ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Estrutura dos sólidos cristalinos

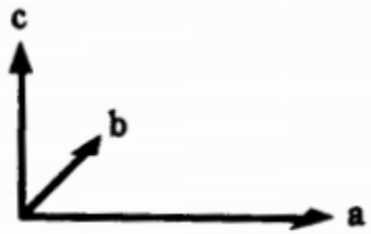
PMT 3301 – Fundamentos de Cristalografia e Difração;

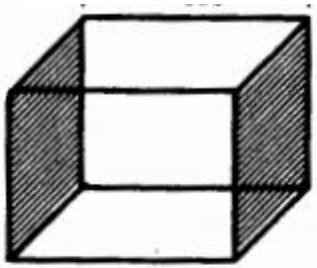
Determinação dos planos cristalino

- Muitas vezes, se faz necessário identificar quais são os planos cristalinos de um determinado sistema;
- Para isso, segue-se a regra:
  - Determinar os interceptos do plano com os eixos do sistema de coordenadas em termos dos parâmetros de rede a, b e c.
  - Se o plano passar pela origem, transladar o plano para uma nova posição no sistema de coordenadas.
  - Obter os recíprocos desses três interceptos. Se o plano for paralelo a um dos eixos, considera-se o intercepto infinito e o seu recíproco zero.
  - Representar na forma (*h k l*)

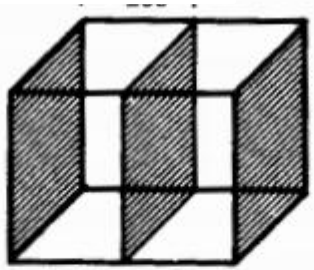
Exercício

- Determine o plano cristalográfico da área sombreada.

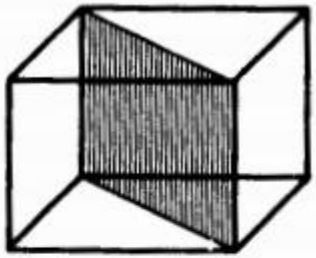




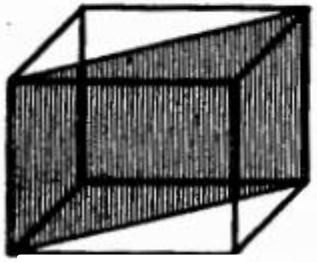
(100)



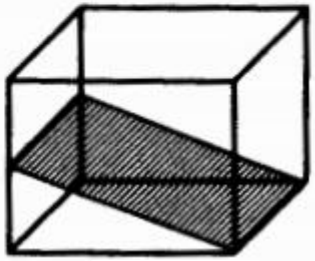
(200)



$(\bar{1}10)$



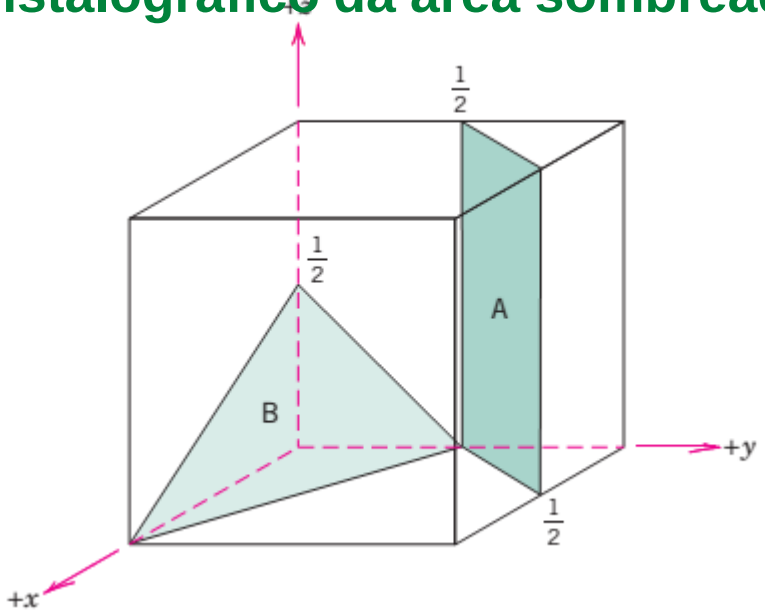
(110)

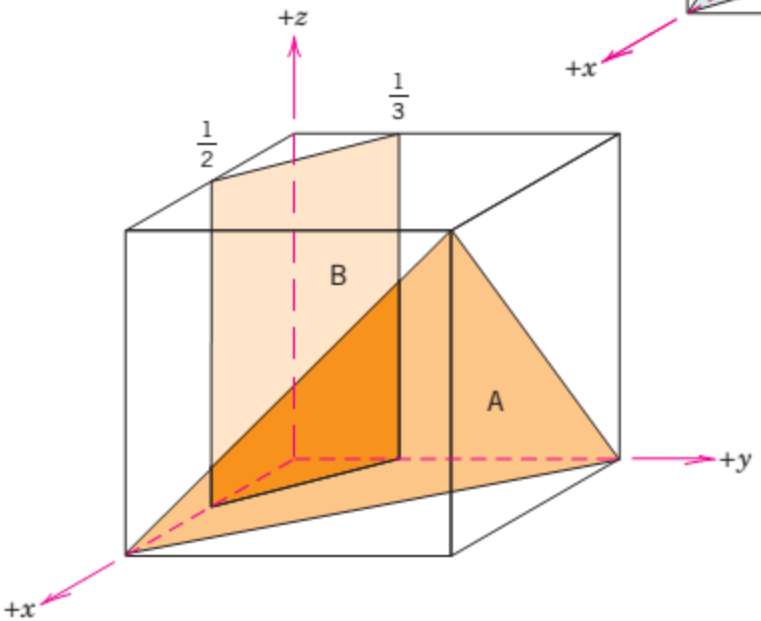


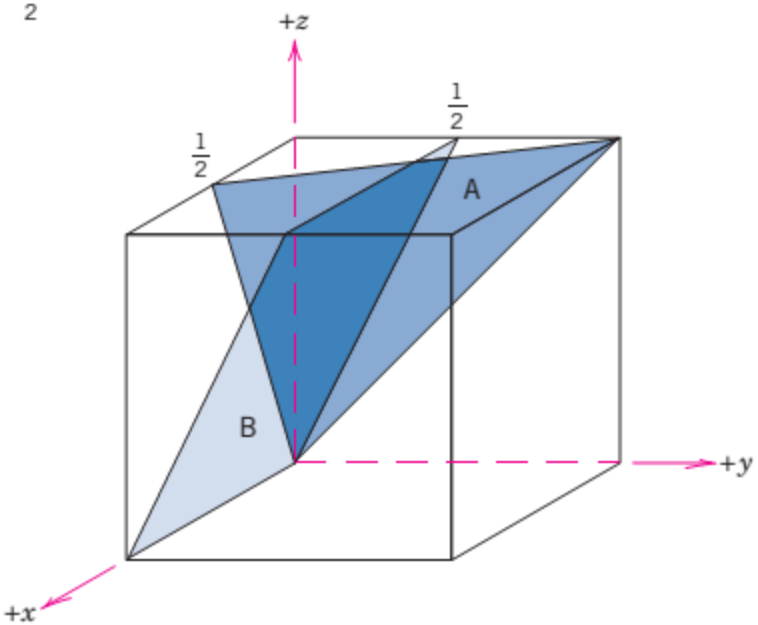
(102)

Estrutura dos sólidos cristalinos

- Determine o plano cristalográfico da área sombreada.

