

PMT2200 – Ciência dos Materiais – Gabarito - Prova 2

Questão 1

Jogo dos sete erros: Considere as sete afirmações abaixo listadas. Cada uma delas apresenta um erro conceitual. Descreva qual o conceito errado e reescreva a frase, corrigindo o erro (vale 2,0 pontos).

- I. Podemos aumentar a capacitância de um capacitor diminuindo a rugosidade da superfície da(s) placa(s) condutoras.
- II. Um capacitor de filme polimérico (seja ele de PVC ou de PE) terá a capacitância tanto menor quanto menor for a espessura do filme (mantendo-se as outras características geométricas do capacitor inalteradas).
- III. A permissividade elétrica de um polímero nunca depende fortemente da temperatura.
- IV. Não podemos alterar as propriedades dielétricas de um polímero apenas pela manipulação da temperatura de transição vítrea (por exemplo, com aditivos).
- V. Sempre é mais fácil produzir filmes finos e resistentes de materiais cerâmicos em comparação com materiais poliméricos.
- VI. A permissividade elétrica de polímeros não depende da estrutura da cadeia (ou seja, da presença ou não de dipolos permanentes na cadeia)
- VII. O que diferencia materiais isolantes de condutores é o fato de que nos primeiros o campo elétrico se anula totalmente em seu interior.

Solução:

- I. A capacitância de um capacitor aumenta proporcionalmente à área da placa condutora, que, por sua vez, aumenta com a rugosidade. A frase correta seria “Podemos aumentar a capacitância de um capacitor aumentando a rugosidade da superfície da(s) placa(s) condutoras”.*
- II. A capacitância de um capacitor de placas paralelas aumenta com a redução da espessura do filme isolante. A frase correta seria “Um capacitor de filme polimérico (seja ele de PVC ou de PE) terá a capacitância tanto maior quanto menor for a espessura do filme (mantendo-se as outras características geométricas do capacitor inalteradas)”.*
- III. A permissividade dielétrica de um polímero varia fortemente nas proximidades da temperatura de transição vítrea, sendo assim, ela pode depender fortemente da temperatura. Uma formulação correta da frase seria “A permissividade elétrica de um polímero pode depender fortemente da temperatura”.*
- IV. A temperatura de transição vítrea de um polímero pode ser fortemente alterada por aditivos à resina básica, sendo assim a permissividade dielétrica também seria função destes aditivos. Uma versão correta da frase seria “Podemos alterar as propriedades dielétricas de um polímero apenas pela manipulação da temperatura de transição vítrea (por exemplo, com aditivos)”.*
- V. Plásticos são mais fáceis de processar, desta forma é mais fácil produzir filmes finos de plástico que de cerâmicas, a questão da resistência é mais complexa, mas podemos assumir que materiais cerâmicos fraturam com mais facilidade que materiais poliméricos, desta forma uma versão correta da frase seria “Frequentemente é mais fácil produzir filmes finos e resistentes de materiais*

poliméricos em comparação com materiais cerâmicos”.

- VI. *A presença de dipolos permanentes na cadeia polimérica introduz um mecanismo de polarização adicional ao material (o mecanismo orientacional), sendo assim a permissividade é alterada pela estrutura da cadeia. A frase correta seria “A permissividade elétrica de polímeros depende da estrutura da cadeia (ou seja, da presença ou não de dipolos permanentes na cadeia)”.*
- VII. *Em um condutor as cargas são livres, portanto elas se reorganizam na superfície do material, blindando completamente o campo elétrico no seu interior. Uma versão correta da frase seria “O que diferencia materiais condutores de isolantes é o fato de que nos primeiros o campo elétrico se anula totalmente em seu interior”.*

Critério de correção:

Somar 0,3 ponto por cada par conceito/frase correto; 0,15 ponto se o aluno acertou o conceito, mas errou a frase; por fim, 0,05 ponto caso o aluno só tenha indicado o conceito incorreto (sem se dar ao trabalho de reescrever a frase). Na frase correta o aluno deve ter reescrito pelo menos até o trecho em que ele deseja modifica-la, após isto ele pode substituir o resto da frase por reticências, assumindo que ele deseja manter inalterado o resto da frase do enunciado.

