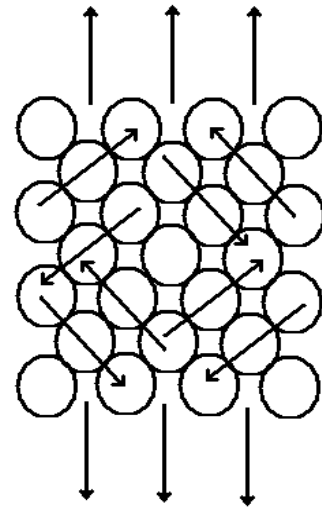


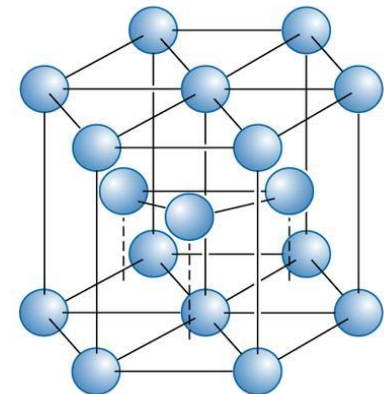
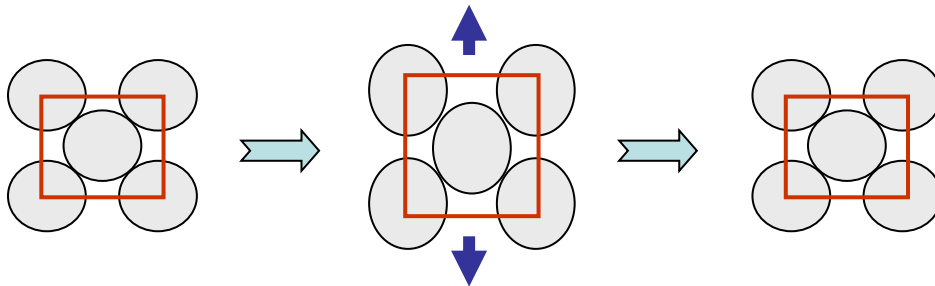
Universidade de São Paulo

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

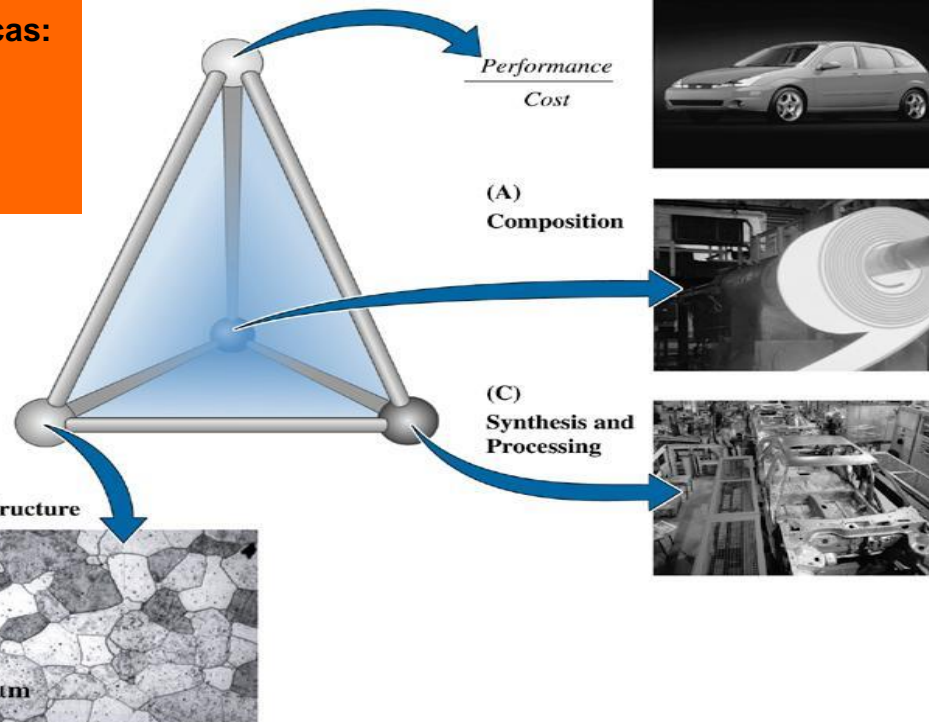
- Estrutura atômica & Ligações interatômicas
- Estrutura dos sólidos cristalinos
- Imperfeições estruturais nos sólidos

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:

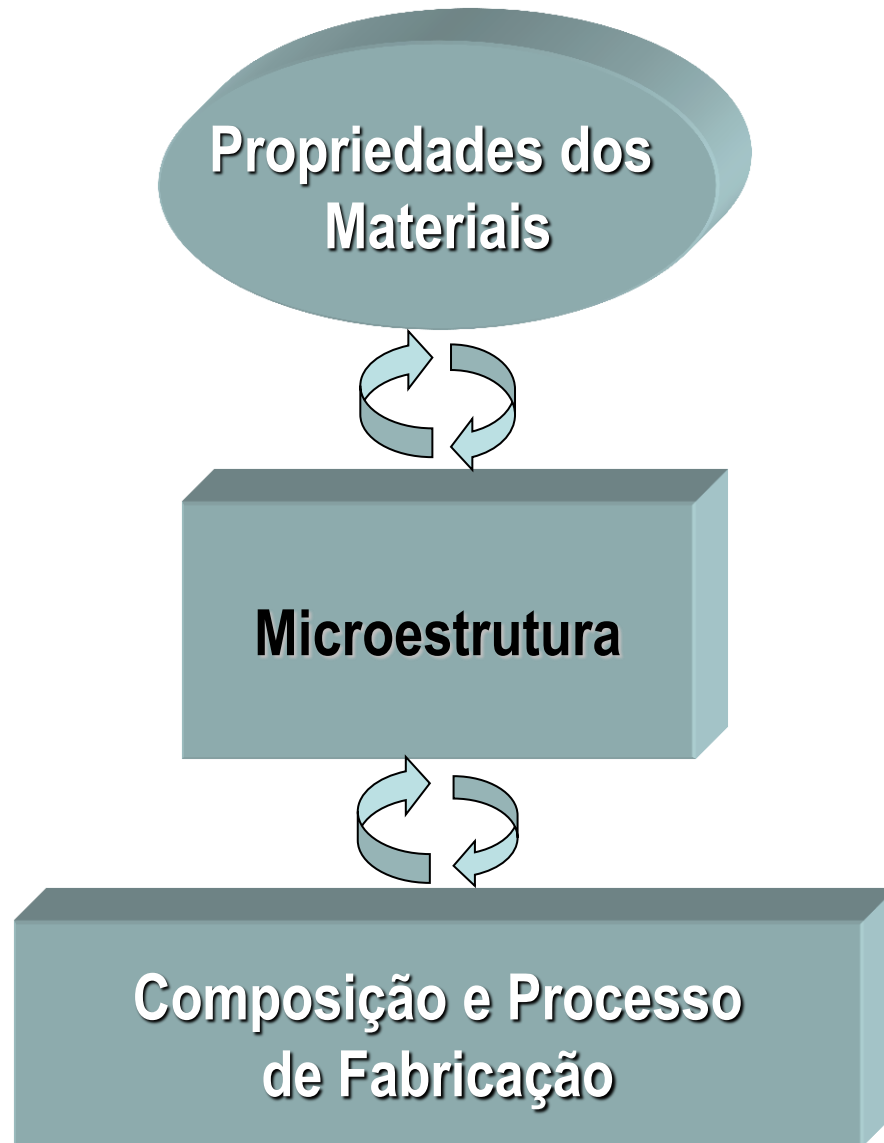
- Mecânica do contínuo
- Computação
- Termodinâmica
- Cinética

Processamento:

- Forjamento
- Laminação
- Extrusão
- Fundição

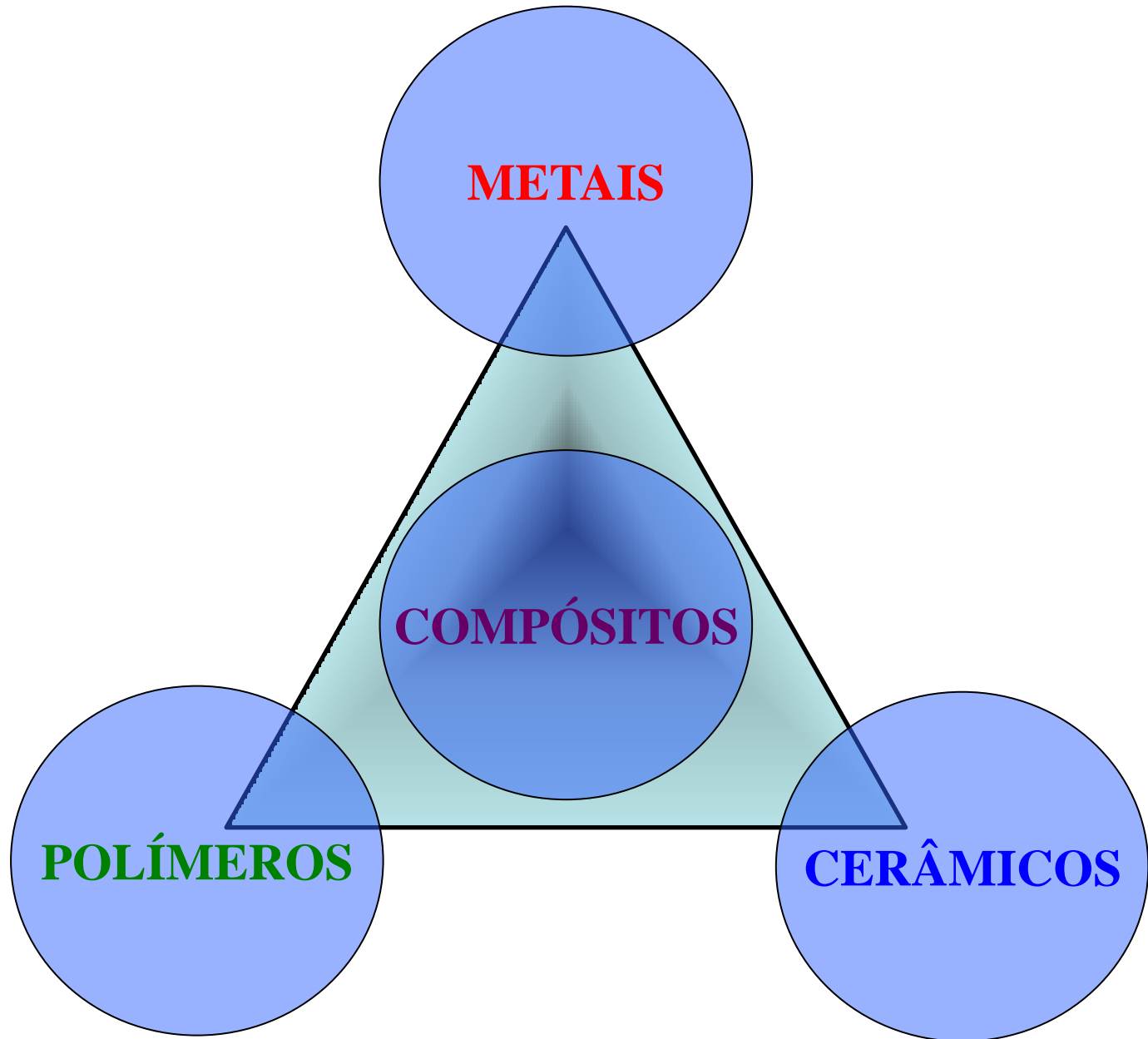
Caracterização:

- Ensaio mecânicos
- Microscopia
- Difração de raios-X



↑
**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 ³)	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 ^{-3/2})	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	NÃO - METAIS	SEMI - METAIS
Bons condutores de calor e de electricidade Geralmente sólidos à temperatura ambiente	Maus condutores de calor e de electricidade Menor uniformidade nas suas propriedades do que os metais	Propriedades intermédias entre os metais e os não-metais

Número Atômico → 1

Peso Atômico → 100794

Símbolo Químico → **H**

Nome do Elemento → Hidrogênio

1A (1)		2A (2)												3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)				
1 100794 H Hidrogênio		3 6,941 Li Lítio	4 9,012182 Be Berílio															5 10,811 B Boro	6 12,0107 C Carbono	7 14,00674 N Nitrogênio	8 15,9994 O Oxigênio	9 18,99840 F Flúor	10 4,002602 He Hélio
11 22,989770 Na Sódio	12 24,3050 Mg Magnésio	3B (3)	4B (4)	5B (5)	6B (6)	7B (7)	8B (8)	9B (9)	10B (10)	11B (11)	12B (12)	13 26,98153 Al Alumínio	14 28,0855 Si Silício	15 30,9737 P Fósforo	16 32,006 S Enxofre	17 35,4527 Cl Cloro	18 39,948 Ar Argônio						
19 39,0983 K Potássio	20 40,078 Ca Cálcio	21 44,9559 Sc Escândio	22 47,867 Ti Titânio	23 50,9415 V Vanádio	24 51,9661 Cr Cromo	25 54,938 Mn Manganês	26 55,845 Fe Ferro	27 58,9332 Co Cobalto	28 58,6934 Ni Níquel	29 63,546 Cu Cobre	30 65,39 Zn Zinco	31 69,723 Ga Gálio	32 72,61 Ge Germânio	33 74,9216 As Arsênio	34 78,96 Se Selênio	35 79,904 Br Bromo	36 83,8 Kr Criptônio						
37 85,4678 Rb Rubídio	38 87,62 Sr Estrôncio	39 88,905 Y Ítrio	40 91,224 Zr Zircônio	41 92,906 Nb Nióbio	42 95,94 Mo Molibdênio	43 96,049 Tc Tecnécio	44 101,07 Ru Rutênio	45 102,9055 Rh Ródio	46 106,42 Pd Paládio	47 107,8682 Ag Prata	48 112,411 Cd Cádmio	49 114,818 In Índio	50 118,71 Sn Estanho	51 121,75 Sb Antimônio	52 127,6 Te Telúrio	53 126,9044 I Iodo	54 131,29 Xe Xenônio						
55 132,90545 Cs Césio	56 137,327 Ba Bário	57 * 71 *	72 178,49 Hf Háfnio	73 180,947 Ta Tântalo	74 183,84 W Tungstênio	75 186,207 Re Rênio	76 190,23 Os Ósmio	77 192,217 Ir Iridio	78 195,078 Pt Platina	79 196,966 Au Ouro	80 200,59 Hg Mercúrio	81 204,3833 Tl Tálio	82 207,2 Pb Chumbo	83 208,9803 Bi Bismuto	84 210 Po Polônio	85 210 At Astató	86 222 Rn Radônio						
87 223,0197 Fr Frâncio	88 226,02 Ra Rádio	89 * * 103 *	104 261,11 Rf Ruterfórdio	105 262,11 Db Dúbnio	106 263,11 Sg Seabórgio	107 262,12 Bh Bóhrio	108 269 Hs Hássio	109 268 Mt Meiteneó	110 269 Uun Unúnio	111 272 Uuu Unúmbio	112 277 Uub Anúmbio												

*	138,9055 57 La Lantânio	140,116 58 Ce Cério	140,9076 59 Pr Praseodímio	144,24 60 Nd Neodímio	145,7 61 Pm Promécio	150,36 62 Sm Samário	151,964 63 Eu Európio	157,25 64 Gd Gadolínio	158,9253 65 Tb Térbio	162,50 66 Dy Dispósio	164,9303 67 Ho Hólmio	167,26 68 Er Érbio	168,9342 69 Tm Túlio	173,04 70 Yb Intérbio	174,967 71 Lu Lutécio
* *	227 89 Ac Actínio	232,0381 90 Th Tório	231,0358 91 Pa Protactínio	238,0289 92 U Urânio	237 93 Np Netúnio	244 94 Pu Plutônio	243 95 Am Americio	247 96 Cm Cúrio	247 97 Bk Berquélio	251 98 Cf Califórnio	252 99 Es Einstênio	257 100 Fm Férmio	258 101 Md Mendelévio	259 102 No Nobélio	262 103 Lr Laurêncio

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

*	138,9055 57 La Lantânio	140,116 58 Ce Cério	140,9076 59 Pr Praseodímio	144,24 60 Nd Neodímio	145,7 61 Pm Promécio	150,36 62 Sm Samário	151,964 63 Eu Európio	157,25 64 Gd Gadolínio	158,9253 65 Tb Térbio	162,50 66 Dy Disprósio	164,9303 67 Ho Hólmio	167,26 68 Er Érbio	168,9342 69 Tm Túlio	173,04 70 Yb Íterbio	174,967 71 Lu Lutécio
**	227 89 Ac Actínio	232,0381 90 Th Tório	231,0358 91 Pa Protactínio	238,0289 92 U Urânio	237 93 Np Netúnio	244 94 Pu Plutônio	243 95 Am Americío	243 96 Cm Cúrio	247 97 Bk Berquécio	251 98 Cf Califórnio	252 99 Es Einstênio	257 100 Fm Férmio	258 101 Md Mendeléio	259 102 No Nobéio	262 103 Lr Laurêncio

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

Cerâmicas são constituídas de **metais & não-metais** (Al_2O_3), **metais & semi-metais** (MoSi_2), e **semi-metais & não-metais** (BN , SiC , Si_3N_4).

CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- Polímeros

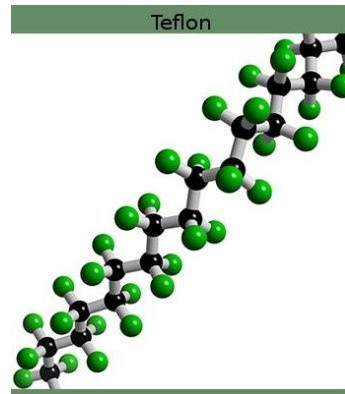


- São geralmente compostos orgânicos baseados em carbono, hidrogênio e outros elementos não-metálicos
- São constituídos de moléculas muito grandes (macromoléculas)
- Tipicamente esses materiais apresentam baixa densidade e podem ser extremamente flexíveis
- Materiais poliméricos incluem plásticos e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

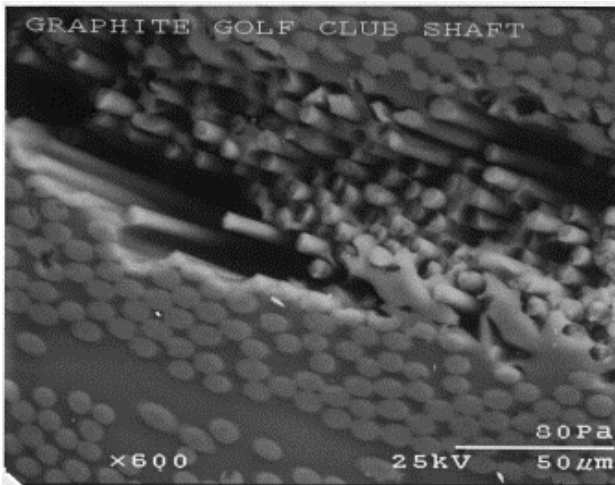


IA												III A IV A V A VI A VII A					II		
1	II A											5	6	7	8	9	10		
H	Be											B	C	N	O	F	Ne		
3 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
11 Na	12 Mg	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe		
55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	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			
87 Fr	88 Ra	89 Ac																	

92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md

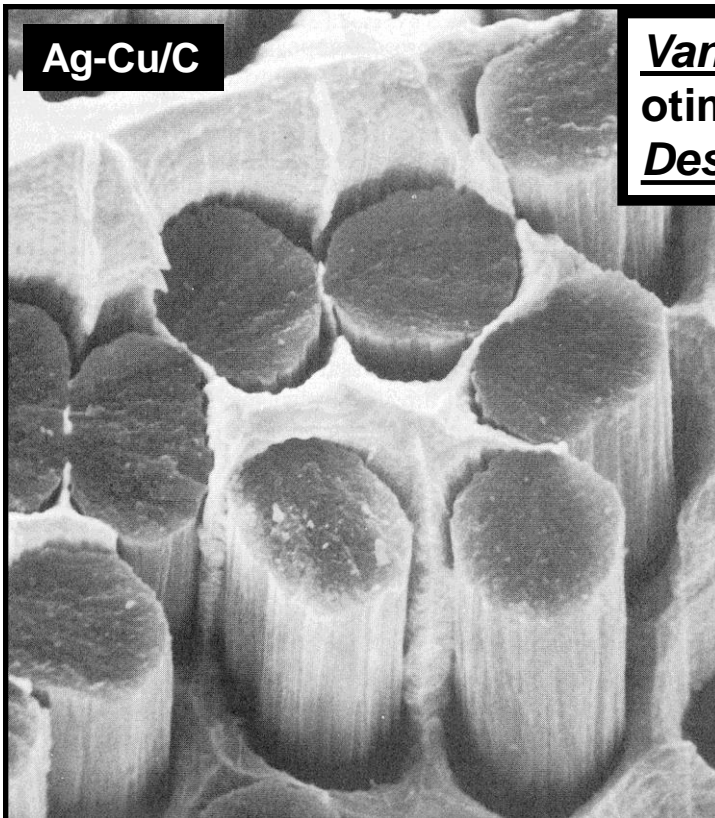
CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

- 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

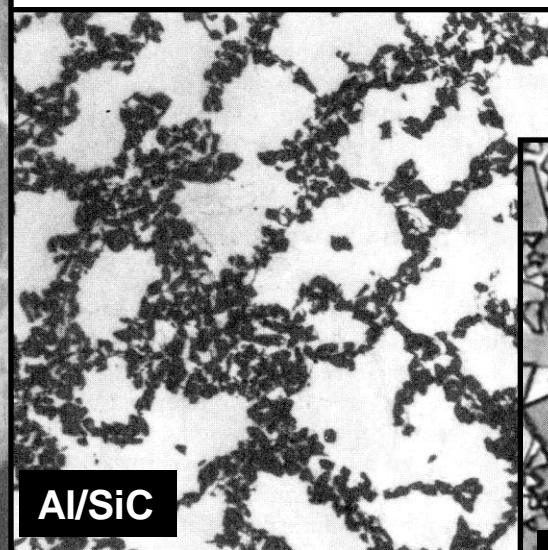
Ag-Cu/C



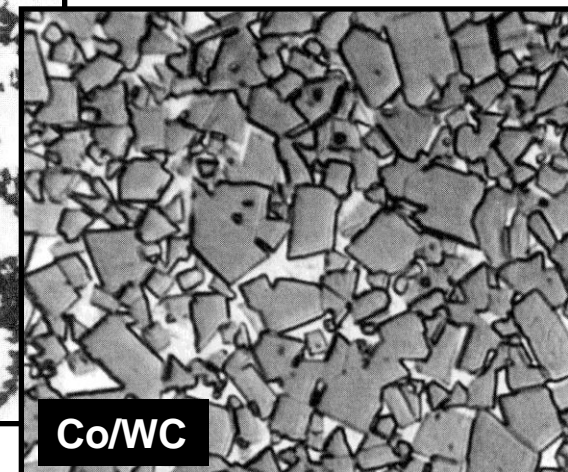
Vantagens: adequação ao uso (compatibilização-otimização de propriedades individuais);
Desvantagens: processamento, custo, reciclagem

