

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/363892983>

CRYSTALWALK

Book · September 2022

CITATIONS

0

READS

432

2 authors:



K. C. G. Candioto

University of São Paulo

34 PUBLICATIONS 206 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



Giuliana de Lima Marcondes Monteiro

University of São Paulo

2 PUBLICATIONS 1 CITATION

[SEE PROFILE](#)



CrystalWalk

MODELAGEM DE ESTRUTURAS CRISTALINAS ÀS SUAS MÃOS

**DRA. KATIA CRISTIANE GANDOLPHO CANDIOTO
GIULIANA DE LIMA MARCONDES MONTEIRO**

Este livro é um trabalho de
coedição entre as editoras:



www.edicoesbrasil.com.br
contato@edicoesbrasil.com.br



www.unieditoras.com.br
contato@unieditoras.com.br



**KATIA CRISTIANE GANDOLPHO CANDIOTO
GIULIANA DE LIMA MARCONDES MONTEIRO**

CRYSTALWALK

**Modelagem de estruturas cristalinas às
suas mãos**

**1^a Edição
Edições Brasil / UniEditoras
Jundiaí/SP
2022**

© Edições Brasil - Dezembro de 2022

Supervisão: Marlene Rodrigues da Silva Aguiar
Capa: Lars Matheus Valencia Dantas e Vinicius Gandolfo Candioto
Editoração eletrônica: João J. F. Aguiar
Revisão ortográfica: as autoras
Revisão Técnica: João José Ferreira de Aguiar.
Conselho Editorial: Teresa Helena Buscato Martins, João Carlos dos Santos, José Fernando Petrini, Dimas Ozanam Calheiros, Antonio Cesar Galhardi.

Todos os direitos reservados e protegidos pela Lei 9610 de 19/02/1998. Todas as informações contidas nesta obra são de exclusiva responsabilidade das autoras.

As figuras e imagens deste livro foram produzidas pelas autoras, sendo elas exclusivamente responsáveis.

Nenhuma parte desta obra pode ser reproduzida ou transmitida por qualquer meio, sem previa autorização por escrito da editora. O mesmo se aplica às características gráficas e à editoração eletrônica desta obra.

Alguns nomes de empresas e respectivos produtos e/ou marcas foram citadas apenas para fins didáticos, não havendo qualquer vínculo das mesmas com a obra.

As editoras e as autoras acreditam que todas as informações apresentadas nesta obra estão corretas. Contudo, não há qualquer tipo de garantia de que o uso das mesmas resultará no esperado pelo leitor. Caso seja(m) necessária(s), as editoras disponibilizarão errata(s) em seus sites. As editoras e/ou as autoras podem alterar ou retirar o conteúdo da internet sem prévio aviso aos leitores.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

C161c Candioto, Katia Cristiane Gandolfo

CrystalWalk: modelagem de estruturas cristalinas às suas mãos / Katia Cristiane Gandolfo Candioto, Giuliana de Lima Marcondes Monteiro – Jundiaí: Edições Brasil / UniEditoras, 2022.

84 p. Formato 16 x 23 cm.

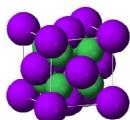
ISBNs: 978-65-5104-010-8 (Edições Brasil)
978-65-89605-05-8 (UniEditoras)

1. CrystalWalk 2. Modelagem 3. Software I. Monteiro,
Giuliana de Lima Marcondes. II. Título

CDD: 542

Distribuição GRATUITA mediante cadastro do leitor e download no site na editora

Edição eletrônica / e-book
sac@edicoesbrasil.com.br - www.edicoesbrasil.com.br

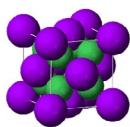


Sumário

1 O QUE É UM CRISTAL?	7
1.1 Metais	8
1.2 Ligas Metálicas	9
1.3 Cristais Iônicos	10
1.4 Cristais Covalentes	11
1.5 Cristais Moleculares	12
2 AS 14 REDES ESPACIAIS DE AUGUSTE BRAVAIS.....	14
3 PARÂMETROS DE REDE.....	16
4 ESTRUTURAS CRISTALINAS E CÉLULAS UNITÁRIAS.....	17
4.1 Células unitárias	18
4.2 Tipos de células unitárias	19
4.2.1 Sistema triclínico.....	20
4.2.2 Sistema Cúbico.....	22
4.2.2.1 Sistema Cúbico Simples	22
4.2.2.2 Sistema Cúbico de Corpo Centrado	24
4.2.2.3 Sistema Cúbico de Face Centrada	26
4.2.3 Sistema Monoclínico e Sistema ortorrômbico.....	28
4.2.4 Sistema Tetragonal e Trigonal (romboédrica)	31
4.2.5 Sistema Hexagonal.....	33
5 PLANOS E DIREÇÕES DE MILLER.....	35
6 O CRYSTALWALK.....	39
7 INTRODUÇÃO A INTERFACE	40
7.1 Ícones do Menu Principal:	43
7.2 Ícones do Submenu – Barra de Alternância	44
8 TRABALHANDO COM O CRYSTALWALK	45
8.1 Editor de Rede Bravais.....	46
8.2 Editor de Motivo:	48
8.2.1 Alterações em Coordenadas Atômicas	50
8.3 Visualização e Interação:.....	54
8.3.1 As Interações com Realidade Virtual.....	65
8.4 Planos e Direções do Cristal	69
8.5 Comentários e Narrativas	73
8.6 Importar ou exportar projetos	76
8.6.1 Importação.....	77
8.6.2 Exportação.....	80
APÊNDICE A	82
SOBRE AS AUTORAS	83

Fonte:

Bardella, F., Montes Rodrigues, A. & Leal Neto, R. M. "CrystalWalk: crystal structures, step by step." **Journal of Applied Crystallography** 50.3 (2017): 949-950 . DOI: 10.1107/S160057671700560X. Disponível em: <https://journals.iucr.org/j/issues/2017/03/00/ks5568/index.html>. Acesso em: 01 mar. 2022.



Conceitos Importantes

1 O QUE É UM CRISTAL?

Um cristal é um material que possui átomos, íons ou moléculas, organizados de forma ordenada e repetitiva através de longas distâncias. A repetição ao longo das distâncias pode se organizar de maneira que padrões geométricos se formem no espaço tridimensional. Os padrões geométricos podem ser definidos de 14 maneiras, são chamados de **redes espaciais**.

Às vezes, materiais brilhantes e translúcidos, como o vidro, são comercialmente chamados de cristais, porém, há uma grande diferença entre as posições atômicas de um vidro e um cristal propriamente dito, isto porque o vidro na realidade é um material amorfó e não cristalino, ou seja, não possui ordenamento de longo alcance como os cristais possuem.

A Figura 1 demostra a organização de átomos em material cristalino e no vidro.

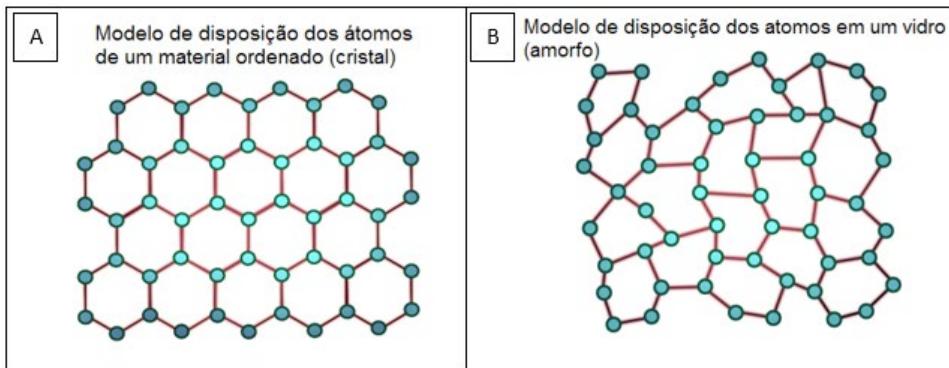


Figura 1: (A) Cristalino e (B) Amorfo. Fonte: Vinicius Gandolpho Candioto, 2021

Em um cristal a posição de cada átomo, íon ou molécula é determinada por espaços e posições já existentes em uma rede espacial, e o nome que se dá aos átomos em nesta rede é: **Motivo**.

A Figura 2 esquematiza a definição de um cristal em relação as repetições a longas distâncias.



Conceitos Importantes

Cristal =
Rede (onde repetir)
+
Motivo (o que repetir)

Figura 2: Definição de cristal. Fonte: Autoria Própria

Alguns exemplos clássicos de materiais cristalinos são os metais, ligas metálicas, cristais iônicos, cristais covalentes e cristais moleculares.

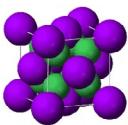
1.1 Metais

Materiais metálicos são compostos por elementos da classe dos Metais na tabela periódica e possuem propriedades físicas e químicas com determinadas características. Uma das características é a presença de elétrons que não são ligados a nenhum átomo em particular e por isso alguns são bons condutores de calor e eletricidade. A Figura 3 apresenta exemplos de materiais metálicos.



Figura 3: Metais. Fonte: Pixabay¹

¹ Disponível em: <https://pixabay.com/pt/photos/a%C3%A7o-inoxid%C3%A1vel-tubos-moagem-5497622/>. Acesso em 30 nov. 2021



Conceitos Importantes

Para saber mais...

Os metais são normalmente cristalinos, mas se resfriados em uma taxa muito alta eles podem ter uma estrutura amorfa (vítreia).

1.2 Ligas Metálicas

As ligas metálicas são como os metais, mas constituídas por dois ou mais tipos de metais, por isso o nome de “Liga”, elas são muito utilizadas em confecção de vários produtos do cotidiano, como por exemplo: fios, lâmpadas, estruturas de carros, bicicletas, viadutos eletrodomésticos entre outros.

Alguns exemplos mais notórios das ligas metálicas:

- **Aço Comum:** liga metálica muito resistente composta de ferro (Fe) e carbono (C), utilizada nas construções de pontes, fogão, geladeira, dentre outras.
- **Aço Inoxidável:** composta de ferro (Fe), carbono (C), cromo (Cr) e níquel (Ni). Diferente do aço comum, essa liga metálica apresenta melhor resistência à oxidação, sendo utilizada na construção de vagões de metrô, trens, fabricações de peças automotivas, utensílios cirúrgicos, farmacêuticos, alimentícios, fogões, pias, talheres, etc.
- **Bronze:** liga metálica formada por cobre (Cu) e estanho (Sn) é utilizada na construção de estátuas, fabricação de sinos, moedas, etc.
- **Latão:** constituída de cobre (Cu) e zinco (Zn), esse tipo de liga metálica é muito utilizada na fabricação de armas, torneiras, etc.
- **Ouro:** na fabricação de joias, o ouro não é empregado em sua forma pura, ou seja, da forma encontrada na natureza. Assim, a liga metálica formada para a fabricação de joias é composta de 75% de ouro (Au) e 25% de cobre (Cu) ou prata (Ag). Observe que para a confecção de joias de ouro 18 quilates, utilizam-se 25% de cobre, enquanto que o ouro chamado de 24 quilates é considerado “ouro puro”. Além disso, a liga metálica composta de ouro é utilizada na fabricação de veículos espaciais, acessórios de astronautas, dentre outros (Figura 4).



Conceitos Importantes



Figura 4: Ouro em joia.

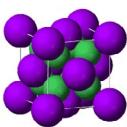
Fonte: Imagem de Arek Socha por Pixabay²

1.3 Cristais iônicos

Os cristais iônicos como o próprio nome diz são cristais que são compostos por íons positivos e negativos. Um exemplo clássico de um cristal iônico é o Cloreto de sódio (NaCl), com íons positivos de Sódio (Na^+) e íons negativos de (Cl^-).

A Figura 5 exemplifica um modelo de cristal do NaCl , os átomos verdes representam os átomos dos ânions e os átomos roxos os de cátions. Percebe-se que há uma diferença de tamanho significativa entre os tamanhos dos átomos representados como esferas rígidas, isto ocorre pela diferença do raio atômico entre os íons.

² Disponível em: <https://pixabay.com/pt/photos/an%C3%A9is-de-casamento-an%C3%A9is-de-noivado-3611277/>. Acesso em 30 nov. 2021



Conceitos Importantes

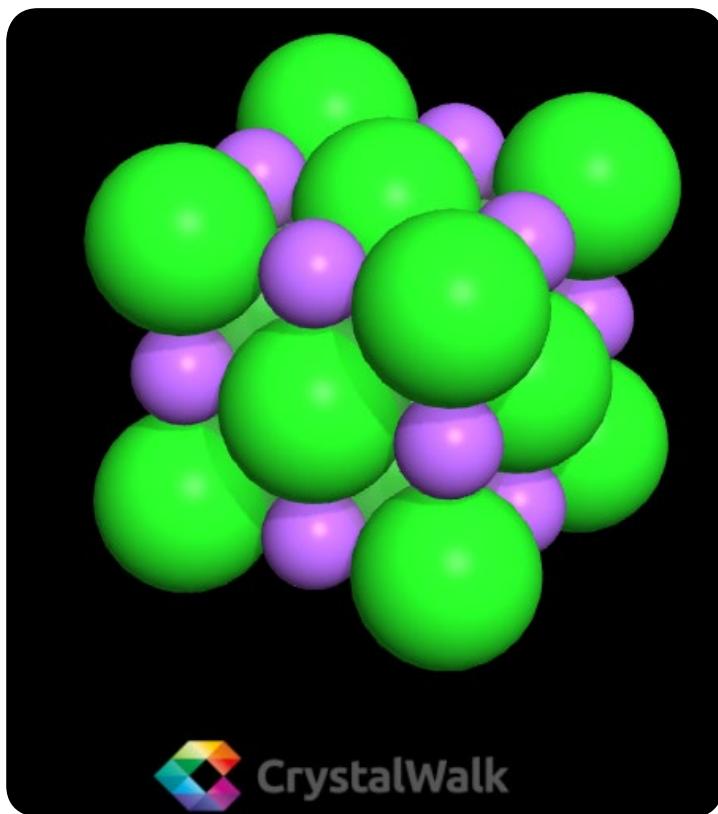
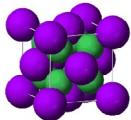


Figura 5: NaCl.

1.4 Cristais Covalentes

Os cristais covalentes se caracterizam por átomos que estão ligados com covalência, ou seja, pelos seus elétrons de valência compartilhados. Uma ligação covalente é contabilizada por dois elétrons, um de cada átomo. Os elétrons tendem a se localizarem entre os átomos que os compartilham. Estas ligações são direcionadas e elas determinam o padrão geométrico dos átomos em um cristal, um exemplo disso é o Diamante (Figura 6).



Conceitos Importantes



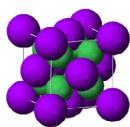
Figura 6: Diamante. Fonte: Pixabay³

Os cristais covalentes possuem pontos de fusão muito elevados e são muito duros, isto ocorre pelo fato das ligações covalentes serem muito rígidas. Como os elétrons são compartilhados entre os átomos, e tendem a se localizarem entre eles, os materiais de cristais covalentes tornam-se maus condutores de eletricidade, uma vez que para ter boa condução, a característica principal é ter elétrons livres nas suas superfícies.

1.5 Cristais Moleculares

Cristais moleculares são aqueles que são constituídos por moléculas interligadas entre si por forças intermoleculares do tipo Van der Waals ou em alguns casos, por pontes de hidrogênio. Alguns exemplos de cristais moleculares são: hidrogênio (H_2), o oxigênio (O_2), o dióxido de carbono (CO_2) e o iodo (I_2) (Figura 7).

³ Disponível em: <https://pixabay.com/illustrations/diamond-precious-stone-jewelry-1199183/>. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes



Figura 7: Iodo. Fonte: Tomihahndorf, Domínio público ⁴

Umas das características de cristais moleculares é a deles possuírem pontos de fusão e ebulição baixos, isso se justifica pelas forças intermoleculares dos cristais não exigirem alto valor de energia para fundir ou vaporizar, como é o caso de Forças de Van der Waals. A água possui pontes de hidrogênio como força intermolecular, porém ela só forma cristais moleculares quando está na forma de gelo, abaixo de 0°C. A Figura 8 exibe como se ordena os átomos da água nos respectivos estados: sólido, líquido e gasoso.

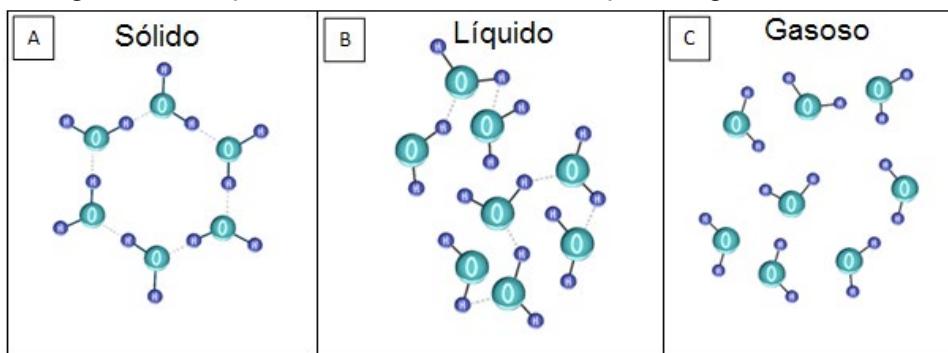


Figura 8: (A) Sólido; (B) Líquido e (C) Gasoso.

Fonte: Vinicius Gandolfo Candioto, 2021

4 Disponível em: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/7/7c/Iod_kristall.jpg. Acesso em 30 nov. 2021



Conceitos Importantes

2 AS 14 REDES ESPACIAIS DE AUGUSTE BRAVAIS



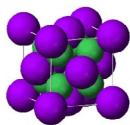
No **capítulo 1**, foi visto a definição de cristal na qual englobava o conceito de rede espacial e padrão geométrico. Neste capítulo, serão apresentadas as 14 redes espaciais e os padrões geométricos de Auguste Bravais, nos quais estão inseridos nas estruturas de materiais cristalinos.

Em 1848, na França, um físico chamado Auguste Bravais foi um notável pesquisador sobre cristalografia e foi o grande responsável por demonstrar as configurações básicas de um sistema cristalino denominando as 14 redes espaciais.

Para ser uma Rede de Bravais, é preciso seguir e obedecer a três condições:

- (1) A estrutura constitui uma célula unitária, ou seja, a menor subdivisão de um material cristalino que contém a rede responsável por conservar as características de todo o reticulado;
- (2) Pontos dispostos de maneira oposta em planos (faces), tornam estes paralelos;
- (3) Os pontos possuem vizinhanças equivalentes.

Será visto com maior profundidade no **capítulo 4** que há a existência de apenas 7 sistemas cristalinos (células unitárias): **triclinico, cúbico, monoclinico, ortorrômbico, tetragonal, trigonal e hexagonal**. As redes que constituem estes sistemas podem ser denominadas primitivas (**P**) quando elas possuírem um **átomo por célula ou não Primitiva (F, C ou I)** quando houver mais que um átomo na célula, isto resulta então nas 14 redes.



Conceitos Importantes

Para as células unitárias e denominações de suas redes: usa-se P para designar uma rede de célula primitiva; F se refere às faces para apenas faces centradas, C se refere às faces perpendiculares aos eixos “c” para células de face centrada e I para célula não primitiva de corpo centrado.



O Quadro 1 traz algumas informações sobre estes 7 sistemas e as redes e que elucidará melhor o que está sendo apresentado.

