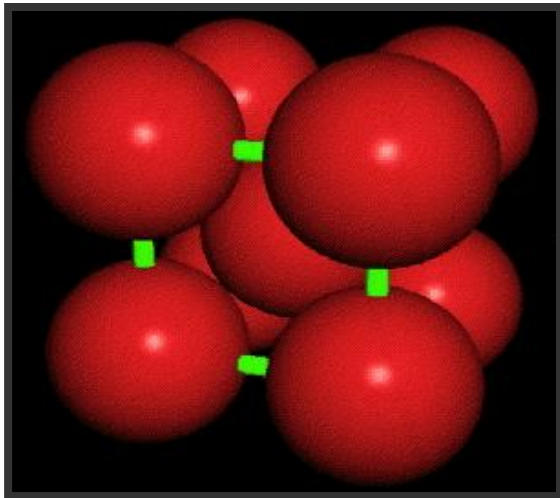




ESTRUTURAS CRISTALINAS

Parte II



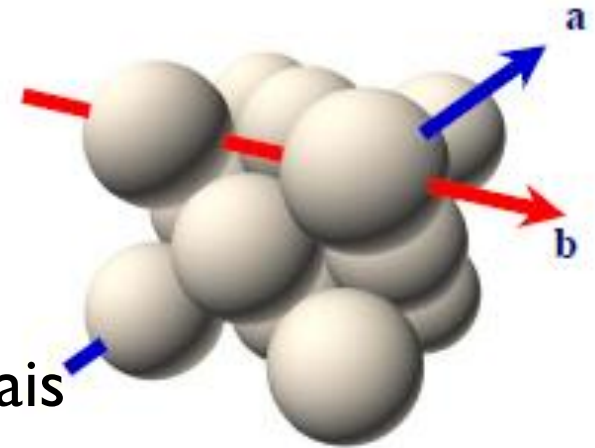


Estrutura dos Sólidos Cristalinos

Por que estudar direções e planos cristalinos?

As **propriedades** de muitos **materiais** são **direcionais**:

- Algumas **direções** da **célula unitária** são de **particular importância**;
- **Por exemplo**: Os **metais** se **deformam** ao longo da **direção** de **maior empacotamento**;
- Algumas **propriedades** dos materiais **dependem** da **direção** do **crystal** em que se encontram e são medidas.



Ponto, Direção e Plano Cristalográfico

Ao lidar com **materiais cristalinos** torna-se necessário **especificar**:

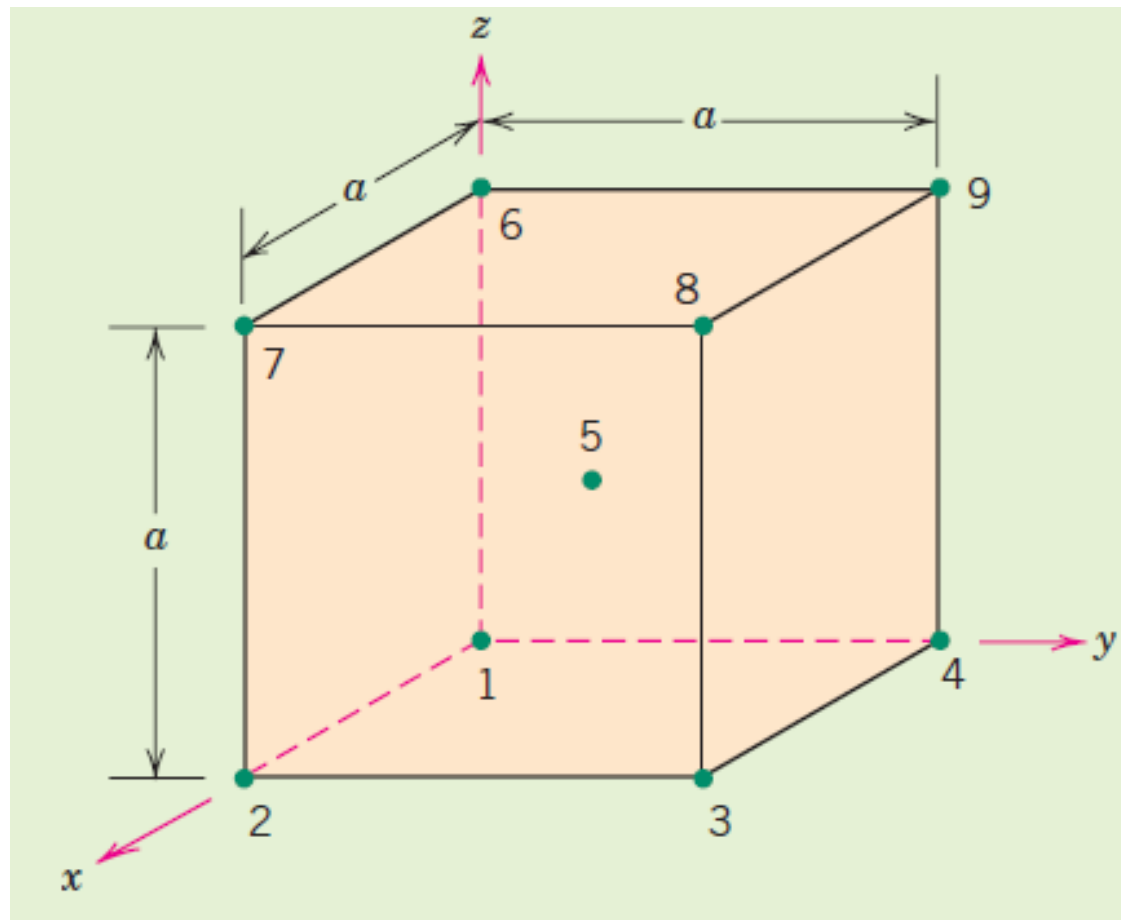
- Um **ponto** particular no interior de uma célula unitária,
- Uma **direção** cristalográfica ou;
- Algum **plano** cristalográfico de átomos.

São usados **3 números** ou **índices** para **designar localização de ponto, direção e plano**.

- A **base** para determinação dos **valores** dos **índices** é a **célula unitária**, com um **sistema** de **coordenadas** de **eixos** (x, y e z) localizados sobre um dos **vértices** e **coincidentes** com as **arestas** da **célula unitária**.

