

# O CRISTAL IDEAL

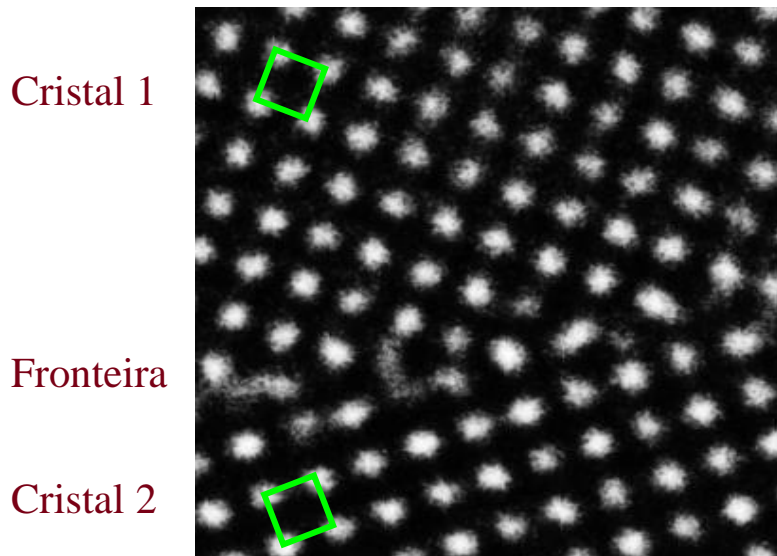
## Estrutura Cristalina

Livro Texto - Capítulo 3

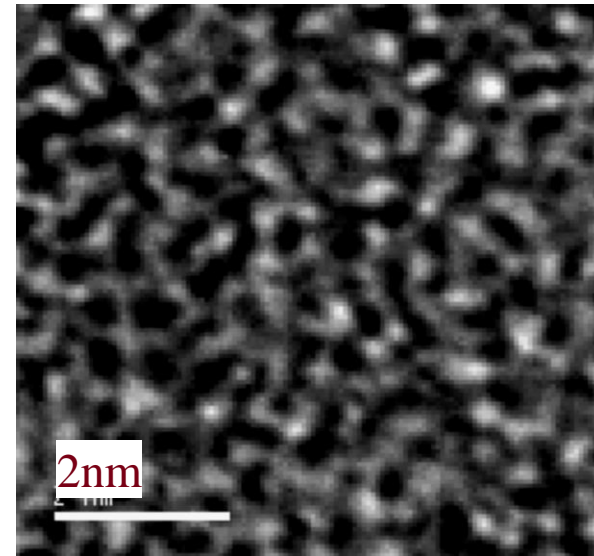


# O Cristal Perfeito - Estrutura Cristalina

- Muitos materiais - metais, algumas cerâmicas, alguns polímeros - ao se solidificarem, se organizam numa rede geométrica 3D - **a rede cristalina**.
- Estes materiais **cristalinos**, têm uma estrutura altamente organizada, em contraposição aos materiais **amorfos**, nos quais não há *ordem de longo alcance*.



Fronteira entre dois cristais de  $\text{TiO}_2$ .  
Note a organização geométrica dos átomos.



Carbono amorfo.  
Note a desorganização na posição dos átomos.

Imagens obtidas com Microscópio Eletrônico de Transmissão (MET).

# Cristais Naturais e Artificiais



Cristais gigantes de gypsum, de origem natural, descobertos em uma mina na Espanha

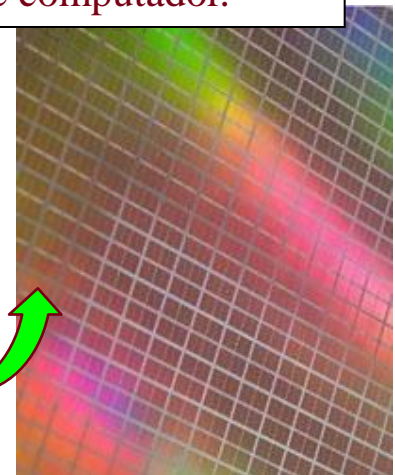
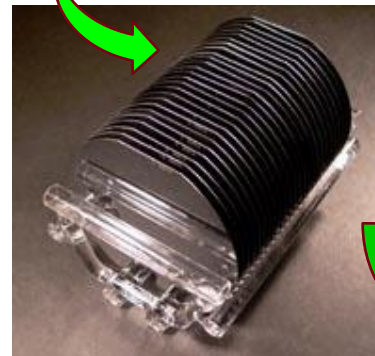


