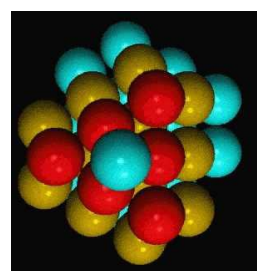
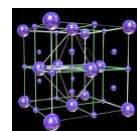


ESTRUTURAS CRISTALINAS



Estruturas cristalinas

- A *estrutura cristalina* dos materiais sólidos com importância para a Engenharia, depende principalmente do *arranjo dos átomos, iões ou moléculas* que os constituem e das *forças de ligação* entre eles.
- Se os átomos ou iões de um sólido se organizarem num padrão que se repete segundo as três dimensões, forma-se um sólido que se diz ter *estrutura cristalina* e se designa por *sólido cristalino* ou *material cristalino*.

Generalidades

- **Material cristalino** é aquele no qual os átomos se encontram ordenados a longas distâncias atômicas formando uma estrutura tridimensional que se chama **rede cristalina**
- Nos *materiais não-cristalinos ou amorfos* não existe ordem de longo alcance na disposição dos átomos

MCR

isep Instituto Superior de
Engenharia do Porto

Generalidades

- Todos os **metais**, **muitos cerâmicos** e **alguns polímeros** formam estruturas cristalinas sob condições normais de solidificação
- As propriedades dos materiais sólidos cristalinos dependem da estrutura cristalina dos mesmos

MCR

isep Instituto Superior de
Engenharia do Porto

Estrutura cristalina

Porquê estudá-la?

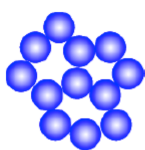
- As propriedades de alguns materiais estão directamente associadas à sua estrutura cristalina (ex: magnésio e berílio que têm a mesma estrutura deformam-se muito menos que ouro e prata que têm outra estrutura cristalina)
- Explica a diferença significativa nas propriedades de materiais cristalinos e não cristalinos de mesma composição

MCR

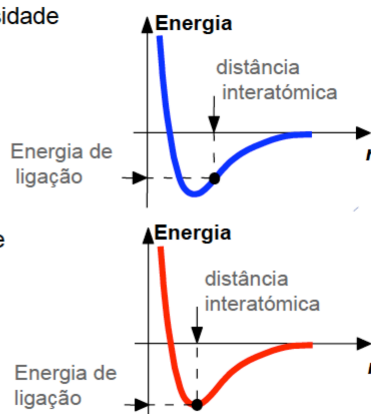
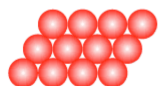
isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Arranjo ordenado *versus* desordenado

- Arranjo **desordenado**, baixa densidade



- Arranjo **ordenado**, alta densidade



Materias com uma estrutura ordenada tendem a ser mais estáveis porque tendem a ter menor energia

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Principais estruturas cristalinas dos metais

- A maior parte dos elementos metálicos (cerca de 90%) cristaliza, ao solidificar, em três estruturas cristalinas compactas: *cúbica de corpo centrado (CCC)*, *cúbica de faces centradas (CFC)* e *hexagonal compacta (HC)*.
- *Isto acontece porque às estruturas mais compactas correspondem arranjos de mais baixa energia, mais estáveis, porque se liberta energia à medida que os átomos se aproximam uns dos outros e se ligam mais compactamente.*

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Sistema cúbico

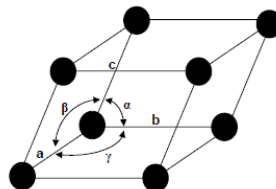
- No sistema cúbico existem três tipos de células unitárias:
 - Cúbica simples
 - Cúbica de corpo centrado
 - Cúbica de faces centradas



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Redes Cristalinas

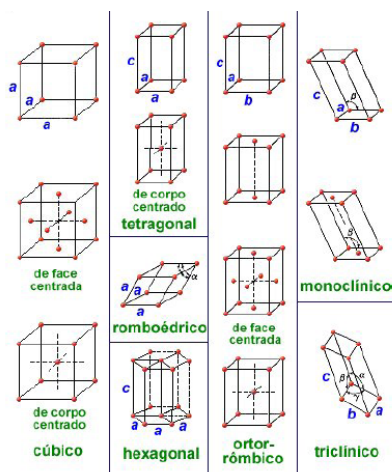


- As redes cristalinas são formadas por **células unitárias**, as quais podem ser definidas por três vectores de rede com origem num dos vértices da célula
- Os comprimentos, **a**, **b** e **c** segundo os eixos e os ângulos α , β e γ compreendidos entre os vários pares de eixos considerados, são designados por **parâmetros de rede**

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto




As 14 redes cristalinas de Bravais



MCR

Segundo Bravais (1811-1863), 14 tipos de células unitárias padrão, agrupadas em 7 sistemas, são suficientes para descrever todas as redes existentes:

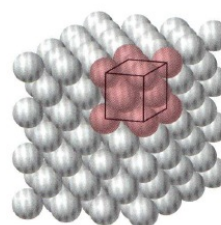
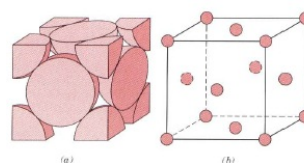
- 3 **cúbicas**: corpo simples, corpo centrado e faces centradas;
- 2 **tetragonais**: corpo simples e corpo centrado;
- 1 **romboédrica**;
- 1 **hexagonal**;
- 4 **ortorrômbicas**: corpo simples, bases centradas, faces centradas e corpo centrado;
- 2 **monoclinicas**: corpo simples e bases centradas;
- 1 **triclinica**.

