Física dos Materiais – 4300502

1º Semestre de 2016

Instituto de Física
Universidade de São Paulo

Professor: **Luiz C C M Nagamine**
E-mail: **nagamine@if.usp.br**
Fone: **3091.6877**
homepage**http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=10070**

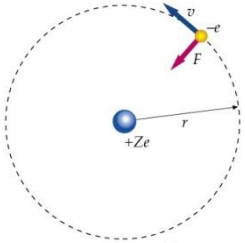
18 de fevereiro

Física dos Materiais

Modelo atômico de Bohr

1) Núcleo com Z prótons + neutrons

2) Eletrosfera com ~Z elétrons em órbitas (ou camadas eletrônicas), apenas uma variável (n => energia)



$$F = \frac{kZe^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

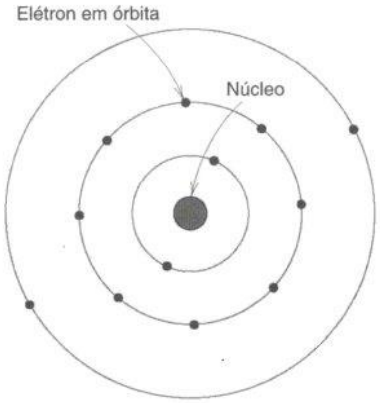


Fig. 2.1 Representação esquemática do átomo de Bohr.

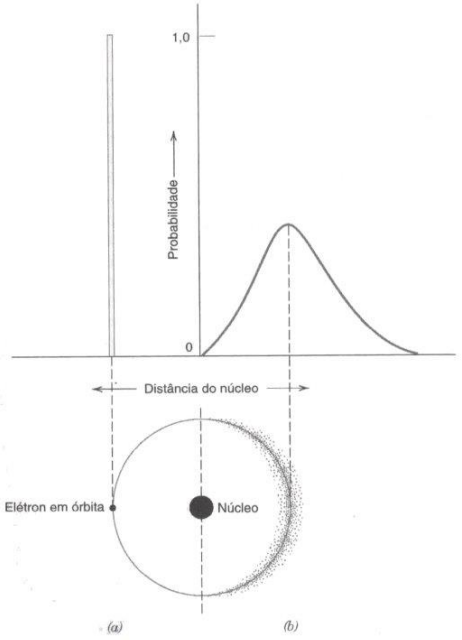


Fig. 2.3 Comparação entre os modelos atômicos de (*a*) Bohr e (*b*) mecânico-ondulatório em termos de distribuição eletrônica. (Adaptado de Z. D. Jastrzebski, *The Nature and Properties of Engineering Materials*, 3. ed., p. 4. Copyright © 1987 de John Wiley & Sons, New York.

Modelo Atômico de Bohr - Postulados:

1. na eletrosfera os elétrons não se encontram em qualquer posição: órbitas fixas e com energia definida. As órbitas são chamadas camadas eletrônicas, representadas pelas letras K, L, M, N, O, P e Q a partir do núcleo, ou níveis de energia representados pelos números 1, 2, 3, 4...;

2. os elétrons ao se movimentarem numa camada eletrônica não absorvem nem emitem energia;

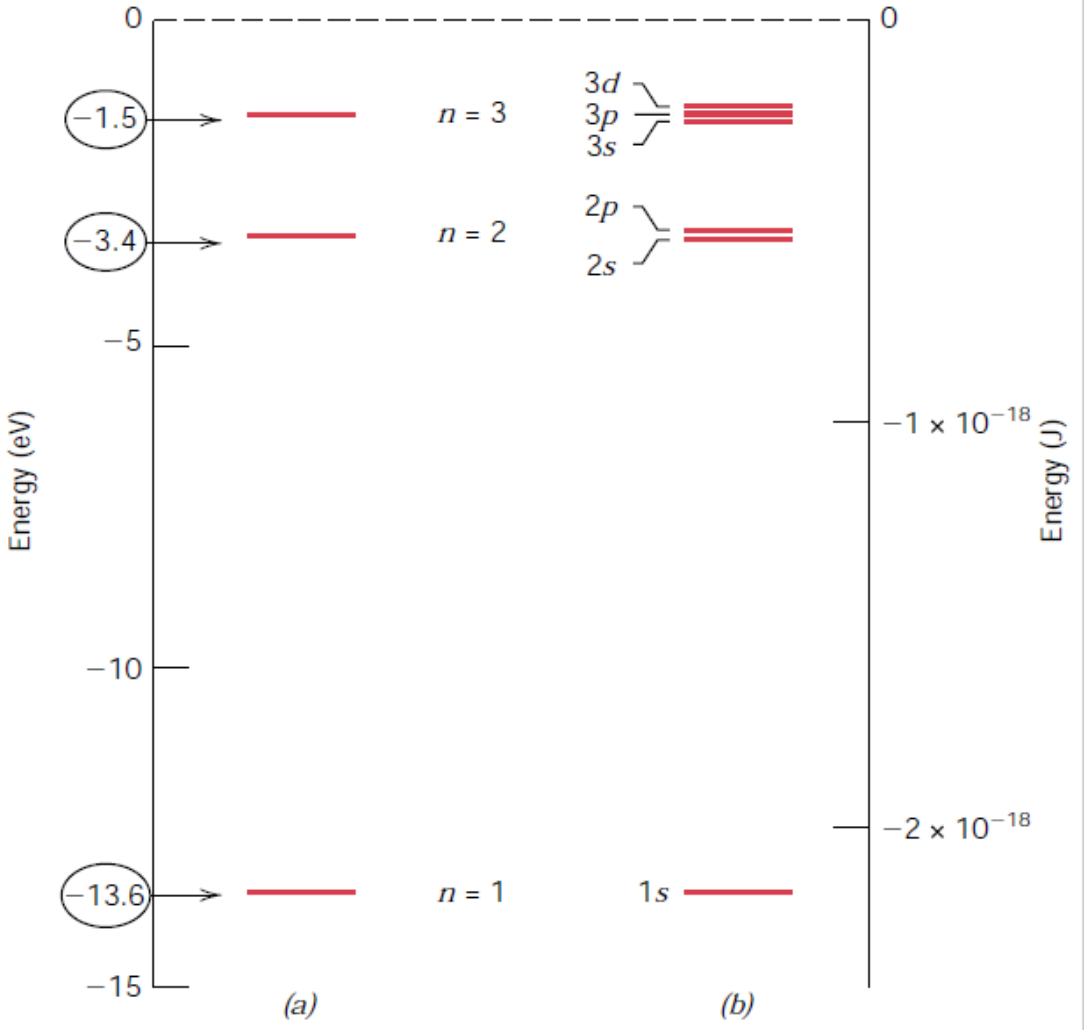
3. os elétrons de um átomo tendem a ocupar as camadas eletrônicas mais próximas do núcleo, isto é, as que apresentam menor energia;

