



NOVA SCHOOL OF
SCIENCE & TECHNOLOGY

Ciência dos Materiais A

Departamento de Ciência dos Materiais

Margarida Lima (mmal@fct.unl.pt), Rui Borges (rcb@fct.unl.pt);

Carmo Lança (mcl@fct.unl.pt)

Departamento de Química

Ana Rita Duarte (ard08968@unl.pt)

FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

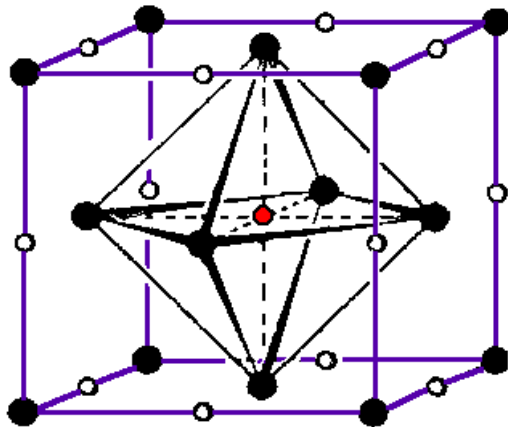
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Ano letivo de 2023-2024

12 – Quais são as posições intersticiais de maior volume nas redes CCC e CFC? Calcular o raio máximo dos átomos que podem entrar nessas posições.

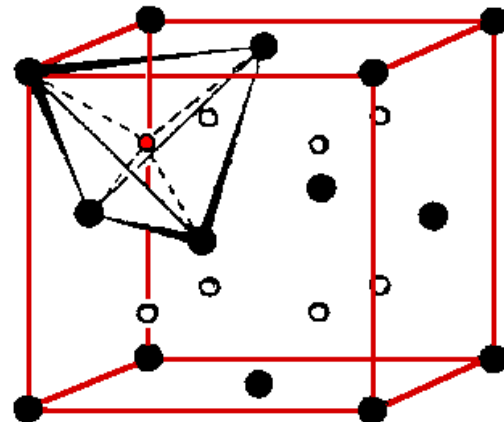
Resolução:

Cúbica de Faces Centradas (CFC)

