

MATERIAIS DE ENGENHARIA ***- (SEM 5908) -***

Aula 03 – Determinação da Estrutura Cristalina

Prof. Dr. João Manuel Domingos de Almeida Rollo
Prof. Dr. Carlos Alberto Fortulan

Materiais Poliméricos

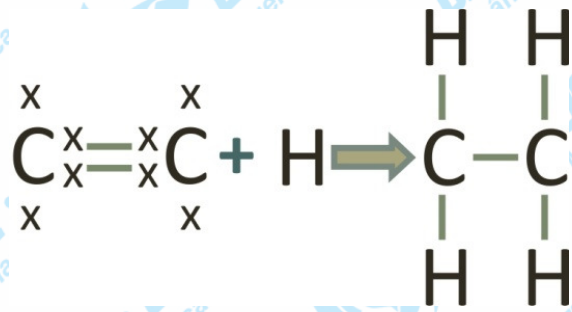
Genericamente os materiais poliméricos possuem baixa condutividade térmica, alto alongamento e não são facilmente degradáveis.

O caminho para explicar tais comportamentos está em estipularmos um “modelo” para um material polimérico.

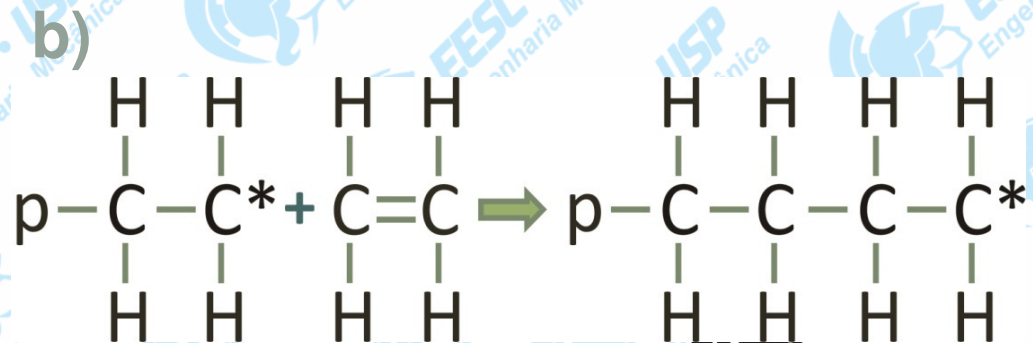
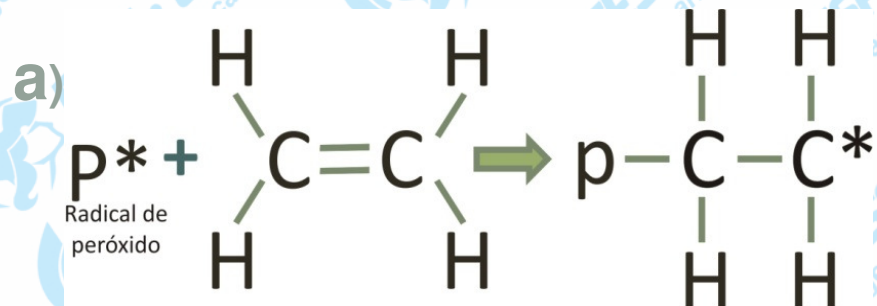
As variáveis que encontramos são: tipos de ligações químicas envolvidas, tamanho dos átomos, disposição das cadeias poliméricas, presença de grupos laterais em relação à cadeia principal, existência ou não de pontos reativos entre as cadeias principais e se o polímero oferece condições de cristalizar-se.

Vamos considerar o material “polietileno”, obtido através das reações de polimerização.

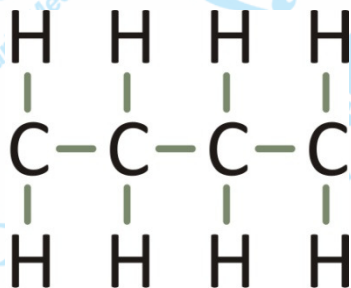
1. Obtenção do monômero



2. Reação de polimerização



c) Depois de determinada reação, a sua estrutura pode ser representada pela sua cadeia principal, podendo conter até 50.000 metros.



Estrutura da cadeia principal do polietileno

(*) Observe que:

- a) O raio atômico do H=0,3 Å
- b) O raio atômico do C=0,7 Å
- c) O raio comprimento da ligação da C-C é de 1,5 Å e a energia de ligação 3,6 e V.

(*) Valores aproximados.

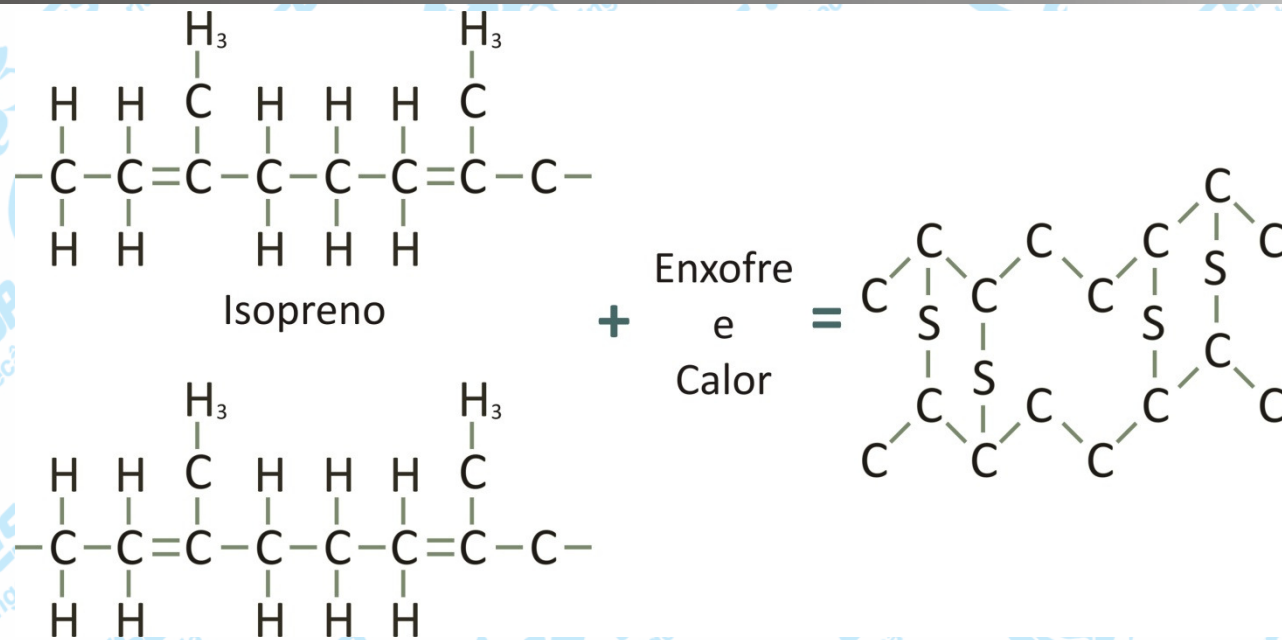
Através das estruturas dos dois polímeros, polietileno e polivinilcloreto (PVC), é fácil perceber que o PVC tem maior resistência a tração, na temperatura ambiente. A isto atribuímos o tamanho do átomo de cloro e ligações de *Van Der Waals* apreciáveis entre as cadeias principais; em linhas gerais, no tracionamento dos polímeros as moléculas de PVC apresentam maior dificuldade em deslizar umas sobre as outras.

Observamos genericamente que os polímeros alongam-se, e este alongamento é irreversível, portanto, o seu uso como material estrutural é inexequível.

Podemos dizer que a borracha é um polímero, porém, como podemos explicar a sua elasticidade?

A resposta está vinculada ao modo de “prendermos” as cadeias principais do polímero (borracha).

O monômero deste polímero é o isopreno (borracha natural), cuja estrutura esquemática está representada juntamente com a reação de vulcanização.



Observe que o enxofre tem 6 elétrons na última camada e com o calor e iniciadores, se abre a dupla ligação, permitindo que o enxofre complete o octeto.

O objetivo está ligado ao fato de que as cadeias principais do polímero estão “presas” pelo átomo de enxofre, desta forma, quando o material é tracionado, este tende em retornar ao estado primitivo.

Os polímeros são ditos lineares (termoplástico), ramificados, com ligação cruzada (termofixo) e é evidente que tais situações irão conduzir as propriedades mecânicas, térmicas e elétricas destes materiais.

Estrutura Cristalina dos Metais

Para os nossos propósitos vamos considerar os átomos como esferas rígidas. Estes agrupam-se em tipos de estruturas cristalinas ao qual damos o nome de empacotamento, figuras 1a, 1b e 1c.

Na figura 2 esta representado os 14 reticulados de BRAVAIS. Qualquer empacotamento deverá encaixar-se em um dos casos. Por exemplo, no aço AISI 1020 onde temos 0,2% de carbono de 99,8% de ferro, o empacotamento à temperatura ambiente será cúbico de corpo centrado (ccc).

Caso se eleve a temperatura à 900°C , sua estrutura passará para cúbico de face centrada (cfc).

O tipo de empacotamento depende da composição, da temperatura em que se encontra o material metálico e da maneira como chegamos a ela (recozimento, têmpera, etc).

Geometria dos sistemas cristalinos

Sistema	Eixos	Ângulos axiais
Cúbico	$a_1 = a_2 = a_3$	Todos os ângulos = 90°
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq c$	Todos os ângulos = 90°
Ortorrômbico	$a \neq b \neq c$	Todos os ângulos = 90°
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	2 ângulos = 90° ; 1 ângulo $\neq 90^\circ$
Triclínico	$a \neq b \neq c$	Todos os ângulos diferentes, nenhum igual a 90°
Hexagonal	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$	Ângulo = 90° e 120°
Romboédrico	$a_1 = a_2 = a_3$	Todos os ângulos iguais, mas não 90°

Alguns exemplos da representação gráfica

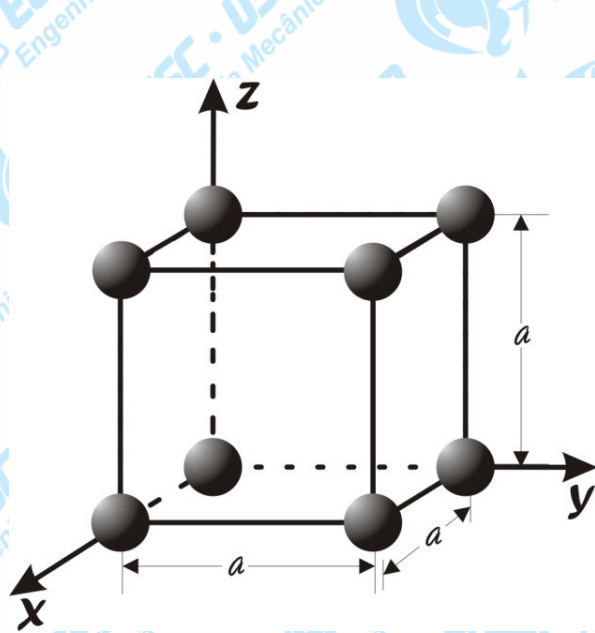


Figura 1a - Estrutura cúbica simples

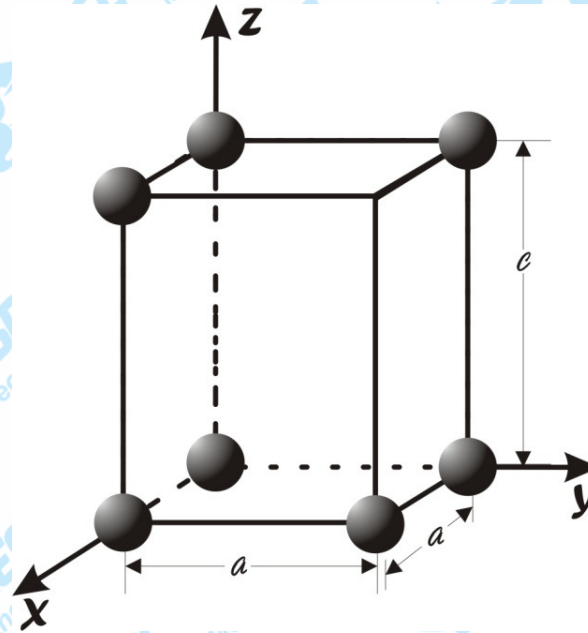


Figura 1b - Estrutura romboédrica

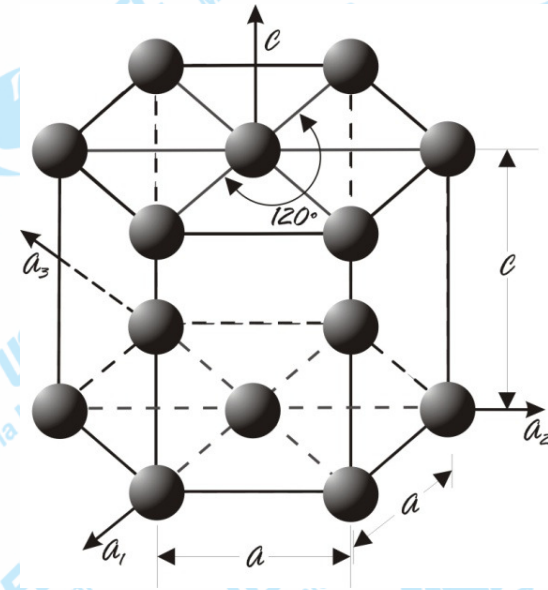
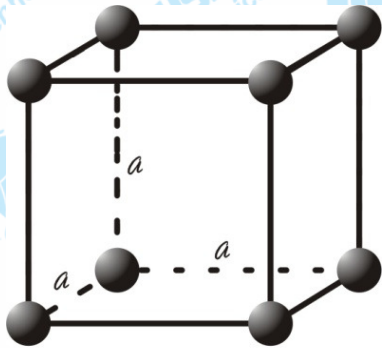
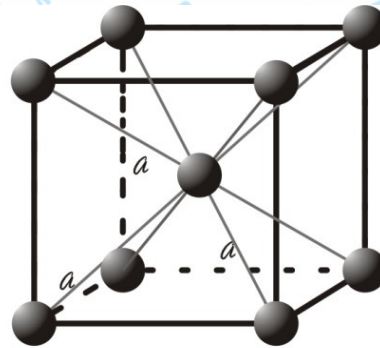


Figura 1c - Estrutura hexagonal

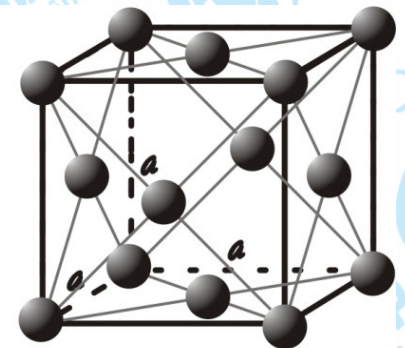
Figura 2 – Reticulado de Bravais:
Grupos espaciais. Estes 14 reticulados de Bravais se repetem nas três dimensões. Cada ponto (átomo), indicado em idênticas vizinhanças.



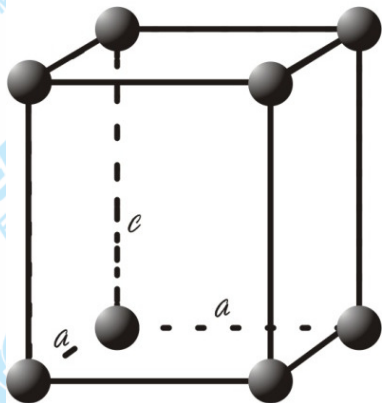
Cúbico Simples (P)



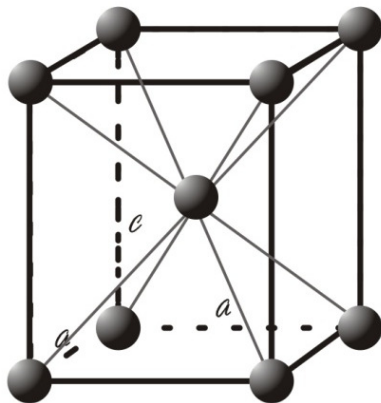
Cúbico de Corpo Centrado (I)



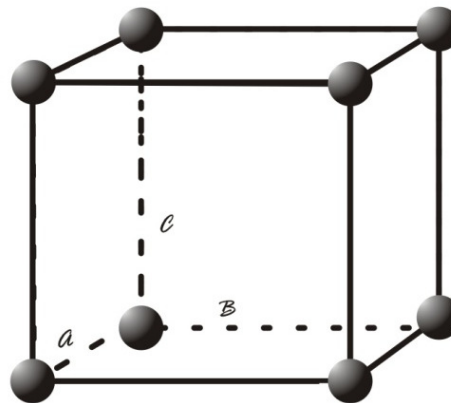
Cúbico de Faces Centradas (F)



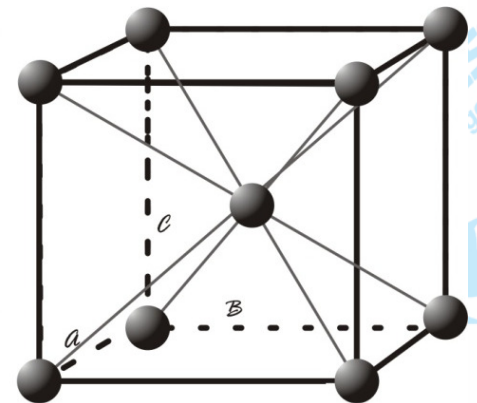
Tetragonal (P)



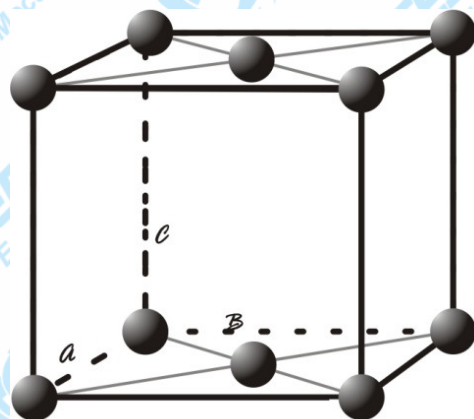
Tetragonal de Corpo Centrado (I)



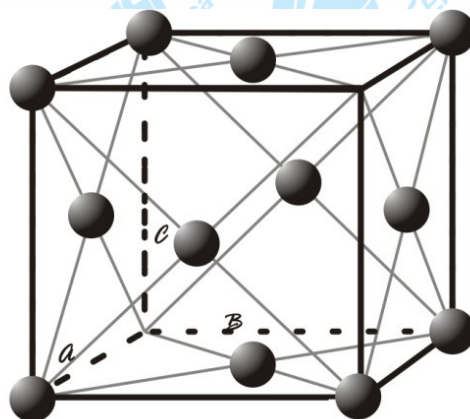
Ortorrômbico Simples (P)



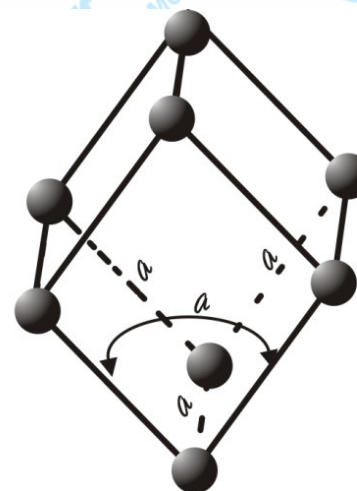
Ortorrômbico de Corpo Centrado (I)



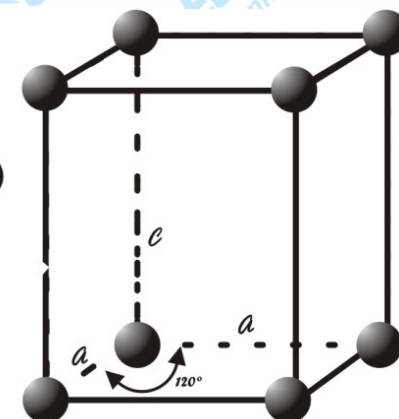
Ortorrômico de Base Centrada (C.)