4. um átomo está no estado fundamental quando seus elétrons ocupam as camadas menos energéticas;

5. quando um átomo recebe energia, o elétron pode saltar para uma camada mais externa (mais energética). Nessas condições o átomo se torna instável. Dizemos que o átomo se encontra num estado excitado;

Estrutura atômica

Modelo ondulatório (quântico)

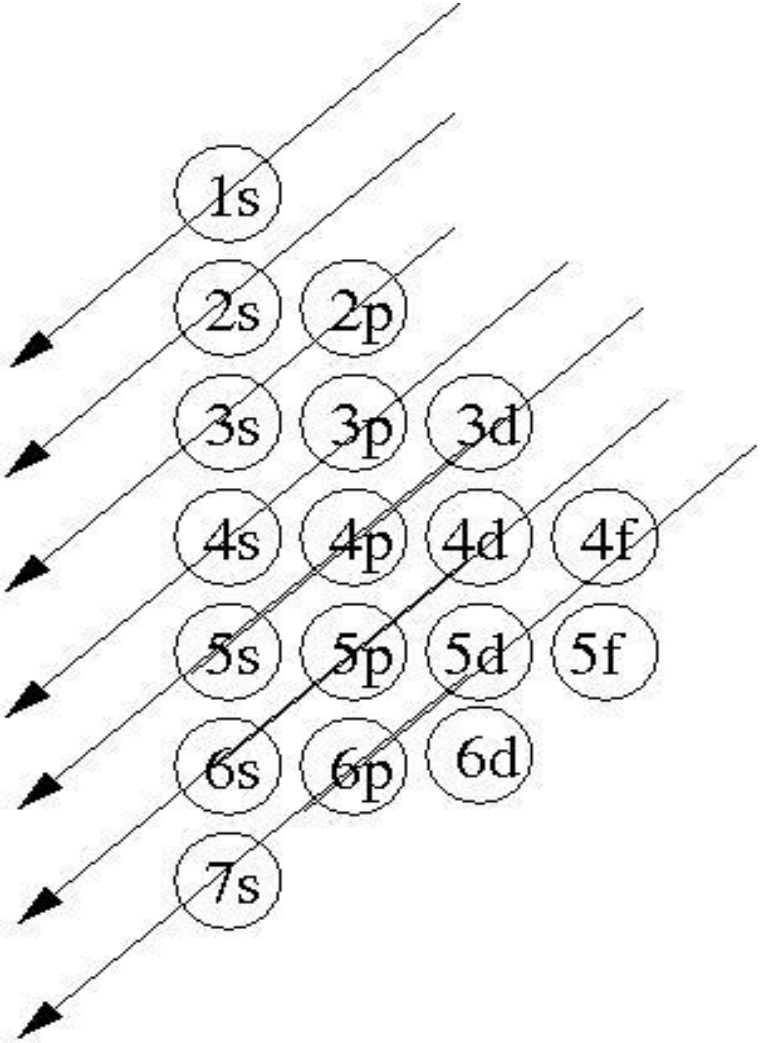


1) Núcleo com Z prótons + neutrons

2) Eletrosfera com ~Z elétrons em orbitais (com camadas e sub-camadas eletrônicas), quatro números quânticos n, l, m_l e m_s (envolvendo energia, momento angular, projeção do momento angular e projeção do spin)

Seqüência de níveis Energéticos

É importante conhecer a seqüência segundo a qual os níveis energéticos são preenchidos. A figura ao lado constitui um auxílio útil. Vêja-se pela figura que a seqüência de preenchimento dos níveis energéticos é: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, etc.