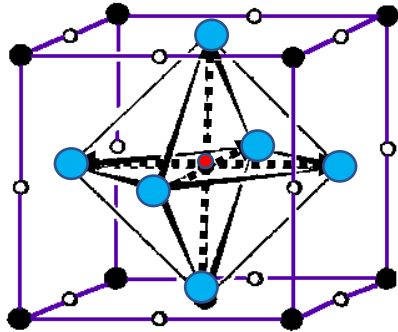


Interstícios
octaédricos

Interstícios
tetraédricos



Interstício octaédrico

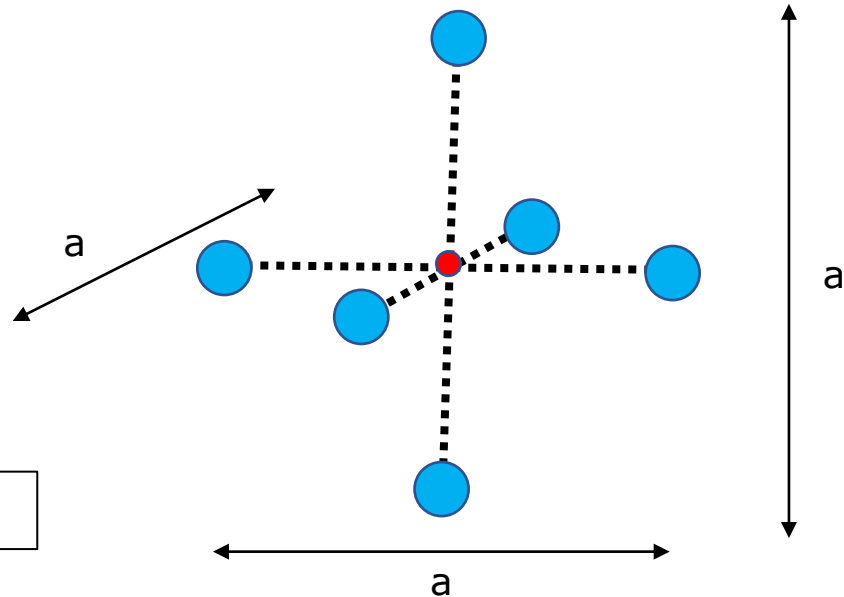


$$a = 2R + 2r$$

$$2\sqrt{2}R = 2R + 2r$$

$$2r = 2\sqrt{2}R - 2R$$

$$r = R(\sqrt{2} - 1)$$

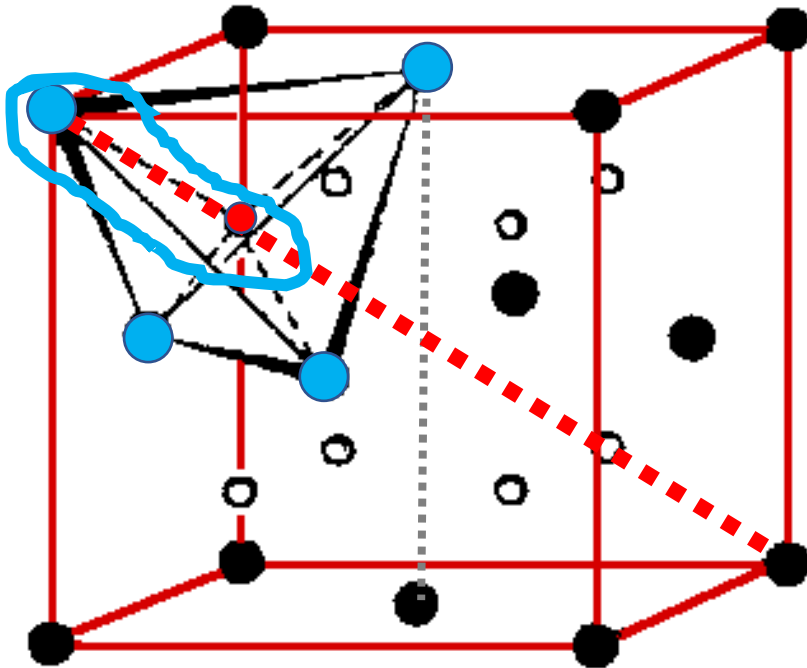


Na estrutura CFC

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

$$\frac{r}{R} = 0,414$$

Interstício tetraédrico



$$d_f^2 = a^2 + a^2 \quad d_f = \sqrt{2}a$$

$$d_c^2 = a^2 + (\sqrt{2}a)^2 = 3a^2 \quad d_c = a\sqrt{3}$$

A distância entre R e r é igual a
 $\frac{1}{4}$ da diagonal do cubo

$$R + r = \frac{1}{4}d_c$$

$$R + r = \frac{1}{4}a\sqrt{3}$$

como

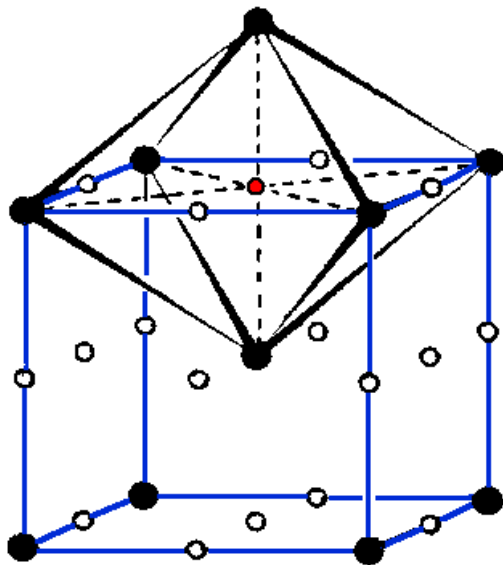
$$a = 2\sqrt{2}R$$

$$R + r = \frac{1}{4} \cdot 2\sqrt{2}R\sqrt{3} = \frac{\sqrt{6}}{2}R$$

$$R\left(\frac{\sqrt{6}}{2} - 1\right) = r$$

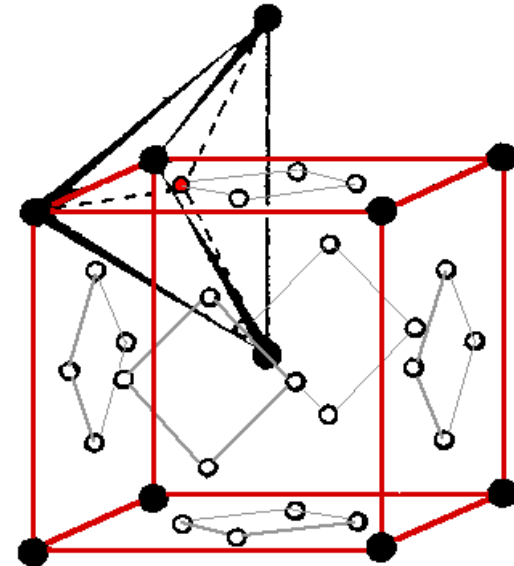
$$\frac{r}{R} = 0,225$$

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)



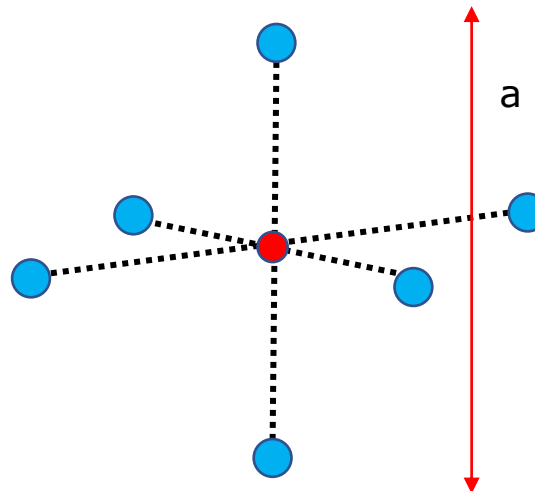
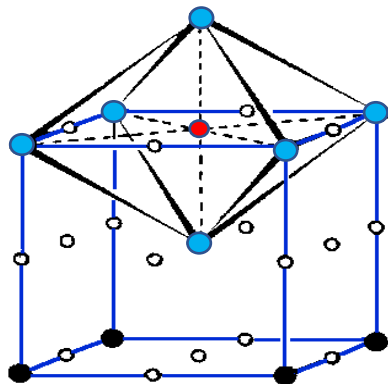
Interstício octaédrico

Interstício tetraédrico



Cúbica de Corpo Centrado (CCC)

