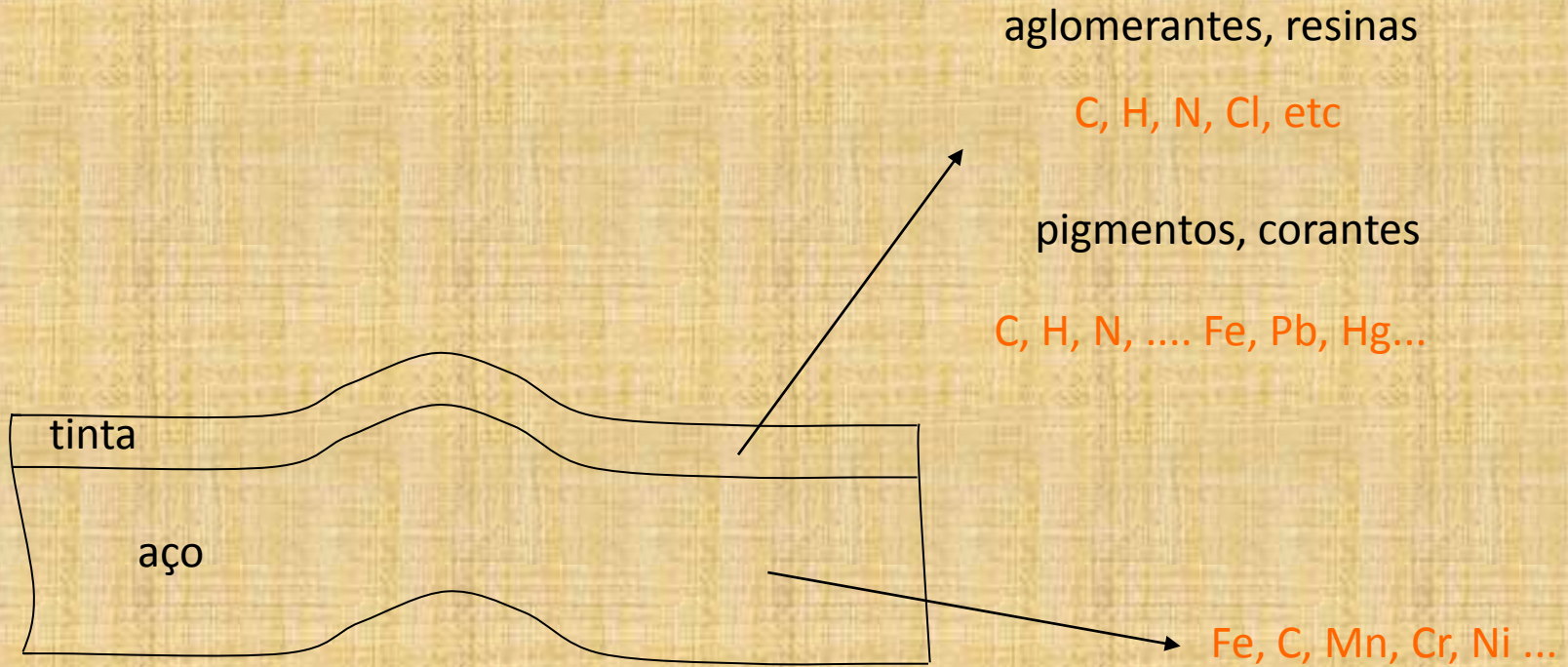


**Curso de Caracterização de Bens Culturais  
CABENS  
2011**

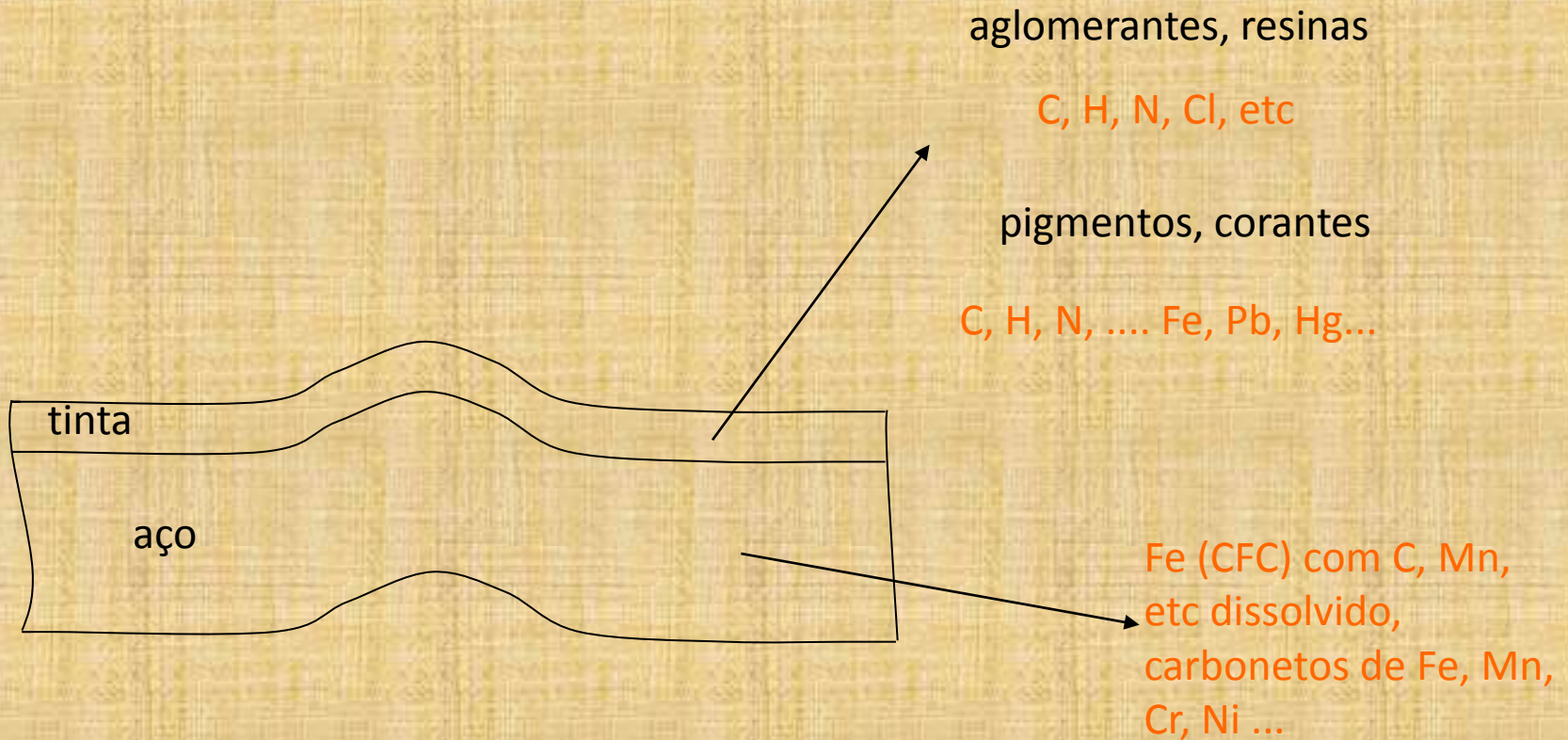
**Ligações Químicas e Características  
dos materiais**

Augusto Camara Neiva  
LABENS (Laboratório de Caracterização de Bens Culturais) – Poli - USP

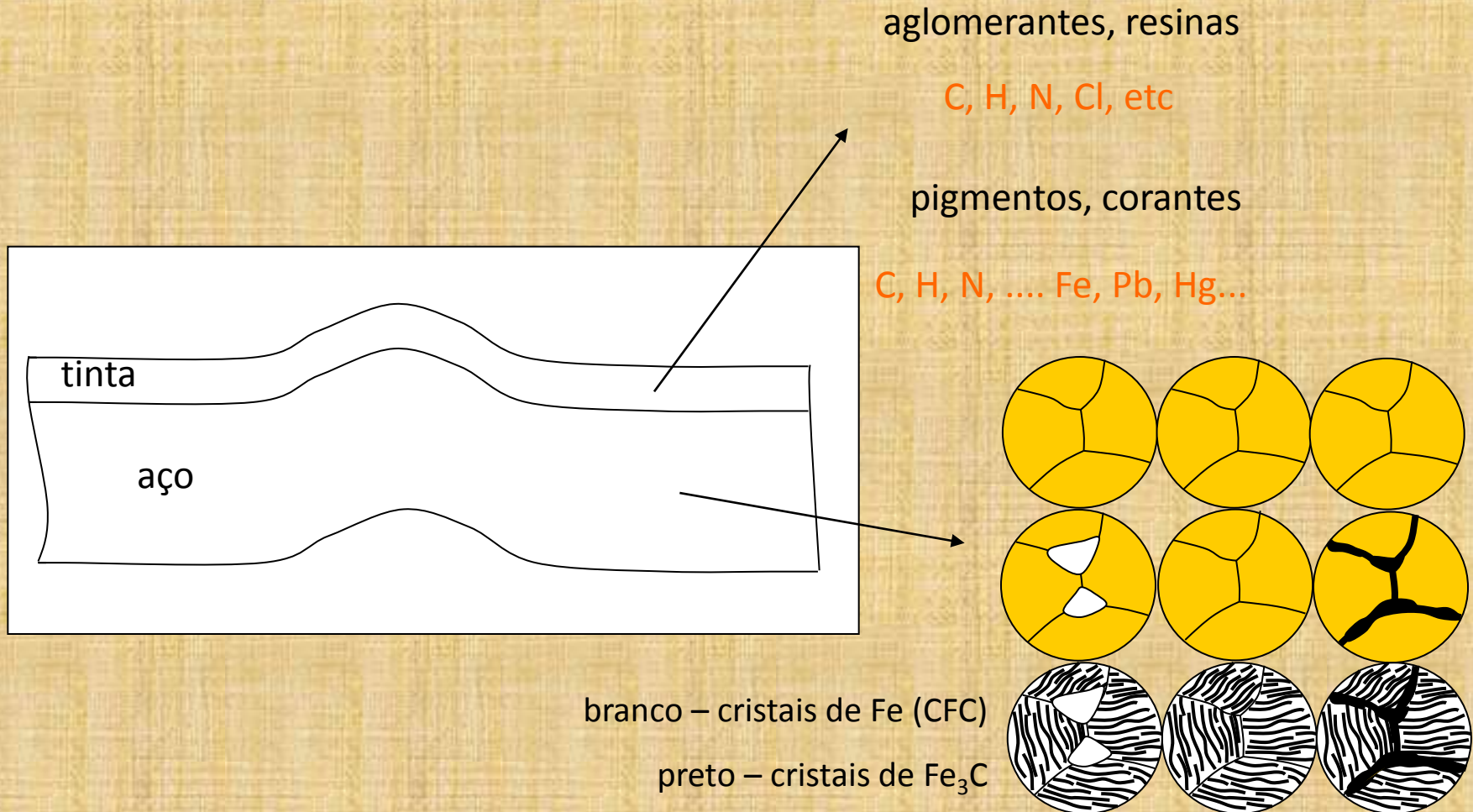
# Como são os materiais



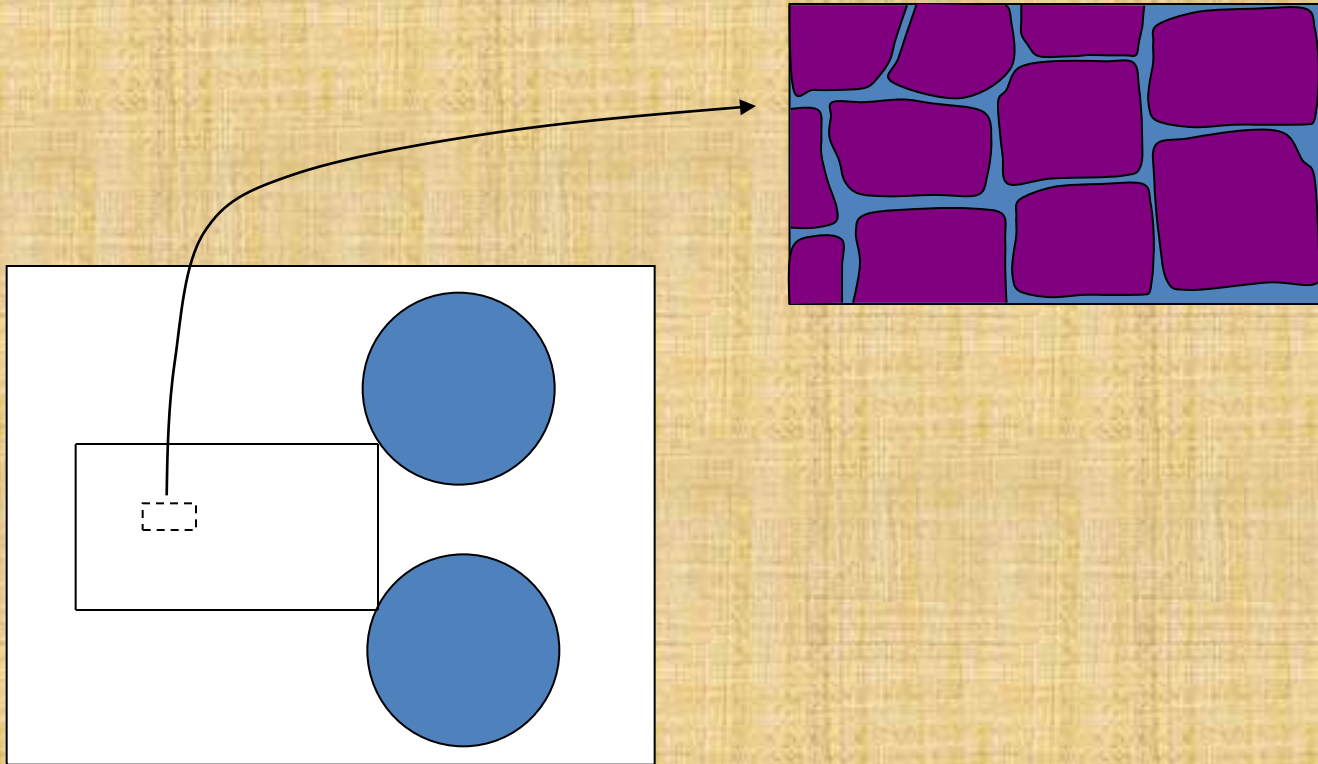
# Como são os materiais



# Como são os materiais

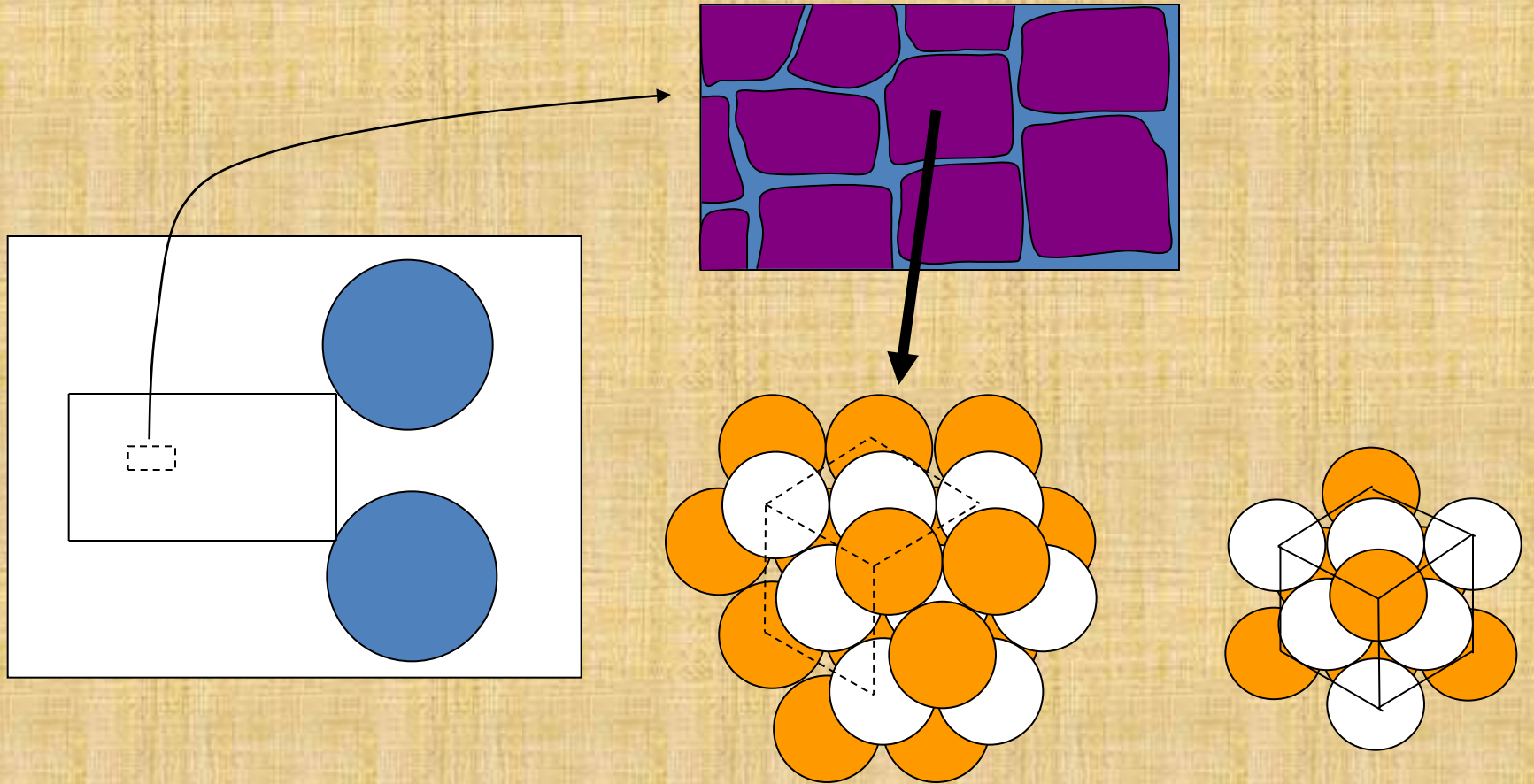


e o processo, afeta a microestrutura?

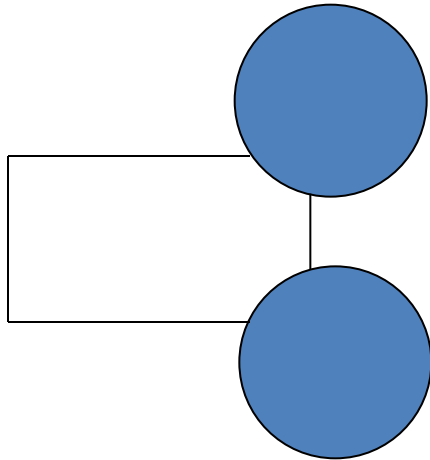




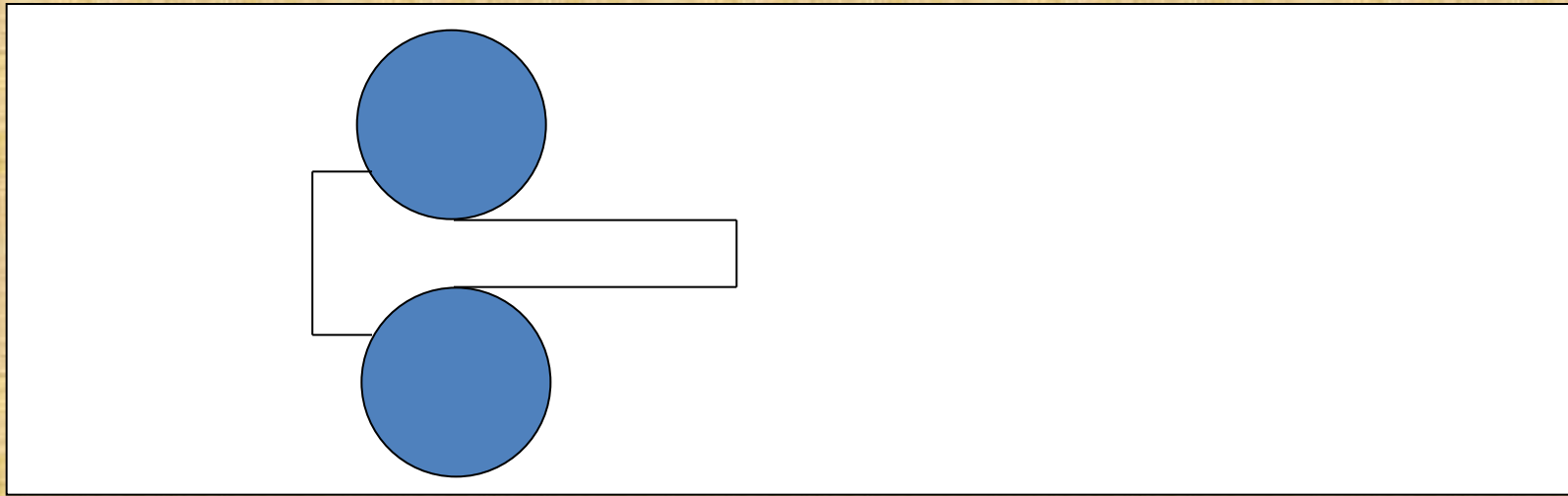
e o processo, afeta a microestrutura?



e o processo, afeta a microestrutura?

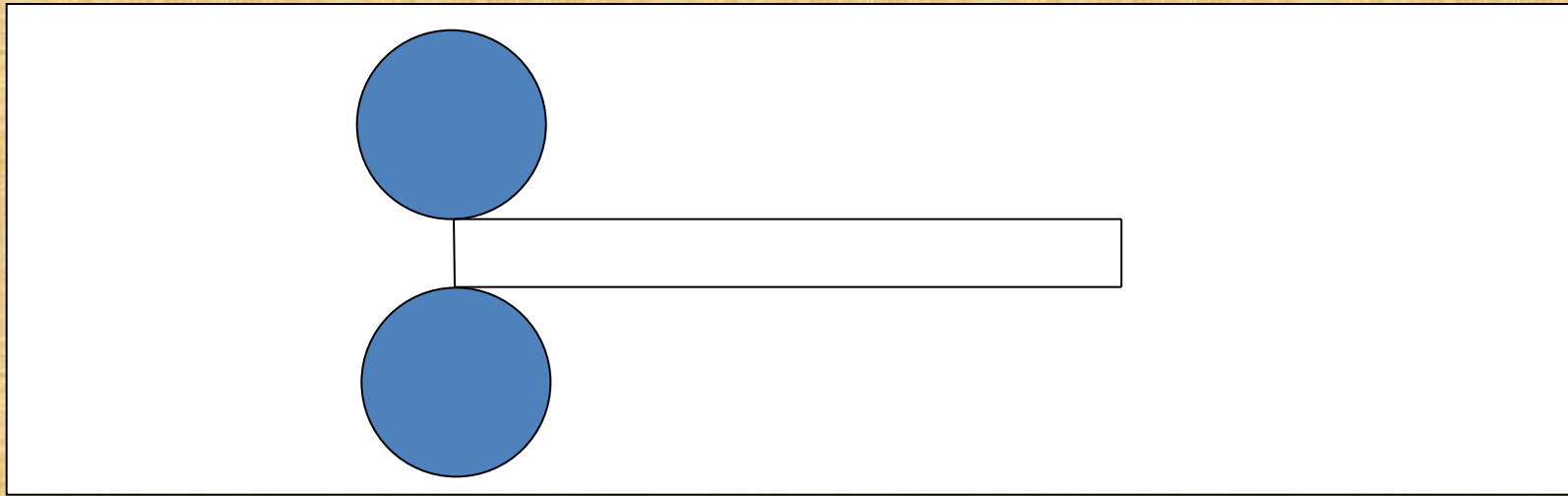


e o processo, afeta a microestrutura?

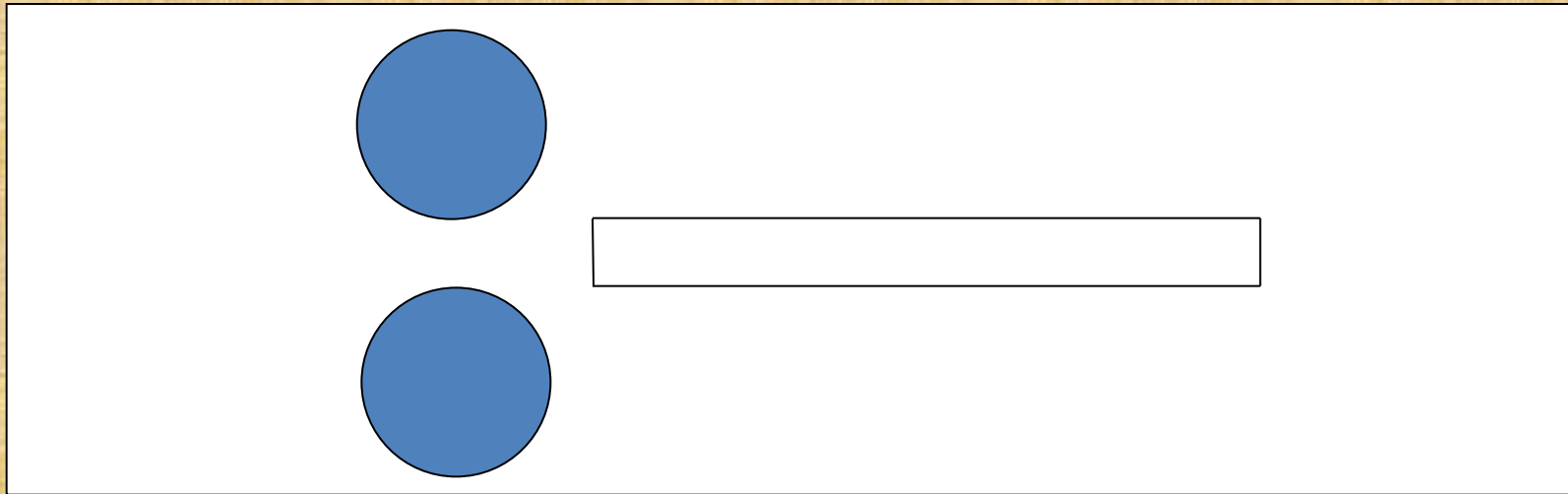




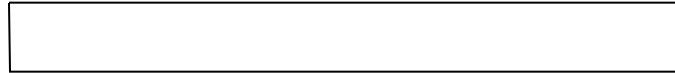
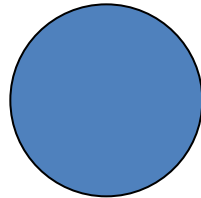
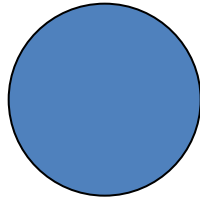
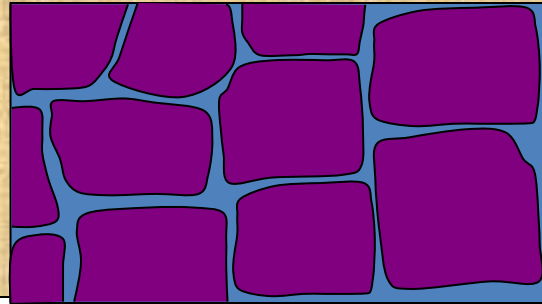
e o processo, afeta a microestrutura?



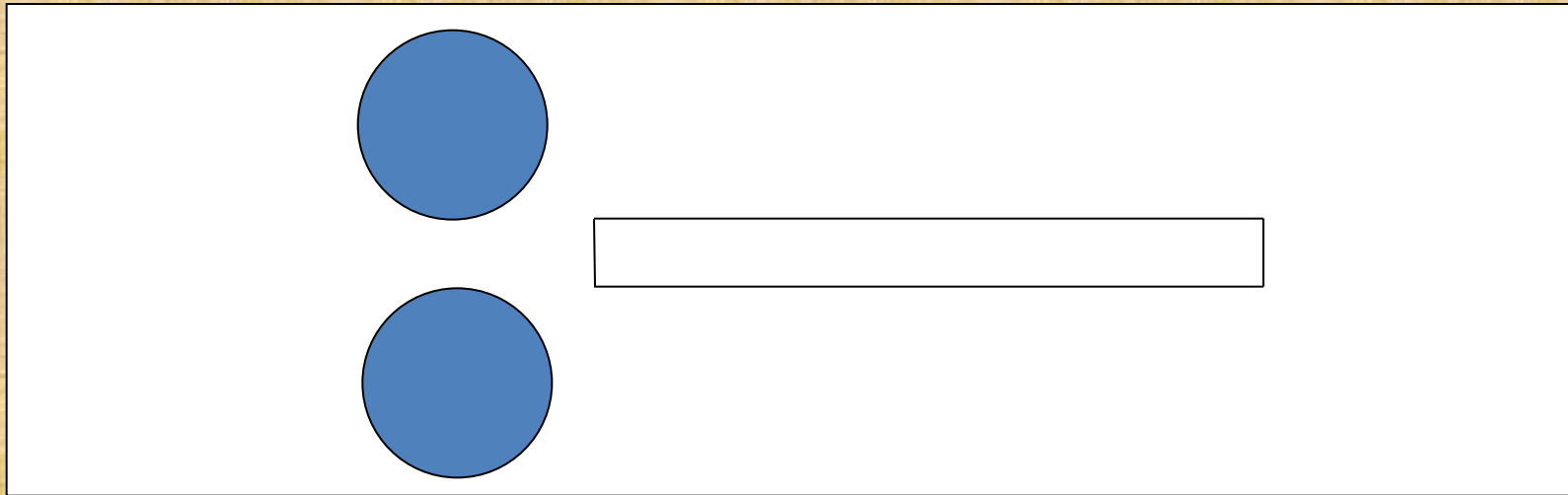
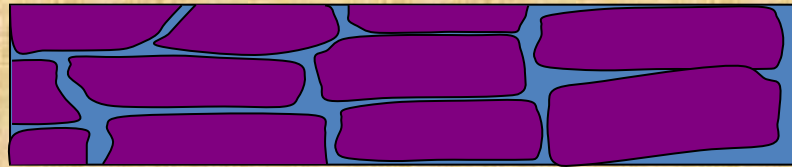
e o processo, afeta a microestrutura?



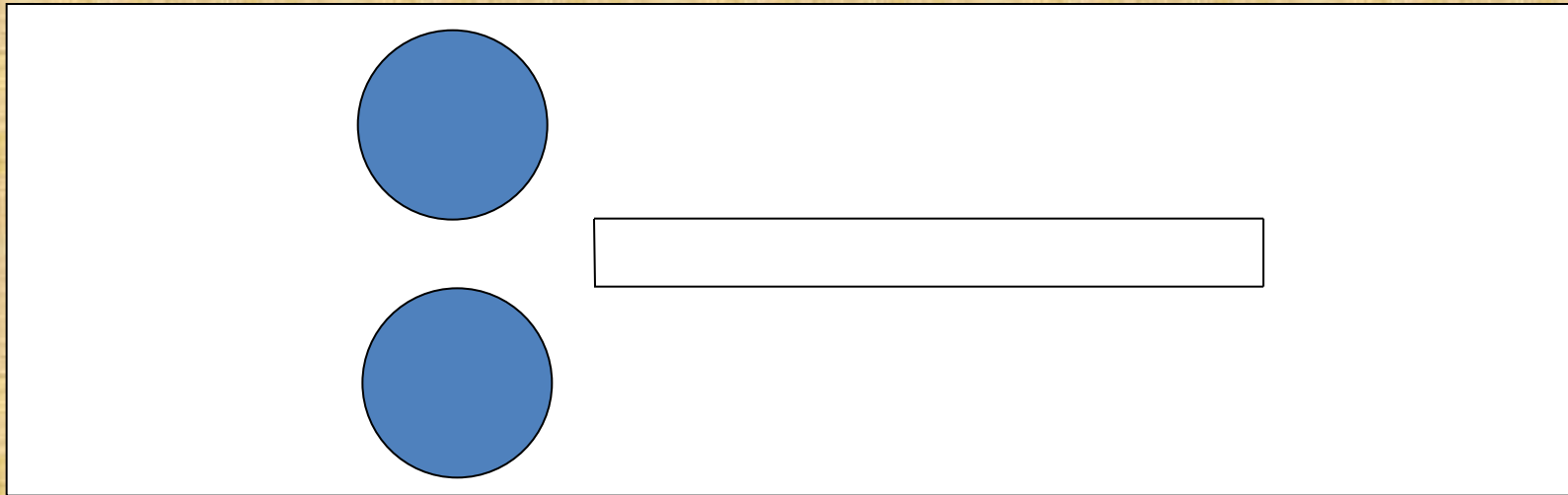
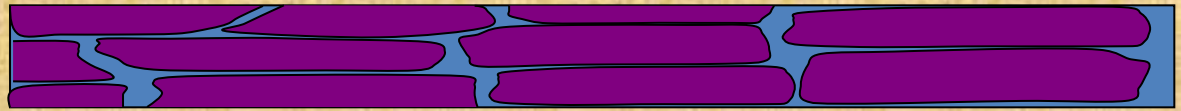
e o processo, afeta a microestrutura?



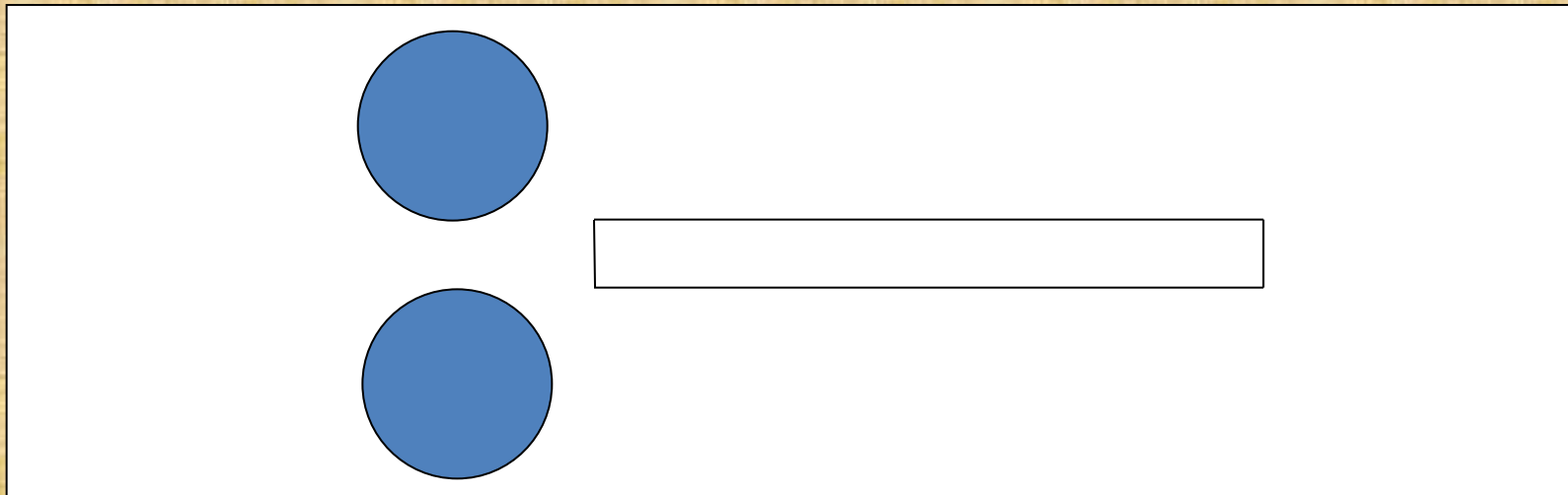
e o processo, afeta a microestrutura?



e o processo, afeta a microestrutura?

