

1ª Prova de Ciência de Materiais - 2012/02

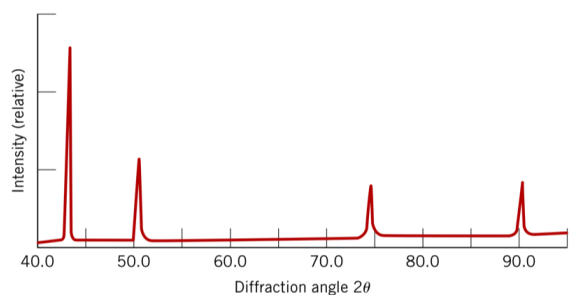
Questão 1) [3,0] Nos átomos há uma probabilidade finita, embora muito pequena, de, num certo instante, um elétron orbital ser encontrado realmente no interior de um núcleo. Na verdade, alguns núcleos instáveis utilizam esse aparecimento ocasional do elétron para decair por um processo denominado captura eletrônica. Admitindo que o próton seja uma esfera de raio $1,1 \cdot 10^{-15}$ m e que a função de onda do elétron do átomo de hidrogênio tenha validade até o centro do próton, use a função de onda do estado fundamental a fim de calcular a probabilidade de o elétron do átomo de hidrogênio estar no interior do núcleo. (Sugestão: quando $x \ll 1$, $e^{-x} \approx 1$).

Obs: A função de onda do estado fundamental é: $\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$, onde $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m.

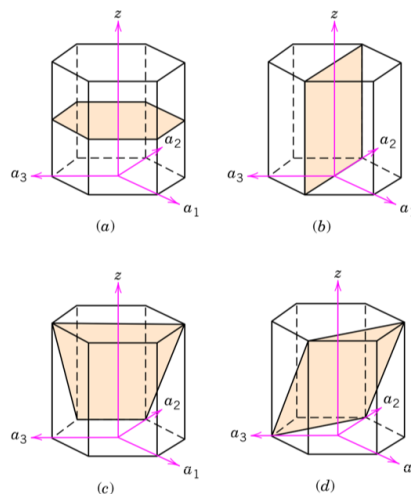
Questão 2) [2,5] A Fig. ao lado mostra os quatro primeiros picos de difração de raios-X para o Cobre, que possui uma estrutura FCC; foi utilizada uma radiação-X com comprimento de onda $\lambda = 0,1542$ nm.

(a) Indexe (ou seja, determine h, k e l índices para) cada um desses picos.

(b) Determine o espaçamento interplanar para cada um desses picos.



Questão 3) [2,0] a) Determine os índices planares para os planos das células hexagonais mostradas na Figura ao lado. b) Quais índices retornam a menor distância interplanar?



Questão 4) [2,5] Mostre que o percentual atômico (C_{at}) em uma liga contendo dois tipos de átomos pode ser escrito na forma

$$C_{at_1} = \frac{C_{m_1} A_2}{C_{m_1} A_2 + C_{m_2} A_1} \times 100,$$

onde C_{at_i} = percentual atômico do átomo i e C_{m_i} = percentual em massa do átomo i . A_i = massa atômica.

Gabarito.

raio do núcleo

$$\langle r \rangle = \int_0^{r_N} \psi^* \psi dV$$

$$\text{com } \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{3/2}} \cdot e^{-r/a_0}$$

Obs: Para o hidrogênio $Z=1$.

Como $\psi(r)$ é real, então $\psi^* = \psi$

Veja: Complexo $C = a + ib$
 $\Rightarrow$ seu conjugado é $C^* = a - ib$

Para um número real $b=0$, logo
 $C = C^* = a$ sendo a real.

$$\Rightarrow \text{Prob.} = \int_0^{r_N} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} dV$$

, como $\psi(r)$ não depende de θ e φ (simetria esférica)

$$\Rightarrow dV = 4\pi r^2 dr$$

$$\text{Prob.} = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^{r_N} r^2 e^{-\alpha r} dr$$

$$\text{sendo } \alpha = 2/a_0$$

O expoente $\frac{2r}{a_0}$ é muito menor que 1 pois $0 < r \leq 1,1 \times 10^{-15}$

enquanto que $a_0 = 5,3 \times 10^{-11}$

$$\Rightarrow 0 < \frac{2r}{a_0} \leq \frac{1,1 \times 10^{-15}}{5,3 \times 10^{-11}}$$

$$0 < \frac{2r}{a_0} \leq 0,00002$$

Portanto, em todo o intervalo $e^{-2r/a_0} \approx 1$ ★ esta foi a dica $e^{-x} \approx 1$.