	<i>Crystal System</i>	<i>Axial Relationships</i>	<i>Interaxial Angles</i>	<i>Unit Cell Geometry</i>
	Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
	Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
	Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
	Rhombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
	Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
	Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
MCR	Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

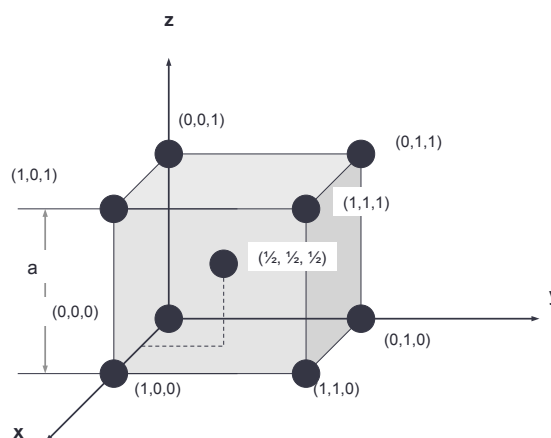
Célula Unitária

- Unidade básica repetitiva da estrutura tridimensional
- Consiste num pequeno grupo de átomos
- Os átomos são representados como esferas rígidas que formam um modelo repetitivo ao longo da estrutura tridimensional
- A célula unitária é escolhida para representar a simetria da estrutura cristalina



isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Coordenadas dos átomos na célula unitária CCC

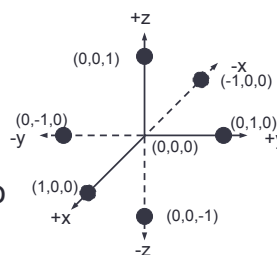


MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Posições atômicas em células unitárias cúbicas

- Para localizar as posições atômicas em células unitárias cúbicas, usam-se os eixos ortogonais x , y e z .
- Em cristalografia, o sentido positivo do eixo x tem geralmente a direcção que sai do papel, o sentido positivo do eixo y aponta para a direita do papel, e o sentido positivo do eixo z aponta para cima.



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

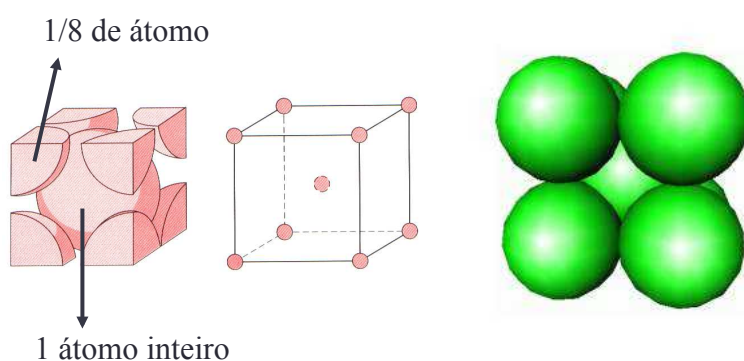
Estrutura cristalina dos metais

- Como a ligação metálica é não-direccional não há restrições quanto ao número e posições dos vizinhos mais próximos.
- Nas estruturas cristalinas dos metais, os átomos têm geralmente um número elevado de vizinhos e um elevado empacotamento atómico.
- **Nº de Coordenação**: nº de átomos vizinhos mais próximos
- **Parâmetros de rede**: dimensões características da figura geométrica que define o sistema cristalino (ex.: no sistema cúbico o parâmetro de rede corresponde à aresta do cubo)

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Número de coordenação



Para a estrutura CCC o número de coordenação é 8

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Factor de compacidade (ou empacotamento) atómica (FCA)

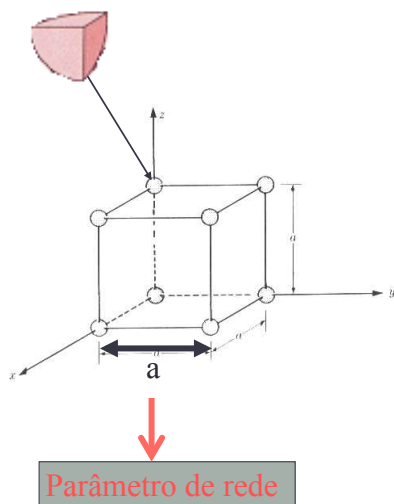
- Se os átomos da célula unitária forem considerados como esferas rígidas, pode-se calcular o factor de compacidade atómica (FCA) usando a equação:

$$\text{FCA} = \frac{\text{Volume dos átomos na célula unitária}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

MCR

 Instituto Superior de Engenharia do Porto

Estrutura cúbica simples (CS)



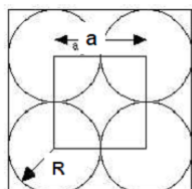
MCR

- Apenas 1/8 de cada átomo cai dentro da célula unitária, ou seja, a célula unitária contém apenas **1 átomo**.
- Os metais não cristalizam na estrutura cúbica simples devido ao baixo empacotamento atómico
- O nº de coordenação da estrutura cúbica simples é **6**

 Instituto Superior de Engenharia do Porto

Sistema cúbico

Estrutura cúbica simples (CS)



✂ Relação entre o raio atómico, R, e o parâmetro de rede, a:

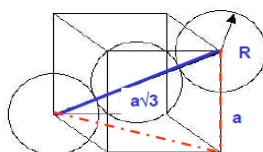
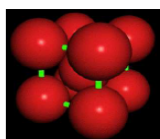
$$a = 2 R$$

