ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

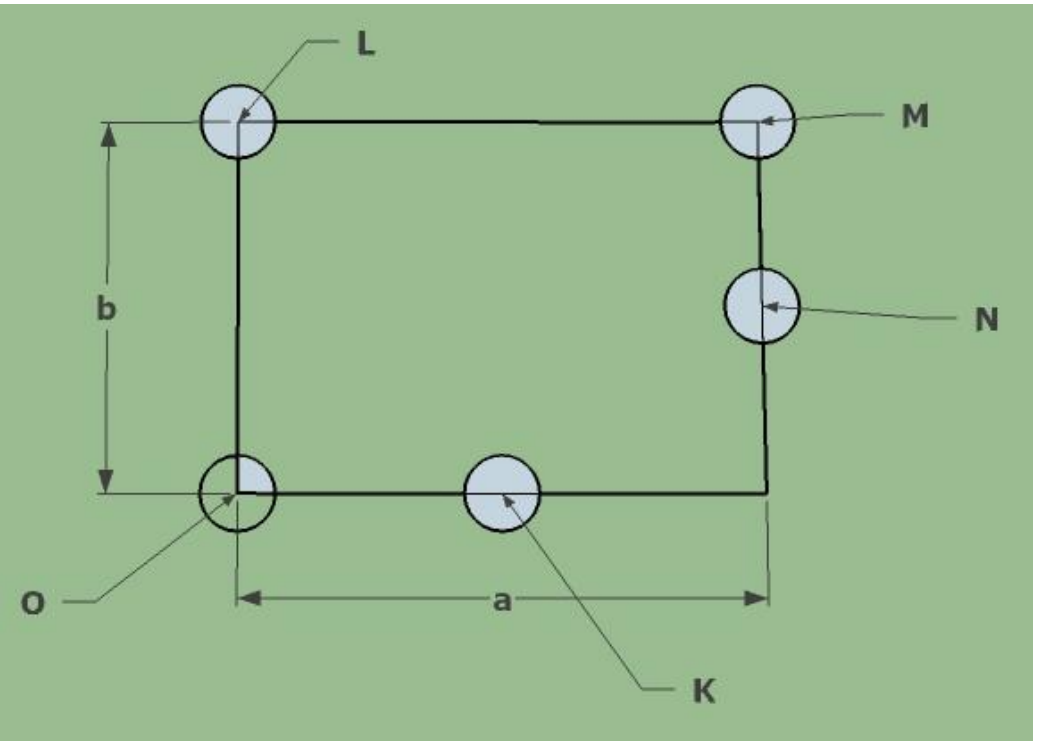
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Estrutura dos sólidos cristalinos

PMT 3301 – Fundamentos de Cristalografia e Difração;

Determinação de coordenadas em uma rede

- A coordenada corresponde a um ponto de referência dentro da rede
- Para isso, devemos sempre estabelecer um ponto de referência;
- Considere a figura abaixo, consideraremos o ponto O como ponto de referência;



- Dessa forma,qualquer ponto da rede pode ser definida pela seguinte equação.