Cristais gigantes de KDP, crescidos em laboratório



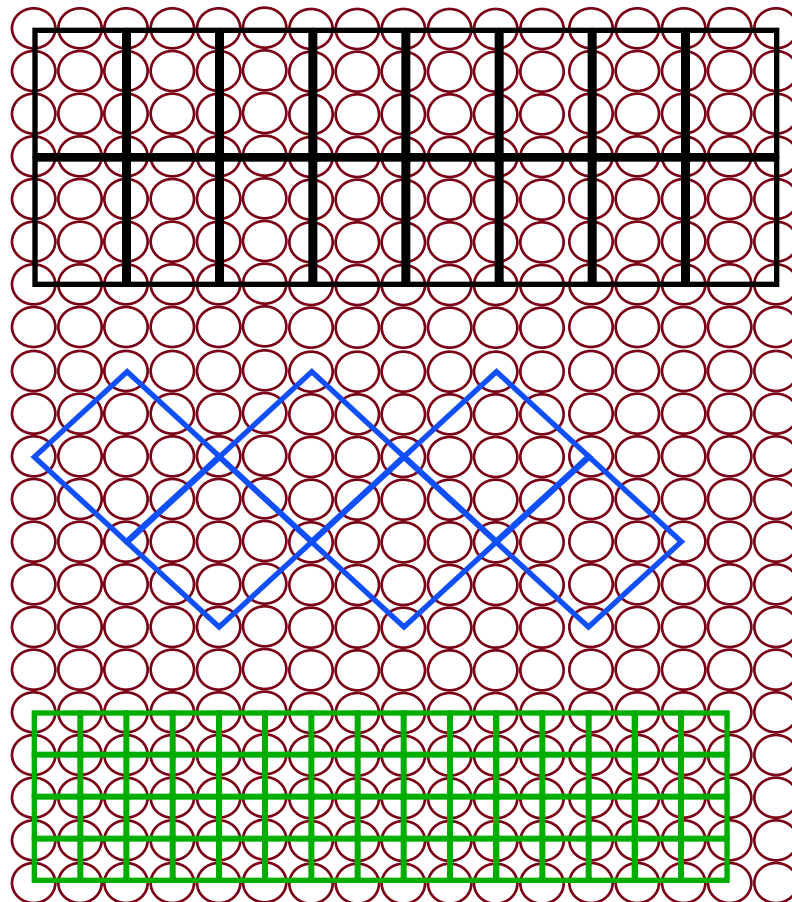
Imagem de alta-resolução mostrando a organização atômica  
Microscópio Eletrônico de Transmissão

Mono-cristal gigante de Silício, a partir do qual são fabricados chips de computador.

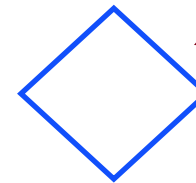


# Célula Unitária

- Como a rede cristalina tem uma estrutura repetitiva, é possível descrevê-la a partir de uma estrutura básica, como um “tijolo”, que é repetida por todo o espaço.



**Células Não-Unitárias**

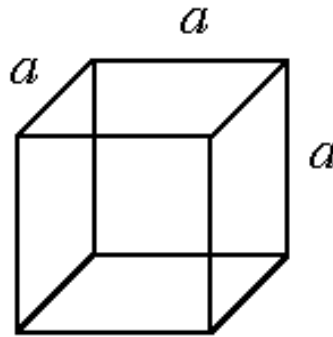
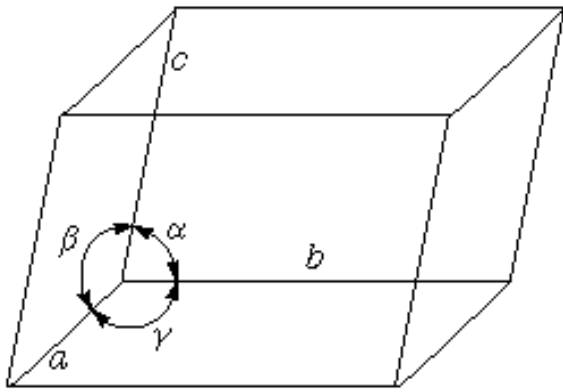


