



**ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

**Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais**

**Estrutura dos sólidos cristalinos – pte 2**  
**Direção cristalográfica**

Prof. Dr. Mateus Botani de Souza Dias

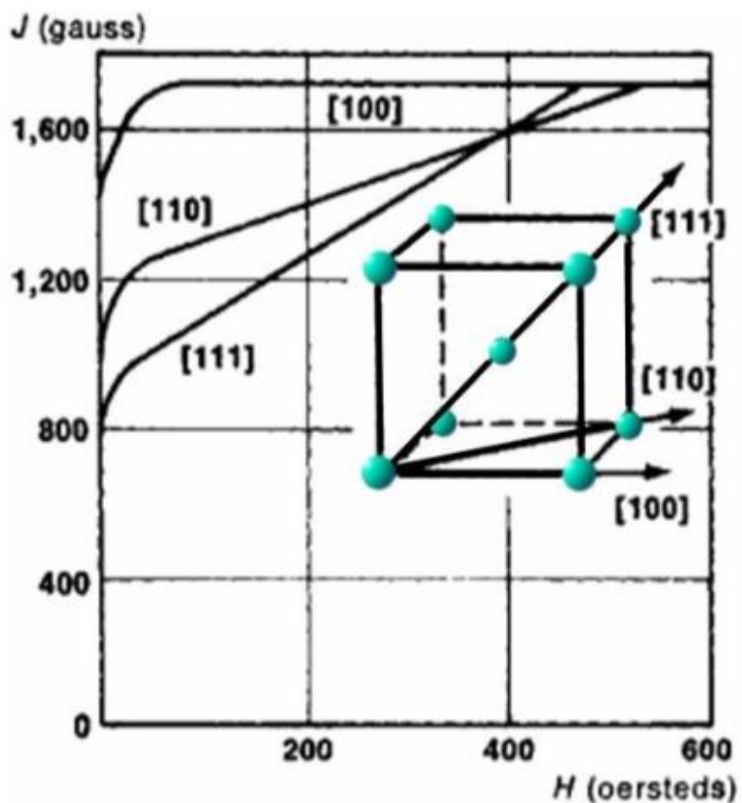
PMT 3301 – Fundamentos de Cristalografia e Difração;



# Estrutura dos sólidos cristalinos

Qual a razão de estudar direções da estrutura cristalina?

## Cúbico de corpo centrado



- As propriedades dependem das direções cristalográficas.





# Estrutura dos sólidos cristalinos

Qual a razão de estudar direções da estrutura cristalina?



- Aços elétricos de grão orientado;

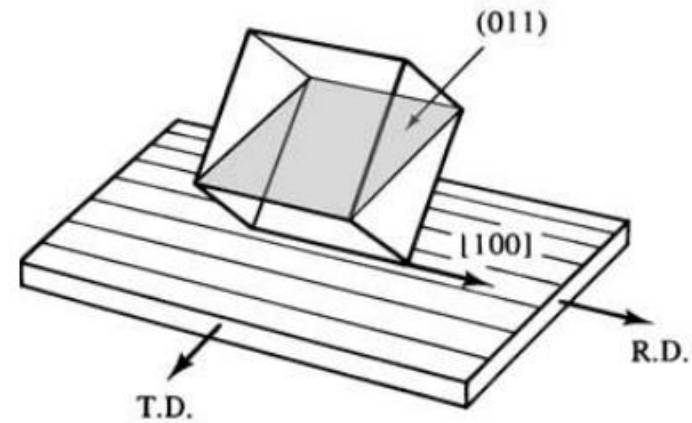
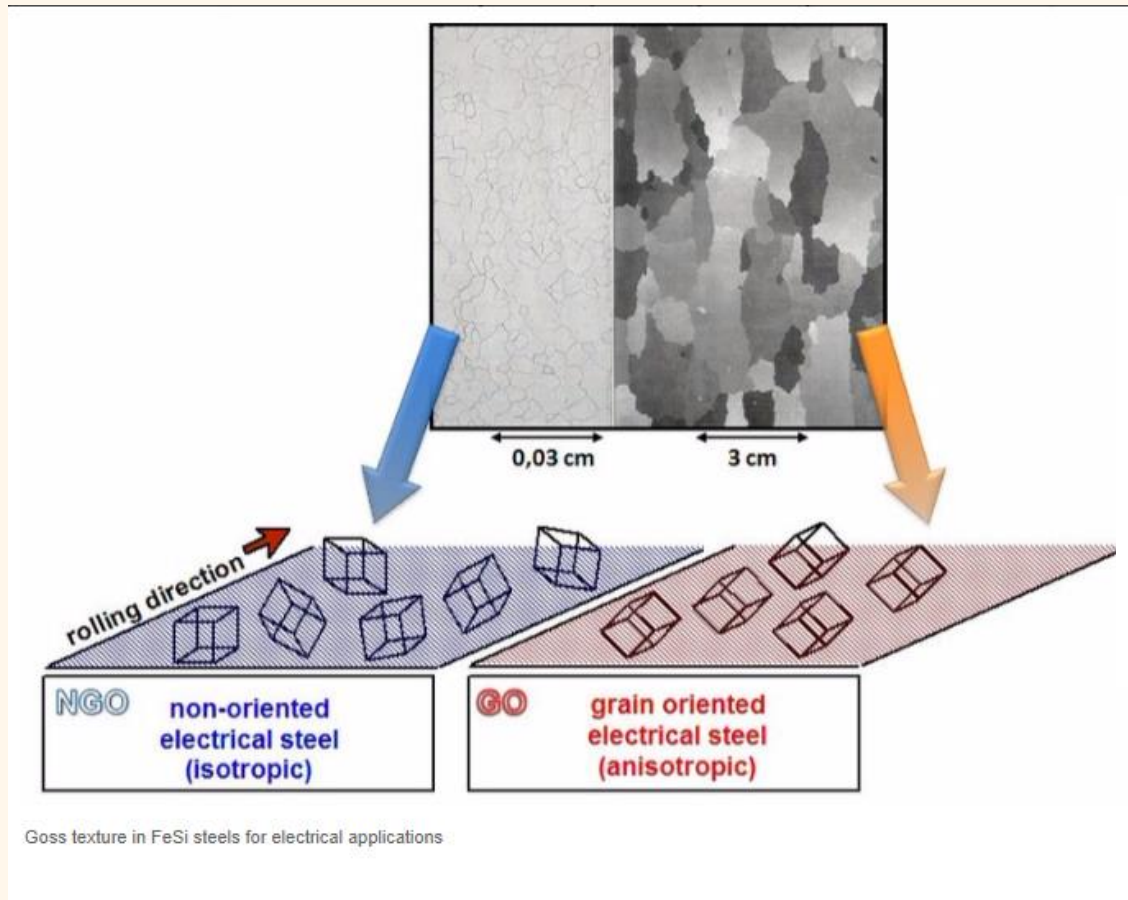


- Aço elétrico de grão não orientado.



# Estrutura dos sólidos cristalinos

Qual a razão de estudar direções da estrutura cristalina?