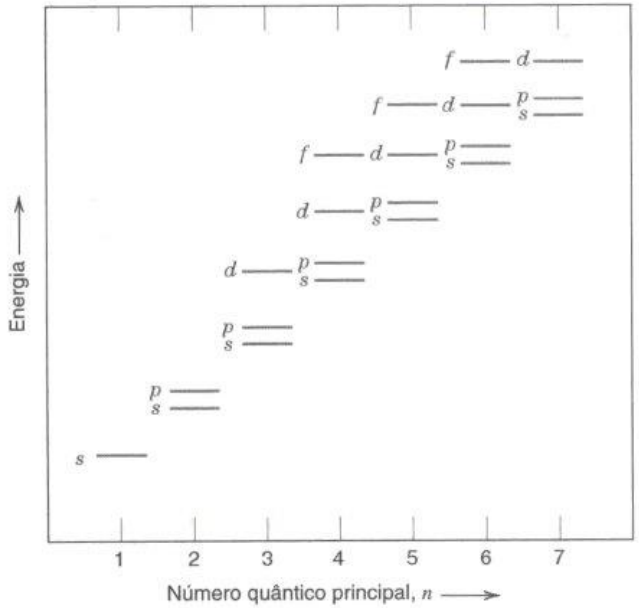


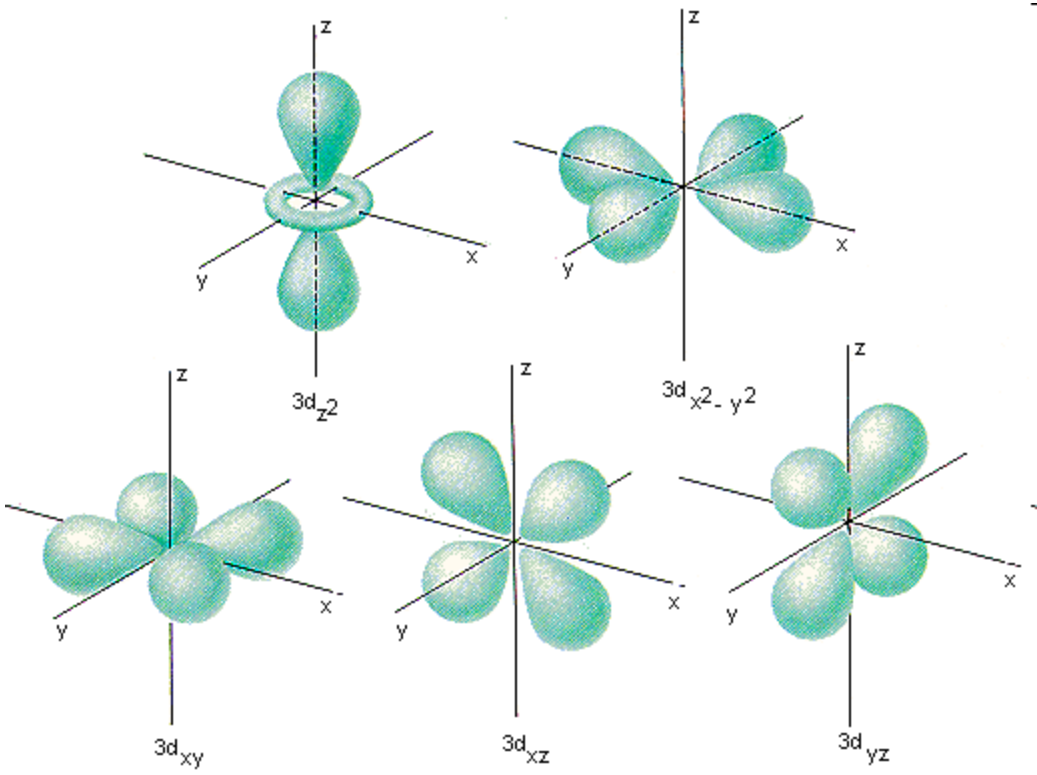
Fig. 2.4 Representação esquemática das energias relativas dos elétrons para as várias camadas e subcamadas. (Extraído de K. M. Ralls, T. H. Courtney e J. Wulff, *Introduction to Materials Science and Engineering*, p. 22. Copyright © 1976 de John Wiley & Sons, New York. Re-

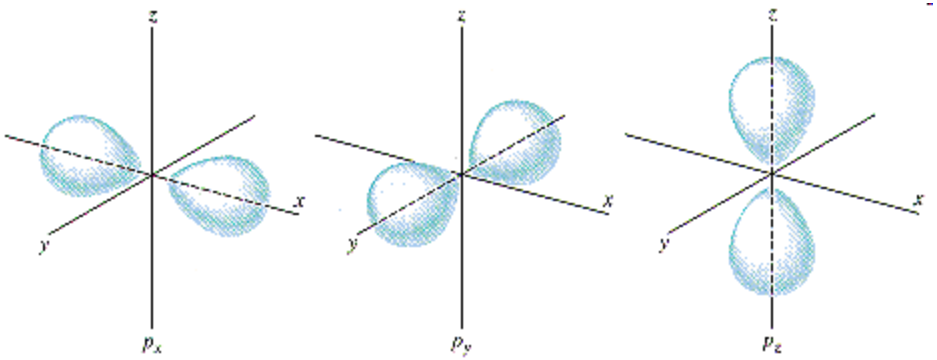
Estrutura atômica

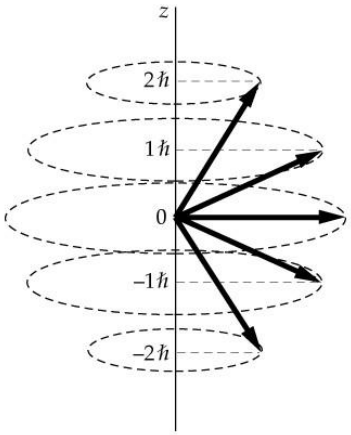
Modelo ondulatório (quântico)

Eletrosfera com ~Z elétrons em orbitais (com camadas e sub-camadas eletrônicas), quatro números quânticos n, l, m_l e m_s (envolvendo energia, momento angular, projeção do momento angular e projeção do spin)

$\ell = 0$
s







Os Níveis Eletrônicos de Energia

- Orbitais: correspondem aos estados individuais que podem ser ocupados por um elétron em um átomo. Cada orbital no átomo acomoda no máximo dois elétrons.

