Ciência de Materiais.

Pré-textuais:

Plano de curso, horários do professor, notas de aulas, exercícios e materiais didáticos diversos serão disponibilizados no site particular do professor: ***paulomoscon.com*** *(obs: bastando seguir os links apropriados).*

O curso seguirá a sequência e o conteúdo do livro texto:

FUNDAMENTOS DA CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS;
Segunda edição;
William D. Callister, Jr.

obs: a Edição não é importante.

— 11 —

Classificação dos materiais.

Porquê classificar os materiais?

A classificação dos materiais não é uma decisão ou opção. Não ocorreu em um momento específico que os materiais deveriam ser agrupados segundo determinadas características específicas.
Este agrupamento, como muitos outros, surge naturalmente e lentamente à medida que se refere a materiais com determinadas características. Por exemplo, quando se pensa em um material que pode "dar choque elétrico" se imagina imediatamente que este material deve ser metálico. Em contraste, quando se quer evitar o risco de choque elétrico se utiliza-se materiais plásticos ou emborrachados. Desta forma, se faz um agrupamento imaginário segundo às características de condução elétrica dos materiais citados. Este agrupamento está em nossas mentes sem a necessidade de que alguém nos ensine. Exemplos semelhantes podem ser citados segundo outras propriedades e/ou característica dos materiais.

- Propriedades térmicas: Pq é adequado cozinhar com colheres de madeira em vez de metálicas ou de borracha/plástica?

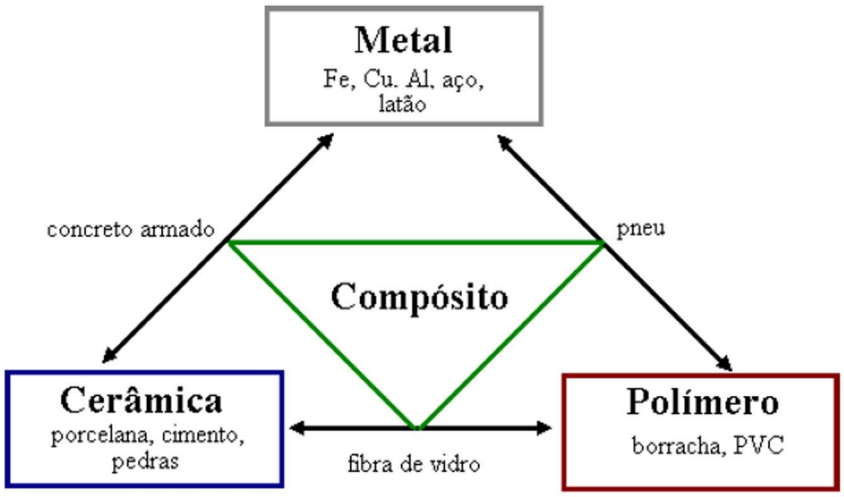
- Propriedades mecânicas: A colher não deve ser de borracha, pois não teria a rigidez adequada. Também não seria agradável que pesasse demais...

- Custo: Uma colher de fibra de carbono seria legal, mas o custo inviabilizaria.

- Etc.

Como vimos, os materiais são naturalmente classificas segundo ao senso comum baseado em determinadas propriedades. Contudo, estas classificações são imprecisas e em alguns casos subjetivas. Com a industrialização veio a necessidade de classificar os materiais de uma forma mais precisa, afinal, é com base em suas característica e propriedades que a indústria opta por um ou outro tipo de material como matéria prima para um determinado produto.

A classificação utilizada hoje é a mostrada na Figura abaixo:



Embora não esteja ainda claro, esta classificação segue o senso comum. Os três grupos apresentam propriedades elétricas, térmicas ou mecânicas distintas. O centro da figura se refere à possibilidade de materiais misturados, chamados compósitos. Portanto, basicamente temos três tipos de materiais:

Metais, Cerâmicas e polímeros.

↳ Com possibilidade de mistura (compósitos).

Classificações adicionais ocorrem quando propriedades importantes se apresentam, podendo esses novos grupos serem ou não compósitos. Como exemplo citamos dois materiais de grande importância tecnológica e médica:

Semicondutores: Revolucionaram as indústrias de produtos eletrônicos e computadores.

