



Ciência dos Materiais

PGMEC – EME 716
Prof Adriano Scheid



Introdução:

A *Ciência dos Materiais* envolve a investigação das relações que existem entre as estruturas e propriedades dos materiais.

A *Engenharia dos Materiais*, baseada nas correlações estruturas-propriedades, busca o desenvolvimento de certas estruturas a fim de obter um determinado conjunto de propriedades.

Estrutura:

A estrutura de um material está relacionada de forma usual ao arranjo dos componentes internos. Em escala subatômica, a estrutura envolve os elétrons e sua interação com os núcleos. Em escala atômica, a estrutura envolve a organização dos átomos ou moléculas relativamente umas às outras. Em uma escala maior temos os agrupamentos atômicos, normalmente denominados “Estrutura Microscópica” ou Microestrutura e podem ser observados por técnicas de microscopia normais.



Introdução:

Propriedades:

As propriedades importantes dos sólidos podem ser agrupadas em seis diferentes grupos – exemplos:

- 1- Propriedades Mecânicas – Módulo de Elasticidade, Resistência Mecânica**
- 2- Propriedades Elétricas – Condutividade Elétrica, Constante Dielétrica**
- 3- Propriedades Térmicas – Condutividade Térmica, Capacidade Calorífica**
- 4- Propriedades Magnéticas – Resposta do material a um Campo Magnético**
- 5- Propriedades Ópticas – Índice de Refração, Refletividade**
- 6- Propriedades Degenerativas – Estabilidade Química ou Reatividade.**



Introdução:

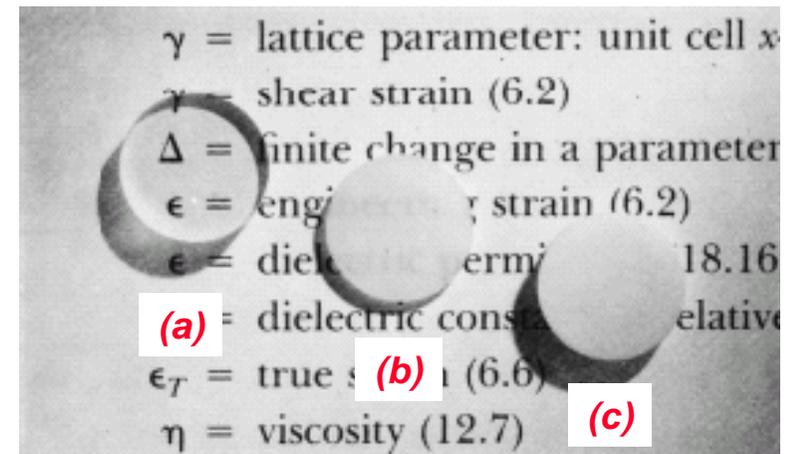
Processamento e Desempenho:

Adicionalmente à estrutura e propriedades, é necessário ainda uma análise das condições de Processamento dos Materiais e de seu Desempenho. Uma vez que a estrutura desenvolvida em determinado material depende do seu processamento e que a estrutura dita as propriedades, que por sua vez dita o desempenho, existe uma correlação linear entre estes fatores.

Processamento → Estrutura → Propriedades → Desempenho

Exemplo: Transmitância da luz em três amostras de óxido de Alumínio, sendo:

- (a) Monocristal (safira) - Transparente
- (b) Policristalino e denso - Translúcido
- (c) Policristalino com 5% porosidade - Opaco





Introdução:

Porque estudar Ciência e Engenharia dos Materiais?

Três razões estão normalmente envolvidas e que justificam o estudo dos materiais:

1- Conhecimento a fim de suportar a seleção de materiais em projetos, a partir da avaliação das condições de serviço e propriedades dos diversos materiais disponíveis, buscando a opção que atenda mais plenamente.

2- Análise da potencial deterioração dos materiais, por exemplo, pela exposição em elevada temperatura ou por ambientes corrosivos.

3- Análise econômica da seleção e especificação dos materiais, considerando custo, desempenho, manutenção, reciclagem, entre outros.



Dados da Produção Mundial

➤ **Aço** – 1,33 bilhões t (2008) (IBS-2005)

➤ **Polímeros** – 230 milhões t (2005)

Petróleo – 80 milhões barris/ano

1 barril – 159 litros

1t – 7,5 barris

1 barril – 42 galões (28 galões de gasolina)

➤ **Cerâmicos** – 6,3 bilhões m² (2004)

➤ **Compósitos** – 30 milhões t



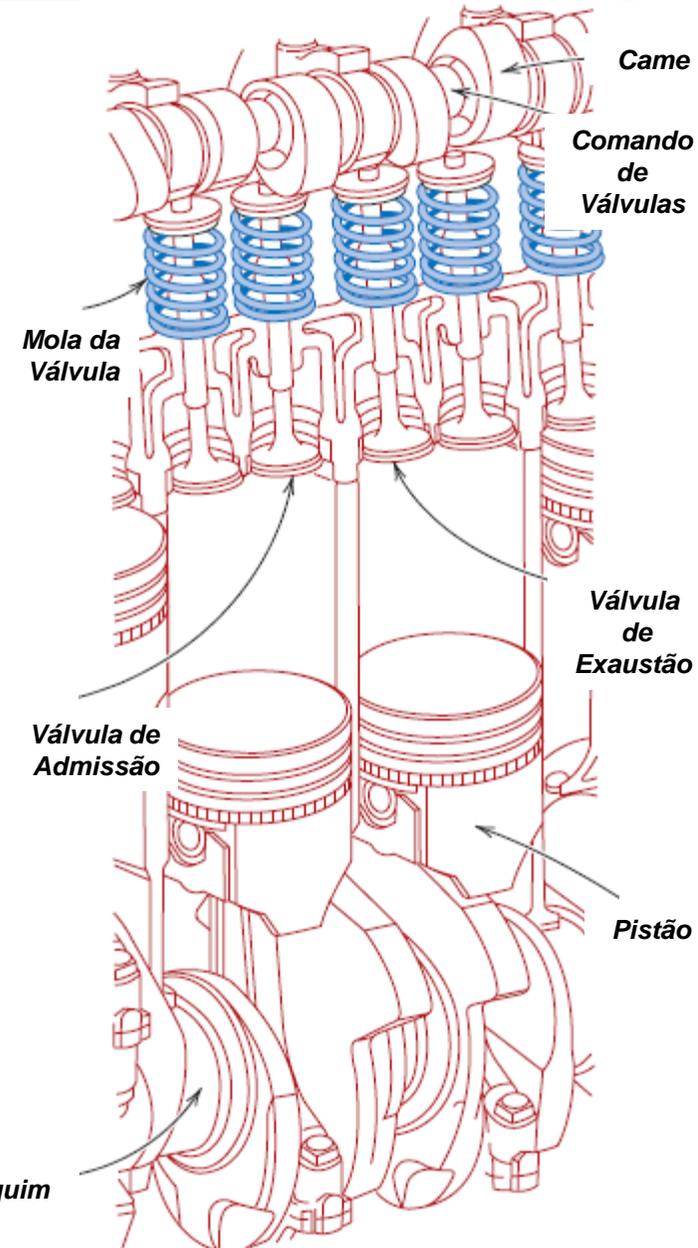
Introdução:

Classificação dos Materiais

Os materiais sólidos são classificados convenientemente em três diferentes grupos: Metais, Polímeros e Cerâmicos.

1- Metais

Os materiais metálicos são normalmente combinações de elementos metálicos. Nesta classe existe um grande número de elétrons livres, ou seja, não ligados a um átomo em especial. São ótimos condutores elétricos e térmicos e não são transparentes à luz visível. Uma superfície metálica polida é adquire aparência lisa ou polida. Os metais são em geral resistentes e deformáveis, o que justifica o uso em inúmeras aplicações estruturais.





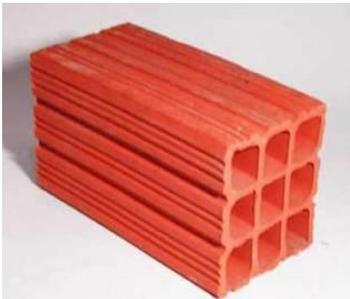
Introdução:

Classificação dos Materiais

Os materiais sólidos são classificados convenientemente em três diferentes grupos: Metais, Polímeros e Cerâmicos.

2- Cerâmicos

Os materiais cerâmicos são combinações de elementos metálicos e não metálicos, frequentemente óxidos, nitretos e carbetos. Nesta classificação, existe um grande número de materiais, como: argilas, cimentos e vidros. Apresentam ligações tipo iônicas ou covalentes, sendo isolantes elétricos e térmicos. Os cerâmicos são em geral resistentes e muito frágeis. São resistentes à elevadas temperaturas e muito resistentes a ambientes corrosivos.





Introdução:

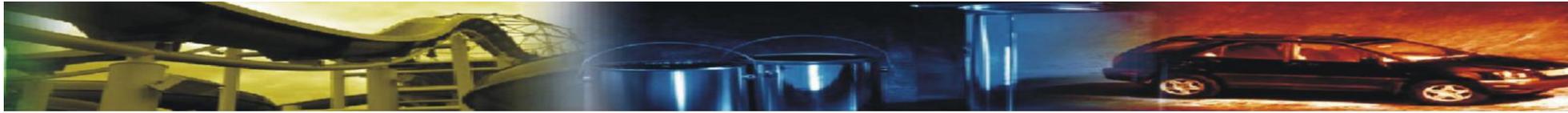
Classificação dos Materiais

Os materiais sólidos são classificados convenientemente em três diferentes grupos: Metais, Polímeros e Cerâmicos.

3- Polímeros

Os materiais poliméricos são normalmente combinações de elementos orgânicos, como o Carbono, Hidrogênio além de outros materiais não metálicos. Nesta classe, os átomos estão ligados por ligações covalentes, além de outros tipos de ligações como forças de Van der Waals. São isolantes elétricos e térmicos, sendo em geral de baixa densidade e grande flexibilidade. Pela constituição e tipos de ligações, apresentam limitada aplicação em temperatura.





Introdução:

Classificação dos Materiais

De forma complementar, é usual classificar outros três grupos, derivados dos anteriores, que são: **Compostos, Semicondutores e Biomateriais.**

4- Compostos

Compósito é basicamente um material em cuja composição entram dois ou mais tipos de materiais diferentes. Alguns exemplos são metais e polímeros, metais e cerâmicos ou polímeros e cerâmicos.

Os materiais que podem compor um material compósito podem ser classificados em dois tipos:

Material matriz é o que confere estrutura ao material compósito, preenchendo os espaços vazios que ficam entre os materiais reforços e mantendo-os em suas posições relativas.

Materiais de reforço são os que realçam propriedades mecânicas, eletromagnéticas ou químicas do material compósito como um todo.

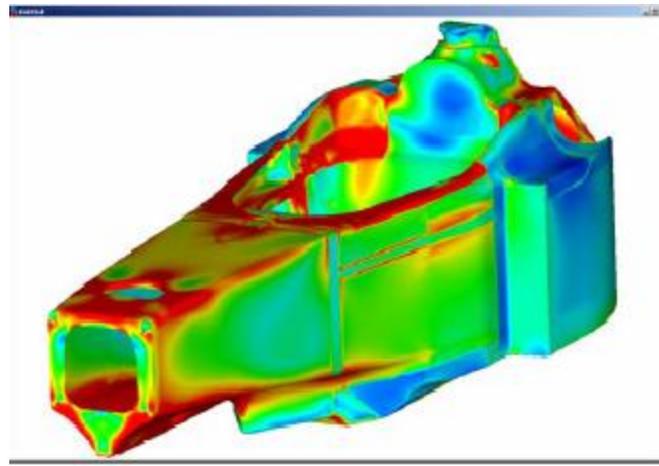
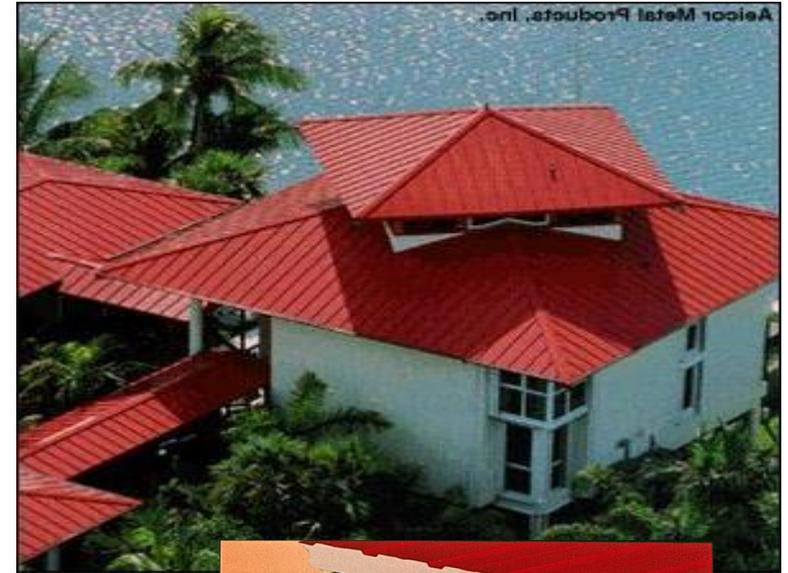
O grande potencial de desempenho destes materiais está baseado na possibilidade de sinergia entre material matriz e materiais reforços que resulte no material compósito final com propriedades não existentes nos materiais originais isoladamente.



Introdução:

Classificação dos Materiais

4- Compostos (exemplos)

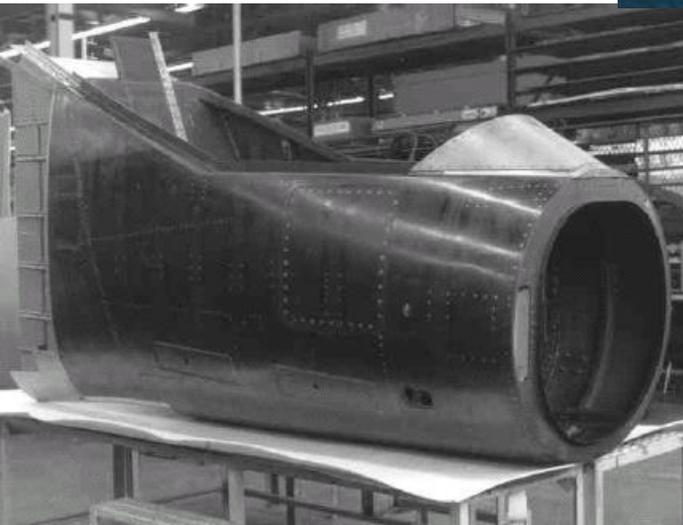




Introdução:

Classificação dos Materiais

**4- Compostos
(exemplos)**





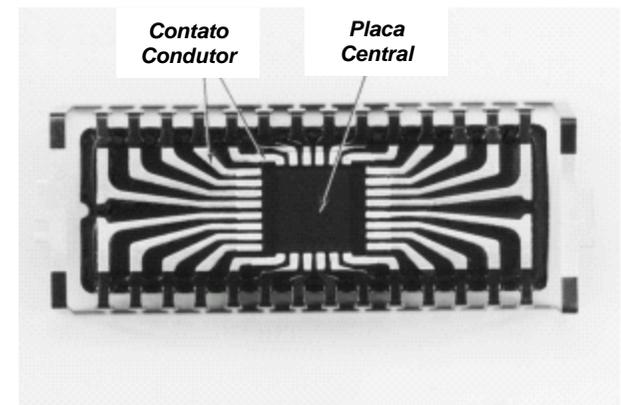
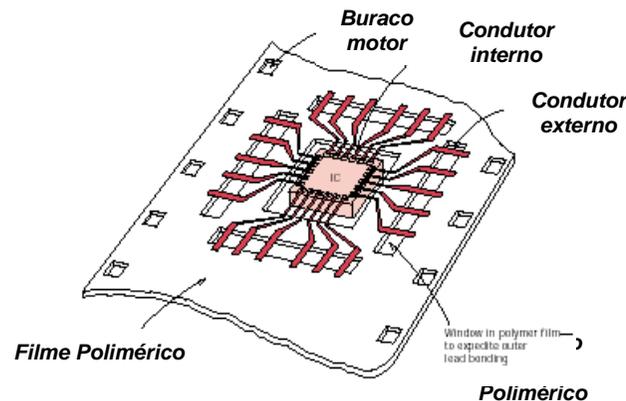
Introdução:

Classificação dos Materiais

De forma complementar, é usual classificar outros três grupos, derivados dos anteriores, que são: **Compostos, Semicondutores e Biomateriais.**

5- Semicondutores

São materiais que apresentam propriedades elétricas intermediárias entre os condutores e os isolantes. As características elétricas destes materiais são extremamente sensíveis a mínimas adições de elementos químicos ou átomos de impurezas, cujas concentrações devem ser controladas. Estes materiais permitiram a fabricação de circuitos integrados que revolucionaram a eletrônica e a indústria de computadores nas últimas duas décadas.