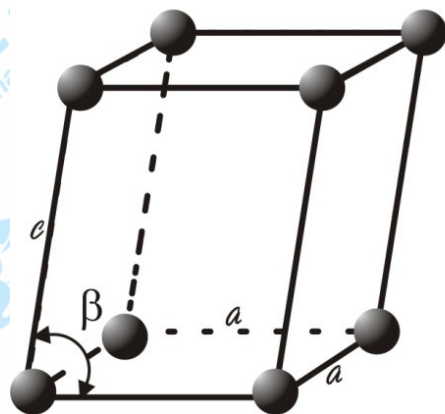
Ortorrômico de Faces Centradas (F)



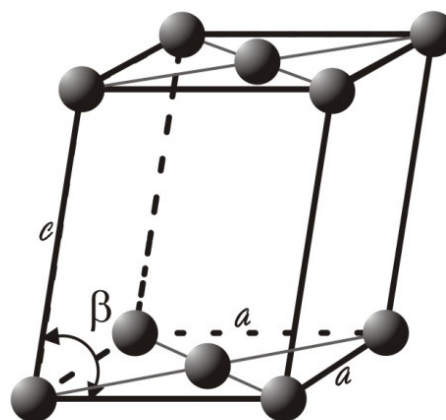
Romboédrico (R)



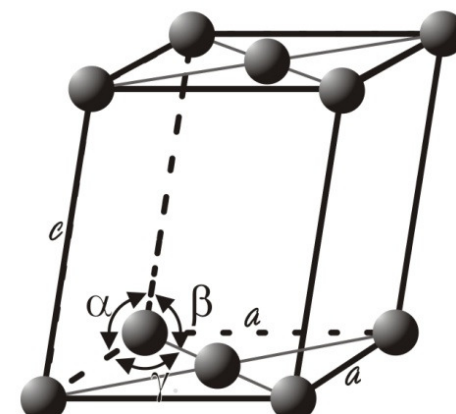
Ortorrômico de Base Centrada (C)



Monoclínico Simples (P)



Monoclínico de Base Centrada (C)



Triclínico (P)

Materiais Metálicos

Os metais possuem elétrons livres, sistemas de empacotamento próprio (enquadram-se em um dos reticulados de Bravais) e alta densidade em relação aos materiais poliméricos.

Para compor um material é necessário rever os conceitos das ligações químicas:

- a) **Ligação iônica:** resulta da atração mútua entre os íons positivos e negativos. O exemplo clássico é a do cristal **NaCl** e é uma ligação forte.
- b) **Ligação covalente:** este tipo de ligação está vinculada à regra do octeto. Nos materiais poliméricos a ligação covalente predomina.
- c) **Ligação metálica:** é uma ligação forte, própria dos metais, desta forma os materiais que contêm elementos que perdem facilmente elétrons são chamados metais.

O átomo que apresenta uns poucos elétrons de valência, estes podem ser removidos com relativa facilidade. Pode-se exemplificar com o elemento Cu. Este elemento possui número atômico 29, cuja configuração eletrônica é assim representada: **2** na camada **K**, **2 + 6** na camada **L**, **2 + 6 + 10** na camada **M** e finalmente apenas **1** na camada **N**.

Pode-se adotar um modelo para o metal cobre (poderá ser estendido a todo metal, figura 3).

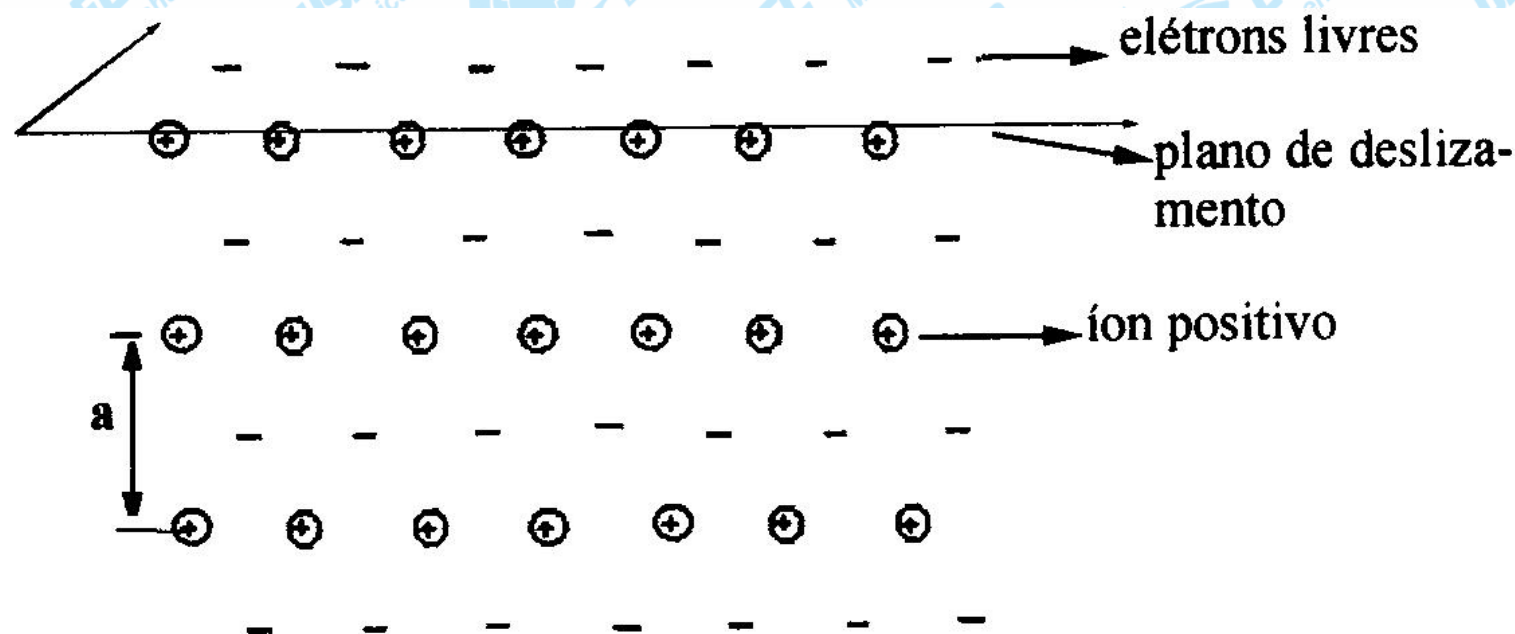


Figura 3 – Modelo de Ligação Metálica

Observe que a distância entre os íons positivos representa o parâmetro de rede do metal e a maneira que estes íons empacotam definirá o seu sistema. No caso do cobre este é o cfc.

Baseado no modelo, pode-se visualizar o que acontece quando um material é usado para a confecção de um para-lama de automóvel, tendo que ficar permanentemente deformado durante a operação de montagem. Neste processo de conformação se observam que os átomos (em primeira aproximação) deslizam uns em relação aos outros quando o limite elástico é ultrapassado e que existe a possibilidade do metal voltar ao seu estado original, se o limite elástico não for atingido.

Materiais Cerâmicos

Isolantes térmicos e elétricos (não possuem elétrons livres), quebradiços devido à natureza da ligação iônica.

Generalizando, o triaxial cerâmico é composto de:

- a) Argila que fornece a plasticidade;
- b) Sílica que fornece a parte refratária;
- c) Feldspato que serve como fluxo ou para formar a fase vítrea após a queima.

O nosso objetivo inicial será o de caracterizar as propriedades de um material cerâmico utilizando os conceitos das ligações químicas.

Fator de empacotamento:

O fator de empacotamento (F.E.) é a grandeza que associa o espaço ocupado pelos átomos na célula unitária.

$$FE = \frac{\text{volume dos átomos}}{\text{volume da célula unitária}}$$

$$FE_{ccc} = \frac{\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)4}{\left(4r/\sqrt{2}\right)^3} = 0,74,$$

ou seja, 74% dos espaços ocupados (figura 4)

OBS: temos no ccc 4 átomos por célula

$4r/\sqrt{2}$ é igual ao lado do cubo em função do raio atômico

Fator de empacotamento:

$$FE_{cfc} = \frac{\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)} \times 2 = 0,68,$$

ou seja, 68% dos espaços ocupados (figura 4b)

OBS: temos no ccc 2 átomos por célula

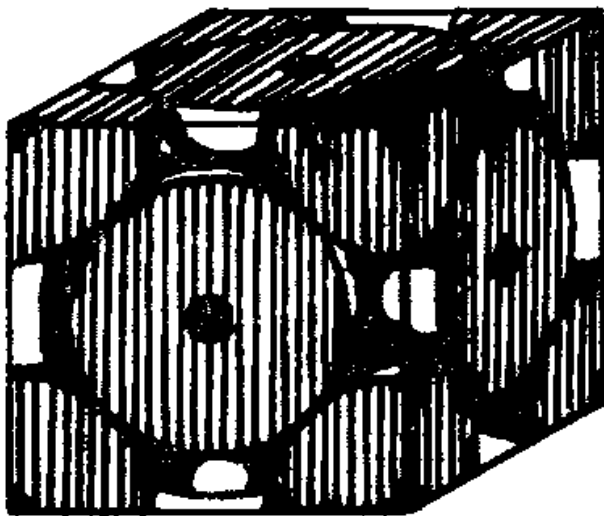
$\frac{4r}{\sqrt{3}}$ é igual ao lado do cubo

- Figura 4a – cfc :

- $a = 4r / \sqrt{2}$

- 4 átomos por célula unitária

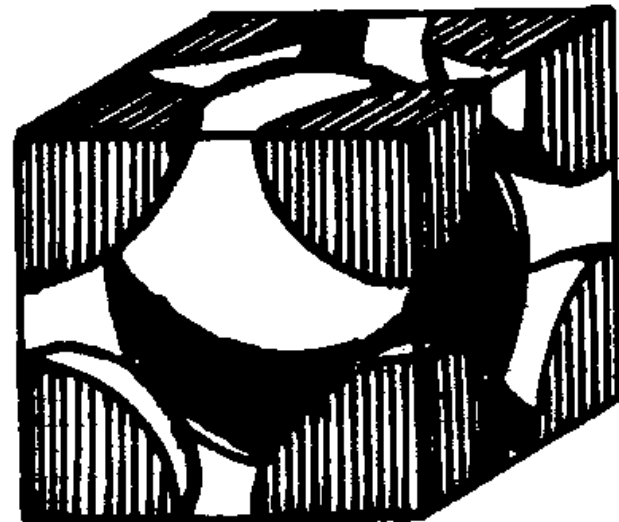
- $FE = 0,74$



- Figura 4b – ccc :

- $a = 4r / \sqrt{3}$

- 2 átomos por célula unitária



Solução Sólida

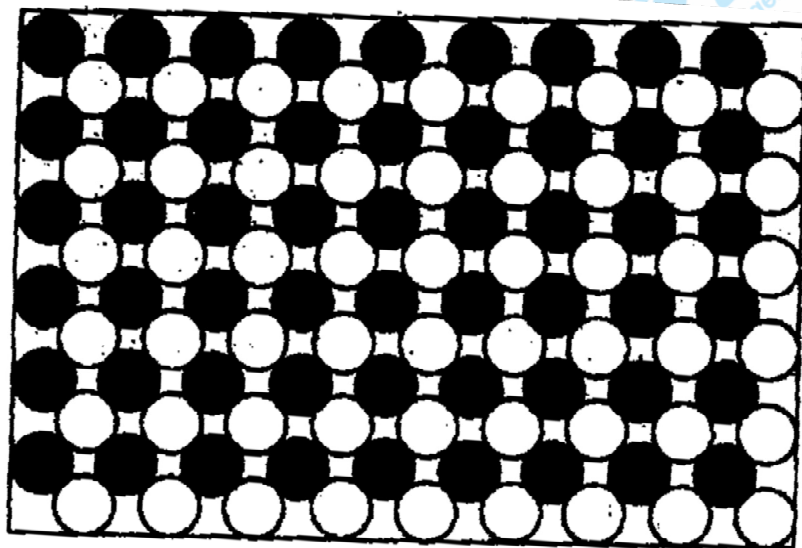
Quando dois ou mais elementos se combinam, o produto é chamado uma **liga**. Quando a combinação ocorre de tal modo que os elementos são misturados em escala atômica, são ditos dissolvidos e o resultado é chamado uma **solução**. No estado sólido, é chamada solução sólida. Qualquer solução sólida é uma liga monofásica. Soluções sólidas podem ser **primárias** ou **secundárias**. Soluções sólidas primárias têm a estrutura cristalina de um dos elementos do sistema e podem ser encaradas como uma solução do outro ou outros elementos no primeiro. O elemento hospedeiro é chamado solvente e o outro soluto. Soluções sólidas primárias podem conter porcentagens de soluto que variam de zero a alguma porcentagem máxima chamado de **limite de solubilidade**. Se a fase de solução sólida existe entre duas concentrações do soluto, nenhuma das quais é zero, então ela é uma solução sólida secundária. Ao contrário dos metais puros, as soluções sólidas geralmente se solidificam em uma faixa de temperatura.

As soluções sólidas podem ser substitucionais ou intersticiais, figuras [5a](#), [5b](#) e [5c](#).

Solução sólida substitucional é obtida quando temos uma mistura de dois metais, cujos átomos têm dimensões semelhantes, e pode substituir o outro com facilidade, sem alterar o arranjo cristalino do metal. Um exemplo é a solução zinco-cobre de raios atômicos $1,278 \text{ \AA}$ e $1,332 \text{ \AA}$ dando origem ao latão.

Solução sólida intersticial é obtida quando misturamos metais cujos átomos têm grande diferença de tamanho tal que o menor pode alojar-se nos vãos intersticiais dos maiores. O carbono e o ferro de raios atômicos $0,77 \text{ \AA}$ e $1,26 \text{ \AA}$ formam uma solução sólida intersticial até certo limite.

