



Estruturas Cristalinas **Cássio Aurélio Suski**

Objetivos

Este texto foi escrito para auxiliar você a:

- compreender os conceitos de estruturas cristalinas, bem como suas características e variedades de padrões em que se apresentam e organizam.

Iniciando o estudo

Neste material, você encontra conceitos sobre estruturas cristalinas e seus principais tipos.

1 Estruturas Cristalinas

A ordenação atômica varia de material para material de acordo com as ligações envolvidas e os processos de fabricação, e se divide em dois grupos:

- amorfos – são materiais que não possuem ordenação espacial a longa distância no nível atômico e são conseguidos pelo resfriamento de materiais derretidos, exemplo: vidro. São algumas vezes designados como líquidos super-resfriados;
- cristalinos – são materiais que apresentam ordenação especial regular com ordenação a longas distâncias no nível atômico.

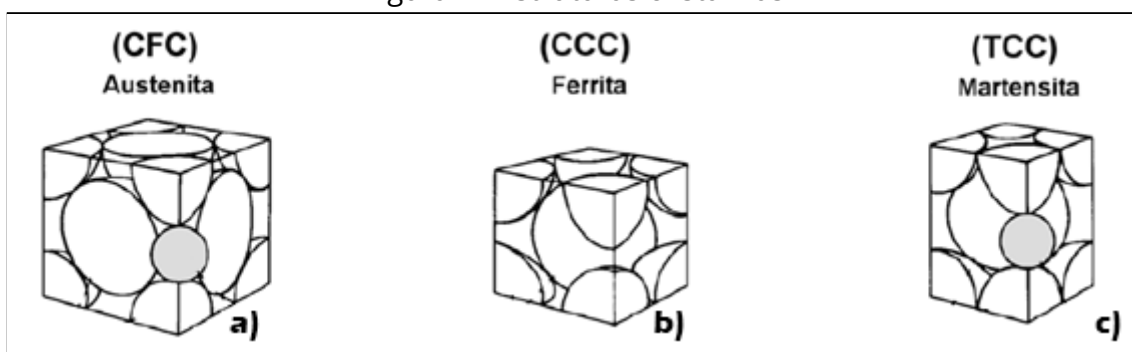
A estrutura cristalina pode ser convenientemente representada por pequenos grupos de átomos que descrevem o arranjo atômico tridimensional do cristal, chamados de células unitárias.

Na natureza é possível encontrar 14 tipos diferentes de células unitárias,

também designadas como rede de Bravais. A estrutura depende da temperatura e afeta, dentre outros fatores, densidade, dureza e rigidez do material.

Uma célula unitária indica o padrão repetitivo que pequenos grupos de átomos assumem durante a solidificação. Nos metais, a ocorrência principal é das células (Figura 1) (a) cúbicas de corpo centrado (CCC), (b) cúbica de face centrada (CFC) e (c) hexagonal compacta (HC).

Figura 1 - Estruturas cristalinas



Fonte: Mariot Cutelaria Artesanal, (2022).

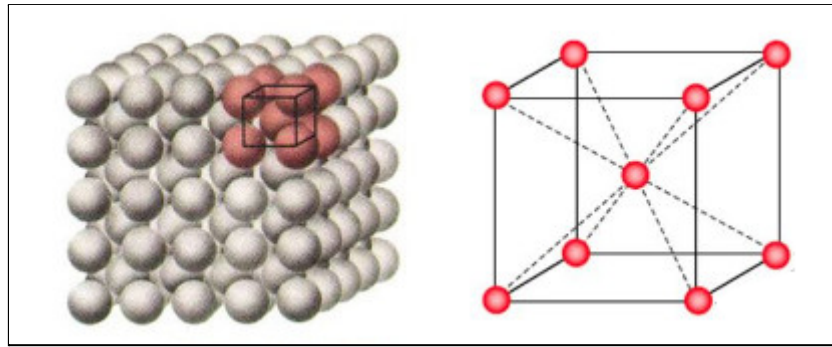
1.1 Estrutura Cristalina CCC

Na estrutura cristalina cúbica de corpo centrado, a célula unitária possui formato de um cubo e os átomos estão localizados nos vértices do cubo (um átomo por vértice) e um átomo localizado no centro do cubo, conforme indicado na figura 2.

