



Introdução a Ciência dos Materiais

ESTRUTURAS CRISTALINAS

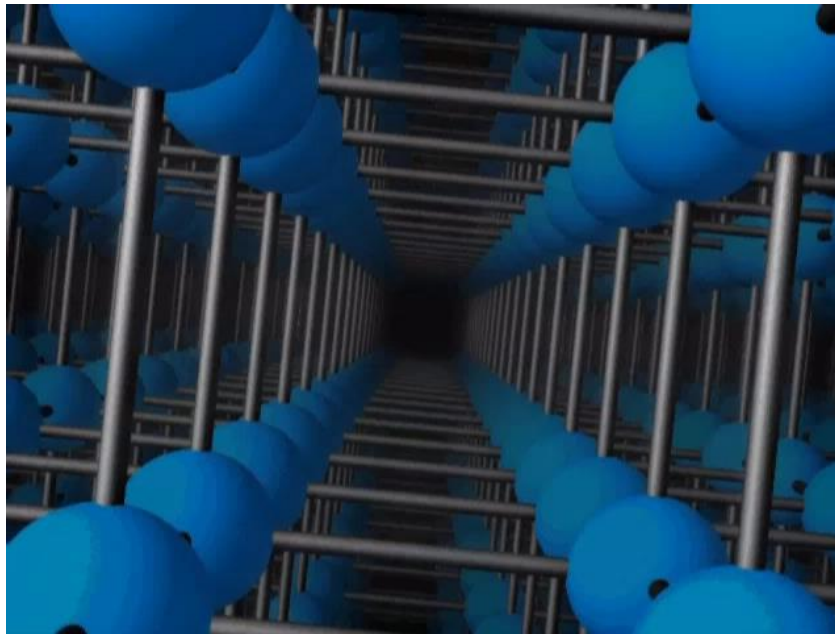
Professora: Maria Ismenia Sodero

maria.ismenia@usp.br



O que você vai aprender?

- Como os átomos se arranjam em estruturas sólidas?
- Como a densidade dos materiais dependem da estrutura?
- Como as propriedades dos materiais variam com a estrutura e/ou orientações dos átomos





Questão

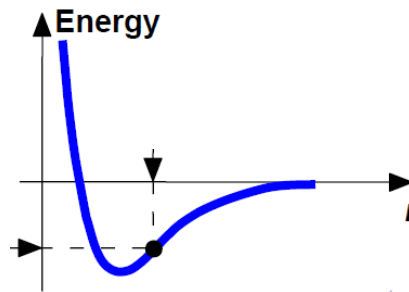
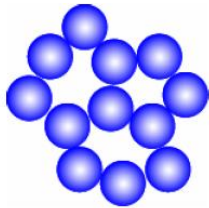
Descreva sobre a dependência das forças repulsivas, atrativa e líquida em relação à separação interatômica para dois átomos isolados;

Quais as propriedades dos materiais podem ser estipuladas através das curvas de força de ligação e energia de ligação para um par atômico? Justifique.

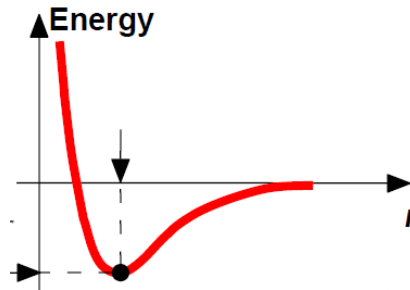
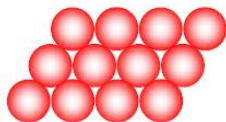


Energia e Empacotamento

Baixa densidade, empacotamento aleatório



Alta densidade, empacotamento ordenado

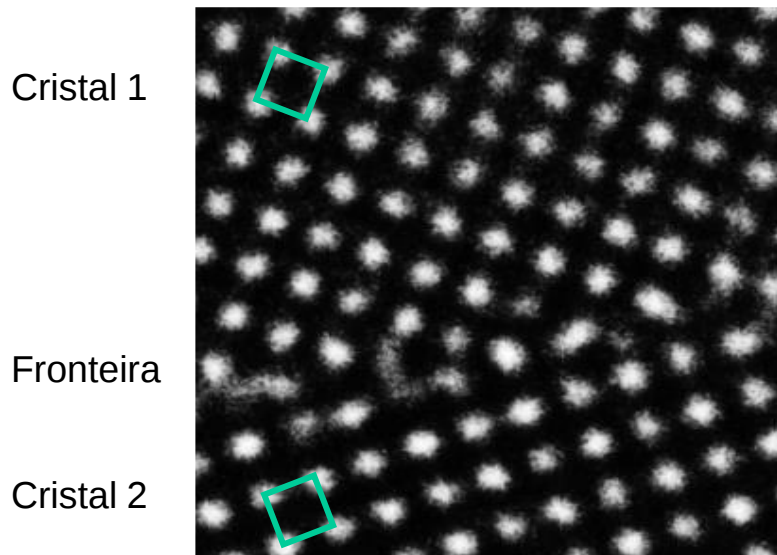




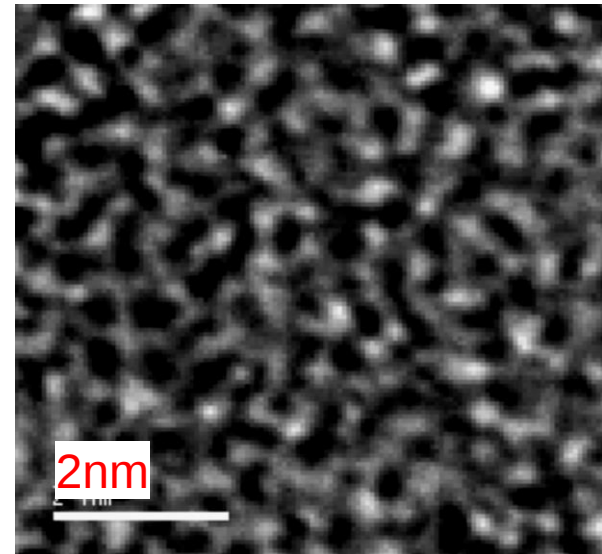
Estruturas Cristalinas

Muitos materiais - metais, algumas cerâmicas, alguns polímeros - ao se solidificarem, se organizam numa rede geométrica 3D - **a rede cristalina**.

Estes materiais **cristalinos**, têm uma estrutura altamente organizada, em contraposição aos materiais **amorfos**, nos quais não há *ordem de longo alcance*.

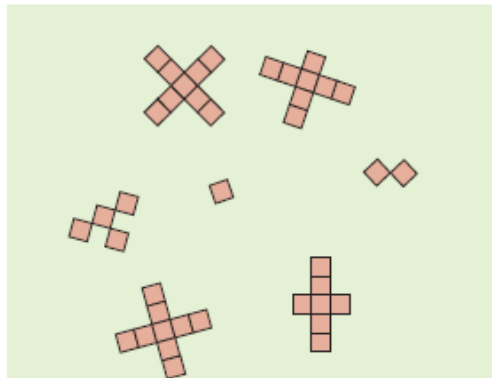


Fronteira entre dois cristais de TiO_2 .
Note a organização geométrica dos átomos.

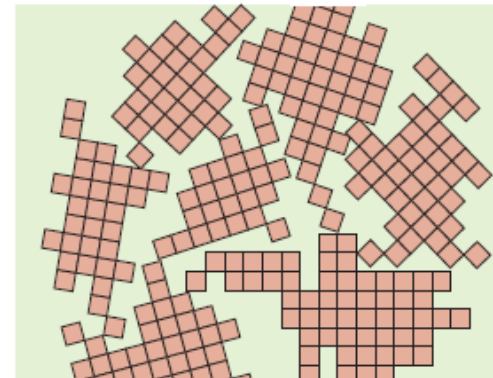


Carbono amorfo.
Note a desorganização na posição dos átomos.

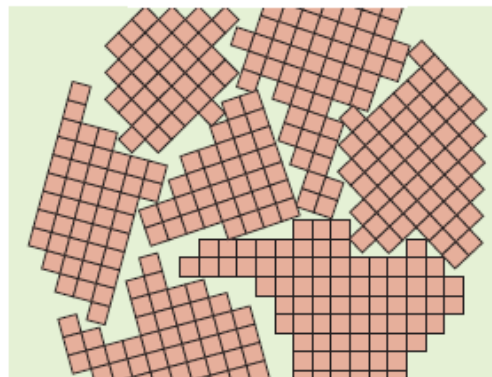
Policristalino



(a)



(b)



(c)

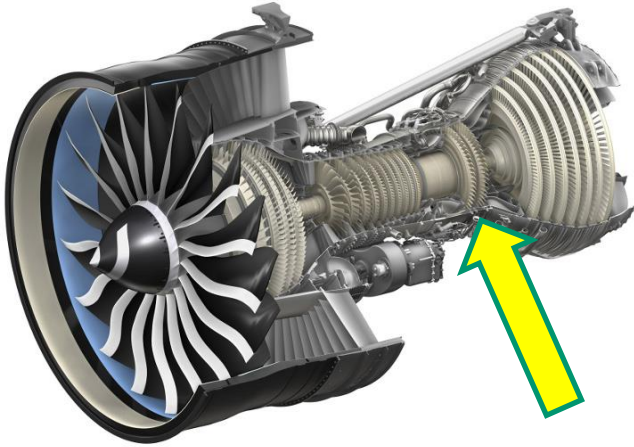


(d)

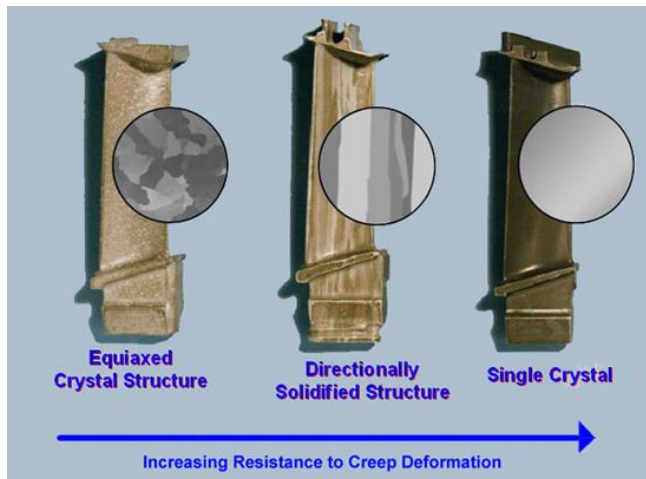
Figura 3.18 Diagramas esquemáticos dos vários estágios na solidificação de um material policristalino; os retículos quadrados representam células unitárias. (a) Pequenos núcleos de cristalização. (b) Crescimento dos cristalitos; também está mostrada a obstrução de alguns grãos adjacentes. (c) À conclusão da solidificação, foram formados grãos com formas irregulares. (d) A estrutura de grãos como ela apareceria sob um microscópio; as linhas escuras são os contornos dos grãos. (Adaptado de W. Rosenhain, *An introduction to the Study of Physical Metallurgy*, 2. ed. Constable & Company Ltd., London, 1915.)



Exemplo de Aplicação de Material Monocristalino: Paletas de superligas à base de níquel para turbina de alta-pressão em turbinas aeronáuticas.