Interstício octaédrico



$$a = 2R + 2r$$

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

$$2R + 2r = \frac{4}{\sqrt{3}} R$$

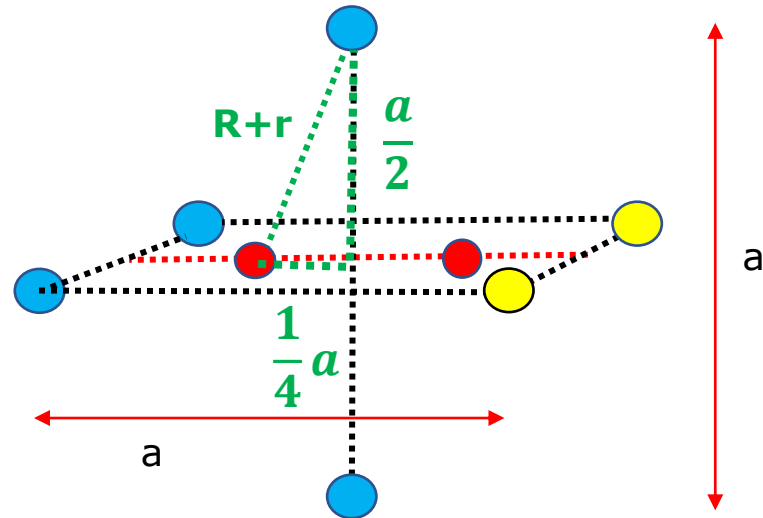
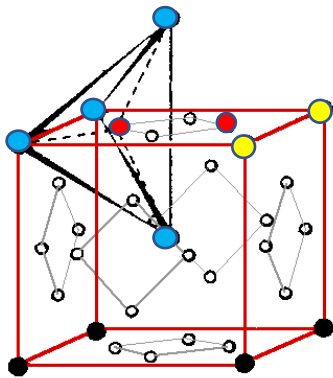
$$2r = \frac{4\sqrt{3}}{3} R - 2R = \frac{4\sqrt{3}}{3} R - \frac{6}{3} R$$

$$2r = R \left(\frac{4\sqrt{3} - 6}{3} \right)$$

$$\frac{r}{R} = 0,155$$

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)

Interstício tetraédrico



$$(R + r)^2 = \left(\frac{1}{4}a\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2$$

$$(R + r)^2 = \frac{1}{16}a^2 + \frac{a^2}{4} = \frac{5}{16}a^2$$

e na rede CCC

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

Cúbica de Corpo Centrado (CCC)

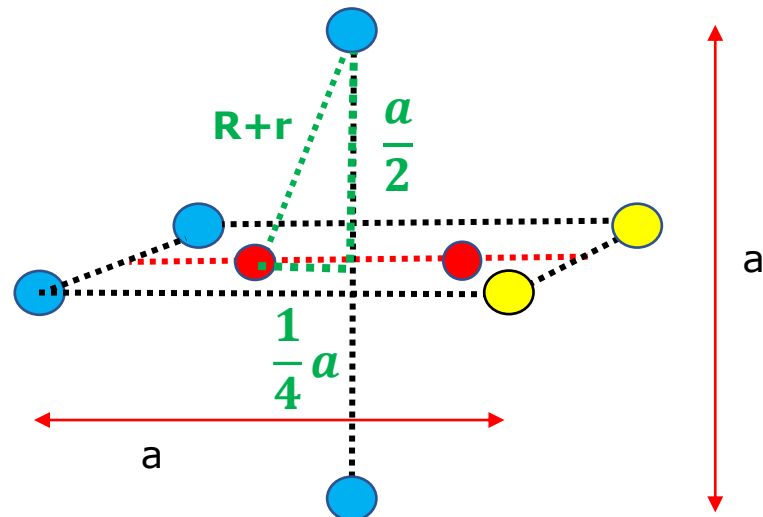
$$(R + r)^2 = \frac{5}{16} a^2$$

$$(R + r)^2 = \frac{5}{16} \left(\frac{4\sqrt{3}}{3} R \right)^2 = \frac{5}{3} R^2$$

$$R + r = \sqrt{\frac{5}{3}} R$$

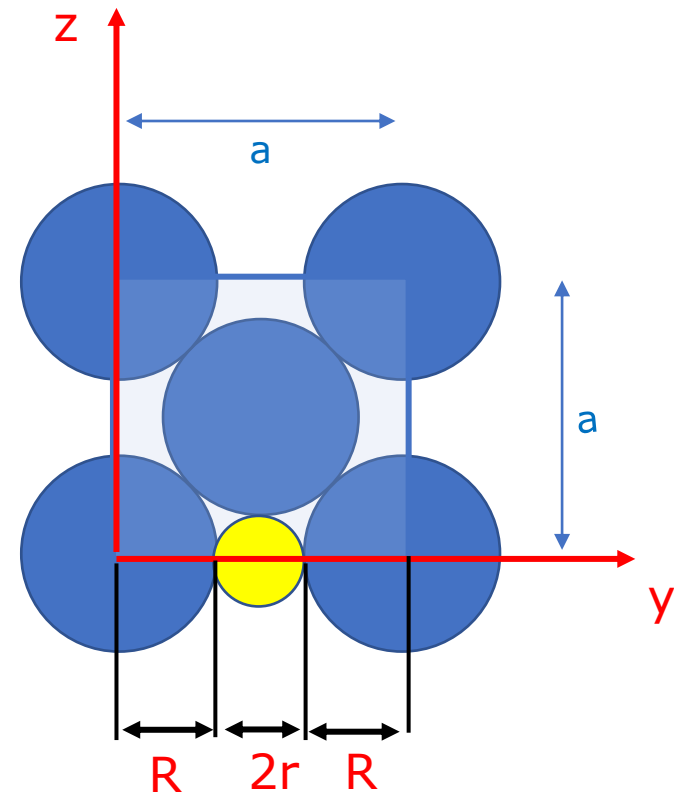
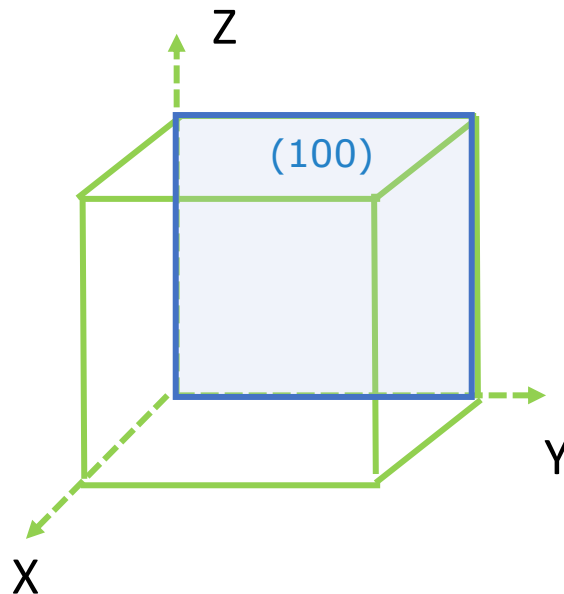
$$r = R \left(\sqrt{\frac{5}{3}} - 1 \right)$$

