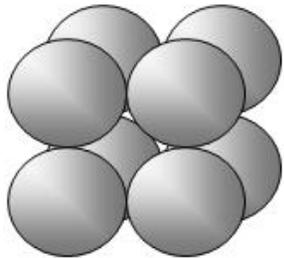


Massas Volúmicas Teóricas

$$\mu = \frac{\text{Massa da célula unitária (m)}}{\text{Volume da célula unitária (V)}}$$

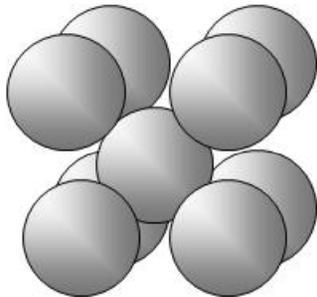
Estrutura Cúbica Simples (CS)



$$m = (8 \times 1/8) \times (M/N_A) = M/N_A$$
$$V = a^3 = (2r)^3$$

$$\mu = \frac{M}{8 r^3 N_A}$$

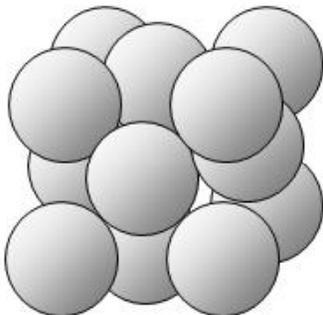
Estrutura Cúbica de Corpo Centrado (CCC)



$$m = (8 \times 1/8 + 1) \times (M/N_A) = 2M/N_A$$
$$V = a^3 = (4r/\sqrt{3})^3$$

$$\mu = \frac{9M}{32\sqrt{3} r^3 N_A}$$

Estrutura Cúbica de Faces Centradas (CFC)



$$m = (8 \times 1/8 + 6 \times 1/2) \times (M/N_A) = 4 M/N_A$$
$$V = a^3 = (2\sqrt{2} r)^3$$

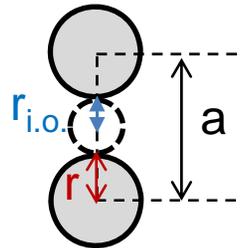
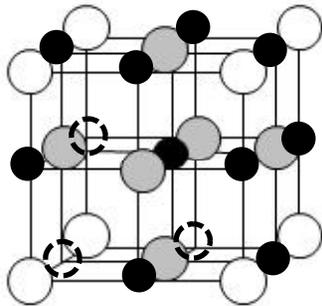
$$\mu = \frac{M}{4\sqrt{2} r^3 N_A}$$

Dimensões dos interstícios nas estruturas compactas

Estimativa do raio da maior esfera que pode ser acomodada sem perturbar os átomos (considerados esferas rígidas)

Estrutura CFC

Octaédricos



$$a = 2r + 2r_{i.o.}$$

$$a = 2\sqrt{2} r$$

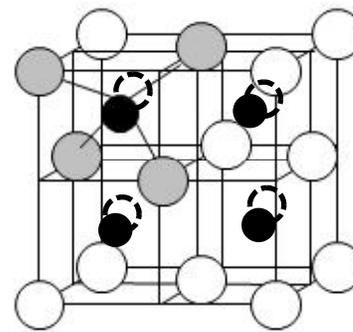


$$2\sqrt{2} r = 2r + 2r_{i.o.}$$

$$r_{i.o.} = (\sqrt{2} - 1) r$$

$$= 0.414 r$$

Tetraédricos



diagonal do cubo: D

diagonal do cubo
elementar: d

$$d = 2r + 2r_{i.t.}$$

$$d = \frac{1}{2} D \quad \text{e} \quad D = \sqrt{3} a = \sqrt{3} \times 2\sqrt{2} r$$