- Figura 5a - Solução sólida substitucional



- Figura 5b – Solução Sólida Intersticial

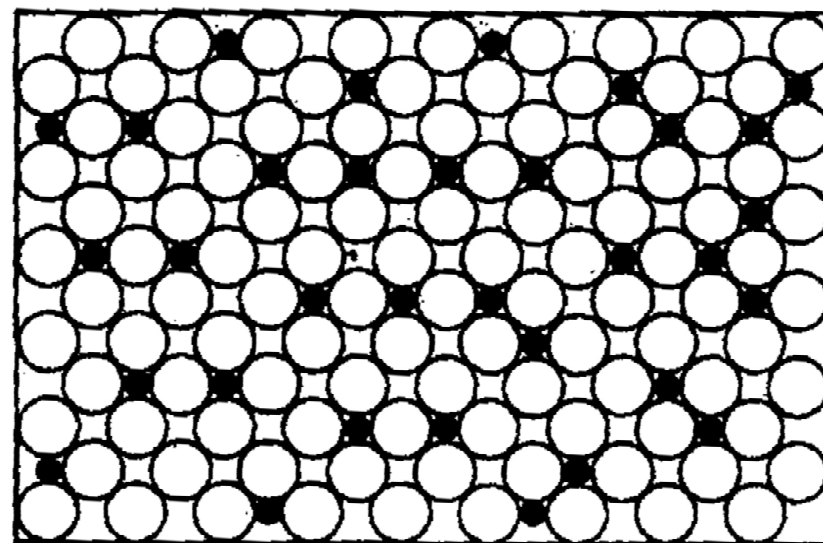
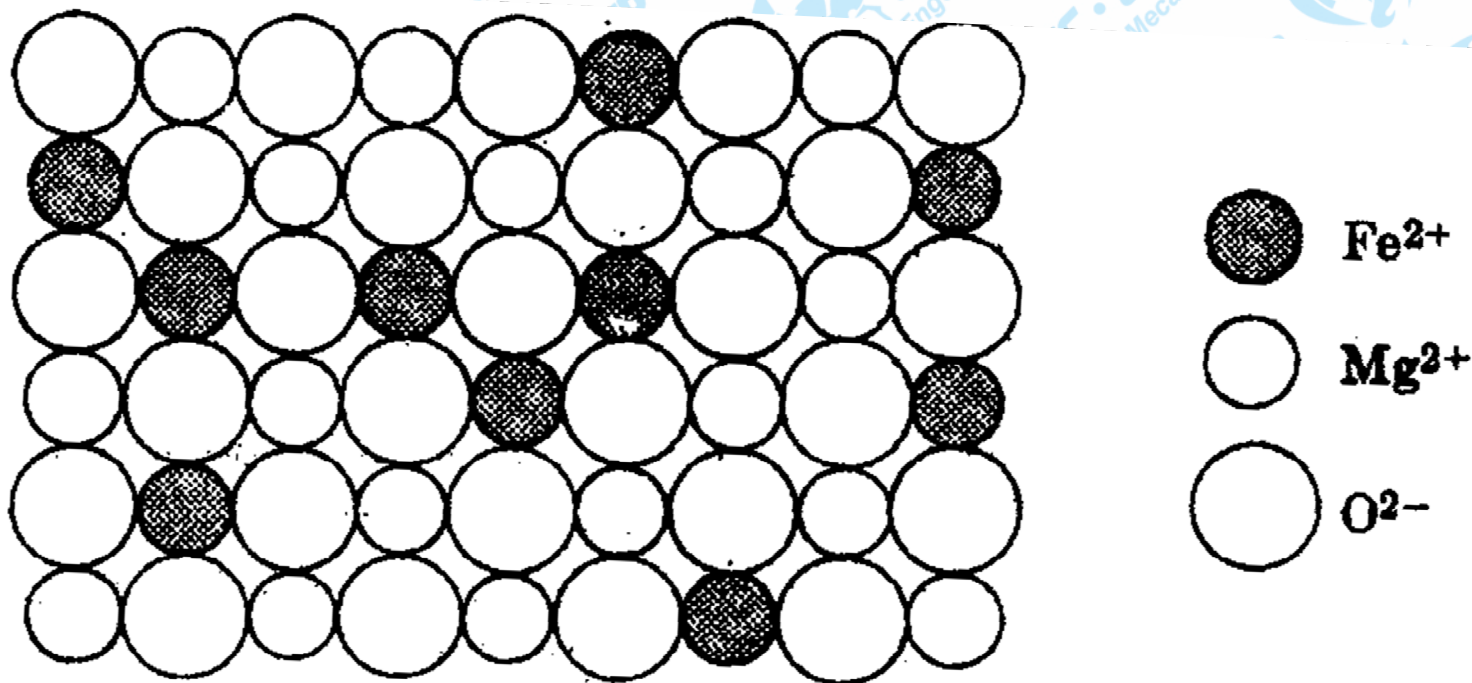


Figura 5c – Solução sólida substitucional em um composto. Fe^{2+} substitui Mg^{2+} na estrutura do MgO .



Regras de Solubilidade Sólida

- **Dimensão atômica:** os raios atômicos dos dois elementos devem estar numa razão da ordem de 15%;
- **Estruturas cristalinas:** as estruturas devem ser do mesmo tipo (há exceções);
- **Valência química:** a valência dos dois elementos não deve diferir por mais de uma unidade;
- **Eletronegatividade:** as eletronegatividades devem ser aproximadamente iguais, caso contrário pode ser formar um composto como resultado da diferença entre as afinidades eletrônicas. Isto significa que o composto terá uma energia livre mas baixa do que a solução única.

Figura 6 – Classificação periódica dos elementos, evidenciando os raios atômicos dos elementos (em Å)

1A																		0	
H 0,5																		He 0,95	
Li 1,52	Be 1,12																	B 0,88	Ne 1,31
Na 1,86	Mg 1,60	3A	4A	5A	6A	7A	8						10	11	12	13A	14A	15A	16A
K 2,31	Ca 1,97	Sc 1,60	Ti 1,46	V 1,31	Cr 1,25	Mn 1,29	Fe 1,26	Co 1,25	Ni 1,24	Cu 1,28	Zn 1,33	Ga 1,22	Ge 1,22	As 1,21	Se 1,17	Br 1,14	Kr 1,89		
Rb 2,44	Sr 2,18	Y 1,80	Zr 1,57	Nb 1,41	Mo 1,38	Tc 1,30	Ru 1,33	Rh 1,34	Pd 1,38	Ag 1,44	Cd 1,49	In 1,62	Sn 1,40	Sb 1,41	Te 1,37	I 1,33	Xe 2,09		
Cs 2,62	Ba 2,17	*	Hf 1,57	Ta 1,43	W 1,37	Re 1,34	Os 1,35	Ir 1,35	Pt 1,38	Au 1,44	Hg 1,52	Tl 1,71	Pb 1,75	Bi 1,46	Po 1,40	At 1,40	Rn 2,14		
Fr 2,70	Ra 2,20	*																	

← CRESCE →																	
La 1,88																	
Ac 2,0																	

É representado pela figura 6 a classificação periódica dos elementos. Para “misturar” os elementos, é primordial conhecer o seu raio atômico, desta forma estamos destacando este parâmetro, como também as regras de solubilidade. Observe que tais regras são válidas para soluções sólidas substitucionais, porém temos que pensar em soluções sólidas intersticiais.

Como exemplo, considere que o átomo de ferro ou o elemento ferro. Este elemento apresenta vãos octaédricos e tetraédricos em suas estruturas ccc e cfc (dependendo da temperatura temos o elemento ferro em uma dessas estruturas).

Para elementos de estrutura cúbica como o ferro, as relações entre o raio (r) do átomo que se alojaria num vão tetraédrico ou octaédrico e o (R) da matriz (solvente) são representados pela tabela 1.

Tabela 1 – Relação entre o raio atômico do elemento intersticial (r) e o raio do átomo do solvente (R).

Estrutura	Relação r/R		FE
	OCTAÉDRICO	TETRAÉDRICO	
CFC	0,414	0,225	0,74
CCC	0,154	0,291	0,68

Para a *tabela 1* observamos que além da estrutura (cfc) ser mais compacta do que a (ccc), ela apresenta vãos maiores, embora obviamente em menor número.

Tabela 2 – Comparação entre o raio atômico do carbono e os vãos da estrutura do ferro

A seguir, na tabela 2, vamos comparar o tamanho do átomo de carbono com os interstícios da matriz do elemento ferro, em duas temperaturas distintas, 500°C e 1000°C.

Ferro						Carbono
			INTERSTÍCIO		SUBSTITUCIONAL	Raio do carbono em Å a 15°C (grafite)
Temperatura °C	Estrutura	Raio Fe (Å)	Raio do vão octaédrico (Å)	Raio do vão tetraédrico (Å)	± 15% do raio do Fe (Å)	
500	ccc	1,25	0,19	0,36		0,71
100	cfc	1,29	0,53	0,29		

A análise da tabela 2 indica que:

- a) O carbono não forma solução sólida substitucional com o ferro;
- b) O carbono é maior que o maior vão da estrutura (cfc) do ferro (aproximadamente 0,71 e 0,53, respectivamente), o que acarretará uma baixa solubilidade do carbono no ferro γ ou (cfc), sendo que apenas 2% de carbono será incorporado ao ferro γ quando este estiver a 1148°C;
- c) O carbono é muito maior que o maior vão da estrutura (ccc) do ferro, aproximadamente 0,71 a 0,36Å, respectivamente, o que acarretará uma solubilidade quase nula no ferro α ou (ccc) sendo que apenas 0,02% de carbono será incorporado ao ferro α e ainda quando este estiver a 727°C.

Estrutura Granular dos Metais – Análise Microestrutural

Um material metálico é composto de cristais de várias orientações. Esses cristais individuais são chamados de grãos, figura 7 e figura 8.

No interior de um grão os átomos estão arranajados segundo um único modelo cristalino, dos 14 já mencionados (retículos de Bravais) e com uma única orientação. Entretanto, no contorno do grão, entre dois grãos adjacentes, há uma zona de transição, a qual não está alinhada com nenhum das duas orientações.

Um dos meios auxiliares mais úteis para compreender a estrutura de todos os tipos de materiais é a fotomicrografia de uma amostra do material quando observada num microscópio

Figura 7 – Esboço mostrando a relação da microestrutura bidimensional de um material para a estrutura espacial

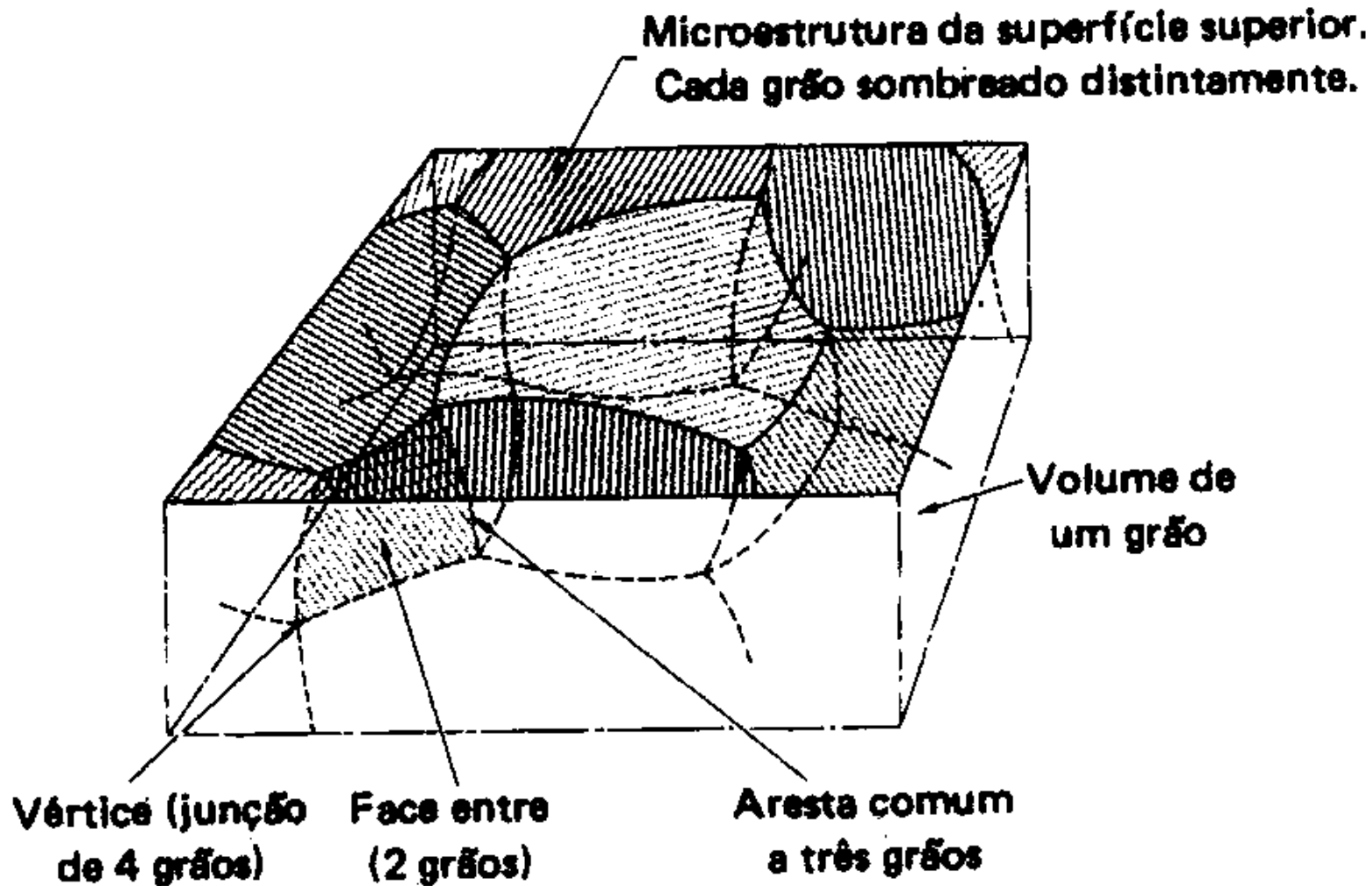
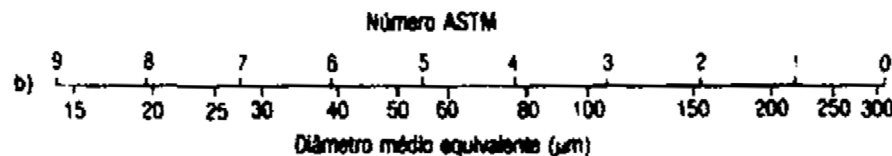
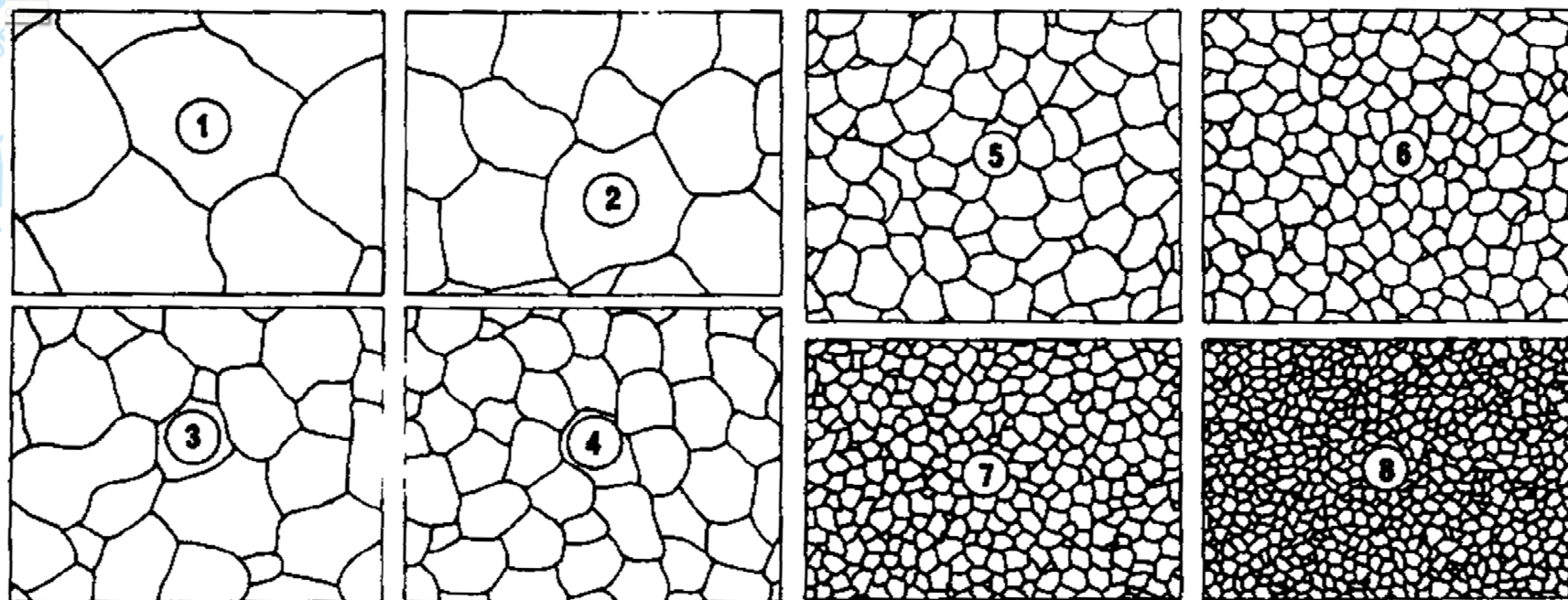


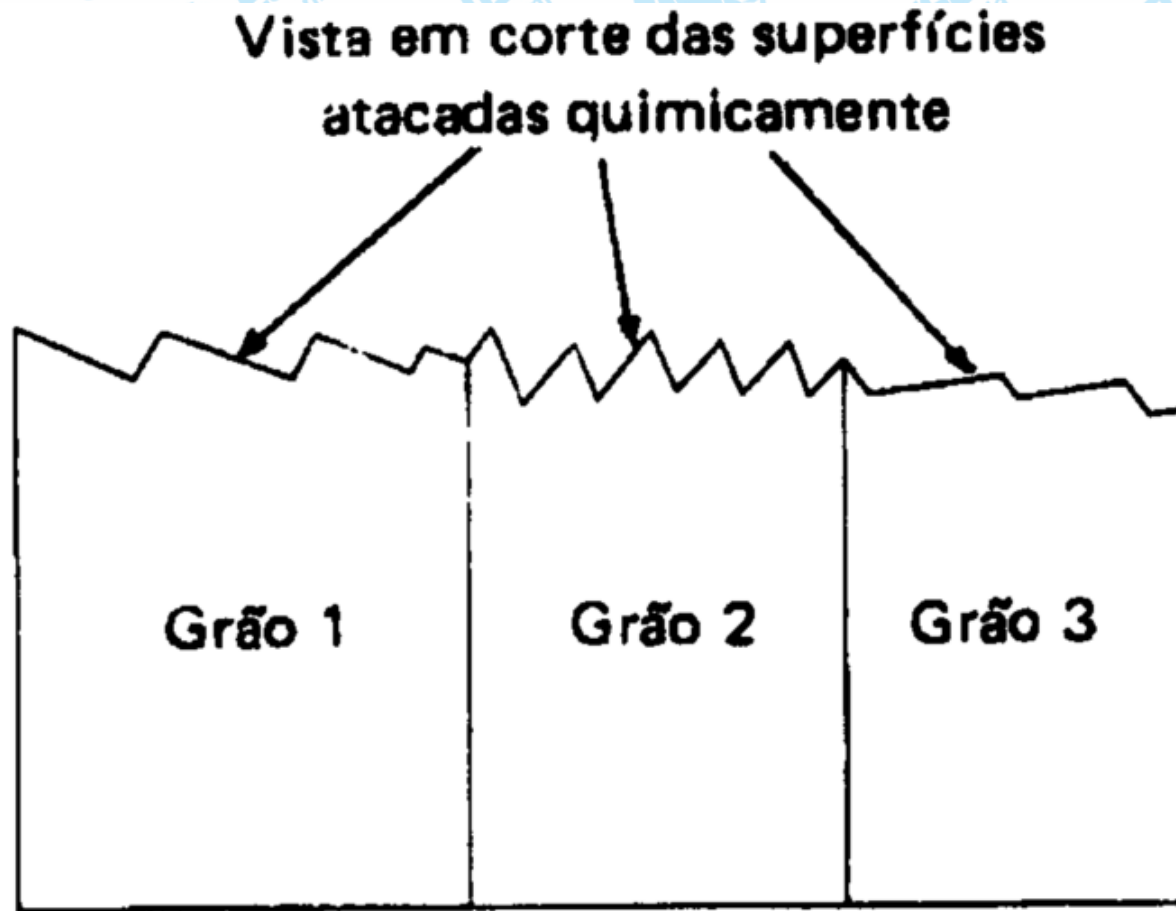
Figura 8 – Relação de tamanhos de grãos segundo a ASTM, para um aumento de 100X



O mecanismo pelo qual o ataque químico revela detalhes da microestrutura com relação aos grãos é mostrado da figura 9.

