

Estrutura dos sólidos cristalinos:

- **Superfícies de baixo índice de Miller**

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

Ciência dos Materiais

2. Estrutura dos sólidos cristalinos

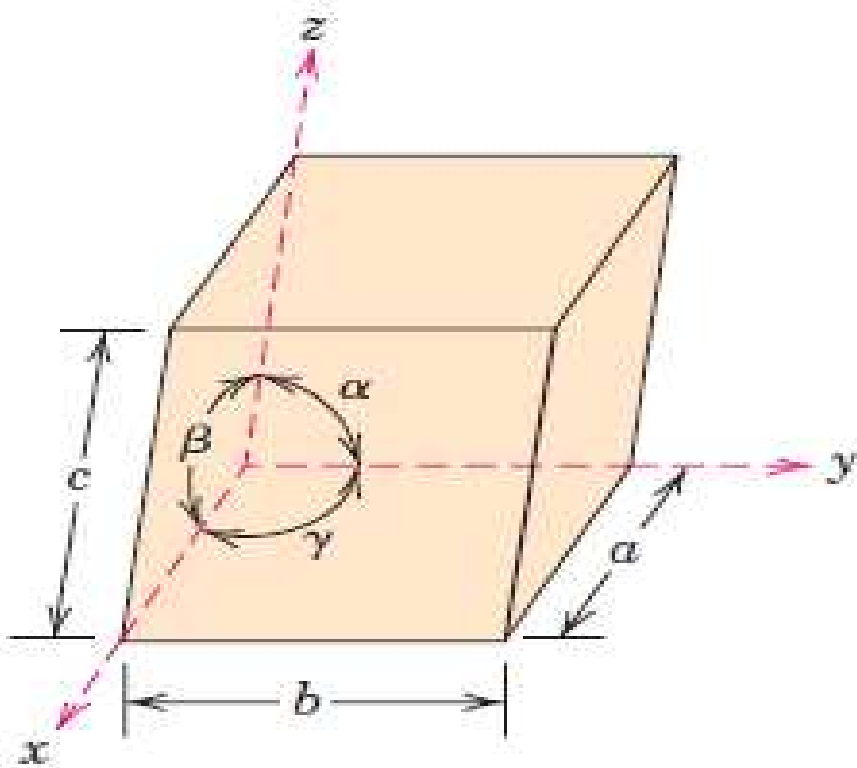
raio atômico

modelo de empacotamento compacto em sólidos metálicos

sítios cristalinos octaédricos e tetraédricos

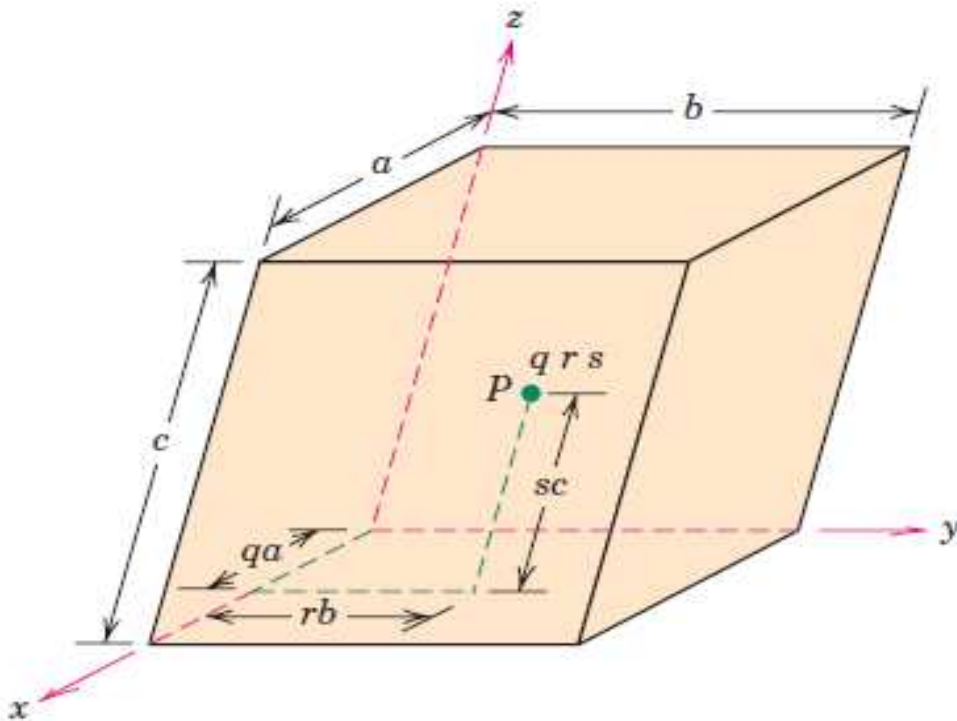
superfícies de baixo índice de Miller

Pontos, Direções e Planos Cristalográficos



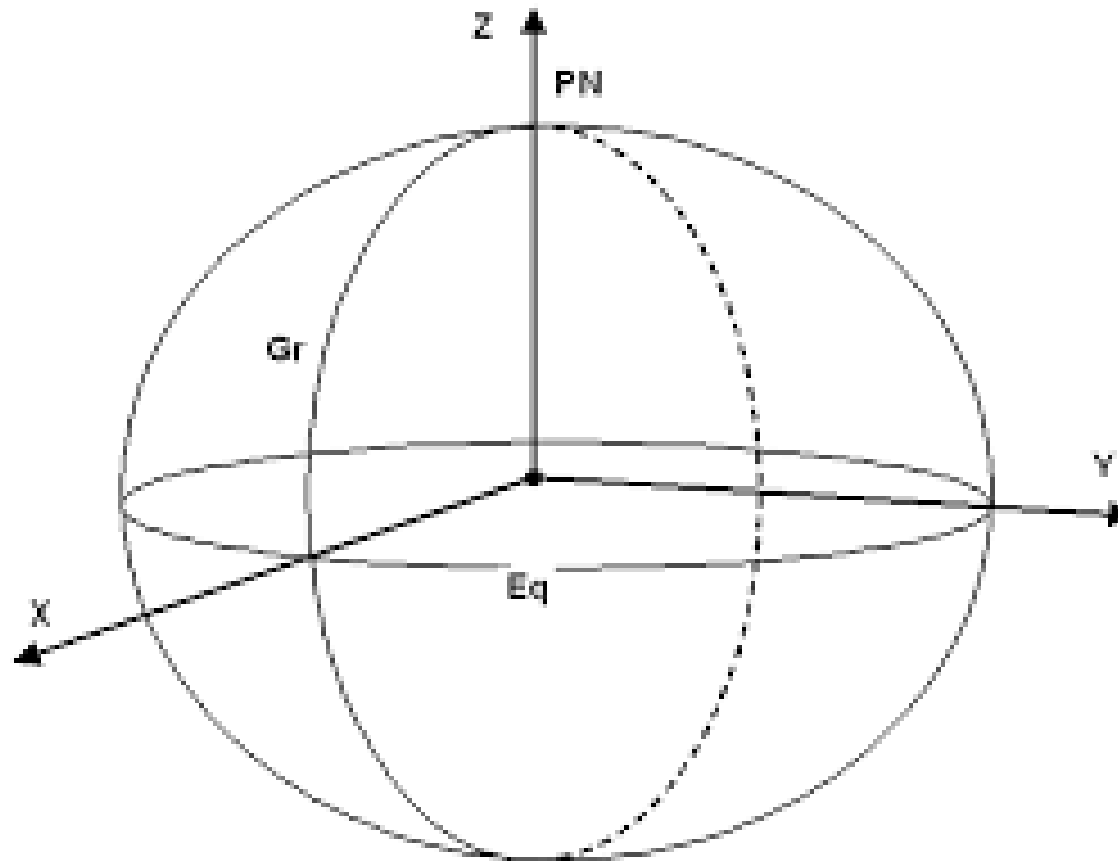
Célula unitária genérica com eixos de coordenadas x , y e z , mostrando as arestas a , b e c e os ângulos α , β e γ

Determinação das coordenadas do ponto P

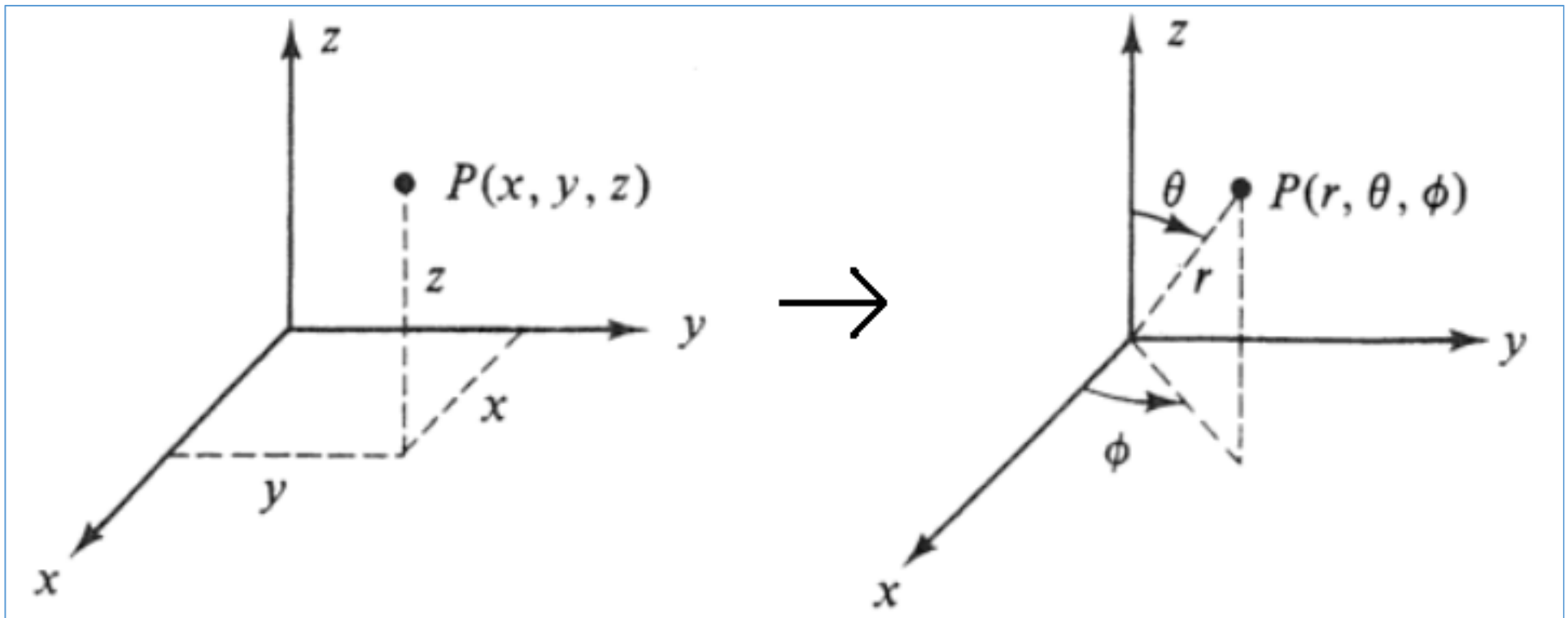


a , b e c são os comprimentos das arestas da célula unitária.
As coordenadas q , r e s correspondem às frações qa , rb e sc .

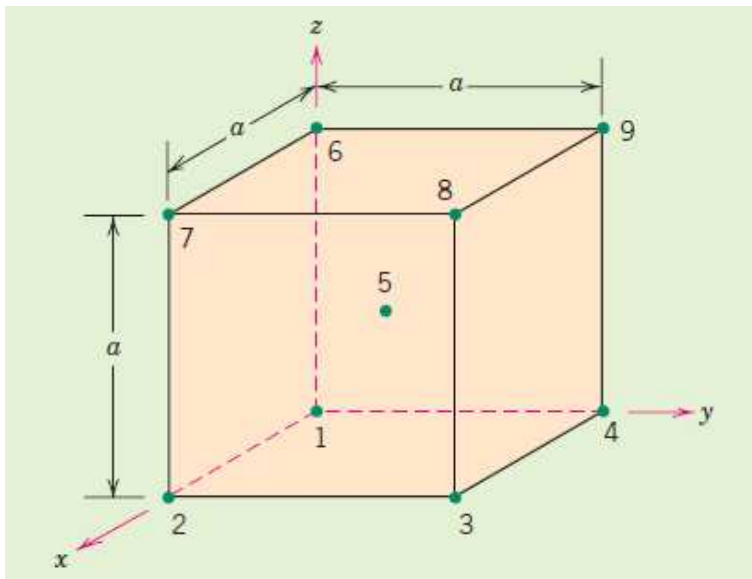
Coordenadas no sistema cristalino cúbico



