

# Ciência dos Materiais A

## Departamento de Ciência dos Materiais

Margarida Lima ([mmal@fct.unl.pt](mailto:mmal@fct.unl.pt)), Rui Borges ([rcb@fct.unl.pt](mailto:rcb@fct.unl.pt));

Carmo Lança ([mcl@fct.unl.pt](mailto:mcl@fct.unl.pt))

## Departamento de Química

Ana Rita Duarte ([ard08968@unl.pt](mailto:ard08968@unl.pt))

FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

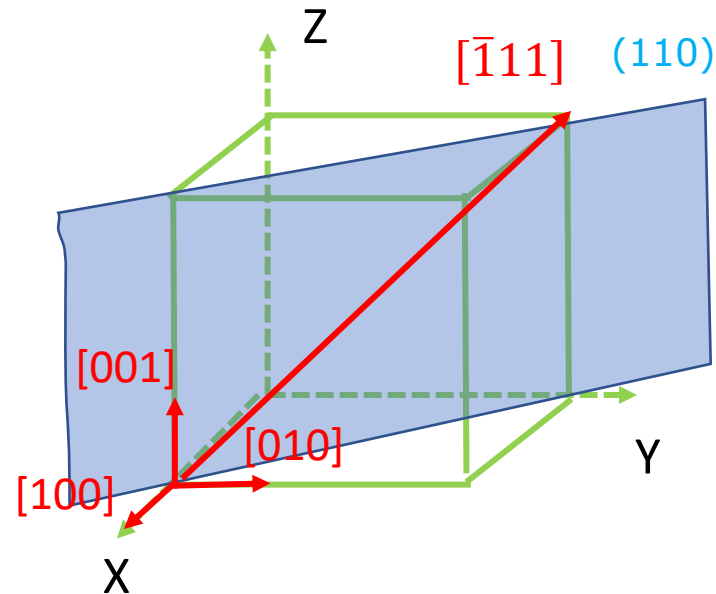
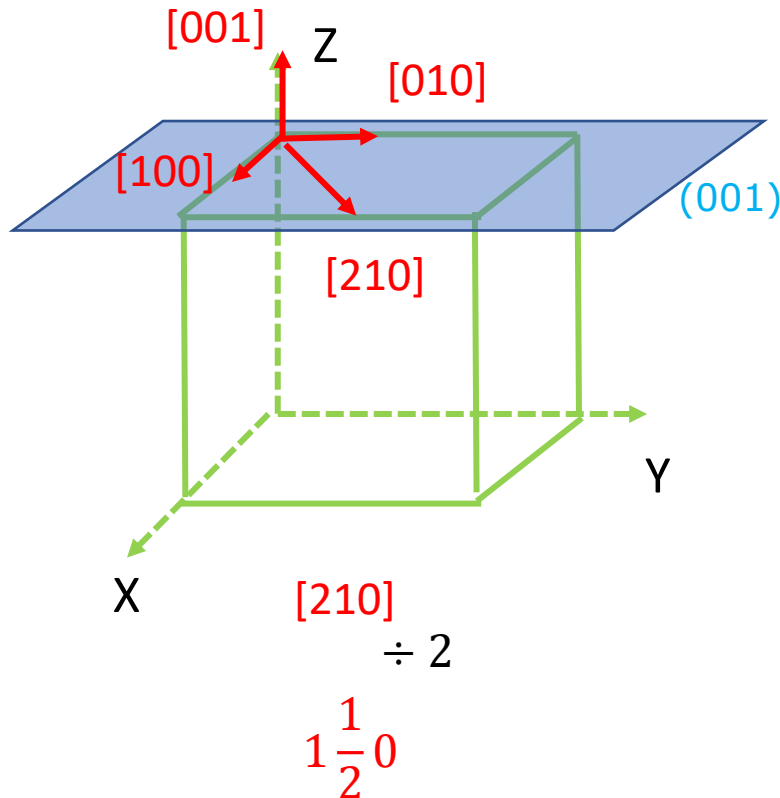
Ano letivo de 2023-2024

4 – Considere uma estrutura cúbica simples:

a) Desenhe os planos com os seguintes índices de Miller i) (001), ii) (110), iii) (111)

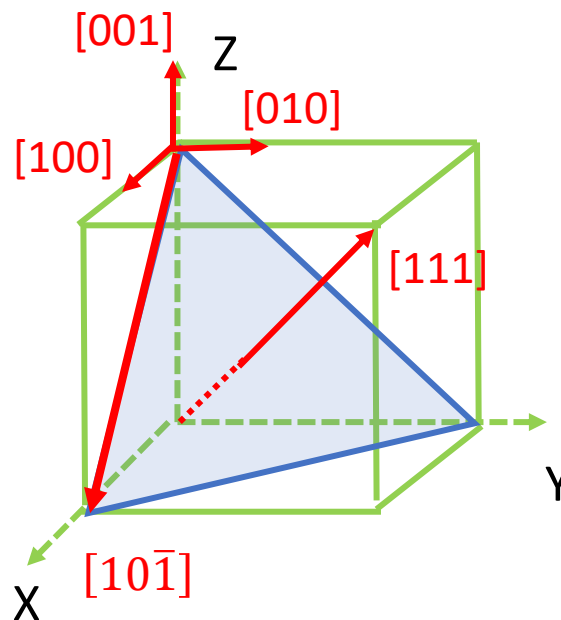
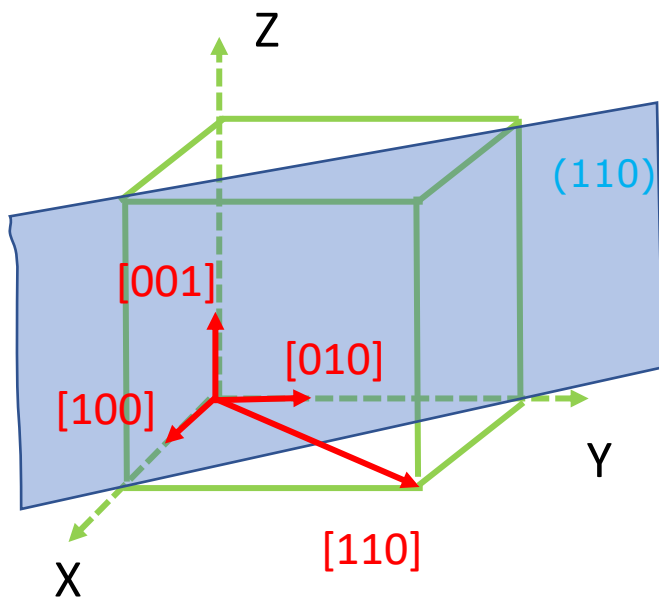
b) Sobre cada um dos planos anteriores desenhe, respetivamente, as direções: i)  $[210]$ , ii)  $[\bar{1}11]$  e iii)  $[10\bar{1}]$

