



Universidade Federal do ABC

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC**

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

# **MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES**

✓ **Estruturas dos materiais**

**Prof. Dr. Renata Ayres Rocha**



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

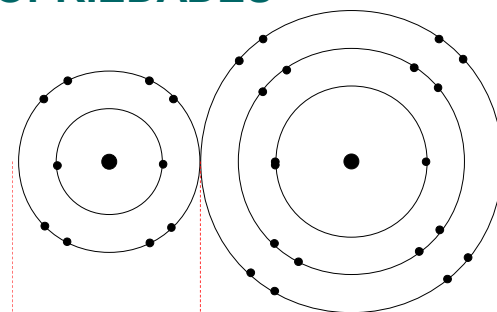
### ESTRUTURA CRISTALINA

#### Modelo de Esferas Rígidas

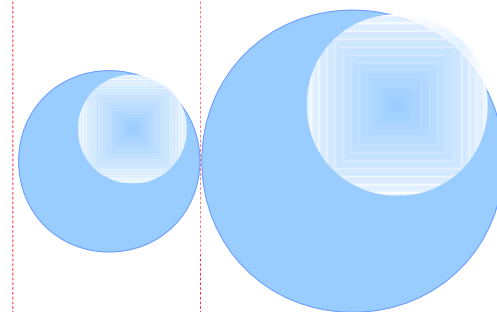
- ✓ Os átomos ou íons podem ser considerados esferas de raio fixo
- ✓ Diferentes elementos apresentam diferentes raios das esferas (raios atômicos)
- ✓ **Raio atômico (ou iônico):** distância do centro do átomo até seu orbital mais externo



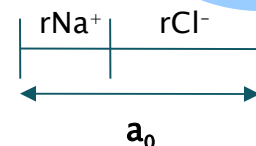
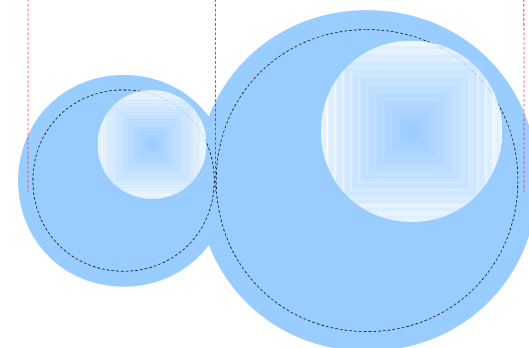
Modelo planetário



Esfera rígida  
(hard sphere)



Esfera flexível  
(soft sphere)





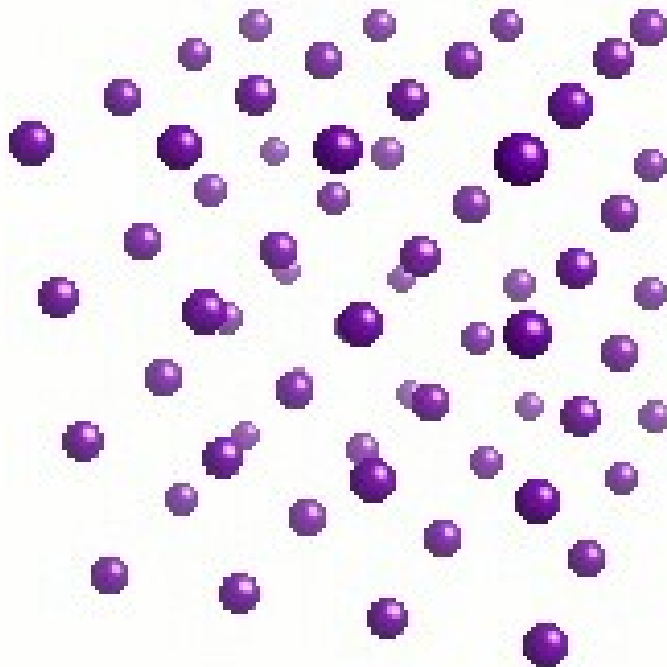
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

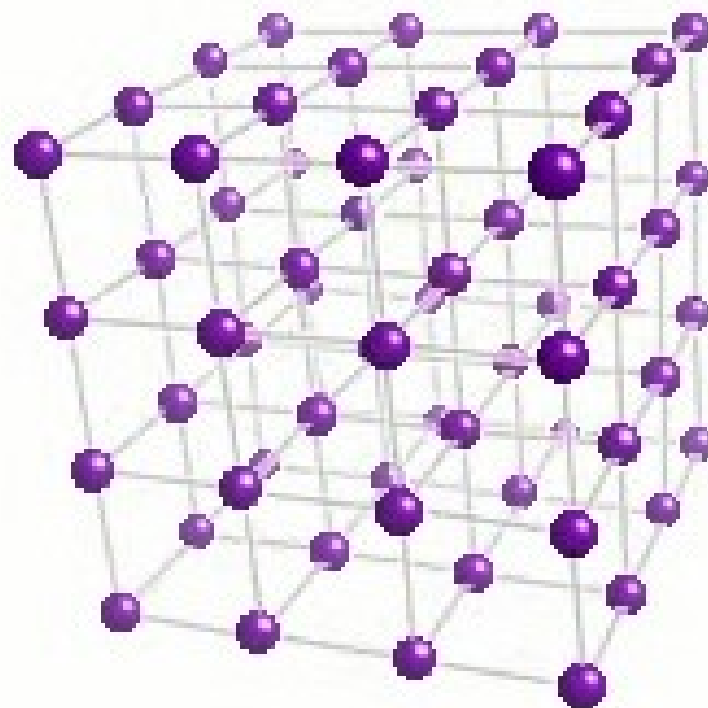
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA

✓ **Reticulado Cristalino (Crystal Lattice):** conjunto de pontos, que podem corresponder a átomos ou grupos de átomos, que se repetem no espaço tridimensional com uma dada periodicidade.



**Sólido cristalino - os átomos são representados por esferas rígidas**



**Reticulado cristalino**



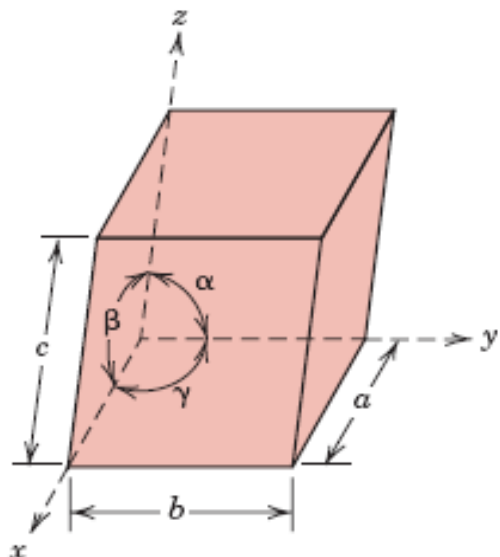
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

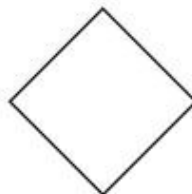
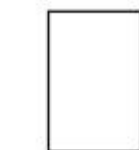
### ESTRUTURA CRISTALINA

**Célula Unitária (unit cell):** agrupamento de átomos representativo de uma determinada estrutura cristalina específica.

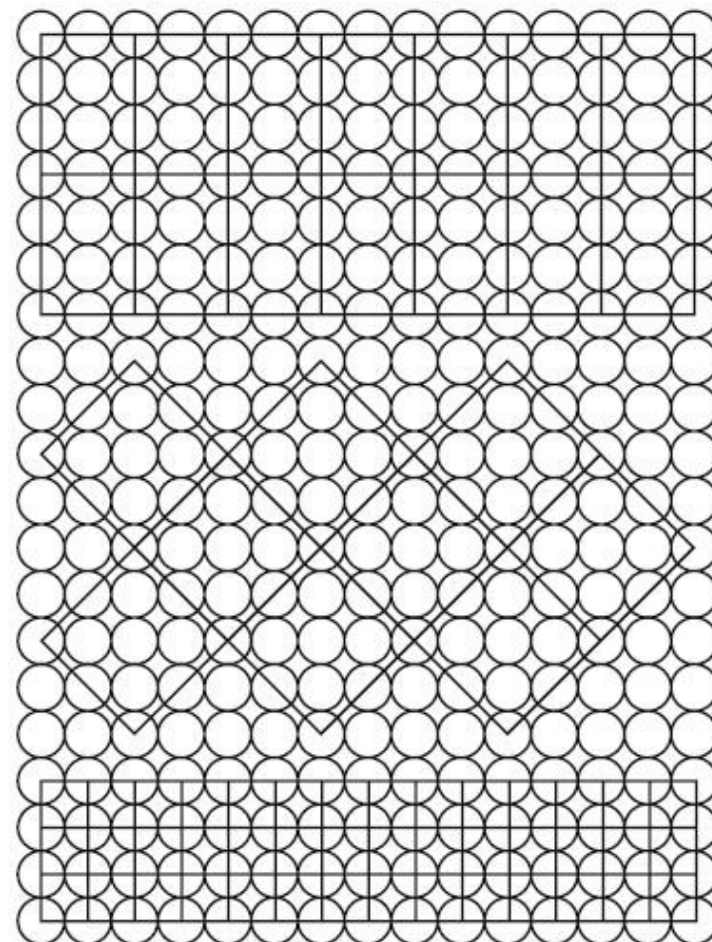


- Sistema de eixos cartesianos ( $x$ ,  $y$  e  $z$ )
- Paralelepípedo (quadrado)

**PARÂMETROS DE REDE:** Arestas ( $a$ ,  $b$  e  $c$ ) e ângulos entre as arestas ( $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ )



célula unitária





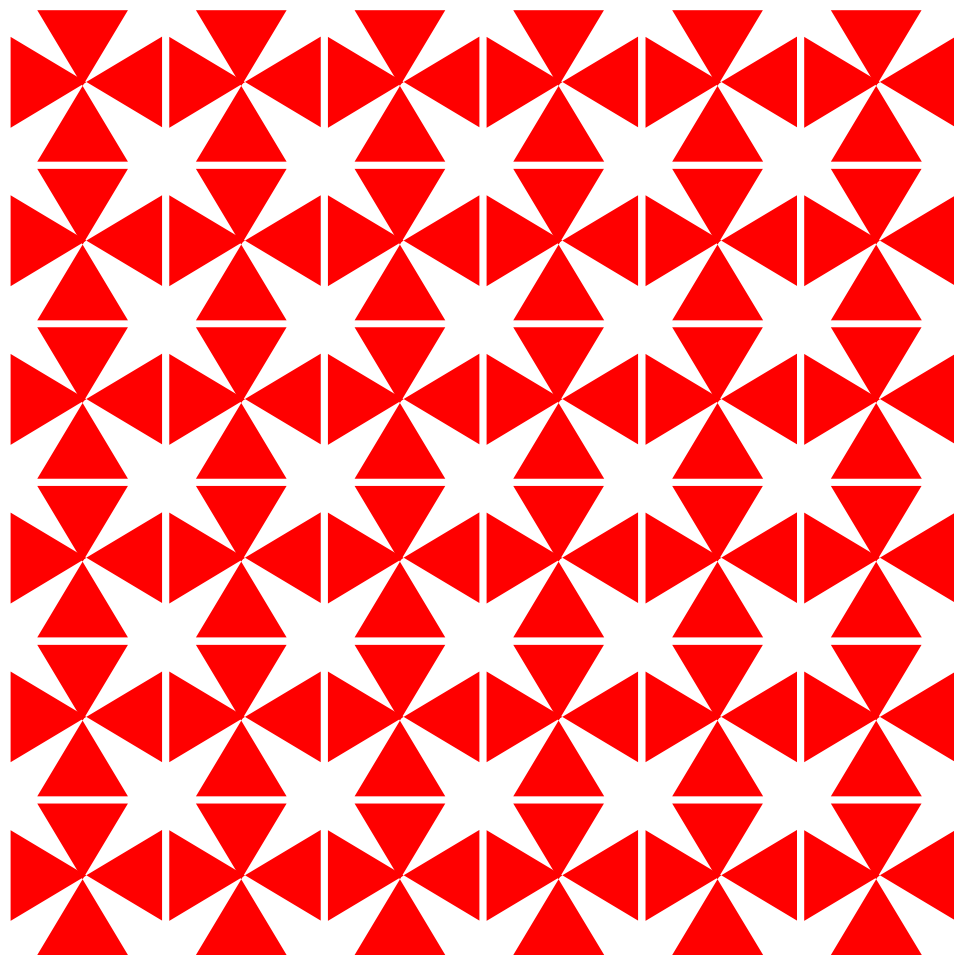
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Célula unitária

*Padrão geométrico repetitivo*



*Qual o elemento  
fundamental de  
repetição?*

*(Menor unidade  
que pode ser  
usada para  
construir o todo)*



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

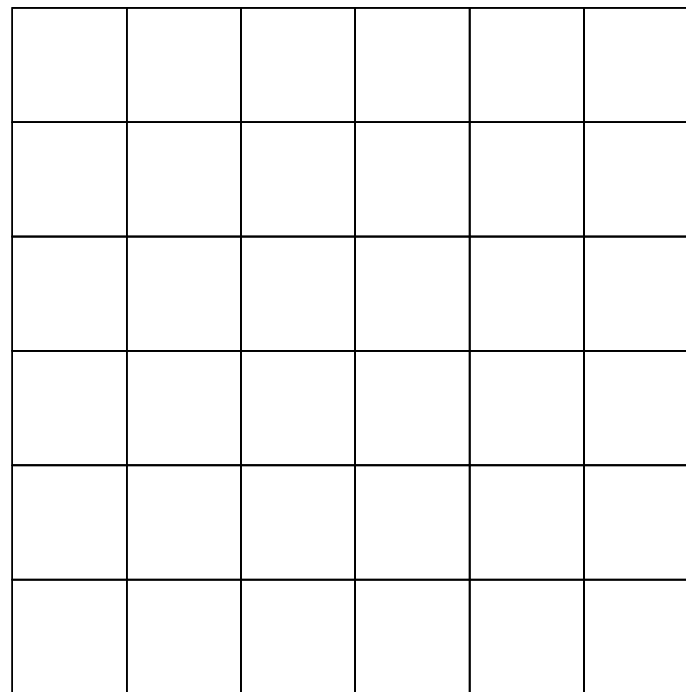
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Célula unitária

**Arranjo aparentemente confuso**



**Arranjo mais ordenado**





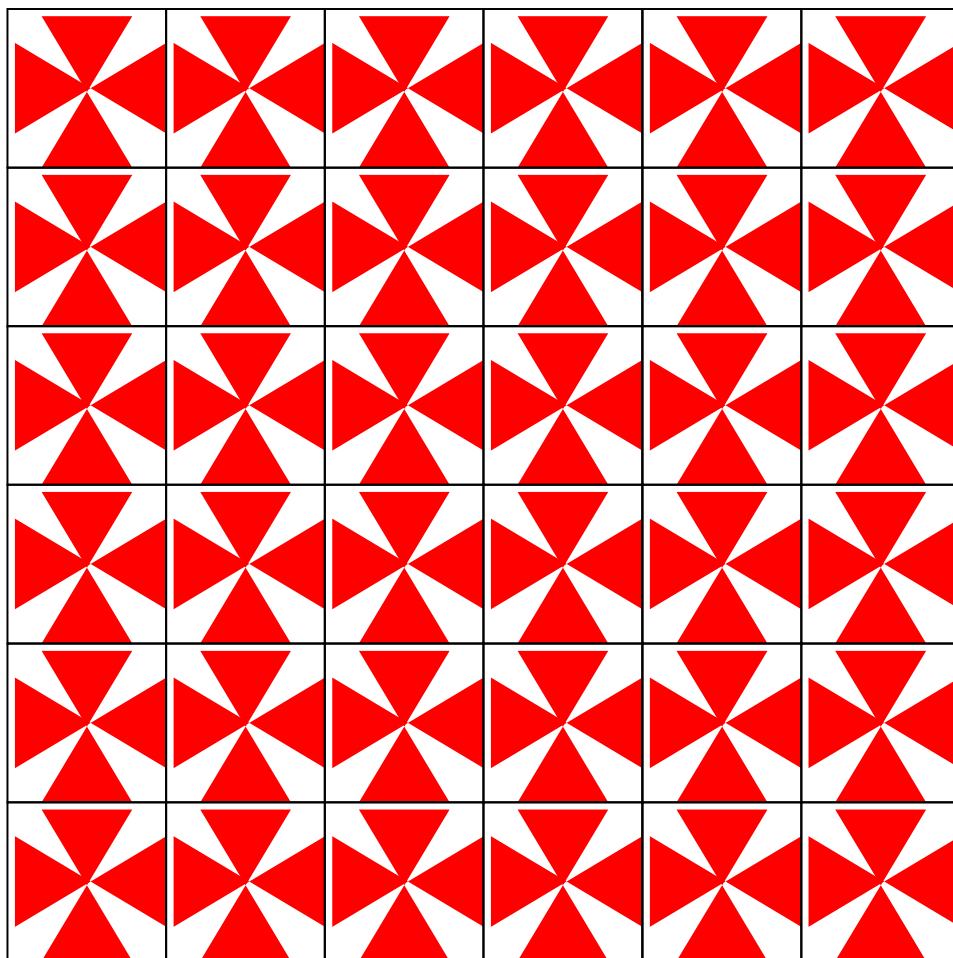
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

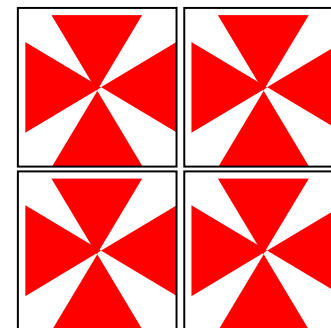
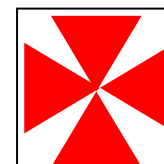
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Célula unitária

