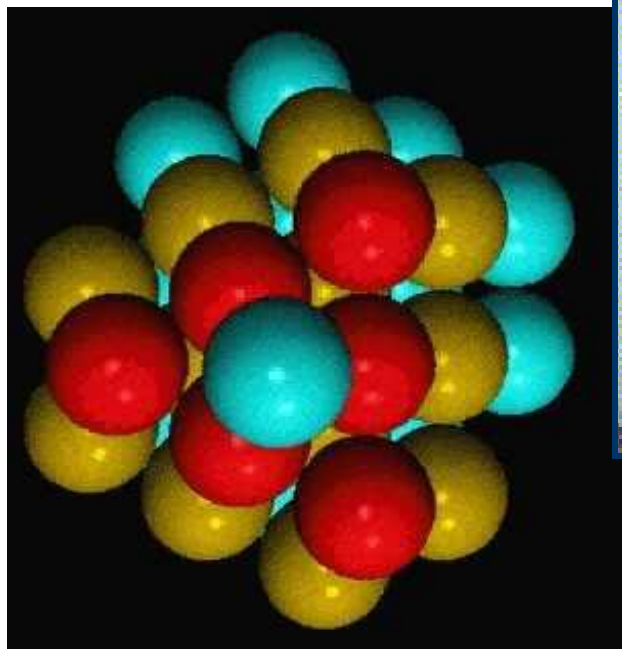
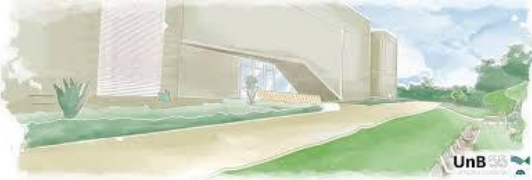


ESTRUTURA CRISTALINA

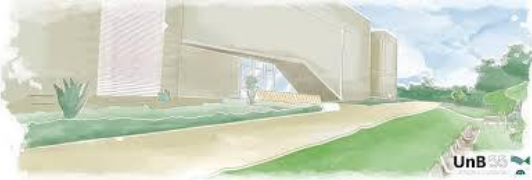




ARRANJAMENTO ATÔMICO

Por quê estudar?

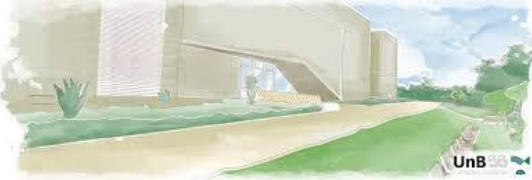
- As propriedades de alguns materiais estão diretamente associadas à sua estrutura cristalina (ex: magnésio e berílio que têm a mesma estrutura se deformam muito menos que ouro e prata que têm outra estrutura cristalina).
- Explica a diferença significativa nas propriedades de materiais cristalinos e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



ARRANJAMENTO ATÔMICO



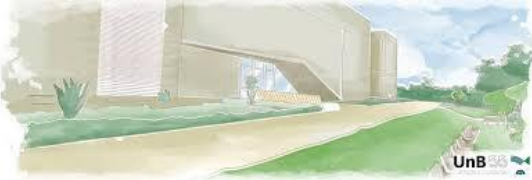
- Os materiais sólidos podem ser classificados em **cristalinos ou não-cristalinos** de acordo com a regularidade na qual os átomos ou íons se dispõem em relação à seus vizinhos.
- **Material cristalino** é aquele no qual os átomos encontram-se ordenados sobre longas distâncias atômicas formando uma estrutura tridimensional que se chama de **rede cristalina**
- Todos os metais, muitas cerâmicas e alguns polímeros formam estruturas cristalinas sob condições normais de solidificação



CÉLULA UNITÁRIA

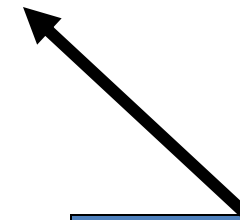
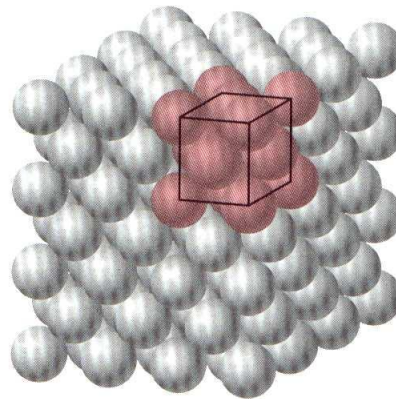
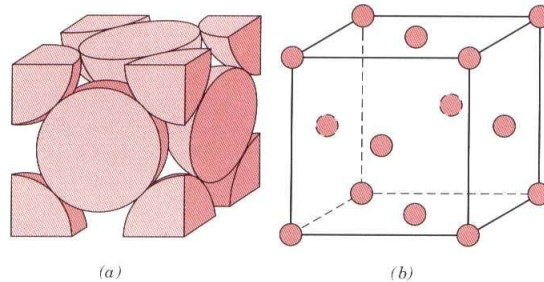
(unidade básica repetitiva da estrutura tridimensional)

- Consiste num pequeno grupos de átomos que formam um modelo repetitivo ao longo da estrutura tridimensional (analogia com elos da corrente)
- **A célula unitária é escolhida para representar a simetria da estrutura cristalina**



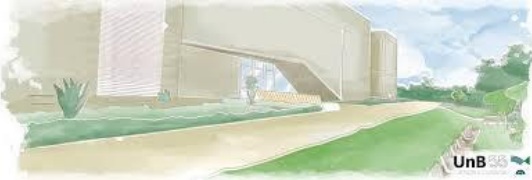
CÉLULA UNITÁRIA

(unidade básica repetitiva da estrutura tridimensional)



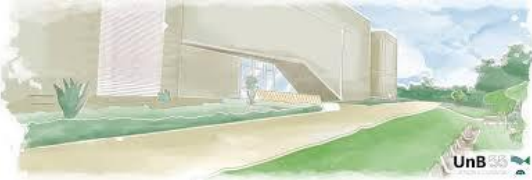
Célula Unitária

Os átomos são representados como esferas rígidas



ESTRUTURA CRISTALINA DOS METAIS

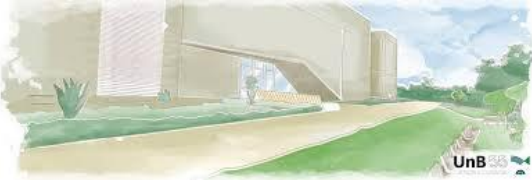
- Como a ligação metálica é não-direcional não há restrições quanto ao número e posições dos vizinhos mais próximos.
- Então, a estrutura cristalina dos metais têm geralmente um **número grande de vizinhos e alto empacotamento atômico**.
- Três são as estruturas cristalinas mais comuns em metais: **Cúbica de corpo centrado, cúbica de face centrada e hexagonal compacta.**