Biomateriais: Materiais biocompatíveis, ou seja, que podem ser implantados no interior do corpo humano.

Capítulo 2

Estrutura atômica e ligação interatômica

Percebemos ao nosso redor muitos materiais com propriedades bastante distintas. Essas propriedades são percebidas externamente, ou seja, macroscopicamente. A ciência dos Materiais objetiva o entendimento, em níveis de magnitudes inferiores ao macroscópico, de porque um determinado material se apresenta com tais propriedades. O entendimento (ou pelo menos a proximidade do entendimento) nos permite não só a explicação fundamental de determinadas propriedades, compreendendo melhor a natureza, mas também nos permite moldar novos materiais com novas propriedades que podem ser úteis para aplicações específicas.

Neste ponto vale consideras as escalas observadas na natureza, para então decidirmos por onde começar a tentative de entendê-la melhor.

Esta Figura mostra um aglomerado de galáxias. Cada região brilhante corresponde a um aglomerado de estrelas presas em um campo gravitacional mútuo.

Cada galáxia contem bilhões de estrelas. Muitas com sistemas planetários.

Curiosidades:

Se o universo é infinito, os cientistas supõem que o número de corpos celestes que o compõem deve ser igualmente infinito. Nós só podemos contar o número de estrelas que ficam na parte visível do cosmo, aquela cuja luz chega até a Terra. Para começar, isso inclui nada menos que 100 bilhões de galáxias - grandes sistemas estelares como a Via Láctea, que abrange todo o nosso Sistema Solar. "Essas galáxias podem conter de alguns milhões de estrelas, no caso das menores, a centenas de bilhões, no caso das mais luminosas", diz o astrônomo Laerte Sodré Jr., da USP. Com uma média de 100 bilhões de estrelas por galáxia, essa estimativa alcançará a bagatela de dez sextilhões de astros! (Para ter uma idéia do que significa um sextilhão, acrescente uma fileira de 21 zeros ao algarismo um.)

Comparada a esse número, a quantidade de estrelas que vemos pela janela representa quase nada: apenas 5 000 são visíveis da Terra a olho nu. Galáxias, então, só enxergamos quatro sem telescópio: a Via Láctea, é claro, mais Andrômeda e as duas Nuvens (Pequena e Grande) de Magalhães.

OBS: texto retirado do site http://mundoestranho.abril.com.br/materia/quantas-estrelas-existem-no-universo

O diâmetro da Via Láctea é de ≈ 100 000 A.L.

"AL = anos luz".

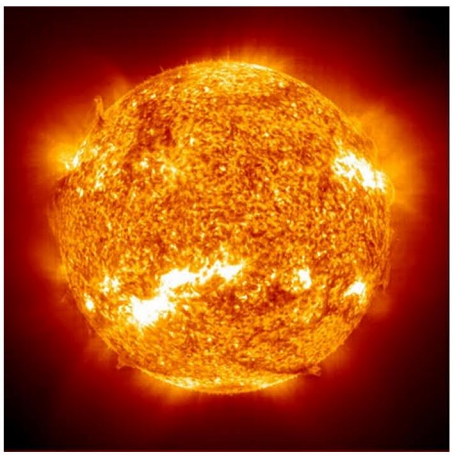
A distância do sol até Sirus é de 4,3 A.L.

Portanto, a imagem ao lado não é real.

"PQ não?".

↑ O sol fica próximo à borda da via Láctea.

— n —



* 1300000 vezes maior que a terra.
* Composto primariamente po Hidrogênio ≈ 92% do volume.
  Hélio ≈ 7% do volumo
* Mostra presença de outros elementos como Ferro, Niquel, Oxigênio, silício, enxofre, magnésio, cálcio e Cromo.

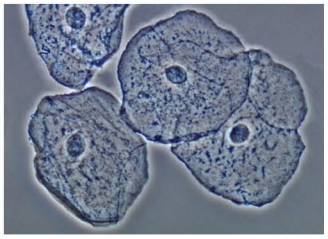
* Diâmetro de ≈ $1,4 \times 10^9$ m.