Esta é uma célula unitária de uma estrutura cúbica de corpo centrado. Como visto, ela contém um átomo em cada vértice do cubo e um átomo em seu centro.

Sendo assim, cada célula unitária contém dois átomos (8 dos vértices que estão compartilhados com mais 7 outras células + 1 átomo do centro: $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$).

Figura 2 - Estrutura Cúbica de corpo centrado



Fonte: Oliveira (2017).

Possui 2 átomos por célula unitária: $(1/8 \times 8) + 1 = 2$.

Considerando que o número de coordenação seja o número de vizinhos mais próximos de um átomo, temos para a estrutura cúbica de corpo centrado, o número de coordenação 8.

Definindo o fator de empacotamento como a relação entre o volume ocupado pelos átomos e o volume da célula unitária, temos:

$$\text{fator de empacotamento} = \frac{\text{volume de 1 átomo (esfera)} * 2 \text{ átomos}}{\text{volume do cubo}}$$

Portanto, podemos correlacionar o parâmetro da célula unitária **a**, com o raio atômico **r**. Uma vez que os átomos que estão em contato pontual sejam aqueles ao longo das diagonais do cubo, a estrutura cúbica de corpo centrado é igual a 0,68.

- Exemplos de metais CCC: Ferro α (Fe), Cromo (Cr), Molibdênio (Mo), Tântalo (Ta), e Tungstênio (W)

- N° de coordenação (que representa o n° de vizinhos mais próximos): 8

- N° de átomos no interior do reticulado: $(8 \times 1/8 + 1) = 2$

- Parâmetro do reticulado $a = 4.R$

$$\sqrt{3}$$

1.2 Estrutura Cristalina TCC

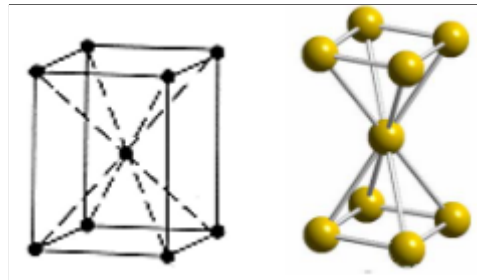
Estrutura Tetragonal de corpo centrado (TCC): na fabricação do aço, Martensita é uma fase metaestável composta por ferro que está supersaturada com carbono e que é o produto de uma transformação sem difusão (atérmica) da austenita.

É formada quando ligas ferro - carbono austenitizadas são resfriadas rapidamente (como no tratamento térmico de têmpera). É uma estrutura monofásica (TCC), tetragonal de corpo centrado, porque se encontra em equilíbrio, resultante de uma transformação sem difusão da austenita.

Na estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado, a célula unitária possui formato tetraédrico (prisma reto de base quadrada), onde os átomos estão localizados nos vértices deste tetraedro (um átomo por vértice) e um átomo localizado no centro do tetraedro, conforme indicado na (Figura 3).

A célula unitária tetraédrica se difere da estrutura cúbica por possuir um dos eixos (eixo c) alongado.

Figura 3 - Estrutura Cristalina TCC



Fonte: Silva (2008).

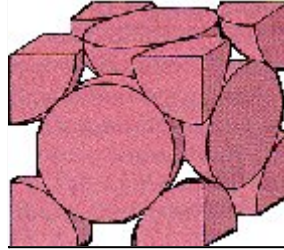
1.3 Estrutura cristalina CFC

Esta é uma célula unitária de uma estrutura cúbica de face centrada, cfc (figura 4). Como visto, ela contém um átomo em cada vértice do cubo além de um átomo em cada face do cubo.

Logo, cada célula unitária contém quatro átomos (8 dos vértices, que

estão compartilhados com mais 7 outras células + 6 átomos das faces, que estão compartilhados, cada qual, com outra célula $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$).

Figura 4 - Estrutura Cúbica de face centrada



Fonte: Cimm ([s.d.])