**Célula Unitária**

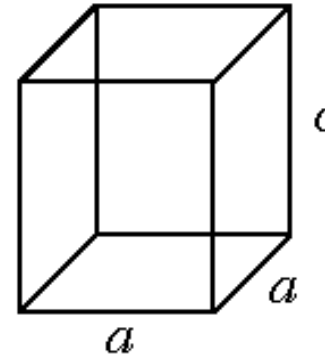
Menor “tijolo” que repetido  
reproduz a rede cristalina

# Os 7 Sistemas Cristalinos

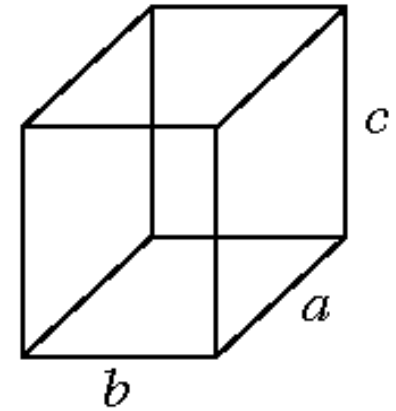
- Só existem 7 tipos de células unitárias que preenchem totalmente o espaço



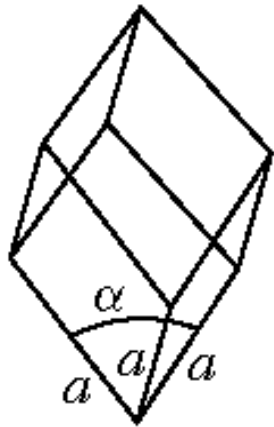
Cúbica  
 $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90$



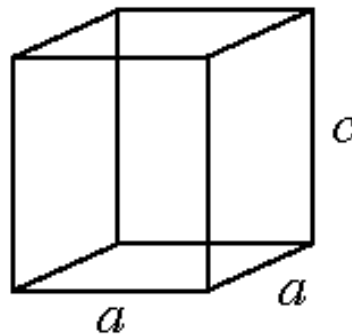
Tetragonal  
 $a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90$



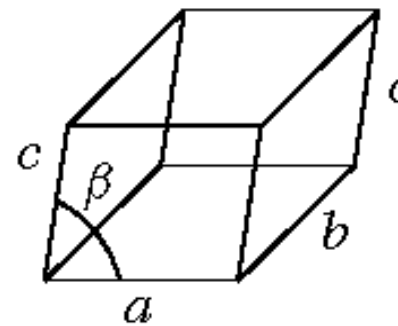
Ortorrômbica  
 $a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90$



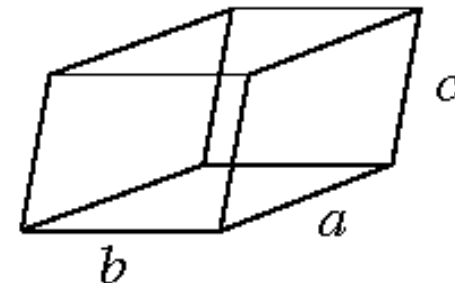
Romboédrica  
 $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90$



Hexagonal\*  
 $a=b \neq c, \alpha=\beta=90, \gamma=120$



Monoclínica  
 $a \neq b \neq c, \alpha=\gamma=90 \neq \beta$



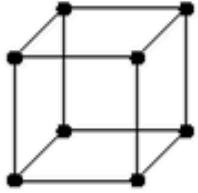
Triclínica  
 $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$



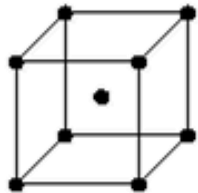
# Sistemas Cristalinos e Redes de Bravais

- Os sistemas cristalinos são apenas entidades geométricas. Quando posicionamos átomos dentro destes sistemas formamos redes (ou estruturas) cristalinas.
- Existem apenas 14 redes que permitem preencher o espaço 3D.
- Nós vamos estudar apenas as redes mais simples:
  - a cúbica de corpo centrado - ccc (bcc - body centered cubic)
  - a cúbica de face centrada - cfc (fcc - face centered cubic)

