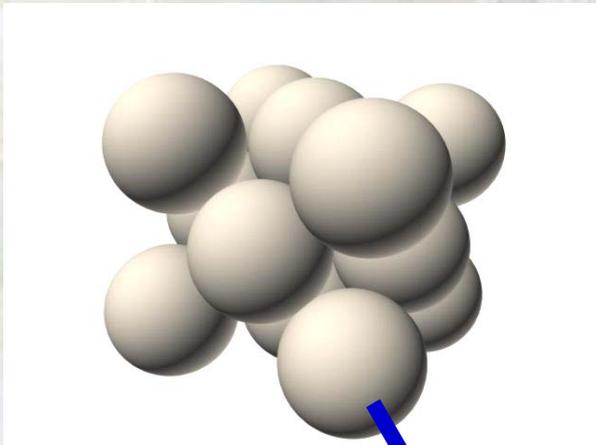
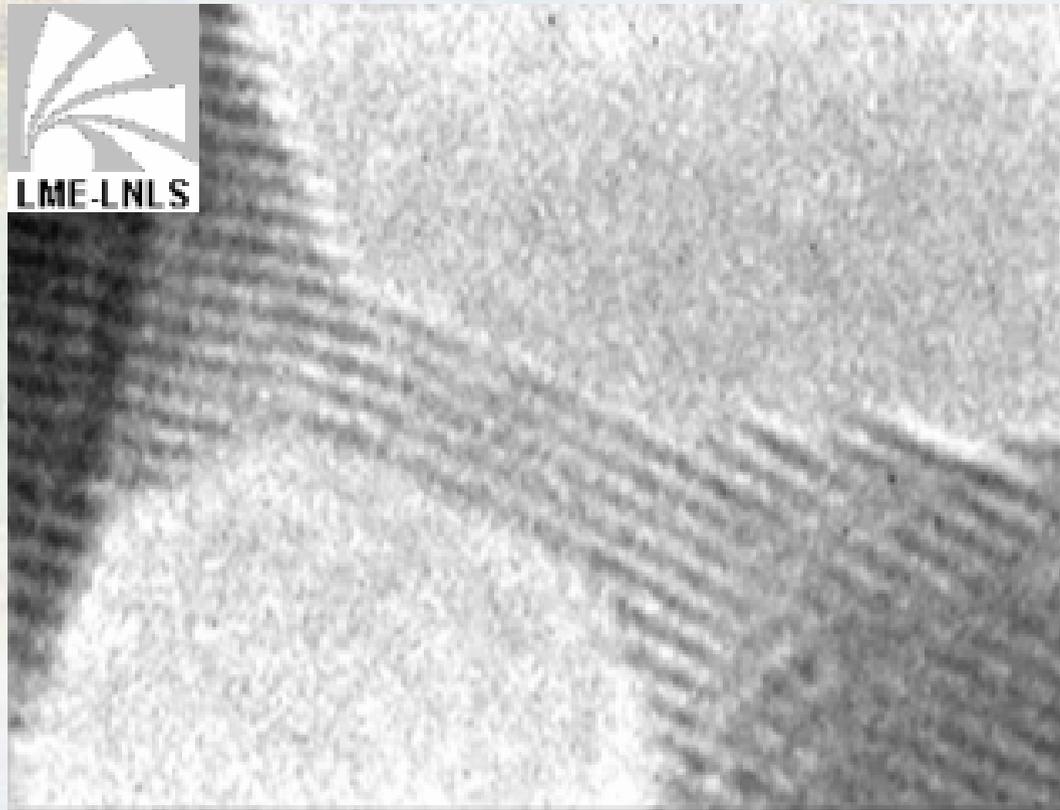
1,0 nm



# ARRANJO CRISTALINO EXISTE?



1,0 nm



[110]



[110]

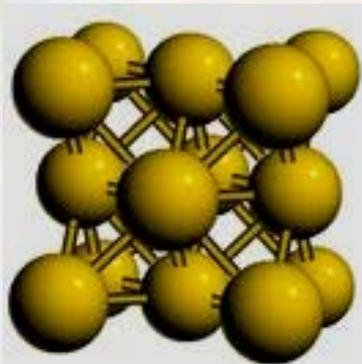


# EMPACOTAMENTO EM SÓLIDOS

- Dois tipos de ligação: Direcionais e Não-direcionais
  - Direcionais: Covalentes e Dipolo-Dipolo  
Arranjo deve satisfazer os ângulos das ligações direcionais
    - Sólidos Covalentes
  - Não-direcionais: Metálica, Iônica, van der Waals  
Arranjo depende de aspectos geométricos e da garantia de neutralidade elétrica
    - Sólidos Metálicos
    - Sólido Iônicos

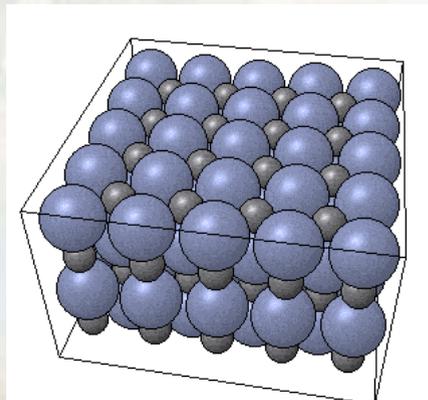
**Metálicos**

Ex.: Pb, Ni



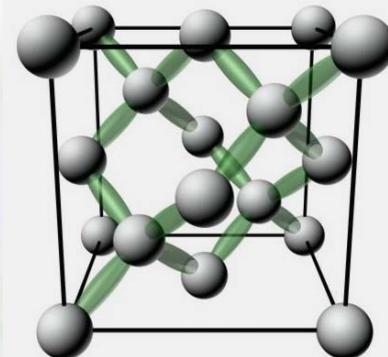
**Iônicos**

Ex.: NaCl



**Covalentes/Moleculares**

Ex.: Diamante, Gelo



# SISTEMAS CRISTALINOS

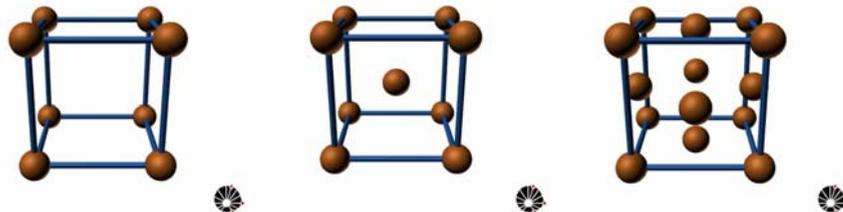
- Estruturas Cristalinas são formadas por unidades básicas e repetitivas denominadas de Células Unitárias
- Célula Unitária - menor arranjo de átomos que pode representar um sólido cristalino
- Existem 7 sistemas cristalinos básicos que englobam todas as substâncias cristalinas conhecidas

SISTEMAS	EIXOS	ÂNGULOS ENTRE OS EIXOS
CÚBICO	$a=b=c$	Todos os ângulos = $90^{\circ}$
TETRAGONAL	$a=b \neq c$	Todos os ângulos = $90^{\circ}$
ORTORRÔMBICO	$a \neq b \neq c$	Todos os ângulos = $90^{\circ}$
MONOCLÍNICO	$a \neq b \neq c$	2 ângulos = $90^{\circ}$ e 1 ângulo $\neq 90^{\circ}$
TRICLÍNICO	$a \neq b \neq c$	Todos ângulos diferentes e nenhum igual a $90^{\circ}$
HEXAGONAL	$a_1=a_2=a_3 \neq c$	2 ângulos = $90^{\circ}$ e 1 ângulo = $120^{\circ}$
ROMBOÉDRICO	$a=b=c$	Todos os ângulos iguais, mas diferentes de $90^{\circ}$

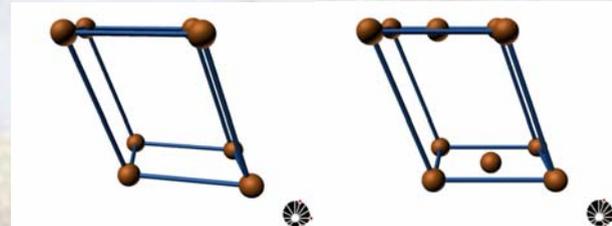


# CÉLULAS UNITÁRIAS DE BRAVAIS

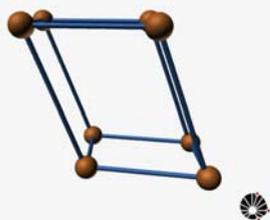
■ Classificação das 14 Células Unitárias de Bravais, baseada nos 7 Sistemas Cristalinos



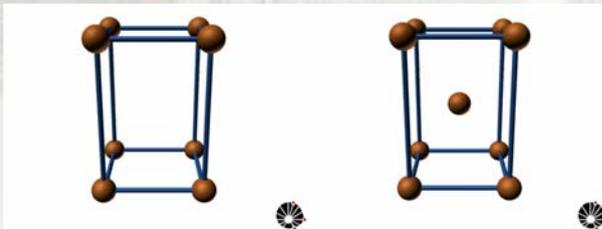
**Cúbico**  
( $a=b=c$  e  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ )



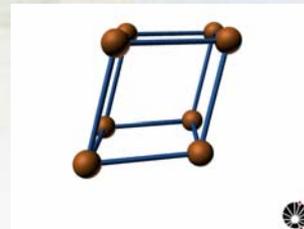
**Monoclínico**  
( $a \neq b \neq c$  e  $\alpha=\beta=90^\circ$  e  $\gamma \neq 90^\circ$ )



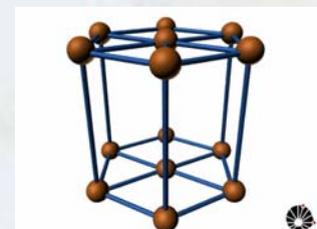
**Triclínico**  
( $a \neq b \neq c$  e  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ )



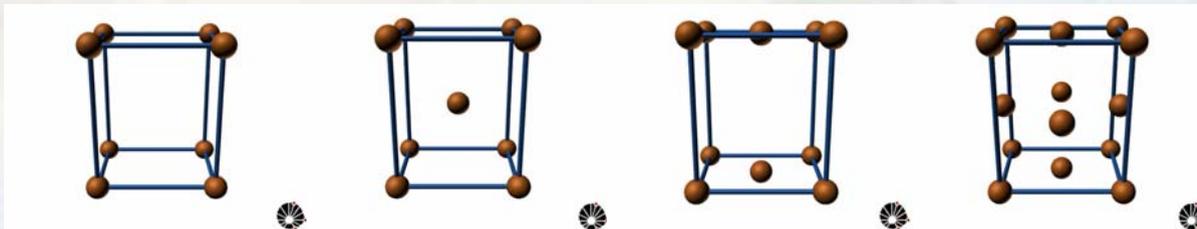
**Tetragonal**  
( $a=b \neq c$  e  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ )



**Romboédrico**  
( $a=b=c$  e  $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$ )



**Hexagonal**  
( $a_1=a_2=a_3 \neq c$  e  $\alpha=\beta=90^\circ$  e  $\gamma=120^\circ$ )



**Ortorrômico**  
( $a \neq b \neq c$  e  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ )



# PRINCIPAIS ESTRUTURAS CRISTALINAS

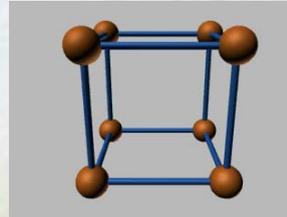
- **Maioria dos elementos metálicos (90%) cristaliza-se com estruturas altamente densas:**
  - **Cúbica de Corpo Centrado (CCC)**
  - **Cúbica de Face Centrada (CFC)**
  - **Hexagonal Compacta (HC)**
- **Dimensões das células cristalinas metálicas são pequenas:**
  - **Aresta de uma célula unitária de Fe à temperatura ambiente é igual a 0,287 nm**
- **Sólidos Cristalinos de 1 único elemento:**
  - **52% - estrutura cúbica**
  - **28% - estrutura hexagonal**
  - **20% - outros 5 tipos estruturais**



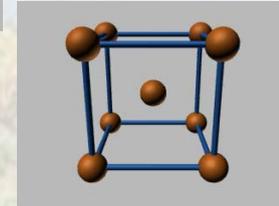
# CRISTAIS COMPACTOS

## ■ Cristais Cúbicos

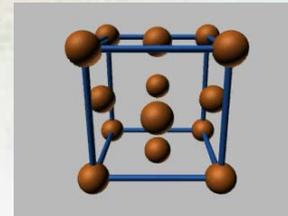
■ Cúbico simples (CS)



■ Cúbico de corpo centrado (CCC)

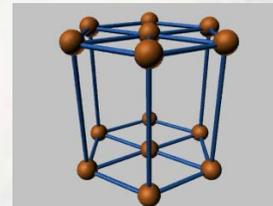


■ Cúbico de face centrada (CFC)

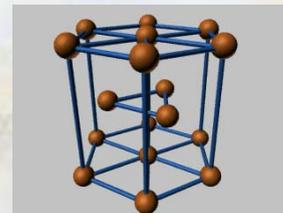


## ■ Cristais Hexagonais

■ Hexagonal simples (HS)



■ Hexagonal compacto (HC)



# FATOR DE EMPACOTAMENTO

- Fator de Empacotamento (F.E.): nível de ocupação por átomos de uma estrutura cristalina,

$$F.E. = \frac{N V_A}{V_C}$$



- $N$  = Número de átomos que efetivamente ocupam a célula;
- $V_A$  = Volume do átomo ( $4/3.\pi.r^3$ );
- $r$  = Raio do átomo;
- $V_C$  = Volume da célula unitária.