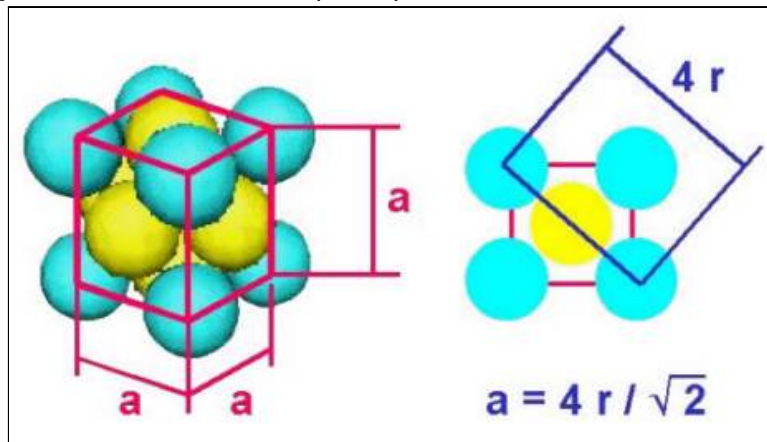
Número de coordenação é o número de vizinhos mais próximos de um átomo. Logo, o número de coordenação da estrutura cúbica de face centrada é 12.

Se definirmos fator de empacotamento como sendo a relação entre o volume ocupado pelos átomos e o volume da célula unitária, temos:

- Exemplos de metais CFC: Alumínio (Al), Cobre (Cu), Ouro (Au), Chumbo (Pb), Níquel (Ni), Platina (Pt), Prata (Ag);
- N° de coordenação: 12 - N° de átomos no interior do reticulado: 4 ($8 \times 1/8 + 6 \times 1/2$);
- Fator de empacotamento atômico: 0,74 (74% do volume da célula é ocupado por átomos);
- Parâmetro do reticulado: $a = 2 * R * \sqrt{2}$

Observando a figura 5, pode-se correlacionar o parâmetro da célula unitária **a**, com o raio atômico **r**. Uma vez que os átomos do vértice estão em contato pontual com o átomo do centro em cada face, temos para a estrutura cúbica de face centrada:

Figura 5 - Relação entre o volume ocupado pelos átomos e o volume da célula unitária.



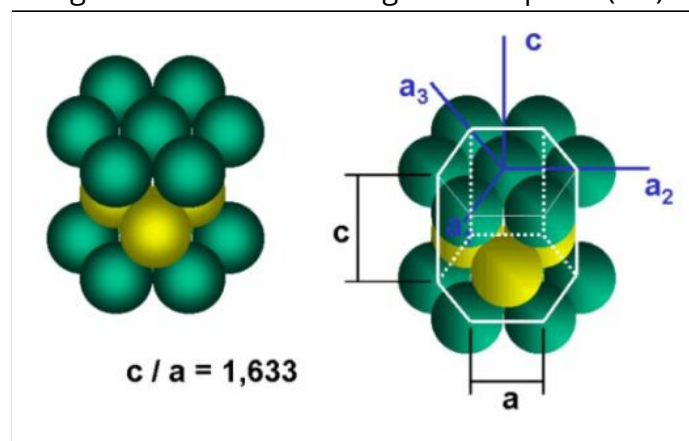
Note que 0,74 é o maior valor que pode ter o fator de empacotamento quando se considera um modelo de esferas de mesmo diâmetro.

Fonte: Cimm ([s.d.])

1.4 Estrutura cristalina HC (Hexagonal Compacta)

A célula unitária do arranjo estrutural HC é formada por dois hexágonos sobrepostos que apresentam um átomo em cada vértice e um átomo nos seus centros, e também por um plano intermediário de três átomos, conforme mostrado na Figura 6.

Figura 6 - Estrutura hexagonal compacta (HC)



Fonte: Cimm ([s.d.])

Esta estrutura é caracterizada pelo fato de que cada átomo de uma dada camada está diretamente abaixo ou acima dos interstícios formados entre três

átomos das camadas adjacentes.

Cada átomo apresenta doze vizinhos mais próximos; logo, o seu número de coordenação (NC) é igual a 12.

