

UNIDADE 4 Estrutura dos Sólidos Cristalinos

1. Calcular a densidade teórica (em g/cm^3) dos seguintes metais:

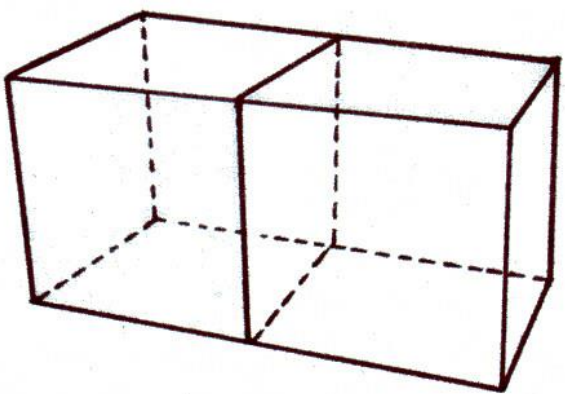
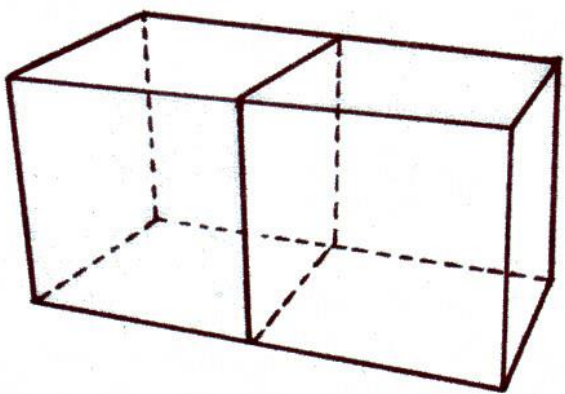
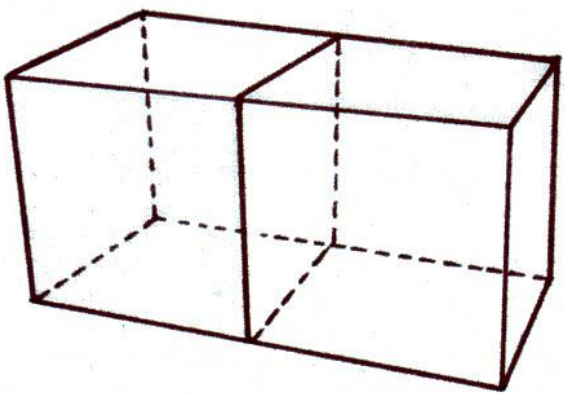
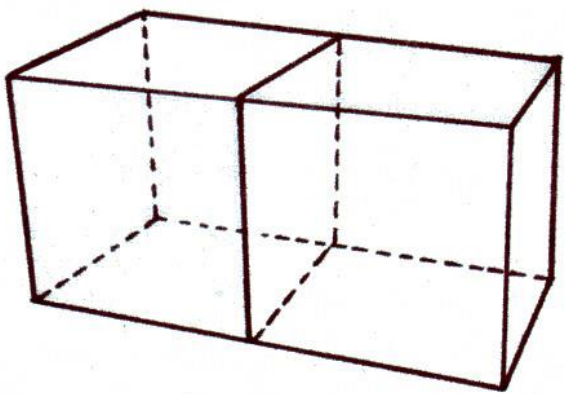
a) Fe- α