Quadro 1: 14 Redes

Sistema	Nº de Redes	Ângulos	Eixos	Estrutura Tridimensional	Representação
Triclínico	1	$\alpha \neq \gamma \neq \beta$	$a \neq b \neq c$	Triclínica	
Monoclínico	2	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$a \neq b \neq c$	Monoclínica P e Monoclínica C	
Ortorrombico	4	$\alpha = \beta = \gamma$	$a \neq b \neq c$	Ortorrombica P, Ortorrombica C, Ortorrombica I e Ortorrombica F	
Tetragonal	2	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$	Tetragonal P e Tetragonal I	



Conceitos Importantes

Cúbico	3	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a=b=c$	Cúbica P, Cúbica I e Cúbica F	
Romboédrico	1	$\alpha=\beta=\gamma<120^\circ$ $e \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	Romboédrica P	
Hexagonal	1	$\alpha=\beta=90^\circ$ e $\gamma=120^\circ$	$a=b \neq c$	Hexagonal P	

Parâmetros de Rede

3 PARÂMETROS DE REDE

Os Parâmetros de Rede como o próprio nome diz são as medidas da rede de uma célula, eles constituem de três comprimentos que são denominados por letras do alfabeto latino e grego. Os comprimentos das arestas das redes são denominados pelas letras a , b e c para os eixos cartesianos x , y e z respectivamente e para os eixos a , b e c de uma célula, já os ângulos são representados pelas letras gregas α , β e γ . Figura 9 destaca os parâmetros de rede em um sistema de rede cúbico simples.

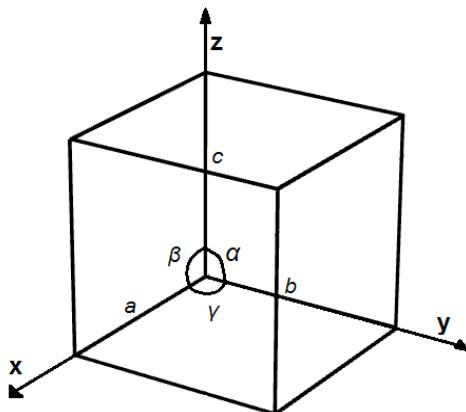
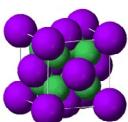


Figura 9-Parâmetros de rede.



Conceitos Importantes

A Figura 9 apresenta a representação dos parâmetros em um sistema cúbico, observe que o ângulo α está entre os eixos cartesianos y e z, β entre x e z e γ entre x e y. As distâncias a , b e c por sua vez estão sobre os eixos cartesianos x, y e z respectivamente. É importante ressaltar que os parâmetros de rede não são constantes, eles são influenciados pelas variações de temperatura, pressão, etc.

Cada átomo possui um raio atômico específico e este raio estará relacionado às distâncias a , b e c da rede. Com as informações do raio atômico de um determinado elemento químico e o conhecimento do modelo de sua ordem de repetição, ou seja, sua rede espacial, é possível calcularmos um fator importante da Ciência de Materiais: Fator de empacotamento atômico. Este fator está intimamente ligado às propriedades dos materiais e cada tipo de Rede espacial de um modelo cristalino possui um valor de fator de empacotamento atômico (FEA).

4 ESTRUTURAS CRISTALINAS E CÉLULAS UNITÁRIAS

O conceito de Estruturas Cristalinas está diretamente relacionado com o com a definição de um cristal, visto no **capítulo 1**. Uma definição clássica é, “uma estrutura cristalina consiste de uma rede espacial 3-D ornamentada com um ou mais, ornamentada com um ou mais átomos”. A rede espacial nada mais é do que rede de Bravais de um padrão geométrico, enquanto que os ornamentos chamados átomos são representados pelo termo “Motivo”.

A Estrutura Cristalina, portanto, compõe a mesma definição de um cristal: Rede + Motivo, ela é nomeada de acordo com o padrão geométrico de rede que se repete ao longo alcance, ou seja, assim como há redes cúbicas, há as estruturas cúbicas, hexagonais, tetragonais e etc.

É importante notificar que assim como os parâmetros de rede são associados às propriedades dos materiais, as estruturas cristalinas são modificadas em alguns materiais que possam passar por transformações físicas e de estado. Com a mudança de temperatura e pressão em determinados processamentos, é possível mudar a estrutura cristalina do material tal quanto suas propriedades físicas, químicas e mecânicas, estes fenômenos podem ocorrer através da



Conceitos Importantes

alotropia ou polimorfismo.

Estudar as estruturas cristalinas dos materiais é de suma importância na Ciência e Engenharia de Materiais para compreender suas propriedades e contribuir para a elaboração ou melhoramento de um determinado material que será uma futura ferramenta para a sociedade.

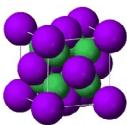
É fato que na natureza e na realidade os materiais cristalinos não constituem da repetição de longo alcance de modo perfeito, os defeitos de orientação de uma estrutura cristalina são responsáveis pelo aparecimento de contornos de grãos em um metal, por exemplo. Os defeitos de uma estrutura cristalina são relacionados aos defeitos pertencentes às redes e posições atômicas, ou seja, defeitos cristalinos são irregularidades nas redes de Bravais e nos motivos.

Neste capítulo, os conceitos de diferentes tipos de defeitos não serão destaque, mas é importante ressaltar como as estruturas cristalinas e suas definições estão diretamente relacionadas às propriedades dos materiais, uma vez que o estudo de defeitos são um dos temas mais importantes dentro da Ciência dos Materiais.

O software CrystalWalk é capaz de simular um empilhamento perfeito de estruturas cristalinas com os 14 tipos de Redes de Bravais, mas para a criação deste empilhamento, é necessário partir-se de uma célula unitária.

4.1 Células unitárias

A célula unitária pode ser definida como sendo o menor agrupamento de um arranjo atômico de um material cristalino, ou seja, ela constitui da menor parte e única de uma estrutura cristalina. A célula unitária agrupada às outras células de mesmo sistema de rede, será responsável pela estruturação cristalina. A Figura 10 apresenta um exemplo de montagem de uma estrutura cristalina no software CrystalWalk.



Conceitos Importantes

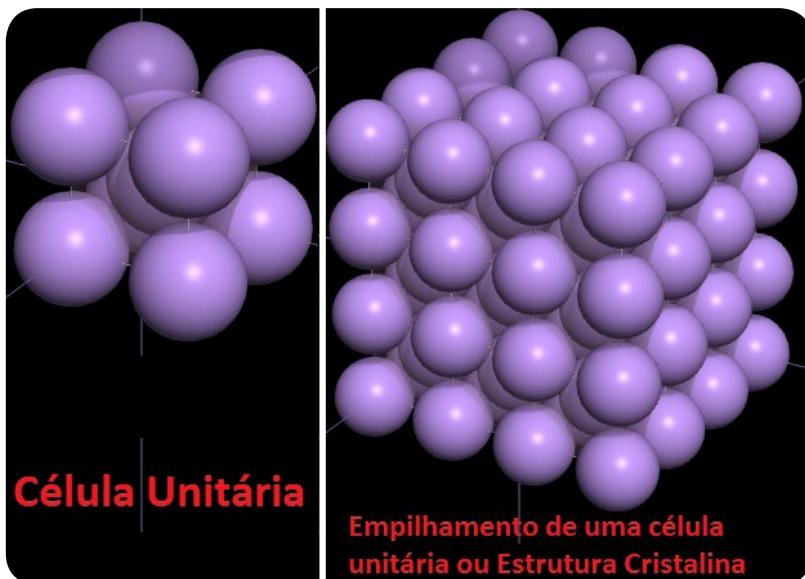


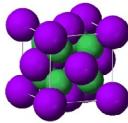
Figura 10: Célula Unitária de uma Estrutura Cristalina

Como pode ser visualizado na Figura 10, a Estrutura Cristalina é composta por várias células unitárias, sendo estas compostas pela rede cúbica I, ou seja, cúbica de corpo centrado, a nomeação de tipos de célula das estruturas de cristais será visto no ítem 4.2. Lembrando que **Rede** é “**ONDE SE REPETE**” e **Motivo** “**O QUE SE REPETE**.” Os átomos que se repetem em cada ponto da rede são o Motivo, cada elemento químico está inserido em uma das 14 redes de bravais na natureza, ou seja, cada tipo de elemento de um material tem sua determinada estrutura cristalina.

4.2 Tipos de células unitárias

Assim como há 7 sistemas de redes vistos no **capítulo 2**, há os 7 sistemas cristalinos que denominam a forma das células unitárias, ambos estão inseridos no mesmo conceito, são eles: **triclinico**, **cúbico**, **monoclínico**, **ortorrômbico**, **tetragonal**, **trigonal** e **hexagonal**. Estes, englobam todos os cristais até então conhecidos. Com o conhecimento do sistema cristalino de uma célula unitária, é possível prever propriedades importantes de um determinado material.

O Apêndice A apresenta a Tabela Periódica com os principais elementos e suas respectivas células unitárias em estado sólido nas



Conceitos Importantes

condições normais de temperatura e pressão. A seguir serão apresentadas descrições dos 7 sistemas cristalinos.

4.2.1 Sistema triclínico

O Sistema triclínico de uma célula unitária é caracterizado pelos ângulos α , β e γ diferentes de 90° , com a medida dos parâmetros a , b e c também diferentes entre si, exibindo uma simetria translacional ou de inversão. A Figura 11 exibe um exemplo de uma célula unitária triclínica.

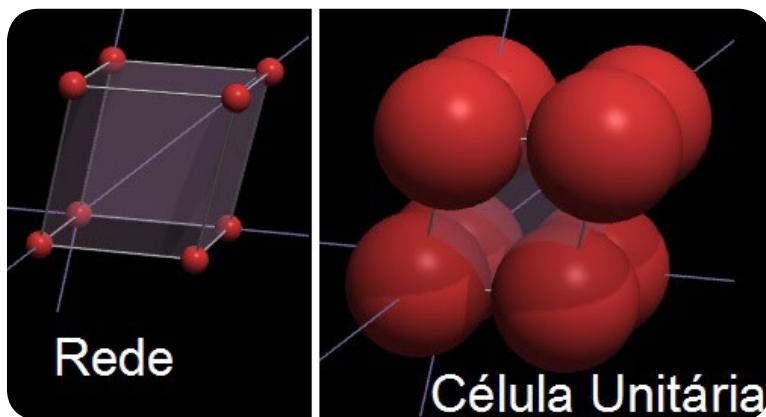
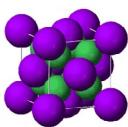


Figura 11: Célula Triclínica.

Este tipo de célula unitária não é muito comum na natureza, dentre os sistemas cristalinos, o triclínico é o que apresenta menor simetria entre os parâmetros, porque os seus três eixos cristalográficos são diferentes entre si. Dos minerais cristalinos conhecidos, apenas 9% apresentam estrutura cristalina triclínica, exemplos de minerais triclínicos são a Rodonita e a Turquesa. A Figura 12 exibe uma fotografia do mineral Rodonita, mineral extraído da jazida localizada no Morro da Mina, na cidade Conselheiro Lafaiete (Queluz de Minas), Minas Gerais, Brasil.



Conceitos Importantes



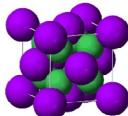
Figura 12: Rodonita. Fonte: By Géry PARENT - Own work, CC BY-SA 4.0 ⁵

Como pode ser visto, o cristal Rodonita varia de uma cor avermelhada ou rósea com traços brancos e partes transparentes. Ela é composta por silicatos de manganês com cálcio em estrutura triclínica, ela pode ser utilizada para a extração de manganês ou pode ser utilizada como pedra ornamental. A Figura 13 exibe a Turquesa, também de estrutura triclínica.



Figura 13: Turquesa. Fonte – Pixabay ⁶

-
- 5 Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=57941455>. Acesso em 30 nov. 2021.
 - 6 Disponível em: <https://pixabay.com/pt/photos/turquesa-rocha-azul-pedra-geologia-3388145/>. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes

A Turquesa varia de uma cor azul ciano à esverdeada, o seu custo aumenta na medida que há uma cor azul que se assemelha a cor do céu, enquanto que as mais baratas são as verdes. Ela é composta por fosfato de alumínio com pequenas quantidades de cobre e ferro.

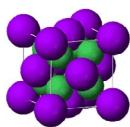
4.2.2 Sistema Cúbico

O sistema cúbico possui três tipos, o cúbico simples, cúbico de corpo centrado e cúbico de faces centradas. Dentre os minerais cristalinos conhecidos cerca de 8% apresenta as características cúbicas. Como visto na Tabela 1, ele possui os três eixos cristalográficos iguais em relação aos ângulos α , β e γ e valores de parâmetros a, b e c .

Os cristais com sistema cúbico são especiais por apresentarem características que nenhum outro material cristalino diferente possui: a capacidade da luz e calor se propagarem na mesma velocidade e em qualquer direção no material, este fenômeno chama-se Isotropia térmica e óptica. Exemplos de cristais cúbicos são diamante, ouro, granadas, prata, pirita, sodalita entre outros.

4.2.2.1 Sistema Cúbico Simples

Como o próprio nome diz, o sistema cúbico simples é simples, consiste em um cubo com 4 vértices com distâncias iguais entre si. É extremamente raro encontrarmos na natureza o sistema cúbico simples, pelo fato do seu baixo valor de fator de empacotamento atômico (FEA). A Figura 14 exibe um exemplo de célula unitária cúbica simples.



Conceitos Importantes

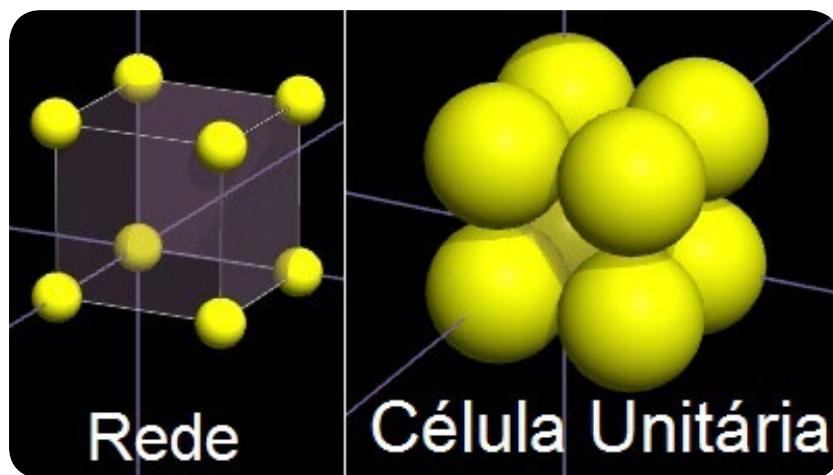


Figura 14: Célula cúbica simples

A célula cúbica simples não é muito fácil de ser denominada aos materiais, isto porquê é uma estrutura rara, pelo fato de possuir baixo fator de empacotamento atômico. O fato dela possuir um fator baixo faz-se necessário uma energia muito grande entre os átomos para manterem suas ligações atômicas, bem como, suas posições. Um exemplo de um material que possui essa estrutura é o Polônio, no qual é um material altamente radioativo. Ele é radioativo por possuir característica de emitir partículas alfas, a Figura 15 apresenta uma imagem real deste semimetal.



Conceitos Importantes

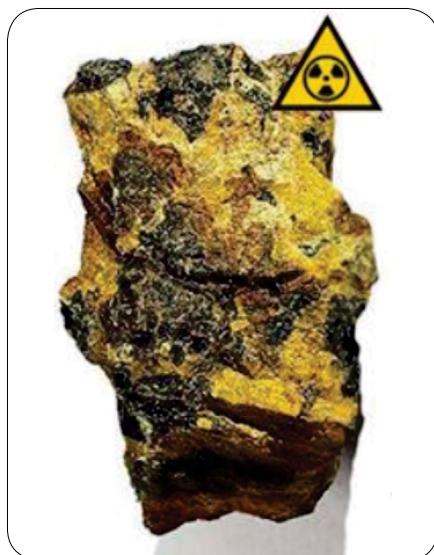


Figura 15: Polônio. Fonte: Página Elementos⁷

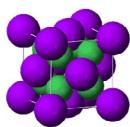
Como pôde ser visto, o polônio possui uma cor que varia entre preto, cinza e amarelo. Ele é altamente radioativo mas possui importantes aplicações como por exemplo usado em modo selado em escovas que removem a poeira em filmes fotográficos, em geradores termoelétricos de satélites artificiais e sondas espaciais. Ele foi o terceiro elemento radioativo descoberto por Marie Skłodowska Curie, e foi o mesmo que levou ela a receber o prêmio Nobel em 1911.

4.2.2.2 Sistema Cúbico de Corpo Centrado

Este tipo de sistema é um sistema bem conhecido e muito presente em vários materiais cristalinos metálicos, o nome “corpo centrado” é o mesmo que “motivo centrado”, ou seja, um átomo que fica no centro de sua estrutura. Ele possui um fator de empacotamento atômico maior que o anterior cúbico simples, mas menor que o posterior que será visto no ítem **4.2.2.3** Sistema cúbico de face centrada.

O fato de um material constituir deste sistema, levará a características específicas e propriedades específicas, nos quais necessitam de um levantamento e pesquisas mais avançadas. Este sistema

⁷ Disponível em: <https://elementos.org.es/polonio>. Acesso em 7 out. 2021.



Conceitos Importantes

cúbico, portanto, possui um átomo inteiro em sua região central e pode ser visto na Figura 16.

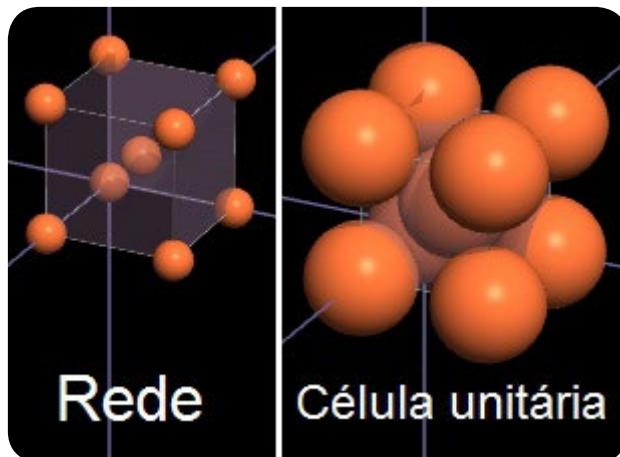


Figura 16: Célula de corpo centrado.

Este modelo de célula é mais comum na natureza, por possuir um fator de empacotamento maior e assim mais propenso a manter os átomos. Um exemplo de um material que possui esta estrutura é o Nióbio. O Nióbio tem propriedades químicas e físicas muito semelhantes ao elemento Tântalo, e é muito utilizado para melhorar algumas propriedades mecânicas de ligas metálicas com formação de carbetas e nitretos, promovendo aumento de dureza. Ele é caracterizado por ser um supercondutor e com essa propriedade ele ajuda na resistência à penetração de ligas metálicas, além de ser muito resistente à corrosão. As primeiras aplicações do Nióbio foram a partir do século XX, e atualmente é muito aplicado em oleodutos, a Figura 17 traz uma imagem deste elemento cúbico de corpo centrado muito famoso no Brasil.



Conceitos Importantes



Figura 17: Nióbio. Fonte: Livre - Própria, CC BY-SA 3.0⁸

Como pode ser visualizado, o Nióbio possui uma cor acinzentada e brilhante, em determinadas condições ambientais pode adquirir cor azul. Ele é altamente resistente a corrosão porquê ao ser exposto em ambientes, uma camada de óxido de nióbio é formada na superfície, protegendo-o do processo espontâneo corrosivo.

O Brasil é muito rico em Nióbio, e este é um metal de grande interesse econômico. A maior produtora de nióbio do mundo se encontra em Belo Horizonte, a sede da Companhia Brasileira de Metallurgia e Mineração (CBMM).