Questão 2

A Tabela 1 apresenta algumas propriedades físicas de três polítipos do SiC, respectivamente as formas 3C, 4H e 6H e do Si puro para fins de comparação. Com base nestes dados responda:

- a. Qual é a fração de portadores intrínsecos de cada uma das três formas de SiC comparadas com o silício puro a 200°C (473K)? (vale 0,5 ponto)
- b. Com base nos resultados anteriores e nos outros valores da tabela justifique a afirmação de que diodos feitos de SiC poderiam operar em temperaturas mais elevadas que os diodos convencionais feitos de Si (vale 0,5 ponto).
- c. Ainda com base nos valores relatados na Tabela 1 justifique a razão pela qual o 4H-SiC seria preferível aos outros polítipos de SiC na fabricação de dispositivos eletrônicos (vale 1,0 ponto).

Tabela 1 – Algumas propriedades físicas de três politipos do SiC e do silício puro.

	3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC	Si
Gap [eV]	2,36	3,23	3,05	1,12
Módulo [GPa]	250	220	220	100
Cond. Térmica [W cm ⁻¹ K ⁻¹]	3,2	3,7	4,9	1,5
Permissividade relativa	9,72	9,7	9,66	11,9
n _i @ 300K [cm ⁻³]	1,5X10 ⁻¹	5X10 ⁻⁹	1,6X10 ⁻⁶	1X10 ¹⁰
Rig. Dielétrica [MV cm ⁻¹]	1,5	3	3,2	0,3
Mobilidade dos portadores n [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹]	800	1000	400	1400
Mobilidade dos portadores p [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹]	40	115	101	471

Fontes: Casady, J. B.; Johnson, R. W. "Status of silicon carbide (SiC) as a wide-bandgap semiconductor for high temperature applications: a review" *Solid-state electronics*, v. 39(10), 1996, pp. 1409-1422 e Ayalev, T. "SiC semiconductor devices: Technology, modeling and simulation" Tese de doutoramento, Technische Universität Wien, Viena (Austria), 2004, disponível em <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/ayalew/mythesis.htm> (acesso em 14/05/2010).

Dado:

$$n_i = A \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

onde n_i é a fração de portadores intrínsecos, A é uma constante (que deve ser determinada para cada caso), k_B = 8,617 X 10⁻⁵ eV K⁻¹ é a constante de Boltzmann e E_g é o Gap.

Solução:

a. Primeiramente devemos determinar a constante A para cada caso, partindo do valor da fração de portadores intrínsecos a 300K, isto é feito resolvendo:

$$A = \frac{n_i}{\exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)} = n_i \exp\left(\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

Substituindo os valores dados na tabela 1 temos A_{3C} = 1x10¹⁹, A_{4H} = 6,8X10¹⁸, A_{6H} = 6,7X10¹⁹, A_{Si} = 2,6x10¹⁹ usando estes valores obtemos as frações de portadores intrínsecos solicitada:

Tabela 1'- Fração de portadores intrínsecos na temperatura de 473K

3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC	Si
2,7x10 ⁶	42	3,8x10 ³	2,8x10 ¹³

b. Os resultados do item anterior mostram claramente que a fração de portadores intrínsecos dos três politipos do SiC a 473K é, mesmo na pior das hipóteses (caso do 3C-SiC), inferior àquela observada para o Si puro à temperatura ambiente. A fração de portadores intrínsecos controla, entre outras coisas, a corrente de fuga na polarização inversa de um diodo. Vemos, portanto, que eventuais diodos feitos destes três politipos de SiC teriam desempenho a 473K similar àquela observado para diodos de Si à temperatura ambiente, justificando a afirmação do enunciado.

c. Em comparação com o politipo cúbico, os dois politipos hexagonais apresentam claras vantagens, apresentando maiores valores de rigidez dielétrica e Gap. A diferenciação dos politipos hexagonais, entretanto, requer uma análise mais cuidadosa. Algumas propriedades do 6H são superiores às do 4H, em particular, a condutividade térmica e a rigidez dielétrica. O que, nitidamente diferencia o 4H a seu favor é a mobilidade dos portadores n e p , que são os que mais se aproximam dos valores observados para o Si puro.

Critérios de correção:

No item a os alunos devem pelo menos acertar a ordem de grandeza (expoente da base 10) para ter direito ao valor da questão.

No item b o aluno deve mencionar que a densidade de portadores nos três politipos de SiC é compatível com a densidade observada à temperatura ambiente no Si.

