Gabarito – Prova 1 – Materiais

Questão 1)

a) A diferença de potencial elétrico representa a energia que cada Coulomb ganha ao ser acelerado entre as duas regiões com potenciais diferentes, portanto:

$\Delta V \cdot e$ = energia ganha pelo elétron.

Esta energia deve produzir um ganho de velocidade tal que $m_e \cdot v = P$ seja suficiente para $\lambda = \frac{h}{P}$ seja da ordem requerida.

Obtenção de $\underline{v}$. Aqui vamos considerar uma abordagem clássica, tal que $\Delta V \cdot e$ seja totalmente convertida em energia cinética do tipo $\frac{1}{2} m_e v^2$.

$\Rightarrow \quad \Delta V \cdot e = \frac{1}{2} m v^2$, mas $\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{m_e \cdot v} \Rightarrow v = \frac{h}{\lambda \cdot m_e}$

$\Rightarrow \quad \Delta V = \frac{1}{2 \cdot e} \cancel{m_e} \cdot \frac{h^2}{\lambda^2 \cdot m_e^{\cancel{2}}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta V = \frac{h^2}{2 e m_e \lambda^2}}$ Obs: Queremos que $\lambda \approx 10^{-10}$ m

$\Rightarrow \quad \Delta V = \frac{6{,}6^2 \times 10^{-68}}{2 \cdot 1{,}6 \times 10^{-19} \cdot 10^{-20} \times 9{,}1 \times 10^{-31}} \cong 1{,}50 \times 10^2 \approx \boxed{150 \text{ volts.}}$

Note que $v \approx \frac{6{,}6 \times 10^{-34}}{10^{-10} \cdot 9{,}1 \times 10^{-31}} \approx 0{,}73 \times 10^7$ m/s

$v \approx 7{,}3 \times 10^6$ m/s

Comparando com a velocidade da luz: $\frac{v}{c} = \frac{7{,}3 \times 10^6}{3{,}0 \times 10^8} \cong 2{,}4 \times 10^{-2} = 0{,}024$

O que representa uma velocidade "muito" menor que a da luz o que torna a abordagem clássica possível e com bons resultados.

b) Fequência da onda.

Relutivisticamente (desnecessário na prova, apenas como ilustração).

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{\gamma m v}$$

Obs: $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ corresponde ao fator relativístico. Note que se $v \ll c$ $\gamma \simeq 1$ e

$\lambda = \frac{h}{p}$.

Para a energia, se considerado o fator relativístico, $E = \gamma m c^2 = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$

Mas $E = h.\nu \Rightarrow h.\nu = \gamma m c^2$

$\Longrightarrow \nu = \frac{mc^2}{h.\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$, onde $\begin{cases} m = \text{massa do elétron} = 9{,}1 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ c = \text{velocidade da luz} = 3{,}0 \times 10^{8} \text{ m/s} \\ v = \text{velocidade do elétron, calculada na letra (a)} = 7{,}3 \times 10^{6} \text{ m/s} \\ h = \text{cte de Planck} = 6{,}6 \times 10^{-34} \text{ J.s} \end{cases}$

Portanto: $\nu = \frac{9{,}1 \times 10^{-31} \cdot 3^2 \times 10^{16}}{6{,}6 \times 10^{-34} \cdot \sqrt{1-0{,}024^2}} = \frac{12{,}4}{\sqrt{0{,}9994}} \times 10^{19}$ Hz

Note que o fator relativístico é praticamente $1 \approx \frac{1}{\sqrt{0{,}9994}}$. Isto deve-se ao fato de $v \ll c$, como comentado acima. Portanto, não seria necessário considerarmos uma abordagem relativística.

$$\approx \boxed{\nu \simeq 12{,}4 \times 10^{19} \text{ Hz}}$$

Forma "errada"

Naturalmente, ocorre uma tendência de se utilizar a relação $E = h.\nu$.

$\Rightarrow \nu = \frac{E}{h}$, tal que E = à energia cinética apenas $\left(\frac{1}{2}mv^2\right)$ invez da energia total $E = \gamma m c^2$.

Neste caso $\Rightarrow e.\Delta V = \frac{1}{2}mv^2 = 1{,}6 \times 10^{-19} \cdot 150$ J $\Rightarrow E \cong 2{,}4 \times 10^{-17}$ J $\Rightarrow \nu = \frac{E}{h} \Rightarrow \nu = 3{,}6 \times 10^{16}$ Hz

Uma frequência 10^3 vezes menor. **Obs: Será considerada correta esta solução. visto que a turma não tem Física moderna**

c) Uma explicação correta pode ter várias formas. De uma forma geral:

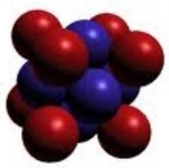
O módulo ao quadrado da função de onda $|\Psi(x,t)|^2$, é interpretado como sendo a probabilidade por unidade de $\underline{x}$ e por unidade de $\underline{t}$ (densidade de probabilidade) de se encontrar a partícula próxima à posição $\underline{x}$ no momento próximo de t. Desta forma a posição dos elétrons ao redor de um núcleo atômico não é bem definida como no modelo de Bohr, mas sim regiões mais ou menos prováveis de serem encontrados. Neste caso, as regiões de maior probabilidade coincidem com os previstos pelo modelo de Bohr.

