



ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

ESTRUTURA DOS SÓLIDOS

**PMT 2100 - Introdução à Ciência dos Materiais para
Engenharia
2º semestre de 2005**

Estrutura Dos Sólidos

Roteiro da aula

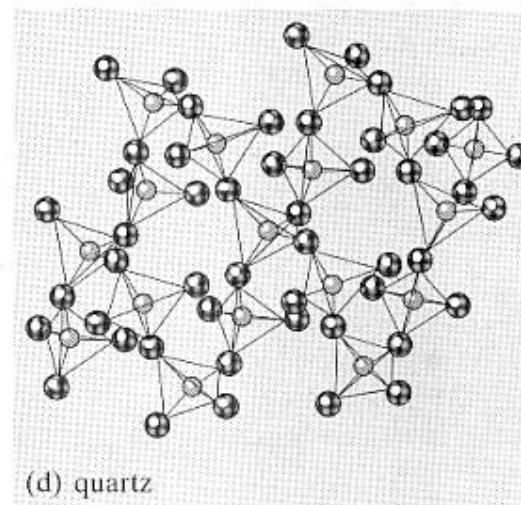
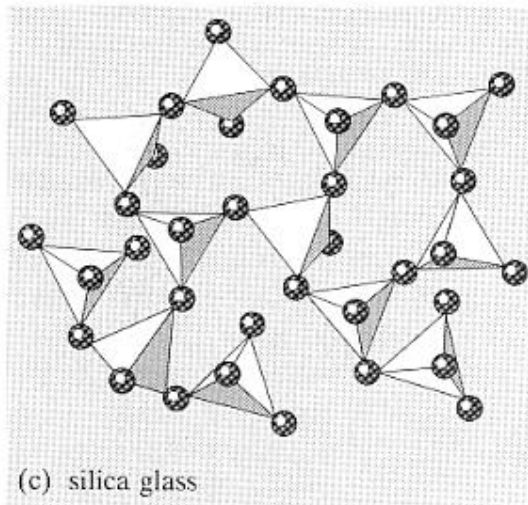
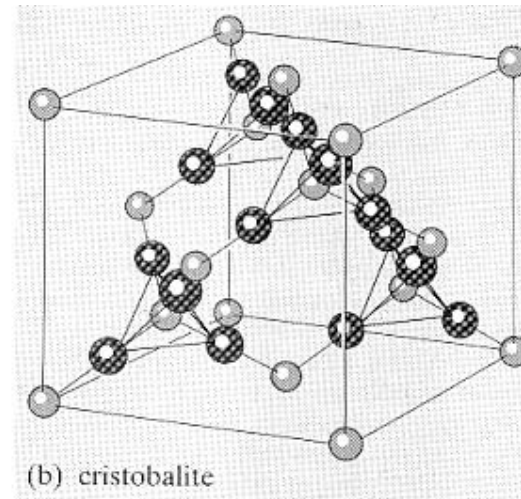
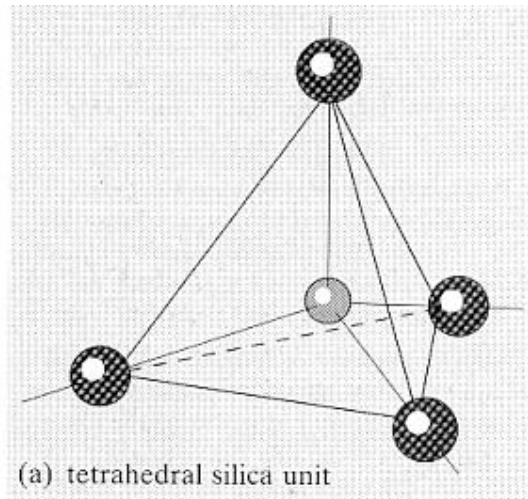
- Sólidos cristalinos e amorfos.
- Reticulado cristalino.
- Sistemas cristalinos.
- Índices de Miller: direções e planos cristalográficos.
- Estruturas cristalinas de materiais metálicos (CFC, CCC e HC).
- Alotropia e polimorfismo.
- Materiais monocristalinos e policristalinos.
- Difração de raios-X.

Sólidos cristalinos e amorfos

Segundo a distribuição espacial dos átomos, moléculas ou íons, os sólidos podem ser classificados em:

- **Cristalinos:** compostos por átomos, moléculas ou íons arranjados de uma forma periódica em três dimensões. As posições ocupadas seguem uma ordenação que se repete para grandes distâncias atômicas (de longo alcance).
- **Amorfos:** compostos por átomos, moléculas ou íons que não apresentam uma ordenação de longo alcance. Podem apresentar ordenação de curto alcance.

Sólidos cristalinos e amorfos

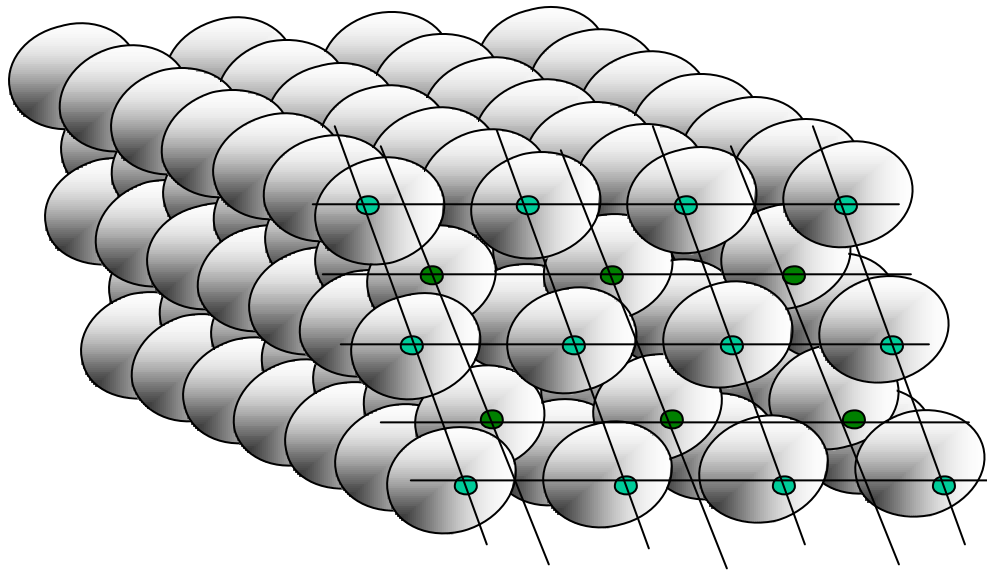


*Estruturas
da sílica*

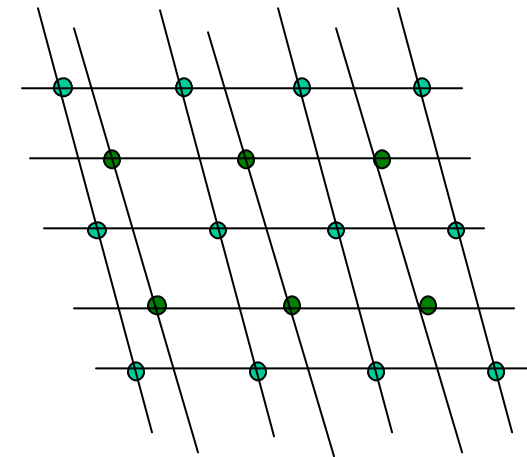
Reticulado cristalino

- Nos materiais cristalinos, denomina-se **estrutura cristalina** à maneira como átomos, moléculas ou íons se encontram espacialmente arranados.
- **Modelo de esferas rígidas**: os átomos ou íons são representados como esferas de diâmetro fixo.
- **Reticulado**: conjunto de pontos, que podem corresponder a átomos ou grupos de átomos, que se repetem no espaço tridimensional com uma dada periodicidade.
- **Célula unitária**: é o menor agrupamento de átomos representativo de uma determinada estrutura cristalina específica.

