

Experimento 1: Estudo Dirigido sobre Estruturas Cristalinas

Larissa Simões – 232028230
Carlos Eduardo da S. Papa – 232013390
Thiago Ferreira – 231025717
Turma 01

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo da estrutura cristalina **hexagonal simples (HS)**, focando na caracterização de sua geometria fundamental. Os objetivos principais foram a identificação das células unitária e primitiva, a determinação de direções e planos cristalográficos por meio dos índices de **Miller-Bravais**, e o cálculo das densidades atômicas linear e planar. A metodologia envolveu a análise detalhada de planos cristalográficos específicos, incluindo os planos fundamentais, a fim de demonstrar a anisotropia característica desta estrutura. Adicionalmente, o software **CARINE Crystallography** foi utilizado como ferramenta complementar para visualizar a estrutura e correlacionar as propriedades teóricas calculadas com as de materiais representativos, como o **Grafite (C)**, o **Selênio (Se)** e o **Telúrio (Te)**.

1. OBJETIVOS

O presente experimento tem como finalidade a identificação da célula unitária e da célula primitiva de uma estrutura cristalina fornecida, bem como a determinação de planos e direções cristalográficas específicas, com o cálculo de suas respectivas densidades planar e linear. Ademais, objetiva-se estabelecer a correlação entre a estrutura cristalina e as propriedades físicas do material, empregando-se o software **CARINE** como ferramenta de visualização, análise e validação prática dos conceitos abordados.

2. INTRODUÇÃO

O experimento foi conduzido em duas etapas: uma prática, realizada em laboratório com o auxílio de modelos físicos, e outra computacional, utilizando o software **CARINE** para visualização e análise do modelo solicitado.

3. MATERIAIS UTILIZADOS

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

4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Palavras-Chave:

- **Romboedro (Rhombhedron):** Figura geométrica tridimensional com seis faces em forma de losango.

4.1. Célula Unitária e Primitiva

A **célula unitária** é o menor bloco de construção que, repetido, forma todo o cristal. Para a estrutura hexagonal, a célula unitária convencional é um prisma de base hexagonal. A **célula primitiva** é a menor unidade de volume possível, contendo apenas um ponto da rede. Na estrutura hexagonal, a célula primitiva é um **romboedro**.

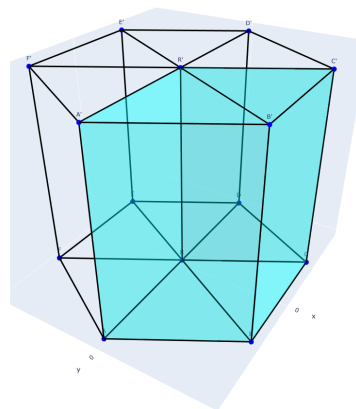


Figura 1: Célula primitiva da célula hexagonal simples (HS), representada por um romboedro dentro da célula unitária convencional.

4.2. Índices de Miller-Bravais

Para sistemas hexagonais, a notação de quatro índices de Miller-Bravais ($hkil$) é utilizada para descrever planos, satisfazendo $h+k+i=0$. Essa notação permite maior clareza e precisão na identificação de planos e direções cristalográficas.

Definições Chave:

- **Densidade Planar (DP):** Número de átomos por unidade de área de um plano.
- **Densidade Linear (DL):** Número de átomos por unidade de comprimento de uma direção.

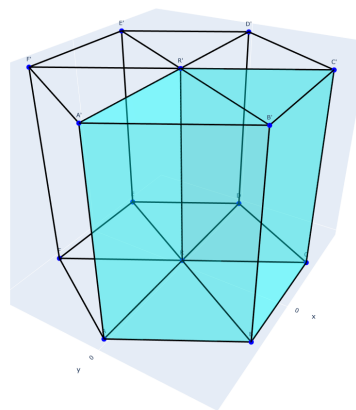


Figura 2: Célula primitiva da célula hexagonal simples (HS)

5. PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

5.1. Primeira Parte:

Um sistema de coordenadas foi definido para a célula hexagonal. A partir dele, planos e direções foram escolhidos para o cálculo das densidades. O software **CARINE** foi usado para visualização, confirmação geométrica e análise de anisotropia.

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.

5.2. Segunda Parte (Carine Crystallography):

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.

6. 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.

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 .

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

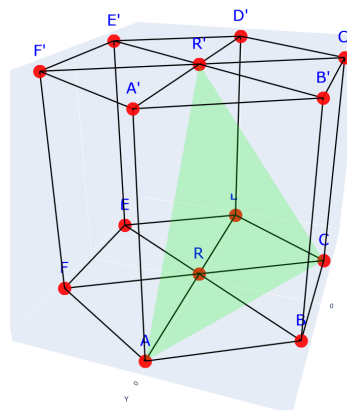


Figura 3: Plano 1

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:

$$(2 \quad 2 \quad 1)$$

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.

