

Estudo dos materiais e ligações químicas

PCC5726

Estrutura dos materiais

- Forma como os componentes internos dos materiais se arranjam.
- Várias formas/níveis de estudo da estrutura do material em função do que se pretende analisar ou manipular (“engenheirar”).
- Objetivos: entender e obter **propriedades** desejadas.

Princípio básico

**O comportamento do
material depende da
microestrutura**

Perguntas fundamentais:

- O que é **propriedade** de um material?

Resposta de um material a um estímulo externo.

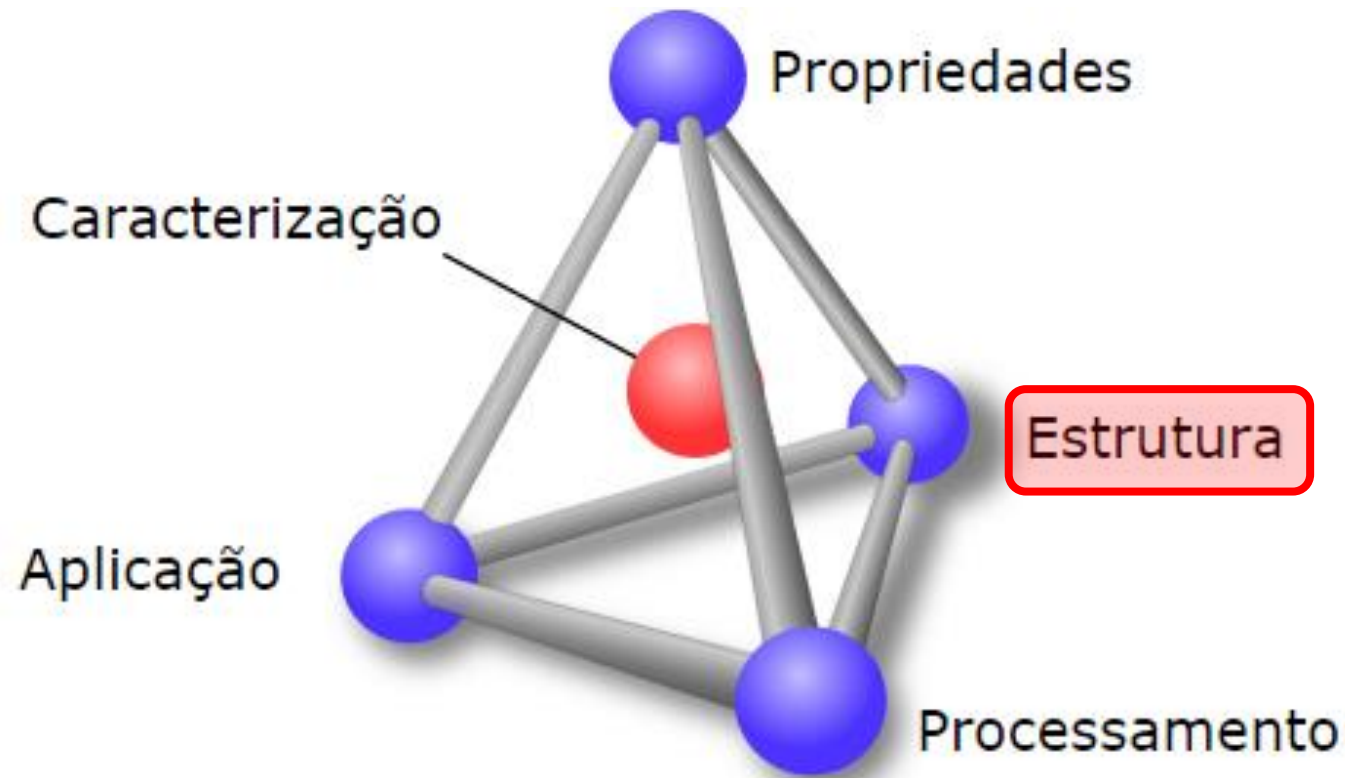
- **Tipos: mecânicas, térmicas, elétricas, magnéticas, óticas e químicas (ligadas à reatividade ou “deteriorativas”).**

- O que é **característica** de um material?

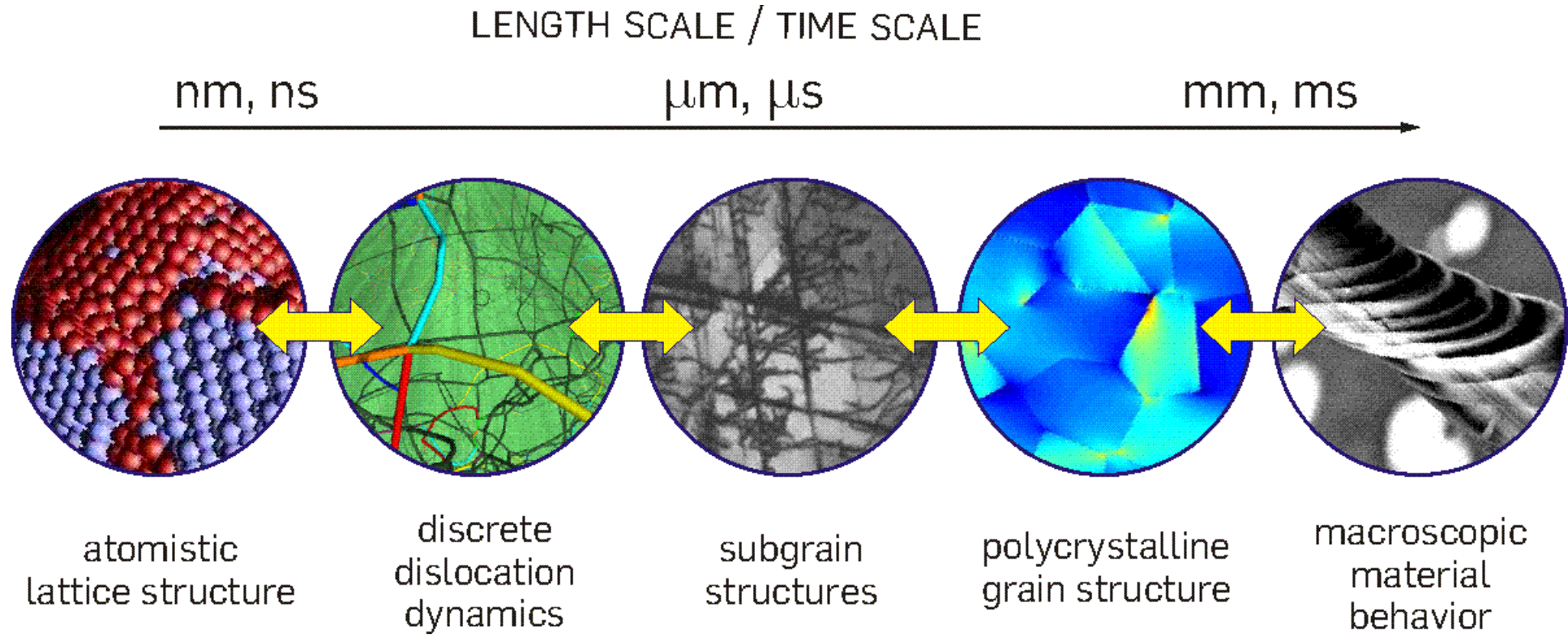
Parâmetro ou atributo que caracteriza um material

- O que é **processamento** de um material?
- O que é **desempenho** de um material?

O Tetraedro das Ciências dos Materiais

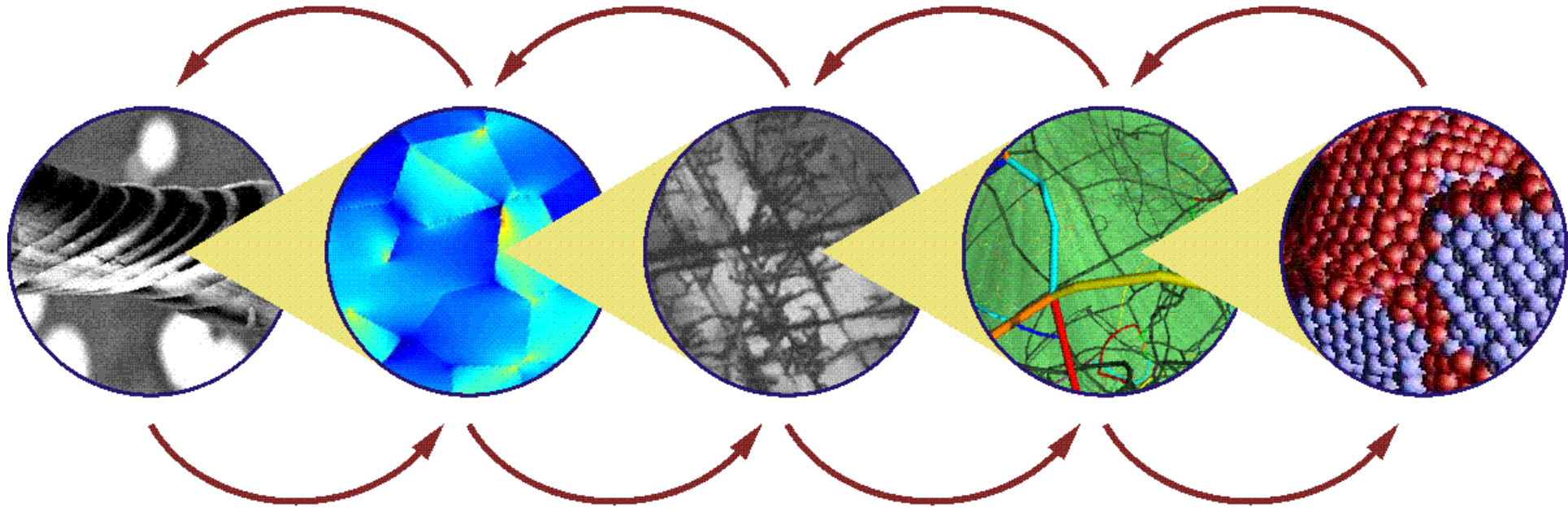


Multi-escala



Multi-escala

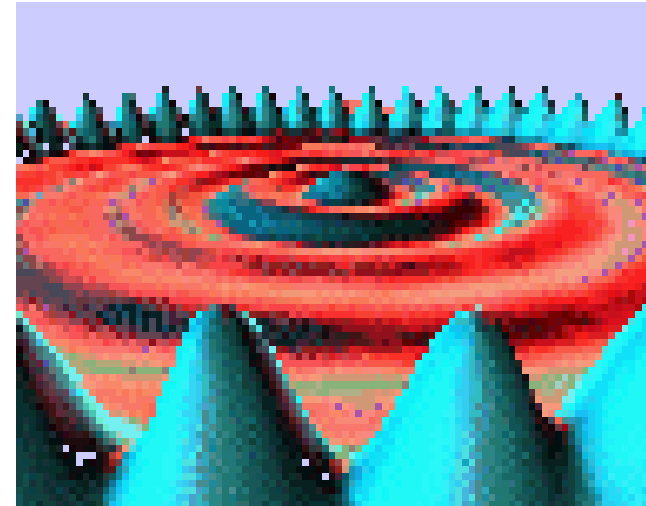
Modeling and Simulation of Material Behavior across the Scales



Design and Production of Materials with Superior Performance

Níveis de estudo dos materiais

- **Sub-atômico ($\text{\AA}$)**
 - átomo
 - microscopia eletrônica de tunelamento
- **Atômico (nm - μm)**
 - moléculas, cristais
 - Difração de raios X
 - Microscopia eletrônica de varredura



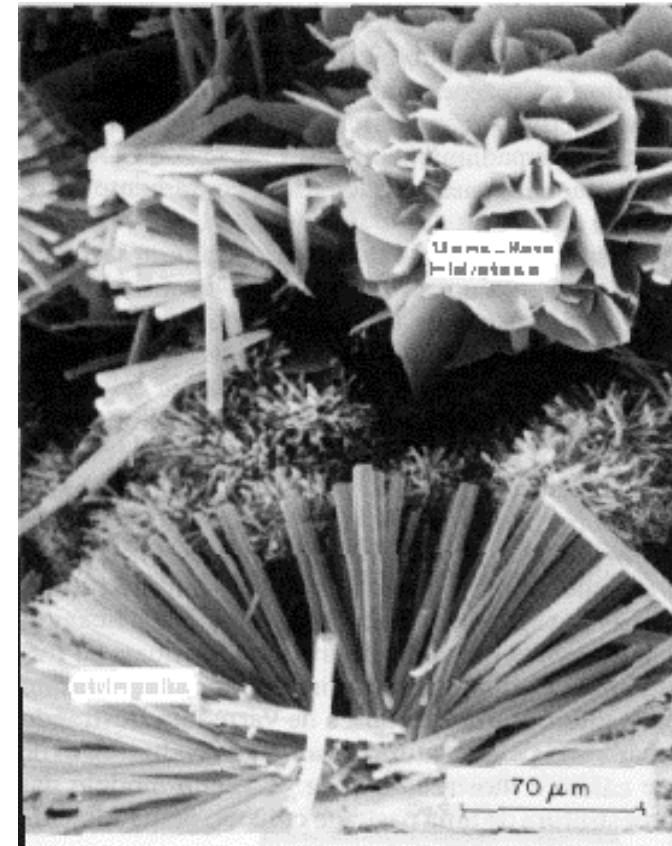
Níveis de estudo dos materiais

- **Microscópico (mm-mm)**

- fases, partículas
- microscópios ótico e de varredura
- ensaios físicos

- **Macroscópico (>mm)**

- todo o material
- ensaios mecânicos



Propriedades analisadas nível do^x estudo

- **Sub-atômico**

- condutividade elétrica
- propriedades térmicas

- **Atômico**

- ligações interatômicas e estado de agregação da matéria

- **Microscópico**

- característica dos materiais em função do arranjo

- **Macroscópico**

- medida de propriedades médias do material

Classificação geral dos materiais da construção civil

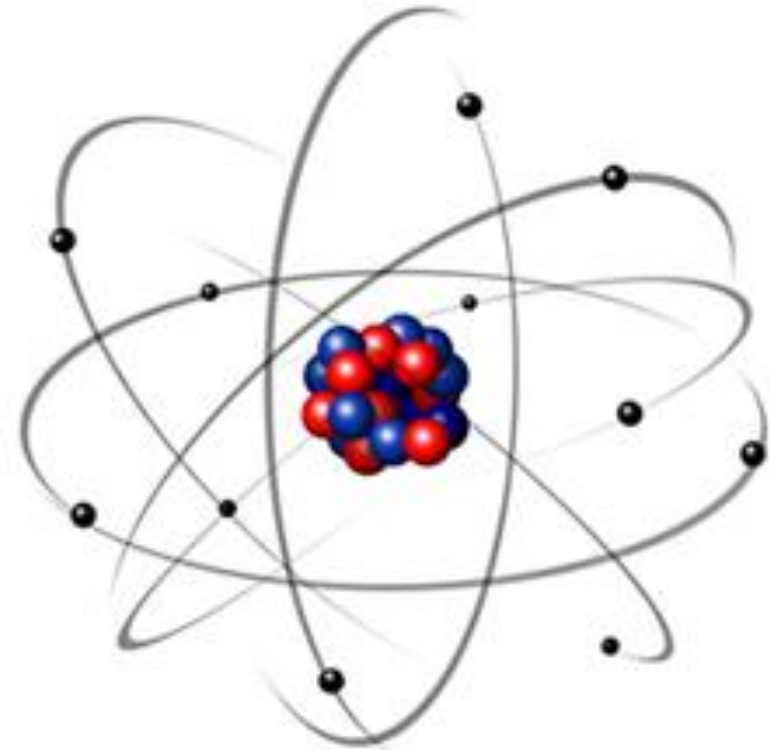
- Cerâmicos
 - Cimento, cal, cerâmica vermelha e branca e vidros.
- Polímeros
 - Plásticos, borrachas, betumes, celulose, etc.
- Metais
 - Ferro, aço, alumínio, cobre, zinco e suas ligas
- Compósitos
 - Madeira, materiais reforçados com fibras, aglomerados.

LIGAÇÕES ATÔMICAS

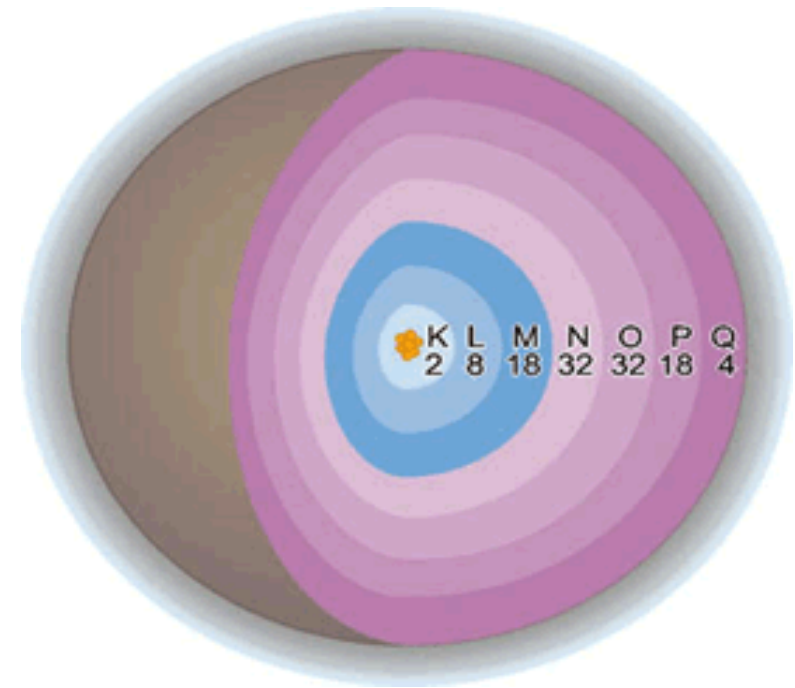
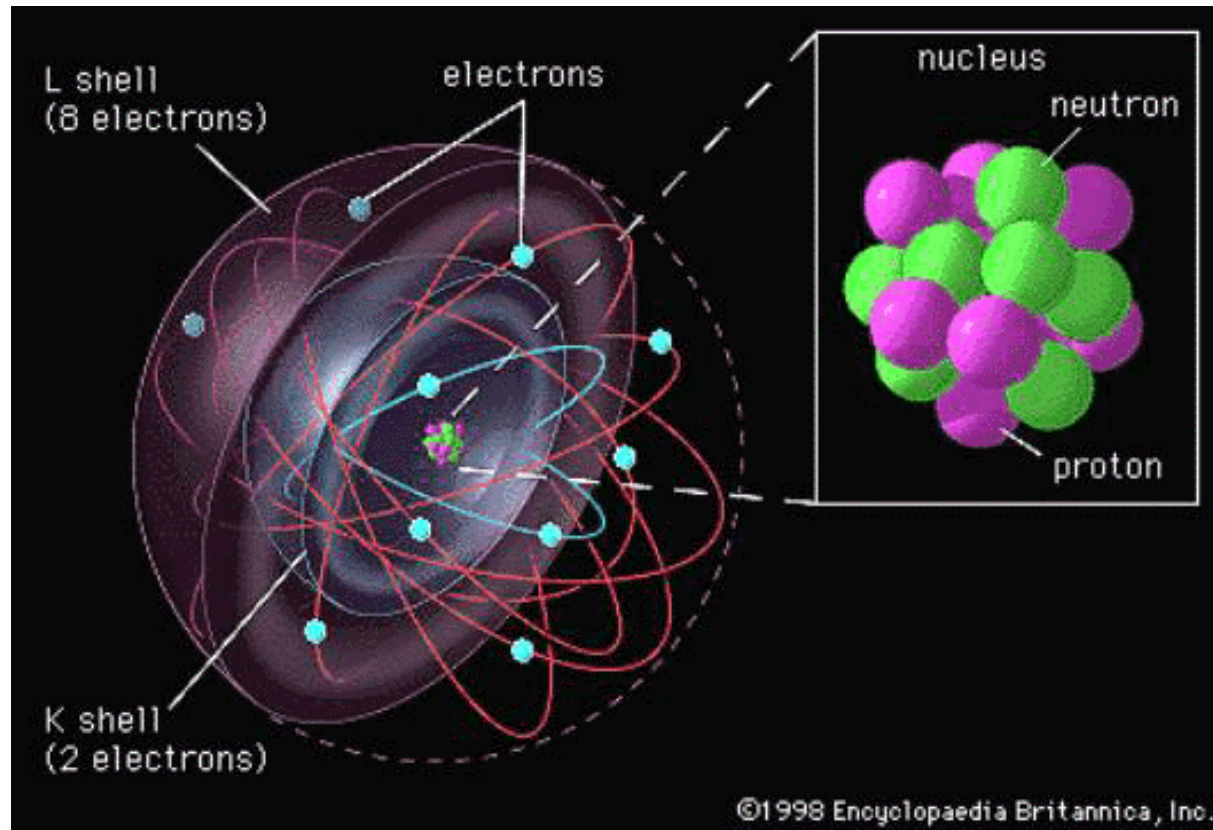
noções básicas

Estrutura do átomo

Modelo



Modelo do Átomo



Estrutura do átomo

- Núcleo carga
 - prótons +1
 - neutrons 0
- Elétrons -1

$$\frac{m_{eletron}}{m_{proton}} \approx \frac{1}{1850}$$

$$10.000 < \frac{d_{ne}}{d_{nu}} < 100.000$$

Massa de prótons e
neutrons = $1,67 \times 10^{-27} \text{kg}$
Massa de elétrons =
 $9,11 \times 10^{-31} \text{kg}$

Estrutura do Átomo

- **Massa** esta concentrada no núcleo.
- Núcleo ocupa pequena parte do volume total do átomo!
- Eletrosfera ocupa maior parte do volume.
- Eletrosfera tem pouca massa.
- Eletrosfera é **deformável**.

