

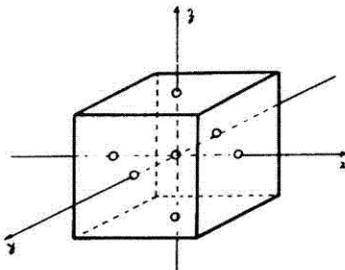
# A GEOMETRIA DOS CRISTAIS

Francis Michel, Ecole Decroly - Bruxelas (\*)

## Introdução

O estudo dos cristais na escola secundária permite introduzir de um modo elegante e natural um grande número de noções matemáticas, físicas e químicas. Neste artigo, vamos-nos limitar à parte matemática dada a grande dificuldade que subsiste, nas escolas, em abordar temas de modo pluridisciplinar. Contudo, é indispensável mostrar cristais naturais ou artificiais aos alunos antes de emprender um tal estudo pois poderemos então fazer referência a observações feitas na aula, o que será uma motivação importante que os manterá atentos e lhes estimulará a imaginação.

Utilizaremos um modelo muito simples para reencontrar as formas cristalinas: em primeiro lugar, uma rede de pontos (centros dos átomos) dispostos com regularidade no espaço. Procuraremos, em seguida, os planos que passam pelo maior número (a mais forte densidade) destes pontos, os planos reticulares. Na realidade, os planos de clivagem passam entre os átomos, mas são paralelos aos planos reticulares. As intersecções dos planos reticulares definem as arestas, os vértices e as faces dos poliedros cristalinos. Pondo os átomos nos pontos de coordenadas inteiras de um sistema ortornormado obtemos uma rede cúbica simples; podemos então observar grupos de oito átomos colocados nos vértices dos cubos. Cada átomo tem seis vizinhos mais próximos pelo que se diz que o índice de coordenação ou coordenância é seis.



Nesta disposição simples, os seis planos reticulares têm como equações:

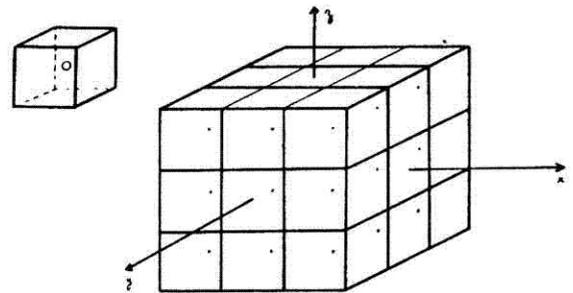
$$x=\pm 1, y=\pm 1, z=\pm 1$$

Os oito vértices são:  $(1,1,1)$ ;  $(1,1,-1)$ ;  $(1,-1,1)$ ;  $(1,-1,-1)$ ;  $(-1,1,1)$ ;  $(-1,1,-1)$ ;  $(-1,-1,1)$ ;  $(-1,-1,-1)$  para os quais utilizaremos a notação seguinte:  $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ .

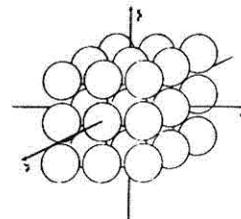
Vemos que o átomo  $(0,0,0)$  está cercado pelos seis vizinhos mais próximos:

$$(0,0,\pm 1); (0,\pm 1,0); (\pm 1,0,0)$$

Utilizaremos frequentemente uma outra representação para facilitar a visualização a três dimensões, para o que colocaremos cada átomo no centro de um cubo, mantendo o mesmo sistema de coordenadas:



Por vezes, ainda, desenharemos esferas:



É também importante construir modelos a três dimensões que precisarão melhor as noções introduzidas. Para este efeito, poder-se-á utilizar papel forte (tipo cartolina).

Outra hipótese é a construção de modelos empilhando bolas de plasticina que colam ligeiramente umas às outras.

Podemos obter outras redes por afinidades ou imbricando vários sistemas cúbicos uns nos outros. Parece natural começar pelo estudo do sistema cúbico simples e pelos poliedros deste sistema.

