

GABARITO DA PROVA DO PROCESSO DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO – 1º SEMESTRE DE 2018
FÍSICA E QUÍMICA DE MATERIAIS
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI

Resposta Questão 1

- a) Considerando o Princípio da Construção após $Z=20$, há uma diminuição da energia dos orbitais 3d em relação ao 4s. Entretanto, as configurações do estado fundamental do Cr e do Cu não são as previstas pelo Princípio da Construção. Para o elemento Cr a configuração eletrônica no estado fundamental é $[\text{Ar}]3d^54s^1$ e não $[\text{Ar}]3d^44s^2$, e para o Cu é $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$ e não $[\text{Ar}]3d^94s^2$, ou seja, a configuração da subcamada semipreenchida d^5 e a configuração da subcamada completa d^{10} têm energia mais baixa que a indicada pela teoria simples. Como resultado, pode-se alcançar uma energia total mais baixa quando um elétron ocupa um orbital 3d em vez de um orbital 4s.
- b) A configuração eletrônica do íon Cu II é $[\text{Ar}]3d^9$. No caso, há perda de dois elétrons que são retirados dos orbitais de maior energia.

Resposta Questão 2

Considerando o diagrama energia dos orbitais moleculares para a molécula SF_6 , os orbitais não-ligantes HOMO podem ser considerados como orbitais de simetria adaptada puramente de caráter F, ou seja, eles não apresentam nenhum caráter de orbitais do S. Eles somente poderia ter algum caráter S se eles fossem orbitais ligantes ou antiligantes composto por orbitais atômicos de ambos tipos de átomos na molécula.

Os orbitais *antiligantes* t apresentam caráter de orbitais de S e F. Considerando que o S é menos eletronegativo que o F, seus orbitais de valência estão em mais altas energias que os orbitais de valência do F, os quais formam as combinações de simetria adaptada t .

Portanto, os orbitais *ligantes* t estão próximos em energia aos dos átomos de F e, conseqüentemente, possuem maior caráter de F; os orbitais antiligantes t (LUMO) estão mais próximos dos átomos de S e conseqüentemente possuem maior caráter S.

Resposta Questão 3

- a) Classe I: materiais híbridos em que não há ligação covalente ou iônica;
Classe II: no mínimo um dos componentes estão ligados por meio de ligações químicas.
- b) Classe I: copolímeros em bloco.
Classe II: nanocompósito polímero/argila
- c) Nanopartículas inorgânicas altamente dispersas levam a um aumento de exposição de área superficial entre o componente inorgânico e orgânico, permitindo o ajuste das propriedades dos materiais, incluindo, por exemplo, tensão e deformação.
- d) Polímeros orgânicos não polares frequentemente não possuem forte interação com componentes inorgânicos polares ou iônicos, levando a problemas como não homogeneidade e falha.

Resposta Questão 4

Orbitais de fronteira são os orbitais de maior energia ocupados e os orbitais de menor energia desocupados de uma espécie química (átomo, íons, moléculas). Como a configuração do átomo de Berílio é $1s^2 2s^2$, os orbitais de fronteira são o 2s (ocupado de maior energia) e o 2p (desocupado de menor energia).

Resposta Questão 5

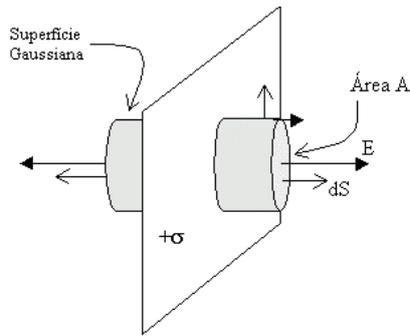
(a) O trabalho é dado por $W = \int_{V_i}^{V_f} p dV$. Nas etapas isobáricas, a expressão resulta em $W = p(V_f - V_i)$. Assim, $W_a = 1.6 kJ$ e $W_c = -1.0 kJ$. Nas etapas isovolumétricas, não há variação de volume, e o trabalho realizado é $W_b = W_d = 0$.

(b) Como o trabalho total realizado pelo gás é positivo, $W = 1.6 - 1.0 = 0.6 kJ$, o ciclo realiza trabalho e, portanto, é uma máquina térmica, e não um refrigerador, no qual o trabalho seria negativo.

c) Como $pV = nRT$, temos que $\frac{pV}{T} = const.$ Assim, se no primeiro ponto $\frac{pV}{T} = \frac{0.8 \times 1}{100} = 0.008$, no segundo ponto teremos $\frac{pV}{T} = \frac{0.5 \times 3}{T} = 0.008$, que resulta em $T = 187.5 K$.