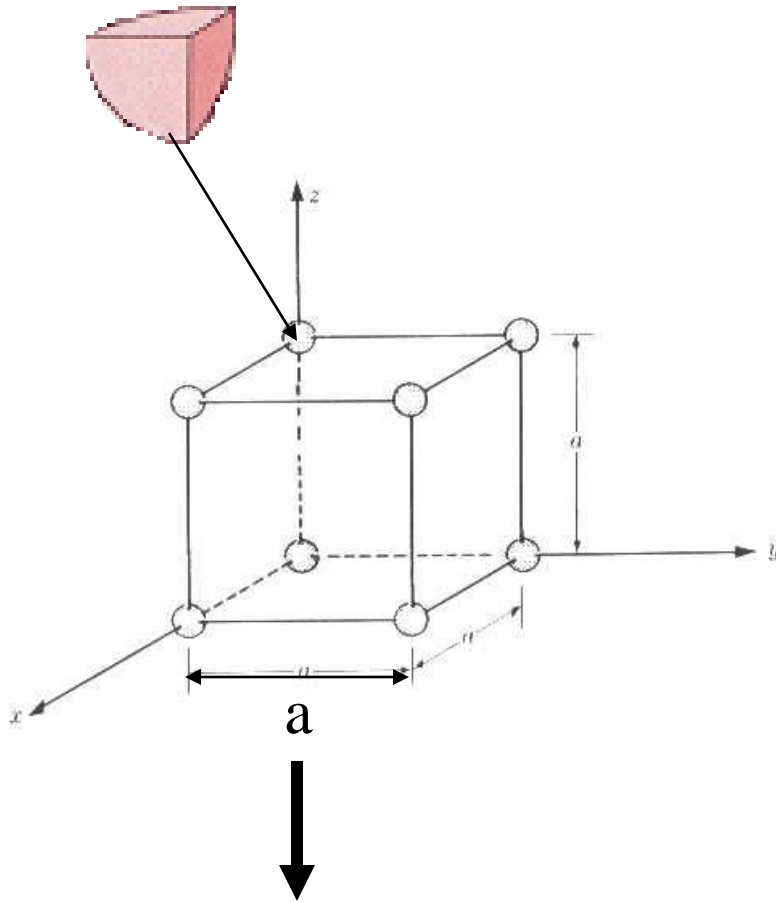
SISTEMA CÚBICO

Os átomos podem ser agrupados dentro do sistema cúbico em 3 diferentes tipos de repetição

- **Cúbico simples**
- **Cúbico de corpo centrado**
- **Cúbico de face centrada**

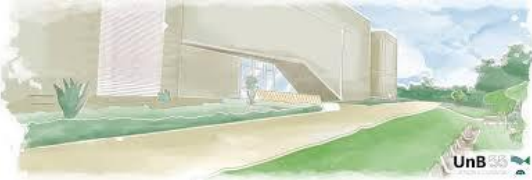


SISTEMA CÚBICO SIMPLES



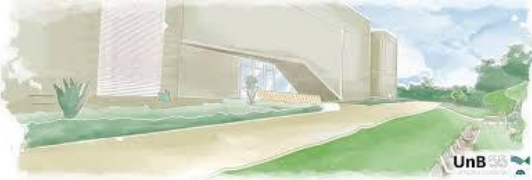
Parâmetro de rede

- ◆ Apenas $1/8$ de cada átomo cai dentro da célula unitária, ou seja, a célula unitária contém apenas 1 átomo.
- ◆ Essa é a razão que os metais não cristalizam na estrutura cúbica simples (devido ao baixo empacotamento atômico)

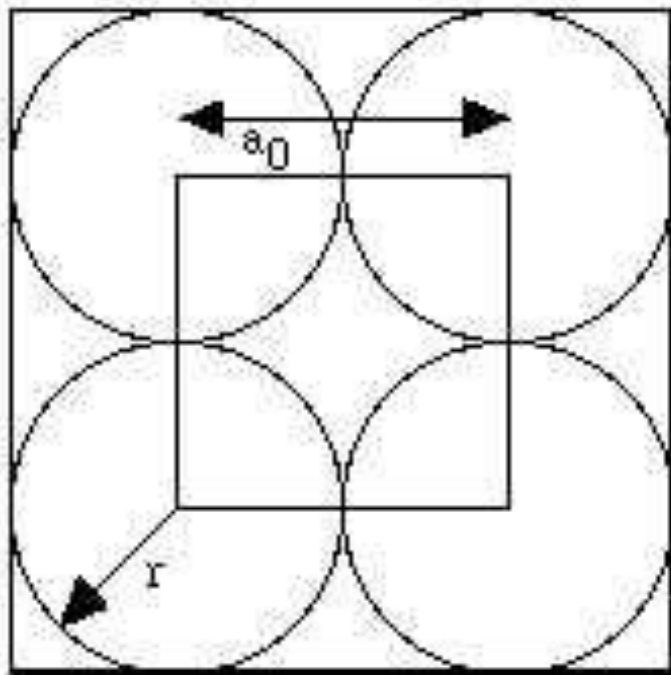


NÚMERO DE COORDENAÇÃO PARA CCC

- ◆ **Número de coordenação** ➡ corresponde ao número de átomos vizinhos mais próximos
- ◆ Para a estrutura cúbica simples o número de coordenação é 6.

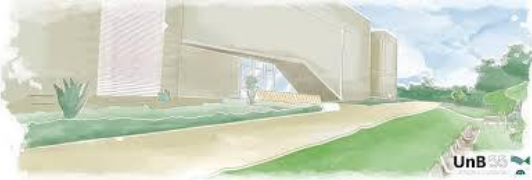


RELAÇÃO ENTRE O RAIO ATÔMICO (R) E O PARÂMETRO DE REDE (a) PARA O SISTEMA CÚBICO SIMPLES



- ◆ No sistema cúbico simples os átomos se tocam na face

$$◆ \quad a = 2 R$$



FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO PARA CÚBICO SIMPLES

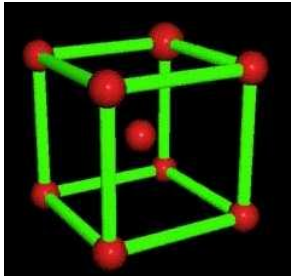
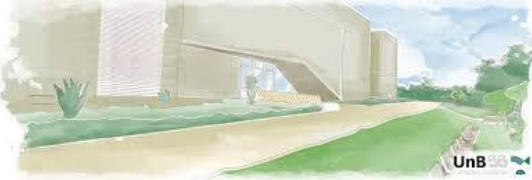
$$\text{Fator de empacotamento} = \frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

$$\text{Vol. dos átomos} = \text{número de átomos} \times \text{Vol. Esfera } (4\pi R^3/3)$$

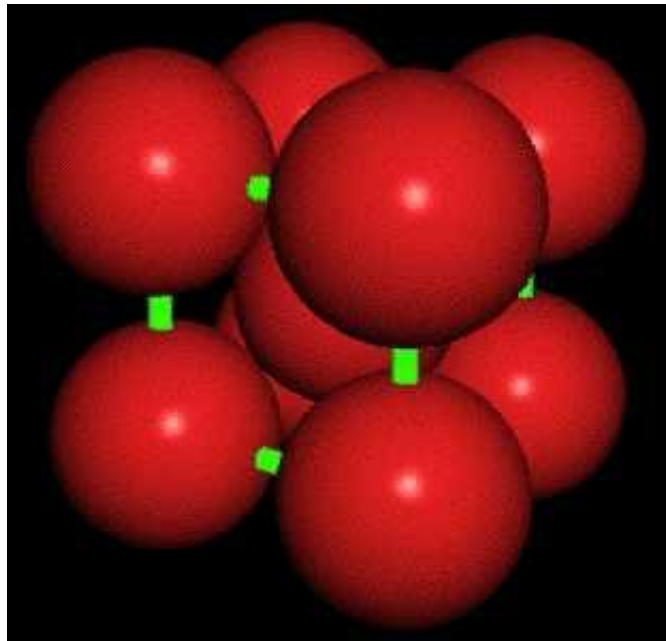
$$\text{Vol. Da célula} = \text{Vol. Cubo} = a^3$$