$$\Rightarrow \text{Prob.} \approx \frac{4}{a_0^3} \int_0^{r_N} r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \left[\frac{r^3}{3} \right]_0^{r_N} = \frac{4}{3} \left(\frac{r_N}{a_0} \right)^3$$

$$\Rightarrow \text{Prob.} \approx \frac{4}{3} \cdot \left(\frac{1,1 \times 10^{-15}}{5,3 \times 10^{-11}} \right)^3$$

$$\text{Prob.} \approx 1,2 \times 10^{-14}$$

Obs: Resolvendo a integral total (com e^{-2r/a_0}) chega-se facilmente na solução exata. Contudo o seu cálculo encontra barreira de processamento em calculadoras científicas comuns, sendo necessária novamente uma aproximação.

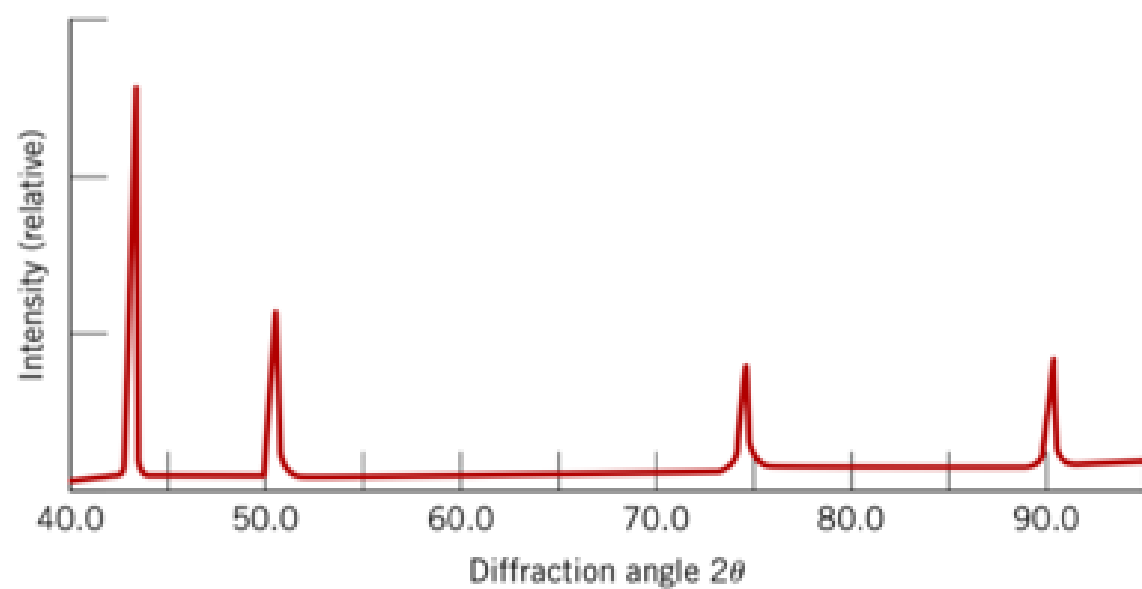
★ Vou considerar os que desenvolveram corretamente a integral.

SOLUÇÃO

Questão 2) [2,5] A Fig. ao lado mostra os quatro primeiros picos de difração de raios-X para o Cobre, que possui uma estrutura FCC; foi utilizada uma radiação-X com comprimento de onda $\lambda = 0,1542\text{nm}$.

(a) Indexe (ou seja, determine h, k e l índices para) cada um desses picos.

(b) Determine o espaçamento interplanar para cada um desses picos.



(a) Menores ângulos $\Rightarrow$ maiores d's.