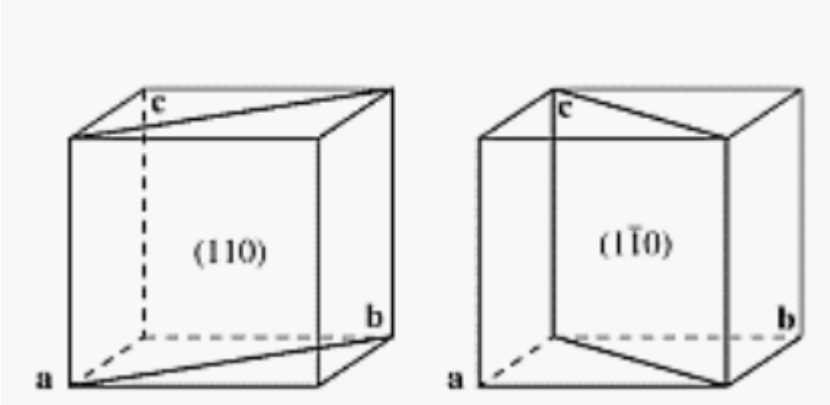






Família de plano e direções

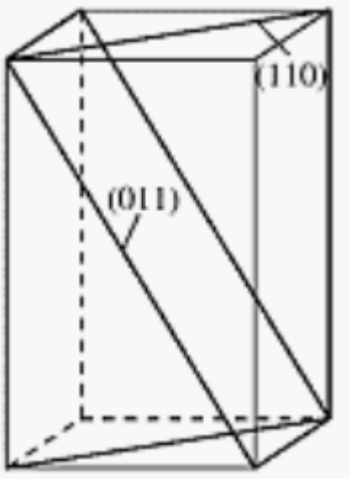
- Dentro de cada sistema cristalino, existem planos cristalográficos que são equivalentes entre sí;
- Por exemplo: plano (110) e $(1\bar{1}0)$ do sistema cúbico;



- Além desses dois, os planos (101), (011), $(\bar{1}10)$ $(10\bar{1})$ $(\bar{1}01)$ e etc. também são equivalentes ;
- Todos esses planos fazer parte da família {110};

Família de plano e direções

- Cuidado!
- Dependendo do sistema cristalino, não são todos os planos que são equivalentes.
- Por exemplo: plano (110) e $(1\bar{1}0)$ do sistema tetragonal;

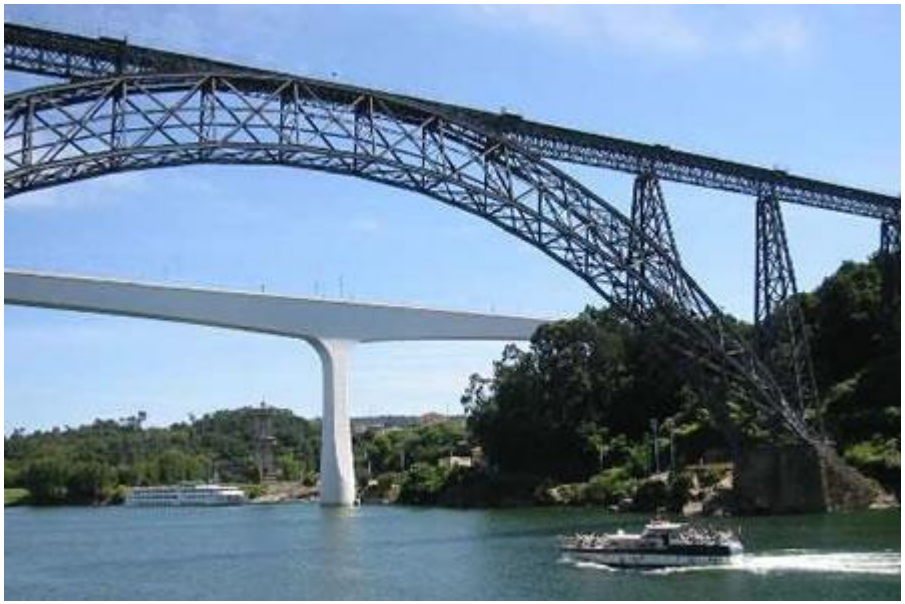


Estrutura cristalina

- A seguir, será apresentado estruturas cristalinas metálicas e cerâmicas mais comuns.

Aplicações

- Ferro (Fe) = Usado em 95% das aplicações em peso do mundo, onde a maioria das aplicações são estruturais.



Aplicações

- Cromo (Cr) – Ótima resistência a corrosão

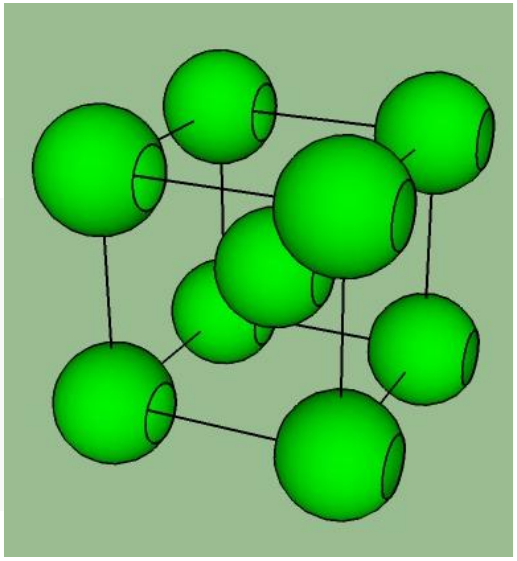
Aplicações

- Tungstênio (W) – Altíssimo ponto de fusão (3695 K) e dureza

Aplicações

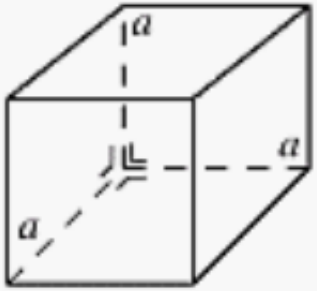
- Nióbio (Nb) – biocompatível e supercondutor

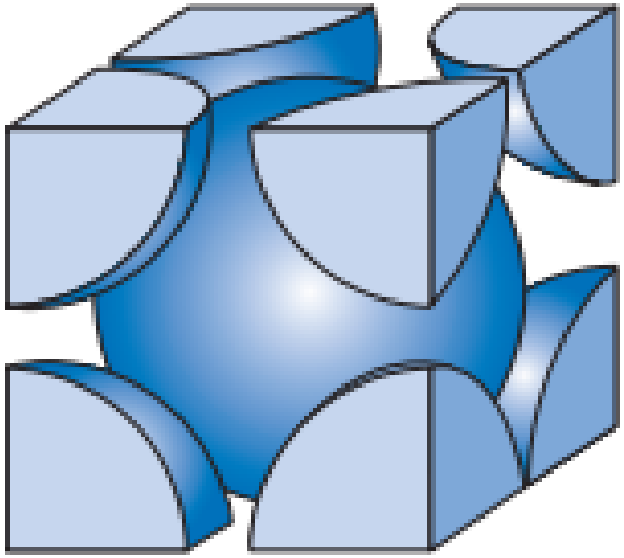
Estrutura metálica



- Cúbica de corpo centrada (CCC)

$a = b = c,$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$ **CUBIC**
$\{a, a, a, 90, 90, 90\}$