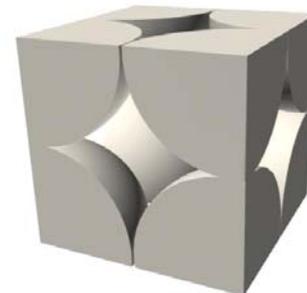
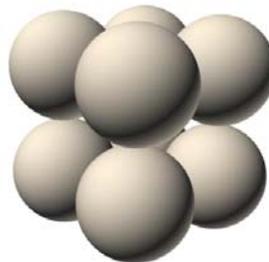
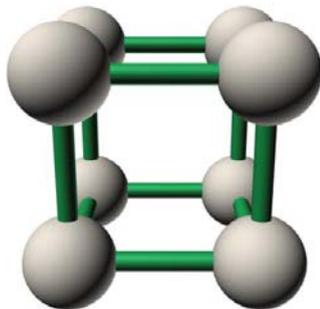
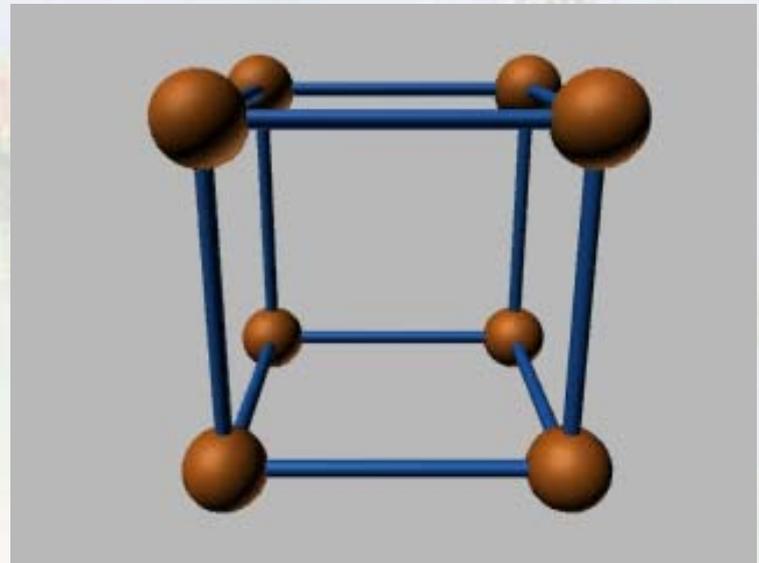
# ESTRUTURA CS - P<sub>o</sub>

- N<sup>o</sup> de átomos dentro da célula unitária
  - 1/8 de átomo em cada vértice:  $8 \times 1/8 = 1$  átomo
- Volume da célula

$$V_C = a^3 = (2r)^3 = 8r^3$$

- Fator de Empacotamento

$$F.E. = \frac{1 \frac{4}{3} \pi r^3}{8r^3} = 0,52$$



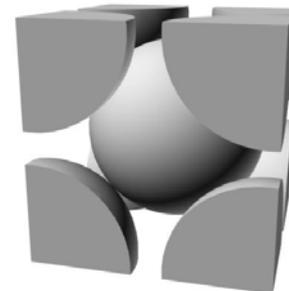
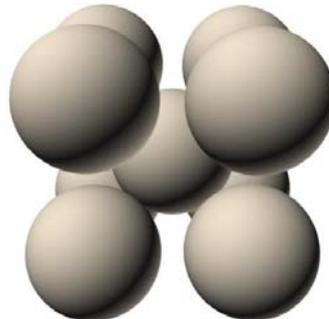
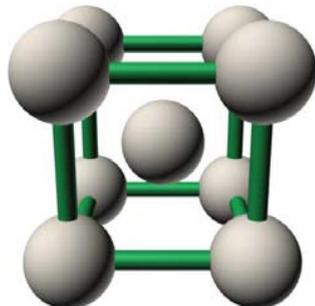
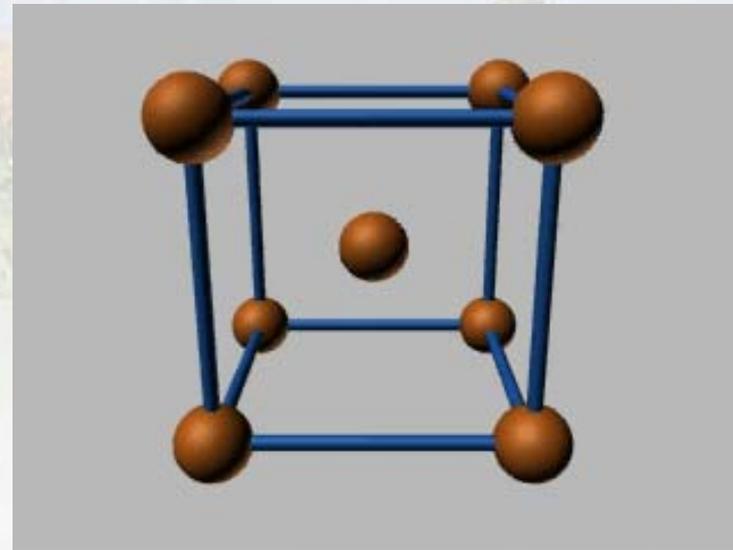
# ESTRUTURA CCC - Fe, Nb, Cr

- Nº de átomos dentro da célula unitária
  - 1/8 de átomo nos vértices e 1 no centro:  $8 \times 1/8 + 1 = 2$  átomos
- Volume da célula

$$V_C = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3 = \frac{64 r^3}{3\sqrt{3}}$$

- Fator de Empacotamento

$$F.E. = \frac{\frac{8}{3} \pi r^3}{\frac{64 r^3}{3\sqrt{3}}} = 0,68$$



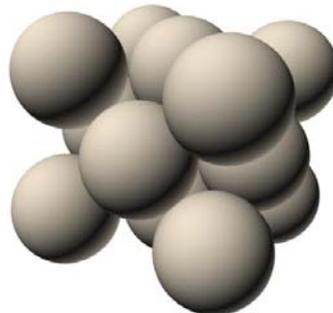
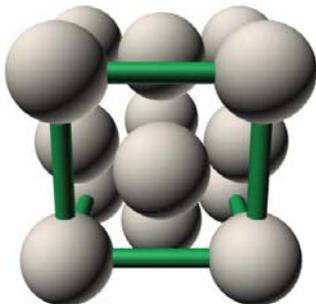
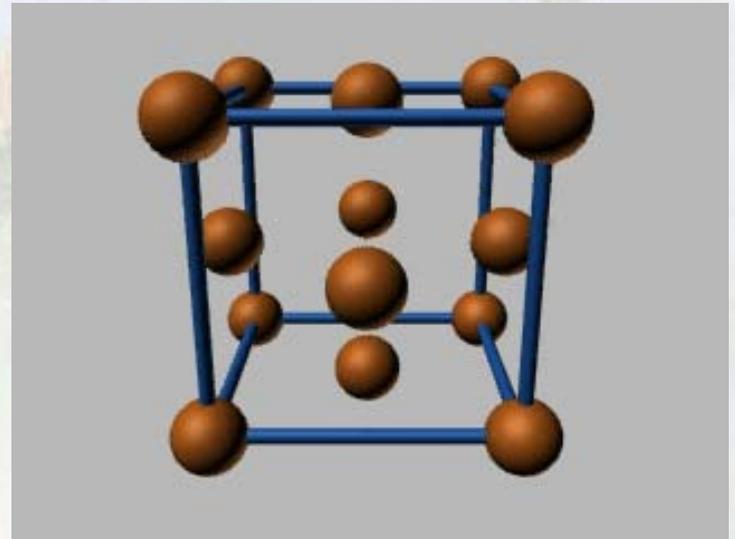
# ESTRUTURA CFC - Al, Cu, Au, Ag

- Nº de átomos dentro da célula unitária
  - 1/8 de átomo nos vértices e 1/2 nas faces:  $8 \times 1/8 + 3 = 4$  átomos
- Volume da célula

$$V_C = a^3 = (2\sqrt{2}r)^3 = 16\sqrt{2}r^3$$

- Fator de Empacotamento

$$F.E. = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{16\sqrt{2}r^3} = 0,74$$



# ESTRUTURA HS

- Nº de átomos dentro da célula unitária

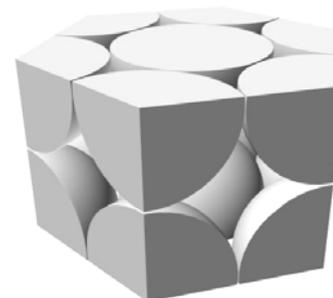
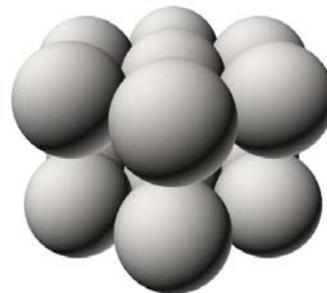
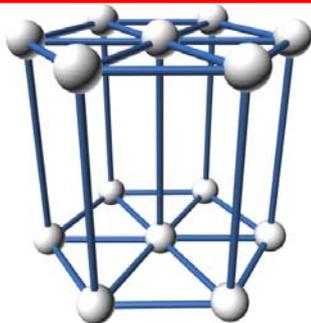
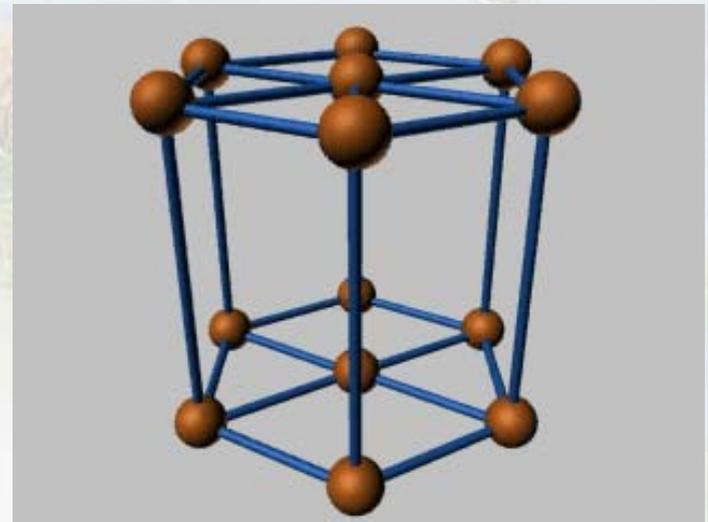
- 1/6 de átomo nos vértices e 1/2 nas faces:  $12 \times 1/6 + 1 = 3$  átomos

- Volume da célula

$$V_{\text{HS}} = S_{\text{He H}} = \frac{6 a^2 \sqrt{3}}{4} a = 12 \sqrt{3} r^3$$

- Fator de Empacotamento

$$\text{F.E.} = \frac{\frac{12}{3} \pi r^3}{12 \sqrt{3} r^3} = 0,60$$



# ESTRUTURA HC - Ti, Mg, Zn

- N<sup>o</sup> de átomos dentro da célula unitária

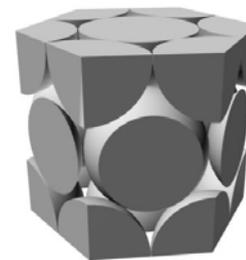
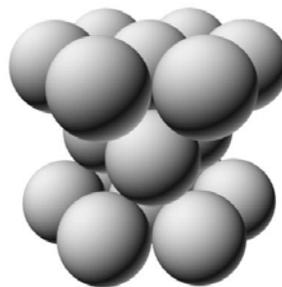
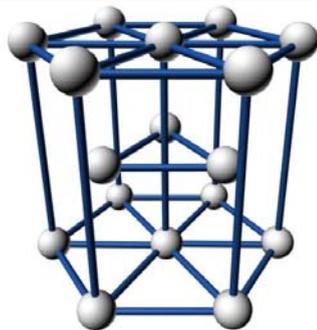
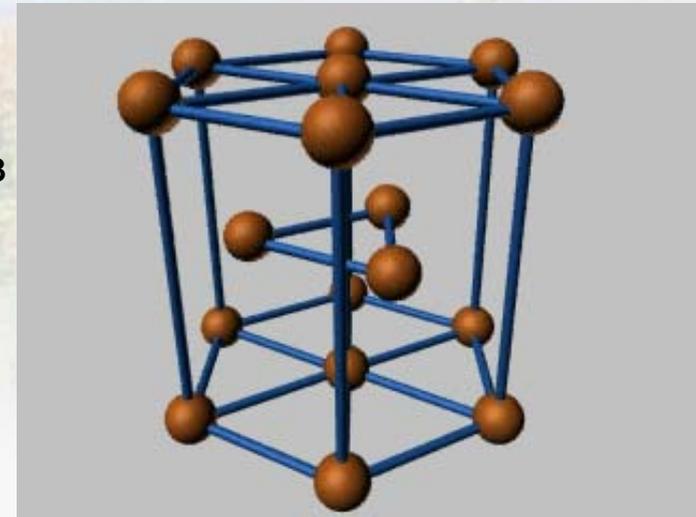
- 1/6 de átomo nos vértices e 1/2 nas faces e 3 no interior:  
 $12 \times 1/6 + 1 = 3$  átomos

- Volume da célula

$$V_{\text{HC}} = S_{\text{He}} H = \frac{6 a^2 \sqrt{3}}{4} \frac{2 \sqrt{2} a}{\sqrt{3}} = 24 \sqrt{2} r^3$$

- Fator de Empacotamento

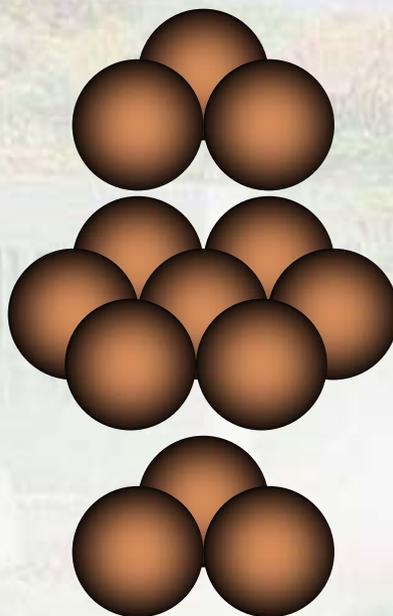
$$\text{F.E.} = \frac{\frac{24}{3} \pi r^3}{24 \sqrt{2} r^3} = 0,74$$



