

Componente Curricular: Ciências e Tecnologia de Materiais (ECT2411) – 2020.5

Professores: Amanda Melissa, Kaline Viana, Jorge Carlos

Lista de Exercício 2 - I unidade

1. Cite sucintamente as principais diferenças entre as ligações iônica, covalente e metálica.

Teórica

2. Dê uma explicação para a razão pela qual os materiais ligados covalentemente são, em geral, menos densos do que aqueles ligados por meio da ligação iônica ou metálica.

Teórica

3. Mostre três semelhanças e duas diferenças entre as estruturas cristalinas CFC e HC.

Teórica

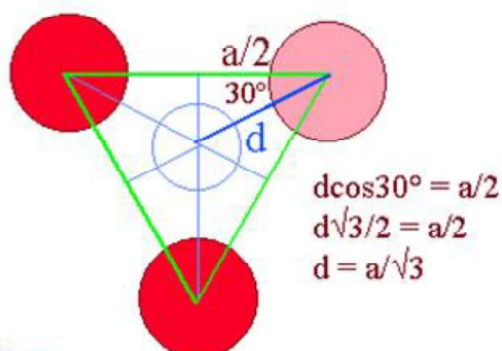
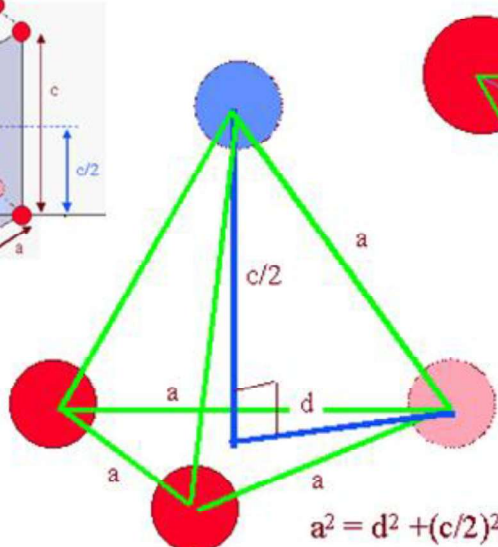
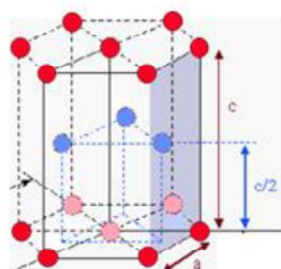
4. O que são planos e direções compactas, e sistemas de deslizamento. Qual a importância destes parâmetros na propriedade mecânica dos materiais metálicos e cerâmicos?

Teórica

5. Demonstre a relação $c/a = 1,6333$ para o HC e calcule o FEA.

x	$\sin x$	$\cos x$	$\tan x$
30°	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{3}$
45°	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	1
60°	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{3}$

☞ Cálculo da razão c/a



$$a^2 = a^2/3 + c^2/4$$

$$c^2 = 8a^2/3$$

$$c/a = \sqrt{8/\sqrt{3}} = 1.633$$

6. Esta é uma célula unitária para um metal hipotético:

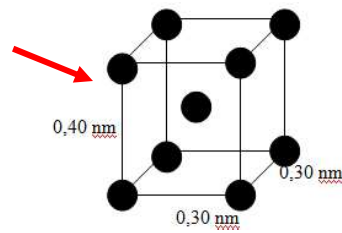
a) A qual sistema cristalino pertence essa célula unitária?

Tetragonal

b) Como seria chamada essa estrutura cristalina?

Tetragonal de corpo centrado

c) Calcule a densidade do material, dado que o seu peso atômico é de 141 g/mol.