COMPÓSITOS

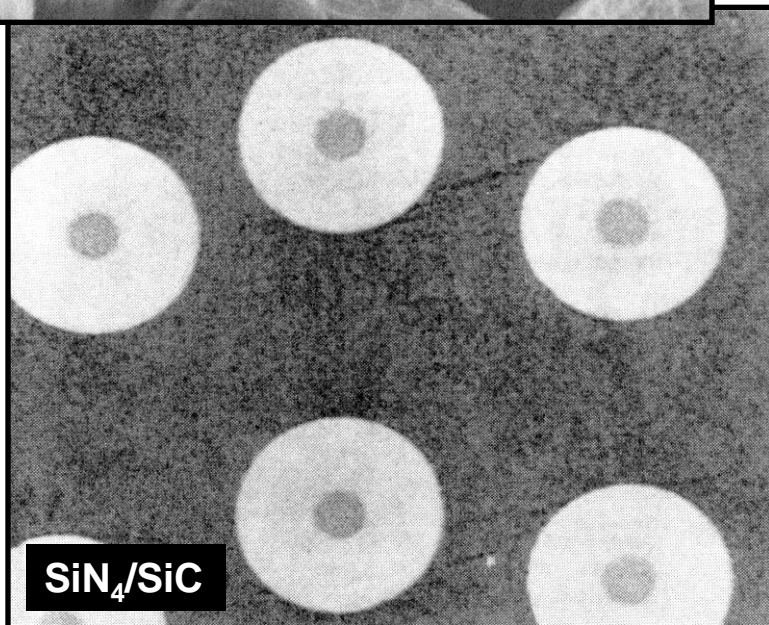
Al/SiC



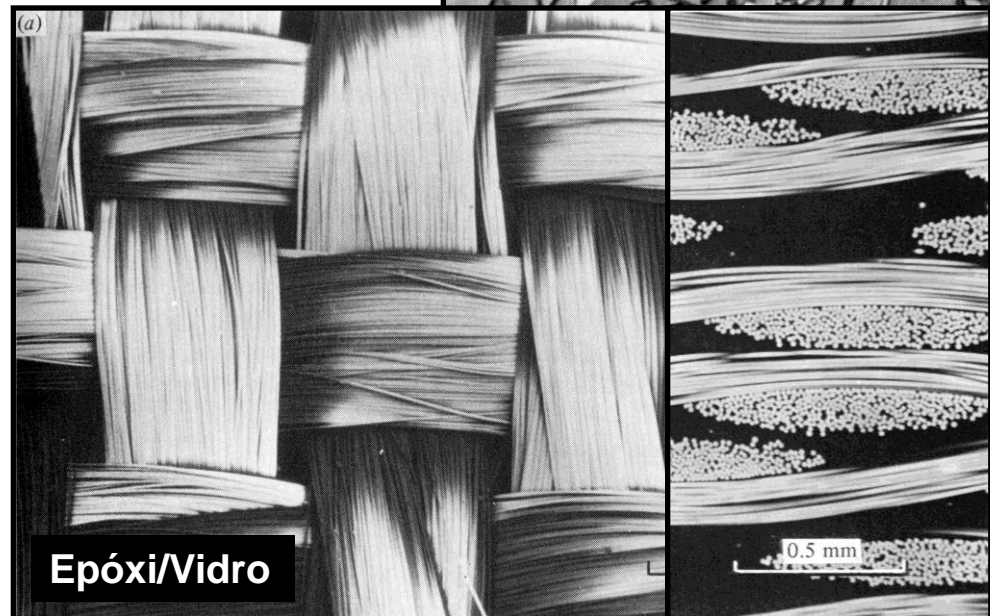
Co/WC



SiN₄/SiC

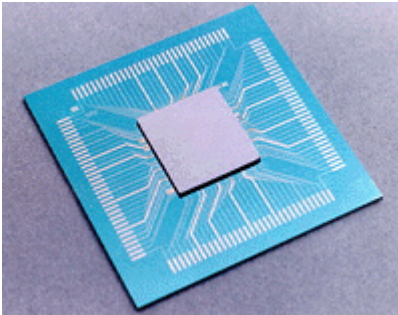


Epóxi/Vidro



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:**

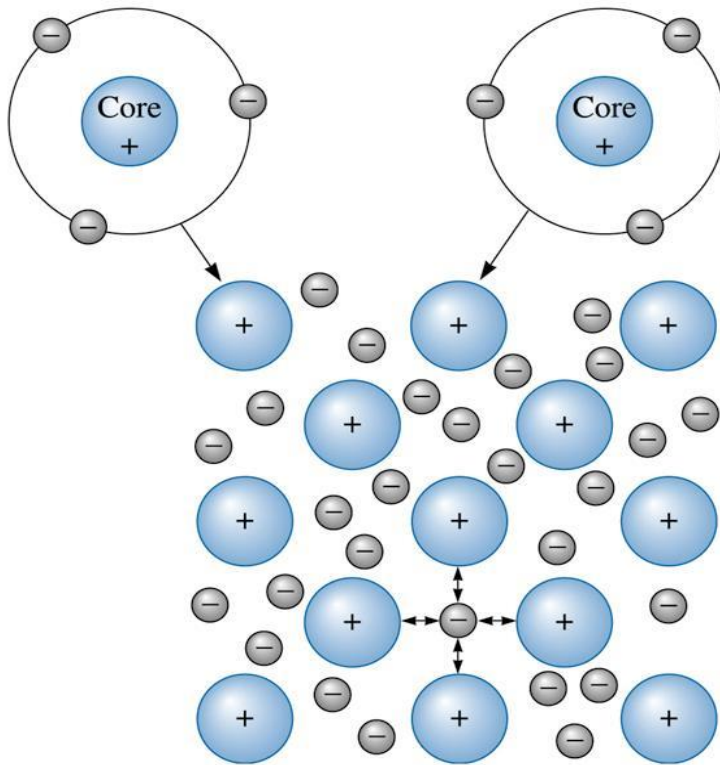
- **Iônica, Covalente, Metálica.**

- **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

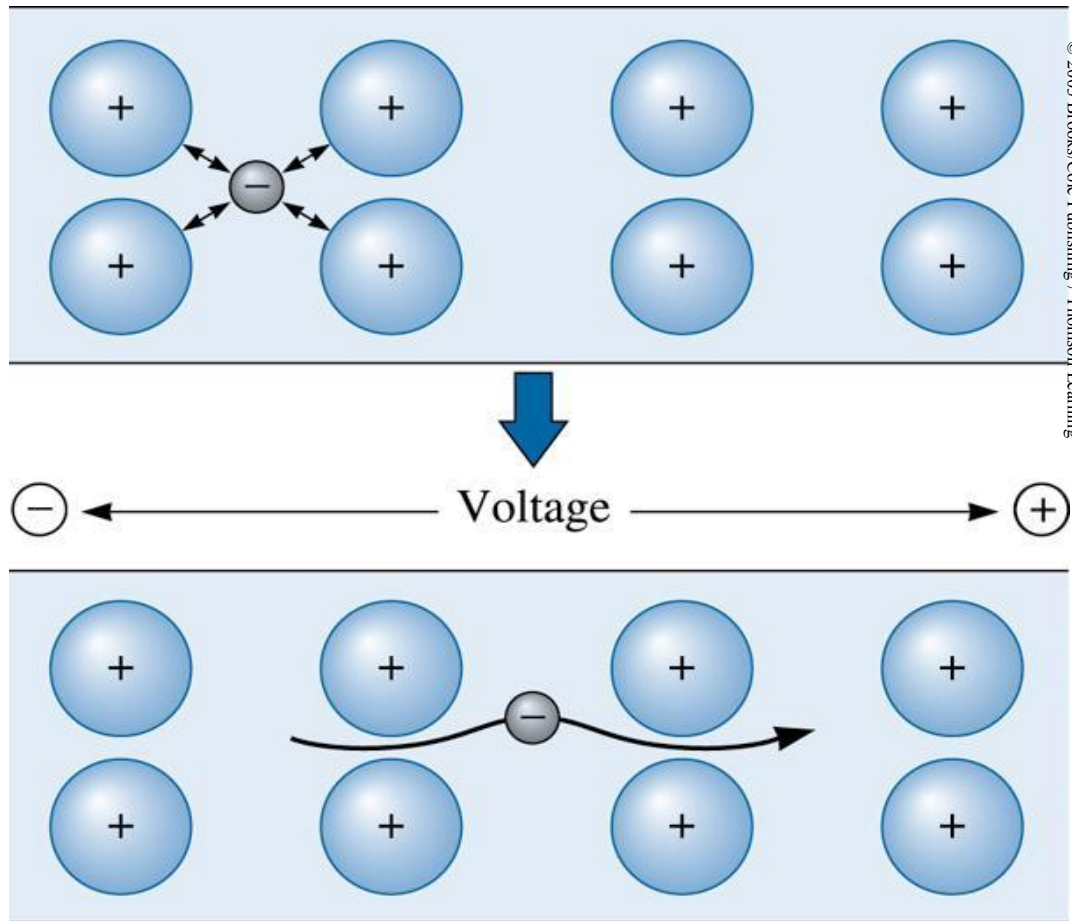


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

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.

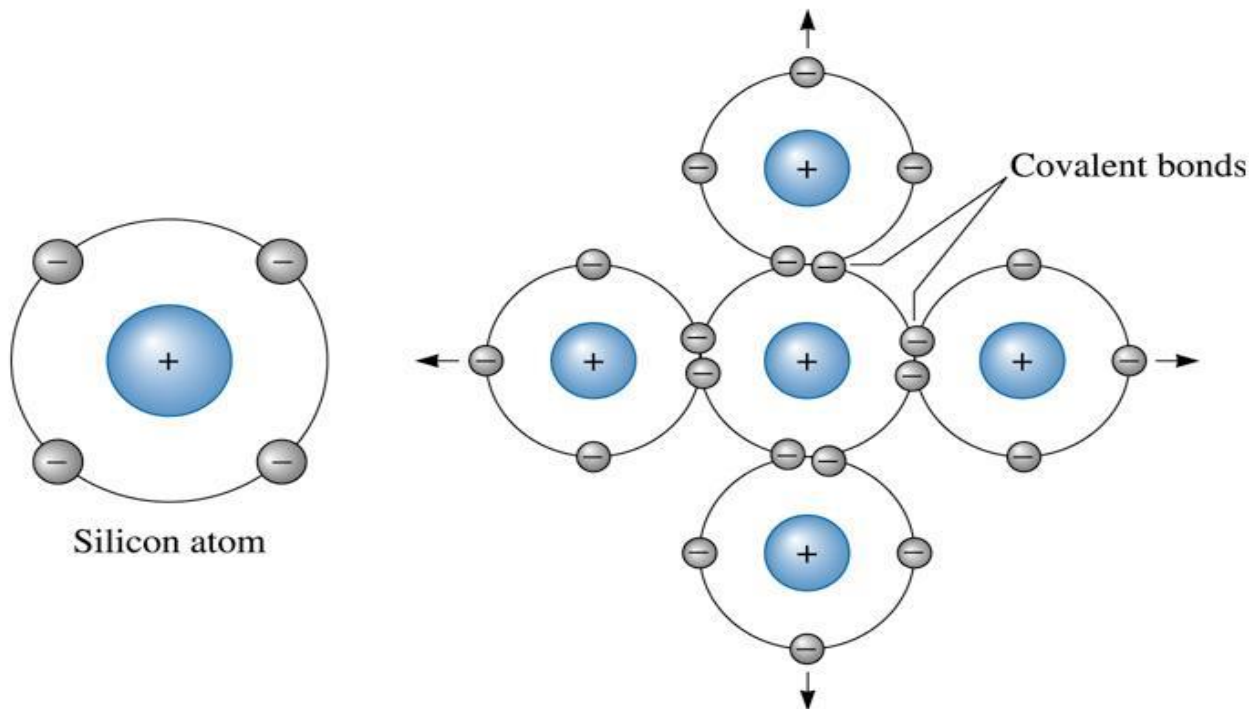
LIGAÇÃO METÁLICA



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°C, DURO) OU PODEM SER MUITO FRACAS COMO NO BISMUTO (FUNDE A 270°C).

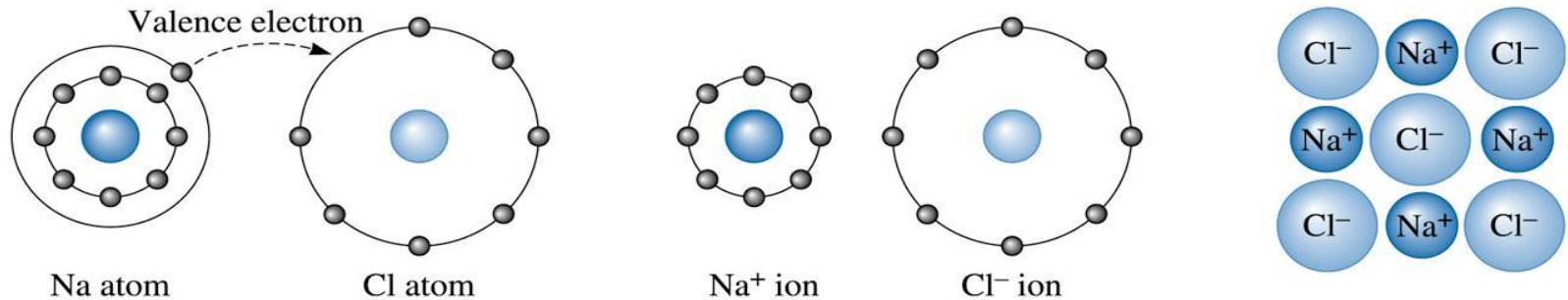


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

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

LIGAÇÃO IÔNICA

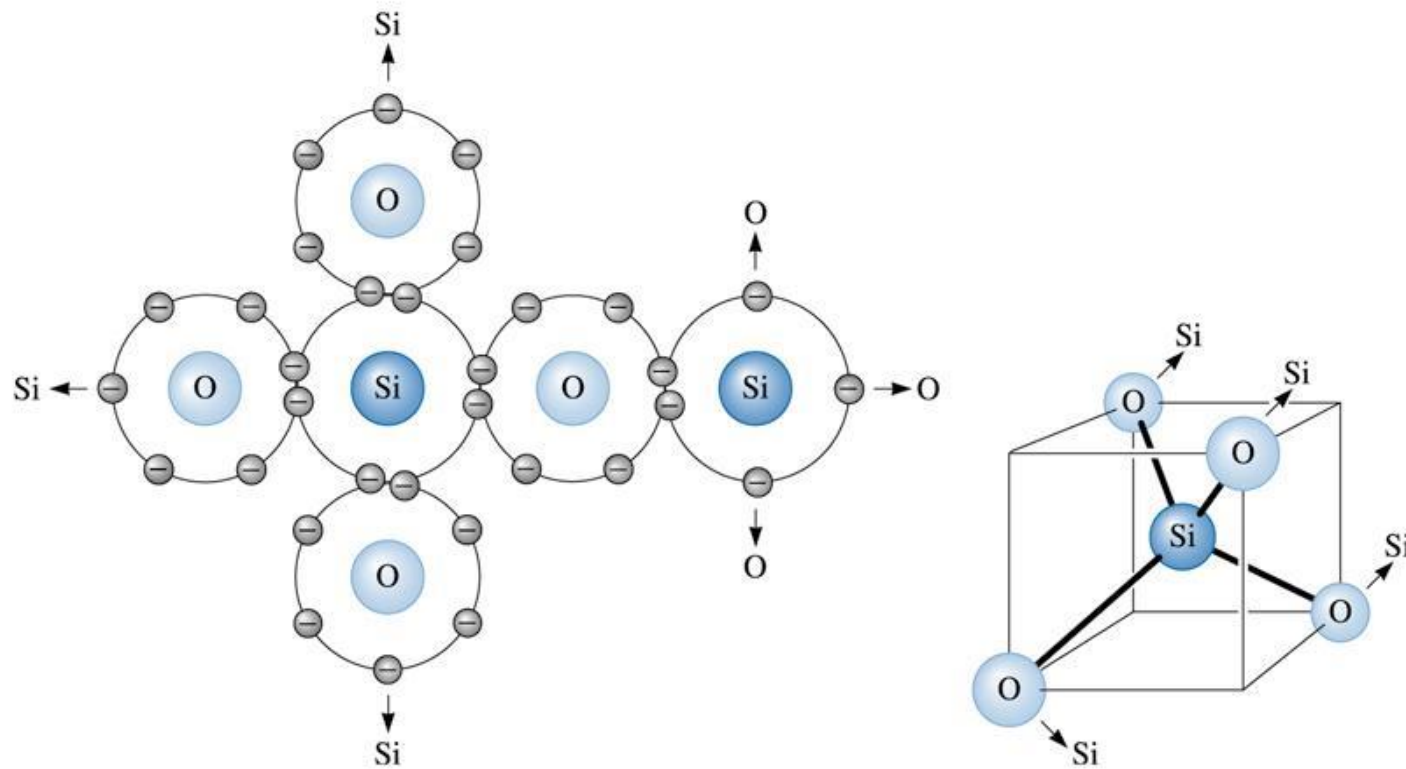
- ÁTOMOS FORMAM ÍONS QUANDO PERDEM OU GANHAM ELÉTRONS
- CÁTION É POSITIVO (Na^+) E ÂNION É NEGATIVO (Cl^-)
- LIGAÇÃO IÔNICA SE FORMA PELA ATRAÇÃO ELETROSTÁTICA ENTRE OS ÍONS
- CONDUTIVIDADE ELÉTRICA POBRE \Rightarrow MOVIMENTO IÔNICO



© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

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).

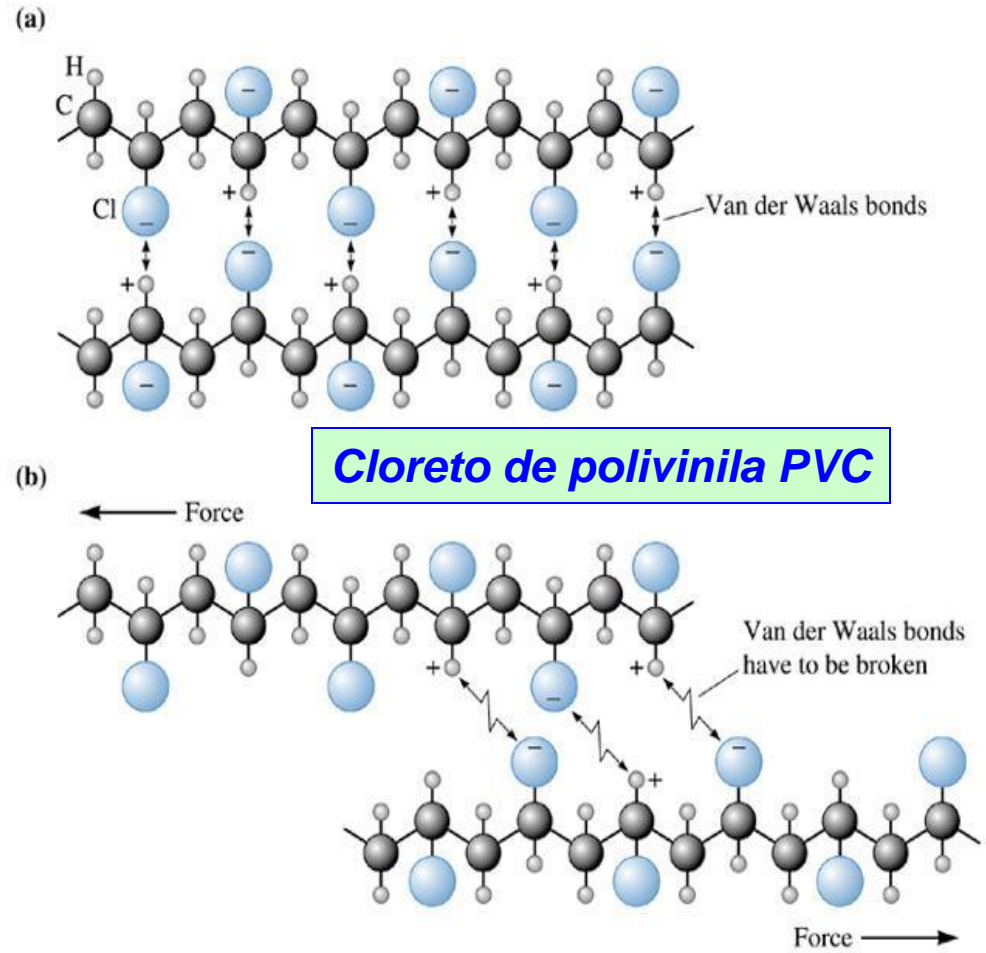


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

A estrutura tetraédrica da sílica (SiO₂), 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

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

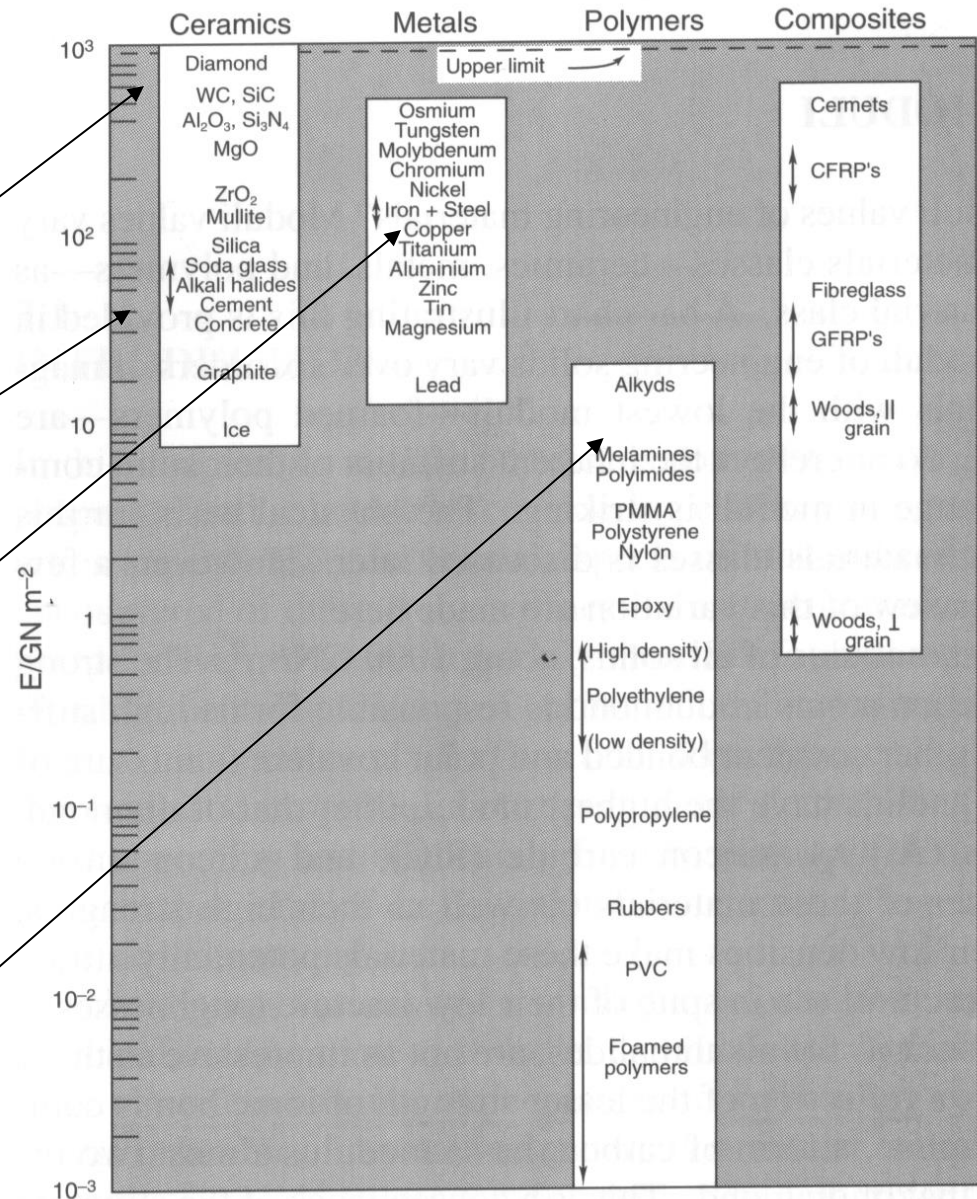
Propriedades Elásticas dos Materiais

Forte ligações covalentes

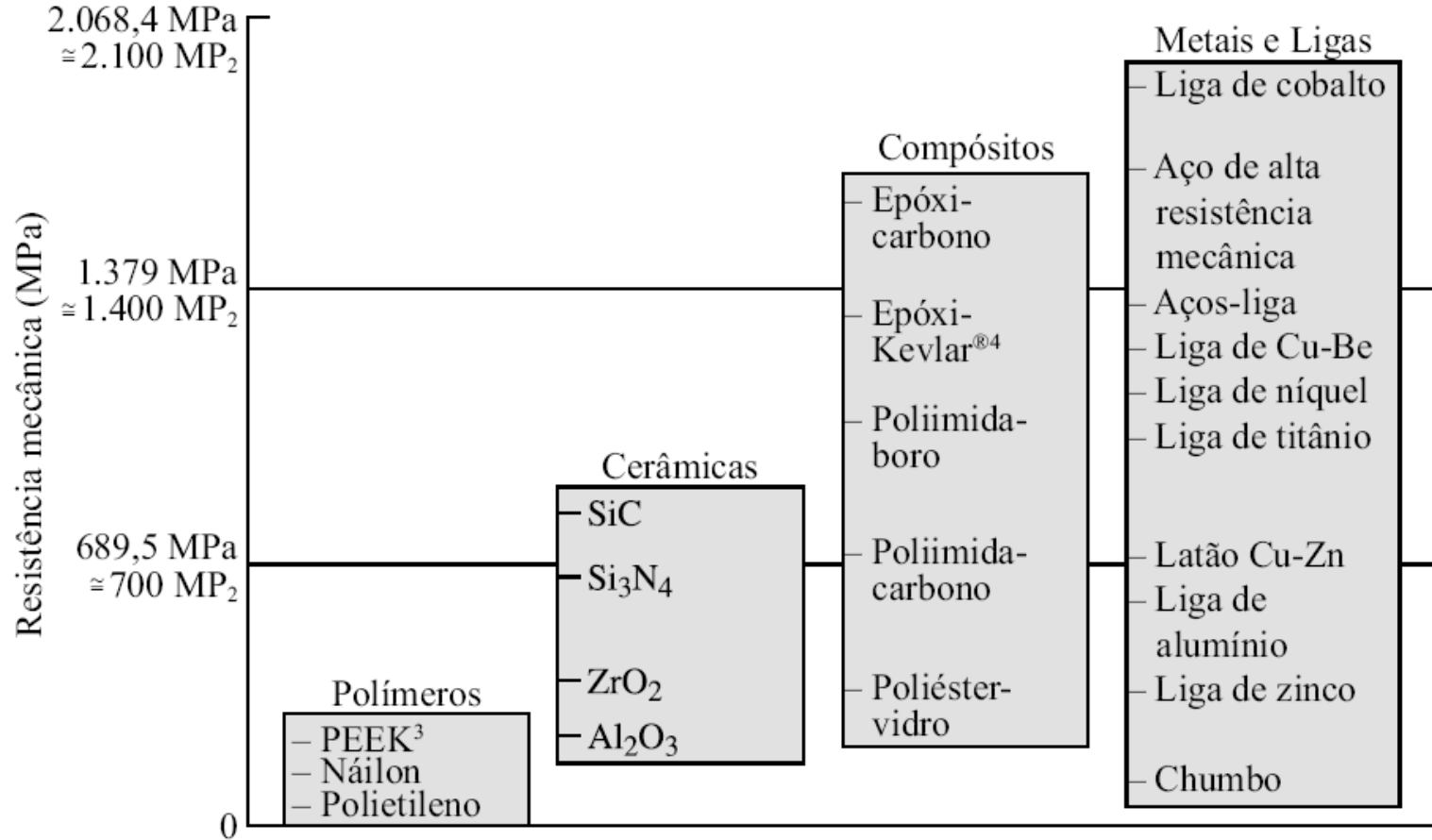
As ligações iônicas não são tão fortes quanto as covalentes.