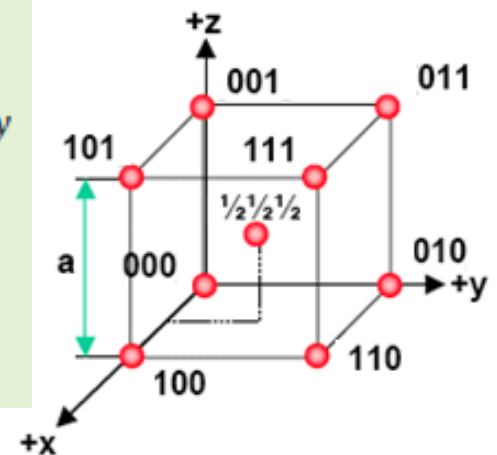
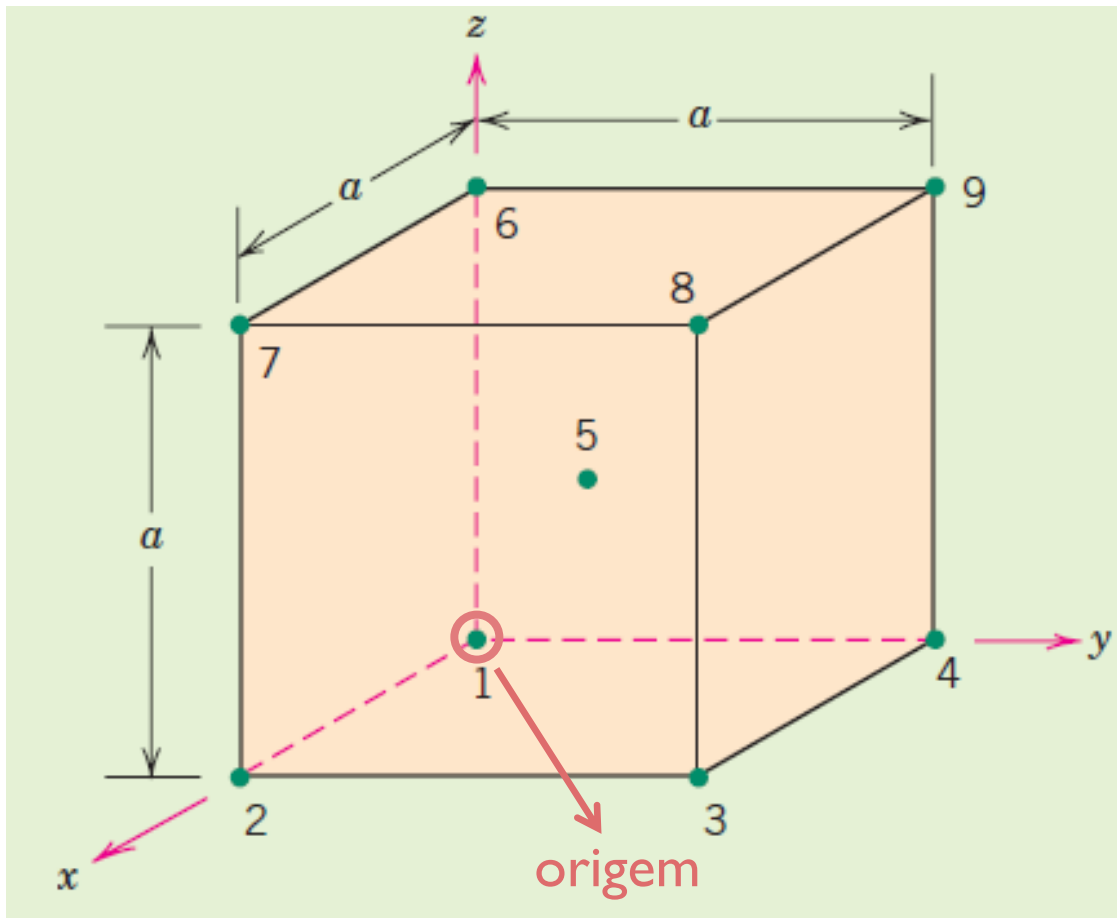
Coordenadas dos Pontos

- Especifique as coordenadas de **pontos** para todas as **posições atômicas** em uma **célula unitária CCC**.



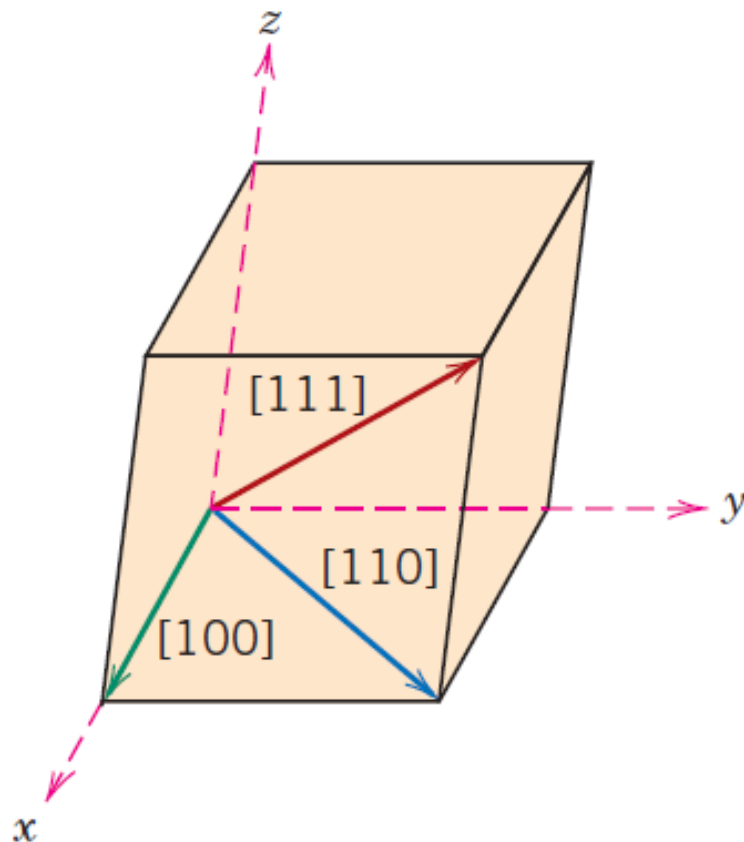
Coordenadas dos Pontos

- Especifique as coordenadas de **pontos** para todas as **posições atômicas** em uma **célula unitária CCC**.



Direções Cristalográficas

Exemplos de direções comuns:

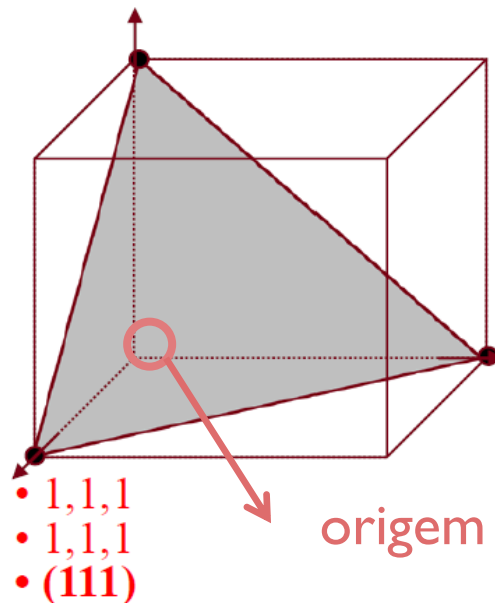


Planos Cristalográficos

- São *especificados pelos 3 índices de Miller* (exceção do sistema hexagonal);

Plano **não** passa pela **origem**:

- números entre *parênteses* (h k l).

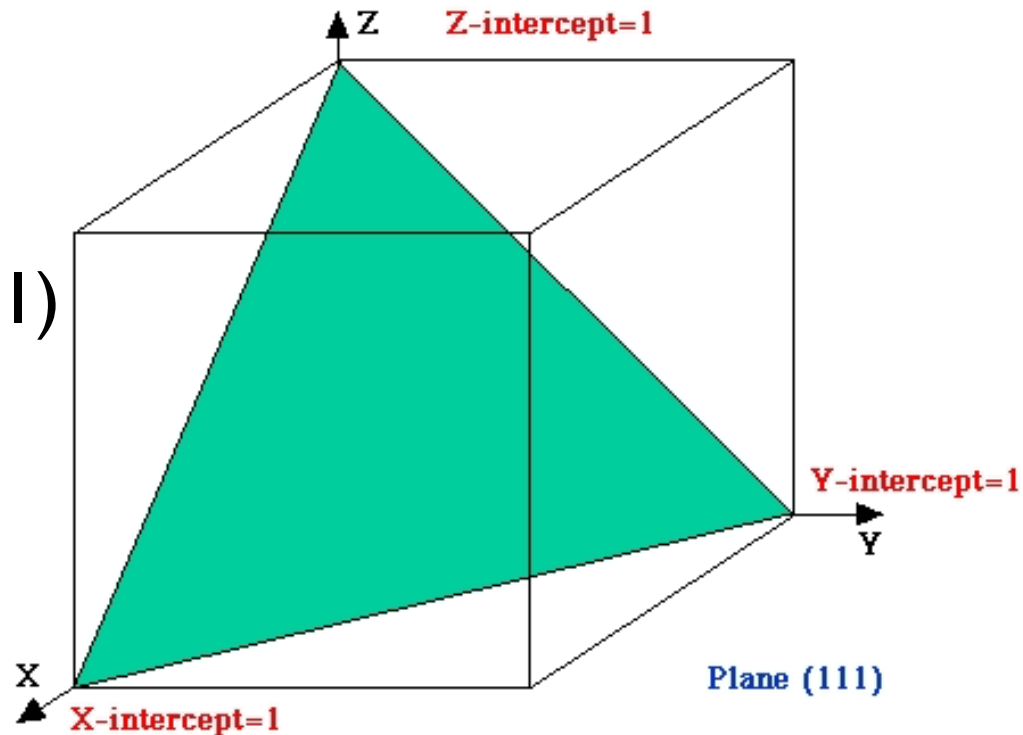


Planos Cristalográficos

Procedimento para determinação de um plano cristalográfico:

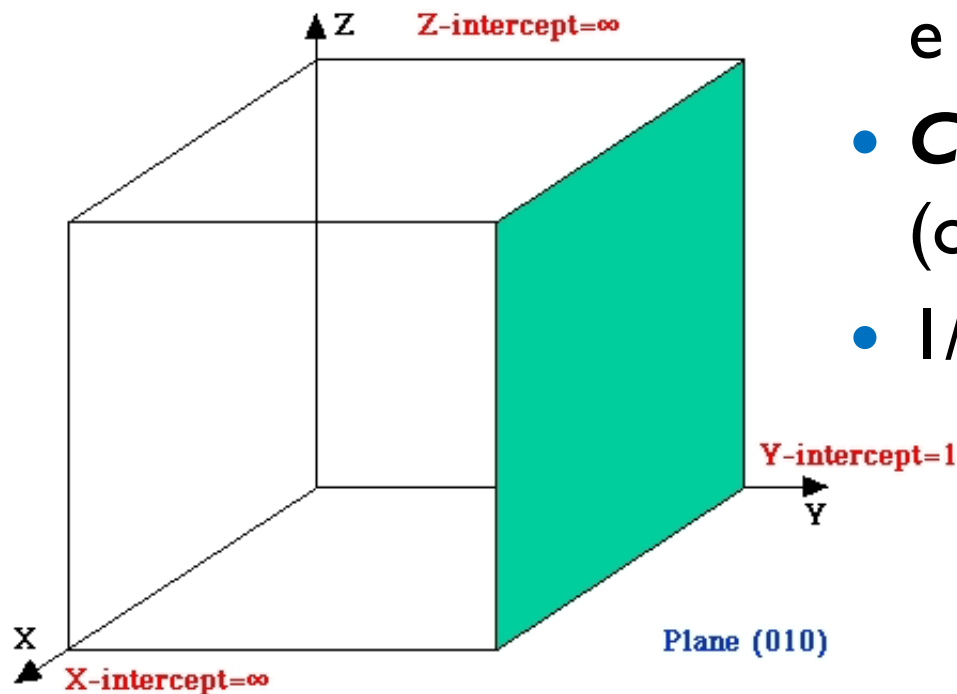
- **Corta os 3 eixos** cristalográficos
- $1/1, 1/1, 1/1 = (111)$

Plano (111)



Planos Cristalográficos

Procedimento para determinação de um plano cristalográfico:

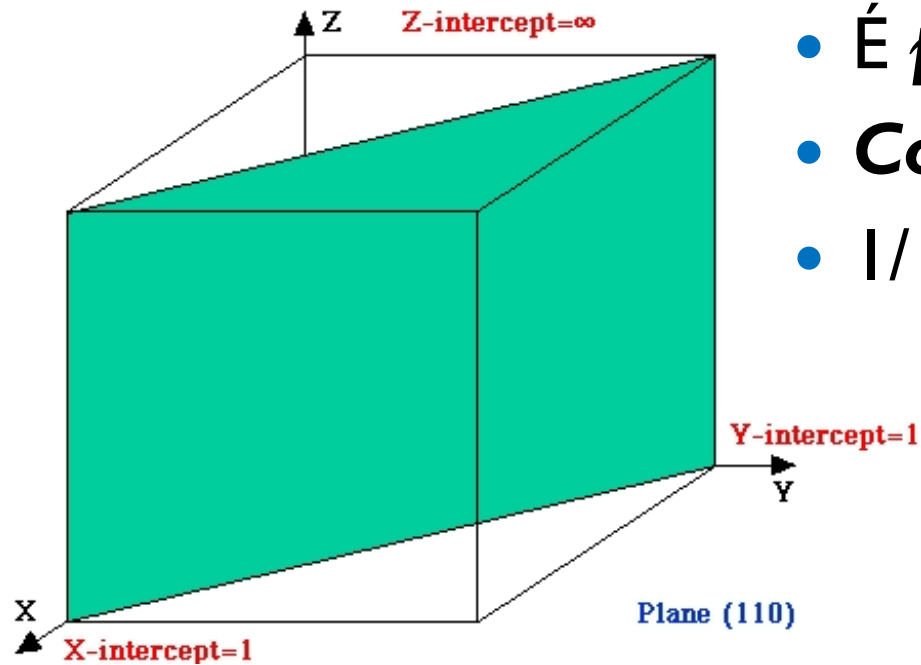


- É **paralelo** aos eixos **x** e **z** (paralelo à face)
- **Corta** o eixo **y** em **1** (os eixos **x** e **z** em ∞)
- $1/\infty, 1/1, 1/\infty = (010)$

Plano (010)

Planos Cristalográficos

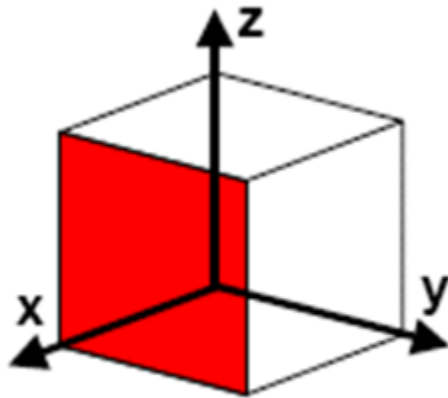
Procedimento para determinação de um plano cristalográfico:



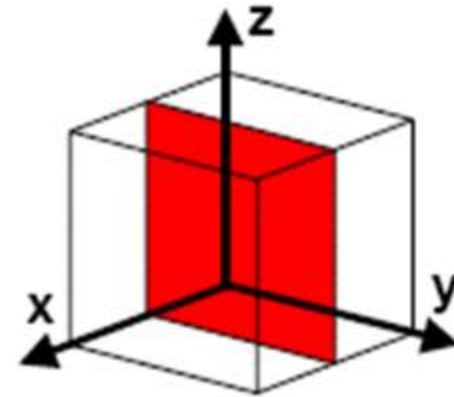
- É **paralelo** a um eixo **z**
- **Corta** dois eixos **x** e **y**
- $1/1, 1/1, 1/\infty = (110)$

Plano (110)

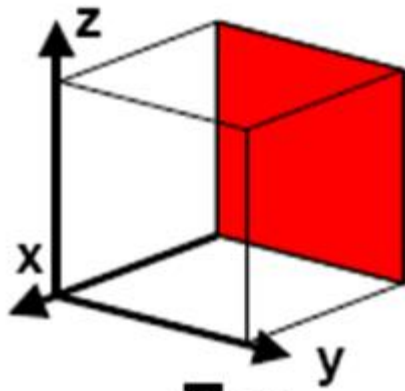
Planos Cristalográficos



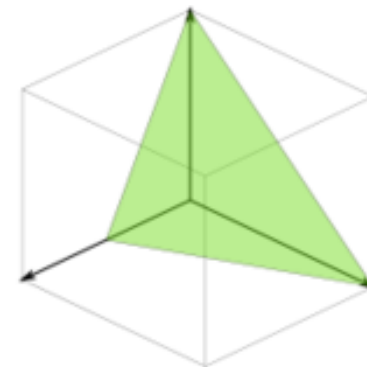
(100)



(200)

