

Nome:

Matrícula:

Universidade Federal do Espírito Santo  
Prof. Paulo Moscon

Prova Final de Ciência de Materiais - 2017/02

**Nota)** Os passos adotados precisam ser justificados ou por breves comentários ou por sequência lógica durante as resoluções. Passos que aparentarem pura memorização serão desconsiderados.

**Questão 1)** [2,5] Para qual conjunto de planos cristalográficos irá ocorrer um pico de difração de primeira ordem em um ângulo de difração de  $2\theta = 46,21^\circ$  para o ferro CCC quando for usada uma radiação monocromática com comprimento de onda de  $0,0711\text{nm}$ ?

Solução: Dados:  $\lambda = 0,0711\text{nm}$   
 $\theta = \frac{46,21^\circ}{2}$   
 $m = 1$

$R = 0,1241\text{nm}$   
 $\rightarrow$  Raio do átomo de Fe.

$2d \sin(\theta) = m\lambda$

- $\rightarrow$  Comprimento de onda utilizado
- $\rightarrow$  Ordem de difração: Primeiros picos  $\Rightarrow m=1$ .
- $\rightarrow$  Ângulo de incidência do feixe eletromagnético (luz), relativamente aos planos com distância  $d$  analisados.
- $\rightarrow$  Distância interplanar dos planos analisados.

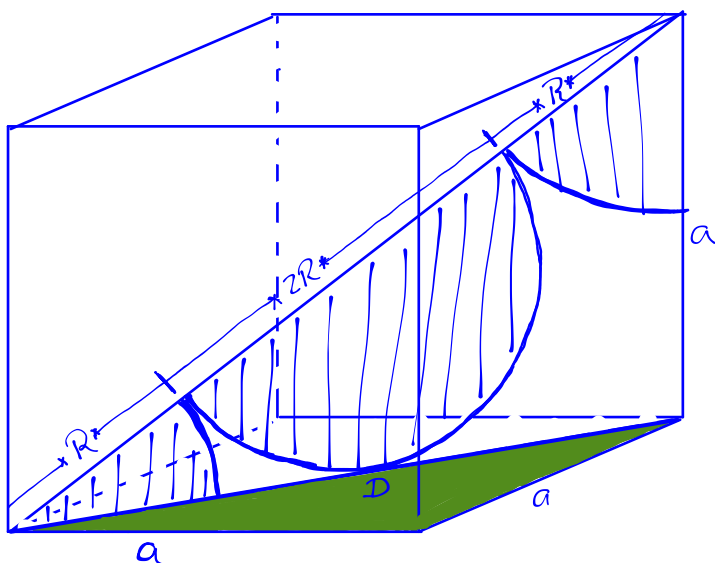
$$\Rightarrow d = \frac{\lambda}{2 \sin(\theta)} = \frac{0,0711\text{nm}}{2 \sin\left(\frac{46,21^\circ}{2}\right)} = 0,09059\text{nm}$$

Por outro lado,  $d$  pode ser relacionado com os índices de Miller, que definem os pontos onde o plano corta os eixos da célula unitária;

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

$\rightarrow$  parâmetro de rede

O parâmetro de rede pode ser obtido através de sua relação com o raio atômico de uma estrutura CCC.



$$(4R)^2 = a^2 + D^2$$

$$\Rightarrow D^2 = a^2 + a^2$$

$$\Rightarrow (4R)^2 = a^2 + a^2 + a^2$$

$$(4R)^2 = 3a^2$$

$$\sqrt{(4R)^2} = \sqrt{3a^2}$$

$$4R = a\sqrt{3}$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow d_{hkl} = \frac{4R}{\sqrt{3} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$d$  já foi obtido ;  $d = 0,09059 \text{ nm}$

$R$  foi dado (no quadro) ;  $R = 0,1241 \text{ nm}$

$$\Rightarrow \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = \frac{4R}{\sqrt{3} \cdot d}$$

$$h^2 + k^2 + l^2 = \frac{16 R^2}{3 d^2} = \frac{16}{3} \times \left( \frac{0,1241}{0,09059} \right)^2$$

$$h^2 + k^2 + l^2 = 10$$

$\Rightarrow$  Precisamos, portanto, escolher  $\{h, k, l\}$  tais que  $h^2 + k^2 + l^2 = 10$ .