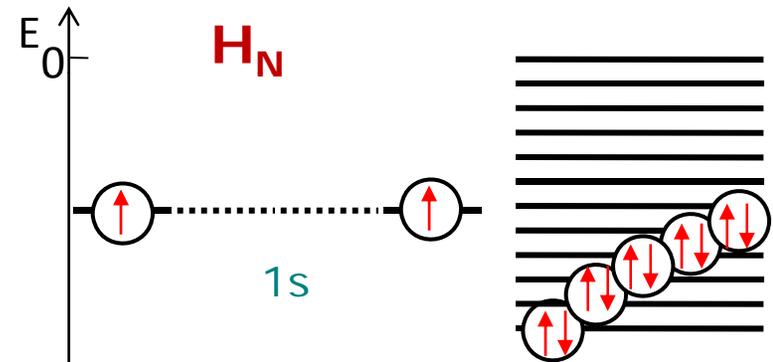
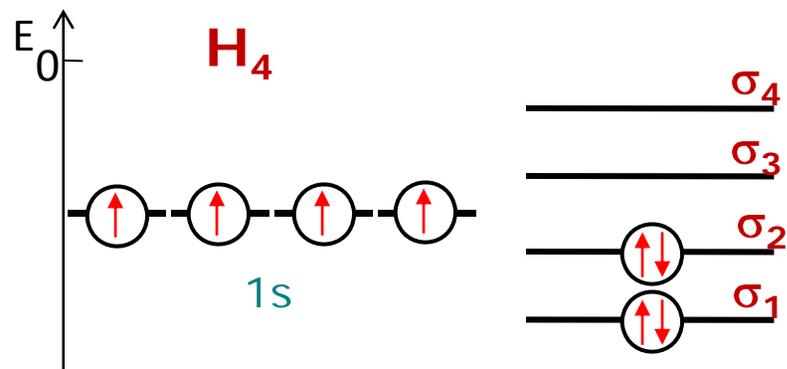
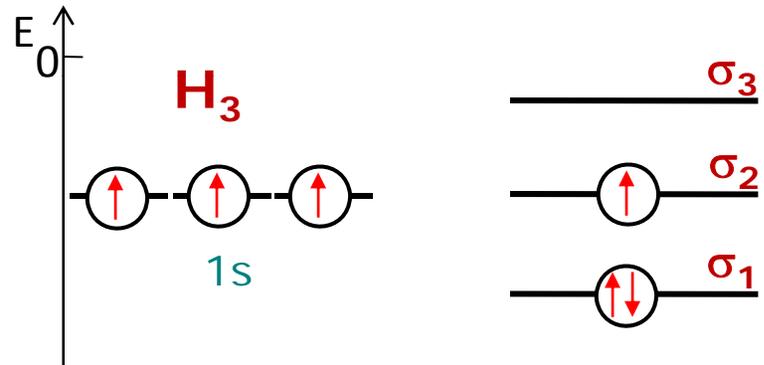
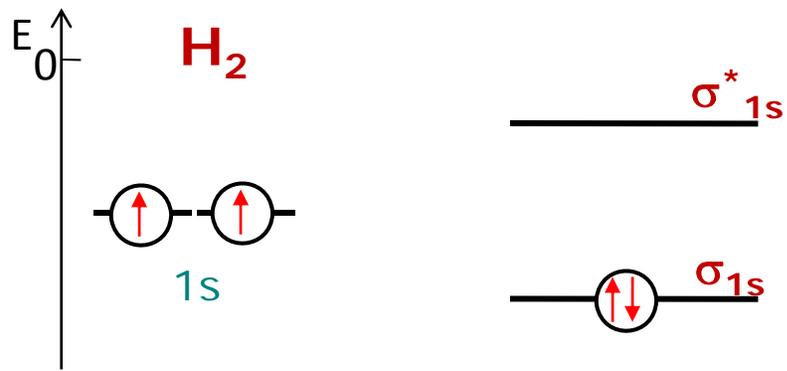
$$2r + 2r_{i.t.} = \sqrt{3} \times \sqrt{2} r$$

$$2 r_{i.t.} = (\sqrt{6} - 2) r$$

$$r_{i.t.} = 0.225 r$$

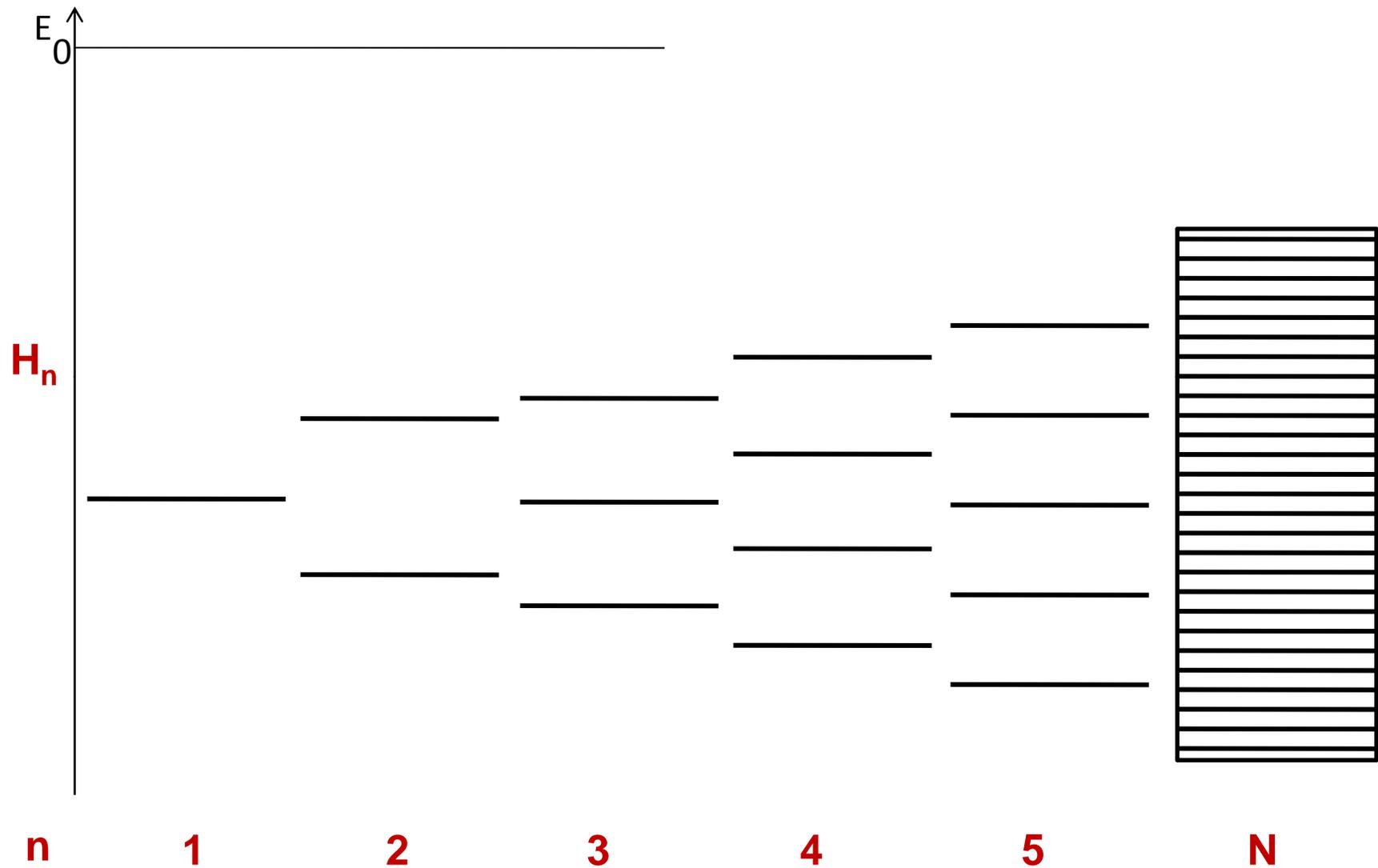
Estas dimensões são importantes nas ligas metálicas