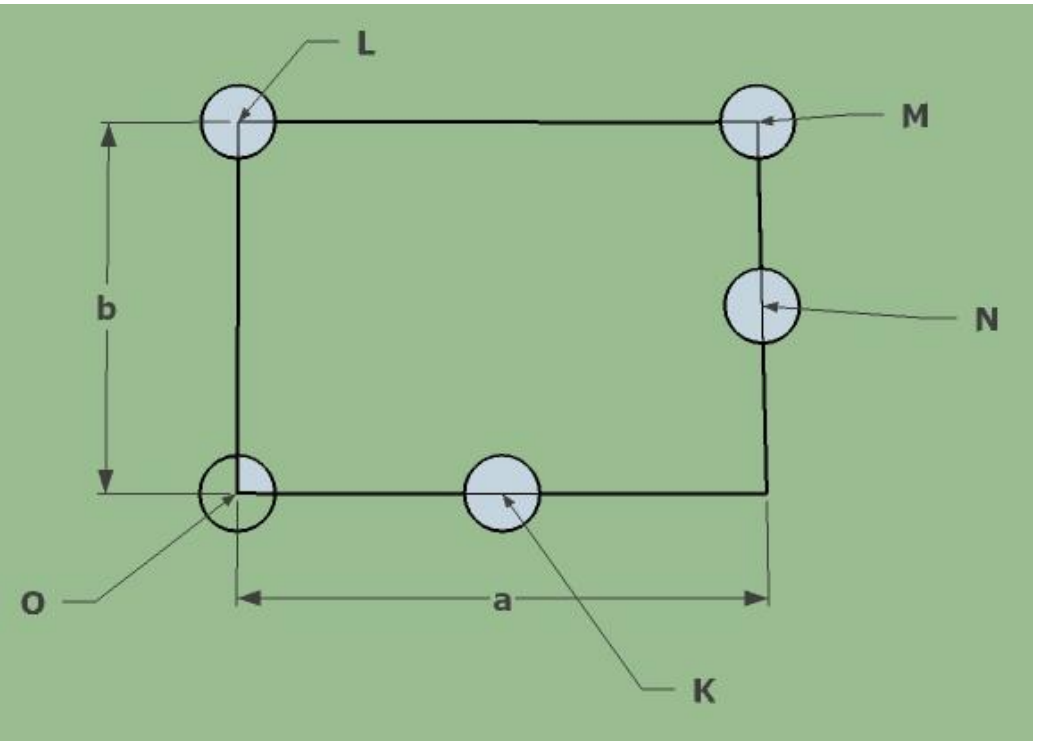
$$C_x = ua + vb \text{ (2D)}$$

$$C_x = ua + vb + wc \text{ (3D);}$$

- Assim, a coordenada é descrita como (u,v) ou (u,v,w).

Determinação de coordenadas em uma rede

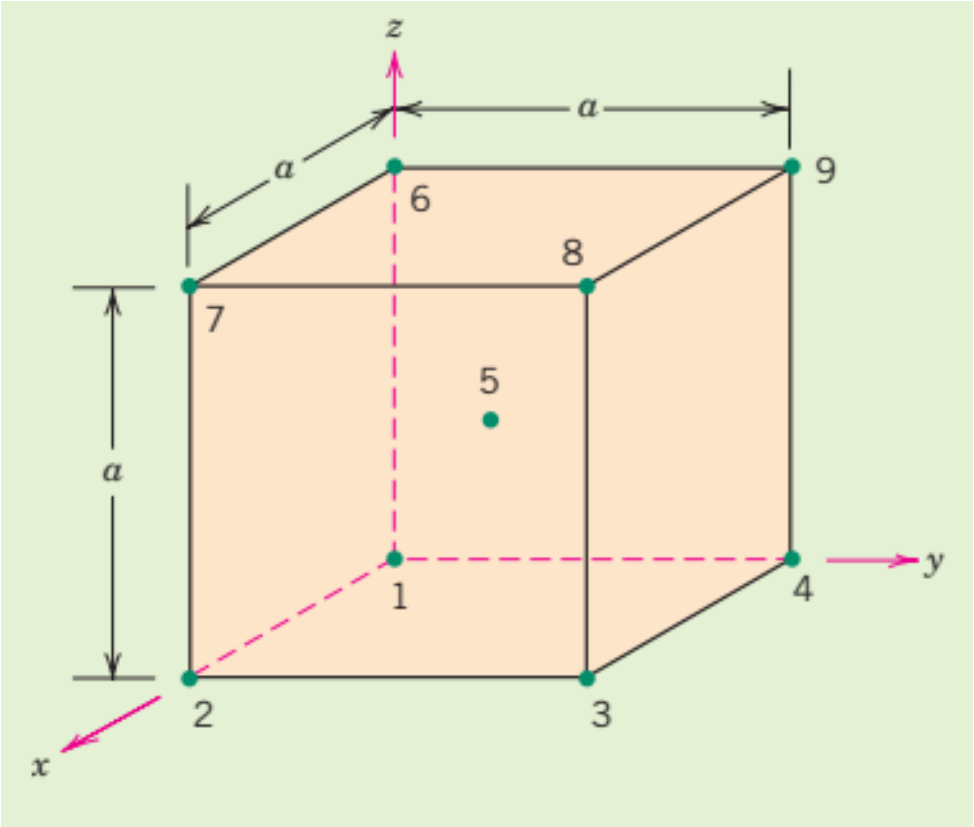
- A coordenada do ponto M será: $C_M = 1a + 1b$ (2D)
- A representação da coordenada será (1,1);
- Calcule a coordenada dos pontos L, N e K;