Resolução:



4 – a) Desenhe os planos com os seguintes índices de Miller i) (001), ii) (110), iii) (111)  
b) Sobre cada um dos planos anteriores desenhe, respetivamente, as direções: i) [210],  
ii)  $[\bar{1}11]$  e iii)  $[10\bar{1}]$

Resolução:

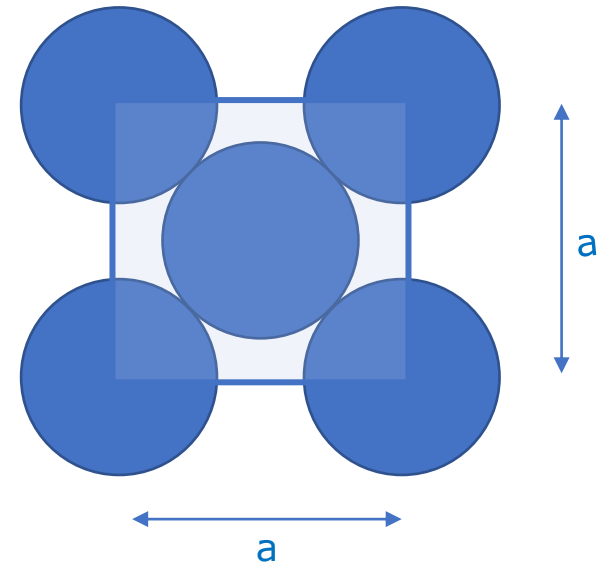
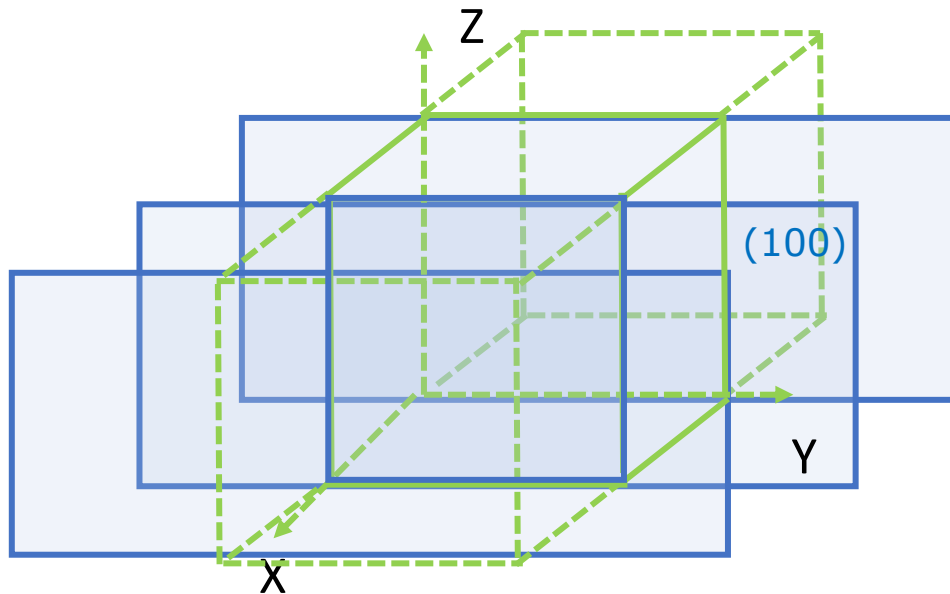


a direção perpendicular ao plano  
possui os mesmos índices de Miller

5 – Quantos átomos por  $\text{mm}^2$  existem nos planos (100) e (111) do chumbo?

Resolução:

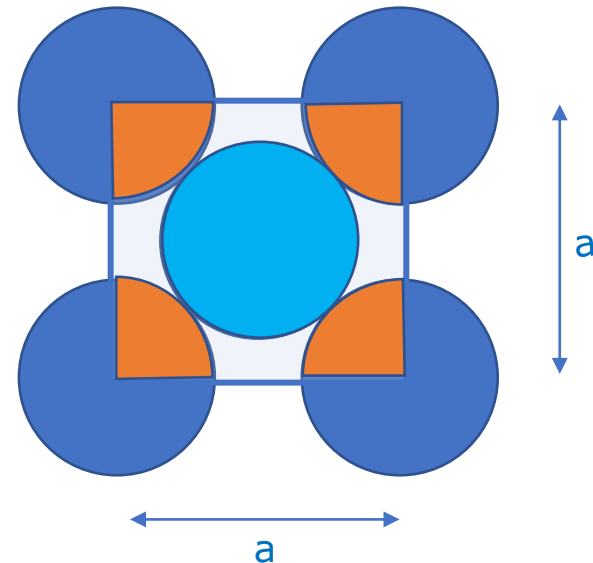
O Pb possui estrutura Cúbica de Faces Centradas (CFC)  
e o parâmetro de rede é  $a_{\text{Pb}} = 4,95\text{\AA}$