4.2.2.3 Sistema Cúbico de Face Centrada

O termo “Face centrada” se refere à átomos que estarão centrados em cada face (Figura 18). Este tipo de célula possui um fator de empacotamento de 0,74 e este é um fator que garante maior estabilidade que o de cúbico de corpo centrado (0,68), pode-se dizer que quanto maior o fator, é indicado que os átomos por estarem mais próximos não demanda muita força para permanecerem ligados, isto é, sua energia de ligação é maior, ao contrário do cúbico simples visto no ítem 4.2.2.1, no qual os átomos não tinham uma energia de ligação suficiente para permanecerem em suas posições

⁸ Disponível em: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Minerio_de_Niobio.jpg#/media/File:Minerio_de_Niobio.jpg. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes

e por isto se tornou rara a sua existência na natureza.

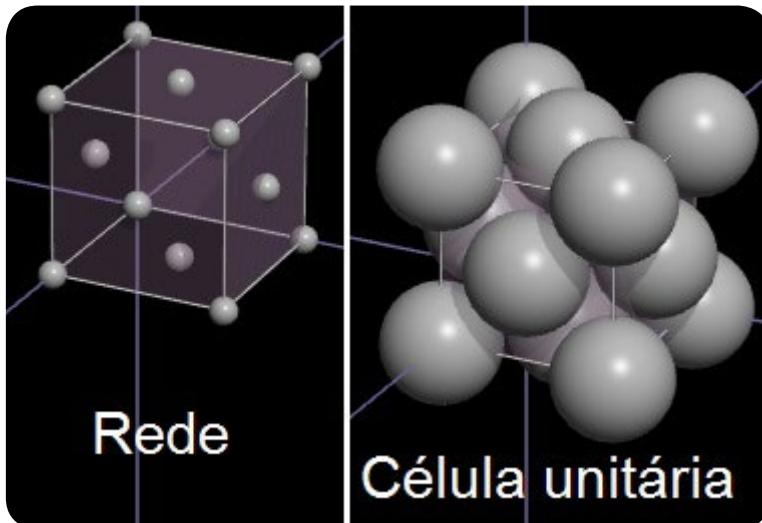
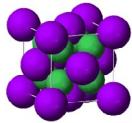


Figura 18: Célula de face centrada

Como pode ser visto na Figura 18, em cada face do cubo há um átomo posicionado na região central desta face. Exemplos de materiais metálicos com estrutura cristalina C.F.C são: Alumínio, Chumbo, Cobre, Níquel, Ouro, Prata, Platina. Pode-se inferir que quanto maior o fator de empacotamento atômico, maior será sua capacidade de deformação, isto é um exemplo sobre como as propriedades dos materiais estão intrinsecamente relacionadas às suas células unitárias e estruturas cristalinas. A Figura 19 apresenta uma fotografia do material metálico ouro, no qual é conhecido por ter uma “maciez” quando está em seu estado puro.



Conceitos Importantes



Figura 19: Ouro. Fonte: Steve Bidmead por Pixabay ⁹

4.2.3 Sistema Monoclínico e Sistema ortorrômbico

O sistema monoclinico é composto por uma rede de Bravais que tem os ângulos α y β um grau que varia deste. Dos minerais conhecidos, cerca de 30,8% são deste modelo que pode ser visualizado na Figura 20.

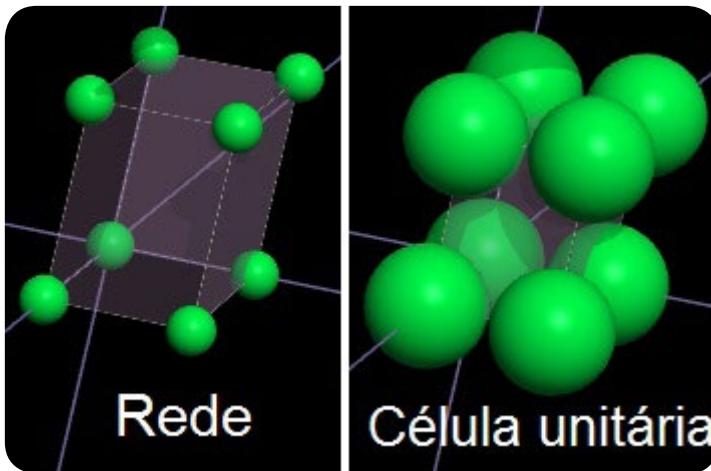
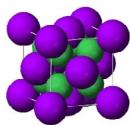


Figura 20: Sistema monoclinico

⁹ Disponível em: <https://pixabay.com/pt/photos/ouro-lingotes-tesouro-513062/>. Acesso em 2021.



Conceitos Importantes

Um exemplo que constitui esse modelo pode-se citar o mineral jadeíta, no qual a Figura 21 o apresenta.

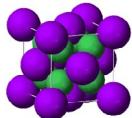


Figura 21: Jadeíta. Fonte: by A M Felicisimo, CC BY-NC-ND 2.0 ¹⁰

A jadeíta é o mineral que provem a pedra Jade, na qual é uma pedra com cor que varia de tonalidades de verde. Ela é usualmente empregada em objetos de adorno, em estatuetas.

O sistema ortorrômbico por sua vez é o sistema cristalino que assim como os demais apresentados, há os três eixos cristalográficos mutuamente perpendiculares, mas com seus comprimentos todos diferentes (Figura 22).

¹⁰ Disponível em: <https://www.flickr.com/photos/elgolem/19416255856>. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes

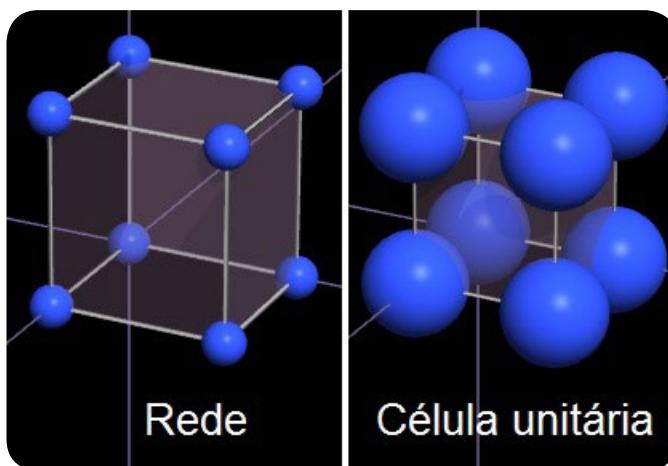


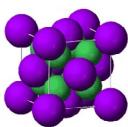
Figura 22: Sistema ortorrômbico

O modelo de célula unitária ortorrômbica possui seus comprimentos a, b e c diferentes entre si, é importante destacar que assim como o sistema cúbico, o sistema triclinico, monoclinico, ortorrômbico e os demais possuem a possibilidade de serem de corpo centro e faces centradas também. Mas como este livro é um livro base para a utilização do CrystalWalk, não será abordado de maneira profunda estes conceitos de cada uma, por isto, é sugerido a realização de pesquisas complementares caso necessite. A Figura 23 apresenta um exemplo de um mineral que possui o sistema ortorrômbico, o Topázio.



Figura 23: Topázio azul. Fonte: By Didier Descouens - Own work, CC BY-SA 4.0¹¹

¹¹ Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=6949402>. Acesso em 7 out. 2021.



Conceitos Importantes

O Topázio varia de cores, pode ser encontrado nas cores vermelha, laranja, amarela, cor de vinho, rosa, azul, marrom e incolor. Ele é composto por nesossilicato de flúor e alumínio e pode ser utilizado em joalherias.

4.2.4 Sistema Tetragonal e Trigonal (romboédrica)

O Sistema Tetragonal de uma célula unitária é caracterizado por três eixos cristalográficos perpendiculares, assim como nos sistemas cúbicos, com os eixos a e b contendo comprimentos iguais e c diferente. Cerca de 6,4% dos minerais conhecidos são constituídos deste modelo de célula que pode ser visualizada na Figura 24.

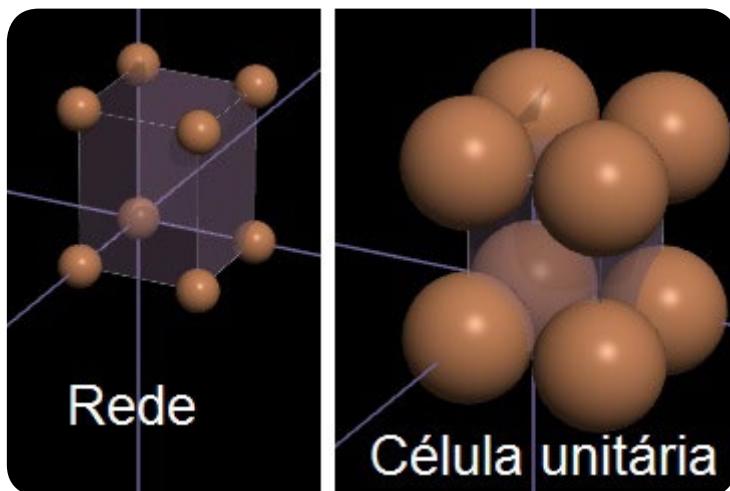


Figura 24: Célula Tetragonal

Um exemplo de mineral que possui o tipo de rede tetragonal é a Apofilita, na qual pode ser visualizada na Figura 25.



Conceitos Importantes



Figura 25: Apofilita. Fonte: By Didier Descouens - Own work, CC BY-SA 3.0¹²

O sistema trigonal também pode ser chamado de romboédrico, ele possui três eixos com $a = b = c$, formando ângulos de 120° entre si, a célula unitária, ou seja, o sistema de rede comum determinado motivo pode ser visualizado na Figura 26.

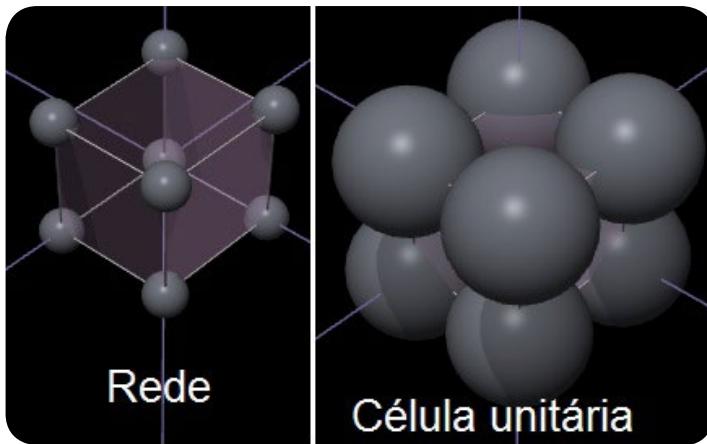
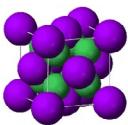


Figura 26: Sistema Romboédrico.

Alguns autores consideram esta célula como sendo uma célula primitiva do sistema hexagonal que será visto no ítem **4.2.5** pelo fato

¹² Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=7276283>. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes

dela possuir simetria dos ângulos como uma parte de um sexto (1/6) da célula hexagonal. O cristal Quartzo é composto por um sistema romboédrico, e este pode ser visualizado na Figura 27. Em algumas literaturas pode ser encontrado que ele possui sistema hexagonal, mas se considerarmos que a primitiva do sistema hexagonal é o sistema trigonal, uma definição provém da outra.



Figura 27: Quartzo. Fonte: Pixabay¹³

4.2.5 Sistema Hexagonal

O Sistema hexagonal possui três e não dois eixos horizontais, separados por ângulos de 120° e iguais em seu comprimento, o eixo vertical, ou seja, do parâmetro “c” é o que possui um comprimento diferente dos horizontais. Este sistema é definido como sistema hexagonal simples, e pode-se definir que ele possui simetria senária, isto é, quando uma rotação ou giro completo, a mesma imagem se repete seis vezes. É importante ressaltar que os metais não cristalizam nesta forma simples, pelo fato do fator de empacotamento atômico ser muito baixo, assim como o sistema cúbico simples, e, portanto, eles se estruturam e cristalizam na forma hexagonal compacta. A Figura 28 apresenta a hexagonal simples e a estrutura da hexagonal compacta.

¹³ Disponível em: <https://pixabay.com/pt/photos/quartzo-claro-transparente-trans-4238802/>. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes

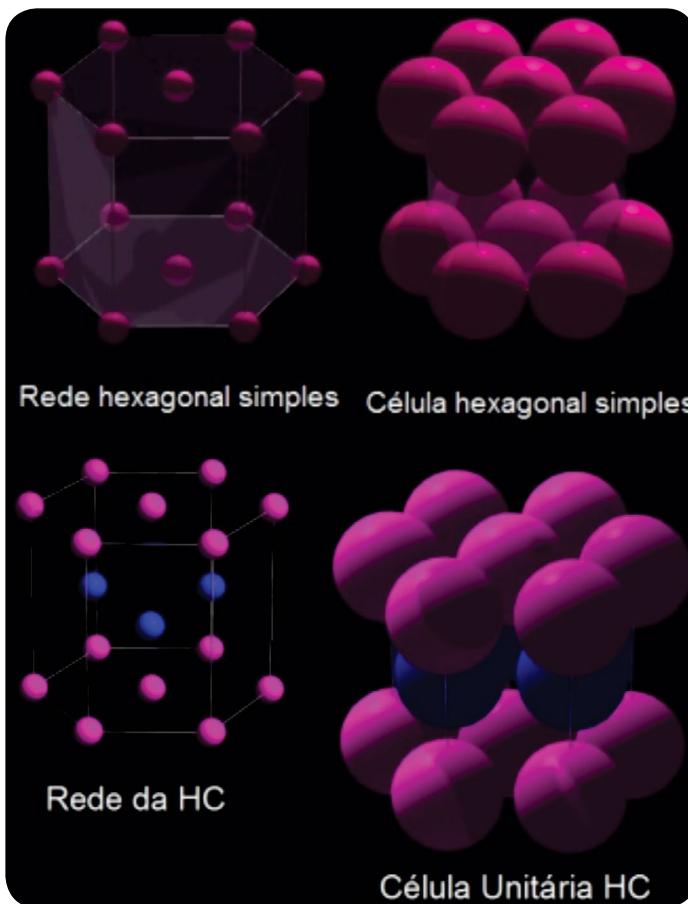
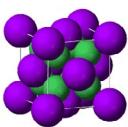


Figura 28: Hexagonal simples e compacta

Como pode ser visualizado na Figura 28, a estrutura da hexagonal simples se difere da compacta. A hexagonal compacta pode ser definida como o empilhamento de duas hexagonais simples no eixo vertical “z”, os elementos se estruturam desta maneira quando possuem a estrutura na forma hexagonal. Um exemplo deste tipo de célula em um cristal é o cristal Berilo, no qual pode ser visualizado na Figura 29. Eles são extremamente raros quando na cor avermelhada e também pode ser chamado de esmeralda vermelha, esmeralda escarlate ou bixbite. Uma curiosidade interessante deste cristal é que na época da sociedade celta, druidas utilizavam desta pedra como um objeto dividido, enquanto que os antigos escoceses lhe chamavam de “pedra do poder”. Atualmente é uma pedra muito utilizada.



Conceitos Importantes

da na indústria aeroespacial.



Figura 29: Berilo vermelho. Fonte: Rob Lavinsky, iRocks.com, CC BY-SA 3.0 ¹⁴

5 PLANOS E DIREÇÕES DE MILLER

O CrystalWalk possui uma função de criar planos e direções de Miller, e neste capítulo será abordado algumas definições necessárias para o conhecimento desta ferramenta.

Em 1839, o mineralogista William Hallowes Miller criou um sistema para referenciar de forma precisa todas as direções e planos de um determinado cristal, e por isto recebem os nomes índices de Miller. Os índices de Miller são importantes para definir e estudar propriedades magnéticas ou mecânicas importantes dos materiais,

¹⁴ Disponível em: <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/cb/Beryl-196800.jpg>. Acesso em 30 nov. 2021.



Conceitos Importantes

como por exemplo a capacidade de deformação plástica na qual acontece preferencialmente em determinadas direções e planos de um sistema cristalino e pode receber o nome de sistema de deslizamento.

Em 1989 Miller publicou o livro “A Treatise on Crystallography”, no qual propunha o sistema de indexação de direções e planos de um cristal. As direções de Miller podem ser definidas como sendo uma linha entre dois pontos, ou um vetor, onde os números são representados entre colchetes, não são separados por vírgulas e sim espaços, e números negativos recebem uma barra acima. É preciso definir e realizar algumas álgebras simples para referenciar uma direção de Miller corretamente a Figura 30 exibe o passo a passo para determinar 3 exemplos diferentes de direções de Miller:

- (1) – determina-se as coordenadas cartesianas [x y z] do alvo e da origem do vetor;
- (2) – faz-se a subtração das coordenadas cartesianas do alvo e origem;
- (3) – se houver frações no resultado da subtração, multiplica-se por um fator comum de modo que obtenha números inteiros, caso não haja frações, basta colocar os números entre colchetes e este será o resultado para referenciar uma direção de Miller.

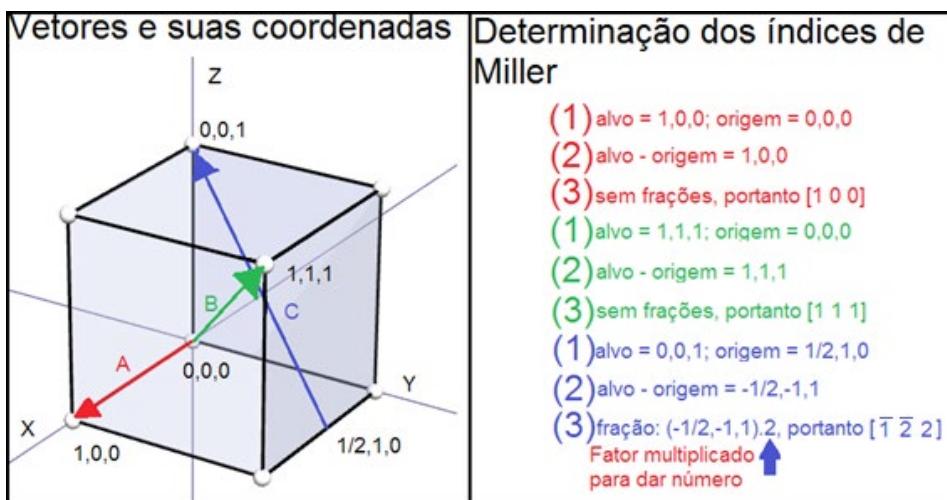
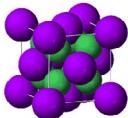


Figura 30: Direções de Miller e exemplos de determinação. Fonte: Autoria Própria.



Conceitos Importantes

Existem famílias de direções, nas quais são representadas como $\langle uvw \rangle$ ao invés dos colchetes, onde u se refere ao primeiro índice, v o segundo e w o terceiro. Exemplo: para o sistema cúbico cristalino têm-se a família $\langle 100 \rangle$, na qual tem as direções $[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0]$ e $[00\bar{1}]$ que são todas as combinações de vetores possíveis considerando rotação do plano cristalino, mantendo similar direção.

Os planos de Miller são índices que são representados por números entre parênteses (hkl) , e suas famílias entre chaves $\{hkl\}$. Para suas determinações basta seguir os passos assim descritos que podem ser visualizados pela Figura 31 o qual exibe e determina o plano (211) :

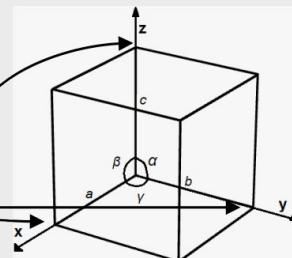
- (1) – ver onde o plano toca nos eixos da célula unitária;
- (2) – se ele toca na metade ou em uma região anterior ao parâmetro da célula, deve-se inverter este número fracionário para o número inteiro e assim referenciar o índice corretamente.

