

Introdução à Ciência e  
Engenharia dos Materiais  
SMM 0300

Coordenadas, Direções e Planos  
Cristalográficos

Prof. Vera L. Arantes  
2019

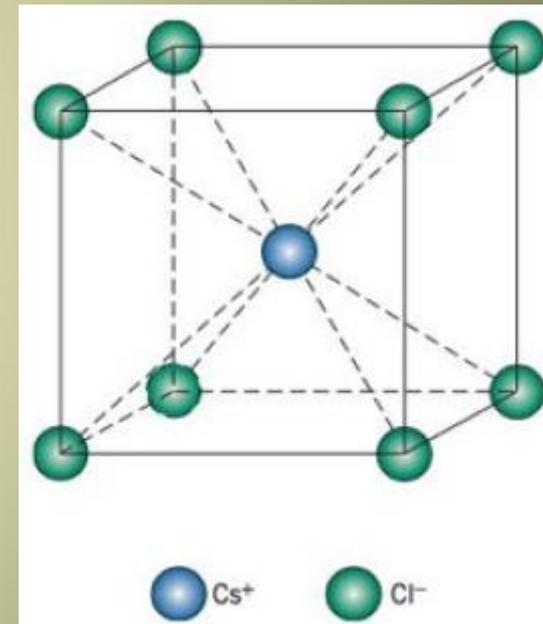
Qual a importância de estudar o assunto?

O sistema de coordenadas dentro de uma célula cristalina é importante para localizar pontos de interesse

Ex: átomos substitucionais e intersticiais

Além disso, muitas propriedades podem variar ao longo de direções e planos específicos dentro da estrutura cristalina do material (como propriedades magnéticas e mecânicas, por exemplo)

Desse modo, se faz necessário entender como esses pontos, direções e planos são determinados



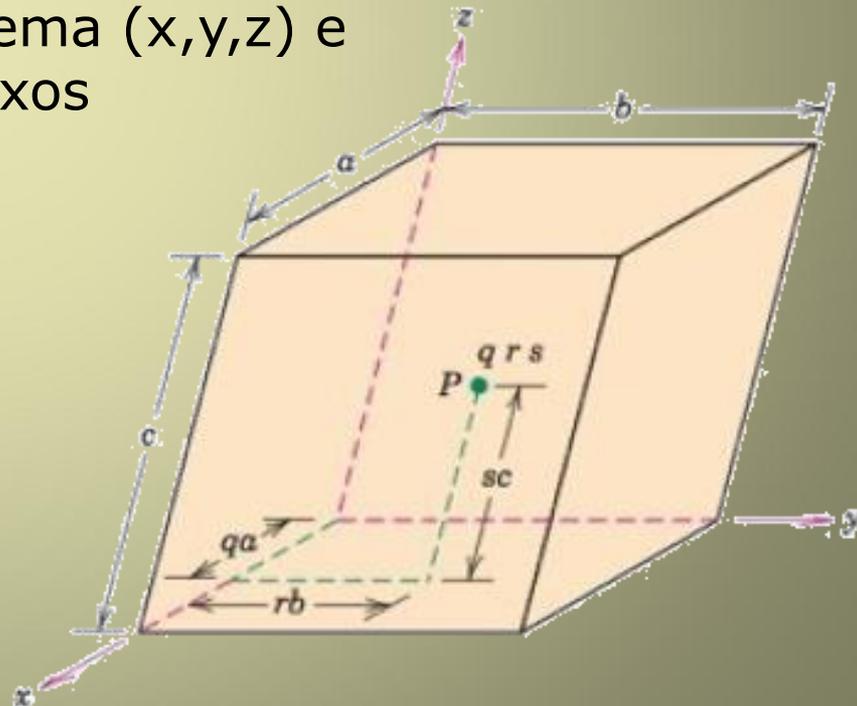
Estrutura do cloreto de césio. O átomo de césio ocupa a posição  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

## Coordenadas dos Pontos

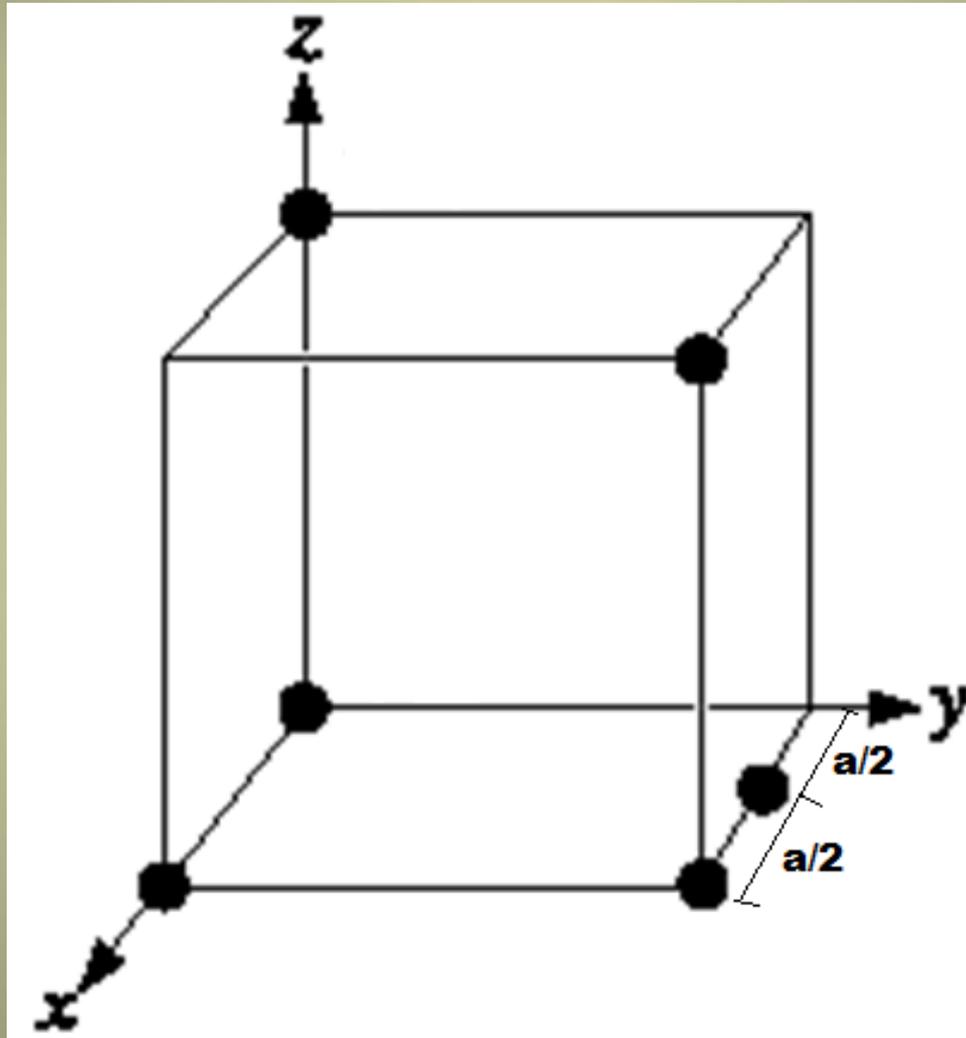
As células unitárias possuem parâmetros de rede ( $a, b$  e  $c$ ), que são definidos baseados nas dimensões das arestas das células

Por conveniência, a célula unitária tem sua origem coincidente com a origem do sistema  $(x, y, z)$  e suas arestas coincidem com os eixos coordenados

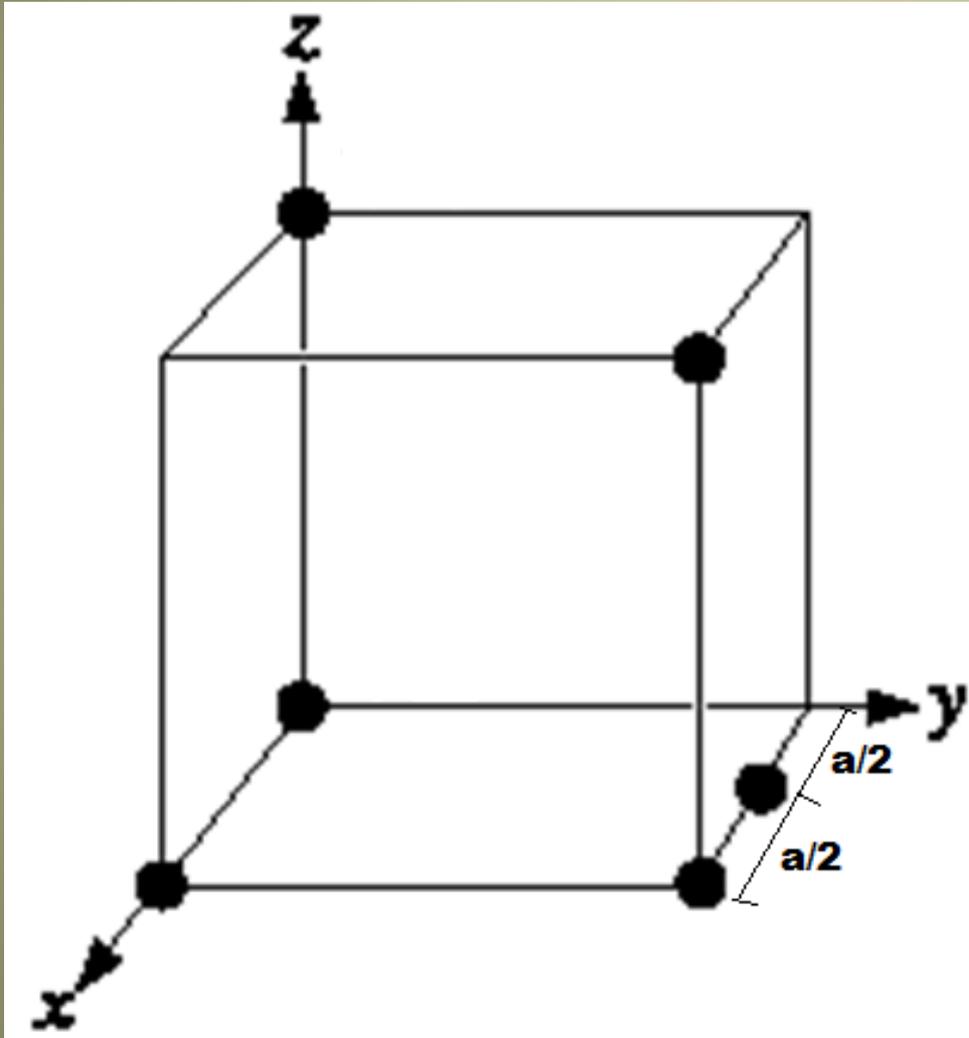
As coordenadas são dadas com relação aos seus parâmetros de rede e sua notação é sem Vírgula (Ex:  $qrs$ )



Determine as coordenadas dos pontos abaixo



Determine as coordenadas dos pontos abaixo



Coordenadas:

000

001

100

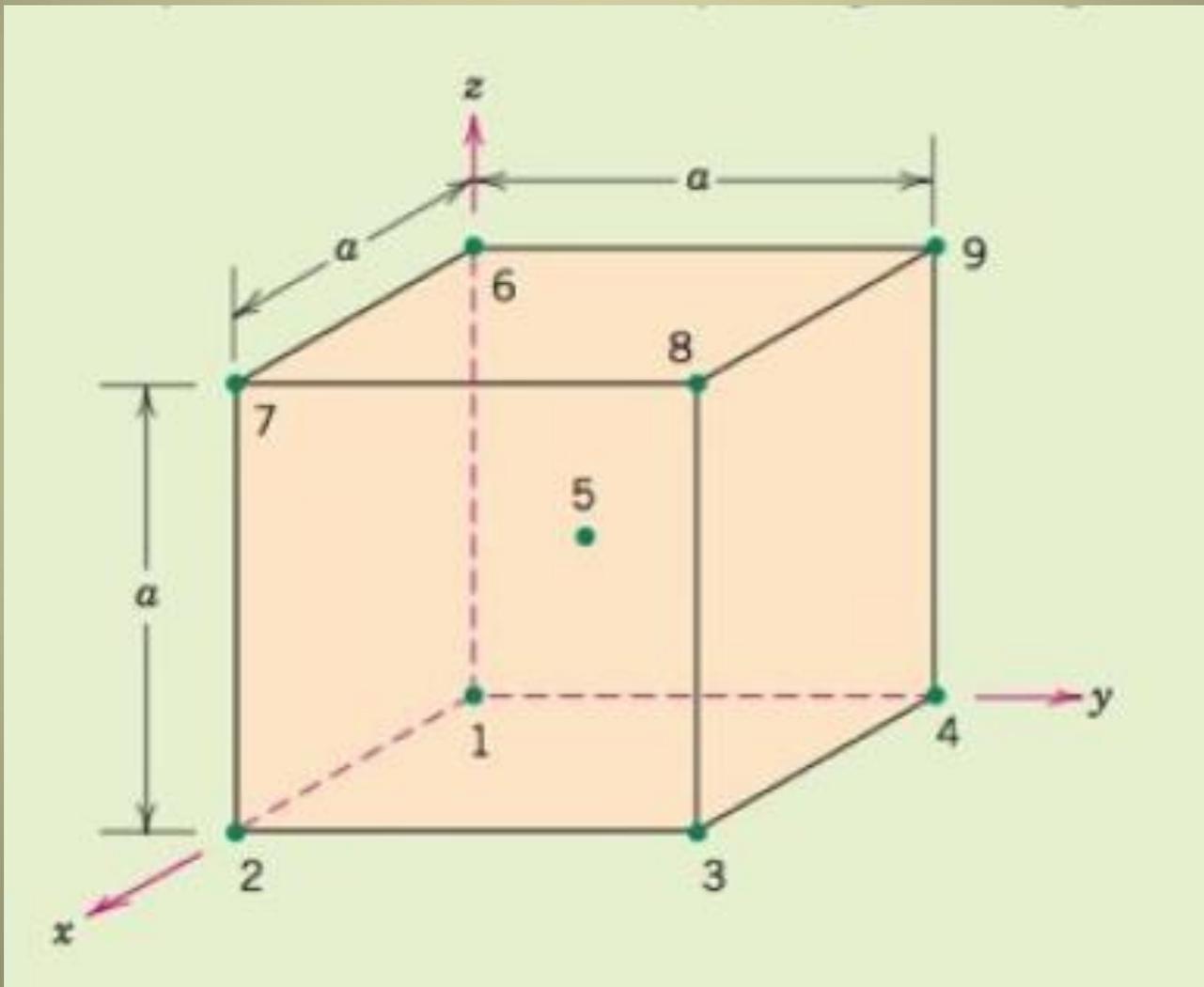
110

111

$\frac{1}{2}$ 10

$\frac{1}{2}$

Especifique as coordenadas dos pontos para todas as posições atômicas em uma célula unitária CCC.



Especifique as coordenadas dos pontos para todas as posições atômicas em uma célula unitária CCC.

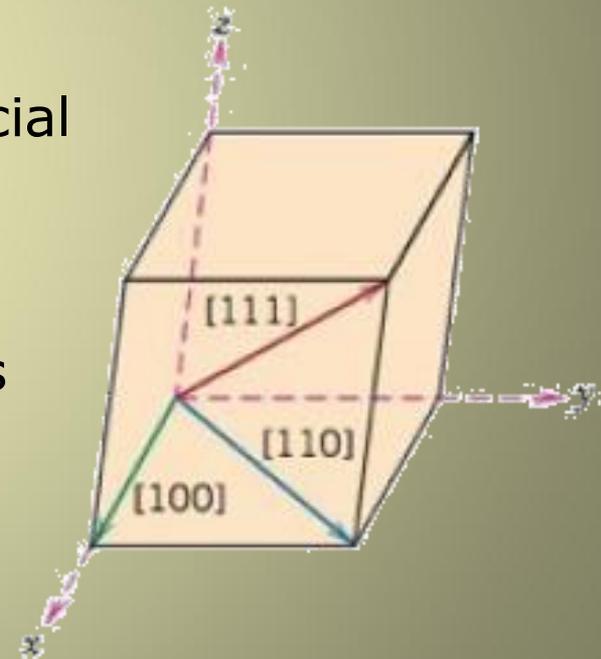
<i>Número do Ponto</i>	<i>Comprimentos Fracionários</i>			<i>Coordenadas dos Pontos</i>
	<i>Eixo x</i>	<i>Eixo y</i>	<i>Eixo z</i>	
1	0	0	0	000
2	1	0	0	100
3	1	1	0	110
4	0	1	0	010
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$
6	0	0	1	001
7	1	0	1	101
8	1	1	1	111
9	0	1	1	011

# Direções Cristalográficas

Direção cristalográfica é definida como uma linha entre dois pontos (vetor) dentro da célula unitária.

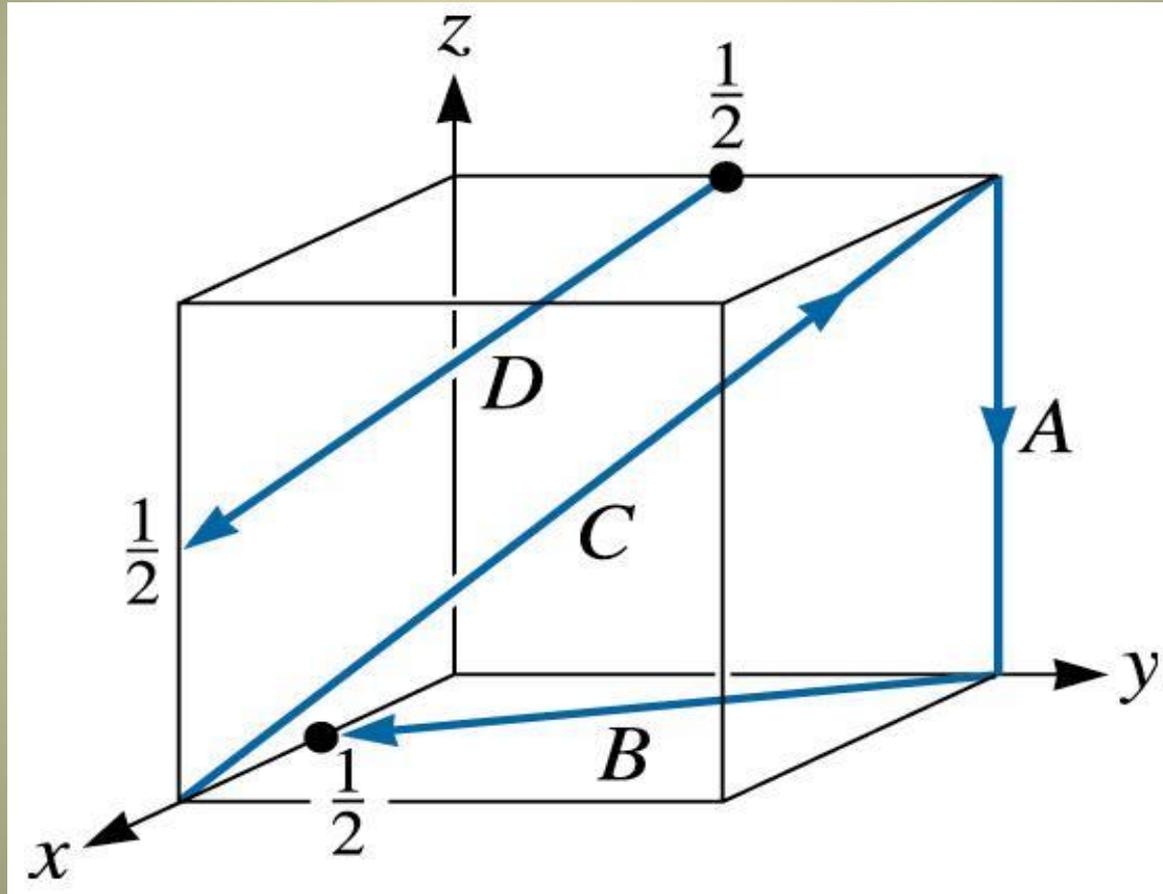
Etapas para determinar uma direção:

1. Determine as coordenadas do ponto inicial e do ponto final do vetor
2. Subtraia as coordenadas do ponto final das coordenadas do ponto inicial
3. Esses números devem ser apresentados como os menores valores inteiros
4. A notação é do tipo  $[uvw]$ , sem vírgulas e entre colchetes. Em caso de sinal negativo, represente como uma barra acima do número:  $[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$

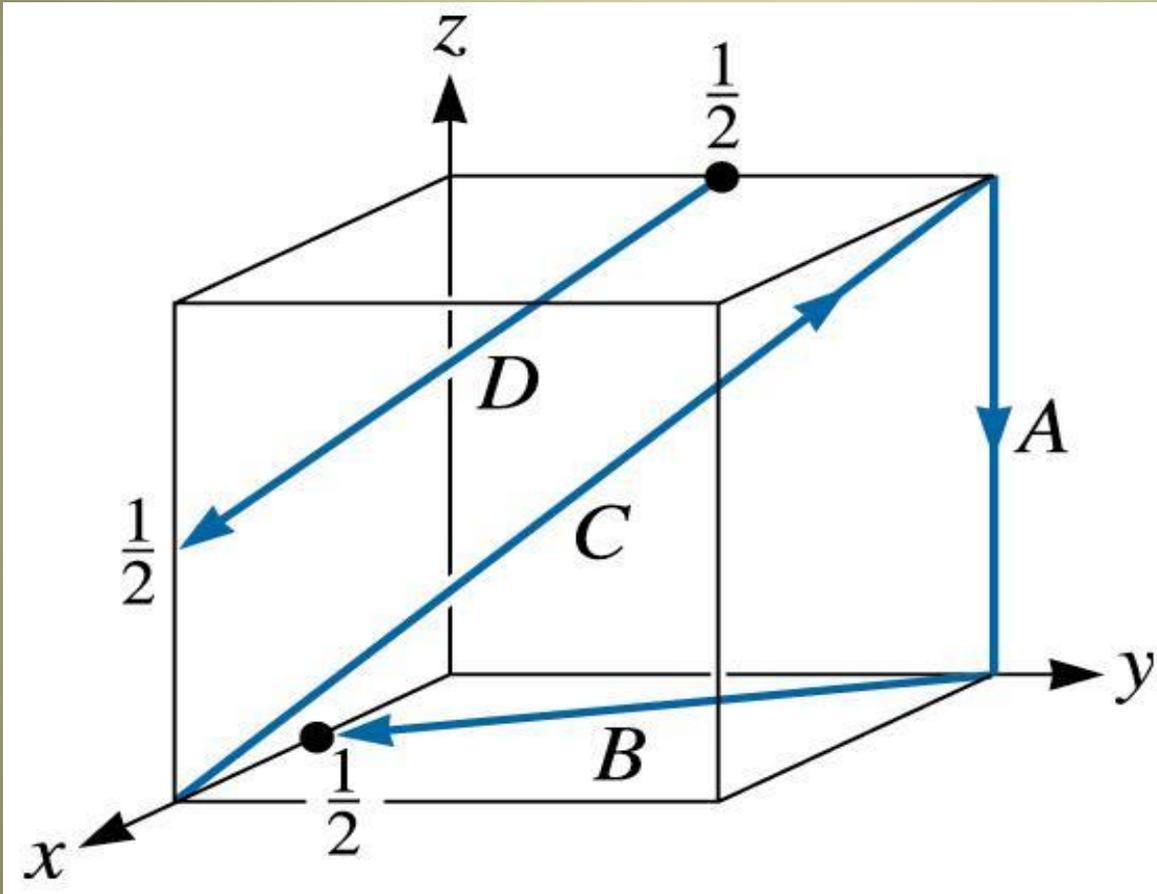


As direções  $[100]$ ,  $[110]$  e  $[111]$  são direções comuns em uma célula unitária

Determine os índices de Miller das direções desenhadas na figura abaixo.



Determine os índices de Miller das direções desenhadas na figura abaixo.



