



Universidade Federal do ABC

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC**

**CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS**

## **MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES**

✓ **Caracterização de estruturas cristalinas**

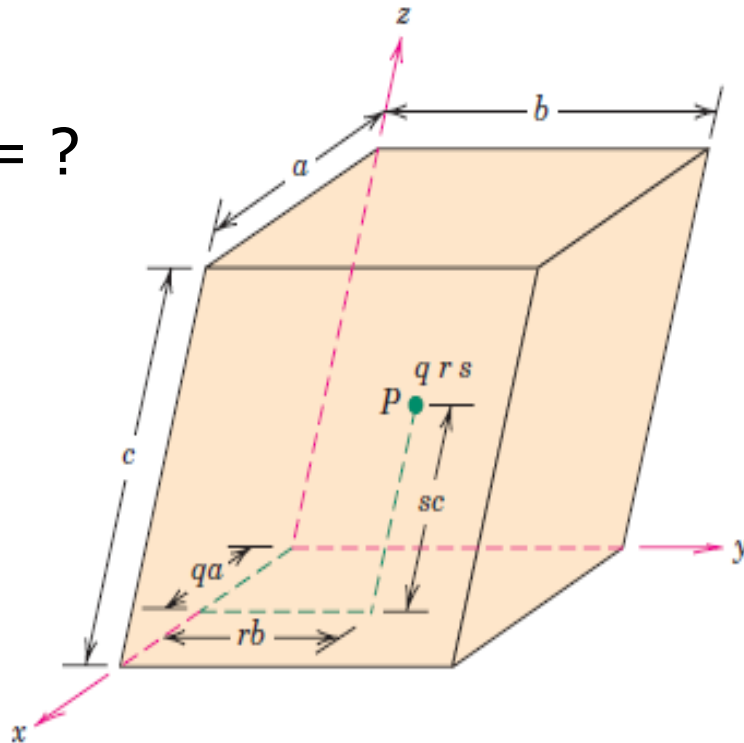
**Prof. Dr. Renata Ayres Rocha**



## PONTOS CRISTALOGRÁFICOS – ÍNDICES DE MILLER

### Coordenada dos Pontos:

$P = ?$

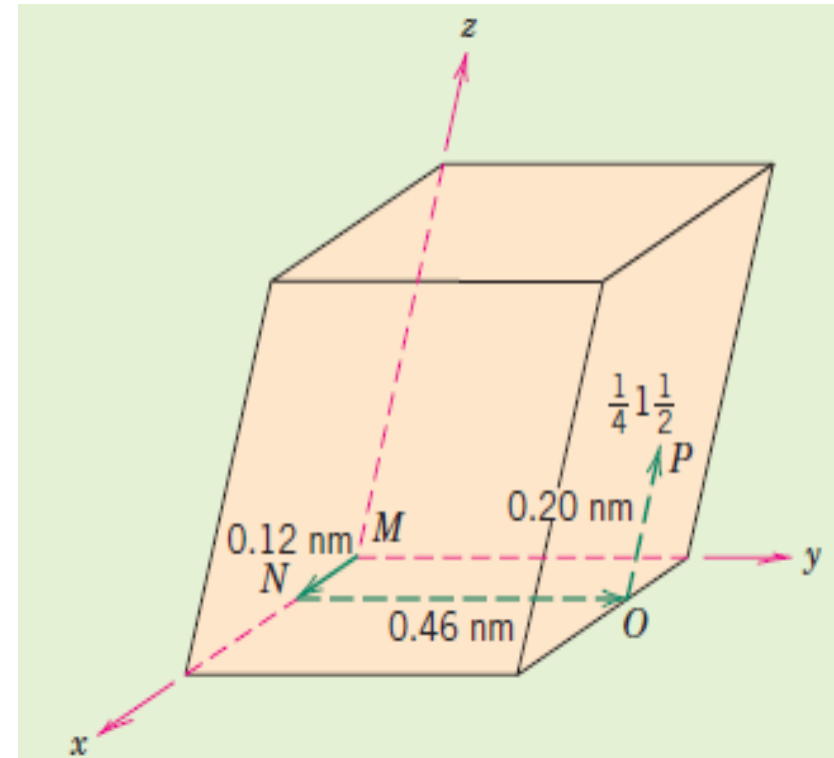


$$P = qa \ rb \ sc$$

$$P = qrs$$

Exemplo:  $\frac{1}{4} \ 1 \ \frac{1}{2}$

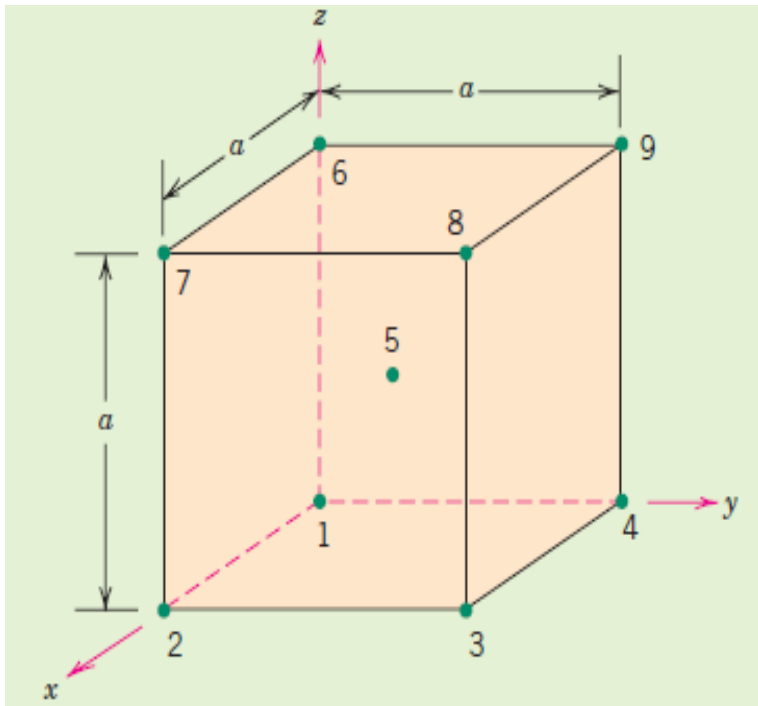
onde  $a=0,48\text{nm}$ ;  $b=0,46\text{nm}$ ;  $c=0,40\text{nm}$





## PONTOS CRISTALOGRAFICOS – ÍNDICES DE MILLER

### Coordenada dos pontos (átomos) estrutura CCC:



Point Number	Fractional Lengths			Point Coordinates
	<i>x axis</i>	<i>y axis</i>	<i>z axis</i>	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
6	0	0	1	0 0 1
7	1	0	1	1 0 1
8	1	1	1	1 1 1
9	0	1	1	0 1 1

## DIREÇÕES E PLANOS CRISTALOGRAFICOS – ÍNDICES DE MILLER

### ✓ Direções Cristalográficas

✓ As direções são vetores que unem dois pontos da rede cristalina.

✓ Procedimento para determinação dos índices de Miller de uma direção cristalográfica:

✓ transladar o “vetor direção” de maneira que ele passe pela origem do sistema de coordenadas.

✓ determinar a projeção do vetor em cada um dos três eixos de coordenadas. Essas projeções devem ser medidas em termos dos parâmetros de rede (a,b,c)

## DIREÇÕES E PLANOS CRISTALOGRAFICOS – ÍNDICES DE MILLER

### ✓ Direções Cristalográficas

#### ✓ Procedimento para determinação dos índices de Miller de uma direção cristalográfica:

- ✓ multiplicar ou dividir esses três números por um fator comum, tal que os três números resultantes sejam os menores inteiros possíveis.
- ✓ representar a direção escrevendo os três números entre colchetes e sem vírgulas:  $[u \ v \ w]$ .
- ✓ coloca-se uma barra sobre o número caso ele seja negativo:

$[0\bar{1}2]$ .

## DIREÇÕES E PLANOS CRISTALOGRAFICOS – ÍNDICES DE MILLER

### ✓ Direções Cristalográficas

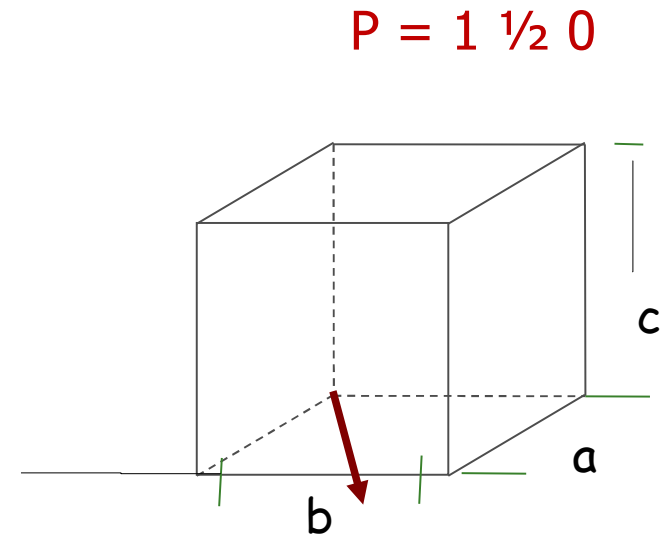
### Como representar as direções dos átomos?

- 1- Posicionar o vetor passando pela origem;
- 2- Determinar os comprimentos das projeções (coordenada de pontos)

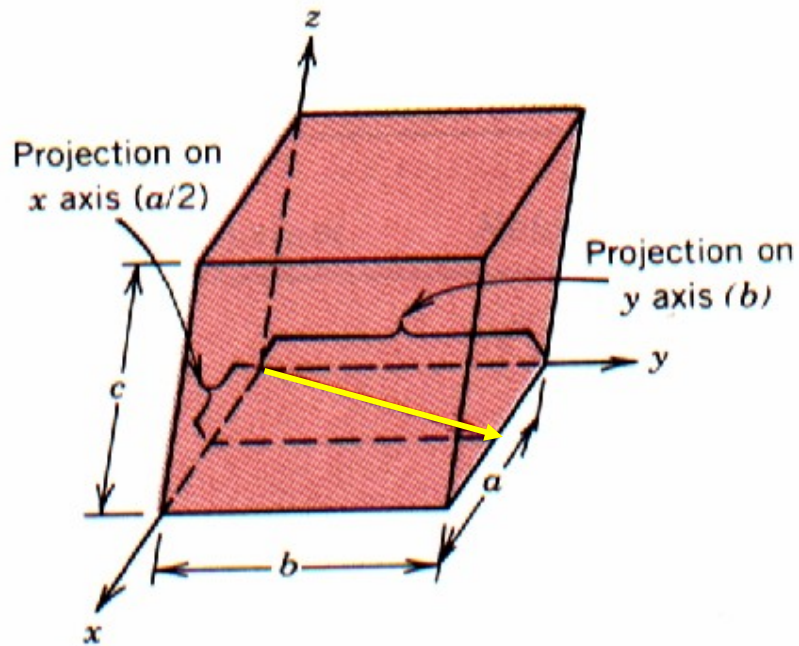
(Ex.:  $P = 1 \frac{1}{2} 0 \Rightarrow a = 1, b = 1/2 \text{ e } c = 0$ )

- 3- Dividir ou multiplicar os três números por um fator comum (3 números resultantes sejam os **menores inteiros** possíveis). Ex.:  $\times 2$ ;

- 4- Representação direção cristalográfica:  $[210]$



## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER



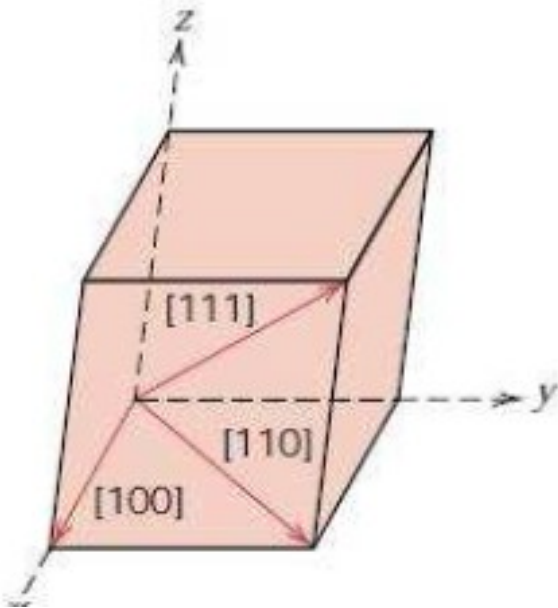
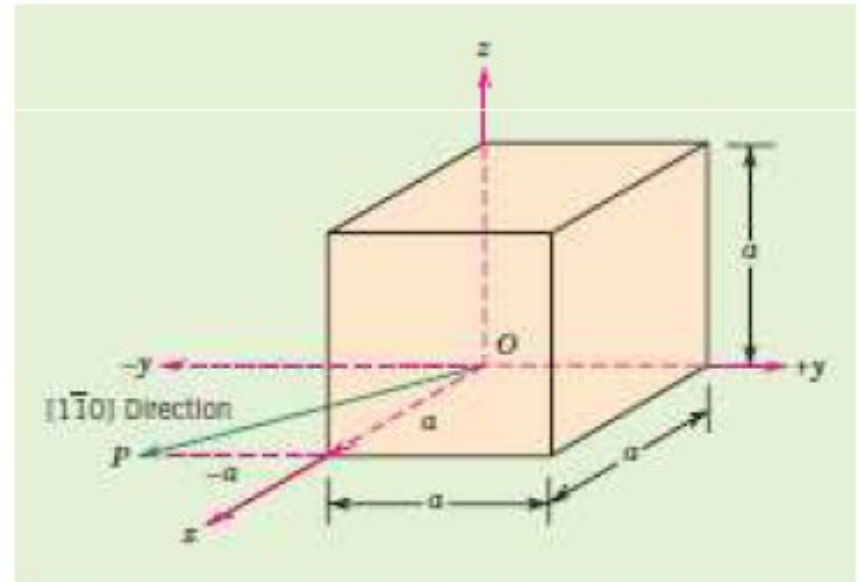
	x	y	z
projeções	$\frac{1}{2}a$	1b	0c
projeções em termos de a,b e c	$\frac{1}{2}$	1	0
redução a mínimos inteiros	1	2	0
notação	[120]		



## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

Indique a direção cristalográfica  $[1\ 1\ 0]$

	x	y	z
notação		$[1\bar{1}0]$	
projeção	1a	-1b	0c

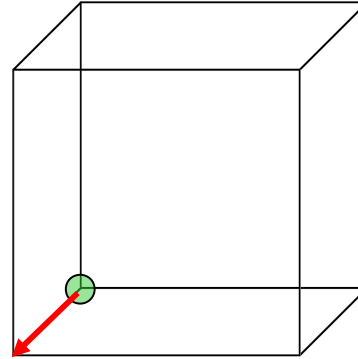






## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

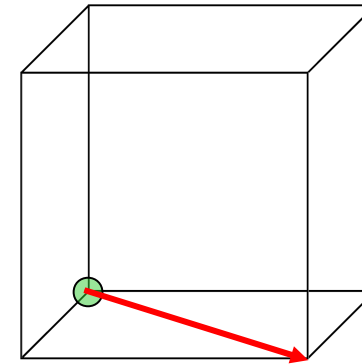
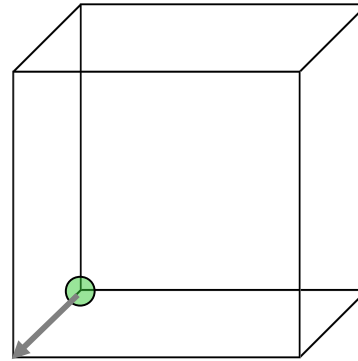
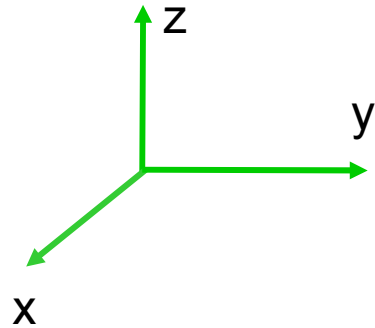
•  $[100]$





## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

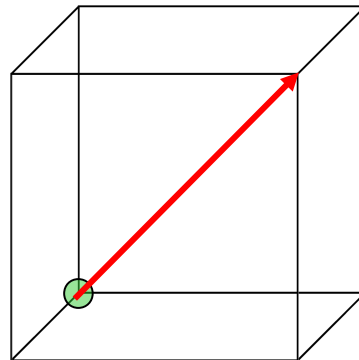
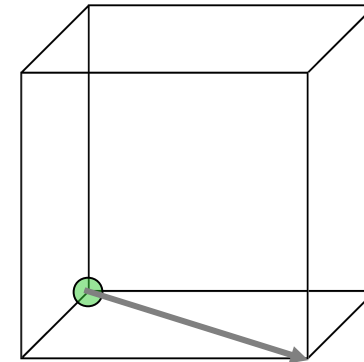
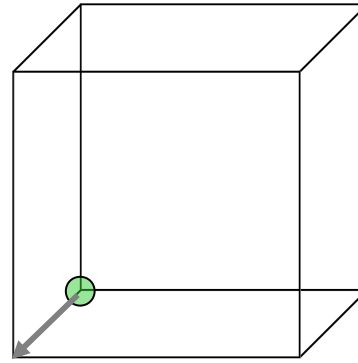
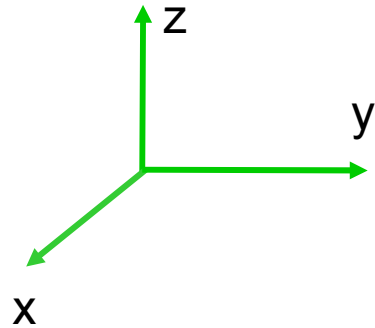
- $[100]$
- $[110]$





## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

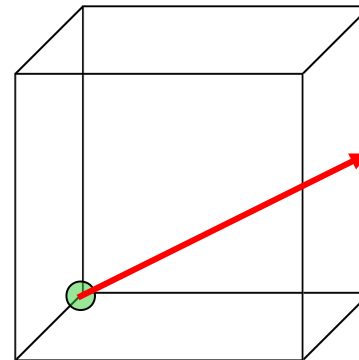
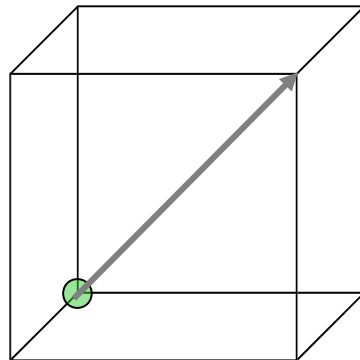
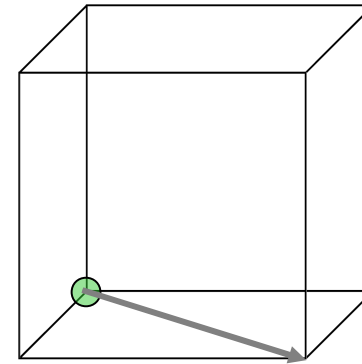
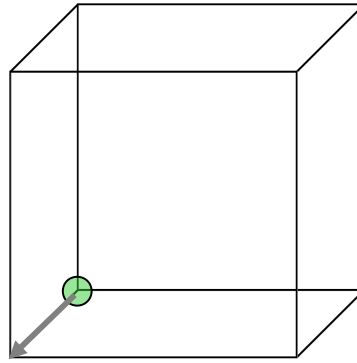
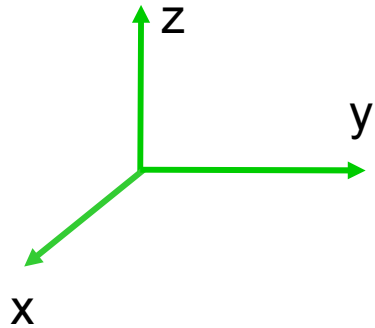
- $[100]$
- $[110]$
- $[111]$





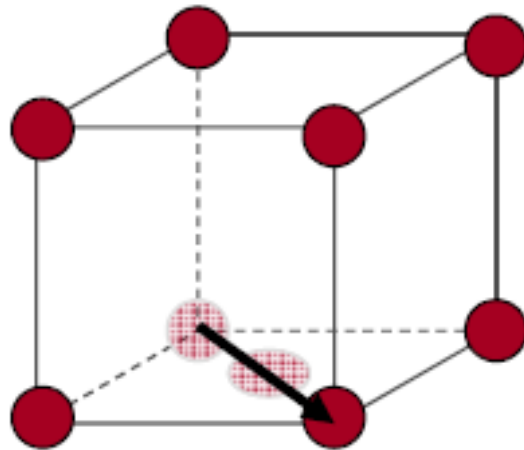
## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

- $[100]$
- $[110]$
- $[111]$
- $[021]$

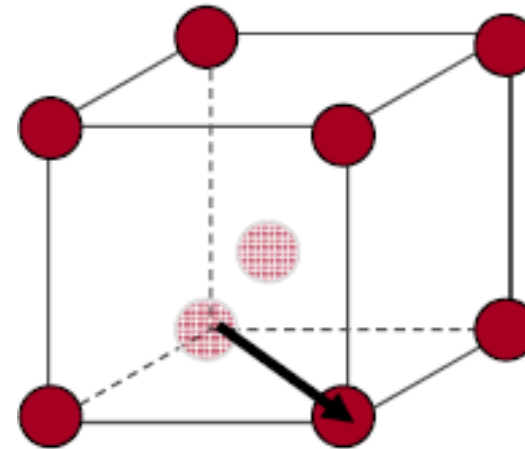




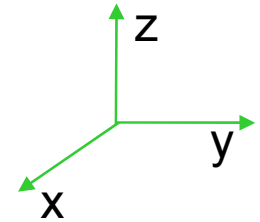
## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER



$[110]$  CFC



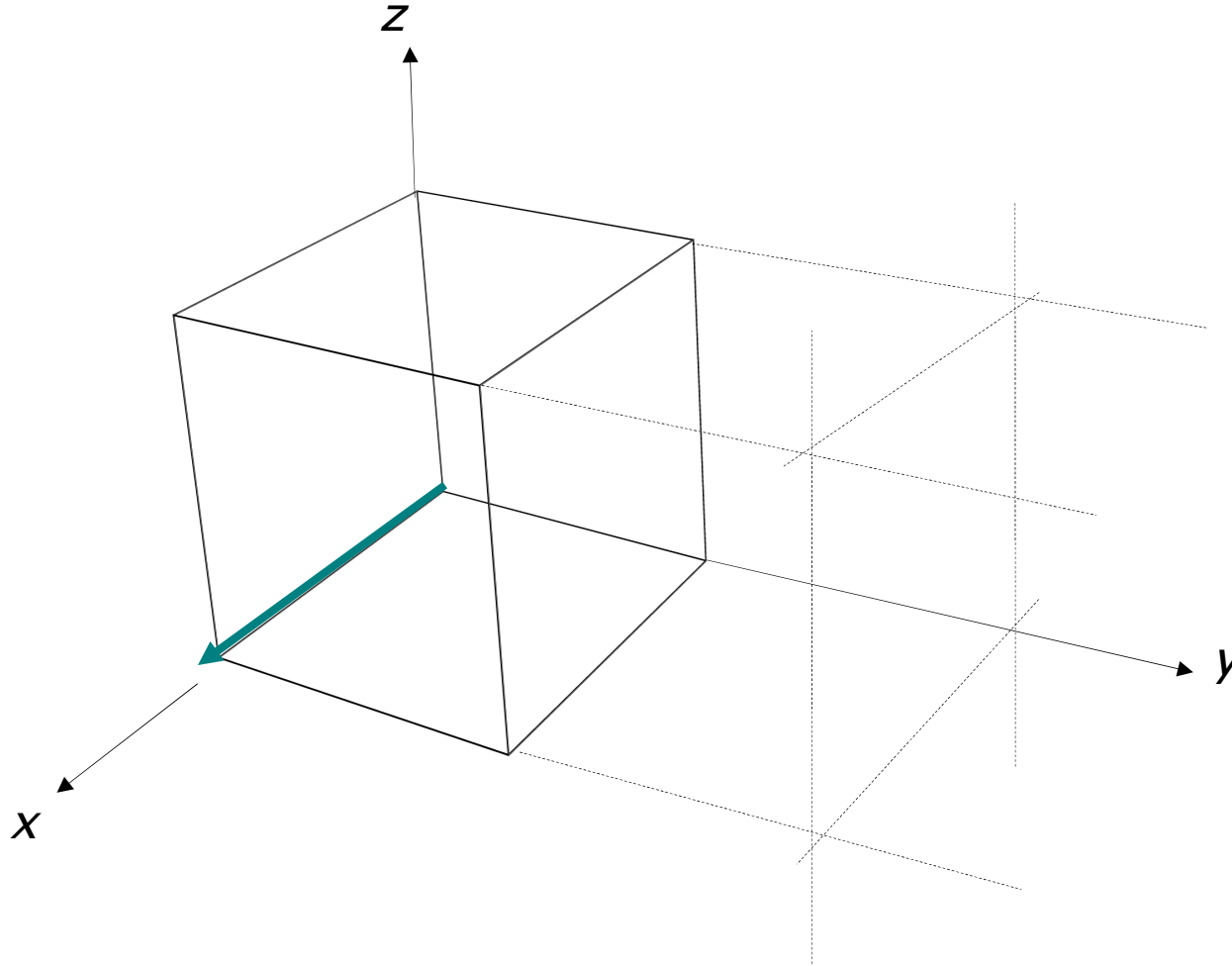
$[110]$  CCC





## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

[100]

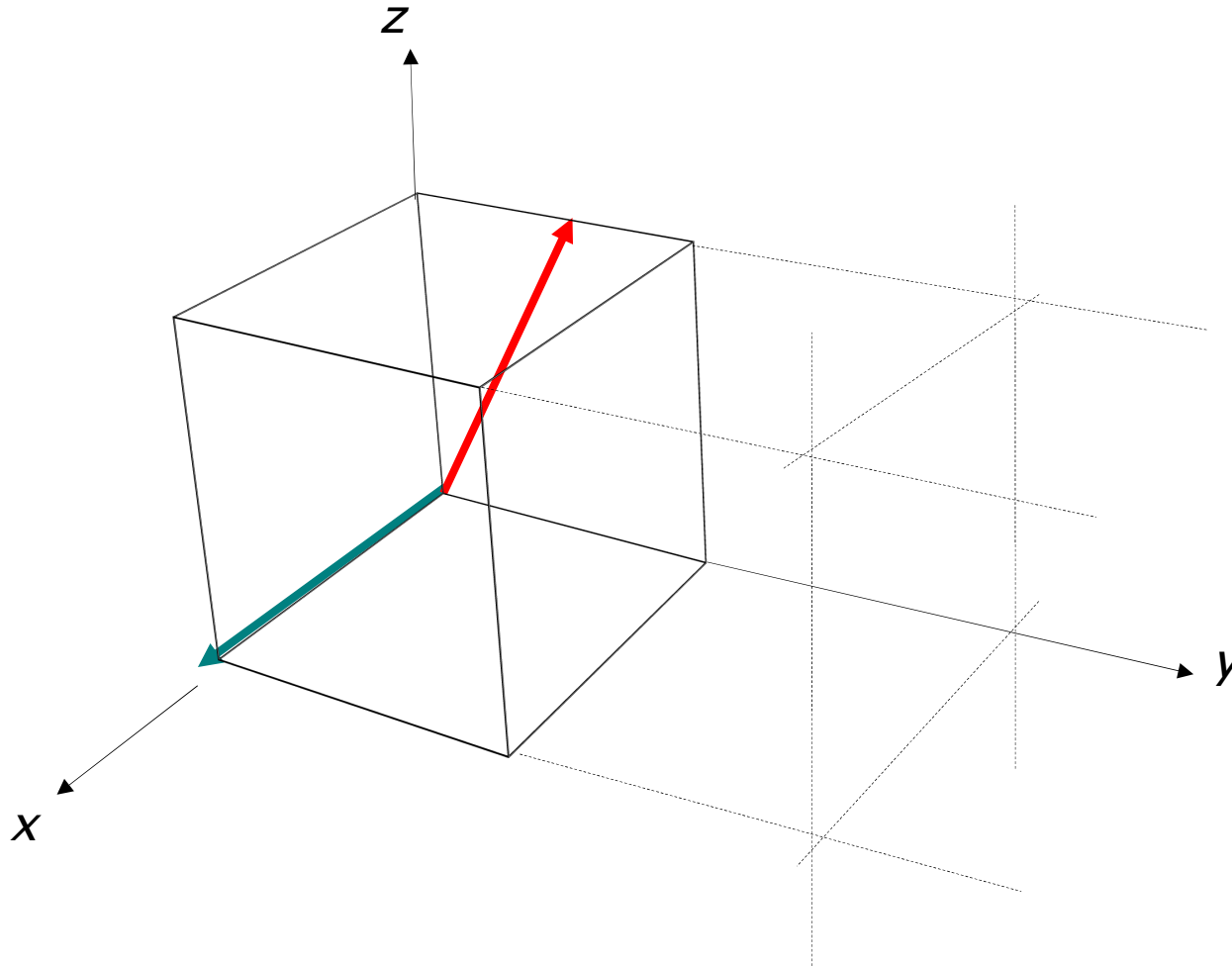




## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

[100]

[012]