### O sistema cúbico simples

#### a) As isometrias do cubo

Os elementos de simetria duma rede cúbica simples são as isometrias do cubo:

seis eixos de ordem 2:  $6L^2$

quatro eixos de ordem 3:  $4L^3$

três eixos de ordem 4:  $3L^4$

nove planos de simetria:  $9P$

um centro de simetria:  $C$

Falaremos de holoedria quando se tratar de um poliedro com todas as simetrias de uma rede, caso contrário falaremos de hemiedria.

#### b) A holoedria

Relembremos algumas propriedades do cubo:

Planos:  $x = \pm 1, y = \pm 1, z = \pm 1$  (se a aresta for 2)

Vértices:  $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$

Faces: quadrados

Ângulos diedros:  $90^\circ$  ou  $\pi/2$  radianos (plano)

Ângulos sólidos:  $1/8$  de esfera ou  $4\pi/8 = \pi/2$  radianos (volume)

Os cubos "pavimentam" o espaço.

Seis faces idênticas (quatro posições para cada face).

Dito vértices idênticos (três posições para cada vértice).

Doze arestas idênticas (duas posições para cada aresta).

(24 posições no total)

15 pares de faces - 3 pares de faces opostas e 12 pares de faces adjacentes (arestas)

28 pares de vértices - 4 pares de vértices opostas (grandes diagonais); 12 pares de vértices opostos segundo as faces (pequenas diagonais); 12 pares de vértices adjacentes (arestas).

66 pares de arestas - 18 pares de arestas paralelas (12+6); 24 pares de arestas concorrentes; 24 pares de arestas enviesadas.

O octaedro obtém-se cortando a rede pelos planos

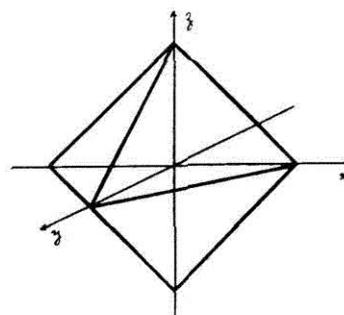
$$\pm x \pm y \pm z = 1$$

Os vértices são:  $(\pm 1, 0, 0)$

$(0, \pm 1, 0)$

$(0, 0, \pm 1)$

As faces são triângulos equiláteros.



Os ângulos diedros

$$\cos \varphi = (1, 1, 1) \cdot (1, 1, -1) / \sqrt{3} \sqrt{3} = 1/3$$

$$\varphi \approx 70,52^\circ \text{ donde } \delta \approx 109,47^\circ \approx 1,91 \text{ rad}$$

O ângulo sólido  $\sigma \approx 4 \times 1,91 - 2\pi \approx 1,357$

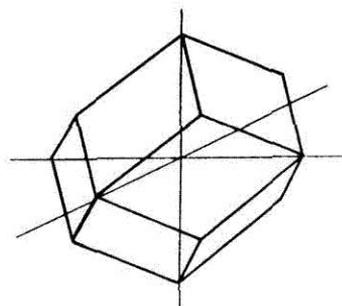
Os elementos de simetria são os mesmos que os do cubo com a correspondência "vértices  $\leftrightarrow$  faces".

O rombo-dodecaedro é delimitado pelos planos:

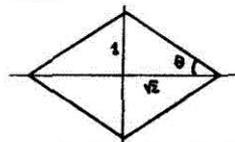
$$\pm x \pm y = 1$$

$$\pm y \pm z = 1$$

$$\pm z \pm x = 1$$



As faces são losangos cujas diagonais medem 1 e  $\sqrt{2}$ .



$$\text{tg } \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ donde } \theta \approx 35,26^\circ$$

Os ângulos diedros

$$\cos \varphi = (1, 1, 0) \cdot (1, 0, 1) / \sqrt{2} \sqrt{2} = 1/2$$

$$\varphi = 60^\circ \quad \delta = 120^\circ = 2\pi/3$$

o que se verifica facilmente com dodecaedros de cartão.

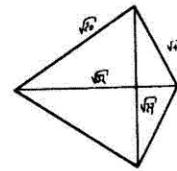
Existem dois tipos de vértices:

1) com três arestas;

$$\hat{\text{ângulo sólido}} = 3 \cdot (2\pi/3) - \pi = \pi$$

2) com quatro arestas;

$$\hat{\text{ângulo sólido}} = 4 \cdot (2\pi/3) - 2\pi = 2\pi/3$$



Para pavimentar o espaço eles dispõem-se de forma a ter quatro vértices do primeiro tipo ou seis vértices do segundo para formar ângulos sólidos completos.

