UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

✓ **Classificação dos materiais em função das ligações químicas**

Prof. Dr. Renata Ayres Rocha

TIPOS DE MATERIAIS

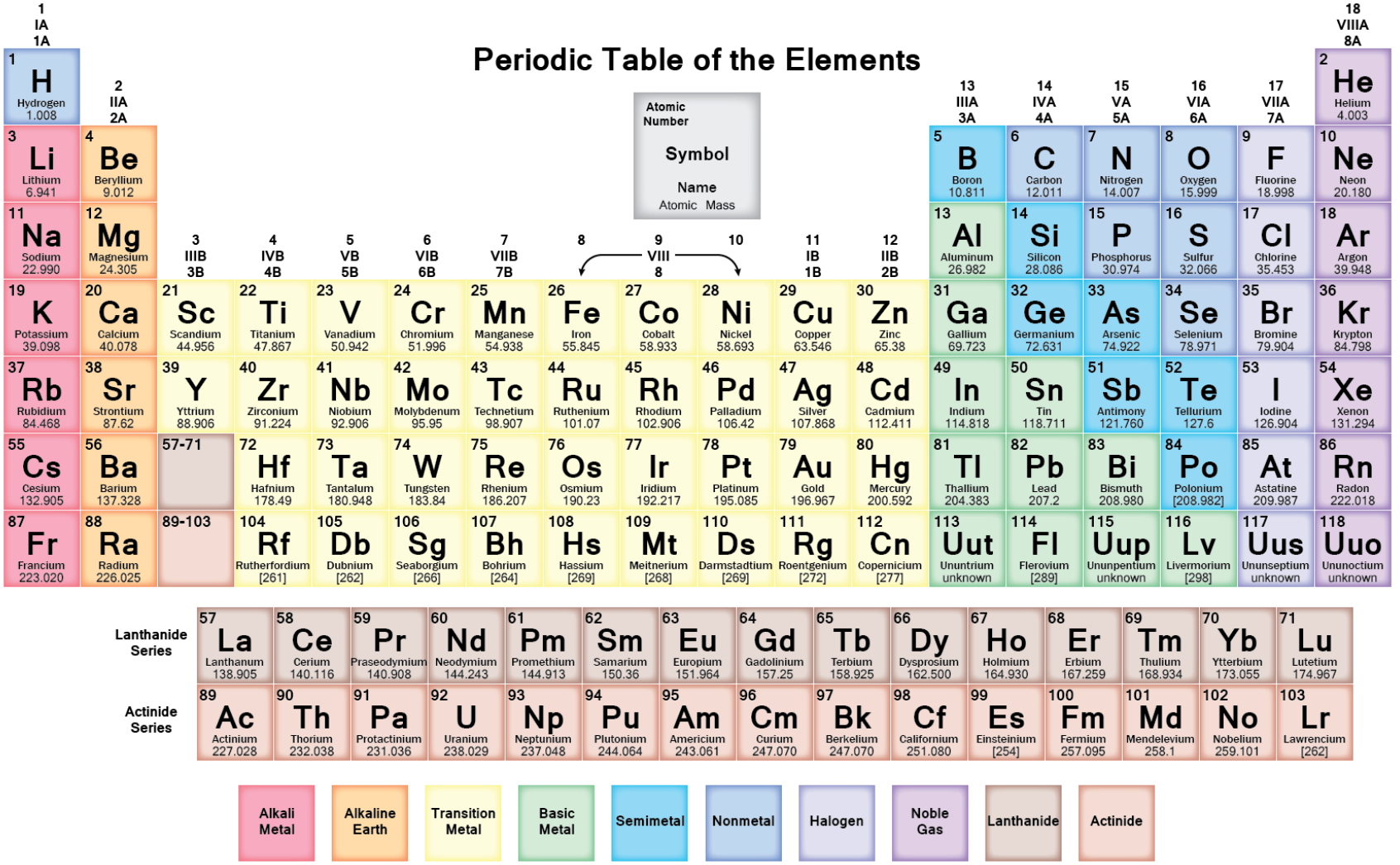
Polímeros

Metais

Cerâmicas

ELEMENTOS QUÍMICOS - TABELA PERIÓDICA

Os elementos químicos são classificados de acordo com a sua configuração eletrônica



NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

- ✓ **Cada elétron em um átomo é caracterizado por quatro parâmetros → os números quânticos.**
- ✓ **Não existem dois elétrons com os mesmos números quânticos**

Principal Quantum Number n	*Shell Designation*	*Subshells*	*Number of States*	*Number of Electrons*	
				Per Subshell	*Per Shell*
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	

NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

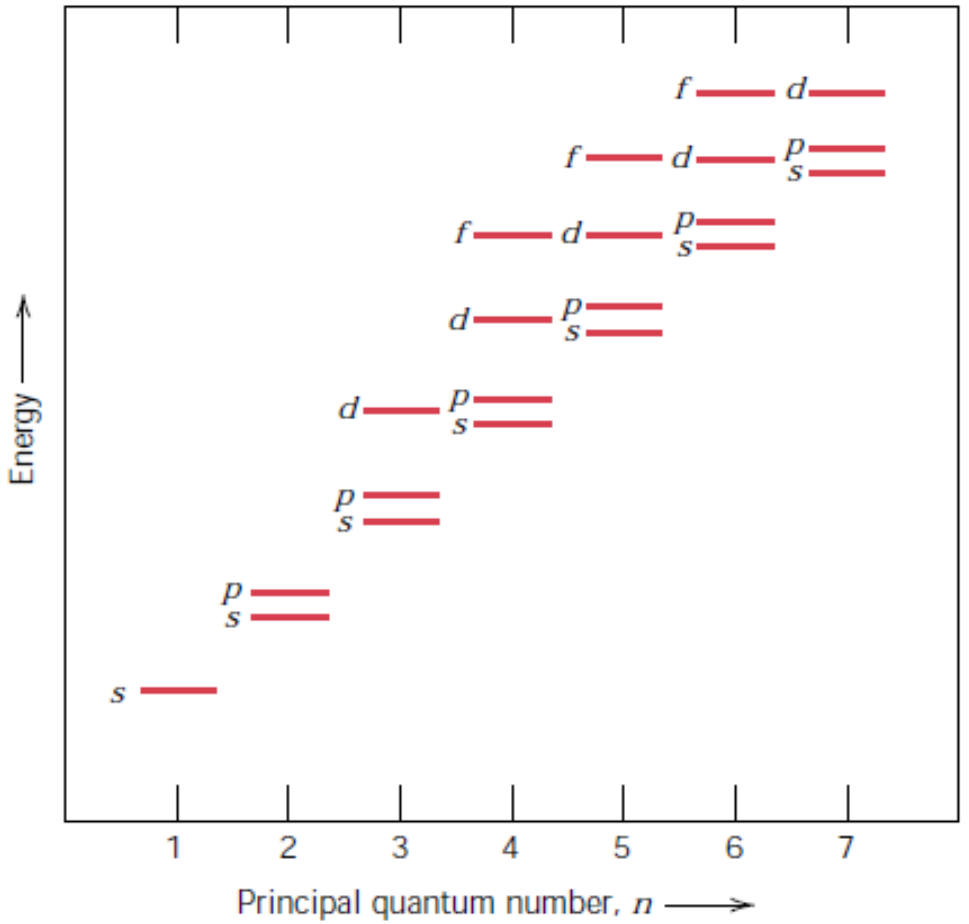
Número Quântico Principal (n)

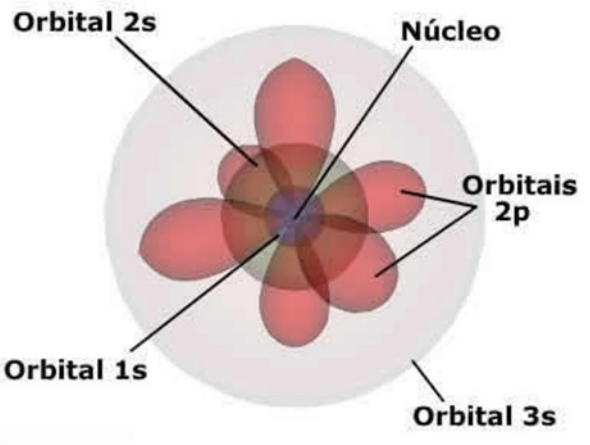
K (n=1)	$1s^2$
L (n=2)	$2s^2$ $2p^6$
M (n=3)	$3s^2$ $3p^6$ $3d^{10}$
N (n=4)	$4s^2$ $4p^6$ $4d^{10}$ $4f^{14}$
O (n=5)	$5s^2$ $5p^6$ $5d^{10}$ $5f^{14}$
P (n =6)	$6s^2$ $6p^6$ $6d^{10}$
Q (n=7)	$7s^2$

Ocupação dos elétrons

→ Subníveis em cada camada (número quântico secundário)

NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

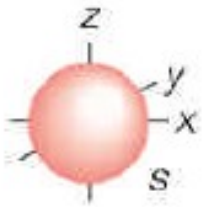




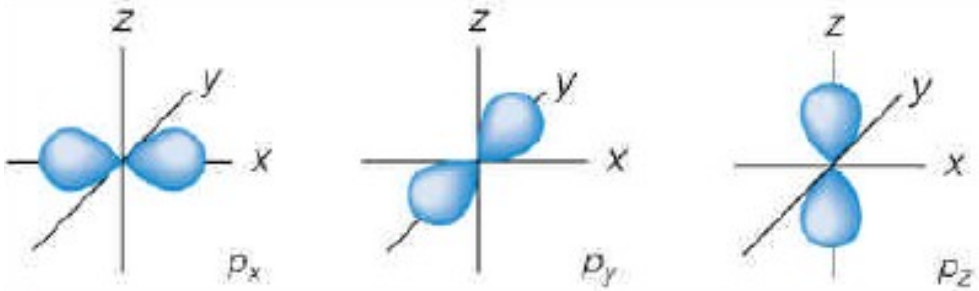
Representação esquemática das energias relativas para várias camadas e subcamadas

NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

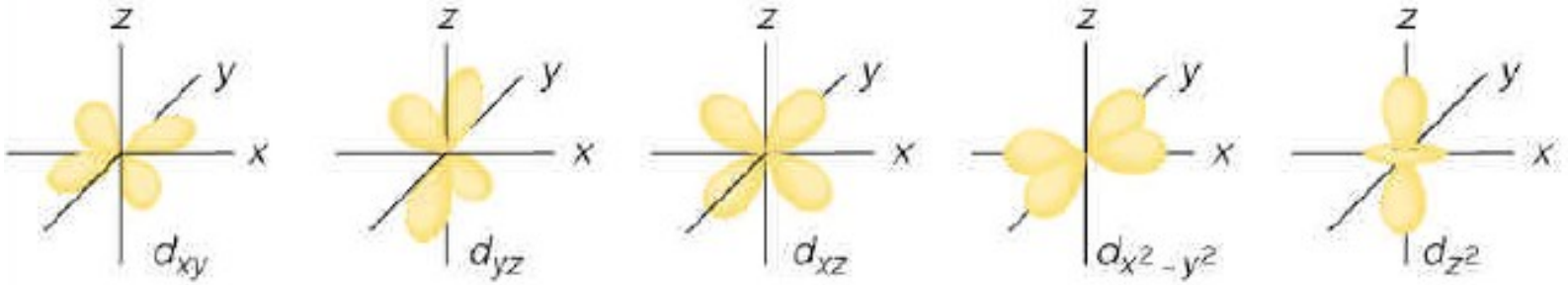
Número Quântico Orbital ou Secundário (l)