Reticulado cristalino

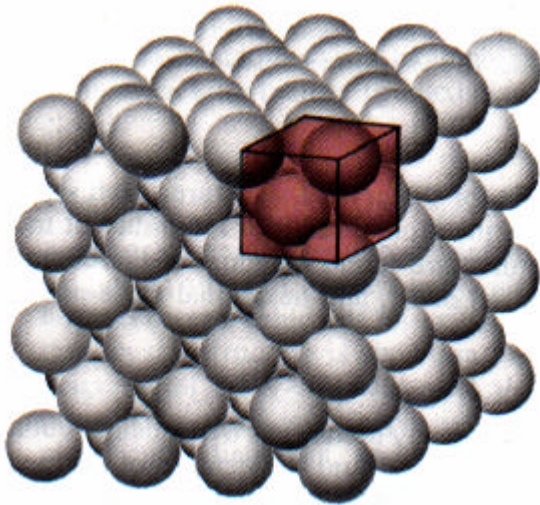


Sólido cristalino no qual os átomos são representados por esferas rígidas

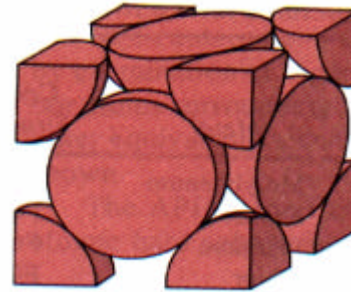


Reticulado cristalino

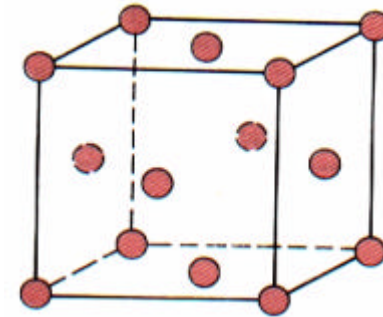
Célula Unitária



Sólido cristalino CFC



*Célula unitária
representada por
esferas rígidas (em
escala)*



*Outra representação da
célula unitária. Os círculos
representam as posições
ocupadas pelos átomos*

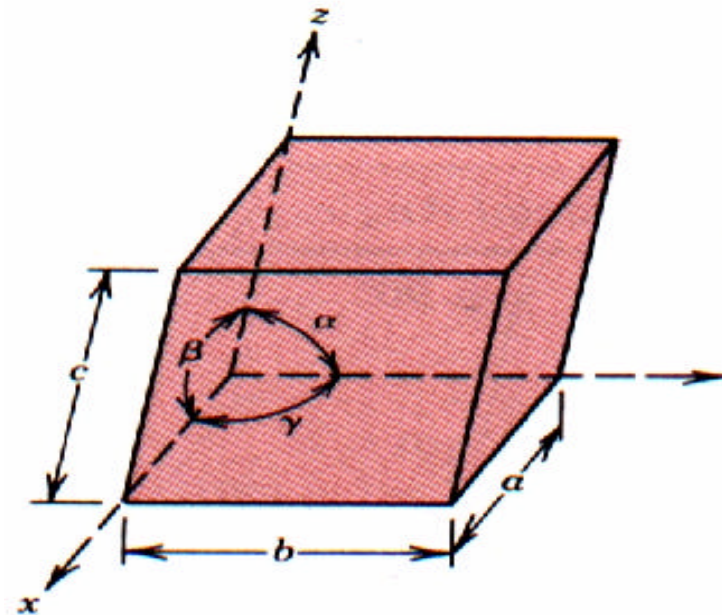
O conceito de célula unitária é usado para representar a simetria de uma determinada estrutura cristalina.

Qualquer ponto da célula unitária que for transladado de um múltiplo inteiro de **parâmetros de rede** ocupará uma posição equivalente em outra célula unitária.

Parâmetros de rede

Geometricamente uma célula unitária pode ser representada por um paralelepípedo.

A geometria da célula unitária é univocamente descrita em termos de seis parâmetros: o comprimento das três arestas do paralelepípedo (**a**, **b** e **c**) e os três ângulos entre as arestas (α , β e γ). Esses parâmetros são chamados **parâmetros de rede**.



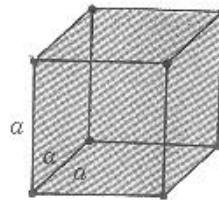
Sistemas cristalinos

Existem somente sete diferentes combinações dos parâmetros de rede. Cada uma dessas combinações constitui um sistema cristalino.

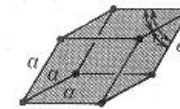
Cubic

$$a = b = c$$

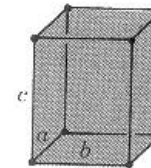
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Rhombohedral $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



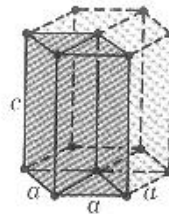
Orthorhombic $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



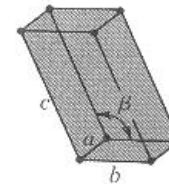
Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



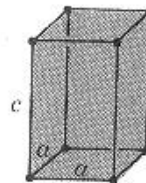
Monoclinic $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$



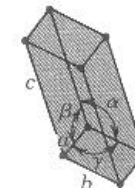
Tetragonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

