

03 de Setembro de 2024

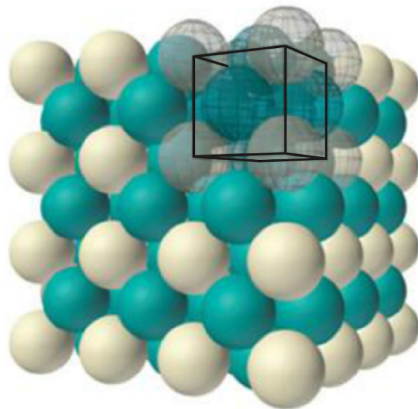
Estrutura Cristalinos

Número Coordenação, é quantos vizinhos mais próximos tem o átomo (ou o número de átomos em contato)

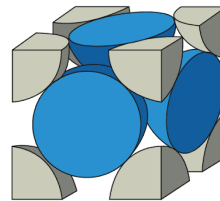
Fator de Empacotamento é o nível de ocupação por átomo de uma célula unitária.

Cúbico de Face Centrada (CFC)

1. O número de átomos inteiros por célula unitária é igual a 4, sendo:
 - 8 partes de $\frac{1}{8}$ de átomo
 - 6 partes de $\frac{1}{2}$ de átomo
2. O número de coordenação é igual a 14, sendo:
 - 8 átomos, 1 em cada canto
 - 6 em cada face do cubo



Cúbico de face centrada



Exemplo: Al (Alumínio), Cu (Cobre). Ag (Prata), Au (Ouro), Fe-y (Ferro), Ni (Níquel), Pb (Chumbo)

Para calcular a área da célula unitária do CFC é

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

Fator de empacotamento atômico para CFC - FEA

$$FEA = \frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume de célula unitária}}$$

Exercícios

Demonstre que o fator de empacotamento para estrutura cristalina CFC é **0,74**.

Lembre-se:

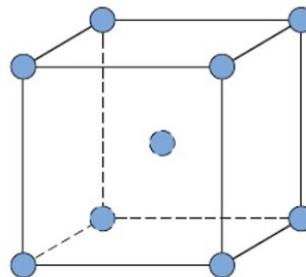
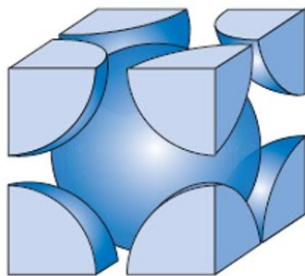
- $a = 2r\sqrt{2}$
- Número de átomos de uma célula unitária CFC é igual a 4
- Volume de átomos de uma célula unitária é o volume de um cubo: $V_c = a^3$
- Volume dos átomos é o volume da esfera: $V_e = \frac{4}{3} \pi r^3$

$$FEA = \frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume de célula unitária}}$$

$$FEA = \frac{4 \cdot V_e}{V_c} = \frac{4 \cdot \left(\frac{4}{3} \pi r^3\right)}{(2r\sqrt{2})^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{8r^3 \cdot 2\sqrt{2}} = \frac{\frac{16}{3} \pi}{16\sqrt{2}} = \frac{16}{3} \pi \cdot \frac{1}{16\sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$$

Cúbico de Corpo Centrado (CCC)

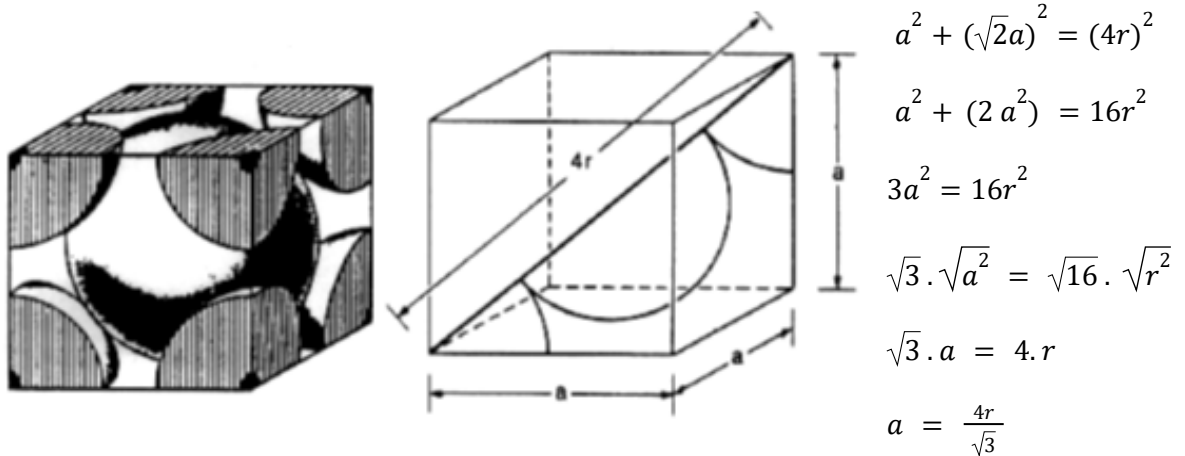
1. O número de átomos por célula unitária é igual a **2**.
 - 1 átomos no centro
 - 8 partes de $\frac{1}{8}$ de átomo
2. O número de coordenação é igual a **8**.
 - 8 átomos, sendo 1 a cada canto do Cubo



Célula Unitária Cúbica de Corpo Centrado (CCC)

Exemplos de metais que possuem em um CCC: Fe- α (Ferritina), Mo (Molibdênio), Nb (Niobe), Ta (Tântalo), W (Tungstênio).