Ordem e períodos de repetição podem ser destacados



Célula unitária  
ou primitiva



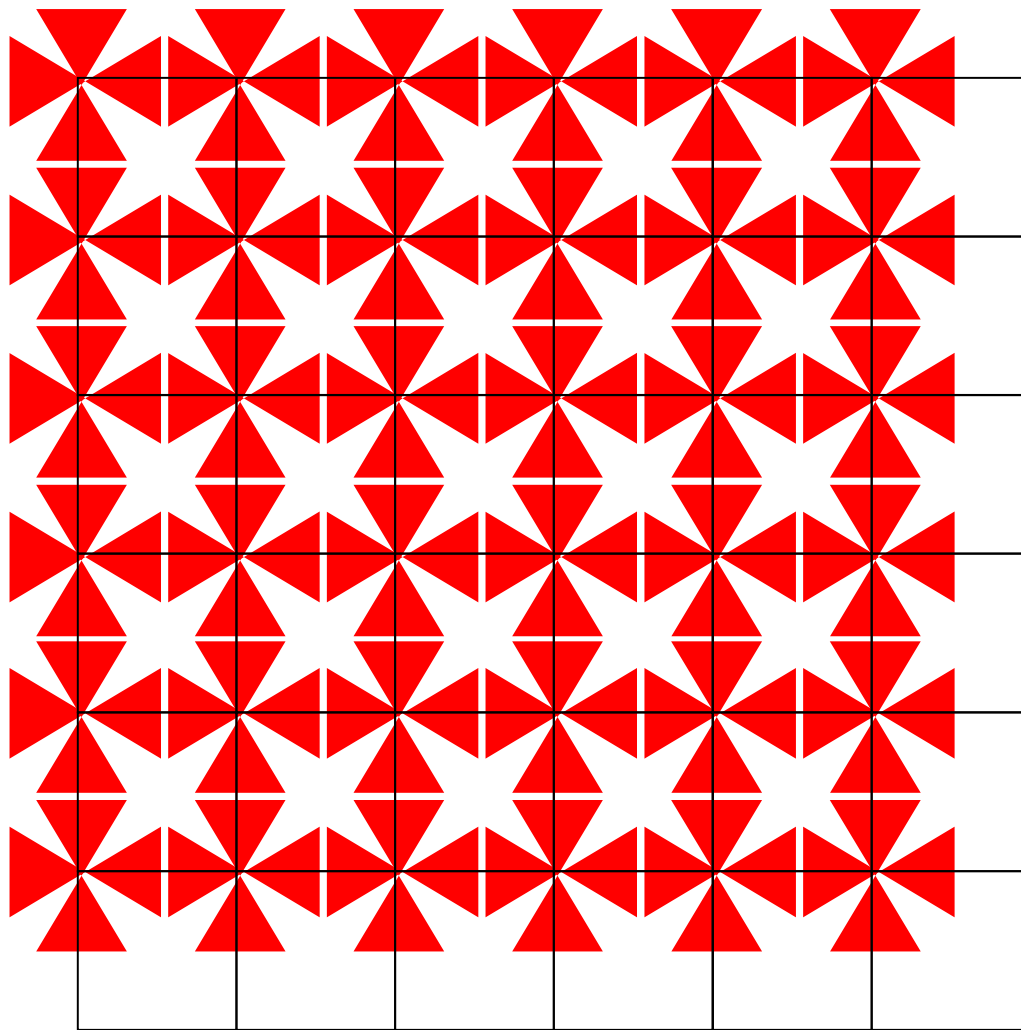


Universidade Federal do ABC

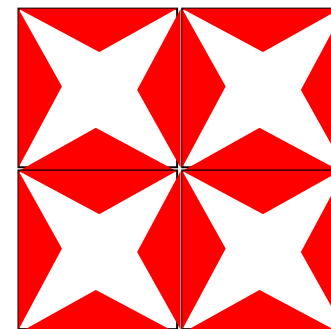
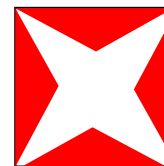
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Célula unitária



**Célula unitária  
ou primitiva**





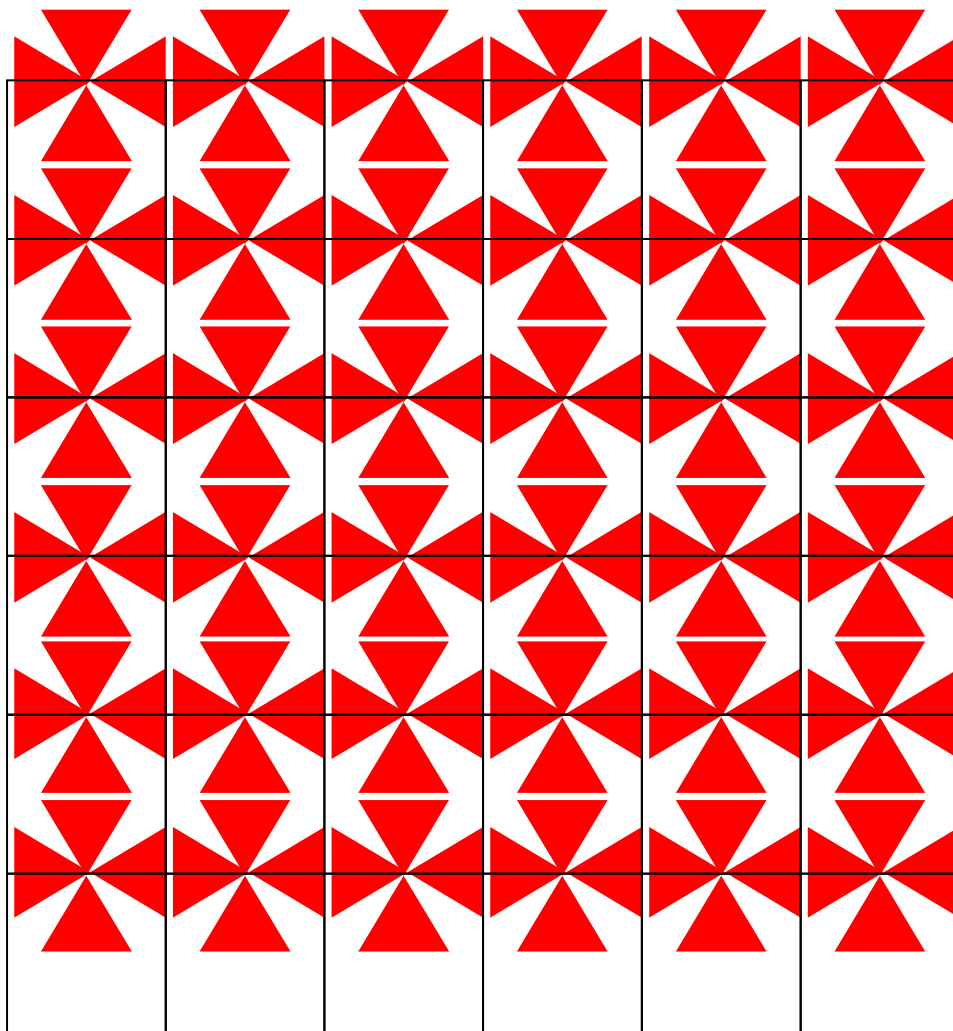


Universidade Federal do ABC

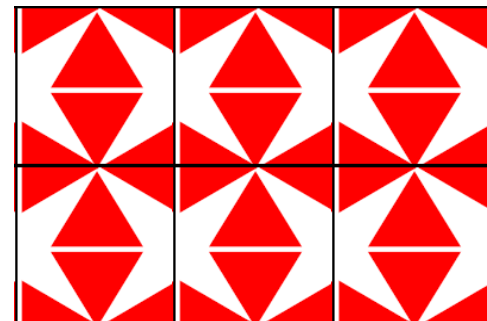
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Célula unitária



**Célula unitária  
ou primitiva**





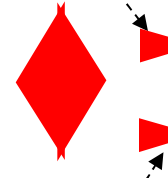
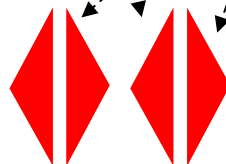
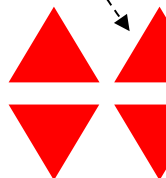
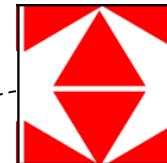
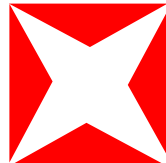
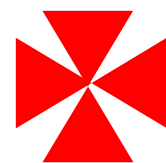
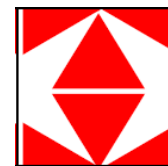
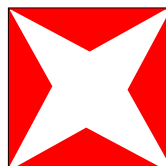
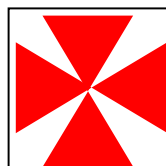
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Célula unitária

Qual das células unitárias é a correta?



2



por





Universidade Federal do ABC

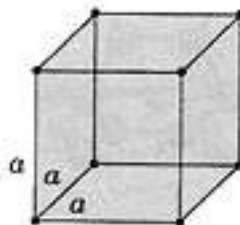
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Os sete sistemas cristalinos (crystal systems)

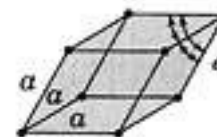
Cúbico

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



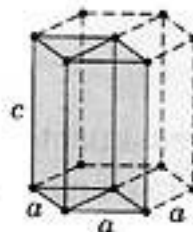
Romboédrico  
(Trigonal)

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



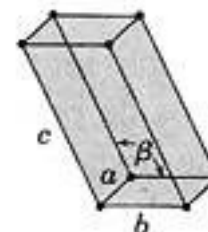
Hexagonal

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



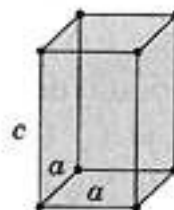
Monoclínico

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



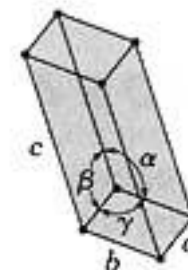
Tetragonal

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



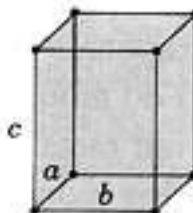
Triclínico

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Ortorrômico

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



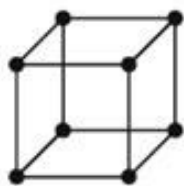


Universidade Federal do ABC

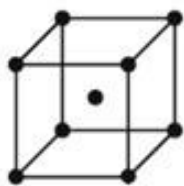
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

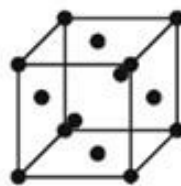
### ESTRUTURA CRISTALINA – Os 14 reticulados de Bravais



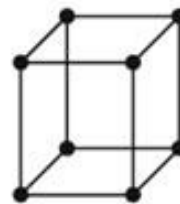
Cúbica simples



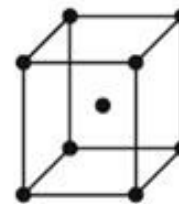
Cúbica de corpo centrado



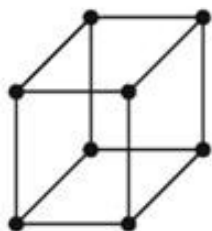
Cúbica de face centrada



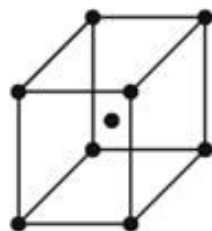
Tetragonal simples



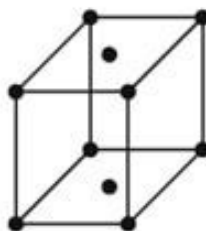
Tetragonal de corpo centrado



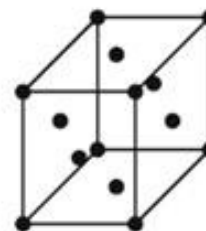
Ortorrômica simples



Ortorrômica de corpo centrado



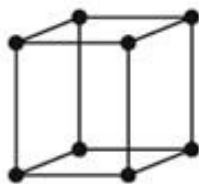
Ortorrômica de base centrada



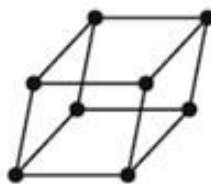
Ortorrômica de face centrada



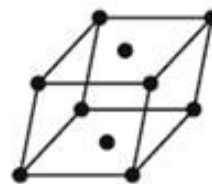
Romboédrica



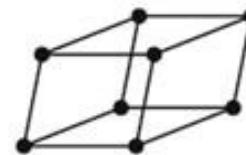
Hexagonal



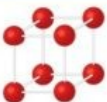

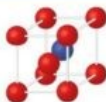

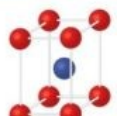
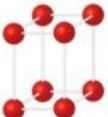
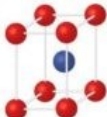
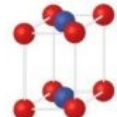
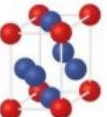

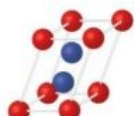

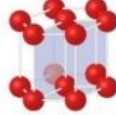

Monoclínica simples



Monoclínica de base centrada



Triclínica

System/Axes/Angles	Unit Cells
<p>Cubic</p> $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 <p>Simple cubic</p>  <p>Face-centered cubic</p>  <p>Body-centered cubic</p>
<p>Tetragonal</p> $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 <p>Simple tetragonal</p>  <p>Body-centered tetragonal</p>
<p>Orthorhombic</p> $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 <p>Simple orthorhombic</p>  <p>Body-centered orthorhombic</p>  <p>Base-centered orthorhombic</p>  <p>Face-centered orthorhombic</p>
<p>Monoclinic</p> $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$	 <p>Simple monoclinic</p>  <p>Base-centered monoclinic</p>
<p>Triclinic</p> $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 <p>Triclinic</p>
<p>Hexagonal</p> $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$	 <p>Hexagonal</p>
<p>Rhombohedral</p> $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	 <p>Rhombohedral</p>



Universidade Federal do ABC

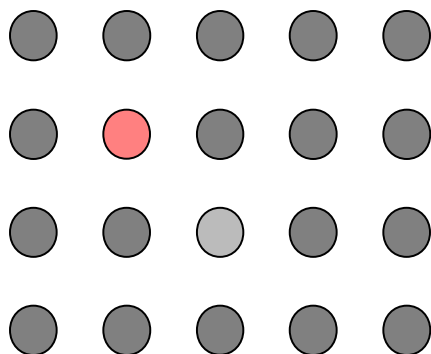
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

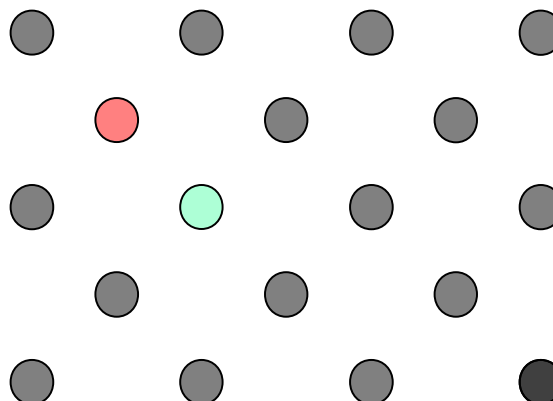
### ESTRUTURA CRISTALINA

#### Número de coordenação (NC):

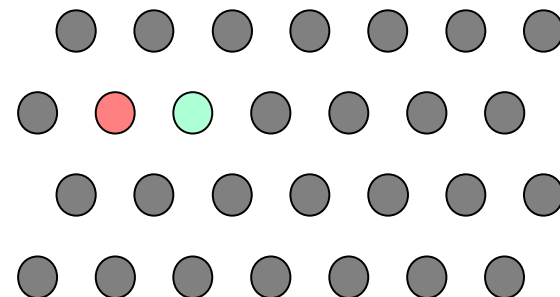
número de vizinhos mais próximos na rede tridimensional



**NC = 4**



**NC = 4**



**NC = 6**

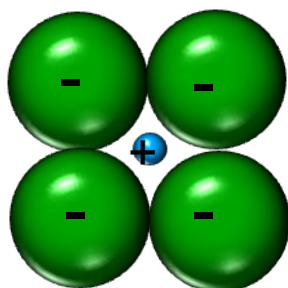


Universidade Federal do ABC

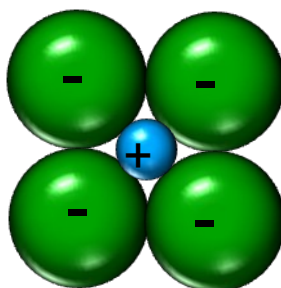
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

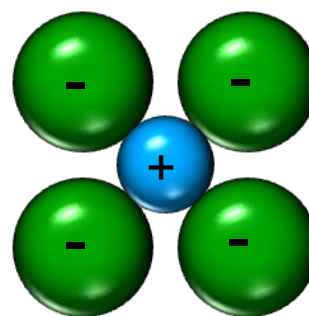
### ESTRUTURA CRISTALINA – Número de coordenação



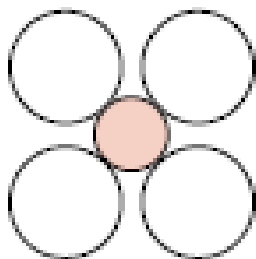
instável



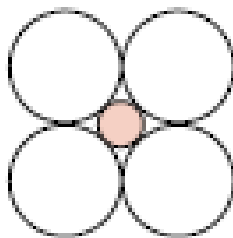
estável



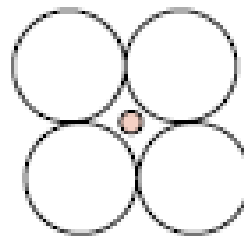
estável



Stable



Stable



Unstable

**FIGURE 3.4** Stable and unstable anion-cation coordination configurations. Open circles represent anions; colored circles denote cations.



