

A MATEMÁTICA NA ESTRUTURA CRISTALINA DOS MATERIAIS

J. G. Lopes, J. V. Barros

Universidade de Pernambuco – Campus Garanhuns

Rua Capitão Pedro Rodrigues, 105, Bairro: São José 55.294-902, Garanhuns – Pernambuco – Brasil. E-mail: janavbarros@yahoo.com.br

RESUMO

A maioria dos materiais utilizados em Engenharia possui uma estrutura cristalina que caracteriza-se pelo modelo tridimensional, ordenado e repetitivo. Nessa estrutura é perceptível um arranjo atômico semelhante em todas as dimensões do material cristalino, onde é possível evidenciar a maioria das propriedades através de equações matemáticas e procedimentos algébricos que são determinantes para o conhecimento minucioso da estrutura como um todo. A análise matemática dessas estruturas detém-se a uma pequena parte do material que conserva todas as suas propriedades, a célula unitária. Através da análise da célula é possível traçar relações entre os parâmetros de rede e o raio atômico dos átomos, sendo que essa relação é fundamental para determinar o grau de ocupação e a densidade da célula unitária. A linguagem matemática traduz as características dos arranjos cristalinos dos materiais, desde a estrutura geométrica das células até os procedimentos para o cálculo do fator de empacotamento e da densidade.

Palavras-chave: Estrutura cristalina, arranjo atômico, Ciência dos Materiais.

INTRODUÇÃO

Os materiais sólidos podem ser cristalinos ou amorfos. O conceito de estrutura cristalina está associado à organização dos átomos na forma geométrica, sendo que essa estrutura cristalina é resultado da natureza das suas ligações químicas e das forças intermoleculares. Um material cristalino apresenta um agrupamento ordenado de seus átomos, íons ou moléculas, que se repete tridimensionalmente, culminando em uma distribuição bem ordenada, exibindo simetria e posições bem definidas no

espaço. Com isso, qualquer posição em uma estrutura cristalina caracteriza-se por apresentar uma vizinhança semelhante.

As estruturas cristalinas estão presentes em diversos materiais tais como: metais, ligas metálicas e materiais cerâmicos. Seus átomos estão distribuídos ordenadamente, formando uma rede denominada retículo cristalino. Esta rede é formada por unidades atômicas ou iônicas fundamentais, que se repetem tridimensionalmente, chamadas de célula unitária, que serve de base para a formação do retículo cristalino, onde cada átomo ocupa uma posição bem definida no espaço. O arranjo interno é característico do estado sólido⁽¹⁾.

As características de uma célula unitária e de todo retículo cristalino podem ser descritas matematicamente por expressões e fórmulas. A visão geométrica do modelo matemático permite uma análise extremamente detalhada dessas células, sendo que o detalhamento dos fenômenos que ocorrem nesses modelos adquirem uma fundamentação teórica precisa através de raciocínios matemáticos. Como exemplo disso, podemos mencionar que a esquematização de uma célula unitária é estruturada perfeitamente pela geometria espacial, bem como o cálculo do volume de um átomo e da própria célula unitária.

ESTRUTURAS CRISTALINAS DOS METAIS

Grande parte dos materiais utilizados na Engenharia, como os metais, se arranja em um modelo tridimensional, ordenado e repetido, constituindo, portanto, uma estrutura cristalina⁽²⁾. Nesses materiais cristalinos, os arranjos dos átomos podem ser descritos, referindo os átomos aos pontos de interseção de uma rede tridimensional de linhas retas. Esta rede designa-se por rede espacial.

As estruturas cristalinas possuem características como piezoelectricidade, ferroelectricidade, efeito piroelétrico e também podem atuar como semicondutores⁽³⁾.

Em função dessas características, os materiais com estruturas cristalinas são amplamente utilizados pela Engenharia e pela indústria na confecção de termômetros, transistores, máquinas fotográficas, relógios e balanças, materiais cerâmicos, entre outros⁽³⁾.