Questão 2)

Dados: $r = 0{,}143$ nm ; Estrutura CFC, massa $= 27u$.

a) Volume da célula unitária:

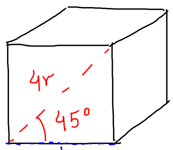
Face-Centered Cubic Structure



A sample static image from the Animations for Introductory Chemistry CD-ROM by John I. Gelder at Oklahoma State University
© 1994 Copyright by Oklahoma State University

$\Rightarrow V_c = a^3$, sendo $\underline{a}$ o comprimento das arestas cujos vértices estão situados no centro dos átomos.

$\Rightarrow$



$\hookrightarrow a = 4r\cos(45°) \quad \Rightarrow V_c = \left(4 \cdot 0{,}143 \cdot 10^{-9} \cdot \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^3$

$a \approx 0{,}404^3 \times 10^{-27}\ m^3$

$a \approx 0{,}066 \cdot 10^{-27}\ m^3$

$$\boxed{a \cong 6{,}6 \times 10^{-29}\ m^3}$$

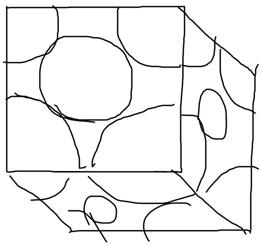
b) densidade (ρ).

$$\rho = \frac{\text{massa} \rightarrow (\text{kg no SI})}{\text{volume} \rightarrow (m^3 \text{ no SI})}$$

$\Rightarrow$ Precisamos saber quanta massa tem dentro de uma célula e dividir pelo volume da célula.

$\Downarrow$

Primeiro vamos verificar quantos átomos existem dentro de uma célula do tipo CFC.



No centro de cada face temos meio átomo, como existem 6 faces ⇒ temos 3 átomos. Temos também 1/8 de átomo em cada vértice. Existem 8 vértices, portanto mais 1 átomo, totalizando quatro átomos dentro da célula.

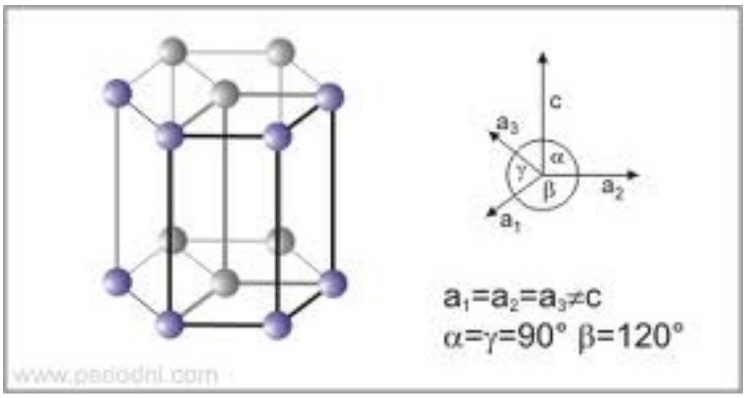
$$\Rightarrow \rho = \frac{4 \times 27u}{6{,}6 \times 10^{-29}\,m^3} \quad ; \quad 1u = 1{,}66 \times 10^{-27}\,kg$$

$$\rho = \frac{4 \times 27 \times 1{,}66 \times 10^{-27}}{6{,}6 \times 10^{-29}}\,kg/m^3 = 27{,}16 \times 10^{2}\,kg/m^3$$

$$\boxed{\rho \approx 2716\,kg/m^3}$$

Questão 3) Resp. (100), (002), (101).

Solução: Um sistema hexagonal é do tipo



Para o caso particular de um sistema hexagonal,

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + l^2 \cdot \frac{a^2}{c^2}}}$$

Pela equação acima fica claro que quanto menores os valores de h, k e l, maior será o valor de d_{hkl}. Uma maneira de se responder o problema é atribuindo valores aos índices h, k e l; atribuindo algum valor qualquer para $\underline{a}$ e $\underline{c}$ e então verificar-se os d_{hkl} de forma crescente.

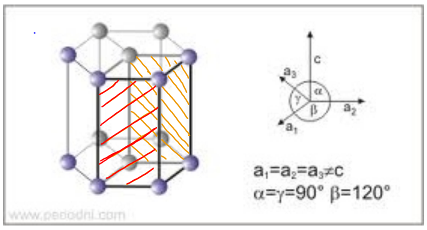
Outra forma seria utilizar-se a figura acima, do sistema hexagonal, visualizando-se (justificando) quais seriam os maiores d_{hkl}.

