

Estrutura dos sólidos cristalinos:

- **Materiais cristalinos e não cristalinos**

Estrutura dos sólidos cristalinos:

- **Monocristais**
- **Anisotropia**
- **Materiais policristalinos**

Estrutura dos sólidos cristalinos:

- **Monocristais**
- **Superfícies Monocristalinas**

Monocristais

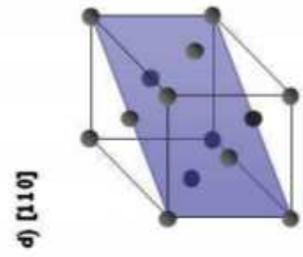
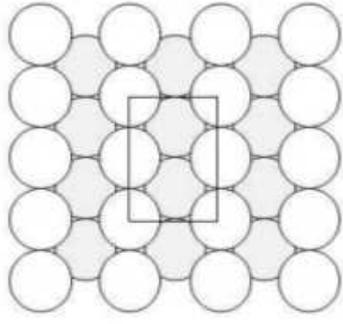
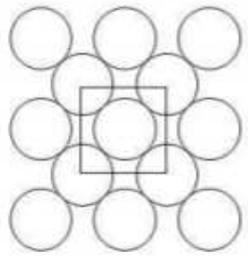
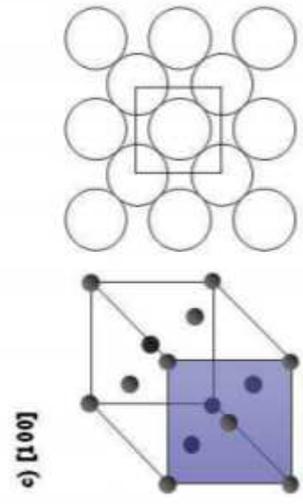
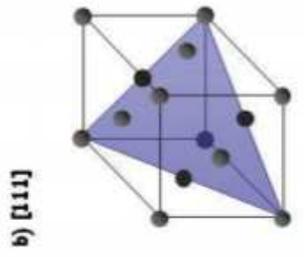
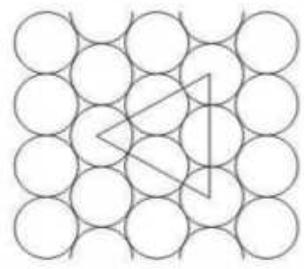
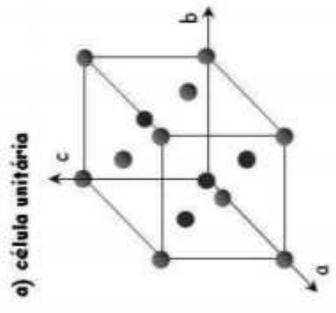


Monocristal de garnet

Um **monocristal** ou sólido monocristalino é um material no qual o retículo cristalino é continuamente repetido, sem rupturas e interrupção, por toda a amostra até suas bordas. As células unitárias se interligam na mesma direção.

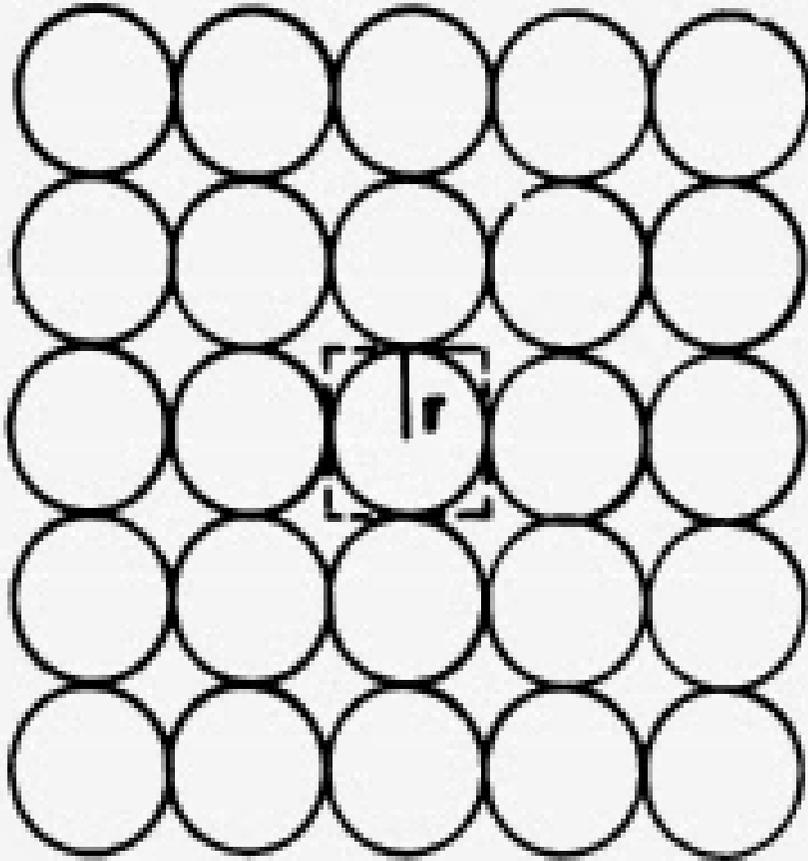
Monocristal: Tântalo monocristalino de alta pureza (99,999%), alguns fragmentos cristalinos de tântalo, e um cubo de tântalo de alta pureza (99,99%) de 1 cm³. Estrutura cristalina do tântalo: CCC



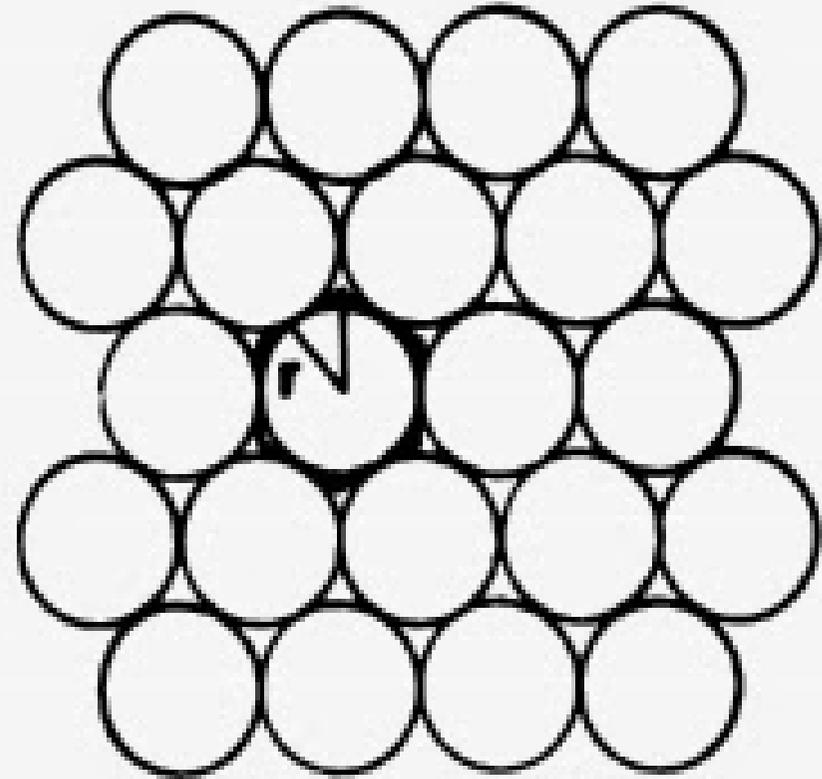


Legenda:

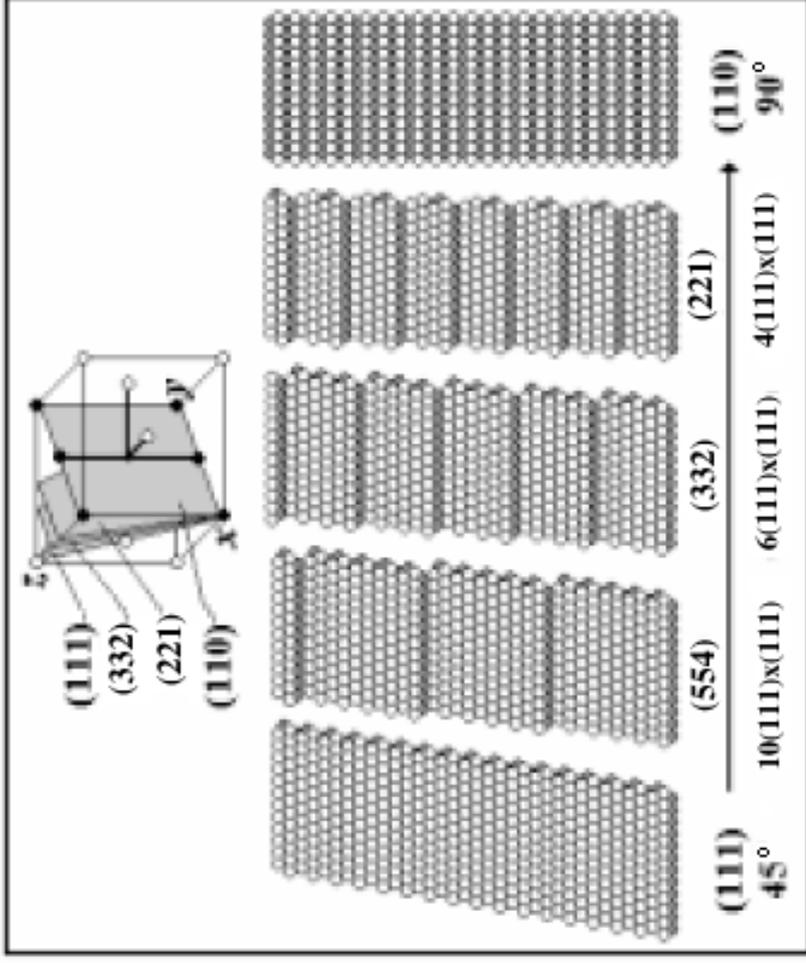
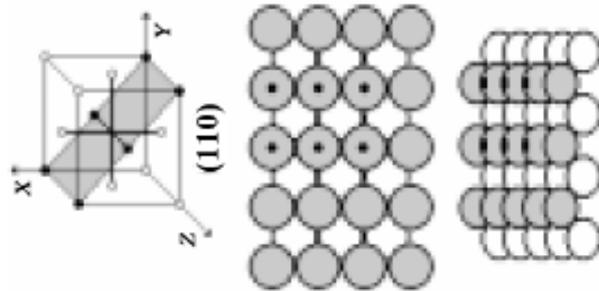
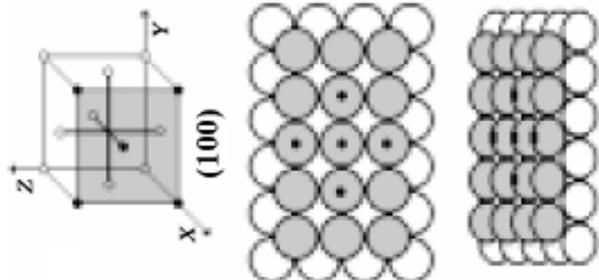
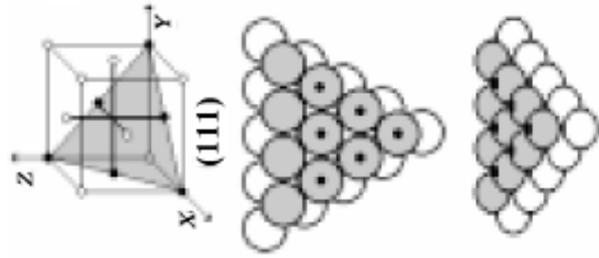
Metal (primeiro plano) Metal (segundo plano)

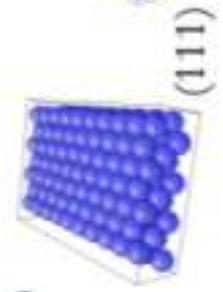
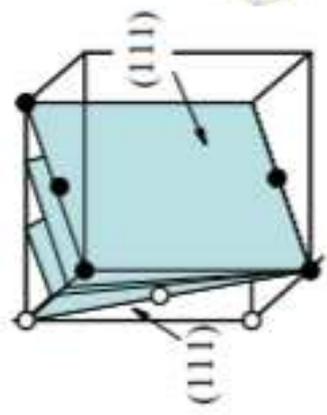


Superfície (100) - CFC



Superfície (111) - CFC





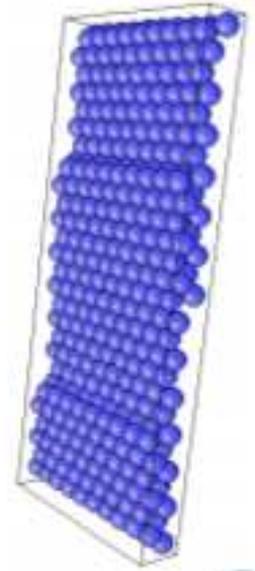
(111)



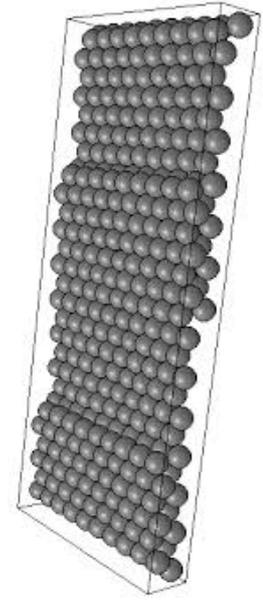
(100)

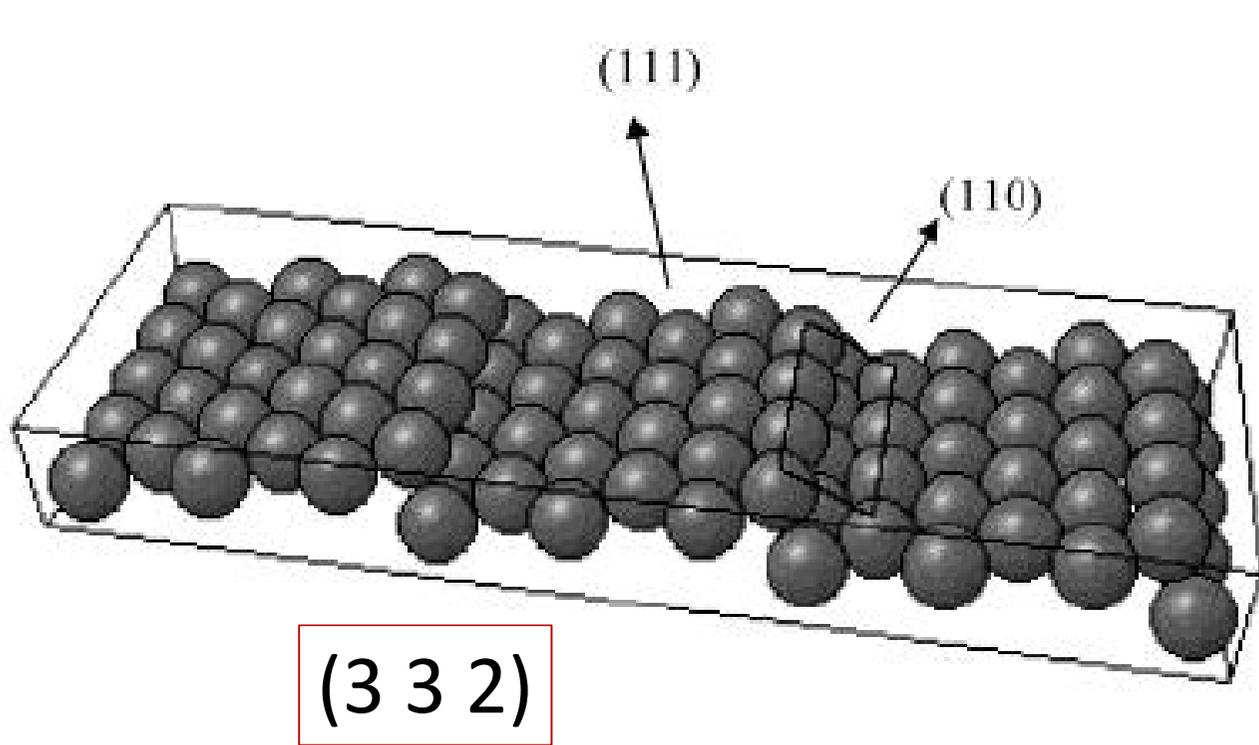


(110)

