

**ESTRUTURA CRISTALINA**

1. I) Desenhe em cubos unitários os planos com os seguintes índices de Miller:

- a)  $(1\ 0\ \bar{1})$       b)  $(0\ \bar{3}\ 1)$       c)  $(\bar{1}\ 2\ 3)$

II) Desenhe em cubos unitários as direcções com os seguintes índices:

- a)  $[\bar{1}\ 0\ \bar{1}]$       b)  $[0\ \bar{3}\ 1]$       c)  $[\bar{1}\ 2\ 3]$

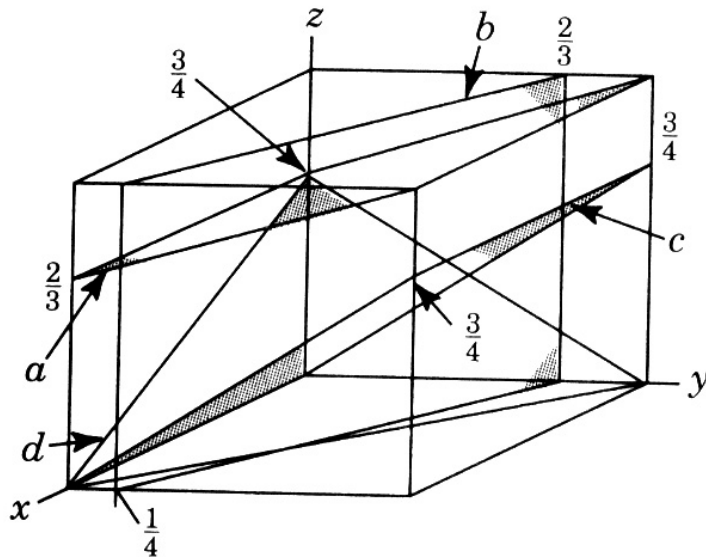
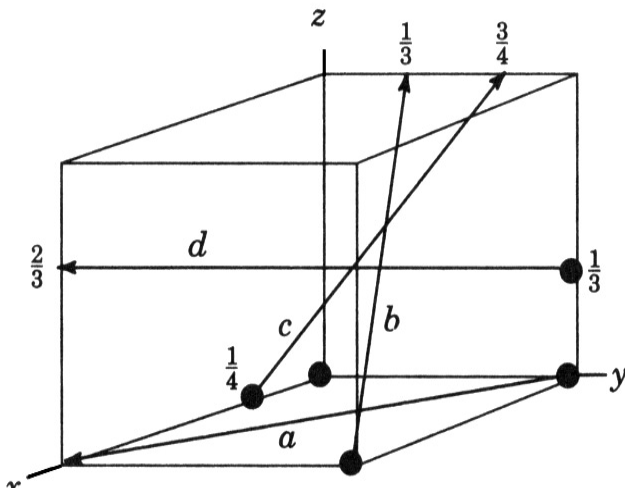
2. I) Desenhe em cubos unitários os planos com os seguintes índices de Miller:

- a)  $(1\ 2\ \bar{3})$       b)  $(01\bar{2})$       c)  $(\bar{3}\bar{3}1)$       d)  $(12\bar{2})$       e)  $(235)$

II) Desenhe em cubos unitários as direcções com os seguintes índices:

- a)  $[1\ 2\ \bar{3}]$       b)  $[01\bar{2}]$       c)  $[\bar{3}\bar{3}1]$       d)  $[12\bar{2}]$       e)  $[235]$