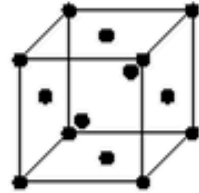
# As 14 Redes de Bravais



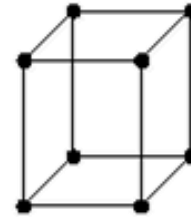
Cúbica Simples



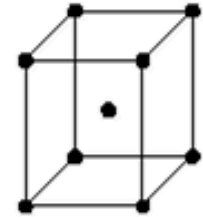
Cúbica de  
Corpo Centrado



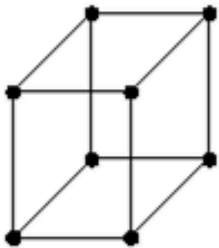
Cúbica de Face  
Centrada



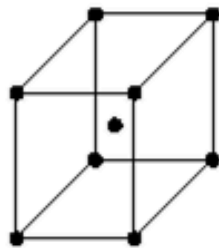
Tetragonal  
Simples



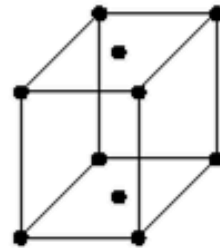
Tetragonal de  
Corpo Centrado



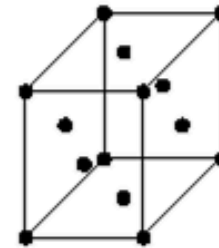
Ortorrômbica  
Simples



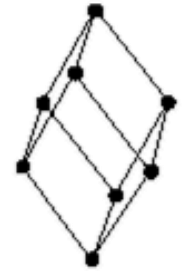
Ortorrômbica de  
Corpo Centrado



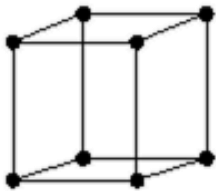
Ortorrômbica de  
Base Centrada



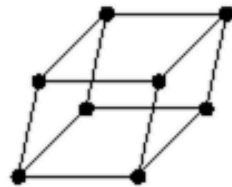
Ortorrômbica de  
Face Centrada



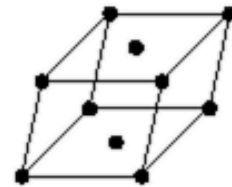
Romboédrica  
Simples



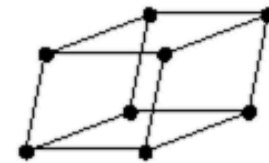
Hexagonal



Monoclínica  
Simples



Monoclínica de  
Base Centrada



Triclínica

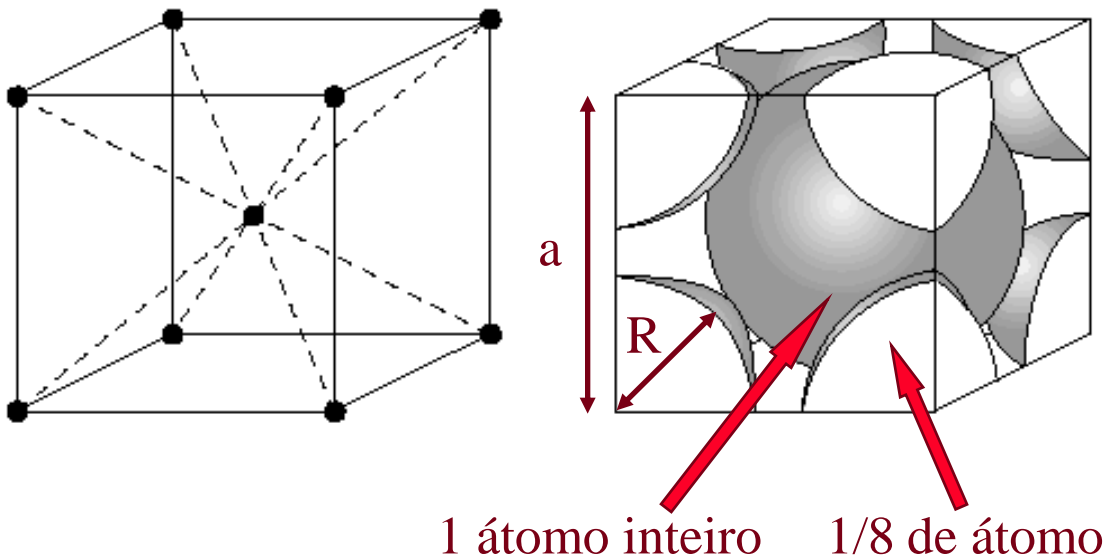


Site com animações



# A rede ccc

- A rede cúbica de corpo centrado é uma rede cúbica na qual existe um átomo em cada vértice e um átomo no centro do cubo. Os átomos se tocam ao longo da diagonal.