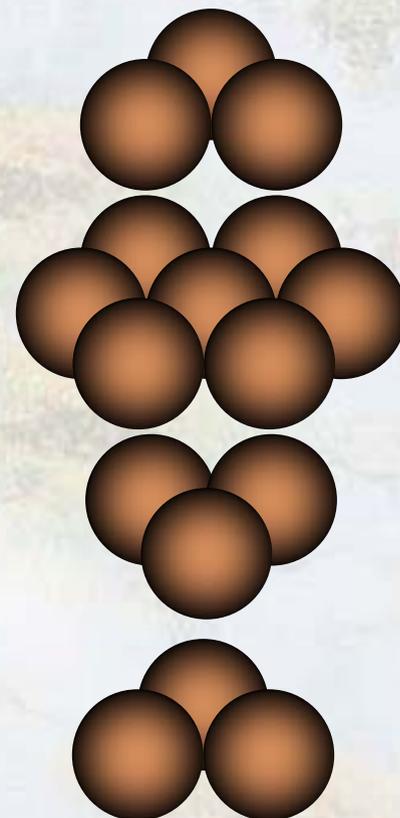
# SEQÜÊNCIA DE EMPILHAMENTO

## ■ Fator de Empacotamento das estruturas cúbicas e hexagonais:

- CS - 0,52
- CCC - 0,68
- CFC - 0,74 ⇐
- HS - 0,60
- HC - 0,74 ⇐



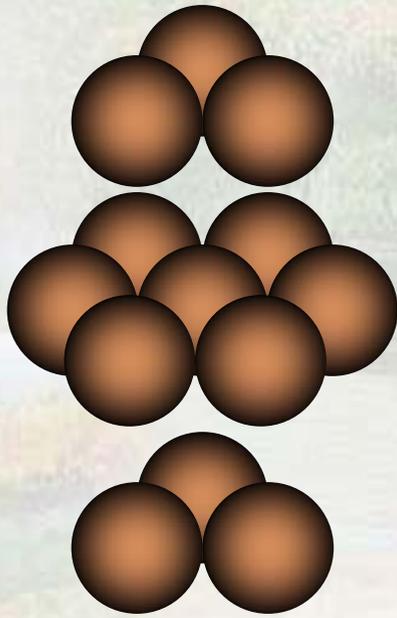
HC



CFC



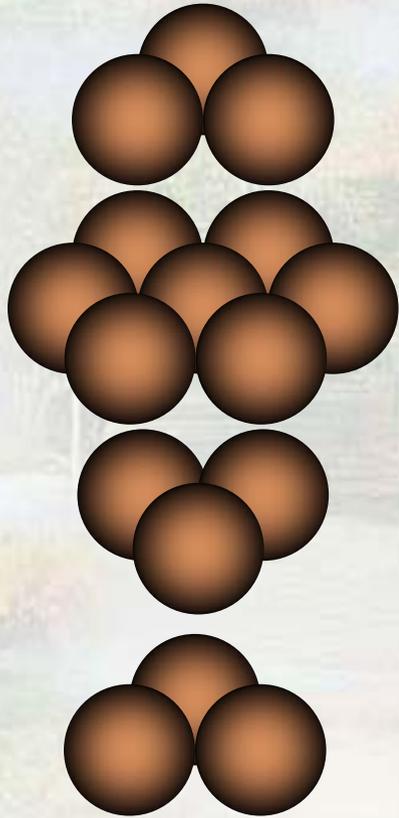
# ESTRUTURA HC



HC



# ESTRUTURA CFC



CFC



# ALOTROPIA OU POLIMORFISMO

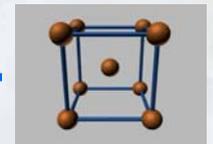
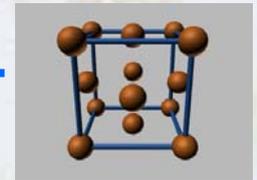
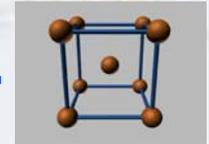
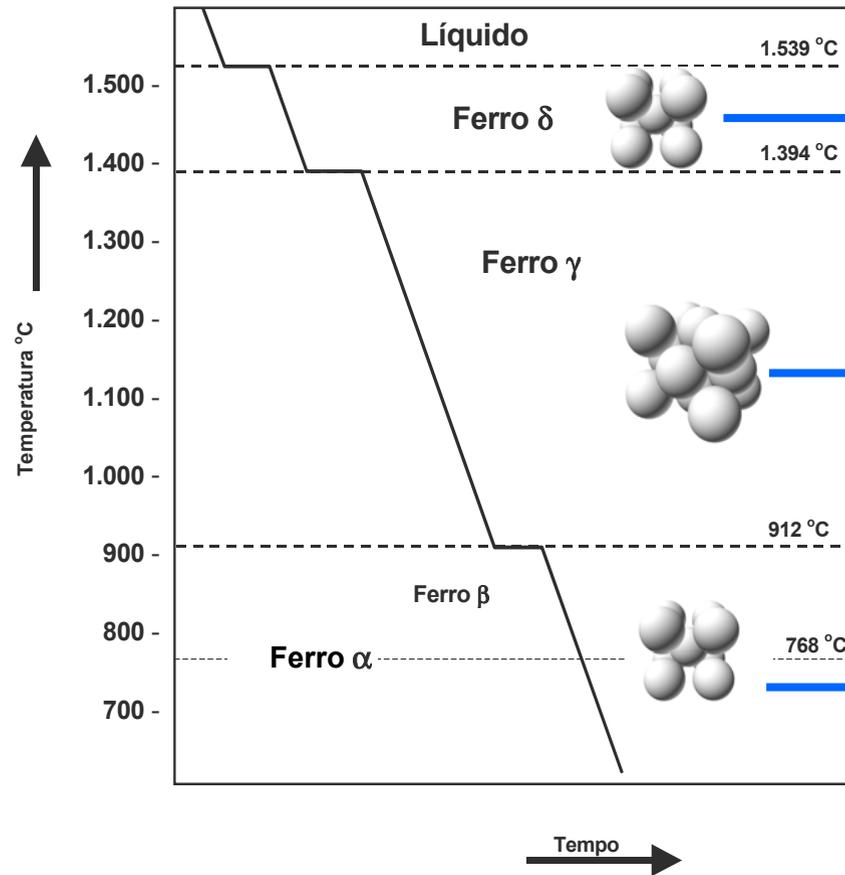
- Fenômeno onde uma substância apresenta variações de arranjos cristalinos em diferentes condições
- Dos elementos químicos conhecidos, 40 % apresentam variações alotrópicas

METAL	ESTRUTURA NA TEMP. AMBIENTE	EM OUTRAS TEMPERATURAS
Ca	CFC	CCC (>447 <sup>0</sup> C)
Co	HC	CFC (>427 <sup>0</sup> C)
Hf	HC	CFC (>1.742 <sup>0</sup> C)
Fe	CCC	CFC (912-1.394 <sup>0</sup> C) CCC (>1.394 <sup>0</sup> C)
Li	CCC	HC (<-193 <sup>0</sup> C)
Na	CCC	HC (<-233 <sup>0</sup> C)
Sr	CFC	CCC (>557 <sup>0</sup> C)
Tl	HC	CCC (>234 <sup>0</sup> C)
Ti	HC	CCC (>883 <sup>0</sup> C)
Y	HC	CCC (>1.481 <sup>0</sup> C)
Zr	HC	CCC (>872 <sup>0</sup> C)

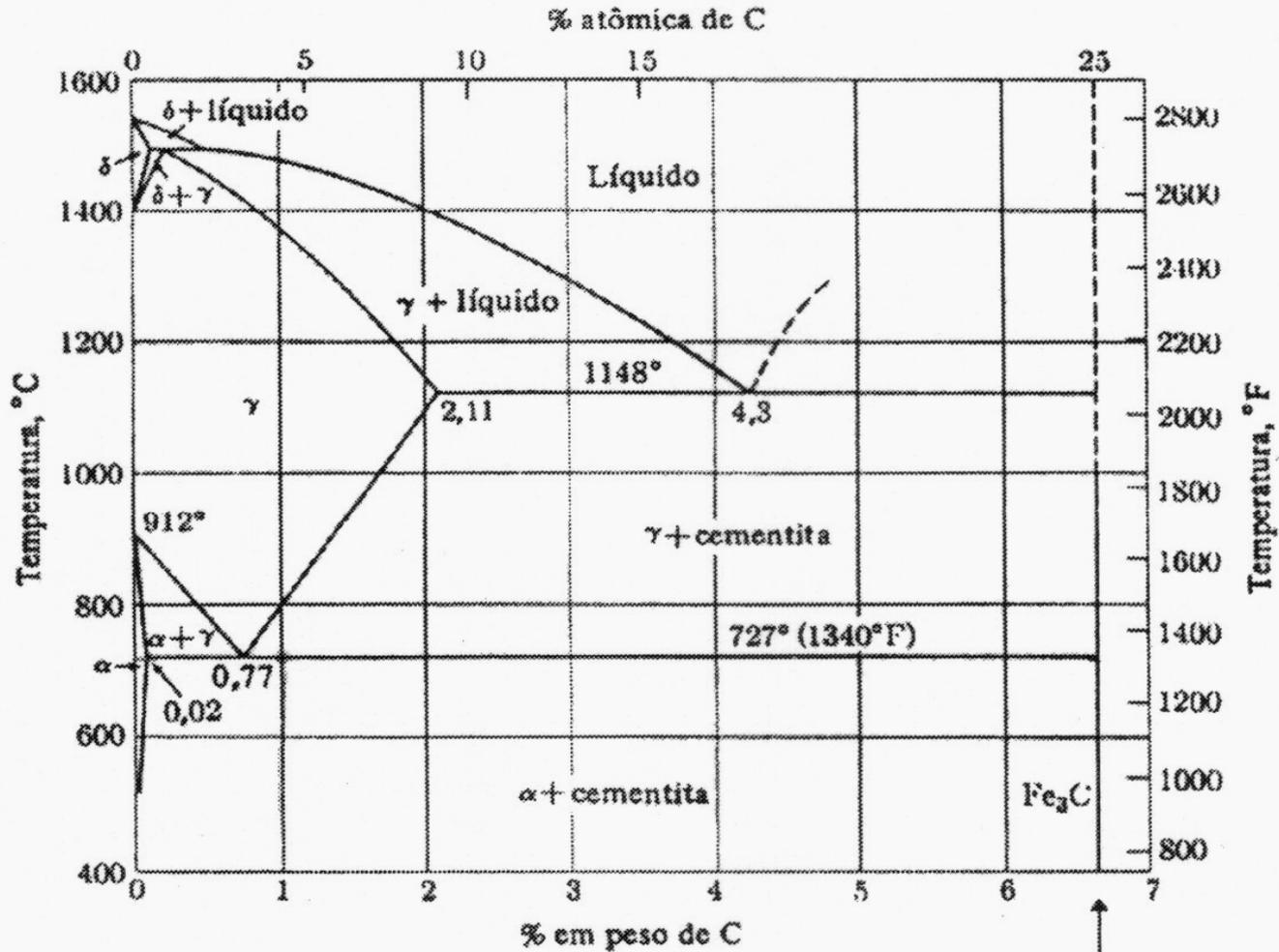


# POLIMORFISMO DO Fe

## ■ Ferro Puro



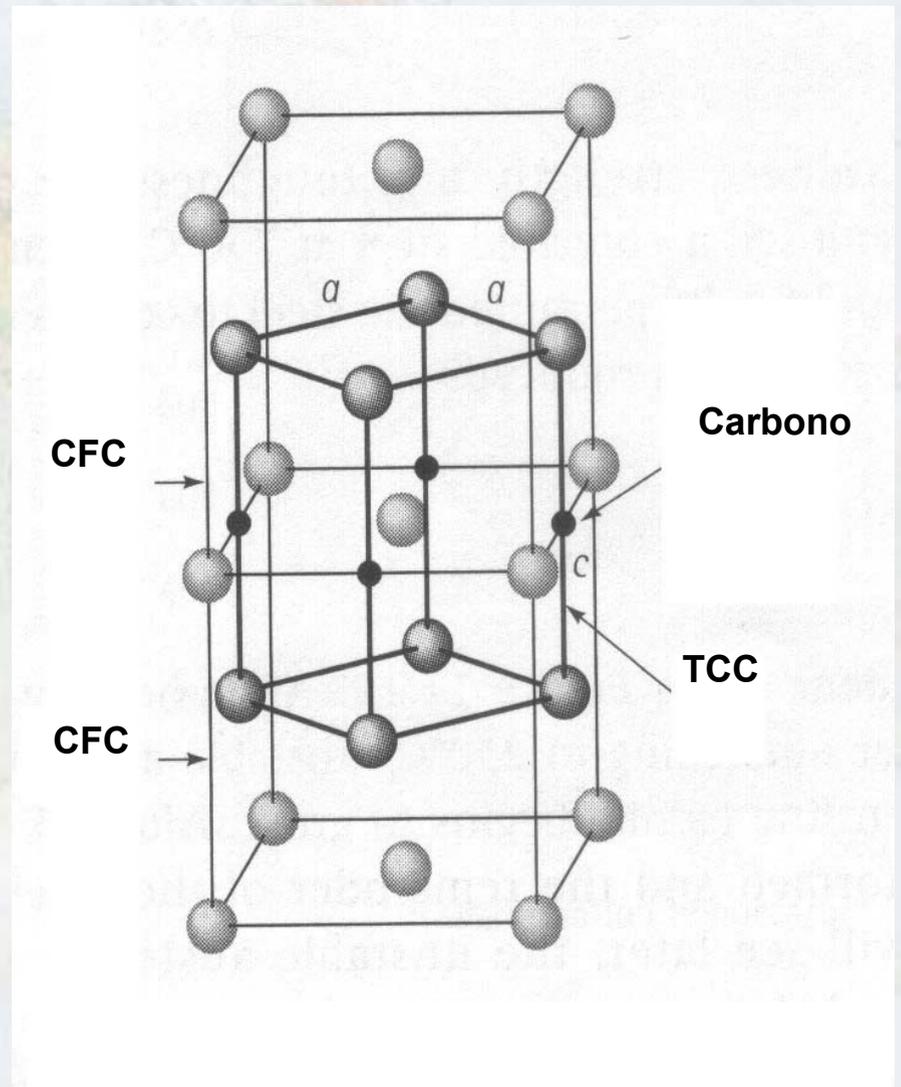
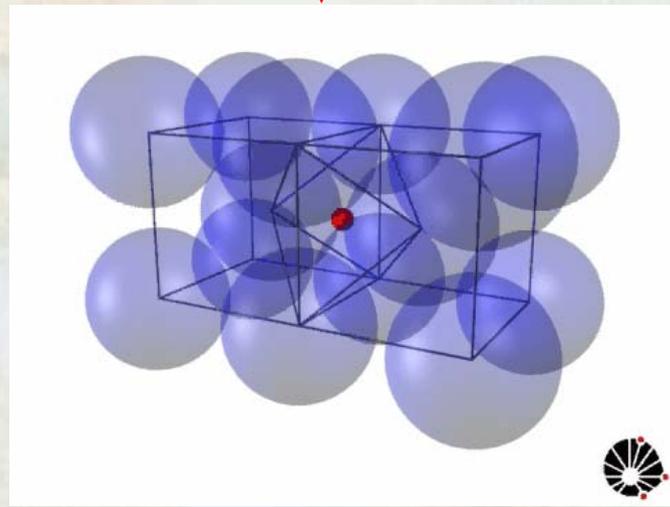
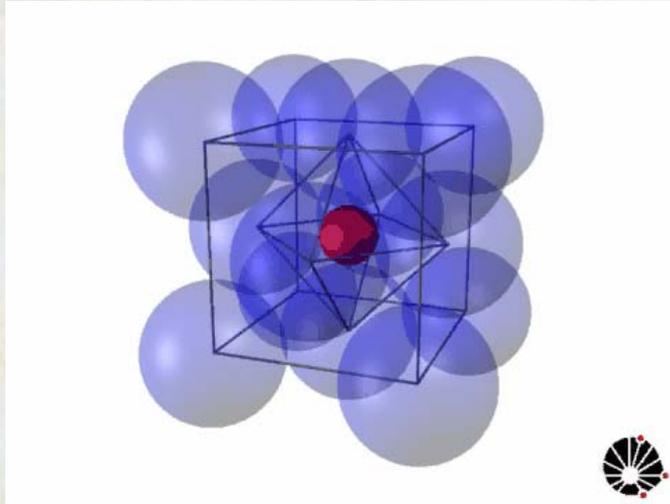
# Fe-C



6,7%



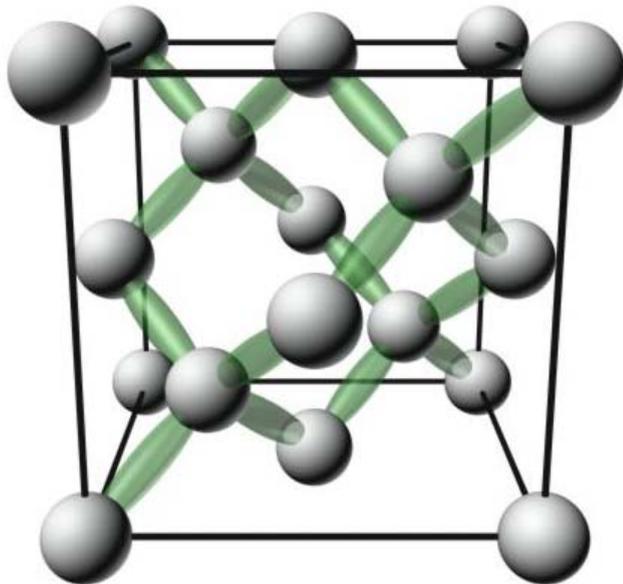
# MARTENSITA



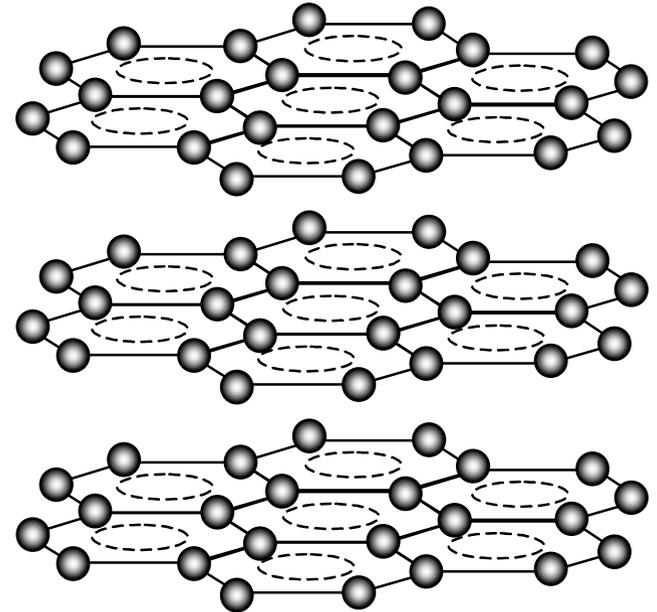
# POLIMORFISMO DO C

## ■ Carbono

DIAMANTE



GRAFITE



# EXERCÍCIO

- À TEMPERATURA AMBIENTE, O ESTRÔNCIO EXIBE ESTRUTURA CFC. AO SER AQUECIDO ACIMA DE 557 °C, ESSE ARRANJO ATÔMICO TRANSFORMA-SE EM CCC. DETERMINE A VARIAÇÃO DE VOLUME QUE ENVOLVE ESSA TRANSFORMAÇÃO ALOTRÓPICA. CONSIDERE QUE O RAIOS ATÔMICO PERMANECE CONSTANTE.