Aspectos ligados às ligações químicas:

- Os elétrons de valência (do último nível) são os que efetivamente participam das ligações químicas.
- Os átomos buscam uma condição mais estável: configuração dos gases nobres (com 2 ou 8 elétrons no último nível)
- Apresentam diferentes níveis de energia de ligação.
- As ligações químicas têm total influência sobre as propriedades e características dos materiais

Importante!

- Átomos que perdem elétrons ficam positivos e são chamados **cátions**.
- Átomos que ganham elétrons ficam negativos e são chamados **ânions**.
- Átomos que não ganham nem perdem elétrons não combinam com ninguém e são chamados de **gases nobres**.
- A formação de um material depende da formação de íons.

Ligação iônica

- Para que ocorra ligação iônica é necessário que haja íons com alta e baixa eletronegatividade
- atração eletrostática
 - perda de elétrons +
 - ganho de elétrons -
- exemplos:

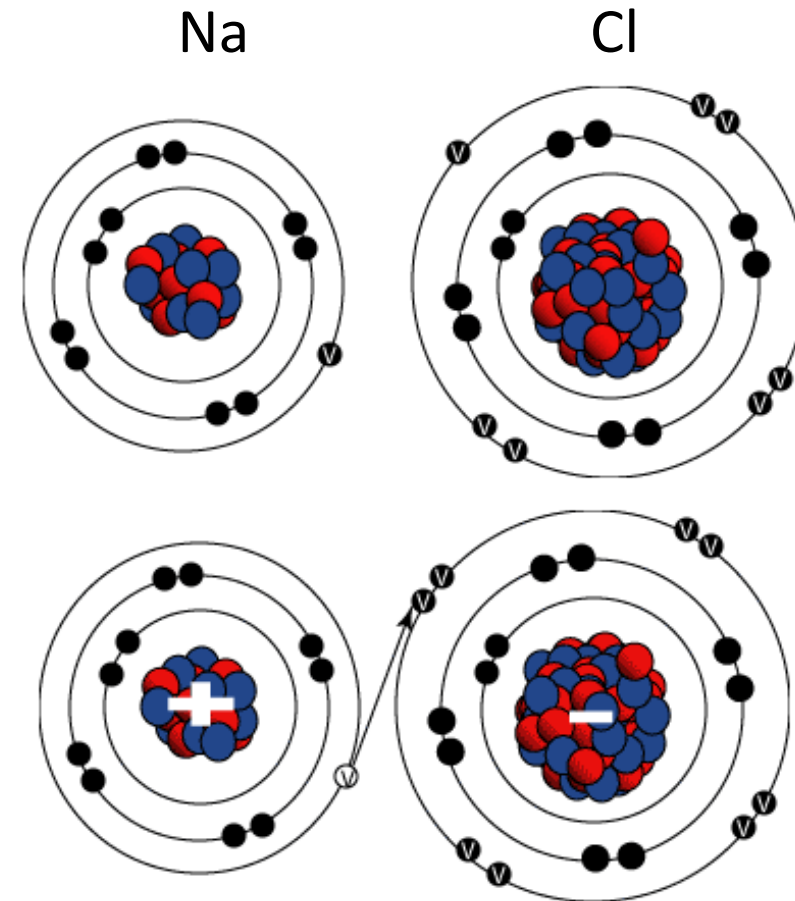
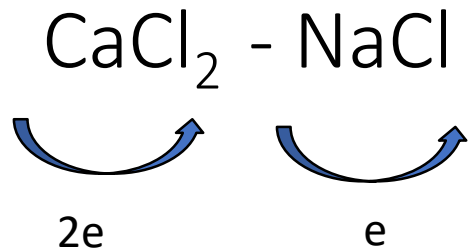
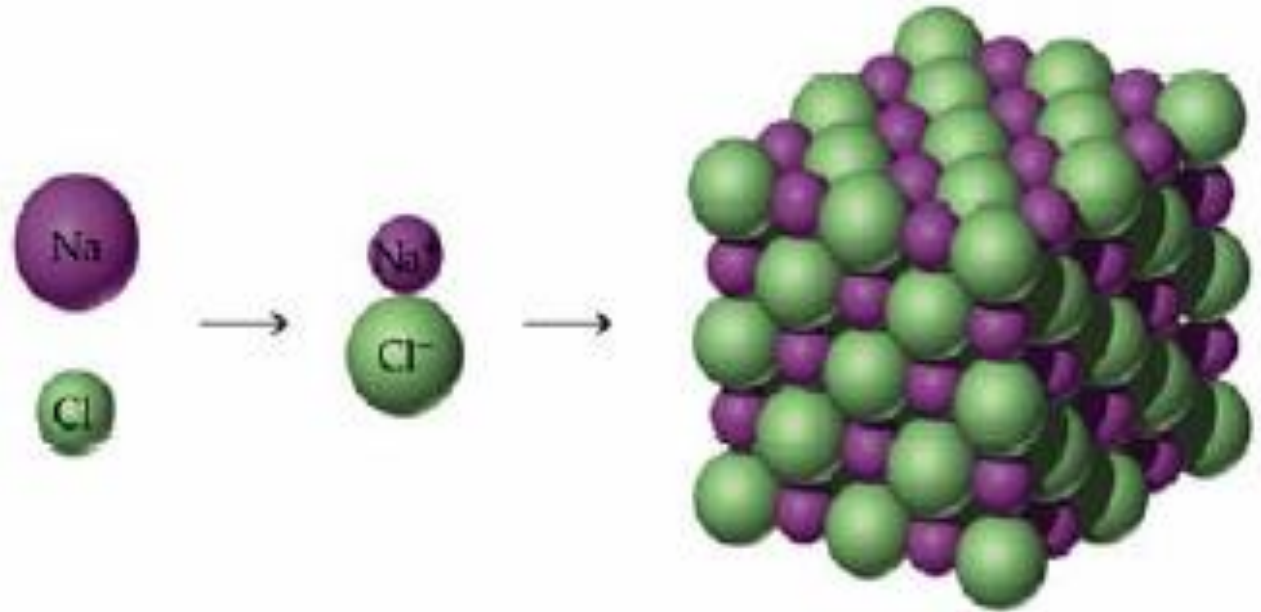


Tabela periódica

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	1A																	8A
1	H Hidrogênio 1,00794																	He Hélio 4,002602
2	Li Lítio 6,941	Be Berílio 9,012182																
3	Na Sódio 22,98976... -10,82	Mg Magnésio 24,305 +1,31																
4	K Potássio 39,0983 -10,82	Ca Cálcio 40,078 +1,30	Sc Escândio 44,955912 +2,28	Ti Titânio 47,867 +1,10	V Vanádio 50,9415 +1,11	Cr Cromo 51,9961 -1,02	Mn Manganês 54,938045 -1,02	Fe Ferro 55,845 -1,41	Co Cobalto 58,933195 -1,02	Ni Níquel 58,6934 -1,02	Cu Cobre 63,546 -1,02	Zn Zinco 65,38 -1,02	Ga Gálio 69,723 -1,02	Ge Germanício 72,63 +1,02	As Arsênio 74,9216 +1,02	Se Selênio 78,96 +1,02	Br Bromo 79,904 +1,02	Kr Criptônio 83,798 +1,02
5	Rb Rubídio 85,4678 -10,82	Sr Estrôncio 87,62 +1,30	Y Ítrio 88,90585 +2,28	Zr Zircônio 91,224 +1,10	Nb Nióbio 92,90638 +1,11	Mo Molibdênio 95,96 -1,02	Tc Tecnécio (98) -1,02	Ru Rutênio 101,07 -1,02	Rh Ródio 102,9055 -1,02	Pd Paládio 106,42 -1,02	Ag Prata 107,8682 -1,02	Cd Cádmio 112,411 -1,02	In Índio 114,818 -1,02	Sn Estanho 118,71 +1,02	Sb Antimônio 121,76 +1,02	Te Telúrio 127,6 +1,02	I Iodo 126,90447 +1,02	Xe Xenônio 131,293 +1,02
6	Cs Césio 132,9054... -10,82	Ba Bário 137,327 +1,30	57–71 *	Hf Háfnio 178,49 +1,10	Ta Tântalo 180,94788 +1,11	W Tungstênio 183,84 -1,02	Re Rênio 186,207 -1,02	Os Osmio 190,23 -1,02	Ir Íridio 192,217 -1,02	Pt Platina 195,084 -1,02	Au Ouro 196,966569 -1,02	Hg Mercúrio 200,59 +1,02	Tl Tálio 204,3833 +1,02	Pb Chumbo 207,2 +1,02	Bi Bismuto 208,9804 +1,02	Po Polônio (209) +1,02	At Astato (210) +1,02	Rn Radônio (222) +1,02
7	Fr Frâncio (223) -10,82	Ra Rádío (226) +1,30	89–103 **	Rf Rutherfordio (267) +1,10	Db Dubnio (268) +1,11	Sg Seabörgio (271) -1,02	Bh Bório (272) -1,02	Hs Hásio (270) -1,02	Mt Meitnério (278) -1,02	Ds Darmstádio (281) -1,02	Rg Roentgênio (280) -1,02	Cn Copernício (285) +1,02	Uut Ununtrio (284) +1,02	Uuq Ununquádro (289) +1,02	Uup Ununpentio (288) +1,02	Uuh Ununhéxio (293) +1,02	Uus Ununséptio (294) +1,02	Uuo Ununoctio (294) +1,02
			*	La Lantânio 138,90547 +1,02	Ce Cério 140,116 +1,02	Pr Praseodímio 140,90765 +1,02	Nd Neodímio 144,242 +1,02	Pm Promécio (145) +1,02	Sm Samário 150,36 +1,02	Eu Európio 151,964 +1,02	Gd Gadolínio 157,25 +1,02	Tb Térbio 158,92535 +1,02	Dy Disprósio 162,5 +1,02	Ho Hólmio 164,93032 +1,02	Er Érbio 167,259 +1,02	Tm Túlio 168,93421 +1,02	Yb Íterbio 173,054 +1,02	Lu Lutécio 174,9688 +1,02
		**		Ac Actínio (227) +1,02	Th Tório 232,03806 +1,02	Pa Protactínio 231,03688 +1,02	U Urânio 238,02891 +1,02	Np Neptúnio (237) +1,02	Pu Plutónio (244) +1,02	Am Americio (243) +1,02	Cm Cúrio (247) +1,02	Bk Berquélio (247) +1,02	Cf Califórnia (251) +1,02	Es Einstênio (252) +1,02	Fm Férmio (257) +1,02	Md Mendelévio (258) +1,02	No Nobelio (259) +1,02	Lr Laurêncio (262) +1,02

Ligação iônica

- **atração eletrostática**
perda de elétrons +
ganho de elétrons -
- **não direcional**
- **sólido**
- **solúveis (solventes polares)**
- **Isolantes**



Não permite deslocamentos relativos dentro dos planos cristalinos

Ligação covalente

- A ligação covalente é um tipo de ligação química que ocorre com o compartilhamento de pares de elétrons entre átomos que podem ser o hidrogênio, não-metais ou semi-metais

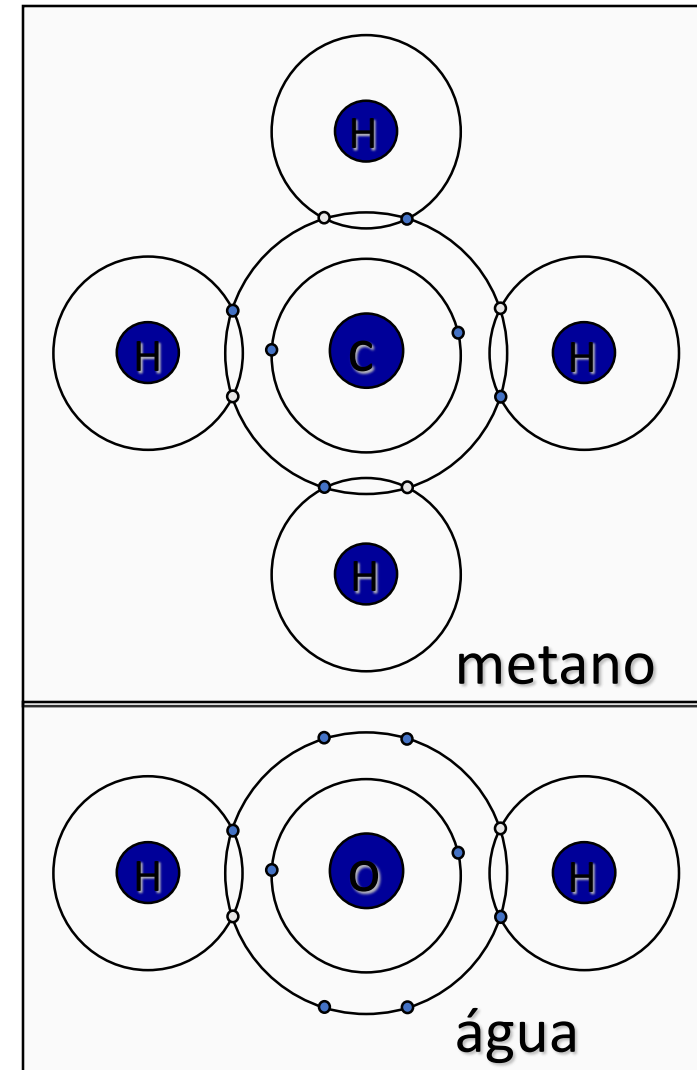
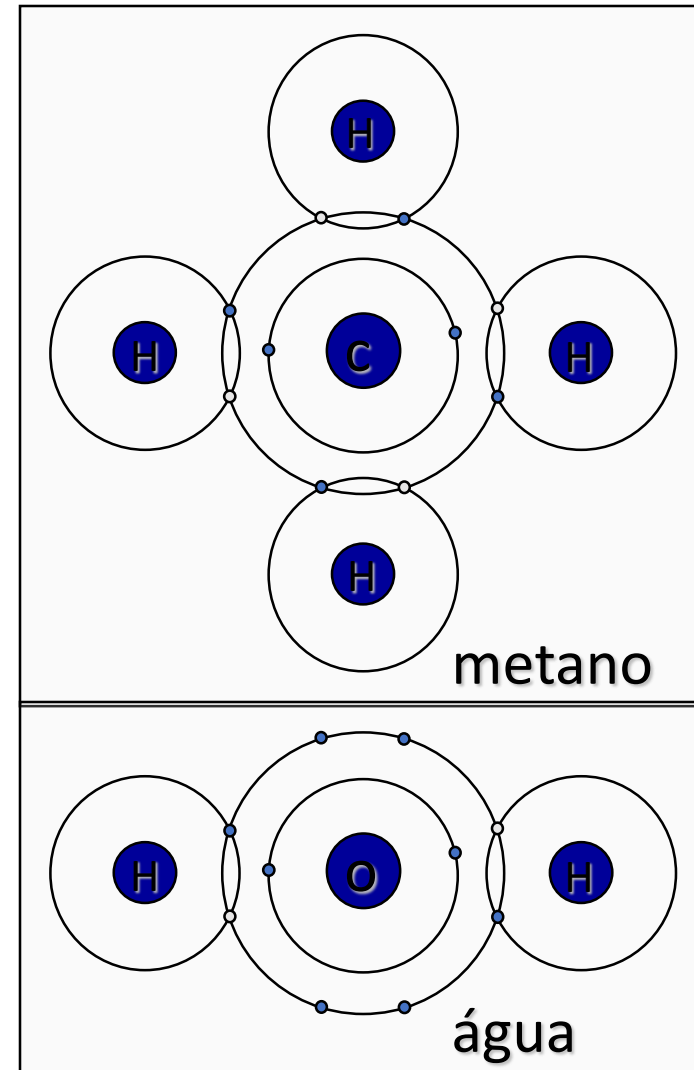