A partir do conceito de estrutura cristalina, é possível descrever um conjunto de posições atômicas, iônicas ou moleculares repetitivas e definir o conceito de uma célula unitária, como sendo a menor porção de um cristal que ainda conserva todas

as propriedades do mesmo, revelando um arranjo estrutural simétrico. Através da adoção de valores específicos associados às unidades de medidas nos eixos de referência, definidos como parâmetros de rede, e aos ângulos entre esses eixos, pode-se obter células unitárias de diversos tipos ⁽¹⁾.

Apesar da sua enorme diversidade, os cristais, dependendo da composição e condições de formação, assumem formas regulares e hoje facilmente dedutíveis em função das características atômicas e moleculares dos seus constituintes. Tal aspecto permite a sua fácil classificação em função de um número reduzido de parâmetros de rede.

Em função dos parâmetros de rede e dos ângulos que as suas faces formam entre si, podem-se identificar sistemas cristalinos básicos. Neste contexto, um sistema de cristalização caracteriza-se por um conjunto de simetrias de rotação e reflexão permitidas ao manter fixo um ponto da malha cristalina.

Há sete tipos de sistemas cristalinos que abrangem as substâncias cristalinas conhecidas pelo homem, Tab. 1.

Tabela 1. Sistemas cristalinos básicos e suas características

SISTEMAS	EIXOS	ÂNGULOS ENTRE OS EIXOS
Cúbico	$a=b=c$	todos os ângulos são iguais a 90°
Tetragonal	$a=b \neq c$	todos os ângulos são iguais a 90°
Ortorrômico	$a \neq b \neq c$	todos os ângulos são iguais a 90°
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	dois ângulos iguais a 90° e dois ângulos diferentes de 90°
Triclínico	$a \neq b \neq c$	todos ângulos são diferentes e nenhum é igual a 90°
Hexagonal	$a_1=a_2=a_3 \neq c$	dois ângulos são iguais a 90° e um ângulo é igual a 120°
Romboédrico	$a=b=c$	todos os ângulos são iguais, mas diferentes de 90°

Tendo em vista a classificação dos sistemas cristalinos acima citados, é possível descrever 14 células unitárias, as quais englobam qualquer tipo de estrutura cristalina conhecida, Fig. 1. Tal aspecto foi constatado pelo cientista francês A. Bravais em meados do século passado ⁽²⁾.

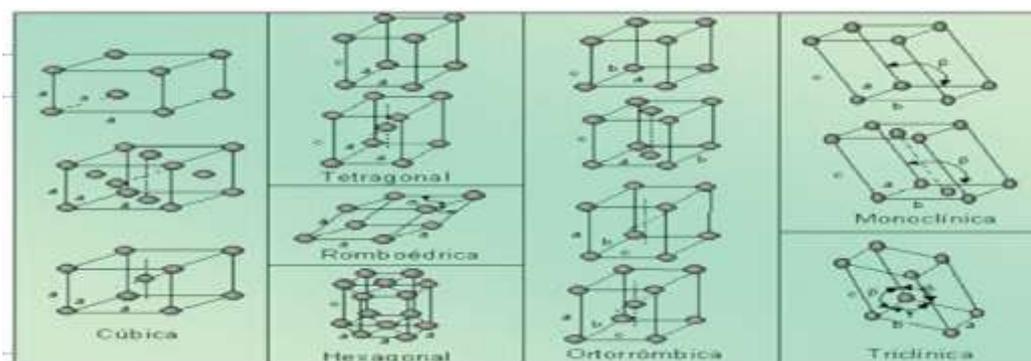


Figura 1- classificação dos sistemas cristalinos em redes de Bravais

Dos 14 tipos de arranjos cristalinos sugeridos por Bravais, alguns ocorrem na natureza com maior frequência que outros, pois alguns materiais mesmo apresentando a mesma composição química, apresentam estruturas cristalinas diferentes caracterizando o fenômeno de polimorfia⁽²⁾. As estruturas cristalinas determinam as propriedades físicas de um mineral. Pois, apesar do diamante e da grafite ter a mesma composição química, a grafite é tão mole que é utilizada como lubrificante, enquanto o diamante é o mais duro dos minerais, embora ambos sejam variedades alotrópicas do carbono⁽⁴⁾.