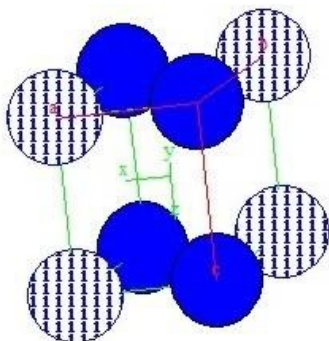


Figura 4: Plano [2 2 1]

Para que seja definida a densidade planar conta-se o número de átomos que estão contidos no plano e divide-se pela a área do mesmo. Tomando o comprimento do raio da estrutura um valor a temos que a densidade planar para o plano [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:

$$[4 \ 4 \ 1]$$

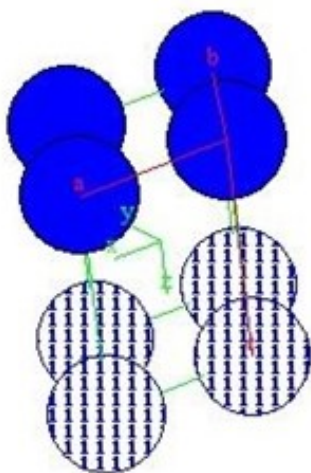


Figura 5: Plano [4 4 1]

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:

$$[1 \ 1 \ 1]$$

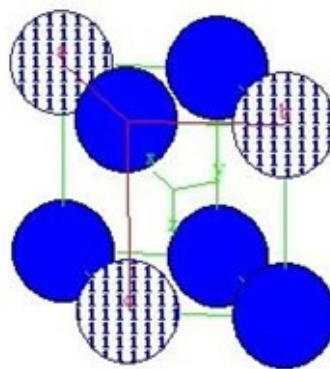


Figura 6: Plano [1 1 1]

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

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:

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

7. ANÁLISE 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 $(a) = 436.6 \text{ pm}$ e $(c) = 495.9 \text{ pm}$, 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 solares. O **Telúrio**, por sua vez, também cristaliza em uma estrutura hexagonal (frequentemente descrita como trigonal, mas com base hexagonal), com constantes de rede aproximadamente $(a) = 0.445 \text{ nm}$ e $(c) = 0.593 \text{ nm}$.

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 $3.3 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ e $2.1 \text{ W/m}\cdot\text{K}$, 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 π 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 β), 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.

- **Grafite:** Estrutura em camadas de grafeno, condutividade

elétrica elevada no plano, baixa entre planos, excelente lubrificante sólido.

- **Selênio (Se) e Telúrio (Te):** Estruturas hexagonais com átomos em cadeias helicoidais ao longo do eixo c , resultando em anisotropia elétrica e térmica explorada em fotodetectores e dispositivos termoeletrônicos.

Palavras-Chave:

- **Enantiomorfo:** É formado das mesmas partes dispostas em ordem inversa, de tal modo que sejam simétricas em relação a um plano.
- **Anisotrópico:** Material ou sistema cujas propriedades físicas (como resistência, condutividade ou elasticidade) variam dependendo da direção em que são medidas.
- **Quiralidade:** Qualidade ou propriedade do que é quiral ou é dotado de assimetria e não se pode sobrepor à sua imagem especular.
- **Forças de Van der Waals:** Conjunto de forças intermoleculares fracas que mantêm as moléculas próximas, resultando de atrações temporárias entre dipolos induzidos e dipolos permanentes.

8. CONCLUSÃO

O presente estudo permitiu compreender os conceitos relacionados a diferentes formações cristalinas, bem como seus atributos relacionados. Por meio da estrutura disponibilizada foi possível realizar observações importantes sobre características da estrutura hexagonal simples.

Tanto a análise teórica, quanto a aplicação prática, viabilizada pelo software **CARINE Crystallography** e pela investigação de materiais como o **Grafite**, o **Selênio** e o **Telúrio**, viabilizaram a compreensão das características das formações cristalinas. Observou-se que a anisotropia calculada manifesta-se diretamente em propriedades macroscópicas, na notável capacidade de lubrificação e na condutividade elétrica direcional do **Grafite**, bem como nas singulares características semicondutoras e termoeletrônicas do **Selênio** e do **Telúrio**.

Dessa forma, foi possível constatar experimentalmente os índices de Miller-Bravais e densidade atômica, além disso demonstrou como a arquitetura em escala atômica governa o comportamento e o potencial dos materiais. A integração entre modelos físicos, simulação computacional e análise de materiais reais provou ser uma metodologia eficaz

para a compreensão profunda dos fundamentos da Ciência dos Materiais.

— 9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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> "ISO-FLEX 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 Chemicalbook"
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"