NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

Ciência dos Materiais A

Departamento de Ciência dos Materiais

Margarida Lima (mmal@fct.unl.pt), Rui Borges (rcb@fct.unl.pt);

Carmo Lança (mcl@fct.unl.pt)

Departamento de Química

Ana Rita Duarte (ard08968@unl.pt)

FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

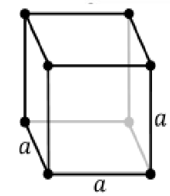
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Ano letivo de 2023-2024

1 – Para as estruturas cúbica simples (CS), cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de faces centradas (CFC), calcule:

a) a relação entre o parâmetro de rede **a** e o raio atómico.

Resolução:

Crystal System	Axial Relationships	Interaxial Angles	Unit Cell Geometry
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	

Cúbica Simples (CS)

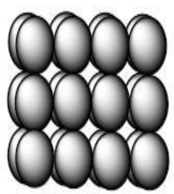


Figure 3a:
Square Array Layering

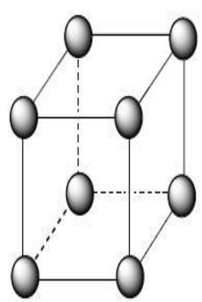


Figure 3b:
Simple Cubic

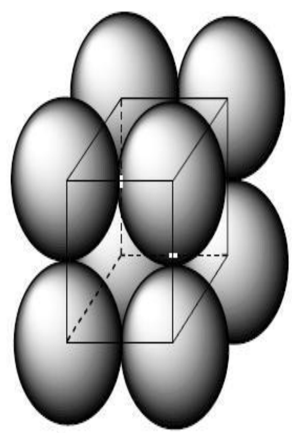
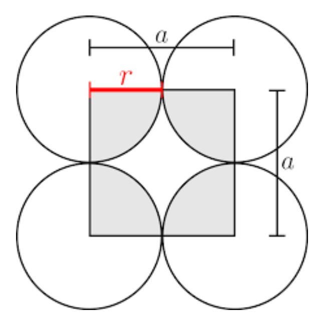
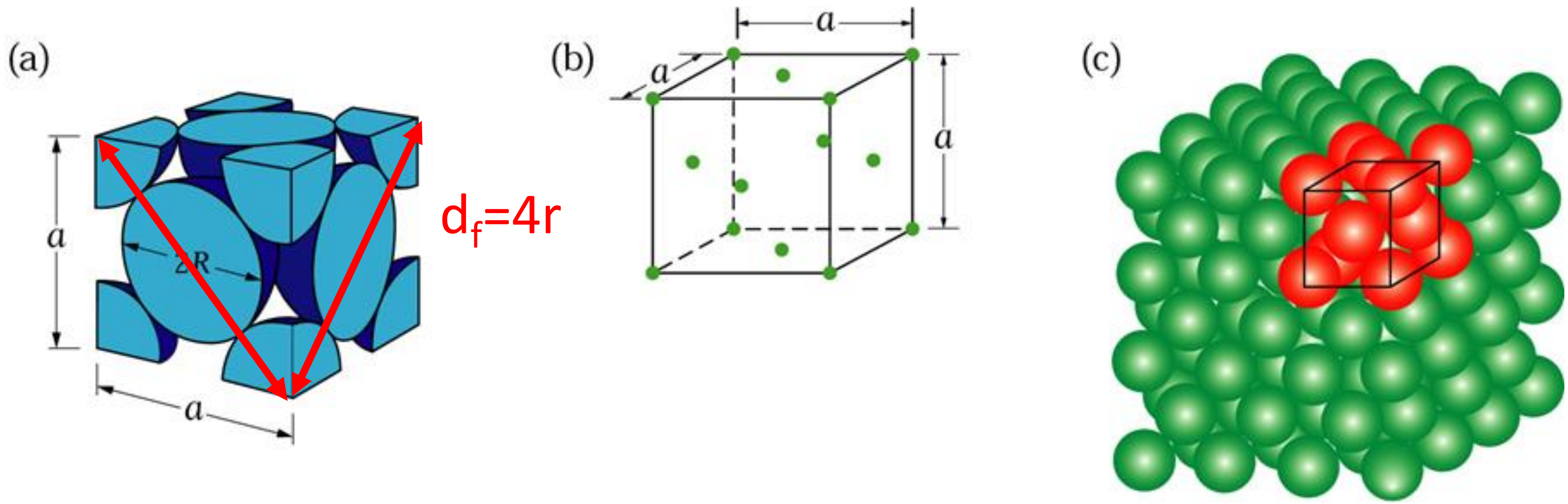