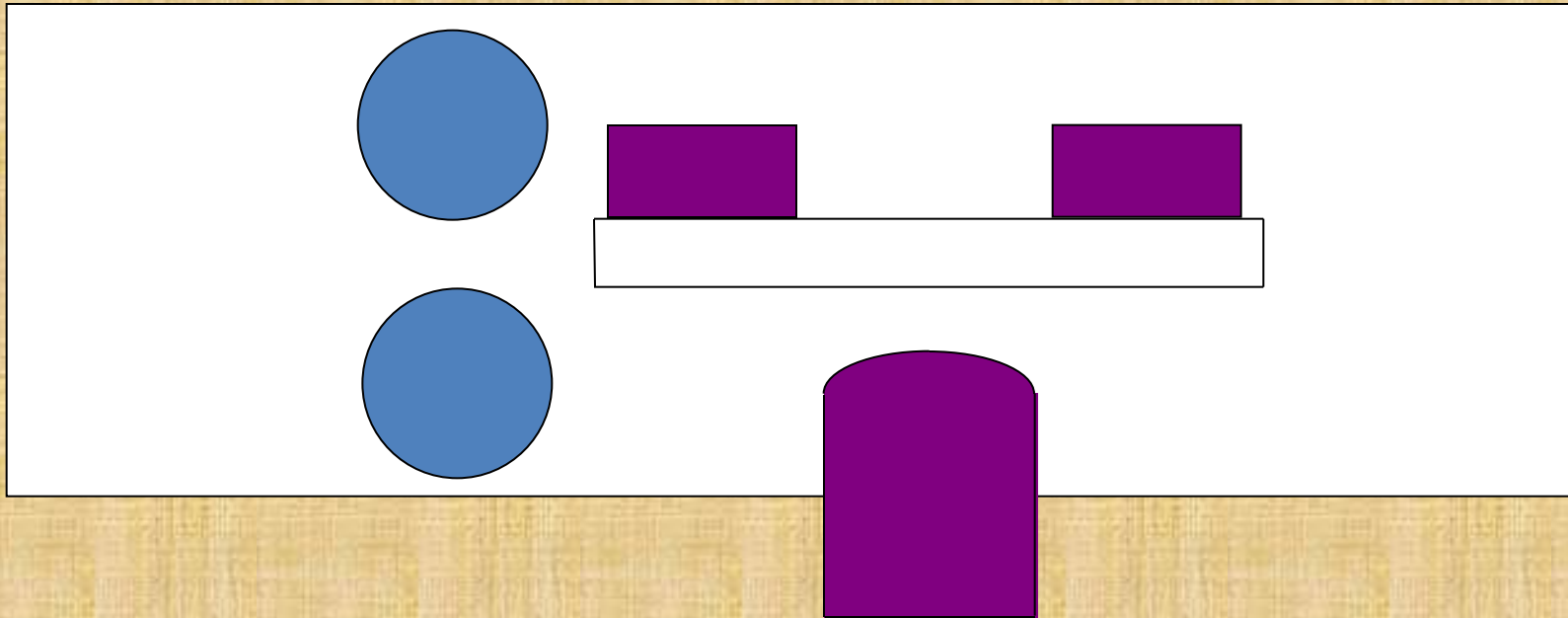


e o processo, afeta a microestrutura?

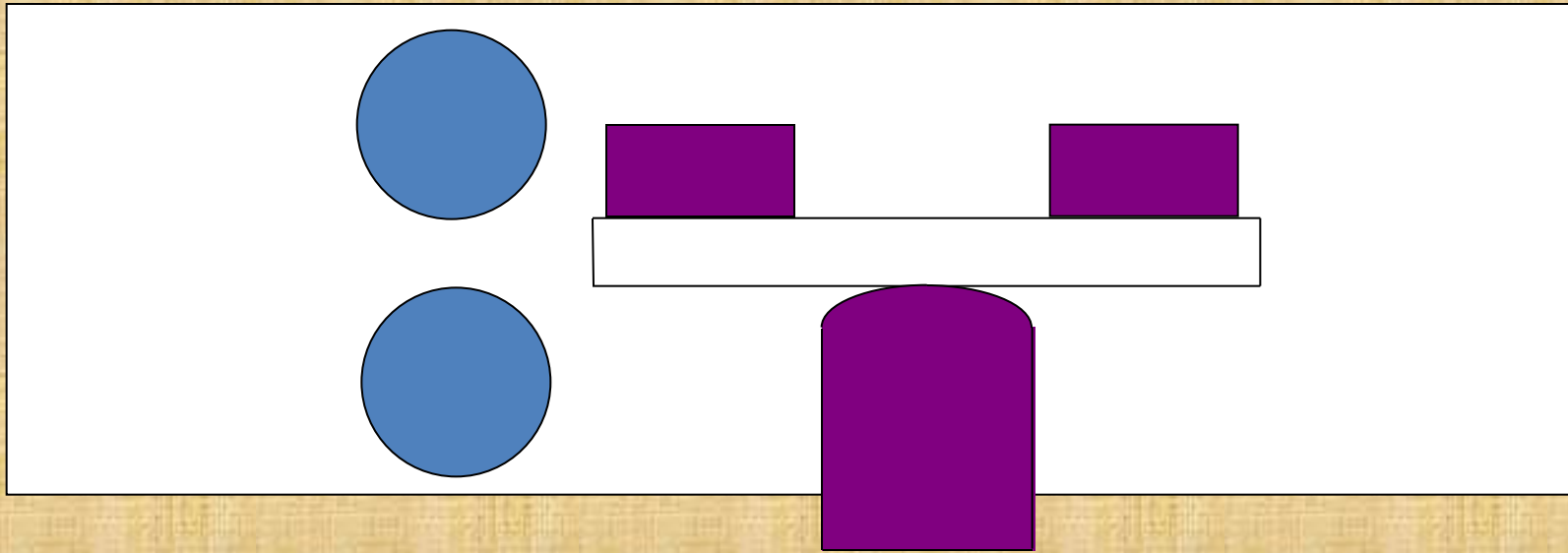




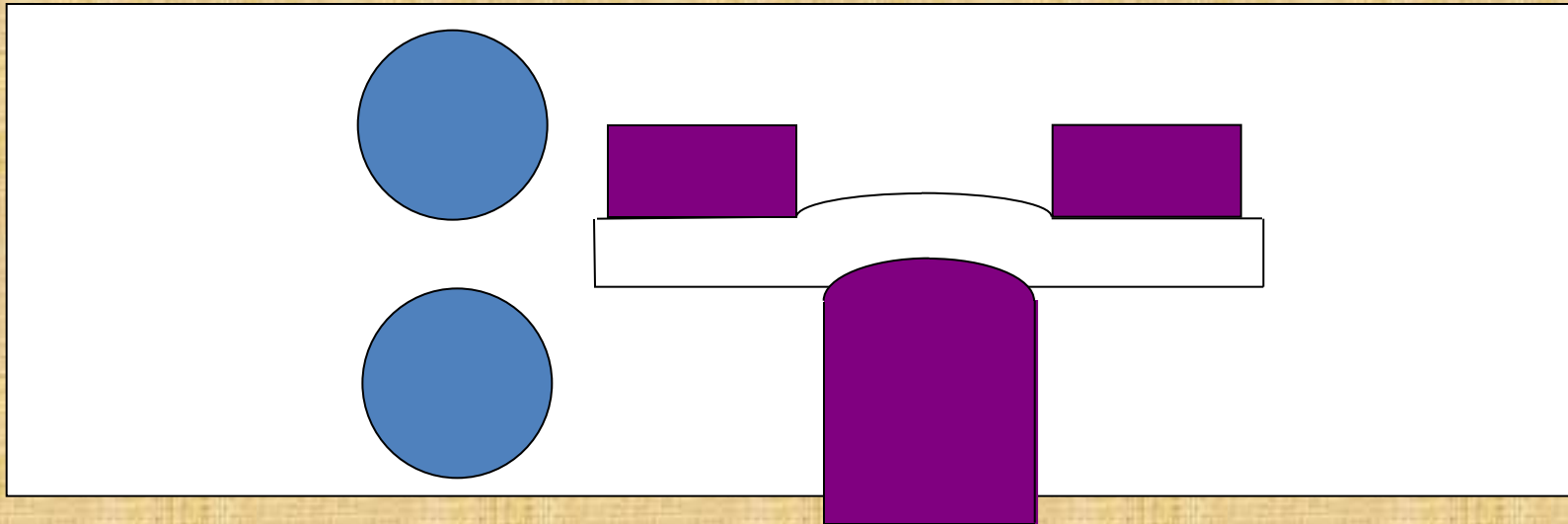
e o processo, afeta a microestrutura?



e o processo, afeta a microestrutura?



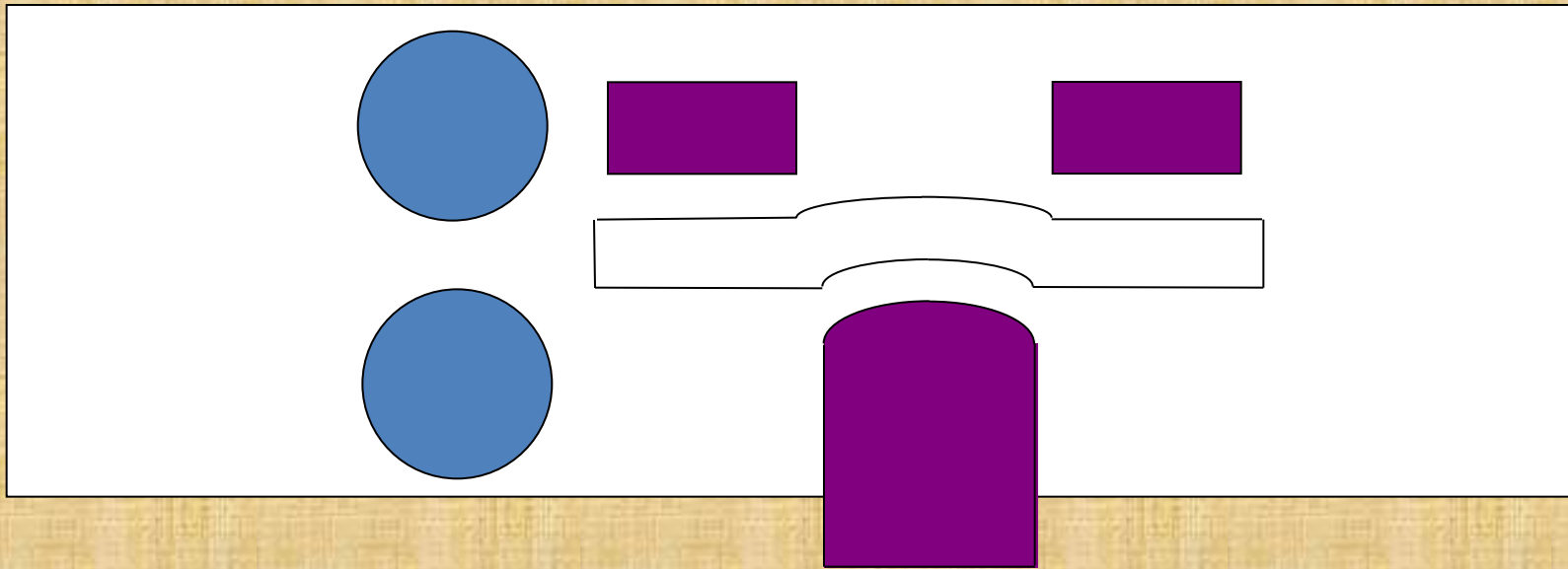
e o processo, afeta a microestrutura?

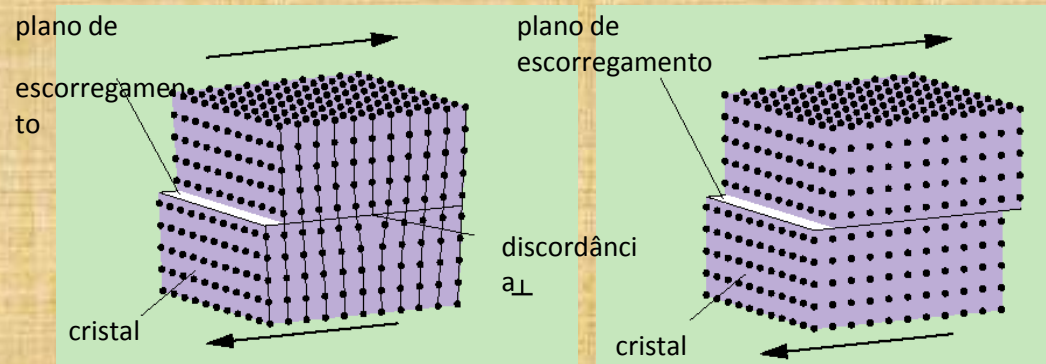
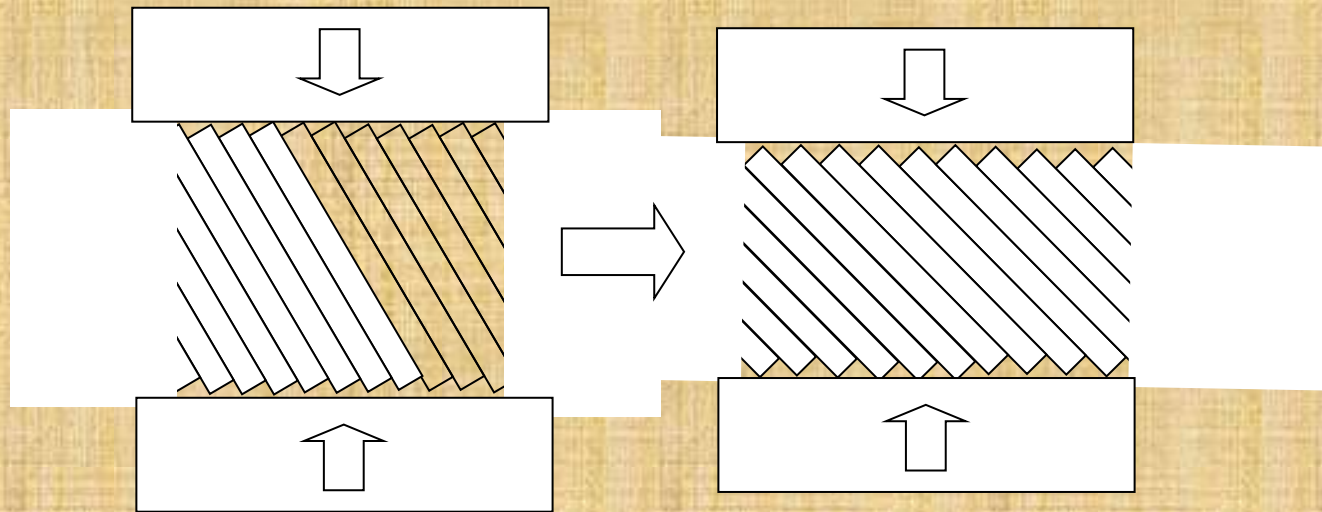


# e o processo, afeta a microestrutura?



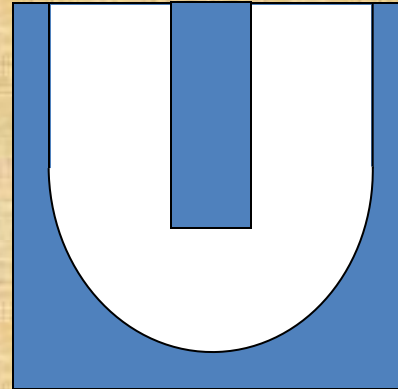
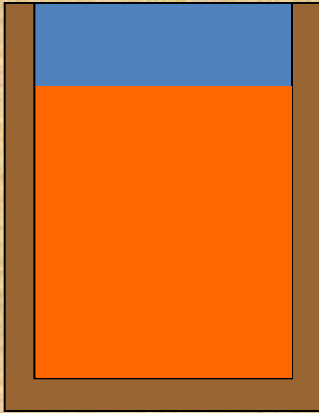
Como mudaria a microestrutura?





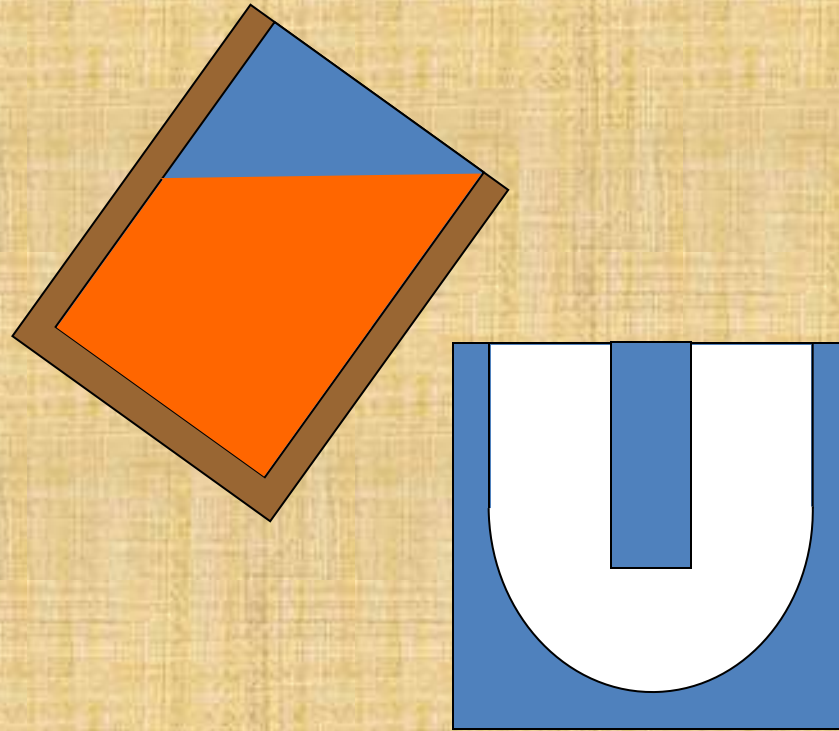
e o processo, afeta a microestrutura?

Fundição

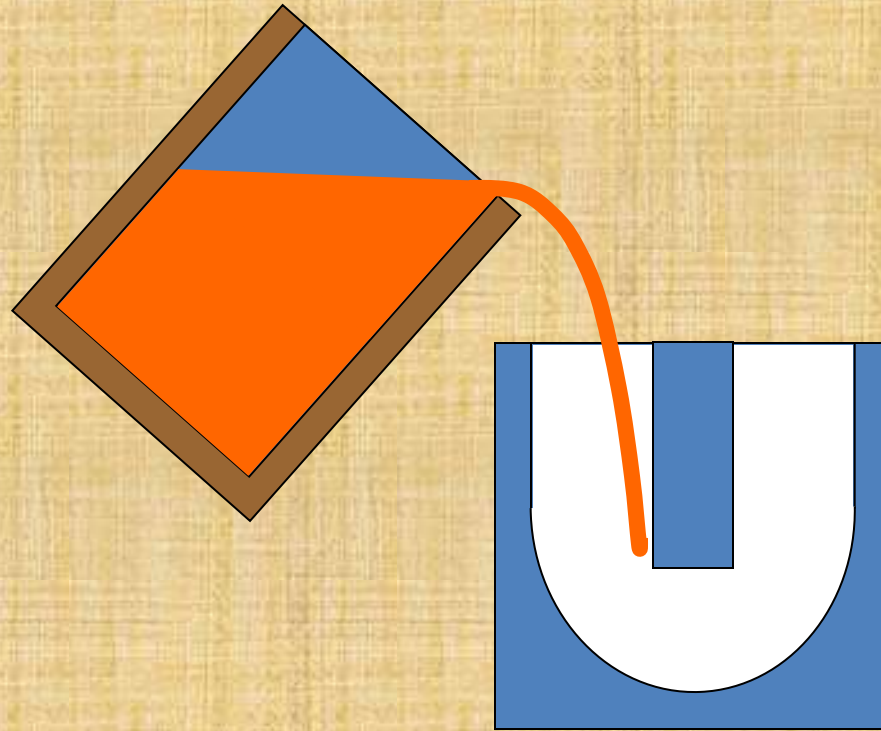




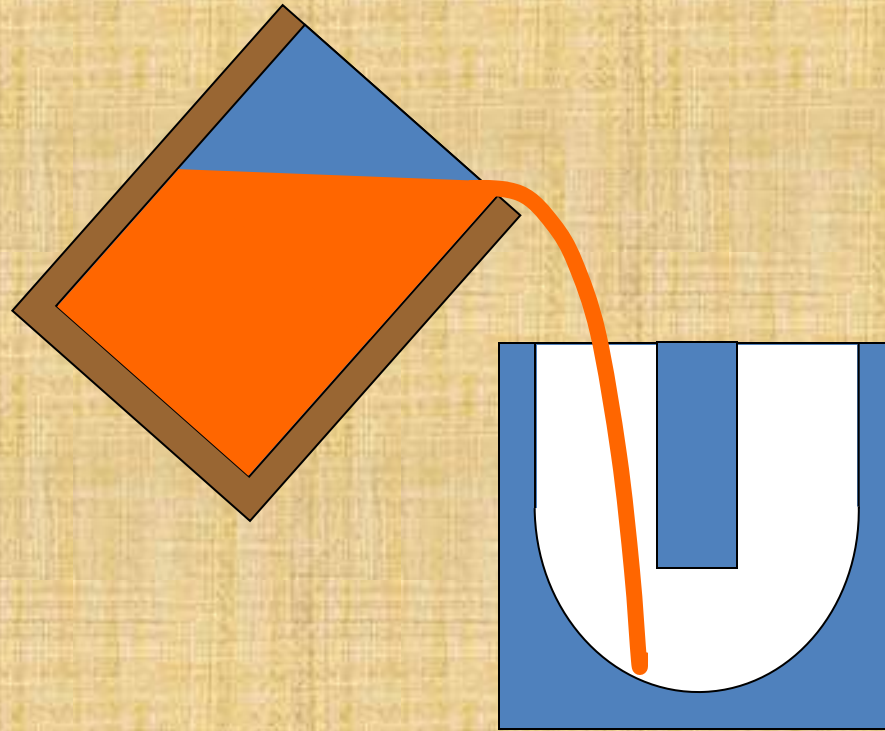
e o processo, afeta a microestrutura?



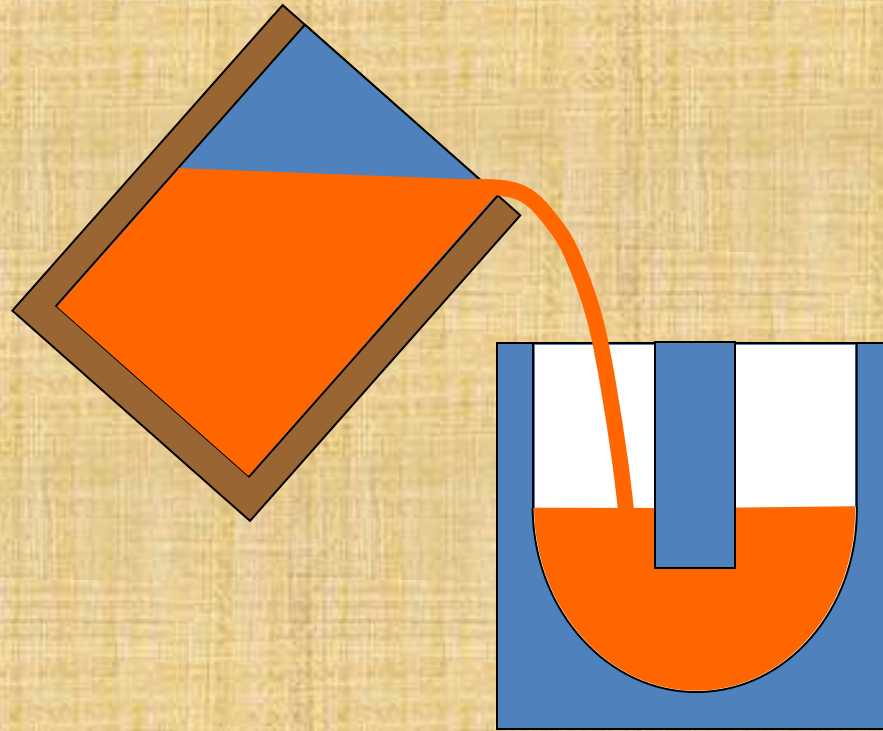
e o processo, afeta a microestrutura?



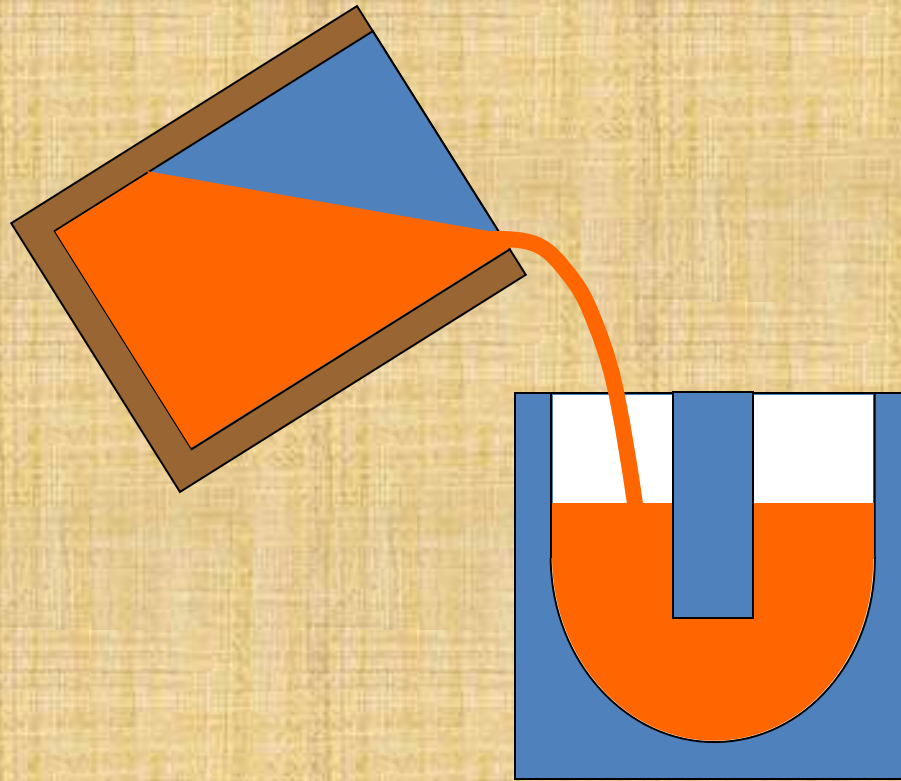
e o processo, afeta a microestrutura?



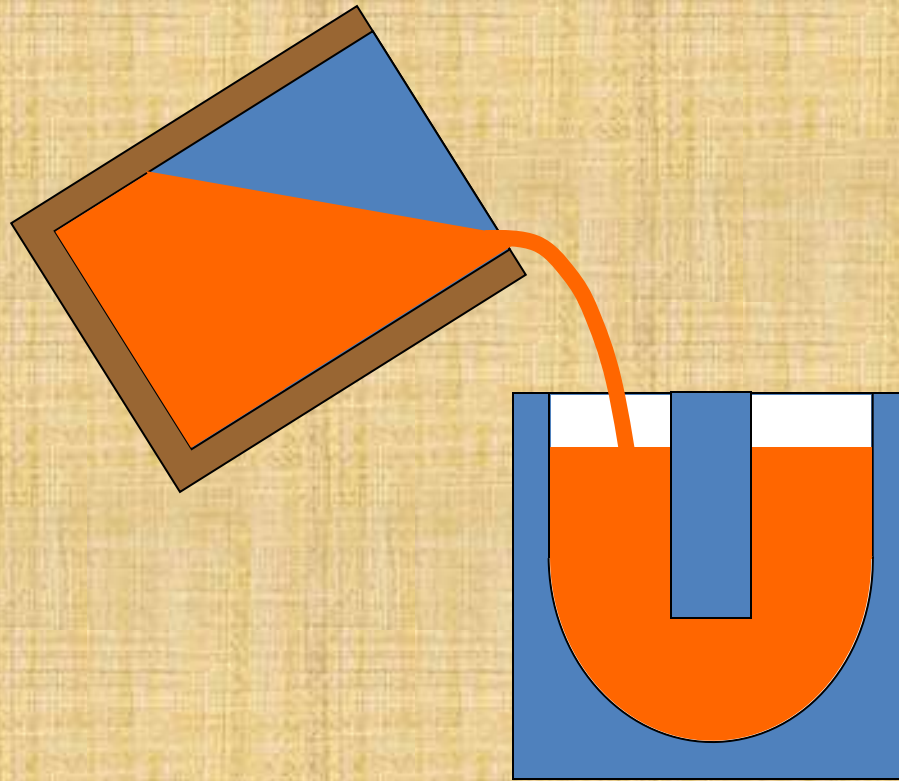
e o processo, afeta a microestrutura?



e o processo, afeta a microestrutura?

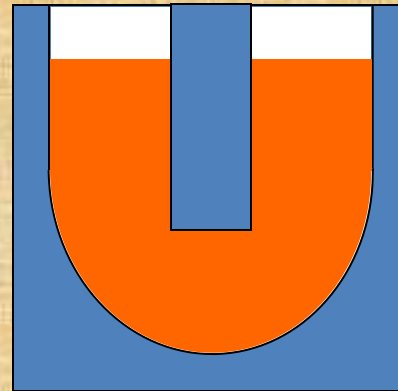
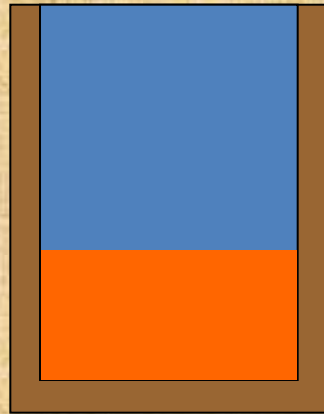


e o processo, afeta a microestrutura?

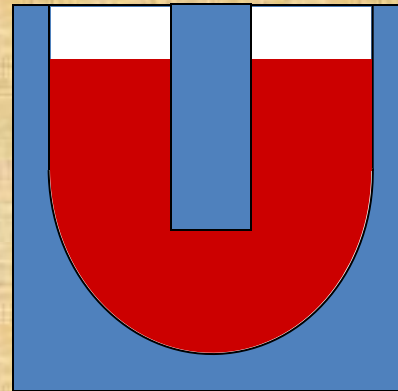
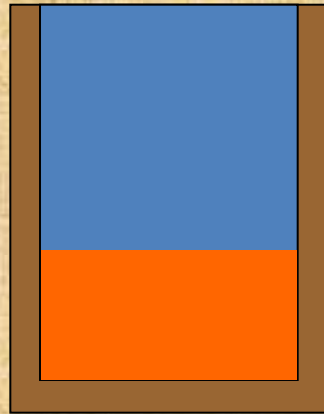




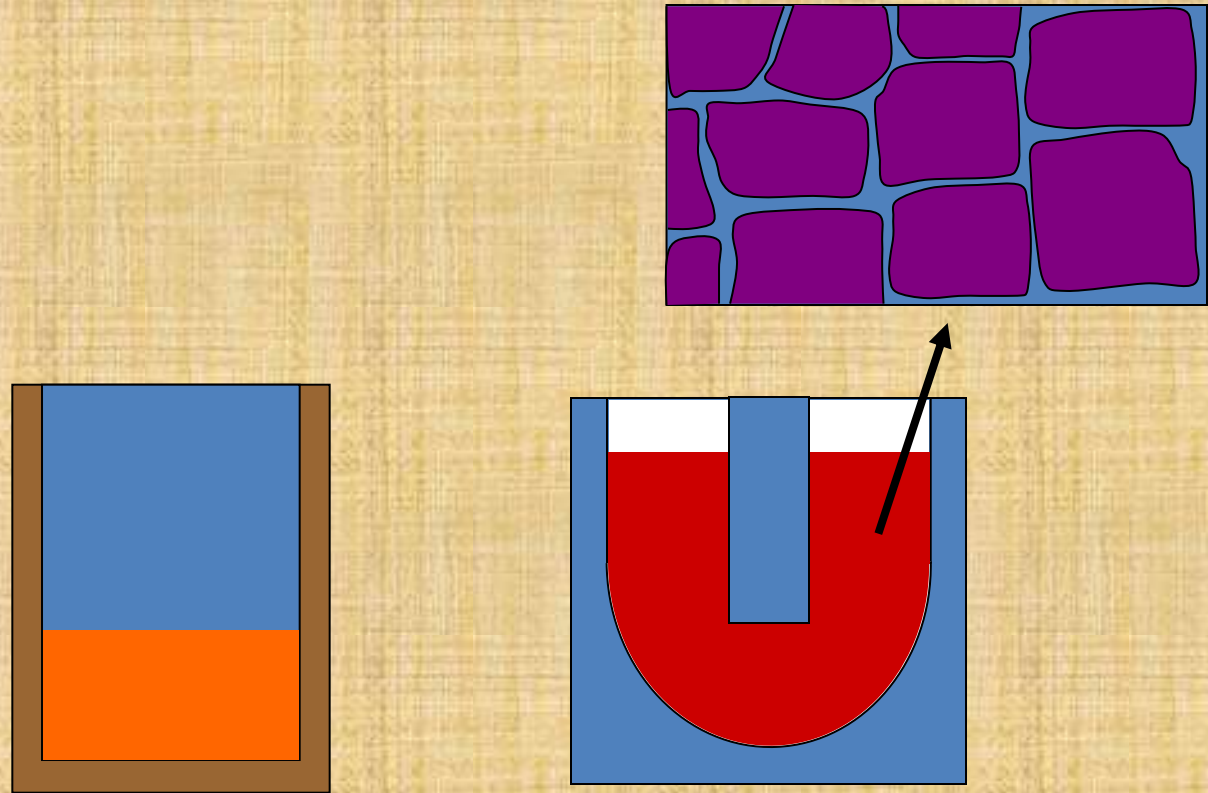
e o processo, afeta a microestrutura?