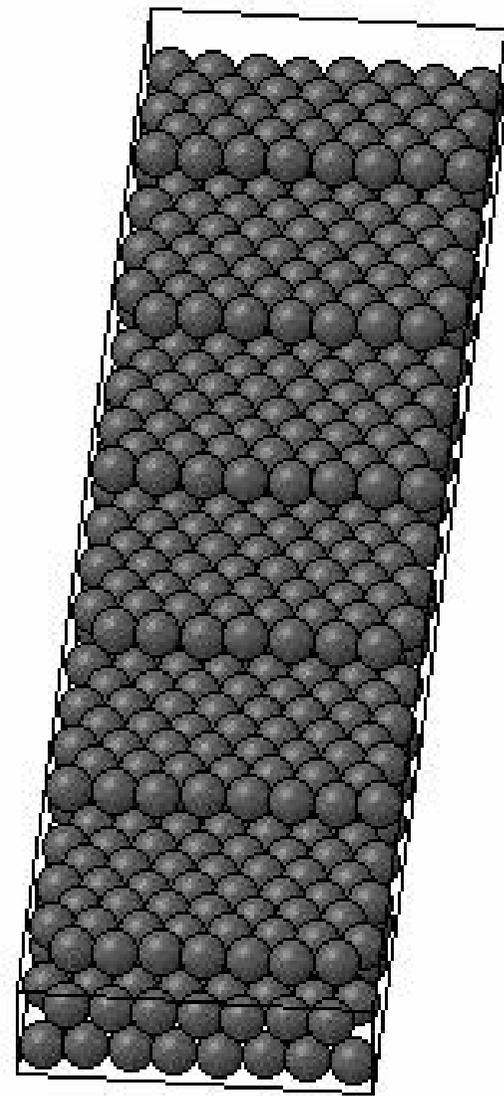


(112)





(7 7 5)



Estrutura dos sólidos cristalinos:

- **Anisotropia**
- **Materiais policristalinos**

Anisotropia

As propriedades físicas de monocristais de algumas substâncias dependem da direção cristalográfica na qual as medições são feitas. O módulo de elasticidade, a condutividade elétrica e o índice de refração podem ter valores diferentes nas direções [100] e [111], esse direcionamento das propriedades é chamada de **Anisotropia** e está associada à diferença do espaçamento atômico em função da direção cristalográfica

As substâncias nas quais as propriedades físicas medidas são independente da direção da medição são chamadas de **Isotrópicas**.

Anisotropy

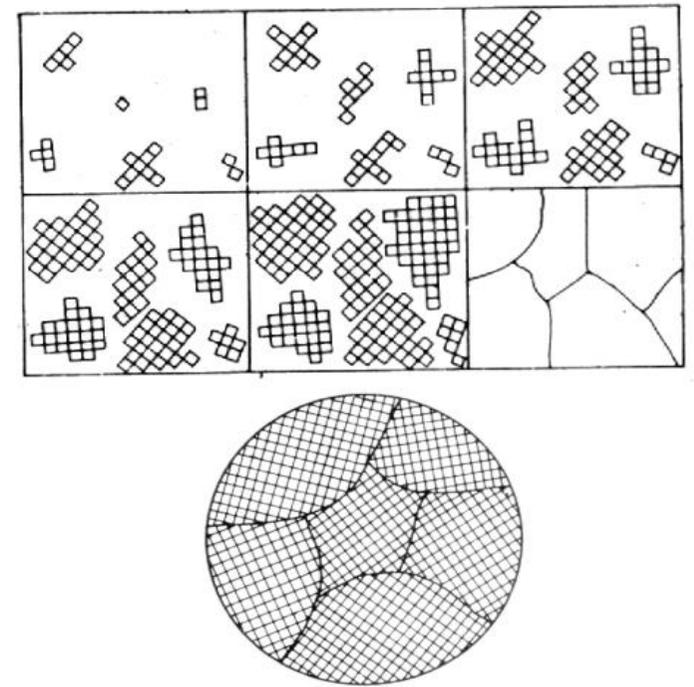
<i>Metal</i>	<i>Modulus of Elasticity (GPa)</i>			
	<i>[100]</i>	<i>[110]</i>	<i>[111]</i>	
Aluminum	63.7	72.6	76.1	(CFC)
Copper	66.7	130.3	191.1	(CFC)
Iron	125.0	210.5	272.7	(CCC)
Tungsten	384.6	384.6	384.6	(CCC)

Isotropia

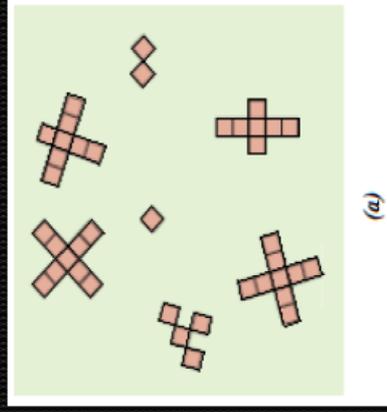
- Simetria da estrutura cristalina;
- menor a simetria → maior a anisotropia.

Materiais policristalinos

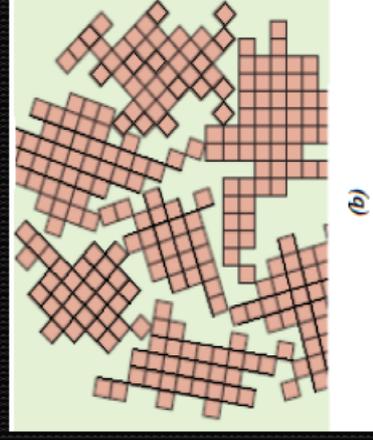
- Os metais ao solidificarem se cristalizam em diferentes posições da matriz fundida.
- Em cada ponto de solidificação os átomos buscam posições definidas e se ordenam em redes espaciais (compostas de células unitárias) formando reticulados cristalinos.
- Os reticulados crescem e se chocam originando grãos da mesma rede cristalina mas com diferentes direções cristalográficas, definindo, assim, contornos de grãos.



