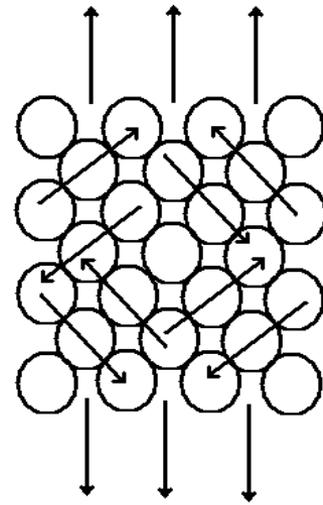


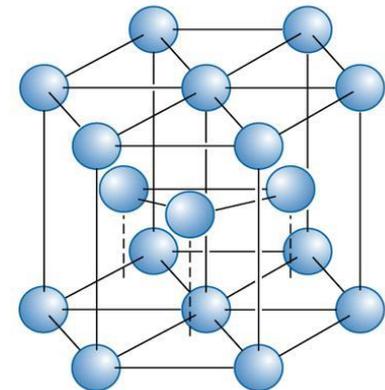
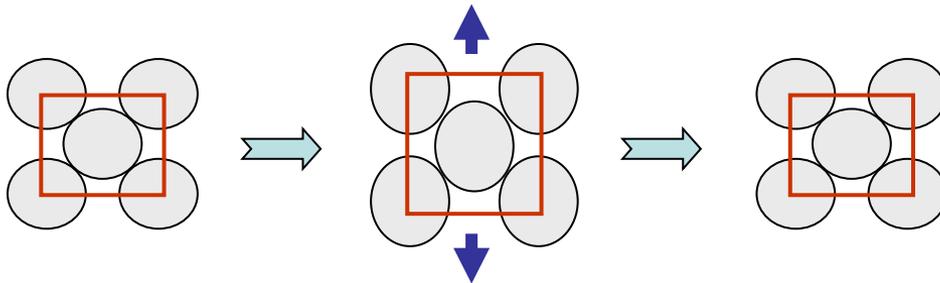
Universidade de São Paulo

Escola de Engenharia de São Carlos

Departamento de Engenharia de Materiais



# *Sólidos Cristalinos*



**Engenharia e Ciência dos Materiais I**

**Prof. Dr. Cassius O. F. T. Ruchert**

**Revisado pelo Prof. Eduardo Bellini Ferreira**

# Objetivos

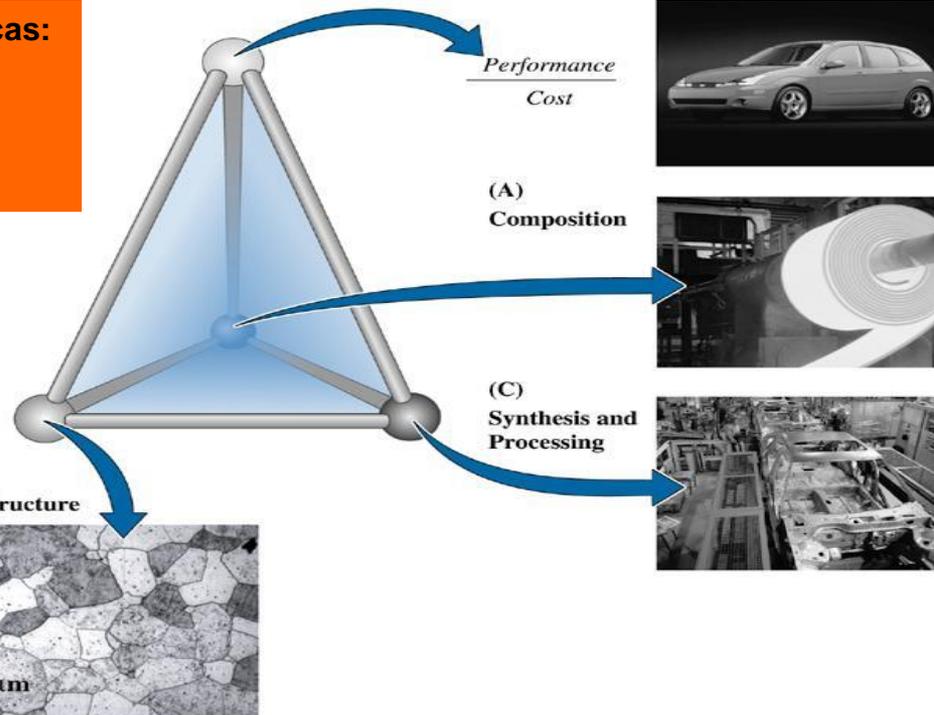
- Estrutura atômica & Ligações interatômicas
- Estrutura dos sólidos cristalinos
- Imperfeições estruturais nos sólidos

# Estrutura e Deformação nos Materiais

- Vários materiais podem ser usados em determinadas aplicações, por exemplo onde resistência mecânica é necessária.
- O sucesso da utilização dos materiais exige que eles satisfaçam não só uma mas um conjunto de propriedades:
  - térmicas, óticas, mecânicas, físicas, químicas, nucleares, etc.
- Tais propriedades estão intimamente ligadas à microestrutura do material.
- A microestrutura é por sua vez resultado da composição, síntese e processamento.

## Propriedades Mecânicas:

- Fadiga
- Fluência
- Fratura
- Resistência



## Teoria:

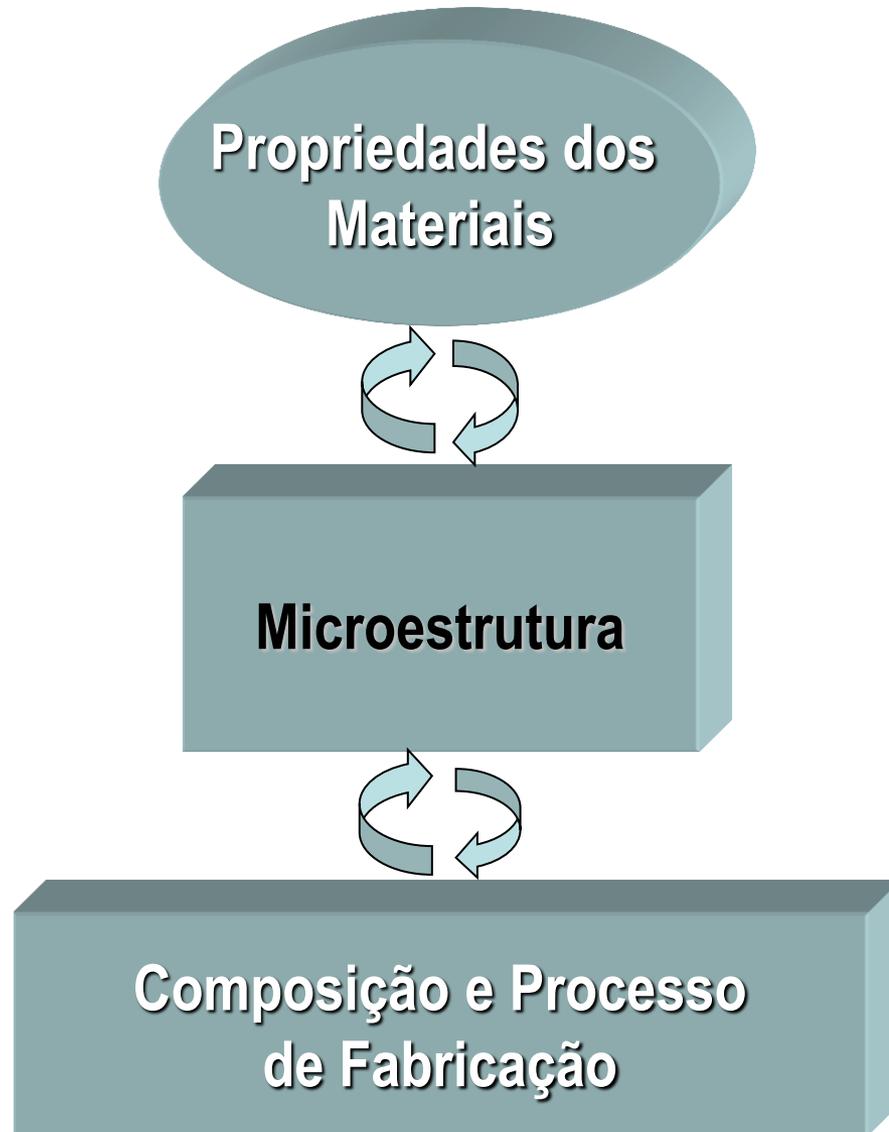
- Mecânica do contínuo
- Computação
- Termodinâmica
- Cinética

## Caracterização:

- Ensaio mecânicos
- Microscopia
- Difração de raios-X

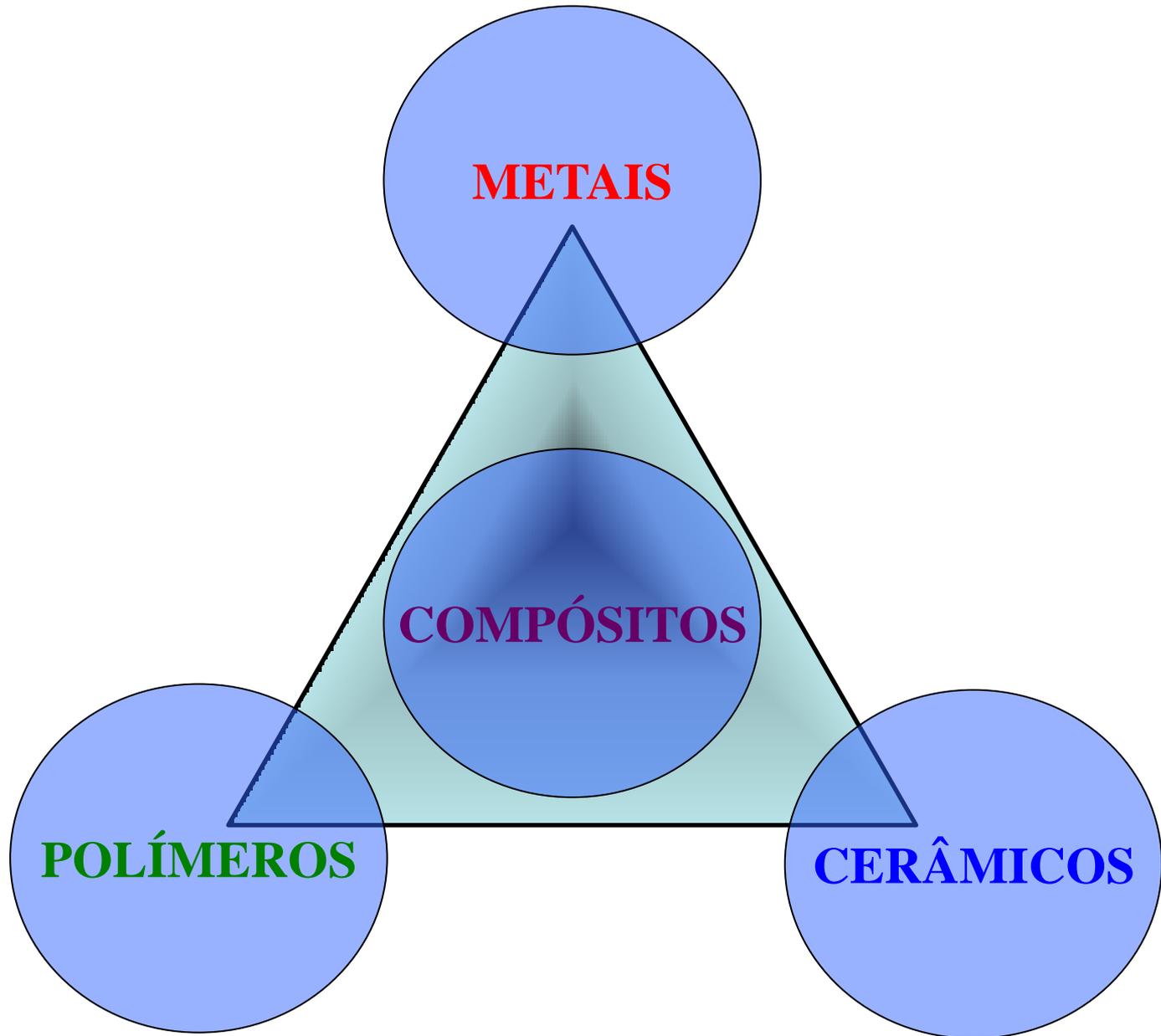
## Processamento:

- Forjamento
- Laminação
- Extrusão
- Fundição

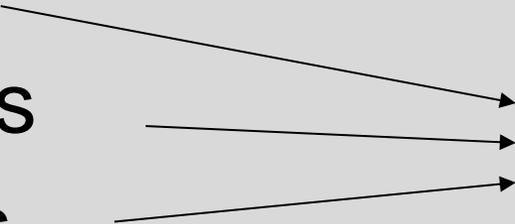


↑  
E  
N  
G  
E  
N  
H  
A  
R  
I  
A  
↓

# FAMÍLIAS DE MATERIAIS DE ENGENHARIA



# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Metais
  - Cerâmicas
  - Polímeros
  - Compósitos
  - Semicondutores
  - Biomateriais
  - Materiais vítreos
  - Grafenos
- Classificação tradicional
- 

## *QUANTOS MATERIAIS DIFERENTES EXISTEM ?*

Entre 40.000 e 80.000, contando variantes  
de tratamento térmico e composição  
de cada material

## ALGUMAS PROPRIEDADES DAS VÁRIAS CATEGORIAS DE MATERIAIS

PROPRIEDADE	METAIS	CERÂMICAS	POLÍMEROS
Densidade (g/cm <sup>3</sup> )	2 a 20	1 a 14	1 a 2,5
Condutividade elétrica	alta	baixa	baixa
Condutividade térmica	alta	baixa	baixa
Ductilidade (%)	4 – 40	<1	2 – 4
Resistência à tração (MPa)	100 – 1500	100 – 400	-
Resistência à compressão (MPa)	100 – 1500	1000 – 5000	-
Tenacidade à fratura (MNm <sup>-3/2</sup> )	10 – 30	1 – 10	2 – 8
Temp. máxima de trabalho (°C)	1000	1800	250
Resistência à corrosão	B a M	A	M
Tipo de ligação	metálica	iônica e covalente	covalente e secundária
Estruturas	CCC, CFC, HC	Cristalina complexa, amorfa, semicristalina	Amorfa ou semicristalina

Os elementos químicos podem também classificar-se em três categorias:

### METAIS

Bons condutores de calor e de electricidade  
Geralmente sólidos à temperatura ambiente

### NÃO - METAIS

Maus condutores de calor e de electricidade  
Menor uniformidade nas suas propriedades do que os metais

### SEMI - METAIS

Propriedades intermédias entre os metais e os não-metais

Número Atômico → 1  
 100794 → Peso Atômico  
**H** → Símbolo Químico  
 Hidrogênio → Nome do Elemento

1A (1)	2A (2)	3A (3)	4A (4)	5A (5)	6A (6)	7A (7)	8A (18)																												
1 100794 <b>H</b> Hidrogênio	2 4,002602 <b>He</b> Hélio	3 6,941 <b>Li</b> Lítio	4 9,012182 <b>Be</b> Berílio	5 10,811 <b>B</b> Boro	6 12,0107 <b>C</b> Carbono	7 14,00674 <b>N</b> Nitrogênio	8 15,9994 <b>O</b> Oxigênio	9 18,99840 <b>F</b> Flúor	10 20,1797 <b>Ne</b> Neônio																										
11 22,989770 <b>Na</b> Sódio	12 24,3050 <b>Mg</b> Magnésio	13 26,98153 <b>Al</b> Alumínio	14 28,0855 <b>Si</b> Silício	15 30,9737 <b>P</b> Fósforo	16 32,006 <b>S</b> Enxofre	17 35,4527 <b>Cl</b> Cloro	18 39,948 <b>Ar</b> Argônio	19 39,0983 <b>K</b> Potássio	20 40,078 <b>Ca</b> Cálcio	21 44,9559 <b>Sc</b> Escândio	22 47,867 <b>Ti</b> Titânio	23 50,9415 <b>V</b> Vanádio	24 51,9661 <b>Cr</b> Cromo	25 54,938 <b>Mn</b> Manganês	26 55,845 <b>Fe</b> Ferro	27 58,9332 <b>Co</b> Cobalto	28 58,6934 <b>Ni</b> Níquel	29 63,546 <b>Cu</b> Cobre	30 65,39 <b>Zn</b> Zinco	31 69,723 <b>Ga</b> Gálio	32 72,61 <b>Ge</b> Germânio	33 74,9216 <b>As</b> Arsênio	34 78,96 <b>Se</b> Selênio	35 79,904 <b>Br</b> Bromo	36 83,8 <b>Kr</b> Criptônio										
37 85,4678 <b>Rb</b> Rubídio	38 87,62 <b>Sr</b> Estrôncio	39 88,905 <b>Y</b> Ítrio	40 91,224 <b>Zr</b> Zircônio	41 92,906 <b>Nb</b> Nióbio	42 95,94 <b>Mo</b> Molibdênio	43 96,049 <b>Tc</b> Tecnécio	44 101,07 <b>Ru</b> Rutênio	45 102,9055 <b>Rh</b> Ródio	46 106,42 <b>Pd</b> Paládio	47 107,8682 <b>Ag</b> Prata	48 112,411 <b>Cd</b> Cádmio	49 114,818 <b>In</b> Índio	50 118,71 <b>Sn</b> Estanho	51 121,75 <b>Sb</b> Antimônio	52 127,6 <b>Te</b> Telúrio	53 126,9044 <b>I</b> Iodo	54 131,29 <b>Xe</b> Xenônio	55 132,90545 <b>Cs</b> Césio	56 137,327 <b>Ba</b> Bário	57 71 *	72 178,49 <b>Hf</b> Háfnio	73 180,947 <b>Ta</b> Tântalo	74 183,84 <b>W</b> Tungstênio	75 186,207 <b>Re</b> Rênio	76 190,23 <b>Os</b> Ósmio	77 192,217 <b>Ir</b> Iridio	78 195,078 <b>Pt</b> Platina	79 196,966 <b>Au</b> Ouro	80 200,59 <b>Hg</b> Mercúrio	81 204,3833 <b>Tl</b> Tálio	82 207,2 <b>Pb</b> Chumbo	83 208,9803 <b>Bi</b> Bismuto	84 210 <b>Po</b> Polônio	85 210 <b>At</b> Astató	86 222 <b>Rn</b> Radônio
87 223,0197 <b>Fr</b> Frâncio	88 226,02 <b>Ra</b> Rádio	89 103 **	104 261,11 <b>Rf</b> Ruterfórdio	105 262,11 <b>Db</b> Dúbnio	106 263,11 <b>Sg</b> Seabórgio	107 262,12 <b>Bh</b> Bóhrio	108 269 <b>Hs</b> Hássio	109 268 <b>Mt</b> Meitnênio	110 269 <b>Uun</b> Unúnio	111 272 <b>Uuu</b> Unúmbio	112 277 <b>Uub</b> Anúmbio	113 204,3833 <b>Tl</b> Tálio	114 207,2 <b>Pb</b> Chumbo	115 208,9803 <b>Bi</b> Bismuto	116 210 <b>Po</b> Polônio	117 210 <b>At</b> Astató	118 222 <b>Rn</b> Radônio	119 223,0197 <b>Fr</b> Frâncio	120 226,02 <b>Ra</b> Rádio	121 227 <b>Ac</b> Actínio	122 232,0381 <b>Th</b> Tório	123 231,0358 <b>Pa</b> Protactínio	124 238,0289 <b>U</b> Urânio	125 237 <b>Np</b> Netúnio	126 244 <b>Pu</b> Plutônio	127 243 <b>Am</b> Americio	128 247 <b>Cm</b> Cúrio	129 247 <b>Bk</b> Berquélcio	130 251 <b>Cf</b> Califórnio	131 252 <b>Es</b> Einstênio	132 257 <b>Fm</b> Férmio	133 258 <b>Md</b> Mendelévio	134 259 <b>No</b> Nobélio	135 262 <b>Lr</b> Laurêncio	
136 138,9055 <b>La</b> Lantânio	137 140,116 <b>Ce</b> Cério	138 140,9076 <b>Pr</b> Praseodímio	139 144,24 <b>Nd</b> Neodímio	140 145,7 <b>Pm</b> Promécio	141 150,36 <b>Sm</b> Samário	142 151,964 <b>Eu</b> Európio	143 157,25 <b>Gd</b> Gadolínio	144 158,9253 <b>Tb</b> Térbio	145 162,50 <b>Dy</b> Dispósio	146 164,9303 <b>Ho</b> Hólmio	147 167,26 <b>Er</b> Érbio	148 168,9342 <b>Tm</b> Túlio	149 173,04 <b>Yb</b> Intérbio	150 174,967 <b>Lu</b> Lutécio																					

■ Hidrogênio

■ Metais

■ Semi-metais

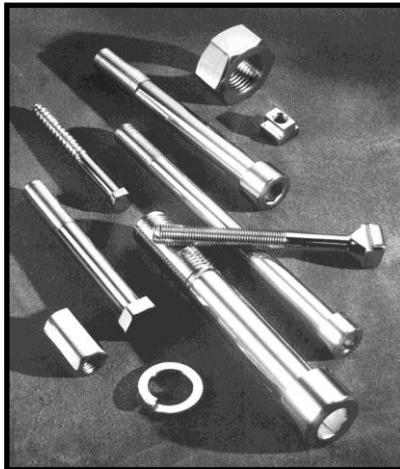
■ Não-metais

■ Gases nobres

# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS



- Metais



- São formados por um ou uma combinação de elementos metálicos.
- Os elétrons não estão ligados a nenhum átomo em particular e por isso são bons condutores de calor e eletricidade
- Não são transparentes à luz visível
- Têm aparência brilhante e espelhada quando polidos
- Geralmente têm alta resistência mecânica e são deformáveis
- São muito utilizados para aplicações estruturais

# Metais

- **Vantagens**: resistência mecânica, rigidez, tenacidade à fratura, temperatura e ambiente de uso, formabilidade/ductilidade, condutividade térmica e elétrica, reciclagem;
- **Desvantagens**: processamento, corrosão, reatividade, densidade (propriedades específicas)

# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Cerâmicas



- São geralmente uma combinação de elementos metálicos e não-metálicos
- Geralmente são óxidos, nitretos e carbetos
- São geralmente isolantes de calor e eletricidade
- São mais resistentes a altas temperaturas e a ambientes severos que metais e polímeros
- Com relação às propriedades mecânicas, as cerâmicas são duras, porém frágeis
- Em geral são leves

# Cerâmicas

- **Vantagens**: resistência à compressão, rigidez, temperatura e agressividade do ambiente de serviço, densidade (propriedades específicas), isolantes térmicos e elétricos;
- **Desvantagens**: resistência à tração, tenacidade à fratura (frágeis), processamento, custo, reciclagem

# OS MATERIAS CERÂMICOS NA TABELA PERIÓDICA

Número Atômico → 1  
 100794 → Peso Atômico  
**H** → Símbolo Químico  
 Hidrogênio → Nome do Elemento

1A (1)	2A (2)											3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)
1 100794 <b>H</b> Hidrogênio																	2 4,002602 <b>He</b> Hélio
3 6,941 <b>Li</b> Lítio	4 9,012182 <b>Be</b> Berílio											5 10,811 <b>B</b> Boro	6 12,0107 <b>C</b> Carbono	7 14,00674 <b>N</b> Nitrogênio	8 15,9994 <b>O</b> Oxigênio	9 18,99840 <b>F</b> Flúor	10 20,1797 <b>Ne</b> Neônio
11 22,989770 <b>Na</b> Sódio	12 24,3050 <b>Mg</b> Magnésio	3B (3)	4B (4)	5B (5)	6B (6)	7B (7)	8B (8)	9B (9)	10B (10)	11B (11)	12B (12)	13 26,98153 <b>Al</b> Alumínio	14 28,0855 <b>Si</b> Silício	15 30,9737 <b>P</b> Fósforo	16 32,006 <b>S</b> Enxofre	17 35,4527 <b>Cl</b> Cloro	18 39,948 <b>Ar</b> Argônio
19 39,0983 <b>K</b> Potássio	20 40,078 <b>Ca</b> Cálcio	21 44,9559 <b>Sc</b> Escândio	22 47,867 <b>Ti</b> Titânio	23 50,9415 <b>V</b> Vanádio	24 51,9661 <b>Cr</b> Cromo	25 54,938 <b>Mn</b> Manganês	26 55,845 <b>Fe</b> Ferro	27 58,9332 <b>Co</b> Cobalto	28 58,6934 <b>Ni</b> Níquel	29 63,546 <b>Cu</b> Cobre	30 65,39 <b>Zn</b> Zinco	31 69,723 <b>Ga</b> Gálio	32 72,61 <b>Ge</b> Germânio	33 74,9216 <b>As</b> Arsênio	34 78,96 <b>Se</b> Selênio	35 79,904 <b>Br</b> Bromo	36 83,8 <b>Kr</b> Criptônio
37 85,4678 <b>Rb</b> Rubídio	38 87,62 <b>Sr</b> Estrôncio	39 88,905 <b>Y</b> Ítrio	40 91,224 <b>Zr</b> Zircônio	41 92,906 <b>Nb</b> Nióbio	42 95,94 <b>Mo</b> Molibdênio	43 96,049 <b>Tc</b> Tecnécio	44 101,07 <b>Ru</b> Rutênio	45 102,9055 <b>Rh</b> Ródio	46 106,42 <b>Pd</b> Paládio	47 107,8682 <b>Ag</b> Prata	48 112,411 <b>Cd</b> Cádmio	49 114,818 <b>In</b> Índio	50 118,71 <b>Sn</b> Estanho	51 121,75 <b>Sb</b> Antimônio	52 127,6 <b>Te</b> Telúrio	53 126,9044 <b>I</b> Iodo	54 131,29 <b>Xe</b> Xenônio
55 132,90545 <b>Cs</b> Césio	56 137,327 <b>Ba</b> Bário	57 71 *	72 178,49 <b>Hf</b> Háfnio	73 180,947 <b>Ta</b> Tântalo	74 183,84 <b>W</b> Tungstênio	75 186,207 <b>Re</b> Rênio	76 190,23 <b>Os</b> Ósmio	77 192,217 <b>Ir</b> Iródio	78 195,078 <b>Pt</b> Platina	79 196,966 <b>Au</b> Ouro	80 200,59 <b>Hg</b> Mercúrio	81 204,3833 <b>Tl</b> Tálio	82 207,2 <b>Pb</b> Chumbo	83 208,9803 <b>Bi</b> Bismuto	84 210 <b>Po</b> Polônio	85 210 <b>At</b> Astato	86 222 <b>Rn</b> Radônio
87 223,0197 <b>Fr</b> Frâncio	88 226,02 <b>Ra</b> Rádio	89 **	104 261,11 <b>Rf</b> Rutherfordório	105 262,11 <b>Db</b> Dúbnio	106 263,11 <b>Sg</b> Seabórgio	107 262,12 <b>Bh</b> Bóhrio	108 269 <b>Hs</b> Hássio	109 268 <b>Mt</b> Meitnênio	110 269 <b>Uun</b> Unúnio	111 272 <b>Uuu</b> Unúmbio	112 277 <b>Uub</b> Anúmbio						

*	138,9055 57 <b>La</b> Lantânio	140,116 58 <b>Ce</b> Cério	140,9076 59 <b>Pr</b> Praseodímio	144,24 60 <b>Nd</b> Neodímio	145,7 61 <b>Pm</b> Promécio	150,36 62 <b>Sm</b> Samário	151,964 63 <b>Eu</b> Európio	157,25 64 <b>Gd</b> Gadolínio	158,9253 65 <b>Tb</b> Térbio	162,50 66 <b>Dy</b> Dispósio	164,9303 67 <b>Ho</b> Hólmio	167,26 68 <b>Er</b> Érbio	168,9342 69 <b>Tm</b> Túlio	173,04 70 <b>Yb</b> Íterbio	174,967 71 <b>Lu</b> Lutécio
**	227 89 <b>Ac</b> Actínio	232,0381 90 <b>Th</b> Tório	231,0358 91 <b>Pa</b> Protactínio	238,0289 92 <b>U</b> Urânio	237 93 <b>Np</b> Netúnio	244 94 <b>Pu</b> Plutônio	243 95 <b>Am</b> Americío	243 96 <b>Cm</b> Cúrio	247 97 <b>Bk</b> Berquécio	247 98 <b>Cf</b> Califórnio	251 99 <b>Es</b> Einstênio	252 100 <b>Fm</b> Férmio	258 101 <b>Md</b> Mendeléio	259 102 <b>No</b> Nobélio	262 103 <b>Lr</b> Laurêncio

■ Hidrogênio    
 ■ Metais    
 ■ Semi-metais    
 ■ Não-metais    
 ■ Gases nobres

Cerâmicas são constituídas de **metais & não-metais** ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), **metais & semi-metais** ( $\text{MoSi}_2$ ), e **semi-metais & não-metais** ( $\text{BN}$ ,  $\text{SiC}$ ,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ).

# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Polímeros

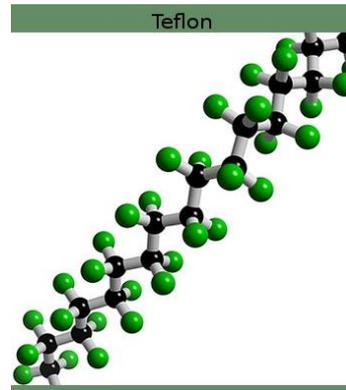


- São geralmente compostos orgânicos baseados em carbono, hidrogênio e outros elementos não-metálicos
- São constituídos de moléculas muito grandes (macromoléculas)
- Tipicamente esses materiais apresentam baixa densidade e podem ser extremamente flexíveis
- Materiais poliméricos incluem plásticos e borrachas

# Polímeros

- **Vantagens**: custo, processabilidade/fabricação, resistência à corrosão, densidade (propriedades específicas), isolantes térmicos e elétricos, ductilidade dos termo-plásticos, reciclagem;
- **Desvantagens**: resistência mecânica, rigidez, temperatura e meio de aplicação (UV e solventes), fragilidade dos termo-rígidos

# Os polímeros na tabela periódica

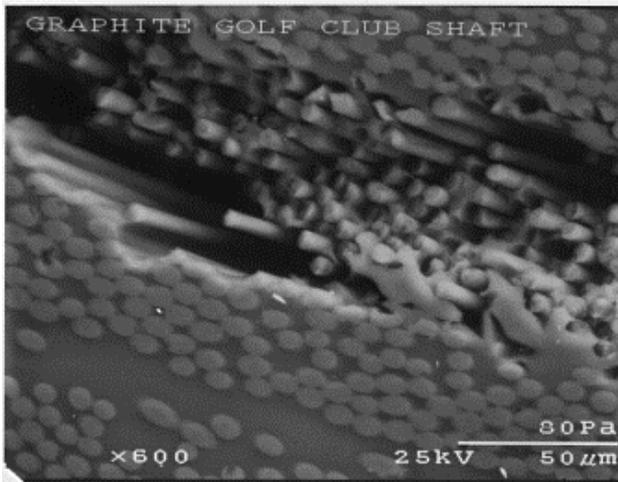


IA																	D	
1	IIA										III A IV A V A VI A VII A					2		
H											B	C	N	O	F	Ne		
3	4											5	6	7	8	9	10	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
11	12	VIII										13	14	15	16	17	18	
Na	Mg	II B	IV B	V B	VI B	VII B	Cr	Co	Ni	Cu	Zn	II B	Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31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

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	95	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

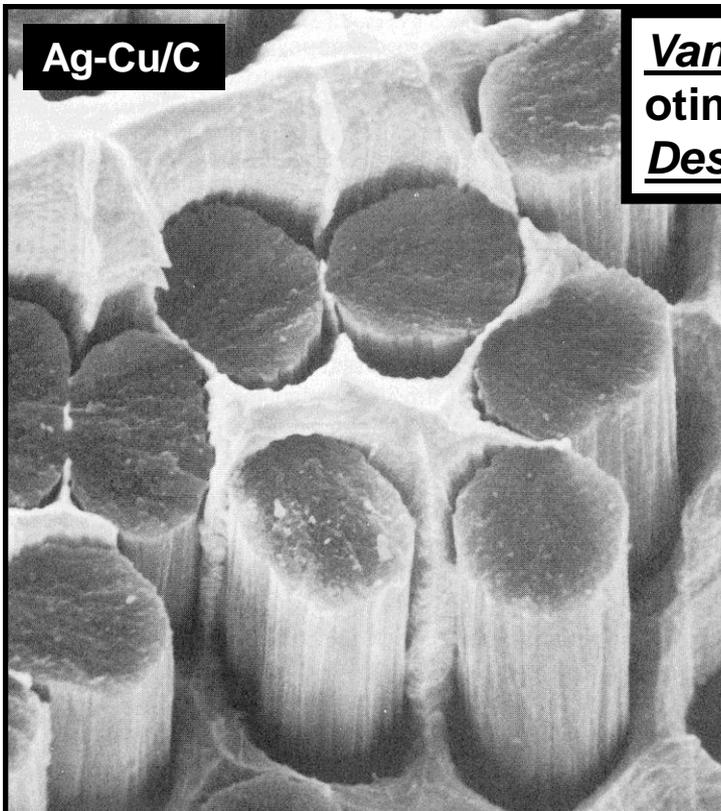
# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Compósitos



- São constituídos de mais de um tipo de material, insolúveis entre si.
- Os compósitos são “desenhados” para apresentarem a combinação das melhores características de cada material constituinte
- Muitos dos recentes desenvolvimentos em materiais envolvem materiais compósitos
- Um exemplo clássico é o compósito de matriz polimérica com fibra de vidro. O material compósito apresenta a resistência da fibra de vidro associado à flexibilidade do polímero

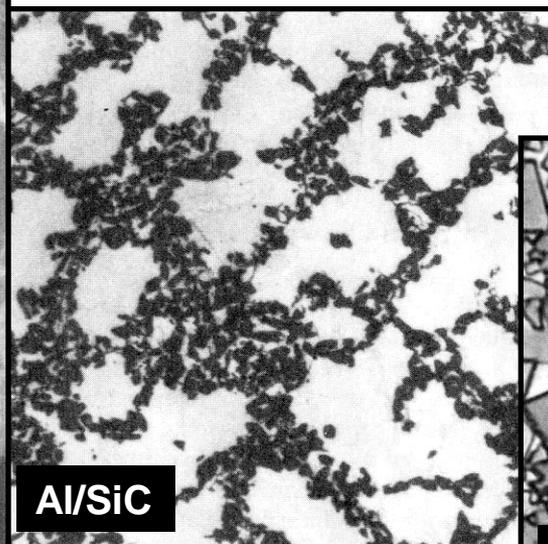
Ag-Cu/C



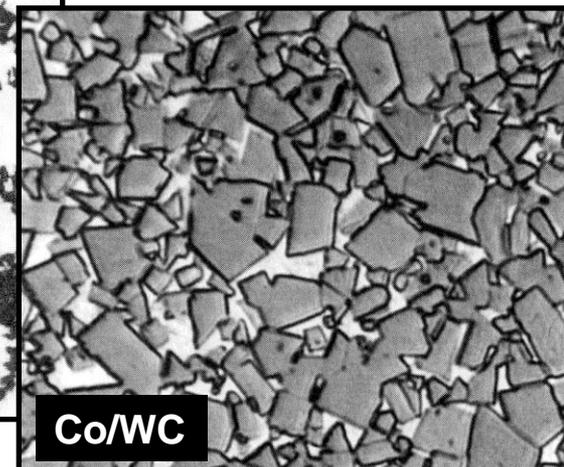
**Vantagens:** adequação ao uso (compatibilização-otimização de propriedades individuais);  
**Desvantagens:** processamento, custo, reciclagem

## COMPÓSITOS

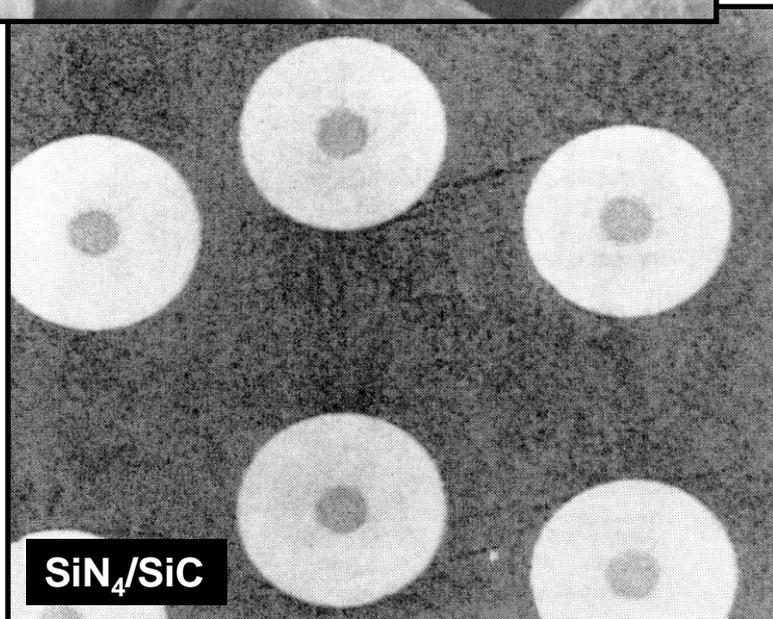
Al/SiC



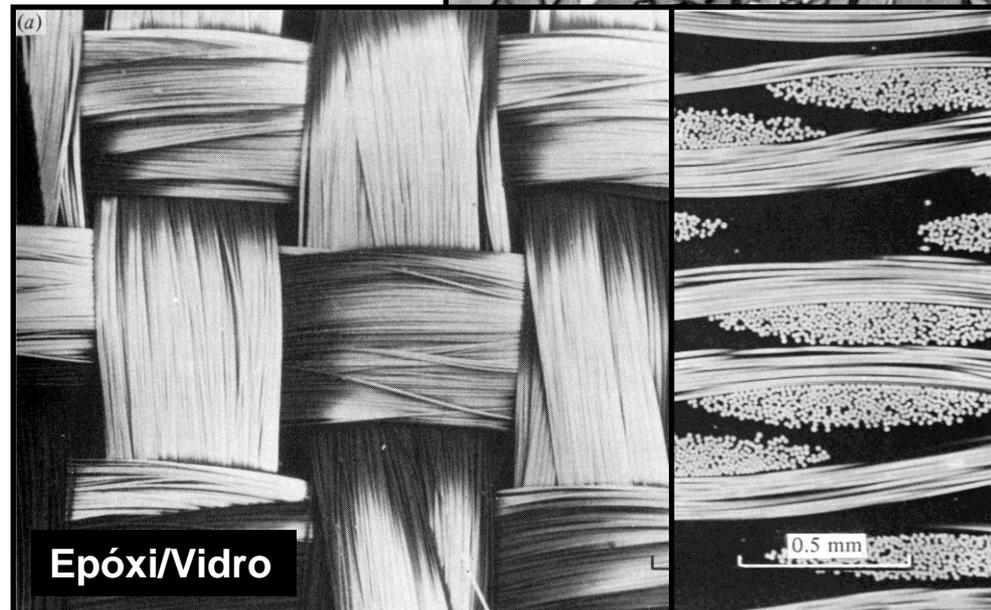
Co/WC



SiN<sub>4</sub>/SiC

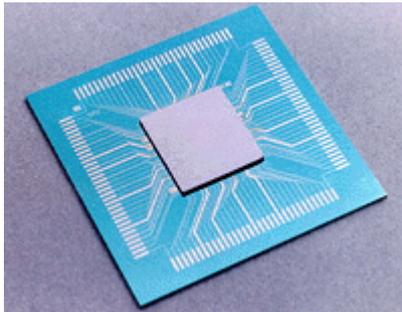


Epóxi/Vidro



# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Semicondutores



- Apresentam propriedades elétricas que são intermediárias entre metais e isolantes
- Suas características elétricas são extremamente sensíveis à presença de pequenas quantidades de impurezas, cuja concentração pode ser controlada em pequenas regiões do material (ex.: junções p-n)
- Os semicondutores tornaram possível o advento do circuito integrado, que revolucionou as indústrias de eletrônica e computadores
- Ex: Si, Ge, GaAs, InSb, GaN, CdTe

# CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Biomateriais



- Biomateriais são empregados em componentes para implantes de partes em seres humanos
- Esses materiais não devem produzir substâncias tóxicas e devem ser compatíveis com o tecido humano (isto é, não deve causar rejeição).
- Metais, cerâmicos, compósitos e polímeros podem ser usados como biomateriais.

# **LIGAÇÕES ATÔMICAS**

- **Ligações interatômicas primárias:**

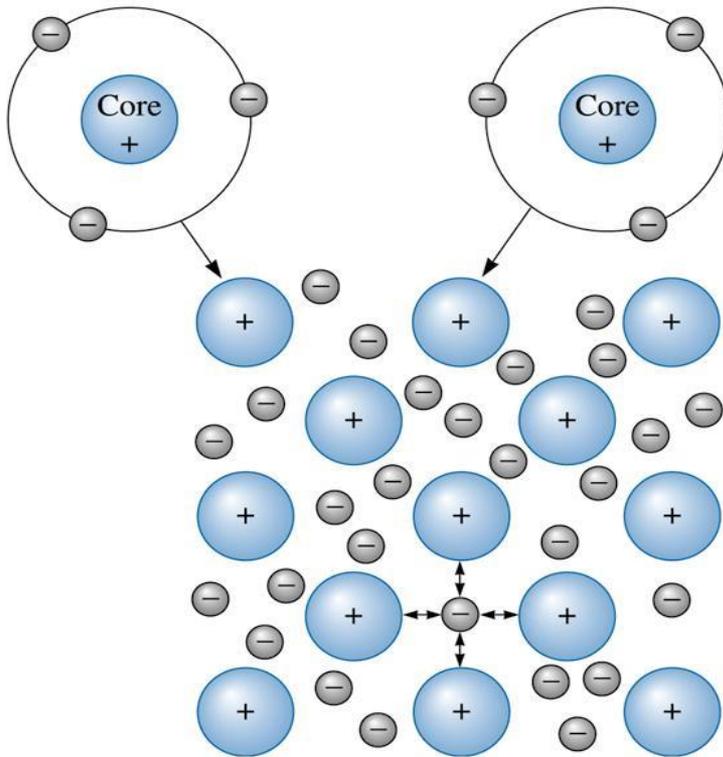
- **Iônica, Covalente, Metálica.**

- **Ligações interatômicas secundárias:**

- **Van der Waals, Pontes de Hidrogênio**

# LIGAÇÃO METÁLICA

- ÁTOMOS MANTIDOS UNIDOS E COESOS PELA ATRAÇÃO MÚTUA ENTRE NÚCLEOS POSITIVOS E NÚVEM ELÉTRONS NEGATIVOS
- ELÉTRONS LIVRE  $\Rightarrow$  ÓTIMAS CONDUTIVIDADES ELÉTRICA E TÉRMICA

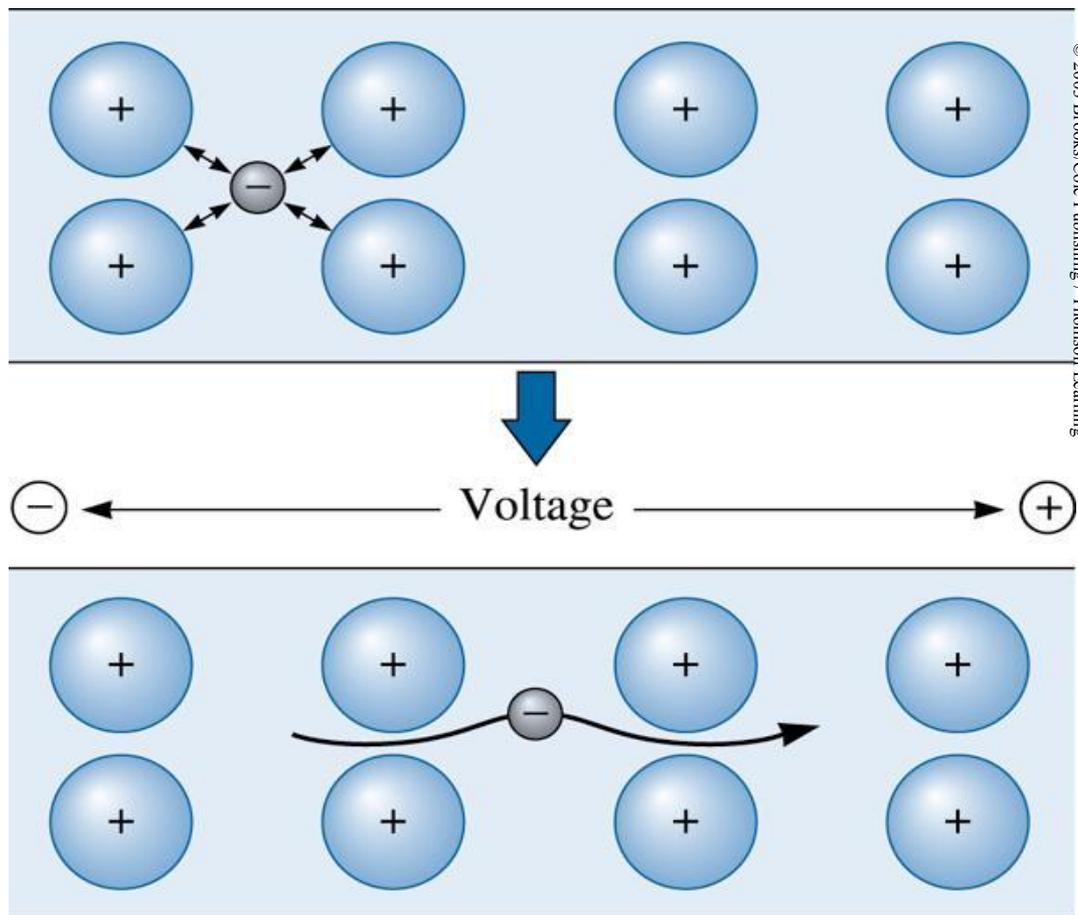


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

**As ligações metálicas se formam quando os átomos têm seus elétrons de valência fracamente ligados aos núcleos, e formam uma nuvem que é compartilhada por todos os átomos do material.**

**As cargas positivas dos núcleos dos átomos ficam mutuamente atraídas à carga negativa da nuvem.**

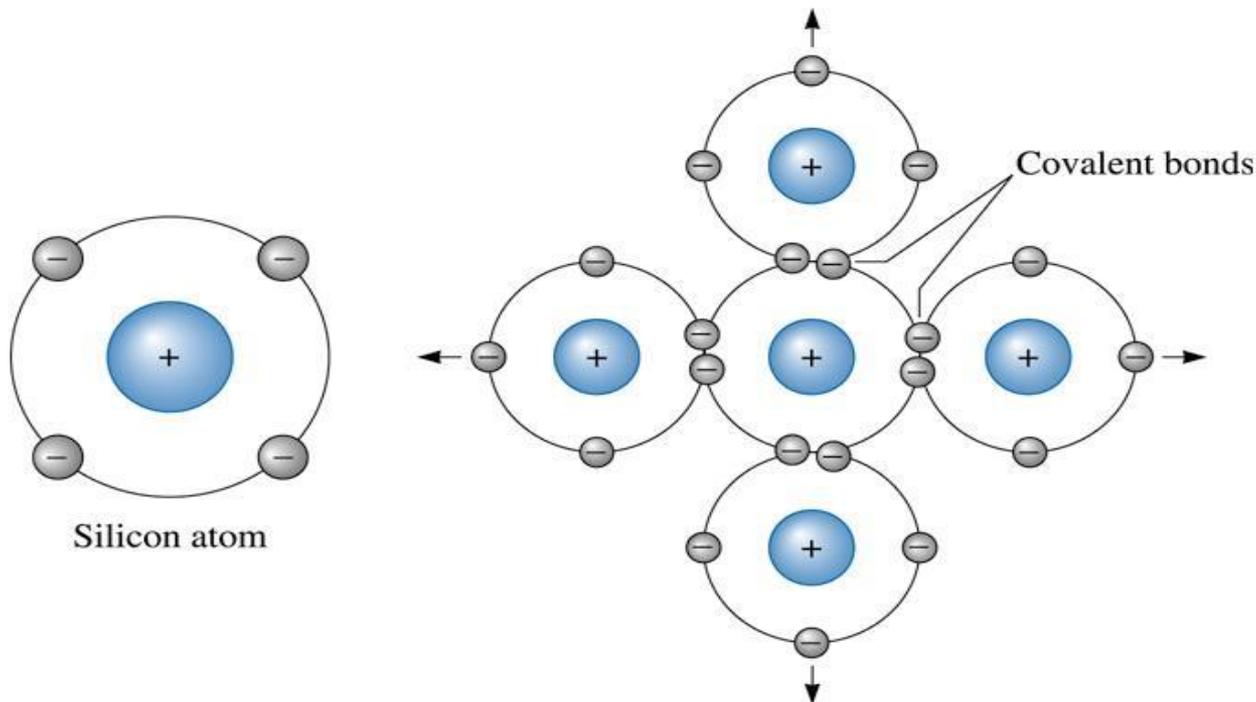
# LIGAÇÃO METÁLICA



**Quando uma voltagem é aplicada ao metal, os elétrons da nuvem comum aos átomos podem mover-se facilmente e criar uma corrente.**

# LIGAÇÃO COVALENTE

- ESTABILIDADE É ADQUIRIDA APÓS O COMPARTILHAMENTO DE ELÉTRONS ENTRE ÁTOMOS ADJACENTES (2 OU 8 ELÉTRONS DE VALÊNCIA = ESTABILIDADE)
- LIGAÇÃO ALTAMENTE DIRECIONAL E RÍGIDA  $\Rightarrow$  FRAGILIDADE DAS CERÂMICOS E POLÍMEROS TERMO-RÍGIDOS
- CONDUTIVIDADES ELÉTRICA E TÉRMICA POBRES  $\Rightarrow$  QUEBRA DAS FORTES LIGAÇÕES COVALENTE PARA LIBERAÇÃO DE ELÉTRONS
- PODEM SER MUITO FORTES COMO NO DIAMANTE (ALTO PONTO FUSÃO  $3550^{\circ}\text{C}$ , DURO) OU PODEM SER MUITO FRACAS COMO NO BISMUTO (FUNDE A  $270^{\circ}\text{C}$ ).

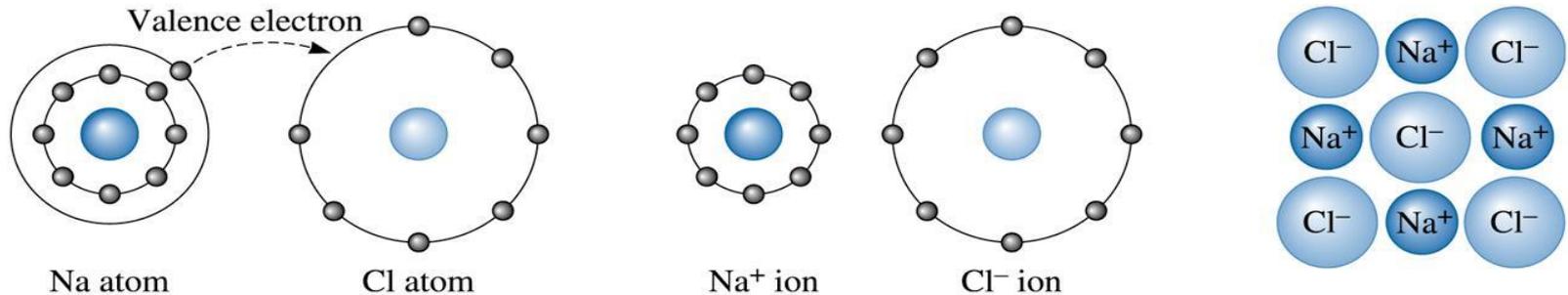


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

O Si, com valência 4+, necessita de 4 ligações covalentes entre si.

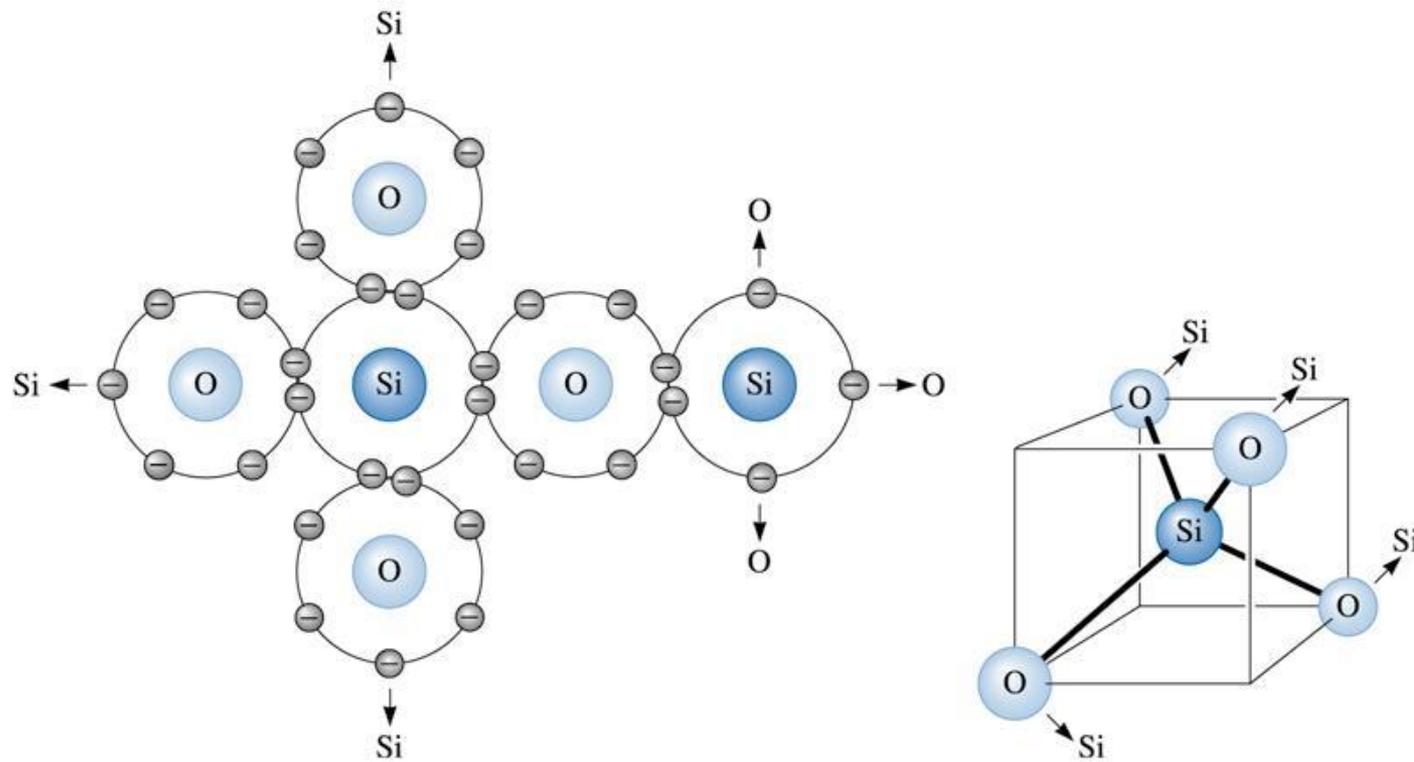
# LIGAÇÃO IÔNICA

- ÁTOMOS FORMAM ÍONS QUANDO PERDEM OU GANHAM ELÉTRONS
- CÁTION É POSITIVO ( $\text{Na}^+$ ) E ÂNION É NEGATIVO ( $\text{Cl}^-$ )
- LIGAÇÃO IÔNICA SE FORMA PELA ATRAÇÃO ELETROSTÁTICA ENTRE OS ÍONS
- CONDUTIVIDADE ELÉTRICA POBRE  $\Rightarrow$  MOVIMENTO IÔNICO



**Uma ligação iônica é criada entre dois átomos com muito diferentes eletronegatividades. Quando o Na doa seu elétron de valência para o Cl, cada elemento se torna um íon, a atração ocorre e a ligação iônica é formada.**

As ligações predominantes nos materiais cerâmicos são iônicas, covalentes ou uma mistura das duas (parcialmente iônica e covalente).

