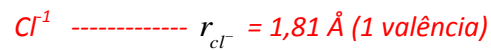
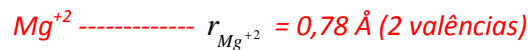


CTM – Primeira Lista de Exercícios

1. Cite 3 características típicas de cada uma das 5 classes de materiais apresentadas no curso.
  - Metais: resistentes, dúcteis, bons condutores térmicos/elétricos
  - Cerâmicas: resistentes, frágeis, refratárias, isolantes
  - Polímeros: resistência menor do que metais/cerâmicas, baixa densidade, isolantes
  - Compósitos: combinação de materiais de diferentes classes, alta resistência específica
  - Semicondutores: não tem aplicação estrutural, condutividade depende da dopagem, podem emitir luz.
2. Calcule a força de atração entre um cátion  $Mg^{+2}$  e seu vizinho  $Cl^-$  no composto  $MgCl_2$ . Assumir que os íons são cargas puntiformes. Dados:  $R_{Mg^{+2}} = 0,078 \text{ nm}$  e  $R_{Cl^-} = 0,181 \text{ nm}$ .

$$F_{\text{atração}} = \frac{K \cdot Z_1 \cdot q \cdot Z_2 \cdot q}{a^2}, \text{ onde } Z_1 \text{ e } Z_2 \text{ são as valências.}$$



$q = 1,6 \times 10^{-19} \text{ Coulomb}$

$a = r_{Mg^{+2}} + r_{Cl^{-}}$

$K = 9 \times 10^9 \text{ V.m/C}$

$$F_{\text{atração}} = \frac{\langle 9 \times 10^9 \rangle \cdot \langle 2 \rangle \cdot \langle 1,6 \times 10^{-19} \rangle \cdot \langle 1 \rangle \cdot \langle 1,6 \times 10^{-19} \rangle}{\left[ (0,78 + 1,81) \cdot 10^{-10} \right]^2}$$

$F_{\text{atração}} = 6,86 \times 10^{-9} \text{ N}$

3. Calcule qual dos seguintes compostos: MgO e BaO, possui maior força de atração ( $F_a$ ) para suas distâncias de equilíbrio ( $a_0$ ).

- Considere os raios iônicos listados a seguir para o cálculo das distâncias de equilíbrio  $a_0 = R_{\text{cátion}} + R_{\text{ânion}}$ :  $R_{\text{Mg}^{2+}} = 0,072 \text{ nm}$ ,  $R_{\text{Ba}^{2+}} = 0,136 \text{ nm}$  e  $R_{\text{O}^{2-}} = 0,14 \text{ nm}$
- As valências ( $Z_1$ ) dos cátions é +2, enquanto a valência de oxigênio ( $Z_2$ ) é -2. As constantes,  $K$  e  $q$ , têm valores de  $9 \times 10^9 \text{ V.m/C}$  e  $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ , respectivamente.
- Use o valor calculado da força de atração para a distância de equilíbrio ( $F_a$ ) para determinar qual dos dois compostos terá temperatura de fusão mais alta.

**MgO:**  $a_0 = 0,072 \text{ nm} + 0,14 \text{ nm}$

$a_0 = 0,212 \text{ nm}$ .

$$F_a = \frac{K Z_1 Z_2 e^2}{(a_0)^2}$$

$$F_a = \frac{9 \times 10^9 \frac{\text{V.m}}{\text{C}} \cdot h \cdot (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})^2}{(0.212 \times 10^{-9} \text{ nm})^2}$$

$$F_a = \frac{92.16 \times 10^{-29} \text{ V.m.C}}{0.044944 \times 10^{-18} \text{ m}^2}$$

$$F_a = 2050,55 \times 10^{-11} \frac{\text{VC}}{\text{m}}$$

$$F_a = 2,05 \times 10^{-8} \frac{\text{VC}}{\text{m}} = \left( \frac{\text{J}}{\text{C}} \cdot \frac{\text{C}}{\text{m}} \right) = \left( \frac{\text{J}}{\text{m}} \right) = \left( \frac{\text{N.m}}{\text{m}} \right)$$

$$F_a = 2,05^{-8} \text{ N}$$

**BaO:**  $a_0 = 0,136 \text{ nm} + 0,14 \text{ nm}$

$a_0 = 0.276 \text{ nm}$ .