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

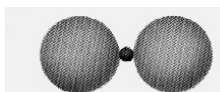
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Número de coordenação

Número de ânions mais próximos para um cátion

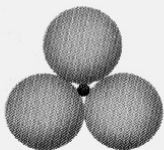
Coord #

2



**Binário**

3



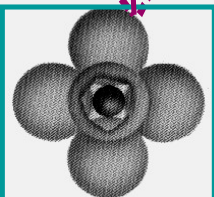
**Trigonal**

4



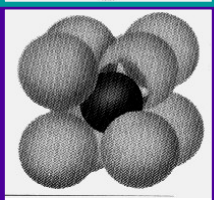
**Tetraédrico**

6



**Octaédrico**

8



**Cúbico**

- O número de coordenação aumenta com o aumento da possibilidade de se organizar um maior número de ânions ao redor do cátion.



**FATORES GEOMÉTRICOS**





Universidade Federal do ABC





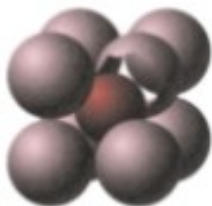
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA – Número de coordenação

Dependem de:  $\frac{r_{\text{cátion}}}{r_{\text{ânion}}}$

**Table 3.3** Coordination Numbers and Geometries for Various Cation-Anion Radius Ratios ( $r_c/r_a$ )

Coordination Number	Cation-Anion Radius Ratio	Coordination Geometry
2	$< 0,155$	
3	$0,155 - 0,225$	
4	$0,225 - 0,414$	
6	$0,414 - 0,732$	
8	$0,732 - 1,0$	

Source: W. D. Kingery, H. K. Bowen, and D. R. Uhlmann, *Introduction to Ceramics*, 2nd edition. Copyright © 1976 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.



Universidade Federal do ABC

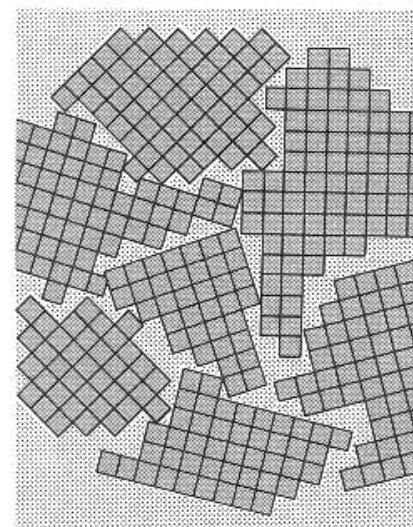
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA

#### Materiais monocristalinos e policristalinos

- ▶ **MONOCRISTALINOS:** constituídos por um único cristal em toda a extensão do material, sem interrupções.
- ▶ **POLICRISTALINOS:** constituído de vários cristais ou grãos, cada um deles com diferentes orientações espaciais.



*Material policristalino*

Os **CONTORNOS DE GRÃO** são regiões que separam cristais de diferentes orientações em um material policristalino.



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ALOTROPIA E POLIMORFISMO

- ✓ **POLIMORFISMO:** fenômeno no qual um sólido (metálico ou não metálico) pode apresentar mais de uma estrutura cristalina, dependendo da temperatura e da pressão (por exemplo, o dióxido de silício ( $\text{SiO}_2$ ) apresenta-se como quartzo, cristobalita e tridimita).
- ✓ **ALOTROPIA:** polimorfismo em elementos puros.

*Exemplo:* o diamante e o grafite são constituídos por átomos de carbono arranjados em diferentes estruturas cristalinas.



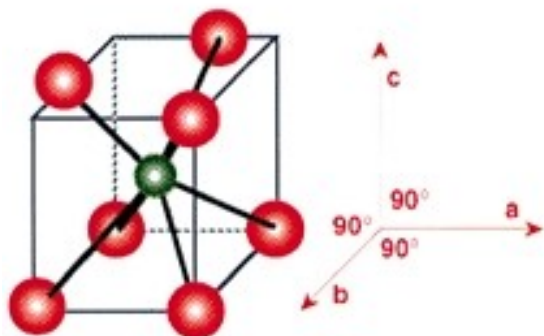
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

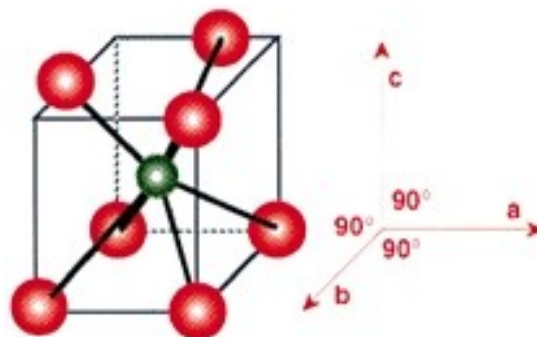
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ALOTROPIA E POLIMORFISMO

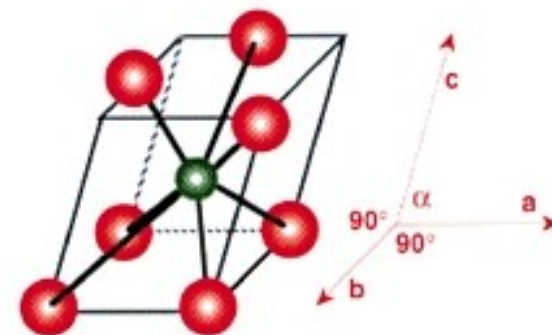
#### ► Polimorfismo da zircônia ( $\text{ZrO}_2$ )



cúbica



tetragonal



monoclínica



Íon oxigênio  $\text{O}^{2-}$



Íon zircônio  $\text{Zr}^{4+}$



Universidade Federal do ABC

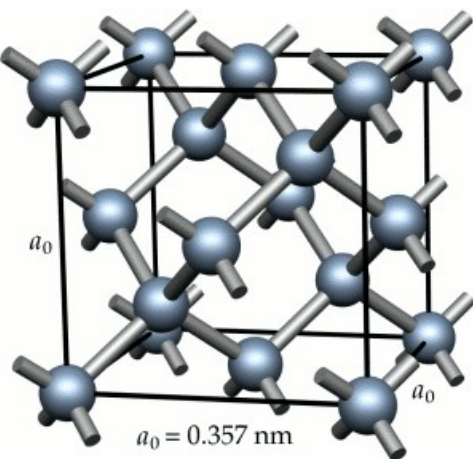
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

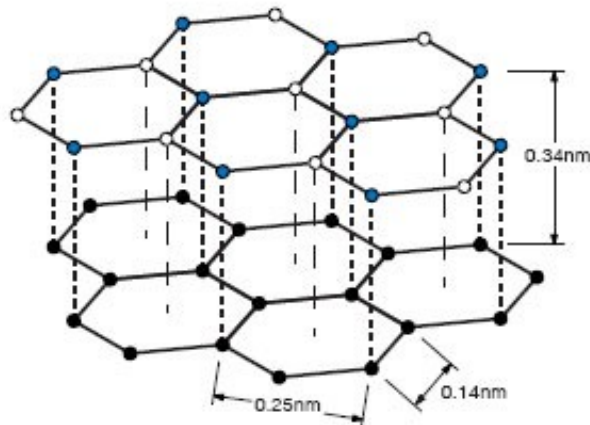
### ALOTROPIA E POLIMORFISMO

#### ► Alotropia do Carbono

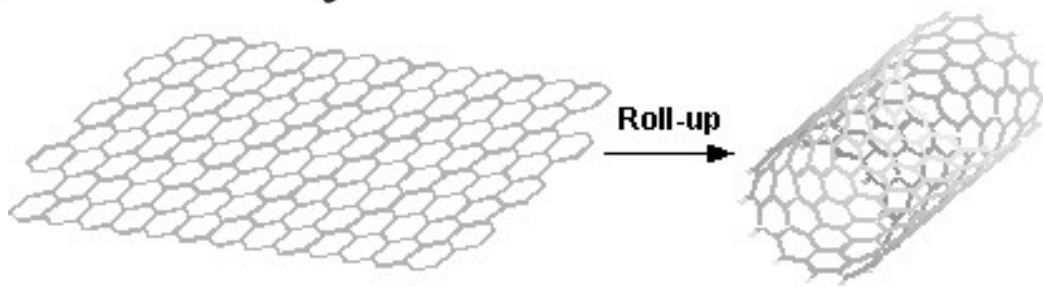
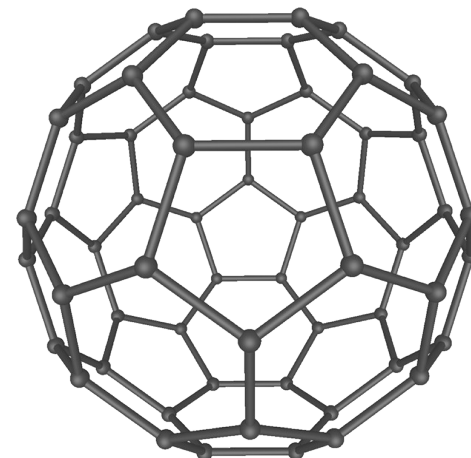
diamante



grafite



C60

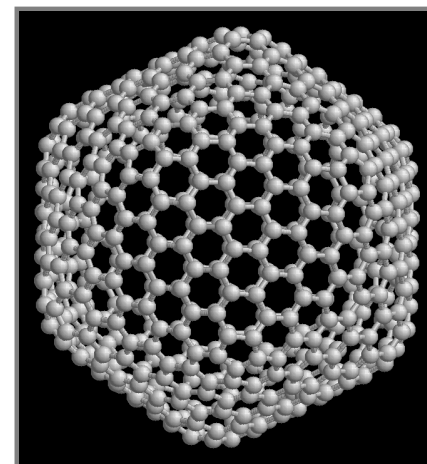


graphene sheet

SWNT

nanotubo

C540





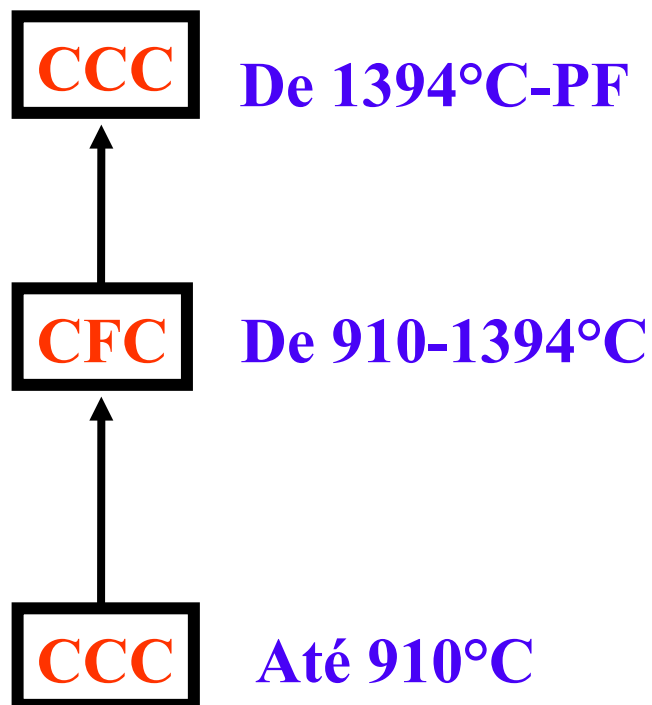
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ALOTROPIA E POLIMORFISMO

#### ► Alotropia do Ferro



- Na temperatura ambiente, o ferro tem estrutura CCC (Fe- $\alpha$ , ou ferrita), com raio atômico de 1,241 Å.
- A 910°C, o ferro passa para estrutura CFC (Fe- $\gamma$ , ou austenita), com raio atômico de 1,292 Å.
- A 1394°C o ferro passa novamente para CCC (Fe- $\delta$ ).



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### SÓLIDOS AMORFOS

### Materiais poliméricos

mero: menor unidade repetitiva de um polímero

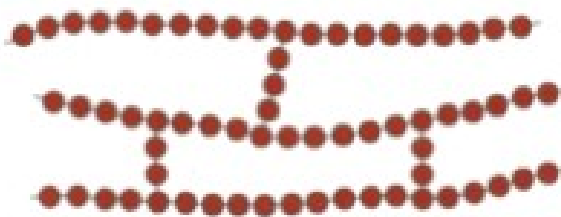
polímero: arranjo molecular de meros



Cadeia linear

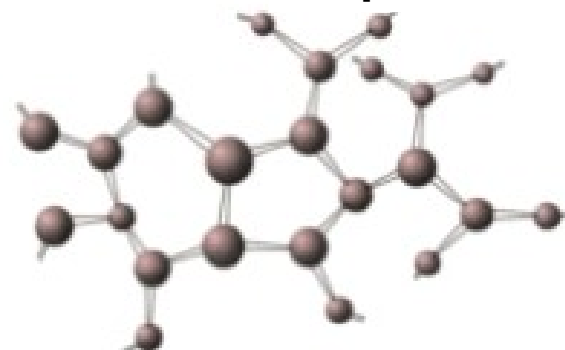


Cadeia ramificada



Cadeia cruzada

Representação  
tridimensional  
da cadeia  
polimérica







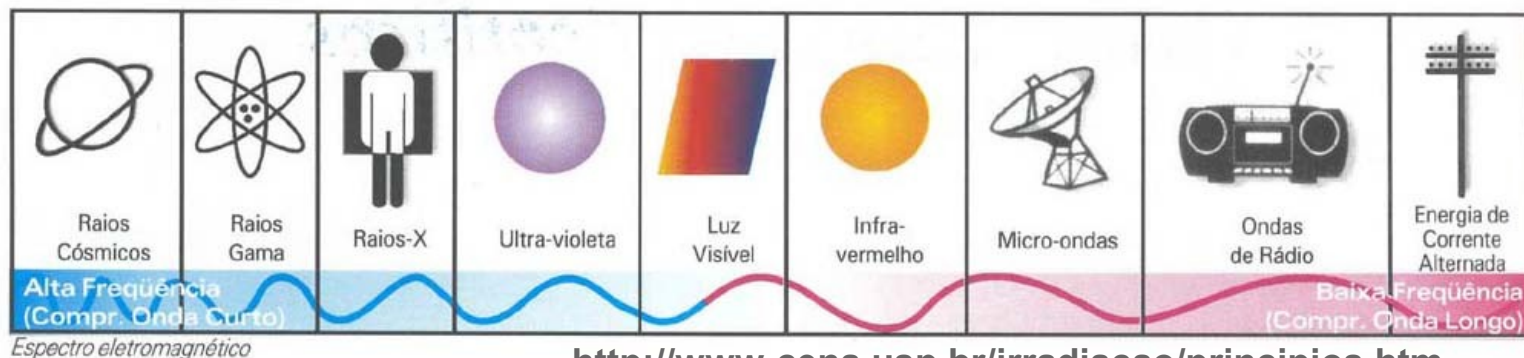
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS

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



Espectro eletromagnético

<http://www.cena.usp.br/irradiacao/principios.htm>





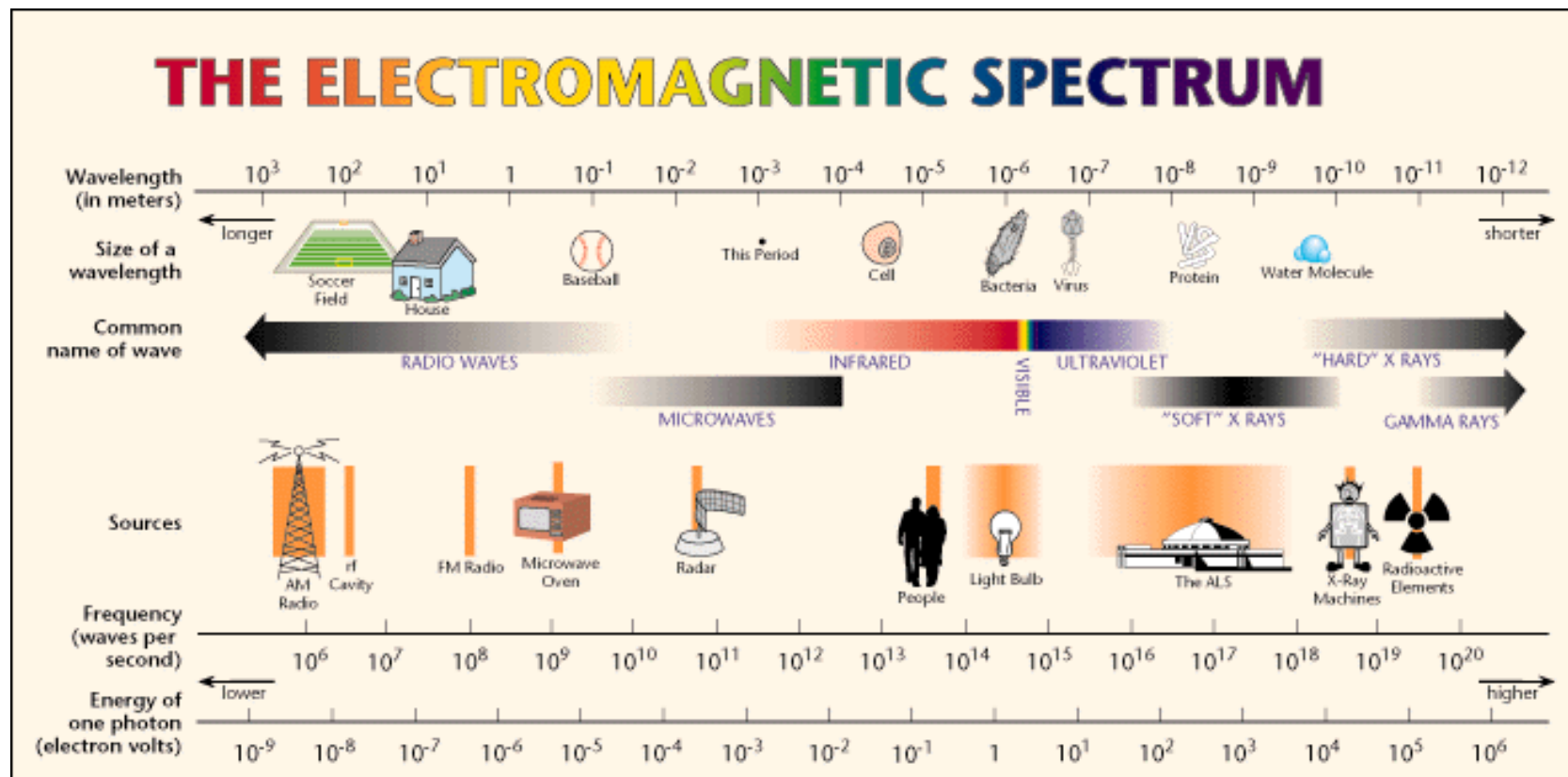
Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

## CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS

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



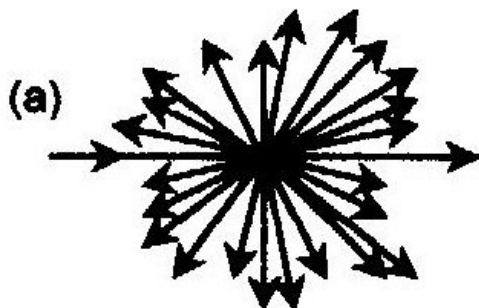


Universidade Federal do ABC

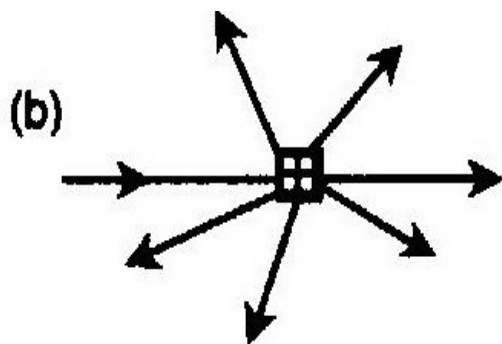
## CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS

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

#### Interação de raios X com a matéria



Em um arranjo aleatório de átomos, os espalhamentos causados pelos átomos causam interferência destrutiva e não há reflexões de raios X



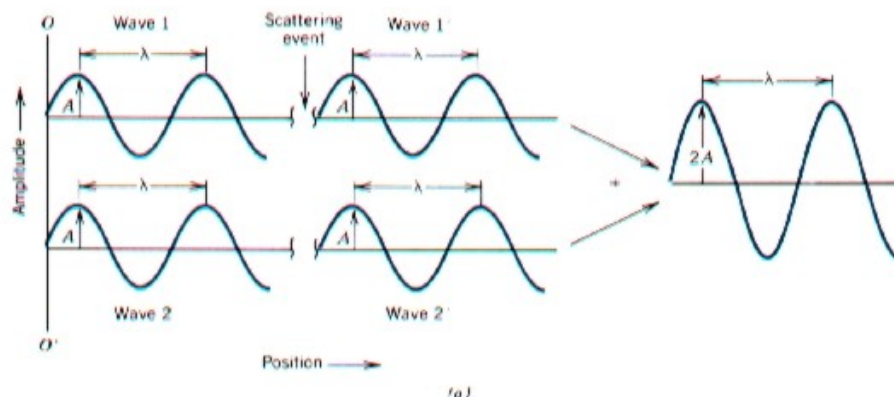
Difração por um cristal: arranjos periódicos de átomos (estruturas cristalinas) causam interferência construtiva dos raios X em algumas direções



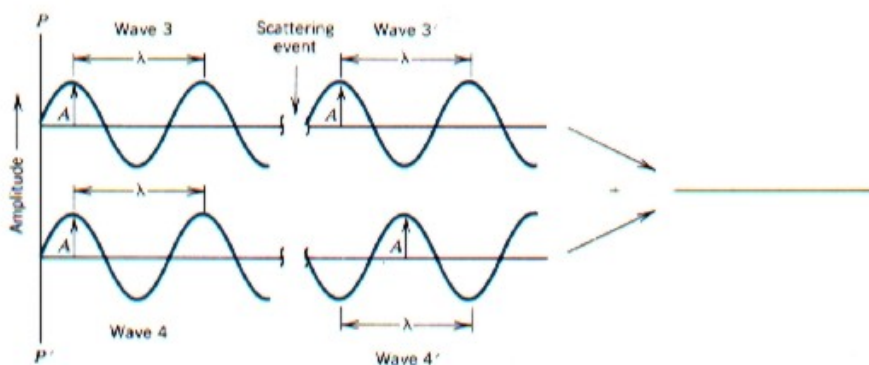
Universidade Federal do ABC

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

- O fenômeno de difração ocorre quando uma onda encontra uma série de obstáculos espaçados regularmente, que: (1) são capazes de espalhar a onda e (2) o espaçamento entre eles é comparável em magnitude ao comprimento de onda.



**Interferência  
construtiva**



**Interferência  
destrutiva**

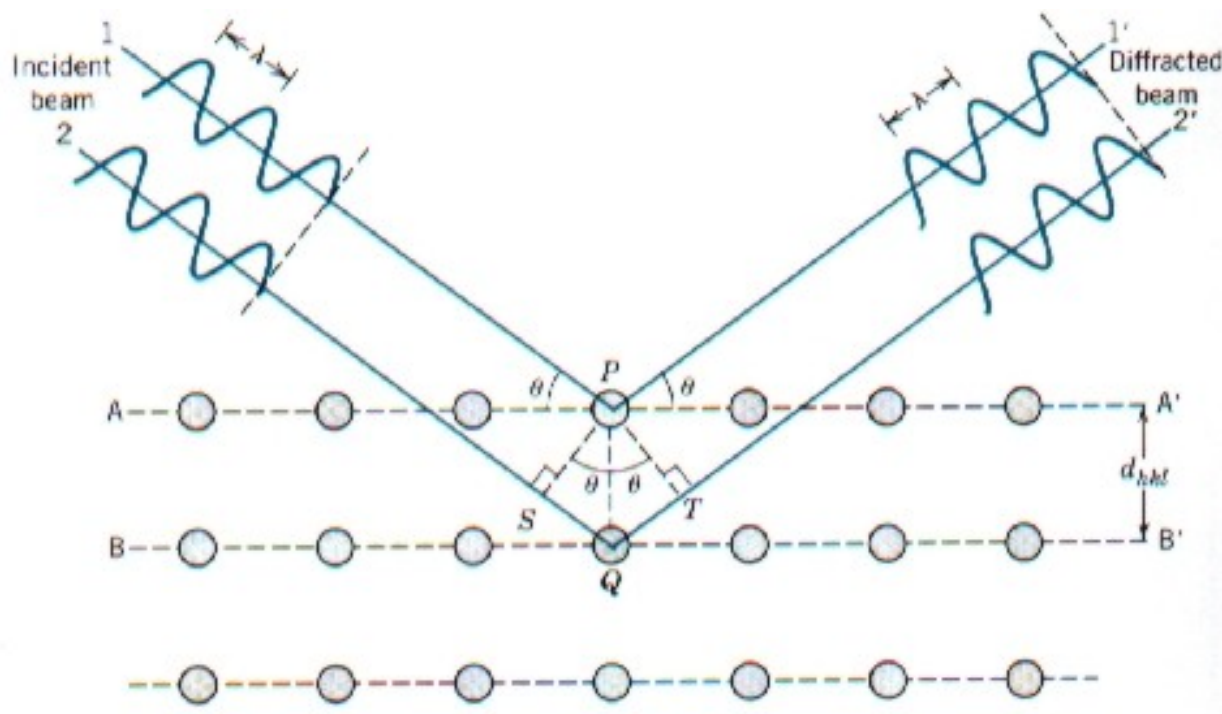


Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

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



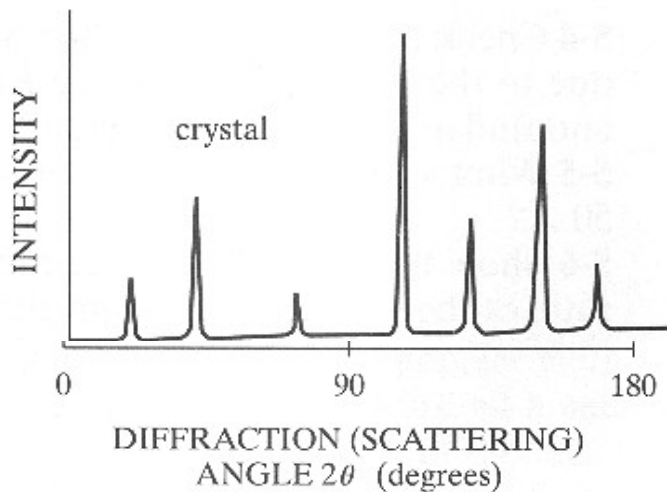


Universidade Federal do ABC

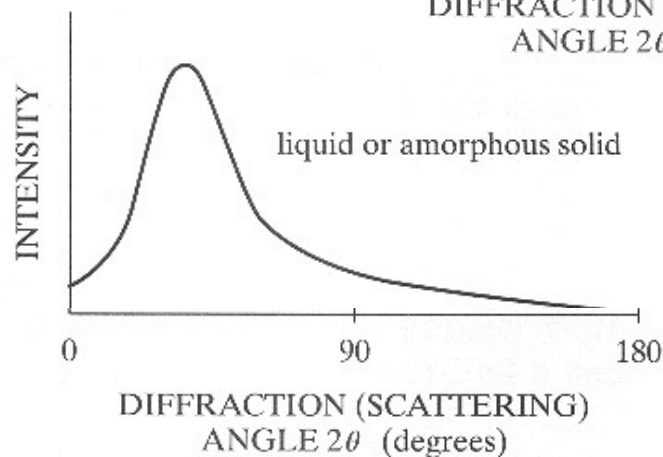
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

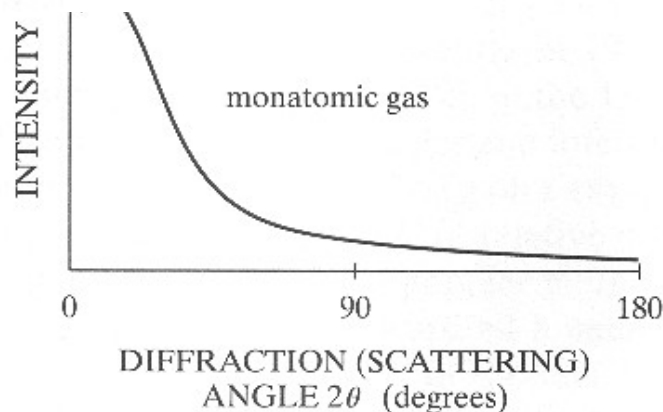
### DIFRAÇÃO DE RAIOS X (X-RAY DIFFRACTION)



Difratograma esquemático de um sólido cristalino. (Picos correspondem aos planos cristalinos)



Difratograma para um sólido amorfo ou para um líquido.



Difratograma para um gás monoatômico.





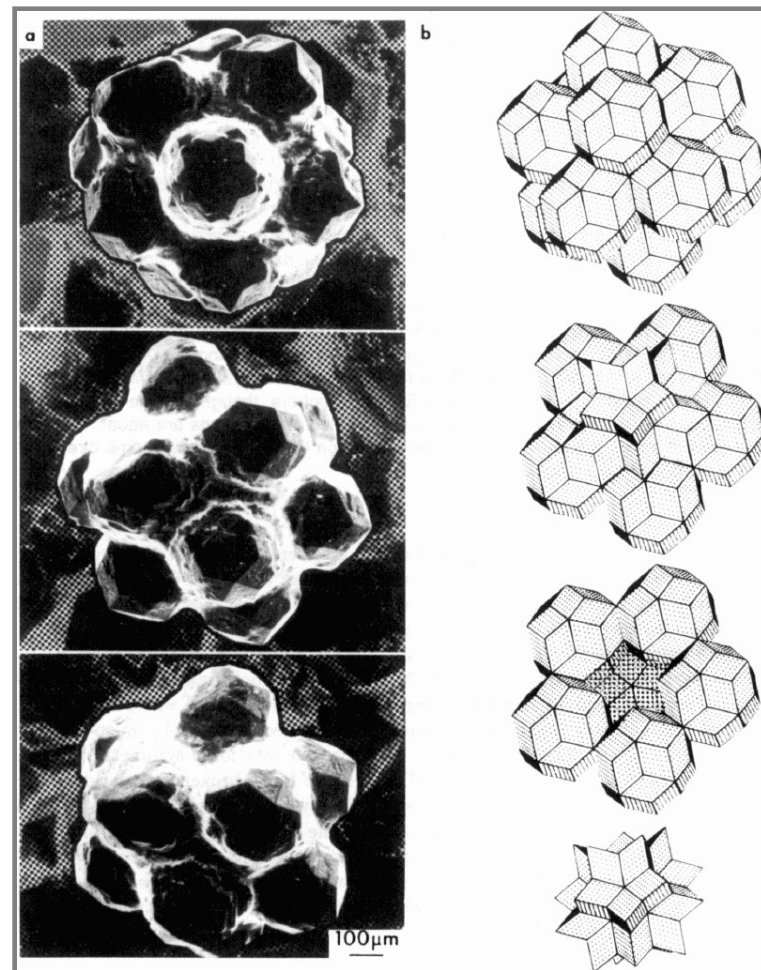
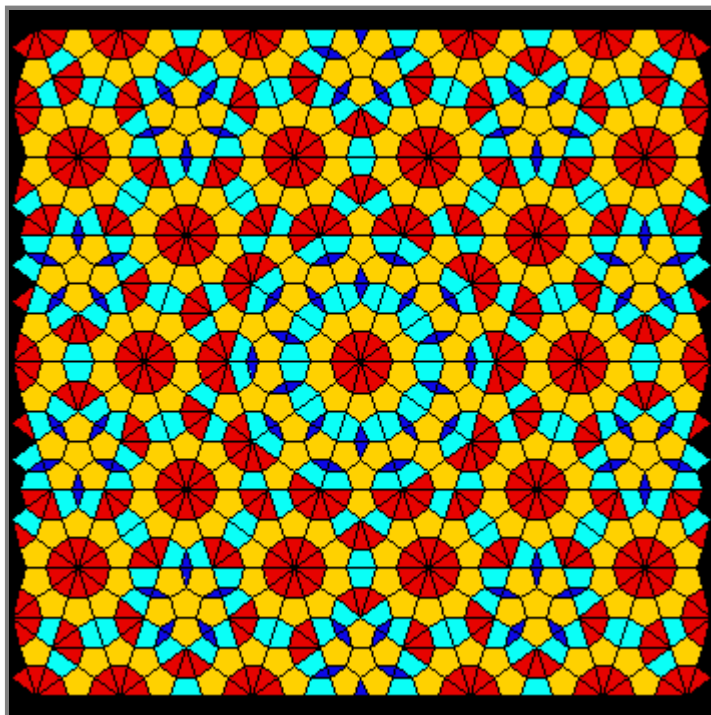
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### QUASE-CRISTAIS (quasicrystals)

- São materiais que apresentam estrutura ordenada, mas não periódica.



J. H. Lang, M. Audier, B. Dubost, e P. Sainfort, J. of Crystal Growth, **83**, 456 (1987).



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS

#### ✓ Número de coordenação (NC):

- ✓ número de vizinhos mais próximos na rede tridimensional
- ✓ em metais: todos os átomos possuem o mesmo número de vizinhos mais próximos

#### ✓ Fator de empacotamento atômico (FEA):

- ✓ fração do volume de uma célula unitária que corresponde às esferas sólidas (assumindo o modelo das esferas rígidas)
- ✓ grau de ocupação de uma célula unitária

**Modelos das esferas rígidas**

**Sistemas cristalinos + reticulados de Bravais**



Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

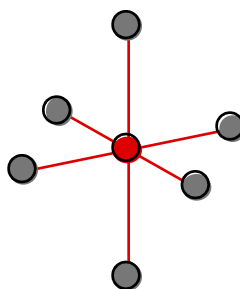
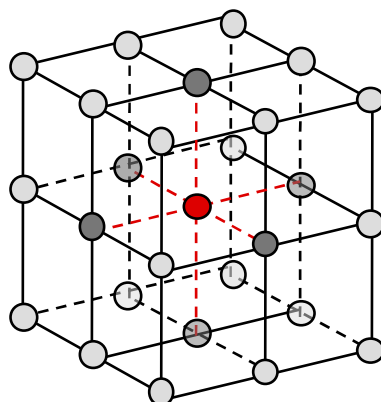
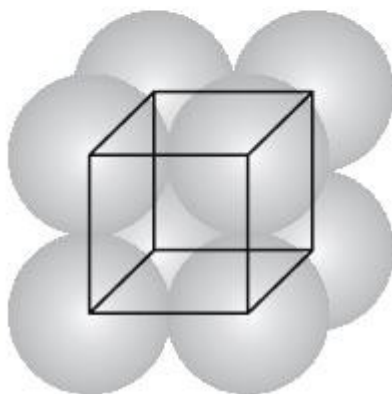
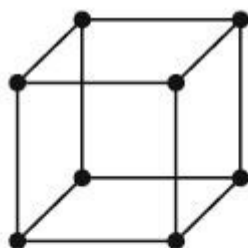
3-2-2019

Prof. Renata Ayres Rocha – Materiais e Suas

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

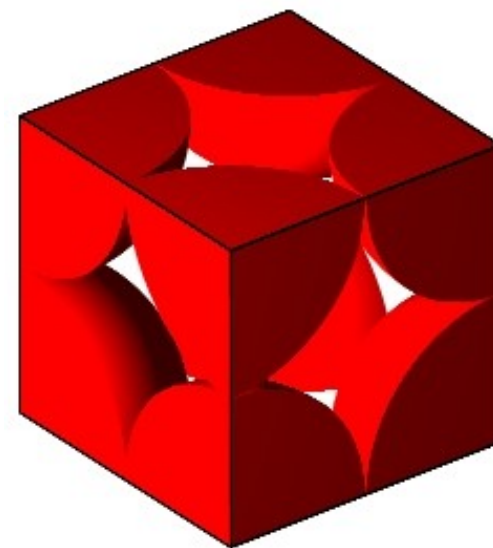
#### ✓ Estrutura Cúbica Simples (CS) (simple cubic)

- ✓ Estrutura rara devido à pequena fração de empacotamento.
- ✓ Ex.: Polônio



NC=?

