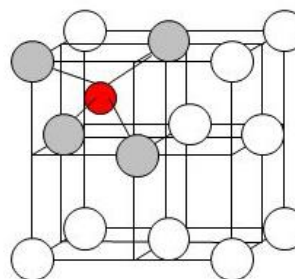


### Raios Iônicos para Vários Cátions e Ânions (para um Número de Coordenação de 6)

Cátion	Raio Iônico (nm)	Ânion	Raio Iônico (nm)
Al <sup>3+</sup>	0,053	Br <sup>-</sup>	0,196
Ba <sup>2+</sup>	0,136	Cl <sup>-</sup>	0,181
Ca <sup>2+</sup>	0,100	F <sup>-</sup>	0,133
Cs <sup>+</sup>	0,170	I <sup>-</sup>	0,220
Fe <sup>2+</sup>	0,077	O <sup>2-</sup>	0,140
Fe <sup>3+</sup>	0,069	S <sup>2-</sup>	0,184
K <sup>+</sup>	0,138		
Mg <sup>2+</sup>	0,072		
Mn <sup>2+</sup>	0,067		
Na <sup>+</sup>	0,102		
Ni <sup>2+</sup>	0,069		
Si <sup>4+</sup>	0,040		
Ti <sup>4+</sup>	0,061		



### 5 Contorno de grãos:

- Formada entre cristais (contornos de grãos) ou nas superfícies externas.
- No contorno dos grãos, os átomos não estão à mesma distância uns dos outros. Há tensões de tração e compressão.
- Influenciam nas propriedades físicas (ex: resistência mecânica) e químicas.
- Ajuste do tamanho dos grãos → uma das formas de controle das propriedades de um metal.
  - Ex: Reduzindo o tamanho dos grãos, há aumento do área de contorno de grão, diminuindo a distância percorrida pelas discordâncias aumento da resistência mecânica do material.

### 6 Tipos de soluções de materiais metálicos

- Soluções sólidas:
  - intersticial
  - Substitucional:
    - \* Ordenada
    - \* Ao acaso

### 7 Regras de Hume-Rothery para solubilidade

- Variação % causada pela diferença entre raios < 15% (evitar distorções na rede): raio soluto = raio solvente/
- Mesma estrutura cristalina;
- Eletronegatividades semelhantes
- Mesma valência.

Sistema	Δ Raios (%)	Solubilidade (%)
Cu-Zn	3,9	38,3
Cu-Pb	36,7	0,1
Cu-Ni	-2,3	100
Cu-Al	11,7	16,4

### 8 Direções Cristalográficas

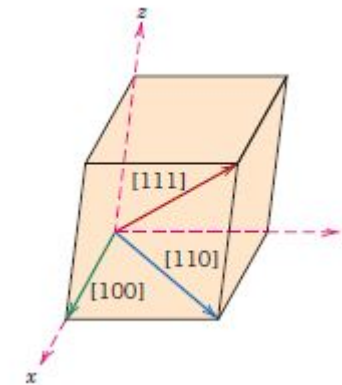
A crystallographic direction is defined as a line between two points, or a vector. The following steps are used to determine the three directional indices:

- A vector of convenient length is positioned such that it passes through the origin of the coordinate system. Any vector may be translated throughout the crystal lattice without alteration, if parallelism is maintained.
- The length of the vector projection on each of the three axes is determined; these are measured in terms of the

unit cell dimensions a, b, and c.

3. These three numbers are multiplied or divided by a common factor to reduce them to the smallest integer values.

4. The three indices, not separated by commas, are enclosed in square brackets, thus: [uvw]. The u, v, and w integers correspond to the reduced projections along the x, y, and z axes, respectively.



This procedure may be summarized as follows:

	x	y	z
Projections	a/2	b	0c
Projections (in terms of a, b, and c)	1/2	1	0
Reduction	1	2	0
Enclosure	[120]		

### 9 Planos Cristalográficos

1. If the plane passes through the selected origin, either another parallel plane must be constructed within the unit cell by an appropriate translation, or a new origin must be established at the corner of another unit cell.

2. At this point the crystallographic plane either intersects or parallels each of the three axes; the length of the planar intercept for each axis is determined in terms of the lattice parameters a, b, and c.

3. The reciprocals of these numbers are taken. A plane that parallels an axis may be considered to have an infinite intercept, and, therefore, a zero index.