Uma avaliação mais detalhada dos arranjos cristalinos de Bravais revela que as estruturas cúbicas de corpo centrado (CCC), cúbica de face centrada (CFC) e hexagonal compacta (HC) são aquelas que permitem maior grau de empacotamento atômico (68%, 74%, 74%, respectivamente), devido ao maior preenchimento da célula unitária por átomos. A estrutura hexagonal compacta é na verdade uma modificação da estrutura hexagonal simples (HS), pois a mesma apresenta dois hexágonos sobrepostos e entre eles existe um plano intermediário de três átomos.

A maioria dos elementos metálicos solidifica nestas estruturas compactas, por elas serem altamente densas. Esses arranjos densos ocorrem, porque a energia é liberada com a aproximação dos átomos até a distância de equilíbrio. Sendo assim, uma estrutura compacta apresenta um nível de energia mais baixo e, portanto, é mais estável⁽¹⁾.

Quando comparados aos materiais metálicos, observa-se que os materiais cerâmicos transmitem calor e eletricidade de forma precária, e são química e termicamente mais estáveis que os metais. Enquanto os metais têm maior resistência à tração, às cerâmicas são resistentes a compressão. Nos metais o deslizamento de planos atômicos é um fenômeno relativamente fácil de ocorrer, já

nas cerâmicas, tal processo é mais difícil. Tal fato permite explicar a razão da alta fragilidade das cerâmicas e da boa ductibilidade dos metais. Contudo, os materiais cerâmicos tendem a cristalizar assumindo, assim como os metais, as estruturas cúbica de corpo centrado, cúbica de face centrada e hexagonal compacta, embora os valores para o grau de empacotamento variem de cerâmica para cerâmica, devido ao caráter iônicos das ligações químicas presentes nesses materiais⁽²⁾.

Na Ciência e Engenharia dos Materiais observa-se a matemática traduzindo a organização dos átomos através de suas ligações (covalente e metálica, principalmente) para formar estruturas cristalinas e conferir propriedades aos materiais, como ductibilidade, maleabilidade, condutibilidade e resistência a desgastes. Neste contexto, esse trabalho tem o objetivo de explorar a Matemática nos sistemas cristalográficos dos materiais cristalinos.

Estrutura Cristalina Cúbica Simples

A estrutura cúbica é uma das que ocorrem com maior frequência nas substâncias cristalinas e é considerada a mais importante, pois dependendo da posição que os átomos ocupam na estrutura cúbica, a mesma pode se apresentar de três formas distintas: cúbica simples (CS), cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de faces centradas (CFC).

O arranjo cúbico simples, embora pertença às estruturas cúbicas, ocorre raramente na natureza devido principalmente ao seu baixo fator de empacotamento (52,3%). A análise desse arranjo é importante para compreender com perfeição as outras estruturas cúbicas.

Na estrutura cúbica simples, existe apenas um átomo em cada vértice do cubo que representa a célula unitária.

O parâmetro de rede definido por a corresponde ao tamanho da aresta do cubo da célula unitária e o raio atômico definido por r se relacionam da seguinte forma: $a=2r$ (pois os átomos se tocam na face do cubo).

Através da relação entre o parâmetro de rede e o raio atômico, podemos definir o procedimento para o cálculo do fator de empacotamento (F.E), que evidencia a porcentagem de ocupação dos átomos em uma célula unitária:

$$F.E. = \frac{N V_a}{V_c}$$

onde:

V_a = volume do átomo; V_c = volume da célula unitária; N = número de átomos que ocupam a célula unitária.

Com base nessa relação, vamos calcular o F.E da estrutura CS:

O volume do átomo pode ser calculado utilizando a fórmula do volume de uma esfera.

Então: $V_a = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3$, Onde: r = raio atômico

O volume da célula unitária pode ser calculado utilizando a fórmula do volume do cubo, então: $V_c = a^3 \quad \therefore a=2r \quad \therefore V_c = (2r)^3 \quad \therefore V_c = 8r^3$

Apenas a oitava parte do volume dos átomos em cada vértice está dentro da célula unitária e que existem 8 partes de átomos dentro dessa célula o que forma um único átomo, então:

$N = 8 \cdot \frac{1}{8} \quad N=1 \text{ átomo} \quad \text{Logo:}$

$F.E. = \frac{N V_a}{V_c} \quad \therefore F.E = 1 \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot \frac{1}{8} \quad \therefore F.E = \frac{\pi}{6} \quad \therefore F.E = 0,523 \quad \therefore F.E = 52,3\%$

Esse resultado nos mostra que apenas 52,3% da estrutura CS está preenchida por átomos.