Tabela periódica

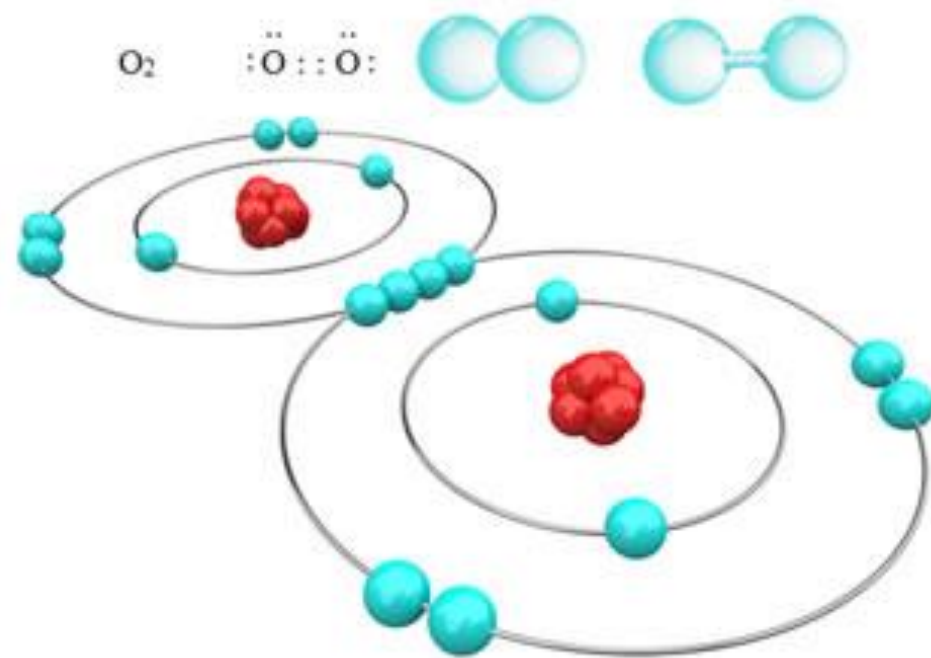
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1A	2A																8A
1 H Hidrogênio 1,00784																	2 He Hélio 4,002602
3 Li Lítio 6,941	4 Be Berílio 9,012182																
5 Na Sódio 22,989768	6 Mg Magnésio 24,305																
7 K Potássio 39,0983	8 Ca Cálcio 40,078	9 Sc Escândio 44,955912	10 Ti Titânio 47,887	11 V Vanádio 50,9415	12 Cr Cromo 51,9961	13 Mn Manganês 54,938045	14 Fe Ferro 55,845	15 Co Cobalto 58,933195	16 Ni Níquel 58,6934	17 Cu Cobre 63,546	18 Zn Zinco 65,38	19 Ga Gálio 69,723	20 Ge Germânio 72,63	21 As Arsênio 74,9216	22 Se Selênio 78,96	23 Br Bromo 79,904	24 Kr Criptônio 83,798
9 Rb Rubídio 85,4678	10 Sr Estrôncio 87,62	11 Y Ítrio 88,90585	12 Zr Zircônio 91,224	13 Nb Níbio 92,90638	14 Mo Molibdênio 95,96	15 Tc Tecnécio (98)	16 Ru Rutênio 101,07	17 Rh Ródio 102,9055	18 Pd Paládio 106,42	19 Ag Prata 107,8682	20 Cd Cádmio 112,411	21 In Índio 114,818	22 Sn Estanho 118,71	23 Sb Antimônio 121,76	24 Te Telúrio 127,6	25 I Iodo 126,90447	26 Xe Xenônio 131,293
11 Cs Césio 132,90545	12 Ba Bário 137,327	13 La Lantânio 138,90547	14 Hf Háfnio 178,49	15 Ta Tântalo 180,94788	16 W Tungstênio 183,84	17 Re Rênio 186,207	18 Os Osmio 190,23	19 Ir Írídio 192,217	20 Pt Platina 195,084	21 Au Ouro 196,966569	22 Hg Mercúrio 200,59	23 Tl Tálio 204,3833	24 Pb Chumbo 207,2	25 Bi Bismuto 208,9804	26 Po Polônio (209)	27 At Astato (210)	28 Rn Radônio (222)
13 Fr Frâncio (223)	14 Ra Rádio (226)	15 Ac Actínio (227)	16 Rf Rutherfordio (261)	17 Db Dubnio (268)	18 Sg Seabórgio (271)	19 Bh Bório (272)	20 Hs Hássio (270)	21 Mt Meitnério (278)	22 Ds Darmastádio (281)	23 Rg Roentgênio (280)	24 Cn Copernício (285)	25 Uut Ununtrio (284)	26 Uuq Ununquádro (289)	27 Uup Ununpêntio (288)	28 Uuh Ununhécio (293)	29 Uus Ununseptio (294)	30 Uuo Ununoctio (294)

Ligação covalente

- Elétrons compartilhados em orbitais específicos
- N° de ligações depende do N° de valência
- Isolantes
 - direcional
 - exemplo: polímeros

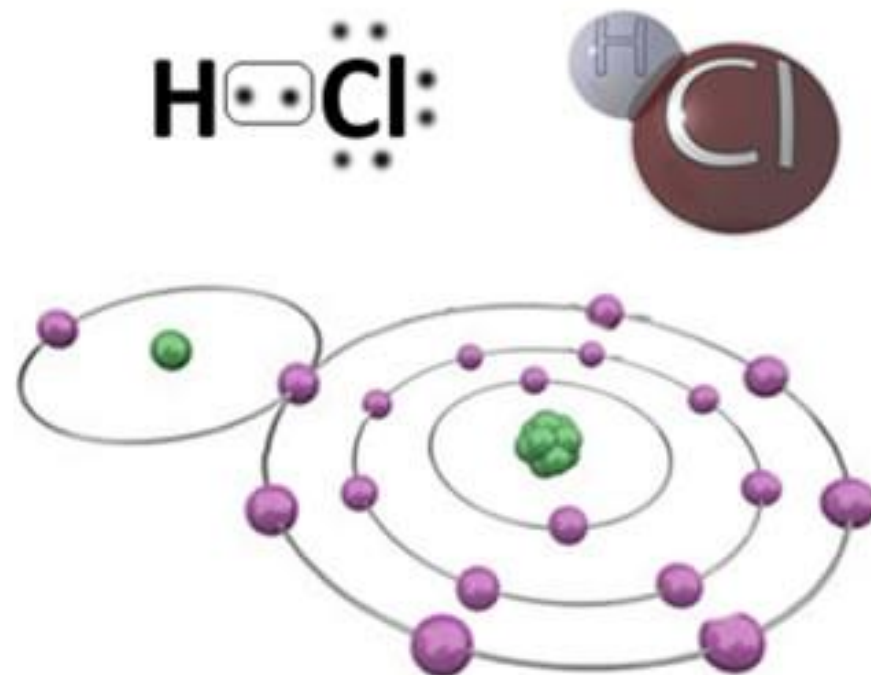


Ligação Covalente - Apolar



Molécula O_2

Ligação Covalente - Polar



Molécula HCl

Ligação Iônica x Covalente

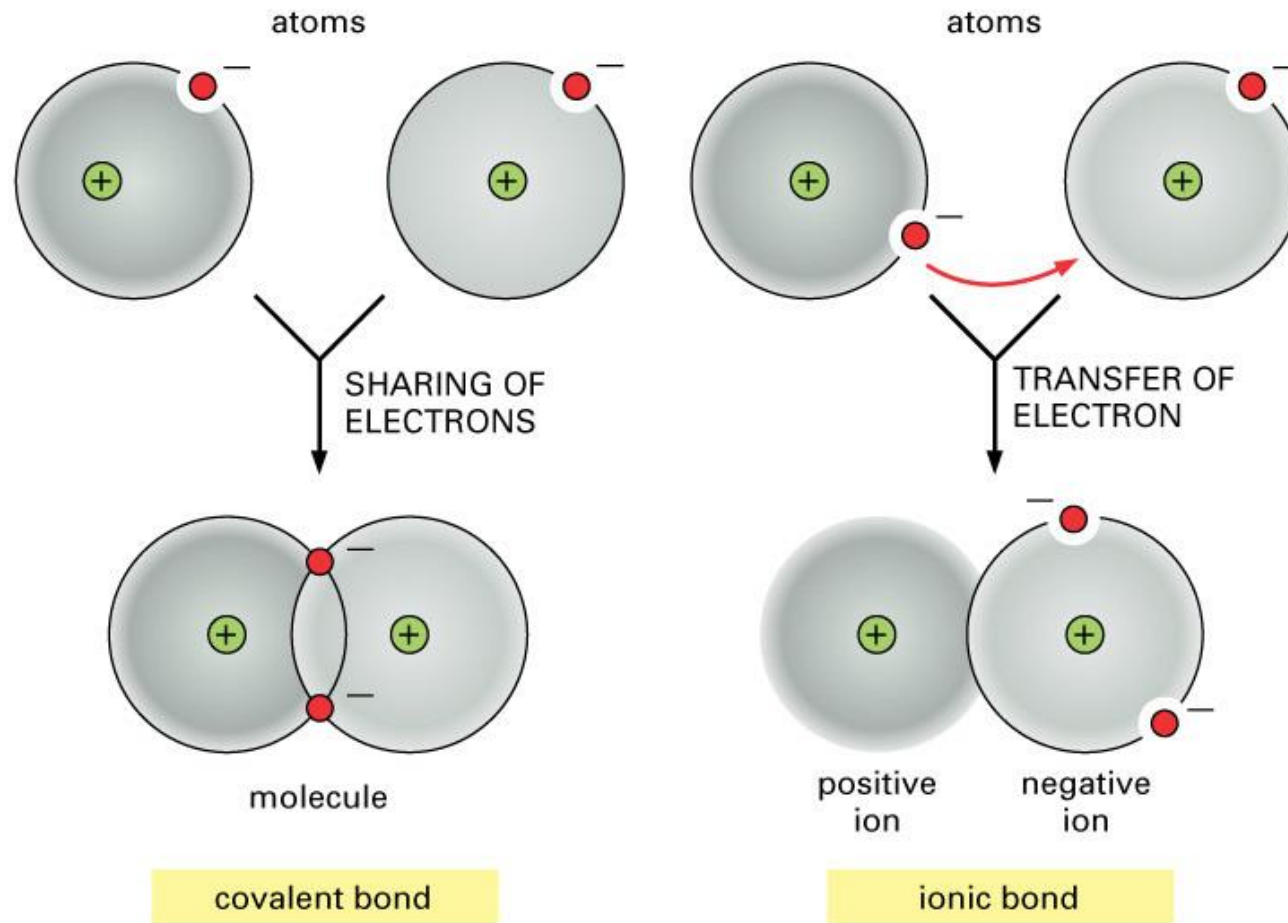
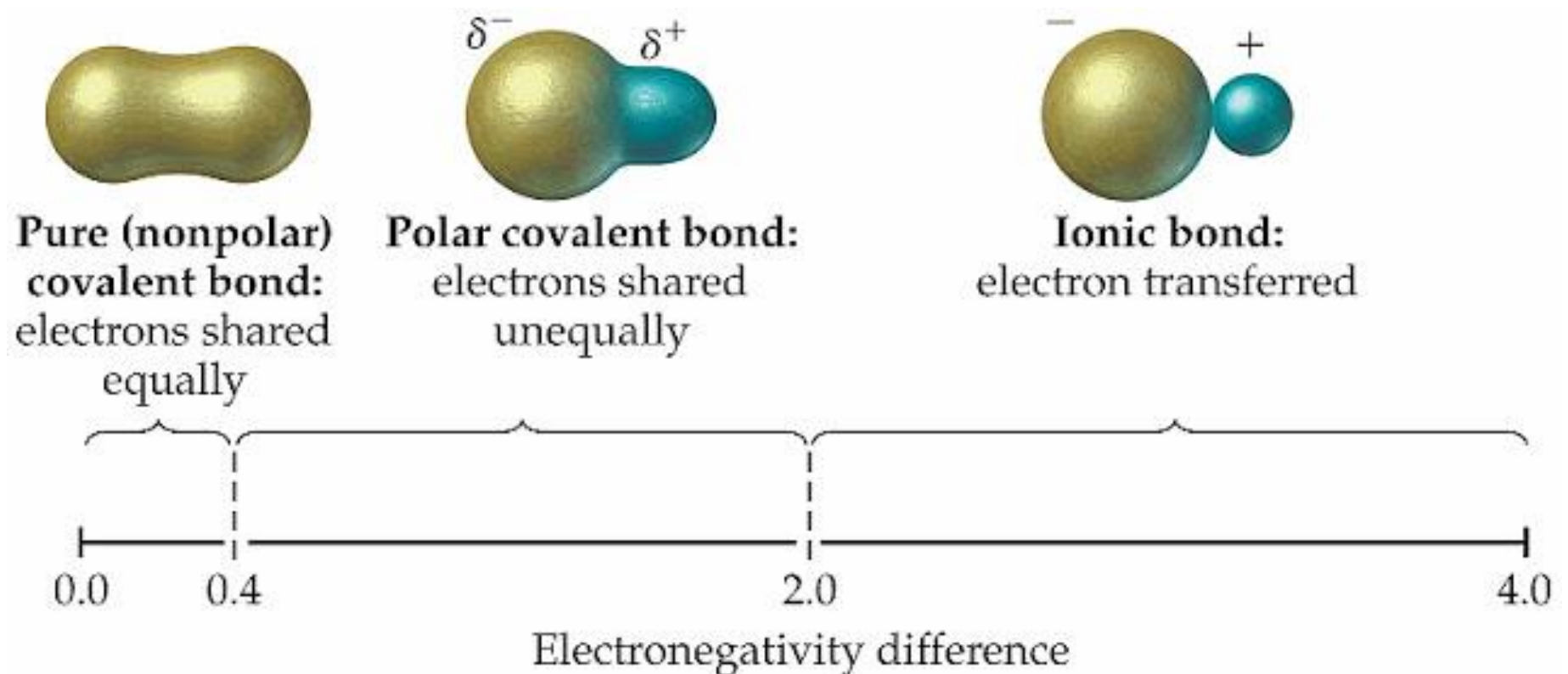


Figure 2.6 Essential Cell Biology, 2/e. (© 2004 Garland Science)

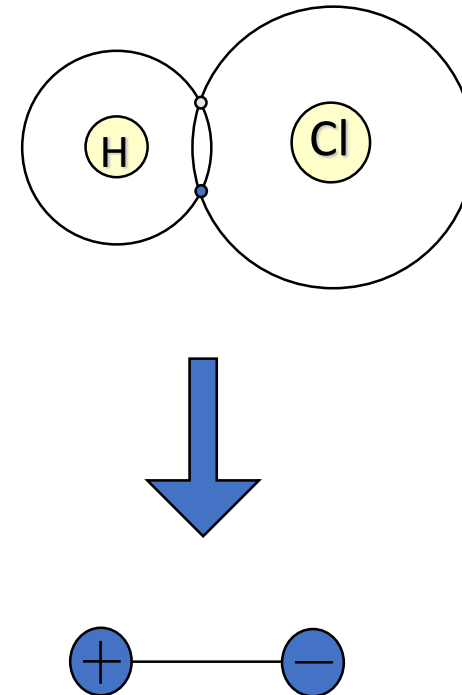
Ligação Iônica x Covalente



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

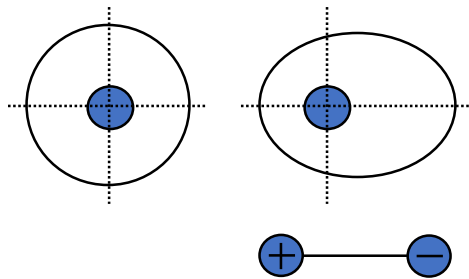
Forças de Van der Waals

- Aglutinam “moléculas”
- Forças secundárias ocorrem em praticamente todos átomos e moléculas (gases inertes)
- Surgem forças de atração entre átomos ou moléculas:
 - ✓ Entre dipolos induzidos
 - ✓ Entre dipolos induzidos e moléculas polares
 - ✓ Entre moléculas polares



Forças de Van der Waals

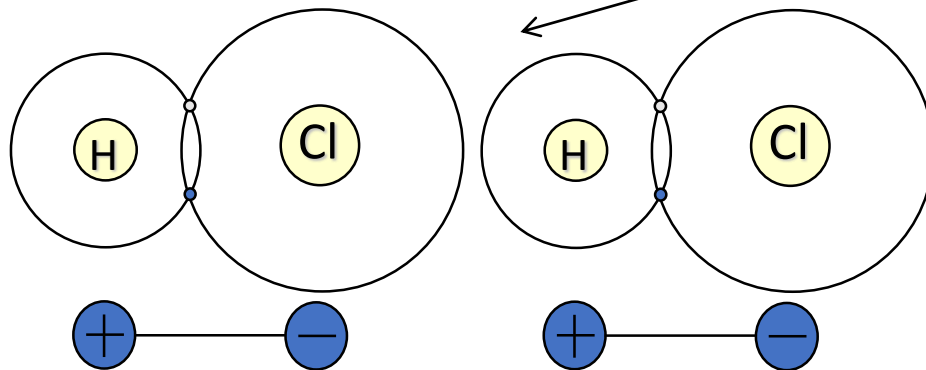
- Dipolo induzido



- Moléculas polarizadas por indução ou permanentes:

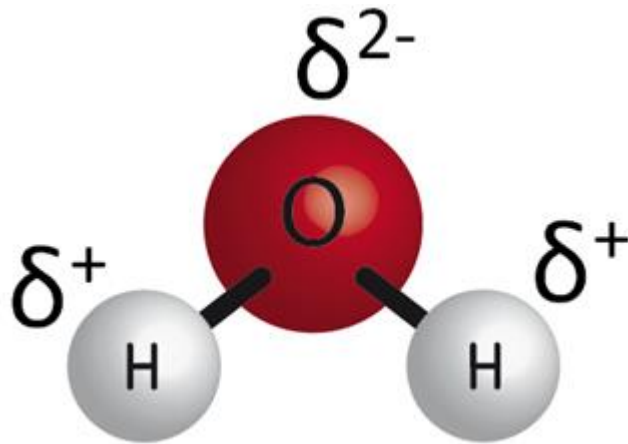
- Exemplo: Pontes de H
- (moléculas compostas por H – polo positivo)