Se os vértices com quatro arestas estão em  $(\pm 2, 0, 0)$ ,  $(0, \pm 2, 0)$ ,  $(0, 0, \pm 2)$ , como os vértices de um octaedro, os outros estão em  $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$  como os vértices de um cubo.

Podemos fazer-se a seguinte tabela de correspondência:

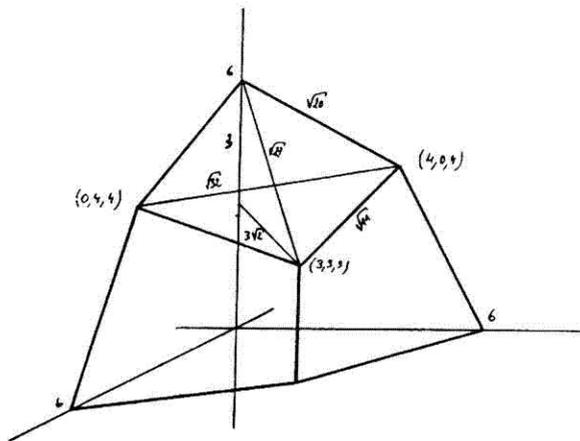
Rombo-dodecaedro	Cubo	Octaedro
12 grandes diagonais		12 arestas
12 diagonais menores	12 arestas	
8 vértices c/ 4 arestas	8 vértices	8 faces
6 vértices c/ 3 arestas	6 faces	6 vértices

Reencontram-se evidentemente todas as simetrias do sistema cúbico.

Os planos

$$\begin{aligned} \pm 2x \pm y \pm z &= 12 \\ \pm x \pm 2y \pm z &= 12 \\ \pm x \pm y \pm 2z &= 12 \end{aligned}$$

determinam um poliedro com vinte e quatro faces:



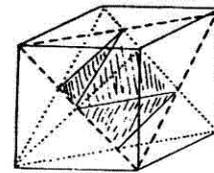
As faces são quadriláteros (tipo papagaio de papel):

O cálculo dos ângulos fica como exercício de Trigonometria.

Estes dois últimos poliedros são frequentes na cristalização natural da granada.

c) A hemiedria

O tetraedro pode ser obtido em duas posições diferentes:



Estes dois tetraedros são inscritos num cubo e intersectam-se segundo um octaedro. As suas faces são:

$$\begin{aligned} x + y + z &= 1 & -x + y - z &= 1 \\ -x - y + z &= 1 & -x - y - z &= 1 \\ x - y - z &= 1 & x - y + z &= 1 \\ -x + y - z &= 1 & -x + y + z &= 1 \end{aligned} \quad \text{e}$$

que são as faces do octaedro.

As faces são triângulos equiláteros.

Os vértices são os do cubo (dois subconjuntos).

Os ângulos diedros:

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= (1, 1, 1) \cdot (-1, -1, 1) / \sqrt{3} \sqrt{3} = -1/3 \\ \varphi &\approx 109.47^\circ & \delta &\approx 70.52^\circ \approx 1.23 \end{aligned}$$

O ângulo  $\delta$  corresponde ao ângulo entre as diagonais do cubo.

$$\text{O ângulo sólido: } \sigma \approx 3 \times 1.23 - \pi \approx 0.5513$$

$$\text{Verificamos que } 4 \sigma_{\text{tetraedro}} + 3 \sigma_{\text{octaedro}} = 2\pi$$

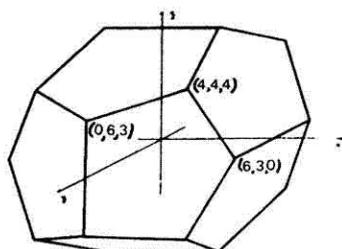
O tetraedro tem

$\left. \begin{array}{l} \text{quatro vértices (3 posições)} \\ \text{quatro faces (3 posições)} \\ \text{seis arestas (2 posições)} \end{array} \right\} \text{deslocamentos } 12$   
 seis planos de simetria  
 não tem centro de simetria

Donde, teremos os elementos de simetria  $3L^2 4L^3 6P$ .