- Antes da transformação:

$$V_I = V_{\text{CFC}} = a^3 = (2\sqrt{2}R)^3 = 16\sqrt{2}R^3 = 22,62R^3$$

- Após a transformação:

$$V_F = 2V_{\text{CCC}} = 2a^3 = 2\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 = \frac{128}{3\sqrt{3}}R^3 = 24,63R^3$$

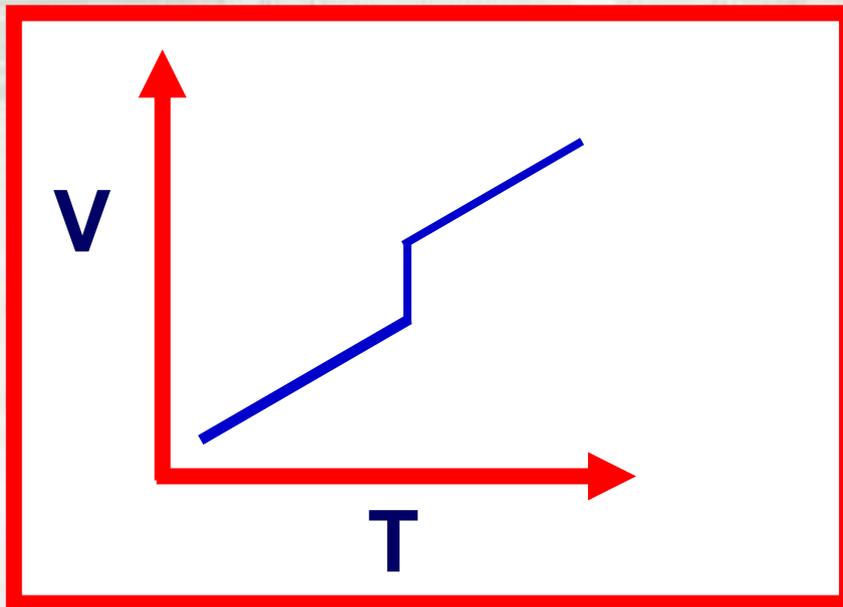


# EXERCÍCIO

■ A VARIACÃO DE VOLUME É DADA POR:

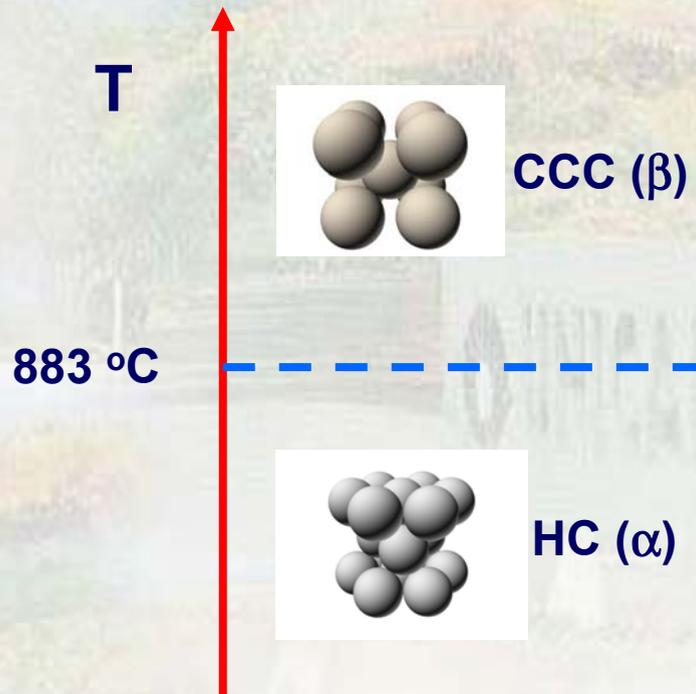
$$\Delta V = \frac{24,63R^3 - 22,62R^3}{22,62R^3} = 0,089 \quad \text{ou} \quad 8,9\%$$

OCORREU EXPANSÃO VOLUMÉTRICA EQUIVALENTE A:  
**8,9%** DO VOLUME INICIAL.



# POLIMORFISMO DO Ti

## ■ Titânio



- Baixa densidade, boa resistência mecânica, alta resistência à fadiga e à corrosão;
- Modificação do comportamento mecânico é obtido com a adição de elementos de liga ao titânio;
- Elementos de liga podem mudar a estabilidade das estruturas cristalinas.



# LIGAS DE Ti

- **Liga Ti-6Al-4V:** definida como tipo  $\alpha+\beta$ , boa conformabilidade mecânica, elevada resistência à fadiga e excelente resistência à corrosão.

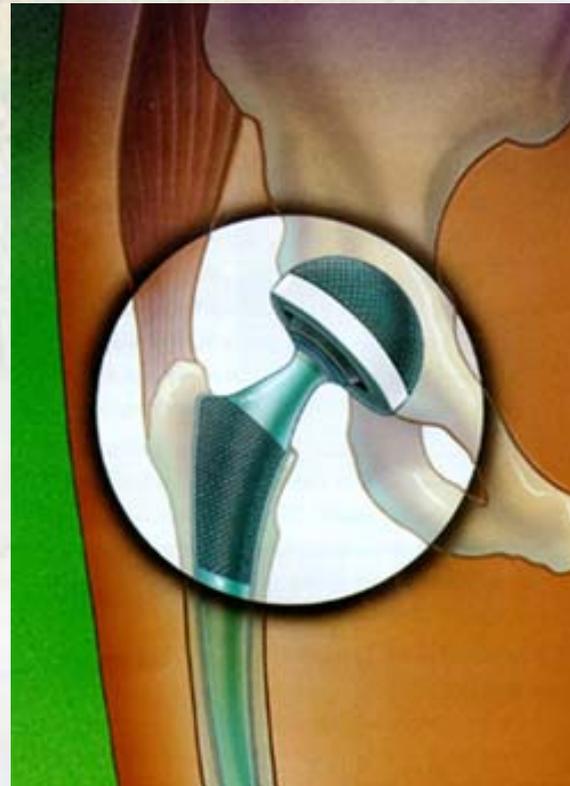


**Liga Ti-6Al-4V: fase de estrutura CCC é estabilizada pela presença do V**



# APLICAÇÃO: PRÓTESE TOTAL DE QUADRIL

- Conceitos da estrutura interna do materiais podem ser aplicados na otimização de propriedades mecânicas, em aplicações específicas



# ARTROPLASTIA DO QUADRIL



**Remoção da  
cabeça do fêmur**



**Preparação de  
cavidade no acetábulo**



**Exame da forma  
da cavidade**



**Preparação da  
cavidade no fêmur**



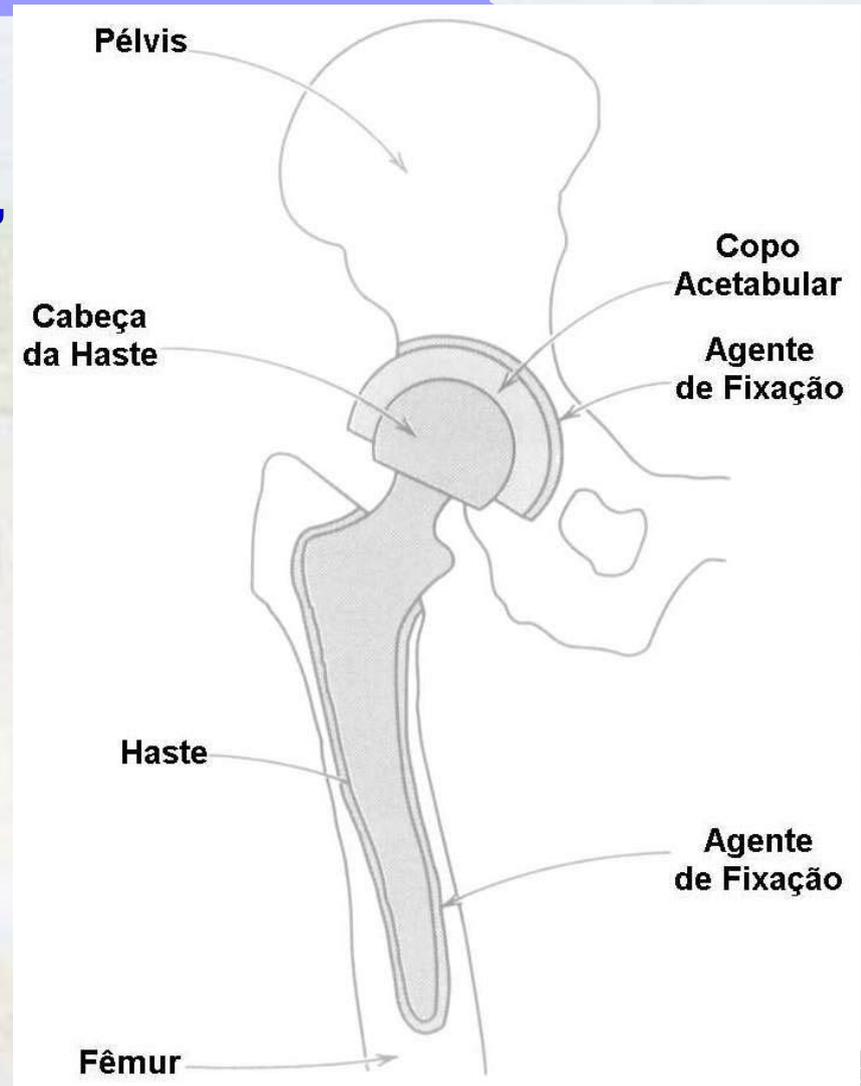
**Inserção da  
haste metálica**



**Inserção da  
cabeça do haste**

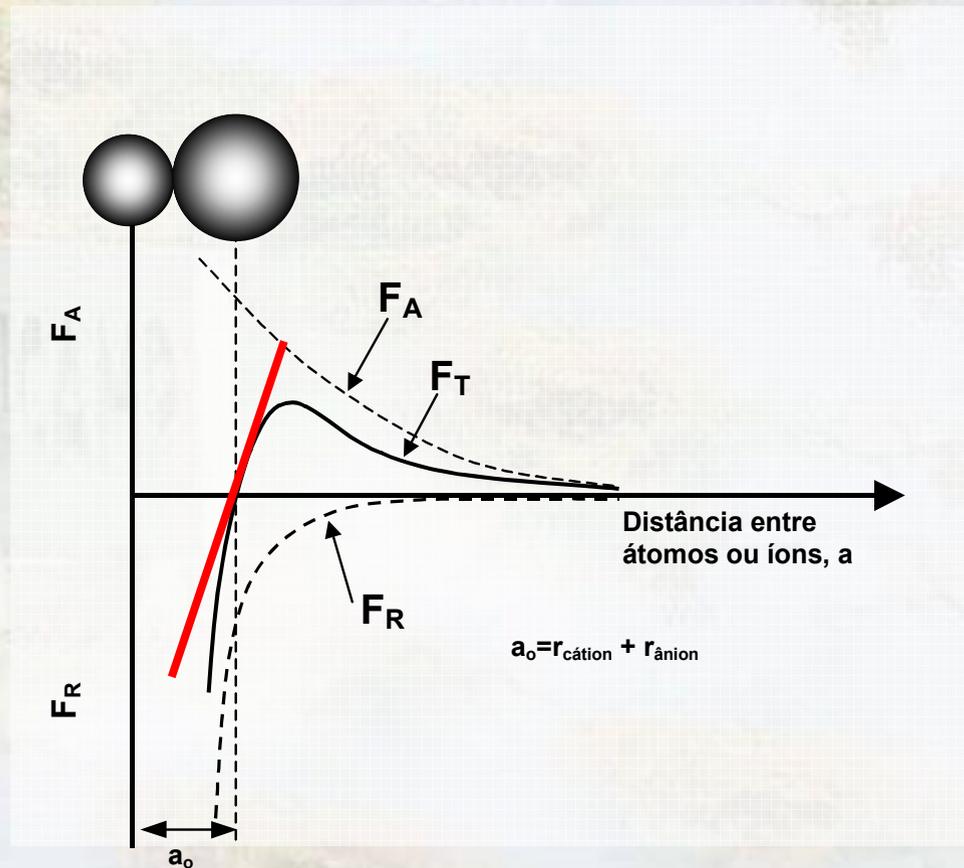
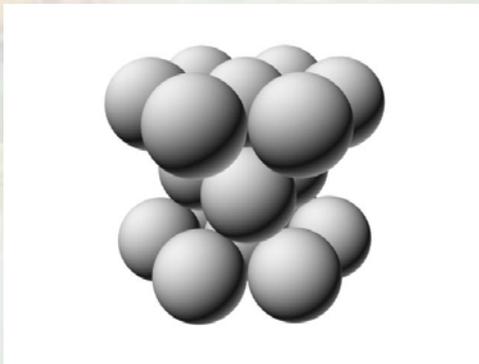
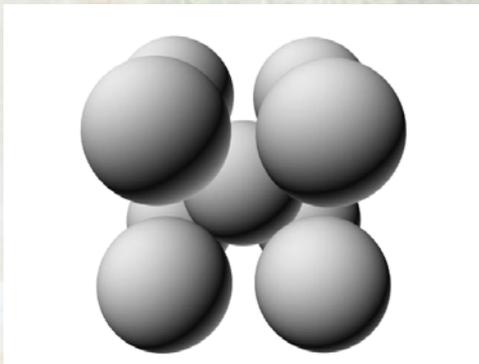
# REQUISITOS DE IMPLANTES

- Alta resistência mecânica, elevada biocompatibilidade e alta resistência à corrosão, implante ortopédico deve simular o comportamento elástico do tecido ósseo próximo
- Módulo de elasticidade é a propriedade de maior interesse nesse caso:
  - E osso: 10 - 40 GPa
  - E aço inox: 200 GPa
  - E Ti puro: 100 GPa
  - E Ti-6Al-4V: 110 GPa
  - E ligas  $\beta$ : 50 GPa



# MÓDULO DE ELASTICIDADE E ESTRUTURA

- Estruturas menos compactas exibem menor módulo de elasticidade



# EFEITO DO MÓDULO DE ELASTICIDADE

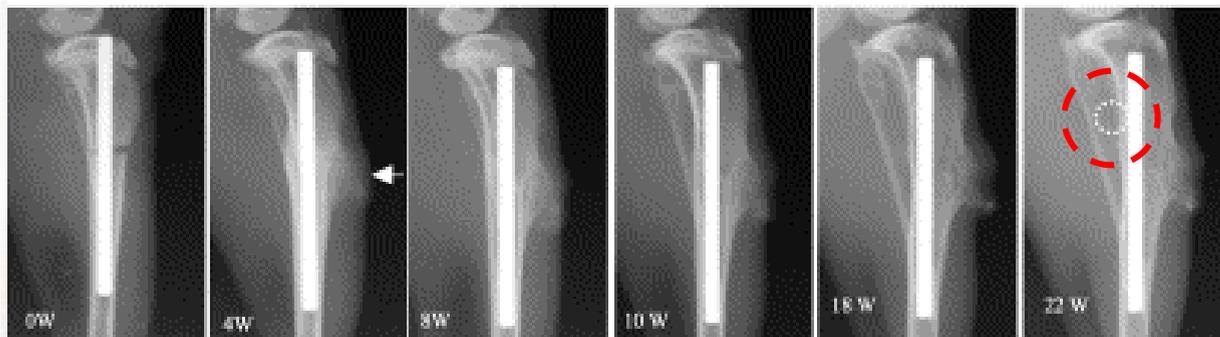
Liga de Ti  
Tipo  $\beta$   
 $E \cong 52 \text{ GPa}$



Liga de Ti  
Tipo  $\alpha+\beta$   
 $E \cong 110 \text{ GPa}$



Aço Inox  
316L  
 $E \cong 200 \text{ GPa}$



# EFEITO DO MÓDULO DE ELASTICIDADE

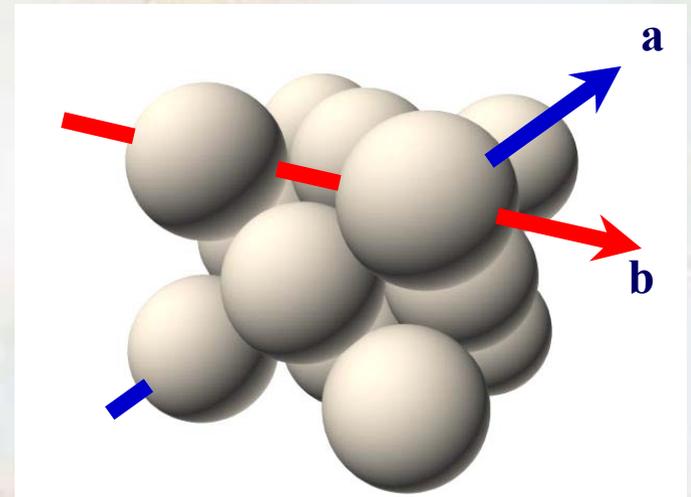
## Fratura óssea (fêmur)