$$\boxed{\frac{r}{R} = 0,291}$$

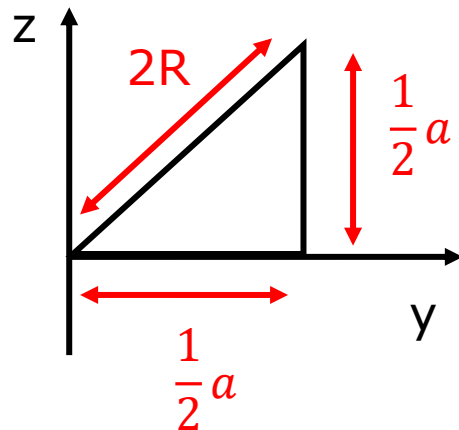


13 – Calcule o raio do maior interstício na rede do ferro- γ (CFC). O raio atômico do ferro na rede CFC é 0,129 nm e os maiores interstícios surgem em posições do tipo $(\frac{1}{2}, 0, 0)$; $(0, \frac{1}{2}, 0)$; $(0, 0, \frac{1}{2})$, etc.

Resolução:

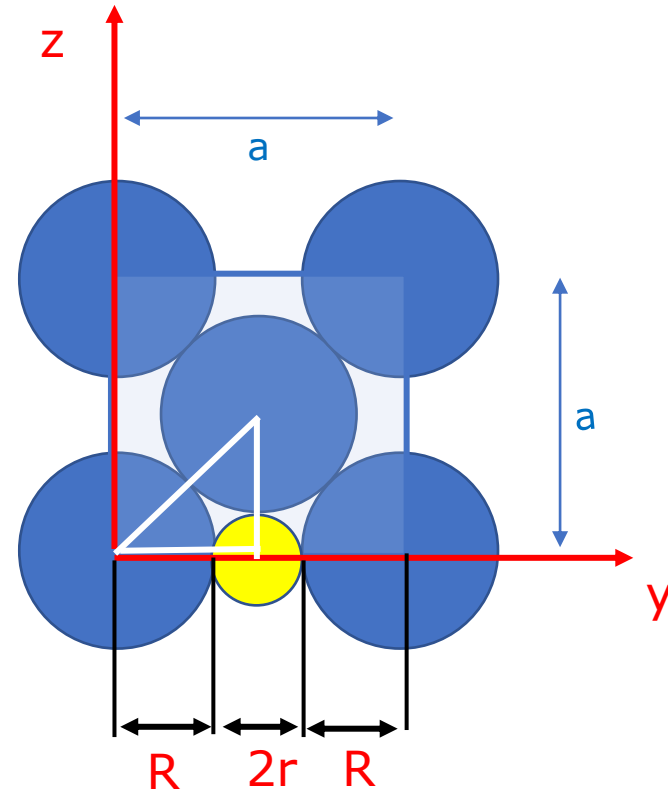


$$a = 2R + 2r$$



$$(2R)^2 = \left(\frac{1}{2}a\right)^2 + \left(\frac{1}{2}a\right)^2$$

$$2R = \frac{1}{\sqrt{2}}a \quad \text{ou} \quad a = 2\sqrt{2}R$$



$$a = 2R + 2r$$

$$2R + 2r = 2\sqrt{2}R$$

$$r = (\sqrt{2} - 1)R = 0,414R$$

$$r = 0,414 * 0,129 = 0,053 \text{ nm}$$

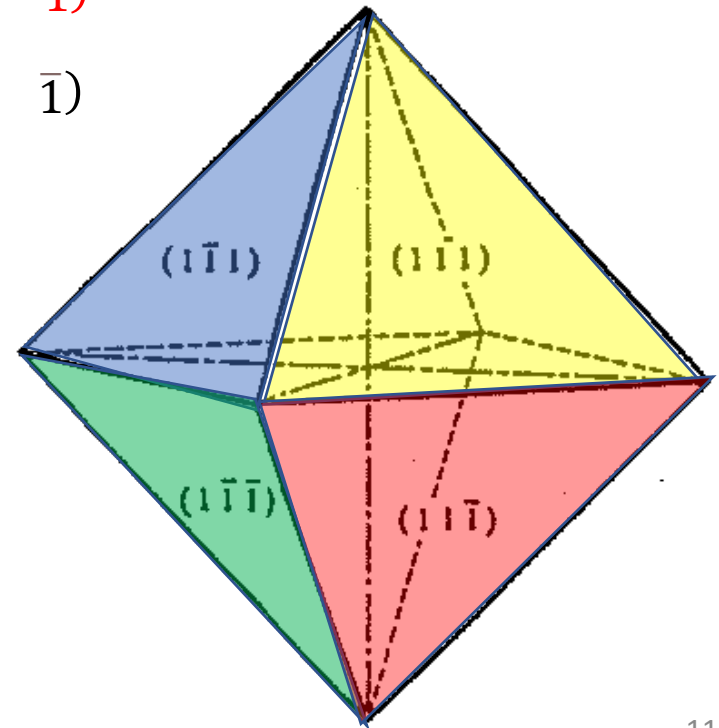
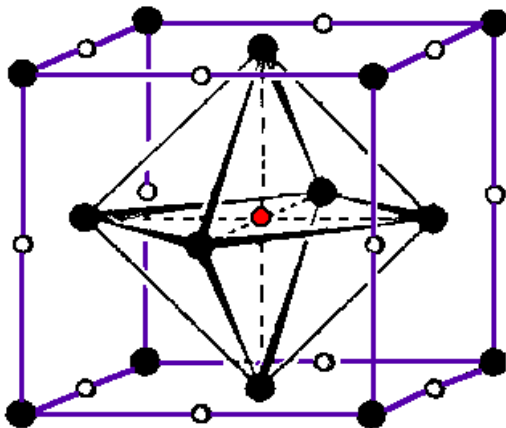
14 – Nos metais de estrutura CFC o escorregamento dá-se em planos do tipo $\{111\}$ ao longo de direções $\langle 110 \rangle$ paralelas a esses planos. Escreva todas as possíveis combinações plano direção de escorregamento para estes metais.