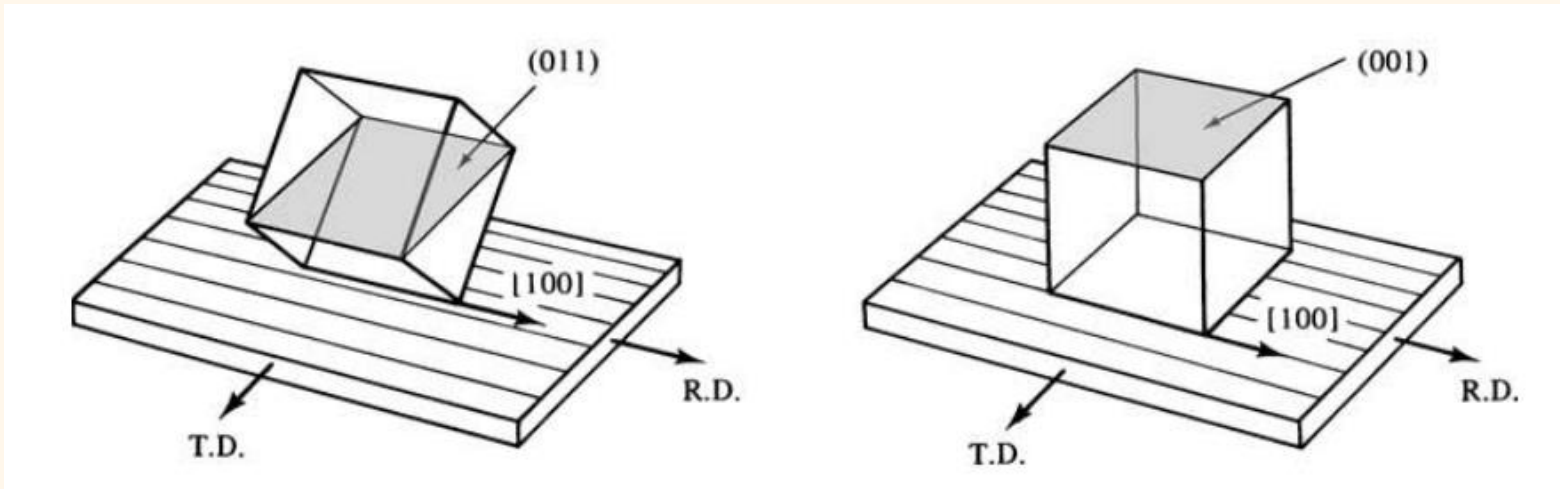




# Estrutura dos sólidos cristalinos

Qual a razão de estudar direções da estrutura cristalina?

- **Todo grão é definido por um conjunto de direção e plano;**
- **A normal do plano é perpendicular a superfície;**
- **A direção cristalográfica está paralela a alguma direção do material (geralmente é a direção de laminação).**





# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Determinação de coordenadas em uma rede

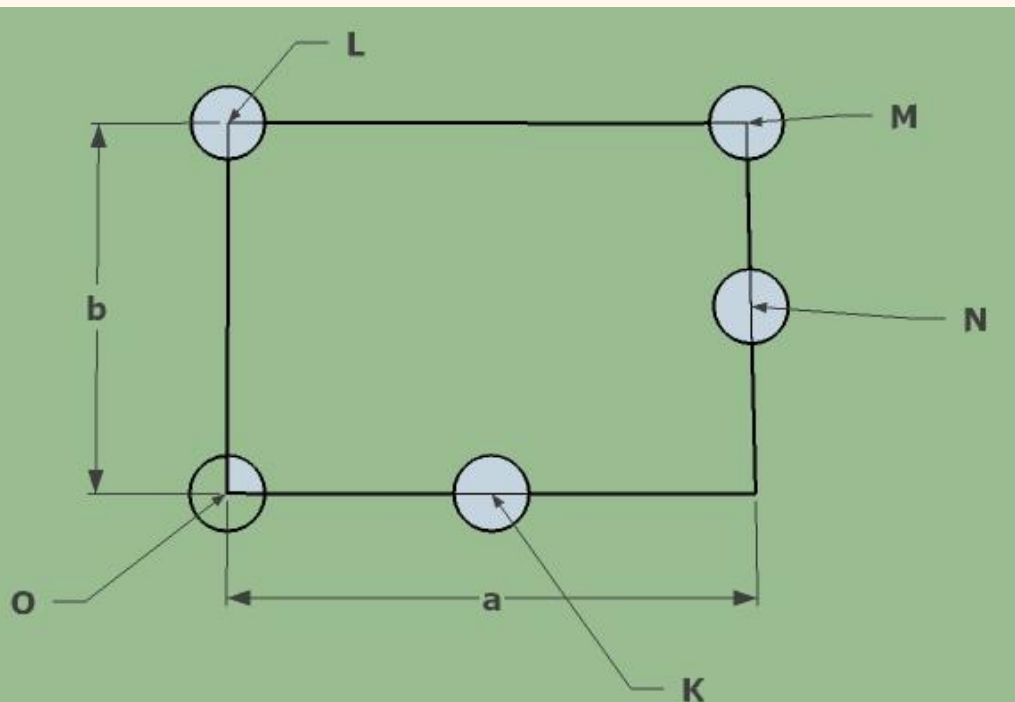
- A coordenada corresponde a um ponto de referência dentro da rede;
- Para isso, devemos sempre estabelecer um ponto de referência;
- Consideraremos o ponto “O” como ponto de referência;

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

$$C_X = ma + nb \quad (2D)$$

$$C_X = ma + nb + oc$$

- Assim, a coordenada é descrita como (m,n) ou (m,n,o).



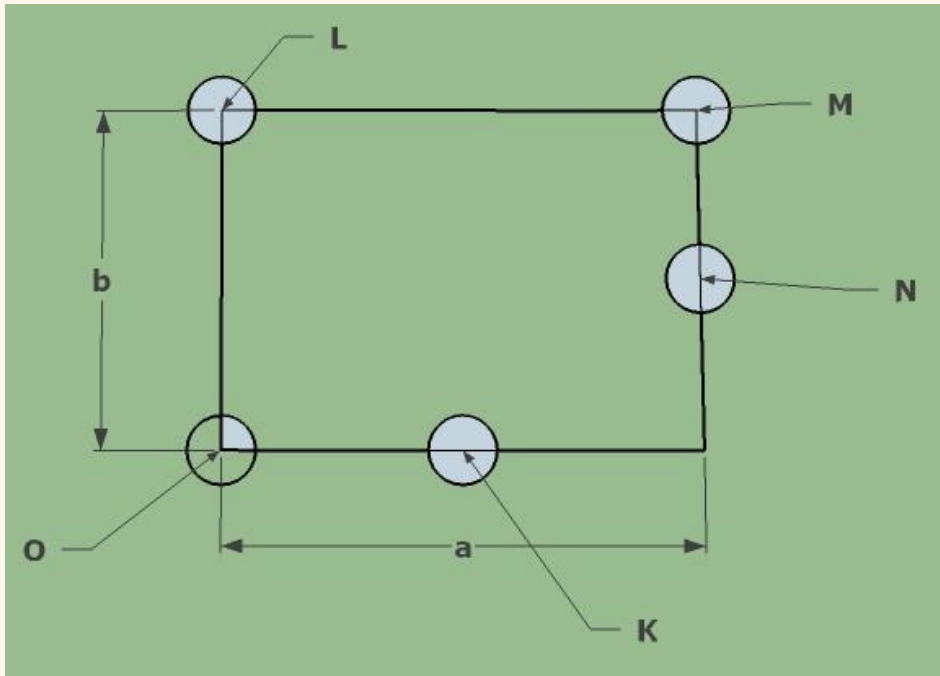




# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Determinação de coordenadas em uma rede

- A coordenada do ponto M será:  $C_M = 1a + 1b$  (2D)
- A representação da coordenada será (1,1);
- Obs: No caso de coordenadas, NÃO se deve deixar os números inteiros;
  - Por exemplo: Ponto “K”, se a coordenada for  $(1/2, 0)$ , deve-se DEIXAR em fração;