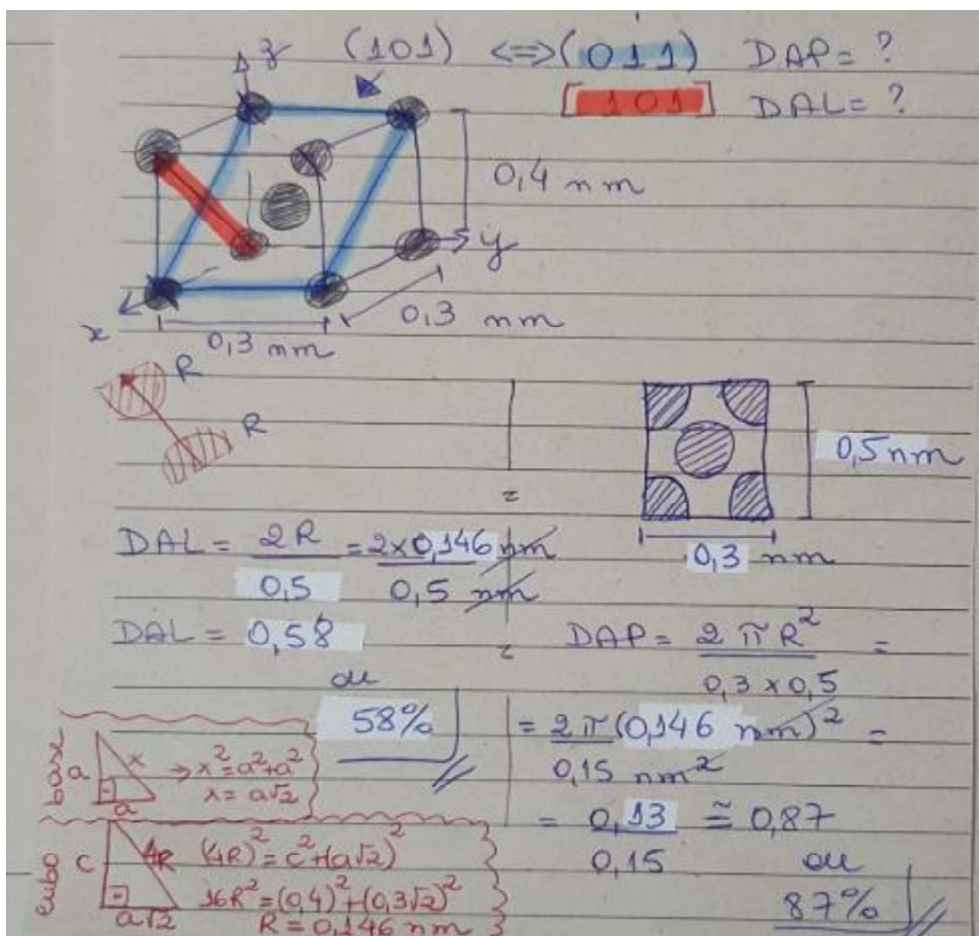


⑥

$$\rho = \frac{n \cdot A}{V_c \cdot N_A} = \frac{2 \cdot 141 \text{ g/mol}}{(0,4 \times 10^{-7} \text{ cm} \times 0,3 \times 10^{-7} \text{ cm} \times 0,3 \times 10^{-7} \text{ cm}) \times (6,023 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}$$

$$= \frac{282}{(3,6 \times 10^{-23}) \times (6,023 \times 10^{23})} = 13,00 \text{ g/mol}$$

d) calcule a densidade planar para o plano (011) e a densidade linear para a direção [101].



7. Justifique porque os metais não se cristalizam na estrutura cúbica simples e têm preferência pelas estruturas CFC e HC.

CFC e HC são as que possuem maior FEA e por isso favorecem a estabilidade das estruturas metálicas, favorecendo tbm uma maior energia de ligação.

8. “Sabemos que as estruturas cristalinas CFC e HC apresentam semelhanças entre si, porém os metais que se cristalizam nestas estruturas apresentam principalmente propriedades mecânicas bastante distintas”. Justifique esta afirmativa.

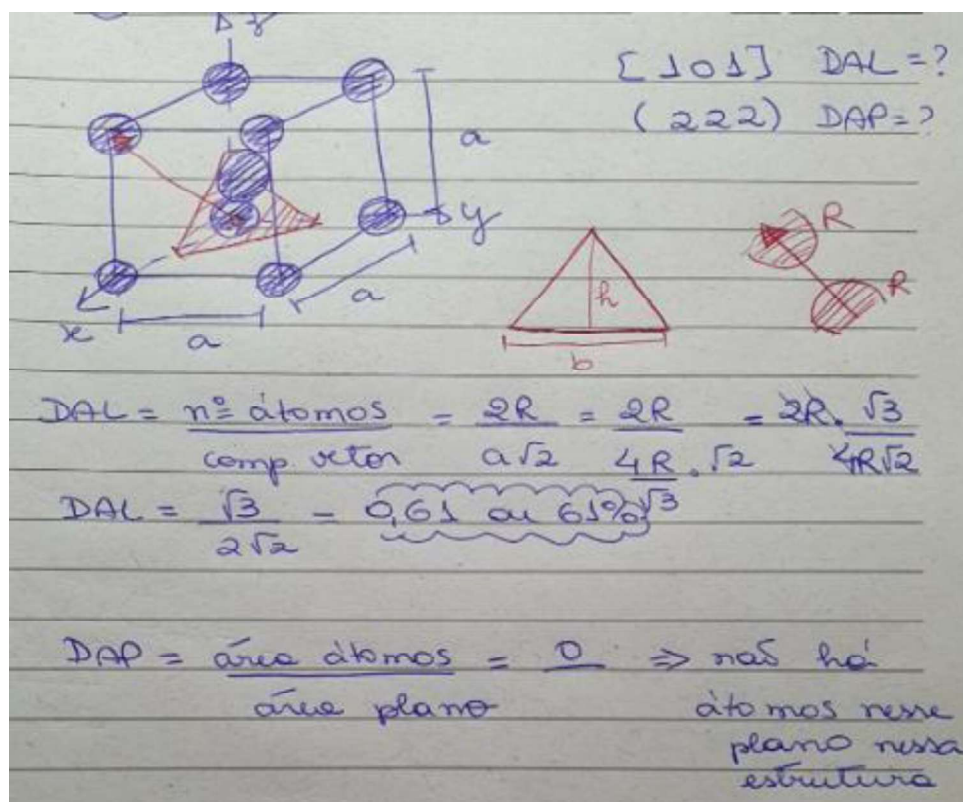
Devido ao número de planos de escorregamento ser diferente.

