UFES CEUNES

Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Paulo Moscon

Nome:

Matrícula:

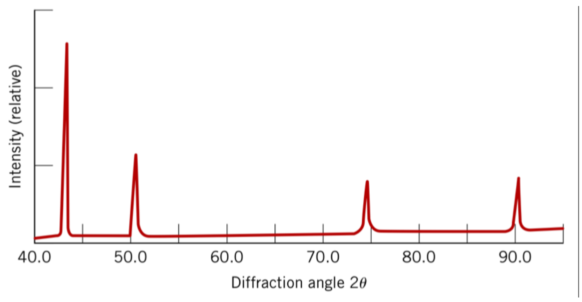
1^a Prova de Ciência de Matereiais - 2012/02

Questão 1) [3,0] Calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ e σ_x para a função de onda normalizada

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{x^2 + a^2}.$$

Dado: $\int_{-\infty}^{\infty} dx/(x^2 + a^2) = \pi/a$.
Obs: σ_x corresponde ao desvio quadrático médio com relação ao valor médio da variável x (o mesmo desvio padrão estudado em disciplinas experimentais).

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)** Para qual conjunto de planos cristalográficos ocorrerá o pico de difração de primeira ordem em um ângulo de difração de 46,21^o para o Fe CCC quando uma radiação monocromática com comprimento de 0,0711nm é usada?

Questão 4) [2,5] Mostre que a fração atômica (F_{at}) em uma liga contendo dois tipos de átomos pode ser escrita na forma

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

onde F_{at_i} = fração atômica do átomo i e C_{m_i} podendo ser o percentual ou a fração em massa do átomo i. A_i = massa atômica.

Questão 1) [3,0] Calcule $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ e σ_x para a função de onda normalizada

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}\frac{1}{x^2+a^2}.$$

Dado: $\int_{-\infty}^{\infty} dx/(x^2+a^2) = \pi/a$.
Obs: σ_x corresponde ao desvio quadrático médio com relação ao valor médio da variável x (o mesmo desvio padrão estudado em disciplinas experimentais).

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x).x.\psi(x)\,dx \quad , \text{como } \psi(x) \text{ é real} \rightarrow \psi^* = \psi$$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2a^3}{\pi}\times\frac{x}{(x^2+a^2)^2}\,dx \Rightarrow u = x^2+a^2 \quad du = 2x\,dx$$

$$\langle x\rangle = \frac{2a^3}{\pi.2}\int_{-\infty}^{\infty} u^{-2}\,du = \frac{a^3}{\pi}.\frac{u^{-1}}{-1}\Big]_{-\infty}^{\infty} = -\frac{a^3}{\pi}\left[\frac{1}{x^2+a^2}\right]_{-\infty}^{\infty} = \text{zero}$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{2a^3}{\pi}.\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2}{(x^2+a^2)^2}dx} \qquad u = x^2+a^2 \rightarrow du = 2x\,dx$$

$$\rightarrow \int \frac{x^2}{a^4\left[1+\frac{x^2}{a^2}\right]^2}dx = \frac{1}{a^4}\int\frac{x^2}{\left[1+\left(\frac{x}{a}\right)^2\right]^2}dx$$

$$\rightarrow \frac{x}{a} = tag(\theta) \rightarrow \frac{dx}{d\theta} = a\sec^2(\theta) \quad ; \; x^2 = a^2 tag^2(\theta)$$

$$\rightarrow \frac{1}{a^4}\int\frac{a^2 tag^2(\theta).a\sec^2(\theta)\,d\theta}{\left[1+tag^2(\theta)\right]^2} = \frac{1}{a}\int\frac{tag^2(\theta).\sec^2(\theta)\,d\theta}{\sec^4(\theta)}$$

$$\frac{1}{a}\int\frac{tag^2(\theta)\,d\theta}{\sec^2(\theta)} = \frac{1}{a}\int\frac{sen^2(\theta)}{\cancel{\cos^2(\theta)}}.\cancel{\cos^2(\theta)}\,d\theta = \frac{1}{a}\int sen^2(\theta)\,d\theta$$