Orbital s (número quântico secundário = 0)

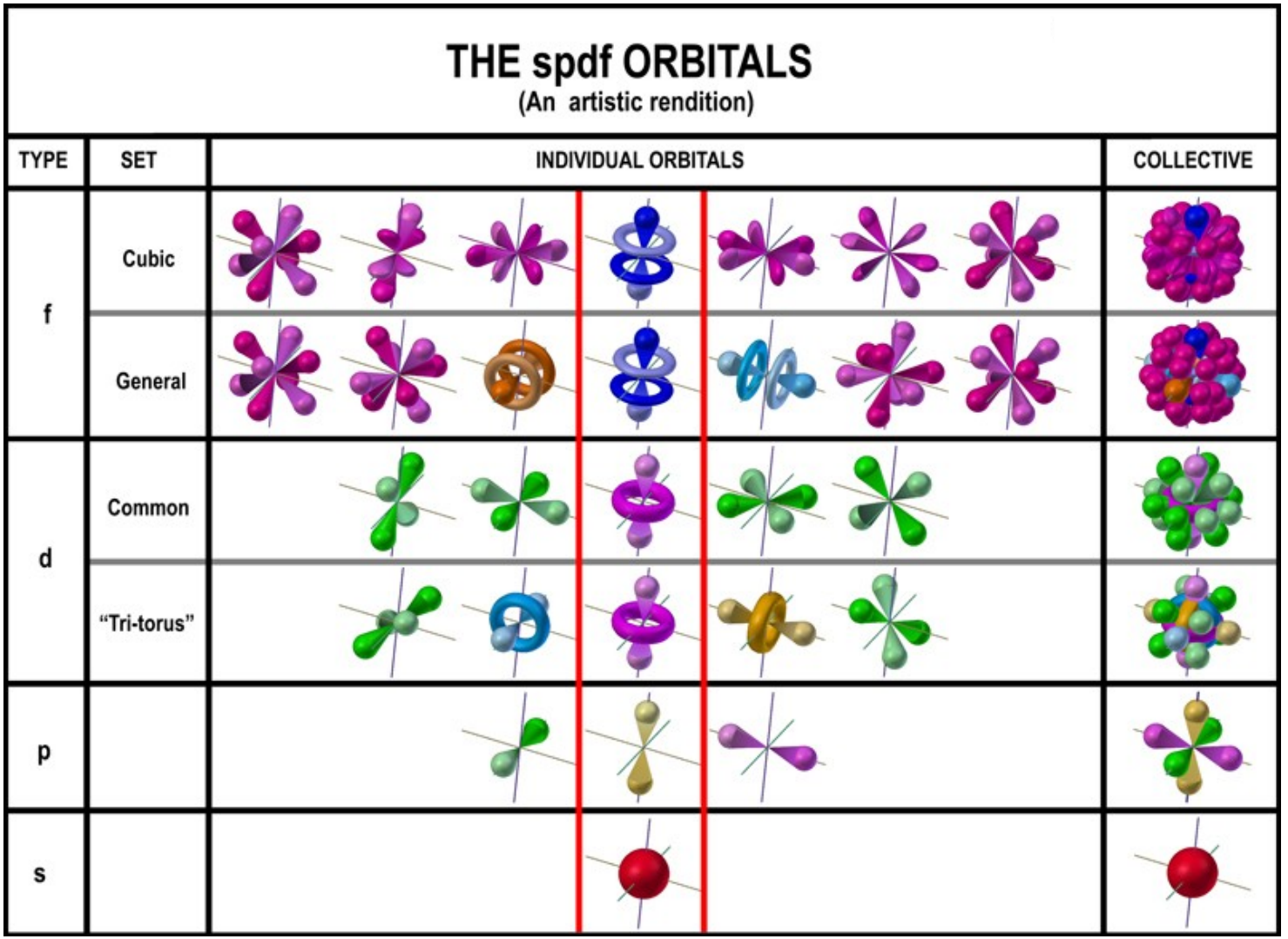


Orbital p (número quântico secundário = 1)



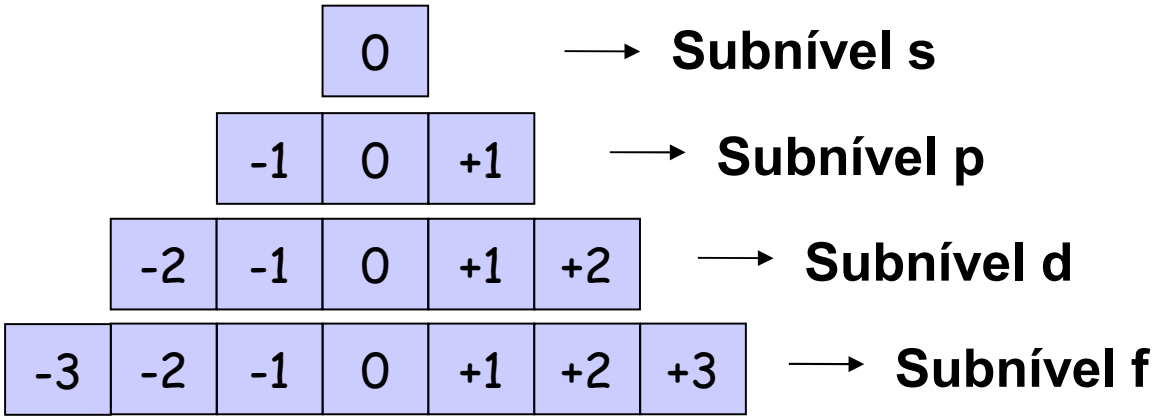
Orbital d (número quântico secundário = 2)

NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA



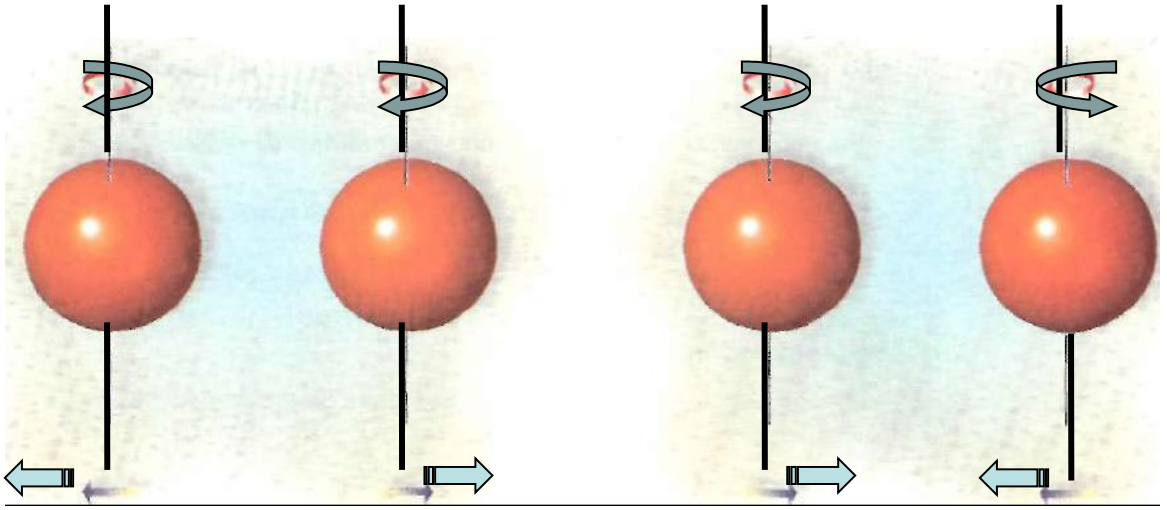
NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

Número Quântico Orbital magnético (m_l)



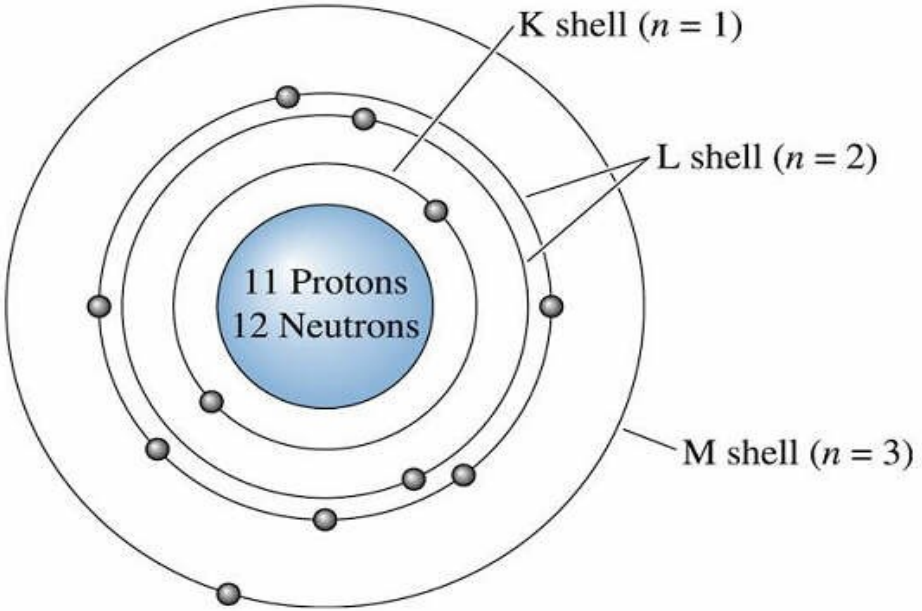
NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

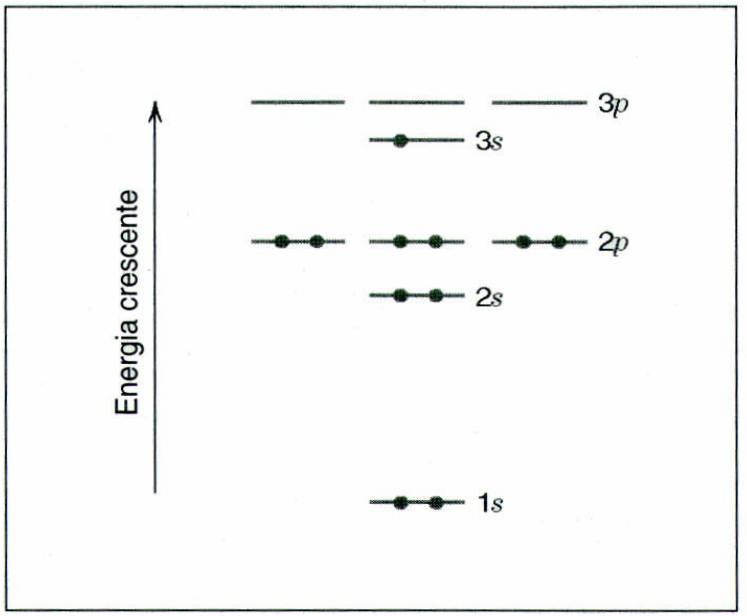
Número Quântico de Spin (m_s)



