



Introdução a Ciência dos Materiais

ESTRUTURAS CRISTALINAS

Parte 2

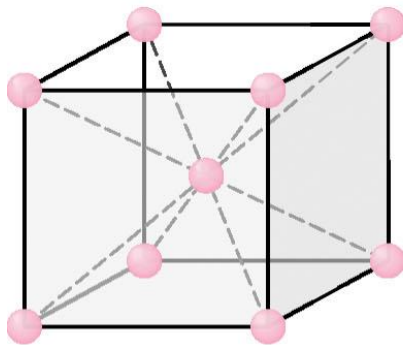
Professora: Maria Ismenia Sodero

maria.ismenia@usp.br



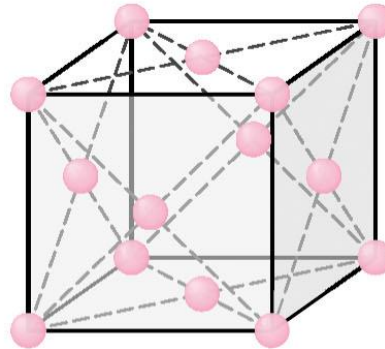
Princípios estruturas dos metais

A maior parte dos elementos metálicos (~90%) se cristaliza, ao se solidificar, em três estruturas cristalinas compactas: cúbica de corpo centrado, cubica de face centrada e hexagonal compacta.



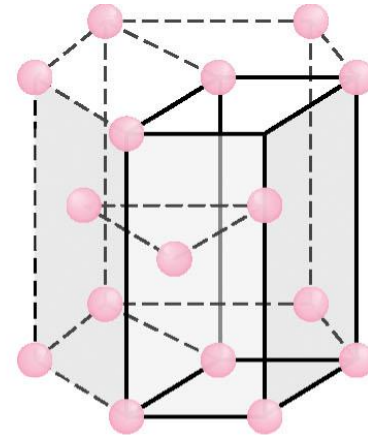
(a)

BCC



(b)

FCC



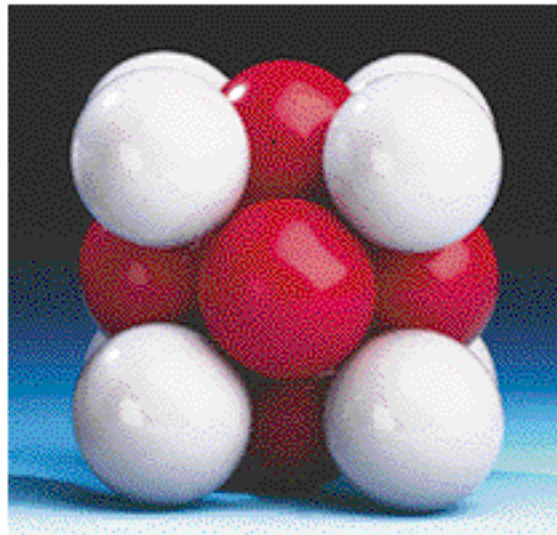
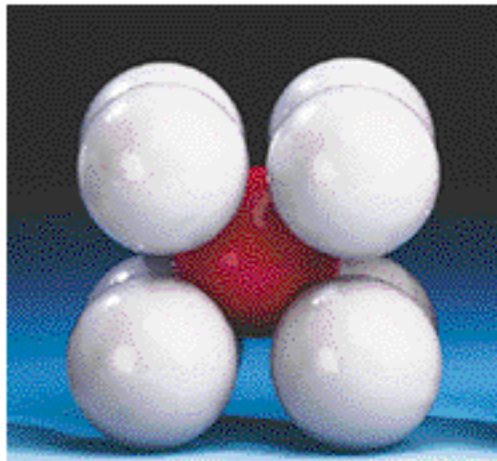
(c)

HCP



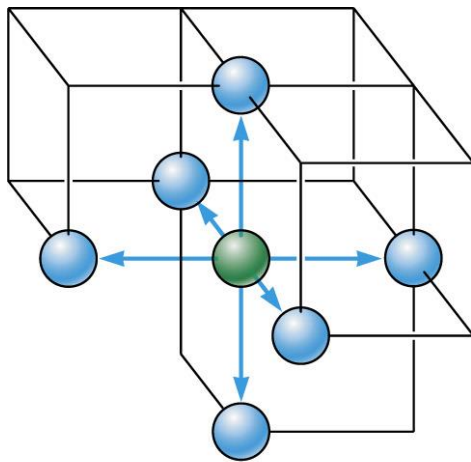
Estruturas Cristalinas dos Metais

- Como a ligação metálica é não direcional não há grandes restrições quanto ao número e posição de átomos vizinhos. Assim, os metais terão **NC (número de coordenação) alto** e **empilhamento compacto**.
- Geralmente formados de um mesmo elemento – raio atômico igual;
- Daqui para frente representaremos os átomos como esferas rígidas que se tocam. As esferas estarão centradas nos pontos da rede cristalina.