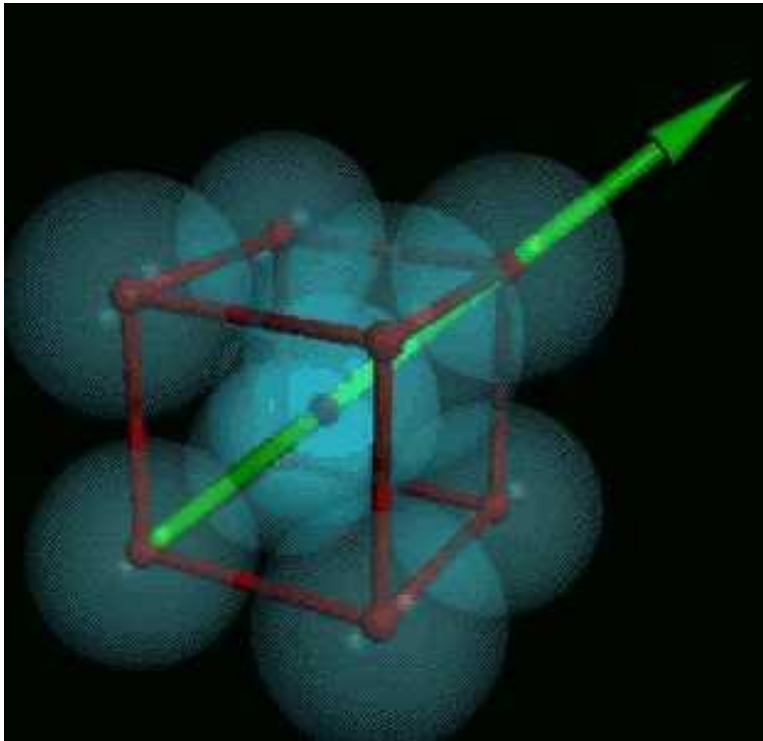


($\bar{1}00$)



(211)

Densidade Atômica Linear - CCC



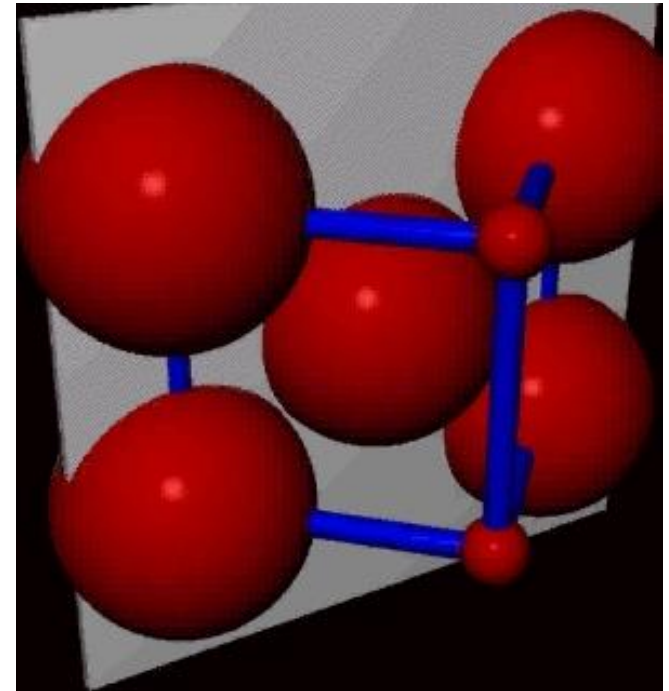
- No **sistema CCC** os átomos se tocam ao longo da **diagonal do cubo**, que corresponde a família de direções $\langle 111 \rangle$;
- A **direção $\langle 111 \rangle$** é a de **maior densidade atômica linear** para o sistema CCC.

Densidade Atômica Linear: corresponde à **fração linear** coberta por **átomos** em uma **determinada direção**.

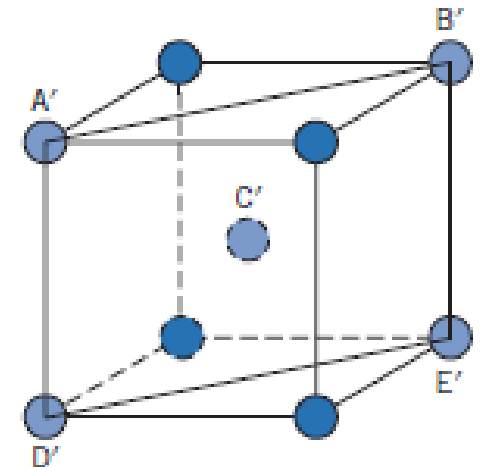
Densidade Atômica Planar - CCC

Sistema CCC:

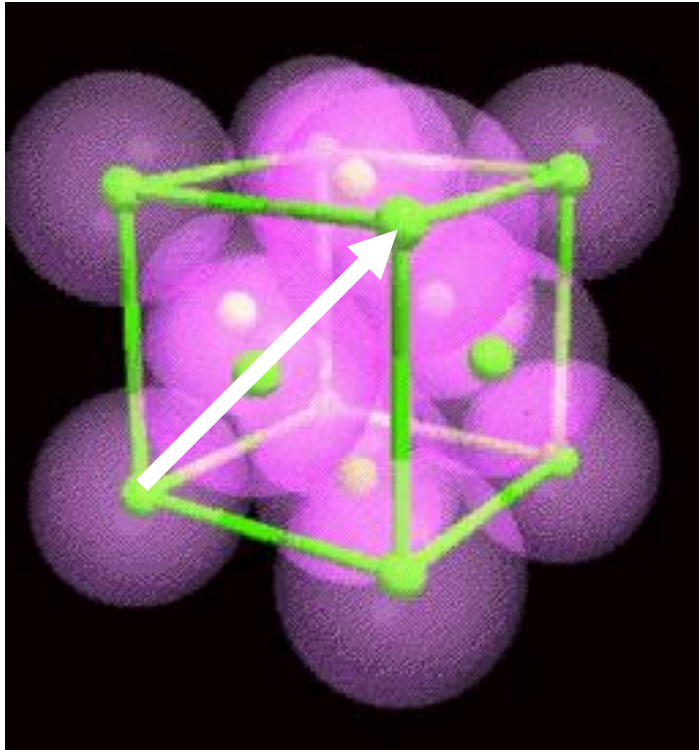
- A família de **planos** $\{110\}$ no sistema CCC é o de **maior densidade atômica planar**.



Densidade Atômica Planar:
Análogo à densidade linear, que
corresponde à **densidade
volumétrica** de **átomos**.



Densidade Atômica Linear - CFC



- No **sistema CFC** os átomos se tocam ao longo da **diagonal da face**, que corresponde a família de direções $\langle 110 \rangle$;
- Então, a **direção $\langle 110 \rangle$** é a de **maior densidade atômica linear** para o sistema CFC.

Densidade Atômica Linear: Análogo ao fator de **empacotamento atômico**, corresponde à **fração linear** coberta por **átomos** em uma **determinada direção**.

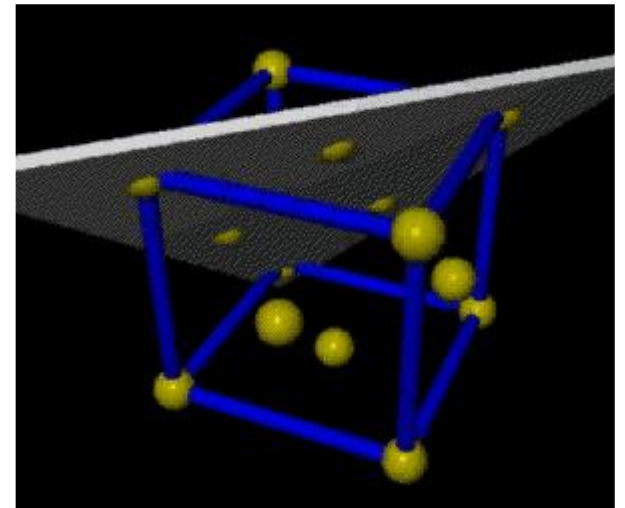
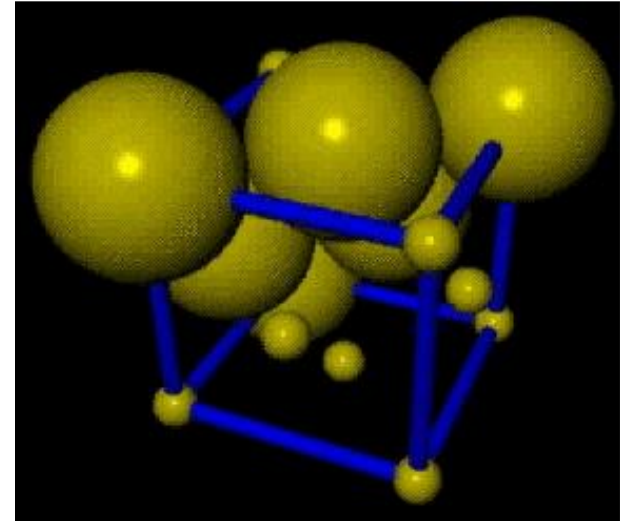
Densidade Atômica Planar - CFC

Sistema CFC:

- A família de **planos $\{111\}$** no sistema CFC é o de **maior densidade atômica planar**.