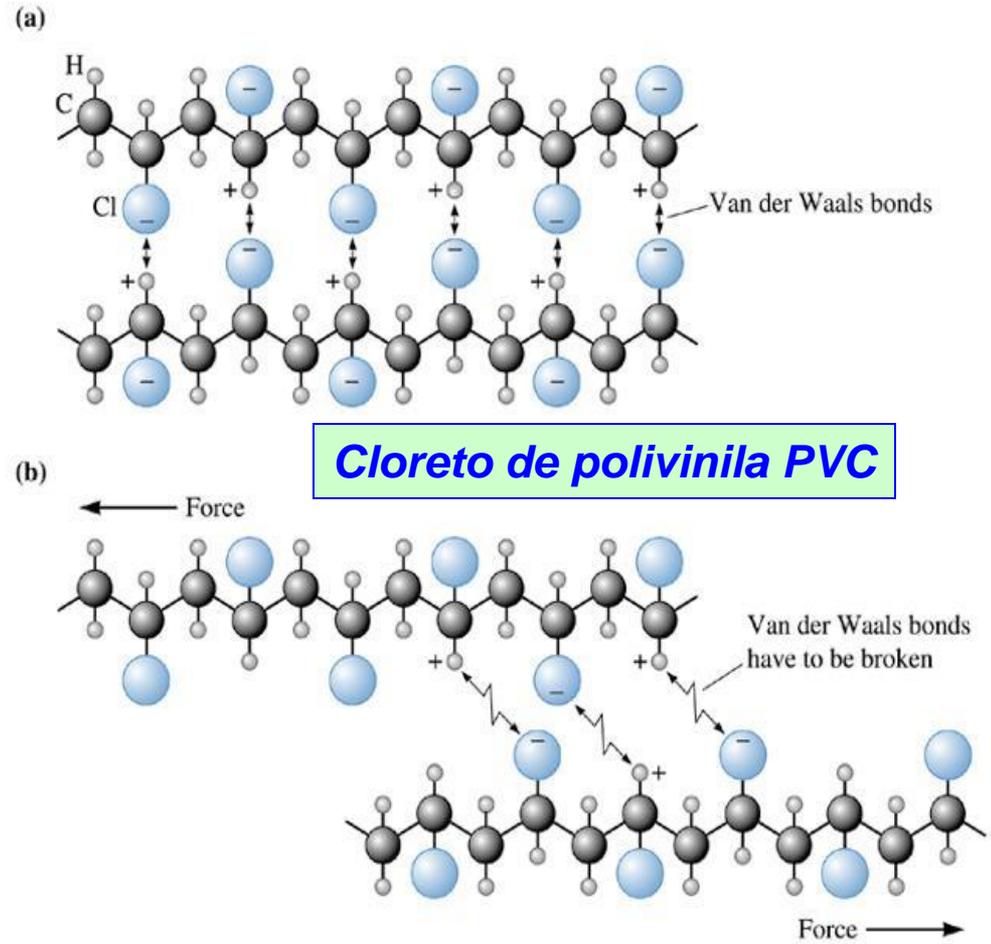


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

**A estrutura tetraédrica da sílica (SiO<sub>2</sub>), que contém ligações parcialmente iônicas e parcialmente covalentes entre os átomos de Si e de O.**

# LIGAÇÕES MOLECULARES

- (a) No cloreto de polivinila (PVC), os átomos de Cl unidos à cadeia do polímero tem uma carga negativa e os átomos de H são positivamente carregados. A cadeia é ligada fracamente por ligações de van der Waals. Esta ligação extra faz o PVC mais rígido,
- (b) Quando uma força é aplicada ao polímero, as ligações de van der Waals são quebradas e as cadeias escorregam umas sobre as outras.



## ***ENERGIA DAS LIGAÇÕES PRIMÁRIAS E SECUNDÁRIAS***

<b>Bond</b>	<b>Binding Energy (kcal/mol)</b>
Ionic	150–370
Covalent	125–300
Metallic	25–200
Van der Waals	< 10

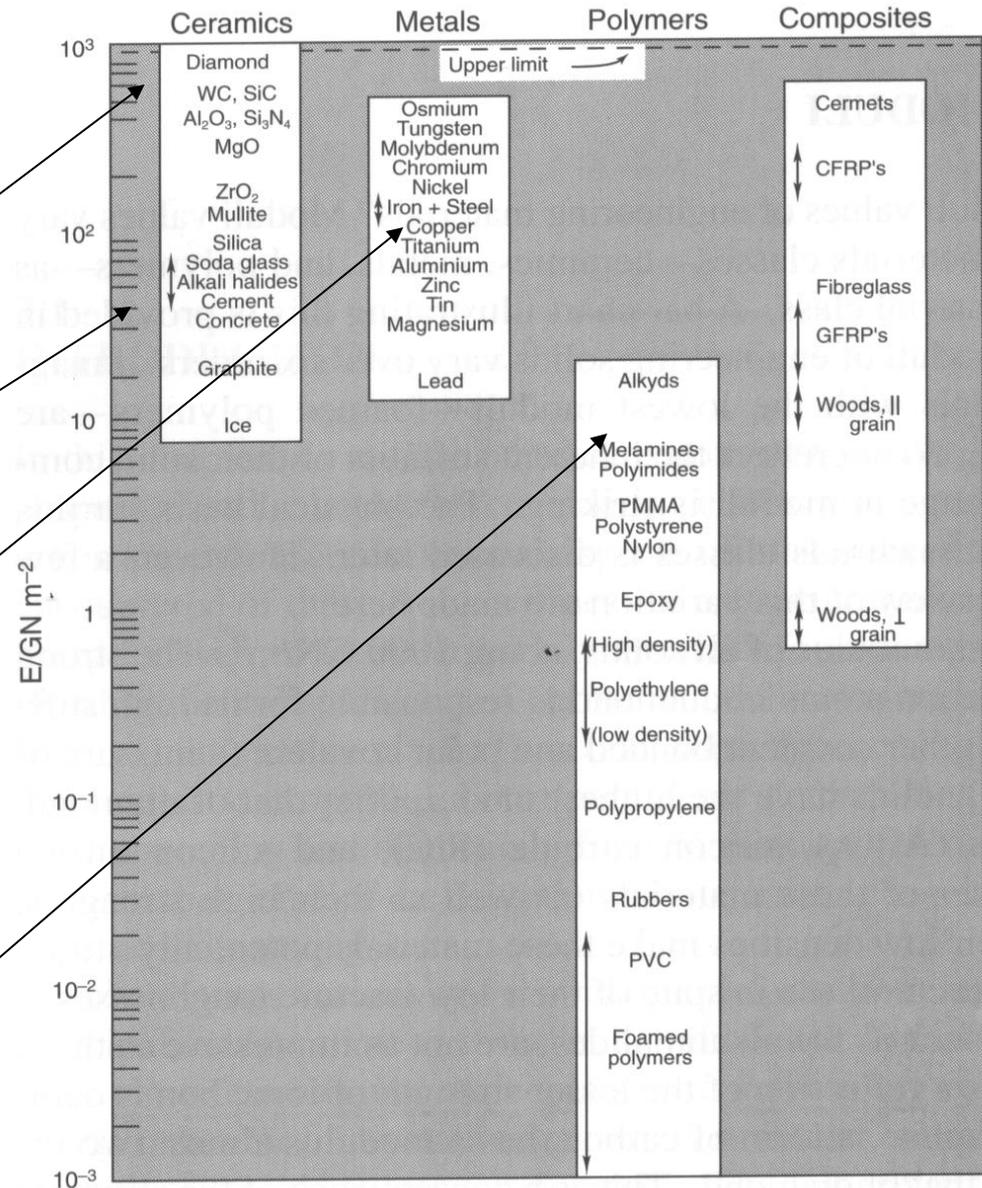
# Propriedades Elásticas dos Materiais

Forte ligações covalentes

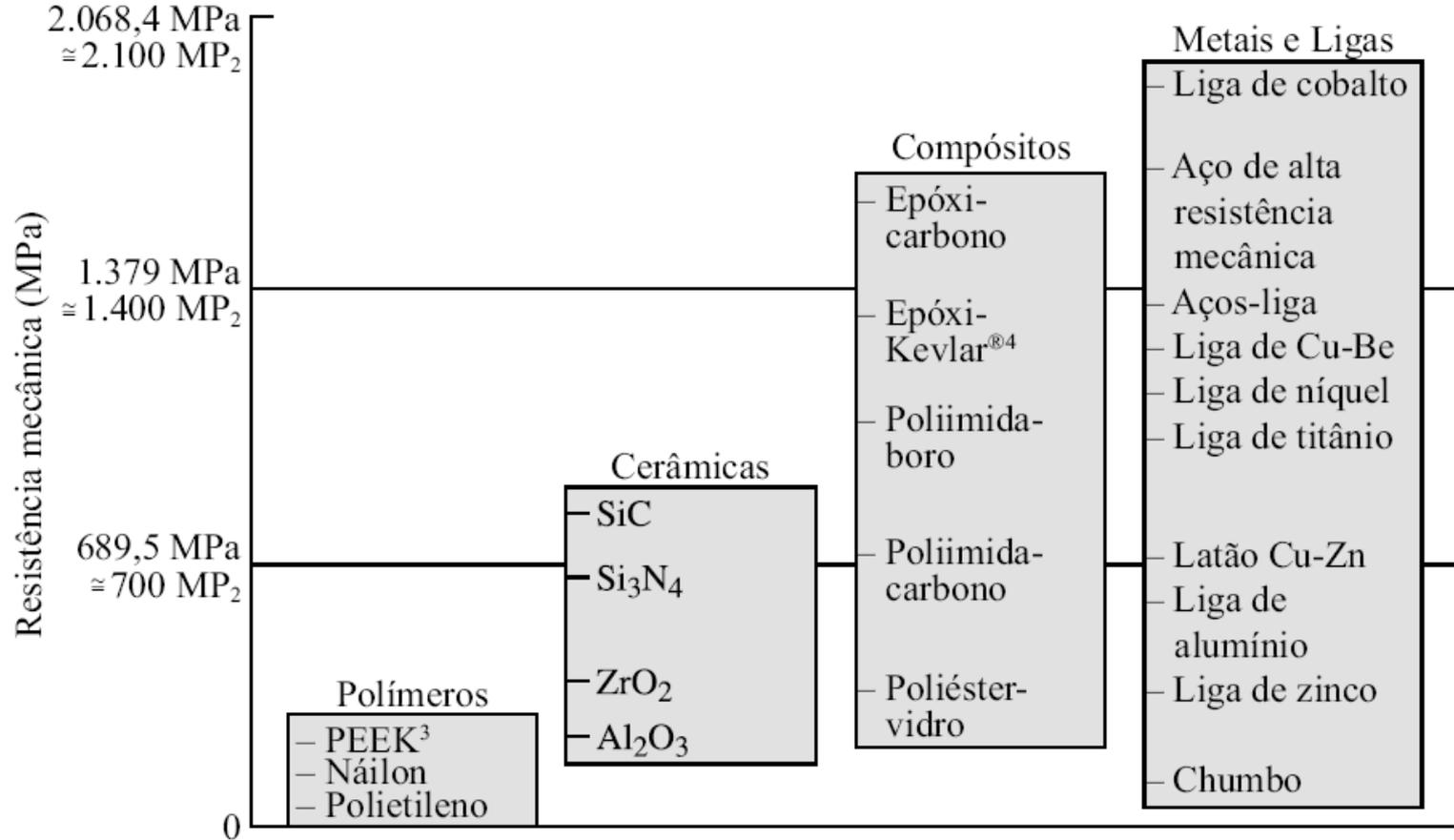
As ligações iônicas não são tão fortes quanto as covalentes.

As ligações metálicas são fortes, mas não tanto quanto as covalentes. Os metais refratários possuem os maiores Módulos de Elasticidade. Existe uma correlação da força de ligação com o ponto de fusão.

Os maiores valores de E para os polímeros são parecidos com os mais baixos dos metais.

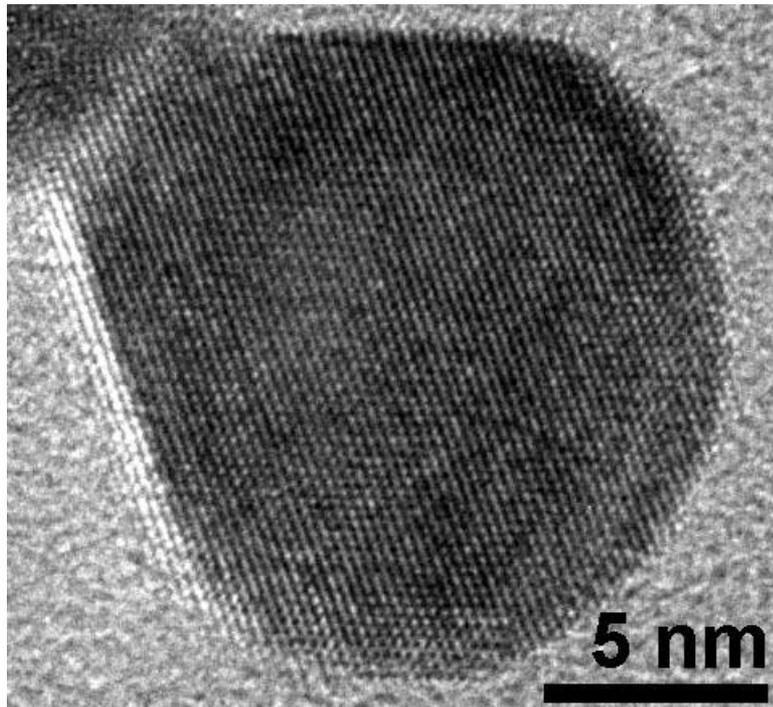


# RESISTÊNCIA MECÂNICA DAS VÁRIAS CATEGORIAS DE MATERIAIS



# ESTRUTURA DOS MATERIAIS

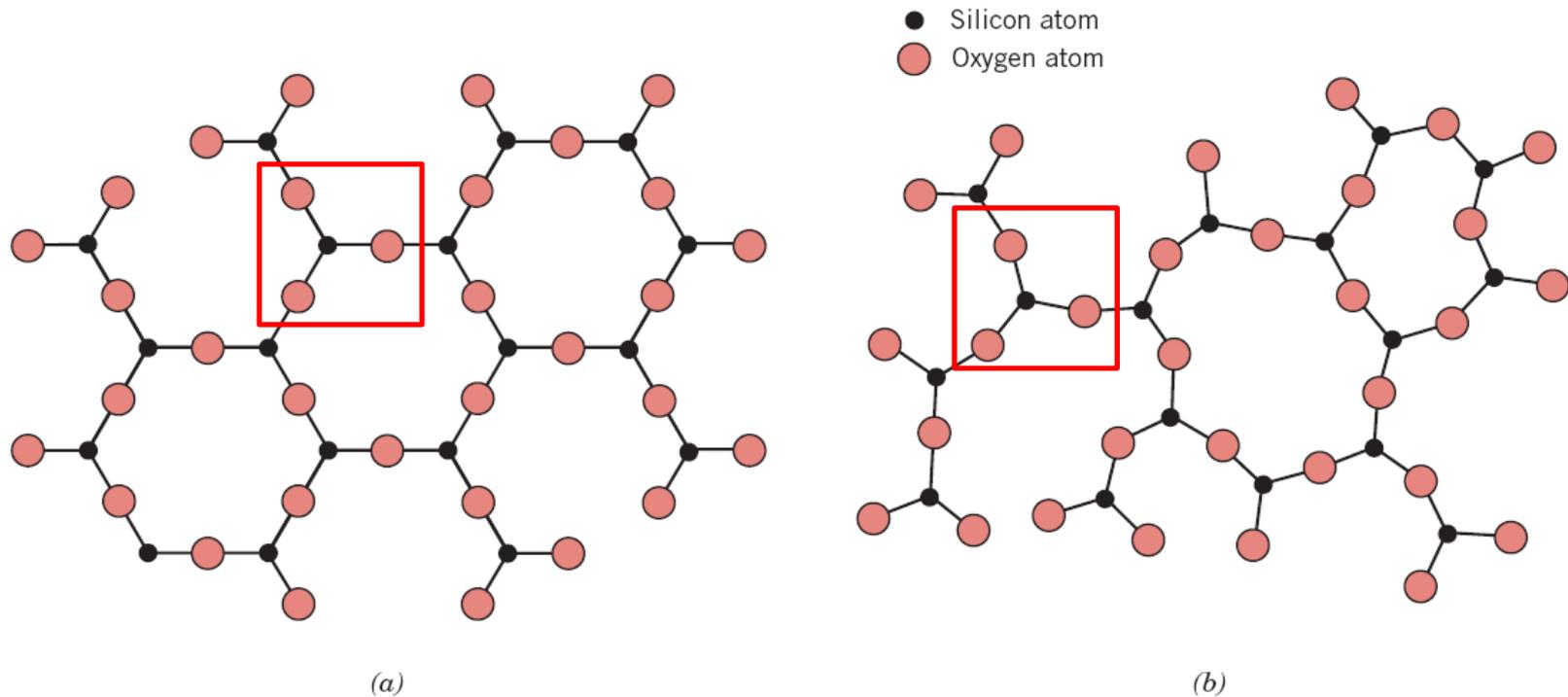
- Materiais sólidos em equilíbrio são cristalinos, ou seja, a estrutura possui **ordem de longo alcance** em nível atômico
- Cristalinidade não existe em gases ou líquidos
- Metais, cerâmicas e polímeros podem ou não ser cristalinos
  - Metais são normalmente cristalinos, mas se resfriados em taxas muito altas podem adquirir estrutura amorfa
  - Cerâmicas podem ser amorfas ( $\text{SiO}_2$  – sílica vítrea) ou cristalinas (quartzo, cristobalita, tridimita e outras)
  - Polímeros consistem de longas cadeias carbônicas e podem possuir diferentes **graus de cristalinidade**



- Estrutura cristalina de uma nanopartícula de ouro observada em Microscópio Eletrônico de Transmissão (MET)

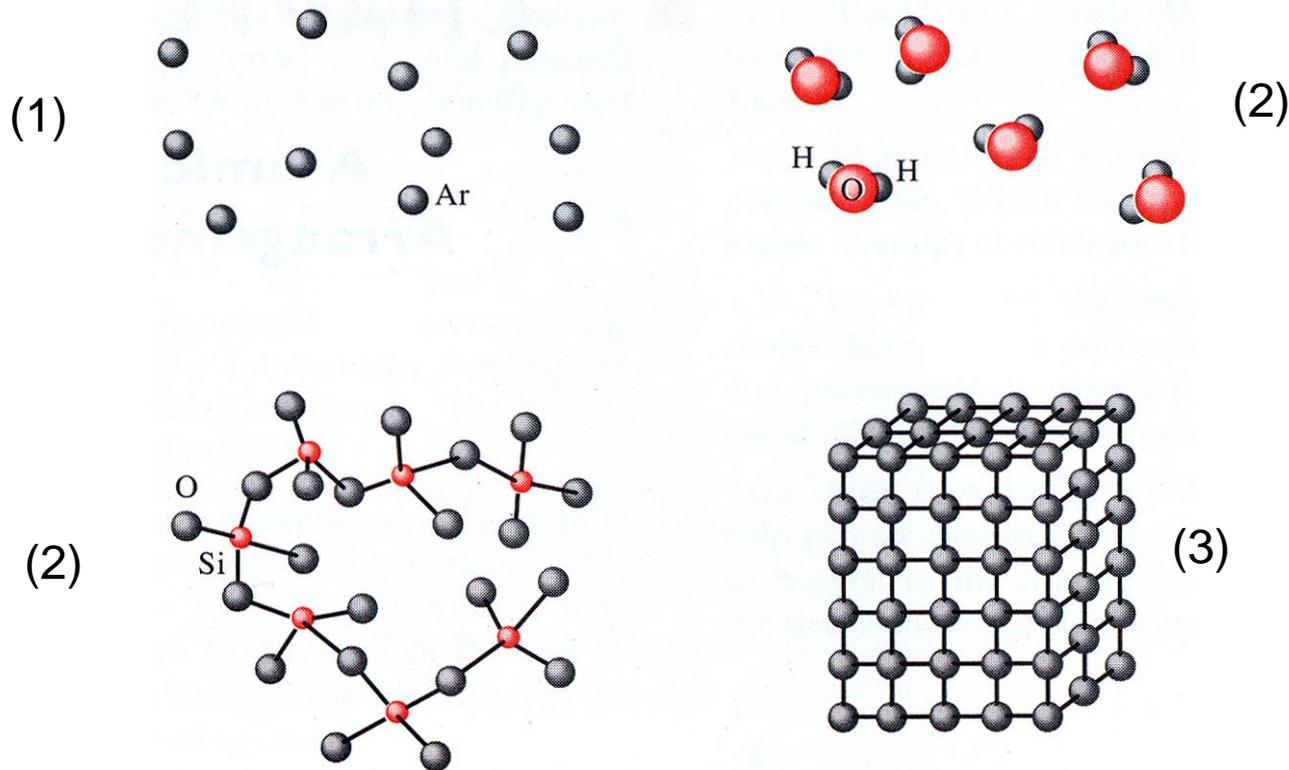
# Cristais e vidros à base de sílica ( $\text{SiO}_2$ )

- Tetraedros de  $\text{SiO}_4^{4-}$  são a unidade básica



**FIGURE 3.38** Two-dimensional schemes of the structure of (a) crystalline silicon dioxide and (b) noncrystalline silicon dioxide.

# ESTRUTURA DOS SÓLIDOS CRISTALINOS



## ARRANJOS ATÔMICOS (MOLECULARES)

### ORDENAMENTOS DE CURTO E LONGO ALCANCE

**1 - GASES NOBRES (Ar) = NENHUM ARRANJO ESPACIAL DEFINIDO (PREENCHEM TOTALMENTE O ESPAÇO DE CONFINAMENTO)**

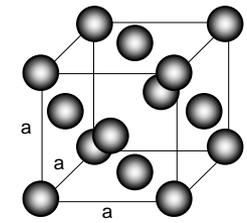
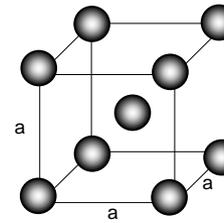
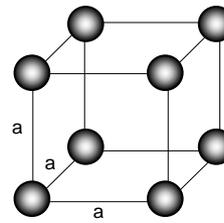
**2 - VAPORES, LÍQUIDOS E SÓLIDOS AMORFOS (VIDROS) = ARRANJO ORDENADO DE CURTO ALCANCE (DA ORDEM DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS VIZINHAS)**

**3 - VIRTUALMENTE TODOS OS METAIS, MUITAS CERÂMICAS E POLÍMEROS = ARRANJO ORDENADO DE LONGO ALCANCE = ESTRUTURA CRISTALINA**

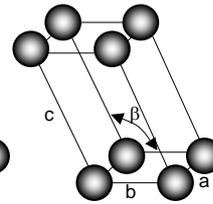
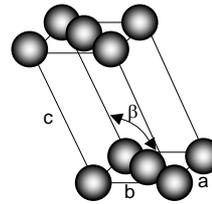
Uma célula unitária é definida como a menor porção do cristal que conserva as informações completas da estrutura do mesmo.

Existem células unitárias de diversos tipos. Em meados do século passado, o cientista francês **Bravais** descreveu as 14 células unitárias que descrevem qualquer tipo de estrutura cristalina conhecida (com exceção dos quasicristais...)