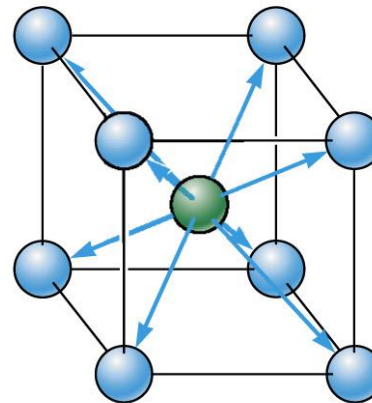


Numero de Coordenação

Nos metais, todos os átomos possuem o mesmo número de vizinhos mais próximos ou átomos em contato, o que é chamado de número de coordenação



(a)



(b)

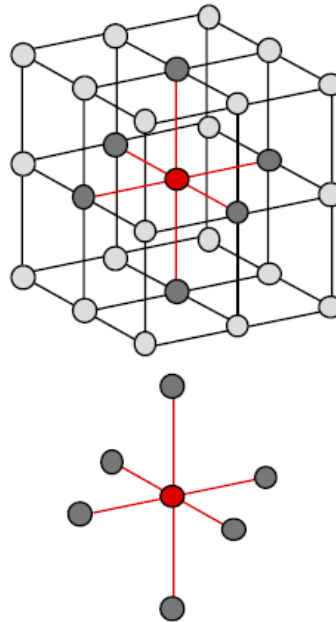
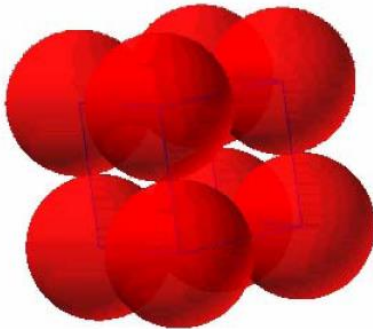
Coordenações em células unitárias CS (a) e CCC (b). Seis átomos se tocam na estrutura CS e oito átomos estão em contato na célula unitária CCC.



Estrutura Cúbica Simples (CS)

Rara devido ao baixo fator de empacotamento (apenas o Polônio possui esta estrutura);

Alinhamento dos centros dos átomos em todas as camadas – Ocupação de 52% do espaço.



FEA = Fator de empacotamento atômico
(APF - atomic packing factor)

Número de átomos na célula unitária

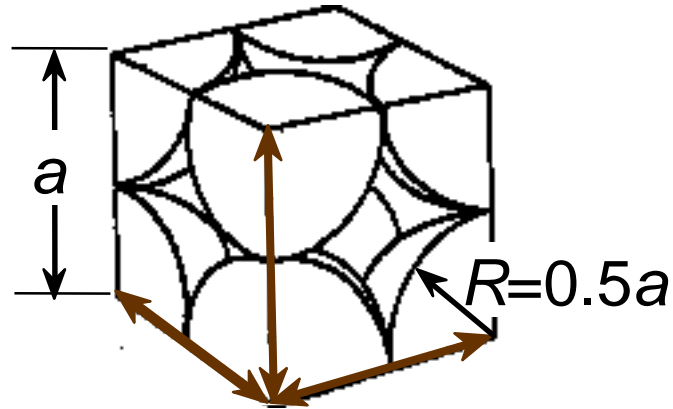
$$N_a = 8 \times (1/8) = 1$$

NC (numero de vizinhos) = 6

$$\begin{aligned} FEA &= \frac{\text{Volume}(\text{átomos})}{\text{Volume}(\text{célula})} = \\ &= \frac{N(\text{átomos})V(1\text{átomo})}{a^3} = \\ &= \frac{N(\text{átomos}) \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} \end{aligned}$$



Estrutura Cúbica Simples



Direção compacta
contém $8 \times 1/8 =$
1 Átomo/célula

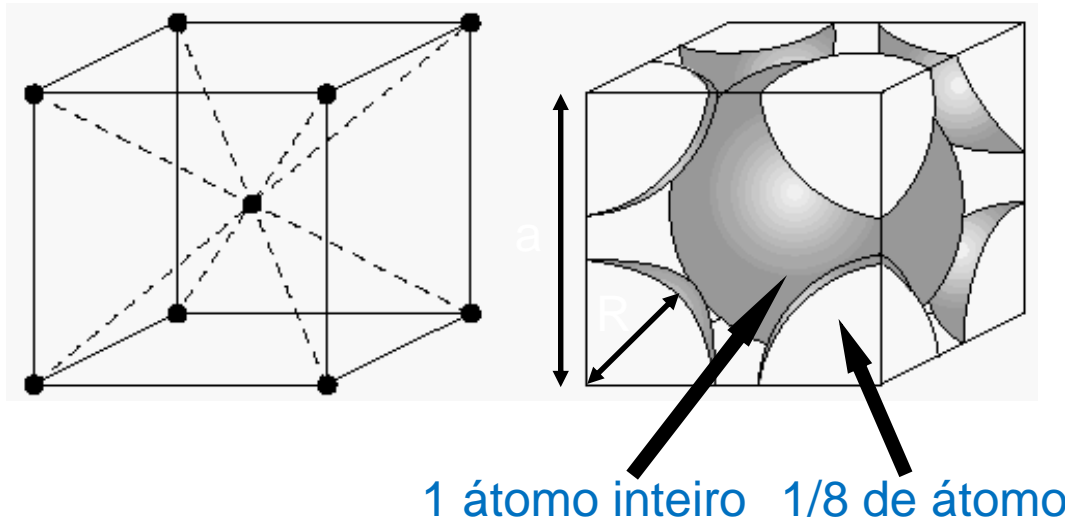
$$\text{FEA} = \frac{\frac{\text{átomos}}{\text{célula}} \cdot 1 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2} \right)^3}{a^3} = \frac{\text{volume átomo}}{\text{volume célula}}$$

- Fator de empacotamento da Cúbica Simples = 0,52.



A rede ccc

A rede cúbica de corpo centrado é uma rede cúbica na qual existe um átomo em cada vértice e um átomo no centro do cubo. Os átomos se tocam ao longo da diagonal.