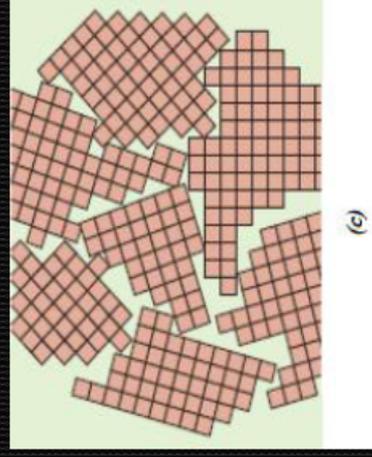
Materiais policristalinos



Pequenos núcleos de cristalização



Crescimento dos cristalitos; obstrução de alguns grãos adjacentes

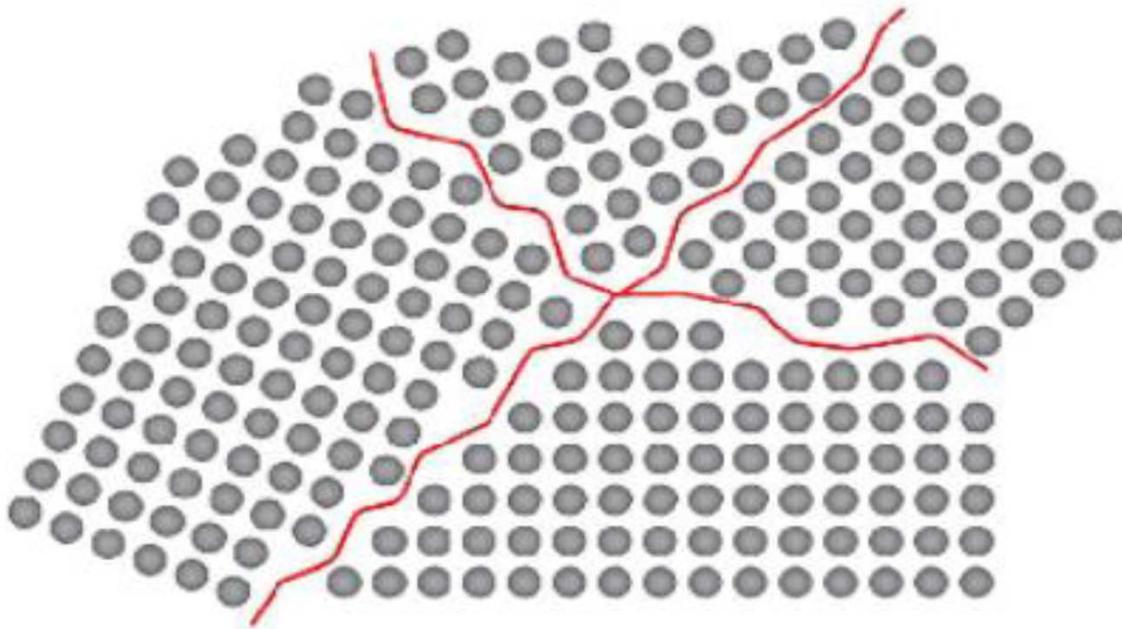


Conclusão da solidificação; foram formados grãos com formas irregulares

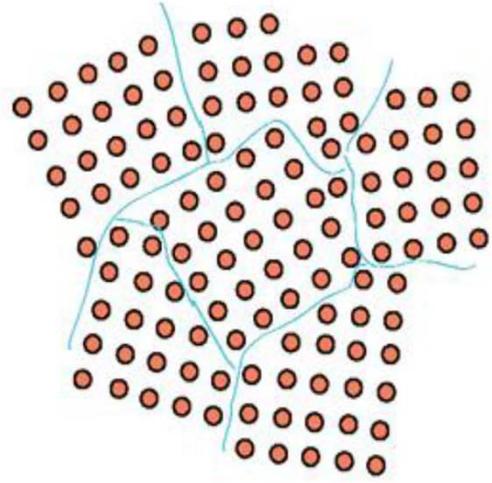
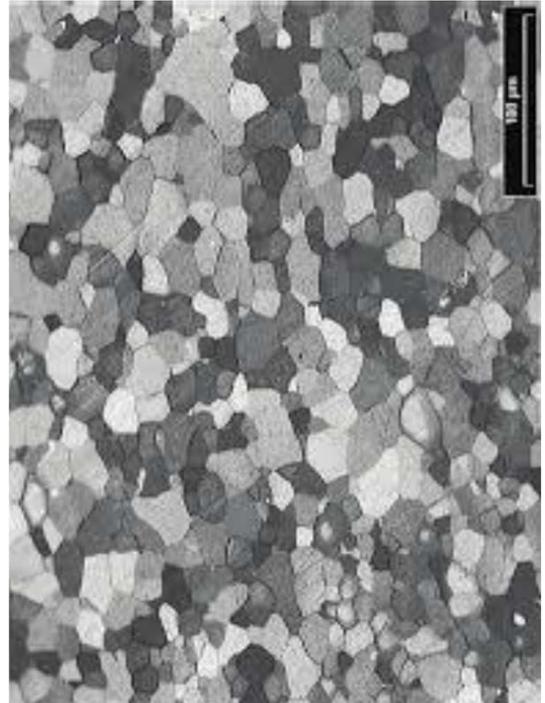
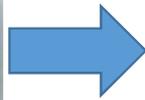


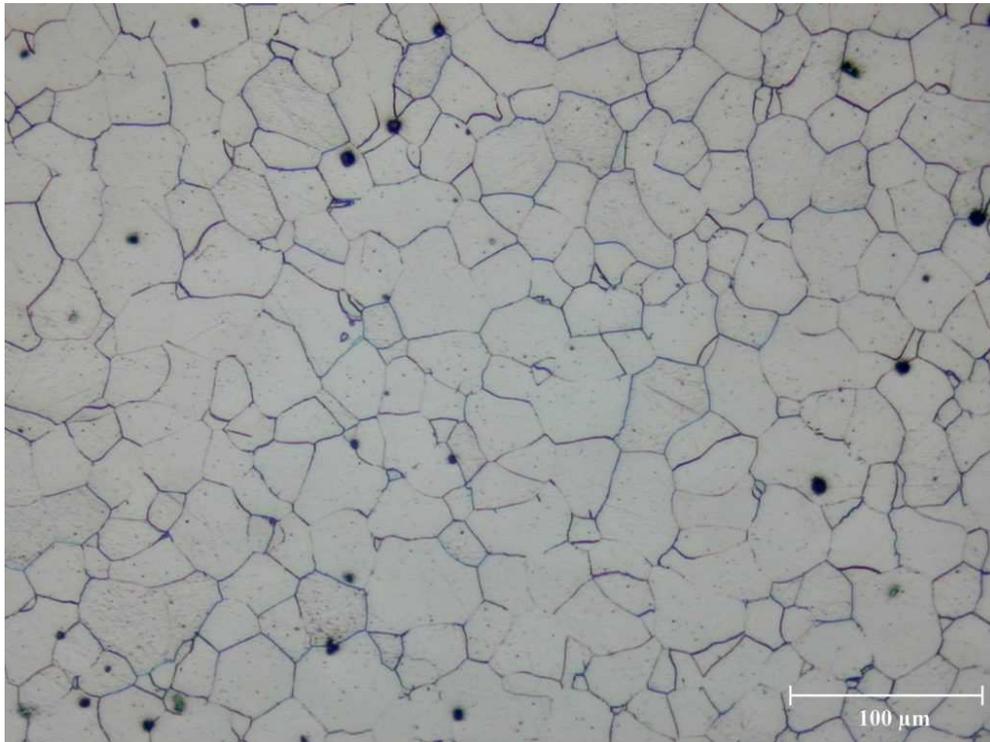
A estrutura de grãos como ela apareceria sob um microscópio

Contorno de grãos

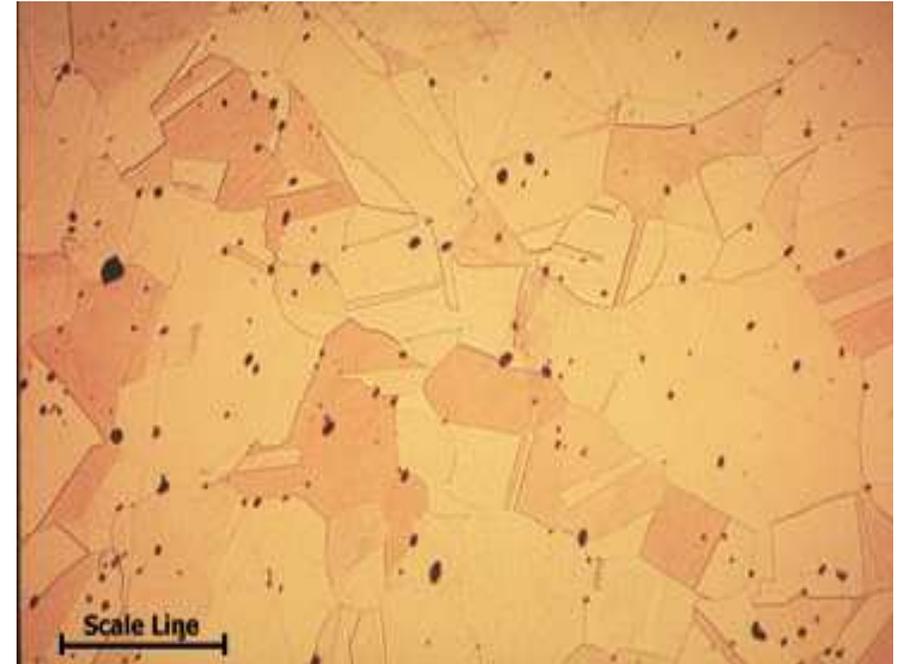


Cada grão possui uma orientação cristalina particular da mesma rede cristalográfica. A região de transição entre os grãos, define os contornos de grãos.