$$sen^2(\theta) = \frac{1-\cos(2\theta)}{2}$$

$$\rightarrow \frac{1}{a}.\int\frac{\left[1-\cos(2\theta)\right]}{2}d\theta = \frac{1}{a}\left\{\int\frac{1}{2}d\theta - \int\frac{\cos(2\theta)}{2}d\theta\right\}$$

$$\rightarrow \frac{1}{a}\left\{\left[\frac{\theta}{2}\right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{2}\left[\frac{sen(2\theta)}{2}\right]_{-\infty}^{\infty}\right\}$$

Voltando $\Rightarrow$ avíamos definido $tag(\theta) = \frac{x}{a}$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2a^3}{\pi} \frac{1}{a} \left\{ \left[\frac{\theta}{2} \right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{2} \left[\frac{sen(2\theta)}{2} \right]_{-\infty}^{\infty} \right\}$$

mudando os limites: $x \longrightarrow -\infty$ $tag(\theta) = -\infty$ $\Rightarrow \theta = -\pi/2$

$x \longrightarrow +\infty$, $tag(\theta) = +\infty$ $\Rightarrow \theta = \pi/2$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2a^2}{\pi} \left\{ \left[\frac{\theta}{2} \right]_{-\pi/2}^{\pi/2} - \frac{1}{4} \left[sen(2\theta) \right]_{-\pi/2}^{\pi/2} \right\} = \frac{2a^2}{\pi} \cdot \left\{ \left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{4} \right) - \cancel{\frac{1}{4} \left(0 + 0 \right)} \right]$$

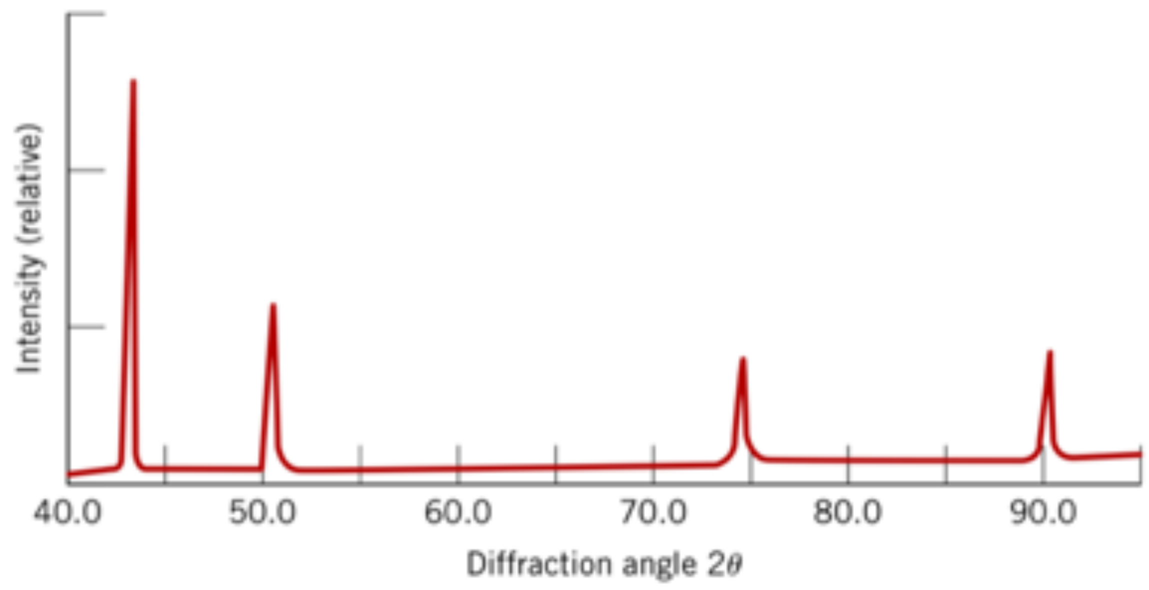
$$\langle x^2 \rangle = \frac{2a^2}{\pi} \left\{ \frac{\pi}{2} \right\} = a^2$$

$$\Rightarrow \sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{a^2}$$

$$\boxed{\sigma_x = a}$$

— 11 —

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.