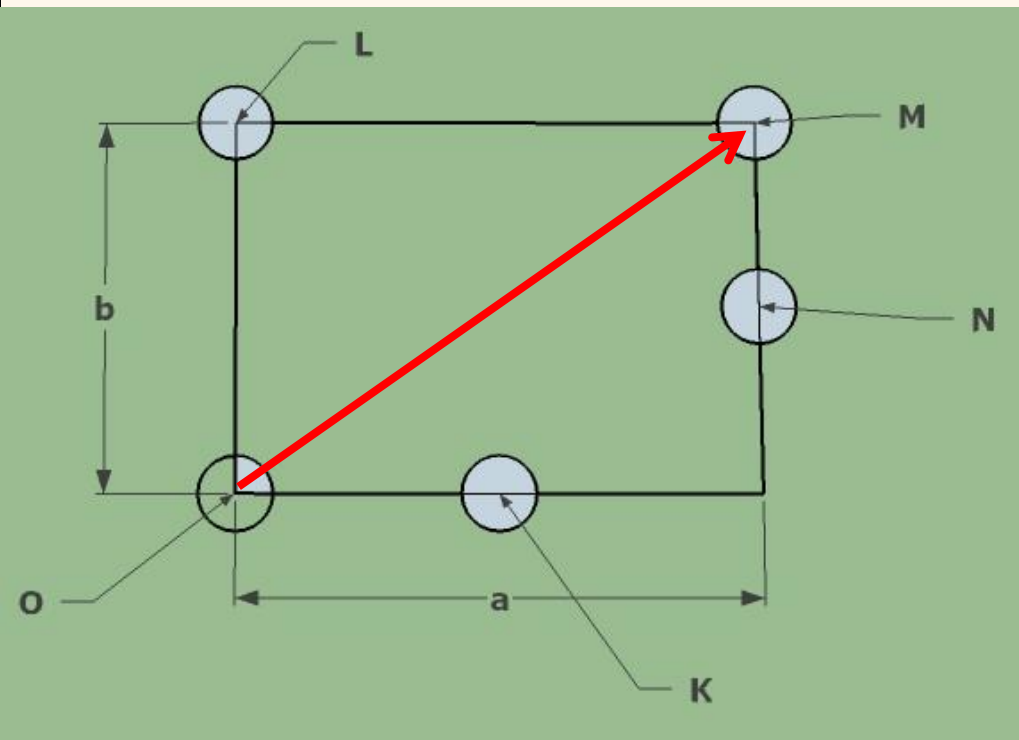




## Estrutura dos sólidos cristalinos

### 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;



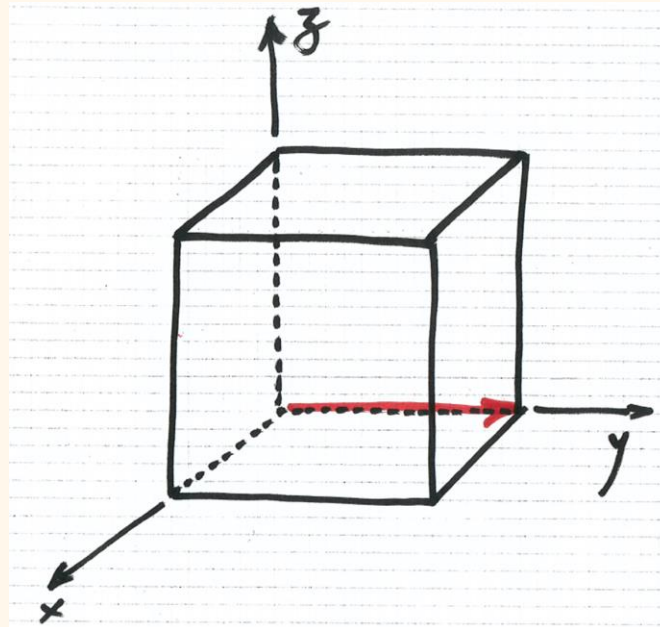
- O vetor em vermelho liga o ponto “O” ao ponto “M”;
- Logo, essa direção será  $[1\ 1]$ ;
- A mesma é representada por colchetes e não possui vírgula;
- Perceba que esse vetor pode ser usado para qualquer rede;
- OBS: As direções devem ser sempre números inteiro.



# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Família de direções

- Dentro de cada sistema cristalino, existem direções cristalográficas que são equivalentes entre si;
- Por exemplo: direção  $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$  do sistema cúbico;



- Todas estas direções fazem parte da família  $\langle 100 \rangle$ .

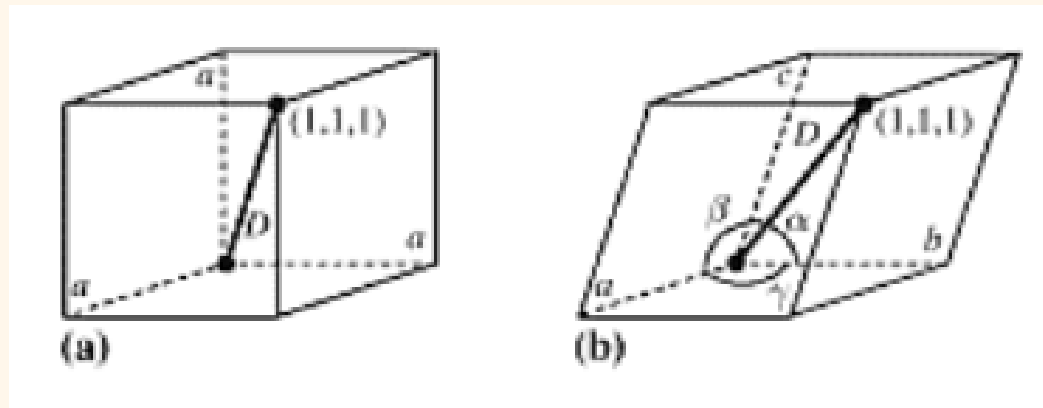




## Estrutura dos sólidos cristalinos

### Calculo: Distância de um vetor, ângulo entre duas direções

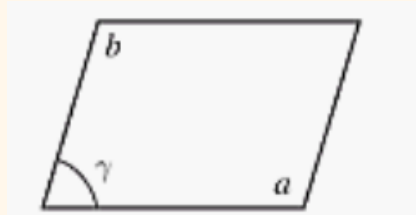
- Em diversas situações, se faz necessário calcular o módulo de um vetor;
- Por exemplo: Distância de uma aresta, distância entre dois átomos, ângulo da rede cristalina ou ângulo entre dois átomos e etc.;
- Se o sistema cristalino for ortogonal (cúbico, tetragonal ou ortogonal) é só usar o teorema de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





# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Devemos usar tensores – 2 D



$$|\overrightarrow{OM}|^2 = [u \quad v] \begin{bmatrix} a^2 & a \cdot b \cdot \cos(\gamma) \\ a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$$

- “a” e “b” são as arestas da célula unitária;
- “γ” é o ângulo entre as arestas da célula unitária;
- “u” e “v” são os vetores que ligam a origem ao ponto desejado.



# Estrutura dos sólidos cristalinos

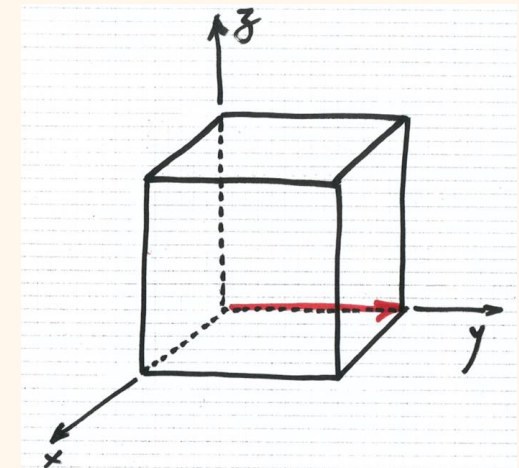
## Devemos usar tensores – 3 D

- Em 3-D, essa análise se torna;

$$|\overrightarrow{OM}|^2 = [u \quad v \quad w] \begin{bmatrix} a^2 & a.b.\cos(\gamma) & a.c.\cos(\beta) \\ a.b.\cos(\gamma) & b^2 & b.c.\cos(\alpha) \\ a.c.\cos(\beta) & b.c.\cos(\alpha) & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

- **Lembre-se:**

- “u”, “v”, “w” = está relacionado com a aresta  
“a”, “b”, “c”, respectivamente.