$$F_a = \frac{K Z_1 Z_2 e^2}{(a_0)^2}$$

$$F_a = \frac{92.16 \times 10^{-29} \text{ V.m.C}}{0.076176 \times 10^{-18} \text{ m}^2}$$

$$F_a = 120.83 \times 10^{-11} \frac{\text{VC}}{\text{m}}$$

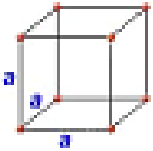
$$F_a = 1,2 \times 10^{-8} \frac{\text{VC}}{\text{m}} = \left( \frac{\text{J}}{\text{C}} \cdot \frac{\text{C}}{\text{m}} \right) = \left( \frac{\text{J}}{\text{m}} \right) = \left( \frac{\text{N.m}}{\text{m}} \right)$$

$$F_a = 1,2^{-8} \text{ N}$$

O MgO possui  $T_f$  mais alta, pois sua  $F_a$  o distancia de equilíbrio e maior, que a  $F_a$  da BaO.

4. Para as células unitárias das redes Cúbica Simples, Cúbica de Corpo Centrado e Cúbica de Face Centrada:
- Calcule o número de átomos por célula unitária
  - Obtenha a relação entre o parâmetro de rede ( $a$ ) e o raio atômico ( $R$ ).
  - Calcule o Fator de Empacotamento Atômico

#### Cúbico simples



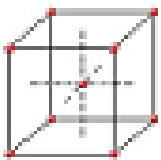
$$n^{\circ} \text{ de átomos} = \frac{1}{8} \times 8 = 1 \text{ átomo} \quad \text{volume da célula unitária} = a^3$$

$$\text{Considerando os átomos como esferas rígidas: volume do átomo} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3$$

$$\text{relação entre } a \text{ e } r: a_{CS} = 2 \cdot R$$

$$FEA = \frac{1 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3}{(2 \cdot R)^3} = 0,52$$

#### Cúbico corpo centrado

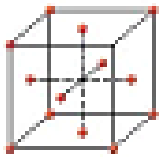


$$n^{\circ} \text{ de átomos} = \frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2 \text{ átomos}$$

$$\text{relação entre } a \text{ e } r: a_{CCC} = \frac{4 \cdot R}{\sqrt{3}}$$

$$FEA = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}} \cdot R\right)^3} = 0,68$$

Cúbico de faces centradas

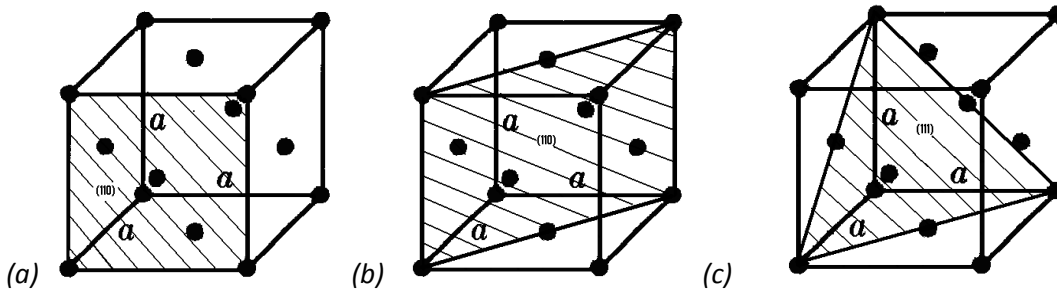


$$n^{\circ} \text{ de átomos} = \frac{1}{8} \times 8 + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \text{ átomos}$$

$$\text{relação entre } a \text{ e } r: a = \frac{4 \cdot R}{\sqrt{2}}$$

$$FEA = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3}{\left(\frac{4 \cdot R}{\sqrt{2}}\right)^3} = 0,74$$

5. Calcule a densidade atômica planar (DAP) para os planos cristalinos dos desenhos abaixo. O que você pode concluir sobre a probabilidade de deslizamento nestes planos?