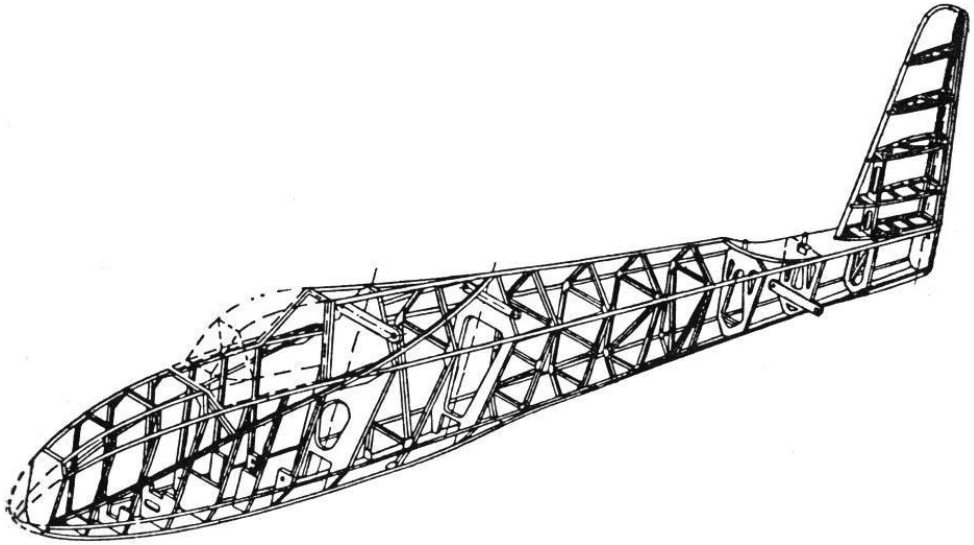




- Número de coordenação (NC) = 8;
- Fator de empacotamento atômico (FEA) = 0,68.
- Elementos com essa estrutura: Cr, Fe, Mo, Ta, W, Nb;
- Cada célula possui 2 átomos (1/8 em cada vértice e 1 átomo no centro);

Aplicações

- Alumínio (Al) – Leve e com boa condutividade elétrica



Aplicações

- Cobre (Cu) – Alta condutividade elétrica

Aplicações

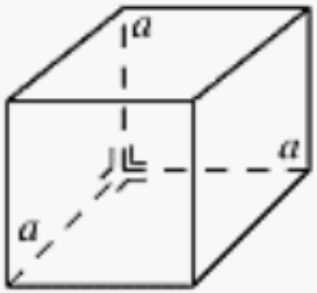
- Chumbo (Pb) – Blindagem radioativa e resistência a corrosão

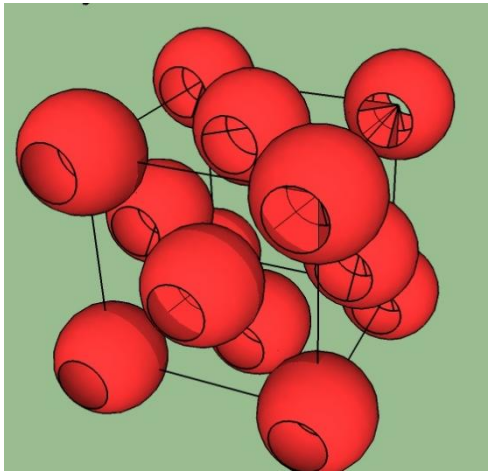
Estrutura metálica

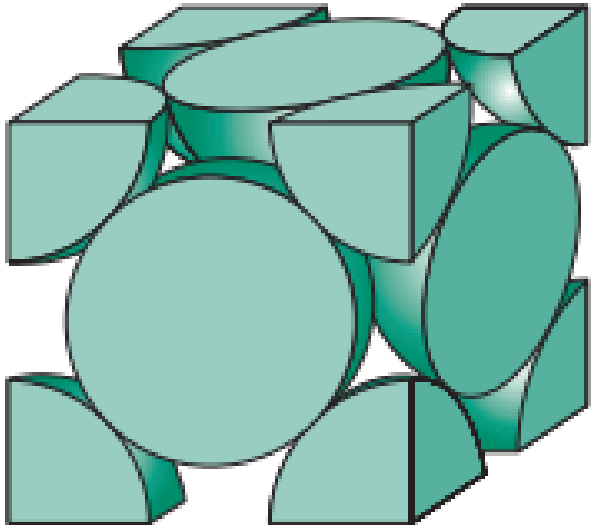
- Cúbica de face centrada (CFC);

$a = b = c,$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
$\{a, a, a, 90, 90, 90\}$

CUBIC







- Número de coordenação (NC) = 12;
- Fator de empacotamento atômico (FEA) = 0,74.
- Elementos com essa estrutura: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Ag;
- Cada célula possui 4 átomos (1/8 em cada vértice e 1/2 átomo em cada face);

Aplicações

- Titânio (Ti) – Leveza e alta resistência a temperatura

Aplicações

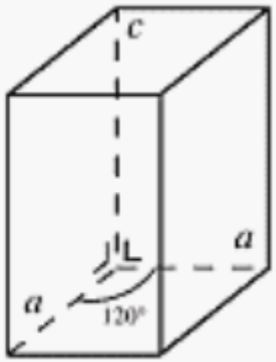
- Zinco (Zn) – Metal de sacrifício

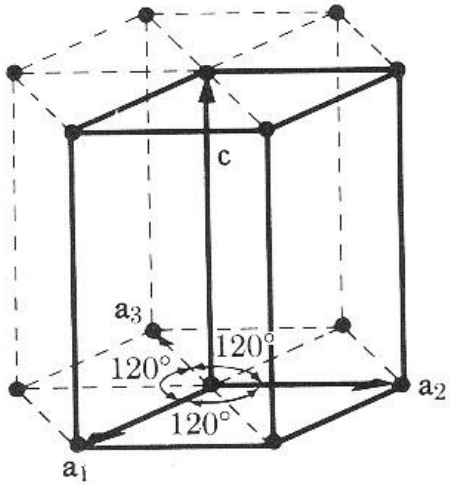
Estrutura metálica

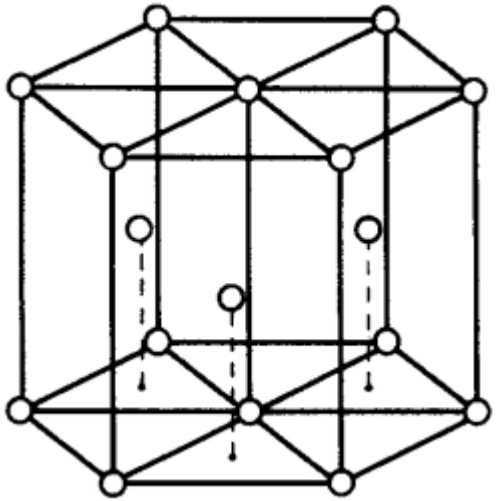
- Hexagonal compacta (HC);

$a = b,$
$\alpha = \beta = 90°,$
$\gamma = 120°$
$\{a, a, c, 90, 90, 120\}$

HEXAGONAL



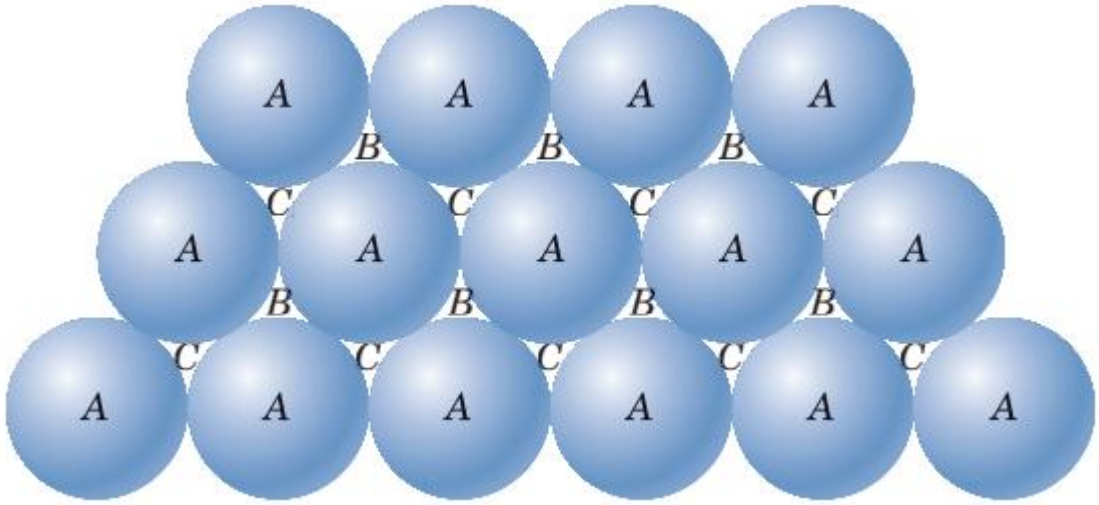




- Número de coordenação (NC) = 12;
- Fator de empacotamento atômico (FEA) = 0,74.
- Elementos com essa estrutura: Cd, Co, Ti, Zn;
- Cada célula possui 2 átomos (1/2 em cada face e 1 átomo no centro);