CFC possui 12 planos de escorregamento, consequentemente maior ductilidade.

HC possui 6 ou 3 (dependendo do metal) planos de escorregamento, consequentemente menor ductilidade.

(ver seção 7.4 SISTEMAS DE ESCORREGAMENTO, página 253, Callister – 9ª edição)

9. Represente em uma estrutura cristalina CCC a direção $[101]$ e o plano (222) e calcule a DAL e DAP para o ferro ($A = 26$). Calcule também a densidade volumétrica em g/cm^3 .



Handwritten solution for problem 9:

Diagram of a BCC unit cell with side length a . The $[101]$ direction is indicated by a red arrow. A triangle is drawn with vertices at $(0,0,0)$, $(a,0,0)$, and $(0,0,a)$. The height of this triangle is labeled h . The base is labeled b .

Calculations:

$[101]$ DAL = ?
 (222) DAP = ?

$$DAL = \frac{n^\circ \text{ átomos}}{\text{comp. vetor}} = \frac{2R}{a\sqrt{2}} = \frac{2R}{4R \cdot \sqrt{2}} = \frac{2R \cdot \sqrt{3}}{4R\sqrt{2}}$$

$$DAL = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} = 0,61 \text{ ou } 61\% \sqrt{3}$$

$$DAP = \frac{\text{área átomos}}{\text{área plano}} = 0 \Rightarrow \text{não há átomos nesse plano nessa estrutura}$$

10. Calcule para um óxido hipotético do tipo AX, que possui número de coordenação 6 tanto para os cátions como para os ânions, os seguintes itens:

Dados:

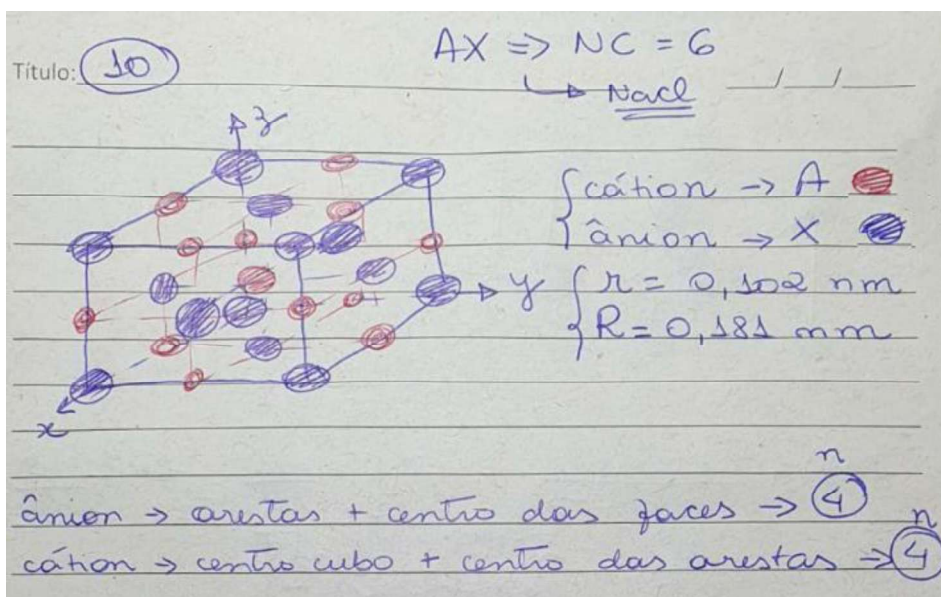
Raio do cátion é 0,102 nm

Raio do ânion é 0,181 nm

$A_{\text{cátion}} = 22,99 \text{ uma}$

$A_{\text{ânion}} = 35,45 \text{ uma}$

$N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ g/mol}$



a) parâmetro de rede em (nm) e (cm)

