

CM A – Estruturas Cristalinas

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

1 de maio de 2024

Conteúdo

Questão 1	2	Questão 4	9
Questão 2	3	Questão 5	10
Questão 3	6	Questão 6	11

Questão 1

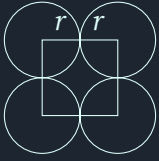
Para as estruturas cúbica simples (CS), cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de faces centradas (CFC), calcule:

Q1 a.

A relação entre o parâmetro de rede a e o raio atômico

Resposta

(i) CS



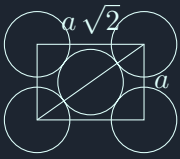
$$a_{CS} = 2r$$

(iii) CFC



$$a_{CFC} = 4r \cos(\pi/4) = 2r\sqrt{2}$$

(ii) CCC



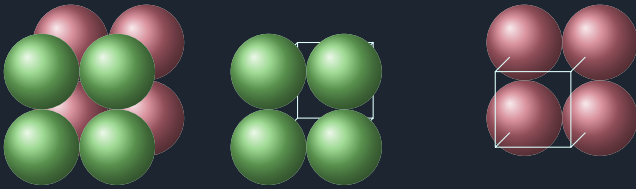
$$a_{CCC}^2 + (a_{CCC} \sqrt{2})^2 = (4r)^2 \implies a_{CCC} = 4r/\sqrt{3}$$

Q1 b.

O número de átomos por célula unitária

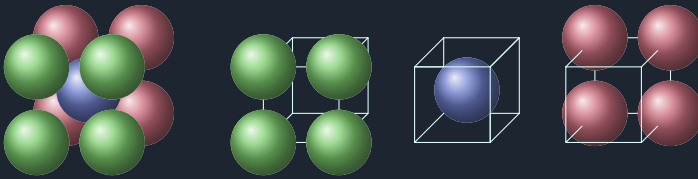
Resposta

(i) CS



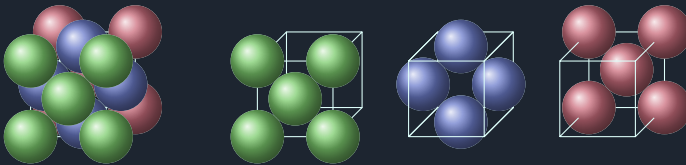
$$n_{CS} = 8 * 1/8 = 1$$

(ii) CCC



$$n_{CCC} = 1 + 8 * 1/8 = 2$$

(iii) CFC



$$n_{CFC} = 6 * 1/2 + 8 * 1/8 = 4$$

Q1 c.

O espaço ocupado por um átomo em cada estrutura

Resposta

(i) CS

$$\frac{1 * \pi r^3 4/3}{a^3} = \frac{\pi r^3 4/3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} \cong 52.4\%$$

(ii) CCC

$$\frac{\pi r^3 4/3}{a^3} = \frac{\pi r^3 4/3}{(4r/\sqrt{3})^3} = \frac{\pi 4/3}{4^3/3^{3/2}} = \frac{\pi \sqrt{3}}{16} \cong 34.0\%$$

(iii) CFC

$$\frac{\pi r^3 4/3}{a^3} = \frac{\pi r^3 4/3}{(r\sqrt{2})^3} = \frac{\pi}{3 * 2^{3*3/2-2}} = \frac{\pi}{3 * 2^{3/2}} \cong 18.5\%$$

Questão 2

Calcule o fator de empacotamento atômico das estruturas CS, CCC e CFC

Resposta

(i) CS

$$fea_{CS} = 1 \frac{\pi r^3 4/3}{a^3} \cong \\ \cong 52.360 \%$$

(ii) CCC

$$fea_{CCC} = 2 \frac{\pi r^3 4/3}{a^3} \cong \\ \cong 2 * 34.009 \% \cong 68.017 \%$$

(iii) CFC

$$fea_{CFC} = 4 \frac{\pi r^3 4/3}{a^3} \cong \\ \cong 4 * 18.512 \% \cong 74.048 \%$$

Questão 3

Q3 a.