$$\diamond \text{ Fator de empacotamento} = \frac{4\pi R^3/3}{(2R)^3}$$

O FATOR DE EMPACOTAMENTO PARA A EST. CÚBICA SIMPLES É 0,52



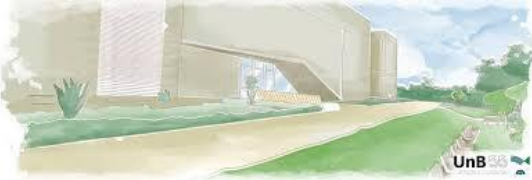
ESTRUTURA CÚBICA DE CORPO CENTRADO



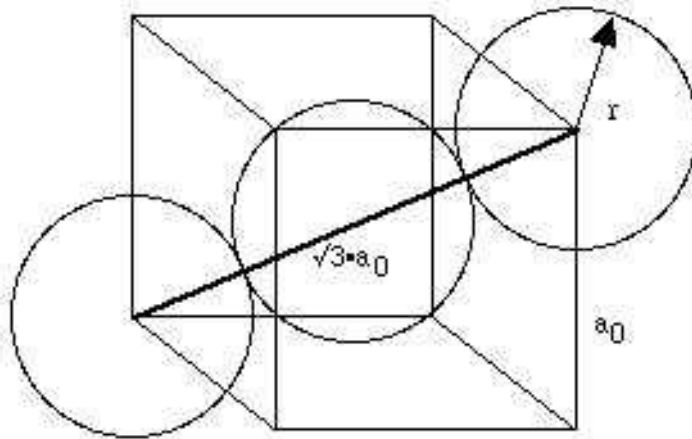
- ♦ O PARÂMETRO DE REDE E O RAIOS ATÔMICO ESTÃO RELACIONADOS NESTE SISTEMA POR:

$$a_{ccc} = 4R / (3)^{1/2}$$

- ♦ Na est. ccc cada átomo dos vértices do cubo é dividido com 8 células unitárias
- ♦ Já o átomo do centro pertence somente a sua célula unitária.
- ♦ Cada átomo de uma estrutura ccc é cercado por 8 átomos adjacentes
- ♦ Há 2 átomos por célula unitária na estrutura ccc
- ♦ O Fe, Cr, W cristalizam em ccc

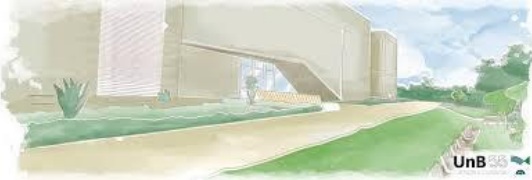


RELAÇÃO ENTRE O RAIO ATÔMICO (R) E O PARÂMETRO DE REDE (a) PARA O SISTEMA CCC



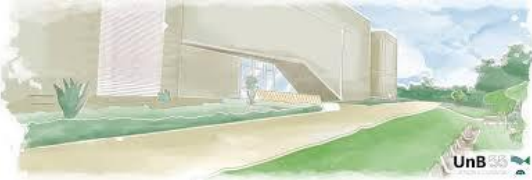
- ◆ No sistema CCC os átomos se tocam ao longo da diagonal do cubo: $(3)^{1/2} \cdot a = 4R$

$$a_{ccc} = 4R / (3)^{1/2}$$

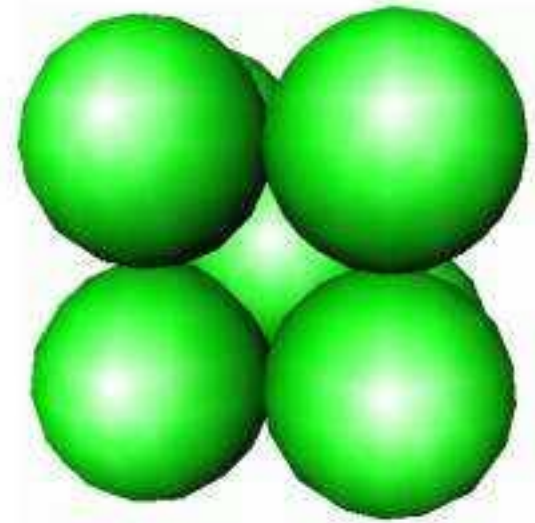
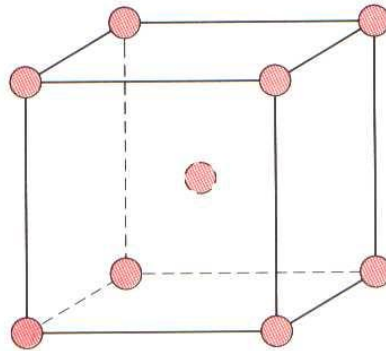
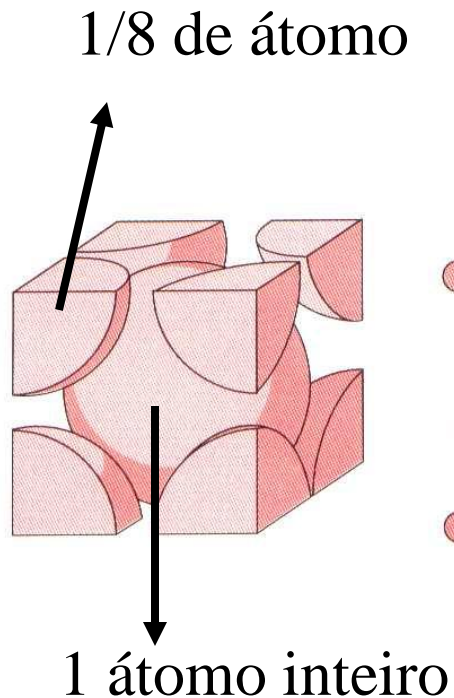


NÚMERO DE COORDENAÇÃO PARA CCC

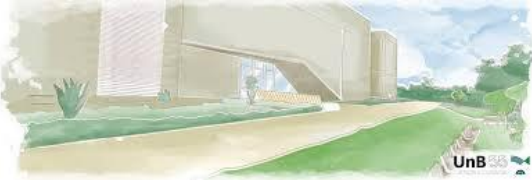
- ◆ **Número de coordenação** ➡ corresponde ao número de átomos vizinhos mais próximos
- ◆ Para a estrutura ccc o número de coordenação é 8.



NÚMERO DE COORDENAÇÃO



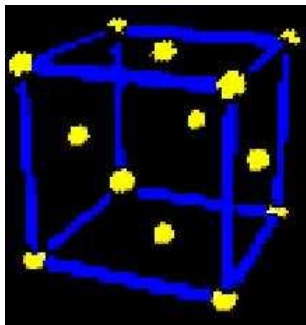
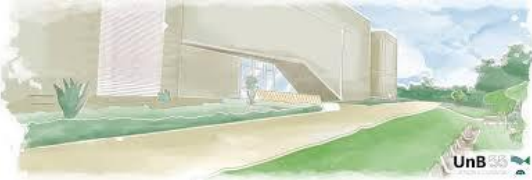
Para a estrutura ccc o número de coordenação é 8



FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO PARA CCC

$$\text{Fator de empacotamento} = \frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

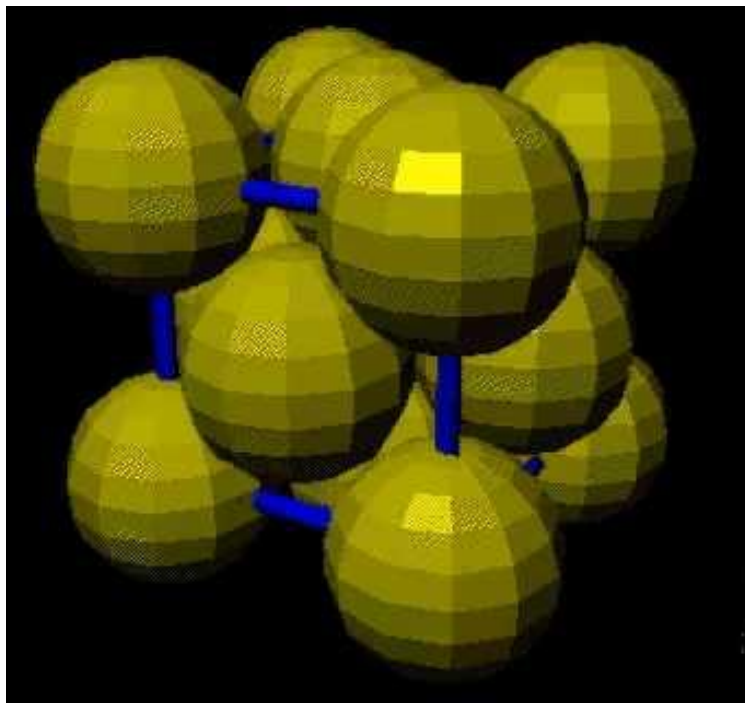
O FATOR DE EMPACOTAMENTO PARA A EST. CCC É 0,68