Número de átomos na célula unitária

$$N_a = 1 + 8 \times (1/8) = 2$$

$$NC = 8$$

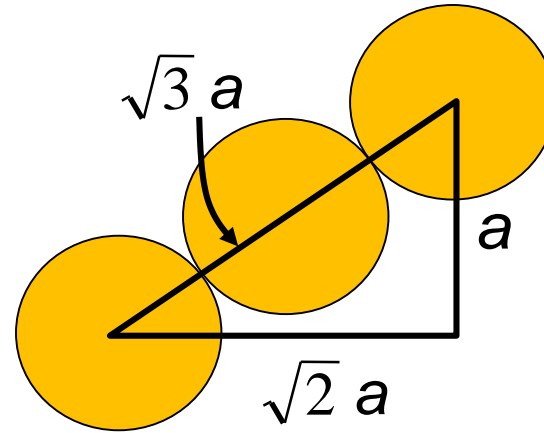
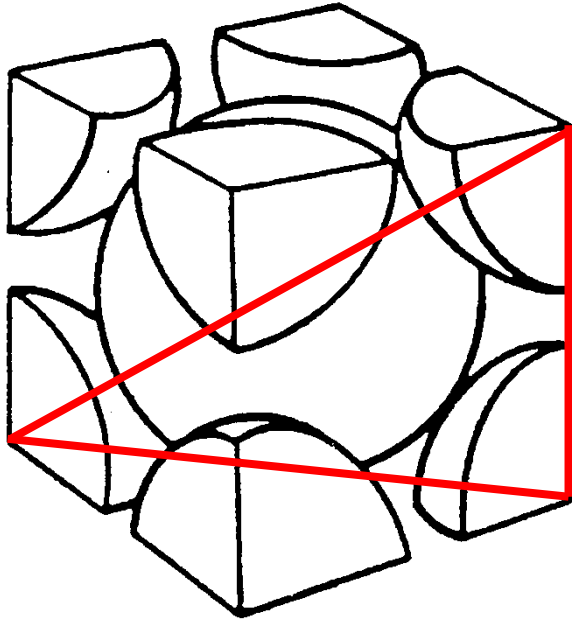
FEA = Fator de empacotamento atômico
(APF - atomic packing factor)

$$\begin{aligned} FEA &= \frac{\text{Volume}(\text{átomos})}{\text{Volume}(\text{célula})} = \\ &= \frac{N(\text{átomos})V(1\text{átomo})}{a^3} = \\ &= \frac{N(\text{átomos}) \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} \end{aligned}$$

$$FEA_{ccc} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3} \pi R^3}{\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi \approx 0,68$$



Estrutura Cúbica de Corpo Centrado - CCC



Direções compactas:

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

Célula unitária contém:

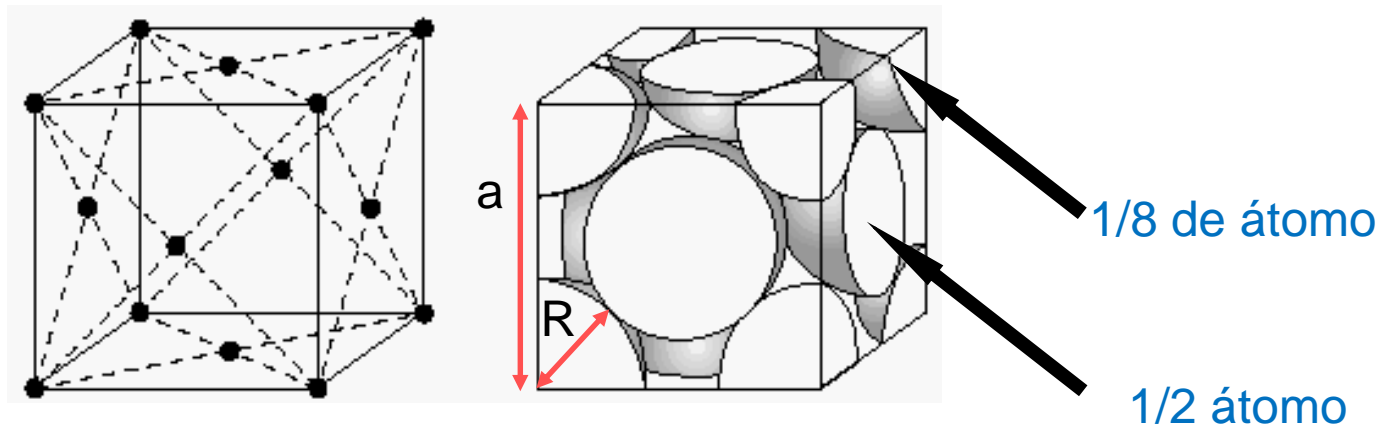
$$1 + 8 \times 1/8 \\ = 2 \text{ átomos/célula}$$

$$\text{FEA} = \frac{\frac{\text{átomos}}{\text{célula}} \cdot 2 \cdot \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3}{a^3} \quad \frac{\text{volume}}{\text{átomo}} \quad \frac{\text{volume}}{\text{célula}}$$

- Fator de empacotamento da CCC = 0,68.

A rede cfc

A rede cúbica de face centrada é uma rede cúbica na qual existe um átomo em cada vértice e um átomo no centro de cada face do cubo. Os átomos se tocam ao longo das diagonais das faces do cubo.