Direções:

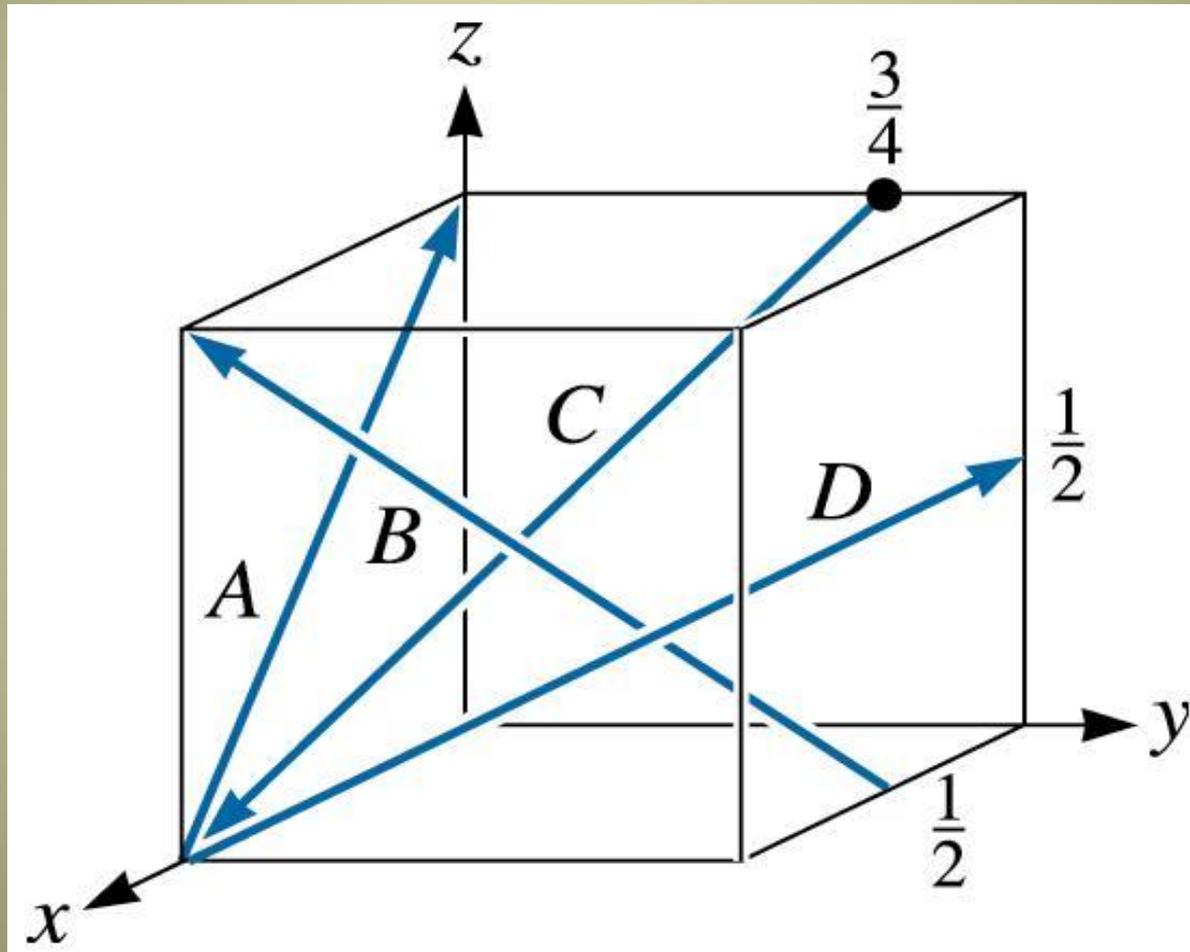
A:  $[00\bar{1}]$

B:  $[1\bar{2}0]$

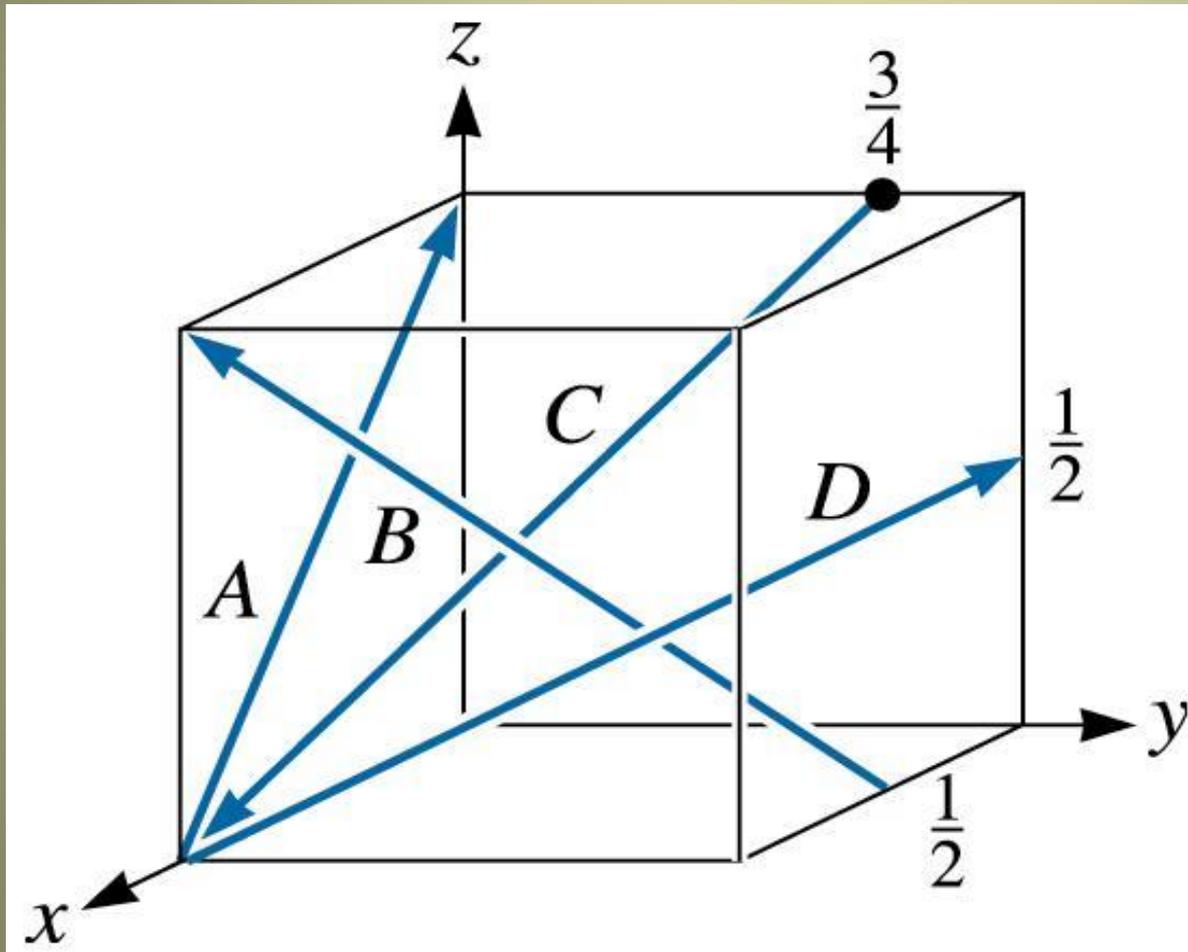
C:  $[\bar{1}11]$

D:  $[2\bar{1}\bar{1}]$

Determine os índices de Miller das direções desenhadas na figura abaixo.



Determine os índices de Miller das direções desenhadas na figura abaixo.



Direções:

A:  $[\bar{1}01]$

B:  $[1\bar{2}2]$

C:  $[4\bar{3}\bar{4}]$

D:  $[\bar{2}21]$

Desenhe, em uma célula cúbica, as seguintes direções:

A:  $[100]$

B:  $[111]$

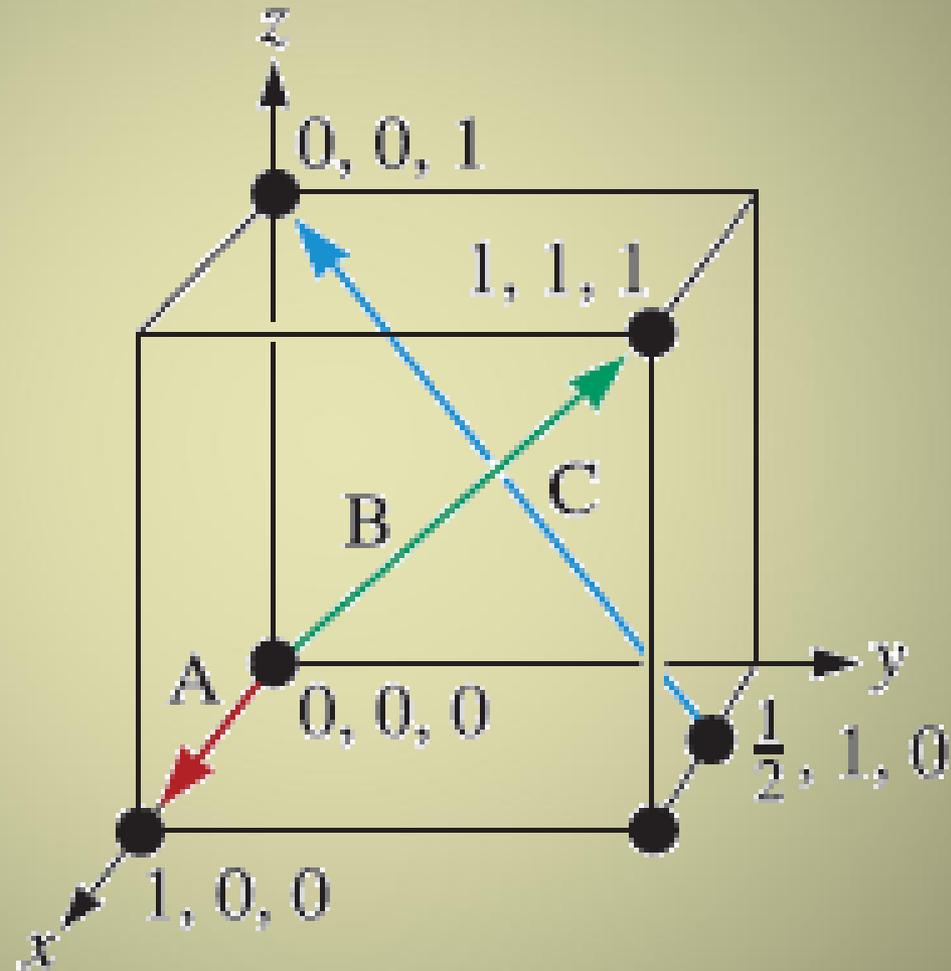
C:  $[\bar{1}\bar{2}2]$

Desenhe, em uma célula cúbica, as seguintes direções:

A:  $[100]$

B:  $[111]$

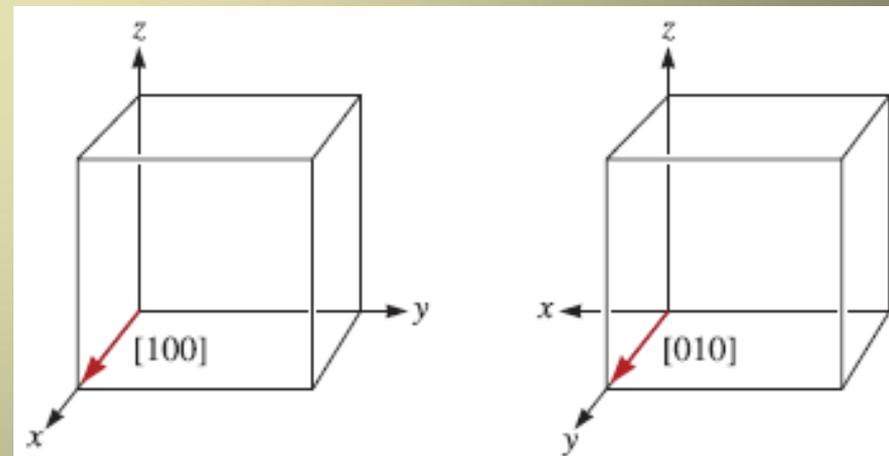
C:  $[\bar{1}\bar{2}2]$



## Família de Direções

Certos grupos de direções são equivalentes (apresentam as mesmas propriedades). É comum se referir a esses grupos como família de direções e utilizar  $\langle \rangle$  para representá-las. Abaixo, está ilustrada a família  $\langle 110 \rangle$  para sistemas cúbicos

$$\langle 110 \rangle = \left\{ \begin{array}{ll} [110] & [\bar{1}\bar{1}0] \\ [101] & [\bar{1}0\bar{1}] \\ [011] & [0\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}0] & [\bar{1}10] \\ [10\bar{1}] & [\bar{1}01] \\ [01\bar{1}] & [0\bar{1}1] \end{array} \right.$$