TOM/CLOA Aplicada aos Metais



N níveis de energia
 $N/2$ preenchidos

Banda de Níveis de Energia do Hidrogénio Metálico



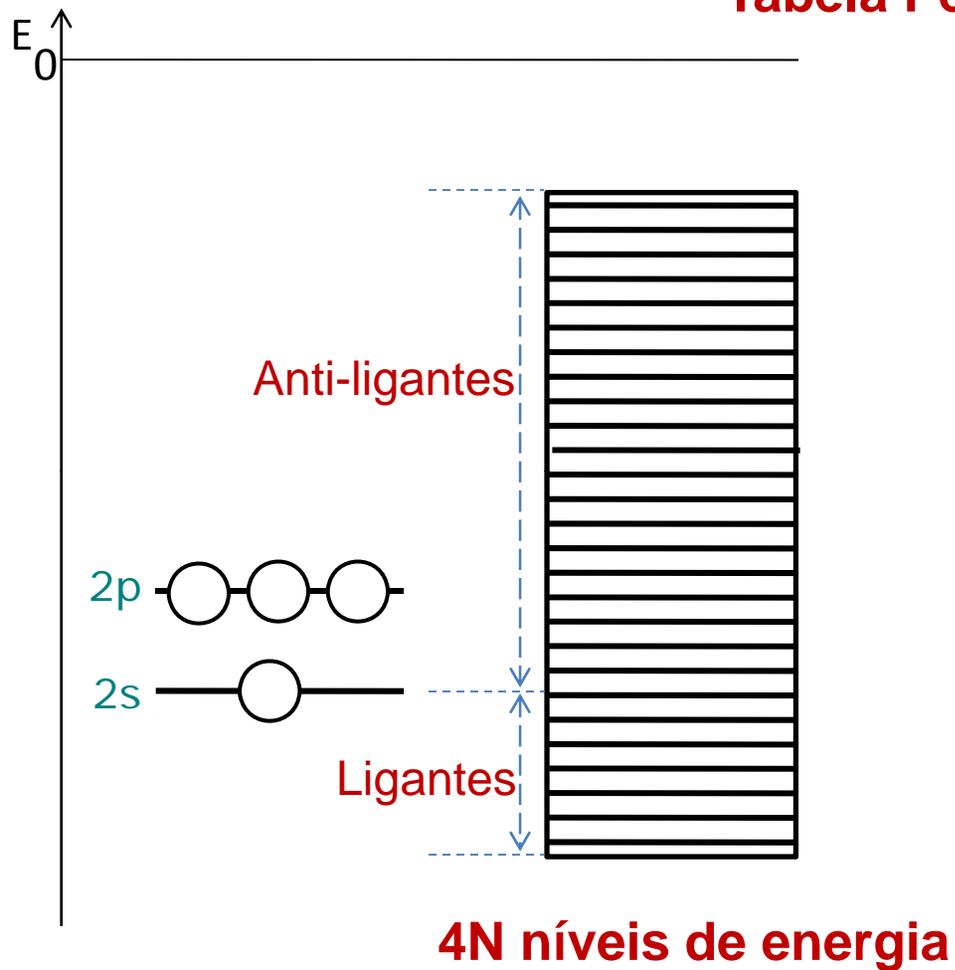
METAIS

elevada densidade; elevada condutividade térmica e eléctrica; ductilidade

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----------|---------------------------------------|---------------------------------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|--|--|--|--|--|---|
| | 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 |
| | H 1s ¹ | | | | | | | | | | | | | | | | | He 1s ² |
| 2º grupo | Li 1s ² 2s ¹ | Be 1s ² 2s ² | | | | | | | | | | | B 1s ² 2s ² 2p ¹ | C 1s ² 2s ² 2p ² | N 1s ² 2s ² 2p ³ | O 1s ² 2s ² 2p ⁴ | F 1s ² 2s ² 2p ⁵ | Ne 1s ² 2s ² 2p ⁶ |
| 3º grupo | Na [Ne]3s ¹ | Mg [Ne]3s ² | | | | | | | | | | | Al [Ne]3s ² 3p ¹ | Si [Ne]3s ² 3p ² | P [Ne]3s ² 3p ³ | S [Ne]3s ² 3p ⁴ | Cl [Ne]3s ² 3p ⁵ | Ar [Ne]3s ² 3p ⁶ |
| | 19 K [Ar]4s ¹ | 20 Ca [Ar]4s ² | 21 Sc [Ar]3d ¹ 4s ² | 22 Ti [Ar]3d ² 4s ² | 23 V [Ar]3d ³ 4s ² | 24 Cr [Ar]3d ⁵ 4s ¹ | 25 Mn [Ar]3d ⁵ 4s ² | 26 Fe [Ar]3d ⁶ 4s ² | 27 Co [Ar]3d ⁷ 4s ² | 28 Ni [Ar]3d ⁸ 4s ² | 29 Cu [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ | 30 Zn [Ar]3d ¹⁰ 4s ² | 31 Ga [Ar]4s ² 4p ¹ | 32 Ge [Ar]4s ² 4p ² | 33 As [Ar]4s ² 4p ³ | 34 Se [Ar]4s ² 4p ⁴ | 35 Br [Ar]4s ² 4p ⁵ | 36 Kr [Ar]4s ² 4p ⁶ |
| | 37 Rb [Kr]5s ¹ | 38 Sr [Kr]5s ² | 39 Y [Kr]4d ¹ 5s ² | 40 Zr [Kr]4d ² 5s ² | 41 Nb [Kr]4d ⁴ 5s ¹ | 42 Mo [Kr]4d ⁵ 5s ¹ | 43 Tc [Kr]4d ⁵ 5s ² | 44 Ru [Kr]4d ⁷ 5s ¹ | 45 Rh [Kr]4d ⁸ 5s ¹ | 46 Pd [Kr]4d ¹⁰ 5s ⁰ | 47 Ag [Kr]4d ¹⁰ 5s ¹ | 48 Cd [Kr]4d ¹⁰ 5s ² | 49 In [Kr]5s ² 5p ¹ | 50 Sn [Kr]5s ² 5p ² | 51 Sb [Kr]5s ² 5p ³ | 52 Te [Kr]5s ² 5p ⁴ | 53 I [Kr]5s ² 5p ⁵ | 54 Xe [Kr]5s ² 5p ⁶ |