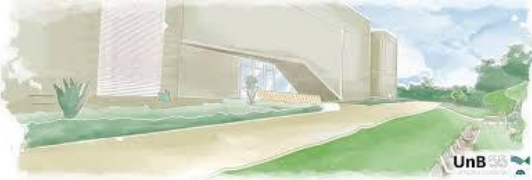
ESTRUTURA CÚBICA DE FACE CENTRADA

- ♦ O PARÂMETRO DE REDE E O RAIOS ATÔMICO ESTÃO RELACIONADOS PARA ESTE SISTEMA POR:

$$a_{\text{cfc}} = 4R / (2)^{1/2}$$

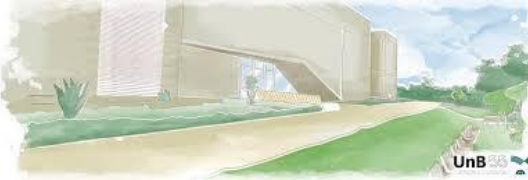


- ♦ Na est. cfc cada átomo dos vértices do cubo é dividido com 8 células unitárias
- ♦ Já os átomos das faces pertencem somente a duas células unitárias
- ♦ Há 4 átomos por célula unitária na estrutura cfc
- ♦ É o sistema mais comum encontrado nos metais (Al, Fe, Cu, Pb, Ag, Ni,...)



NÚMERO DE COORDENAÇÃO PARA CFC

- ◆ Número de coordenação corresponde ao número de átomos vizinhos mais próximo
- ◆ *Para a estrutura cfc o número de coordenação é 12.*

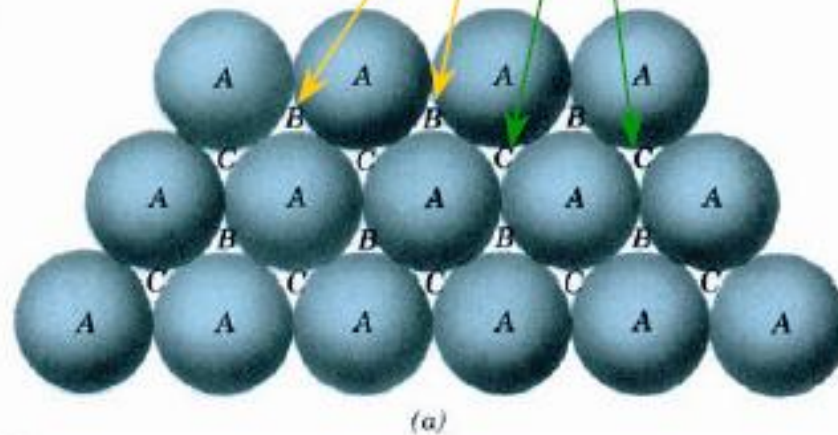
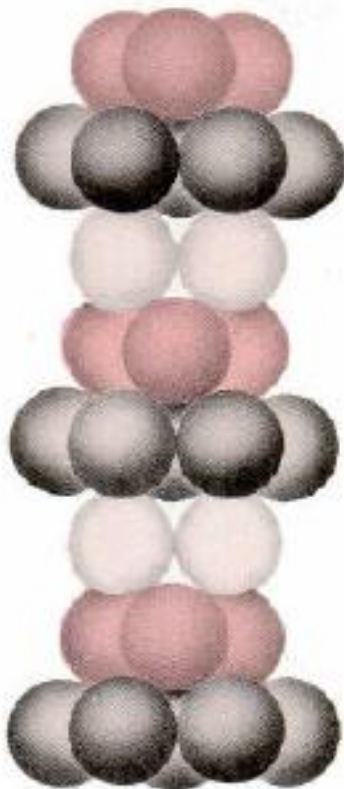


ESTRUTURA CRISTALINA

TEORIA DE MATERIAIS DE CONSTRUÇÃO

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

A...B...C...A...B...C...

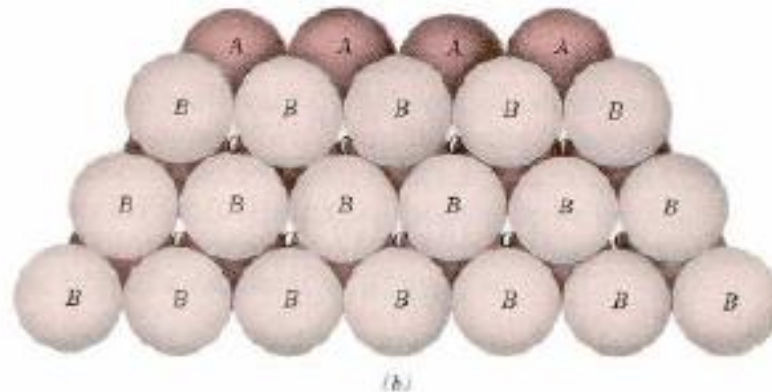


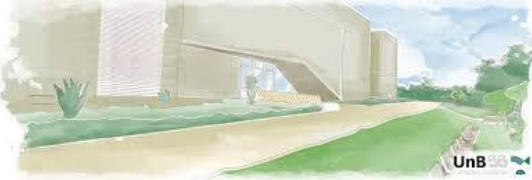
A

C

B

A

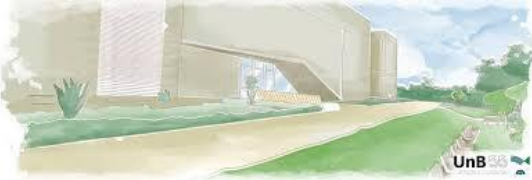




FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO PARA CFC

$$\text{Fator de empacotamento} = \frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula unitária}}$$

O FATOR DE EMPACOTAMENTO PARA A EST. CFC É 0,74



DEMONSTRE QUE O FATOR DE EMPACOTAMENTO PARA A EST. CFC É 0,74

Fator de empacotamento = $\frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula unitária}}$

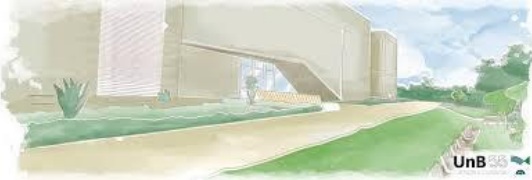
Vol. dos átomos = Vol. Esfera = $4\pi R^3/3$

Vol. da célula = Vol. Cubo = a^3

Fator de empacotamento = $\frac{4 \times 4\pi R^3/3}{(2R \sqrt{2})^3}$

Fator de empacotamento = $\frac{16/3 \pi R^3}{16 R^3 (2)^{1/2}}$

Fator de empacotamento = 0,74



CÁLCULO DA DENSIDADE

O conhecimento da estrutura cristalina permite o cálculo da densidade (ρ):

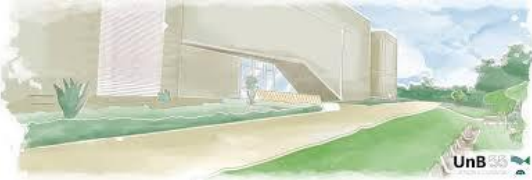
$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$$

n = número de átomos da célula unitária

A = peso atômico

V_c = Volume da célula unitária

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



EXEMPLO:

- ◆ Cobre têm raio atômico de $0,128\text{nm}$ ($1,28\text{ \AA}$), uma estrutura cfc, um peso atômico de $63,5\text{ g/mol}$. Calcule a densidade do cobre.
- ◆ Resposta: $8,89\text{ g/cm}^3$
- ◆ Valor da densidade medida= $8,94\text{ g/cm}^3$

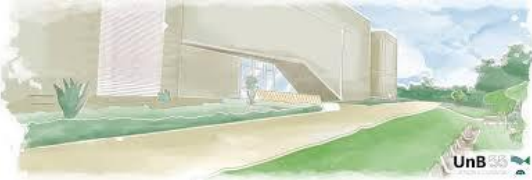
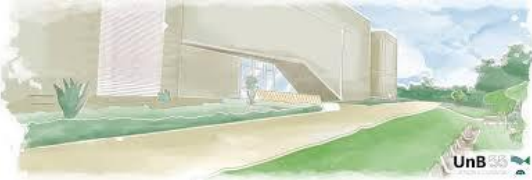


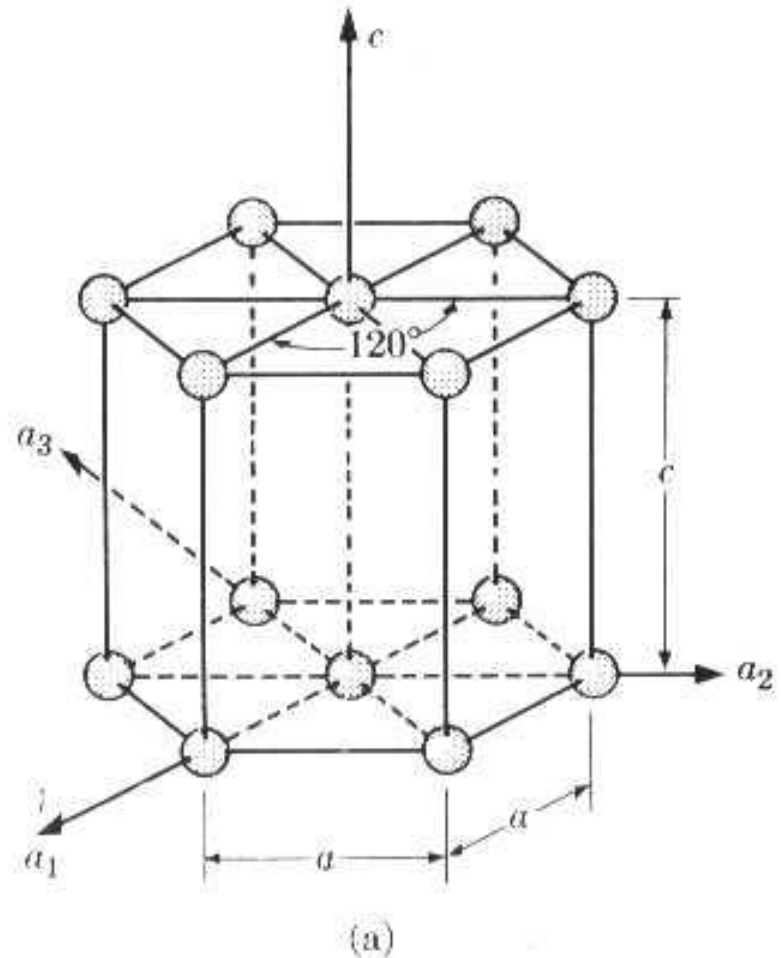
TABELA RESUMO PARA O SISTEMA CÚBICO

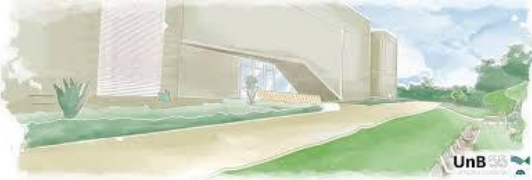
	Átomos por célula	Número de coordenação	Parâmetro de rede	Fator de empacotamento
CS	1	6	$2R$	0,52
CCC	2	8	$4R/(3)^{1/2}$	0,68
CFC	4	12	$4R/(2)^{1/2}$	0,74



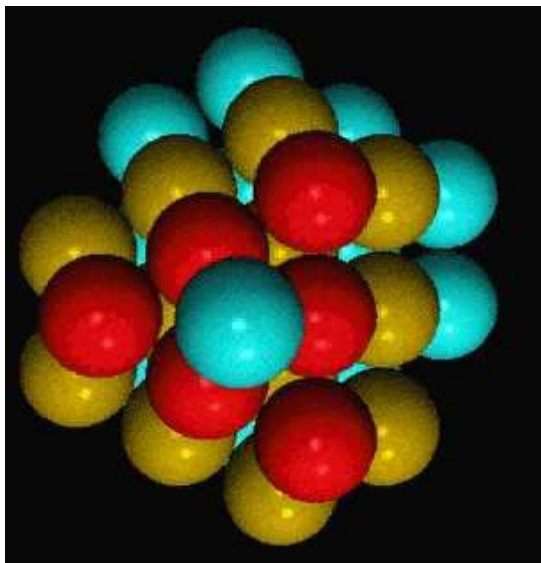
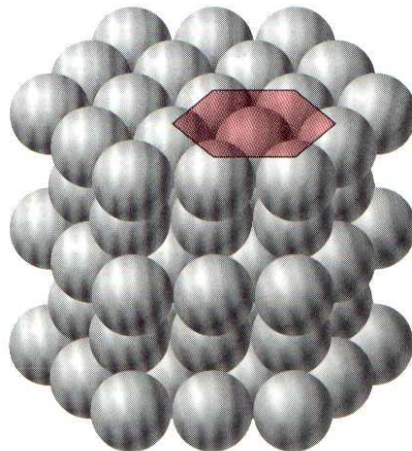
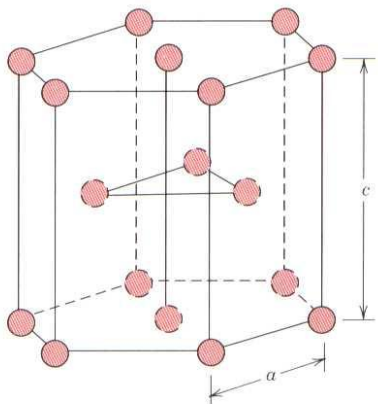
SISTEMA HEXAGONAL SIMPLES

- ◆ Os metais não cristalizam no sistema hexagonal simples porque o fator de empacotamento é muito baixo
- ◆ Entretanto, cristais com mais de um tipo de átomo cristalizam neste sistema

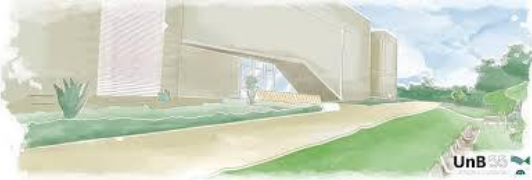




ESTRUTURA HEXAGONAL COMPACTA

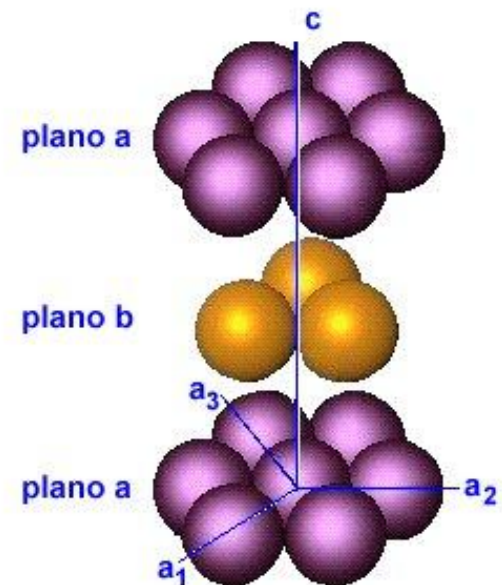
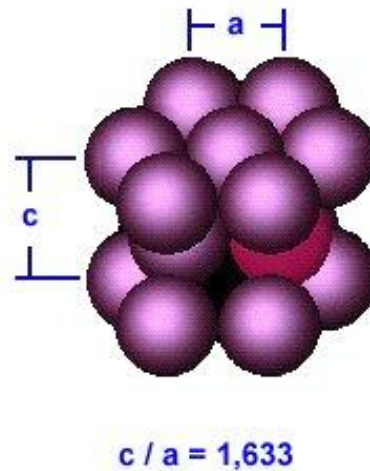