Resposta Questão 6

(a) Escolhendo uma superfície gaussiana cilíndrica que envolva um pedaço da placa, como na figura abaixo,



e aplicando a Lei de Gauss, $\oint \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{q}{\epsilon_0}$, onde q é a carga envolvida pela superfície, encontramos,

separando a superfície nas duas bases e a lateral do cilindro: $\int_{base1} E dS + \int_{lateral} \vec{E} \cdot d\vec{S} + \int_{base2} E dS = \frac{q}{\epsilon_0}$. Como o

campo elétrico é sempre perpendicular à lateral do cilindro, o produto $\vec{E} \cdot d\vec{S}$ se anula sobre essa superfície, fazendo $\int_{lateral} \vec{E} \cdot d\vec{S} = 0$. Já o campo elétrico é constante sobre as bases do cilindro

(paralelas à placa), podendo ser retirado das integrais, resultando em $\int_{base1} E dS + \int_{base2} E dS = 2EA = \frac{q}{\epsilon_0}$, ou

$$E = \frac{q}{A} \frac{1}{2\epsilon_0} = \frac{\sigma}{2\epsilon_0}.$$

(b) O campo elétrico gerado pela placa da esquerda é uniforme e, à esquerda da placa, aponta para a direita, enquanto à direita da placa aponta para a esquerda. Já na placa da direita, como o sinal da carga se inverte, os sentidos se invertem, ou seja, à esquerda da placa o campo aponta para a esquerda, e à direita aponta para a direita. Fazendo a superposição do campo nas três regiões, os campos se cancelam à esquerda e à direita do capacitor, e no interior se reforçam, resultando em um campo de módulo $E = \frac{\sigma}{\epsilon_0}$, apontando para a direita.

Resposta Questão 7

Temos $L = mvr$. Igualando a força centrípeta sobre o elétron à força de atração do núcleo, temos

$$\frac{mv^2}{r} = k \frac{e^2}{r^2}. \text{ Multiplicando os dois lados da equação por } mr^3 \text{ obtemos } m^2 v^2 r^2 = L^2 = kme^2 r.$$

Isolando-se o raio da órbita e usando $L = n\hbar$, obtemos $r = \frac{n^2 \hbar^2}{kme^2}$. Como $v^2 = k \frac{e^2}{mr}$, temos

$v^2 = k^2 \frac{e^4}{n^2 \hbar^2}$. Substituindo v^2 e r na expressão para a energia do elétron na órbita circular,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - k \frac{e^2}{r}, \text{ obtemos } E = -\frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Resposta Questão 8

Temos $E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Fazendo $p \approx \Delta p$ e $x \approx \Delta x$ (justificado pelos valores médios de x e p serem nulos no oscilador harmônico), e usando o princípio da incerteza $\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p}$,

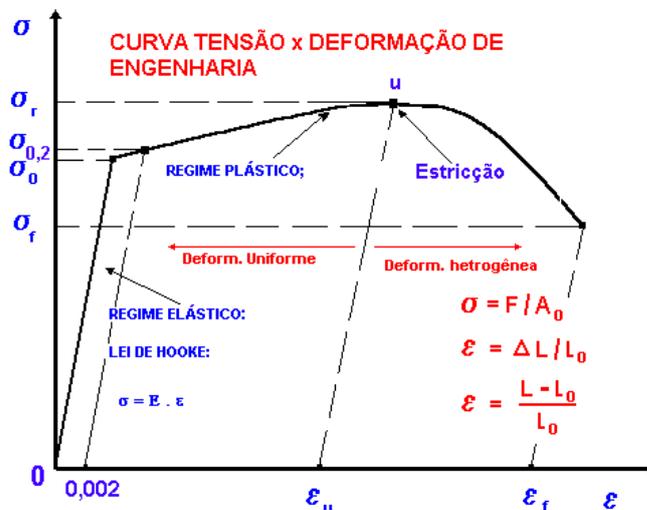
encontramos $E \leq \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{2\Delta p^2}$. Minimizando a expressão em relação a Δp , ou seja,

calculando $\frac{dE}{d\Delta p} = 0$, encontramos $\frac{\Delta p}{m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2\Delta p^3} = 0$. Resolvendo para Δp , obtemos $\Delta p^2 = \frac{m\omega\hbar}{\sqrt{2}}$.

Finalmente, substituindo esse resultado na expressão para a energia, encontramos $E \leq \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}$.

Resposta Questão 9

No ensaio de tração o corpo de prova de dimensões normalizadas é preso ao suporte e tracionado longitudinalmente até a ruptura. Com isto, gera-se a curva tensão versus deformação do material. No eixo Y tem-se a tensão (MPa) imposta no material, ela é calculada pela força dividida pela área da seção transversal do corpo de prova. No eixo x tem-se a deformação (%).



Pela análise da curva tensão VS deformação pode-se obter as seguintes propriedades mecânicas do material ensaiado:

Regime elástico: Inicialmente o material apresenta somente deformação elástica. Ou seja, se a força for retirada a deformação do corpo de prova volta a zero.

Tensão limite de escoamento: Regime de transição elasto plástico do material. Esta é a tensão limite onde o material passa de uma deformação elástica para deformação plástica definitiva.