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.

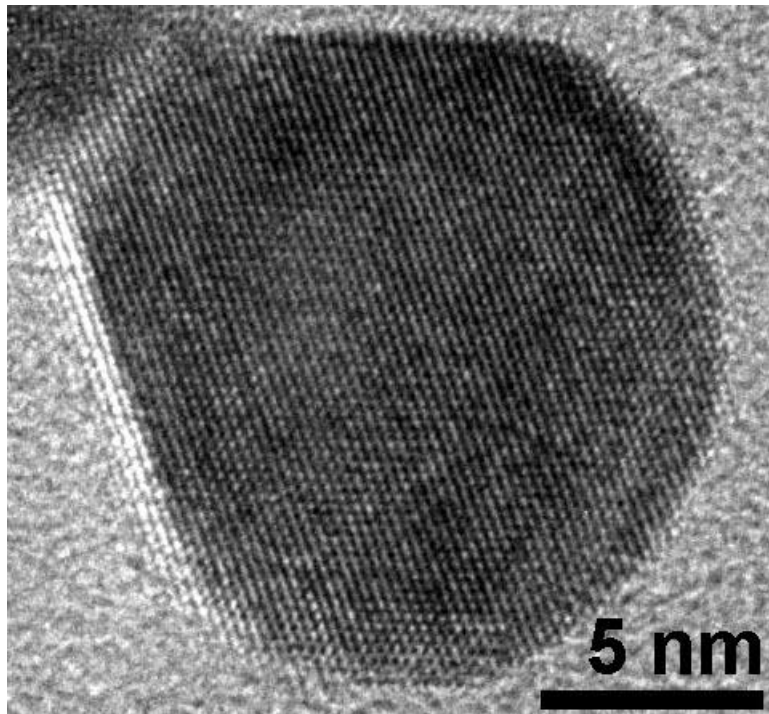


RESISTÊNCIA MECÂNICA DAS VÁRIAS CATEGORIAS DE MATERIAIS



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 (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 (SiO_2)

- Tetraedros de SiO_4^{4-} são a unidade básica

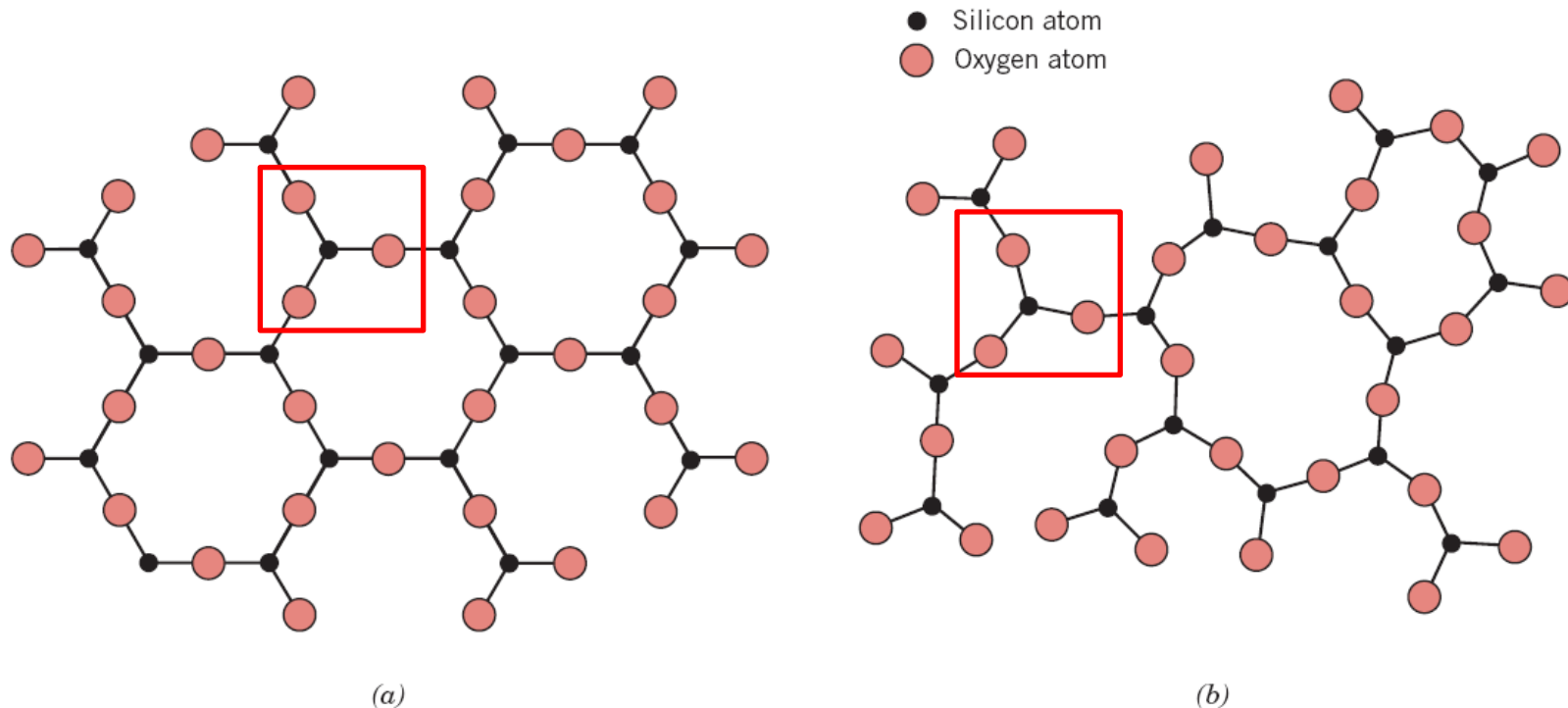
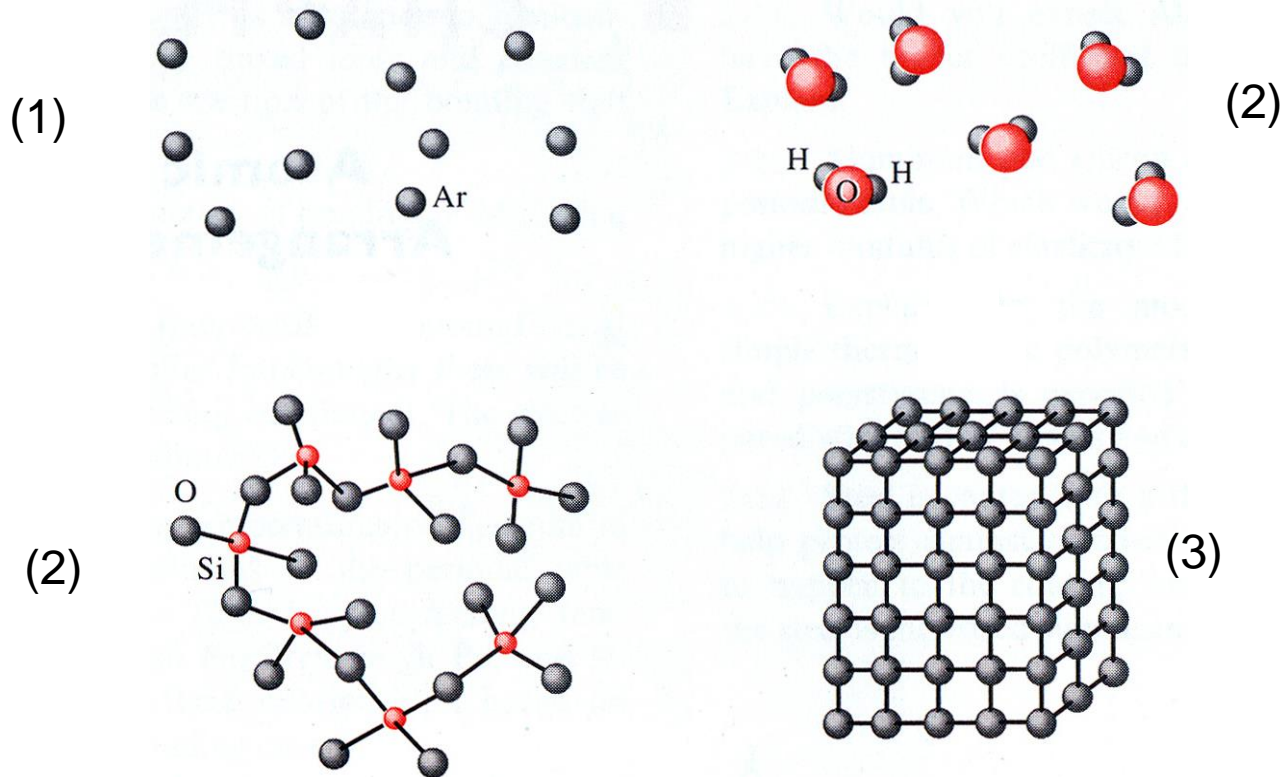


FIGURE 3.38 Two-dimensional schemes of the structure of (a) crystalline silicon dioxide and (b) noncrystalline silicon dioxide.

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)

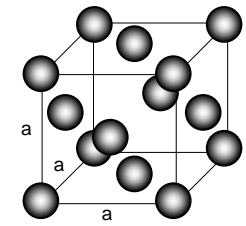
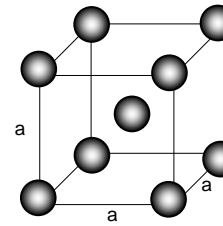
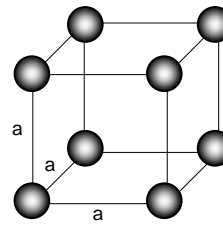
2 - VAPORES, LÍQUIDOS E SÓLIDOS AMORFOS (VIDROS) = ARRANJO ORDENADO DE CURTO ALCANCE (DA ORDEM DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS VIZINHAS)

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

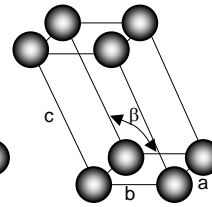
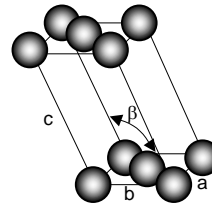
Uma célula unitária é definida como a menor porção do cristal que conserva as informações completas da estrutura do mesmo.

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...)

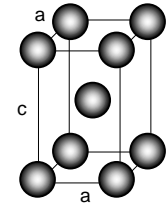
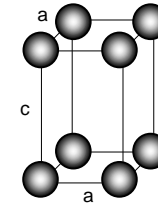
Uma avaliação mais aprofundada dos arranjos cristalinos de Bravais revela que as estruturas cúbica de corpo centrado (CCC), cúbica de face centrada (CFC) e hexagonal compacta (HC) são aquelas que permitem maior grau de empacotamento atômico



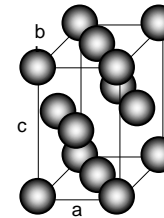
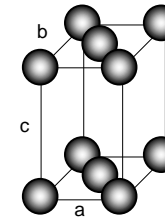
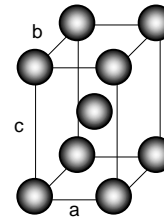
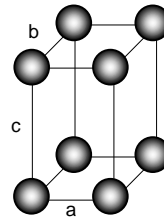
CÚBICO



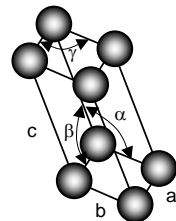
MONOCLÍNICO



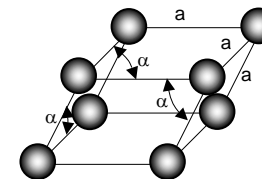
TETRAGONAL



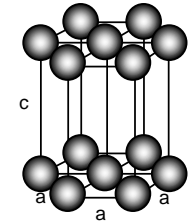
ORTORRÔMBICO



TRICLÍNICO



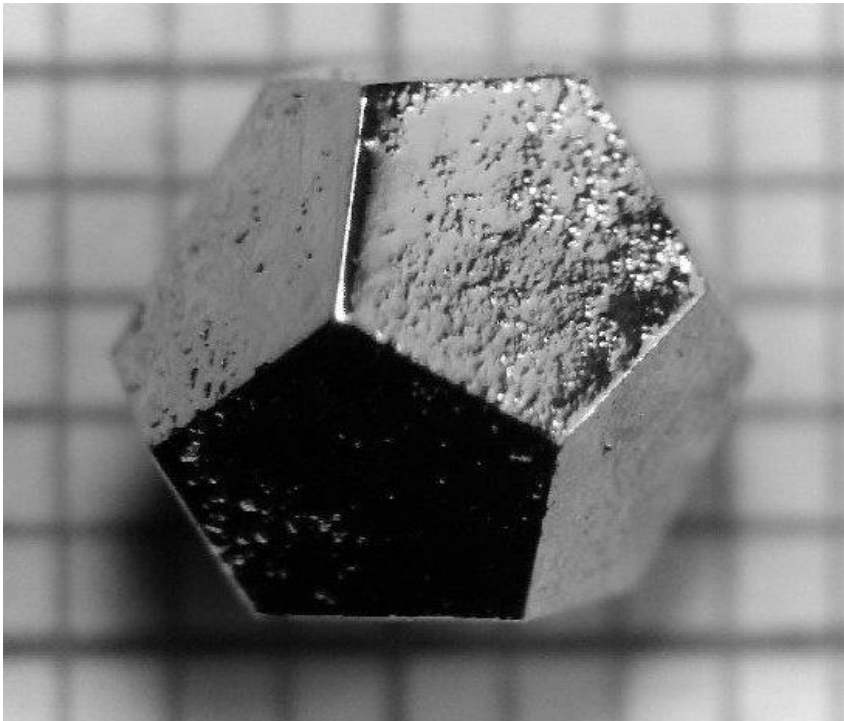
ROMBOÉDRICO



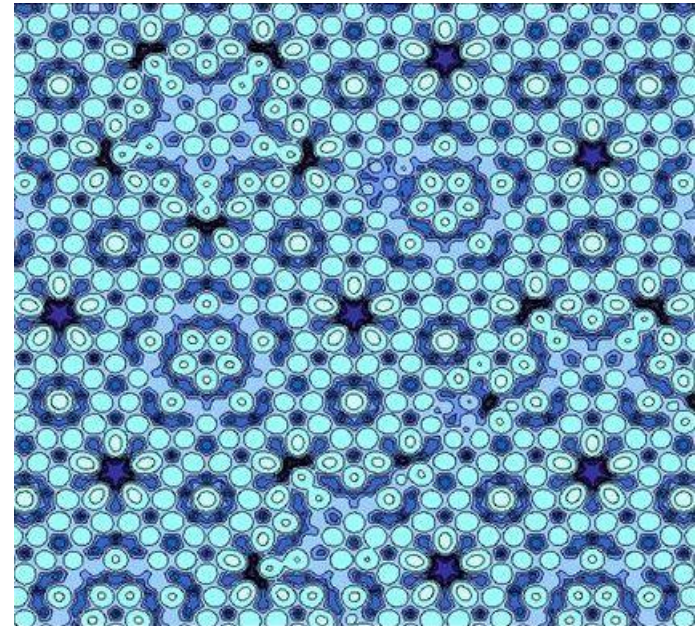
HEXAGONAL

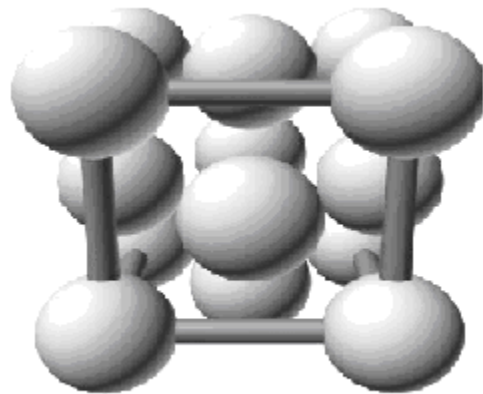
Shechtman (Israel) recebeu o Prêmio Nobel de Química de 2011 pela descoberta dos Quasicristais

Um quasicristal icosaédrico de Ho-Mg-Zn

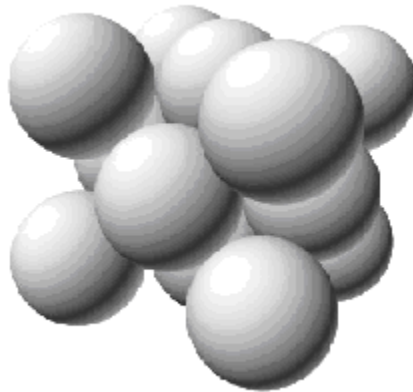


Atomic model of an aluminium-palladium-manganese (Al-Pd-Mn) quasicrystal surface





a)

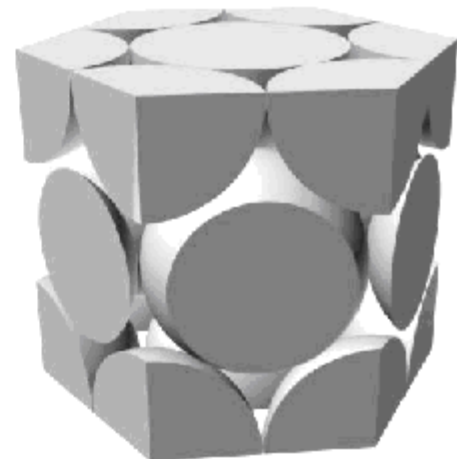
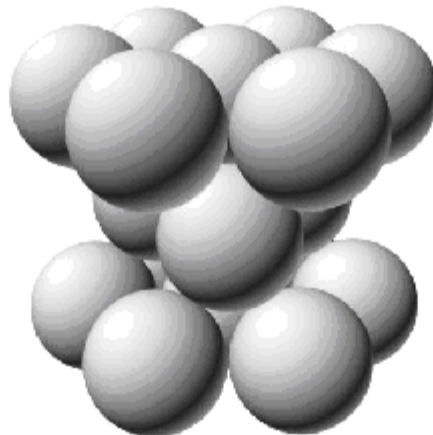
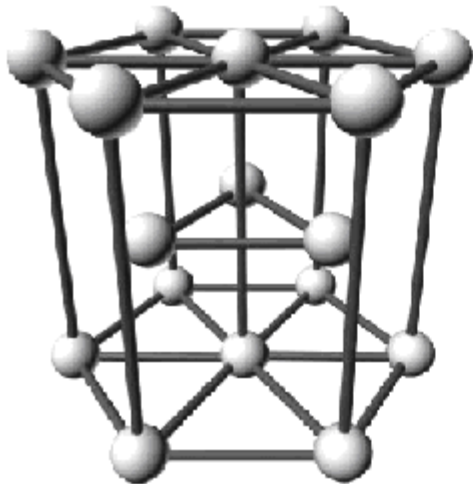


b)

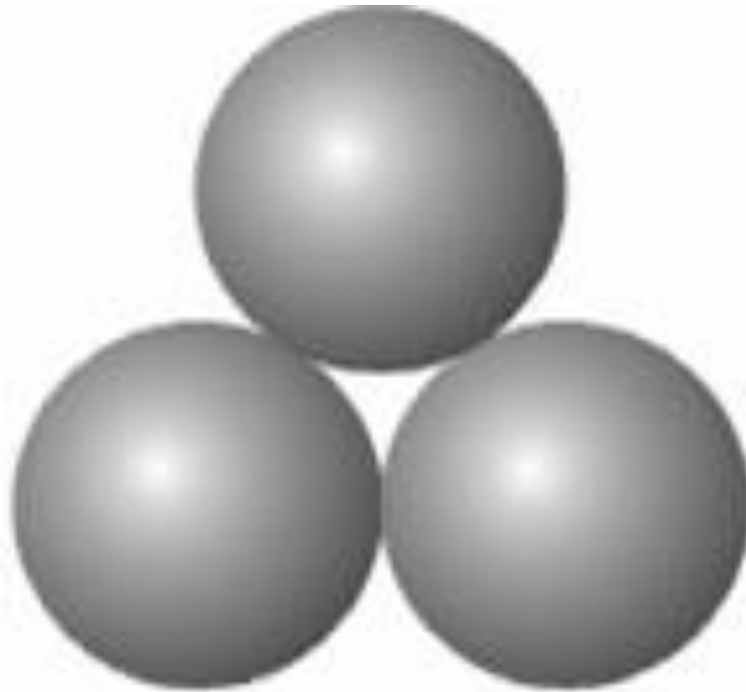


c)

