

Estrutura dos sólidos cristalinos: Célula unitária

Ciência dos Materiais

2. Estrutura dos sólidos cristalinos

ligações químicas

rede cristalina

célula unitária

raio atômico

modelo de empacotamento compacto em sólidos metálicos

sítios cristalinos octaédricos e tetraédricos

superfícies de baixo índice de Miller

estruturas polifásicas e polimorfismo em metais

Ciências dos materiais

2. Estrutura dos sólidos cristalinos

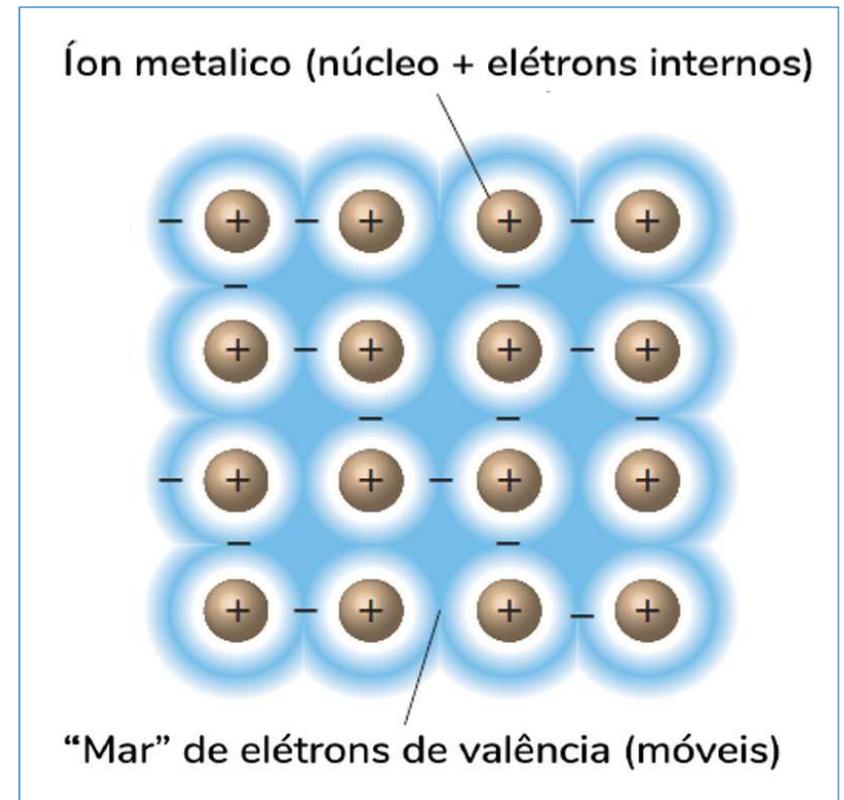
Célula unitária

```
graph TD; A[Ciências dos materiais] --- B[2. Estrutura dos sólidos cristalinos]; B --- C[Célula unitária];
```

Estrutura cristalina dos metais

Em geral, cada átomo de um metal está ligado com seus vizinhos por ligações metálicas, então:

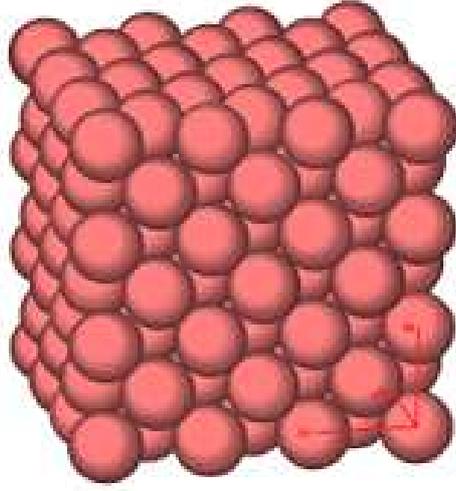
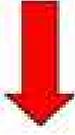
- Como a ligação metálica é *não-direcional*, não há restrições quanto ao número e posições dos vizinhos mais próximos.
- A estrutura cristalina dos metais pode ter um grande número de vizinhos e alto empacotamento atômico.



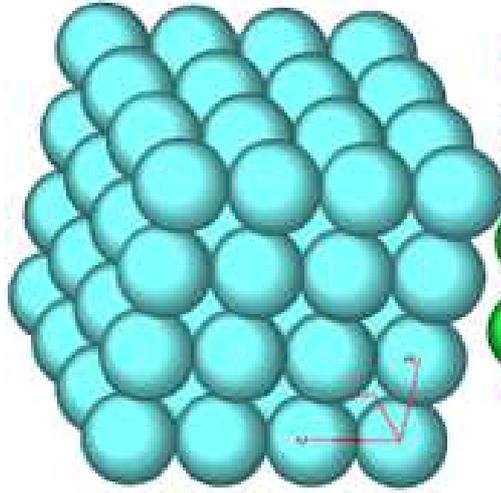
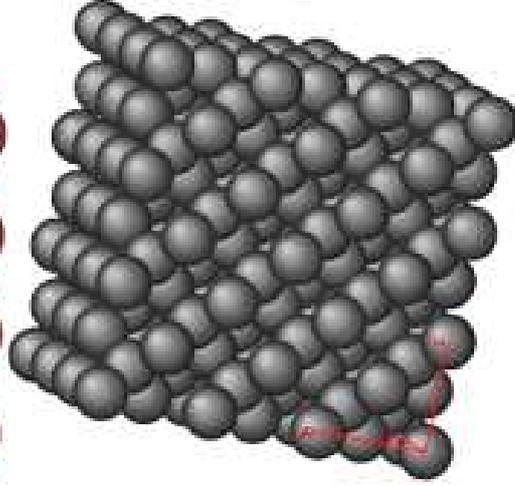
As estruturas cristalinas mais comuns em metais são:

- CS (cúbica simples)
- CCC (cúbica de corpo centrado)
- CFC (cúbica de face centrada)
- HC (hexagonal compacta)