Quanto átomos por célula unitária?



$$N_A = 8 \times 1/8 = 1 \text{ átomo}$$





Universidade Federal do ABC

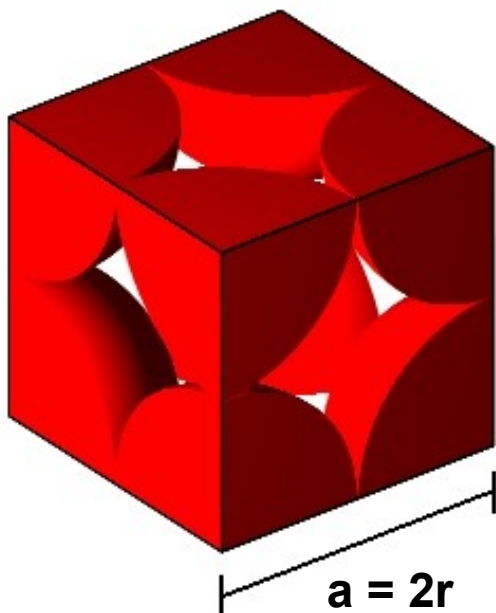
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

$$FEA = \frac{\text{volume} \cdot \text{total} \cdot \text{dos} \cdot \text{átomos}}{\text{volume} \cdot \text{total} \cdot \text{da} \cdot \text{célula} \cdot \text{unitária}} = \frac{V_a}{V_c}$$

#### Estrutura Cúbica Simples



$$V_a = 1 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$V_c = a^3 = (2r)^3 = 8r^3$$

$$FEA = V_a / V_c = \pi / 6 = 0,52$$



Universidade Federal do ABC

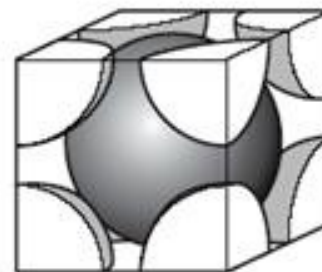
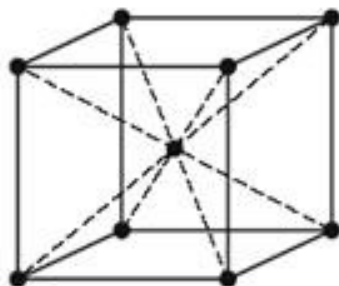
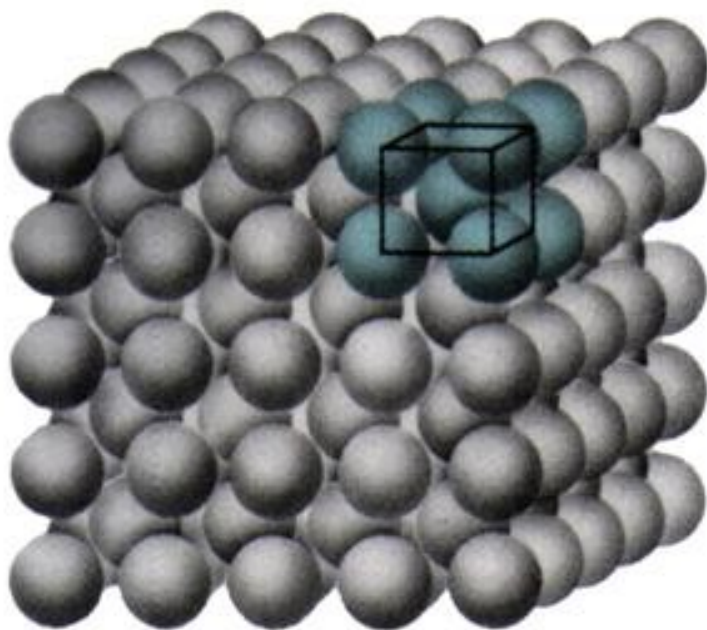
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Corpo Centrado (CCC) ou body-centered cubic (BCC)

✓ Estrutura comum em metais. Exs.: Fe- $\alpha$ , Cr, V, Mo, W



NC=?

Quantos átomos por  
célula unitária?

$$NA = 1 + (8 \times 1/8) = 2 \text{ átomos}$$



Universidade Federal do ABC

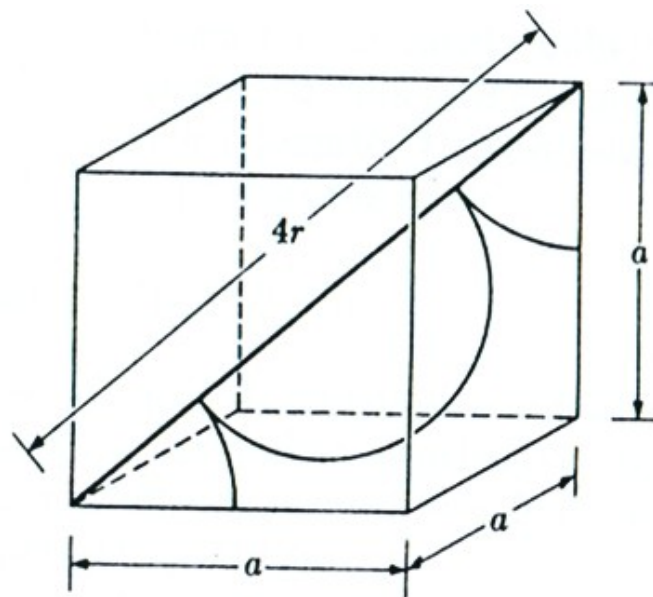
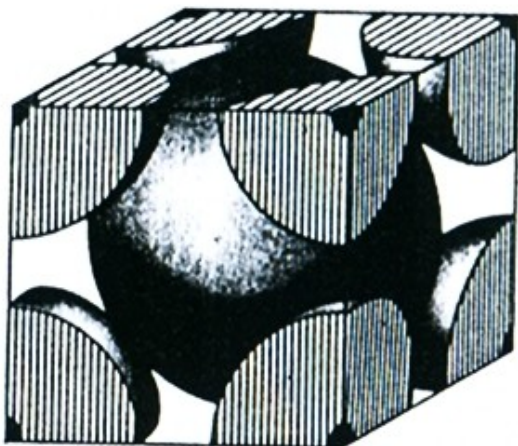
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

3-2-2019

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

- ✓ Estrutura Cúbica de Corpo Centrado (CCC) ou body-centered cubic (BCC)



$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

$$FEA = 0,68$$

A estrutura CCC ainda não é tão compacta, por isso ocorre em **metais com um pouco de caráter covalente** (direcionalidade das ligações).



Universidade Federal do ABC

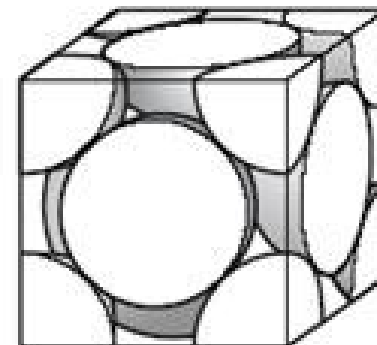
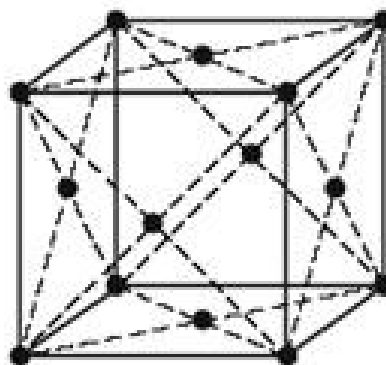
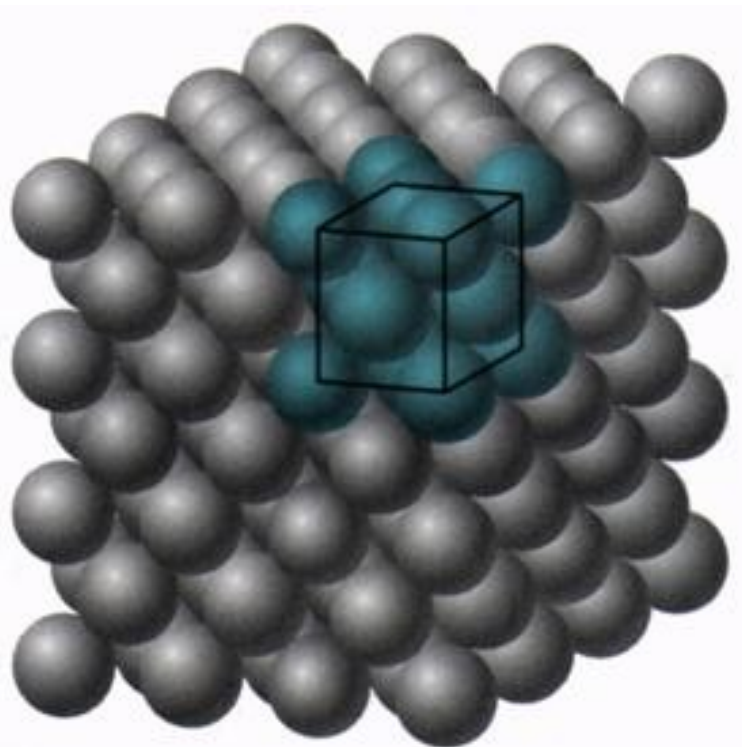
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada (CFC) ou face-centered cubic (FCC)

✓ Estrutura comum em metais. Exs.: Fe- $\gamma$ , Al, Cu, Au, Ag, Pb, Ni



Quantos átomos por  
célula unitária?

$$NA = (6 \times 1/2) + (8 \times 1/8) = 4 \text{ átomos}$$

NC=?



Universidade Federal do ABC

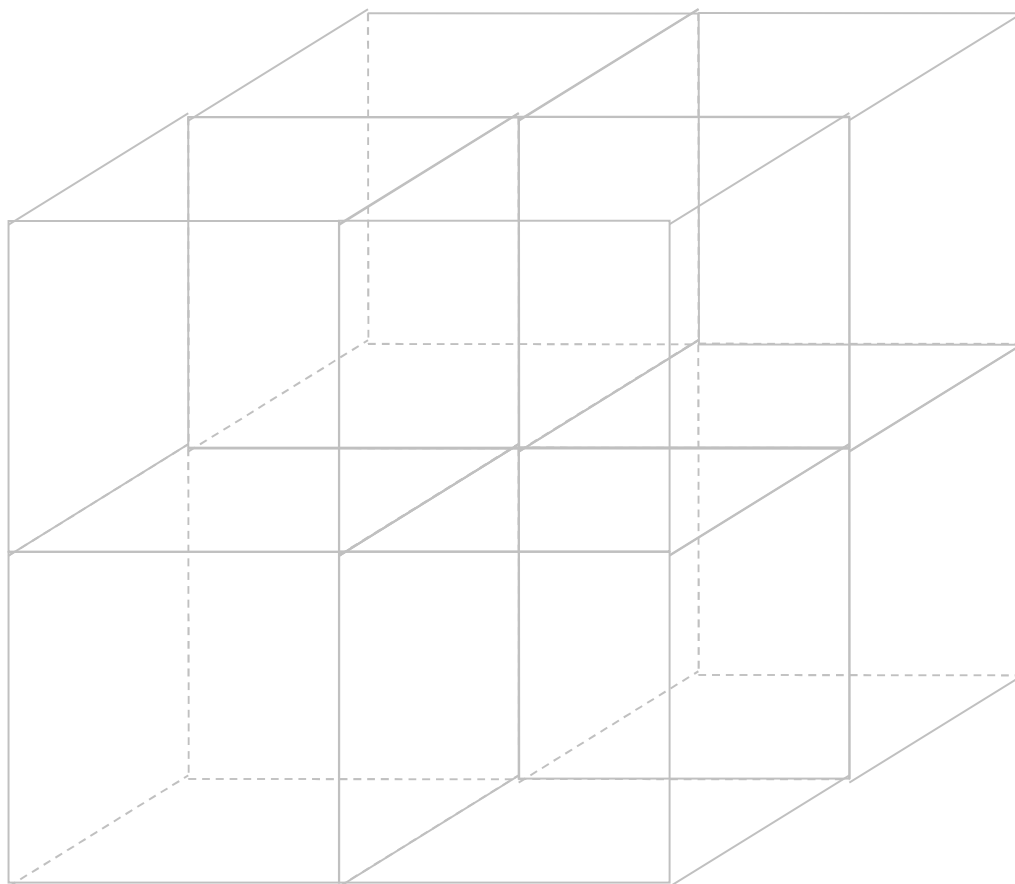
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

2019

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





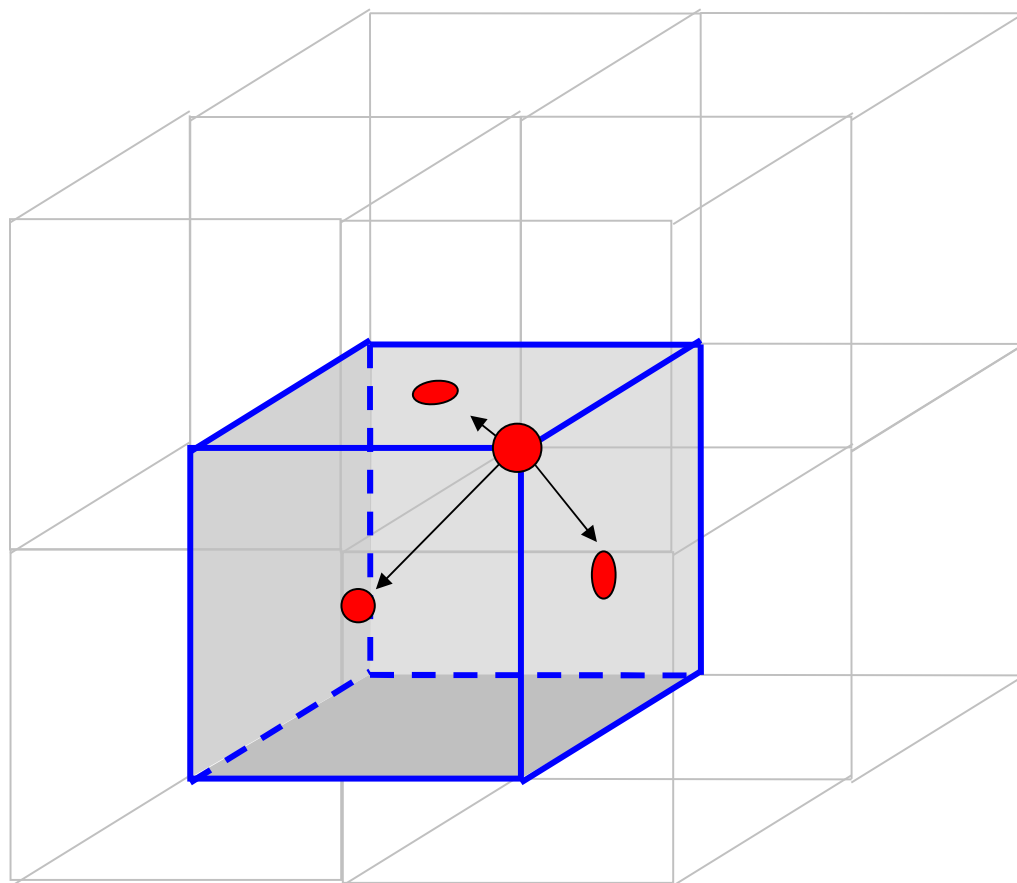
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





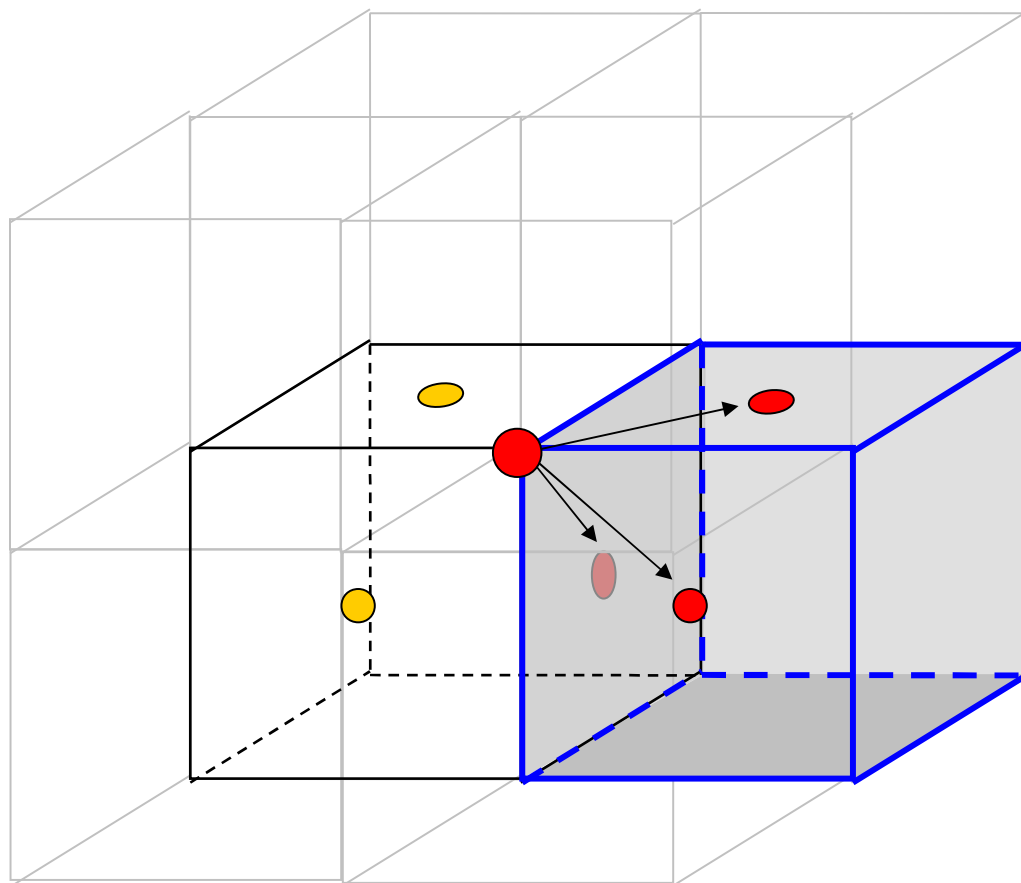
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