- ◆ Os metais em geral não cristalizam no sistema hexagonal simples pq o fator de empacotamento é muito baixo, exceto cristais com mais de um tipo de átomo
- ◆ O sistema Hexagonal Compacta é mais comum nos metais (ex: Mg, Zn)
- ◆ Na HC cada átomo de uma dada camada está diretamente abaixo ou acima dos interstícios formados entre as camadas adjacentes

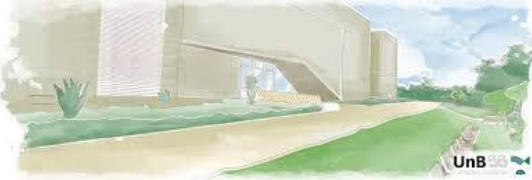


ESTRUTURA HEXAGONAL COMPACTA

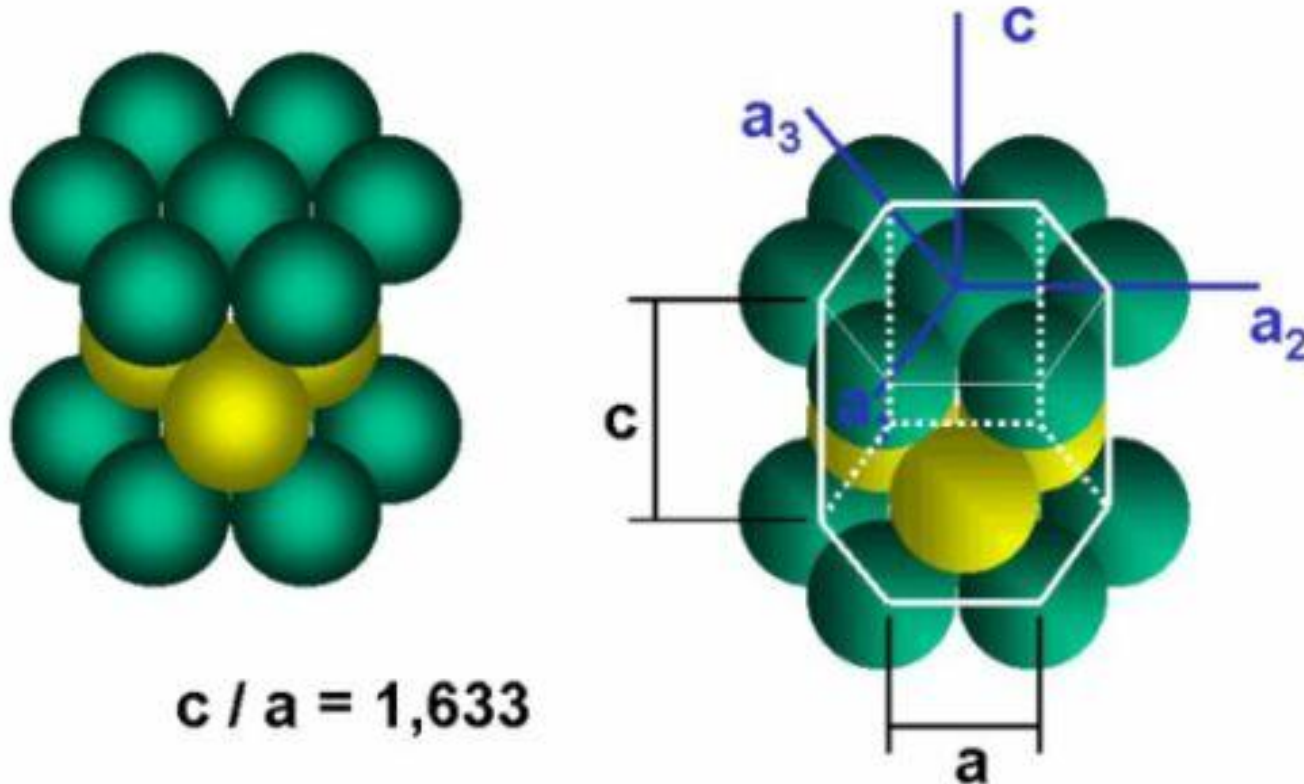
- ◆ Cada átomo tangencia 3 átomos da camada de cima, 6 átomos no seu próprio plano e 3 na camada de baixo do seu plano
- ◆ O número de coordenação para a estrutura HC é 12 e, portanto, o fator de empacotamento é o mesmo da cfc, ou seja, 0,74.



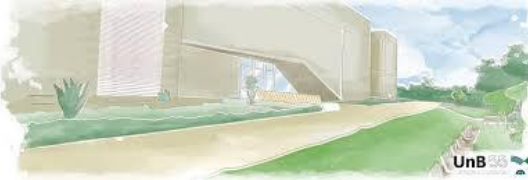
Relação entre R e a :
 $a = 2R$



ESTRUTURA HEXAGONAL COMPACTA



Há 2 parâmetros de rede representando os parâmetros
Basais (a) e de altura (c)



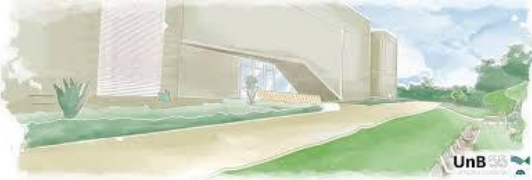
RAIO ATÔMICO E ESTRUTURA CRISTALINA DE ALGUNS METAIS

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

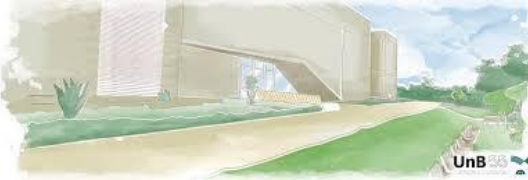
^a FCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

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



SISTEMAS CRISTALINOS

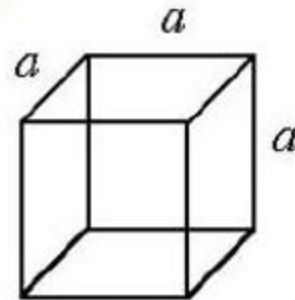
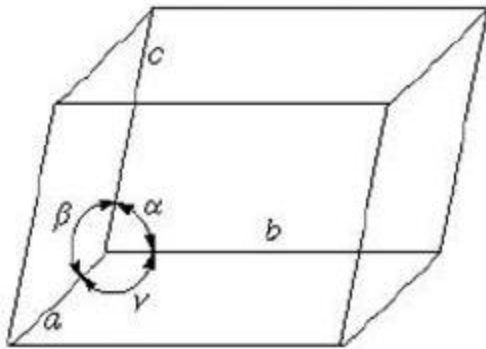
Estes sistemas incluem todas as possíveis geometrias de divisão do espaço por superfícies planas contínuas



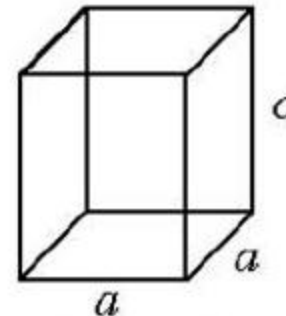
ESTRUTURA CRISTALINA

TEORIA DE MATERIAIS DE CONSTRUÇÃO

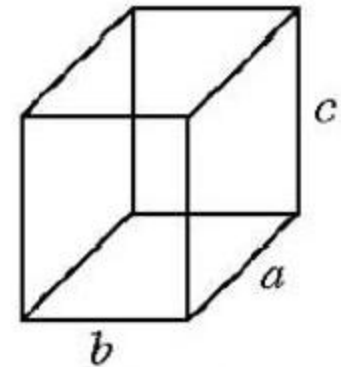
- Só existem 7 tipos de células unitárias que preenchem totalmente o espaço