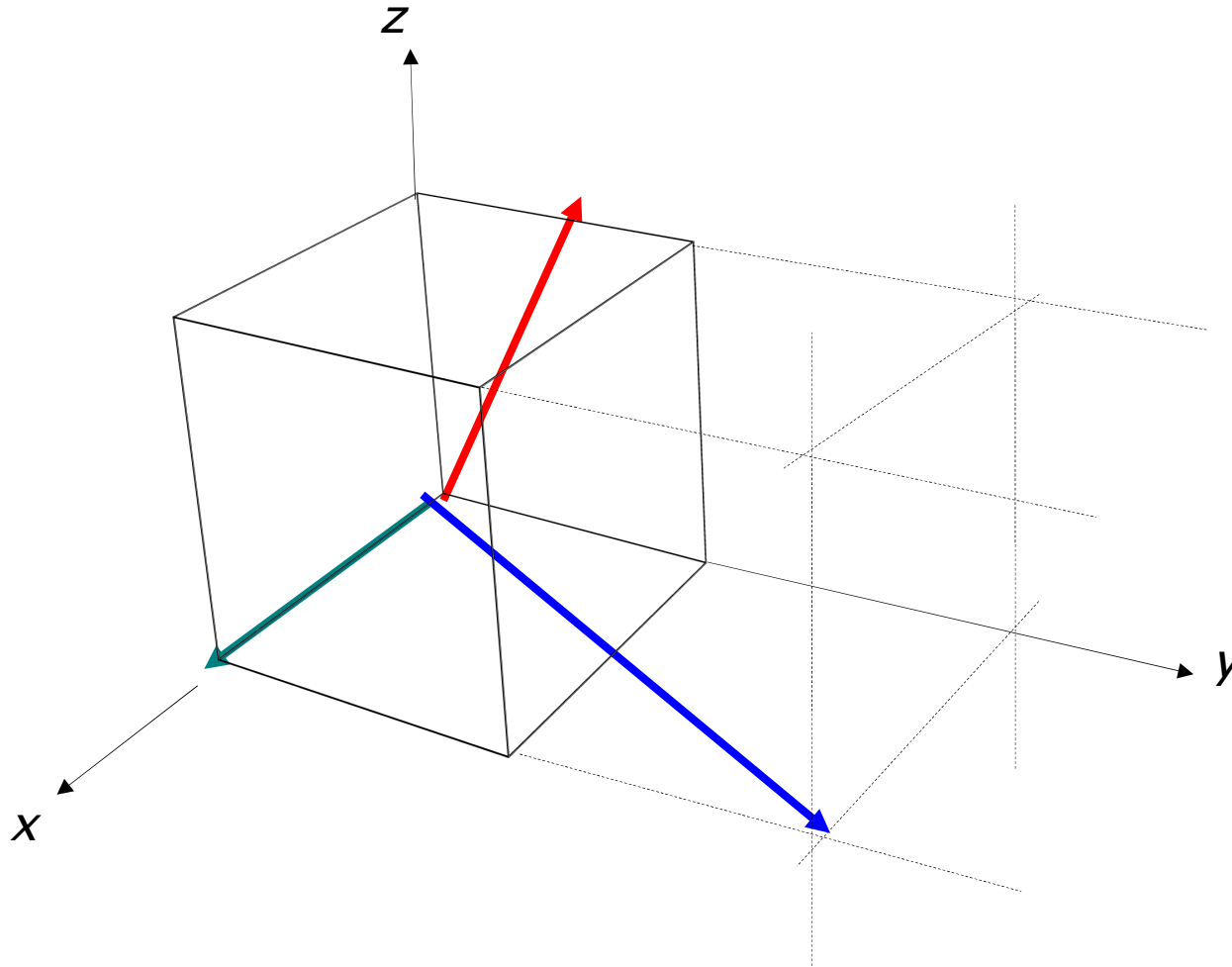


## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

[100]

[012]

[120]

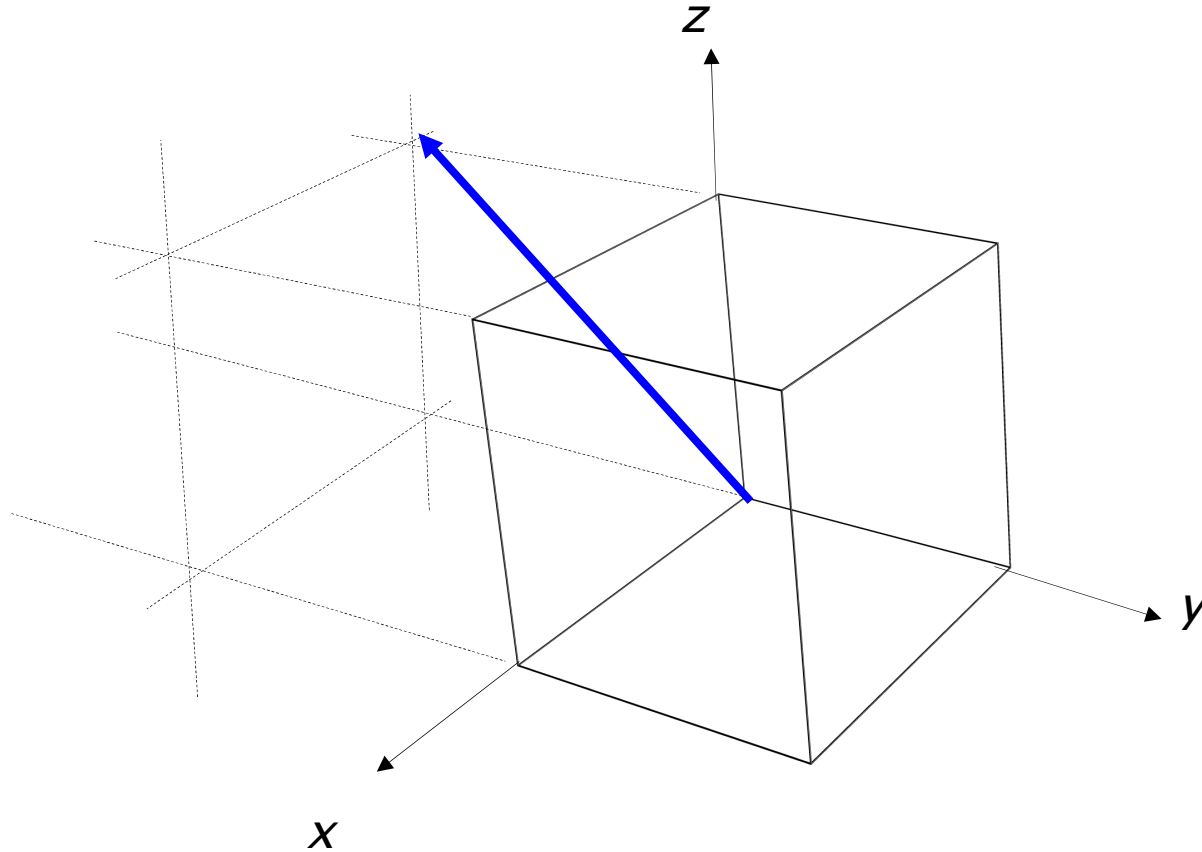






## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

$[0\bar{1}1]$

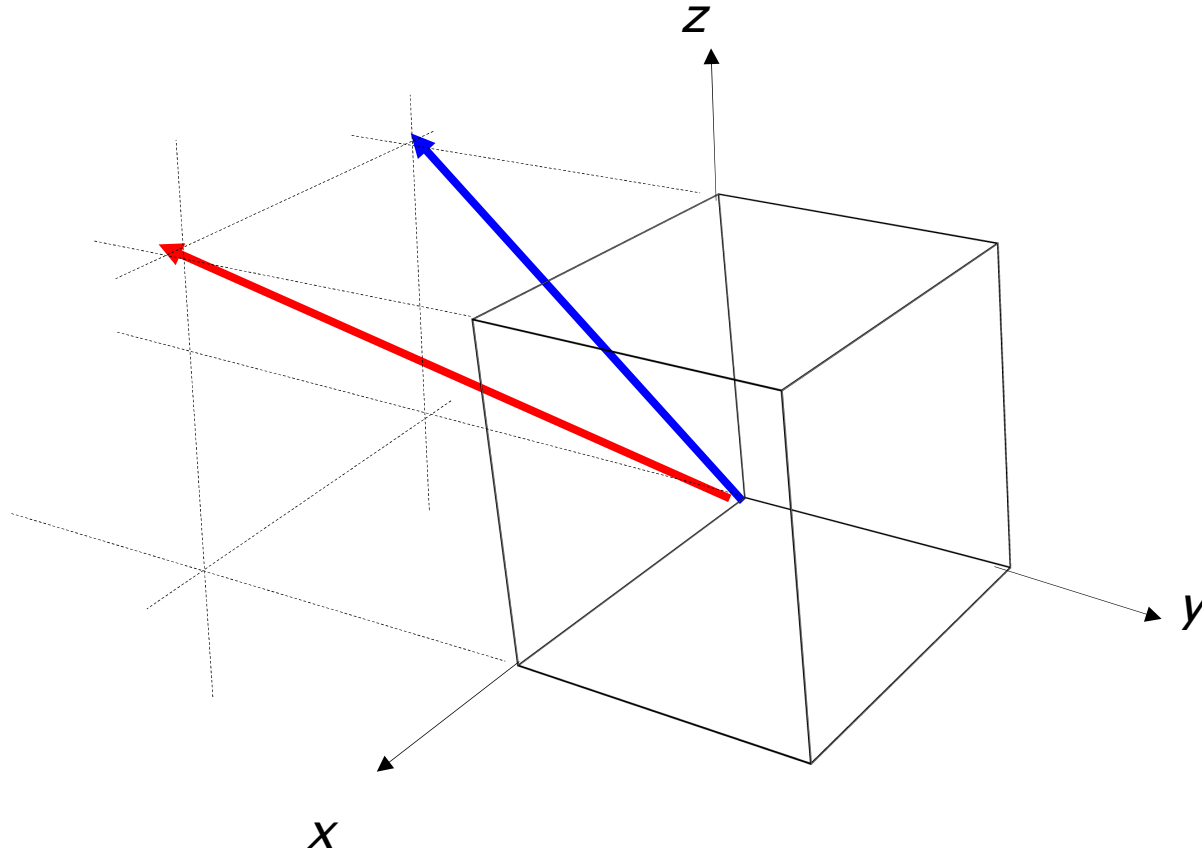




## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

$[0\bar{1}1]$

$[1\bar{1}1]$



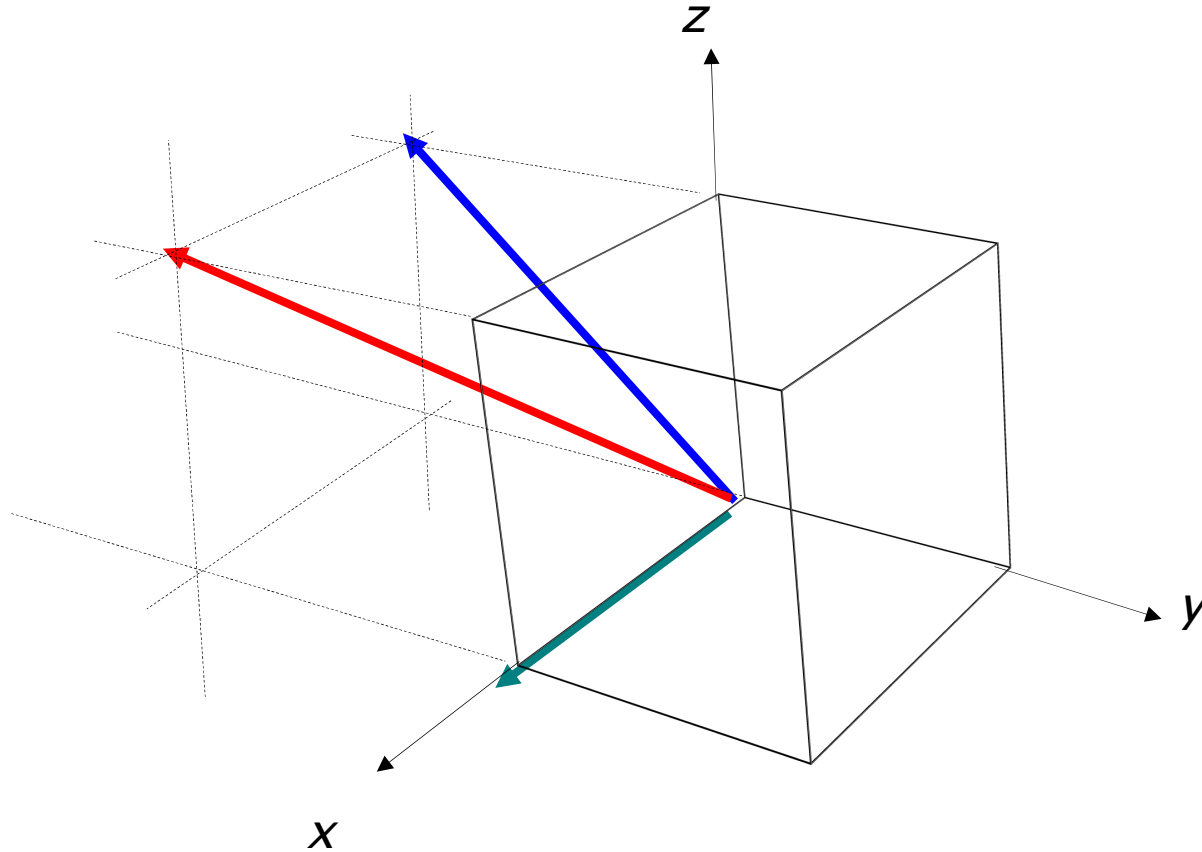


## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

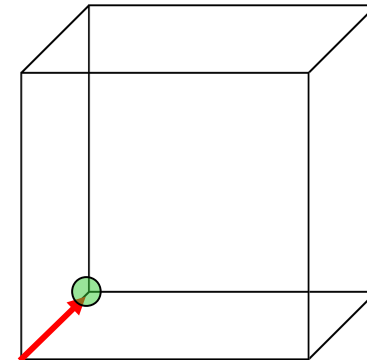
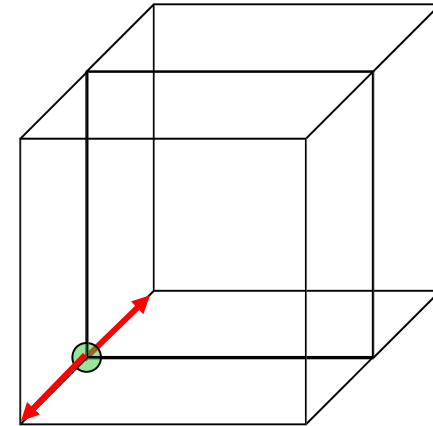
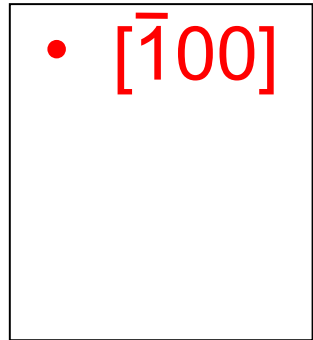
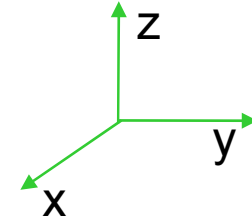
$[0\bar{1}1]$

