

Nome:

Matrícula:

Universidade Federal do Espírito Santo
Prof. Paulo Moscon

1ª Prova de Ciência de Materiais - 2017/02

Questão 1) [2,5] A função de onda do estado $2p$ do átomo de hidrogênio é dada por

$$\Psi_{2p} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0},$$

onde a_0 é o raio de Bohr, $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0,529 \times 10^{-10}$. Qual é a distância mais provável, com relação ao núcleo, de se encontrar um elétron $2p$?

Questão 2) [2,5] Dado o padrão de difração para o Alumínio (gráfico e tabela completa), determinar os coeficientes dos planos atômicos identificados. Considerar a radiação-X $\lambda = 0,154056\text{nm}$. Obs: O Alumínio sólido apresenta uma estrutura cristalina CFC.

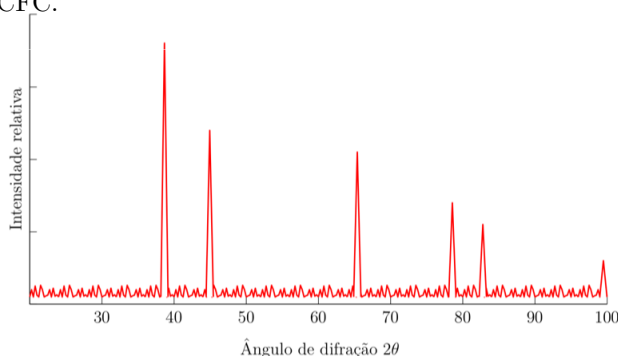


Tabela 1: Picos de difração para o alumínio.

Pico	2θ
1	38,5192
2	44,7651
3	65,1402
4	78,2641
5	82,4726
6	99,1140
7	112,0367
8	116,5898
9	137,4595

Questão 3) [2,5] O metal irídio possui uma estrutura cristalina FCC. Se o ângulo de difração para o conjunto de planos (200) é $69,2^\circ$, quando uma radiação-X com $\lambda = 0,1542\text{nm}$ é usada; qual o raio atômico do irídio?

Questão 4) [2,5] A energia potencial líquida entre dois íons adjacentes, E_L , pode ser representado por

$$E_L = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n}. \quad (1)$$

Calcule a energia de ligação em termos dos parâmetros A, B e n.

Questão 1)

Solução

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{2}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

★ Densidade volumétrica de probabilidade é $|\psi_{1s}|^2$

$$|\psi_{1s}|^2 = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{2a_0} \right)^3 \cdot \frac{r^2}{a_0^2} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

★ Densidade radial de probabilidade é $|\psi_{1s}|^2 \cdot 4\pi r^2$ { "Colocado no quadro durante a prova"

$$P(r) = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{2a_0} \right)^3 \cdot \frac{r^2}{a_0^2} \cdot 4\pi r^2 e^{-\frac{r}{a_0}}$$

O elétron é mais provável de ser encontrado no máximo de $P(r)$.

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0$$

$$\Rightarrow \cancel{\text{cte}} \frac{d}{dr} \left(r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} \right) = 0$$

$$\cancel{r^4} \cdot \cancel{e^{-\frac{r}{a_0}}} \cdot \left(-\frac{1}{a_0} \right) + e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4 \cancel{r^3} = 0$$

$$\frac{r}{a_0} = 4$$

$$r = 4a_0$$

$$r = 4 \cdot 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$r = 2,116 \times 10^{-10} \text{ m}$$