- Vol. dos átomos = N° de átomos x Vol. esfera
- Vol. da célula = Vol. cubo = $a^3 = (2R)^3$

$$\text{Factor de empacotamento} = 1 \times \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} = 0,52$$

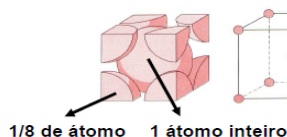
Estrutura Cúbica

Estrutura cúbica de corpo centrado (CCC)



✂ No sistema CCC os átomos tocam-se ao longo da diagonal do cubo:

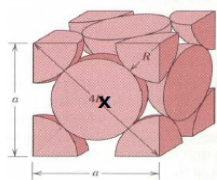
$$a = 4R / \sqrt{3}$$



- ✂ No sistema CCC cada célula unitária possui 2 átomos
- ✂ No CCC o N° de coordenação é 8
- ✂ Ex: Fe, Cr, W

Estrutura Cúbica

Estrutura cúbica de faces centradas (CFC)



Relação entre o parâmetro (a) de rede e o raio atômico (R):

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

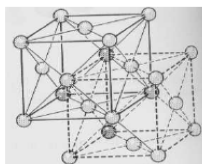
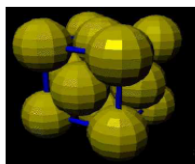
$$2 a^2 = x^2$$

$$x = a\sqrt{2} \text{ e } x = 4R$$

Então,

$$a\sqrt{2} = 4R$$

$$a = 4R / \sqrt{2}$$



⌘ No sistema CFC cada célula tem 4 átomos

⌘ O n° de coord. é 12

⌘ Sistema mais comum nos metais (Al, Fe, Cu, Pb, Ag, Ni,...)

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Estrutura Cúbica

Estrutura cúbica de faces centradas (CFC)



- Vol. dos átomos = N° de átomos x Vol. esfera
- Vol. da célula = Vol. cubo = $a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3$
- N° de átomos = $8 \times \frac{1}{8}$ (vértices) + $6 \times \frac{1}{2}$ (faces) = 4

$$\text{Factor de empacotamento} = 1 \times \frac{\frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = 0,74$$

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Curiosidade!



- O **Atomium** é uma estrutura simbólica com 103 metros de altura que foi construída para a Feira Mundial de 1958 e encontra-se em Bruxelas. É constituída por nove esferas de aço ligadas por tubos, constituindo a forma da célula unitária CCC de um cristal de ferro ampliado 165 biliões de vezes!

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Deformação de metais

- A deformação de metais envolve deslizamento de planos atômicos
- O deslizamento ocorre mais facilmente nos planos e direcções de maior densidade atómica

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

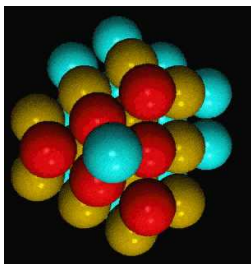
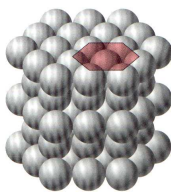
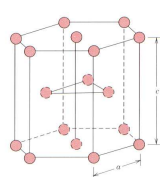
Tabela resumo para o sistema cúbico

Sistema Cristalino	Nº de átomos por célula unitária	Nº de coordenação	Parâmetro de rede (a)	Factor de empacotamento
CS	1	6	$2R$	0,52
CCC	2	8	$\frac{4R}{\sqrt{3}}$	0,68
CFC	4	12	$\frac{4R}{\sqrt{2}}$	0,74

MCR

 Instituto Superior de Engenharia do Porto

Estrutura hexagonal compacta (HC)



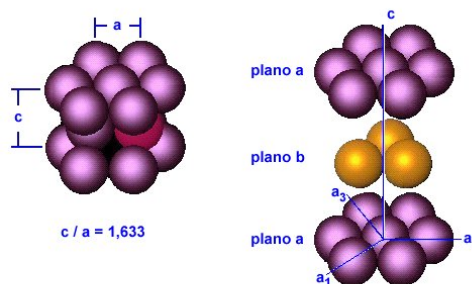
MCR

- Os metais em geral não cristalizam no sistema Hexagonal Simples porque o factor de empacotamento é muito baixo, excepto cristais com mais de um tipo de átomo
- O sistema Hexagonal Compacto é mais comum nos metais (ex: Mg, Zn)
- Na HC cada átomo de uma dada camada está directamente abaixo ou acima dos interstícios formados entre as camadas adjacentes

 Instituto Superior de Engenharia do Porto

Estrutura hexagonal compacta (HC)

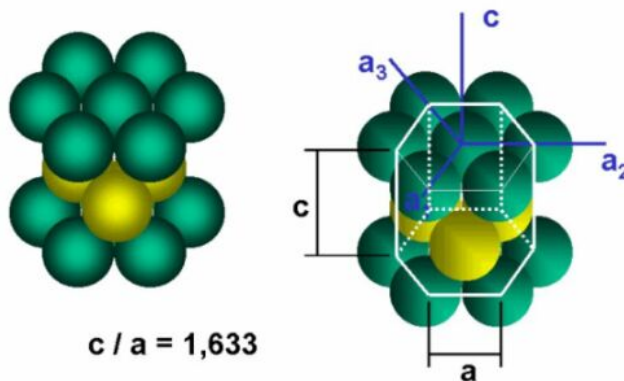
- Cada átomo tangencia 3 átomos da camada de cima, 6 átomos no seu próprio plano e 3 na camada de baixo do seu plano
- O número de coordenação para a estrutura HC é 12 e, portanto, o factor de empacotamento é o mesmo da CFC, ou seja, 0,74.



