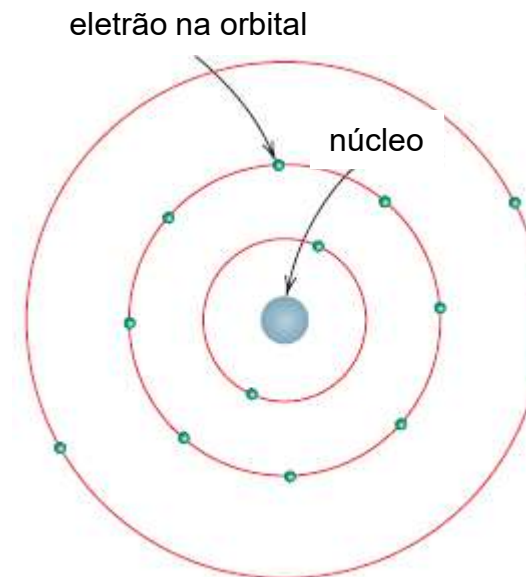


Breve revisão de conceitos....

Os átomos são formados por 3 tipos de partículas subatômicas:

- prótons
 - neutrões
 - eletrões
- } núcleo



Representação esquemática do átomo de Bohr

Os eletrões mais exteriores determinam a maioria das propriedades elétricas, químicas, térmicas e óticas dos materiais.



Cada elemento químico é caracterizado por:

- **número atómico (Z)**: número de prótons (partículas carregadas positivamente) do núcleo;
- **massa atómica (MA)**: massa, em gramas, de $6,022 \times 10^{23}$ átomos (o número de Avogadro, N_A) desse elemento.

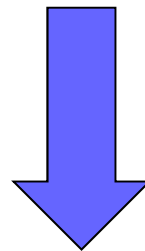


TABELA PERIÓDICA

																		<div><div></div> Metal</div>					<div><div></div> Nonmetal</div>					<div><div></div> Intermediate</div>														
																		IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA																				
IA	1																	5	6	7	8	9	10																			
	H	IIA	4																	B	C	N	O	F	Ne																	
	3		Be																																							
	11		12																	13	14	15	16	17	18																	
	Na		Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar																							
	19		20	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																							
	37		38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54																							
	Rb		Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																							
	55		56	Rare earth series										72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86														
	Cs		Ba											Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn														
	87		88	Actinide series										104	105	106	107	108	109	110																						
	Fr		Ra											Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds																						

cedem 1e⁻

cedem 2e⁻

cedem 3e⁻

aceitam 2e⁻

aceitam 1e⁻

gases inertes

Elementos eletropositivos:

cedem elétrons para se tornarem íons positivos (catiões)

Elementos eletronegativos:

aceitam elétrons para se tornarem
íons negativos (ânions).



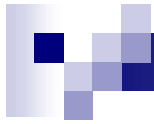
Qual é a massa em gramas de um átomo de Cu?

$MA(\text{Cu}) = 63,546 \text{ g/mol}$

$1,05 \times 10^{-22} \text{ g/átomo de Cu}$

Quantos átomos de Cu há em 1 g de Cu?

$9,48 \times 10^{21} \text{ átomos/1 g de Cu}$



Configuração eletrónica é a distribuição dos eletrões de um átomo pelas respetivas orbitais atómicas.

Principal Quantum Number n	Shell Designation	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
				Per Subshell	Per Shell ($2n^2$)
1	K	s	1	2	2
2	L	s	1	2	8
		p	3	6	
3	M	s	1	2	18
		p	3	6	
		d	5	10	
4	N	s	1	2	32
		p	3	6	
		d	5	10	
		f	7	14	



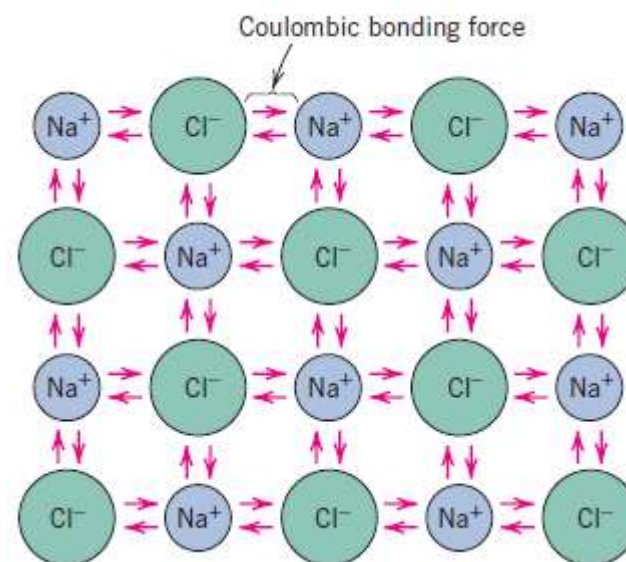
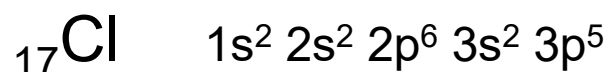
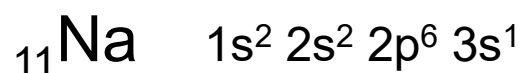
Escreva a configuração eletrónica do átomo Fe ($Z=26$) e dos iões Fe^{2+} e Fe^{3+} .



Ligação química (primária) entre átomos:

iônica, covalente e metálica

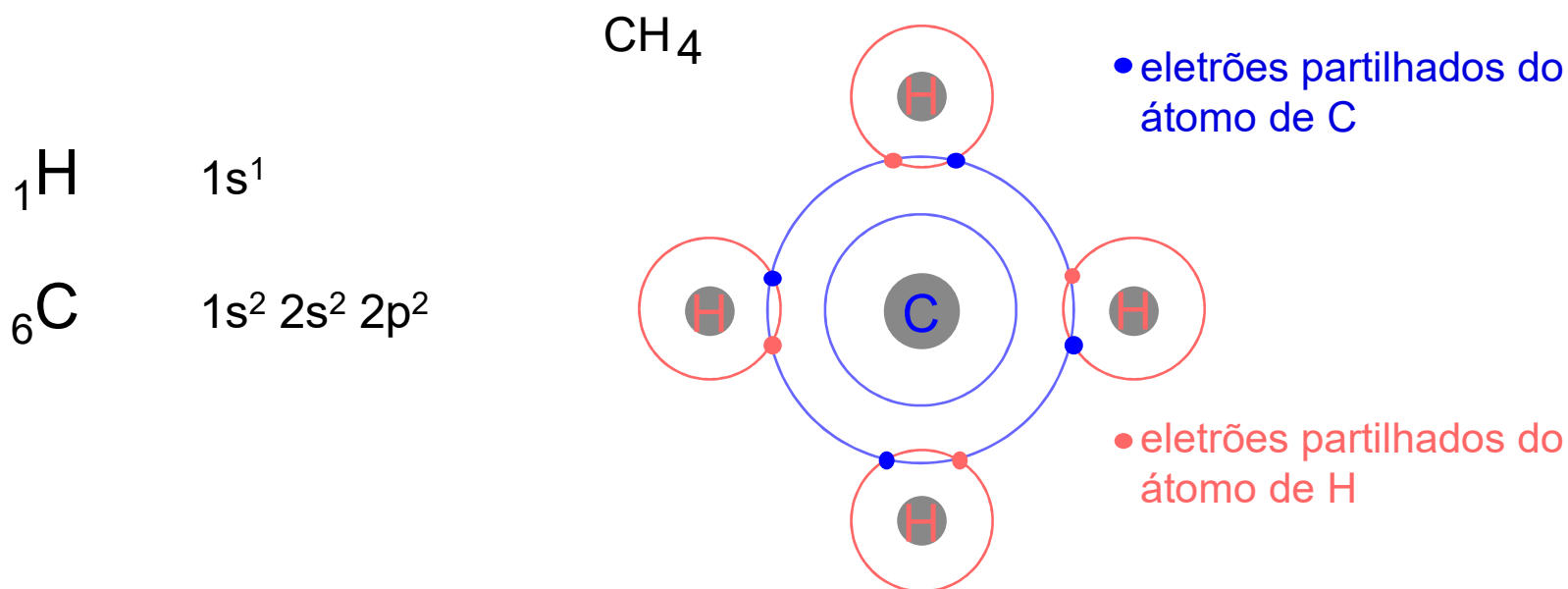
Ligação iônica: transferência de elétrons de um átomo para outro; as forças envolvidas são forças de atração eletrostática (forças de Coulomb).



Representação esquemática da ligação iônica no NaCl



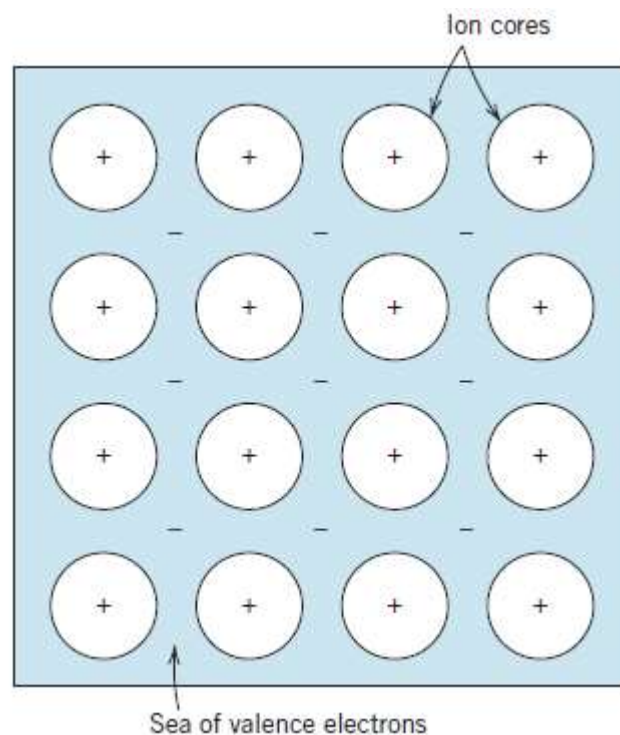
Ligação covalente: partilha de eletrões entre átomos adjacentes; ligação simples e ligações múltiplas (duplas e triplas).