4. If necessary, these three numbers are changed to the set of smallest integers by multiplication or division by a common factor.3

5. Finally, the integer indices, not separated by commas, are enclosed within parentheses, thus: (hkl).

Baseado nas listas de exercícios

### 1 Definições

Numero de Coordenação: número de partículas que envolvem uma partícula central.

Fator de empacotamento: volume de átomos numa célula unitária / volume da célula unitária.

### 2 Redes Cristalinas

- NC: Número de Coordenação
- FE: Fator de empacotamento

Cubo simples - CS

- NC: 6;
- FE:  $\frac{4}{3} \cdot \frac{\pi \cdot r^3}{a^3} = 0,52$ ;
- Rel:  $a = 2R$ ;

Cúbico de Corpo Centrado - CCC

- NC: 8
- FE:  $2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{\pi \cdot r^3}{a^3} = 0,68$
- Rel:  $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$

Cúbico de Faces Centradas - CFC

- NC: 12
- FE:  $4 \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{\pi \cdot r^3}{a^3} = 0,74$
- Rel:  $a = \frac{4 \cdot R}{\sqrt{2}}$

Hexagonal

- NC: 12
- FE: 0,73 (=CFC)
- Rel:  $a = 2R$

Coordination number	Radius ratio, r/R	Coordination geometry
2	$0 < \frac{r}{R} < 0,155$	
3	$0,155 \leq \frac{r}{R} < 0,225$	
4	$0,225 \leq \frac{r}{R} < 0,414$	
6	$0,414 \leq \frac{r}{R} < 0,732$	
8	$0,732 \leq \frac{r}{R} < 1$	
12	1	

\*The geometry on the left is for the hexagonal close-packed (hcp) structure and that on the right for the face-centered cubic (fcc) structure. These crystal structures are discussed in Chapter 3.

### 3 Variação Vol pela Mudança de Estrutura Cristalina

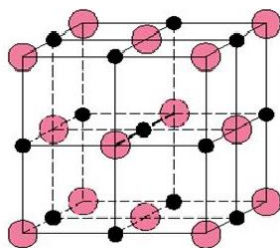
Ao avaliar redução de volume resultada pela mudança de estrutura cristalina de um material que durante o seu aquecimento/resfriamento devemos levar em consideração o número de átomos que cada uma das estruturas comporta. Outro ponto importante é levar em consideração que o número de átomos é constante e portanto haverá variação na número de células unitárias formadas.

### 4 Estrutura dos materiais Cerâmicos

O posicionamento das partículas nos materiais cerâmicos depende da relação entre os raios(cátion/ânion) e das cargas envolvidas. Nos vazios (sítios ou interstícios) da rede cristalina se posicionam partículas diferentes das que existem na rede cristalina principal. Em redes compactas há espaços intersticiais, onde as partículas ficam equidistantes do centro do espaço vazio.

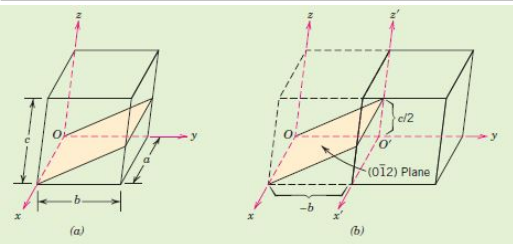
Posições octaédricas na rede cfc:

- NC: 6
- Local:arestas (3 sítios) + centro da célula unitária
- Total: 4 partículas (1 por partículas da célula unitária)



Posições tetraédricas na rede cfc:

- NC: 4
- Local:posições do tipo  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$
- Total: 8 partículas (2 por partículas da célula unitária)



	x	y	z
Intercepts	$\infty$	$-b$	$c/2$
Intercepts (in terms of lattice parameters)	$\infty$	$-1$	$\frac{1}{2}$
Reciprocals	0	$-1$	2
Reductions (unnecessary)			
Enclosure			(012)

## 10 Densidade Teórica

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A} \quad (1)$$

- $n$  = number of atoms associated with each unit cell
- $A$  = atomic weight
- $V_C$  = volume of the unit cell
- $N_A$  = Avogadro's number  $16.022 \cdot 10^{23} \frac{\text{atoms}}{\text{mol}^2}$