| | 55 Cs [Xe]6s ¹ | 56 Ba [Xe]6s ² | 57 La [Xe]5d ¹ 6s ² | 72 Hf [Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ² | 73 Ta [Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² | 74 W [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ² | 75 Re [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ² | 76 Os [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ² | 77 Ir [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ² | 78 Pt [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹ | 79 Au [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹ | 80 Hg [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² | 81 Tl [Xe]6s ² 6p ¹ | 82 Pb [Xe]6s ² 6p ² | 83 Bi [Xe]6s ² 6p ³ | 84 Po [Xe]6s ² 6p ⁴ | 85 At [Xe]6s ² 6p ⁵ | 86 Rn [Xe]6s ² 6p ⁶ |
| | 87 Fr [Rn]7s ¹ | 88 Ra [Rn]7s ² | 89 Ac [Rn]6d ¹ 7s ² | 104 Rf [Rn]5f ¹⁴ 6d ² 7s ² | 105 Db [Rn]5f ¹⁴ 6d ³ 7s ² | 106 Sg [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ² | 107 Bh [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ² | 108 Hs [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ² | 109 Mt [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ² | 110 Ds [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁸ 7s ² | 111 Rg [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁹ 7s ² | 112 Uub [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² | 113 Uut [Rn]6s ² 6p ¹ | 114 Uuq [Rn]6s ² 6p ² | 115 Uup [Rn]6s ² 6p ³ | 116 Uuh [Rn]6s ² 6p ⁴ | | |

| | | | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|--|---|---|---|---|---|--|--|---|---|---|---|
| 6 | 58 Ce [Xe]4f ¹ 5d ¹ 6s ² | 59 Pr [Xe]4f ³ 6s ² | 60 Nd [Xe]4f ⁴ 6s ² | 61 Pm [Xe]4f ⁵ 6s ² | 62 Sm [Xe]4f ⁶ 6s ² | 63 Eu [Xe]4f ⁷ 6s ² | 64 Gd [Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ² | 65 Tb [Xe]4f ⁹ 6s ² | 66 Dy [Xe]4f ¹⁰ 6s ² | 67 Ho [Xe]4f ¹¹ 6s ² | 68 Er [Xe]4f ¹² 6s ² | 69 Tm [Xe]4f ¹³ 6s ² | 70 Yb [Xe]4f ¹⁴ 6s ² | 71 Lu [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ² |
| 7 | 90 Th [Rn]6d ² 7s ² | 91 Pa [Rn]5f ² 6d ¹ 7s ² | 92 U [Rn]5f ³ 6d ¹ 7s ² | 93 Np [Rn]5f ⁴ 6d ¹ 7s ² | 94 Pu [Rn]5f ⁶ 6d ¹ 7s ² | 95 Am [Rn]5f ⁷ 7s ² | 96 Cm [Rn]5f ⁷ 6d ¹ 7s ² | 97 Bk [Rn]5f ⁹ 7s ² | 98 Cf [Rn]5f ¹⁰ 7s ² | 99 Es [Rn]5f ¹¹ 7s ² | 100 Fm [Rn]5f ¹² 7s ² | 101 Md [Rn]5f ¹³ 7s ² | 102 No [Rn]5f ¹⁴ 7s ² | 103 Lr [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ² |