Relação entre R e a :
 $a = 2R$

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Estrutura hexagonal compacta (HC)



Existem 2 parâmetros de rede:

- parâmetro basal (a) e parâmetro de altura (c)

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Raio atômico e estrutura cristalina de alguns metais

Table 3.1 Atomic Radii and Crystal Structures for 16 Metals

<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure^a</i>	<i>Atomic Radius^b (nm)</i>	<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>
Aluminum	FCC	0.1431	Molybdenum	BCC	0.1363
Cadmium	HCP	0.1490	Nickel	FCC	0.1246
Chromium	BCC	0.1249	Platinum	FCC	0.1387
Cobalt	HCP	0.1253	Silver	FCC	0.1445
Copper	FCC	0.1278	Tantalum	BCC	0.1430
Gold	FCC	0.1442	Titanium (α)	HCP	0.1445
Iron (α)	BCC	0.1241	Tungsten	BCC	0.1371
Lead	FCC	0.1750	Zinc	HCP	0.1332

^a FCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

^b A nanometer (nm) equals 10^{-9} m; to convert from nanometers to angstrom units (\AA), multiply the nanometer value by 10.

MCR

 isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

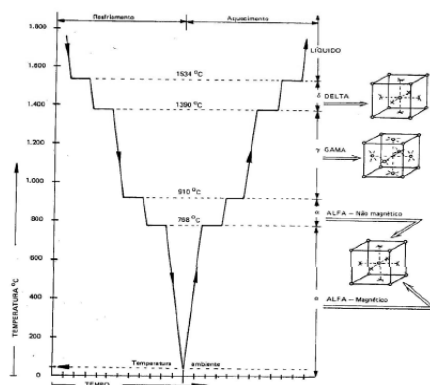
Polimorfismo ou Alotropia

- Alguns metais e não metais podem apresentar mais de uma estrutura cristalina dependendo da temperatura e pressão a que se encontram. Esse fenómeno é denominado de **POLIMORFISMO**.
 - Exs. Fe, Ti, Co, Zr,
- Geralmente as transformações polimórficas são acompanhadas de alterações da densidade e mudança de outras propriedades físicas

MCR

 isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Polimorfismo do ferro



✂ À temperatura ambiente, o Ferro tem estrutura CCC, número de coordenação 8, factor de empilhamento de 0,68.

✂ A 910°C, o Ferro passa para estrutura CFC, número de coordenação 12, factor de empilhamento de 0,74.

✂ A 1390°C o Ferro passa novamente para uma estrutura CCC.

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Outros exemplos de Polimorfismo

Titânio

FASE α

- Existe até 883°C
- Apresenta estrutura HC

FASE β

- Existe a partir de 883°C
- Apresenta estrutura CCC

O **Carbono**, à temperatura ambiente e à pressão atmosférica poderá apresentar 3 formas alotrópicas distintas: **Diamante**, **Grafite** ou **Carvão**.

O **Cobalto** passa de uma estrutura HC para CFC acima de 427°C.

O **Sódio** passa de uma estrutura CCC para HC quando a temperatura desce abaixo de - 233°C.

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Cálculo da densidade volúmica

- Usando o modelo de esferas rígidas para a célula unitária da estrutura cristalina de um metal e um valor para o raio atómico, determinado por difracção de raios-X, pode obter-se a densidade volúmica de um metal usando a equação:

$$\text{Densidade volúmica do metal} = \rho_v = \frac{\text{massa célula unitária}}{\text{volume célula unitária}}$$

Cálculo da densidade volúmica

- Ou então:

$$\rho = \frac{n M}{V_C N_A}$$

 The image cannot be displayed. Your computer may not have enough memory to open the image, or the image may have been corrupted. Restart your computer, and then open the file again. If the red x still appears, you may have to delete the image and then insert it again.

n = número de átomos da célula unitária

M = Massa atómica

V_c = Volume da célula unitária

N_A = Número de Avogadro ($6,02 \times 10^{23}$ átomos/mol)

Direcções em células unitárias cúbicas

- É muitas vezes necessário fazer referência a direcções específicas nas redes cristalinas particularmente no caso dos metais e ligas com propriedades que variam com a orientação cristalográfica.
 - *Para os cristais cúbicos, os índices das direcções cristalográficas são as componentes do vector-direcção segundo cada um dos eixos coordenados, após redução aos menores inteiros.*

MCR

 Instituto Superior de Engenharia do Porto

Direcções em células unitárias cúbicas

- Para indicar uma direcção numa célula unitária cúbica, desenha-se um **vector- direcção** a partir de uma origem, que é geralmente um vértice da célula cúbica, até que “saia” da superfície do cubo.
- As coordenadas do ponto da célula unitária em que o vector-direcção emerge da superfície do cubo, após conversão em inteiros, são os índices da direcção.
- Os índices de uma direcção são colocados entre parêntesis rectos, sem vírgulas a separá-los.
- Indica-se que o índice de uma direcção é negativo colocando uma barra sobre o índice.