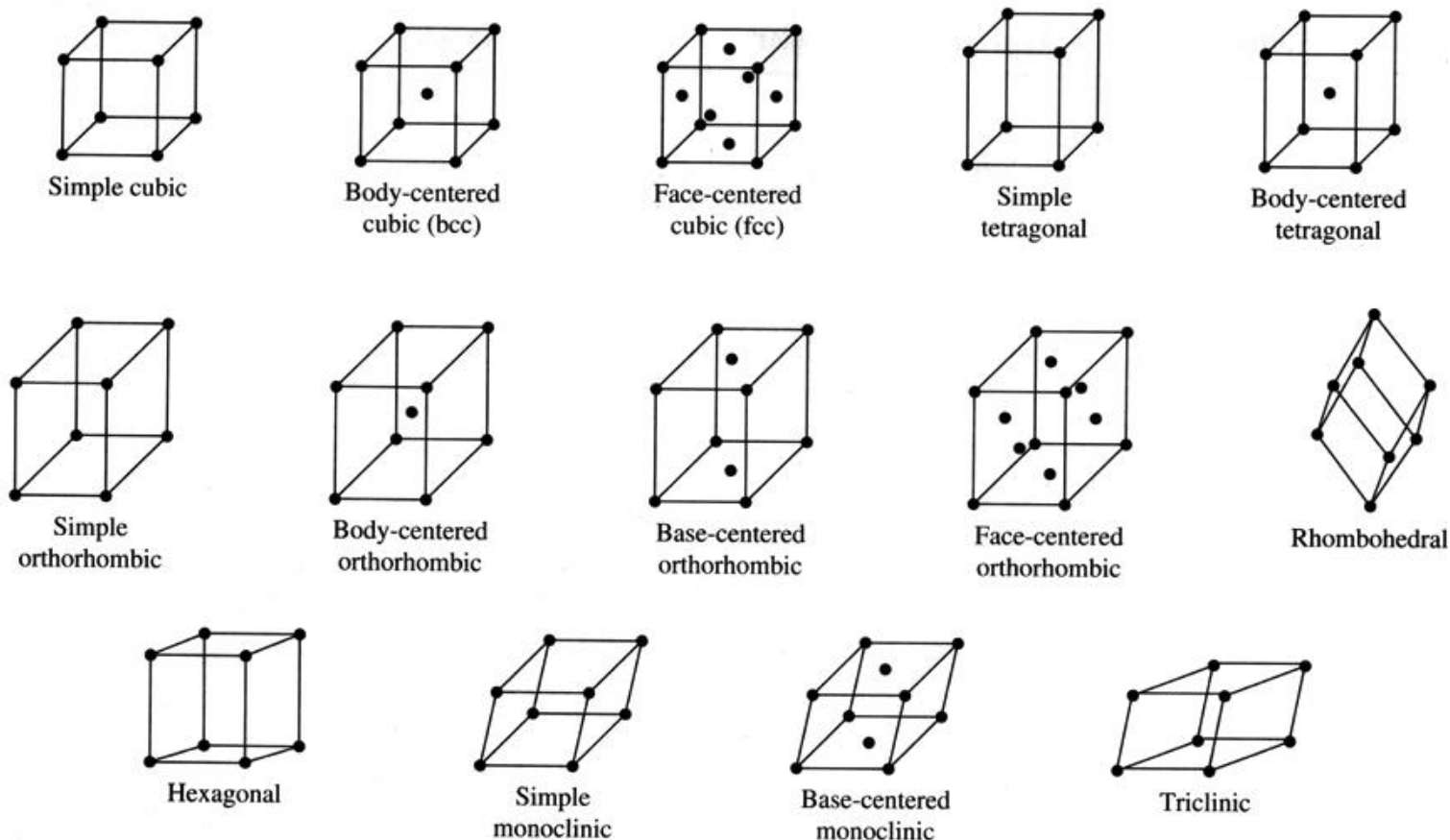


Triclinic $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



Reticulados de Bravais

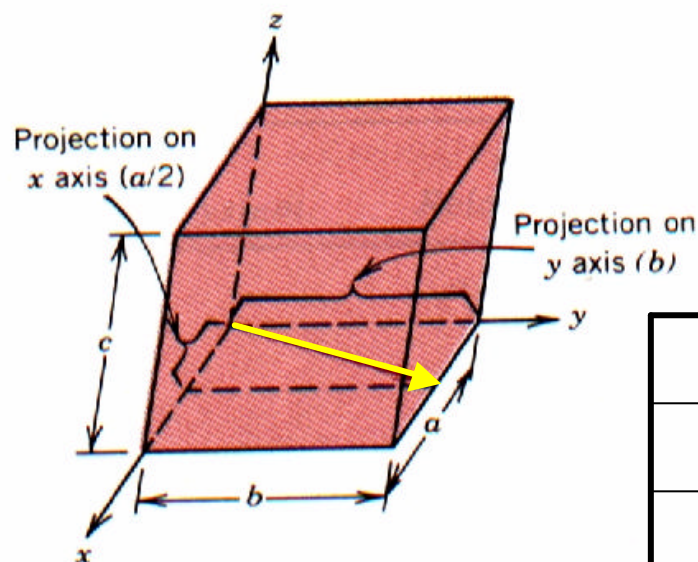
Qualquer reticulado cristalino pode ser descrito por um dos 14 reticulados de Bravais.



Índices de Miller: direções cristalográficas

- **Direção cristalográfica:** vetor que une dois pontos da rede cristalina.
- Procedimento para determinação dos índices de Miller de uma direção cristalográfica:
 - transladar o “vetor direção” de maneira que ele passe pela origem do sistema de coordenadas.
 - determinar a projeção do vetor em cada um dos três eixos de coordenadas. Essas projeções devem ser medidas em termos dos parâmetros de rede (a,b,c)
 - multiplicar ou dividir esses três números por um fator comum, tal que os três números resultantes sejam os menores inteiros possíveis.
 - representar a direção escrevendo os três números entre colchetes: $[u \ v \ w]$.

Direções cristalográficas : exemplo



	x	y	z
projeções	$\frac{1}{2} \times a$	$1 \times b$	$0 \times c$
projeções em termos de a,b e c	$\frac{1}{2}$	1	0
redução a mínimos inteiros	1	2	0
notação	[120]		

Nota: uma **família de direções**, por exemplo $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$ e $[00\bar{1}]$ é representada por **<100>**

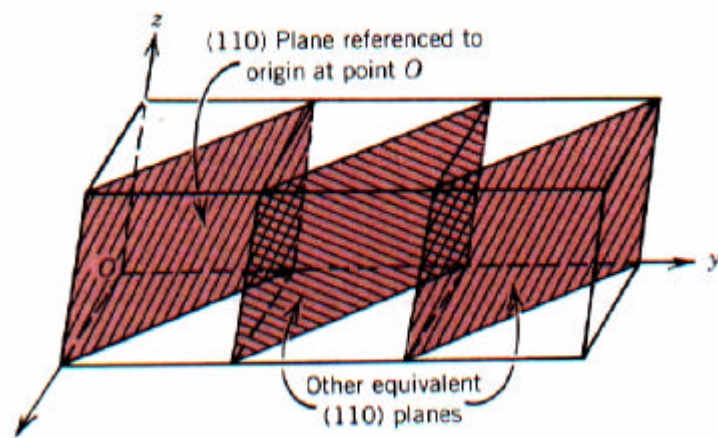
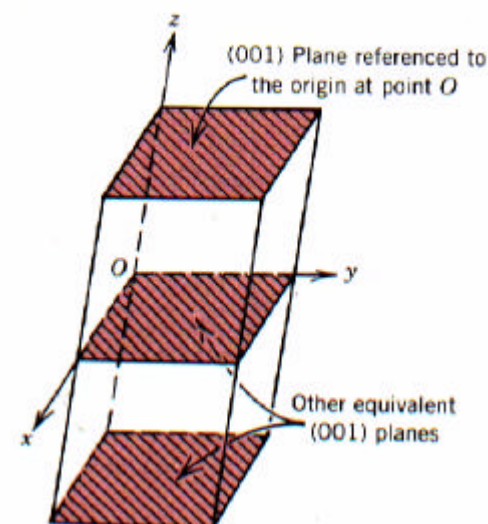
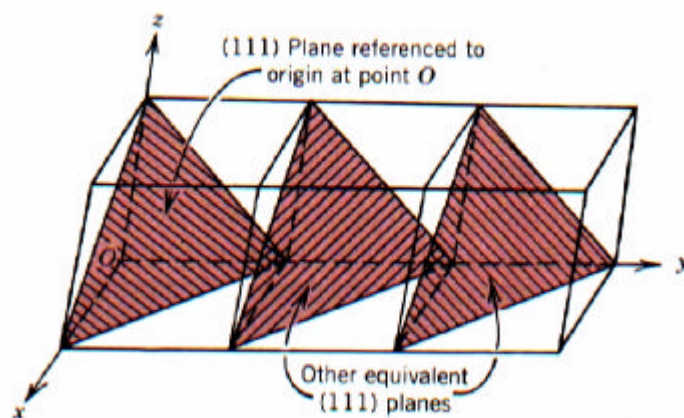
Índices de Miller: Planos Cristalográficos