Representação esquemática da ligação covalente (simples) na molécula de CH₄.

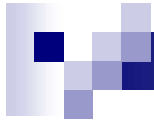


Ligação metálica: ligação típica que ocorre em metais e em ligas metálicas.

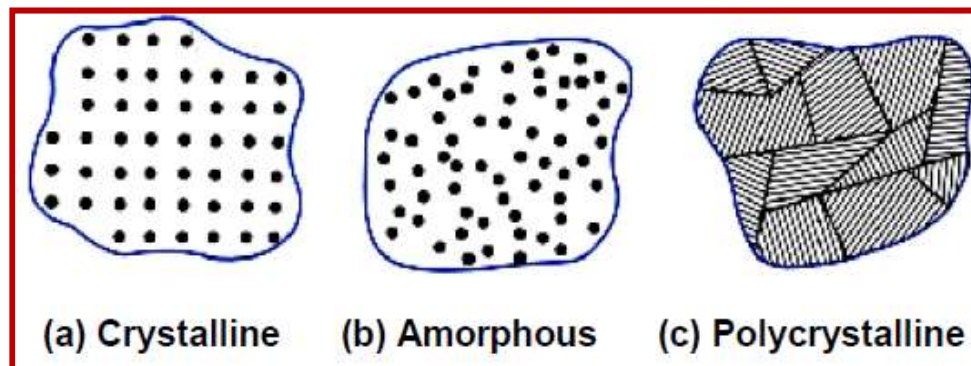
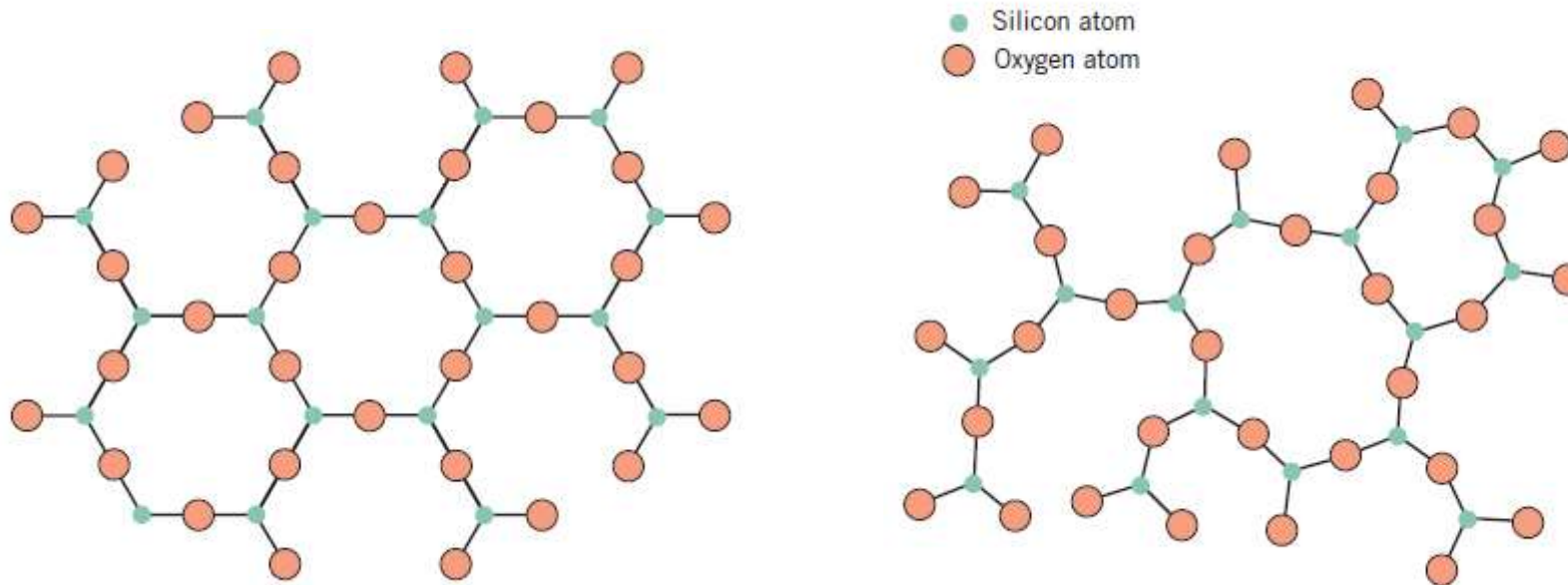


Representação esquemática da ligação metálica.

ductilidade, tenacidade, condutividade elétrica e térmica

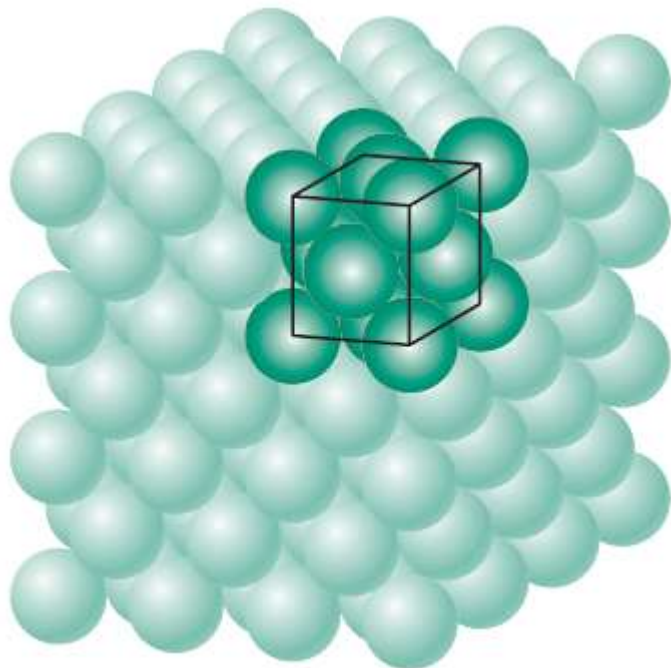


Estrutura cristalina *versus* **Estrutura não cristalina (amorfa)**

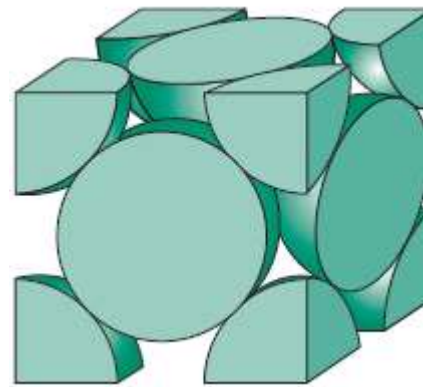




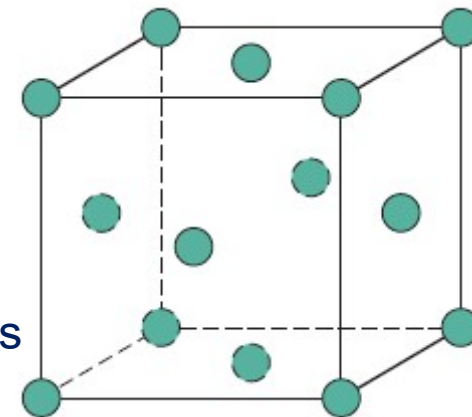
Um sólido diz-se **crystalino** quando os seus átomos ou iões se arranjam num padrão que se repete segundo as 3 dimensões (**célula unitária**).



crystal com muitas células unitárias



modelo de esferas rígidas



modelo de esferas reduzidas

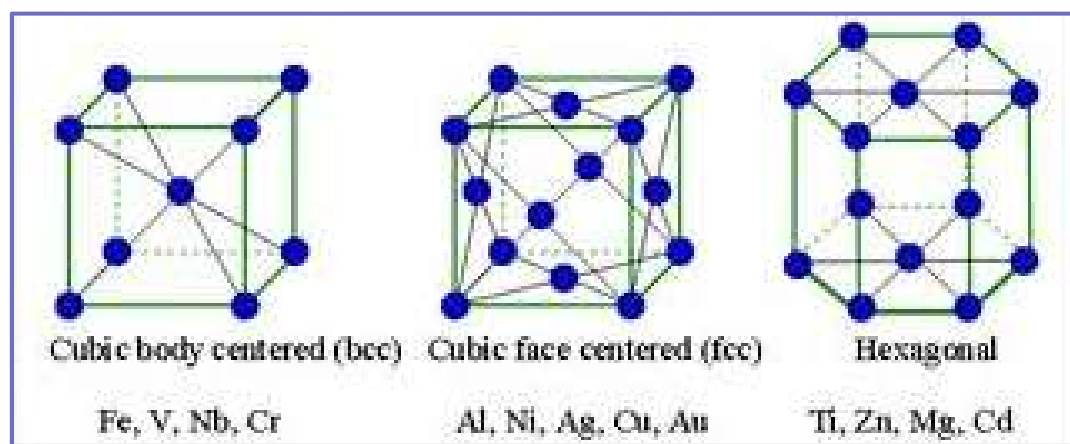


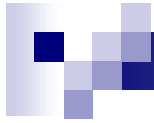
Todos os **metais**, muitos **cerâmicos** e alguns **polímeros** possuem **estruturas cristalinas (rede)** quando solidificam em condições normais.

