Materiais

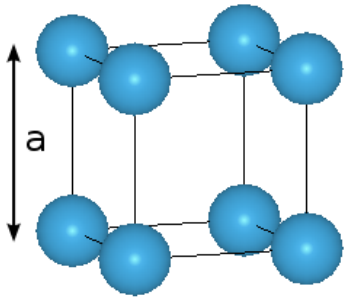
Problemas

José Carlos Pereira
Carlos.pereira@ist.utl.pt
Tel. 3938
Sala 5-1.5A (5º Piso Torre Química)

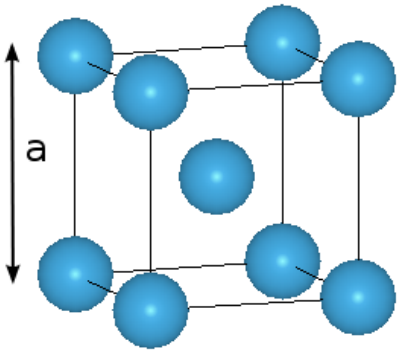
Lisboa, 2019

I Problemas Estrutura Cristalina

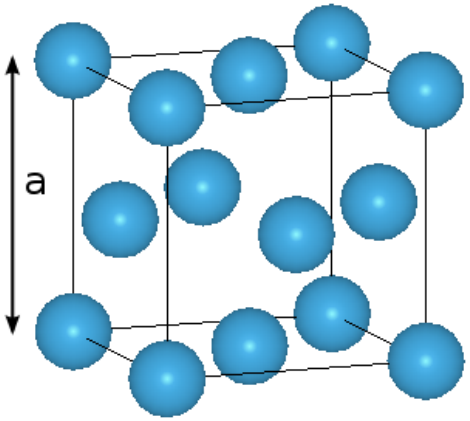
Problema 1 Determine o factor de compacidade V_o/V_t para as estruturas cs, ccc e cfc.



$$\begin{cases} a = 2R \\ \dfrac{V_o}{V_t} = \dfrac{(8\times\frac{1}{8})\,\frac{4}{3}\,\pi\,R^3}{a^3} = \dfrac{\frac{4}{3}\,\pi\,R^3}{(2\,R)^3} = \dfrac{\pi}{6} = 0.524 \end{cases}$$



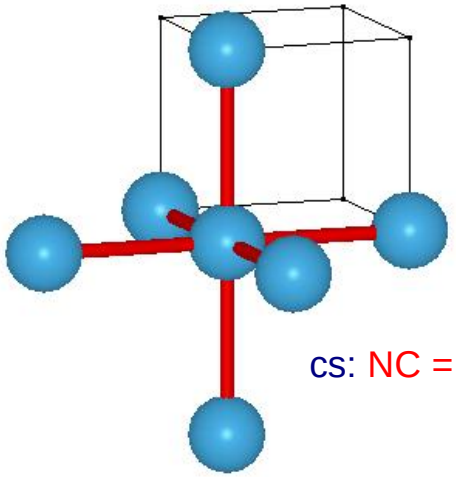
$$\begin{cases} \sqrt{3}\,a = 4R \\ \dfrac{V_o}{V_t} = \dfrac{(8\times\frac{1}{8}+1)\,\frac{4}{3}\,\pi\,R^3}{a^3} = \dfrac{\frac{8}{3}\,\pi\,R^3}{(\frac{4\,R}{\sqrt{3}})^3} = \dfrac{\pi\,\sqrt{3}}{8} = 0.680 \end{cases}$$



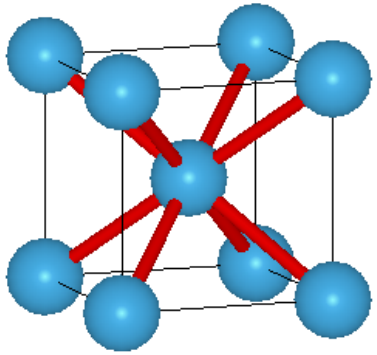
$$\begin{cases} \sqrt{2}\,a = 4R \\ \dfrac{V_o}{V_t} = \dfrac{(8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2})\,\frac{4}{3}\,\pi\,R^3}{a^3} = \dfrac{\frac{16}{3}\,\pi\,R^3}{(\frac{4\,R}{\sqrt{2}})^3} = \dfrac{\pi\,\sqrt{2}}{6} = 0.740 \end{cases}$$

I Problemas Estrutura Cristalina

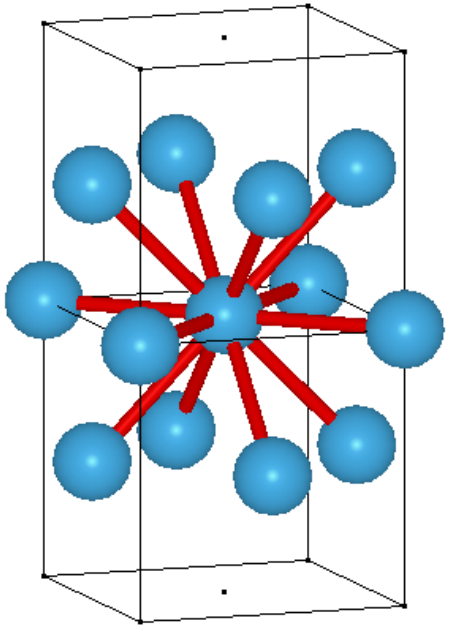
Problema 2 Determine o número de coordenação para as estruturas cs, ccc, cfc e hcp.



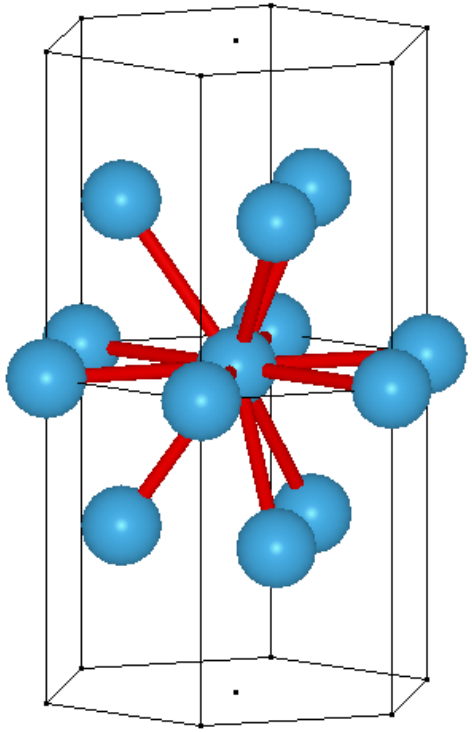
cs: NC = 6



ccc: NC = 8



cfc: NC = 12

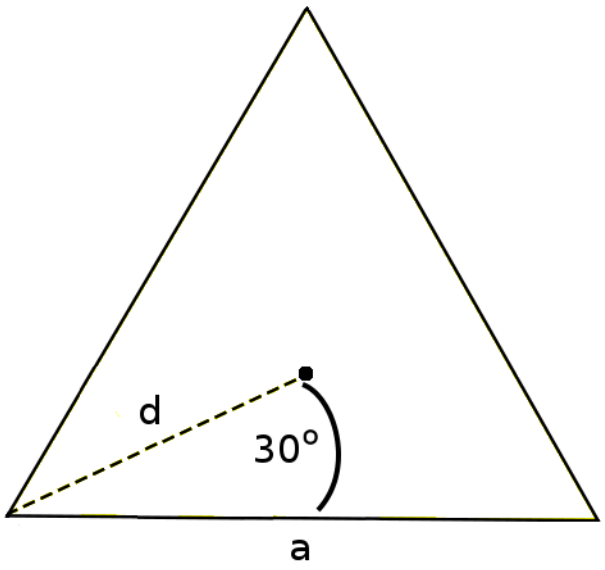


hcp: NC = 12

I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 3

Determine a distância ao centro geométrico de um triângulo equilátero. Esta distância é útil para calcular a razão c/a ideal numa estrutura hexagonal compacta e a razão crítica r/R na coordenação triângular em cristais iónicos.