**Fator de empacotamento atômico**  
(APF - atomic packing factor)

$$\begin{aligned}
 FEA &= \frac{\text{Volume}(\text{átomos})}{\text{Volume}(\text{célula})} = \\
 &= \frac{N(\text{átomos})V(1\text{átomo})}{a^3} = \\
 &= \frac{N(\text{átomos})\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}
 \end{aligned}$$

**Número de átomos na célula unitária**

$$N_a = 1 + 8 \times (1/8) = 2$$

**Relação entre a e R**

$$4R = a\sqrt{3} \Rightarrow a = 4R/\sqrt{3}$$

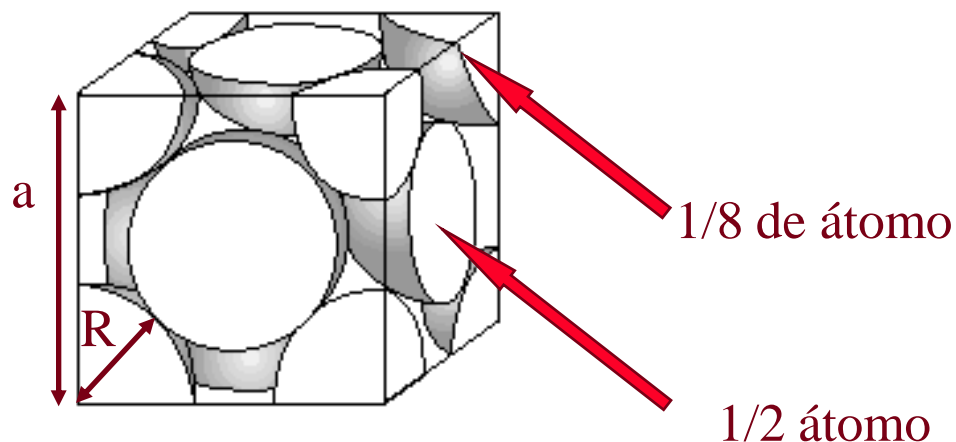
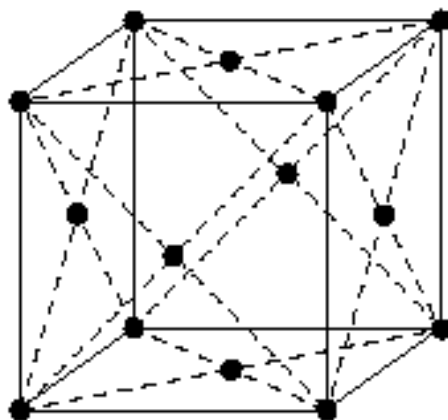
$$FEA_{ccc} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi R^3}{\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0,68$$





# A rede cfc

- A rede cúbica de face centrada é uma rede cúbica na qual existe um átomo em cada vértice e um átomo no centro de cada face do cubo. Os átomos se tocam ao longo das diagonais das faces do cubo.



**Número de átomos na célula unitária**

$$N_a = 6 \times 1/2 + 8 \times (1/8) = 4$$

**Relação entre a e r**

$$4R = a \sqrt{2} \Rightarrow a = 2R\sqrt{2}$$

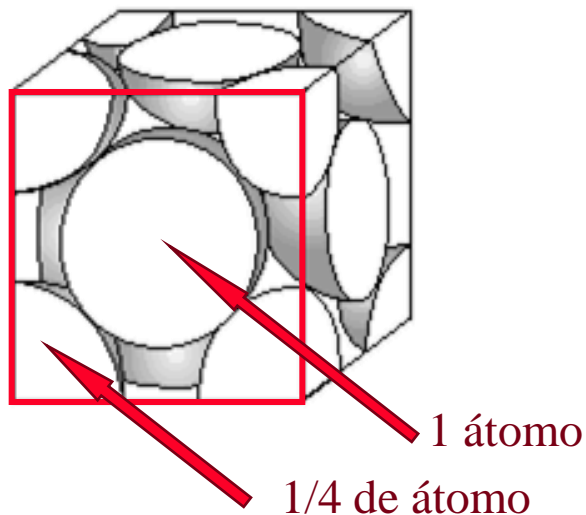
**Fator de empacotamento atômico**

$$FEA_{cfc} = \frac{\text{Volume dos átomos}}{\text{Volume da célula}} = 0.74$$

*A rede cfc é a mais compacta*

# Densidade Atômica Planar

- Análogo ao fator de empacotamento atômico, que corresponde à densidade volumétrica de átomos, podemos definir a *densidade atômica planar*
  - $DAP = \text{Área Total de Átomos} / \text{Área do Plano}$
- Exemplo
  - Calcule a DAP dos planos das faces na rede CFC



