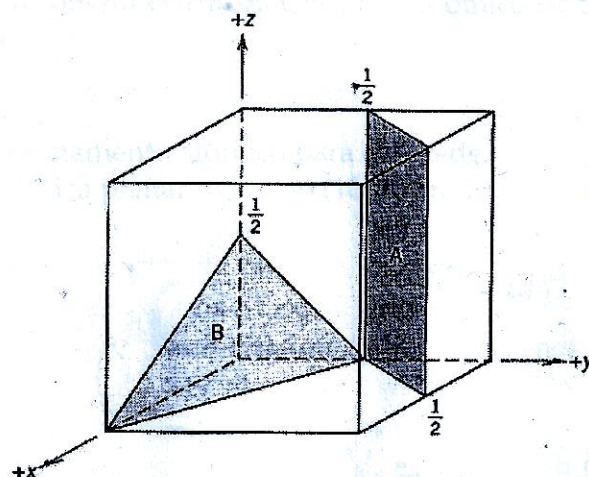


Questão 1

(2.0)

Determine os índices de Miller para os planos que estão mostrados na seguinte célula unitária:



(1.0): a) Planos A e B.

(0.5): b) Calcule os espaçamentos interplanares para os conjuntos de planos A do níquel (Ni), com estrutura cristalina cúbica de face centrada (CFC). O parâmetro de rede (a) do Ni é 0.352 nm.

(0.5): c) Determine o ângulo de difração esperado para a reflexão de primeira ordem para o conjunto de planos A do Ni, quando for usada uma radiação monocromática de 0.1542 nm.

(a) Plano A

corta os eixos $-\frac{1}{2}a$ $\frac{1}{2}b$ ∞c

em termos de parâmetros de rede $-\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ ∞

invertendo -2 2 0

$(\bar{2} 2 0)$

$h = -2, k = 2, l = 0$

Plano B

corta os eixos 1 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$

invertendo 1 2 2

$(1 2 2)$

$h = 1, k = 2, l = 2$

cont. Questão 1.)

$$b) d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{0,352}{\sqrt{(-2)^2 + 2^2 + 0^2}} = \boxed{0,124 \text{ nm}}$$

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

primeira ordem $n=1$

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2 \times 1 \times d_{hkl}} = \frac{0,1542}{2 \times 0,124} = 0,622$$

$$\theta = 38,4^\circ$$

$$c) \text{ \u00c2ngulo de difrac\u00e7\u00e3o: } \boxed{2\theta = 76,89^\circ}$$

Questão 2

(2.0)

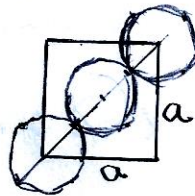
Sabendo que o cobre (Cu) possui estrutura CFC, raio atômico de 0.128 nm e massa atômica de 63.546 g/mol, calcule:

(1.0): a) Densidade do Cu.

(0.5): b) O fator de empacotamento atômico para esta rede.

(0.5): c) A densidade atômica planar no plano (100) para o Cu.

Para estrutura CFC



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

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

$$V_c = a^3 = 16R^3\sqrt{2}$$

$$V_c = 16 \times (0.128)^3 \sqrt{2} = 4.745 \times 10^{-23} \text{ nm}^3$$

$$V_c = 4.745 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

$$\rho = \frac{nA}{N_A V_c}$$

$$n = 4 \text{ (estrutura CFC)}$$

$$\rho = \frac{4 \times 63.546 \text{ g/mol}}{6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \times 4.745 \times 10^{-23} \text{ cm}^3}$$

$$(a) \quad \boxed{\rho = 8.894 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}}$$

$$F_{at} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{16 \pi R^3}{a^3} = \frac{16}{3} \frac{\pi R^3}{16 R^3 \sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6}$$

$$\boxed{F_{at} = 0.740}$$

cont. Questão 2

$$(c) D_p = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{8R^2}$$

$$D_p = \frac{1}{4R^2} = \frac{1}{4 \times (0,128)^2 \times 10^{-18}}$$

$$D_p = 1,526 \times 10^{19} \frac{\text{átomos}}{\text{m}^2}$$

Questão 3

(2.0)

Para uma liga de aço, foi determinado que um tratamento térmico de carbonetação com duração de 15 horas irá elevar a concentração de carbono para 0.35%p em um ponto a 2.0 mm da superfície. Estime o tempo necessário para atingir a mesma concentração em uma posição a 6.0 mm da superfície para um aço idêntico e à mesma temperatura de carbonetação.