- Spin Eletrônico: é uma propriedade dos elétrons. Quando há dois elétrons no mesmo orbital, seus spins estão em direções opostas.

- Subcamadas: Os orbitais em um átomo são agrupados em conjuntos chamados subcamadas. Em átomos no seu estado fundamental quatro tipos de subcamadas são ocupadas por elétrons, designadas por s, p, d e f, que consistem em 1, 3, 5 e 7 orbitais, respectivamente.

- Camadas: Um agrupamento de subcamadas é denominado camada. Todos os elétrons em uma dada camada estão a mesma distância média do núcleo. Dois métodos equivalentes são normalmente utilizados para a designação das camadas: K, L, M, N etc.; isto é, a primeira camada (n=1) é denominada camada K, a segunda camada (n=2) é L, e assim por diante.

O Princípio da Exclusão de Pauli

Para definir um orbital são necessários três números quânticos n, l e m. Cada orbital pode conter dois elétrons, desde que eles tenham spins opostos. Um número quântico adicional é necessário para definir o spin de um elétron no orbital. Portanto, são necessários quatro números quânticos para definir a energia de um elétron num átomo. O Princípio da Exclusão de Pauli diz que os dois elétrons de um orbital não podem ter iguais os quatro números quânticos.

Para mostrar a posição dos elétrons num átomo, usam-se os símbolos 1s, 2s, 2p, etc. para indicar o nível energético principal e o subnível. Um índice indica o número de elétrons em cada série de orbitais. Por exemplo, o hidrogênio contém 1 elétron, o que se indica por $1s^1$. No hélio, o nível 1s contém 2 elétrons, o que se indica por $1s^2$

As estruturas eletrônicas podem ser escritas como abaixo:

H=$1s^1$

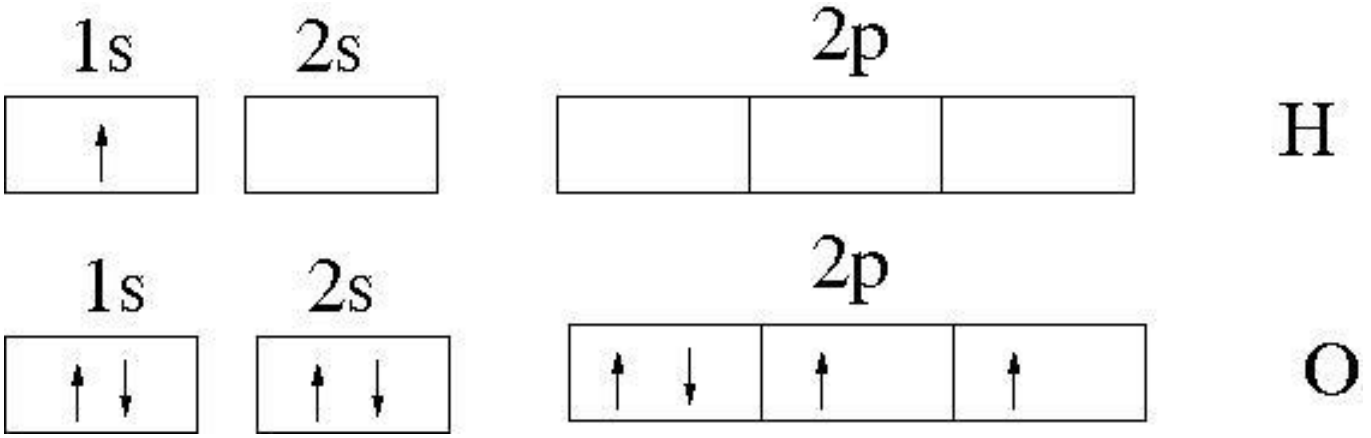
He=$1s^2$

Li=$1s^2$ $2s^1$

Be=$1s^2$ $2s^2$

B=$1s^2$ $2s^2$ $2p^1$

Uma maneira alternativa de representar a estrutura eletrônica de um átomo é representar os orbitais por quadrados e os elétrons por pequenas setas:



name	symbol	orbital meaning	range of values	value example
principal quantum number	n	shell	$1 \leq n$	$n = 1, 2, 3...$
azimuthal quantum number (angular momentum)	ℓ	subshell (s orbital is listed as 0, p orbital as 1 etc.)	$(0 \leq \ell \leq n - 1)$	for $n = 3$: $\ell = 0, 1, 2\ (s, p, d)$
magnetic quantum number, (projection of angular momentum)	m_ℓ	energy shift (orientation of the subshell's shape)	$-\ell \leq m_\ell \leq \ell$	for $\ell = 2$: $m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$
spin projection quantum number	m_s	spin of the electron (-1/2 = counter-clockwise, 1/2 = clockwise)	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	for an electron, either: $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Tabela 2.1 O Número de Estados Eletrônicos Disponíveis em Algumas Camadas e Subcamadas Eletrônicas