3. Indique os índices das direcções e dos planos representados nas figuras.



**ESTRUTURA CRISTALINA**

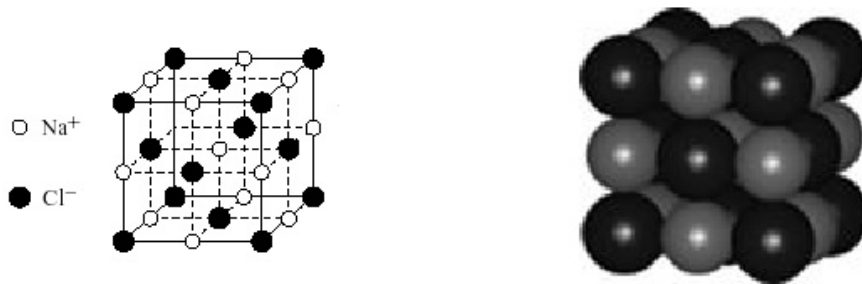
4. O tungsténio (W) apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), sendo o parâmetro da rede  $a=3,16 \text{ \AA}$ . A sua densidade é  $19,3 \text{ g/cm}^3$ .
- Faça um esboço da célula estrutural do W.
  - Calcule a massa atómica do W.
  - No esboço feito na alínea **a)** indique o plano  $(1\bar{1}0)$ .
  - Indique uma das direcções mais compactas do plano  $(1\bar{1}0)$  e escreva os respectivos índices.
5. À temperatura ambiente o alumínio(Al) apresenta estrutura cristalina cúbica de faces centradas (CFC) e o seu raio atómico é  $0,143 \text{ nm}$ . A massa atómica do Al é  $26,98 \text{ g/mol}$ .
- Faça um esboço da célula estrutural do Al à temperatura ambiente. Calcule o valor do parâmetro da rede  $a$  do Al.
  - Calcule a densidade teórica do Al.
  - No esboço feito na alínea **a)** represente o plano  $(11\bar{1})$ . Considerando que o plano do papel representa o plano referido anteriormente, faça um esboço onde mostre a disposição dos átomos nesse plano. Represente as direcções mais compactas nele contidas e indique os respectivos índices.
6. O titânio (Ti) sofre, ao ser arrefecido, uma transformação alotrópica ao atingir-se a temperatura de  $882 \text{ }^\circ\text{C}$ , passando de uma estrutura cristalina de cúbica de corpo centrado (CCC) para hexagonal compacta (HC). A  $882 \text{ }^\circ\text{C}$ , o parâmetro da rede da célula unitária CCC é  $a=0,332 \text{ nm}$ , e a célula unitária HC tem  $a=0,2950 \text{ nm}$  e  $c=0,4683 \text{ nm}$ . A massa atómica do Ti é  $47,88 \text{ g/mol}$ .
- Faça um esboço da célula estrutural do Ti à temperatura ambiente. Calcule a densidade teórica do Ti a uma temperatura ligeiramente inferior a  $882 \text{ }^\circ\text{C}$ .
  - Calcule a percentagem de variação de volume que ocorre quando a estrutura cristalina do Titânio passa de CCC para HC.
  - Indique os índices de Miller-Bravais de planos de máxima compactidade da estrutura cristalina do Ti à temperatura ambiente.
7. Desenhe em células unitárias convencionais da rede hexagonal os planos com os seguintes índices de Miller-Bravais:
- a)**  $(2\bar{1}\bar{3}2)$  **b)**  $(1\bar{2}11)$  **c)**  $(2\bar{3}10)$  **d)**  $(11\bar{1}1)$