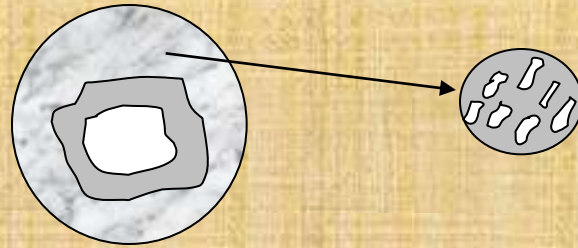
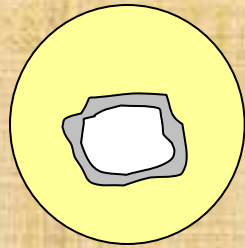
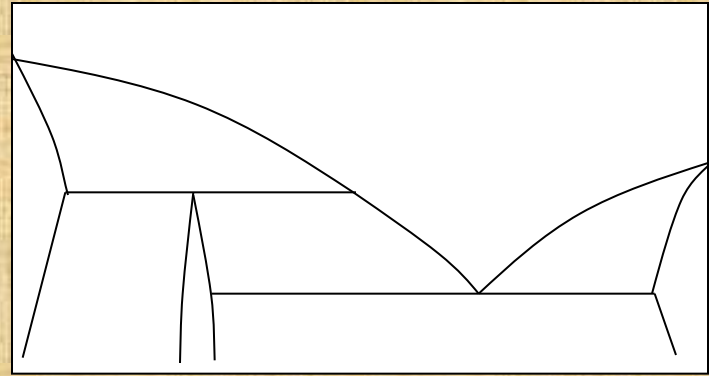
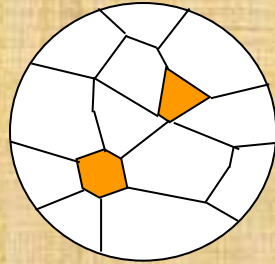
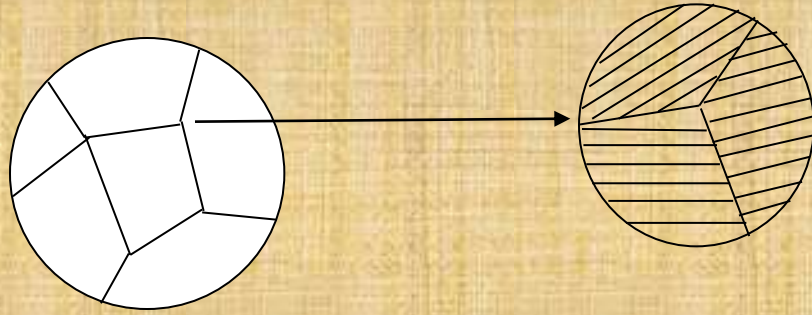


e o processo, afeta a microestrutura?



e o processo, afeta a microestrutura?





# Estrutura dos átomos

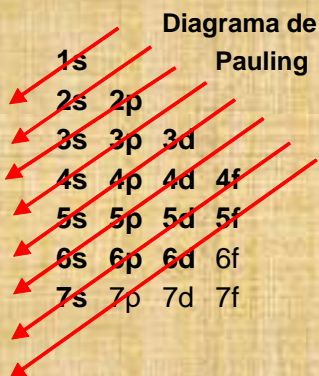
Ligações metálicas  
Ligações covalentes  
Ligações iônicas

Tabela  
Periódica

Materiais



	1	2	3										4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18							
	Ia	Ia																	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0										
1	1		metais alcalinos: coluna 1										halogênios: coluna 17						2															
	H		metais alcalino-terrosos: coluna 2										gases nobres: coluna 18						He															
	1s																		1s															
2	3	4	IIIb										IVb Vb VIb VIIb VIIIb Ib IIb						5	6	7	8	9	10										
	Li	Be																	B	C	N	O	F	Ne										
	2s	2s																	2p	2p	2p	2p	2p	2p										
3	11	12	terras-raras: Ce - Lu										(quando obedecem ao Diagrama de Pauling)						13	14	15	16	17	18										
	Na	Mg																	d1	d2	d3	d4	d5	d6	d7	d8	d9	d10	Al	Si	P	S	Cl	Ar
	3s	3s																	3p	3p	3p	3p	3p	3p	3p									
4	19	20	actínideos: Th - Lr																21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
	K	Ca																	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
	4s	4s																	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	4p	4p	4p	4p	4p	4p	4p
5	37	38	f1	f2	f3	f4	f5	f6	f7	f8	f9	f10	f11	f12	f13	f14	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
	Rb	Sr	(quando obedecem ao Diagrama de Pauling)																Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
	5s	5s																	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	5p	5p	5p	5p	5p	5p	5p
6	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86		
	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
	6s	6s	5d	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	6p	6p	6p	6p	6p	6p			
7	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104																
	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Ku																
	7s	7s	6d	6d	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	6d	6d																	



**Exemplos de não-obeidência ao Diagrama de Pauling**

<b>Cr (24)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s1	3d5							
<b>Cu (29)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s1	3d10							
<b>Nb (41)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s1	4d4				
<b>Ag (47)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s1	4d10				
<b>La (57)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f0	5d1

Relação: Cr, Cu, Nb-Ag, La, Pt, Au, Ac-Bk, Th (há divergências entre autores diferentes)

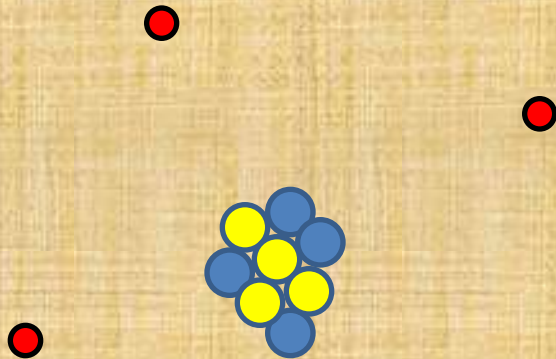
**Exemplos de comportamento metálico**

<b>Na (11)</b>	1s2	2s2	2p6	3s1									
<b>Fe (26)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d6						
<b>Ce (58)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f2
<b>Pr (59)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f3
<b>Ga (31)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p1					

**Exemplos de comportamento covalente**

<b>O (8)</b>	1s2	2s2	2p4		
<b>Cl (17)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p5





Seja o elemento 4:

4 prótons – carga positiva, massa grande

4 nêutrons – sem carga, massa grande

4 elétrons, massa muito pequena

1 H	2 He	3 Li	4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O	etc
-----	------	------	------	-----	-----	-----	-----	-----

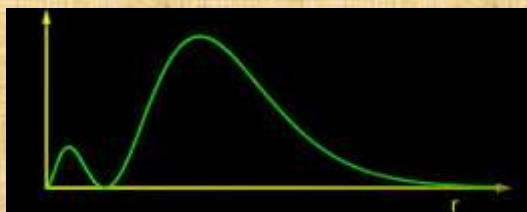
Tabela periódica: períodos

	total
Inicialmente 2	2
Depois 2 + 6	10
Depois 2 + 6	18
Depois 2 + 10 + 6	36
Depois 2 + 10 + 6	54
Depois 2 + 14 + 10 + 6	86
Depois 2 + 14 + 2	104

?

# Regiões de probabilidade definidas pela resolução da equação de Schrödinger (95%)

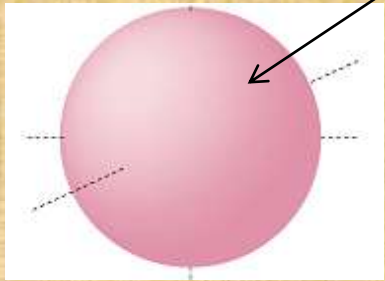
## Os orbitais "s"



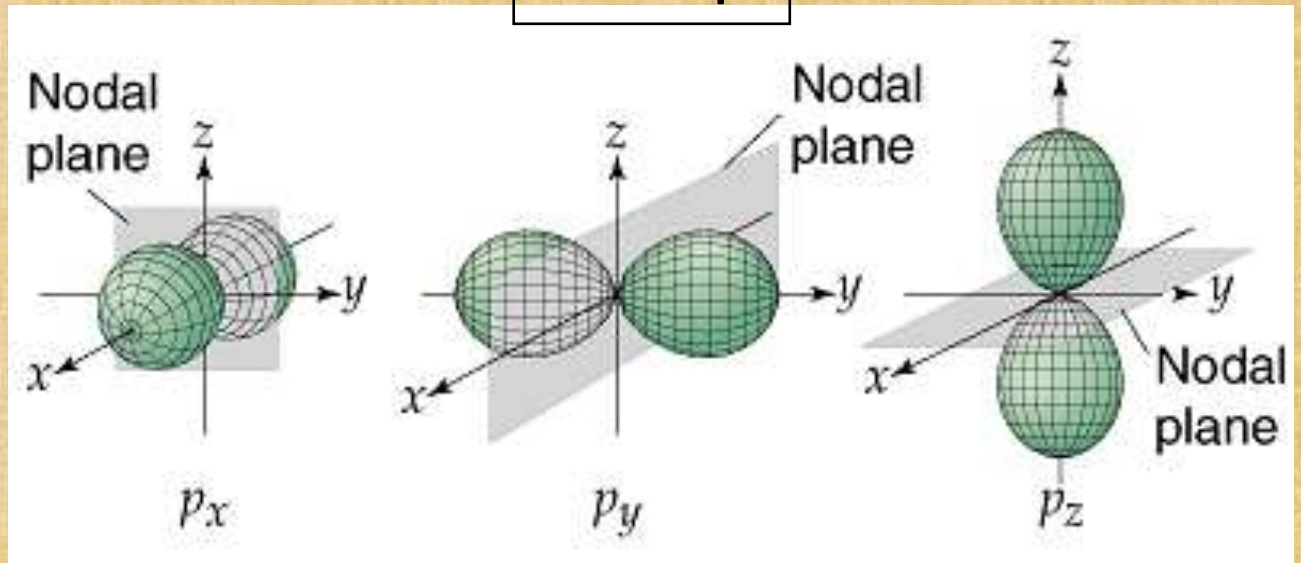
De onde vêm estas quantidades (2, 6, 10, 14)?

orbital s

2 elétrons



Orbitais p



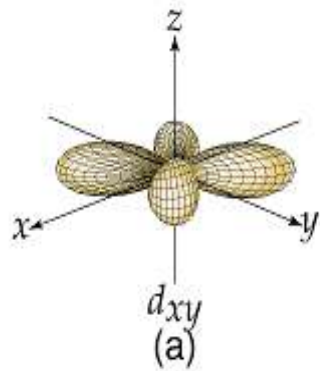
2 elétrons

2 elétrons

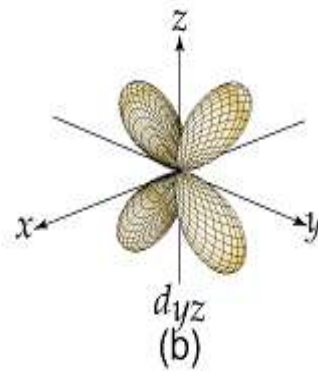
2 elétrons

**Orbitais d**

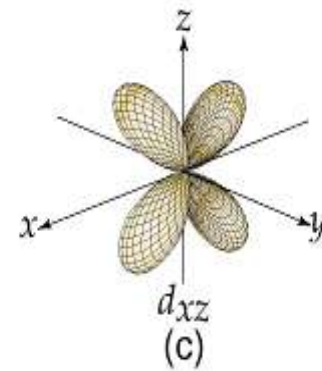
**2 électrons**



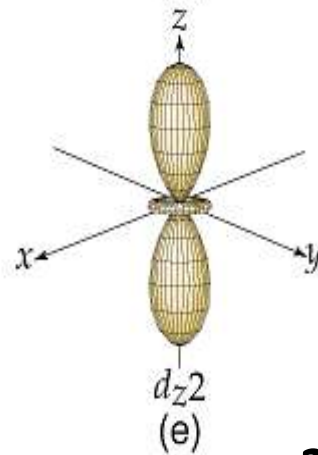
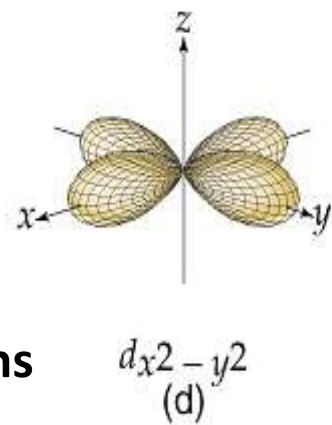
**2 électrons**



**2 électrons**



**2 électrons**



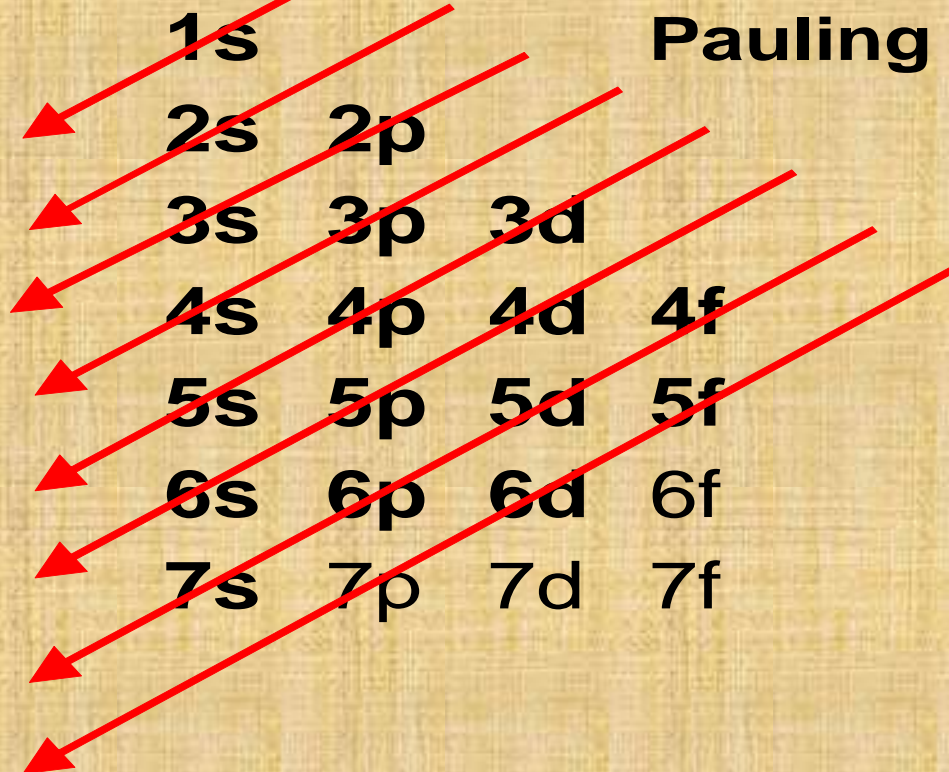
**2 électrons**



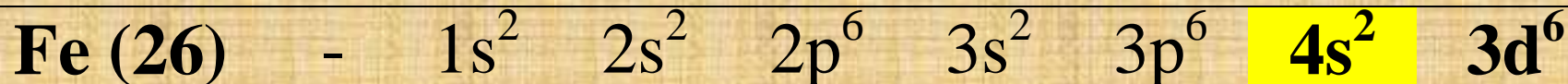
## Tabela periódica: períodos

Primeiro	2	2
Depois	2 + 6	10
Depois	2 + 6	18
Depois	2 + 10 + 6	36
Depois	2 + 10 + 6	54
Depois	2 + 14 + 10 + 6	86
Depois	2 + 14 + 1	103

## Diagrama de Pauling

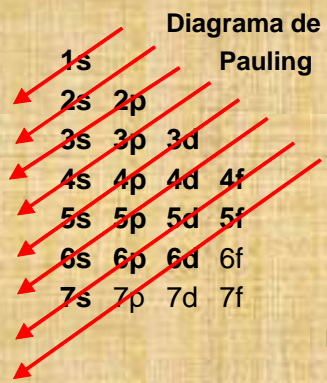


Re



↑  
poderia chegar até 10

1		2		3																4		5		6		7		8		9		10		11		12		13		14		15		16		17		18			
1a		2a																																																	
1		2		metais alcalinos: coluna 1 metais alcalino-terrosos: coluna 2 metais de transição: colunas 3 - 12																halogênios: coluna 17 gases nobres: coluna 18																															
3		4		IIIb																IVb		Vb		VIb		VIIb		VIIIb		Ib		IIb		5		6		7		8		9		10							
1		2																		B		C		N		O		F		Ne																					
11		12																		Al		Si		P		S		Cl		Ar																					
19		20		terras-raras: Ce - Lu actínideos: Th - Lr																21		22		23		24		25		26		27		28		29		30		31		32		33		34		35		36	
37		38		(quando obedecem ao Diagrama de Pauling)																Sc		Ti		V		Cr		Mn		Fe		Co		Ni		Cu		Zn		Ga		Ge		As		Se		Br		Kr	
55		56																		39		40		41		42		43		44		45		46		47		48		49		50		51		52		53		54	
87		88																		Lu		Hf		Ta		W		Re		Os		Ir		Pt		Au		Hg		Tl		Pb		Bi		Po		At		Rn	
7		8																		71		72		73		74		75		76		77		78		79		80		81		82		83		84		85		86	
87		88																		89		90		91		92		93		94		95		96		97		98		99		100		101		102		103		104	
7s		7s																		6d		6d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d		5d			
s1		s2																		p1		p2		p3		p4		p5		p6																					



**Exemplos de não-obeidiência ao Diagrama de Pauling**

<b>Cr (24)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s1	3d5							
<b>Cu (29)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s1	3d10							
<b>Nb (41)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s1	4d4				
<b>Ag (47)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s1	4d10				
<b>La (57)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f0	5d1

Relação: Cr, Cu, Nb-Ag, La, Pt, Au, Ac-Bk, Th (há divergências entre autores diferentes)

**Exemplos de comportamento metálico**

<b>Na (11)</b>	1s2	2s2	2p6	3s1									
<b>Fe (26)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d6						
<b>Ce (58)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f2
<b>Pr (59)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f3
<b>Ga (31)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p1					

**Exemplos de comportamento covalente**

<b>O (8)</b>	1s2	2s2	2p4		
<b>Cl (17)</b>	1s2	2s2	2p6	3s2	3p5



# METAIS

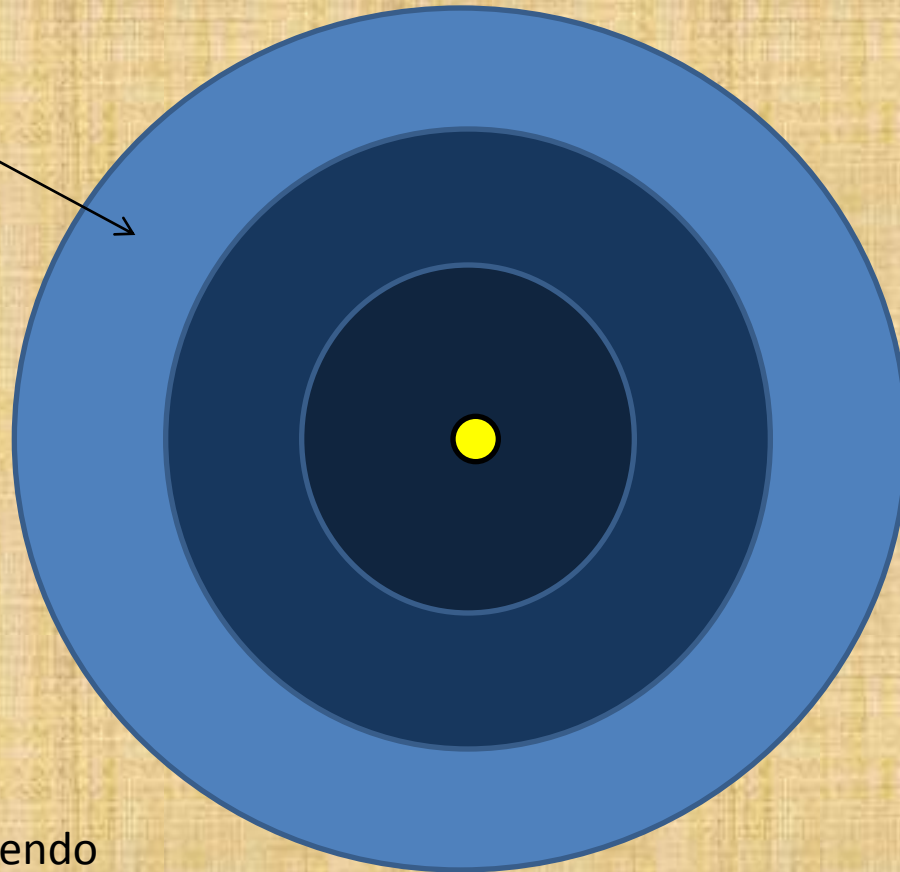
Elementos que, no estado atômico, têm um ou mais elétrons com energia muito alta, por estarem muito mais distantes do núcleo do que a maioria dos demais elétrons.



24 elétrons até a camada 3

$4s \uparrow$   
○

○  
 $4s \downarrow$



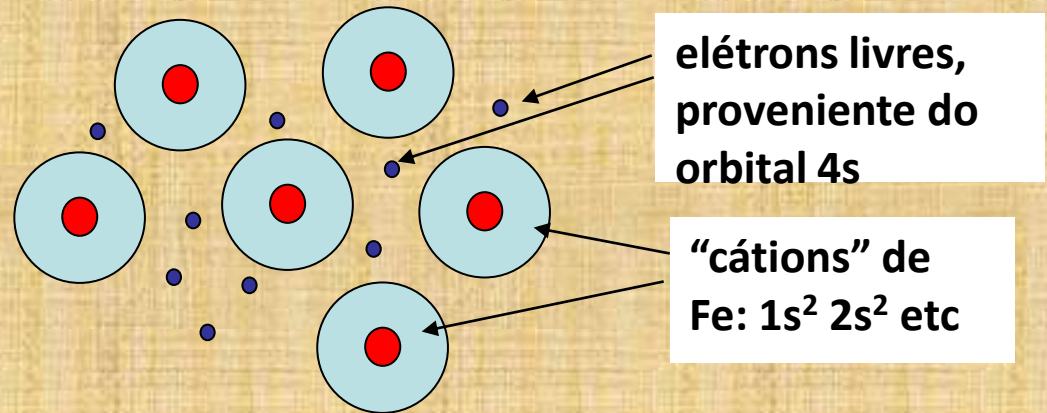
A camada 3d está sendo preenchida, mas os 4s são mais externos

# DUAS OPÇÕES MELHORES

compartilhar estes  
elétrons com outros  
átomos de ferro

ferro metálico

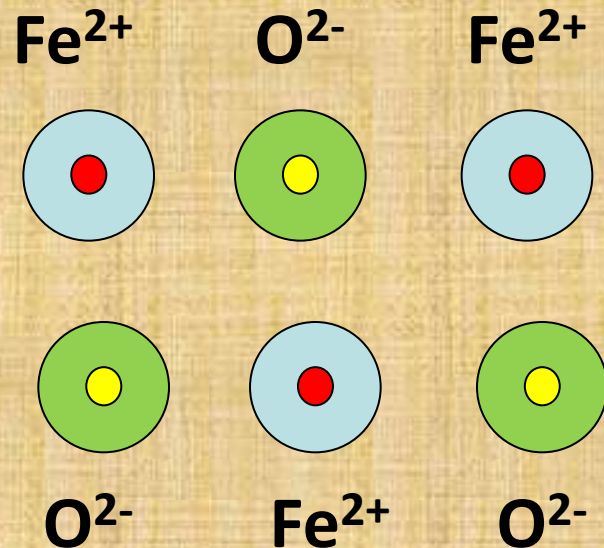
LIGAÇÃO METÁLICA



mandar estes elétrons  
para elementos que  
queiram recebê-los

FeO

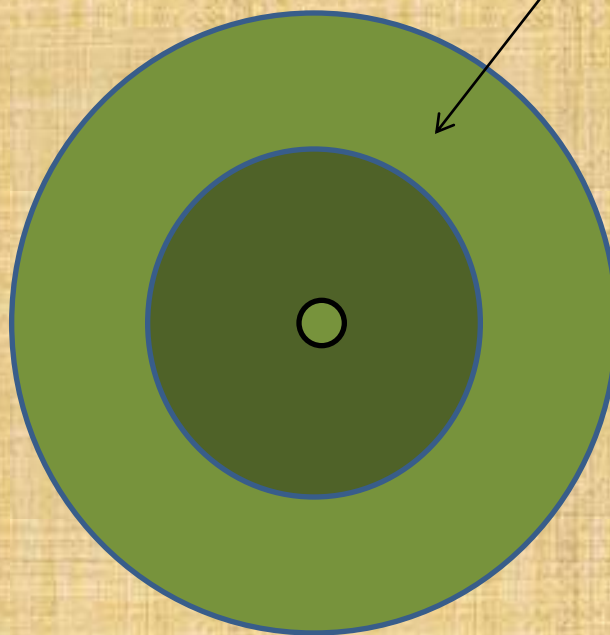
LIGAÇÃO IÔNICA



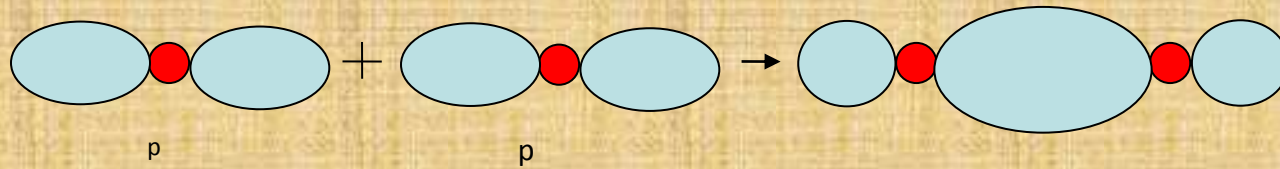
# POR QUÊ O OXIGÊNIO QUER RECEBER DOIS ELÉTRONS?

O (8):  $1s^2 2s^2 2p^4$

6 elétrons no nível 2  
(cabem 8)



# OUTRA SOLUÇÃO PARA O OXIGÊNIO



Orbital p de um átomo de oxigênio, com apenas um elétron (cabem dois)

Orbital p de outro átomo de oxigênio, com apenas um elétron (cabem dois)

Orbital molecular com dois elétrons  
Molécula de O<sub>2</sub>

## LIGAÇÃO COVALENTE

O<sub>2</sub> CO<sub>2</sub> CO N<sub>2</sub> H<sub>2</sub>O diamante  
silício etc



## RESUMINDO

- **Sistemas no universo tendem a buscar a situação de maior estabilidade**
- **Os átomos raramente são encontrados em forma isolada**

**Átomos isolados constituem-se em entidades com alta energia**



## PROCURANDO CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DE MENOR ENERGIA

### – Evitar orbitais incompletos

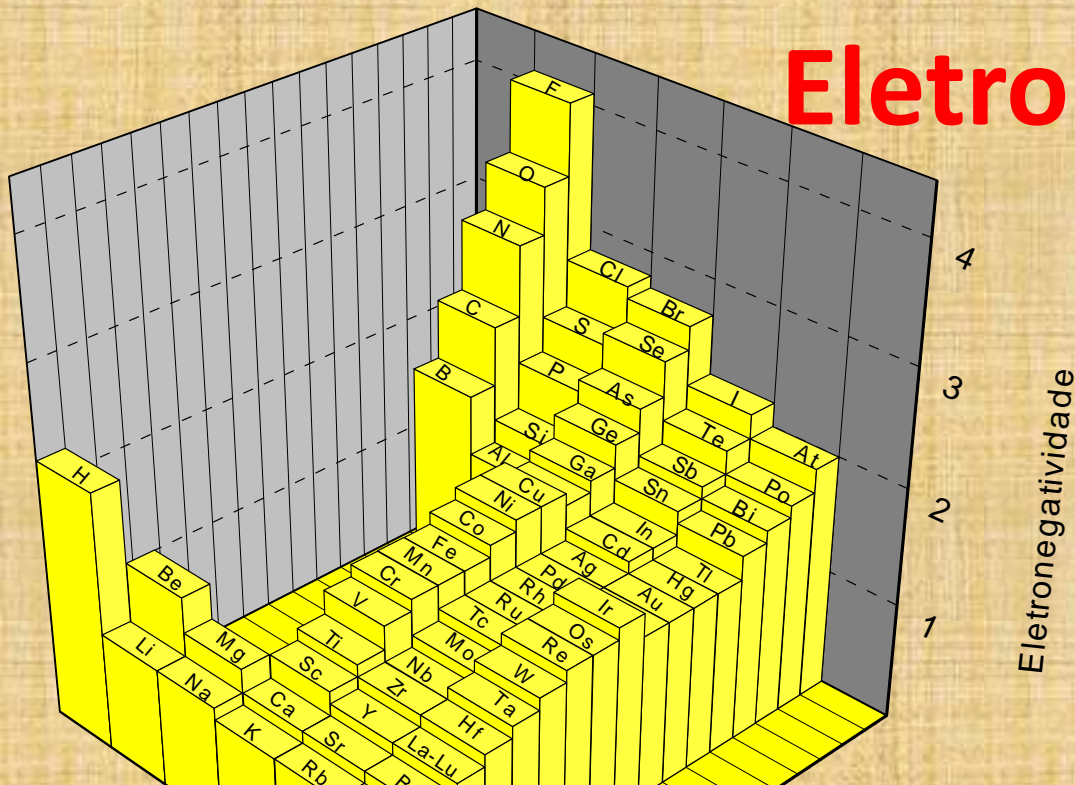
- recebendo elétrons (formando ânions)
- compartilhando elétrons entre pares de átomos (ligações covalentes)

### – Evitar camadas com poucos elétrons

- perdendo elétrons (formando cátions)
- compartilhando estes elétrons entre todos os átomos, fora dos orbitais (ligações metálicas)

- Nas ligações puramente iônicas, **não há compartilhamento.**
- Nas ligações metálicas, **uma parte dos elétrons é compartilhada por todos os átomos** do cristal ou da peça.
- Nas ligações covalentes, **pares de elétrons são compartilhados** entre dois átomos.

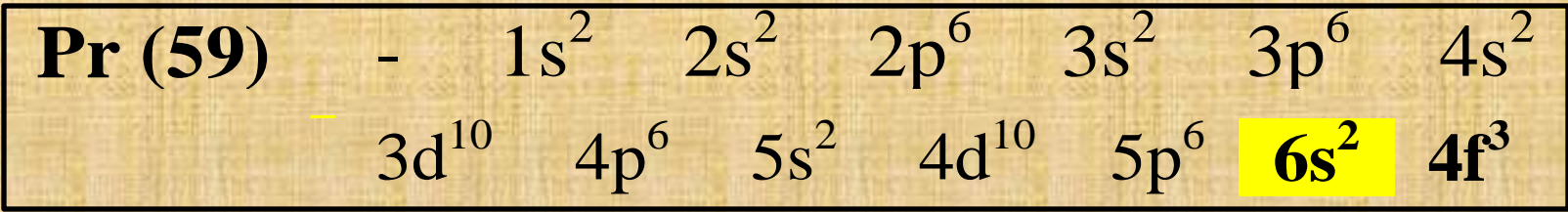
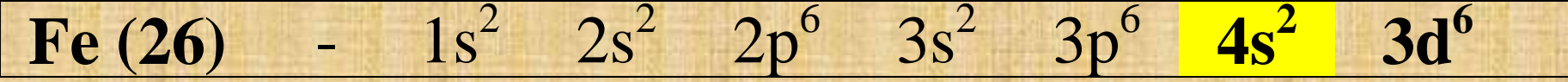
# Eletronegatividade



	<b>1A</b>											<b>8A</b>						
<b>1</b>	H	<b>2A</b>	<b>8B</b>										<b>3A</b>	<b>4A</b>	<b>5A</b>	<b>6A</b>	<b>7A</b>	He
<b>2</b>	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
<b>3</b>	Na	Mg	<b>3B</b>	<b>4B</b>	<b>5B</b>	<b>6B</b>	<b>7B</b>			<b>1B</b>	<b>2B</b>	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
<b>4</b>	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
<b>5</b>	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
<b>6</b>	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
<b>7</b>	Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt									
<b>Lanthanides</b>			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
<b>Actinides</b>			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

# quem são os metais?

	1	2	3										4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																								
	Ia	IIa																	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0																											
1	1		metais alcalinos: coluna 1 metais alcalino-terrosos: coluna 2 metais de transição: colunas 3 - 12										halogênios: coluna 17 gases nobres: coluna 18						2																																
2	3	4	IIIb										IVb Vb VIb VIIb VIIIb Ib IIb						5	6	7	8	9	10																											
3	11	12	terras-raras: Ce - Lu actinídeos: Th - Lr										d1 d2 d3 d4 d5 d6 d7 d8 d9 d10 (quando obedecem ao Diagrama de Pauling)						13	14	15	16	17	18																											
4	19	20	(quando obedecem ao Diagrama de Pauling)										21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36																							
5	37	38	f1 f2 f3 f4 f5 f6 f7 f8 f9 f10 f11 f12 f13 f14	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
6	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	
7	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104											p1	p2	p3	p4	p5	p6																	
	s1	s2																																																	





# alcalinos e alcalinos-terrosos

Ao se formar o metal, a camada que está sendo preenchida desaparece, e o que sobra parece gás nobre

	1	2		
	la	IIa		
1	1			
	H			
	1s			
2	3	4		
	Li	Be		
	2s	2s		
3	11	12		
	Na	Mg		
	3s	3s		
4	19	20		
	K	Ca		
	4s	4s		
5	37	38	f1	f2
	Rb	Sr		
	5s	5s		
6	55	56	57	58
	Cs	Ba	La	Ce
	6s	6s	5d	4f
7	87	88	89	90
	Fr	Ra	Ac	Th
	7s	7s	6d	6d
	s1	s2		

Li e Be: desaparece a camada 2

Rb e Sr: desaparece a camada 5

Camada externa completa

este elétron se torna deslocalizado

<b>Na (11)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>1</sup>									
<b>Fe (26)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>6</sup>						
<b>Ce (58)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>6</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>6</sup>	6s <sup>2</sup>	4f <sup>2</sup>
<b>Pr (59)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>6</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>6</sup>	6s <sup>2</sup>	4f <sup>3</sup>
<b>Ga (31)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>1</sup>					

4 5 6 7 8 9 10 11 12 13

IIIa

halogênios: coluna 17  
gases nobres: coluna 18

	IVb	Vb	VIb	VIIIb	VIIIb	Ib	IIb			5	
	d1	d2	d3	d4	d5	d6	d7	d8	d9	d10	
	(quando obedecem ao Diagrama de Pauling)										
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	4
14	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49
	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	Ir
	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	5
0	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81
7b	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl
	4f	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	5d	6
02	103	104									p1
0	Lr	Ku									
	5f	6d	6d								

# METAIS DE TRANSIÇÃO d

Ao se retirarem os elétrons da camada s, a camada anterior fica **externa**. Ela está sendo **preenchida na subcamada d**.

Assim, a **camada d dita as propriedades químicas**.

externa sendo preenchida

## Exemplos de comportamento metálico

<b>Na (11)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>1</sup>									
<b>Fe (26)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>6</sup>						
<b>Ce (58)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>6</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>6</sup>	6s <sup>2</sup>	4f <sup>2</sup>
<b>Pr (59)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>6</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>6</sup>	6s <sup>2</sup>	4f <sup>3</sup>
<b>Ga (31)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>1</sup>					





# METAIS DE TRANSIÇÃO f

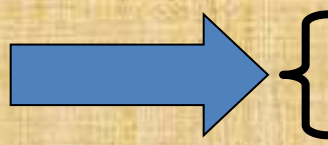
Ao se retirarem os elétrons da camada s, a camada anterior, que está **completa**, fica **externa**. A que sendo **preenchida** (a camada f) está um nível abaixo.