IMPORTANTE!

Nos sistemas cúbicos define-se como limite do comprimento dos eixos x , y e z , os valores de a , b e c das células unitária sendo igual a 1.



1





Conceitos Importantes

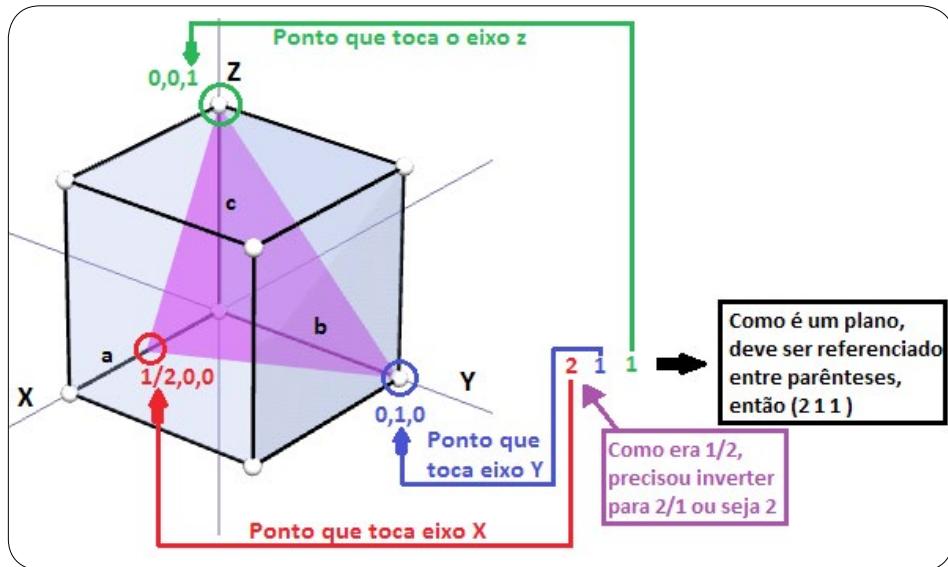


Figura 31: Determinação dos índices de planos de Miller. Fonte: Autoria própria

A Figura 32 exibe, como exemplo, os diversos planos da família $\{110\}$. É importante ressaltar que para entender a visualização destas famílias é necessário imaginar a origem $0,0,0$ do sistema cristalino deslocado ou rotacionado em algumas delas.

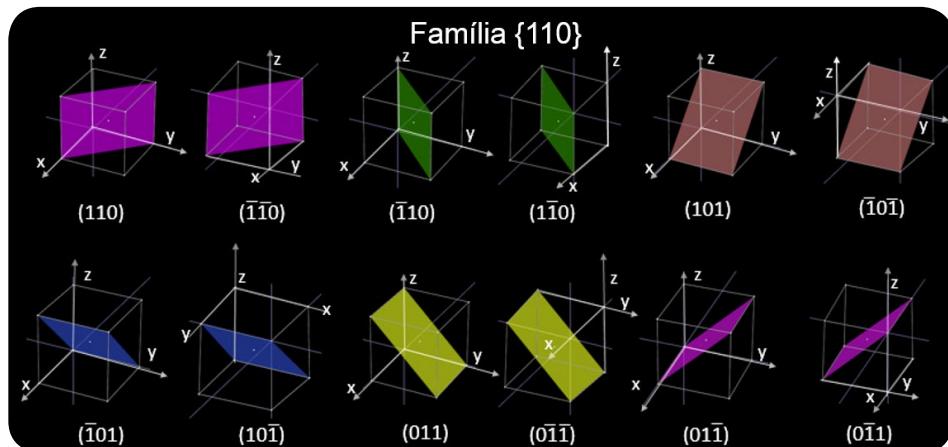


Figura 32: Família $\{110\}$. Fonte: Autoria própria



O CrystalWalk

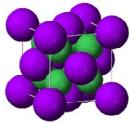
6 O CRYSTALWALK

O CrystalWalk é um software didático-interativo para síntese e visualização de estruturas cristalinas. Seu desenvolvimento foi justificado pela percepção de pesquisadores sobre a falta de ferramentas de ensino-aprendizagem relacionadas ao estudo de estruturas cristalinas de materiais e as dificuldades apontadas pelos estudantes de Engenharia sobre a complexidade da temática.

Na elaboração e especificação do CrystalWalk, foram sugeridos os princípios do software livre, da acessibilidade e da democratização do conhecimento. Com intuito de maior alcance social, foram adotados recursos de artes tecnológicas e serviços para o desenvolvimento de aplicações web interativas, tal como WebGL/HTML5 que possui código aberto, promovendo acessibilidade por meio de desktops, tablets e smartphones, disponível sendo on-line e gratuito.

O programa sugere a possibilidade de visualização com óculos 3-D, ao fazer estereografia por cores ou com outras tecnologias que proporcionam outros níveis de imersão como o Óculos Rift e o Google CardBoard.

Por ter finalidade didática, o CrystalWalk é um software de cristalografia para não cristalógrafos, e pode ser usado por alunos de graduação ou pós-graduação em engenharia de materiais, química, física e geologia, entre outras áreas.



Introdução a Interface

7 INTRODUÇÃO A INTERFACE

Ao entrar no site do CrystalWalk (<https://crystalwalk.herokuapp.com/>) pela primeira vez, uma interface inicial é exibida, conforme pode ser visualizado na Figura 33, uma caixa é aberta na qual há um texto com Boas-Vindas ao usuário, definições de algumas funções do software e informações do projeto e seu desenvolvimento. Na parte inferior da Figura 33 há duas opções para clicar, são elas: “OK, ENTENDI” e “TUTORIAL PASSO A PASSO”.

Ao clicar em “OK, ENTENDI” a interface inicial oficial do CrystalWalk é exibida, conforme pode ser visualizado na Figura 34.

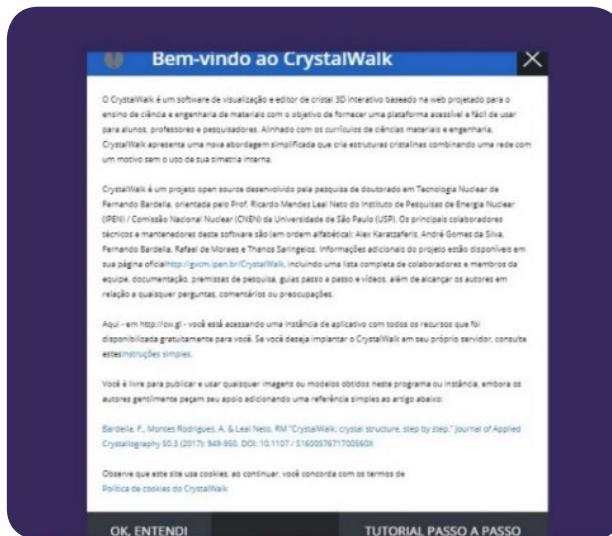


Figura 33: Interface inicial do CrystalWalk

O programa por ser altamente didático e interativo, ao clicar em “TUTORIAL PASSO A PASSO” ele exibe 7 passos instrutivos e básicos para construção de uma Estrutura Cristalina ou Célula Unitária. Ao clicar em “TUTORIAL PASSO A PASSO” o software o guia com animações e destaque possibilizando instruir o usuário a utilizar das principais ferramentas da interface de uma maneira simples e didática.



Introdução a Interface

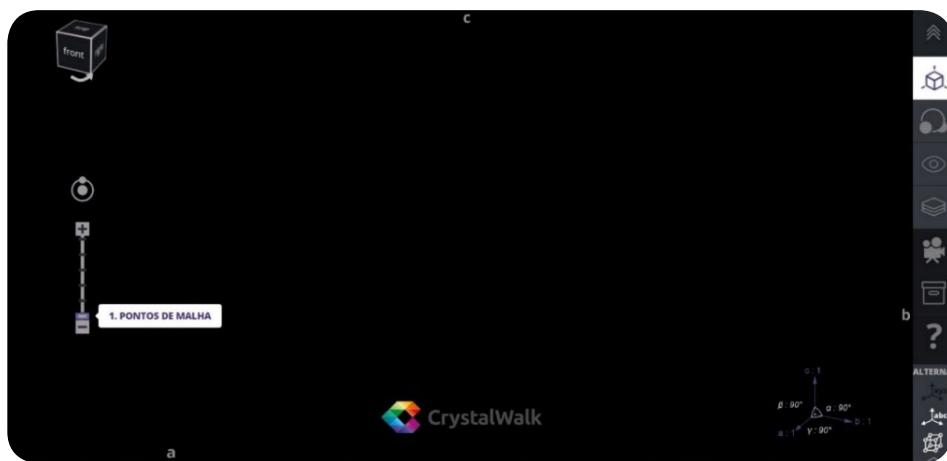


Figura 34: Interface Oficial do CrystalWalk

A interface oficial contém os seguintes itens principais, indicados na Figura 35.

- (1) – Menu Principal e Barra de Alternância.
- (2) – Barra de opções para diferentes modos de visualizações dos átomos.
- (3) – Cubo para seleção de vistas da estrutura.



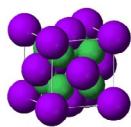
Figura 35: Principais áreas da Interface

O Menu Principal contém os ícones que darão as opções para a construção da sua Estrutura Cristalina enquanto o “Submenu -



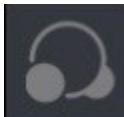
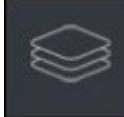
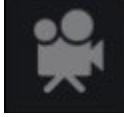
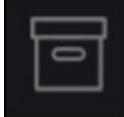
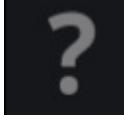
Introdução a Interface

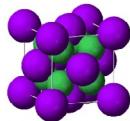
Barra de Alternância” configura algumas definições de visualizações do projeto que ficará como opção de escolha durante a execução do programa.



Ícones do Menu Principal

7.1 Ícones do Menu Principal:

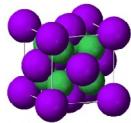
-  **Editor de Redes Bravais:** ícone principal para definir as Redes ou Malhas Bravais.
-  **Editor de Motivo:** ícone principal para definir os Átomos e Parâmetros da Rede.
-  **Visualização e Interação:** ícone principal para definir representações das células unitárias e modelos cristalinos.
-  **Planos e direções do cristal:** ícone para identificar os planos e direções por índices de Miller.
-  **Comentários e Narrativas:** ícone para criar narrativas didáticas.
-  **Importar e Exportar:** ícone para importar ou exportar projetos.
-  **Sobre:** ícone para saber mais sobre o CrystalWalk e refazer o Tutorial passo a passo.



Sub Menu - Barra de Alternância

7.2 Ícones do Submenu – Barra de Alternância

-  Ícone exibir/ocultar eixo ortogonal XYZ.
-  Ícone exibir/ocultar eixo cristalográfico ABC.
-  Ícone de exibir/ocultar pontos da rede de Bravais.
-  Ícone de exibir/ocultar aresta da célula unitária.
-  Ícone de exibir/ocultar face da célula unitária.
-  Ícone de exibir/ocultar planos cristalográficos.
-  Ícone de exibir/ocultar direções cristalográficas.
-  Ícone de exibir/ocultar botão de volume atômico.
-  Ícone de exibir/ocultar representação atômica.
-  Ícone de exibir/ocultar átomos sobrepostos.
-  Ícone de exibir/ocultar símbolo dos Elementos.
-  Ícone de exibir/ocultar janela de exibição.
-  Ícone de exibição da tela em modo cheio.



Trabalhando com o CrystalWalk

8 TRABALHANDO COM O CRYSTALWALK

O CrystalWalk por ser um software altamente didático e interativo, é um programa que se difere de outros softwares de cristalografia de caráteres profissionais, por possuir uma interface amigável com o público não especializado o que não obriga o entendimento sobre grupos espaciais e posições Wyckoff.

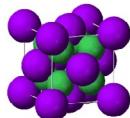
Pela não obrigatoriedade de conhecimento sobre as simetrias para construção de cristais a partir dos 236 grupos espaciais existentes, o CrystalWalk facilita ao apresentar os 14 reticulados de Bravais mais utilizados em livros sobre Ciências dos Materiais para estudantes na construção da estrutura cristalina.

No Menu Principal o ícone “Editor de Rede Bravais” é o primeiro que deve ser utilizado para começar a execução do programa, pois com ele é possível escolher uma das 14 redes bravais para a construção da estrutura (Figura 36), são elas: Triclinica, Cúbica, Tetragonal, Ortorrômbica, Romboédrica, Hexagonal e Monoclínica, as mesmas apresentadas na apostila teórica.

Malha Bravais

Triclinico	Cúbico	Tetragonal	Ortorrômico	Romboédrico	Hexagonal	Monoclínico
$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ SIMPLES	 SIMPLES	 SIMPLES	 SIMPLES	 SIMPLES	 PRIMITIVO	 SIMPLES
	 CENTRADO NO CORPO	 CENTRADO NO CORPO	 CENTRADO NO CORPO		 CENTRADO NO ROSTO	
				 CENTRADO NA BASE		 CENTRADO NA BASE

Figura 36: As 14 Malhas de Bravais



Trabalhando com o CrystalWalk

8.1 Editor de Rede Bravais



Editor de Rede Bravais: Como exemplo, ao escolher a Rede Cúbica de Corpo Centrado (CCC) é observado que o Editor de Rede de Bravais (Figura 38) possui quatro partes de edição, são elas: (1) BRAVAIS LATTICE, (2) BRAVAIS LATTICE REPETITION, (3) BRAVAIS LATTICE LENGTH/BRAVAIS LATTICE ANGLE e (4) CELL VISUALIZATION PARAMETERS. Em (3) BRAVAIS LATTICE LENGTH/BRAVAIS LATTICE ANGLE, é possível alterar os parâmetros pré-definidos da malha pelo programa, nos quais são encontrados na literatura e na natureza.

Como opção de visualização e exemplificação de um Empilhamento, o software disponibiliza a ferramenta (2) BRAVAIS LATTICE REPETITION, para aumentar o número de repetições da Rede escolhida nos eixos ortogonais X, Y ou Z conforme a Figura 37.

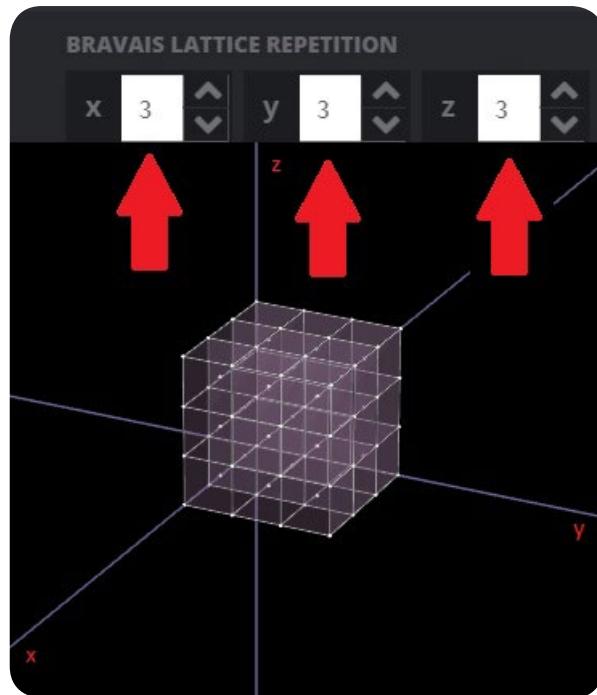
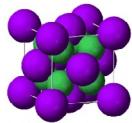


Figura 37: Repetição de Bravais



Trabalhando com o CrystalWalk



Figura 38: Aba do Editor de Malhas



Trabalhando com o CrystalWalk



Ícone de cadeado do canto direito. Quando este está fechado o programa estará com a restrição do piloto automático ativa. Ou seja, não será possível alterar os parâmetros de rede nem os ângulos de uma Malha, uma vez que elas são estabelecidas na razão 1:1 Para alterar, só clicar em cima para desbloquear.

A quarta parte da aba do Editor de Rede (**CELL VISUALIZATION PARAMETERS**), possibilita alterar os parâmetros de visualização da célula, conforme é exemplificado na e Figura 39 e Figura 40.

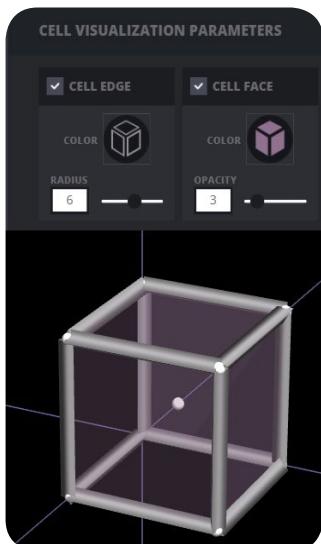


Figura 39: Parâmetros de visualização alterados

Em “**CELL EDGE**” é possível trocar as cores e a espessura das arestas do cubo e em “**CELL FACE**” alterar a cor da face do cubo assim como a transparência da cor.

Com essas alterações é possível aprimorar a didática que o software propõe.

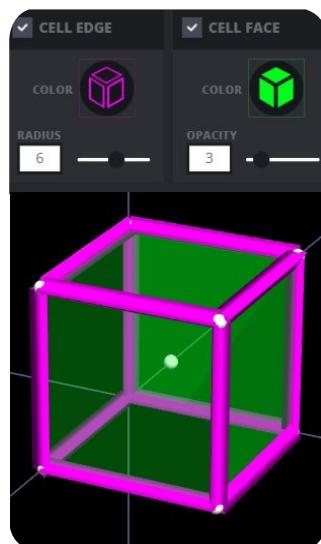
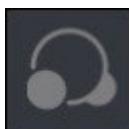
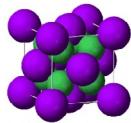


Figura 40: Alteração dos parâmetros de visualização

8.2 Editor de Motivo



Editor de Motivo: No Menu Principal, o ícone Editor de Motivo será muito importante, por ser responsável pelas configurações dos átomos na construção da Estrutura Cristalina. Clicando sobre ele abrirá uma aba do lado direito para as definições e a interface inicial mudará para as cinco visões da célula unitária, da rede do cristal e do motivo sobre os eixos ortogonais X, Y e Z conforme apresenta a Figura 41.



Trabalhando com o CrystalWalk

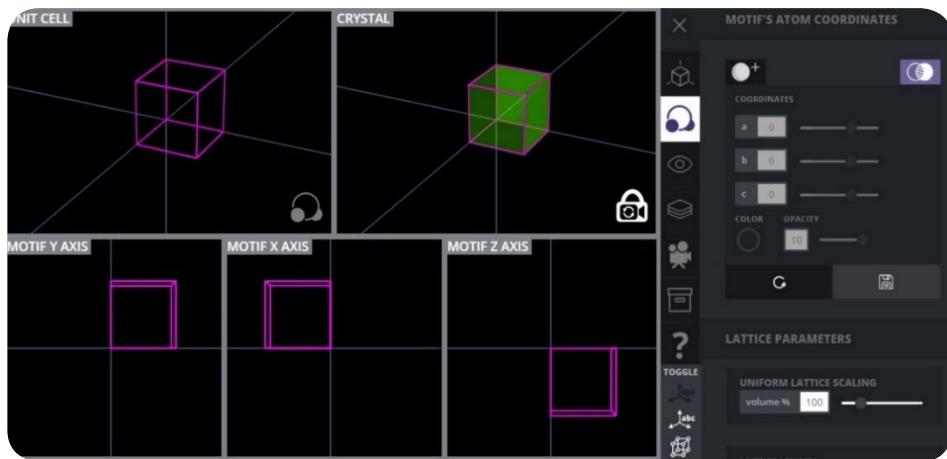
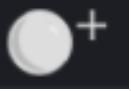


Figura 41: Visões da Célula Unitária, Rede e Motivo

 Neste ícone, faz-se a escolha do tipo de rede. Seguindo a proposta de escolha de uma Rede Cúbica de Corpo Centrado, é possível a escolha do átomo de Ferro- α como exemplo, pois este apresenta rede do tipo CCC e assim realizar a representação de sua Estrutura Cristalina. Para realizar a escolha do átomo, é necessário clicar no ícone, que abrirá a tabela Periódica com os elementos conhecidos conforme apresenta Figura 42.