Estrutura metálica

- Existem alguma semelhanças entre as estruturas CCC e HC;
- Fator de empacotamento e número de coordenação

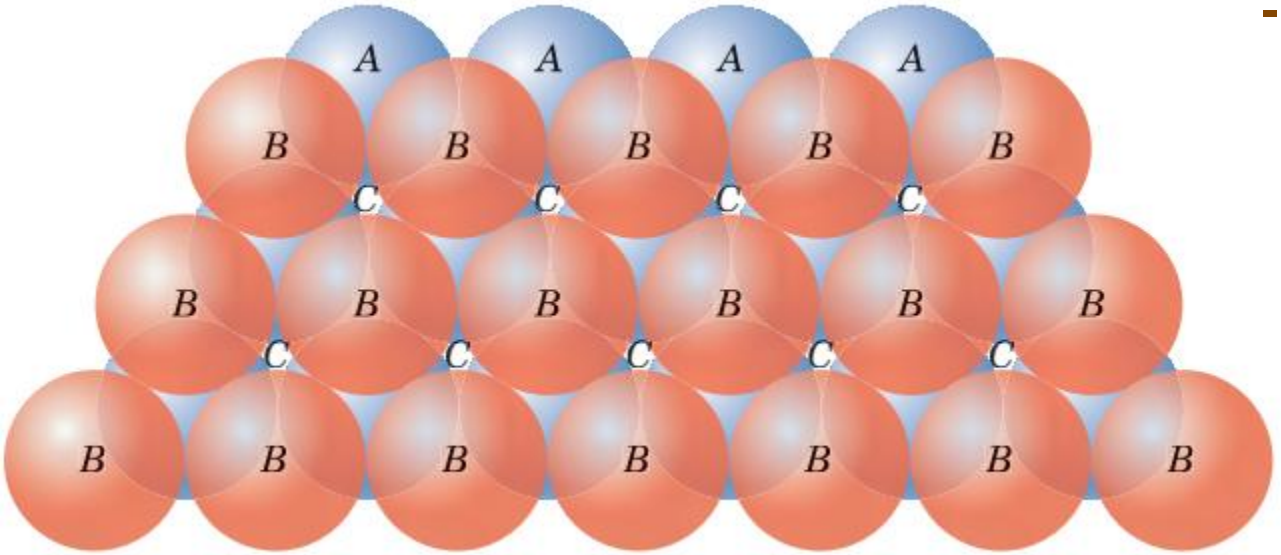


- O centro de cada átomo esta em A;
- Alguns espaços são chamados de B (triângulo para cima);
- Alguns espaços são chamados de C (triângulo para baixo);

Estrutura metálica

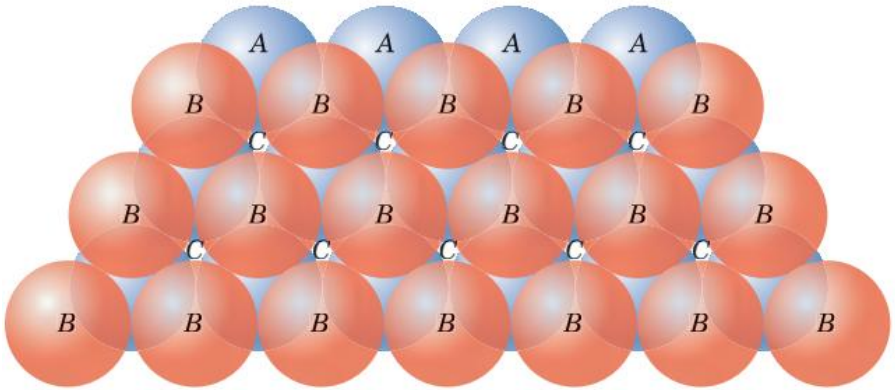
- A segunda camada atômica pode ser colocada nas posições “B” ou C”;
- Neste caso, a sequência de empilhamento é chamada “AB”

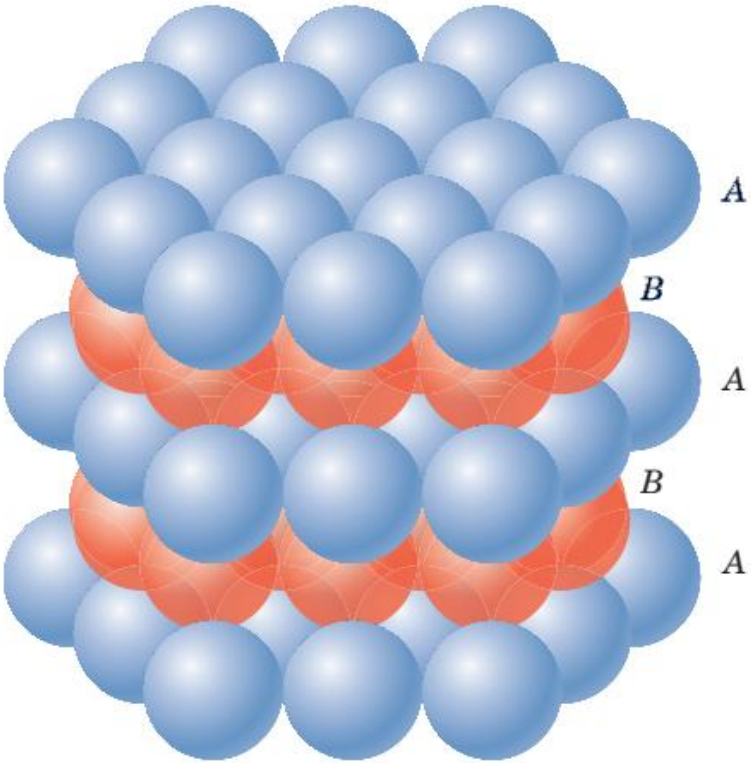
- A real diferença entre CCC e HC está na posição da terceira camada atômica;
- Esta pode ser colocada nas posições “A” ou “C”;