- Moléculas polares

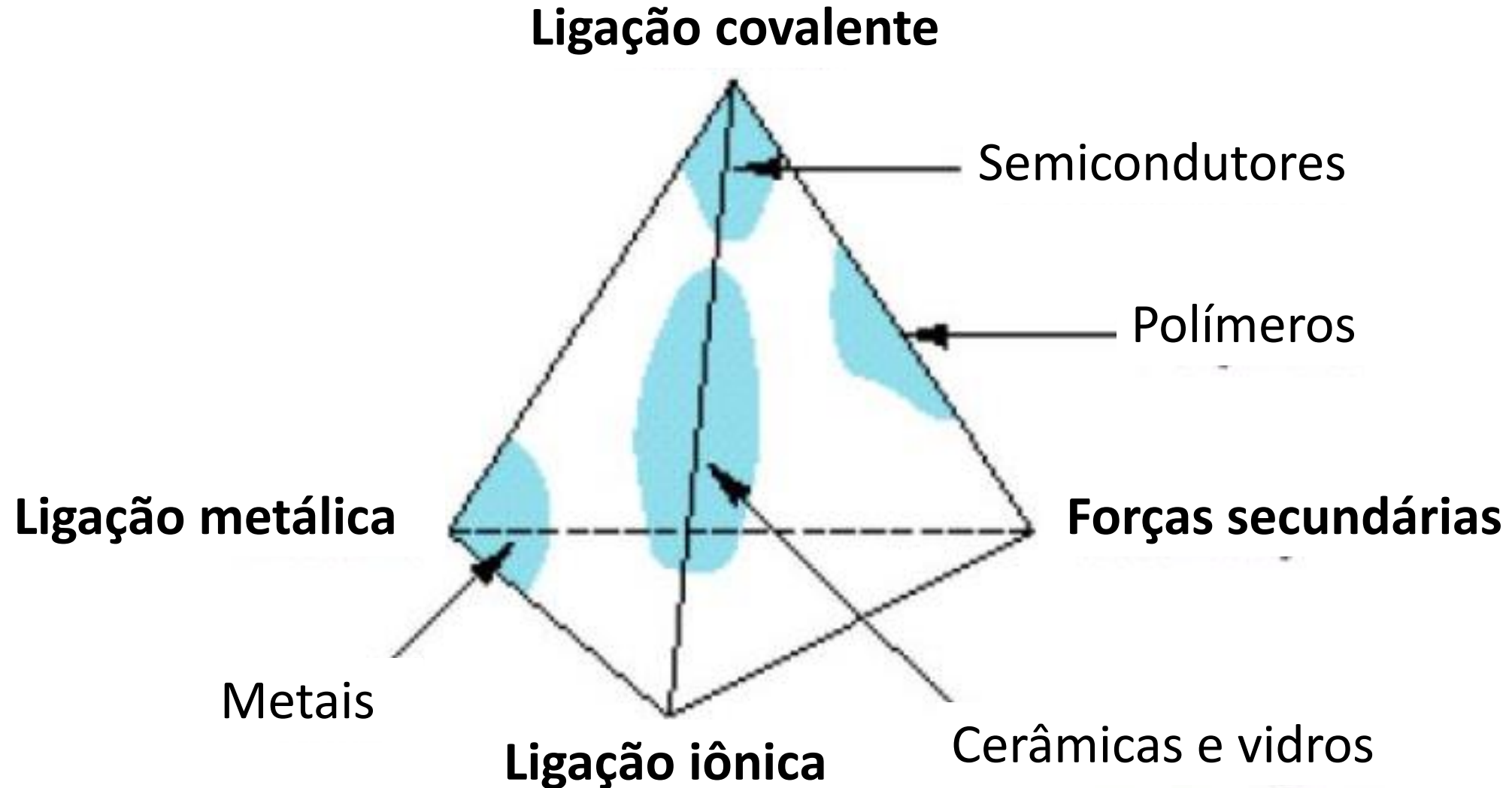


Moléculas polares: água

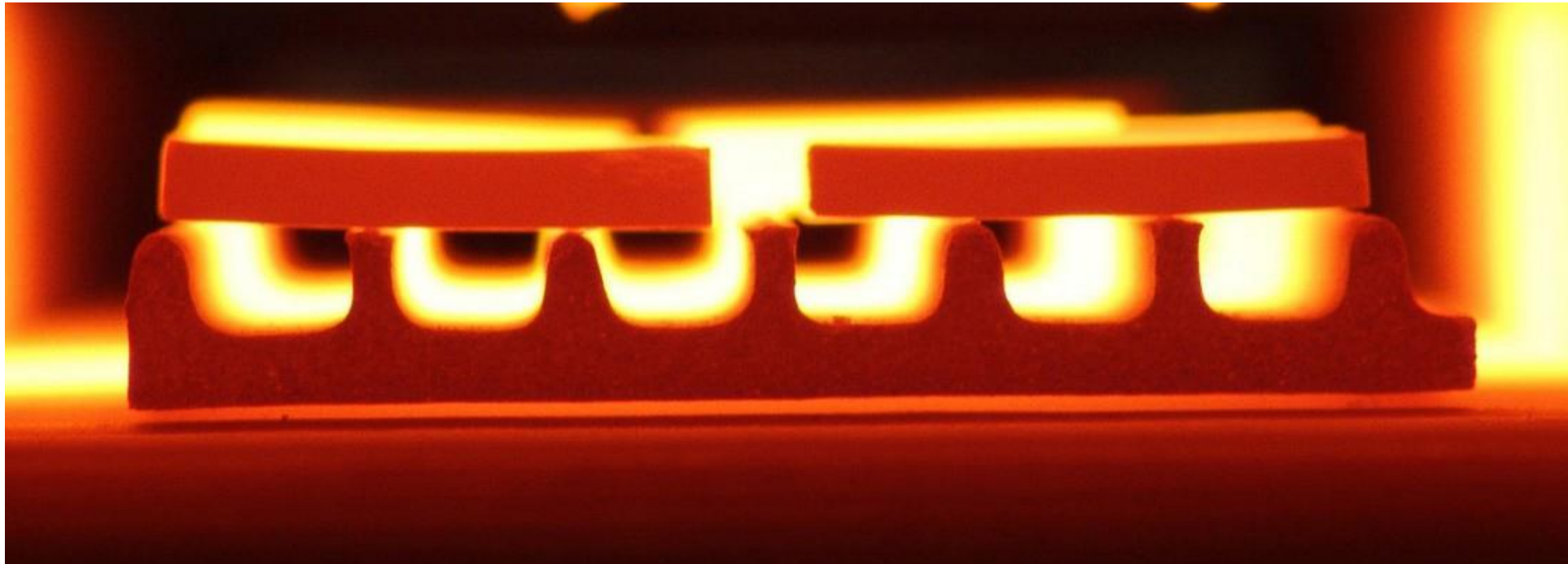
- As moléculas acabam por serem atraídas umas às outras pelo efeito de dipolo.



Ligações predominantes & Famílias de materiais



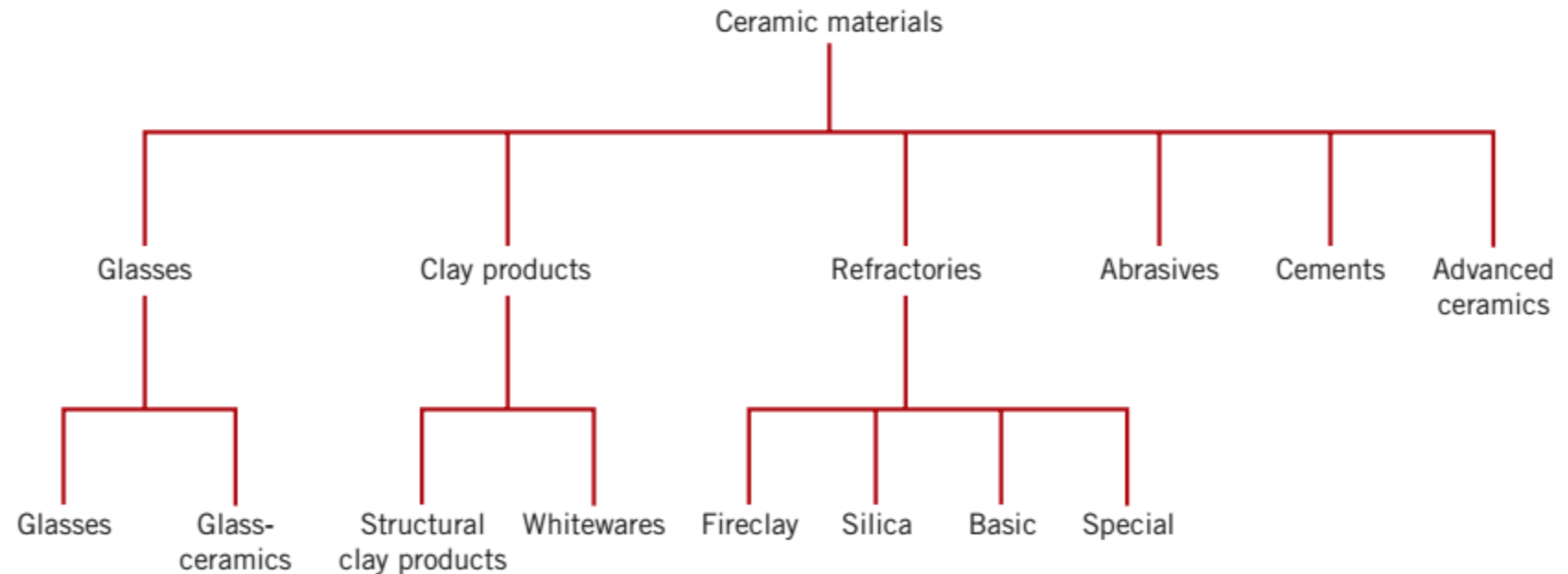
Materiais Cerâmicos



Definição e classes de materiais cerâmicos

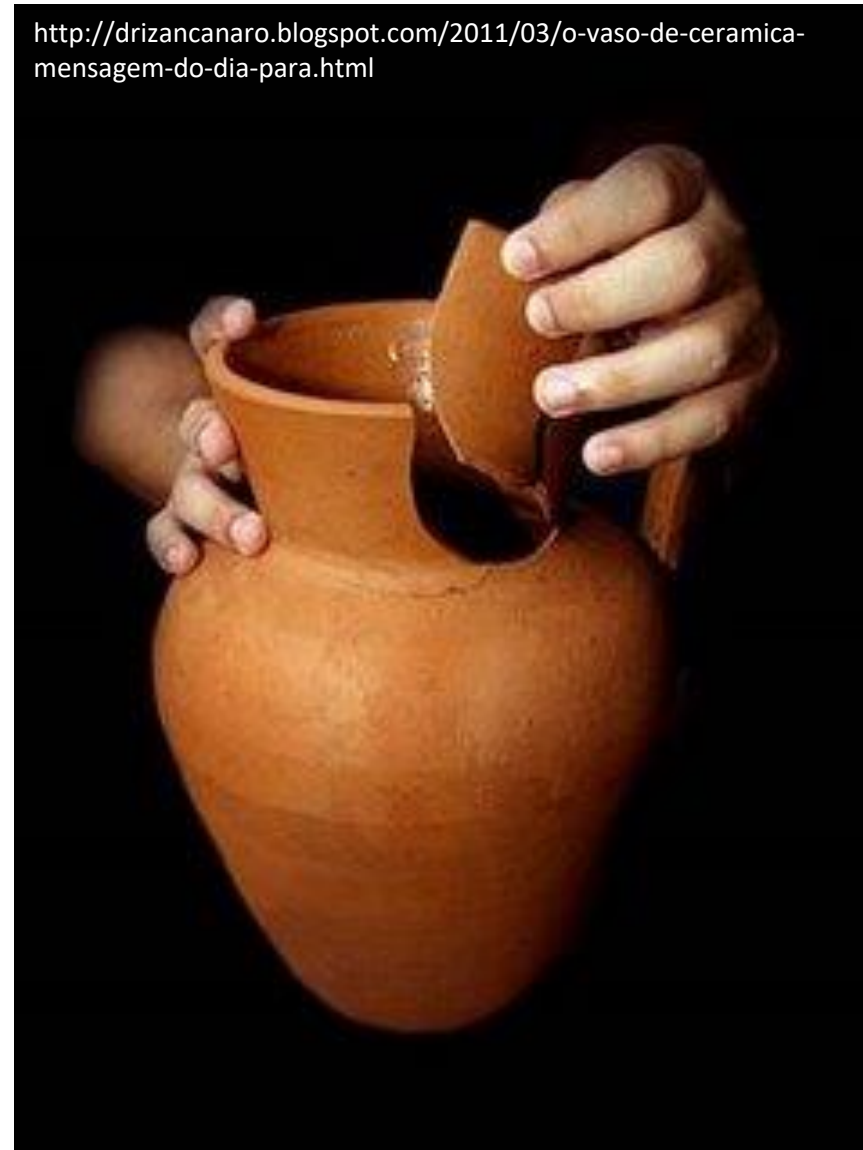
Grego: “KERAMOS” - COISA QUEIMADA

Materiais inorgânicos, excluindo os metais e suas ligas, utilizáveis após tratamento em altas temperaturas. (*American Ceramic Society*)



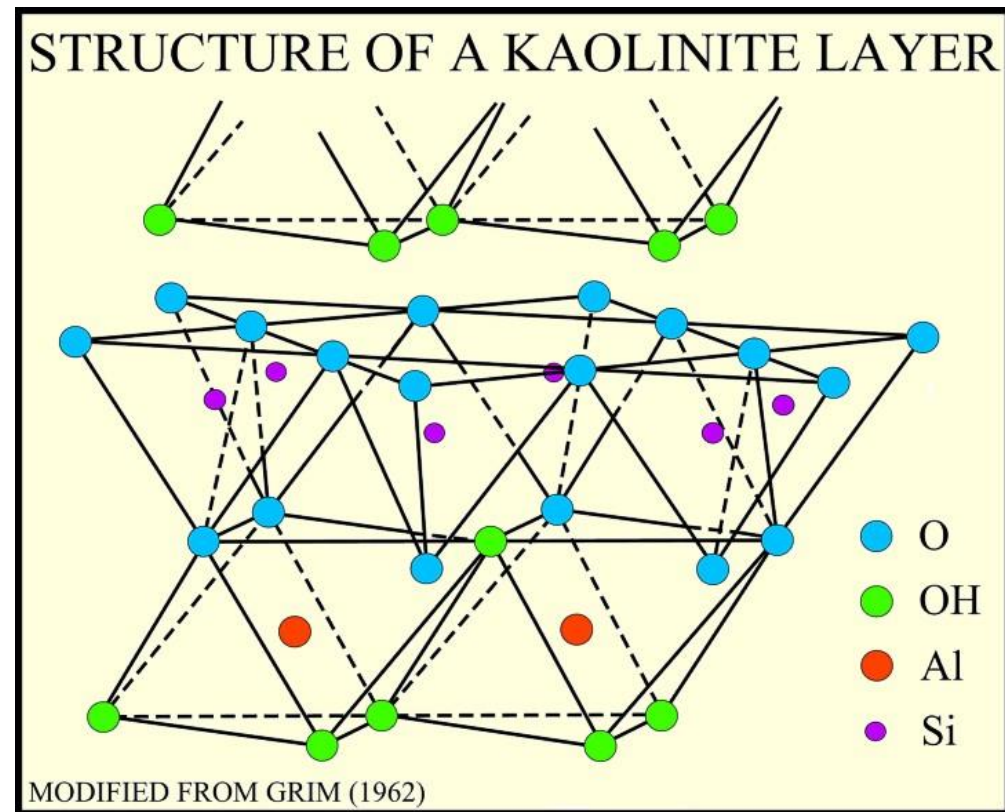
Comportamento básico das Cerâmicas

- Material frágil
- Durável
- Resistência depende fundamentalmente de:
 - Porosidade
 - Qualidade do esqueleto cerâmico (composição e queima)

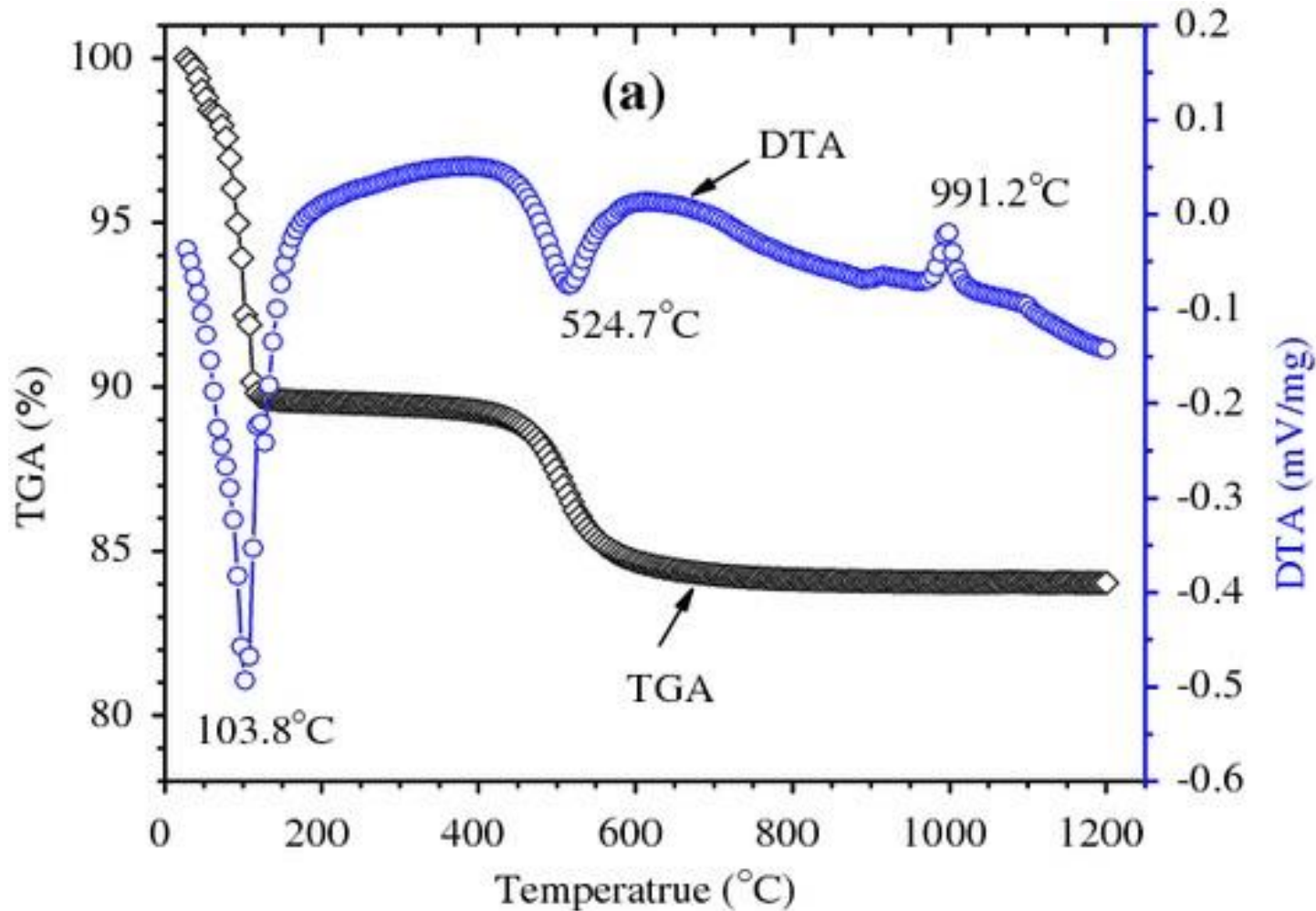


Constituintes principais das argilas

↳ Argilo-minerais – silicatos hidratados de Al, Fe, Mg e K, entre outros, associados a óxidos



Calcinação das argilas



The TGA-DTA curves of kaolin doi:10.1007/s10934-008-9258-z

$T < 200\text{ }^{\circ}\text{C}$ – eliminação umidade residual da moldagem

$200^{\circ}\text{C} < T < 400\text{ }^{\circ}\text{C}$ – queima de matéria orgânica

$573\text{ }^{\circ}\text{C}$ – inversão quartzo α para β , expansão volumétrica

$450^{\circ}\text{C} < T < 600\text{ }^{\circ}\text{C}$ – Desidroxilação caulinita, retração volumétrica

$950\text{ }^{\circ}\text{C}$ – formação espinélio e mulita a partir caulinita

$1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ – início da fusão de feldspato e mica em fase vítrea

$1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ – vitrificação completa, retração volumétrica máxima