Número de átomos na célula unitária

$$N_a = 6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \left(\frac{1}{8}\right) = 4$$

Relação entre a e r

$$4R = a\sqrt{2} \Rightarrow a = 2R\sqrt{2} \quad \text{NC} = 12$$

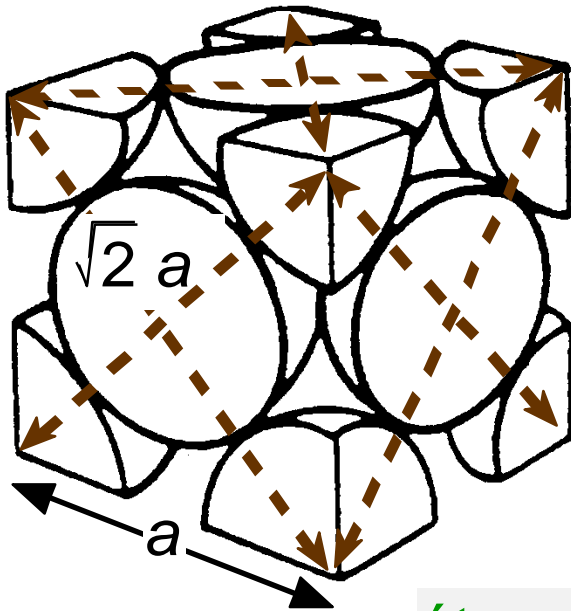
Fator de empacotamento atômico

$$FEA_{\text{cfc}} = \frac{\text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula}} = 0.74$$

A rede cfc é a mais compacta



Estrutura Cúbica de Face Centrada - CFC



Direções compactas:

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

Célula unitária contém:

$$6 \times 1/2 + 8 \times 1/8$$

$$= 4 \text{ atoms/célula}$$

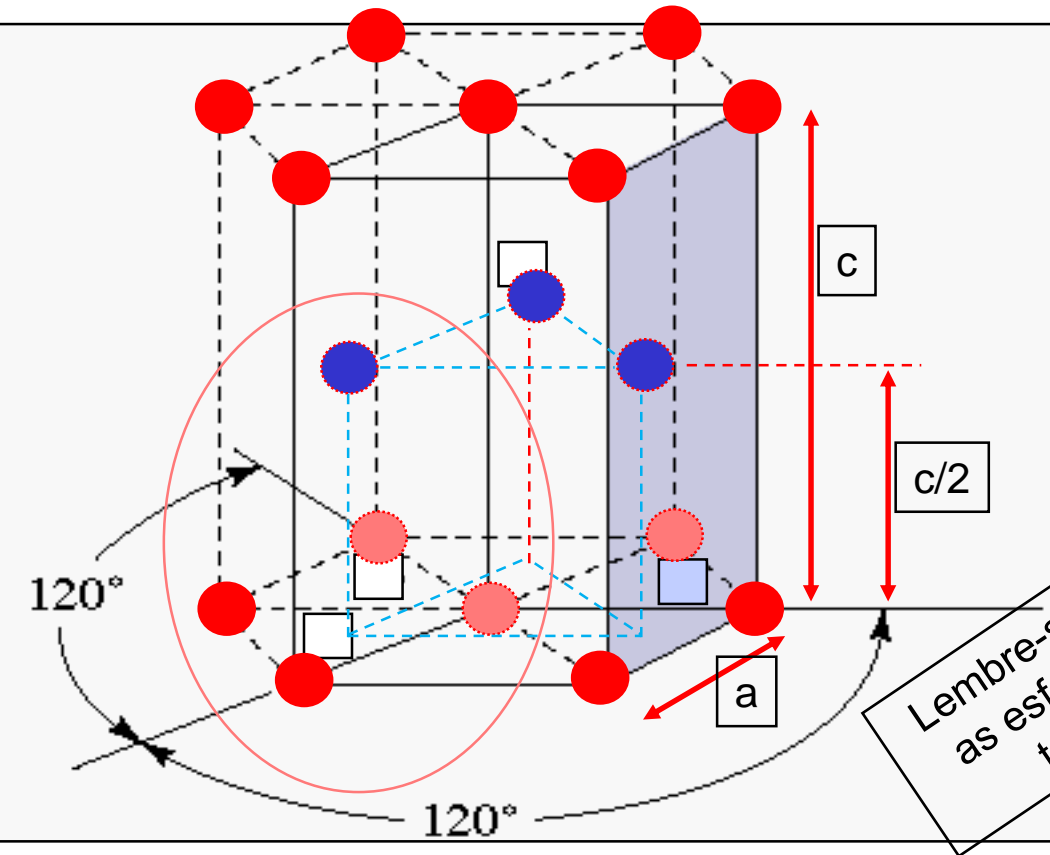
$$\text{FEA} = \frac{\frac{\text{átomos}}{\text{célula}} \cdot \frac{4}{3} \pi (\sqrt{2}a/4)^3}{a^3} = \frac{\text{volume átomo}}{\text{volume célula}}$$

- Fator de empacotamento da CFC = 0,74
(valor máximo de fator de empacotamento)



A rede hexagonal compacta

A rede hc pode ser representada por um prisma com base hexagonal, com átomos na base e topo e um plano de átomos no meio da altura.