⇒ por $d_{hkl} = \dfrac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + \left(\frac{l.a}{c}\right)^2}}$, jogando valores para h, k e l;

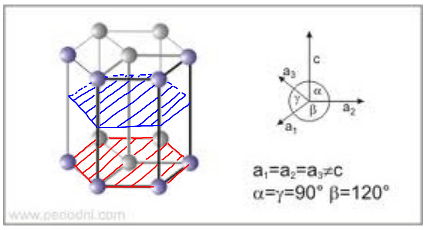
construindo uma tabela para várias combinações chega-se que o três primeiros picos ocorrem para (100), (002) e (101).

Pela Fig. ⇒

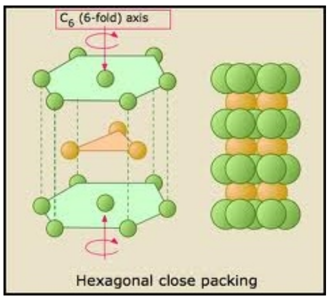
(100) ⇒



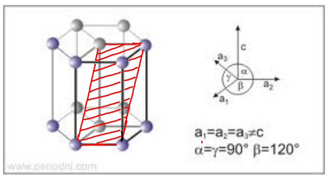
(002) ⇒



"lembrar que existem átomos situados nos espaços vazios do plano intermediário.



e (101)

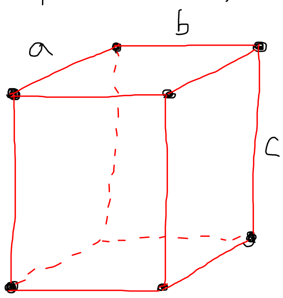


Obs: desenhando demais planos possíveis nota-se que os planos acima são os que possuem maiores d_{hkl}.

— // —

Vamos usar a relação $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{K^2}{b^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$, que apesar de não ser a expressão correta para uma célula hexagonal podemos retornar "bons" valores para h, K e ℓ.

Para isso vamos supor que a célula que se repete é uma parte da hexagonal, como segue:



Vamos impor, como muitos fizeram na prova, que $a = b = 1$ e $c = 2$.

$$\Rightarrow \frac{1}{d^2} = h^2 + K^2 + \frac{\ell^2}{4} \Rightarrow d = \frac{1}{\sqrt{h^2 + K^2 + \frac{\ell^2}{4}}}$$

Quanto menores os valores de $hK\ell$, maior o d. Como temos átomos em $c/2$ ⇒ os planos (001) são na verdade a 2ª ordem de (002), portanto (001) deve ser descartado). Adicionalmente (100) equivale a (010) ...

Testes para: (100), (002), (110), (101) ... "Não imagino outras possibilidades".

Obs: (101) = (011)

Para (100) $\Rightarrow d_{hK\ell} = \frac{1}{\sqrt{1}} = 1$ (unidades quaisquer de comprimento).

Para (002) $\Rightarrow d_{hK\ell} = \frac{1}{1} = 1$ "Metade da altura"

Para (110) $\Rightarrow d_{hK\ell} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0{,}7$

Para (101) $\Rightarrow d_{hK\ell} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{4}}} = \frac{1}{\sqrt{1{,}25}} = 0{,}89$

Portanto os que retornam maiores $d_{hK\ell}$'s são (100), (002) e (101).
Mesmo com a expressão "errada" a aproximação é boa.

—//—

Questão 4) Obs: Como estamos estudando cristalografia, então a resposta deve estar baseada na forma da estrutura cristalina da água sólida comparada com a água no seu estado líquido.

↓

Um dos motivos para $\rho_{a,\text{sólida}} < \rho_{a,\text{líquida}} \Rightarrow (\rho_s < \rho_L)$, apontado por muitos alunos na avaliação, foi: No estado líquido as moléculas possuem mobilidade e ocupam posições aleatórias quaisquer. Ao solidificar a ligação produz uma molécula estável com espaços vazios que não são ocupados; desta forma $\rho_s < \rho_L$. $\Rightarrow$ Isto efetivamente ocorre, mas não é uma boa explicação, pois se esse fosse o motivo principal todos os materiais seriam expandidos ao solidificarem, afinal sempre assumem alguma estrutura cristalina estável com espaços vazios... (e então, pq com a água $\rho_s < \rho_L$ e a grande maioria dos outros líquidos não?).

O que diferencia a água em relação aos demais é que a estrutura da água sólida, com 4 ligações de hidrogênio, resulta em uma estrutura tetraédrica; estrutura com baixo fator de empacotamento. Outros materiais tendem à estruturas cristalinas com alto fator de empacotamento fazendo, em geral, $\rho_s > \rho_L$.