- Obs: No caso de coordenadas, NÃO se deve deixar os números inteiros;
- Por exemplo: Se a coordenada for (1/3, 1,1), deve-se DEIXAR em fração;

Exercício

- Determine as coordenadas da figura abaixo;

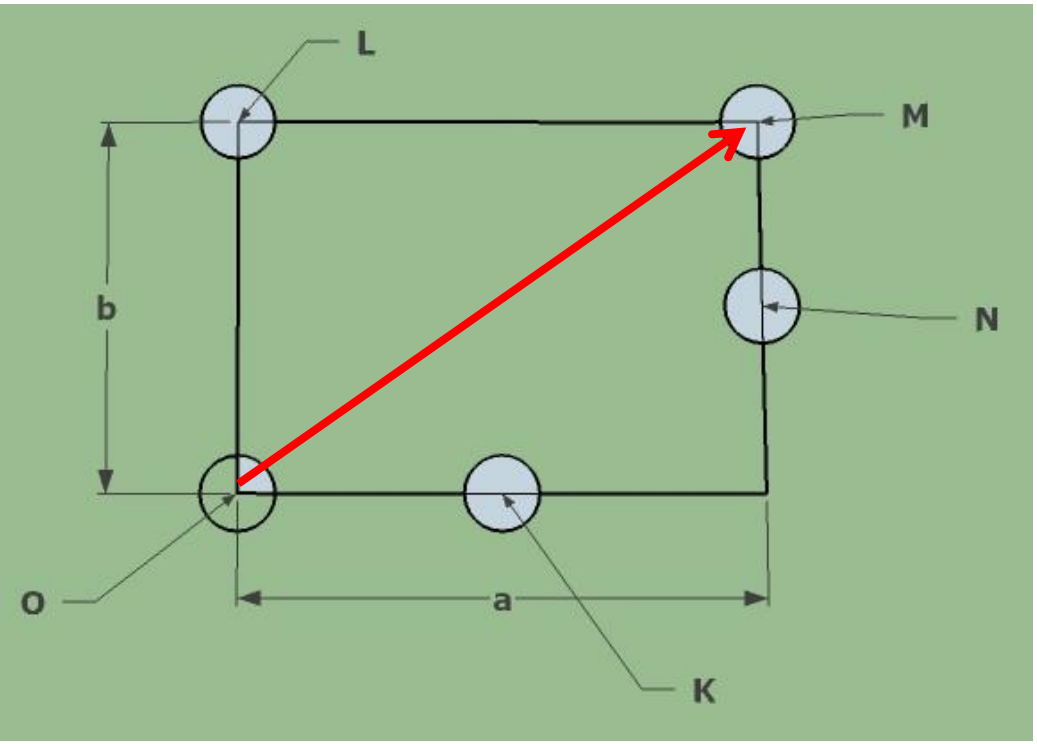


$C_x = ua + vb + wc$ (3D);

A representação da coordenada será (u,v,w).