Estrutura Cristalina Cúbica de Corpo Centrado

Em comparação com a estrutura CS, o arranjo Cúbico de Corpo Centrado (CCC) apresenta um átomo centralizado ao redor do qual existem 8 átomos, um em cada vértice do cubo. Devido à existência desse átomo central a relação entre o parâmetro de rede e o raio atômico na célula unitária CCC é totalmente distinta da estrutura CS, bem como o valor do fator de empacotamento que sofre um aumento significativo, visto que os átomos ocupam mais densamente os espaços vazios na célula unitária.

Podemos traçar uma relação entre o parâmetro de rede a e o raio atômico r na estrutura CCC, pois a diagonal principal do cubo, a diagonal da base e a aresta do cubo correspondem respectivamente à hipotenusa e aos catetos de um triângulo retângulo. Como o valor da diagonal principal (d_p) corresponde a $4r$ e a diagonal da base (d_b) é igual a $a\sqrt{2}$, pode-se relacionar a e r através do teorema de Pitágoras.

Observe:

$$a^2 + d_b^2 = d_p^2 \therefore a^2 + (a\sqrt{2})^2 = (4r)^2 \therefore a^2 + 2a^2 = 16r^2 \therefore 3a^2 = 16r^2 \therefore a^2 = \frac{16}{3} r^2 \therefore a = \frac{4}{\sqrt{3}} r$$

Com base nessa relação, vamos calcular o volume da célula unitária CCC:

$$V_c = a^3 \therefore a = \frac{4}{\sqrt{3}} r \therefore V_c = \left(\frac{4}{\sqrt{3}} r\right)^3 \therefore V_c = \frac{64}{3\sqrt{3}} r^3$$

O volume do átomo pode ser calculado utilizando a fórmula do volume de uma esfera, então: $V_a = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3$

Para calcularmos o F.E. da estrutura CCC devemos encontrar ainda o número de átomos presentes na célula unitária (N).

Apenas a oitava parte do volume dos átomos em cada vértice está dentro da célula unitária sendo que existem 8 partes de átomos dentro dessa célula o que forma um único átomo, então como existe um átomo central nessa estrutura tem-se:

$$N = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 \therefore N = 1 + 1 \therefore N = 2 \text{ átomos}$$

Enfim, calculando o fator de empacotamento da estrutura CCC, temos:

$$F.E. = \frac{N V_a}{V_c} \therefore F.E. = 2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \frac{3\sqrt{3}}{64} \quad F.E. = \frac{24\sqrt{3}}{192} \pi \therefore F.E. = 0,679 \quad F.E. = 67,9 \%$$

Esse resultado aponta um aumento significativo no grau de ocupação da célula unitária se comparar as estruturas CCC e CS, o que torna esse arranjo mais comum entre os metais.

Estrutura Cristalina Cúbica de Faces Centradas

Em comparação com a estrutura CS e CCC, o arranjo cúbico de faces centradas (CFC) caracteriza-se por exibir os mesmos átomos nos vértices e apresenta um átomo em cada face da célula unitária. Devido ao seu alto fator de empacotamento atômico (74%), essa estrutura é muito comum entre os metais (alumínio, cálcio, chumbo, níquel, cobre, platina, prata, ouro, etc.), pois permite um arranjo compacto dentro da célula unitária.