Aço Inox 316L  
 $E \cong 200 \text{ GPa}$



# DIREÇÕES E PLANOS EM CRISTAIS

- FREQUENTEMENTE É NECESSÁRIO IDENTIFICAR DIREÇÕES E PLANOS ESPECÍFICOS EM CRISTAIS
- POR EXEMPLO
  - PROPRIEDADES MECÂNICAS X DIREÇÕES E PLANOS:
  - MÓDULO DE ELASTICIDADE (direções mais compactas → maior módulo)
  - DEFORMAÇÃO PLÁSTICA (deslizamento de planos → planos compactos)

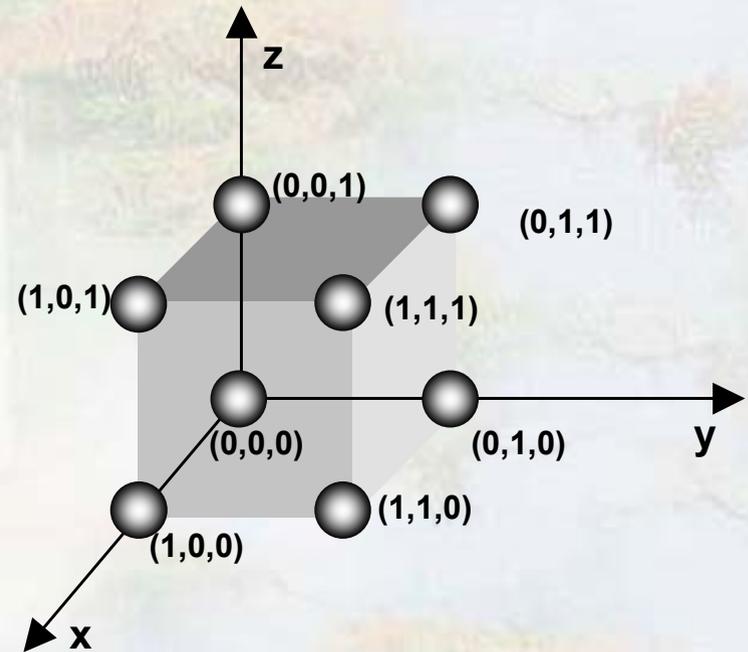
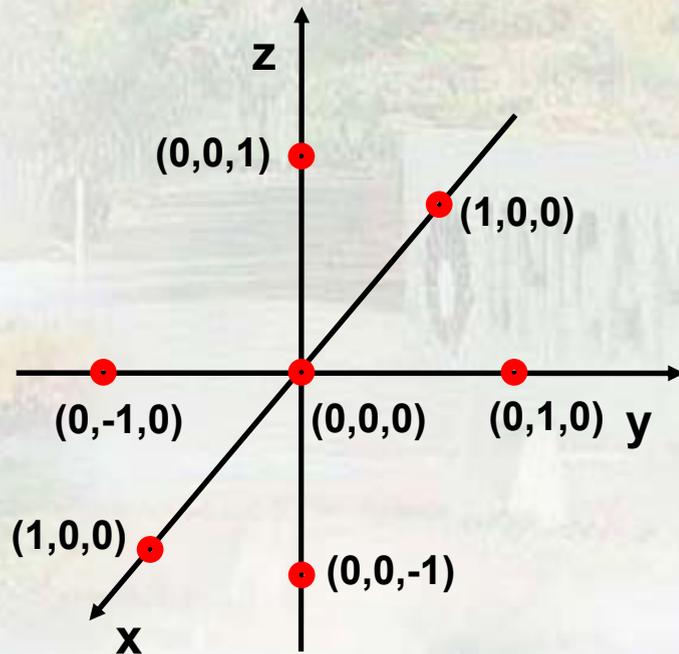


# DIREÇÕES E PLANOS EM CRISTAIS



# DIREÇÕES E PLANOS EM CRISTAIS

- INDICAÇÃO DE DIREÇÕES E PLANOS ENVOLVE O ESTABELECIMENTO DE POSIÇÕES NO CRISTAL, DAS POR SUAS COORDENADAS

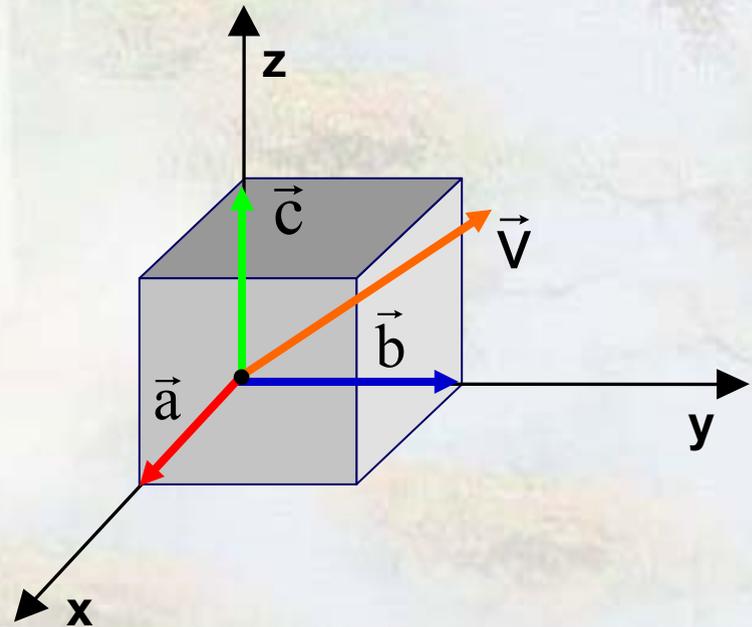
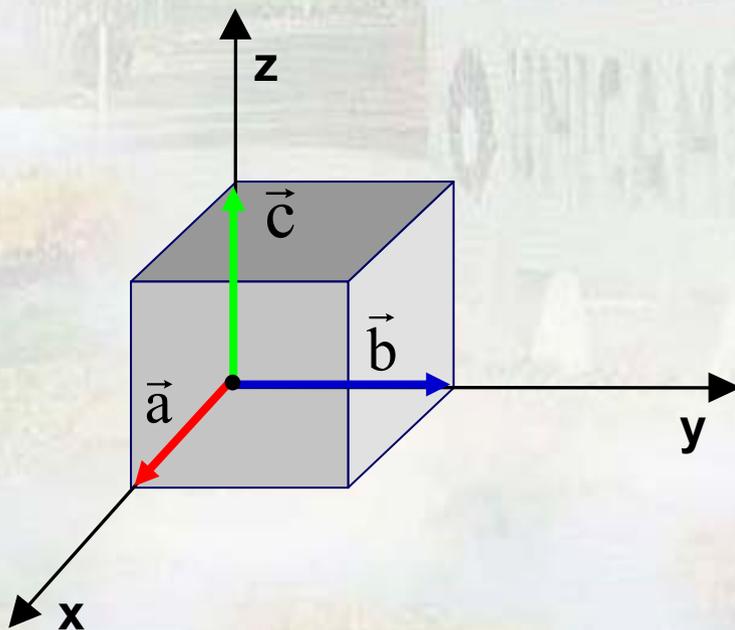


COORDENADAS SÃO EXPRESSAS EM TERMOS DOS PARÂMETROS DE REDE DA CÉLULA CRISTALINA (NÃO SÃO USADAS UNIDADES – cm OU Å)



# DIREÇÕES EM CRISTAIS CÚBICO

- A PARTIR DOS VETORES  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  E  $\vec{c}$ , PODE-SE REPRESENTAR QUALQUER VETOR NO SISTEMA CRISTALINO
- UM VETOR DA ORIGEM ATÉ O PONTO (X,Y,Z) É REPRESENTADO POR:  $\vec{v} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$



# DETERMINAÇÃO DE UMA DIREÇÃO

- Uma direção é dada pelas componentes do vetor que a escreve no sistema ortogonal  $x,y,z$ , partindo da origem, até o ponto  $(x,y,z)$ ;
- As coordenadas são reduzidas ao menor conjunto de números inteiros;
- A unidade de medida de cada eixo é função do parâmetro de rede de cada eixo e assim, não representa valores reais de distância;
- A notação empregada é  $[u\ v\ w]$  (entre colchetes) e representa uma linha que vai da origem até um ponto de coordenadas  $(u,v,w)$ ;



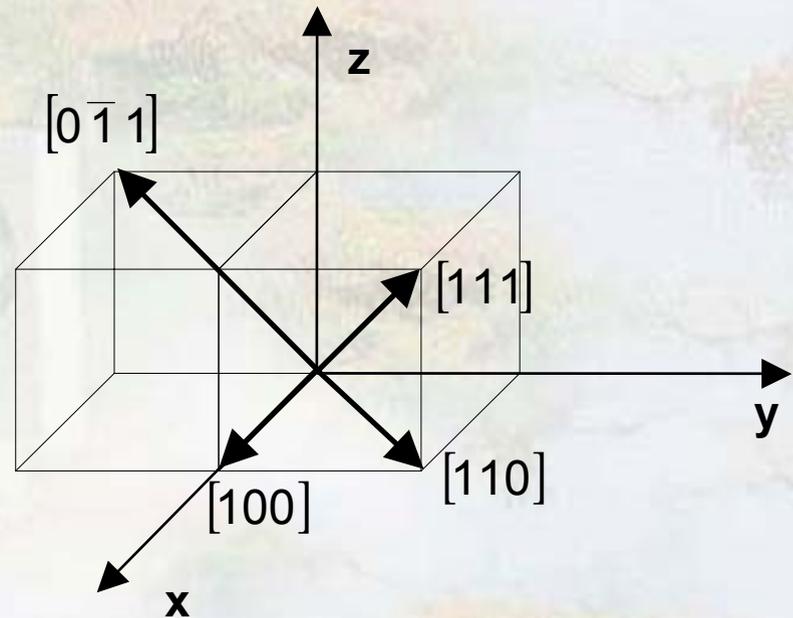
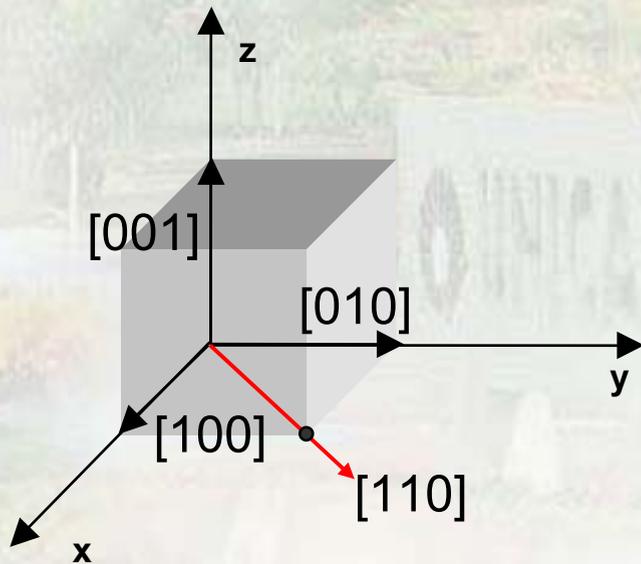
# DETERMINAÇÃO DE UMA DIREÇÃO

- Os índices negativos são representados por uma barra sobre os mesmos:  $[\bar{u}vw]$ ;
- Quaisquer direções paralelas são equivalentes;
- Um vetor que passa na origem, em (1,1,1), em (2,2,2), e em (3,3,3) pode ser identificado pela direção  $[111]$ ;
- Em cristais, uma família de direções está associada a um conjunto de direções com características equivalentes. A notação empregada para representar uma família de direções é  $\langle uvw \rangle$ , que contém as direções:  $[uvw]$ ,  $[\bar{u}vw]$ ,  $[u\bar{v}w]$ ,  $[uv\bar{w}]$ ,  $[\bar{u}v\bar{w}]$  ...

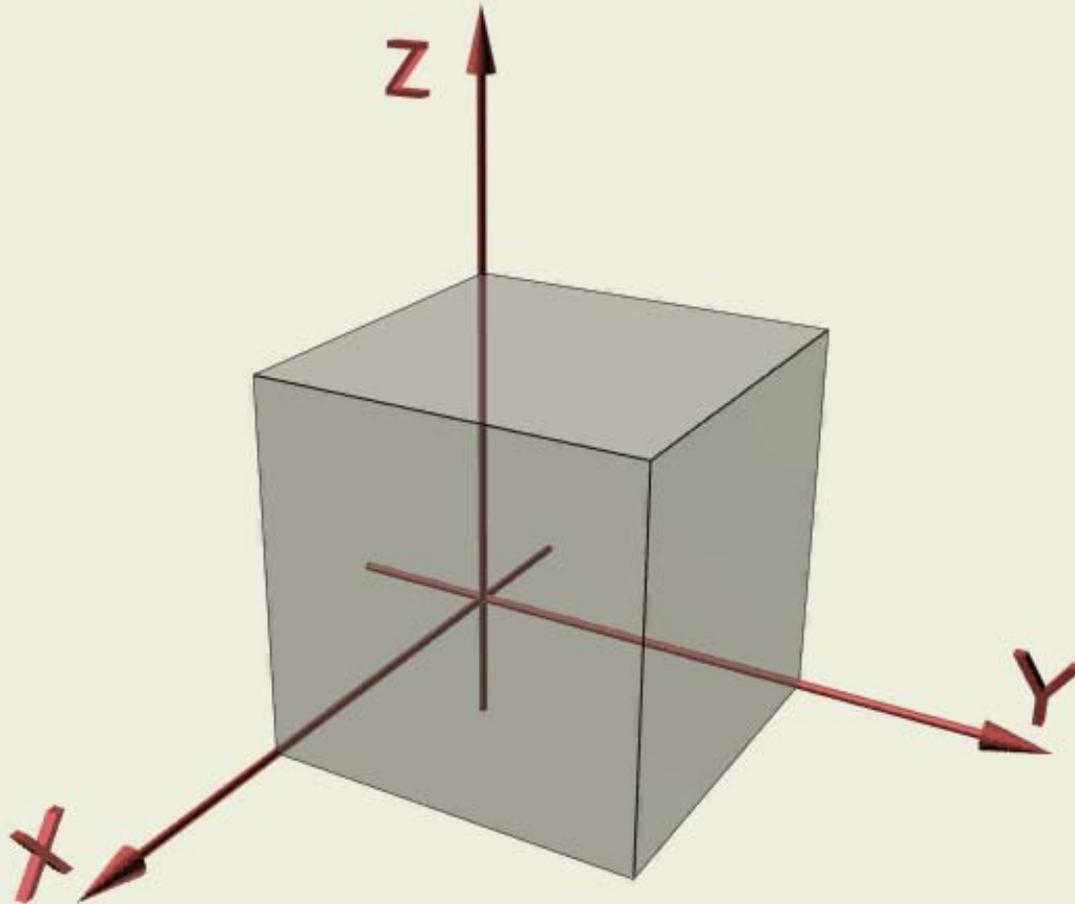


# DETERMINAÇÃO DE DIREÇÕES

- DA ORIGEM ATÉ O PONTO EM QUESTÃO

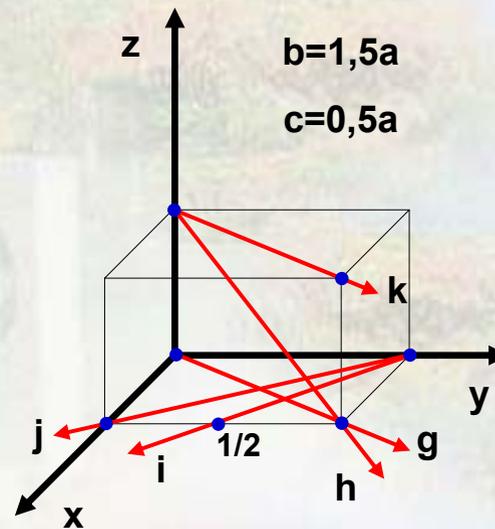
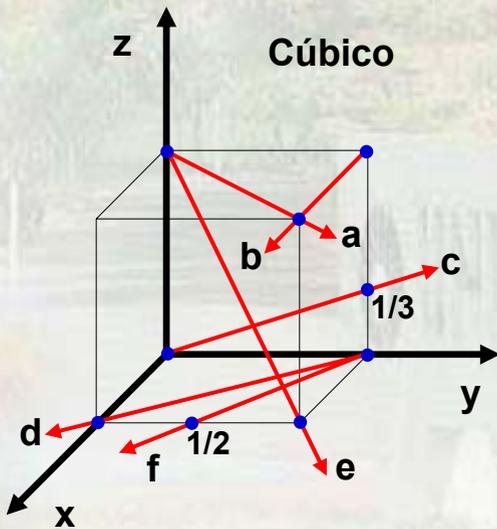


# DIREÇÕES



# EXERCÍCIOS

- DETERMINE AS DIREÇÕES A SEGUIR:



# PLANOS EM CRISTAIS CÚBICO

- PLANOS SÃO IDENTIFICADOS PELOS ÍNDICES DE MILLER.
- UM PLANO DEVE SATISFAZER A EQUAÇÃO:

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1 \quad \leftarrow \text{EQUAÇÃO DO PLANO}$$

ONDE  $a$ ,  $b$  E  $c$  SÃO OS PONTOS DE INTERCEPTAÇÃO DO PLANO COM OS EIXOS  $x$ ,  $y$  E  $z$ .