Cálculo de direção cristalográfica

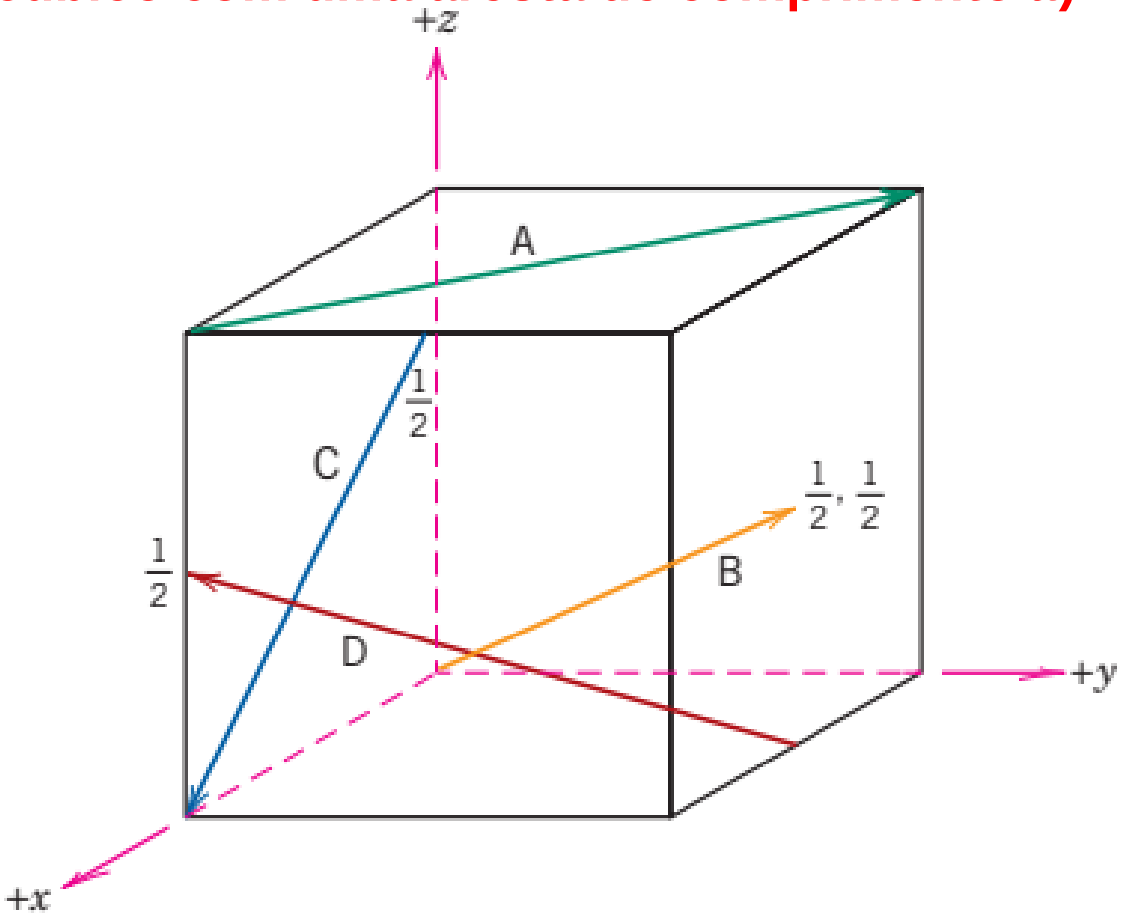
- Para calcular a direção cristalográfica dentro de uma estrutura, faz-se a diferença entre a coordenada final menos a coordenada inicial;



- O vetor em vermelho liga o ponto “O” ao ponto “M”;
- Logo, essa direção será [1 1] ;
- A mesma é representada por colchetes e não possui vírgula;
- Perceba que esse vetor pode ser usado para qualquer rede;
- OBS: As direções devem ser sempre números inteiro.

