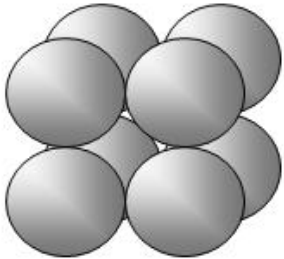


## Massas Volúmicas Teóricas

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

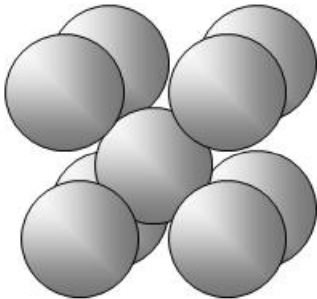
### Estrutura Cúbica Simples (CS)



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

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

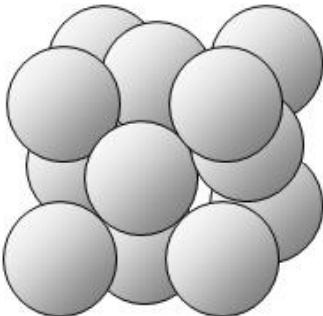
### Estrutura Cúbica de Corpo Centrado (CCC)



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

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

### Estrutura Cúbica de Faces Centradas (CFC)



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

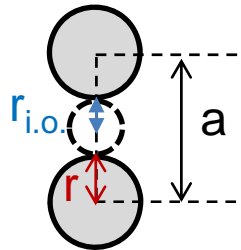
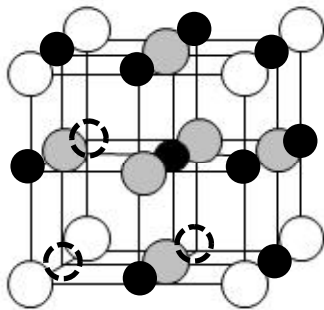
$$\mu = \frac{M}{4\sqrt{2} r^3 N_A}$$