Os parâmetros da rede (a, c) são dados por:

$$a = 2r$$

$$c \approx 1,633a$$

O fator de empacotamento atômico (FE) é dado por:

$$N = (1/6 \text{ átomo / vértice}) \cdot 12 \text{ vértices} + (1/2 \text{ átomo / face}) \cdot 2 + 3 \text{ átomos} = 6$$

$$V_A = 4/3 \pi r^3$$

$$V_C = 3 a^2 c \cdot \cos 30^\circ = 3 (2r)^2 (1,633 \cdot 2r) \sqrt{3} / 2 = 19,596r^3 \sqrt{3}$$

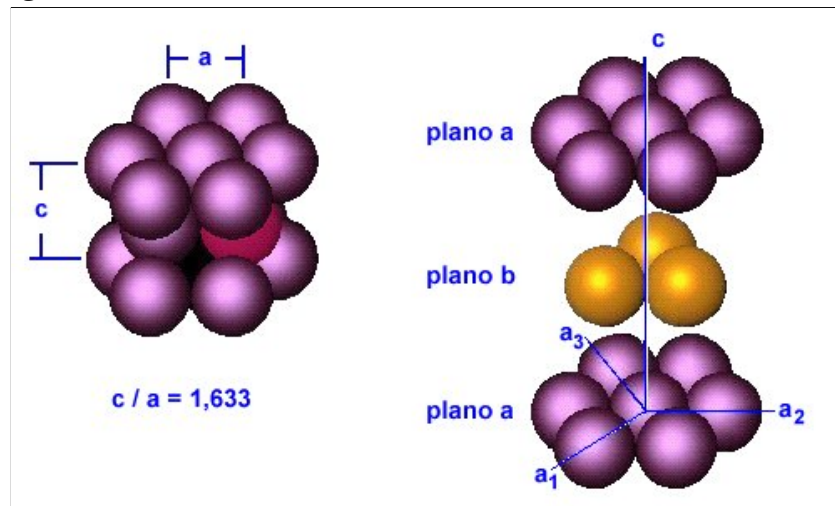
$$FE = \frac{6 \cdot 4/3 \pi r^3}{19,596r^3 \sqrt{3}} = 0,74$$

Em outras palavras, 74% desta célula unitária são efetivamente preenchidos por átomos. Como essa estrutura é compacta, diversos metais solidificam segundo a mesma, como: magnésio (Mg), zinco (Zn), cádmio (Cd), cobalto (Co), titânio (Ti) e berílio (Be).

Cálculo do parâmetro c

O parâmetro **c** da célula hexagonal compacta pode ser calculado a partir dos esquemas mostrados na Figura 7.

Figura 7 - Posicionamento de átomos na célula da estrutura HC



Fonte: Cimm ([s.d.])

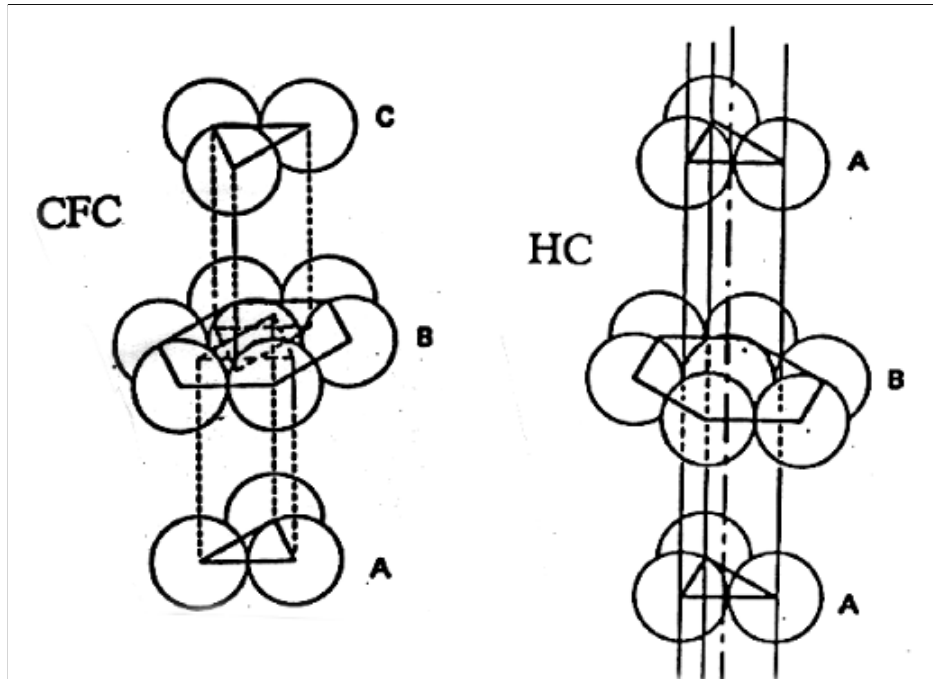
A figura 7 mostra que a célula unitária de uma estrutura HChc pode ser visualizada como um hexágono regular cujos planos superior e inferior contém 7 átomos. Entre estes planos está um meio-hexágono de 3 átomos.