**ESTRUTURA CRISTALINA**

8. O óxido de magnésio (MgO) é um cerâmico que apresenta a estrutura cristalina do cloreto de sódio (NaCl). Os raios iónicos do  $Mg^{2+}$  e do  $O^{2-}$  são, respectivamente, 0,078 nm e 0,132 nm. As massas atómicas do Mg e do O são, respectivamente, 24,31 g/mol e 16,00 g/mol.
- Faça um esboço da célula estrutural do MgO e determine o respectivo parâmetro da rede.
  - Calcule o factor de compacidade iónica do MgO.
  - Calcule a densidade teórica do MgO.
9. Uma amostra de Al foi irradiada utilizando raios-X de comprimento de onda  $\lambda=0,1541$  nm. Calcule o ângulo  $2\theta$  para o qual ocorreu difracção pelos planos: (dados: ver problema 5)
- a)  $\{1\ 1\ 1\}$ ; b)  $\{1\ 0\ 0\}$  ; c)  $\{2\ 0\ 0\}$  ; d)  $\{9\ 7\ 1\}$
10. Um espectro de difracção de um elemento com estrutura cristalina CFC ou CCC apresenta picos de difracção para os seguintes valores do ângulo  $2\theta$ : 25.062°, 35.698°, 44.116°, 51.405°. Foram utilizados raios-X de comprimento de onda  $\lambda=0,1541$  nm.
- Determine a estrutura cristalina do elemento.
  - Determine o parâmetro de rede do elemento.
  - Identifique o elemento.
11. A 20 °C, o tungsténio (W) apresenta estrutura cúbica de corpo centrado (CCC.), sendo o seu parâmetro de rede  $a = 0,316$  nm.
- Faça um esboço da célula estrutural do tungsténio. Diga o nome da rede e qual é o motivo.
  - Calcule o valor do raio atómico do W.
  - Calcule a densidade (massa específica) teórica do W, sabendo que a massa atómica é de 183,85 g/mol. ( $N_a = 6,02 \times 10^{23}$ ).
  - Num esboço semelhante ao da alínea a), represente o plano  $(1\ \bar{1}\ 0)$ . Calcule a respectiva densidade atómica planar (número de átomos por unidade de área). O plano  $(1\ 0\ 0)$  é mais ou menos compacto?
  - Indique quais os índices das direcções atómicas mais compactas que estejam contidas no plano  $(1\ \bar{1}\ 0)$ .
12. O molibdénio (Mo) apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), sendo o parâmetro da rede  $a=3,15$  Å. A sua densidade é 10,2 g/cm<sup>3</sup>.
- Faça um esboço da célula estrutural do Mo.
  - Calcule a massa atómica do Mo.
  - No esboço feito na alínea a) indique um plano de máxima compacidade e indique os respectivos índices de Miller. Calcule a respectiva densidade atómica planar, em átomos por mm<sup>2</sup>.

**ESTRUTURA CRISTALINA**

13. O cloreto de sódio (NaCl) apresenta a seguinte célula unitária.



a) Indique qual a rede cristalina do NaCl e qual a respectiva base (ou: motivo).

b) Calcule a densidade (massa específica) teórica do NaCl. Os raios iónicos do  $\text{Na}^+$  e do  $\text{Cl}^-$  são, respectivamente, 0,102 nm e 0,181 nm. As massas atómicas do Na e do Cl são, respectivamente, 22,99 g/mol e 35,45 g/mol. Nota: as direcções de máxima compacidade são da família  $\langle 100 \rangle$ .

c) Para cristais cúbicos, represente (em cubos diferentes) os seguintes planos cristalográficos:

i)  $(2 \bar{1} 0)$     ii)  $(3 \ 1 \ 2)$ .

d) Para cristais hexagonais, represente (em prismas diferentes) os seguintes planos cristalográficos:

i)  $(1 \bar{1} \ 0 \ 1)$     ii)  $(1 \ 1 \ \bar{2} \ 0)$ .

14. A generalidade dos metais usados em aplicações de engenharia apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (c.c.c.), cúbica de faces centradas (c.f.c.) ou hexagonal compacta (h.c.).

- a) Faça um esboço da célula unitária convencional da rede cúbica de corpo centrado (c.c.c.).
- b) Determine o factor de compacidade atómica da estrutura cúbica de faces centradas (c.f.c.), i.e., o quociente entre o volume de um átomo e o volume ocupado em média por átomo. Justifique.
- c) Para cristais cúbicos, represente –se possível– os seguintes planos cristalográficos. Justifique.

i)  $(1 \bar{2} \ 0)$     ii)  $(3 \ 1 \ 2)$     iii)  $(-1 \ 0,333 \ 2)$

d) Para cristais cúbicos, represente as seguintes direcções cristalográficas. Justifique.