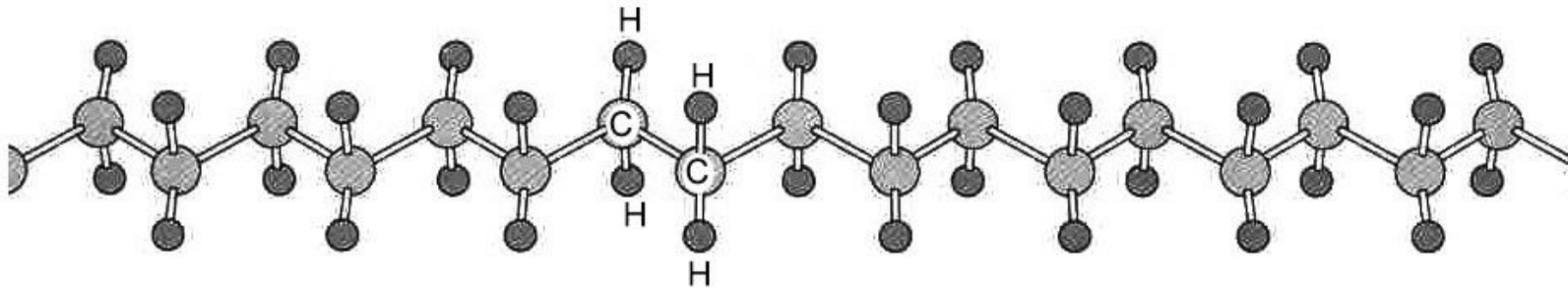
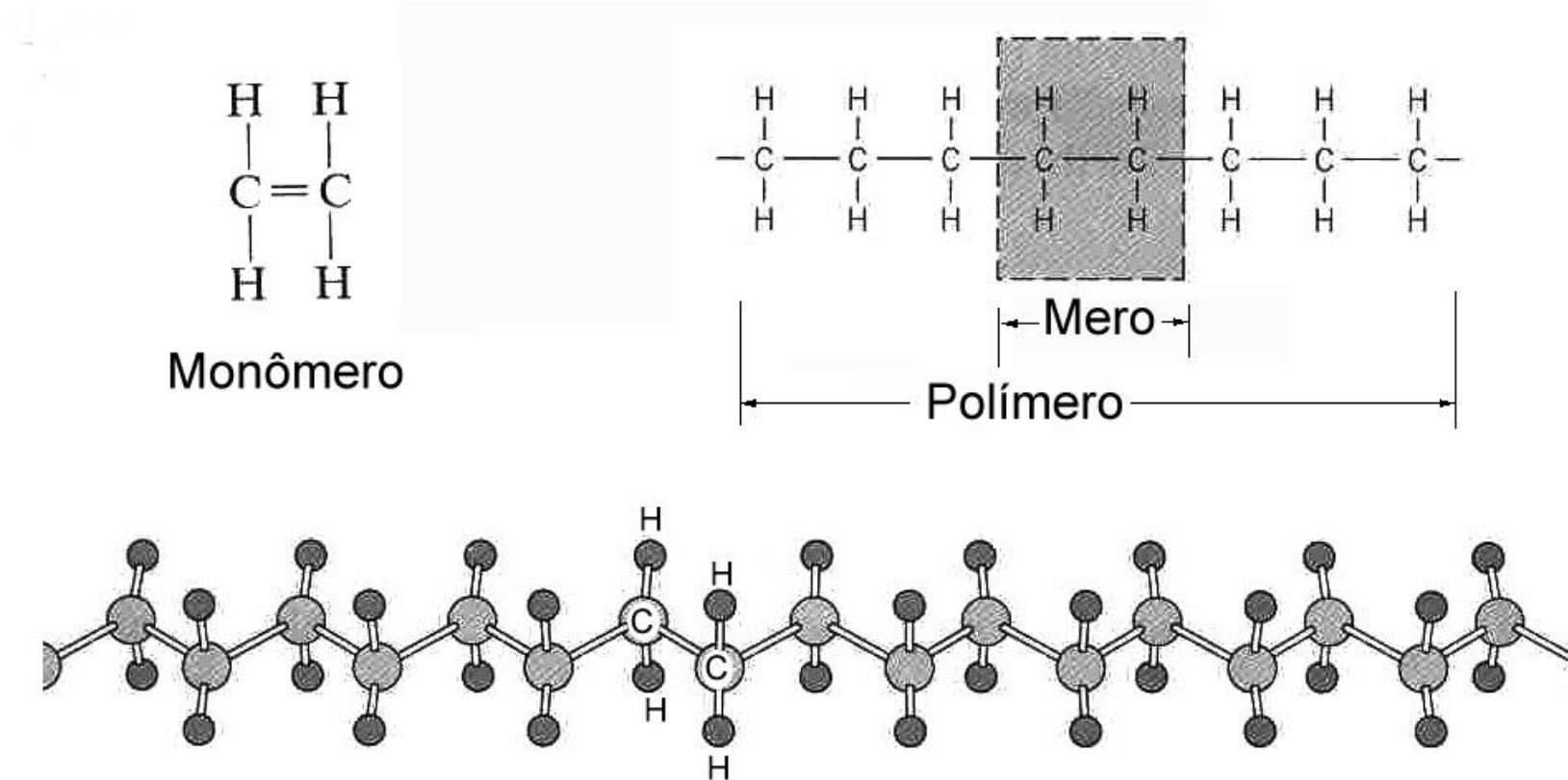
Materiais poliméricos



Principais tipos de plásticos usados
nos produtos e sistemas construtivos

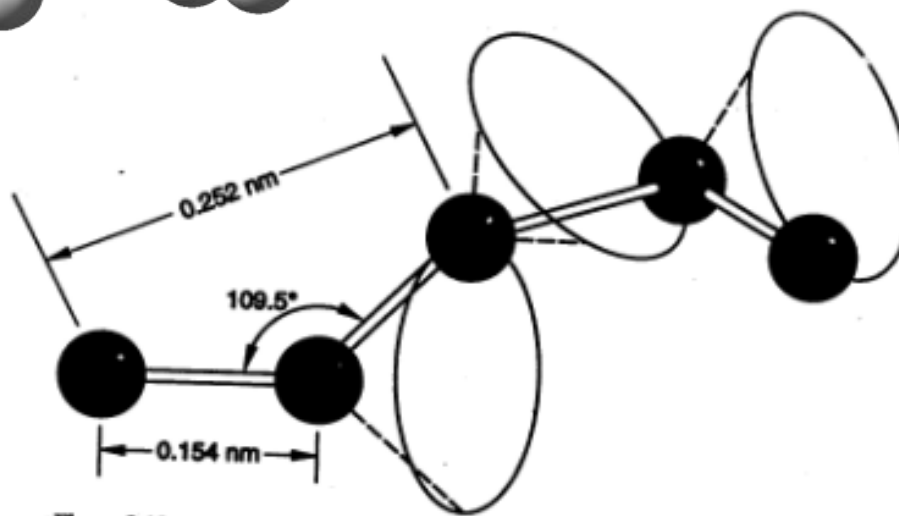
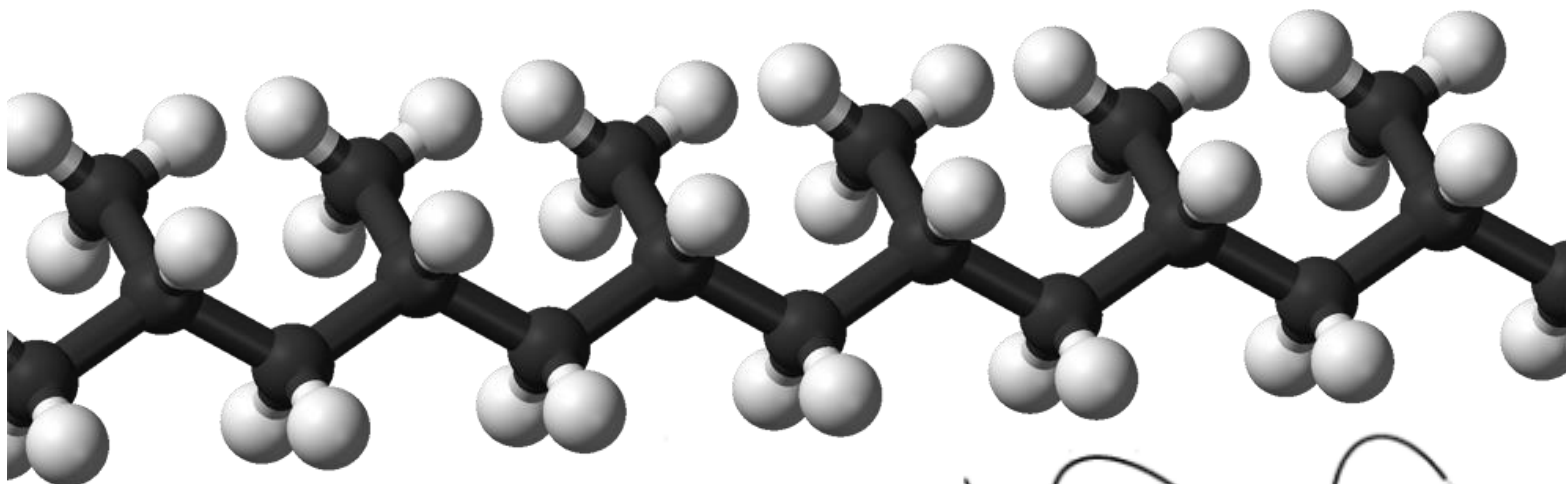
<http://cobec.com.br/principais-tipos-de-plasticos-usados-nos-produtos-e-sistemas-construtivos/>

Monômero, Mero e Polímero



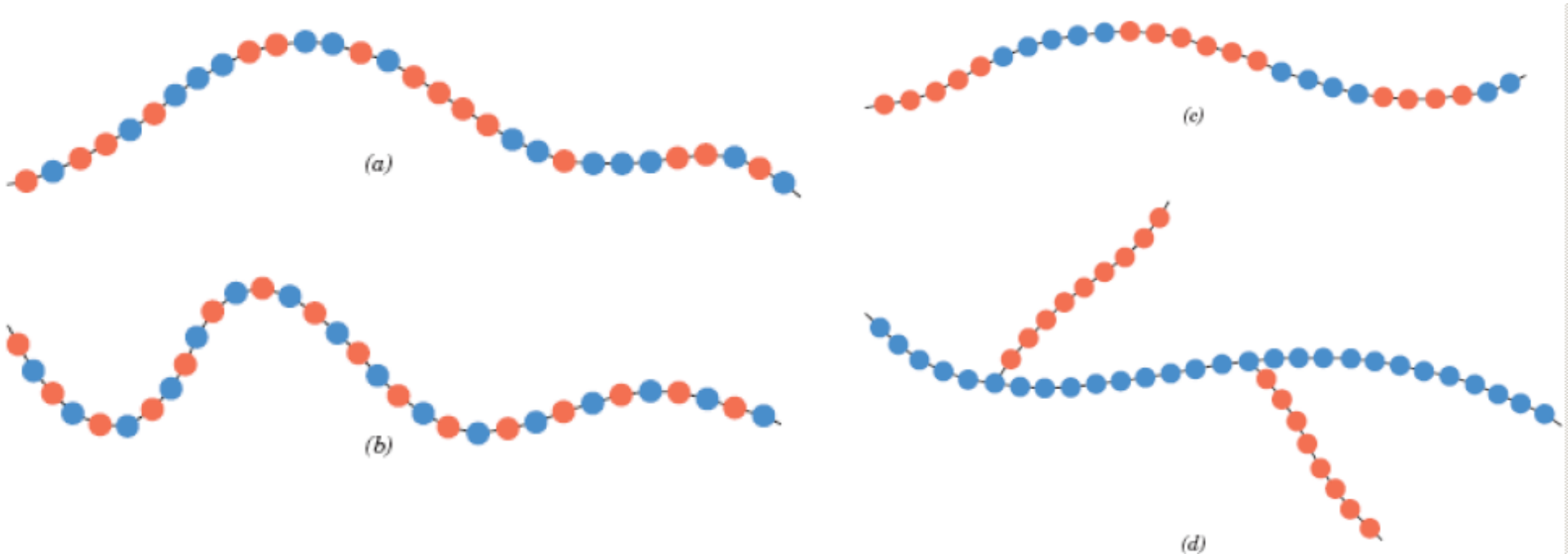
Molécula de polietileno

Ligação covalente é direcional: influencia comportamento dos polímeros



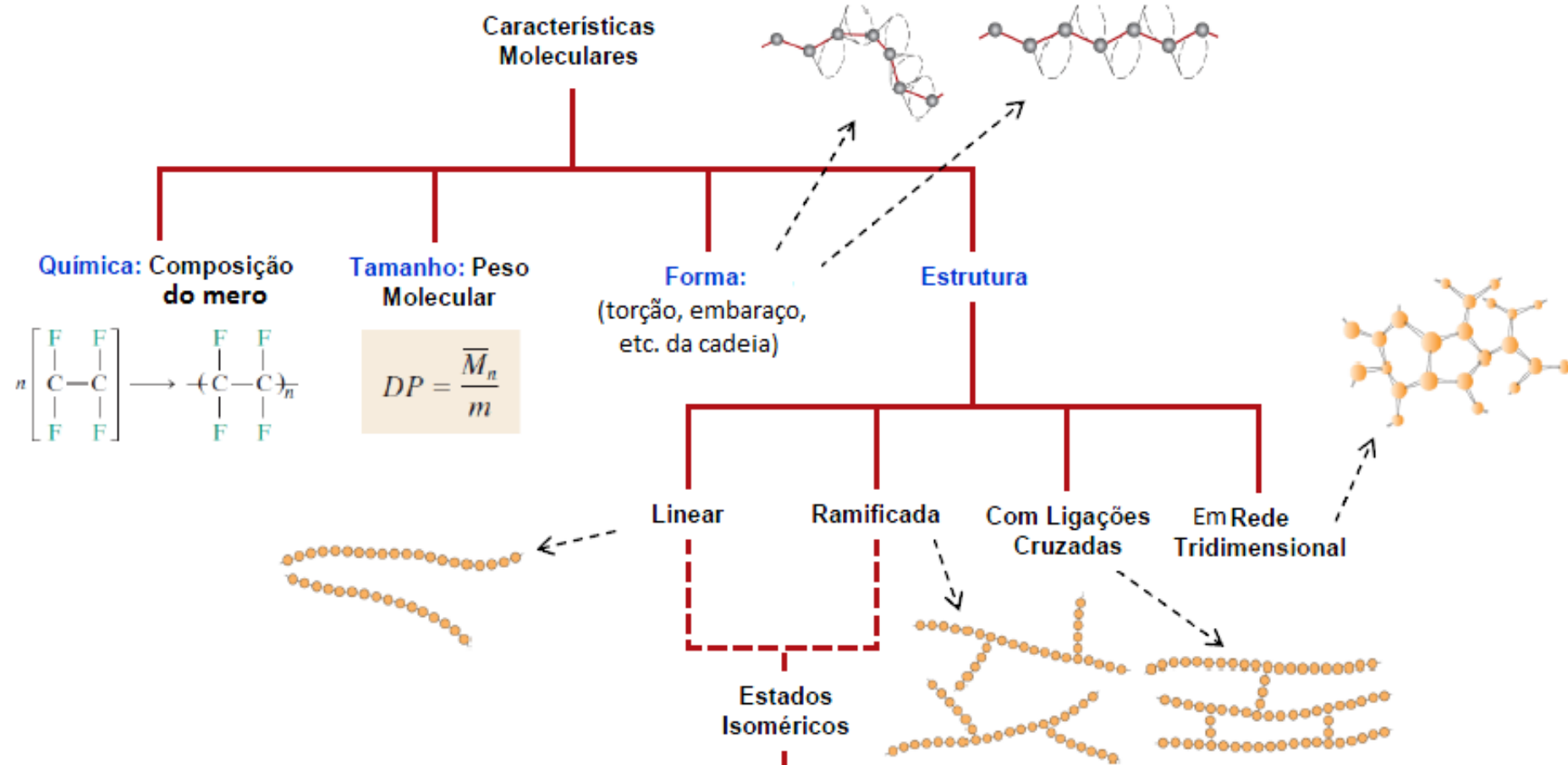
Copolímeros

- **Homopolímero:** polímero derivado de apenas uma espécie de monômero.
- **Copolímero:** polímero derivado de duas ou mais espécies de monômero.



Tipos de distribuição dos diferentes monômeros nas moléculas dos copolímeros: (a) aleatória, (b) alternada, (c) em bloco e (d) ramificada

Características Moleculares



Extraído de
Jedyn - UFPR

Polímeros termoplásticos e termofixos

Termoplásticos

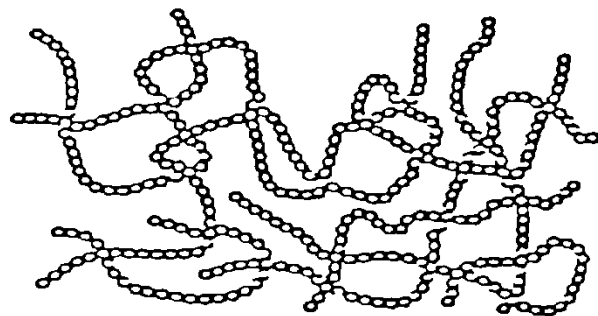
- Lineares ou ramificados.
- Podem ser conformados mecanicamente repetidas vezes, desde que reaquecidos (são facilmente *recicláveis*).
- Parcialmente cristalinos ou totalmente amorfos.

Termofixos

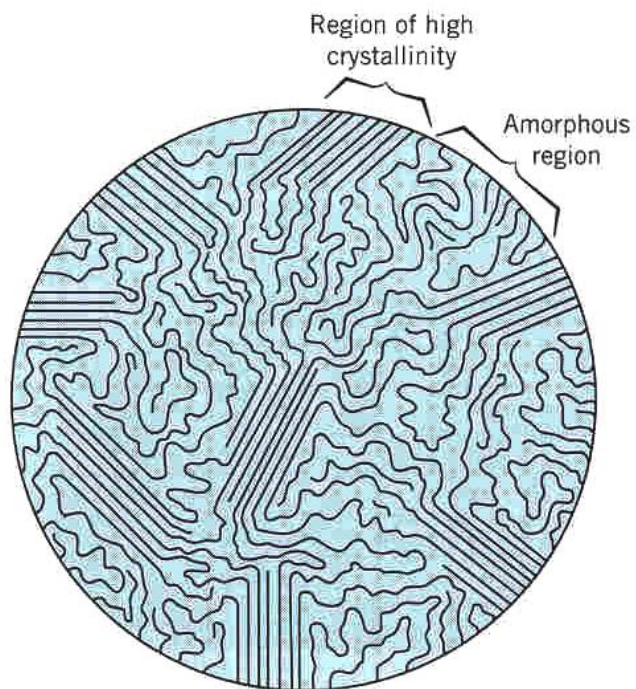
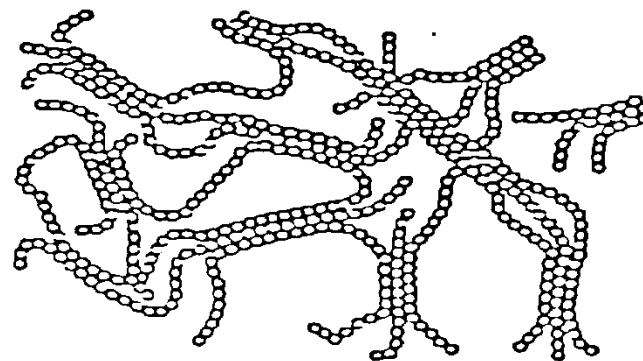
- Possuem uma estrutura tridimensional em rede com ligações cruzadas.
- Podem ser conformados plasticamente apenas em um estágio intermediário de sua fabricação.
- O produto final é duro e não amolece com o aumento da temperatura.
- Eles são insolúveis e infusíveis.
- Mais resistentes ao calor do que os termoplásticos.
- Completamente amorfos.

Microestrutura

100% Amorfo



Semi-cristalino



Microestrutura de um polímero semi-cristalino apresentando regiões cristalinas e amorfas.

