

Introdução à Nanotecnologia

Ele 1060

Aula 4

2010 - 01

Fundamentos

Aula Anterior

- Classificação dos Materiais;
- Átomos;
- Elétrons nos Átomos.

Ligação Atômica no Sólidos

- Para compreender as **propriedades físicas dos materiais**:
 - Deve-se conhecer as **forças interatômicas** que **unem os átomos** entre si.
- Vamos considerar **dois átomos** separados.

Ligação Atômica no Sólidos

- 2 tipos de forças:
 - Atrativa e Repulsiva.
 - Dependem da distância interatômica.

$$F_T = F_A + F_R$$

- No equilíbrio: $F_T = 0$.
- Distância de equilíbrio – r_0
 - Aproximadamente 0,3 nm para muitos átomos.

Ligação Atômica no Sólidos

- Vamos pensar em termos de energia.
 - E_0 – Energia de Ligação (Energia mínima).

$$E_T = E_A + E_R$$

Ligação Atômica no Sólidos

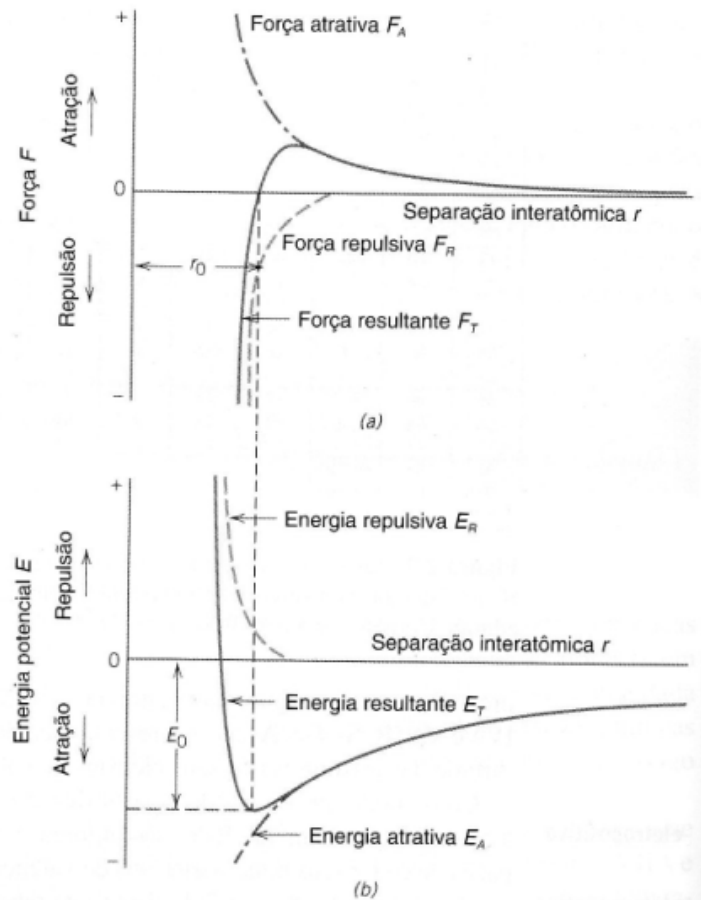


Figura 2.8 (a) A dependência das forças repulsiva, atrativa e resultante em relação à separação interatômica para dois átomos isolados. (b) A dependência das energias repulsiva, atrativa e resultante em relação à separação interatômica para dois átomos isolados.