Figure 3c:
Space Filling Simple Cubic



$\boxed{a=2r}$

Cúbica de Faces Centradas (CFC)



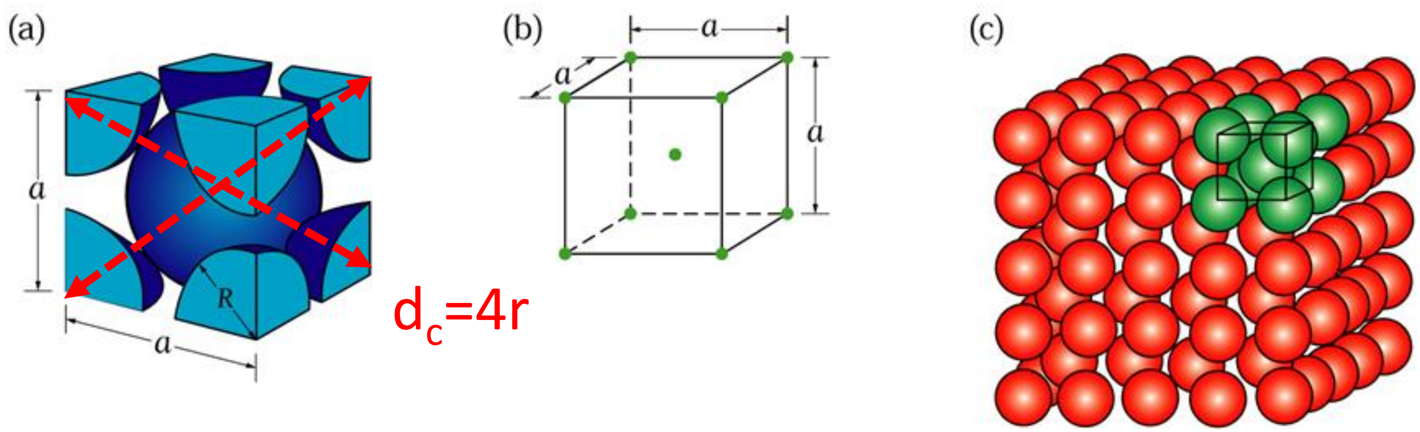
$$a^2 + a^2 = (4r)^2$$

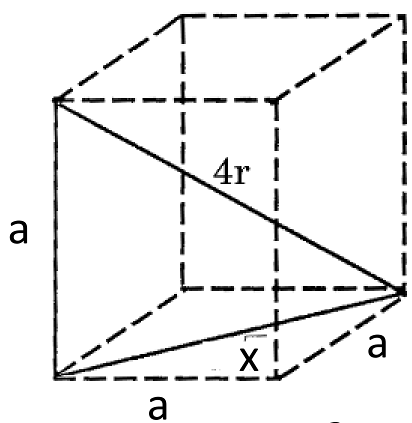
$$2a^2 = 16r^2$$

$$a = \sqrt{8}r$$

$$\boxed{a = 2\sqrt{2}r}$$

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)