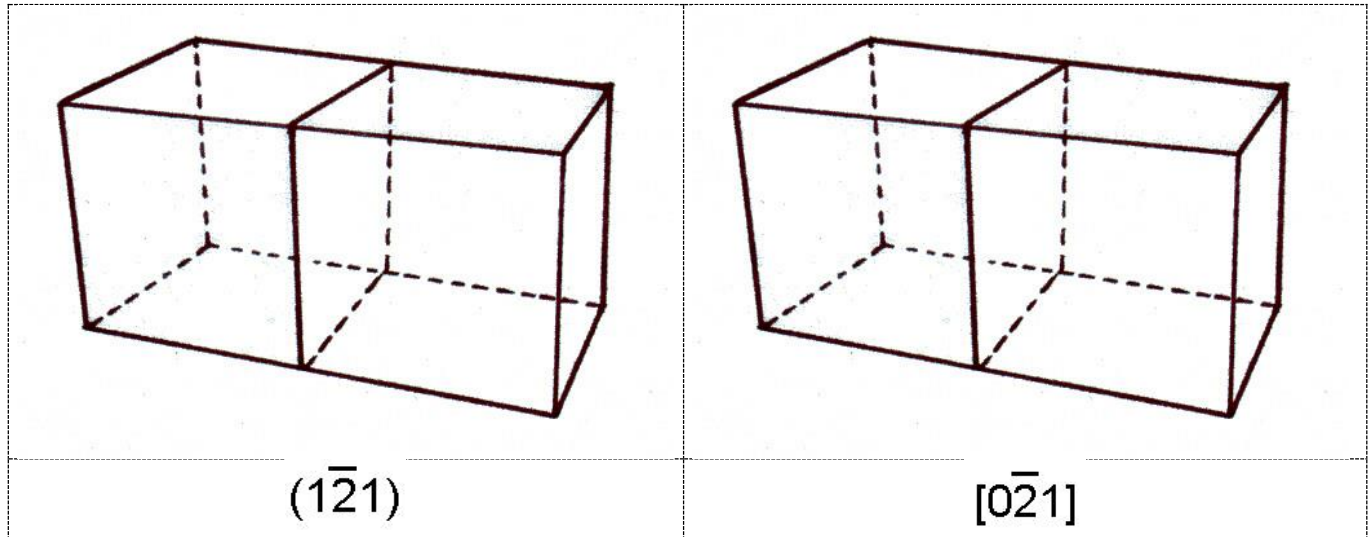
b) Al

DADOS	Estrutura Cristalina	Raio Atômico (nm)	Massa Molar (g/mol)
Fe- α	CCC	0,1241	55,85
Alumínio	CFC	0,1430	26,98

Observação: $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$

2. Represente nas células unitárias abaixo as direções ou planos cristalográficos indicados.

	
[123]	(01 $\bar{1}$)
	
[1 $\bar{1}$ 0]	(101)



3. Sabe-se que um metal hipotético cujos dados são apresentados abaixo tem estrutura cristalina cúbica. Com base nesses dados apresentados, a estrutura seria CFC, CCC ou cúbica simples?

Peso Atômico (g/mol)	Densidade Teórica (g/cm ³)	Raio Atômico (nm)
43,1	6,40	0,122

4. Calcule os fatores de empacotamento atômico (**FEA**) para as estruturas cúbica simples (**CS**), cúbica de corpo centrado (**CCC**) e cúbica de face centrada (**CFC**).

5. Calcule as densidades atômicas planares (**DP**) para o **plano (100)** nas estruturas cúbica simples (**CS**), cúbica de corpo centrado (**CCC**) e cúbica de face centrada (**CFC**).

6. Calcule as densidades atômicas lineares (**DL**) para as **direções [100], [110] e [111]** nas estruturas cúbica simples (**CS**), cúbica de corpo centrado (**CCC**) e cúbica de face centrada (**CFC**).

7. Algumas dezenas de exercícios de **indexação de planos cristalinos** como os indicados abaixo encontram-se no seguinte site da U.Cambridge:

https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/questions.php

Game: Identify the planes

Drag each index to the box below the correct plane

(1 2 3) (1 1 1)

(2 2 2) (2 1 0)

(3 1 2) (1 1 0)