Como a estrutura é CCC  $\Rightarrow$  A soma dos índices deve ser par (regras de seleção)

$$h^2 + k^2 + l^2$$

Geral

|    |                                                                           |
|----|---------------------------------------------------------------------------|
| 1  | 100                                                                       |
| 2  | 110                                                                       |
| 3  | 111                                                                       |
| 4  | 200                                                                       |
| 5  | 210                                                                       |
| 6  | 211                                                                       |
| 7  | ? $\Rightarrow$ Não existe combinação que $h^2 + k^2 + l^2 = 7$           |
| 8  | 220                                                                       |
| 9  | 300, 221                                                                  |
| 10 | 310 $\Rightarrow h^2 + k^2 + l^2 = 10$<br>Além disso, $3+1+0$ é par (ccc) |

$\Rightarrow$  O conjunto de planos é  $\{310\}$

**Questão 2)** [2,5] A função de onda associada aos números quânticos  $n = 1$  e  $l = 0$ , para o elétron submetido ao potencial de um próton (átomo de hidrogênio) é

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cdot e^{-i\omega t}$$

- a) Escreva a função para a densidade volumétrica de probabilidade. O que significa?
- b) Escreva a função para a densidade radial de probabilidade. O que significa?

(a) Densidade volumétrica de probabilidade  $= |\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$

$\Psi^*$  é o complexo conjugado de  $\Psi$ .

$$\Psi^* = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cdot e^{+i\omega t}$$

$$\rho_v(\vec{r}) = |\Psi|^2 = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cdot e^{-i\omega t} \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cdot e^{+i\omega t} \right)$$

$$\rho_v(\vec{r}) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{z}{a_0} \right)^3 e^{-2\frac{zr}{a_0}} \left[ e^{(-i\omega t + i\omega t)} \right]$$

$$\rho_v(\vec{r}) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{z}{a_0} \right)^3 e^{-2\frac{zr}{a_0}} \underbrace{e^0}_1$$

$$\rho_v(\vec{r}) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{z}{a_0} \right)^3 e^{-2\frac{zr}{a_0}}$$

$\rho$  que significa?  $|\psi|^2$  representa, pela interpretação de Max Born, aceita até o momento, a probabilidade de se encontrar a partícula (no caso o elétron) em um elemento de volume infinitesimal  $dV$ , localizado em um dado ponto do espaço e em um dado momento. Neste caso, como  $|\psi|^2$  não depende do tempo, trata-se de um sistema em estado estacionário - que não muda sua configuração média (números quânticos) no tempo; portanto uma densidade espacial de probabilidade.

(b) Densidade radial:

Se  $|\psi|^2$  é volumétrica e só depende de  $r$ .

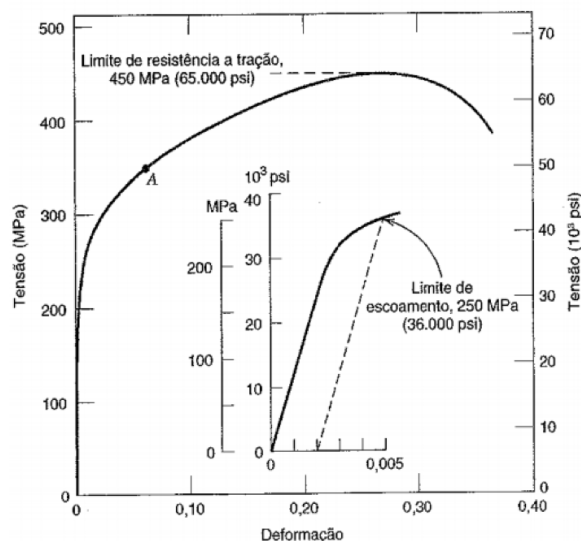
$\Rightarrow |\psi|^2 \cdot \underbrace{4\pi r^2 dr}_{\text{Elemento de volume } dV, \text{ de uma casca de raio } r}.$

Portanto,  $|\psi|^2 \cdot 4\pi r^2$  é a probabilidade radial de probabilidade  $P(r)$ ;

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

$\rho$  que significa? A probabilidade de se encontrar a partícula em uma distância  $r$ , relativamente ao centro do sistema escolhido, dentro de uma distância infinitesimal  $dr$ .

**Questão 3)** [2,5] Um corpo de prova cilíndrico feito a partir de uma liga de latão e que possui um comprimento de 60 mm deve se alongar em somente 10,8 mm quando uma carga de tração de 50.000 N é aplicada. Sob essas circunstâncias qual deve ser o raio do corpo de prova? suponha que esta liga de latão apresente o comportamento tensão-deformação apresentado na Figura ao lado.