No item c o aluno deverá corretamente identificar a mobilidade dos portadores como fator que diferencia o desempenho dos dispositivos semicondutores feitos de 4H-SiC.

Questão 3

Discorra sobre a importância das três contribuições principais para a energia de magnetização de um cristal ferromagnético (a energia de troca, a energia de anisotropia magnetocristalina e a energia magnetostática) e descreva como se desenvolve o processo de magnetização em monocristais de ferro α desde o estado desmagnetizado até a saturação, para os casos onde o campo magnético esteja orientado ao longo das direções [100] e [110] (vale 2,0 pontos).

Solução:

Parte 1:

A energia de troca é uma interação de origem quântica entre os momentos magnéticos atômicos que, no caso de um material ferromagnético, impõe o alinhamento paralelo de momentos vizinhos, é a interação mais intensa do processo de magnetização espontânea e faz que surja uma magnetização espontânea em regiões do cristal denominadas domínios magnéticos, ela é isotrópica (ou seja, só depende da distância entre os momentos e não da sua orientação no espaço). A energia de anisotropia magnetocristalina é a parcela da interação entre momentos que depende da sua orientação no espaço (ou seja, ela é responsável pela anisotropia da interação), esta parcela é característica da estrutura cristalina do material e é ela que faz com que o momento se alinhe espontaneamente (ou seja, na ausência de um campo externo) em uma dada direção cristalográfica, também chamada de direção de fácil magnetização. Em um material ferromagnético a energia de anisotropia magnetocristalina é menos intensa que a energia de troca. A energia magnetostática é a contribuição para a energia total de magnetização do sistema que descreve a interação entre os momentos atômicos e um campo magnético externo favorecendo a orientação paralela entre estes dois vetores. Ela,

em geral, é menos intensa que as outras contribuições, mas como é proporcional à intensidade do campo (na verdade, proporcional ao produto escalar do vetor de campo magnético com o momento magnético atômico) ela pode eventualmente suplantará a contribuição da energia de anisotropia magnetocristalina, forçando os momentos magnéticos atômicos a se alinharem com a direção do campo externo e não com a direção de fácil magnetização do cristal.

Parte 2:

O processo de magnetização de um cristal ferromagnético a partir do estado desmagnetizado se inicia com o cristal organizado em regiões chamadas domínios magnéticos. Estes domínios possuem uma magnetização espontânea próxima à da magnetização de saturação e momentos alinhados com uma das direções de fácil magnetização do cristal, mas sua distribuição é tal que a resultante total da magnetização se anula identicamente. Aplicando-se um campo magnético externo inicialmente temos o crescimento dos domínios melhor orientados com relação ao vetor do campo externo às custas dos demais domínios. Este crescimento se dá pela movimentação das paredes de domínio e produzem uma indução resultante diferente de zero. A orientação dos momentos inicialmente continua atrelada às direções de fácil magnetização, mas a partir de uma certa intensidade de campo, sua direção se altera de forma a torná-los paralelos a direção do campo externo. Na saturação final teremos todo o cristal correspondendo praticamente a um monodomínio com os momentos magnéticos orientados paralelamente à direção do campo externo. No ferro α temos que a direção de fácil magnetização pertence à família $\{100\}$. O monocristal orientado com a direção $[100]$ paralela ao campo irá se magnetizar rapidamente até a saturação com campos muito pouco intensos. A permeabilidade magnética e a remanência, portanto serão elevadas. Já no monocristal com a direção $[110]$ orientada paralela à direção do campo teremos um processo de magnetização mais difícil, pois os momentos na saturação serão rodados aproximadamente 45° para fora da direção de fácil magnetização, reduzindo a remanência.

Critério de correção:

O aluno deverá mencionar em sua resposta os termos grifados no texto acima nesta formulação ou em outra que seja equivalente. Os termos grifados com linha tracejada podem ser considerados equivalentes aos pares, conforme o esquema de identificação indicado ao lado, nestes casos basta que o aluno mencione um deles apenas. Cada termo grifado corresponde a 0,1 ponto na nota da questão. Para facilitar a correção o professor irá grifar o termo considerado correto na resposta do aluno e identificá-lo com a numeração descrita acima.