# Estrutura dos sólidos cristalinos

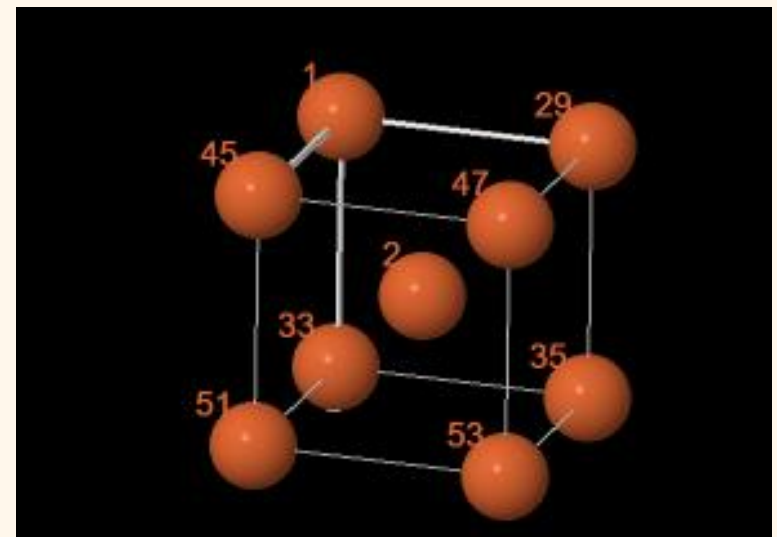
Devemos usar tensores – 3 D (<https://bdec.dotlib.com.br/inicio>)

- Em 3-D, essa análise se torna;

$$|\overrightarrow{OM}|^2 = [u \quad v \quad w] \begin{bmatrix} a^2 & a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & a \cdot c \cdot \cos(\beta) \\ a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & b^2 & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) \\ a \cdot c \cdot \cos(\beta) & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

Calcule a distância entre os átomos 51-29 da estrutura CCC do Fe.

Use o DOI: 10.1038/s41598-019-48817-7

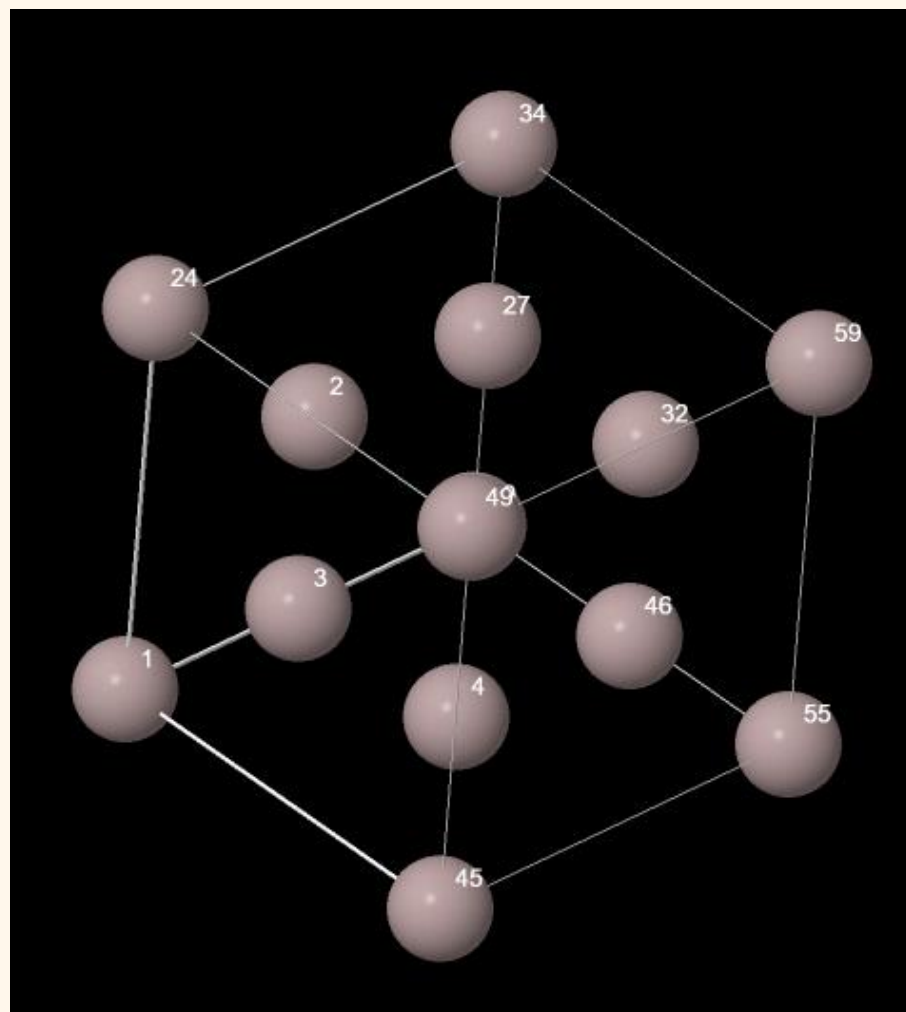




# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Devemos usar tensores – 3 D

- Calcule a distância entre os átomos 46-32 da estrutura CFC Do alumínio.



Use o DOI:

[10.1021/acs.chemmater.9b05145](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b05145)



# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Ângulo entre duas direções cristalográficas

- Para isso, usaremos o produto escalar de dois vetores:

$$\overrightarrow{OM} \cdot \overrightarrow{ON} = |\overrightarrow{OM}| \cdot |\overrightarrow{ON}| \cdot \cos\theta$$

$$|\overrightarrow{OM}|^2 = [u \quad v \quad w] \begin{bmatrix} a^2 & a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & a \cdot c \cdot \cos(\beta) \\ a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & b^2 & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) \\ a \cdot c \cdot \cos(\beta) & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

$$|\overrightarrow{ON}|^2 = [u \quad v \quad w] \begin{bmatrix} a^2 & a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & a \cdot c \cdot \cos(\beta) \\ a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & b^2 & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) \\ a \cdot c \cdot \cos(\beta) & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

$$\overrightarrow{OM} \cdot \overrightarrow{ON} = [u \quad v \quad w] \begin{bmatrix} a^2 & a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & a \cdot c \cdot \cos(\beta) \\ a \cdot b \cdot \cos(\gamma) & b^2 & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) \\ a \cdot c \cdot \cos(\beta) & b \cdot c \cdot \cos(\alpha) & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