Número de átomos na célula unitária

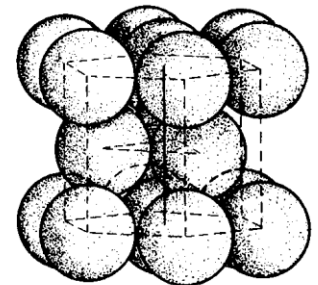
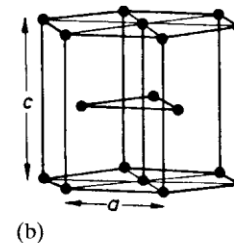
$$N_a = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \left(\frac{1}{2}\right) + 3 = 6$$

Relação entre a e r

$$2R = a$$

$$\text{FEA} = 0.74 \quad \text{NC} = 12$$

A rede hc é tão compacta quanto a cfc





Resumo estrutura cristalina metais

Características de estrutura cristalina de alguns metais

Structure	a_0 versus r	Atoms per Cell	Coordination Number	Packing Factor	Examples
Simple cubic (SC)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Polonium (Po), α -Mn
Body-centered cubic (BCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Zr, Cr
Face-centered cubic (FCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Au, Pt, Ag, Pb, Ni
Hexagonal close-packed (HCP)	$a_0 = 2r$ $c_0 \approx 1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd



Densidade Teórica

$$\text{Densidade} = \rho = \frac{\text{Massa de átomos por célula unitária}}{\text{Volume total da célula unitária}}$$

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$$

n = número de átomos/cel. unit.

A = massa atômica

V_c = volume da cela unit. = a^3 para as cúbicas

N_A = número de Avogadro



Ex: Cr (CCC)

$$A = 52.00 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.125 \text{ nm}$$

$$n = 2 \text{ átomos/célula}$$

$$a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$$

Diagram illustrating the calculation of density ρ for Chromium (Cr) in a body-centered cubic (BCC) structure:

The density ρ is calculated as the ratio of the mass of the unit cell to its volume:

$$\rho = \frac{\text{átomos/célula} \times \text{g/mol}}{\text{volume célula} \times \text{átomos/mol}}$$

Substituting the values:

$$\rho = \frac{2 \times 52.00}{a^3 \times 6.022 \times 10^{23}}$$

Where:

- a^3 is the volume of the unit cell (volume célula).
- 6.022×10^{23} is Avogadro's number (átomos/mol).

Calculated values:

$\rho_{\text{teórica}}$	$= 7,18 \text{ g/cm}^3$
ρ_{real}	$= 7,19 \text{ g/cm}^3$



Densidades das classes de materiais

$$\rho_{\text{metais}} > \rho_{\text{cerâmicas}} > \rho_{\text{polímeros}}$$

Metais:

- Alto empacotamento (FEA) - (ligação metálica);
- Elementos de alta massa atômica

Cerâmicas:

- Baixo FEA;
- Elementos leves

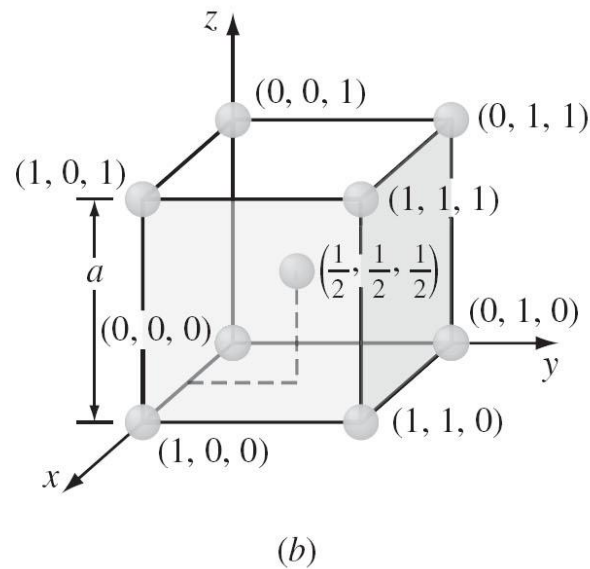
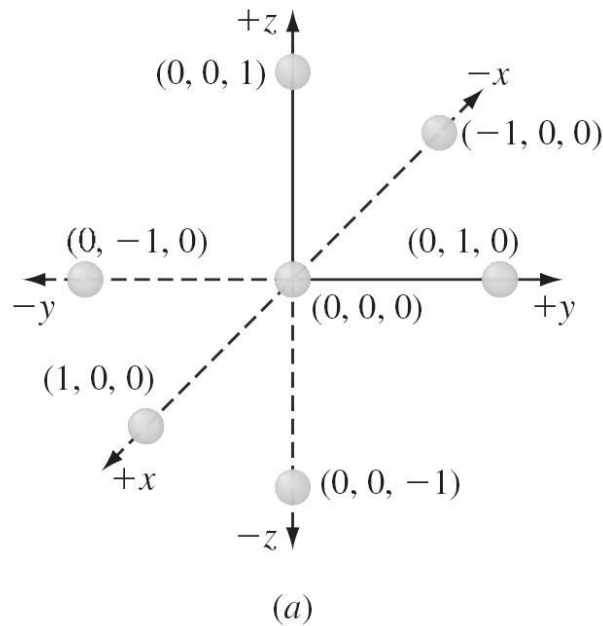
Polímeros:

- Baixo FEA – ou amorfos
- Elementos leves (C, H, O)