Questão 4

Leia o texto em destaque, que foi retirado da *Revista Pesquisa FAPESP* on-line (originalmente publicado na edição impressa 169 de março de 2010). Ele descreve um uso possível de dois materiais: o polímero Poli(fluoreto de vinidileno), PVDF, e o zirconato titanato de chumbo (PZT) um material cerâmico com estrutura semelhante ao titanato de bário cuja estequiometria é $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$. A seguir responda as perguntas listadas abaixo.

Roupas Inteligentes

Já pensou em vestir uma camisa ou um vestido capaz de gerar energia para carregar seu aparelho de MP3? É isso que engenheiros da Universidade da Califórnia, em Berkeley, nos Estados Unidos, conseguiram inventar. Eles criaram nanogeradores capazes de produzir energia a partir de esforços mecânicos. Em seguida, inseriram

esses dispositivos na base das fibras do tecido, fazendo o movimento da roupa gerar eletricidade. Esses nanogeradores são 100 vezes mais finos do que um fio de cabelo e possuem um décimo da largura das fibras têxteis convencionais. As nanofibras usadas na pesquisa são feitas de fluoreto de polivinilideno orgânico (PVDF), um material cristalino com excelente resistência química. Além de serem flexíveis, são relativamente fáceis e baratos de fabricar. Outro avanço na área de dispositivos capazes de gerar energia a partir do movimento do corpo humano vem da Universidade de Princeton, nos Estados Unidos. Pesquisadores da instituição criaram nanofitas de borracha flexíveis capazes de converter a energia mecânica gerada pelo movimento da respiração ou pelo caminhar em eletricidade, que poderia ser usada para abastecer telefones celulares, marca-passos e outros aparelhos eletrônicos portáteis. Eles usaram nanofitas de titanato-zirconato de chumbo (PZT) com silicone. A vantagem do dispositivo é sua biocompatibilidade, o que permite ser implantado no corpo e alimentar dispositivos médicos.

- a. Qual a propriedade destes materiais que é responsável pelo desempenho descrito para estas roupas e dispositivos (descreva esquematicamente como eles poderiam gerar eletricidade)? (vale 0,5 ponto)
- b. Qual a relevância, para a aplicação descrita, do fato deste materiais se encontrarem na forma de nanofibras ou nanofitas? (vale 0,5 ponto)
- c. O texto sobre as nanofibras de PVDF afirma que estas “Além de serem flexíveis, são relativamente fáceis e baratos (*sic*) de fabricar.”, qual a característica deste polímero poderia justificar esta afirmação? (vale 0,5 ponto)
- d. No caso das nanofitas de PZT, qual seria a função do silicone? (vale 0,5 ponto)

Solução:

- a. *Piezoelasticidade, a geração de um potencial elétrico por meio de deformação. Na roupa as fibras funcionariam como o isolante de capacitores. Com o movimento o material piezoelétrico induz cargas nas placas condutores deste capacitor. Estas cargas geram uma corrente elétrica que pode ser usada para o carregamento de baterias, por exemplo.*
- b. *Primeiramente há a necessidade de incorporar estes materiais ao tecido da roupa, que se torna muito mais simples se eles tiverem forma e tamanho semelhante às outras fibras. O caso do PZT temos ainda o agravante de que este é um material cerâmico. A manufatura na forma de nanofitas, neste caso, tem ainda a finalidade de conceder a flexibilidade necessária à fabricação e uso da roupa.*
- c. *Trata-se do fato de que o polímero é um termoplástico, permitindo o uso de técnicas de processamento de alta produtividade, como extrusão, por exemplo.*
- d. *O PZT, como uma camada cerâmica, seria naturalmente frágil. A função do silicone é sustentar a camada de PZT conferindo à nanofita a flexibilidade necessária ao manuseio.*

Crerios de correção. As respostas dos alunos devem ser compatíveis com o contexto das respostas acima listadas, mas, particularmente no caso do item a temos as seguintes regras de correção:

- O aluno pode ter feito um desenho para esquematizar o uso das nanofibras e nanofitas como geradores elétricos, neste caso o capacitor deve estar claramente discernível, e

- O aluno que identificou corretamente o fenômeno da piezoelectricidade, descrevendo-o, mas errou o seu nome, sofrerá uma penalidade de 0,1 ponto no item (taxa de falta de atenção).