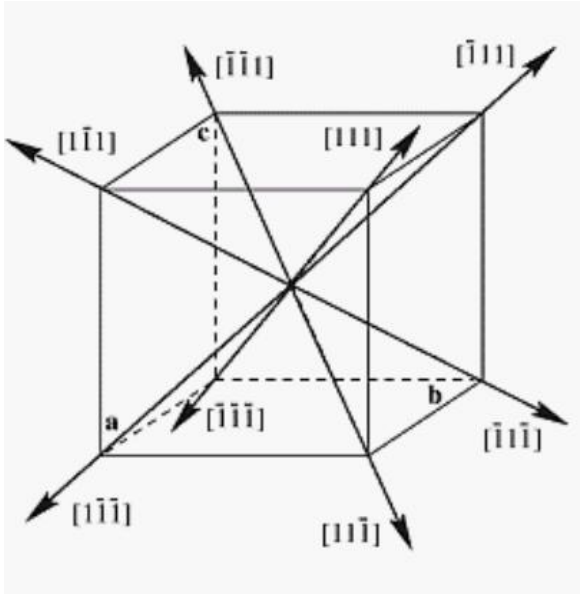
Exercício

- Calcule as direções indicadas nas figuras abaixo (considere que o sistema é cúbico com uma aresta de comprimento *a*)



Família de direções

- Dentro de cada sistema cristalino, existem direções cristalográficos que são equivalentes entre si;
- Por exemplo: direção [111] do sistema cúbico;



- Todas estas direções fazem parte da família <111>;

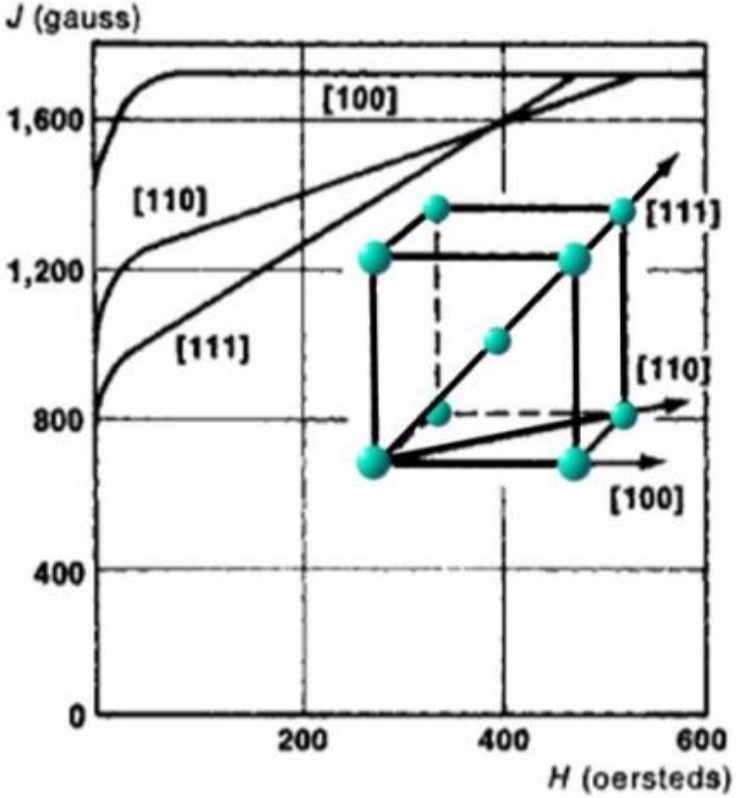
Qual a razão de estudar direções e planos em estrutura cristalina?

- Aços elétricos de grão orientado;

- Aço elétrico de grão não orientado.

Vamos analisar uma das estruturas mais simples e comuns

Cúbico de corpo centrado



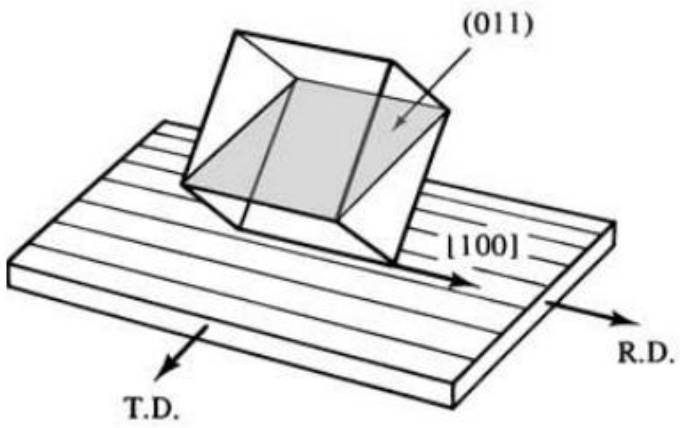
Role of the Goss texture for aligning the optimal soft magetic direction with the transformer directions.