Estrutura metálica

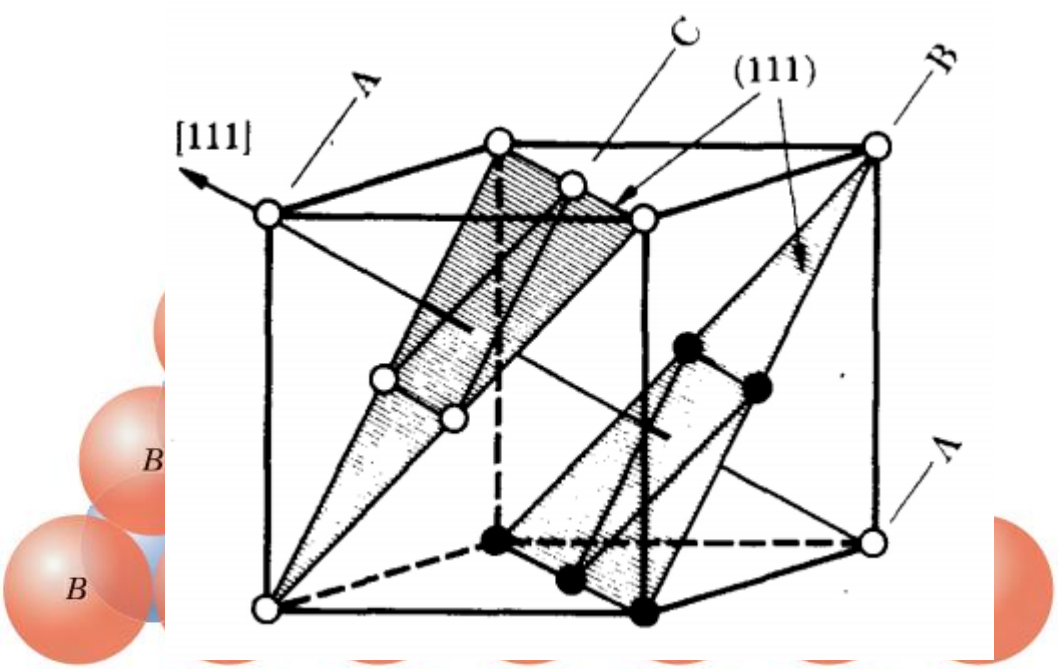
- No caso da HC, a terceira camada está na posição “A”;
- E a sequência de empilhamento é chamada de “ABABABAB...”;
- Ou “ACACAC...”, caso a segunda camada tenha ocupada a posição C;

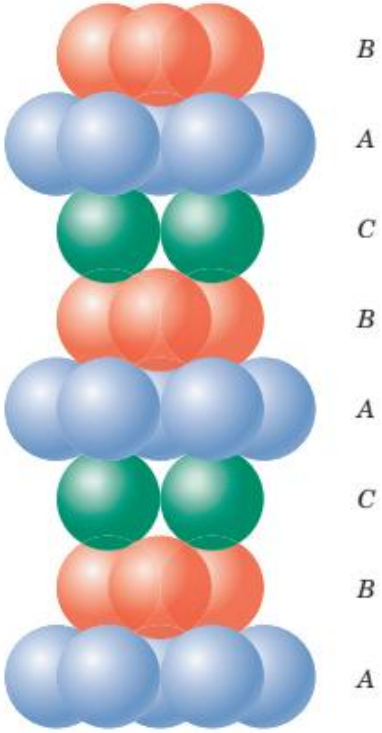


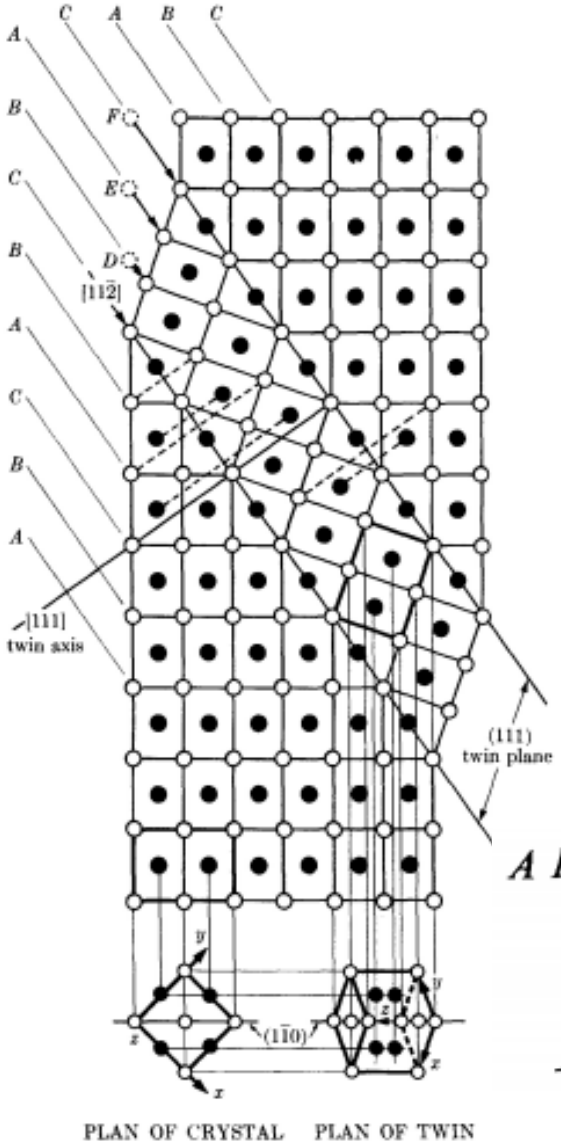


Estrutura metálica

- No caso da CFC, a terceira camada está na posição “C”;
- E a sequência de empilhamento é chamada de “ABCABCABCABC...”;
- Ou “ACBACB...”, caso a segunda camada tenha ocupada a posição C;

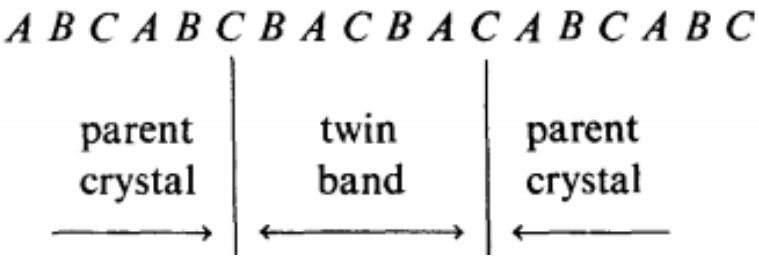






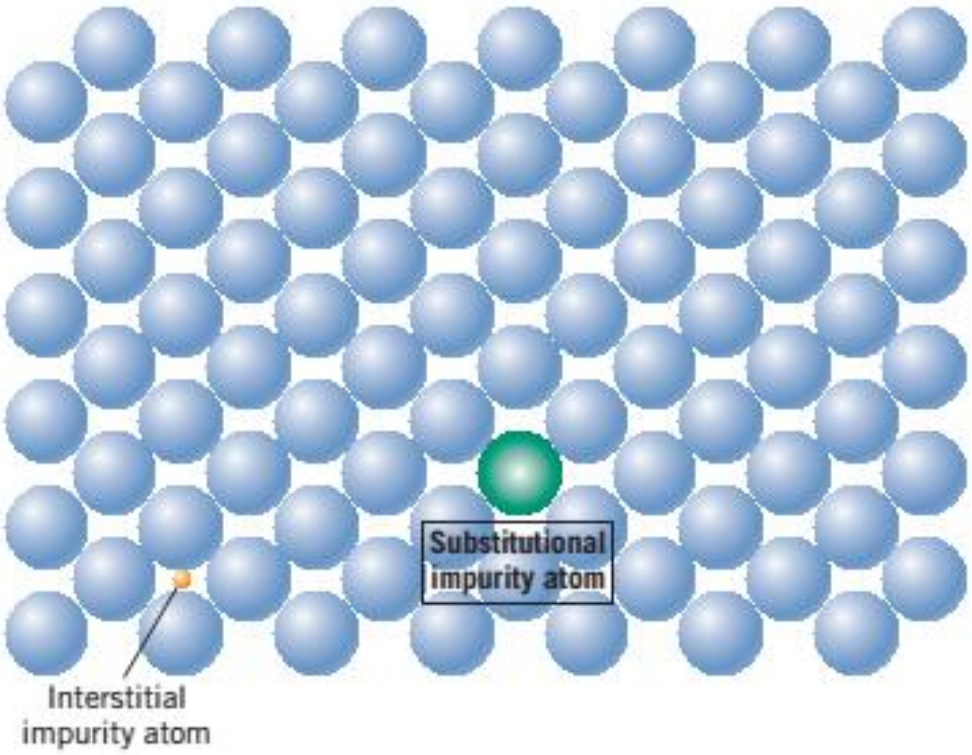
Maclas em cristais

- É um tipo especial de contorno de grão que possui uma simetria espelhada;
- Maclas de deformação (CCC e HC) ou Maclas de recozimento (CFC);
- Alteração na sequência de empilhamento.



