

**PI – MET 1831 2008.1 – Turma 3UA – Prof. Sidnei Paciornik**

***Justifique sempre as respostas dadas.  
Respostas sem justificativas não serão consideradas.***

Nome:

Assinatura:

Matrícula:

**1. (2,0)**

a) (1,0) Liste as ligações atômicas e as classifique por:

- Energia de Ligação
- Transferência de elétrons
- Direcionalidade da ligação

<b>Ligação</b>	<b>Energia</b>	<b>Transferência de Elétrons</b>	<b>Direcionalidade da Ligação</b>
Iônica	Alta	Troca	Não direcional
Covalente	Alta	Compartilhamento	Direcional
Metálica	Alta	Compartilhamento	Não direcional
Van der Waals	Baixa	Nem troca nem compartilhamento	Não direcional (na verdade não é relevante)

b) (1,0) Desenhe esquematicamente em um mesmo gráfico os diagramas de energia potencial (**E**) versus distância interatômica (**a**) para um par de átomos metálicos de titânio (Ti) e de tântalo (Ta), respectivamente. Leve em conta os seguintes dados:

Raios atômicos:  $R(\text{Ti}) = R(\text{Ta}) = 0,146 \text{ nm}$

Temperaturas de fusão:  $T_f(\text{Ti}) = 1668^\circ\text{C}$ ;  $T_f(\text{Ta}) = 2996^\circ\text{C}$

**JUSTIFIQUE SEU GRÁFICO.**

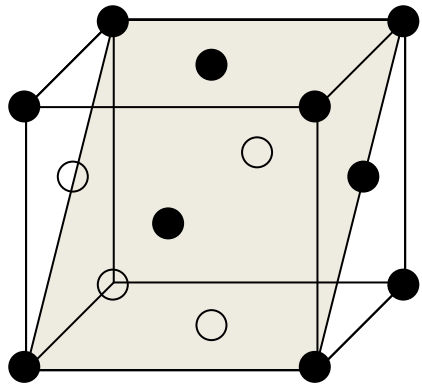
Gráfico típico de poço de potencial, com ponto de mínimo no mesmo valor de  $a = 0,292 \text{ nm}$ , mas com o poço do Tântalo mais profundo, já que tem maior ponto de fusão.

O ponto de fusão está diretamente associado à energia de ligação entre os átomos de um material. Quanto maior a energia de ligação, mais difícil é separar os átomos na fusão. Como a profundidade do poço está associada à energia de ligação, o tântalo terá um poço de potencial mais profundo.

2. (1,5) Considere uma rede CFC.

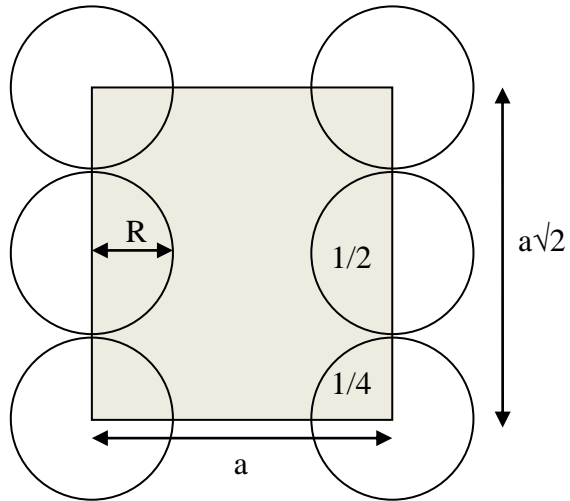
a) (0,5) Desenhe em uma célula unitária o plano (101); (Dica: não é necessário desenhar os átomos com seus raios corretos)

b) (1,0) Calcule a densidade atômica planar do plano do item acima.