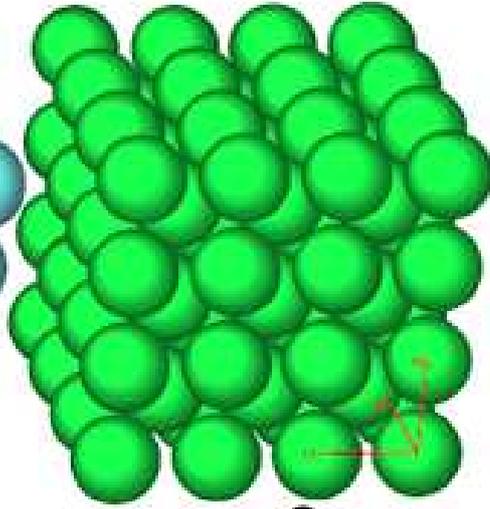
Cúbico
Face
Centrada



Cúbico
complejo
(diamante)



Cúbico
Simple

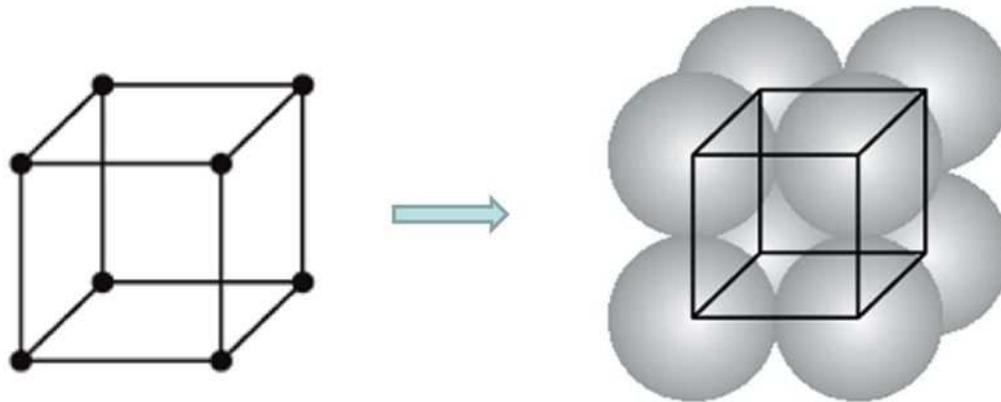


Cúbico
Corpo
Centrado

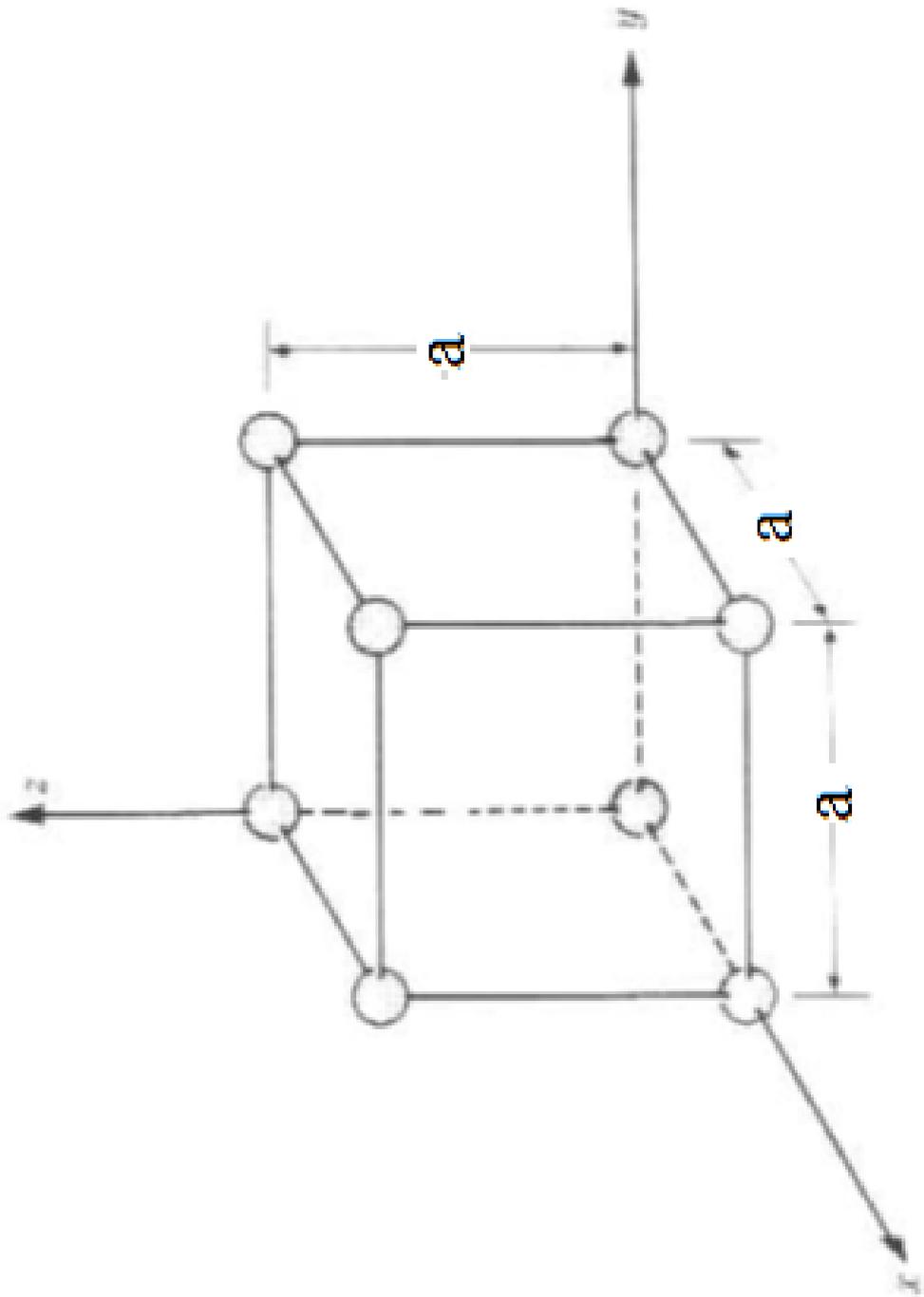


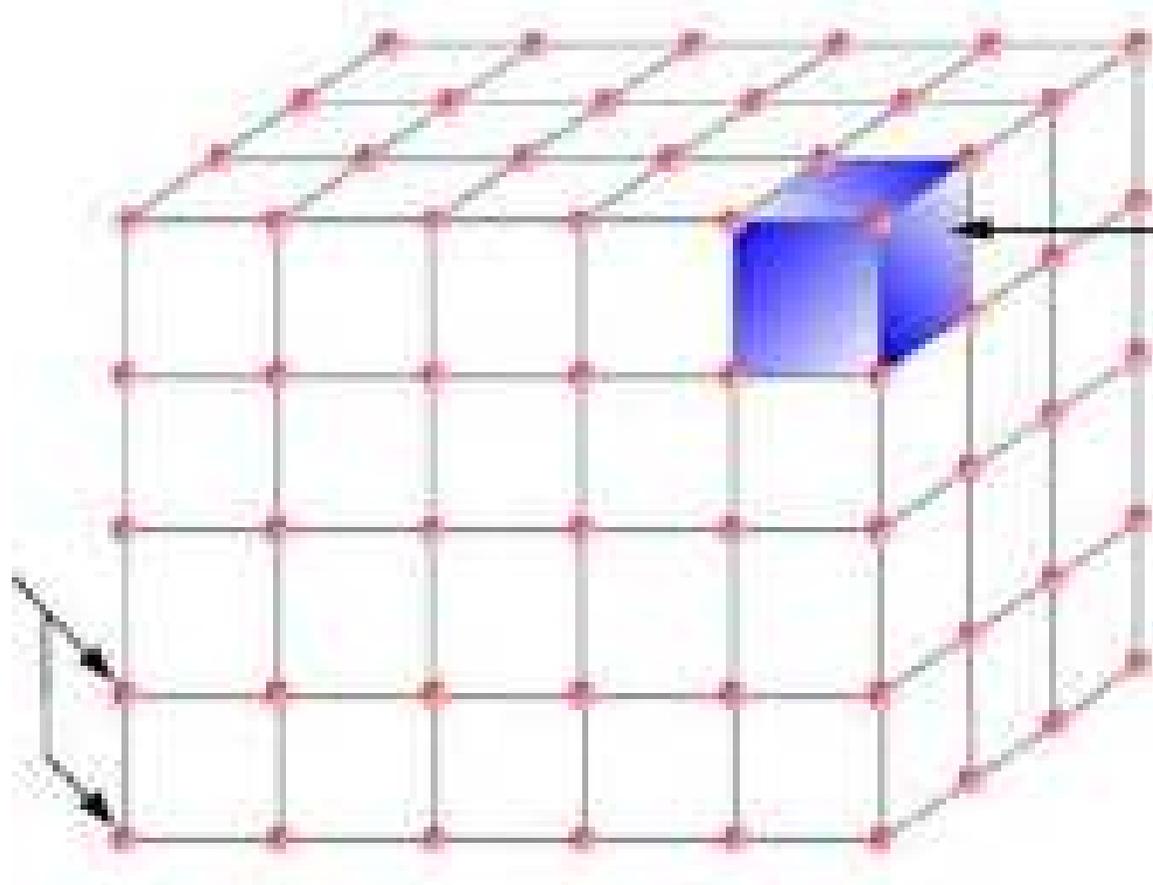
Célula Unitária: Estrutura cúbica simples

Estrutura cúbica simples



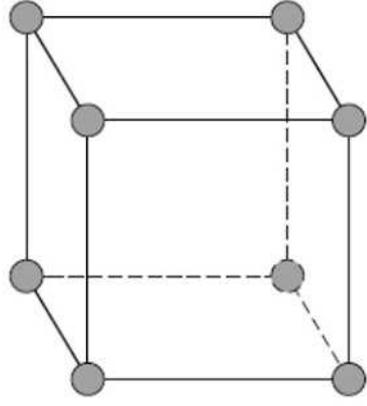
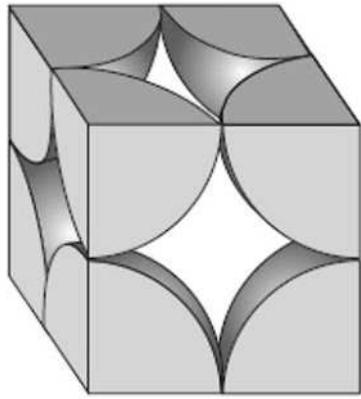