MCR

 Instituto Superior de Engenharia do Porto

Direcções em células unitárias cúbicas

- Usam-se letras u , v , w , para indicar os índices segundo os eixos x , y e z , respectivamente e escreve-se $[uvw]$.
- Todas as direcções paralelas têm os mesmos índices.
- As direcções dizem-se **cristalograficamente equivalentes** se, ao longo dessas direcções, o espaçamento entre os átomos for o mesmo.
 - P.ex. as seguintes direcções, correspondentes às arestas do cubo são cristalograficamente equivalentes:

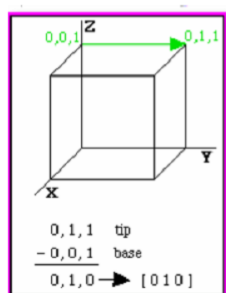
$$[100], [010], [001], [0\bar{1}0], [00\bar{1}], [1\bar{0}0] \equiv \langle 100 \rangle$$

MCR

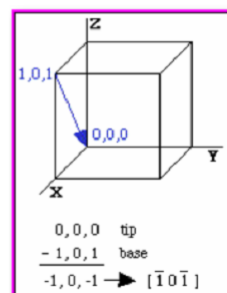
isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Direcções nos cristais Sistema cúbico

- ✂ São representadas: $[hkl]$
- ✂ Família de direcções: $\langle hkl \rangle$



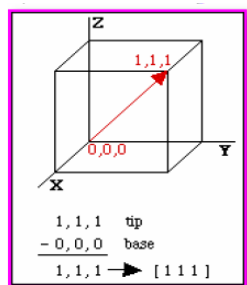
Se da subtracção resultar um número negativo, coloca-se uma barra sobre o número



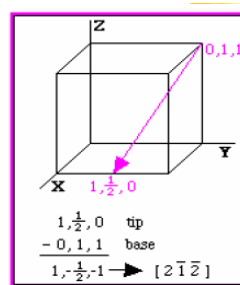
MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Direcções nos cristais Sistema cúbico



Vector direcção com origem na origem do sistema de eixos

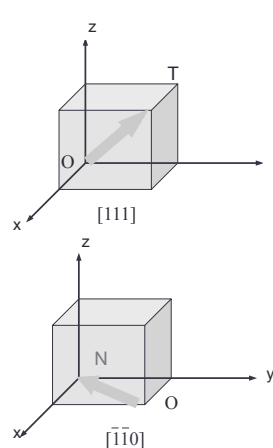
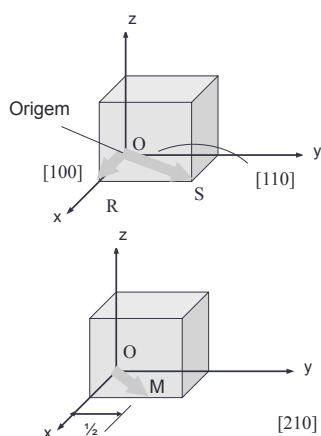


O resultado deve ser dividido ou multiplicado por um factor comum para dar números inteiros

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Diversas direcções em células unitárias cúbicas



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

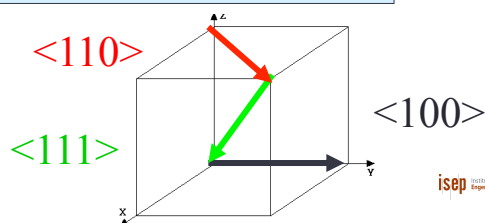
Família de Direcções - Sistema cúbico

- A simetria desta estrutura permite que as direcções equivalentes sejam agrupadas para formar uma família de direcções:

$\langle 100 \rangle$ para as faces

$\langle 110 \rangle$ para as diagonais das faces

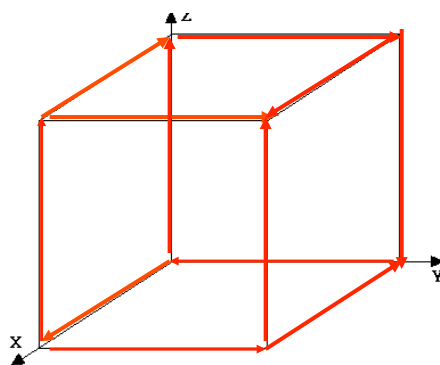
$\langle 111 \rangle$ para a diagonal do cubo



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

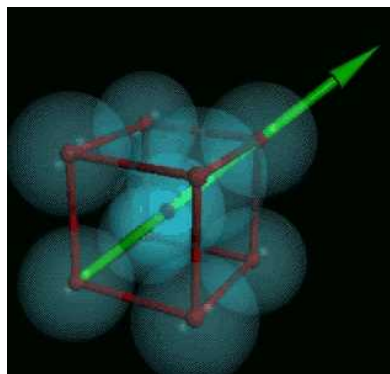
Algumas direcções da família de direcções $\langle 100 \rangle$



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Família de Direcções Sistema CCC

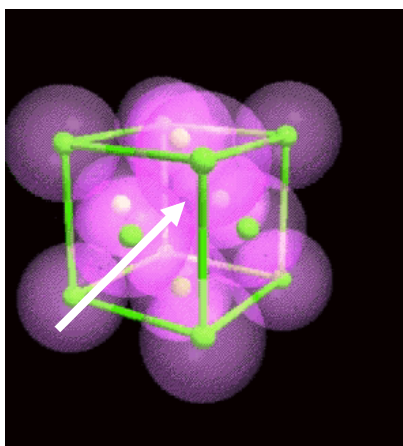


MCR

isep Instituto Superior de
Engenharia do Porto

- No sistema CCC os átomos tocam-se ao longo da diagonal do cubo, que corresponde a família de direcções $\langle 111 \rangle$
- Então, a direcção $\langle 111 \rangle$ é a de maior empacotamento atómico para o sistema CCC

Família de Direcções Sistema CFC



MCR

isep Instituto Superior de
Engenharia do Porto

- No sistema CFC os átomos tocam-se ao longo da diagonal da face, que corresponde a família de direcções $\langle 110 \rangle$
- Então, a direcção $\langle 110 \rangle$ é a de maior empacotamento atómico para o sistema CFC

Índices de Miller-Bravais de planos cristalográficos em células unitárias cúbicas

- Numa estrutura cristalina é por vezes necessário fazer referência a determinados planos de átomos, ou pode haver interesse em conhecer a orientação cristalográfica de um plano ou conjunto de planos de uma rede cristalina. Para identificar planos cristalográficos numa estrutura cristalina cúbica, usa-se o sistema de notação de Miller-Bravais.