+1/2 ou -1/2

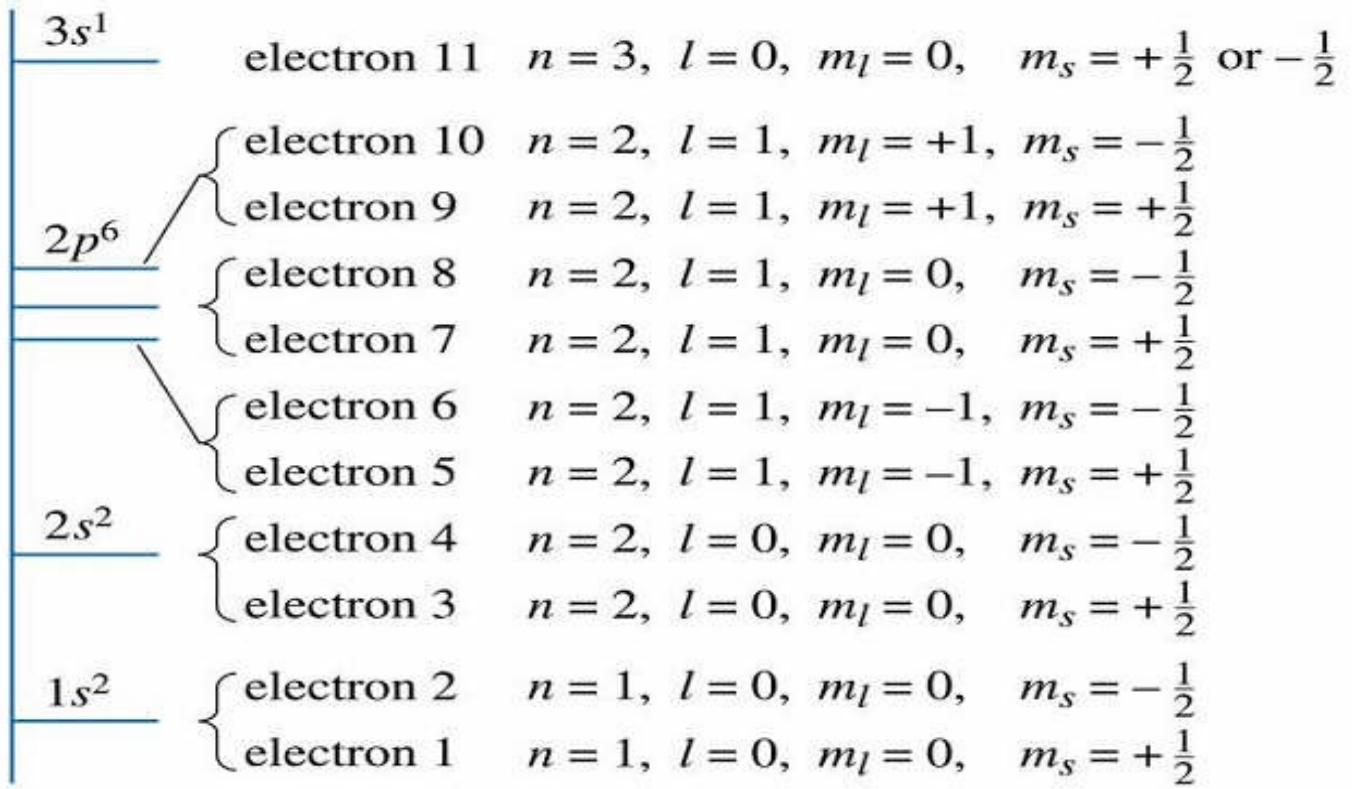
NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA





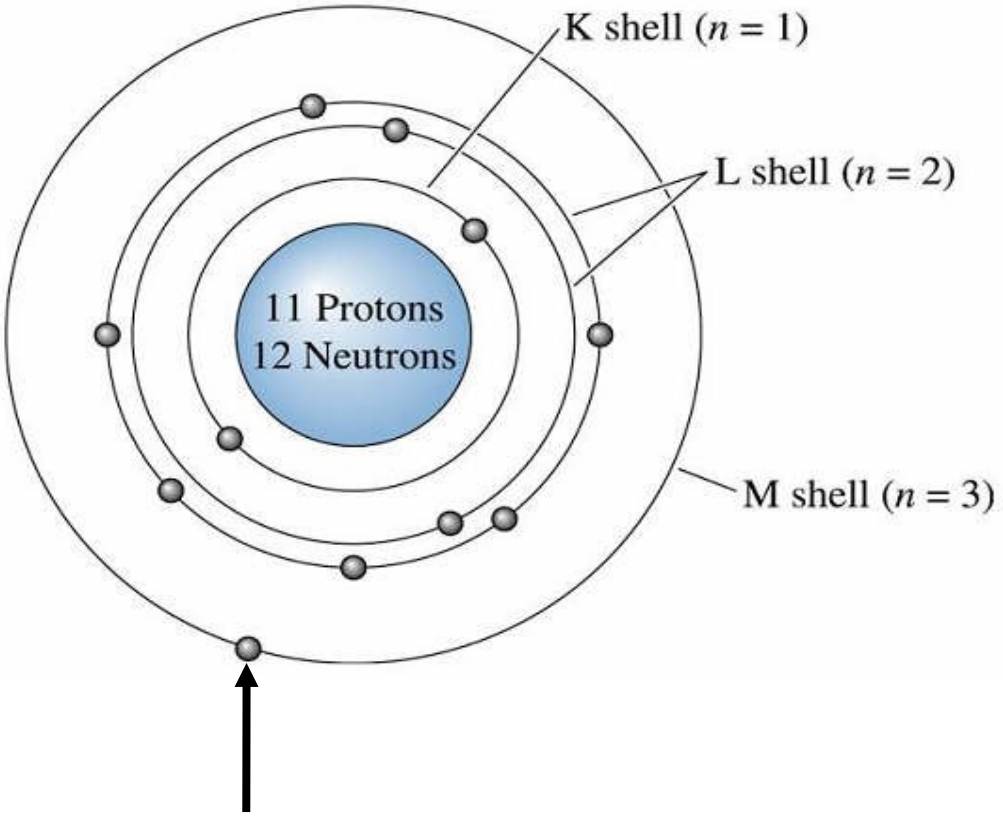
NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

Configuração Eletrônica do Átomo de Sódio



NÚMEROS QUÂNTICOS E CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

- ✓ **Elétrons de Valência**
  - ✓ São aqueles que ocupam a camada eletrônica mais externa.
- ✓ **Configurações Eletrônicas Estáveis**
  - ✓ As camadas eletrônicas mais externas estão completamente preenchidas.



Elétron de valência do sódio

LIGAÇÕES QUÍMICAS EM MATERIAIS SÓLIDOS

Os elementos se ligam para formar os sólidos para atingir uma configuração mais estável: oito elétrons na camada mais externa.

A ligação química é formada pela interação dos elétrons de valência através de um dos seguintes mecanismos:

- Ganho de elétrons

- Perda de elétrons

- Compartilhamento de elétrons

LIGAÇÕES QUÍMICAS EM MATERIAIS SÓLIDOS

Quais as ligações químicas primárias (entre os átomos) ?

– Iônica: forte e não direcional (grande diferença de eletronegatividade). Os íons se comportam como esferas.

– Metálica: forte e não direcional (nenhuma diferença de eletronegatividade e elétrons não localizados). Os átomos se comportam como esferas.

– Covalente: muito forte e direcional (pequena ou nenhuma diferença de eletronegatividade e elétrons localizados). A direção de ligação é dada pela direção dos orbitais.

LIGAÇÕES QUÍMICAS EM MATERIAIS SÓLIDOS

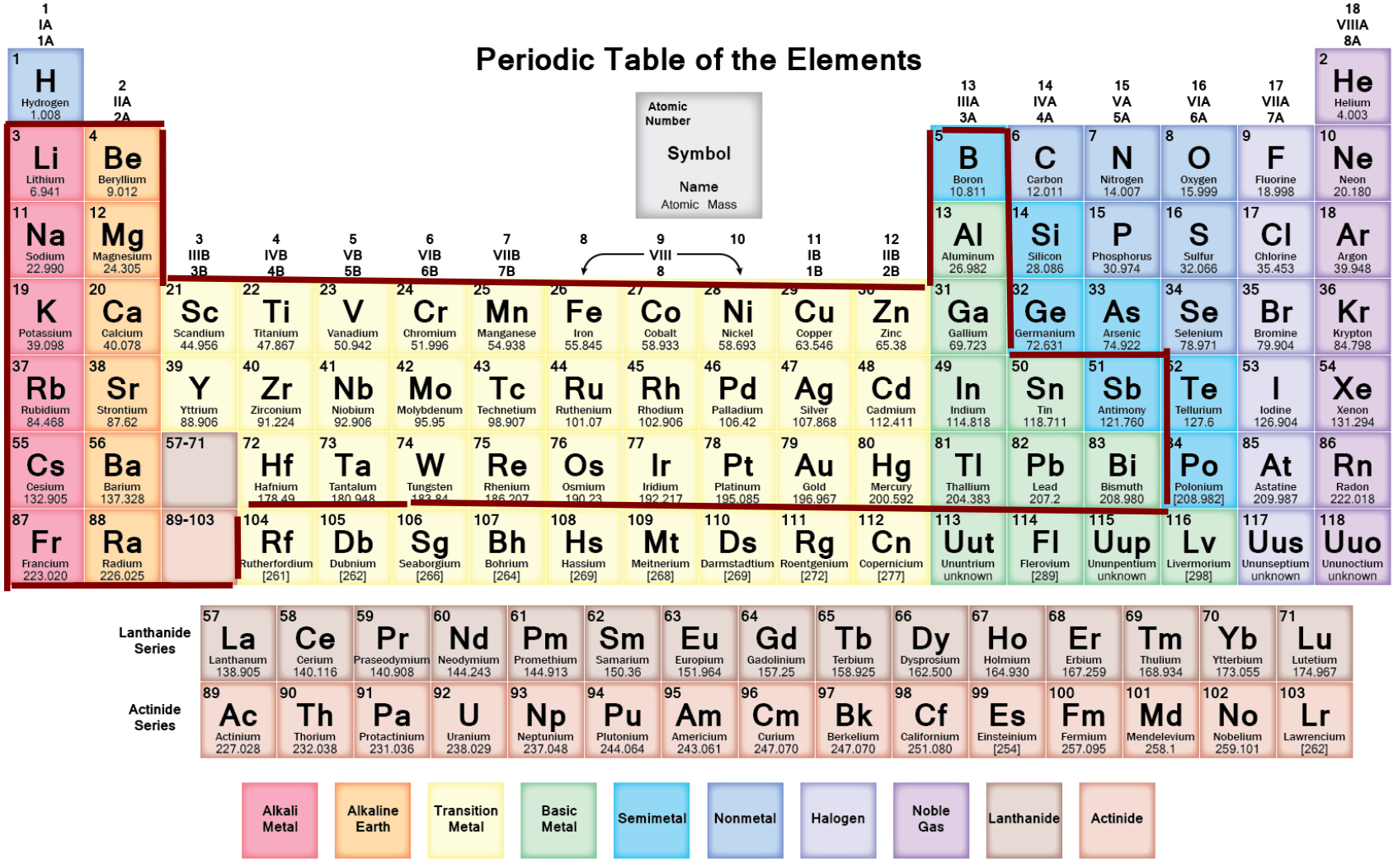
Table 2.3 Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

Bonding Type	*Substance*	*Bonding Energy*		*Melting Temperature*
		kJ/mol (kcal/mol)	*eV/Atom, Ion, Molecule*	*(°C)*
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	−39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	−189
	Cl_2	31 (7.4)	0.32	−101
Hydrogen	NH_3	35 (8.4)	0.36	−78
	H_2O	51 (12.2)	0.52	0