Número Quântico Principal n	*Designação da Camada*	*Subcamadas*	*Número de Estados*	*Número de Elétrons*	
				Por Subcamadas	*Por Camada*
1	*K*	*s*	1	2	2
		s	1	2	
2	*L*	*p*	3	6	8
		s	1	2	
3	*M*	*p*	3	6	18
		d	5	10	
		s	1	2	
4	*N*	*p*	3	6	32
		d	5	10	
		f	7	14	

Exercício: Dar a configuração eletrônica para Fe^{3+}.
Fe: Z=26

Estrutura atômica

Tabela 2.2 Uma Listagem das Configurações Eletrônicas Esperadas Para Alguns dos Elementos Comuns[a]

Elemento	*Símbolo*	*Número Atômico*	*Configuração Eletrônica*
Hidrogênio	H	1	$1s^1$
Hélio	He	2	$1s^2$
Lítio	Li	3	$1s^2 2s^1$
Berílio	Be	4	$1s^2 2s^2$
Boro	B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
Carbono	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Nitrogênio	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
Oxigênio	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Flúor	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Neônio	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Sódio	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Magnésio	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Alumínio	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Silício	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Fósforo	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Enxofre	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Cloro	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Argônio	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Potássio	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
Cálcio	Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
Escândio	Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
Titânio	Ti	22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
Vanádio	V	23	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
Cromo	Cr	24	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
Manganês	Mn	25	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$
Ferro	Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
Cobalto	Co	27	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$
Níquel	Ni	28	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$
Cobre	Cu	29	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
Zinco	Zn	30	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
Gálio	Ga	31	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
Germânio	Ge	32	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
Arsênio	As	33	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$
Selênio	Se	34	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$
Bromo	Br	35	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$
Criptônio	Kr	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

[a]Quando alguns elementos se ligam covalentemente, eles formam ligações híbridas *sp*. Isto é especialmente verdadeiro para os átomos de C, Si e Ge.

Elétrons de valência

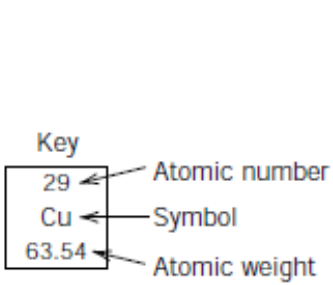
Algumas subversões !

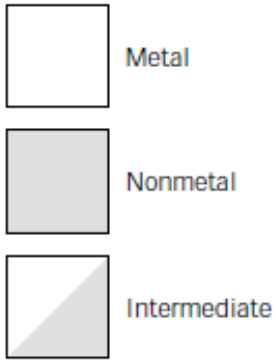
Alcalinos

Alcalinos terrosos

Halogênios

Metais de transição





IA							VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0
1 H 1.0080	IIA																2 He 4.0026
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	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB				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															

Rare earth series	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
Actinide series	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)

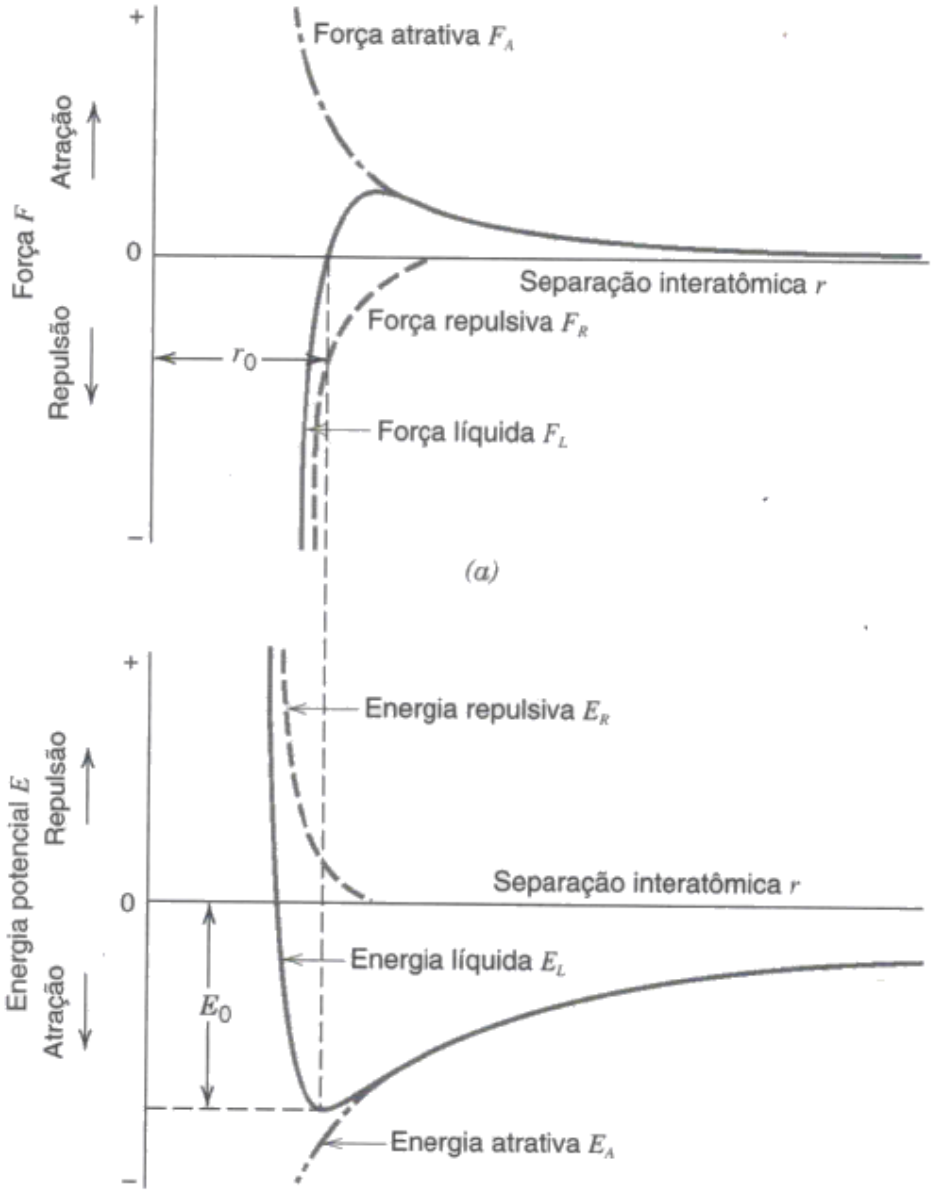
FIGURE 2.6 The periodic table of the elements. The numbers in parentheses are the atomic weights of the most stable or common isotopes.