Resolução:

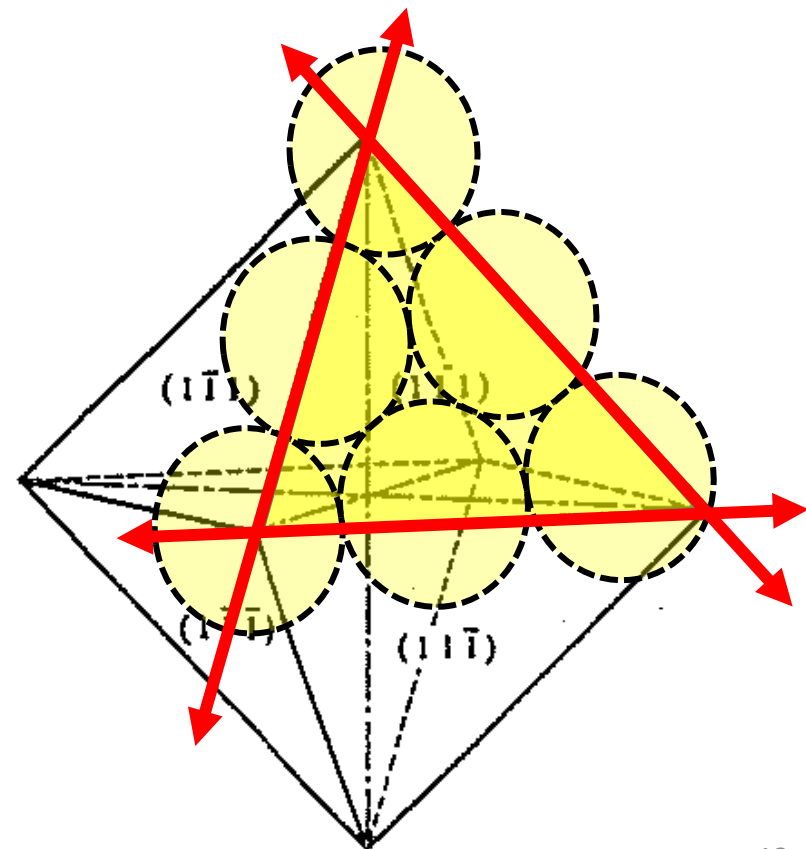
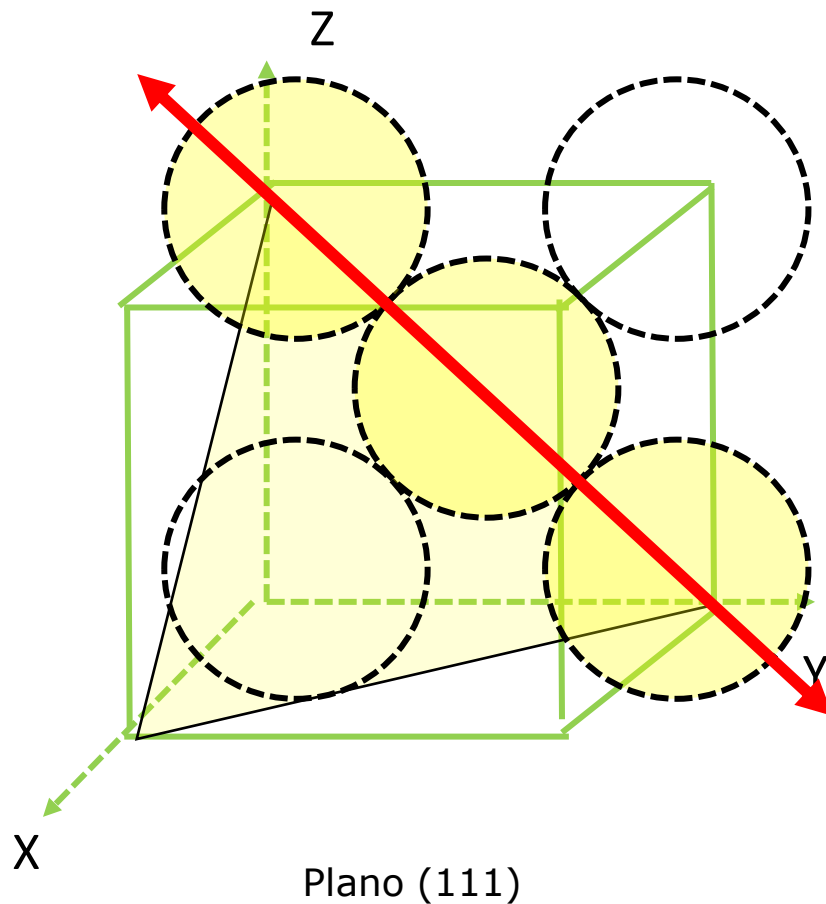
família de planos $\{111\}$