$[1\bar{1}1]$

$[100]$

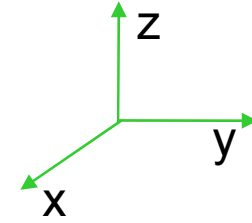
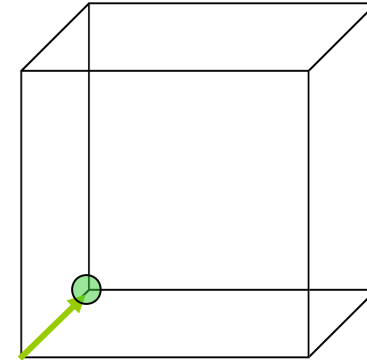
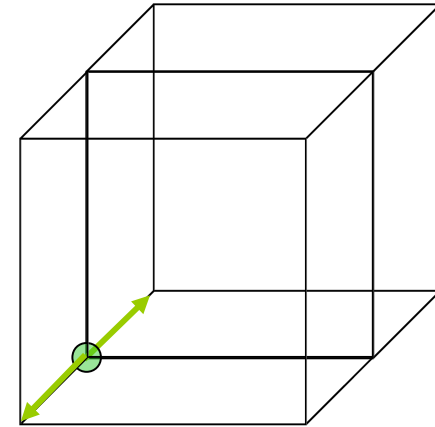
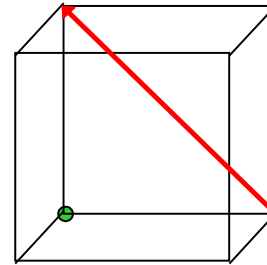
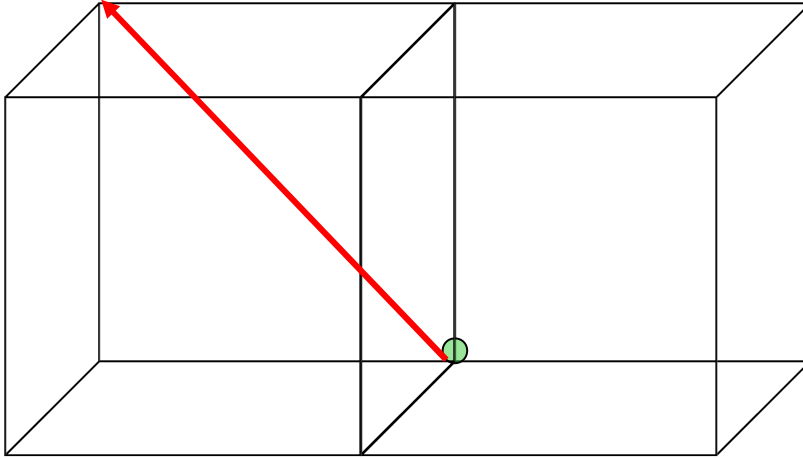


## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER



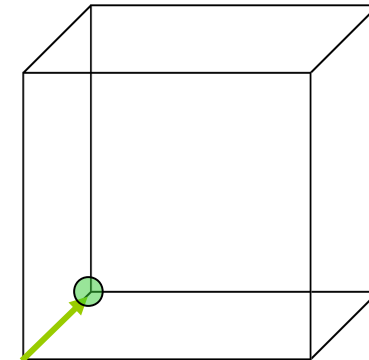
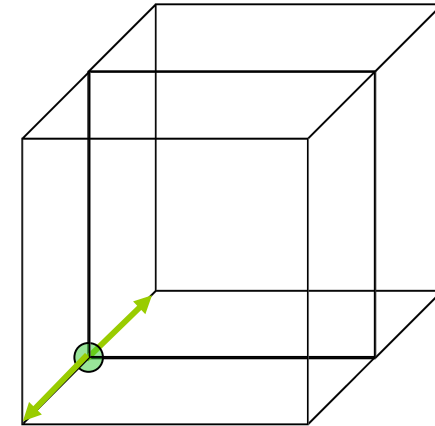
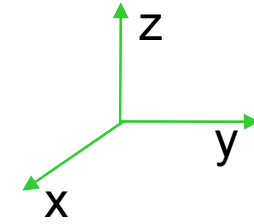
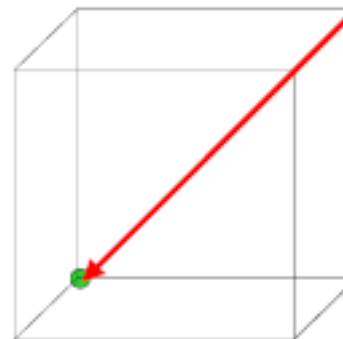
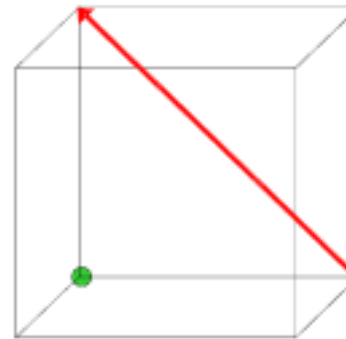
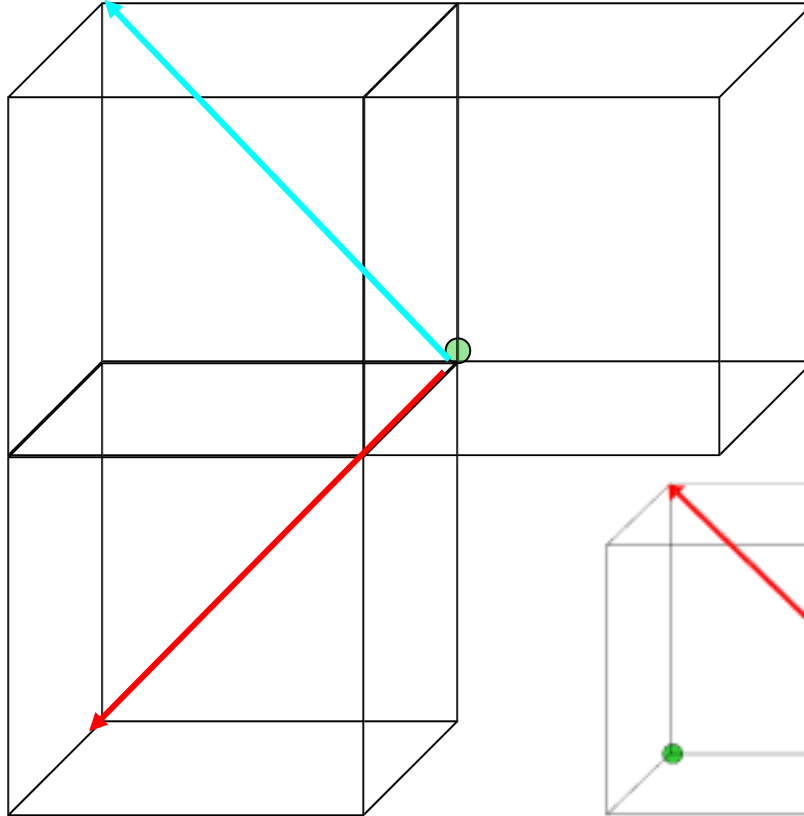
# DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

- $[\bar{1}00]$
- $[0\bar{1}1]$



# DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

- $[\bar{1}00]$
- $[0\bar{1}1]$
- $[0\bar{1}\bar{1}]$



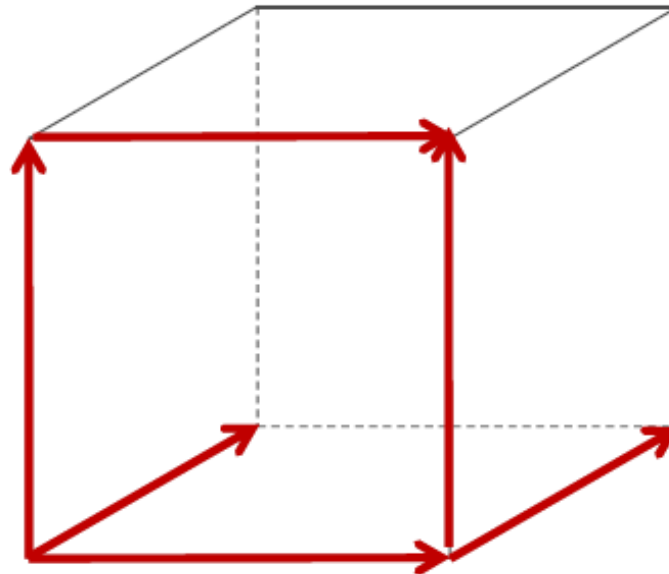
## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

**Direções equivalentes, mesmo que não paralelas!!!**

Espaçamento entre os átomos ao longo  
de cada direção é o mesmo

**Representação:**  $\langle u \ v \ w \rangle$

$\langle 100 \rangle$ :



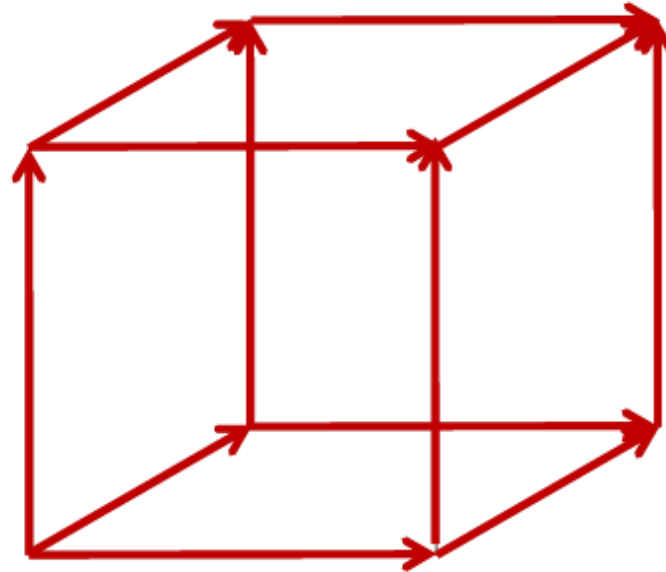
## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

**Direções equivalentes, mesmo que não paralelas!!!**

Espaçamento entre os átomos ao longo  
de cada direção é o mesmo

**Representação:**  $\langle u \ v \ w \rangle$

$\langle 100 \rangle$ :







Universidade Federal do ABC

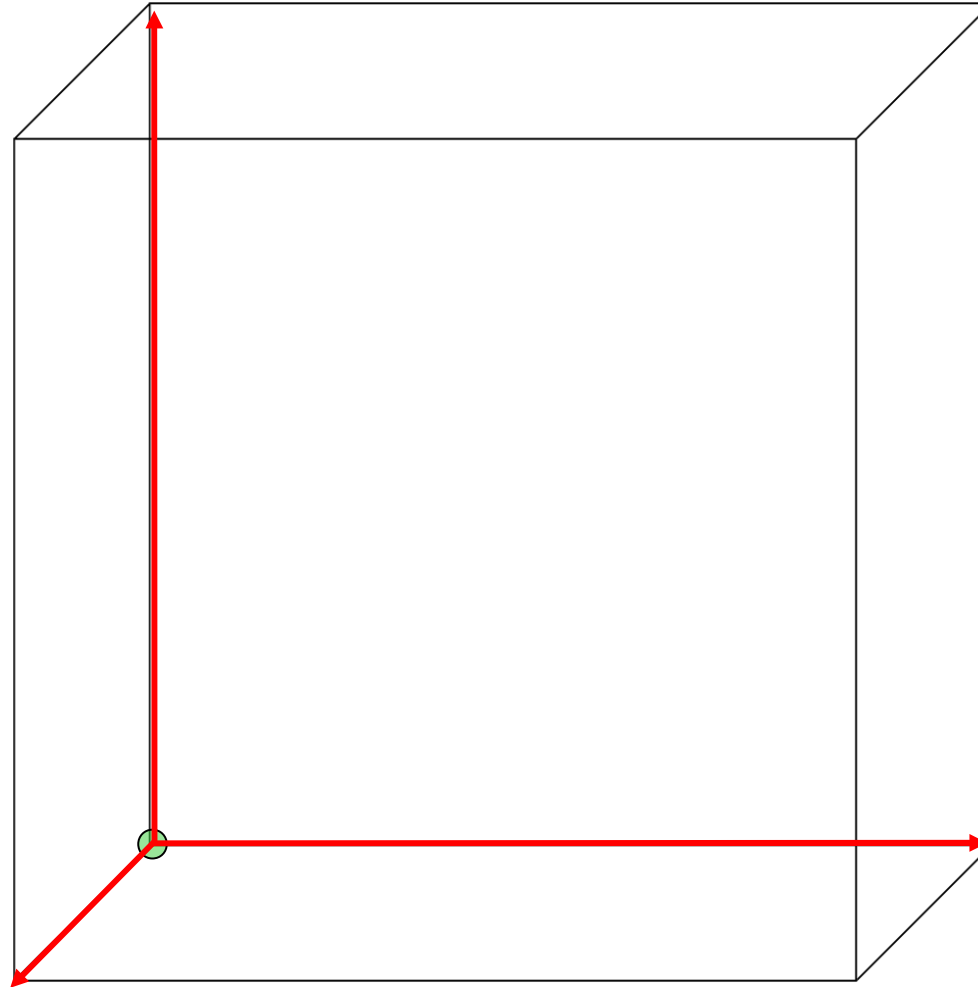
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

### Família de direções

- **$\langle 100 \rangle$**
- $[100]$
- $[010]$
- $[001]$



Uma <família de direções> inclui todas as direções possíveis com as mesmas coordenadas básicas

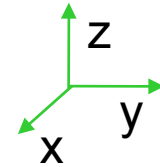
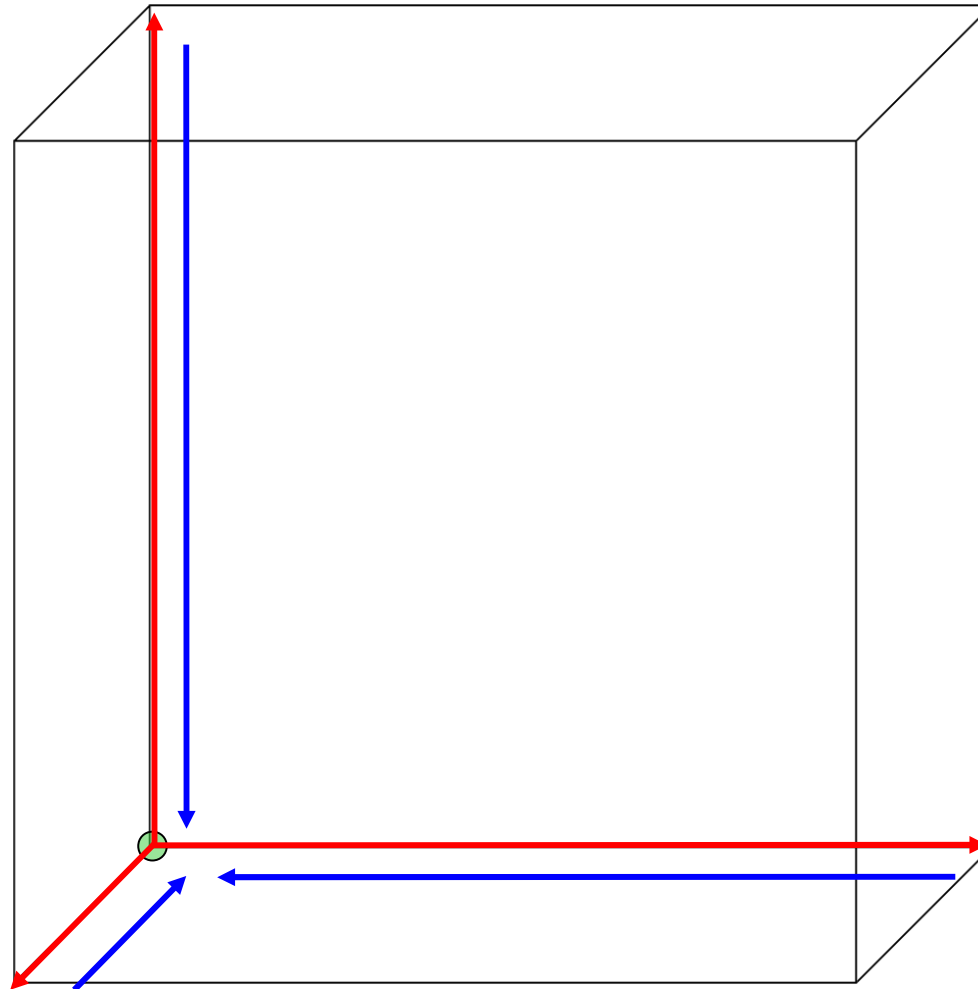


## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

### Família de direções

- **$\langle 100 \rangle$**
- $[100]$
- $[010]$
- $[001]$
- $[\bar{1}00]$
- $[0\bar{1}0]$
- $[00\bar{1}]$

*Sistema cúbico*

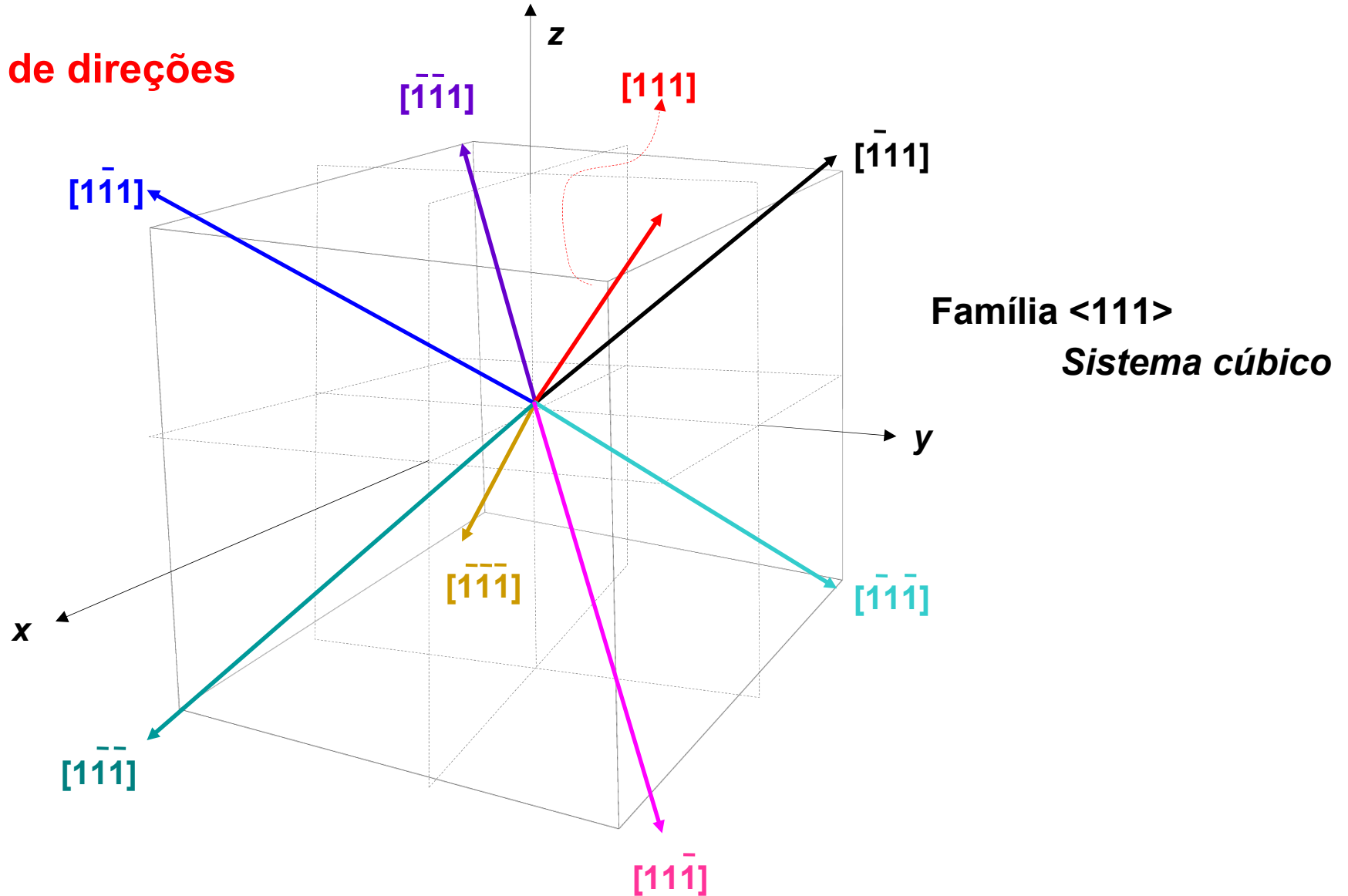


Uma <família de direções> inclui todas as direções possíveis com as mesmas coordenadas básicas



## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – ÍNDICES DE MILLER

**Família de direções**





## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – Família de direções

As direções sempre precisam ser equivalentes para pertencerem à mesma família. Para sistemas com parâmetros de rede diferentes, as famílias podem diferir do sistema cúbico.

**Ex.: sistema tetragonal ( $a=b \neq c$ ):**

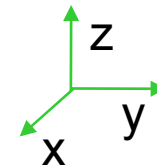
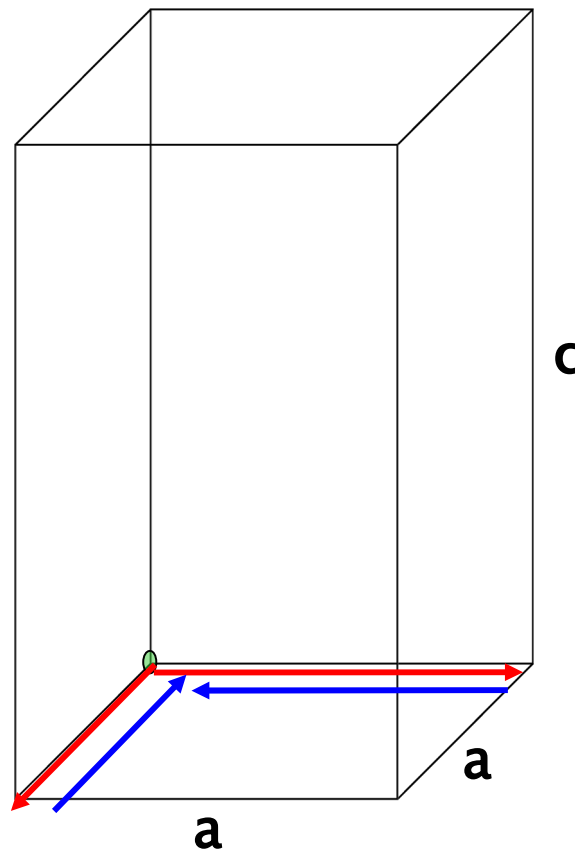
**$\langle 100 \rangle$**

$[100]$

$[010]$

$[\bar{1}00]$

$[0\bar{1}0]$



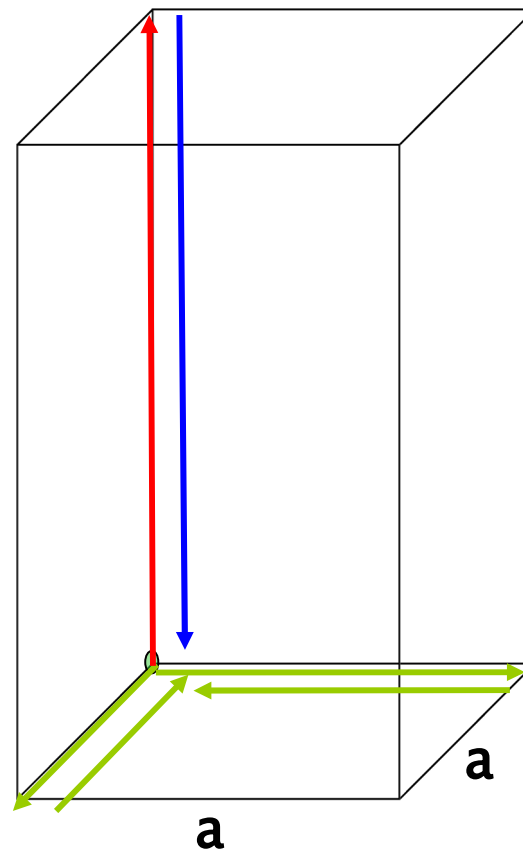


## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS – Família de direções

As direções sempre precisam ser equivalentes para pertencerem à mesma família. Para sistemas com parâmetros de rede diferentes, as famílias podem diferir do sistema cúbico.

**Ex.: sistema tetragonal ( $a=b \neq c$ ):**

<b><math>\langle 100 \rangle</math></b>
$[100]$
$[010]$
$[\bar{1}00]$
$[0\bar{1}0]$
<b><math>\langle 001 \rangle</math></b>
$[001]$
$[00\bar{1}]$

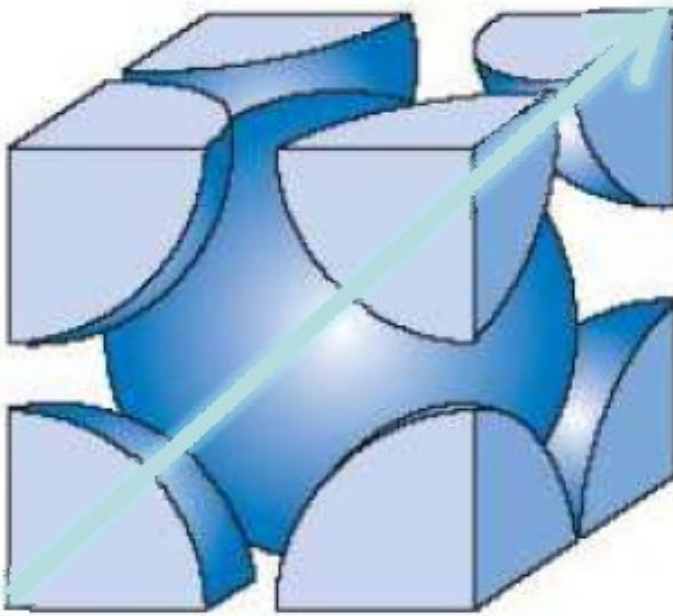


**As famílias  $\langle 100 \rangle$  e  $\langle 001 \rangle$  não são equivalentes!!**



## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS

### Direções Cristalográficas para sistema CCC

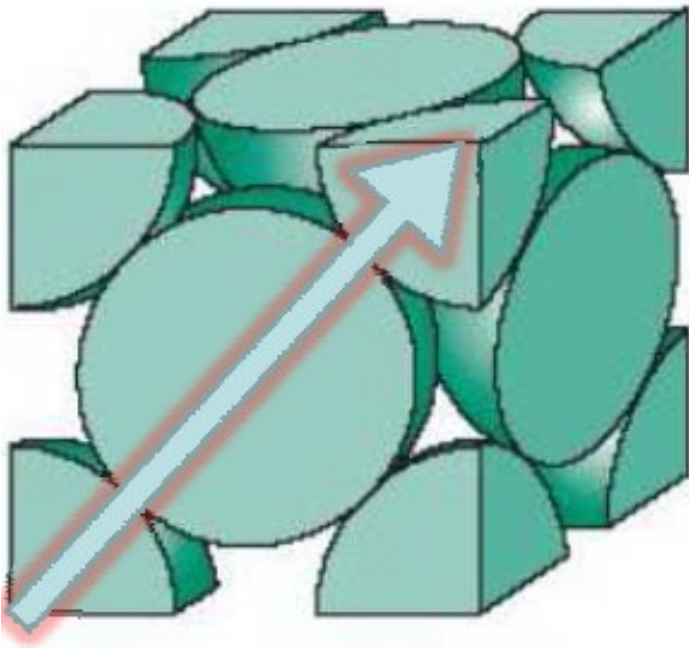


- No sistema CCC os átomos se tocam ao longo da diagonal do cubo, que corresponde a família de direções  $\langle 111 \rangle$ .
- Então, a direção  $\langle 111 \rangle$  é a de maior empacotamento atômico para o sistema CCC.



## DIREÇÕES CRISTALOGRÁFICAS

### Direções Cristalográficas para o sistema CFC



- No sistema CFC os átomos se tocam ao longo da diagonal da face, que corresponde a família de direções  $\langle 110 \rangle$ .
- Então, a direção  $\langle 110 \rangle$  é a de maior empacotamento atômico para o sistema CFC.

## DIREÇÕES E PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Planos cristalográficos

1- Desenhe a origem e a célula unitária

2- O plano  $x, y, z$  interceptará os eixos em  $1/x, 1/y$  e  $1/z$ .