Pontos, Direções e Planos Cristalográficos

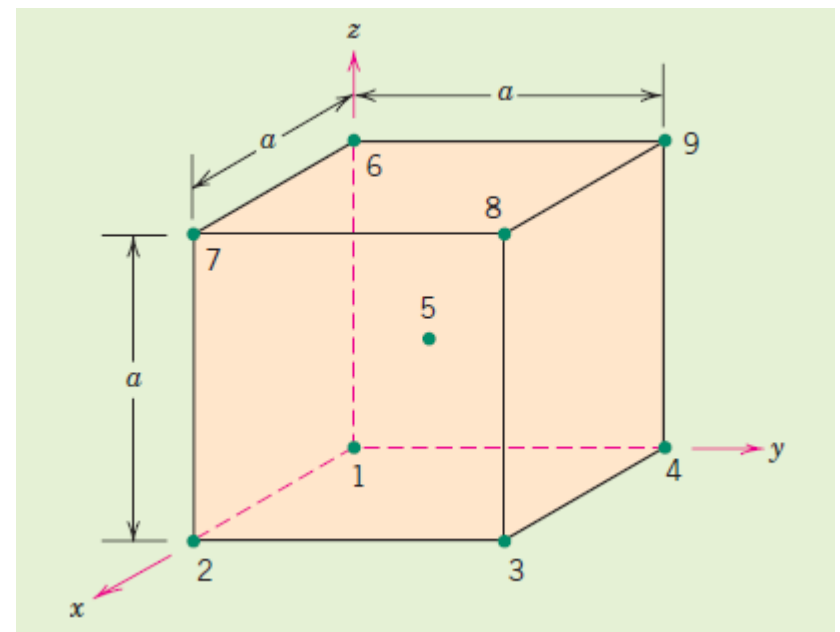
Existem algumas regras básicas para descrever a geometria em e ao redor de uma célula unitária. Essas regras e as notações associadas são usadas uniformemente pelos cristalógrafos, geólogos, cientistas de materiais. O que vamos aprender é, então um VOCABULÁRIO que nos permite comunicar de forma eficiente sobre a estrutura cristalina. Esse vocabulário será útil quando começarmos a lidar com propriedades sensíveis à estrutura.



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



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



Point Number	Fractional Lengths			Point Coordinates
	<i>x axis</i>	<i>y axis</i>	<i>z axis</i>	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
6	0	0	1	0 0 1
7	1	0	1	1 0 1
8	1	1	1	1 1 1
9	0	1	1	0 1 1



Direções

As seguintes etapas são consideradas para determinação dos índices direcionais:

- 1- Um vetor com comprimento conveniente é posicionado de maneira tal que ele passe através da origem do sistema de coordenadas;
- 2- São determinados os comprimentos das projeções do vetor sobre cada um dos três eixos; esses são *medidos em termos das dimensões a , b e c da célula unitária*;
- 3- Esses três números são multiplicados ou divididos por um fator comum, para reduzi-los aos menores valores inteiros;
- 4- Os três índices, sem separação por vírgulas, são colocados entre colchetes: $[uvw]$.

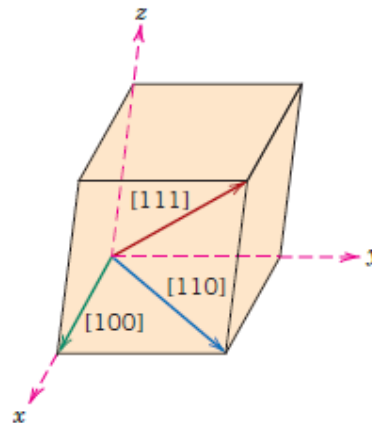


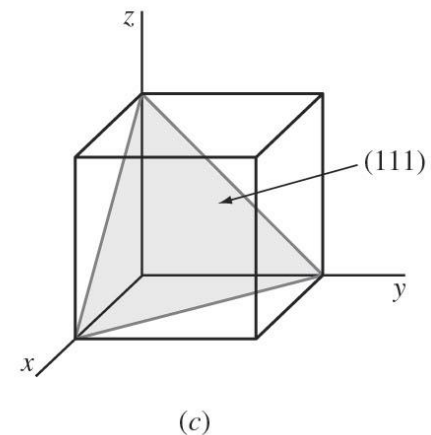
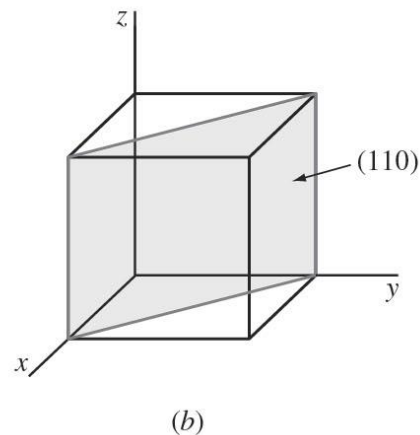
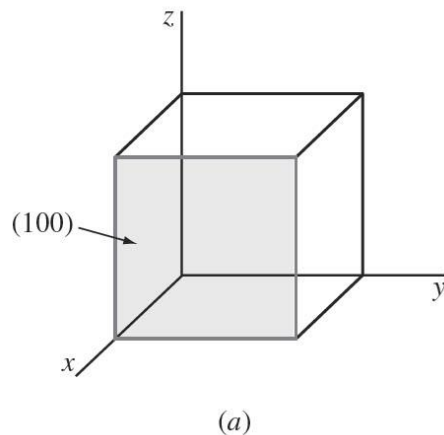
Figura 3.6 As direções $[100]$, $[110]$ e $[111]$ em uma célula unitária.

Planos

Para identificar os planos cristalinos usar-se o sistema de notação de Miller, que são definidos como os inversos das interseções fracionárias que o plano faz com os eixos cristalográficos x , y e z ;

Procedimento:

- 1- escolher um plano que não passe pela origem $(0,0,0)$;
- 2- determinar as interseções do plano com os eixos cristalográficos x , y e z do cubo unitário;
- 3- obter os inversos destas interseções;
- 4- reduzir as frações ao mesmo denominador e determinar o menor conjunto de números inteiros que estejam na mesma proporção das interseções.