E se mais de um elemento químico estiver presente?

- Solução sólida: substitucional ou intersticial;



- Substitucional: átomos de soluto entram na rede do átomo de solvente;
- Intersticial: átomos de soluto entram nos interstícios da rede;

Solução sólida substitucional

- Átomo em maior quantidade = Solvente (A);
- Átomo em menor quantidade = Soluto (B)
- Exemplo de ligas = $AuCu_3$, $Fe_{97}Si_3$, $Fe_{90}Al_{10}$;
- Os átomos A e B podem estar organizados de duas formas:
- Ordenamento de longo alcance ou desordenada;

Ordenamento de longo alcance (possui uma super rede)

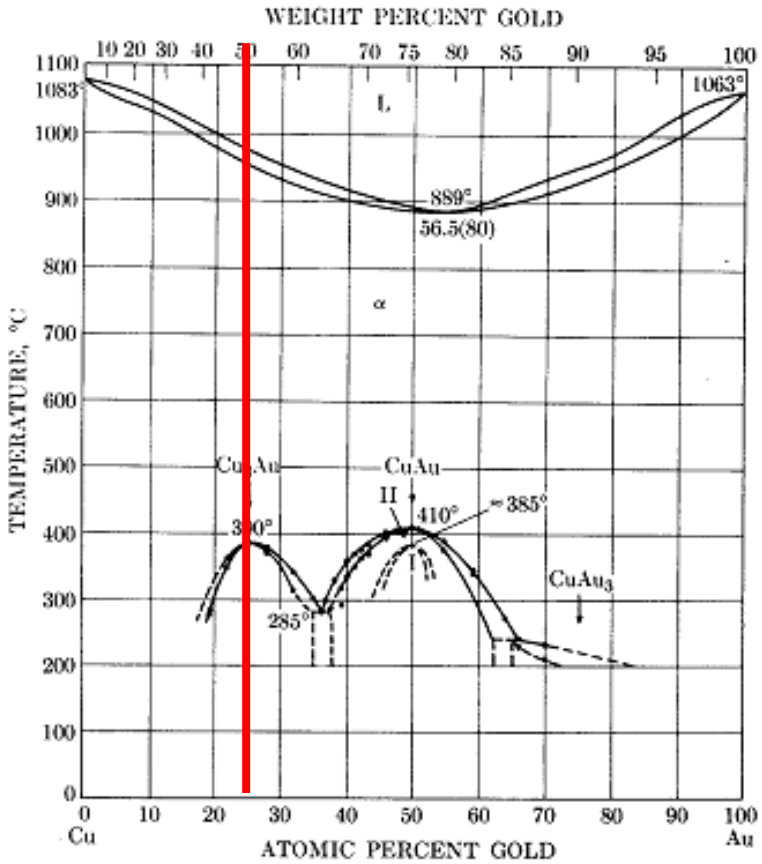
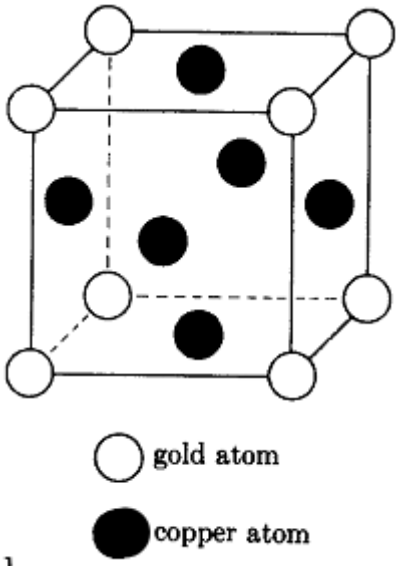
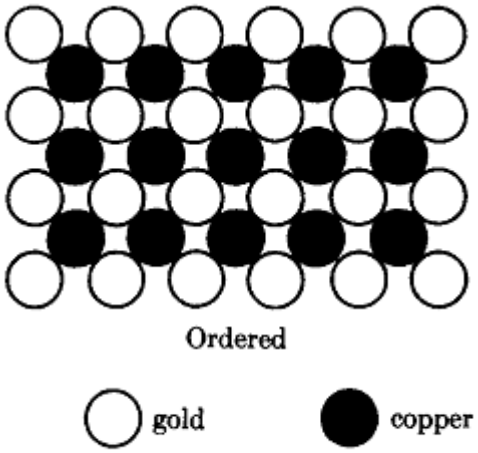


Fig. 13–5 Phase diagram of the copper-gold system. Hansen and Anderko [13.4].

- Os átomos A e B estão organizados de forma periódica;
- Átomos de Au estão nos cantos e Cu no centro das faces;





Desordenação

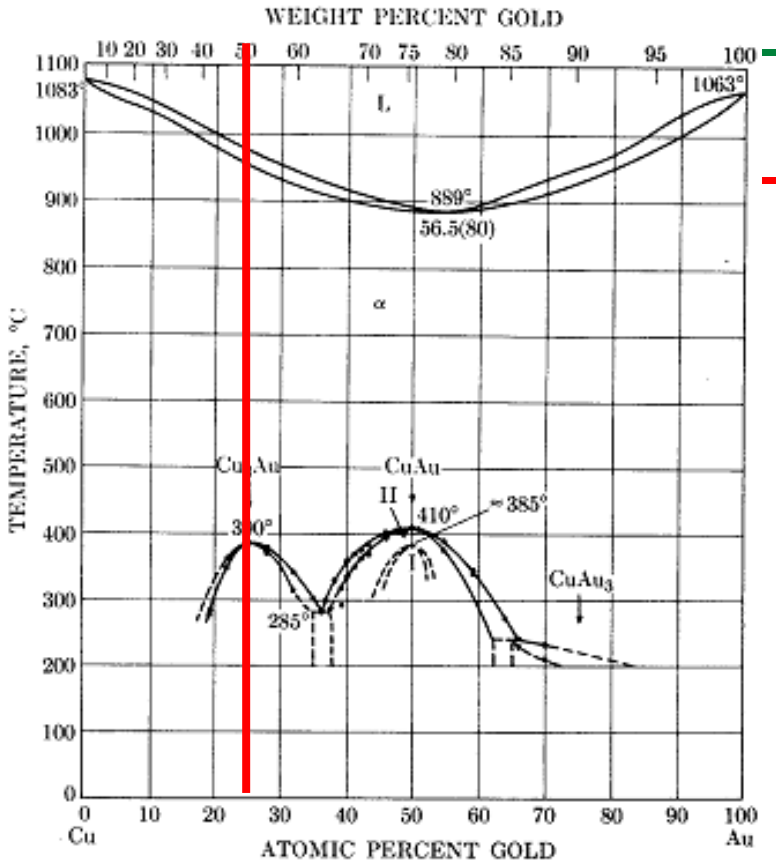
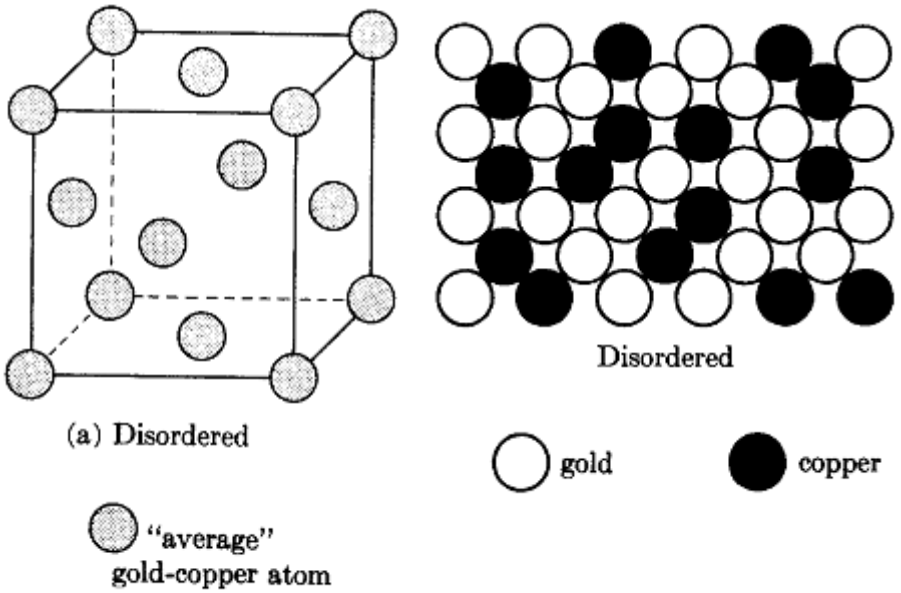