2 Sequência de Empilhamento

A estrutura cúbica de face centrada e a estrutura hexagonal compacta têm o mesmo fator de empacotamento atômico ($FE = 0,74$), o que é esperado, pois ambas possuem o mesmo número de coordenação ($NC = 12$).

Os arranjos atômicos de planos cristalinos na direção da diagonal do cubo da estrutura CFC, e na direção perpendicular à base no caso da HC, são de mesma natureza; o que muda entre as duas estruturas é o posicionamento dos átomos destes planos em relação a um ponto de referência. Os planos do cristal HC apresentam apenas duas variações de posicionamento e, desta forma, obedecem a uma sequência do tipo "ABABAB...", já os cristais CFC apresentam três variações no posicionamento de planos exibindo, assim, a sequência "ABCABCABC...". A Figura 8 representa essas sequências de empilhamento.

Figura 8 - Sequências de empilhamento de planos para as estruturas HC (imagem à esquerda) e CFC (imagem à direita)



Fonte: Van Vlack, 1970.

Concluindo o estudo

Você estudou, neste material, conceitos sobre estruturas cristalinas e seus principais tipos. Além disso, você encontrou informações sobre características e variedades de padrões em que as estruturas cristalinas se apresentam e se organizam. Espera-se que você tenha conseguido obter informações suficientes para entender melhor a respeito das estruturas cristalinas e seus componentes.

Referências

CIMM. **Defeitos em Linha nos Materiais Cristalinos**. ([s.d.])a. Disponível em: https://www.cimm.com.br/portal/material_didatico/6421-defeitos-em-linha-nos-materiais-cristalinos. Acesso em: 18 nov. 2021.

Mariot Cutelaria Artesanal. Disponível em: <https://cutelariamariot.com/tratamentos-termicos/>. Acesso em: 13 out. 2021.

OLIVEIRA, Valter Vander de. **Processo de Fundição**. Joinville: IFSC, 2010.

Disponível em: http://joinville.ifsc.edu.br/~valterv/Processos_de_Fabricacao/aula_2_Processo_de_Fundicao.pdf . Acesso em: 10 fev. 2017.

OLIVEIRA, Valter Vander de. **Tecnologia de Fabricação**: Deformação dos Materiais. Joinville: IFSC, 2011. Disponível em: http://joinville.ifsc.edu.br/~valterv/Tecnologia_de_Fabricacao/Aula%203_Estrutura%20cristalina.pdf . Acesso em: 14 fev. 2017.

SILVA, Angelus G. P. da . **Estrutura e Propriedades de Materiais Cerâmicos** Capítulo IV: Estruturas Atômicas, 2008.

SILVA, Antonio Carlos da; AVANZI, Caio. **Habilitação Técnica em Mecânica**: Tecnologia dos Materiais e Industrial. São Paulo: Fundação Padre Anchieta, 2011. (Vol. II).

SILVA, Décio Cardoso da. **Materiais para Construção Mecânica**. São Paulo: Centro Paulo Souza, 2010. Disponível em: <http://www.ebah.com.br/content/ABAAA4SYAB/apostila-teoria-materiais-1#> Acesso em: 2 mar. 2017.

OLIVEIRA, José Rodolfo. **Metalurgia**: materiais e processos de fabricação. Materiais e Processos de Fabricação. 2017. Disponível em: <https://www.linkedin.com/pulse/metalurgia-materiais-e-processos-de-fabrica%C3%A7%C3%A3o-jos%C3%A9-rodolfo-oliveira/?originalSubdomain=pt>. Acesso em: 24 fev. 2022

VAN VLACK, Lawrence H. **Princípios de Ciência dos Materiais**. São Paulo: Edgard Blücher, 1970.