Na estrutura cúbica simples, um átomo ocupa cada um dos pontos do retículo, ou seja, os vértices do cubo.





Parâmetro de rede (a)

Célula unitária

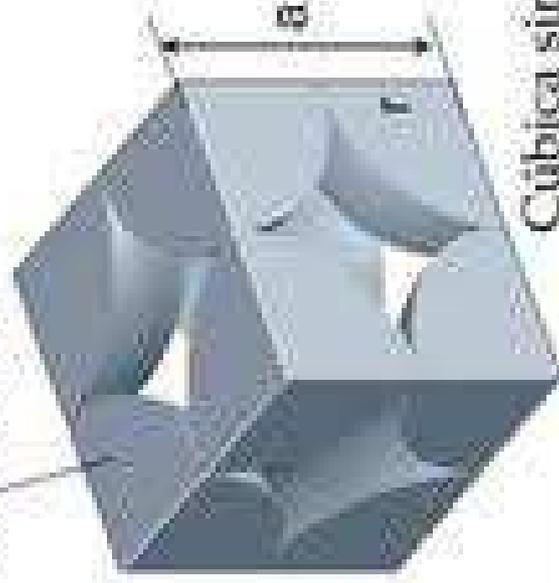


Célula Unitária Cúbica Simples (CS)

A célula unitária da estrutura *cúbica simples* é constituída por um cubo com $1/8$ de átomo em cada vértice, que se repete nas três dimensões formando um corpo sólido macroscópico.