Coordenadas cartesianas vs. coordenadas polares

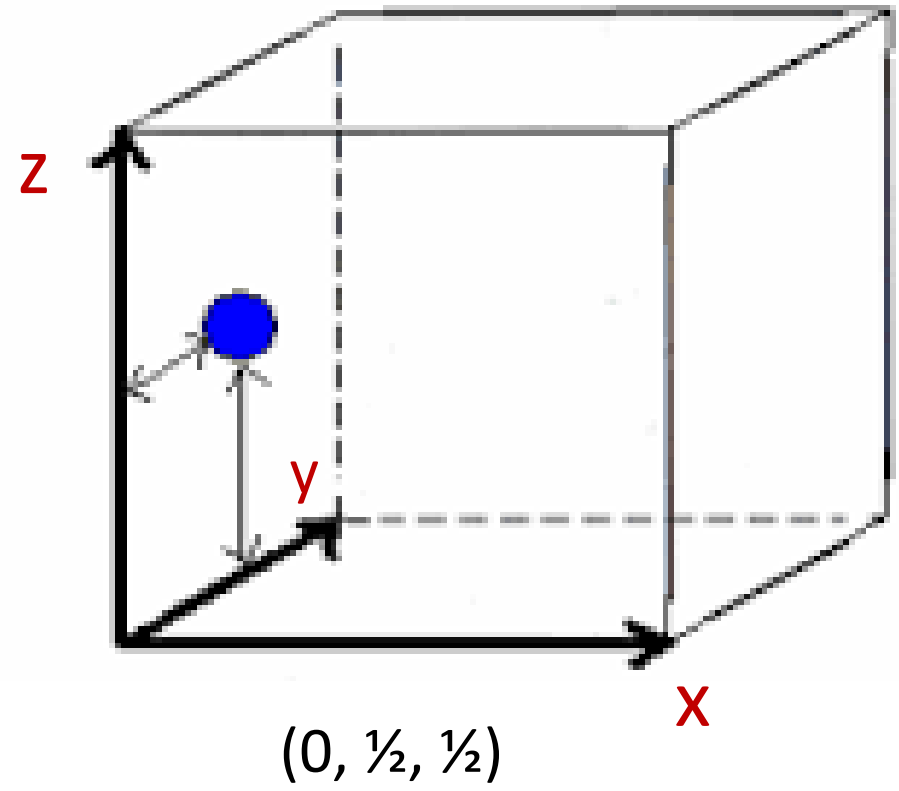
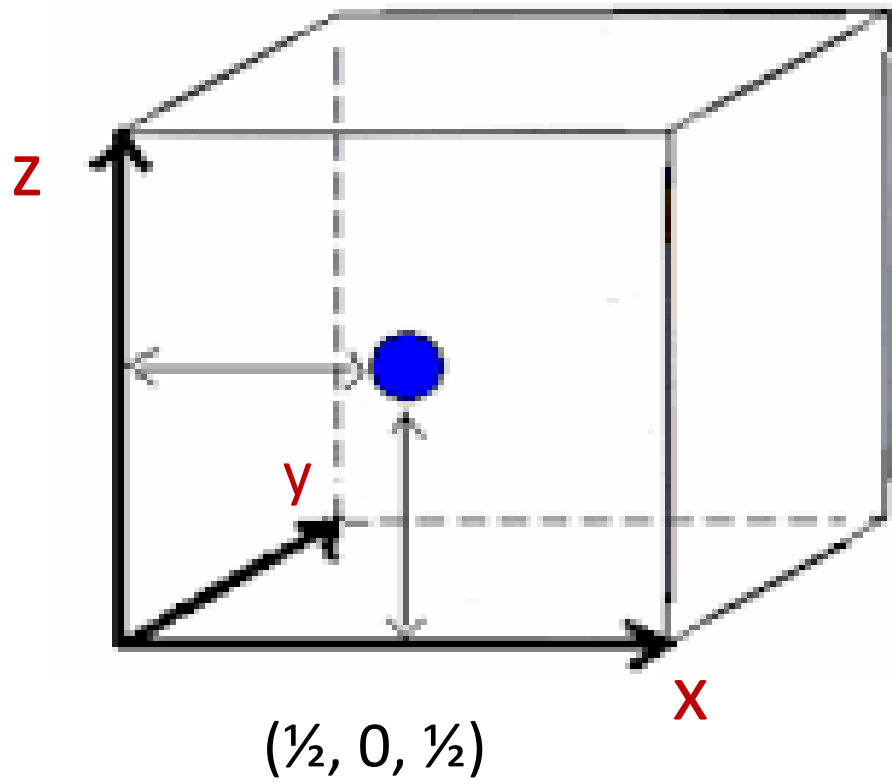


Coordenadas no sistema cúbico: coordenadas dos pontos numerados (posições atômicas) em uma célula unitária CCC.

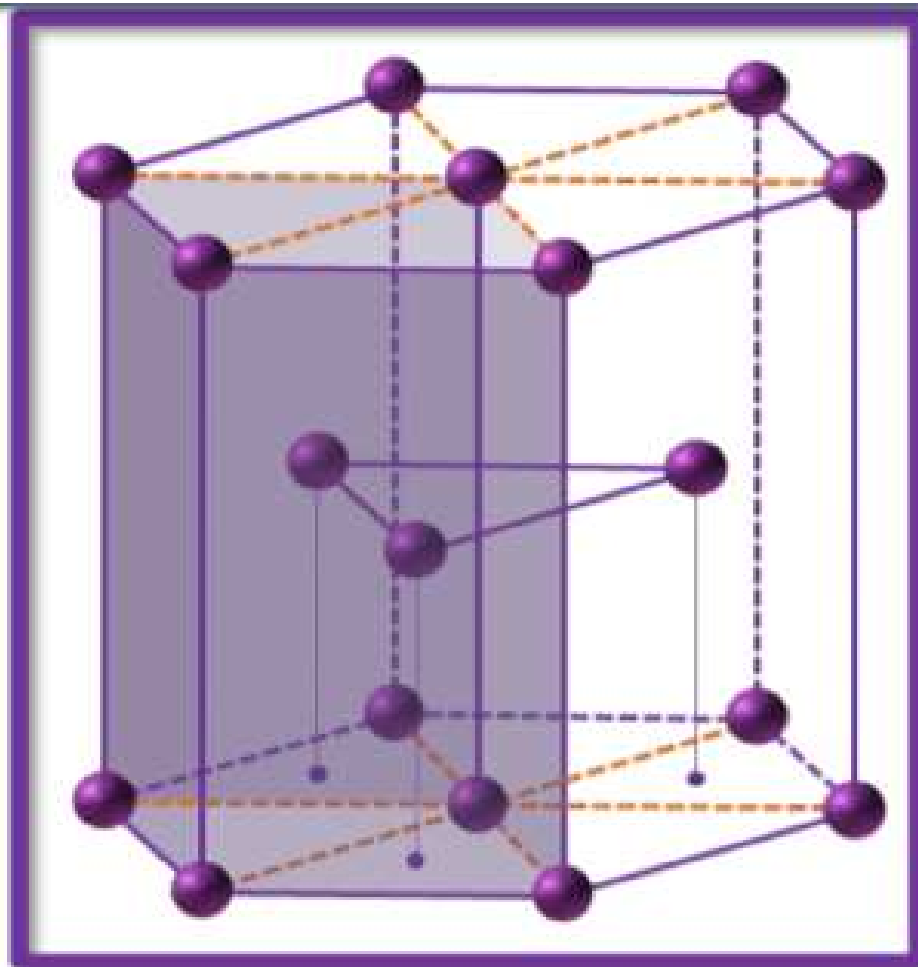


<i>Point Number</i>	<i>Fractional Lengths</i>			<i>Point Coordinates</i>
	<i>x axis</i>	<i>y axis</i>	<i>z axis</i>	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
6	0	0	1	0 0 1
7	1	0	1	1 0 1
8	1	1	1	1 1 1
9	0	1	1	0 1 1

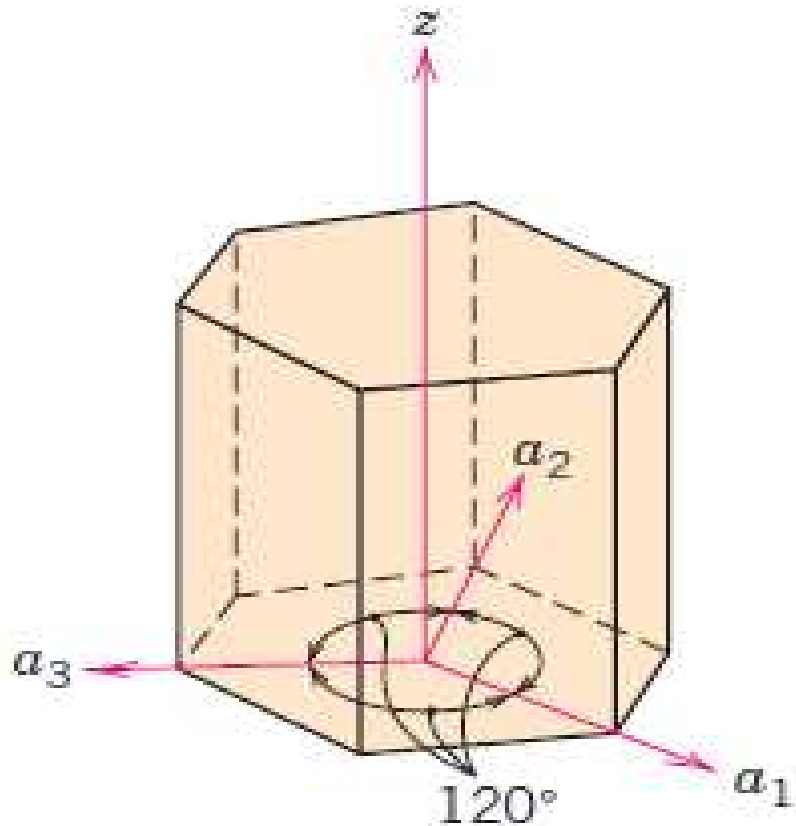
Sistema CFC



Coordenadas no sistema hexagonal

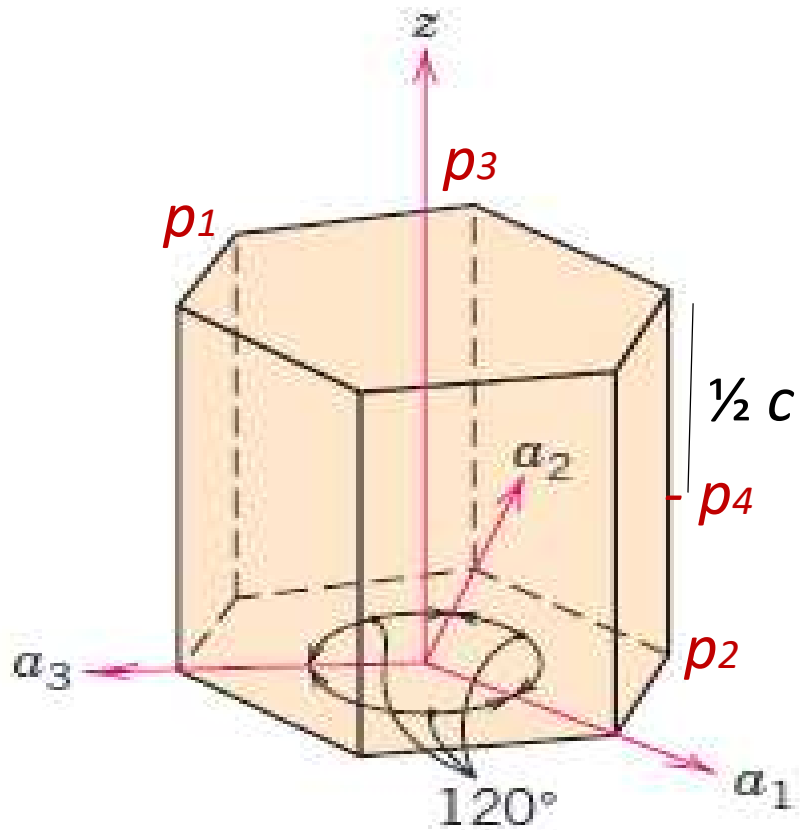


Coordenadas no sistema hexagonal



Sistema de coordenada com quatro eixos: três dos eixos estão contidos no mesmo plano a_1 , a_2 e a_3 (*plano basal*) e formam ângulos de 120° entre si. O eixo z é perpendicular ao plano basal. As coordenadas de um ponto no sistema hexagonal são representadas por quatro pontos.