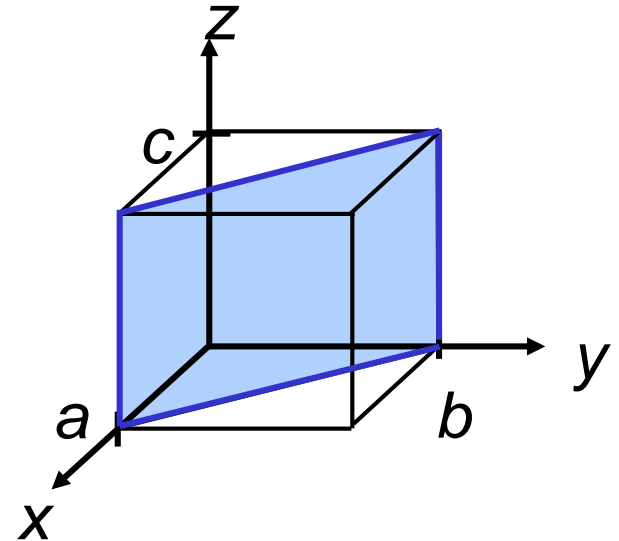


Índices de Miller de alguns planos importantes em cristais cúbicos (a) (100), (b) (110) e (c) (111).

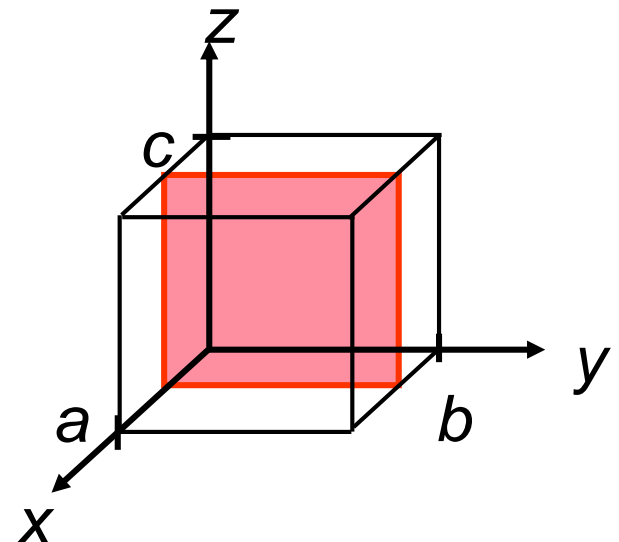


Exemplos

	a	b	c
1. Interceptos	1	1	∞
2. Recíprocos	1/1	1/1	1/ ∞
	1	1	0
3. Redução	1	1	0
4. Índices de Miller	(110)		



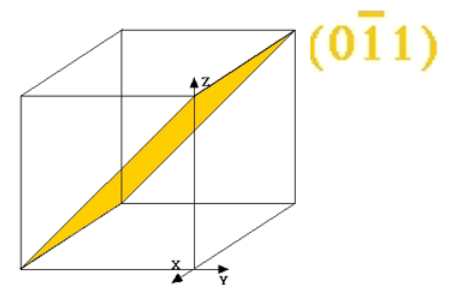
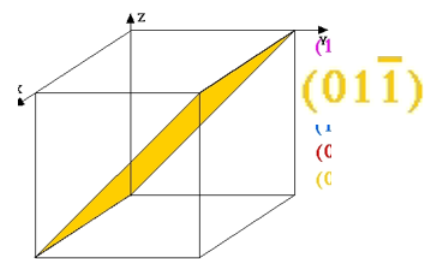
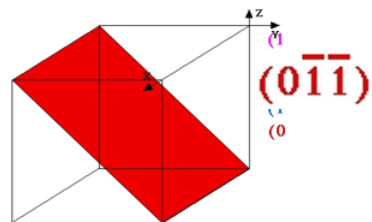
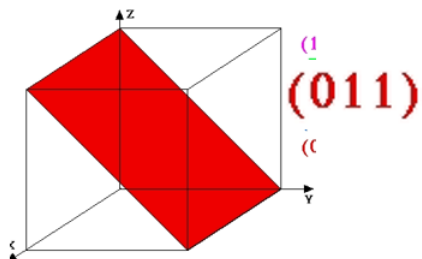
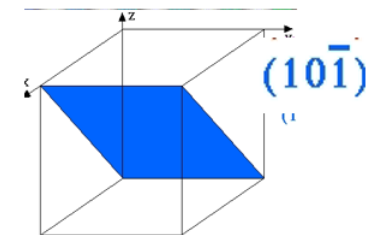
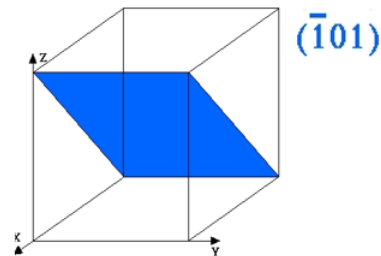
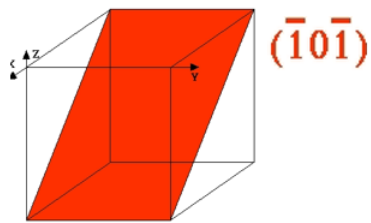
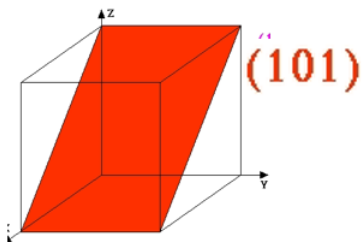
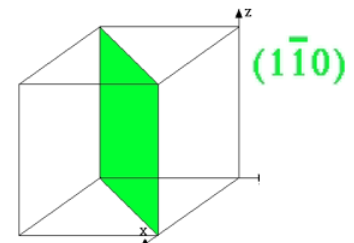
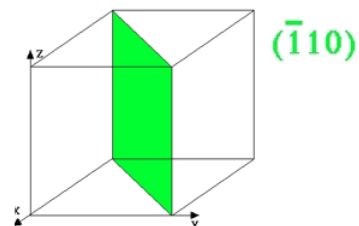
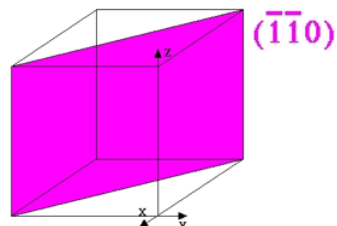
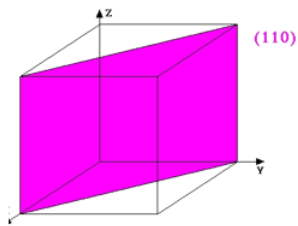
	a	b	c
1. Interceptos	1/2	∞	∞
2. Recíprocos	1/1/2	1/ ∞	1/ ∞
	2	0	0
3. Redução	2	0	0
4. Índices de Miller	(100)		





