

# Experimento 1

## Estudo dirigido sobre estruturas cristalinas

Larissa Simões – 232028230, Carlos Eduardo da S. Papa – 232013390, Thiago Ferreira – 232028230

Turma 01

### 1. OBJETIVOS

O experimento tem como objetivos identificar a célula unitária e primitiva de uma estrutura cristalina fornecida, determinar planos e direções cristalográficas específicas e calcular suas respectivas densidades planar e linear. Além disso, busca-se relacionar a estrutura cristalina com as propriedades físicas do material e utilizar o software CARINE para visualização, análise e confirmação prática desses conceitos.

### 2. INTRODUCAO

O experimento foi conduzido em duas etapas complementares: uma prática, realizada em laboratório com o auxílio de modelos físicos, e outra computacional, utilizando o software CARINE para simulação e análise detalhada.

Na etapa prática, o grupo manipulou modelos tridimensionais de estruturas cristalinas, como as redes cúbicas de face centrada (CFC) ou corpo centrado (CCC), para identificar visualmente e geometricamente a célula unitária e primitiva. Foi explicado como identificar e selecionar os planos cristalográficos específicos e as direções e as atômicas, e então, escolhendo três planos diferentes iniciou-se o experimento com o cálculo das densidades planar e linear para cada caso. Essa abordagem permitiu verificar a anisotropia das propriedades, como variações na densidade atômica em diferentes orientações.

### 3. MATERIAIS UTILIZADOS

- Modelo da célula unitária hexagonal simples;
- Software CARINE Crystallography 3.0.

### 4. PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

Na primeira parte do experimento, utilizando o modelo cristalino disponibilizado no laboratório, estabeleceu-se inicialmente um sistema de coordenadas que serviu de referência para a análise estrutural. A partir desse sistema, foi possível identificar tanto a célula primitiva quanto a célula unitária da estrutura estudada, ressaltando a diferença entre ambas: enquanto a célula primitiva contém apenas um ponto de rede, representando a menor porção do cristal capaz de reproduzir toda a rede por translação, a célula unitária corresponde a uma forma mais conveniente de representação, que muitas vezes facilita a visualização da simetria do cristal. Assim, com a célula escolhida, demos procedimento à definição dos três planos distintos para estudo, os quais são identificados por meio de seus índices de Miller. Para cada plano determinado, calculou-se a densidade atômica planar, isto é, a quantidade de átomos existentes por unidade de área, e verificou-se quais átomos são interceptados por esse plano. É importante que os três planos definidos possuam densidades planares diferentes, de modo a permitir a comparação entre distintas orientações cristalográficas.

Na segunda parte do experimento, desenvolvida com o auxílio do software CARINE Crystallography 3.0, o procedimento foi similar, mas agora aplicado a um modelo tridimensional gerado virtualmente. Primeiro a partir da célula gerada no software, são definidos novamente três planos distintos, para os quais se calculam as densidades planares e se identificam os átomos que pertencem a cada plano, bem como duas direções cristalográficas diferentes, nas quais são determinadas as densidades lineares correspondentes. Por fim, realizou-se uma pesquisa para identificar qual elemento ou composto cristaliza na mesma forma estrutural do modelo analisado e quais propriedades físicas, elétricas, mecânicas ou químicas estão relacionadas à disposição espacial dos átomos nessa rede.

### 5. RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Uma vez que a estrutura cristalina utilizada para o estudo foi a célula unitária hexagonal simples, a célula primitiva relacionada à tal estrutura é um losango tridimensional, ou estrutura trigonal.

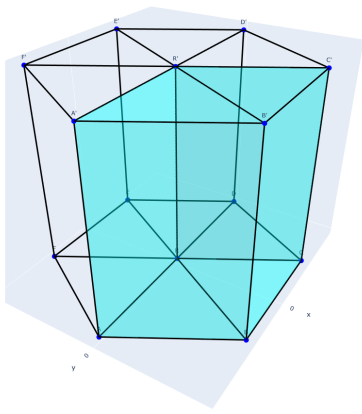


Figure 1: Célula primitiva da célula hexagonal simples (HS)

Para a definição dos planos que serão estudados é necessário definir em que pontos o plano desejado intercepta o sistema (x, y, z) escolhido. Escolhemos como referência o sistema no qual o eixo x forma um ângulo de 120° com o eixo y, e os eixos x e y formam 90° com o eixo z.