$$\begin{aligned} \text{Área} &= a^2 = 4,95^2 \text{ \AA}^2 = 24,5 \text{ \AA}^2 \\ &= 24,5 \times 10^{-14} \text{ mm}^2 \end{aligned}$$

$$\text{n}^\circ. \text{ de átomos no plano} = 4 \times \frac{1}{4} + 1 = 2$$

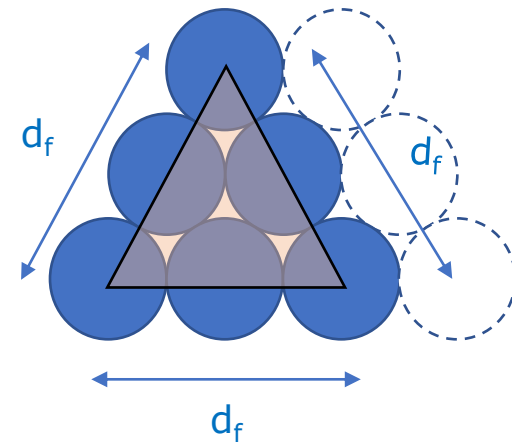
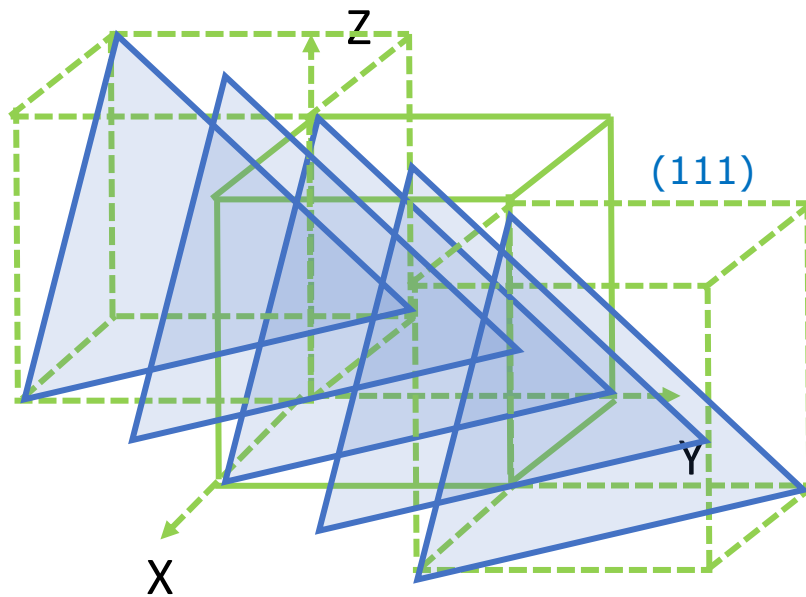
$$\text{átomos/mm}^2 = \frac{2}{24,5 \times 10^{-14}} = 8,16 \times 10^{12} \text{ átom/mm}^2$$