Termoplásticos x temperatura

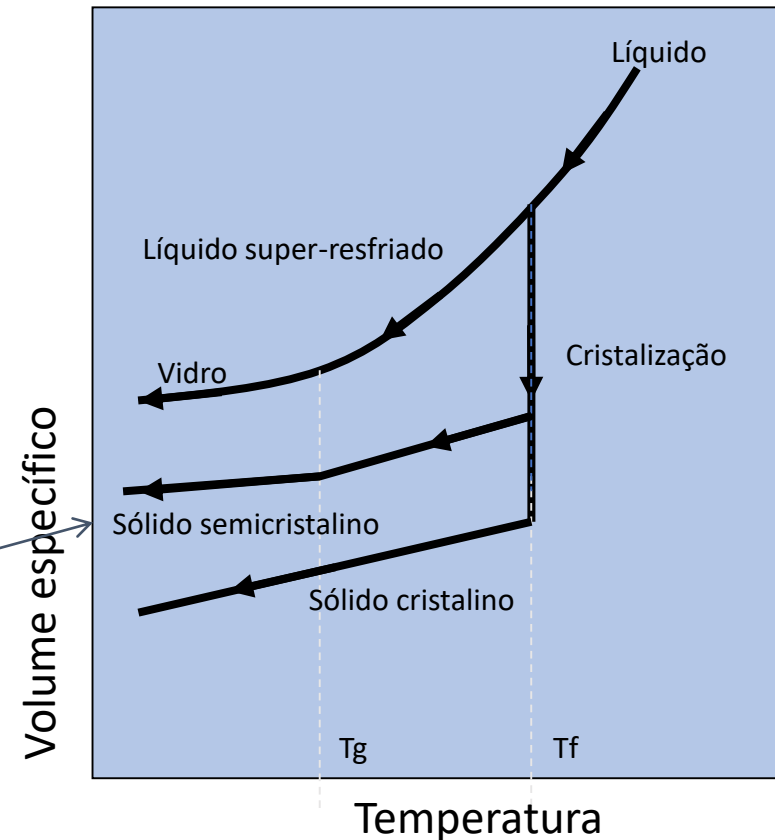
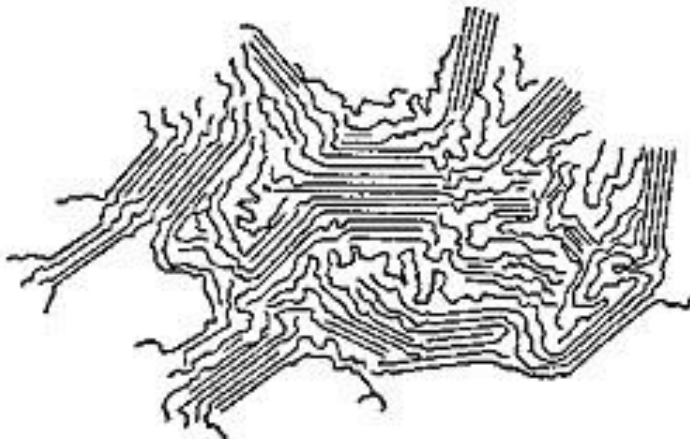
- Temperatura de transição vítrea (T_g)

Abaixo da T_g :

tornam-se frágeis

< deformação térmica

< deformação elasto-plástica



Quais características
dos polímeros que
contribuem para o
seu uso?

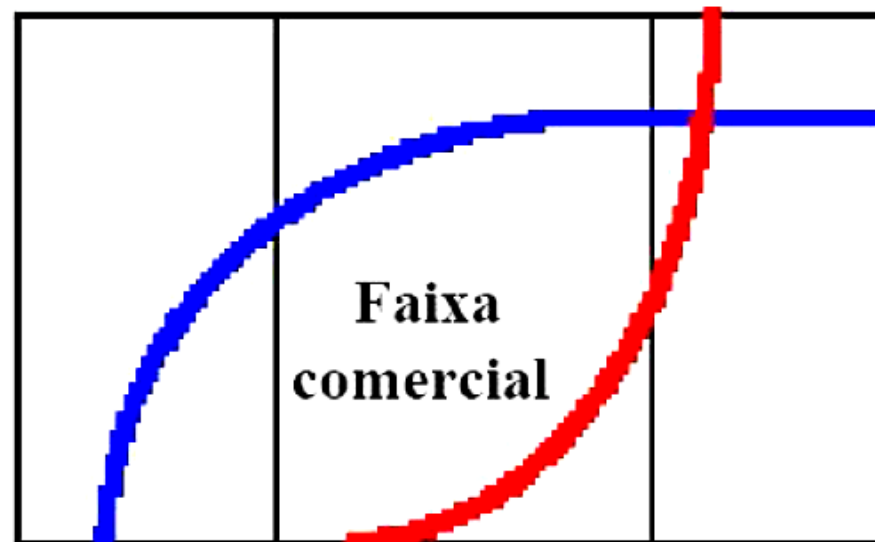
Resposta

- Não sofre corrosão
 - água ou ar
- Estanqueidade
- Solubilidade reduzida
 - Ácidos e bases
- Isolamento
 - Térmico, elétrico
- Leve
 - Densidade entre 0,9 e 1,4 kg/dm³
- Flexíveis (com variações)

Pontos importantes

- Polímeros constituem uma família de materiais com grande amplitude comportamental
- Diferentes estruturas moleculares levam a famílias de comportamentos distintos

**Propriedades
Mecânicas**



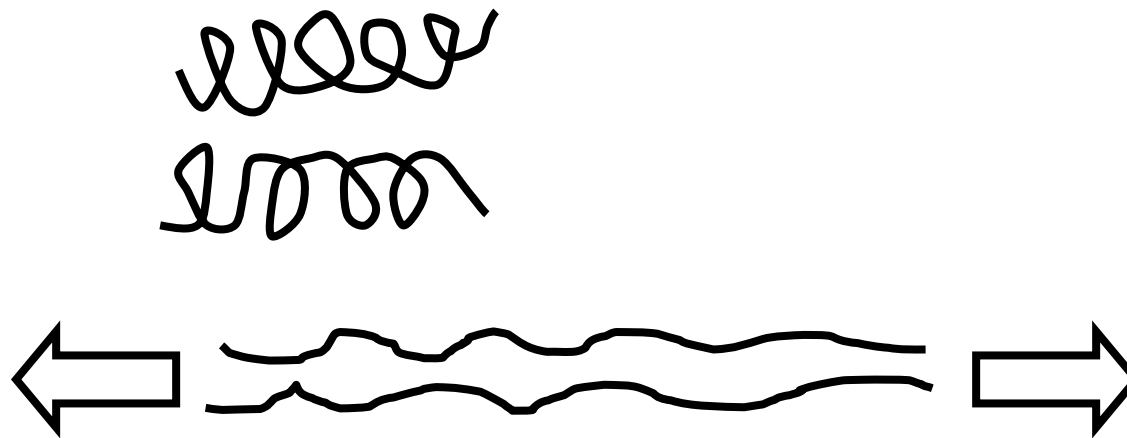
**Faixa
comercial**

**Viscosidade
de
Fluxo**

Grau de Polimerização

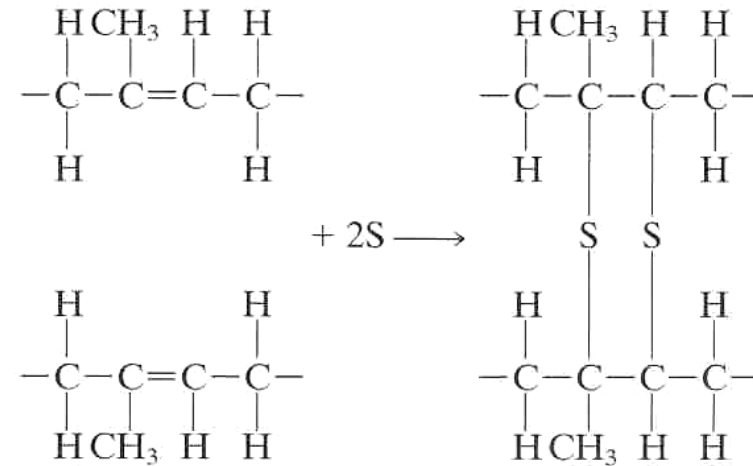
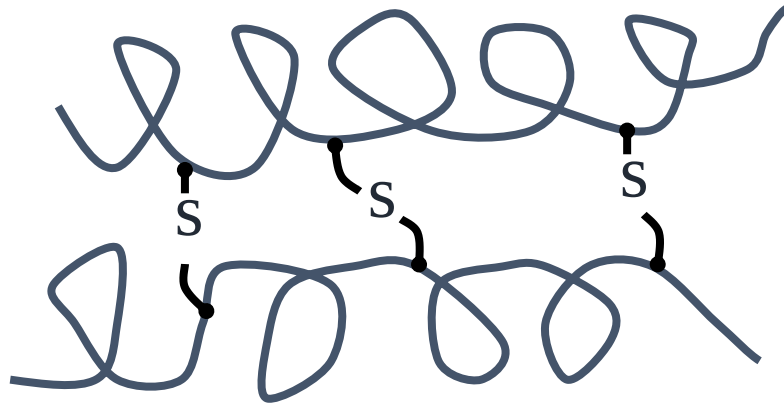
Elastômeros

- Cadeias amorfas em conformação espiralada
- >>> deformação elástica inicial (endireitamento das espiras)
- >>> deformação viscosa



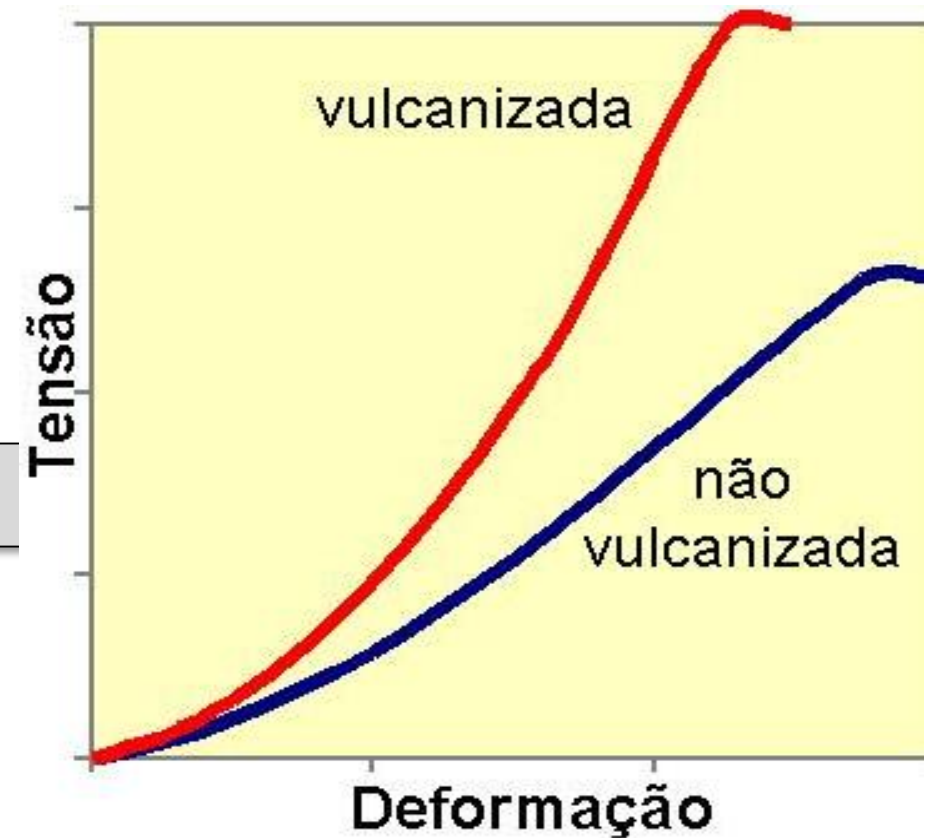
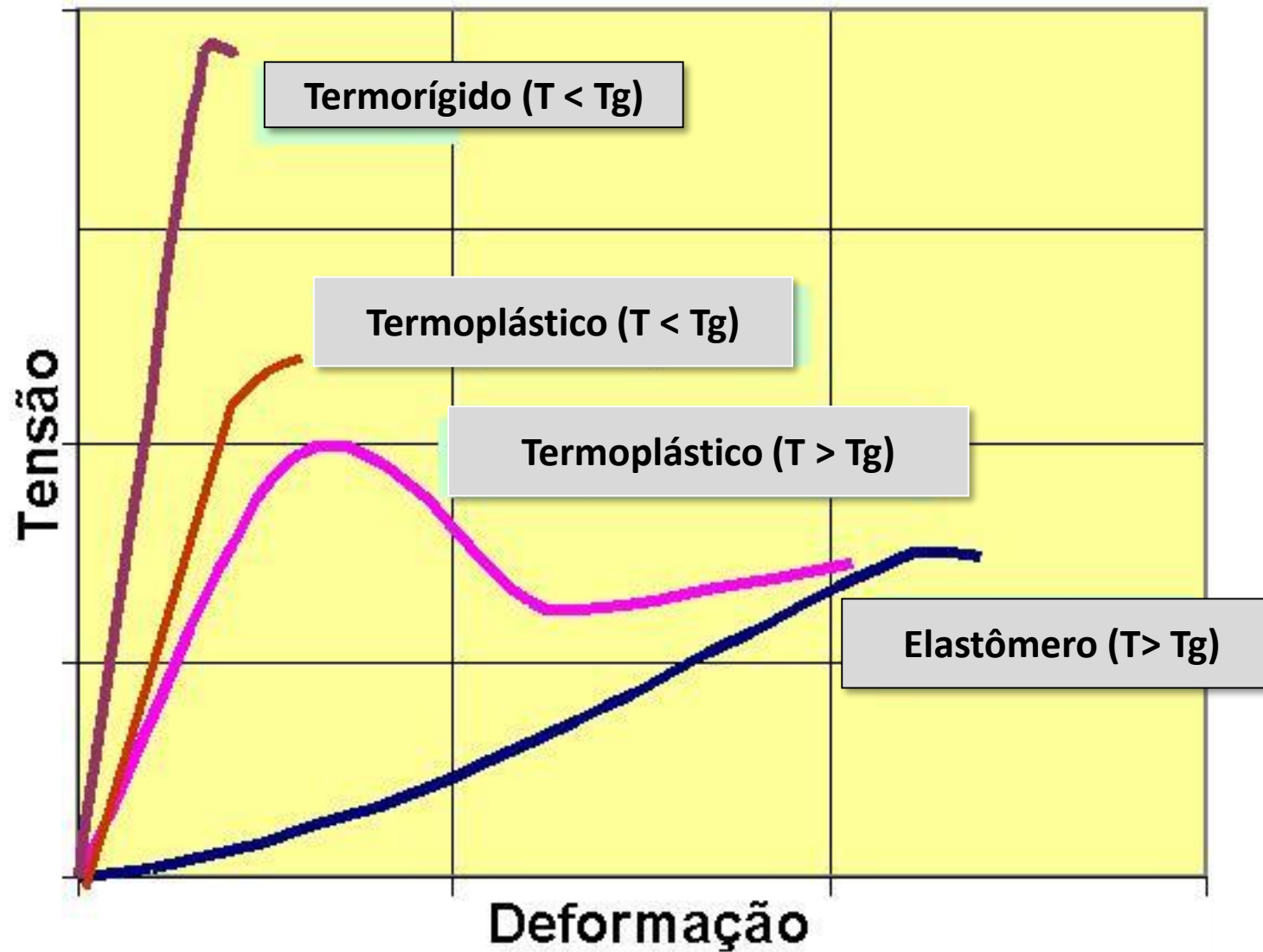
Elastômeros

- O processo de **vulcanização** consiste de reações químicas entre cadeias do elastômero e o enxôfre (ou outro agente), adicionado na proporção de 1 a 5 %, gerando ligações cruzadas entre cadeias conforme esquematizado abaixo:



- Borracha não-vulcanizada:** mais macia, pegajosa e com baixa resistência à abrasão.
- Borracha vulcanizada:** valores maiores de módulo de elasticidade, resistência à tração e resistência à degradação oxidativa.

Tensão x Deformação

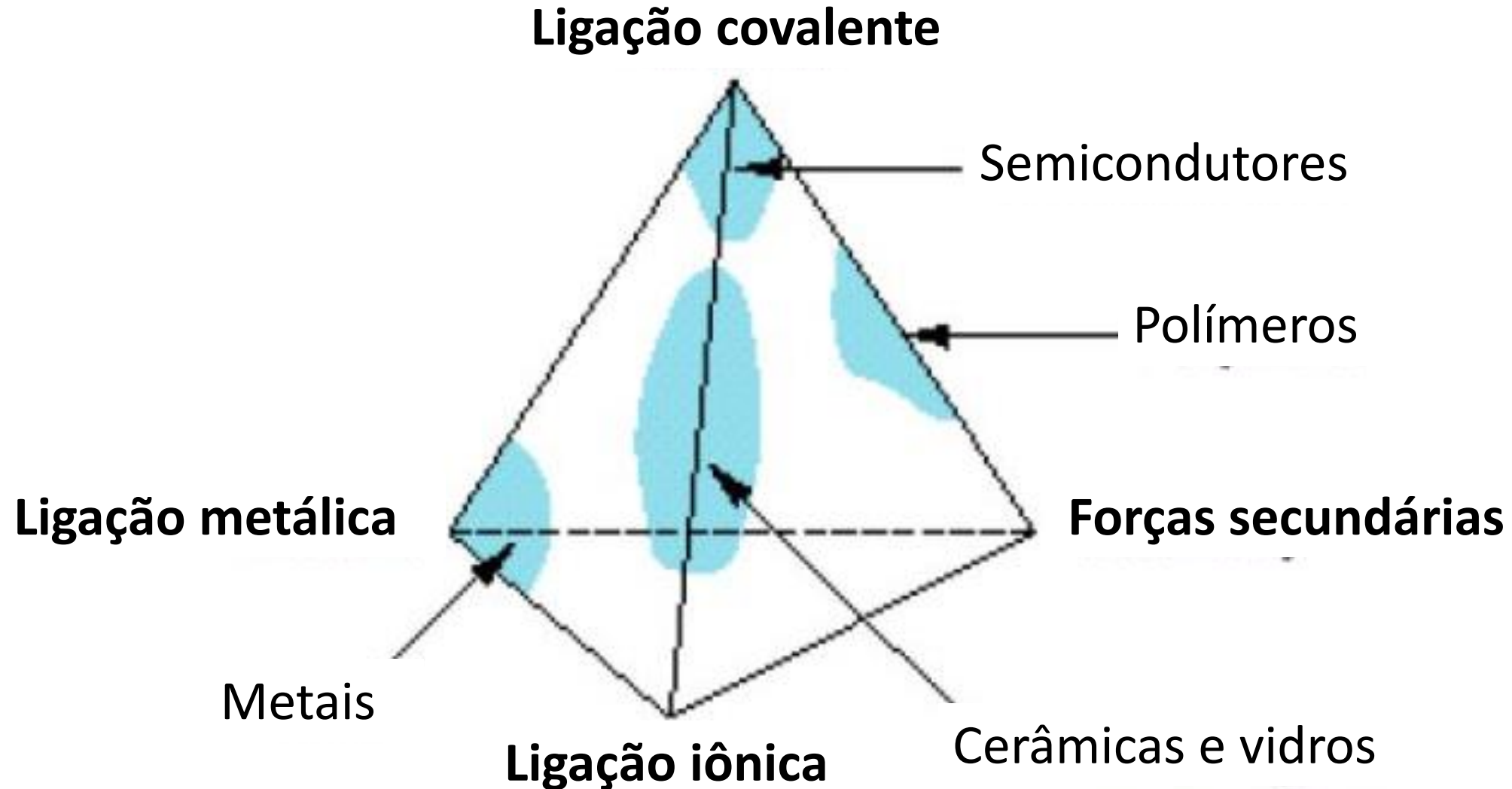


Metais



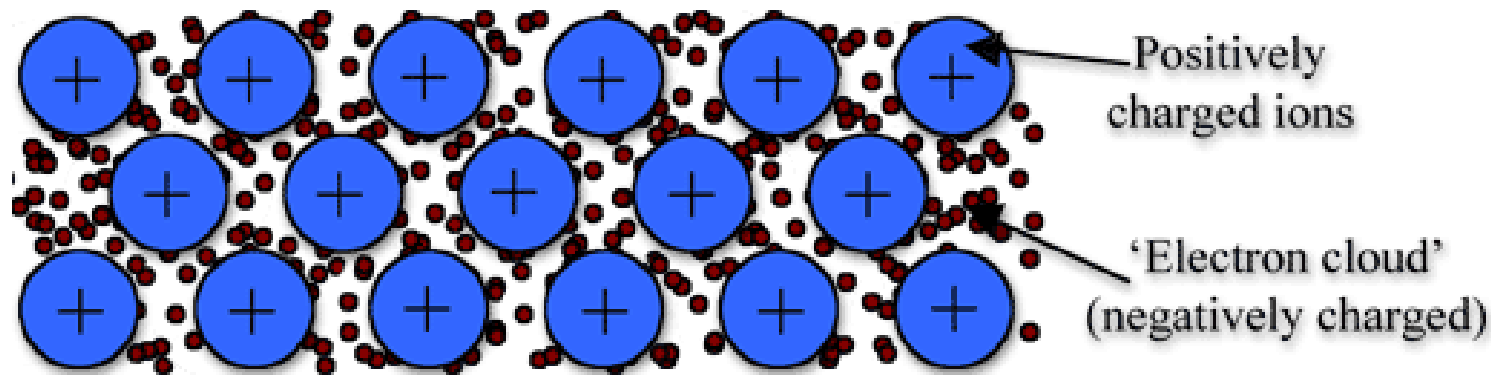
http://static.wixstatic.com/media/43cc43_607b9ceb24ac4f4e83400d45715ef1fd.jpg

Ligações predominantes & Famílias de materiais



Ligação metálica

- 1- Uma rede de cátions metálicos num “mar” de elétrons de valência;
- 2- Elétrons confinados ao metal por atração eletrostática aos cátions;



- 3- Elétrons fluem livremente através do metal, pois nenhum elétron é localizado entre dois átomos de metal;
- 4- Há facilidade de condução de energia;
- 5- Não possui ligações definidas e mostra facilidade de deformação (maleabilidade e ductilidade).
- 6- Por não ser direcional, facilita arranjo cristalino.