A substância química (ataque químico) remove uma pequena quantidade de material da superfície finamente polida e produz facetas de cristais cuja orientação varia de grão para grão. Cada grão (quando examinado no microscópio ótico), reflete luz de modo diferente e tem tonalidade distinta. Nos contornos dos grãos pode existir uma diferença de nível ou pode-se formar um entalhe. Em ambos os casos a luz incidente é refletida para o lado e o contorno é visível como uma linha escura.

Figura 9 – Ilustração esquemática das facetas de cristais produzidas pelo ataque químico.



DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA CRISTALINA

CONCEITOS IMPORTANTES PARA A CARACTERIZAÇÃO DOS RETICULADOS CRISTALINOS

- **NÚMERO DE COORDENAÇÃO:**

Representa o número de átomos mais próximos a um átomo de referência.

- **PARÂMETRO DO RETICULADO:**

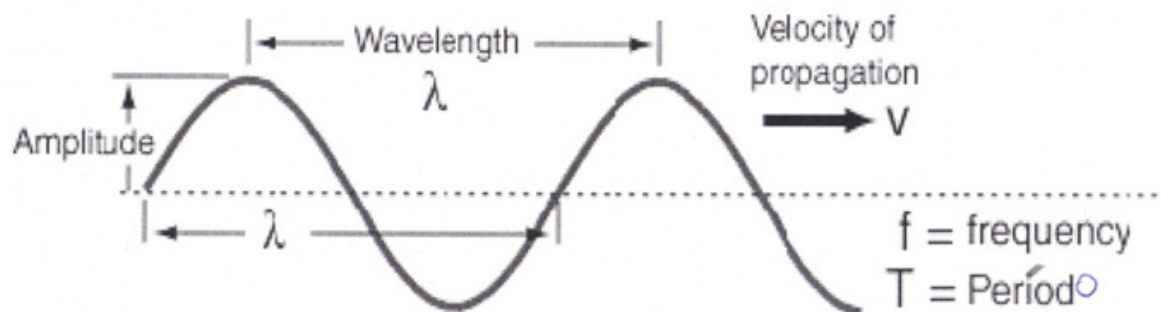
Constitui uma relação matemática entre uma dimensão da célula e o raio atômico

- **FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO:**

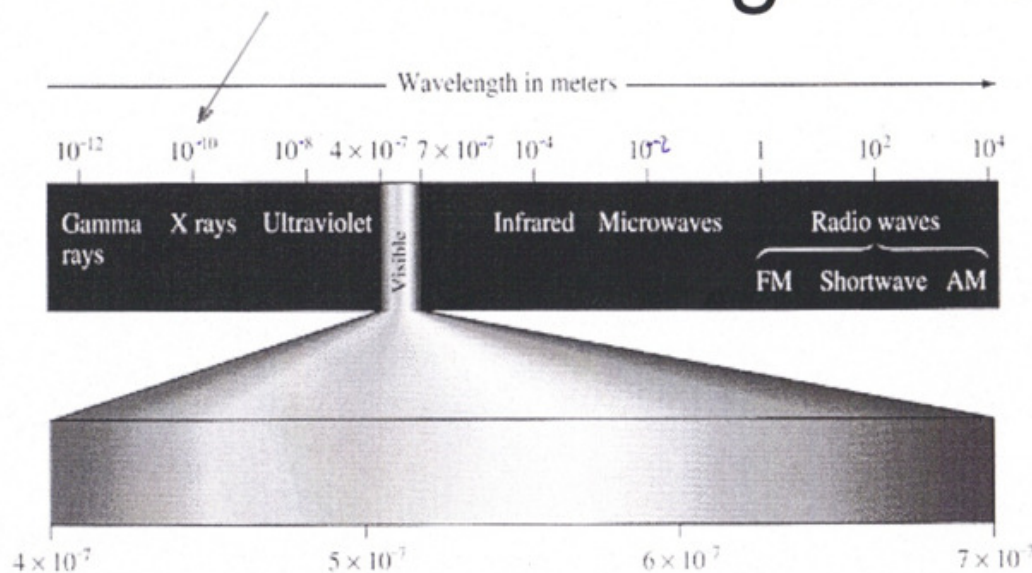
É a relação entre o volume dos átomos no interior da célula unitária pelo volume total da célula

$$F.E.A. = \frac{\text{Volume dos átomos no interior da célula}}{\text{Volume total da célula}}$$

O que é uma onda?



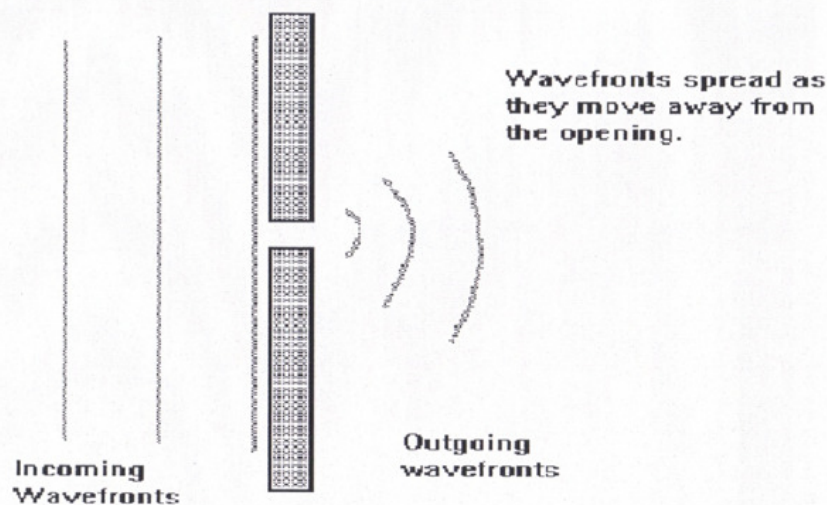
Onda eletromagnética



O que é difração ?

Difração é um fenômeno ondulatório que ocorre quando ondas passam por um orifício ou contornam um objeto. A dimensão do obstáculo ou fenda é da mesma ordem de grandeza que o seu comprimento de onda (λ).

O desvio na trajetória da onda, causado pela difração, depende do comprimento de onda e do tamanho do obstáculo.



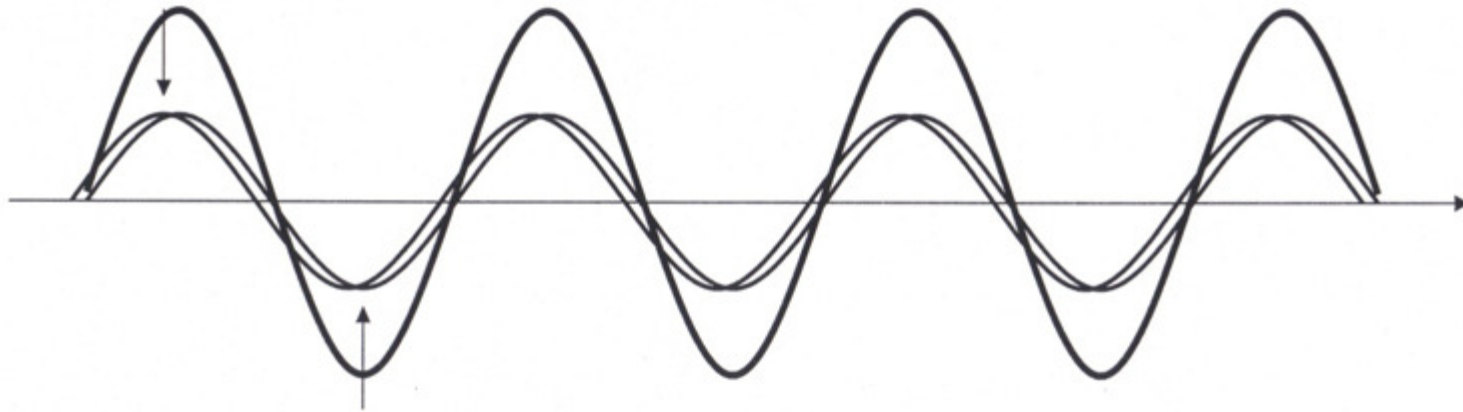
O que é interferência ?

•Princípio de superposição

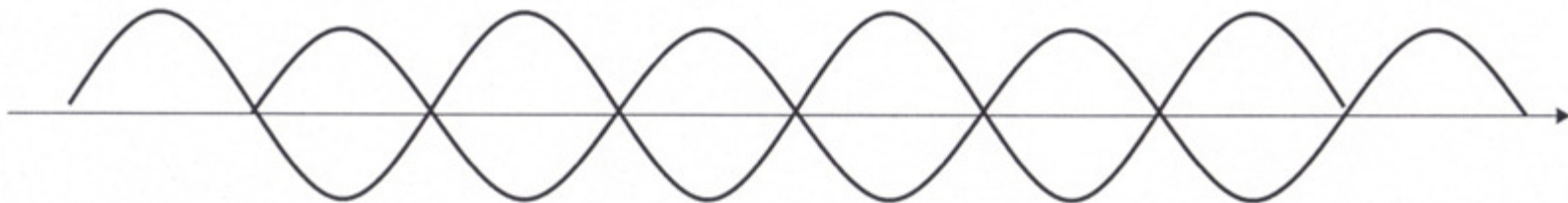
Quando duas ondas estão no mesmo lugar, o distúrbio resultante é a soma dos dois distúrbios individuais