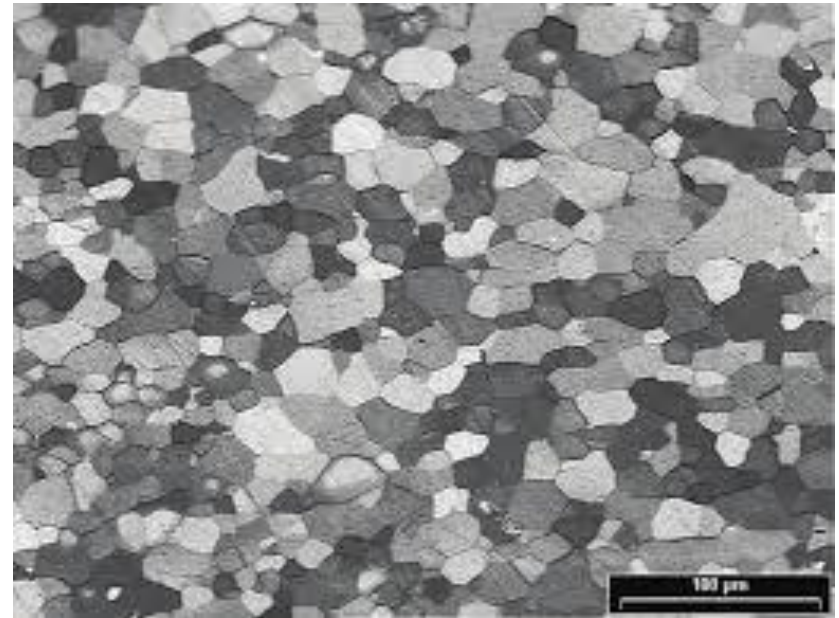
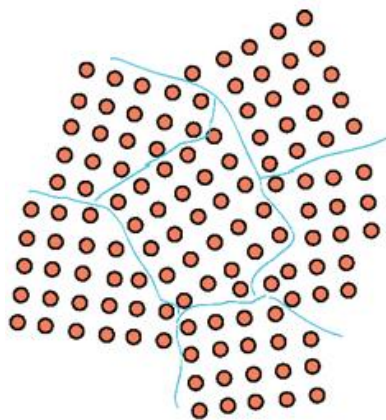
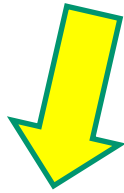


Paletas de superliga à base de níquel da
turbina de alta pressão.



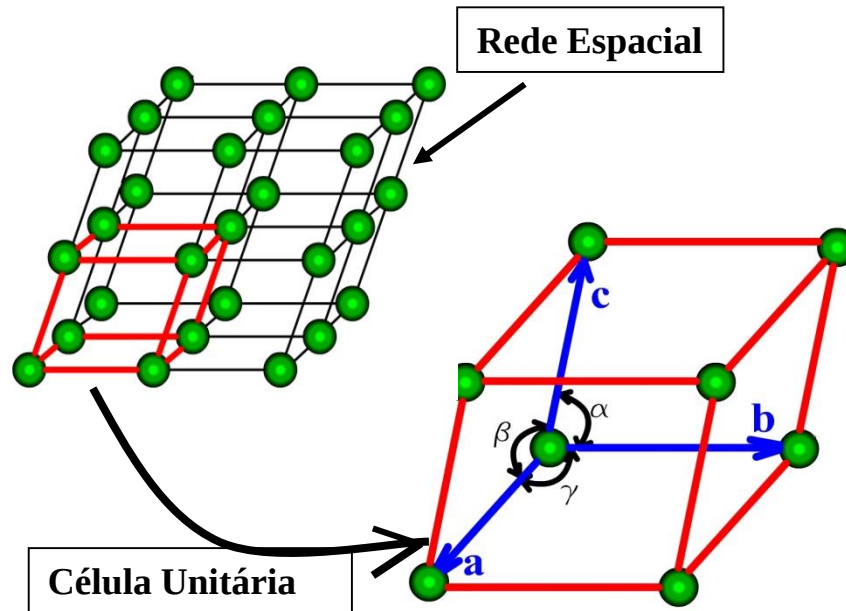


Exemplo de Aplicação de Material Policristalino: Chapas laminadas de aço para indústria da linha branca – geladeira; fogão; micro-ondas.



Célula Unitária

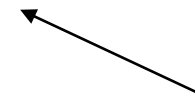
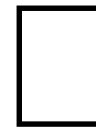
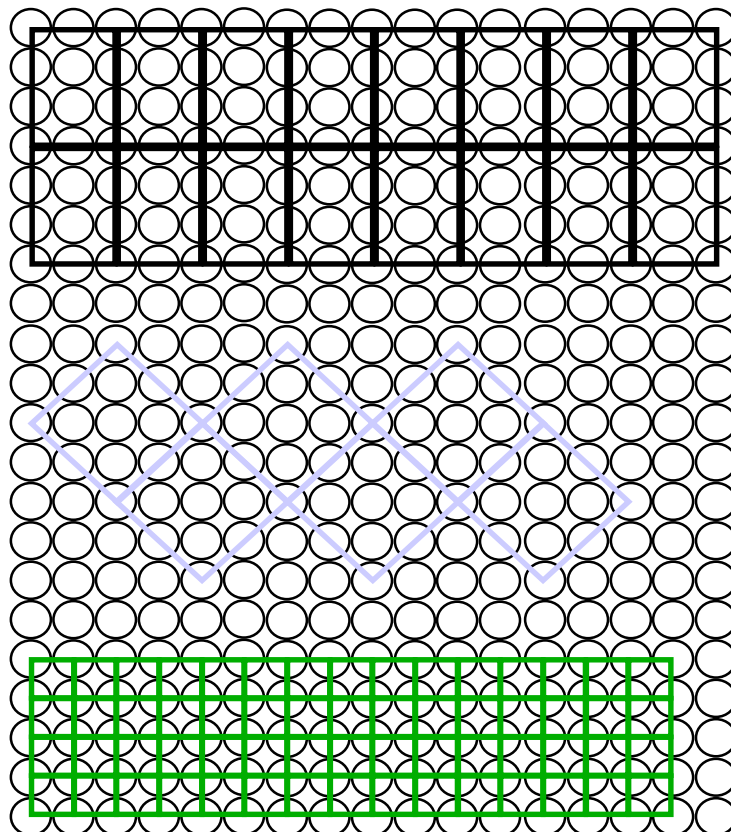
A célula unitária consiste na unidade estrutural básica ou bloco construtivo básico da estrutura cristalina e define a estrutura cristalina em relação a sua geometria e das posições dos átomos no seu interior.



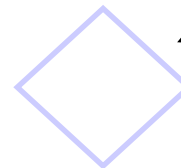


Célula Unitária

Como a rede cristalina tem uma estrutura repetitiva, é possível descrevê-la a partir de uma estrutura básica, como um “tijolo”, que é repetida por todo o espaço.



Células Não-Unitárias



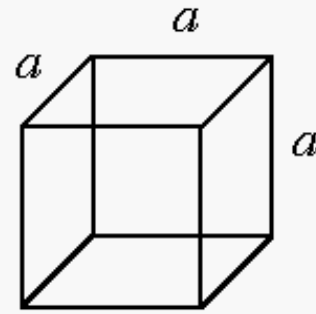
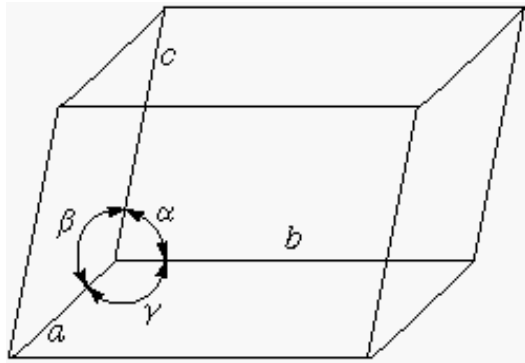
Célula Unitária

Menor “tijolo” que repetido reproduz a rede cristalina

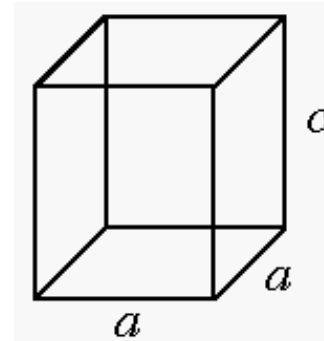


Os 7 Sistemas Cristalinos

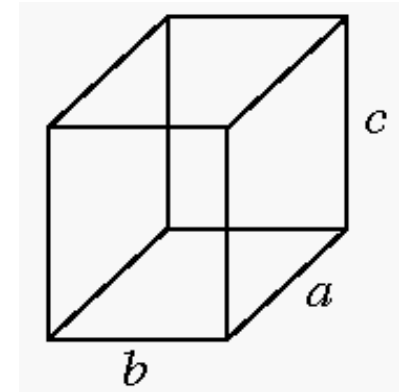
Só existem 7 tipos de células unitárias que preenchem totalmente o espaço



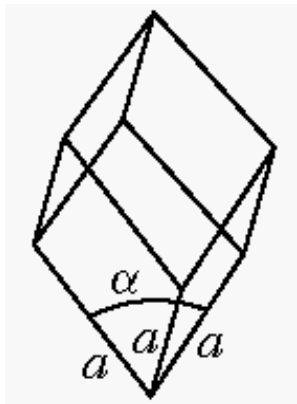
Cúbica
 $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



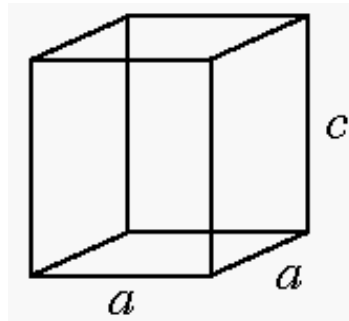
Tetragonal
 $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



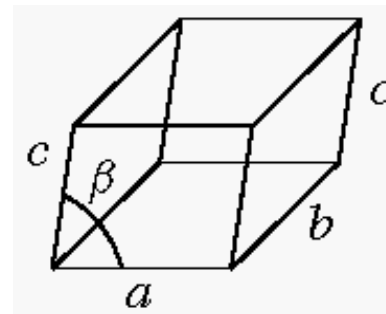
Ortorrômbica
 $a \neq b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



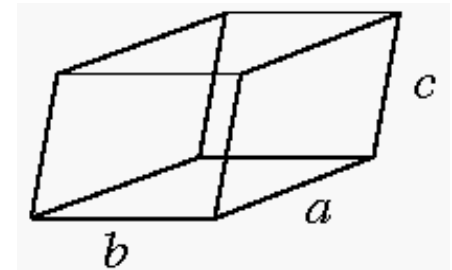
Romboédrica
 $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$



Hexagonal*
 $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$



Monoclínica
 $a \neq b \neq c$, $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$

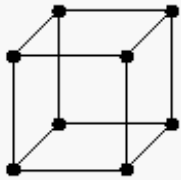


Triclínica
 $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

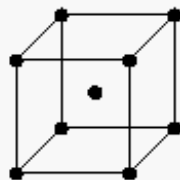


As 14 Redes de Bravais

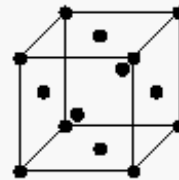
Redes Cristalinas = posicionamento dos átomos em entidades geométricas