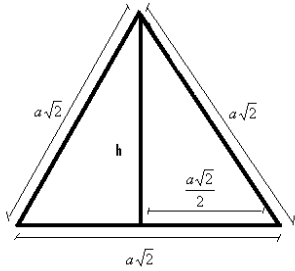
$$DAP = \frac{\text{Área total de átomos}}{\text{Área do plano}} \quad a_{CFC} = \frac{4 \cdot r}{\sqrt{2}}$$

$$(a) \text{ n}^{\circ} \text{ de átomos} = \frac{1}{4} \times 4 + 1 = 2 \text{ átomos. Área do plano: } a^2$$

$$DAP = \frac{2 \cdot \pi \cdot r^2}{a^2} = \frac{2 \cdot \pi \cdot r^2}{\left(\frac{4 \cdot r}{\sqrt{2}}\right)^2} = \frac{2 \cdot \pi \cdot r^2}{16 \cdot r^2} = 0,785$$

$$(b) \text{ n}^\circ \text{ de átomos} = \frac{1}{4} \times 4 + \frac{1}{2} \times 2 = 2 \quad \text{átomos. Área do plano: } a \times a\sqrt{2} = a^2\sqrt{2}$$

$$DAP = \frac{2 \cdot \pi \cdot r^2}{a^2 \cdot \sqrt{2}} = \frac{2 \cdot \pi \cdot r^2}{\left(\frac{4 \cdot r}{\sqrt{2}}\right)^2 \cdot \sqrt{2}} = 0,555$$



(c)

$$(a \cdot \sqrt{2})^2 = h^2 + \left(\frac{a \cdot \sqrt{2}}{2}\right)^2 \quad h = a\sqrt{\frac{3}{2}} = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$

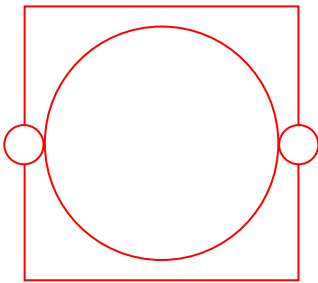
$$\text{n}^\circ \text{ de átomos} = 3 \times \frac{1}{2} + 3 \times \frac{1}{6} = 1,5 + 0,5 = 2 \text{ átomos}$$

$$\text{Área do plano (111): } \frac{\text{base} \times \text{altura}}{2} = \frac{\left(a\sqrt{2} \times \frac{a\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\right)}{2} = \frac{a^2 \cdot \sqrt{3}}{2}$$

$$DAP = \frac{2 \cdot \pi \cdot r^2}{\left(\frac{a^2 \cdot \sqrt{3}}{2}\right)} = 0,906$$

6. Determine o raio ( $r$ ) do maior interstício nas redes CCC e CFC. Expresse seu resultado em função do raio atômico ( $R$ ). Calcule o valor de  $r$  para Ferro, nas duas estruturas, sabendo que  $R_{Fe}=0,124$  nm. Compare com o raio do Carbono ( $R_C = 0,077$ nm). O que você pode concluir sobre a facilidade de diluir Carbono em Ferro CCC ou CFC?

Para visualizar os interstícios é útil imaginar um corte vertical passando pelo centro da célula unitária. Estes cortes estão representados abaixo para as duas redes, com os átomos originais da rede representados como círculos grandes e os interstícios representados como círculos pequenos.



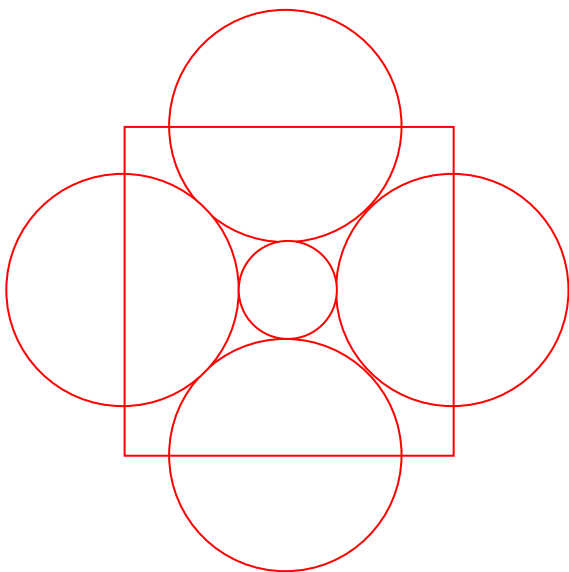
**CCC**

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

$$2R + 2r = a$$

$$r = R \left( \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) = 0,154R \text{ e para } R_{Fe} = 0,124 \text{ nm } r = 0,019 \text{ nm}$$