A maioria dos **metais** cristaliza em 3 geometrias **cristalinas compactas**:

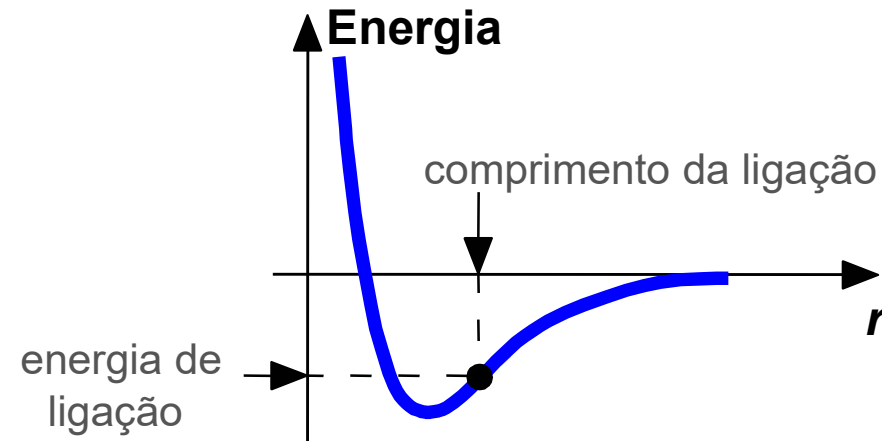
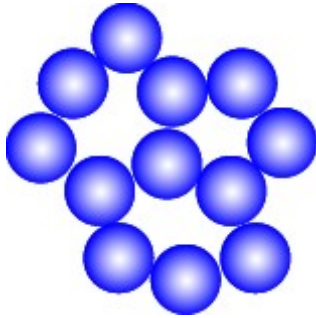
- *cúbica de corpo centrado (CCC)*
- *cúbica de faces centradas (CFC)*
- *hexagonal compacta (HC)*

maior estabilidade
mais baixa energia

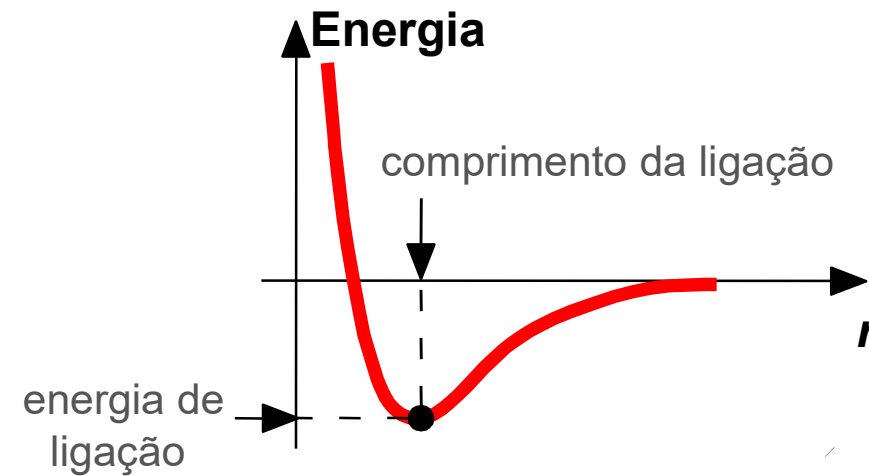
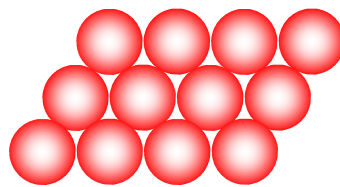




- Estrutura não cristalina



- Estrutura cristalina (densa)



Estruturas cristalinas tendem a ter baixas energias!



Table 3.1 Atomic Radii and Crystal Structures for 16 Metals

<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure^a</i>	<i>Atomic Radius^b (nm)</i>	<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>
Aluminum	FCC	0.1431	Molybdenum	BCC	0.1363
Cadmium	HCP	0.1490	Nickel	FCC	0.1246
Chromium	BCC	0.1249	Platinum	FCC	0.1387
Cobalt	HCP	0.1253	Silver	FCC	0.1445
Copper	FCC	0.1278	Tantalum	BCC	0.1430
Gold	FCC	0.1442	Titanium (α)	HCP	0.1445
Iron (α)	BCC	0.1241	Tungsten	BCC	0.1371
Lead	FCC	0.1750	Zinc	HCP	0.1332

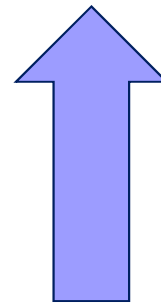
^a FCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

^b A nanometer (nm) equals 10^{-9} m; to convert from nanometers to angstrom units (\AA), multiply the nanometer value by 10.

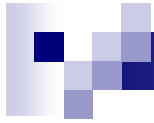


À temperatura ambiente, o comprimento da aresta da célula unitária da estrutura CCC do Fe- α é $0,287 \times 10^{-9}$ m (0,287 nm). Se as células unitárias do Fe- α se alinharem lado a lado, quantas células unitárias existirão em 1 mm?

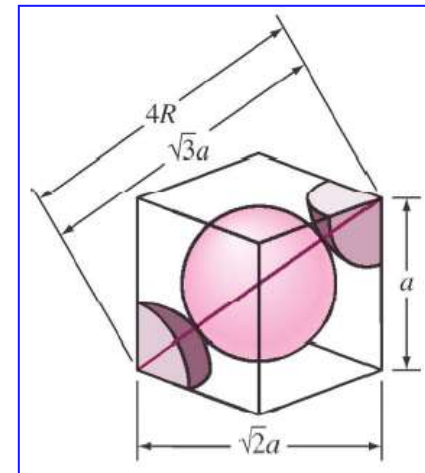
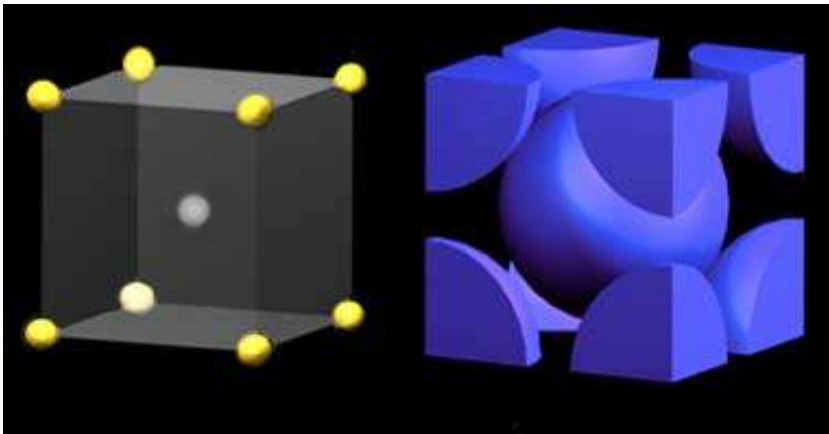
3484321 células unitárias



Tamanho extremamente pequeno da célula unitária!



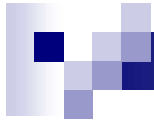
Estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC)



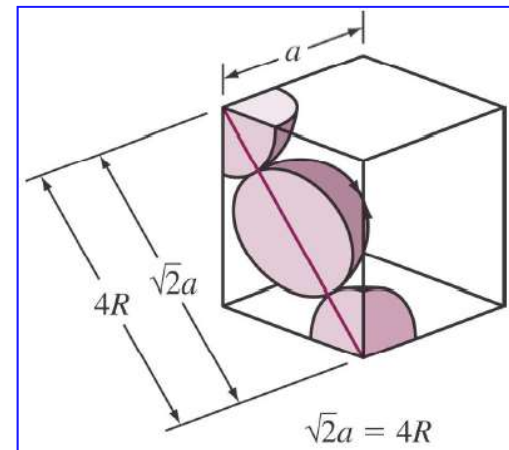
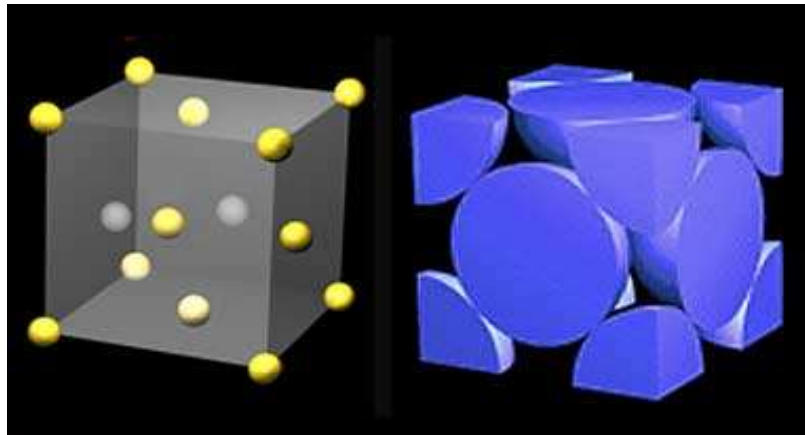
a – parâmetro de rede

R – raio atômico

- cada célula possui o equivalente a **2 átomos** por célula unitária
- os átomos tocam-se segundo a diagonal do cubo
- relação entre a e R :
$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$



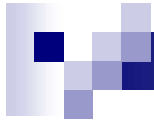
Estrutura cristalina cúbica de faces centradas (CFC)