## 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



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

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

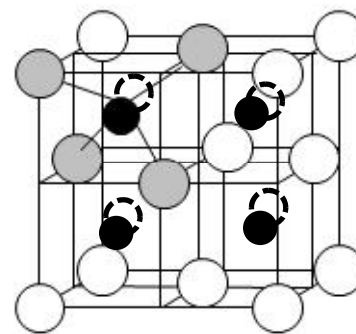


$$2\sqrt{2} r = 2r + 2r_{i.o.}$$

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

$$= 0.414 r$$

Tetraédricos



diagonal do cubo: D

diagonal do cubo  
elementar: d

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

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



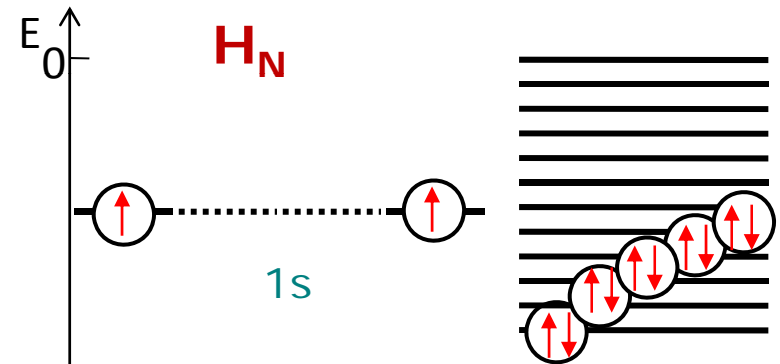
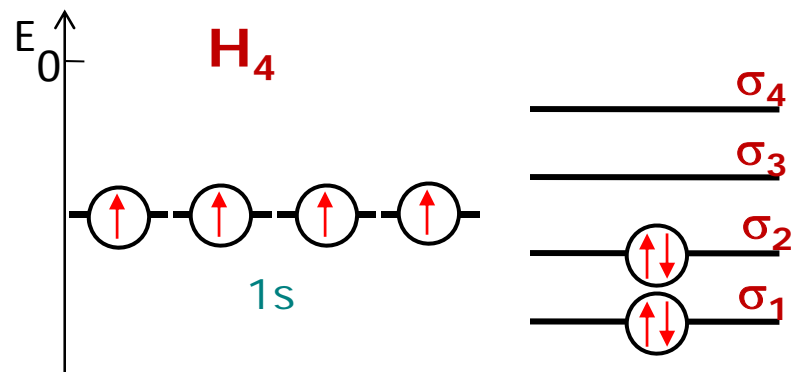
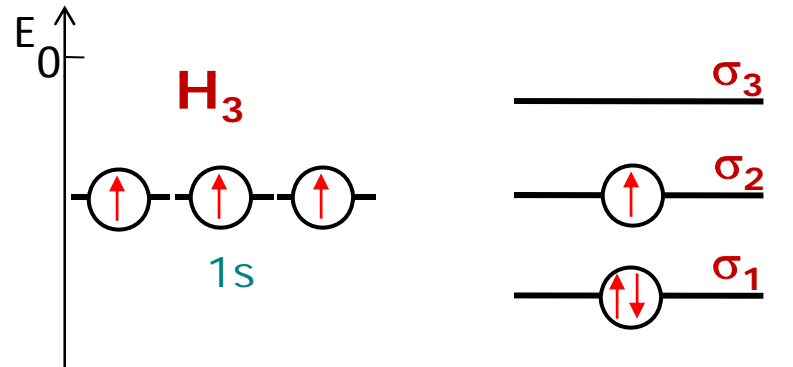
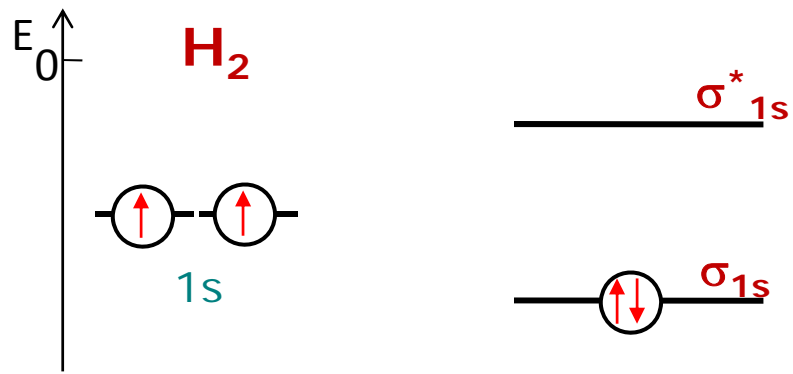
$$2r + 2r_{i.t.} = \sqrt{3} \times \sqrt{2} r$$