Determinação dos índices de Miller de um plano cristalográfico:

- 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 $(h\ k\ l)$

Nota : às vezes é necessário multiplicar os três números resultantes por um fator comum para assim obter três índices inteiros.

Planos cristalográficos



Nota: uma **família de planos**, como por exemplo $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$, $(11\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}1\bar{1})$ e (111) é representada por **$\{111\}$**

Fator de empacotamento atômico (FEA)

$$FEA = \frac{V_{\text{átomos}}}{V_{\text{célula}}}$$

$$FEA_{CFC} = \frac{4 \left(\frac{4p R^3}{3} \right)}{a^3} = \frac{4 \left(\frac{4p R^3}{3} \right)}{(2R\sqrt{2})^3} = 0,74$$

Densidade Atômica Planar (DP)

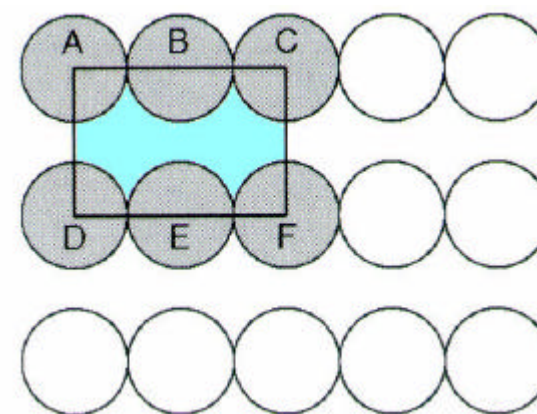
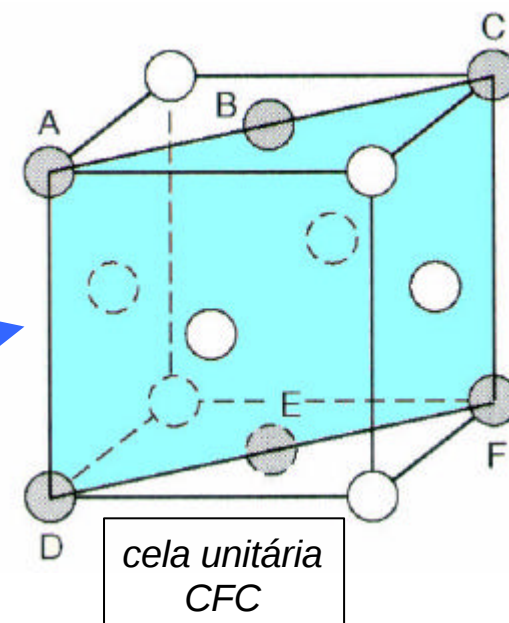
$$DP = \frac{\text{Área}_{\text{átomos no plano}}}{\text{Área}_{\text{plano}}}$$

$$A_p = (\overline{AC})(\overline{AD}) = (4R)(2R\sqrt{2}) = 8R^2\sqrt{2}$$

$$A_c = (2)p R^2$$

Assim :

$$DP = \frac{A_c}{A_p} = \frac{2p R^2}{8R^2\sqrt{2}} = 0,555$$



CFC – plano (110)

Densidade Atômica Linear (DL)

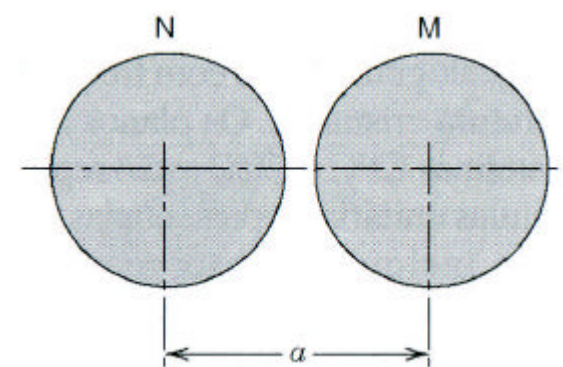
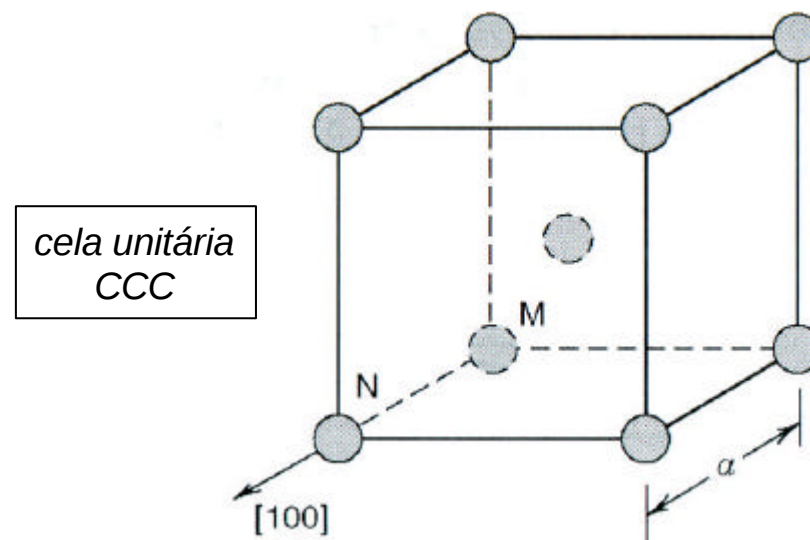
$$DP = \frac{L_{\text{átomos}}}{L_{\text{linha}}}$$