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

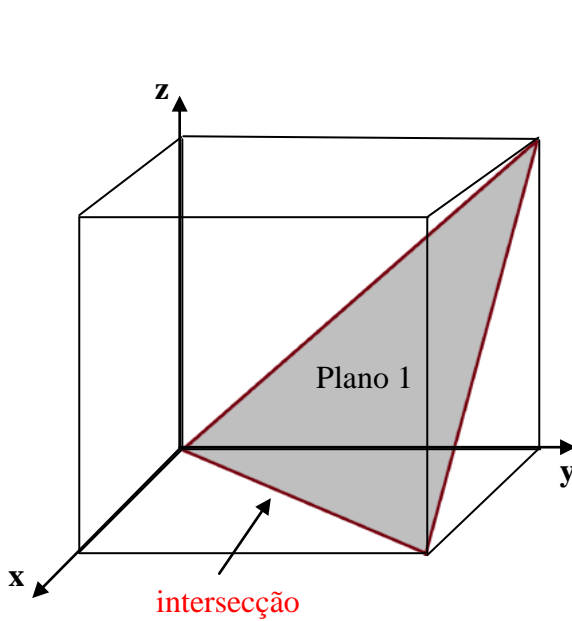
$$a = 2R\sqrt{2}$$



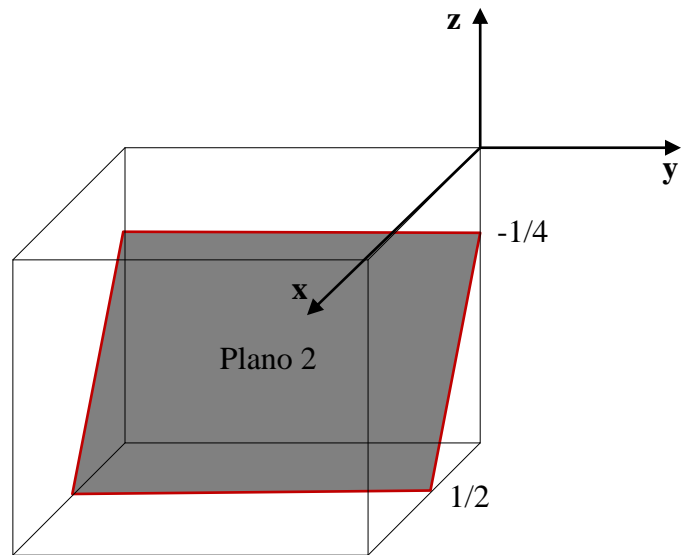
$$DAP = \frac{\text{Área Atômica}}{\text{Área do Plano}} = \frac{(2 \times 1/2 + 4 \times 1/4)\pi R^2}{a \times a\sqrt{2}} = \frac{2\pi R^2}{a^2\sqrt{2}} = \frac{2\pi R^2}{(2R\sqrt{2})^2\sqrt{2}} = \frac{2\pi R^2}{8R^2\sqrt{2}} = \frac{\pi}{4\sqrt{2}} = 0,555$$

(1,5)

a) (1,0) Determine os índices de Miller dos planos desenhados abaixo:



**Intersecções:** 1,-1,1  
**Inversos:** 1,-1,1  
**Índices de Miller:**  $(1 \bar{1} 1)$



**Intersecções:**  $1/2, \infty, 3/4$   
**Inversos:** 2,0,4/3  
**Índices de Miller:**  $(6 \ 0 \ 4)$

b) (0,5) Determine os índices da direção determinada pela intersecção do Plano 1 com o plano (001).

O plano (001) corresponde à base ou ao topo do cubo. Usando o plano da base, vê-se que a intersecção corresponde à diagonal indicada, cujos índices são  $[1 \ 1 \ 0]$ .

3. (2,0) Dentre as afirmativas abaixo, identifique a que está correta e explique sucintamente o que está errado com as outras. (Resposta correta = 0,8 – Cada justificativa das erradas = 0,3)

(a) Vacâncias e impurezas substitucionais são defeitos pontuais. A concentração destes defeitos aumenta com a temperatura e também com a energia de formação destes defeitos.

Errado. A concentração diminui com a energia de formação.

(b) Vacâncias, interstícios e impurezas intersticiais são defeitos pontuais. A concentração destes defeitos aumenta com a temperatura e diminui com a energia de formação destes defeitos.

Errado. Interstícios não são defeitos; fazem parte da geometria da rede cristalina.

(c) Vacâncias, impurezas substitucionais e intersticiais são defeitos pontuais. Sua concentração, em uma rede cristalina, aumenta com a temperatura e diminui com energia de formação destes defeitos.

Correta.

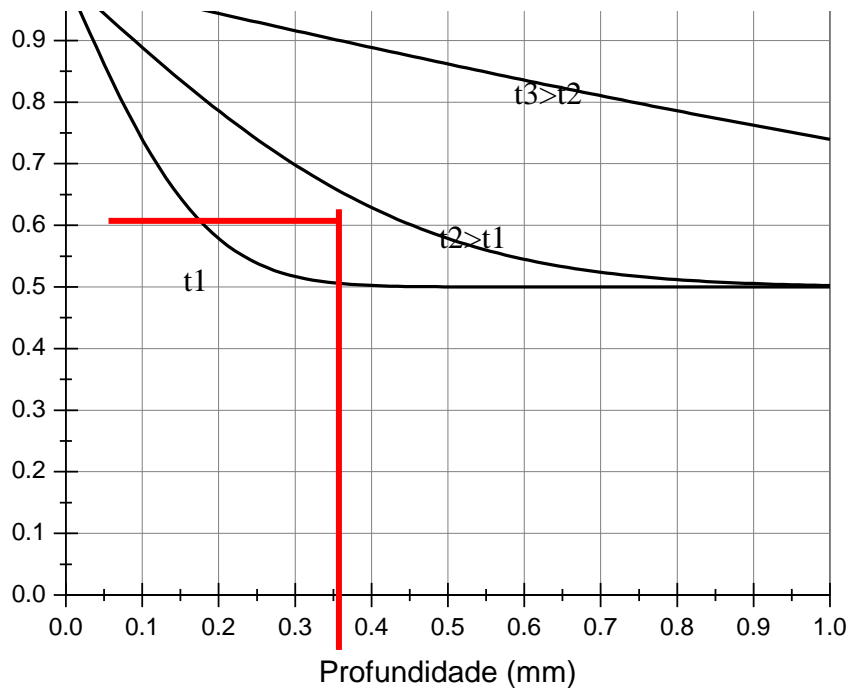
(d) Defeitos substitucionais se formam quando os átomos de impureza são muito parecidos com os átomos da matriz (ou seja, satisfazem as regras de Hume-Rothery). Por isso, a difusividade deste tipo de defeito será maior do que a de defeitos intersticiais.