Podemos traçar a relação entre o parâmetro de rede **a** e o raio atômico **r** na estrutura CCC, visto que a diagonal da face (d_f) é igual a $4r$ e forma com as arestas dessa face um triângulo retângulo isósceles, então, dispondo do teorema de Pitágoras é possível escrever **a** em função de **r**, observe:

$$a^2 + a^2 = (4r)^2 \therefore 2.a^2 = 16r^2 \quad a^2 = 8r^2 \therefore a = r\sqrt{8} \quad a = 2\sqrt{2}r$$

Com base nessa relação vamos calcular o volume da célula unitária CFC:

$$V_c = a^3 \therefore V_c = (2\sqrt{2}r)^3 \quad V_c = 16\sqrt{2}r^3$$

O volume do átomo pode ser calculado utilizando a fórmula do volume de uma esfera, então: $V_a = \frac{4}{3}\pi.r^3$

É possível calcular o número de átomos presente na célula unitária:

$$N = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} \therefore N = 1 + 3 \quad N = 4 \text{ átomos}$$

Enfim, calculando o fator de empacotamento da estrutura CCC, temos:

$$F.E. = \frac{NV_a}{V_c} \therefore F.E. = 4 \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot \frac{1}{16\sqrt{2}} \quad F.E. = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \therefore F.E. = 0,74 \quad F.E. = 74\%$$

Esse resultado aponta um aumento significativo no grau de ocupação da célula unitária se comparar com as estruturas CFC e CS, demonstrando a razão da estrutura cúbica de face centrada apresentar-se mais comumente na natureza, pois proporciona uma proximidade maior entre os átomos dentro das moléculas.

Estruturas Cristalina Hexagonal Simples e Hexagonal compacta

Como mencionado anteriormente, as estruturas hexagonais e as estruturas cúbicas compõem os principais arranjos atômicos dos cristais elementares ou aqueles formados por um átomo apenas. Entre esses cristais, mais de 50% apresenta estrutura cúbica, cerca de 33,3% apresenta estrutura hexagonal e o restante dos cristais estão distribuídos entre os outros tipos de estruturas. Este fato justifica o estudo das estruturas hexagonais em cristalografia dado sua importância.

Existem dois tipos de arranjo hexagonal: o hexagonal simples e o hexagonal compacto. A estrutura hexagonal simples (HS) é formada por átomos posicionados no vértice de dois hexágonos sobrepostos com um átomo no centro de cada um, isso faz com que a célula unitária tenha o formato de um prisma de base hexagonal. Nesse caso o parâmetro de rede a é igual ao parâmetro c que é igual a $2r$, onde r é o raio atômico. Os ângulos da base são iguais a 120° e os ângulos verticais são retos. Essa estrutura pode ser encontrada no selênio e no telúrio apenas, visto que seu fator de empacotamento (60,5%) é muito baixo.

Com base na relação $a=2r$, é possível calcular F.E. da estrutura HS:

O volume do átomo pode ser calculado utilizando a fórmula do volume de uma esfera, então: $V_a = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3$

Para calcular o volume da célula unitária, usaremos a fórmula para o cálculo do volume de um prisma, então:

$V_c = A_b \cdot h$, onde: A_b é a área da base e h a altura da célula unitária.

Então, se deve encontrar o valor da área base e da altura na célula unitária:

$$h=2r \quad A_b = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2, \quad \text{como } a=2r \quad A_b = 6\sqrt{3} \cdot r^2$$

Calculando o volume da célula unitária HS, tem-se:

$$V_c = A_b \cdot h \quad \therefore \quad V_c = 6\sqrt{3} \cdot r^2 \cdot 2r \quad V_c = 12\sqrt{3} \cdot r^3$$

O número de átomos na célula unitária HS pode ser calculado da seguinte maneira: Apenas a sexta parte do volume dos átomos em cada vértice está dentro da célula unitária sendo que existem 12 partes de átomos dentro dessa célula o que forma dois átomos, além de duas metades, uma em cada face que compõem outro átomo, então:

$$N = 12 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{2} \quad \therefore \quad N = 2 + 1 \quad N = 3 \text{ átomos}$$

Enfim, calculando o fator de empacotamento da estrutura HS, tem-se:

$$F.E. = \frac{N V_a}{V_c} \quad \therefore \quad F.E. = 3 \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot \frac{1}{12\sqrt{3}} \quad F.E. = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} \quad \therefore \quad F.E. = 0,605 \quad F.E. = 60,5\%$$

Os metais não cristalizam no sistema hexagonal simples porque o fator de empacotamento é muito baixo, a exceção são o selênio e o telúrio. Entretanto, cristais com mais de um tipo de átomo cristalizam neste sistema.