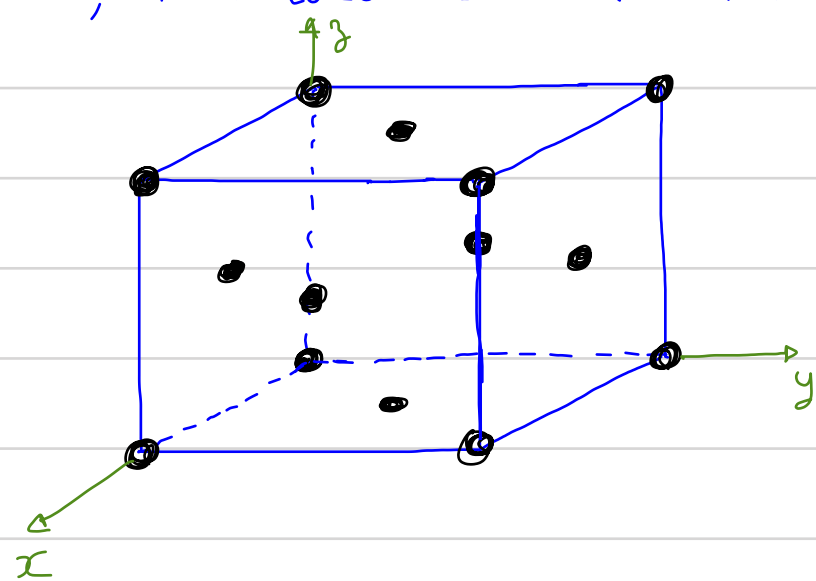
Vamos listar alguma famílias $\{hkl\}$

Obs: famílias pq (100) , (010) , (001) , por exemplo são planos equivalentes $\Rightarrow$ basta usar $\{100\}$.

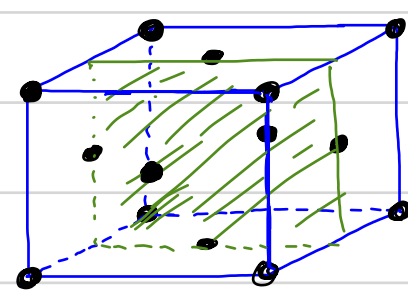
Algumas possibilidades:

$\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$, $\{222\}$... "se faltar algo acrescentamos outras possibilidades depois"

Destes, nem todos se encaixam bem em uma simetria FCC, vejamos.

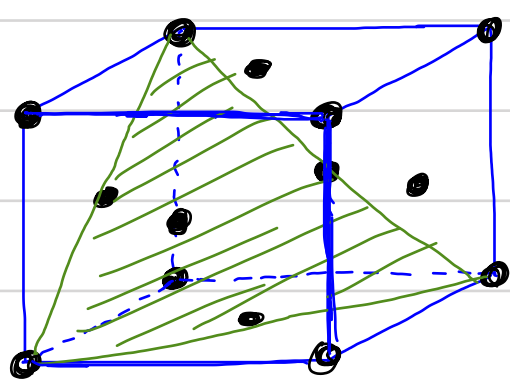


Nítidamente planos da família $\{100\}$ não se encaixam pois existe um plano no meio do "caminho"



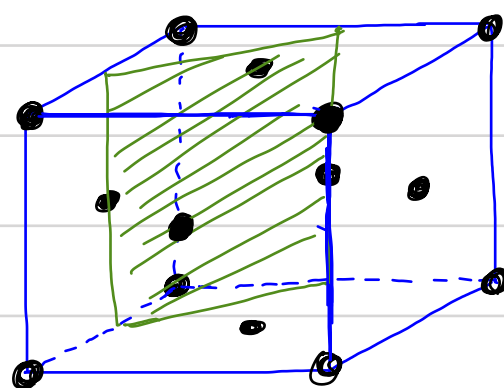
$\Rightarrow (200)$
deve ser um pois possui distância relativamente grande.

Ulhando para a célula "vemos" possibilidades para as maiores distâncias (sempre eliminando os planos com dobro da distância, assim como fizemos com $\{100\} \rightarrow \{200\}$)



$\Rightarrow (111)$

, também $\Rightarrow$



$\Rightarrow (220)$

"Note que (110) está fora pq é o dobro de (220) ."

Vamos então analisar entre as possibilidades

(precisamos de mais um pico que não está claro nos desenhos.

~~$\{100\}$~~ , ~~$\{110\}$~~ , $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$, $\{222\}$...

$\{210\}$, $\{211\}$, $\{300\}$, $\{310\}$, $\{311\}$...

Pode (analisar)

Ser, vamos testar.

não existem átomos neste plano.