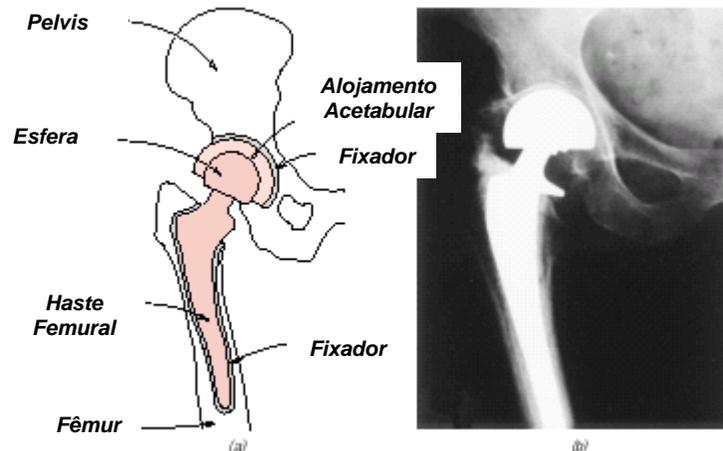
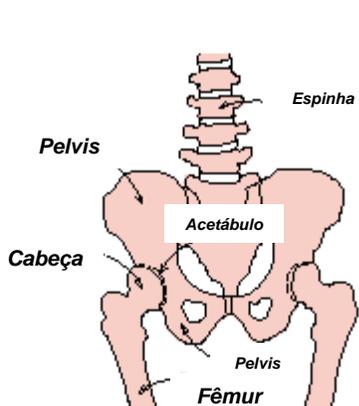
Introdução:

Classificação dos Materiais

De forma complementar, é usual classificar outros três grupos, derivados dos anteriores, que são: **Compostos, Semicondutores e Biomateriais.**

6- Biomateriais

São materiais empregados em implantes para o corpo humano, especialmente para substituir partes doentes, danificadas ou desgastadas. Estes materiais não podem produzir substâncias tóxicas e devem ser compatíveis com os tecidos humanos ou não causar reações biológicas adversas (ex. ósseointegração).





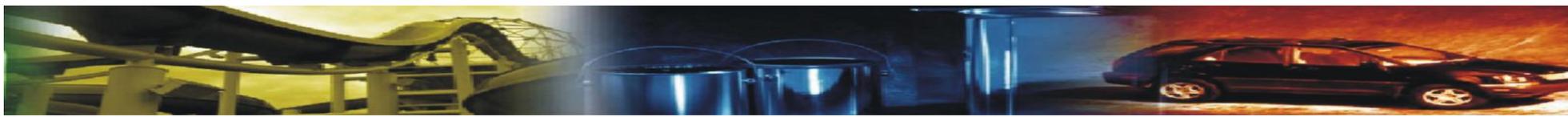
Desafios de algumas áreas que demandam desenvolvimento de materiais:

Energia Nuclear – Combustíveis, estruturas para plantas e disposição de lixo radioativo,

Transportes (automotiva, aérea, trens) – Razão resistência/peso,

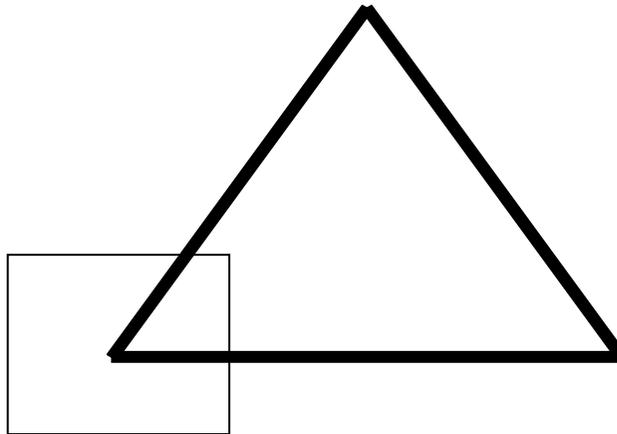
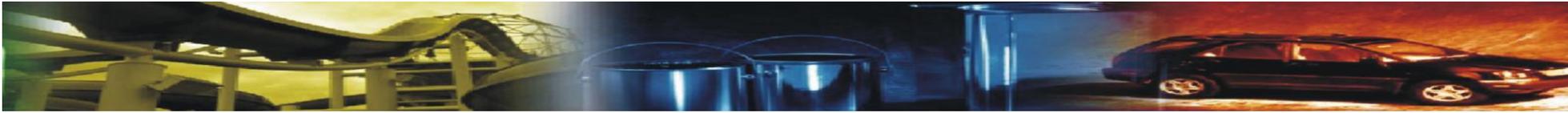
Meio Ambiente – Controle da poluição, possibilidade de redução do impacto ambiental,

Reciclagem (materiais oriundos de fontes renováveis) – Polímeros: fonte finita, alternativas de sucedâneos, reciclabilidade.

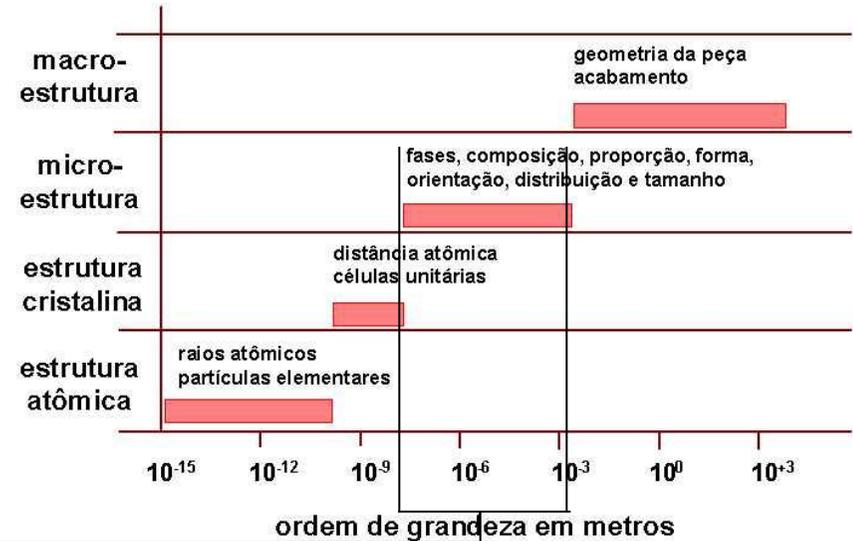


Ligações e Estruturas Atômicas

O início...



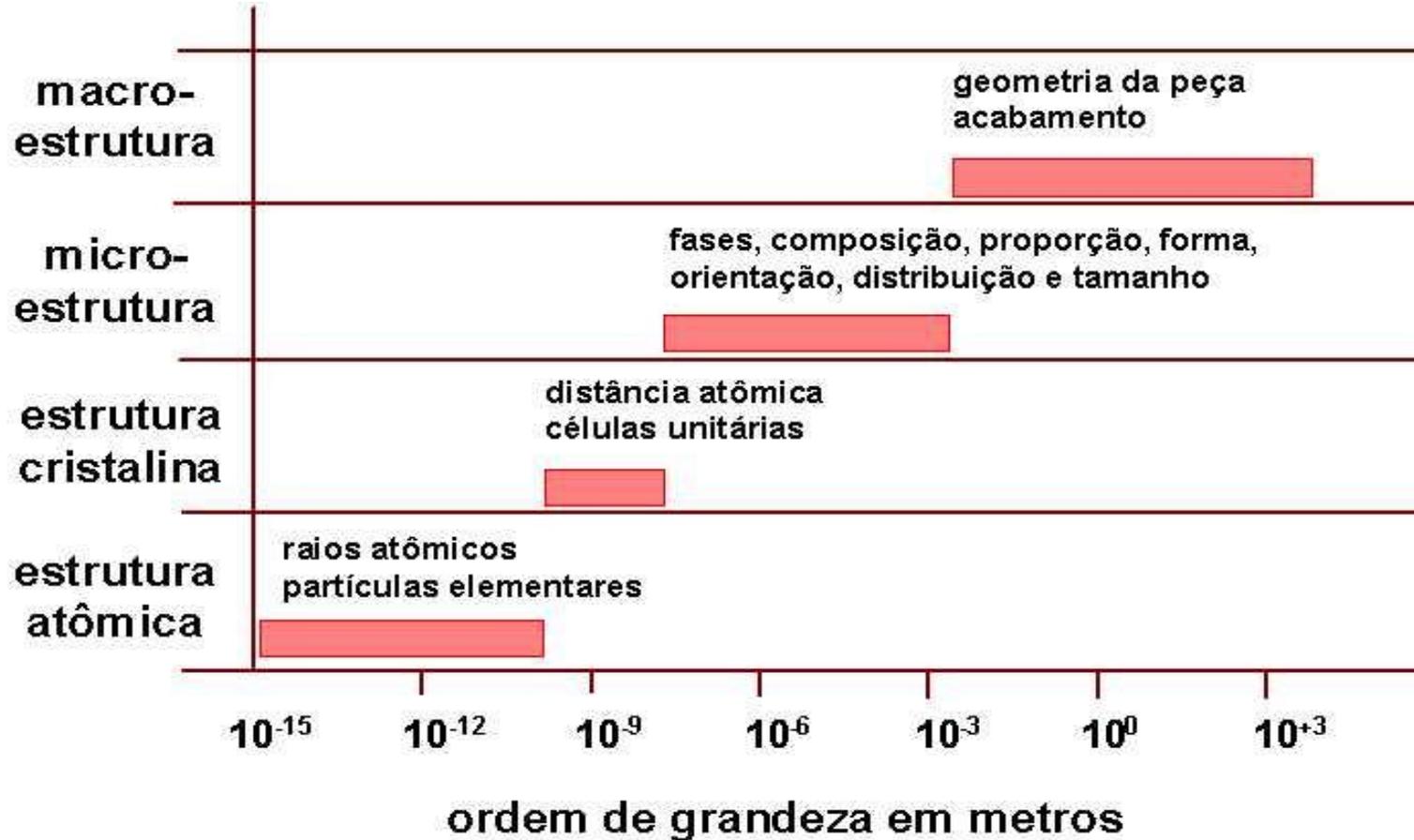
ESTRUTURA ATÔMICA
ESTRUTURA CRISTALINA
MICROESTRUTURA



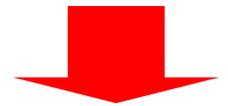
Antes de entender fenômenos que determinam propriedades nos materiais a partir da MICROESTRUTURA deve-se entender a **ESTRUTURA ATÔMICA** e **ESTRUTURA CRISTALINA** dos materiais porque estas definem algumas de suas propriedades.



Ordem de grandeza da estrutura atômica $\Rightarrow 10^{-15}$ a 10^{-10} m



A estrutura eletrônica dos átomos determina a natureza das ligações atômicas e define algumas propriedades dos materiais



Propriedades: físicas, ópticas, elétricas e térmicas



- *Por que os elementos não se decompõem formando novos elementos?*
- *Por que as substâncias se decompõem formando novas substâncias?*
- *Por que o número de elementos é pequeno comparado ao número de substâncias?*



Surgimento de

TEORIAS:

Dalton

Thompson

Rutherford

Bohr

Princípio da incerteza de Heisenberg

Um Breve Histórico!

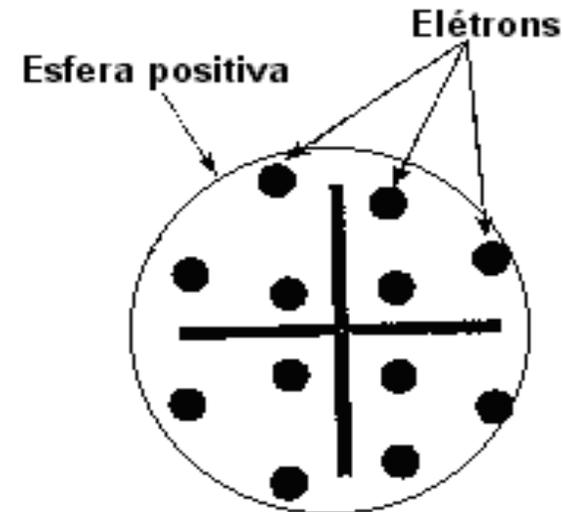


• Teoria atômica de Dalton entre 1803-1808:

- átomo;
- igual em todas as suas propriedades;
- átomos de elementos possuem propriedades físicas e químicas diferentes;
- substância formada pela combinação de dois ou mais átomos
- Cada átomo guarda sua identidade química.

• Teoria atômica de Thomson 1887:

- átomo de Dalton não explicava fenômenos elétricos (raios catódicos = e^-);
- modelo do “pudim de passas”: uma esfera positiva com e^- na superfície;
- Eugene Goldstein supôs o próton destruindo a teoria de Thomson.