*OBS: Na verdade o maior interstício na rede CCC não é o que está desenhado, mas outro posicionado em uma coordenada  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$ , cuja visualização e cálculo são mais complexos. Este interstício, na rede do ferro CCC, tem  $r = 0,036$  nm.*



**CFC**

$$4R = a\sqrt{2}$$

$$2R + 2r = a$$

$$r = R \left( \frac{2}{\sqrt{2}} - 1 \right) = 0,414R \text{ e para } R_{Fe} = 0,124 \text{ nm } r = 0,051 \text{ nm}$$

Nota-se que o interstício da rede CFC tem raio  $\approx 1.4$  vezes maior do que o interstício da rede CCC o que leva a um volume quase 3 vezes maior. Em ambos os casos, o átomo de carbono é maior do que o interstício e causará distorção na rede cristalina do ferro ao ocupar os interstícios. Como esta distorção será substancialmente maior na rede CCC, a solubilidade máxima de carbono em ferro CCC (ferrita) será muito menor, 0,02 wt%, do que em ferro CFC (austenita), 2,11 wt%.

7. Calcule a fração dos sítios atômicos que estão vagos para o chumbo na sua temperatura de fusão de 327°C. Suponha uma energia para a formação de lacunas equivalente a 0,55 eV/átomo.

$$\text{Adote: } C_D = N_D / N = \exp(-Q_D / kT)$$

$$Q_D = 0,55 \text{ eV/átomo;}$$

$$k = 8,62 \times 10^{-5} \text{ eV/átomo-K}$$

$$T = 600 \text{ K}$$

$$N_D / N = \text{fração de sítios vazios} = \underline{2,4 \times 10^{-5}}$$

$$\text{Resp: } 2,4 \times 10^{-5}$$

8. Calcule a energia para a formação de lacunas na prata, sabendo-se que o número de lacunas em equilíbrio a 800°C é de  $3,6 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ . O peso atômico e a densidade para a prata são, respectivamente, 107,9g/mol e  $9,5 \text{ g/cm}^3$ .

$$m = N \times (\text{massa atômica} / A) \quad (\text{Eq. 1})$$

$$m = \text{massa do material} \quad N = \text{número de átomos} \quad A = \text{n. de Avogadro}$$

Dividindo Eq. 1 pelo volume (v), tem-se:

$$N / v = (\rho \times A) / \text{massa atômica} \quad (\text{Eq. 2})$$

Onde  $\rho$  = densidade

$$\text{Da Eq. 2, calcula-se } N / v = 53 \times 10^{21} \text{ átomos/cm}^3 = 53 \times 10^{27} \text{ átomos/m}^3$$

$$N_D / N = \exp(-Q_D / kT) \quad (\text{Eq. 3})$$

Da Eq. 3 com  $N_D = 3,6 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ,  $N = 53 \times 10^{27} \text{ átomos-m}^{-3}$ ,  $k = 8,62 \times 10^{-5} \text{ eV/átomo-K}$  e

$T = 1073 \text{ K}$ , calcula-se  $Q_D = \underline{1,1 \text{ eV/átomo}}$

**Resp: 1,1 eV/átomo**

9. A 400°C, a fração de sítios com vacâncias da rede do Al é  $2,29 \times 10^{-5}$ . Calcule a fração a 660°C (logo abaixo do seu ponto de fusão). Sabe-se que  $E_v = 0,76 \text{ eV}$ .  $k = 86,2 \times 10^{-6} \text{ eV/K}$ .