Coordenadas dos pontos



$$P_1 = (-1, 0, 0, 1)$$

$$P_2 = (0, 0, -1, 0)$$

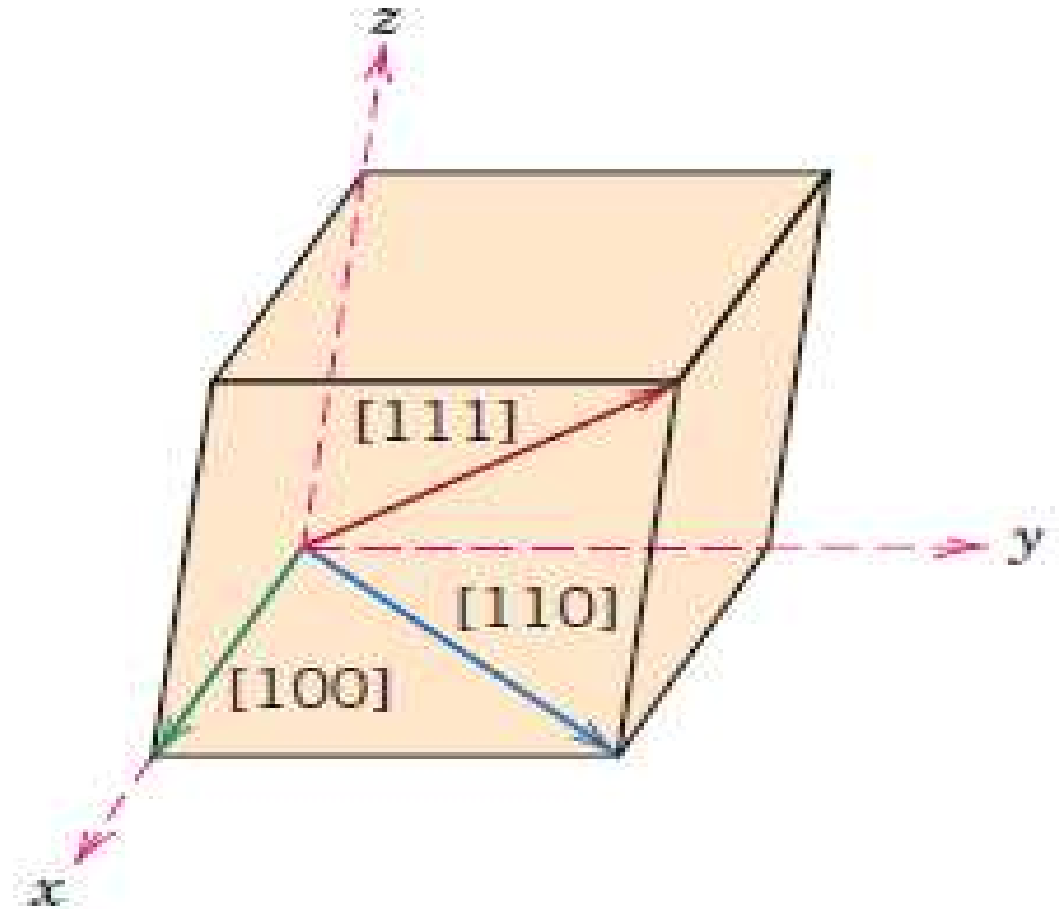
$$P_3 = (0, 1, 0, 1)$$

$$P_4 = (0, 0, -1, \frac{1}{2})$$

Direções Cristalográficas – Índice de Miller-Bravais

DIREÇÕES SÃO IDENTIFICADAS
PELOS ÍNDICES DE MILLER

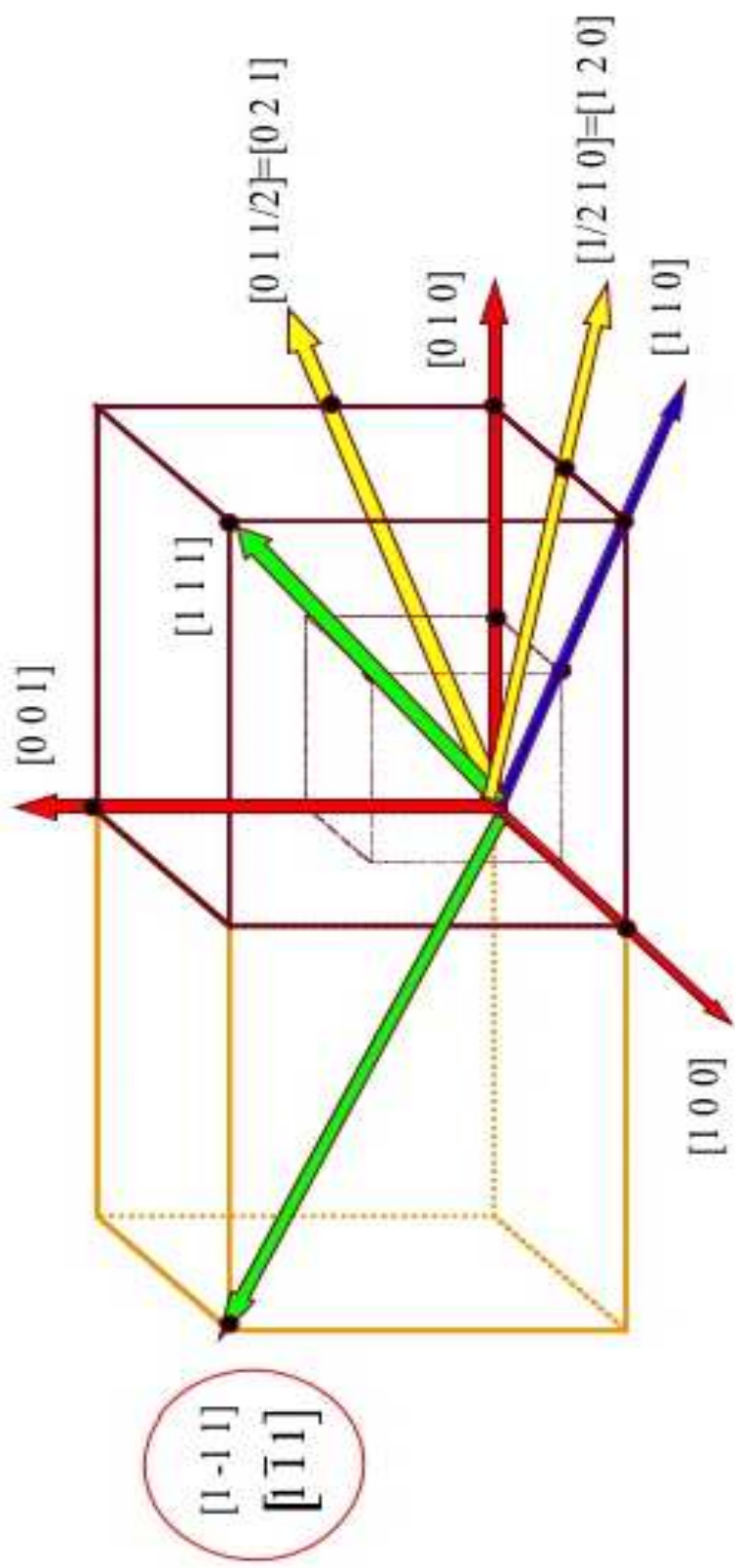
Direções $[1\ 0\ 0]$, $[1\ 1\ 0]$ e $[1\ 1\ 1]$
dentro da célula unitária

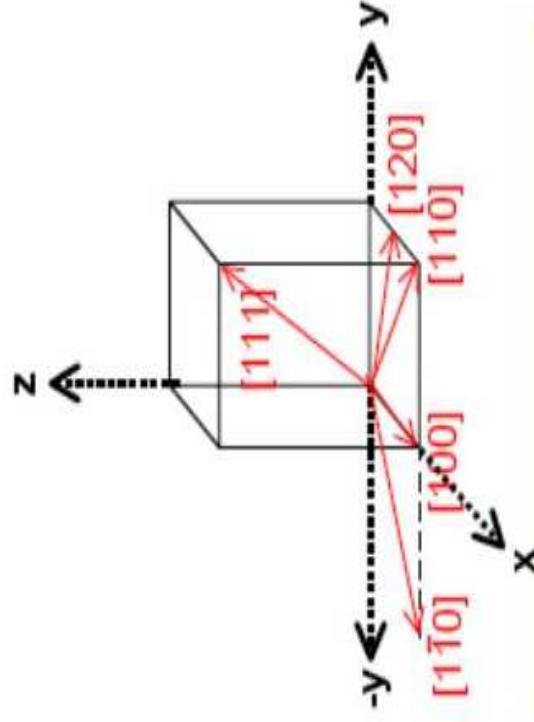


Direções Cristalográficas no Sistema Cúbico

As seguintes etapas devem ser consideradas para determinação dos índices direcionais:

- 1- O vetor deve ser posicionado passando através da origem do sistema de coordenadas, mantendo-se o seu paralelismo;
- 2- Determinar os comprimentos das projeções do vetor sobre cada um dos três eixos;
- 3- Esses três números são multiplicados ou divididos por um fator comum, para reduzi-los aos menores valores inteiros;
- 4- Os três índices são colocados entre colchetes, sem separação por vírgulas: $[u\ v\ w]$.

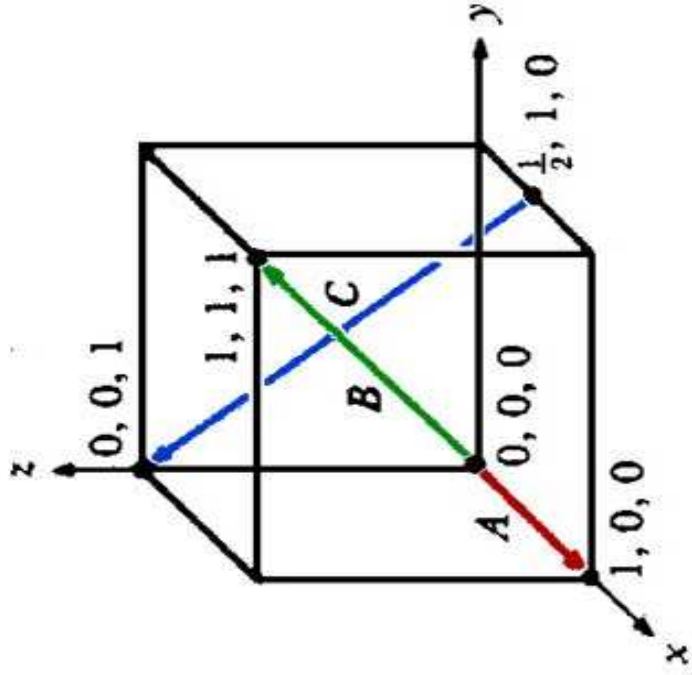




Índices de uma direção $[120]$

	x	y	z
Projeções	a/2	b	0c
Projeções	1/2	1	0
Reduções	1	2	0

Representação $[120]$



Direção A:

1. alvo = 1, 0, 0; origem = 0, 0, 0
2. alvo - origem = 1, 0, 0
3. sem frações
4. $[1\ 0\ 0]$

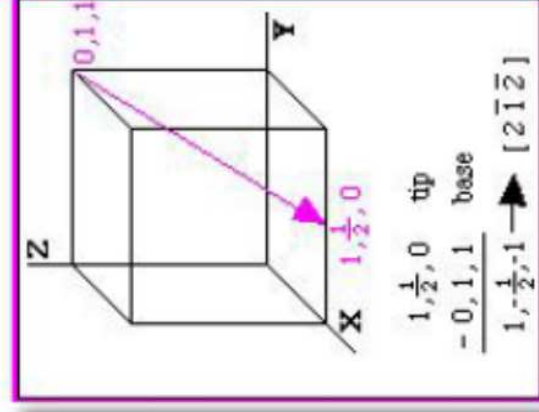
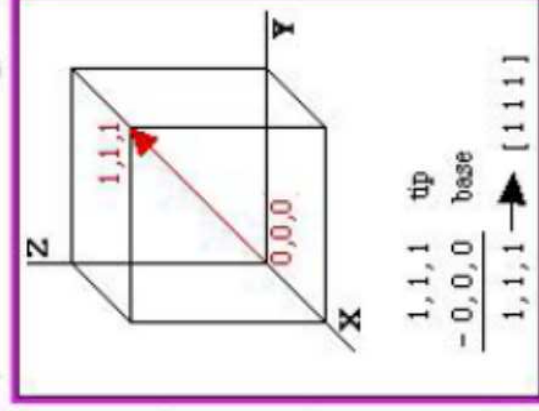
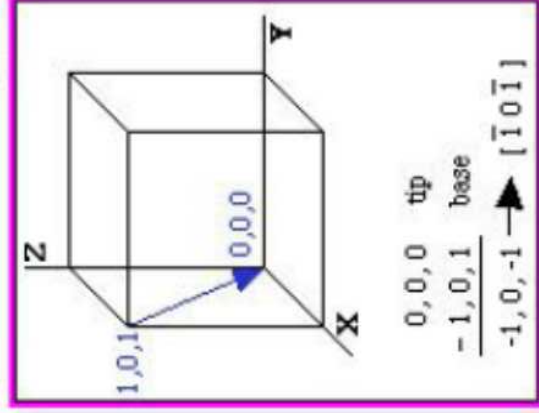
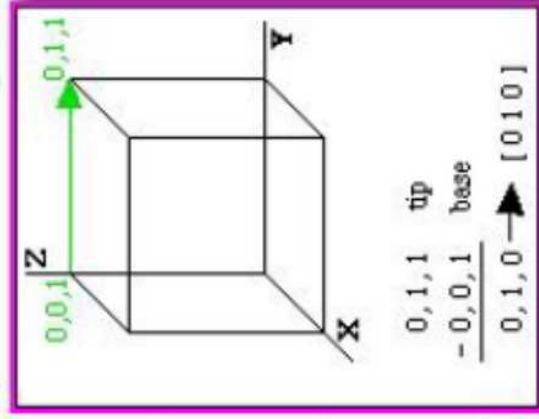
Direção B:

1. alvo = 1, 1, 1; origem = 0, 0, 0
2. alvo - origem = 1, 1, 1
3. sem frações
4. $[1\ 1\ 1]$

Direção C:

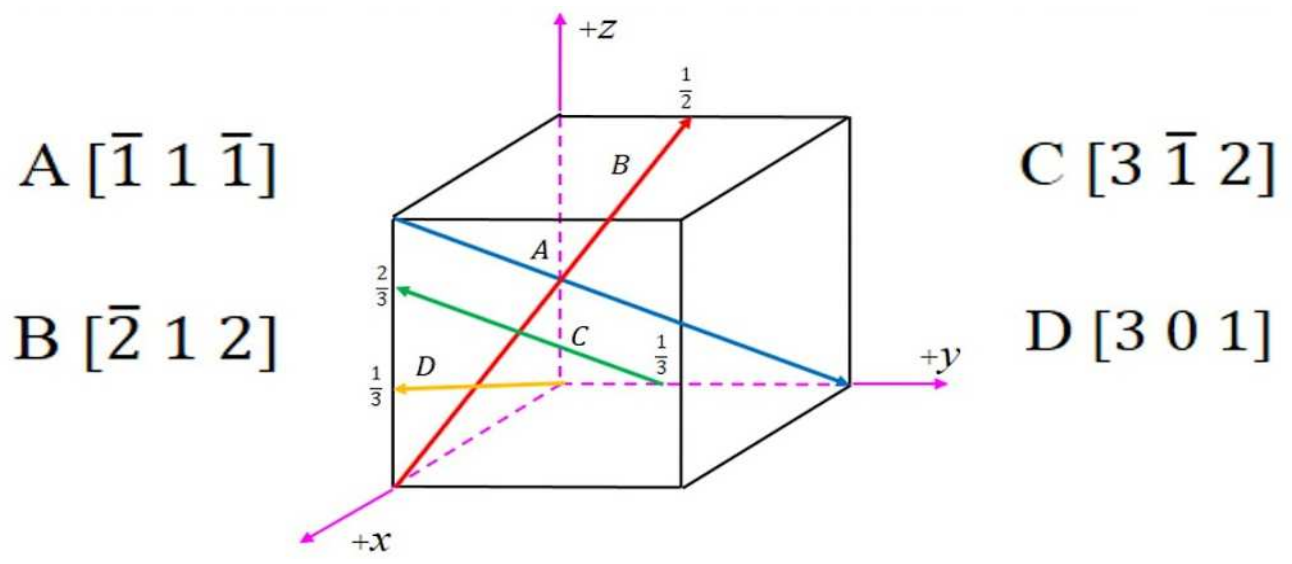
1. alvo = 0, 0, 1; origem = $1/2, 1, 0$
2. alvo - origem = $-1/2, -1, 1$
3. $2(-1/2, -1, 1) = -1, -2, 2$
4. $\overline{[1\ 2\ 2]}$

➤ Direções cristalinas em estruturas cúbicas – $[hkl]$ ou $\langle hkl \rangle$



Regras:

- Estabeleça a origem do sistema de coordenadas
- Determine as coordenadas da base do “vetor”
- Determine as coordenadas da ponta do “vetor”
- Subtraia as coordenadas
- Caso necessário racionalize os índices $[hkl]$ para números inteiros



A $[\bar{1} \ 1 \ \bar{1}]$

B $[\bar{2} \ 1 \ 2]$

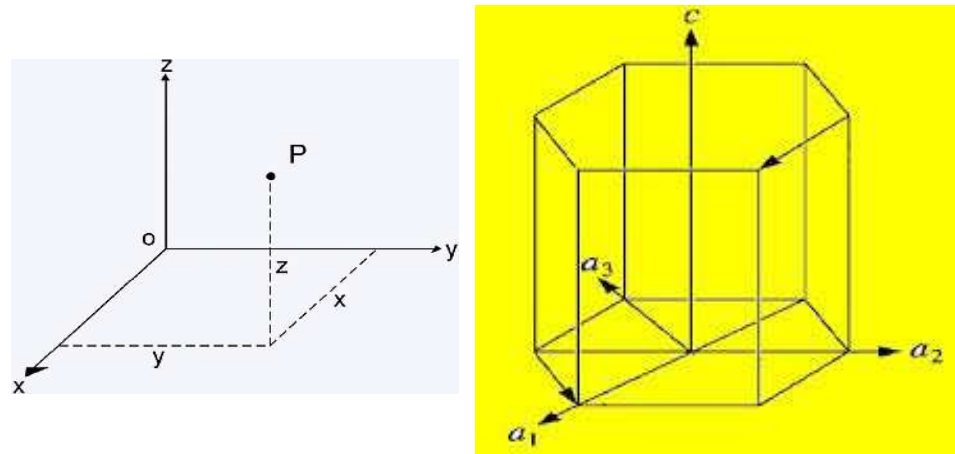
C $[3 \ \bar{1} \ 2]$

D $[3 \ 0 \ 1]$

A	B	C	D
$(0, 1, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, 1)$	$(1, 0, \frac{2}{3})$	$(1, 0, \frac{1}{3})$
$-(1, 0, 1)$	$-(1, 0, 0)$	$-(0, \frac{1}{3}, 0)$	$-(0, 0, 0)$
<hr/>	<hr/>	<hr/>	<hr/>
$[\bar{1} \ 1 \ \bar{1}]$	$[\bar{1} \ \frac{1}{2} \ 1] \equiv [\bar{2} \ 1 \ 2]$	$[1 \ \frac{1}{3} \ \frac{2}{3}] \equiv [3 \ \bar{1} \ 2]$	$[1 \ 0 \ \frac{1}{3}] \equiv [3 \ 0 \ 1]$