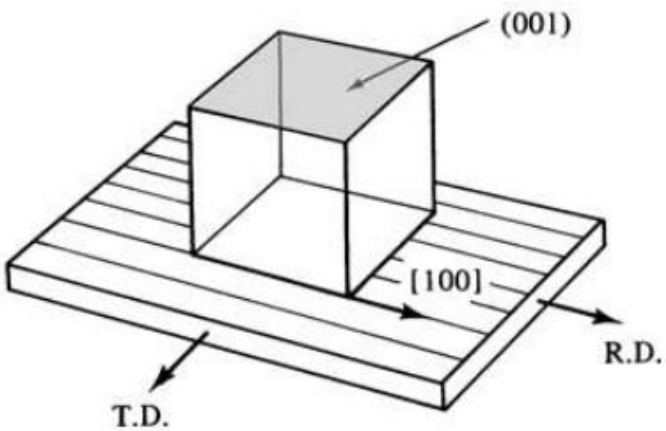
- As propriedades dependem das direções cristalográficas.

Qual a razão de estudar direções e planos em estrutura cristalina?

Aço elétrico de grão orientado

- O material é magnetizado somente em uma direção;
- Por essa razão, deseja-se que o mesmo seja magnetizado na direção [100];



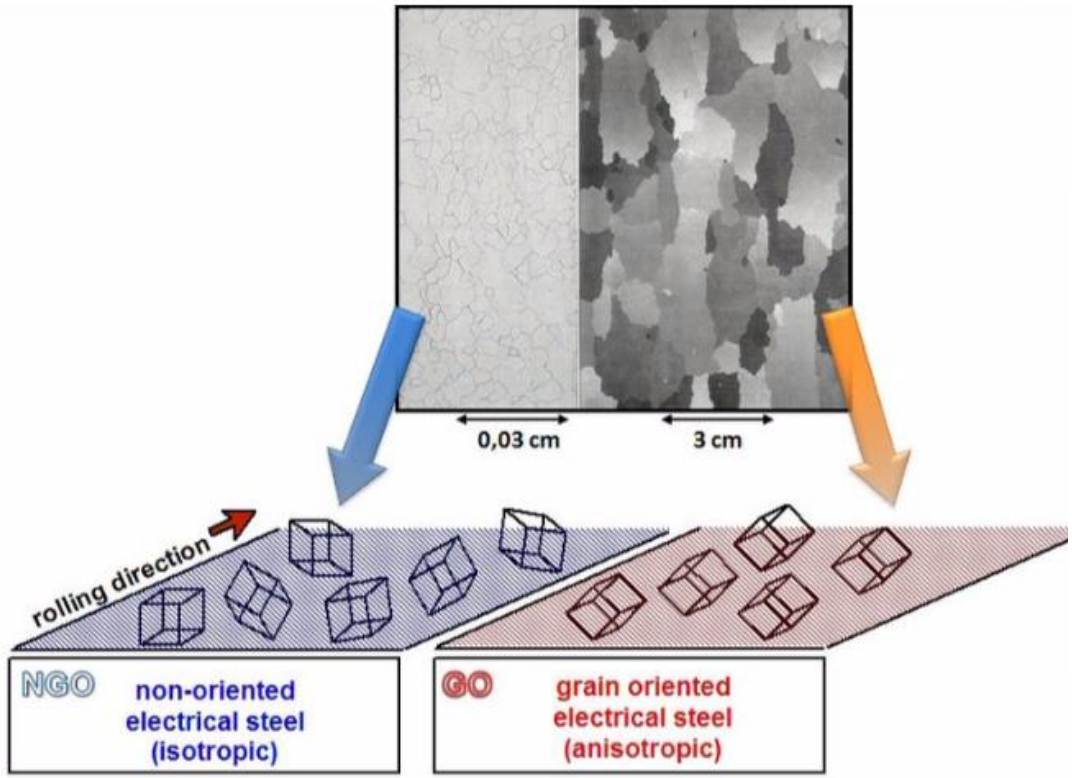


Qual a razão de estudar direções e planos em estrutura cristalina?