$$1 \bar{a} + 1 \bar{b} + 2 \bar{c}$$

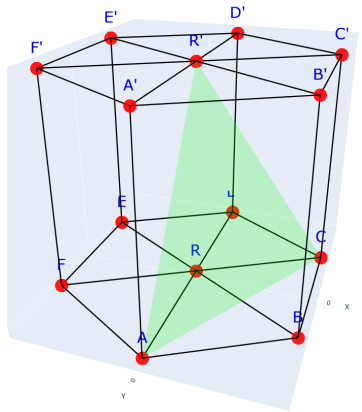


Figure 2: Plano 1

Para retirar a notação de infinito (pelo fato do plano não cortar o eixo) são utilizados os inversos de cada termo.

$$\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}$$

Após esse passo devem-se reduzir os valores encontrados aos menores valores inteiros, resultando em:

$$(2 \ 2 \ 1)$$

Os inteiros encontrados são chamados de índices de Miller e definem um conjunto de planos paralelos na rede. O índices [2 2 1] representam o plano da figura abaixo.

Para que seja definida a densidade planar conta-se o número de átomos que estão contidos no plano e divide-se

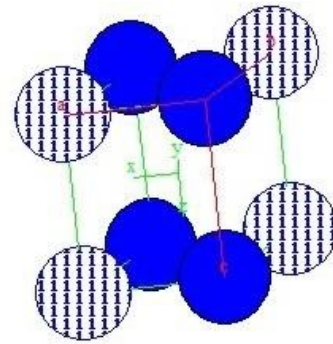


Figure 3: Plano [2 2 1]

pela a área do mesmo. Tomando o comprimento do raio da estrutura um valor a temos que a densidade planar para o plana [2 2 1] é dada por:

$$\frac{1}{2} \bar{a} + \frac{1}{2} \bar{b} + 2 \bar{c}$$

$$2, 2, \frac{1}{2}$$

Reduzindo aos menores valores inteiros encontra-se o seguinte plano:

$$[4 \ 4 \ 1]$$

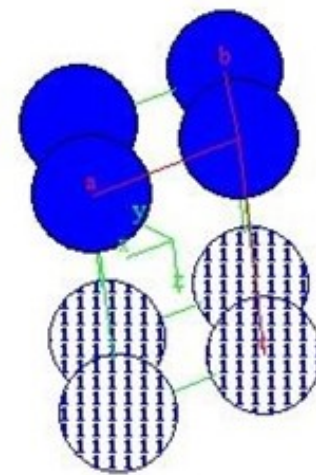


Figure 4: Plano [4 4 1]

A densidade planar é dada por:

$$DP = \frac{1/12}{(\sqrt{3} a^2)/2} = \frac{\sqrt{3}}{18 a^2}$$

Definindo o terceiro plano com o mesmo método utilizado anteriormente temos:

$$\frac{1}{1} \bar{a} + \frac{1}{1} \bar{b} + \frac{1}{2} \bar{c}$$

2 , 2 , 2

Reduzindo, como nos casos anteriores, aos menores valores inteiros é obtido o seguinte plano:

[ 1 1 1 ]

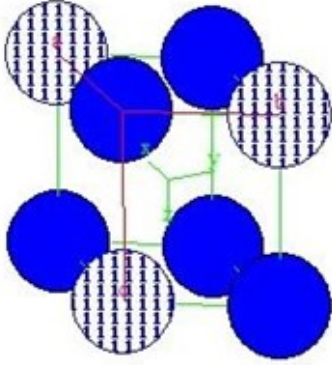


Figure 5: Plano [1 1 1]

$$DP = \frac{1/4}{(\sqrt{3} a^2)} = \frac{\sqrt{3}}{12 a^2}$$

Os outros dois planos solicitados foram obtidos da mesma forma, seguindo as etapas mostradas para o plano [2 2 1] marcados entre colchetes. Os resultados foram:

A densidade planar para esse plano é zero, pois o plano não corta nenhum átomo, portanto:

$$DP = 0$$

Escolhendo a direção x do sistema (x, y, z) adotado, calculou-se a densidade linear, que é obtida dividindo-se o número de átomos pelo comprimento. A densidade da direção x é então:

$$DL = \frac{2 R}{a} = \frac{\text{diâmetro}}{a} = \frac{1 \text{ átomo}}{a}$$

Onde R é o raio do átomo e a é o comprimento do raio da estrutura. Da mesma forma calculou-se a densidade linear da direção z e obteve-se:

$$DL = \frac{2 R}{2 a} = \frac{\text{diâmetro}}{2 a} = \frac{1 \text{ átomo}}{2 a}$$

## 6. ANALISE DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Por meio de uma pesquisa, foi possível encontrar diversos elementos e compostos cristalizam na forma da rede hexagonal simples, também conhecida como sistema cristalino hexagonal. Entre eles, destacam-se o selênio (Se) e

o telúrio (Te), ambos exibindo estruturas hexagonais sob condições específicas. O selênio metálico (forma cinza) cristaliza-se no sistema hexagonal, com parâmetros cristalográficos aproximadamente iguais a  $(a) = 436.6pm$  e  $(c) = 495.9pm$ , na estrutura espacial  $P3_121$ . Esse arranjo é característico de sua forma mais estável e metálica, e confere ao selênio propriedades semicondutoras valiosas em aplicações fotodetectores, fotocopiadoras e células sola Já ores. telúrio, por sua vez, também cristaliza em uma estrutura hexagonal (frequentemente descrita como trigonal, mas com base hexagonal), com constantes de rede aproximadamente  $(a) = 0.445nm$  e  $(c) = 0.593nm$ .