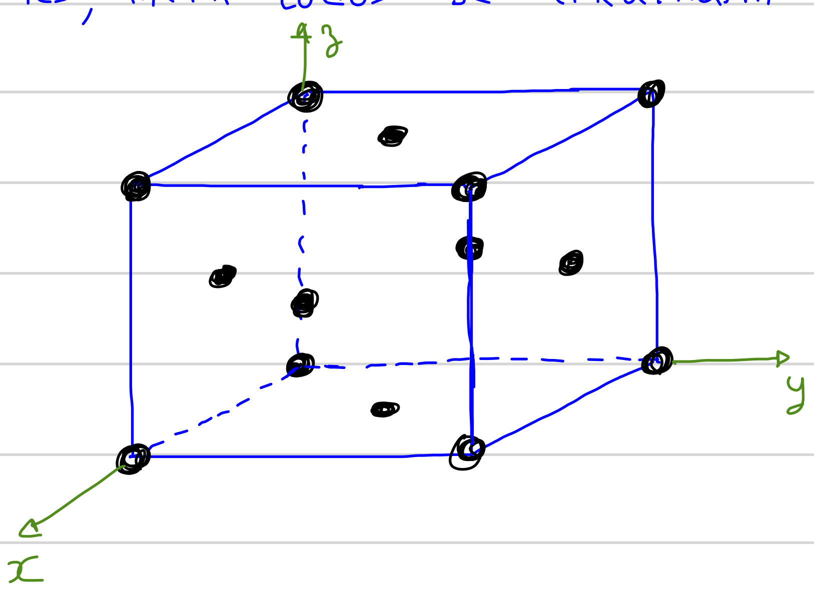
(a) Menores ângulos ⟹ maiores d's.

Vamos listar alguma famílias $\{hkl\}$
Obs: famílias pq (100), (010), (001), por exemplo são planos equivalentes ⟹ basta usar $\{100\}$.

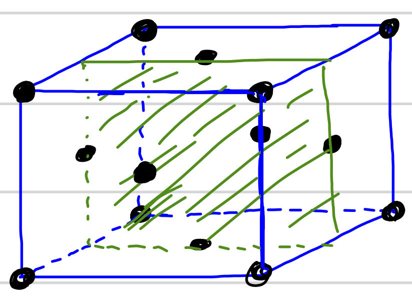
Algumas possibilidades:

$\{100\}, \{110\}, \{111\}, \{200\}, \{220\}, \{222\} \ldots$ "se faltar algo acrescentamos outras possibilidades depois"
$\{210\}, \{211\}, \{300\}, \{310\}, \{311\} \ldots$

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

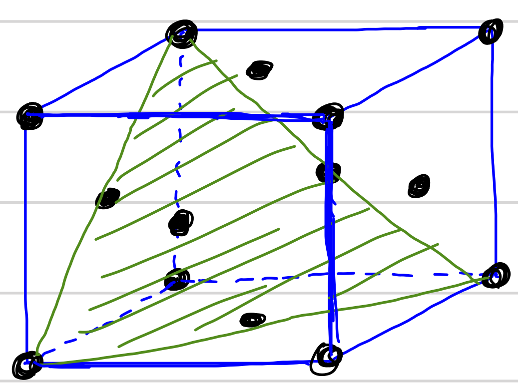


Nitidamente planos da família $\{100\}$ não se encaixam pois existe um plano no meio do "caminho" ⇓

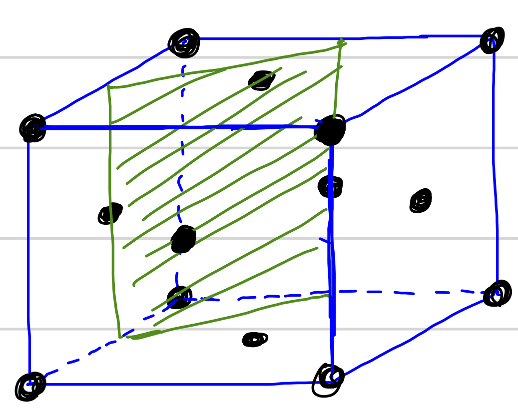


→ (200) → deve ser um pois possui distância relativamente grande.

