

oficina de textos

Richard J. D. Tilley

# CRISTALOGRAFIA

*cristais e estruturas cristalinas*

tradução | Fábio R. D. de Andrade

Crystal and crystal structures  
Copyright original © 2006 John Wiley & Sons Ltd, Sussex, Inglaterra  
Copyright da tradução em português © 2014 Oficina de Textos

Grafia atualizada conforme o Acordo Ortográfico da Língua Portuguesa de 1990,  
em vigor no Brasil desde 2009.

CONSELHO EDITORIAL Cylon Gonçalves da Silva; Doris C. C. K. Kowaltowski; José  
Galizia Tundisi; Luis Enrique Sánchez; Paulo Helene;  
Rozely Ferreira dos Santos; Teresa Gallotti Florenzano

CAPA E PROJETO GRÁFICO Malu Vallim  
DIAGRAMAÇÃO E PREPARAÇÃO DE FIGURAS Maria Lúcia Rigon  
PREPARAÇÃO DE TEXTOS Pâmela de Moura Falarara  
REVISÃO DE TEXTOS Hélio Hideki Iraha  
IMPRESSÃO E ACABAMENTO Prol gráfica e editora

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**  
**(Câmara Brasileira do Livro, SP, Brasil)**

---

Tilley, Richard J. D.  
Cristalografia : cristais e estruturas cristalinas / Richard J.  
D. Tilley; tradução Fábio R. D. de Andrade. -- 1. ed. -- São Paulo :  
Oficina de Textos, 2014.

Crystal and crystal structures  
Bibliografia.  
ISBN 978-85-7975-154-7

1. Cristalografia 2. Estrutura molecular  
I. Título.

14-08256

CDD-541.22

---

Índices para catálogo sistemático:  
1. Estrutura biomolecular : Química 541.22

Todos os direitos reservados . Tradução autorizada da edição em língua inglesa publicada pela John Willey & Sons Limited.  
A responsabilidade pela precisão da tradução é exclusivamente da Oficina de Textos e não é de responsabilidade da John  
Willey & Sons Limited. Nenhuma parte desse livro pode ser reproduzida de nenhuma forma sem a permissão por escrito  
do detentor do copyright original, John Willey & Sons Limited.

Todos os direitos reservados à **Oficina de Textos**  
Rua Cubatão, 959  
CEP 04013-043 – São Paulo – Brasil  
Fone (11) 3085 7933 Fax (11) 3083 0849  
www.ofitexto.com.br e-mail: atend@ofitexto.com.br

## 1

CRISTAIS E ESTRUTURAS CRISTALINAS .....	11
1.1 Famílias de cristais e sistemas cristalinos .....	12
1.2 Morfologia e classes cristalinas .....	13
1.3 Determinação de estruturas cristalinas .....	15
1.4 Descrição de estruturas cristalinas .....	16
1.5 Estrutura de empacotamento cúbico compacto (A1) do cobre..	18
1.6 Estrutura de empacotamento cúbico de corpo centrado (A2) do tungstênio .....	18
1.7 Estrutura hexagonal (A3) do magnésio.....	19
1.8 Estrutura da halita .....	19
1.9 Estrutura do rutilo.....	20
1.10 Estrutura da fluorita.....	20
1.11 Estrutura da ureia.....	21
1.12 Densidade de cristais.....	23
Respostas das questões introdutórias.....	24
Problemas e exercícios.....	25

## 2

RETÍCULOS, PLANOS E DIREÇÕES.....	27
2.1 Retículos bidimensionais .....	27
2.2 Celas unitárias .....	30
2.3 Retículos recíprocos em duas dimensões .....	33
2.4 Retículos tridimensionais .....	34
2.5 Celas unitárias alternativas .....	36
2.6 Retículos recíprocos em três dimensões .....	39
2.7 Planos do retículo e índices de Miller .....	42
2.8 Retículos hexagonais e índices de Miller-Bravais.....	42
2.9 Índices de Miller e planos em cristais .....	43
2.10 Direções .....	46
2.11 Geometria de retículos .....	47
Respostas das questões introdutórias.....	49
Problemas e exercícios.....	49

**3**

PADRÕES BIDIMENSIONAIS E MOSAICOS.....	52
3.1 Simetria de uma forma isolada: simetria pontual.....	52
3.2 Simetria rotacional de um retículo plano.....	55
3.3 Simetria de retículos planos.....	56
3.4 Os dez grupos pontuais de simetria cristalográfica plana.....	57
3.5 A simetria dos padrões: os 17 grupos pontuais .....	59
3.6 Estruturas cristalinas bidimensionais .....	64
3.7 Posições gerais e especiais.....	67
3.8 Padrões de mosaicos .....	69
Respostas das questões introdutórias .....	71
Problemas e exercícios.....	72