$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-7} \text{ mm}$$



$$a^2 + a^2 = d_f^2$$

$$2a^2 = d_f^2$$

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

Área do plano = Área do triângulo

Altura do triângulo

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

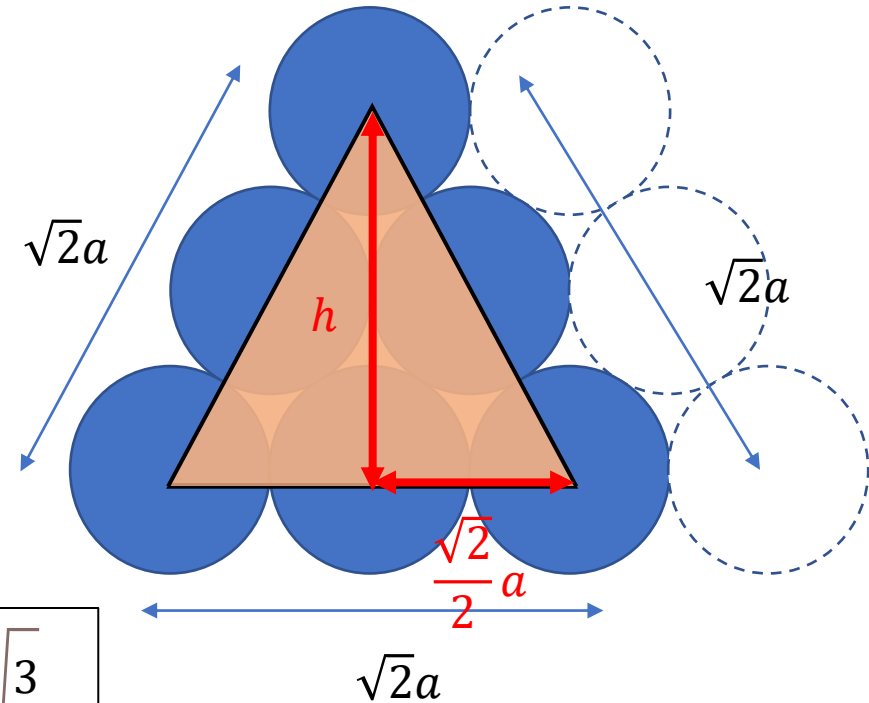
$$\frac{2a^2}{4} + h^2 = 2a^2$$

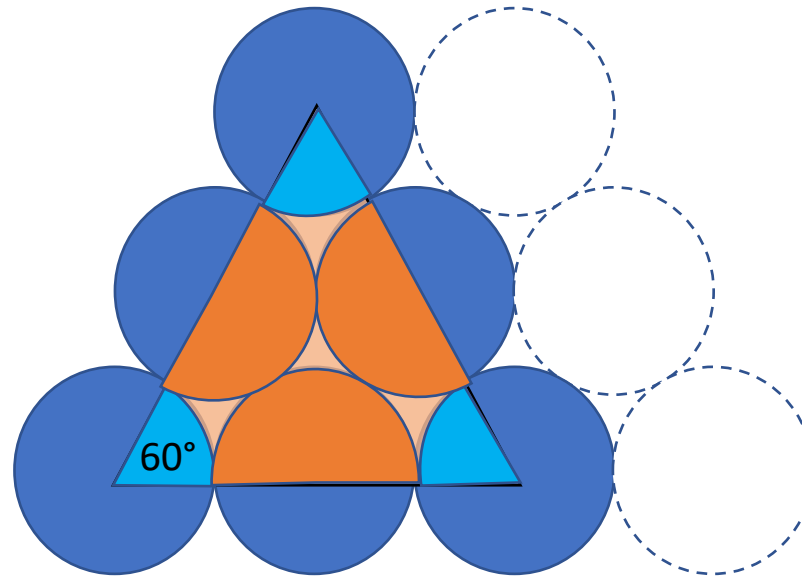
$$h^2 = 2a^2 - \frac{2a^2}{4} = \frac{8a^2}{4} - \frac{2a^2}{4} = \frac{3}{2}a^2$$

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

$$\text{Área do plano} = \frac{\text{base} \times \text{altura}}{2} = \sqrt{2}a \times \sqrt{\frac{3}{2}}a \times \frac{1}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 = 4,95^2 \times \frac{\sqrt{3}}{2} = 21.2 \text{ \AA}^2$$

$$= 21,2 \times 10^{-14} \text{ mm}^2$$





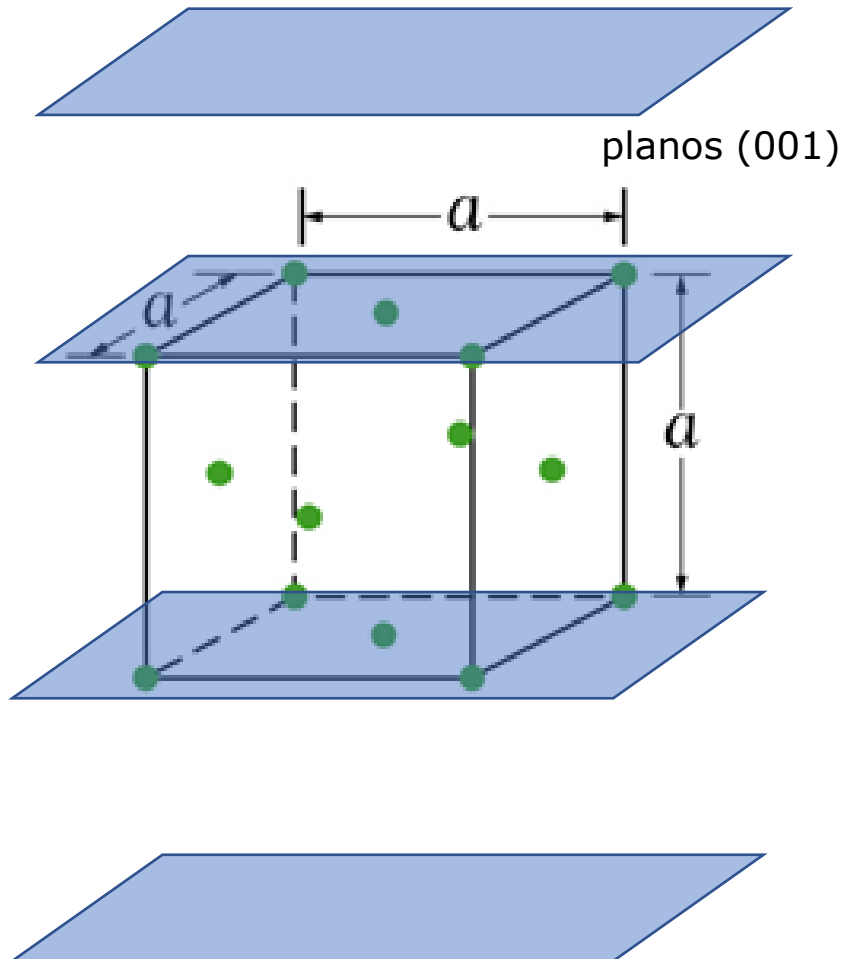
$$\text{n.º. de átomos no plano} = 3 \times \frac{1}{2} + 3 \times \frac{1}{6} = 2$$

$$\text{átomos/mm}^2 = \frac{2}{21,2 \times 10^{-14}} = 9,43 \times 10^{12} \text{ átom/mm}^2$$



6 – O cobre tem uma estrutura CFC e um raio atômico de 1,278 Å. Quantas camadas de planos {100} existem ao longo da espessura de uma película de 1 µm de espessura; Suponha que os planos (001) são paralelos às superfícies superior e inferior da película.

Resolução:



Quantas vezes **a** cabe em 1 µm?

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

$$a = 2\sqrt{2} \times 1,278 = 3,615 \text{ Å}$$

$$1 \text{ µm} = 10^{-6} \text{ m}$$

$$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$\frac{10^{-6}}{3,615 \times 10^{-10}} = \mathbf{2766}$$

7 – Sabendo que os critérios para determinar a existência de difração por parte de uma família de planos são na estrutura:

- cúbica simples (CS): todos os índices possíveis
- cúbica de corpo centrado (CCC): soma dos índices par
- cúbica de faces centradas (CFC): índices todos pares ou todos ímpares

assinale abaixo nas colunas correspondentes as reflexões possíveis para cada caso.