Direções Cristalográficas no Sistema Hexagonal

Direções em cristais hexagonais



$$[x \ y \ z] \rightarrow [a_1, a_2, a_3, c]$$

Conversão do sistema de três índices basais para o sistema de quatro índices:

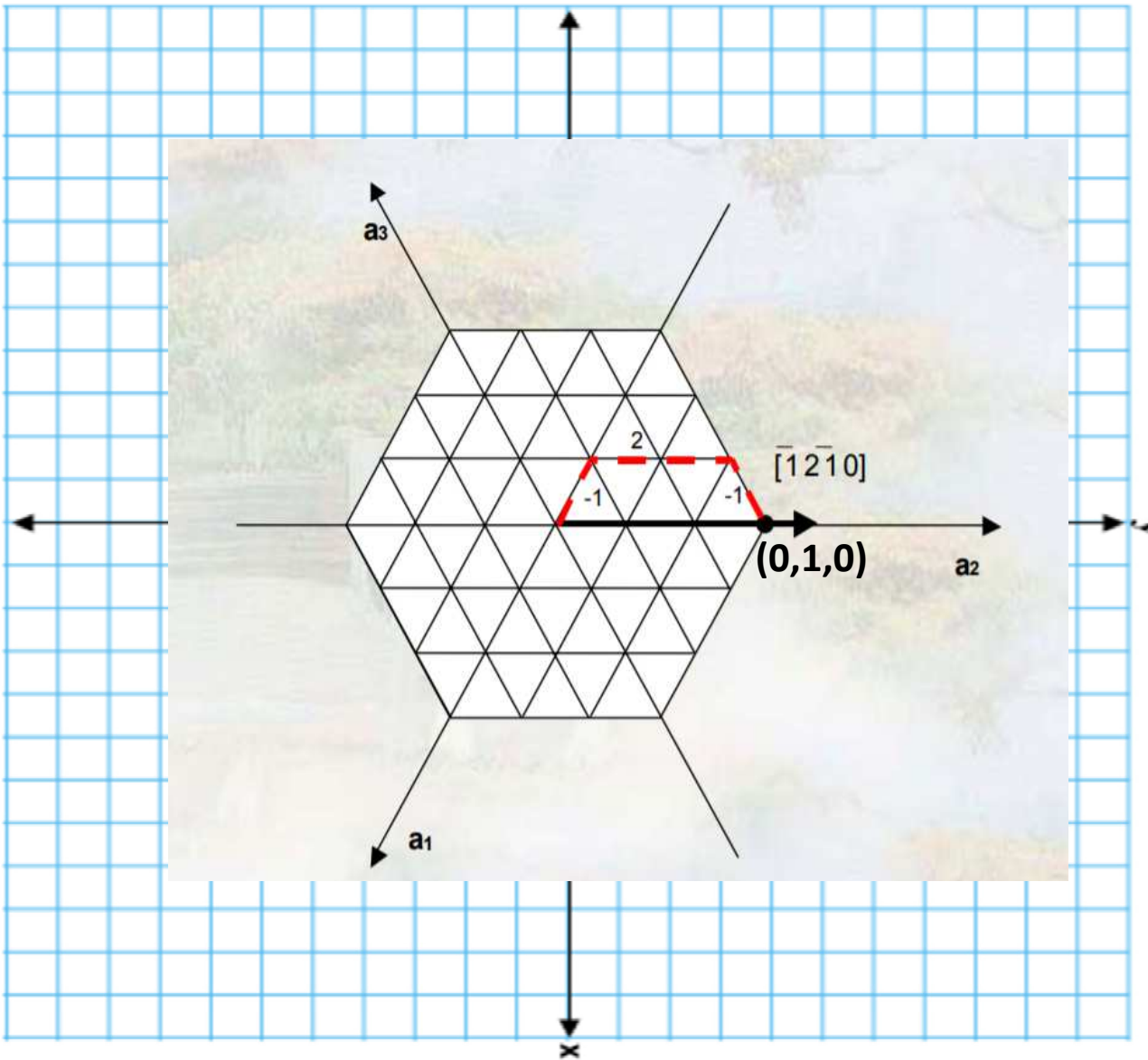
$$[UVW] \rightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = z$$



Para o ponto: $(0,1,0)$, $U=0$, $V=1$ e $W=0$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V) \rightarrow u = \frac{1}{3}(2 \times 0 - 1) = -\frac{1}{3}$$

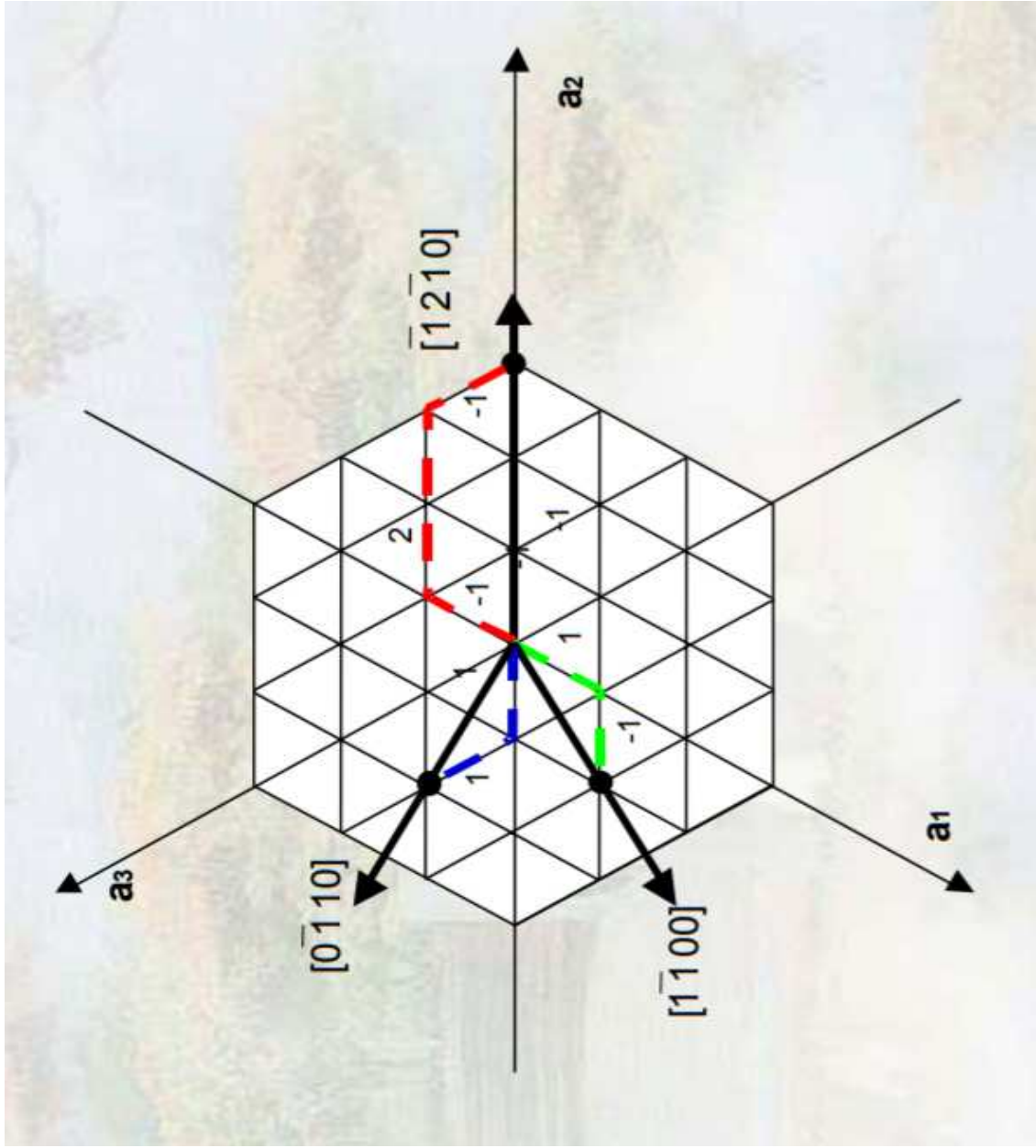
$$v = \frac{1}{3}(2V - U) \rightarrow v = \frac{1}{3}(2 \times 1 - 0) = \frac{2}{3}$$

$$t = -(u + v) \rightarrow t = -\left(-\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\right) = -\frac{1}{3}$$

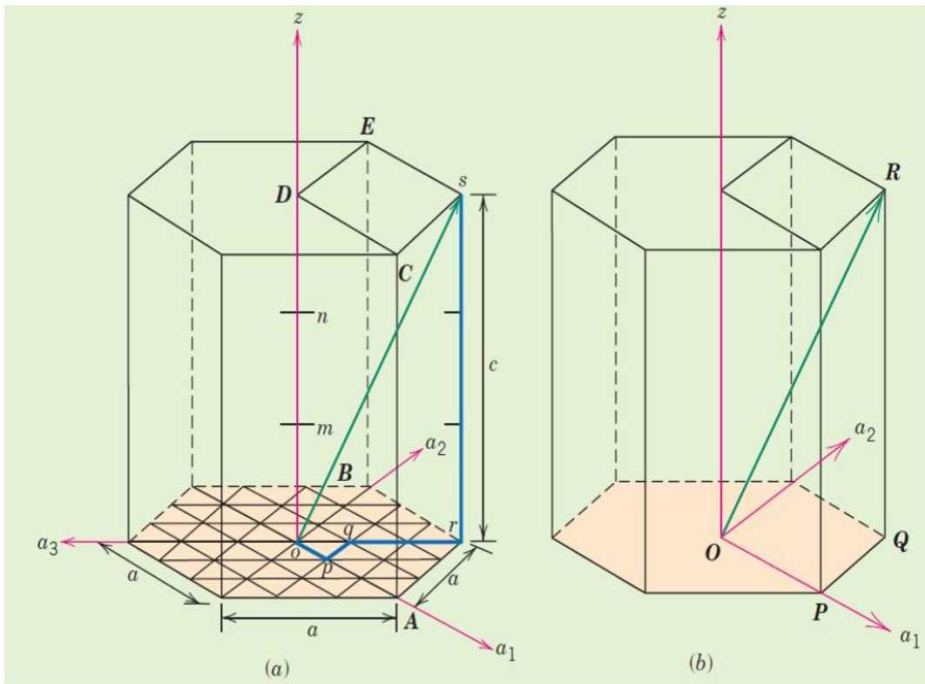
$$w = z = 0$$

Coordenadas de Miller da direção:

$$\left[-\frac{1}{3} \quad \frac{2}{3} \quad -\frac{1}{3} \quad 0 \right] \equiv [\bar{1} \ 2 \ \bar{1} \ 0]$$



$$[a_1 a_2 a_3 c] \rightarrow [u v t w]$$



Coordenadas do ponto R: (0,1,1)

$$[U V W] \rightarrow [u v t w]$$

$$[0 \ 1 \ 1] \rightarrow [u \ v \ t \ w]$$

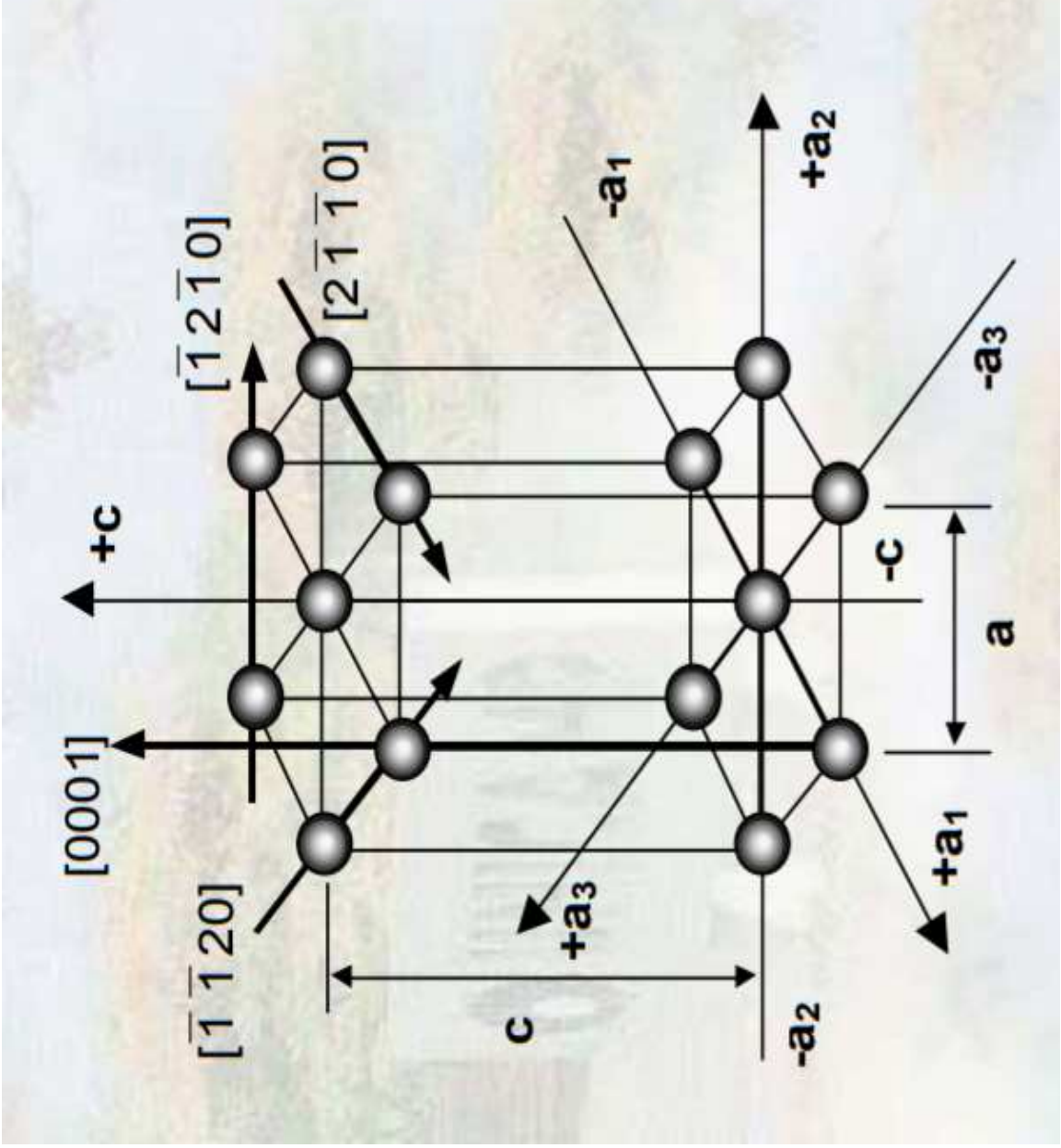
$$u = \frac{1}{3}(2U - V) = \frac{1}{3}(2 \times 0 - 1) = -\frac{1}{3}$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U) = \frac{1}{3}(2 \times 1 - 0) = \frac{2}{3}$$