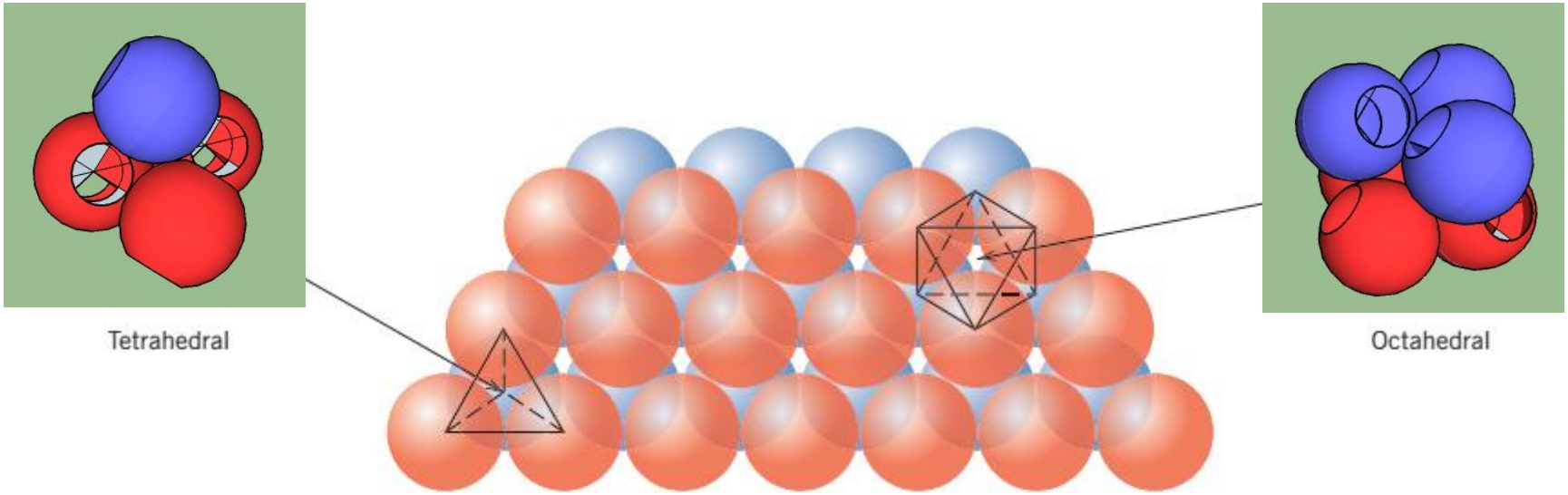
Fig. 13–5 Phase diagram of the copper-gold system. Hansen and Anderko [13.4].

- Os átomos A e B estão organizados de forma "desordenada";
- Os átomos A e B não possuem uma posição definida na rede cristalina



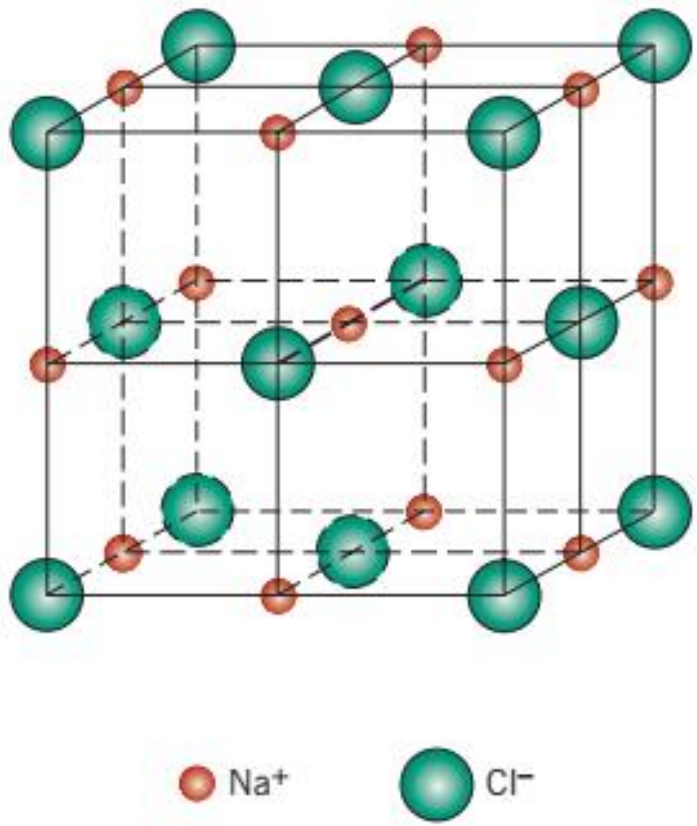
Solução sólida intersticial - metais

- Átomo em maior quantidade = Solvente (A) – átomo grande;
- Átomo em menor quantidade = Soluto (B) – átomo pequeno (C, N, B);
- Podem ocupar os sítios tetragonais ou octaédricos;



Estruturas cerâmicas – sal gema ou NaCl (MgO, MnS, LiF e FeO)

- Qual é a estrutura cristalina deste composto?



- Estrutura CFC dos átomos de cloro;

- Cátions ocupam os sítios intersticiais octaédricos da estrutura;

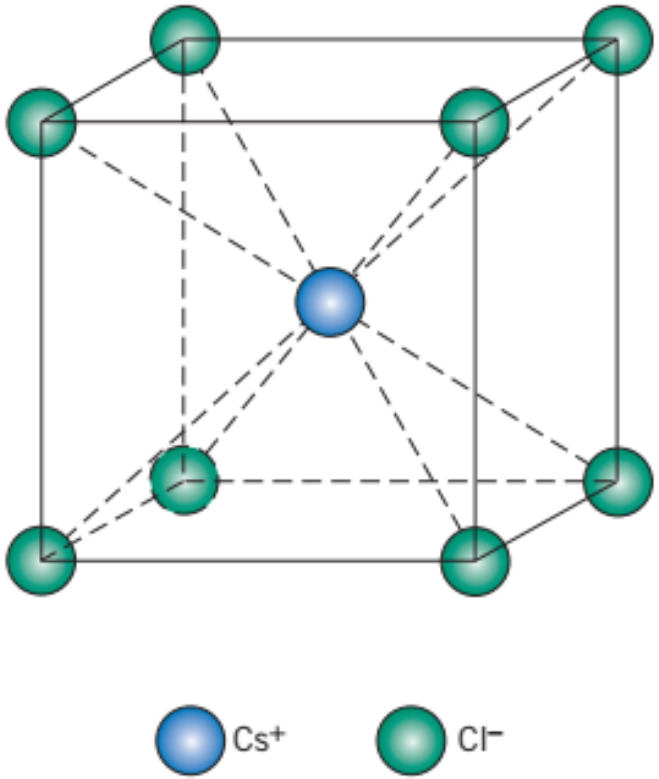
- Os sítios intersticiais continuam os mesmos (tetraédricos ou octaédricos);