Resolução:

$$N = h^2 + k^2 + l^2$$

N	h	k	l	CS	CFC	CCC
1	1	0	0	X		
2	1	1	0	X		X
3	1	1	1	X	X	
4	2	0	0	X	X	X
5	2	1	0	X		
6	2	1	1	X		X
8	2	2	0	X	X	X
9	2	2	1	X		
9	3	0	0	X		
10	3	1	0	X		X
11	3	1	1	X	X	
12	2	2	2	X	X	X

cúbica simples (CS):  
todos os índices possíveis

cúbica de faces centradas (CFC):  
índices todos pares ou  
todos ímpares

cúbica de corpo centrado (CCC):  
soma dos índices par

8 – Os elementos do Grupo IV-A da tabela periódica apresentam uma estrutura cristalina designada de diamante em que as reflexões ocorrem nos planos nos quais os índices (hkl) são: i) todos ímpares ou ii) todos pares e  $h+k+l = 4n$ , i.e., a soma é um múltiplo de 4.

Determine as posições  $2\theta$  em que deverá obter os primeiros 12 picos de difração do Si ( $a_{\text{silício}} = 5,4309 \text{ \AA}$ ), utilizando o comprimento de onda da radiação  $K\alpha_{\text{Mo}} = 0,71073 \text{ \AA}$  e  $K\alpha_{\text{Cu}} = 1,5406 \text{ \AA}$ .

Resolução:

$$n\lambda = 2d_{hkl}\text{Sen}\theta$$

para a primeira ordem de reflexão  $n = 1$

para o sistema cúbico

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

N

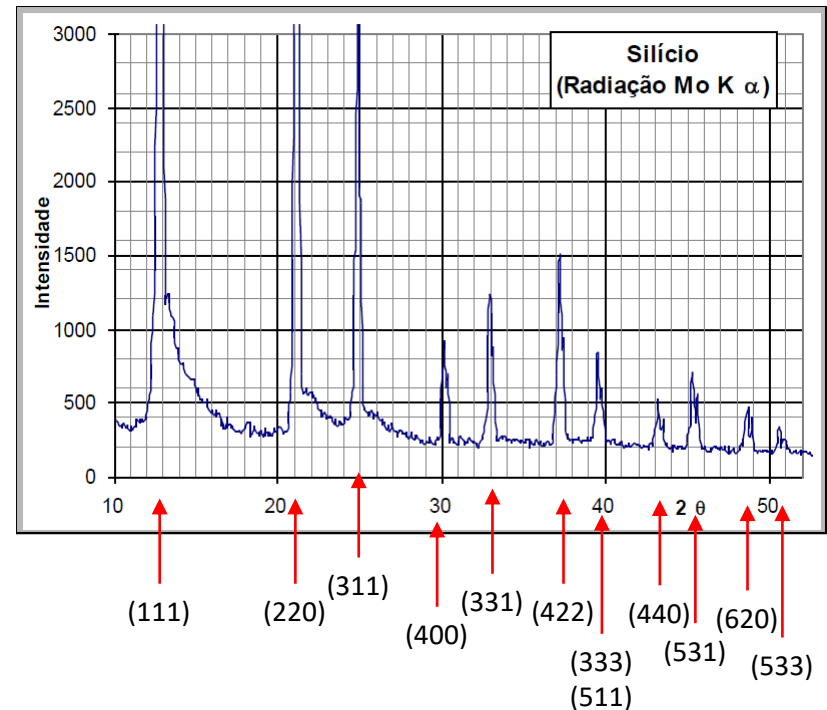
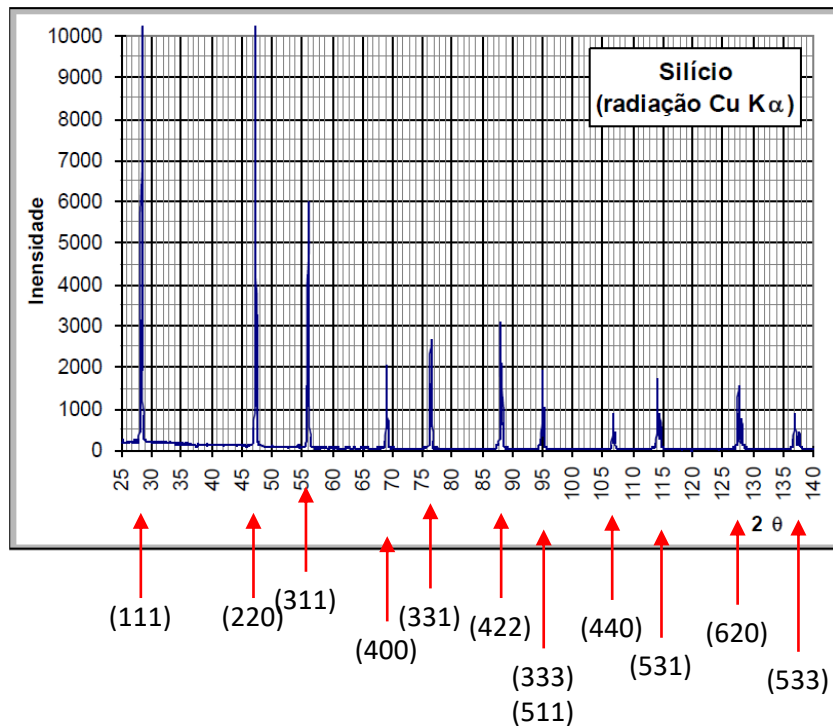
$$\text{sen}\theta = \frac{\lambda}{2d} = \frac{\lambda\sqrt{N}}{2a} \Rightarrow \theta = \text{arc sen}\left(\frac{\lambda\sqrt{N}}{2a}\right) \Rightarrow \boxed{2\theta = 2\text{arc sen}\left(\frac{\lambda\sqrt{N}}{2a}\right)}$$

- todos ímpares
- todos pares e  $h+k+l = 4n$

$$2\theta = 2 \arcsin \left( \frac{\lambda \sqrt{N}}{2a} \right)$$

A variação do  $\lambda$  da radiação utilizada origina uma variação do espectro, i.e., do número de picos que surgem numa dada gama angular