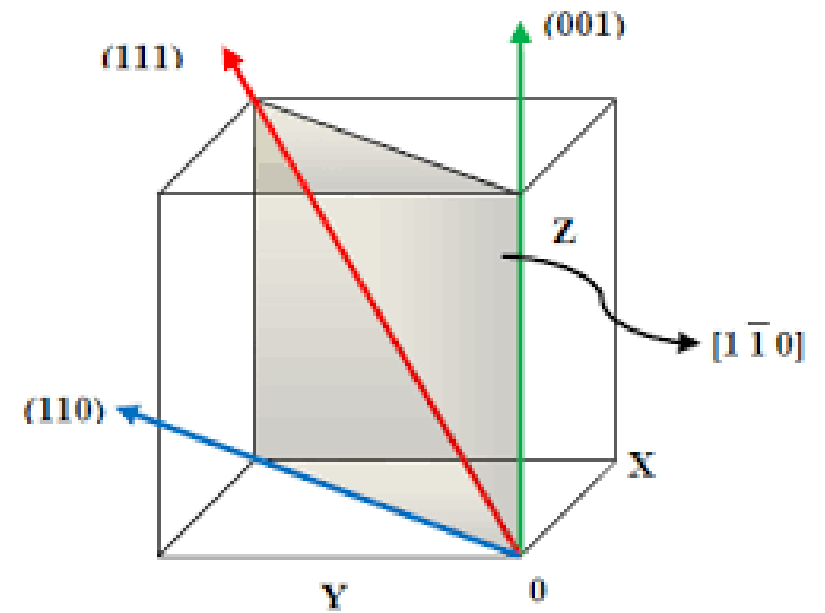
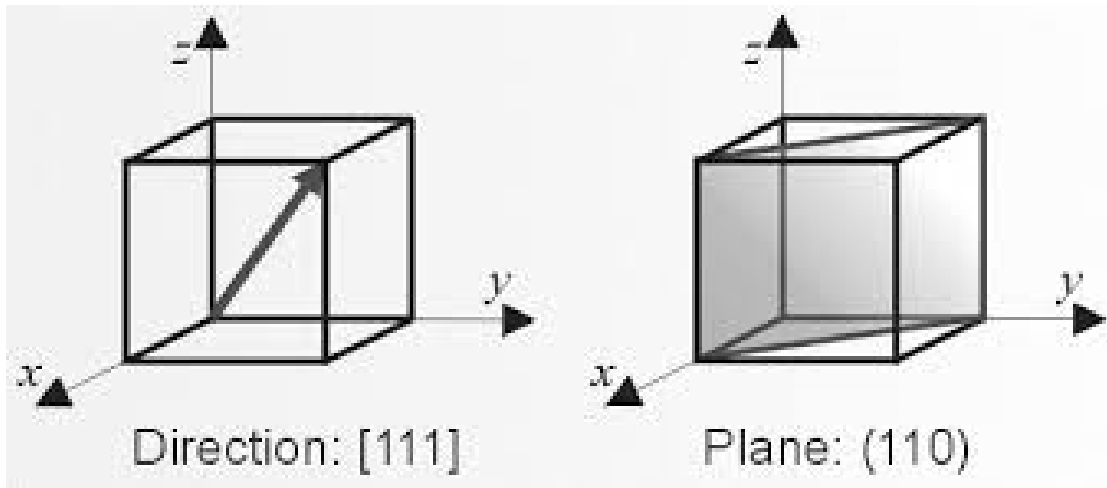
$$t = -(u + v) = -\left(-\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\right) = -\frac{1}{3}$$

$$w = 1$$

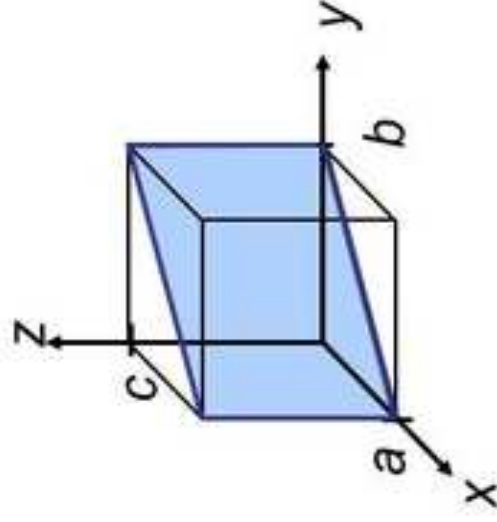
$$\left[\bar{1} \ \frac{2}{3} \ -\frac{1}{3} \ 1 \right] \equiv [\bar{1} \ 2 \ \bar{1} \ 1]$$



Planos Cristalográficos no Sistema Cúbico



Crystallographic Planes

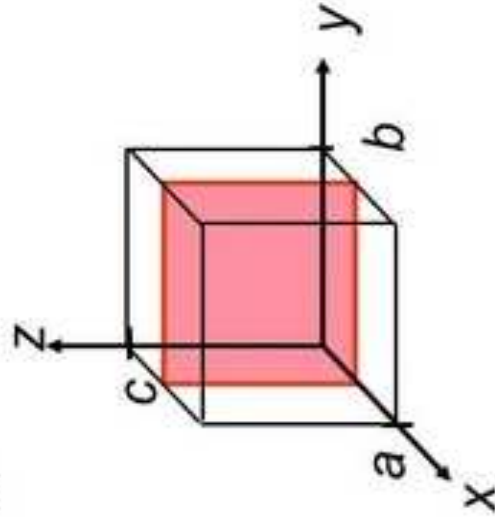


- Example 1**
1. Intercepts

a	b	c
1	1	∞
 2. Reciprocals

1/1	1/1	1/ ∞
1	1	0
 3. Reduction

1	1	0
---	---	---
 4. Miller Indices (110)

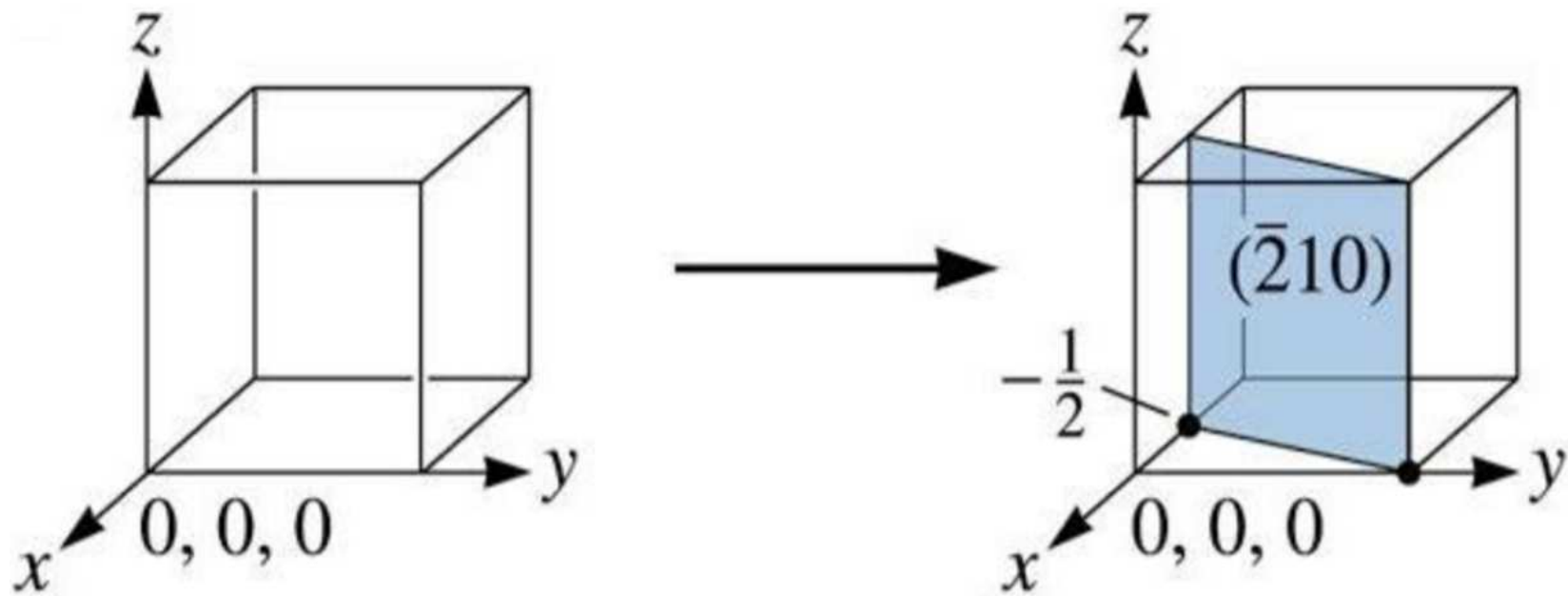


- Example 2**
1. Intercepts

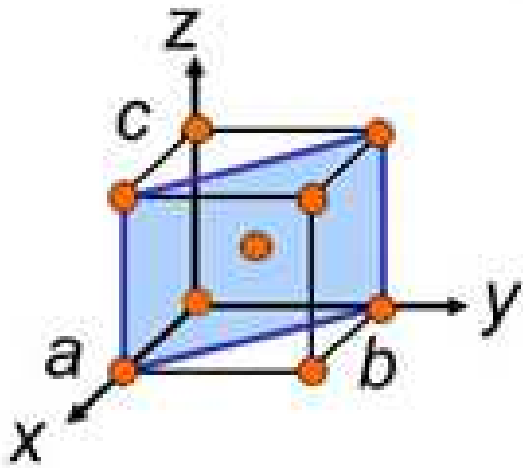
a	b	c
$\frac{1}{2}$	∞	∞
 2. Reciprocals

1/ $\frac{1}{2}$	1/ ∞	1/ ∞
2	0	0
 3. Reduction

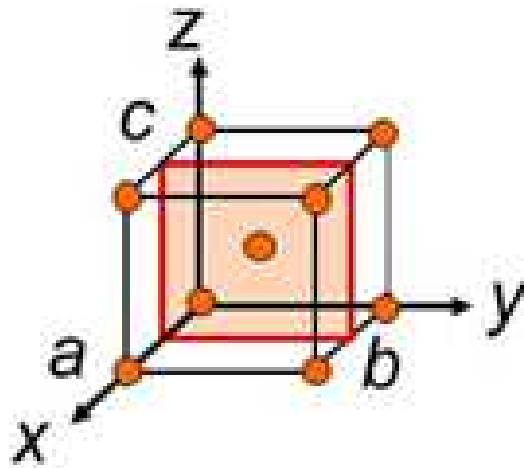
2	0	0
---	---	---
 4. Miller Indices (200)



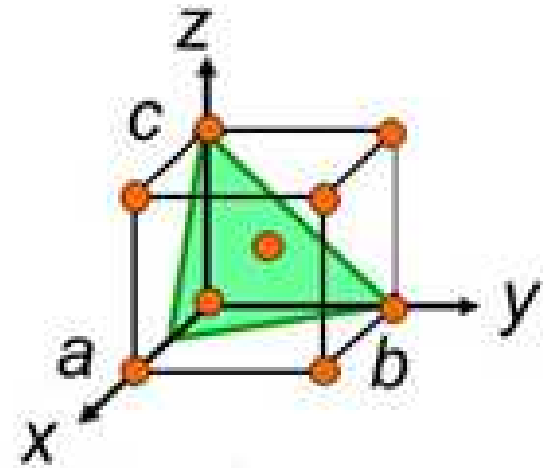
Coordenadas do plano $(\frac{\bar{1}}{2} \ 1 \ \frac{1}{\infty}) \equiv (\bar{2} \ 1 \ 0)$



(1 1 0)



(2 0 0)



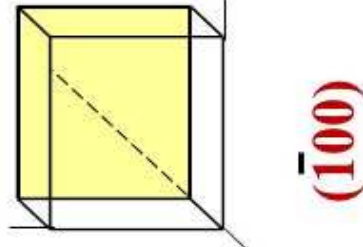
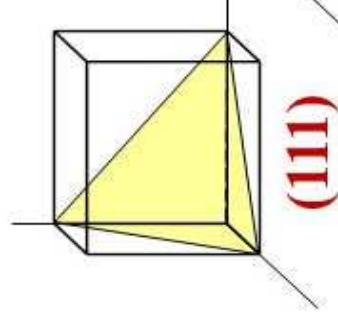
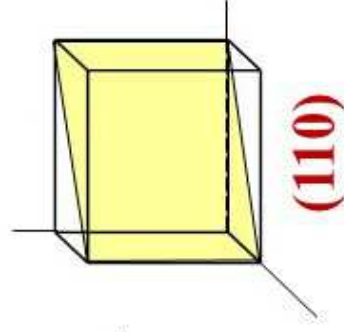
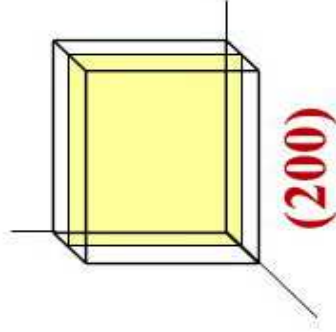
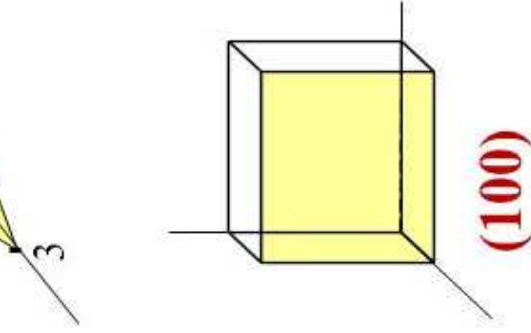
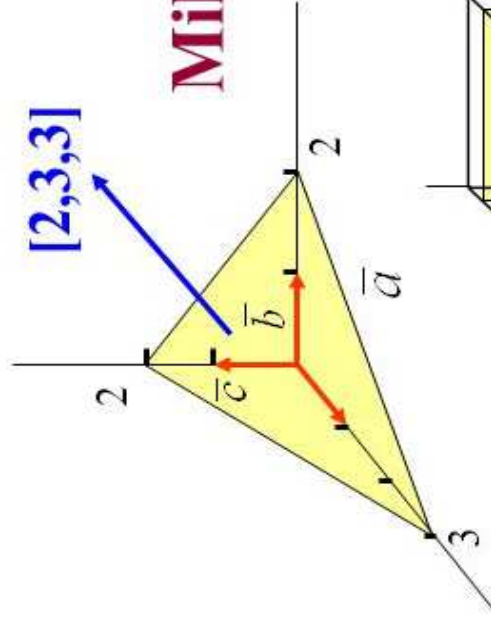
(2 1 1)