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



⟹ (111), também ⟹



→ (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.)

$\cancel{\{100\}}$ fora, $\cancel{\{110\}}$ fora, $\{111\}$ ✓, $\{200\}$ ✓, $\{220\}$ ✓, $\cancel{\{222\}}$ … (perceba que não é possível - Veja Figuras)
$\underbrace{\{210\}}$, $\underbrace{\{211\}}$, $\{300\}$, $\{310\}$, $\{311\}$ …

Pode (analisar) ser, vamos testar.

não existem átomos neste plano.

(necessitam verificação - voltemos aos desenhos) ⇓

Verificando se {2 1 0}, {2 1 1}, {3 1 0}, {3 1 1} definem planos cujos de difração entre os verificados nos picos.
$\underbrace{\{210\},\{211\},\{310\},\{311\}}_{*}$

Obs: Já encontramos os 3 primeiros picos {1 1 1}, {2 0 0} e {2 2 0}. O 4º pico não possui fácil visualização. Vamos então calcular a usando um, digamos {1 1 1} e ver se os hkl's * acima, na ordem de maiores d's, retornam o mesmo a.

Usando {1 1 1} $\Rightarrow$ $2d\,sen(\theta) = n\lambda$ "n = 1" $\Rightarrow d_{111} = \dfrac{\lambda}{2sen(\theta)} = \dfrac{1{,}542 \times 10^{-10}}{2\,sen(21{,}5°)}\,m$

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

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

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

$\Rightarrow d_{200} = \dfrac{1{,}542}{2 \cdot sen(\frac{}{}50{,}05°)} \times 10^{-10}\,m \cong 1{,}823 \times 10^{-10}\,m$

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

Como deve ser.

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

$\Rightarrow d_{210} \cong 1{,}1 \times 10^{-10}\,m$ isso produz um $a = \left(\sqrt{4+1}\right) \cdot 1{,}1 \times 10^{-10}\,m$

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

Com $d_{210} = \dfrac{a}{\sqrt{4+1}}$ errado, sabemos que é $3{,}64 \times 10^{-10}\,m$.

$\Rightarrow$ {2 1 0} descartado.

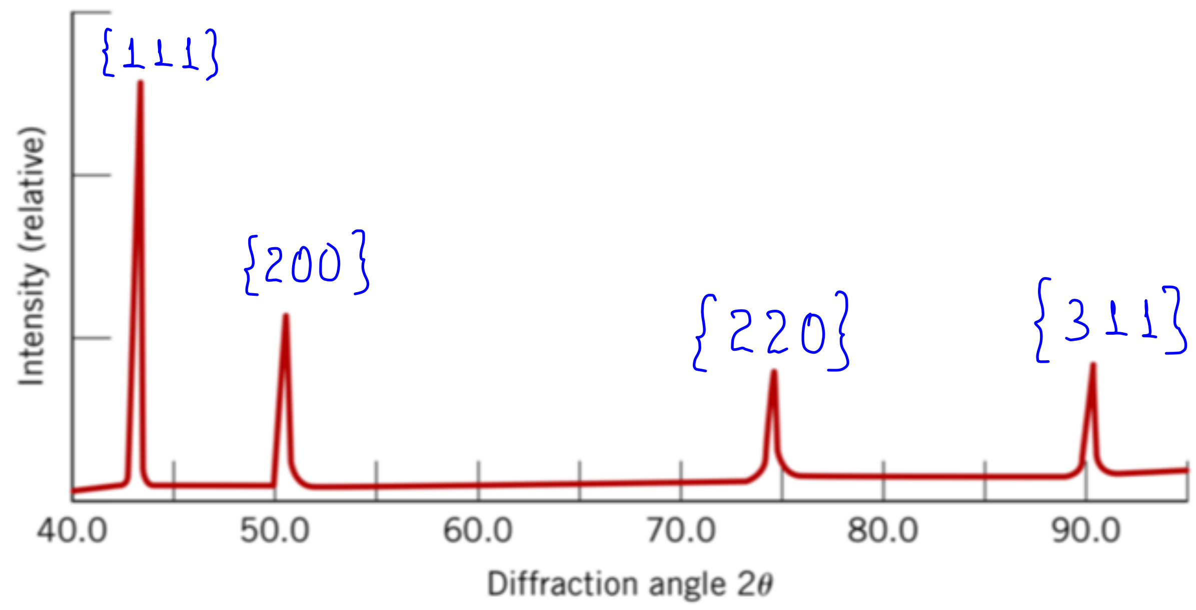
"sempre supondo ser o 4º pico" $\Rightarrow$ Já vimos que o $d_{(4°\ pico)} \cong 1{,}1 \times 10^{-10}\,m$