Ligações Interatômicas Primárias

- Ligação Iônica
- Ligação Covalente
- Ligação Metálica

Ligação Iônica

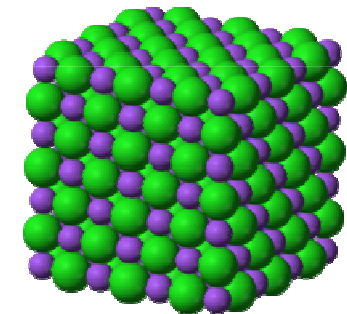
- **Fácil** de ser **descrita e visualizada**;
- Encontrada em compostos envolvendo **elementos metálicos e não-metálicos**;
- Átomos de um **elemento metálico** perdem elétron
 - Ficam **positivos**
- Átomos de um **elemento não-metálico** ganha elétron
 - Ficam **negativos**

Ligação Iônica

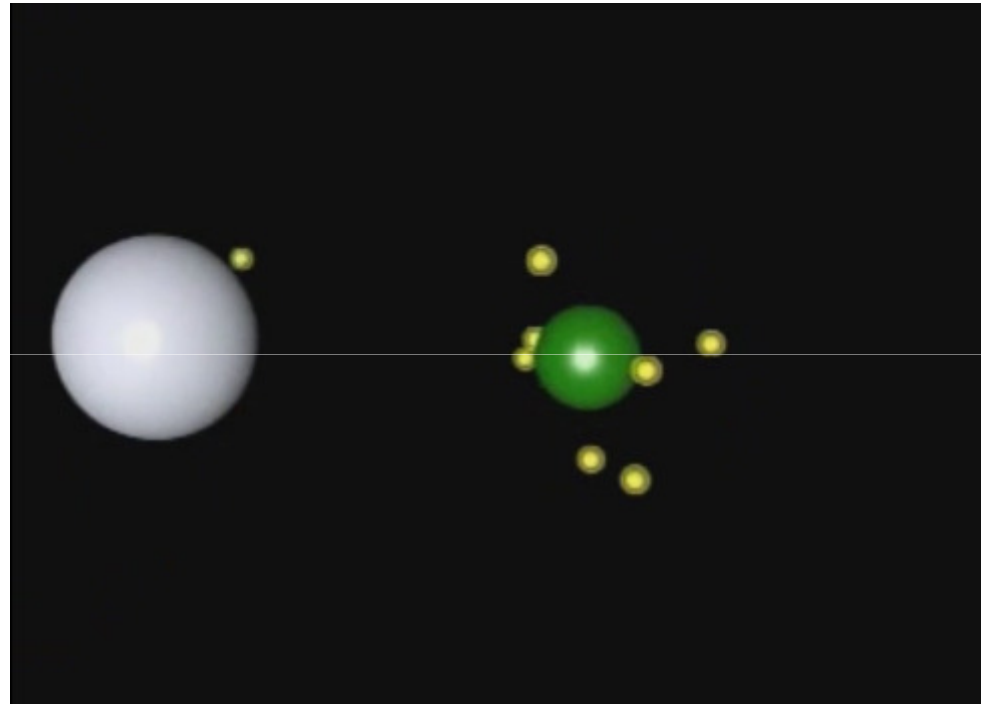
- Exemplo clássico: NaCl.

1A		2A		Elementos de transição										3A					4A	5A	6A	7A	8A
1	H													B	C	N	O	F	Ne				
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne					
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar					
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr					
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe					
6	Cs	Ba	57-71	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn					
7	Fr	Ra	89-103	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo					

* 6	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
** 7	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw



Ligação Iônica



Ligação Iônica

- Força de Ligação atrativa – **Coulomb**
 - Íons **positivos e negativos se atraem**;
 - Energia para dois íons isolados.

$$E_A = -\frac{A}{r}$$

- Energia de Repulsão.

$$E_R = -\frac{B}{r^n}$$

- A, B e n são constante (n é aproximadamente 8)