Banda de Níveis de Energia dos Metais dos 2º e 3º Períodos da Tabela Periódica



Orbitais de valência:
2s e 2p ou 3s e 3p
(**4** orbitais por átomo)



Para um cristal com **N** átomos:
4N orbitais atômicas

METAIS

elevada densidade; elevada condutividade térmica e eléctrica; ductilidade

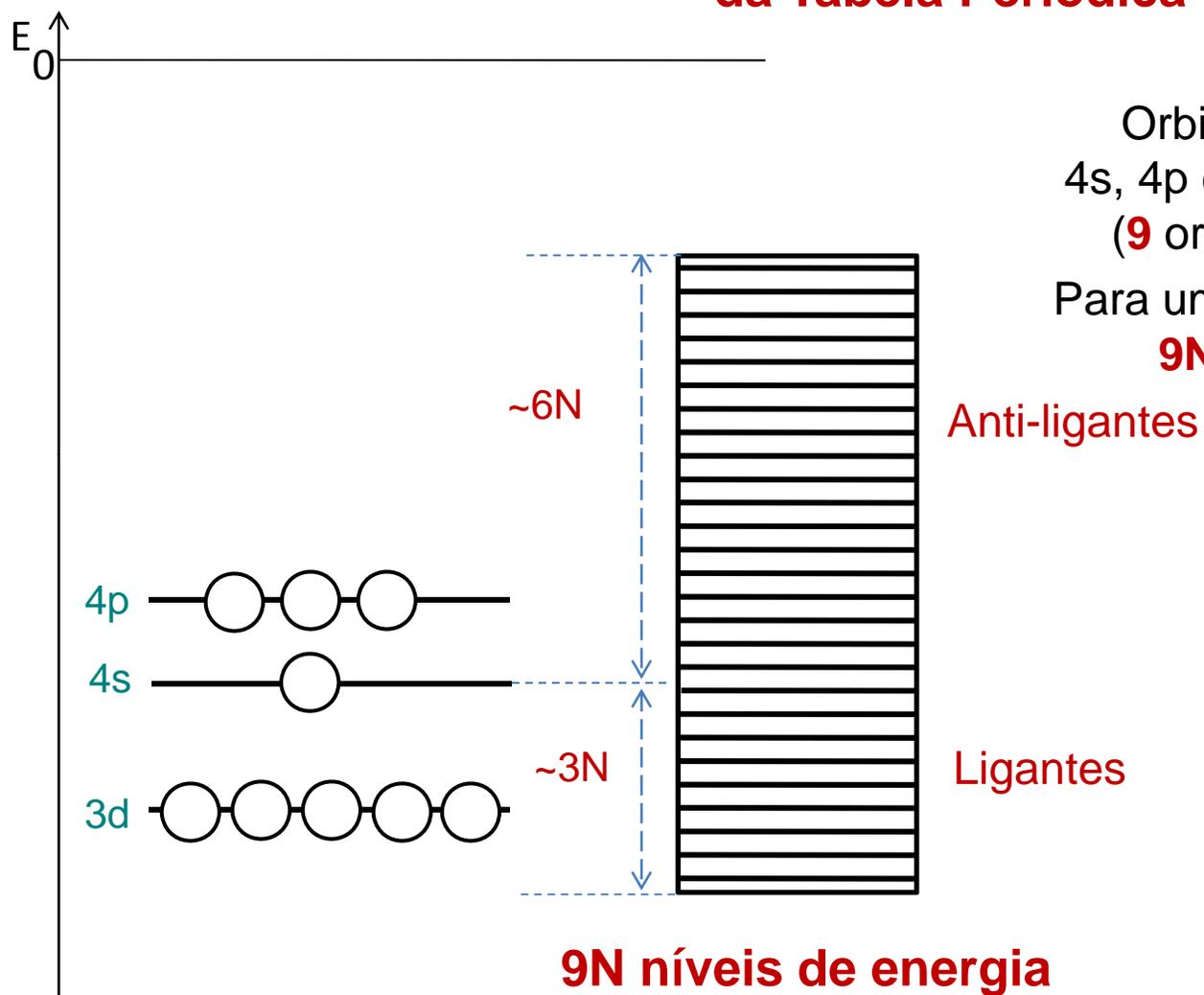
| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------|-------------------------|------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|---------------------------------|---------------------------------|------------------------------|------------|------------|------------|----------|------------------------------|
| 1 H $1s^1$ | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He $1s^2$ |
| 3 Li $1s^2 2s^1$ | 4 Be $1s^2 2s^2$ | | | | | | | | | | | 5 B $1s^2 2s^2 2p^1$ | 6 C | 7 N | 8 O | 9 F | 10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$ |
| 11 Na $[Ne] 3s^1$ | 12 Mg $[Ne] 3s^2$ | | | | | | | | | | | 13 Al $[Ne] 3s^2 3p^1$ | 14 Si | 15 P | 16 S | 17 Cl | 18 Ar $[Ne] 3s^2 3p^6$ |
| 19 K $[Ar] 4s^1$ | 20 Ca $[Ar] 4s^2$ | 21 Sc $[Ar] 3d^1 4s^2$ | 22 Ti | 23 V | 24 Cr | 25 Mn | 26 Fe | 27 Co | 28 Ni | 29 Cu | 30 Zn $[Ar] 3d^{10} 4s^1$ | 31 Ga $[Ar] 4s^2 p^1$ | 32 Ge | 33 As | 34 Se | 35 Br | 36 Kr $[Ar] 4s^2 4p^6$ |
| 37 Rb $[Kr] 5s^1$ | 38 Sr $[Kr] 5s^2$ | 39 Y $[Kr] 4d^1 5s^2$ | 40 Zr | 41 Nb | 42 Mo | 43 Tc | 44 Ru | 45 Rh | 46 Pd | 47 Ag $[Kr] 4d^{10} 5s^1$ | 48 Cd $[Kr] 5s^2 5p^1$ | 49 In | 50 Sn | 51 Sb | 52 Te | 53 I | 54 Xe $[Kr] 5s^2 5p^6$ |
| 55 Cs $[Xe] 6s^1$ | 56 Ba $[Xe] 6s^2$ | 57 La $[Xe] 5d^1 6s^2$ | 72 Hf | 73 Ta | 74 W | 75 Re | 76 Os | 77 Ir | 78 Pt | 79 Au $[Xe] 5d^{10} 6s^1$ | 80 Hg $[Xe] 6s^2 6p^1$ | 81 Tl | 82 Pb | 83 Bi | 84 Po | 85 At | 86 Rn $[Xe] 6s^2 6p^6$ |
| 87 Fr $[Rn] 7s^1$ | 88 Ra $[Rn] 7s^2$ | 89 Ac $[Rn] 6d^1$ | 104 Rf | 105 Db | 106 Sg | 107 Bh | 108 Hs | 109 Mt | 110 Ds | 111 Rg | 112 Uub | 113 Uut | 114 Uuq | 115 Uup | 116 Uuh | | |