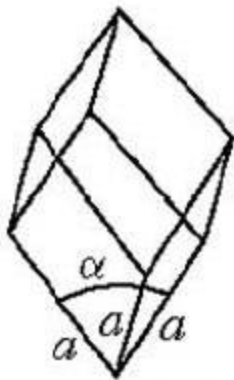
Cúbica
 $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



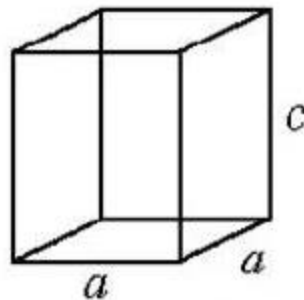
Tetragonal
 $a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



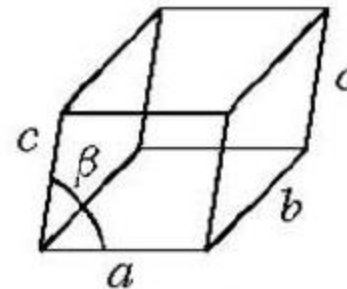
Ortorrômbrica
 $a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



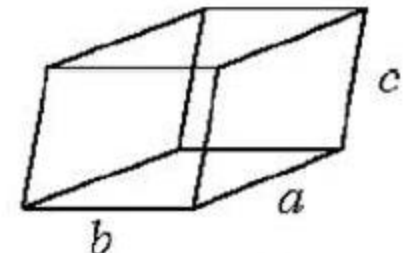
Romboédrica
 $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$



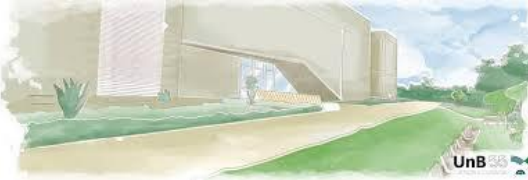
Hexagonal*
 $a=b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$



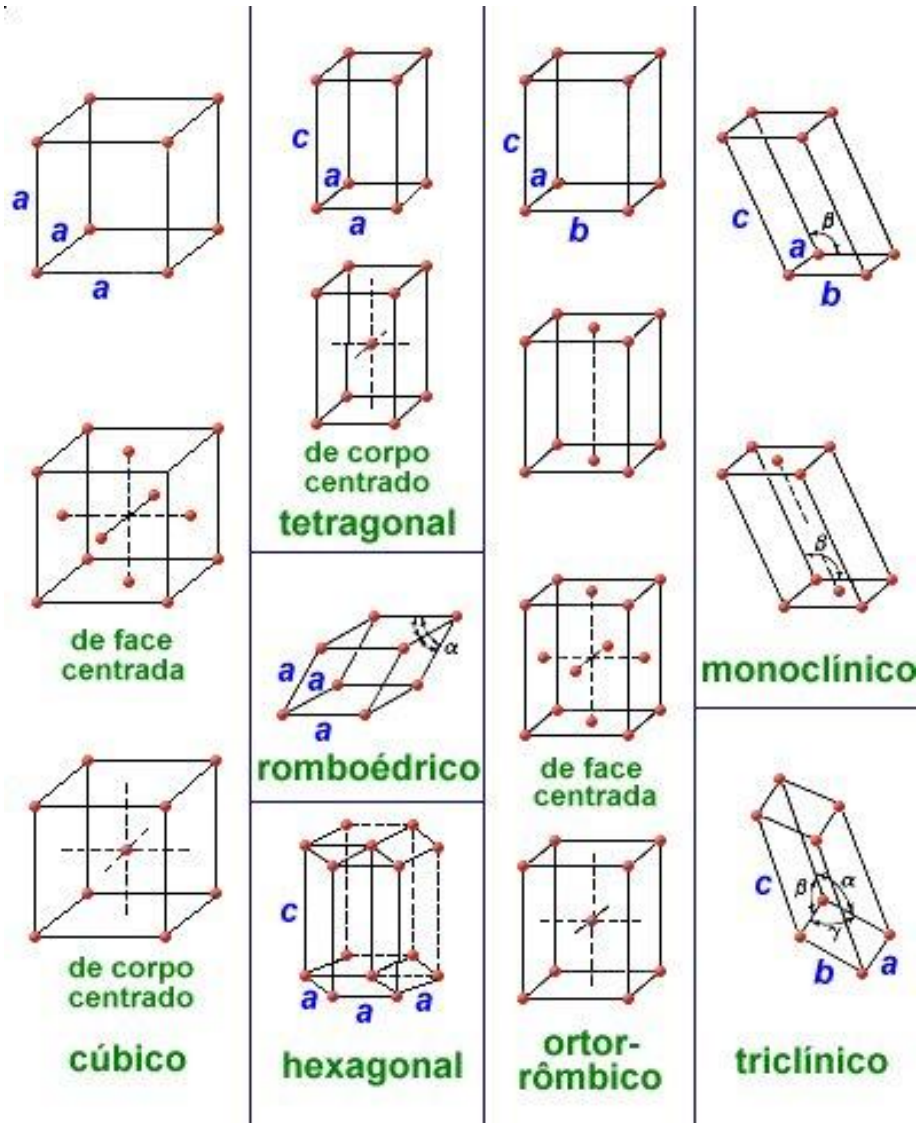
Monoclínica
 $a \neq b \neq c, \alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$



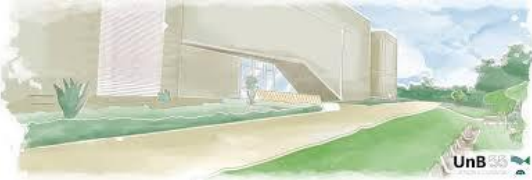
Triclínica
 $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



AS 14 REDES DE BRAVAIS

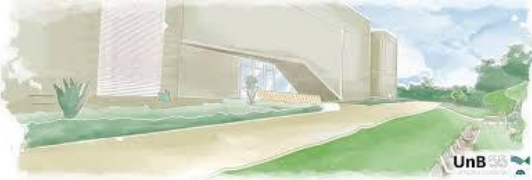


Dos 7 sistemas cristalinos podemos identificar 14 tipos diferentes de células unitárias, conhecidas com redes de Bravais. Cada uma destas células unitárias tem certas características que ajudam a diferenciá-las das outras células unitárias. Além do mais, estas características também auxiliam na definição das propriedades de um material particular.



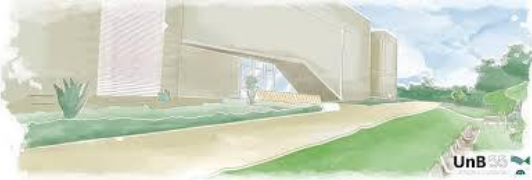
POLIMORFISMO OU ALOTROPIA

- ◆ Alguns metais e não-metais podem ter mais de uma estrutura cristalina dependendo da temperatura e pressão. Esse fenômeno é conhecido como polimorfismo.
- ◆ Geralmente as transformações polimórficas são acompanhadas de mudanças na densidade e mudanças de outras propriedades físicas.