Clear and see new set

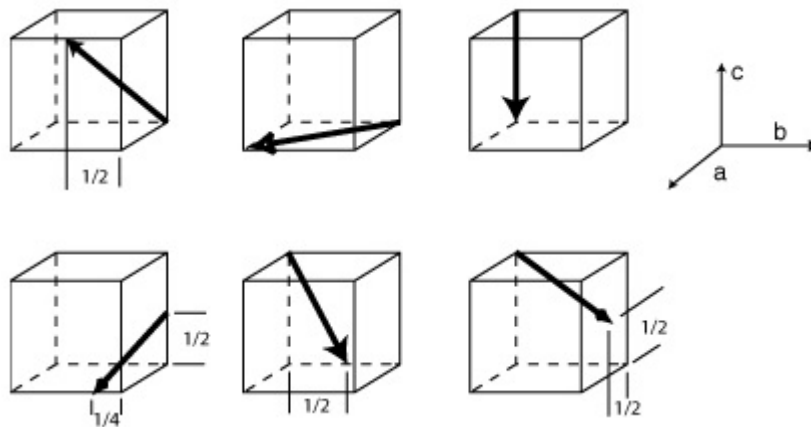
Score: Score

Reset these indices

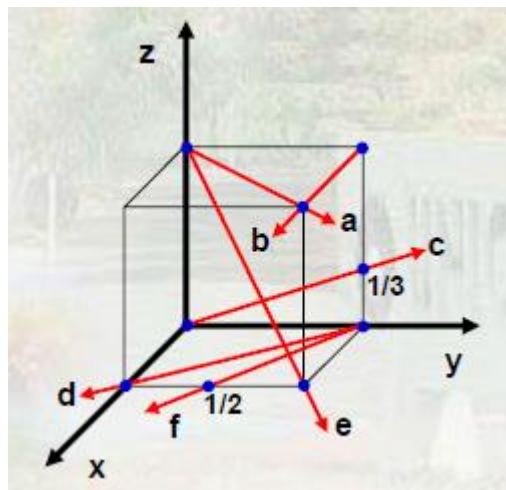
CC BY NC SA

www.doitpoms.ac.uk

8. Determine os índices de Miller das direções apresentadas abaixo.



9. Determine os índices de Miller das direções apresentadas abaixo.



GABARITO

UNIDADE 4 Estrutura dos Sólidos Cristalinos

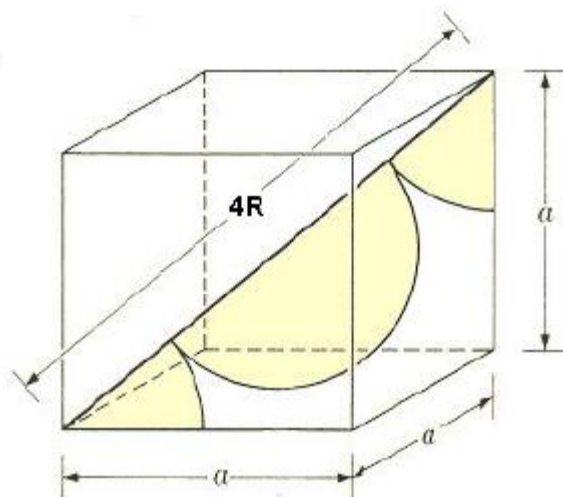
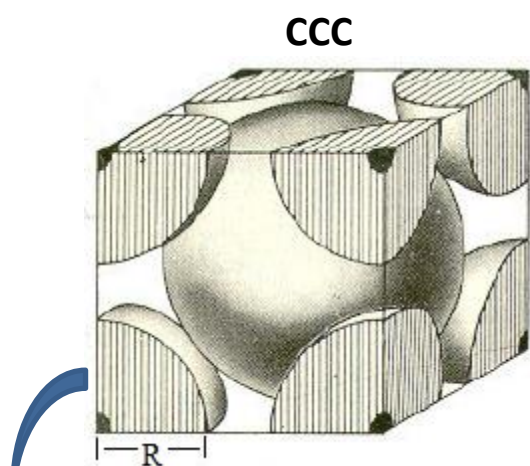
1. Calcular a densidade teórica (em g/cm^3) dos seguintes metais:

- a) Fe- α
b) Al

DADOS	Estrutura Cristalina	Raio Atômico (nm)	Massa Molar (g/mol)
Fe- α	CCC	0,1241	55,85
Alumínio	CFC	0,1430	26,98

Observação: $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$

a) Fe- α



Número de átomos por célula = 2

Volume da célula unitária:

$$4R = \sqrt{3} a$$

$$a = \frac{4 \times 0,1241}{\sqrt{3}} = 0,2866 \text{ nm}$$

$$V = a^3 = 0,0235 \text{ nm}^3 = 0,0235 \times 10^{-21} \text{ cm}^3$$

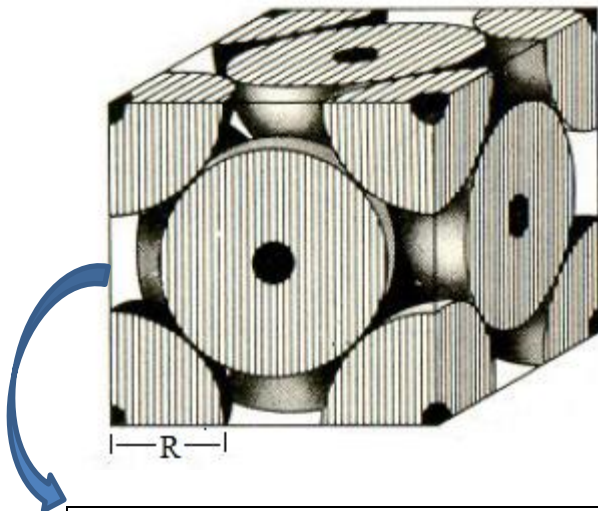
Massa de dois átomos:

$$\frac{6,022 \times 10^{23}}{2} \times \frac{55,85 \text{ g}}{\text{mol}} = 1,855 \times 10^{-22} \text{ g}$$