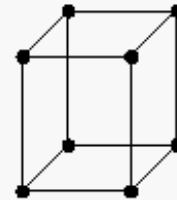
Cúbica Simples



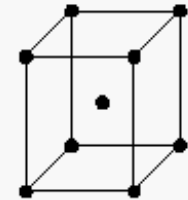
Cúbica de Corpo
Centrado



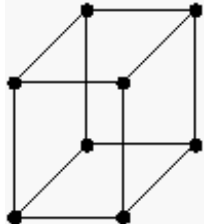
Cúbica de Face
Centrada



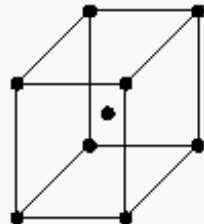
Tetragonal Simples
tetragonal



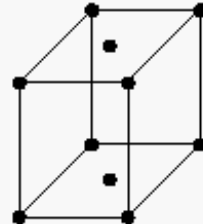
Tetragonal de
Corpo Centrado



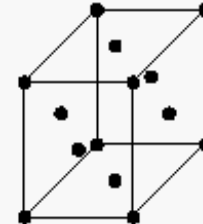
Ortorrrômbica
Simples



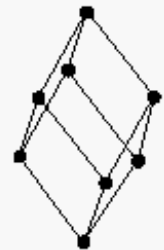
Ortorrrômbica de
Corpo Centrado



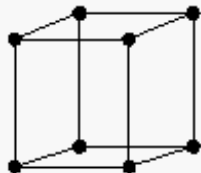
Ortorrrômbica de
Base Centrada



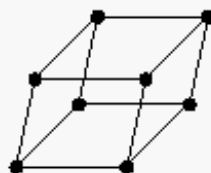
Ortorrrômbica de
Face Centrada



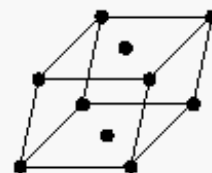
Romboédrica Simples



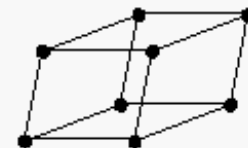
Hexagonal



Monoclínica
Simples



Monoclínica de Base
Centrada

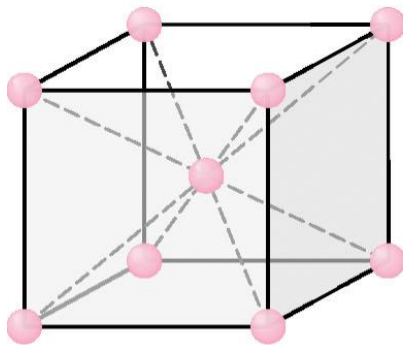


Triclínica



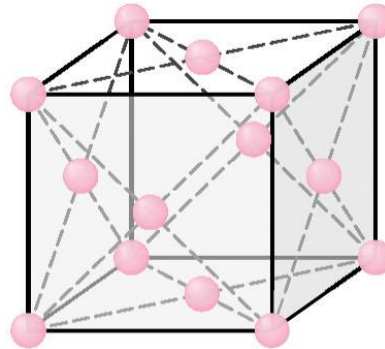
Princípios estruturas dos metais

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.



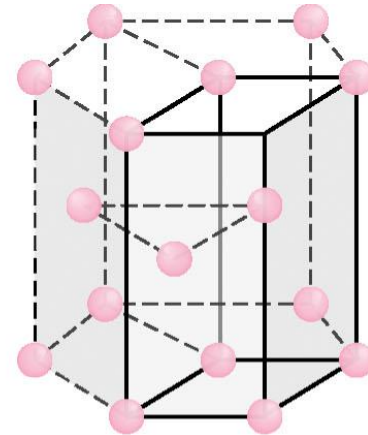
(a)

BCC



(b)

FCC



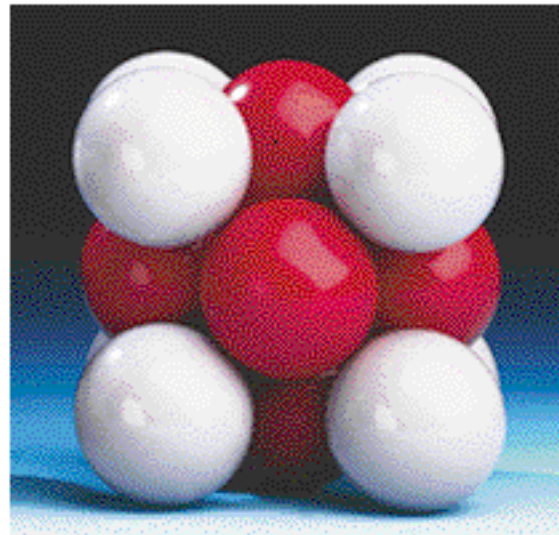
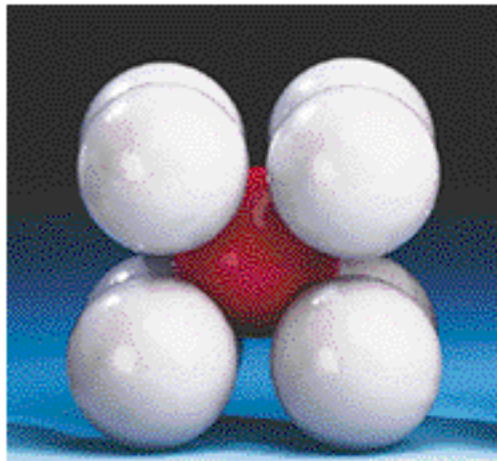
(c)

HCP



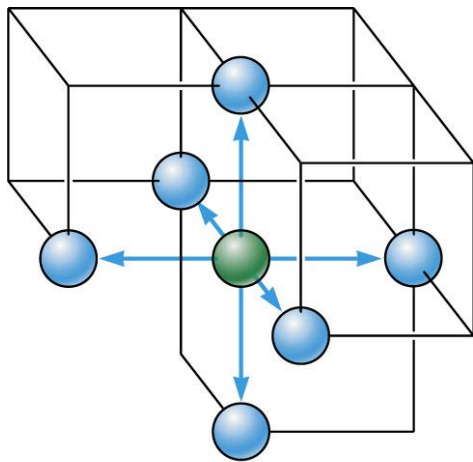
Estruturas Cristalinas dos Metais

- 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.

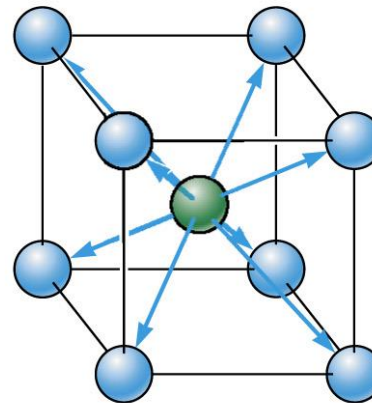


Numero de Coordenação

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)

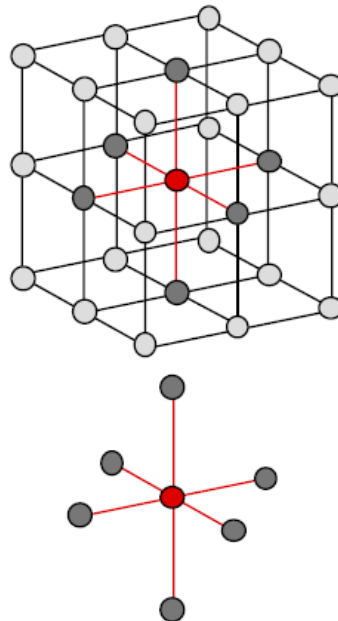
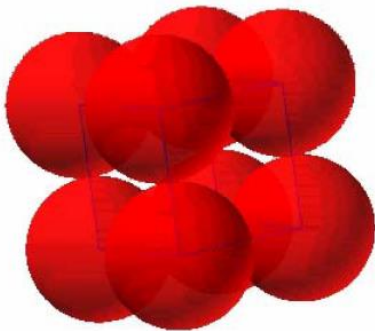
Coordenações em células unitárias CS (a) e CCC (b). Seis átomos se tocam na estrutura CS e oito átomos estão em contato na célula unitária CCC.



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

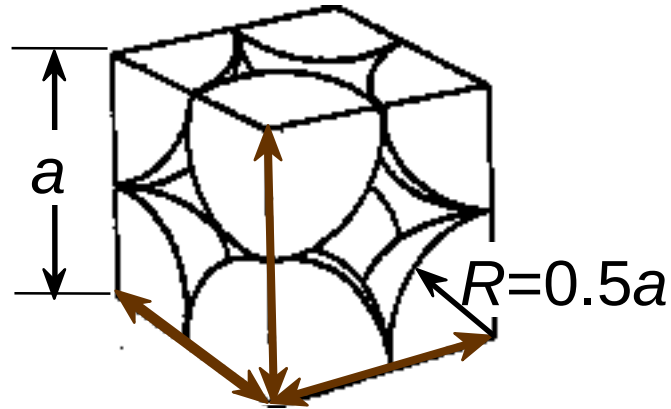
$$N_a = 8 \times (1/8) = 1$$

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

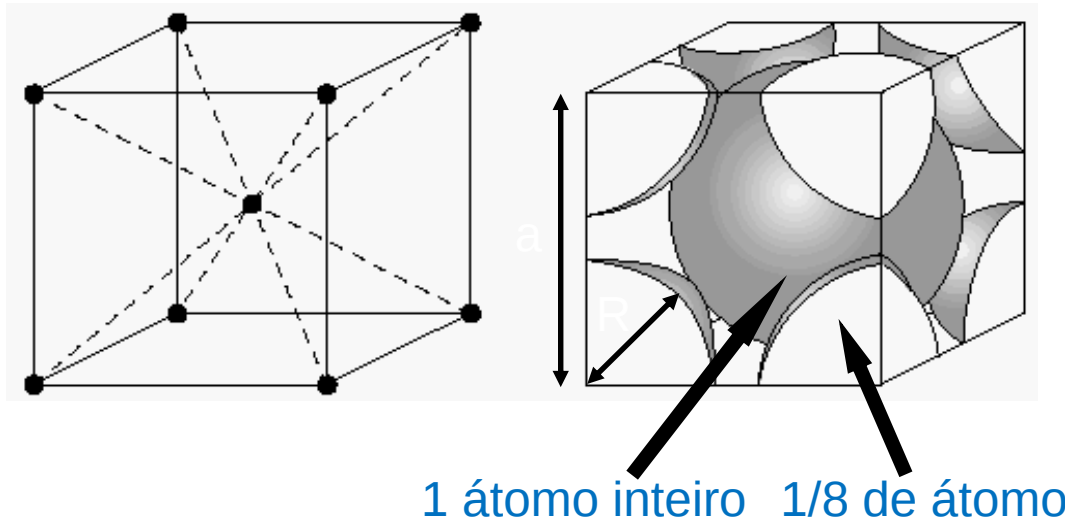
$$\text{FEA} = \frac{\frac{\text{átomos}}{\text{célula}} \cdot 1 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2} \right)^3}{a^3} = \frac{\text{volume átomo}}{\text{volume célula}}$$

- 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

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

$$NC = 8$$

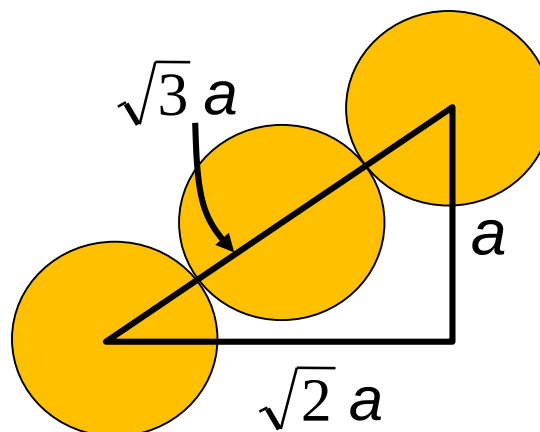
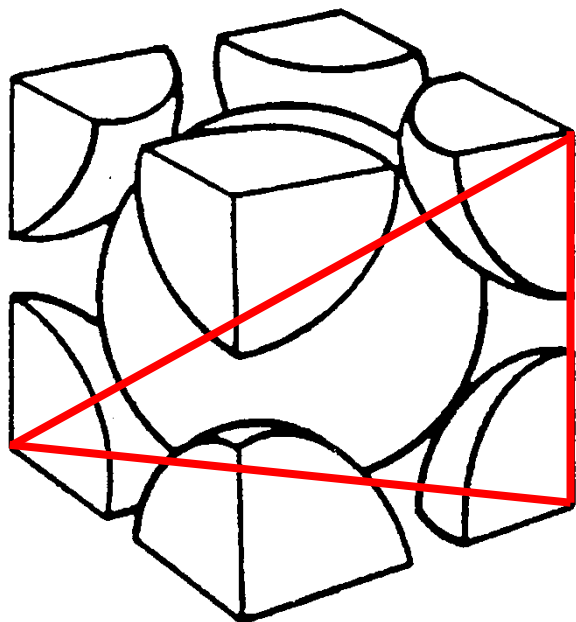
FEA = Fator de empacotamento atômico
(APF - atomic packing factor)