N	h	k	l	$2\theta$ $K\alpha_{Mo}$	$2\theta$ $K\alpha_{Cu}$
3	1	1	1	13,02	28,44
8	2	2	0	21,33	47,30
11	3	1	1	25,07	56,12
16	4	0	0	30,35	69,13
19	3	3	1	33,14	76,38
24	4	2	2	37,39	88,03
27	3	3	3	39,75	94,95
27	5	1	1	39,75	94,95
32	4	4	0	43,45	106,71
35	5	3	1	45,55	114,09
40	6	2	0	48,89	127,55
43	5	3	3	50,81	136,90



- 9 – a) Usando a lei de Bragg, calcule os ângulos de difração  $2\theta$  para os três primeiros picos do Fe- $\alpha$  (CCC) obtidos com uma ampola de cobre e com uma ampola de crómio.
- b) Compare os dados obtidos a partir destes cálculos com os valores do espectro do aço ferramenta H13.

Dados:  $r_{\text{Fe}} = 1,24 \text{ \AA}$  ;  $\lambda K\alpha_{\text{Cu}} = 1,54 \text{ \AA}$ ;  $\lambda K\alpha_{\text{Cr}} = 2,29 \text{ \AA}$

Resolução:

CCC  
soma dos índices h, k, l, par

N	h	k	l
2	1	1	0
4	2	0	0
6	2	1	1

$$\lambda = 2d_{hkl}\text{Sen}\theta \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{N}}$$

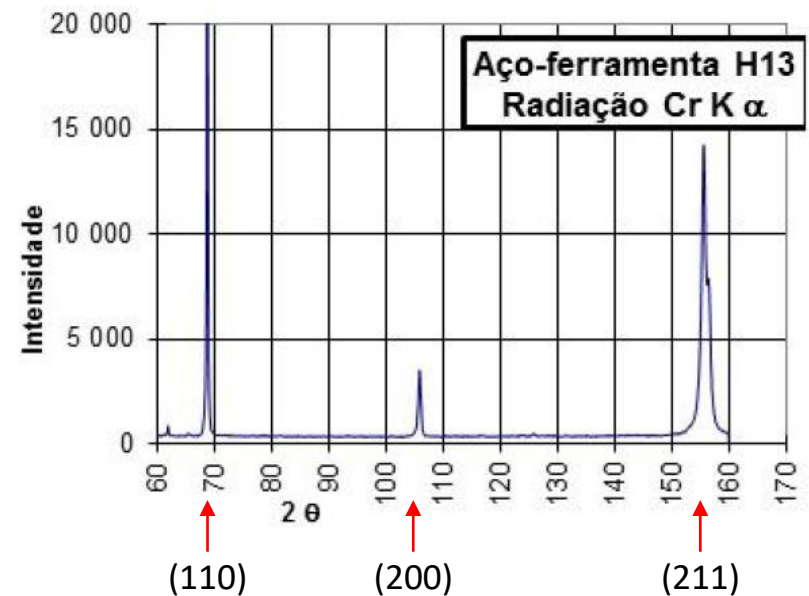
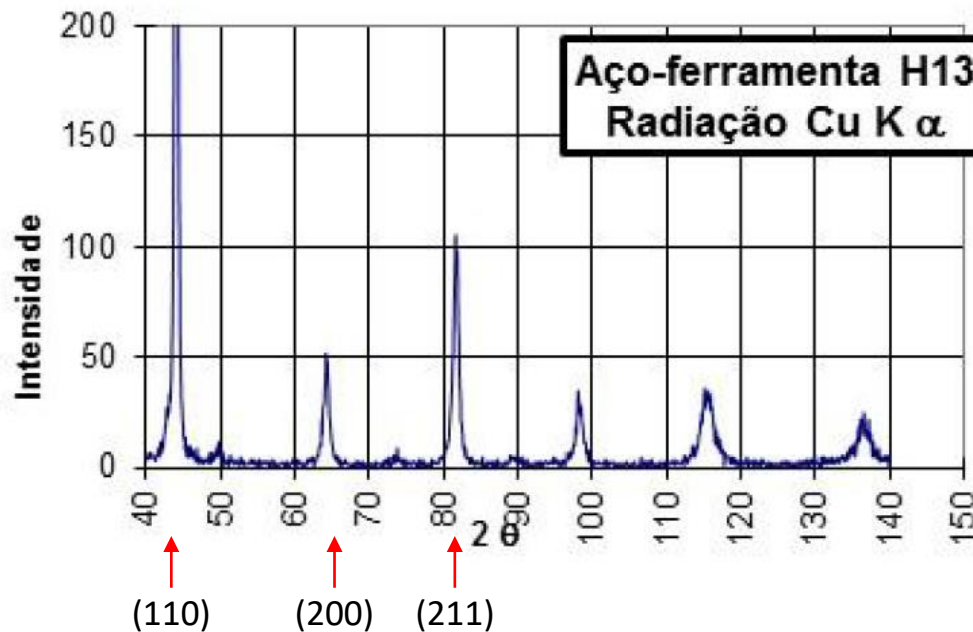
$$\theta = \text{arc sen} \left( \frac{\lambda\sqrt{N}}{2a} \right) \Rightarrow 2\theta = 2\text{arc sen} \left( \frac{\lambda\sqrt{N}}{2a} \right)$$

$$a = \frac{4}{\sqrt{3}}r = \frac{4}{\sqrt{3}} \times 1,24 \text{ \AA} = 2,864 \text{ \AA}$$