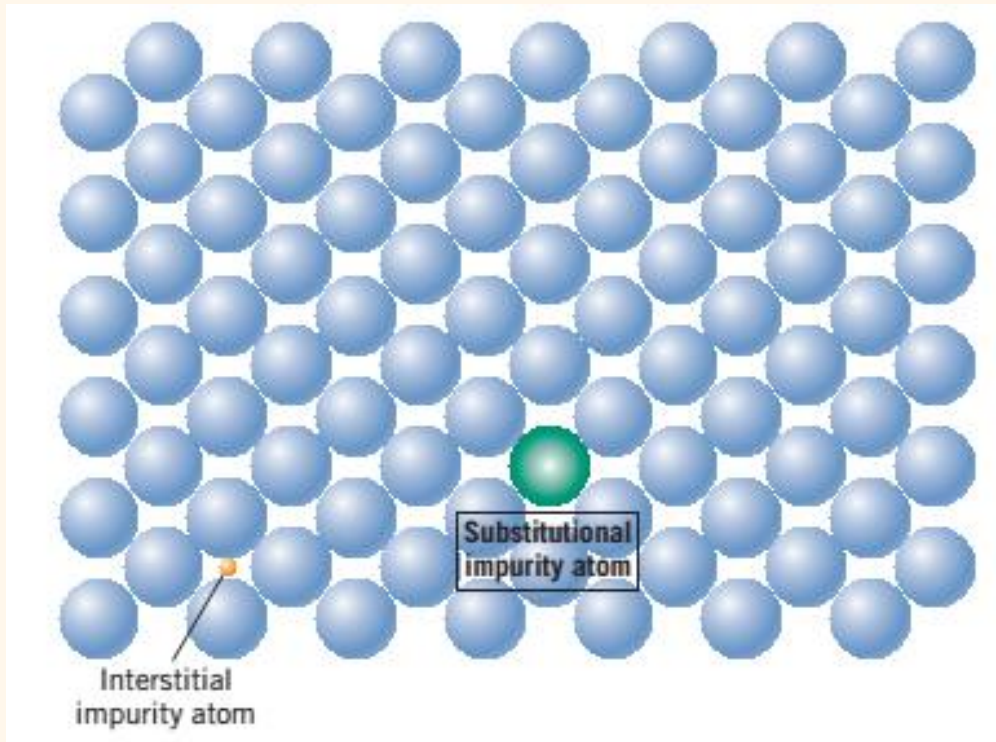




# Estrutura dos sólidos cristalinos

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.**



# Estrutura dos sólidos cristalinos

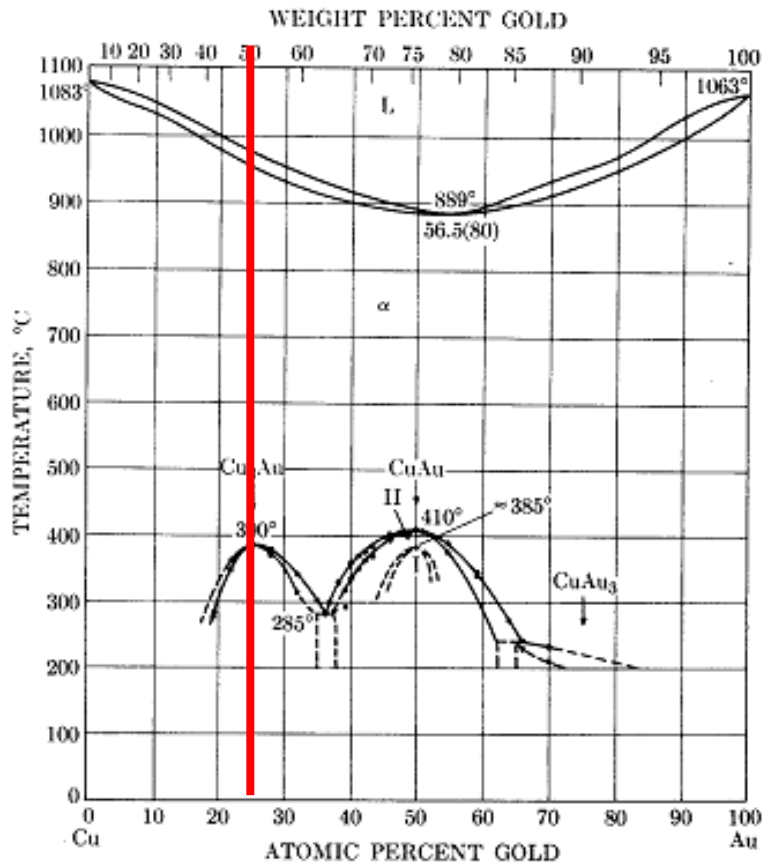
## Solução sólida substitucional

- **Átomo em maior quantidade = Solvente (A);**
- **Átomo em menor quantidade = Solute (B)**
- **Exemplo de ligas =  $\text{AuCu}_3$ ,  $\text{Fe}_{97}\text{Si}_3$ ,  $\text{Fe}_{90}\text{Al}_{10}$ ;**
- **Os átomos A e B podem estar organizados de duas formas:**
- **Ordenamento de longo alcance ou curto alcance (desordenada).**

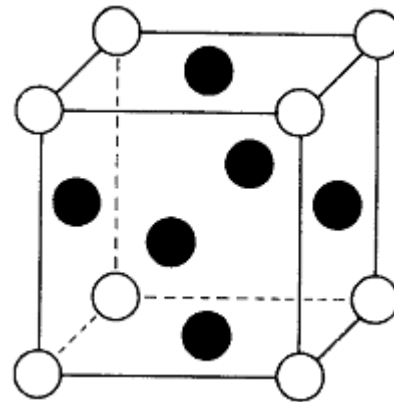


# Estrutura dos sólidos cristalinos

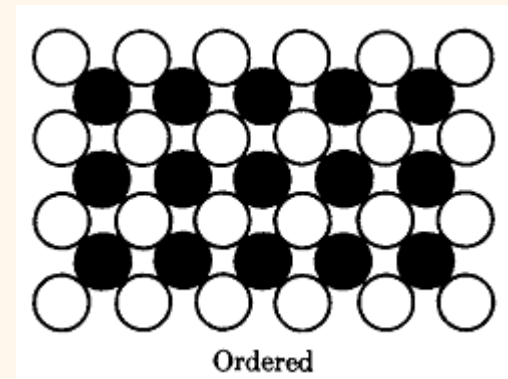
## Ordenamento de longo alcance (possui uma super rede)



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



○ gold atom  
● copper atom



○ gold      ● copper

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



# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Ordenamento de longo alcance (desordenada)

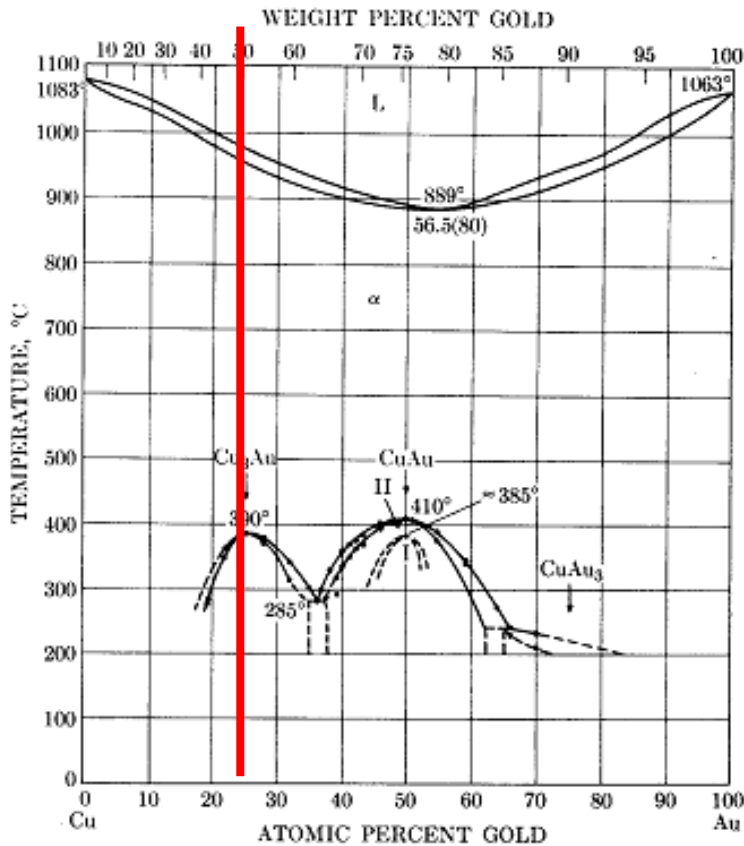
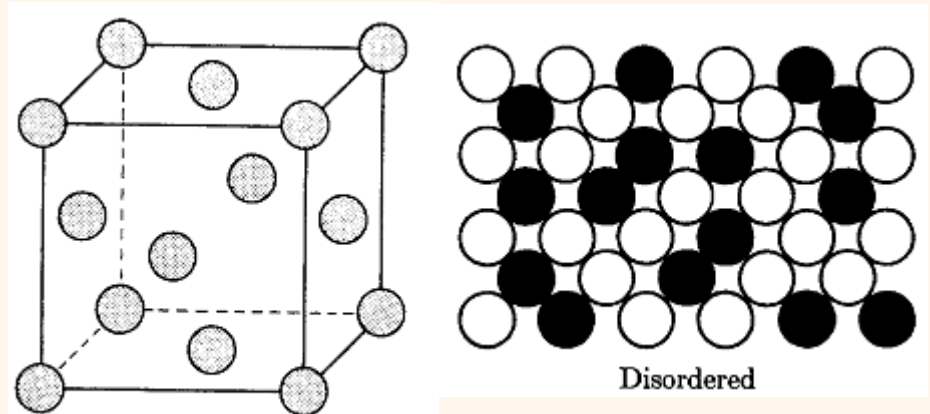


Fig. 13-5 Phase diagram of the copper-gold system. Hansen and Anderko [13.4].