Eletronegatividade

IA																	0
1 H 2,1	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He –
3 Li 1,0	4 Be 1,5											5 B 2,0	6 C 2,5	7 N 3,0	8 O 3,5	9 F 4,0	10 Ne –
11 Na 0,9	12 Mg 1,2	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	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															

Fig. 2.7 Os valores de eletronegatividade para os elementos. (Adaptado de Linus Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, 3.ª ed. Copyright 1939 e 1940, copyright da 3ª edição © 1960, de Cornell University. Usado sob permissão da editora, Cornell University Press.)

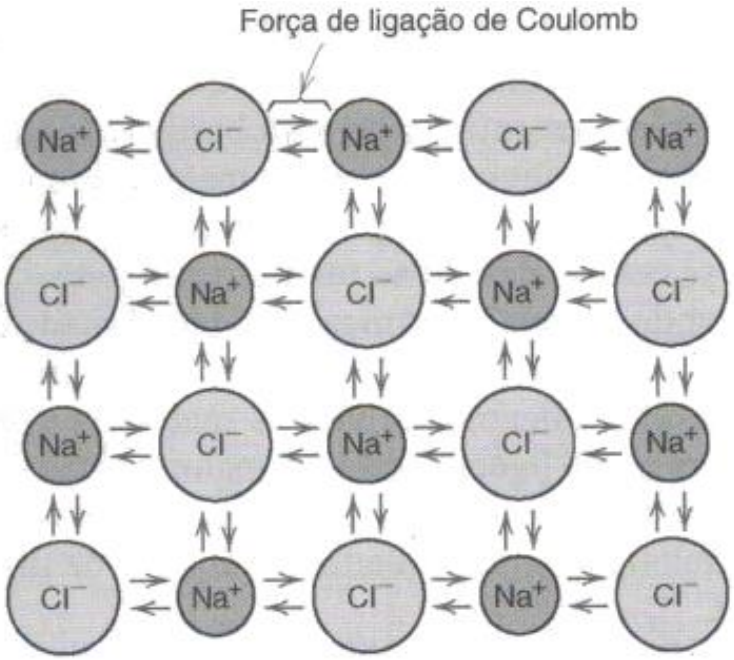
Ligações químicas



Força e Energia Potencial entre dois átomos vizinhos.

Ligações químicas

Ligação iônica



Representação esquemática da ligação iônica no (NaCl).

Íons esféricamente simétricos (ligações não direcionais)

Força atrativa coulombiana (muito forte)

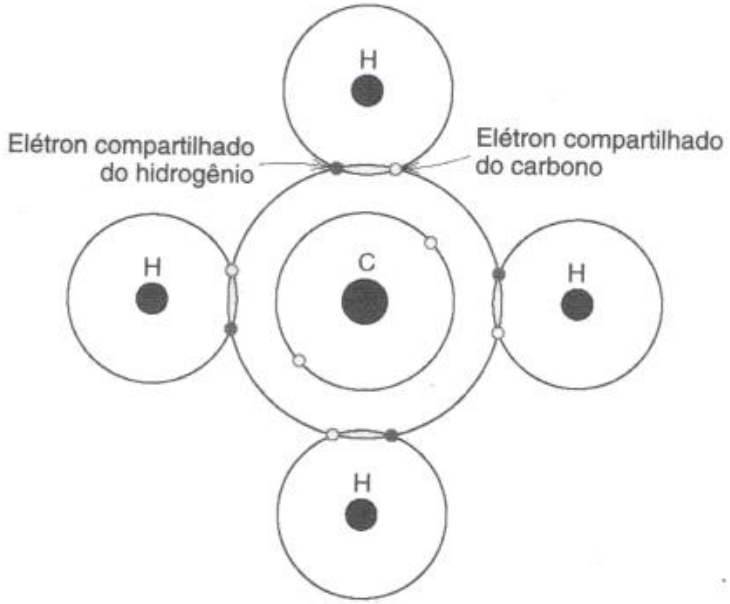
Alta energia de ligação → $E_A = -\frac{A}{r}$