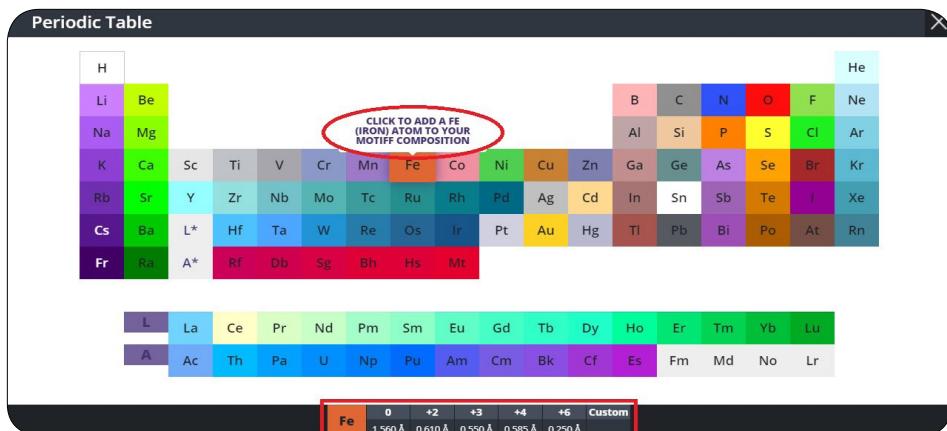


Figura 42: Tabela Periódica CrystalWalk.

Na parte inferior, haverá duas opções: a de customização do raio para o átomo selecionado (como exemplo o Ferro) e a de sele-



Trabalhando com o CrystalWalk

cionar as valências pré-definidas. Neste exemplo, foi selecionado o Ferro com 1,560 Å de raio atômico e Nox 0, para demonstrar a Estrutura Cristalina dele sozinho, ou seja, ele sendo o motivo. A Figura 43 exibe o resultado após a seleção no símbolo Fe.

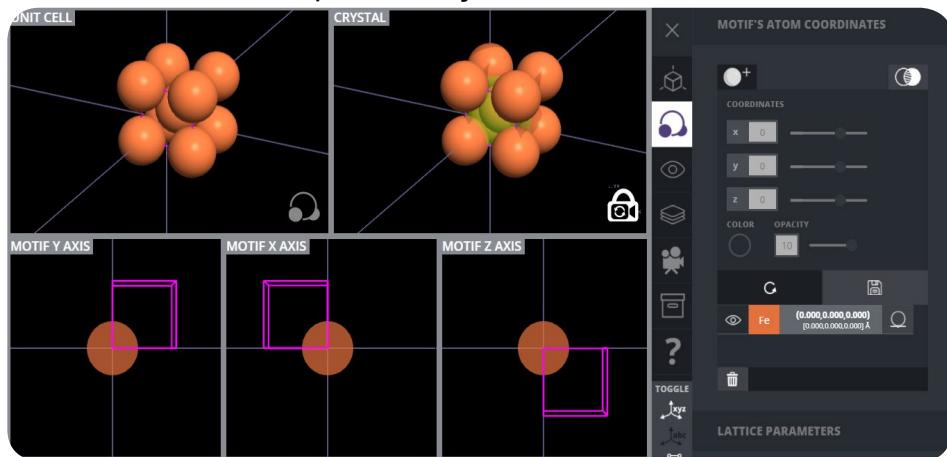


Figura 43: Estrutura Cristalina do Ferro.

E assim será uma das sínteses da Estrutura Cristalina do Ferro!

8.2.1 Alterações em Coordenadas Atômicas

O software oferece a opção de alterar as coordenadas dos átomos, alterando consequentemente seus parâmetros de rede pré-definidos. O exemplo a ser usado para visualizar este procedimento será a do Cloreto de Césio (CsCl), cuja Estrutura Cristalina está ilustrada na Figura 44. A Figura 45 identifica o local que altera esses parâmetros.

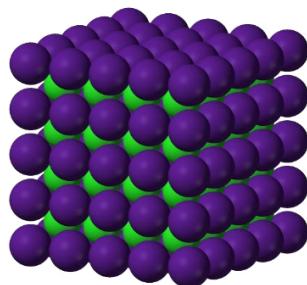
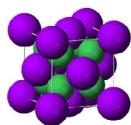


Figura 44: Representação da Estrutura de CsCl.
Fonte: Página do WikiMédia¹⁵

15

Para criar a Estrutura com mais de um átomo no motivo como

15 Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Caesium-chloride-3D-ionic.png>. Acesso em 18 mar. 2021.



Trabalhando com o CrystalWalk

o exemplo de CsCl, necessita seguir os seguintes Passos:

Passo 1 – Selecionar a rede de Bravais em “BRAVAIS LATTICE EDITOR”

Passo 2 – Selecionar o Motivo em “MOTIV EDITOR”

Passo 3 – Selecionar o átomo de Cloro e posteriormente salvar.

Passo 4 – Selecionar o átomo de Césio e posteriormente salvar.

Olhando para a Estrutura, até pode aparecer que ela é CCC (Cúbica de Corpo Centrado), mas na verdade ela é CS (Cúbica Simples). Os dois Átomos que compõe o Motivo se posicionam em coordenadas vetoriais diferentes, são elas (0;0;0) a do Cl^- e (0,499;0,499;0,499) do Cs^+ . Quando se constrói essa Estrutura no CrystalWalk são apresentadas as coordenadas como nos quadros 1 e 2 da Figura 45.

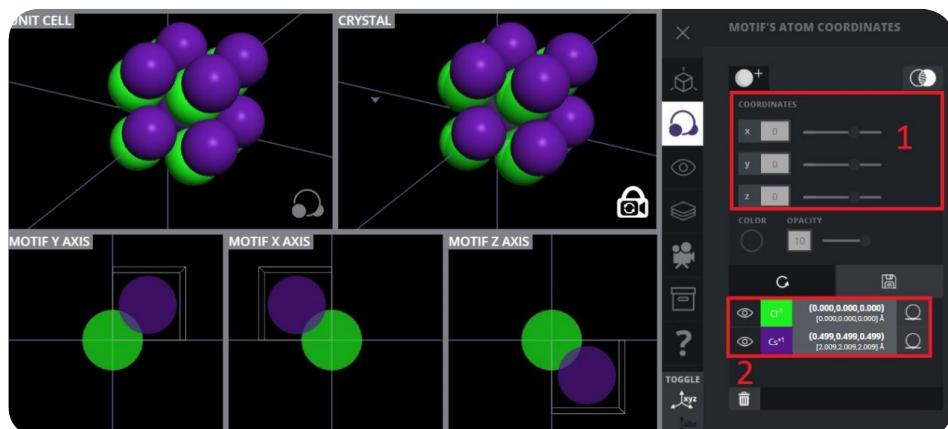
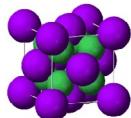


Figura 45: Coordenadas



Trabalhando com o CrystalWalk



Figura 46: Coordenadas com o Cs selecionado

No quadro 1 da Figura 46 observa-se que as coordenadas do Motivo nos eixos X, Y e Z estão zeradas pelo fato de não ter nenhum dos átomos selecionados no quadro 2. Ao selecionar um dos átomos que compõem o Motivo, as coordenadas se alteram. Selecionando o átomo de Cs^+ no quadro 2 será possível observar como se revelará as coordenadas no quadro 1 (Figura 46). As vistas do Motivo não se alteram se as coordenadas não forem alteradas.

Por fins didáticos, é possível alterar para visualizar como o átomo de Cs e Cl estão localizados no espaço tridimensional representado na Figura 47.

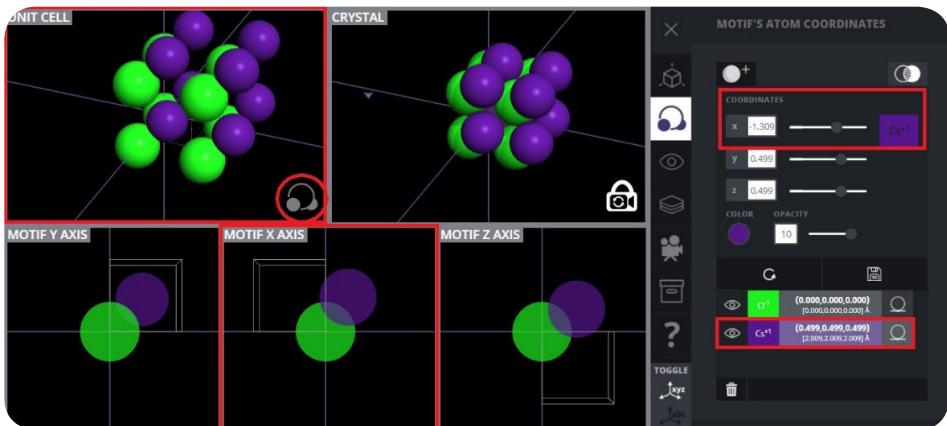
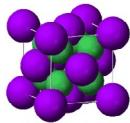


Figura 47: Coordenada no eixo X Alterada



Ícone circulado no quadro “Unit Cell”: tem como função mostrar o Motivo da Rede. Ao clicar, automaticamente os outros átomos que se encontrarem fora do Motivo daquela célula ficarão invisíveis.



Trabalhando com o CrystalWalk

Ainda na **Aba Editor de Motivos**, há outros ícones importantes. São eles:

 Implementa as alterações da célula em todo o cristal.

 Salva as implementações das alterações da célula em todo o cristal.

 Mostra/Oculta átomo do motivo selecionado.

 Ativa o modo tangente de motivo para alterar posição do átomo em relação a coordenadas esféricas.

 Exclui um átomo selecionado do motivo.

Abaixo do ícone de Excluir, há uma outra área da Aba de Editor de Motivo chamada “*LATTICE PARAMETERS*” que quer dizer “Parâmetros de rede” (Figura 48), nessa área é possível consultar e alterar os parâmetros de rede a , b e c e também os ângulos α , β e γ da célula unitária. Mas isso é somente possível se o cadeado estiver desbloqueado. Essa alteração pode ser opcional ou não, dependendo da disposição dos átomos. Compostos do tipo bivalentes como o exemplo da Fluorita (CaF_2), torna-se a opção de alterar parâmetros necessária, pois ele não o faz automaticamente.



Trabalhando com o CrystalWalk

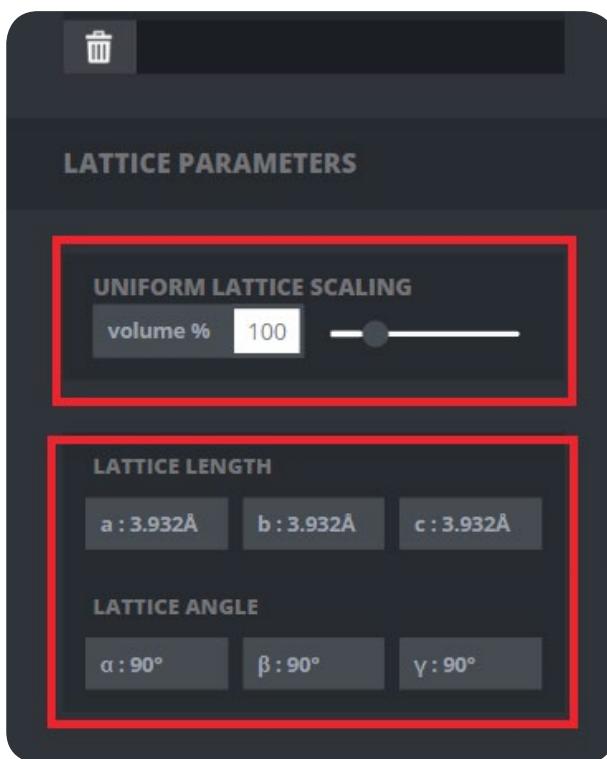
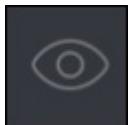


Figura 48: Lattice Parameters

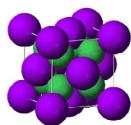
8.3 Visualização e Interação



Visualização e Interação: Este ícone do Menu Principal é o ícone responsável pela definição de representações das células unitárias, modelos cristalinos nos cinco quadros de visualização do Editor De Motivo (Figura 41).

Neste item será abordado as funções de cada sub ícone e exemplos de visualizações que o software oferece.

A primeira parte da Aba do ícone é sobre a escolha de representação dos Átomos do modelo cristalino e na célula unitária, cada um possui quatro sub ícones indicados na Figura 49. A interface principal é a representação do modelo cristalino, ou seja, para ver as alterações na célula unitária basta ir ao Editor de motivo que apresenta os cinco quadros de representação.



Trabalhando com o CrystalWalk

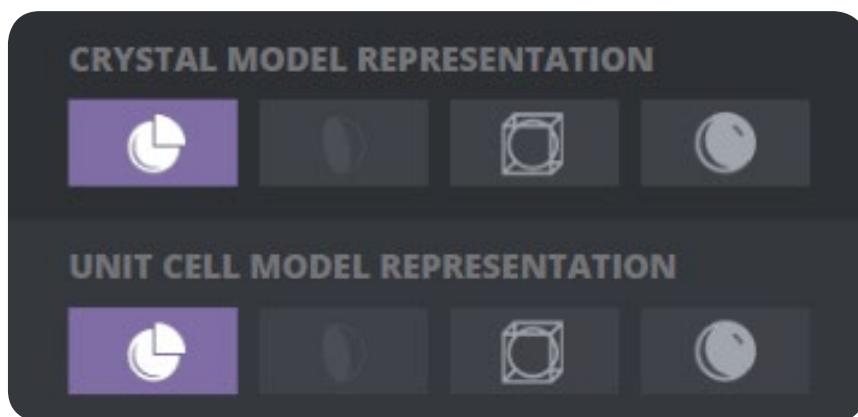


Figura 49: Sub Ícones Aba de Visualização

O primeiro ícone (Figura 50) apresenta a estrutura com todos os átomos inseridos, ele não oculta nenhum átomo que não compõe o motivo.

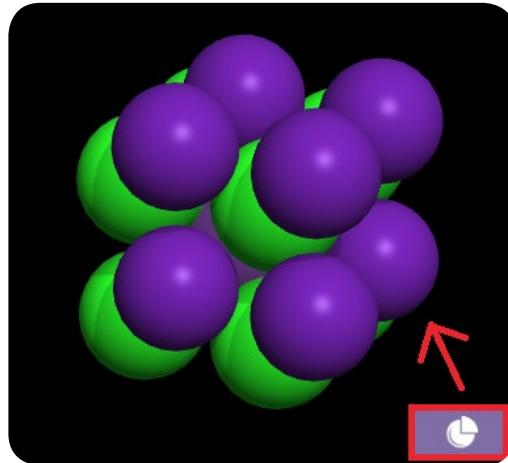
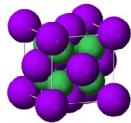


Figura 50: Primeira Representação

O segundo ícone representa os átomos cortados e a composição dos átomos juntos, ele apresenta como o átomo de Cs está inserido entre a estrutura CS do Cl (Figura 51) e auxilia na hora de contar as proporções dos átomos no cálculo do FEA.



Trabalhando com o CrystalWalk

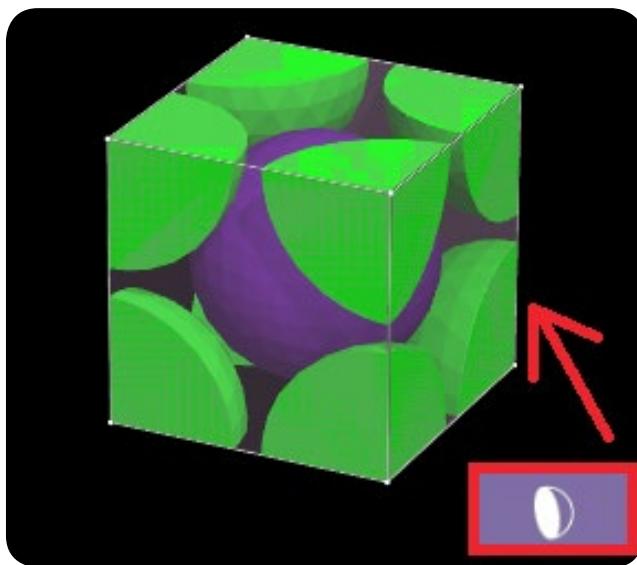


Figura 51: Segunda Representação

O terceiro ícone representa o espaço vazio da estrutura ou célula unitária (Figura 52).

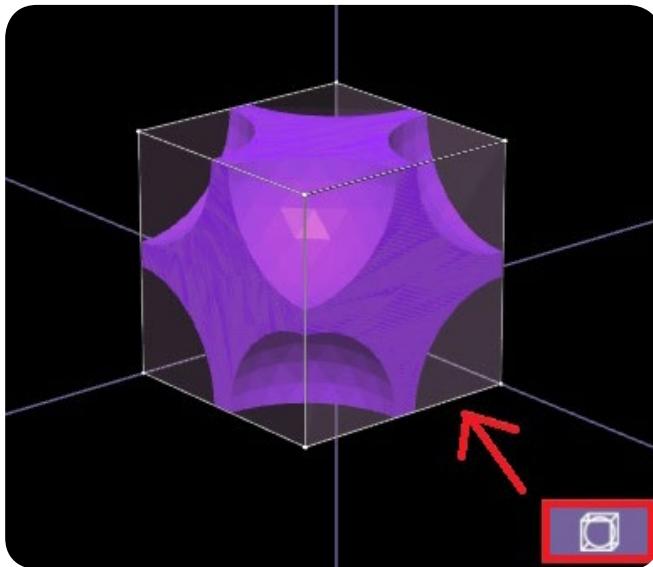
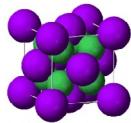


Figura 52: Representação do Espaço Vazio



Trabalhando com o CrystalWalk

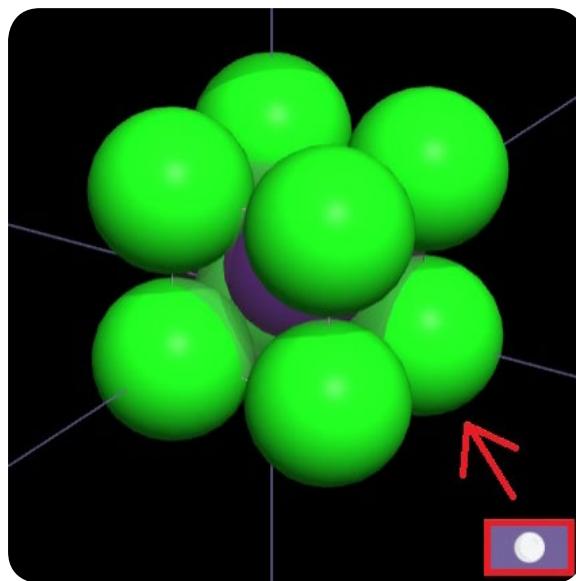
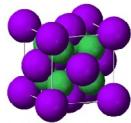


Figura 53: Quarto Ícone de Representação

O quarto ícone de representação é sobre a simetria do modelo cristalino, ele torna invisível os outros átomos de Cs.