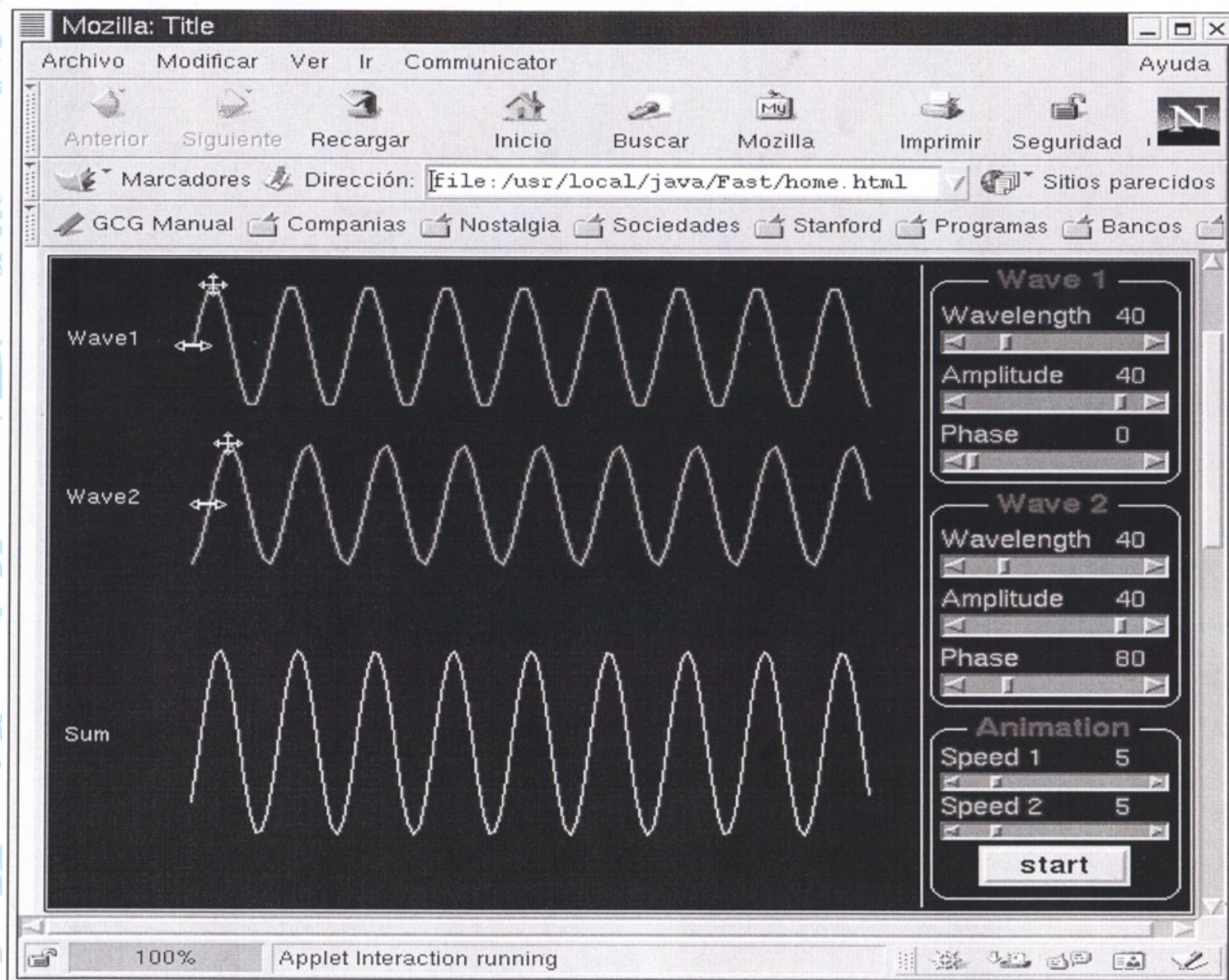


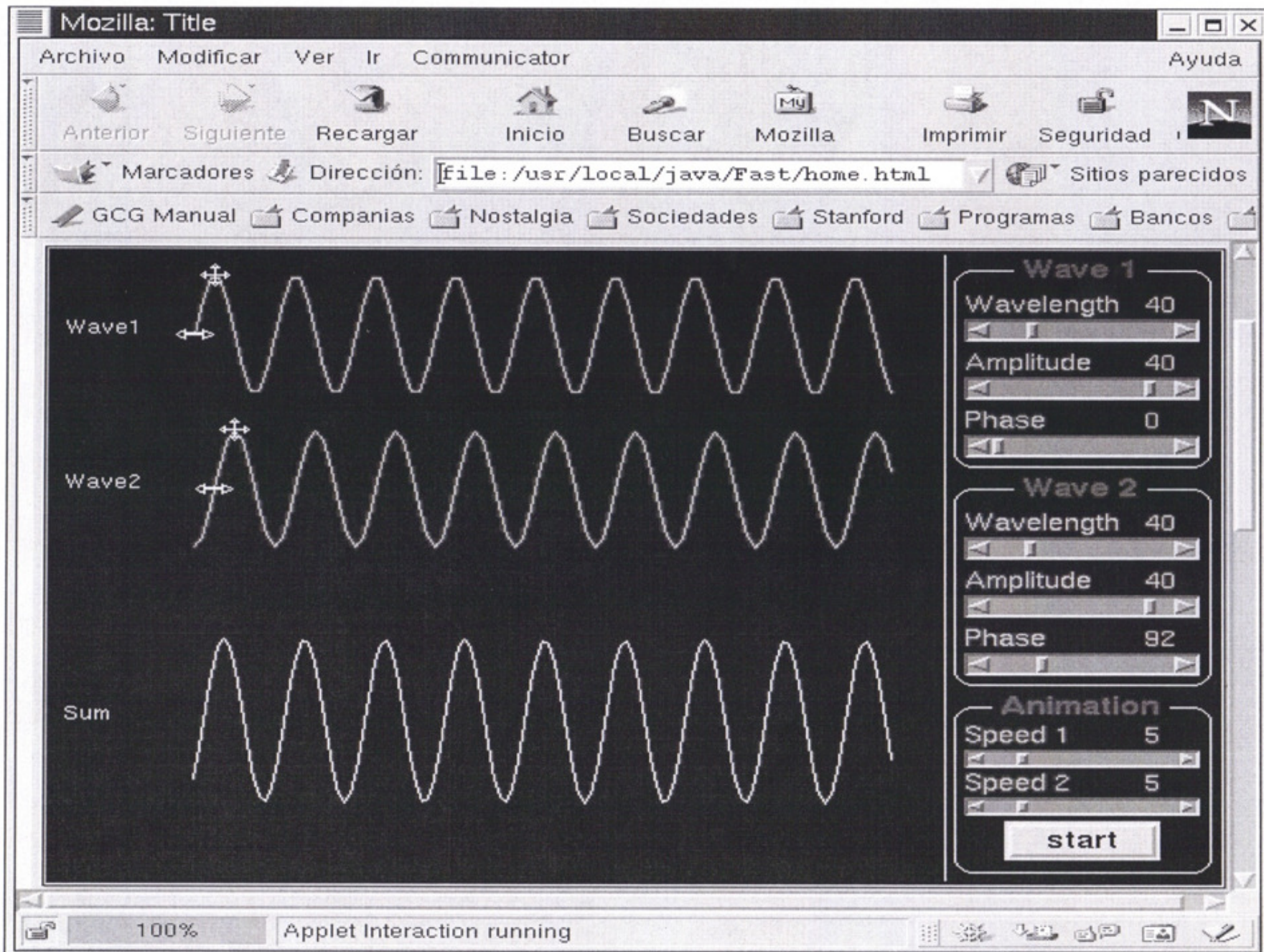
Interferência Construtiva

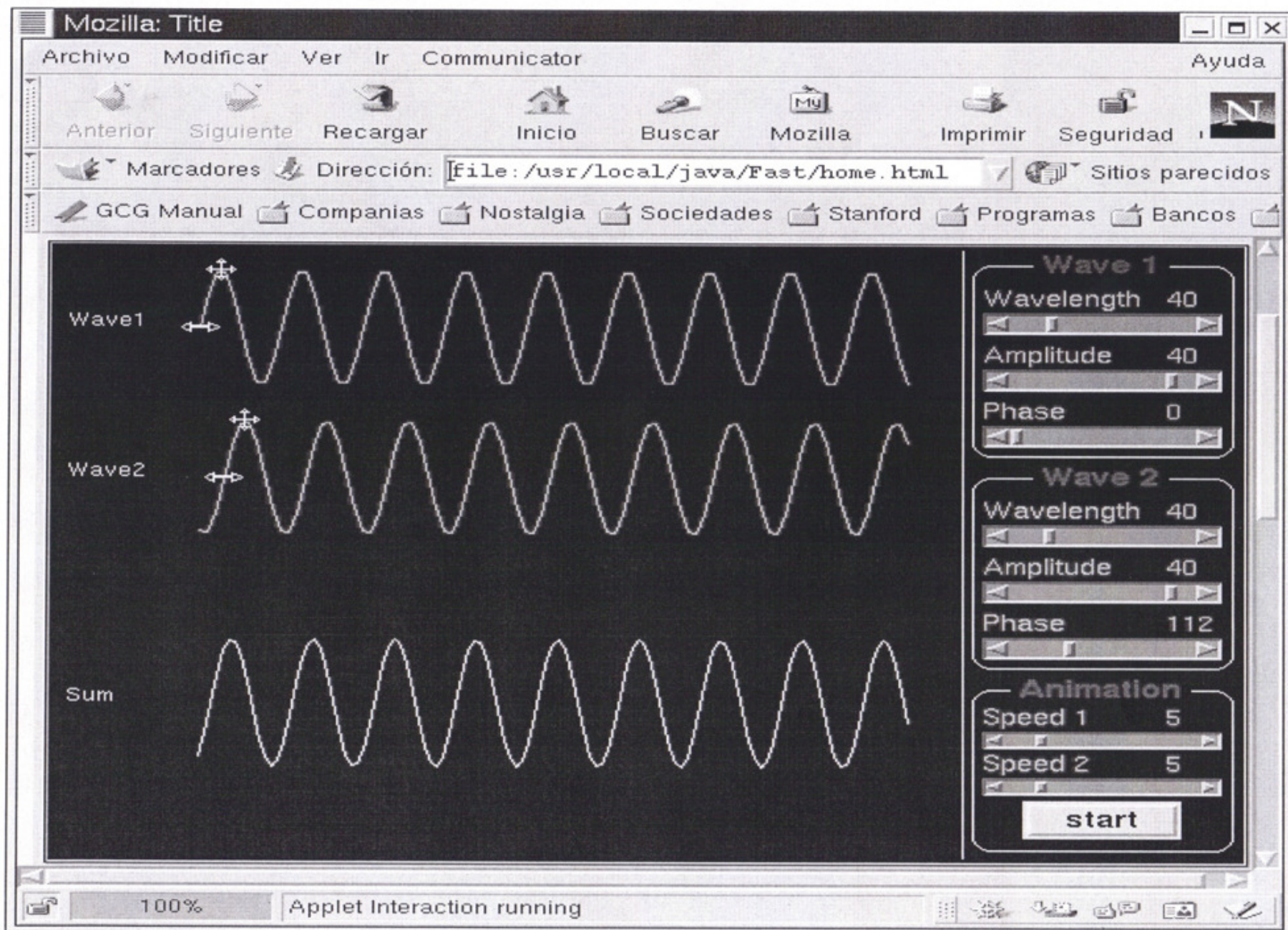


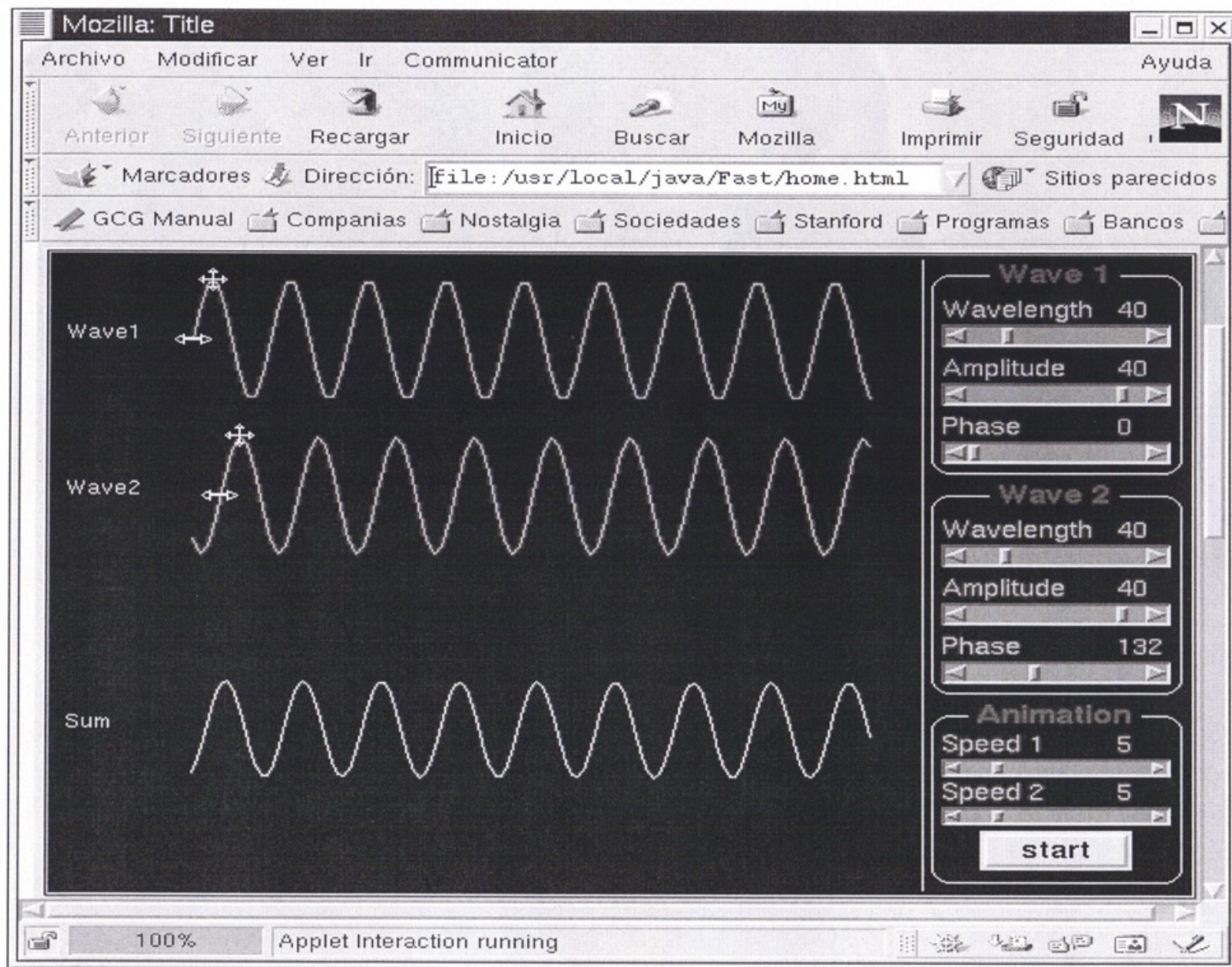
Interferência Destrutiva

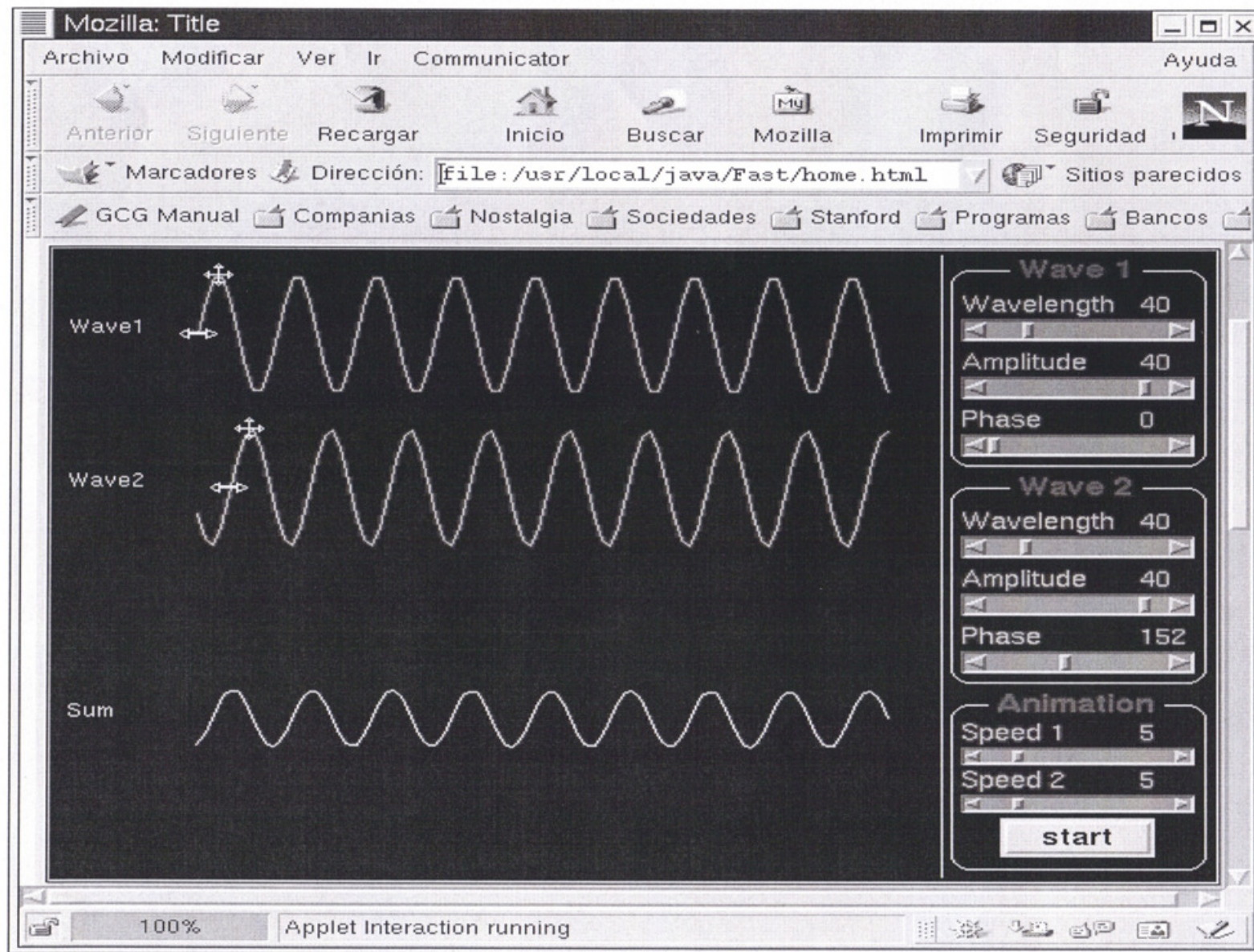


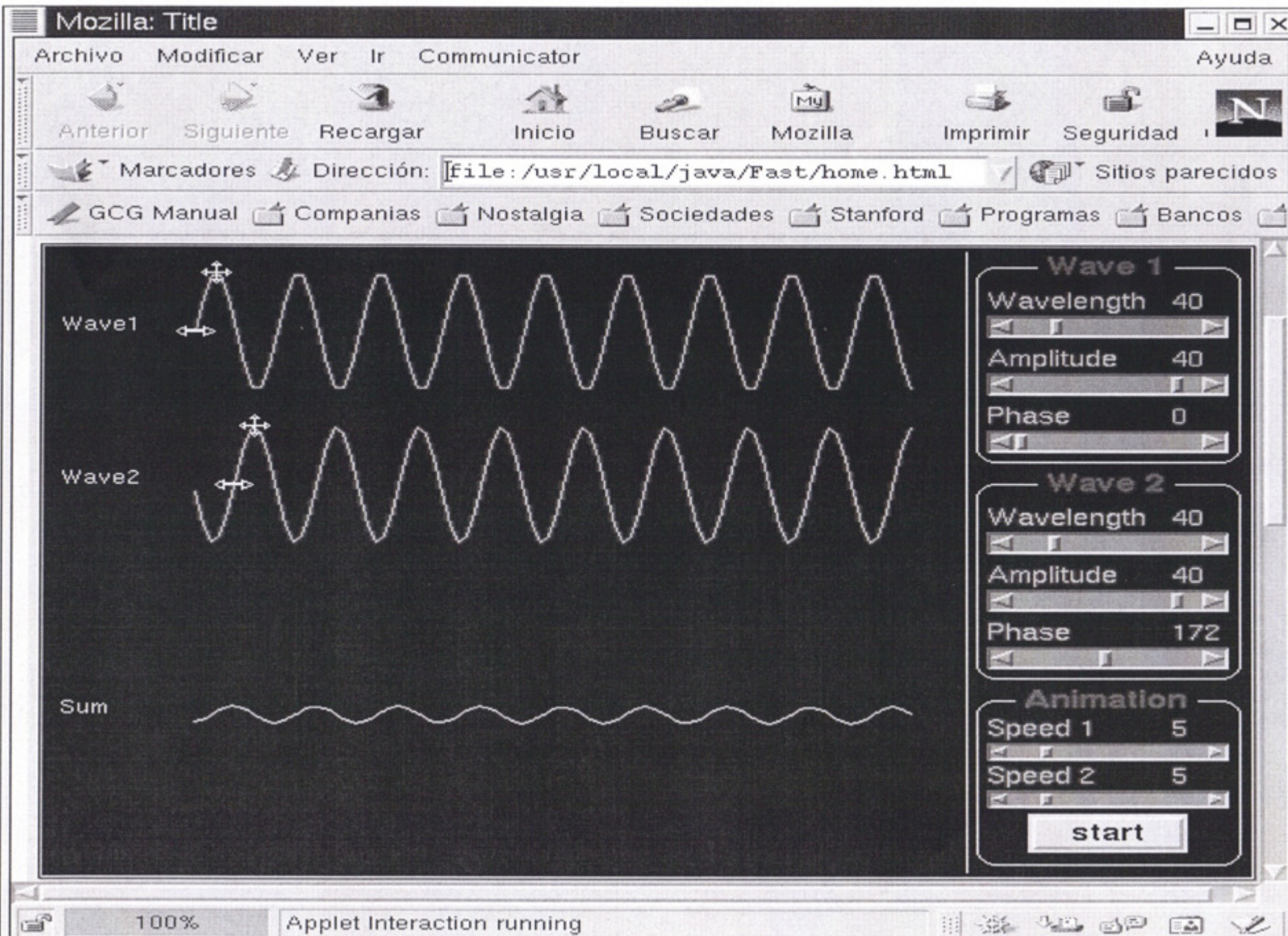


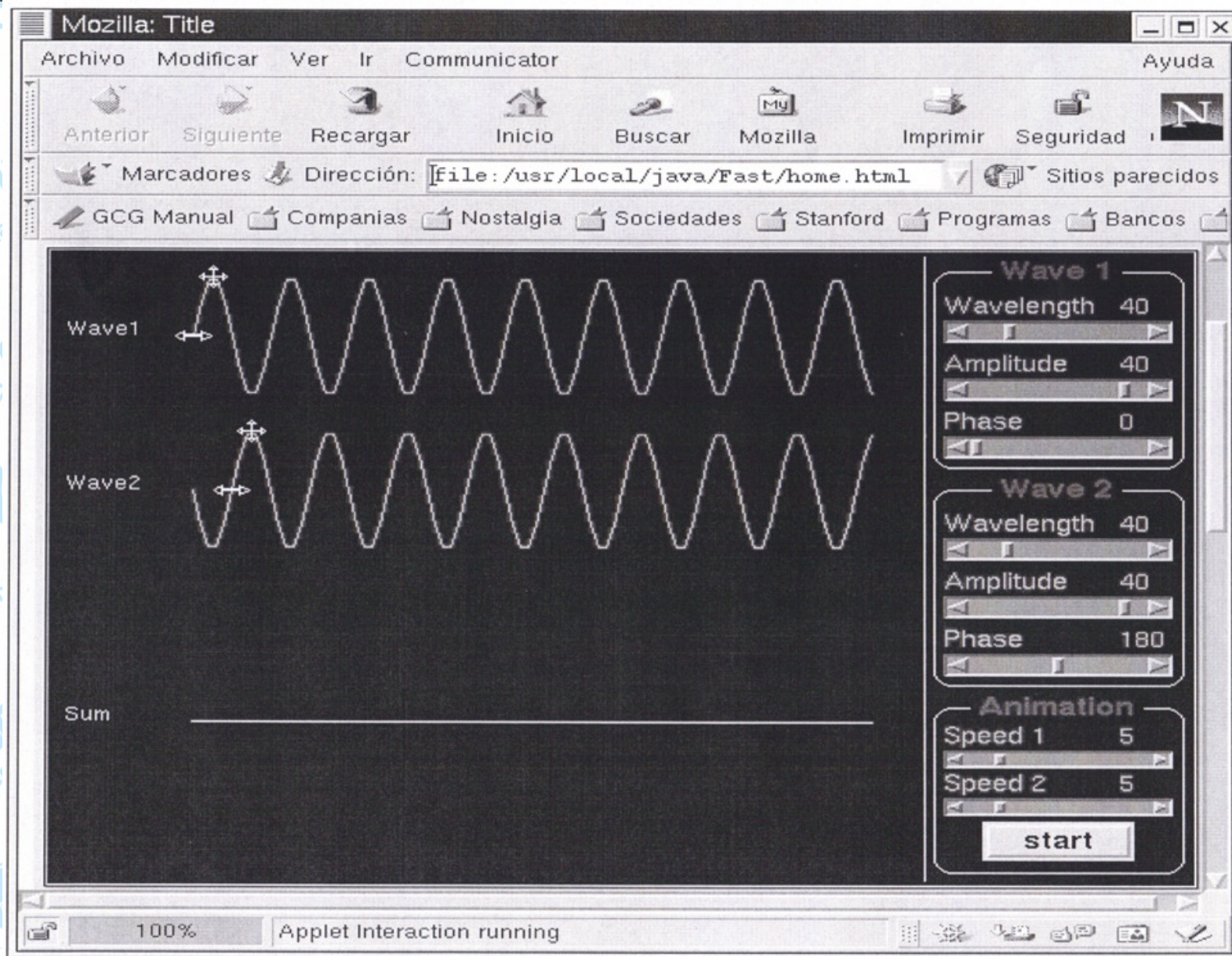












Quais são os métodos ?