Universidade Federal do ABC

METAIS – LIGAÇÕES METÁLICAS

Metais na tabela periódica



METAIS – LIGAÇÕES METÁLICAS

- ✓ **Átomos dos metais possuem de um a três elétrons de valência.**
- ✓ **A ligação resultante é *não-direcional*.**
- ✓ **Os elétrons de valência passam a se comportar como *elétrons "livres"* :**
  - ✓ **Apresentam a mesma probabilidade de se associar a um grande número de átomos vizinhos.**
  - ✓ **Formam uma "nuvem eletrônica".**

METAIS – LIGAÇÕES METÁLICAS

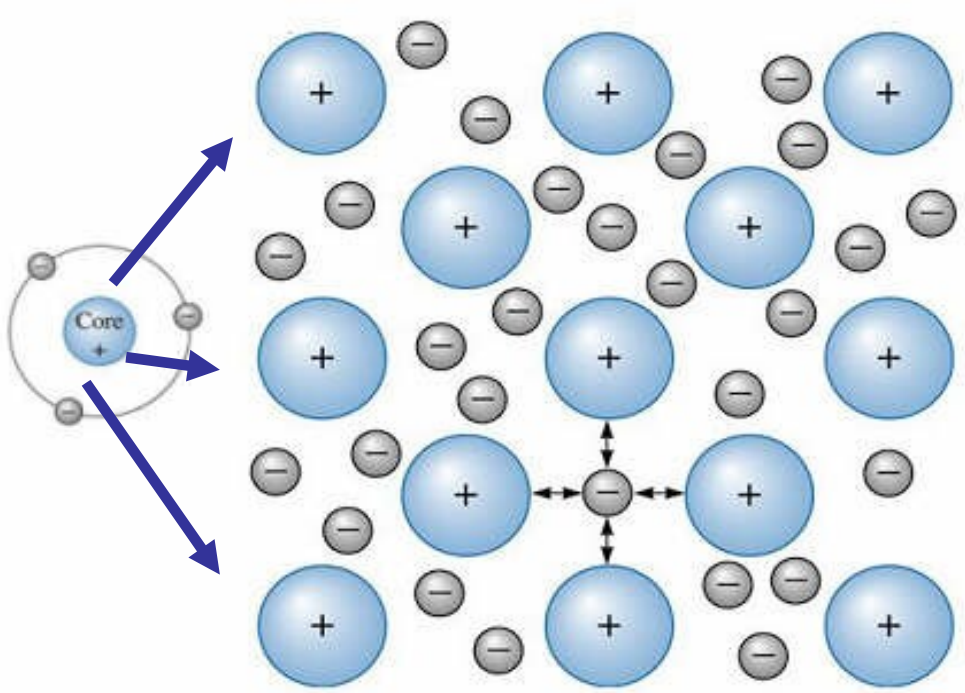
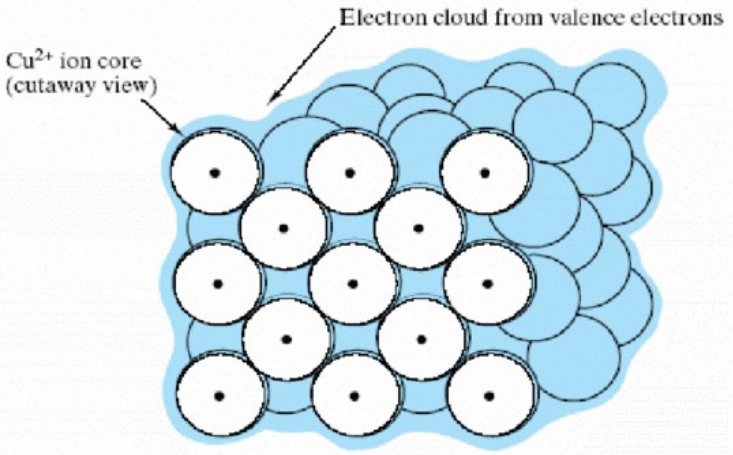


Ilustração esquemática da ligação metálica

Ligações metálicas envolvem a deslocalização de eletrons de valência



TIPOS DE MATERIAIS

Materiais metálicos

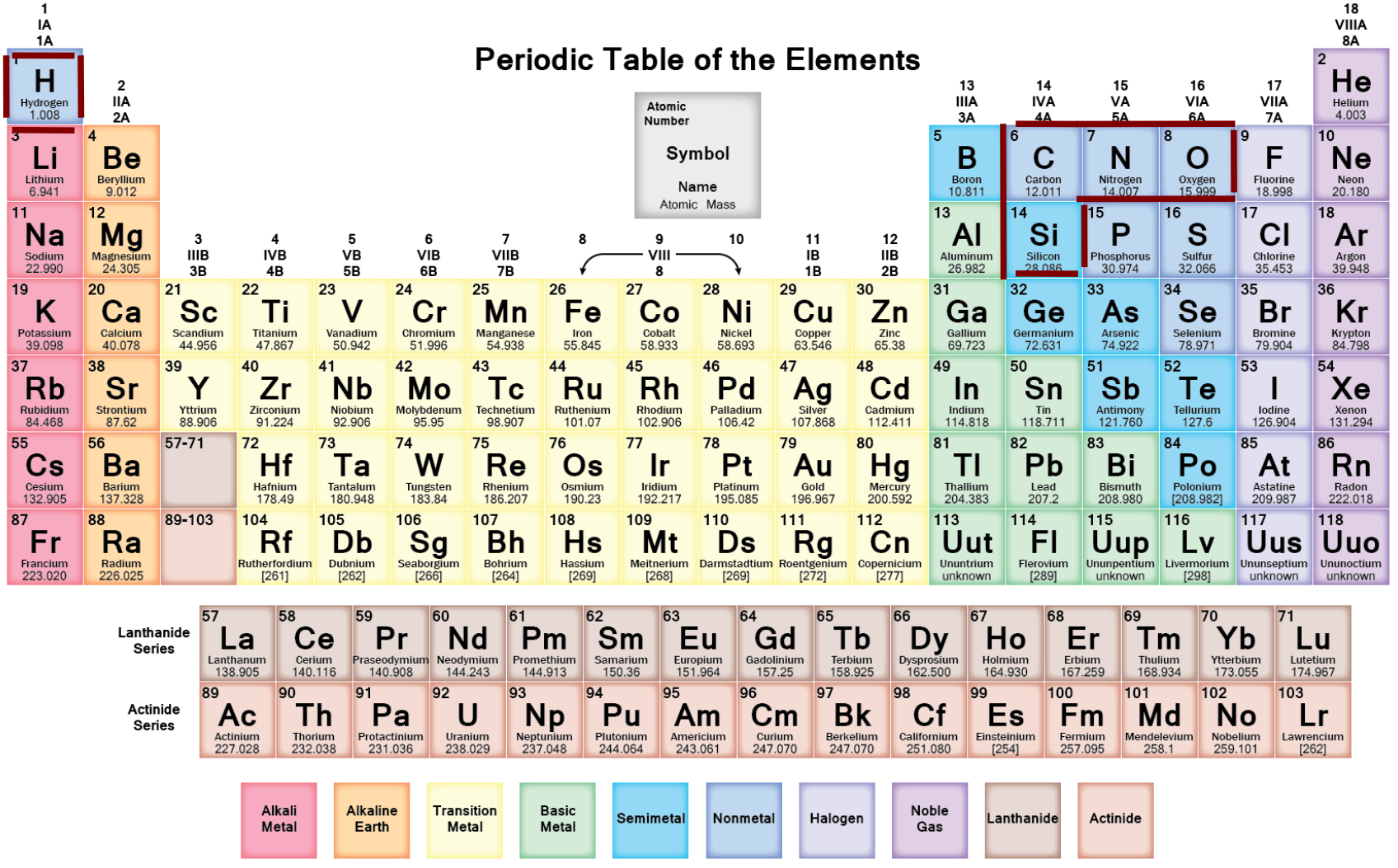
- Dúctil
- Alta densidade
- Condutividade térmica e elétrica
- Temperatura de fusão relativamente elevada

Ligações metálicas

Universidade Federal do ABC

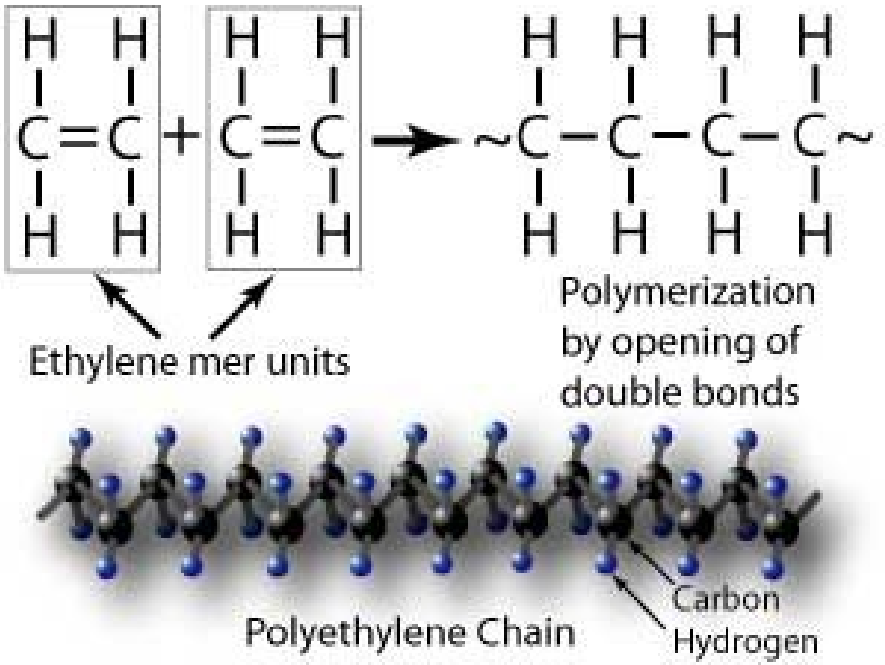
POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Polímeros na tabela periódica



POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Primárias - Ligação Covalente



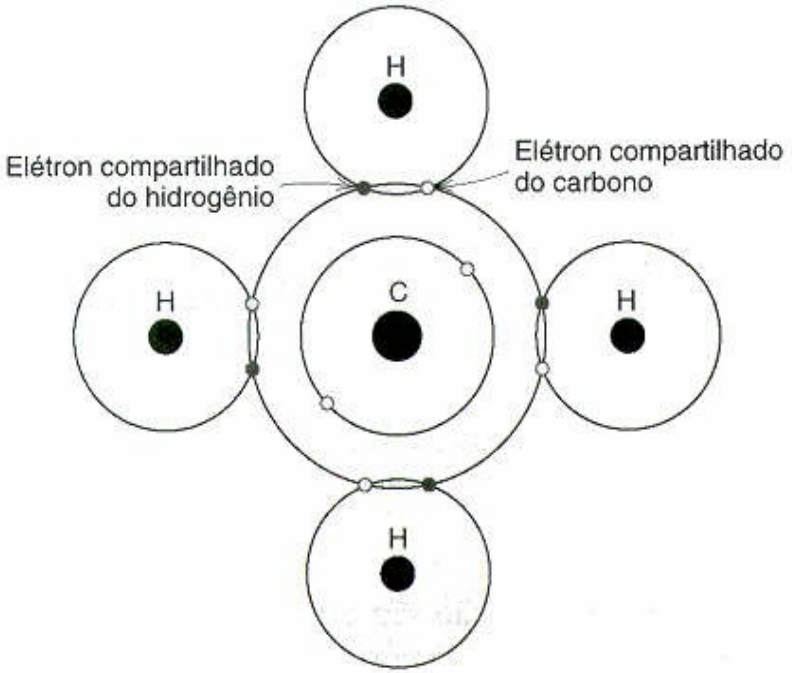
https://www.nde-ed.org/EducationResources/CommunityCollege/Materials/Graphics/PolyethyleneChain.jpg