4º grupo

- Hidrogénio
- Metais alcalinos
- Metais alcalino-terrosos
- Metais de transição
- Metalóides
- Não metais
- Gases raros
- Terras raras

| | | | | | | | | | | | | | | |
|---|-----------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|---------------------------------------|
| 6 | 58 Ce $[Xe] 4f^1 5d^1 6s^2$ | 59 Pr | 60 Nd | 61 Pm | 62 Sm | 63 Eu | 64 Gd | 65 Tb | 66 Dy | 67 Ho | 68 Er | 69 Tm | 70 Yb | 71 Lu $[Xe] 4f^{14} 5d^1 6s^2$ |
| 7 | 90 Th $[Rn] 6d^2 7s^2$ | 91 Pa | 92 U | 93 Np | 94 Pu | 95 Am | 96 Cm | 97 Bk | 98 Cf | 99 Es | 100 Fm | 101 Md | 102 No | 103 Lr $[Rn] 5f^{14} 6d^1 7s^2$ |

Banda de Níveis de Energia dos Metais dos 4^o, 5^o e 6^o Períodos da Tabela Periódica

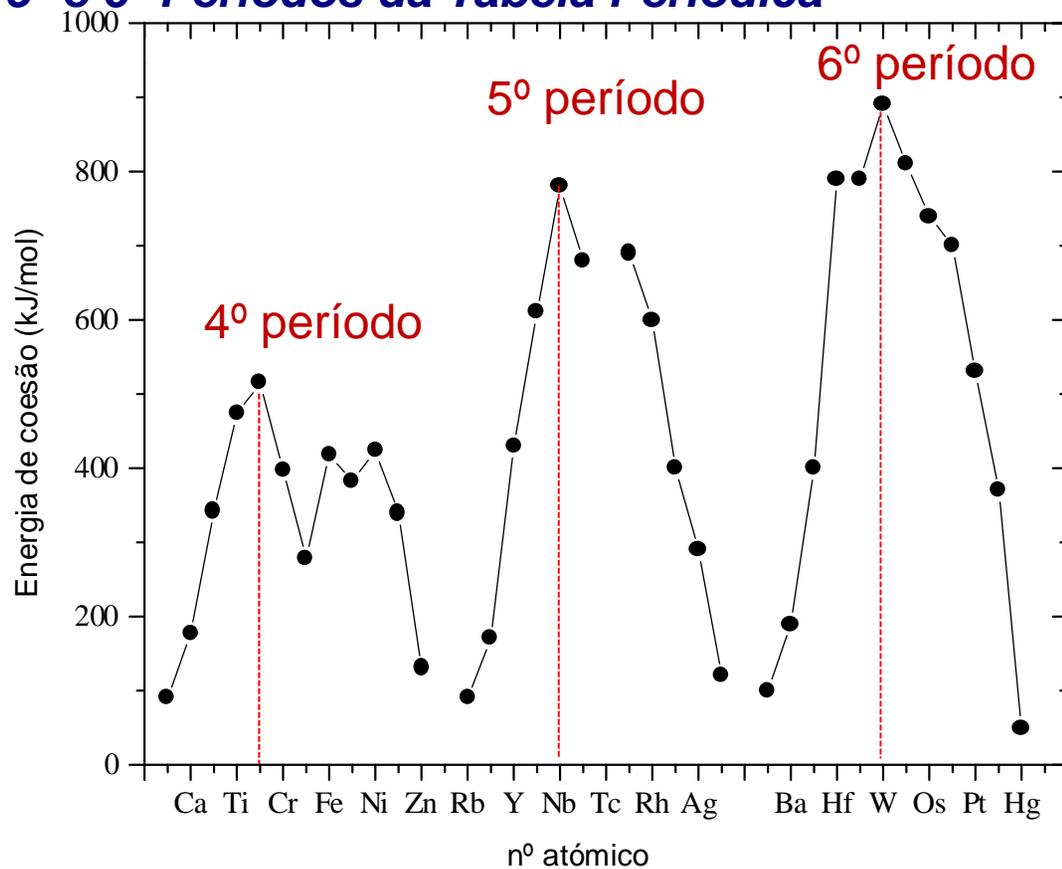


Grau de Preenchimento e Energia de Coesão

Metais do 3º Período

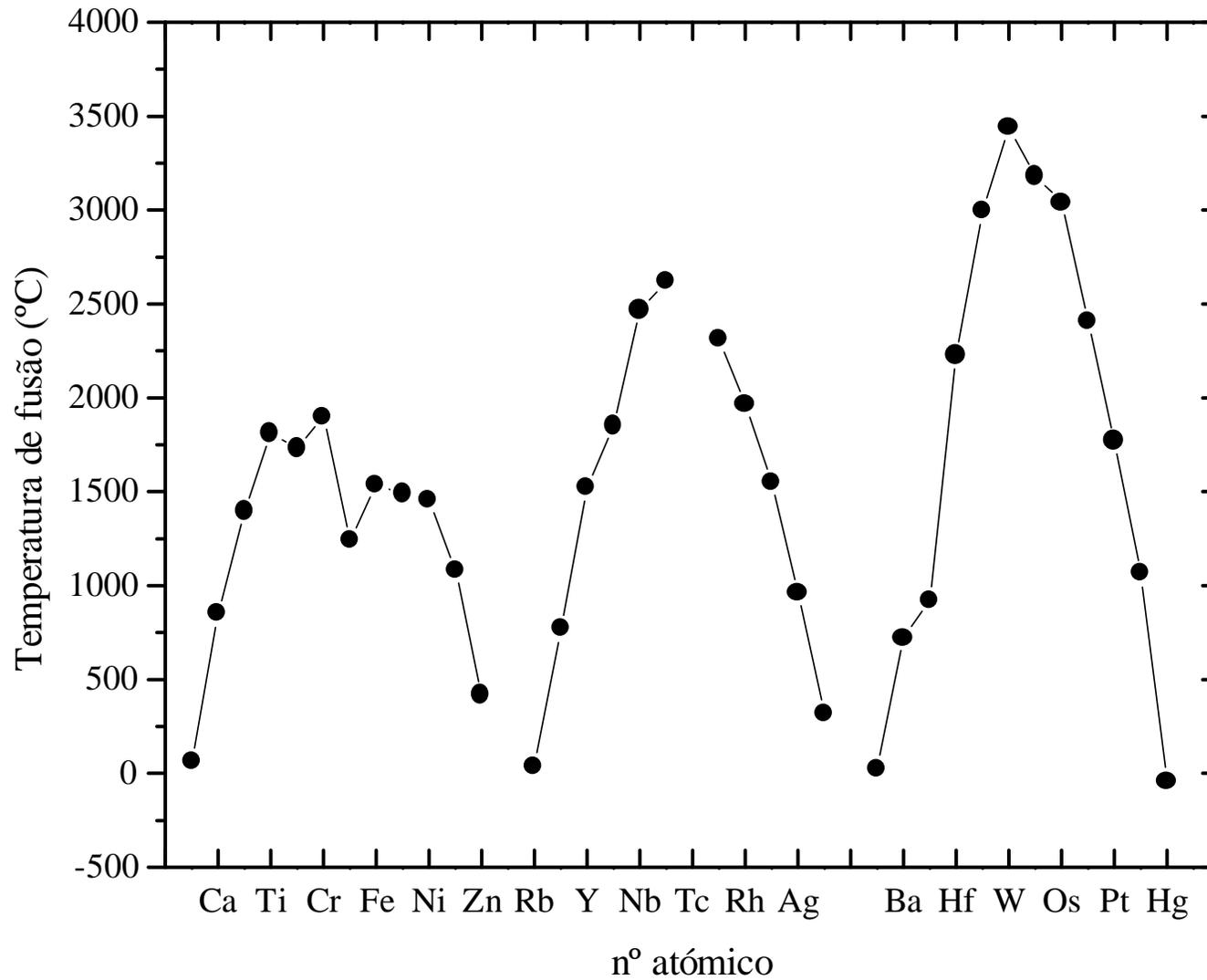
| Metal | Na | Mg | Al |
|----------------------------|-----|-----|-----|
| Electrões de Valência | 1 | 2 | 3 |
| Energia de Coesão (kJ/mol) | 108 | 146 | 326 |