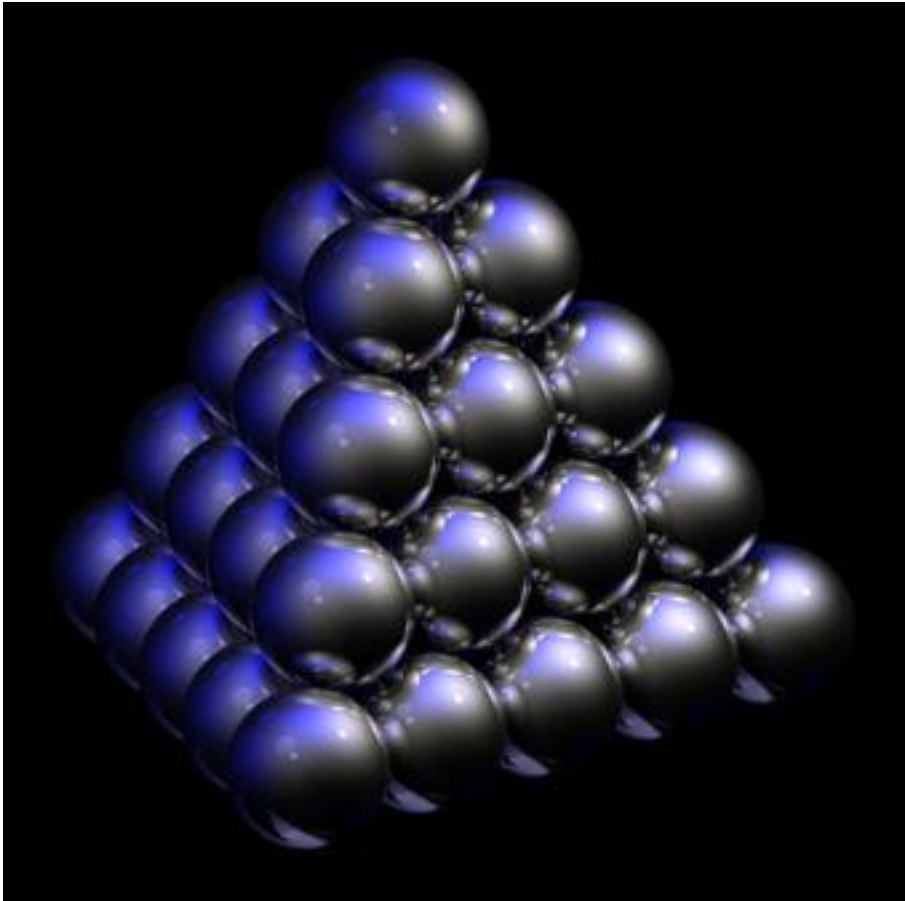
Representação esquemática de uma célula unitária Cúbica de Face Centrada (CFC – acima) e Hexagonal Compacta (HC – abaixo): (a) posições atômicas; (b) arranjo atômico; (c) átomos dentro da célula unitária



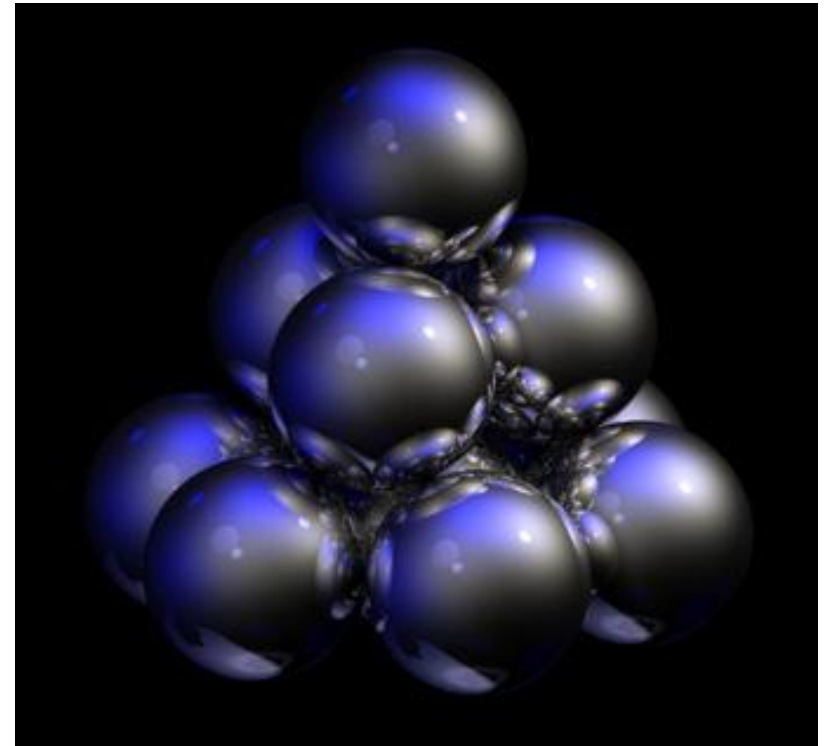
Empacotamento denso



Empacotamentos densos

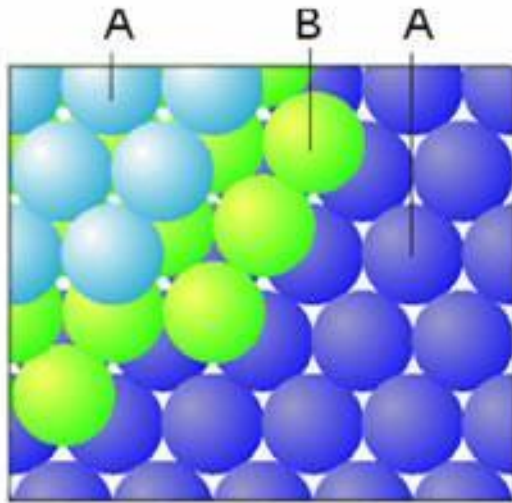


Cúbico de Face Centrada – CFC

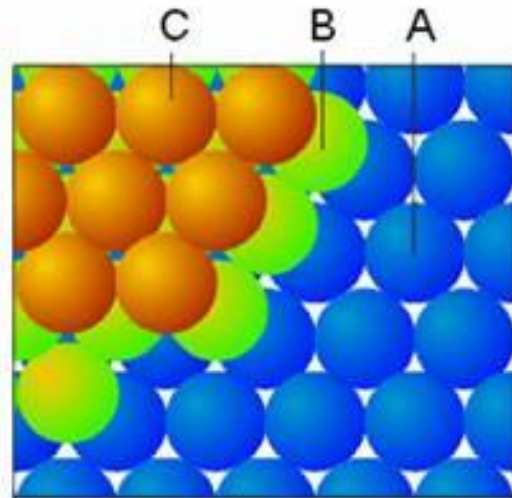


Hexagonal Compacta – HC

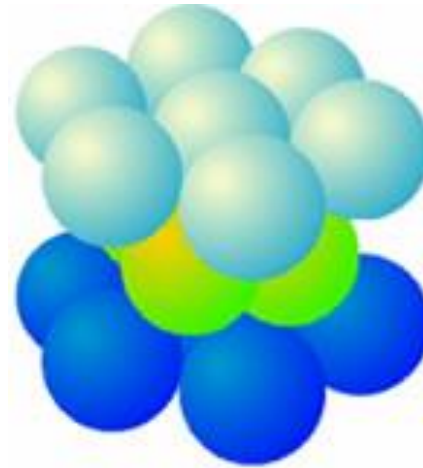
Empacotamentos densos



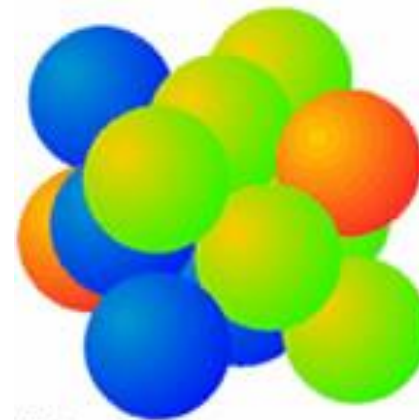
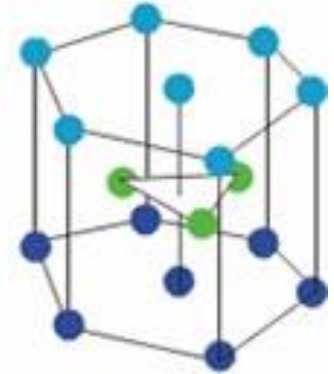
(a)



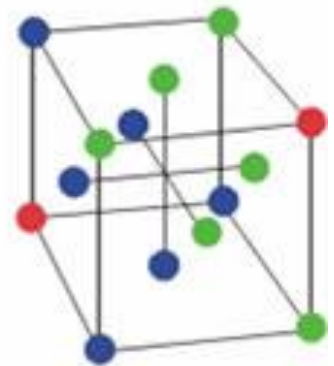
(b)



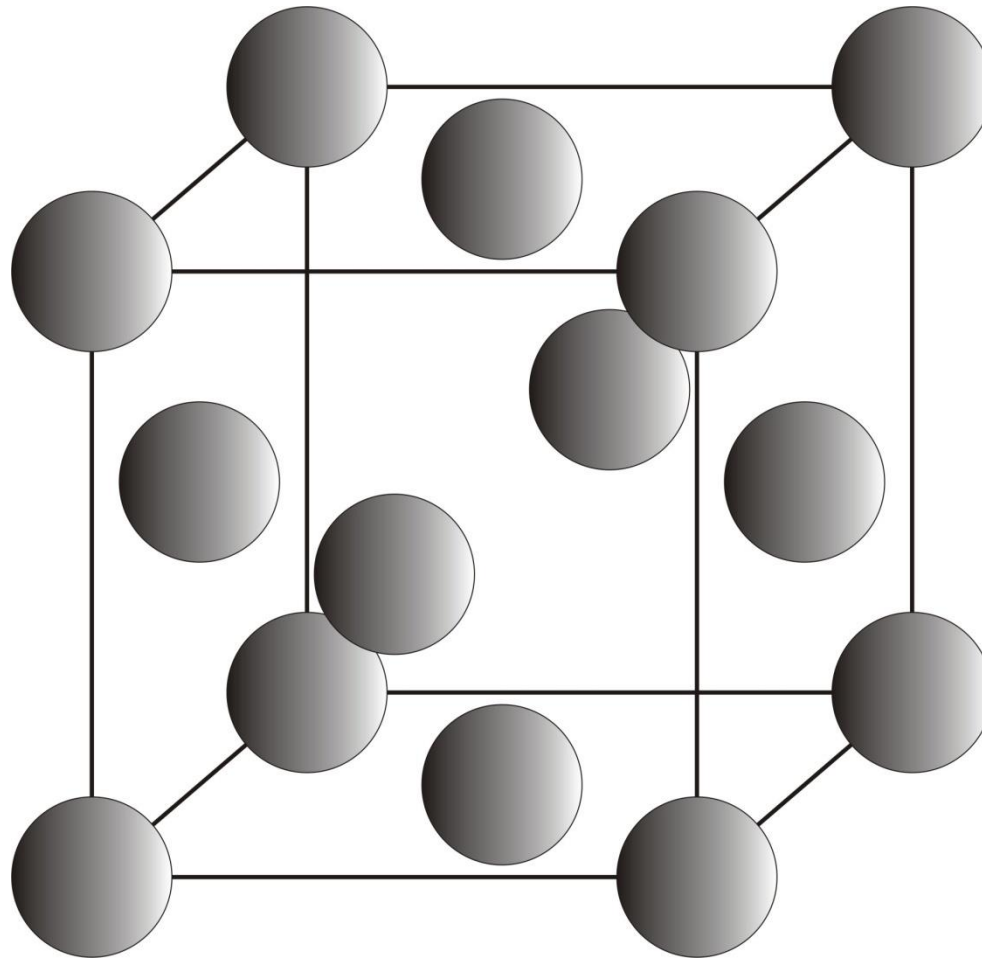
(a)



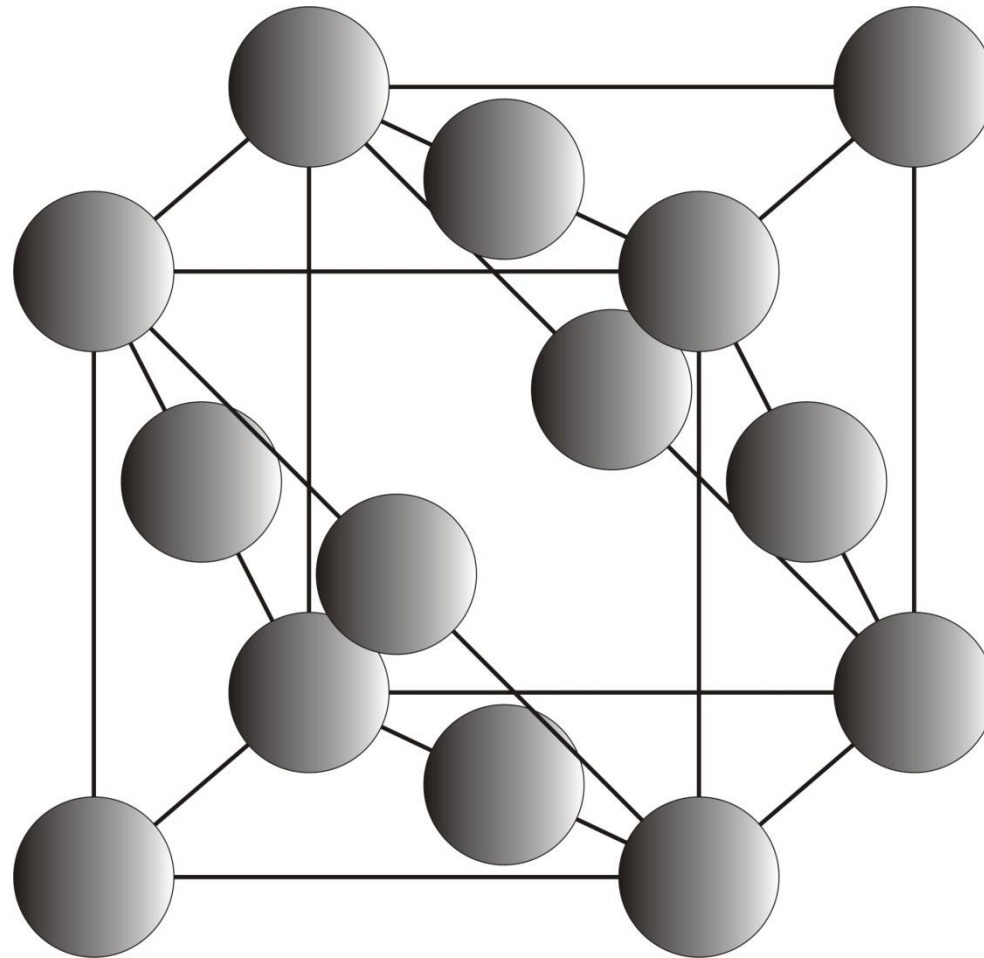
(b)



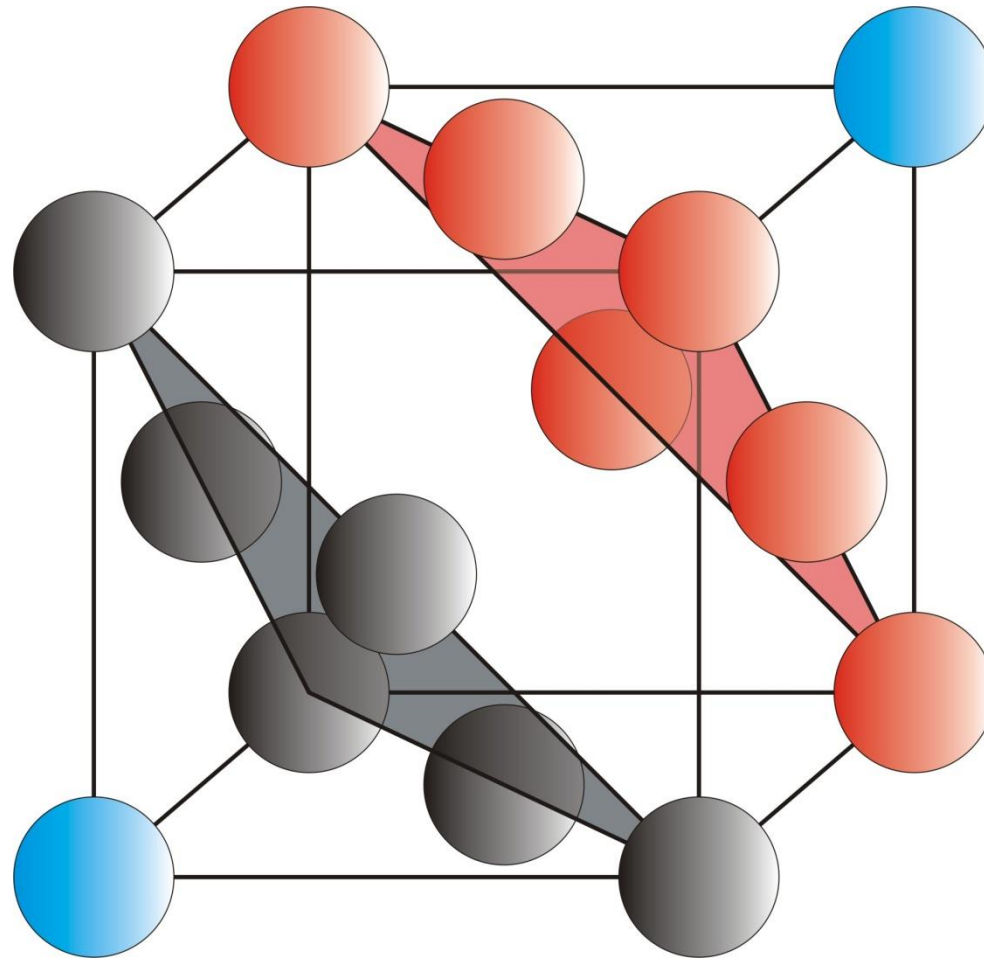
Entendendo a estrutura CFC



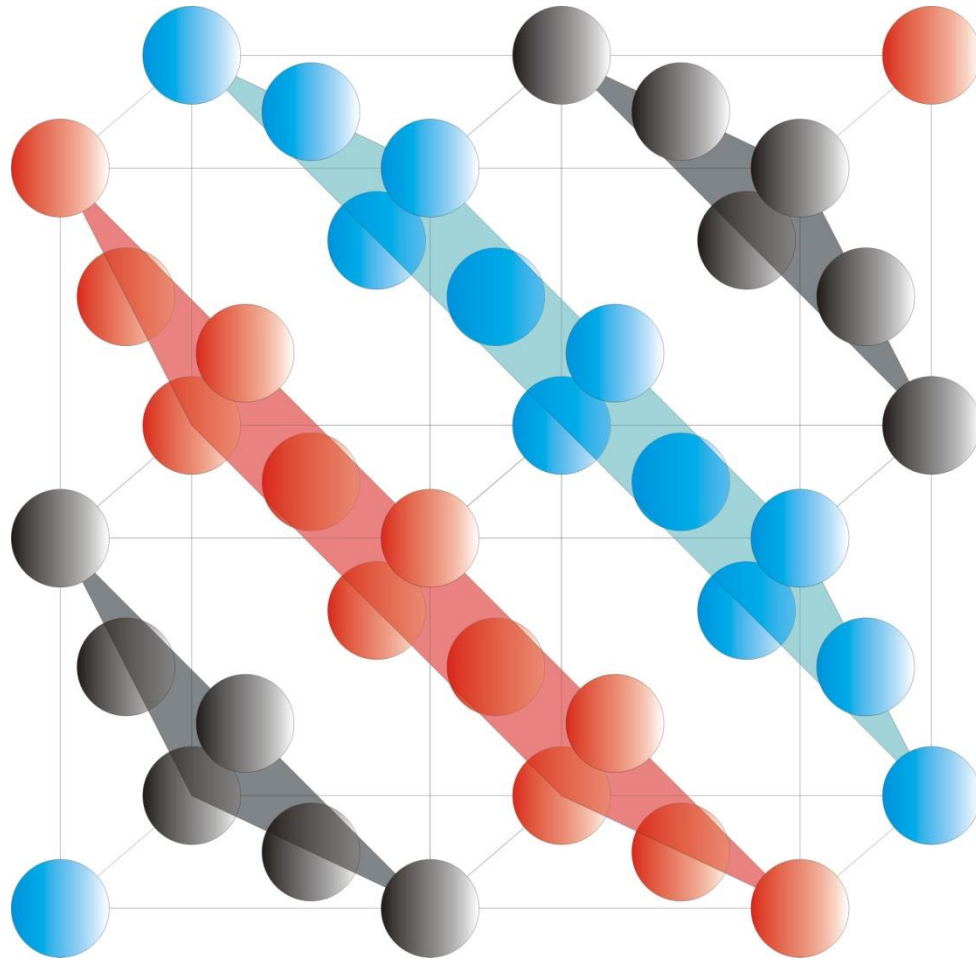
Entendendo a estrutura CFC



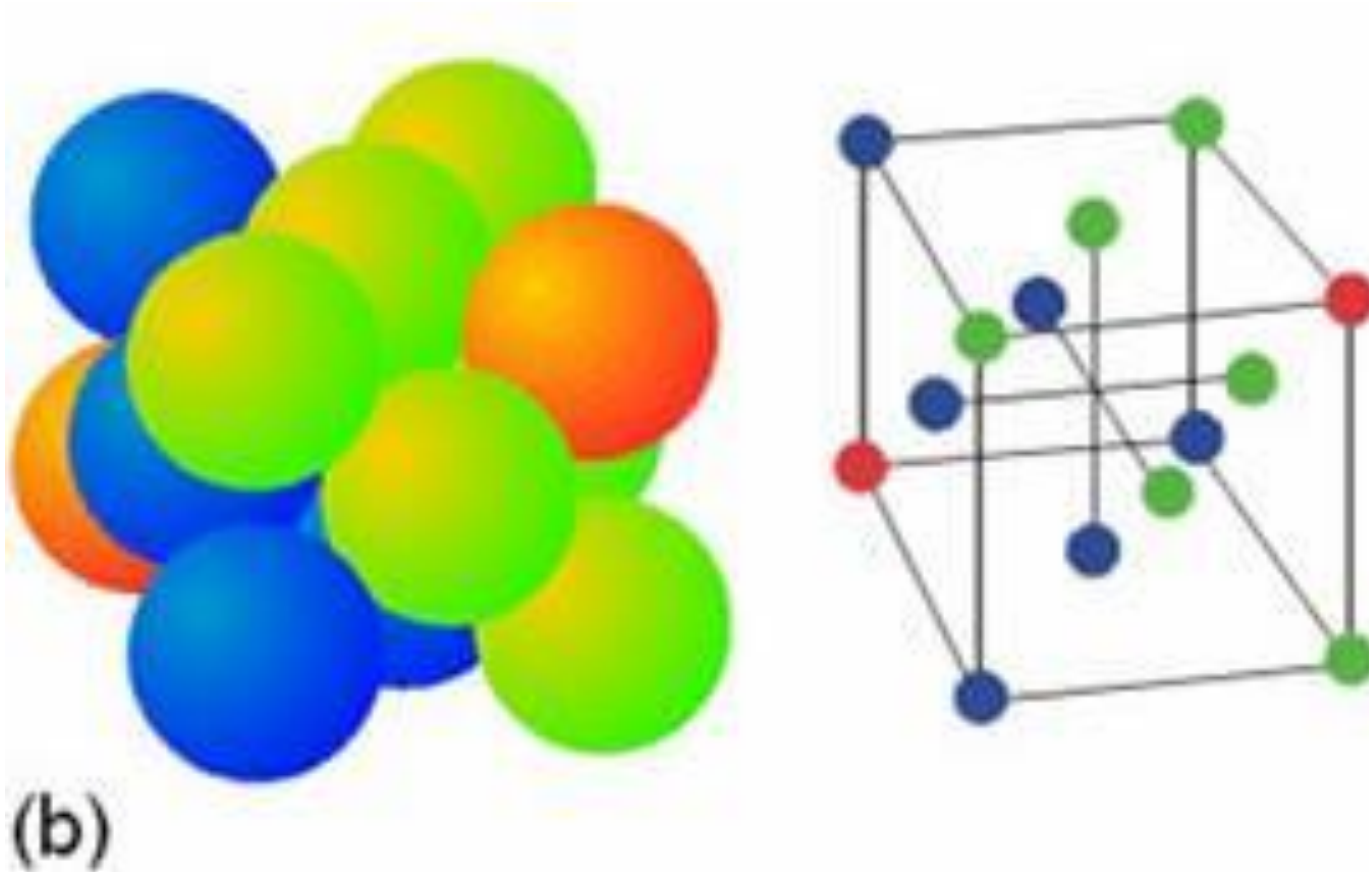
Entendendo a estrutura CFC



Entendendo a estrutura CFC



Entendendo a estrutura CFC



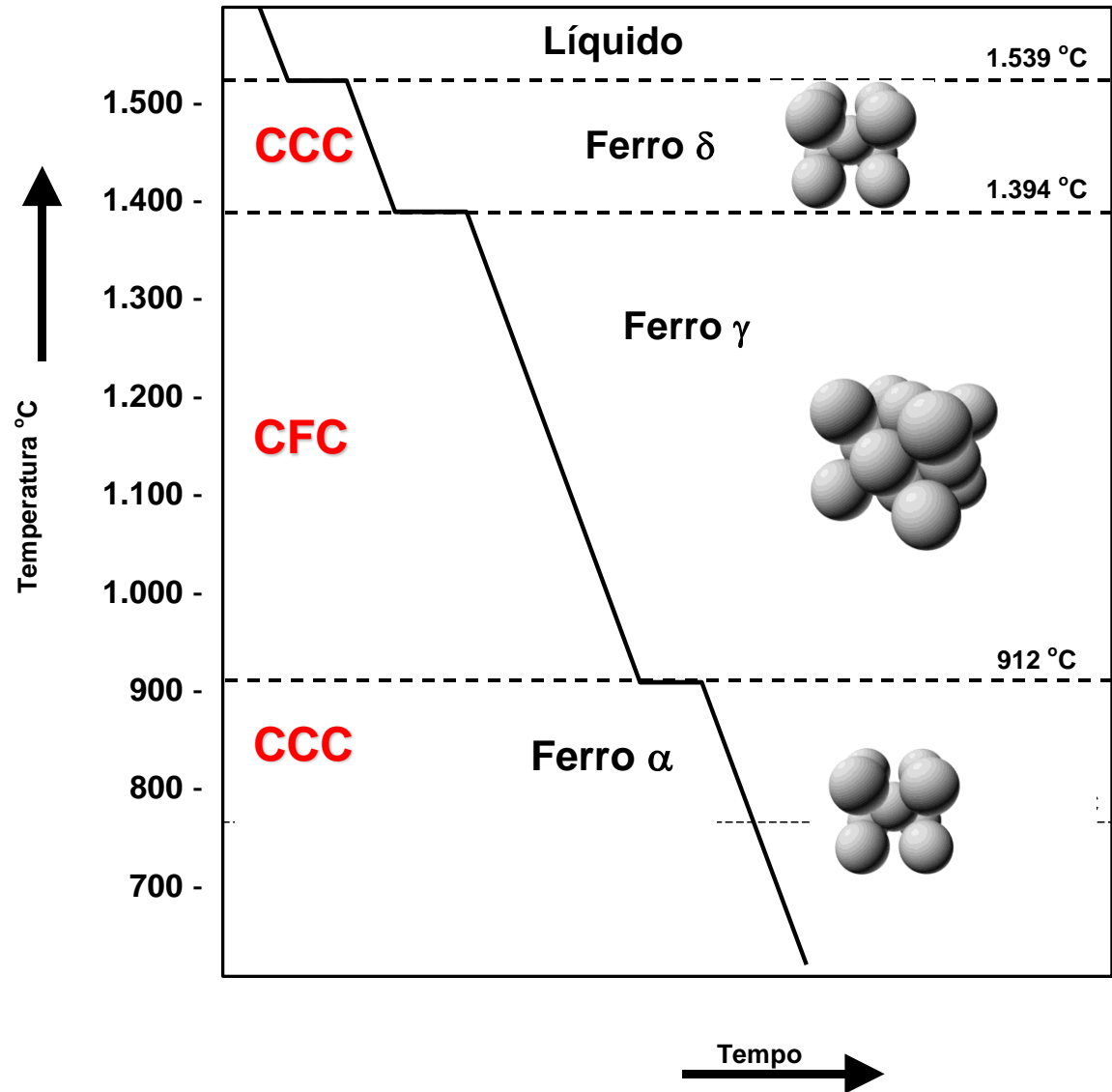
Estrutura cristalina e propriedades de alguns elementos