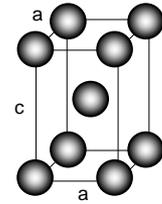
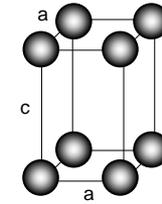
Uma avaliação mais aprofundada dos arranjos cristalinos de Bravais revela que as estruturas cúbica de corpo centrado (CCC), cúbica de face centrada (CFC) e hexagonal compacta (HC) são aquelas que permitem maior grau de empacotamento atômico



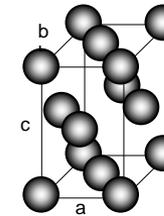
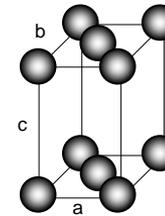
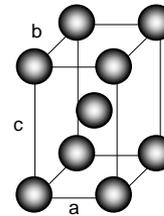
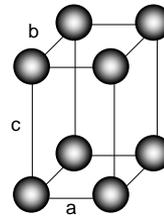
CÚBICO



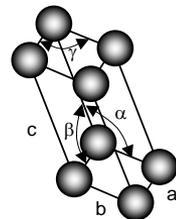
MONOCLÍNICO



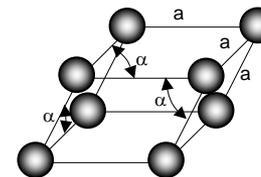
TETRAGONAL



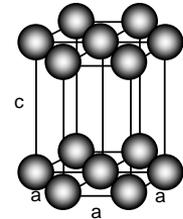
ORTORRÔMBICO



TRICLÍNICO



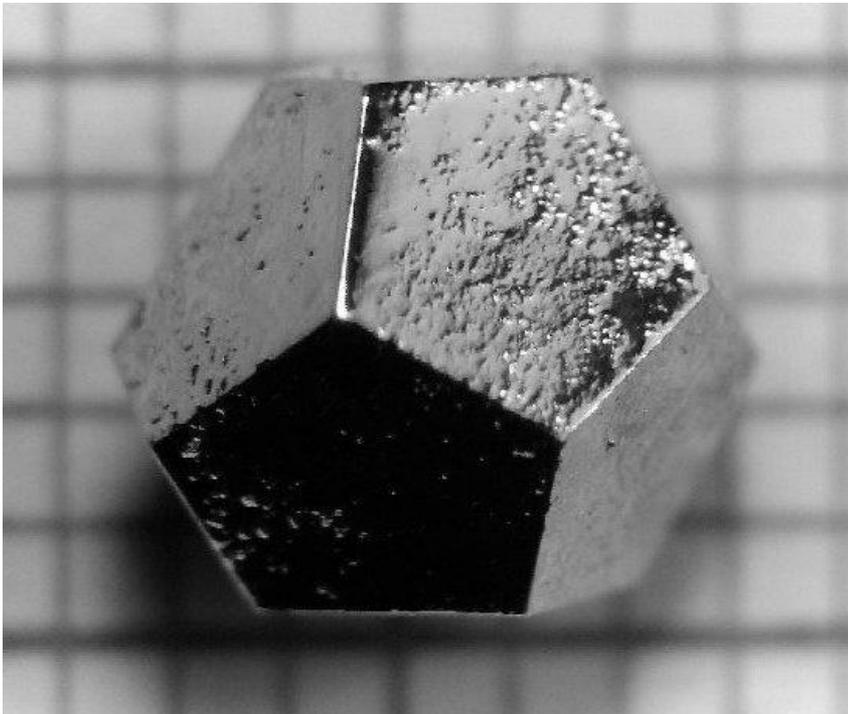
ROMBOÉDRICO



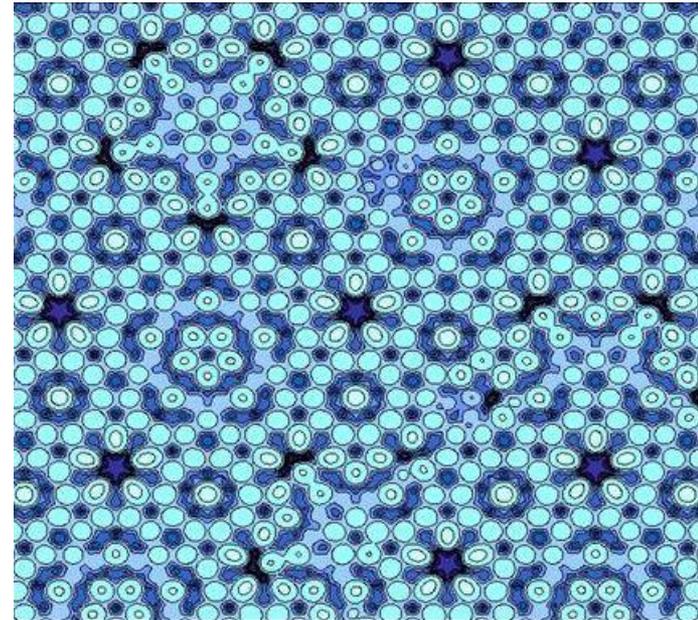
HEXAGONAL

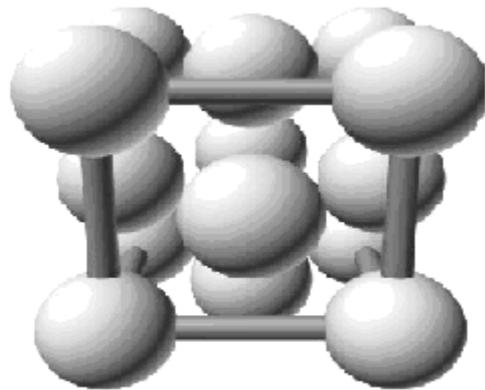
# Shechtman (Israel) recebeu o Prêmio Nobel de Química de 2011 pela descoberta dos Quasicristais

Um quasicristal icosaédrico de Ho-Mg-Zn

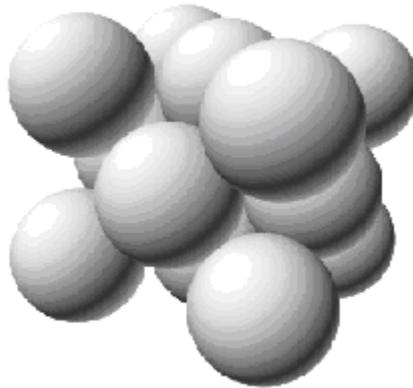


Atomic model of an aluminium-palladium-manganese (Al-Pd-Mn) quasicrystal surface





a)

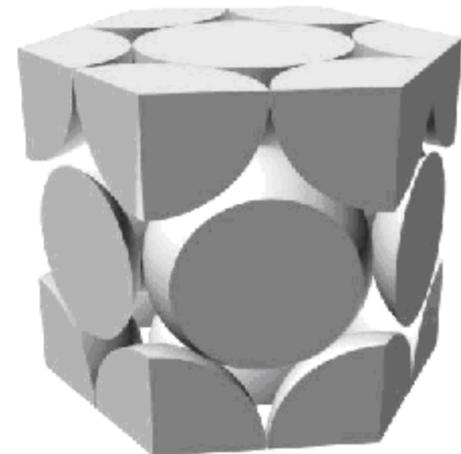
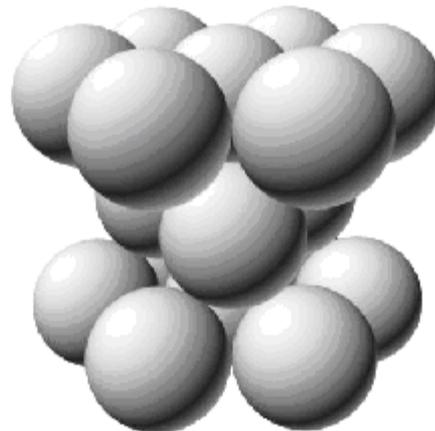
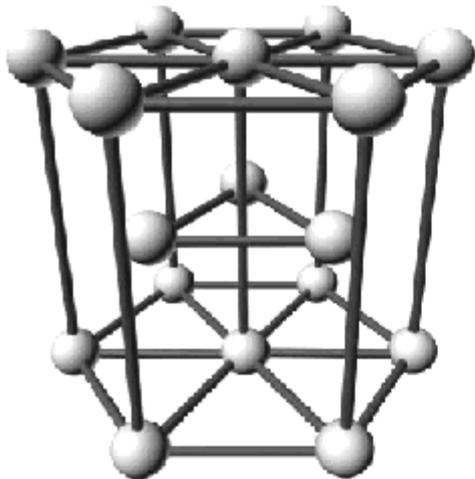


b)

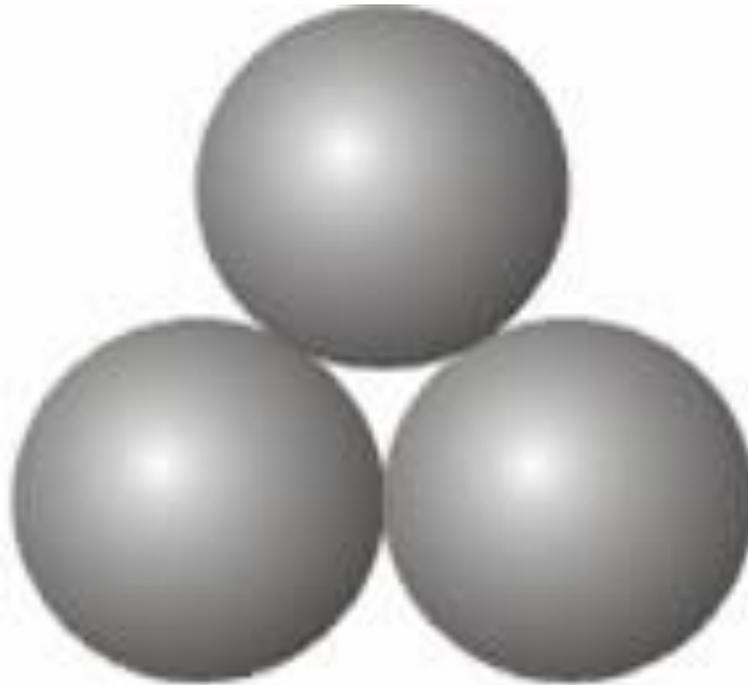


c)

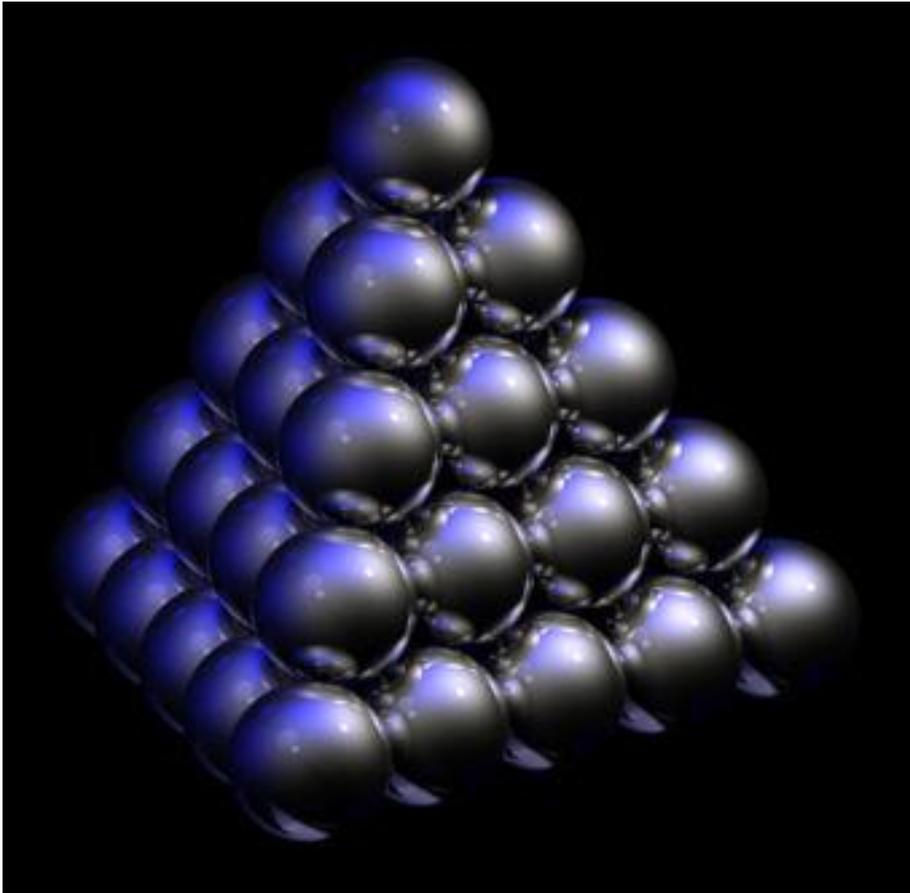
Representação esquemática de uma célula unitária Cúbica de Face Centrada (CFC – acima) e Hexagonal Compacta (HC – abaixo): (a) posições atômicas; (b) arranjo atômico; (c) átomos dentro da célula unitária



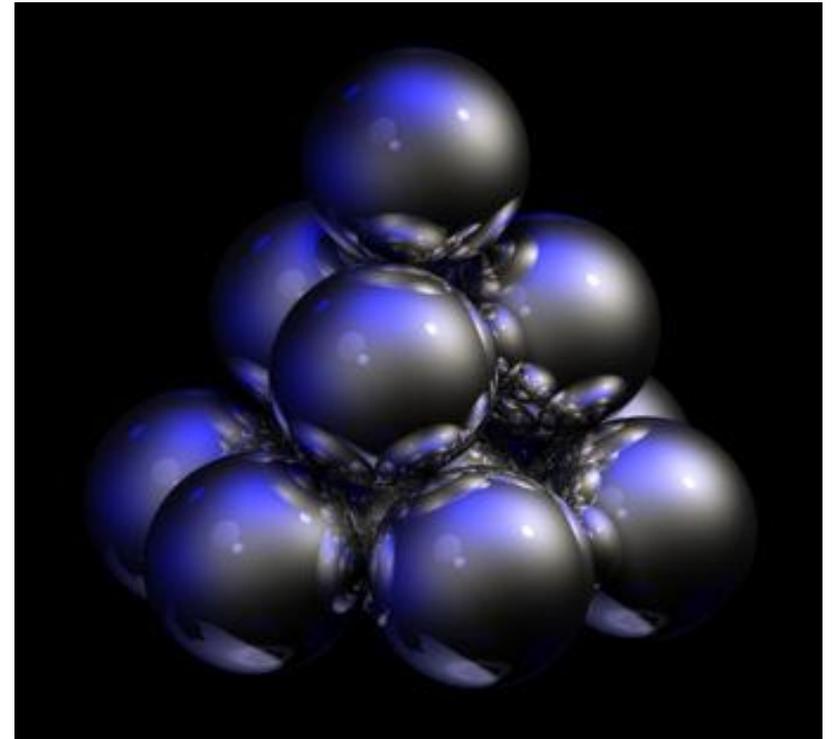
# Empacotamento denso



# Empacotamentos densos

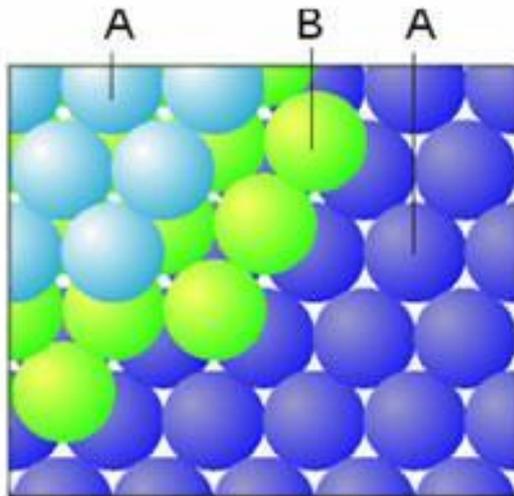


Cúbico de Face Centrada – CFC

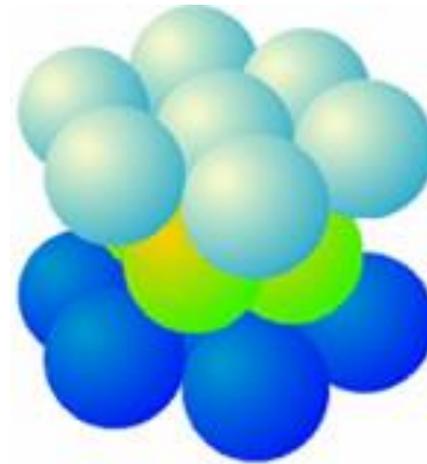


Hexagonal Compacta – HC

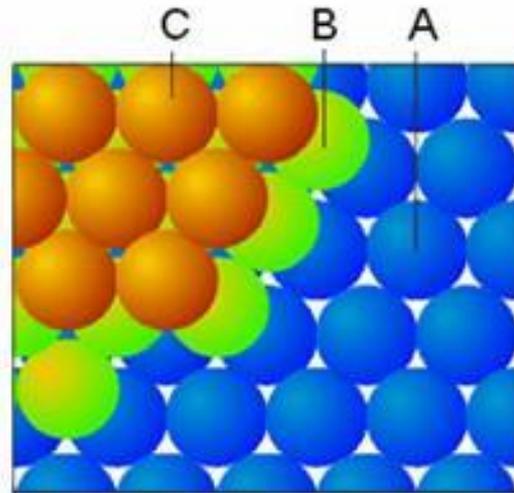
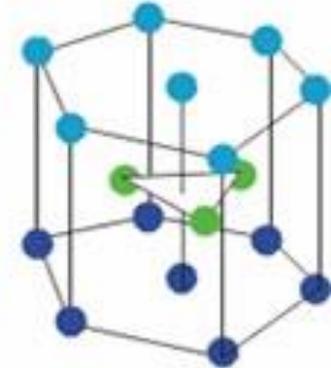
# Empacotamentos densos



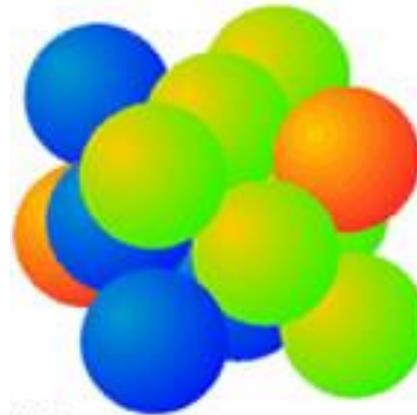
(a)



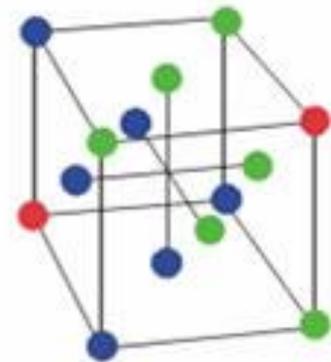
(a)



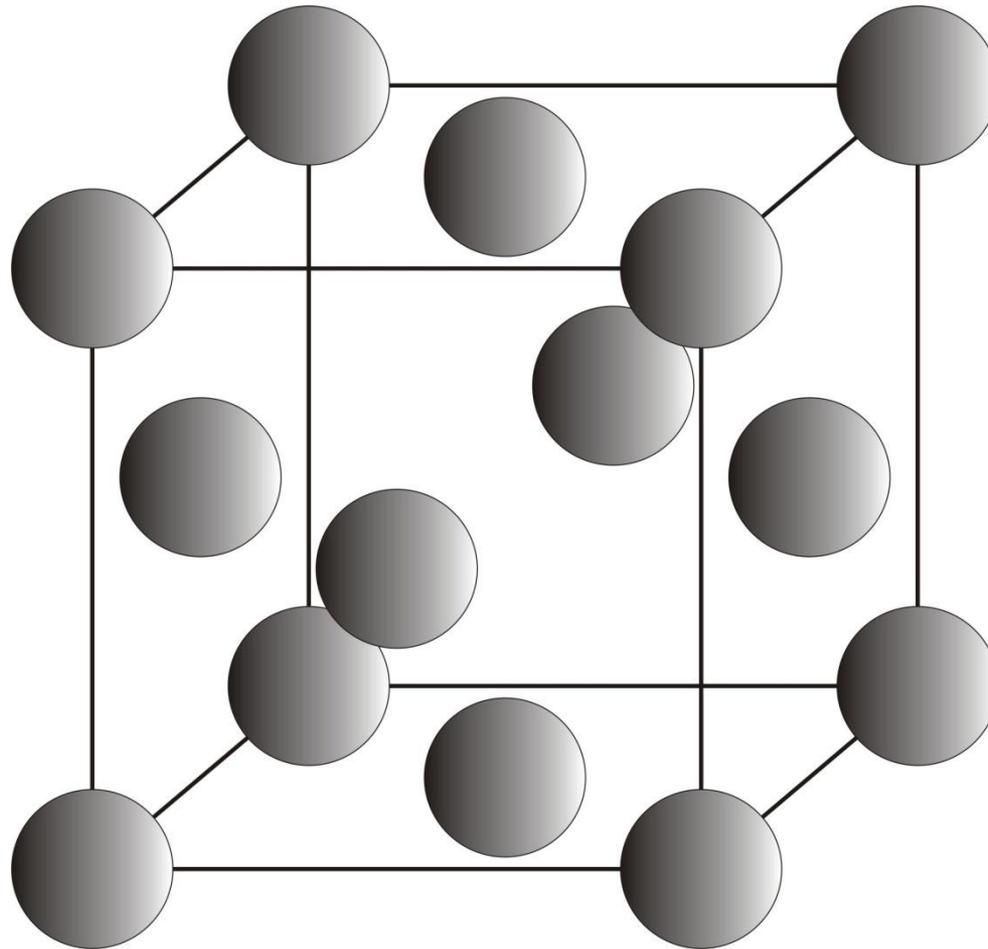
(b)



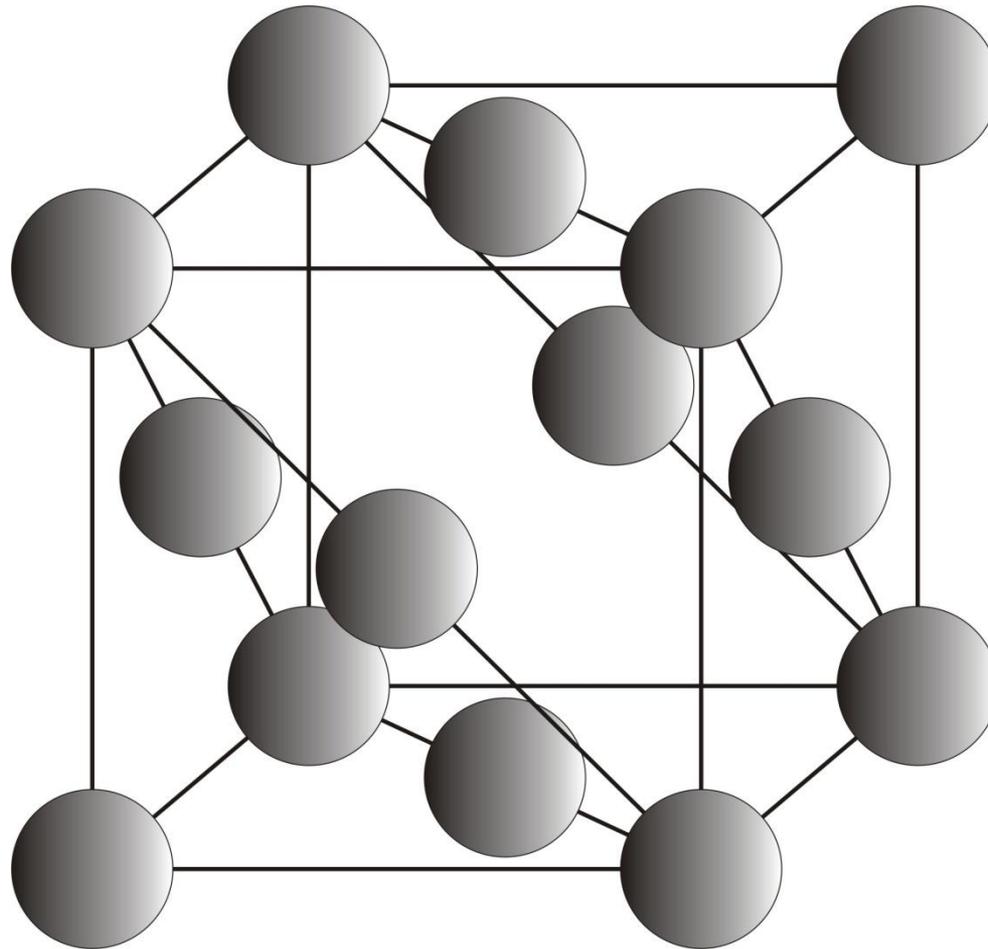
(b)