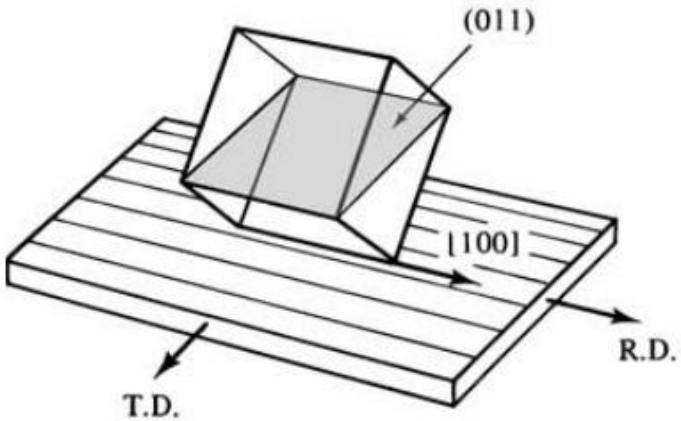
Aço elétrico de grão não orientado

- O material é magnetizado em todas as direções;
- Por essa razão, deseja-se que o mesmo não possua uma direção específica;

Qual a razão de estudar direções e planos em estrutura cristalina?



Goss texture in FeSi steels for electrical applications



IOP Publishing
Smart Materials and Structures
Smart Mater. Struct. **24** (2015) 105004 (7pp)
doi:10.1088/0964-1726/24/10/105004

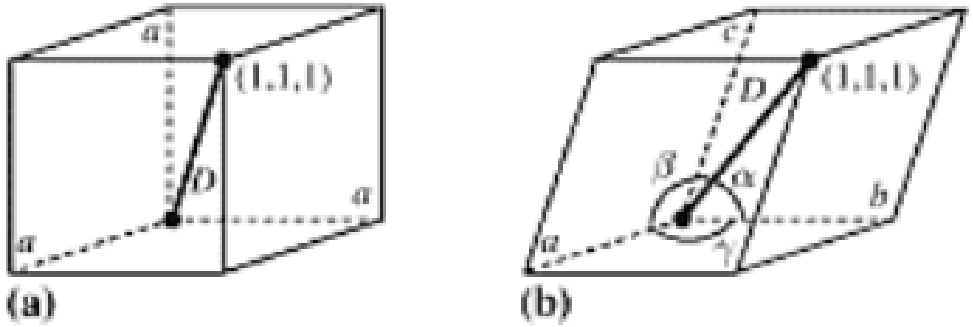
Magnetomechanical behavior of a directly solidified Fe–Al–B alloy

Mateus B S Dias[1], Cristina Bormio-Nunes[1,4], Clara Johanna Pacheco[2], Vagner de Oliveira Machado[1] and Olivier Hubert[3]

[1] Escola de Engenharia de Lorena, Depto de Engenharia de Materiais, Universidade de São Paulo, 12602-1810, Lorena, SP, Brazil
[2] Universidade Federal do Rio de Janeiro, LNDC/COPPE Laboratório De Ensaios Não Destructivos, Corrosão e Soldagem (LNDC), UFRJ, 22453900, Rio de Janeiro, RJ, Brazil
[3] LMT-Cachan (ENS-Cachan/CNRS UMR 8535/Université Paris Saclay), 94235 CACHAN Cedex, France

Calculo: Distância de um vetor, ângulo entre duas direções

- Em diversas situações, se faz necessário calcular o módulo de um vetor;
- Por exemplo: Distância de uma aresta, distância entre dois átomos, ângulo da rede cristalina ou ângulo entre dois átomos e etc.
- Se o sistema cristalino for ortogonal (cúbico, tetragonal ou ortogonal) é só usar o teorema de Pitágoras;
- Mas e se o sistema não for ortogonal?