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

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

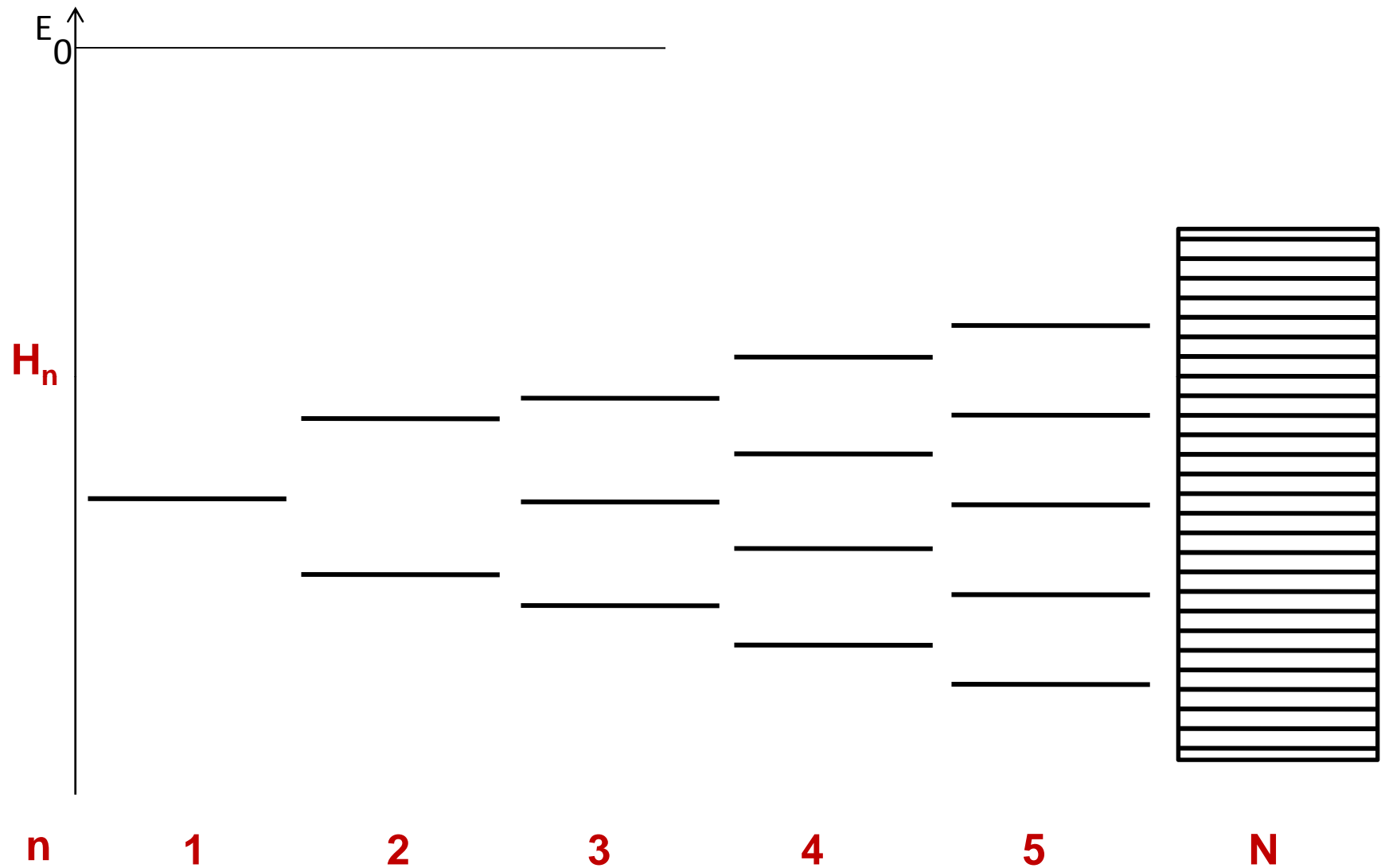
Estas dimensões são importantes nas ligas metálicas