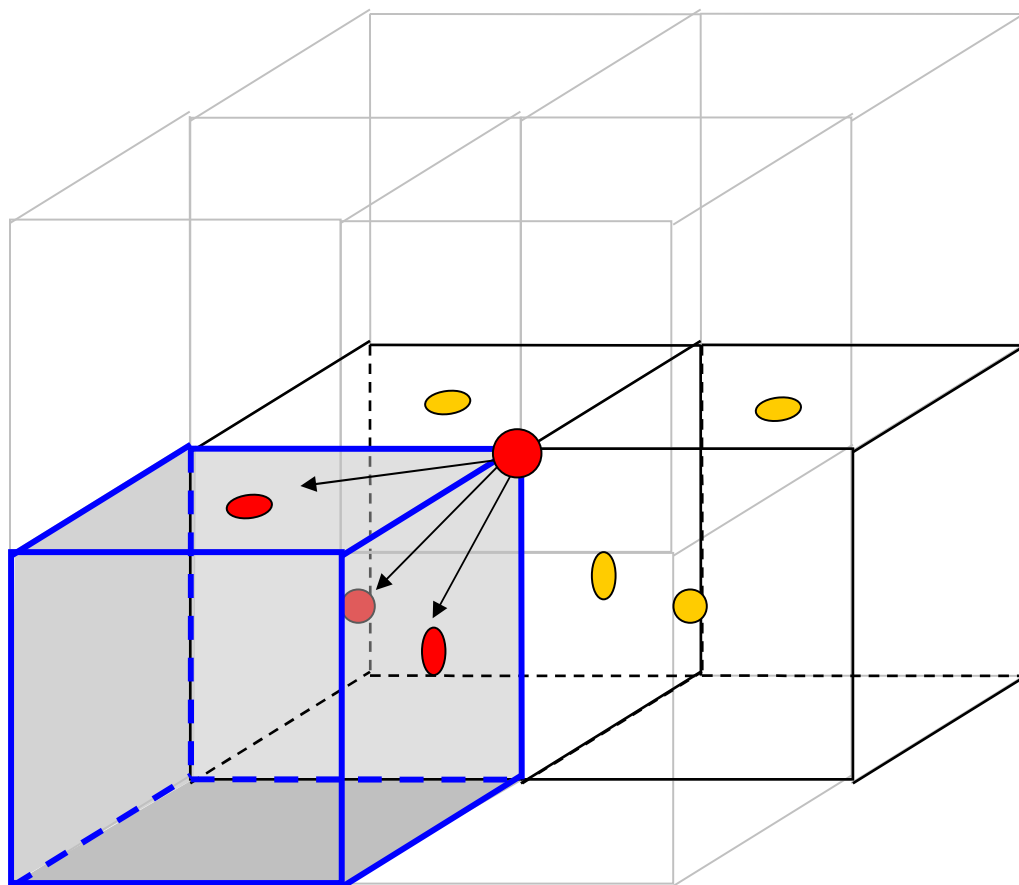
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:







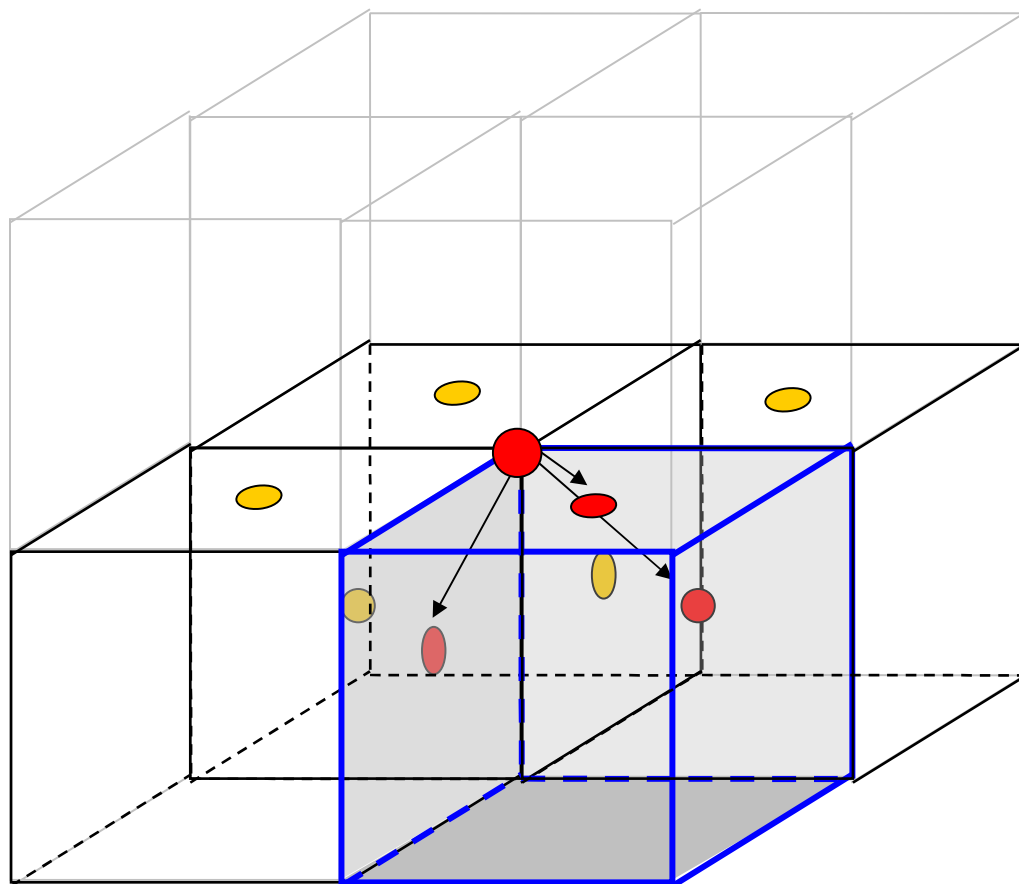
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





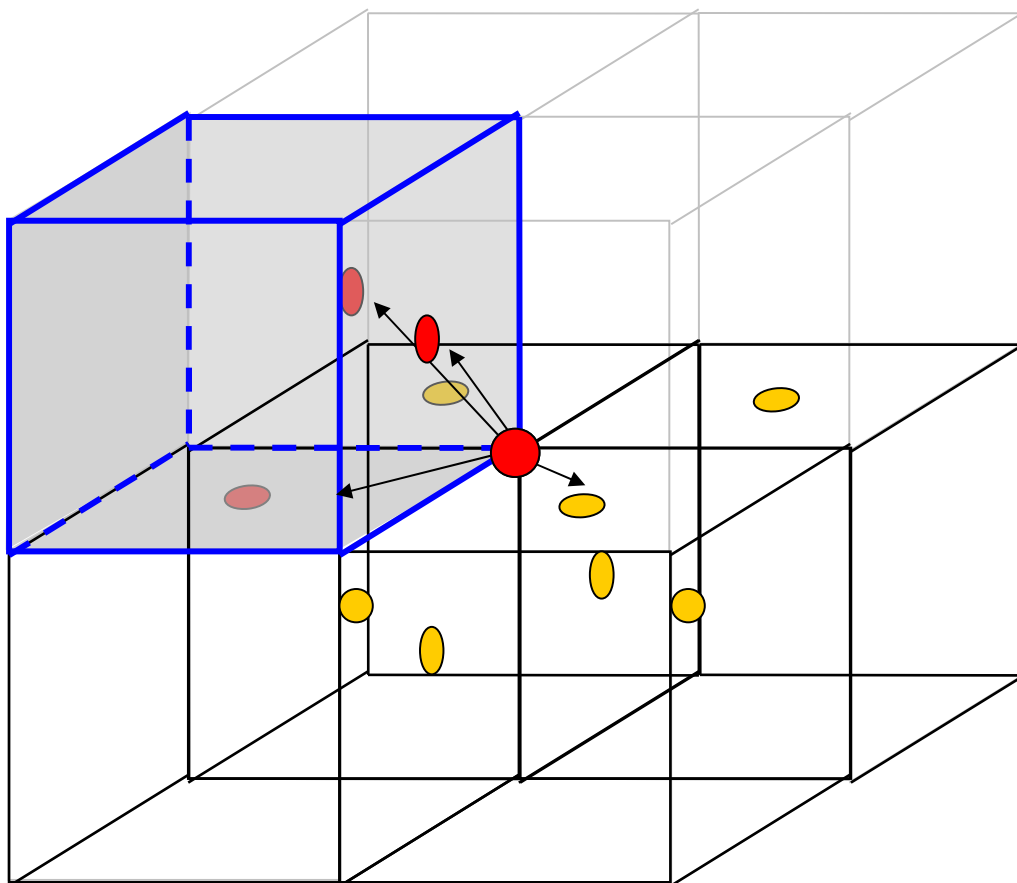
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

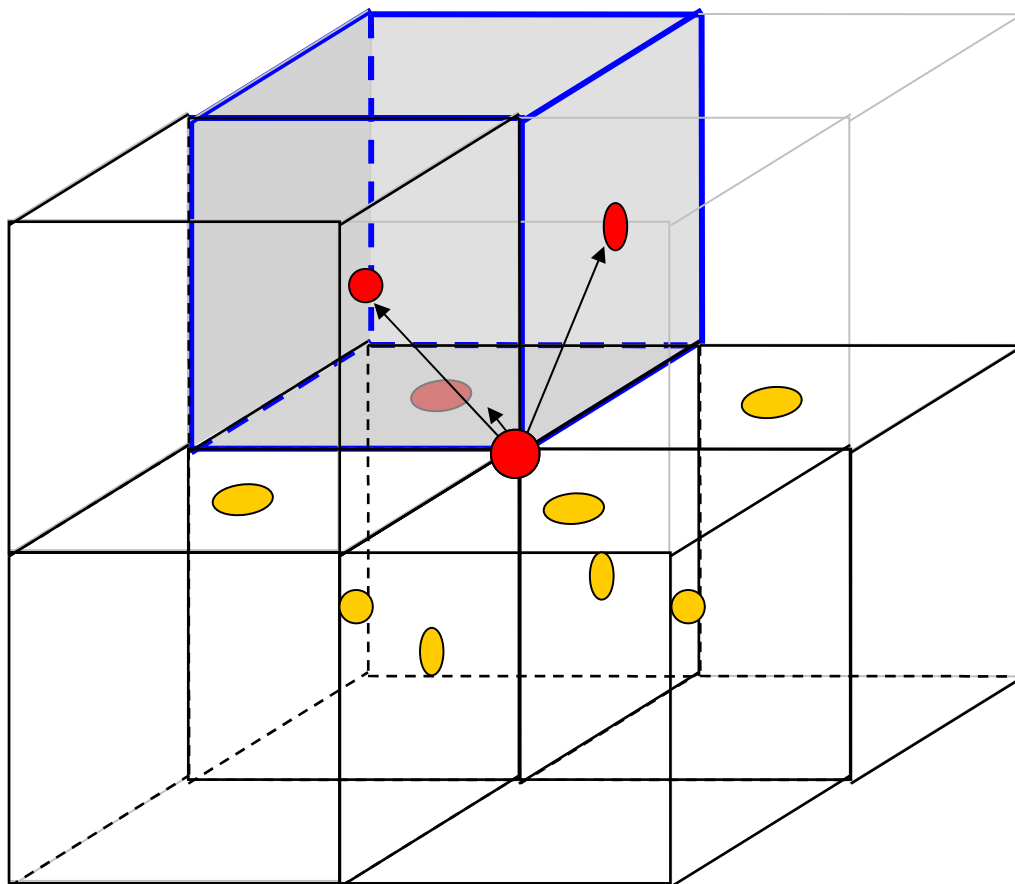
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

2019

Prof. Renata Ayres Rocha – Materiais e Suas Propriedades

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





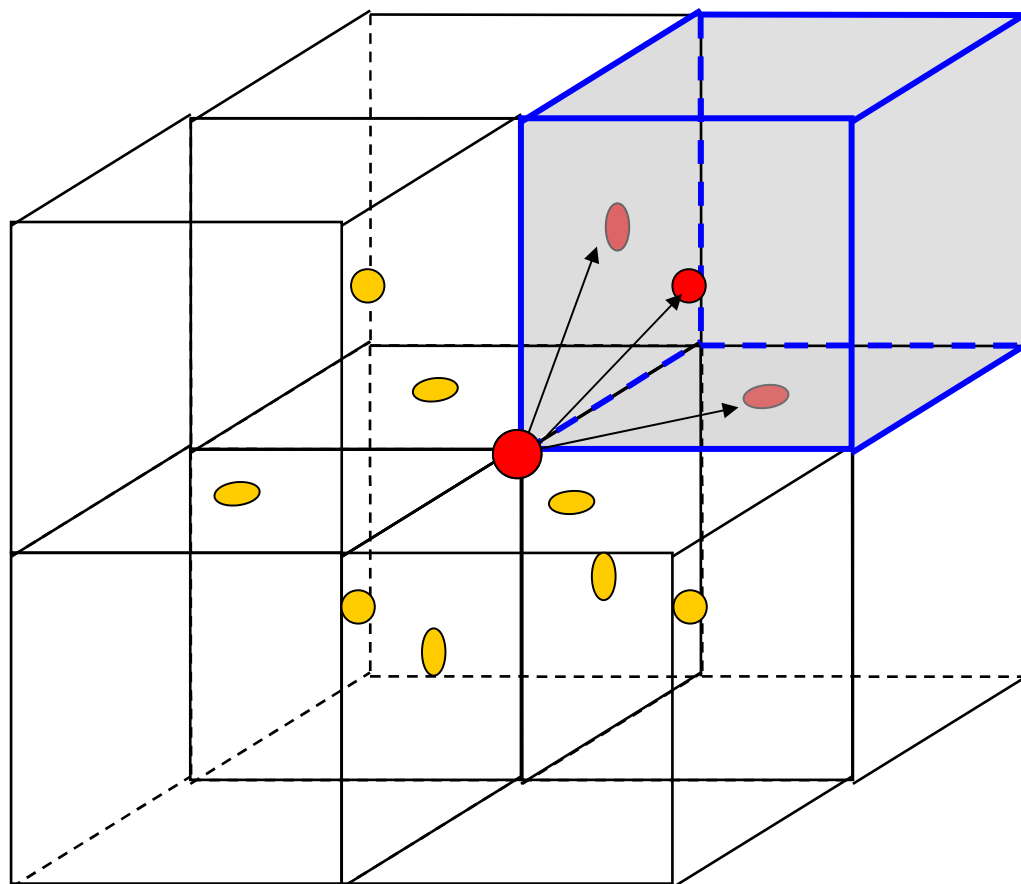
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





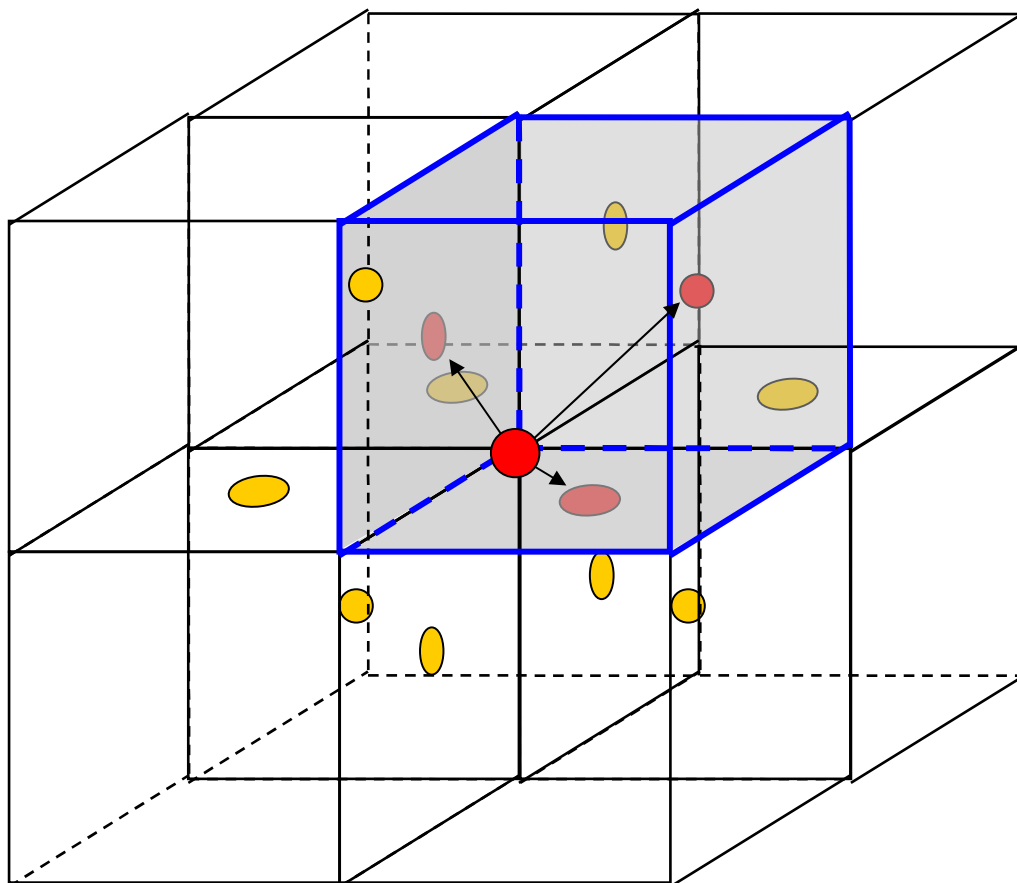
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