- dentre os metais só o polônio apresenta esta estrutura
- como o sistema CS contém $1/8$ de átomo em cada vértice e o cubo contém 8 vértice, então, representativamente a célula unitária contém um átomo completo por cubo ($8 \times 1/8 = 1$).
- o parâmetro de rede é $2 \times R$, $a = 2R$ (onde R : raio atômico)
- número de coordenação = 6

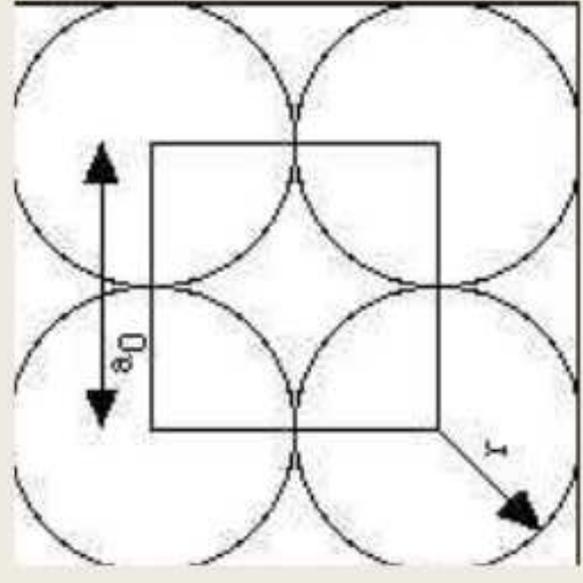
$\frac{1}{8}$ dos átomos nos 8 vértices



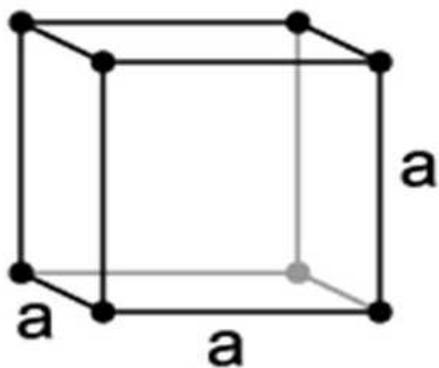
Cúbica simples

No sistema cúbico simples os átomos se tocam na face

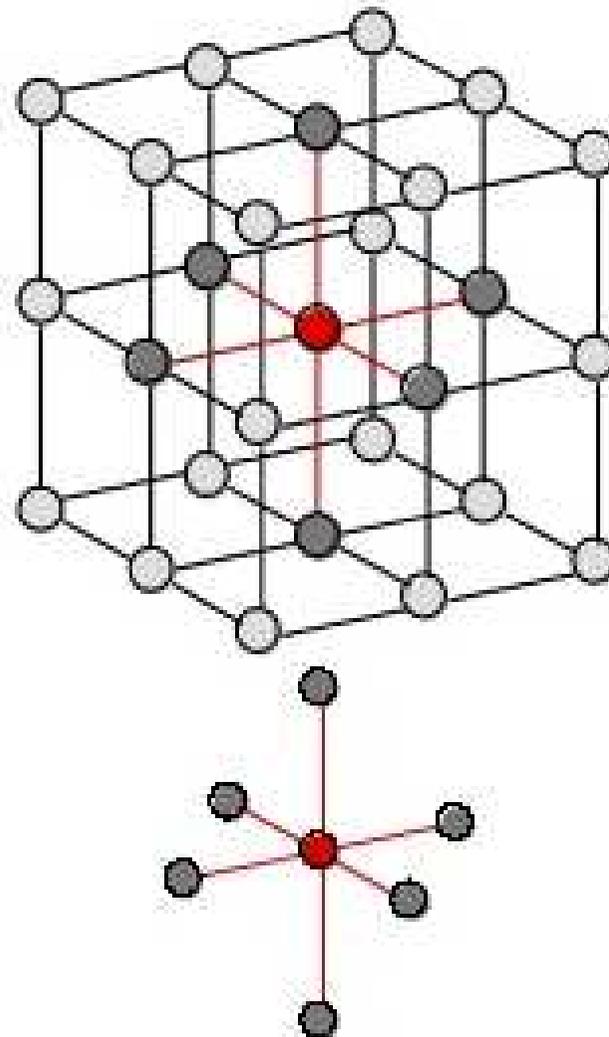
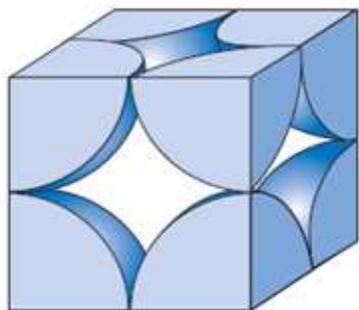
$$a = 2R$$



Número de coordenação = 6



Parâmetro de rede = $a = 2R$



$$\text{Número de átomos por célula unitária} = N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_v}{8}$$

onde,

N_i = número de átomos no interior da célula unitária

N_f = número de átomos nas faces da célula unitária

N_v = número de átomos nos vértices da célula unitária

$$\text{Volume de 1 átomo (esférico)} = \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$\text{Volume da célula unitária} = a^3 = (2R)^3 = 8R^3$$

Fator de Empacotamento Atômico

$$FEA = \frac{\text{Volume(átomos)}}{\text{Volume(célula)}} = \frac{N(\text{átomos})V(\text{látomo})}{a^3} = \frac{N(\text{átomos})\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$$

Cálculo do fator de empacotamento atômico da célula unitária do sistema CS

$$FEA = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{8R^3} = \frac{1}{6} \pi = 0,524$$