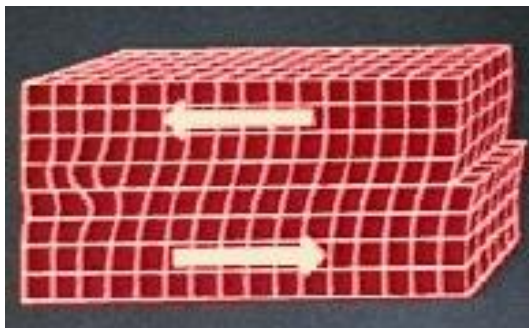
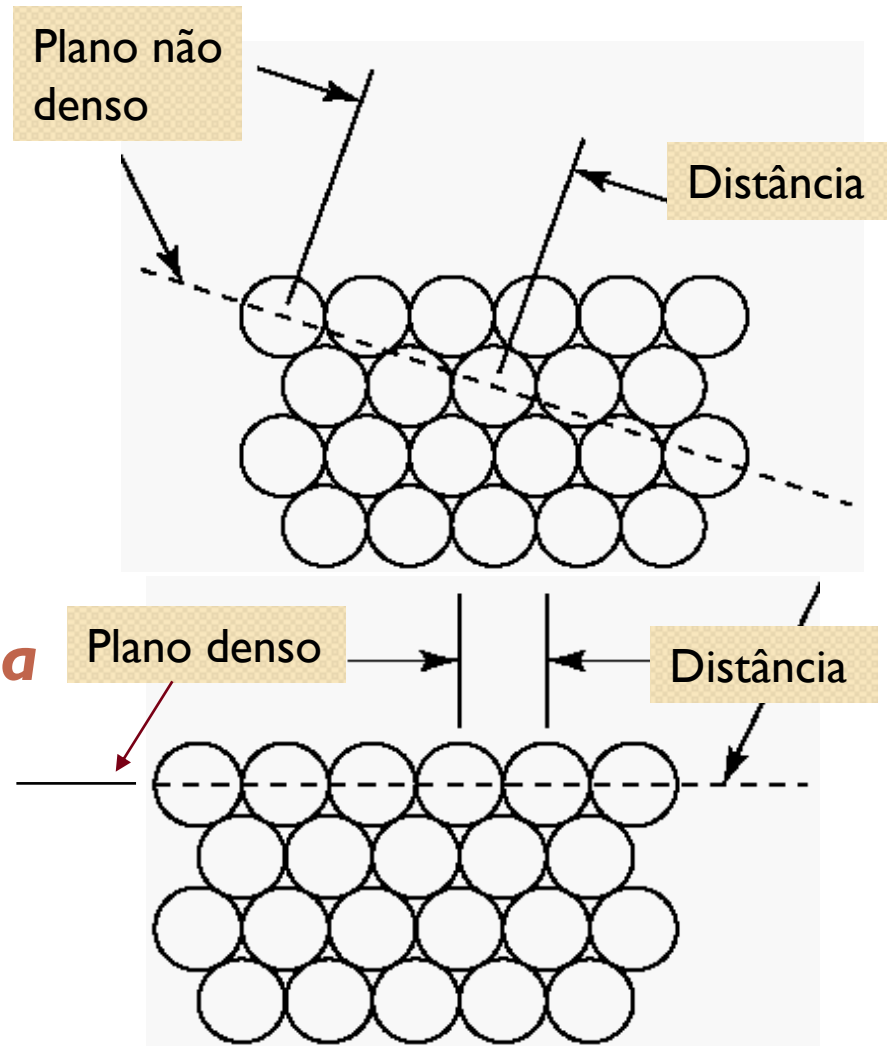
Densidade Atômica Planar:

Análogo à densidade linear, que corresponde à **densidade volumétrica** de **átomos**.



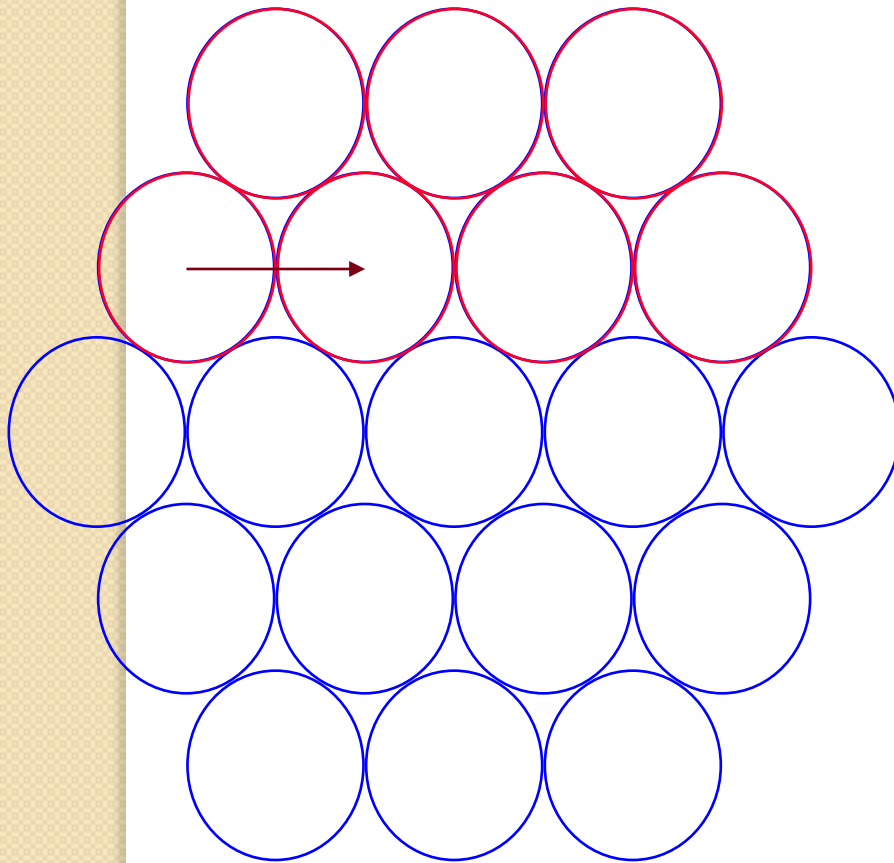
Sistemas de Deslizamento

- 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.

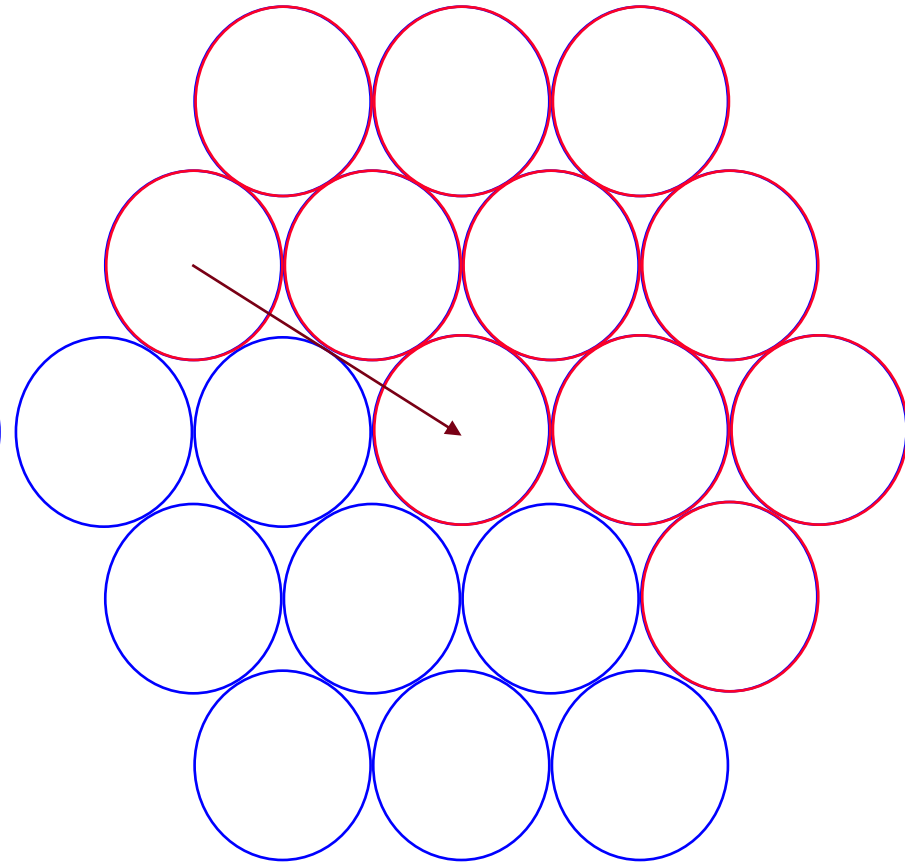


A **deformação plástica** corresponde à deformação permanente que se dá pelo **movimento de discordâncias**.

