



TECNOLOGIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

AULA 06: SISTEMAS CRISTALINOS E PONTOS CRISTALOGRÁFICOS

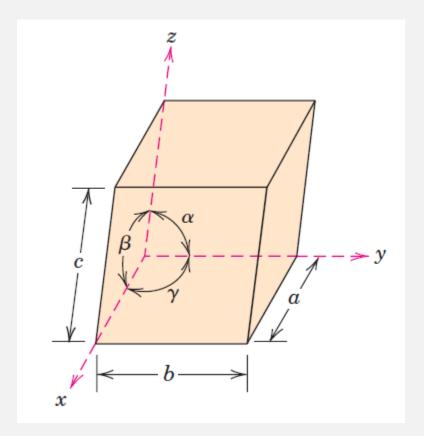
Prof.: Gabriel Henrique Arruda Tavares de Lima

Uberlândia - MG

SISTEMAS CRISTALINOS

• A geometria da célula unitária é completamente definida em termos de seis parâmetros:

- Os comprimentos das três arestas: a, b, c.
- Três **ângulos entre os eixos**: α , β , γ .



SISTEMAS CRISTALINOS

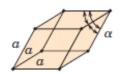
Sistema Cristalino	Relações Axiais	Ângulos entre os Eixos	Geometria da Célula Unitária
Cúbico	a = b = c	$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$	a a a
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$	

SISTEMAS CRISTALINOS

Romboédrico (Trigonal)

$$a = b = c$$

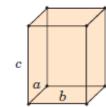
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^{\circ}$$



Ortorrômbico

$$a \neq b \neq c$$

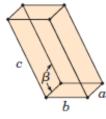
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$$



Monoclínico

$$a \neq b \neq c$$

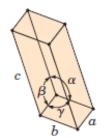
$$\alpha = \gamma = 90^{\circ} \neq \beta$$



Triclínico

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$$

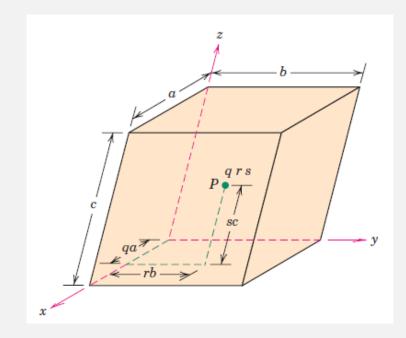


COORDENADAS DOS PONTOS

- Algumas vezes é necessário especificar uma posição na rede cristalina dentro de uma célula unitária. Isso é possível usando três índices de coordenadas de pontos: q, r, s.
- Esses índices são múltiplos fracionários dos comprimentos da aresta da célula unitária a, b, c.

COORDENADAS DOS PONTOS

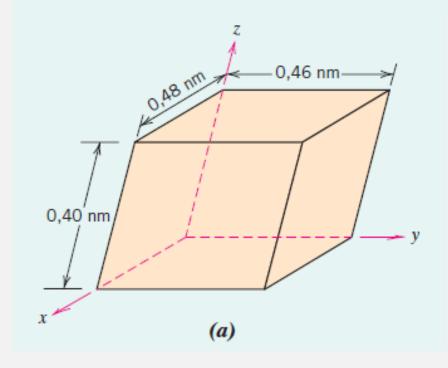
- q é algum comprimento fracionário de a ao longo do eixo x;
- r é algum comprimento fracionário de b ao longo do eixo y;
- s é algum comprimento fracionário de c ao longo do eixo z.



EXEMPLO

Localização de um Ponto com Coordenadas Específicas

Para a célula unitária mostrada na figura (a) a seguir, localize o ponto com coordenadas $\frac{1}{4}$ 1 $\frac{1}{2}$.



•
$$q = \frac{1}{4}$$
;

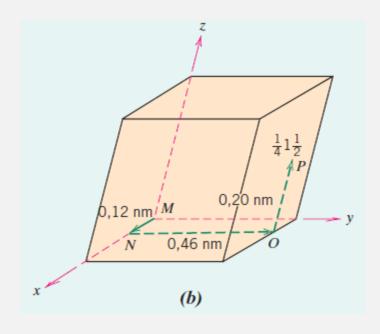
•
$$r = 1$$
;

•
$$s = \frac{1}{2}$$
;

posição na rede cristalina em referência ao eixo x = qa= $(\frac{1}{4})a = \frac{1}{4}(0,48 \text{ nm}) = 0,12 \text{ nm}$

posição na rede cristalina em referência ao eixo y = rb= (1)b = 1(0,46 nm) = 0,46 nm

posição na rede cristalina em referência ao eixo z = sc= $(\frac{1}{2})c = \frac{1}{2}(0,40 \text{ nm}) = 0,20 \text{ nm}$



- É definida como uma linha direcionada entre dois pontos, ou um vetor.
- As seguintes etapas são usadas para determinar os três índices direcionais:
- 1. Criar um sistema de coordenadas x-y-z no vértice da célula unitária;
- 2. Determinar as coordenadas de dois pontos que estão sobre o mesmo vetor direção.

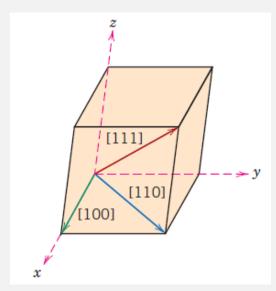
$$P1(x_1, y_1, z_1)$$
, $P2(x_2, y_2, z_2)$

- 3. As coordenadas do ponto inicial são subtraídas do ponto final : $x_2 x_1$, $y_2 y_1$, $z_2 z_1$;
- 4. As diferenças são então normalizadas por seus respectivos parâmetros de rede: a, b, c.

$$\frac{x_2-x_1}{a}$$
 $\frac{y_2-y_1}{b}$ $\frac{z_2-z_1}{c}$

- 5. Se necessário, os números são divididos ou multiplicados por um fator comum para reduzi-los aos menores valores inteiros (n);
- 6. Os três índices resultantes são colocados em colchetes [u v w], podendo ser determinados pelas equações.

$$u = n \left(\frac{x_2 - x_1}{a} \right)$$
$$v = n \left(\frac{y_2 - y_1}{b} \right)$$
$$w = n \left(\frac{z_2 - z_1}{c} \right)$$



- Para cada um os três eixos haverá tanto coordenadas positivas quanto coordenadas negativas.
- Dessa forma, índices negativos também são possíveis, os quais são representados por uma barra sobre o índice apropriado.

Exemplo:

A direção $[1\overline{1}1]$ teria um componente na direção – y.

• Determine os índices para a direção mostrada na figura abaixo.