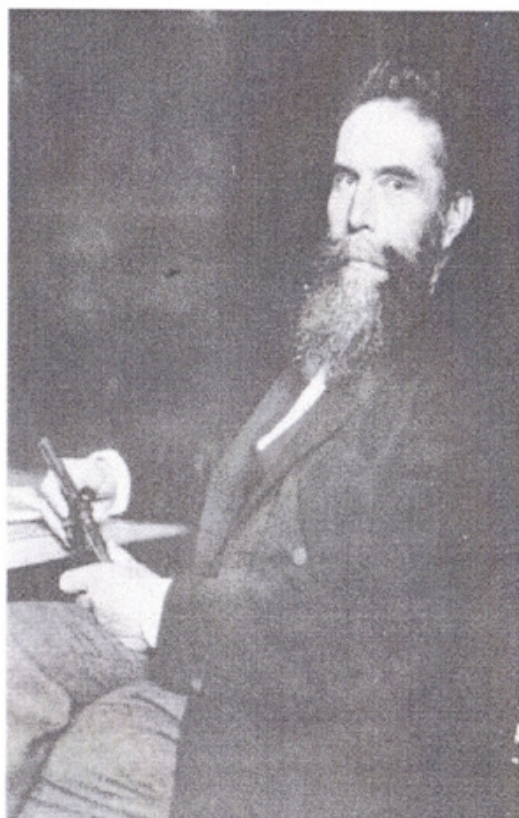
- Difração de raios X
- Difração de elétrons
- Difração de nêutrons



Informações sobre:

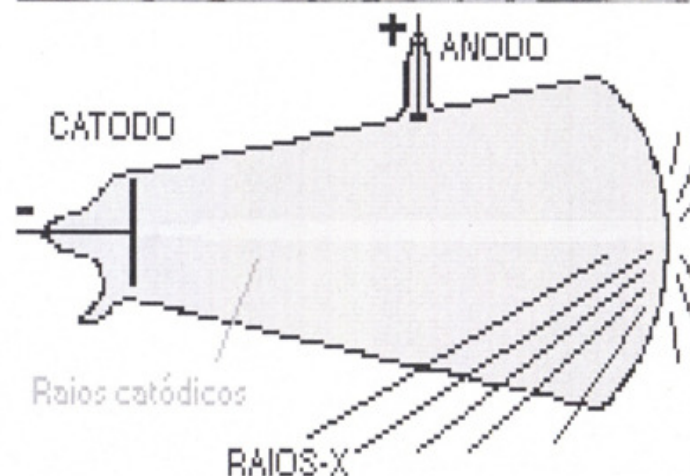
- ❖ Natureza
- ❖ Parâmetros do reticulado
- ❖ Tamanho
- ❖ Perfeição
- ❖ Orientação dos cristais.

Descobrimento dos Raios X



Wilhelm Roentgen

(1845-1923)



Raios X $\neq$ raios catódicos

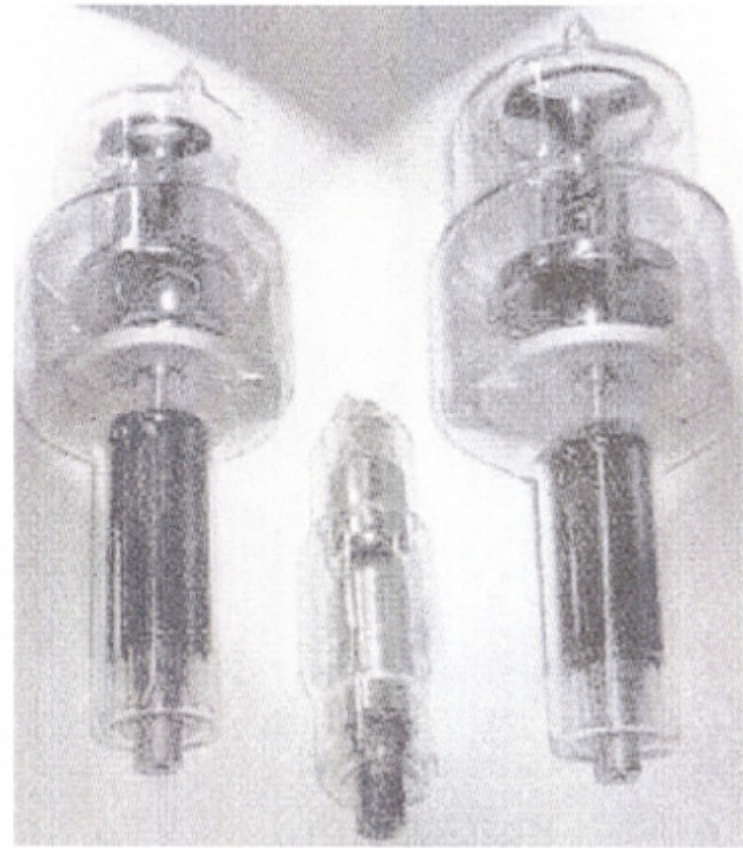
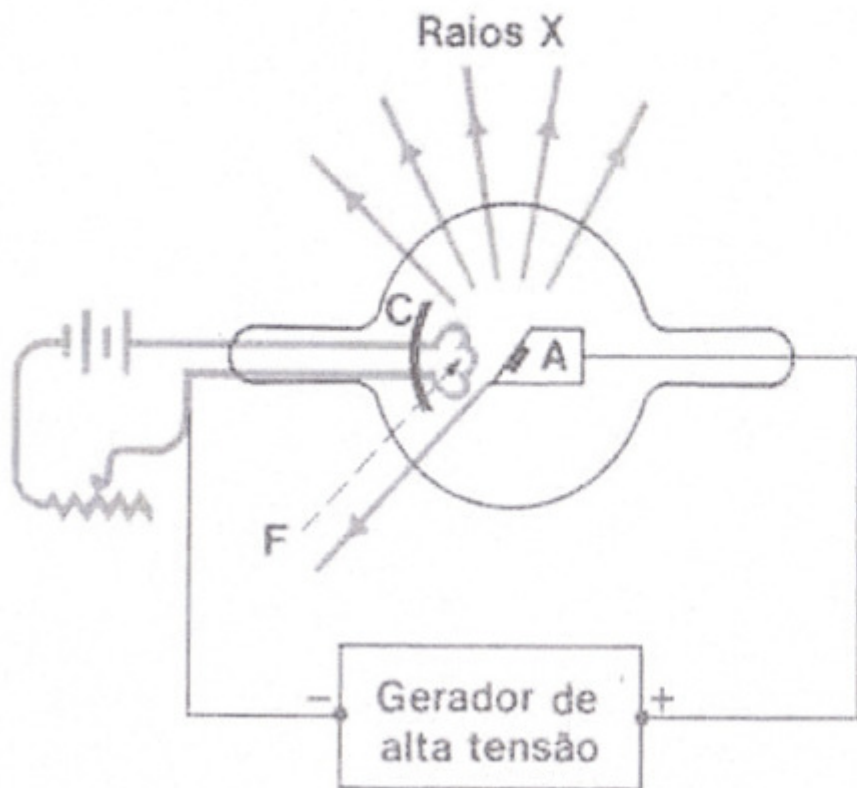
- ❖ Não eram afetados por campos elétricos e magnéticos.
- ❖ Podiam penetrar sólidos, com profundidades que dependem da sua densidade.
- ❖ 1897: J.J. Thomson mostrou que os raios catódicos eram corpúsculos com carga negativa: elétrons
- ❖ Suspeitava-se que os raios X fossem ondas eletromagnéticas, mas não se conseguia observar o fenômeno da interferência, típico de ondas.

DESCOBRIMENTO DOS RAIOS X

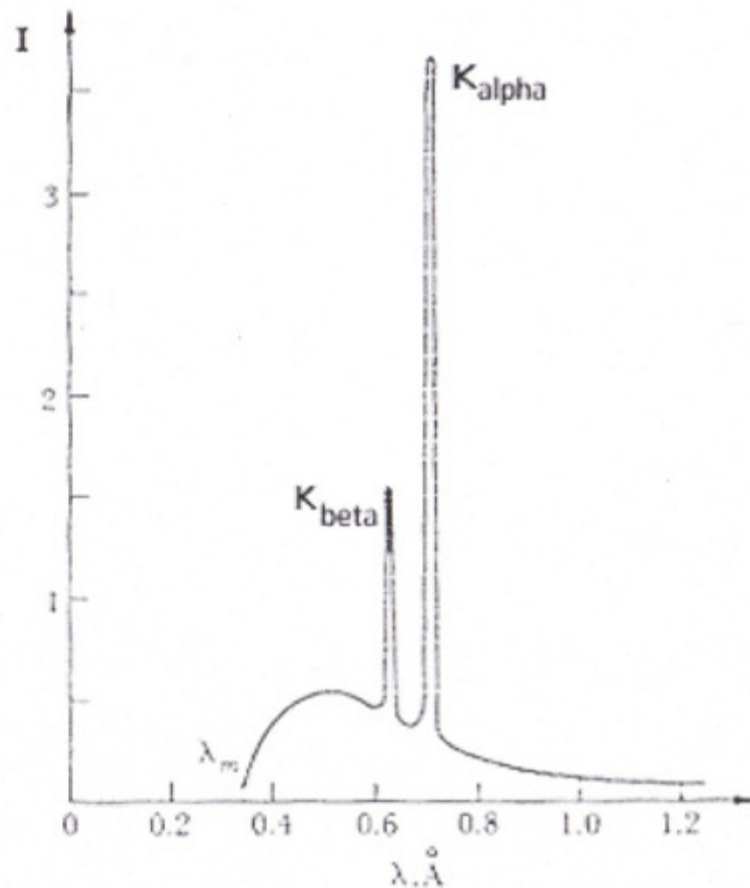
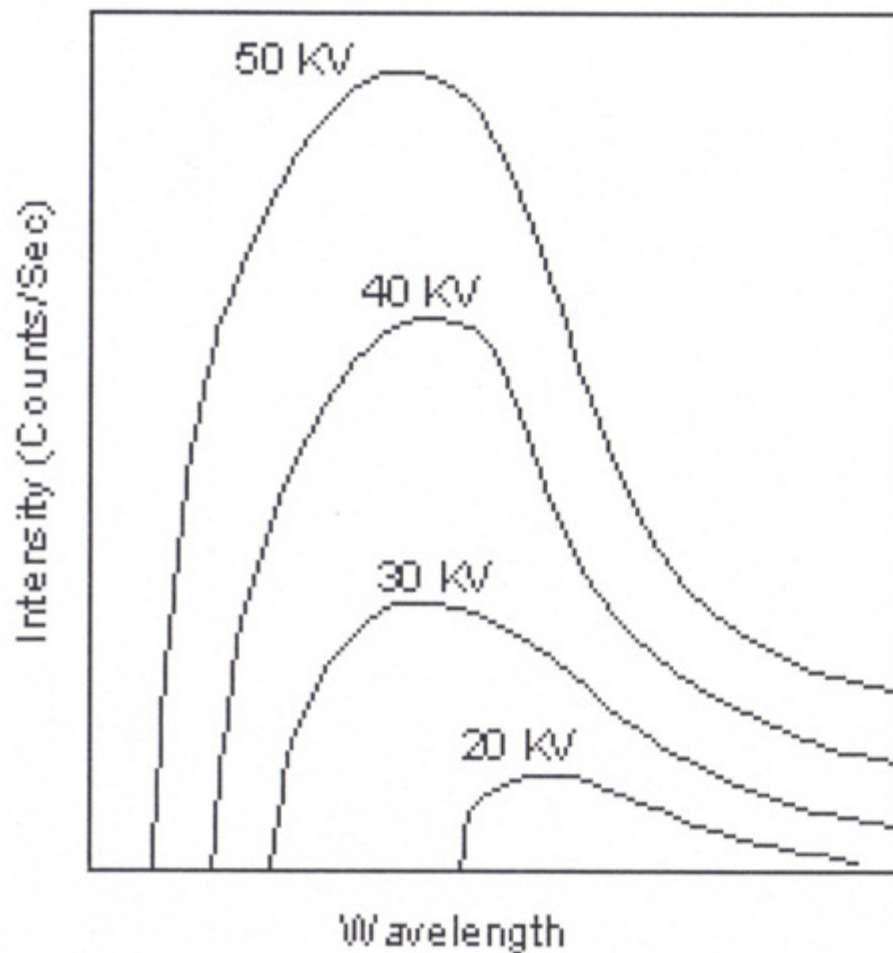
Propriedades:

- ✓ Propaga em linha reta
- ✓ Absorvido pela Matéria ($\exp \approx$ massa da matéria)
- ✓ Não são afetados por E_i ; B_i
- ✓ Produz fluorescência e fosforescência (subst.)
- ✓ Geração de emulsões
- ✓ Velocidade características