(necessitam verificação - voltemos aos desenhos)

(perceba que não é possível - veja Figuras)

Verificando se $\{210\}, \{211\}, \{310\}, \{311\}$ definem planos cujos de difração entre os verificados nos picos. *

Obs: Já encontramos os 3 primeiros picos $\{111\}$, $\{200\}$ e $\{220\}$. O 4º pico não possui fácil visualização. Vamos então calcular a usando um, digamos $\{111\}$ e ver se os hkl's * acima, na ordem de maiores d 's, retornam o mesmo a.

Usando $\{111\} \Rightarrow 2d \sin(\theta) = m\lambda$ "m=1" $\Rightarrow d_{111} = \frac{\lambda}{2 \sin(\theta)} = \frac{1,542 \times 10^{-10}}{2 \sin(21,5^\circ)} \text{ m}$

$\Rightarrow d_{111} \approx 2,10 \times 10^{-10} \text{ m}$

mas $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{1^2+1^2+1^2}} \Rightarrow a = 2,10 \times 10^{-10} \cdot \sqrt{3} \quad \underline{a \approx 3,64 \times 10^{-10} \text{ m}}$

Obs: Obviamente, todos os picos devem retornar o mesmo $a = 3,64 \times 10^{-10} \text{ m}$.
Vamos verificar com d_{200} .

$\Rightarrow d_{200} = \frac{1,542}{2 \cdot \sin(\sim 59,05^\circ)} \times 10^{-10} \text{ m} \approx 1,823 \times 10^{-10} \text{ m}$

$d_{200} = \frac{a}{\sqrt{2^2}} \Rightarrow a = 2 \cdot 1,823 \times 10^{-10} = 3,64 \times 10^{-10} \text{ m}$

Como deve ser.

Continuando: $\{210\}$ $d_{210} = \frac{1,542}{2 \cdot \sin(\frac{90,0^\circ}{2})} \times 10^{-3}$ "supondo que seja o 4º pico"

$\Rightarrow d_{210} \approx 1,1 \times 10^{-10} \text{ m}$

isso produz um $a = (\sqrt{4+1}) \cdot 1,1 \times 10^{-10} \text{ m}$

$a = 2,46 \times 10^{-10} \text{ m}$

errado, sabemos que é $3,64 \times 10^{-10} \text{ m}$.

$\Rightarrow \{210\}$ descartado.

"sempre supondo ser o 4º pico." $\Rightarrow$ Já vimos que o $d_{(4^\circ \text{ pico})} \approx 1,1 \times 10^{-10} \text{ m}$

$\{211\}$ Para $d_{211} \Rightarrow d_{211} = \frac{a}{\sqrt{4+1+1}} \Rightarrow a \approx \sqrt{6} \cdot 1,1 \times 10^{-10}$

$a \approx 2,69 \times 10^{-10} \text{ m}$

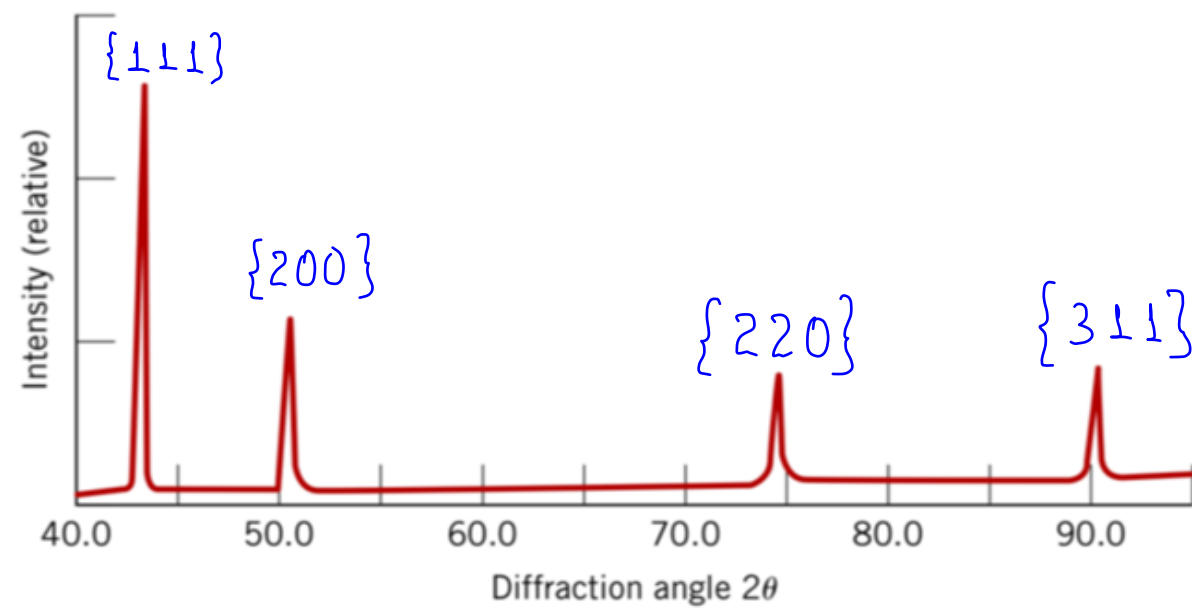
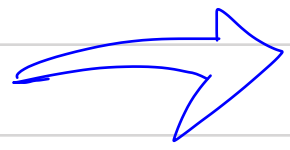
errado $\Rightarrow \{211\}$ descartado.