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Índices de Miller-Bravais de planos cristalográficos em células unitárias cúbicas

- Os índices de Miller-Bravais de um plano cristalográfico são definidos como os inversos das intersecções fraccionárias (com as fracções reduzidas ao mesmo denominador) que o plano faz com os eixos cristalográficos x , y e z coincidentes com três arestas não paralelas da célula unitária cúbica

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Determinação dos índices de Miller-Bravais de planos:

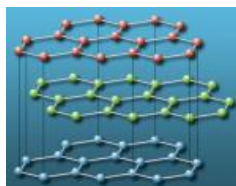
- Escolher um plano que não passe pela origem (0,0,0)
- Determinar as intersecções do plano com os eixos cristalográficos x, y e z do cubo unitário. Estas intersecções podem ser **números fraccionários**.
- Obter os **inversos** destas intersecções
- Reduzir as fracções ao mesmo denominador e determinar o menor conjunto de números inteiros que estejam na mesma proporção das intersecções.
- Estes números inteiros são os **índices de Miller-Bravais** do plano cristalográfico e são colocados entre parenteses curvos (hkl), sem vírgulas entre eles
- No caso de um número ser negativo, coloca-se uma barra em cima desse número $-hkl = \bar{h}kl$

Planos Cristalográficos - Qual a sua importância?

- **Para a determinação da estrutura cristalina**
 - Os métodos de difracção medem directamente a distância entre planos paralelos de pontos da rede cristalina e/ou os ângulos entre os planos da rede.
Determinação dos parâmetros de rede de um cristal
- **Para a deformação plástica**
 - A deformação plástica (permanente) dos metais ocorre pelo deslizamento dos átomos, escorregando uns sobre os outros no cristal. Este deslizamento tende a acontecer preferencialmente ao longo dos planos de mais elevada densidade atómica.
- **Para as propriedades de transporte**
 - Em certos materiais, a estrutura atómica em determinados planos promove o transporte de electrões e/ou acelera a condução nestes planos
 - **Exemplo 1: grafite**
 - A condução de calor é mais rápida nos planos unidos covalentemente sp² do que nas direcções perpendiculares a esses planos.
 - **Exemplo 2: supercondutores a base de YBa₂Cu₃O₇**
 - Alguns planos contêm somente Cu e O. Estes planos conduzem pares de electrões (chamados pares de cobre) que são os responsáveis pela supercondutividade. Estes supercondutores são electricamente isolantes em direcções perpendiculares as dos planos Cu-O.

Materiais anisotrópicos

- As propriedades físicas dependem da direcção em que são medidas.
- Exemplo:
 - A **grafite** (estrutura hexagonal) conduz mais facilmente o calor na direcção dos planos basais do cristal ($1950 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$), comparativamente ao que se verifica para os outros planos ($5,7 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$).



MCR

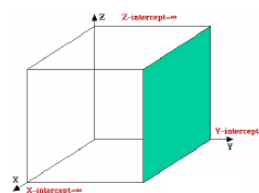
Departamento de
Física
Instituto Superior de Engenharia do Porto

isep Instituto Superior de
Engenharia do Porto

Planos Cristalográficos Sistema cúbico

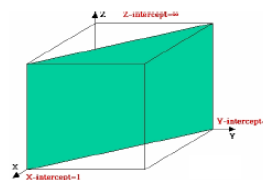
Planos (010)

- ⌘ São paralelos aos eixos x e z (paralelo à face)
- ⌘ Cortam um eixo (Ex.: y em 1)
- ⌘ $1/\infty, 1/1, 1/\infty = (010)$



Planos (110)

- ⌘ São paralelos a um eixo (z)
- ⌘ Cortam dois eixos (x e y)
- ⌘ $1/1, 1/1, 1/\infty = (110)$



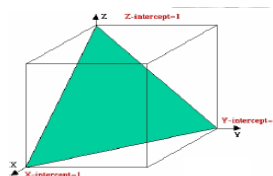
MCR

isep Instituto Superior de
Engenharia do Porto

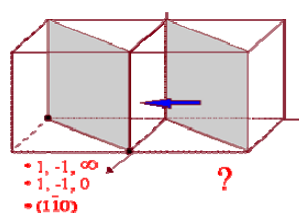
Planos Cristalográficos Sistema cúbico

Planos (111)

- ✂ Cortam os 3 eixos cristalográficos
- ✂ $1/1, 1/1, 1/1 = (111)$



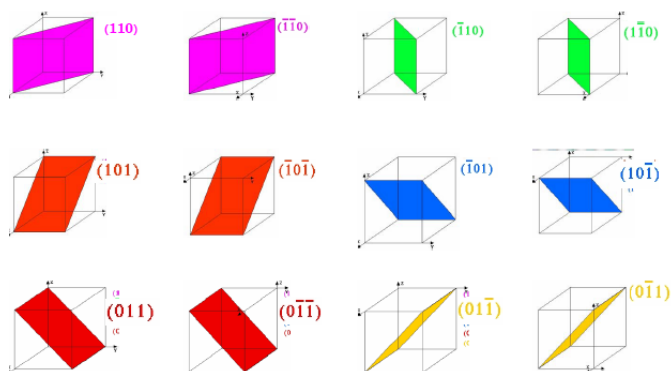
- ✂ Quando os planos interceptam a origem dos eixos deve-se seleccionar uma nova origem para os eixos