$$\cos 30^o = \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{a/2}{d}$$

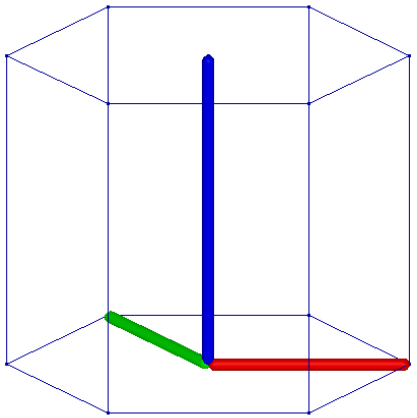
$$d = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

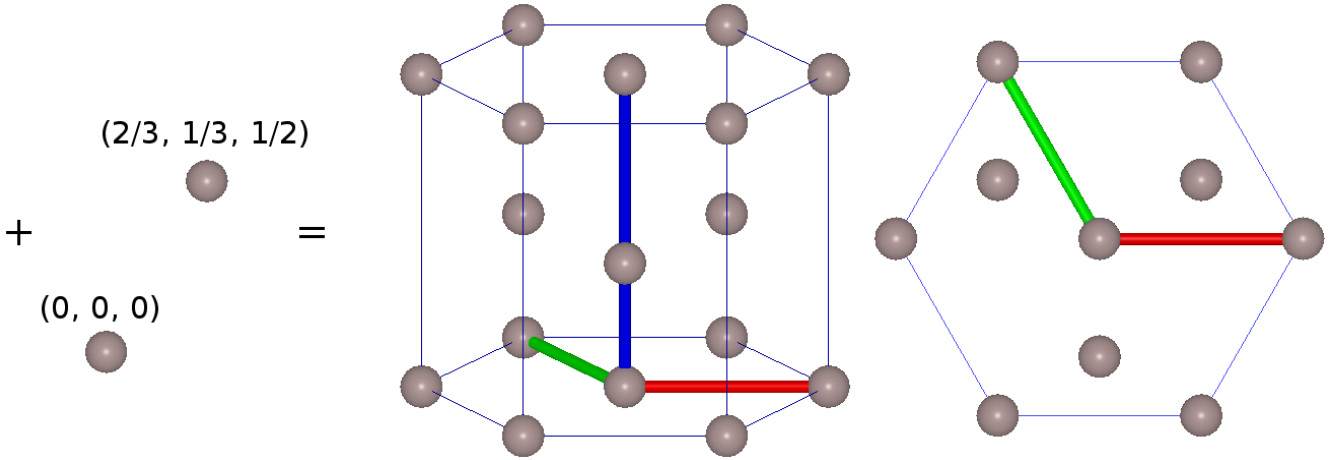
I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 4

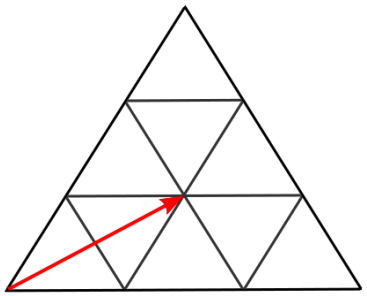
Para a estrutura hexagonal compacta: a) indique a rede cristalina e a unidade estrutural; b) mostre como os 3 átomos a meio do prisma hexagonal resultam da aplicação das coordenadas (2/3, 1/3, 1/2); c) determine a razão c/a ideal; d) determine o factor de compacidade V_o/V_t teórico.

a)

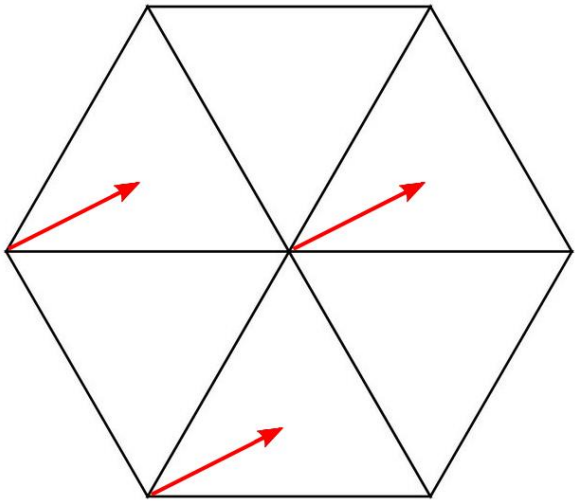




b)



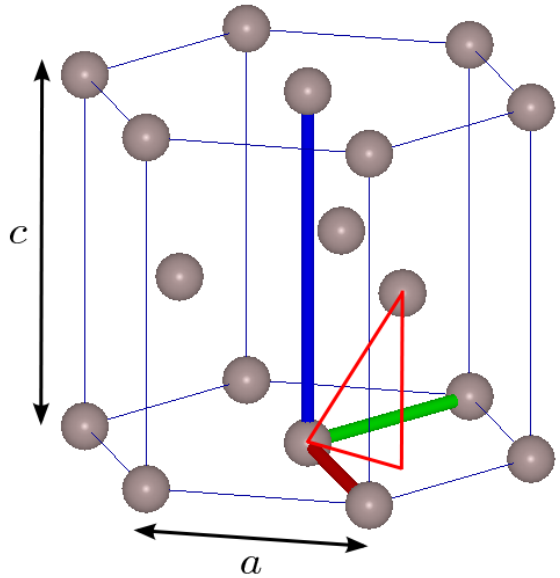
Aplicando o vector (2/3, 1/3) a partir de um vértice, obtém-se o centro de um triângulo equilátero.



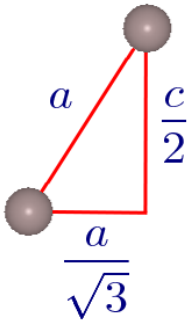
Aplicando o vector (2/3, 1/3, 1/2) a todos os nós do prisma, apenas 3 dos átomos gerados ficam dentro do prisma.

Problema 4 (cont.)

c)



Os átomos tocam-se segundo as arestas do hexágono: $a = 2r$



$$a^2 = \left(\frac{a}{\sqrt{3}}\right)^2 + \left(\frac{c}{2}\right)^2 = \frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}$$

$$\Leftrightarrow \frac{2}{3}a^2 = \frac{c^2}{4} \Leftrightarrow \left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3}$$

$$\Leftrightarrow \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

d)

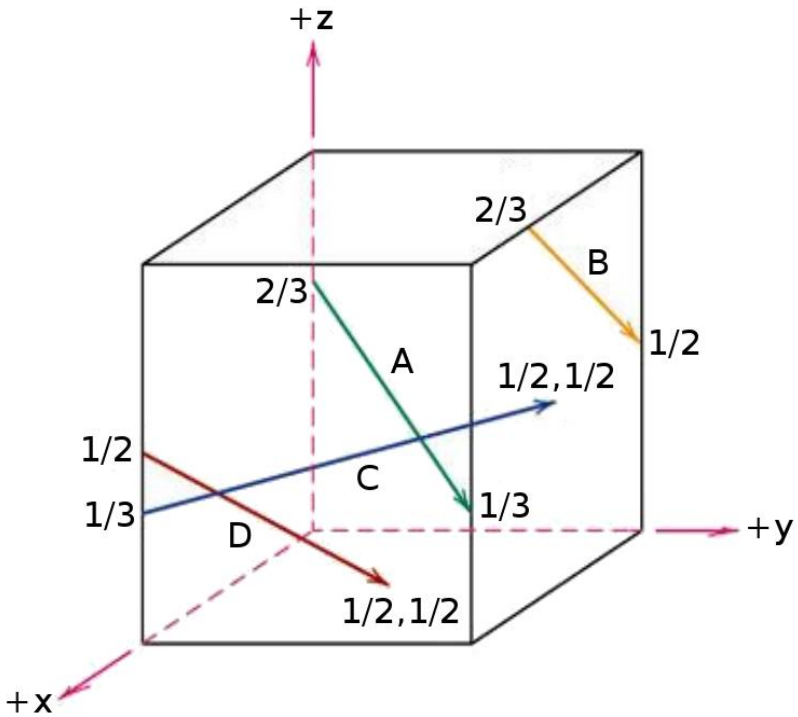
$$\frac{V_o}{V_t} = \frac{\left(12 \times \frac{120}{360} \times \frac{1}{2} + 2 \times \frac{1}{2} + 3\right)\frac{4}{3}\pi r^3}{c \times 6 \times \frac{a \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times a}{2}} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\sqrt{\frac{8}{3}}\,a \times 6 \times \frac{\sqrt{3}}{4}\,a^2} = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{\frac{a^3}{\sqrt{2}}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.740$$

igual à estrutura cfc

I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 5

Indique os índices das direcções indicadas na figura.