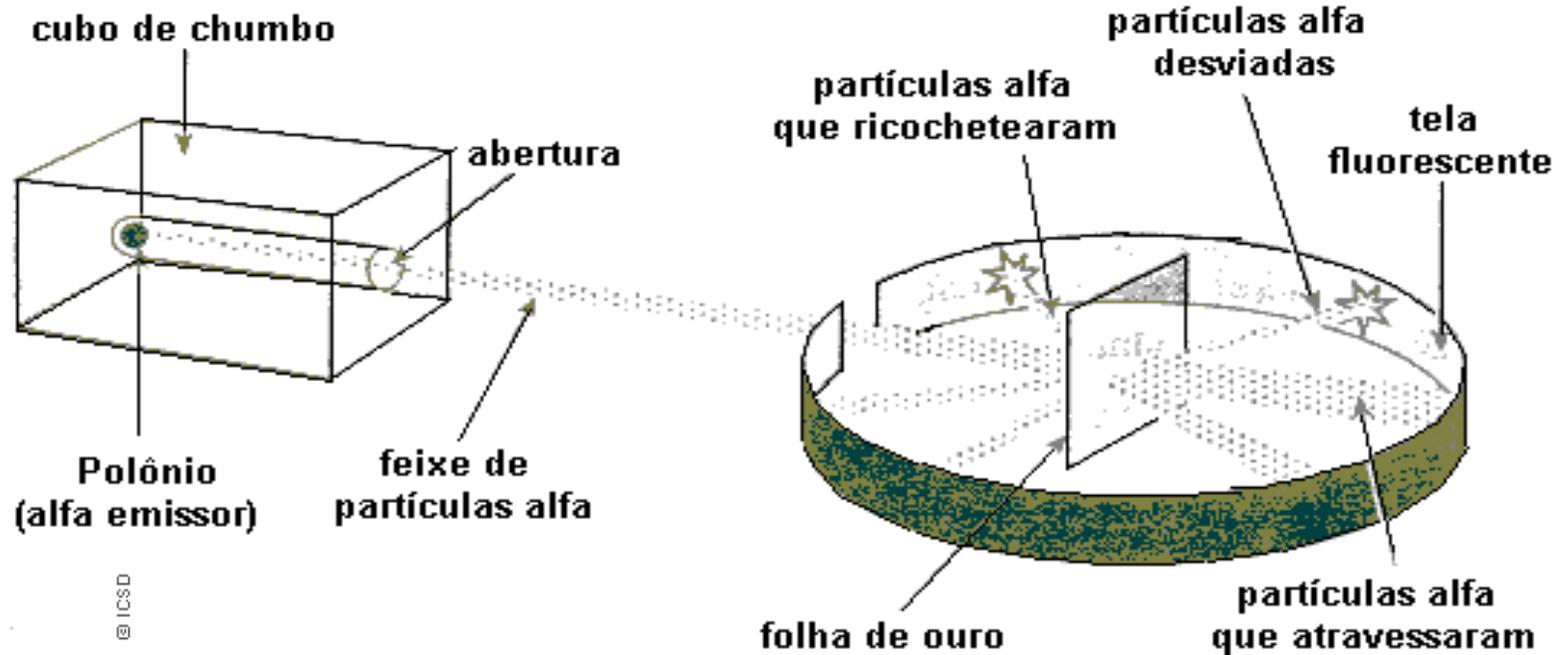




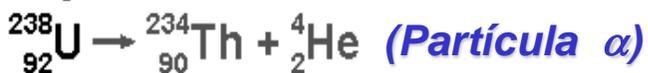
- **Teoria atômica de Rutherford 1911:**

⇒ Para saber o conteúdo de um caixote pode-se atirar nele, se a bala passar ele está vazio, ou tem um material pouco consistente.

⇒ Partículas alfa contra uma fina lâmina de ouro (0,0001 cm - dez mil átomos) a grande maioria das partículas atravessava a lâmina e uma outra parte ricocheteava.



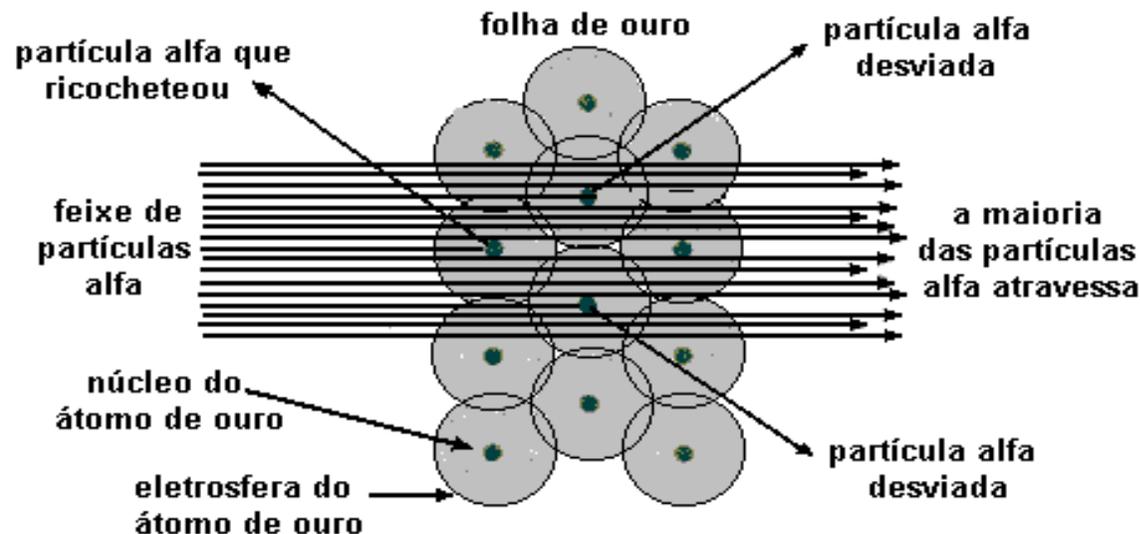
© ICSD



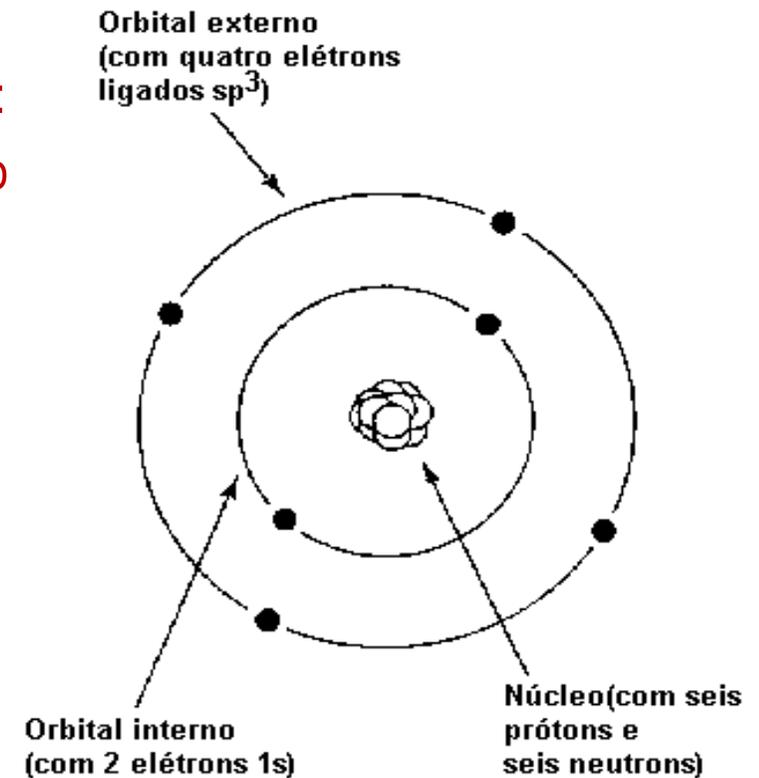


• Teoria atômica de Rutherford 1911:

- o átomo não é maciço, mais existem espaços vazios;
- na região central - núcleo - existem cargas positivas;
- na eletrosfera - elétrons (com massa 1836 vezes menor);
- a relação entre partículas que passam e as que ricocheteiam: tamanho do átomo cerca de 10 mil vezes maior que o tamanho do núcleo.



MODELO PLANETÁRIO





Teoria atômica de Bohr 1913:

Não explicava os espectros atômicos.

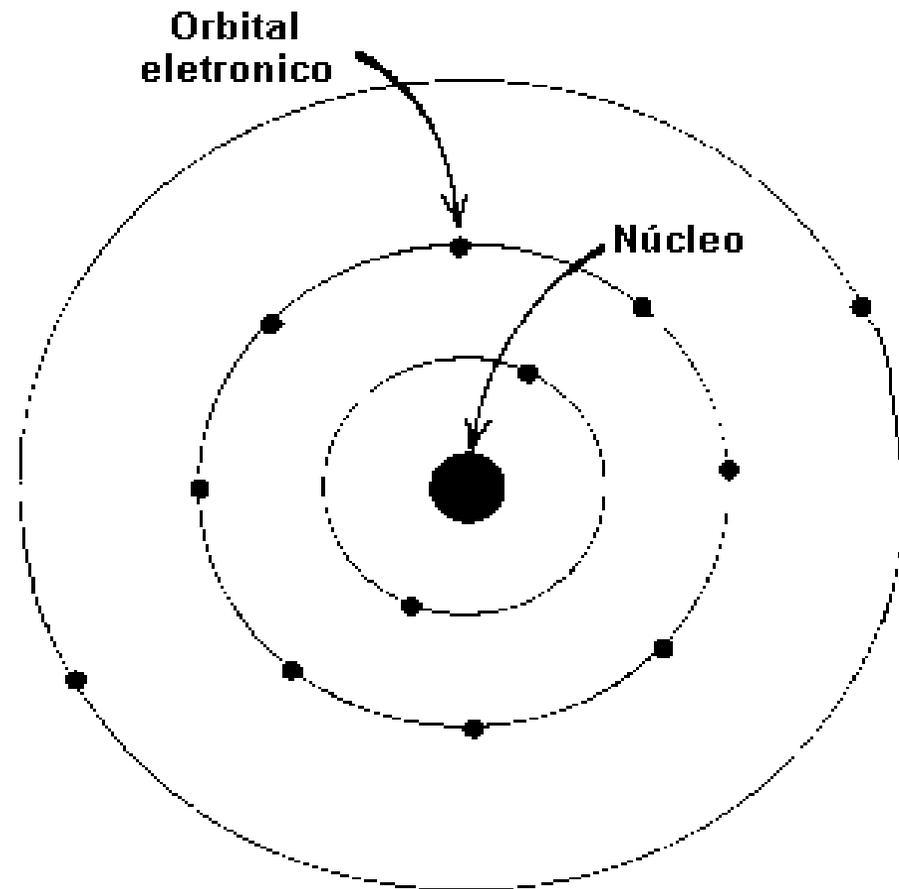
Considera que:

- os elétrons circundam orbitalmente
- cada nível tem um valor determinado de energia (não é possível permanecer entre os níveis);
- excitação do elétron: passa de um Nível para o outro;
- volta emitindo energia

NOVIDADE DA TEORIA:

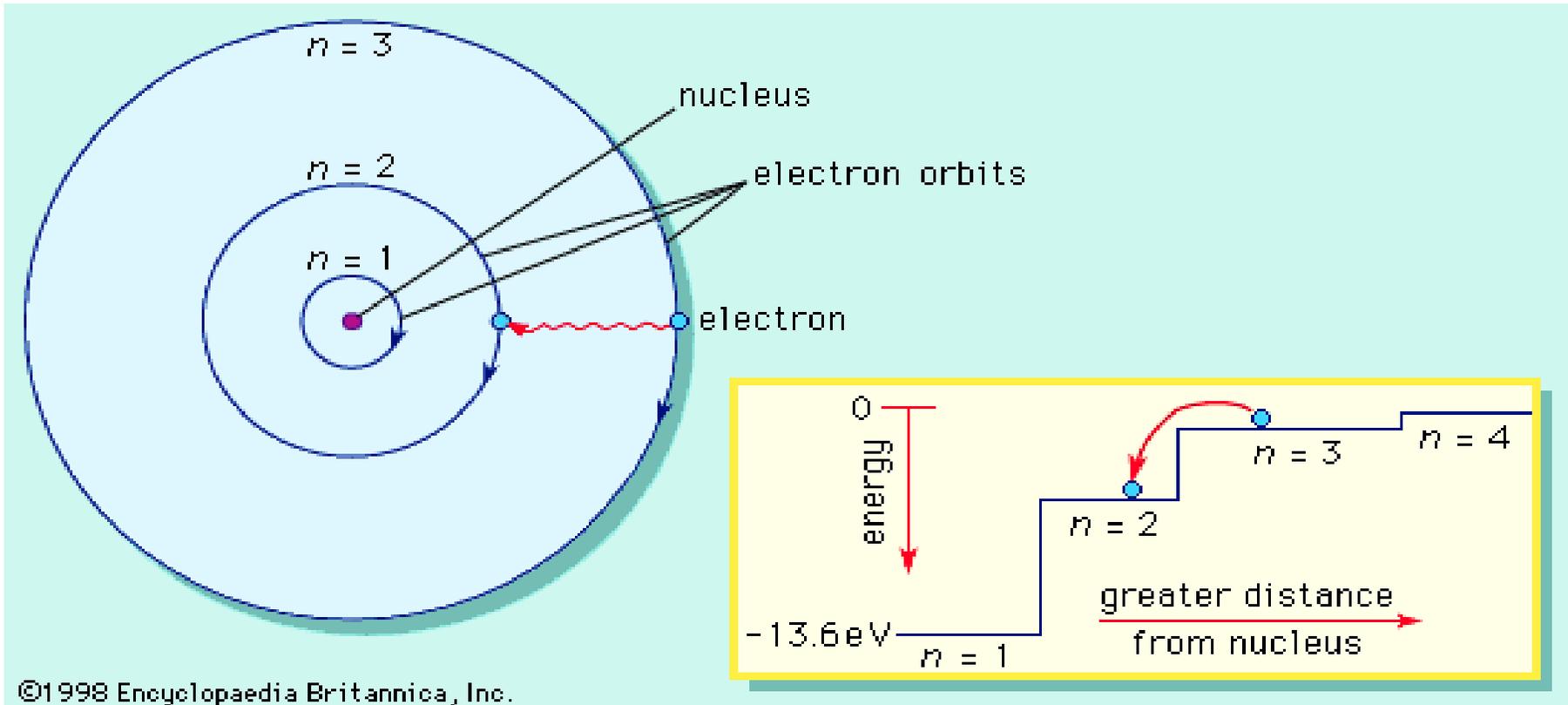
quantização da energia dos elétrons

MODELO RUTHERFORD-BOHR

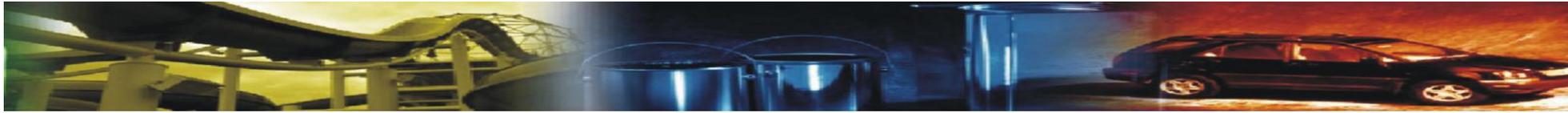


• Teoria atômica de Bohr 1913:

MODELO RUTHERFORD-BOHR

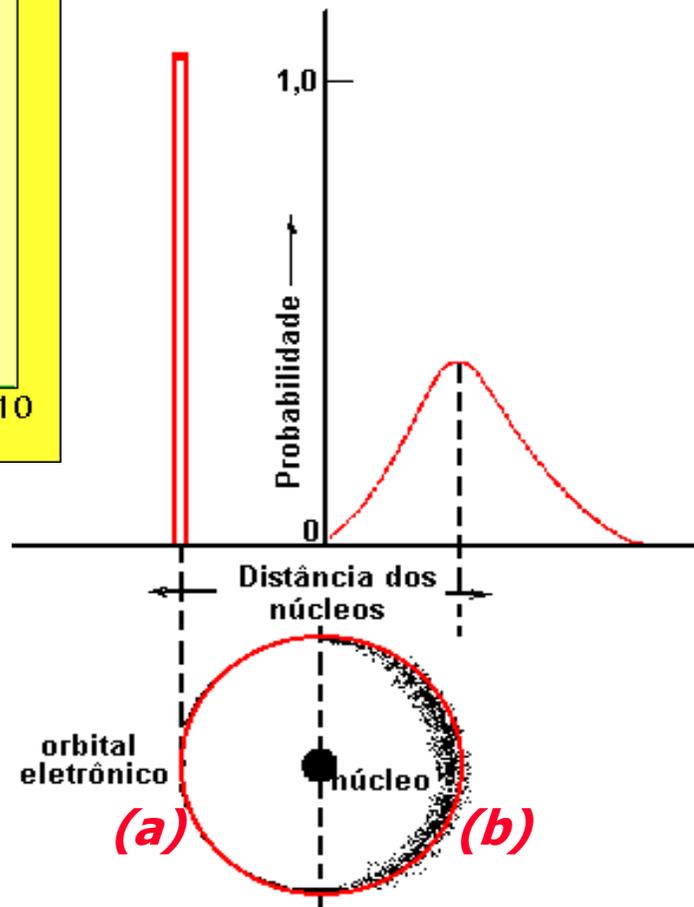
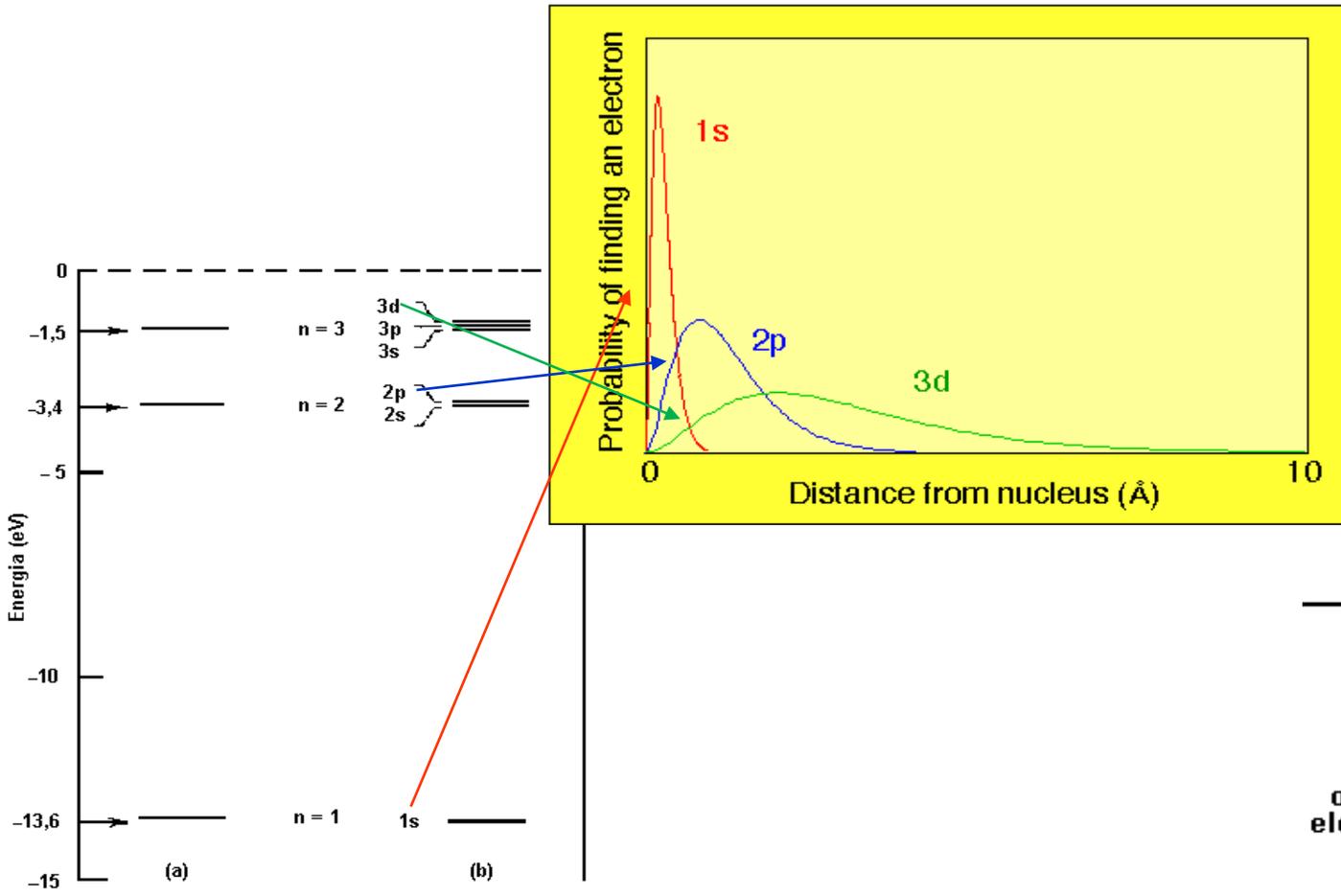


O átomo de Bohr mostrando os elétrons em orbitas circulares ao redor do núcleo. Os orbitais apresentam energia quantizada. Ocorre transmissão de energia do átomo quando um elétron pula de um orbital mais afastado do núcleo, para um mais próximo.



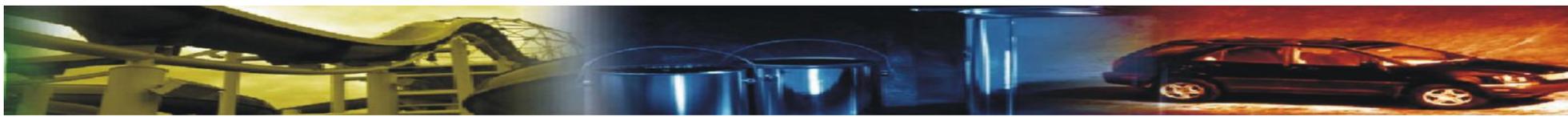
Teoria atômica de Bohr 1913:

MODELO RUTHERFORD-BOHR



Energia dos três primeiros elétrons de hidrogênio.

Comparação entre (a) Bohr e (b) modelo mecânico ondulatório (quântico) em função da distribuição de e⁻.



- **Princípio da Incerteza de Heisenberg 1927:**

- a luz interage com o elétron, logo não é possível ter certeza de sua posição;
- contrapõe as órbitas circulares de Bohr;
- o elétron é bem mais caracterizado pela sua energia do que por sua posição, velocidade ou trajetória.

Fenômenos químicos: eletrosfera - núcleo inalterado

Fenômenos nuclear ou radioativo: núcleo



Ligações e Estruturas Atômicas

Introdução:

O estudo e entendimento das ligações interatômicas nos sólidos se justifica na medida que o tipo de ligação permite explicar uma série de propriedades dos materiais.

Um exemplo é o **Carbono Grafite e Diamante** que apresentam dureza diferente, sendo o primeiro com dureza relativamente baixa enquanto o segundo elevada dureza, diferença esta justificada diretamente a partir do tipo de ligação interatômica que ocorre no Grafite e que não é encontrada no Diamante.



Ligações e Estruturas Atômicas

Estrutura Atômica

Cada átomo consiste de um pequeno núcleo composto por prótons e nêutrons que é circundado por elétrons em movimento. Elétrons e prótons são carregados eletricamente com carga de $1,6 \times 10^{-19}$ C, negativo em sinal para elétrons e positivo para prótons, enquanto os nêutrons são eletricamente neutros.

A massa das partículas é muito pequena, sendo a dos prótons aproximadamente a dos nêutrons de $1,67 \times 10^{-27}$ kg e os elétrons de $(9,11 \times 10^{-31}$ kg).



Ligações e Estruturas Atômicas

Estrutura Atômica – Número Atômico e Número de Massa

Cada átomo é caracterizado pelo **número atômico Z** ou número de prótons. O Z varia desde 1 (Hidrogênio) até 92 (Urânio), considerando os elementos químicos naturais estáveis da tabela periódica.

Um átomo eletricamente neutro é aquele que apresenta o mesmo número de prótons e elétrons.

O **número de massa A** , pode ser expresso pela soma das massas dos prótons e nêutrons do seu núcleo. Embora um átomo de um determinado elemento apresente o mesmo número de prótons, podem existir diferentes números de nêutrons, o que origina os Isótopos do elemento.



Ligações e Estruturas Atômicas

Estrutura Atômica – Número Atômico e Número de Massa

O peso atômico de um elemento corresponde à média das massas atômicas. Uma **unidade de massa atômica (u.m.a)** é definida como sendo 1/12 avos da massa atômica do Isótopo do Carbono 12 (^{12}C), sendo $A = 12,00000$.

Desta forma, podemos aproximar:

$$A \sim Z + N$$

O peso atômico ou molecular de um componente pode ser especificado com base na unidade de massa atômica por átomo ou massa por mol de material, sendo:

$$1\text{u.m.a/átomo} = 1\text{g/mol}$$



Ligações e Estruturas Atômicas

Estrutura Atômica – Número Atômico e Número de Massa

Em um mol de qualquer substância temos:

$6,02 \times 10^{23}$ átomos ou moléculas (n° Avogadro)

Exemplo:

Átomo de Ferro:

Massa Atômica: 55,85 g/átomo ou 55,85 g/mol



Estrutura Nuclear

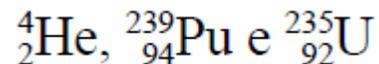
O núcleo atômico é constituído por **Nucleons (A)**, sendo N nêutrons e Z prótons. Os prótons são carregados positivamente e determinam o número de elétrons do átomo, uma vez que este é eletricamente neutro. Os nêutrons possuem praticamente a mesma massa dos prótons, mas não tem carga elétrica. Assim, **prótons e nêutrons são chamados de nucleons.**

O número de nucleons de um átomo é dado por: $A = Z + N$, sendo chamado de número de massa. Z é o número de prótons ou número atômico.

Os nucleons se movem com uma velocidade média de 30.000 km/s. A densidade nuclear tem um valor aproximado de $\rho = 10^{15} \text{ g/cm}^3$.

Notação Química

A notação para representar um elemento químico é ${}^A_Z X$, onde A é o número de massa e Z o número atômico.



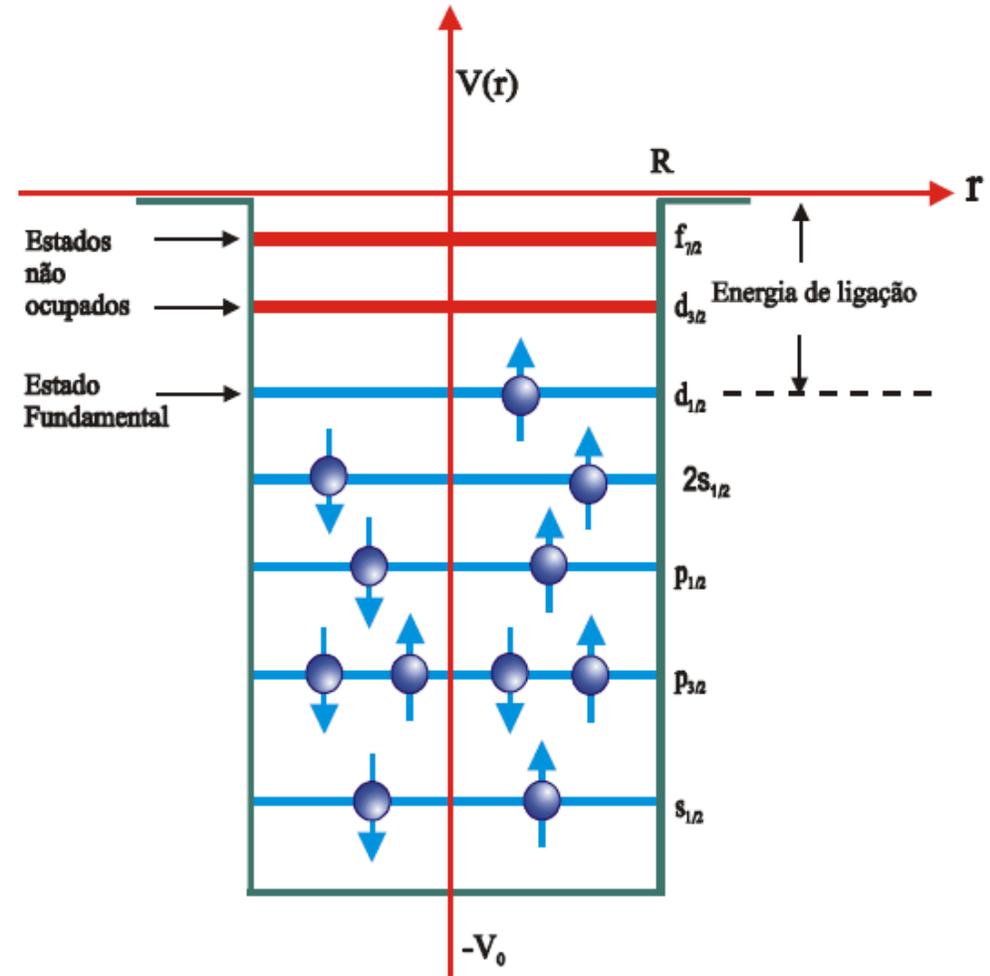


Organização Nuclear

Os prótons e nêutrons se organizam em orbitais, em níveis de energia, sob a ação do campo de forças intensas e de curto alcance.

A energia de ligação da última partícula dentro do poço de potencial, caracteriza a **energia de ligação do núcleo** (relativa ao estado fundamental).

A energia média de ligação dos núcleos é de 7,5MeV, sendo muito superior à energia de ligação dos elétrons.