$$a) a = 2R_A + 2R_X = 2(R_A + R_X) = 2(0,102 + 0,181)$$

$$a = 0,566 \text{ nm}$$

b) fator de empacotamento iônico FEI em (%)

$$b) FEI = \frac{V_{\text{ions}}}{V_{\text{célula}}} = \frac{\left[4 \cdot \frac{4}{3} \pi R_A^3 \right] + \left[4 \cdot \frac{4}{3} \pi R_X^3 \right]}{a^3}$$

$$= \frac{\left[\frac{16}{3} \pi \cdot 0,102^3 \right] + \left[\frac{16}{3} \pi \cdot 0,181^3 \right]}{(0,566 \text{ nm})^3} \text{ nm}^3$$

$$= \frac{\frac{16}{3} \pi [6,99 \times 10^{-3}]}{0,181} = \frac{0,117}{0,181} = 0,65$$

ou 65%

c) densidade volumétrica em g/cm^3

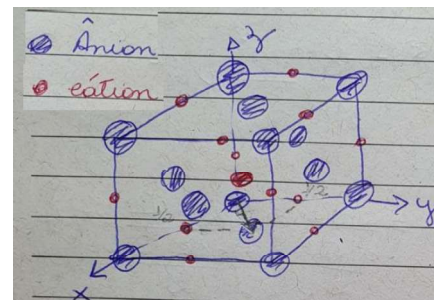
$$c) \rho = \frac{n_A A_A + n_X A_X}{V_c \cdot N_A} = \frac{4(22,99) + 4(35,45)}{(0,566 \times 10^{-7})^3 \times (6,023 \times 10^{23})}$$

$$= \frac{233,76}{109,21} \Rightarrow \rho = 2,1 \text{ g/cm}^3$$

d) densidade iônica linear para direção [220] em (íons/nm)

d)

$$DAL = \frac{2RA}{\frac{a\sqrt{2}}{2}} = \frac{1 \text{ íon A}}{0,566 \sqrt{2}} = \frac{1 \text{ íon A}}{0,4} \approx 2,5 \text{ íon A/nm}$$



e) densidade iônica planar para o plano (220) em (íons/nm²)

e)

$\hat{\text{Anion}} \rightarrow X$
 $\hat{\text{cation}} \rightarrow A$

$y^2 = (a/2)^2 + (a/2)^2$
 $y^2 = a^2/4 + a^2/4$
 $y^2 = 2a^2/4$
 $y^2 = a^2/2$
 $y = \sqrt{a^2/2}$
 $y = a/\sqrt{2}$

$DIP = \frac{1 \text{ íon X} + 1 \text{ íon A}}{\frac{a}{\sqrt{2}} \cdot a}$

$DIP = \frac{1 \text{ íon X} + 1 \text{ íon A}}{(0,566)^2 / \sqrt{2}}$

$DIP = \frac{1 (\text{íon X} + \text{íon A})}{0,226}$

$DIP \approx 4,42 (\text{íon X} + \text{íon A}) / \text{nm}^2$

11. Calcule para um óxido hipotético do tipo $AnBmXp$ que possuem estrutura cristalina do tipo do $BaTiO_3$ (titanato de bário), os seguintes itens:

- a) Parâmetro de rede(nm) e (cm)
- b) Fator de empacotamento iônico
- c) Densidade volumétrica (g/cm^3)
- d) Densidade iônica linear para direção $[101]$ em íons/nm
- e) Densidade iônica planar para o plano (100) em íons/nm²

Dados:

Raio do cátion A é 0,112 nm

Raio do cátion B é 0,071 nm

Raio do ânion é 0,137 nm

$A_{\text{cátion A}} = 87,62$ uma

$A_{\text{cátion B}} = 118,71$ uma

$A_{\text{ânion}} = 16$ uma

$N_A = 6,02 \times 10^{23}$ g/mol

12. Calcule para um óxido hipotético do tipo AX que possui número de coordenação 8 tanto para os cátions como para os ânions,, os seguintes itens:

- a) Parâmetro de rede(nm) e (cm)
- b) Fator de empacotamento iônico
- c) Densidade volumétrica?
- d) Densidade iônica linear para direção [010]?
- e) Densidade iônica planar para o plano (112)?

