



ESTRUTURA DOS MATERIAIS

noções básicas

Estruturas dos sólidos

- formas com que os átomos se organizam

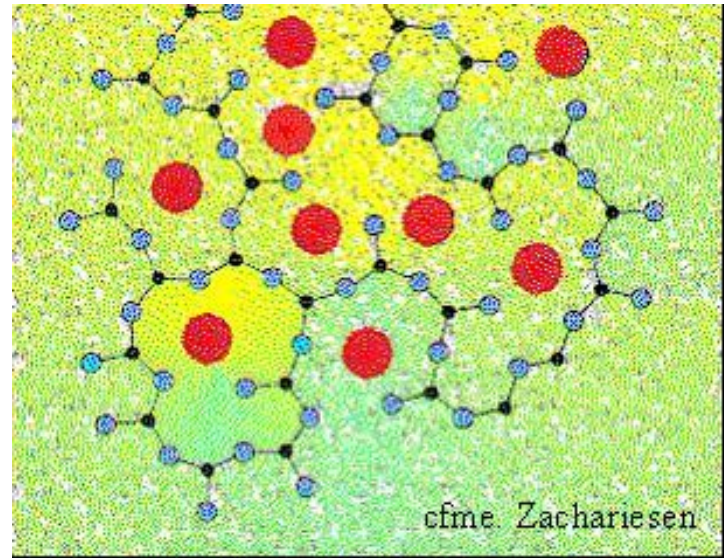
An orange rectangular box with a subtle drop shadow, containing three lines of text in a bold, black, sans-serif font.