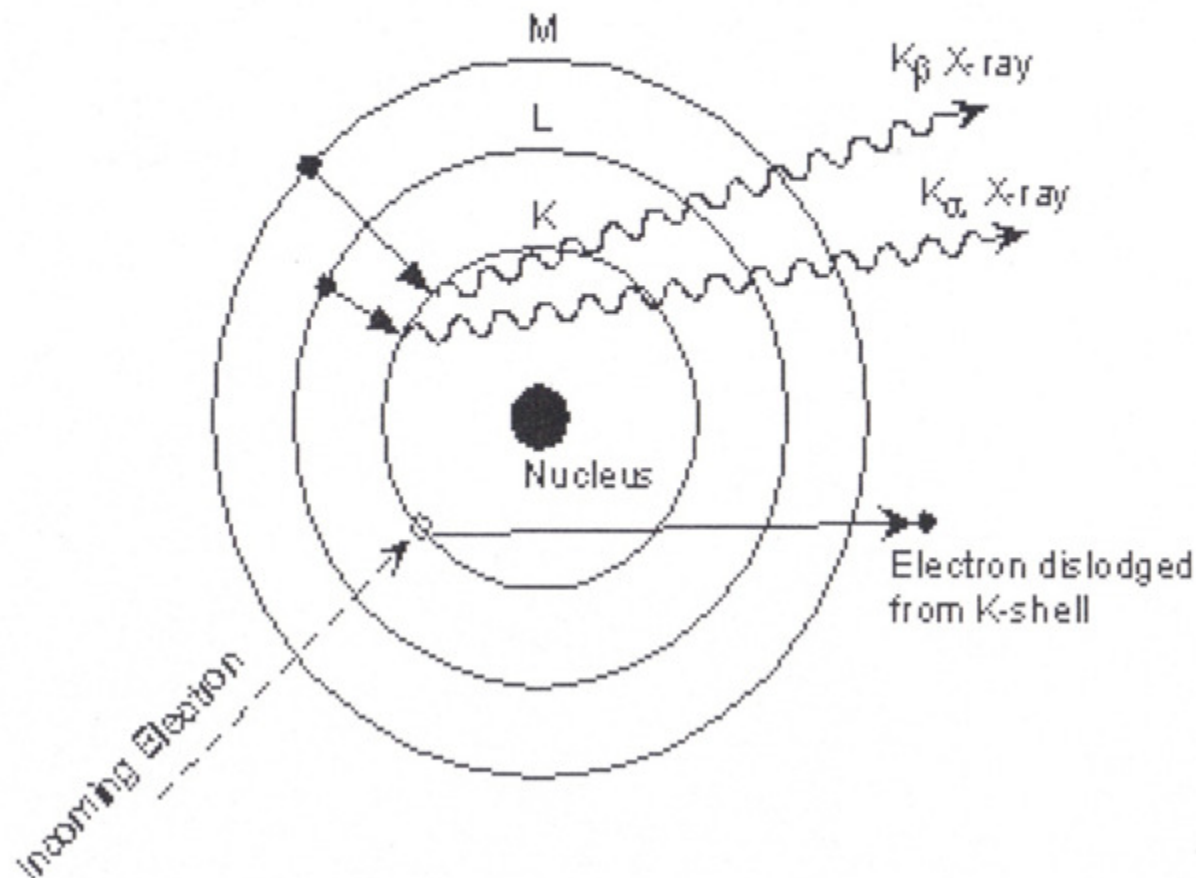
Tubo gerador de Raios X



Espectros de Raios X



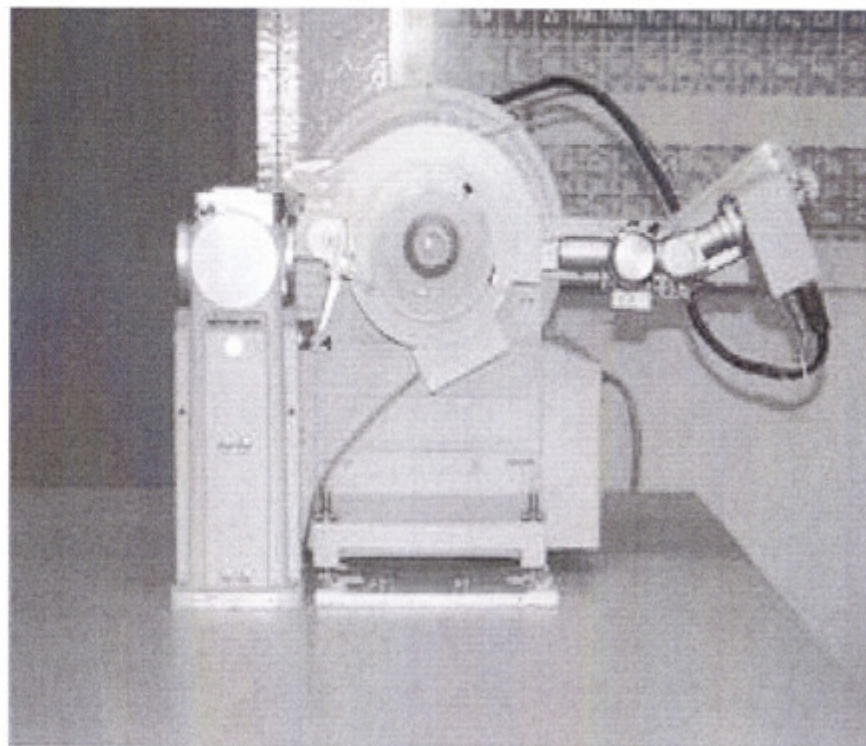
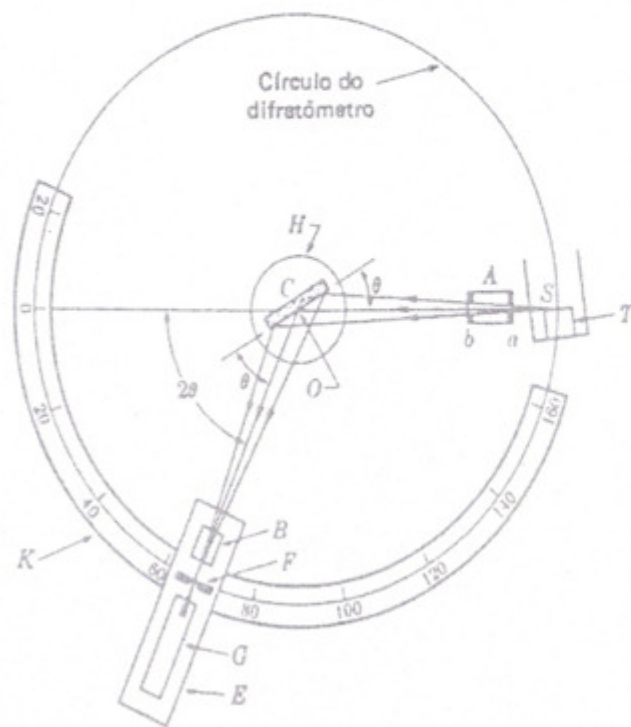
Interação de elétrons com átomo



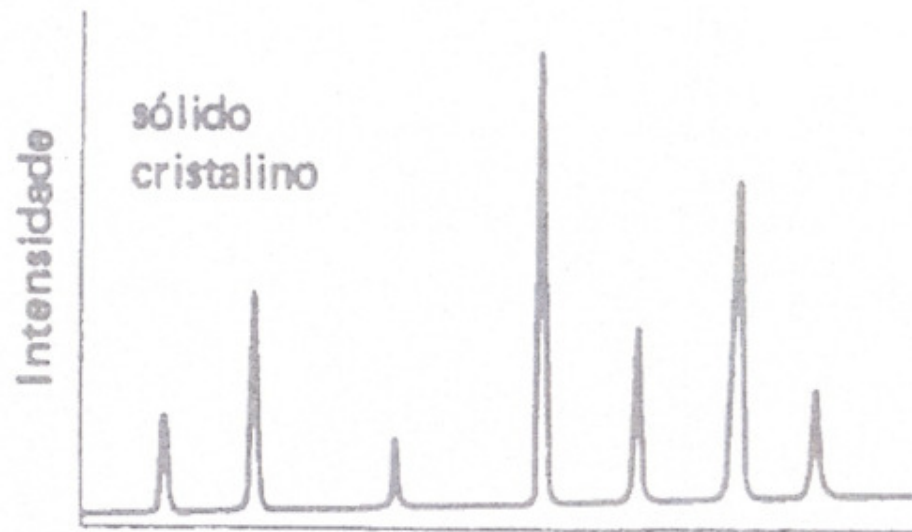
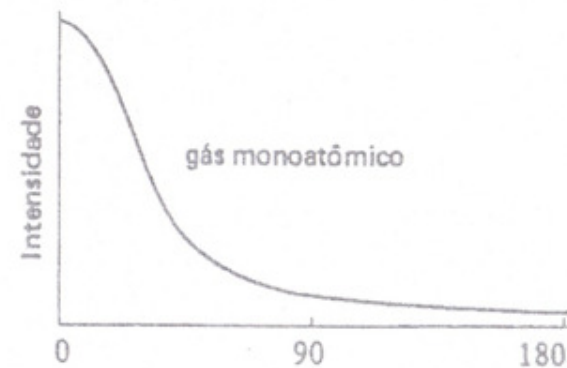
Breve histórico da Difração de raios X

...se muitos sólidos são um arranjo periódico de átomos (cristais) e se os raios x são ondas eletromagnéticas com comprimento de onda comparável ao espaçamento interatômico, quando um feixe de raios x incidir sobre um cristal deve (para determinadas condições) ocorrer interferência construtiva (difração e interferência).

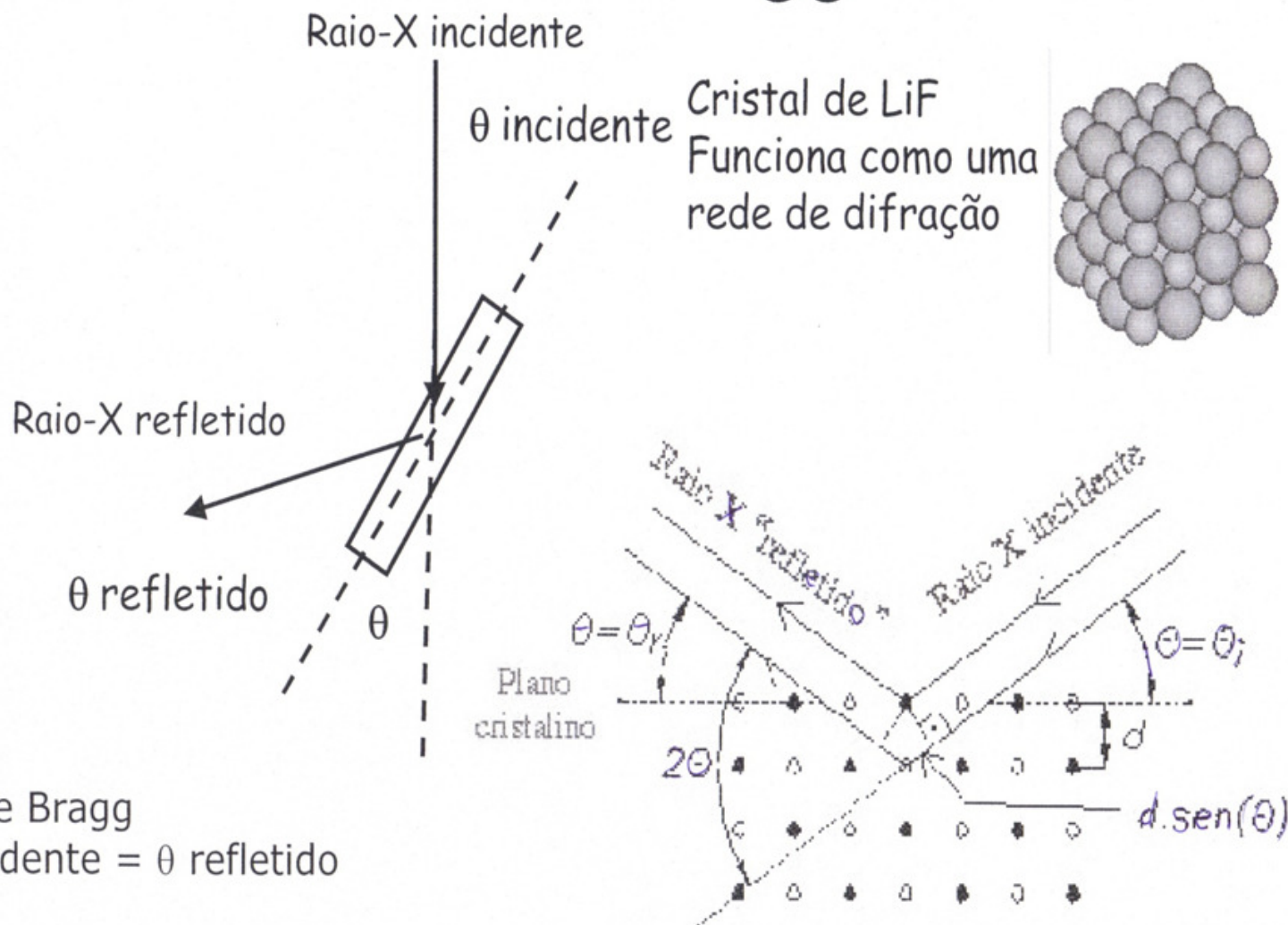
Difratômetro de Raio X



Difratograma típicos.



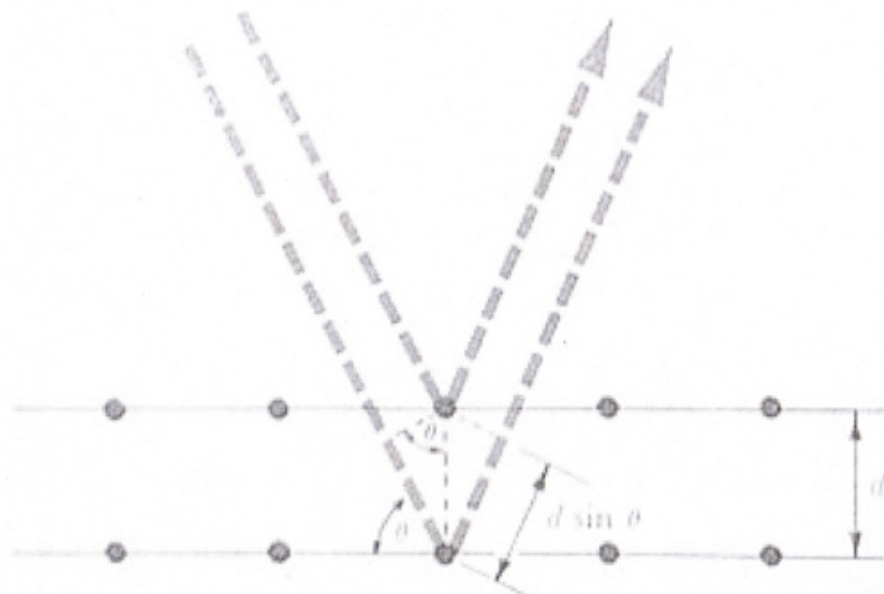
Lei de Bragg



Lei de Bragg

θ incidente = θ refletido

Lei de Bragg

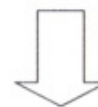


Lei de Bragg

$$\theta_i = \theta_r = \theta$$

$$2d \sin(\theta) = n\lambda$$

Para $n=1$

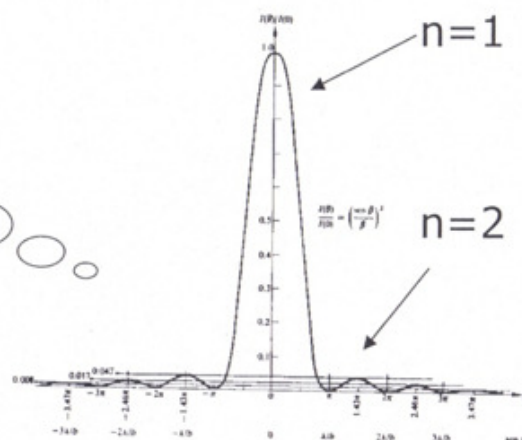


$$\lambda = 2d \sin(\theta)$$

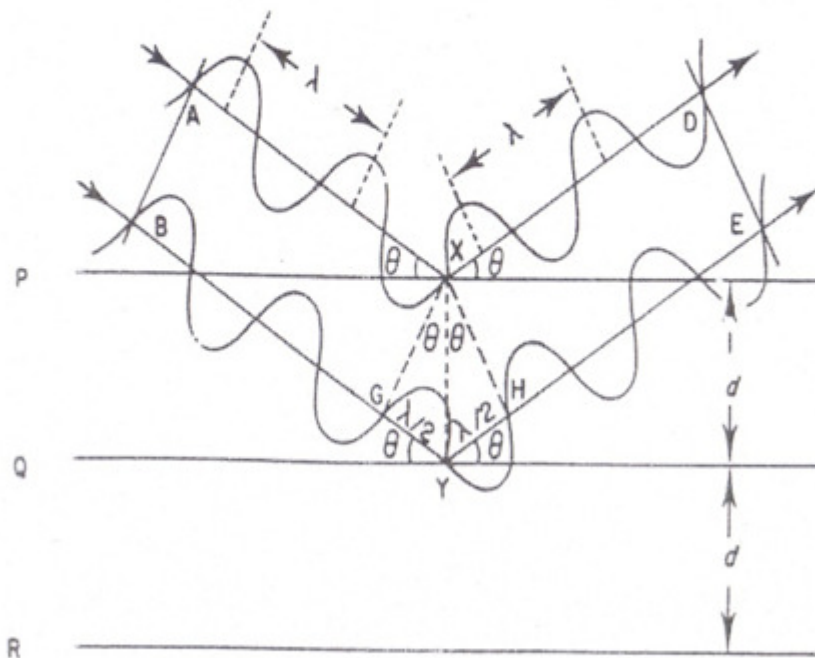
$$d = 2.015 \text{ \AA}$$

Era conhecida

Para que haja
interferência
construtiva

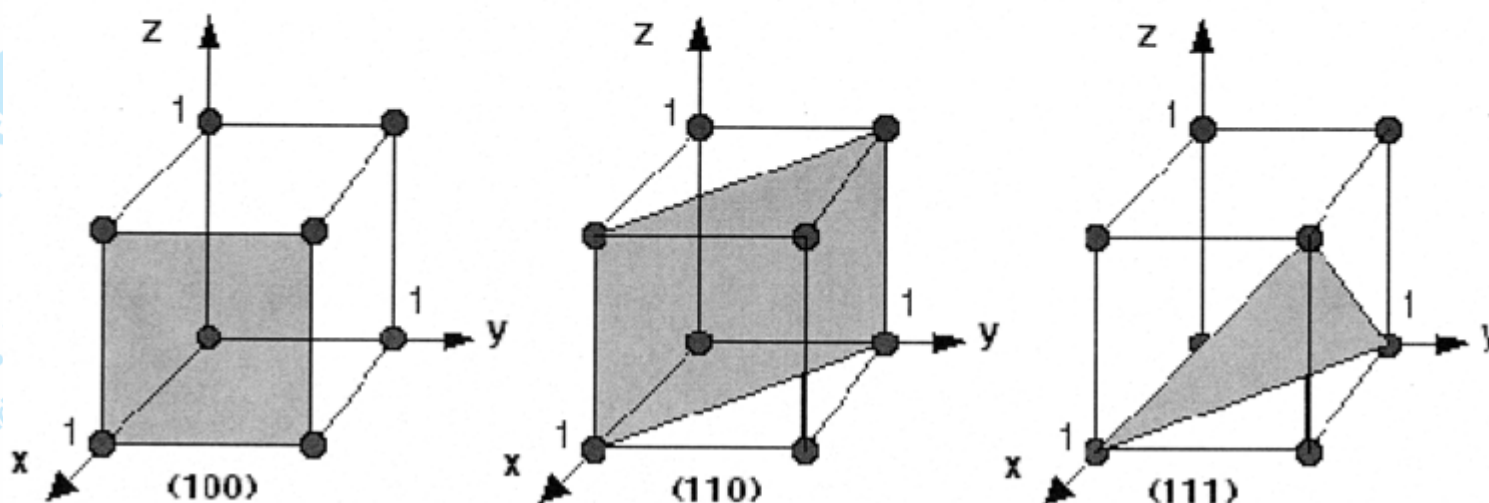


Lei de Bragg



Condição de Bragg : $2d \sin \theta = n\lambda$, para $n = 1$
(GY + YH = $\lambda/2 + \lambda/2$)