$$\frac{n_v}{n_{\text{sítios}}} = 2,29 \times 10^{-5}$$

$$\frac{n_v}{n_{\text{sítios}}} = 11,2 e^{\frac{-0,76}{86,2 \times 10^{-6} \times 922}}$$

$$\frac{n_v}{n_{\text{sítios}}} = C e^{-E_v/kT}$$

$$\frac{n_v}{n_{\text{sítios}}} = 8,82 \times 10^{-4}$$

$$C = \frac{n_v}{n_{\text{sítios}}} e^{E_v/kT}$$

~ em torno de 9 vacâncias  
para 10.000 sítios de rede

$$C = 2,29 \times 10^{-5} e^{\frac{0,76}{86,2 \times 10^{-6} \times 672}}$$



10. Cu e Ni fazem uma solução sólida completa, enquanto Si e Al são solúveis entre si somente em um grau limitado. Explique este comportamento baseado nos valores dos raios atômicos listados abaixo.

| Elemento | Raio atômico (nm) |
|----------|-------------------|
| Cu       | 0,128             |
| Ni       | 0,125             |
| Al       | 0,143             |
| Si       | 0,117             |

Cu – Ni

$$\% \text{ diferença de raios} = \frac{0,128\text{nm} - 0,125\text{nm}}{0,128\text{nm}} \times 100$$

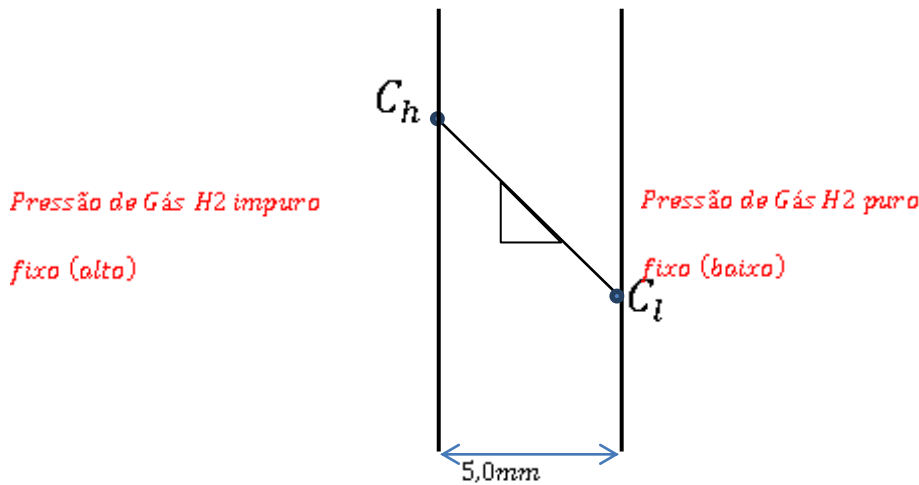
$$\% \text{ diferença de raios} = 2,3\% (< 15\%)$$

Al – Si

$$\% \text{ diferença de raios} = \frac{0,143\text{nm} - 0,117\text{nm}}{0,143\text{nm}} \times 100$$

$$\% \text{ diferença de raios} = 18,2\% (> 15\%)$$

11. Uma membrana para purificação de gás  $H_2$  feita de  $Pd$  possui área de  $0,2m^2$  e a espessura de  $5,0mm$ . Se a concentração fixa de  $H_2$  no lado de alta pressão (gás impuro) da chapa ( $C_h$ ) for  $1,5kg/m^3$  e do lado de baixa pressão da chapa ( $C_l$ ) for  $0,3kg/m^3$ , calcule a massa do  $H_2$  purificado por hora considerando  $D_H$  (constante de difusão de hidrogênio no  $Pd$ ) de  $1,0 \times 10^{-8} m^2/s$ .



Condição estacionária,

usar a 1ª lei de Fick

$$J = -D \frac{\Delta C}{\Delta X}$$

$$J = -1,0 \times 10^{-8} \frac{m^2}{s} \left( \frac{1,5 \frac{Kg}{m^3} \times 0,3 \frac{Kg}{m^3}}{0 - 0,005 m} \right)$$

$$J = -1,0 \times 10^{-8} \frac{m^2}{s} \left( - \frac{1,2 \frac{Kg}{m^3}}{5 \times 10^{-3} m} \right)$$