Terra:

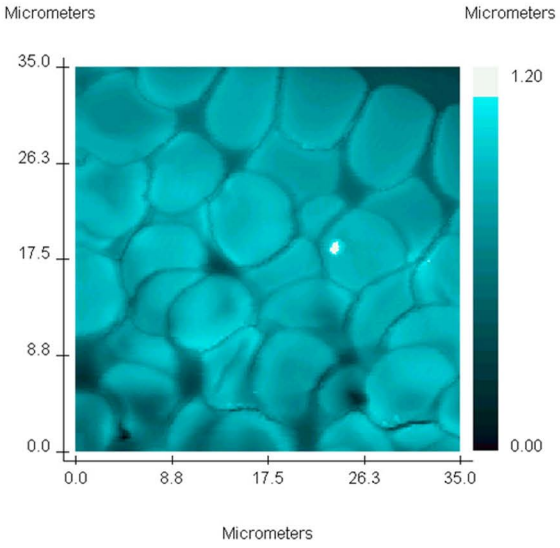
Diâmetro de ≈ 12000 Km.

Estruturas sobre a terra:

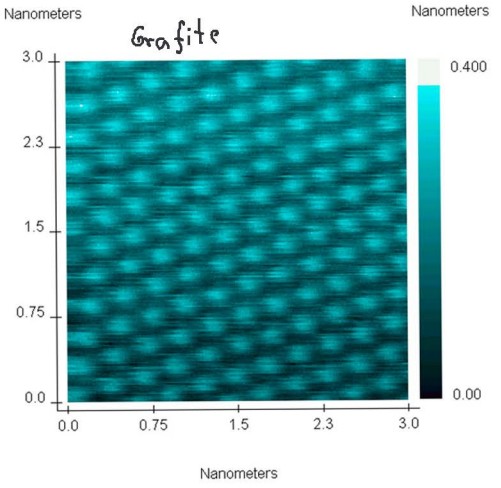
da ordem de metros.

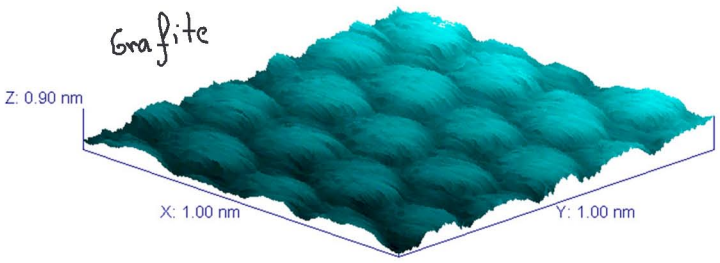


Células ≈ microns.



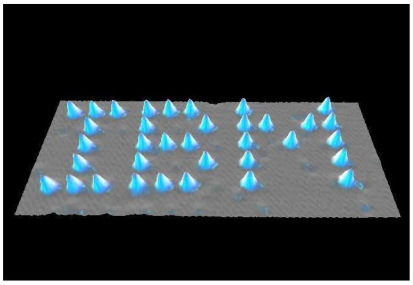
Glóbulos vermelhos, da ordem de microns.



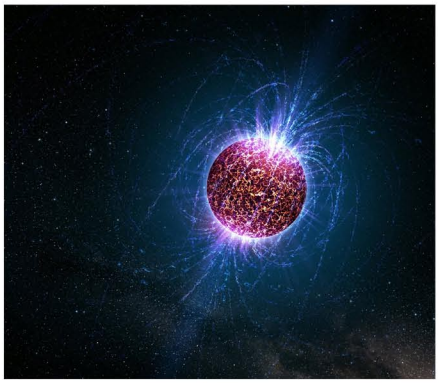


Átomos de Carbono da ordem de 10^{-10} m (Ångstroms).

Obs: Embora não pareça são imagens reais dos átomos. A coloração resulta do processamento computacional.



IBM escrito com 35 átomos de Xenom Sobre uma placa de Níquel.



Próton "Não é uma imagem real, não é possível".