Dados:

Raio do cátion é 0,170 nm,

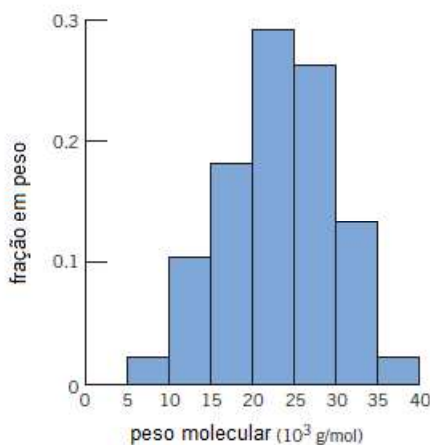
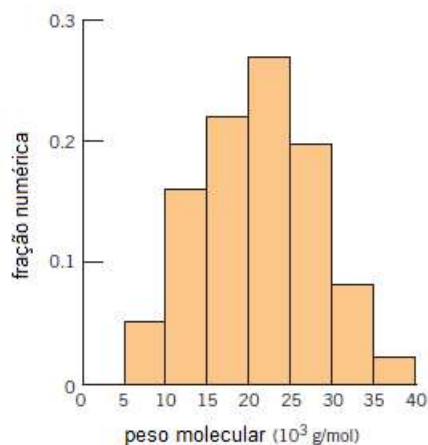
Raio do ânion é 0,181 nm

$A_{\text{cátion}} = 132,91$ uma

$A_{\text{ânion}} = 35,45$ uma

$N_A = 6,02 \times 10^{23}$ g/mol

13. Considere que a distribuição de pesos moleculares abaixo é para o PS e calcule:



- O peso molecular médio numérico
- O grau de polimerização
- O peso molecular médio ponderal

Peso Molecular ($\times 10^3 \text{ g/mol}$)	M_i	x_i	$M_i x_i$	w_i	$M_i w_i$
5-10	7,5	0,05	0,375	0,02	0,150
10-15	12,5	0,16	2,000	0,105	1,312
15-20	17,5	0,22	3,850	0,18	3,150
20-25	22,5	0,28	6,300	0,29	6,525
25-30	27,5	0,19	5,225	0,26	7,150
30-35	32,5	0,08	2,600	0,13	4,225
35-40	37,5	0,02	0,750	0,02	0,750
TOTAL \Rightarrow		1	23,1	1	23,26

a) $\overline{M}_n = \sum x_i M_i = 23100 \text{ g/mol}$

b) $GP = \frac{\overline{M}_n}{m}$

$GP = \frac{23100 \text{ g/mol}}{62,45 \text{ g/mol}}$

$GP = 338$

Esquema da unidade repetitiva do PVC:

$$\left[\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ | & | \\ -\text{C} - & \text{C}- \\ | & | \\ \text{H} & \text{Cl} \end{array} \right]_n$$

Cálculo da massa molar da unidade repetitiva:

C = $2 \times 12 = 24,00$

H = $3 \times 1 = 3,00$

Cl = $1 \times 35,45 = 35,45$

$62,45 \text{ g/mol}$

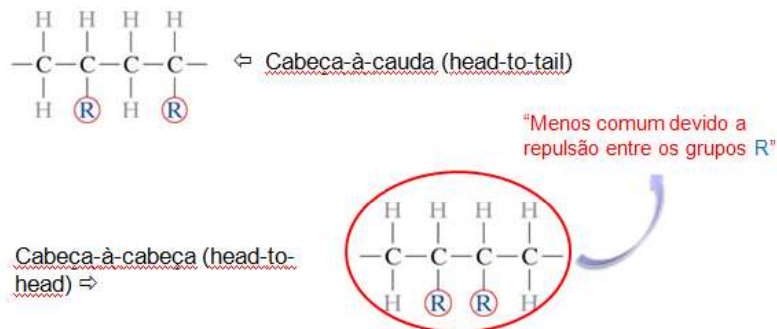
Observações, em média, da massa em cada cadeia do PVC

c) $\overline{M}_w = \sum w_i M_i = 23260 \text{ g/mol}$

14. Classifique os polímeros quanto:

a) À configuração das cadeias poliméricas:

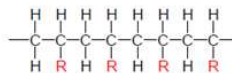
Cabeça-à-cauda (head-to-tail) ou Cabeça-à-cabeça (head-to-head)



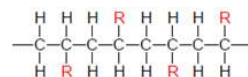
b) À regularidade das cadeias poliméricas;

• **Estereoisomerismo ou Taticidade** → regularidade das cadeias

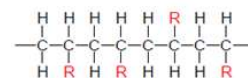
Isotático – todos os grupos **R** estão no mesmo lado da cadeia



Sindiotático – os grupos **R** alternam de lado



Atático – os grupos **R** estão distribuídos de forma randômica "aleatória"



15. Defina copolímero e cite as configurações possíveis para as cadeias poliméricas.

Copolímero é um polímero que as suas cadeias são compostas por duas ou mais unidades de repetição (meros) diferentes.