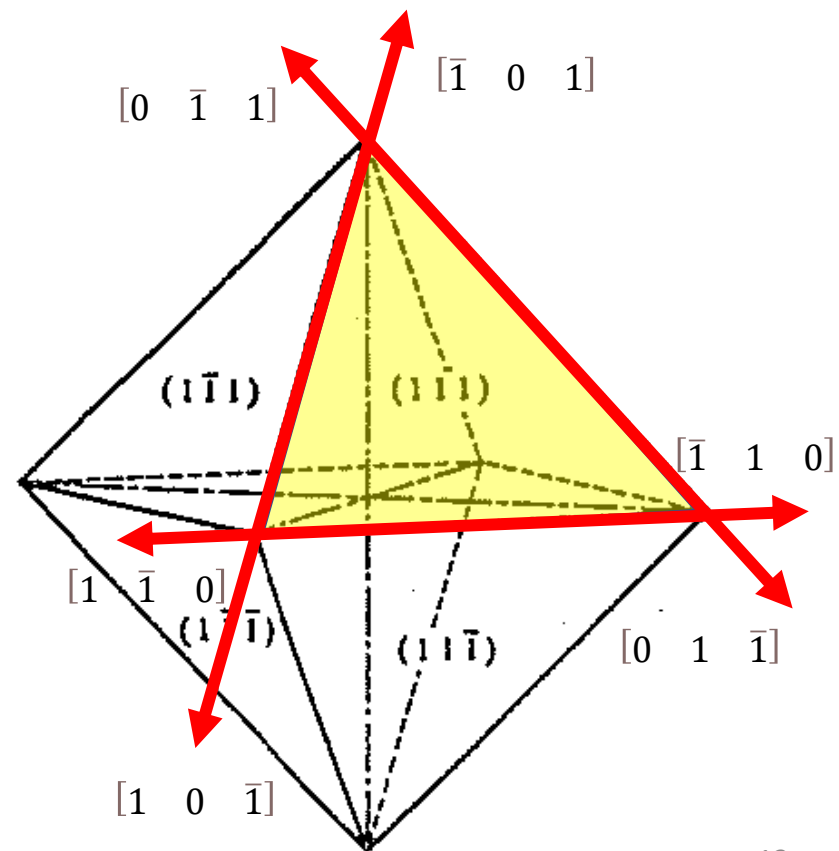
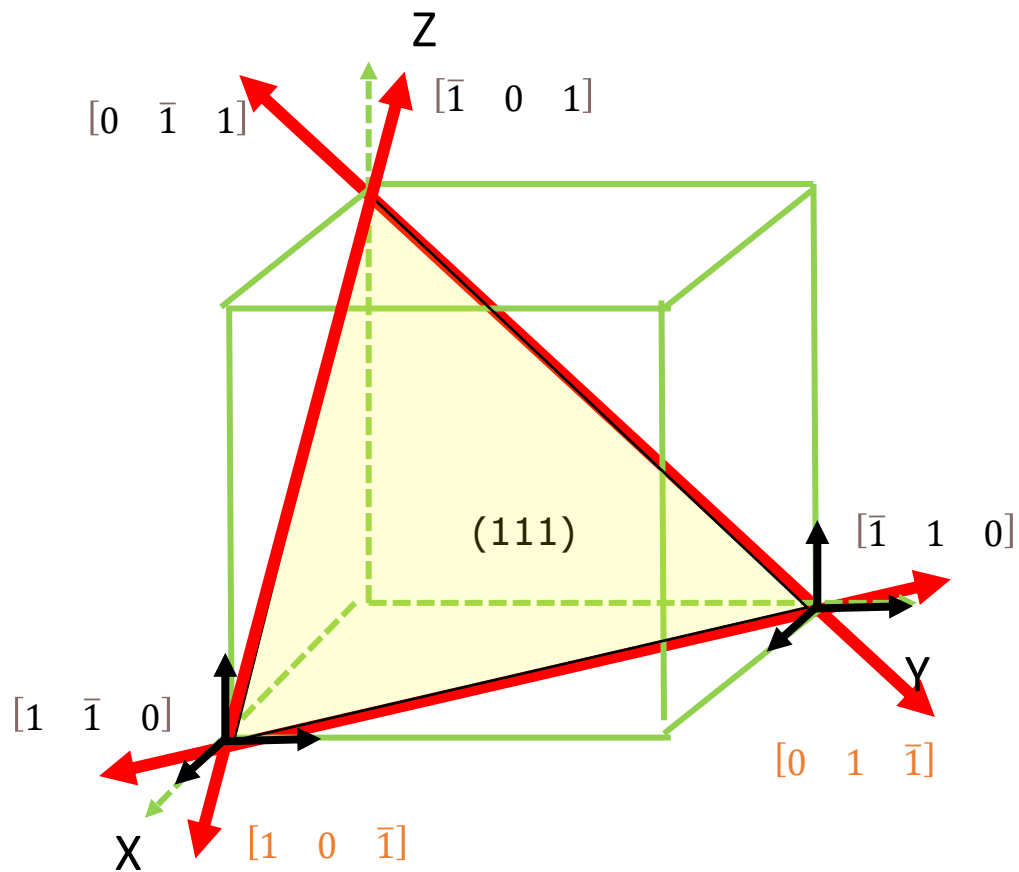
planos $(1\ 1\ 1)$ $(\bar{1}\ 1\ 1)$ $(1\ \bar{1}\ 1)$ $(1\ 1\ \bar{1})$