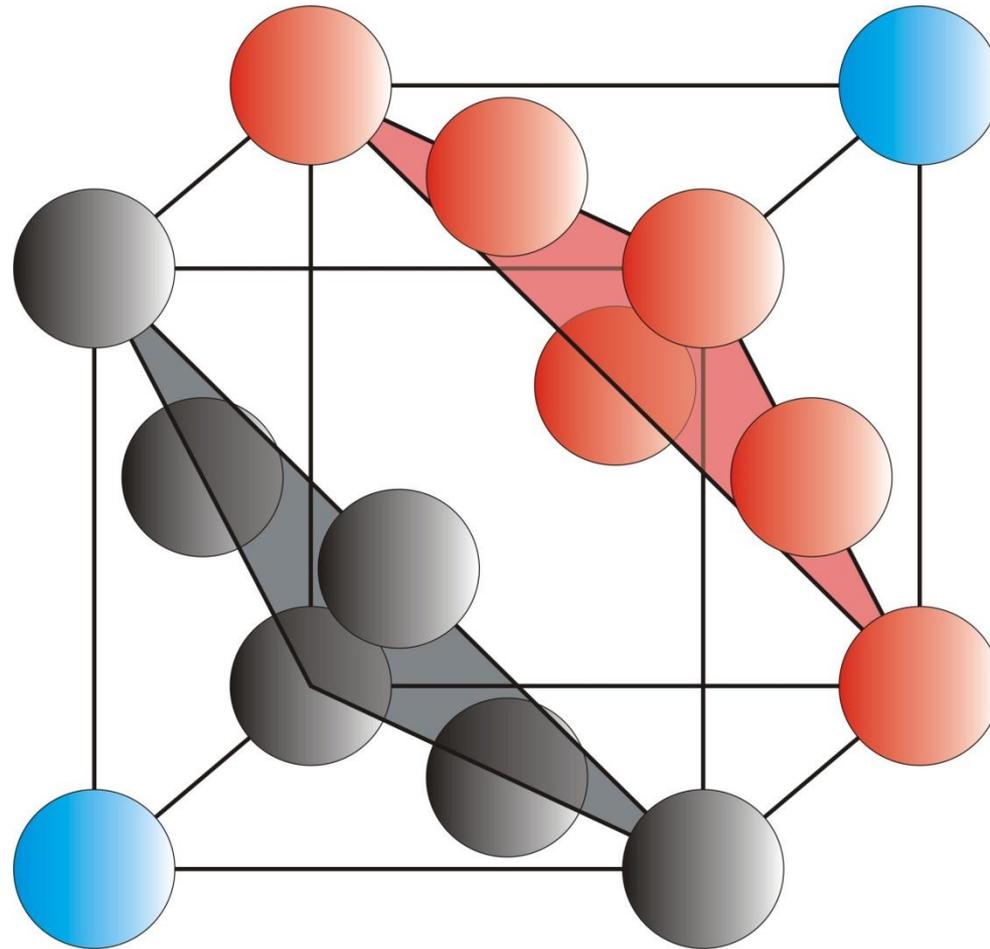
# Entendendo a estrutura CFC



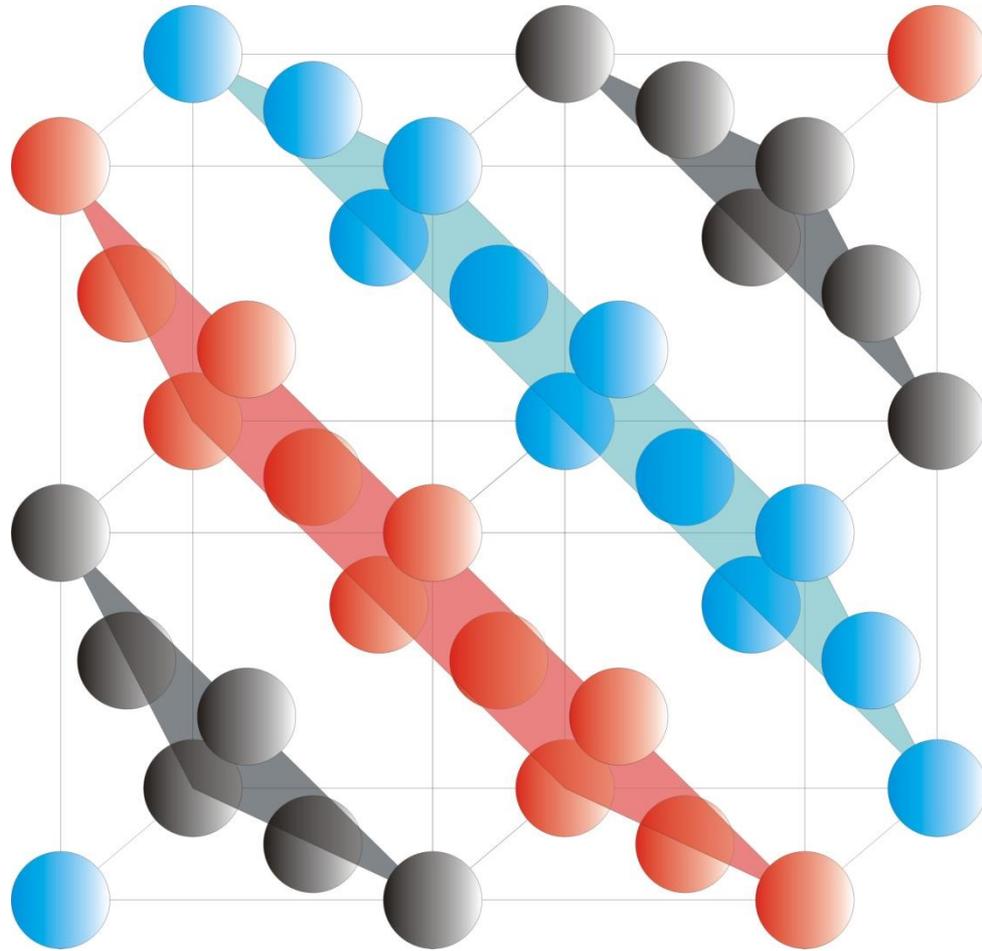
# Entendendo a estrutura CFC



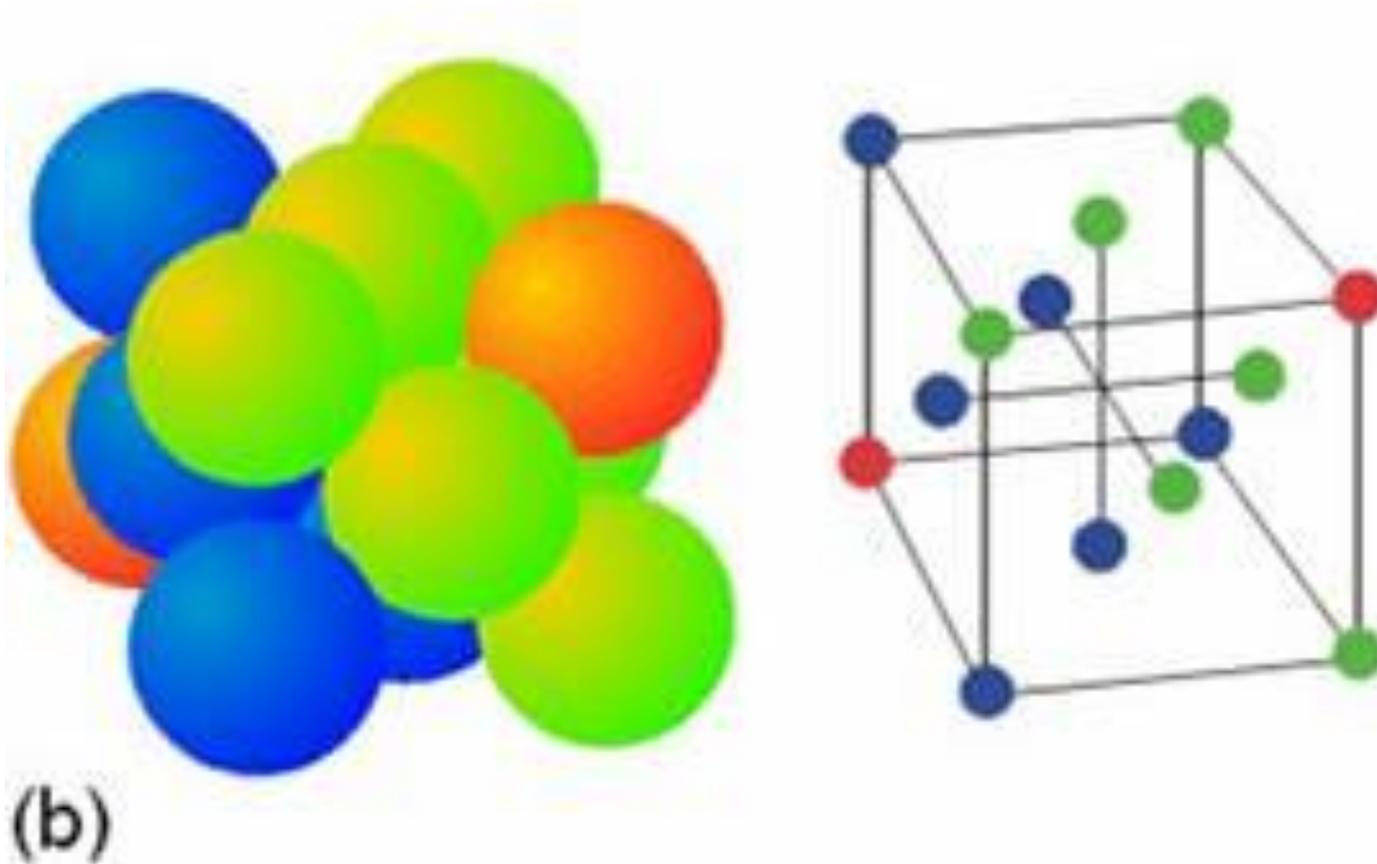
# Entendendo a estrutura CFC



# Entendendo a estrutura CFC



# Entendendo a estrutura CFC



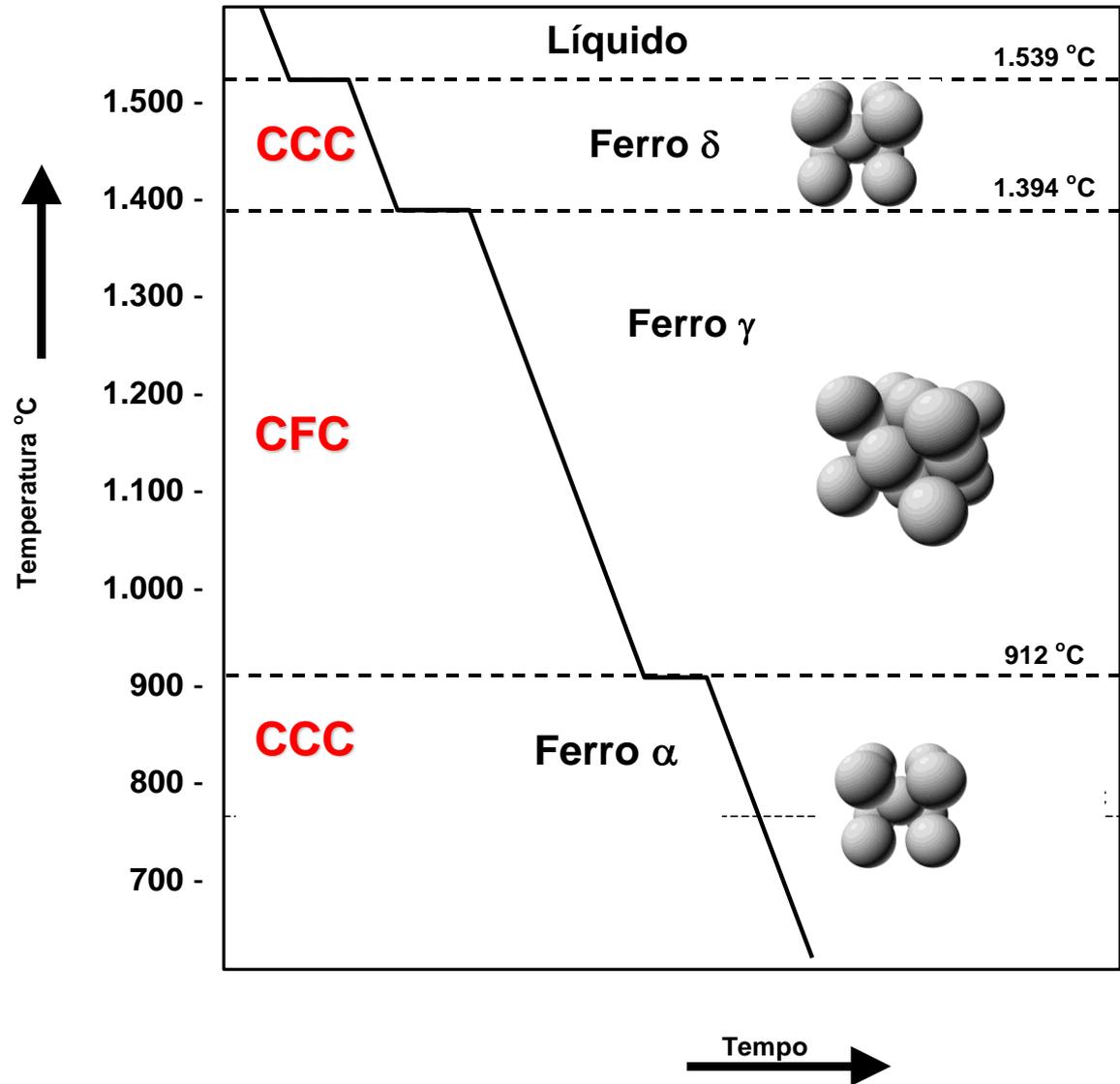
## Estrutura cristalina e propriedades de alguns elementos

Elemento	Símbolo	Número Atômico	Massa Atômica (g/mol)	Densidade à 20 °C (g/m <sup>3</sup> )	Estrutura Cristalina à 20 °C	Raio Atômico (nm)
Alumínio	Al	13	26,98	2,70	CFC	0,143
Ferro	Fe	26	55,85	7,87	CCC	0,124
Chumbo	Pb	82	207,20	11,36	CFC	0,175
Cobalto	Co	27	58,93	8,83	CCC	0,125
Cobre	Cu	29	63,54	8,93	CFC	0,128
Cromo	Cr	24	51,99	7,19	CCC	0,125
Enxofre	S	16	32,06	2,07	Ortorrômbica	0,104
Platina	Pt	78	195,09	21,45	CFC	0,139
Magnésio	Mg	12	24,30	1,74	HC	0,160
Manganês	Mn	25	54,94	7,47	Cúbica	0,112
Mercúrio	Hg	80	200,59	13,55	Romboédrica	0,155
Molibdênio	Mo	42	95,94	10,22	CCC	0,136
Nióbio	Nb	41	92,90	8,57	CCC	0,143
Níquel	Ni	28	58,69	8,90	CFC	0,124
Titânio	Ti	22	47,88	4,51	HC	0,148
Tungstênio	W	74	183,85	19,25	CCC	0,137
Urânio	U	92	238,03	19,05	Ortorrômbica	0,138
Vanádio	Va	23	50,94	6,10	CCC	0,132
Zinco	Zn	30	65,38	7,13	HC	0,133
Zircônio	Zr	40	91,22	6,51	HC	0,159

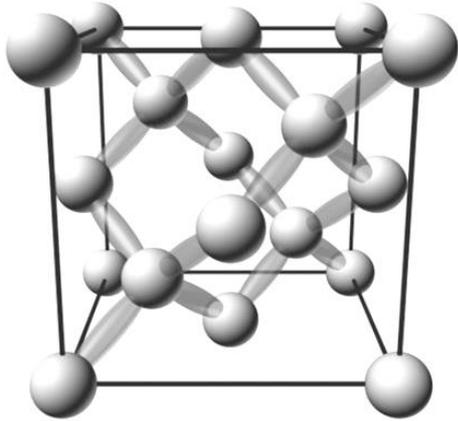
# ALOTROPIA OU POLIMORFISMO

Os materiais cristalinos, incluindo os metais, podem ter mais de uma estrutura cristalina – depende da temperatura e da pressão

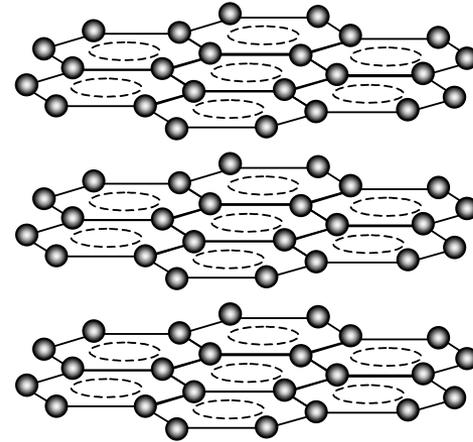
Nas mudanças polimórficas há normalmente uma alteração da densidade e de outras propriedades físicas



## Diamante X Grafite (CARBONO)



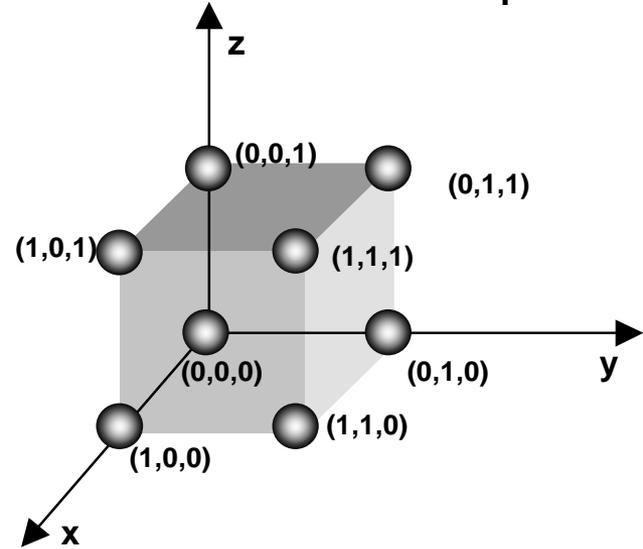
(a) Diamante



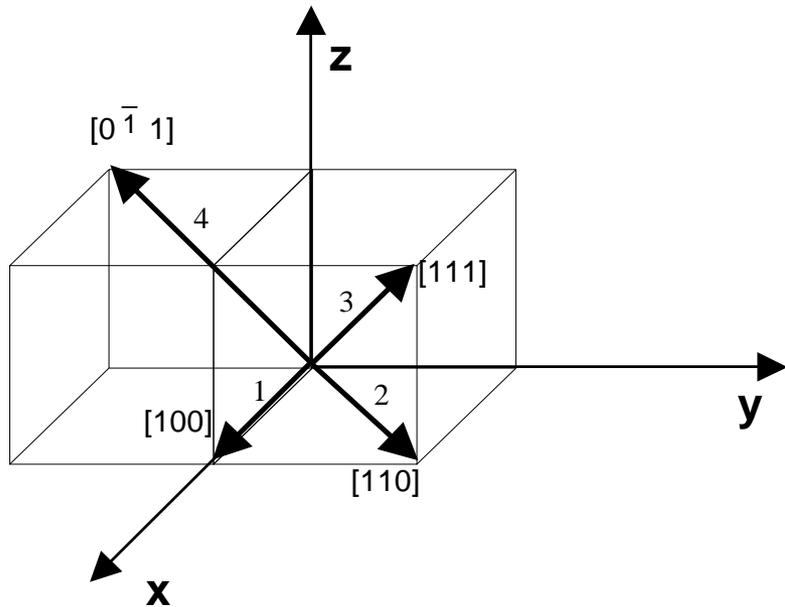
(b) Grafite

Figura 3.9. Estruturas cristalinas do carbono nas variações alotrópicas "diamante" e "grafite".

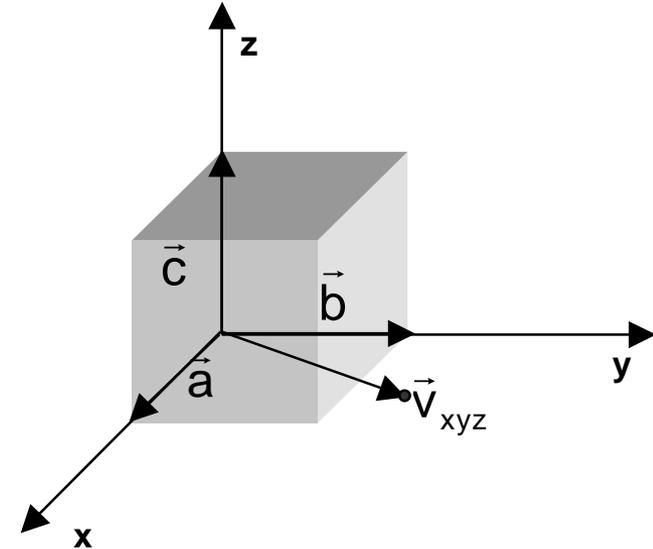
A grafita é o polimorfo estável nas condições ambientes, enquanto o diamante é formado a pressões extremamente elevadas.



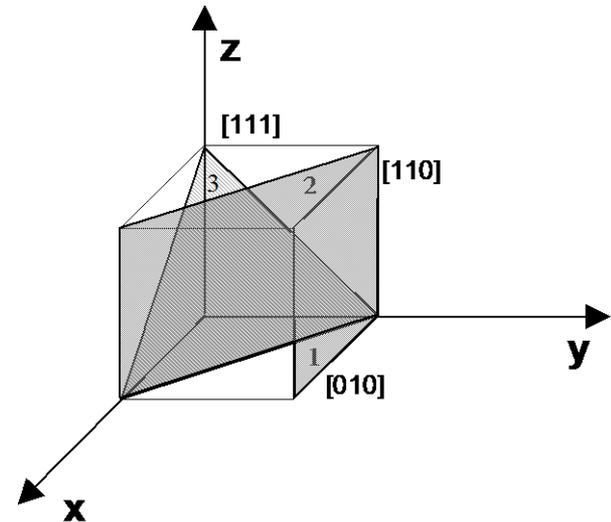
A s propriedades dependem da orientação cristalográfica.  
 Há necessidade de se determinar direções e planos em um cristal.  
 (Posições atômicas em uma célula unitária da estrutura CS)



Direções em uma célula unitária cúbica.



Uma direção em uma célula unitária é determinada a partir de um vetor que parte da origem e atinge a posição definida pelas coordenadas consideradas.



Planos cristalográficos em estruturas cúbicas.

# DEFEITOS CRISTALINOS

## O QUE É UM DEFEITO?

É uma imperfeição ou um "erro" no arranjo periódico regular dos átomos em um cristal.

Podem envolver uma irregularidade

- na posição dos átomos
- no tipo de átomos

O tipo e o número de defeitos dependem do material, do meio ambiente, e das circunstâncias sob as quais o cristal é processado.

## Tipos de defeitos

- **Defeitos Pontuais:** irregularidades que se estendem sobre somente alguns átomos (0-D)
- **Defeitos Lineares:** irregularidades que se estendem através de uma única fileira de átomos (1-D)
- **Defeitos Planares (superfície):** irregularidades que se estendem através de um plano de átomos (2-D)
- **Defeitos Volumétricos:** irregularidades que se estendem sobre o conjunto 3-D dos átomos na estrutura

## Por que os defeitos são importantes?

Os defeitos, mesmo em concentrações muito pequenas, podem causar uma mudança significativa nas propriedades de um material.

Sem a presença de defeitos:

- os dispositivos eletrônicos do estado sólido não existiriam
- os metais seriam muito mais resistentes
- os cerâmicos seriam muito mais tenazes
- os cristais não teriam nenhuma cor

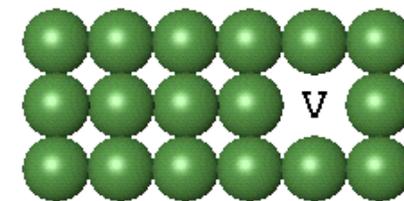
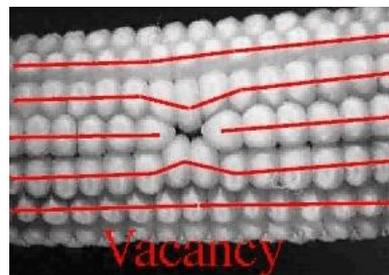
# DEFEITOS PONTUAIS

[Vazios \(Lacunas ou Vacâncias\) e Intersticiais](#)

[Impurezas nos Sólidos](#)

[Impurezas Substitucionais](#)

**Vazios (Lacunas ou Vacâncias) e Intersticiais**



• **Vazios** = ausência de um átomo da sua posição normal em uma estrutura cristalina perfeita

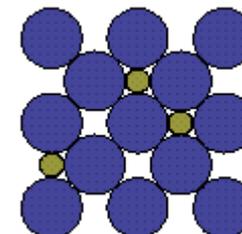
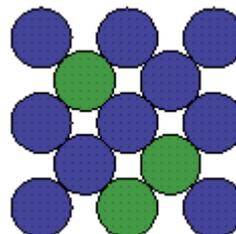
A presença de um vazio significa que as ligações atômicas na vizinhança do defeito não foram satisfeitas

• **Intersticiais** = ocorrência de um átomo em uma posição que não pertence à estrutura do cristal perfeito, como um vazio intersticial

• • A presença de um intersticial significa uma distorção na estrutura devido ao desajuste causado pela presença deste átomo

## “Impurezas nos Sólidos”: TERMINOLOGIA

- cristal matriz = solvente
- átomos de impureza = soluto



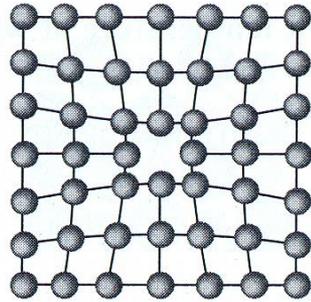
O cristal matriz contendo impurezas é chamado uma solução sólida, porque os átomos de impureza ocupam posições aleatórias no cristal, similarmente a um soluto em um líquido.

## Tipos de Soluções Sólidas

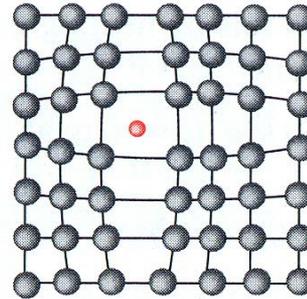
- soluções sólidas **Substitucionais** :os átomos de impureza estão localizados em posições normalmente ocupadas pelos átomos do cristal matriz. Eles "substituem" os átomos do cristal matriz.
- soluções sólidas **Intersticiais** os átomos de impureza estão localizados nos interstícios da estrutura cristalina matriz. Normalmente tem um pequeno tamanho quando comparadas aos átomos da matriz.

# IMPERFEIÇÕES EM SÓLIDOS CRISTALINOS

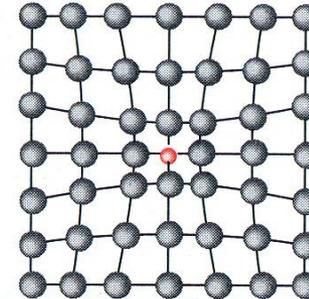
## DEFEITOS PUNTUAIS



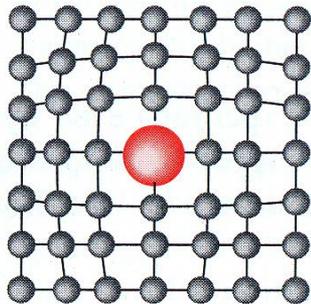
(a)



(b)

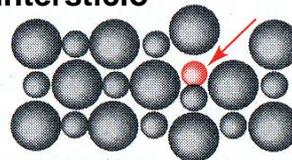


(c)



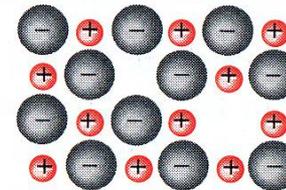
(d)

Movimento de um  
cátion numa posição  
normal para um  
interstício



(e)

Lacuna de cátion e  
lacuna de ânion



(f)

## AUSÊNCIA OU PRESENÇA DE ÁTOMOS

(a) Vacância, (b) Átomo intersticial, (c) Pequeno átomo substitucional, (d) Grande átomo substitucional, (e) Defeito Frenkel, (f) Defeito Schottky. Todos estes defeitos destroem localmente o arranjo cristalino perfeito dos átomos vizinhos.

# DEFEITOS EM LINHA

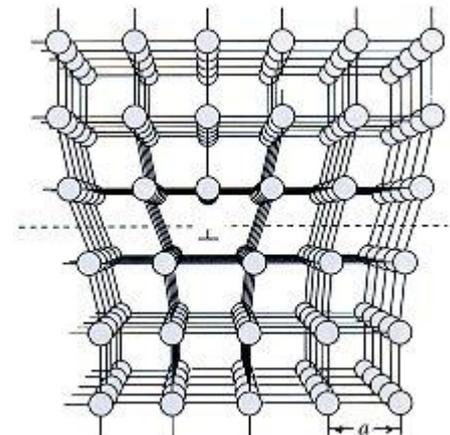
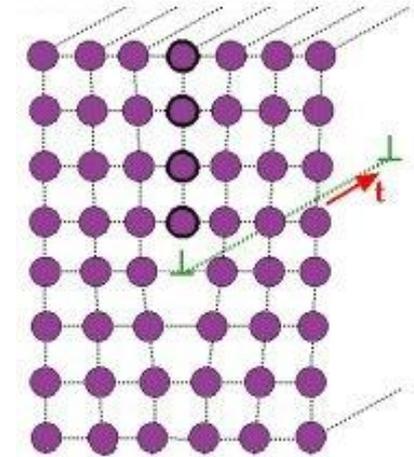
- imperfeições em uma estrutura cristalina nas quais uma **linha** de átomos (ou com átomos em torno de si) tem uma estrutura local que difere da estrutura ideal.
- são criados durante o **processamento** (a forma usada na fabricação) e por forças mecânicas que atuam sobre o material.
- estão sempre presentes nos cristais reais.
- em um material típico, aproximadamente **5 de cada 100 milhões de átomos** (0.000005%) pertencem a um defeito de linha.
- defeitos em linha são chamados **linhas de discordâncias** e têm uma forte influência sobre as propriedades mecânicas dos metais.