Questão 5

a) Durante o processo de sinterização pode ocorrer a densificação das peças cerâmicas e a densificação pode ser favorecida pela presença de fase líquida. Você concorda ou discorda desta afirmativa? Por que? (vale 0,5 ponto)

Solução: Durante o processo de sinterização, a densificação é favorecida pela presença de fase líquida porque o processo de difusão em fase líquida é maior do que o processo de difusão em fase sólida.

b) Relacione a densificação das peças cerâmicas com suas propriedades mecânicas. (Vale 0,25 ponto)

Solução: A presença de poros prejudica as propriedades mecânicas de peças cerâmica porque quanto maior a quantidade de poros menos material para resistir ao esforço aplicado e também poros atuam como defeitos. Assim busca-se a máxima densificação possível durante o processo de sinterização.

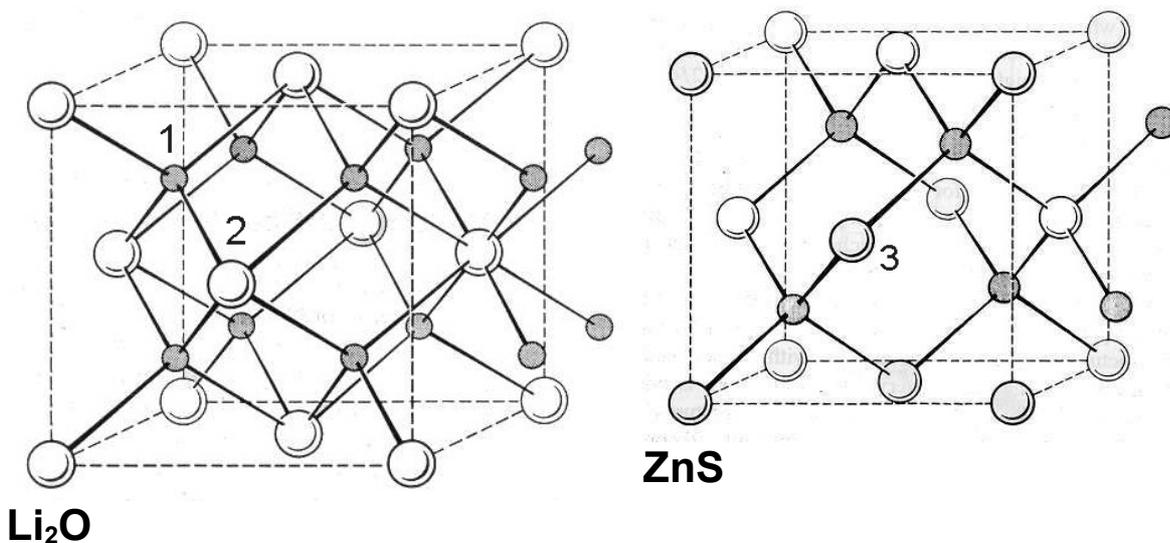
c) Relacione o tempo de sinterização de uma peça cerâmica com o tamanho das partículas do pó empregado na fabricação das peças. (Vale 0,25 ponto)

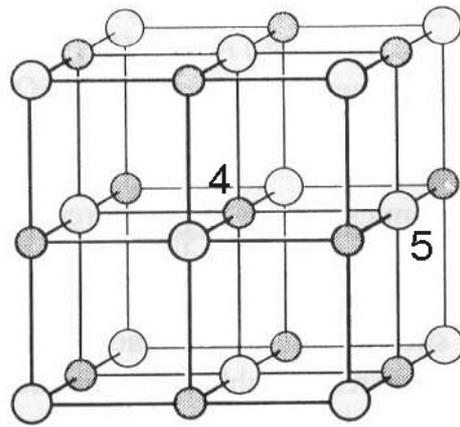
Solução: O tempo de sinterização de peças cujas partículas são finas é muito menor do que o de peças com partículas grosseiras.

Isto pode ser facilmente explicado uma vez que a força motriz para o processo de sinterização é redução de área superficial. (resposta adicional não obrigatória)

Questão 6

Quais são os números de coordenação dos íons (1, 2, 3, 4 e 5) indicados nas estruturas cristalinas dos compostos representados na Figura 1. (vale 1,0 ponto)





NaCl

Figura 1 – Representação esquemática das estruturas cristalinas de três compostos cerâmicos típicos.

Solução:

Número de coordenação dos íons:

Íon 1 = 4

Íon 2 = 8

Íon 3 = 4

Íon 4 = 6

Íon 5 = 6

Critério de Correção:

0,2 ponto para cada resposta correta.