FAMÍLIA DE PLANOS $\{110\}$

É paralelo a um eixo





Cálculo da densidade linear

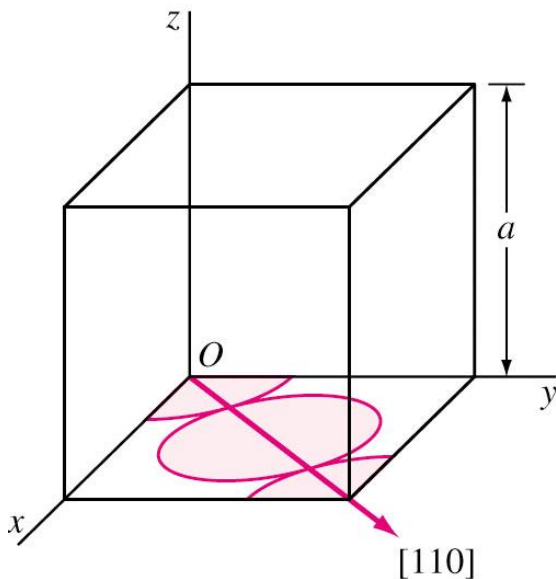
$$DL = \frac{\text{número de átomos centrados sobre o vetor direção}}{\text{comprimento do vetor direção}}$$

Exemplo: para um cristal de cobre CFC ($a=0.361$), a direção $[110]$ intersecção de dois meios diâmetros e um átomo (diâmetro) inteiro. Portanto, intersecciona 2 átomos.

$$\text{comprimento da linha} = \sqrt{2} \times a$$

$$\text{comprimento da linha} = \sqrt{2} \times 0.361 \text{ nm}$$

$$DL = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2} \times 0.361 \text{ nm}} = \frac{3.92 \text{ atoms}}{\text{nm}} = \frac{3.92 \times 10^6 \text{ atoms}}{\text{mm}}$$



Esquema para determinação linear na direção $[110]$ em uma célula unitária CFC



Cálculo da densidade planar

$$DP = \frac{\text{número de átomos centrados sobre um plano}}{\text{área do plano}}$$

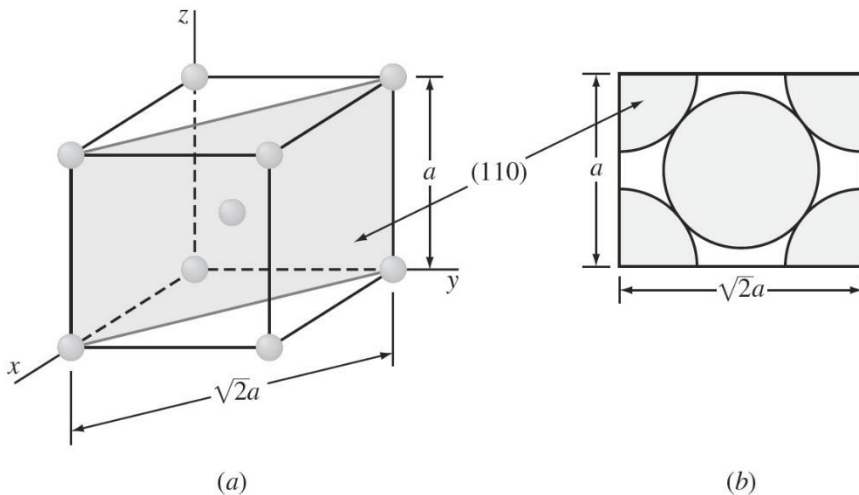
Exemplo: Ferro BCC, $a=0,287$

O plano (110) intercepta o centro de 2 átomos ($4 \times \frac{1}{4}$) + 1 = 2 átomos

$$\text{Área do plano (110)} = \sqrt{2}a \times a = \sqrt{2}a^2$$

$$\rho_p = \frac{2}{\sqrt{2}(0.287)^2}$$

$$= \frac{17.2 \text{ atoms}}{\text{nm}^2} = \frac{1.72 \times 10^{13}}{\text{mm}^2}$$



(a) célula unitária CCC com as posições atômicas, indicando-se pelo sombreado o plano (110);
(b) áreas dos átomos cortados pelo plano (110) em uma célula unitária.