$$E_R = \frac{B}{r^n}$$

com n~ 8

Ligações químicas

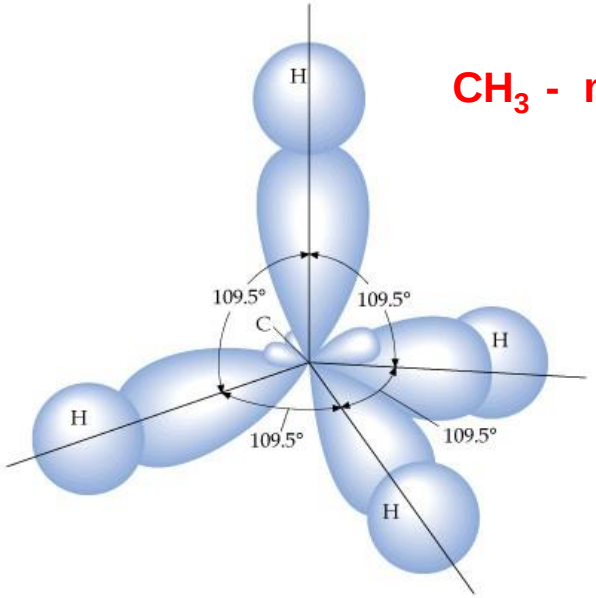
Ligação covalente



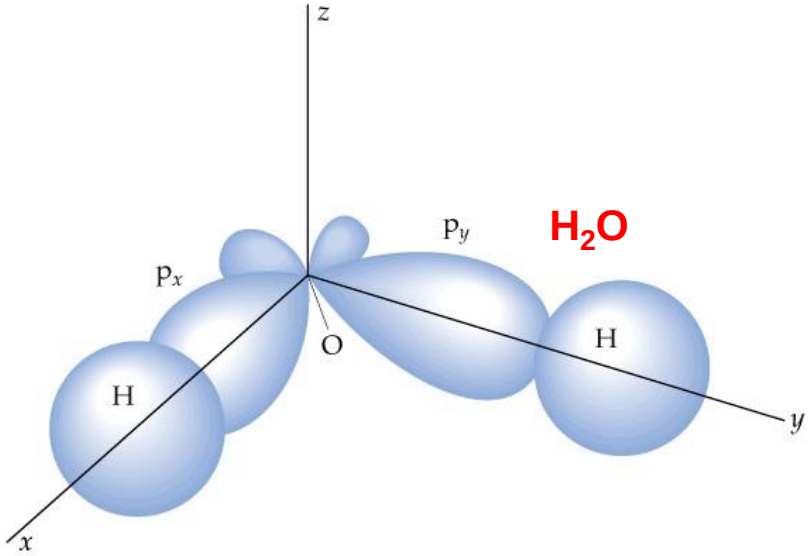
Representação esquemática da ligação covalente em molécula de metano (CH_4).

- Átomos ficam polarizados
- Ligações altamente direcionais (associadas aos orbitais)
- Cargas elétricas distribuidas entre os átomos
- Compartilhamento de elétrons de valência entre vizinhos
- Baixa energia de ligação (em geral)

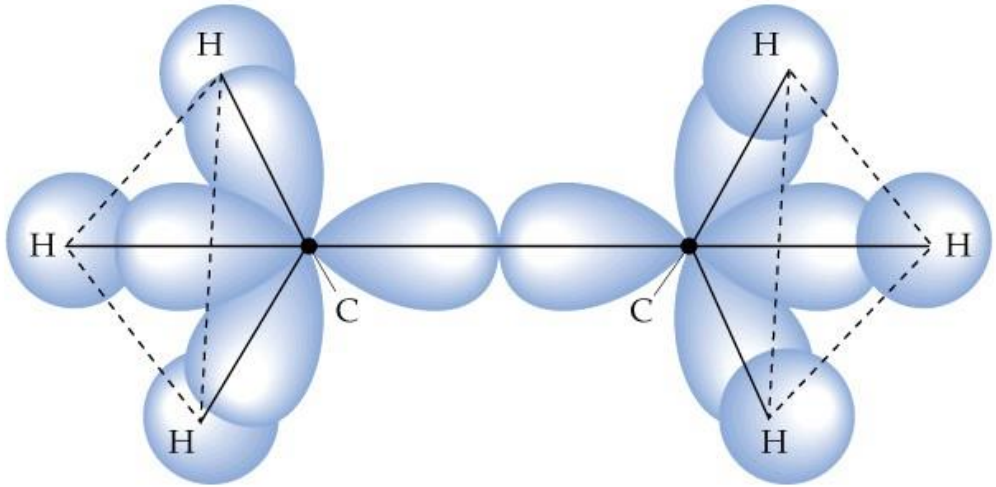
Alguns exemplos



CH_3 - metano



H_2O



C_2H_6 - etano

$$= \left\{1 - \exp\left[-0,25\left(X_a - X_b\right)^2\right]\right\} \times 100$$

Carater iônico ou covalente ?

% Carater iônico $= \{1 - exp[-0,25(X_a - X_b)^2]\} \times 100$

Onde Xa e Xb são as eletronegatividades dos componentes

IA												IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0
1 H 2,1	IIA						VIII			IB	IIB						2 He –
3 Li 1,0	4 Be 1,5											5 B 2,0	6 C 2,5	7 N 3,0	8 O 3,5	9 F 4,0	10 Ne –
11 Na 0,9	12 Mg 1,2	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB						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															

Fig. 2.7 Os valores de eletronegatividade para os elementos. (Adaptado de Linus Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, 3.ª ed. Copyright 1939 e 1940, copyright da 3ª edição © 1960, de Cornell University. Usado sob permissão da editora, Cornell University Press.)