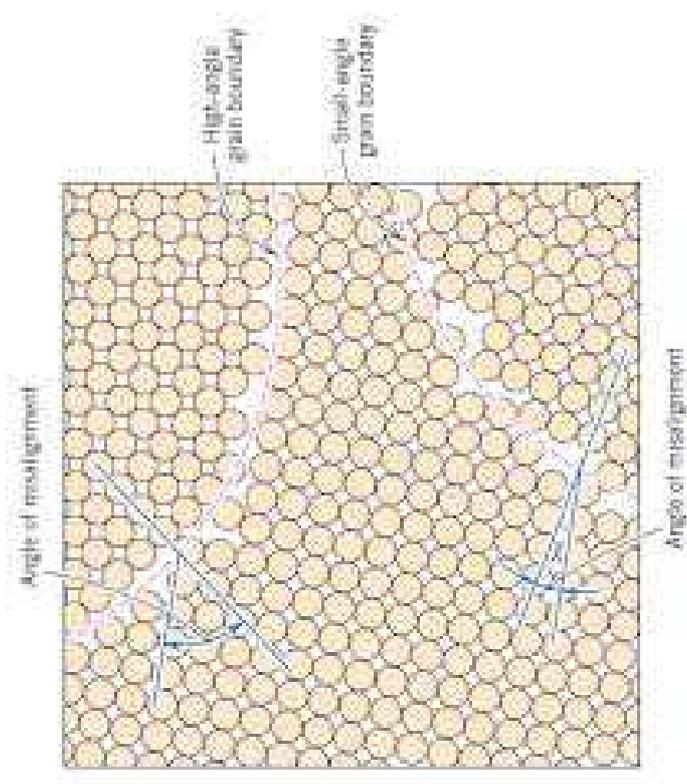
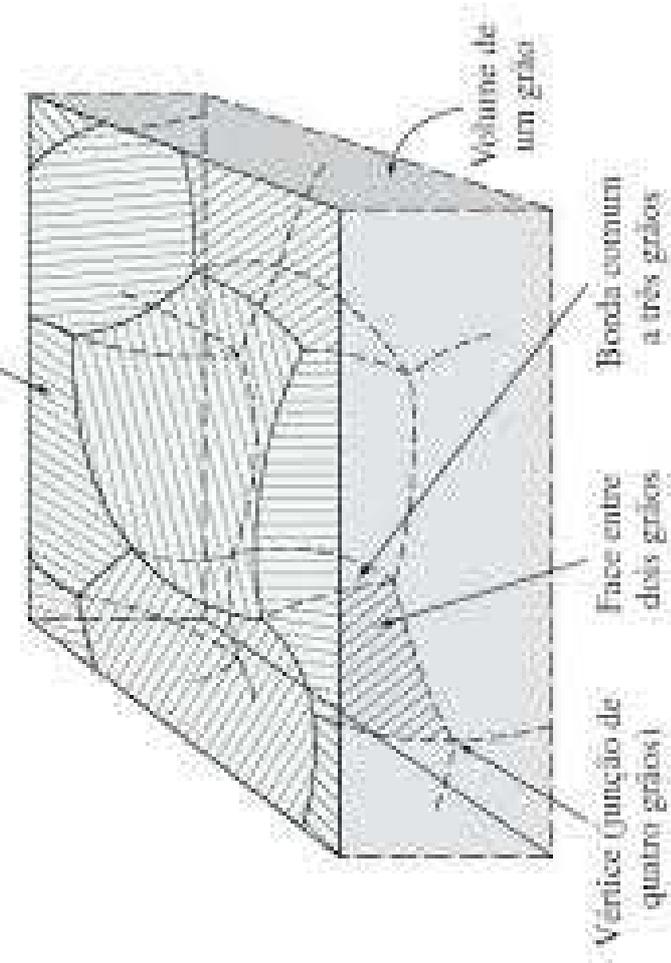


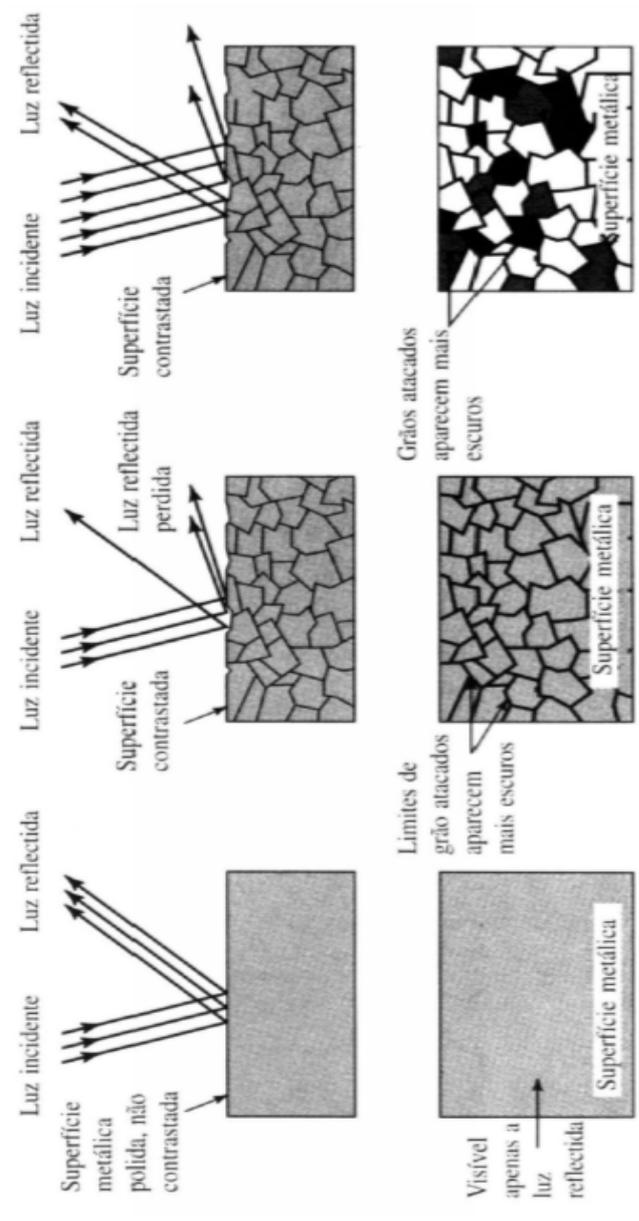
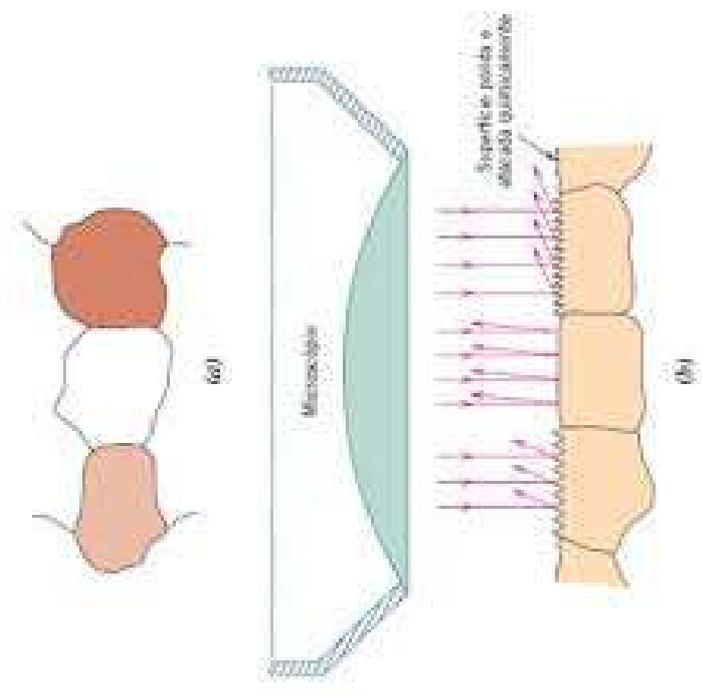
Aço com até 0,021 % de C



Cobre

Microestrutura na superfície superior.
Cada grão está sombreado de forma distinta.