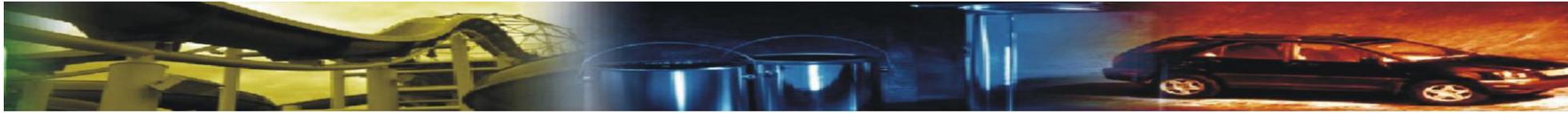
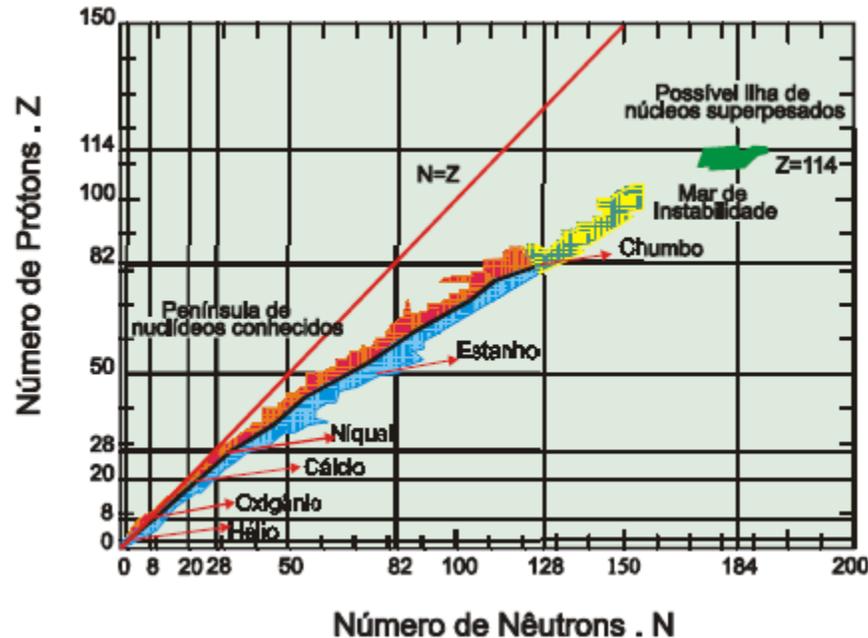


Tabela de Nuclídeos

A tabela de nuclídeos consiste da relação de todos os elementos estáveis e instáveis, colocados em termos de relação prótons e nêutrons dos seus núcleos. Pode-se observar que, para elementos com baixo número de massa, o número de prótons e de nêutrons é aproximadamente igual. À medida que A aumenta, o número de nêutrons aumenta relativamente, chegando a 40% de excesso para o elementos mais pesados.





Isótopos, Isóbaros e Isótonos

A **primeira observação** da reprodução parcial da tabela de nuclídeos abaixo é de que existem diversos elementos que não são nuclearmente puros, ou seja, apresentam diferentes números de massa (A), com mesmo nº de prótons ($=Z$) conforme coluna horizontal. Estes são chamados de Isótopos. Assim, o mesmo elemento químico apresentará sempre o mesmo Z , o que o diferencia de outros elementos químicos, apesar de ter diferente nº de nêutrons.

Radionuclídeos / Radioisótopos

Um elemento químico pode ser constituído de diferentes isótopos estáveis e/ou instáveis. **Quando os nuclídeos são instáveis, estes são chamados de radionuclídeos ou radioisótopos.**

Z	Isóbaros							
	Cl 32 291 ms β^+ 9,5; 11,7... γ 2230; 4770... $\beta\alpha$ 2,20; 1,67... βp 0,991; 0,762; 1,324...	Cl 33 2,61 s β^+ 4,5... γ 841; 1966; 2867...	Cl 34 32,0 m 1,53 s β^+ 2,5... γ 2127; 1176; β^+ 4,5... 3303... γ 146	Cl 35 75,77 σ 43 $\sigma_{n,p}$ 0,489 $\sigma_{n,\alpha}$ 0,00008	Cl 36 3,0 · 10 ⁴ s β^- 0,7 α ; β^+ ... $\sigma < 10$	Cl 37 24,23 σ 0,428	Cl 38 37,48 m β^+ 4,9... γ 2168; 1642...	
	S 31 2,58 s β^+ 4,4... γ 1266	S 32 96,02 σ 0,53 $\sigma_{n,\alpha}$ 0,004	S 33 0,75 $\sigma_{n,p}$ 0,002 $\sigma_{n,\alpha}$ 0,140	S 34 4,21 s σ 0,240	S 35 87,5 d β^- 0,2	S 36 0,02 σ 0,15	S 37 5,0 m β^- 1,8; 4,9... γ 3103...	Isótopo
	P 30 2,60 m β^+ 3,2... γ 2235...	P 31 100 σ 0,180	P 32 14,3 d β^- 1,7	P 33 25,3 d β^- 0,2	P 34 12,4 s β^- 5,4... γ 2127...	P 35 47,4 s β^- 2,3... γ 1572...	P 36 ? s β^- γ 3290...	
	Si 29 4,67 σ 0,28	Si 30 3,10 σ 0,107	Si 31 2,62 h β^+ 1,5 γ (1266) σ 0,48	Si 32 101 s β^- 0,2	Si 33 6,18 s β^- 3,0; 5,8... γ 1848...	Si 34 2,77 s β^- 3,1... γ 1179; 429; 1608...	Si 35	N
			Isótono					



Isótopos, Isóbaros e Isótonos

A **segunda observação** é de que existem diversos elementos com mesmo número de nêutrons, sendo chamados de isótonos (=N) e estão relacionados na coluna vertical. A **terceira observação** é de que existem diversos elementos com mesmo número de massa (=A) e estão relacionados na diagonal da reprodução.

Z	Isóbaros							
	Cl 32 291 ms β^+ 9,5; 11,7... γ 2230; 4770... $\beta\alpha$ 2,20; 1,67... βp 0,991; 0,762; 1,324...	Cl 33 2,51 s β^+ 4,5... γ 841; 1966; 2867...	Cl 34 32,0 m 1,53 s β^+ 2,5... γ 2127; 1176; β^+ 4,5... 3303... γ 146	Cl 35 76,77 σ 43 $\sigma n, p$ 0,489 $\sigma n, \alpha$ 0,00008	Cl 36 $3,0 \cdot 10^6$ s β^- 0,7 ϵ ; β^+ ... $\sigma < 10$	Cl 37 24,23 σ 0,428	Cl 38 37,48 m β^+ 4,9... γ 2168; 1642...	
	S 31 2,58 s β^+ 4,4... γ 1266	S 32 96,02 σ 0,53 $\sigma n, \alpha$ 0,004	S 33 0,75 $\sigma n, p$ 0,002 $\sigma n, \alpha$ 0,140	S 34 4,21 s σ 0,240	S 35 87,5 d β^- 0,2	S 36 0,02 σ 0,15	S 37 5,0 m β^- 1,8; 4,9... γ 3103...	Isótopo
	P 30 2,50 m β^+ 3,2... γ 2235...	P 31 100 σ 0,180	P 32 14,3 d β^- 1,7	P 33 25,3 d β^- 0,2	P 34 12,4 s β^- 5,4... γ 2127...	P 35 47,4 s β^- 2,3... γ 1572...	P 36 ? s β^- γ 3290...	
	Si 29 4,67 σ 0,28	Si 30 3,10 σ 0,107	Si 31 2,62 h β^- 1,5 γ (1266) σ 0,48	Si 32 101 a β^- 0,2	Si 33 6,18 s β^- 3,0; 5,8... γ 1848...	Si 34 2,77 s β^- 3,1... γ 1179; 429; 1608...	Si 35	N
	Isótonos							



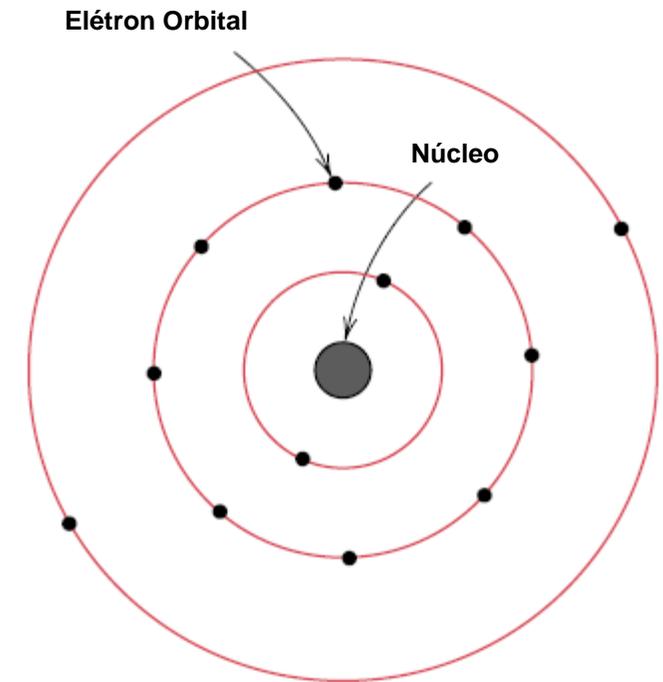
Ligações e Estruturas Atômicas

Estrutura Atômica – Modelos Atômicos

Modelo Atômico de Bohr

Modelo atômico no qual os elétrons circulam ao redor do núcleo atômico em orbitais e a posição de qualquer elétron é mais ou menos bem definido em termos do seu orbital.

Um importante princípio da mecânica quântica determina que os elétrons apresentam energias quantificadas e definidas. Um elétron pode mudar de energia, mas para isto deve mudar de nível absorvendo ou emitindo energia.



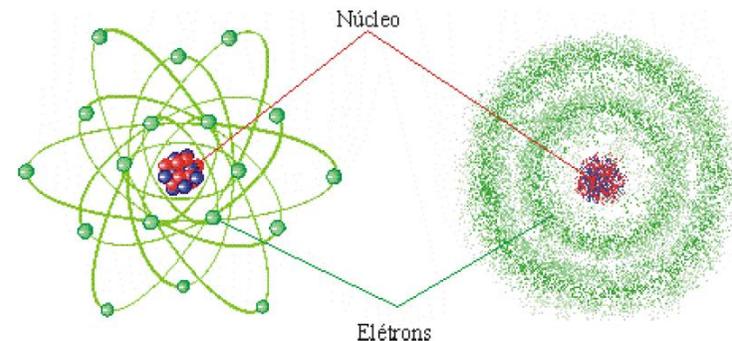


Estrutura Eletrônica:

Os elétrons se distribuem em camadas ou orbitais. Dois elétrons podem ocupar a mesma região no espaço, desde que tenham spins contrários (princípio da exclusão de Pauli).

Quanto mais elétrons um determinado átomo tiver, mais camadas ou mais complexa a distribuição será.

Cada orbital pode ser representado por um elétron se movendo por uma trajetória circular (ou elíptica) ou mesmo por uma nuvem envolvendo o núcleo do átomo e distribuída segundo um raio médio. Um orbital é definido como a região do espaço em torno do núcleo onde os elétrons tem grande probabilidade de estar localizados.





Energia de Ligação Eletrônica

Cada elétron está vinculado (ligado) ao núcleo pela atração entre a sua carga negativa e a carga positiva do núcleo e pelo acoplamento atrativo do seu momento magnético, apesar da fraca repulsão que existe entre os elétrons da mesma camada.

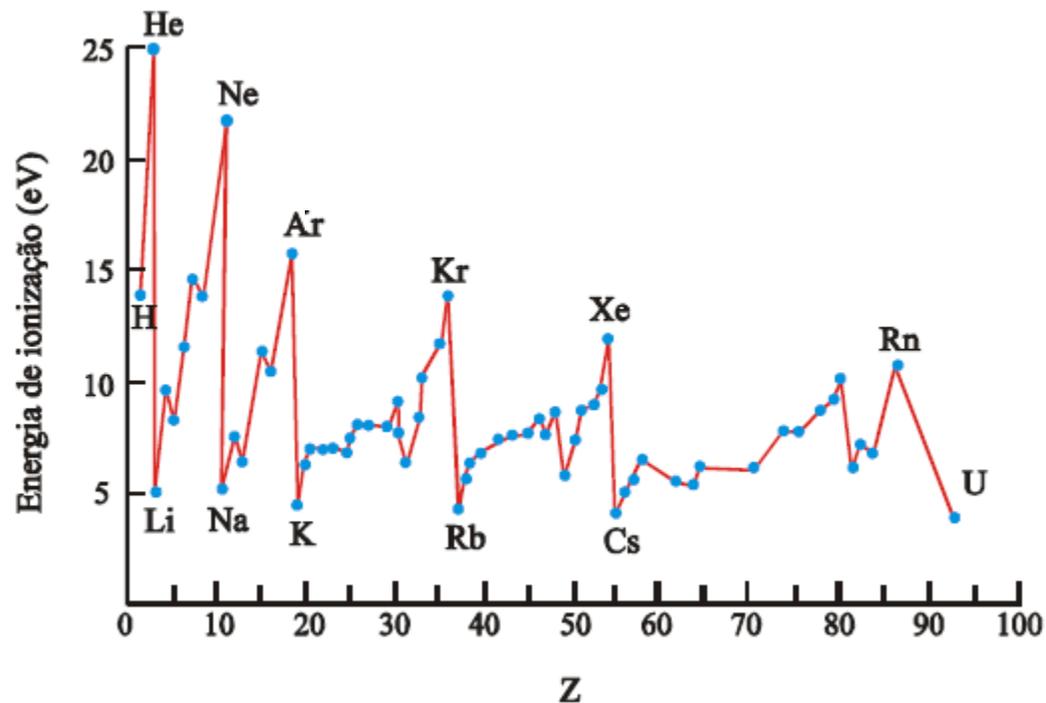
A energia deste balanço é denominada de energia de ligação do elétron ao núcleo. Em átomos de número atômico elevado, a energia de ligação dos elétrons mais próximos do núcleo é elevada, chegando a cerca de 100keV, enquanto dos elétrons mais externos é da ordem de apenas alguns eV.

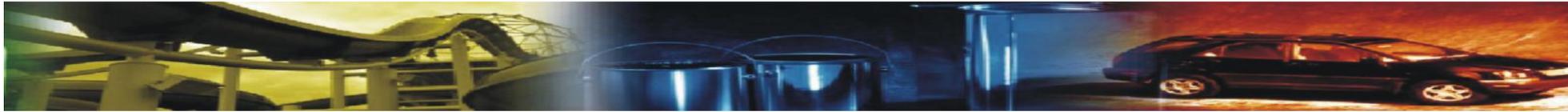
A energia de ligação dos elétrons presentes em camadas completas é maior, enquanto camadas incompletas apresentam menor energia de ligação.



Energia de Ligação Eletrônica

A energia necessária para remover os elétrons da última camada eletrônica é reduzida à medida que Z aumenta, uma vez que os elétrons estão mais distantes do núcleo (Z maior implica em raio atômico maior). Como estes elétrons estão mais distantes do núcleo, a força de atração nuclear sobre eles é mais fraca. Elementos com a última camada completa apresentam os maiores valores de energia de ionização.