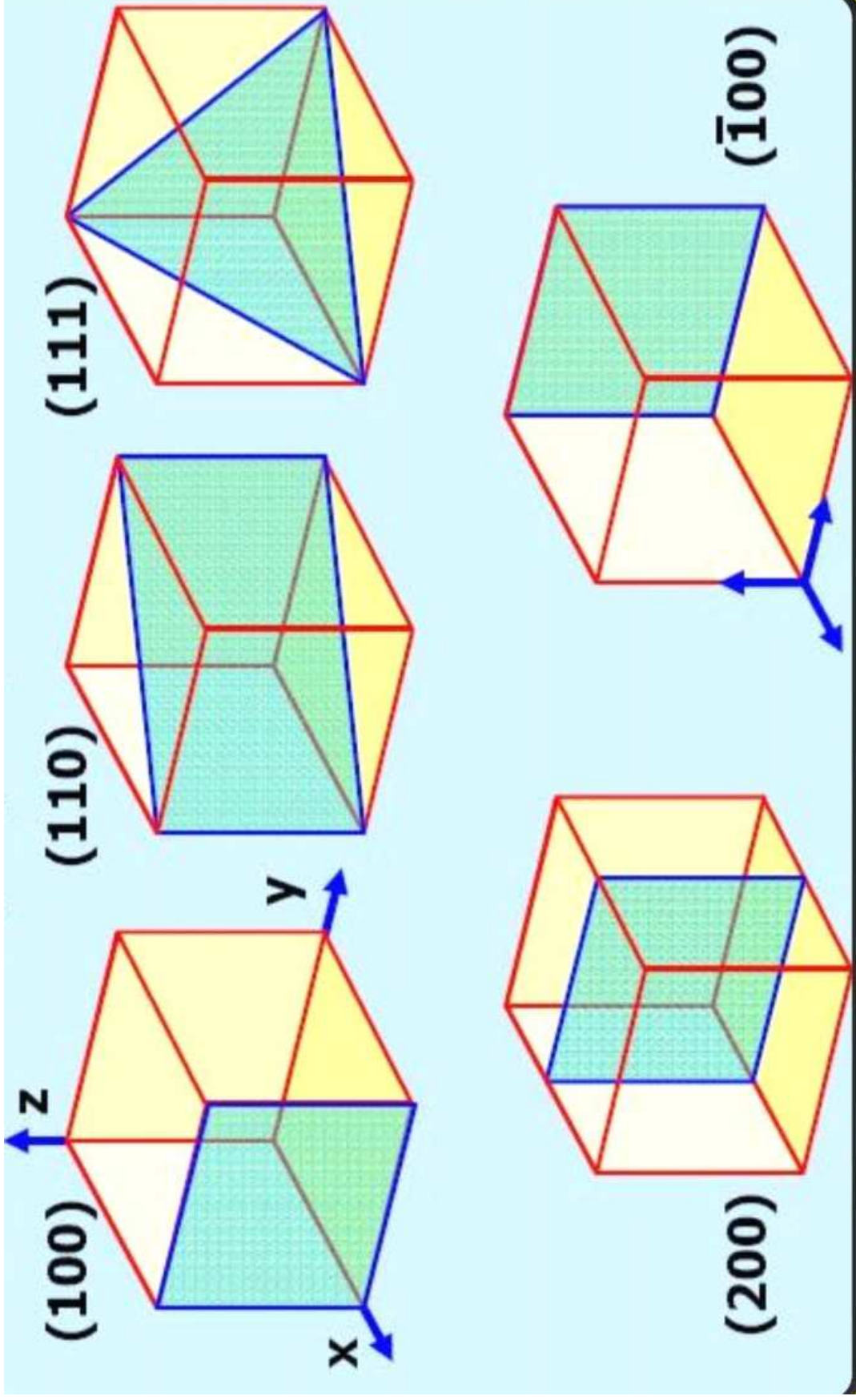
Plane intercepts axes at $3\bar{a}$, $2\bar{b}$, $2\bar{c}$

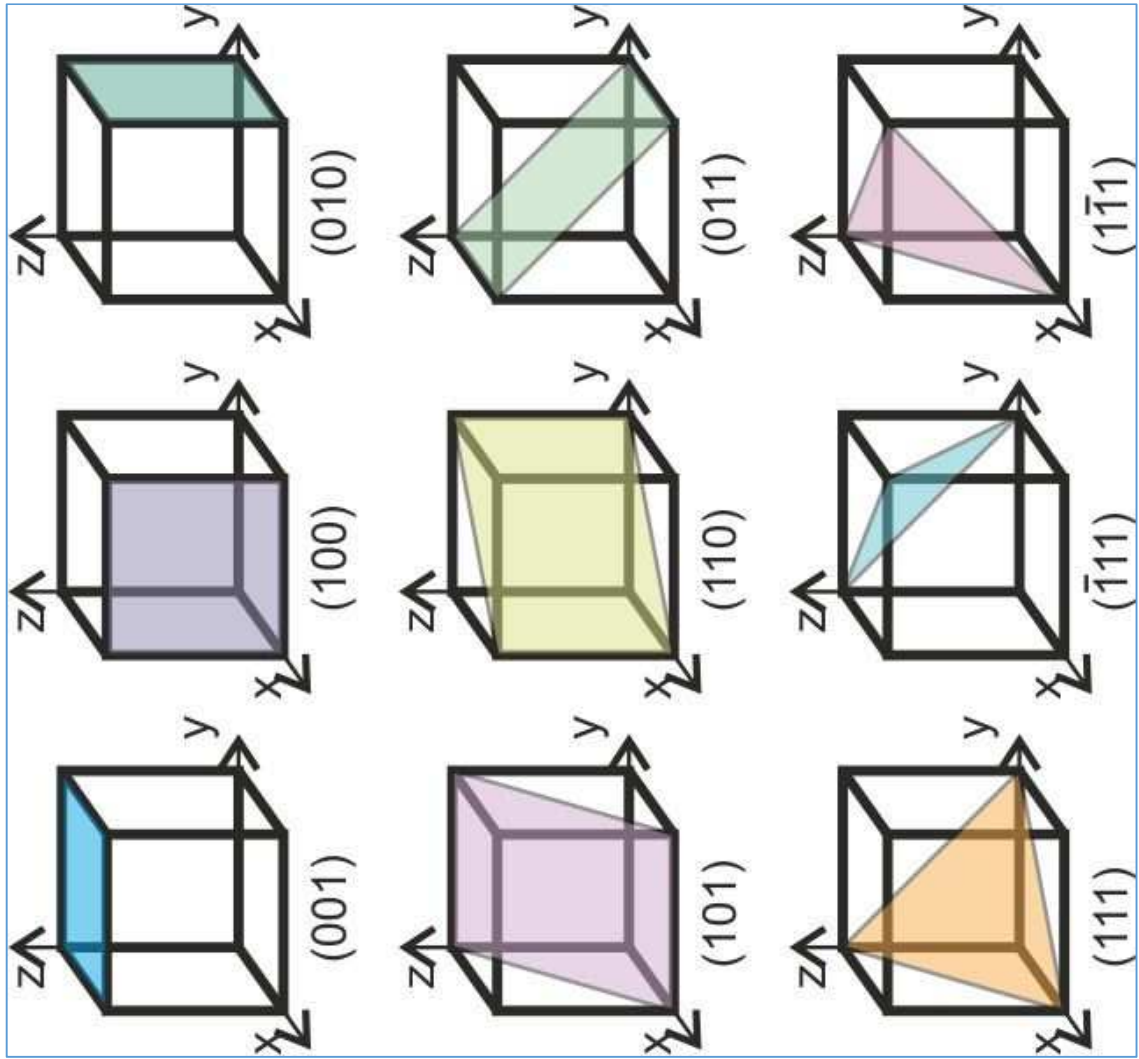
Reciprocal numbers are: $\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Miller Indices of the plane: (2,3,3)

Indices of the direction: [2,3,3]







Planos da Rede Hexagonal

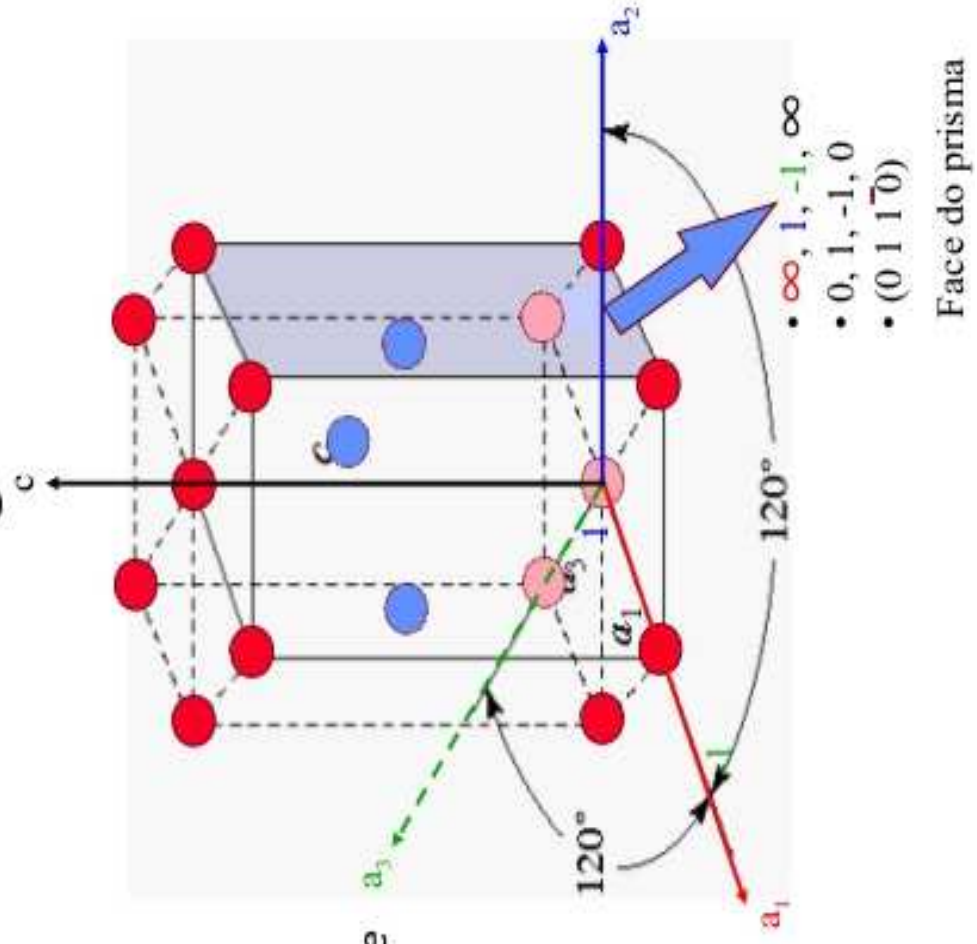
- ✓ Os 3 eixos, a_1 , a_2 e a_3 eixes estão contidos dentro da base planar;
- ✓ O ângulo entre eles é de 120°
- ✓ O eixo Z é perpendicular à base planar.

$$[h'k'l'] \longrightarrow [hkil]$$

$$i = -(h + k)$$

Índices de Miller-Bravais

- 4 coordenadas
- redundância



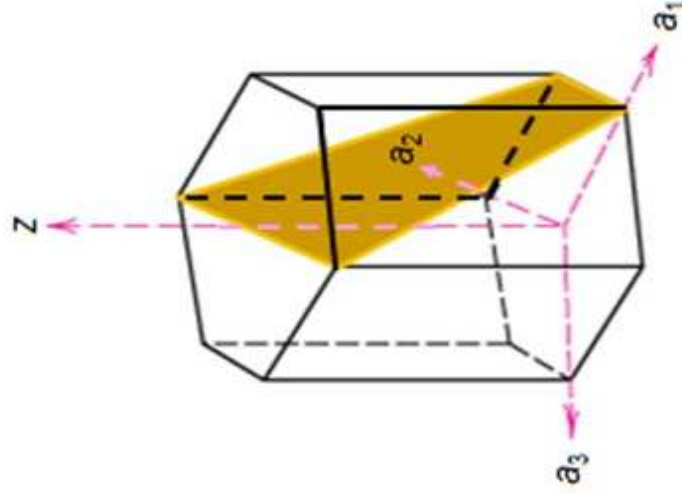
Planos Cristalográficos em Metais: Sistema Hexagonal

example

1. Intercepts
2. Reciprocals
3. Reduction

a_1	a_2	a_3	c
1	∞	-1	1
1	$1/\infty$	-1	1
1	0	-1	1
1	0	-1	1

4. Miller-Bravais Indices $(10\bar{1}1)$



DENSIDADE ATÔMICA LINEAR E PLANAR

- ◆ Densidade linear= átomos/cm (igual ao fator de empacotamento em uma dimensão)
- ◆ Densidade planar= átomos/unidade de área (igual ao fator de empacotamento em duas dimensões)

Densidades atómicas

Linear

- ▶ Número de átomos que são intersectados por um segmento de recta de uma determinada direcção cristalográfica.
- ▶ Esse segmento de recta deve passar pelo centro dos átomos.

$$\rho_l = \frac{N_d}{l}$$

ρ_l – Densidade linear

N_d – Número de átomos cujos diâmetros atómicos são intersectados pelo segmento de recta seleccionado

l – Comprimento do segmento de recta.

