

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA INOVAÇÃO E MODELAGEM
DE MATERIAIS
MESTRADO ACADÊMICO
PROVA DE SELEÇÃO 2015.01

Nome Candidado:

Nota:

Seção A – Matemática

Q.1. Considere uma molécula diatômica, formada por dois átomos que interagem através do potencial do tipo Lennard-Jones

$$U(r)=D[(a/r)^{12} - 2(a/r)^6]$$

Sendo: r a distância entre os átomos. Pede-se:

- a) Faça o gráfico de $U(r)$
- b) Para que distância entre os átomos $U(r)$ é mínimo
- c) Para que distância $U(r)=0$ e qual o significado de D ?

Seção B – Química

Q.2. Explique o que significa o termo "efeito de blindagem da carga elétrica nuclear" e determine as consequências deste efeito para as seguintes propriedades atômicas de acordo com a tendência de periodicidade esperada na tabela Periódica: volume atômico e energias de ionização.

Q.3. Usando somente o diagrama de Linus Pauling para distribuição eletrônica e a regra de Hund no estado fundamental do átomo, especifique quais dos seguintes átomos ou íons devem ser paramagnéticos (elétrons desemparelhados) ou diamagnéticos (elétrons emparelhados):

- a) Li ($Z=3$);
- b) Mg ($Z=12$);
- c) Zn ($Z=30$)
- d) Fe³⁺ ($Z=26$)
- e) Cu²⁺ ($Z=29$).

Seção C – Física

Q.4. Através do seguinte exemplo ilustramos como a função entropia é importante na Ciência dos Materiais.

“Nanopartículas quando interagem (devido as forças eletromagnéticas), formam cristais ou super redes. Também é conhecido que na ausência destas forças eletromagnéticas de atração, é possível a auto formação destes cristais. Uma explicação para este fato é devido à mudança da entropia do sistema “.

- a) Considere um gás ideal formado por moléculas monoatômicas. Obtenha a expressão da entropia (no processo reversível), como função do volume e temperatura do gás.
- b) No caso do gás ideal ser submetido a um processo irreversível, explique o que acontece com a entropia do sistema.

Seção D – Ciências dos Materiais

Q.5. *“O estudo de Ciências dos Materiais nos permite prever e compreender o comportamento macroscópico dos materiais a partir do conhecimento de sua microestrutura. A estrutura atômica dos átomos que formam um determinado material irá favorecer a formação de ligações químicas, que por sua vez irão determinar a estrutura cristalina de um material, que poderá ser cristalina ou não.”*

O parágrafo cita fundamentos básicos dos capítulos iniciais dos cursos de Ciências dos Materiais: Estrutura Atômica, Ligações Químicas e Estrutura Cristalina. *Estes fundamentos, associados à forma como ocorre o processo de formação dos materiais – reações químicas ou reações o estado sólido, permite prever e compreender as propriedades mecânicas e químicas de determinado material.*

Considerando os tópicos acima, faça considerações sobre as seguintes questões:

- a) Polímeros: por que tipicamente possuem baixa resistência mecânica, baixo ponto de fusão e baixa condutividade elétrica (e térmica)?
- b) Metais: por que tipicamente apresentam elevada condutividade elétrica e térmica?
- c) Metais: quais fatores - relativos à sua estrutura e às reações no estado sólido - fazem com que alguns metais, em particular os aços, sejam de extrema importância tecnológica por apresentarem vasta variabilidade de propriedades mecânicas?
- d) Cerâmicos: por que são tipicamente duros, frágeis e de elevado ponto de fusão?

Q.6. Caracterizar um material implica em conhecer aspectos e sua microestrutura, como composição, organização estrutural e ligações químicas existentes. É uma tarefa comum e essencial para todo pesquisador na área de materiais.

Algumas caracterizações mais comuns e importantes estão associadas aos raios X, incidentes sobre um material ou emitidos por ele.

- a) Descreva como a Lei de Bragg é utilizada para determinar a estrutura de um material;
- b) Descreva como a estrutura quantizada dos níveis e orbitais atômicos nos permite determinar a presença de elementos químicos nos materiais, tanto em um pequeno pedaço e de metal ou até mesmo de uma estrela.