- **Envolve o *compartilhamento* dos elétrons de valência de átomos adjacentes.**
- **A ligação resultante é *altamente direcional*.**
- **Menor diferença de eletronegatividade entre os elementos do que o observado em ligações iônicas.**

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Primárias - Ligação Covalente

Representação esquemática da ligação covalente na molécula de metano (CH_4)

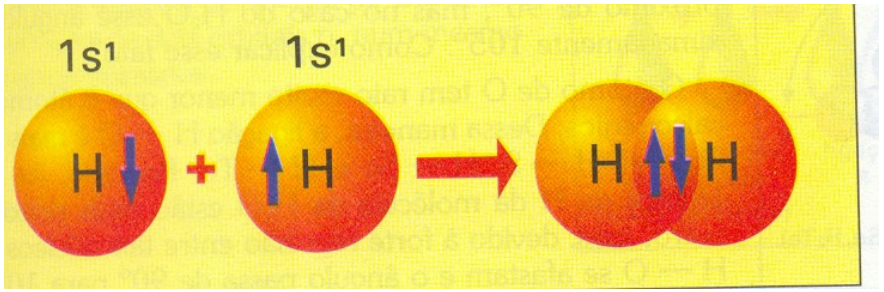


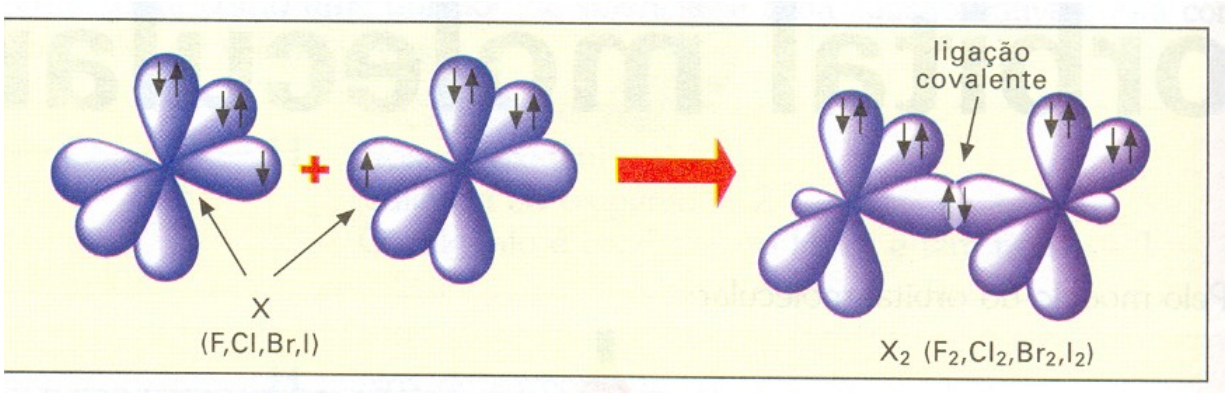
C = 2,5
H = 2,1
D_E = 0,4
Forte caráter covalente

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Primárias - Ligação Covalente

Modelo do Orbital Molecular → **uma ligação é formada pela interpenetração de um orbital semi-cheio do átomo A com um orbital semi-cheio do átomo B.**

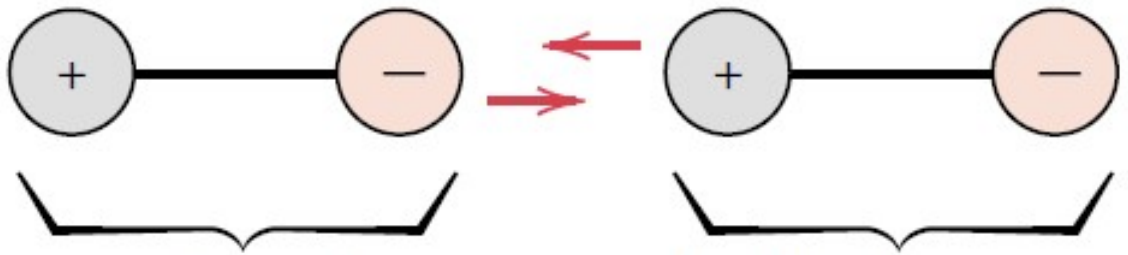




POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Secundárias ou de Van der Waals

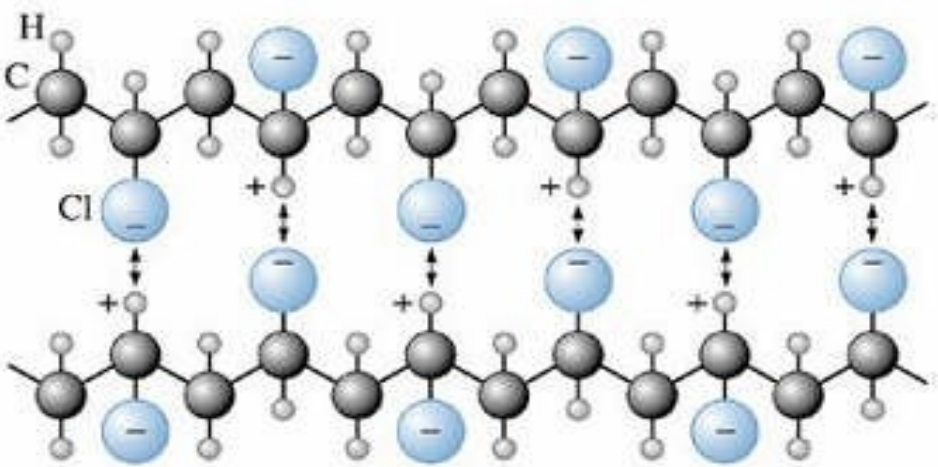
- ✓ **Ocorrem atrações entre dipolos gerados pela assimetria de cargas.**
- ✓ **O mecanismo dessas ligações é similar ao das ligações iônicas, porém não existem elétrons transferidos.**



Atomic or molecular dipoles

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Secundárias ou de Van der Waals



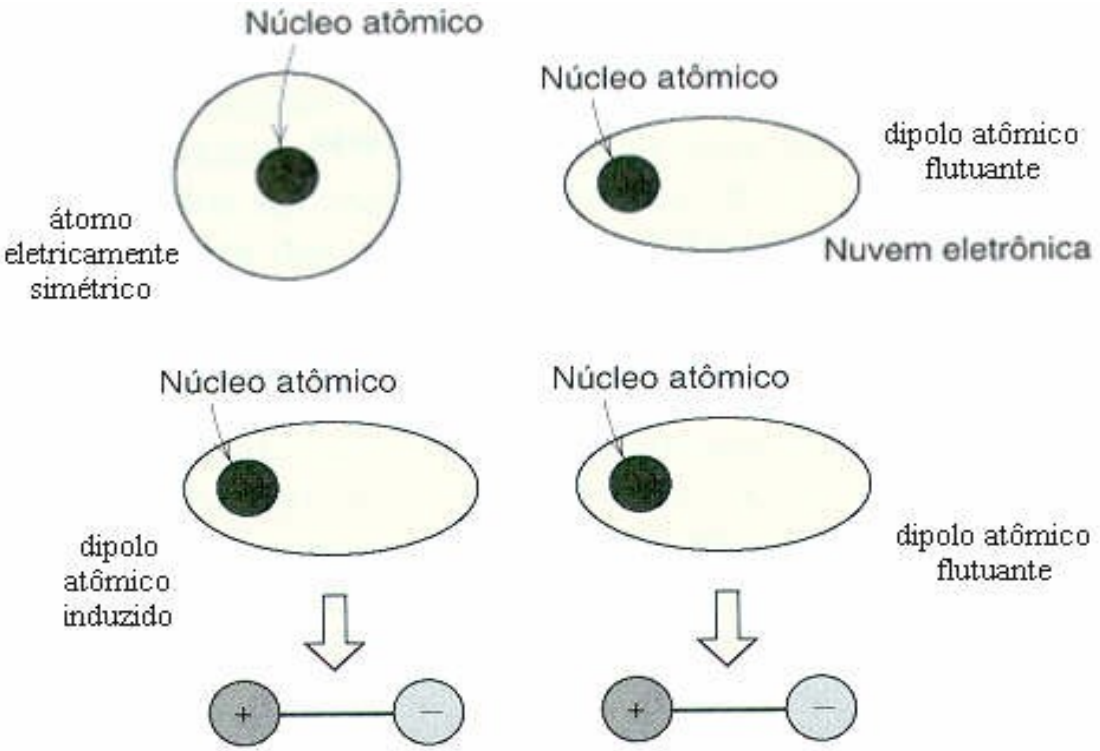
Ligações de Van der Waals no PVC (entre duas moléculas distintas)

As ligações dipolares podem ser entre:

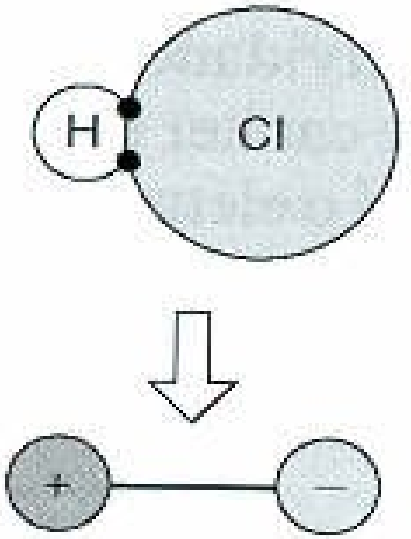
dipolos permanentes.
dipolos permanentes e induzidos.
dipolos induzidos flutuantes.