COPOLÍMEROS

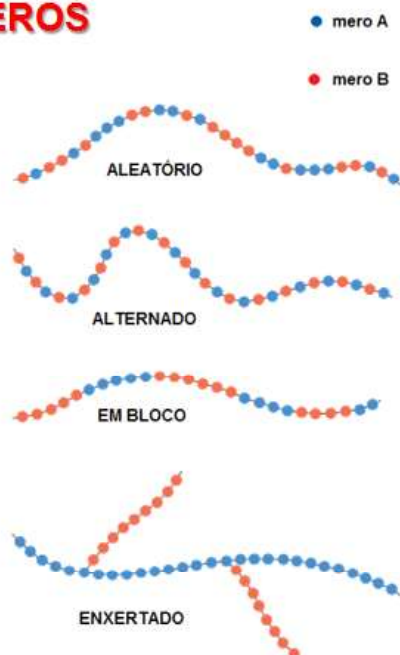
• Dois ou mais monômeros diferentes polimerizados juntos

Aleatório – A e B aleatoriamente distribuídos na cadeia

Alternado – A e B alternando na cadeia polimérica

Em bloco – blocos de A alternando com blocos de B

Enxertado – cadeias de B enxertadas na cadeia de A



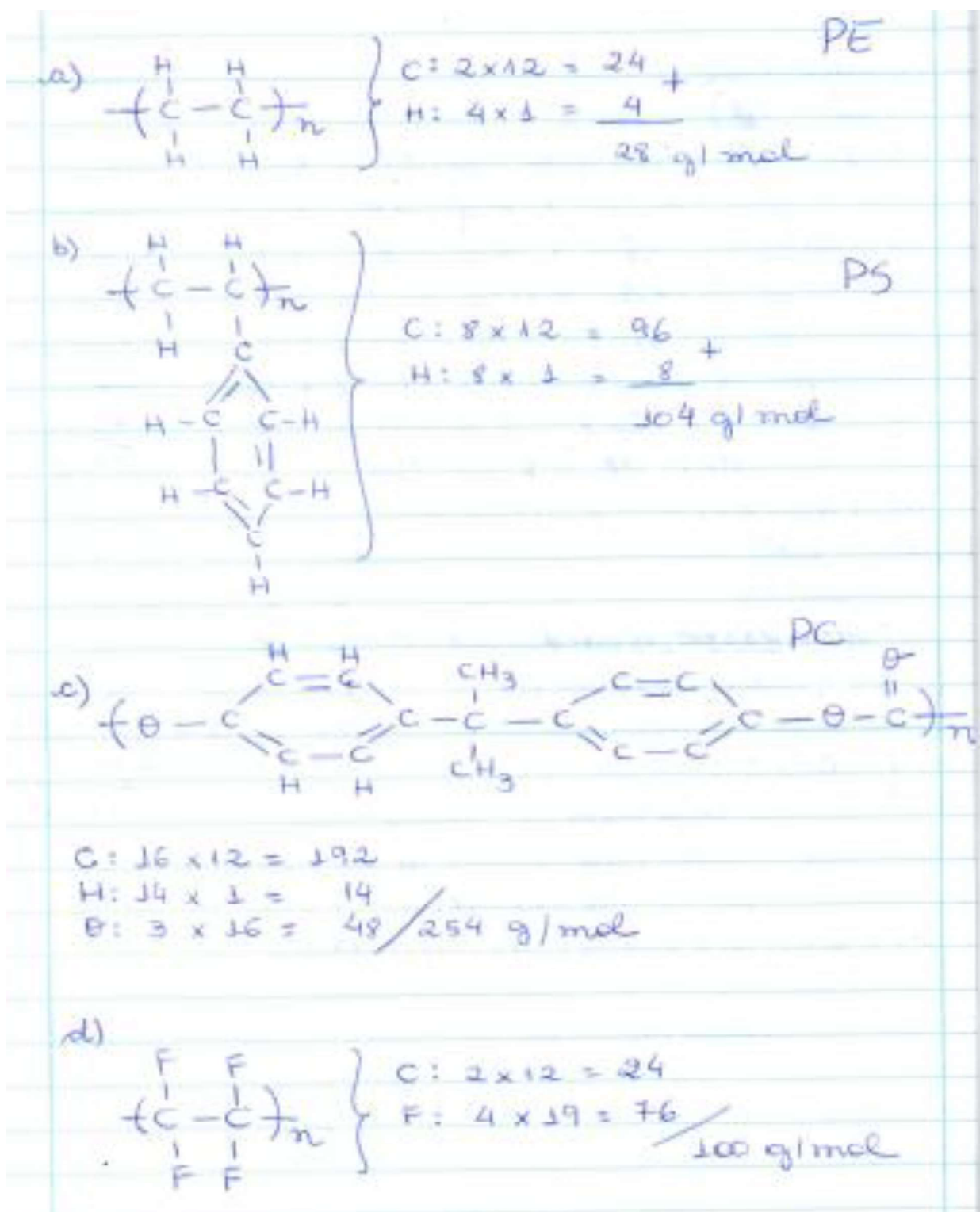
16. Calcule o peso molecular dos meros constituintes dos seguintes polímeros:

(a) PE

(b) PS

(c) PC

(d) PTFE



17. Os dados da massa molecular de um polímero estão representados a seguir:

Massas molares (x 10 ³ g/mol)	x _i	w _i
15 - 30	0,04	0,01
30 - 45	0,07	0,04
45 - 60	0,16	0,11
60 - 75	0,26	0,24
75 - 90	0,24	0,27
90 - 105	0,12	0,16
105 - 120	0,08	0,12
120 - 135	0,03	0,05

M _i (x 10 ³ g/mol)	x _i M _i	w _i M _i
22,5	0,9	0,225
37,5	2,625	1,500
52,5	8,4	5,775
67,5	17,55	16,2
82,5	19,8	22,275
97,5	11,7	15,6
112,5	9,0	13,5
127,5	3,825	6,375
TOTAL	Σ x_iM_i = 73,015	Σ w_iM_i = 81,45

Calcule:

- Massa molecular média numérica $\Sigma x_i M_i = 73,015 \times 10^3 \text{ g/mol}$
- Massa molecular média ponderal $\Sigma w_i M_i = 81,45 \times 10^3 \text{ g/mol}$
- Sabendo-se que o grau de polimerização desse polímero é de 710, qual dentre os polímeros citados na questão 22 é esse polímero?

Handwritten calculation:

$$GP = \frac{\overline{M}_w}{\overline{M}_n} \rightarrow m = \frac{\overline{M}_n}{GP} = \frac{73,015}{710} \text{ g/mol}$$

$$\Rightarrow m = 102,8 \approx 103 \Rightarrow \text{PS}$$

18. As cristalinidades percentuais e as densidades associadas a dois materiais feitos em PE são as seguintes:

$\rho \text{ (g/cm}^3\text{)}$	Cristalinidade (%)
0,965	76,8
0,925	46,4

- Calcular as densidades do PE totalmente cristalino e do PE totalmente amorfo.
- Determinar o percentual de cristalinidade de uma amostra com densidade de $0,95 \text{ g/cm}^3$

(a)

$\rho_c (\text{g/cm}^3)$	Crystallinidade (%)
0,965	76,8
0,925	46,4

$$\% \text{ Crystallinidade} = \frac{\rho_c (\rho_e - \rho_a)}{\rho_e (\rho_c - \rho_a)} \times 100$$

P/ Amostra 1:

$$76,8 = \frac{\rho_c (0,965 - \rho_a)}{0,965 (\rho_c - \rho_a)} \rightarrow (\rho_c - \rho_a) = \frac{\rho_c (0,965 - \rho_a)}{74,11}$$

$$X = Y$$

P/ Amostra 2:

$$46,4 = \frac{\rho_c (0,925 - \rho_a)}{0,925 (\rho_c - \rho_a)} \rightarrow (\rho_c - \rho_a) = \frac{\rho_c (0,925 - \rho_a)}{42,92}$$