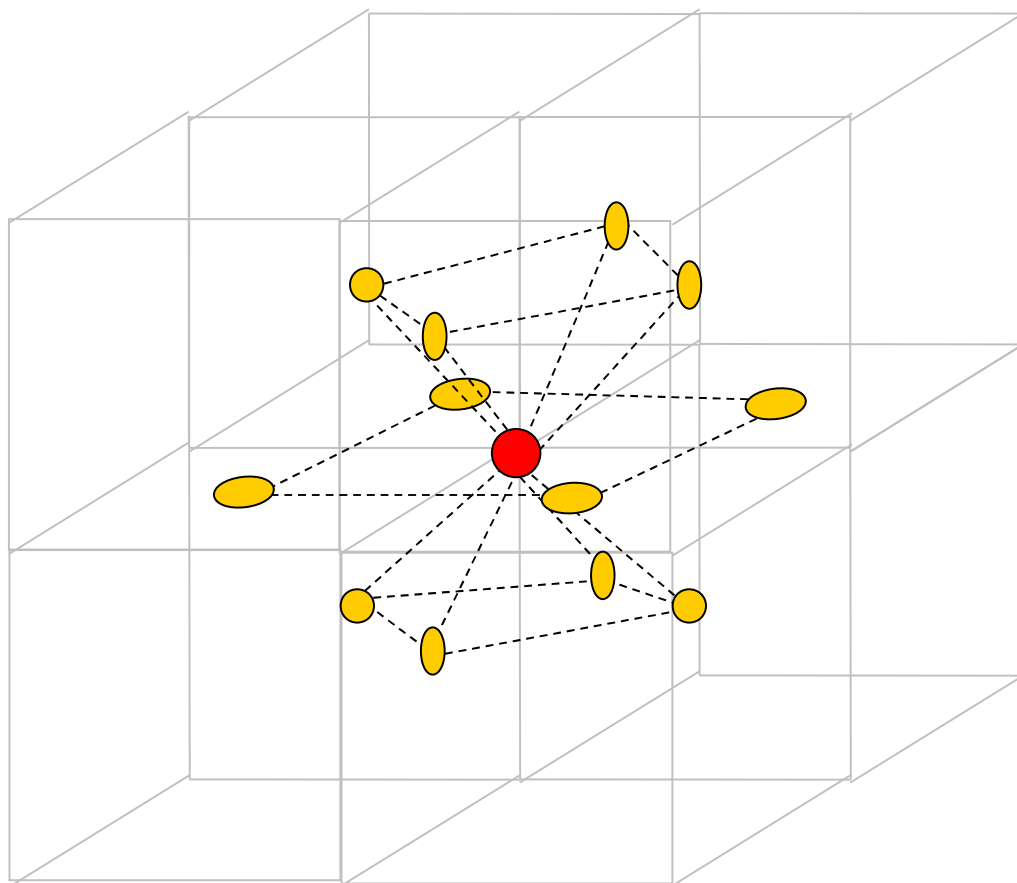
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada – NC:





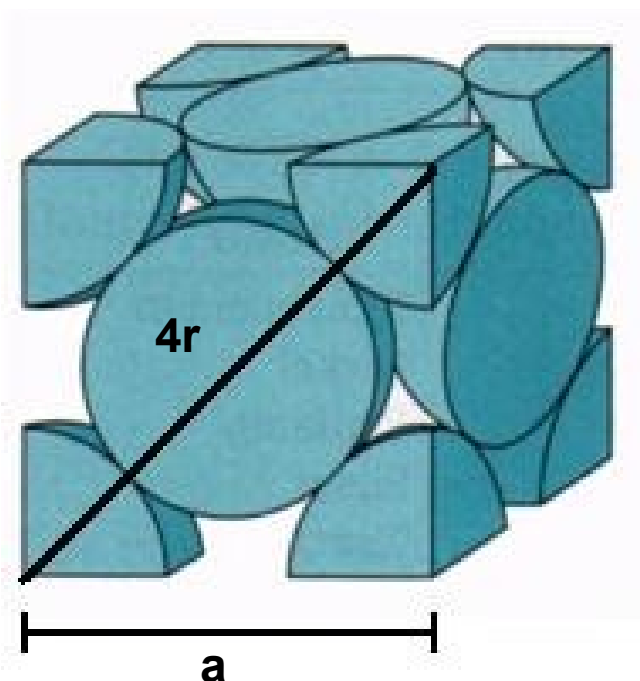
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Cúbica de Face Centrada (CFC) ou face-centered cubic (FCC)



$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$$FEA = 0,74$$

**Maior fator de empacotamento possível para esferas iguais**





Universidade Federal do ABC

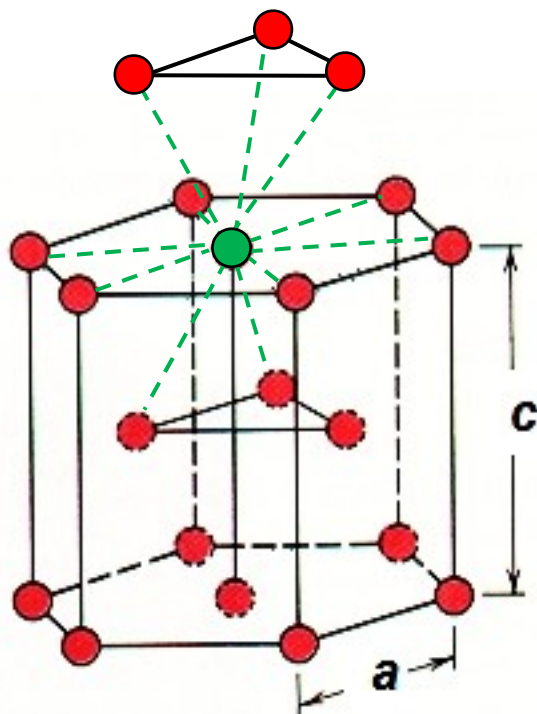
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

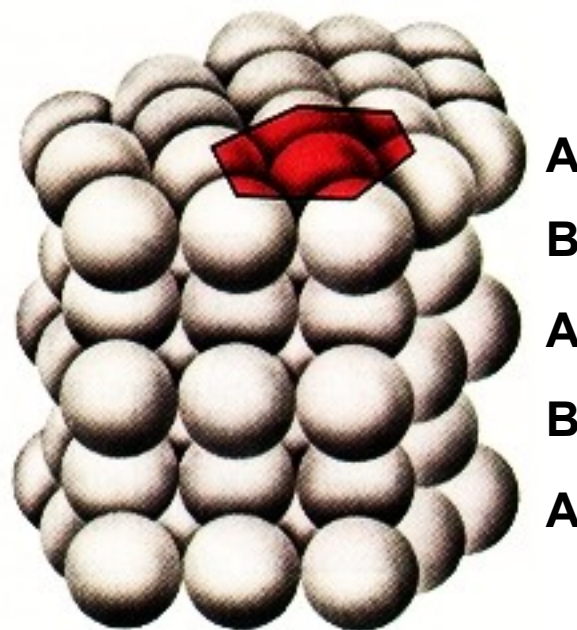
### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Hexagonal Compacta (HC) ou hexagonal close-packed (HCP)

✓ Estrutura comum em metais. Exs.: Mg, Zn, Ti, Co, Cd



Empilhamento de planos ABAB:



NC=?



Universidade Federal do ABC

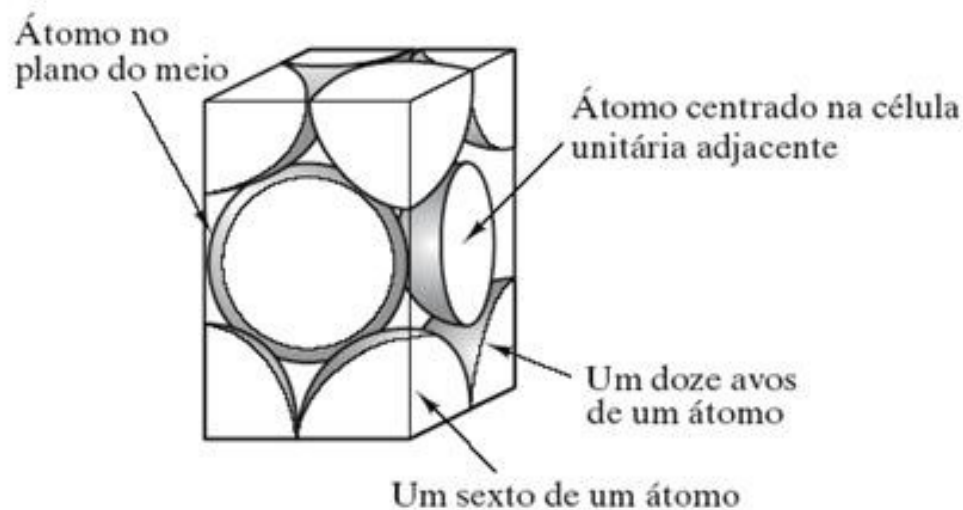
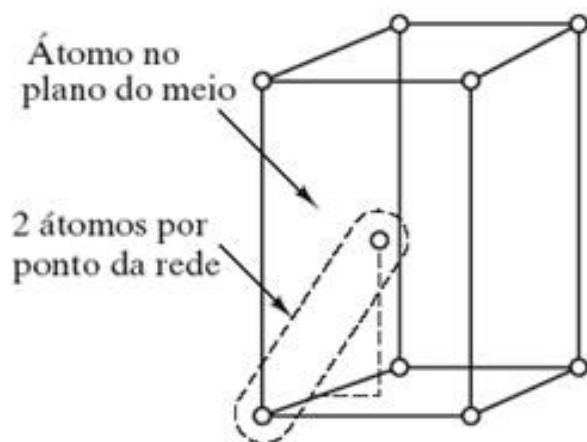
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Hexagonal Compacta (HC) ou hexagonal close-packed (HCP)

#### CÉLULA UNITÁRIA



Quantos átomos por célula unitária?

$$NA = 1 + (4 \times 1/6) + (4 \times 1/12) = 2 \text{ átomos}$$



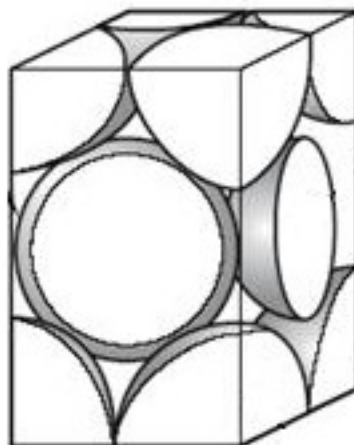
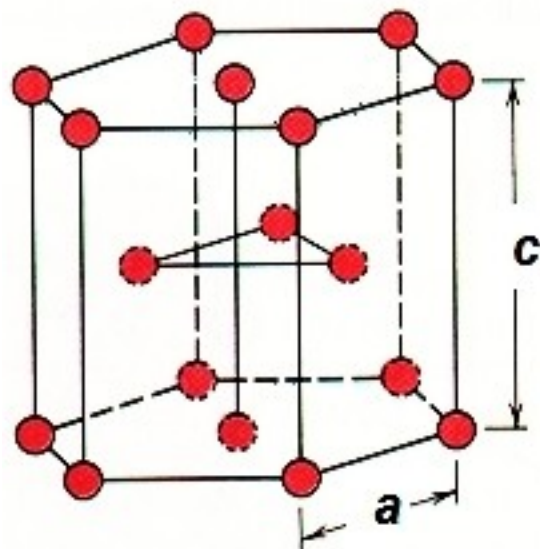
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS - FATOR DE EMPACOTAMENTO ATÔMICO (FEA)

#### ✓ Estrutura Hexagonal Compacta (HC) ou hexagonal close-packed (HCP)



Relação ideal  $c/a = 1,633$

$$FEA = 0,74$$

As estruturas HC e CFC são as mais compactas possíveis



Universidade Federal do ABC

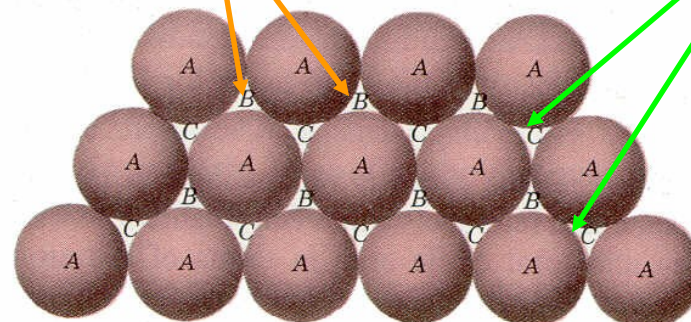
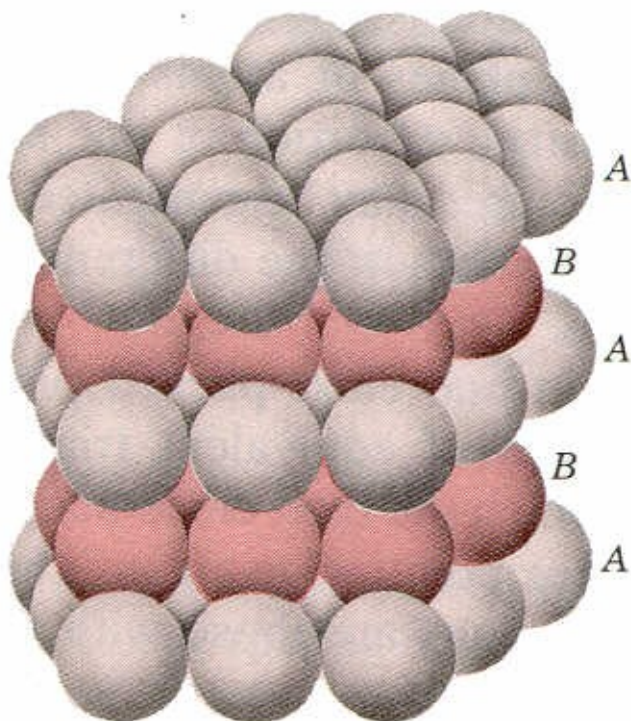
# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura HC – empilhamento ABAB

*Plano compacto formado por esferas rígidas (A).  
Observam-se dois tipos de interstícios, que são  
assinalados como B (triângulo para cima) e C  
(triângulo para baixo).*



(a)



(b)

**A estrutura HC não utiliza os interstícios C**





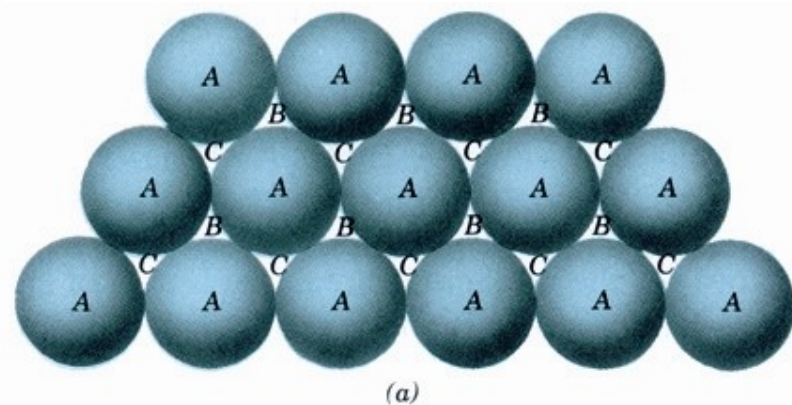
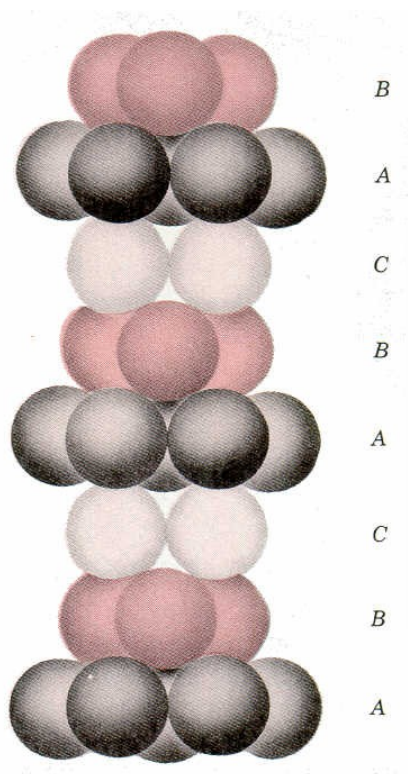
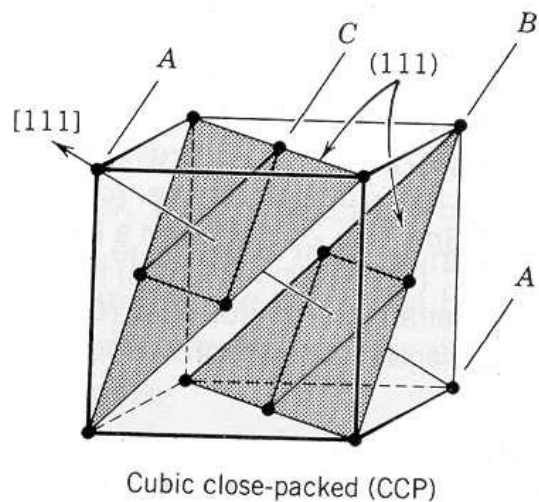
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura CFC – empilhamento ABCABC