# TOM/CLOA Aplicada aos Metais



$N$  níveis de energia  
 $N/2$  preenchidos

# Banda de Níveis de Energia do Hidrogénio Metálico



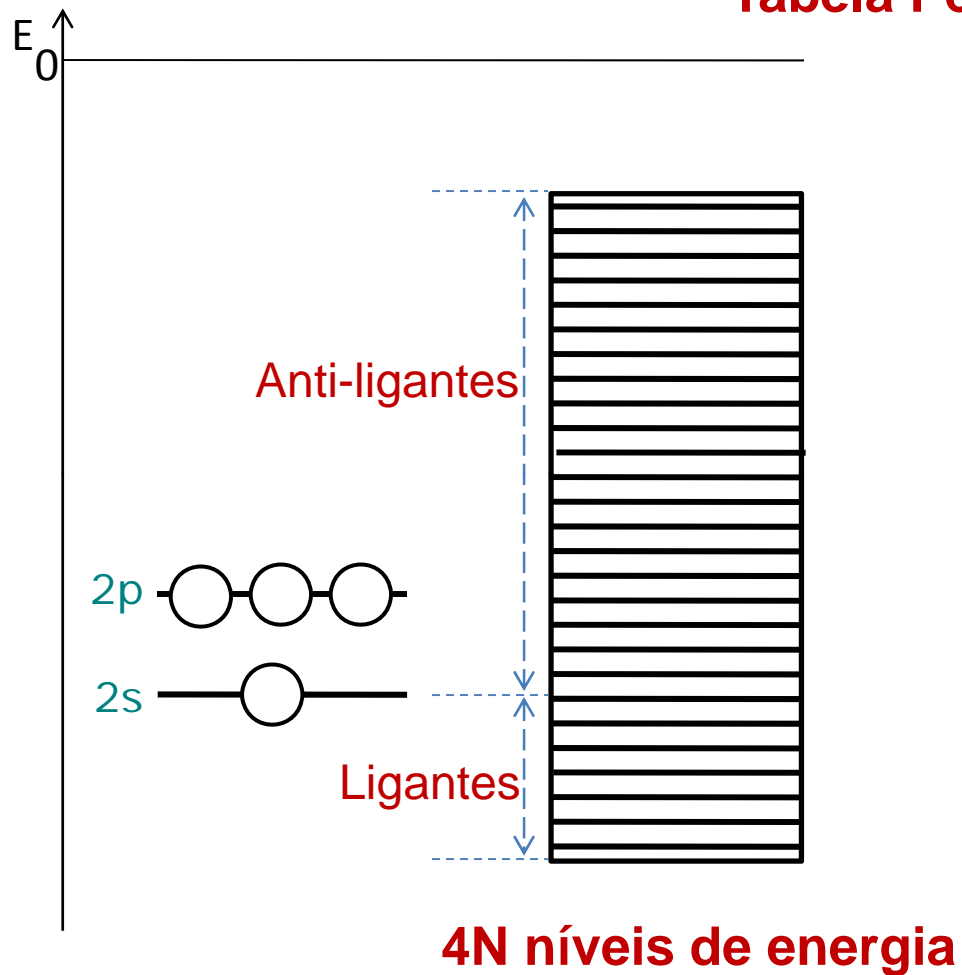
# METAIS

elevada densidade; elevada condutividade térmica e eléctrica; ductilidade

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

6	58 Ce [Xe]4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	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 <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>
7	90 Th [Rn]6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	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 <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>