52,4 % do volume da célula unitária está preenchido por átomos

• **Massa Específica (densidade, ρ):**

$$\rho = \frac{N A}{V_c N_A}$$

N = Número de átomos por célula unitária

A = Peso atômico

V_c = Volume da célula unitária

N_A = Número de Avogadro = $6,022 \times 10^{23}$ átomos /mol

Para o Polônio

$$\rho = 9,3 \text{ g/cm}^3$$

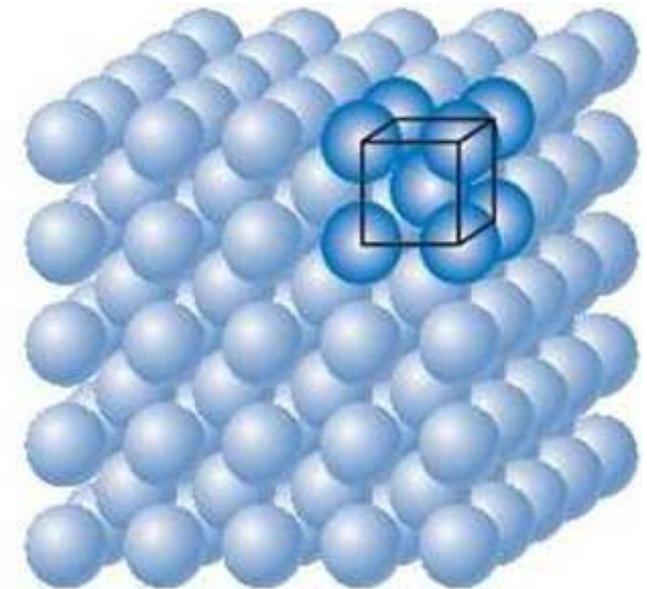
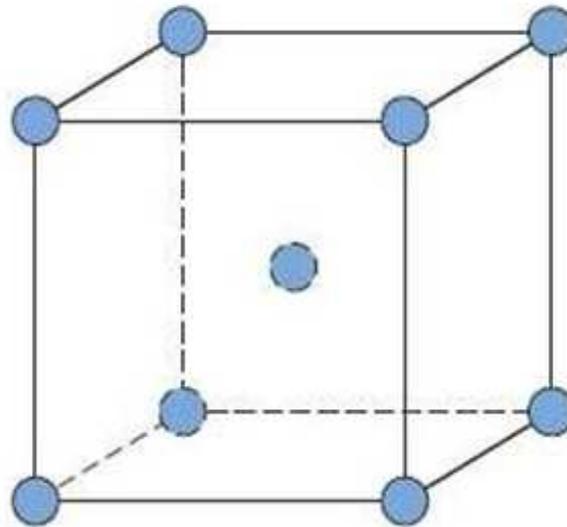
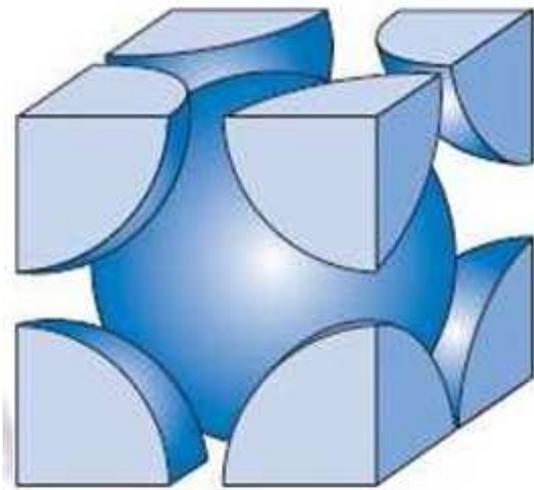
$$N = 1$$

$$A = 208,98 \text{ g/mol}$$

$$V_c = 8 R^3$$

$$\rho = \frac{1 \times 208,98}{8 (1,68 \times 10^{-8})^3 6,022 \times 10^{23}} = 9,23 \text{ g/cm}^3$$

**Célula Unitária:
Estrutura cúbica de corpo centrado**



A célula unitária da estrutura *cúbica de corpo centrado (CCC)* é constituída por um cubo com 1/8 de átomo em cada vértice e um átomo no centro do cubo, que se repete nas três dimensões formando um corpo sólido macroscópico.

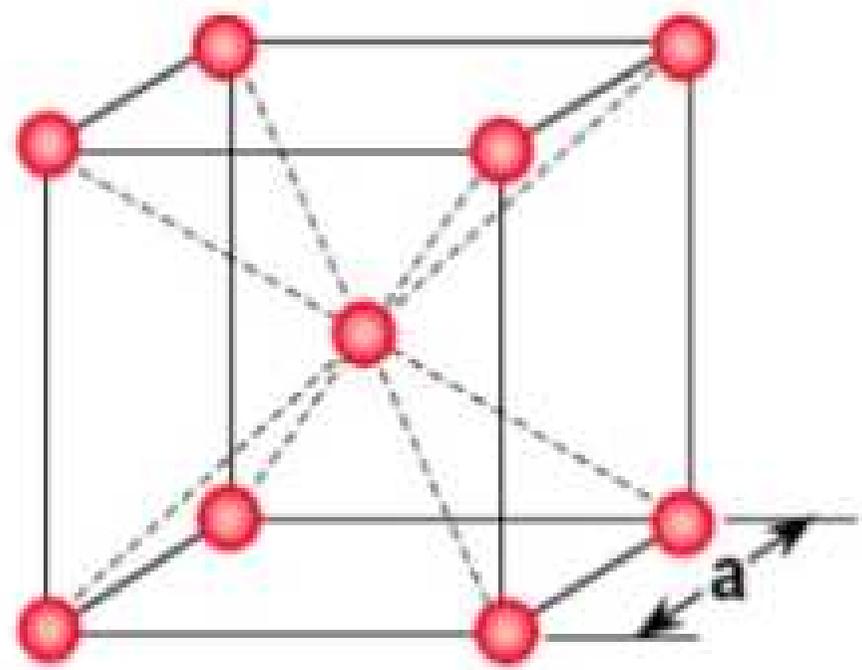
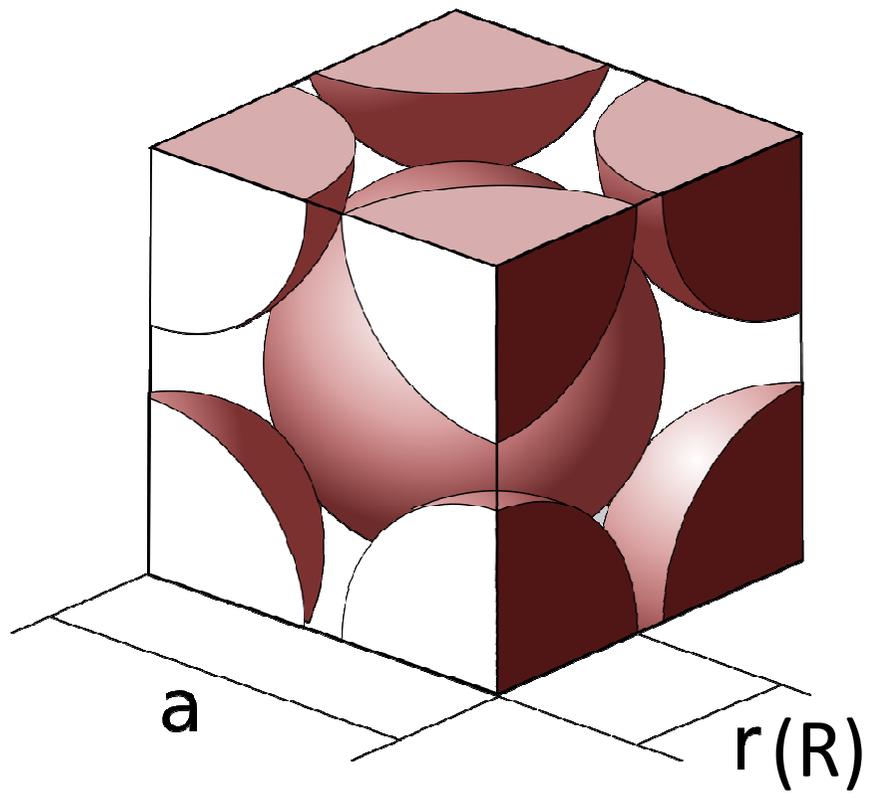
– vários metais apresenta a estrutura CCC: Cr, Fe, Mo, W, etc