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

$$a^2 + a^2 = x^2$$

$$2a^2 = x^2$$

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

$$a^2 + \left(\sqrt{2}a\right)^2 = (4r)^2$$

$$3a^2 = 16r^2$$

$$a^2 = \frac{16}{3}r^2$$

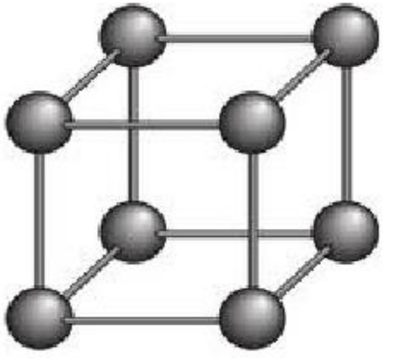
$$\boxed{a = \frac{4}{\sqrt{3}}r} \quad \text{ou} \quad \boxed{a = \frac{4\sqrt{3}}{3}r}$$

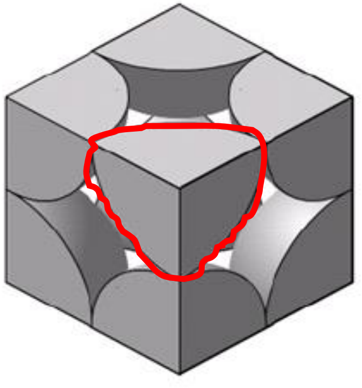
b) O número de átomos por célula unitária.

Resolução:

Cúbica Simples (CS)

A estrutura possui 8 átomos, um em cada vértice da célula unitária.

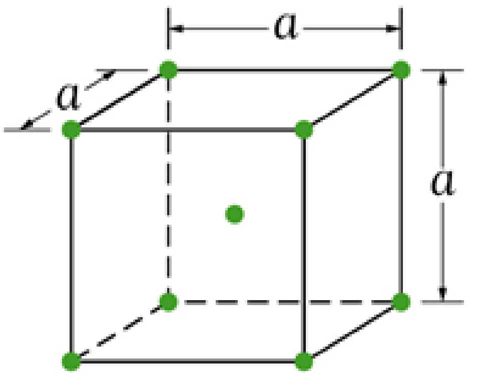




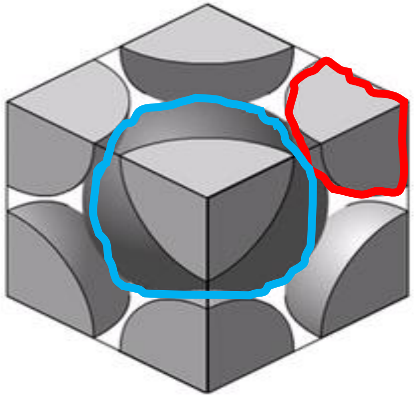
Cada átomo contribui para a célula unitária com 1/8 de átomo

Número de átomos por célula unitária = $8x\frac{1}{8} = 1$

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)



A estrutura possui 1 átomo em cada vértice da célula unitária, e 1 átomo no centro da célula unitária



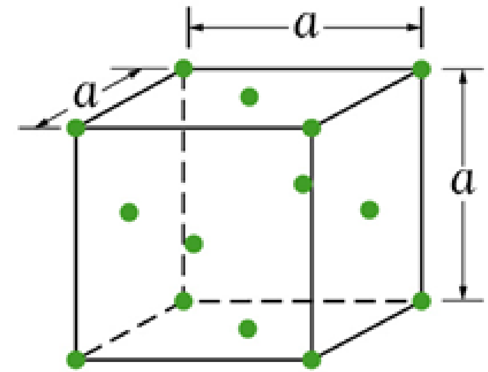
Cada átomo de cada vértice contribui para a célula unitária com 1/8 de átomo