{2 1 1} $\Rightarrow$ Para d_{211} $\Rightarrow$ $d_{211} = \dfrac{a}{\sqrt{4+1+1}}$ $\Rightarrow$ $a \cong \sqrt{6} \times 1{,}1 \times 10^{-10}$

$\underbrace{a \cong 2{,}69 \times 10^{-10}\,m}_{\text{errado}}$ $\rightarrow$ {2 1 1} descartado.

{3 1 0} $\Rightarrow a = \sqrt{10} \times 1{,}1 \times 10^{-10}\,m \simeq 3{,}48$ "errado" $\rightarrow$ {3 1 0} descartado

{3 1 1} $\rightarrow a = \sqrt{11} \times 1{,}1 \times 10^{-10}\,m \simeq 3{,}64$ ✓ este é o quarto pico.



(b) Os d's já foram calculados:

$$d = \frac{1{,}542 \times 10^{-10}}{2\,\mathrm{sen}(\theta)} \Rightarrow d_{111} \simeq 2{,}10 \times 10^{-10}\,m$$

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

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

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

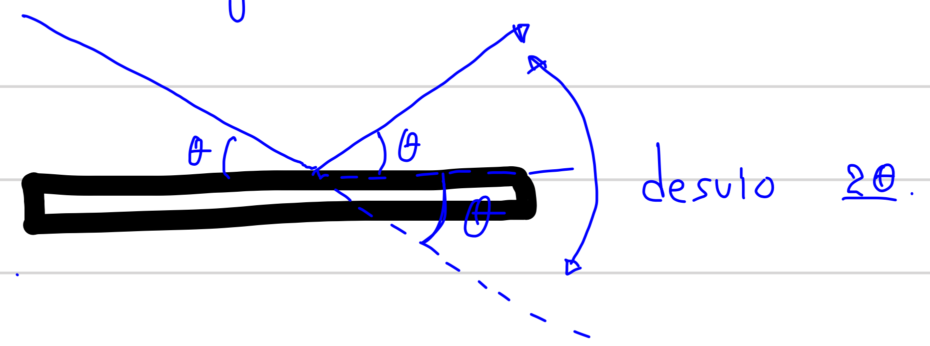
—//—

Questão 3) [2,0]**a)** Para qual conjunto de planos cristalográficos ocorrerá o pico de difração de primeira ordem em um ângulo de difração de 46,21^o para o Fe CCC quando uma radiação monocromática com comprimento de 0,0711nm é usada?