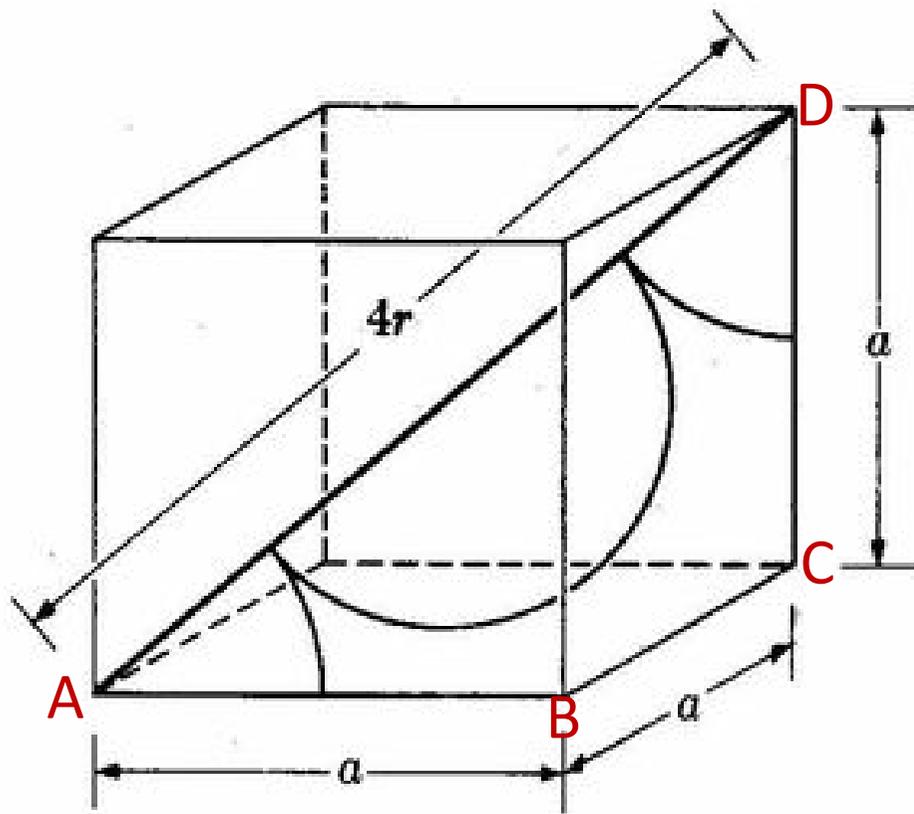
– Número de átomos por célula unitária = $N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_v}{8}$

$$N = 1 + 0 + 8/8 = 2 \text{ átomos}$$

– o parâmetro de rede $a = 4 R/\sqrt{3}$ (onde R : raio atômico)

– número de coordenação = 8





Triângulo **ABC**: Diagonal da face do cubo (d)

$$d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$$

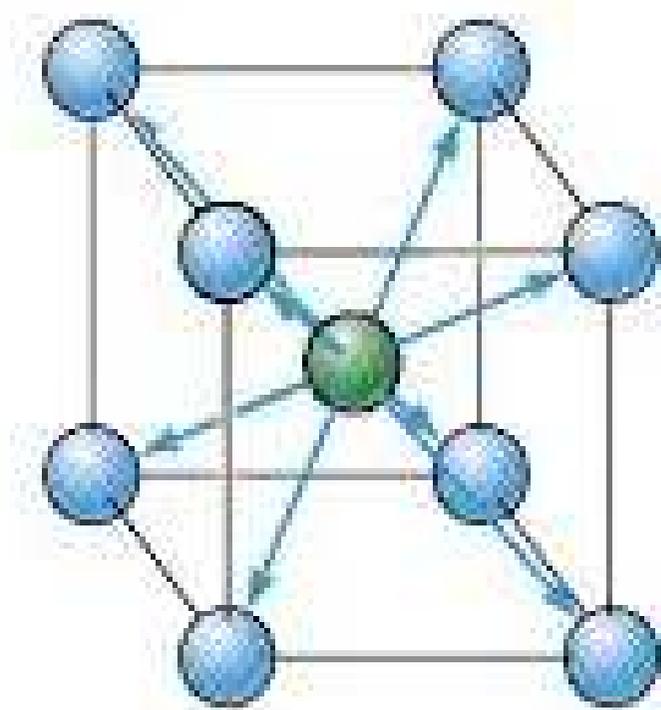
$$d = a\sqrt{2}$$

Triângulo **ACD**:

$$(4R)^2 = a^2 + (a\sqrt{2})^2 = 3a^2$$

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

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



Oito átomos estão em contato na célula unitária CCC. Número de coordenação = 8

$$\text{Volume da célula unitária} = a^3 = (4 R/\sqrt{3})^3 = (64/3\sqrt{3}) R^3 = 12,317 R^3$$

