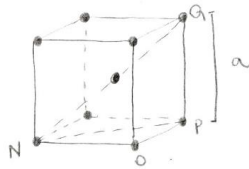


EXERCÍCIOS – ESTRUTURA CRISTALINA

- 1- Mostrar que para a estrutura cristalina CCC, o comprimento da aresta da célula unitária a e o raio atômico R estão relacionados através da expressão: $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$



$$\Delta NOP \Rightarrow (NP)^2 = (NO)^2 + (OP)^2$$

$$(NP)^2 = a^2 + a^2$$

$$(NP)^2 = 2a^2$$

$$\Delta NPQ \Rightarrow (NQ)^2 = (QP)^2 + (NP)^2$$

$$(4R)^2 = a^2 + 2a^2$$

$$16R^2 = a^2 + 2a^2$$

$$16R^2 = 3a^2$$

$$a = \sqrt{\frac{16R^2}{3}} \quad \therefore a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad \text{cqd}$$

- 2- Mostrar que o fator de empacotamento atômico para a estrutura CCC é 0,68.

$$FEA = \frac{V_a}{V_c}$$

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

$$N = 2 \text{ átomos}$$

$$\therefore FEA = \frac{2 \cdot \frac{4\pi R^3}{3}}{a^3} = \frac{2 \cdot \frac{4\pi R^3}{3}}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{2\pi}{3} = \frac{16}{3\sqrt{3}} = 0,68 \quad \text{cqd}$$

- 3- Calcular o fator de empacotamento atômico para a estrutura CFC.

$$FEA = \frac{V_a}{V_c}$$

$$a_{CFC} = 2\sqrt{2}R$$

$$N = 4 \text{ átomos}$$

$$\therefore FEA = \frac{4 \cdot \frac{4\pi R^3}{3}}{a^3} = \frac{16\pi R^3}{3(2\sqrt{2}R)^3} = 0,74 \quad \text{cqd}$$

- 4- O molibdênio (Mo) possui uma estrutura cristalina CCC, um raio atômico de 0,1363 nm e um peso atômico de 95,94 g/mol. Calcule e compare sua massa específica teórica com o valor experimental.

Mo → CCC

$$r = 0,1363 \text{ nm}$$

$$A = 95,94 \text{ g/mol}$$

$$\rho_{\text{exp}} = \frac{n \cdot A}{V_c N_A}$$

$$V_{c(\text{CCC})} = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}} \right)^3$$

$$n = 2 \text{ átomos}$$

$$\rho = \frac{2 \cdot 95,94}{\left(\frac{4 \cdot 0,1363 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{3}} \right)^3 \cdot 6,022 \cdot 10^{23}}$$

$$\rho_{\text{exp}} = 10,22 \text{ g/cm}^3$$

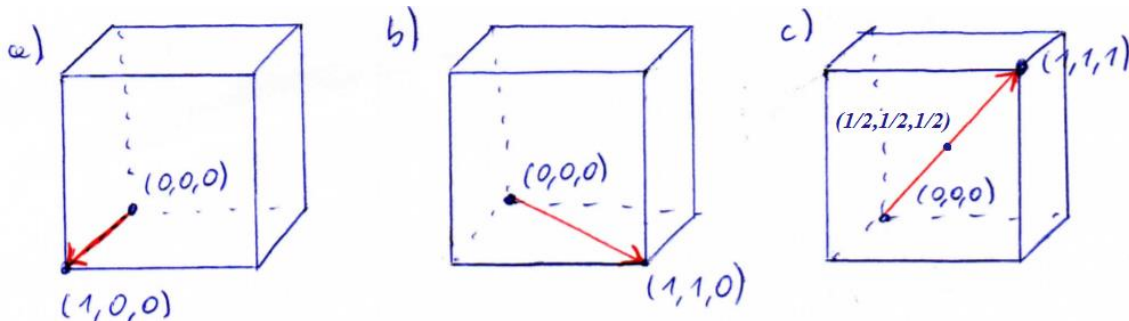
$$\rho_{\text{teórica}} = 10,22 \text{ g/cm}^3$$

- 5- Em uma célula unitária CCC, desenhe as seguintes direções e enumere as coordenadas dos átomos que têm os centros interceptados pela direção do vetor.

a) [100]

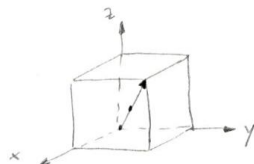
b) [110]

c) [111]



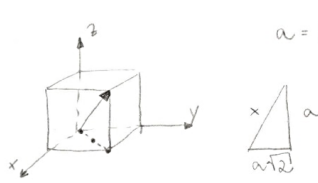
- 6- Calcule a densidade linear dos átomos ao longo da direção [111] em:

a) Tungstênio CCC $r_w = 0,137 \text{ nm}$



$$d_{\text{linear}} = \frac{2}{4R} = \frac{1}{2 \cdot 0,137 \cdot 10^{-7}} = 3,65 \cdot 10^7 \text{ átomos/cm}$$

b) Alumínio CFC $r_{Al} = 0,143 \text{ nm}$



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

$$x^2 = a^2 + 2a^2$$

$$x^2 = 3a^2$$

$$x = a\sqrt{3}$$

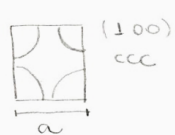
$$x = 2\sqrt{2} \cdot \sqrt{3} \cdot R$$

$$x = 2\sqrt{6}R$$

$$d_{linear} = \frac{1}{2\sqrt{6} \cdot 0,143 \cdot 10^{-7}}$$

$$d_{linear} = 1,43 \cdot 10^7 \text{ átomos/cm}$$

7- Calcule a densidade atômica planar em átomos/mm² para o plano cristalino (100) do cromo CCC, o qual tem parâmetro de rede de 0,28846 nm.



$$d_{planar} = \frac{\text{no de átomos}}{A_p} = \frac{1}{(0,28846 \cdot 10^{-6})^2} = 1,202 \cdot 10^{13} \text{ átomos/mm}^2$$