Elemento	Símbolo	Número Atômico	Massa Atômica (g/mol)	Densidade à 20 °C (g/m ³)	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

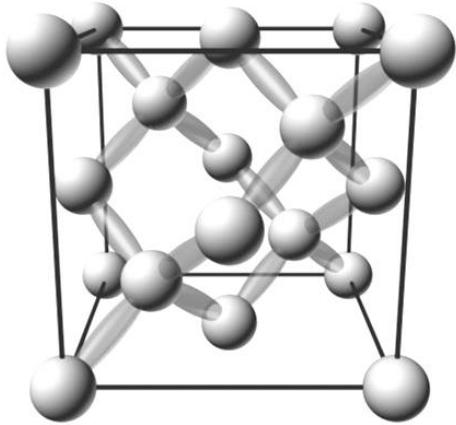
ALOTROPIA OU POLIMORFISMO

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

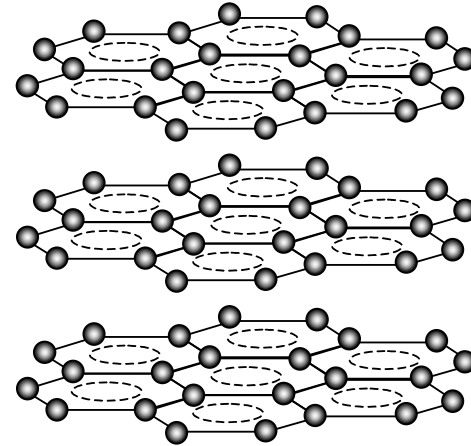
Nas mudanças polimórficas há normalmente uma alteração da densidade e de outras propriedades físicas



Diamante X Grafite (CARBONO)



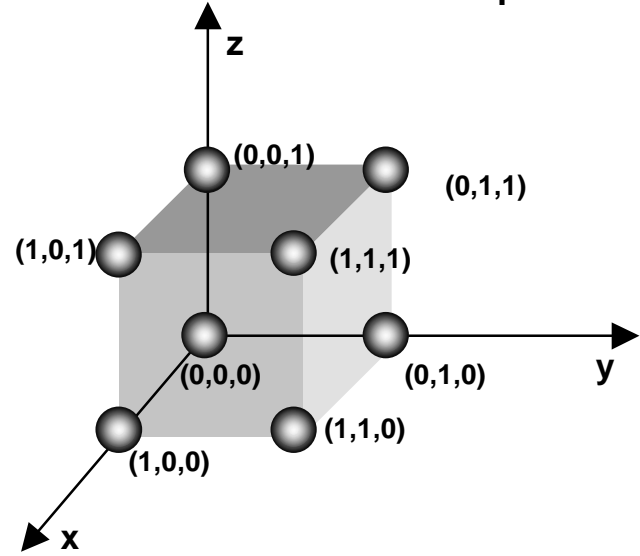
(a) Diamante



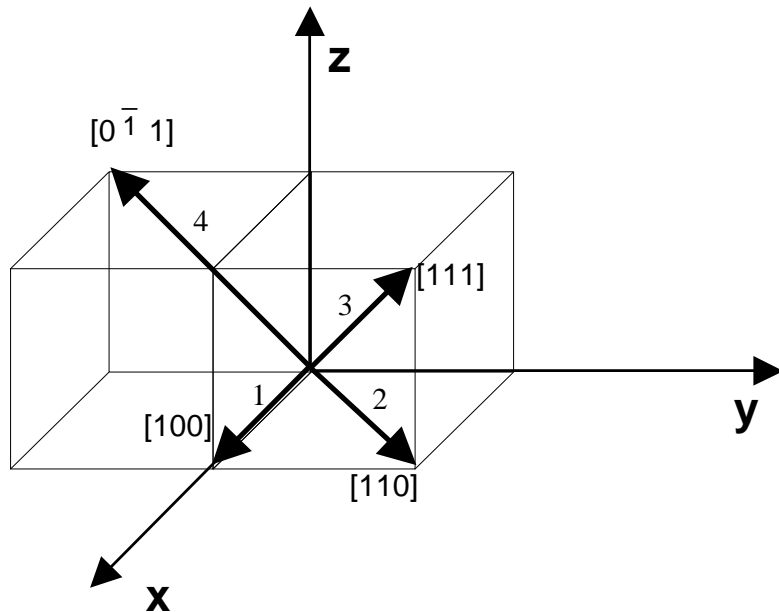
(b) Grafite

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

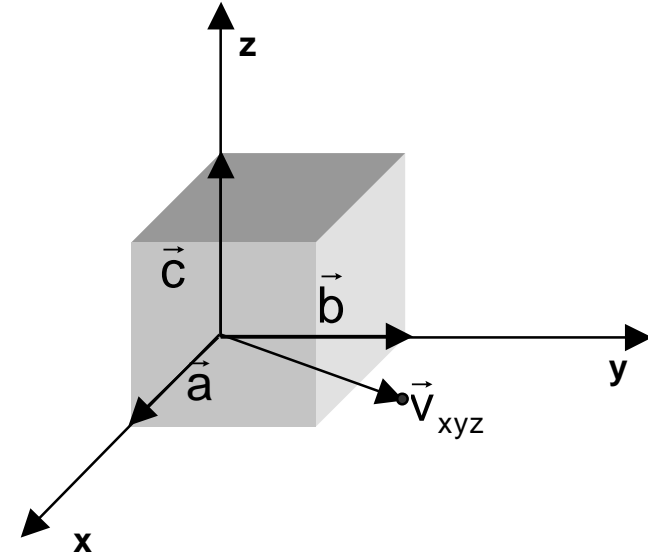
A grafita é o polimorfo estável nas condições ambientes, enquanto o diamante é formado a pressões extremamente elevadas.



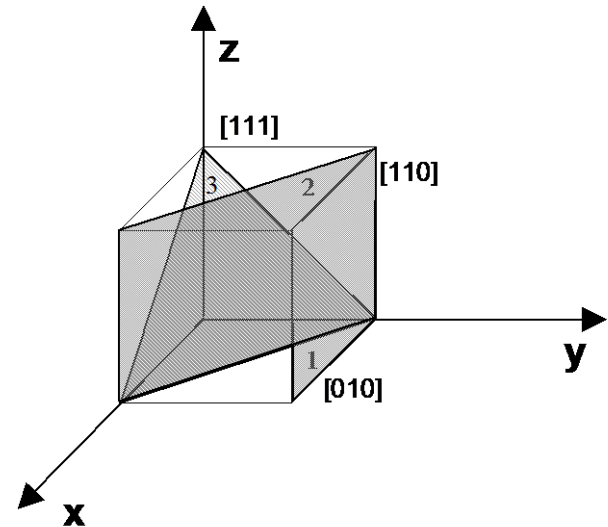
A s propriedades dependem da orientação cristalográfica.
 Há necessidade de se determinar direções e planos em um cristal.
 (Posições atômicas em uma célula unitária da estrutura CS)



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

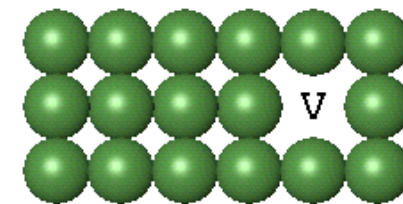
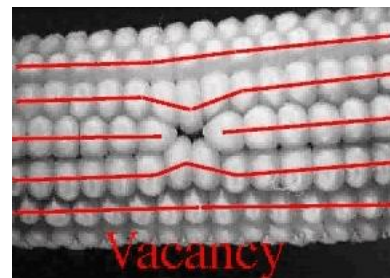
DEFEITOS PONTUAIS

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

[Impurezas nos Sólidos](#)

[Impurezas Substitucionais](#)

Vazios (Lacunas ou Vacâncias) e Intersticiais



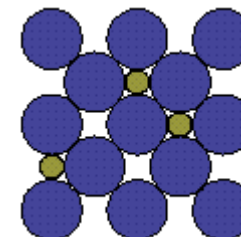
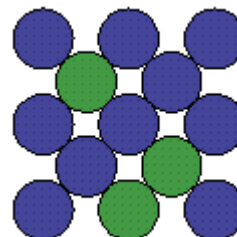
• **Vazios** = ausência de um átomo da sua posição normal em uma estrutura cristalina perfeita
A presença de um vazio significa que as ligações atômicas na vizinhança do defeito não foram satisfeitas

• **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



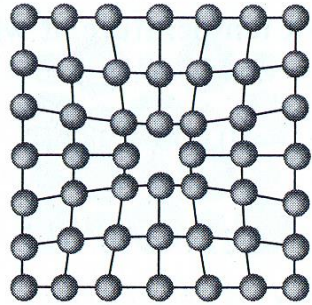
O cristal matriz contendo impurezas é chamado uma solução sólida, porque os átomos de impureza ocupam posições aleatórias no cristal, similarmente a um soluto em um líquido.

Tipos de Soluções Sólidas

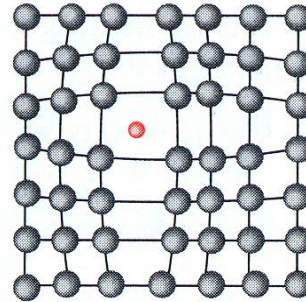
- soluções sólidas **Substitucionais** :os átomos de impureza estão localizados em posições normalmente ocupadas pelos átomos do cristal matriz. Eles "substituem" os átomos do cristal matriz.
- soluções sólidas **Intersticiais** os átomos de impureza estão localizados nos interstícios da estrutura cristalina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

IMPERFEIÇÕES EM SÓLIDOS CRISTALINOS

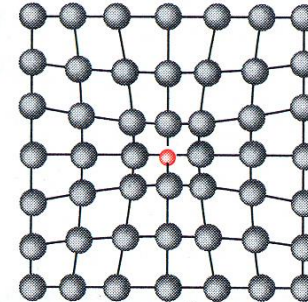
DEFEITOS PUNTUAIS



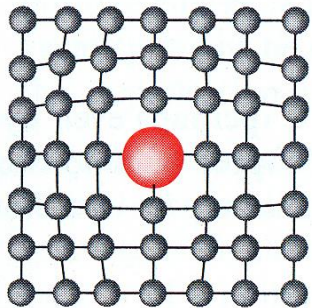
(a)



(b)

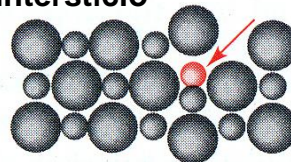


(c)



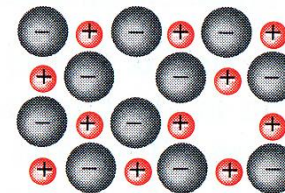
(d)

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

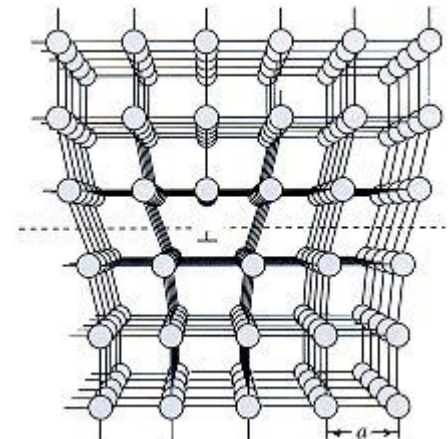
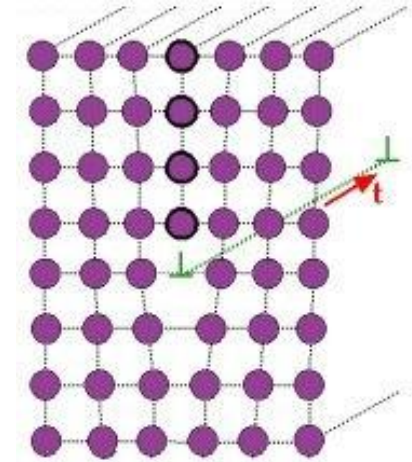
- imperfeições em uma estrutura cristalina nas quais uma **linha** de átomos (ou com átomos em torno de si) tem uma estrutura local que difere da estrutura ideal.
- são criados durante o **processamento** (a forma usada na fabricação) e por forças mecânicas que atuam sobre o material.
- estão sempre 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

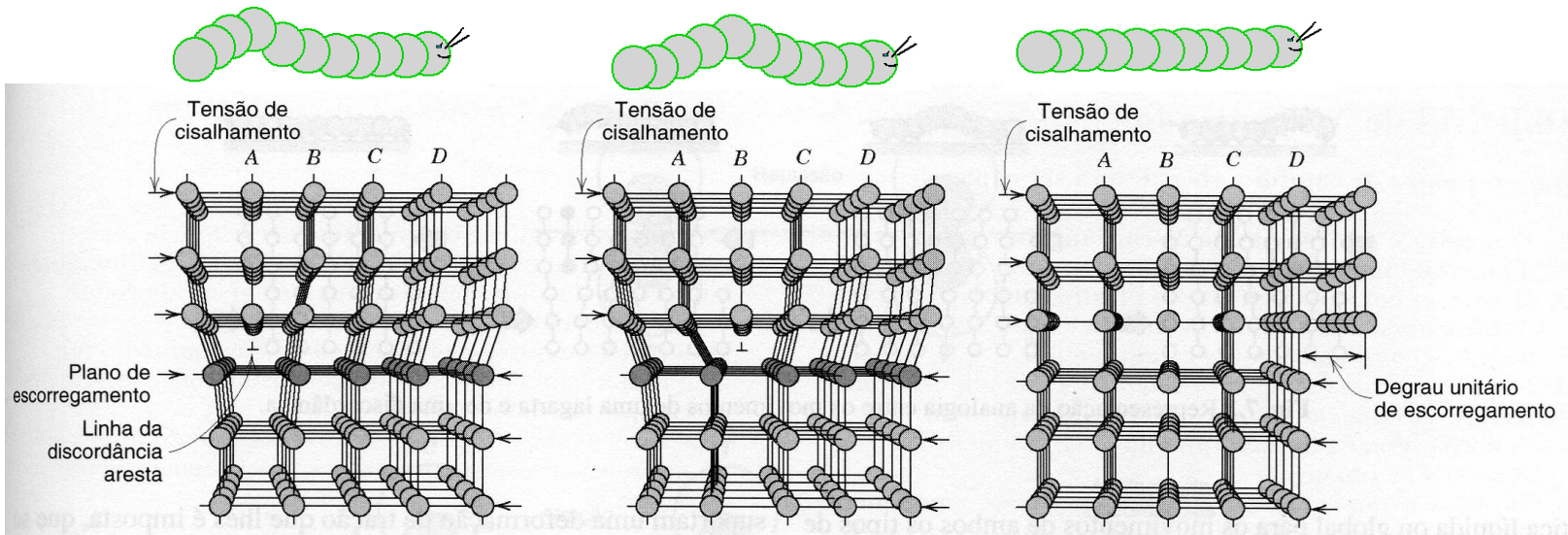
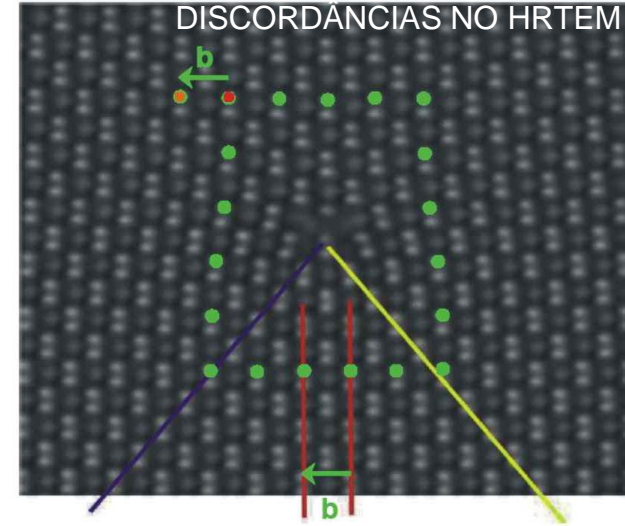
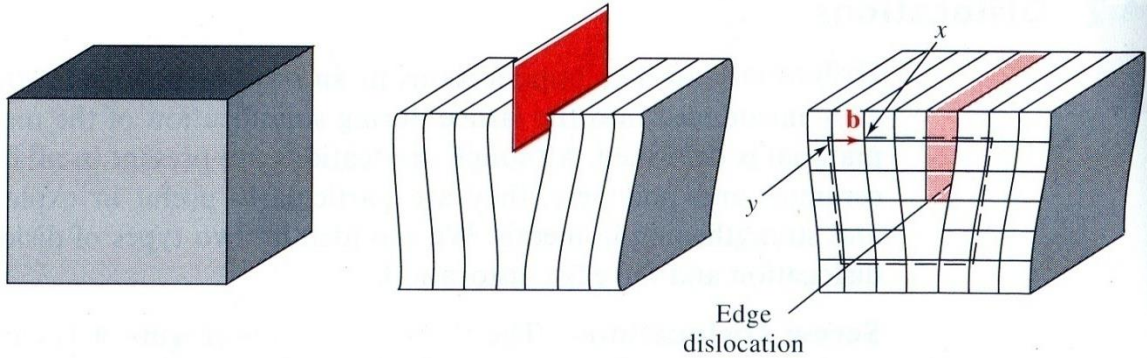
- A tensão de cisalhamento correspondente ao início da fase plástica em um monocristal é surpreendentemente pequena quando comparada à resistência ao cisalhamento de um cristal perfeito (calculada em termos de forças coesivas entre os átomos).
- Em outras palavras, o cristal se deforma plasticamente 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.