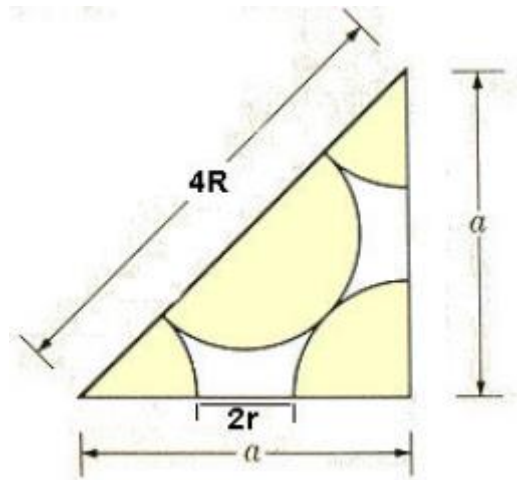
$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{1,855 \times 10^{-22} \text{ g}}{0,0235 \times 10^{-21} \text{ cm}^3} = 7,89 \text{ g/cm}^3$$

b) Alumínio

CFC



Número de átomos por célula = 4



$$4R = \sqrt{2}a$$

$$a = \frac{4 \times 0,143}{\sqrt{2}} = 0,4045 \text{ nm}$$

$$V = a^3 = 0,0662 \text{ nm}^3 = 0,0662 \times 10^{-21} \text{ cm}^3$$

Massa de quatro átomos:

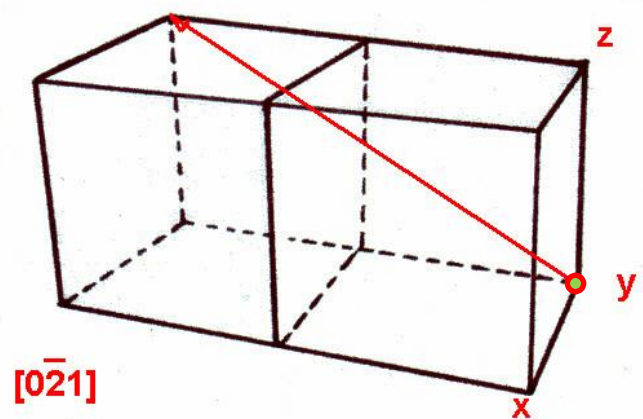
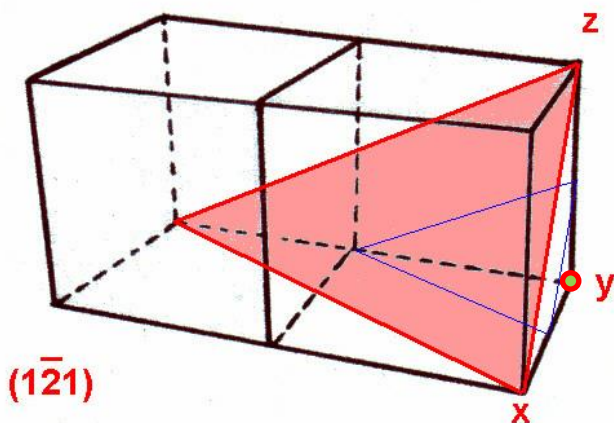
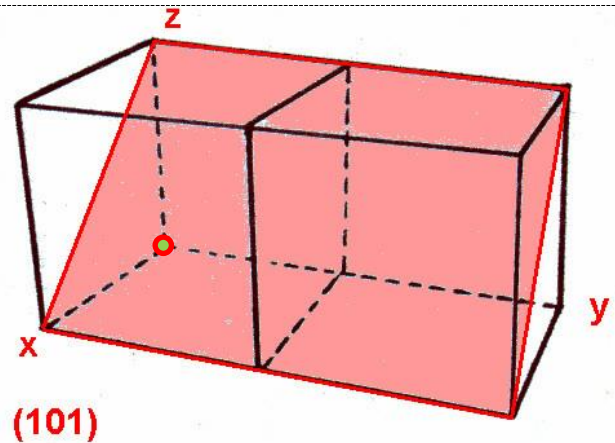
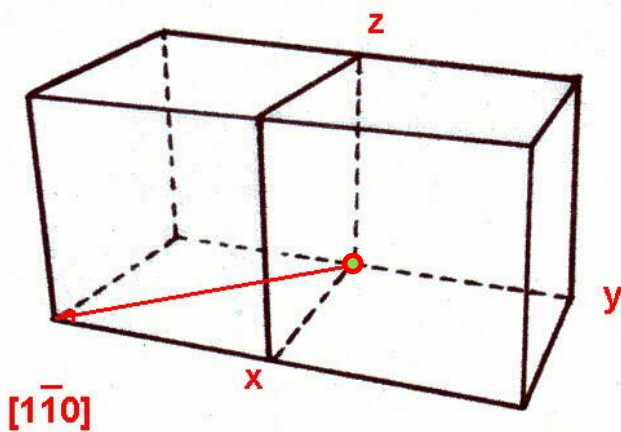
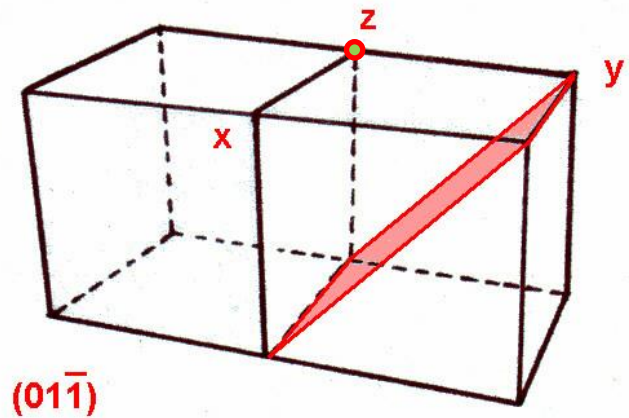
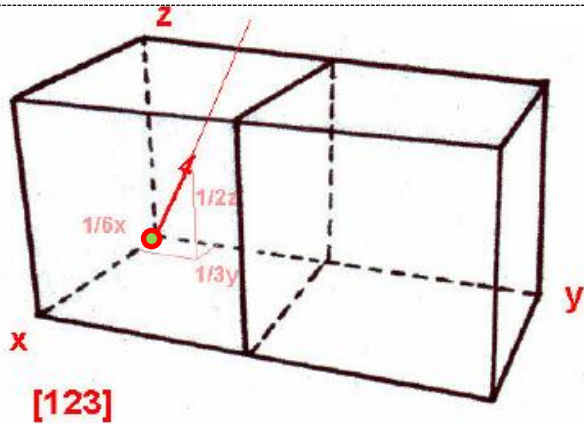
$$\frac{6,022 \times 10^{23}}{4} \times \frac{26,98 \text{ g}}{x} = 1,792 \times 10^{-22} \text{ g}$$