$$A: \quad (0,0,2/3) \rightarrow (1,1,1/3) \Rightarrow (1-0, 1-0, 1/3-2/3) = (1,1,-1/3) \Rightarrow [33\bar{1}]$$

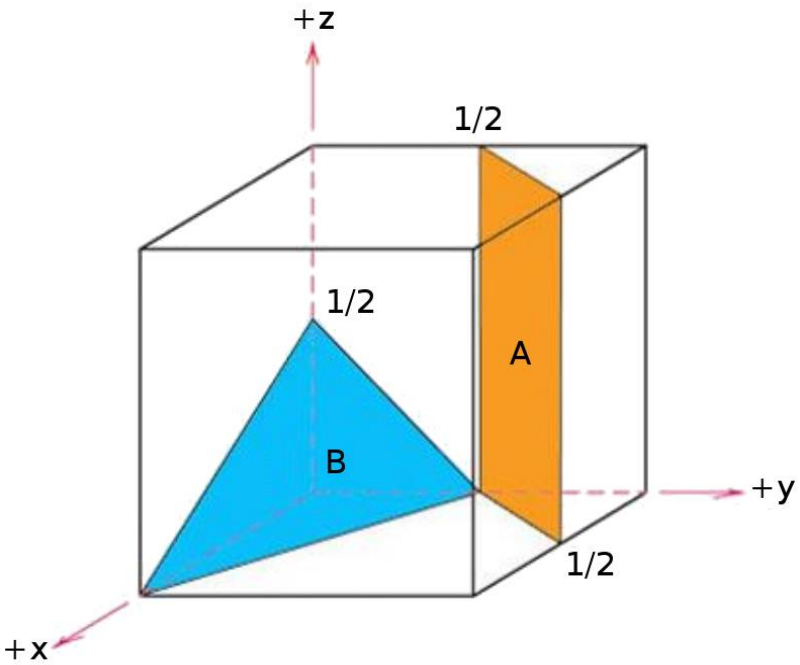
$$B: \quad (2/3,1,1) \rightarrow (0,1,1/2) \Rightarrow (0-2/3, 1-1, 1/2-1) = (-2/3,0,-1/2) \Rightarrow [\bar{4}0\bar{3}]$$

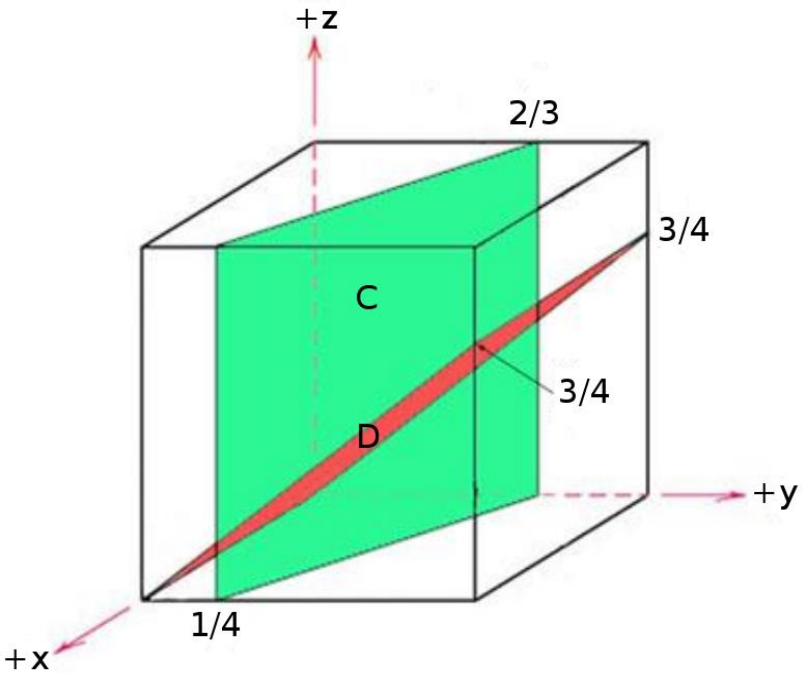
$$C: \quad (1,0,1/3) \rightarrow (1/2,1,1/2) \Rightarrow (1/2-1, 1-0, 1/2-1/3) = (-1/2,1,1/6) \Rightarrow [\bar{3}61]$$

$$D: \quad (1,0,1/2) \rightarrow (1/2,1/2,0) \Rightarrow (1/2-1, 1/2-0, 0-1/2) = (-1/2,1/2,-1/2) \Rightarrow [\bar{1}1\bar{1}]$$

Problema 6

Indique os índices dos planos indicados na figura.





$$A: \quad 1/2, -1/2, \infty \xrightarrow{1/x} 2, -2, 0 \quad \Rightarrow \quad (1\bar{1}0)$$

$$B: \quad 1, 1/2, 1/2 \xrightarrow{1/x} 1, 2, 2 \quad \Rightarrow \quad (122)$$

$$C: \quad \frac{2/3-1/4}{1} = \frac{2/3}{a} \Rightarrow a = 2/3 \times 12/5 = 8/5$$

$$8/5, 2/3, \infty \xrightarrow{1/x} 5/8, 3/2, 0 \quad \Rightarrow \quad (5\ 1$$

$$D: \quad \infty, -1, 3/4 \xrightarrow{1/x} 0, -1, 4/3 \quad \Rightarrow \quad (0\bar{3}$$

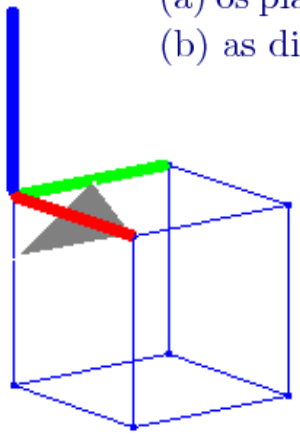
I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 7

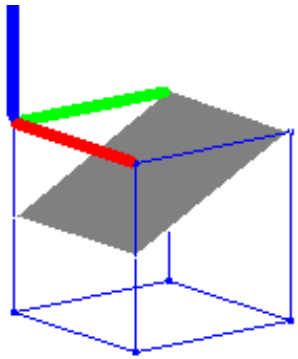
Desenhe em cubos unitários:

(a) os planos com os seguintes índices de Miller: *i*) $(12\bar{3})$; *ii*) $(01\bar{2})$; *iii*) $(3\bar{3}1)$; *iv*) $(12\bar{2})$; *v*) (235).

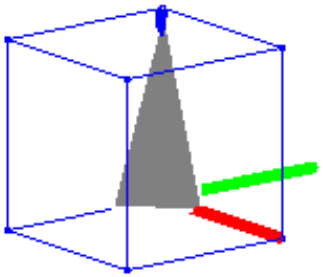
(b) as direcções com os seguintes índices: *i*) $[12\bar{3}]$; *ii*) $[01\bar{2}]$; *iii*) $[3\bar{3}1]$; *iv*) $[12\bar{2}]$; *v*) $[235]$.