A densidade do Al é 2.70 g/cm³. O peso atômico é 26.98 g/mol. Calcular os parâmetros da rede CFC do Al

Resposta

$$\begin{aligned} a &= \sqrt[3]{V_{ol}} = \sqrt[3]{\frac{m}{\rho}} = \sqrt[3]{\frac{Pa_{Al} \frac{\text{g}}{\text{mol}} \frac{\text{mol}}{N_A \text{ Atomos}} n_{\text{atomos por celula uni Atomos}}}{\rho}} = \\ &= \sqrt[3]{\frac{Pa_{Al} n_{\text{atomos por celula uni}}}{\rho N_A}} = \sqrt[3]{\frac{4 * 26.98}{2.70 (1 \text{ E}^{-8})^3 * 6.022 \text{ E}^{23}}} \text{ \AA} \cong \\ &\cong 4.049 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Q3 b.

A densidade do Fe- α é 7.87 g/cm³. O peso atômico é 55.85 g/mol.
Calcular os parâmetros da rede CCC do Fe- α

Resposta

$$a = \sqrt[3]{\frac{2 * 55.85}{7.87 (1 \text{ E}-8)^3 6.022 \text{ E}^{23}}} \cong 2.867 \text{ \AA}$$

Q3 c.

A densidade do Mg é 1.741 g/cm^3 . O peso atômico é 24.31 g/mol .
Calcular os parâmetros da rede HC do Mg

Resposta

$$a = 2r;$$

$$V_{\text{atomo}} = \pi r^3 4/3;$$

$$V_{\text{atomo}}/fe_{\text{HC}} = V_{\text{atomo por unidade}} = \frac{Pa}{\rho} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow a = 2r = 2 \left(\sqrt[3]{\frac{V_{\text{atomo}} 3}{4\pi}} \right) = 2 \sqrt[3]{\frac{(V_{\text{atomo por unidade}} fe_{\text{HC}}) 3}{4\pi}} =$$

$$= 2 \sqrt[3]{\frac{\left(\frac{Pa}{\rho N_A}\right) fe_{\text{HC}} 3}{4\pi}} \cong 2 \sqrt[3]{\frac{\frac{24.31}{1.741 \text{ E}-24 * 6.022 \text{ E}^{23}} * 74.048 \% * 3}{4\pi}} \text{ \AA} \cong$$

$$\cong 3.201 \text{ \AA};$$

$$c = 1.633 a \cong 1.633 * 3.201 \text{ \AA} \cong 5.227 \text{ \AA}$$

Questão 4

Considere a estrutura cúbica simples:

Q4 a.

Desenhe os planos com os seguintes índices de miller

i: (001)

ii: (110)

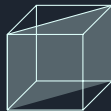
iii: (111)

Resposta

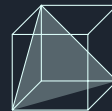
(i) (001)



(ii) (110)



(iii) (111)



Q4 b.

Sobre os planos anteriores desenhe, respectivamente, as direções:

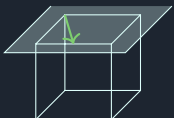
i: $[210]$

ii: $[\bar{1}11]$

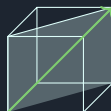
iii: $[10\bar{1}]$

Resposta

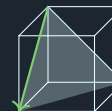
(i) $[210]$



(ii) $[\bar{1}11]$



(iii) $[10\bar{1}]$



Questão 5

O Pb possui estrutura Cúbica de Faces Centradas (CFC) e o seu parâmetro de rede é $a_{\text{Pb}} = 4.95 \text{ \AA}$. Quantos átomos por mm^2 existem nos planos (1 0 0) e (1 1 1) do chumbo?

Resposta

(100) :

$$\frac{N_{\text{atomos}}}{\text{Area}} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{(4.95 \text{ E}^{-7})^2} \cong 8.162 \text{ E}^{12} \text{ Atomos/mm}^2;$$

(111) :

$$\frac{N_{\text{atomos}}}{\text{Area}} = \frac{3 * 1/2 + 3 * 1/6}{a \sqrt{2} * a \sqrt{2} \sin(\pi/3)/2} = \frac{4}{(4.95 \text{ E}^{-7})^2 \sqrt{3}} \cong 9.425 \text{ E}^{12} \text{ Atomo/mm}^2$$

Questão 6

O cobre tem uma estrutura CFC e um raio atômico de 1.278 Å. Quantas camadas de planos {1 0 0} existem ao longo da espessura de uma película de 1 μm de espessura. Suponha que os planos (0 0 1) são paralelos às superfícies superior e inferior da película.

Resposta

$$\left\lfloor \frac{1 \mu\text{m}}{a} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{1 \mu\text{m}}{r 2^{3/2}} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{1 \mu\text{m}}{(1.278 \text{ E}^{-4}) 2^{3/2}} \right\rfloor = 2766$$