- COMO  $a$ ,  $b$  E  $c$  PODEM SER MENORES QUE 1 OU INFINITO NO CASO DO PLANO SER PARALELO A UM EIXO, ADOTA-SE O INVERSO DOS VALORES DE  $a$ ,  $b$  E  $c$ :

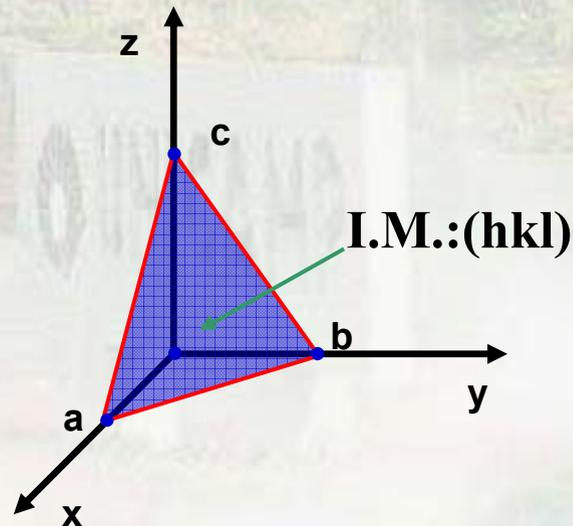
$$h=1/a; k=1/b; l=1/c$$



# PLANOS EM CRISTAIS CÚBICOS

## ■ ÍNDICES DE MILLER $h, k$ E $l$

$$hx + ky + lz = 1 \quad \leftarrow \text{EQUAÇÃO DO PLANO}$$



# DETERMINAÇÃO DE PLANOS

- Plano a ser determinado não pode passar pela origem (0,0,0);
- Planos paralelos são equivalentes;
- Obtenção dos pontos de interceptação do plano com os eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ ;
- Obtenção dos inversos das interceptações:  $h=1/a$ ,  $k=1/b$  e  $l=1/c$ ;
- Obtenção do menor conjunto de números inteiros;
- Índices obtidos devem ser apresentados entre parênteses:  $(hkl)$ ;

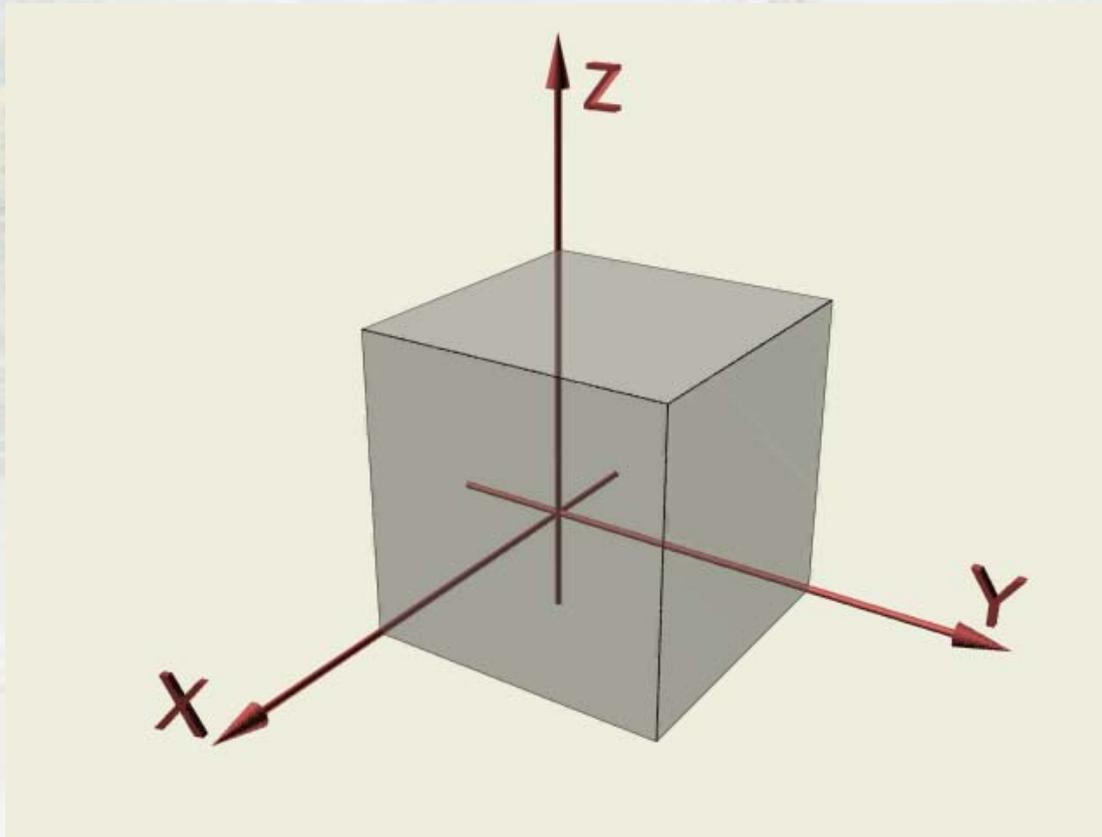


# DETERMINAÇÃO DE PLANOS

- Plano a ser determinado não pode passar pela origem (0,0,0);
- Índices negativos são representados por uma barra sobre os mesmos:  $(\bar{h}kl)$ ;
- Em cristais, alguns planos podem ser equivalentes, o que resulta em uma família de planos. A notação empregada para representar uma família de planos é  $\{hkl\}$ , que contém os planos  $(hkl)$ ,  $(\bar{h}kl)$ ,  $(h\bar{k}l)$ ,  $(hk\bar{l})$ ,  $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$   
...

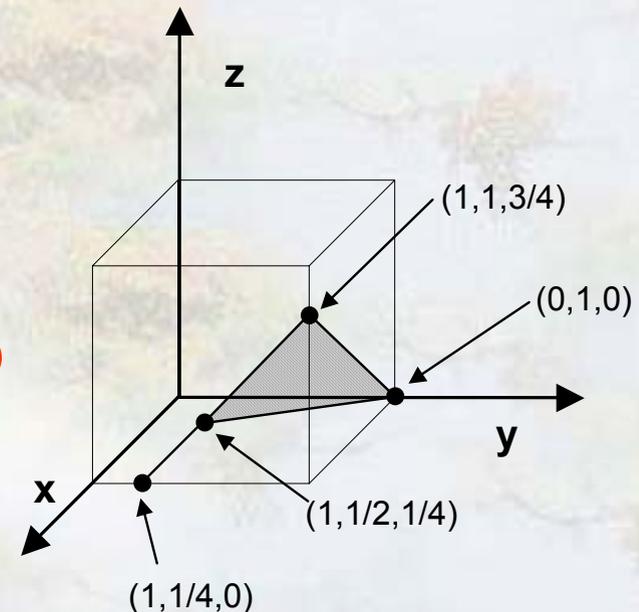


# PLANOS



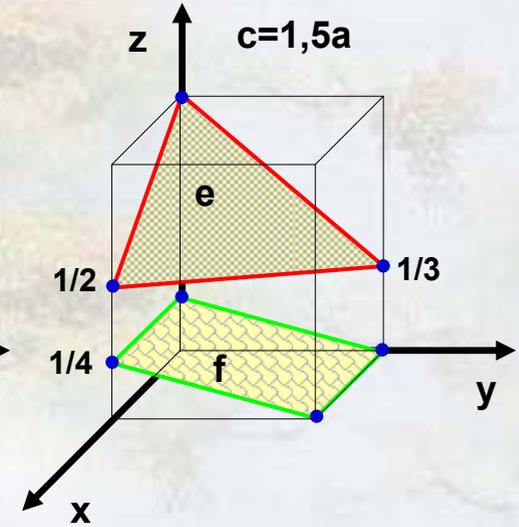
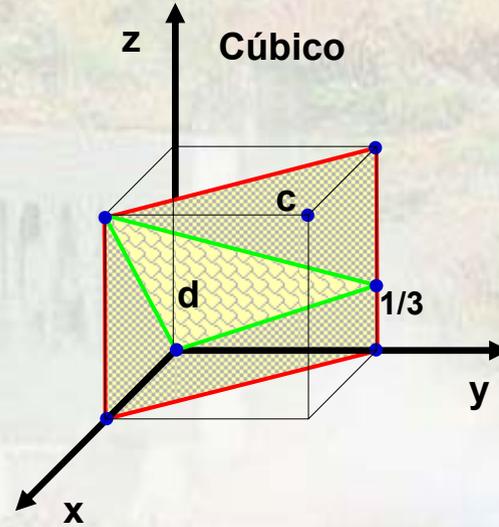
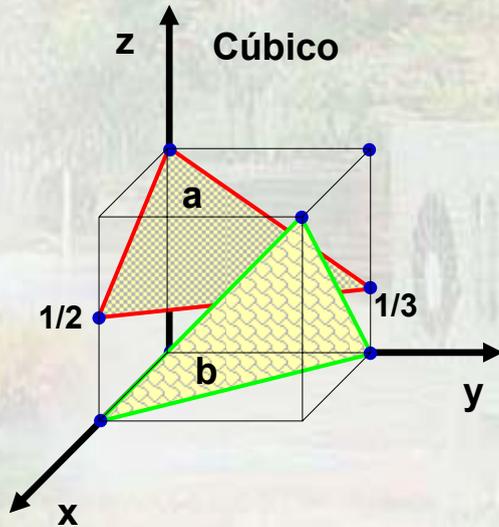
# EXERCÍCIO

- DETERMINE OS I.M. NA ESTRUTURA CÚBICA, DO PLANO QUE PASSA PELAS POSIÇÕES ATÔMICAS  $(1,1,3/4)$ ;  $(1,1/2,1/4)$  E  $(0,1,0)$ .
- PONTOS PERMITEM ESTABELEECER O PLANO MOSTRADO. UMA LINHA UNINDO OS PONTOS  $(1,1,3/4)$  E  $(1,1/2,1/4)$  POSSIBILITA ENCONTRAR O PONTO  $(1,1/4,0)$ . DESLOCANDO A ORIGEM, É POSSÍVEL NOTAR QUE O PLANO INTERCEPTA O EIXO X EM  $X=-1$ , O EIXO Y EM  $Y=-3/4$  E O EIXO Z EM  $Z=3/4$ .
- ISSO CONDUZ AOS I.M.=  $(\bar{3}\bar{4}4)$



# EXERCÍCIOS

- DETERMINE OS ÍNDICES DE MILLER DOS PLANOS A SEGUIR



# RELAÇÕES MATEMÁTICAS

## ■ ÂNGULOS ENTRE DUAS DIREÇÕES

SUPONHA DUAS DIREÇÕES REPRESENTADAS POR SEUS RESPECTIVOS VETORES:

$$\vec{A} = x_1\vec{a} + y_1\vec{b} + z_1\vec{c}$$

$$\vec{B} = x_2\vec{a} + y_2\vec{b} + z_2\vec{c}$$

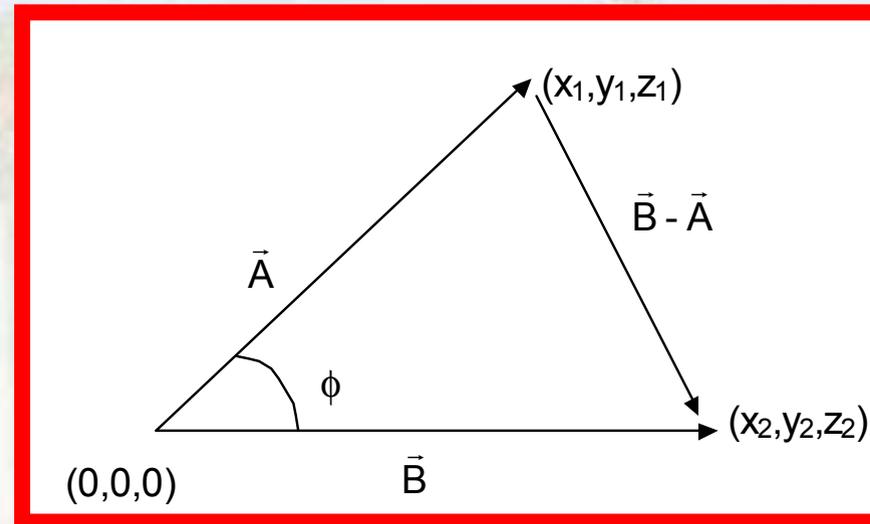
$$|\vec{B} - \vec{A}|^2 = |\vec{B}|^2 + |\vec{A}|^2 - 2|\vec{B}||\vec{A}|\cos\phi$$

$$\cos\phi = \frac{\vec{A} \cdot \vec{B}}{|\vec{A}||\vec{B}|} \quad |\vec{A}|^2 = \vec{A} \cdot \vec{A}$$

$$|\vec{A}| = (x_1^2 + y_1^2 + z_1^2)^{1/2}$$

$$|\vec{B}| = (x_2^2 + y_2^2 + z_2^2)^{1/2}$$

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$$



$$\cos\phi = \frac{x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2}{(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2)^{1/2}(x_2^2 + y_2^2 + z_2^2)^{1/2}}$$

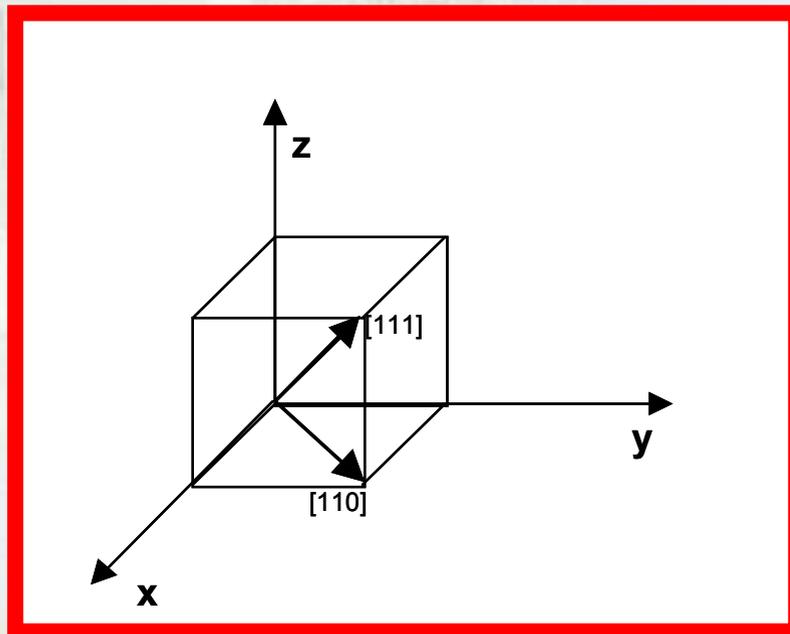


# EXERCÍCIO

- DETERMINE O ÂNGULO ENTRE AS DIREÇÕES [111] E [110].