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

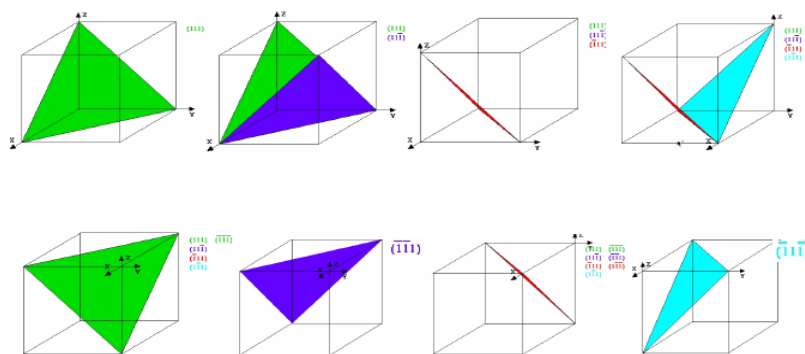
Família de planos {110} Paralelo a um eixo



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Família de planos $\{111\}$ Intersecção com os 3 eixos

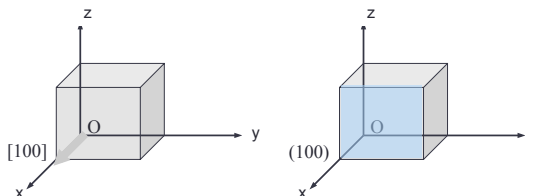


MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Sistema cúbico

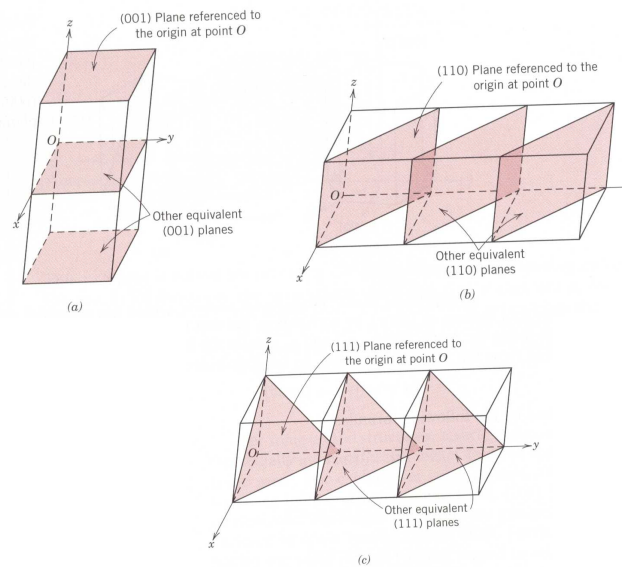
- Uma relação importante no sistema cúbico e apenas no sistema cúbico, é que os índices de uma direcção perpendicular a um plano cristalográfico são iguais aos índices de Miller desse plano.
- Exemplo:
 - A direcção $[100]$ é perpendicular ao plano cristalográfico (100)



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

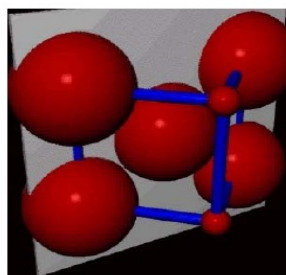
Planos cristalinos



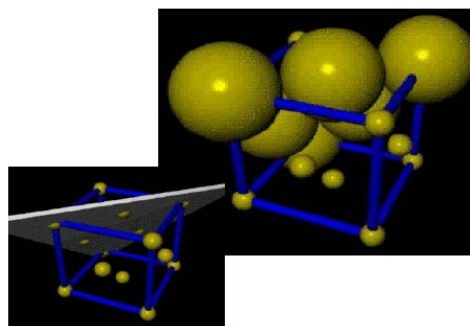
MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Planos de maior densidade Sistema cúbico



A família de planos $\{110\}$ no sistema CCC é o de maior densidade atômica



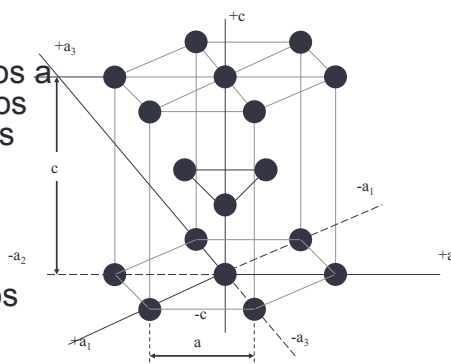
A família de planos $\{111\}$ no sistema CFC é o de maior densidade atômica

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Índices de planos cristalográficos em células unitárias HC

- Numa célula unitária hexagonal, os índices de Miller-Bravais estão referidos a um sistema com quatro eixos coordenados em vez de três como nas células unitárias cúbicas.
- Os índices de um plano designados por índices de Miller-Bravais, são indicados pelas letras **h**, **k**, **i** e **l** colocados entre parentesis curvos (hkil).