$$J = -1,0 \times 10^{-8} \frac{m^2}{s} (-0,24 \times 10^3 \frac{Kg}{m^4})$$

$$J = 0,24 \times 10^{-5} \frac{Kg}{m^2s}$$

$$J = 2,4 \times 10^{-6} \frac{Kg}{m^2s}$$

Para calcular o fluxo por hora,

temos que multiplicar por  $3600s/h$ :

$$J = 2,4 \times 10^{-6} \frac{Kg}{m^2s} \cdot 3,6 \times 10^3 \frac{s}{h}$$

$$J = 8,64 \times 10^{-3} \frac{Kg}{m^2h}$$

Tendo uma área de  $0,2m^2$ ,

a membrana vai purificar

a seguinte massa por hora:

$$m/h = 8,64 \times 10^{-3} \frac{Kg}{m^2h} \cdot 0,2 m^2$$

12. Para discordâncias em aresta e em hélice indique a relação de orientação entre a discordância, o vetor de Burgers, uma tensão cisalhante aplicada e direção de movimento da discordância.

*Discordância em aresta: a direção da tensão cisalhante é paralela à direção do movimento da discordância. O vetor de Burgers é perpendicular à discordância.*

*Discordância em hélice: a direção da tensão cisalhante é perpendicular à direção do movimento da discordância. O vetor de Burgers é paralelo à discordância.*

13. A figura abaixo se encontra em escala e representa o comportamento tensão-deformação em tração de um corpo de prova de uma liga de latão com comprimento e diâmetro iniciais de 250 mm e 12,8 mm, respectivamente. A região elástica do material acha-se detalhada no interior da referida figura e observe que a reta passa pela origem. Com base no diagrama apresentado e sabendo que  $\text{MPa} = \text{MN} / \text{m}^2$ , determine:

- O módulo de elasticidade da liga de latão.

*O módulo de elasticidade é a inclinação da parte inicial (linear elástica) da curva tensão-deformação. Adotando-se a Lei de Hooke ( $\sigma = E\epsilon$ ) na figura ampliada desta região, para tensão de 150 MPa, encontra-se a deformação correspondente (0,0016) e calcula-se  $E = 94 \text{ GPa}$ .*

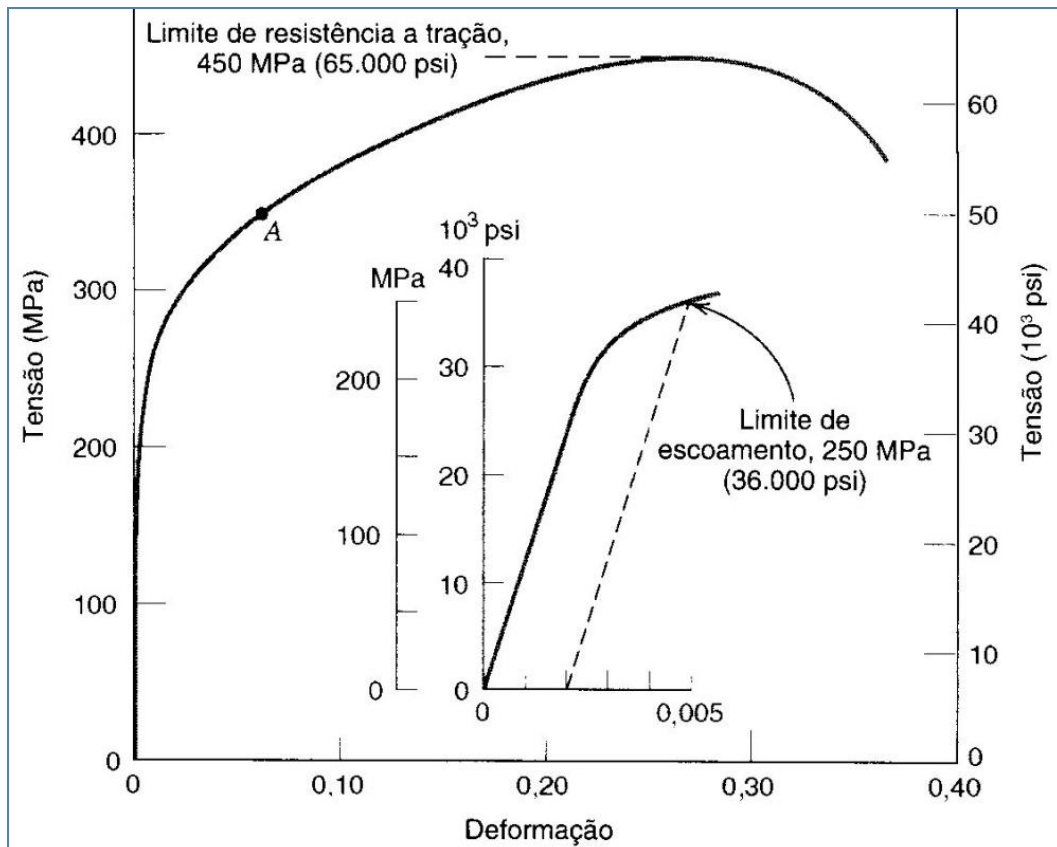
- O alongamento do corpo de prova sob tensão de 400 MPa;