## 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)



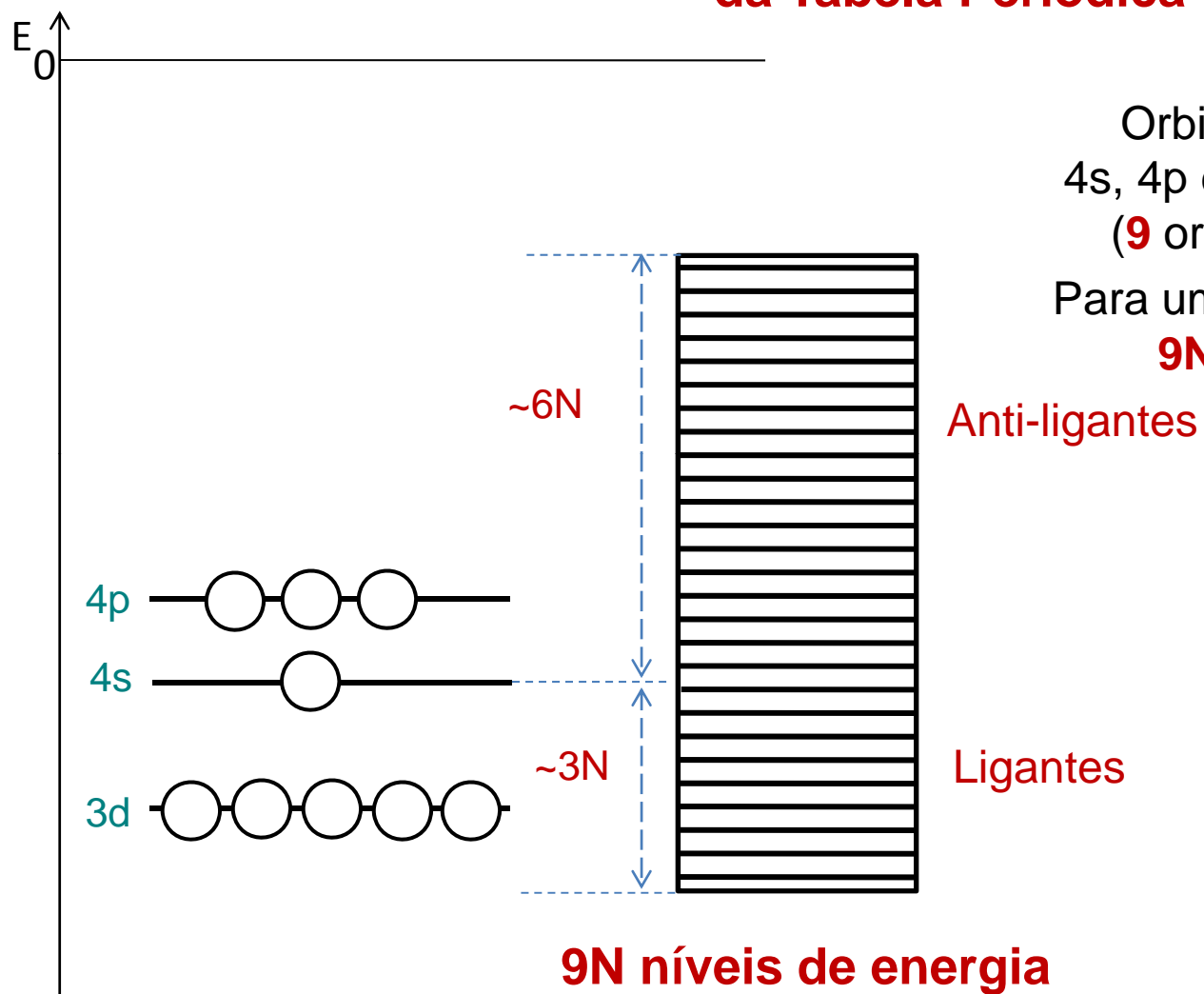
Para um cristal com **N** átomos:  
**4N** orbitais atômicas

# METAIS

elevada densidade; elevada condutividade térmica e eléctrica; ductilidade

	1																	2
	H 1s <sup>1</sup>																	He 1s <sup>2</sup>
	3	4																10
	Li 1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>	Be 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>																Ne 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>
	11	12																18
	Na [Ne]3s <sup>1</sup>	Mg [Ne]3s <sup>2</sup>																Ar [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>
4º grupo	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
	K [Ar]4s <sup>1</sup>	Ca [Ar]4s <sup>2</sup>	Sc [Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga [Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>1</sup>	Ge	As	Se	Br	Kr [Ar]4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>
	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
	Rb [Kr]5s <sup>1</sup>	Sr [Kr]5s <sup>2</sup>	Y [Kr]4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	Sn [Kr]5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	Sb	Te	I	Xe [Kr]5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>
	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
	Cs [Xe]6s <sup>1</sup>	Ba [Xe]6s <sup>2</sup>	La [Xe]5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au [Xe]5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>	Hg [Xe]6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	Tl [Xe]6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	Pb	Bi	Po	At	Rn [Xe]6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>
	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116		
	Fr [Rn]7s <sup>1</sup>	Ra [Rn]7s <sup>2</sup>	Ac [Rn]6d <sup>1</sup>	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh		
	6	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
		Ce [Xe]4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>			
	7	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
		Th [Rn]6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>			