Errado. Justamente por serem grandes, similares aos átomos da rede, os defeitos substitucionais têm maior dificuldade de se locomover dentro da rede ou seja, menor difusividade. Os intersticiais têm maior difusividade porque são menores e porque existem, em geral, mais interstícios do que vacâncias na rede.

(e) Vacâncias e interstícios são fundamentais para a difusão nos estados sólido e líquido. A difusão intersticial é mais veloz porque os átomos intersticiais são menores e existem mais interstícios que vacâncias.

Errado. Vacâncias e interstícios não têm nenhum papel no estado líquido porque não existe rede cristalina.

4. (3,0) Três peças do mesmo aço foram submetidas a carbonetação. Os gráficos abaixo representam a concentração de carbono em função da profundidade para as três peças. Todos os processos ocorreram na mesma temperatura.



A partir destes gráficos responda às seguintes questões:

a) (0,5) É possível afirmar se a concentração de soluto na superfície é constante? Se for, qual é este valor? **Sim, para os 3 gráficos o valor para profundidade zero é igual ( $C_s=1,0$  wt%), como se pode ver no gráfico.**

b) (0,5) Qual era a concentração original de soluto, antes do início do processo? **Este valor pode ser obtido pela assíntota das duas curvas que variam mais rapidamente.  $C_0=0,5$  wt%**

c) (1,0) Utilizando o gráfico intermediário, calcule o tempo de difusão sabendo que  $D = 6.25 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ . (Dica: use um ponto fácil de ler no gráfico e apenas duas casas decimais nos cálculos).

d) (1,0) Qual parâmetro experimental está variando entre os três gráficos? Indique no gráfico a ordem crescente de variação deste parâmetro. **O tempo. Vide gráfico.**

Dados:

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

$z$	$\text{erf}(z)$	$z$	$\text{erf}(z)$
0.00	0.0000	0.70	0.6778
0.01	0.0113	0.75	0.7112
0.02	0.0226	0.80	0.7421
0.03	0.0338	0.85	0.7707
0.04	0.0451	0.90	0.7969
0.05	0.0564	0.95	0.8209
0.10	0.1125	1.00	0.8427
0.15	0.1680	1.10	0.8802
0.20	0.2227	1.20	0.9103
0.25	0.2763	1.30	0.9340
0.30	0.3286	1.40	0.9523
0.35	0.3794	1.50	0.9661
0.40	0.4284	1.60	0.9763
0.45	0.4755	1.70	0.9838
0.50	0.5205	1.80	0.9891
0.55	0.5633	1.90	0.9928
0.60	0.6039	2.00	0.9953
0.65	0.6420		

Item c: Usando o ponto marcado no gráfico ( $x=0,3\text{mm}$  e  $C=0,7\text{ wt\%}$ ) e substituindo na expressão temos:

$$\frac{0,7 - 0,5}{1,0 - 0,5} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{0,3 \times 10^{-3}}{2\sqrt{6,25 \times 10^{-12} t}}\right)$$

$$\frac{0,2}{0,5} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{3 \times 10^{-4}}{5 \times 10^{-6} \sqrt{t}}\right)$$

$$0,4 = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{60}{\sqrt{t}}\right)$$

$$0,6 = \operatorname{erf}\left(\frac{60}{\sqrt{t}}\right)$$

$$\left(\frac{6 \times 10^1}{\sqrt{t}}\right) = 0,6 \text{ (da tabela } \operatorname{erf}(0,6) = 0,60 \text{ com 2 casas decimais)}$$

$$\frac{36 \times 10^2}{t} = 0,36$$

$$t = 10^4 \text{ s} = 2,78 \text{ horas}$$