Planar

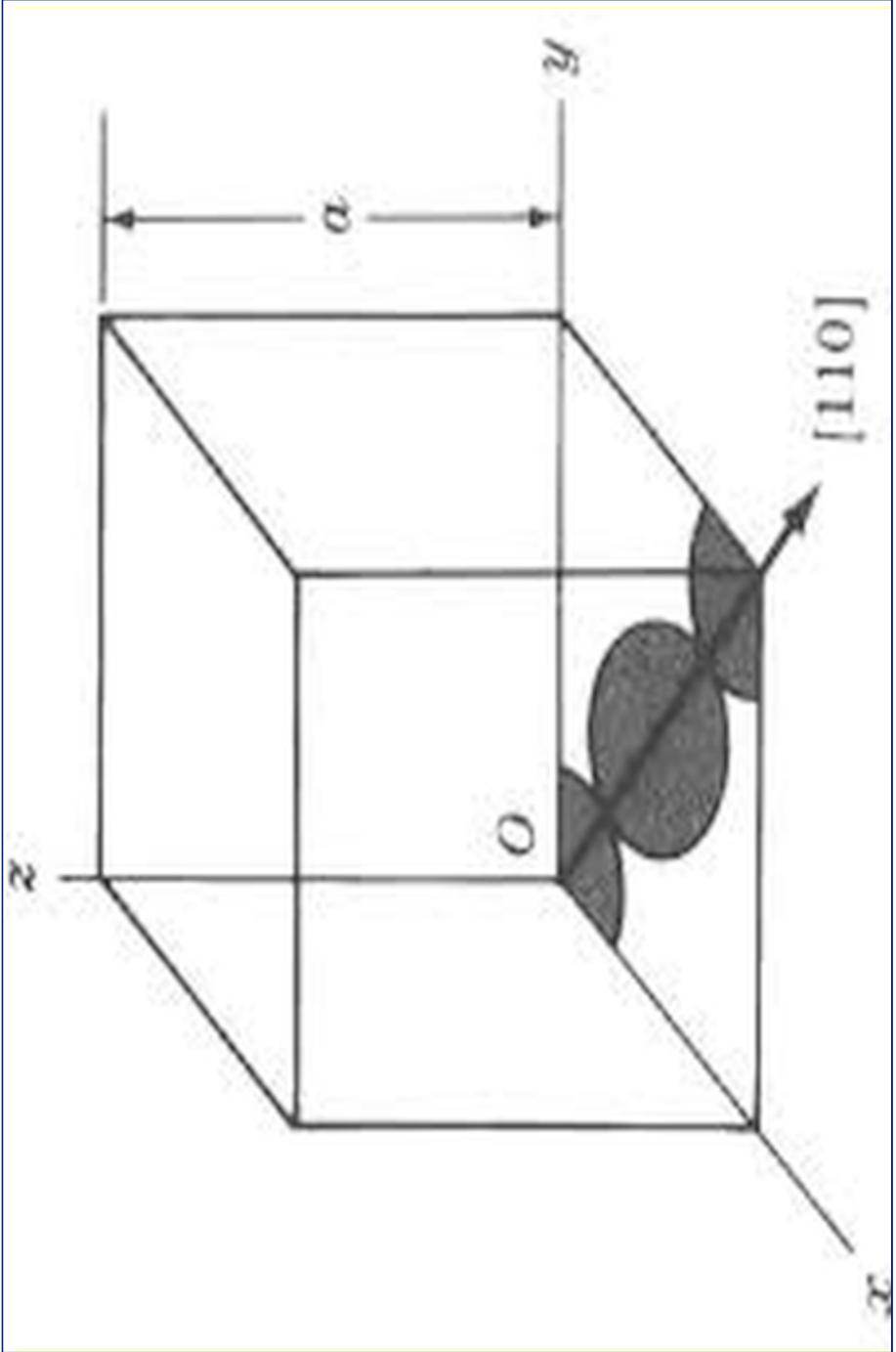
- Número de átomos cujos centros se encontram na área do plano cristalográfico
- Os planos devem passar pelo centro dos átomos.

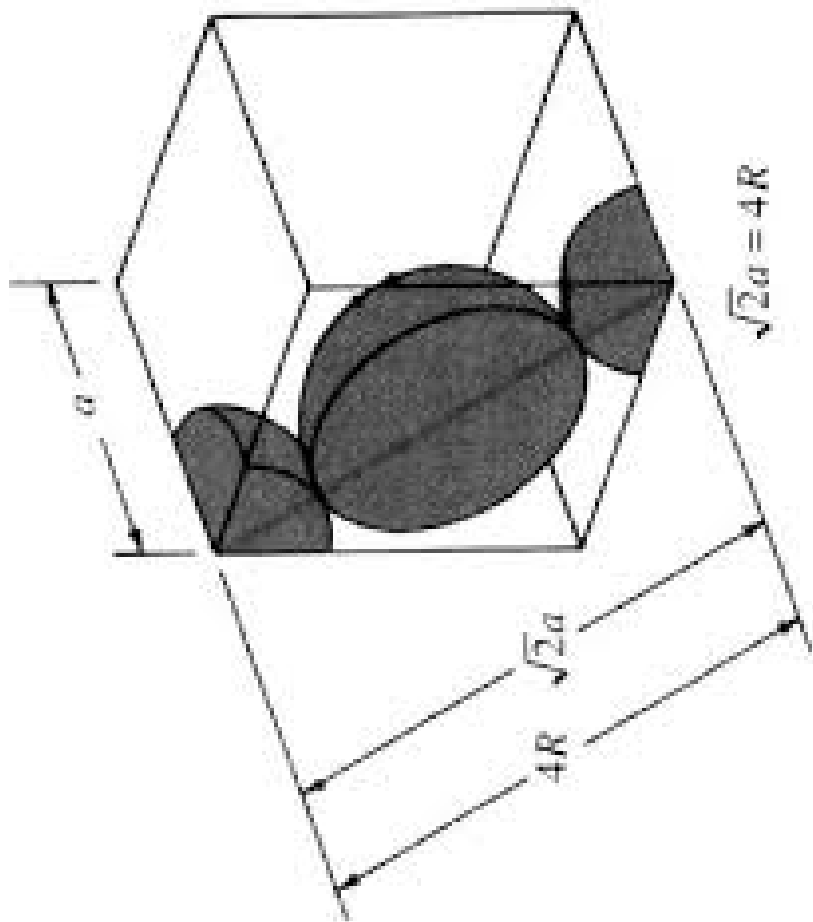
$$\rho_p = \frac{N_A}{A}$$

ρ_p – Densidade planar

N_A – Número de átomos cujos centros são intersectados pela área seleccionada

A – Área seleccionada.





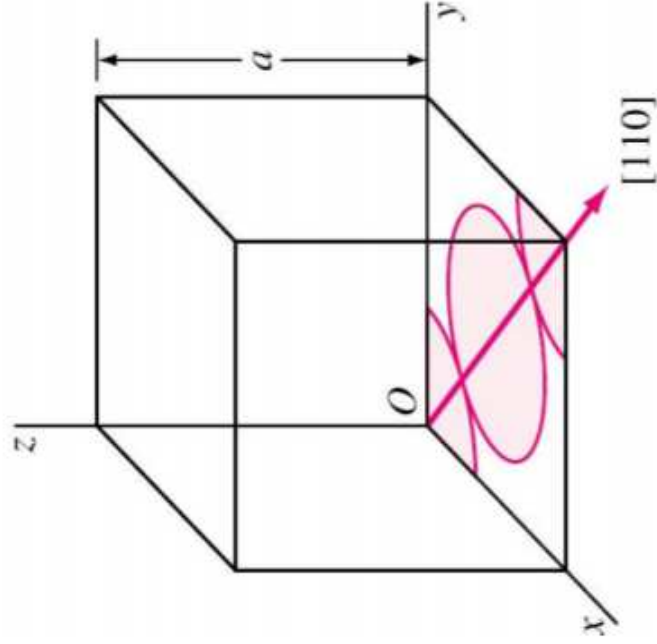
$$DL = \frac{\text{número de átomos centrados sobre o vetor direção}}{\text{comprimento do vetor direção}}$$

Exemplo: para um cristal de cobre CFC ($a=0.361$), a direção $[110]$ intersecciona de dois meios diâmetros e um átomo (diâmetro) inteiro. Portanto, intersecciona 2 átomos.

$$\text{comprimento da linha} = \sqrt{2} \times a$$

$$\text{comprimento da linha} = \sqrt{2} \times 0.361 \text{ nm}$$

$$DL = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2} \times 0.361 \text{ nm}} = \frac{3.92 \text{ atoms}}{\text{nm}} = \frac{3.92 \times 10^6 \text{ atoms}}{\text{mm}}$$



Volume da célula unitária:

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

$$a = \frac{4 \times 0,1241}{\sqrt{3}} = 0,2866 \text{ nm}$$

$$V = a^3 = 0,0235 \text{ nm}^3 = 0,0235 \times 10^{-21} \text{ cm}^3$$

Exercício : Calcule a densidade linear para a direção [1 0 0] do Potássio.

RESPOSTA

Dados: K: Estrutura CCC

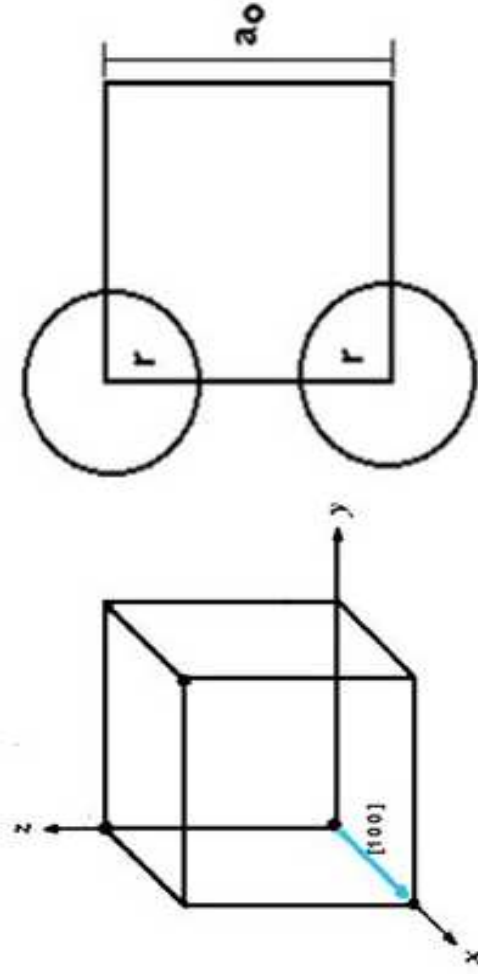
Raio Atômico: 0,2312 nm ou 2,312Å

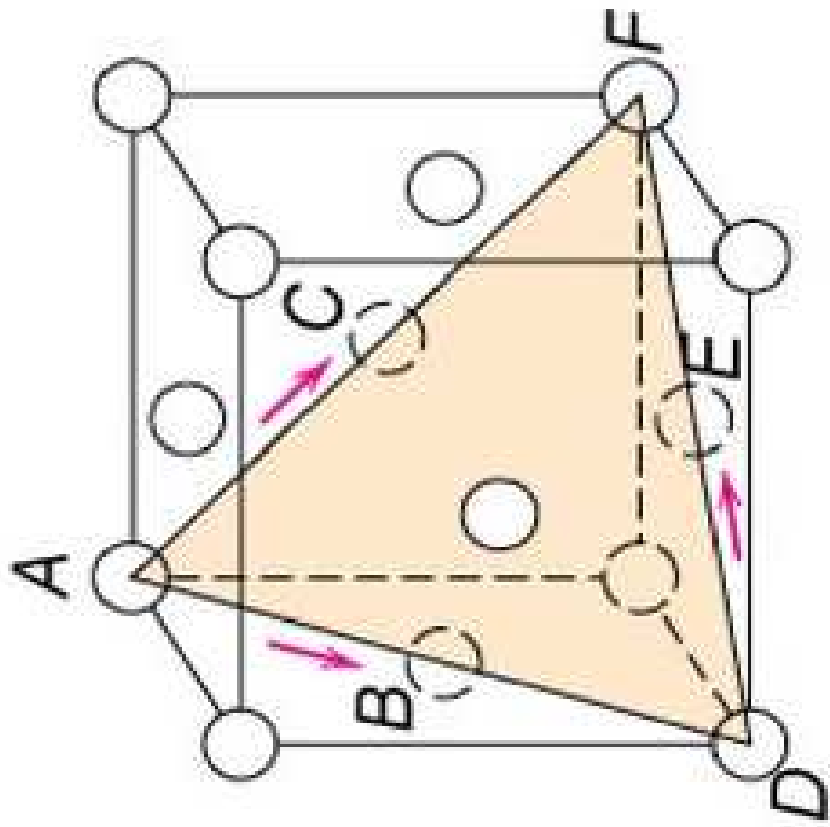
$$\rho_{LI} = \frac{n^{\circ} \text{ átomos}}{\text{unid comprimento}}$$

$$\rho_{LI} = \frac{1/2 + 1/2}{a_0}$$

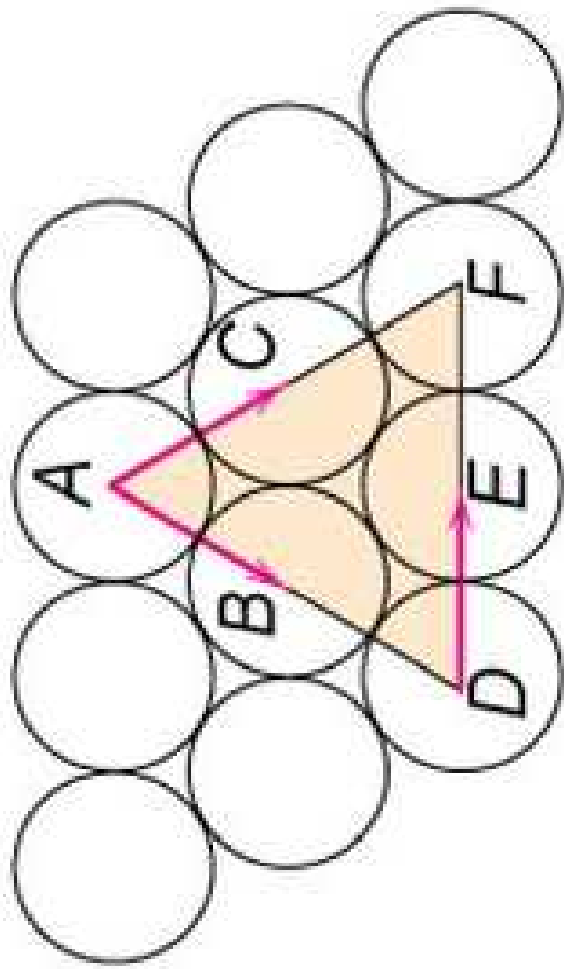
$$a_0 = 4r/\sqrt{3}$$

$$\rho_{LI} = 0,187 \text{ átomos/Å}$$

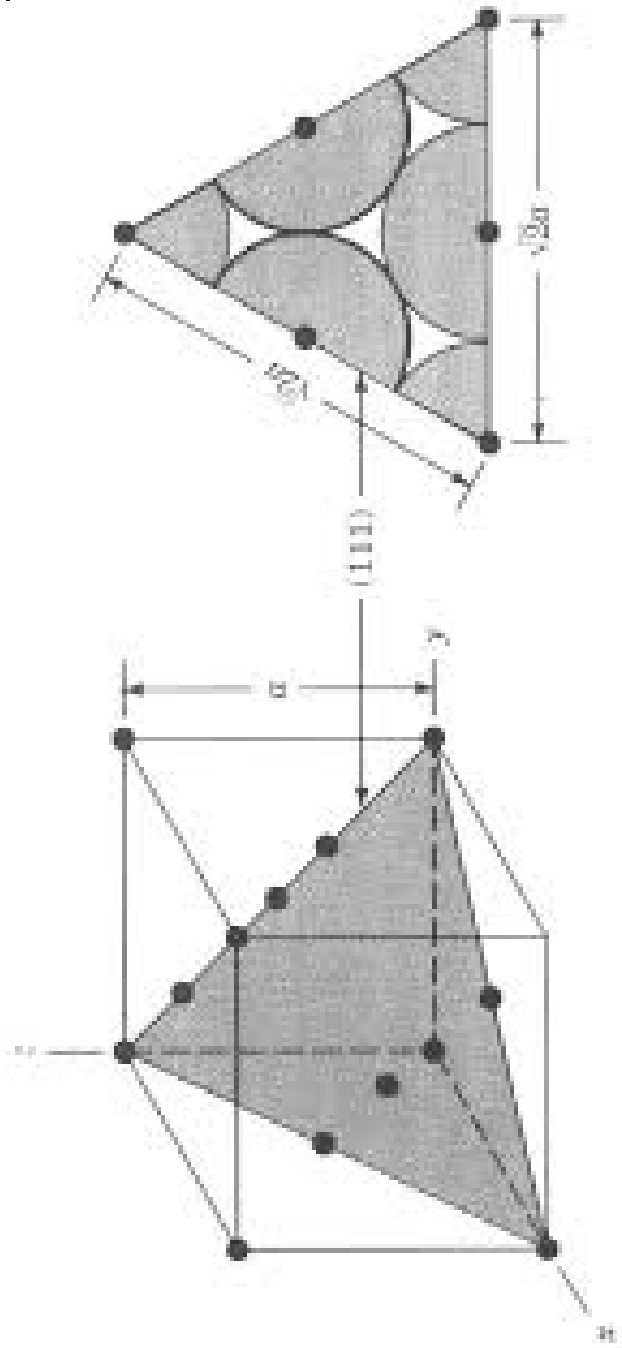




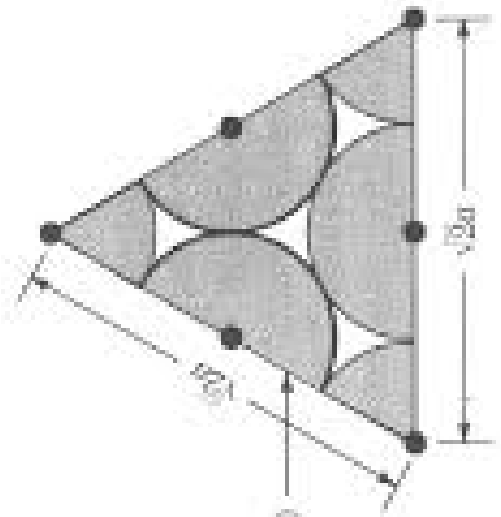
(a)