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Secundárias ou de Van der Waals



Dipolos Induzidos Flutuantes



Dipolo Molecular Permanente

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Secundárias ou de Van der Waals

Ligações do hidrogênio

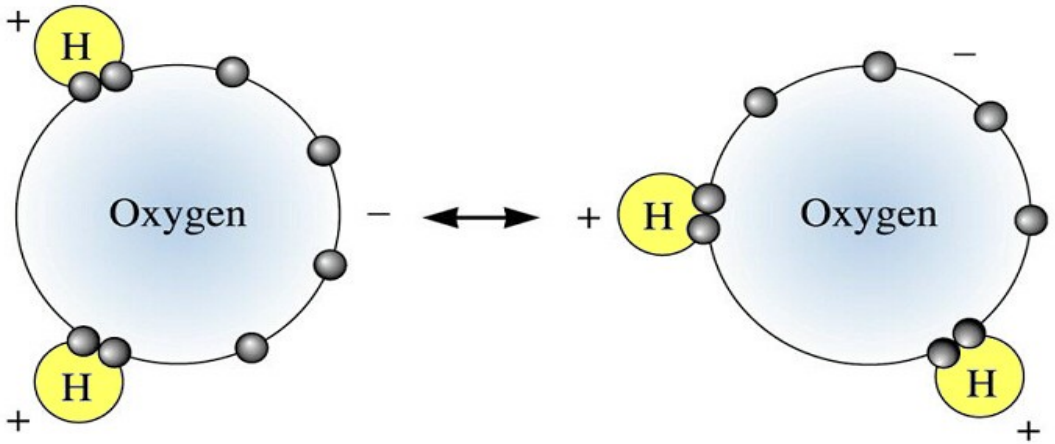
- **É um caso especial de ligação entre moléculas polares.**
- **É o tipo de ligação secundária mais forte.**
- **Ocorre entre moléculas em que o H está ligado covalentemente ao flúor (como no HF), ao oxigênio (como na água) ou ao nitrogênio (por exemplo, NH_3).**

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Secundárias ou de Van der Waals

Ligações do hidrogênio

Ligação de hidrogênio no HF

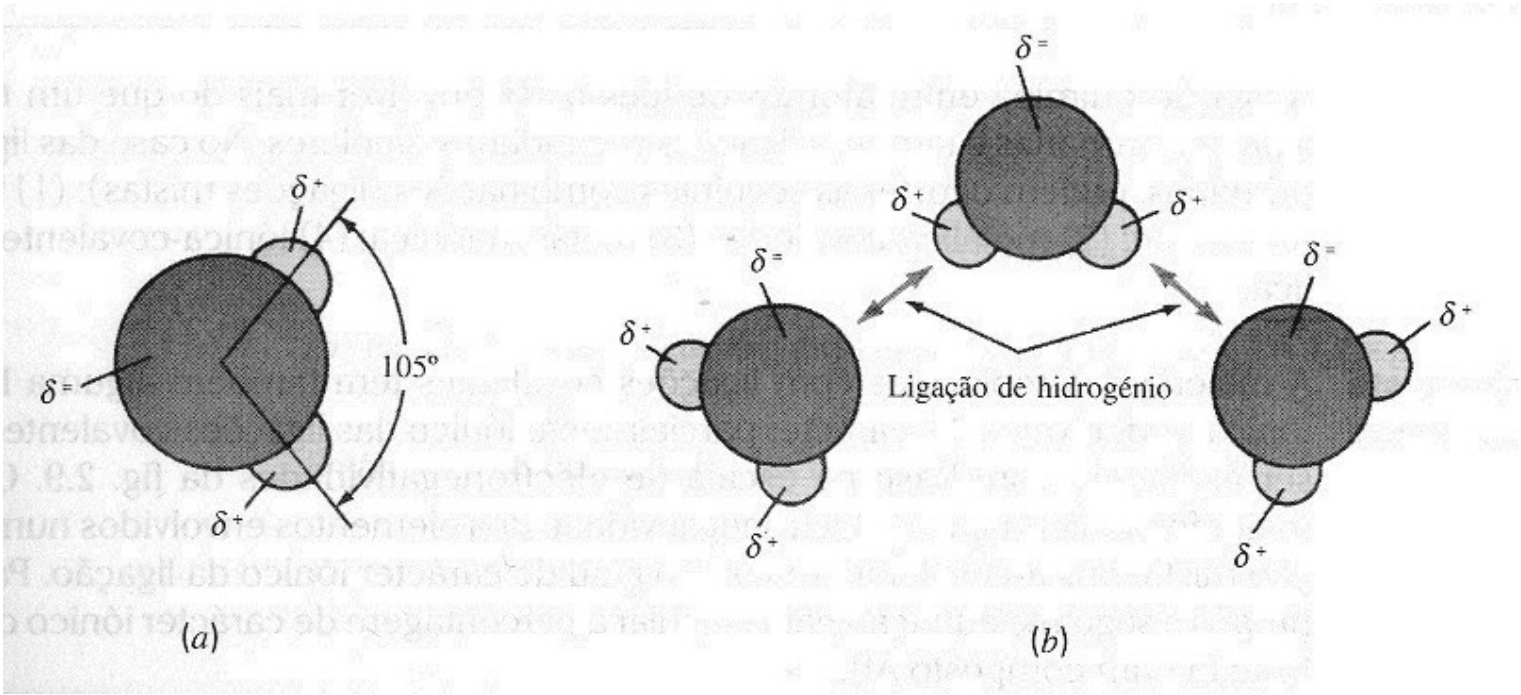


Ligação de hidrogênio na molécula da água

POLÍMEROS – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Ligações Secundárias ou de Van der Waals

Ligações do hidrogênio



(a) Dipolo permanente da molécula de água;

(b) Ligação de hidrogênio entre moléculas de água (atração entre dipolos permanentes).

TIPOS DE MATERIAIS

Materiais poliméricos

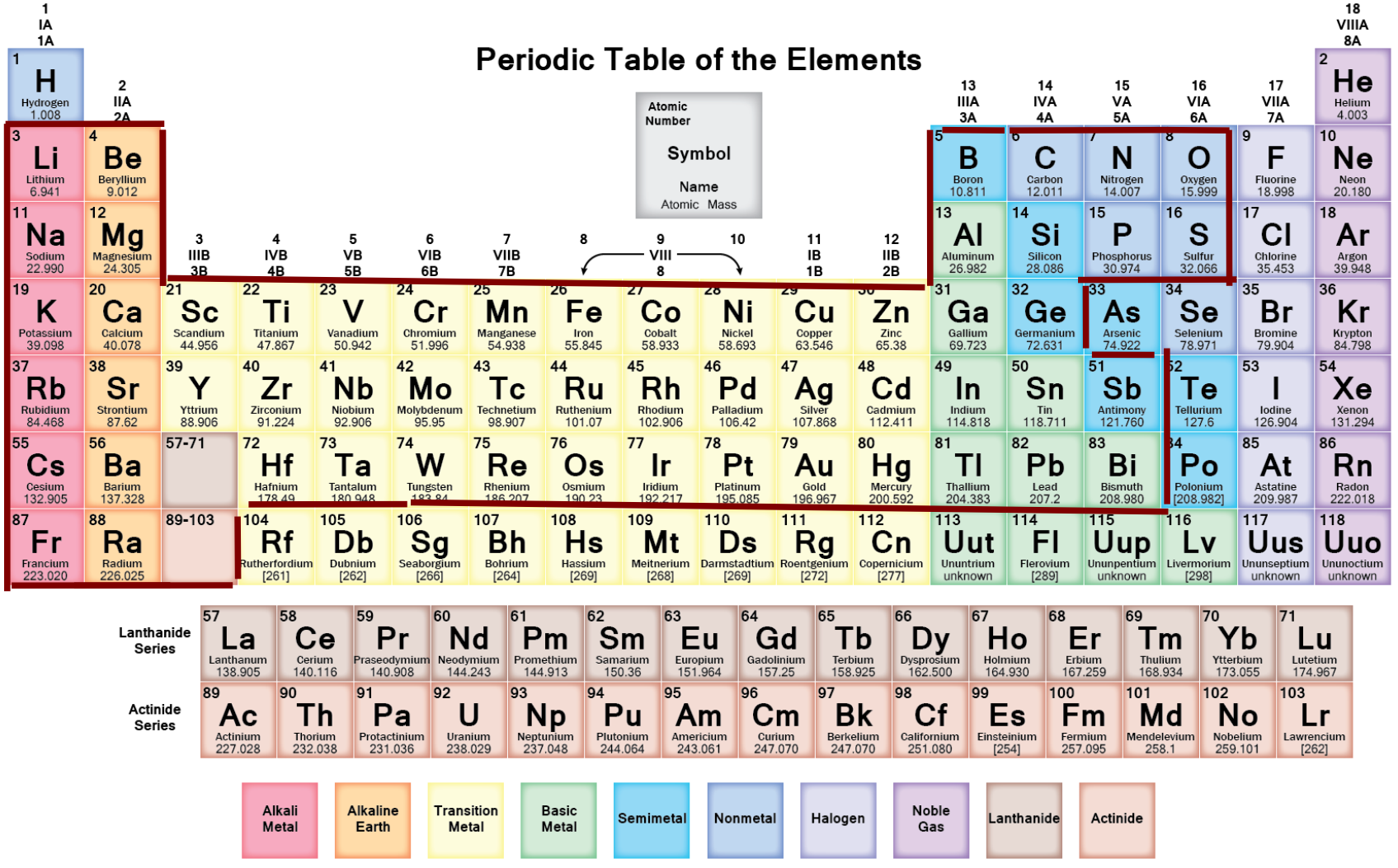
- Baixa densidade
- Isolantes térmicos e elétricos
- Temperatura de fusão relativamente baixa
- Resistência mecânica relativamente baixa

Ligações covalentes (primárias e secundárias)

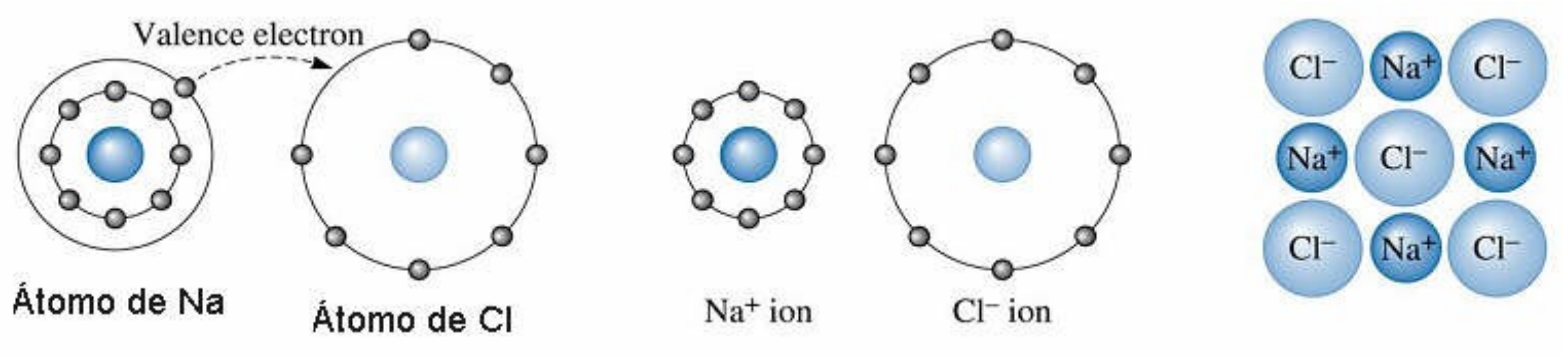
Universidade Federal do ABC

CERÂMICAS – LIGAÇÕES COVALENTES E LIGAÇÕES IÔNICAS

Cerâmicas na tabela periódica



CERÂMICAS – LIGAÇÕES IÔNICAS

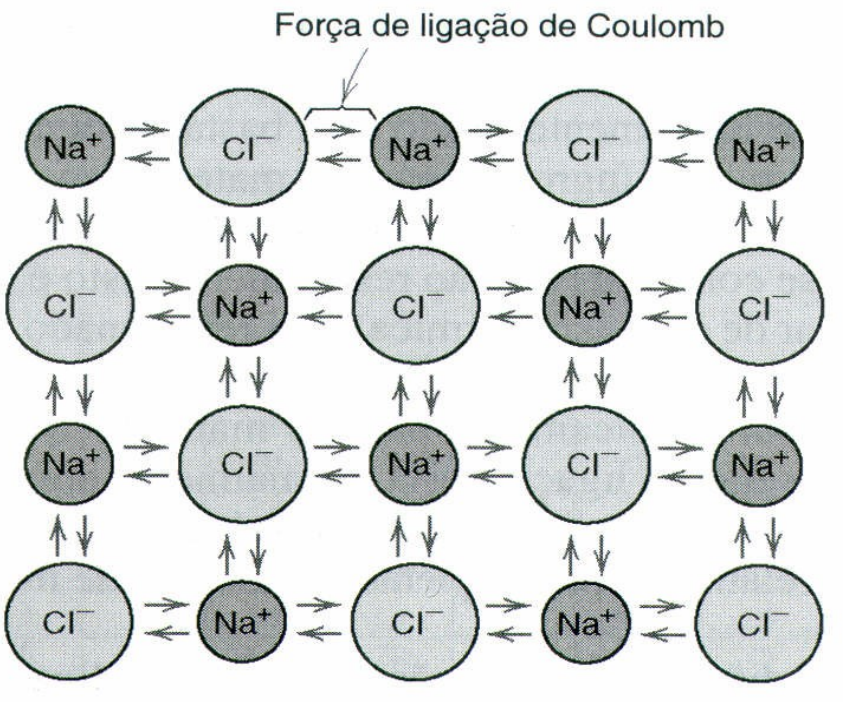


- ✓ **Envolve a *transferência de elétrons* de um átomo para outro.**
- ✓ **A ligação é *não-direcional*.**
- ✓ **Grande diferença de eletronegatividade entre os elementos:**