A estrutura hexagonal compacta (HC) é constituída por dois hexágonos sobrepostos e entre eles existe um plano equidistante com três átomos. Nos dois hexágonos, como na estrutura HS, existem seis átomos nos vértices e um outro no centro. Nesse caso, o parâmetro de rede a é igual a $2r$, o que não altera a área da base, contudo este parâmetro é diferente do parâmetro de rede c , que é igual a $\frac{4\sqrt{6}}{3} r$, equivalente à altura da célula unitária. Os ângulos da base são iguais a 120° e os ângulos verticais são retos, similar a célula HS.

Com base nas informações anteriores podemos calcular o F.E. da célula HC:

O volume do átomo pode ser calculado utilizando a fórmula do volume de uma esfera, então: $V_a = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3$

Para calcular o volume da célula unitária, usaremos a fórmula para o cálculo do volume de um prisma, então:

$$V_c = A_b \cdot h \quad \therefore \quad V_c = 6\sqrt{3} \cdot r^2 \cdot \frac{4\sqrt{6}}{3}r \quad V_c = 24r^3\sqrt{2}$$

O número de átomos na célula unitária HC pode ser calculado da seguinte maneira: Apenas a sexta parte do volume dos átomos em cada vértice esta dentro da célula unitária sendo que existem 12 partes de átomos dentro dessa célula o que forma dois átomos, além de duas metades, uma em cada face que compõem outro átomo e 3 átomos no plano equidistante, então:

$$N = 12 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 3 \quad \therefore \quad N = 2 + 1 + 3 \quad N = 6 \text{ átomos}$$

Enfim, calculando o fator de empacotamento da estrutura HS, tem-se:

$$F.E. = \frac{N V_a}{V_c} \quad \therefore \quad F.E. = 6 \cdot \frac{4}{3} \pi \frac{1}{24\sqrt{2}} \quad F.E. = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \quad \therefore \quad F.E. = 0,74 \quad F.E. = 74\%$$

Devido ao alto fator de empacotamento, a estrutura HC é bem comum na natureza, alguns metais como berílio, berquélío, lítio, magnésio, cádmio, cobalto e titânio se arranjam dessa forma.

Cálculo da densidade volumétrica (ρ_v).

Usando o modelo atômico de esferas rígidas para a célula unitária de uma estrutura cristalina qualquer de um metal e um valor para o raio atômico desse metal, obtido através do processo de difração de raios-X, é possível determinar a densidade volumétrica de um metal através da seguinte equação:

$$\rho_v = \frac{n \cdot m}{v \cdot N_a}$$

onde:

n=número de átomos por célula unitária; m=massa atômica do material;

V=volume da célula unitária do material; N_a : número de Avogrado ($6,02 \times 10^{23}$).

Para uma melhor compreensão dessa relação, faz-se necessário sua aplicação em um problema concreto, então:

O átomo de cobre tem estrutura CFC e raio atômico 0,1278 nm. Considerando que os átomos são esferas rígidas que se tocam ao longo das faces da célula unitária CFC, calcule o valor teórico da densidade do cobre, em megagramas por metro cúbico. A massa atômica do cobre é 63,54 g/mol.

RESOLUÇÃO: Na célula unitária CFC existem 4 átomos($n=4$ átomos), a massa m pode ser calculada multiplicando a massa atômica por 10^{-6} que é o fator de conversão de gramas para mega gramas, logo:

$$m = 63,54 \cdot 10^{-6} \quad \therefore \quad m = 6,354 \cdot 10^{-5} \text{ Mg/mol}$$

O volume da célula unitária pode ser calculado através da relação demonstrada anteriormente ($V_c = 16\sqrt{2} r^3$):

$$V_c = 16 \cdot 1,41 \cdot (0,1278 \cdot 10^{-9})^3 \quad \therefore \quad V_c = 0,0470 \cdot 10^{-27} \quad V_c = 4,70 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