Assim, as **propriedades químicas são muito semelhantes**

terras-raras: Ce - Lu  
actinídeos: Th - Lr

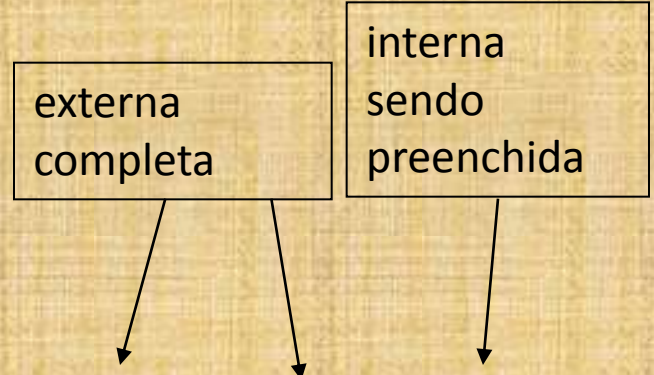
(quando obedecem ao Diagrama de Pauling)

2s															d1	d2
3s															(quando	
4s															21	22
5s															3d	3
6s	f1	f2	f3	f4	f5	f6	f7	f8	f9	f10	f11	f12	f13	f14	39	40
7s															Y	Z
															4d	4
	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	H
	5d	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	5d	5
	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104
	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	K
	6d	6d	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	6d	6



## Exemplos de comportamento metálico

Na (11)	1s2	2s2	2p6	3s1												
Fe (26)	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d6									
Ce (58)	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f2			
Pr (59)	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p6	5s2	4d10	5p6	6s2	4f3			
Ga (31)	1s2	2s2	2p6	3s2	3p6	4s2	3d10	4p1								



	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0						
						2 He 1s						
IIb	[Blue shaded area representing the d-block]											
110							13 Al 3p					
0							31 Zn 3d	31 Ga 4p				
8							49 Cd 4d	50 In 5p	50 Sn 5p			
0							81 Hg 5d	82 Tl 6p	83 Pb 6p	83 Bi 6p	84 Po 6p	
							p1	p2	p3	p4	p5	p6

## Al, Ga, In, Sn, Tl, Pb, Bi, Po

Perdem elétrons *s* e também *p*. Resta a camada anterior, completa.

### Exemplos de comportamento metálico

<b>Na (11)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>1</sup>									
<b>Fe (26)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>6</sup>						
<b>Ce (58)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>6</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>6</sup>	6s <sup>2</sup>	4f <sup>2</sup>
<b>Pr (59)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>6</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>6</sup>	6s <sup>2</sup>	4f <sup>3</sup>
<b>Ga (31)</b>	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>1</sup>					



camada externa, completa

# O que sobra? Os não-metais.

com outros não-metais  
(ou consigo mesmo)

com metais

fazem ligações  
covalentes ou  
iônicas








gases  
nobres

					2 He 1s	
5 B 2p	6 C 2p	7 N 2p	8 O 2p	9 F 2p	10 Ne 2p	
	14 Si 3p	15 P 3p	16 S 3p	17 Cl 3p	18 Ar 3p	
	32 Ge 4p	33 As 4p	34 Se 4p	35 Br 4p	36 Kr 4p	
		51 Sb 5p	52 Te 5p	53 I 5p	54 Xe 5p	
				85 At 6p	86 Rn 6p	
	p1	p2	p3	p4	p5	p6

# METAIS

s		d										p		
Li	Be	<b>Entalpia de ligação</b>												
161	322													
Na	Mg													
108	144													
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga		
90	179	381	470	515	397	285	415	423	422	339	131	272		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	
80	165	420	593	753	659	661	650	558	373	285	112	237	301	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi
79	185	431	619	782	851	778	790	669	565	368	61	181	195	209

2A												3A	4A	5A	6A	7A
Li	Be	<b>NA NATUREZA</b>														
Na	Mg	3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B	Al					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga				
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn			
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi		

-   
Chlorides
-   
Silicates
-   
Carbonates
-   
Phosphates
-   
Oxides
-   
Free metals
-   
Sulfides



# Tipos de arranjos espaciais

- **Moléculas:**

- Unidades “autônomas”, com quantidade de átomos limitada
- Formadas por ligações covalentes
- Unidas entre si por ligações de Van der Waals e pontes de hidrogênio (podendo formar gases, líquidos, sólidos amorfos e sólidos cristalinos)

- **Cristais:**

- Formam arranjos tridimensionais ilimitados
- Principalmente ligações metálicas e iônicas
- Eventualmente, apenas ligações covalentes (diamante, Si ...)
- Podem ser formados por moléculas
- Formam sólidos



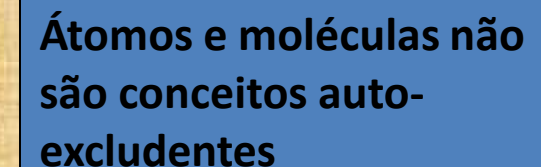
# Tipos de arranjos espaciais de todos os materiais

- **Moléculas:**

- Unidades “autônomas”, com quantidade de átomos limitada
- Formadas por ligações covalentes
- Unidas entre si por ligações de Van der Waals e pontes de hidrogênio (podendo formar gases, líquidos, sólidos amorfos e sólidos cristalinos)

- **Cristais:**

- Formam arranjos tridimensionais ilimitados
- Principalmente ligações metálicas e iônicas
- Eventualmente, apenas ligações covalentes (diamante, Si . . .)
- Podem ser formados por moléculas
- Formam sólidos

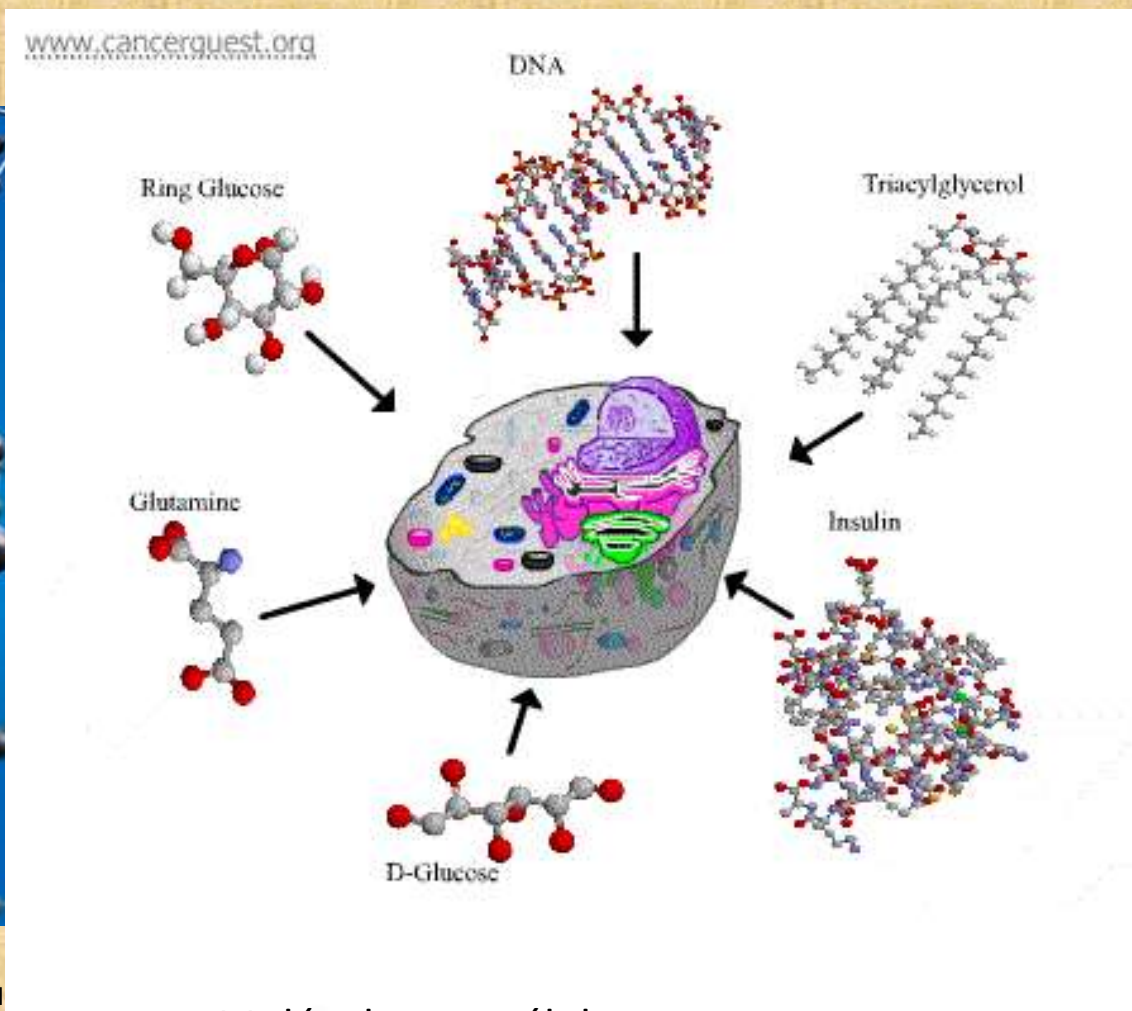


Átomos e moléculas não são conceitos auto-excludentes

# MOLÉCULAS



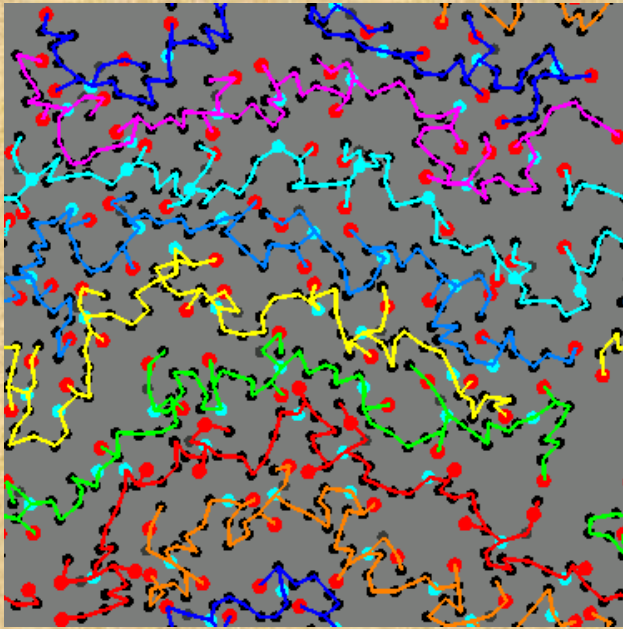
<http://www.innovationcanada.ca/25/en/articles/molecul>



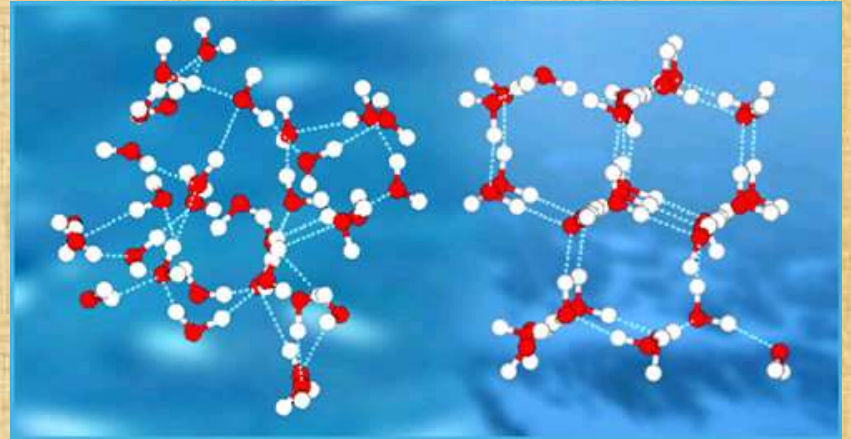
## Moléculas em célula

([www.cancerquest.org/printfriendly.cfm?printsec=8](http://www.cancerquest.org/printfriendly.cfm?printsec=8))

# MOLÉCULAS

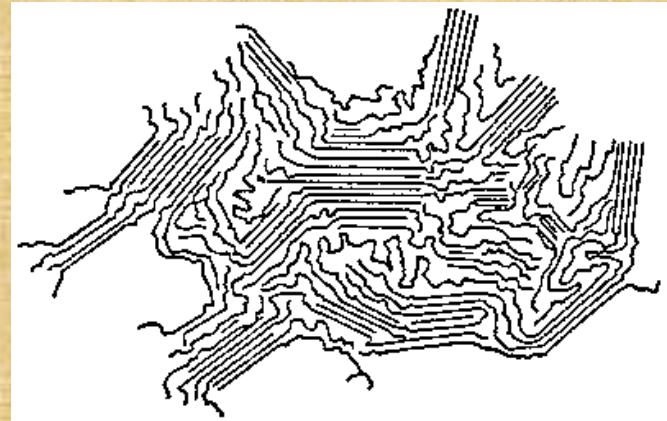


Moléculas em polímero, com algumas ligações cruzadas (bolinhas vermelhas)  
(<http://polymer.bu.edu/~trunfio/about.html>)



## Água líquida e gelo.

Junto a um sólido, algumas moléculas de água líquida assumem estrutura semelhante à do gelo. (<http://www.lbl.gov/Science-Articles/Archive/sabl/2005/February/water-solid.html>)

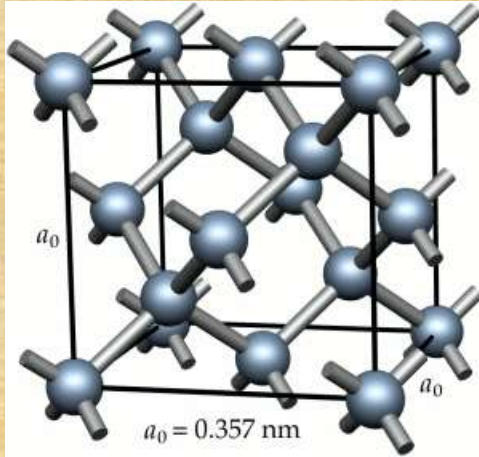


## Regiões cristalinas em polímero

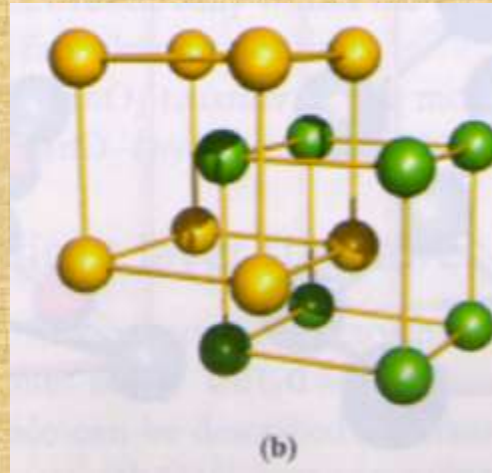
([http://www.tangram.co.uk/TI-Polymer-Shrinkage\\_in\\_plastics.html](http://www.tangram.co.uk/TI-Polymer-Shrinkage_in_plastics.html))



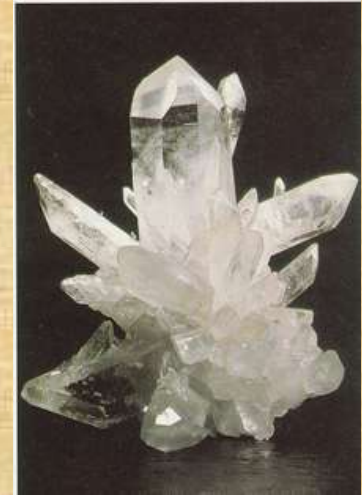
# CRISTAIS



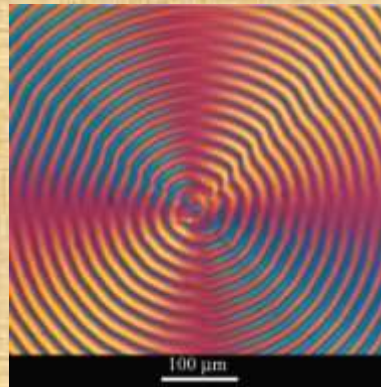
diamante (covalente)



CsCl (iônico)



quartzo



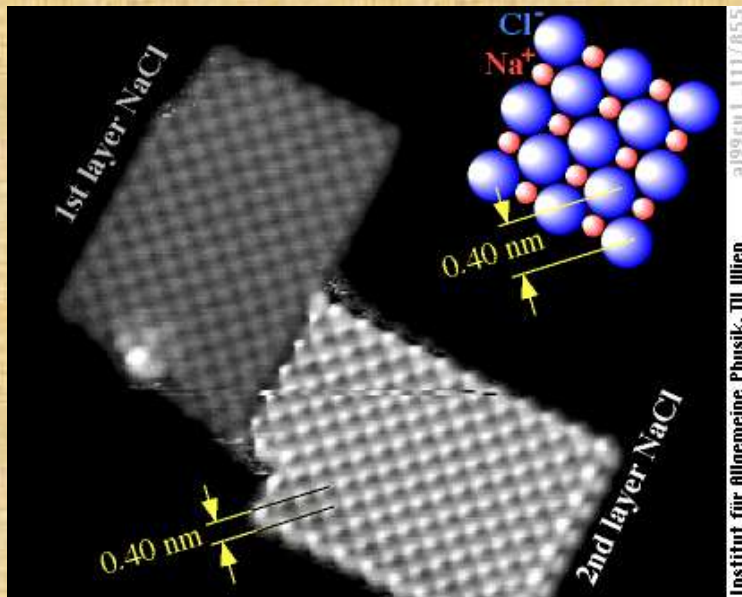
esferulito em polímero



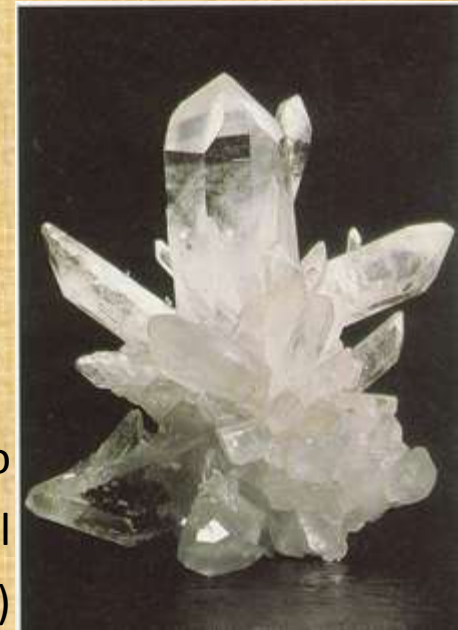
liga metálica

Algo mais sobre cristais? Veja a apostila (pg. 56 a 67) e aguarde apresentação sobre "Cristais".

# Alguns cristais



NaCl (cristal iônico) – imagem de microscópio de tunelamento  
([http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/STM\\_Gallery/nonmetals.html](http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/STM_Gallery/nonmetals.html))



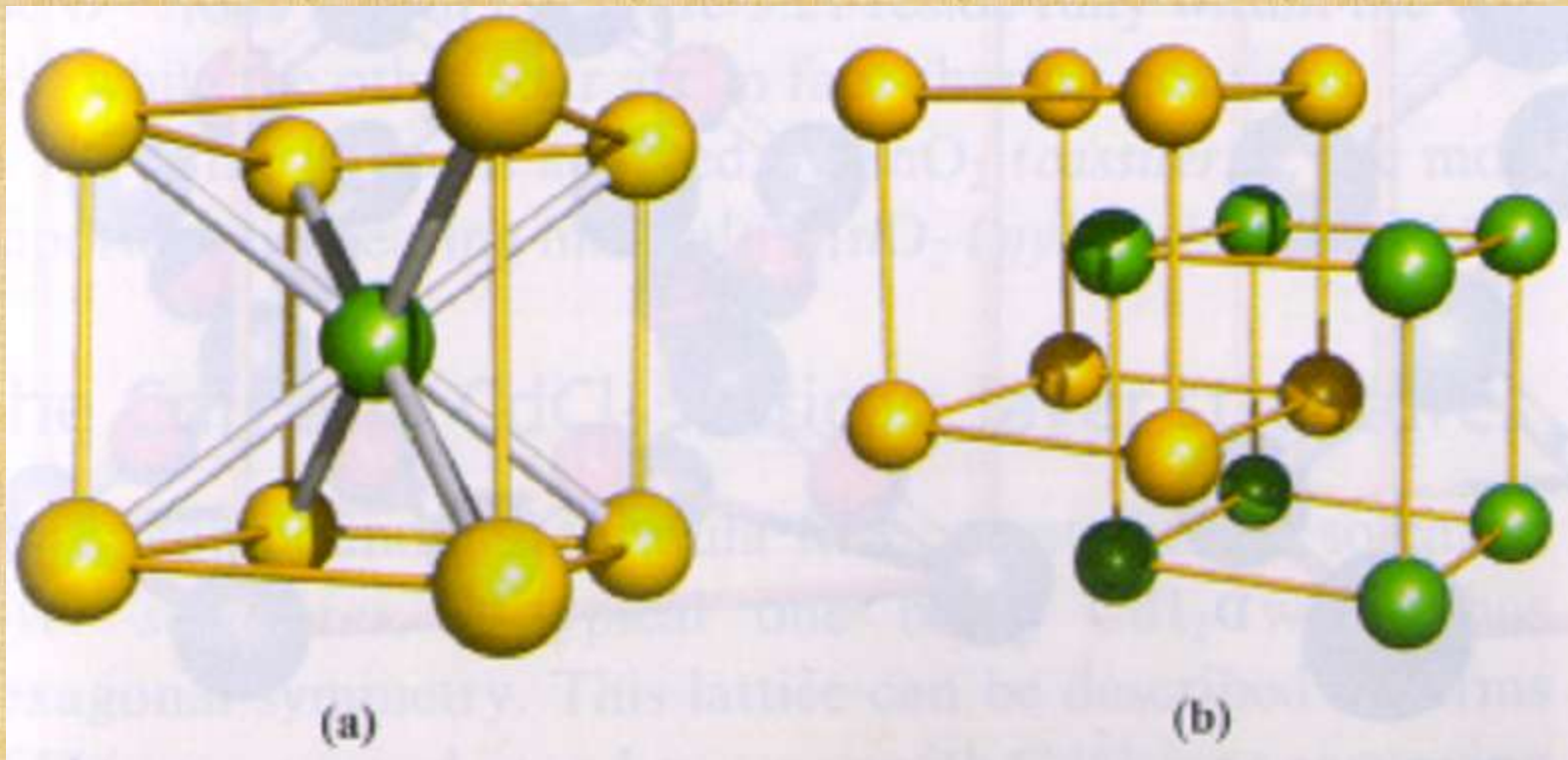
Quartzo  
(SiO<sub>2</sub>, cristal iônico/covalente)



Diamante (cristal covalente)



# Cristais iônicos

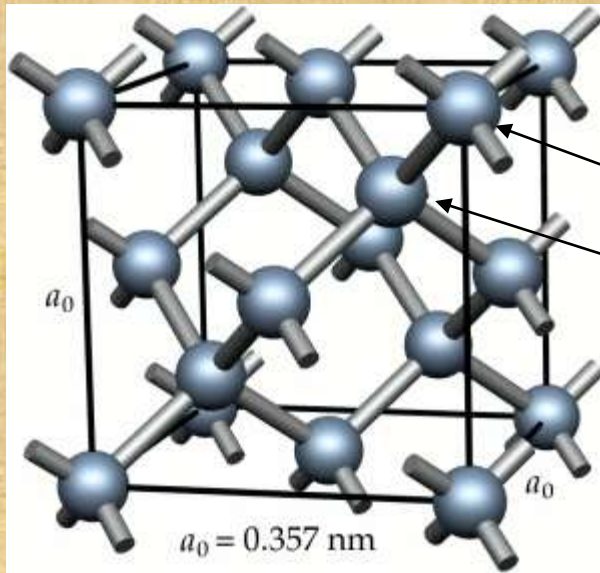


CsCl – número de coordenação 8:8

Será cúbico de corpo centrado?

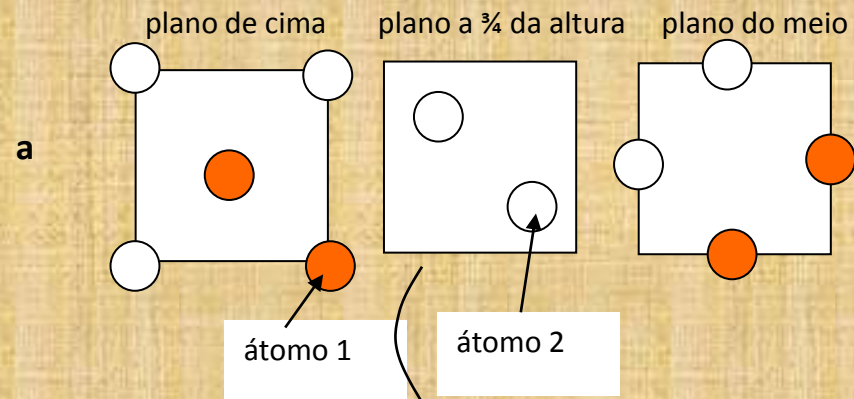
apostila: pg. 46

# cristais covalentes

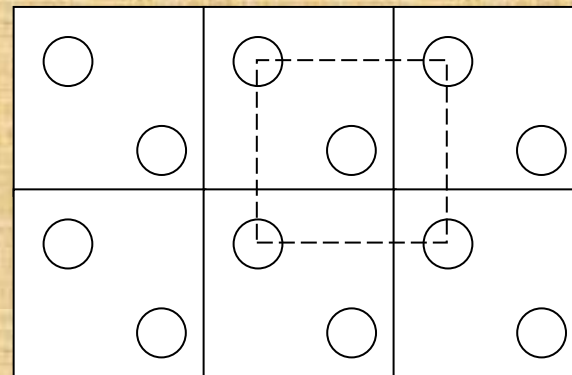


átomo 1

átomo 2

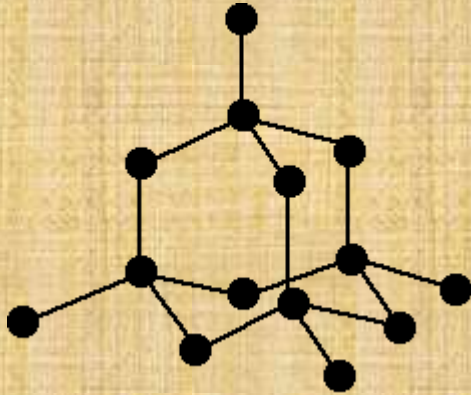


b



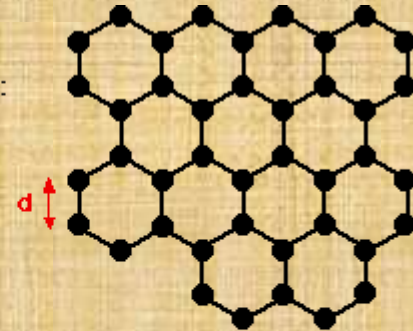
apostila: pg. 25 - 26

... às vezes são chamados “cristais moleculares”

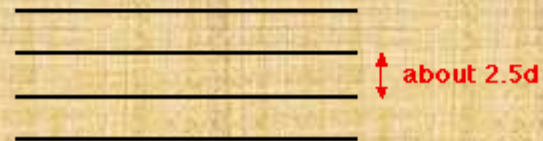


Diamante

atoms in one layer:

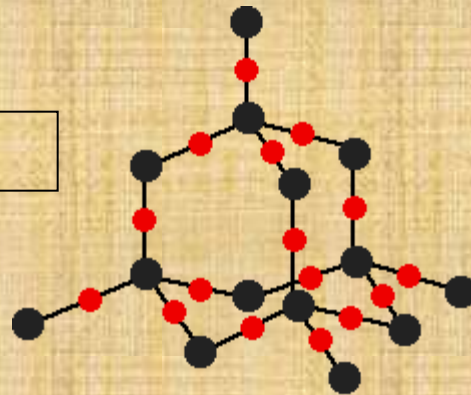


a stack of layers:



Grafite

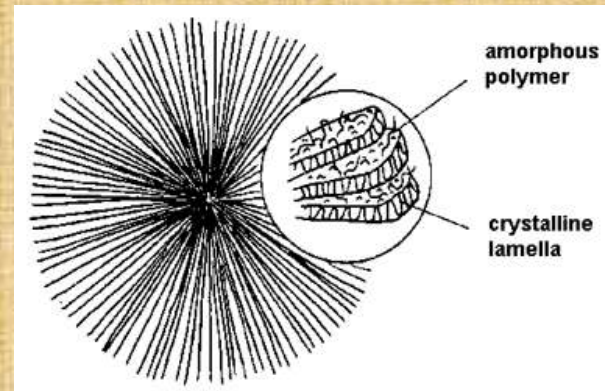
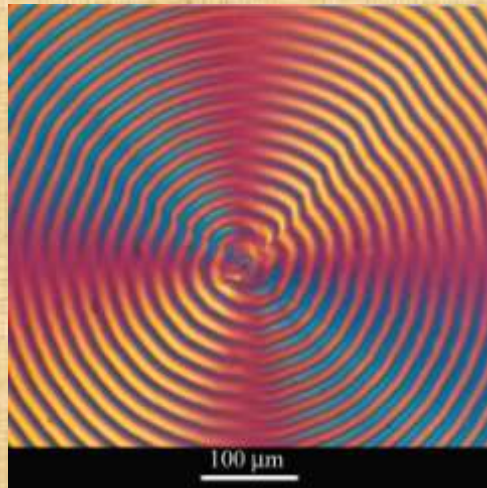
apostila: pg. 25 - 26



Sílica



# Cristais de polímeros

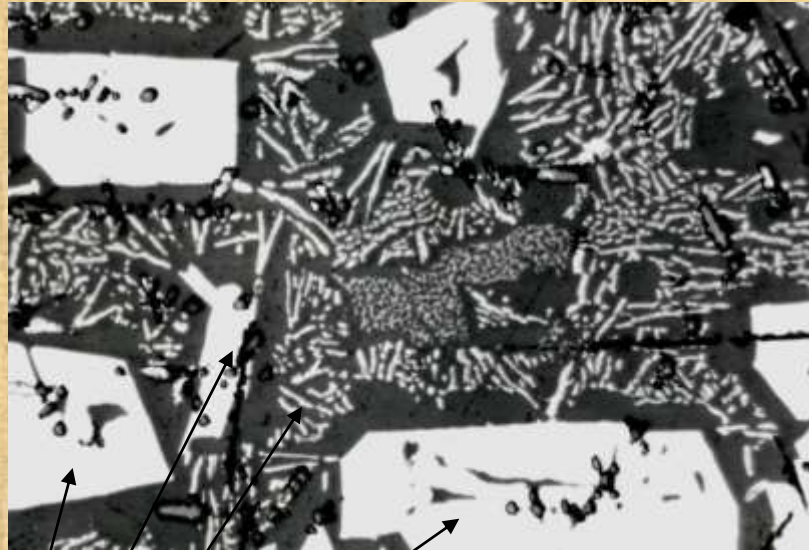


Esferulito em polihidroxibutirato

(microscopia óptica com luz polarizada)

<http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/polymers/spherulites.php>

# Cristais em material metálico



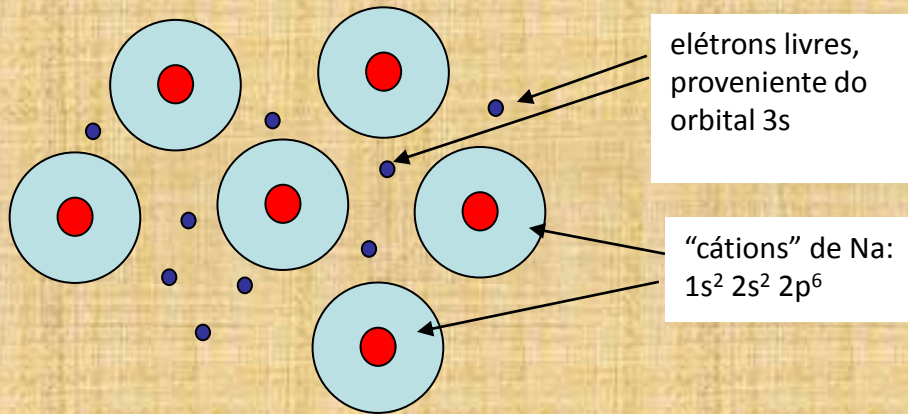
cristais

Microscópio óptico,  
liga Pr-Fe-B

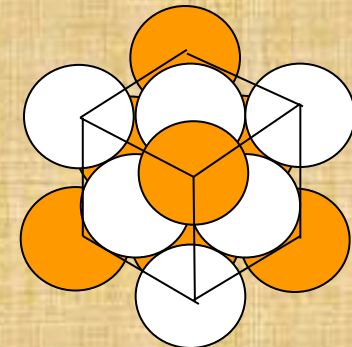
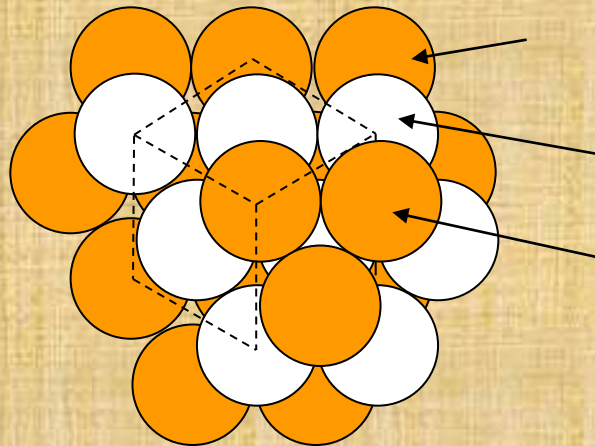
(foto A. C. Neiva)



# Cristais metálicos



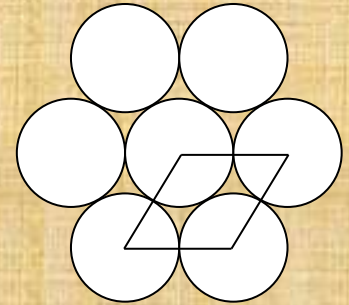
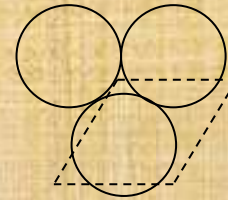
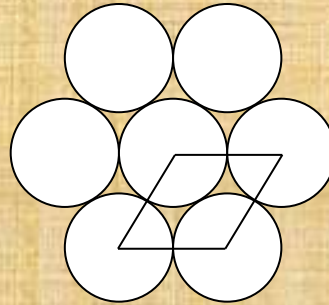
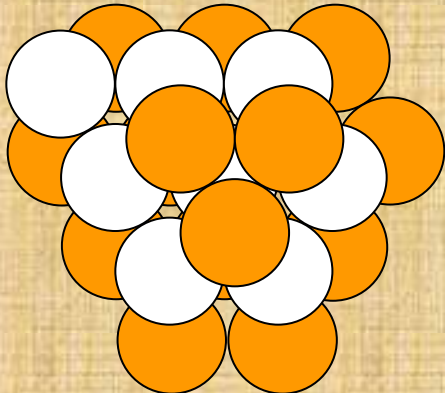
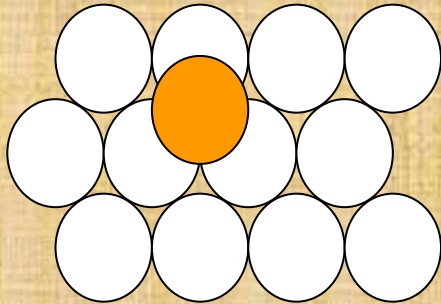
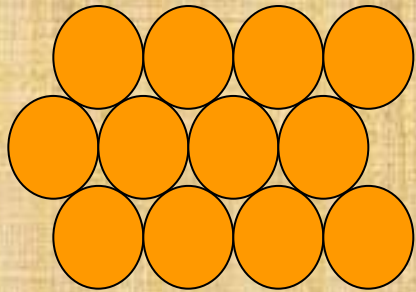
**metais**