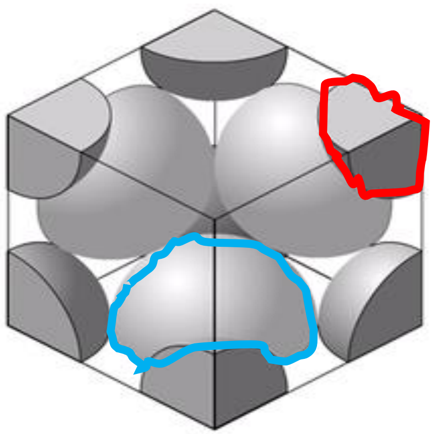
Há que considerar ainda o átomo no centro da célula unitária

Número de átomos por célula unitária = $8x\frac{1}{8}+1=2$

Cúbica de Faces Centradas (CFC)

A estrutura possui 1 átomo em cada vértice da célula unitária, e 1 átomo no centro de cada face





Cada átomo de cada vértice contribui para a célula unitária com 1/8 de átomo.

Cada átomo de cada face contribui para a célula unitária com ½ átomo

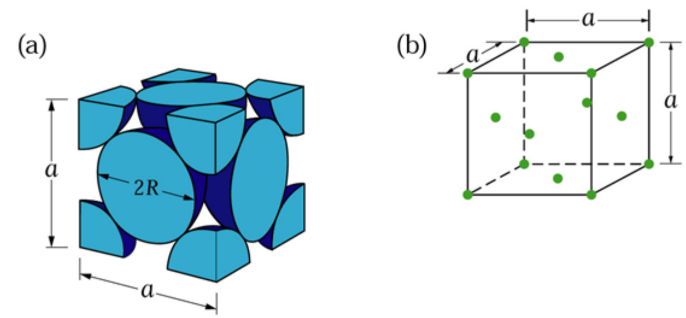
Número de átomos por célula unitária = $8x\frac{1}{8} + 6x\frac{1}{2} = 4$

c) o espaço ocupado por um átomo em cada estrutura.

Resolução:

Volume por átomo $$V_{at} = \frac{4}{3}\pi r^3$$

Cúbica de Faces Centradas (CFC)



Do problema anterior sabemos que :

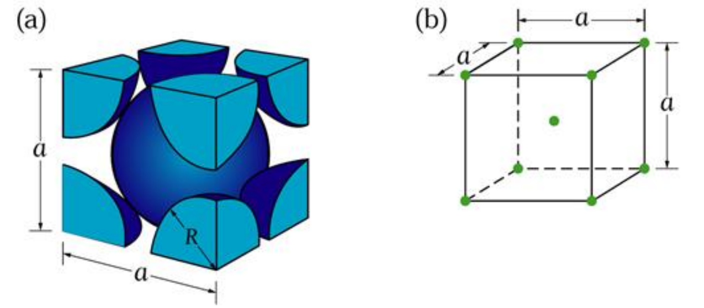
$$\boxed{a = 2\sqrt{2}r}$$ ou $$\boxed{r = \frac{a}{2\sqrt{2}}}$$

$$V_{at} = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2\sqrt{2}}\right)^3 = \frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{8x2\sqrt{2}} = \frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{16\sqrt{2}} = \frac{\pi}{12}x\frac{a^3}{\sqrt{2}} = 0{,}185a^3$$

Volume da célula unitária = a^3

$$\boxed{V_{at} = 0{,}185V_{total}}$$

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)



Do problema anterior sabemos que :

$$\boxed{a = \frac{4}{\sqrt{3}}r} \quad \text{ou} \quad \boxed{r = \frac{\sqrt{3}}{4}a}$$

$$V_{at} = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3 = \frac{4}{3}\pi\frac{3\sqrt{3}}{4^3}a^3 = \frac{\sqrt{3}}{4^2}\pi a^3 = 0{,}34a^3$$

Volume da célula unitária = a^3

$$\boxed{V_{at} = 0{,}34V_{total}}$$

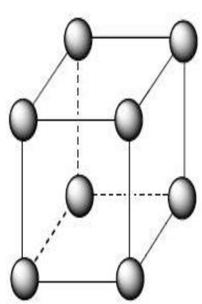
2 – Calcule o factor de empacotamento atómico das estruturas CS, CCC, e CFC.