Para calcular a área do CCC é



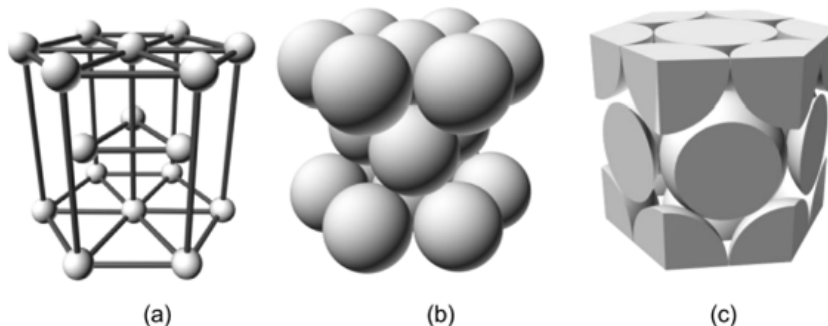
Calculando o fator de empacotamento atômico

$$FEA = \frac{\text{Número de átomos} \times \text{Volume dos átomos}}{\text{Volume de célula unitária}}$$

$$FEA = \frac{2 \cdot V_e}{V_c} = \frac{2 \cdot \left(\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3\right)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3} \cdot \pi \cdot r^3}{\frac{64r^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\frac{8}{3} \cdot \pi}{\frac{64}{3\sqrt{3}}} = \frac{8}{3} \cdot \pi \cdot \frac{3\sqrt{3}}{64} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$$

Estrutura Hexagonal Compacta (HC)

- O número total de átomos por célula unitária é igual a **6**, sendo:
 - 12 partes de $\frac{1}{6}$ de átomo
 - 2 partes de $\frac{1}{2}$ de átomo
 - 3 átomos inteiros ao centro
- O número de coordenação é igual a **12**, sendo:
 - 6 átomos da camada de cima
 - 6 átomos da camada de baixo



O número de coordenação é o mesmo do CFC, **0,74**.

Para calcular a área da célula unitária do CFC é

$$a = 2r$$

Exemplo: Cd (Cadmio), Co (Cobalto), Zn (Zinco), TI-α

Fator de empacotamento HC, mesmo do CFC, mas cálculo usando o volume de um Hexágono.

O conhecimento da estrutura cristalina de um sólido metálico, permite o cálculo de sua massa específica teórica, através da relação.

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

Onde:

- n = Número de átomos associados a cada célula unitária
- A = Peso atômico ou massa atômica
- Vc = Volume da célula unitária
- Na = Número de Avogadro ($6,023 \times 10^{23}$ átomos/mol)

Exercícios:

1. O cobre possui um raio atômico de 0,128 nm, uma estrutura cristalina CFC e um peso atômico de 63,5 g/mol. Calcule a massa específica teórica

Lembre-se:

- Número de átomos por célula unitária CFC é igual a 4
- Volume da célula unitária CFC
- $V_c = a^3 = (2r\sqrt{2})^3 = 16r^3\sqrt{2}$
- Converta o raio atômico para cm, onde $0,128 \times 10^{-9} = 1,28 \times 10^{-8}$
- $\rho = \frac{nA}{V_c N_a}$

SOLUÇÃO

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_a} = \frac{4 \times 63,5}{(16r^3\sqrt{2}) \cdot (6,023 \times 10^{23})} = \frac{264}{(16 \cdot (1,28 \times 10^{-8})^3 \cdot \sqrt{2}) \cdot (6,023 \times 10^{23})} = \frac{264}{(16 \cdot (1,28 \times 10^{-24}) \cdot \sqrt{2}) \cdot (6,023 \times 10^{23})}$$

$$\rho = \frac{264}{28,57} = 8,89 \text{ g/cm}^3$$

2. Calcule a massa específica teórica do Al(Alumínio), para isso considere:

- $r = 0,143 \text{ nm} = 1,43 \times 10^{-8}$
- Estrutura cristalina CFC
- $A = 26,98 \text{ g/mol}$

ENTREGAR no dia 10/09/2024

SOLUÇÃO

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_a} = \frac{4 \times 26,98}{(16r^3\sqrt{2}) \cdot (6,023 \times 10^{23})} = \frac{53,96}{(16 \cdot (1,43 \times 10^{-8})^3 \cdot \sqrt{2}) \cdot (6,023 \times 10^{23})} = \frac{53,96}{(16 \cdot (1,43 \times 10^{-24}) \cdot \sqrt{2}) \cdot (6,023 \times 10^{23})}$$

$$\rho = \frac{53,96}{19,49} = 2,77 \text{ g/cm}^3$$