Sistemas de Deslizamento



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**

Materiais Monocristalinos

- **Monocristal**: Quando o arranjo periódico é repetido da amostra é **perfeito** ou se estende ao longo da totalidade da amostra, **sem interrupções**. **Todas as células unitárias se interligam da mesma maneira e possuem a mesma orientação**;
- Os monocristais existem na natureza ou podem ser produzidos artificialmente;
- A **forma** é um indicativo da **estrutura cristalina**.



Materiais Monocristalinos



A **Mina Naica** e os **cristais gigantes** do **México**. Em grutas gigantes os exploradores encontraram **cristais de selenita (CaSO_4)** com **um metro** de diâmetro e **quinze metros** de comprimento. Conhecida como a **Gruta dos Cristais Gigantes**, encontra-se a **305 metros de profundidade**.

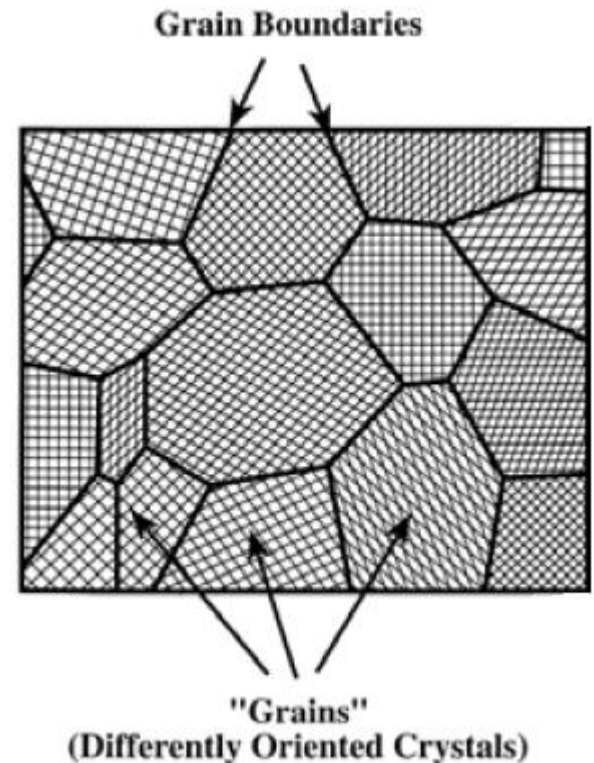
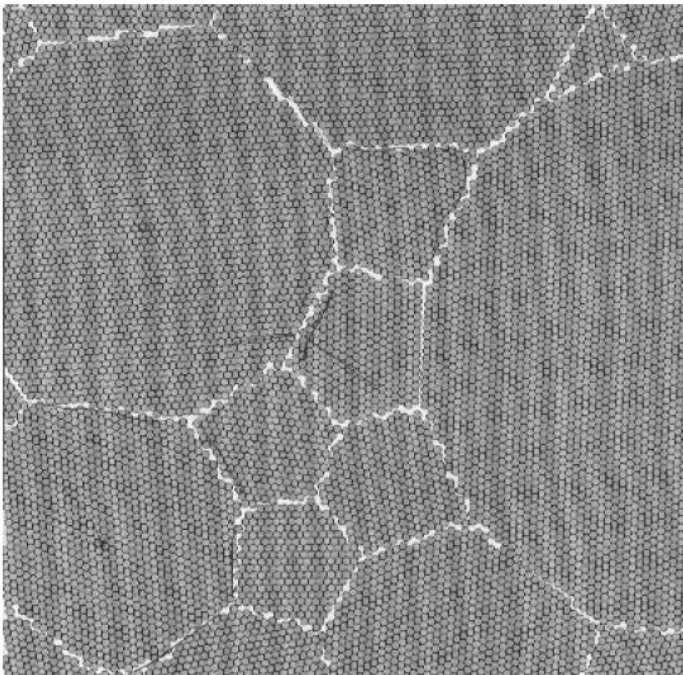




Materiais Policristalinos

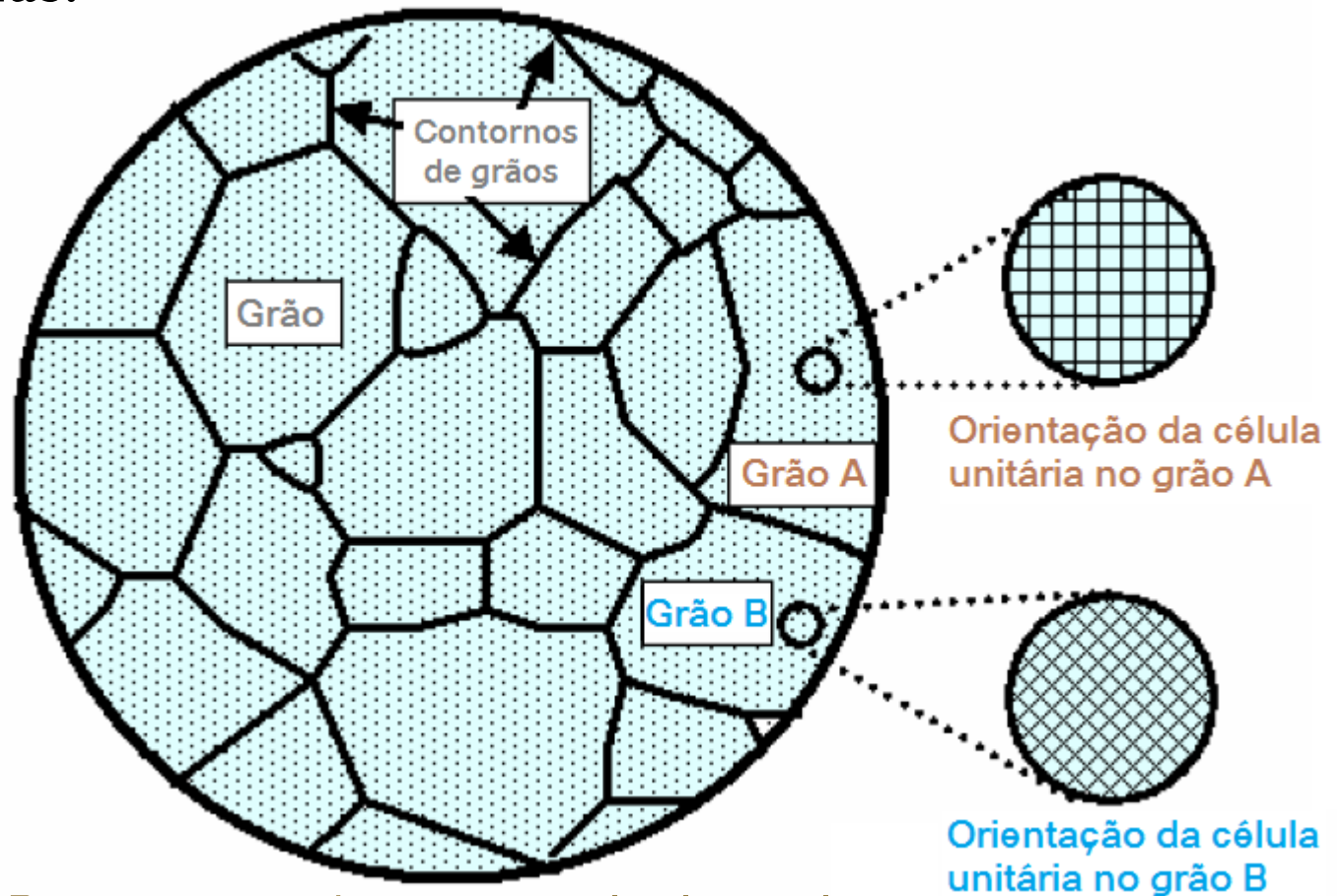
- A maioria dos sólidos cristalinos é composta por um **conjunto de cristais pequenos** ou **grãos**;
- Os monocristais ou grãos possuem **orientação cristalográfica aleatória**;
- Região onde **dois cristais** se encontram é chamada de **contorno de grão**.