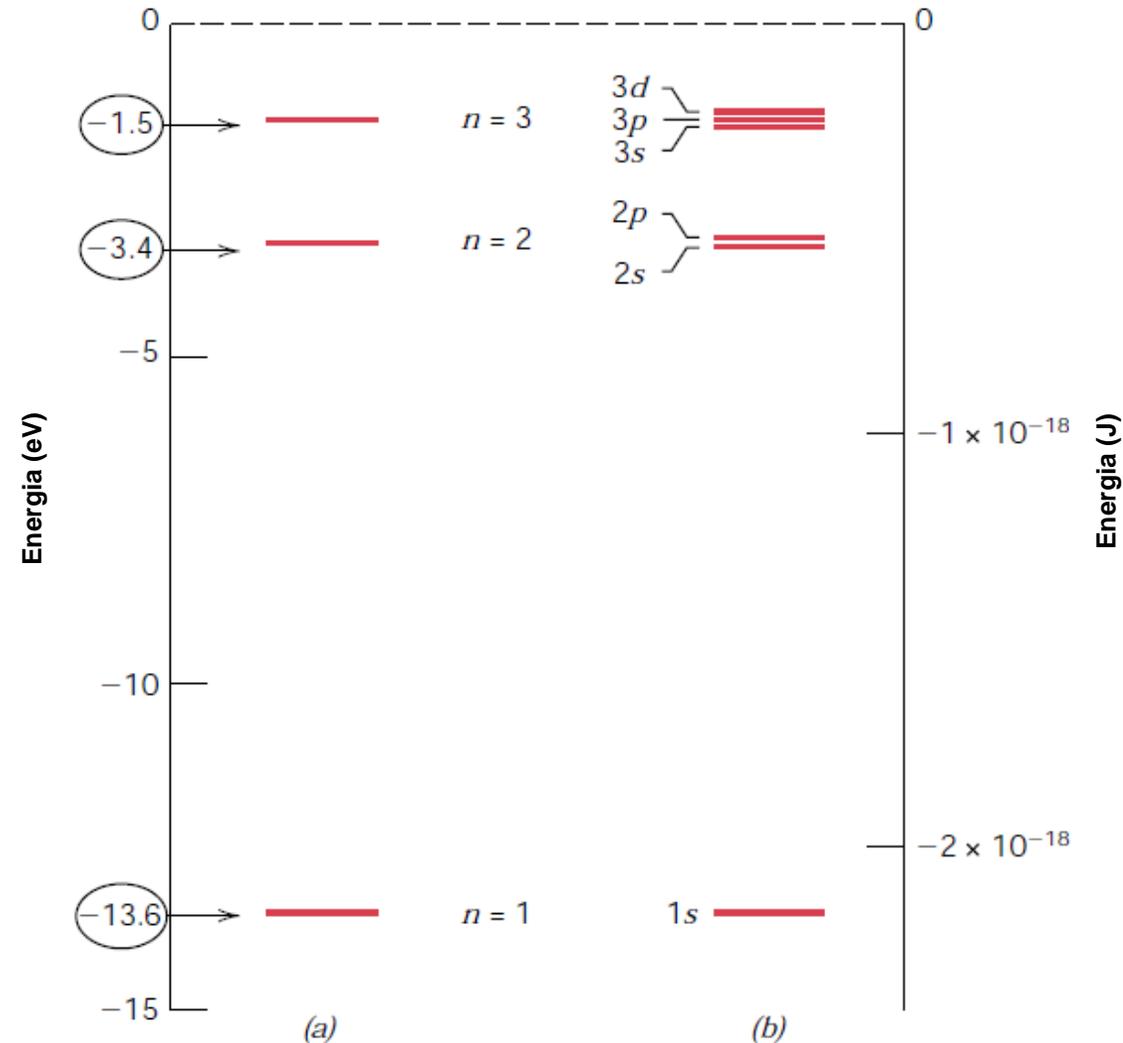


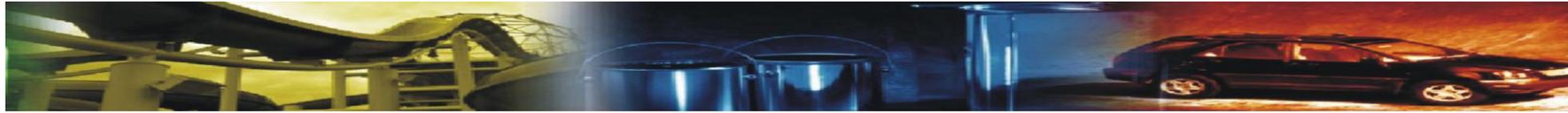
Ligações e Estruturas Atômicas

Modelo Atômico de Bohr

Figura mostrando os três primeiros estados de energia eletrônicos do átomo de Hidrogênio (-13,6 / -3,4 / -1,5 eV) (a).

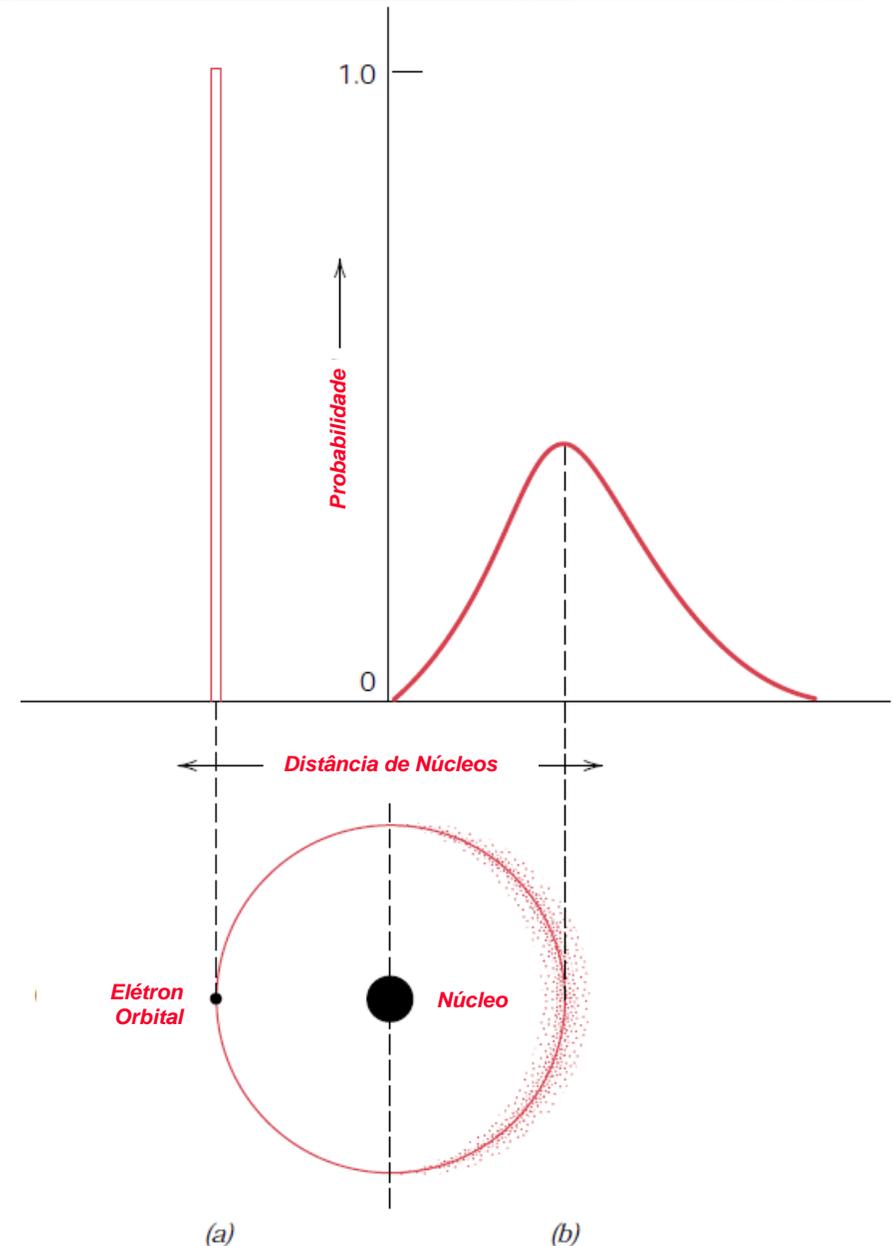
Estados de energia do elétron para as três primeiras camadas segundo o modelo ondulatorio (b).





Ligações e Estruturas Atômicas

O Modelo Atômico de Bohr apresenta algumas limitações (a) quando é usado para explicar alguns fenômenos envolvendo os elétrons, problema que foi resolvido pela adoção do modelo mecânico ondulatório, em que os elétrons exibem características de onda e partícula. Assim, passa-se a considerar a probabilidade de um elétron ocupar certas posições ao redor do núcleo atômico (b).



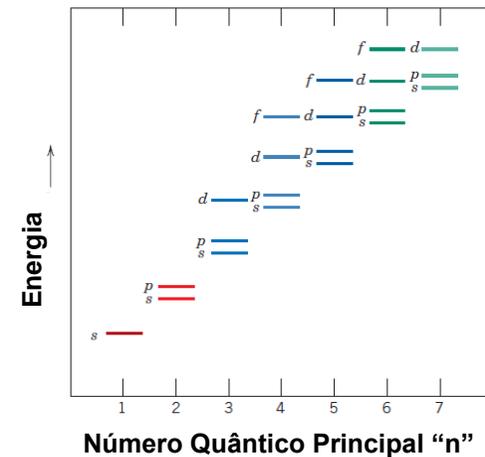


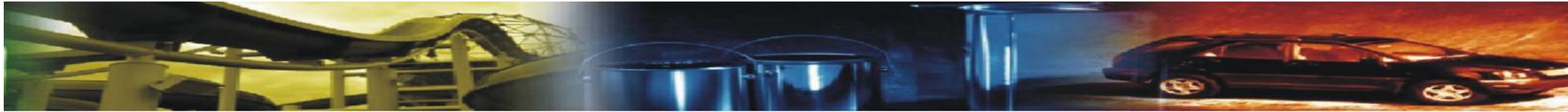
Números Quânticos

Cada elétron em um átomo é caracterizado por números quânticos. As camadas eletrônicas são especificadas por um número quântico principal “n” que assume valores inteiros a partir da unidade. As camadas são designadas com letras K, L, M, N, O e assim por diante, que correspondem, respectivamente, por valores de “n” de 1, 2, 3, 4, 5,...

O modelo de Bohr foi refinado pela mecânica ondulatória, dando origem a subcamadas dentro das camadas originais.

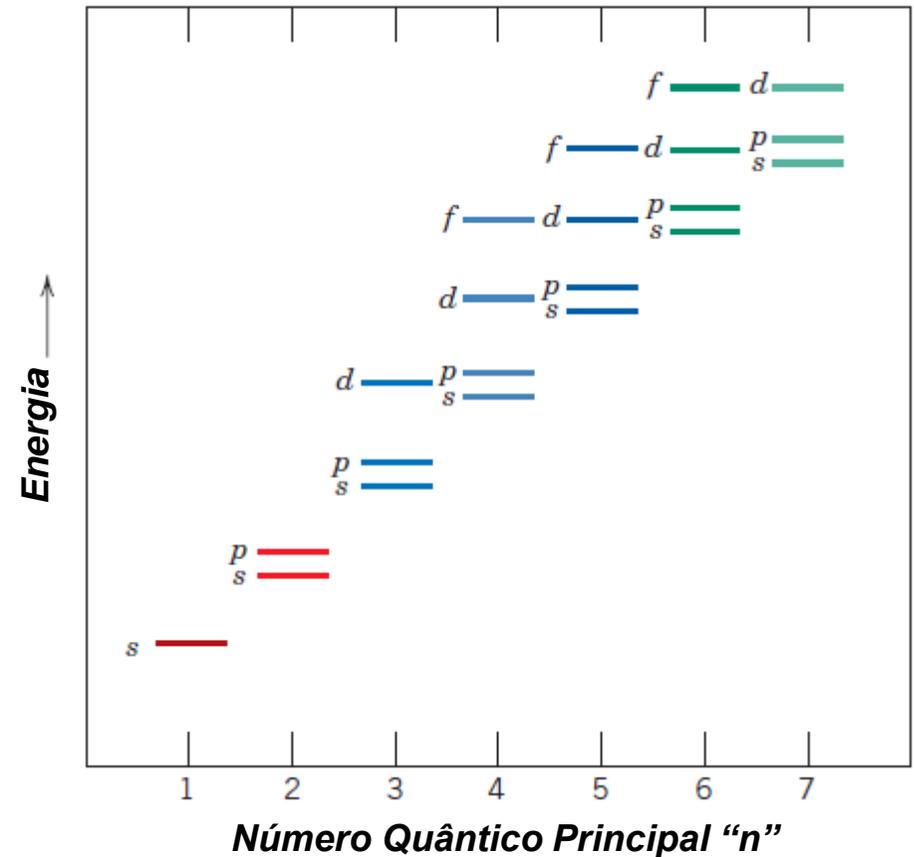
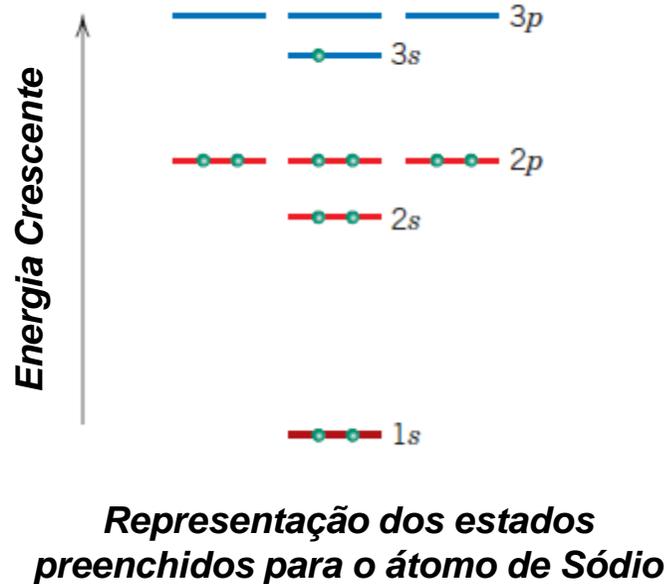
Número Quântico Principal “n”	Designação da Camada	Subcamadas	Número de Estados	Número de Elétrons	
				Por Subcamada	Por Camada
1	<i>K</i>	<i>s</i>	1	2	2
2	<i>L</i>	<i>s</i>	1	2	8
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	1	2	
3	<i>M</i>	<i>s</i>	1	2	18
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	1	2	
4	<i>N</i>	<i>s</i>	1	2	32
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	
		<i>g</i>	1	2	





Distribuição Eletrônica

Para a maioria dos átomos, os elétrons preenchem os estados eletrônicos de energias mais baixas nas camadas e subcamadas.





Distribuição Eletrônica – Elétrons de Valência

Os **elétrons de valência** são aqueles que ocupam a camada mais externa.

Os elétrons de valência participam na ligação atômica, de maneira a formar agrupamentos de átomos ou moléculas e muitas propriedades físicas e químicas estão baseadas nestes elétrons.

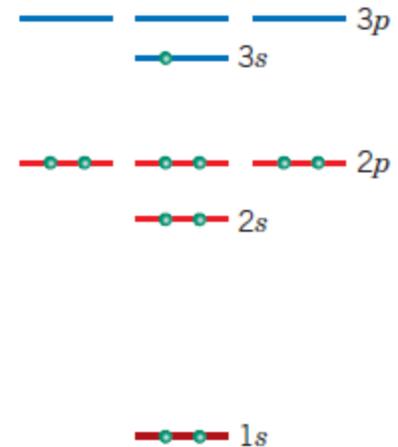
Átomos como Neônio, Criptônio, Argônio são conhecidos pela configuração eletrônica estável, ou seja, os estados energéticos dentro da camada mais externa estão preenchidos com elétrons, totalizando oito elétrons. A exceção é o Hélio, que apresenta apenas dois elétrons 1s.