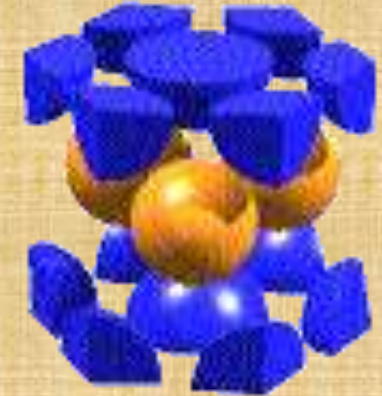
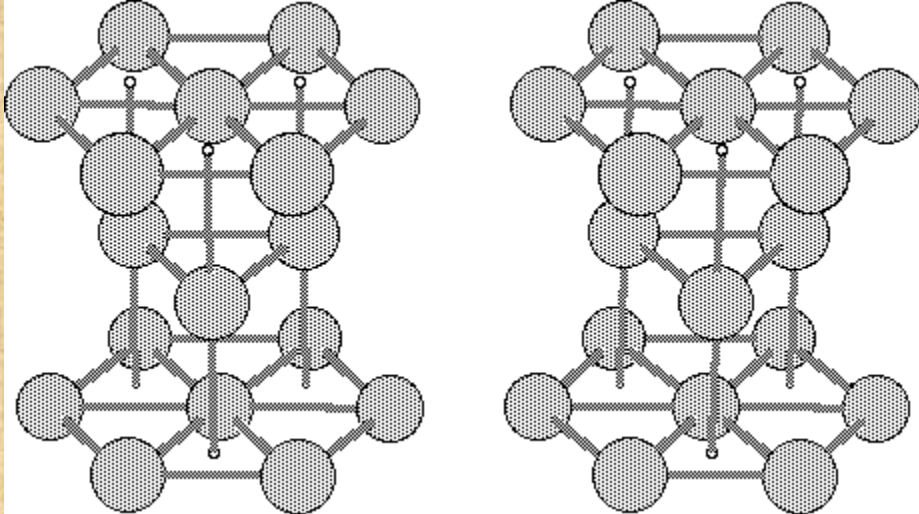
# Cristais

- **Número de coordenação:**
  - **Depende do arranjo cristalino assumido pelos átomos.**
- **Admitimos que os átomos ou íons são esferas rígidas.**
- **Estruturas cristalinas mais comuns.**

# Hexagonal compacto

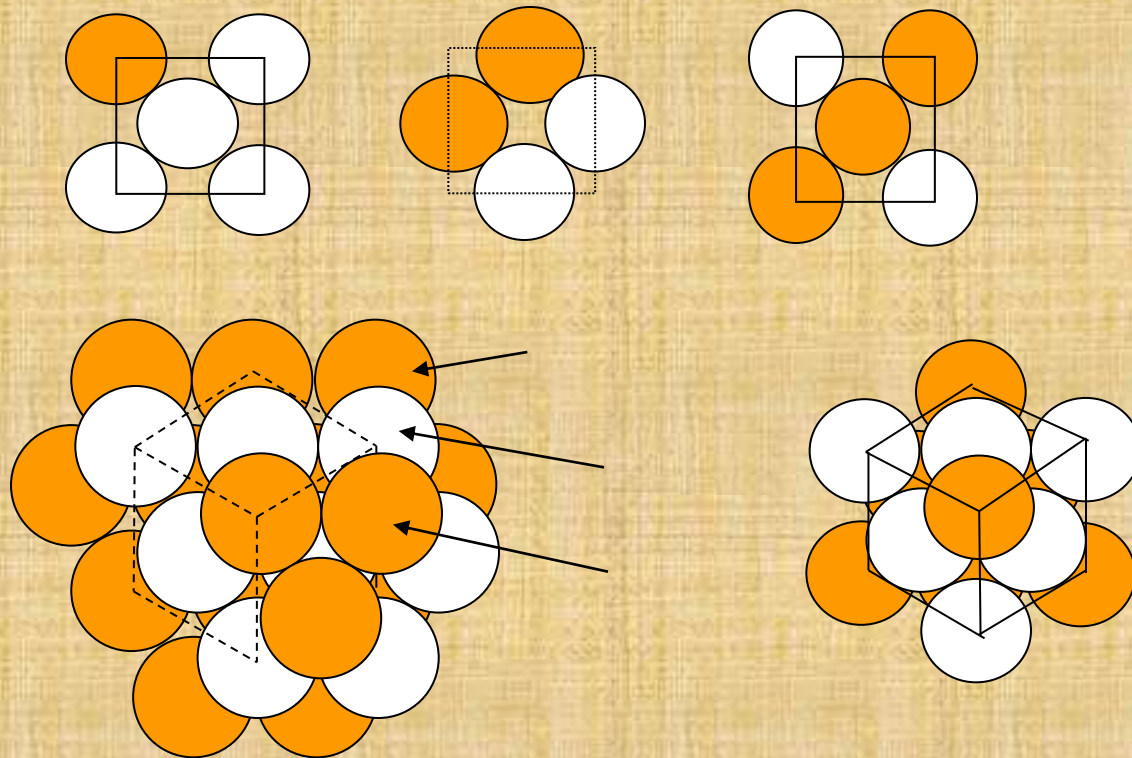


# HC



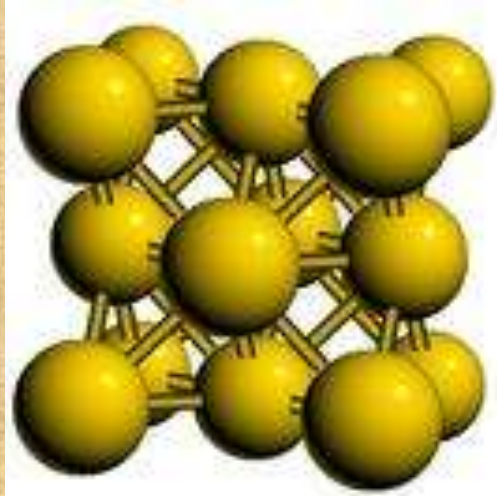
- Número de coordenação.
- Número de átomos por célula unitária.
- Fator de empacotamento.
- Cálculo da densidade.

# Cúbico de face centrada



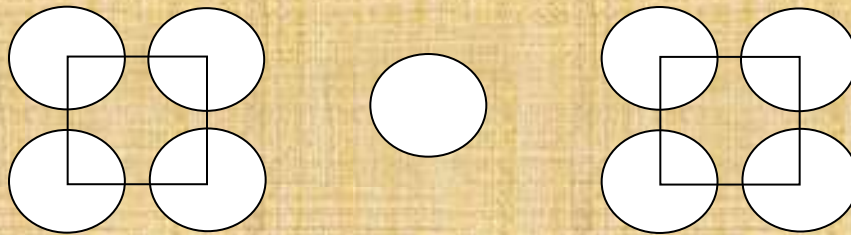


# CFC

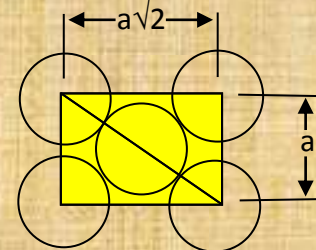
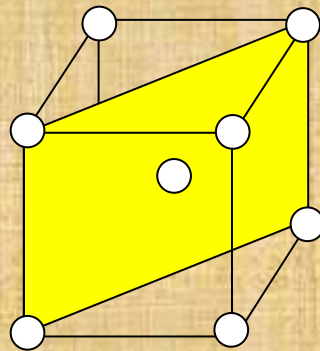


- Número de coordenação.
- Número de átomos por célula unitária.
- Fator de empacotamento.
- Cálculo da densidade.

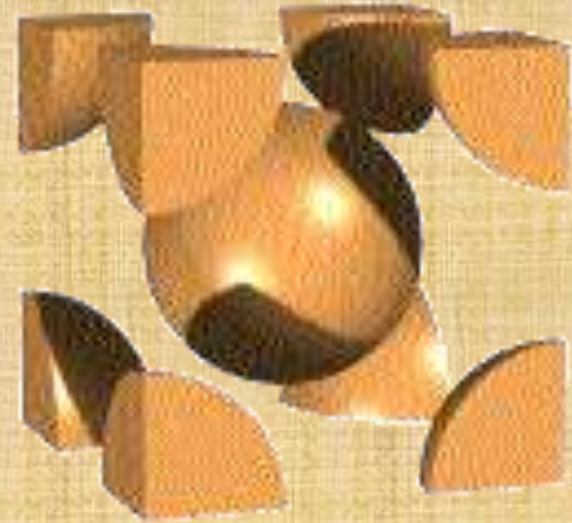
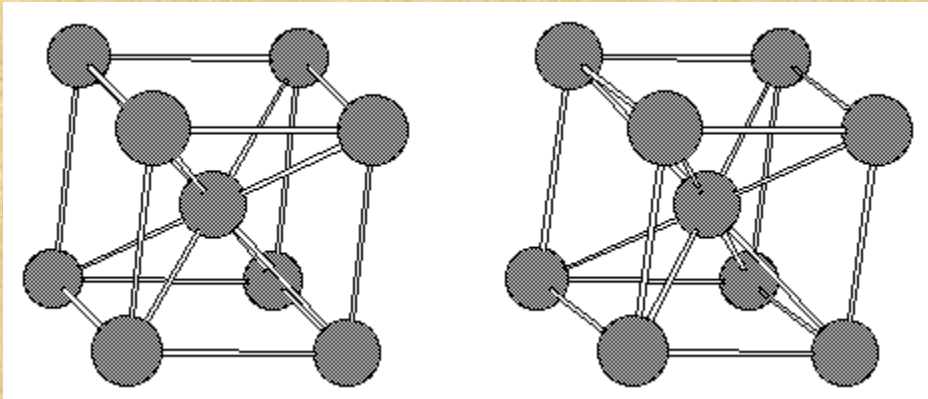
# Cúbico de corpo centrado



Distância:  
facilmente  
determinável  
por difração de  
raios X



# CCC: 2 átomos por célula



- Número de coordenação.
- Número de átomos por célula unitária.
- Fator de empacotamento.
- Cálculo da densidade.

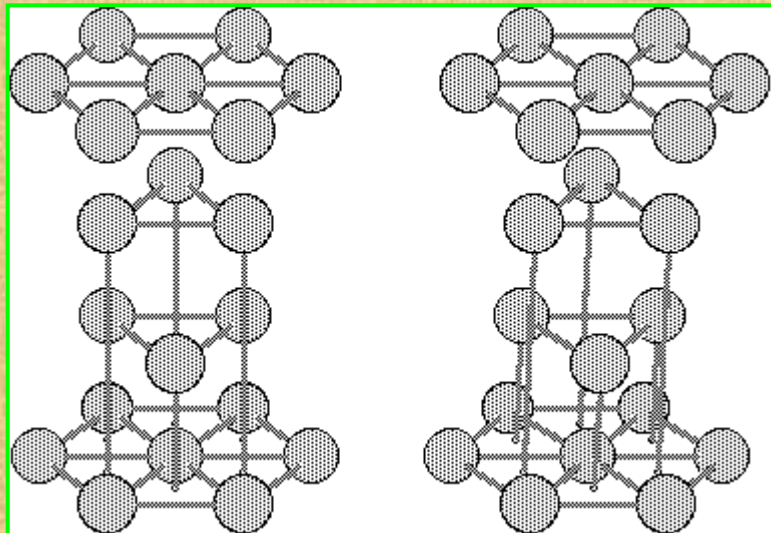
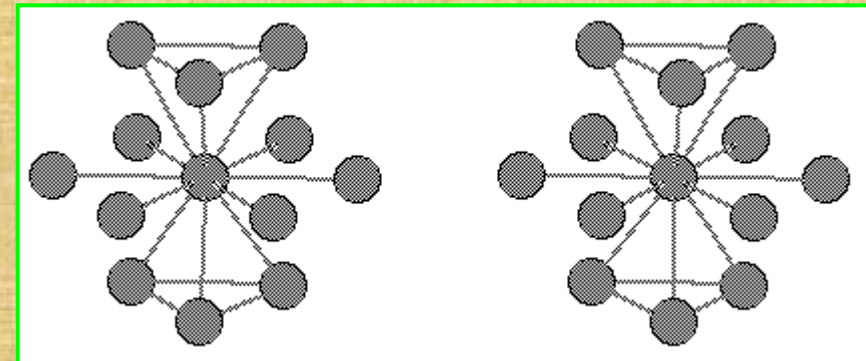
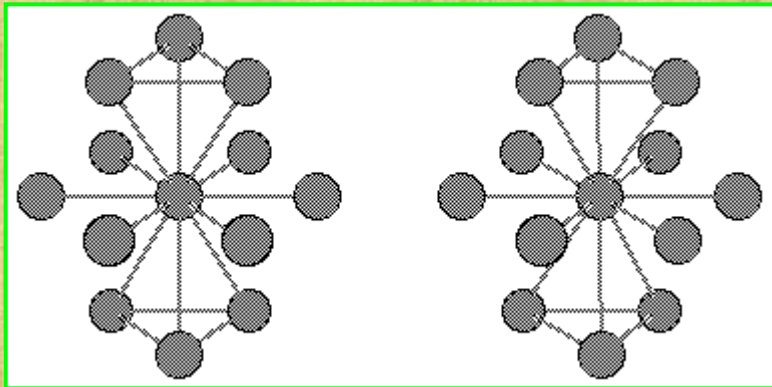




# Diferenciando o CFC do HC

CFC

HC



E isso tem importância prática?

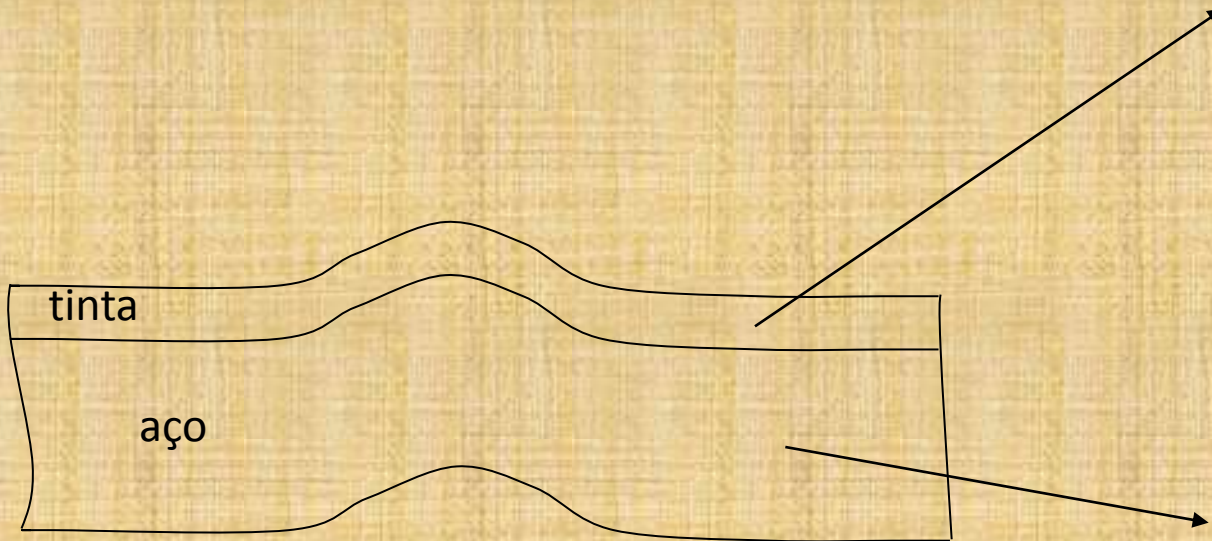


# E isso tem importância prática?

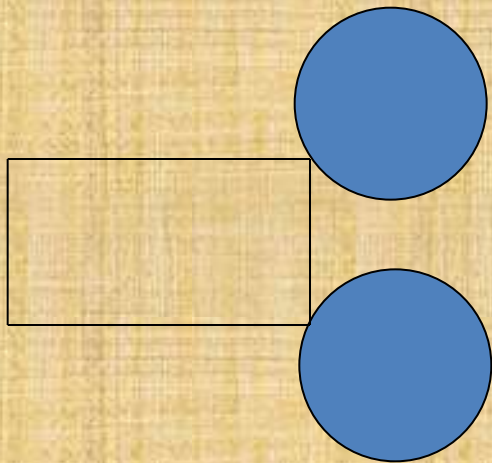
- Típicos HC: Mg e Zn (duros, frágeis)
- Típicos CFC: Cu, Au, Ag (maleáveis)
  
- HC e CFC são muito parecidos (têm o mesmo tipo de plano compacto). Só muda a seqüência de empilhamento.
  
- Maleabilidade tem a ver com deformação plástica. O que é deformação plástica em um metal?

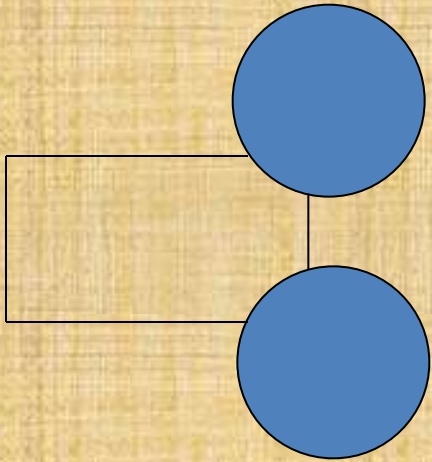
repetindo...

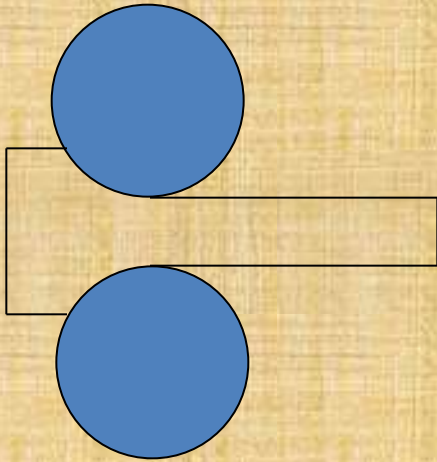
- Seja uma chapa metálica com um ressalto: como obtê-la?



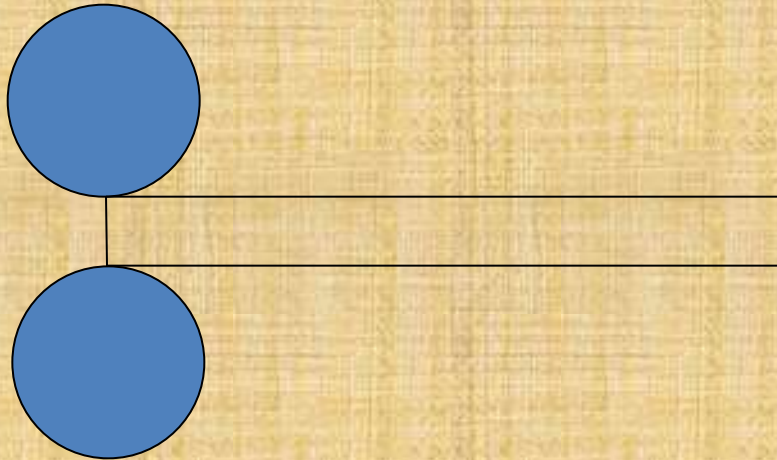
# Parte-se de uma chapa grossa

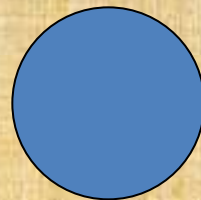
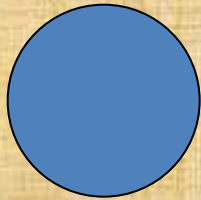


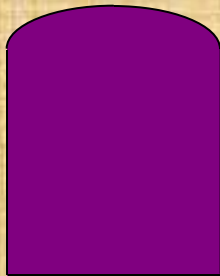
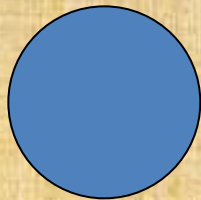
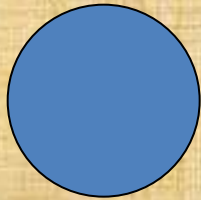


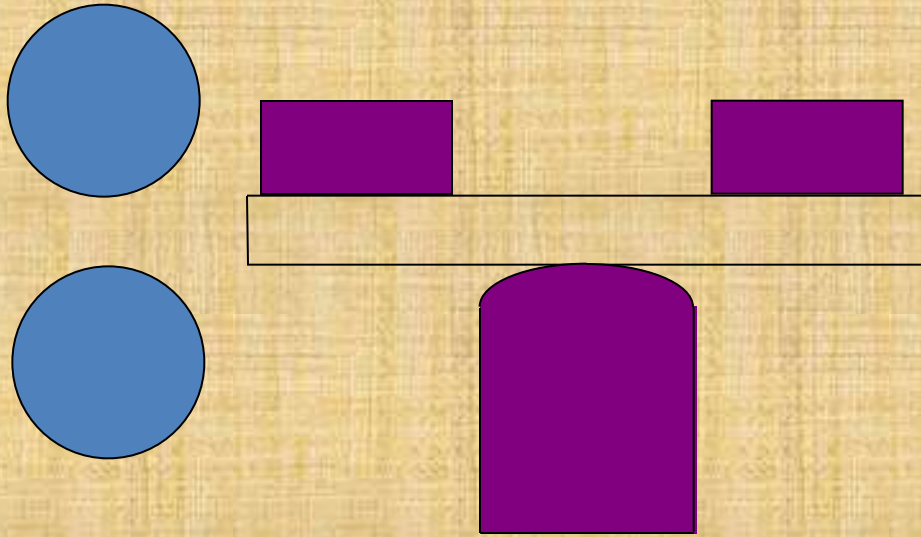


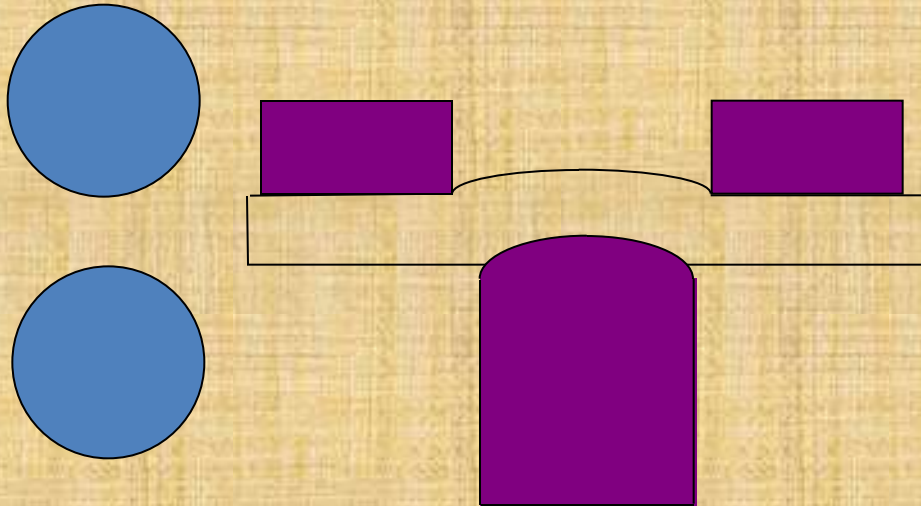






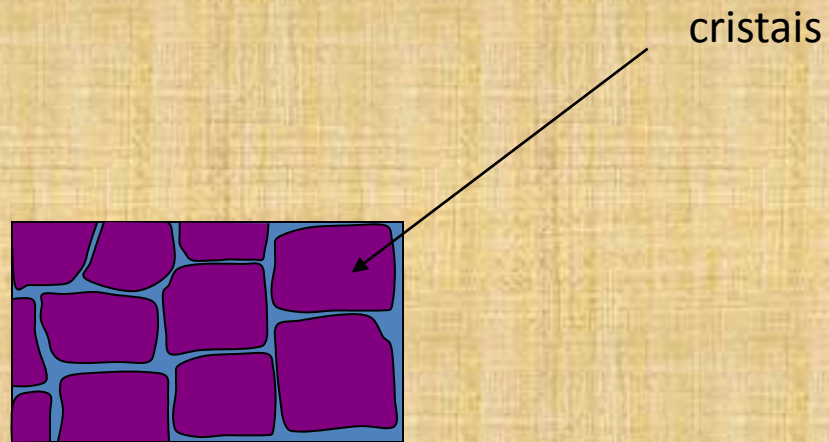


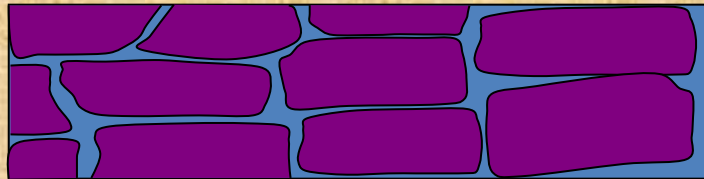


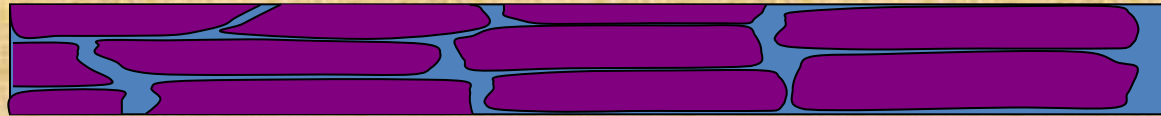




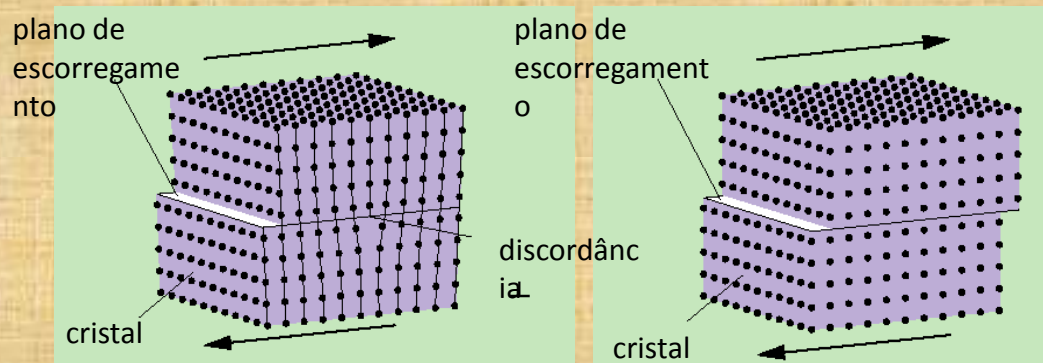
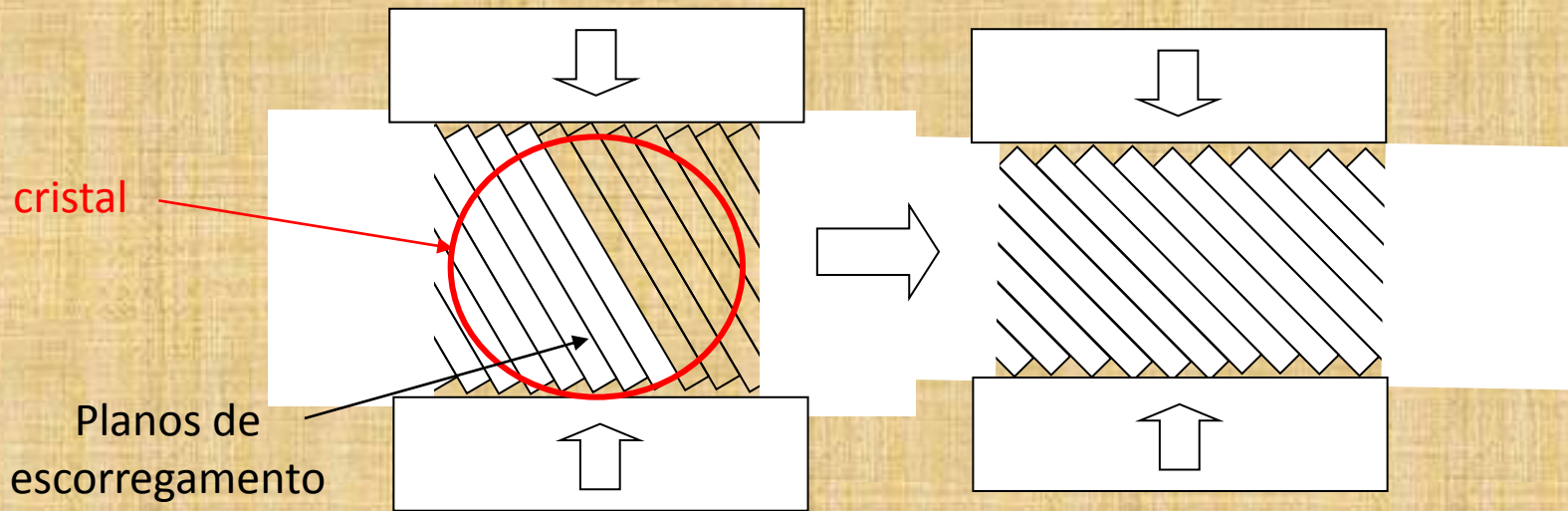
# Vejamos isto em escala microscópica











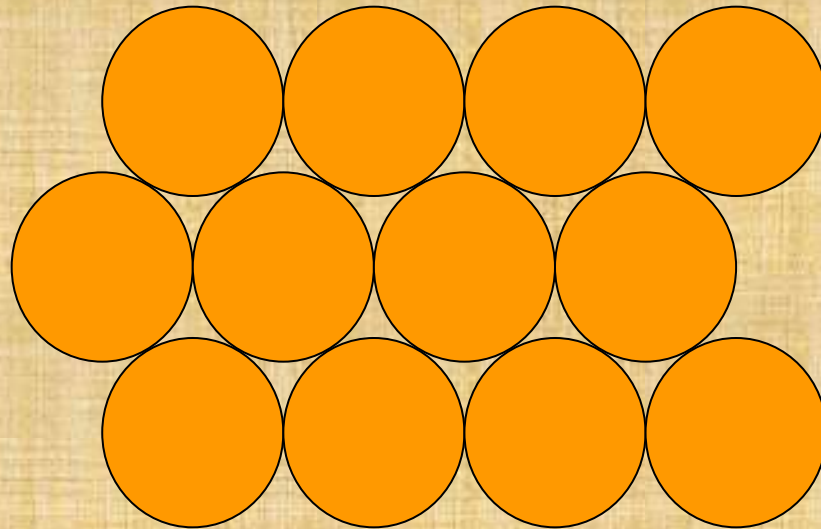
apostila: pg. 71



- Onde é mais fácil ocorrer escorregamento: HC ou CFC?
- HC – planos compactos em apenas uma direção
- CFC – planos compactos em várias direções (por uma questão de simetria)

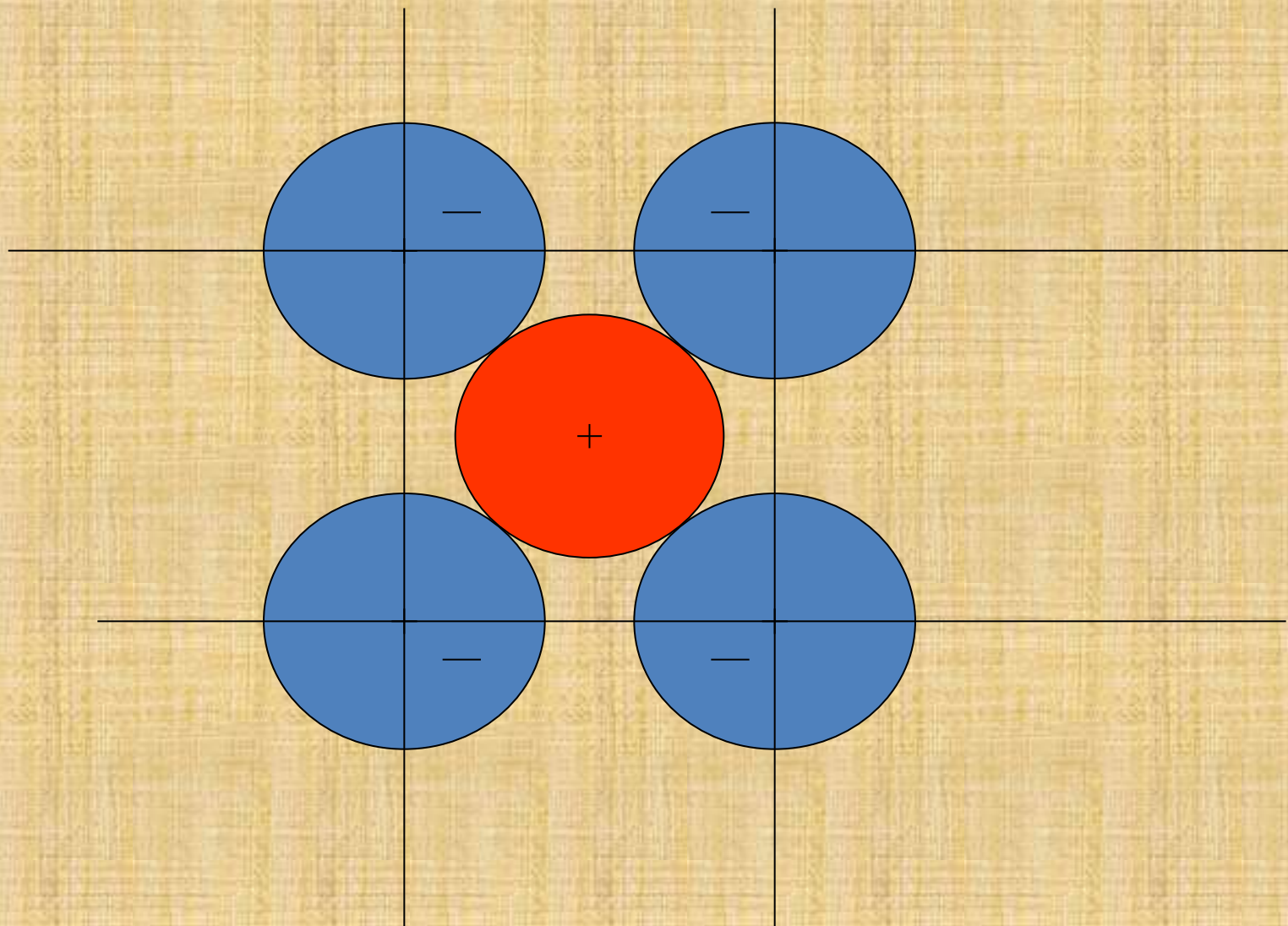
# E se forem íons?