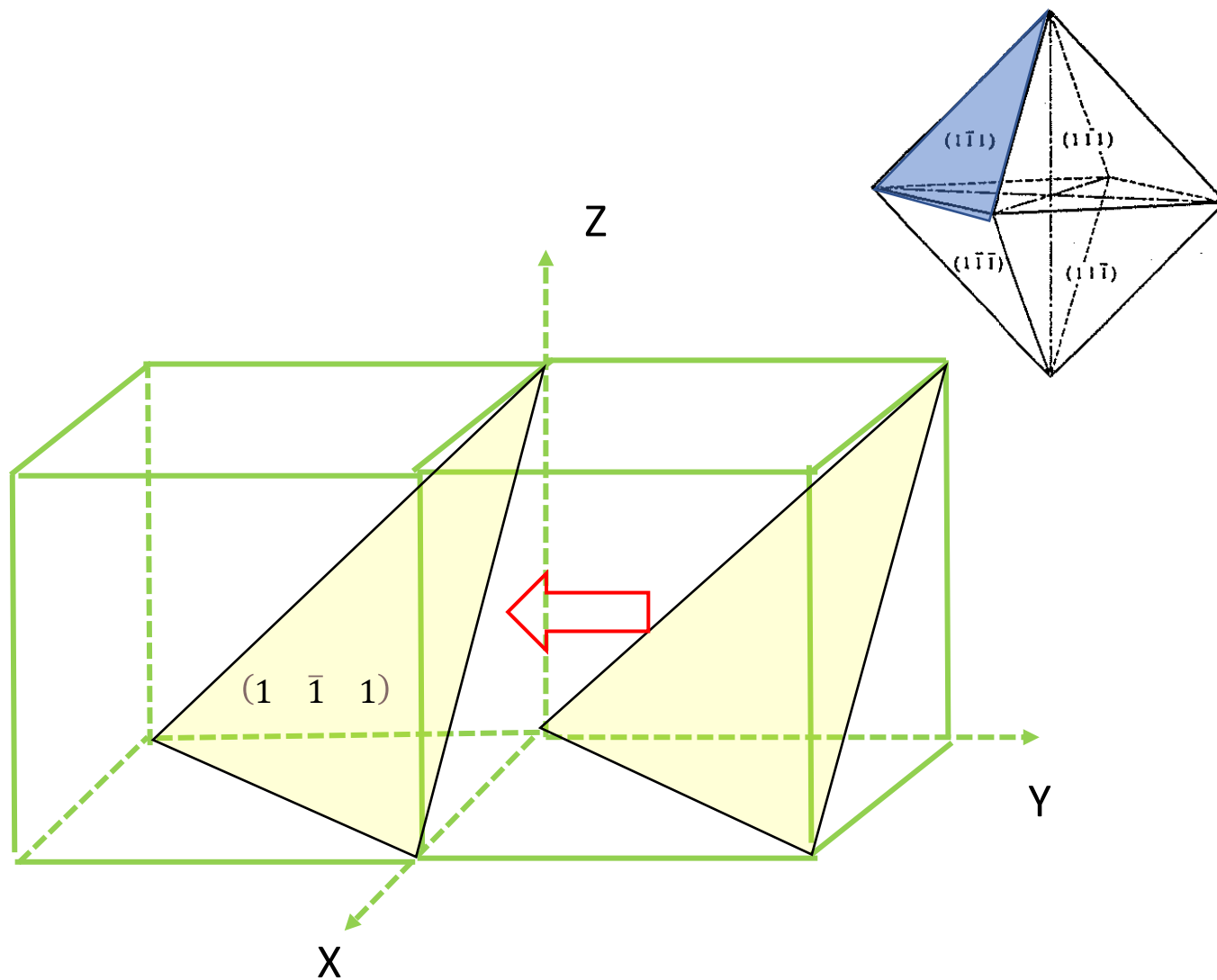
$(\bar{1}\ \bar{1}\ 1)$ $(\bar{1}\ 1\ \bar{1})$ $(1\ \bar{1}\ \bar{1})$ $(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1})$