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

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



Estrutura Cúbica de Corpo Centrado - CCC



Direções compactas:

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

Célula unitária contém:

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

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

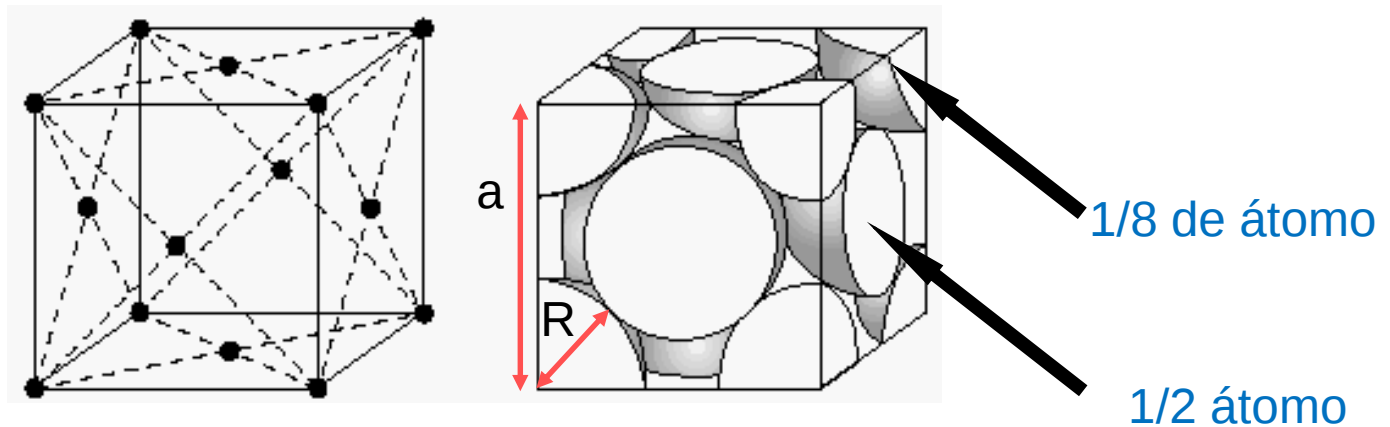
Diagram illustrating the calculation of the packing factor (FEA) for the BCC structure. The numerator represents the total volume of atoms in the unit cell, calculated as the number of atoms per cell (2) multiplied by the volume of a single atom ($\frac{4}{3} \pi R^3$, where $R = \sqrt{3}a/4$). The denominator represents the volume of the unit cell (a^3).

- 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

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

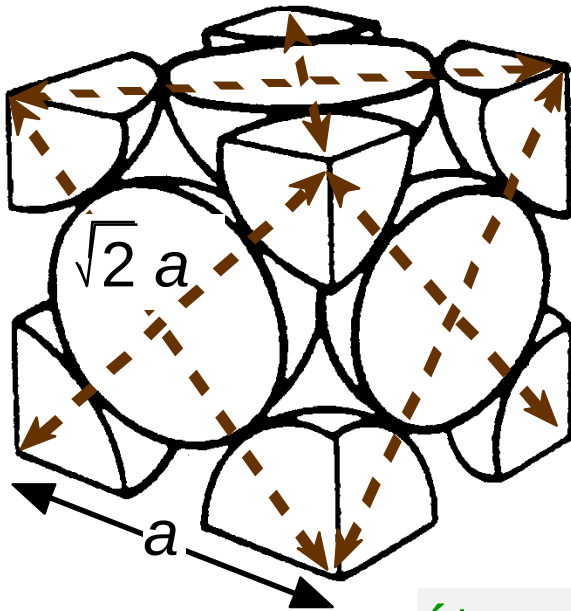
Fator de empacotamento atômico

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

A rede cfc é a mais compacta



Estrutura Cúbica de Face Centrada - CFC



Direções compactas:

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

Célula unitária contém:

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

$$= 4 \text{ atoms/célula}$$

átomos
célula

FEA=

$$4 \frac{4}{3} \pi (\sqrt{2}a/4)^3$$

volume
átomo

$$a^3$$

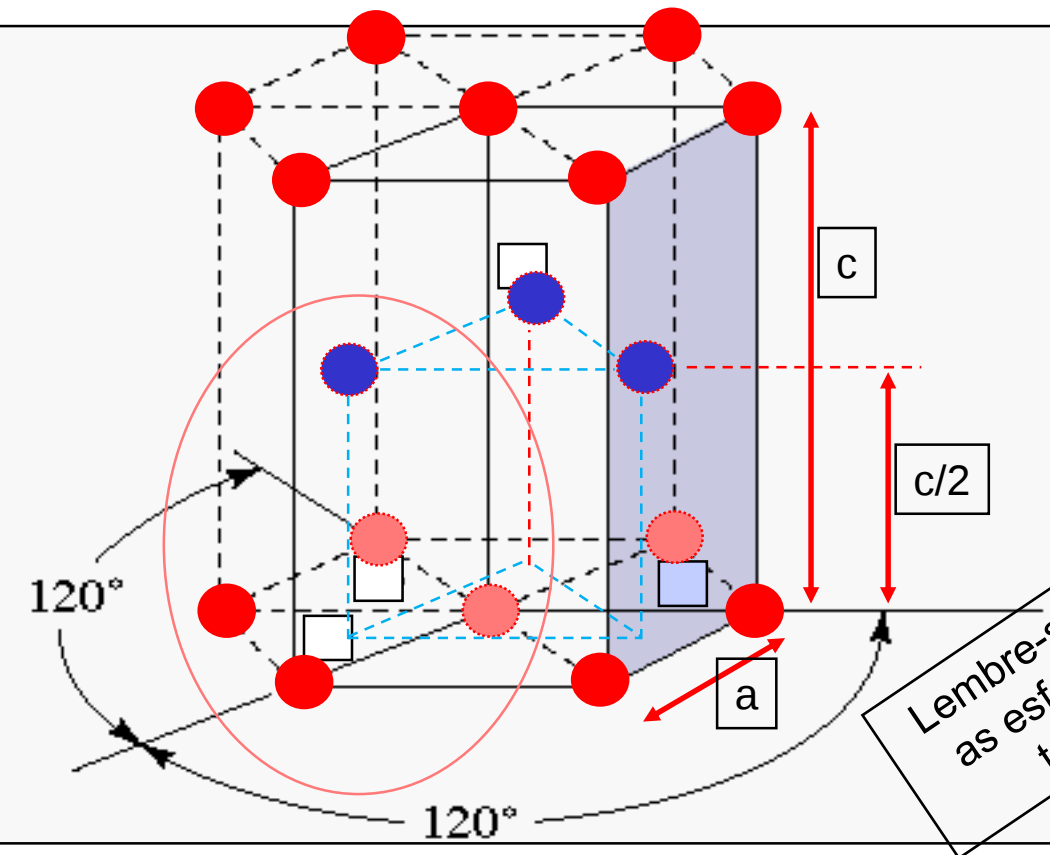
volume
célula

- 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

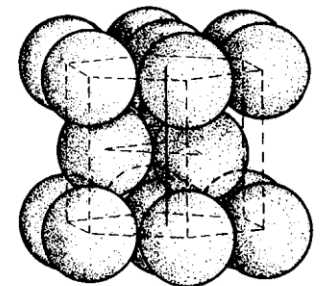
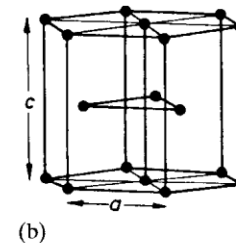
$$N_a = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \left(\frac{1}{2}\right) + 3 = 6$$

Relação entre a e r

$$2R = a$$

FEA = 0.74 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) with 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:

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

The diagram shows the unit cell volume a^3 and the number of atoms per unit cell (2) in the numerator, and the volume of the unit cell a^3 and Avogadro's number 6.022×10^{23} in the denominator.

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

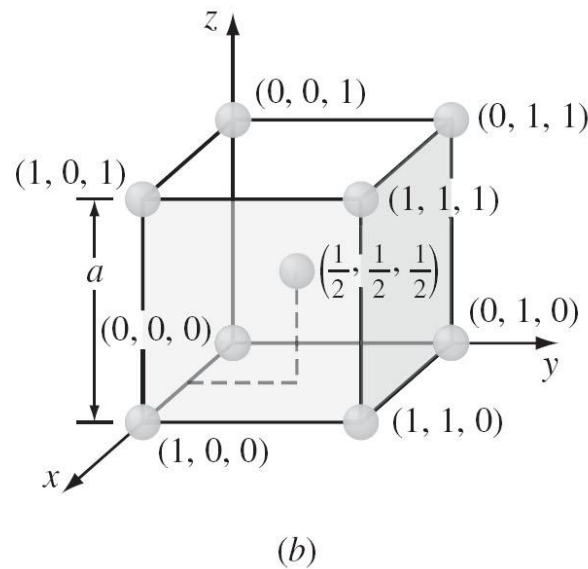
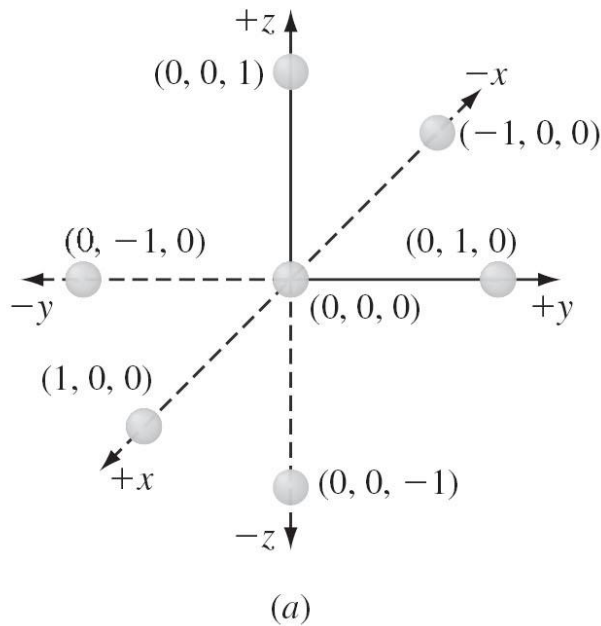
Polímeros:

- 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.



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: $[uvw]$.