(b)



(a)



(b)

Densidade Planar (DP)

$$DP = \frac{\text{número de átomos no plano}}{\text{área do plano}}$$

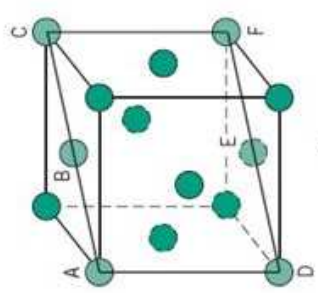


Figure 3.10 (a) Reduced-sphere FCC unit cell with (110) plane. (b) Atomic packing of an FCC (110) plane. Corresponding atom positions from (a) are indicated.

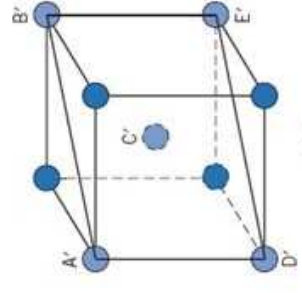
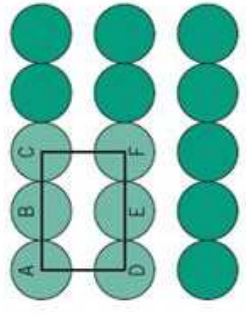
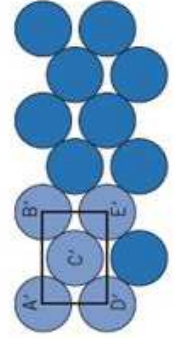
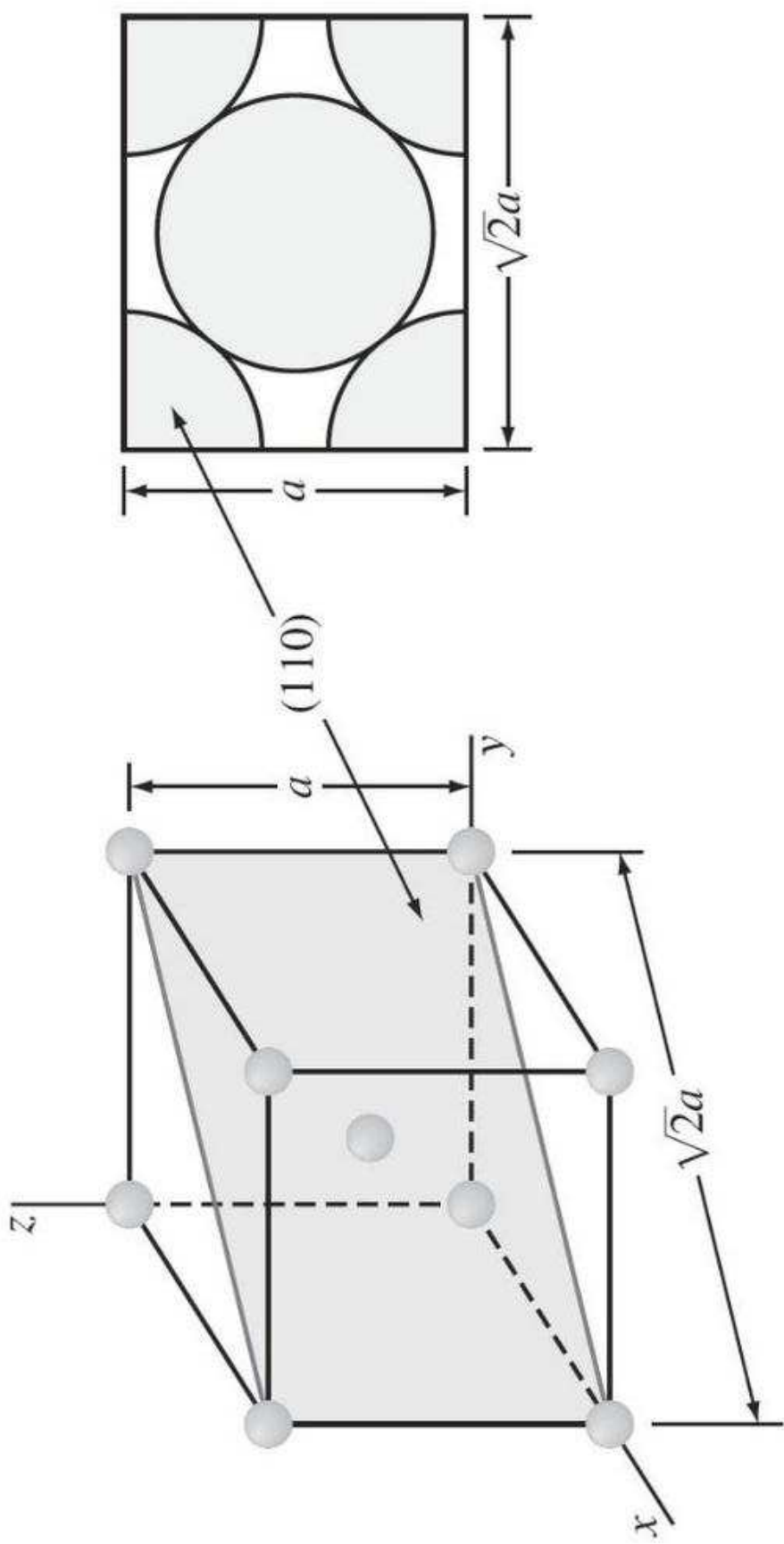
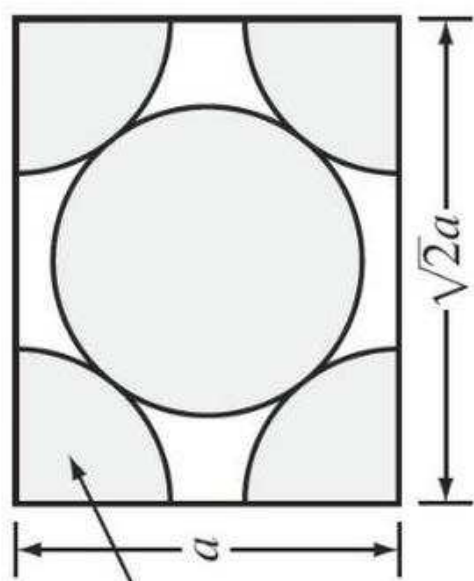


Figure 3.11 (a) Reduced-sphere BCC unit cell with (110) plane. (b) Atomic packing of a BCC (110) plane. Corresponding atom positions from (a) are indicated.





(a)



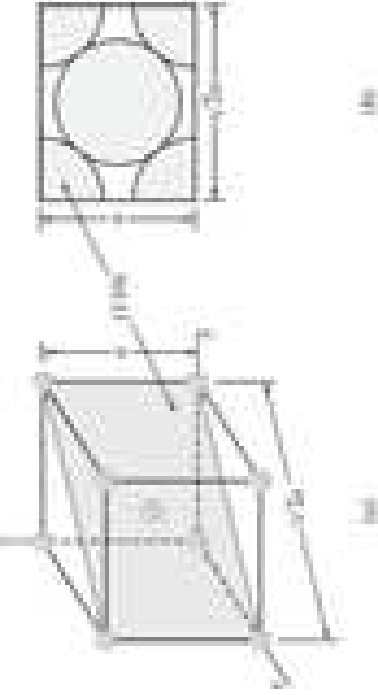
(b)

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



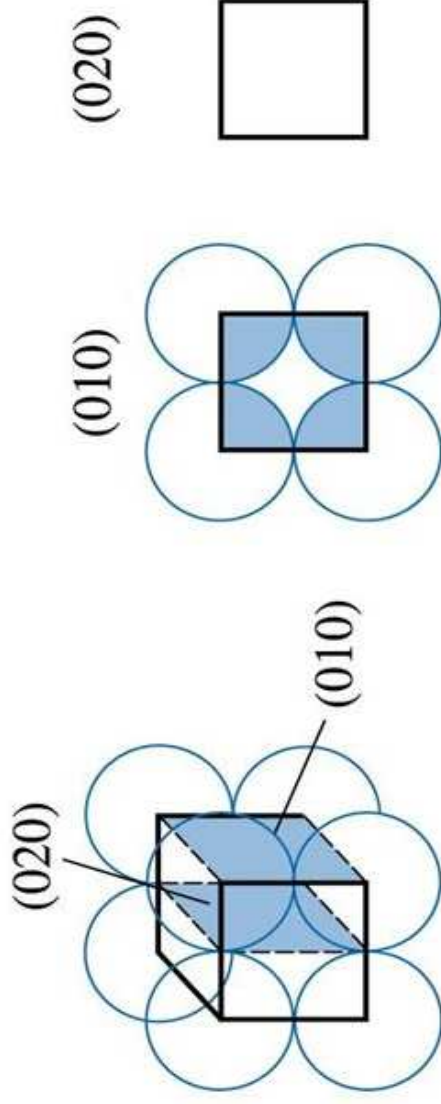
Área do plano (100) = $\sqrt{2}a \times a = \sqrt{2}a^2$

$$\rho_p = \frac{2}{\sqrt{2}(0.287)^2}$$

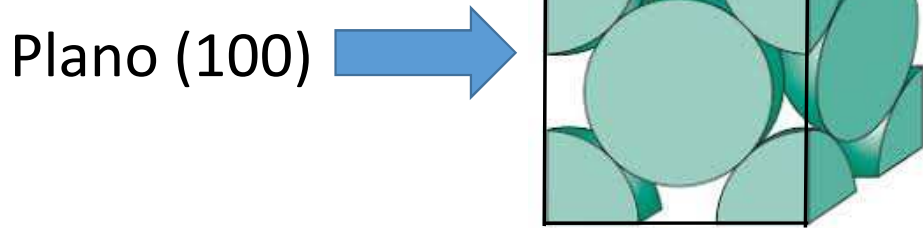
$$= \frac{17.2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} = \frac{1.72 \times 10^{13}}{\text{nm}^2}$$

Cálculo de densidade planar

Calcule a densidade planar para os planos (010) e (020) do polônio que apresenta estrutura cúbica simples, de parâmetro de rede = 0.334 nm.



Calcule a densidade atômica planar do plano (100) na rede CFC?



Área total dos átomos:

$$A_{\text{átomos}} = 2 \pi R^2$$

Área do plano (100) na célula unitária;

$$A_{\text{plano}} = a^2 = 8 R^2, (4R = a\sqrt{2})$$

Número total de átomos no plano (100) na célula unitária CFC:

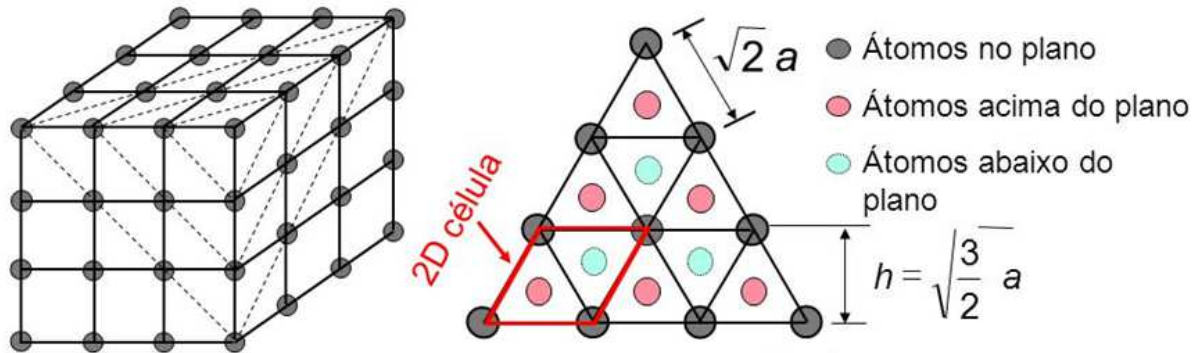
$$n_{\text{átomos}} = 1 + 4 \frac{1}{4} = 2 \text{ átomos}$$

$$D_{\text{planar}} = \frac{2\pi R^2}{8R^2} = \frac{\pi}{4} = 0,785$$

78,5 % da área do plano está ocupada por átomos

Densidade Planar do Fe: Plano (111)

1 átomo no plano / célula



$$A_{\blacklozenge} = 2 \cdot A_{\blacktriangle} = b \cdot h = a\sqrt{2} \cdot a \sqrt{\frac{3}{2}} = \sqrt{3} \cdot a^2 = \sqrt{3} \cdot \frac{16}{3} \cdot R^2$$

$$\text{Dens. Planar} = \frac{\frac{\text{átomos}}{2\text{D célula}}}{\frac{\text{area}}{2\text{D célula}}} = \frac{1}{\frac{16\sqrt{3}}{3} R^2} = 7.0 \frac{\text{átomos}}{\text{nm}^2} = 0.70 \times 10^{19} \frac{\text{átomos}}{\text{m}^2}$$

$$A_{\blacktriangle} = \frac{b \cdot h}{2}$$

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

$$(a\sqrt{2})^2 = h^2 + \left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2$$

$$h = a \sqrt{\frac{3}{2}}$$

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

$$a^2 = \frac{16}{3} \cdot R^2$$

$$R_{Fe} = 0,287 \text{ nm}$$

$$N_{\text{átomos } \blacklozenge} = 2 \cdot \frac{1}{3} + 2 \cdot \frac{1}{6} = 1$$