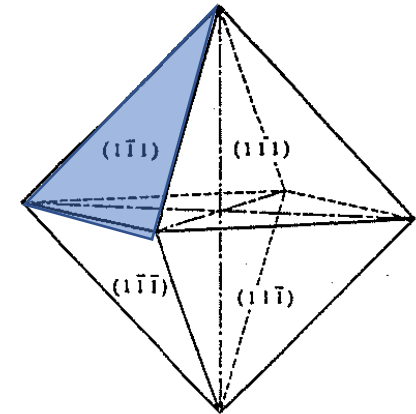
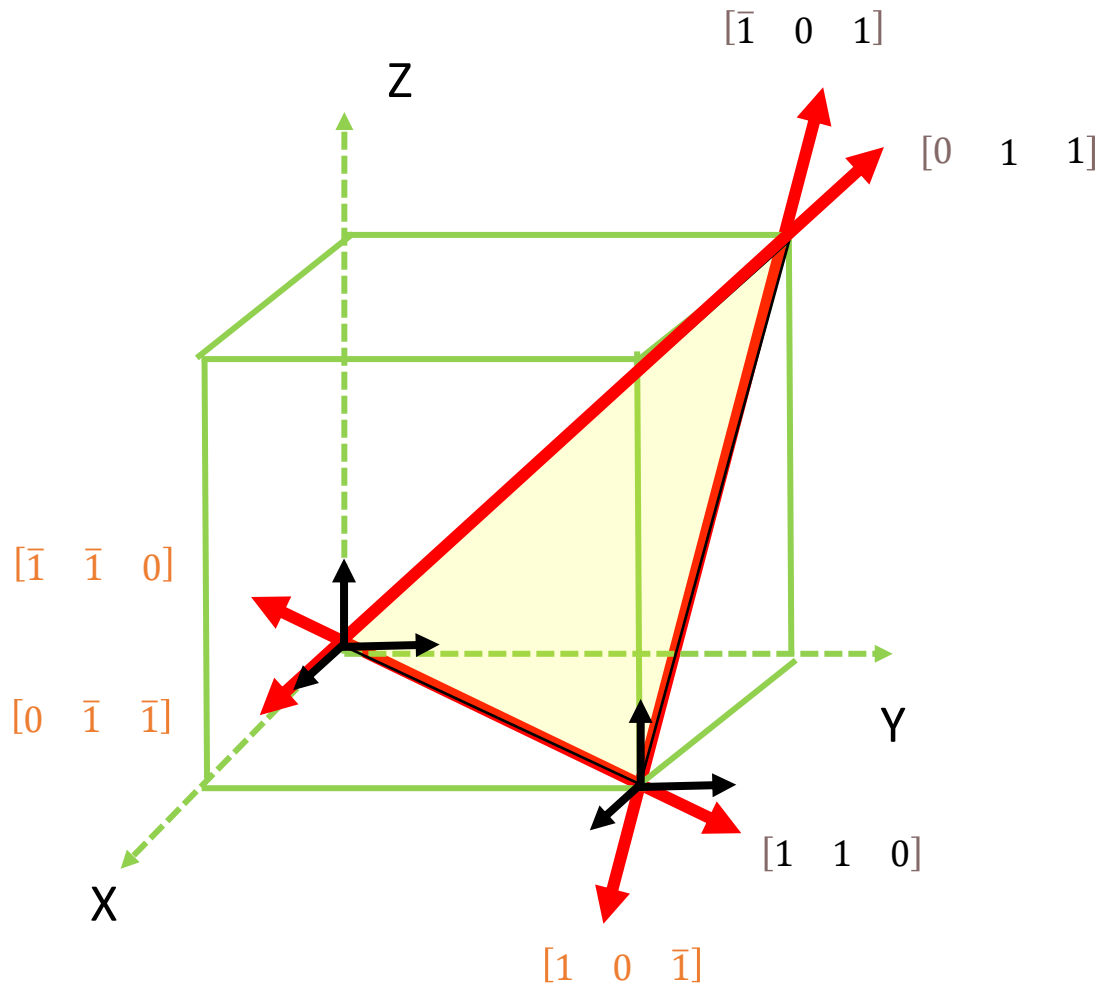


As direções de escorregamento $\langle 110 \rangle$ são as
direções mais compactas dos planos $\{111\}$









15 – Usando os dados da tabela, compare o grau de solubilidade no estado sólido dos seguintes elementos no cobre : Zn, Pb, Si, Ni, Al e Be.

| Elemento | Raio atômico nm | Estrutura cristalina | electronegatividade | Valência |
|----------|-----------------|----------------------|---------------------|----------|
| Cobre | 0,128 | CFC | 1,8 | +2 |
| Zinco | 0,133 | HC | 1,7 | +2 |
| Chumbo | 0,175 | CFC | 1,6 | +2, +4 |
| Silício | 0,117 | Cúbica Diamante | 1,8 | +4 |
| Níquel | 0,125 | CFC | 1,8 | +2 |
| Alumínio | 0,143 | CFC | 1,5 | +3 |
| Berílio | 0,114 | HC | 1,5 | +2 |

Resolução:

- **Raio atômico** - < 15%
- **Estrutura cristalina** - igual
- **Eletronegatividade** - próximas
- **Valência** - igual

Sistema Cu-Zn

$$\begin{aligned}
 \text{diferença de raios atômicos} &= \frac{\text{raio Zn} - \text{raio Cu}}{\text{raio Cu}} \times 100 \\
 &= \frac{0,133 - 0,128}{0,128} \times 100 = +3,9\%
 \end{aligned}$$

| Elemento | Raio atômico nm | Estrutura cristalina | electronegatividade | Valência |
|----------|-----------------|----------------------|---------------------|----------|
| Cobre | 0,128 | CFC | 1,8 | +2 |
| Zinco | 0,133 | HC | 1,7 | +2 |
| Chumbo | 0,175 | CFC | 1,6 | +2, +4 |
| Silício | 0,117 | Cúbica Diamante | 1,8 | +4 |
| Níquel | 0,125 | CFC | 1,8 | +2 |
| Alumínio | 0,143 | CFC | 1,5 | +3 |
| Berílio | 0,114 | HC | 1,5 | +2 |

- **Raio atômico** - < 15%
- **Estrutura cristalina** - igual
- **Eletronegatividade** - próximas
- **Valência** - igual

| Sistema | Diferença dos raios atômicos, % | Diferença de electronegatividades | Grau de solubilidade | Solubilidade máxima observada, %at |
|---------|---------------------------------|-----------------------------------|----------------------|------------------------------------|
| Cu-Zn | +3,9 | 0,1 | Alta | 38,3 |
| Cu-Pb | +36,7 | 0,2 | Muito baixa | 0,1 |
| Cu-Si | -8,6 | 0 | Moderada | 11,2 |
| Cu-Ni | -2,3 | 0 | Muito alta | 100 |
| Cu-Al | +11,7 | 0,3 | Moderada | 19,6 |
| Cu-Be | -10,9 | 0,3 | Moderada | 16,4 |

| %at | Solubilidade |
|--------|--------------|
| 70-100 | Muito alta |
| 30-70 | Alta |
| 10-30 | Moderada |
| 1-10 | Baixa |
| <1 | Muito baixa |