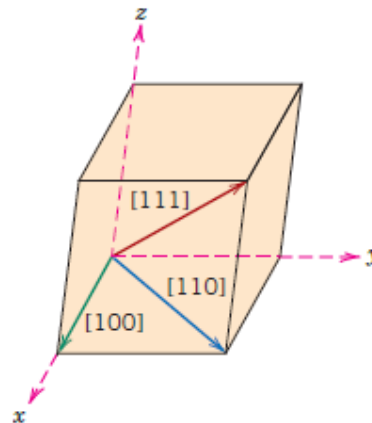


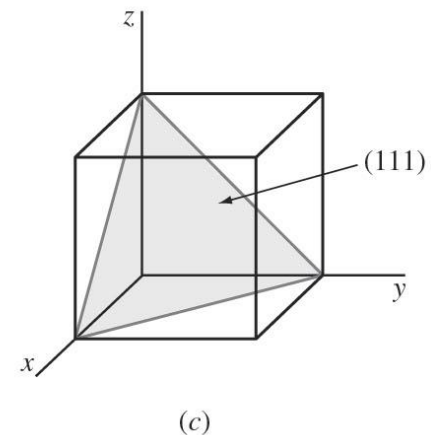
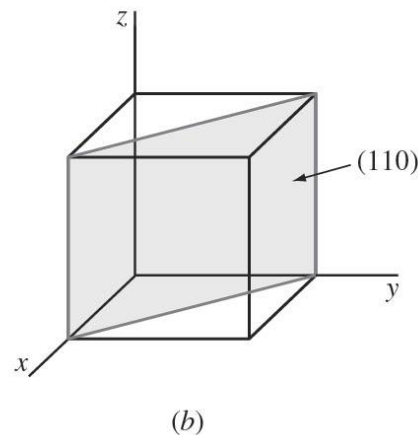
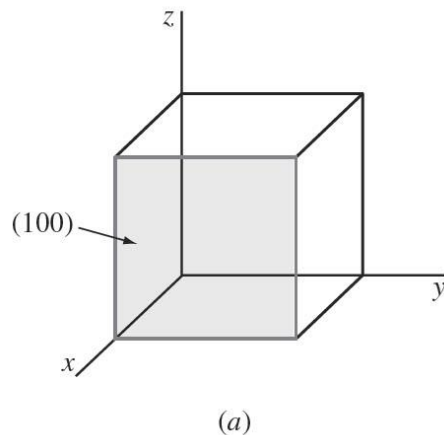
Figura 3.6 As direções $[100]$, $[110]$ e $[111]$ em uma célula unitária.

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.

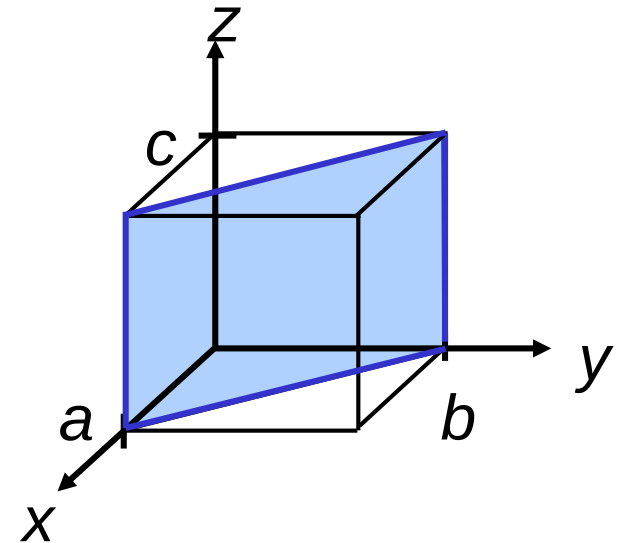


Índices de Miller de alguns planos importantes em cristais cúbicos (a) (100), (b) (110) e (c) (111).

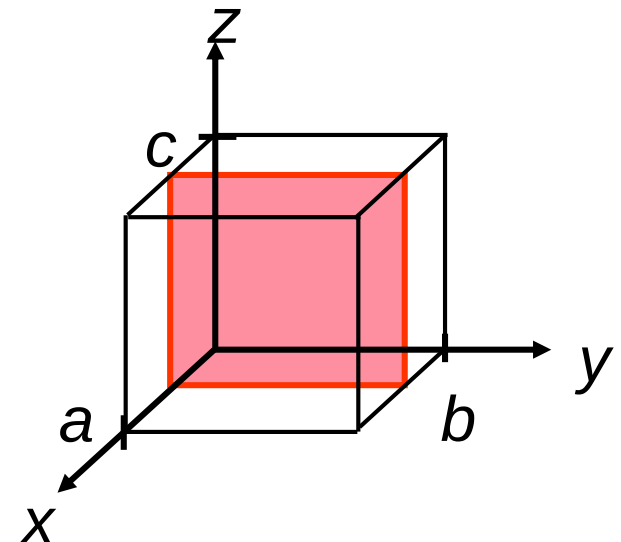


Exemplos

	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)		



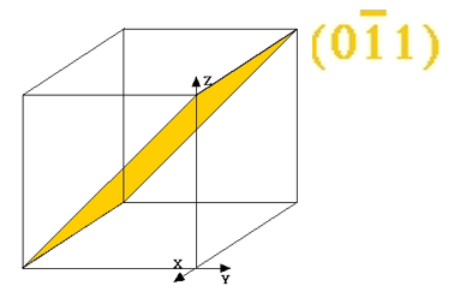
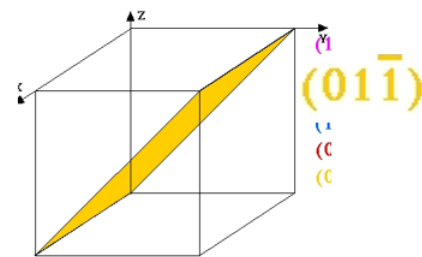
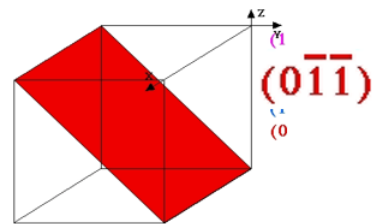
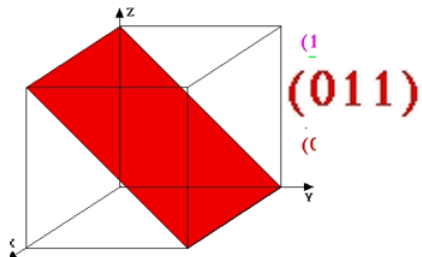
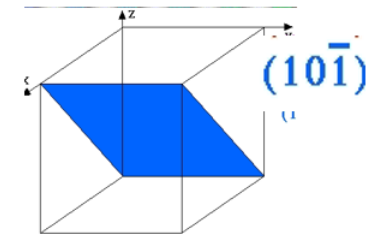
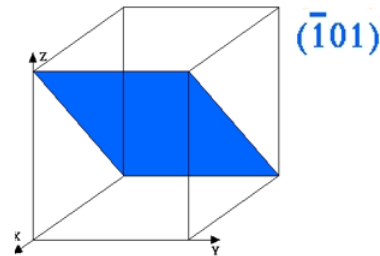
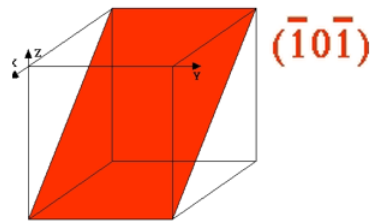
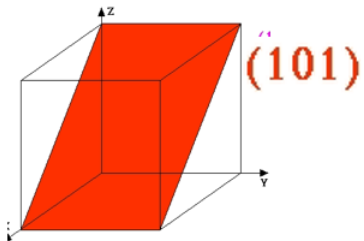
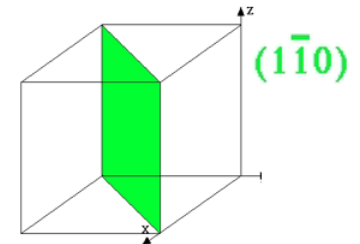
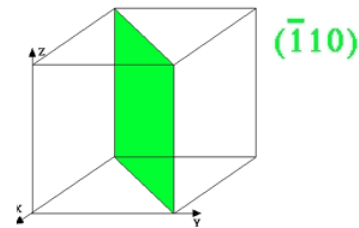
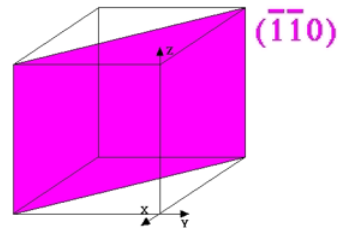
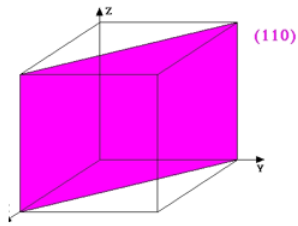
	a	b	c
1. Interceptos	1/2	∞	∞
2. Recíprocos	1/1/2	1/ ∞	1/ ∞
	2	0	0
3. Redução	2	0	0
4. Índices de Miller	(100)		





FAMÍLIA DE PLANOS $\{110\}$

É paralelo à um eixo





Cálculo da densidade linear

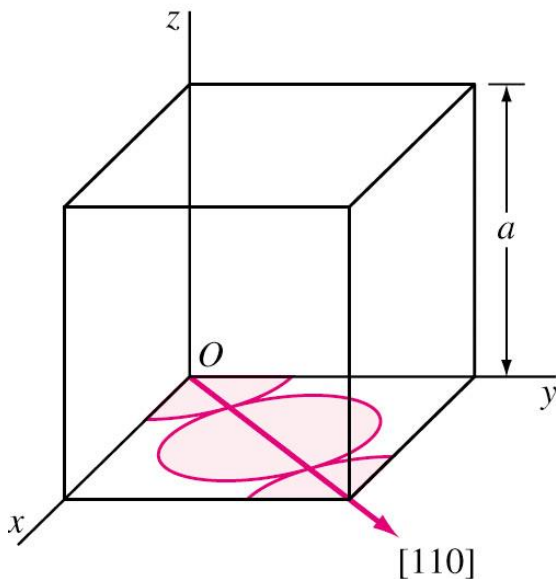
$$DL = \frac{\text{número de átomos centrados sobre o vetor direção}}{\text{comprimento do vetor direção}}$$

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

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

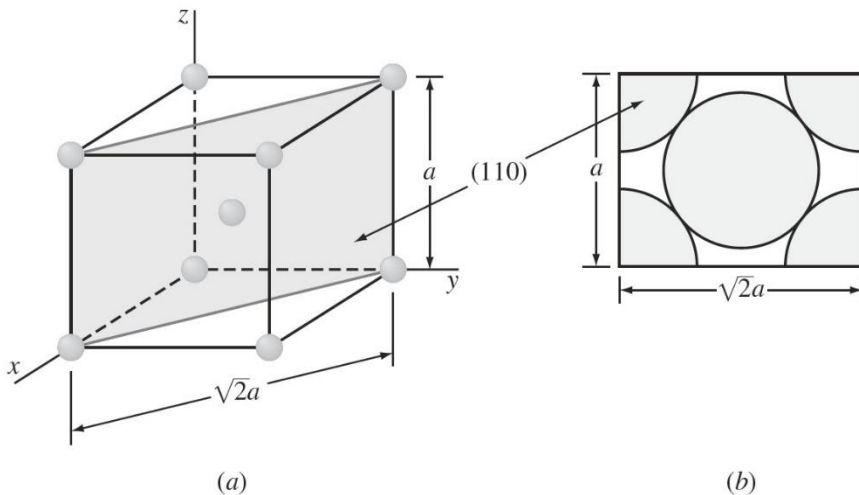
Exemplo: Ferro BCC, $a=0,287$

O plano (100) 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.