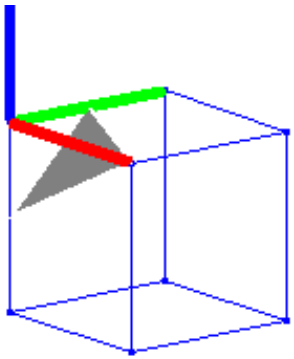
$(12\bar{3})$



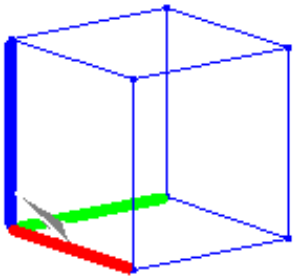
$(01\bar{2})$



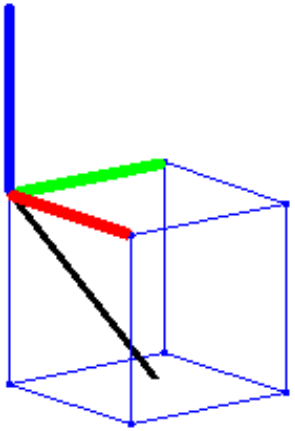
$(3\bar{3}1)$



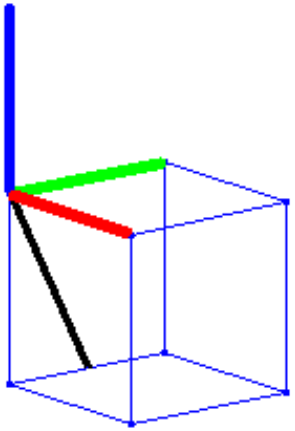
$(12\bar{2})$



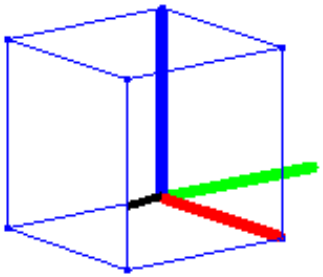
(235)



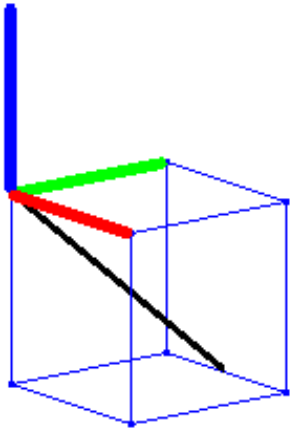
$[12\bar{3}]$



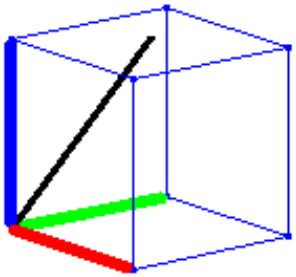
$[01\bar{2}]$



$[3\bar{3}1]$



$[12\bar{2}]$

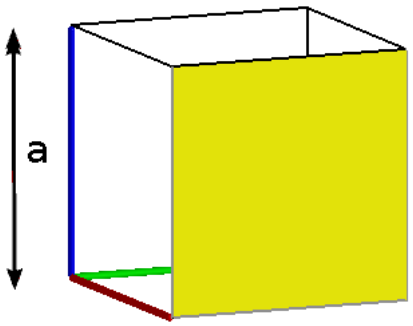


$[235]$

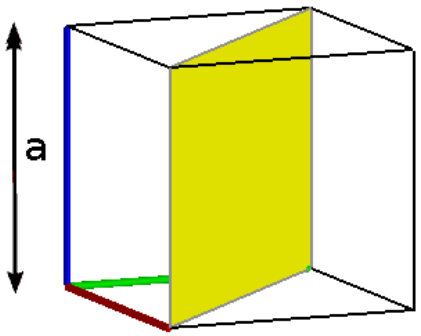
I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 8

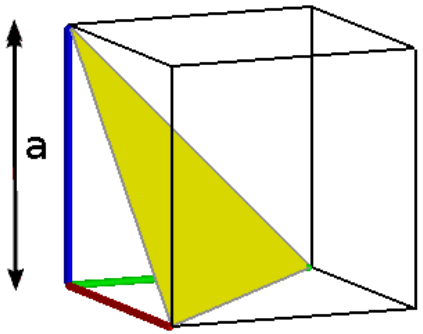
Determine a área por nó para os planos (100), (110) e (111), para as redes cs, ccc e cfc.



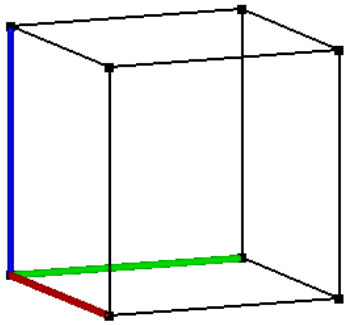
$$A = a^2$$



$$A = \sqrt{2}\,a^2$$



$$A = \frac{\sqrt{2}\,a \times \sqrt{2}\,a\frac{\sqrt{3}}{2}}{2} = \frac{\sqrt{3}\,a^2}{2}$$



$$(100): \quad \frac{A}{N} = \frac{a^2}{8 \times 1/8} = a^2$$

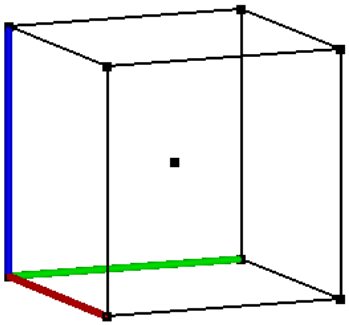
planos mais compactos

$$(110): \quad \frac{A}{N} = \frac{\sqrt{2}\,a^2}{8 \times 1/8} = \sqrt{2}\,a^2 = 1.414\,a^2$$

$$(111): \quad \frac{A}{N} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2}{\frac{60}{360} \times 3} = \sqrt{3}\,a^2 = 1.732\,a^2$$

I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 8
(cont.)

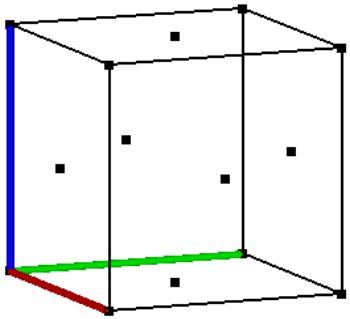


$$(100): \quad \frac{A}{N} = \frac{a^2}{8 \times 1/8} = a^2$$

$$(110): \quad \frac{A}{N} = \frac{\sqrt{2}\,a^2}{8 \times 1/8 + 1} = \frac{a^2}{\sqrt{2}} = 0.707\,a^2$$

planos mais compactos

$$(111): \quad \frac{A}{N} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2}{\frac{60}{360} \times 3} = \sqrt{3}\,a^2 = 1.732\,a^2$$



$$(100): \quad \frac{A}{N} = \frac{a^2}{8 \times 1/8 + 1} = \frac{a^2}{2} = 0.5\,a^2$$

$$(110): \quad \frac{A}{N} = \frac{\sqrt{2}\,a^2}{8 \times 1/8 + 2 \times 1/2} = \frac{a^2}{\sqrt{2}} = 0.707\,a^2$$

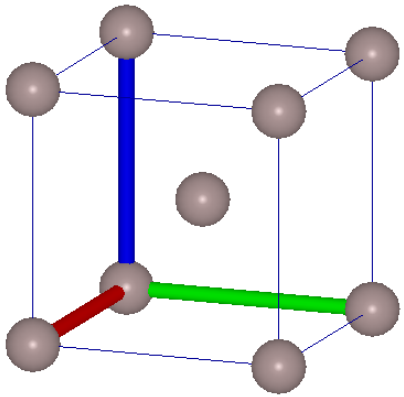
$$(111): \quad \frac{A}{N} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2}{\frac{60}{360} \times 3 + 3 \times 1/2} = \frac{\sqrt{3}\,a^2}{4} = 0.433\,a^2$$

planos mais compactos

Problema 9

À temperatura ambiente, o tântalo (Ta) apresenta estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC) sendo o seu raio atómico 0.143 nm e o seu peso atómico 180.95 g/mol. Número de Avogadro = 6.023×10^{23} /mol. Calcule / indique:

(a) o parâmetro de rede do Ta; 0.3302 nm



$$4r = \sqrt{3}a \Leftrightarrow a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4\times 0.143}{\sqrt{3}} = 0.3302\ nm$$

(b) o número de átomos existentes em 1 cm^3 de Ta; 5.553×10^{22} átomos/cm^3

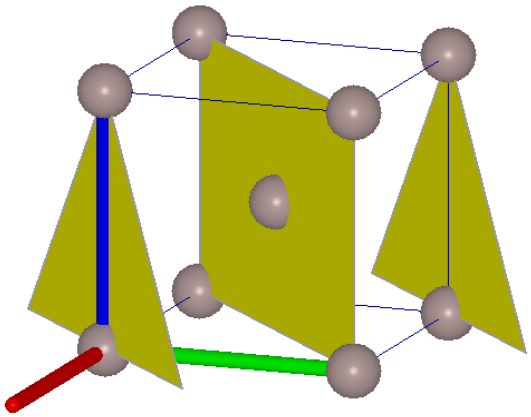
$$\frac{N}{V} = \frac{8\times\frac{1}{8}+1}{(0.3302\times 10^{-7})^3} = \frac{2}{0.3302^3} \times 10^{21} = 5.555 \times 10^{22} \text{ átomos } /cm^3$$

(c) a densidade teórica do Ta; 16.68 g/cm^3

$$\rho = \frac{N}{V} \times m_1 = 5.555 \times 10^{22} \times \frac{180.95}{6.023\times 10^{23}} = \frac{5.555\times 180.95}{6.023} \times 10^{-1} = 16.68\ g/cm^3$$

Problema 9
(cont.)

(d) o número de átomos que existem num milímetro quadrado dos planos $\{\bar{1}10\}$ do Ta; 1.297×10^{13} átomos/mm^2



$$\frac{N}{A} = \frac{4\times\frac{1}{4}+1}{\sqrt{2}a\times a} = \frac{\sqrt{2}}{a^2} = \frac{\sqrt{2}}{(0.3302\times10^{-6})^2} = \frac{\sqrt{2}}{0.3302^2}\times10^{12} = 1.297\times10^{13} \text{ átomos / mm}^2$$

(e) a distância interplanar dos planos $\{\bar{1}10\}$ do Ta; 0.2335 nm

$$d_{\{\bar{1}10\}} = \frac{\sqrt{2}a}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{0.3302}{\sqrt{2}} = 0.2335\ nm$$

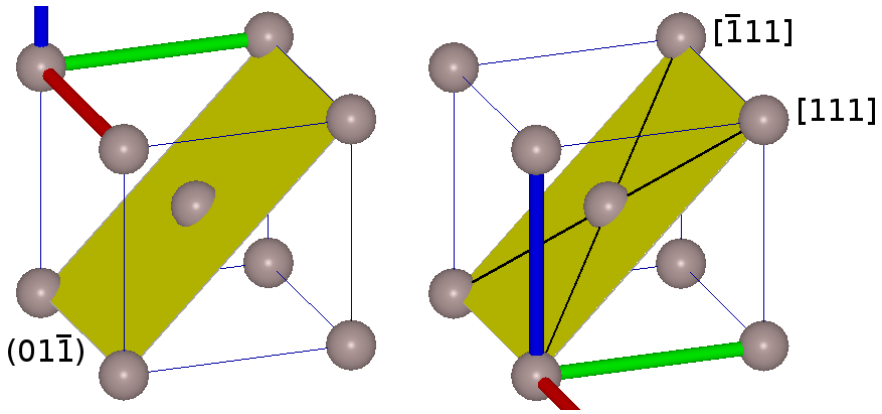
(f) o ângulo 2θ para o qual ocorreu a difracção (de primeira ordem) pelos planos $\{\bar{1}10\}$, sabendo que a estrutura cristalina do Ta foi determinada utilizando difracção de raios-X cujo comprimento de onda era $\lambda = 0.1541$ nm; 38.532^o

Problema 9
(cont.)

$$2d_{(hkl)}\sin\theta = n\lambda \Leftrightarrow 2\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\sin\theta = n\lambda \Leftrightarrow \sin\theta = \frac{n\lambda\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{2a}$$

$$= \frac{1\times 0.1541\times\sqrt{2}}{2\times 0.3302} = 0.329997 \Rightarrow \theta = 19.269^o \Rightarrow 2\theta = 38.538^o$$

(g) os índices das direcções de máxima compacidade contidas no plano $(01\bar{1})$ do Ta; [111] e $[\bar{1}11]$



(h) o número de átomos que existem num milímetro das direcções referidas na alínea (g). 3.496×10^6 átomos/mm

$$\frac{N}{L} = \frac{2\times\frac{1}{2}+1}{\sqrt{3}a} = \frac{2}{\sqrt{3}a} = \frac{2}{\sqrt{3}\times 0.3302\times 10^{-6}} = 3.497\times 10^6 \text{ átomos/mm}$$

Problema 10

In a X-ray diffractogram of a cubic substance, done with radiation $Cu_{K\alpha}$ (λ = 1.542 Å), peaks were observed for diffraction angles of 24.6º, 28.2º, 40.4º, 48.0º, 50.2º, 58.6º, 64.4º and 66.2º. Determine the plane indices for each diffraction angle, the type of lattice and the lattice parameters. Knowing that this molecular substance has a density of 8.31 g/cm³ and a molecular mass of 312 g/mol, determine the number of molecules per lattice node.

For the cubic system $d = \frac{a}{(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}$ and writing Bragg's law, $2d\sin\theta = n\lambda$, for $n = 1$:

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2} = \frac{\lambda^2}{4\sin^2\theta} \Rightarrow \sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2+k^2+l^2)$$

Dividing this equation by the corresponding equation for the smallest angle θ_1:

$$\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\theta_1} = \frac{h^2+k^2+l^2}{h_1^2+k_1^2+l_1^2}$$

$\sin^2\theta$ increases with $\theta \epsilon [0, 90^o]$ and $h^2+k^2+l^2$ is an integer, so $\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$ is a ratio ≥ 1 between two integers. Multiplying $\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$ by increasing integers p, at some point $p = h_1^2+k_1^2+l_1^2$ and the result becomes an integer $q = h^2+k^2+l^2$ for each angle θ.

Problema 10

(cont.)

2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta / \sin^2\theta_1$	$\sin^2\theta / \sin^2\theta_1 \times 3$	$h^2 + k^2 + l^2$	(hkl)
24.6	0.04538	1.00000	3.00000	3	(111)
28.2	0.05935	1.30775	3.92325	4	(200)
40.4	0.11923	2.62727	7.88182	8	(220)
48.0	0.16543	3.64539	10.93616	11	(311)
50.2	0.17995	3.96513	11.89538	12	(222)
58.6	0.23950	5.27732	15.83197	16	(400)
64.4	0.28396	6.25705	18.77115	19	(331)
66.2	0.29823	6.57150	19.71449	20	(420)

Only planes with indices h,k,l all even or all odd are observed, so the lattice is face-centered. As the substance is cubic, the Bravais lattice is cF. After identifying the planes (hkl) the lattice parameter a can be calculated, using for example (111) data:

$$a^2 = (h^2 + k^2 + l^2)\frac{\lambda^2}{4\sin^2\theta} = \frac{3 \times 1.542^2}{4 \times 0.04538} \Rightarrow a = 6.27 \text{ Å}$$

The density and molecular weight of the substance are known so the number of molecules per cell can be calculated:

$$\text{mass / cell} = \rho \times a^3 = 8.31 \times (6.27 \times 10^{-8})^3 = 2.05 \times 10^{-21} g$$