Cálculo do fator de empacotamento atômico da célula unitária do sistema CCC

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

68 % do volume da célula unitária está preenchido por átomos

Para o molibdenio

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

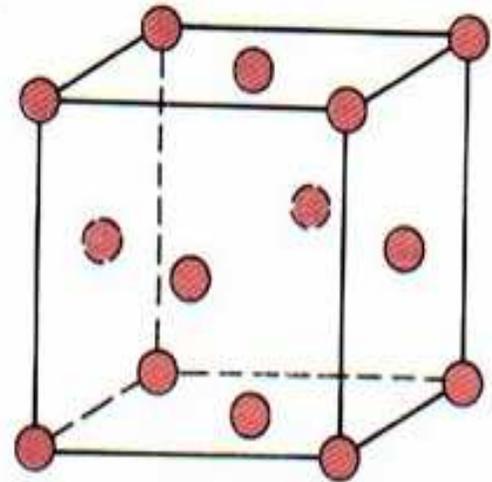
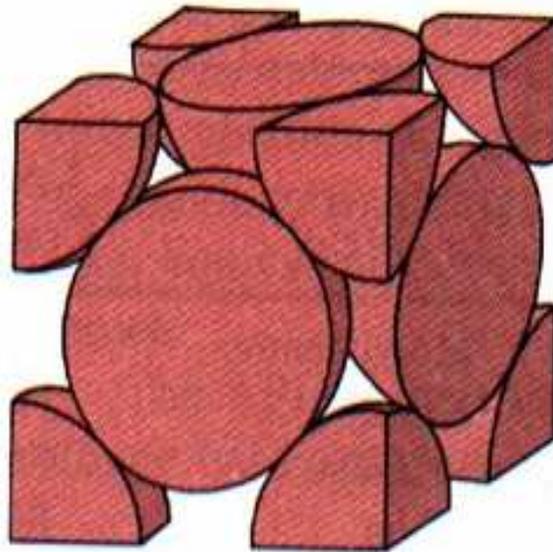
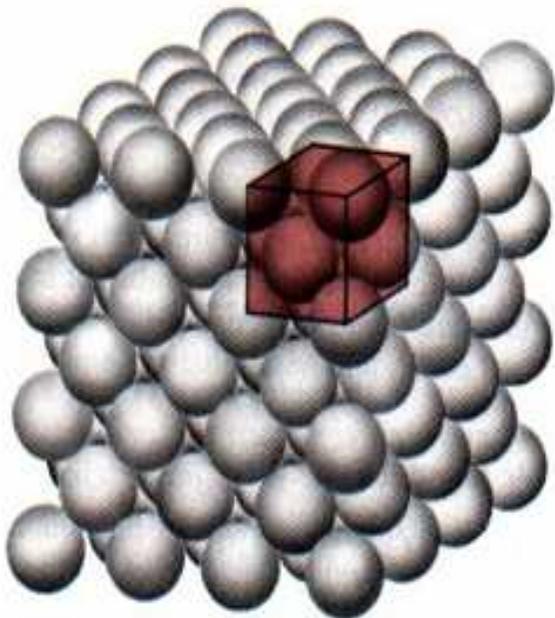
$$N = 2$$

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

$$V_c = 12,317 R^3$$

$$\rho = \frac{2 \times 95,94}{12,317 (1,364 \times 10^{-8})^3 6,022 \times 10^{23}} = 10,19 \text{ g/cm}^3$$

Célula Unitária: Estrutura cúbica de face centrada



A célula unitária da estrutura *cúbica de face centrada (CFC)* é constituída por um cubo com 1/8 de átomo em cada vértice e meio átomo no centro de cada face, que se repete nas três dimensões formando um corpo sólido macroscópico.

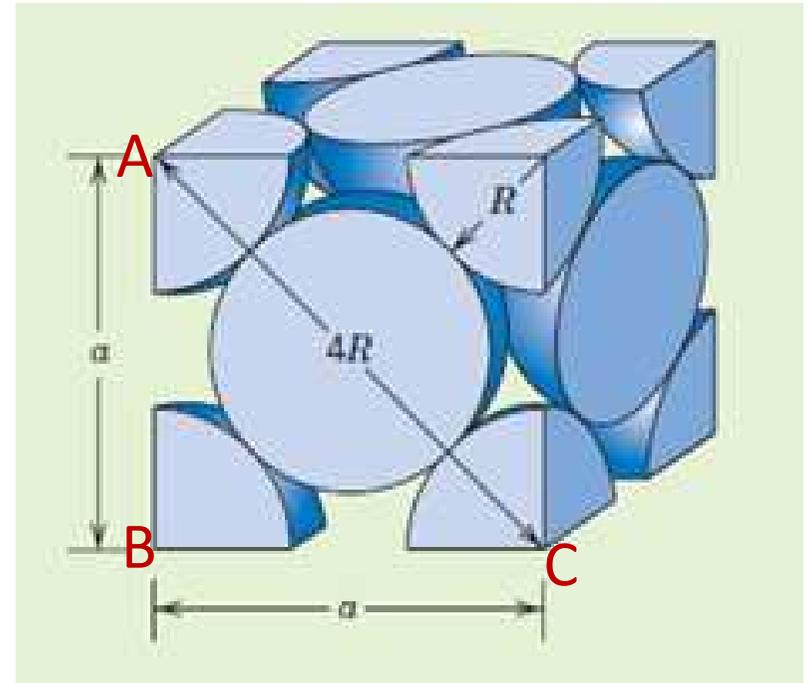
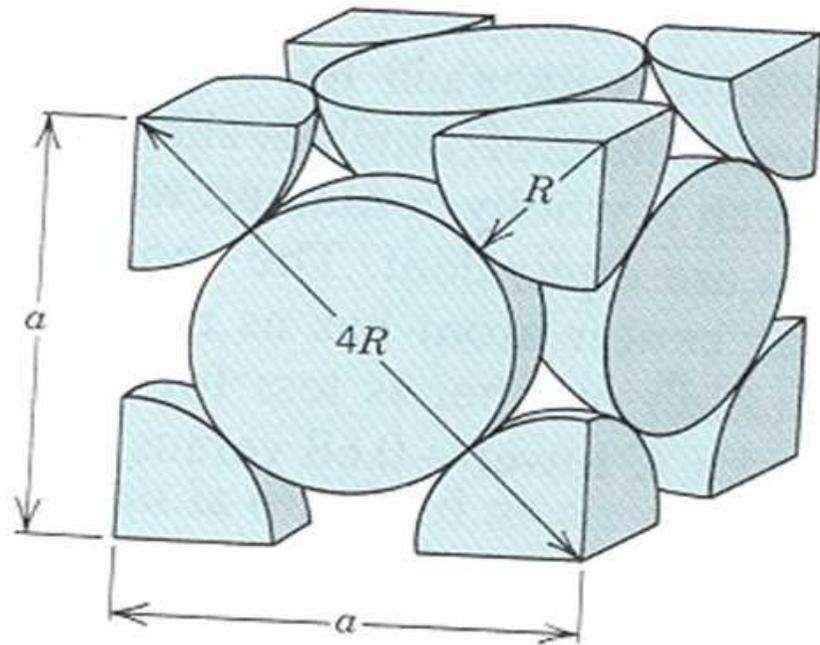
– vários metais apresenta a estrutura CCC: Cu, Al, Ni, Au, Pb, Pt, etc