Sódio

Na

11

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$





A tabela Periódica

Todos os elementos tem sido classificados de acordo com a configuração eletrônica na tabela periódica. Nela, os elementos estão posicionados em ordem crescente de número atômico e em sete linhas horizontais chamadas de períodos. O arranjo dos elementos é tal que todos os elementos que estão na mesma coluna ou grupo apresentam similar estrutura dos elétrons de valência, assim como propriedades químicas e físicas. Estas propriedades alteram gradual e sistematicamente à medida que movem horizontalmente através de cada período.

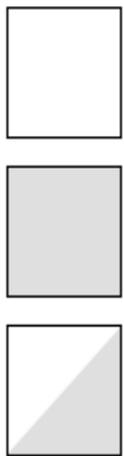
Os elementos posicionados no grupo 0, grupo mais à direita, são os gases inertes, que apresentam configurações eletrônicas estáveis e com as camadas eletrônicas preenchidas.

Os elementos dos grupos VIIA e VIA apresentam falta de um e dois elétrons nas camadas respectivamente, em relação às estruturas estáveis. Os elementos do grupo VIIA (F, Cl, Br, I e At) são chamados de Halogêneos.

IA		IIA		III A - VIII									IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0
1 H 1.0080		3 Li 6.939	4 Be 9.0122										5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.183
11 Na 22.990	12 Mg 24.312	III B	IV B	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.064	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948	
19 K 39.102	20 Ca 40.08	21 Sc 44.956	22 Ti 47.90	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.847	27 Co 58.933	28 Ni 58.71	29 Cu 63.54	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (99)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.40	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30	
55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	Rare earth series	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)	
87 Fr (223)	88 Ra (226)	Acti-nide series																

Key

- 29 ← Número Atômico
- Cu ← Símbolo
- 63.54 ← Peso Atômico



Série das Terras Raras

57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.35	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

Série dos Actínídeos

89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa (231)	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (249)	99 Es (254)	100 Fm (253)	101 Md (256)	102 No (254)	103 Lw (257)
-------------------	--------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------



A tabela Periódica

Os metais alcalino e alcalino-terrosos (Li, Na, K, Be, Mg, Ca, etc) são posicionados nos grupos IA e IIA tendo, respectivamente, um e dois elétrons em excesso em relação às configurações estáveis.

Os elementos dos três longos períodos IIIB até IIB são chamados de metais de transição, os quais possuem os estados eletrônicos **d** parcialmente preenchidos e, em alguns casos, um ou dois elétrons na próxima camada de mais elevada energia.

Os grupos IIIA, IVA e VA (B, Si, Ge, As, etc) mostram características que são intermediárias entre os metais e não metais como resultados da estrutura dos elétrons de valência.



A tabela Periódica

A maior parte dos elementos está classificada como metais. Estes são chamados **eletropositivos**, indicando que são capazes de ceder os seus poucos elétrons de valência, se tornando íons carregados positivamente.

IA												0					
1 H 2.1	IIA											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
3 Li 1.0	4 Be 1.5											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2	III B	IV B	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7					
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9																



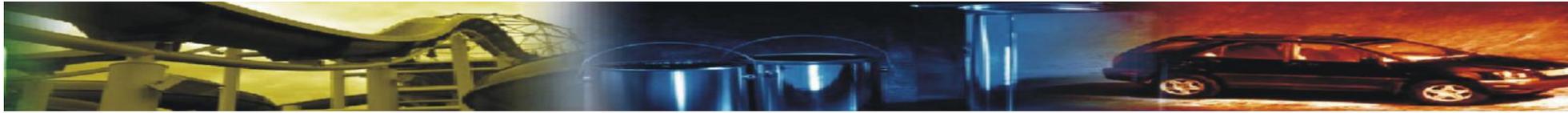
A tabela Periódica

Por outro lado, os elementos localizados à direita da tabela periódica são **eletronegativos**, ou seja, prontamente recebem elétrons formando íons carregados negativamente. Outras vezes estes elementos compartilham elétrons com outros tipos de átomos.

IA 1 H 2.1																	0 2 He -
3 Li 1.0	IIA 4 Be 1.5											III A 5 B 2.0	IV A 6 C 2.5	V A 7 N 3.0	VIA 8 O 3.5	VII A 9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															

eletronegatividade ↑

eletronegatividade →



Ligações Atômicas em Sólidos

Forças e Energias de Ligação

O entendimento de muitas propriedades físicas pode ser prevista pelo conhecimento das forças de ligação que mantêm os átomos juntos. Uma abordagem simplificadora pode ser feita a partir da **análise das ligações entre dois átomos desde uma proximidade grande até uma distância infinita.**

- em grandes distâncias as forças podem ser desconsideradas.
- à medida que os átomos se aproximam exercem forças uns sobre os outros.

Estas forças podem ser de atração ou de repulsão! E a magnitude depende da distância entre os átomos.



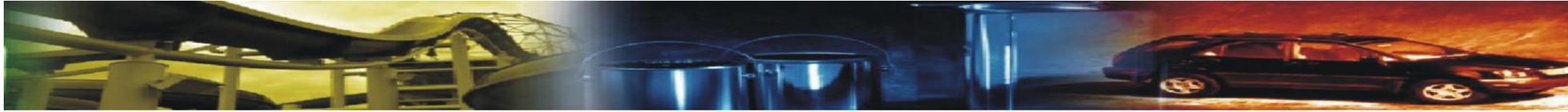
Ligações Atômicas em Sólidos

Forças e Energias de Ligação

- A força de atração depende do tipo de ligação e varia com a distância interatômica.
- Quando a última camada de dois átomos começa a se sobrepor, surgem forças de repulsão.

A força de ligação (F_N) é então a resultante entre a força de Atração e a de repulsão:

$$F_N = F_A + F_R$$



Ligações Atômicas em Sólidos

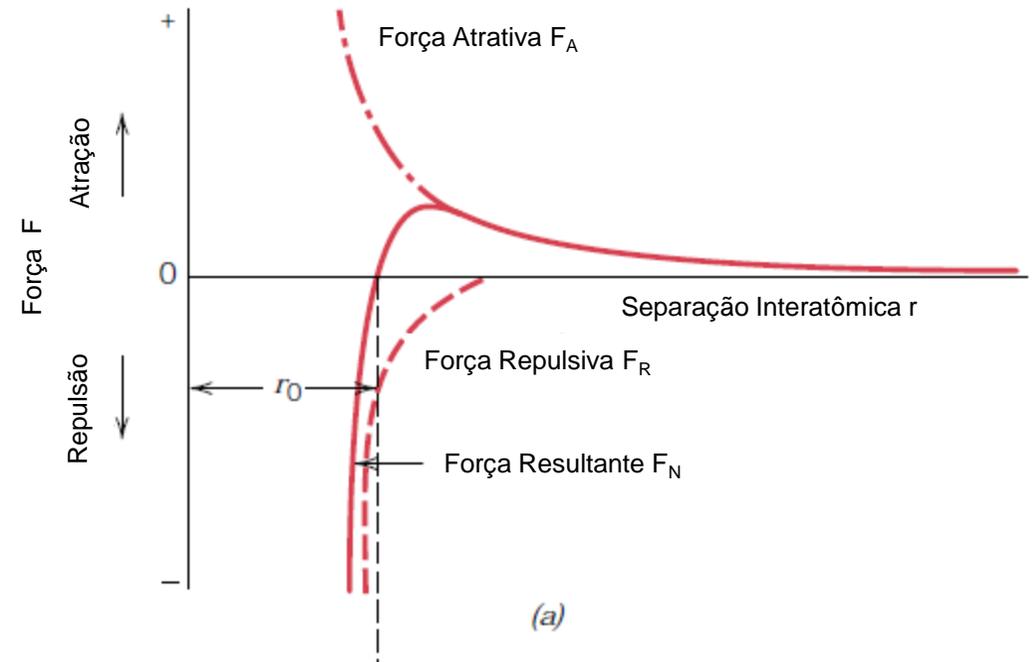
Forças e Energias de Ligação

Dependência entre a força de Atração, Repulsão e Força de Ligação.

Quando existe equilíbrio entre as forças de atração e repulsão, a força resultante de ligação é zero.

$$F_A + F_R = 0$$

Nesta condição, estabelece-se a distância interatômica de equilíbrio, ou r_0 .



Neste caso, os centros do átomos estarão separados por uma distância r_0 . Para diversos átomos esta distância é de 3nm.



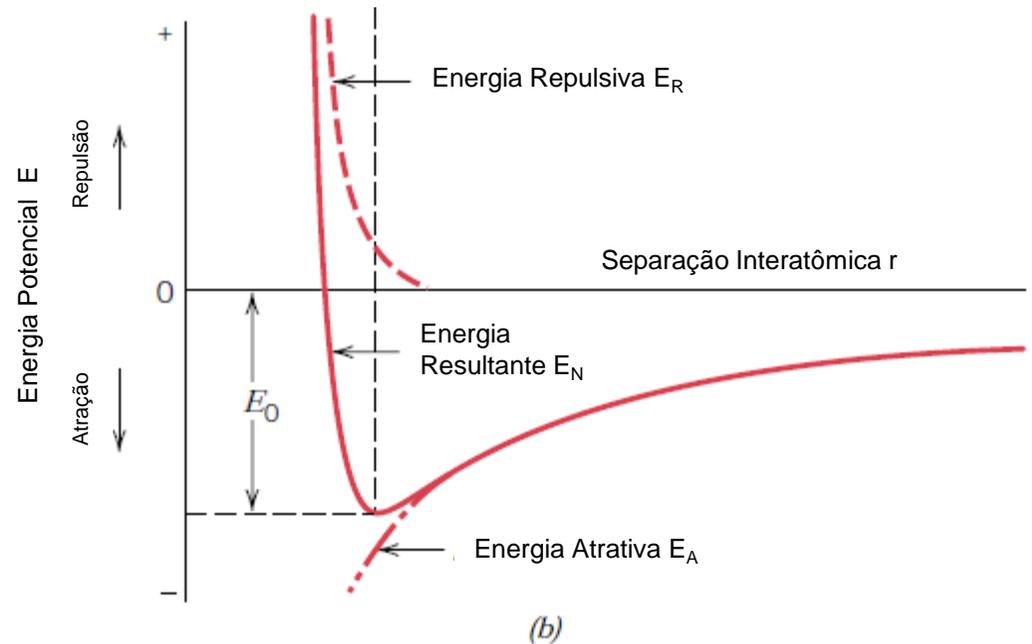
Ligações Atômicas em Sólidos

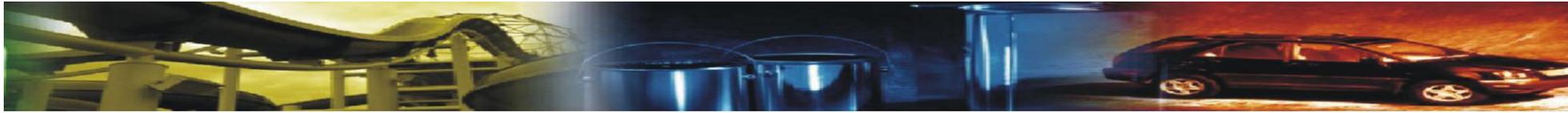
Forças e Energias de Ligação

Dependência entre a Energia Potencial E conforme a variação da energia de Atração e Energia de Repulsão.

Quando analisamos a Energia potencial ao invés da força, vemos que a distância de equilíbrio r_0 é aquela que desenvolve a menor energia.

Nesta condição, estabelece-se a Energia mínima E_0 e representa a energia necessária para separar estes dois átomos até uma distância infinitamente grande.





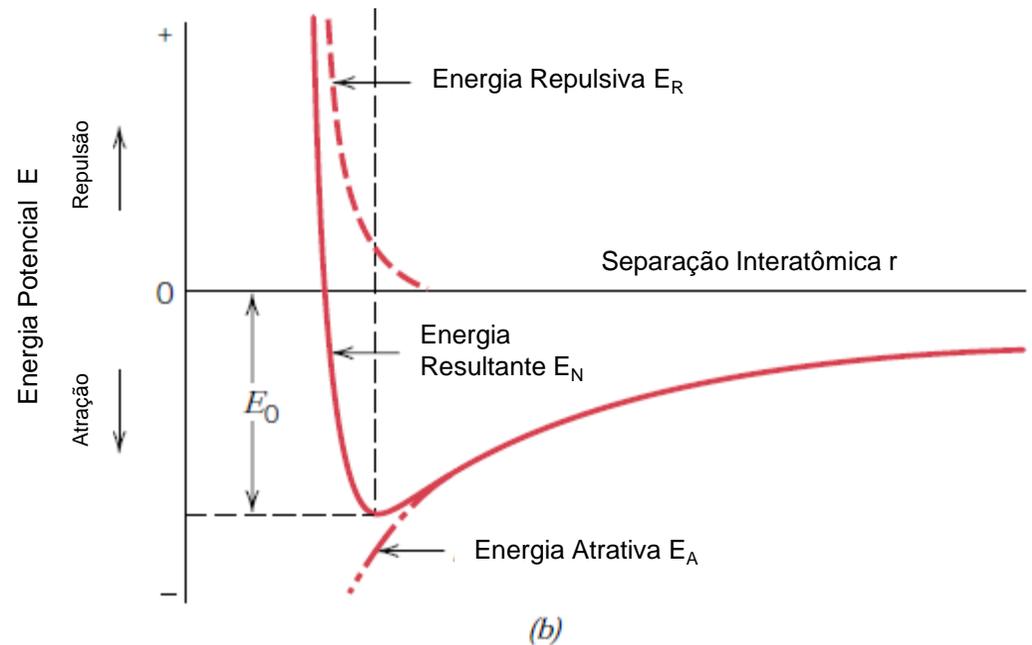
Ligações Atômicas em Sólidos

Forças e Energias de Ligação

Dependência entre a Energia Potencial E conforme a variação da energia de Atração e Energia de Repulsão.

Quando consideramos diferentes átomos e tipos de ligação química, **temos curvas diferentes de energia resultante.**

Quando consideramos, por exemplo, uma deformação que envolve o distanciamento de átomos no regime elástico, **podemos entender que o módulo de elasticidade de cada material será diferente, pela razão antes exposta.**





Ligações Atômicas em Sólidos

Algumas Propriedades x Exemplos:

Temperatura de Fusão:

Quanto maior o valor de $|E_0|$, maior a temperatura de fusão de um material, já que há necessidade de rompimento de ligações para a mudança de estado físico (sólido \rightarrow líquido).

Por outro lado, pequenos valores de $|E_0|$, são típicos de materiais gasosos e líquidos apresentam energias de ligação intermediária.

Coeficiente de Expansão

O coeficiente de expansão linear de um material é dependente da forma da curva E_0 versus r_0 .



Ligações Atômicas em Sólidos

Os tipos primários de ligação em sólidos são: iônicas, Covalentes e Metálicas.

Para cada um destes tipos, a ligação envolve os elétrons de valência e o tipo de ligação depende da estrutura eletrônica dos átomos.

De forma geral, cada um destes tipos de ligação visam assumir estruturas eletrônicas estáveis como a dos gases nobres, com a última camada apresentando oito elétrons.

Forças de origem secundária ou física são ainda encontradas em muitos materiais sólidos. Estas forças são mais fracas que os tipos de ligações principais e nenhuma influencia as propriedades físicas dos materiais.