**4**

SIMETRIA EM TRÊS DIMENSÕES .....	76
4.1 Simetria de um objeto: simetria pontual .....	76
4.2 Eixos de inversão: rotoinversão .....	78
4.3 Eixos de inversão: rotorreflexão .....	81
4.4 Símbolos de Hermann-Mauguin para grupos pontuais.....	82
4.5 Simetria dos retículos de Bravais.....	83
4.6 Grupos pontuais cristalográficos.....	85
4.7 Grupos pontuais e propriedades físicas .....	89
4.8 Propriedades dielétricas .....	89
4.9 Índice de refração.....	93
4.10 Atividade óptica .....	94
4.11 Moléculas quirais.....	96
4.12 Geração de segundos harmônicos.....	96
4.13 Grupos pontuais magnéticos e simetria de cor .....	97
Respostas das questões introdutórias .....	99
Problemas e exercícios.....	100

**5**

CONSTRUÇÃO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS COM BASE EM RETÍCULOS E GRUPOS ESPACIAIS .....	103
5.1 Simetria de padrões tridimensionais: grupos espaciais.....	103
5.2 Cristalografia de grupos espaciais.....	104
5.3 Símbolos de simetria de grupo espacial .....	106
5.4 Representação gráfica de grupos espaciais .....	108
5.5 Construção de uma estrutura a partir de um grupo espacial .....	111
5.6 Estrutura do diopsídio, $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ .....	113
5.7 Estrutura da alanina, $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2$ .....	115
Respostas das questões introdutórias .....	120
Problemas e exercícios.....	121

## 6

DIFRAÇÃO E ESTRUTURAS CRISTALINAS.....	124
6.1 Posição dos raios difratados: a Lei de Bragg.....	125
6.2 Geometria dos padrões de difração.....	126
6.3 Tamanho de partícula.....	130
6.4 Intensidade dos raios difratados.....	131
6.5 Fator de espalhamento atômico.....	132
6.6 Fator de estrutura.....	134
6.7 Fatores de estrutura e intensidades.....	136
6.8 Avaliação numérica de fatores de estrutura.....	137
6.9 Simetria e intensidade de reflexão.....	139
6.10 Fator térmico.....	141
6.11 Difração de raios X, método do pó.....	143
6.12 Microscopia eletrônica e imageamento de estruturas.....	147
6.13 Determinação de estrutura por difração de raios X.....	153
6.14 Difração de nêutrons.....	155
6.15 Cristalografia de Proteínas.....	156
6.16 Solução do problema das fases.....	157
6.17 Cristais fotônicos.....	163
Respostas das questões introdutórias.....	165
Problemas e exercícios.....	167

## 7

REPRESENTAÇÃO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS.....	170
7.1 Tamanho dos átomos.....	170
7.2 Empacotamento de esferas.....	171
7.3 Raio metálico.....	174
7.4 Raio iônico.....	176
7.5 Raio covalente.....	177
7.6 Raio de Van der Waals.....	178
7.7 Estruturas iônicas e regras de construção de estrutura.....	179
7.8 Modelo de valência de ligação.....	180
7.9 Estruturas em termos do empacotamento de não metais (ânions).....	183
7.10 Estruturas em termos do empacotamento de metais (cátions).....	185
7.11 Representação de cristais com poliedros de coordenação de cátions centrados.....	185
7.12 Representação de cristais com poliedros de coordenação de ânions centrados.....	188
7.13 Estruturas como redes.....	191
7.14 Representação de estruturas orgânicas.....	193

7.15	Representação de estruturas de proteínas.....	194
	Respostas das questões introdutórias.....	199
	Problemas e exercícios.....	200

## 8

	DEFEITOS, ESTRUTURAS MODULADAS E QUASICRISTAIS.....	203
8.1	Defeitos e fatores de ocupação.....	203
8.2	Defeitos e parâmetros de cela unitária.....	205
8.3	Defeitos e densidade.....	206
8.4	Estruturas modulares.....	207
8.5	Polítipos.....	210
8.6	Fases de cisalhamento cristalográfico.....	213
8.7	Intercrescimentos planos e polissomas.....	217
8.8	Estruturas incomensuradamente moduladas.....	220
8.9	Quasicristais.....	226
	Respostas das questões introdutórias.....	228
	Problemas e exercícios.....	230

## APÊNDICES

1	Adição e subtração de vetores.....	233
2	Dados de algumas estruturas inorgânicas.....	234
3	Símbolos de Schoenflies.....	237
4	Os 230 grupos espaciais.....	240
5	Números complexos.....	244
6	Amplitudes complexas.....	246

	RESPOSTAS DOS PROBLEMAS E EXERCÍCIOS.....	248
--	---	-----

	BIBLIOGRAFIA.....	255
--	-------------------	-----

	ÍNDICE REMISSIVO.....	263
--	-----------------------	-----