A segunda parte da área da aba exemplificada é a “*INTERFACE COLOR CUSTOMIZATION*”, ou seja, “Customização das cores da Interface” (Figura 54).



Trabalhando com o CrystalWalk

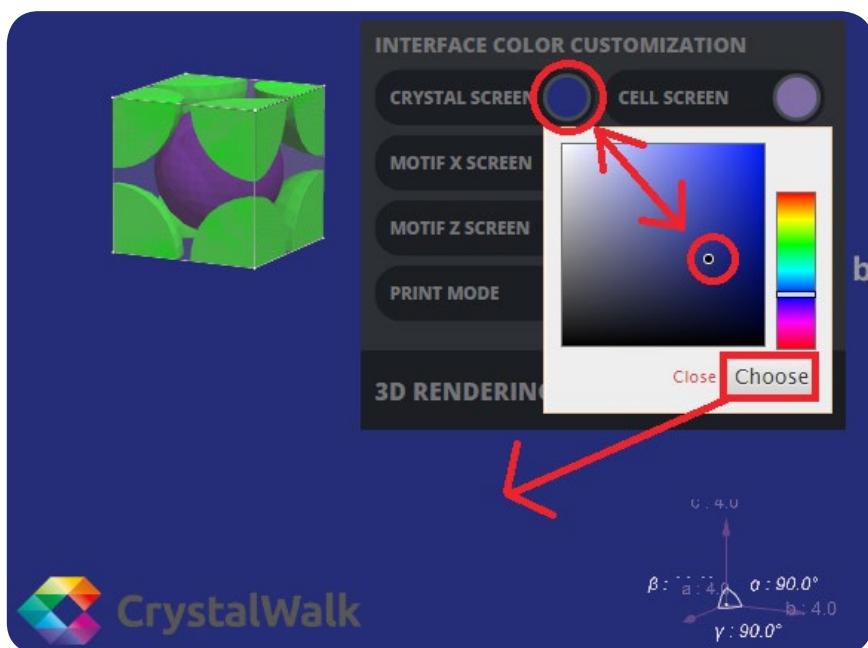
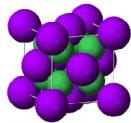


Figura 54: Exemplo de troca de cor da Tela de Fundo

O programa propõe essa oportunidade de mudar de cores na intenção de auxiliar na narrativa didática. Uma vez alterada a cor de um dos quadros que compõem a área do Editor de Motivo, basta clicar no ícone para a visualização (Figura 55). “Print Mode” e “Screen Mode” (em lilás), são botões que implementam as cores personalizadas no salvamento do projeto ou na impressão, nos quais possuem cores automáticas originais, são elas: brancas e pretas respectivamente.



Trabalhando com o CrystalWalk

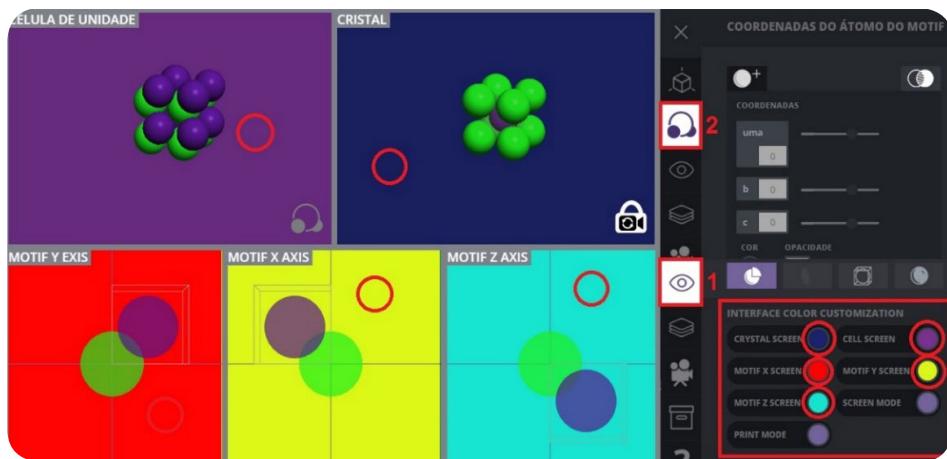
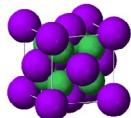


Figura 55: Exemplo de cores nos quadros do Motivo

A terceira parte do ícone “Visualização e Interação” é composta por opções para alterações na qualidade do desenho em 3D. A Figura 56 demonstra como se organiza e quais opções da aba “3D RENDERING PARAMETERS” separadas em 3 partes de escolhas: (1) “RENDERING PRESETS”, (2) “3D OBJECTS LEVEL OF DETAIL (LOD)” e (3) “REDERING CUSTOM MODES, SHADERS AND EFFECTS”.



Figura 56: 3D Rendering Parameters



Trabalhando com o CrystalWalk

Em “(1) RENDERING PRESETS”, ou seja, “Predefinições de Renderização”, o software oferece 4 modos de exibição para a qualidade de imagem da célula, estrutura ou rede, que são: “*AUTO*, *LOW*, *MEDIUM* e *HIGH*”. O modo “*AUTO*” é aquele automático que o software oferece a princípio; “*LOW*” se refere a uma opção com menos qualidade de imagem 3D; “*MEDIUM*” trata de um modo mediano de qualidade; por fim, “*HIGH*” o modo que contém a maior qualidade na renderização (Figura 57).

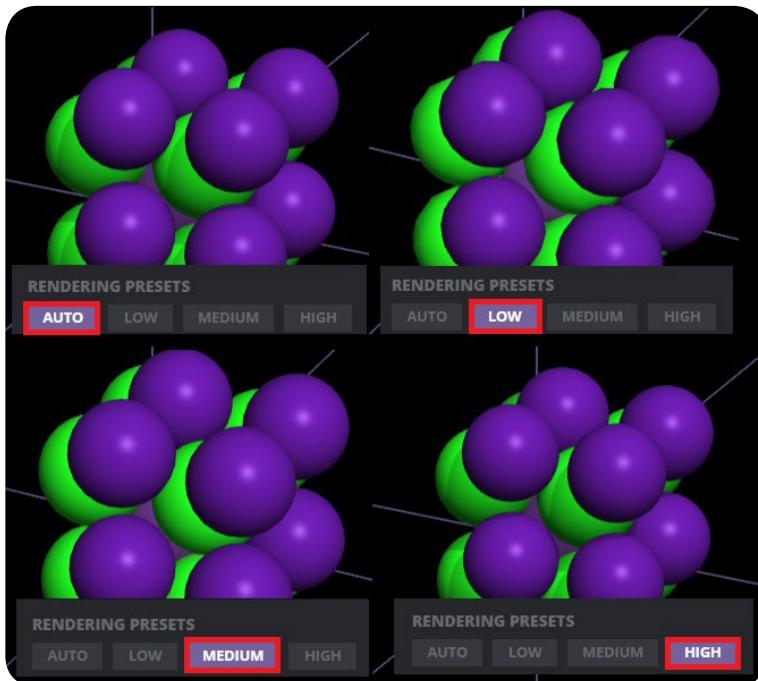
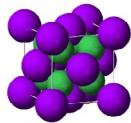


Figura 57: Rendering Presets

Enquanto em (1) as mudanças estão na qualidade da Renderização, em “(2) 3D OBJECTS LEVEL OF DETAIL (LOD)” as mudanças estão nos níveis dos detalhes dos objetos 3D. São cinco níveis de percepção dos detalhes em 3D, a Figura 58 revela e exemplifica os níveis de 0 a 5.



Trabalhando com o CrystalWalk

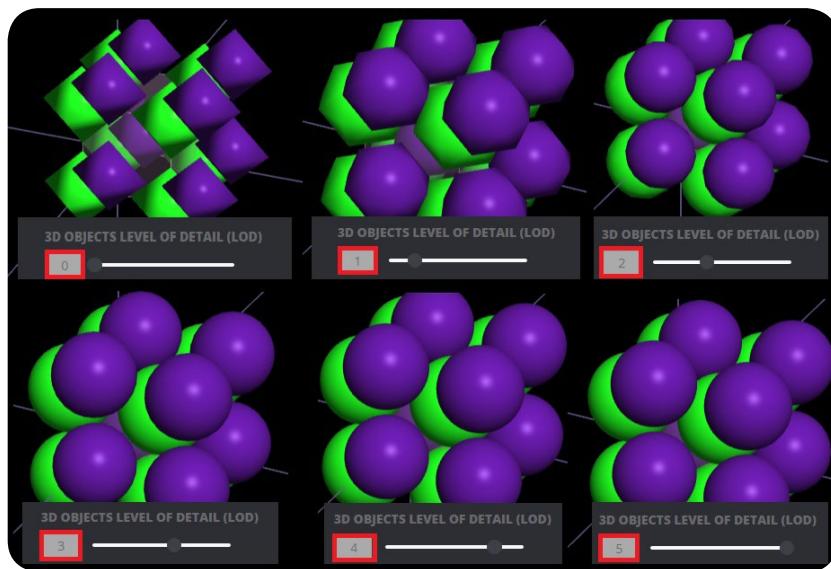


Figura 58: 3D Objects Level of Detail (LOD)

Vale destacar que esses níveis de detalhes são propostos para a visualização estar ao agrado do usuário do programa.

Em “**(3) 3D RENDERING CUSTOM MODES, SHADERS AND EFFECTS**” é outra área da aba que possibilita a customização de detalhes e personalização dos objetos, sendo esta relativa ao sombreamento e efeitos de luz dos átomos conforme exemplos da Figura 58¹⁶.

16 Os exemplos das imagens estão com nível 3 de qualidade no detalhe do átomo. Isso influencia e varia na representação.



Trabalhando com o CrystalWalk

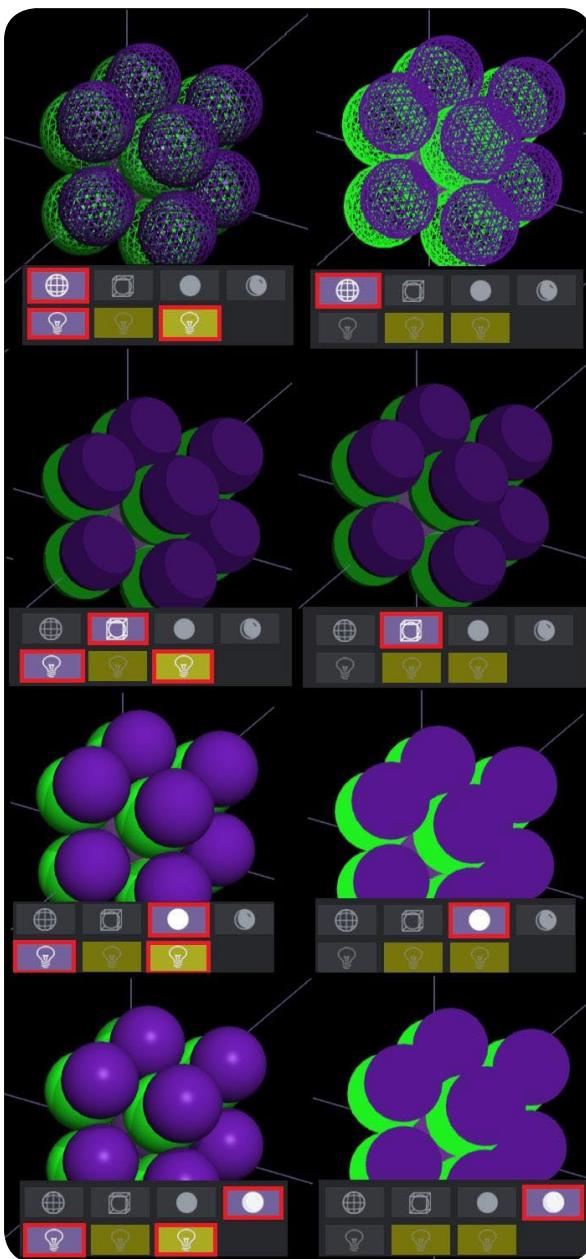
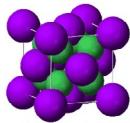


Figura 59: 3D Rendering Custom Modes, Shaders and Effects

A quarta parte da área de Visualização e Interação: “STEREO-COPY, SPATIAL SOUND AND ADVANCED HID” ou “Estereoscopia,



Trabalhando com o CrystalWalk

som espacial e ocultação avançada” contém diversas possibilidades de visualizações, com o óculos 3D Anáglifo, ao fazer estereografia por cores e outras duas tecnologias que proporcionam outros níveis de imersão: o Óculos Rift e o Google CardBoard. A Figura 60 apresenta os ícones que contém essas configurações de visualização, além de outras duas opções de escolha em relação à perspectiva 3D: “(1) PERSPECTIVE MODE” (Figura 61) e “(2) FOCAL POINT MODE”. Em “SPATIAL SOUND” é possível ativar a fonte de som e movê-la para o centro dos Átomos.

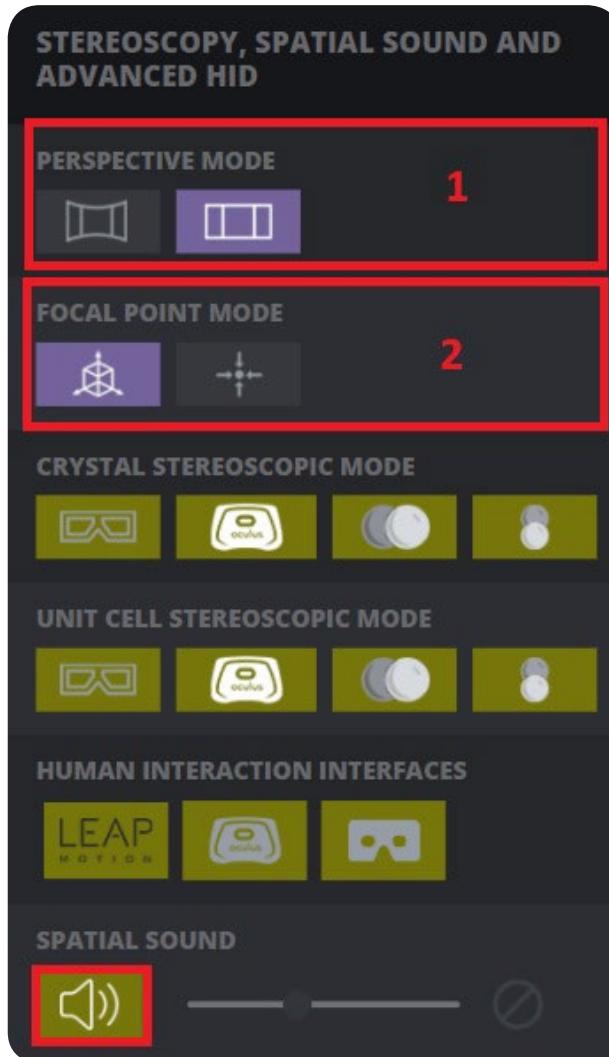
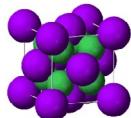


Figura 60: Stereoscopy, Spatial sound and Advanced Hid



Trabalhando com o CrystalWalk

Em “(1) PERSPECTIVE MODE” é possível alterar o modo de perspectiva da construção, para isso basta selecionar um dos ícones dessa aba e escolher o de preferência (Figura 61).

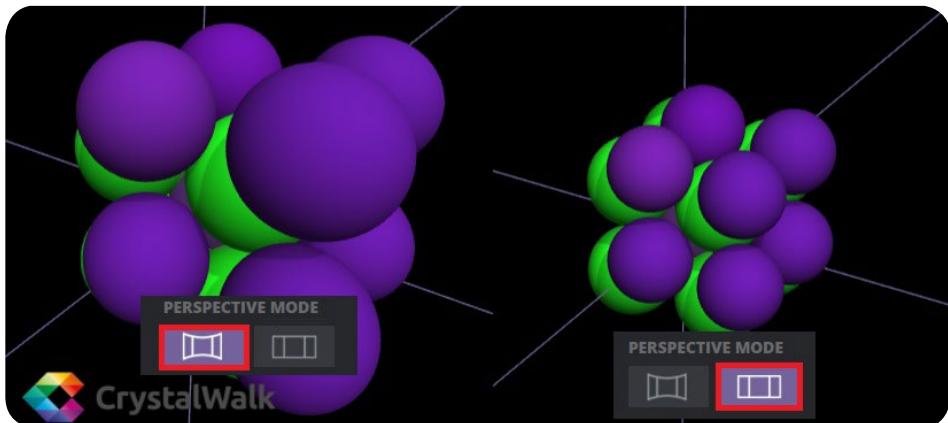


Figura 61: Perspective Mode

Em “(2) FOCAL POINT MODE” é possível definir o ponto focal.



Define o ponto focal para o centro dos Eixos X, Y e Z.



Define o ponto focal para o centro do cristal.

Ao ativar a opção “SPATIAL SOUND” um som começa a ser reproduzido, além de efeitos visuais que indicam qual átomo está relacionado ao som (Figura 62).

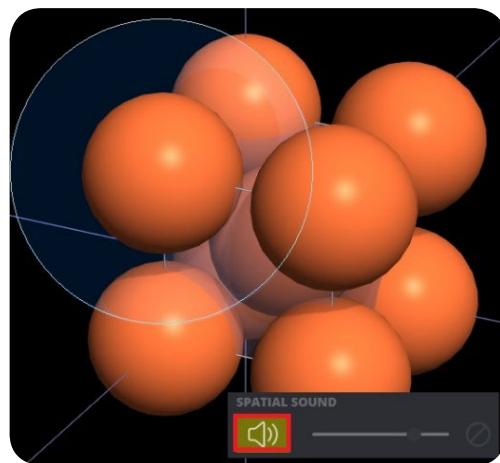
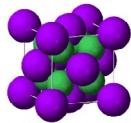
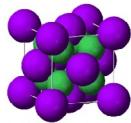


Figura 62: Spatial Sound

8.3.1 As Interações com Realidade Virtual.

A Figura 60 apresenta uma aba na qual é preenchida com ícones que possibilitam o usuário escolher visualizar a Estrutura de maneiras distintas, como por exemplo visualizar o cristal com o óculos 3D Anáglifo ou imergir em diferentes tipos de realidade virtual, com o *Oculus Rift* ou com o *Google CardBoard*, além do modo *Leap Motion*, que se refere a um dispositivo que possui sensor de movimento.

É possível usar outros tipos de óculos de Realidade Virtual com a mesma tecnologia do *Google CardBoard*, como por exemplo o Óculos VR 5+.



Trabalhando com o CrystalWalk



OCULUS RIFT: é um óculos de realidade virtual aumentada, desenvolvido pela empresa *Oculus VR*. Basicamente, é um sistema visual do tipo *Head-Mounted Display (HMD)*, que proporciona maior nível de interação com as Estruturas Cristalinas criadas no CrystalWalk.

GOOGLE CARDBOARD: é um visualizador de realidade virtual feito de papelão, criado pela empresa Google. Ele leva a realidade virtual para usuários de Android e iOS. É possível criar o CardBoard com as instruções na página oficial da empresa.



ÓCULOS 3D ANÁGLIFO: é utilizado para imagens anáglifas, aquelas formatadas de maneira especial para fornecer um efeito tridimensional estereoscópico. Elas são formatadas por duas camadas de cores sobrepostas, mas com uma pequena distância entre as duas para produzir um efeito de profundidade, na mente de quem observa usando o óculos.

ÓCULOS VR 5+: é utilizado com a mesma tecnologia do óculos de papelão do Google, porém é composto por plástico e elástico de forma que seja anatômico, produzido pela empresa ChipSCE da marca 5+.