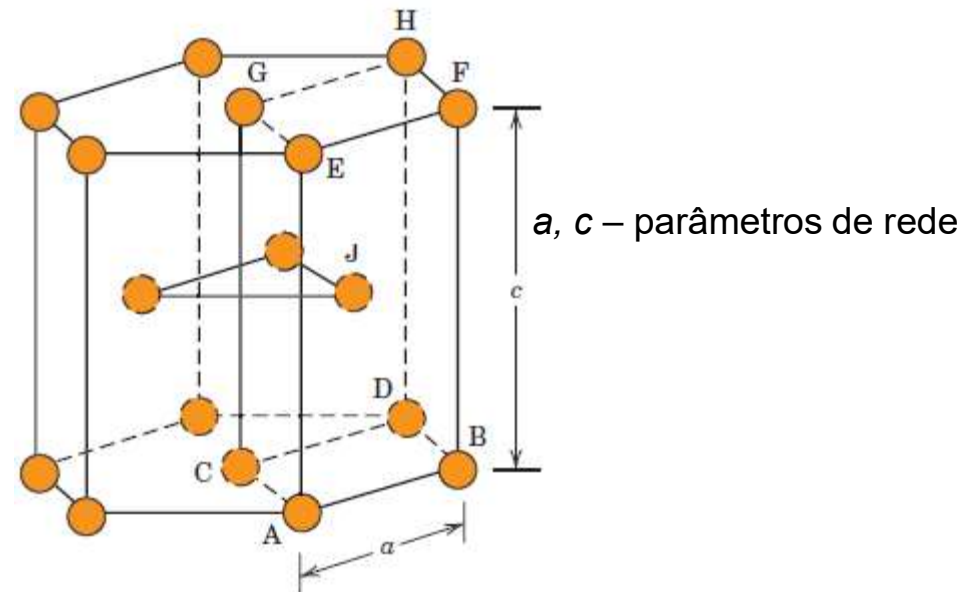
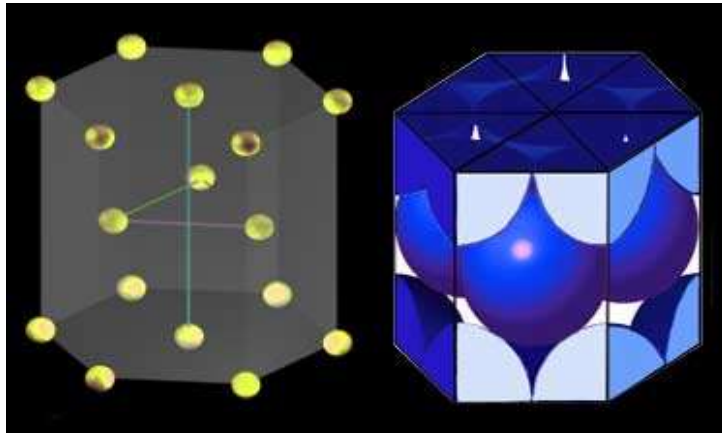
a – parâmetro de rede

R – raio atômico

- cada célula possui o equivalente a **4 átomos** por célula unitária
- os átomos tocam-se segundo as diagonais das faces do cubo
- relação entre a e R :
$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$



Estrutura cristalina hexagonal compacta (HC)



- cada célula possui o equivalente a **6 átomos** por célula unitária
- relação entre a e R : $a = 2R$
- razão entre c e a para estrutura cristalina HC ideal: $\frac{c}{a} = 1,633$



Outras importantes características da estrutura do cristal:

➤ número de coordenação (NC): número de vizinhos mais próximos de um átomo

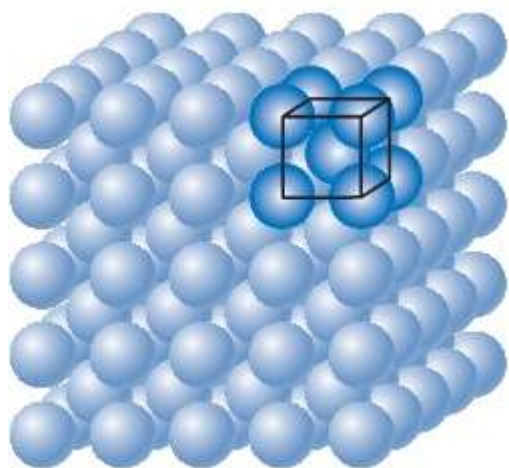
➤ fator de empacotamento ou fator de compacidade atômica (FCA):

$$FCA = \frac{\text{volume de átomos na célula unitária}}{\text{volume da célula unitária}}$$

➤ massa volúmica do metal (teórica): $\rho_V = \frac{\text{massa da célula unitária}}{\text{volume da célula unitária}}$



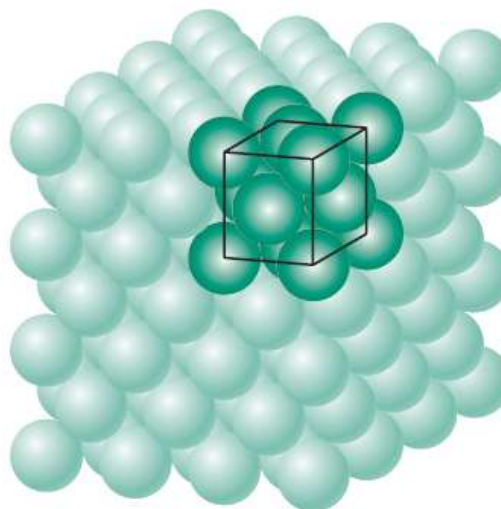
Cristal CCC



$$NC = 8$$

$$FCA = 0,68$$

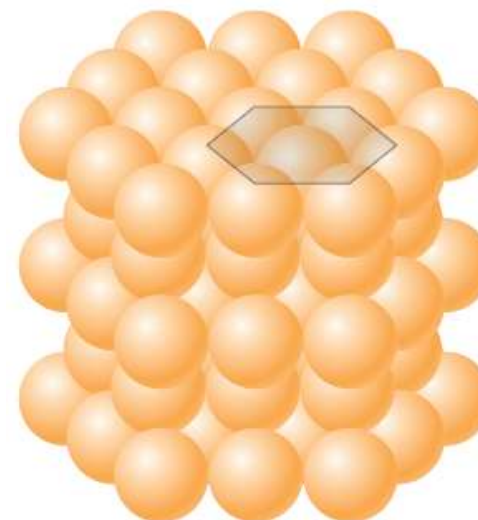
Cristal CFC



$$NC = 12$$

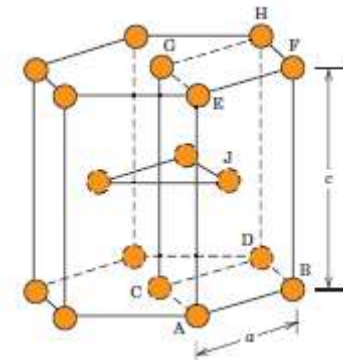
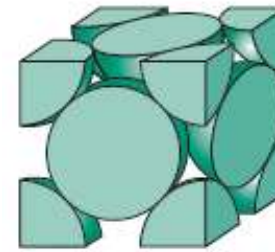
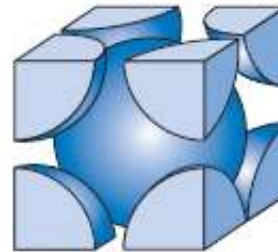
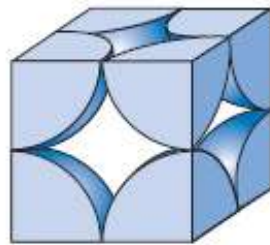
$$FCA = 0,74$$

Cristal HC



$$NC = 12$$

$$FCA = 0,74$$



	cúbica simples (CS)	cúbica de corpo centrado (CCC)	cúbica de faces centradas (CFC)	hexagonal compacta (HC)
nº de átomos / célula	$\frac{1}{8} \times 8 = 1$	$\frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$	$\frac{1}{8} \times 8 + 6 \times \frac{1}{2} = 4$	$12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$
parâmetro de rede (a)	2R	$\frac{4R}{\sqrt{3}}$	$\frac{4R}{\sqrt{2}}$	$a = 2R$ $c = 4 \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R$
diagonal da face (df)	$2\sqrt{2} R$	$4 \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R$	4 R	não se aplica
diagonal do cubo (dc)	$2\sqrt{3} R$	4 R	$4 \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} R$	não se aplica
fator de compacidade atômica (FCA)	0,52	0,68	0,74	0,74

CS – estrutura hipotética para metais puros; os metais não cristalizam neste tipo de estrutura cristalina.