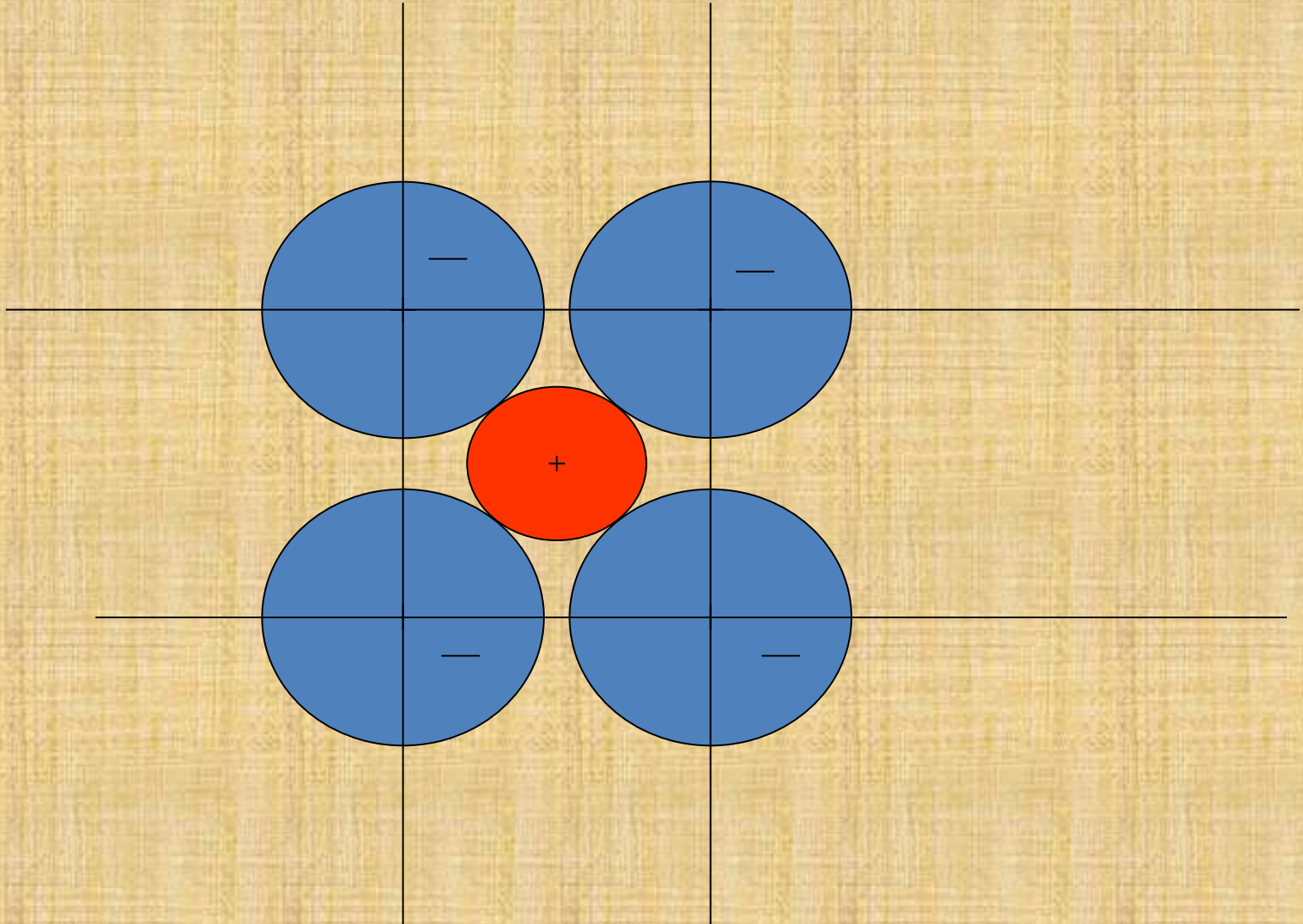
- Dá para fazermos um plano como no HC ou no CFC?

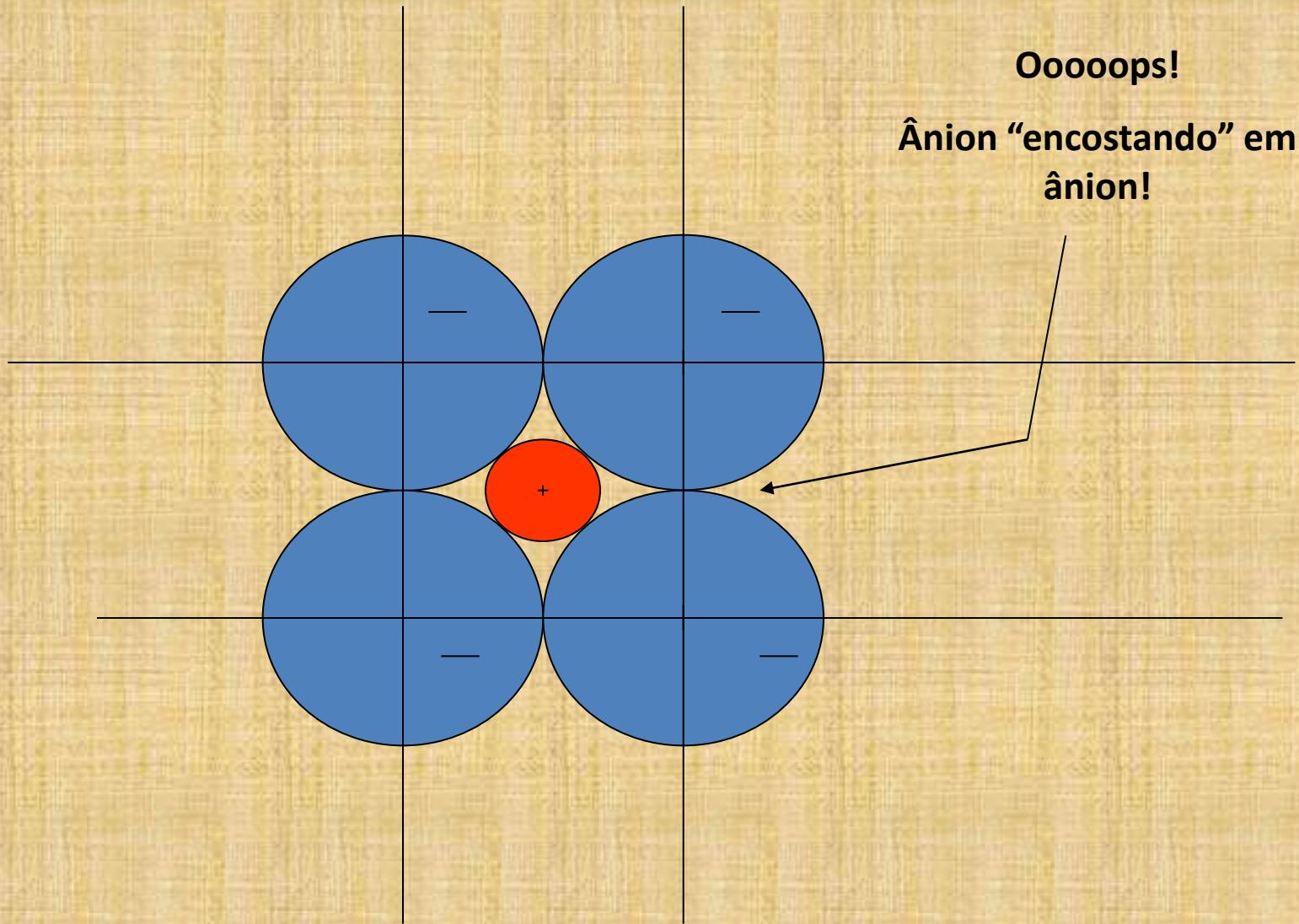


Não dá.

**Com íons: o tamanho relativo define a possibilidade de diferentes estruturas**



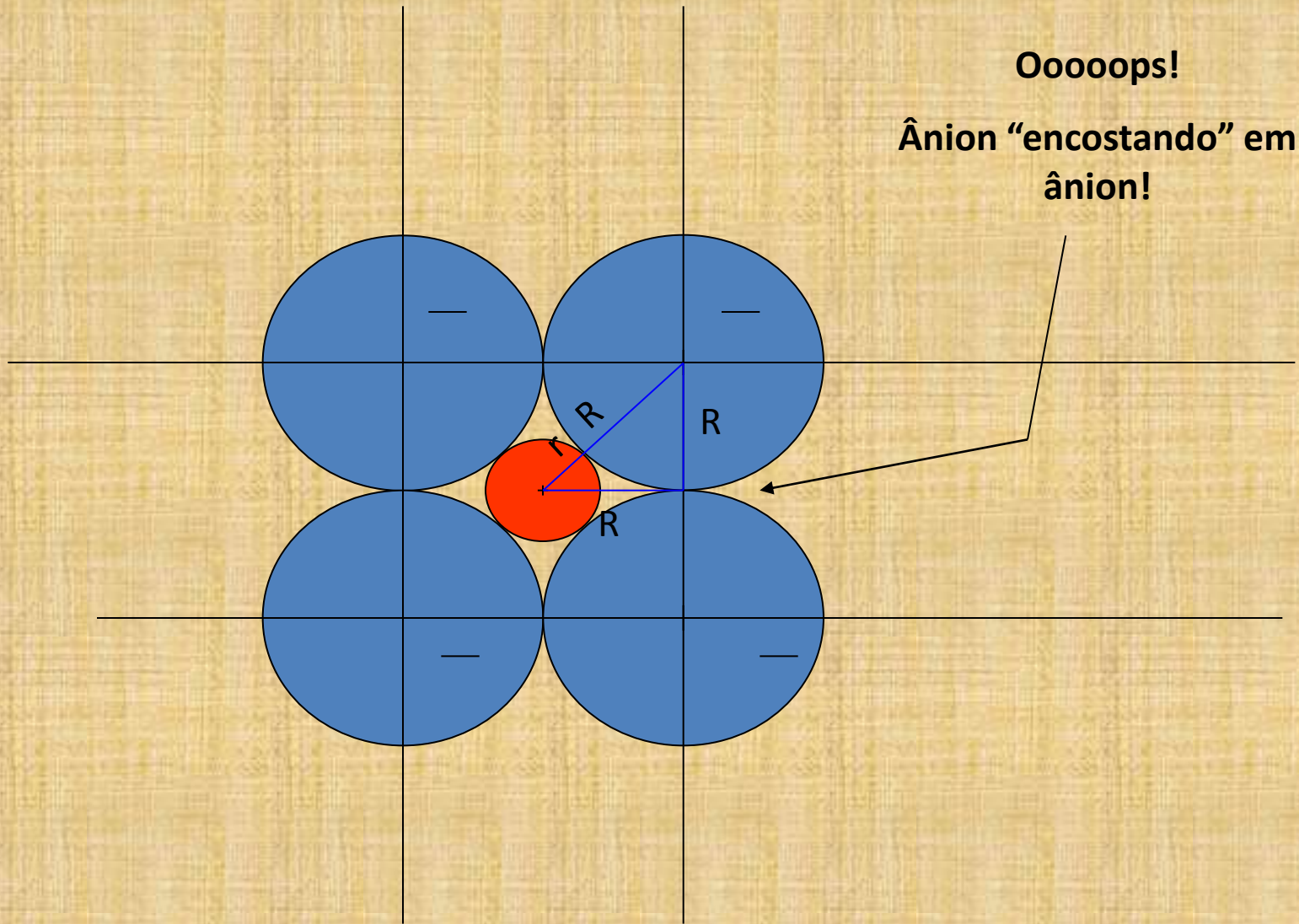




Oooooops!

Ânion “encostando” em  
ânion!

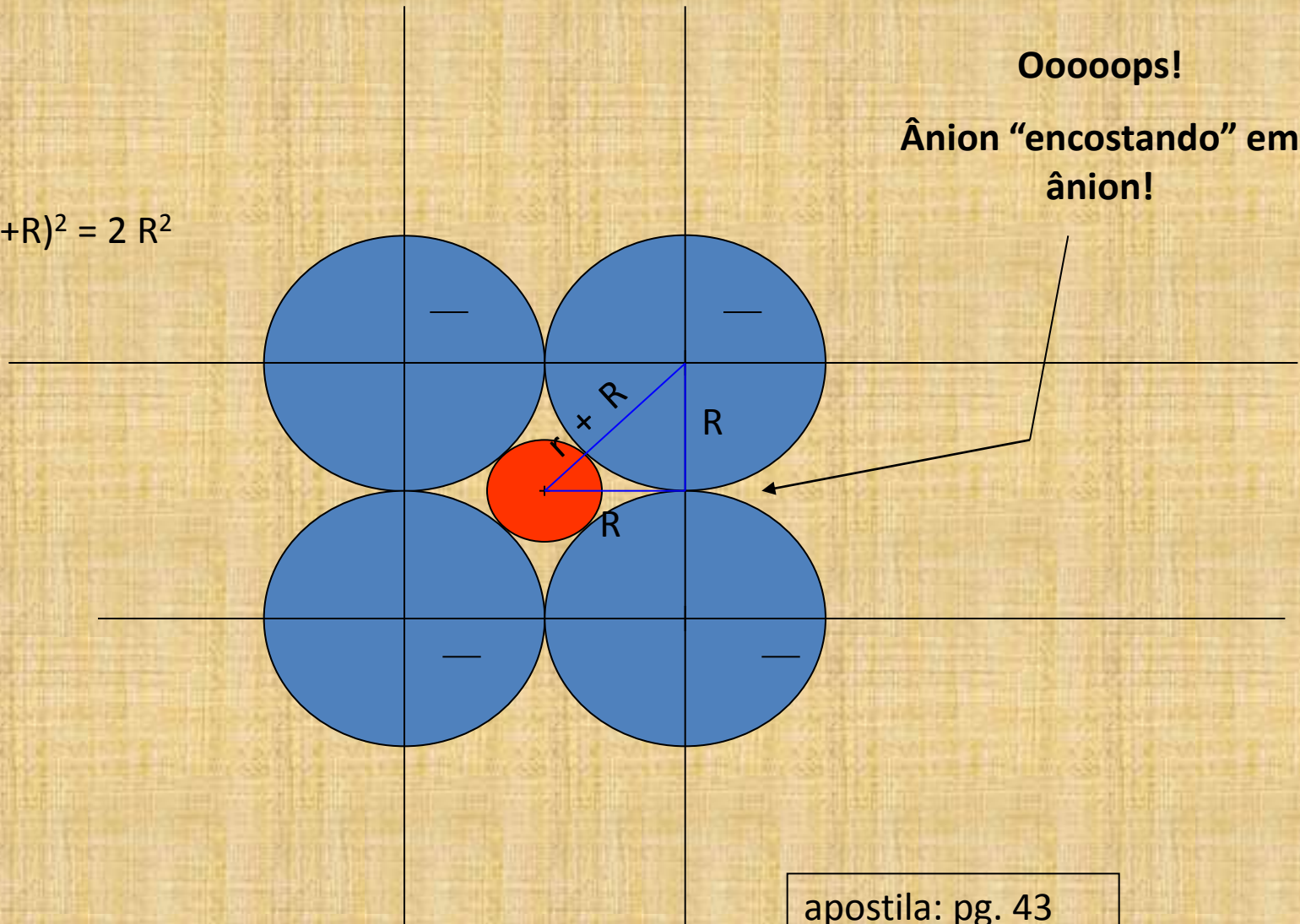


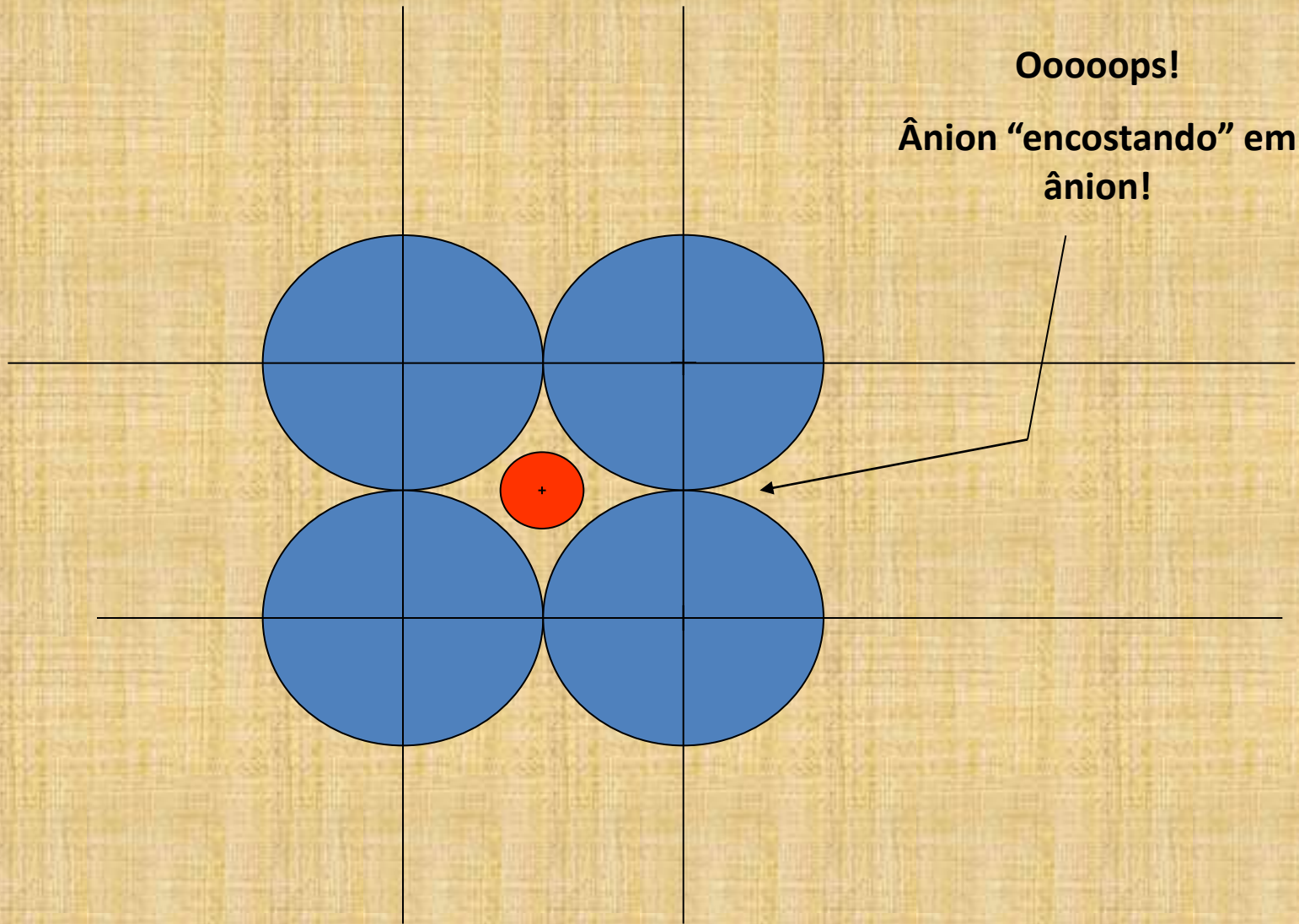


Oooooops!

Ânion "encostando" em ânion!

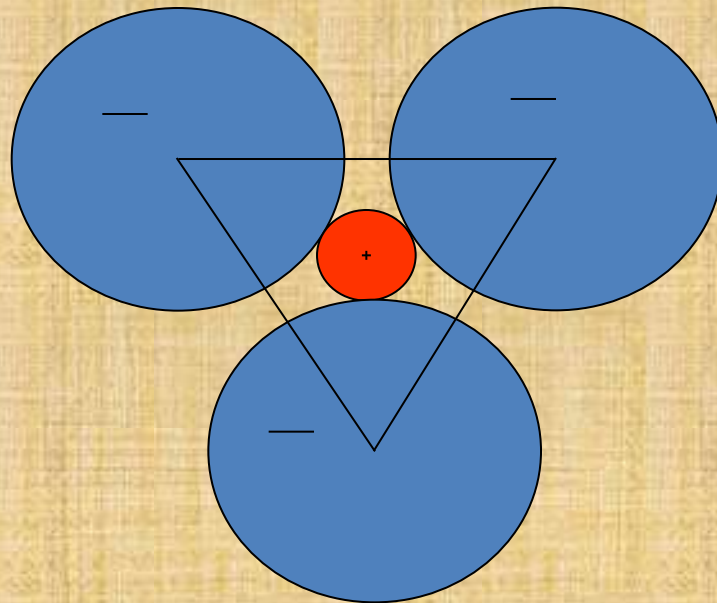
$$(r+R)^2 = 2 R^2$$

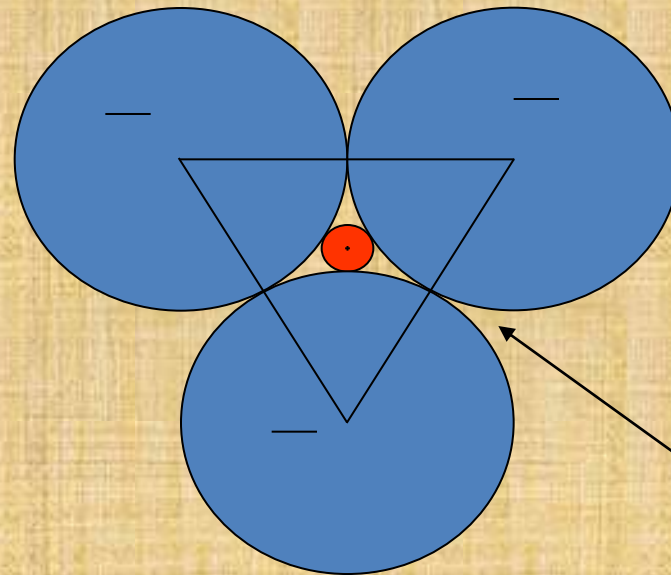




Oooooops!

Ânion "encostando" em  
ânion!





Oooooops!

Ânion “encostando” em  
ânion!



## Geometrias de coordenação em cristais iônicos

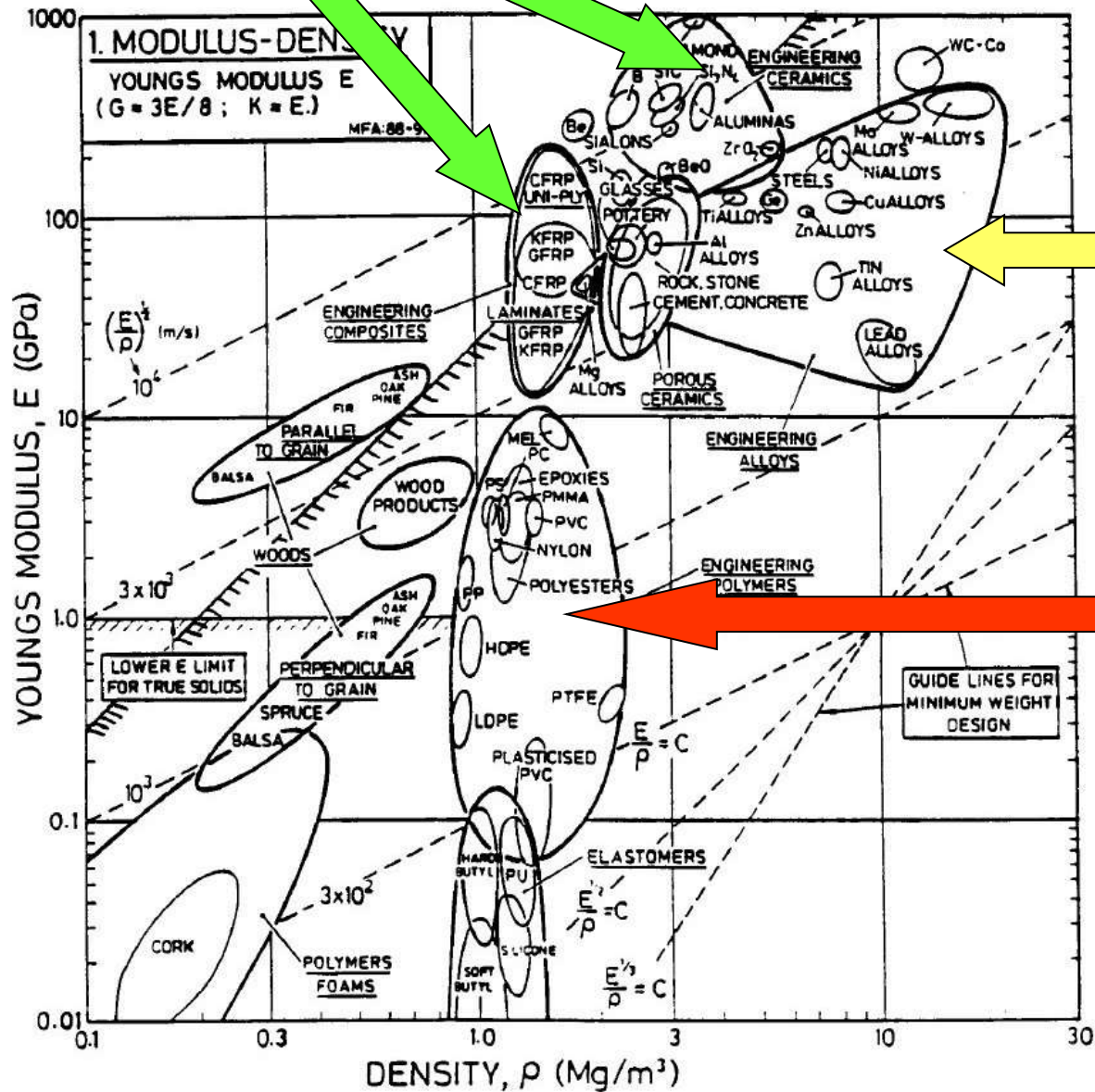
Número de Coordenação	Geometria	Relação limite de raios	Íon coordenado	Composto
8	cúbica	0,732	Cs, Cl	CsCl
6	octaédrica	0,414	Na, Cl Ti Al	NaCl TiO <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
6	Prisma trigonal	0,528	Ni	NiAs
4	tetraédrica	0,225	F Zn, S Be	CaF <sub>2</sub> ZnS BeF <sub>2</sub>
3	Trigonal plana	0,155	O	TiO <sub>2</sub>

tipos de materiais vs ligações

# Grandes grupos de materiais

- Polímeros (plásticos, borracha, madeiras, resinas, tintas ...) – moléculas longas, eventualmente ordenadas (esferulitos)
- Cerâmicas, pedras – cristais de óxidos ou outros compostos, e regiões amorfas (ou seja, não-cristalinas) entre eles
- Metais – cristais simples (por exemplo Fe CFC), cristais mais complicados (por exemplo  $\text{Fe}_3\text{C}$ )

cerâmicos



metais

polímeros densos



# Transições entre ligações

Metálicas

Li

Ag

Na<sub>3</sub>Bi

Sn

Na<sub>3</sub>Sb

As

Na<sub>3</sub>As

Te

Na<sub>3</sub>P

S

Na<sub>3</sub>N

I<sub>2</sub>

ClF

OF<sub>2</sub>

NF<sub>3</sub>

CCl<sub>4</sub>

BF<sub>3</sub>

BeF<sub>2</sub>

Na<sub>2</sub>O

F<sub>2</sub>

IF<sub>7</sub>

SF<sub>6</sub>

PF<sub>5</sub>

SiF<sub>4</sub>

AlF<sub>3</sub>

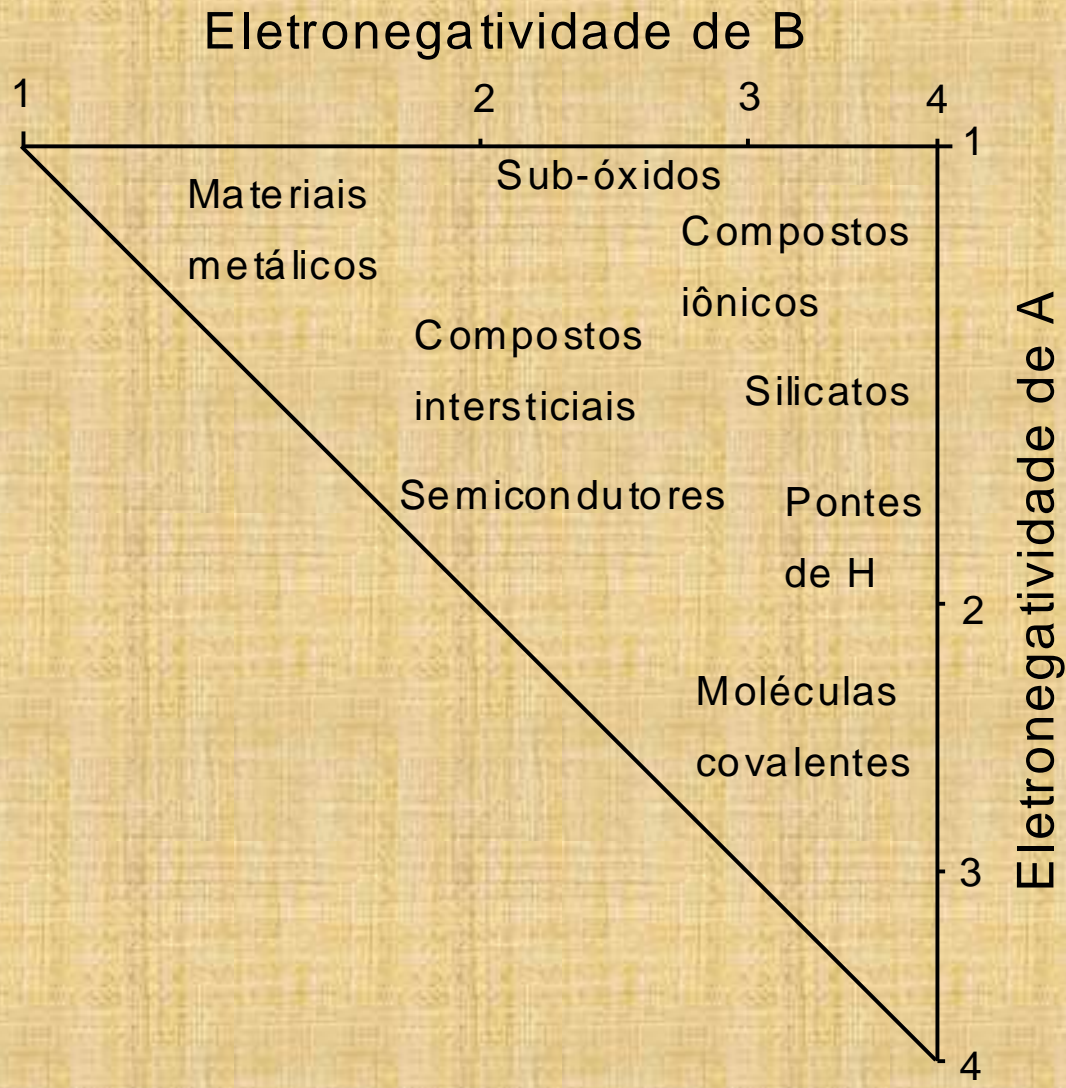
MgF<sub>2</sub>

CsF

Covalentes

Iônicas



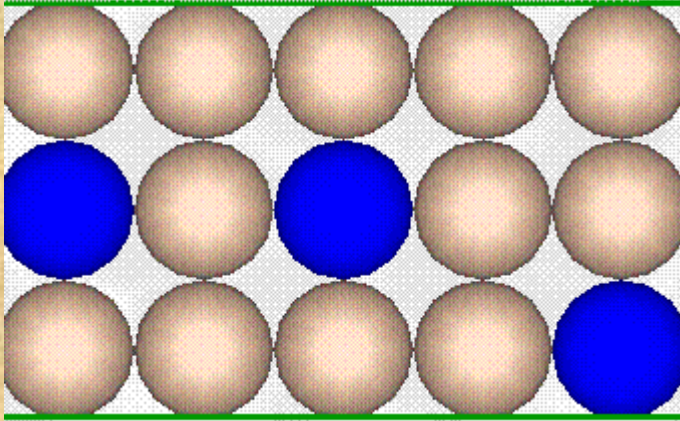


# LIGAÇÕES METÁLICAS

- Interação eletrostática entre os cátions e os elétrons livres **não depende da direção no espaço** → **estruturas cristalinas compactas** ou ao menos cúbicas
- **Soluções sólidas cristalinas substitucionais** (quando os cátions têm tamanhos não muito dissimilares) ou **intersticiais** (no caso oposto)

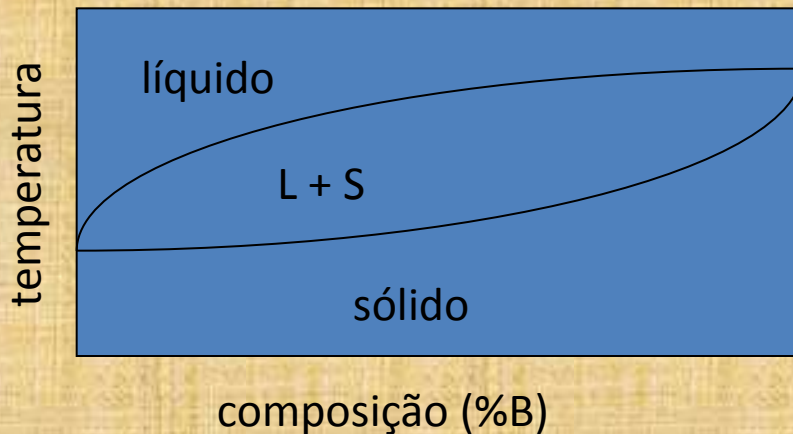
**Solução sólida:** átomos B dissolvem-se na estrutura dos átomos A, em quais quantidades (usualmente dentro de uma faixa)

# solução sólida substitucional

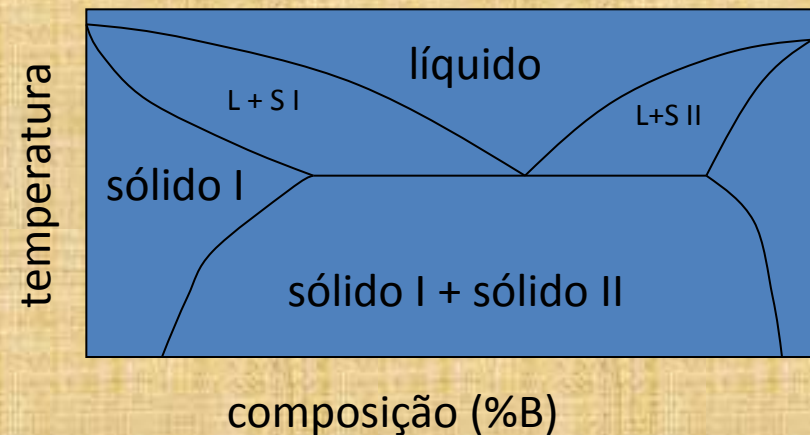


CFC - cobre-níquel, ouro-prata, etc

CCC – molibdêno-tungstênio, etc

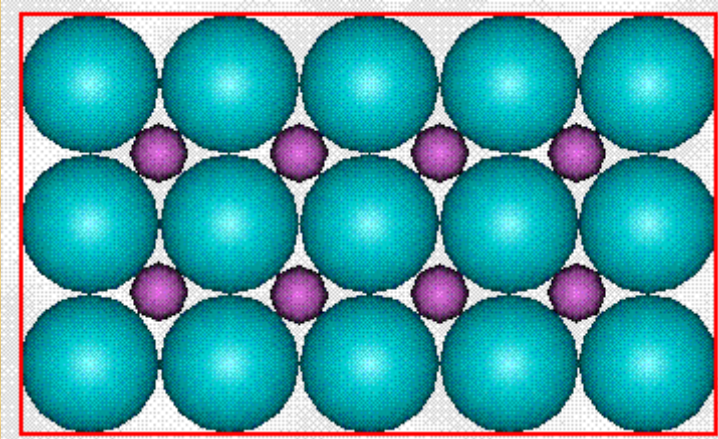


Completa: qualquer composição é possível



Parcial: faixas de composições possíveis

# solução sólida intersticial



aço

C em Fe CFC

C em Fe CCC

Fe CFC – estável em alta temperatura

Fe CCC – estável em alta temperatura

C em Fe CFC – alta solubilidade

C em Fe CCC – baixa solubilidade

resfriamento lento: o carbono forma carbonetos

resfriamento rápido: o carbono não tem tempo de formar carbonetos, e forma estrutura distorcida, muito dura