$$\text{Número total de átomos} = 1 + 4 \cdot 1/4 = 2$$

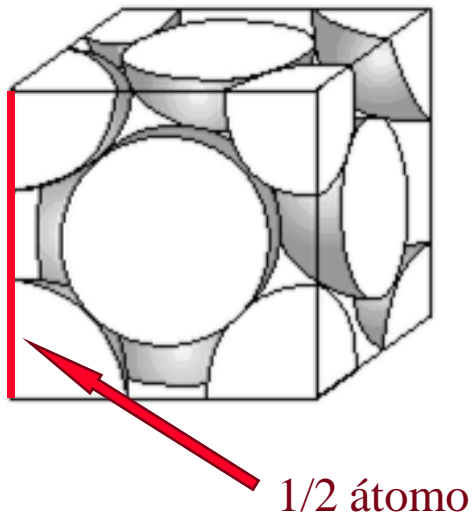
$$\text{Área total de átomo} = 2 \times \text{Área de 1 átomo} = 2\pi R^2$$

$$\text{Área do Plano} = a^2 \text{ e } 4R = a \sqrt{2} \Rightarrow a = 2R\sqrt{2}$$

$$DAP = 2\pi R^2 / a^2 = 2\pi R^2 / 8R^2 = \pi/4 = 0,785$$

# Densidade Atômica Linear

- Análogo à DAP podemos definir a *densidade atômica linear*
  - $DAL = \text{Comprimento Total de Átomos} / \text{Comprimento de uma direção}$
- Exemplo
  - Calcule a DAL das arestas na rede CFC



Comprimento total de átomos = 2 x Raio de 1 átomo =  $2R$

Comprimento da direção =  $a$  e  $4R = a\sqrt{2} \Rightarrow a = 2R\sqrt{2}$

$DAL = 2R/a = 2R / 2R\sqrt{2} = 1/\sqrt{2} = 0.707$

# Planos e Direções Compactas

- Em cada rede, existe um certo número de planos e direções compactos (maior valor de DAP e DAL)
  - As direções compactas estão contidas em planos compactos
  - Estes planos e direções serão fundamentais na deformação plástica de materiais.
  - A deformação plástica normalmente se dá através do *deslizamento de planos*.