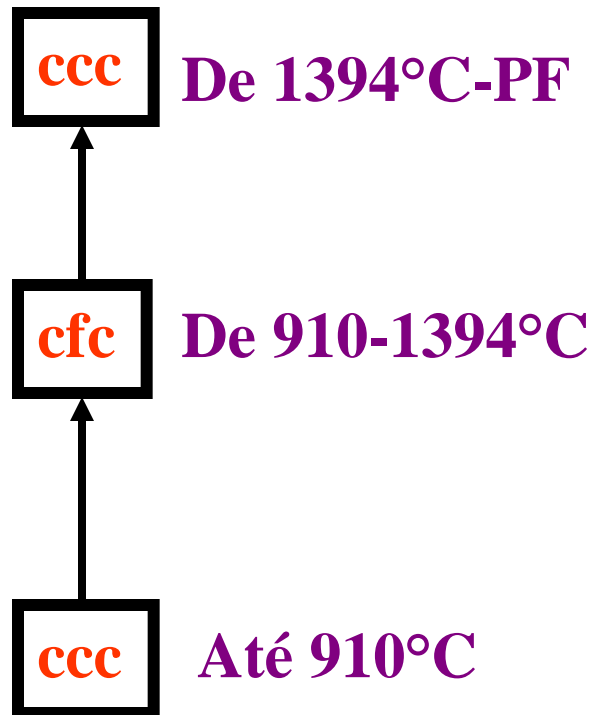


EXEMPLOS DE MATERIAIS QUE EXIBEM POLIMORFISMO

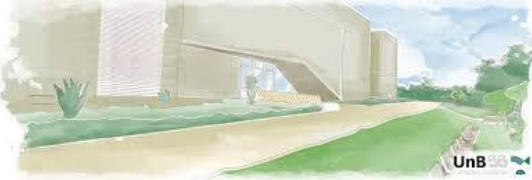
- ◆ Ferro
- ◆ Titânio
- ◆ Carbono (grafite e diamante)
- ◆ SiC (chega a ter 20 modificações cristalinas)
- ◆ Etc.



ALOTROPIA DO FERRO

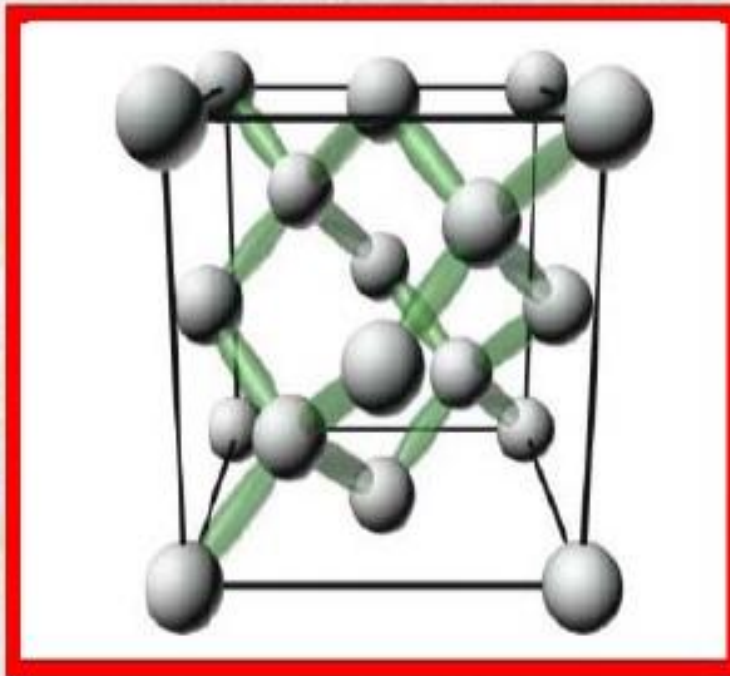


- ♦ Na temperatura ambiente, o Ferro têm estrutura ccc, número de coordenação 8, fator de empacotamento de 0,68 e um raio atômico de 1,241Å.
- ♦ A 910°C, o Ferro passa para estrutura cfc, número de coordenação 12, fator de empacotamento de 0,74 e um raio atômico de 1,292Å.
- ♦ A 1394°C o ferro passa novamente para ccc.

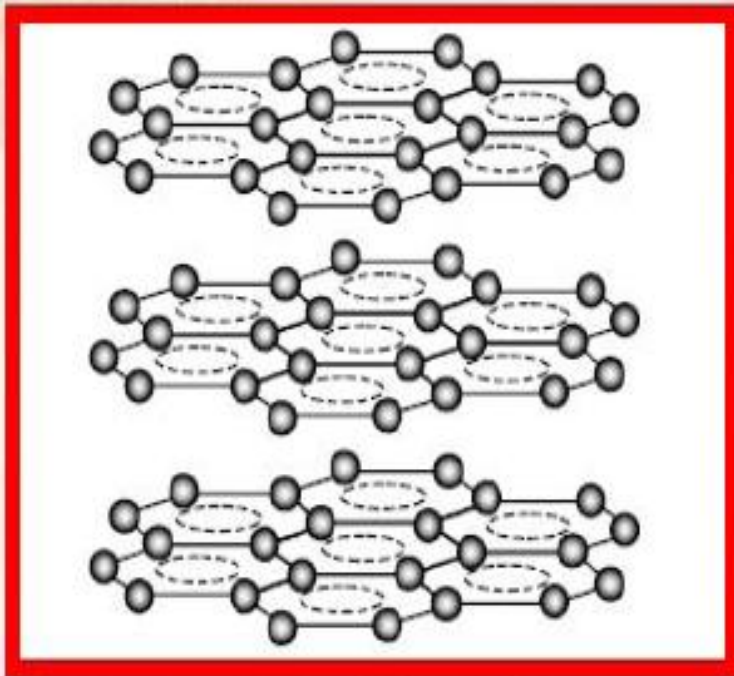


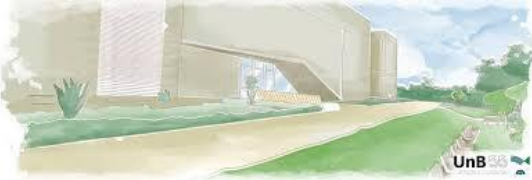
ALOTROPIA DO CARBONO

DIAMANTE

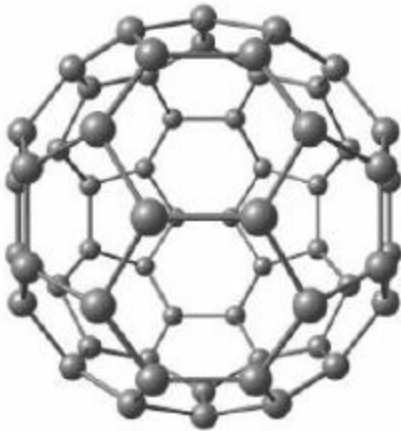


GRAFITE

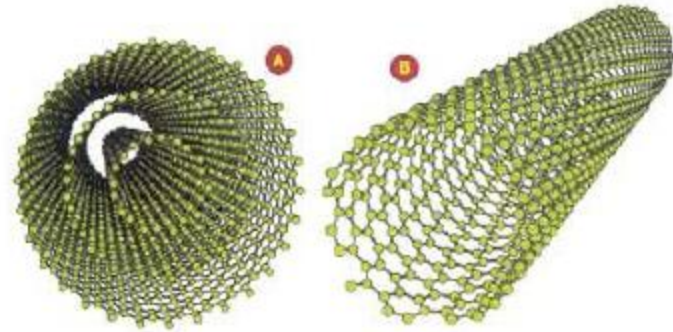




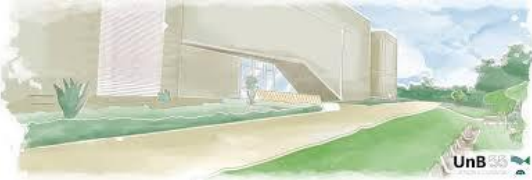
ALOTROPIA DO CARBONO



- Configuração estrutural do fullereno C60



- Configuração estrutural dos nanotubos



ESTRUTURA CRISTALINA

TEORIA DE MATERIAIS DE CONSTRUÇÃO