  Na = 0,9 ; Cl = 3,0
- ✓ **A ligação iônica resulta da atração eletrostática entre dois íons de cargas opostas.**

CERÂMICAS – LIGAÇÕES IÔNICAS

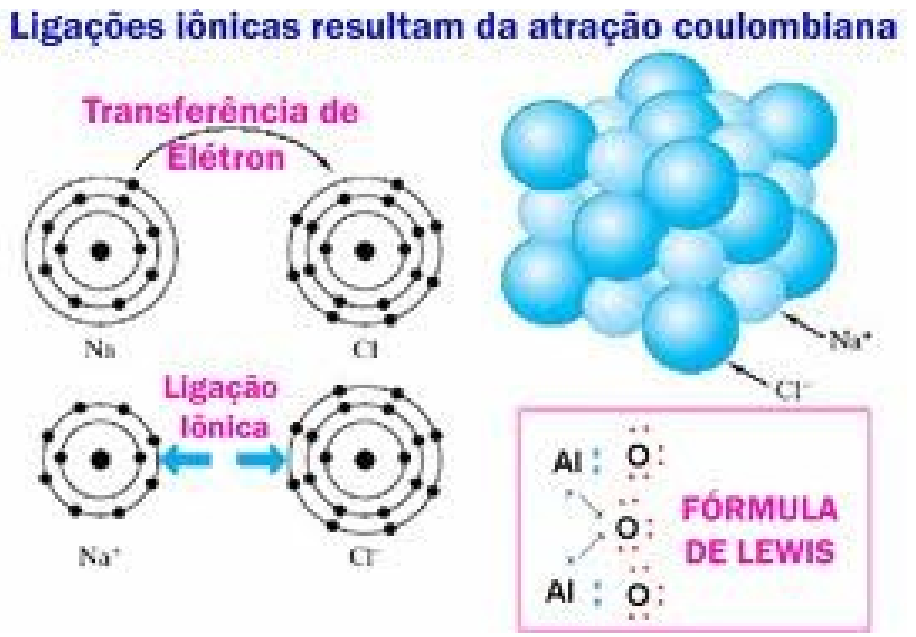
Ligações Primárias - Ligação Iônica

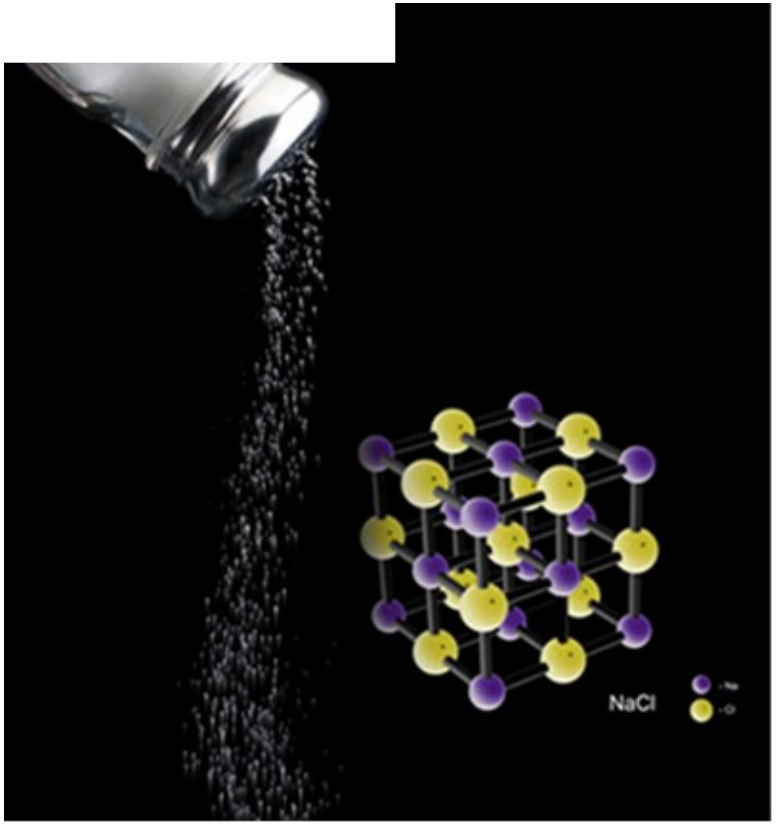


Exemplo: Cloreto de sódio → tanto o cátion Na^+ quanto o ânion Cl^- ficam com seus orbitais externos completos.

CERÂMICAS – LIGAÇÕES IÔNICAS

Ligações Primárias - Ligação Iônica

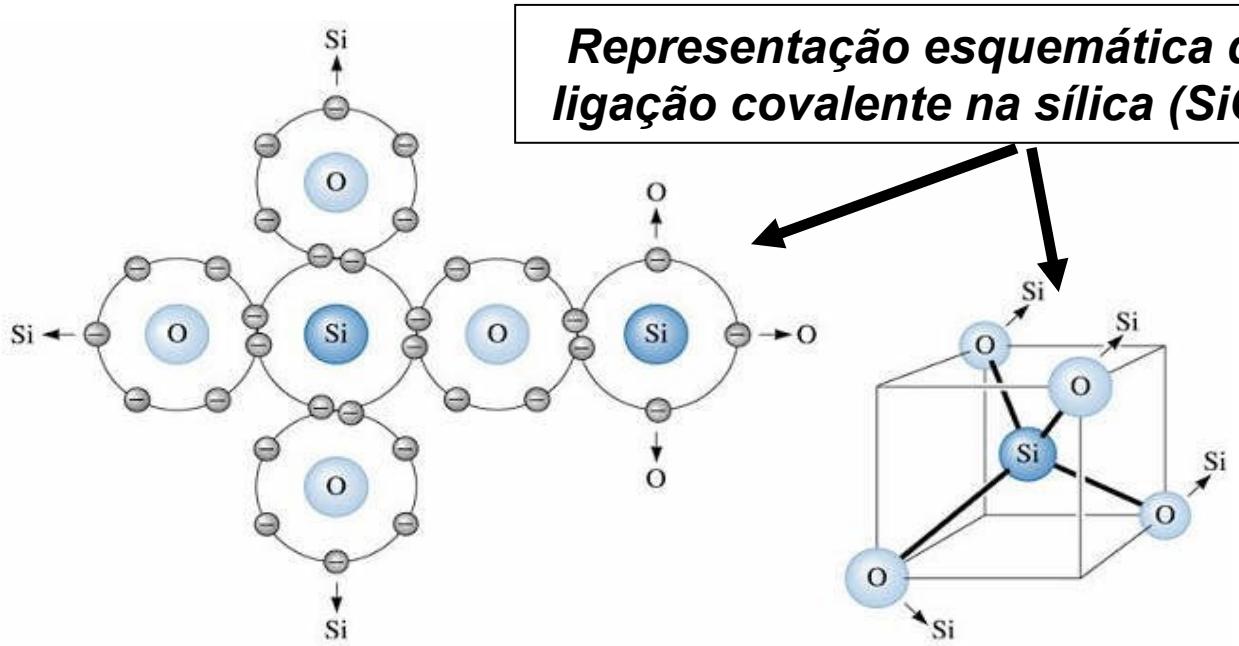




- **Forças de atração Coulombianas (variam com o quadrado do inverso da distância interatômica).**

CERÂMICAS – LIGAÇÕES COVALENTES

Ligações Primárias - Ligação Covalente



O = 3,5
Si = 1,8
D_E = 1,7
Caráter iônico-covalente

- **Envolve o *compartilhamento* dos elétrons de valência de átomos adjacentes.**
- **A ligação resultante é *altamente direcional*.**
- **Menor diferença de eletronegatividade entre os elementos do que o observado em ligações iônicas.**

TIPOS DE MATERIAIS

Materiais cerâmicos

- Frágil
- Elevada dureza
- Boa refratariedade
- Isolantes térmicos e elétricos

Ligações iônicas e/ou covalentes

ELETRONEGATIVIDADE

- **Eletronegatividade → "poder que um átomo tem de atrair elétrons para si"**

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

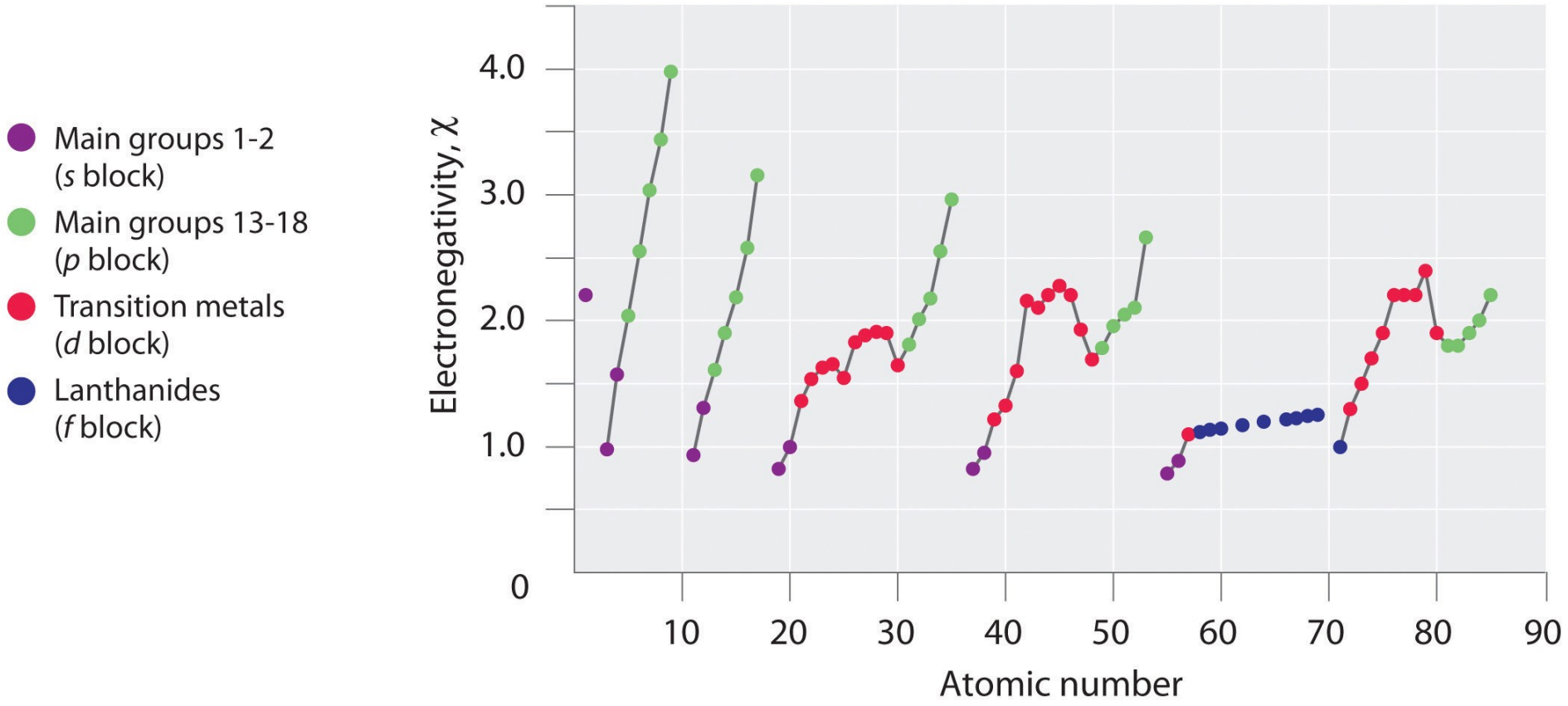
Maior "facilidade" em ceder elétrons = CÁTIONS