i)  $[1 \ \bar{2} \ 0]$     ii)  $[1 \ 2 \ 1]$

e) Para cristais hexagonais, represente –se possível– os seguintes planos cristalográficos. Justifique.

i)  $(1 \ 0 \ \bar{1} \ 1)$     ii)  $(0 \ 1 \ 1 \ 1)$     iii)  $(1 \ \bar{2} \ 1 \ 0)$

(Nota: nas alíneas c)-e), por motivos de clareza, é conveniente representar cada um dos planos/direcções individualmente, i.e., esboçar apenas um plano ou direcção em cada célula unitária).

15. O vanádio (V) apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), sendo o raio atómico  $R = 1,32 \text{ \AA}$ . A sua massa específica (densidade) é  $5,96 \text{ g/cm}^3$ .

- a) Faça um esboço da célula estrutural do V e indique o respectivo motivo.
- b) Calcule a massa atómica do V. [ $N. \text{ Avogadro} = 6.023 \times 10^{23}$ ]
- c) No esboço feito na alínea a) (ou num esboço semelhante) indique um plano de máxima compacidade e indique os respectivos índices de Miller. Calcule a respectiva densidade atómica planar, em átomos por  $\text{mm}^2$ .

**ESTRUTURA CRISTALINA**

16. O ferro apresenta uma transformação alotrópica a 912 °C, passando (em arrefecimento) de uma estrutura CFC para uma estrutura CCC.

- a) Faça esboços: i) da célula convencional da rede cristalina do Fe a 913 °C;  
ii) da célula estrutural do Fe a 911 °C.

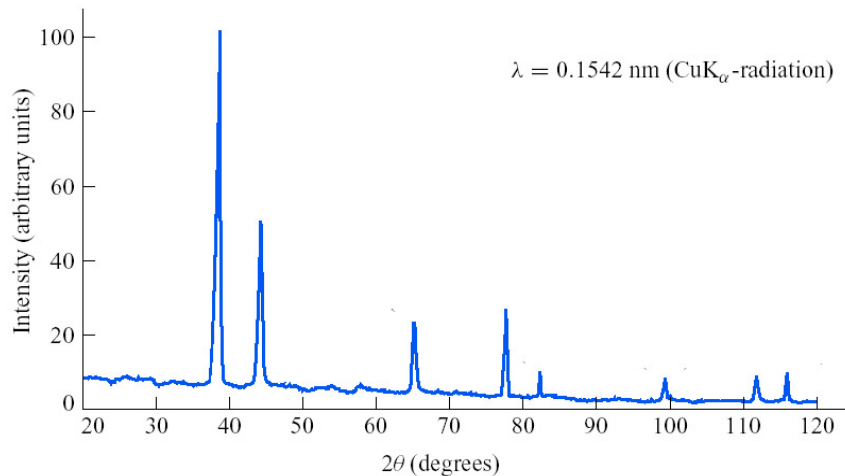
b) Considere uma peça de ferro com 10 cm<sup>3</sup> de volume a 913 °C. Calcule o seu volume a 911 °C. Considere apenas a variação de volume associada à transformação alotrópica (ou seja, admita que a contracção térmica é desprezável e que o raio atómico se mantém constante).

c) Para células unitárias cúbicas, represente\* se possível as seguintes direcções cristalográficas:

i)  $\left[ \bar{1} 0 2 \right]$     ii)  $\left[ 1 \frac{\pi}{2} 2 \right]$     iii)  $\left[ 1 \bar{2} \infty \right]$ .    iv)  $[ 2 1 2 ]$ .    (\*de preferência em cubos diferentes)

17. a) Considere o difractograma representado na figura. Poderá o metal que foi analisado ter estrutura CCC ou CFC? Justifique. Sabe-se que para a estrutura CCC os planos difractores (de índices não necessariamente reduzidos aos menores inteiros) são aqueles cuja soma dos índices é um número par, ao passo que para a estrutura c.f.c. os planos difractores são aqueles cujos índices de Miller têm a mesma paridade.