MgO
Uso agrícula

Estruturas cerâmicas – Cloreto de césio (CeCl)

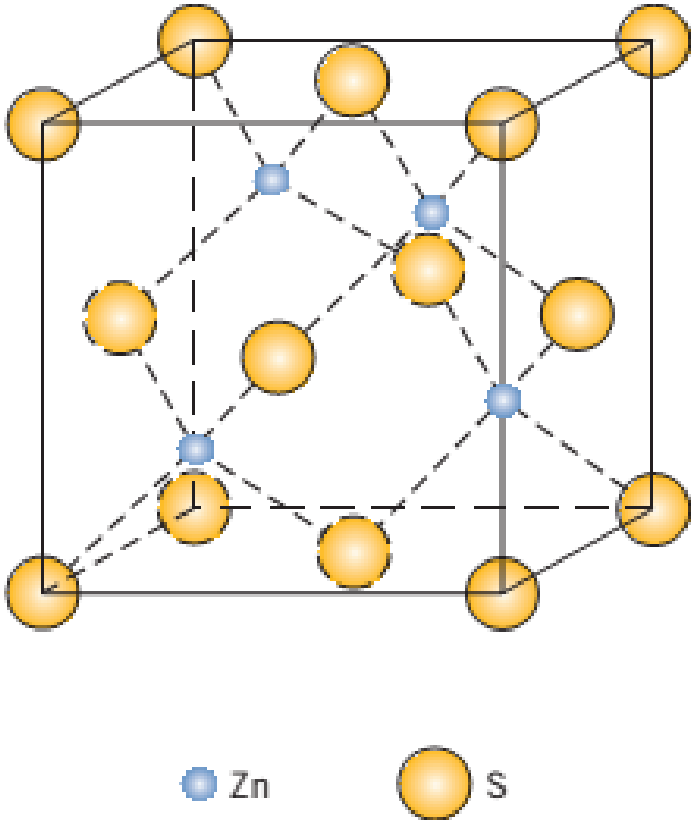
- Qual é a estrutura cristalina deste composto?

- Estrutura cúbica simples;
- Não é uma estrutura CCC.



Estruturas cerâmicas – Blenda de zinco

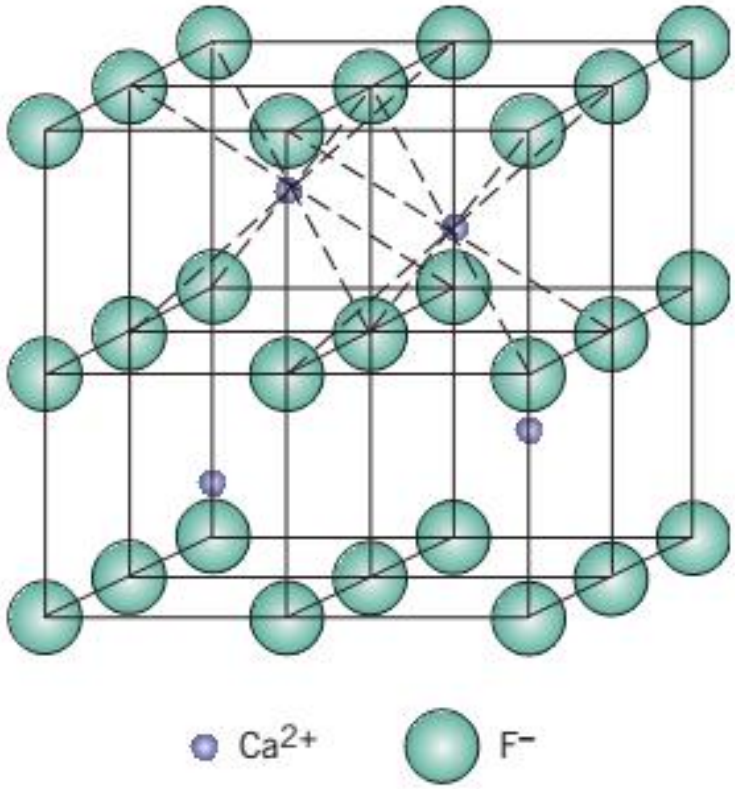
- Qual é a estrutura cristalina deste composto?



- Estrutura CFC dos átomos de S;
- Os ânions estão localizados nos vértices e nas faces da estrutura;
- Os cátions estão localizados nos sítios tetraédricos.

Estruturas cerâmicas – fluorita (CaF_2)

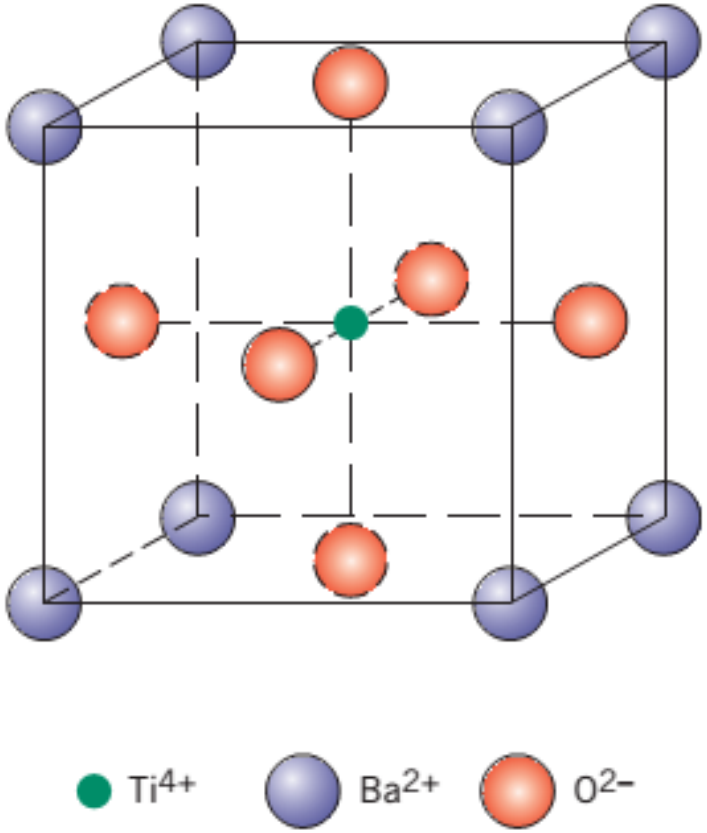
- Qual é a estrutura cristalina deste composto?



- Estrutura cúbica simples;
- Os íons de Ca estão posicionados no centro dos cubos;
- Átomos de F nos cantos da estrutura;
- Para garantir a estabilidade elétrica, nem todas as posições estão ocupadas;

Estruturas cerâmicas – Peroviskita ($BaTiO_3$)

- Qual é a estrutura cristalina deste composto?



- **Estrutura cúbica de face centrada;**
- **Os íons de Ti estão posicionados no centro dos cubos;**
- **Os íons de O estão posicionados no centro das faces;**
- **Os íons de Ba estão posicionados nos cantos da célula;**

Estruturas cerâmicas – Peroviskita ($BaTiO_3$)

- Piezoelétrico – geração de energia

Article

JOURNAL OF COMPOSITE MATERIALS

Journal of Composite Materials
2016, Vol. 50(12) 1573–1579
© The Author(s) 2015
Reprints and permissions:
sagepub.co.uk/journalsPermissions.nav
DOI: 10.1177/0021998315577685
jcm.sagepub.com
SAGE

Flexible ceramic-elastomer composite piezoelectric energy harvester fabricated by additive manufacturing

Jae-Il Park[1], Gil-Yong Lee[2], Jinkyu Yang[2], Chung-Soo Kim[1,3] and Sung-Hoon Ahn[1,3]