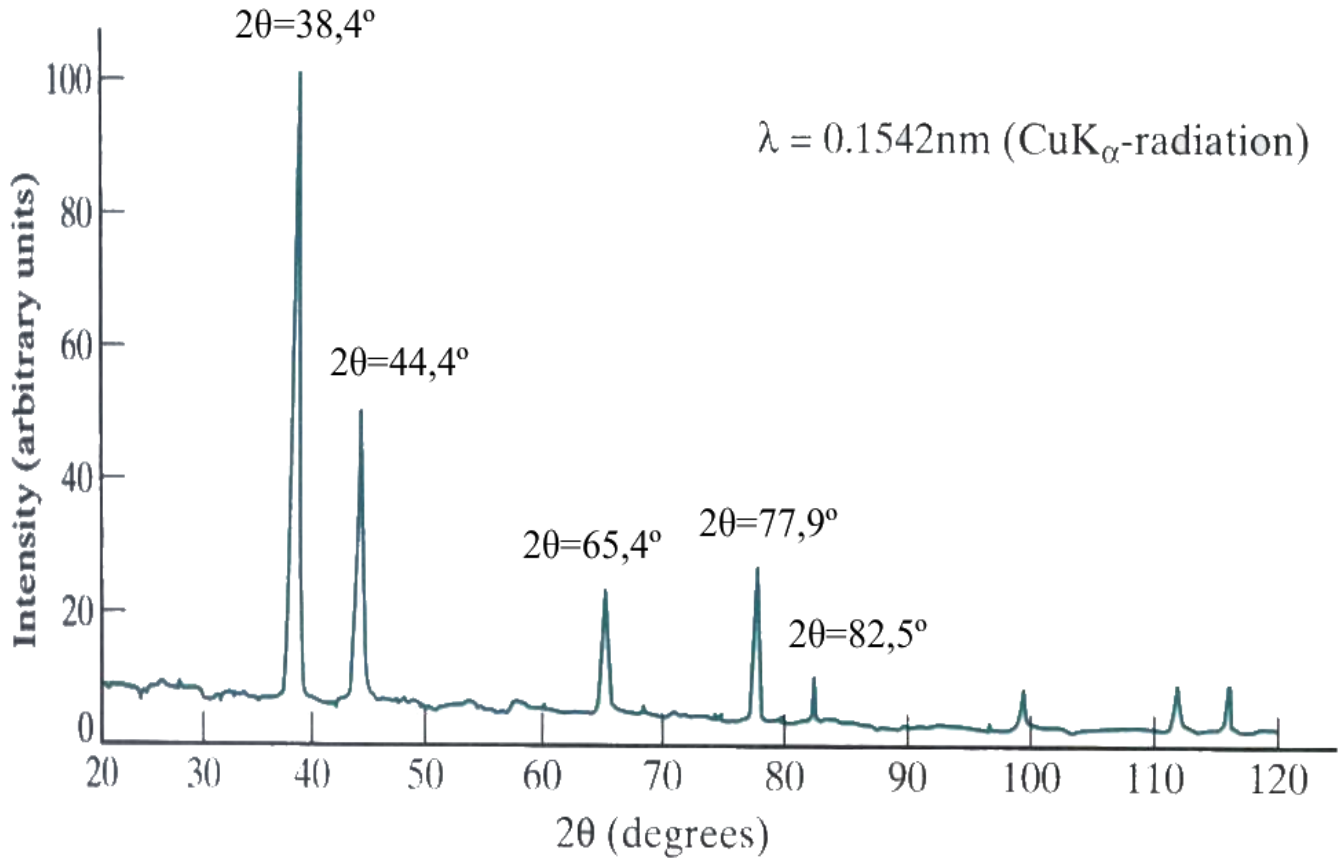
$$\text{molecules / cell} = \frac{2.05 \times 10^{-21}}{\frac{312}{6.023 \times 10^{23}}} = 3.96 \approx 4$$

The cF lattice cell contains $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ nodes so there must be 1 molecule / node.

I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 11

Determinou-se a estrutura cristalina de um material metálico utilizando raios-X cujo comprimento de onda era 0.1542 nm. Obteve-se o espectro de difracção representado na figura abaixo. Número de Avogadro: $N = 6.023 \times 10^{23}$ / mol.



(a) Qual a estrutura cristalina do metal? Assuma que esta só pode ser CS, CCC ou CFC. Justifique a sua resposta; CFC

Problema 11 (cont.)

Estrutura	Planos
CS	(hkl) quaisquer
CCC	h+k+l = par
CFC	h,k,l da mesma paridade

Lei de Bragg: $2d_{(hkl)}\sin\theta = n\lambda$ No sistema cúbico: $d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$$2\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\sin\theta = n\lambda \Leftrightarrow 4\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}\sin^2\theta = n^2\lambda^2 \Leftrightarrow \sin^2\theta = \frac{n^2\lambda^2}{4a^2}(h^2+k^2+l^2)$$

$$\Rightarrow \frac{\sin^2\theta_1}{\sin^2\theta_2} = \frac{(h^2+k^2+l^2)_1}{(h^2+k^2+l^2)_2}$$

Método simples:

Estrutura	$(hkl)_1$	$(hkl)_2$	$\sin^2\theta_1/\sin^2\theta_2$
CS	(100)	(110)	0.5
CCC	(110)	(200)	0.5
CFC	(111)	(200)	0.75

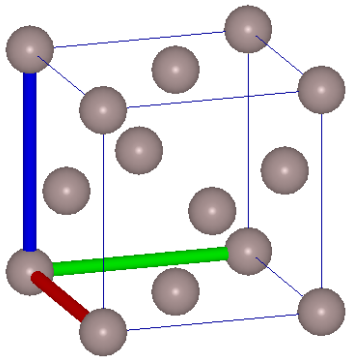
Pela figura: $\frac{\sin^2\theta_1}{\sin^2\theta_2} = \frac{\sin^2(38.4/2)}{\sin^2(44.4/2)} = 0.758 \approx 0.75 \Rightarrow$ Estrutura CFC

Problema 11
(cont.)

Método geral:

2θ	θ	$\sin\theta$	$\sin^2\theta$	$\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\theta_1}$	$n\times\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\theta_1}$	$h^2+k^2+l^2$	(hkl)
38.40	19.20	0.328867	0.108153	1.000000	3.000000	3	111
44.40	22.20	0.377841	0.142764	1.320012	3.960037	4	200
65.40	32.70	0.540240	0.291860	2.698574	8.095722	8	220
77.90	38.95	0.628642	0.395191	3.653988	10.961963	11	311
82.50	41.25	0.659346	0.434737	4.019637	12.058911	12	222

Todos os ângulos verificam a regra válida para estruturas CFC



(b) Calcule o parâmetro de rede a do metal; 0.4061 nm

$$a = \frac{n\lambda}{2\sin\theta}\sqrt{h^2+k^2+l^2} = \frac{1\times 0.1542}{2\sin\frac{38.4}{2}}\sqrt{3} = 0.4061\ nm$$

(c) Considerando os metais indicados na tabela abaixo, identifique o metal; Alumínio (Al)

I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 11 (cont.)

Metal	Estrutura	Parâmetro de rede (nm)		Peso atómico (g/mol)
		a	*c*	
crómio	CCC	0,289	---	52,00
ferro-α	CCC	0,287	---	55,85
molibdénio	CCC	0,315	---	95,94
alumínio	CFC	0,405	---	26,98
cobre	CFC	0,3615	---	63,54
níquel	CFC	0,352	---	58,71
cádmio	HC	0,2973	0,5618	112,40
cobalto	HC	0,2507	0,4069	58,93
zinco	HC	0,2665	0,4947	65,37

Entre os 3 metais CFC apresentados, apenas o Al tem um parâmetro da rede semelhante ao calculado na alínea anterior.