# DEFEITOS EM LINHA

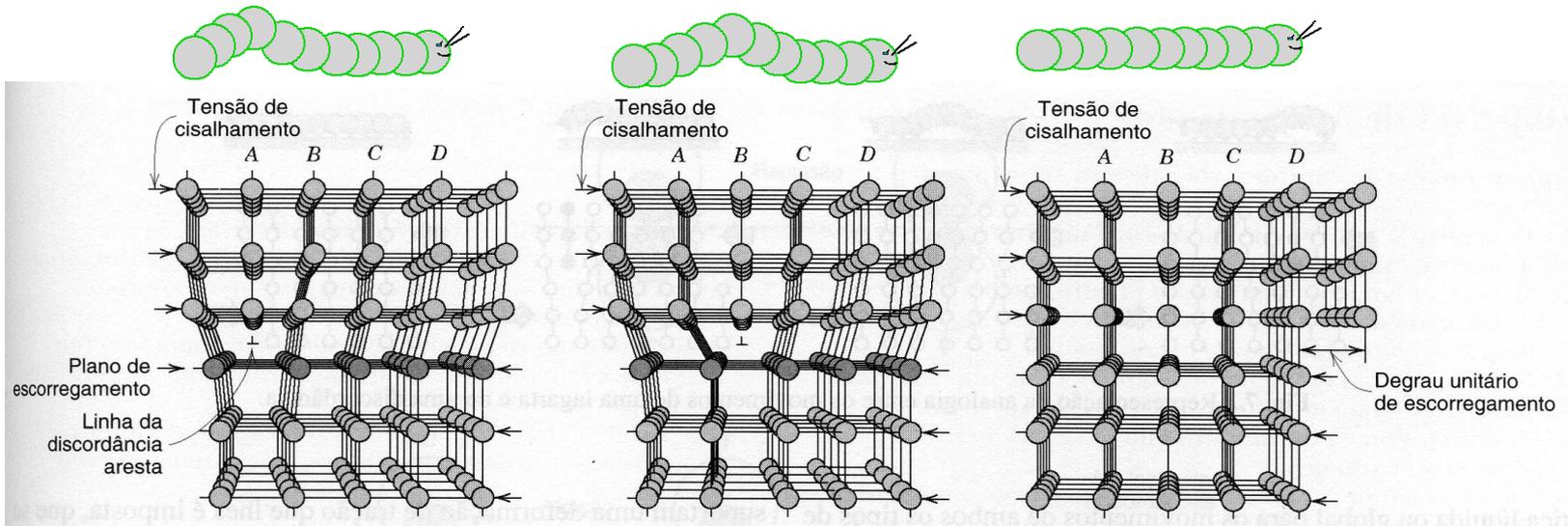
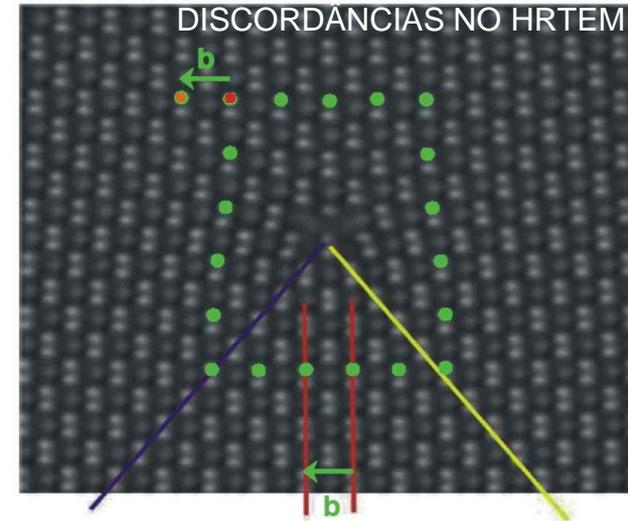
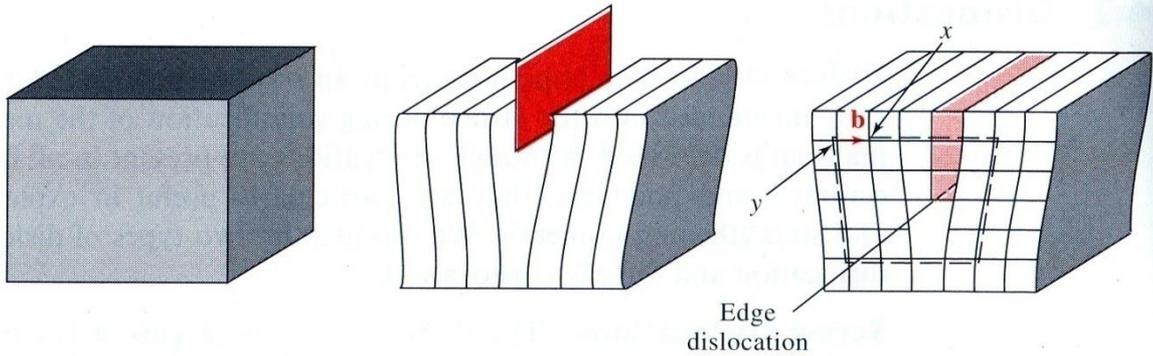
- A tensão de cisalhamento correspondente ao início da fase plástica em um monocristal é surpreendentemente pequena quando comparada à resistência ao cisalhamento de um cristal perfeito (calculada em termos de forças coesivas entre os átomos).
- Em outras palavras, o cristal se deforma plasticamente com tensões  $1/10.000$  de sua resistência teórica.
- Analogamente, os cristais reais de outros metais se deformam sob tensões que são frações pequenas de suas resistências teóricas ( $1/1.000$  a  $1/10.000$ ).
- A explicação para a discrepância entre os limites de escoamento calculado e real reside no fato de que os cristais não são perfeitos, pois contêm defeitos, sendo que as discordâncias são o tipo de defeito responsável por este fato.

# Discordâncias em aresta ou em cunha

- é o tipo mais simples de linha de discordância
- pode ser entendido como um semiplano de átomos inserido na estrutura, que termina de forma abrupta, em qualquer lugar do cristal.
- a linha de discordância é a extremidade do semiplano, conforme mostra a figura ao lado, e pode ser representada pelo símbolo  $\top$  ou  $\perp$ , dependendo da direção
- o cristal é distorcido onde o semiplano atinge o **plano de escorregamento**
- a distorção diminui de intensidade quando se afasta da aresta do semiplano, e a grandes distâncias os átomos tendem a rearranjar-se como em um cristal perfeito.
- A distorção do cristal é centrada em torno da aresta do plano extra.

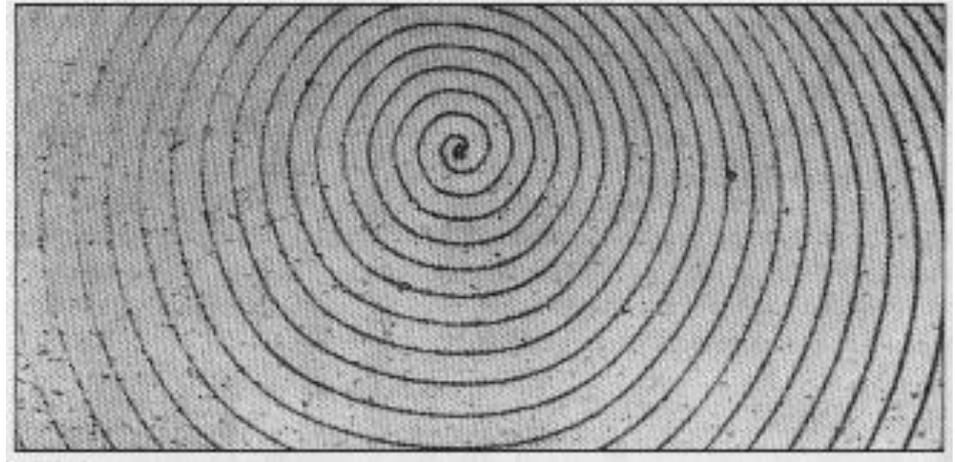
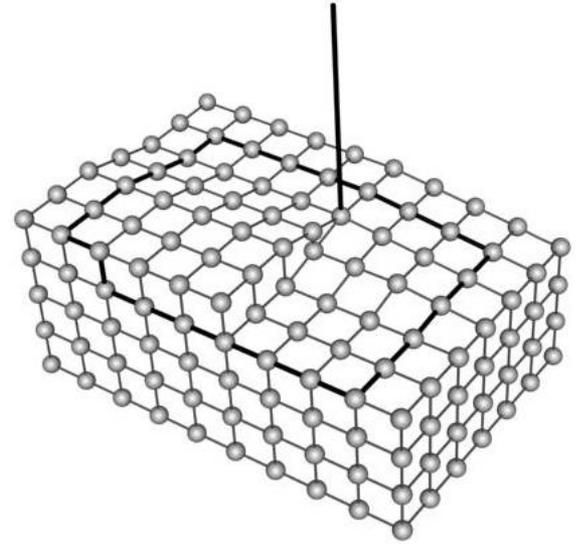


# Movimento de linhas de discordância



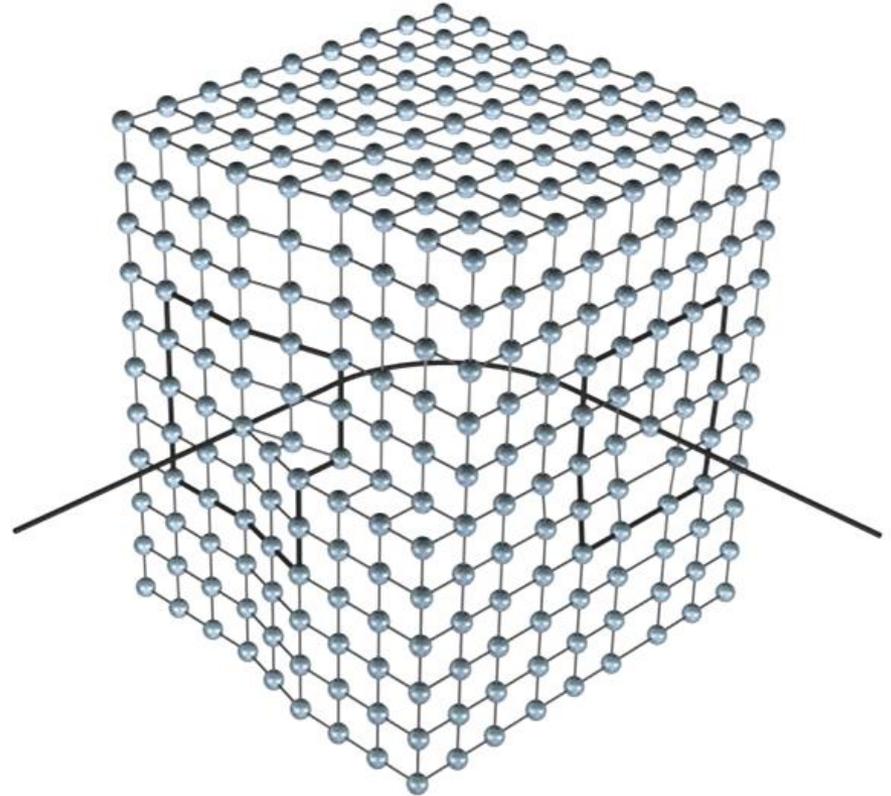
# Discordância em hélice

- ocorre quando o empilhamento dos planos atômicos se distorce ao longo de uma hélice.

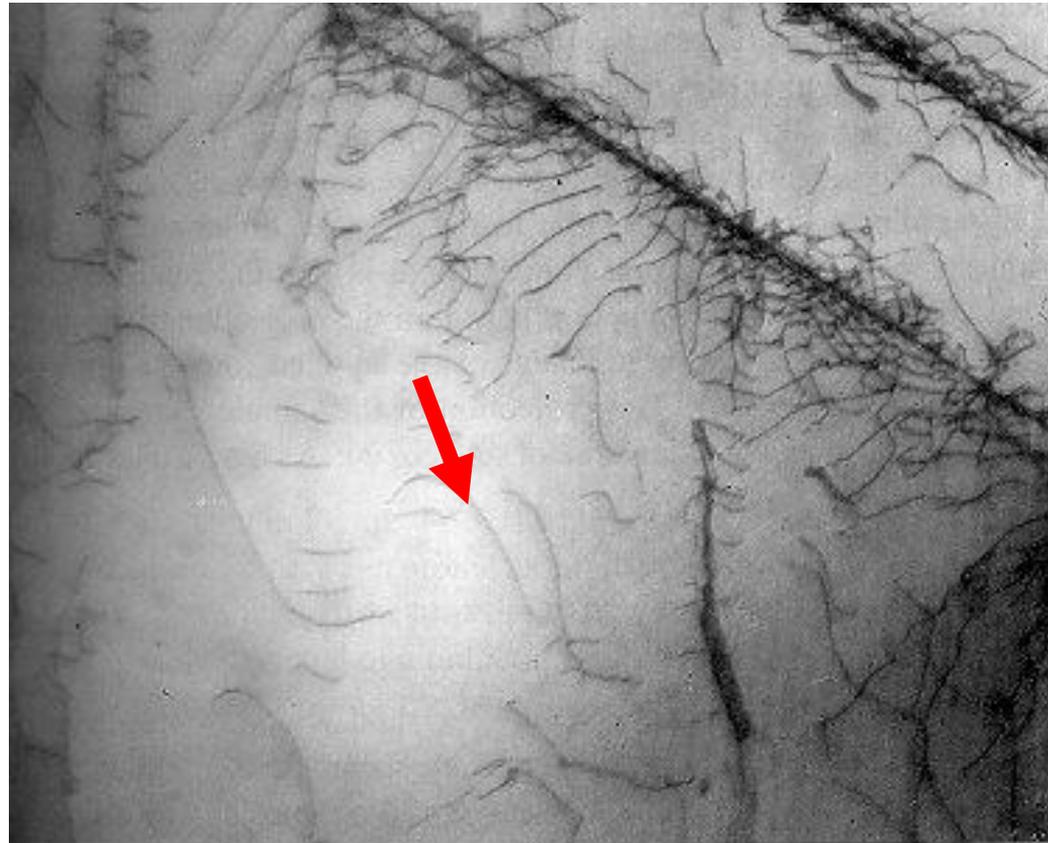


# Discordância mista

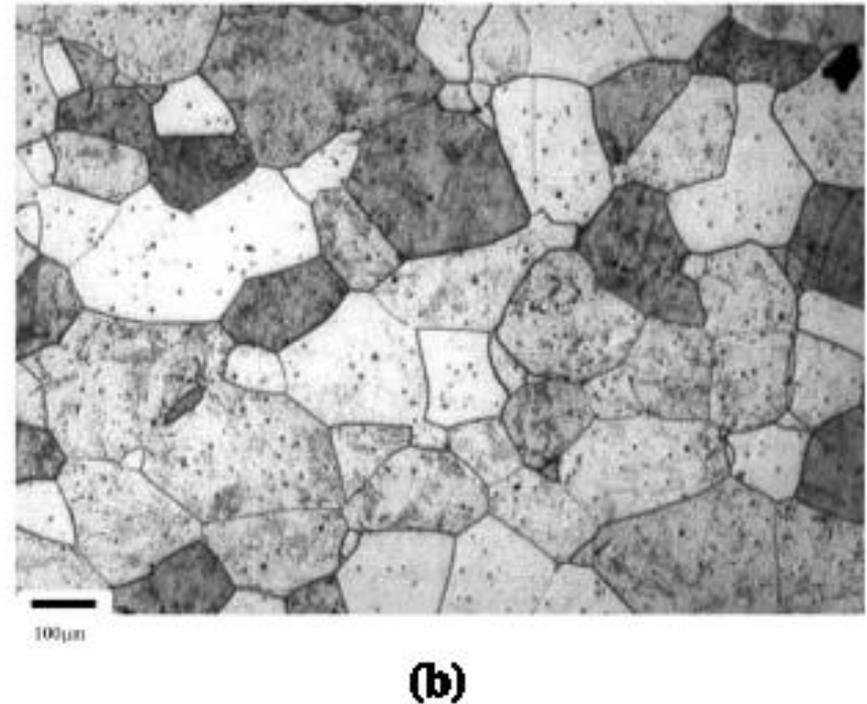
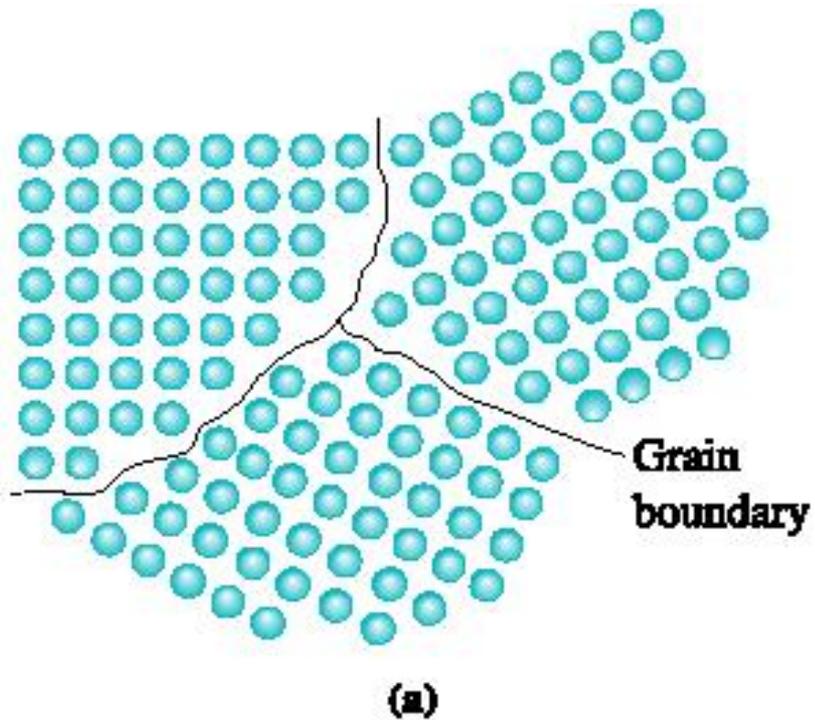
- As discordâncias são produzidas durante a solidificação do material ou quando é aplicada uma tensão cisalhante sobre a estrutura cristalina.
- Em geral, uma discordância em cunha está associada a uma discordância em hélice, o que forma uma discordância mista e neste caso, a linha de discordância é única para as duas discordâncias, como ilustra a figura ao lado.
- Assim, a linha de discordância pode apresentar curvatura.



# DISCORDÂNCIAS NO MICROSCÓPIO ELETRÔNICO DE TRANSMISSÃO

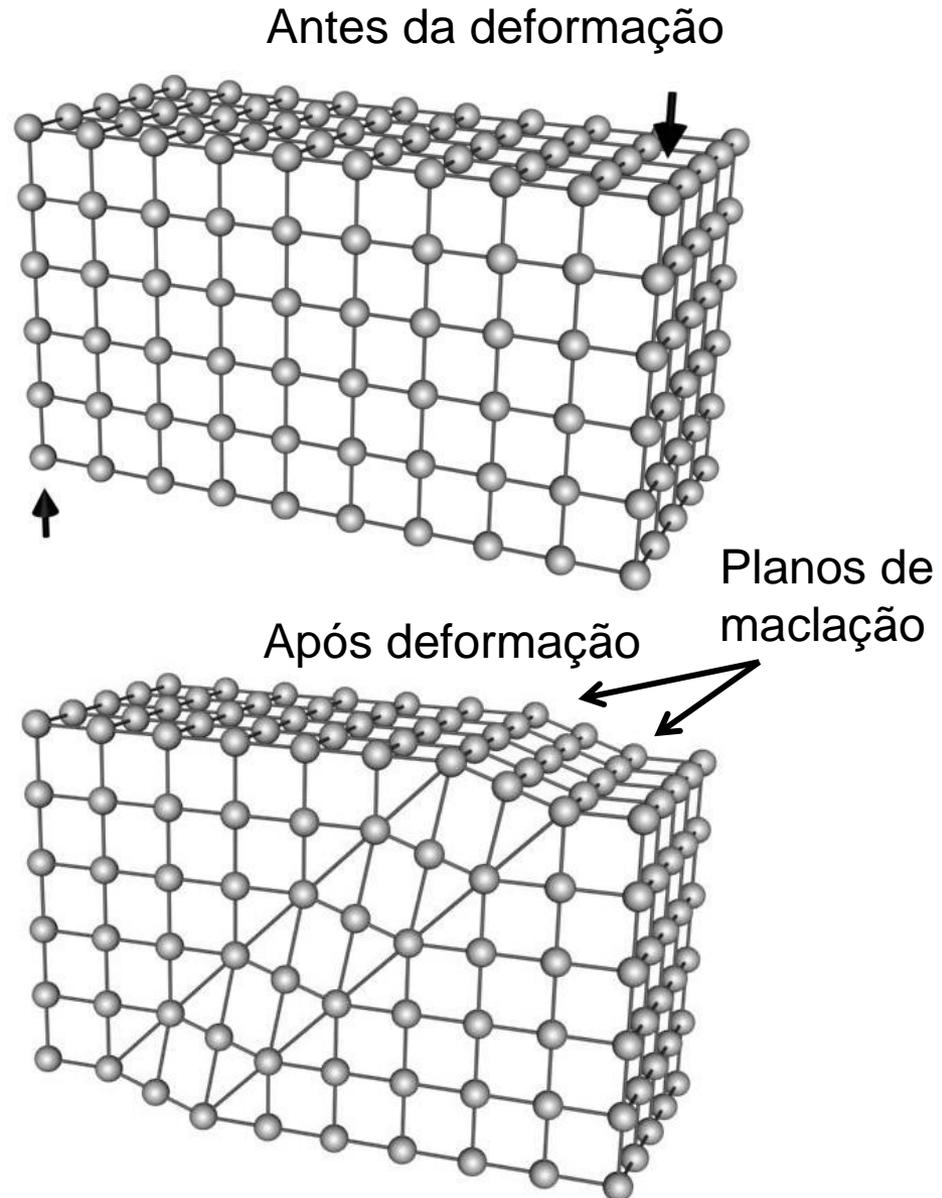
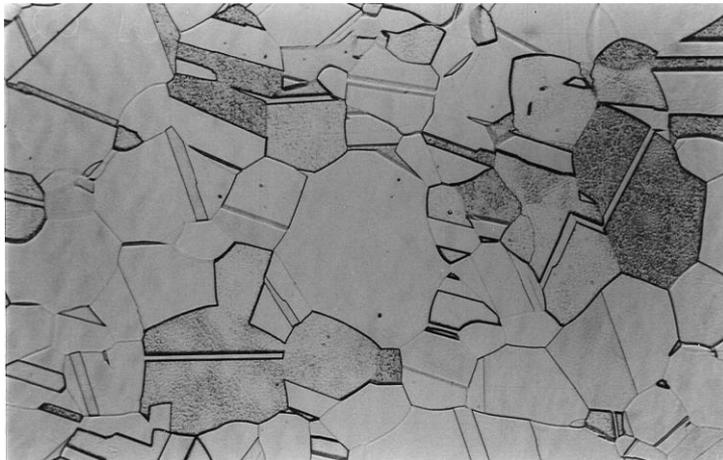


# Defeitos superficiais – contornos de grãos



# Defeitos superficiais – maclas

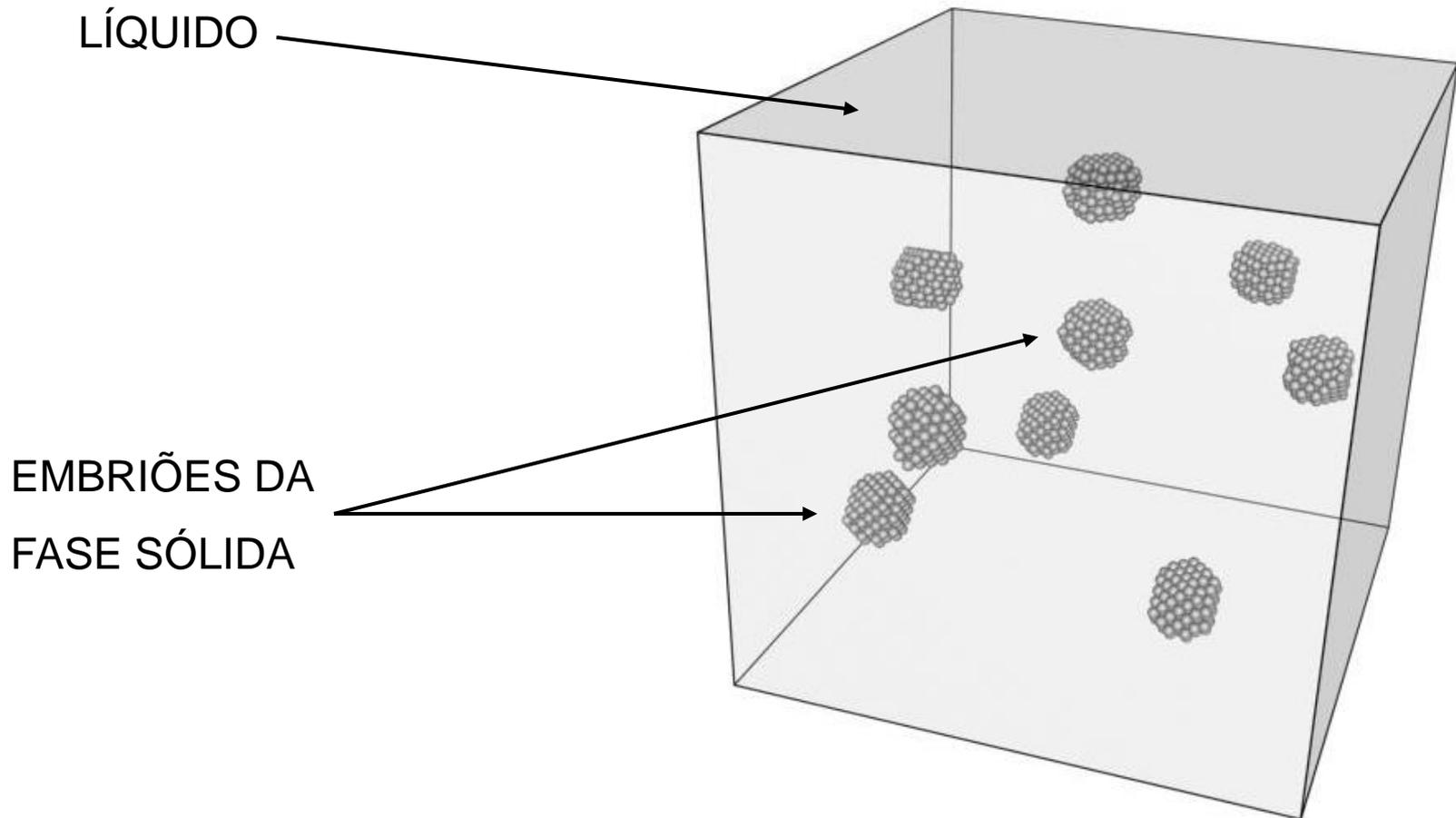
- surgem a partir de tensões térmicas advindas da solidificação ou tensões mecânicas (deformação plástica), recristalização ou crescimento de grão.
- ocorre quando parte da rede cristalina é deformada de modo que um lado do contorno é uma imagem especular da outra.



# Defeitos Volumétricos

- **Inclusões**  impurezas
- **Precipitados**  partículas de 2ª fase cuja composição difere da matriz
- **Porosidade**  origina-se devido a presença ou formação de gases
- **2ª Fase**  ocorre quando o limite de solubilidade é ultrapassado devido à presença de impurezas

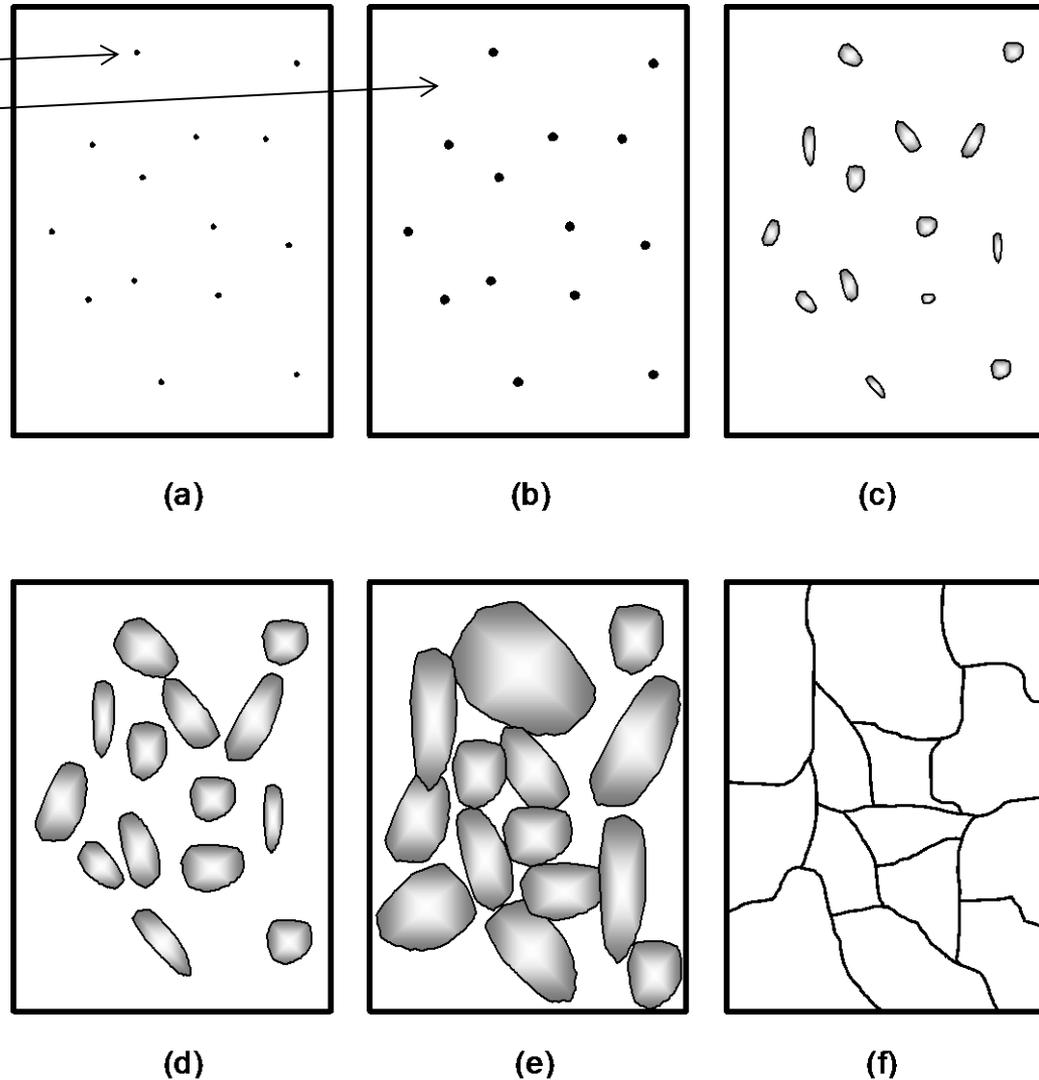
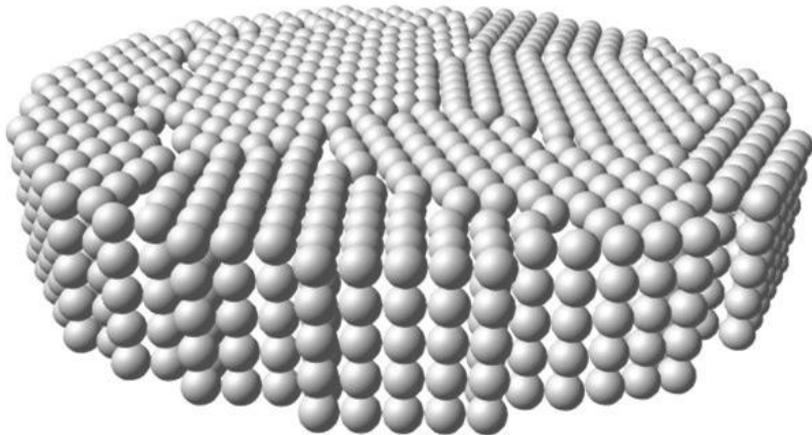
# Formação dos grãos cristalinos – solidificação



Com a evolução do processo, os **embriões** são transformados em **núcleos** da nova fase.