Dentro do regime elástico aplica-se a Lei de Hooke: $\sigma = E \cdot \epsilon$. Neste caso, a tensão imposta é igual a deformação vezes o módulo de elasticidade do material. O módulo de elasticidade, a nível atômico, mede a força de ligação entre os átomos.

Regime Plástico: Após ultrapassar a tensão limite de escoamento o material, inicia a deformação plástica permanente.

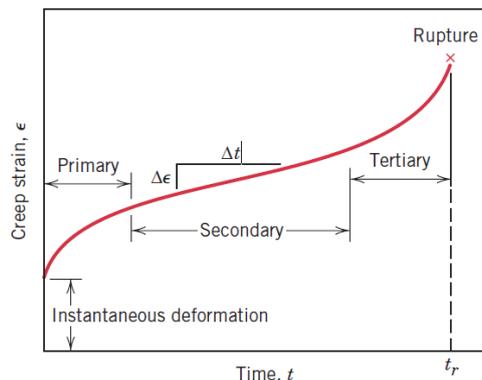
Tensão de resistência máxima: Até esta tensão imposta o material apresenta deformação uniforme ao longo de seu comprimento. Após este valor o material começa a apresentar um empescoamento onde irá ocorrer a fratura do material.

Ductilidade: Capacidade do material se deformar plasticamente até a fratura. É medida pela equação: $Ductilidade = (L_i - L_o / L_o) * 100\%$, onde L_i : dimensão final do corpo de prova após ensaio de tração L_o : dimensão inicial do corpo de prova antes ensaio de tração.

Tenacidade: Capacidade do material absorver energia até a fratura.

Resposta Questão 10

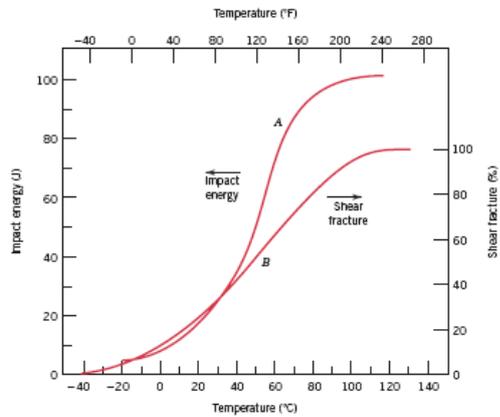
A Fluência ocorre em todos os tipos de materiais dependendo da temperatura de trabalho. O mecanismo envolve a deformação permanente de materiais quando estes são sujeitos a cargas constantes ao longo do tempo. Para o caso específico dos metais a fluência somente ocorre quando a temperatura de trabalho do metal for acima de 0,4 da temperatura de fusão do metal. Para os outros materiais a fluência ocorre independente da temperatura. O ensaio fornece uma curva deformação versus tempo até ocorrer a fratura. O processo de deformação do material até a fratura é dividido em 3 etapas: fluência primária, secundária e terciária. Na etapa primária a carga é aplicada ocorrendo uma deformação elástica instantânea e em seguida ocorre uma deformação plástica que se torna constante devido o encruamento ocorrido na estrutura do material. A segunda etapa é a mais longa onde a velocidade de deformação é constante. Na terceira e última etapa ocorre a deformação muito rápida do material até a ruptura.



Resposta Questão 11

O ensaio de Charpy é realizado para medir a resistência ao impacto de um material. Neste caso, determina-se a temperatura de transição dúctil frágil do material e sua tenacidade ou energia absorvida para uma determinada temperatura. O corpo de prova de dimensões normatizadas é colocado no equipamento e um martelo exerce uma força constante de impacto sobre o material.

Assim, mede-se a energia absorvida para fraturar o corpo de prova em uma determinada temperatura. Com este ensaio obtem-se a curva da energia absorvida pela temperatura, sendo possível determinar a temperatura de transição dúctil frágil do material, onde ele deixa de absorver energia e apresenta fratura frágil. No eixo X tem-se a temperatura e no eixo Y a energia absorvida.



Resposta Questão 12

$$\begin{aligned}
 F &= 90.000 \text{ N} \\
 \sigma_{L6} &= 320 \text{ MPa} \\
 \text{Fator de Seg.} &= 4 \\
 \sigma_{\text{trabalho}} &= \frac{\sigma_{L6}}{\text{Fator de Seg.}} = \frac{320 \text{ MPa}}{4} = 80 \text{ MPa} \\
 \sigma &= \frac{F}{A} \Rightarrow \pi \left(\frac{d}{2}\right)^2 = \frac{F}{\sigma} \Rightarrow d = 2 \sqrt{\frac{F}{\sigma \cdot \pi}} \\
 d &= 2 \sqrt{\frac{90.000 \text{ N}}{\pi (80 \times 10^6 \text{ N/m}^2)}} \\
 d &= 0,04 \text{ m} = 40 \text{ mm}
 \end{aligned}$$