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



(a) Disordered

● “average”  
gold-copper atom

○ gold      ● copper



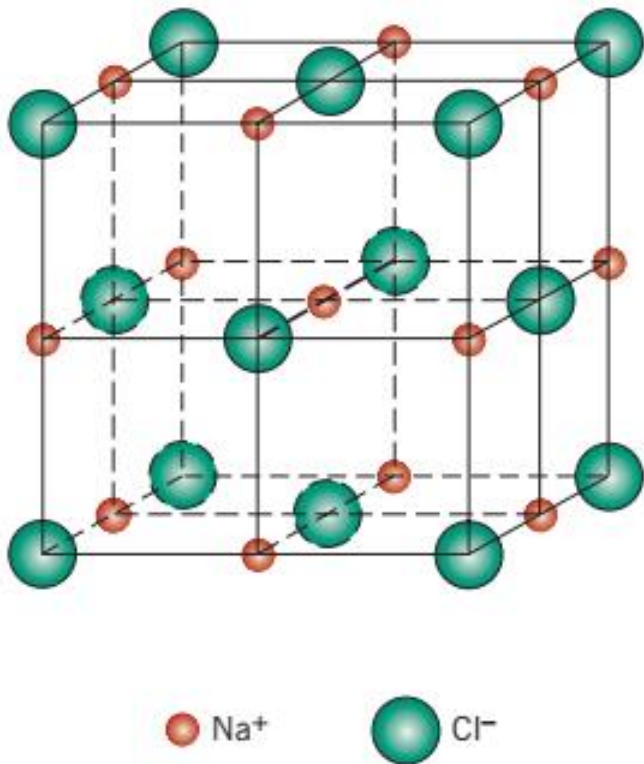


## Estrutura dos sólidos cristalinos

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

- Qual é a estrutura cristalina deste composto?

- Estrutura CFC dos átomos de cloro;



**MgO**  
**Uso agrícola**

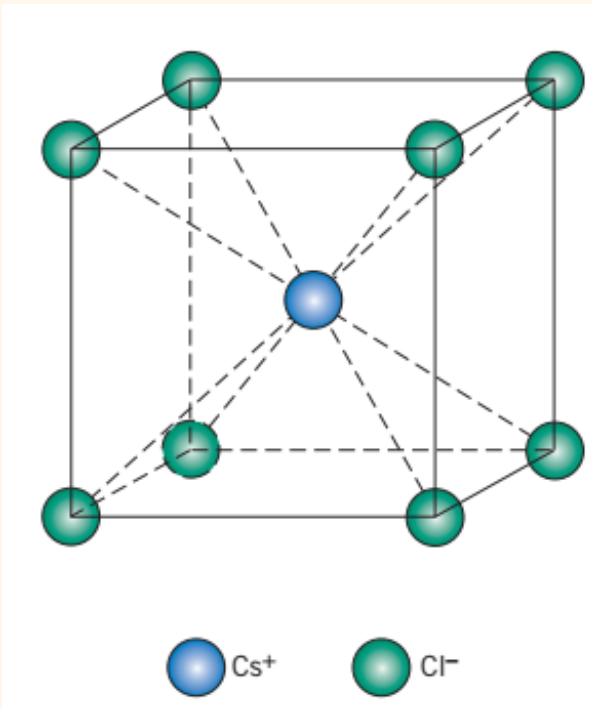


# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Estruturas cerâmicas – Cloreto de célio ( $\text{CeCl}$ )

- Qual é a estrutura cristalina deste composto?

- Estrutura cúbica simples.

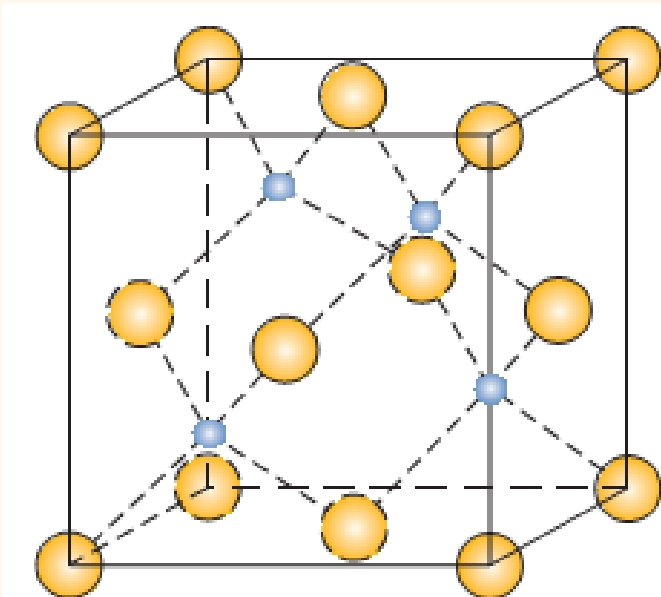




# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Estruturas cerâmicas – Blenda de zinco

- Qual é a estrutura cristalina deste composto?



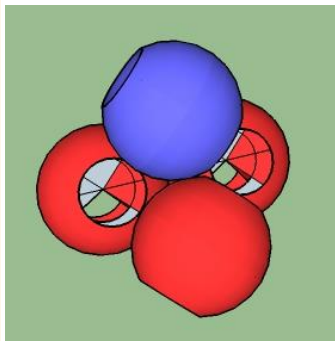
- **Estrutura CFC dos átomos de S;**
- **Os ânions estão localizados nos vértices e nas faces da estrutura;**
- **Os cátions estão localizados nos sítios tetraédricos.**



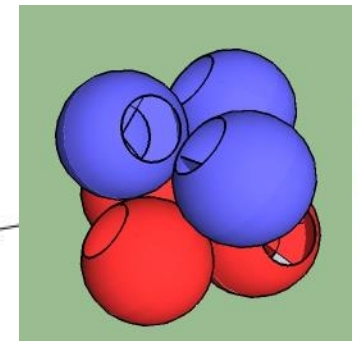
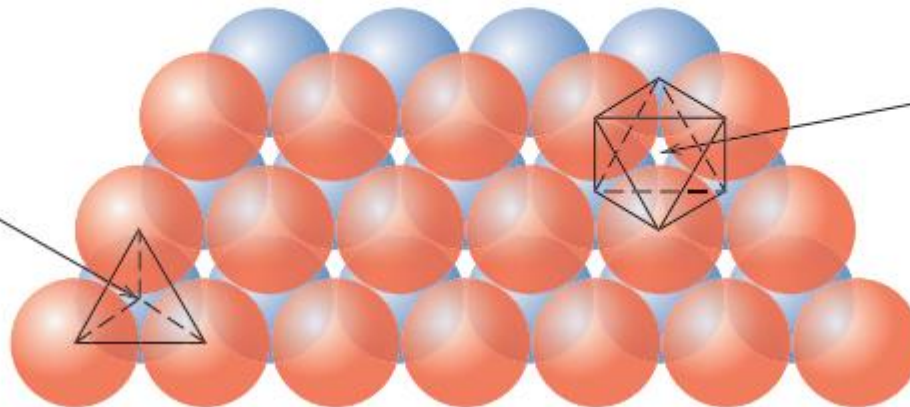
# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Solução sólida intersticial - metais