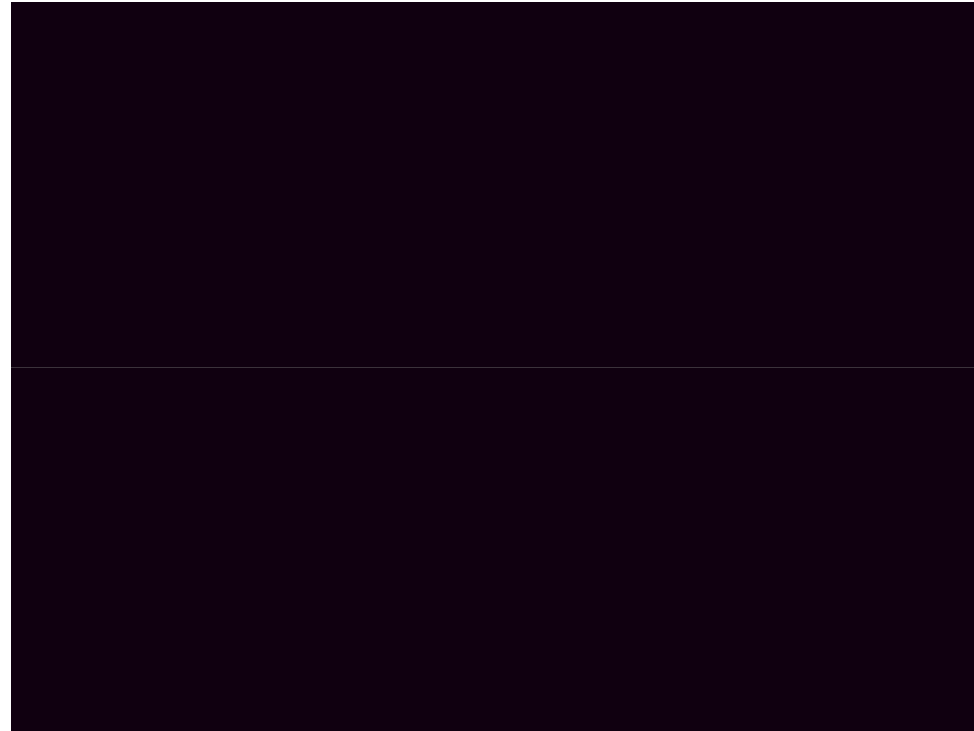
Ligação Iônica

- Ligação **não-direcional**
 - Íons positivos dever ter vizinhos negativos.
- Ligação predominante nos **materiais cerâmicos**;
- **Energias** de ligação são **grandes**
 - Entre 600 e 1500 kJ/mol;
- Materiais **duros e frágeis**.

Ligação Covalente

- Caracterizada pelo **compartilhamento de elétrons** entre átomos adjacentes;
 - Elétrons podem ser considerados como **pertencentes a ambos os átomos**.
- Ligação **direcional**
 - Ocorre entre átomos específicos.
- Ocorre em:
 - Sólidos elementares (diamante, silício e germânio)
 - Moléculas elementares (H_2 , Cl_2 , F_2 , etc)
 - Outros.

Ligação Covalente



Ligação Covalente

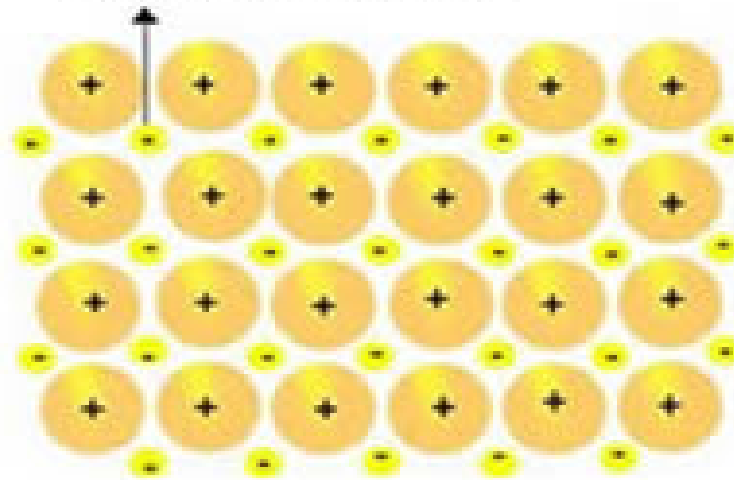
- Ligações **Fortes**
 - Ex: Diamante
- Ligações **Fracas**
 - Ex: Bismuto
- Normal em materiais **poliméricos**;
- É normal a existência de ligações interatômicas que são **parcialmente iônicas e parcialmente covalentes**.