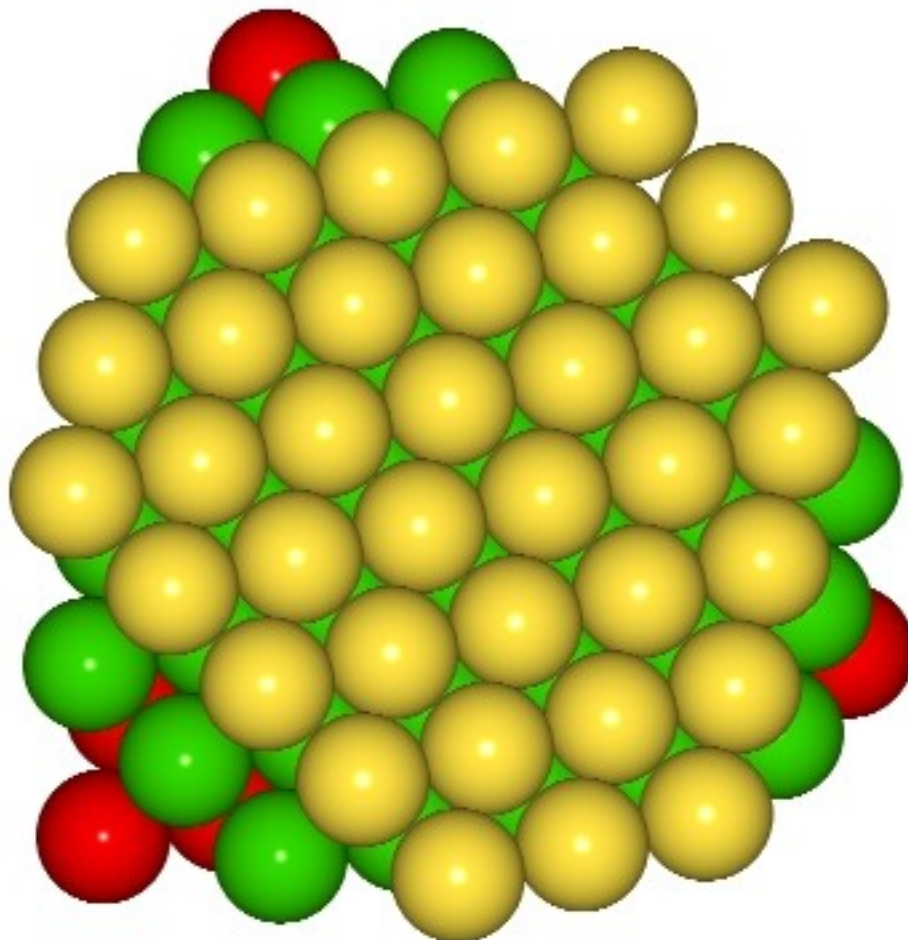
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura CFC – empilhamento ABCABC





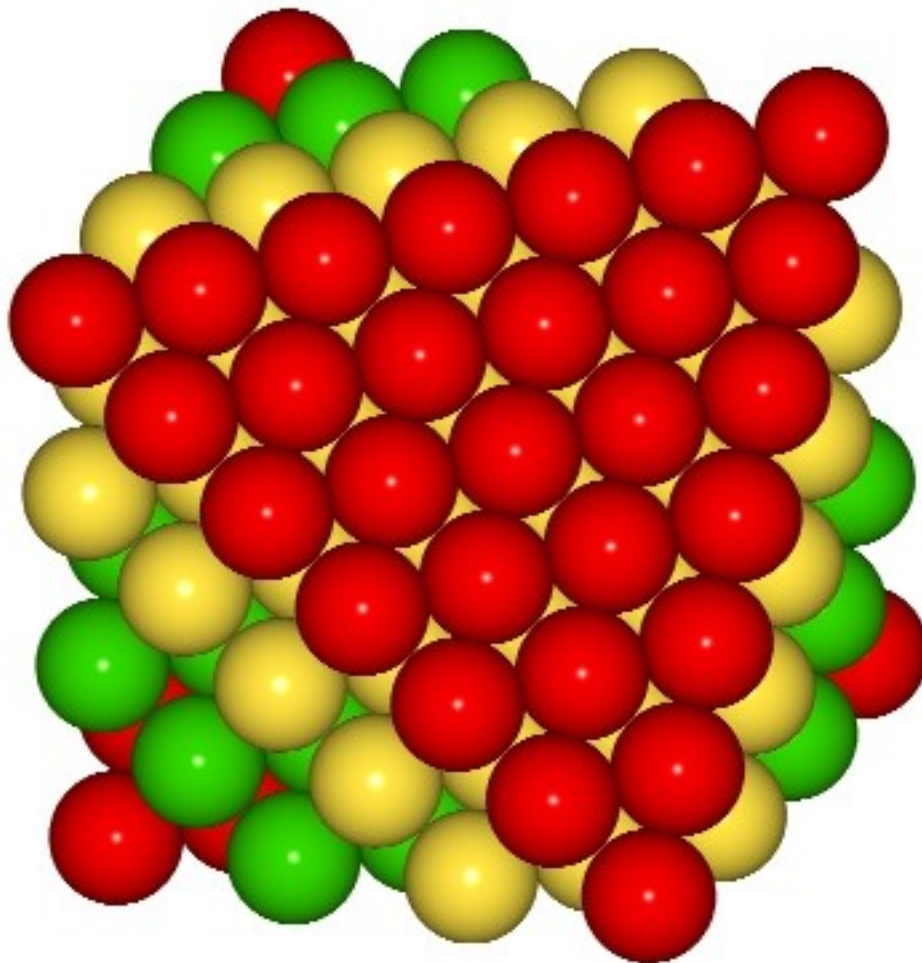
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura CFC – empilhamento ABCABC







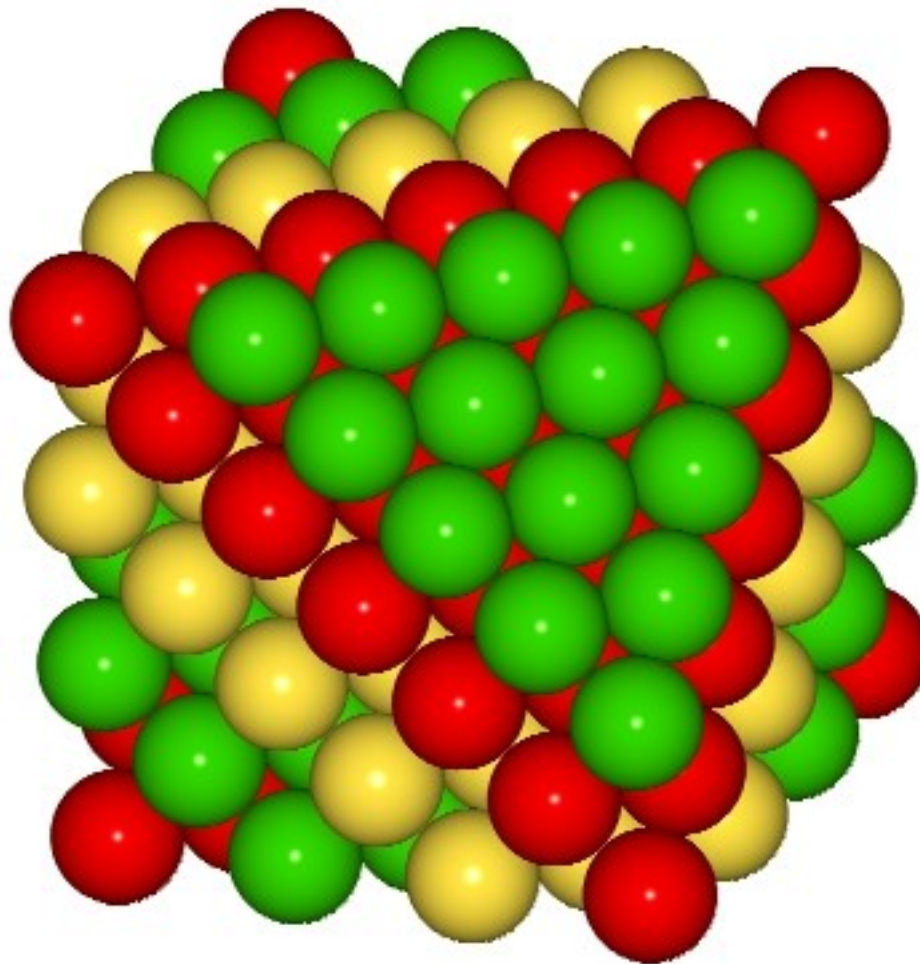
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura CFC – empilhamento ABCABC





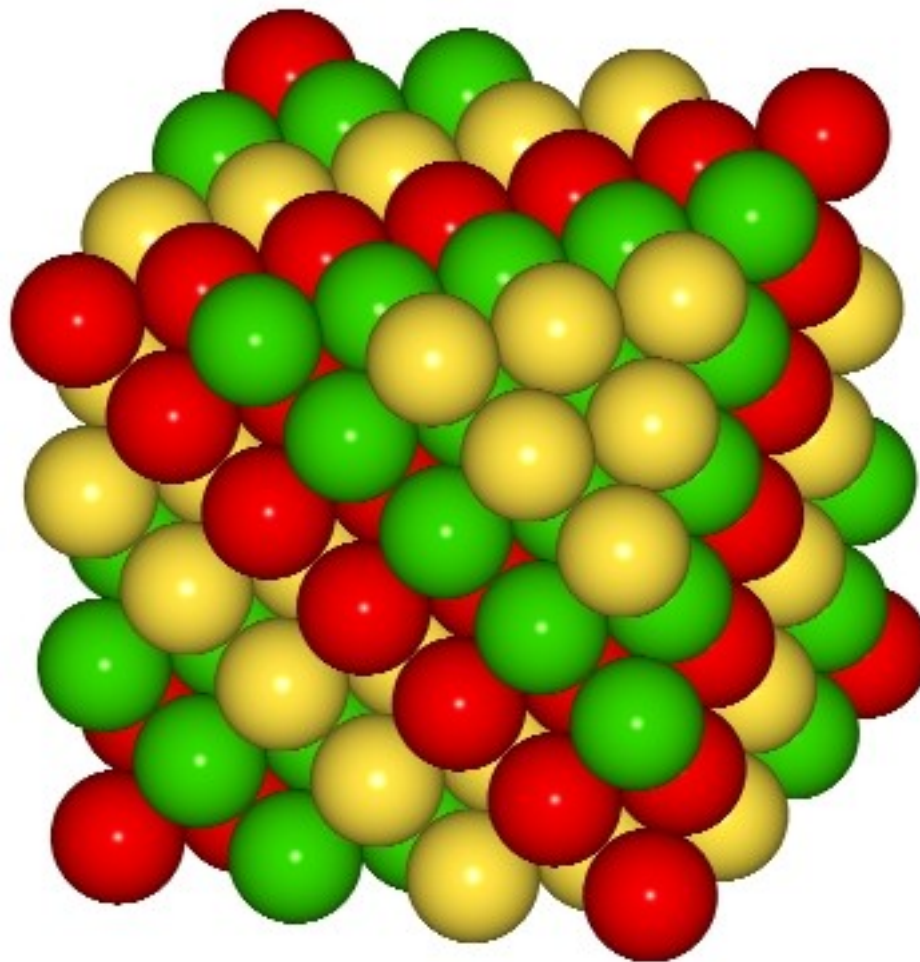
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura CFC – empilhamento ABCABC





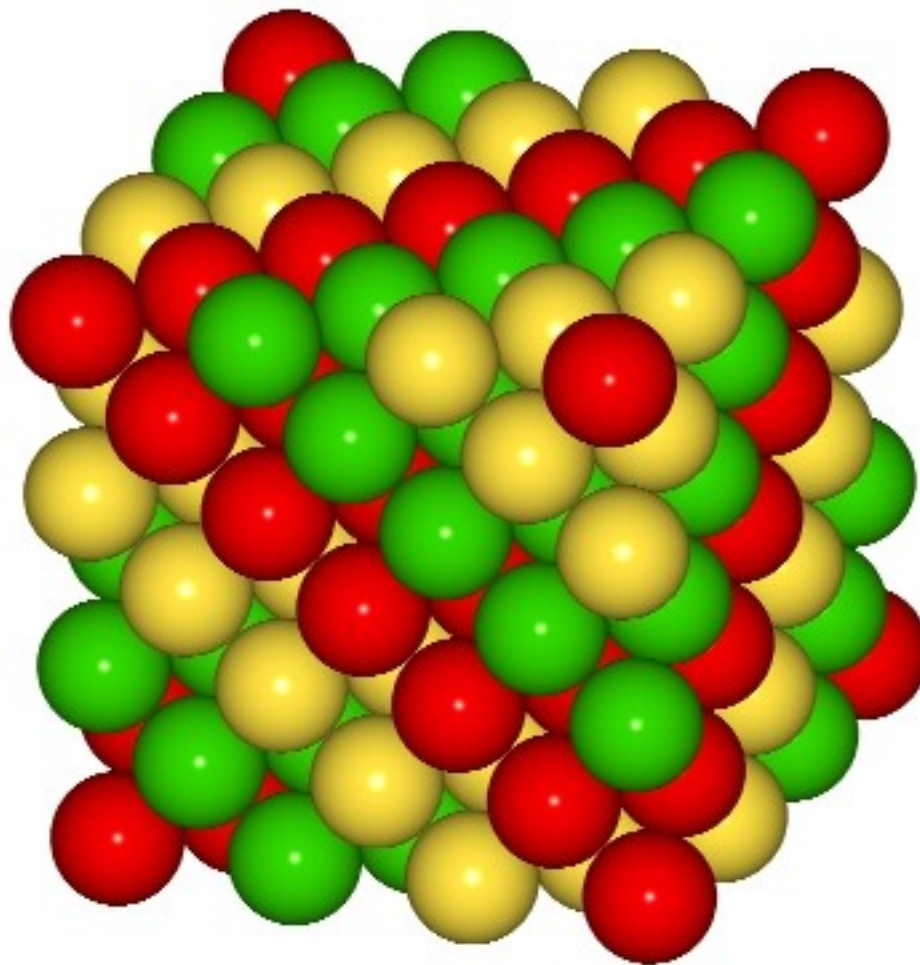
Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ESTRUTURA CRISTALINA DE METAIS – Comparação entre estruturas HC e CFC

#### Estrutura CFC – empilhamento ABCABC





Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

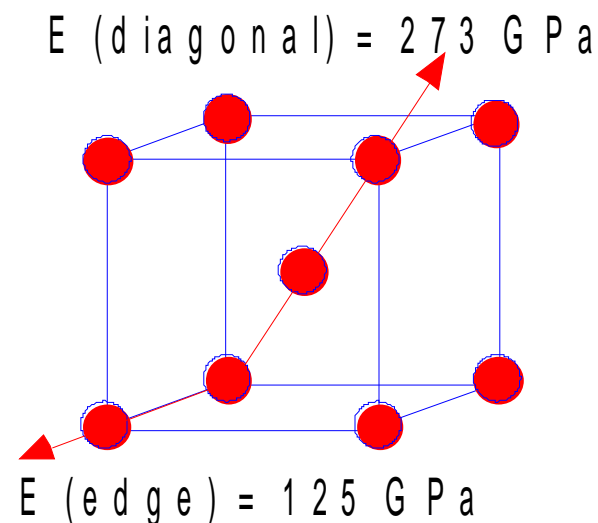
### ANISOTROPIA

- ✓ As propriedades de um monocristal são dependentes da direção cristalográfica deste cristal, ou seja, da direção em que a medida é feita.

<i>Metal</i>	<i>Modulus of Elasticity (GPa)</i>		
	<i>[100]</i>	<i>[110]</i>	<i>[111]</i>
Aluminum	63.7	72.6	76.1
Copper	66.7	130.3	191.1
Iron	125.0	210.5	272.7
Tungsten	384.6	384.6	384.6

↓  
CCC

Ferro  
CCC



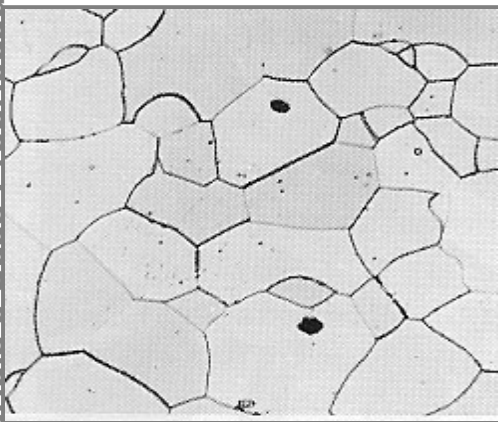


Universidade Federal do ABC

# CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

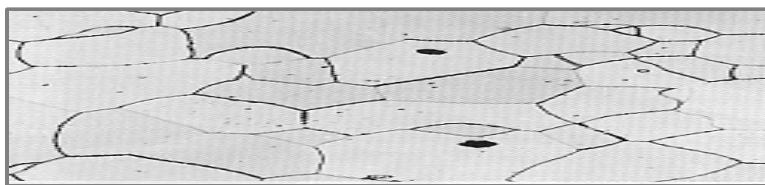
## MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

### ISOTROPIA



Em uma peça ou componente macroscópico: normalmente o número de cristais (grãos) é tão grande que o valor da propriedade acaba sendo **isotrópico** e é uma média de todas as direções.

$$E_{\text{(Fe policristalino)}} = 210 \text{ GPa}$$



**Anisotropia (textura)**

Em alguns casos, existe uma **orientação preferencial** dos cristais

**Sólidos amorfos são geralmente isotrópicos**