O óculos 3D também é possível ser produzido pelo próprio usuário do programa, assim como o *Google CardBoard*. O link da página oficial da Empresa Google para produção dos óculos de papelão de realidade virtual é: https://arvr.google.com/intl/pt-BR_pt/cardboard/manufacturers/

Ainda no ícone de Visualização e Interação, abaixo do ícone



Trabalhando com o CrystalWalk

de Som Espacial (“*SPATIAL SOUND*”), há dois modos de personalização da célula e da tela são elas: “*SPATIAL FOG*” e “*VISUALIZATION TOOLS*” respectivamente apontadas na Figura 63.

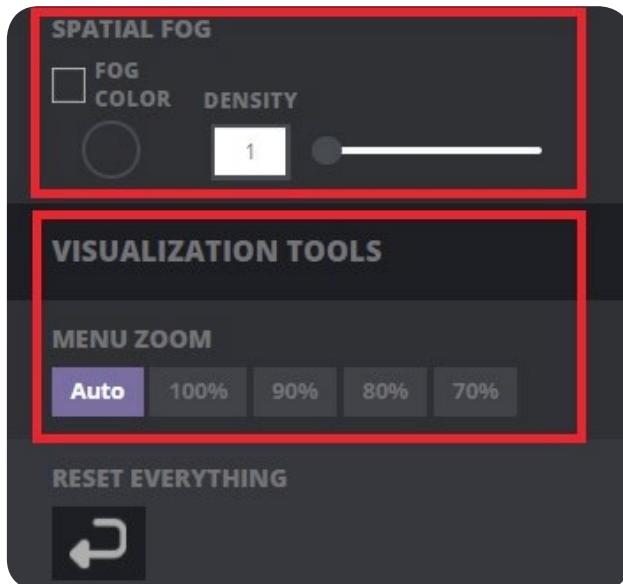
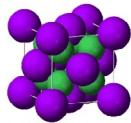


Figura 63: Spatial Fog e Visualization Tools

A ferramenta “*SPATIAL FOG*” é uma ferramenta que está relacionada ao ícone de criação da narrativa didática: “Comentários e Narrativa”, na qual é abordada e exemplificada item 2.5. A “*SPATIAL FOG*” possibilita personalizar uma cor da névoa na exibição durante a reprodução da narrativa, na qual propõe auxiliar na perspectiva e entendimento do cristal criado. Em “*VISUALIZATION TOOLS*” há a opção de diminuir parcela da visualização do Menu Principal, diminuindo de tamanho os ícones que o contém, como representado na Figura 64, na qual possui 100% e 70% de parcela do menu respetivamente.



Trabalhando com o CrystalWalk

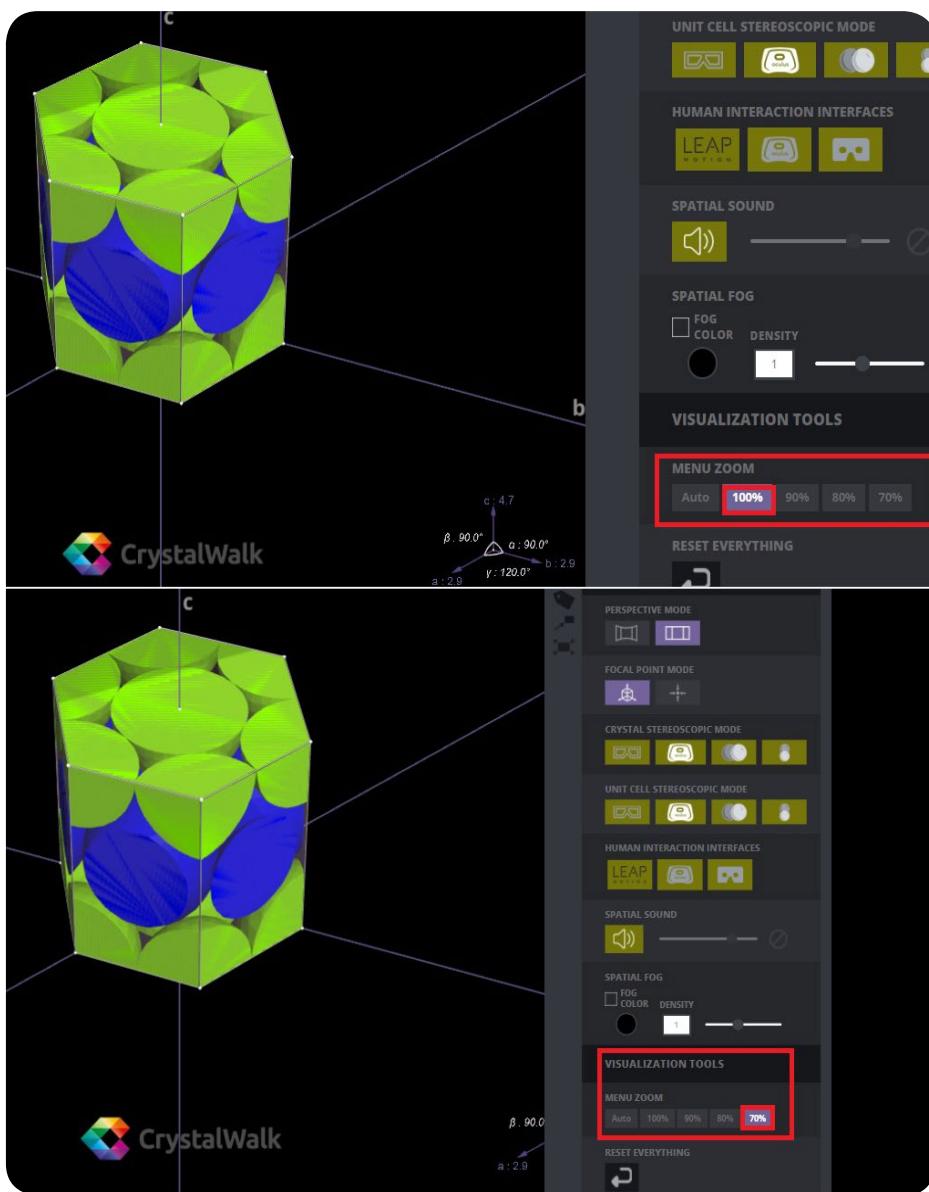


Figura 64: Menu Zoom



Ao clicar nesse botão toda a criação e suas configurações são resetadas e não é capaz de recuperá-las ao menos que ela seja salva.



Trabalhando com o CrystalWalk

8.4 Planos e Direções do Cristal



Planos e Direções do Cristal: Este ícone tem a função de criar planos e direções cristalográficas, aquelas mencionadas. A Figura 65 revela o que aparece ao lado do Menu Principal, ao clicar no ícone “Planos e Direções do Cristal”.



Figura 65: Planos e Direções do Cristal

Em “CRYSTAL PLANES PARAMETERS” é o local onde se indica as coordenadas do plano para ser criado. Em “CRYSTAL DIRECTIONS PARAMETERS” é o local para adicionar as direções dos índices de Miller, para fazê-las deve-se clicar no ícone indicado



Trabalhando com o CrystalWalk

na Figura 65. Tanto para as criações de planos quanto para as criações de direções, é possível renomear e personalizar as cores, opacidade e o raio, respectivamente. A Figura 66, exibe 4 passos para criação de um plano com índices de Miller (1,1,1).

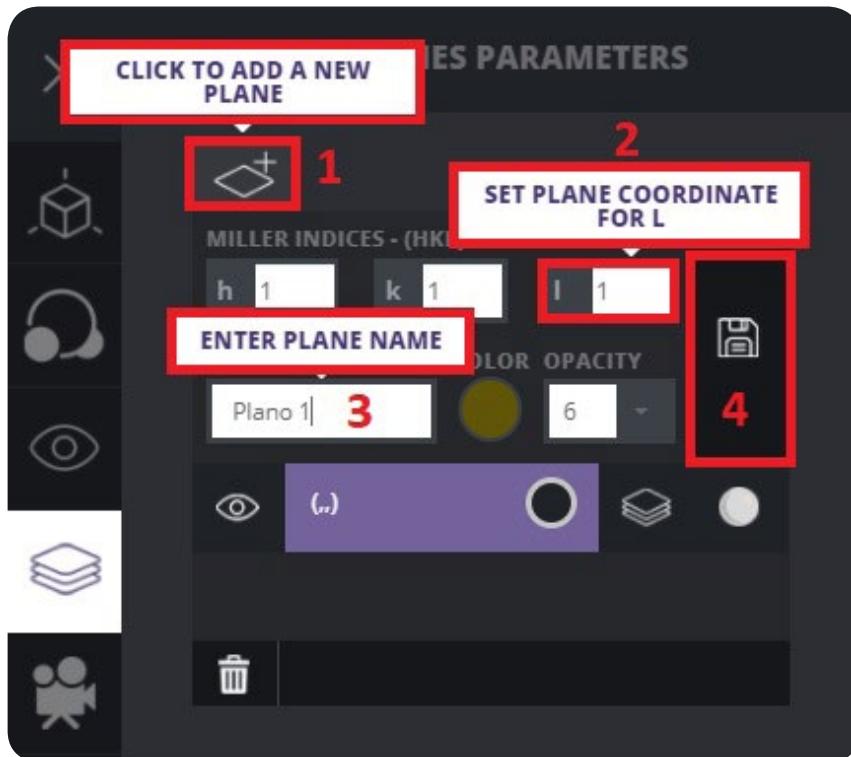


Figura 66: Passo a Passo criação de um Plano

Passo 1 – Adicionar um novo plano;

Passo 2 – Indicar as coordenadas em “*h, k e l*”;

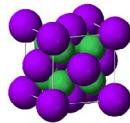
Passo 3 – Escolher um nome para o Plano (não obrigatório);

Passo 4 – Clicar no ícone “Salvar”;

Após seguido estes passos, é possível personalizar a cor do plano e sua opacidade, que ficará a critério de escolha do usuário. A Figura 67 exibe os passos 5, 6 e 7 para realizar essa personalização.

Passo 5 – Clicar em “COLOR”, escolher a cor e clicar em “CHOOSE”;

Passo 6 – Clicar no ícone indicado para ocultar átomos que



Trabalhando com o CrystalWalk

não interceptam o plano, para melhor visualização do resultado (não obrigatório);

Passo 7 – Clicar no ícone salvar;

Observação: Para melhor visualização do exemplo citado, foi utilizado uma ferramenta do “Sub Menu – Barra de Alternância”, ferramenta: “Ícone exibir/ocultar botão de volume atômico”.

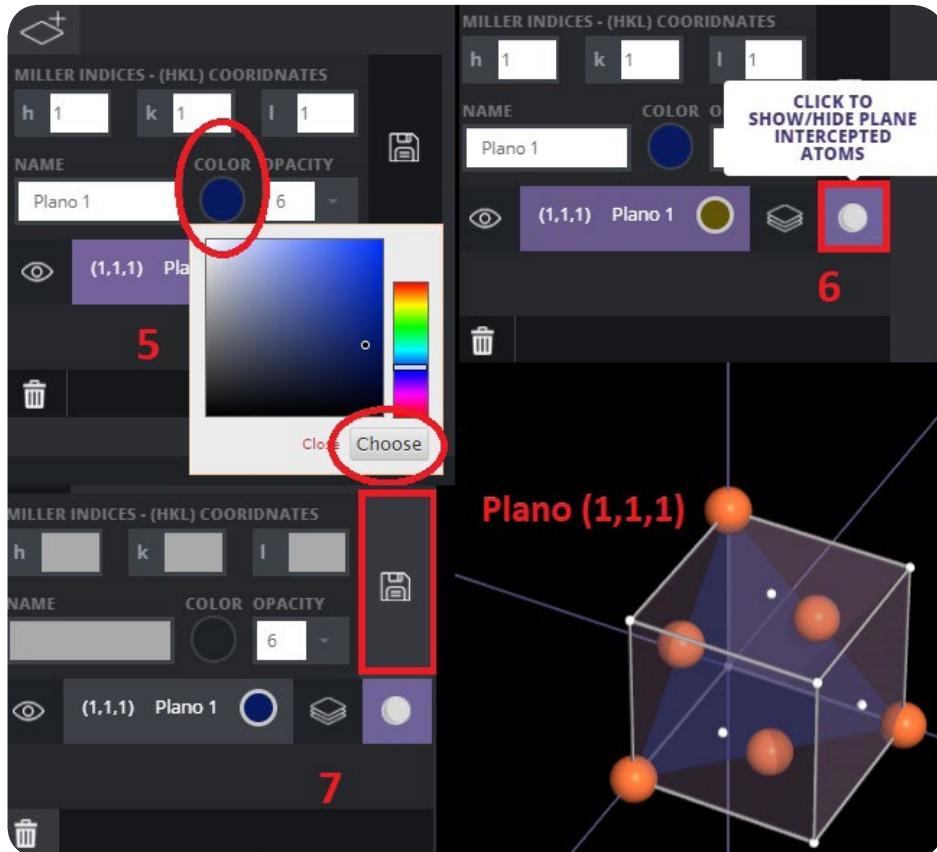


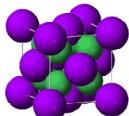
Figura 67: Personalização do Plano



Exibe/Oculta plano selecionado;



Exibe/Oculta famílias paralelas do plano selecionado;



Trabalhando com o CrystalWalk

Para criação de Planos em sistemas Hexagonais, é necessário saber converter os planos em índices de Miller nesse sistema. O software CrystalWalk possibilita criar planos nesses sistemas também, a diferença é que uma nova caixa onde preenche as coordenadas aparecerá (Figura 68).

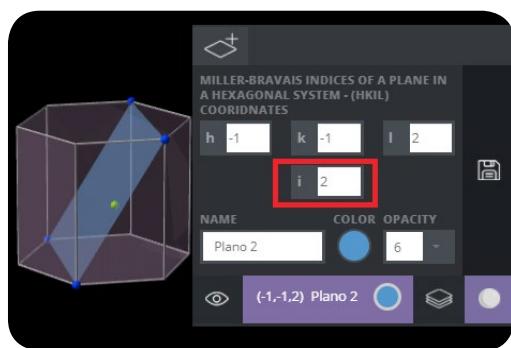
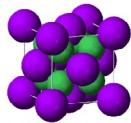


Figura 68: Plano no Sistema Hexagonal

A criação das direções segue a mesma lógica da criação de planos, com a diferença que ao invés de poder mudar a opacidade da cor do plano, ela possibilita mudar o raio, ou seja, a espessura do vetor. A Figura 69 apresenta duas criações de uma direção [1,1,1], com raios 10 e 100.



Trabalhando com o CrystalWalk

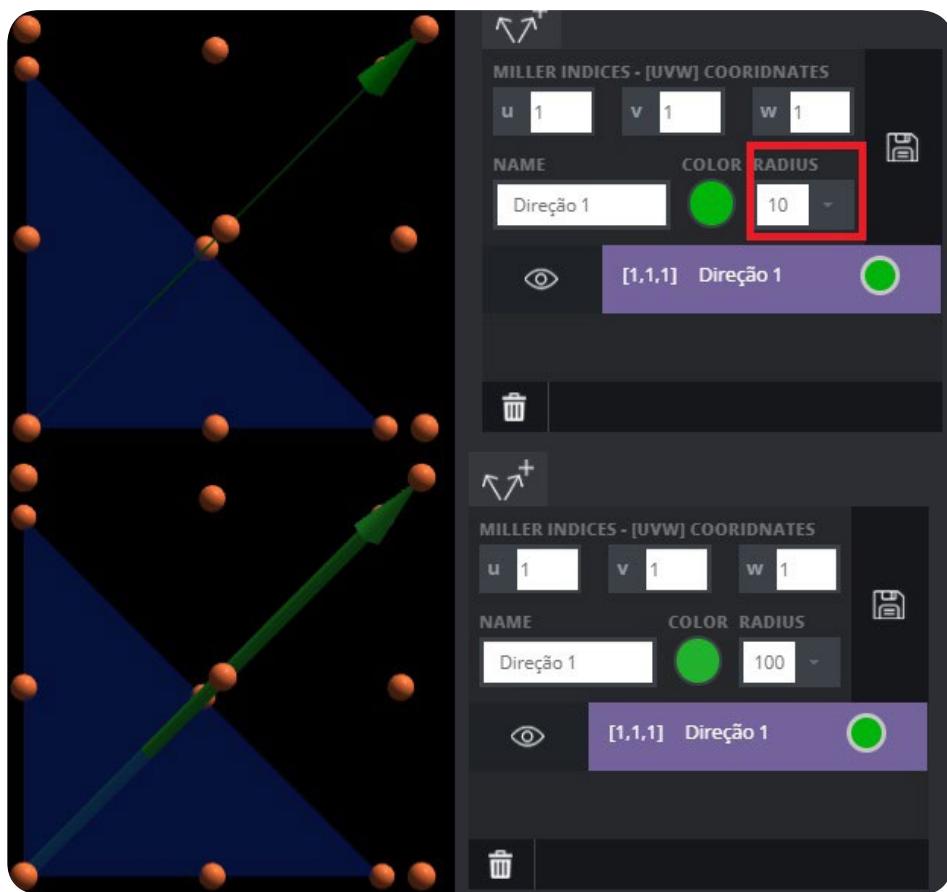


Figura 69: Exemplo mudança do raio do vetor

8.5 Comentários e Narrativas



Comentários e Narrativas: Este ícone é interessante ser usado para apresentações de trabalhos ou aulas e tem uma função didática, ele possibilita criar vídeos, acrescentar caixas de comentários e fazer referências com pontos da imagem do Cristal ou Célula criada, auxiliando assim na função que o software propõe de ser uma ferramenta na qual descomplica a visualização das Estruturas. Ao clicar neste ícone, uma aba abrirá para configurá-lo representada na Figura 70, com 6 passos simples para criação de uma caixa de comentários.



Trabalhando com o CrystalWalk



Figura 70: Passos para criação de um comentário

Passo 1 – Adicionar um novo comentário ou uma narrativa. Nisso, uma caixa branca aparecerá no canto superior esquerdo da interface.

Passo 2 – Escolher um Título para a caixa.

Passo 3 – Escrever um comentário ou narrativa para a caixa.

Passo 4 – Escolher a cor da caixa (opcional).

Passo 5 – Arrastar a caixa para a posição desejada.

Passo 6 – Clicar em Salvar.



Trabalhando com o CrystalWalk

É possível alterar a opacidade da caixa em “OPACITY”, opção esta que está ao lado de “COLOR”.

Assim como, é possível adicionar mais de um comentário ou narrativa, é possível alterar a posição de cada caixa, relacionando-a com a perspectiva de um detalhe da célula que tenda a ser destacada. Para isso o ícone (1) deve estar ativo na hora da criação dessa caixa. Quando ele está desativado a posição da célula não se alterará. O ícone (2) é responsável para editar o modo de visualização do motivo e átomos da célula. Ele deve estar ativo para configurar a visualização que o usuário optar, caso contrário ele não mudará uma visualização para outra.

- (1): “ENABLE/DISABLE SAVING CAMERA POSITION”
- (2): “ENABLE/DISABLE SAVING CRYSTAL SCENE PARAMETERS”.

A área destacada da Figura 71, se refere a opção de escolha de tempo da permanência de cada comentário na interface. O Tempo mínimo é de 3 segundos e o tempo máximo 300 segundos. A área circulada é uma segunda opção de personalização das cores das caixas de comentários/narrativas.

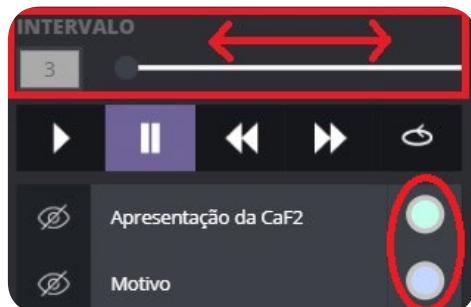
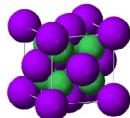


Figura 71: Intervalo de tempo e cores de caixas

- Ícone para dar Play e reproduzir os comentários ou narrativas didáticas.
- Ícone para dar pause na reprodução dos comentários ou narrativas didáticas.
- Ícone para voltar em um comentário ou narrativa didática.
- Ícone para ir ao próximo comentário ou narrativa didática.