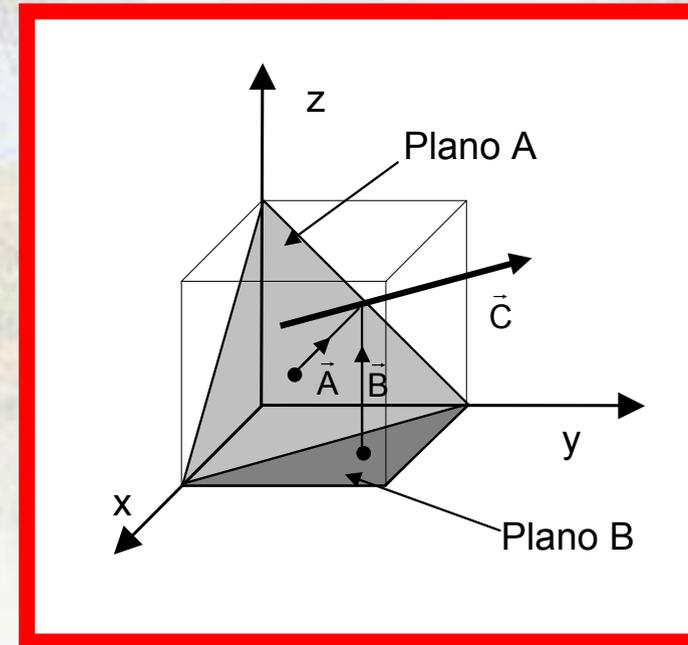
$$\cos\phi = \frac{x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2}{(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2)^{1/2}(x_2^2 + y_2^2 + z_2^2)^{1/2}} = \frac{1.1 + 1.1 + 1.0}{(1+1+1)^{1/2}(1+1+0)^{1/2}} = \frac{2}{\sqrt{6}}$$

- $\phi$  É IGUAL A:  
35,2°



# RELAÇÕES MATEMÁTICAS

- DIREÇÃO RESULTANTE DA INTERSECÇÃO DE DOIS PLANOS  
SUPONHA DOIS PLANOS A E B,  
REPRESENTADOS PELOS I.M.  $(h_1 \ k_1 \ l_1)$  E  $(h_2 \ k_2 \ l_2)$ :
- INTERSECÇÃO DE A E B SERÁ A DIREÇÃO C
- PRODUTO VETORIAL DE A E B SERÁ C:  $\vec{A} \times \vec{B} = \vec{C}$



$$\vec{A} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{a} & \vec{b} & \vec{c} \\ h_A & k_A & l_A \\ h_B & k_B & l_B \end{vmatrix} = \vec{a}(k_A l_B - k_B l_A) + \vec{b}(l_A h_B - l_B h_A) + \vec{c}(h_A k_B - h_B k_A)$$



# EXERCÍCIO

- DETERMINE A DIREÇÃO DA INTERSECÇÃO DOS PLANOS (111) E (001).

O produto vetorial entre os planos A e B produz o vetor (direção de intersecção):

$$\vec{C} = \begin{vmatrix} \vec{a} & \vec{b} & \vec{c} \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \vec{a}(1-0) + \vec{b}(0-1) + \vec{c}(0-0) = \vec{a} - \vec{b}$$

- A direção de intersecção é  $[1 \bar{1} 0]$ .



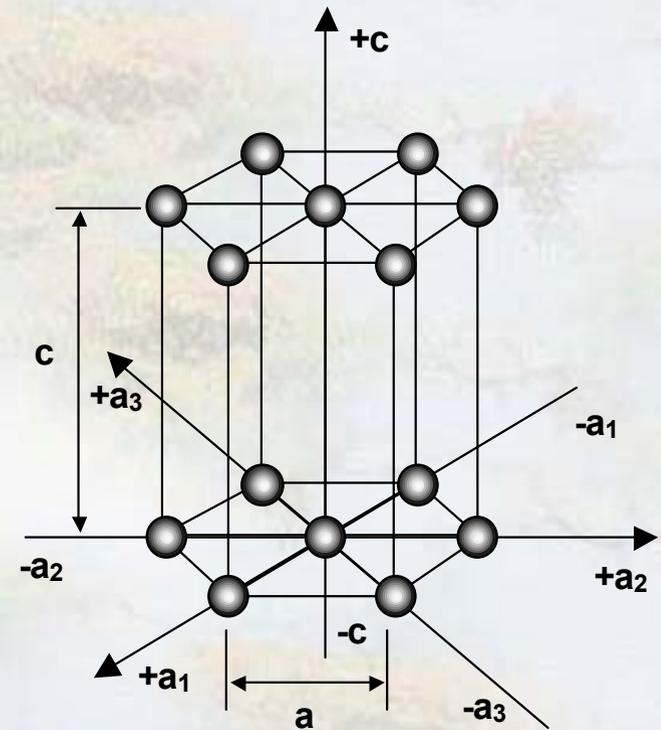
# EXERCÍCIO

- DETERMINE O PLANO QUE PASSA PELAS POSIÇÕES a:  $(1,0,1)$ ; b:  $(1/2,1,0)$ ; c:  $(1,1/2,0)$

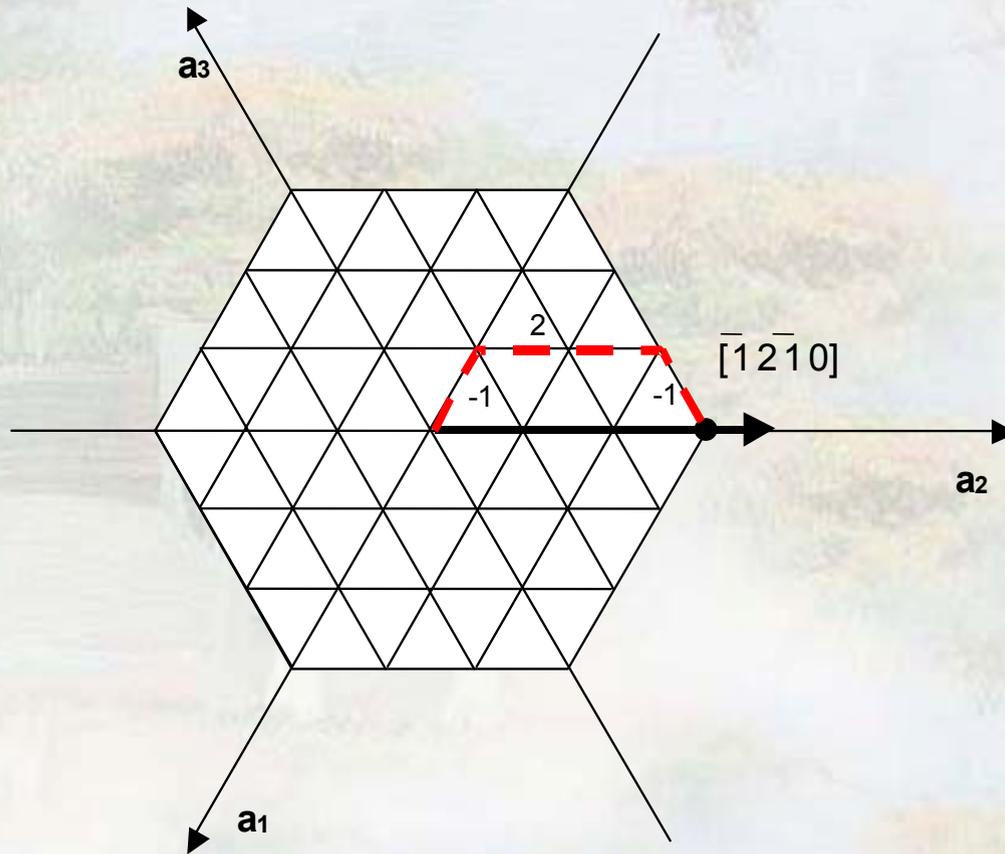


# DIREÇÕES EM CRISTAIS HEXAGONAIS

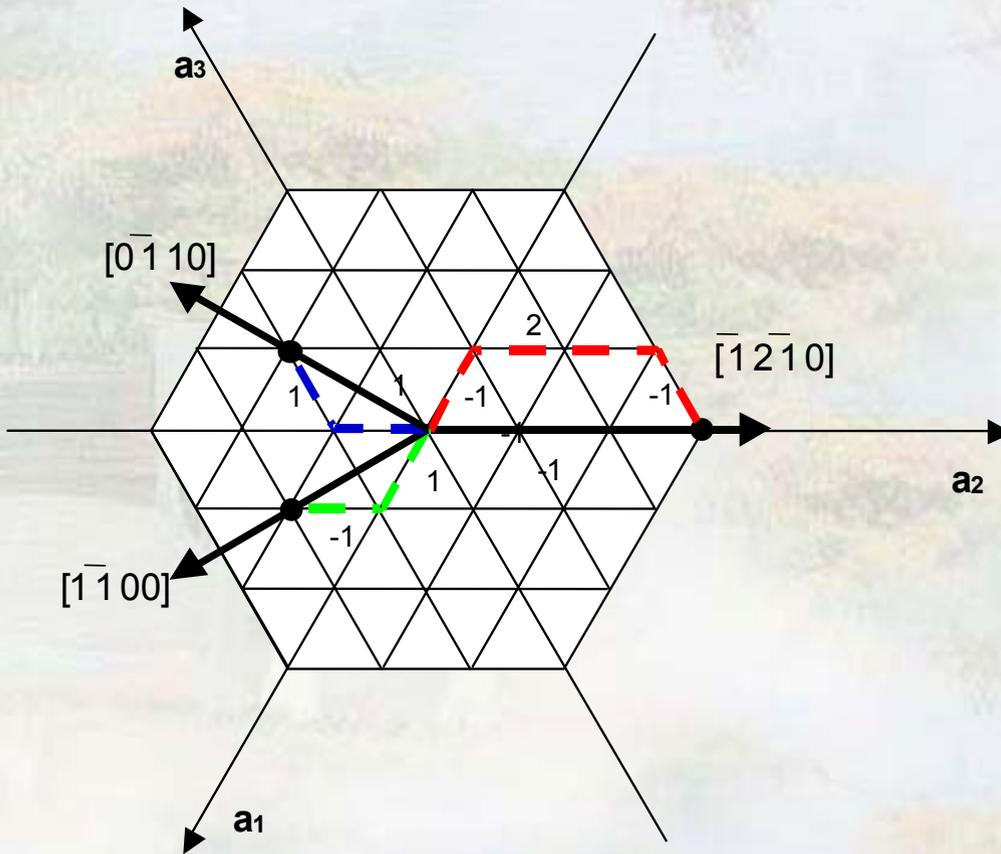
- DIREÇÕES SÃO INDICADAS POR QUATRO ÍNDICES:
  - ÍNDICES:  $u$ ,  $v$ ,  $t$  E  $w$ , APRESENTADOS ENTRE COLCHETES
  - SISTEMA DE QUATRO EIXOS:
  - ÍNDICES  $u$ ,  $v$  E  $t$  ESTÃO ASSOCIADOS AOS EIXOS  $a_1$ ,  $a_2$ , E  $a_3$
  - ÍNDICE  $w$  REFERE-SE AO EIXO  $c$
  - CONDIÇÃO:  
 $u+v=-t$