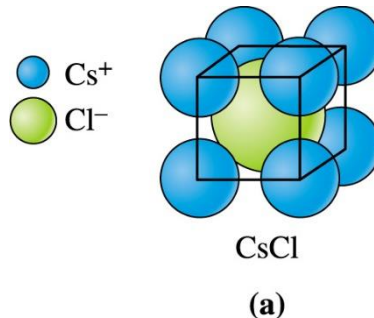


Estrutura Cristalina de Materiais Iônicos

- Vários materiais cerâmicos contêm uma fração considerável de ligações iônicas entre ânions e cátions. Esses materiais precisam ter estruturas cristalinas que assegurem neutralidade elétrica, mas permitam um empacotamento eficiente de íons de diferentes tamanhos.
- As estruturas cristalinas iônicas podem ser consideradas estruturas compactas de ânions, que formam tetraedros ou octaedros, permitindo que os cátions se encaixem em seus interstícios.
- Balanço de cargas;

Estrutura do Cloreto de Césio

Possui uma estrutura cubica simples, na qual o interstício cúbico é ocupado pelo Anión Cl^-

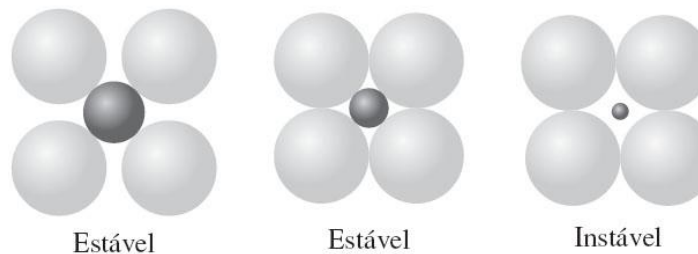




Características dos íons

Duas características dos íons influenciam na estrutura:

- Magnitude da carga elétrica dos íons:
 - O cristal deve ser eletricamente neutro;
 - A fórmula química define a quantidade de cátions e ânions.
- Tamanho relativo dos cátions e ânions:
 - Cada cátion prefere ter tantos ânions como vizinhos mais próximos quanto possível e vice-versa;
 - **Numero de coordenação**: número de ânions vizinhos mais próximos para um cátion, está relacionado com a razão entre os raios do cátion e do ânion.



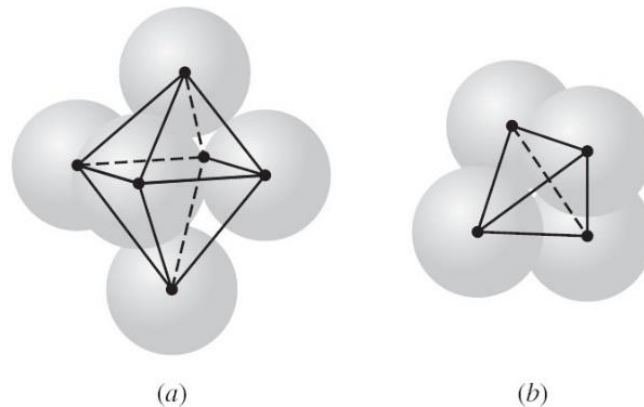
(De W.D. Kingery, H.K. Bowen, and D.R. Uhlmann, "Introduction to Ceramics", 2. ed., Wiley, 1976. Reimpresso com permissão de John Wiley & Sons, Inc.)



Interstícios

No interstício **octaédrico**, há seis átomos ou íons equidistantes do centro do espaço vazio. Recebe este nome porque os átomos ou íons no entorno do centro do espaço vazio formam um octaedro (oito lados);

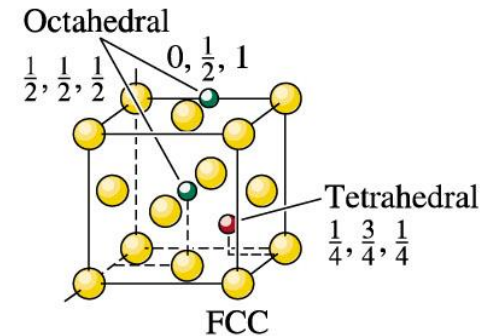
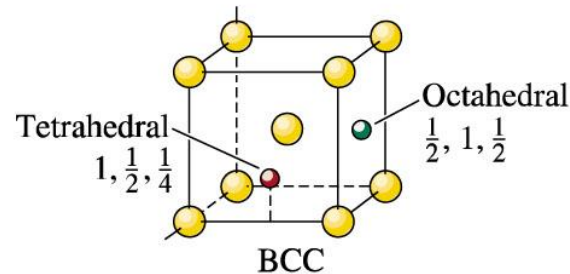
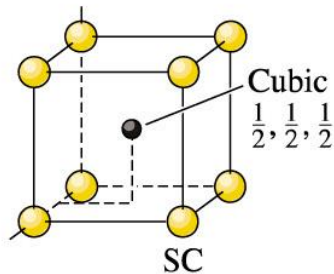
No espaço **tetraédrico**, há quatro átomos ou íons equidistantes do centro do espaço vazio,



Espaços intersticiais em retículos estruturais cristalinos de CFC e HC.
(a) Espaço intersticial octaédrico formado ao centro, onde seis átomos se tangenciam.
(b) Espaço intersticial tetraédrico formado ao centro, onde quatro átomos se tangenciam.

Localização dos interstícios

- Os interstícios **octaédricos** em células unitárias CCC estão localizados nas faces do cubo;
- Os interstícios **octaédricos** em células unitárias CFC estão localizados dentro de cada aresta do cubo, assim como no centro da própria célula unitária;





Número de coordenação e razão entre raios

Os átomos ou íons intersticiais cujos raios são ligeiramente maiores que o interstício podem entrar nesse local, forçando ligeiramente os átomos circundantes para os lados.

Átomos cujos raio são menores do que o raio da cavidade, não se alojam no interstício, porque o íon iria “agitar-se” dentro deste espaço.

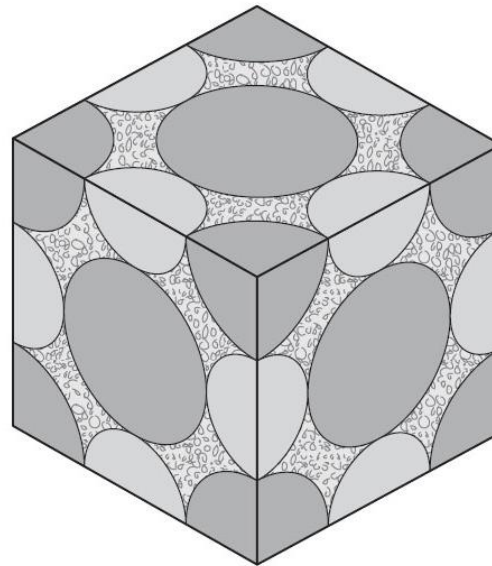
Se o átomo for muito grande, vai preferir um interstício com numero de coordenação maior

Coordination Number	Location of Interstitial	Radius Ratio	Representation
2	Linear	0–0.155	
3	Center of triangle	0.155–0.225	
4	Center of tetrahedron	0.225–0.414	
6	Center of octahedron	0.414–0.732	
8	Center of cube	0.732–1.000	

Estruturas Tipo AX

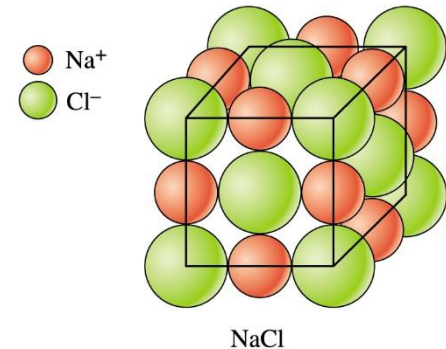
Estrutura do Cloreto de Sódio

- Números iguais de cátions e de ânions;
- Cada cátion central está circundado por 6 ânions Cl^- ($\text{NC}=6$) – coordenação octaédrica.
- Outros exemplos: MgO , CaO , NiO e FeO .



Estrutura cristalina do cloreto de sódio
NaCl

(Cor clara) íons de sódio — (raio 0,102 nm) $\frac{r_{\text{Na}^+}}{R_{\text{Cl}^-}} = 0,56$
(Cor escura) íons de cloreto — (raio 0,181 nm)

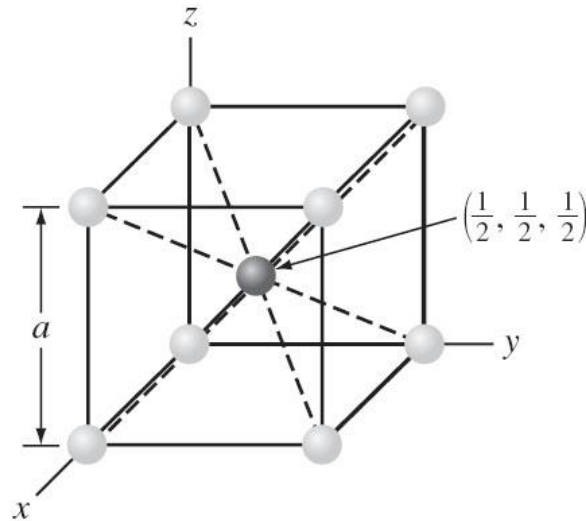


(Octaedro ilustrando a coordenação octaédrica de seis ânions Cl^- em torno de um cátion Na^+ .
Célula unitária de NaCl truncada.

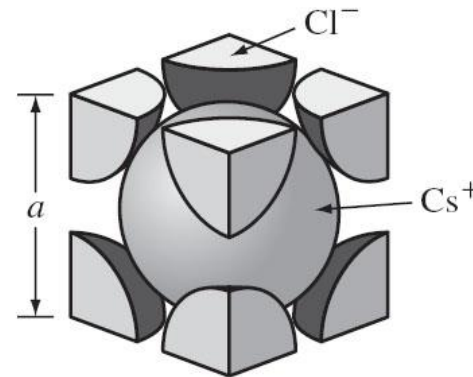
Estruturas Tipo AX

Estrutura do Cloreto de Césio

- Números iguais de cátions e de ânions;
- Cada cátion (Cs) central está circundado por 8 ânions Cl^- ($\text{NC}=8$) – coordenação cúbica.
- Não é uma estrutura cristalina CCC, pois estão envolvidos íons de dois tipos diferentes.
- Outros exemplos: CsBr , AgMg .



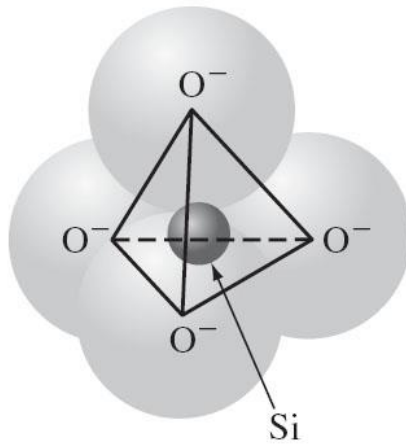
(a)



(b)

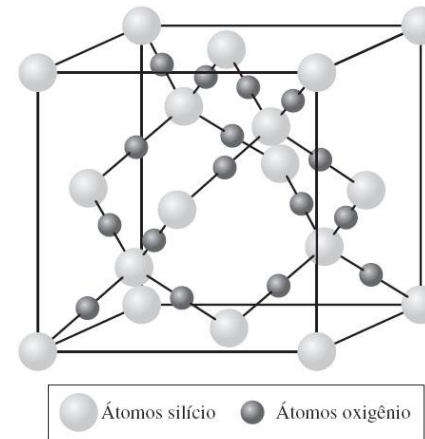
A célula unitária estrutural cristalina do cloreto de césio (CsCl). (a) Célula unitária de posição iônica. (b) Célula unitária de esfera rígida. Nesta estrutura cristalina, oito íons de cloreto circundam um cátion em posição central com coordenação cúbica ($\text{NC} = 8$). Nesta célula unitária, há um íon Cs^+ e um íon Cl^- .