$$\rho_{\text{metais}} > \rho_{\text{cerâmicos}} > \rho_{\text{polímeros}}$$

Metais

- empacotamento compacto (ligação metálica)
- massas atômicas elevadas

Cerâmicos

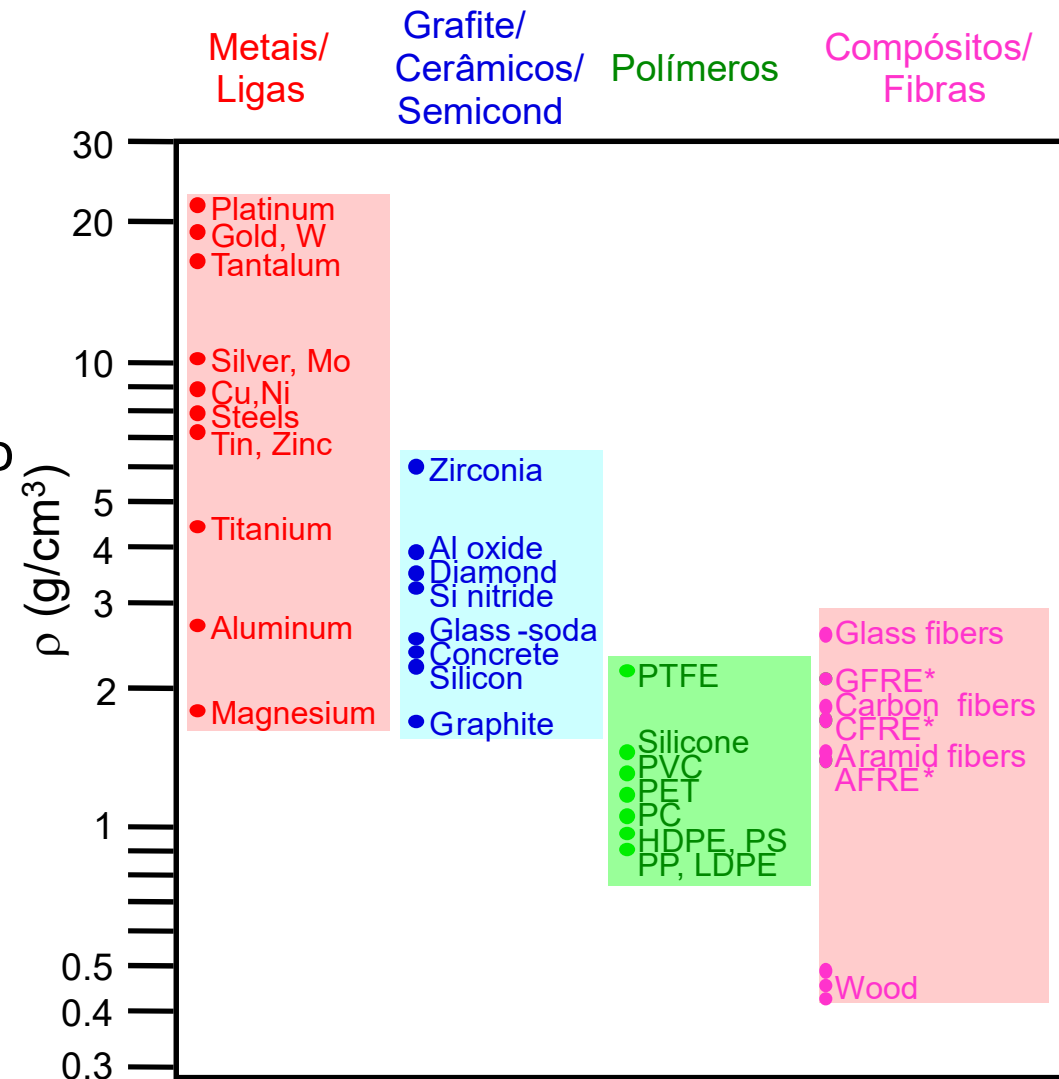
- empacotamento pouco denso
- elementos leves

Polímeros

- pouco densos (geralmente amorfos)
- elementos leves (C, H, O)

Compósitos

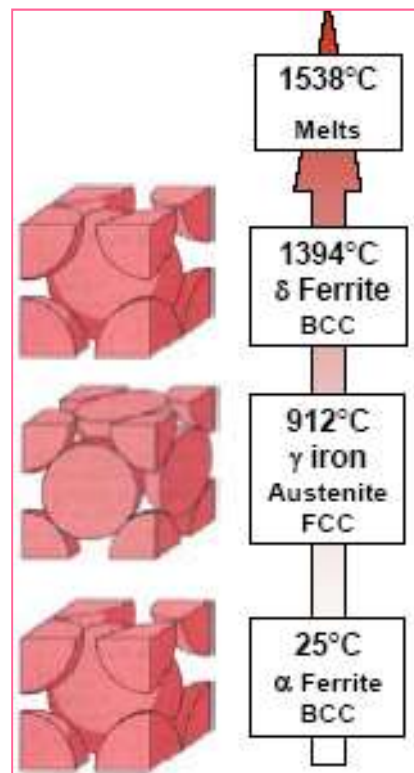
- valores intermédios



Muitos elementos existem em mais do que uma forma cristalina para diferentes condições de temperatura e pressão



Polimorfismo ou Alotropia



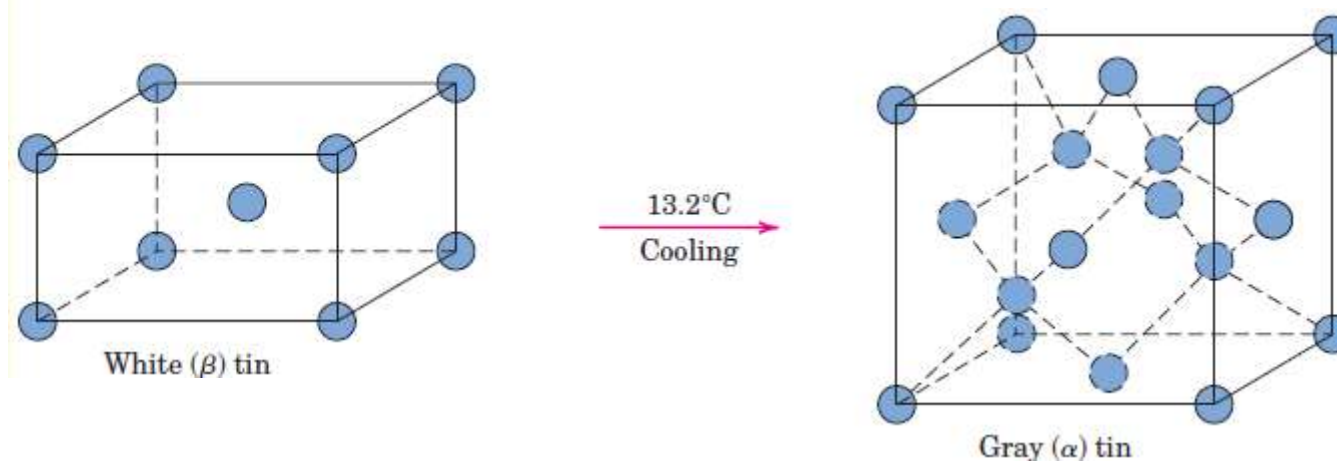
Formas cristalinas alotrópicas de alguns metais

METAL	ESTRUTURA NA TEMP. AMBIENTE	EM OUTRAS TEMPERATURAS
Ca	CFC	CCC (>447 ⁰ C)
Co	HC	CFC (>427 ⁰ C)
Hf	HC	CFC (>1742 ⁰ C)
Fe	CCC	CFC (912-1394 ⁰ C) CCC (>1394 ⁰ C)
Li	CCC	HC (<-193 ⁰ C)
Na	CCC	HC (<-233 ⁰ C)
Tl	HC	CCC (>234 ⁰ C)
Ti	HC	CCC (>883 ⁰ C)
Y	HC	CCC (>1481 ⁰ C)
Zr	HC	CCC (>872 ⁰ C)

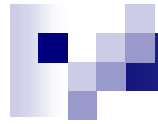


Transição alotrópica do estanho

“doença do estanho”

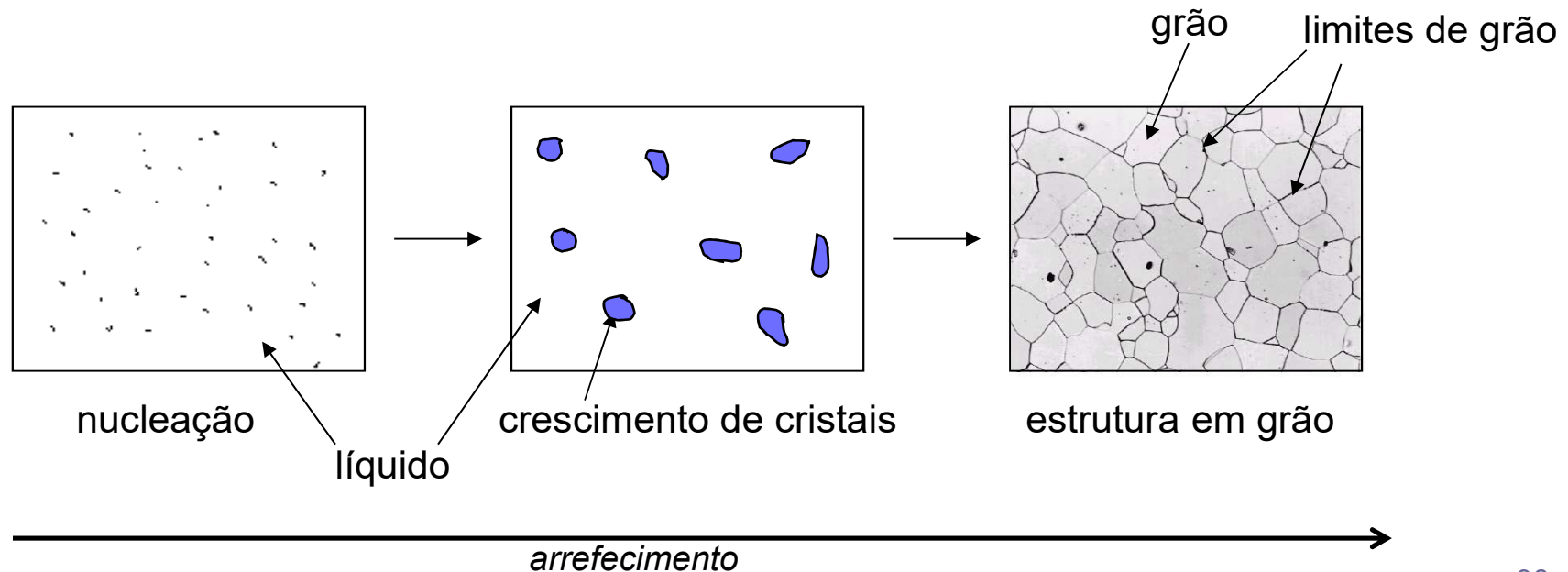


Specimen of white tin (left). Another specimen disintegrated upon transforming to gray tin (right) after it was cooled to and held at a temperature below 13.2°C for an extended period of time.