*Para a tensão de 400 MPa, a deformação corresponde a 0,125. Fazendo-se  $\epsilon = \Delta l / l_0$ , para  $l_0 = 250 \text{ mm}$ , calcula-se  $\Delta l = 31,3 \text{ mm}$*

- A carga máxima que pode ser suportada pelo material.

*A carga máxima corresponde ao limite de resistência mecânica (450 MPa).*

*Fazendo-se  $\sigma = F / A_0$  ( $= 128,6 \text{ mm}^2$ ), calcula-se  $F = 58 \text{ kN}$ .*



14. A tabela abaixo apresenta os resultados de um ensaio de tração em uma barra de alumínio com 12,8 mm de diâmetro e 50,8 mm de comprimento. Determine:

| Carga (kN)       | Elongamento (mm) |
|------------------|------------------|
| 0                | 0,000            |
| 4,448            | 0,0254           |
| 13,345           | 0,0762           |
| 22,241           | 0,1270           |
| 31,138           | 0,1778           |
| 33,362           | 0,762            |
| 35,141           | 2,032            |
| 35,586           | 3,048            |
| 35,363           | 4,064            |
| 33,806 (fratura) | 5,207            |

- O módulo de elasticidade do material.  
A tensão ( $\sigma = F / A_0$ ) e deformação ( $\epsilon = \Delta l / l_0$ ) para a menor carga (4.448 N),  $A_0 = 128,6 \text{ mm}^2$ , alongamento corresponde à carga (0,0254 mm) e  $l_0 = 50,8 \text{ mm}$ , equivalem a 34,6 MPa e 0,0005, respectivamente. Adotando-se  $\sigma = E\epsilon$ , calcula-se  $E = \underline{69 \text{ GPa}}$ .
- O limite de escoamento e sua respectiva deformação (%), considerando que, neste instante, o alongamento da barra equivale a 0,1778 mm.  
Para o alongamento de 0,1778 mm, a carga equivale a 31.138 N.  
Fazendo-se  $LE = F / A_0 (= 128,6 \text{ mm}^2)$  e  $\epsilon = \Delta l / l_0 (= 50,8 \text{ mm})$ , calcula-se  $LE = \underline{242 \text{ MPa}}$  e  $\epsilon = \underline{0,0035}$ .
- A tensão máxima que pode ser suportada pelo material, e sua respectiva deformação.  
Resp: 277 MPa; 6%  
Para a carga máxima (35.586 N), o alongamento equivale a 3,048 mm.  
Fazendo-se  $LRM = F / A_0 (= 128,6 \text{ mm}^2)$  e  $\epsilon = \Delta l / l_0 (= 50,8 \text{ mm})$ , calcula-se  $LRM = 277 \text{ MPa}$  e  $\epsilon = 0,06$  (ou 6%).
- A tensão de fratura e sua respectiva deformação.  
Resp: 263 MPa; 10,3%  
Para a carga de fratura (33.806 N), o alongamento equivale a 5,207 mm.  
Fazendo-se  $TF = F / A_0 (= 128,6 \text{ mm}^2)$  e  $\epsilon = \Delta l / l_0 (= 50,8 \text{ mm})$ , calcula-se tensão  $TF = 263 \text{ MPa}$  e  $\epsilon = 0,103$  (ou 10,3%).