Na etapa de **nucleação**, os núcleos surgem de forma aleatória, cada um com uma **orientação cristalográfica** própria, porém, em um mesmo núcleo os átomos seguem uma **única estrutura cristalina**. Após crescerem além de um certo tamanho crítico, tais regiões são chamadas de **grãos**.

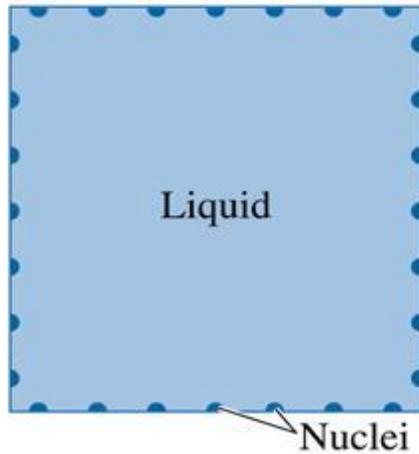
Na fase seguinte à nucleação, denominada de **crescimento** de cristal ou grão, os grãos crescem até entrarem em contato com grãos vizinhos, formando na região de contato um **contorno de grão** (que em 3D são superfícies).



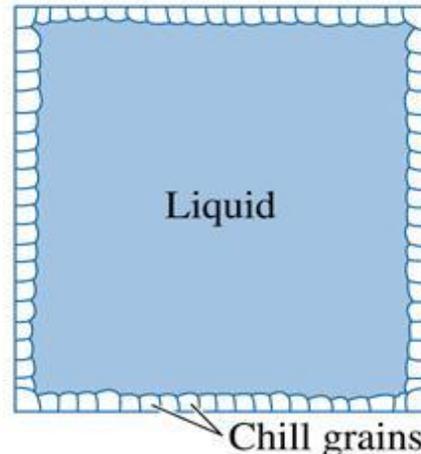
**Solidificação** e formação de um **material policristalino**:

- (a) presença de flutuações estruturais: embriões;
- (b) embriões transformam-se em núcleos;
- (c) crescimento dos núcleos, formando grãos;
- (d) grãos cristalinos crescem;
- (e) encontro dos grãos cristalinos com seus vizinhos;
- (f) formação de contornos de grãos.

**Desenvolvimento da estrutura cristalina em um lingote fundido durante o processo de fundição, em contato com a parede do recipiente – ocorre nucleação heterogênea**



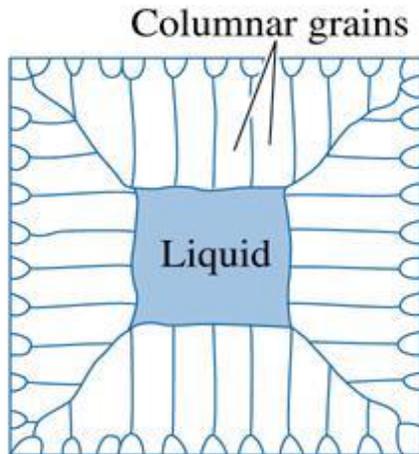
(a)



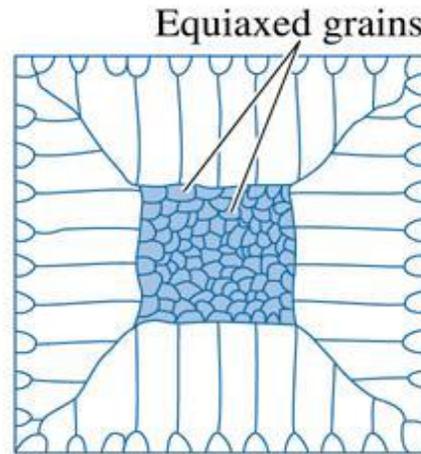
(b)

**(a) a nucleação ocorre de forma heterogênea na parede do recipiente ou molde**

**(b) zonas coquilhadas**



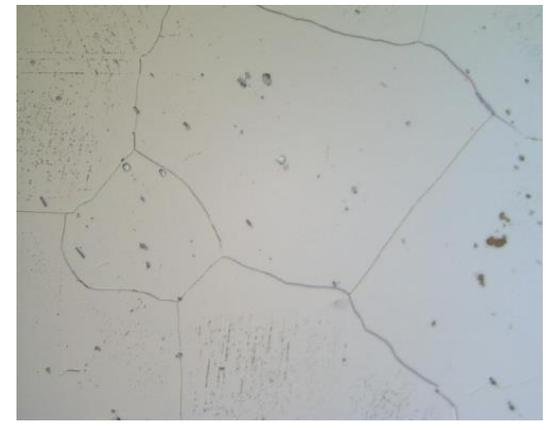
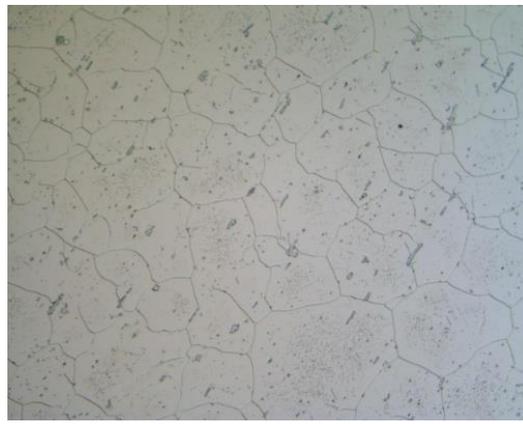
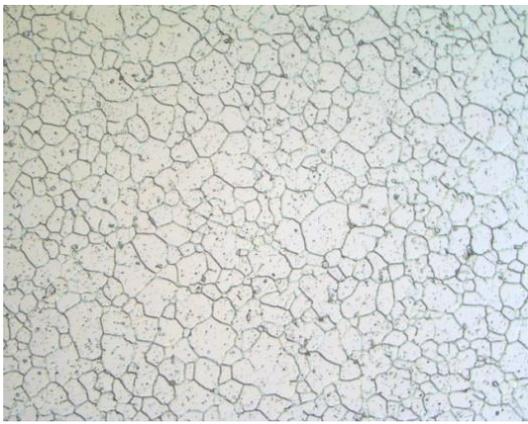
(c)



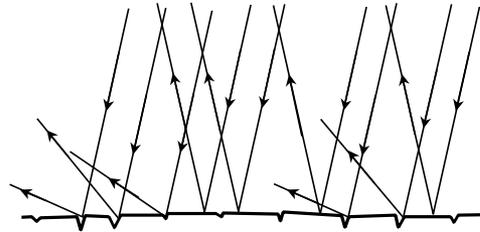
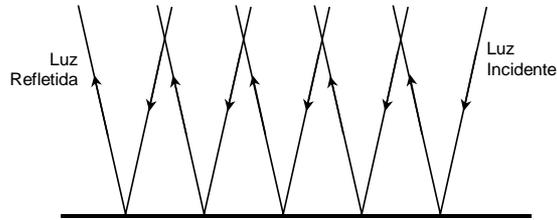
(d)

**(c) crescimento preferencial produz uma zona de grãos colunares**

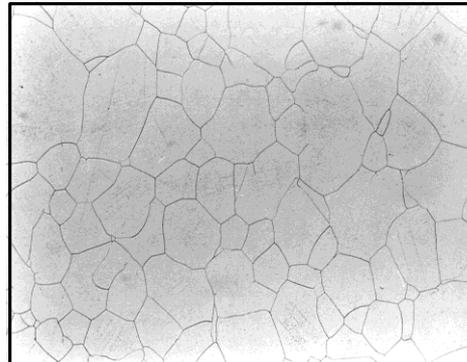
**(d) nucleação adicional criando uma zona equiaxial**



Em um estudo metalográfico são utilizados reagentes químicos para revelar os contornos de grãos. Os átomos de um contorno de grão estão ligados a seus vizinhos de forma menos intensa que os átomos localizados no interior do grão cristalino. Tal fato permite que a região dos contornos de grãos sofra mais intensamente a ação de reagentes químicos. Isso permite revelar os contornos. Dessa maneira, a região do contorno de grão aparece mais escura no microscópio devido à capacidade menor de refletir a luz em comparação com regiões onde a reação química não foi intensa.

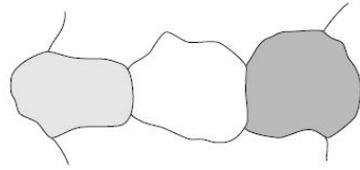


Amostra só  
polida

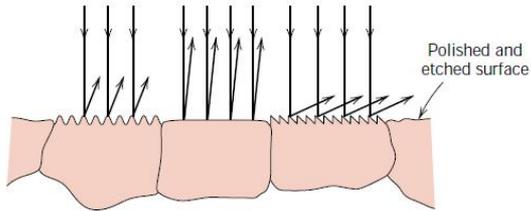
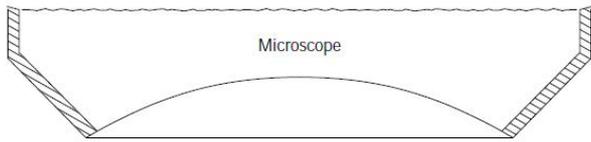


Amostra atacada quimicamente.  
A região do contorno de grão  
aparece mais escura no  
microscópio devido sua menor  
capacidade de reflexão da luz.

# Preparação metalográfica



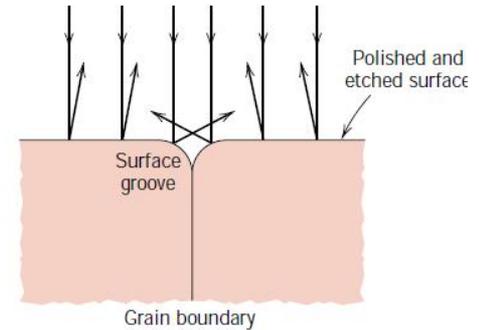
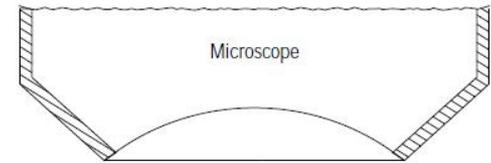
(a)



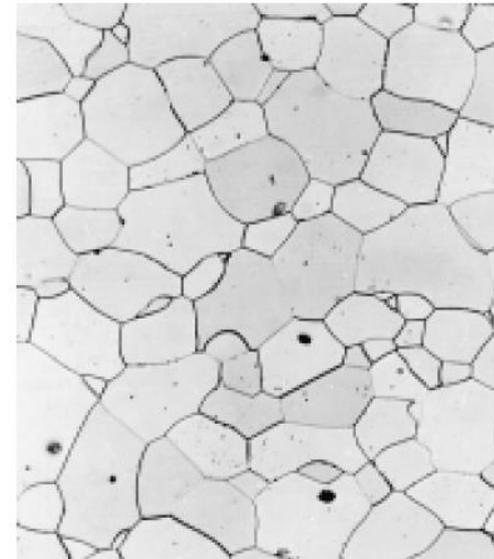
(b)



(c)



(a)

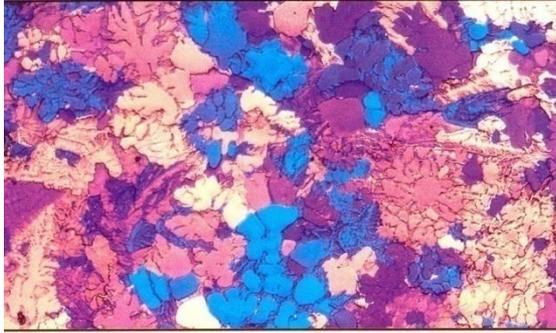


(b)

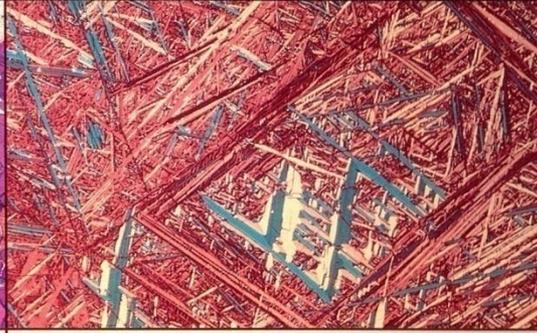


6 mm

## *Non-Ferrous*

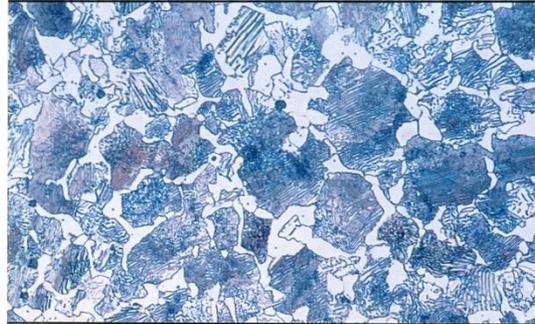


**Aluminum**

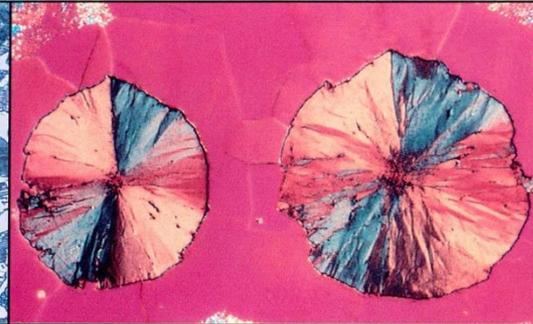


**Aluminum-Bronze**

## *Ferrous*



**Medium Carbon Steel**



**Ductile Cast Iron**

## *Titanium*

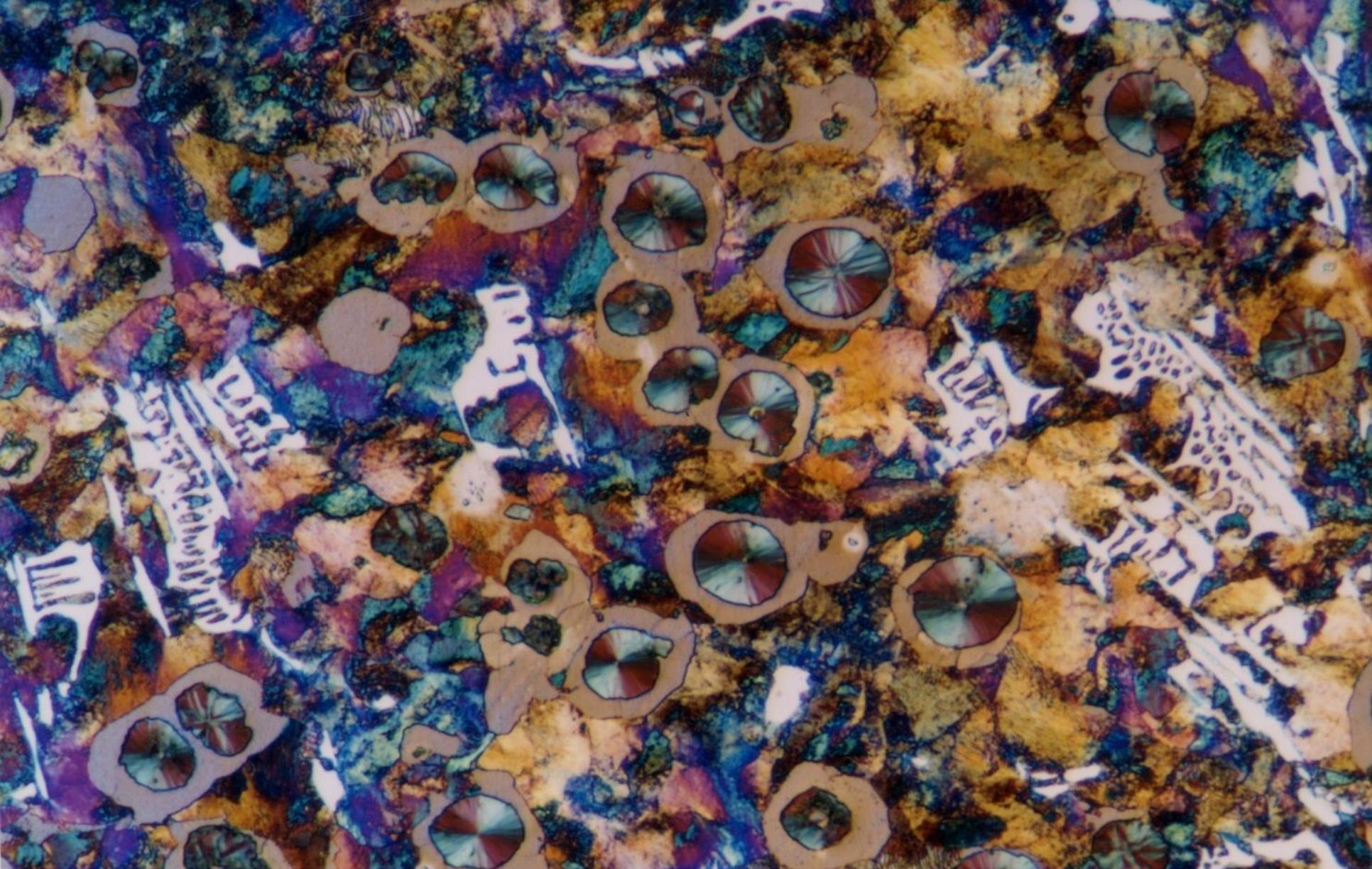


**Titanium 6-4**

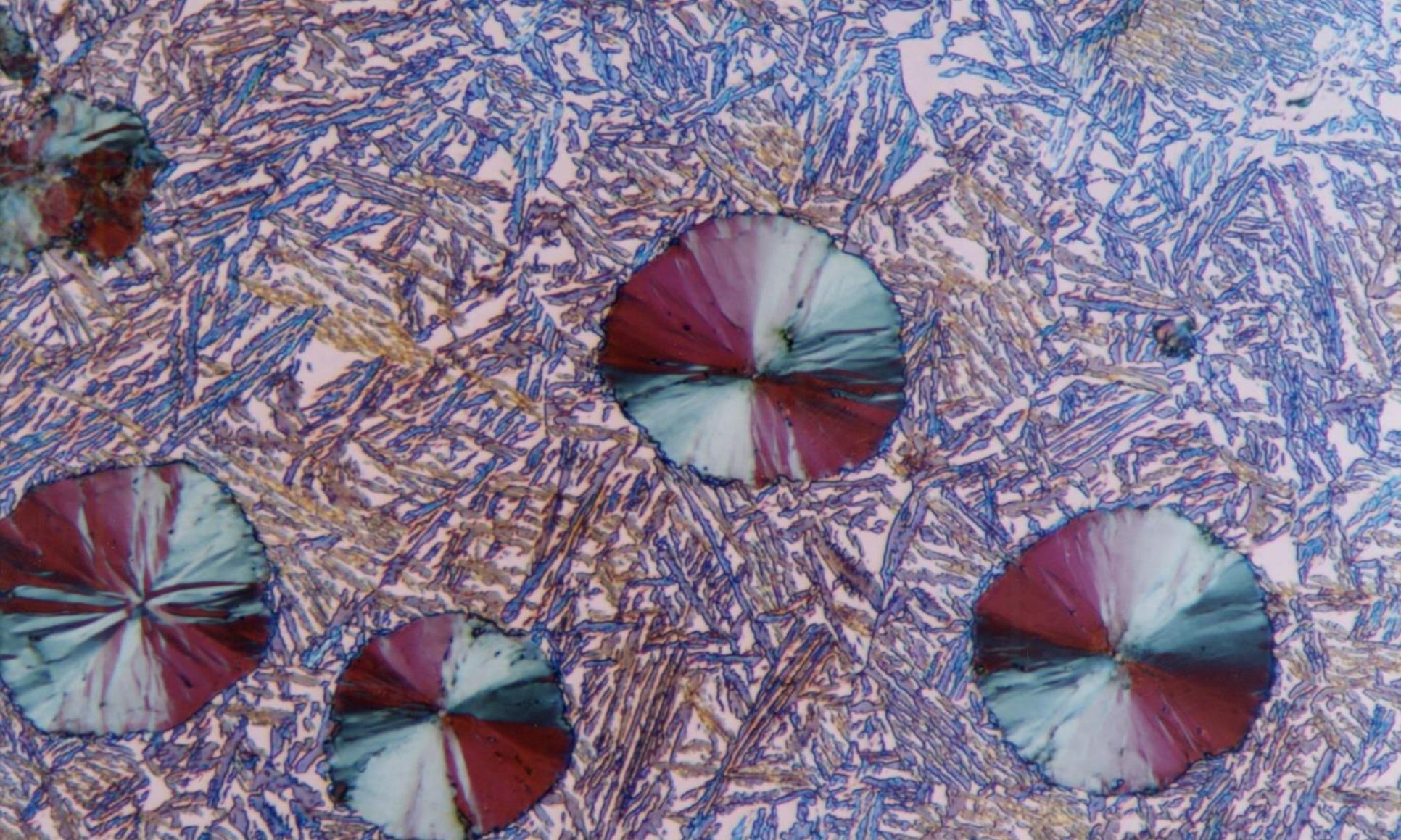
## *Sintered Carbides*



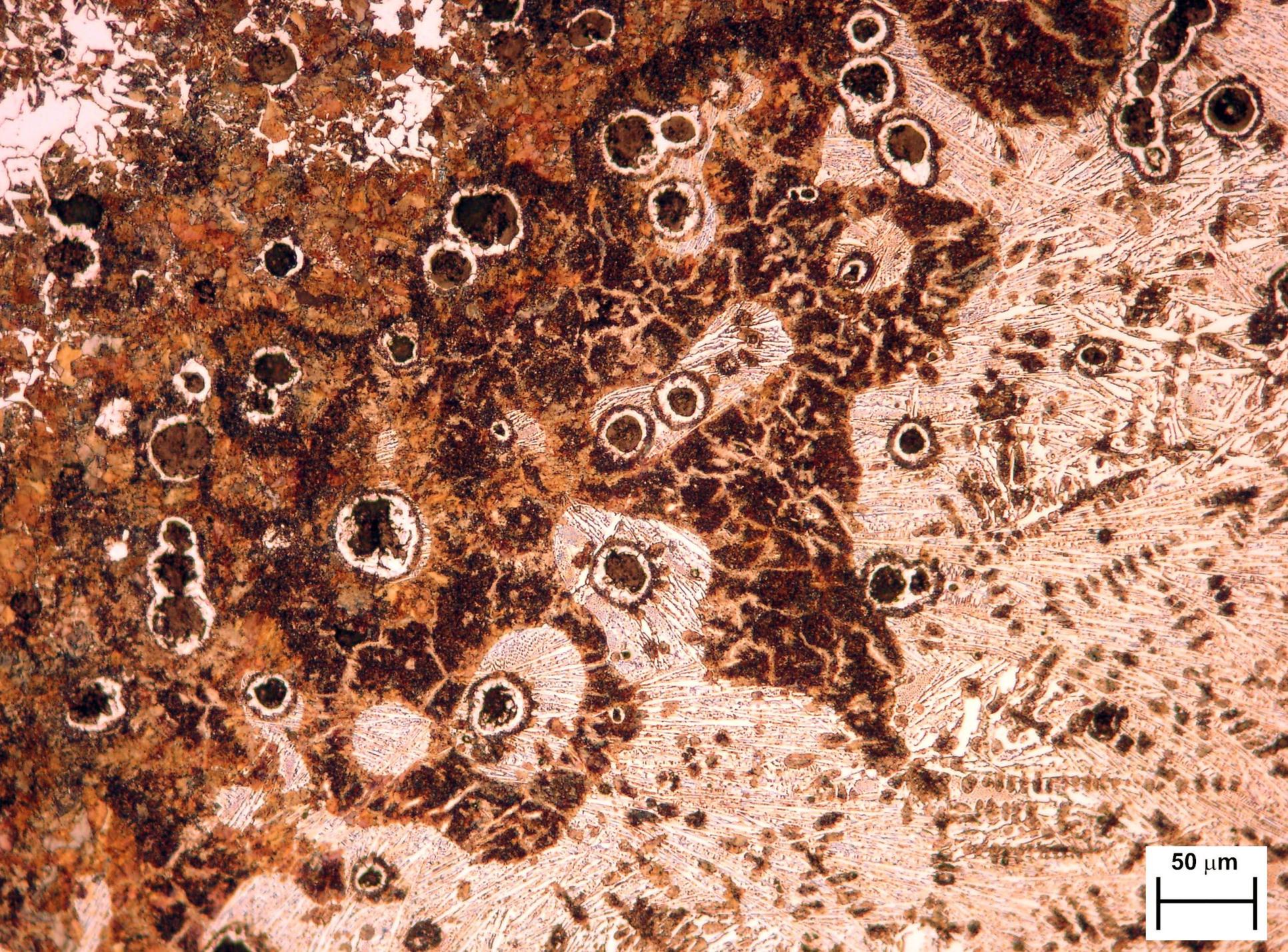
**Tungsten Carbide**



Microstructure of pearlitic ductile iron containing cementite (white) revealed using Beraha's CdS reagent and viewed with polarized light plus sensitive tint. Original at 500X.