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



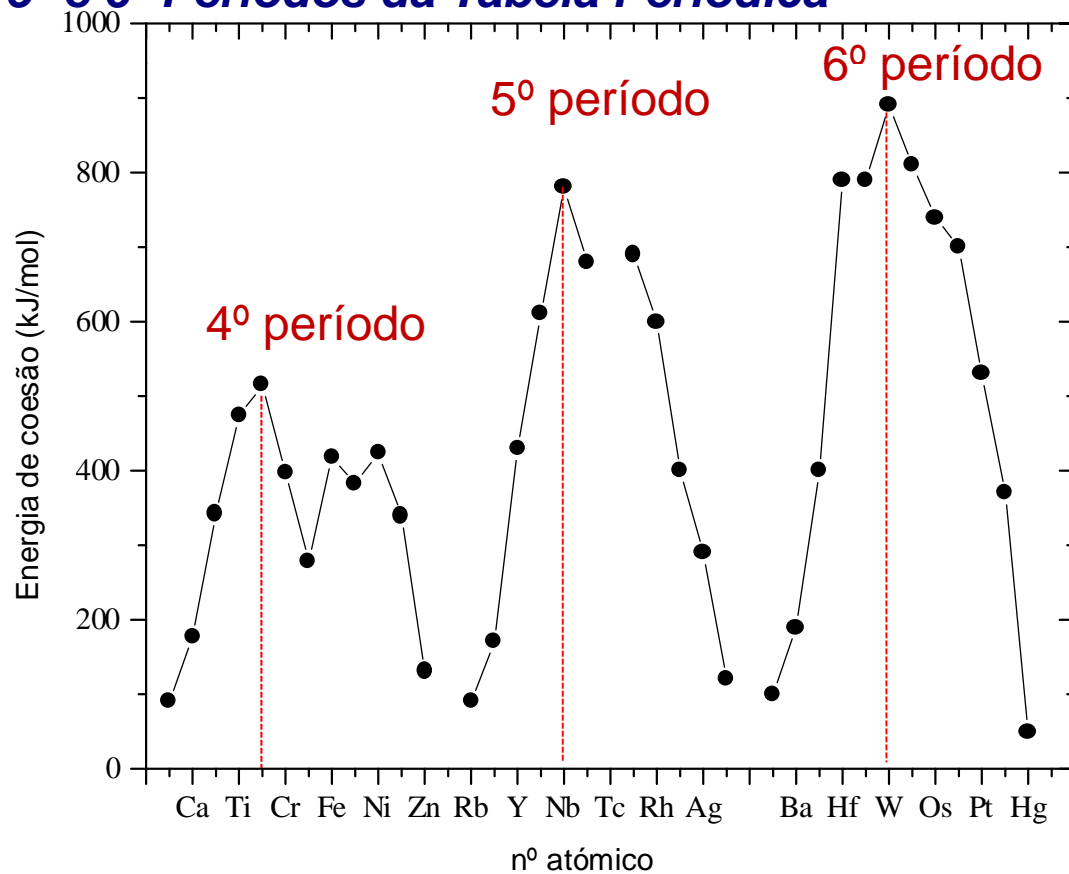


## Grau de Preenchimento e Energia de Coesão