Ligação Metálica

- Encontrada nos metais e ligas metálicas;
- **Elétrons de valência não estão ligados** a qualquer átomo no sólido.
 - Estão livres para se movimentarem.
 - “mar de elétrons” ou “núvem de elétrons”.
- Elétrons restantes + núcleos
 - Núcleos iônicos – **Positivos**.
- Ligação **não-direcional**.

Ligação Metálica

Elétrons livres



Ligação Metálica

- Ligações **Fortes**.
 - EX: Tungstênio.
- Ligações **Fracas**
 - EX: Mercúrio.
- Obviamente, os metais são **bons condutores de eletricidade**.

Ligações Secundárias (Van der Waals)

- Também conhecidas como **ligações Físicas**;
- São mais **fracas**;
- Existem entre praticamente **todos** os átomos e moléculas;
- Resulta da **atração de Coulomb** entre **dipolos**;

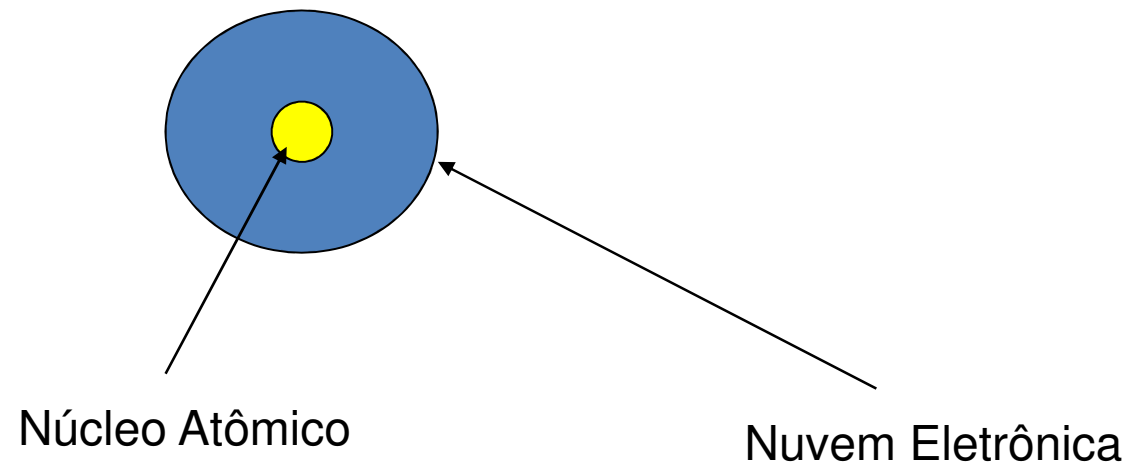
Ligações Secundárias (Van der Waals)

- Ligações de dipolo induzido flutuante;
- Ligações entre moléculas polares e dipolos induzidos;
- Ligações de dipolos permanentes.

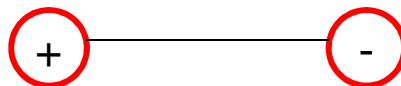
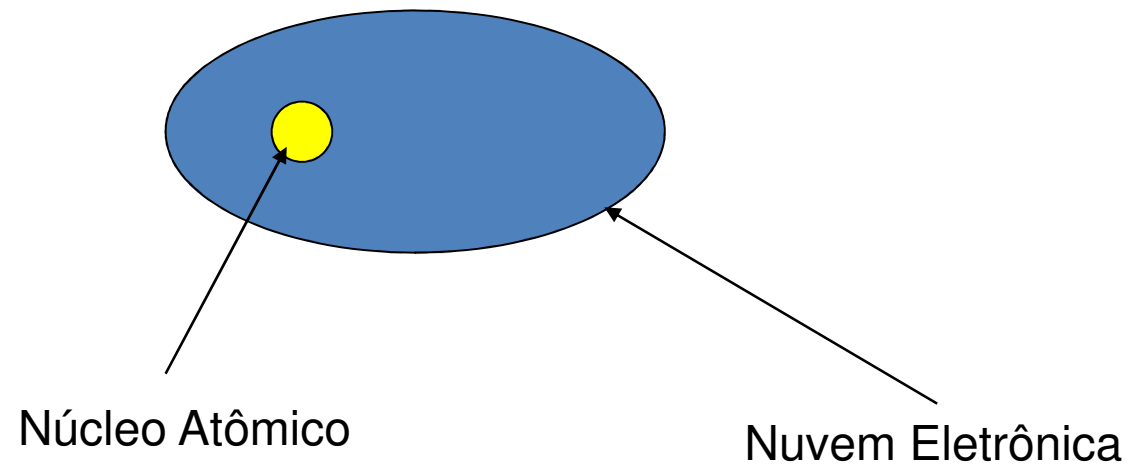
Ligações de dipolo induzido flutuante