b) Utilize a lei de Bragg:  $n \lambda = 2 d_{hkl} \text{sen}(\theta)$ , bem como as conclusões da alínea anterior para calcular o parâmetro de rede do elemento. Nota: para o sistema cúbico  $d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$



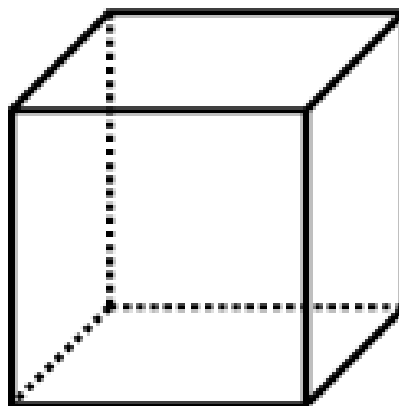
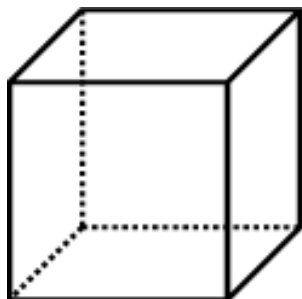
**ESTRUTURA CRISTALINA**

18. O ferro apresenta uma transformação alotrópica a 912 °C, passando (em arrefecimento) de uma estrutura CFC para uma estrutura CCC.

a) Usando os cubos unitários fornecidos no enunciado, faça esboços:

i) da célula convencional da rede cristalina do Fe a 911 °C;

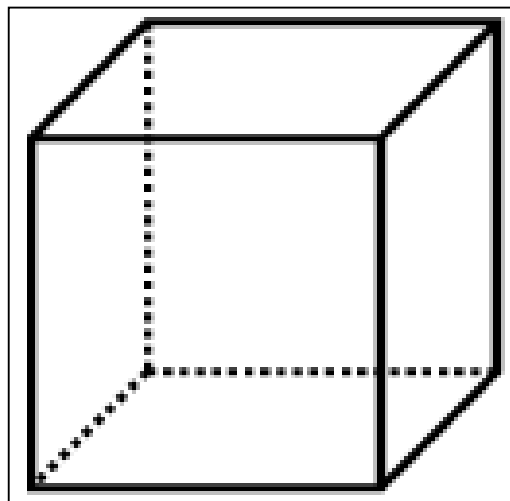
ii) da célula estrutural do Fe a 913 °C.



b) Calcule a massa específica (densidade) do Fe à temperatura ambiente, sabendo que o raio atômico é  $R = 0.124 \text{ nm}$  e que a massa atômica  $M$  é  $55.85 \text{ g/mol}$ . [ $N^\circ \text{ Avogadro} = 6.023 \times 10^{23}$ ]

c) Represente, na célula unitária fornecida, os planos atômicos de índices de Miller:

- i)  $(1\ 4\ 0)$ ;
- ii)  $(\bar{3}\ \bar{2}\ 1)$ ;
- iii)  $(1\ \bar{2}\ 1\ 1)$ ;
- iv)  $[2\ 1\ 0]$ ;
- v)  $[0\ \infty\ 1]$ ;
- vi)  $(\bar{3}\ 1\ 0)$ ;
- vii)  $(\bar{2}\ \bar{4}\ 5)$ .



d) Calcule quantos átomos de Fe existem por mm ao longo de uma direção da família  $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$  (à temperatura ambiente).

e) Com base na lei de Bragg  $n \lambda = 2 d \text{ sen}(\theta)$ , indique como poderia usar o 1º e 7º picos de difracção para distinguir resultados de ensaios de difracção de raios-X feitos a amostras de materiais que hipoteticamente poderiam assumir estruturas CS ou CCC. Como facilmente se pode verificar, ao usar os dois primeiros picos, ambas as estruturas conduzem ao resultado:

$$\frac{\text{sen}^2(\theta_A)}{\text{sen}^2(\theta_B)} = \frac{1}{2}, \text{ daí a necessidade de usar o } 7^\circ \text{ pico.}$$