Ligações Primárias: iônicas, Covalentes, Metálicas

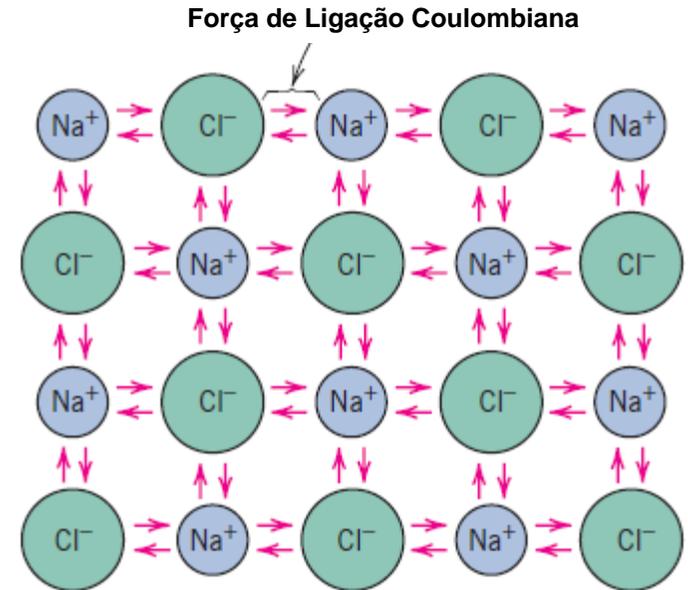
Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.



Ligações Atômicas em Sólidos

Ligações Iônicas

Uma das mais fáceis de descrever e visualizar. São sempre encontradas em compostos formados por metais e não-metais, situados horizontalmente nas extremidades da tabela periódica. Os átomos metálicos facilmente cedem os elétrons de valência aos elementos não-metálicos. Neste caso, os átomos das duas espécies adquirem a configuração estável ou tal como a dos gases inertes e ainda os átomos passam a ser ions.



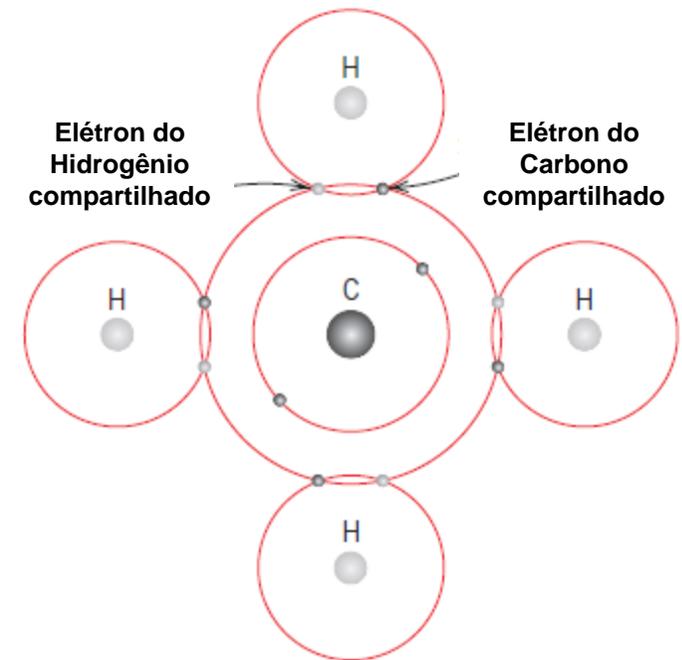


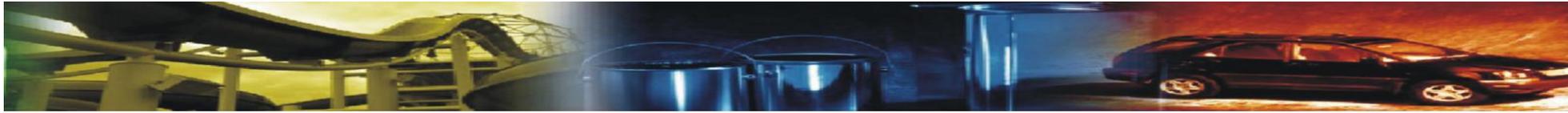
Ligações Atômicas em Sólidos

Ligações Covalentes

Nas ligações covalentes, a configuração estável é obtida pelo compartilhamento dos elétrons entre átomos adjacentes. Estes elétrons pertencerão a ambos.

Este tipo de ligação aparece em não-metais como H_2 , Cl_2 , F_2 , H_2O , HNO_3 , assim como em sólidos tais como o Diamante (Carbono), Silício, Germânio e compostos formados por elementos do lado direito da tabela periódica, como o Gálio-Arsênio, Índio-Antimônio e Carbetos de Silício.

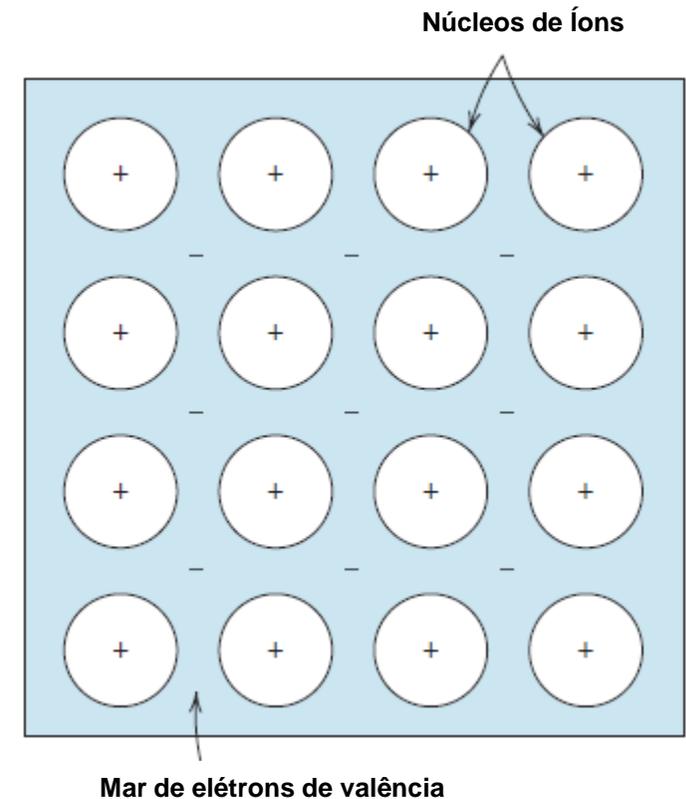




Ligações Atômicas em Sólidos

Ligações Metálicas

As ligações metálicas são encontradas nos metais e ligas metálicas. Os metais tem entre um e três elétrons de valência e dentro deste modelo, os elétrons de valência não estão ligados a um átomo específico e estão livres para o movimento entre os átomos que compõe o material, tal como uma nuvem eletrônica. Os elétrons que não são os de valência e os núcleos atômicos formam o que usualmente se chama de núcleos iônicos, com carga positiva igual em magnitude à carga total dos elétrons de valência por átomo.





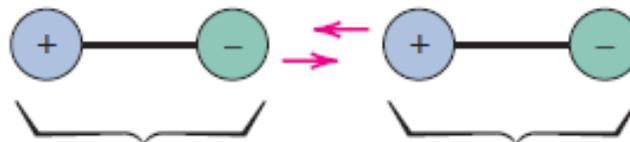
Ligações Atômicas em Sólidos

Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.

Van der Waals

As ligações secundárias de van der Waals ou ligações físicas, são fracas em comparação às ligações primárias, ficando na ordem de 10kJ/mol ou $0,1\text{eV/átomo}$. Estas forças aparecem entre os átomos ou moléculas, entretanto, a sua presença é obscura quando existem ligações primárias de maior intensidade.

As ligações secundárias são visualizadas entre átomos de gases inertes que apresentam estruturas eletrônicas estáveis e entre moléculas ligadas covalentemente.



Dipolos atômicos ou moleculares



Ligações Atômicas em Sólidos

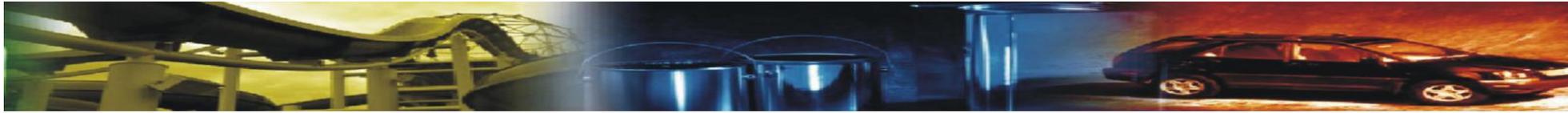
Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.

Dipolo

Forças de ligação secundária aparecem a partir de dipolos atômicos ou moleculares. Na prática, dipolos existem quando existe alguma separação de regiões positivas ou negativas em um átomo ou molécula. As ligações são o resultado de forças Coulombianas entre uma extremidade positiva e a extremidade negativa de uma molécula adjacente.

Estas ligações **podem ocorrer entre:**

- Dipolos Induzidos
- Dipolos Induzidos e Moléculas Polares
- Moléculas Polares

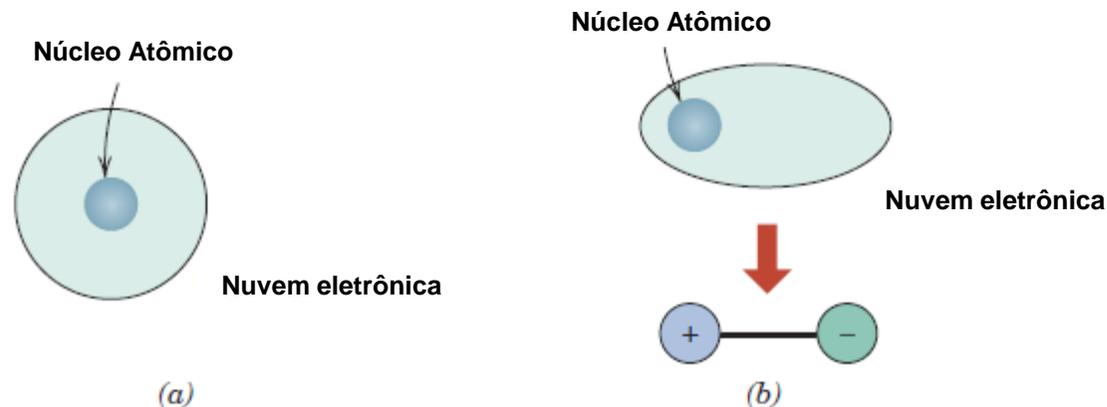


Ligações Atômicas em Sólidos

Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.

Ligações Dipolo Induzidas por Flutuação

Um dipolo pode ser criado em um átomo ou molécula que é eletricamente simétrica (a). A própria vibração atômica ou molecular pode induzir a criação de um dipolo instantâneo num átomo (b). Quando este desbalanço causa o mesmo efeito em um átomo vizinho, cria-se um dipolo, tipo de ligação de van der Waals.





Ligações Atômicas em Sólidos

Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.

Ligações Dipolo Induzidas por Flutuação

A liquefação ou até mesmo a solidificação de gases inertes, além de outras moléculas eletricamente neutras e simétricas, tais como H_2 ou Cl_2 , são realizadas devido a este tipo de interação.

As temperaturas de fusão e ebulição são extremamente baixas em materiais em que houver predomínio de ligações tipo dipolo. Dentre todos os tipos de ligações intermoleculares, estas são as mais fracas.



Ligações Atômicas em Sólidos

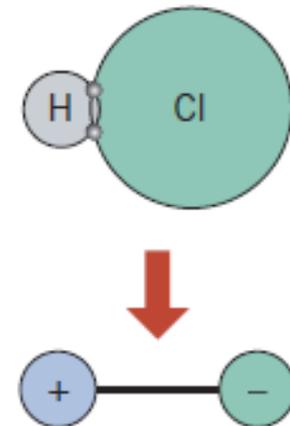
Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.

Ligações Molécula Polar x Dipolo Induzido

Momentos de Dipolo permanentes existem em algumas moléculas devido ao arranjo assimétrico dos íons positivos ou negativos. Tais moléculas são ditas **Moléculas Polares (exemplo: HCl)**.

Estas moléculas podem induzir dipolos em moléculas adjacentes não polares e uma ligação se formará como resultado das forças de atração entre as moléculas.

Estas ligações desenvolverão magnitude de força maior que a de Dipolo Induzido por Flutuação.





Ligações Atômicas em Sólidos

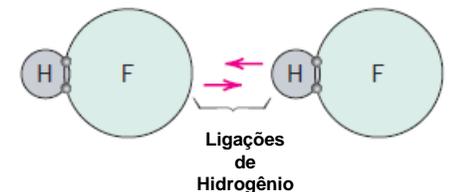
Ligações Secundárias: Van der Waals: Dipolo Induzido por Flutuação, Dipolo Induzido - Moléculas Polares, Dipolo Permanente.

Ligações Dipolo Permanente

As ligações de van der Waals existirão entre moléculas polares adjacentes. O mais forte tipo de ligação secundária – a ligação do Hidrogênio – é um caso especial de ligação de molécula polar. Ocorre entre moléculas em que o Hidrogênio está Covalentemente ligado ao Flúor, formando a molécula HF, ao Oxigênio na água H_2O e ao Nitrogênio na Amônia NH_3 .

Em cada ligação H-F, H-O ou H-N, o único elétron do Hidrogênio é compartilhado com o outro átomo. Desta forma, a extremidade do Hidrogênio está carregada positivamente, como um próton desprotegido que fica circundado por elétrons.

São as pontes de H formadas entre átomos negativos.





Ligações Atômicas e Propriedades

Tipo de Ligação	Substância	Energia de Ligação		Temperatura de Fusão (°C)
		KJ/ mol	eV / átomo, Íon / Molécula	
Iônica	NaCl	640	3.3	801
	MgO	1000	5.2	2800
Covalente	Si	450	4.7	1410
	C (Diamante)	713	7.4	>3550
Metálica	Hg	68	0.7	-39
	Al	324	3.4	660
	Fe	406	4.2	1538
	W	849	8.8	3410
Van der Waals	Ar	7.7	0.08	-189
	Cl ₂	31	0.32	-101
Hidrogênio	NH ₃	35	0.36	-78
	H ₂ O	51	0.52	0



Ligações Atômicas e Propriedades

Materiais com ligações iônicas apresentam:

- Elevadas temperaturas de fusão,
- Elevada Dureza e Fragilidade,
- Isolantes Elétricos e Térmicos.

Materiais com ligações Covalentes apresentam:

a) ligações fortes como a do Diamante, que resultam em:

- Elevadas temperaturas de fusão (3550°C) e elevada Dureza, ou

b) Ligações fracas como a do Bismuto, que resultam em:

- Baixas temperaturas de fusão (270°C).

* Ambos são isolantes elétricos e térmicos.



Ligações Atômicas e Propriedades

Materiais com ligações Metálicas apresentam:

- Temperaturas de fusão desde baixas até elevadas.
- Baixa dureza e alta ductilidade,
- Bons condutores elétricos e térmicos, como consequência dos elétrons livres.

Materiais Moleculares com ligações de van der Waals / Hidrogênio apresentam:

- Baixas temperaturas de fusão,
- Baixa Dureza.



FIM