– Número de átomos por célula unitária = $N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_v}{8}$

$$N = 0 + 6/2 + 8/8 = 3 + 1 = 4 \text{ átomos}$$

– o parâmetro de rede $a = 2\sqrt{2} R$ (onde R : raio atômico)

– número de coordenação = 12



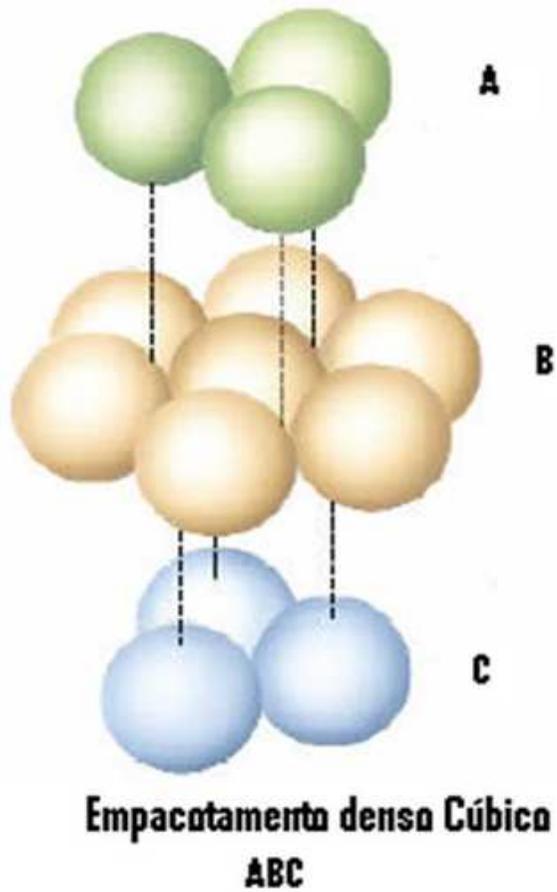
Triângulo **ABC**:

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

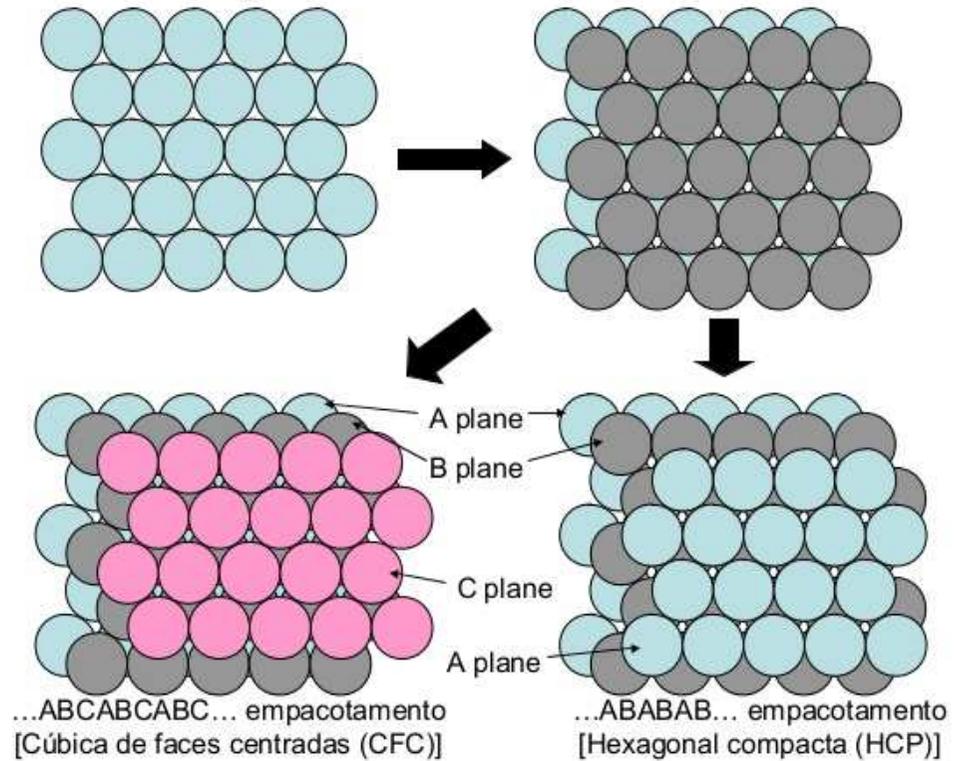
$$16R^2 = 2a^2$$

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

$$\text{Volume} = a^3 = (2\sqrt{2}R)^3 = \left(\frac{4}{\sqrt{2}}\right)^3 R^3 = \frac{32}{\sqrt{2}} R^3$$



Diferença entre C.F.C. e H.C.P.



Número de coordenação = 12

Cálculo do fator de empacotamento atômico da célula unitária do sistema CFC

$$FEA = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(2\sqrt{2}R)^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{16\sqrt{2}R^3} = \left(\frac{1}{3\sqrt{2}}\right) \pi = 0,74$$

74 % do volume da célula unitária está preenchido por átomos

Para o ouro

$$\rho = 19,32 \text{ g/cm}^3$$

$$N = 4$$

$$A = 196,97 \text{ g/mol}$$

$$V_c = 22,6275 R^3$$

$$\rho = \frac{4 \times 196,97}{22,6275 (1,443 \times 10^{-8})^3 6,022 \times 10^{23}} = 19,26 \text{ g/cm}^3$$