Sua estrutura se organiza em cadeias helicoidais ao longo do eixo (c), com átomos de telúrio ligados em espiral; essa morfologia dá origem a formas enantiomórficas, resultando em atividade óptica associada à quiralidade cristalográfica, [Instituto de Metais R]. O telúrio é um semicondutor sensível à luz, exibindo condutividade que varia com a orientação atômica. Essa anisotropia se reflete em propriedades térmicas e elétricas distintas ao longo e perpendicular ao eixo (c), com condutividade térmica variando entre cerca de  $3.3W/m \cdot K$  e  $2.1W/m \cdot K$ , e resistividade elétrica também anisotrópica.

Outro material que cristaliza de forma hexagonal é o grafite, frequentemente descrito como grafite alfa (forma hexagonal mais comum). Cada camada de grafeno do grafite consiste em átomos de carbono ligados em  $sp^2$  em um padrão hexagonal bidimensional, com ligações covalentes robustas entre três vizinhos e um elétron  $\pi$  deslocalizado que confere excelente condutividade elétrica no plano. As camadas são mantidas unidas por forças de van der Waals fracas, resultando em uma distância intercamadas entre 0.335 nm e 0.340 nm, que facilita o deslizamento entre camadas e confere ao grafite sua notável capacidade lubrificante. Além da forma hexagonal, o grafite pode apresentar estrutura romboédrica (grafite  $\beta$ ), com empilhamento ABCABC em vez do ABAB mais comum; essas formas têm propriedades físicas muito semelhantes, mas diferem ligeiramente em empilhamento atômico e comportamento mecânico.

## 7. CONCLUSAO

Nesse experimento conseguiu-se alcançar todos os objetivos propostos. Foi possível verificar a concordância dos resultados obtidos com os resultados teóricos estudados.

Apesar de apresentar efeitos satisfatórios, o software Carine trouxe algumas dificuldades, como, por exemplo, não possuir a célula unitária hexagonal simples, o que nos fez trabalhar com a célula primitiva correspondente. Porém, conclui-se a partir do estudo que a célula unitária é formada pela união de 3 células primitivas. E como a celular primitiva é um representativo de toda a rede, podemos encontrar resultados semelhantes para a célula unitária.

Pode-se observar também que a densidade linear varia de acordo com a direção desejada, bem como a densidade planar varia de acordo com o plano adotado.

Observou-se através da avaliação da estrutura cristalina do prisma hexagonal que a geometria do sólido e a disposição espacial dos átomos ajudam a definir as propriedades dos compostos e elementos definidos por tal geometria.

## 8. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

1. CESCHIN, Artemis M. Apostila de materiais eletricos e magneticos.
2. <https://mateck.com/en/content/119-selen-34se78> "Selenium (Se) - Mateck"
3. <https://www.periodic-table.org/Selenium-crystal-structure/> "Selenium - Crystal Structure"
4. <https://www.isoflex.com/selenium-se> "ISOFLEX USA - Selenium"
5. <https://www.espimetals.com/index.php/technical-data/253-Tellurium.com> "Tellurium - ESPI Metals"
6. <https://www.chemicalbook.com/article/tellurium-crystal.htm> "Tellurium Crystal Chemical-book"
7. <https://www.osti.gov/etdeweb/biblio/275148> "The crystal structure and optical activity of tellurium"
8. <https://en.institut-seltene-erden.de/seltene-erden-und-metalle/strategische-metalle-2/tellur/> "Tellurium Price, Occurrence, Extraction and Use"
9. <https://www.periodic-table.org/tellurium-crystal-structure/> "Tellurium - Crystal Structure"
10. <https://en.wikipedia.org/wiki/Tellurium> "Tellurium"
11. <https://www.geeksforgeeks.org/chemistry/graphite/> "Graphite - GeeksforGeeks"
12. <https://www.infogalactic.com/info/Graphite> "Graphite - Infogalactic"
13. <https://unacademy.com/content/jee/study-material/chemistry/structure-of-carbon-allotrope/> "Structure of Carbon Allotrope"