

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
--	-----------------------	-----