## 11 Densidade Linear

$$LD = \frac{\text{nmerodetomosCentradosnaDireeodoVetor}}{\text{tamanhodovetordireo}} \quad (2)$$

## 12 Densidade Planar

$$PD = \frac{\text{nmerodetomosCentradosnoPlano}}{\text{readoplano}} \quad (3)$$

## 13 Mecanismos de Difusão

Mecanismos propostos:

- Difusão por lacunas (ou difusão substitucional): Átomo se desloca da posição padrão da rede cristalina para algum local (sitio) vazio próximo.
  - átomo do elemento acrescido substitui a posição de um dos átomos presentes na célula unitária
  - O átomo segue direção contrária ao movimento da lacuna.
  - Depende da quantidade de lacunas presentes na rede cristalina.
  - A quantidade de lacunas aumenta com a temperatura.
  - O processo é denominado AUTODIFUSÃO quando os próprios átomos da rede se difundem ou INTERDIFUSÃO quando ocorre difusão de impurezas substitucionais.
- Difusão intersticial
  - átomo invade o interstício dos átomos que formam a rede cristalina

- Átomos intersticiais migram para posições adjacentes da rede cristalina.
- Corresponde a um tipo importante de difusão em metais e ligas cuja impureza apresenta pequeno raio atômico em relação ao átomo da matriz cristalina. (ex: C e H)
- É geralmente mais rápida (apresenta maior coeficiente de difusão)
- Menor energia necessária para o movimento dos átomos.

### 13.1 Fluxo de Difusão

A velocidade com que ocorre a difusão é avaliada em termos de FLUXO DE DIFUSÃO que corresponde a massa (ou número de átomos) que se difunde por unidade de tempo através de uma área perpendicular à direção do movimento da massa que está se difundindo.

$$J = \frac{M}{(A \cdot t)} \quad (4)$$

onde:

- $J$  = fluxo de difusão.  $[\frac{Kg}{m^2 \cdot s}]$  ou  $[\frac{t}{m^2 \cdot s}]$
- $M$  = massa transportada (ou quantidade de átomos)
- $A$  = área da seção transversal
- $t$  = tempo
- Difusão em estado estacionário
- Difusão em estado não estacionário (condições transientes)

DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO  
Condições:

- $J$  não varia com o tempo.
- $J$  não varia com a posição.

PRIMEIRA LEI DE FICK: relaciona o fluxo com o gradiente de concentração

$$J = D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x} \quad (5)$$

DIFUSÃO EM ESTADO NÃO- ESTACIONÁRIO  
Segunda lei de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (6)$$

$$\frac{C_X - C_0}{C_S - C_0} = 1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right), \quad \text{onde } C_X = C = f(x, t) \quad (7)$$

Onde:

- $x$  = condição á superfície
- $C_x$  = Concentração á profundidade  $x$ , após tempo  $t$
- $C_0$  = Concentração inicial da espécie
- $C_s$  = Concentração na superfície

$$\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy \quad (8)$$

CALCULO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO

$$D = D_0 e^{\left(\frac{-Q_d}{RT}\right)} \quad (9)$$

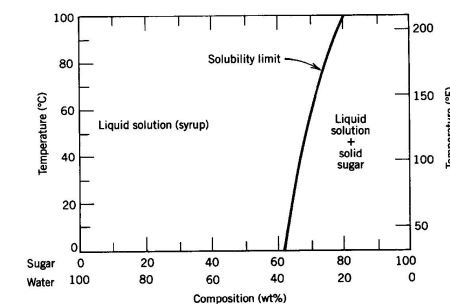
Onde:

- $D_0$  constante independente da  $T$ , em  $\frac{m^2}{s}$  valores tabelados.
- $Q_d$  energia de ativação para a difusão  $[\frac{J}{mol}]$ .

## 14 Diagrama de Fases

Def: O diagrama de fases de um dado sistema indica que tipo de microestrutura estará presente, em uma determinada temperatura e composição. É um diagrama termodinâmico, que não indica a velocidade das reações. A solubilidade é um dos fatores que interferem diretamente na formação de uma ou mais fases. Pois, quando o sistema ultrapassar o limite de solubilidade uma segunda fase será formada. Uma liga metálica policristalina pode apresentar mais de um fase.

A figura abaixo mostra como a solubilidade uma determinada substância em relação a outra pode alterar em função da temperatura.