Devemos usar tensores

$$|\overrightarrow{OM}| = \sqrt{u^2a^2\vec{i}^2 + v^2b^2\vec{j}^2 + uvab\vec{i}\vec{j} + uvab\vec{j}\vec{i}}$$

- No formato de tensores, essa equação se torna

$$|\overrightarrow{OM}|^2 = [u \quad v\,]\begin{bmatrix} a^2\vec{i}^2 & ab\vec{i}\vec{j} \\ ab\vec{j}\vec{i} & b^2\vec{j}^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$$

- Sabe-se que $\vec{i}.\,\vec{i}$ = cos0 = 1;
- Sabe-se que $\vec{i}.\,\vec{j}$ = cosθ;

$$\boxed{|\overrightarrow{OM}|^2 = [u \quad v\,]\begin{bmatrix} a^2 & abcos\theta \\ abcos\theta & b^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}}$$

Devemos usar tensores

- Em 3-D, essa análise se torna

$$\left|\overrightarrow{OM}\right|^2 = [u \quad v \quad w\,] \begin{bmatrix} a^2 & abcos\gamma & accos\beta \\ abcos\gamma & b^2 & bccos\alpha \\ accos\beta & bccos\alpha & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

- Calcule para um cristal monoclínico {a = 3, b = 4, c = 6, α = 90˚, β = 120˚, γ = 90˚} a distância da diagonal.

Devemos usar tensores

- Em 3-D, essa análise se torna

$$\left|\overrightarrow{OM}\right|^2 = [u \quad v \quad w\,] \begin{bmatrix} a^2 & abcos\gamma & accos\beta \\ abcos\gamma & b^2 & bccos\alpha \\ accos\beta & bccos\alpha & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

- Calcule para um cristal triclínico {a = 3, b = 4, c = 6, $\alpha = 80^\circ, \beta = 120^\circ, \ \gamma = 70^\circ$} a distância da direção [112].

Devemos usar tensores

- Podemos usar essa ferramenta para calcular a distância entre dois átomos:

$$\left|\overrightarrow{OM}\right|^2 = [u \quad v \quad w\,] \begin{bmatrix} a^2 & abcos\gamma & accos\beta \\ abcos\gamma & b^2 & bccos\alpha \\ accos\beta & bccos\alpha & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

- Calcule para um cristal tetragonal {a = 2, b = 2, c = 3, $\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \gamma = 90^\circ$} a distância entre dois átomos que estão localizados nas coordenadas (1/2, 1/3, 1/4) (1/3, 1/2, 3/4).

Devemos usar tensores

- Podemos usar essa ferramenta para calcular o ângulo entre duas direções cristalográficas:

$$\left|\overrightarrow{OM}\right|^2 = [u \quad v \quad w\,] \begin{bmatrix} a^2 & abcos\gamma & accos\beta \\ abcos\gamma & b^2 & bccos\alpha \\ accos\beta & bccos\alpha & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

- Considere um cristal monoclínico com a = 4, b = 6, c = 5 e β = 120˚, qual é o ângulo entre as direções [101] e [$\bar{2}$01].

- Para isso, usaremos o produto escalar de dois vetores

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{t} = |\mathbf{s}|\,|\mathbf{t}| \cos\theta,$$

Devemos usar tensores

- Podemos usar essa ferramenta para calcular o ângulo entre duas ligações:

$$\left|\overrightarrow{OM}\right|^2 = [u \quad v \quad w\,] \begin{bmatrix} a^2 & abcos\gamma & accos\beta \\ abcos\gamma & b^2 & bccos\alpha \\ accos\beta & bccos\alpha & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

- Em um cristal cúbico com parâmetro a = 3, um átomo de oxigênio está na posição (0, 0, 0) e está ligado com em dois átomos de titânio localizados na posição (1/2, 1/2, 0) e (1/2, 0, 1/2). Calcule o ângulo dessas ligações.
- Para isso, usaremos o produto escalar de dois vetores

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{t} = |\mathbf{s}|\,|\mathbf{t}| \cos\theta,$$