$\{310\}$ $a = \sqrt{10} \cdot 1,1 \times 10^{-10} \text{ m} \approx 3,48$

"errado" - $\{310\}$ descartado

$\{311\} - a = \sqrt{11} \cdot 1,1 \times 10^{-10} \text{ m} \approx 3,64$

✓ este é o quarto pico.



(b) Os d 's já foram calculados:

$$d = \frac{1,542 \times 10^{-10}}{2 \sin(\theta)}$$

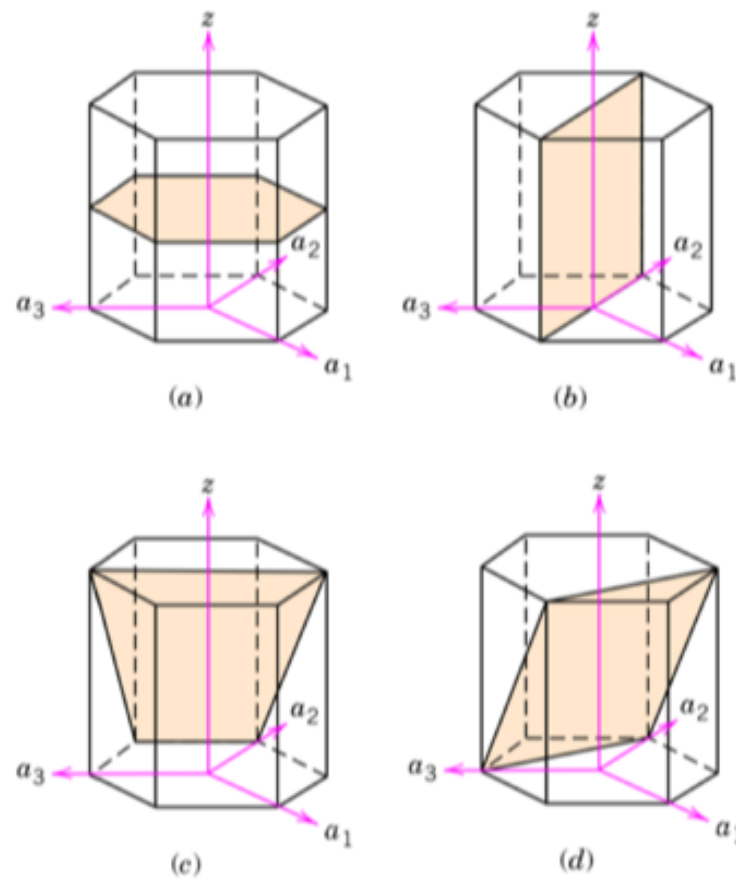
$$\Rightarrow d_{111} \approx 2,10 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$d_{200} \approx 1,82 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$d_{220} \approx 1,21 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$d_{311} \approx 1,1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