(a)

(b) Ver fig. 4.46

(c) Ver fig. 9.10

- Uma peça de cobre é composta de milhões de pequenos cristais formando um material policristalino.
- Cada cristal é chamado de *grão*, que apresenta tamanho típico de 100 μm .
- A fronteira entre os cristais (grãos) é chamada de *contorno de grão*

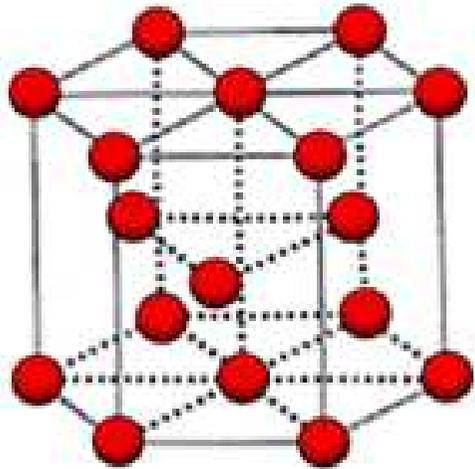
Polimorfismo

- Alguns metais e não-metais podem ter mais de uma estrutura cristalina dependendo da temperatura e pressão. Esse fenômeno é conhecido como polimorfismo.
- Geralmente as transformações polimórficas são acompanhadas de mudanças na densidade e mudanças de outras propriedades físicas.

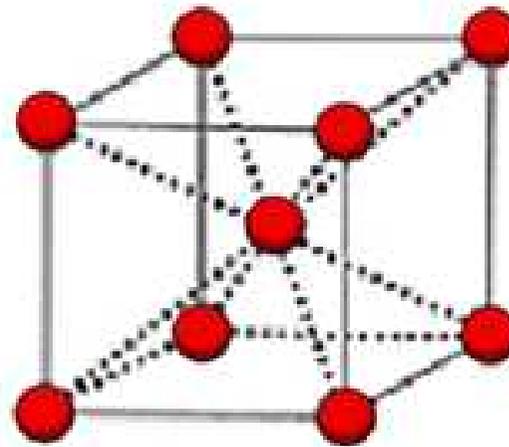
Alotropia

- Quando o polimorfismo é encontrado em sólidos elementares ele é mais frequentemente denominado de *alotropia*

O titânio quando submetido a diferentes temperaturas apresenta *alotropia*. Sua estrutura cristalina hexagonal compacta que é mole e estável na temperatura ambiente é denominada de fase α . Em temperaturas superiores a $882\text{ }^{\circ}\text{C}$, sua estrutura é dura e muda para cúbica de corpo centrado, conhecida como fase β .

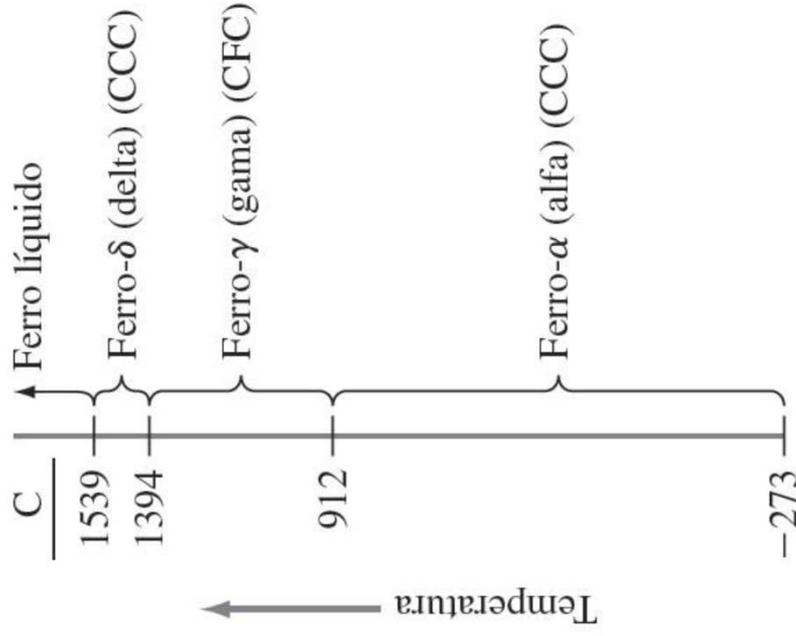


Titânio α



Titânio β

ALOTROPIA DO FERRO

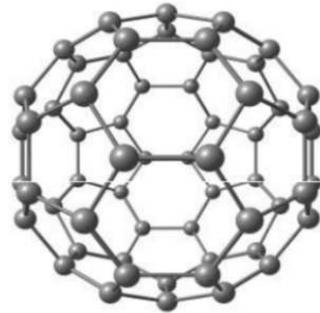


- ♦ Na temperatura ambiente, o Ferro tem estrutura ccc, número de coordenação 8, fator de empacotamento de 0,68 e um raio atômico de 1,241Å.
- ♦ A 910°C, o Ferro passa para estrutura cfc, número de coordenação 12, fator de empacotamento de 0,74 e um raio atômico de 1,292Å.
- ♦ A 1394°C o ferro passa novamente para ccc.

Metais que apresentam 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)

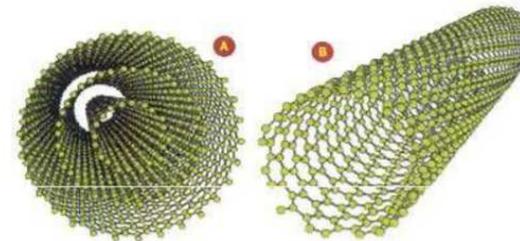
Polimorfismo do Carbono



- Configuração estrutural do fullereno C_{60}

Semelhante a uma bola de futebol, 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.

Resistência 20x maior do que os aços mais resistentes.