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{1,793 \times 10^{-22} \text{ g}}{0,0662 \times 10^{-21} \text{ cm}^3} = 2,71 \text{ g/cm}^3$$

2. Represente nas células unitárias abaixo as direções ou planos cristalográficos indicados.



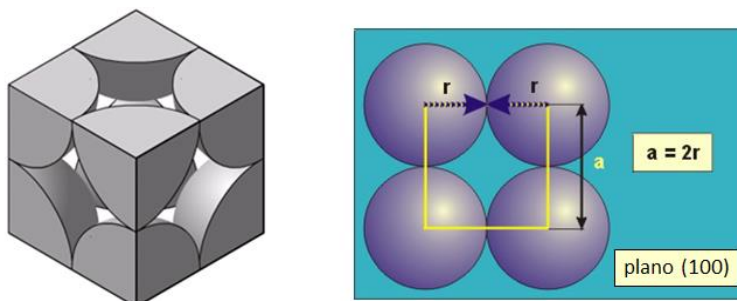
Como temos a liberdade de definir a origem do sistema de coordenadas, em cada caso a origem está indicada pelo círculo colorido. As direções dos eixos são como representado ao lado



3. Sabe-se que um metal hipotético cujos dados são apresentados abaixo tem estrutura cristalina cúbica. Com base nesses dados apresentados, a estrutura seria CFC, CCC ou cúbica simples?

Peso Atômico (g/mol)	Densidade Teórica (g/cm ³)	Raio Atômico (nm)
43,1	6,40	0,122

O raciocínio é exatamente o mesmo empregado na resolução do exercício 1. Calcula-se a densidade teórica para cada caso. No exercício 1 estão representados os cálculos para estruturas CCC e CFC. Os cálculos para estrutura cúbica simples (CS) são feitos considerando que a aresta da cela unitária é igual a $2R$, e que existe um átomo por cela unitária, segundo as figuras abaixo:



Representações da Estrutura Cúbica Simples (CS)

O resultado dos cálculos é apresentado abaixo.

Estrutura	Parâmetro de rede		Nº átomos/célula (At/cél)	Volume/célula	Densidade	
CFC	$a = 2\sqrt{2}R$	0,345068	4	0,04108795	$M/(N \cdot V_{\text{célula}}/(\text{At/cel}))$	6,9699
CCC	$a = 4\sqrt{3}R/3$	0,281747	2	0,02236545	$M/(N \cdot V_{\text{célula}}/(\text{At/cel}))$	6,4023
CS	$a = 2R$	0,244	1	0,01452678	$M/(N \cdot V_{\text{célula}}/(\text{At/cel}))$	4,9285

4. Calcule os fatores de empacotamento atômico (**FEA**) para as estruturas cúbica simples (**CS**), cúbica de corpo centrado (**CCC**) e cúbica de face centrada (**CFC**).