Planos de difração



Planos de difração

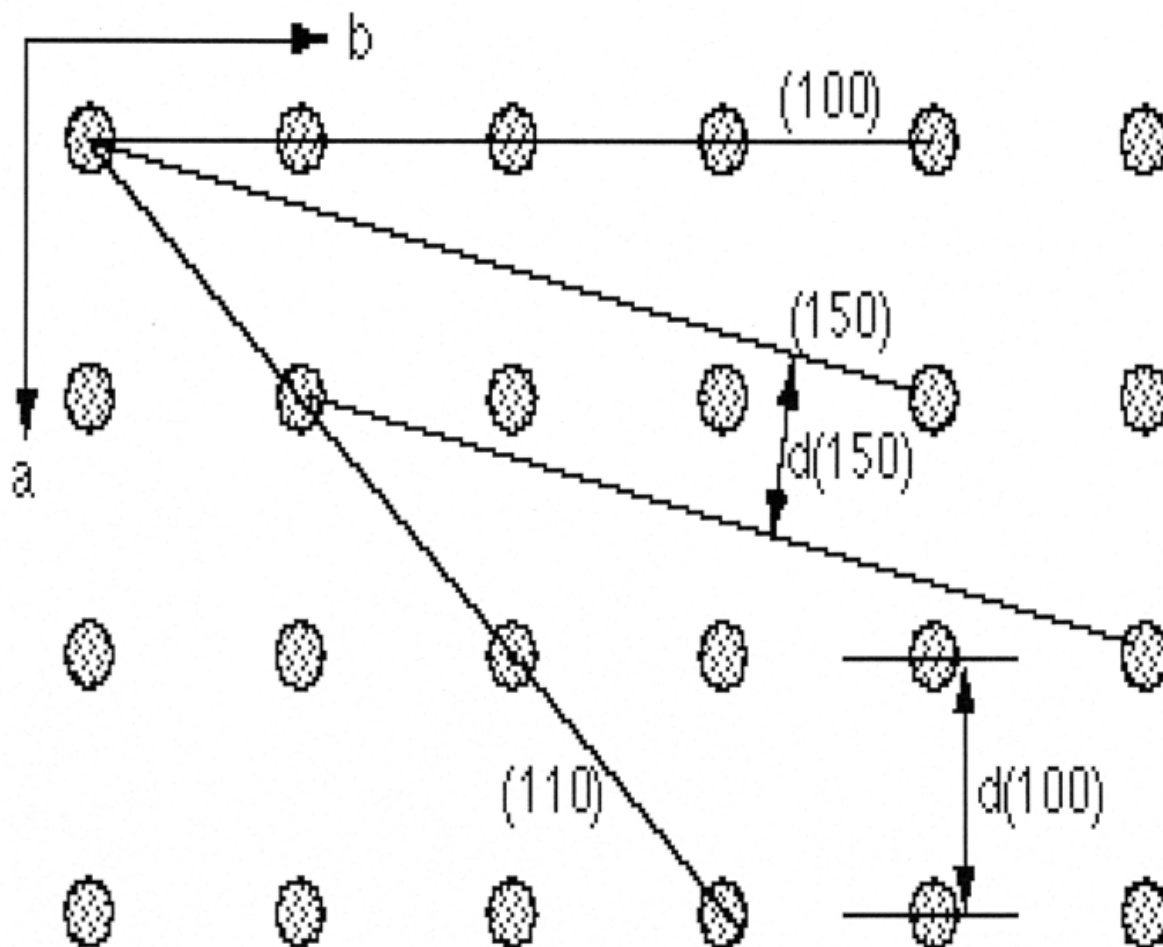


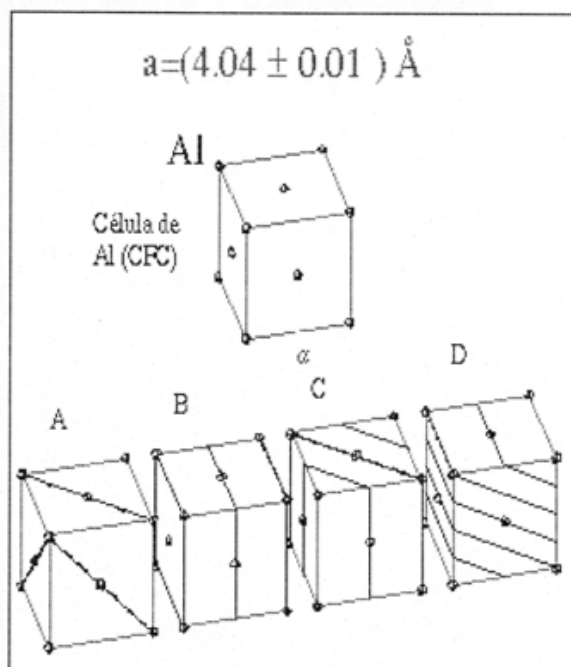
Tabela 6.1 — Comprimentos de onda das radiações mais utilizadas em difração de raios x (em Å).

Elemento	K_{α}^*	$K_{\alpha 2}$ (forte)	$K_{\alpha 1}$ (muito forte)	$K_{\beta 1}$ (fraca)
Cr	2,29100	2,293606	2,28970	2,08487
Fe	1,937355	1,939980	1,936042	1,75661
Co	1,790260	1,792850	1,788965	1,62075
Cu	1,541838	1,544390	1,540562	1,392218
Mo	0,710730	0,713590	0,709300	0,632288

* Média ponderada entre $K\alpha_1$ (peso 2) e $K\alpha_2$ (peso 1).

Exemplo

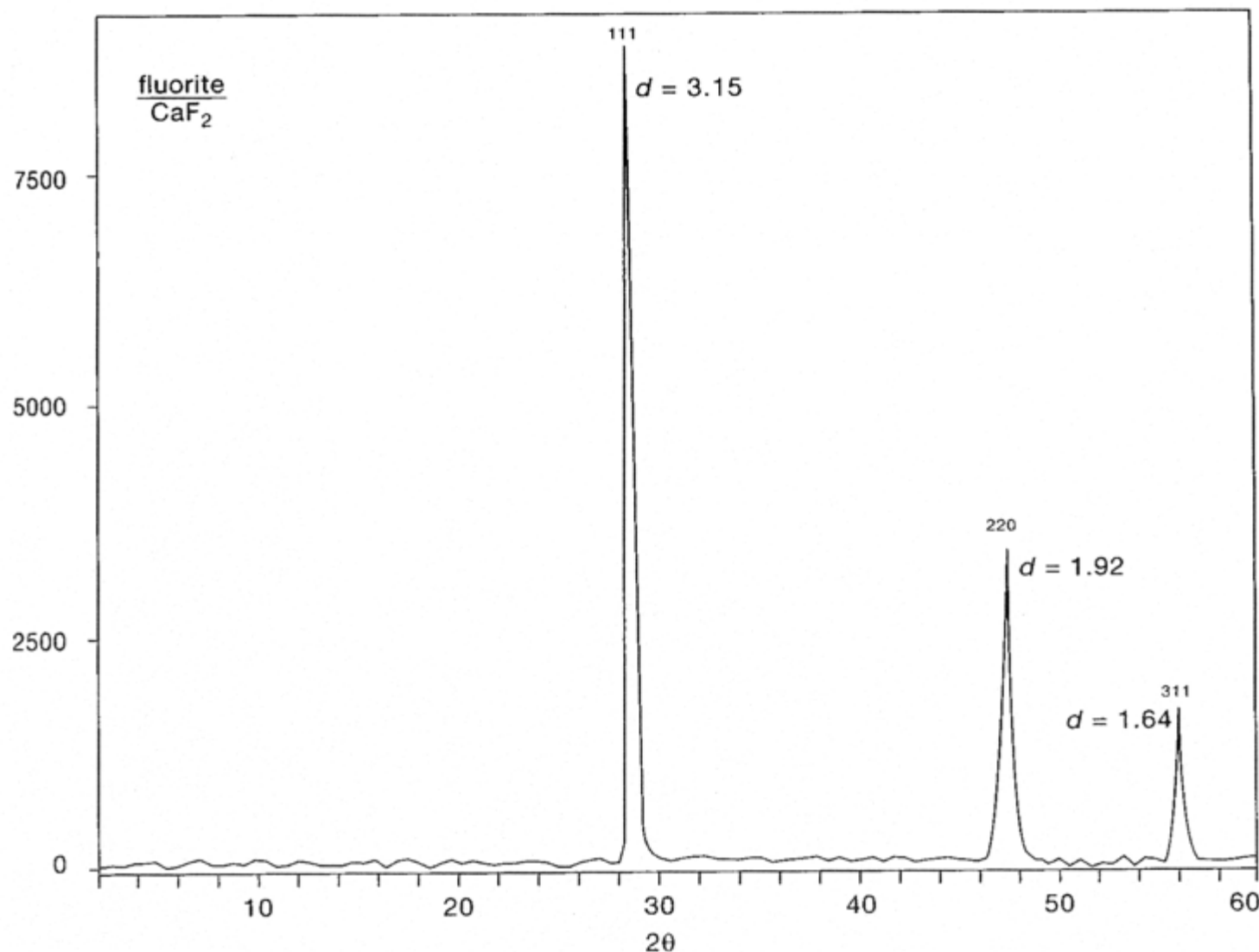
Estrutura do policristal de Alumínio



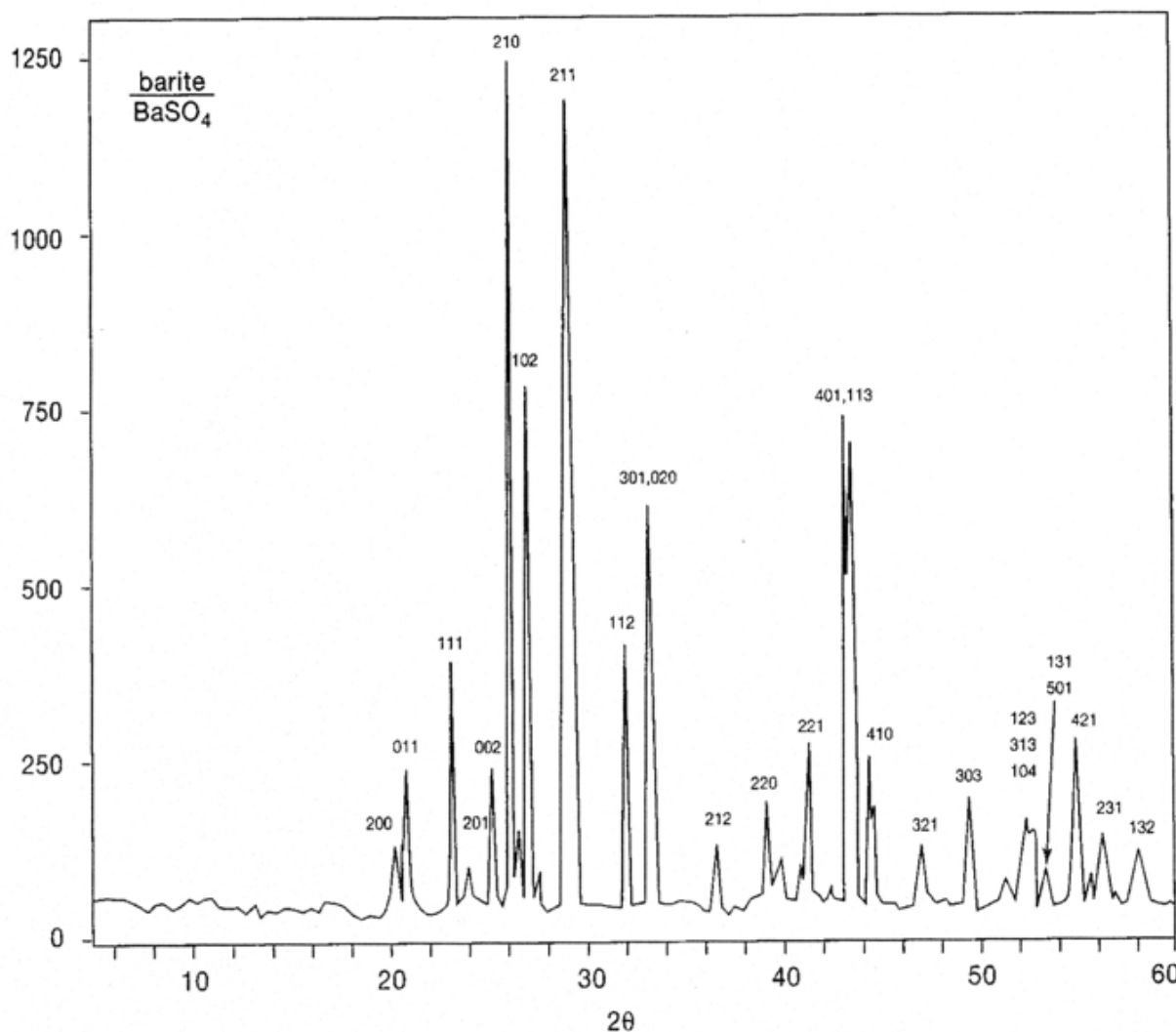
Menores ângulos de difração

Família	d	n	$2d \sin \theta$	Ângulo
A	$\frac{1}{\sqrt{3}}a$	1	$\frac{2}{\sqrt{3}}a$	θ_1
B	$\frac{1}{2}a$	1	a	θ_2
C	$\frac{1}{2\sqrt{2}}a$	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}a$	θ_3
D	$\frac{1}{\sqrt{11}}a$	1	$\frac{2}{\sqrt{11}}a$	θ_4
A	$\frac{1}{\sqrt{3}}a$	2	$\frac{1}{\sqrt{3}}a$	θ_5
B	$\frac{1}{2}a$	2	$\frac{1}{2}a$	θ_6

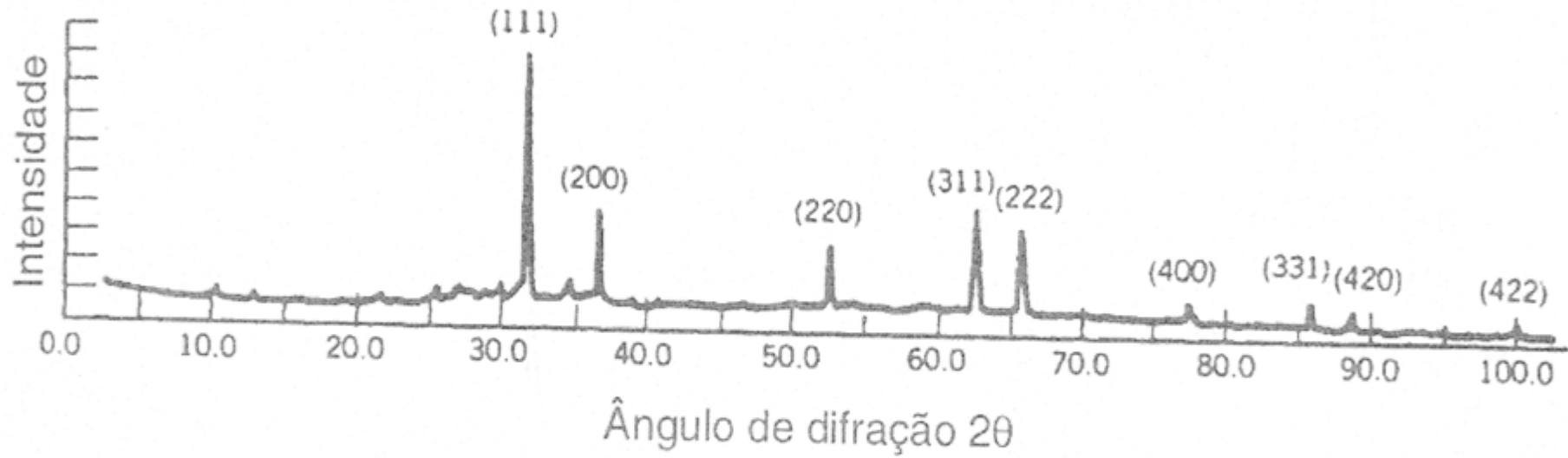
Difratograma da Fluorita



Difratograma da Barita



Exercício



Leitura das posições (2θ) dos picos: (111) = 31,29°; (200) = 36,29°
(220) = 52,27°; (311) = 62,19°; (222) = 65,29°; (400) = 77,06°
(331) = 85,50°; (420) = 88,28°; (422) = 99,44°.

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Considerando $n=1$

Dados para o primeiro pico (111): $\theta = 31.29^\circ$; $\theta/2 = 15.595^\circ$; $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$

Assim

a) Qual é o espaçamento entre os planos?

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

$$d = \frac{1.5418}{2 \sin 15.595}$$

$$d = \frac{1.5418}{2 \sin 15.595}$$

Resposta: $d = 2.86$

Obs.: para cada pico haverá um “d” característico, diferenciando os valores.

b) Qual é o parâmetro de rede?

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Após algumas manipulações matemáticas...

$$a = d \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Como já foi dito anteriormente: (hkl) = (111)

Portanto

$$a = 2.86 \sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}$$

$$a = 4.95$$

Obs.: para todos os picos haverá o mesmo “a”, pois o parâmetro de rede do chumbo é o mesmo para toda a amostra.

A seguir, uma tabela com todos os resultados deste exercício.....

a)				b)		
2θ	θ/2	sin(θ/2)	d		(hkl)	a
31,19	15,6	0,27	2,86		111	4,95
36,29	18,15	0,32	2,41		200	4,82
52,27	26,14	0,44	1,75		220	4,96
62,19	31,1	0,52	1,48		311	4,92
65,29	32,65	0,54	1,43		222	4,95
77,06	38,53	0,63	1,22		400	4,89
85,5	42,75	0,68	1,13		331	4,94
88,28	44,14	0,7	1,10		420	4,93
99,44	49,72	0,76	1,01		422	4,97