Assim como na Questão (2), vamos usar $2d\,\text{sen}(\theta) = n\lambda$; primeira ordem $\Rightarrow n=1$.

também: $$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

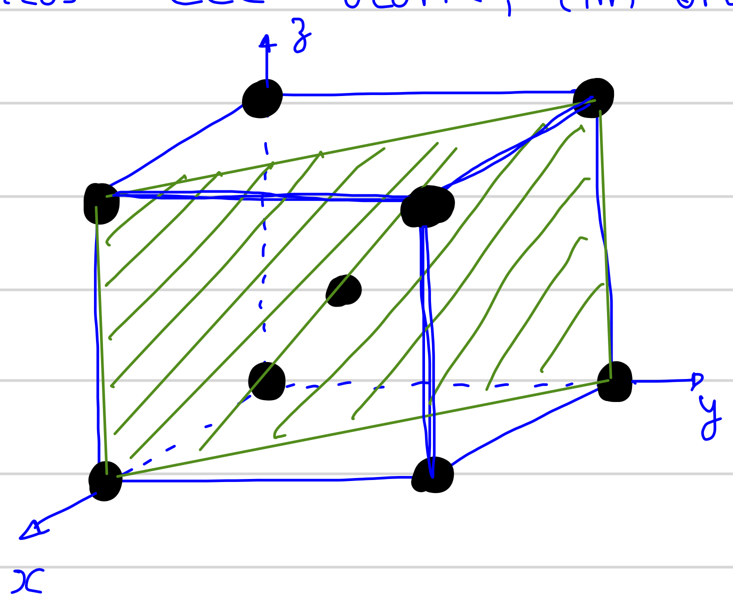
Ângulo de difração é o ângulo de desvio em relação ao feixe incidente



$\rightarrow \theta = \dfrac{46{,}21^\circ}{2}$ Calculando $\underline{d}$:

$$d = \frac{7{,}11\times10^{-11}\,m}{2\,\text{sen}\left(\frac{46{,}21}{2}\right)} \simeq 9{,}059\times10^{-11}\,m$$

Agora façamos testes: Os picos CCC ocorre, em ordem crescente, com hkl



(1 1 0) é o plano mais extenso.

Outras possibilidades (gerais) seriam: {100}, {200}, {210}, {211}, {220}, {222} etc...

"Como o ângulo 2θ 46,21° "Veja questão anterior" devemos estar buscando o 1º ou 2º ou 3º pico... Vamos definir os hkl para estes e testar escrevendo-os em função de a.

$\cancel{\{100\}}$, $\underbrace{\{200\}}$, $\underbrace{\{210\}}$, $\underbrace{\{211\}}$, $\underbrace{\{220\}}$, $\underbrace{\{222\}}$, $\overbrace{\{310\}}^{\text{pode ser...}}$, $\underbrace{\{321\}}$

fora pois é o dobro do existente {200}

{211} → dentro

{220} → dentro

{222} → não passa por átomo na célula.

{321} → pode ser

{210} → excluído ou por geometria - ou lembrando que $\underline{h+k+l \text{ deve ser par}}$ para CCC.

{200} → Claramente ocorre "usar a figura".

Vamos testar {110}, {200}, {220} e {222}, com sorte podemos, testar o correto primeiro.

Vamos testar {110}, {200}, {220}, {310} e {321}

Relacionar d_{hkl} com a   Vamos, por palpite, usar {200} primeiro

$9{,}06 \times 10^{-11} = \dfrac{a}{2}$ $a = 18{,}12 \times 10^{-11}$ m   (*)

Claramente necessitamos de a. "ou equivalentemente, do raio atômico do Fe.

Ou então que seja dado mais de um pico; como na Questão 2.

Como só temos um pico:

Para conferi (*) precisamos de R.

Obs: O problema não fornece o raio atômico do Fe. Assume-se que o estudante tenha memorizado.
Eu não percebi este detalhe e não acho que o estudante deve memorizar detalhes técnicos.

Desta forma vou considerar corretos os que chegaram nos índices possíveis → {110}, {200}, {220}, {310} e {321} e na relação (*).

"Sabemos que é um dos quatro acima, mas precisamos de R para dizer qual".

Com a possibilidade de alguém conhecer que $R_{Fe} = 140 \cdot 10^{-12}$ m, vou terminar o problema...

Vamos conferir se a relação $a = 18{,}12 \times 10^{-11}$ m, obtida com (200) é satisfeita com o R_{Fe}.