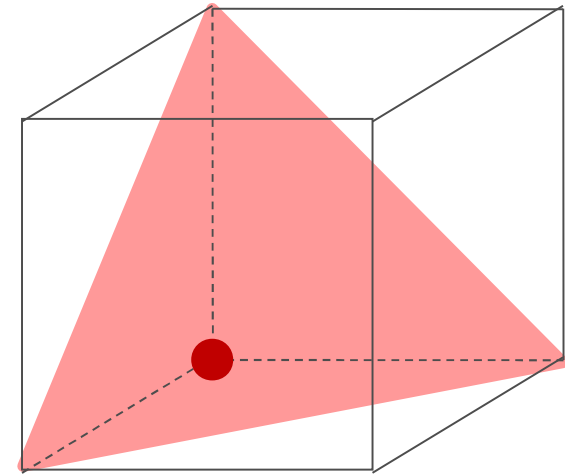
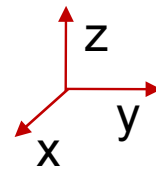
(Ex: 1,1,1)

3- Dividir ou multiplicar os três números por um fator comum

(Ex: 1,1,1)

4- Representação por meio dos índices de Miller, entre parênteses:  
(h k l)

Plano (111):



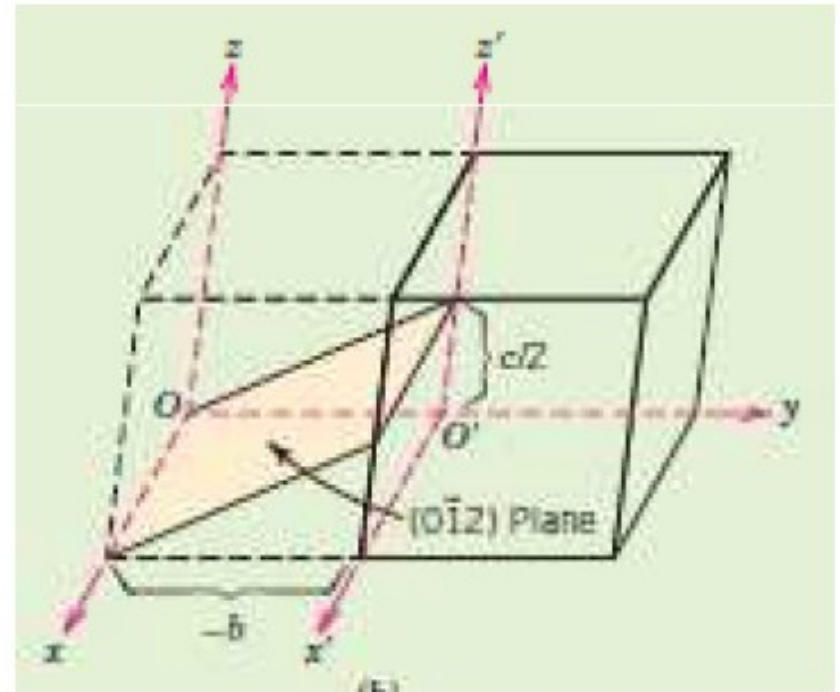


## PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Planos cristalográficos

Determine os índices de miller para o plano cristalográfico indicado na figura

Como o plano passa pela origem, deve ser transladado ou nova origem escolhida

	x	y	z
intercepto	$\infty$ a	-b	c/2
	$\infty$	-1	1/2
inverso	0	-1	2
notação	$(0\bar{1}2)$		





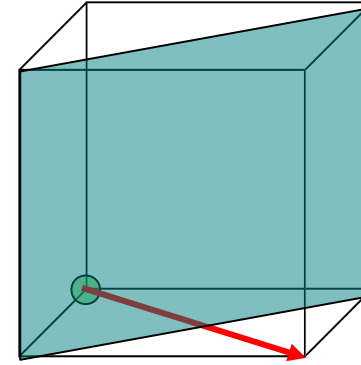
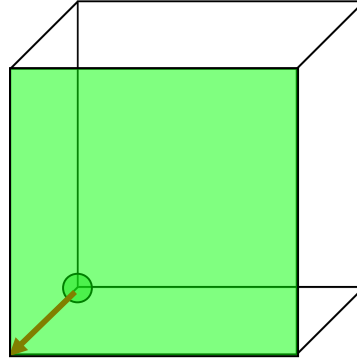
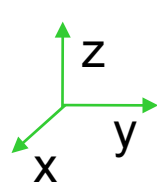
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Planos cristalográficos

- (hkl):
- (100)
- (110)





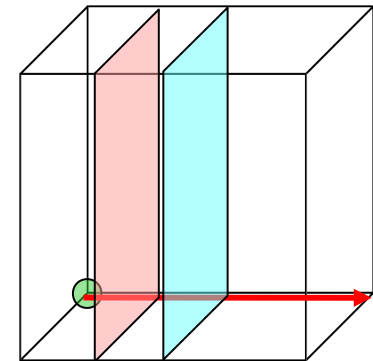
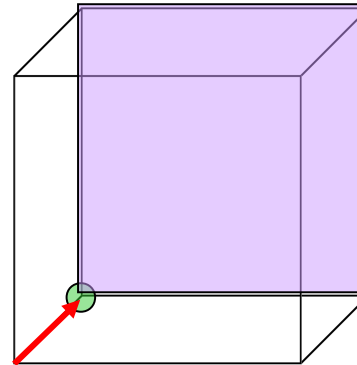
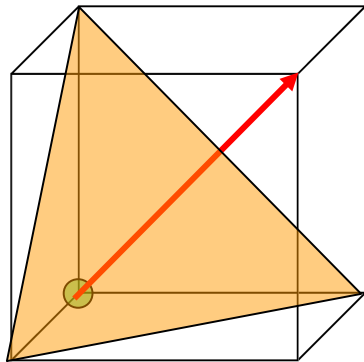
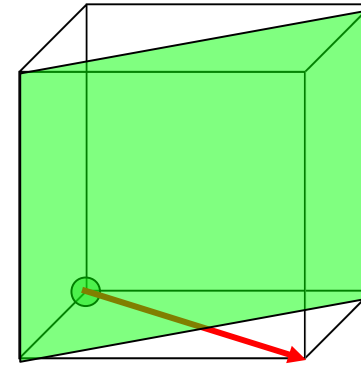
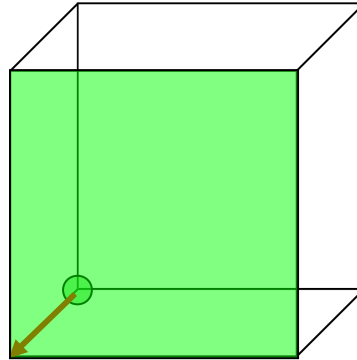
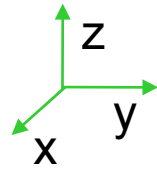
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Planos cristalográficos

- $(hkl)$ :
- $(100)$
- $(110)$
- $(111)$
- $(\bar{1}00)$
- $(020)$
- $(040)$



**No sistema cúbico, uma direção com os mesmos índices de Miller de um plano representa a direção normal a esse plano!**

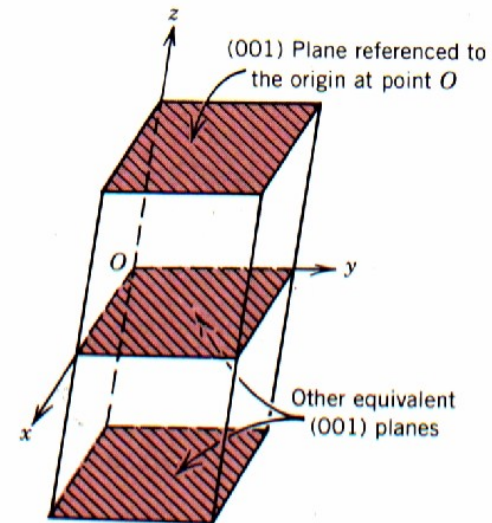
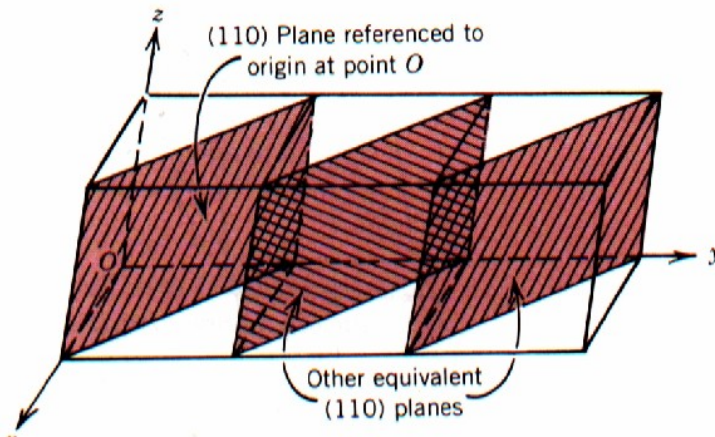
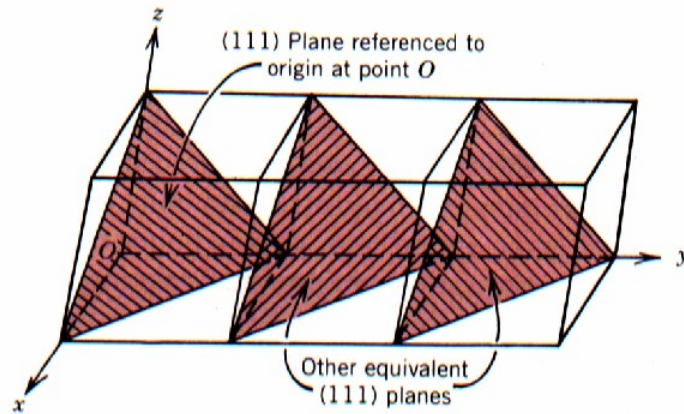


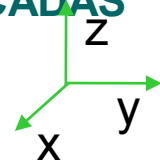
Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

## PLANOS CRISTALOGRÁFICOS – Planos cristalográficos

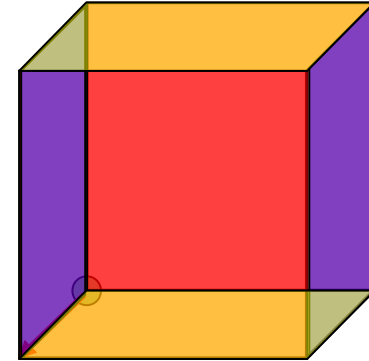
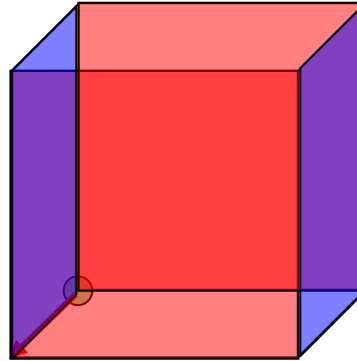
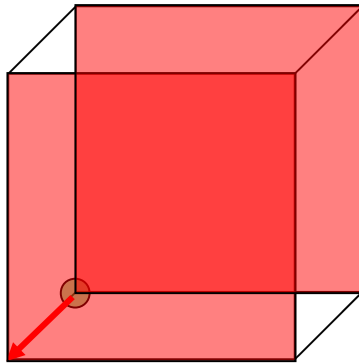


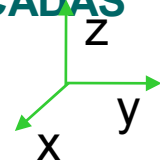


## PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Planos cristalográficos

Notação:  $\{hkl\}$

- $\{100\}$

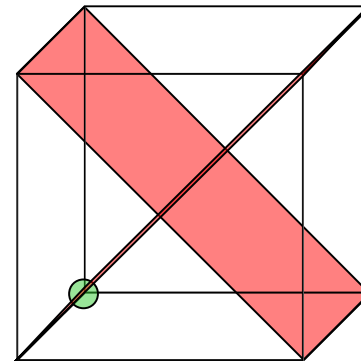
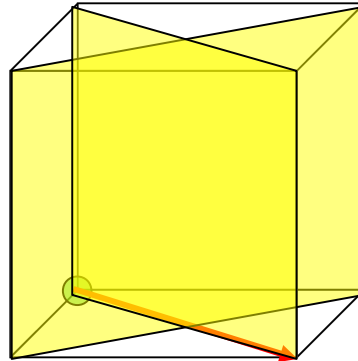
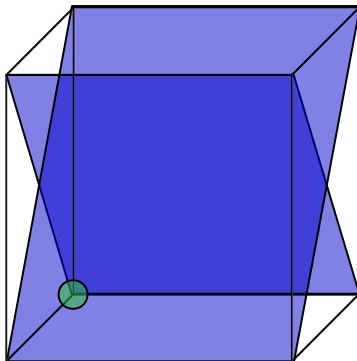
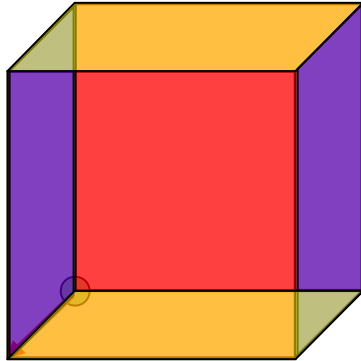




## PLANOS CRISTALOGRÁFICOS – Família de planos

Notação:  $\{hkl\}$

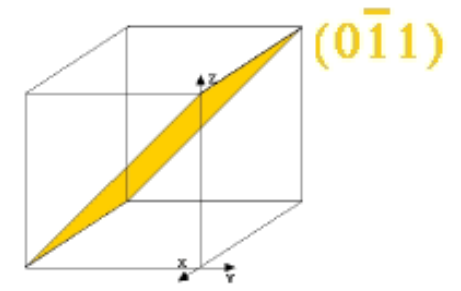
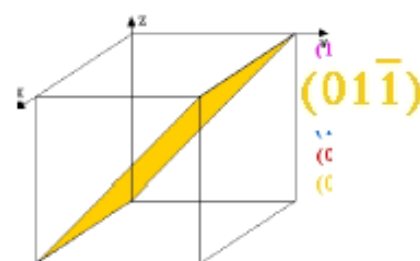
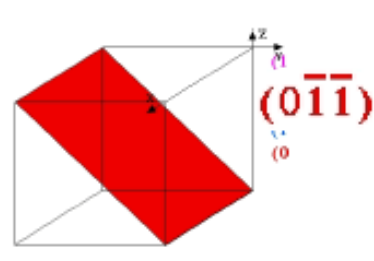
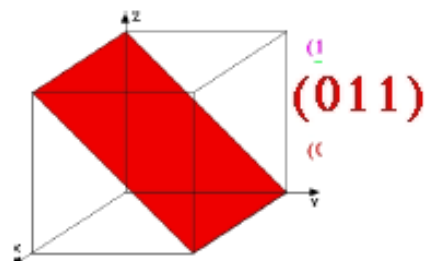
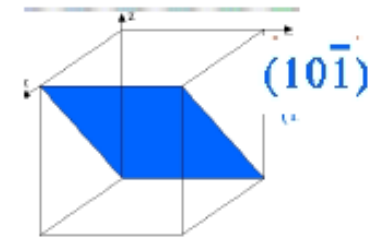
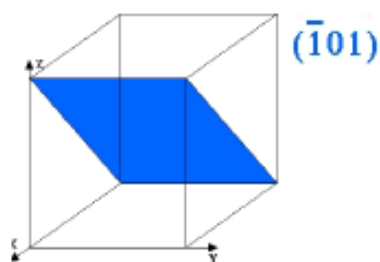
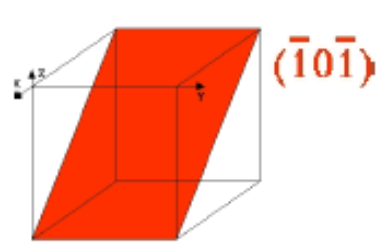
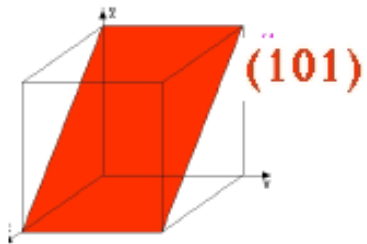
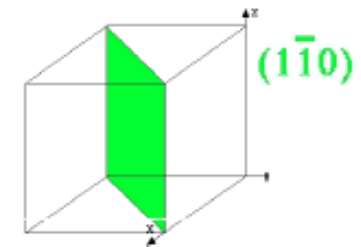
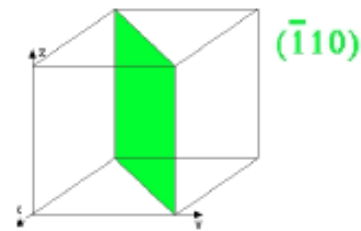
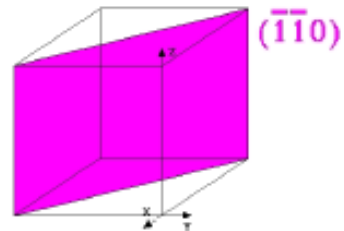
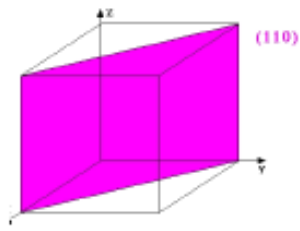
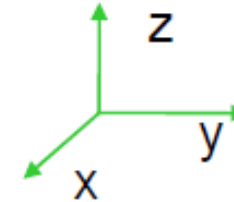
- $\{100\}$
- $\{110\}$