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

constante pois C_x , C_0 e C_s são constantes

$$\Rightarrow 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = \text{constante}$$

$$\Rightarrow \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = \text{constante}$$

$$\Rightarrow \frac{x}{\sqrt{t}} = \text{constante}$$

$$\frac{x_1}{\sqrt{t_1}} = \frac{x_2}{\sqrt{t_2}}$$

$$\frac{2}{\sqrt{15}} = \frac{6}{\sqrt{t_2}}$$

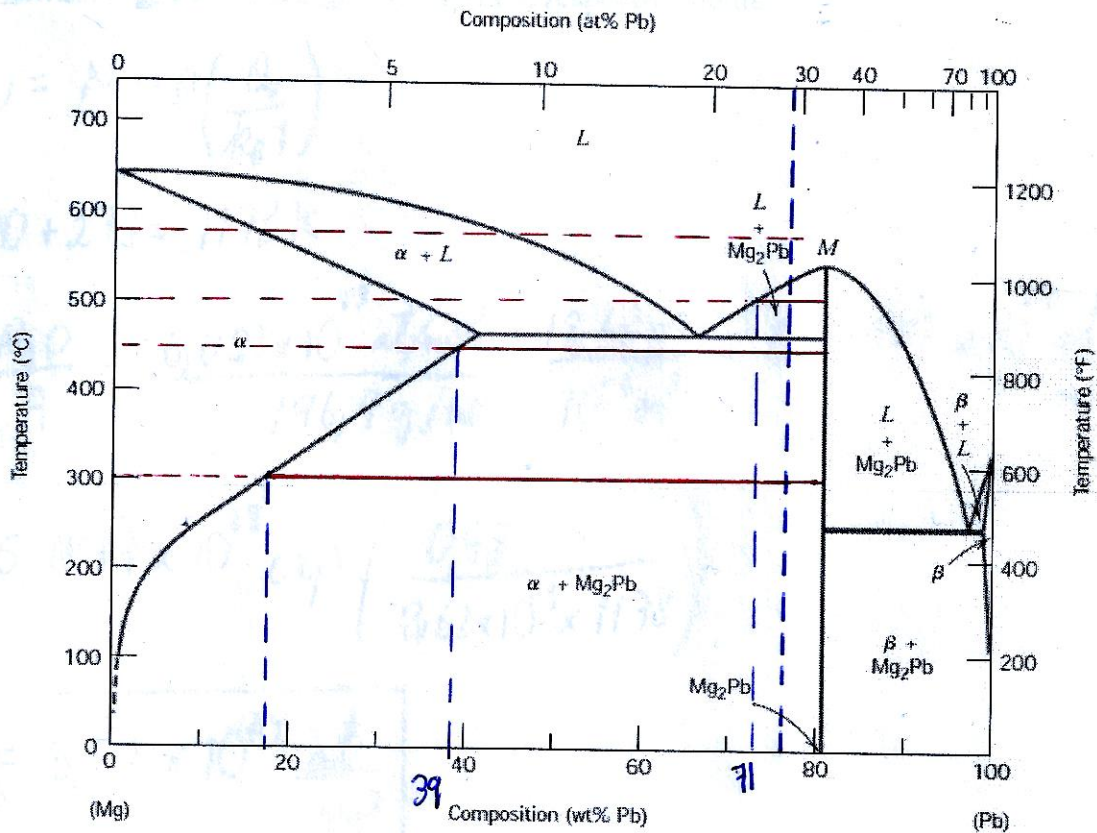
$$\frac{4}{15} = \frac{36}{t_2}$$

$$t_2 = \frac{15 \times 36}{4} = \boxed{135 \text{ horas}}$$

Questão 4

(2.0)

Para uma liga contendo 76%pPb-24%pMg, quais são as fases presentes e as suas respectivas composições para as condições de resfriamento muito lento nas temperaturas:



(0,5): a) 575°C.

(0,5): b) 500°C.

(0,5): c) 450°C. Determine também as quantidades relativas das fases nesta temperatura.

(0,5): d) 300°C. Determine também as quantidades relativas das fases nesta temperatura.

(a) Líquido 76% Pb 24% Mg

(b) Mg₂Pb 81% Pb 19% Mg

Líquido 71% Pb 29% Mg

(c) α 39% Pb 61% Mg
Mg₂Pb 81% Pb 19% Mg

$$w_{\alpha} = \frac{5}{44} = 0,11 \Rightarrow w_{\alpha} = 11\%$$

$$w_{Mg_2Pb} = \frac{39}{44} = 0,89 \Rightarrow w_{Mg_2Pb} = 89\%$$

(d) α 17% Pb 83% Mg
Mg₂Pb 81% Pb 19% Mg

$$w_{\alpha} = \frac{5}{74} = 0,068 \Rightarrow w_{\alpha} = 6,8\%$$

$$w_{Mg_2Pb} = \frac{69}{74} = 0,932 \Rightarrow w_{Mg_2Pb} = 93,2\%$$

Questão 5

(2,0)

Calcule o número de lacunas por metro cúbico no ouro (Au) a 900°C. A energia para a formação de lacunas é de 0,98 eV/átomo. Adicionalmente, a massa específica e o peso atômico para o Au valem 19,3 g/cm³ (a 900°C) e 196,9 g/mol, respectivamente.

$$N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{k_B T}\right)$$

$$T = 900 + 273 = 1173 \text{ K}$$

$$N = \frac{N_A \rho}{A} = \frac{6,023 \times 10^{23} \text{ at/mol} \times 19,3 \text{ g}}{196,9 \text{ g/mol} \times 10^{-6} \text{ m}^3} = 5,6987 \times 10^{29} \frac{\text{at}}{\text{m}^3}$$

$$N_v = 5,6987 \times 10^{29} \exp\left(-\frac{0,98}{8,62 \times 10^{-5} \times 1173}\right)$$

$$N_v = 3,52 \times 10^{24} \frac{\text{at}}{\text{m}^3}$$