Dados:  $r_{\text{Fe}} = 1,24 \text{ \AA}$ ;  $\lambda K\alpha_{\text{Cu}} = 1,54 \text{ \AA}$ ;  $\lambda K\alpha_{\text{Cr}} = 2,29 \text{ \AA}$

$$2\theta = 2 \arcsin \left( \frac{\lambda \sqrt{N}}{2a} \right)$$

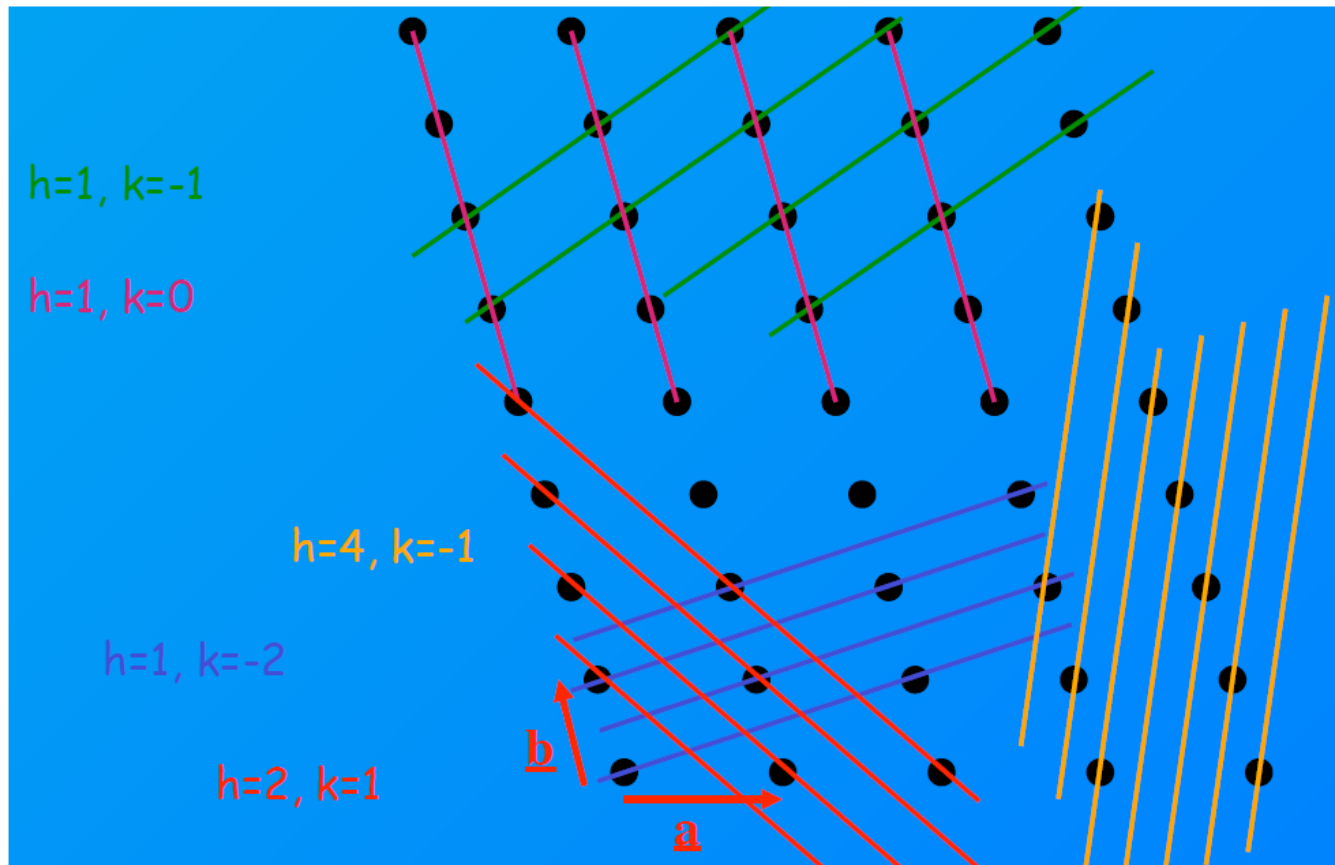
N	h	k	l	$2\theta K\alpha_{\text{Cu}}$	$2\theta K\alpha_{\text{Cr}}$
2	1	1	0	44,71	68,89
4	2	0	0	65,08	106,25
6	2	1	1	82,42	156,88



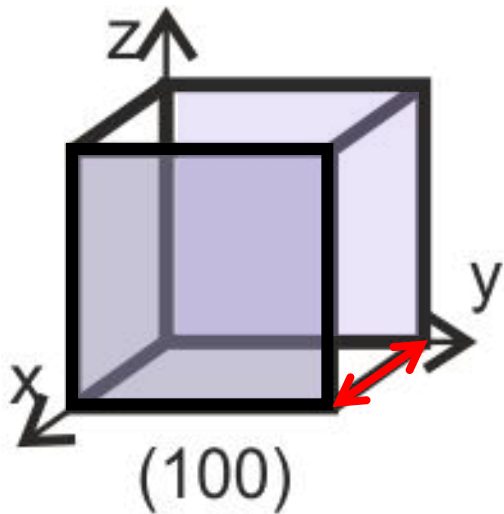
Os picos dos espectros do aço-ferramenta desviam-se ligeiramente dos valores calculados, como resultado de uma variação do parâmetro de rede  $a$  devido ao material analisado não se tratar de Fe puro e conter outros elementos como, por exemplo, o C em posições intersticiais e o Cr em posições substitucionais.