Em geral, pode dividir-se a **solidificação** de um metal, ou liga, nas seguintes etapas:

- formação, no líquido, de **núcleos** estáveis (**nucleação**);
- crescimentos dos núcleos, originando **cristais**;
- formação de uma estrutura em **grão**.





Muitas propriedades importantes dos materiais são devidas à presença de imperfeições!

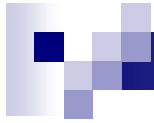
- Que tipo de imperfeições/defeitos são esses?
- Porque são eles importantes?



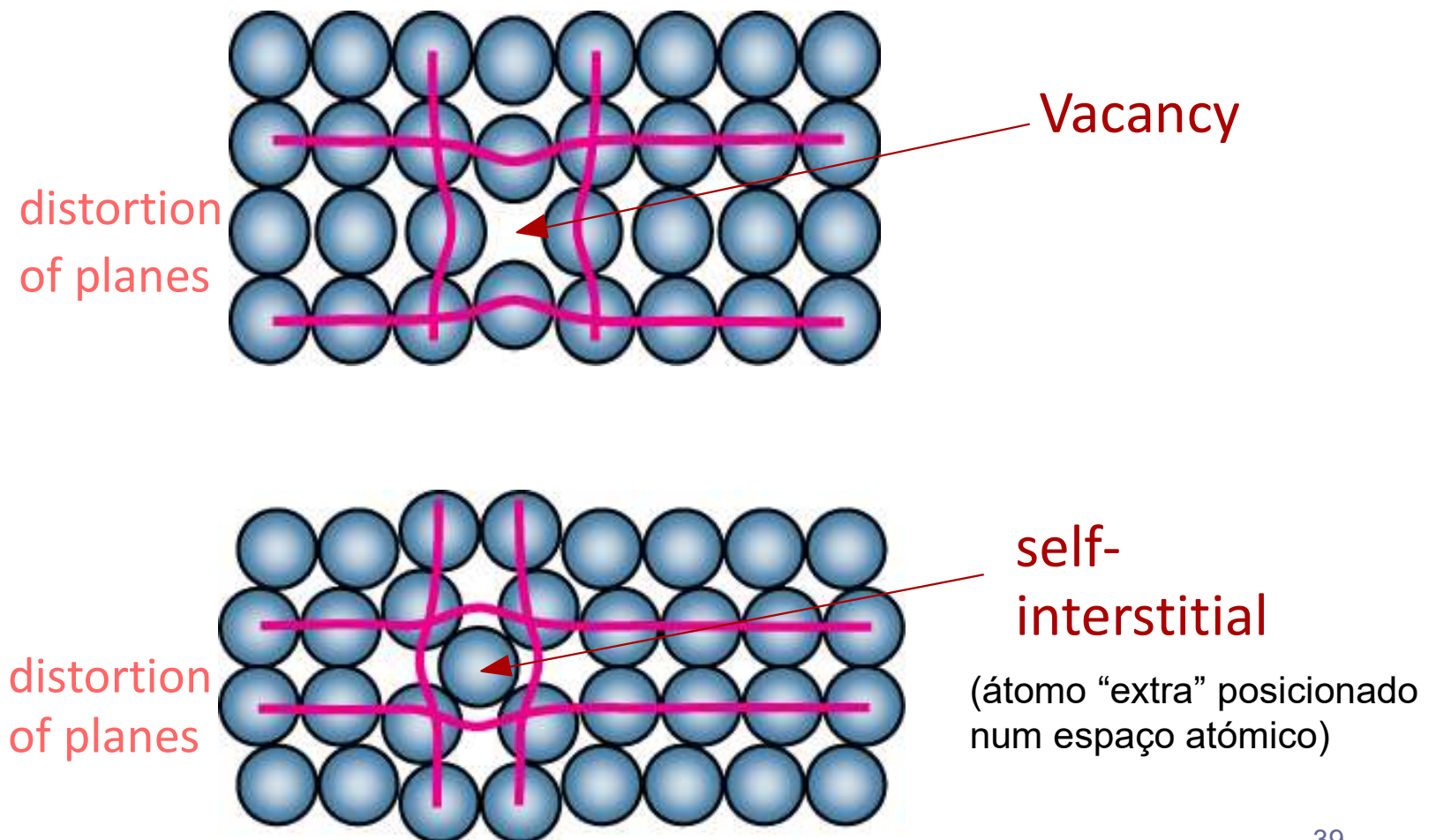
Principais tipos de defeitos:

Micro scópicos

- defeitos pontuais (lacunas...);
 - impurezas;
 - defeitos lineares (ou deslocações);
 - defeitos interfaciais (incluem as superfícies exteriores e os limites de grão interiores).
-
- defeitos macroscópicos tridimensionais (poros, fendas e inclusões)

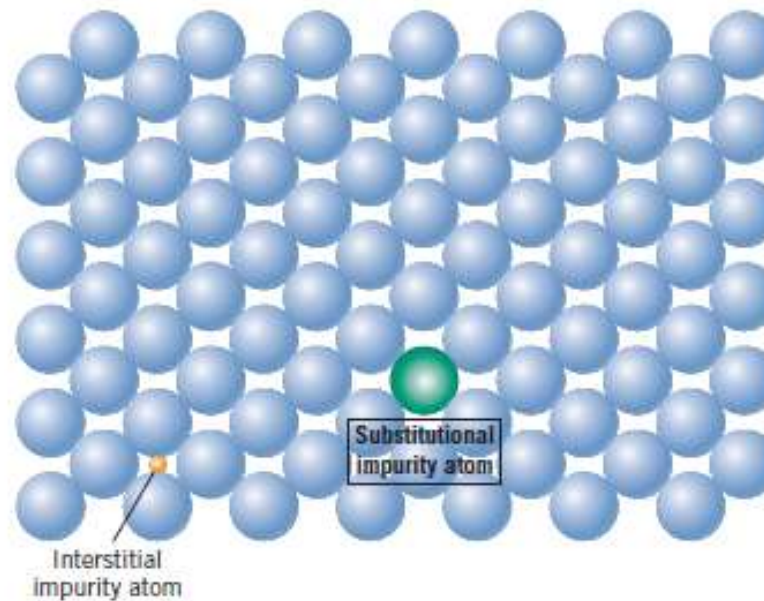


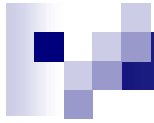
Lacuna e defeito auto-intersticial:



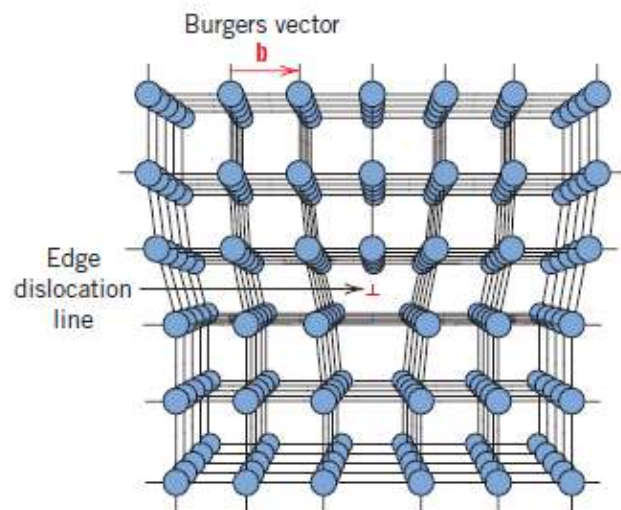


Impurezas (substitucionais e intersticiais):

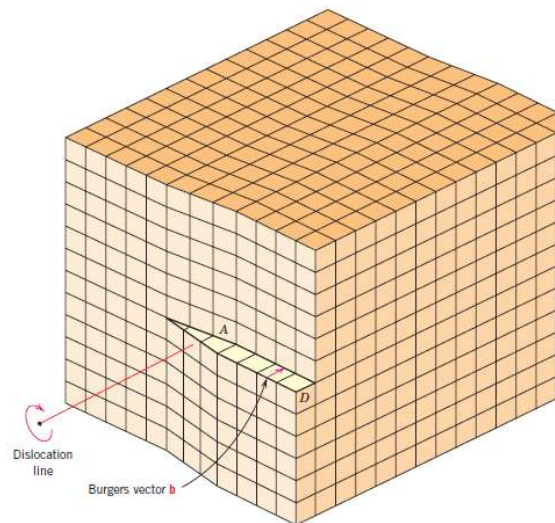




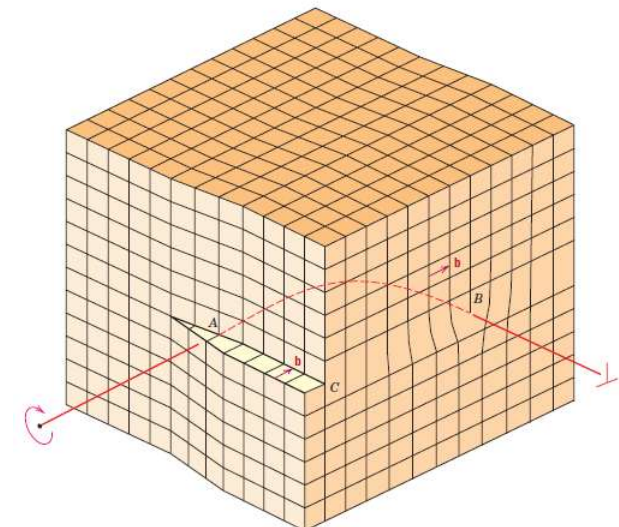
Defeitos lineares (ou deslocações): distorção da rede centrada em torno de uma linha (tipo cunha, parafuso e mista).