Calculando a densidade do cobre, enfim:

$$\rho_v = \frac{n \cdot m}{V \cdot N_a} \quad \therefore \quad \rho_v = \frac{4,6,354}{6,02 \cdot 4,70} \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-23} \cdot 10^{29} \quad \rho_v = 0,898 \cdot 10 \quad \therefore \quad \rho_v = 8,98 \text{ Mg/m}^3$$

Neste problema, obteve-se para a densidade do cobre o valor $8,98 \text{ Mg/m}^3$ ($8,98 \text{ g/cm}^3$). O valor experimental Tabelado para a densidade do cobre é $8,96 \text{ Mg/m}^3$ ($8,96 \text{ g/cm}^3$). O valor ligeiramente mais baixo da densidade experimental pode ser atribuído à ausência de átomos em algumas posições atômicas (lacunas), há defeitos lineares e ao desajustamento dos átomos em limites de grão (fronteiras entre grãos). Outra causa da discrepância pode ser devida ao fato de os átomos não serem esferas perfeitas e o cálculo do volume da célula unitária ser feito através da geometria euclidiana.

CONCLUSÕES

Grande parte dos materiais utilizados em Engenharia possui uma estrutura cristalina que se caracteriza por ser um modelo tridimensional, ordenado e repetitivo. Nessa estrutura, é perceptível um arranjo atômico semelhante em todas as dimensões do material cristalino, onde é possível evidenciar a maioria das propriedades através de equações matemáticas e procedimentos algébricos que são determinantes para o conhecimento minucioso da estrutura como um todo. Neste contexto, a análise matemática dessas estruturas detém-se a uma pequena parte do material que conserva todas as suas propriedades, a célula unitária. Através da análise de cada célula unitária, é possível traçar relações importantes entre os parâmetros de rede (arestas da célula unitária) e o raio atômico dos átomos, sendo que essa relação é fundamental para determinar o grau de ocupação da célula unitária (fator de empacotamento) e a densidade real da célula unitária. Com base na análise dos arranjos cristalinos na natureza, constata-se que uns ocorrem mais comumente devido ao elevado fator de empacotamento da célula unitária.

A análise comparativa evidencia o alto grau de ocupação da célula unitária nos arranjos cúbicos de faces centradas (CFC) e hexagonal compacto (HC). O alto fator de empacotamento dessas duas estruturas resulta em propriedades bem definidas que tornam os materiais que possuem essas estruturas muito utilizadas na Engenharia.

Portanto, a linguagem matemática traduz as características dos arranjos cristalinos desde a estruturação geométrica das células unitárias até os procedimentos para o cálculo do fator de empacotamento e da densidade real dos mesmos, sendo que a fundamentação teórica desses procedimentos torna-se concisa e precisa, além de explicar coerentemente os resultados de tais procedimentos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 - PADILHA, A. F. Materiais de engenharia. São Paulo: Hemus, 1997.
- 2 - VAN VLACK, L. H. Princípio de ciência dos materiais. Edgar Blucher, 1984.
- 3 - NEVES, Paulo Cesar Pereira. Introdução à mineralogia prática. 2ª Ed. Canoas: ULBRA. 2008.
- 4 - SMITH, W. F. Princípio de ciência e engenharia dos materiais. 3 ed. Portugal: McGraw-Hill, 1998.

MATHEMATICS IN SCIENCE AND ENGINEERING OF MATERIALS

ABSTRACT

Most materials used in engineering that has a crystal structure characterized by a three-dimensional model, ordered and repetitive. This structure is noticeable atomic arrangement similar in all dimensions of the crystalline material, where it is possible to show most of the properties through mathematical equations and algebraic procedures that are essential to the thorough knowledge of the structure as a whole. The mathematical analysis of these structures holds up a small part of the material that retains all its properties, unit cell. Through analysis of the cell is possible to trace relationships between network parameters and the atomic radius of atoms, and that this relationship is critical in determining the degree of occupancy and density of the unit cell. The mathematical language translates the characteristics of the crystalline arrangement of the materials, since the geometrical structure of the cells to the procedures for calculating the packing factor and density.

Key-words: crystal Structure, atomic arrangement, Materials Science.