É homogêneo nos seus pares de faces e nos seus pares de vértices. Tem dois tipos de pares de arestas: concorrentes ou enviesadas.

O dodecaedro pentagonal é delimitado por planos recticulares de declive dois. Não se deve confundir com o dodecaedro regular:



Tem também duas maneiras de ser obtido, mas os seus elementos de simetria não são os mesmos que os do tetraedro. Os planos das faces são:

$$\begin{aligned} \pm x \pm 2y &= 12 & \pm 2x \pm y &= 12 \\ \pm y \pm 2z &= 12 & \pm 2x \pm z &= 12 \\ \pm z \pm 2x &= 12 & \pm 2z \pm x &= 12 \end{aligned}$$

Os ângulos diedros são de dois tipos, ou  $\cos \psi = (2,1,0) \cdot (2,-1,0) / \sqrt{5} \sqrt{5} = 3/5$   
 $\psi \approx 58.13^\circ \quad \delta \approx 126.86^\circ$

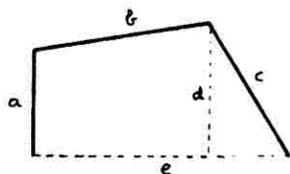
ou, então,

$$\cos \psi = (1,2,0) \cdot (0,1,2) / \sqrt{5} \sqrt{5} = 2/5$$

$$\psi \approx 66.42^\circ \quad \delta \approx 113.58^\circ$$

Os elementos de simetria são  $3L^2 4L^3 3PC$

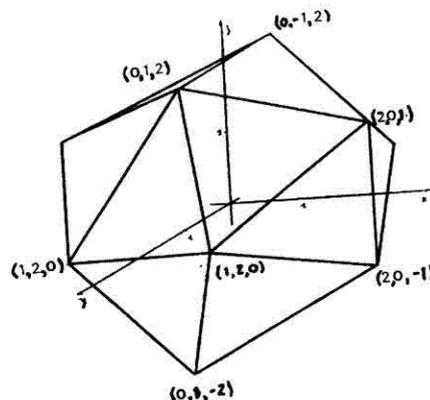
Para o cálculo os comprimentos das arestas, o desenho com cubos poderá ser útil. Obter-se-á:



$$\begin{aligned} a &= 3 \quad (2a=6) \\ b &= \sqrt{1+4+16} = \sqrt{21} \\ c &= \sqrt{4+1+16} = \sqrt{21} \\ d &= 4 \quad (2d=8) \\ e &= \sqrt{9+36} = \sqrt{45} \end{aligned}$$

O icosaedro (figura seguinte) também não é regular. Tem dois tipos de faces:

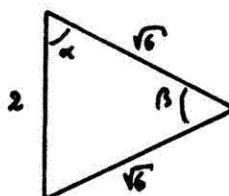
- 1) Triângulos equiláteros (lado= $\sqrt{6}$ )
- 2) Triângulos isósceles (lados=2 e  $\sqrt{6}$ )



É determinado pelos planos

$$\pm x \pm y \pm z = 3 \quad \text{e} \quad \begin{aligned} \pm 2x \pm y &= 4 \\ \pm 2y \pm z &= 4 \\ \pm 2z \pm x &= 4 \end{aligned}$$

As faces



$$\begin{aligned} \cos \alpha &= 1/\sqrt{6} \\ \alpha &\approx 65.9^\circ \\ \beta &\approx 48.2^\circ \end{aligned}$$

Os ângulos diedros

$$\cos \psi_1 = (2,1,0) \cdot (2,-1,0) / \sqrt{5} \sqrt{5} = 3/5$$

$$\psi_1 \approx 53^\circ \quad \delta_1 \approx 127^\circ$$

$$\cos \psi_2 = (2,1,0) \cdot (1,1,1) / \sqrt{5} \sqrt{3} = \sqrt{3}/\sqrt{5}$$

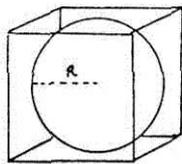
$$\psi_2 \approx 39.25^\circ \quad \delta_2 \approx 140.75^\circ$$

Estes poliedros encontram-se nos cristais da pirite.