Lembre que para CCC $\Rightarrow$ $(4R)^2 = a^2 + a^2 + a^2$ → $3a^2 = (4R)^2$ = $a = \dfrac{4R}{\sqrt{3}}$

diagonal

$\Rightarrow a = \dfrac{4 \times 140 \times 10^{-12}}{\sqrt{3}}$ m, como → $18{,}12 \times 10^{-11} = 4 \times 140 \times 10^{-12}/\sqrt{3}$

$18{,}12 \times 10^{-11} = 32{,}3 \times 10^{-11}$ Σ Não é {200}

Precisamos de um valor maior no lugar de $18,12 \times 10^{-11}$, parece plausível testarmos um {hkl} com soma maior → Vamos tentar então {220}

$$\rightarrow 9,06 \times 10^{-11} = \frac{a}{\sqrt{4+4}} \rightarrow a = \sqrt{8} \cdot 9,06 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$\Rightarrow a = 25,63 \times 10^{-11} \text{ m}$$ $\mathcal{E}$ queremos $32,3 \times 10^{-11}$ m

→ testar {310}

$$a = \sqrt{9+1} \times 9,06 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$a = 28,65 \times 10^{-11} \text{ m}$$ $\mathcal{E}$

testar {321}

$$a = \sqrt{9+4+1} \cdot 9,06 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$a = 33,9 \times 10^{-11} \text{ m}$$ ✓

Valores superiores irão se distanciar de $32,3 \times 10^{-11}$ m
logo, o valor mais próximo é

{hkl} = {321}.

Questão 4) [2,5] Mostre que a fração atômica (F_{at}) em uma liga contendo dois tipos de átomos pode ser escrita na forma

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

onde F_{at_i} = fração atômica do átomo i e C_{m_i} podendo ser o percentual ou a fração em massa do átomo i. A_i = massa atômica.

Como exercício antes da prova.

Aqueles que fizeram esta questão tenderão a achar que existe um erro pela falta do fator 100. Mas note que estamos falando de fração

Solução: Vamos calcular, como no livro, o percentual atômico C_{at_1} lembrando que a fração $F_{at_1} = C_{at_1}/100$.

$$C_{at_1} = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \times 100$$

sendo n_i a quantidade de mols devido à massa m_i.

$$\Rightarrow m_i = n_i . A_i \qquad \Rightarrow n_i = m_i/A_i \qquad \text{"} i=1 \text{ ou } i=2 \text{"}$$

$$\Rightarrow C_{at_1} = \frac{m_1/A_1}{\frac{m_1}{A_1} + \frac{m_2}{A_2}} \times 100 \qquad (1)$$

Devemos inserir C_{m_1} e C_{m_2} "Percentuais em massa.

$$C_{m_i} = \frac{m_i}{m_i + m_j} \times 100 \qquad \Rightarrow \text{Fazendo } m_1 + m_2 = M \quad \text{"massa total"}$$

$$\Rightarrow m_1 = \frac{C_{m_1} . M}{100} \quad \text{e} \quad m_2 = \frac{C_{m_2} . M}{100} \quad . \text{ Isso em } (1)$$

$$\Rightarrow C_{at_1} = \frac{\frac{C_{m_1} . \cancel{M}}{\cancel{100} . A_1}}{\frac{C_{m_1} . \cancel{M}}{\cancel{100} . A_1} + \frac{C_{m_2} . \cancel{M}}{\cancel{100} . A_2}} \times 100 = \frac{C_{m_1}/A_1}{\frac{C_{m_1} . A_2 + C_{m_2} A_1}{A_1 A_2}} = \frac{C_{m_1} . A_2}{C_{m_1} . A_2 + C_{m_2} . A_1} \times 100$$

$$\Rightarrow F_{At_1} = \frac{C_{At_1}}{100} \Rightarrow \left[F_{At_1} = \frac{C_{m_1} . A_2}{C_{m_1} A_2 + C_{m_2} A_1} \right.$$