- **Dipolo** pode ser **criado ou induzido** em um átomo ou molécula eletricamente simétrica;
- **Dipolo** pode **causar distorções instantâneas** na distribuição eletrônica do átomo ou molécula vizinha.

Ligações de dipolo induzido flutuante



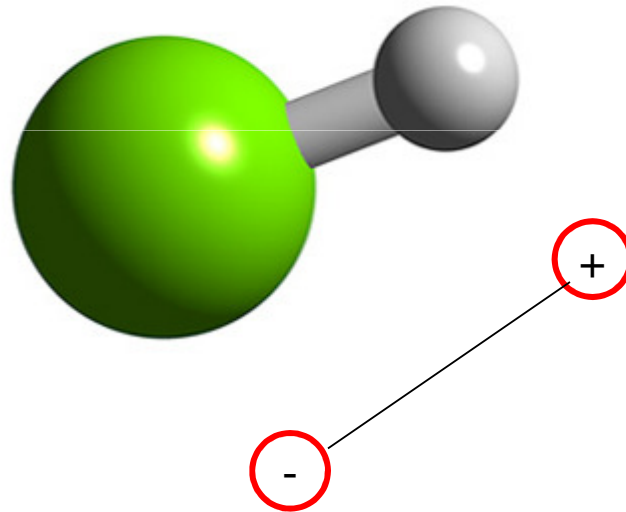
Ligações de dipolo induzido flutuante



Ligações entre moléculas polares e dipolos induzidos

- Algumas moléculas possuem **momentos dipolares permanente**;
 - **Arranjo assimétrico** de regiões positivas e negativas.
 - **Moléculas polares.**
- Moléculas polares podem **induzir dipolos** em moléculas apolares adjacentes.
 - Formará uma **ligação entre elas.**

Ligações entre moléculas polares e dipolos induzidos



Ligações de dipolos permanentes

- Entre **moléculas polares** adjacentes;
- **Energias** de ligação **maiores** que aquelas envolvendo dipolos induzidos;
- **Ligação de Hidrogênio**
 - Flúor – Ex: HF;
 - Oxigênio – Ex: H₂O;
 - Nitrogênio – Ex: NH₃.

Ligações de dipolos permanentes



Comparação entre as ligações

Tabela 2.3 Energias de Ligação e Temperaturas de Fusão para Várias Substâncias

<i>Tipo de Ligação</i>	<i>Substância</i>	<i>Energia de Ligação</i>		<i>Temperatura de Fusão (°C)</i>
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/Átomo, Íon, Molécula</i>	
Iônica	NaCl	640	3,3	801
	MgO	1000	5,2	2800
Covalente	Si	450	4,7	1410
	C (diamante)	713	7,4	>3550
Metálica	Hg	68	0,7	-39
	Al	324	3,4	660
	Fe	406	4,2	1538
	W	849	8,8	3410
van der Waals	Ar	7,7	0,08	-189
	Cl ₂	31	0,32	-101
Hidrogênio	NH ₃	35	0,36	-78
	H ₂ O	51	0,52	0

Referências

- Ciência e Engenharia dos Materiais – Uma Introdução – Sétima Edição.
– William D. Calister Jr.