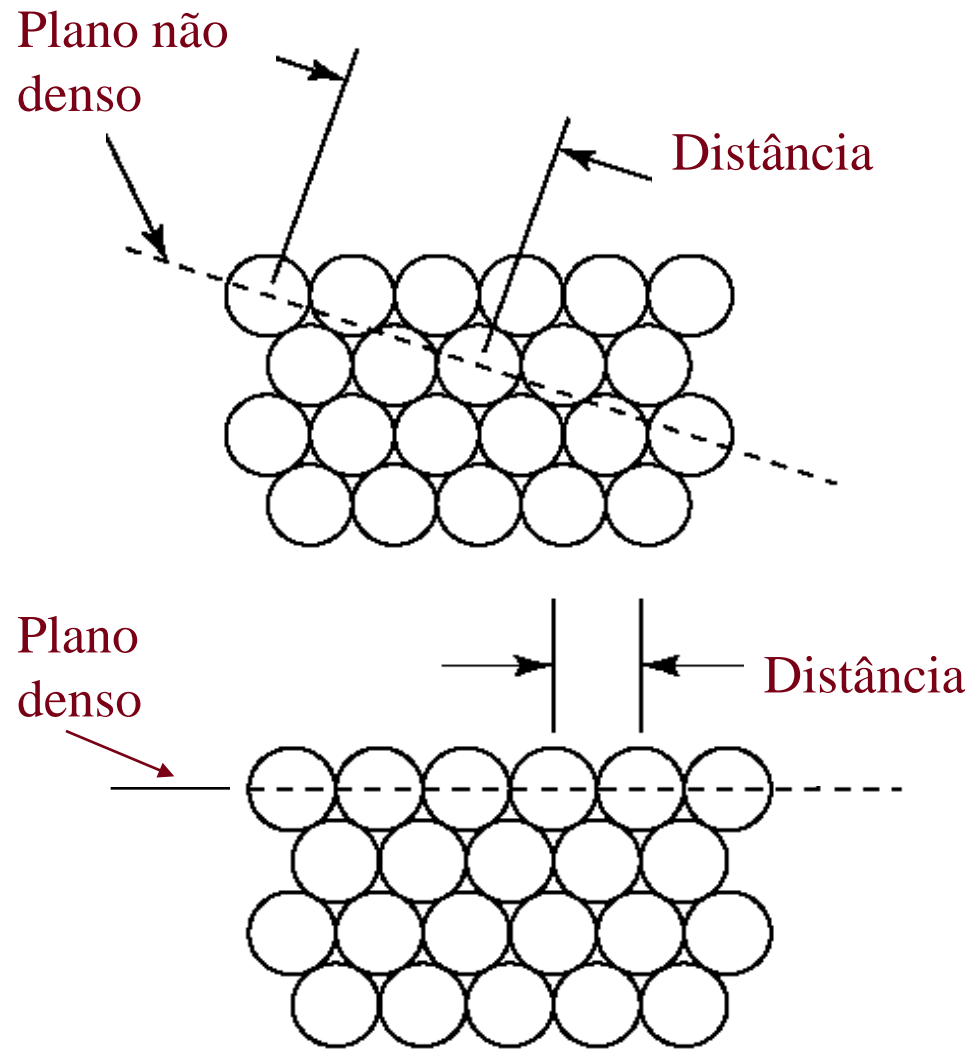
# Sistemas de deslizamento

- O deslizamento ocorrerá mais facilmente em certos planos e direções do que em outros.
- Em geral, o deslizamento ocorrerá paralelo a planos compactos, que preservam sua integridade.
- Dentro de um plano de deslizamento existirão direções preferenciais para o deslizamento.
- A combinação entre os planos e as direções forma os sistemas de deslizamento (slip systems), característicos das diferentes estruturas cristalinas.