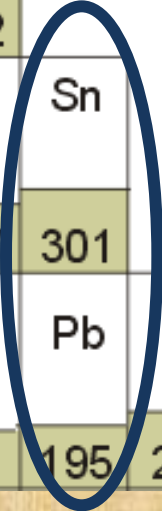
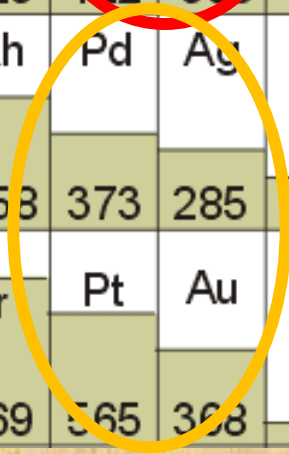
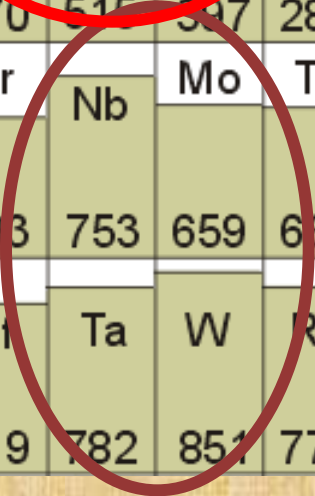
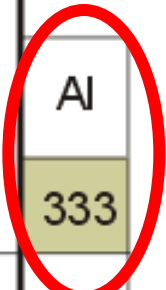
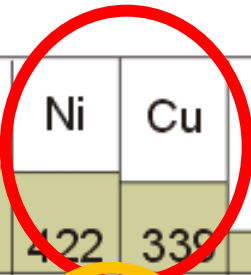
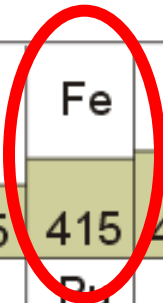
- **não existem ligações rígidas** nestes cristais (não são covalentes)
- **não existem íons com sinais opostos** (não são iônicos)



é possível realizar escorregamento entre planos compactos vizinhos, o que possibilita a **deformação plástica** dos materiais metálicos (rever primeira aula)



<i>s</i>		<i>d</i>										<i>p</i>		
Li	Be													
161	322													
Na	Mg											Al		
108	144											333		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga		
90	179	381	470	515	597	285	415	423	422	339	131	272		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	
80	165	420	593	753	659	661	650	553	373	285	112	237	301	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi
79	185	431	619	782	851	778	790	669	565	398	61	181	195	209



<b>famílias</b>	<b>constituintes</b>	<b>características de interesse</b>
<b>Aços-carbono e aços baixa-liga</b>	Fe, C (Mn, Ni, Cr, Mo, V, Nb, B)	baixo custo dutilidade (conformação mecânica) resistência mecânica
<b>Aços alta-liga</b> (aços inoxidáveis, aços resistentes ao calor, aços-ferramenta)	Fe, C (Mn, Ni, Cr, Mo, V, Nb, W, Co, Cu, Si)	resistência a corrosão trabalho em temperaturas elevadas elevada dureza elevada resistência mecânica
<b>Ferros fundidos</b>	Fe, C (Si, Mn, etc)	baixo custo boa formabilidade (fundição) dureza, resistência à abrasão amortecimento de vibrações
<b>Ligas ferrosas solidificadas rapidamente</b> (amorfas ou de grão fino)	Fe, B (Si, Cr, Ni, Mo, P)	baixa coercividade magnética alta resistência mecânica resistência à corrosão
<b>Superligas ferrosas</b>	Fe, C, Ni, Cr, Mo, Mn, Nb, Ti, Al	resistência à corrosão trabalho em temperaturas elevadas elevada dureza elevada resistência mecânica

<b>famílias</b>	<b>constituintes</b>	<b>características de interesse</b>
<b>Alumínio e suas ligas</b>	Al (Li, Cu, Mn, Si, Mg, Zn)	condutividade elétrica baixo peso resistência à corrosão dutilidade boa aparência
<b>Cobre e suas ligas</b>	Cu (Zn, Sn, Al, Si, Ni, Be)	condutividade elétrica condutividade térmica resistência à corrosão dutilidade resistência mecânica endurecível por solução sólida endurecível por precipitação (Al, Be)

<b>famílias</b>	<b>constituintes</b>	<b>características de interesse</b>
<b>Magnésio e suas ligas</b>	Mg	baixo peso
<b>Titânio e suas ligas</b>	Ti	baixo peso resistência à corrosão resistência razoável a temperaturas altas
<b>Ligas de níquel</b> (v. também superligas)	Ni (Cu)	dureza endurecível por solução sólida
<b>Zn e suas ligas</b>	Zn	proteção catódica de ligas ferrosas baixo ponto de fusão (fundição)
<b>Cr e suas ligas</b>	Cr	dureza e boa aparência (revestimentos)
<b>Pb e suas ligas</b>	Pb	dutilidade e baixo ponto de fusão resistência à corrosão proteção contra radiação
<b>Mo, Nb, Re, Ta, W</b>		alto ponto de fusão
<b>Au, Ir, Os, Pa, Pt, Rh, Ru, Ag</b> (metais preciosos)		alta resistência à corrosão dutilidade condutividade elétrica boa aparência

<b>TIPO</b>	<b>%C</b>	<b>PRINCIPAIS USOS</b>
<i>aços doces acalmados</i>	<0,15%C	carrocerias de veículos, arames, pregos, latas, eletrodomésticos, etc
<i>aços doces</i>	0,15-0,30%C	elementos estruturais, mecânicos, etc
<i>aços médio carbono</i>	0,40-0,60%C	elementos mecânicos, trilhos, etc
<i>aços ferramenta</i>	0,60-1,00%C	ferramentas, matrizes



**MATERIAL DE APOIO - CABENS**

**outubro de 2011**

**A. C. Neiva**

# LIGAÇÕES QUÍMICAS

Introdução

# Visão geral sobre a discussão de ligações químicas

- **ligações iônicas**
- **ligações covalentes**
- **ligações metálicas**
- **ligações de Van der Waals**
- **pontes de hidrogênio**

- **condutores**
- **semicondutores**
- **isolantes**

- **moléculas**
- **cristais**
- **amorfos**

- **orbitais atômicos**
- **orbitais moleculares**
- **elétrons livres**

- **níveis discretos de energia**
- **bandas de energia**

- **materiais metálicos**
- **polímeros**
- **cerâmicas**
- **líquidos**
- **gases**
- **etc**

O estudo das ligações químicas volta-se ao modo como os átomos interagem localmente entre si para formar todas as substâncias existentes.

Estas ligações dependem basicamente da estrutura das **camadas de elétrons**.

Assim, conceitualmente, este estudo parte da descrição da estrutura eletrônica — ou seja, da distribuição de elétrons em **orbitais atômicos** — dos átomos isolados, e segue para a descrição da estrutura eletrônica nos materiais reais, que envolve **orbitais moleculares**, **elétrons livres** e **formação de íons**.

# Visão geral sobre a discussão de ligações químicas

- orbitais atômicos
- orbitais moleculares
- elétrons livres

Estes estudos levam em conta tanto a **distribuição espacial dos elétrons** (“forma” dos orbitais, por exemplo) como a sua **distribuição energética** (níveis discretos de energia, bandas de energia).

Tradicionalmente, as ligações são classificadas em três grandes modelos principais — ligações **iônicas**, **covalentes** e **metálicas** —, e em grande parte das substâncias uma delas predomina claramente sobre as outras.



## Visão geral sobre a discussão de ligações químicas

- **ligações iônicas**
- **ligações covalentes**
- **ligações metálicas**
- **ligações de Van der Waals**
- **pontes de hidrogênio**

- **orbitais atômicos**
- **orbitais moleculares**
- **elétrons livres**

- **níveis discretos de energia**
- **bandas de energia**

Os diferentes tipos de ligações químicas resultam em diferentes arranjos espaciais dos átomos ou íons, como os **crístais** e as **moléculas**, ou ainda arranjos menos organizados (gases, líquidos, sólidos amorfos).

A classificação dos materiais de engenharia em três grandes grupos — **metálicos**, **poliméricos** e **cerâmicos** — obedece às vezes ao tipo de ligação predominante (ligações metálicas nos materiais metálicos, por exemplo), às vezes ao tipo de arranjo espacial (cadeias poliméricas, no caso dos polímeros), às vezes ao tipo de processamento dos materiais (materiais cerâmicos). Em todos os casos, as propriedades mais gerais destes materiais são função das ligações químicas envolvidas.

## Visão geral sobre a discussão de ligações químicas

- **ligações iônicas**
- **ligações covalentes**
- **ligações metálicas**
- **ligações de Van der Waals**
- **pontes de hidrogênio**

- **moléculas**
- **cristais**
- **amorfos**

- **orbitais atômicos**
- **orbitais moleculares**
- **elétrons livres**

- **níveis discretos de energia**
- **bandas de energia**

- **materiais metálicos**
- **polímeros**
- **cerâmicas**
- **líquidos**
- **gases**
- **etc**

Às vezes, há interesse em classificar materiais segundo outros critérios. Por exemplo, definí-los como **condutores**, **semi-condutores** ou **isolantes**. Neste caso, interessa-nos mais entender a distribuição energética dos elétrons do que a classificação das ligações químicas como metálicas, covalentes ou iônicas.

É fácil concluir, portanto, que um bom estudo das ligações químicas **não deve ser** **compartimentalizado** e pode seguir diferentes caminhos.

Nestas apresentações, iremos seguir principalmente pela **área verde** da página seguinte, em constante interação com a área amarela.



# Visão geral sobre a discussão de ligações químicas

- ligações iônicas
- ligações covalentes
- ligações metálicas
- ligações de Van der Waals
- pontes de hidrogênio

Apostila, livros  
sobre ligações  
químicas

Livros de Física

- condutores
- semicondutores
- isolantes

estas  
apresentações

- moléculas
- cristais
- amorfos

- orbitais atômicos
- orbitais moleculares
- elétrons livres

- níveis discretos de energia
- bandas de energia

Livros sobre  
Materiais

- materiais metálicos
- polímeros
- cerâmicas
- líquidos
- gases
- etc



# INTRODUÇÃO

- **Sistemas no universo tendem a buscar a situação de maior estabilidade**
- **Os átomos raramente são encontrados em forma isolada**

**Átomos isolados constituem-se em entidades com alta energia**

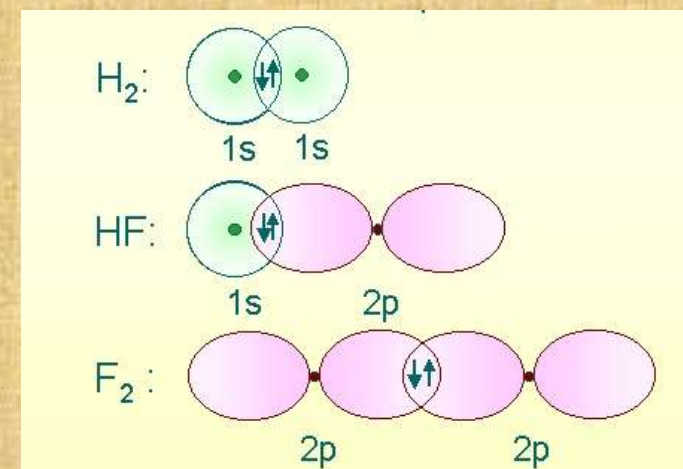
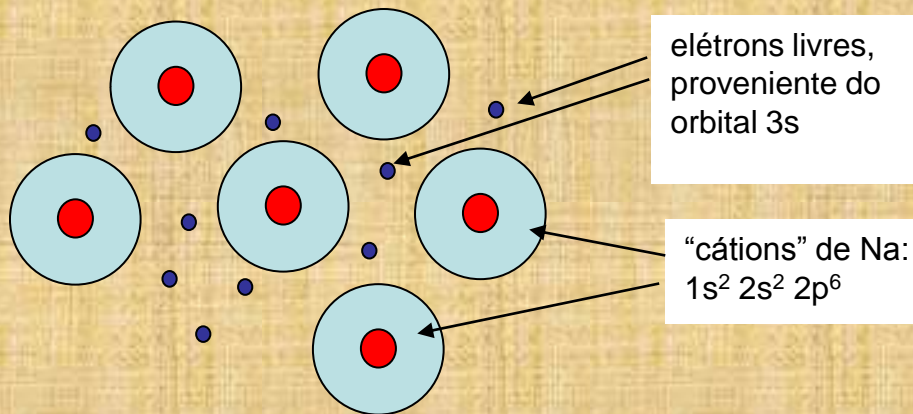
## PROCURANDO CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DE MENOR ENERGIA

### – Evitar orbitais incompletos

- recebendo elétrons (formando ânions)
- compartilhando elétrons entre pares de átomos (ligações covalentes)

### – Evitar camadas com poucos elétrons

- perdendo elétrons (formando cátions)
- compartilhando estes elétrons entre todos os átomos, fora dos orbitais (ligações metálicas)



**ligação metálica: compartilhamento de elétrons por todos os átomos**

**ligação covalente: compartilhamento de elétrons entre dois átomos**



**ligação iônica: não há compartilhamento**

## PROCURANDO CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DE MENOR ENERGIA

### – Evitar orbitais incompletos

- recebendo elétrons (formando ânions)
- compartilhando elétrons entre pares de átomos (ligações covalentes)

### – Evitar camadas com poucos elétrons

- perdendo elétrons (formando cátions)
- compartilhando estes elétrons entre todos os átomos, fora dos orbitais (ligações metálicas)



## – Evitar orbitais incompletos

- recebendo elétrons (formando ânions)
- **compartilhando elétrons entre pares de átomos (ligações covalentes)**

## – Evitar camadas com poucos elétrons

- perdendo elétrons (formando cátions)
- **compartilhando estes elétrons entre todos os átomos, fora dos orbitais (ligações metálicas)**

Formação de íons só ocorre de modo estável se houver onde alojá-los:

- cristais iônicos, sais fundidos (ânions e cátions)
- soluções eletrolíticas (moléculas polares + ânions + cátions)



# Configurações mais estáveis

## – Evitar orbitais incompletos

- recebendo elétrons (formando ânions)
- compartilhando elétrons entre pares de átomos (ligações covalentes)

## – Evitar camadas com poucos elétrons

- perdendo elétrons (formando cátions)
- compartilhando estes elétrons entre todos os átomos, fora dos orbitais (ligações metálicas)

basta termos elementos com alta eletronegatividade

# Obtendo configurações mais estáveis

## – Evitar orbitais incompletos

- recebendo elétrons (formando ânions)
- compartilhando elétrons entre pares de átomos (ligações covalentes)

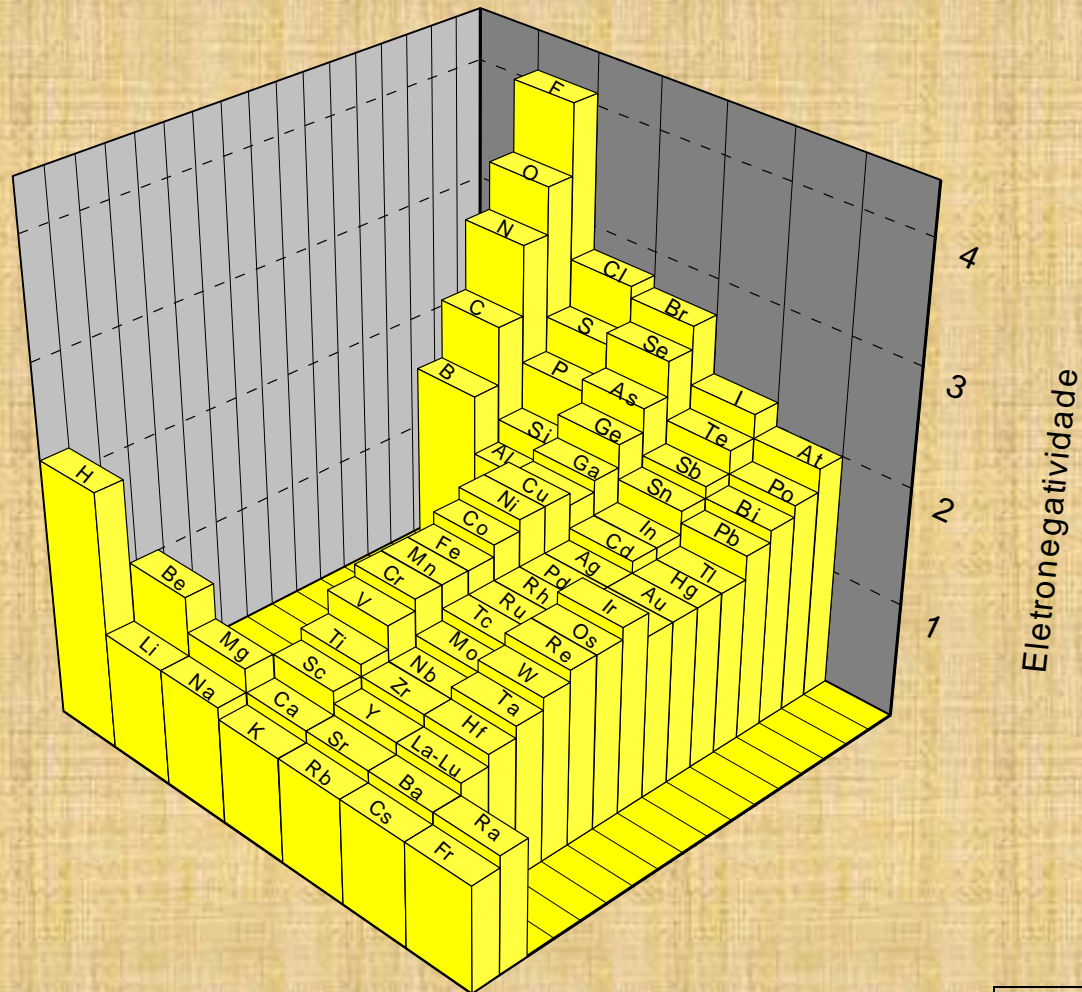
## – Evitar camadas com poucos elétrons

- perdendo elétrons (formando cátions)
- compartilhando estes elétrons entre todos os átomos, fora dos orbitais (ligações metálicas)

→ basta termos elementos com baixa eletronegatividade

→ basta termos elementos com alta eletronegatividade

# Eletronegatividade



apostila: pg. 3

# Eletronegatividade na TP

## Electronegativity Trends in Periodic Table

	<b>1A</b>																	<b>8A</b>
<b>1</b>	H	<b>2A</b>						<b>8B</b>					<b>3A</b>	<b>4A</b>	<b>5A</b>	<b>6A</b>	<b>7A</b>	He
<b>2</b>	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
<b>3</b>	Na	Mg	<b>3B</b>	<b>4B</b>	<b>5B</b>	<b>6B</b>	<b>7B</b>			<b>1B</b>	<b>2B</b>		Al	Si	P	S	Cl	Ar
<b>4</b>	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
<b>5</b>	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
<b>6</b>	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
<b>7</b>	Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt									
<b>Lanthanides</b>			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
<b>Actinides</b>			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Electronegativity increases from bottom to top in a column.

Electronegativity increases from left to right across a group.

H 2.2	2												13	14	15	16	17	He
Li 1	Be 1.5												B 2	C 2.5	N 3.1	O 3.5	F 4.1	Ne
Na 1	Mg 1.2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al 1.5	Si 1.7	P 2.1	S 2.4	Cl 2.8	Ar	
K 0.9	Ca 1	Sc 1.2	Ti 1.3	V 1.5	Cr 1.6	Mn 1.6	Fe 1.6	Co 1.7	Ni 1.8	Cu 1.8	Zn 1.7	Ga 1.8	Ge 2	As 2.2	Se 2.5	Br 2.7	Kr	
Rb 0.9	Sr 1	Y 1.1	Zr 1.2	Nb 1.2	Mo 1.3	Tc 1.4	Ru 1.4	Rh 1.4	Pd 1.4	Ag 1.4	Cd 1.5	In 1.5	Sn 1.7	Sb 1.8	Tc 2	I 2.2	Xe	
Cs 0.9	Ba 1	La-Lu ~1.1	Hf 1.2	Ta 1.3	W 1.4	Re 1.5	Os 1.5	Ir 1.6	Pt 1.4	Au 1.4	Hg 1.4	Tl 1.4	Pb 1.6	Bi 1.7	Po 1.8	At 2	Rn	
Fr 0.9	Ra 1	Ac-Lr	Ku	Ha														



resumindo....

- Nas ligações puramente iônicas, **não há compartilhamento.**
- Nas ligações metálicas, **uma parte dos elétrons é compartilhada por todos os átomos** do cristal ou da peça.
- Nas ligações covalentes, **pares de elétrons são compartilhados** entre dois átomos.

apostila: pg. 7

# Tipos de arranjos espaciais

- **Moléculas:**

- Unidades “autônomas”, com quantidade de átomos limitada
- Formadas por ligações covalentes
- Unidas entre si por ligações de Van der Waals e pontes de hidrogênio (podendo formar gases, líquidos, sólidos amorfos e sólidos cristalinos)

- **Cristais:**

- Formam arranjos tridimensionais ilimitados
- Principalmente ligações metálicas e iônicas
- Eventualmente, apenas ligações covalentes (diamante, Si ...)
- Podem ser formados por moléculas
- Formam sólidos

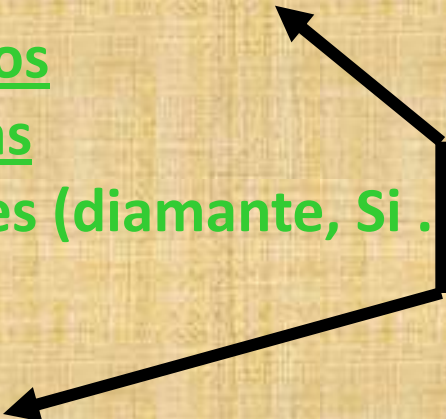
# Tipos de arranjos espaciais

- **Moléculas:**

- Unidades “autônomas”, com quantidade de átomos limitada
- Formadas por ligações covalentes
- Unidas entre si por ligações de Van der Waals e pontes de hidrogênio (podendo formar gases, líquidos, sólidos amorfos e sólidos cristalinos)

- **Cristais:**

- Formam arranjos tridimensionais ilimitados
- Principalmente ligações metálicas e iônicas
- Eventualmente, apenas ligações covalentes (diamante, Si . . .)
- Podem ser formados por moléculas
- Formam sólidos



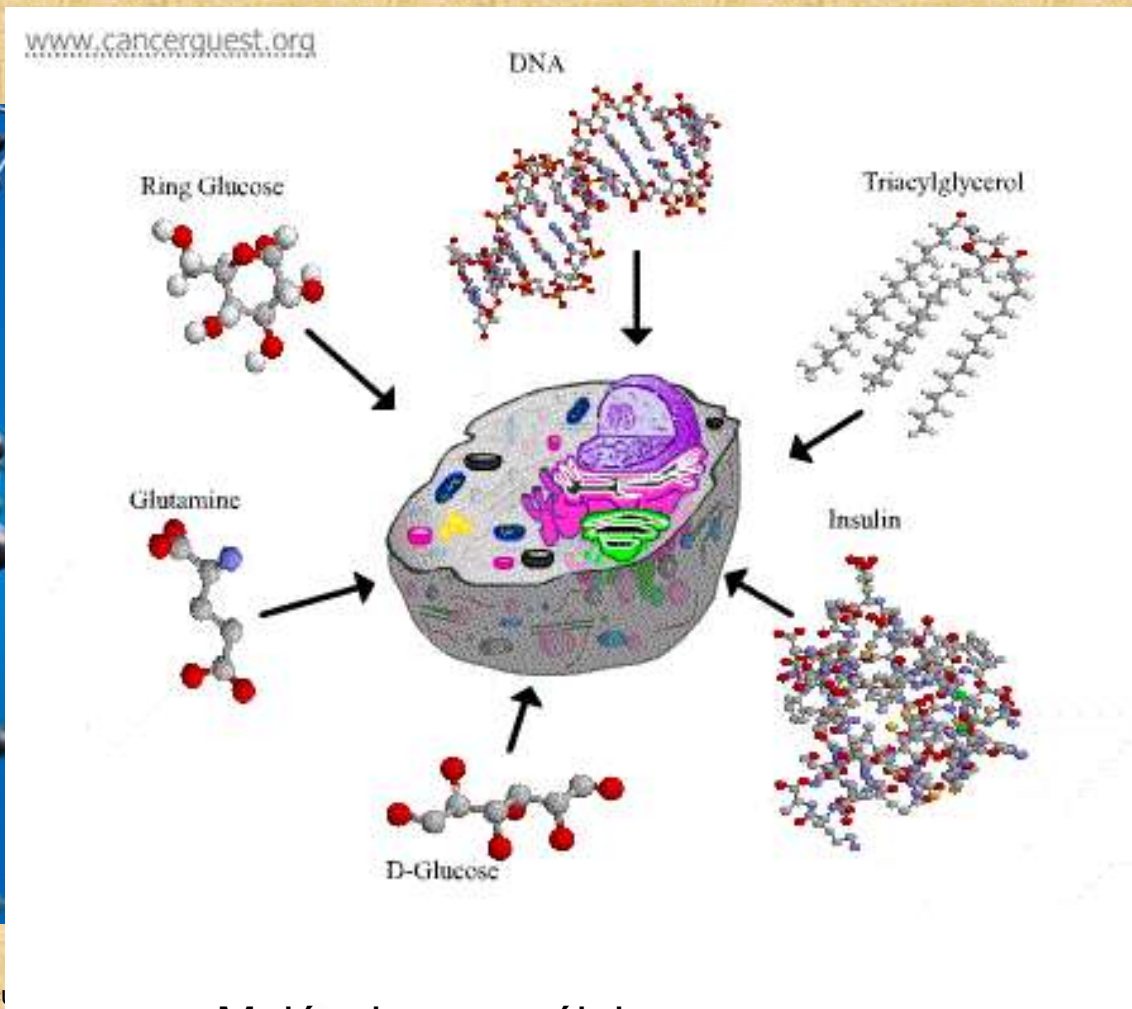
Átomos e moléculas  
não são conceitos auto-  
excludentes



# MOLÉCULAS



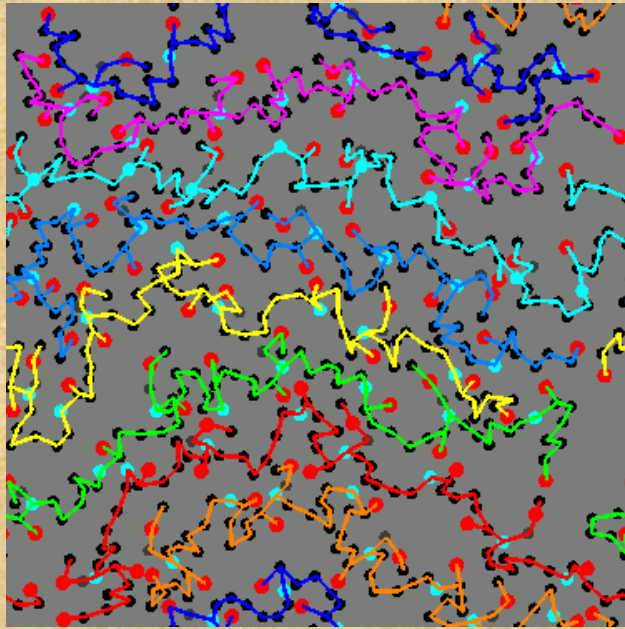
<http://www.innovationcanada.ca/25/en/articles/molecul>



## Moléculas em célula

([www.cancerquest.org/printfriendly.cfm?printsec=8](http://www.cancerquest.org/printfriendly.cfm?printsec=8))

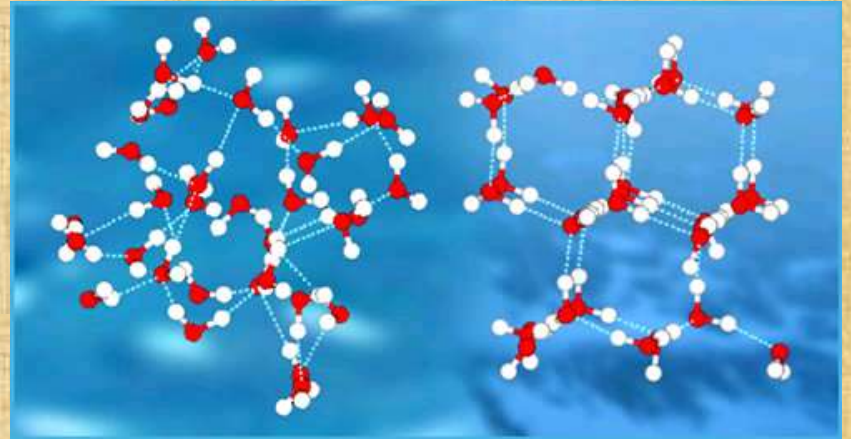
# MOLÉCULAS



Moléculas em polímero, com algumas ligações cruzadas

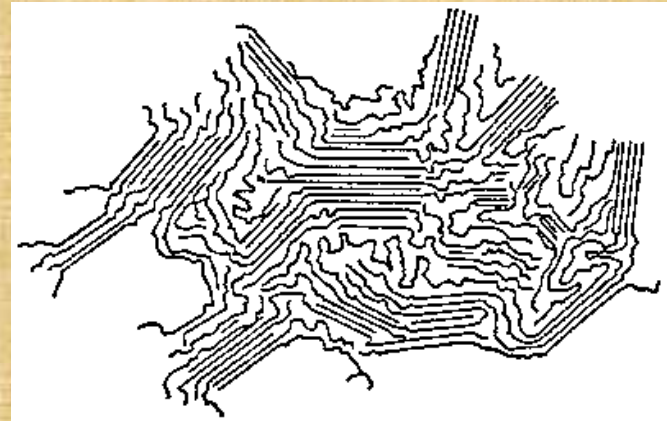
(bolinhas vermelhas)

(<http://polymer.bu.edu/~trunfio/about.html>)



Água líquida e gelo.

Junto a um sólido, algumas moléculas de água líquida assumem estrutura semelhante à do gelo. (<http://www.lbl.gov/Science-Articles/Archive/sabl/2005/February/water-solid.html>)



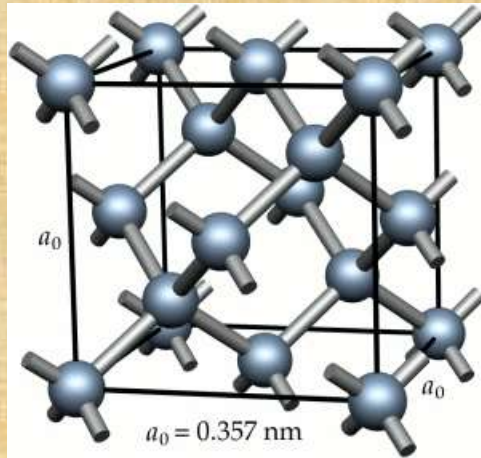
Regiões cristalinas em polímero

([http://www.tangram.co.uk/TI-Polymer-Shrinkage\\_in\\_plastics.html](http://www.tangram.co.uk/TI-Polymer-Shrinkage_in_plastics.html))

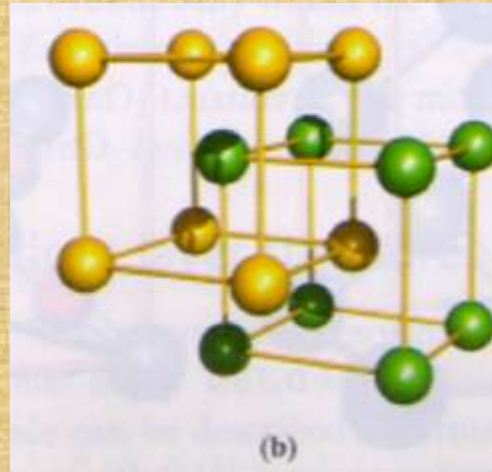
Algo mais sobre moléculas? Veja a apostila (pg. 56 a 67) e aguarde apresentação sobre “Moléculas”.



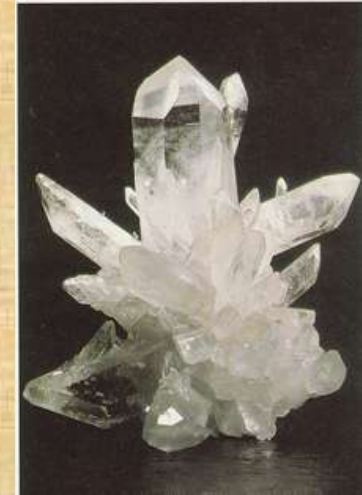
# CRISTAIS



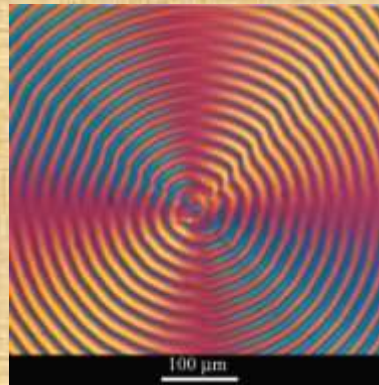
diamante (covalente)



CsCl (iônico)



quartzo



esferulito em polímero



liga metálica

Algo mais sobre cristais? Veja a apostila (pg. 56 a 67) e aguarde apresentação sobre "Cristais".