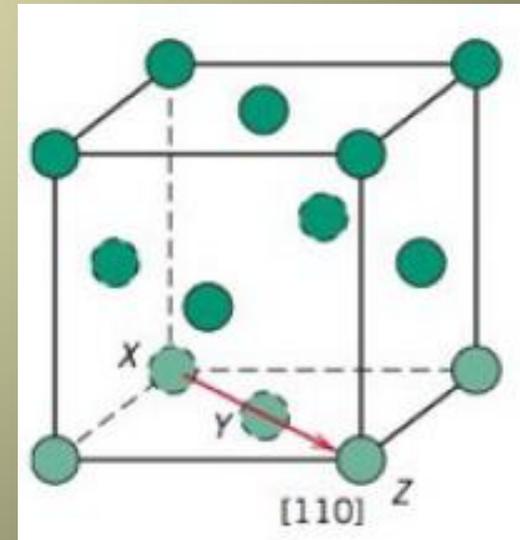
As direções  $[100]$  e  $[010]$  são equivalentes no sistema cúbico

## Densidade Linear

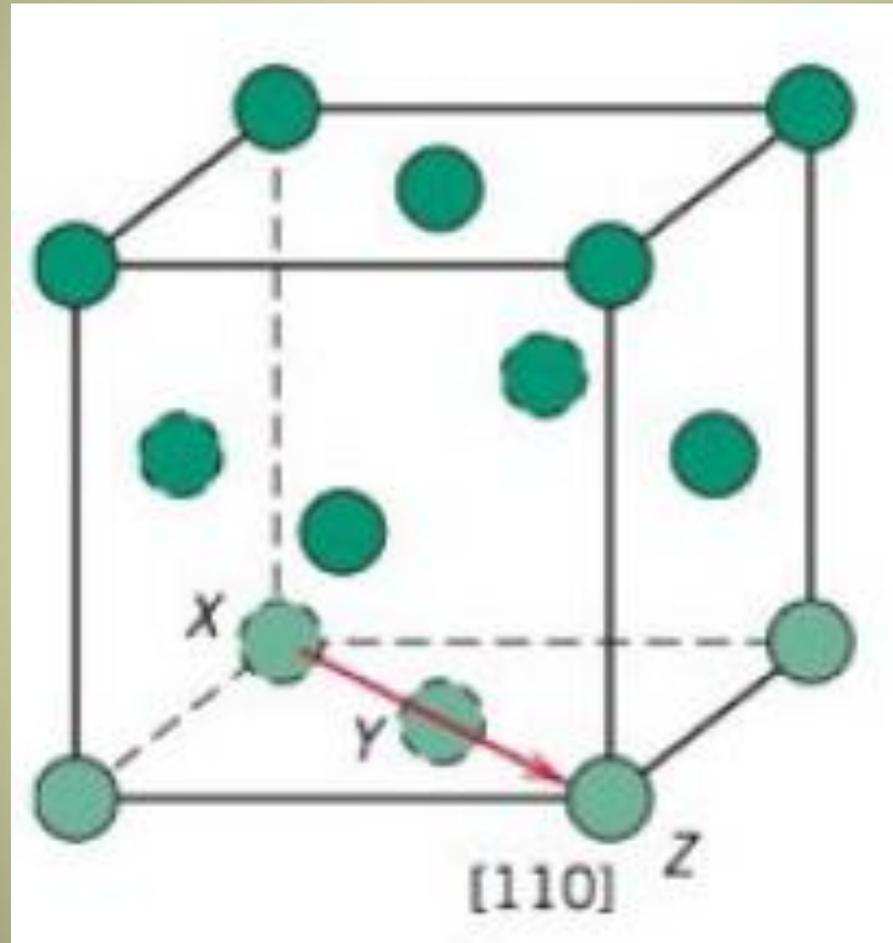
A densidade linear (DL) é calculada como o número de átomos, por unidade de comprimento, cujos centros estão sobre o vetor direção, dada uma direção cristalográfica específica. É calculada por:

$$DL = \frac{\text{número de átomos centrado sobre o vetor direção}}{\text{comprimento do vetor direção}}$$

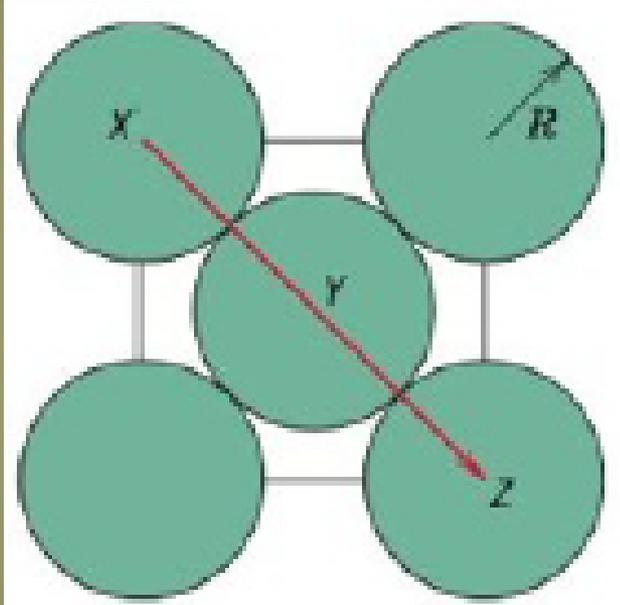
Geralmente essa propriedade é calculada em função do raio ou do parâmetro de rede



Determine a densidade linear em uma célula cúbica de corpo centrado ao longo da direção  $[110]$



Determine a densidade linear, em função do raio atômico do material, em uma célula cúbica de corpo centrado ao longo da direção [110]



$$DL_{110} = \frac{2 \text{ átomos}}{4R} =$$
$$= \frac{1}{2R} \text{ átomos/u.m}$$

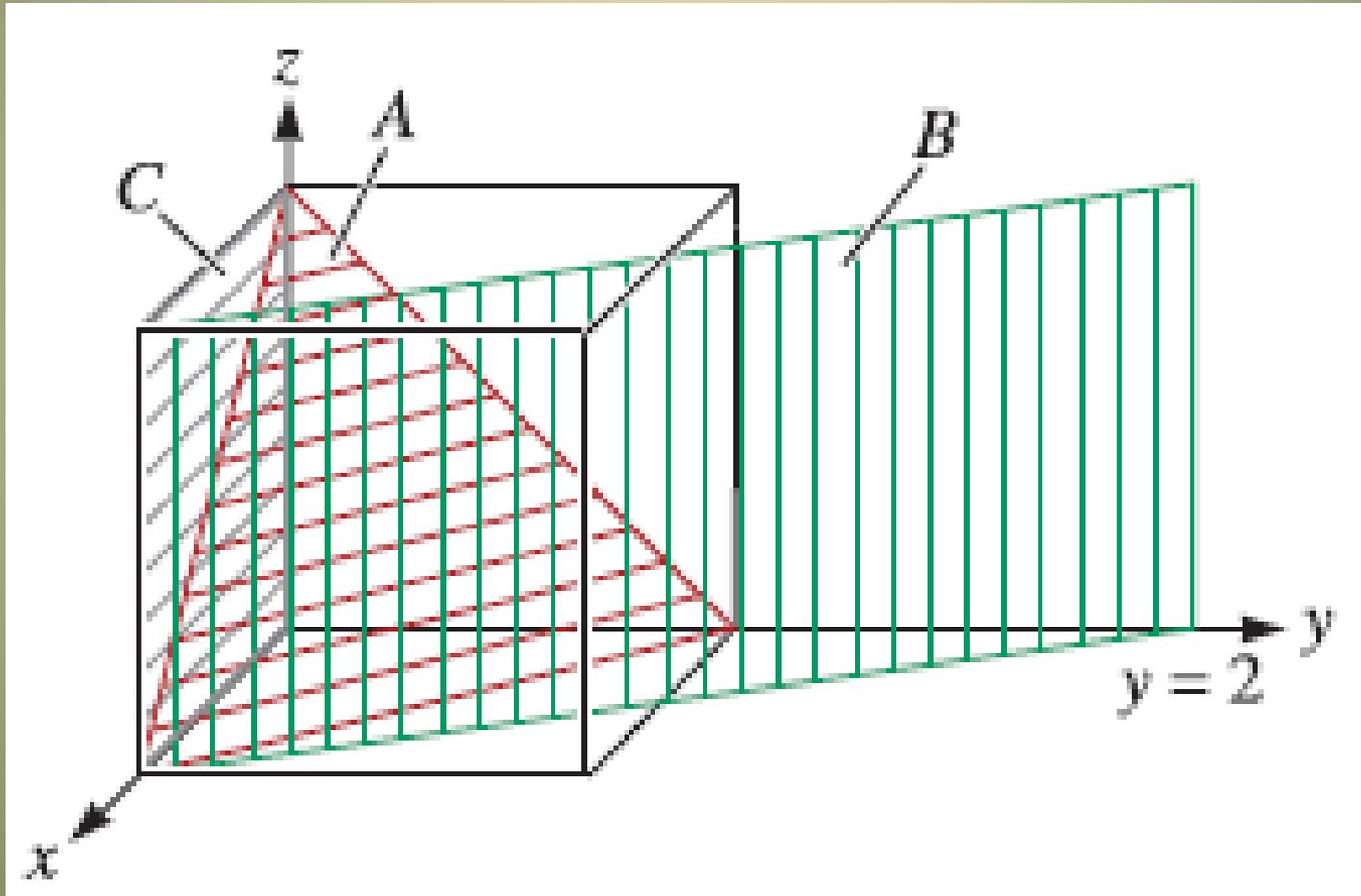
## Planos Cristalográficos

Há também relações de propriedades entre os planos cristalográficos de uma célula unitária. Por exemplo, metais se deformam ao longo de planos de átomos mais compactos.

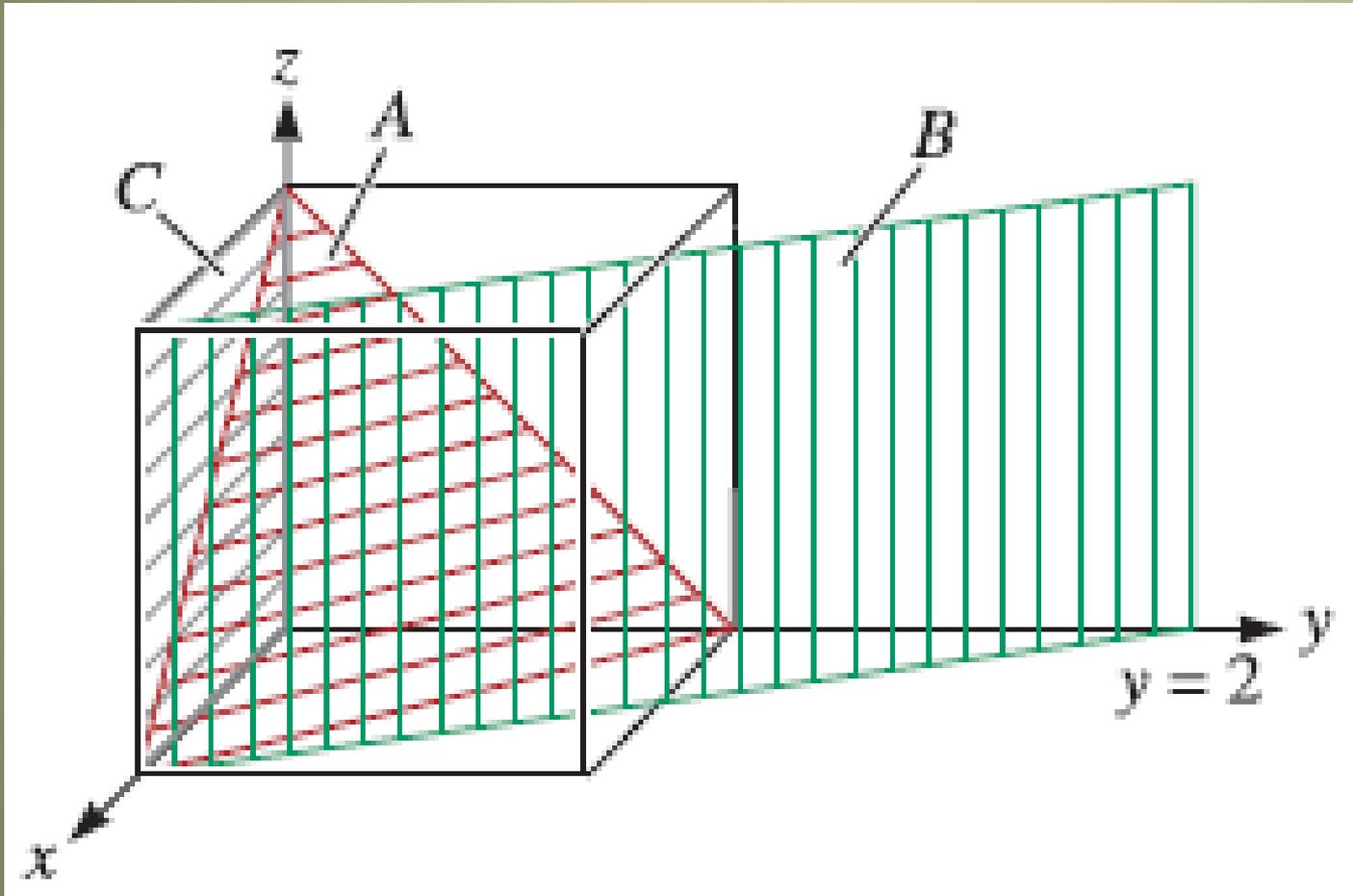
Etapas para determinar os índices de um plano:

1. Identifique os pontos em que o plano intercepta os eixos. Caso o plano atravesse a origem, deve-se usar uma célula unitária adjacente
2. Obtenha os inversos das coordenadas de intersecção
3. Caso haja frações, multiplique todos os números para eliminá-las; porém, não se reduz os índices para os menores inteiros (Plano (110) ≠ Plano (220))
4. A notação é do tipo (hkl), sem vírgulas e entre parênteses. Caso haja índices negativos, novamente usa-se uma barra acima do número:  $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$

Determine os índices de Miller para os planos A, B e C da figura abaixo



Determine os índices de Miller para os planos A, B e C da figura abaixo



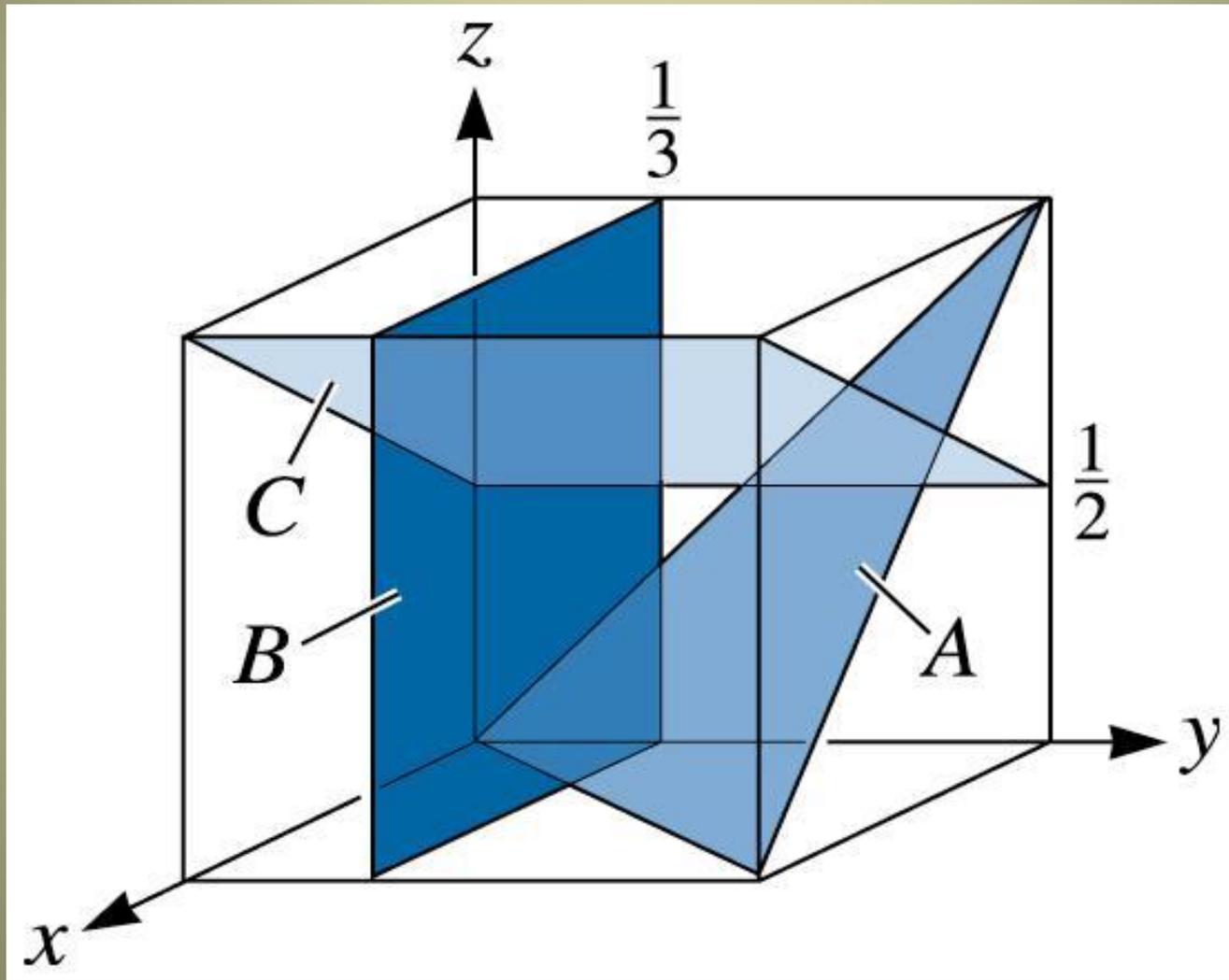
Planos:

A: (111)

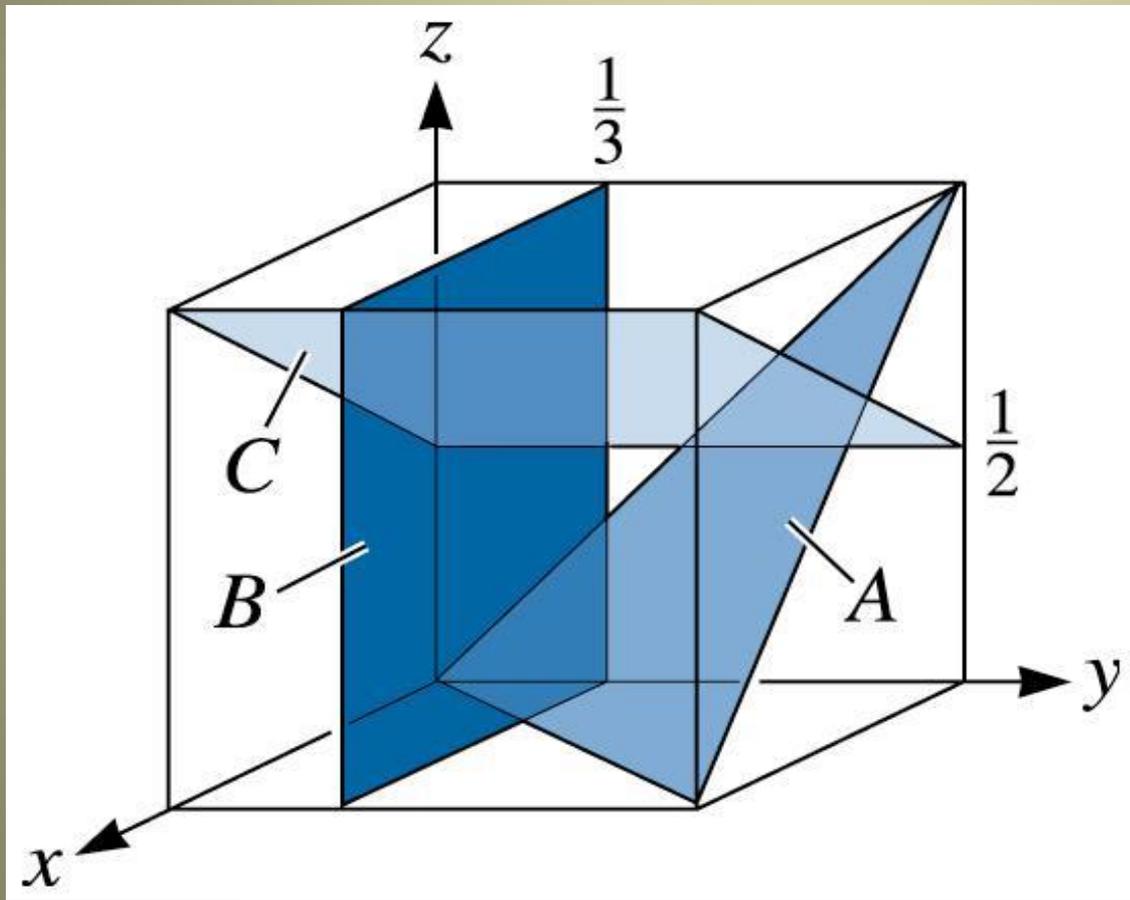
B: (210)

C: (0 $\bar{1}$ 0)

Determine os índices de Miller para os planos A, B e C da figura abaixo



Determine os índices de Miller para os planos A, B e C da figura abaixo



Planos:

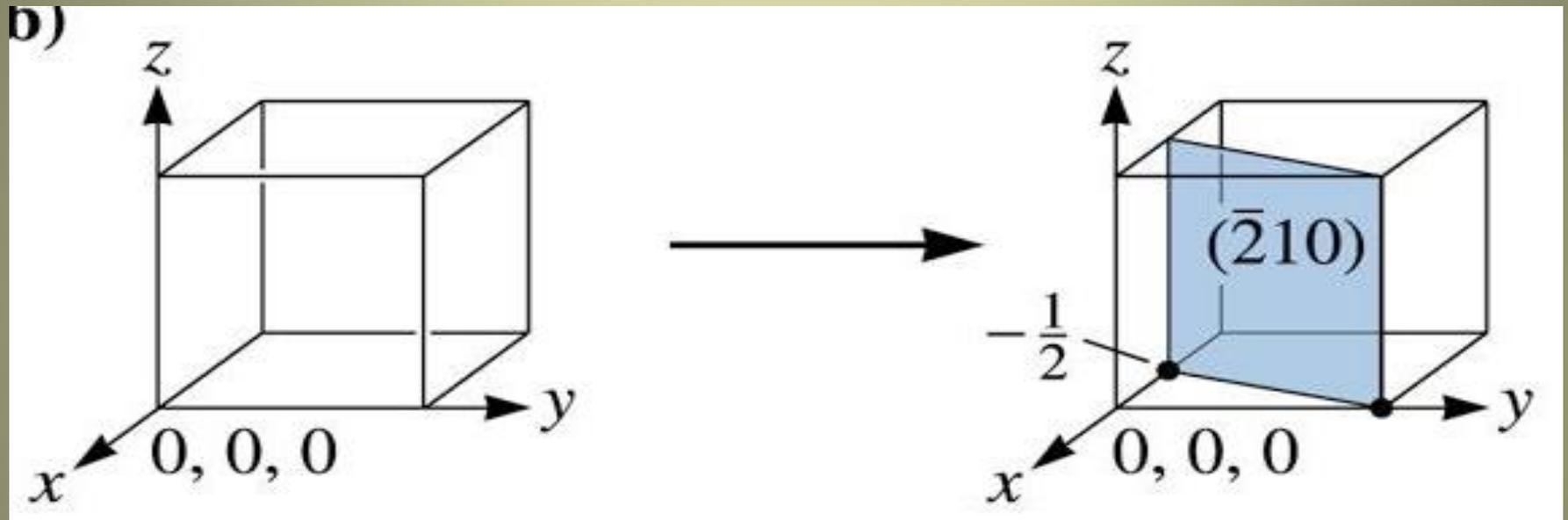
A:  $(1\bar{1}1)$

B:  $(030)$

C:  $(\bar{2}01)$

Desenhe, em uma célula cúbica, o plano  $[\bar{2}10]$

Desenhe, em uma célula cúbica, o plano  $[\bar{2}10]$



## Família de Planos

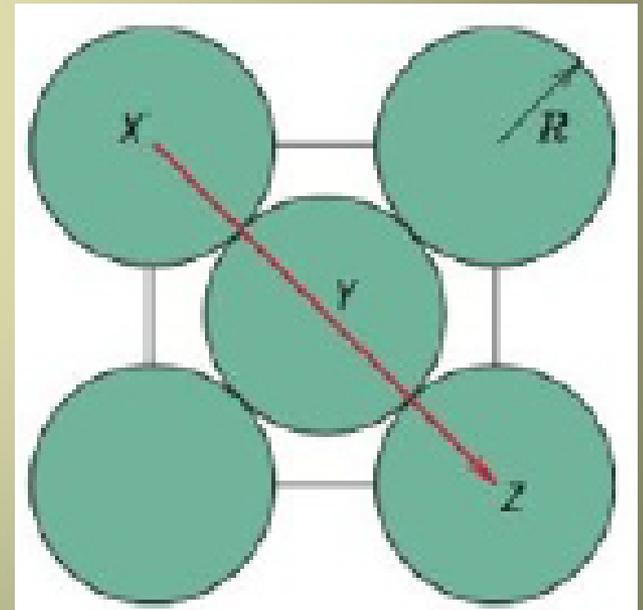
Assim como acontece com as direções, os planos também apresentam famílias, que agrupam planos equivalentes. As famílias são representadas com  $\{ \}$ . Abaixo está ilustrada a família  $\{110\}$  para o sistema cúbico:

$$\{110\} = \begin{cases} (110) \\ (101) \\ (011) \\ (1\bar{1}0) \\ (10\bar{1}) \\ (01\bar{1}) \end{cases}$$