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



Tetrahedral



Octahedral

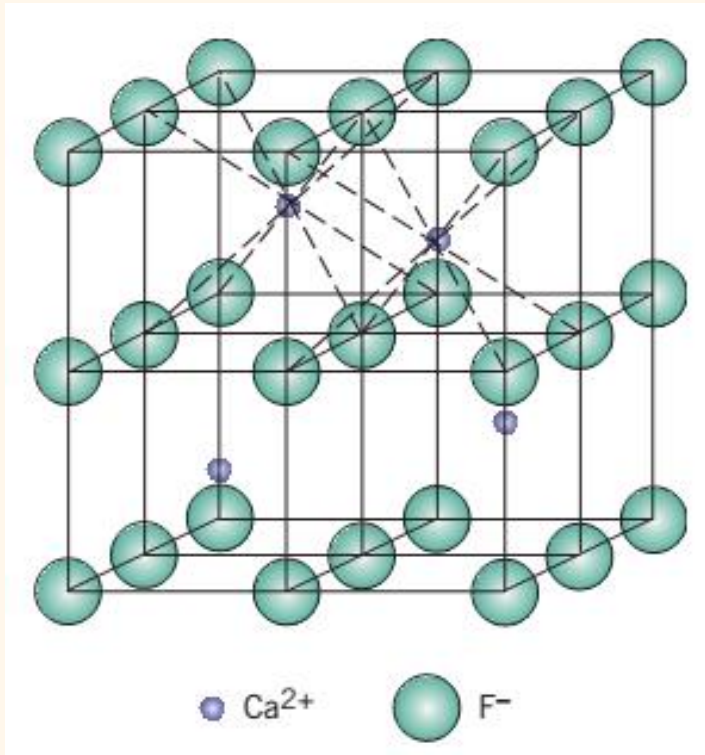




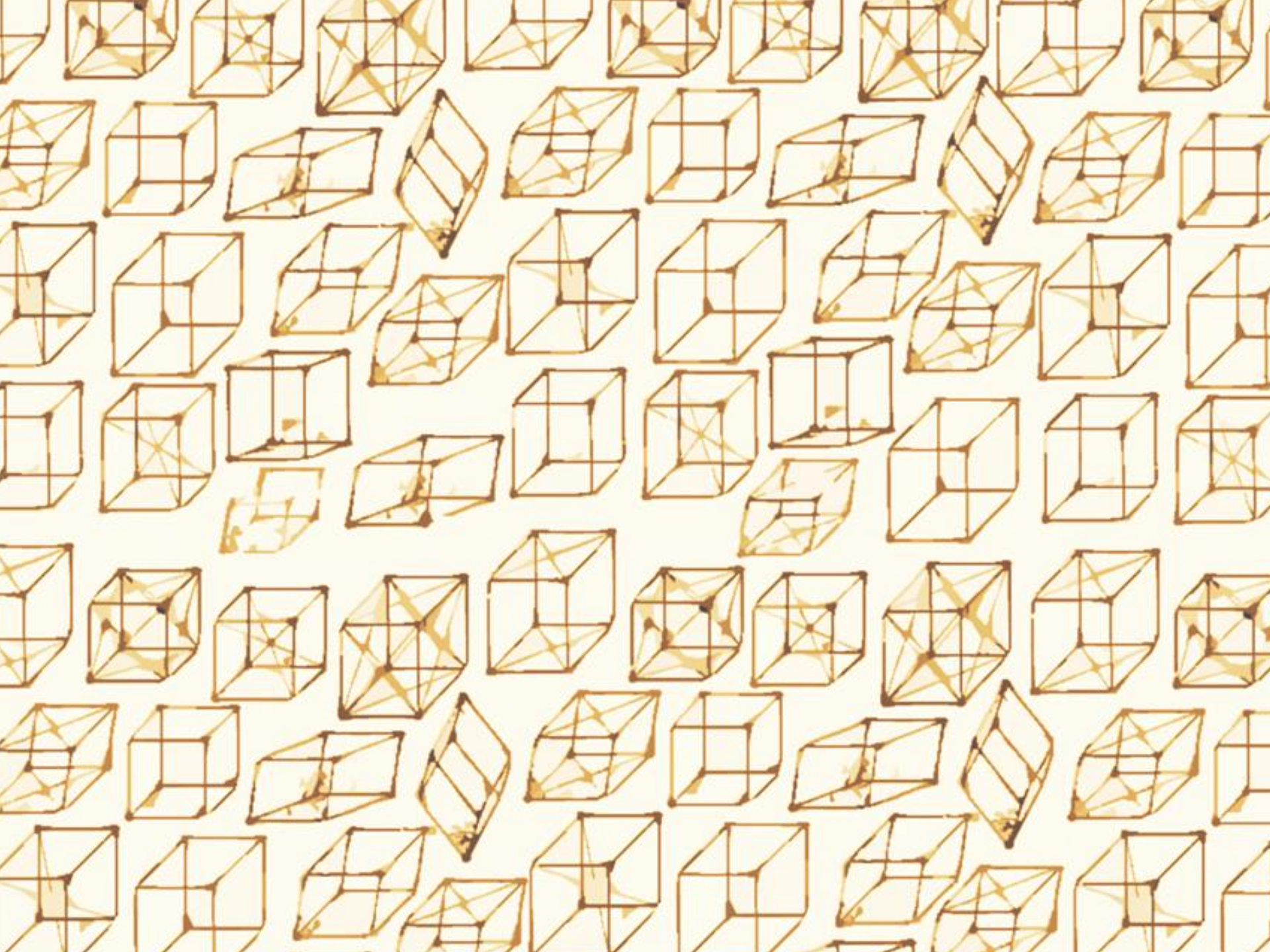
# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Estruturas cerâmicas – fluorita ( $\text{CaF}_2$ )