Maior facilidade em ganhar elétrons = ÂNIONS

Inertes – Gases Nobres

ELETRONEGATIVIDADE

Escala de Eletronegatividade de Pauling



http://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0/s11-the-periodic-table-and-periodi.html

ELETRONEGATIVIDADE

Polaridade das ligações químicas

Relacionada com a diferença de eletronegatividade:

ΔE > 1,7 – ligação iônica

ΔE < 1,7 – ligação covalente polar

ΔE = O – ligação covalente apolar

Fração de caráter iônico

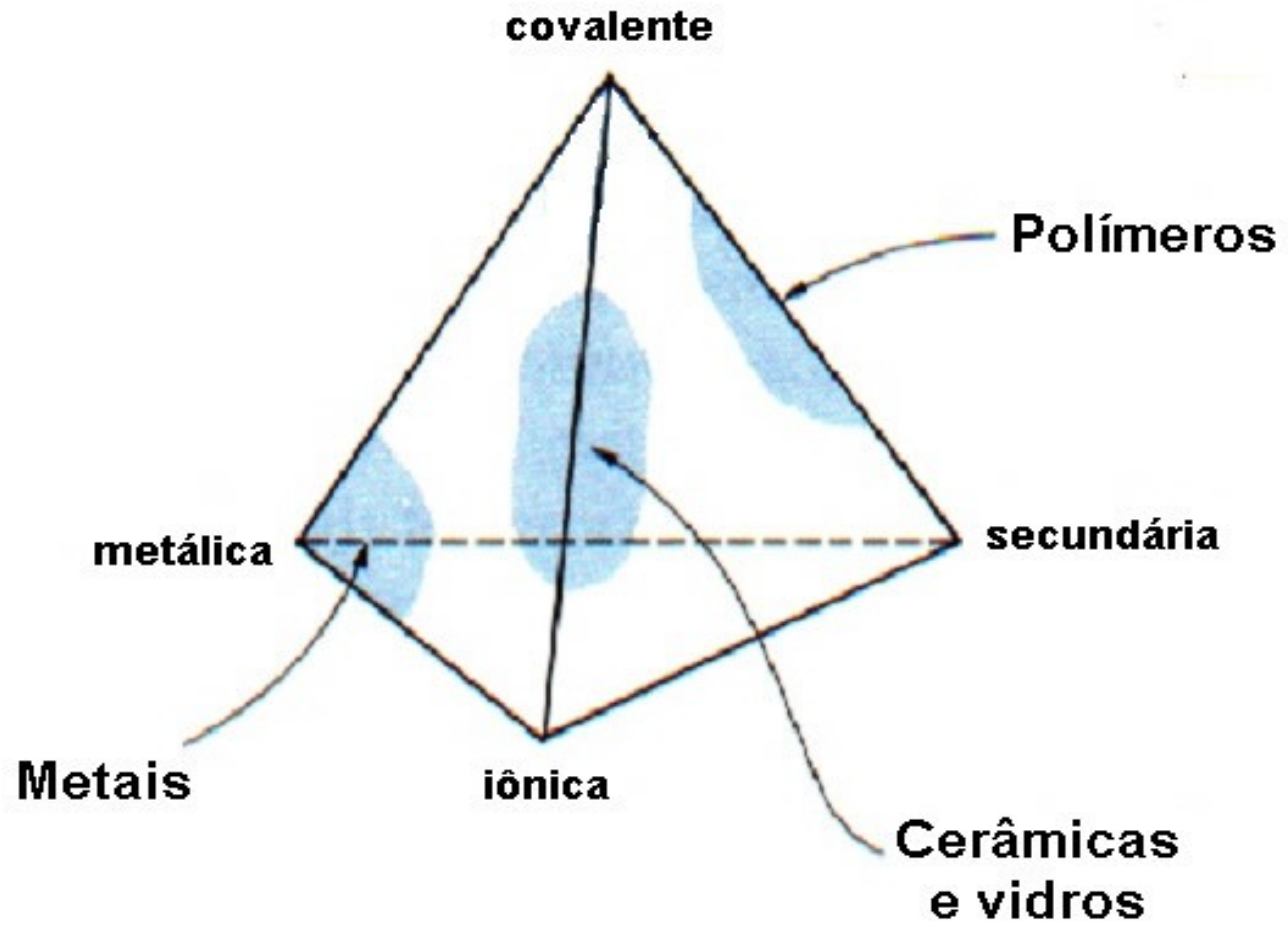
$$\% \text{ caráter iônico} = (1 - e^{-0,25(XA - XB)\text{^}2}) \times 100\%$$

X_A e X_B correspondem aos valores de eletronegatividade dos elementos envolvidos nas ligações

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

Metais	Cerâmicas	Polímeros	Semi-condutores	Compósitos ou conjugados
• Ligação metálica	• Ligação jônica ou covalente • Cristalinos ou amorfos (vidros) • Óxidos e não-óxidos	• Ligação covalente e secundária • Orgânicos ou inorgânicos • Alto peso molecular	• Ligação covalente • Comportamento intermediário de condução eletrônica	• União de mais de um material
• Au, Ag, Pb, Fe, aço (Fe + C), duralumínio (Al + Cu), Na, Hg	• SiO_2, Al_2O_3, MgO, NaCl, vidro de janela, diamante, tijolo, cascalho	• Polietileno, polipropileno, borracha, fibras naturais, silicone, teflon	• Si e Ge (naturais), polianilina (sintéticos)	• Concreto, poliéster + fibra de vidro, lápis, casca de ovo, MDF, circuito impresso

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS: SEGUNDO O TIPO DE LIGAÇÃO QUÍMICA



Tetraedro que representa a contribuição relativa dos diferentes tipos de ligação para categorias de Materiais de Engenharia (metais, cerâmicas e polímeros)

ESTRUTURA DOS SÓLIDOS

SÓLIDOS CRISTALINOS E AMORFOS

Estrutura: organização das partes ou dos elementos que formam um todo.

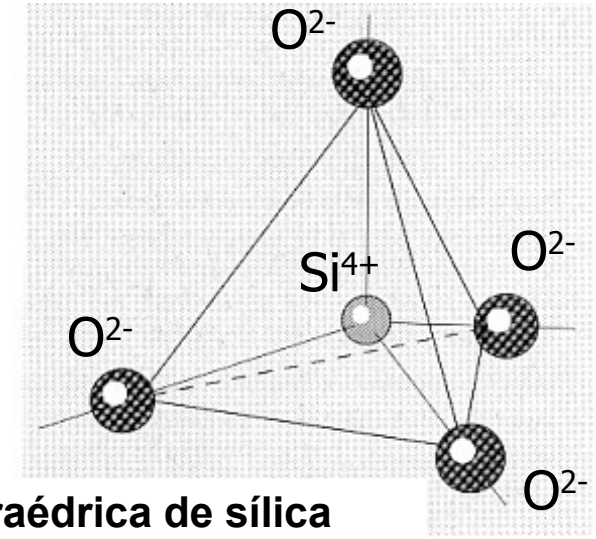
As duas principais classificações de materiais sólidos de acordo com a distribuição espacial dos átomos, moléculas ou íons, são:

- ✓ **Sólidos Cristalinos**: compostos por átomos, moléculas ou íons arranjados de uma forma periódica em três dimensões. A ordem se repete para grandes distâncias atômicas (de longo alcance).

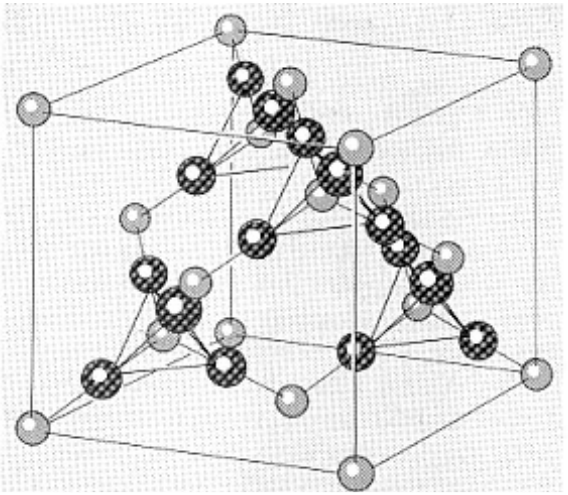
- ✓ **Sólidos Amorfos**: compostos por átomos, moléculas ou íons que não apresentam uma ordenação de longo alcance. Podem apresentar ordenação de curto alcance.

ESTRUTURA DOS SÓLIDOS

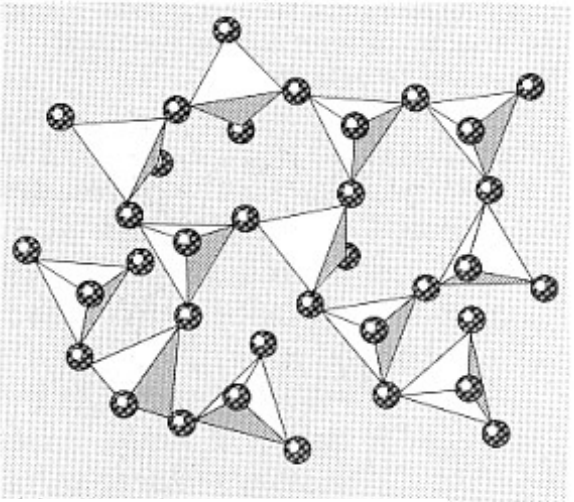
SÓLIDOS CRISTALINOS E AMORFOS



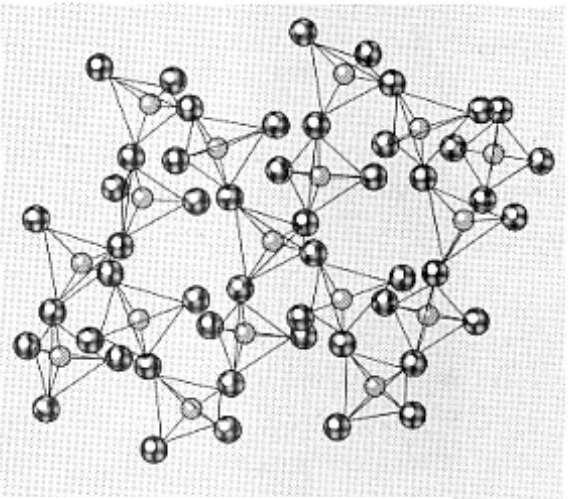
unidade tetraédrica de sílica



cristobalita - cristalina



vidro de sílica - amorfo



quartzo - cristalino