### Metais do 3º Período

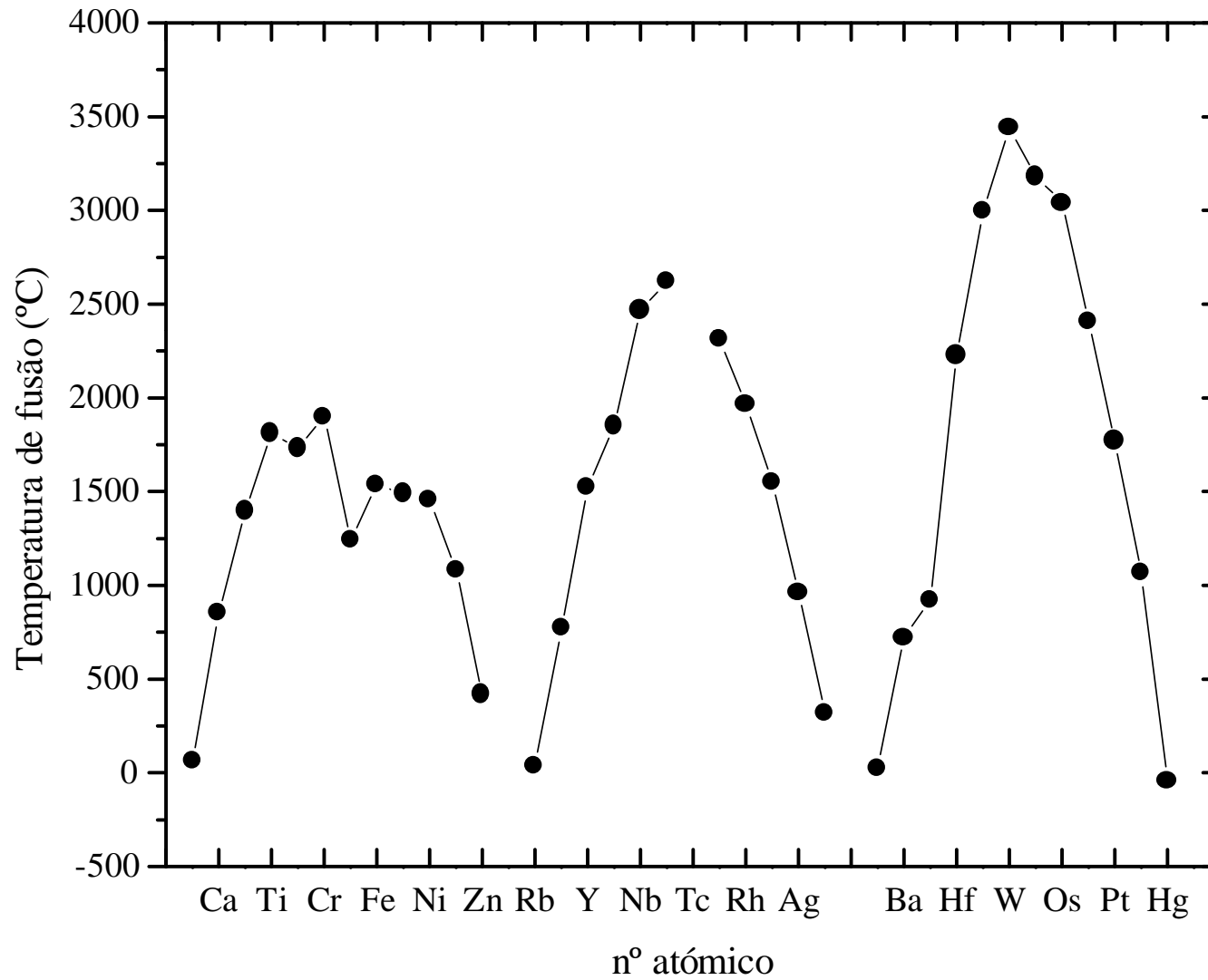
Metal	Na	Mg	Al
Electrões de Valência	1	2	3
Energia de Coesão (kJ/mol)	108	146	326