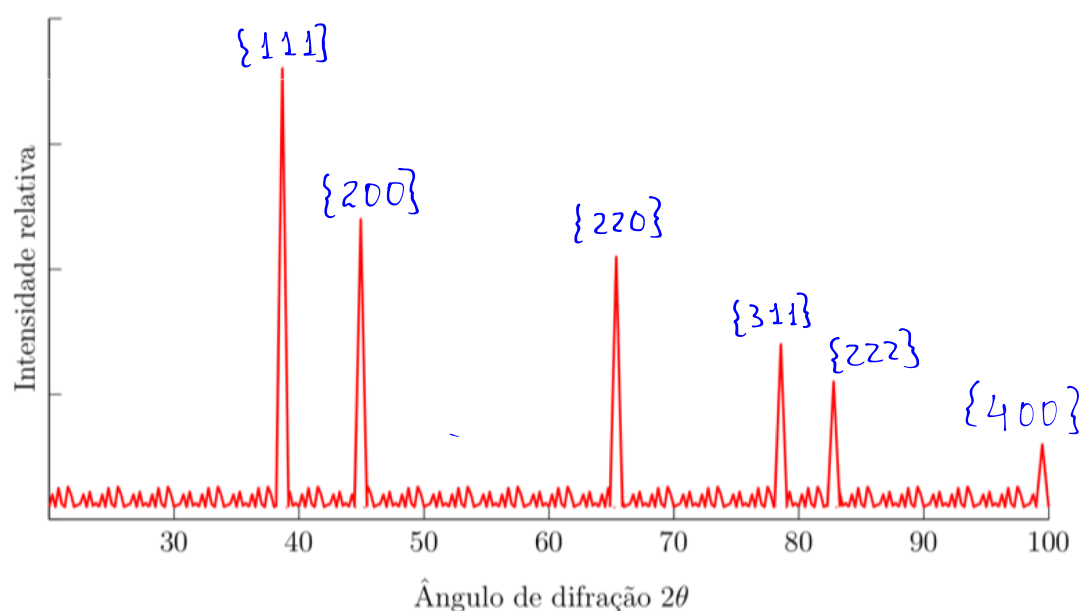
Questão 2) Vejamos as regras de seleção, sabendo que trata-se de uma estrutura FCC.

	$\{hkl\}$	$\sum(h^2+k^2+l^2)$	FCC	BCC
Ordem crescente de $h^2+k^2+l^2$	$\{100\}$	1	X	X
	$\{110\}$	2	X	✓
	$\{111\}$	3	✓	X
	$\{200\}$	4	✓	✓
	$\{210\}$	5	X	X
	$\{211\}$	6	X	✓
	$\{220\}$	8	✓	✓
	$\{221\}$	9	X	X
	$\{300\}$	9	X	X
	$\{310\}$	10	X	✓
	$\{311\}$	11	✓	X
	$\{222\}$	12	✓	✓
	$\{320\}$	13	X	X
	$\{321\}$	14	X	✓
	$\{400\}$	16	✓	✓
	$\{410\}$	17	X	X
	$\{322\}$	17	X	X
	⋮	⋮	⋮	⋮

Como os menores valores de $h^2 + k^2 + l^2$ ocorrem nos menores ângulos
Então os picos, em ordem angular, são (Para FCC):

$\{111\}, \{200\}, \{220\}, \{311\}, \{222\}, \{400\}, \text{etc...}$

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



Se a listagem estiver correta, não há erro.

Mas podemos conferir, verificando se todos os hkl's retornam
mesmo a

$$2d \sin(\theta_i) = \lambda \quad "n=1"$$

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin(\frac{2\theta}{2})}$$

$$\lambda = 0,1542 \text{ nm}$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$\Rightarrow a = \frac{\lambda}{2 \sin(\frac{2\theta}{2})} \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = \frac{0,1542}{2} \cdot \frac{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{\sin(\theta)}$$

$$a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{\sin(\theta)}$$

Testes: 

Verificar se os θ 's e seus respectivos $\{hkl\}$ retornam o mesmo a.

Pico 1) $a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{3}}{\sin\left(\frac{38,5192^\circ}{2}\right)} \approx 4,05 \text{ nm}$ "considerar correto"

Pico 2) $a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{4}}{\sin\left(\frac{44,7651^\circ}{2}\right)} \approx 4,05 \text{ nm}$ ✓

Pico 3) $a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{8}}{\sin\left(\frac{65,1402^\circ}{2}\right)} \approx 4,05 \text{ nm}$ ✓

Pico 4) $a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{11}}{\sin\left(\frac{78,2641^\circ}{2}\right)} \approx 4,05 \text{ nm}$ ✓

Pico 5) $a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{12}}{\sin\left(\frac{82,4726^\circ}{2}\right)} \approx 4,05 \text{ nm}$ ✓

Pico 6) $a = 0,0771 \times \frac{\sqrt{16}}{\sin\left(\frac{99,1140^\circ}{2}\right)} \approx 4,05 \text{ nm}$ ✓

Obs: O primeiro pico foi assumido com θ e $\{hkl\}$ correto. Se estivesse errado, a probabilidade de concordância com os demais seria desprezível.