Resolução:

$$f.e.a = \frac{\text{Volume dos átomos da célula unitária}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

$$f.e.a = \frac{\text{Nº de átomos da célula unitária x Volume por átomo}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

Cúbica Simples (CS)



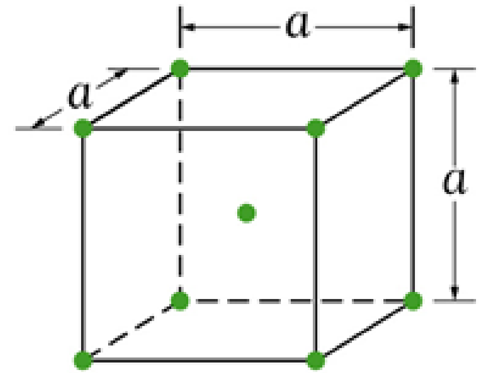
$$f.e.a. = \frac{1x\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$ e a=2r ou $r = \frac{a}{2}$

$$f.e.a. = \frac{1x\frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{8}}{a^3} = \frac{4}{24}\pi = 0,52 \Longrightarrow 52\%$$

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$f.e.a = \frac{\text{Nº de átomos da célula unitária x Volume por átomo}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)

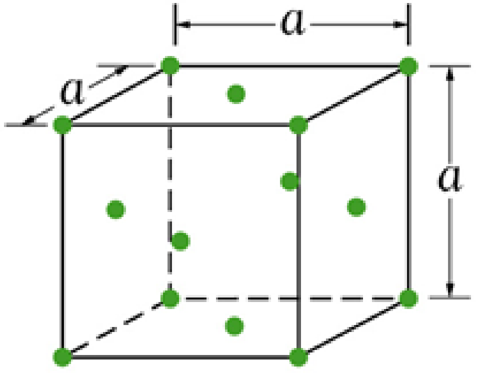


$$f.e.a. = \frac{2x\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} \quad \text{e} \quad a = \frac{4}{\sqrt{3}}r \quad ou \quad r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

$$f.e.a. = \frac{2x\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{2x\frac{4}{3}\pi\frac{3\sqrt{3}}{4^3}a^3}{a^3} = \frac{2\sqrt{3}\pi}{16} = 0{,}68 \quad \Rightarrow \quad 68\%$$

$$f.e.a = \frac{\text{Nº de átomos da célula unitária x Volume por átomo}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

Cúbica de Faces Centradas (CFC)



$$f.e.a. = \frac{4x\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} \quad \text{e} \quad a = 2\sqrt{2}r \quad \text{ou} \quad r = \frac{a}{2\sqrt{2}}$$

$$f.e.a. = \frac{4x\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2\sqrt{2}}\right)^3}{a^3} = \frac{\frac{4^2}{3}\pi\frac{a^3}{8x2\sqrt{2}}}{a^3} = \frac{\pi}{3}x\frac{1}{\sqrt{2}} = 0,74 \Longrightarrow 74\%$$

3 – a) A densidade do Al é 2,70 g/cm^3. O peso atómico é 26,98 (g/mol). Calcular os parâmetros da rede CFC do Al.

Resolução:

Considera-se para os cálculos uma célula unitária

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{n°.\,átomos\ da\ célula\ unitária\ x\ \dfrac{Pa}{N_A}}{V} = \frac{átomos.\dfrac{\dfrac{g}{mol}}{\dfrac{átomos}{mol}}}{cm^3}$$

$$V = \frac{n°.\,átomos\ da\ célula\ unitária\ x\ Pa}{\rho\ x\ N_A} = a^3$$

$$a^3 = \frac{n°.\,átomos\ da\ célula\ unitária\ x\ Pa}{\rho\ x\ N_A}$$

$$a = \sqrt[3]{\frac{n°.\,átomos\ da\ célula\ unitária\ x\ Pa}{\rho\ x\ N_A}}$$

3 – a) A densidade do Al é 2,70 g/cm^3. O peso atómico é 26,98 (g/mol). Calcular os parâmetros da rede CFC do Al.