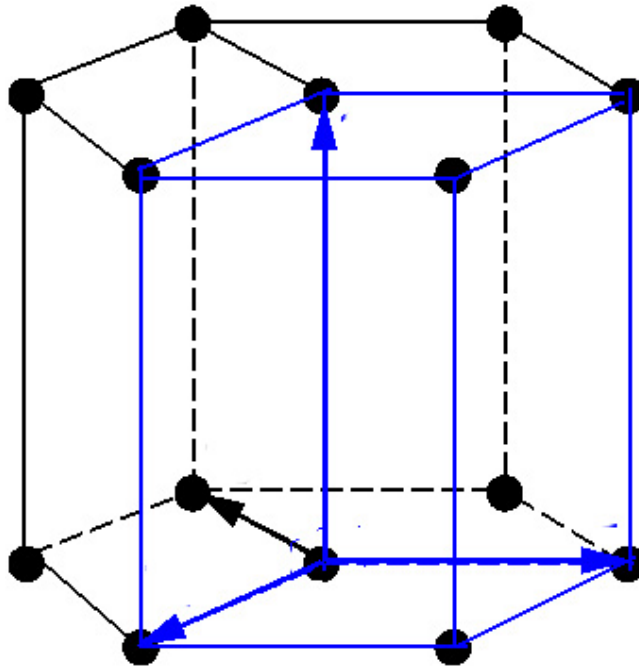
Sugestão: numa tabela, ordene os planos cristalográficos possíveis (incluindo os que cujos índices não estão reduzidos aos menores inteiros) por ordem de  $h^2+k^2+l^2$  e vá identificando os planos difractores. Sabe-se que para a estrutura CS todos os planos são planos difractores, ao passo que para a CCC, são difractores os planos para os quais  $h+k+l = \text{número par}$ . Nota: para o sistema cúbico:  $d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$

**ESTRUTURA CRISTALINA**

19. O titânio sofre, ao ser arrefecido, uma transformação alotrópica ao atingir-se a temperatura de 882 °C, passando de uma estrutura cristalina de cúbica de corpo centrado (CCC) para hexagonal compacta (HC). Imediatamente antes da transformação, o parâmetro da rede da célula unitária CCC é  $a=0,332$  nm. Para a célula unitária HC (a 20 °C):  $a=0,2950$  nm,  $c=0,4683$  nm.  $M(\text{Ti}) = 47,88$  g/mol  $[N_{\text{Avog}} = 6.023 \times 10^{23}]$

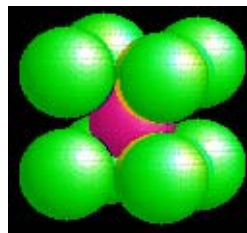
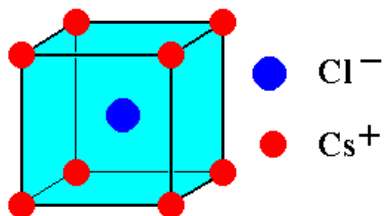
- a) Faça esboços das células estruturais do Ti a: **i)** 883 °C; **ii)** 881 °C.
- b) Calcule a massa específica (densidade) do Ti a uma temperatura ligeiramente superior a 882 °C.
- c) Calcule, em unidades SI, a densidade atômica planar referente aos planos  $\{0\ 0\ 0\ 1\}$  do Ti..
- d) Considere um monocristal de Ti, facetado, em que uma das suas faces é precisamente o plano  $(0\ 0\ 0\ 1)$ . Sabendo que essa face tem as dimensões deste rectângulo  $\square$ , estime quantos átomos se encontrariam nessa superfície.
- e) Para cristais hexagonais, represente (se possível) na figura os seguintes planos cristalográficos:

**i)**  $(1\ 1\ \bar{2}\ 0)$     **ii)**  $(1\ \bar{1}\ 0\ 2)$     **iii)**  $(2\ 0\ \bar{1}\ 1)$ .



**ESTRUTURA CRISTALINA**

20. a) O cloreto de cézio (CsCl) apresenta a seguinte célula unitária.