## Densidade Planar

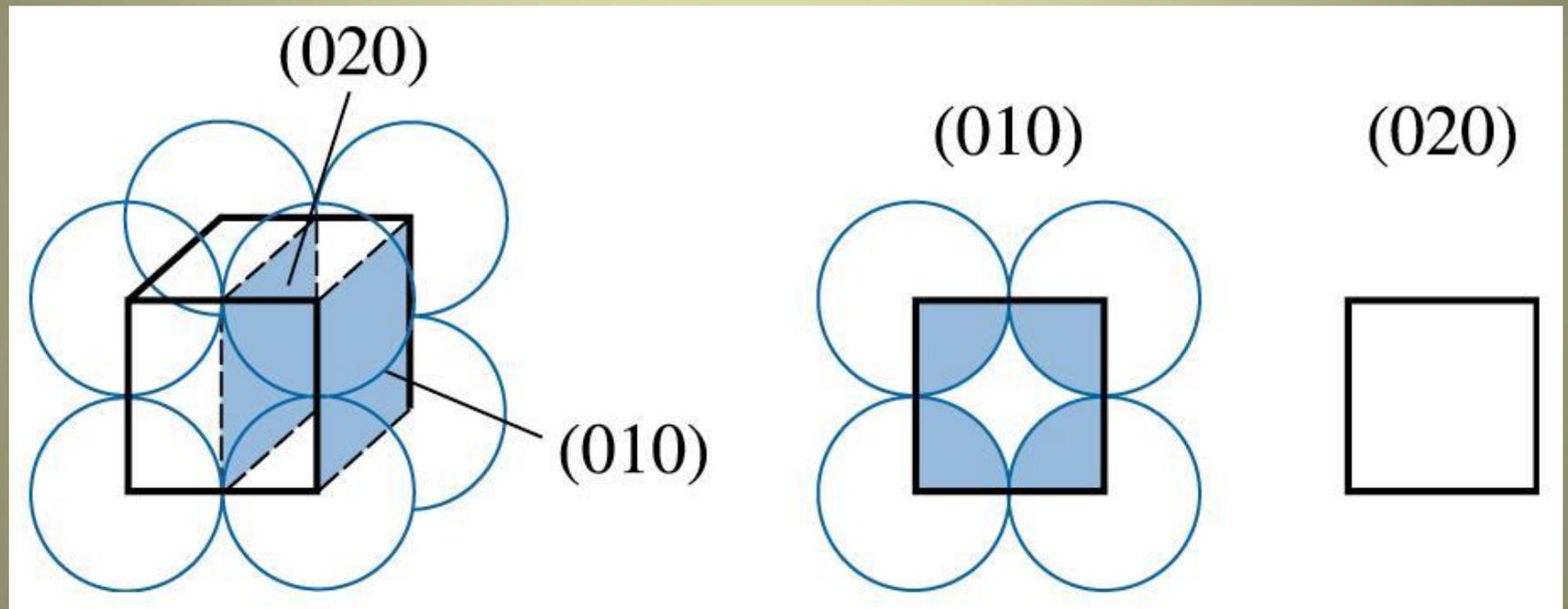
De maneira análoga à densidade linear, a densidade planar (DP) é definida como o número de átomos por unidade de área, os quais estão centrados em um plano cristalográfico particular. É calculada por:

$$DP = \frac{\text{número de átomos no plano}}{\text{área do plano}}$$



Plano da face inferior da célula CFC

Calcule a densidade planar para os planos (010) e (020) do polônio, que apresenta estrutura cúbica simples, de parâmetro de rede  $a = 0.334 \text{ nm}$



Calcule a densidade planar para os planos (010) e (020) do polônio, que apresenta estrutura cúbica simples, de parâmetro de rede  $a = 0.334 \text{ nm}$

$$\begin{aligned} \text{Planar density (010)} &= \frac{\text{atoms per face}}{\text{area of face}} = \frac{1 \text{ atom per face}}{(0.334)^2} \\ &= 8.96 \text{ atoms/nm}^2 = 8.96 \times 10^{14} \text{ atoms/cm}^2 \end{aligned}$$

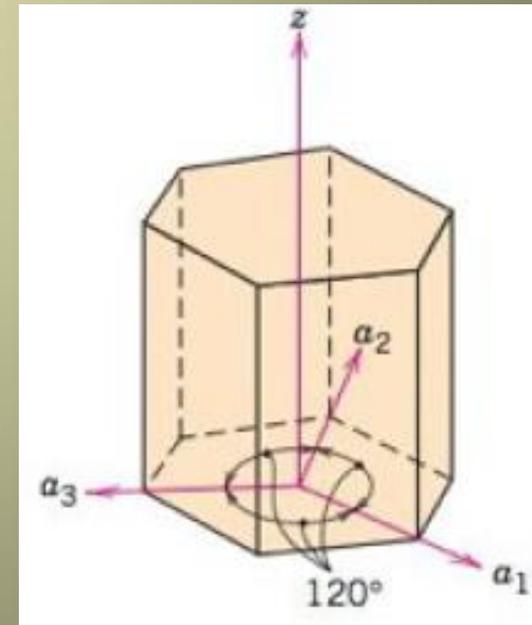
Não há átomos centrado no plano (020), portando a densidade planar desse plano é zero.

## Cristais hexagonais

O sistema de coordenadas convencional apresentado anteriormente (conhecido como sistema de Miller) não é adequado ao se trabalhar com cristais hexagonais, uma vez que direções cristalográficas não possuiriam mesmo conjunto de índices.

Para resolver esse problema, foi criado um sistema com quatro eixos (sistema de Miller-Bravais). Os eixos  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  estão contidos em um único plano (plano basal) e formam ângulos de  $120^\circ$  entre si. O eixo  $z$  é perpendicular ao plano basal.

Para representação de coordenadas nesse sistema, são utilizados quatro índices, sendo que, por convenção, os três primeiros se referem aos eixos  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  e o quarto índice se refere ao eixo  $z$ .



## Conversões entre o sistema Miller e Miller-Bravais

### Miller-Bravais para Miller

**Direções:**  $[uvtw]$  para  $[u'v'w']$

$$u' = u - t, v' = v - t \text{ e } w' = w$$

**Planos:**  $(hkil)$  para  $(h'k'l')$

$$h' = h, k' = k \text{ e } l' = l$$

### Miller para Miller-Bravais

**Direções:**  $[uvw]$  para  $[u'v't'w']$

$$u' = \frac{(2u-v)}{3}, v' = \frac{(2v-u)}{3}, t' = -\frac{(u+v)}{3} = -(u'+v')$$