Cerâmicas a base de silicatos



O arranjo de ligação atômica (iônica) do tetraedro do SiO_4^{4-} .

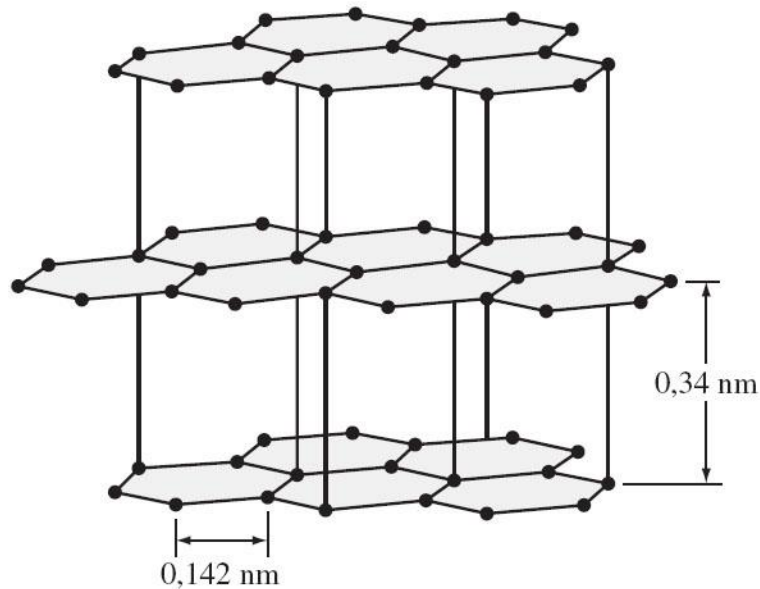
Nesta estrutura, quatro átomos de oxigênio circundam um átomo central de silício. Cada átomo de oxigênio possui um elétron extra, e então uma carga negativa para ligar a outro átomo.



Estrutura da alta **cristobalita**, que é uma forma de sílica (SiO_2). Note que cada átomo de silício é circundado por quatro átomos de oxigênio e que cada átomo de oxigênio forma parte de dois tetraedros SiO_4 .

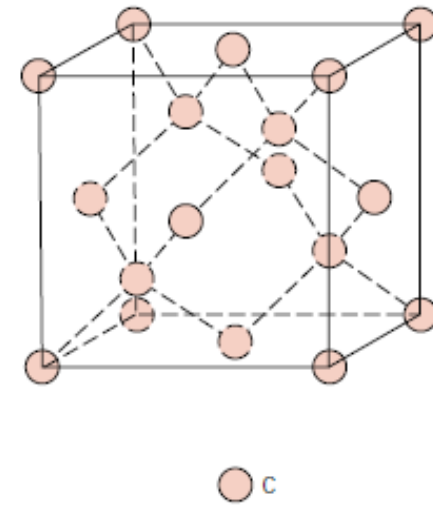
Carbono alótropos

Grafita x Diamante



- Anisotrópica = propriedades dependentes da direção;
- Baixa densidade;
- Bom condutor térmico, no plano da base;

A estrutura da grafita cristalina. Composta por átomos de carbono que seguem um arranjo hexagonal, dentro destas camadas, cada átomo de carbono está ligado através de fortes ligações covalentes a três átomos vizinhos coplanares. O quarto elétron de ligação tem uma ligação do tipo van der Waals, entre as camadas.



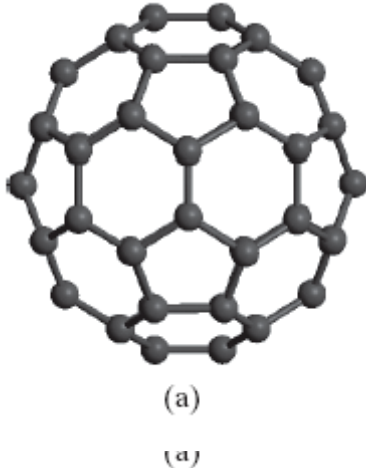
- O diamante é isotrópico, possui maior densidade ($3,51\text{g/cm}^3$).
- Material natural mais rígido, mais duro e de menor compressibilidade.
- Possui altíssima condutividade térmica, porém valores mínimos de condutividade elétrica;

Célula unitária para estrutura cristalina do diamante. Cada átomo de carbono se liga a quatro outros átomos de carbono e essas ligações são totalmente covalentes;



Carbono

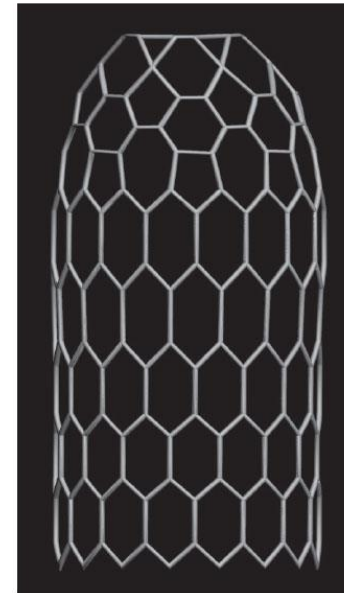
Fullerenos/nanotubos



Muito semelhante a uma bola de futebol, que é feita de 12 pentágonos e 20 hexágonos;

Em cada ponto de junção, um átomo de carbono é ligado covalentemente a três outros átomos.

A estrutura consiste de 60 átomos de carbono



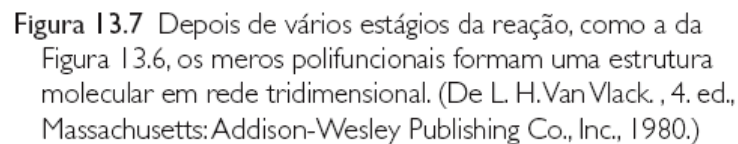
Um esquema de um nanotubo, que consiste em uma única lâmina de grafite, enrolada na forma de um tubo, e com ambas as extremidades tapadas por hemisférios C_{60} de fullerenos

São extremamente resistentes e rígidos (módulo de elasticidade são da ordem de $1\text{TPa}=10^3\text{GPa}$, além de relativamente dúcteis;

Resistência 20x maior do que os aços mais resistentes

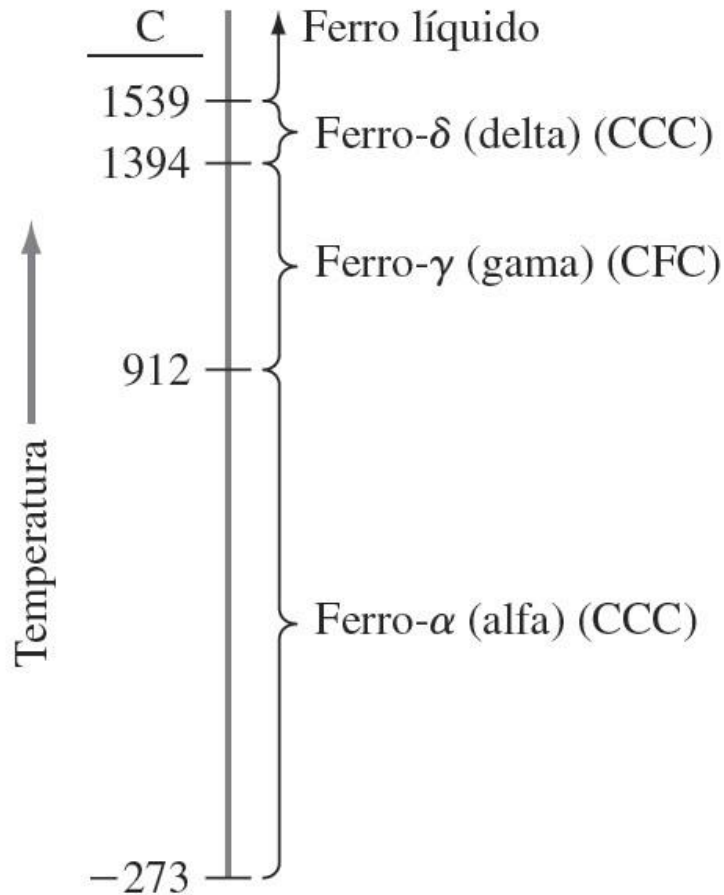
Fibra de carbono = LRT= 7GPa

Nanotubos = LRT = 45GPa e E =ordem de Tera Pa (10^{12})





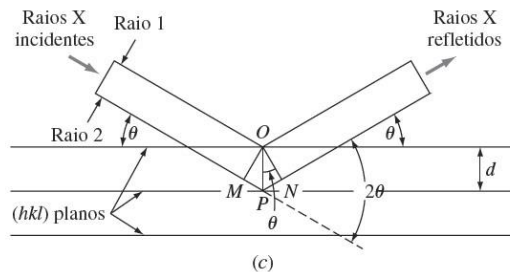
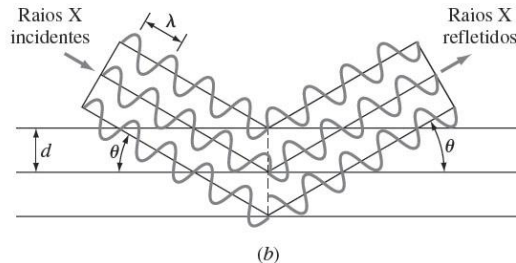
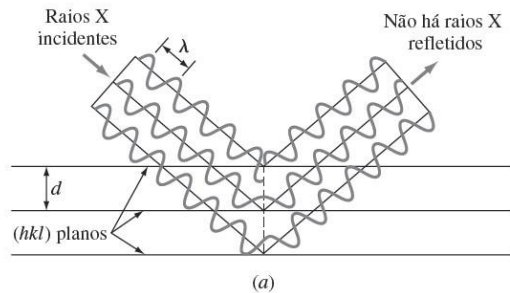
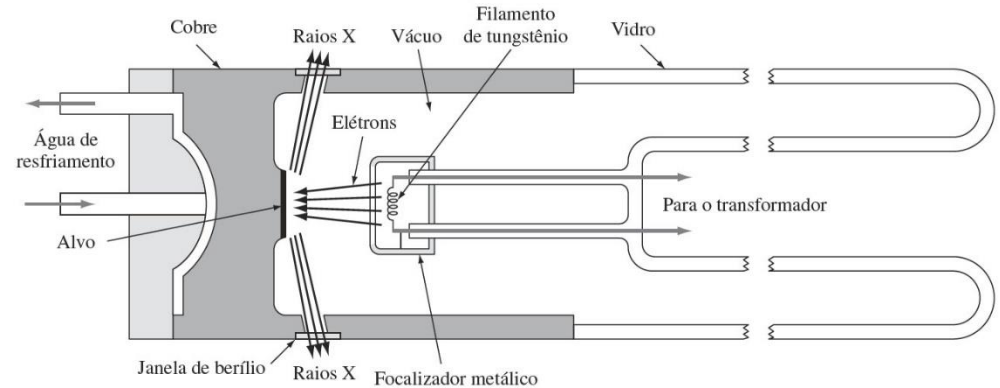
Alotropia



Metais	Estrutura cristalina em temperatura ambiente	Demais temperaturas
Ca	CFC	CCC (> 447 °C)
Co	HC	CFC (> 427 °C)
Hf	HC	CCC (> 1.742 °C)
Fe	CCC	CFC (912–1.394 °C) CCC (> 1.394 °C)
Li	CCC	HC (> -193 °C)
Na	CCC	HC (> -233 °C)
Tl	HC	CCC (> 234 °C)
Ti	HC	CCC (> 883 °C)
Y	HC	CCC (> 1.481 °C)
Zr	HC	CCC (> 872 °C)

Determinação de estruturas cristalinas

Esquema da seção longitudinal de uma ampola de raio X de filamento.