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

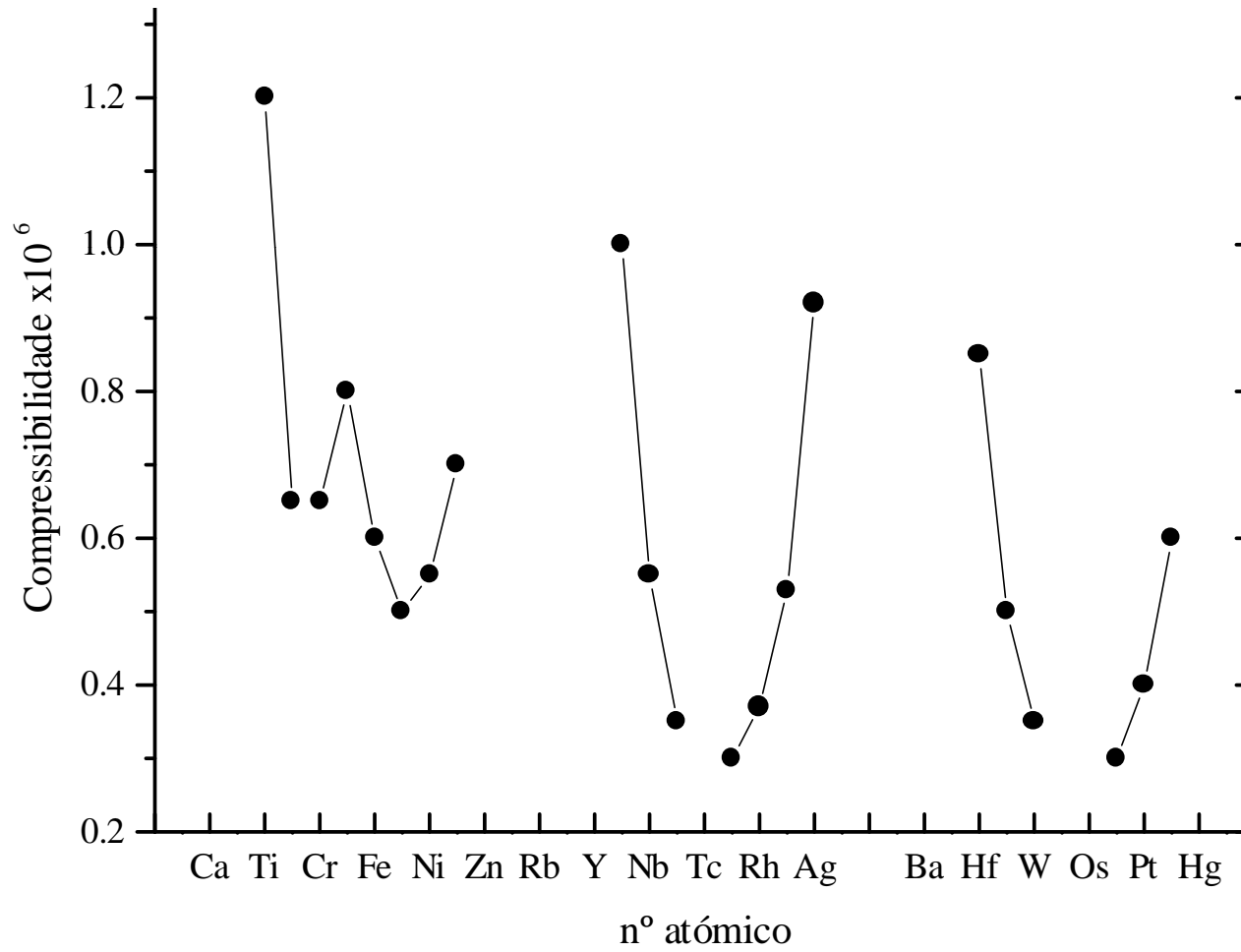


# Energia de Coesão e Propriedades dos Metais

## Temperatura de Fusão



## Compressibilidade



# Ligas metálicas

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

## Soluções sólidas ( $\chi$ 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) ( $\chi$ 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<sup>o</sup> e 3<sup>o</sup> períodos. Metais dos 4<sup>o</sup>, 5<sup>o</sup> e 6<sup>o</sup> períodos.
  - **Propriedades dos Metais: Temperatura de fusão.**  
**Compressibilidade. Condutividade eléctrica.**
  - **Ligas metálicas: Soluções sólidas de substituição e intersticiais.**  
**Exemplos. Compostos intermetálicos.**