O fator de empacotamento atômico é dado pela seguinte expressão:

$$FEA = \frac{\text{volume dos átomos contidos na cela unitária}}{\text{volume da cela unitária}}$$

Estrutura **CÚBICA SIMPLES (CS)** (*um átomo na cela unitária*) :

$$FEA_{CS} = \frac{\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)}{a^3} = \frac{\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)}{(2R)^3} = 0,524$$

Estrutura **CÚBICA DE CORPO CENTRADO (CCC)** (*dois átomos na cela unitária*) :

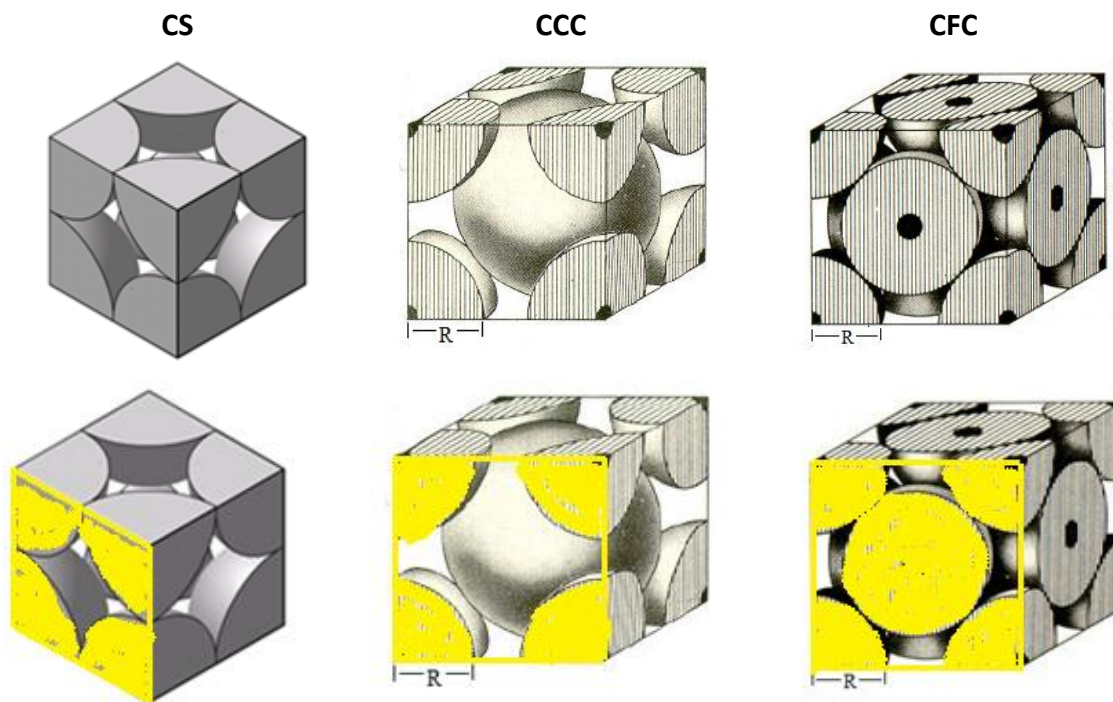
$$FEA_{CCC} = \frac{2\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)}{a^3} = \frac{2\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = 0,680$$

Estrutura **CÚBICA DE FACE CENTRADA (CFC)** (*quatro átomos na cela unitária*) :

$$FEA_{CFC} = \frac{4\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)}{a^3} = \frac{4\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)}{(2R\sqrt{2})^3} = 0,740$$

5. Calcule as densidades atômicas planares (DP) para o **plano (100)** nas estruturas cúbica simples (CS), cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de face centrada (CFC).

A família de planos $\{100\}$, da qual o plano (100) faz parte, é a família de planos das faces da cela unitária cúbica (...simplificando, são os planos que representam as faces do cubo).



	CS	CCC	CFC
área "ocupada" por átomos	1 círculo de raio R	1 círculo de raio R	2 círculos de raio R
Relação da aresta do cubo com o raio atômico	$a = 2R$	$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$	$a = 2R\sqrt{2}$

Estrutura **CÚBICA SIMPLES (CS)** :

$$DP_{CS} = \frac{\pi R^2}{(2R)^2} = \frac{\pi}{4} = 0,785$$

Estrutura **CÚBICA DE CORPO CENTRADO (CCC)** :