10 – Considere uma estrutura cúbica simples. Liste por ordem crescente de densidade atômica os seguintes planos:  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  $\{210\}$ ,  $\{111\}$ ,  $\{211\}$ ,  $\{311\}$ ,  $\{221\}$

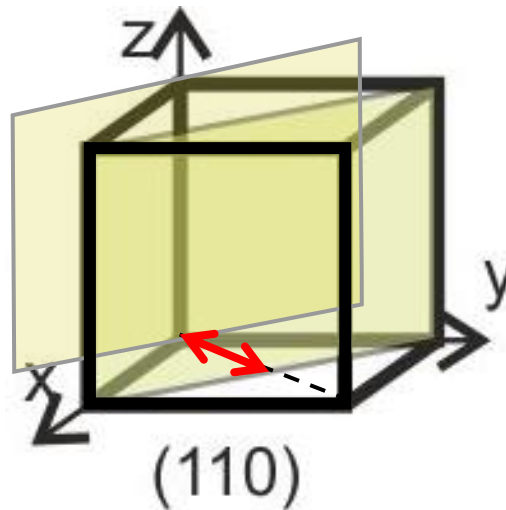
Resolução:



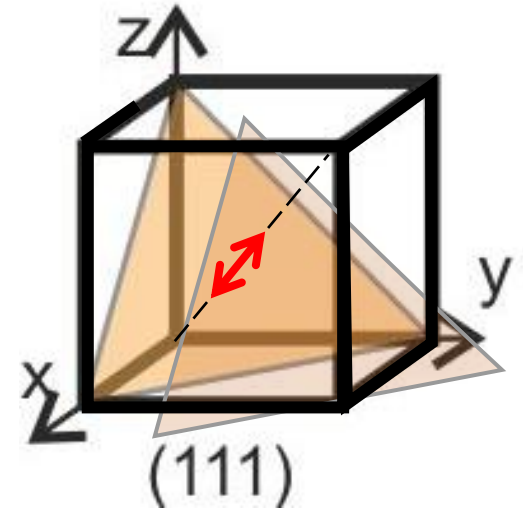
Quanto maior for  $N=h^2+k^2+l^2$  menor é a densidade atômica e menor o espaçamento entre planos



$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 0 + 0}} = a$$



$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$



$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

Os planos são ordenados da seguinte forma :  
{100}, {110}, {111}, {210}, {211}, {221}, {311}





11 – Considere os seguintes ângulos de difração para os primeiros três picos do padrão de difração de raios X de um metal. Utilizou-se radiação monocromática que possui um comprimento de onda de 0,1542 nm.

a) Determinar se esta estrutura cristalina é CFC ou CCC, ou nenhuma delas, justificando a sua escolha.

Resolução:

Ordem dos picos	Ângulo de difração (2θ)	Θ (nm)	d <sub>hkl</sub> (nm)
1ª	38,6	19,3	0,233
2ª	55,7	27,85	0,165
3ª	70,0	35,0	0,134

i) determinar d<sub>hkl</sub> para cada uma das reflexões

$$n\lambda = 2d_{hkl}\text{Sen}\theta$$

$$d_{hkl} = \frac{\lambda}{2\text{Sen}\theta}$$

para a primeira ordem de reflexão n = 1

ii) utilizar o dhkl para calcular o parâmetro de rede para estas primeiras reflexões

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

o parâmetro de rede a é constante

se  $d_{hkl}^2 \uparrow$   $h^2 + k^2 + l^2 \downarrow$

cúbica de faces centradas (CFC):  
índices h, k, l, todos pares ou todos ímpares

os primeiros três picos são: (111), (200) e (220)

$$a_1 = d_1 \sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} = 0,233 \times \sqrt{3} = 0,403 \text{ nm}$$

$$a_2 = d_2 \sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2} = 0,165 \times 2 = 0,33 \text{ nm}$$

$$a_3 = d_3 \sqrt{2^2 + 2^2 + 0^2} = 0,134 \times \sqrt{8} = 0,38 \text{ nm}$$

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

o metal não tem estrutura CFC

cúbica de corpo centrado (CCC):  
soma dos índices h, k, l, par

os primeiros três picos são: (110), (200) e (211)

$$a_1 = d_1 \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2} = 0,233 \times \sqrt{2} = 0,3295 \text{ nm}$$

$$a_2 = d_2 \sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2} = 0,165 \times 2 = 0,33 \text{ nm}$$

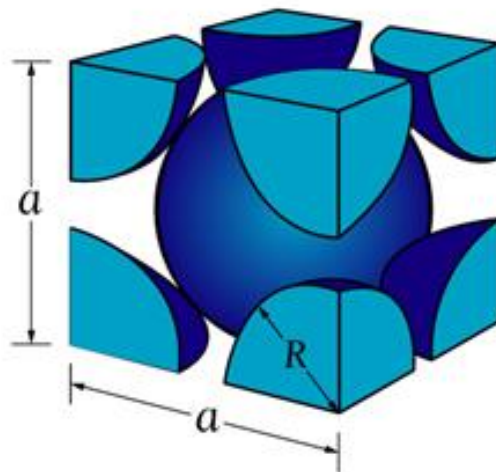
$$a_3 = d_3 \sqrt{2^2 + 1^2 + 0^2} = 0,134 \times \sqrt{6} = 0,329 \text{ nm}$$

$$a_1 \approx a_2 \approx a_3$$

o metal tem estrutura CCC

b) com base na seguinte tabela identifique qual dos metais possui esse padrão de difração

Resolução:



CCC

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

ou

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



Metal	Estrutura cristalina	Raio atômico (nm)
Alumínio	CFC	0,1431
Cadmio	HC	0,1490
<del>Crômio</del>	CCC	0,1249
Cobalto	HC	0,1253
Cobre	CFC	0,1278
Ouro	CFC	0,1442
<del>Ferro-α</del>	CCC	0,1241
Chumbo	CFC	0,1750
<del>Molibdênio</del>	CCC	0,1363
<del>Níquel</del>	CFC	0,1246
Platina	CFC	0,1387
Prata	CFC	0,1445
<b>Tântalo</b>	CCC	0,1430
Titanio-α	HC	0,1445
<del>Tungstênio</del>	CCC	0,1371
Zinco	HC	0,1332

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4} \times 0,3295 = 0,1428 \text{ nm}$$