—||—

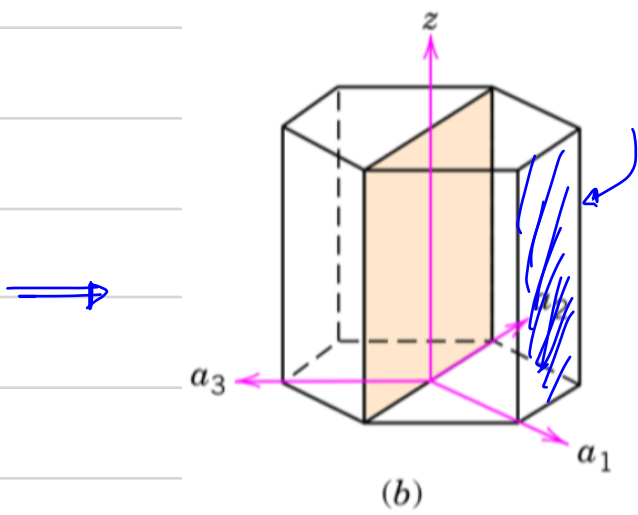


Questão 3) [2,0]a) Determine os índices planares para os planos das células hexagonais mostradas na Figura ao lado.b) Quais índices retornam a menor distância interplanar?

Usando os 4 índices temos: (a) (0002)

na forma (hkil)

(b) Obs: Não se pode usar um plano que passe pelo centro
 ⇒ Vamos utilizar um outro da mesma família.



(1010)

c) (1101)
 d) (2112)

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

Quanto maior a soma $h+k+l$
 ⇒ menor d_{hke} .

Vamos reescrever os planos na forma (hke)

- (a) (002)
- (b) (100)
- (c) (111)
- (d) (212)

~~03~~

Vamos usar que

$$\Rightarrow d_{(a)} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}4 + 4 \frac{a^2}{c^2}}}$$

$$d_{(c)} = \frac{a}{\sqrt{4 + \frac{a^2}{c^2}}}$$

$$d_{(b)} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}}}$$

$$d_{(d)} = \frac{a}{\sqrt{\frac{20}{3} + 4 \frac{a^2}{c^2}}}$$

O maior denominador é, claramente, $d_{(d)}$, portanto (212) retorna a

o menor d_{hke} . ⇒ "Relativamente fácil de ver nos desenhos".

Questão 4) [2,5] Mostre que o percentual atômico (C_{at}) em uma liga contendo dois tipos de átomos pode ser escrito na forma

$$C_{at_1} = \frac{C_{m_1} A_2}{C_{m_1} A_2 + C_{m_2} A_1} \times 100,$$

onde C_{at_i} = percentual atômico do átomo i e C_{m_i} = percentual em massa do átomo i . A_i = massa atômica.

Podemos proceder de diferentes formas:

⇒ Percentual em número de átomos pode ser escrito em mols (n_1 e n_2), sendo que o número de mols em uma massa A é:

$$A \cdot n = m \quad \Rightarrow \quad n_i = \frac{m_i}{A_i} \quad (1), \quad \text{para dois tipos de átomos:}$$

$$\Rightarrow C_{at_1} = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \times 100 \quad \Rightarrow \quad C_{at_1} = \frac{\frac{m_1}{A_1}}{\frac{m_1}{A_1} + \frac{m_2}{A_2}} \times 100 \quad (2)$$

O percentual em massa é: $C_{m_i} = \frac{m_i}{m_i + m_j} \times 100 \quad \Rightarrow \quad \text{de } (1)$

$$\Rightarrow M \equiv m_i + m_j = \text{massa total}$$

$$\Rightarrow m_i = \frac{C_{m_i} \times M}{100} \quad \text{isso em } (2)$$

$$\rightarrow C_{at_1} = \frac{\frac{C_{m_1} \cdot M}{100 \cdot A_1}}{\frac{C_{m_1} \cdot M}{100 \cdot A_1} + \frac{C_{m_2} \cdot M}{100 \cdot A_2}} \times 100 = \frac{C_{m_1} / A_1}{\frac{C_{m_1}}{A_1} + \frac{C_{m_2}}{A_2}} \times 100 = \frac{C_{m_1}}{A_1} \cdot \frac{1}{\frac{C_{m_1} \cdot A_2 + C_{m_2} \cdot A_1}{A_2 \cdot A_2}} \times 100$$

$$C_{at_1} = \frac{C_{m_1} A_2}{C_{m_1} A_2 + C_{m_2} A_1} \times 100$$

e o percentual em número de átomos escrito como função das massas que compõem a amostra e dos percentuais em massa.