$$L_L = \text{aresta} = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

$$L_A = 2R$$

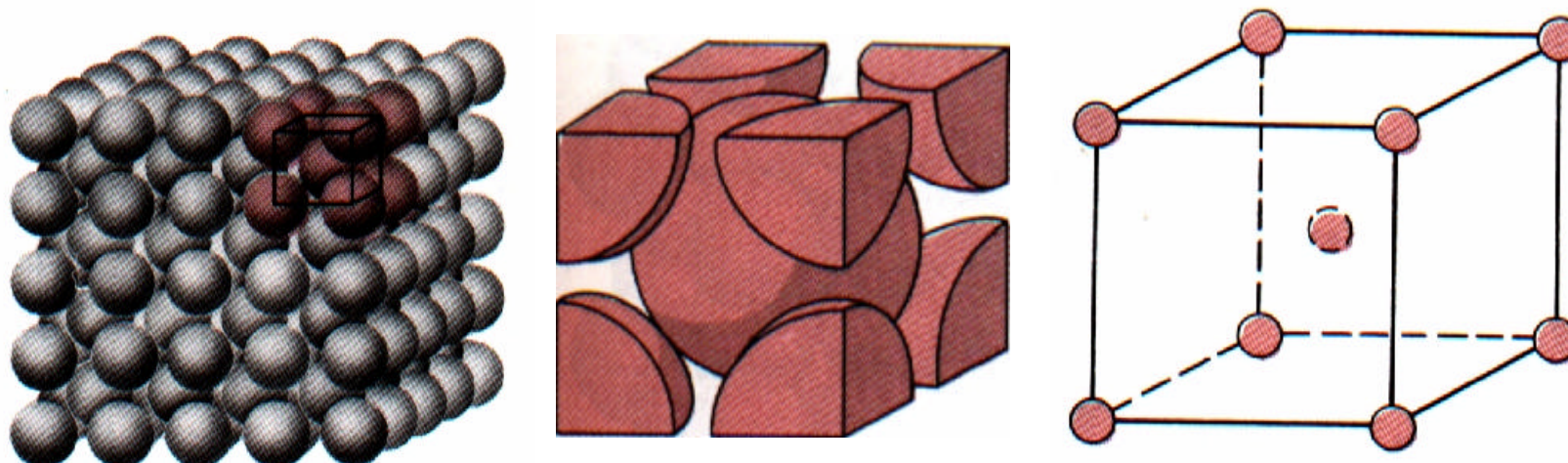
Assim :

$$DL = \frac{L_C}{L_A} = \frac{2R}{4R\sqrt{3}} = 0,866$$



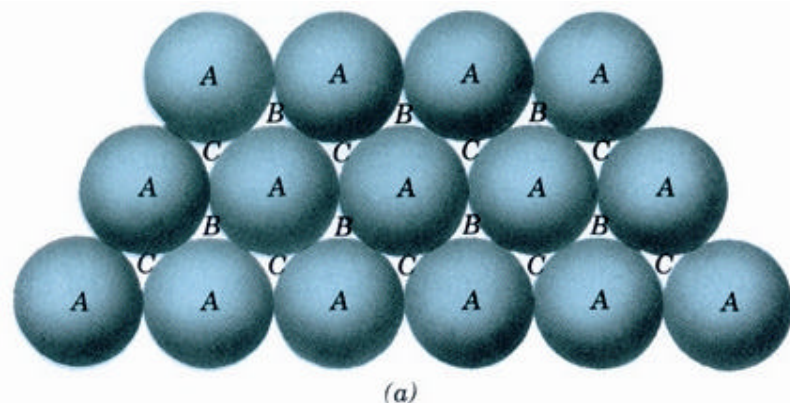
CCC – direção [100]

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)

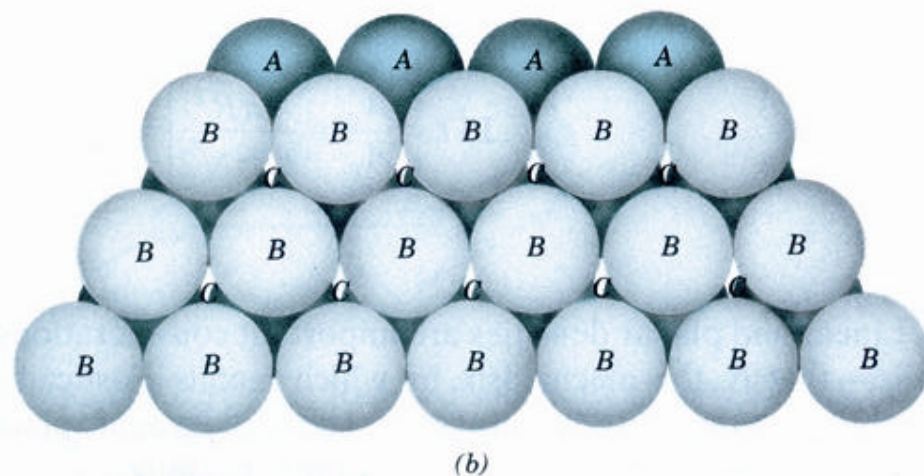


- A relação entre o raio atômico, R , e a aresta do cubo, a , é dada por: $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$
- O número de átomos por célula unitária é igual a 2.
- O **número de coordenação** é igual a 8.
- Exemplo de metais CCC: Fe- α , cromo, tungstênio, molibdênio.

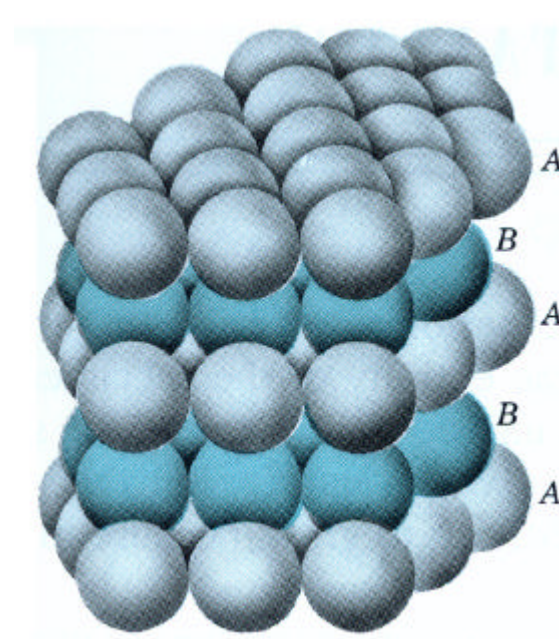
Estruturas compactas – HC



Plano compacto formado por esferas rígidas (A). Observam-se dois tipos de interstícios, que são assinalados como B e C.

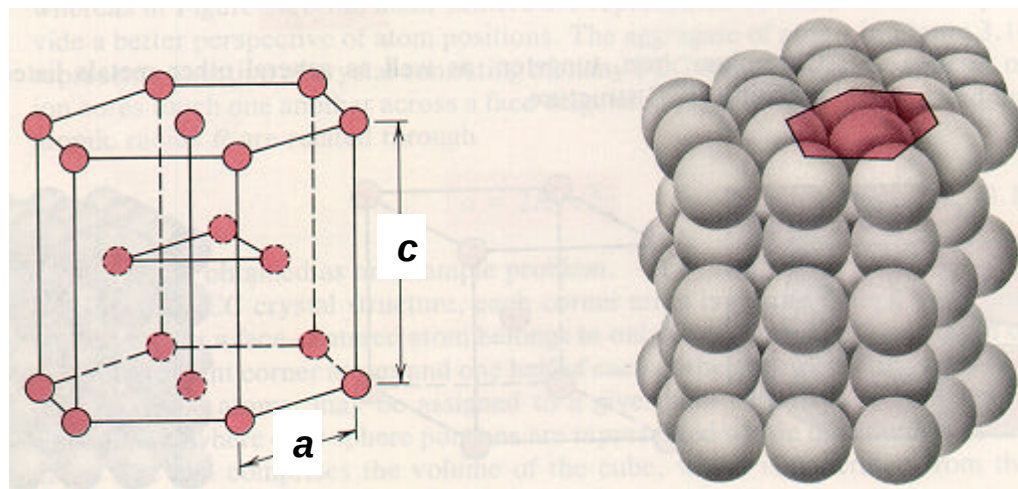


Empilhamento de dois planos compactos.