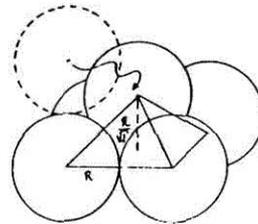
### Os diferentes sistemas cúbicos

Encontramos três redes tendo todas a simetria cúbica: a cúbica simples, a cúbica centrada e a cúbica de faces centradas. Diferenciam-se principalmente pela sua "densidade" ou parte do espaço ocupado pelas esferas atômicas.

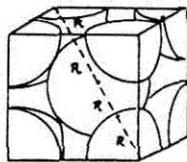
A cúbica simples:



$$\delta = \frac{((4/3)\pi R^3) / 8R^3}{1} = \pi/6 \approx 52\%$$



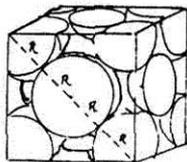
A cúbica centrada:



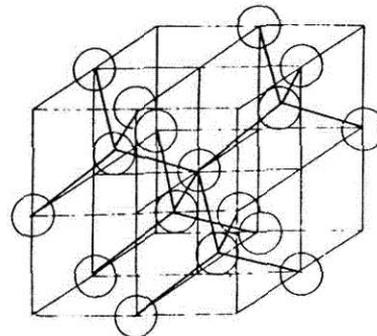
$$\delta = \frac{(2(4/3)\pi R^3) / (4R/\sqrt{3})^3}{1} = \frac{(8\pi/3) / (64/3\sqrt{3})}{1} = \sqrt{3} \pi/8 \approx 68\%$$

Podemos também construir um sistema cúbico (hemiedria) com coordenação quatro onde os átomos ocupam cubos colocados como na figura:

A cúbica de faces centradas:

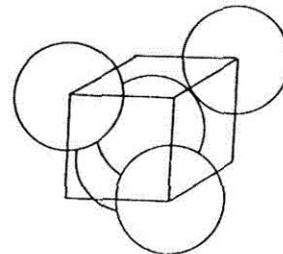
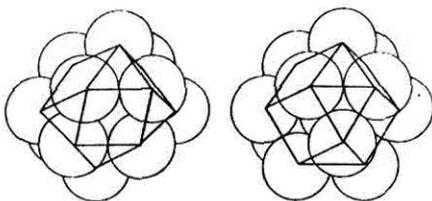


$$\delta = \frac{(4(4/3)\pi R^3) / (4R/\sqrt{2})^3}{1} = \frac{(16\pi/3) / (64/2\sqrt{2})}{1} = \sqrt{2} \pi/6 \approx 74\%$$



A rede cúbica centrada tem índice de coordenação oito. A rede cúbica de faces centradas tem índice de coordenação doze; vamos prová-lo construindo-o de uma outra maneira: é, com efeito, a estrutura mais densa. Podemos colocar esferas num plano formando hexágonos e observar que se pode colocar as esferas adjacentes nos planos paralelos de duas maneiras diferentes (hexagonal ou cúbica):

Se os átomos se tocam:



Neste caso, torna-se indispensável recorrer a modelos tridimensionais para melhor visualizar a posição das esferas. Calcula-se facilmente o volume ocupado por esta estrutura relacionando-o com o da estrutura cúbica simples, constatando-se que equivale a um "esmagamento" correspondente à altura do octaedro (figura seguinte).

$$\text{Donde, } \delta = (\pi/6) \cdot \sqrt{2} \approx 74\%$$

Falta agora mostrar que a segunda estrutura é, de facto, uma rede cúbica de faces centradas:

Reencontramos um semi-sistema cúbico que tem portanto uma densidade de  $68\%/2 \approx 34\%$ . O carbono cristalizado desta maneira pode dar o diamante. É necessário recorrer a um modelo para visualizar os octaedros. Existe uma outra rede de coordenação quatro no sistema hexagonal que corresponde à cristalização do gelo e do quartzo.

(\* ) Francis Michel é um dos sócios fundadores da APM. Este artigo é uma tradução e adaptação (autorizadas pelo autor) de um trabalho publicado no nº 3 (1985) de "Mathématique et Pédagogie", Revista da Sociedade Belga de Professores de Matemática.