Resolução:

$N_A = 6,022x10^{23}$

1 Å = 10^{-10} m

1 Å = 10^{-8} cm

$$a = \sqrt[3]{\frac{4\ x\ 26,98}{2,70\ x\ 6,022x10^{23}}} = 4,05x10^{-8}cm = 4,05\ Å$$

$$\boxed{a_{tab} = 4,05\ Å}$$

Na estrutura CFC $r = \frac{a}{2\sqrt{2}}$

$$r = \frac{4,05}{2\sqrt{2}} = 1,432\ Å$$

$$\boxed{r_{tab} = 1,430\ Å}$$

3 – b) A densidade do Fe-α é 7,87 g/cm^3. O peso atómico é 55,85 (g/mol). Calcular os parâmetros da rede CCC do Fe-α .

Resolução:

$N_A = 6,022 \times 10^{23}$

1 Å = 10^{-10} m

1 Å = 10^{-8} cm

$$a = \sqrt[3]{\frac{2\ x\ 55,85}{7,87\ x\ 6,022x10^{23}}} = 2,867x10^{-8}cm = 2,87\ \text{Å}$$

$$\boxed{a_{tab} = 2,87\ \text{Å}}$$

Na estrutura CCC $\quad r = \dfrac{\sqrt{3}}{4}a$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4}\ x\ 2,87 = 1,241\ \text{Å}$$

$$\boxed{r_{tab} = 1,240\ \text{Å}}$$

3 – c) A densidade do Mg é 1,741 g/cm^3. O peso atómico é 24,31 (g/mol). Calcular os parâmetros da rede HC do Mg.

Resolução:

$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$V = \frac{m}{\rho} \qquad V_{molar} = \frac{Pa}{\rho} = \frac{24{,}31}{1{,}741} = 13{,}963\ \frac{cm^3}{mol}$$

$$V_{\text{átomo}} = \frac{V_{molar}}{N_A} = \frac{13{,}963}{6{,}022x10^{23}} = 23{,}19x10^{-24}\,\frac{cm^3}{\acute{a}tomo} = 23{,}19\,\frac{\text{Å}^3}{\acute{a}tomo}$$

Considera-se para os cálculos uma célula unitária e tem que se afetar o $V_{\text{átomo}}$ do f.e.a

$$V_{\text{átomo}}\ x\ f.e.a = 23{,}19\ x\ 0{,}74 = 17{,}16\,\frac{\text{Å}^3}{\acute{a}tomo}$$

$$V_{\acute{a}tomo}\ x\ f.e.a = 23{,}19\ x\ 0{,}74 = 17{,}16\,\frac{\text{Å}^3}{\acute{a}tomo}$$

Volume por átomo $$V_{at} = \frac{4}{3}\pi r^3$$

$$r^3 = \frac{3}{4}.\frac{V_{\acute{a}tomo}}{\pi} = \frac{3}{4}.\frac{17.16}{\pi} = 4.097\ \text{Å}^3$$

$$r = 1{,}600\ \text{Å} \qquad \boxed{r_{tab} = 1{,}600\ \text{Å}}$$

Na estrutura HC a=2r

$$a = 3{,}2\ \text{Å} \qquad \boxed{a_{tab} = 3{,}209\ \text{Å}}$$

e a relação $\frac{c}{a} = 1{,}633$

$$c = 1{,}633\ x\ 3{,}2 = 5{,}226\ \text{Å} \qquad \boxed{c_{tab} = 5{,}209\ \text{Å}}$$