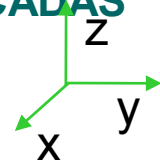




## PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Família de planos

**FAMÍLIA DE PLANOS  $\{110\}$**   
É paralelo à um eixo

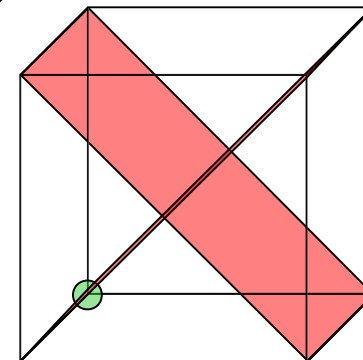
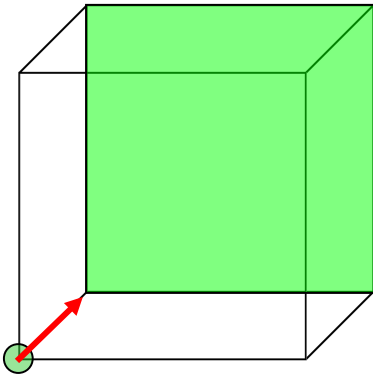
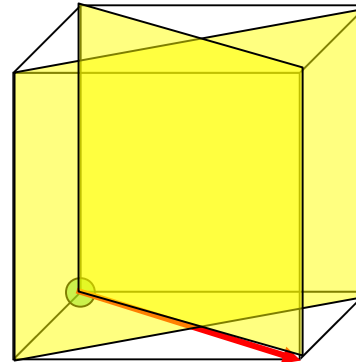
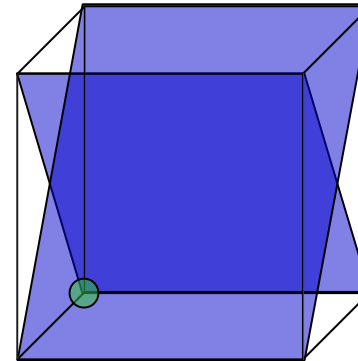
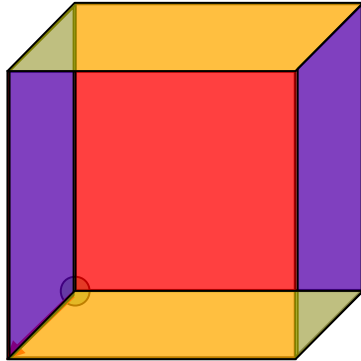




## PLANOS CRISTALOGRÁFICOS – Família de planos

Notação:  $\{hkl\}$

- $\{100\}$
- $\{110\}$
- $(\bar{1}00)$

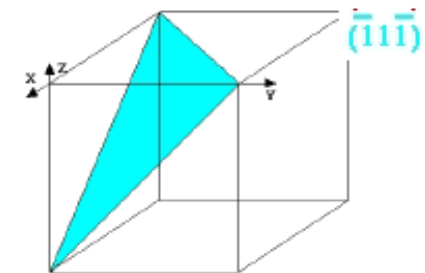
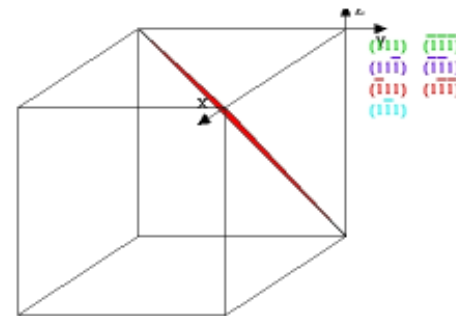
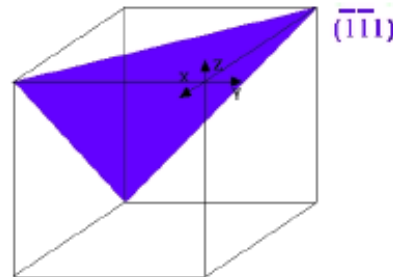
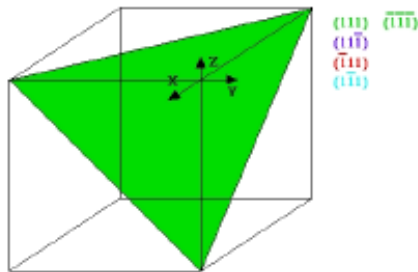
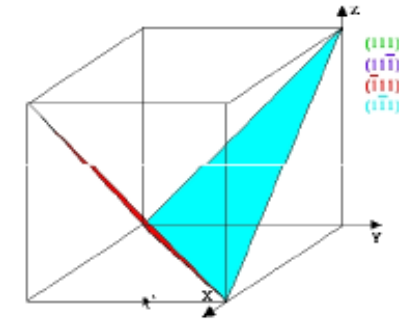
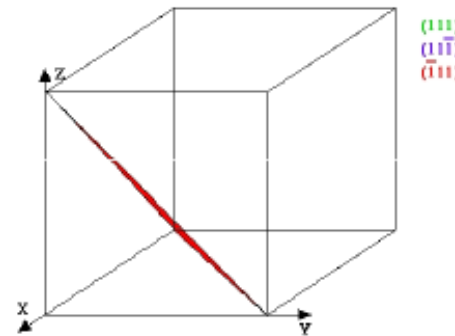
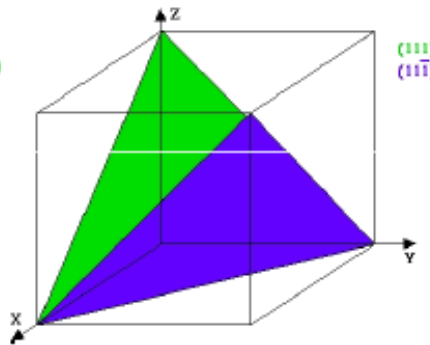
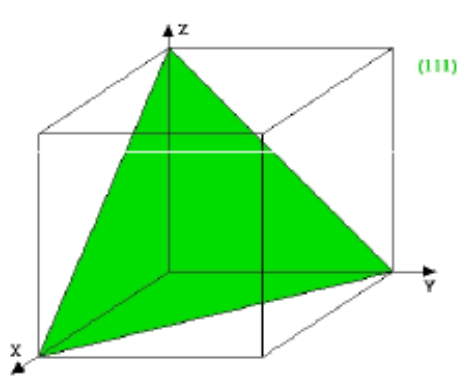
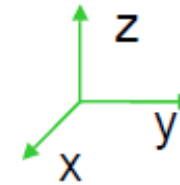






## PLANOS CRISTALOGRAFICOS – Família de planos

### FAMÍLIA DE PLANOS {111} Intercepta os três eixos



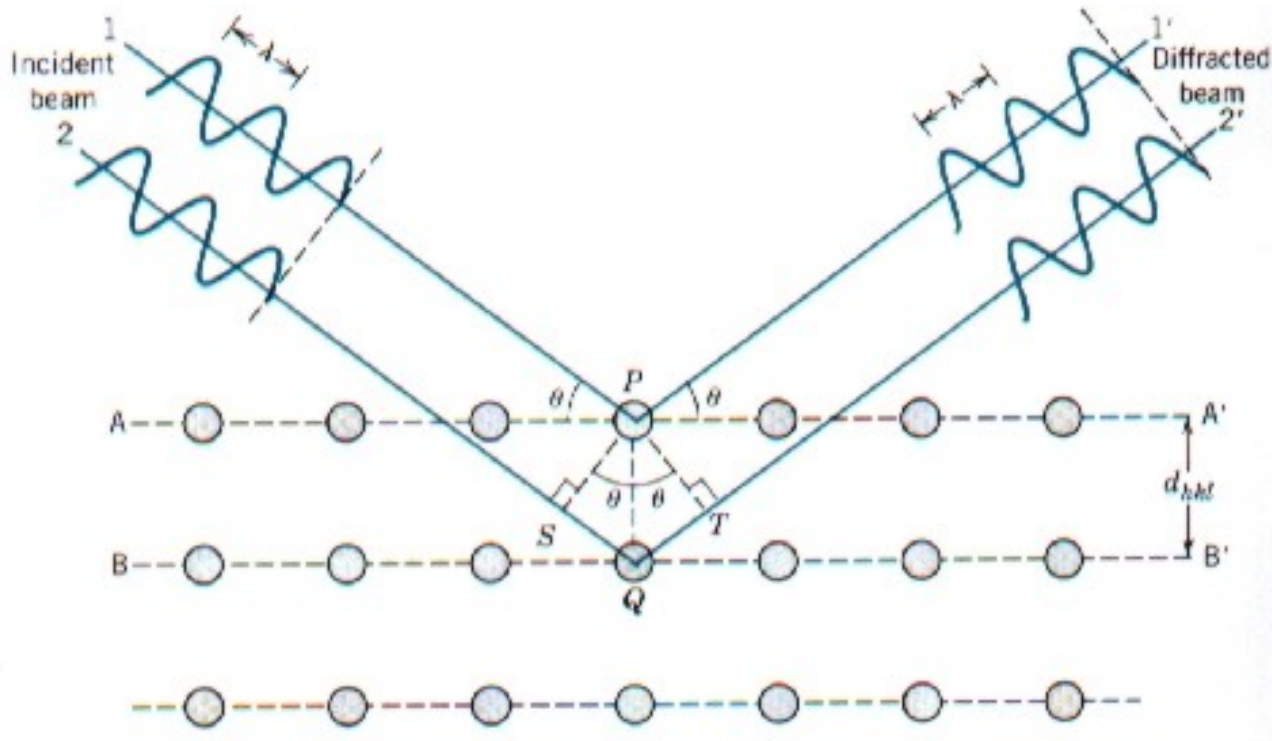


Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### DIFRAÇÃO DE RAIOS X (X-RAY DIFFRACTION)



$$n\lambda = \overline{SQT} \quad \text{Para interferência construtiva}$$

$$n\lambda = d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta = 2d_{hkl} \sin \theta$$

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad (\text{Lei de Bragg})$$

## DENSIDADE – MASSA ESPECÍFICA

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

$\rho$  = densidade

$n$  = número de átomos associados a célula unitária

$V_c$  = volume da célula unitária

$N_A$  = número de Avogadro ( $6,023 \times 10^{23}$  átomos/mol)

$A$  = massa atômica do elemento



Universidade Federal do ABC

## DENSIDADE ATÔMICA LINEAR (DL)

Apenas átomos que tiverem o centro na direção analisada.

$$D_L = \frac{L_{\text{átomos}}}{L_{\text{linha}}} = \frac{L_A}{L_L}$$

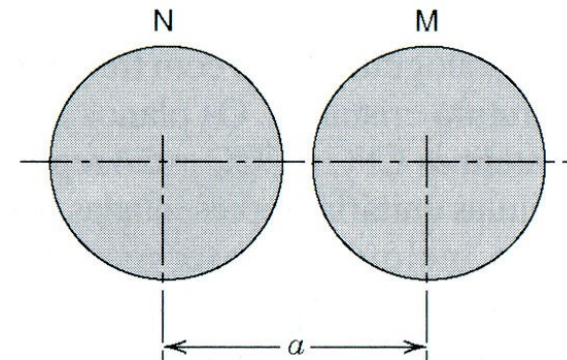
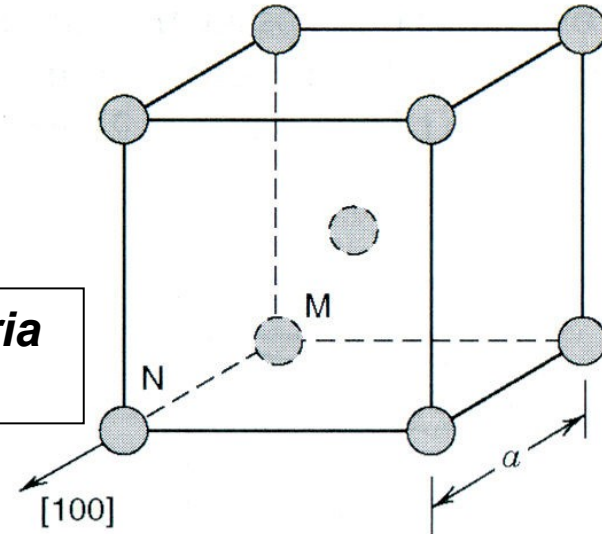
$$L_L = \text{aresta} = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

$$L_A = 2R$$

Assim :

$$D_L = \frac{L_A}{L_C} = \frac{\sqrt{3}R}{2R} = 0,866$$

*cela unitária  
CCC*



**CCC – direção [100]**

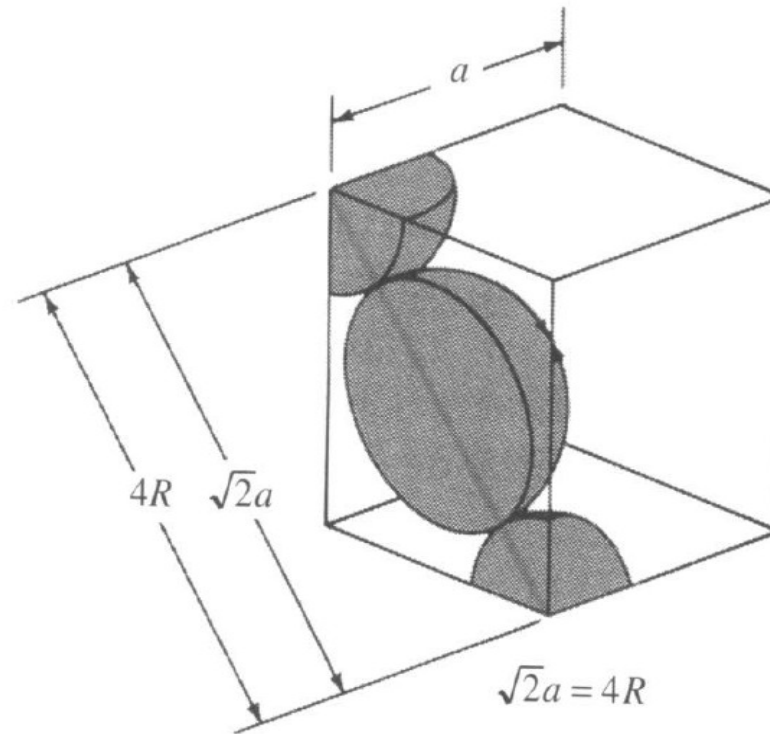
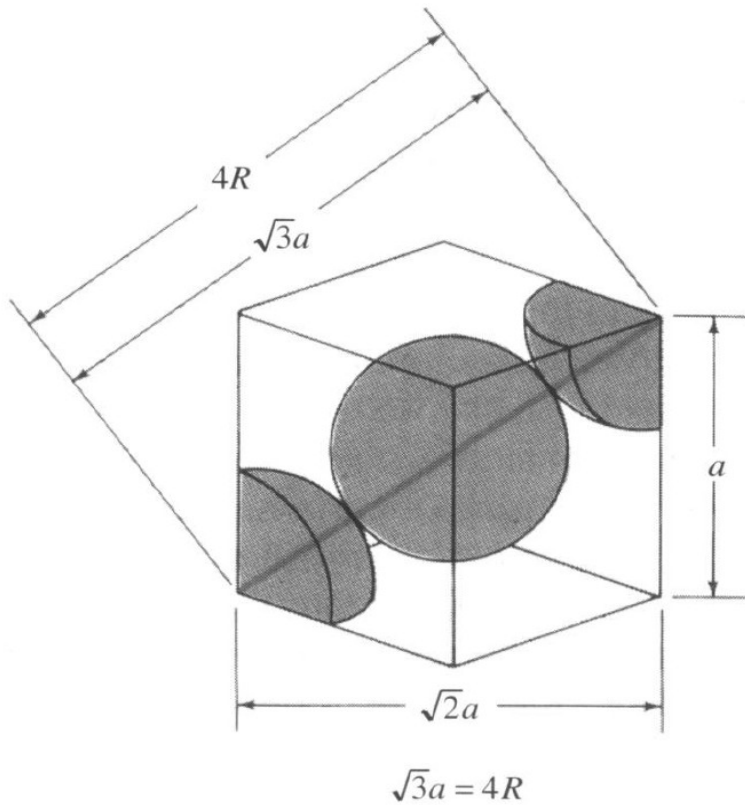


Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### DENSIDADE ATÔMICA LINEAR (DL)



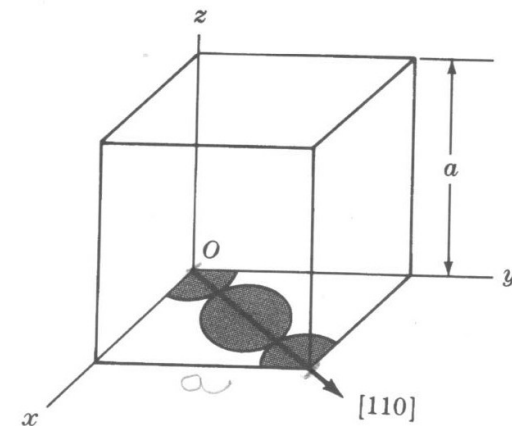
## DENSIDADE ATÔMICA LINEAR (DL)

Calcule a densidade atômica linear  $\rho_l$  na direção  $[110]$  da rede cristalina do cobre, em átomos por milímetro. O cobre é CFC e o parâmetro de rede é 0,361 nm.