Igualando (i) e (ii):

$$\cancel{\rho_c} \frac{(0,965 - \rho_a)}{74,11} = \cancel{\rho_c} \frac{(0,925 - \rho_a)}{42,92}$$

$$74,11 (0,925 - \rho_a) = 42,92 (0,965 - \rho_a)$$

$$68,55 - 74,11 \rho_a = 41,42 - 42,92 \rho_a$$

$$68,55 - 41,42 = 74,11 \rho_a - 42,92 \rho_a$$

$$27,13 = 31,19 \rho_a$$

$$\rho_a = \frac{27,13}{31,19} \rightarrow \rho_a = 0,87 \text{ g/cm}^3$$

↳ 100% amorf

Substituindo ρ_a em (i) :

$$76,8 = \frac{\rho_c (0,965 - \rho_a)}{0,965 (\rho_c - \rho_a)} \times 100$$

$$76,8 \cdot 0,965 (\rho_c - 0,87) = \rho_c (0,965 - 0,87) \times 100$$

$$74,112 \rho_c - 64,47 = 9,5 \rho_c$$

$$74,112 \rho_c - 9,5 \rho_c = 64,47$$

$$64,61 \rho_c = 64,47$$

$$\rho_c = \frac{64,47}{64,61} \rightarrow \rho_c = 0,998 \text{ g/cm}^3$$

↳ 100% cristalino

(b)

% cristalinidade = ?

$$\rho_e = 0,95 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho_a = 0,87 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho_c = 0,998 \text{ g/cm}^3$$

$$\% \text{ crist.} = \frac{0,998 (0,95 - 0,87)}{0,95 (0,998 - 0,87)} \times 100 = \frac{0,07984}{0,1216} \times 100$$

$$\% \text{ crist.} = 0,6566 \times 100$$

$$\% \text{ crist.} = 65,66\%$$

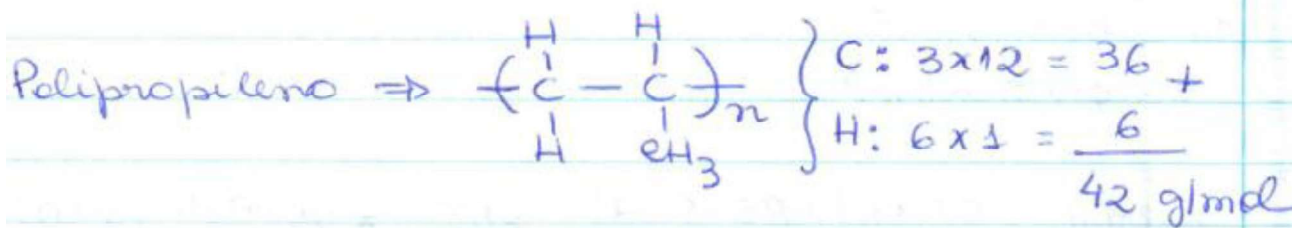
19. A massa específica do polipropileno totalmente cristalino à temperatura ambiente é de $0,946 \text{ g/cm}^3$. Além disso, à temperatura ambiente, a célula unitária para esse material é monoclinica, com os seguintes parâmetros de rede:

$$\begin{array}{ll} a = 0,666 \text{ nm} & \alpha = 90^\circ \\ b = 2,078 \text{ nm} & \beta = 99,62^\circ \\ c = 0,650 \text{ nm} & \gamma = 90^\circ \end{array}$$

Se o volume de uma célula unitária monoclinica é uma função desses parâmetros de rede de acordo com $V = abc \sin \beta$.

Determine o número de unidade repetidas por célula unitária de PP.

$$\begin{aligned} \rho_c &= 0,946 \text{ g/cm}^3 & \begin{cases} a = 0,666 \text{ nm} & \alpha = \\ b = 2,078 \text{ nm} & \beta = 99,62^\circ \\ c = 0,650 \text{ nm} & \gamma = \end{cases} \\ V &= a \cdot b \cdot c \cdot \sin \beta \\ V &= (0,666 \times 10^{-7} \text{ cm}) (2,078 \times 10^{-7} \text{ cm}) (0,650 \times 10^{-7} \text{ cm}) \cdot \sin 99,62^\circ \\ V &= 0,899 \times 10^{-21} \cdot 0,986 \text{ cm}^3 \\ V &= 0,886 \times 10^{-21} \text{ cm}^3 \\ \rho_c &= \frac{\text{massa da célula unitária}}{\text{volume da célula} \cdot N_A} = \frac{M}{V \cdot N_A} \\ M &= \rho_c \cdot V \cdot N_A \\ M &= 0,946 \cdot \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \cdot 0,886 \times 10^{-21} \text{ cm}^3 \cdot 6,023 \times 10^{23} \frac{\text{meros}}{\text{mol}} \\ M &= 504,73 \frac{\text{g} \cdot \text{meros}}{\text{mol}} \end{aligned}$$



Repetições = $\frac{\text{massa da célula unitária}}{\text{massa do monômero}} = \frac{M}{m}$

Repetições = $\frac{504,73 \text{ (g. monômeros) / mol}}{42 \text{ (g/mol)}}$

Repetições ≈ 12 monômeros