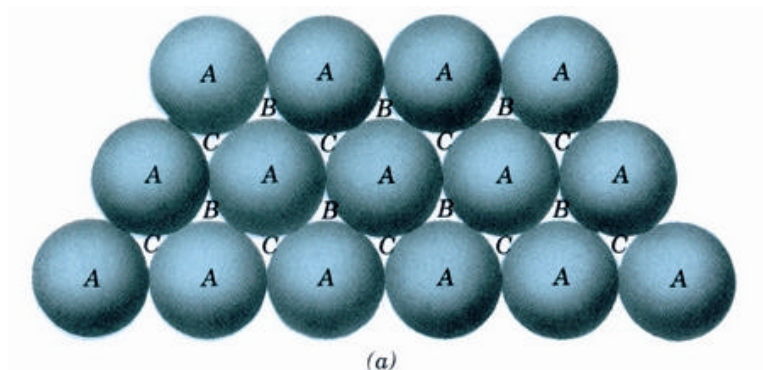
Empilhamento de planos compactos formando uma estrutura HC.

Hexagonal Compacta (HC)

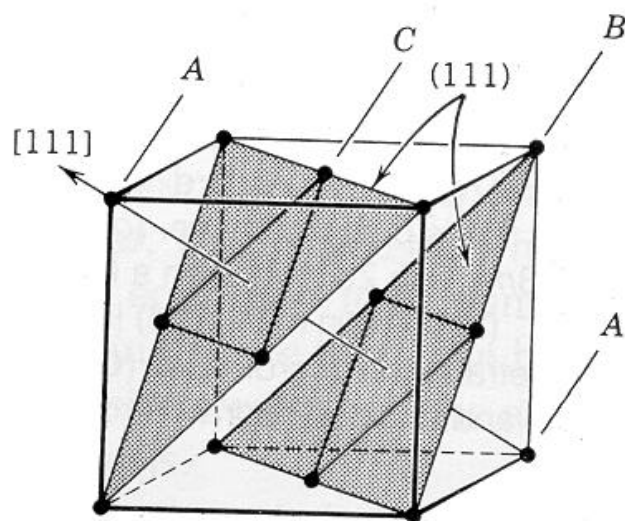


- $c/a = 1,633$ (ideal).
- O número de átomos por célula unitária é igual a 6.
- O **número de coordenação** é igual a 12.
- O FEA é igual a 0,74.
- Exemplo de metais HC: cádmio, cobalto, zinco.

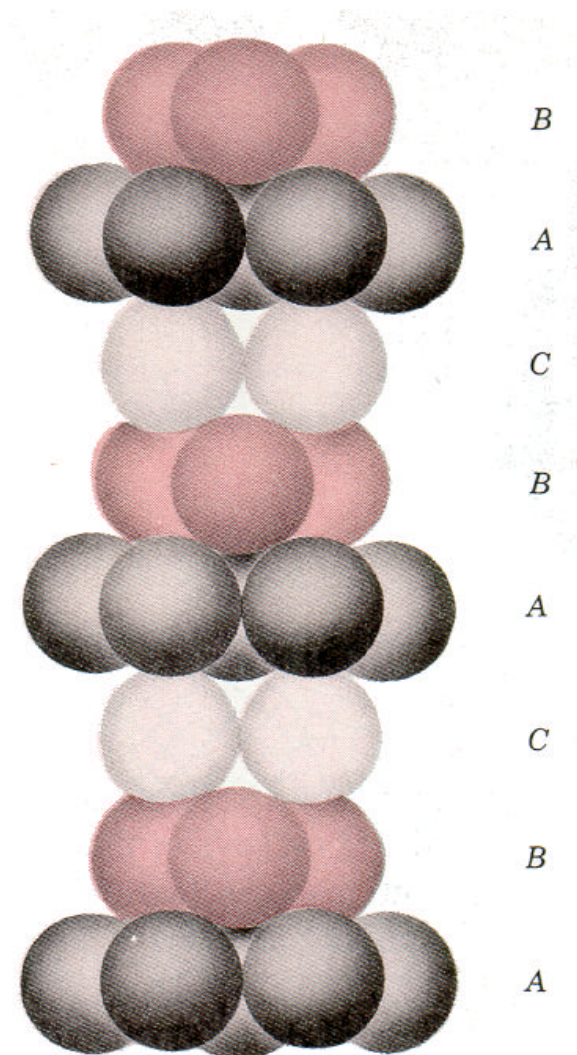
Estruturas compactas - CFC



Plano compacto formado por esferas rígidas (A). Observam-se dois tipos de interstícios, que são assinalados como B e C.

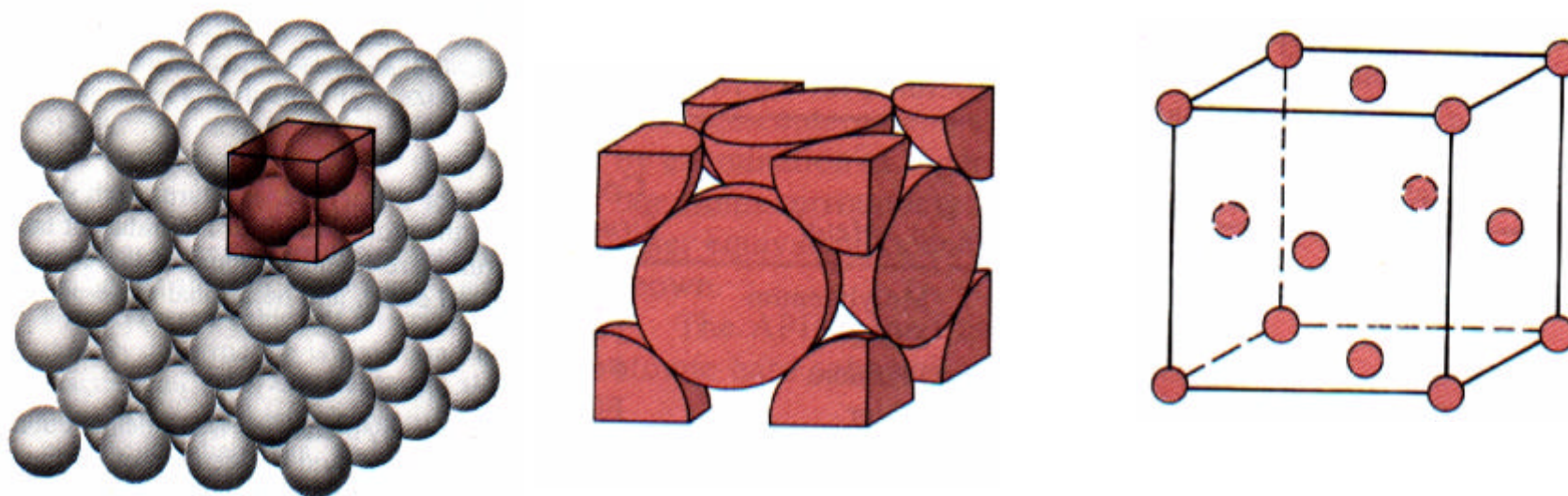


Cubic close-packed (CCP)



Empilhamento de planos compactos formando uma estrutura CFC.