OK! 

Questão 3) Dados: FCC

Escolha $\longrightarrow 2\theta = 69,2^\circ$

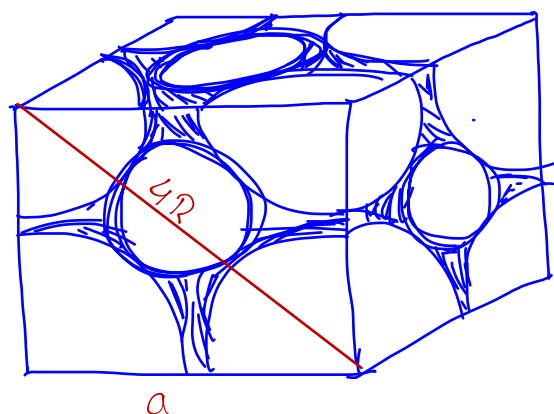
"O problema não especifica, mas $\lambda = 0,1542 \text{ nm}$

o mais comum é fornecer Plano (200)

2θ . Vou aceitar $\theta = 69,2^\circ$ "

Obter o raio atômico.

Vou começar pelo raio atômico de uma célula FCC.



$$\Rightarrow 4R \frac{\sqrt{2}}{2} = a \quad \Rightarrow R = \frac{a}{2\sqrt{2}}$$

Portanto, é preciso conhecer a .

$$a = d \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad \text{senda} \quad d = \frac{\lambda}{2\sin(\theta)}$$

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(\theta)} \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$\Rightarrow R = \frac{a}{2\sqrt{2}} \quad \Rightarrow R = \frac{\lambda \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{4\sin(\theta) \cdot \sqrt{2}}$$

$$R = \frac{0,1542}{4\sin\left(\frac{69,2^\circ}{2}\right)} \times \frac{\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2}}{\sqrt{2}} \text{ nm}$$

$$R \approx 0,096 \text{ nm}$$

Obs.: Difere do problema do Callister devido à utilização do plano (200) em vez do plano correto (220).

Erro de digitação que não compromete a dinâmica do problema.

Questão 4) Dois íons são considerados ligados quando assumem sua configuração estável, ou seja, de menor energia. Nesta situação denotemos sua energia de E_0 e sua distância de r_0 , que ocorrem quando $E(r)$ é mínimo.

$$\Rightarrow \frac{dE(r)}{dr} = 0$$

$$\frac{d}{dr}(-Ar^{-1} + Br^{-m}) = 0$$

$$-(-1)Ar^{-2} + B(-m)r^{-m-1} = 0$$

$$\frac{A}{r^2} - m \frac{B}{r^{m+1}} = 0$$

ou

$$\frac{r^{m+1}}{r^2} = \frac{mB}{A}$$

$$\frac{r^2}{r^{m+1}} = \frac{A}{mB}$$

$$r^{m-1} = m \frac{B}{A}$$

$$r^{1-m} = \frac{A}{mB}$$

$$r_0 = \left(m \frac{B}{A}\right)^{\frac{1}{(m-1)}}$$

$$r_0 = \left(\frac{A}{mB}\right)^{\frac{1}{1-m}}$$

tanto faz

Portanto, $E_0 = -\frac{A}{r_0} + \frac{B}{r_0^m}$

$$E_0 = -\frac{A}{\left(m \frac{B}{A}\right)^{\frac{1}{(m-1)}}} + \frac{B}{\left(m \frac{B}{A}\right)^{\frac{m}{(m-1)}}}$$