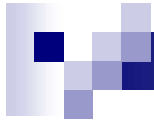
Deslocação tipo cunha



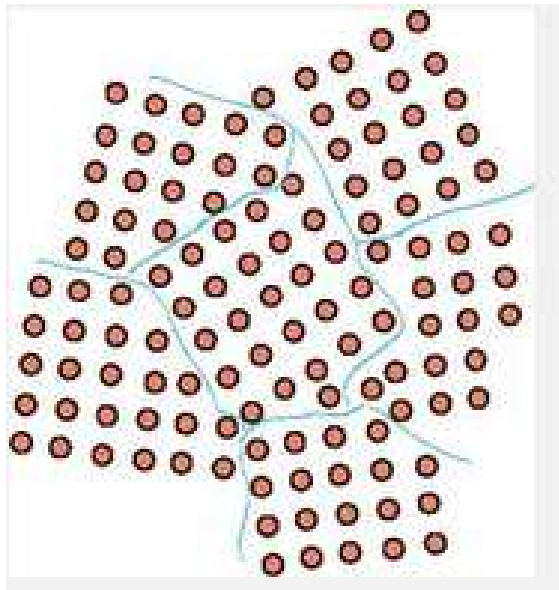
Deslocação tipo parafuso



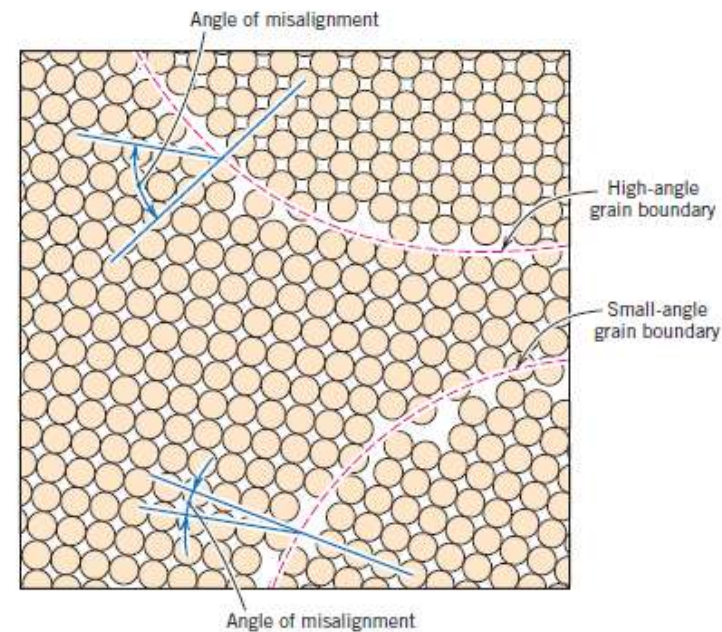
Deslocação mista



Defeitos interfaciais: os limites de grão são defeitos interfaciais que separam grãos (cristais) com diferentes orientações.



material policristalino

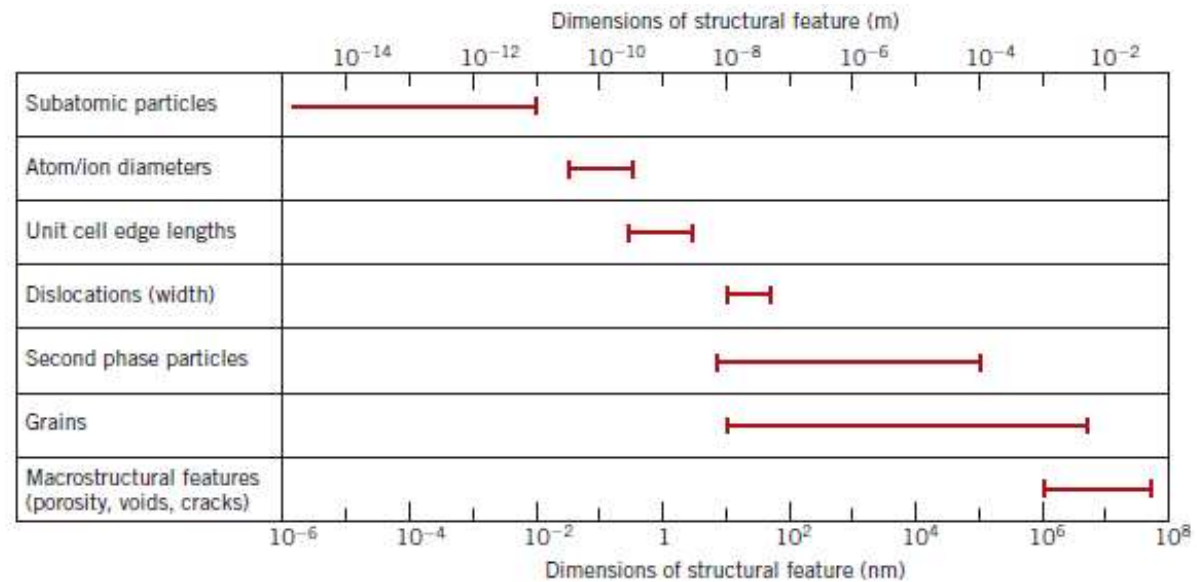


Fronteiras de grão:

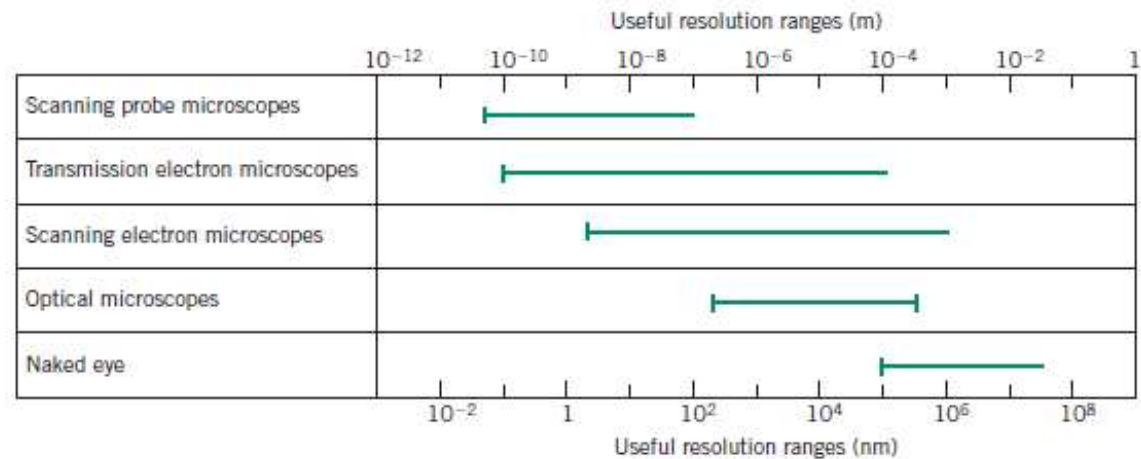
- ligeira desordem
- baixa densidade (desajustamento atômico)
 - elevada mobilidade
 - elevada difusividade
 - elevada reatividade química

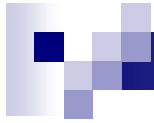


Gamas de tamanho de
vários tipos de estruturas
encontradas nos materiais



Poder de resolução de
diferentes técnicas
microscópicas



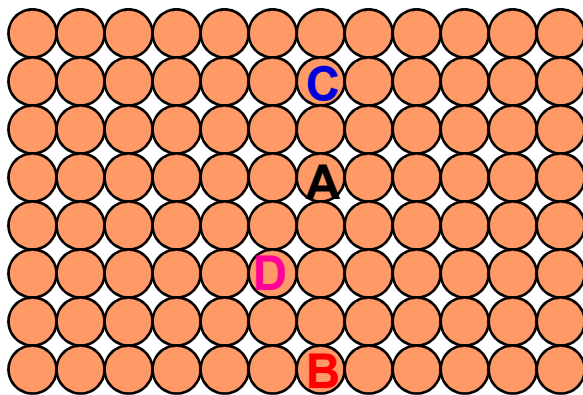


Difusão – transporte de massa devido ao movimento atômico.

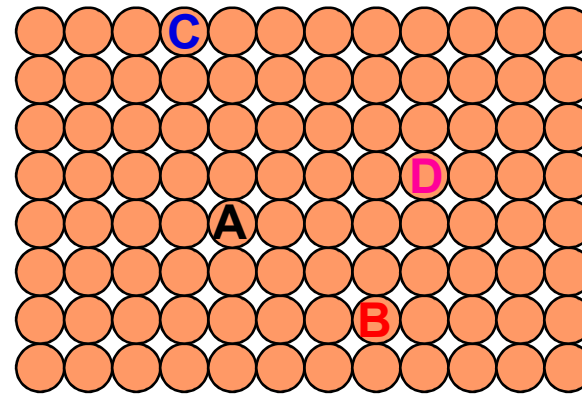
- Gases e líquidos – movimento aleatório (Browniano)
- Sólidos – difusão **substitucional** e difusão **intersticial**