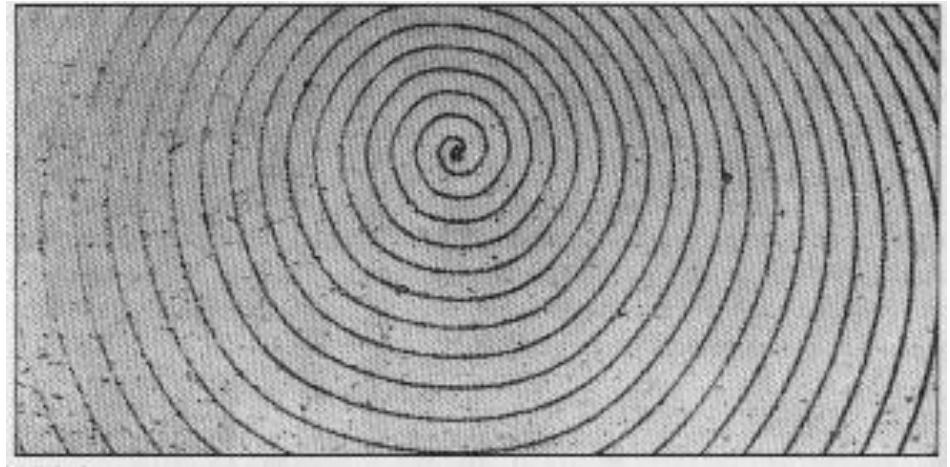
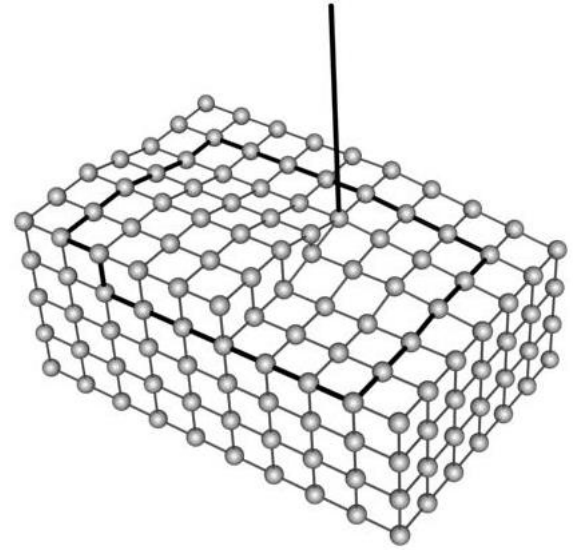


Movimento de linhas de discordância



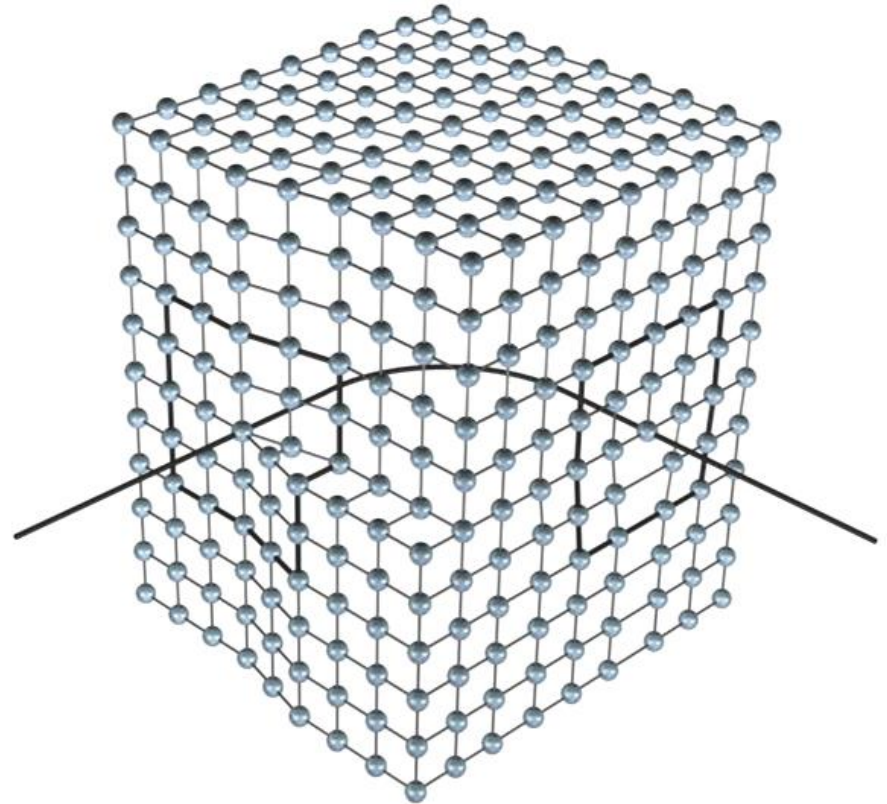
Discordância em hélice

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

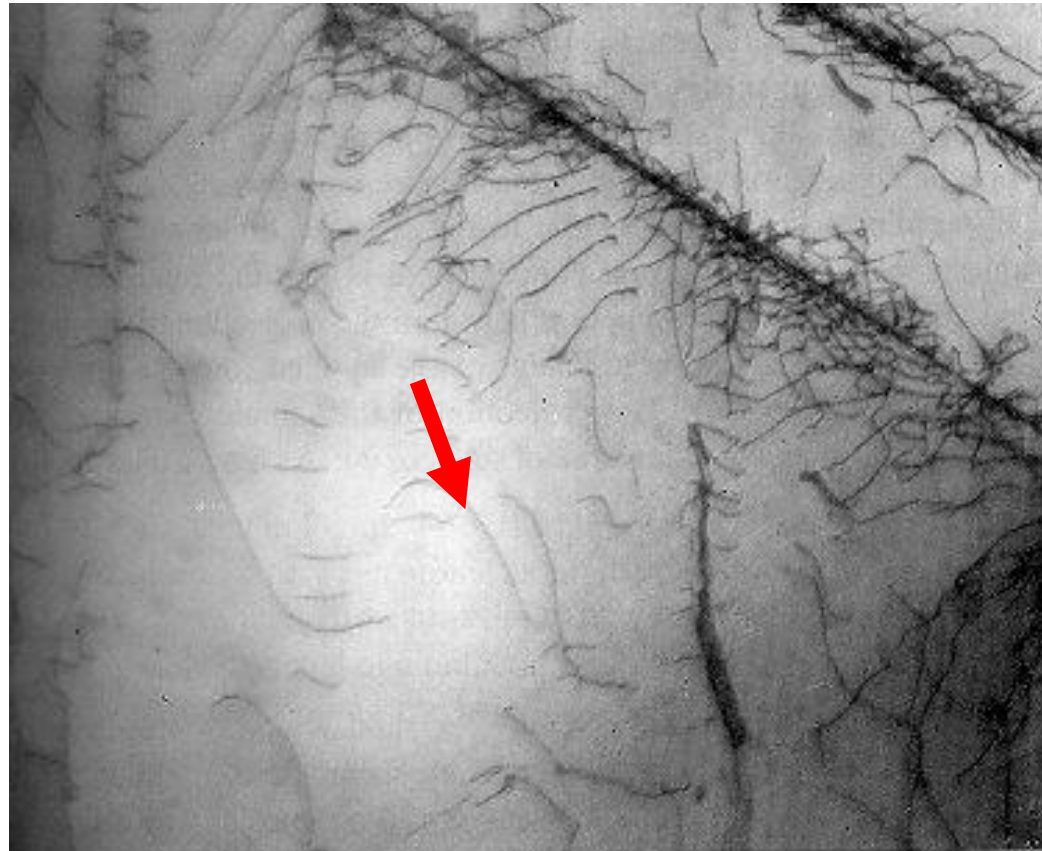


Discordância mista

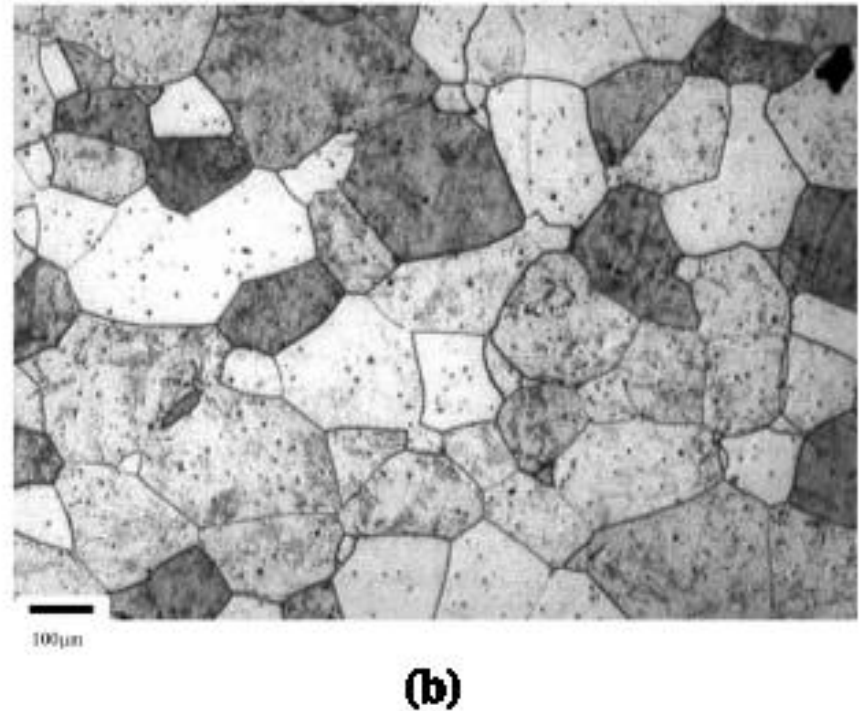
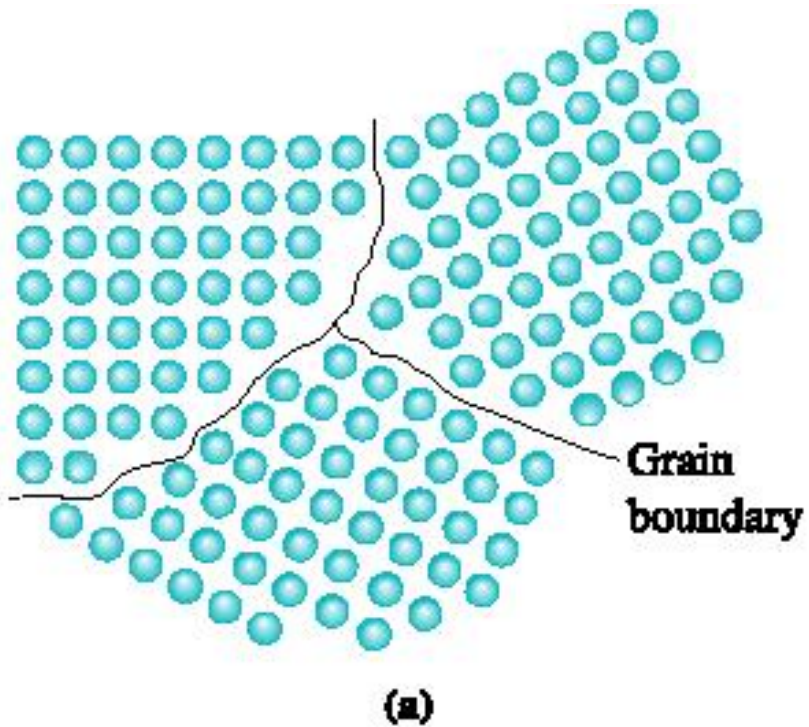
- As discordâncias são produzidas durante a solidificação do material ou quando é aplicada uma tensão cisalhante sobre a estrutura cristalina.
- Em geral, uma discordância em cunha está associada a uma discordância em hélice, o que forma uma discordância mista e neste caso, a linha de discordância é 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

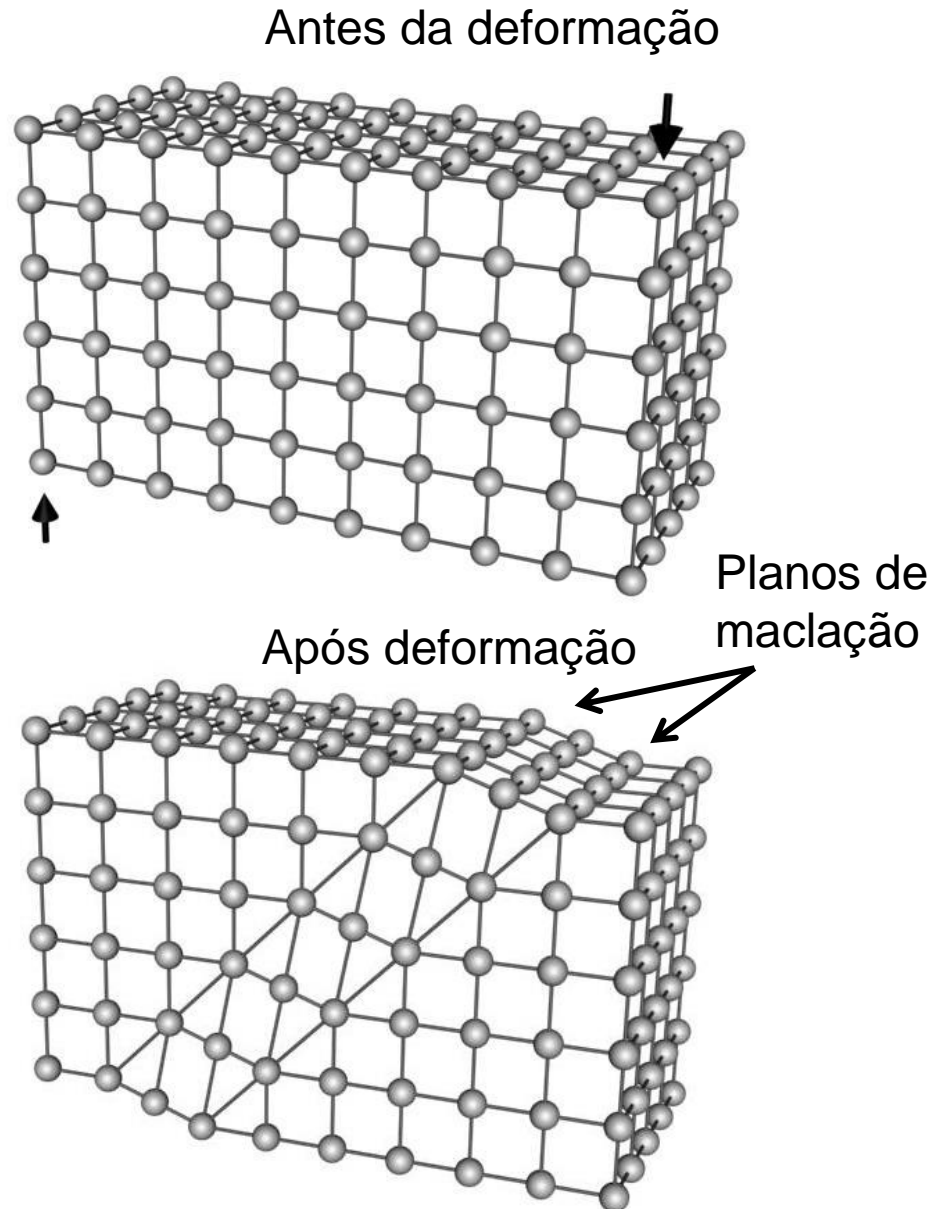
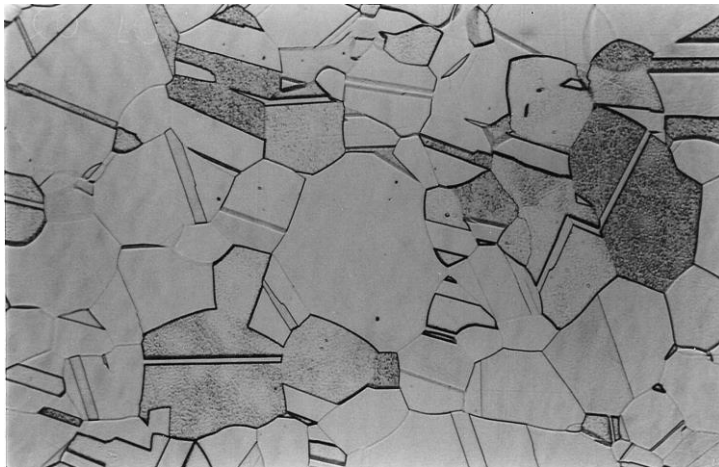


Defeitos superficiais – contornos de grãos







Defeitos superficiais – maclas

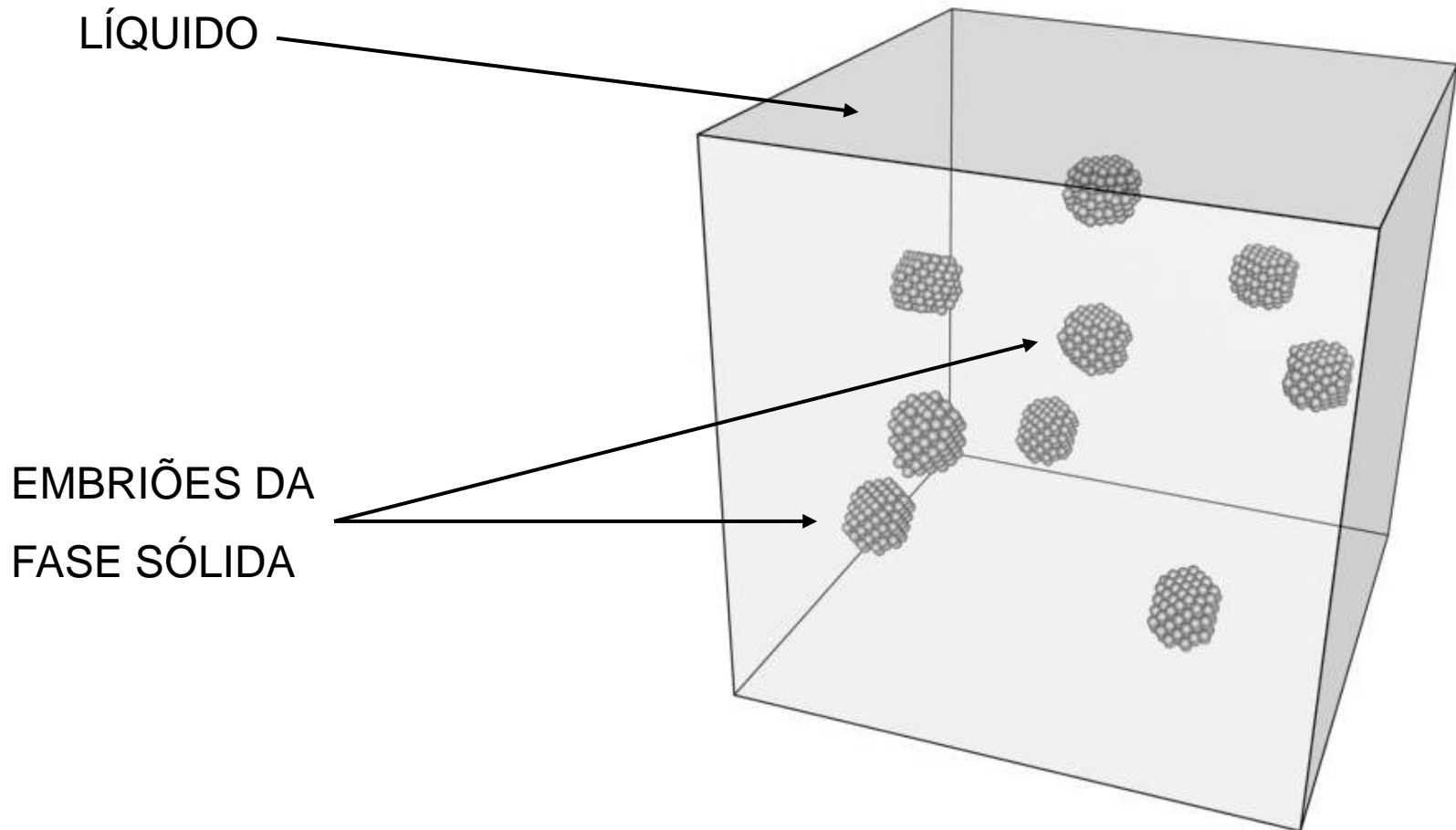
- surgem a partir de tensões térmicas advindas da solidificação ou tensões mecânicas (deformação plástica), recristalização ou crescimento de grão.
- ocorre quando parte da rede cristalina é deformada de modo que um lado do contorno é uma imagem especular da outra.



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

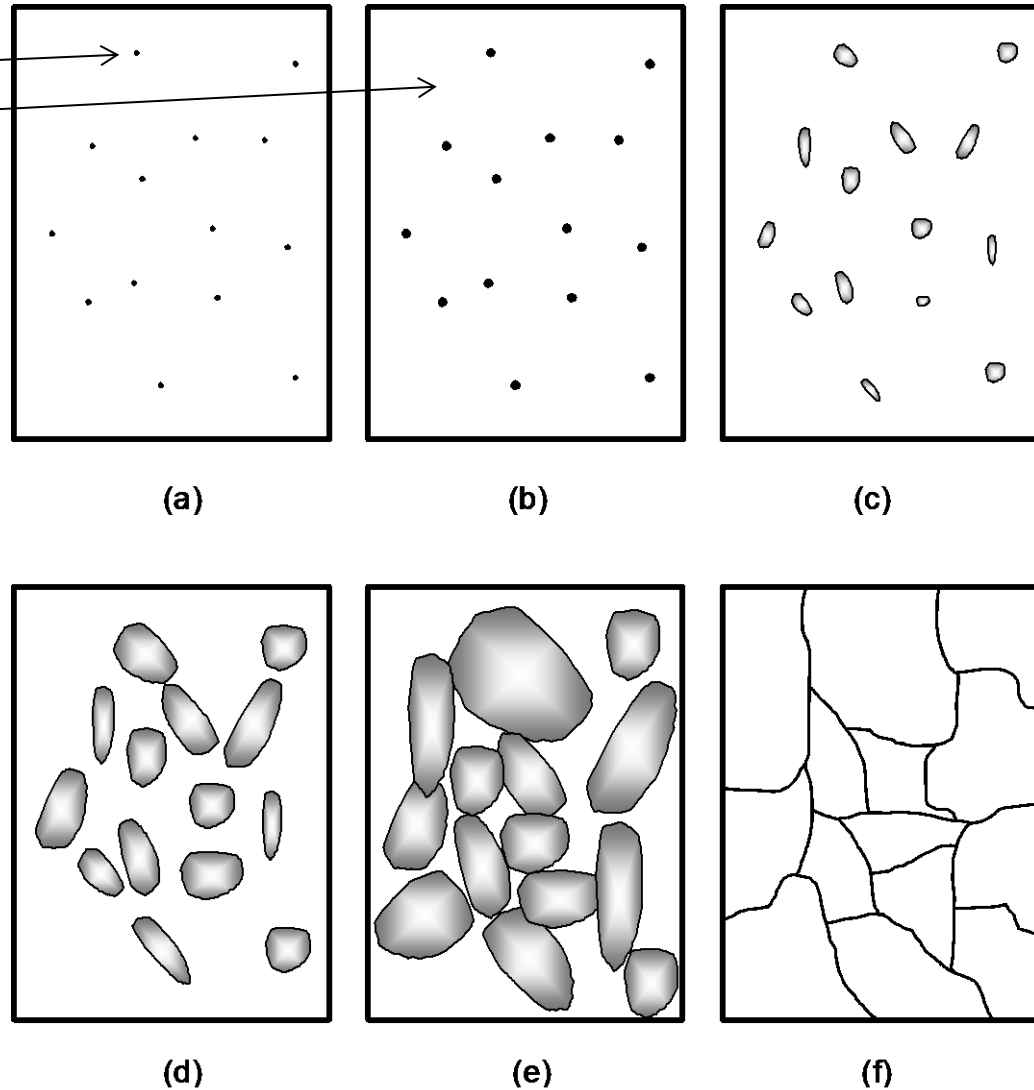
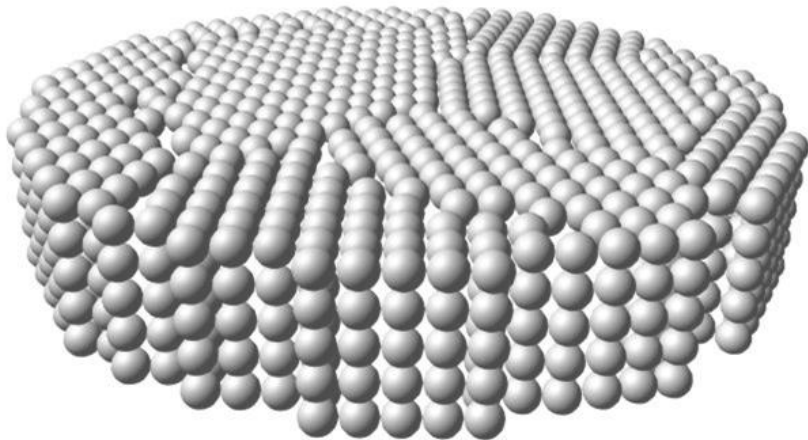
Formação dos grãos cristalinos – solidificação



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**.

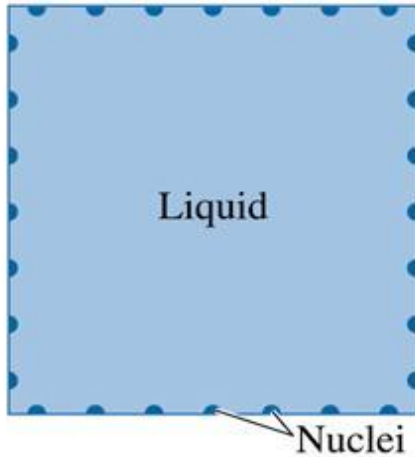
Na fase seguinte à nucleação, denominada de **crescimento** de cristal ou grão, os grãos crescem até entrarem em contato com grãos vizinhos, formando na região de contato um **contorno de grão** (que em 3D são superfícies).



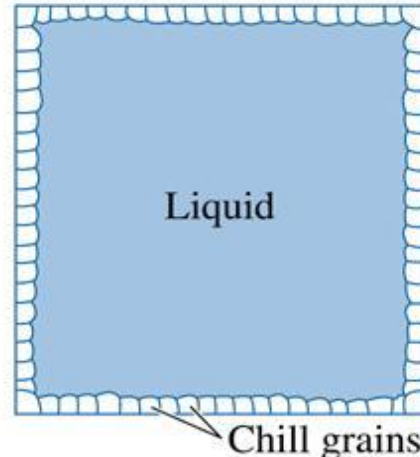
Solidificação e formação de um **material policristalino**:

- presença de flutuações estruturais: embriões;
- embriões transformam-se em núcleos;
- crescimento dos núcleos, formando grãos;
- grãos cristalinos crescem;
- encontro dos grãos cristalinos com seus vizinhos;
- formação de contornos de grãos.