Tamanho $< 10^{-14}$ m

Elétron:

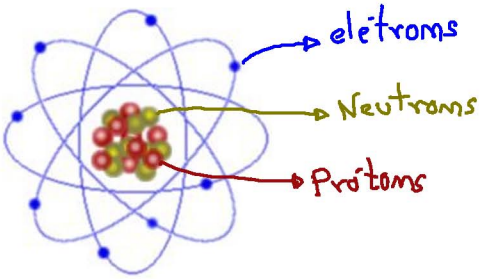
Tamanho $\approx < 10^{-18}$ m

Obs: a imagem está ao lado, só que não dá para ver

— 11 —

Estrutura atômica

* Conceitos fundamentais.



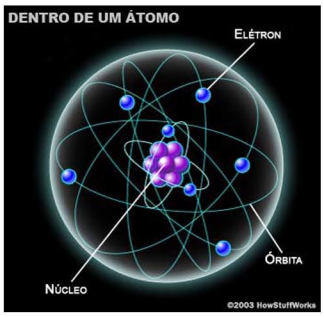
$A \cong Z + N$

- A → Massa atômica
- Z → nº de Prótons
- N → nº de Neutrons

Obs: O sinal aproximado significa que a massa atômica usada para calcular o peso de um átomo não é exatamente Z+N, isso porque na prática a massa medida é uma média ponderada para os diferentes isótopos (diferentes N's).

✱ Elétrons nos átomos – Modelos atômicos.

A estrutura atômica, pensada em termos da mecânica clássica, consiste um núcleo contendo carga elétrica positiva Z.e circundado por elétrons com carga elétrica negativa. Para um átomo neutro o número de elétrons deve ser igual ao número de prótons, portanto a carga deve ser - Z.e. A imagen que se faz de um sistema deste tipo é a representada na Figura abaixo,



Pensa-se em um mini sistema planetário, onde os elétrons ficam presos no campo elétrico do núcleo assim como os planetas ficam presos ao campo gravitacional do sol. Contudo, no nivel atómico muitos fenômenos observados não encontram possibilidade de explicação dentro da estrutura teórica da mecânica clássica.

Exemplos:

Classicamente a órbita do elétron pode ser qualquer, ou seja, o raio da órbita pode assumir qualquer valor desde zero até o infinito. Sendo assim, quando um átomo irradiar (emitir luz) a energia so sistema núcleo + elétron deve diminuir (conservação de energia). No modelo de Bohr a energia total de um átomo de hidrogênio é dada por

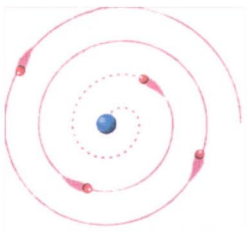
$$U_T = -\frac{qe}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

Obs: A demonstração pode ser encontrada no site abaixo.

http://paulomoscon.com/estudos/Qu%C3%A2ntica-aula-17-22.pdf

Da equação clássica acima a única variável é o raio r. Portanto, qualquer energia proveniente do átomo só pode ocorrer através de uma mudança nesta variável. Em outras palavras, se o átomo emite luz, então o elétron deve cair para uma órbita inferior. Se esta órbita inferior pode ser qualquer, então o átomo poderia emitir continuamente e o elétron colapsaria em direção ao núcleo destruindo assim as possibilidades de ligação com outros átomos bem como a possibilidade de continuar sendo excitado a fim de emitir luz.

A consequência desta possibilidade é a impossibilidade de existência da matéria. Se isso acontecesse, as estruturas se desmanchariam completamente (veja Figura abaixo).

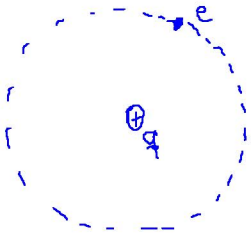


Então a teoria clássica não é capaz de explicar a estabilidade dos átomos.

Bohr então postula que os elétrons só podem ocupar órbitas específicas, podendo transicionar de uma para outra emitindo ou absorvendo energia (luz, por exemplo). Este postulado foi baseado em evidência experimentais -- além disso resolve o problema da estabilidade.