### Resolução:

Os átomos cujos centros são intersectados pela direção  $[110]$  estão indicados na fig. 3.23. Seleccionemos, como comprimento de referência, o comprimento da diagonal da face da célula unitária CFC, que é  $\sqrt{2} a$ . O número de diâmetros atômicos intersectados por este comprimento de referência é  $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2$  átomos. Assim, usando a equação (3.7), a densidade atômica linear é

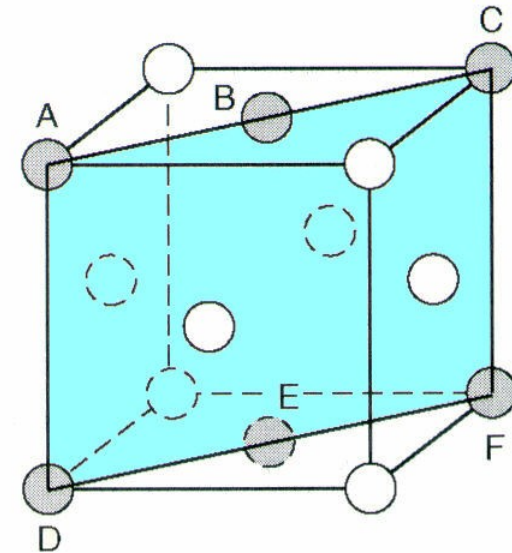
$$\begin{aligned}\rho_l &= \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}} = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2} (0,361 \text{ nm})} = \frac{3,92 \text{ átomos}}{\text{nm}} \\ &= \frac{3,92 \text{ átomos}}{\text{nm}} \times \frac{10^6 \text{ nm}}{\text{mm}} \\ &= 3,92 \times 10^6 \text{ átomos/mm} \triangleleft\end{aligned}$$



## DENSIDADE ATÔMICA PLANAR (DP)

$$DP = \frac{\text{Área}_{\text{átomos no plano}}}{\text{Área}_{\text{plano}}} = \frac{A_A}{A_P}$$

$$A_P = (\overline{AC})(\overline{AD}) = (4R)(2R\sqrt{2}) = 8R^2\sqrt{2}$$



***cela unitária - CFC***

***CFC – plano (110)***





Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### DENSIDADE ATÔMICA PLANAR (DP)

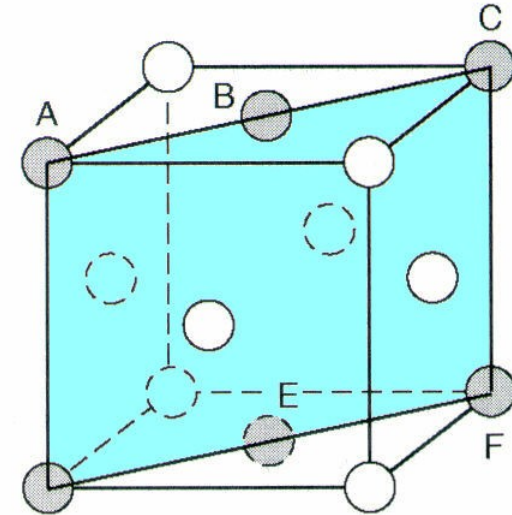
$$DP = \frac{\text{Área}_{\text{átomos no plano}}}{\text{Área}_{\text{plano}}} = \frac{A_A}{A_P}$$

$$A_P = (\overline{AC})(\overline{AD}) = (4R)(2R\sqrt{2}) = 8R^2\sqrt{2}$$

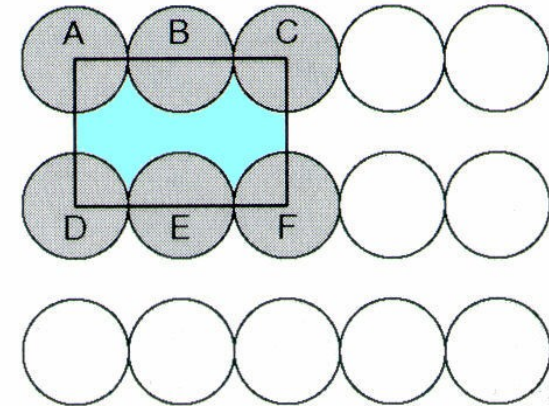
$$A_C = (2)\pi R^2$$

Assim :

$$DP = \frac{A_C}{A_P} = \frac{2\pi R^2}{8R^2\sqrt{2}} = 0,555$$



**cela unitária - CFC**



**CFC – plano (110)**



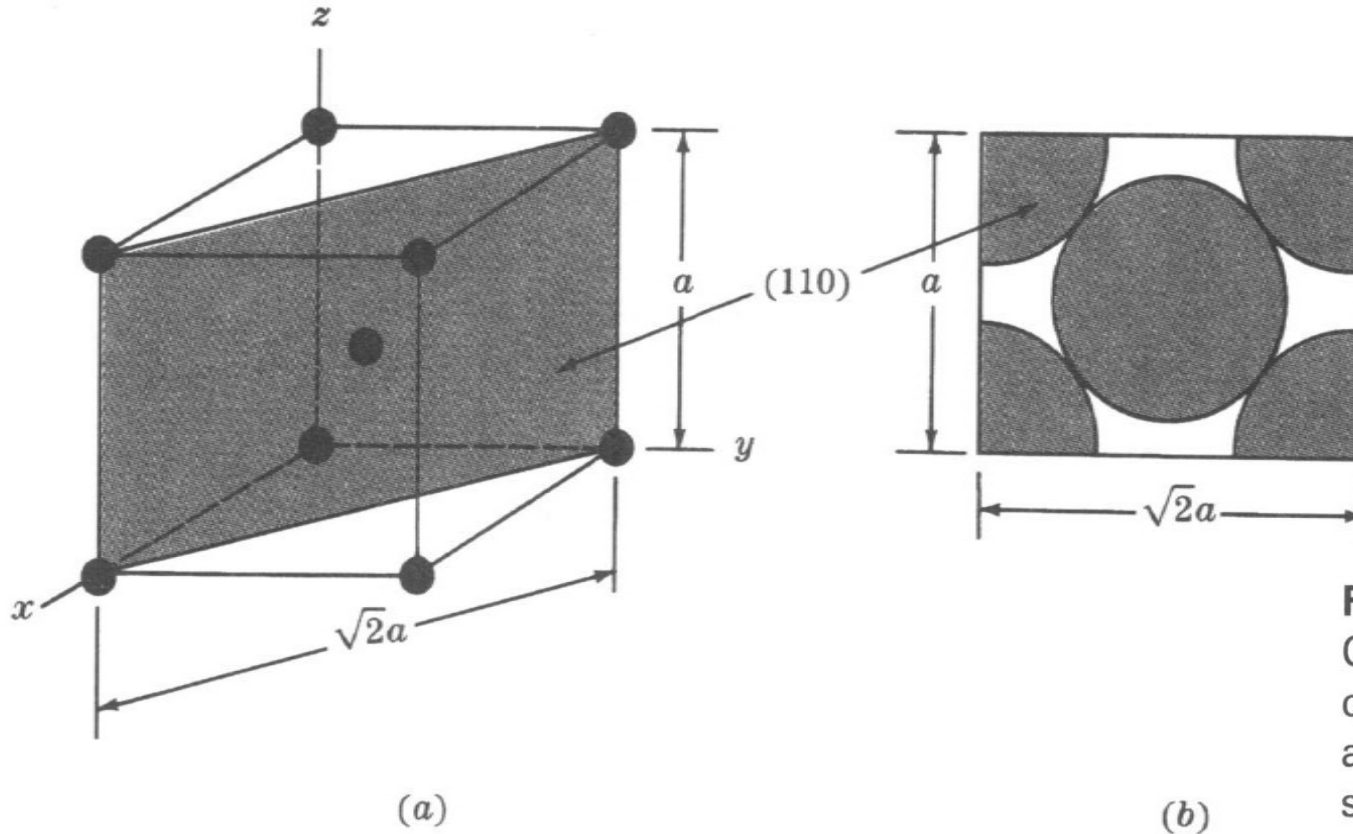


Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

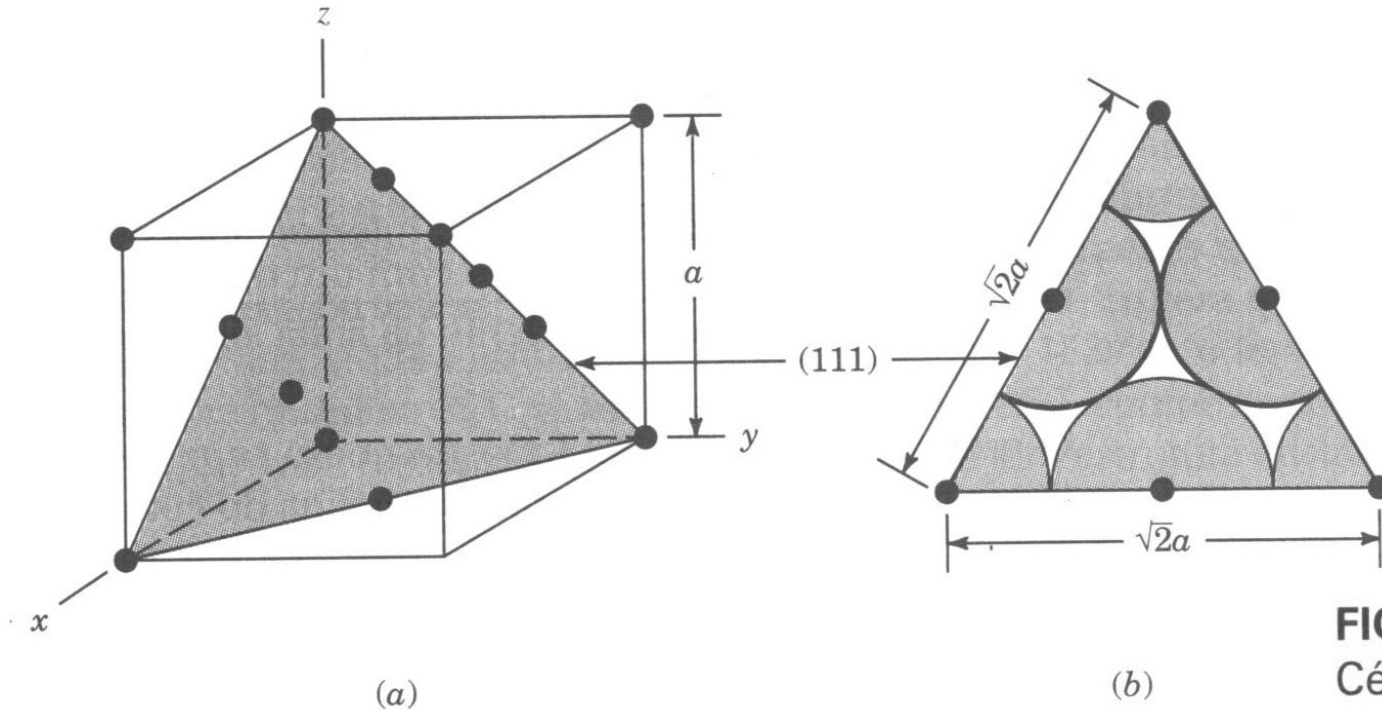
### DENSIDADE ATÔMICA PLANAR (DP)



**FIGURA 3.22** (a) Célula unitária CCC com as posições atômicas, indicando-se, a sombreado, um plano (110). (b) Áreas dos átomos cortados pelo plano (110) numa célula unitária CCC.



## DENSIDADE ATÔMICA PLANAR (DP)



**FIGURA 3.22A** (a) Célula unitária CFC com as posições atômicas, mostrando-se, a sombreado, um plano (111). (b) Áreas dos átomos cortados pelo plano (111) numa célula unitária CFC.

## DENSIDADE ATÔMICA PLANAR (DP)

Calcule a densidade atômica planar  $\rho_p$ , em átomos por milímetro quadrado, no plano (110) do ferro- $\alpha$ , cuja rede é CCC. O parâmetro de rede do ferro- $\alpha$  é 0,287 nm.

**Resolução:**

$$\rho_p = \frac{\text{n.º efectivo de átomos cujos centros são intersectados pela área seleccionada}}{\text{área seleccionada}} \quad (3.6)$$

O número efectivo de átomos intersectados pelo plano (110), em termos da área interior à célula unitária CCC, está representado na fig. 3.22, e é

$$1 \text{ átomo no centro} + 4 \times \frac{1}{4} \text{ átomos nos quatro vértices do plano} = 2 \text{ átomos}$$

A área do plano (110) interior à célula unitária (área seleccionada) é

$$(\sqrt{2}a)(a) = \sqrt{2}a^2$$

Assim, a densidade atômica planar é

$$\begin{aligned} \rho_p &= \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2} (0,287 \text{ nm})^2} = \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \\ &= \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \times \frac{10^{12} \text{ nm}^2}{\text{mm}^2} \\ &= 1,72 \times 10^{13} \text{ átomos/mm}^2 \triangleleft \end{aligned}$$