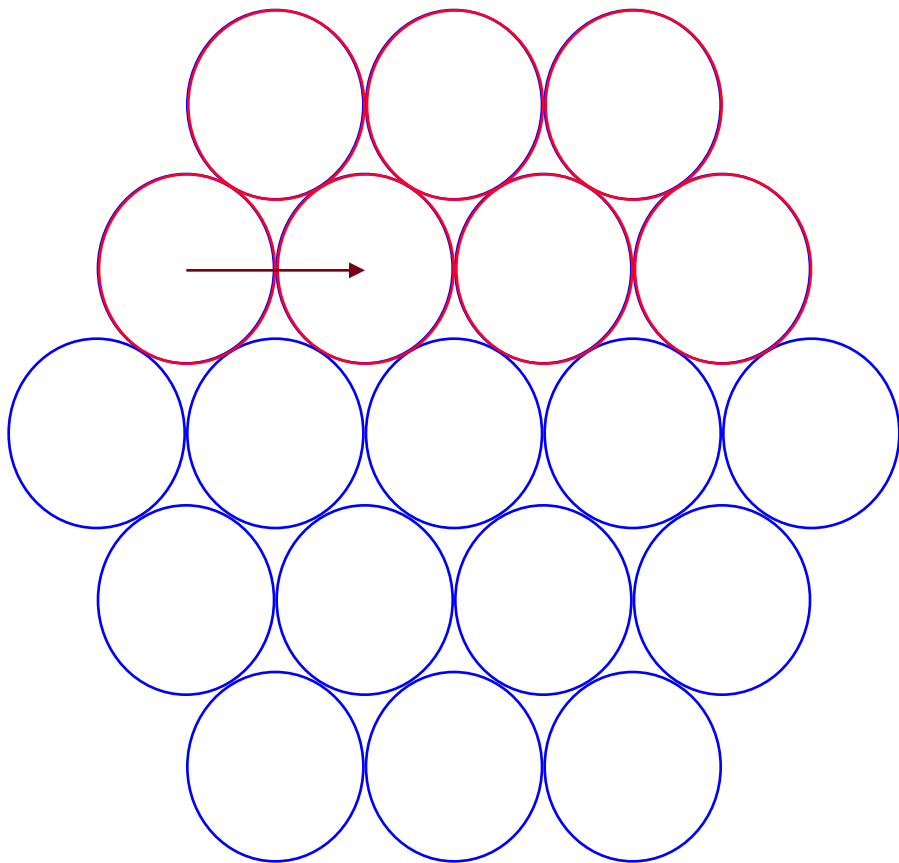


# Sistemas de deslizamento (cont.)

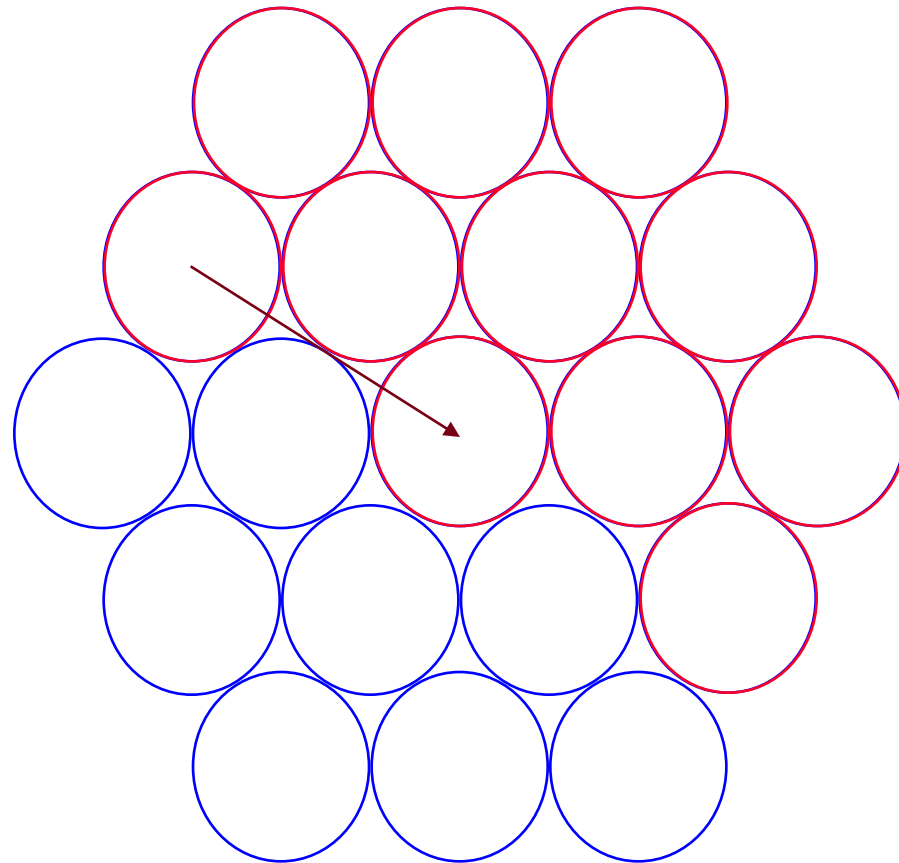
- O deslizamento é mais provável em planos e direções compactas porque nestes casos a distância que a rede precisa se deslocar é mínima.
- Dependendo da simetria da estrutura, outros sistemas de deslizamento podem estar presentes.



# Sistemas de deslizamento (cont.)

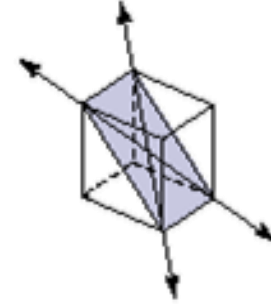
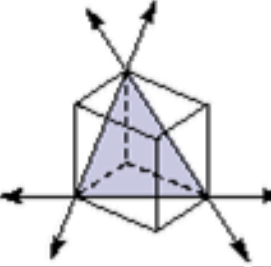
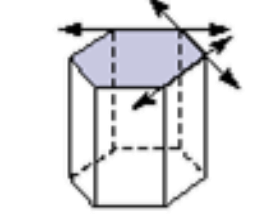


Deslizamento de um plano compacto  
Pequeno deslizamento  $\Rightarrow$  Pequena energia  
 $\Rightarrow$  Mais provável



Deslizamento de um plano não compacto  
Grande deslizamento  $\Rightarrow$  Grande energia  
 $\Rightarrow$  Menos provável

# Sistemas de deslizamento (cont.)

Estrutura Cristalina	Geometria da Célula Unitária	Número de Planos Compactos	Número de Direções Compactas por Plano	Número de Sistemas de Deslizamento	Exemplos
CCC		6	2	$6 \times 2 = 12$	$\alpha$ -Fe, Mo, W
CFC		4	3	$4 \times 3 = 12$	Al, Cu, $\gamma$ -Fe, Ni
HC		1	3	3	Cd, Mg, $\alpha$ -Ti, Zn

A tabela mostra os sistemas de deslizamento das 3 redes básicas. Por exemplo: Como a rede CFC tem 4 vezes mais sistemas primários que a HC, ela será muito mais dúctil.