O que Bohr fez?

1º) Vamos estudar o átomo mais simples, o H. ⇒ 1 eletron + 1 próton



$$\Rightarrow \frac{qe}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{q.e}{4\pi\varepsilon_0 r m}}$$

"velocidade do eletron em função da distancia ao núcleo"

Mas r não pode ser qualquer, afinal observamos emissões discretas (não continuas).

Lembremos que a energia de um fóton emitido é

$$E = h.\nu$$

ν → frequência associada à luz emitida

h → Constante de proporcionalidade (cte de Planck).

Observe que $h = \frac{E}{\nu}$, dimensionalmente $[h] = \frac{\text{Joule}}{\frac{1}{\text{segundo}}} = J.s$

Momento angular é $L = m.v.r \Rightarrow [L] = kg.\frac{m}{s}.m = kg.\frac{m}{s}.m.\frac{s}{s}$

$$[L] = kg.\frac{m}{s^2}.m.s$$

$[L] = kg \cdot \frac{m}{s^2} \cdot m \cdot s$ → distância

$\frac{m}{s^2}$ → aceleração

kg → massa

→ dimensão de força.

$[L] =$ Força . distância . s

→ dimensão de energia (no S.I. → Joule).

Portanto $[L] = J.s$, ou seja h tem dimensão de momento angular.

Desta forma, considerando que o elétron possui um momento angular devido seu movimento ao redor do núcleo; considerando que as energia emitidas ocorre em múltiplos de h ($E = h\upsilon$ em pacotes); é possível então que só possa acontecer momentos angulares em certos valores. Bohr postula então que

$L = n\hbar$, sendo n inteiro e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$\Rightarrow L = m\upsilon r$

$\Rightarrow m\upsilon r = n\hbar$

$r = \frac{n\hbar}{m.\upsilon}$ → mas vimos que $\upsilon = \sqrt{\frac{q.e}{4\pi\varepsilon_0 r m}}$

Portanto: $r = \frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{4\pi\varepsilon_0 r m}{q.e}} \cdot n$, elevando tudo ao quadrado

$r^2 = \frac{4\pi\varepsilon_0 r}{qem}\hbar^2 n^2$

$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0}{qem}\hbar^2 n^2$ →

A menos das constantes cada n faz resultar em um raio.

$n = 1, 2, 3, \ldots$

A fim de testar a hipótese de Bohr, experimentos devem ser realizados. Não se pode medir os raios das órbitas (impossibilidade técnica), mas se pode medir as energias emitidas por um átomo de Hidrogênio. Temos uma equação para o raio quantizado, mas precisamos de uma para a energia quantizada, pois essa pode ser testada.

O procedimento é simples, como segue:

A energia total é $E = K + V$

- V: Energia potencial $V = -\frac{q e}{4\pi\epsilon_0 r}$
- K: Energia cinética do elétron $K = \frac{mv^2}{2}$

Portanto

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{qe}{4\pi\epsilon_0 r}$$

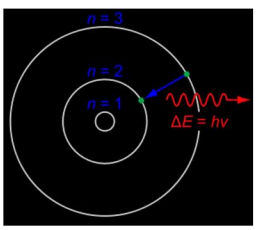
introduzindo o v e o r obtidos anteriormente temos:

$$E = \frac{qe}{2} \frac{qe}{4\pi\epsilon_0 mr} - \frac{qe}{4\pi\epsilon_0 r} = qe\left(\frac{1}{8\pi\epsilon_0} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{qem}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}$$

$$E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q^2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{m}{\hbar^2 n^2}$$

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2}\left(\frac{qe}{4\pi\epsilon_0 \hbar}\right)^2 \cdot \frac{m}{n^2}}$$ → introduzindo valores temos, para o H

$$E_n = -\frac{13{,}6}{n^2}\ eV$$, confirmado experimentalmente.