Propriedades dos metais

- ✓ Alta condutividade elétrica e térmica



Propriedades dos metais

- ✓ Maleáveis
- ✓ Dúcteis



<http://carroceria.blogspot.com/2009/10/estampagem.html>

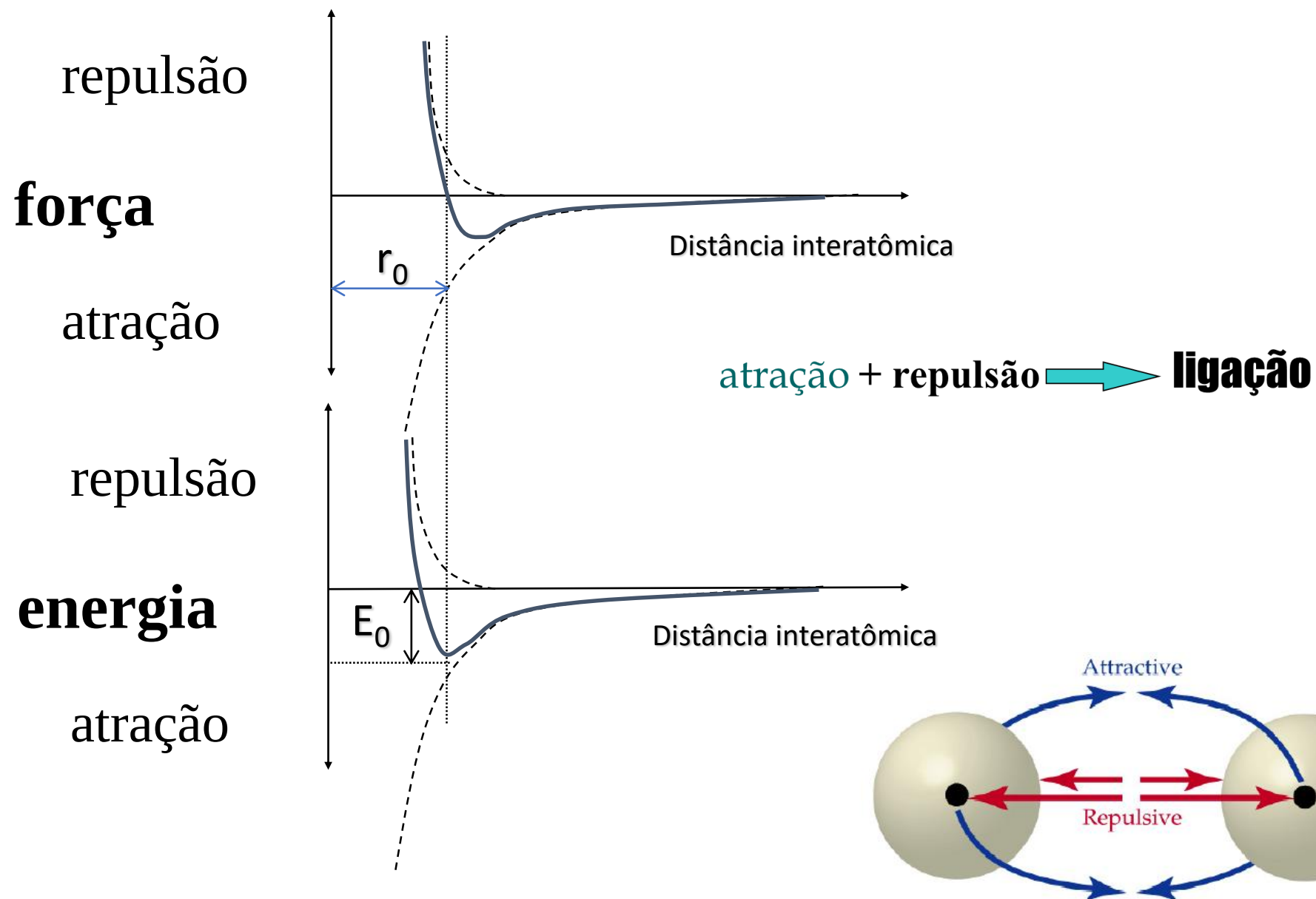
Pergunta:

Por que é mais difícil encontrar materiais cristalinos com ligação covalente do que metálica ou iônica?

Pergunta:

Como você definiria distância interatômica?

Vinculação de força e energia



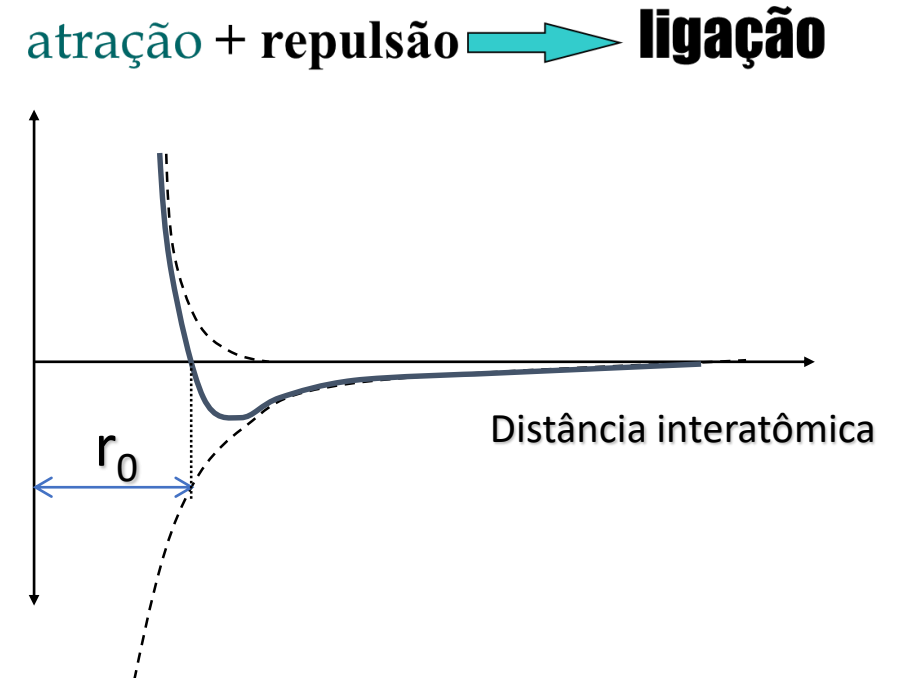
Átomo x Esforços Mecânicos

- Eletrosfera deformável
 - Compressão → aproxima os núcleos
 - Tração → afasta os núcleos
 - **Elasticidade**
- Esforço $\gg$ força de ligação
 - **Ruptura das ligações**
 - Ruptura do material