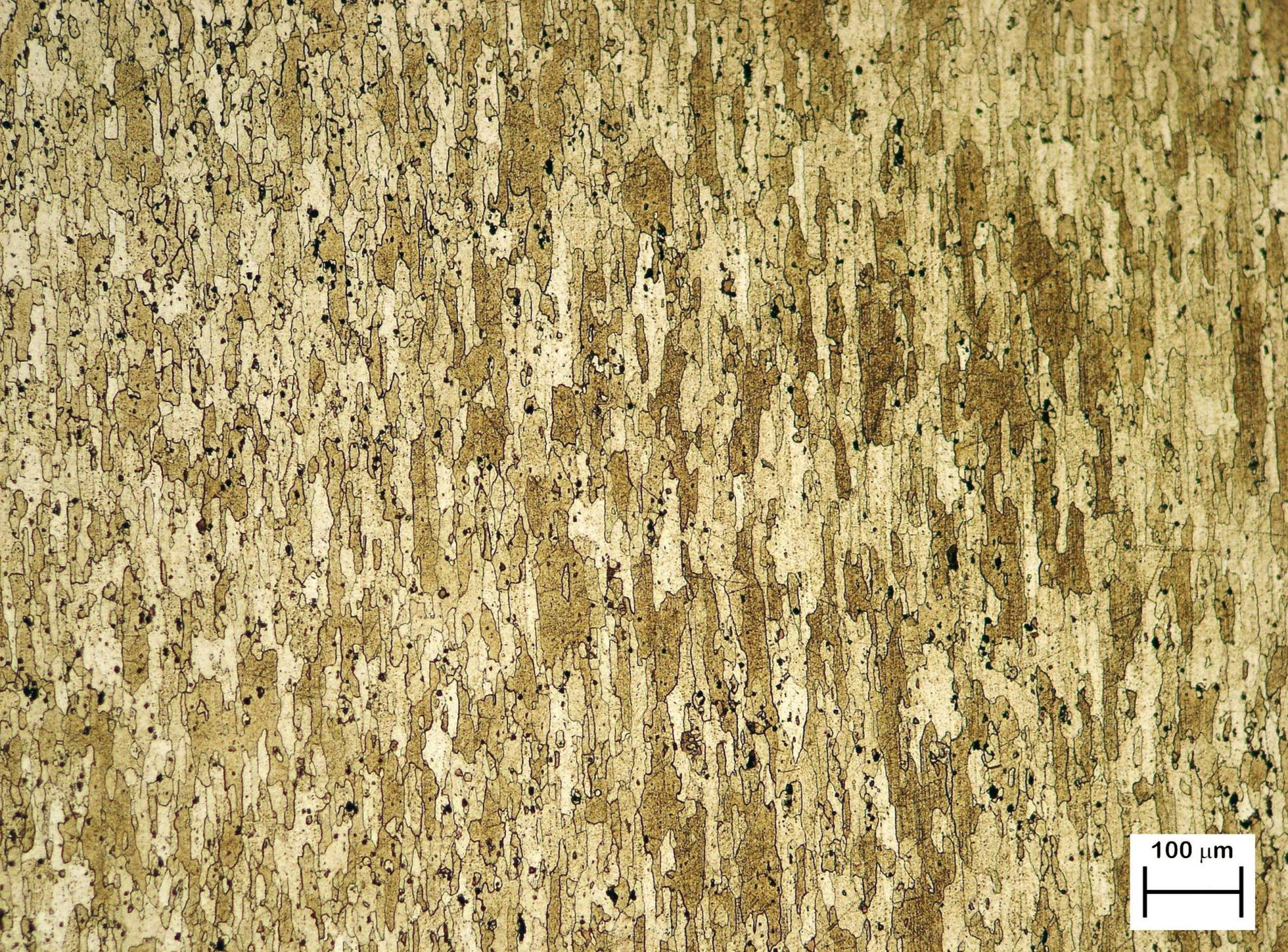


**Microstructure of austempered ductile iron tint etched with Beraha's CdS reagent containing large graphite nodules (arrow), bainite (blue and brown) and retained austenite (white) when viewed with polarized light plus sensitive tint. Original at 500X.**

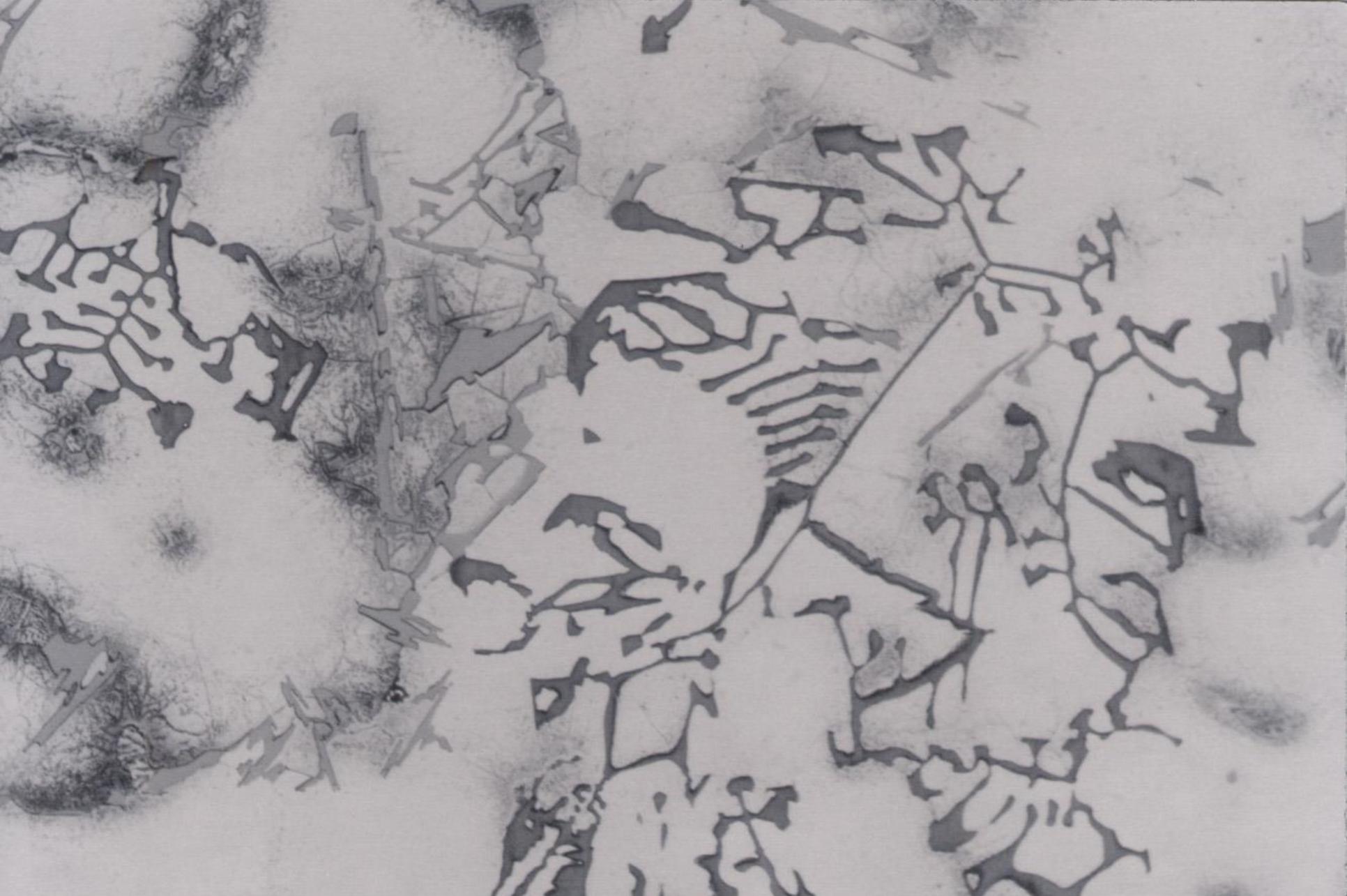


50 μm

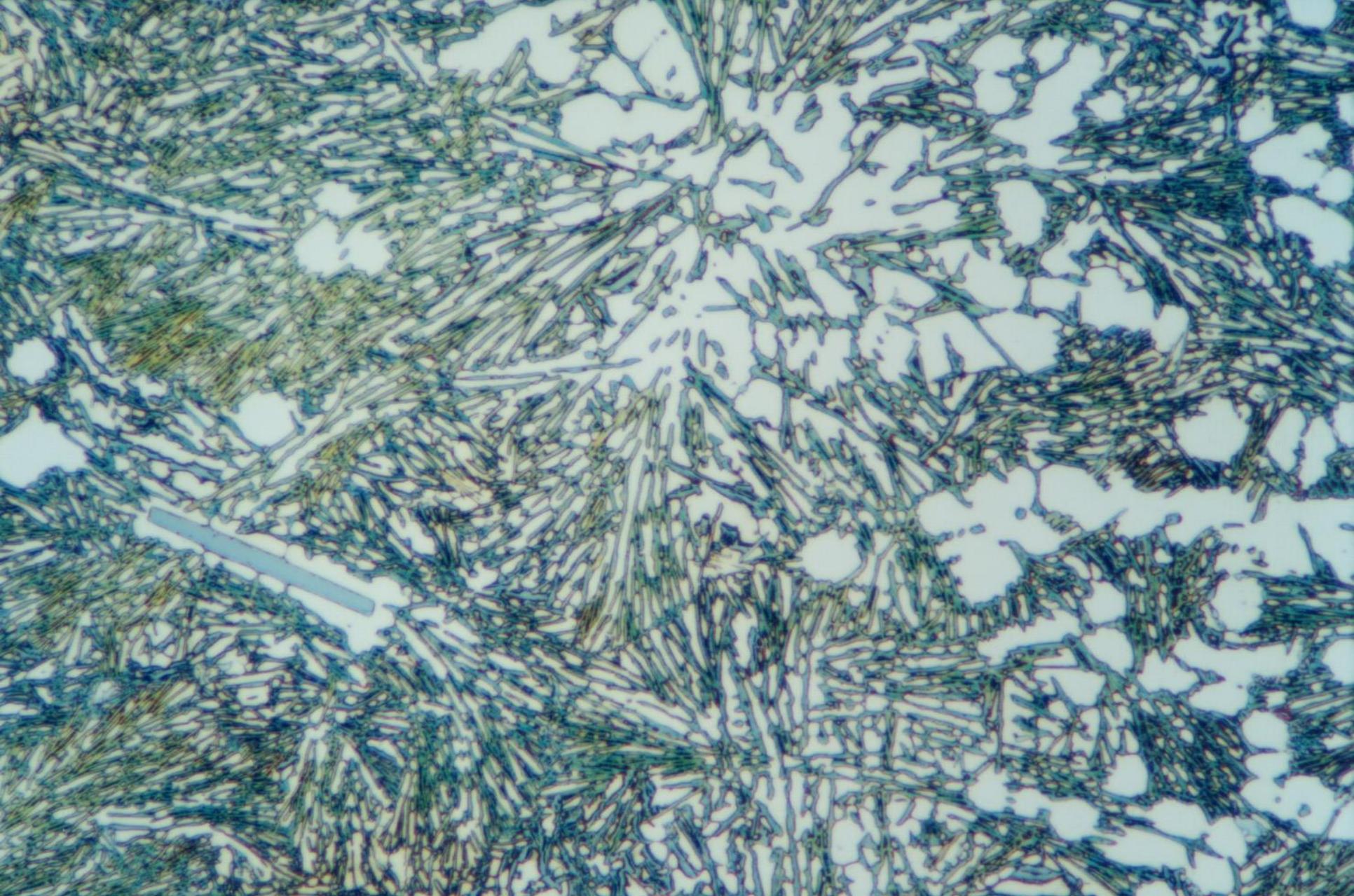




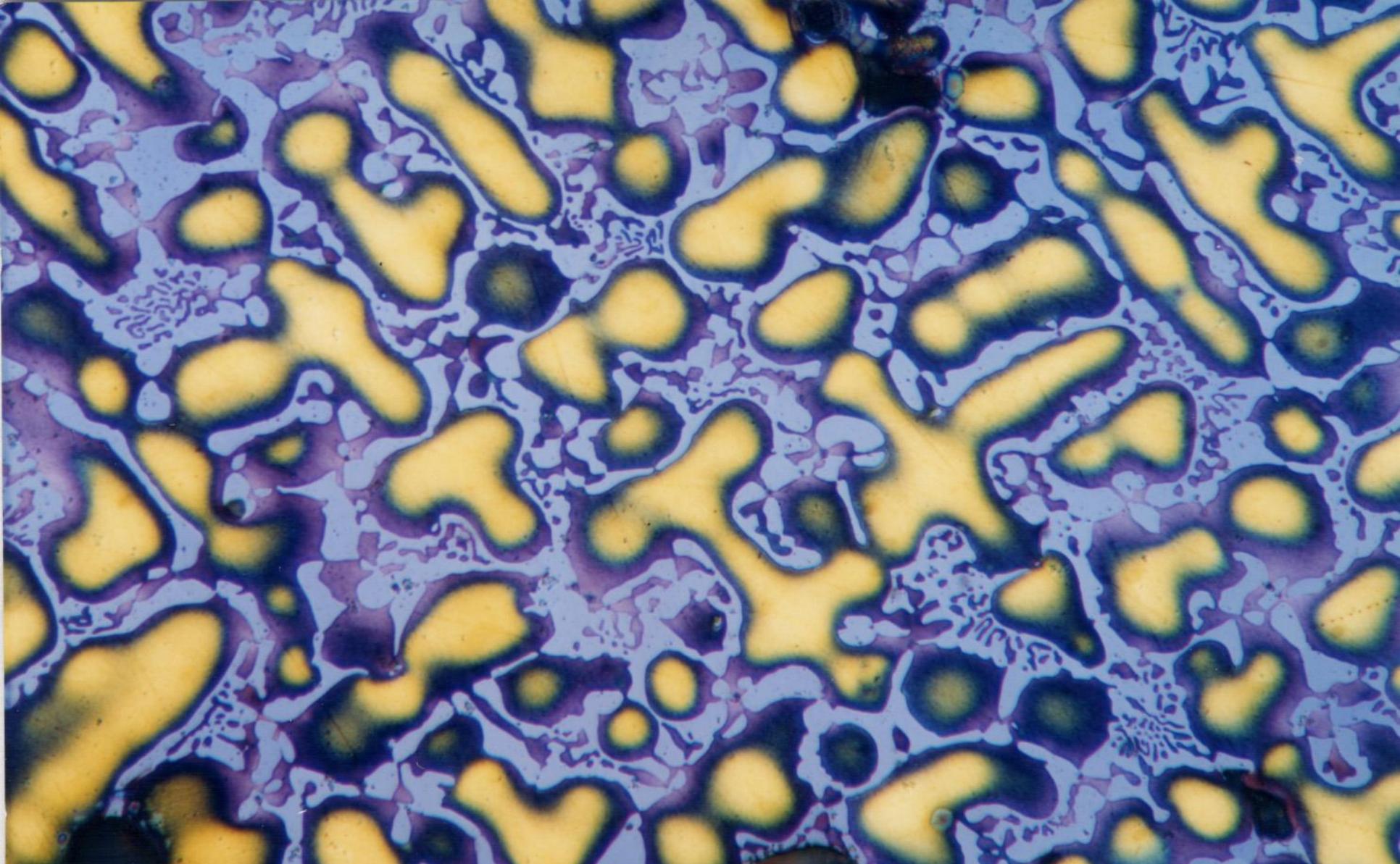
100 μm



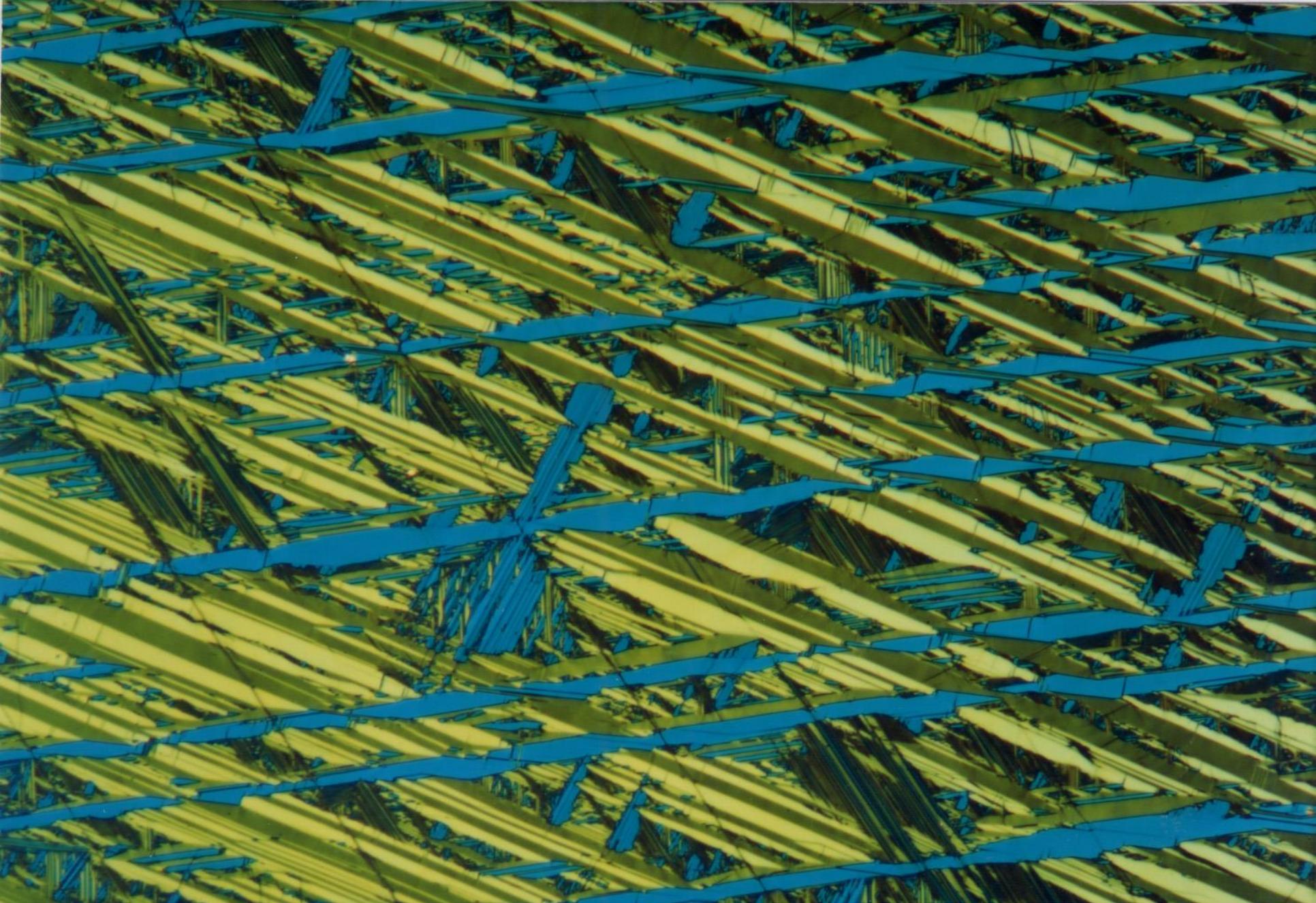
**As-cast 319 aluminum (Al – 6.0% Si – 3.5% Cu) tint etched with Keller’s reagent revealing the intermetallic precipitates. Magnification bar is 50  $\mu\text{m}$  long.**



**As-cast Al – 11.6% Si – 0.6% Fe tint etched with Weck's reagent and viewed with crossed polars. Original at 100X.**

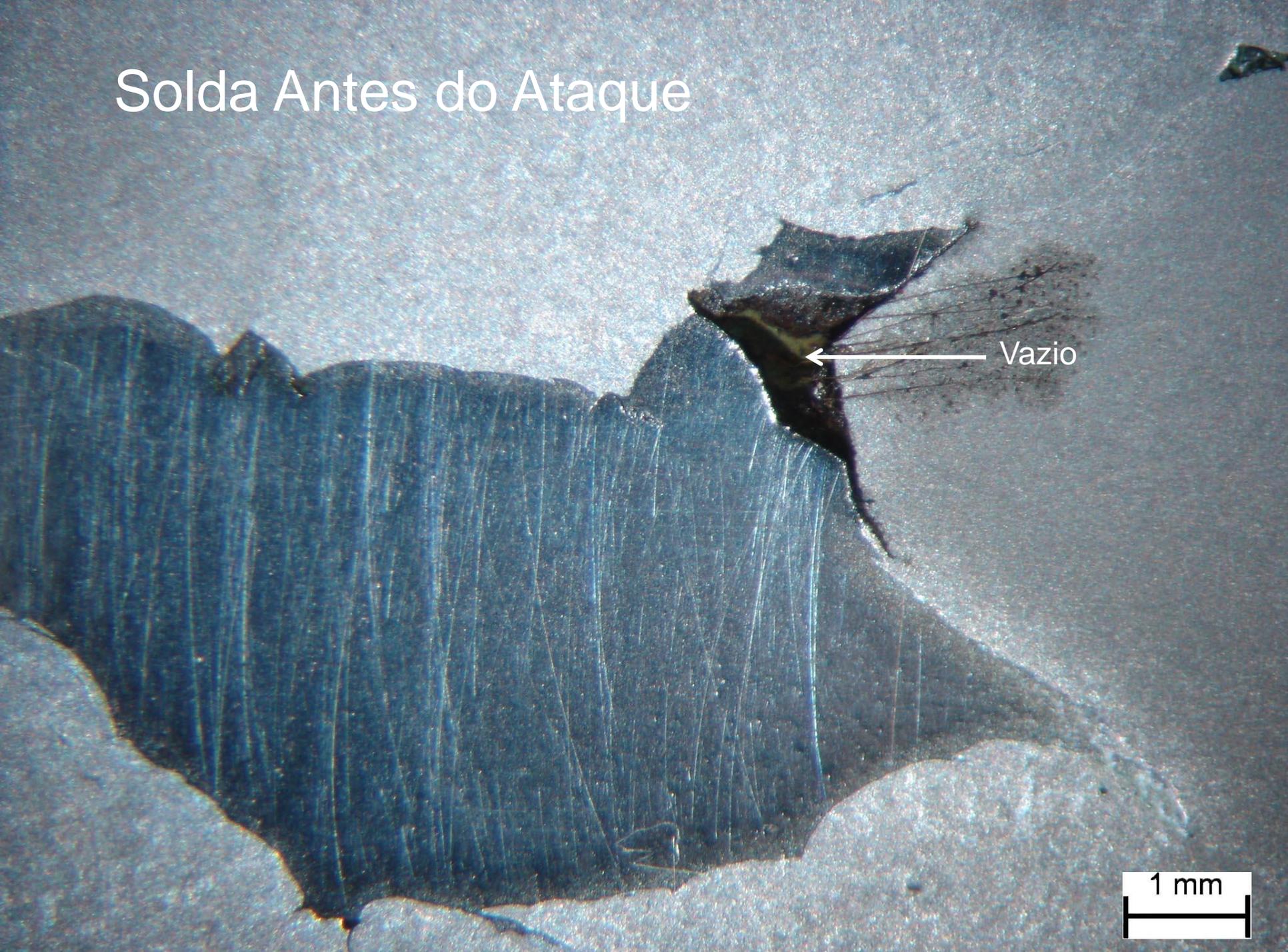


As-cast hypoeutectic Cu – 4.5% P tint etched with Klemm's II reagent which colors the copper-rich proeutectic dendrites. Polarized light plus sensitive tint has changed the appearance (compare with previous image). The copper dendrites are yellow and the last region to solidify, just above the eutectic temperature, has the same color as the copper in the eutectic. The copper phosphide,  $\text{Cu}_3\text{P}$  in the eutectic is colored by the sensitive tint filter. Original at 200X.



Wrought, eutectoid aluminum bronze, Cu – 11.8% Al, heat treated (Heat to 900 ° C (1652 ° F), hold 1 h, water quench) to form martensite. Specimen was not etched. Original at 200X. Viewed with cross polarized light.

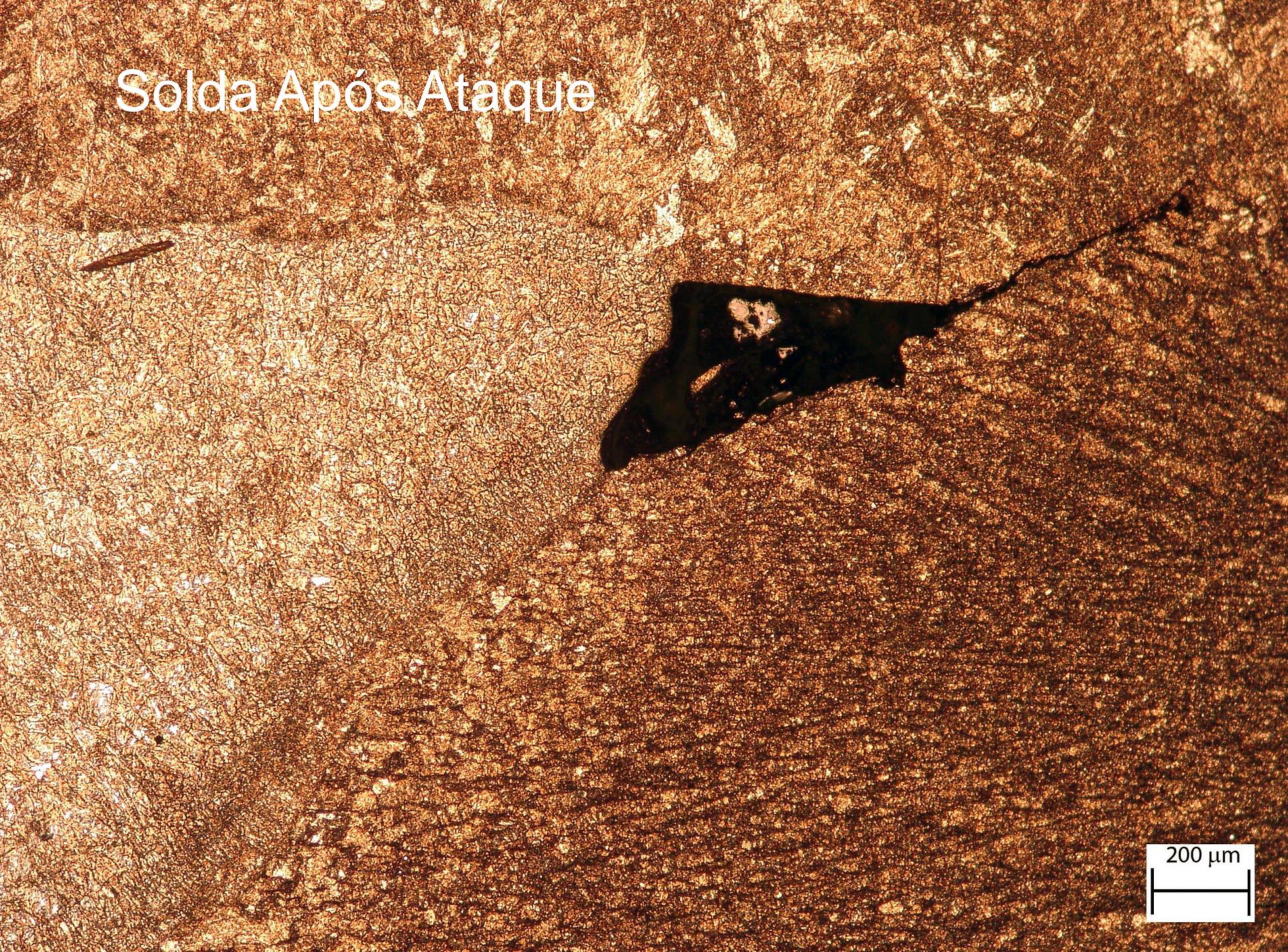
# Solda Antes do Ataque



Vazio

1 mm

Solda Após Ataque



200  $\mu\text{m}$