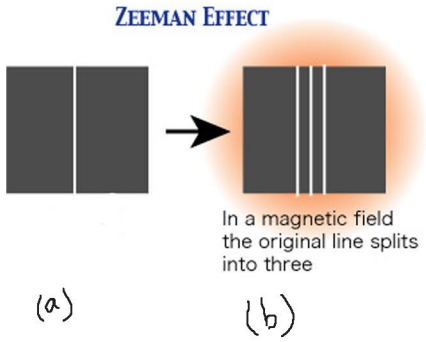


Quando um elétron cai de uma órbita para outra mais próxima ao núcleo, o átomo emite um foton (pulso de luz) cuja energia é equivalente ao salto quântico.

Embora o modelo de Bohr tenha tido sucesso em prever os níveis (cores emitidas) de energia emitidos ou absorvidos dos átomos de um elétron, este modelo falhava em uma série de outras evidências experimentais.

Exemplos:

- Experimentos mais refinados mostravam que as cores emitidas eram não uma única linha mas um conjunto de linhas muito próximas



(a) Emissão prevista no modelo de Bohr

(b) "Olhando" mais de perto percebe-se que na verdade não é uma linha única mas 3 muito próximas não previstas no modelo.

- O modelo de Bohr também não concorda com o princípio de incerteza de Heisemberg, que diz não ser possível determinar com exatidão total qualquer grandeza física. No modelo de Bohr os raios orbitais, as energias, os momentos angulares ... são todos exatos (um valor bem definido para cada n).

- Não concorda com as emissões observadas para átomos com mais de um elétron.

- Não prediz a forma como os elétrons devem ocupar os estados possíveis.

—n—

Erwin Schrödinger: Muitos experimentos evidenciavam uma dualidade no mundo em escala atômica. A saber, em alguns experimentos a luz se mostra como sendo uma onda -- em outros experimentos se mostra como um feixe de partículas.

Einstein explicou o efeito fotoelétrico assumindo a luz como um feixe de partículas cada qual carregando uma energia

$E = h\nu$

⇨ Da relatividade tem-se que $E = pc$ "energia de um fóton é proporcional ao momento linear"

Logo $pc = h\nu$

$p = \frac{h\nu}{c}$, mas c é a velocidade da onda ⇒ $c = \lambda\nu$

Portanto $p = \frac{h\nu}{\lambda\nu}$

$$\boxed{p = \frac{h}{\lambda}}$$

$p = \frac{h}{\lambda}$ ⇒ Diz que um fóton (partícula de massa nula) carregando um momento linear p está associado a uma onda eletromagnética com comprimento de onda λ.

Louis de Broglie, um duque frances, inverteu a relação matemática acima e se perguntou:

$\lambda = \frac{h}{p}$ / Será que qualquer partícula, massiva que seja, carregando um momento linear P pode se comportar como se fosse uma onda?

Pois, físicos experimentais deram início a experimentos que verificaram esta hipótese como verdadeira. Elétrons se comportam sim, como se fossem onda.

Disto vêm novas possibilidades para a tentative de entender o átomo -- "pensa-se" -- pois então os elétrons em um átomo podem se comportar como onda e não como uma partícula do tipo imaginada por Bohr e por todos até aquele momento.

Entra em sena Erwin Schrödinger com sua tentativa de montar uma equação que unisse as duas característica dos entes da natureza, ou seja, algo que seja onda e partícula simultaneamente.

Sua equação, paseada na conservação de energia e nas relações onda/partícula discutidas acima, obtiveram sucesso chegando à relação de Bohr para o átomo de hidrogênio e concordando além de resolver todas as suas falhas.

Equação: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t) + V(r)\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t)$

Em resumo, trata-se de uma equação diferencial. Cada sistema analisado determina uma função para $V(r)$ Inserindo a função $V(r)$ e resolvendo esta equação chega-se na função de onda $\Psi(r,t)$.

A função de onda contem todas as informações do sistema estudado.

Interpretação de Max Born da função de onda:

A função de onda é, em geral, uma função complexa. O módulo da função de onda é dado por $\Psi^*(r,t)\Psi(r,t)$

"complexo conjugado da função X a função, pois assim se obtém um valor real que corresponde ao módulo ao quadrado da função complexa" Este módulo ao quadrado tem uma característica ondulatória e é associado à densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em questão em uma dada região do espaço.