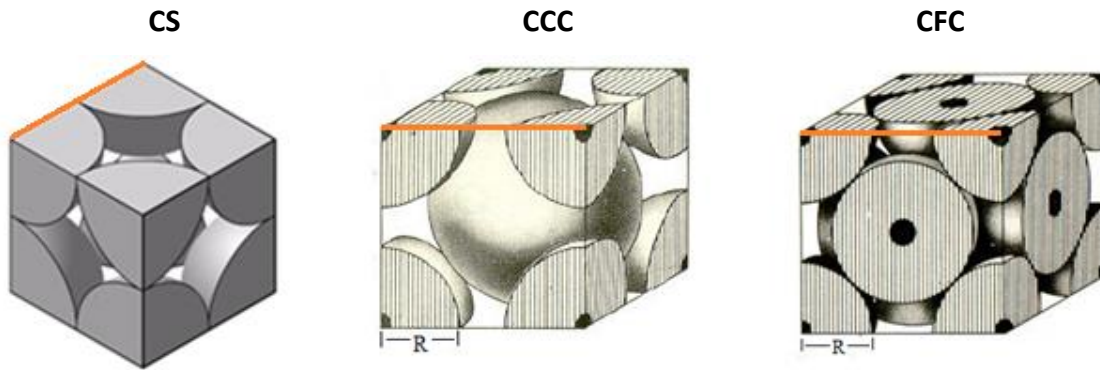
$$DP_{CCC} = \frac{\pi R^2}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^2} = \frac{3\pi}{16} = 0,589$$

Estrutura **CÚBICA DE FACE CENTRADA (CFC)** :

$$DP_{CFC} = \frac{2\pi R^2}{(2R\sqrt{2})^2} = \frac{\pi}{4} = 0,785$$

6. Calcule as densidades atômicas lineares (DL) para as **direções [100], [110] e [111]** nas estruturas cúbica simples (CS), cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de face centrada (CFC).

A família de direções $\langle 100 \rangle$, da qual a **direção [100]** faz parte, é a família de direções das arestas da cela unitária cúbica.



Direção **[100]**, Estrutura **CÚBICA SIMPLES (CS)** :

$$DL_{CS,[100]} = \frac{2R}{a} = \frac{2R}{2R} = 1,000$$

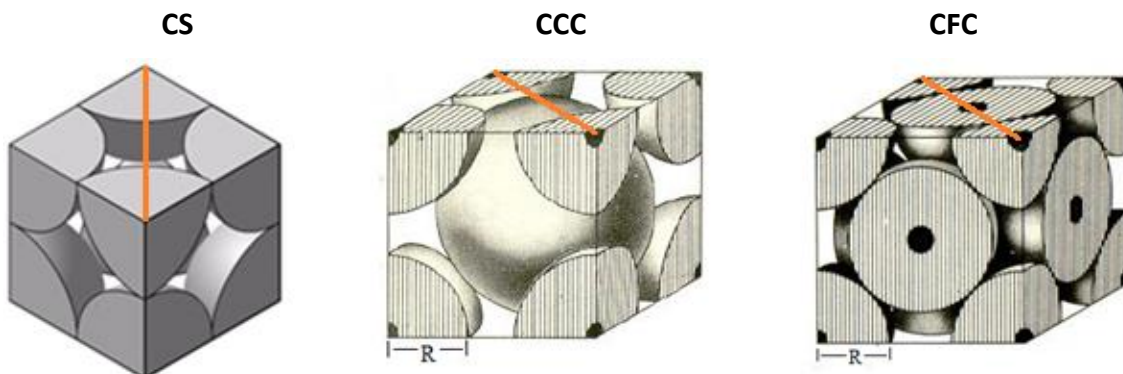
Direção **[100]**, Estrutura **CÚBICA DE CORPO CENTRADO (CCC)** :

$$DP_{CCC,[100]} = \frac{2R}{a} = \frac{2R}{\frac{4R}{\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0,866$$

Direção **[100]**, Estrutura **CÚBICA DE FACE CENTRADA (CFC)** :

$$DP_{CFC,[100]} = \frac{2R}{a} = \frac{2R}{2R\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707$$

A família de direções $\langle 110 \rangle$, da qual a **direção [110]** faz parte, é a família de direções das diagonais das faces da cela unitária cúbica.



Direção **[110]**, Estrutura **CÚBICA SIMPLES (CS)** :

$$DL_{CS,[110]} = \frac{2R}{a\sqrt{2}} = \frac{2R}{2R\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707$$