(d) Calcule o raio atómico do metal; 0.1436nm

Estrutura CFC: $\sqrt{2}a = 4r \Rightarrow r = \sqrt{2}a/4 = \sqrt{2} \times 0.4061/4 = 0.1436\ nm$

(e) Calcule o volume por átomo do metal; $1.674 \times 10^{-29} m^3$

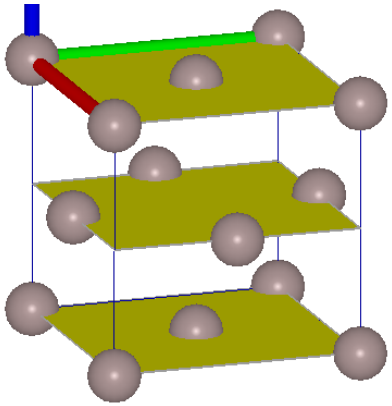
Problema 11 (cont.)

$$V = \frac{a^3}{8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}} = \frac{a^3}{4} = \frac{0.4061^3}{4} = 0.01674\ nm^3 = 1.674\times10^{-29}\ m^3$$

(f) Calcule a densidade do metal, em kg/m^3; 2676 Kg/m^3

$$\rho = \frac{\text{massa por átomo}}{\text{volume por átomo}} = \frac{M_{Al}/N_A}{a^3/4} = \frac{26.98\times10^{-3}/6.023\times10^{23}}{1.674\times10^{-29}} = \frac{26.98}{6.023\times1.674}\times10^3 = 2.676\times10^3 = 2676\ Kg/m^3$$

(g) Considere que o plano do papel é o plano $(00\bar{2})$ da estrutura do metal. Indique a disposição dos átomos nesse plano; quadrado $a\times a$ com átomos nos vértices e no centro do quadrado

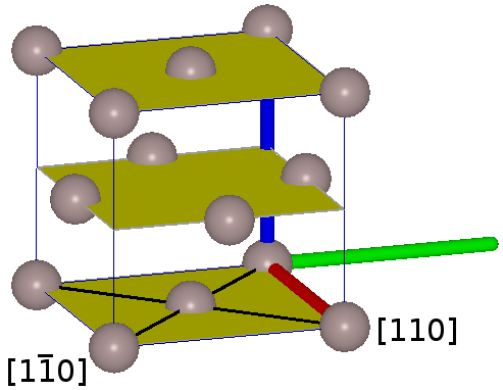


(h) Calcule o número de átomos/mm^2 no plano $(00\bar{2})$ da estrutura do metal; 1.213×10^{13} átomos/mm^2

$$\frac{N}{A} = \frac{4\times\frac{1}{4}+1}{a^2} = \frac{2}{(0.4061\times10^{-6})^2} = 1.213\times10^{13}\ \text{átomos}\ /mm^2$$

Problema 11 (cont.)

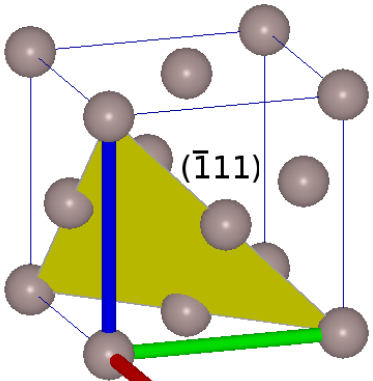
(i) Indique os índices das direções de máxima compacidade contidas no plano $(00\bar{2})$ da estrutura do metal; $[110]$ e $[1\bar{1}0]$

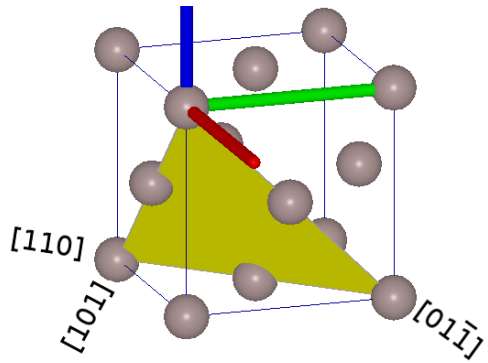


(j) Calcule a densidade atómica linear das direcções referidas na alínea (i); 3.483×10^6 átomos/mm

$$\frac{N}{L} = \frac{2}{\sqrt{2}a} = \frac{\sqrt{2}}{0.4061\times10^{-6}} = 3.483 \times 10^6 \text{ átomos/mm}$$

(k) Suponha que existe no metal uma deslocação cunha, cujo plano de escorregamento é o plano $(\bar{1}11)$. Indique os vectores de Burgers $\vec{b}$ mais prováveis para a deslocação; $\frac{1}{2}[01\bar{1}]$, $\frac{1}{2}[101]$, $\frac{1}{2}[110]$





$$\vec{b}_1 = \frac{1}{2}[110] \quad \vec{b}_2 = \frac{1}{2}[101] \quad \vec{b}_3 = \frac{1}{2}[01\bar{1}]$$

I Problemas Estrutura Cristalina

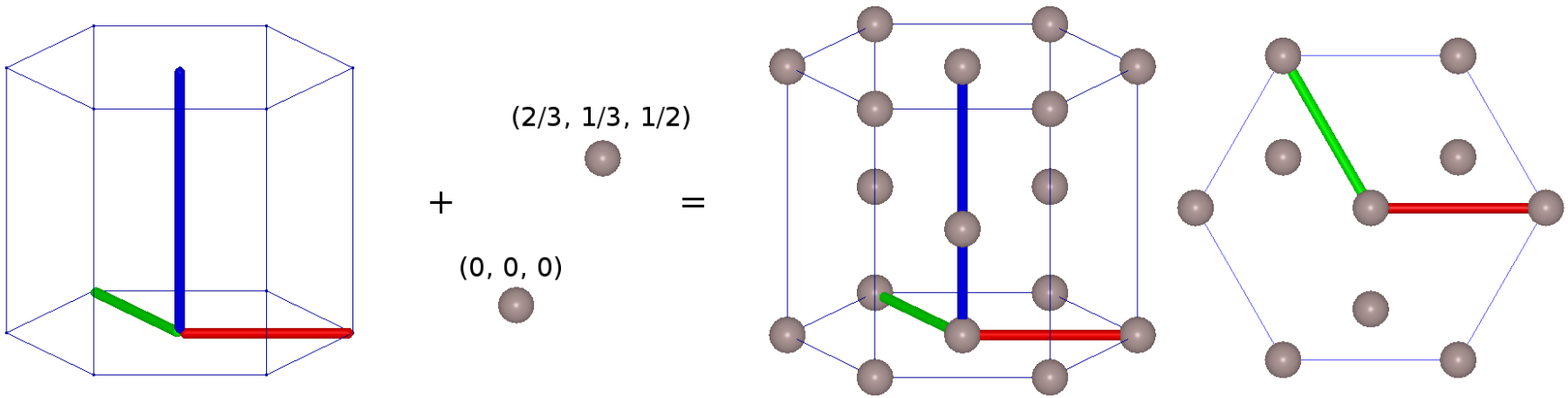
Problema 12

O zircónio (Zr) apresenta estrutura cristalina hexagonal compacta, sendo a razão c/a = 1.593. A densidade do Zr é 6.51 g/cm^3 e o peso atómico 91.22 g/mol. Número de Avogadro = 6.023×10^{23} / mol.

(a) A rede cristalina do Zr é:

1	hexagonal compacta
2	hexagonal
3	hexagonal de bases centradas

Estrutura hexagonal compacta = rede hexagonal + unidade estrutural com dois átomos por nó, com coordenadas (0, 0, 0) e (2/3, 1/3, 1/2)



(b) O peso de um átomo de Zr é:

Problema 12 (cont.)

1	$15.145 \times 10^{-26}\ kg$
2	$91.22 \times 10^{-3}\ kg$
3	$15.145 \times 10^{-22}\ g$

$$m_1 = \frac{91.22}{6.023 \times 10^{23}} = 15.145 \times 10^{-23}\ g = 15.145 \times 10^{-26}\ Kg$$

(c) O volume da célula convencional de Zr é:

1	$13.959 \times 10^{-23}\ cm^3$
2	$6.980 \times 10^{-23}\ cm^3$
3	$6.980 \times 10^{-27}\ m^3$

$$\rho = \frac{(12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3) \times m_1}{V} \Rightarrow V = \frac{6m_1}{\rho} = \frac{6 \times 15.145 \times 10^{-23}}{6.51} = 13.959 \times 10^{-23}\ cm^3$$

(d) O parâmetro de rede a do Zr é:

1	$3.231 \times 10^{-6}\ cm$
2	0.5147 nm
3	0.3231 nm

$$V = c \times 6 \times \frac{a \sin 60^o \times a}{2} = 1.593\ a \times 6 \times \frac{a^2\sqrt{3}}{4} = \frac{1.593 \times 6 \times \sqrt{3}}{4}\ a^3 \Rightarrow a = \sqrt[3]{\frac{4V}{1.593 \times 6 \times \sqrt{3}}}$$

$$= \sqrt[3]{\frac{4 \times 13.959 \times 10^{-23}}{1.593 \times 6 \times \sqrt{3}}} = \sqrt[3]{\frac{4 \times 139.59}{1.593 \times 6 \times \sqrt{3}}} \times 10^{-8} = 3.231 \times 10^{-8}\ cm = 0.3231\ nm$$

Problema 12
(cont.)