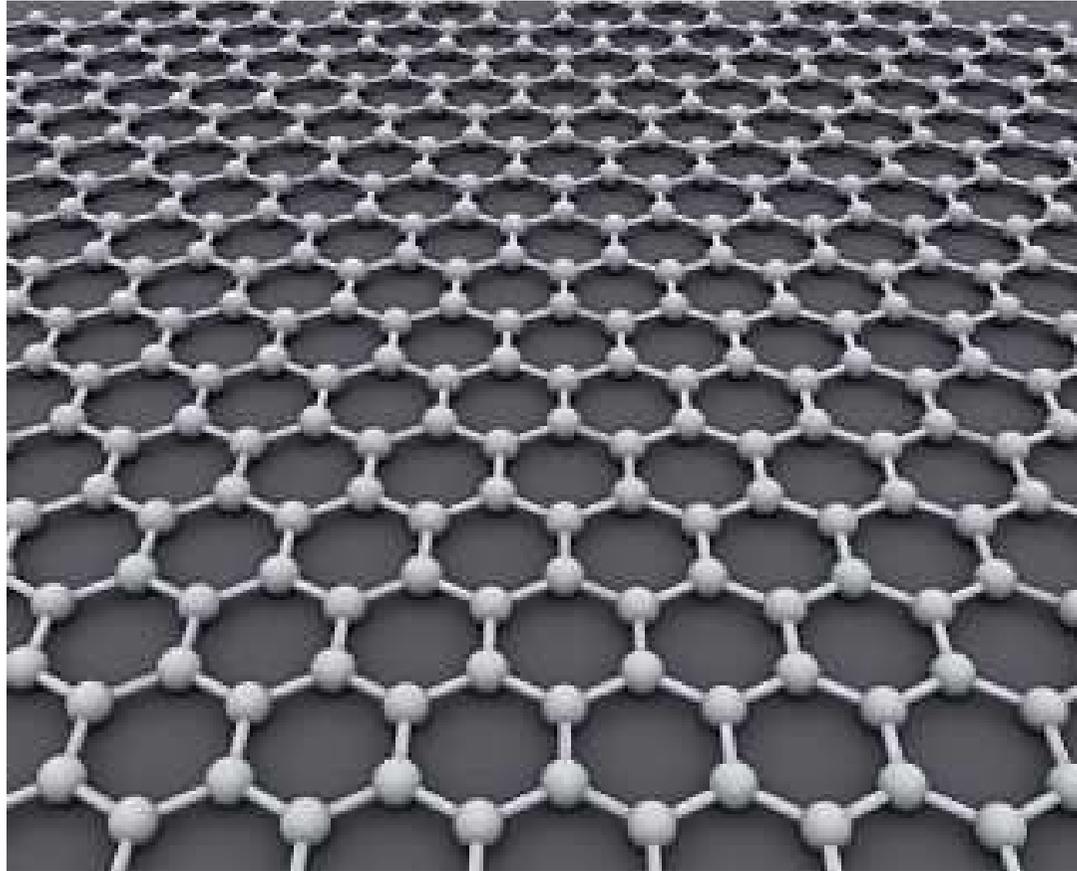


- Configuração estrutural dos nanotubos

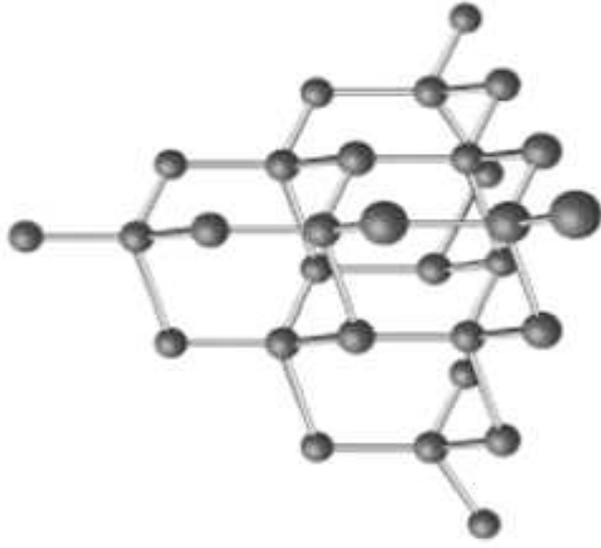
Um nanotubo, é semelhante a uma única lâmina de grafite, enrolada na forma de um tubo;
São extremamente resistentes e rígidos (módulo de elasticidade são da ordem de 1 TPa = 103 GPa, além de serem relativamente dúcteis.

Fibra de carbono = LRT= 7 GPa

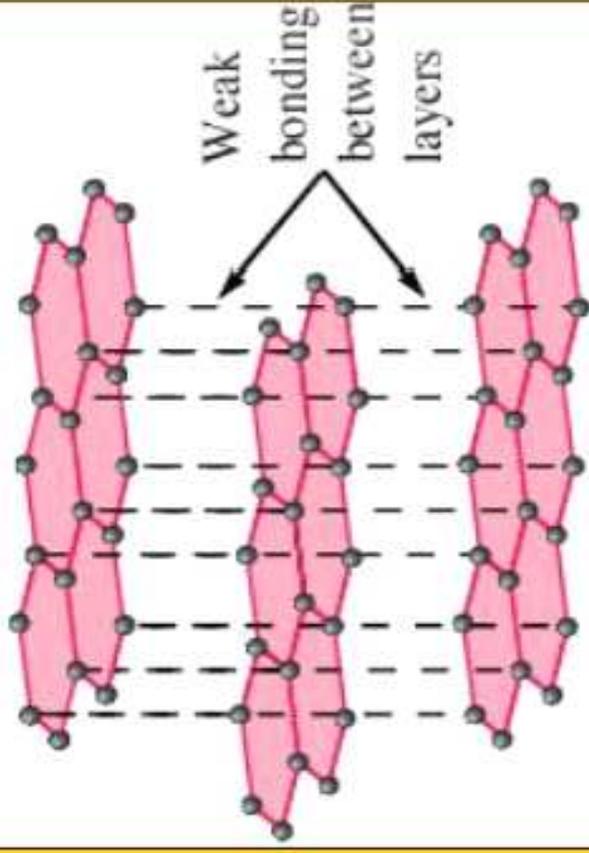
Nanotubos= LRT = 45 GPa e E=ordem de Tpa (1012)



■ Configuração estrutural do grafeno

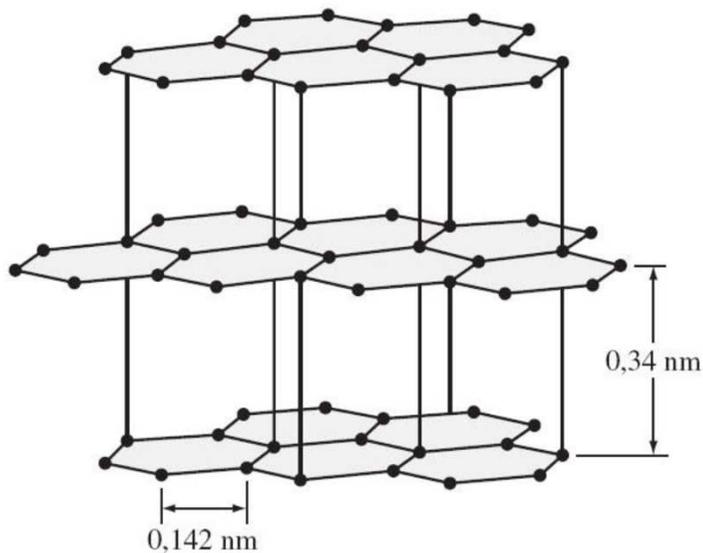


(a) Diamond



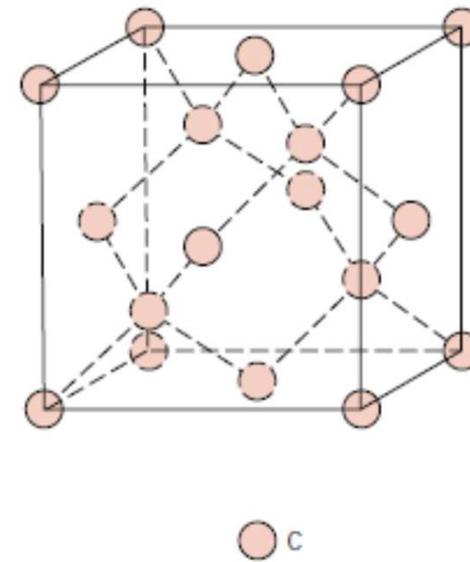
Graphite

(b)



Estrutura cristalina do grafite. Composta por átomos de carbono que seguem um arranjo de camadas de planos hexagonais, cada átomo de carbono nos planos está ligado através de fortes ligações covalentes (sp^2) a três átomos vizinhos coplanares. Entre as camadas se estabelece uma ligação do tipo van der Waals, empregando o quarto elétron do carbono.

- Sólido anisotrópico = propriedades dependem da direção;
- Baixa densidade ($2,26 \text{ g/cm}^3$);
- Bom condutor térmico e elétrico, no direção dos planos.



Célula unitária para a estrutura cristalina do diamante. Cada átomo de carbono se liga a quatro outros átomos de carbono e essas ligações são totalmente covalentes (sp^3).

- O diamante é isotrópico, possui maior densidade ($3,57 \text{ g/cm}^3$).
- Material natural mais rígido, mais duro e de menor compressibilidade.
- Possui altíssima condutividade térmica, porém valores mínimos de condutividade elétrica.