Trabalhando com o CrystalWalk

-  Ícone para repetir a reprodução dos comentários ou narrativas didáticas.
-  Ícone para mostrar ou ocultar um comentário ou narrativa didática.
-  Ícone para excluir um comentário ou narrativa didática.

8.6 Importar ou exportar projetos



Neste item serão apresentadas as diferentes maneiras que o Software CrystalWalk oferece para importar e exportar projetos e como importá-los e exportá-los. O usuário tem a opção de exportar das seguintes maneiras:

- Salvar Online no próprio site do software
- Fazer um Snapshot em formato PNG para o computador
- Salvar em formato STL ou OBJ
- Salvar em formato JSON
- Download para o computador em formato ZIP

Para importações, o software possibilita importar um projeto que foi salvo online no próprio site ou fazer um “*UPLOAD JSON*”. A Figura 72 exibe a área de Importação de projetos.

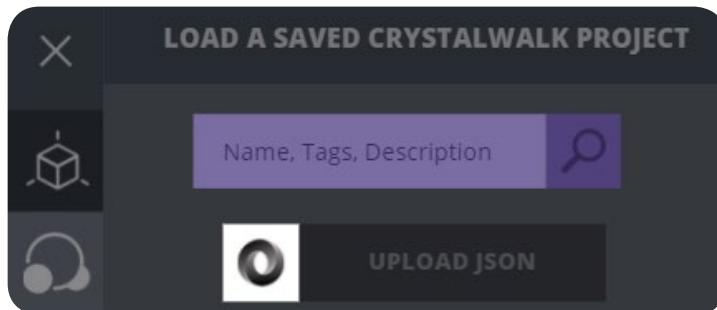
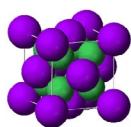


Figura 72: Importação de projetos



Trabalhando com o CrystalWalk



Um projeto que foi salvo online no próprio site pode ser importado em “*Name, Tags, Description*”, nesse espaço deve ser digitado o nome, tag ou descrição do projeto que foi salvo para ser localizado. A Figura 73 e 55, exibem passos para a importação de uma Estrutura de Fluorita salva online. Em “*UPLOAD JSON*” é o local onde se deve clicar para importar uma Estrutura Cristalina do formato JSON salva em um determinado dispositivo, para isso, basta clicar em “*UPLOAD JSON*” e uma janela contendo os documentos salvos no dispositivo do usuário será aberta, por fim, basta localizar o documento e selecioná-lo para abrir no Software CrystalWalk.

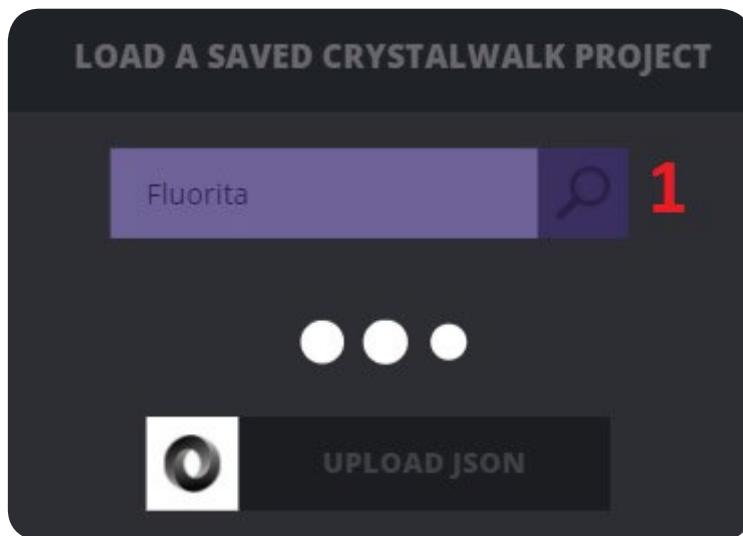


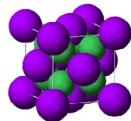
Figura 73: Localizando a Fluorita

8.6.1 Importação

No espaço indicado, deve-se digitar o nome, tag ou descrição do projeto desejado. O Exemplo mostra que foi digitado “Fluorita” para ser exibido.

Ao clicar para pesquisar, abrirá em baixo dessa área os resultados da pesquisa para “*Name*”, “*Tags*” e “*Description*”.

A Figura 74 exibe 4 áreas referenciadas nos cantos inferiores esquerdos.



Trabalhando com o CrystalWalk

The screenshot displays the CrystalWalk software interface with four numbered sections (1, 2, 3, 4) highlighting specific features:

- Section 1:** Shows the search results for "NAME: 7 MATCHES FOUND." It includes a sidebar with icons for search, eye, stack, video, folder, help, and toggle. Below the results are buttons for "TOGGLE" and "abc". A red box highlights the entry "GIULIANA DE LIMA M. MONTEIRO".
- Section 2:** Shows the search results for "TAGS: 8 MATCHES FOUND." It includes a sidebar with icons for search, eye, stack, video, folder, help, and toggle. Below the results are buttons for "TOGGLE" and "abc".
- Section 3:** A detailed view of the entry "GIULIANA DE LIMA M. MONTEIRO". It shows a 3D model of a Fluorite crystal (CaF₂) with pink and blue spheres. Below the model is the name "GIULIANA DE LIMA M. MONTEIRO". To the right is a button labeled "OPEN" with a red circle around it. Further down are buttons for "Fluorita", "MiniCursoCW", "LabEEL", and a note about "Fluorita CaF₂, modelo para os alunos do LabEEL".
- Section 4:** Shows the search results for "DESC: 6 MATCHES FOUND." It includes a sidebar with icons for search, eye, stack, video, folder, help, and toggle. Below the results are buttons for "TOGGLE" and "abc".

Figura 74: Resultados de Buscas da Fluorita



Trabalhando com o CrystalWalk

Área 1 – Resultados da busca para “name” com “Fluorita”, ou seja, arquivos que foram salvos online e que os usuários salvaram o NOME com “Fluorita”.

Área 2 – Resultados da busca para “tags” com “Fluorita”, ou seja, arquivos que foram salvos online e que os usuários salvaram a TAG com “Fluorita”.

Área 3 – Resultados da busca para “description” com “Fluorita”, ou seja, arquivos que foram salvos online e que os usuários ao digitarem a descrição do projeto mencionaram “Fluorita”.

Área 4 – Ao clicar em um dos projetos da busca, a área 4 é exibida abaixo de todas as buscas, para abrir o projeto no software ou exibir o link e código QR gerados. Para abrir, basta clicar em “OPEN” e para exibir link e código QR, basta clicar na área circulada indicada. (Figura 75).

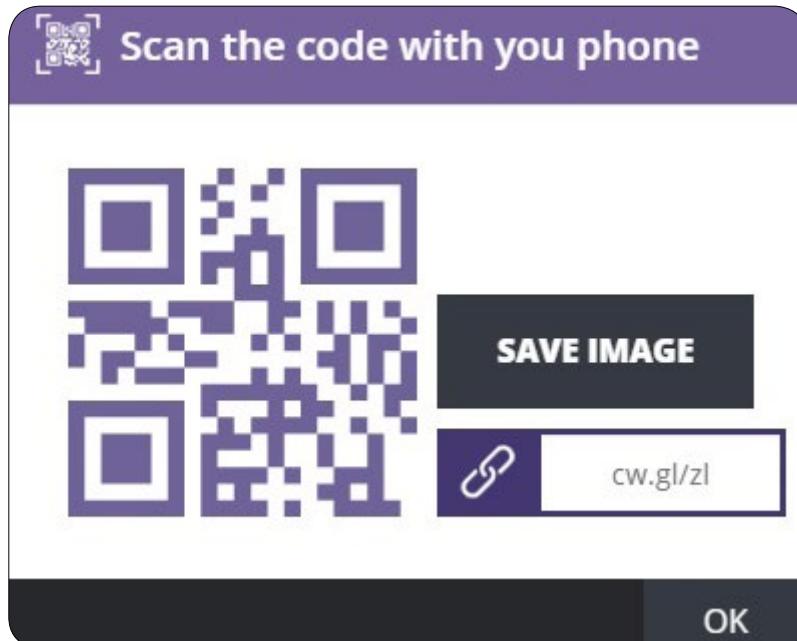
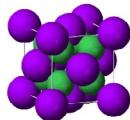


Figura 75: Código e Link de um Projeto

Ao clicar no ícone circulado da Área 4, uma caixa é exibida no centro da interface (Figura 75). Usando um dispositivo com leitor de Código QR é possível redirecionar o usuário diretamente para o link do projeto.



Trabalhando com o CrystalWalk

8.6.2 Exportação

A Figura 76 exibe as diferentes formas de se exportar projetos, mencionadas no item **8.6**. O Exemplo a ser usado no tutorial será o da estrutura cristalina do Ferro- γ (Austenita), para Salvamento de modo online e Snapshot (PNG).

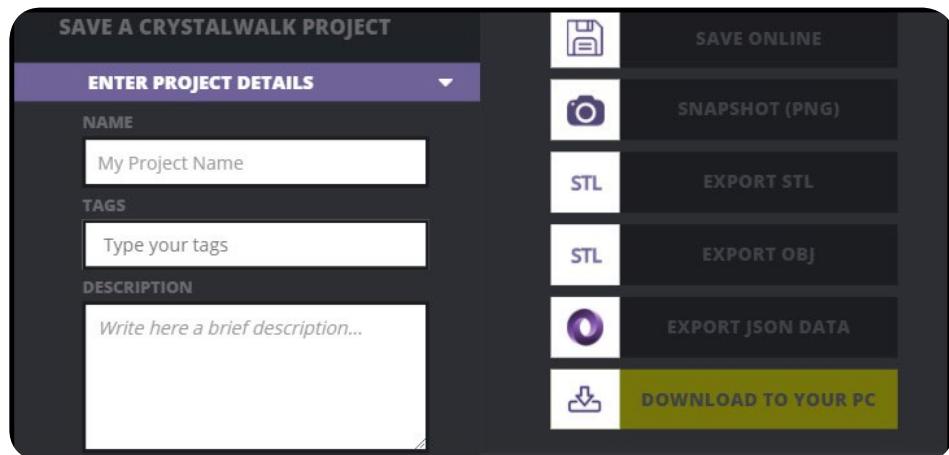


Figura 76: Modos de Exportações de projetos

Para salvar online um projeto criado no CrystaWalk, é preciso clicar em “SAVE ONLINE” e adicionar um Nome, Tag ou Descrição para ele. A Figura 77: Passos para Salvar Online exibe os 4 passos para o salvamento online do Ferro- γ .

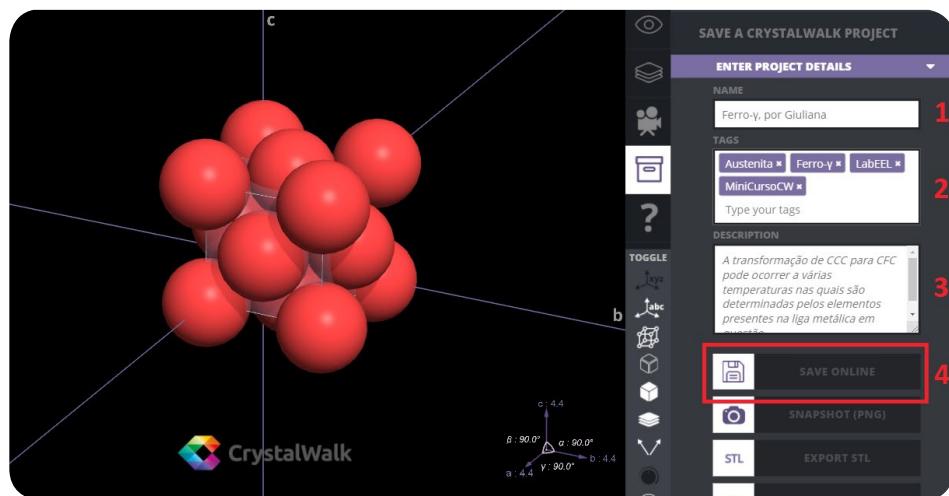
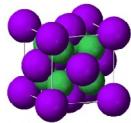


Figura 77: Passos para Salvar Online



Trabalhando com o CrystalWalk

Para salvar um projeto em PNG, é possível escolher a qualidade da imagem e seu dimensionamento: “Low (800x600)”, “Medium (1024x768)” ou “High (1366x768)”, assim como definir para modo de impressão (com fundo branco) ou incluir o código QR na imagem. Todas essas opções estão indicadas no Tutorial da Figura 78, na qual exibe 2 passos para salvamento da imagem com dimensões “L” (800x600).

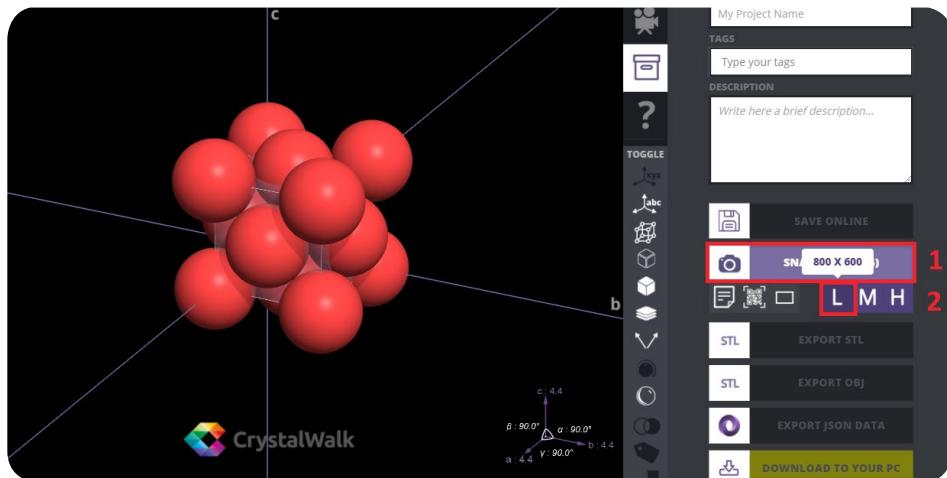
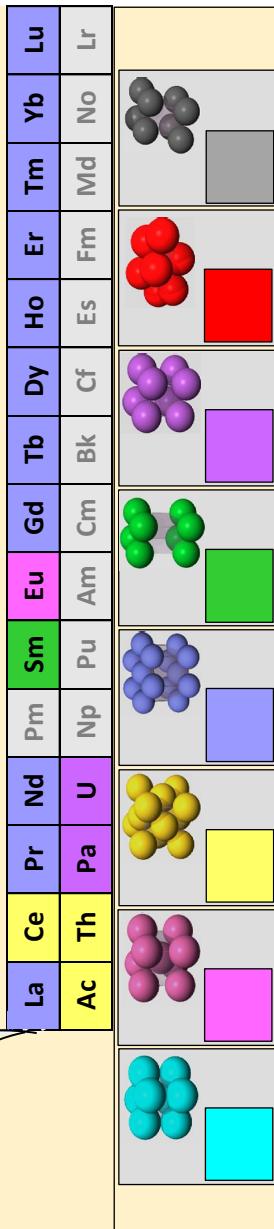


Figura 78: Salvamento Snapshot (PNG) 800x600

Para exportações STL, OBJ, e Download é o mesmo procedimento do modo Snapshot (PNG), com diferenças que as exportações STL e OBJ não possuem modo de impressão nem geram link e código QR. Para exportação JSON o procedimento corresponde ao do salvamento online, com a diferença que ele será exportado para uma determinada pasta do dispositivo na qual o usuário pode escolher.

Apêndice A

Principais Estruturas Cristalinas
dos Elementos



Preparado por síntese

110

Gaso

CS	CCC	CFC	Tetragonal	Preparado por síntese
HC			Ortofórmico	Líquido
			Monodínico	Gasoso
				Trigonal(romboédrico)

Sobre as autoras



Profa. Dra. Katia Cristiane Gandolpho Candioto

Desde 2014 é professora associada (atualmente nível 2) na Escola de Engenharia de Lorena (EEL) da Universidade de São Paulo (USP). Doutora em Ciências, Engenheira química e Técnica em Mecânica possui paixão pelo aprendizado e compartilhamento de conhecimento.

A Profa Drª Katia Cristiane G. Candioto juntamente com seu aluno Michel Ribeiro Villas Boas em 2018 idealizou o LabEEL (www.sites.usp.br/labeel), cujo objetivo vai além de projetos dedicados ao ensino e aprendizagem prática de técnicas de fabricação à disseminação de conhecimentos em softwares livres. O LabEEL fica na Escola de Engenharia de Lorena (EEL-USP) no Departamento de Engenharia de Materiais.



Graduanda: Giuliana de Lima Marcondes Monteiro

Natural de Lorena (SP), sempre amou a área de exatas e tecnologia e sonhava em cursar engenharia. Em 2017, cursando Tecnologia em Processos Metalúrgicos na Fatec de Pindamonhangaba/SP, atuou como monitora em laboratório químico.

Em 2018, ingressou na EEL-USP em Engenharia de Materiais e teve oportunidade de atuar como assistente de ensino na entidade Marie Curie – MacVestinho (2019), além de participar de um projeto de pesquisa como bolsista PUB, envolvendo o estudo de deformações plásticas. Fez parte da Equipe LabEEL na qual ministrou o Minicurso de CrystalWalk que é um software didático e interativo com a realidade virtual, possibilitando a construção de estruturas cristalinas. Constantemente busca se envolver em projetos que possibilitem levar a novos conhecimentos e consequentemente se desenvolver tanto profissionalmente quanto pessoalmente, para assim de alguma forma contribuir para a sociedade.

Nós esperamos que essa obra tenha correspondido às suas expectativas.

Envie sua dúvidas ou sujestões para os nossos e-mails.

Você poderá adquirir nossos livros em nosos sites

Apoio Cultural:



www.edicoesbrasil.com.br
sac@edicoesbrasil.com.br



www.unieditoras.com.br
contato@unieditoras.com.br



www.unieditoras.com
contato@unieditoras.com



Este livro foi escrito baseado em um minicurso (www.sites.usp.br/labeel/minicursos/) para auxiliar no ensino de ciências e engenharia de materiais adicionalmente com uso de um software virtual 3D online complementar. CrystalWalk é um editor de cristal interativo 3D baseado na web e software de visualização com o objetivo de fornecer uma plataforma fácil de usar e acessível para estudantes, professores e pesquisadores. Existe uma abordagem simplificada que cria estruturas cristalinas combinando uma treliça com um motivo sem o uso de sua simetria interna.

CrystalWalk é um projeto de código aberto desenvolvido pela pesquisa de doutorado em Tecnologia Nuclear de Fernando Bardella, orientado pelo Prof. Ricardo Mendes Leal Neto do Instituto de Pesquisas de Energia Nuclear (IPEN) da Universidade de São Paulo (USP). Informações adicionais do projeto estão disponíveis em sua página oficial <http://gvcm.ipen.br/CrystalWalk>.



CrystalWalk

MODELAGEM DE ESTRUTURAS CRISTALINAS ÀS SUAS MÃOS

ISBN 978-65-5104-010-8



9 7 8 6 5 5 1 0 4 0 1 0 8

**DRA. KATIA CRISTIANE GANDOLPHO CANDIOTO
GIULIANA DE LIMA MARCONDES MONTEIRO**