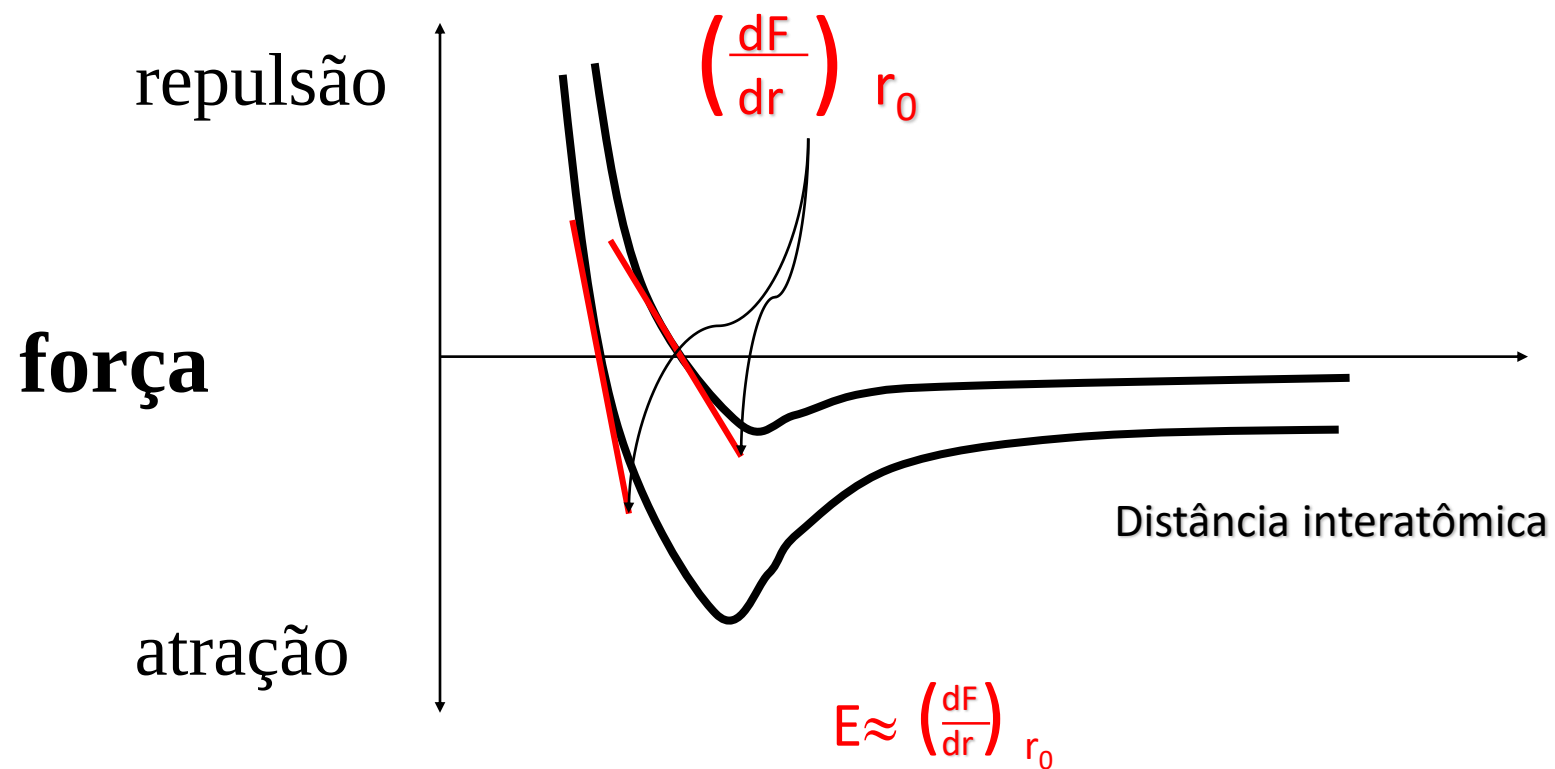
repulsão

força

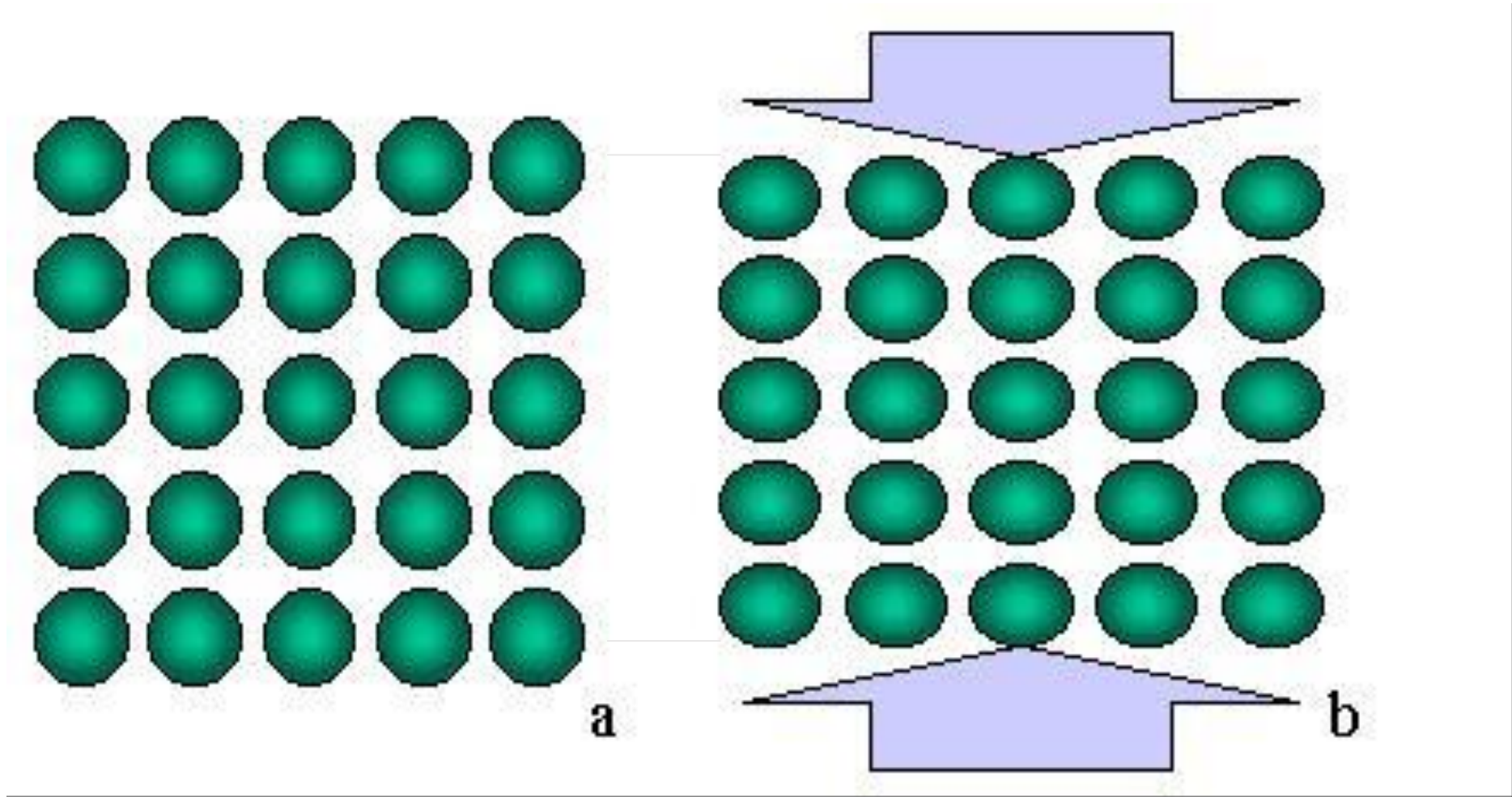
atração



Vinculação de força e energia

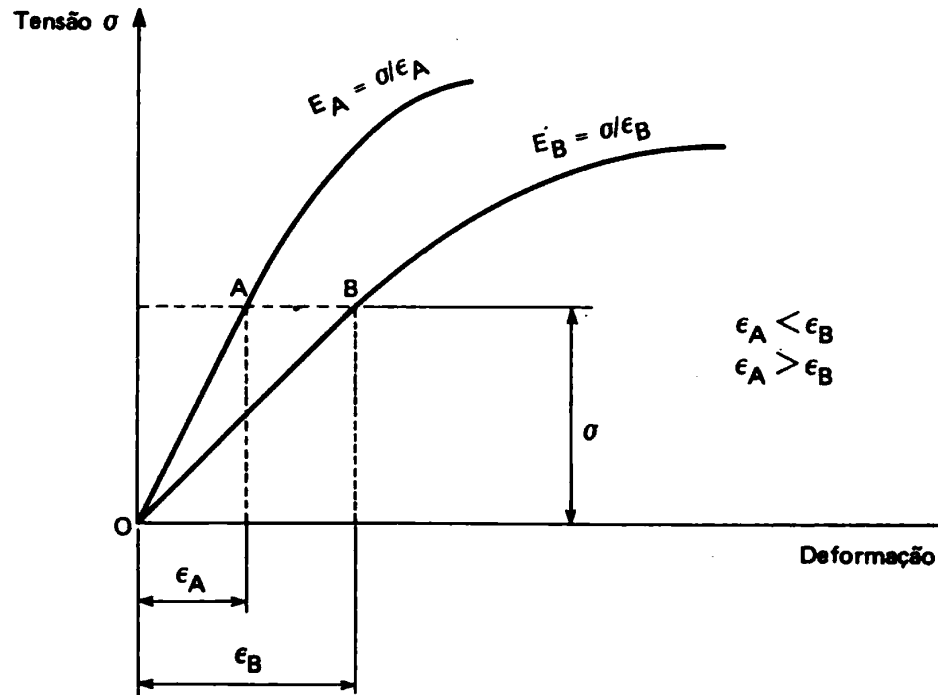


Influência da estrutura



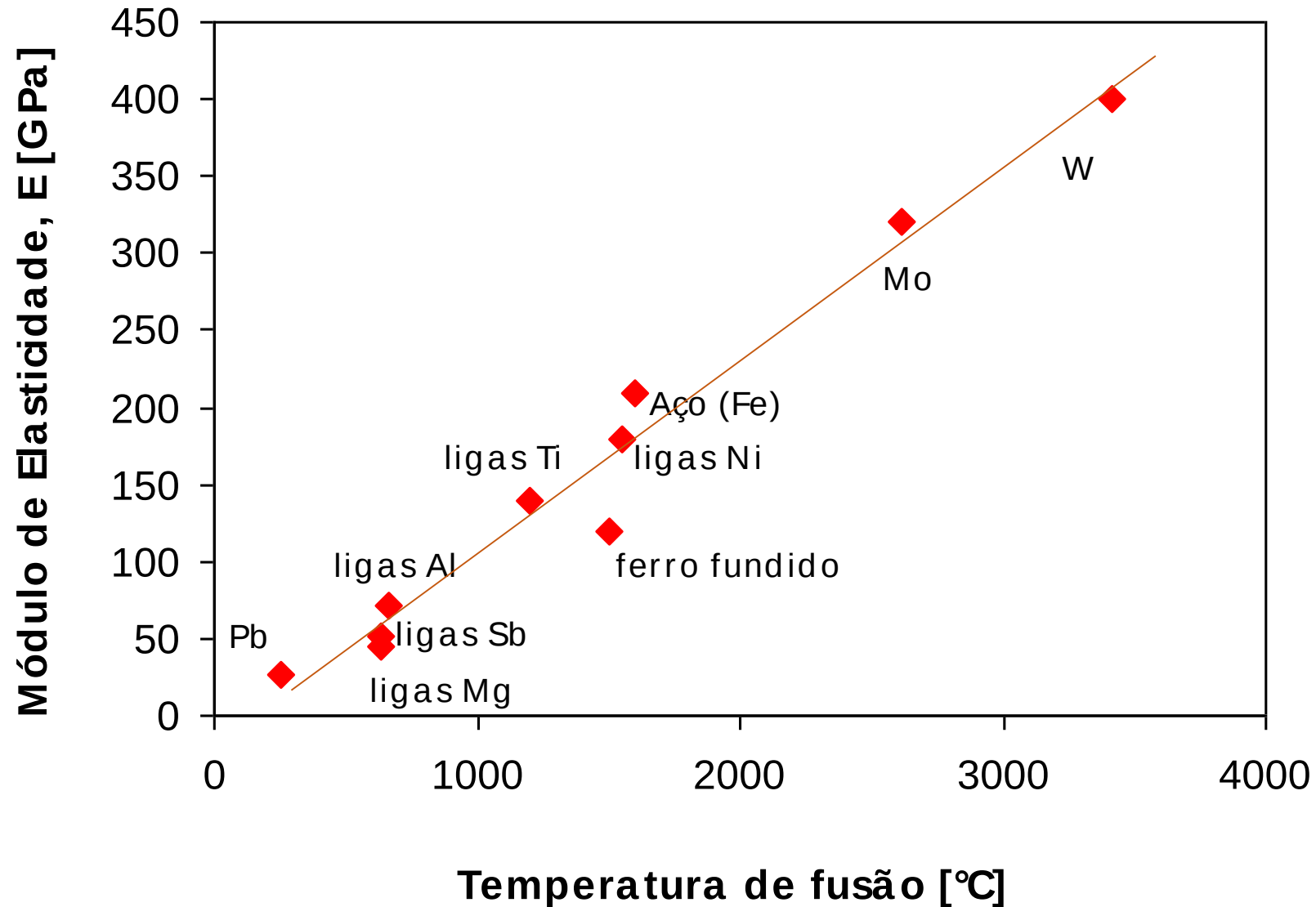
Módulo de elasticidade

Definição de E

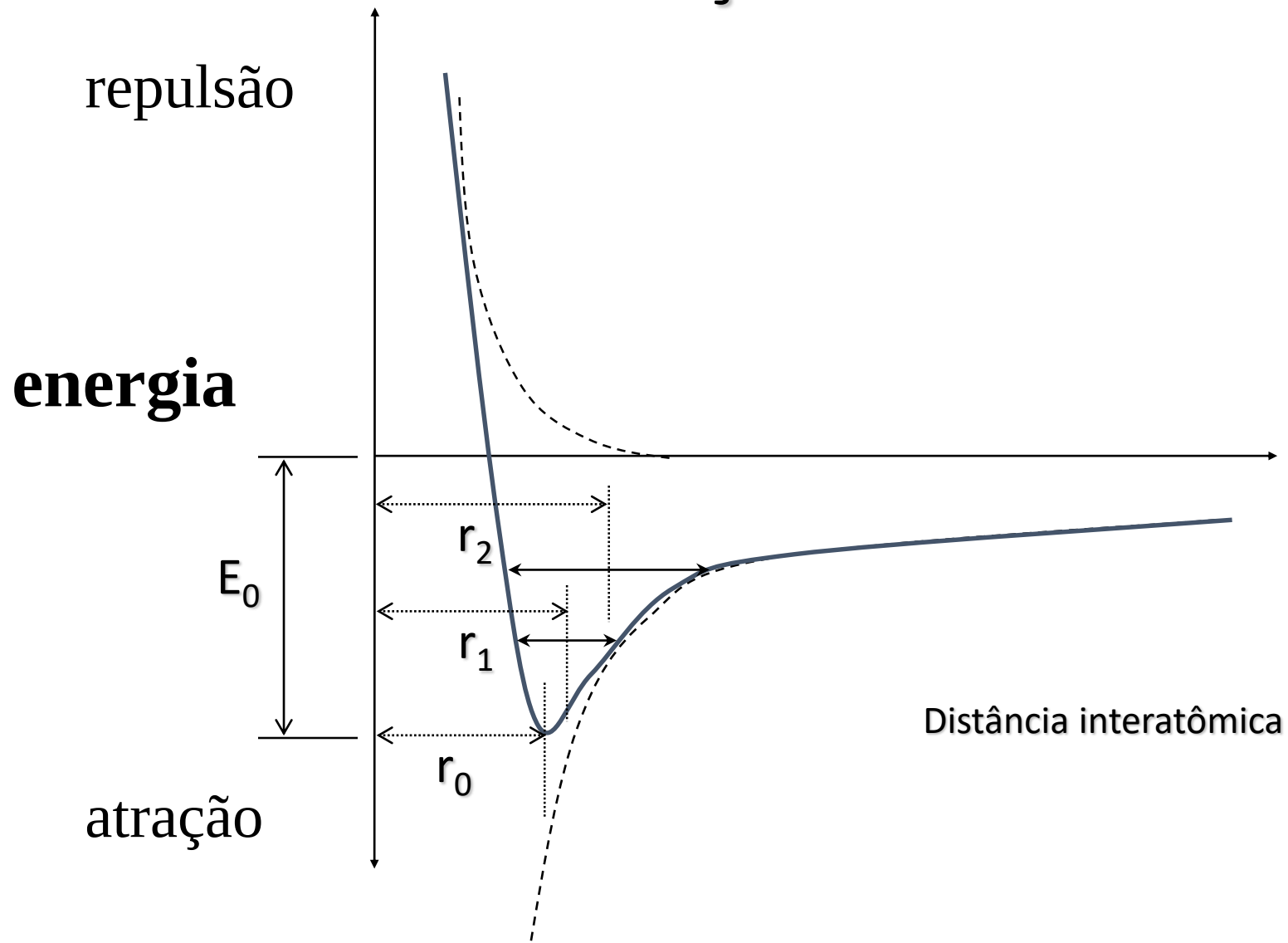


Liga	Módulo de elasticidade (kgf/mm ²)
Aços-carbono e aços-liga em geral	21 000
Aços inoxidáveis austeníticos	19 600
Ferro fundido nodular	14 000
Bronzes e latões	(média)
Bronzes de manganês e ao silício	7 700-11 900
Bronzes de alumínio	10 500
Ligas de alumínio	(média)
Monel (liga de níquel)	8 400-13 300
Hastelloy (liga de níquel)	7 000- 7 450
Invar (liga níquel-ferro)	13 000-18 200
Inconel (liga de níquel)	18 900-21 500
Illium (liga de níquel)	14 000
Ligas de titânio	16 000
Ligas de magnésio	18 700
Ligas de estanho	11 200-12 100
Ligas de chumbo	4 550
	(média)
	5 100- 5 400
	1 400- 2 950

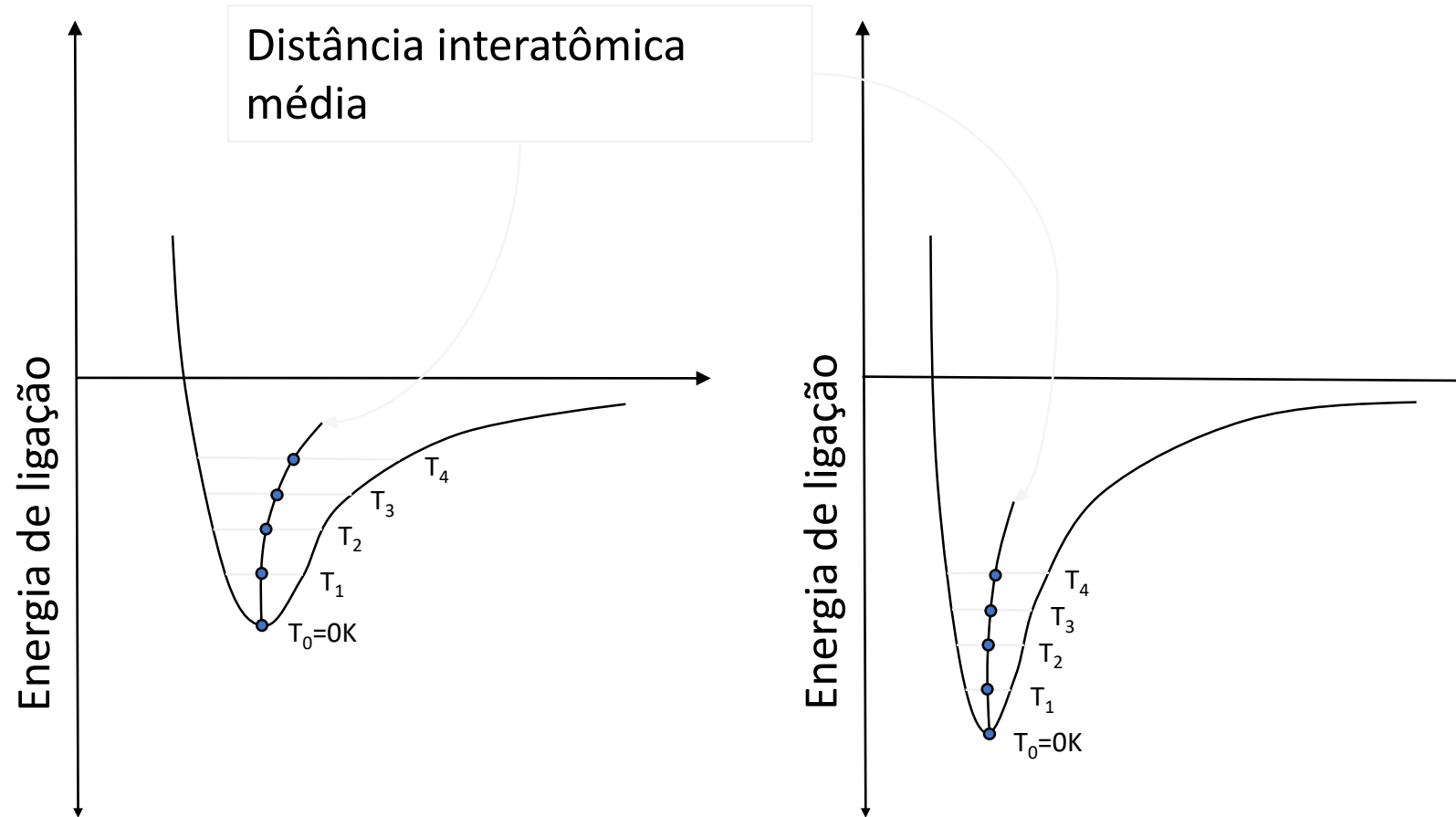
Módulo de elasticidade



Vinculação de distância interatômica e coeficiente de dilatação térmica

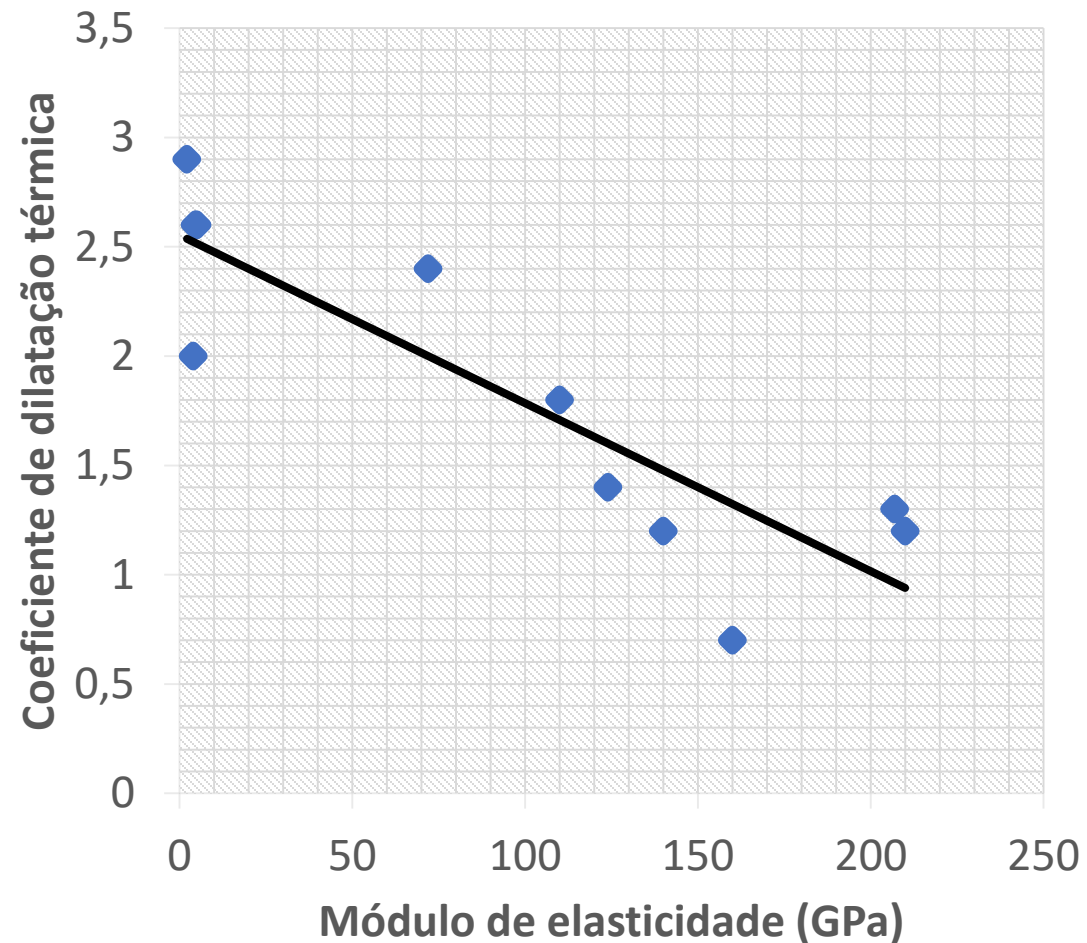


Vinculação de distância interatômica e coeficiente de dilatação térmica

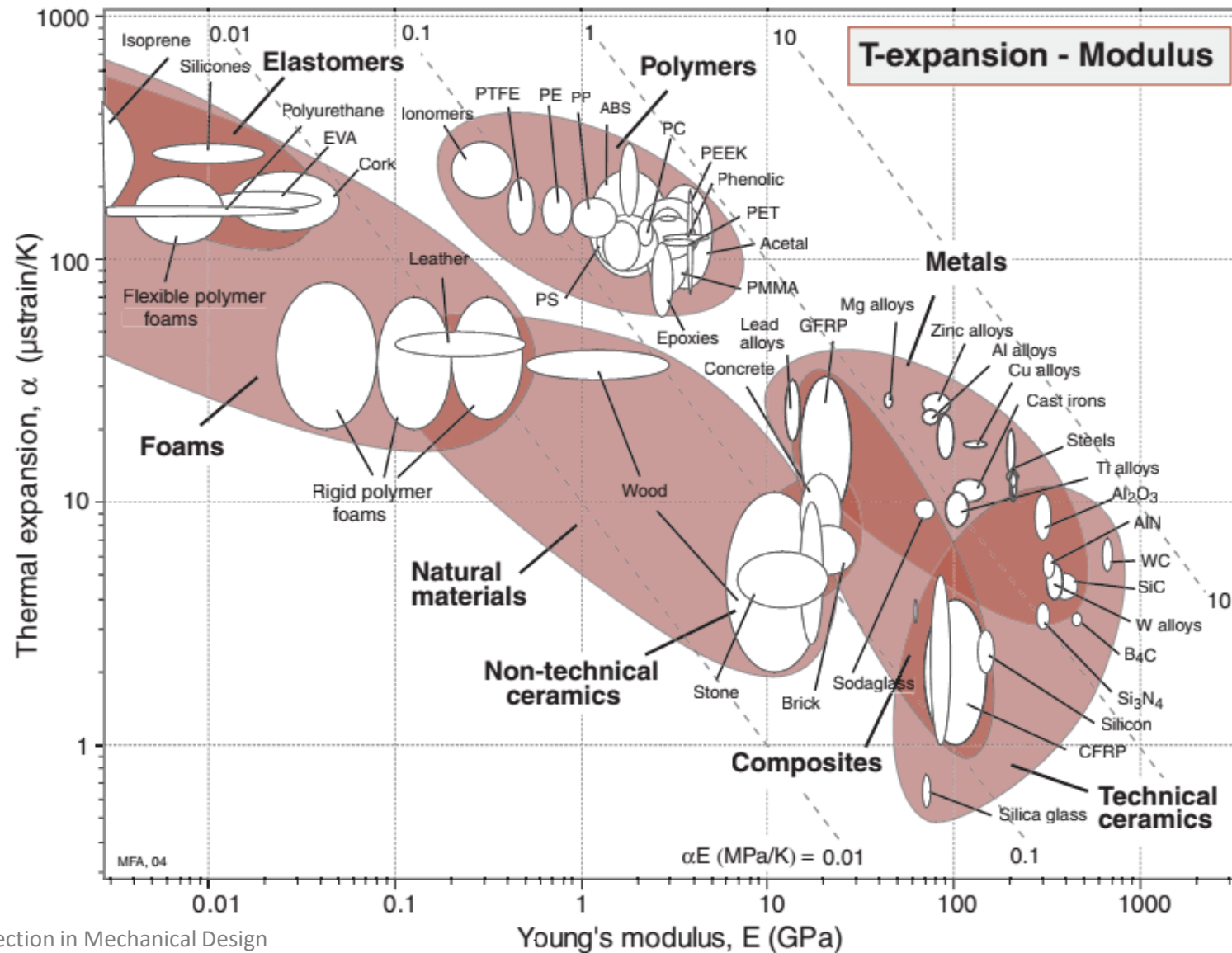


Correlação entre E e α

Metal	E	α
Aço	210	1,2
Ferro	140	1,2
Bronze	110	1,8
Alumínio	72	2,4
Titânio	160	0,7
Magnésio	4,6	2,6
Estanho	5,1	2,6
Chumbo	2,2	2,9
Cobre	124	1,4
Níquel	207	1,3
Latão	4	2



Diagramas de Propriedades



Energia de ligação e ponto de fusão

Ligação	Substância	EL (kJ/mol)	T _{fusão} (°C)
Iônica	NaCl	640	801
	MgO	1000	2800
Covalente	Si	450	1410
	C(diamante)	713	>3550
Metálica	Fe	406	1538
	W	849	3410
van der Waals	Cl ₂	31	-101
	NH ₃	35	-78
Hidrogênio	H ₂ O	51	0

Pergunta:

A energia de ligação C-C, típica dos materiais poliméricos como é o caso do polietileno de alta densidade é de 345 kJ mol^{-1} . Já a ligação Al-Al é um pouco menor: 324 kJ mol^{-1} . Por que então o ponto de fusão do alumínio é de 660°C e o do PEAD é de 137°C ?

Por que concreto armado?

Why Reinforce

Concrete

Discussion

Concreto e o Aço

	Concreto	Aço
Forma de Ruptura	Frágil	Dútil
Tração	Baixa	Alta
Resistência	$f_c < 100 \text{ MPa}$ (compressão)	$f_y > 250 \text{ MPa}$ (tração)
Módulo de elasticidade	$< 30 \text{ GPa}$	210 GPa
Durabilidade	Resiste à ação da água	Sofre corrosão eletrolítica
Manutenção	Baixa	Pintura contra corrosão

Outras possibilidades?

- Compósitos