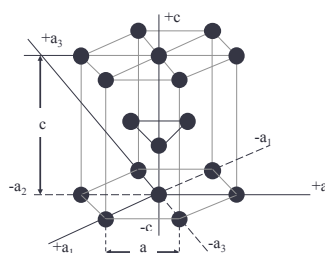


MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Índices de planos cristalográficos em células unitárias HC

- Existem três eixos na base da célula, a_1 , a_2 e a_3 que fazem entre si um ângulo de 120° . O quarto eixo, ou eixo c , é o eixo vertical localizado no centro da célula unitária.
- A unidade a de medida ao longo dos eixos a_1 , a_2 e a_3 é a distância interatômica ao longo destes eixos.



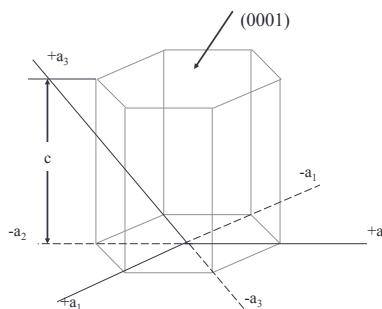
- A unidade de medida ao longo do eixo c é a altura da célula unitária. Os inversos das intersecções do plano cristalográfico com os eixos a_1 , a_2 e a_3 dão os índices **h**, **k** e **i**, enquanto que o inverso da intersecção com o eixo c dá o índice **l**.

MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Planos basais em células unitárias HC

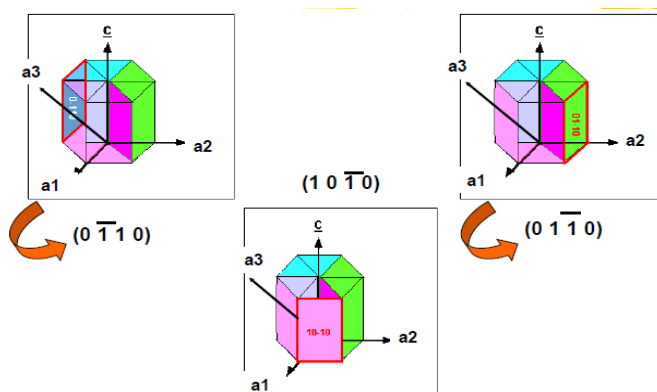
- O plano basal superior da célula unitária HC é paralelo aos eixos a_1 , a_2 e a_3 e a intersecção deste plano com qualquer destes eixos será infinito. Logo: $a_1 = \infty$, $a_2 = \infty$ e $a_3 = \infty$. A intersecção com o eixo c é unitária já que o plano basal superior intersecta o eixo c à distância unitária.
- Tomando os inversos destas intersecções, obtêm-se os índices de Miller-Bravais dos planos basais da estrutura HC:
 $h=0$, $k=0$, $i=0$ e $l=1$.



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

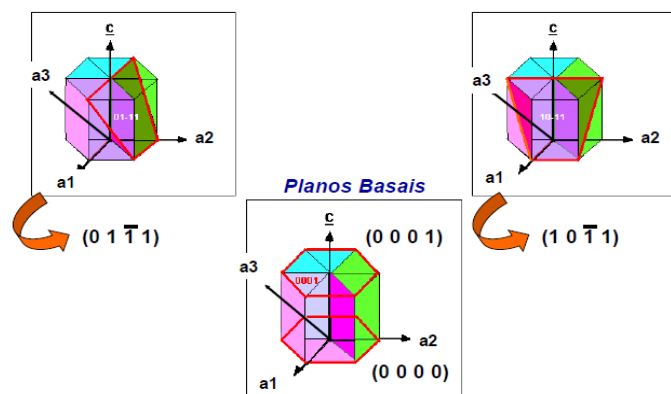
Sistema hexagonal compacto (HC) Planos



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Sistema hexagonal compacto (HC) Planos

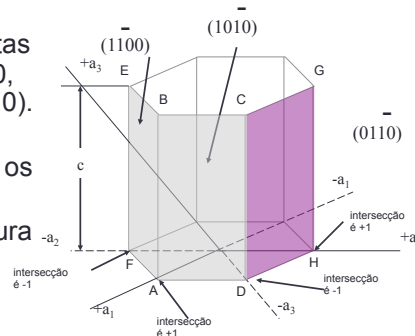


MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Planos prismáticos em células unitárias HC

- As intersecções do plano frontal (ABCD) do prisma da figura são $a_1=+1$, $a_2=\infty$, $a_3=-1$ e $c=\infty$. Tomando todos os inversos destas intersecções, obtém-se $h=1$, $k=0$, $i=-1$ e $l=0$, ou seja, o plano (1010) .
- O plano ABEF do prisma tem os índices (1100) , e o plano DCGH os índices (0110) .
- Os planos prismáticos da estrutura HC podem ser identificados colectivamente pela família de planos $\{1010\}$



MCR

isep Instituto Superior de Engenharia do Porto

Células unitárias HC

- Na estrutura HC, os planos são por vezes identificados apenas por três índices (**hkl**) já que $\mathbf{h}+\mathbf{k}=-\mathbf{i}$. Contudo, os índices (hkil) são usados mais frequentemente, porque mostram a simetria hexagonal da célula unitária HC.
- Nas células unitárias hexagonais, as direcções são também geralmente indicadas por quatro índices **u**, **v**, **t** e **w**, colocados entre parênteses rectos [**uvtw**].
- Os índices **u**, **v**, e **t** são vectores da rede segundo as direcções **a**₁, **a**₂ e **a**₃, respectivamente, e o índice **w** é um vector da rede segundo a direcção **c**.
- Para manter uniformidade entre índices de planos e de direcções em redes hexagonais, convencionou-se que, também no caso das direcções, $u+v=-t$, o que conduz a um método incómodo de designação de direcções.