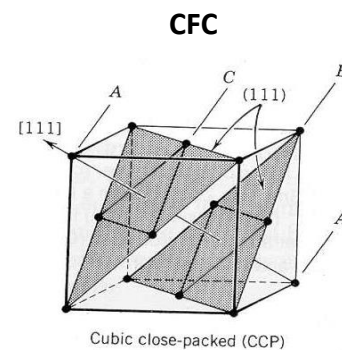
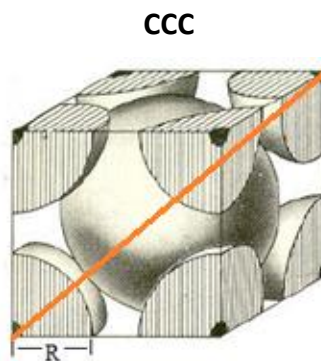
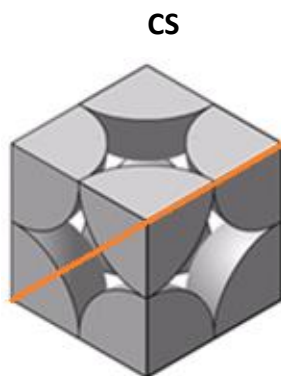
Direção **[110]**, Estrutura **CÚBICA DE CORPO CENTRADO (CCC)** :

$$DP_{CCC,[110]} = \frac{2R}{a\sqrt{2}} = \frac{2R}{\frac{4R}{\sqrt{3}}\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} = 0,612$$

Direção **[110]**, Estrutura **CÚBICA DE FACE CENTRADA (CFC)** :

$$DP_{CFC,[110]} = \frac{4R}{a\sqrt{2}} = \frac{4R}{2R\sqrt{2}\sqrt{2}} = 1,000$$

A família de direções $\langle 111 \rangle$, da qual a **direção [111]** faz parte, é a família de direções das diagonais da cela unitária cúbica (...simplificando, são as diagonais do cubo)..



Direção **[111]**, Estrutura **CÚBICA SIMPLES (CS)** :

$$DL_{CS,[111]} = \frac{2R}{a\sqrt{3}} = \frac{2R}{2R\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0,577$$

Direção **[111]**, Estrutura **CÚBICA DE CORPO CENTRADO (CCC)** :

$$DP_{CCC,[111]} = \frac{4R}{a\sqrt{3}} = \frac{4R}{\frac{4R}{\sqrt{3}}\sqrt{3}} = 1,000$$

Direção **[111]**, Estrutura **CÚBICA DE FACE CENTRADA (CFC)** :

$$DP_{CFC,[111]} = \frac{2R}{a\sqrt{3}} = \frac{2R}{2R\sqrt{2}\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{6}} = 0,408$$

7. O gabarito do conjunto de planos dado no exercício é apresentado abaixo.

Game: Identify the planes

Game: Identify the planes

Drag each index to the box below the correct plane

Clear and see new set

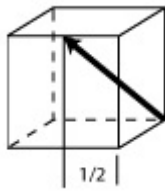
Score: 6 / 6

Reset these indices

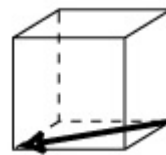
CC BY NC SA

www.doltpoms.ac.uk

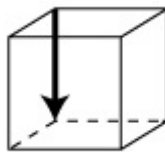
8. Determine os índices de Miller das direções apresentadas abaixo.



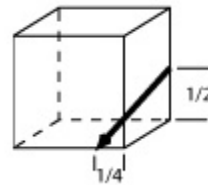
$[2\bar{1}2]$



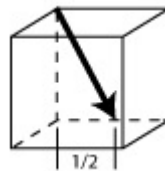
$[1\bar{1}0]$



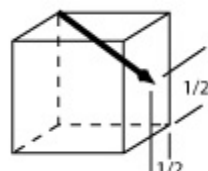
$[00\bar{1}]$



$[4\bar{1}\bar{2}]$

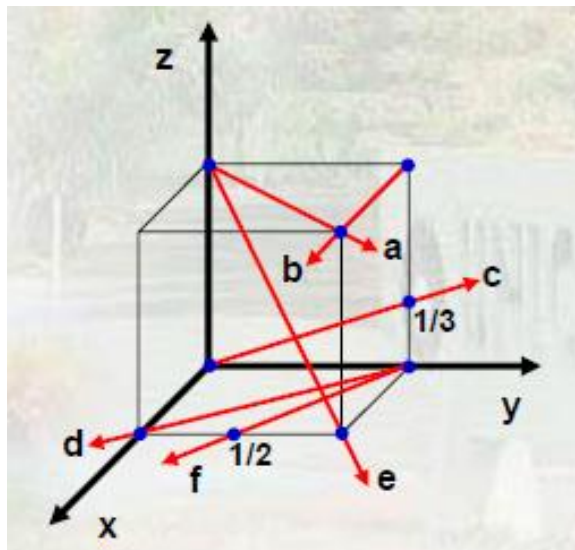


$[01\bar{2}]$



$[12\bar{1}]$

9. Determine os índices de Miller das direções apresentadas abaixo.



a $[110]$

b $[100]$

c $[031]$

d $[1\bar{1}0]$

e $[11\bar{1}]$

f $[2\bar{1}0]$