Ligações químicas

Ligação metálica

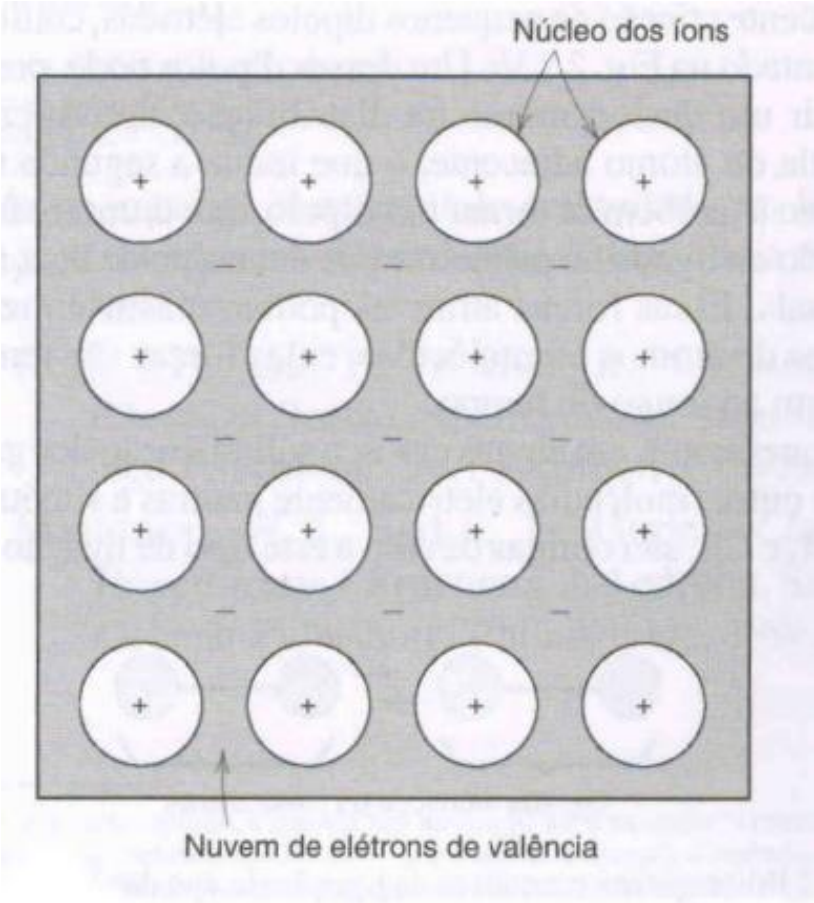


Ilustração esquemática da ligação metálica.

- Átomos cedem elétrons (de valência) para o coletivo
- Ligações não direcionais
- Elétrons livres se movem entre os átomos
- Variada energia de ligação
- Alta condutividade elétrica e térmica

Física dos Materiais

Ligações químicas

Tabela 2.3 Energias de Ligação e Temperaturas de Fusão para Várias Substâncias

Tipo de Ligação	*Substância*	*Energia de Ligação* *kJ/mol (kcal/mol)*	*Energia de Ligação* *eV/Átomo, Íon, Molécula*	*Temperatura de Fusão (°C)*
Iônica	NaCl	640 (153)	3,3	801
	MgO	1000 (239)	5,2	2800
Covalente	Si	450 (108)	4,7	1410
	C (diamante)	713 (170)	7,4	>3550
	Hg	68 (16)	0,7	−39
	Al	324 (77)	3,4	660
Metálica	Fe	406 (97)	4,2	1538
	W	849 (203)	8,8	3410
	Ar	7,7 (1,8)	0,08	−189
van der Waals	Cl_2	31 (7,4)	0,32	−101
	NH_3	35 (8,4)	0,36	−78
Hidrogênio	H_2O	51 (12,2)	0,52	0

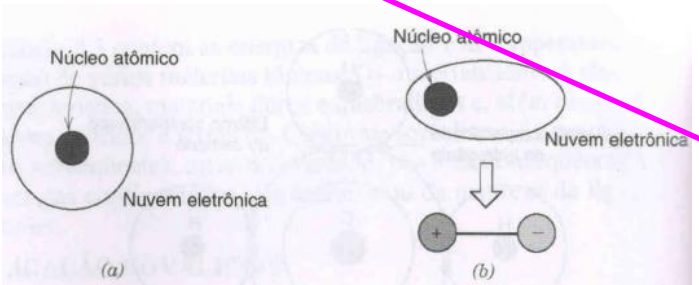
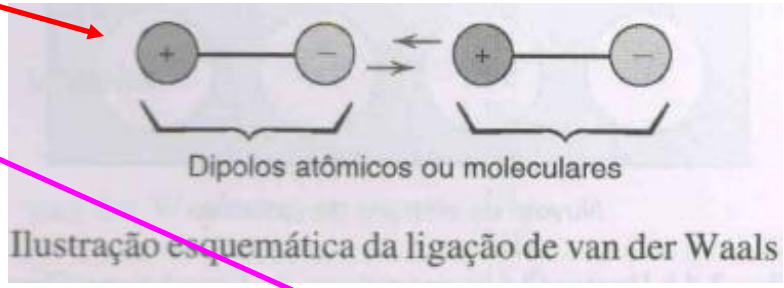


Fig. 2.13 Representações esquemáticas de (*a*) um átomo eletricamente simétrico e (*b*) um dipolo atômico induzido.



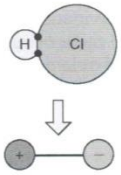


Fig. 2.14 Representação esquemática de uma molécula polar de cloreto de hidrogênio (HCl).