- 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.**



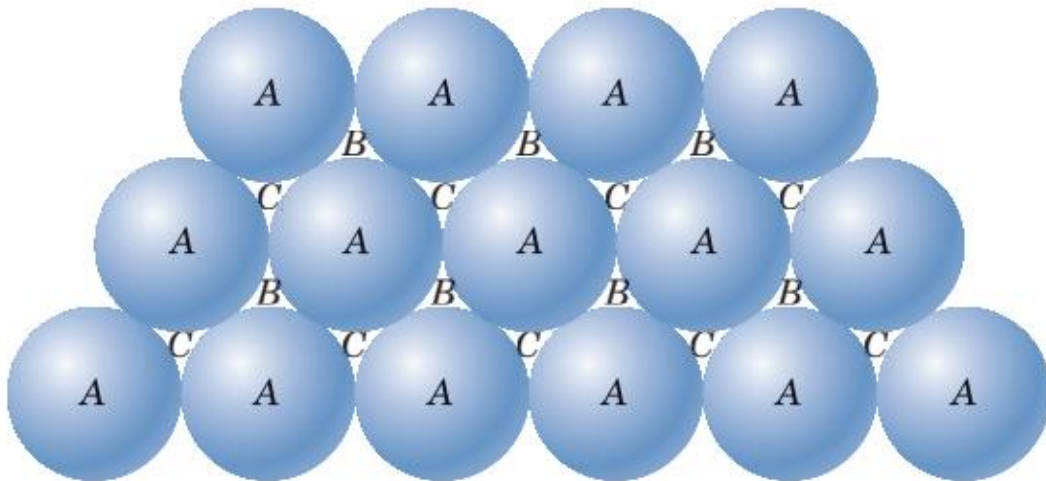




# Estrutura dos sólidos cristalinos

## Estrutura metálica

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



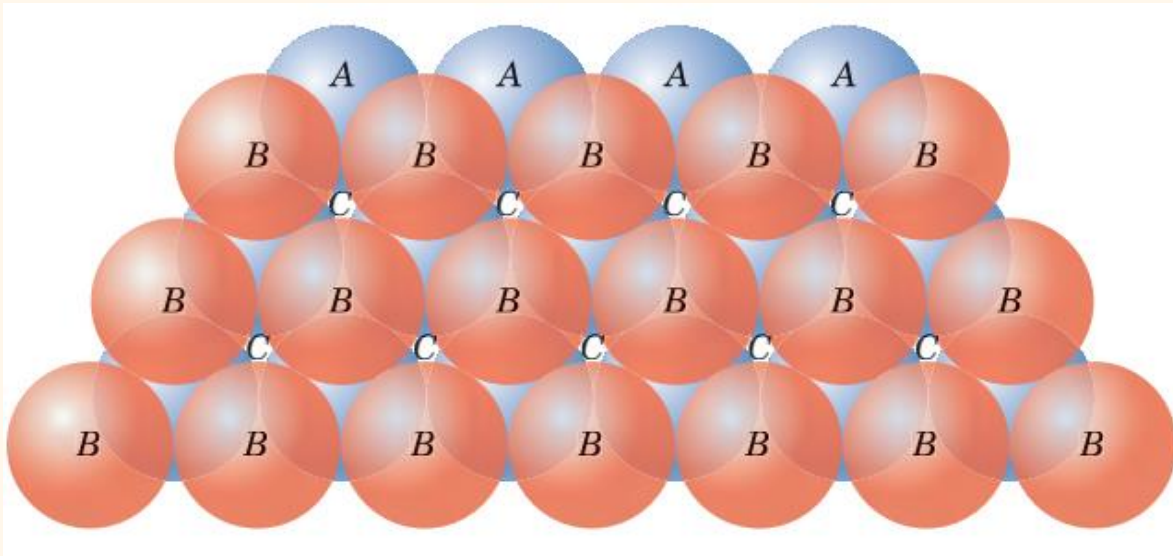
- O centro de cada átomo está em A;
- Alguns espaços são chamados de B (triângulo para cima);
- Alguns espaços são chamados de C (triângulo para baixo).



# Estrutura dos sólidos cristalinos

## 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”.

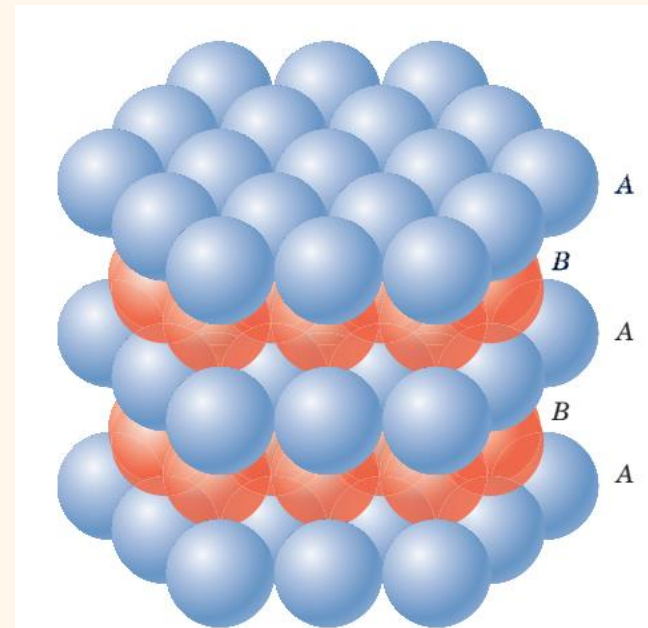
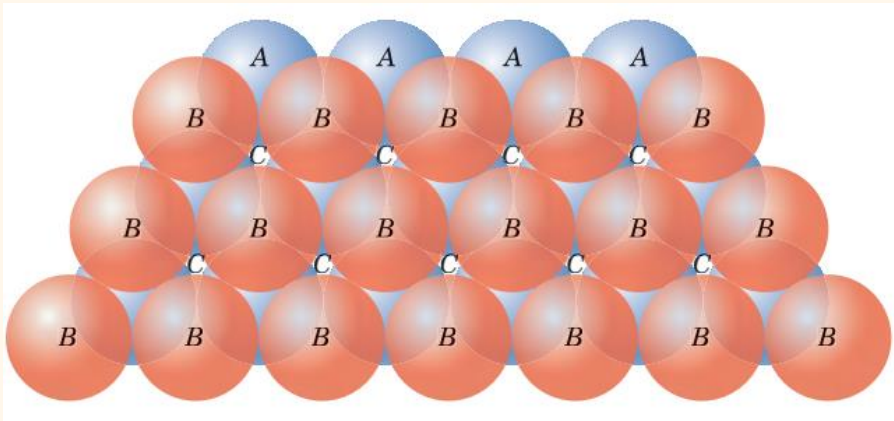




# Estrutura dos sólidos cristalinos

## 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.

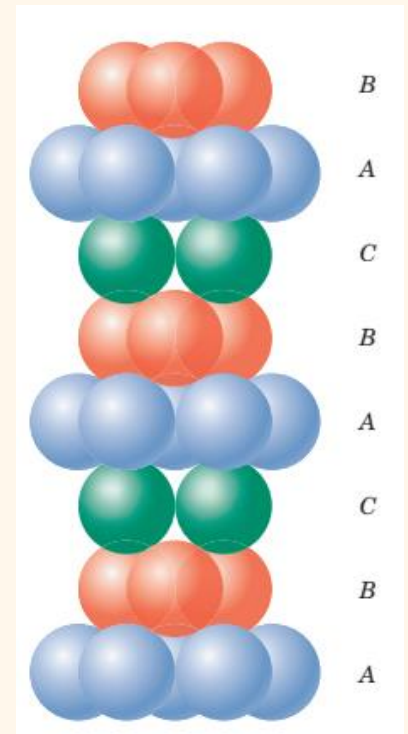
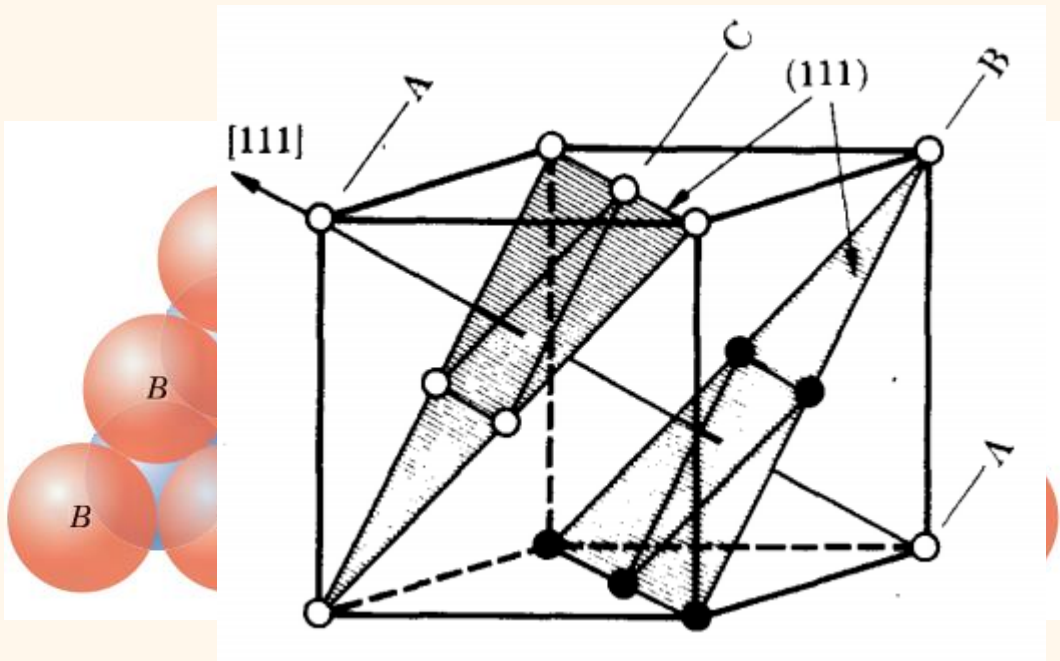




# Estrutura dos sólidos cristalinos

## 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.





# Estrutura dos sólidos cristalinos

## 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.