Cúbica de Face Centrada (CFC)

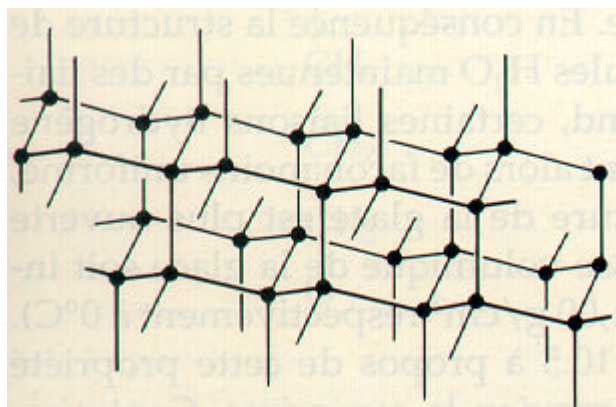


- A relação entre o raio atômico, R , e a aresta do cubo, a , é dada por: $a = 2R\sqrt{2}$.
- O número de átomos por célula unitária é igual a 4.
- O **número de coordenação** é igual a 12.
- Exemplo de metais CFC: cobre, alumínio, ouro, chumbo.

Alotropia e polimorfismo

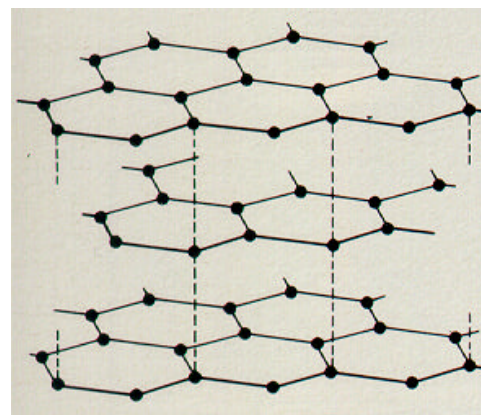
- **Polimorfismo:** fenômeno no qual um sólido (metálico ou não metálico) pode apresentar mais de uma estrutura cristalina, dependendo da temperatura e da pressão (por exemplo, a sílica, SiO_2 como quartzo, cristobalita e tridimita).
- **Alotropia:** polimorfismo em elementos puros.

Exemplo: o diamante e o grafite são constituídos por átomos de carbono arranjados em diferentes estruturas cristalinas.



Diamante

Hibridização sp^3

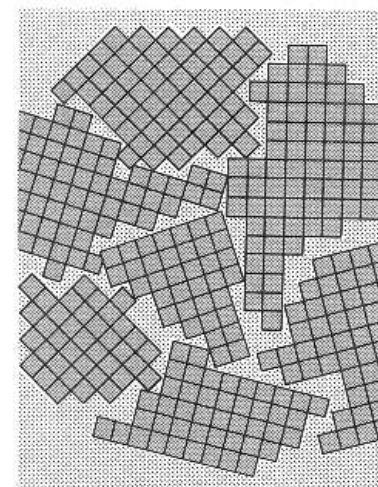


Grafite

Hibridização sp^2

Materiais monocristalinos e policristalinos

- **Monocristalinos:** constituídos por um único cristal em toda a extensão do material, sem interrupções.
- **Policristalinos:** constituído de vários cristais ou grãos, cada um deles com diferentes orientações espaciais.