Metais dos 4º, 5º e 6º Períodos da Tabela Periódica

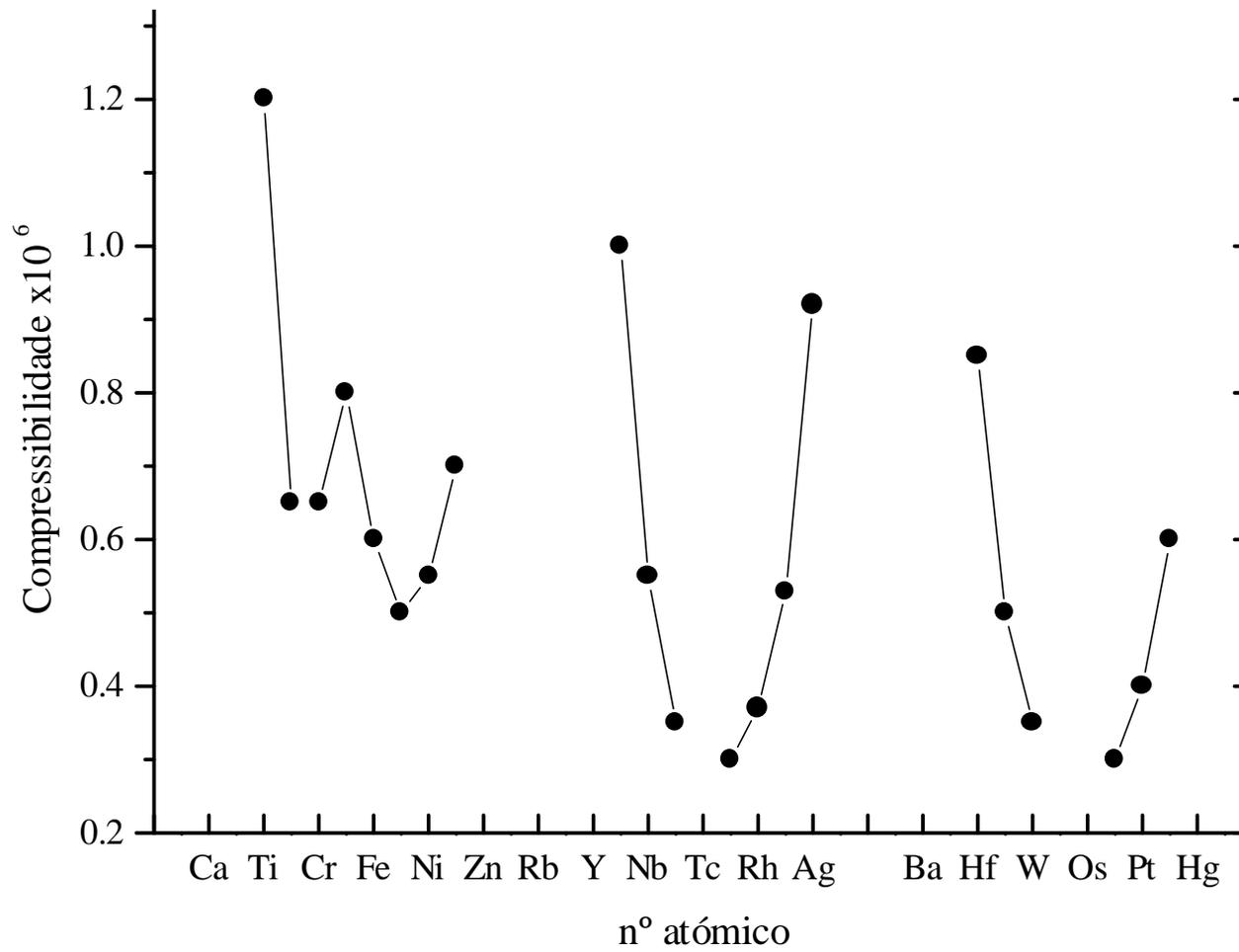


Energia de Coesão e Propriedades dos Metais

Temperatura de Fusão



Compressibilidade



Ligas metálicas

Propriedades metálicas, constituídas por dois ou mais elementos, pelo menos um dos quais é um metal

Soluções sólidas (χ s semelhantes)

Substituição
(dois ou mais metais)

- Dimensões relativas dos átomos não devem diferir mais de 15%
- Estruturas cristalinas compatíveis
- Electronegatividades semelhantes
- Número de electrões de valência

Intersticiais
(metal + não metal)

- Dimensões relativas do metal e do não metal:
 - raio(não metal) < raio(interstício) – solubilidade elevada
 - raio(não metal) > raio(interstício) – baixa solubilidade, desde que a razão dos raios atómicos < 0.59

Compostos intermetálicos (IMC) (χ s muito diferentes)

Sumário 13

- **Metais (Cont.)**
 - **Estruturas Cristalinas dos Metais**
 - Massa e Volume das Células Unitárias
 - Densidades Teóricas
 - **Interstícios de Rede nas Células Compactas**
 - Dimensões dos Interstícios Octaédricos e Tetraédricos
 - **Teoria das Orbitais Moleculares Aplicada aos Metais**
 - Hidrogénio Metálico: Banda de Níveis de Energia
 - **Energia de Coesão e grau de preenchimento da banda**
 - Metais dos 2^o e 3^o períodos. Metais dos 4^o, 5^o e 6^o períodos.
 - **Propriedades dos Metais: Temperatura de fusão.**
Compressibilidade. Condutividade eléctrica.
 - **Ligas metálicas: Soluções sólidas de substituição e intersticiais.**
Exemplos. Compostos intermetálicos.