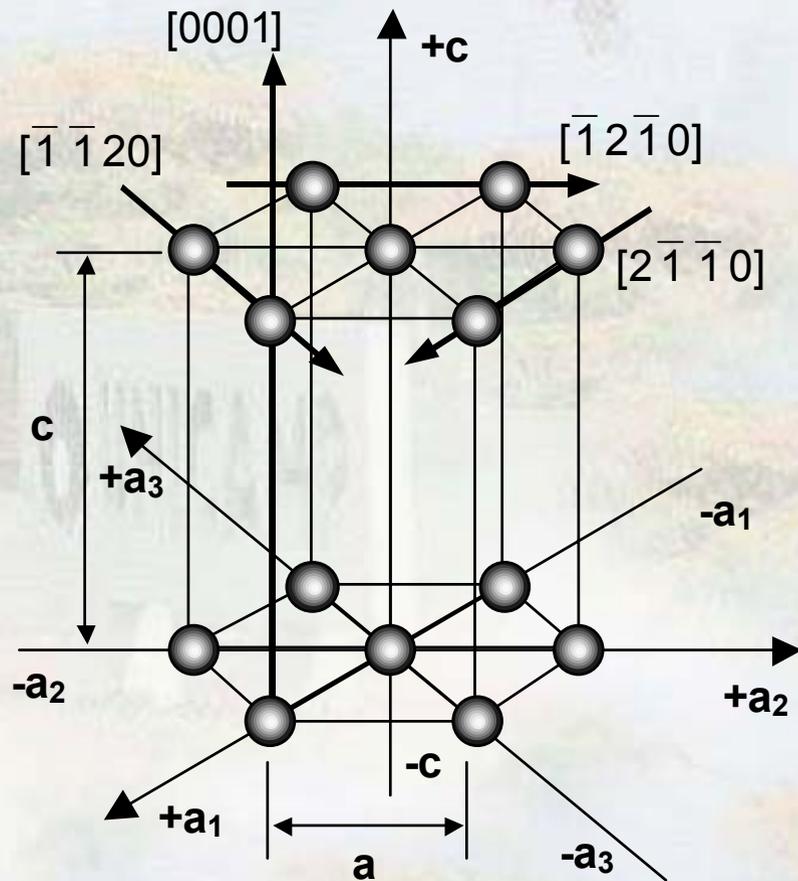
# IDENTIFICAÇÃO DE DIREÇÕES



# IDENTIFICAÇÃO DE DIREÇÕES

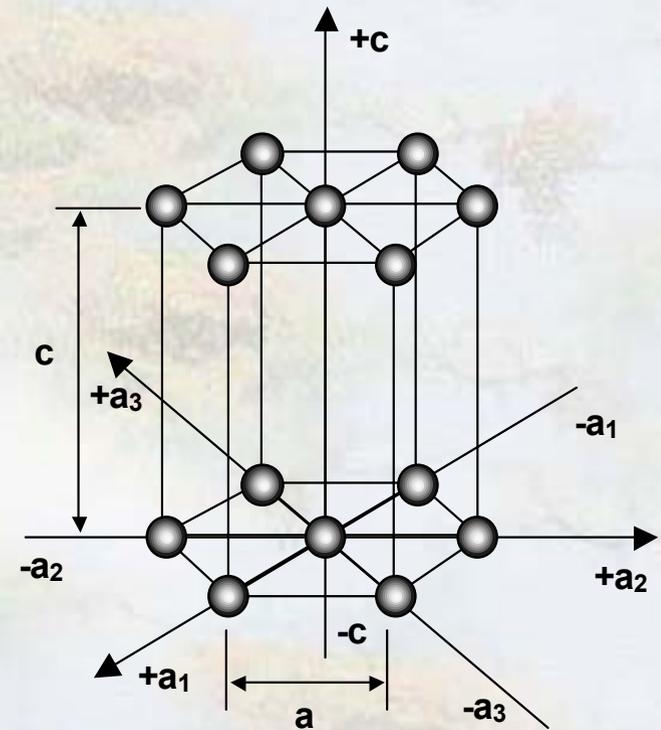


# EXEMPLO DE DIREÇÕES

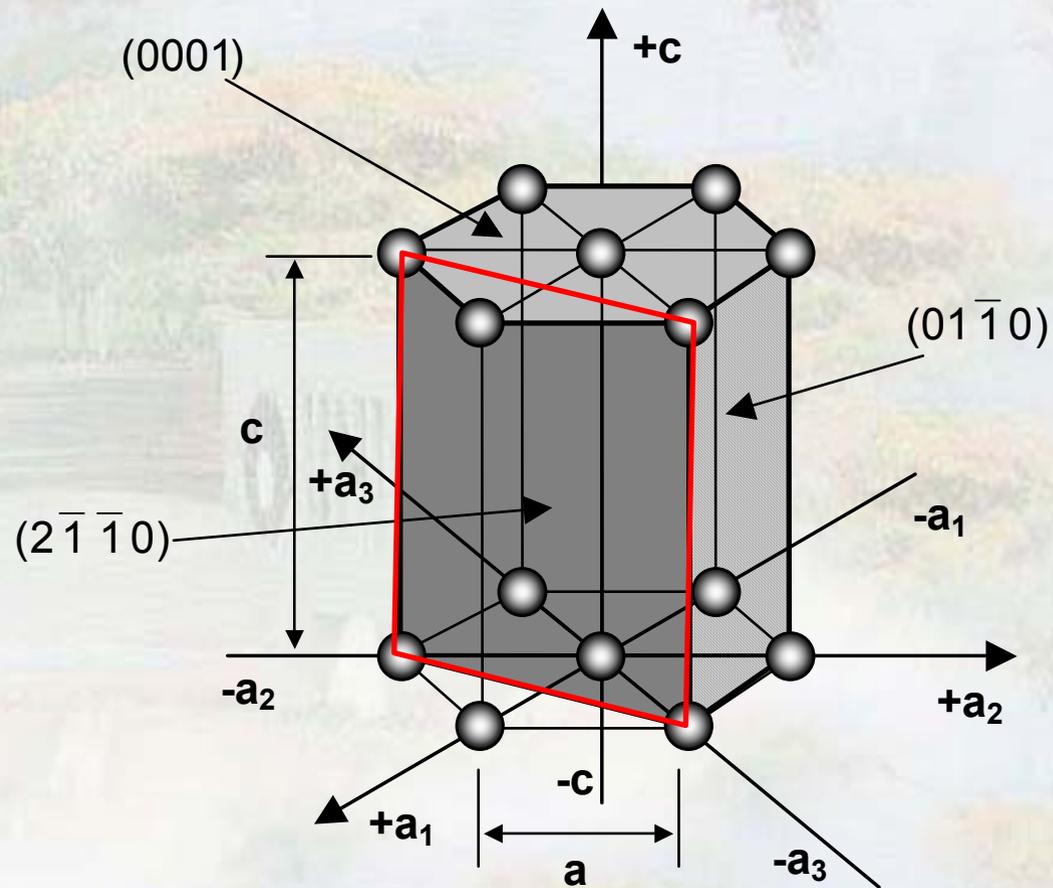


# PLANOS EM CRISTAIS HEXAGONAIS

- PLANOS SÃO INDICADOS POR QUATRO ÍNDICES:
  - ÍNDICES:  $h, k, i$  E  $l$ , APRESENTADOS ENTRE PARÊNTESES
  - SISTEMA DE QUATRO EIXOS:
    - ÍNDICES  $h, k$  E  $i$  ESTÃO ASSOCIADOS AOS EIXOS  $a_1, a_2, \text{ E } a_3$
    - ÍNDICE  $l$  REFERE-SE AO EIXO  $c$
    - CONDIÇÃO:  
 $h+k=-i$

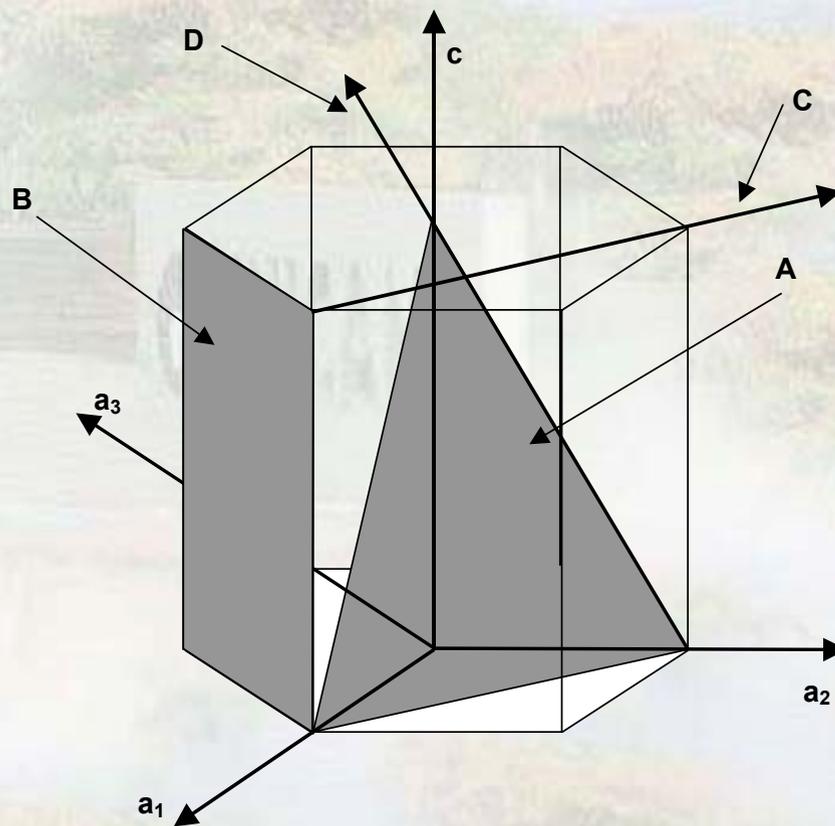


# EXEMPLO DE PLANOS



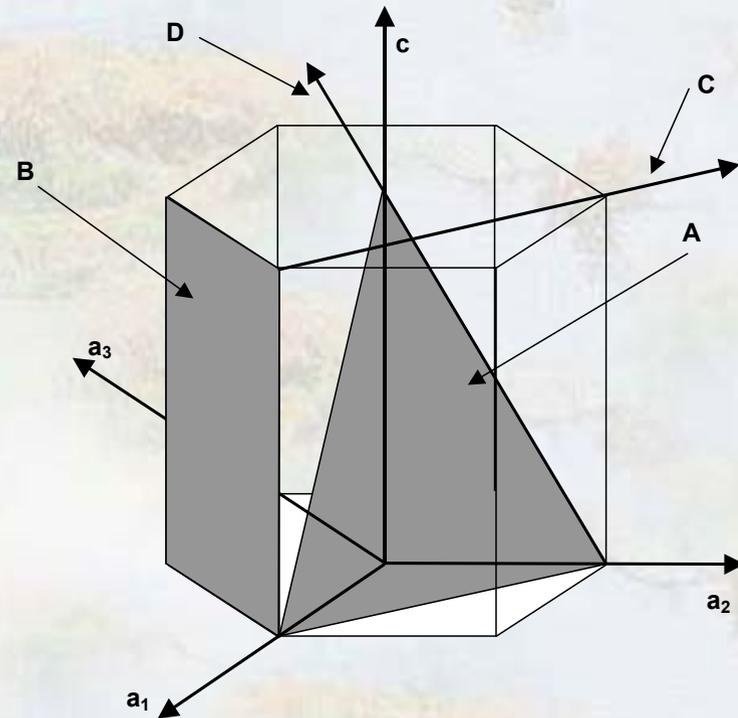
# EXERCÍCIO

- IDENTIFIQUE OS ÍNDICES DE MILLER-BRAVAIS DOS PLANOS A E B E DAS DIREÇÕES C E D.



# SOLUÇÃO

- PLANO A:
- $A_1=1$ ;  $A_2=1$ ;  $A_3=-1/2$  E  $C=1$ .  
INVERTENDO TAIS VALORES, É POSSÍVEL OBTER 1; 1; -2 E 1, RESPECTIVAMENTE. LOGO, O PLANO A TEM ÍNDICES  $(11\bar{2}1)$ .
- PLANO B:
- $A_1=1$ ;  $A_2=-1$ ;  $A_3=\infty$  E  $C=\infty$ .  
INVERTENDO TAIS VALORES, É POSSÍVEL OBTER 1; -1; 0 E 0, RESPECTIVAMENTE. LOGO, O PLANO A TEM ÍNDICES  $(1\bar{1}00)$ .



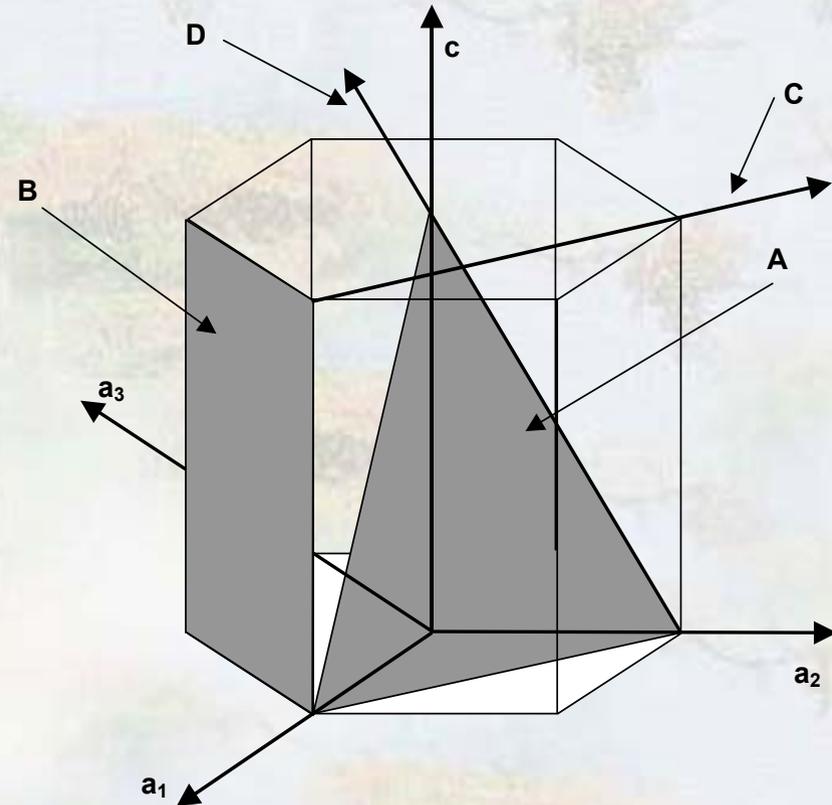
# SOLUÇÃO

## DIREÇÃO C

■ TOMANDO-SE UMA DIREÇÃO PARALELA (QUE PASSA PELA ORIGEM), TEM-SE UM VETOR DA ORIGEM ATÉ O PONTO DE COORDENADAS  $(1,-1,0,0)$ . LOGO, A DIREÇÃO SERÁ  $[1\bar{1}00]$

## ■ DIREÇÃO D

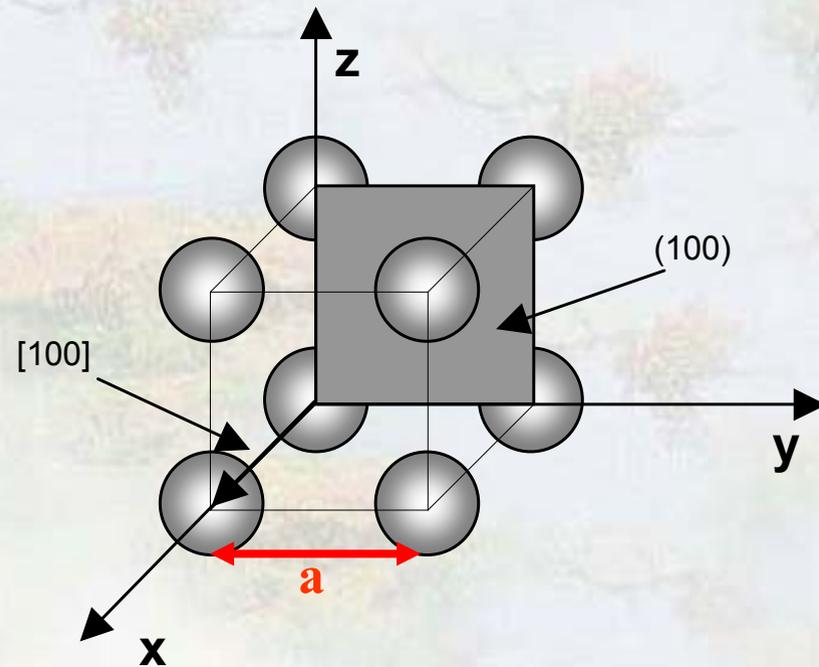
■ TOMANDO-SE UMA DIREÇÃO PARALELA (QUE PASSA PELA ORIGEM), TEM-SE UM VETOR DA ORIGEM ATÉ O PONTO DE COORDENADAS  $(1,-2,1,1)$ . LOGO, A DIREÇÃO SERÁ  $[1\bar{2}11]$



# DENSIDADE DE ÁTOMOS

## ■ DENSIDADE LINEAR

$$D_{\text{linear}} = \frac{\text{n}^\circ \text{ de átomos}}{\text{comprimento}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$$



## ■ DENSIDADE PLANAR

$$D_{\text{planar}} = \frac{\text{n}^\circ \text{ de átomos}}{\text{área}} = \frac{\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$



# EXERCÍCIO

- A ESTRUTURA DO CÁDMIO À TEMPERATURA AMBIENTE É HC. CONSIDERANDO QUE SEUS PARÂMETROS DE REDE SÃO  $a=0,2973\text{nm}$  E  $c=0,5618\text{nm}$ , DETERMINE AS DENSIDADES ATÔMICAS: (A) NA DIREÇÃO  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ ; (B) NO PLANO (0001).



# SOLUÇÃO

- DENSIDADE NA DIREÇÃO  $[2\bar{1}\bar{1}0]$  É OBTIDA DETERMINANDO-SE O NÚMERO DE ÁTOMOS DENTRO DE UMA DISTÂNCIA CONHECIDA. TOMANDO-SE, NA DIREÇÃO MENCIONADA, A DISTÂNCIA EQUIVALENTE A UM PARÂMETRO DE REDE  $a$ , TEM-SE
- NÚMERO DE ÁTOMOS =  $2 \times 1/2 = 1$  ÁTOMO
- DISTÂNCIA =  $0,2973 \times 10^{-9}$  m

$$D_{\text{linear}} = \frac{n^{\circ} \text{ de átomos}}{\text{comprimento}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a} = \frac{1}{0,2973 \times 10^{-9} \text{ m}} = 3,36 \times 10^9 \text{ átomos/m}$$



# SOLUÇÃO

- O PLANO (0001) É DENOMINADO DE PLANO BASAL. A DENSIDADE DE TAL PLANO PODE SER OBTIDA ATRAVÉS DA RAZÃO ENTRE NÚMERO DE ÁTOMOS PRESENTES EM UMA ÁREA DETERMINADA E O VALOR DE TAL ÁREA. TOMANDO-SE COMO REFERÊNCIA UM DOS TRIÂNGULOS EQÜILÁTEROS DO PLANO HEXAGONAL, TEM-SE:
- NÚMERO DE ÁTOMOS =  $3 \times 1/6 = 1/2$  ÁTOMO
- ÁREA =  $3,8 \times 10^{-20} \text{ m}^2$

$$D_{\text{planar}} = \frac{\text{n}^\circ \text{ de átomos}}{\text{área}} = \frac{\frac{1}{6} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6}}{3,8 \times 10^{-9} \text{ m}} = 1,31 \times 10^{19} \text{ átomos/m}^2$$



# EXERCÍCIO

- DETERMINE A DENSIDADE DO FERRO À TEMPERATURA AMBIENTE.
- DADOS:
- RAIOS ATÔMICOS: 0,123 nm
- MASSA ATÔMICA: 56 g/mol
- ESTRUTURA CCC