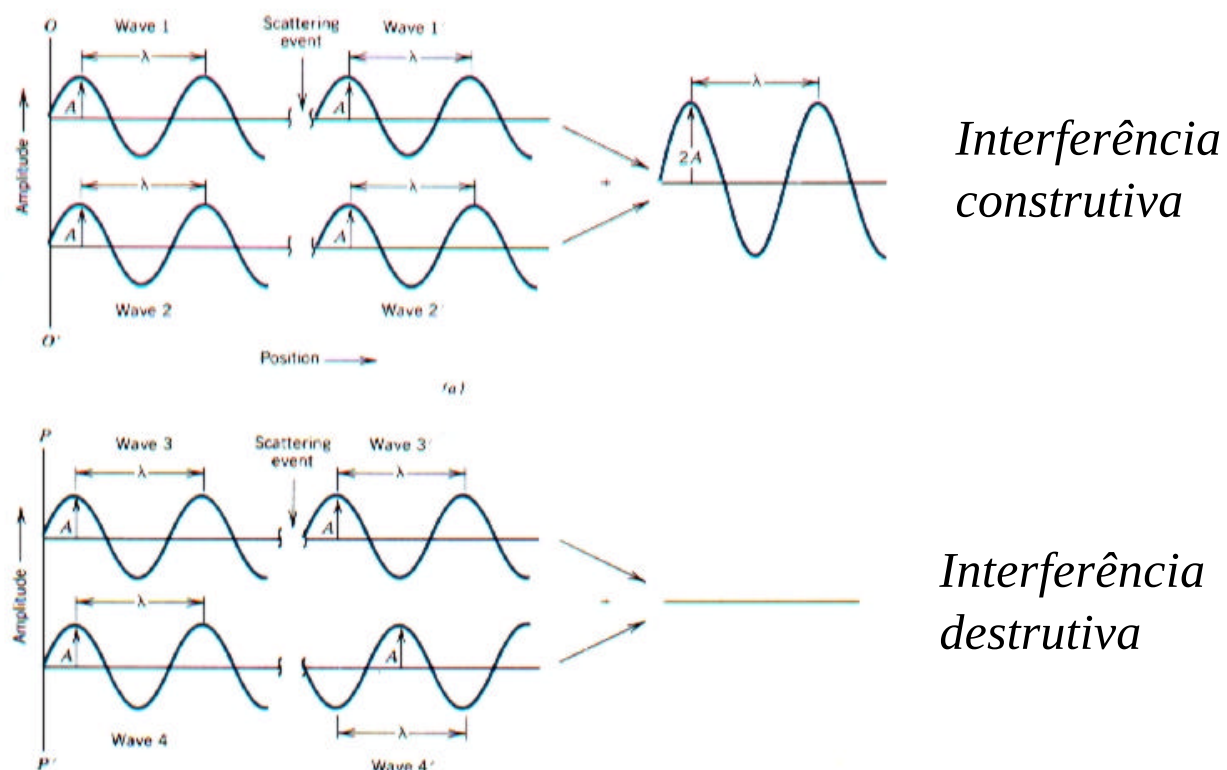


Material policristalino

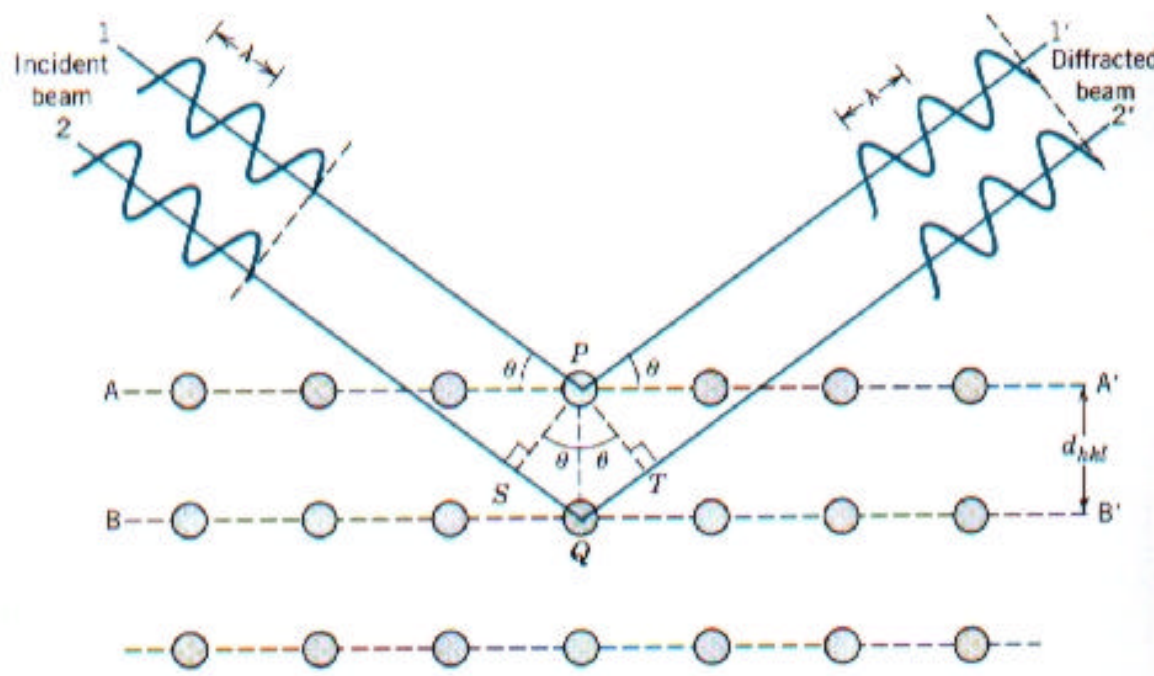
Os **contornos de grão** são regiões separando cristais de diferentes orientações em um material policristalino.

Difração de raios X

- O fenômeno de difração ocorre quando uma onda encontra uma série de obstáculos espaçados regularmente, que: (1) são capazes de espalhar a onda e (2) o espaçamento entre eles é comparável em magnitude ao comprimento de onda.



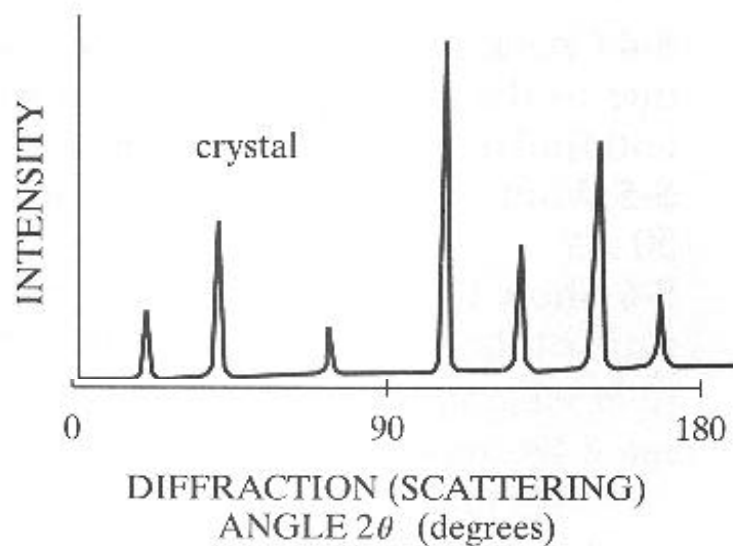
Difração de raios X



$$n\lambda = \overline{SQ} + \overline{QT}$$

$$n\lambda = d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta = 2d_{hkl} \sin \theta$$

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad (\text{Lei de Bragg})$$



Difratograma esquemático de um sólido cristalino.

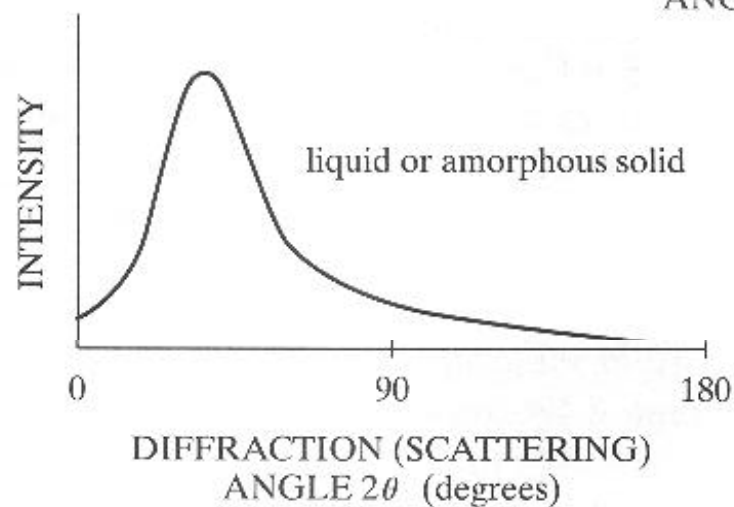


Gráfico de intensidade de raios X em função da variação de 2θ para um sólido amorfo ou para um líquido.

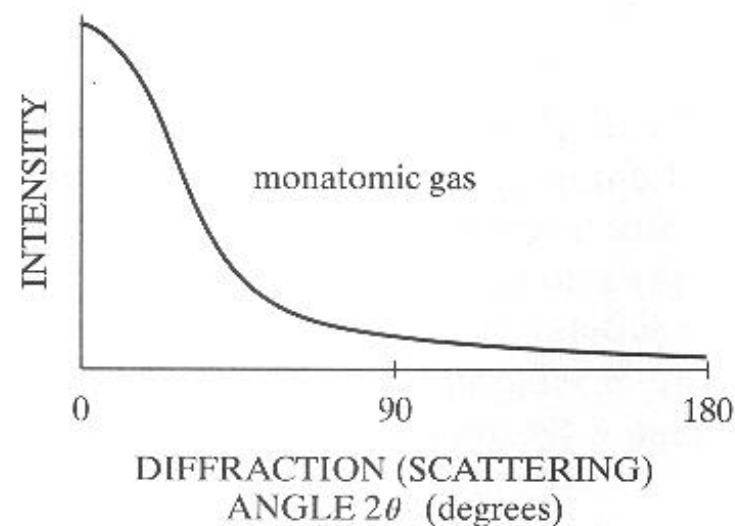


Gráfico de intensidade de raios X em função da variação de 2θ para um gás monoatômico.

- Capítulos do Callister tratados nesta aula
 - Capítulo 3, completo
- Outras referências importantes
 - Van Vlack , L. - Princípios de Ciência dos Materiais, 3ª ed.
 - Capítulo 3 : itens 3-9 a 3-18