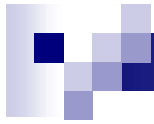
Num elemento **sólido**, os átomos também migram:

posição atômica inicial

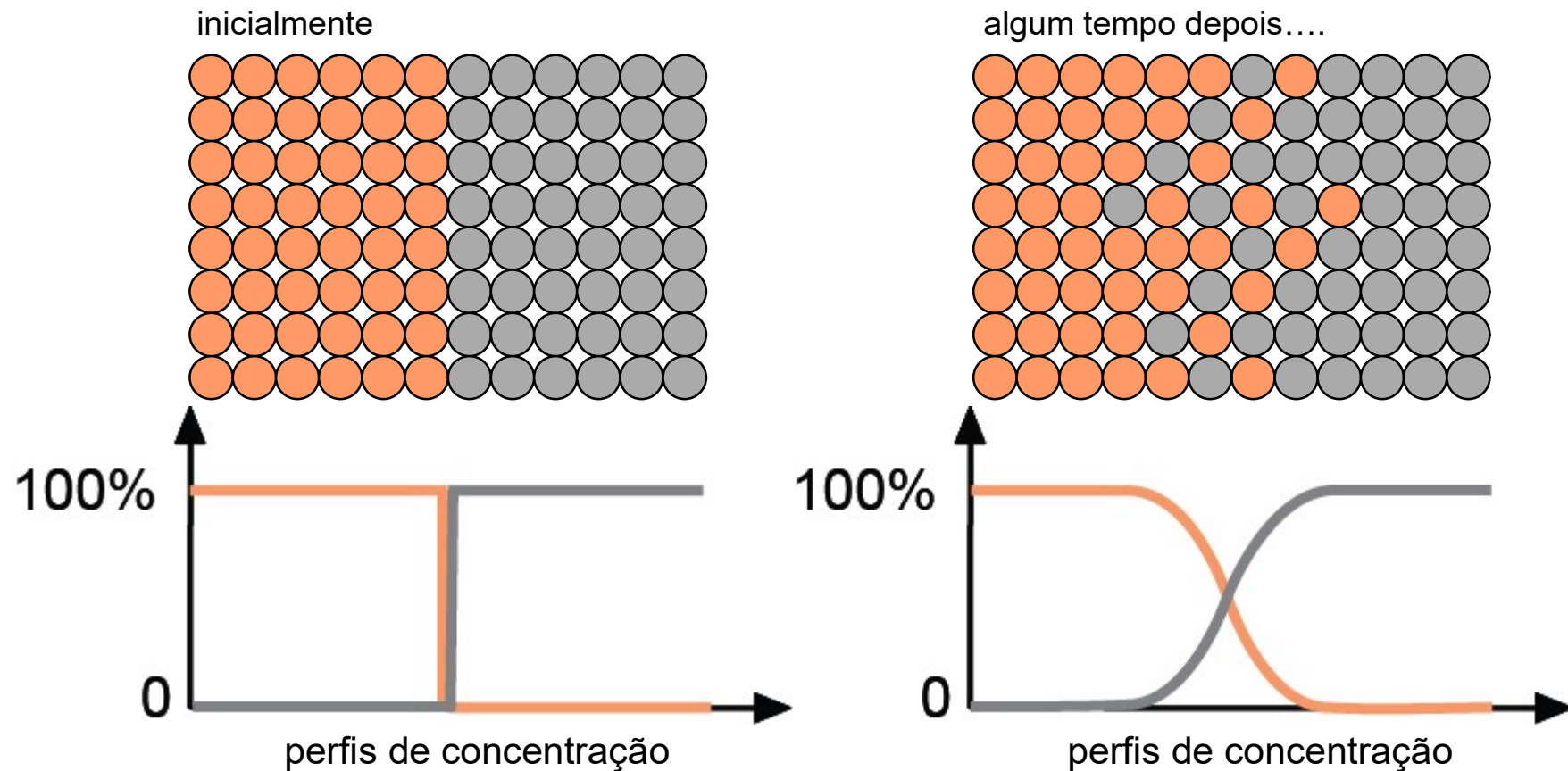


algum tempo depois...





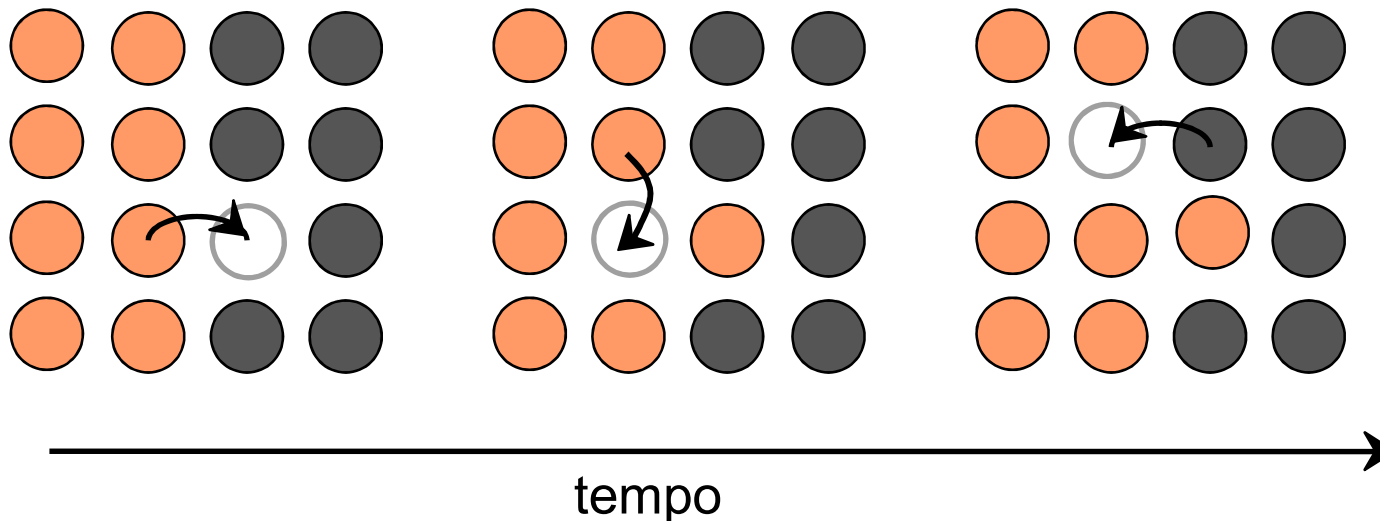
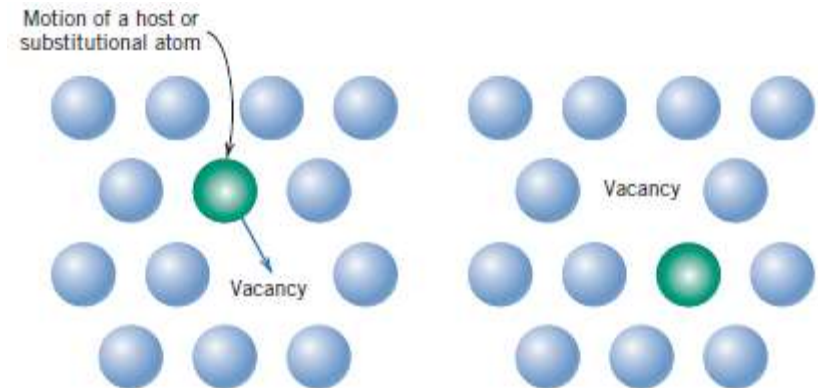
Numa **liga metálica**, os átomos tendem a migrar de regiões de elevada concentração para regiões de mais baixa concentração:

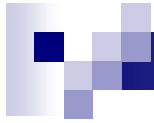




Difusão atômica substitucional

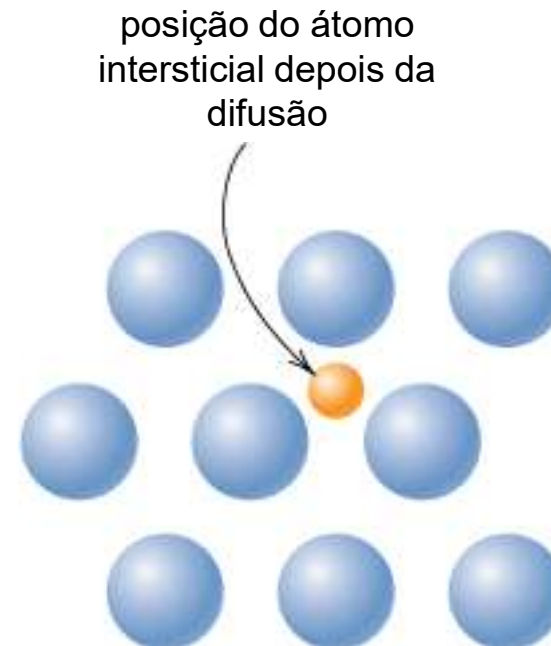
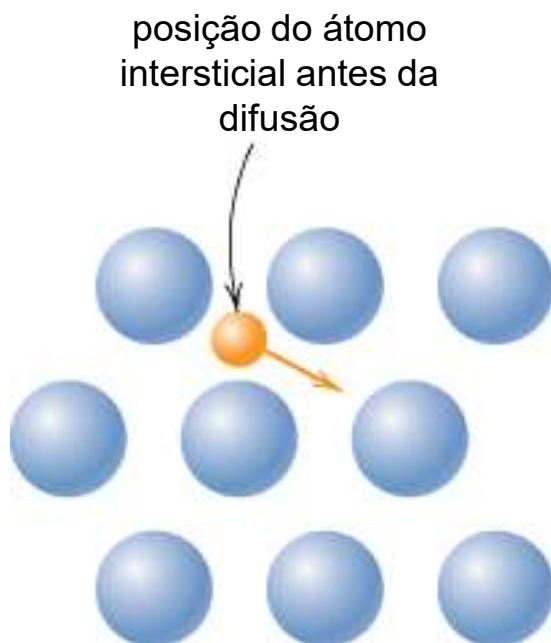
- os átomos trocam de lugar com a lacuna
- a velocidade de difusão depende de:
 - número de lacunas
 - energia de ativação.





Difusão atômica intersticial

- pequenos átomos podem difundir-se entre átomos
- mais rápida que a difusão substitucional





Resumindo.....

Difusão **RÁPIDA** para....

- estruturas cristalinas abertas
- materiais com ligações secundárias
- átomos pequenos
- materiais de baixa densidade

Difusão **LENTA** para...

- estruturas compactas
- materiais com ligações químicas (primárias)
- átomos grandes
- materiais de elevada densidade