# LIGAÇÕES QUÍMICAS

Orbitais e elétrons livres

Energia

# Visão geral sobre a discussão de ligações químicas

- **ligações iônicas**
- **ligações covalentes**
- **ligações metálicas**
- **ligações de Van der Waals**
- **pontes de hidrogênio**

- **condutores**
- **semicondutores**
- **isolantes**

- **moléculas**
- **cristais**
- **amorfos**

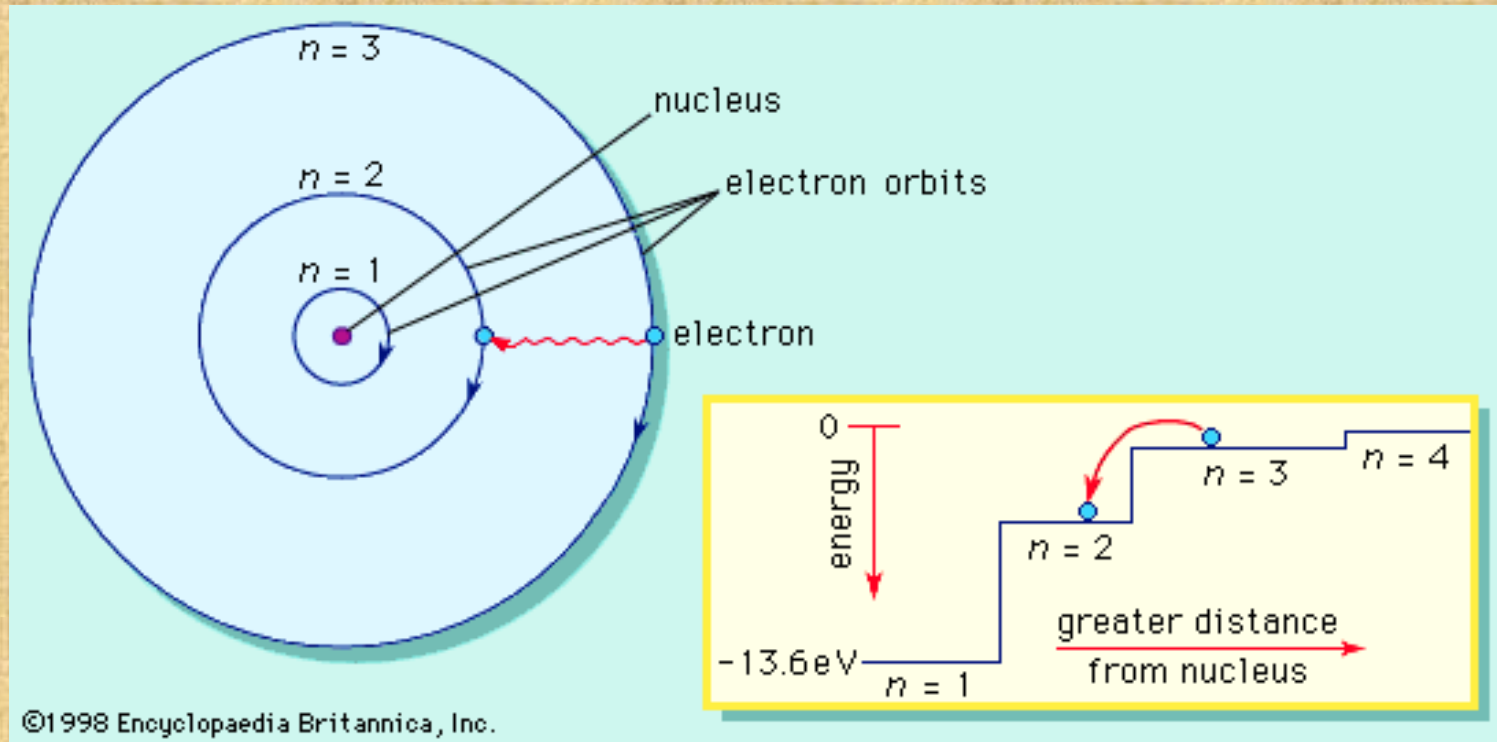
- **orbitais atômicos**
- **orbitais moleculares**
- **elétrons livres**

- **níveis discretos de energia**
- **bandas de energia**

- **materiais metálicos**
- **polímeros**
- **cerâmicas**
- **líquidos**
- **gases**
- **etc**

# Os elétrons em torno do núcleo

## O modelo de Bohr



**Prêmio Nobel de Física em 1922**

apostila: pg. 9



# Regiões de probabilidade definidas pela resolução da equação de Schrödinger (95%)

## Os orbitais "s"





- **Números quânticos:**

- **Principal (n) – 1, 2, 3, ... TAMANHO**

- **Secundário ou azimutal (l) – 0, 1, ..., (n-1) FORMA**

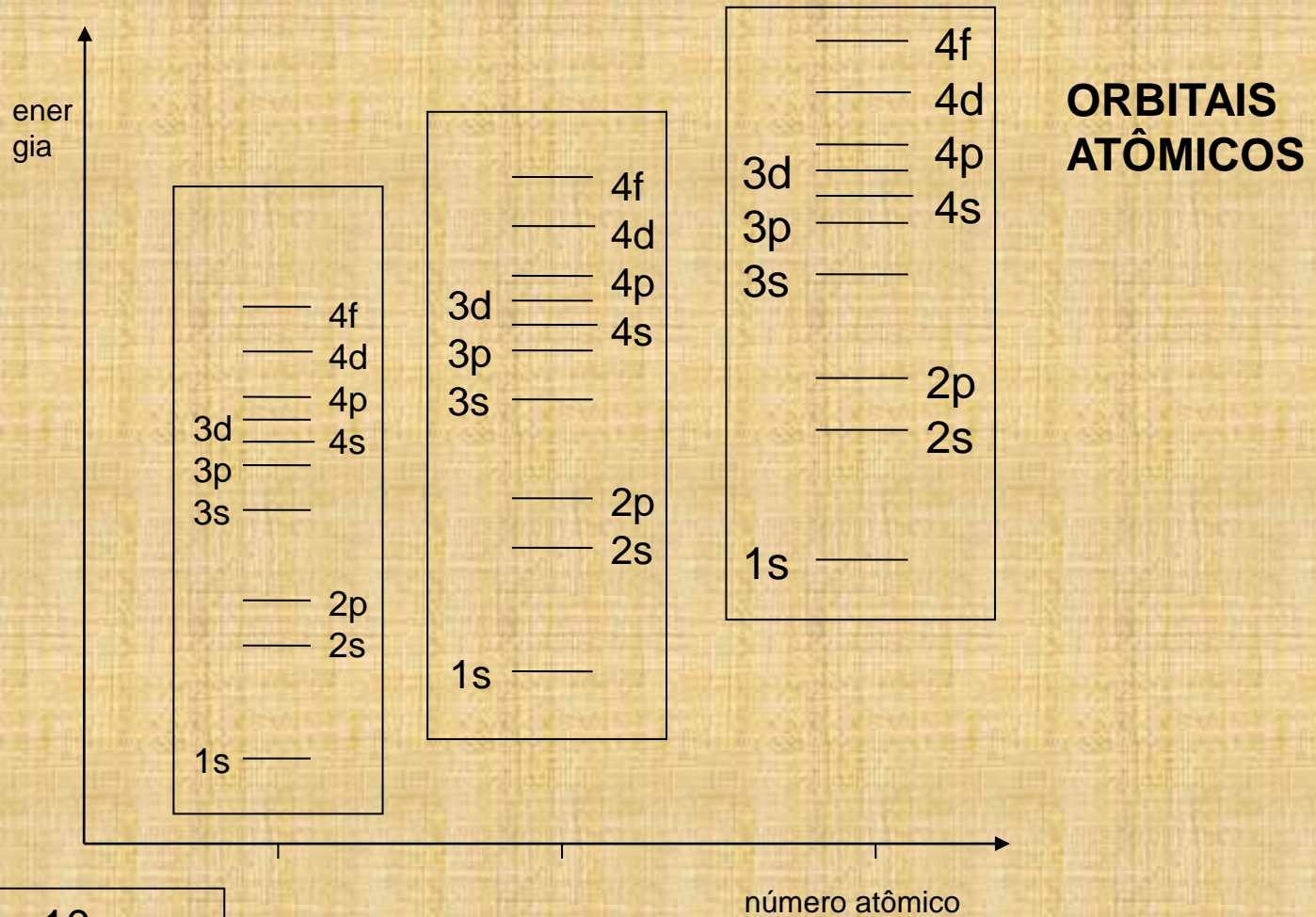
- **Magnético (m) - -l, ..., 0, ..., +l DIREÇÃO**

- **Spin ( $m_s$ ) -  $\pm \frac{1}{2}$**

# Orbitais atômicos e as camadas eletrônicas

n	l	m	Símbolo
1	0	0	1s
2	0	0	2s
2	1	-1, 0, +1	2p
3	0	0	3s
3	1	-1, 0, +1	3p
3	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d
4	0	0	4s
4	1	-1, 0, +1	4p
4	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d
4	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f

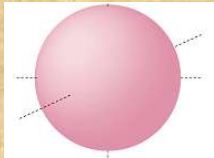
# ENERGIA



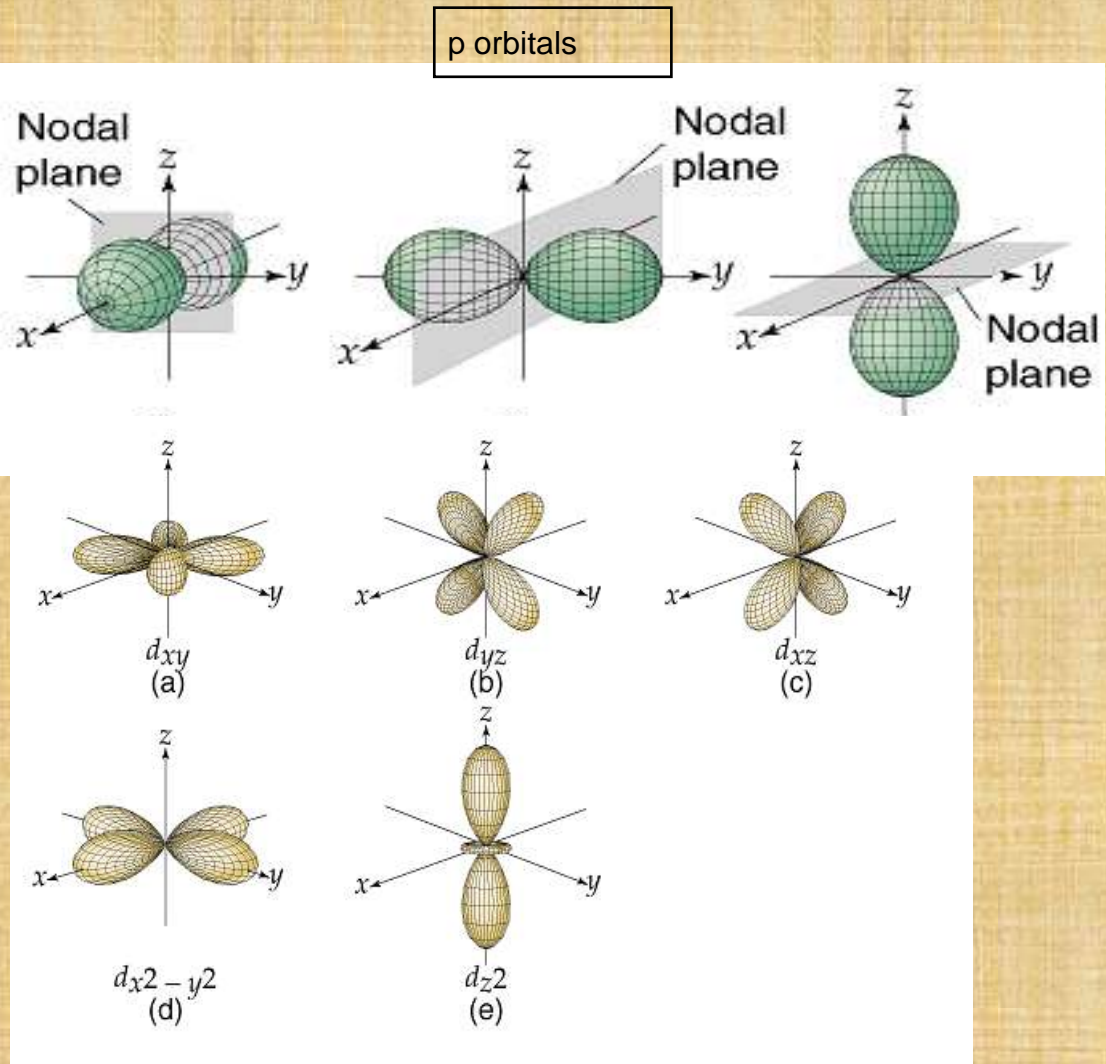
apostila: pg. 10

# Sem compartilhamento: átomos e íons

s orbital



d orbitals



apostila: pg. 11



# ÁTOMOS OU ÍONS AGRUPADOS

Tanto a distribuição espacial como a energia das nuvens eletrônicas se alteram.

Em termos de **distribuição espacial**, podemos distinguir três situações:

- **Orbitais atômicos** – presentes nos **íons** e nas **camadas internas** dos átomos que participam de ligações covalentes e metálicas.
- **Orbitais moleculares** – presentes tanto em moléculas como em cristais covalentes.
- **Compartilhamento geral de elétrons** – presentes nas ligações metálicas, ou em elétrons livres de semi-condutores, em cristais, quase-cristais e sólidos amorfos .

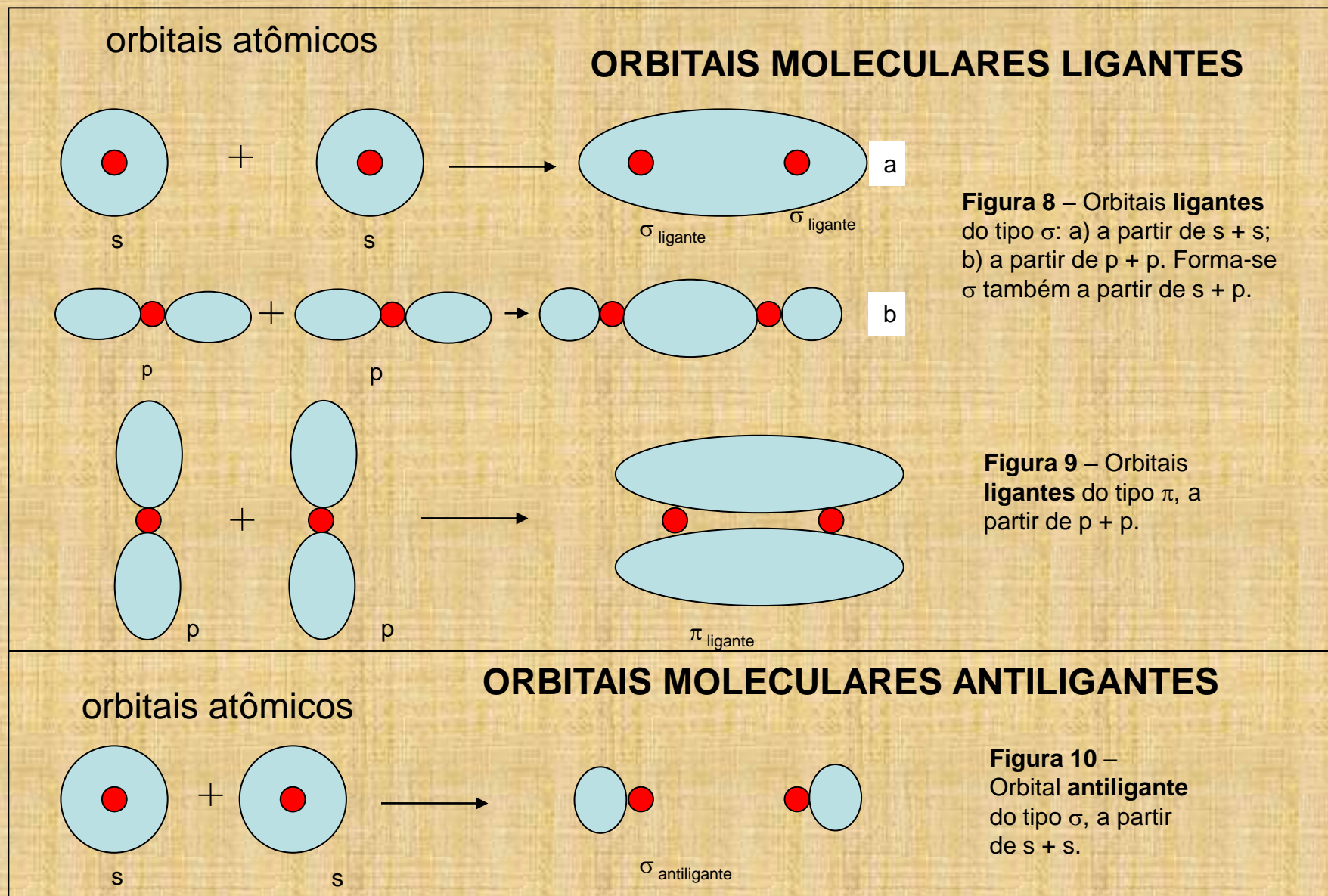
Em termos de **energia**, duas situações se apresentam:

- **Níveis discretos** – Encontrados em átomos ou íons isolados, em moléculas, e nas camadas eletrônicas *internas* de cristais, semi-cristais e sólidos amorfos.
- **Bandas de energia** – Encontrada nas camadas eletrônicas externas de cristais, semi-cristais e sólidos amorfos, sejam eles metálicos, iônicos ou covalentes.

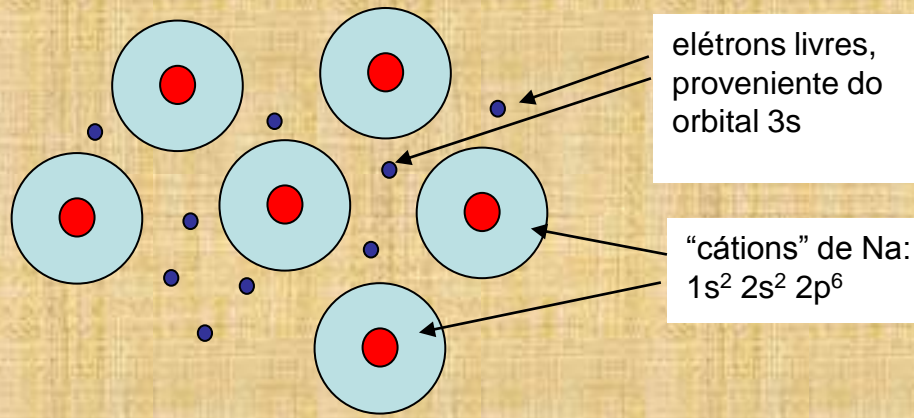
*Não se pode estabelecer um vínculo direto entre distribuição espacial e energia.*



# DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL: ORBITAIS ATÔMICOS E MOLECULARES

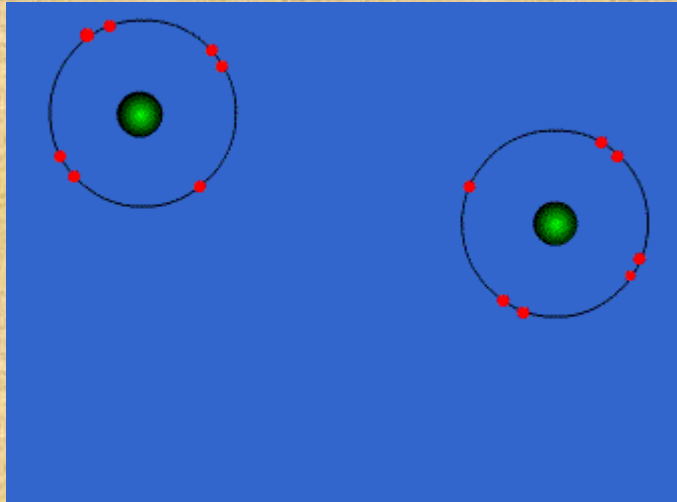


# DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL: COMPARTILHAMENTO GERAL DE ELÉTRONS



elétrons livres de semi-  
condutores, em cristais,  
quase-cristais e sólidos  
amorfos

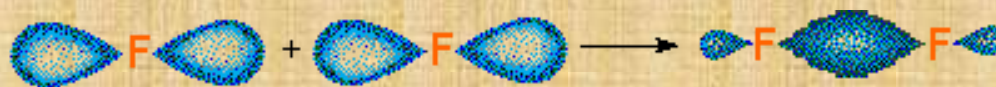
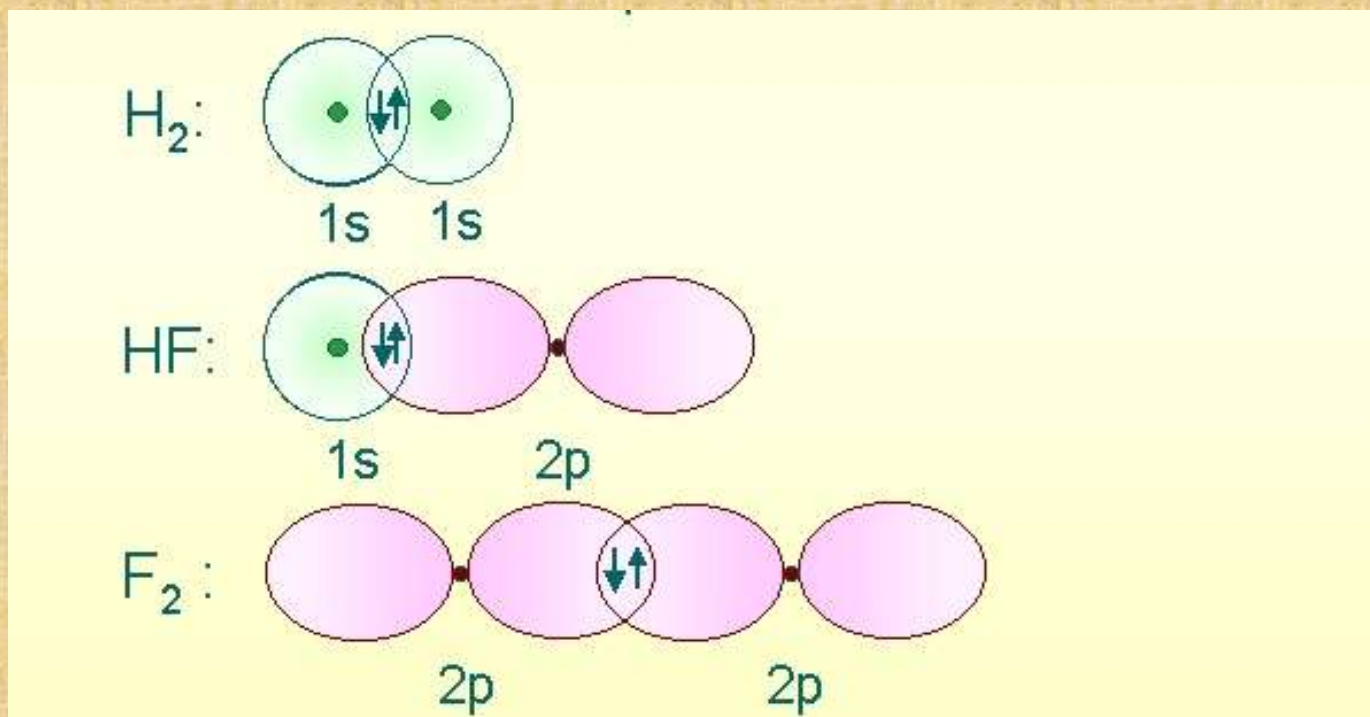
# LIGAÇÕES COVALENTES, ORBITAIS MOLECULARES, MOLÉCULAS



modelinho simplificado: será que dá conta de explicar tudo?

# LIGAÇÕES COVALENTES: CONCEITOS BÁSICOS

- Compartilhamento de elétrons.
- Os orbitais atômicos se sobrepõem, formando orbitais moleculares
- Aumenta a probabilidade de encontrar os elétrons entre os núcleos.



A  $\sigma$ -orbital formation from two p-orbitals



# tipos de orbitais moleculares

apostila: pg. 14

- Por aproximação frontal dos orbitais atômicos:

- *Ligações  $\sigma$*



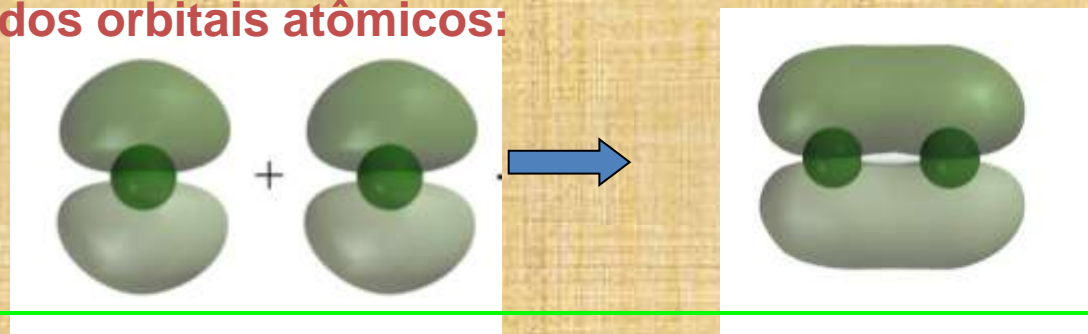
- $\sigma_{s-s}$   $\sigma_{s-p}$   $\sigma_{p-p}$

- Formam-se ligações fortes.

- Átomos podem girar em torno do eixo da ligação.

- Por aproximação lateral dos orbitais atômicos:

- *Ligações  $\pi$*



- São formadas entre átomos que já possuem ligação  $\sigma$ .

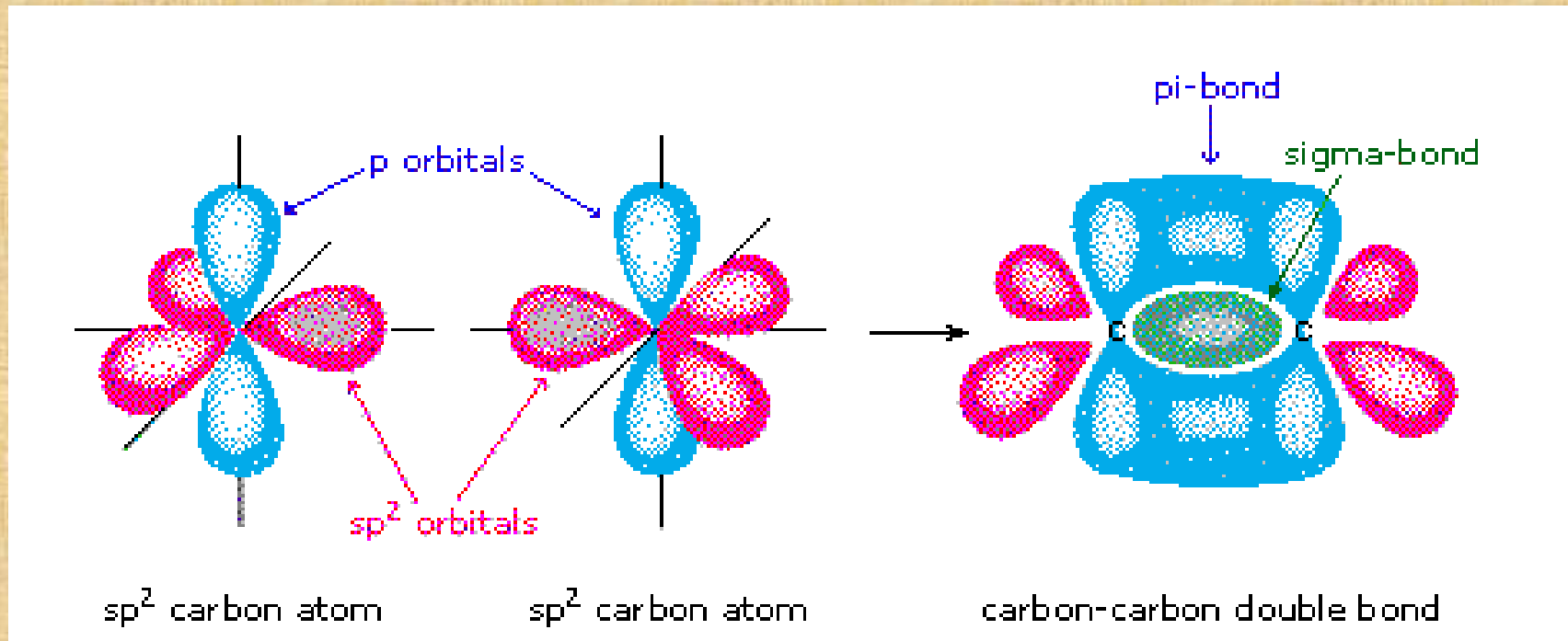
- Orbitais “s” não formam ligações pi.

- São mais fracas que as ligações  $\sigma$ .

- Não permitem rotação dos átomos em torno do eixo internuclear.

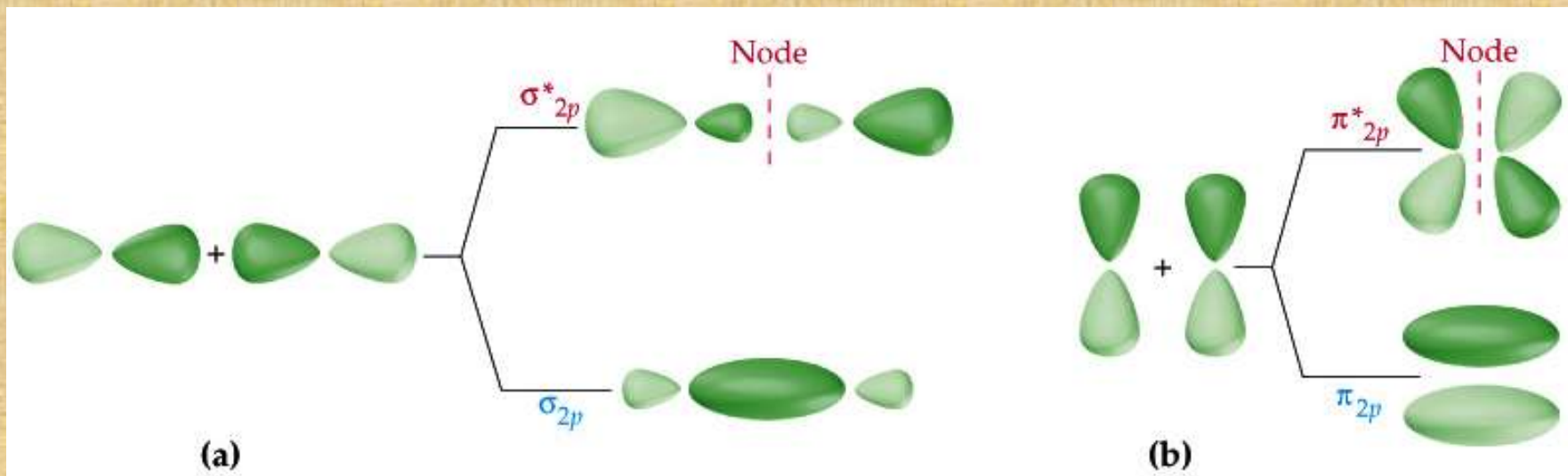


# exemplo de ligações sigma e pi



juntando tudo....

- a) sigma ligante e sigma antiligante
- b) pi ligante e pi antiligante



# Forma da molécula

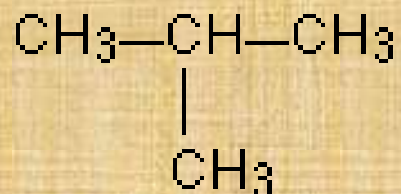
as ramificações impedem uma proximidade maior

butane



B.Pt:  $-0.5^\circ\text{C}$

2-methylpropane



B.Pt:  $-11.7^\circ\text{C}$

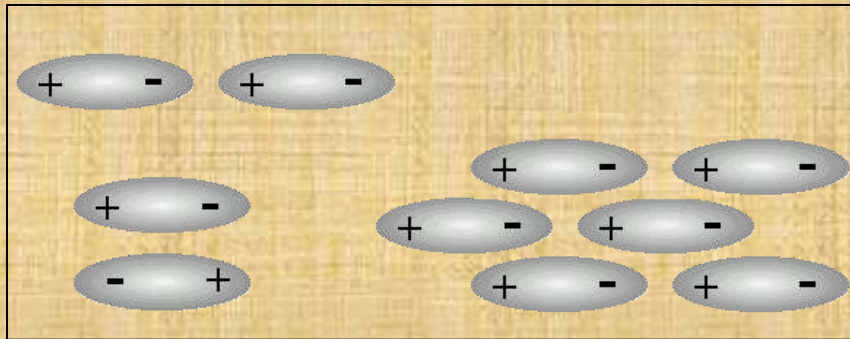
Mas o efeito é pequeno. Isto porque o mais importante são as interações de London.

# Forças intermoleculares

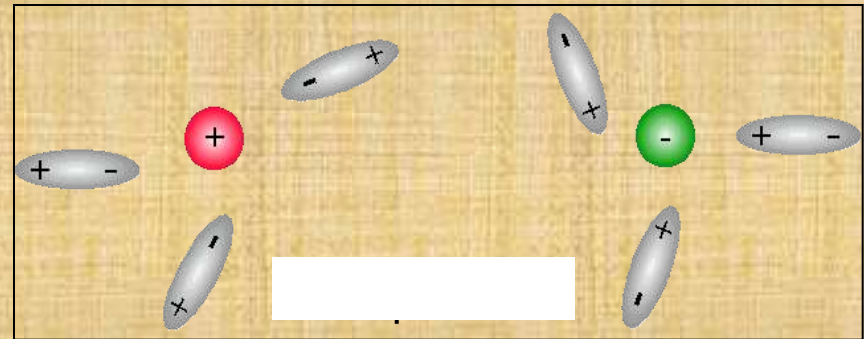
Como se explica que

- moléculas covalentes como CO, H<sub>2</sub>O, etc formem líquidos e sólidos?
- gases nobres formem líquidos?

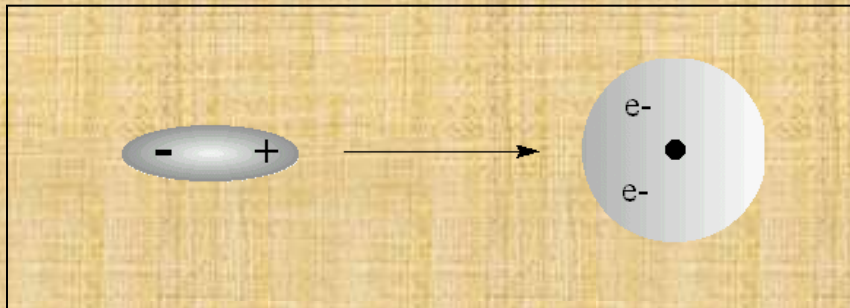
# Forças de Van der Waals



**dipolo - dipolo**

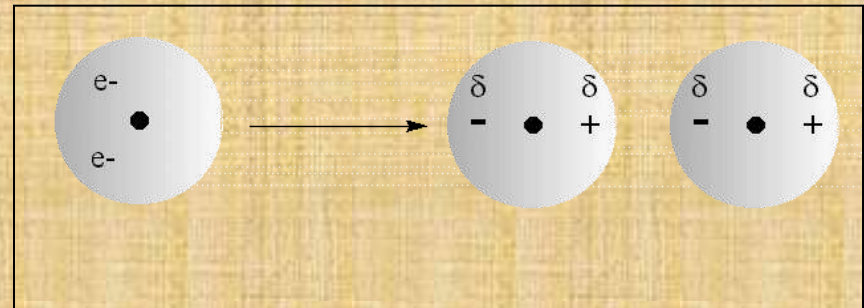


**íon - dipolo**



**dipolo induzido**

*um dipolo induz outro dipolo em átomo ou molécula apolar*



**dipolo – dipolo (forças de London)**

*Um dipolo instantâneo em átomo ou molécula apolar induz um outro apolar*