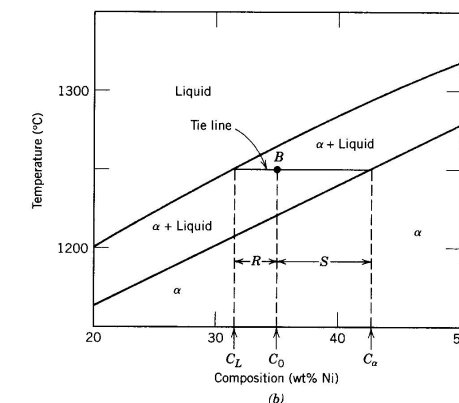
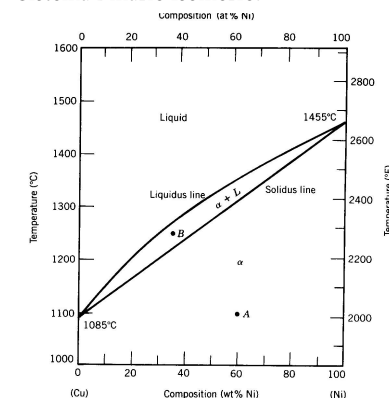


## 15 Solubilidade entre Componentes

### 15.1 Sistema Binário Isomorfo

: com solubilidade total no líquido e no sólido.

Sistema Binário Isomorfo:



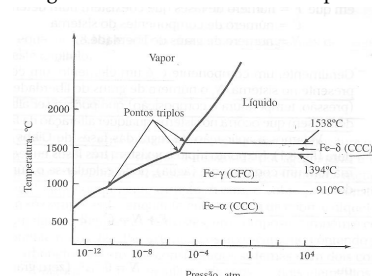
$$C_0 = C_L W_L + C_S W_S \quad (10)$$

$$W_L + W_S = 1 \quad (11)$$

$$W_S = \frac{(C_0 - C_L)}{(C_S - C_L)} \quad (12)$$

$$W_L = \frac{(C_S - C_0)}{(C_S - C_L)} \quad (13)$$

Diagrama de fases de substância pura:

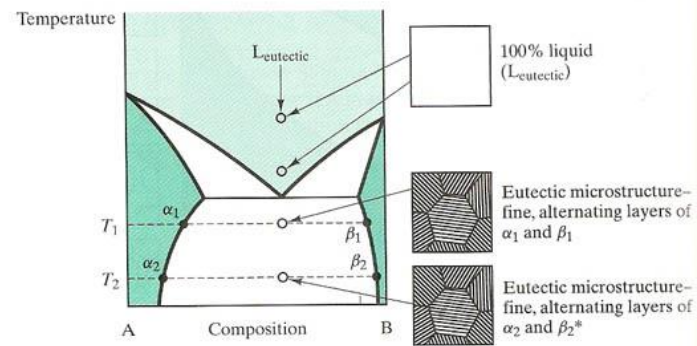
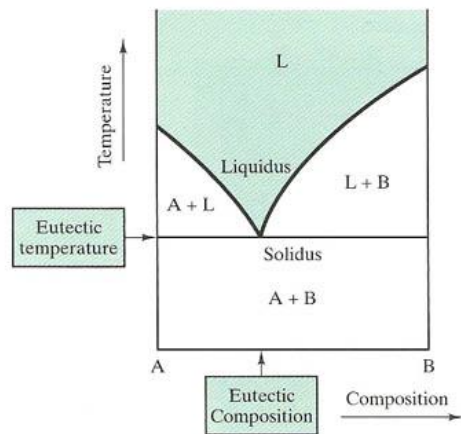
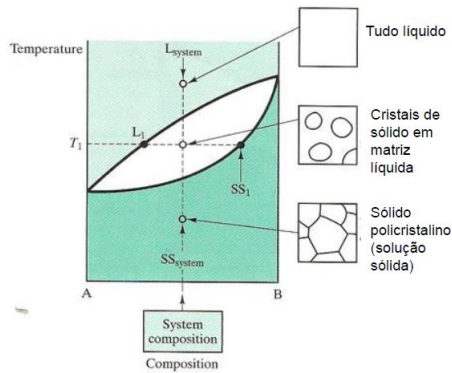


A partir do DIAGRAMA DE FASES, para um dado *teor de soluto* e uma dada *temperatura* podemos predizer:

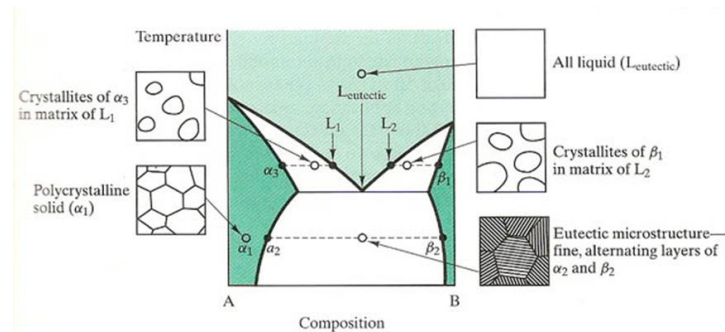
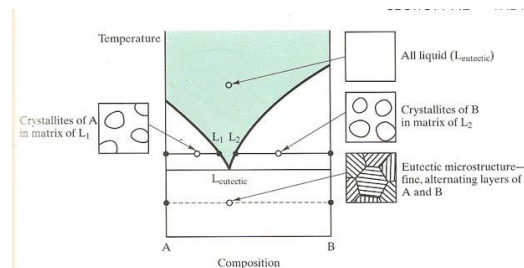
- que fases são *termodinamicamente* estáveis.
- a composição de cada uma delas
- a quantidade de cada uma delas

No diagrama:

- Fração mássica da fase líquida:  $W_L = S / R + S$
- Fração mássica da fase sólida  $W_S = R / R + S$



Microestrutura:



## 16 Tips

Tabela erf(z)

Tabela da função de erro							
z	erf(z)	z	erf(z)	z	erf(z)	z	erf(z)
0	0	0,40	0,4284	0,85	0,7707	1,6	0,9763
0,025	0,0282	0,45	0,4755	0,90	0,7970	1,7	0,9838
0,05	0,0564	0,50	0,5205	0,95	0,8209	1,8	0,9891
0,10	0,1125	0,55	0,5633	1,0	0,8427	1,9	0,9928
0,15	0,1680	0,60	0,6039	1,1	0,8802	2,0	0,9953
0,20	0,2227	0,65	0,6420	1,2	0,9103	2,2	0,9981
0,25	0,2763	0,70	0,6778	1,3	0,9340	2,4	0,9993
0,30	0,3286	0,75	0,7112	1,4	0,9523	2,6	0,9998
0,35	0,3794	0,80	0,7421	1,5	0,9661	2,8	0,9999

Formula da interpolação

$$P_1(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} (x - x_0)$$

Fórmula Volume Esfera

$$V = \frac{4\pi \cdot r^3}{3}$$

Fórmula Volume de cubo

$$V = a \times a \times a$$

$$V = a^3$$

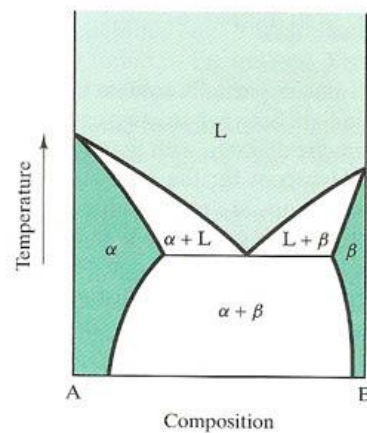
Formula Volume de Hexaedro

$$V = \frac{3a^2\sqrt{3}}{2}h$$

## 15.3 Sistema Binário com solubilidade parcial:

com reação eutética e/ou eutetoide.

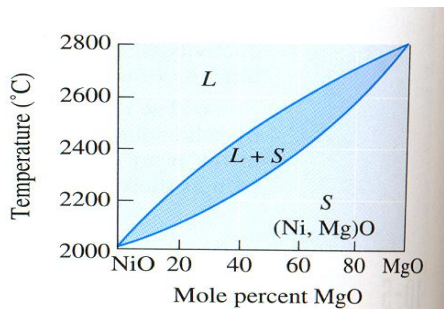
Com reação eutética:



$$L \leftrightarrow S_1 = S_2$$

(14)

Micro estrutura:



A medida que a liga resfria, a solidificação avança e a composição das fases é alterada.

## 15.2 Sistema Binário sem qualquer solubilidade:

sem formação de solução sólida.