ARRANJAMENTO ATÔMICO

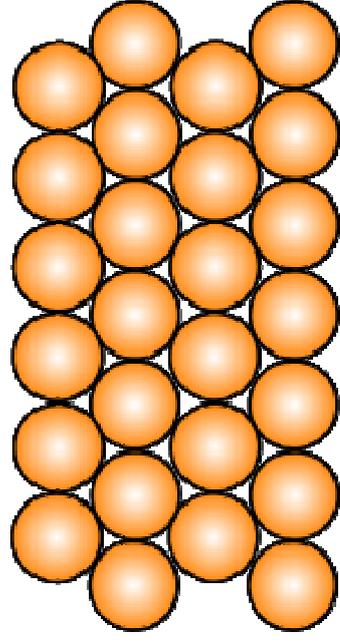
- ◆ As propriedades de alguns materiais estão diretamente associadas à sua estrutura cristalina (ex: magnésio e berílio que têm a mesma estrutura se deformam muito menos que ouro e prata que têm outra estrutura cristalina)
- ◆ Explica a diferença significativa nas propriedades de materiais cristalinos e não cristalinos de mesma composição (materiais cerâmicos e poliméricos não-cristalinos tendem a ser opticamente transparentes enquanto cristalinos não)

Mg e Be: HC; Au e Ag: CFC

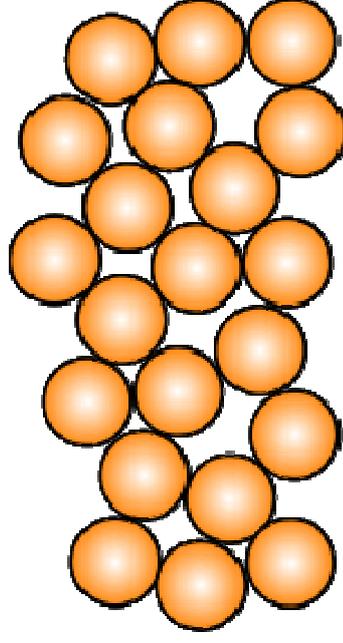
Estrutura dos sólidos cristalinos:

- **Sólidos não cristalinos**

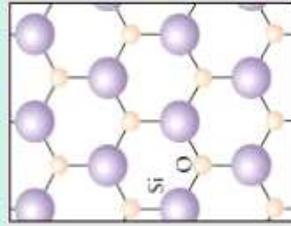
cristalino



amorfo

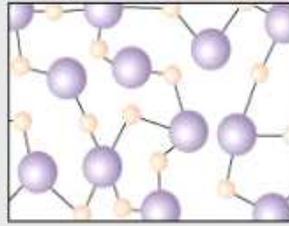


Arranjo ordenado - O quartzo é uma forma cristalina da sílica (SiO_2)



(a)

Arranjo desordenado – Quando a sílica (SiO_2) fundida se solidifica torna-se vidro



(b)

Sólidos não cristalinos

- Não tem arranjo regular ao longo de distâncias atômicas relativamente grandes

AMORFOS

(líquidos superresfriados)

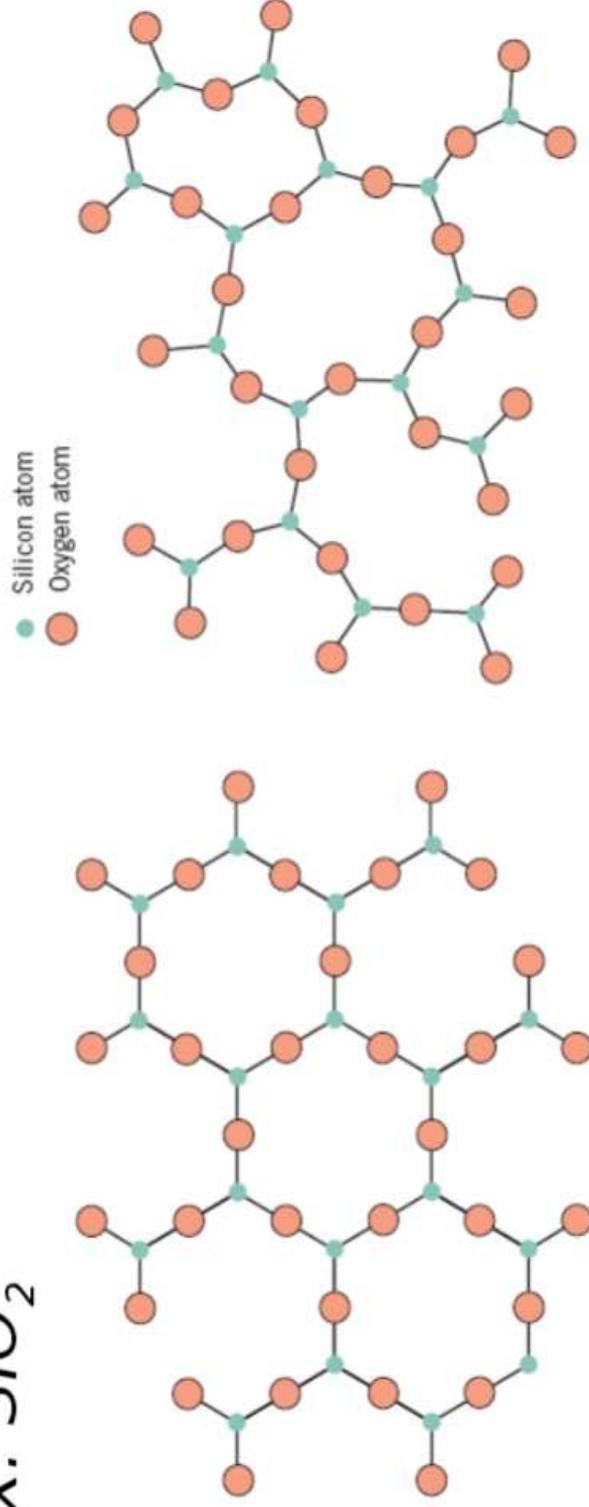
Ex. SiO_2 ambos estados

cristalino

amorfo

Sólidos não cristalinos

Ex. SiO_2



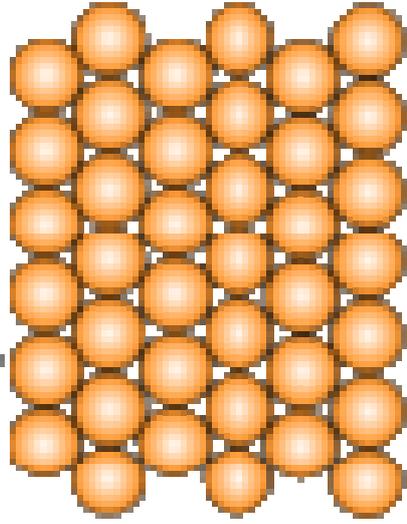
Esquemas bidimensionais da estrutura do (a) dióxido de silício cristalino e (b) do dióxido de silício não-cristalino.



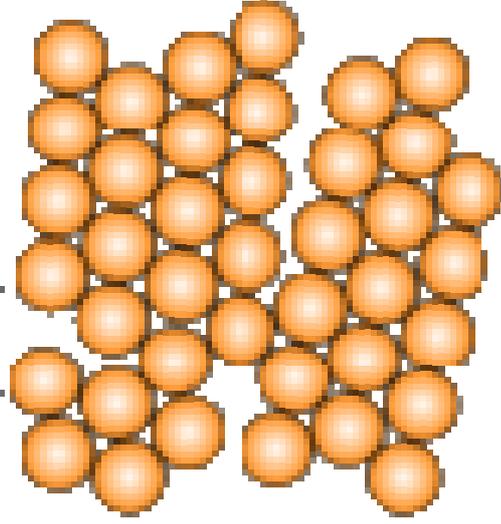
Sólidos não cristalinos

- Resfriamento rápido – favorece a formação do sólido não cristalino;
 - *Metais* → *cristalinos*
 - *Cerâmicas* → *cristalinos*
 - *amorfo* – *vidros inorgânicos*
 - *Polímeros* → *cristalinos*
 - *amorfo*
 - *amorfo/cristalino*

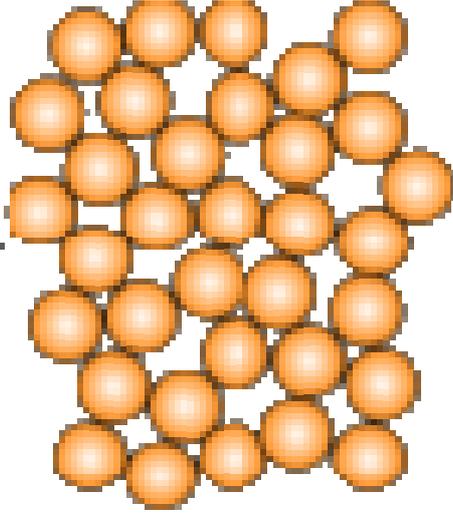
Crystalline



Polycrystalline



Amorphous



ESTAL