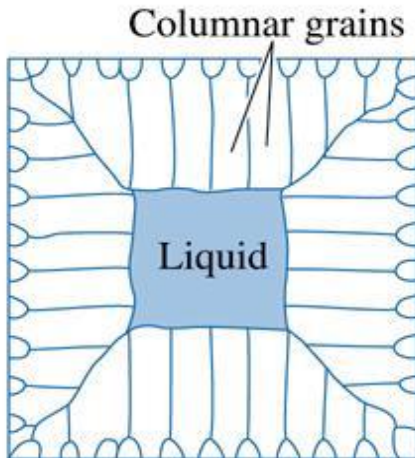
Desenvolvimento da estrutura cristalina em um lingote fundido durante o processo de fundição, em contato com a parede do recipiente – ocorre nucleação heterogênea



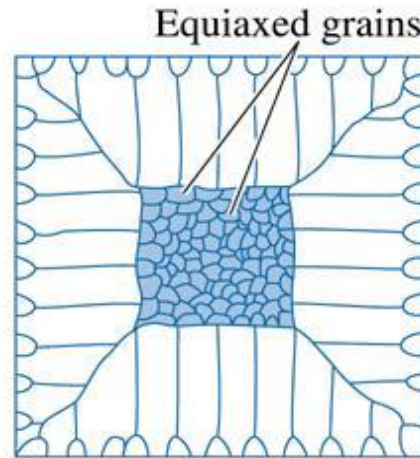
(a)



(b)



(c)



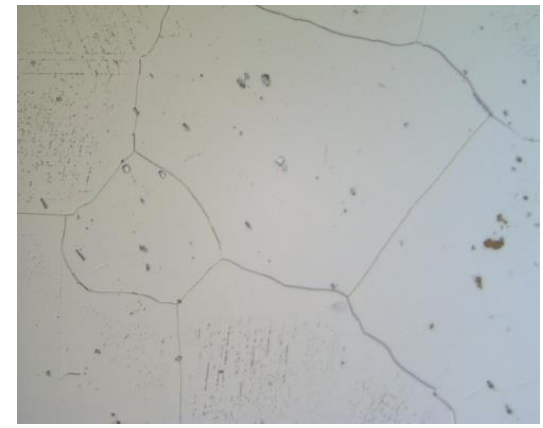
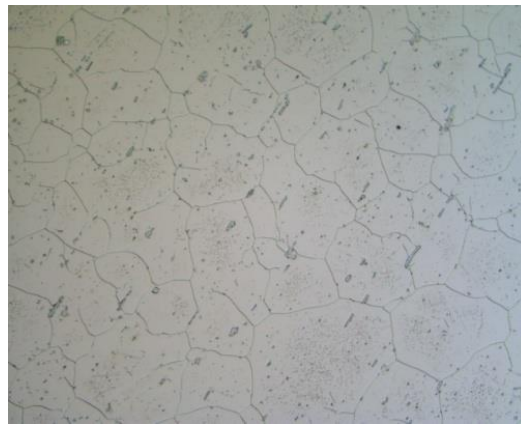
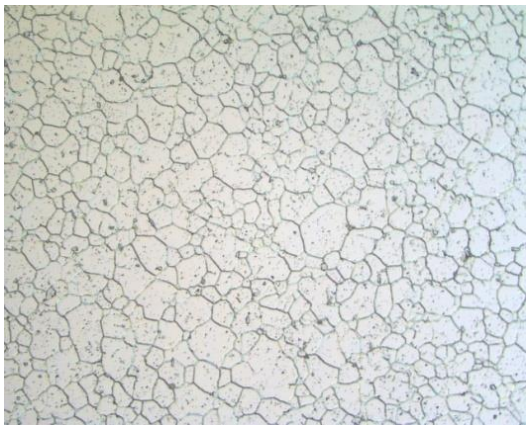
(d)

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

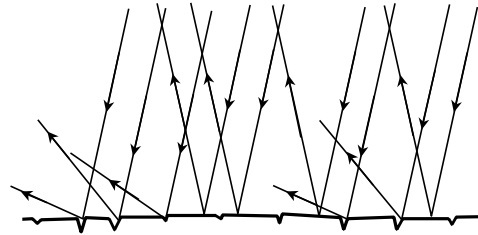
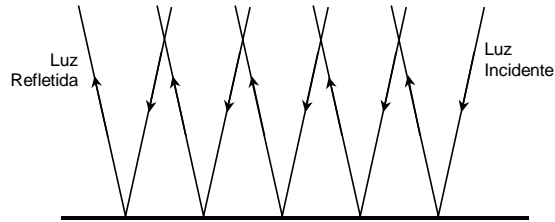
(b) zonas coquilhadas

(c) crescimento preferencial produz uma zona de grãos colunares

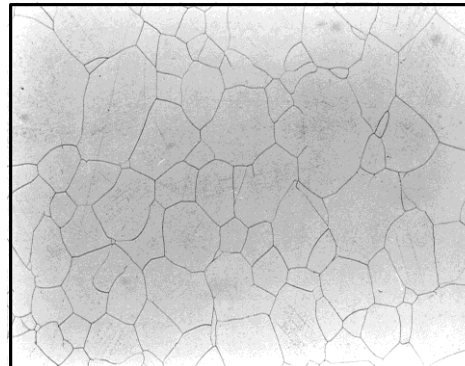
(d) nucleação adicional criando uma zona equiaxial



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.

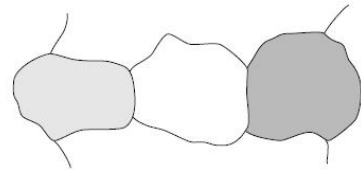


Amostra só
polida

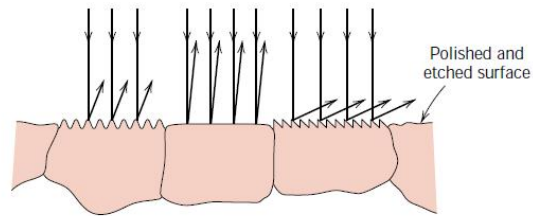
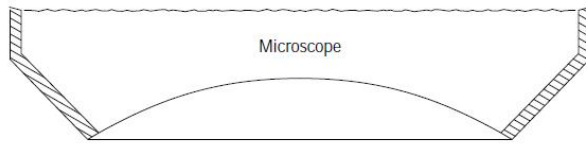


Amostra atacada quimicamente.
A região do contorno de grão
aparece mais escura no
microscópio devido sua menor
capacidade de reflexão da luz.

Preparação metalográfica



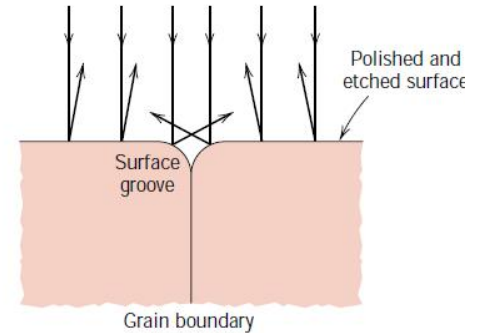
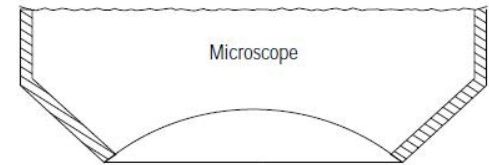
(a)



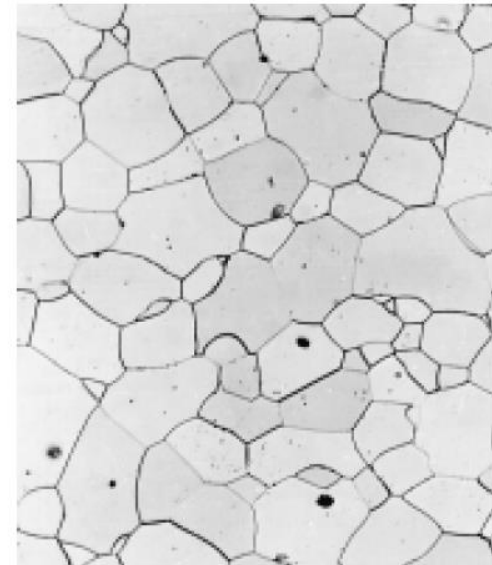
(b)



(c)



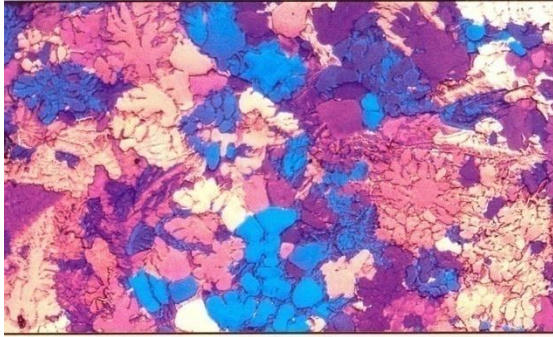
(a)



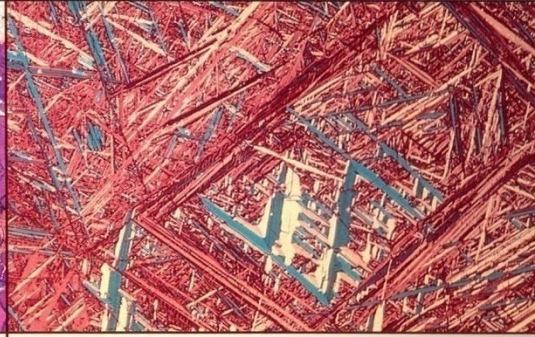
(b)



Non-Ferrous

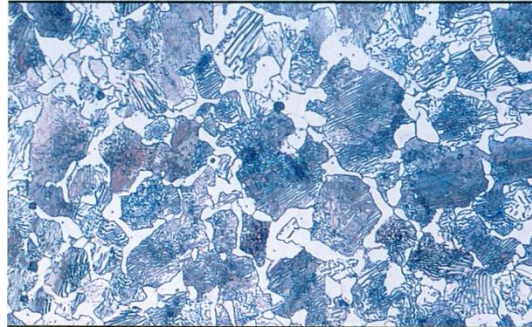


Aluminum

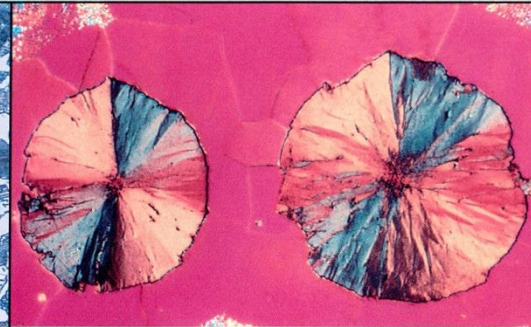


Aluminum-Bronze

Ferrous



Medium Carbon Steel



Ductile Cast Iron

Titanium

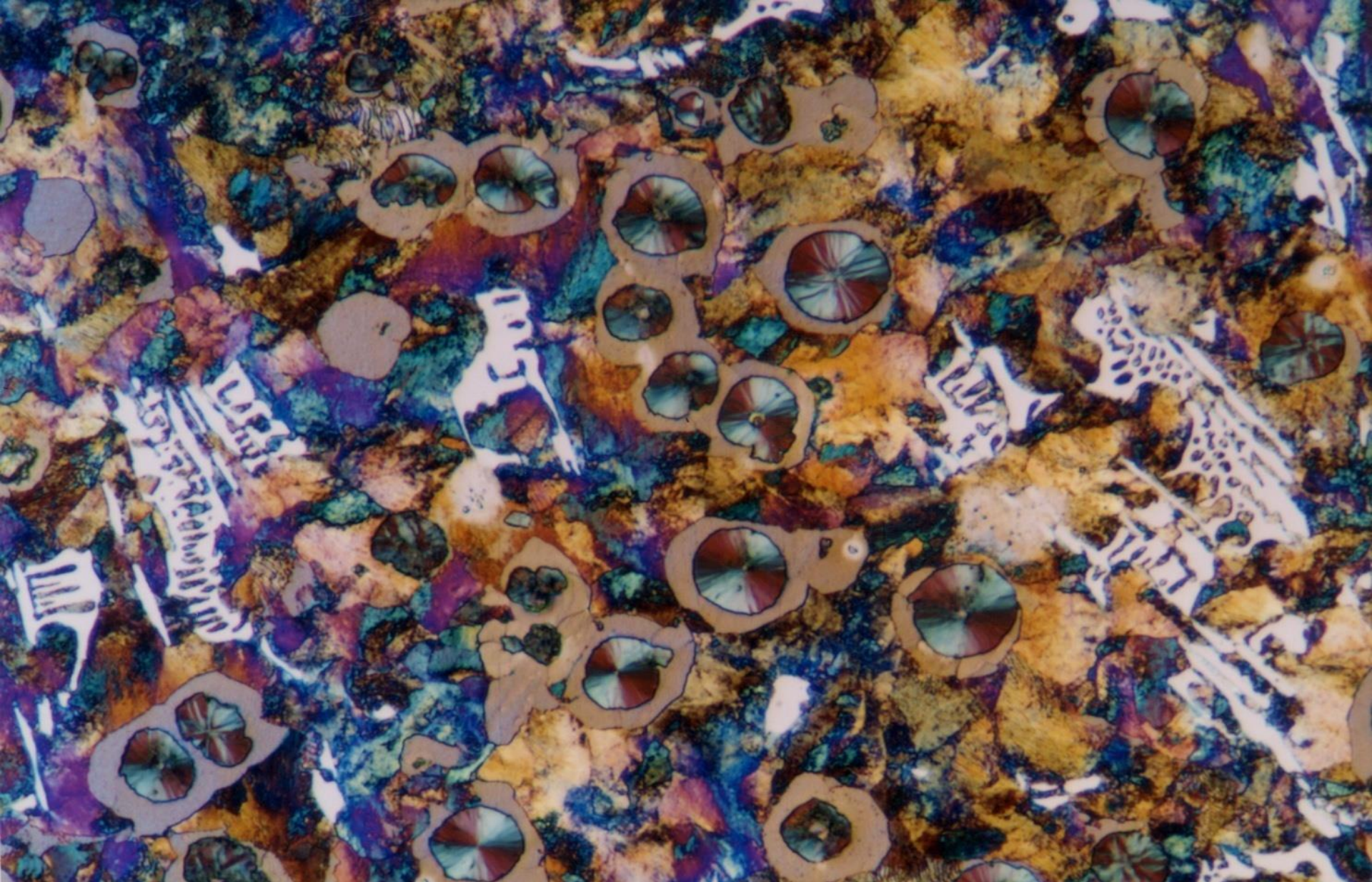


Titanium 6-4

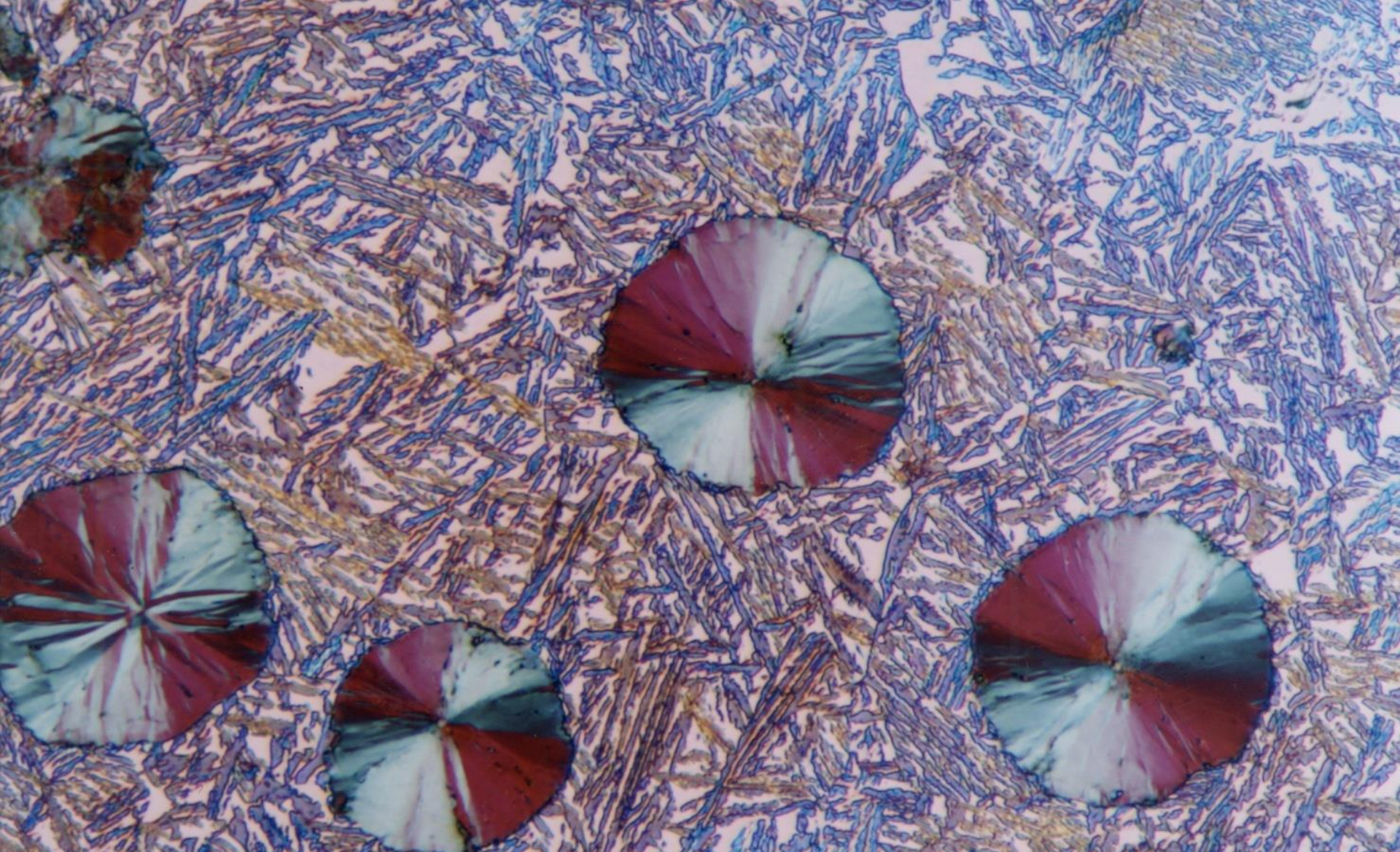
Sintered Carbides



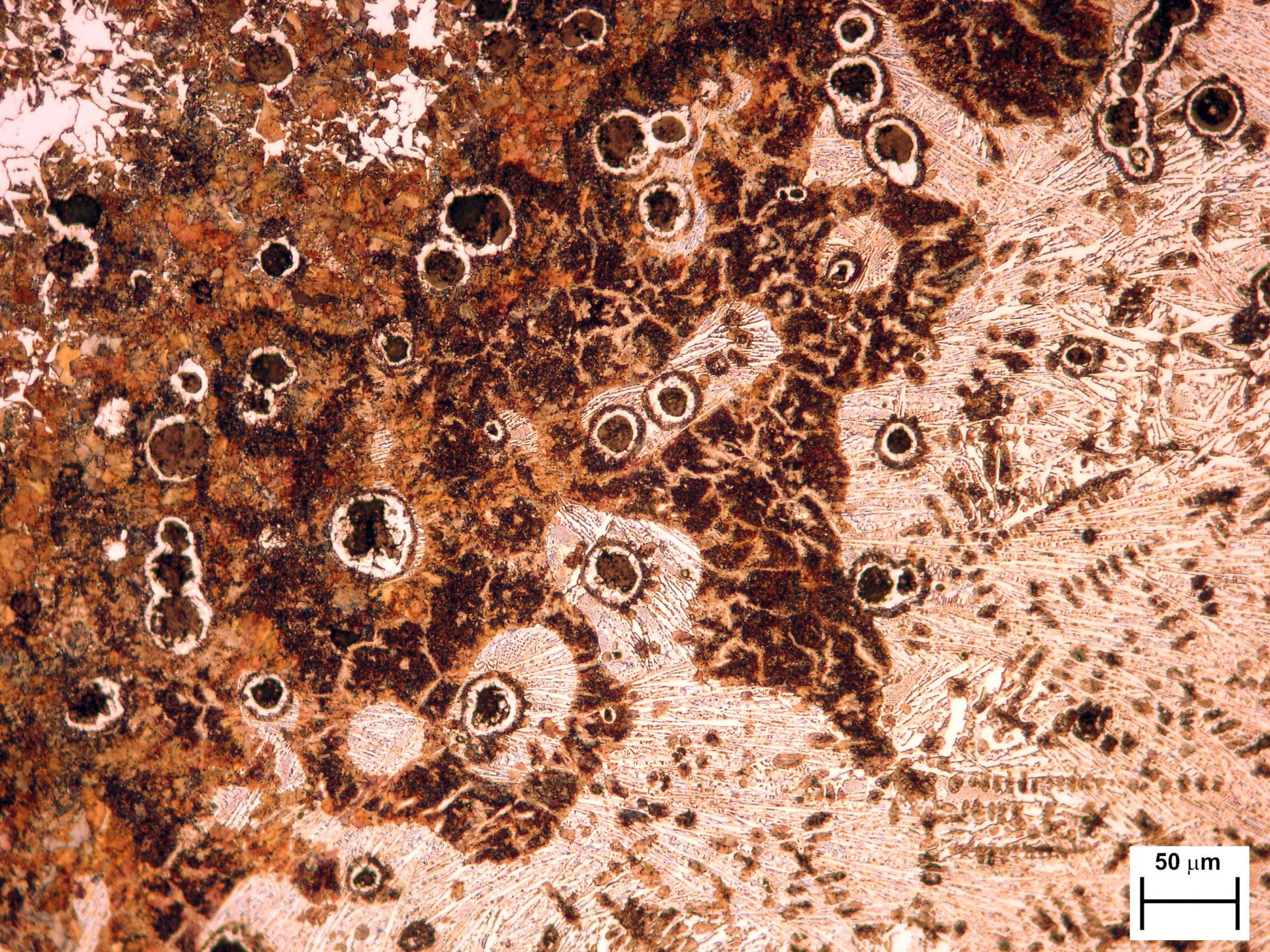
Tungsten Carbide



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.

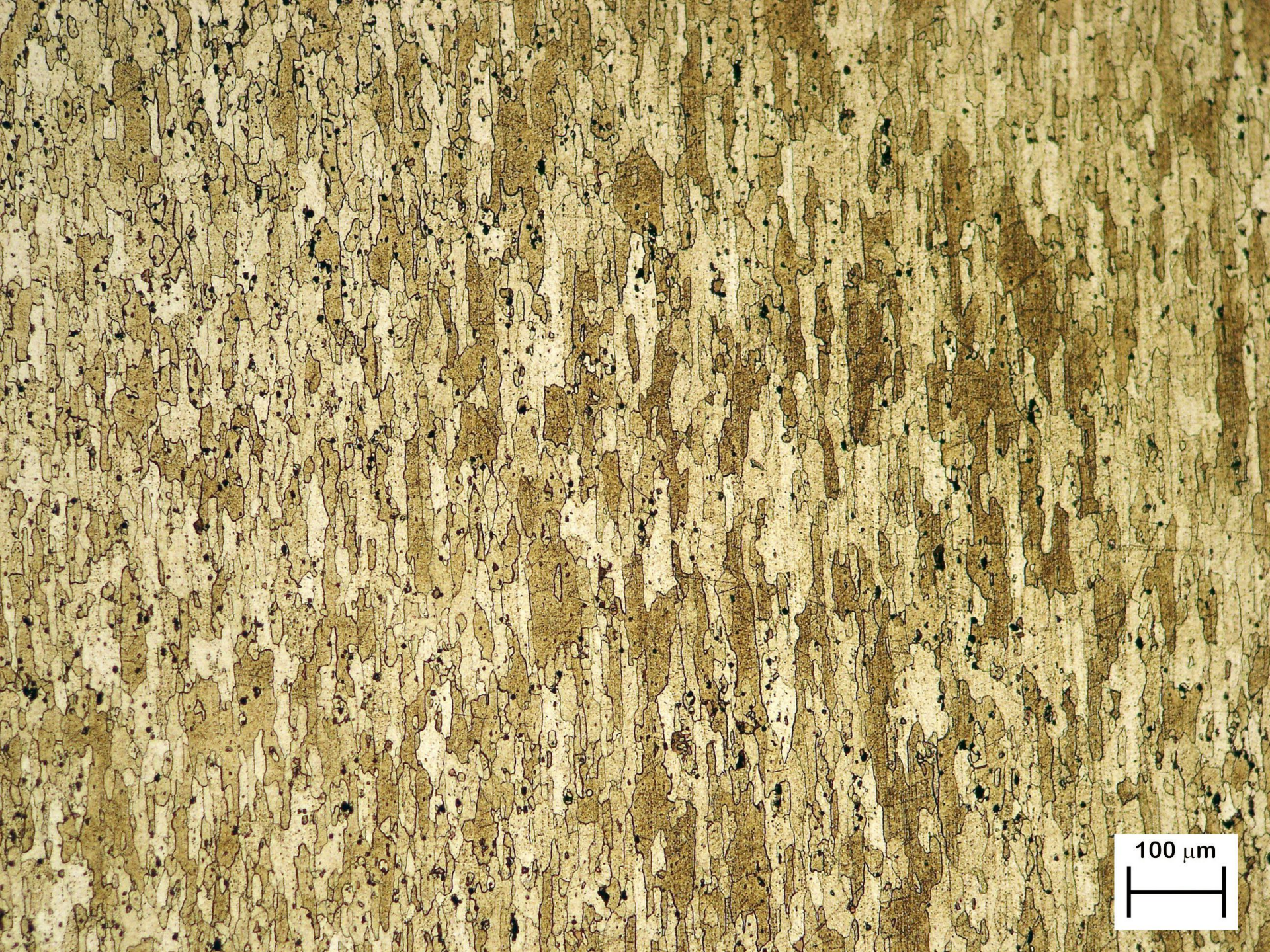


Microstructure of austempered ductile iron tint etched with Beraha's CdS reagent containing large graphite nodules (arrow), bainite (blue and brown) and retained austenite (white) when viewed with polarized light plus sensitive tint. Original at 500X.

