

Lista VESTA: SQF0336 - Ciência de Materiais
Prof. Dr. Juarez L. F. Da Silva (juarez_dasilva@iqsc.usp.br)

Questão 1 Indique em uma tabela as seguintes informações (somente para os problemas de 1.1-1.9): Sistema cristalino, rede de Bravais 3D, grupo espacial, parâmetro de redes (a_0 , b_0 , c_0), ângulos (α , β , γ), número de átomos não-equivalentes, número total de átomos na célula primitiva, comprimentos de ligações médios entre primeiros vizinhos, estimativa do comprimento de ligação médio utilizando raios atômicos, coordenação dos átomos para os seguintes sistemas cristalinos (Sugestão: utilize o VESTA para auxiliar na obtenção das informações solicitadas).

1.1 NaCl, $a_0 = 5.61$, $b_0 = 5.61$, $c_0 = 5.61$ Å, $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 90^\circ$, $Fm3m$, Na₁(0,0,0), Cl₁(0.50,0.50,0.50).

1.2 Diamante, 3.57, 3.57, 3.57 Å, 90, 90, 90, $Fd3m$, C₁(0,0,0).

1.3 SiO₂, 4.92, 4.92, 5.42 Å, 90, 90, 120, $P3_121$, Si₁(0.4698,0,0), O₁(0.4151,0.2675,-0.1194).

1.4 TiO₂, 4.60, 4.60, 2.97 Å, 90, 90, 90, $P4_2/mnm$, Ti₁(0,0,0), O₁(0.3045,0.3045,0).

1.5 α -Al₂O₃, 4.76, 4.76, 12.99, 90, 90, 120, $R\bar{3}c$, Al₁(0,0,0.35216), O₁(0.30624,0,0.25).

1.6 In₂O₃, 10.11, 10.11, 10.11 Å, 90, 90, 90, $Ia3$, In₁(0.25,0.25,0.25), In₂(0.969,0,0.25), O₁(0.390,0.153,0.386).

1.7 PtO₂, 4.48, 4.53, 3.14 Å, 90, 90, 90, $Pnmm$, Pt₁(0,0,0), O₁(0.267,0.35,0).

1.8 Ca₃Cr₂Ge₃O₁₂, 12.26, 12.26, 12.26 Å, 90, 90, 90, $Ia3d$, Ca₁(0.125,0,0.25), Cr₁(0,0,0), Ge₁(0.375,0,0.25), O₁(0.0342,0.0498,0.6507).

1.9 CeO₂, 5.41, 5.41, 5.41 Å, 90, 90, 90, $Fm3m$, Ce₁(0,0,0), O₁(0.25,0.25,0.25).

1.10 Cúbica de face centrada, 1.0, 1.0, 1.0, 90, 90, 90, $P1$, adicione os átomos necessários.

1.11 Cúbica de corpo centrado, 1.0, 1.0, 1.0, 90, 90, 90, $P1$, adicione os átomos necessários.

1.12 Cúbica simples, 1.0, 1.0, 1.0, 90, 90, 90, $P1$, adicione os átomos necessários.

1.13 Hexagonal compacta (HCP), $a_0 = 1.0$, $b_0 = 1.0$, $c_0 = cte \times a_0$ $cte =$ valor ideal, $P1$, adicione os átomos necessários.

1.14 Indique o plano (100) na cúbica de face centrada.

1.15 Indique o plano (110) na cúbica de face centrada.

1.16 Indique os planos (111), (222), (333) na cúbica de face centrada.

1.17 Indique o plano (221) na cúbica de face centrada.

1.18 Indique o plano (997) na cúbica de face centrada.

1.19 Indique o plano (331) na cúbica de face centrada.

1.20 Indique o plano (111) na estrutura do diamante.