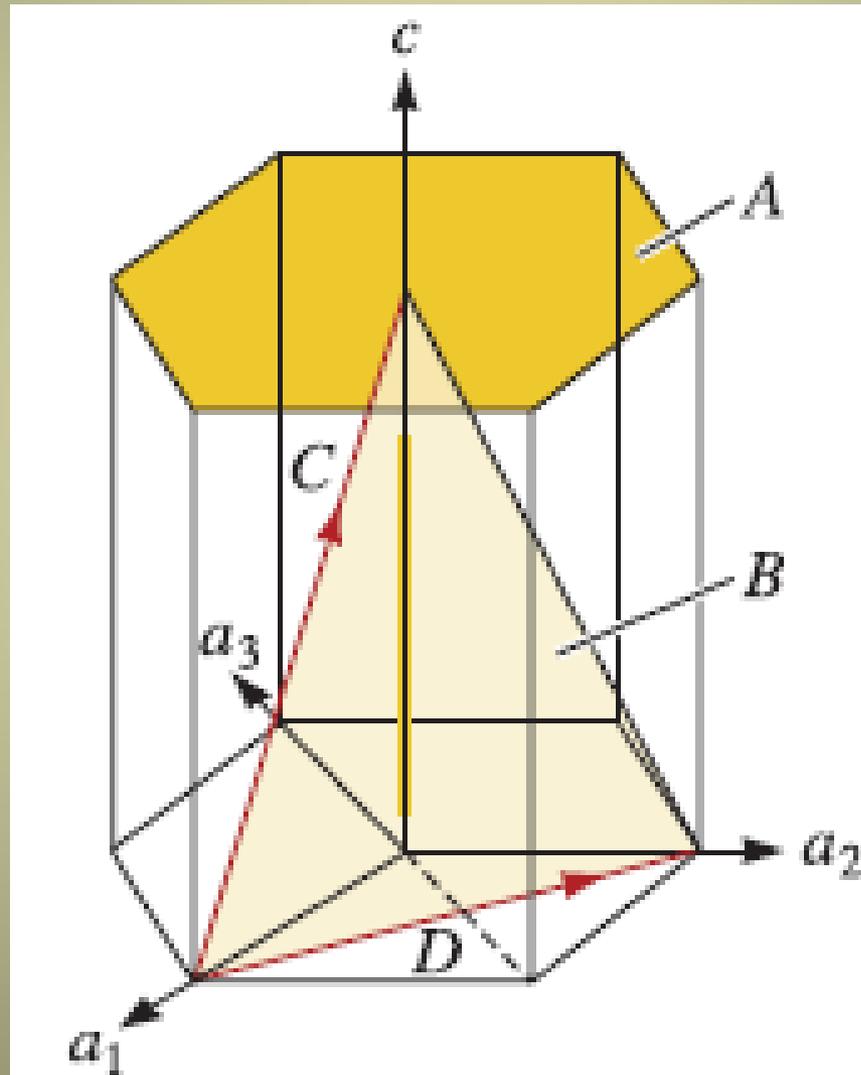
$$\text{e } w' = w$$

**Planos:**  $(hkl)$  para  $(h'k'i'l')$

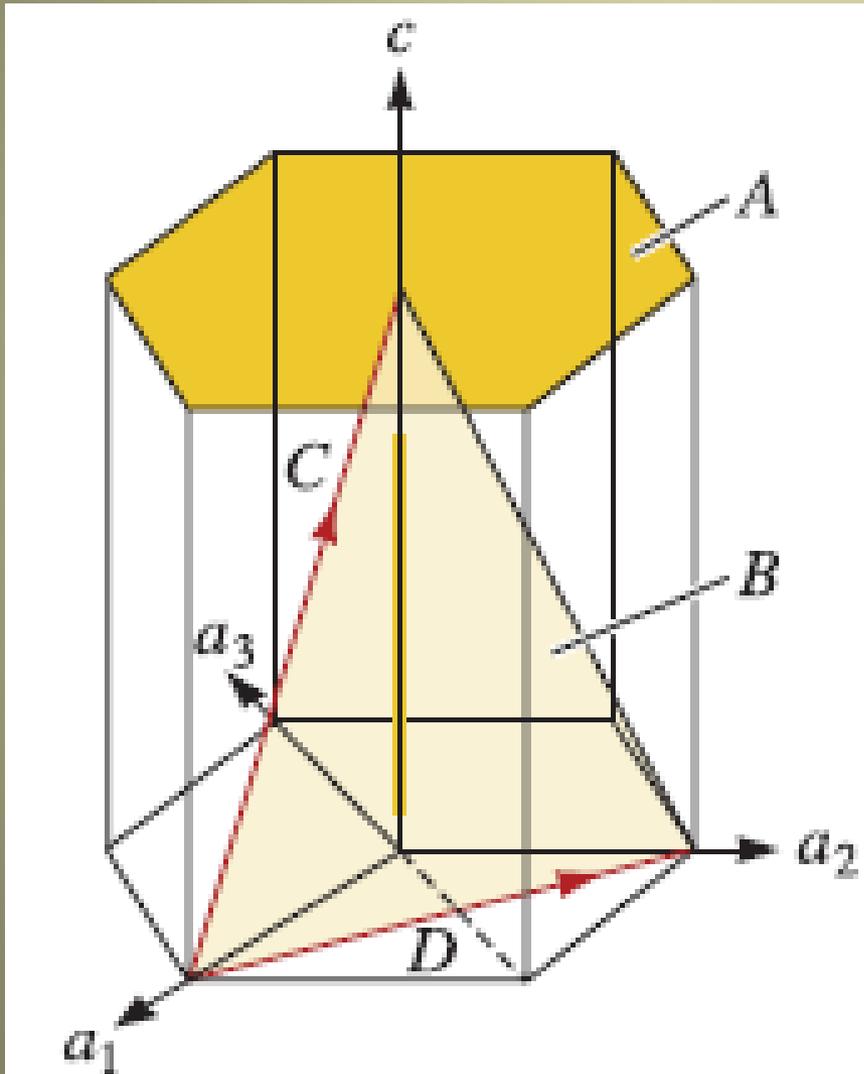
$$h' = h, k' = k, i' = -(h+k) \text{ e } l' = l$$

Sendo que os índices “linha” representam os índices do sistema convencional, e os índices sem a “linha” os índices do sistema hexagonal

Determine os índices de Miller-Bravais para os planos A e B e para as direções C e D da figura abaixo:



Determine os índices de Miller-Bravais para os planos A e B e para as direções C e D da figura abaixo:



Planos:

A: (0001)

B:  $(11\bar{2}1)$

Direções

C:  $[\bar{2}113]$

D:  $[\bar{1}100]$

Desenhe, em um sistema de Miller-Bravais para um cristal hexagonal:

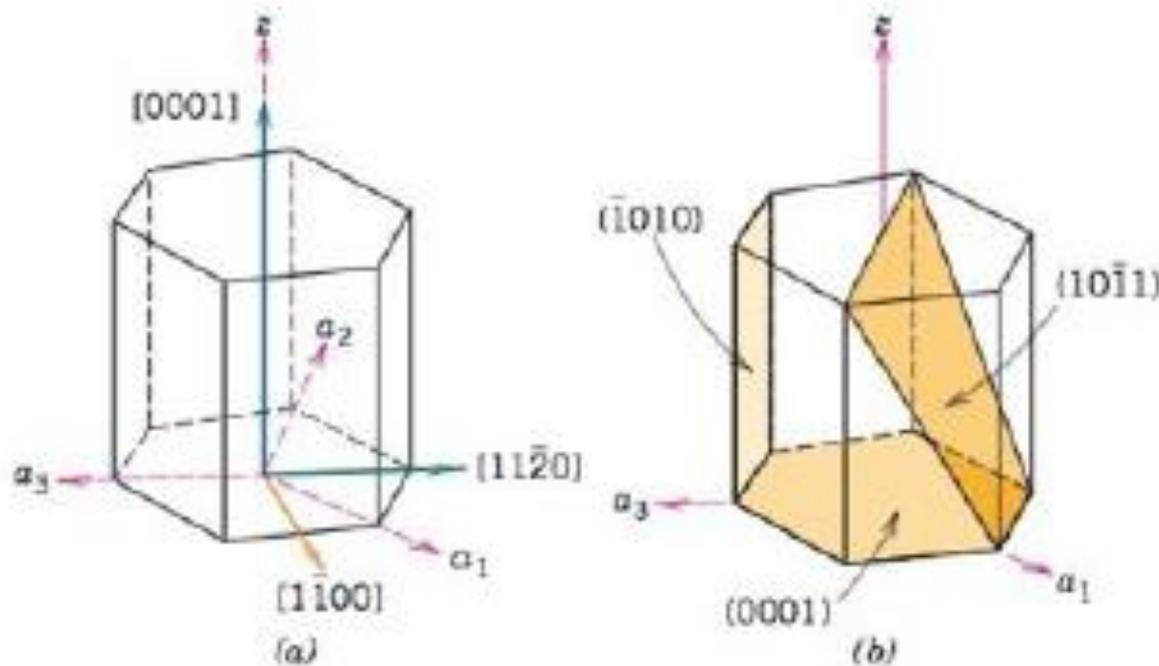
a) As direções  $[11\bar{2}0]$ ,  $[1\bar{1}00]$  e  $[0001]$

b) Os planos  $(\bar{1}010)$ ,  $(10\bar{1}1)$ ,  $(0001)$

Desenhe, em um sistema de Miller-Bravais para um cristal hexagonal:

a) As direções  $[11\bar{2}0]$ ,  $[1\bar{1}00]$  e  $[0001]$

b) Os planos  $(\bar{1}010)$ ,  $(10\bar{1}1)$ ,  $(0001)$

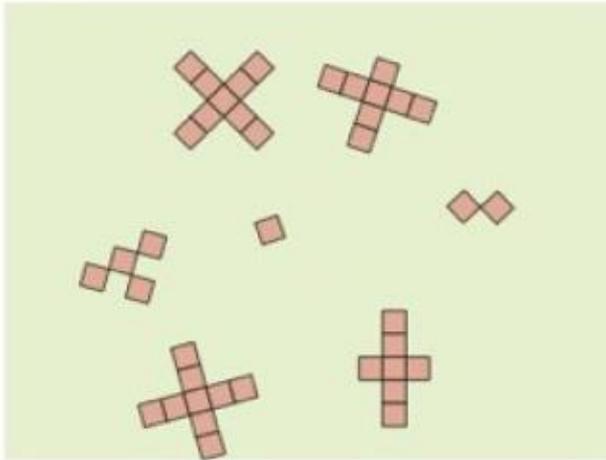


## Monocristalinidade e Policristalinidade

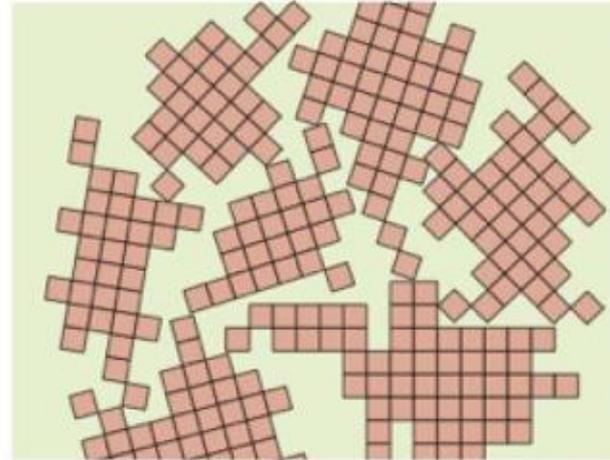
**Materiais Monocristalinos:** quando o arranjo periódico dos átomos se estende por toda a amostra, o resultado é um monocristal. Todas as células unitárias se interligam e possuem a mesma orientação. São raros de acontecerem naturalmente e sua produção artificial exige condições muito bem controladas (taxa de resfriamento)

**Materiais Policristalinos:** quando o sólido é composto por um conjunto de muitos cristais pequenos (grãos). Durante o processo de solidificação, inicialmente, pequenos cristais (ou núcleos cristalinos) se formam, em várias posições e com orientações diferentes. Na medida em que a solidificação se aproxima do fim, as extremidades de grãos adjacentes são forçadas umas contra as outras

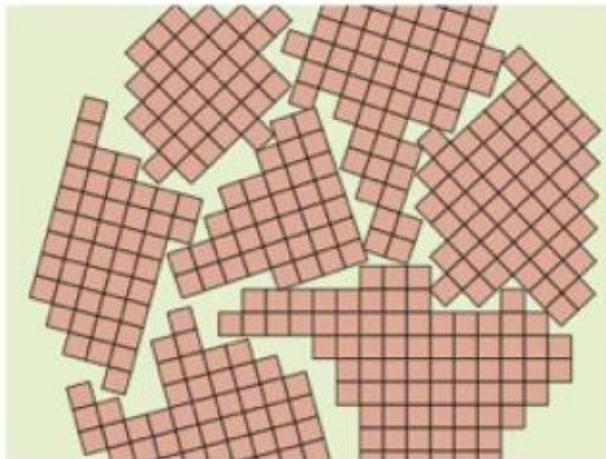
# Cristalização e Crescimento de Grãos



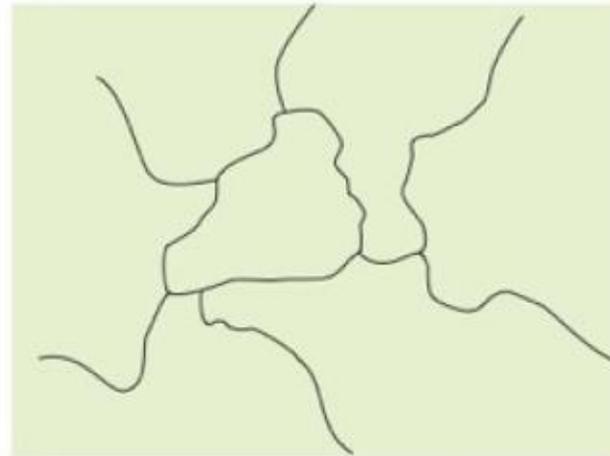
(a)



(b)



(c)



(d)

Representação esquemática do processo de solidificação com a) Início da solidificação, b) durante a solidificação, c) fim da solidificação, d) a estrutura de grãos como ela aparece em um microscópio

## Distância Interplanar

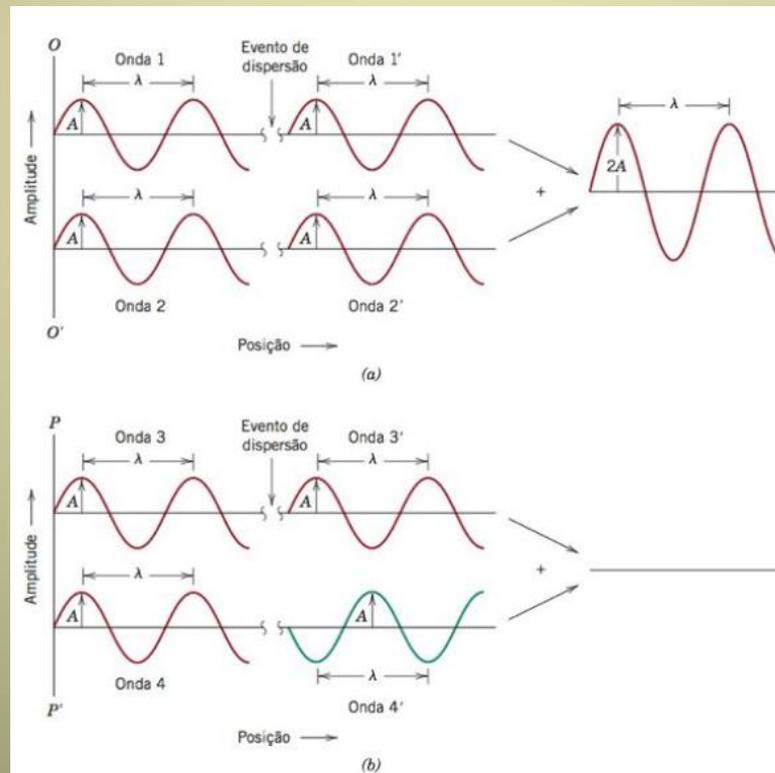
A distância entre dois planos paralelos e adjacentes com os mesmos índices de Miller é chamada de distância interplanar. Para materiais com arranjos do tipo cúbico, a fórmula para essa distância é dada por:

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

Onde  $a$  é o parâmetro de rede da célula unitária e  $h$ ,  $k$ , e  $l$  representam os índices de Miller dos planos considerados

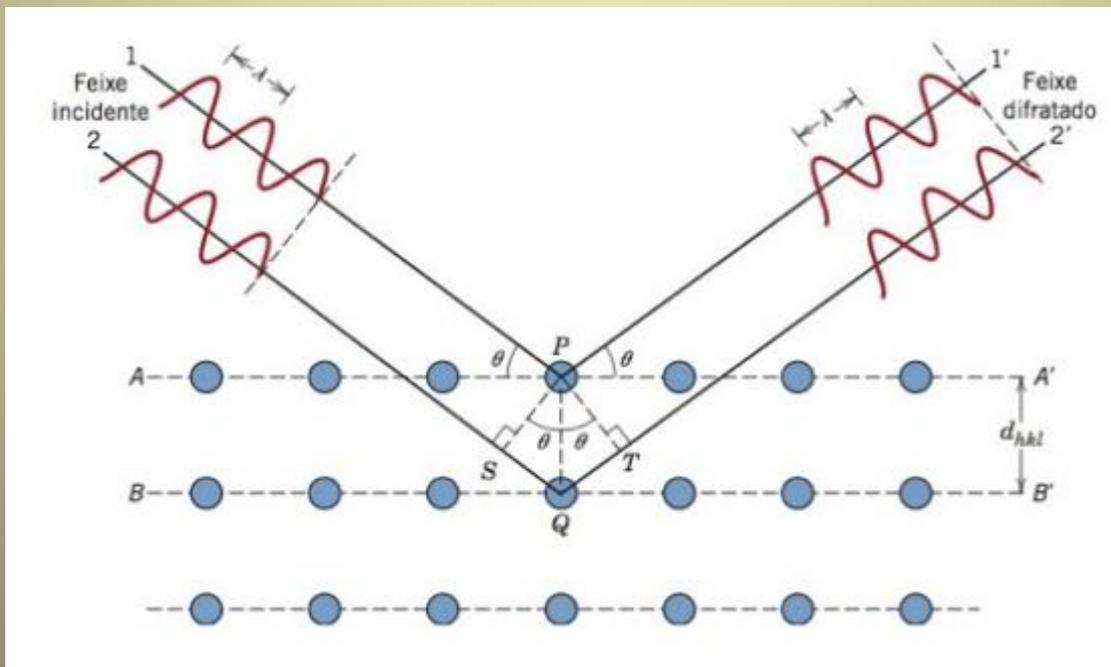
# Difração de Ondas

A difração ocorre quando uma onda encontra uma série de obstáculos regularmente separados que são capazes de dispersar a onda e possuem espaçamentos comparáveis em magnitude ao comprimento de onda.



## Difração de Raios X em sólidos cristalinos

Os raios x são uma forma de radiação com alta energia e comprimento de onda da ordem de espaçamentos atômicos nos sólidos. Quando um feixe de raios x incide sobre um material sólido, uma fração desse feixe será dispersa em todas as direções pelos elétrons que estão associados a cada átomo que se encontra na trajetória do feixe



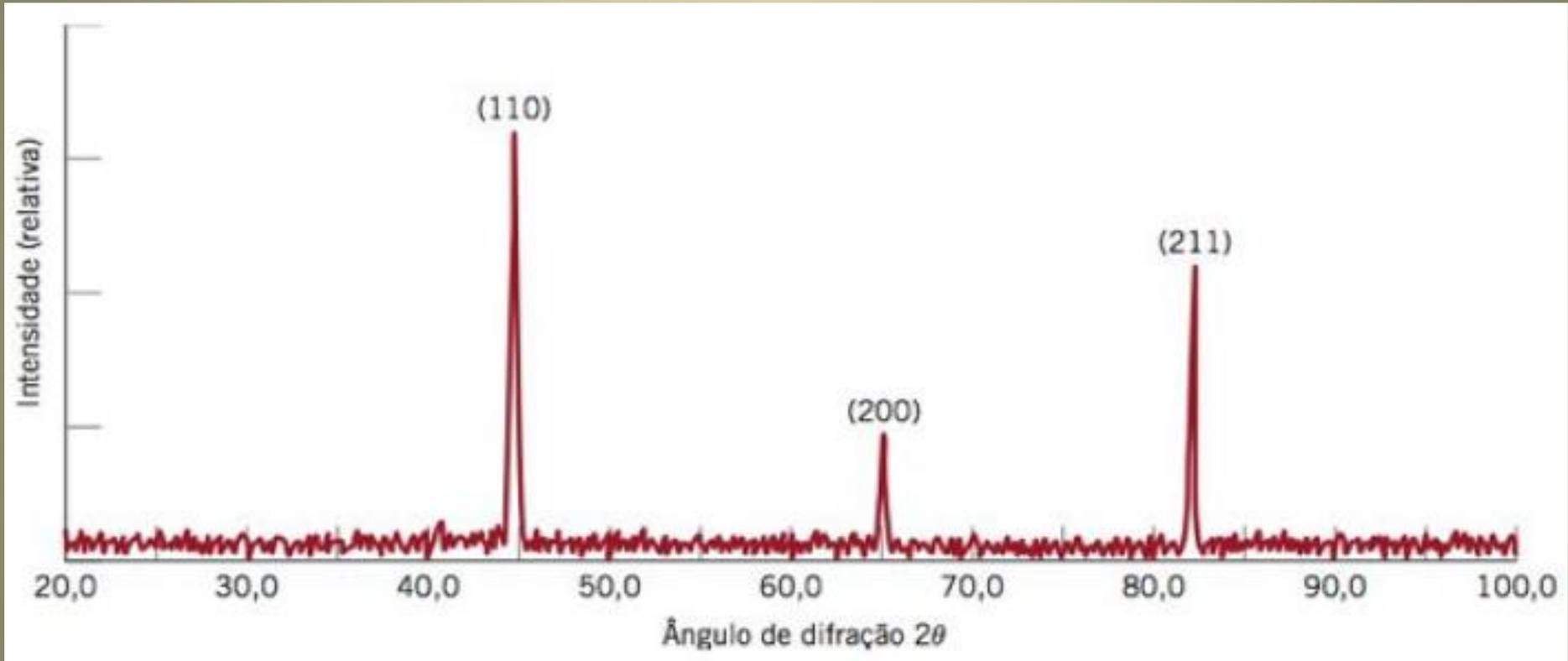
## Condições de Difração

Se certas condições forem respeitadas, haverá difração do feixe de raios x e o padrão dessa difração pode ser utilizado para a identificação de materiais cristalinos. A equação abaixo, conhecida como lei de Bragg, apresenta as condições para que haja difração:

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

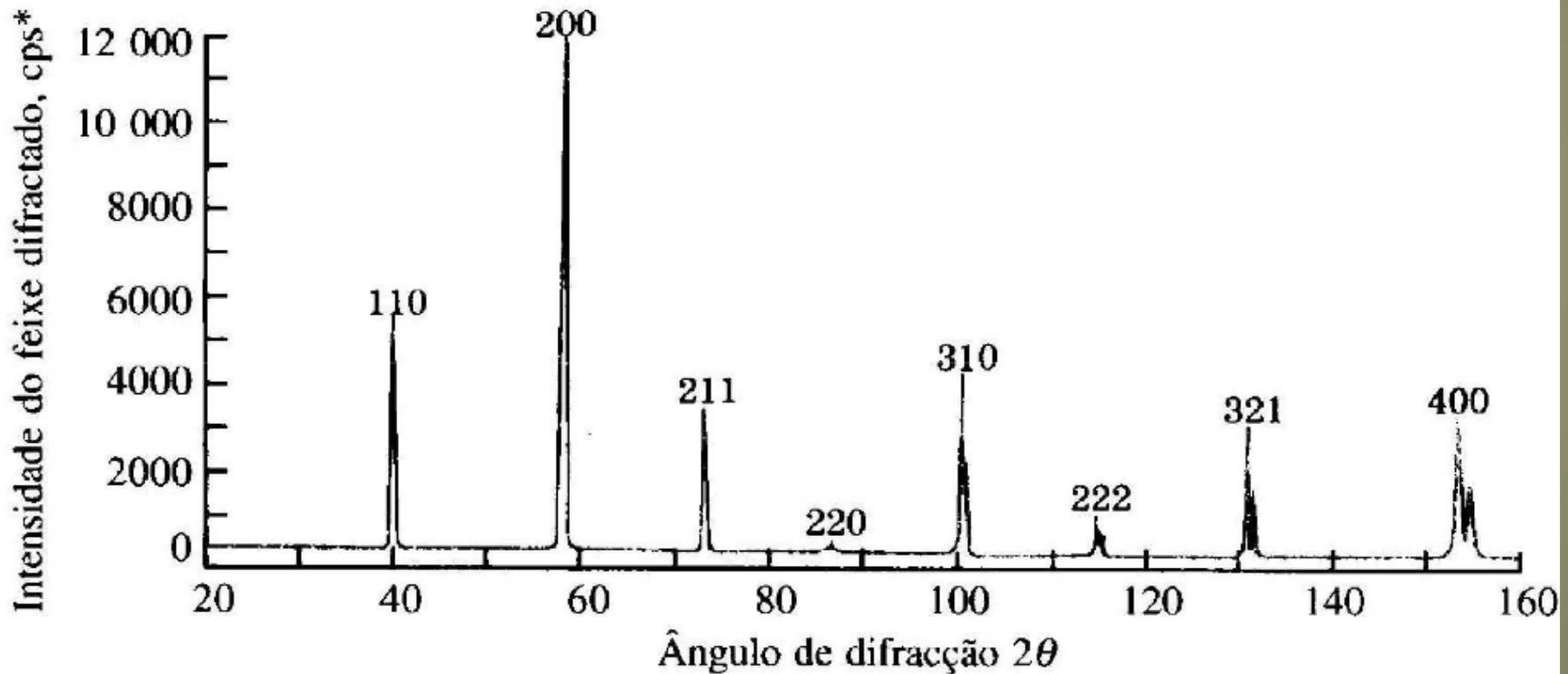
Sendo  $n$  um número inteiro,  $\lambda$  o comprimento da onda de raio x (depende da fonte emissora),  $d_{hkl}$  a distância interplanar e  $\theta$  o ângulo de incidência do feixe na amostra.

# Identificação de sólidos



Padrão de difração do ferro- $\alpha$ , com os picos referentes a cada plano destacados

1) Encontre o parâmetro de rede do material que apresenta o padrão de difração abaixo, sabendo que ele possui estrutura CCC e sabendo que a radiação utilizada é proveniente de Cu  $K_{\alpha 1}$  ( $\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$ ):



2) Com o parâmetro de rede calculado, identifique o material, utilizando a tabela abaixo:

<b>Material</b>	<b>Parâmetro de rede do cubo (em Å)</b>
Ferro	0,287
Cromo	0,289
Tungstênio	0,316
Sódio	0,429
Potássio	0,533

- 1) Encontre o parâmetro de rede do material que apresenta o padrão de difração abaixo, sabendo que ele possui estrutura CCC e sabendo que a radiação utilizada é proveniente de Cu  $K_{\alpha 1}$  ( $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$ ):

Solução

Utilizando o plano (110), pico referente ao ângulo  $2\theta$  de  $40,35^\circ$ , temos que:

$$\lambda = 1,54056 * 10^{-10} \text{ m} \quad n = 1 \quad 2\theta = 40,3^\circ \quad \theta = 20,15^\circ$$

$$\begin{aligned} n\lambda &= 2d\text{sen}(\theta) \\ 1,54056 * 10^{-10} &= 2d\text{sen}(20,15^\circ) \\ d &= \frac{1,54056 * 10^{-10}}{2\text{sen}(20,15^\circ)} \end{aligned}$$

$$d = 2,23607 * 10^{-10}$$

Utilizando o resultado para  $d$  e os índices de Miller do plano, temos que:

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

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

$$a = 2,23607 \cdot 10^{-10} \cdot \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}$$

$$a = 3,16228 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

ou

$$a = 3,16228 \text{ \AA}$$

Esse parâmetro de rede corresponde ao tungstênio