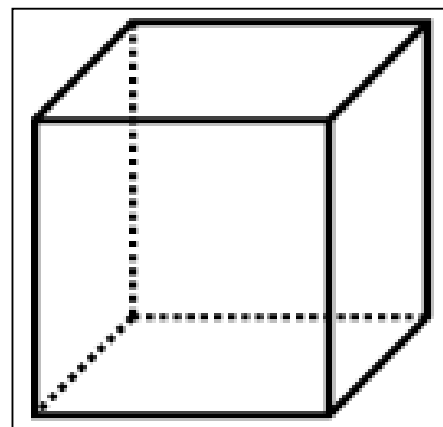
Indique qual a rede cristalina do CsCl e qual a respectiva base (ou: motivo).

b) Calcule a densidade (ou: massa específica) do CsCl. [*N. Avogadro* = 6.023 x 10<sup>23</sup>]

Os raios iónicos do Cs<sup>+</sup> e do Cl<sup>-</sup> são, respectivamente, 0,170 nm e 0,181 nm.

As massas atómicas do Cs e do Cl são, respectivamente, 132,9 x 10<sup>-3</sup> kg/mol e 35,45 10<sup>-3</sup> kg/mol.

c) Represente, na célula unitária fornecida, as direcções atómicas de índices: **i)** [2 2 1]; **ii)** [1̄ 1̄ 2].



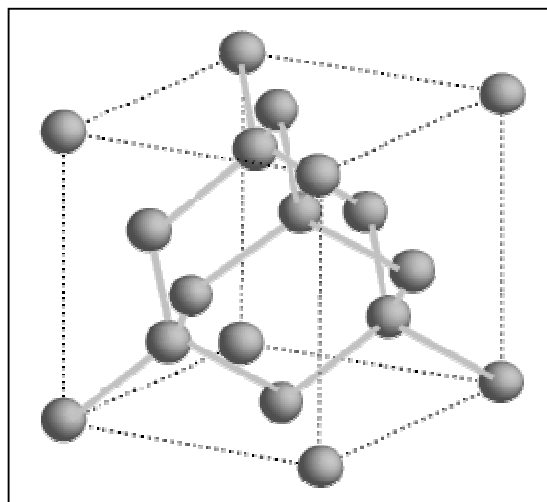
d) Calcule, em função do parâmetro de rede, **a**, a densidade atómica planar referente aos planos {1 1 0} para a estrutura CCC.

e) Calcule, em função do parâmetro de rede, **a**, a densidade atómica linear referente às direcções <1 1 0> para a estrutura CFC.

f) Considere que na seguinte linha assentavam os átomos considerados na alínea anterior: ————, i.e. átomos pertencentes a uma direcção <1 1 0>. Estime o valor do número de átomos ali presentes. Para tal, assuma um valor razoável para o parâmetro de rede.

21. Considere a célula estrutural do silício, em que cada esfera representa um átomo de Si. Sabe-se que o Si tem a chamada estrutura do diamante.

a) Indique qual a base ou motivo desta estrutura. Justifique. (Nota: Sabe-se que a respectiva rede cristalina é a rede CFC). Indique também a razão pela qual esta estrutura se denomina “estrutura do diamante”.



b) Calcule a massa específica (densidade) do Si, sabendo que o parâmetro de rede é  $a = 0.543$  nm e que a massa atómica  $M$  é 28.085 g/mol. [*Nº Avogadro* = 6.023 x 10<sup>23</sup>]



**ESTRUTURA CRISTALINA**

22. Indique os índices das direcções e dos planos representados nas figuras.