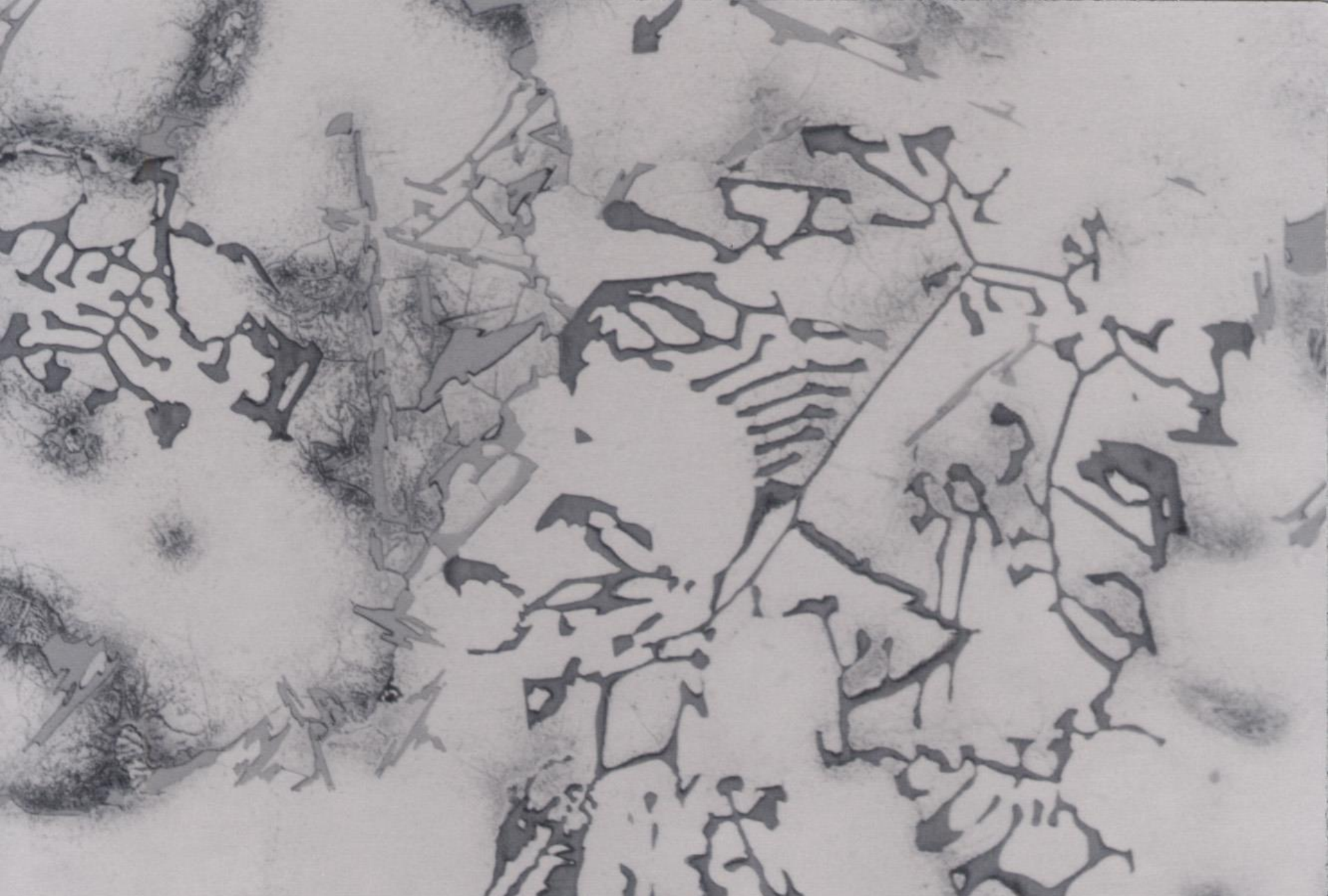


50 μm

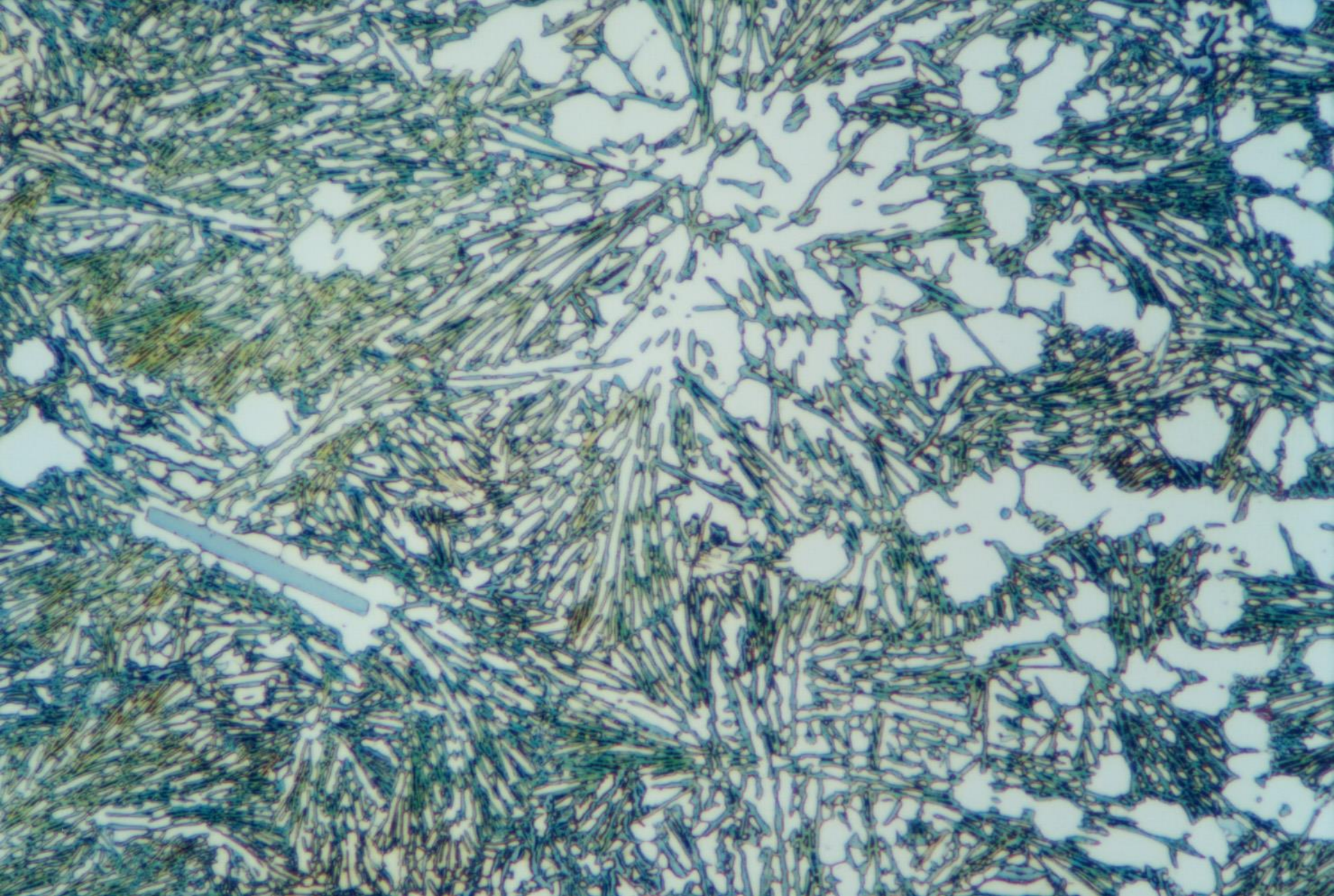




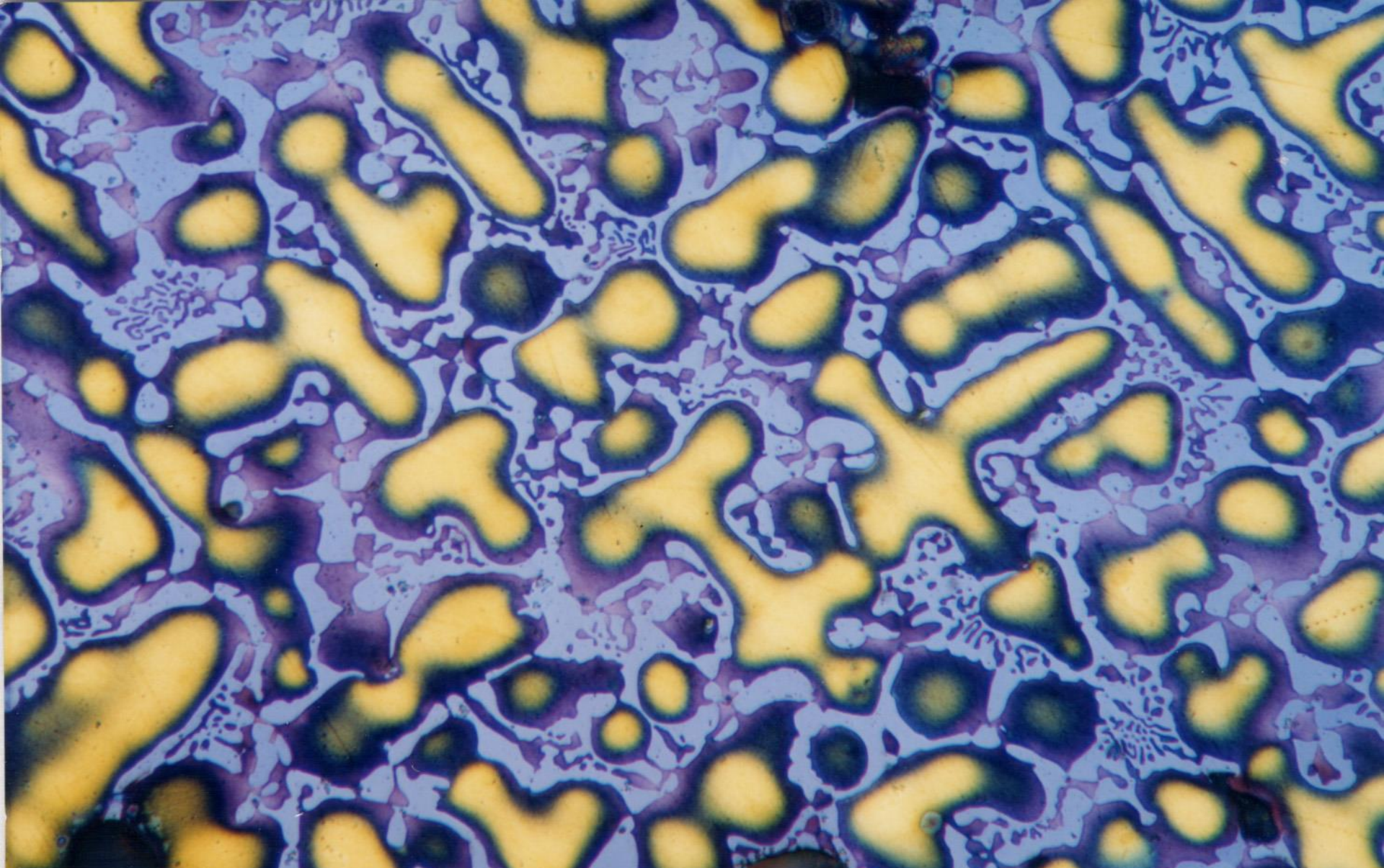
100 μm



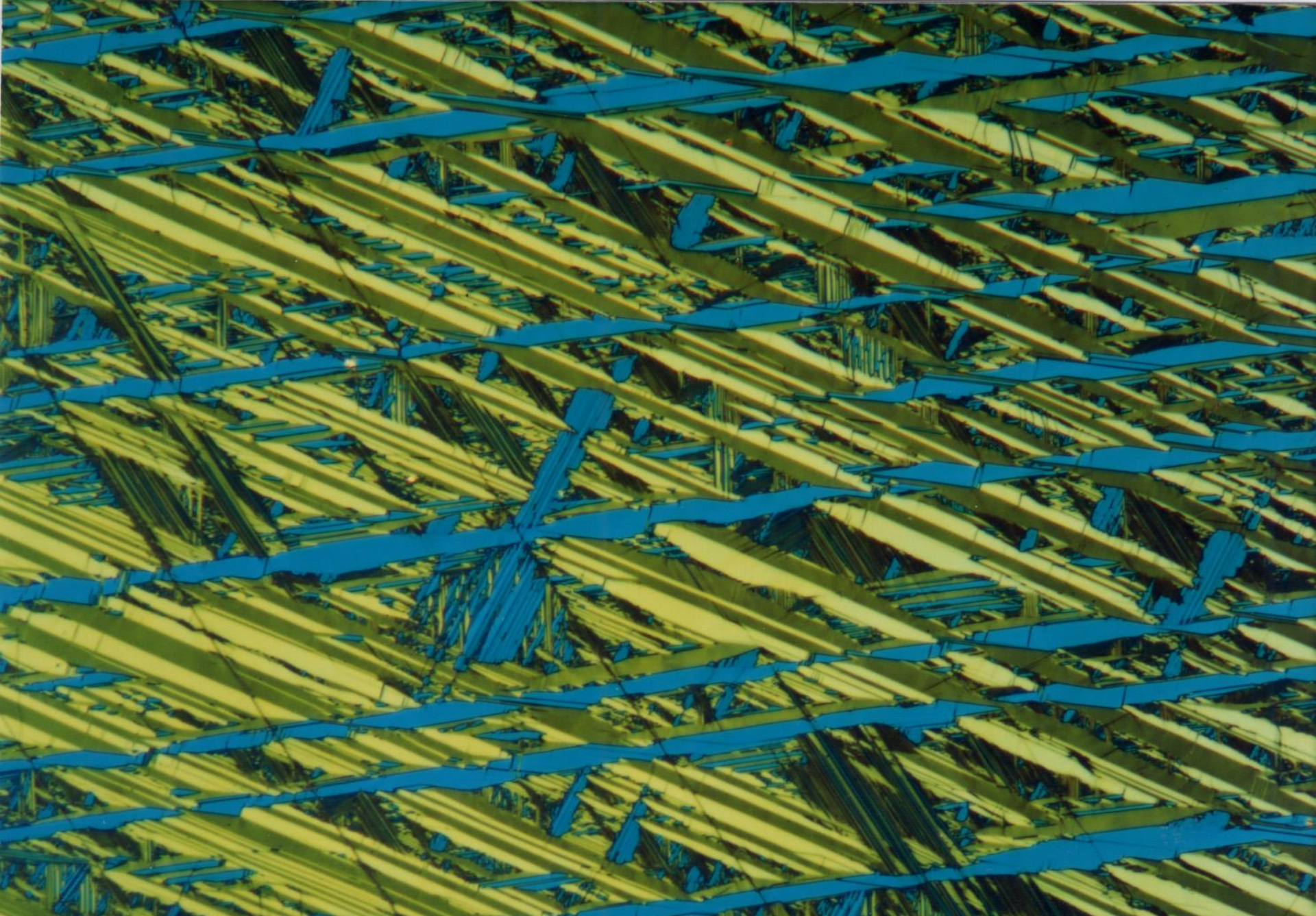
As-cast 319 aluminum (Al – 6.0% Si – 3.5% Cu) tint etched with Keller’s reagent revealing the intermetallic precipitates. Magnification bar is 50 μm long.



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

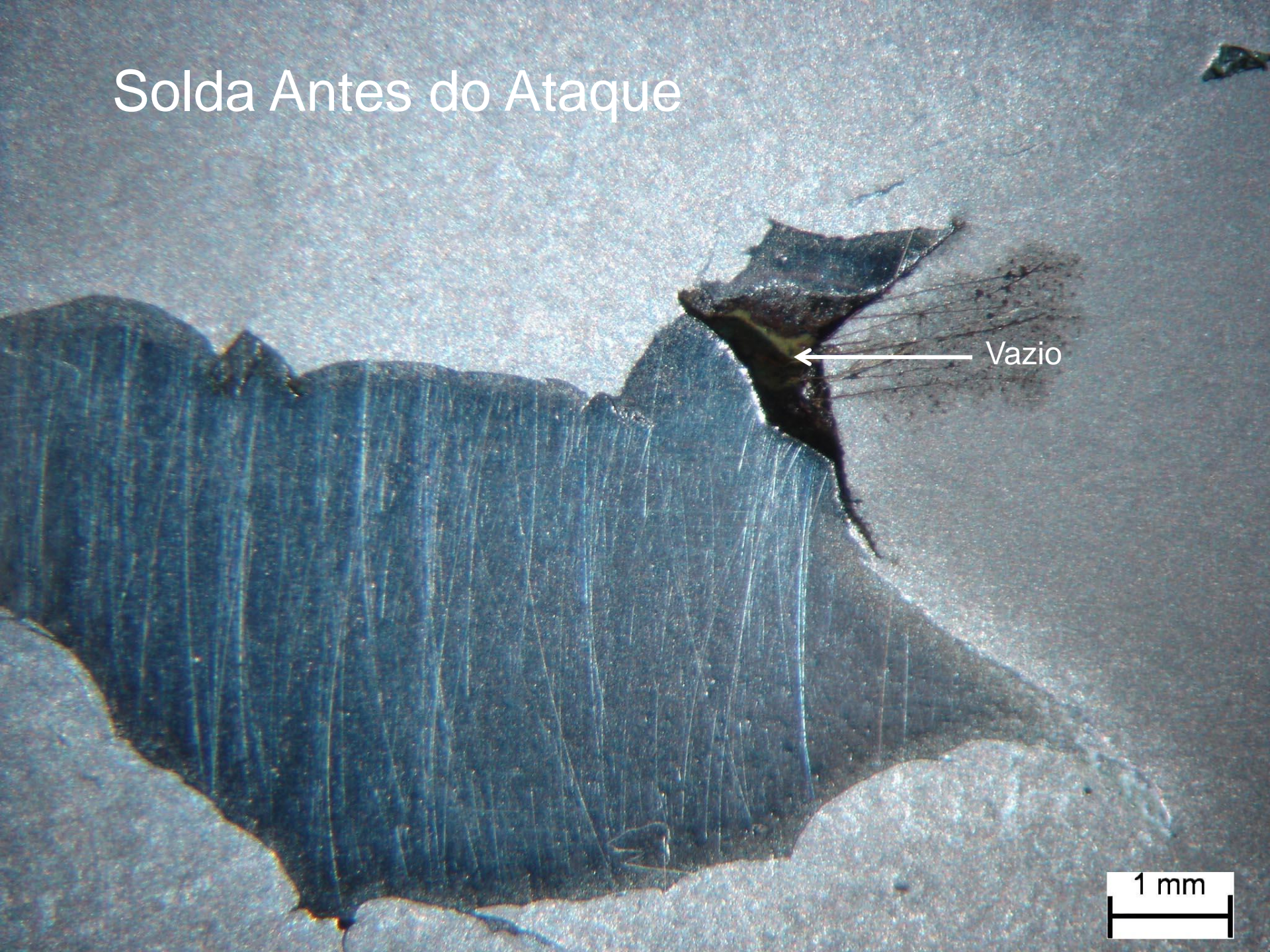


As-cast hypoeutectic Cu – 4.5% P tint etched with Klemm's II reagent which colors the copper-rich proeutectic dendrites. Polarized light plus sensitive tint has changed the appearance (compare with previous image). The copper dendrites are yellow and the last region to solidify, just above the eutectic temperature, has the same color as the copper in the eutectic. The copper phosphide, Cu_3P 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.

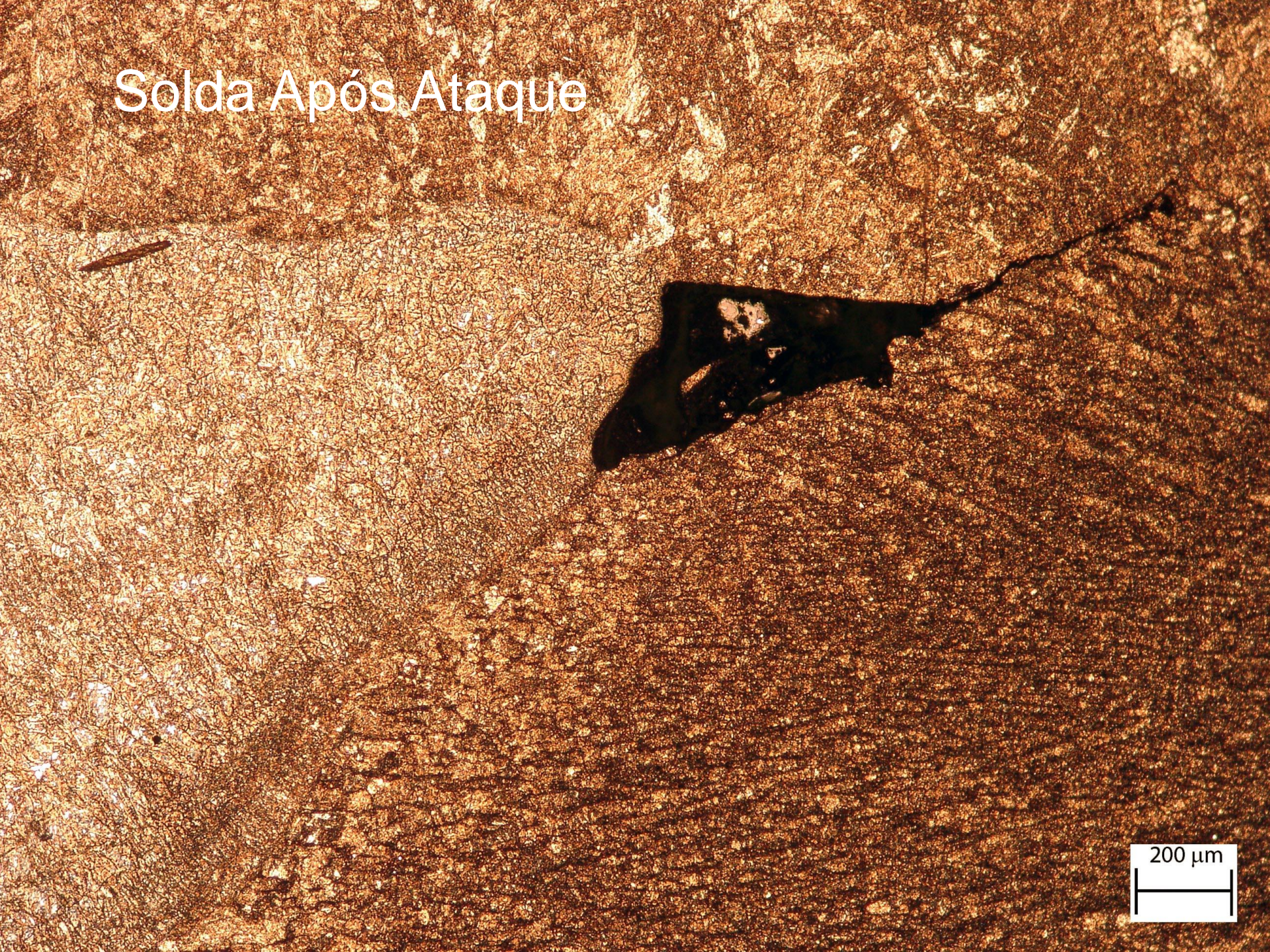
Solda Antes do Ataque



Vazio

1 mm

Solda Após Ataque



200 μm