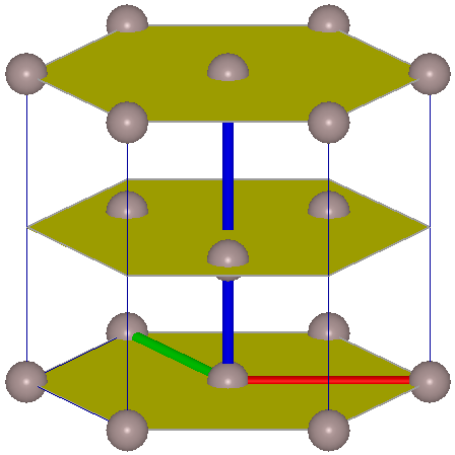
(e) O raio atómico do Zr é:

1	0.2574 nm
2	$1.615 \times 10^{-8}\ cm$
3	1.615 nm

$$a = 2r \Rightarrow r = \frac{a}{2} = \frac{0.3231}{2} = 0.1616\ nm = 1.616 \times 10^{-8}\ cm$$

(f) Os índices de Miller-Bravais dos planos de máxima compacidade do Zr são:

1	(0002)
2	{0001}
3	$\{1\bar{1}00\}$



(g) A densidade atómica planar, em átomos/mm^2, dos planos referidos na alínea (f) é:

Problema 12 (cont.)

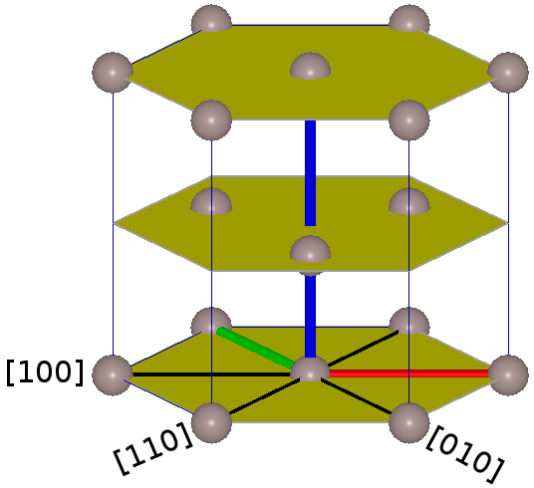
1	9.579×10^{12}
2	1.106×10^{08}
3	1.106×10^{13}

$$\frac{N}{A} = \frac{3}{6\times\frac{a\sin 60^o\times a}{2}} = \frac{2}{\sqrt{3}a^2} = \frac{2}{\sqrt{3}\times 0.3231^2}$$

$$= 11.06 \text{ átomos/nm}^2 = 1.106 \times 10^{13} \text{ átomos/mm}^2$$

(h) Os índices dos direcções de máxima compacidade contidas nos planos referidos na alínea (f) são:

1	[100], [010], [110]
2	[100], [010], [1$\bar{1}$0]
3	[100], [010], [001]



Problema 13

Sabendo que a energia de formação de uma lacuna no Al vale 0.76 eV, determine: a) a concentração de equilíbrio de lacunas, por m^3, no Alumínio puro a 500 ^oC; b) a fracção de lacunas no Al a 600 ^oC. Dados: ρ_{Al} = 2.7 g/cm^3, M_{Al} = 26.98 g/mol, K = 1.38 x 10^{-23} JK^{-1}, 1 eV = 1.6 x x10^{-19} J.

a)

$$n = N\,e^{-E_v/kT} = \frac{\rho\,N_A}{M_{Al}}\,e^{-E_v/kT} = \frac{2.7\times 6.023\times 10^{23}}{26.98}\,e^{\frac{-0.76\times 1.6\times 10^{-19}}{1.38\times 10^{-23}\times(500+273.15)}}$$

$$= 6.027\times 10^{22}\times e^{-11.40} = 6.72\times 10^{17}\ \text{lacunas}/cm^3 = 6.72\times 10^{23}\ \text{lacunas}/m^3$$

b)

$$\frac{n}{N} = e^{-E_v/kT} = e^{\frac{-0.76\times 1.6\times 10^{-19}}{1.38\times 10^{-23}\times(600+273.15)}} = 4.12\times 10^{-5}$$

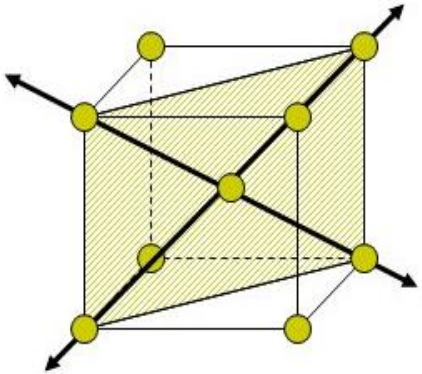
uma lacuna por cada 10^5 posições atómicas!

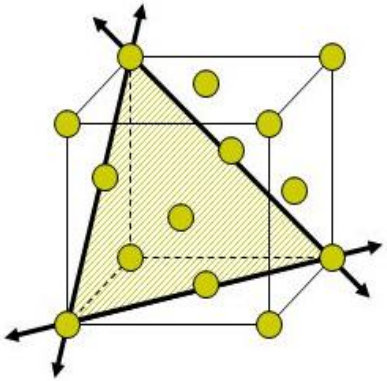
I Problemas Estrutura Cristalina

Problema 14

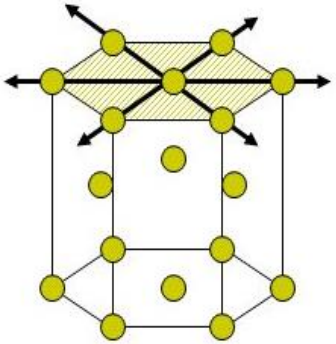
As deslocações movem-se preferencialmente em planos mais compactos, ao longo de direcções mais compactas, naquilo que se designa habitualmente por um sistema de escorregamento. Determine quantos sistemas de escorregamento existem nas seguintes estruturas cristalinas: a) CCC; b) CFC; c) HCP.

CCC: os planos mais compactos são {110} e as direcções mais compactas são <111>. Existem duas orientações diferentes para os planos deste tipo que são paralelos ao vector dos z. Para o vector dos x e dos y também existem duas orientações diferentes para os planos deste tipo. Para cada orientação diferente dos planos existem 2 orientações diferentes para as direcções mais compactas que vivem nesses planos. Existem portanto 6 x 2 = 12 sistemas de escorregamento.





CFC: os planos mais compactos são {111} e as direcções mais compactas são <110>. As direcções [111], que são perpendiculares aos planos (111), unem dois vértices do cubo. Como existem 8 vértices no cubo, existem 4 orientações diferentes para estas direcções, que correspondem a 4 orientações diferentes para estes planos. Para cada orientação diferente dos planos existem 3 orientações diferentes para as direcções mais compactas que vivem nesses planos. Existem portanto 4 x 3 = 12 sistemas de escorregamento.



HCP: os planos mais compactos são {001} e as direcções mais compactas são <100>. Existe apenas uma orientação para este tipo de planos e existem 3 orientações para as direcções deste tipo que vivem nesses planos. Existem portanto 1 x 3 = 3 sistemas de escorregamento.