Polycrystalline Materials



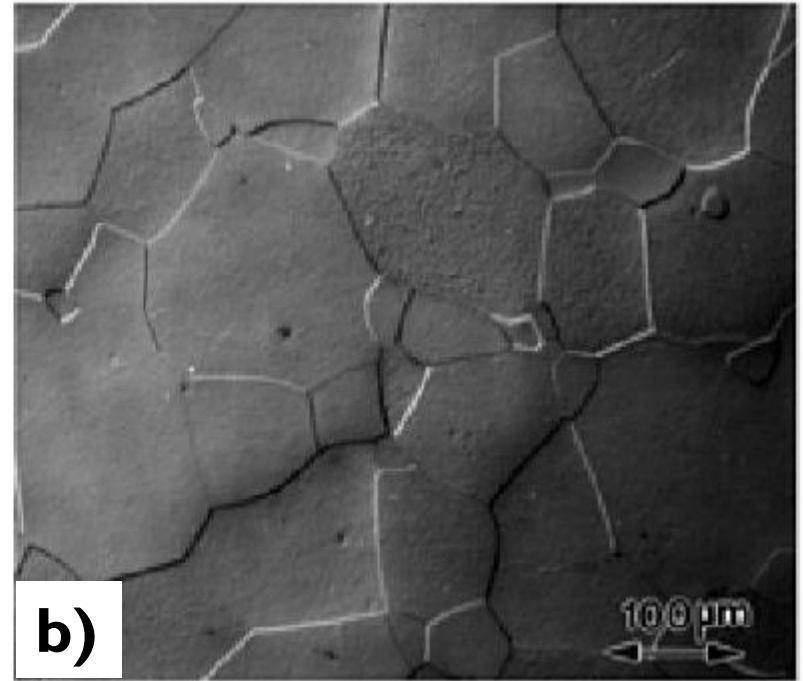
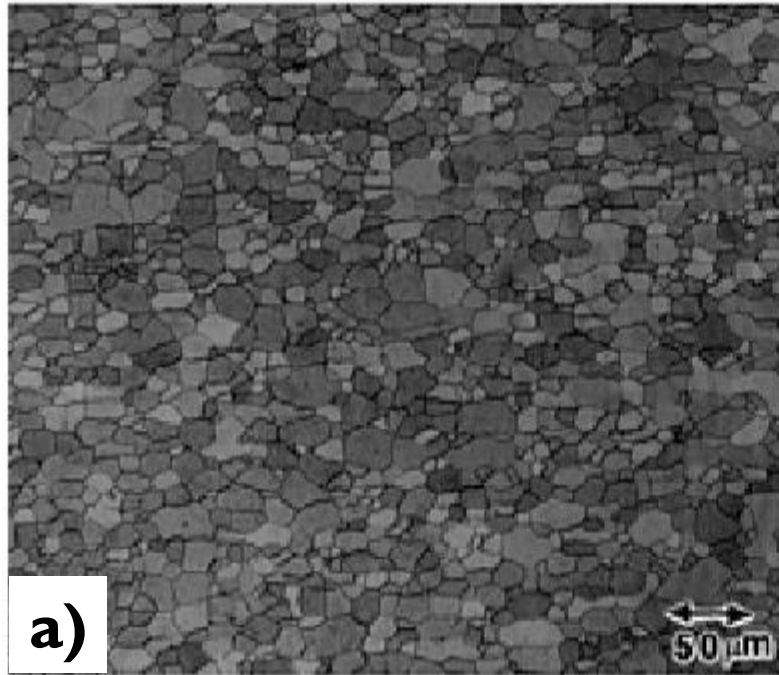
Materiais Policristalinos

- **Policristalinos:** Constituídos por vários **cristais** ou **grãos**, cada um deles com **diferentes orientações** cristalinas.



Representação de um material policristalino.

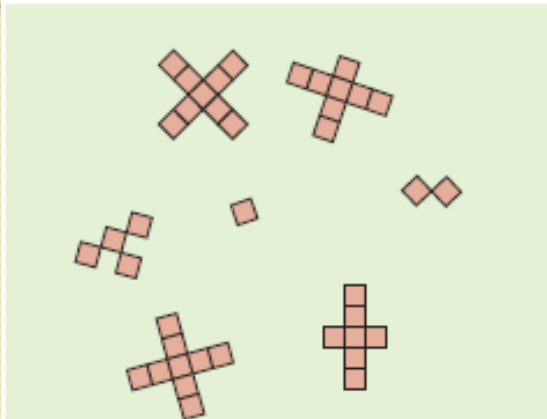
Materiais Policristalinos



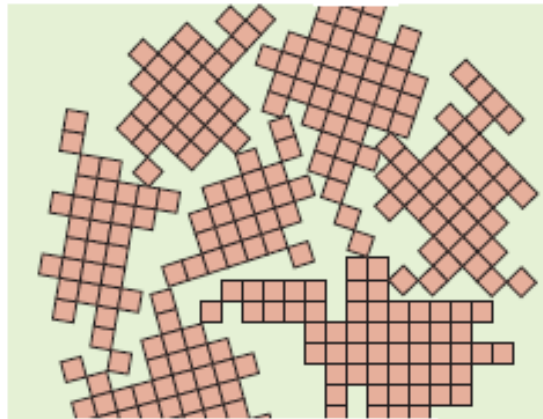
- a) Grãos em **aço** de ultra baixo teor de carbono;
- b) Grãos em **nióbio** puro.

Materiais Policristalinos

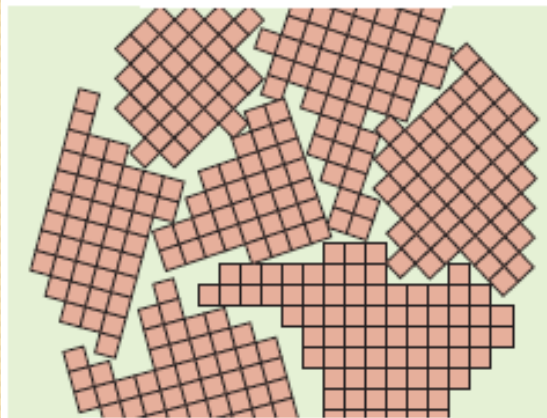
Os **contornos de grão** são regiões separando cristais de diferentes orientações em um material policristalino.



