***LISTA DE EXERCICIOS III: Defeitos***

1) Calcule a fração dos sítios atômicos que estão vagos para o chumbo na sua temperatura de fusão de 327°C (600°F). Suponha uma energia para a formação de lacunas equivalente a 0,55 eV/átomo.

2) Calcule a energia para a formação de lacunas na prata, sabendo-se que o número de lacunas em equilíbrio a 800°C (1073 K) é de 3,6 x 1023 m-3. O peso atômico e a densidade (a 800°C) para a prata são, respectivamente, 107,9 g/mol e 9,5 g/cm3.

3) Abaixo, estão tabulados os valores para o raio atômico, a estrutura cristalina, a eletronegatividade e as valências mais comuns para vários elementos. Para aqueles que são não-metais, apenas os raios atômicos estão indicados.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Elemento | Raio Atômico  (nm) | Estrutura Cristalina | Eletronegatividade | Valência |
| Cu | 0,1278 | CFC | 1,9 | +2 |
| C | 0,071 |  |  |  |
| H | 0,046 |  |  |  |
| O | 0,060 |  |  |  |
| Ag | 0,1445 | CFC | 1,9 | +1 |
| Al | 0,1431 | CFC | 1,5 | +3 |
| Co | 0,1253 | HC | 1,8 | +2 |
| Cr | 0,1249 | CCC | 1,6 | +3 |
| Fe | 0,1241 | CCC | 1,8 | +2 |
| Ni | 0,1246 | CFC | 1,8 | +2 |
| Pd | 0,1376 | CFC | 2,2 | +2 |
| Pt | 0,1387 | CFC | 2,2 | +2 |
| Zn | 0,1332 | HC | 1,6 | +2 |

Quais desses elementos você esperaria que formassem o seguinte com o cobre:

(a) Uma solução sólida substitucional com solubilidade completa?

(b) Uma solução sólida substitucional com solubilidade incompleta?

(c) Uma solução sólida intersticial?

4) Existem, para as estruturas cristalinas CFC e CCC, dois tipos diferentes de sítios intersticiais. Em cada caso, um tipo de sítio é maior do que o outro, e este sítio maior é normalmente ocupado por átomos de impurezas. Para a estrutura cristalina CFC, esse sítio maior está localizado no centro de cada uma das arestas da célula unitária; este é conhecido por sítio intersticial octaédrico. Por outro lado, na estrutura CCC, o maior tipo de sítio é encontra do nas posições 0,1/2,1/4 — isto é, sobre as faces {100}, estando estes situados a meio caminho entre duas ares tas da célula unitária sobre esta face e a um quarto da distância entre as outras duas arestas da célula unitária; este é conhecido por sítio intersticial tetraédrico. Tanto para a estrutura cristalina CFC como para a estrutura CCC, calcule o raio r de um átomo de impureza que irá se ajustar exatamente no interior desses sítios, em termos do raio atômico R do átomo hospedeiro.

5) Para um dado material, você esperaria que a energia de superfície fosse maior que, igual ou menor que a energia do contorno de grão? Por quê?

6) Descreva sucintamente uma macla e um contorno de macla.