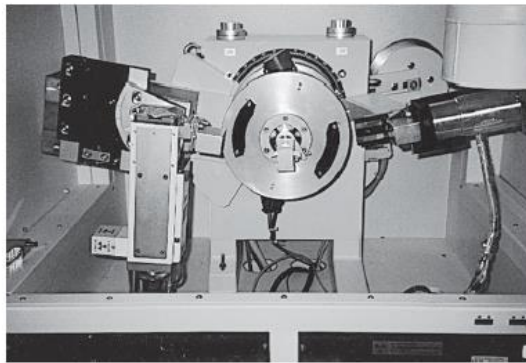


O FENÔMENO DA DIFRAÇÃO

Reflexão de um feixe de raios X pelos planos (hkl) de um cristal (a) Se o ângulo de incidência for arbitrário, não se produz feixe refletido; (b) Para o ângulo de Bragg θ , os raios refletidos estão em fase e se reforçam uns aos outros; (c) O mesmo que (b), exceto que se omitiu a representação das ondas.

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

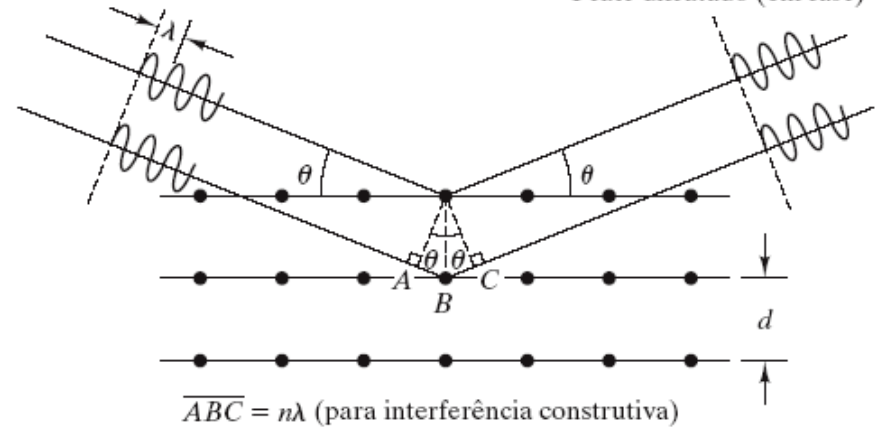
Análise de estruturas por difração de raios X



(a)

Feixe de raios X incidente (em fase)

Feixe difratado (em fase)

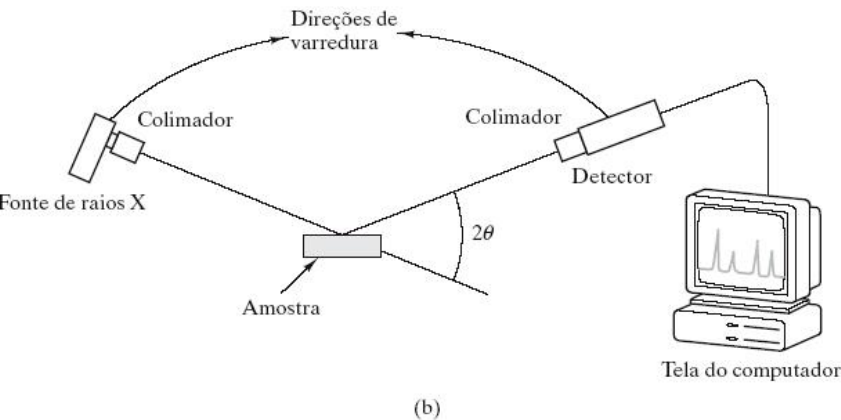


LEI DE BRAGG

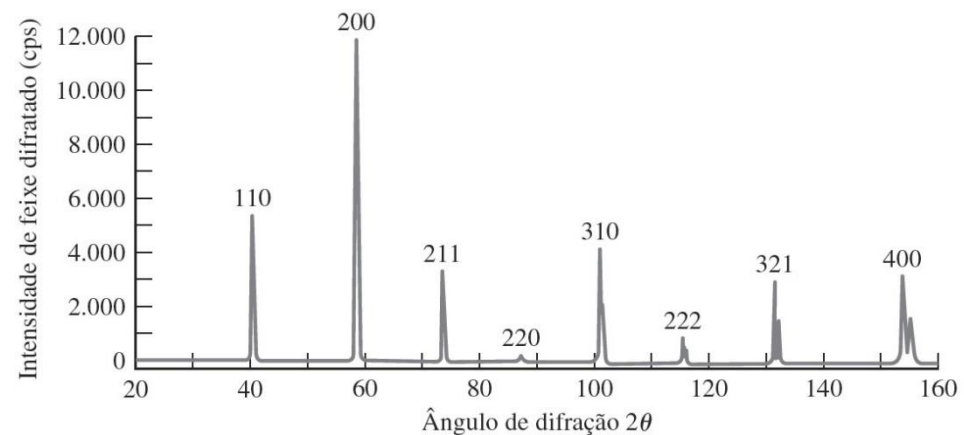
$$\overline{AB} = \overline{BC} = d \sin \theta$$

Portanto

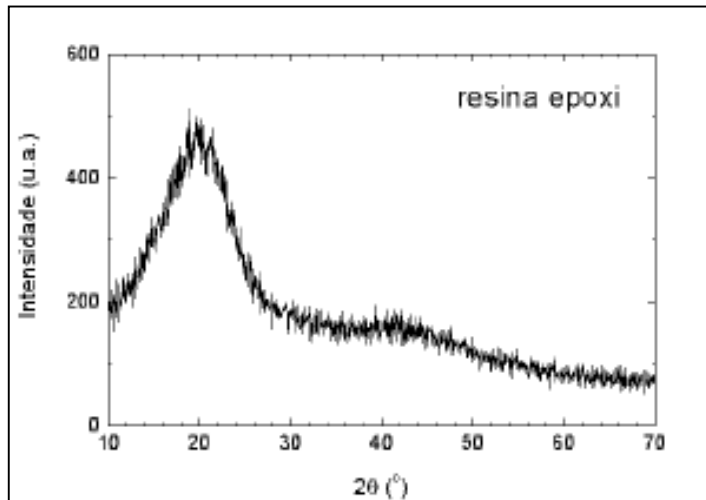
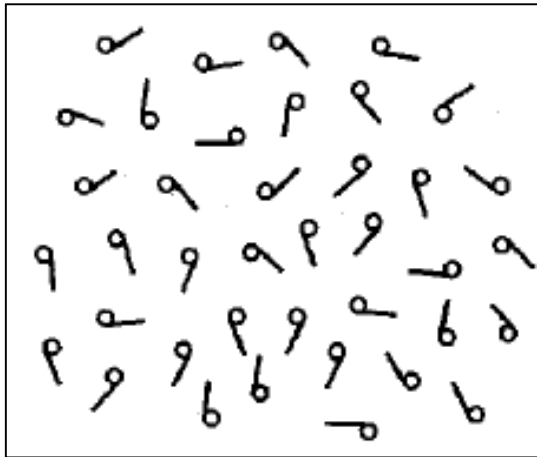
$$n\lambda = 2d \sin \theta$$



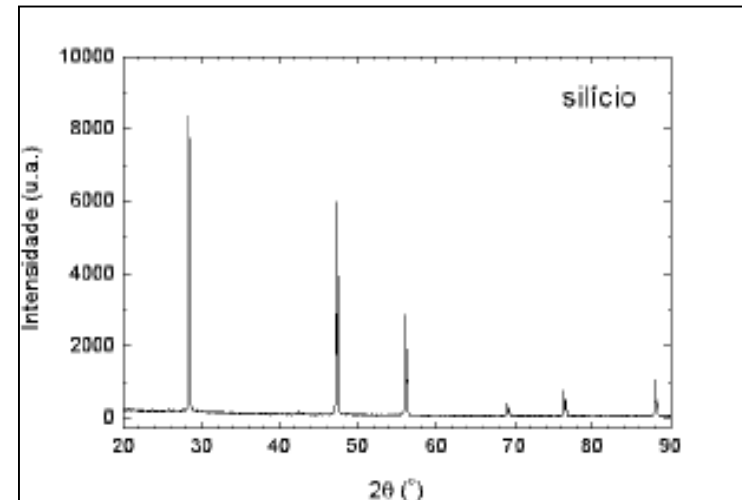
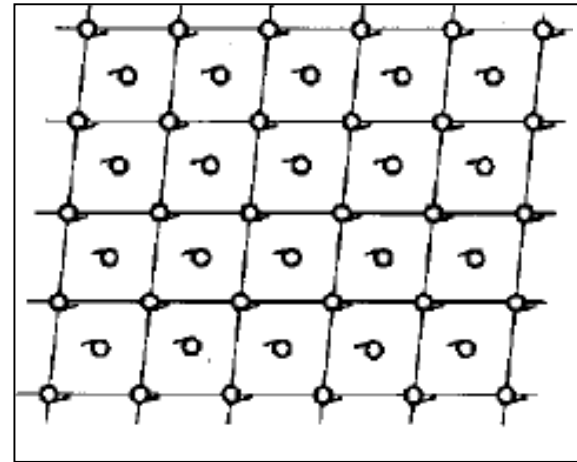
(b)



Amorfo

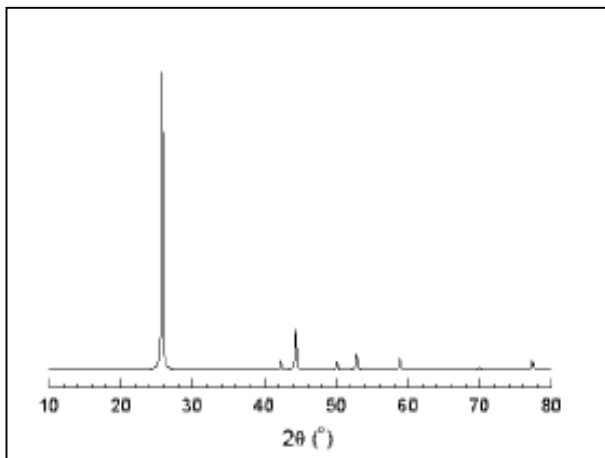
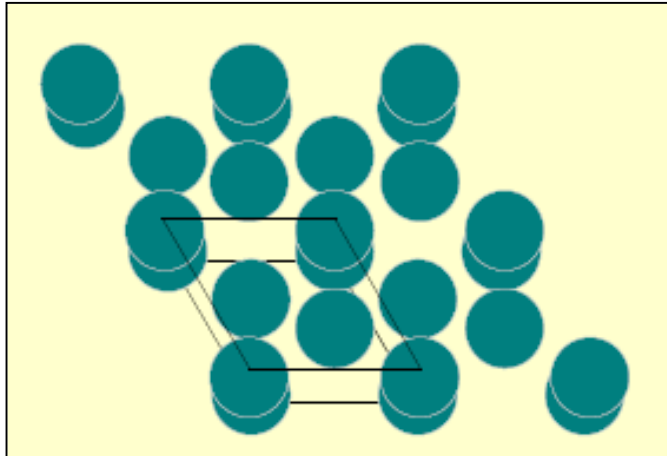


Cristalino



Carbono

grafite



diamante