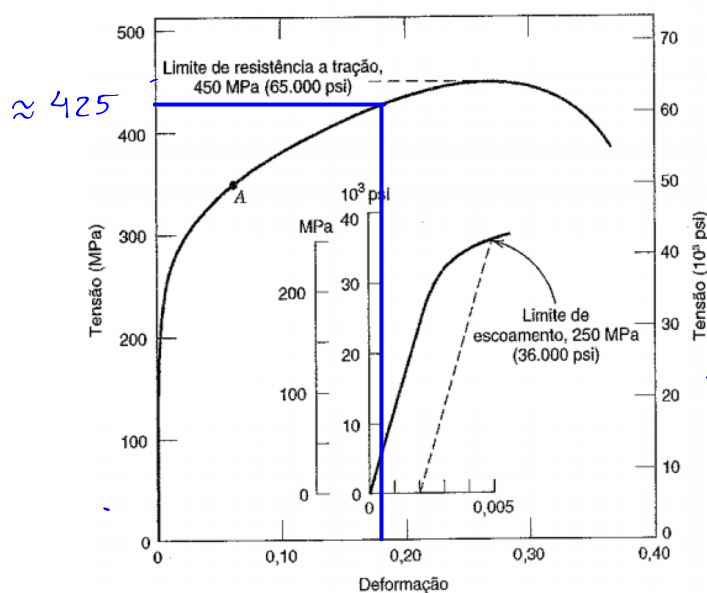


Dados:  $l_0 = 60 \text{ mm}$   
 $\Delta l = 10,8 \text{ mm}$   
 $F = 50000 \text{ N}$

Solução:  $\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{10,8 \text{ mm}}{60 \text{ mm}} = 0,18$

Note que esta deformação está fora da região de linearidade. Portanto  $\sigma = E \epsilon$  não é aplicado.

Para esta deformação, recorrendo ao gráfico:



$\Rightarrow \sigma \approx 425 \text{ MPa}$

Mas  $\sigma = \frac{F}{A}$

$\sigma = \frac{F}{\pi r_0^2}$

$r_0 \approx \sqrt{\frac{F}{\pi \sigma}}$

$r_0 \approx \sqrt{\frac{5 \times 10^4}{\pi \cdot 425 \times 10^6}}$

$r_0 \approx 0,0061 \text{ m} \approx 6,1 \text{ mm}$

**Questão 4)** [2,5] Uma liga de ferro-carbono com estrutura cristalina CFC contendo inicialmente 0,35%p C está exposta a uma atmosfera rica em oxigênio e virtualmente isenta de carbono, a 1400 K. Sob essas circunstâncias o carbono se difunde da liga e reage com o oxigênio na atmosfera; isto é, a concentração de carbono na superfície é mantida essencialmente em 0%p C. (Esse processo de esgotamento do carbono é conhecido como *descarbonetação*.) Em qual posição a concentração de carbono será de 0,15%p após um tratamento de 10 hs? O valor de  $D$  a 1400 K é de  $2,5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ .

| $z$   | $\text{erf}(z)$ | $z$  | $\text{erf}(z)$ |
|-------|-----------------|------|-----------------|
| 0     | 0               | 0,55 | 0,5633          |
| 0,025 | 0,0282          | 0,60 | 0,6039          |
| 0,05  | 0,0564          | 0,65 | 0,6420          |
| 0,10  | 0,1125          | 0,70 | 0,6778          |
| 0,15  | 0,1680          | 0,75 | 0,7112          |
| 0,20  | 0,2227          | 0,80 | 0,7421          |
| 0,25  | 0,2763          | 0,85 | 0,7707          |
| 0,30  | 0,3286          | 0,90 | 0,7970          |
| 0,35  | 0,3794          | 0,95 | 0,8209          |
| 0,40  | 0,4284          | 1,0  | 0,8427          |
| 0,45  | 0,4755          | 1,1  | 0,8802          |
| 0,50  | 0,5205          | 1,2  | 0,9103          |

Explicação de o que está acontecendo já está no enunciado  $\Rightarrow$  descarbonetação; ou seja, a concentração de carbono é diminuída no tempo (não estacionário).

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Dados:  $C_0 = 0,35\% \text{ p C}$

$C_s = 0\% \text{ p C}$

$T = 1400 \text{ K}$

$C_x = 0,15\% \text{ p C}$

em qual  $x$  ?

$D_{1400\text{K}} = 2,5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$

$t = 10 \text{ hs} = 36000 \text{ s}$

$$\Rightarrow \frac{0,15 - 0,35}{0 - 0,35} = 1 - \text{erf}(z)$$

$$\text{erf}(z) = 0,42857 \approx 0,4286$$

Da tabela:

0,40      0,4284

$z$       0,4286

0,45      0,4755

$$\frac{z - 0,40}{0,45 - 0,40} = \frac{0,4286 - 0,4284}{0,4755 - 0,4284}$$

$$\Rightarrow z = 0,4002 \quad \Rightarrow x = 0,4002 \times 2\sqrt{2,5 \times 36 \times 10^{-4}}$$

$$x = 0,759 \text{ mm}$$