(a)



(b)



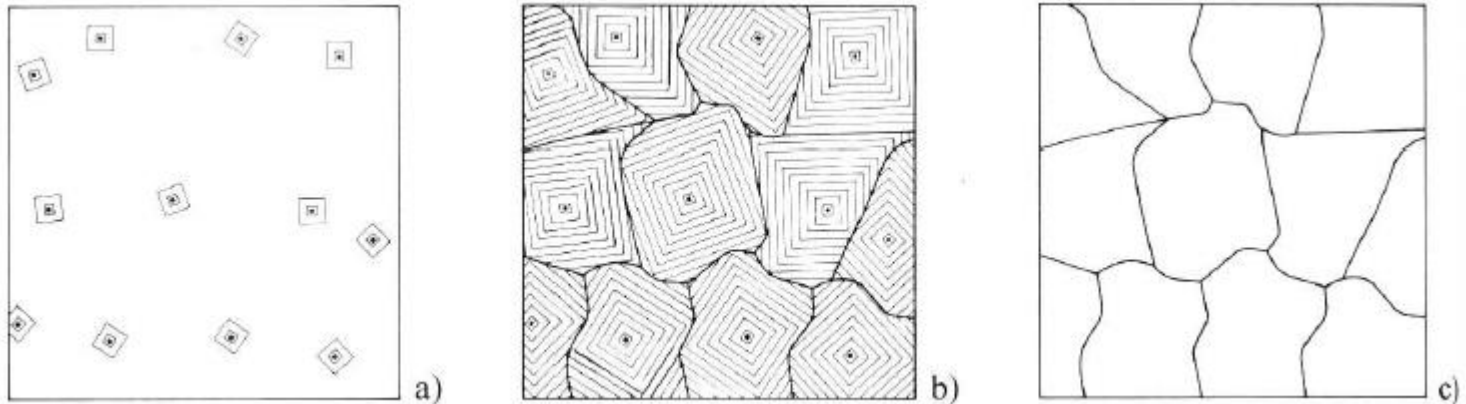
(c)



(d)

- a) **Pequenos núcleos** de cristalização (cristalito);
- b) Crescimento dos grãos pela **adição de átomos** à sua **estrutura**;
- c) À conclusão da solidificação, ocorre **desalinhamento dos átomos** onde dois **grãos se encontram**;
- d) A **estrutura granular** como apareceria em um microscópio, as linhas escuras são os **contornos de grãos**.

Materiais Policristalinos



Desenvolvimento de um **policristal** ou **agregado policristalino**:

a) Formação de vários **núcleos**, que inicialmente crescem de forma independente;

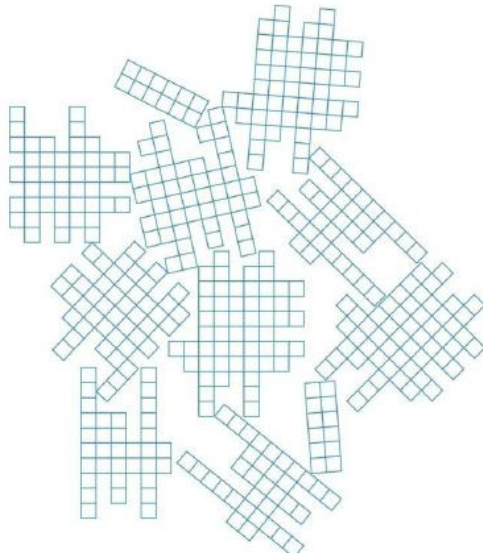
b) Colisão entre os **vários microcristais** (cristalitos, ou grãos cristalinos) originando um **agregado de cristais** com **orientações aleatórias**. A **forma regular** dos pequenos cristais individuais **não** se **manifesta** na **forma exterior** do **agregado**;

c) As fronteiras entre os **grãos cristalinos** individuais de um **policristal** podem ser **observados** ao **microscópio**. Nas **fronteiras de grão** os átomos apresentam **irregularidades** de alinhamento, aumentando o contraste a luz.

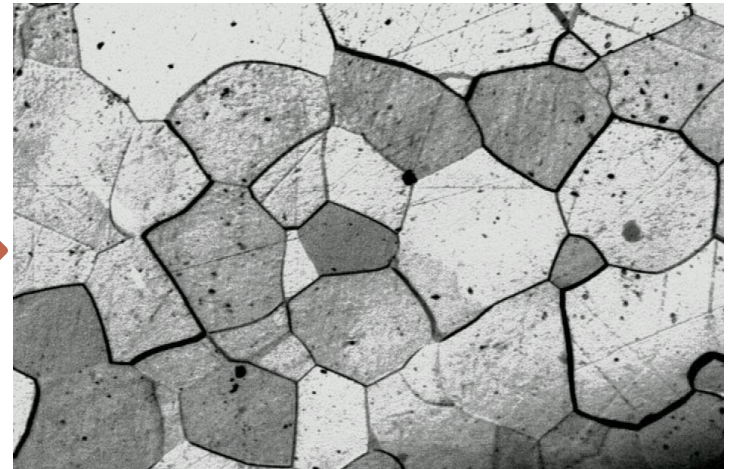
Materiais Policristalinos

Fusão

- Processo de *formação dos grãos* no material *policristalino*:



Solidificação



Formação dos contornos

Anisotropia

- As propriedades físicas dos monocristais de algumas substâncias dependem da direção cristalográfica;
- Este comportamento está associado às **diferenças** entre os **espaçamentos atômicos** ou **iônicos** em função da **direção cristalográfica**;
- Por exemplo, o **módulo de elasticidade**, **condutividade elétrica** e o **índice de refração** podem ter valores diferentes nas direções $[100]$ e $[111]$;
- Esta **direcionalidade** das **propriedades** é denominada **ANISOTROPIA**.
- As substâncias em que as **propriedades** medidas são **independentes** da **direção** da medição são **ISOTRÓPICAS**.

Anisotropia

ANISOTROPIA - Exemplo de *propriedades direcionais*:

Clivagem: Significa a forma como muitos **minerais** se **quebram paralelamente** sempre em **determinadas posições**, seguindo uma **série de planos** conforme a sua cristalização.



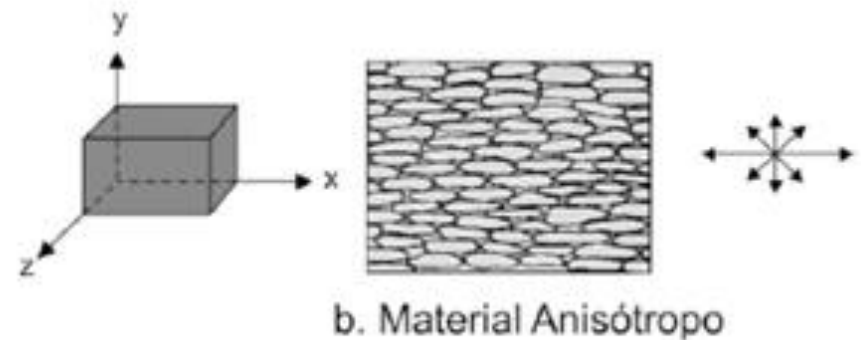
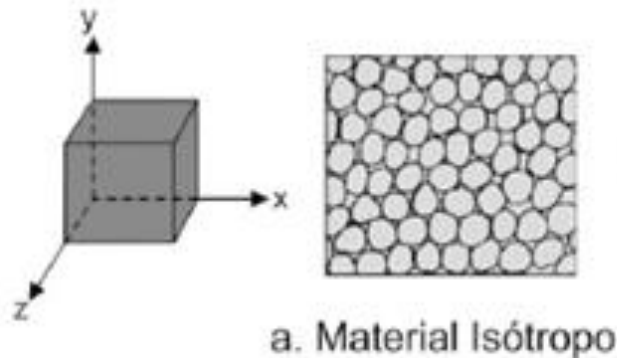
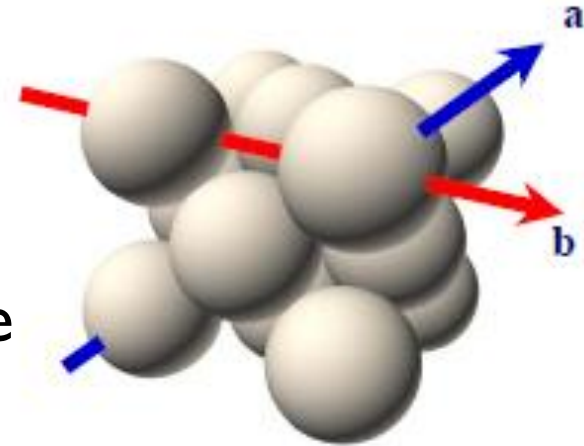
Minerais que podem apresentar superfícies de clivagem: calcita e mica.

Anisotropia

ANISOTROPIA - Exemplo de *propriedades direcionais*:

DEFORMAÇÃO PLÁSTICA

- **Deformação** em metais envolve **deslizamento** de **planos atômicos**;
- O deslizamento ocorre mais facilmente nos **planos** e **direções** de **maior densidade atômica**;



Representação do comportamento isotrópico (a) e anisotrópico (b) do módulo de elasticidade.