vítrea
cristalina
molecular

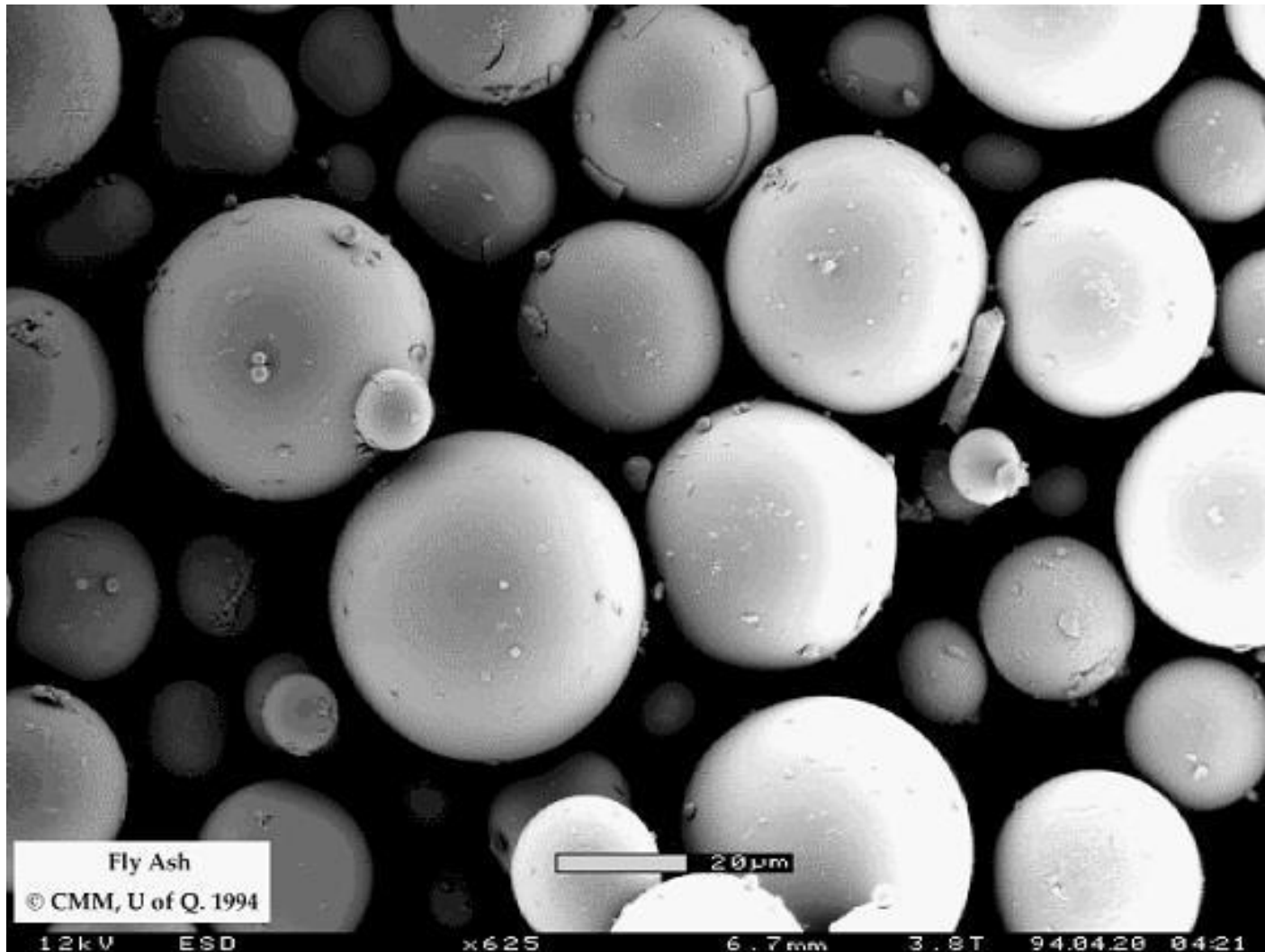
Sólidos vítreos ou amorfos

- ausência de:
 - ordem
 - simetria
 - ponto de fusão
- balanço elétrico
- isotrópicos
- - estáveis
- Ex. Pozolanas
vidros

- cadeia básica
- Si 
- Modificadores
- Ca  Na, Fe, Al, ..



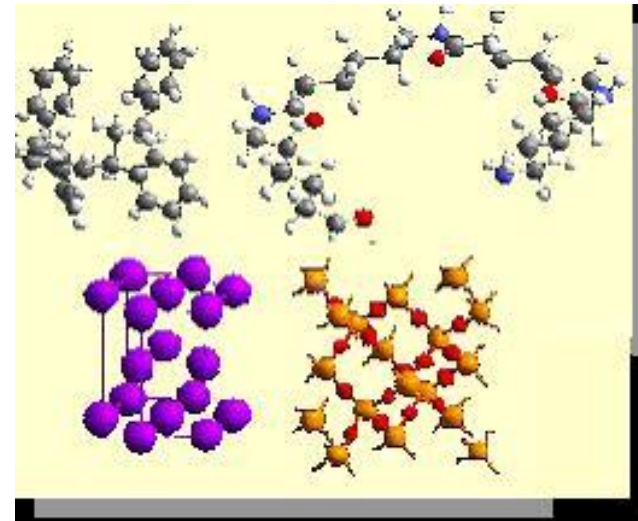
Sólidos vítreos ou amorfos



pozolana

Sólidos Cristalinos

- Ordem
- Simetria
- Repetição
- Metais
- Iônicos ou covalentes
- Planos de clivagem
- Estáveis
- Anisotrópicos
- Alto ponto de fusão
- Resistentes
- Duros



Sólidos cristalinos

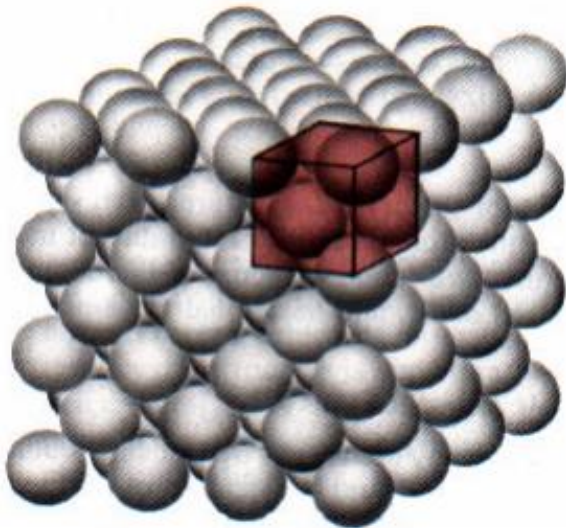
- Centro de simetria
- Eixo(s) de simetria
- Plano de simetria
- Forma células cristalinas



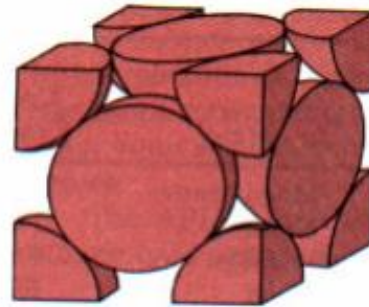
Célula unitária cristalina

- Parte de mínima escala da estrutura cristalina que a caracteriza.
- Quantos átomos compõem uma célula unitária cúbica de face centrada?

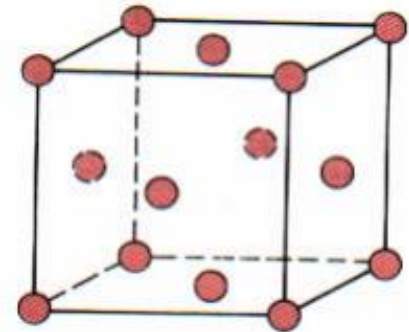
Célula Unitária



Sólido cristalino CFC

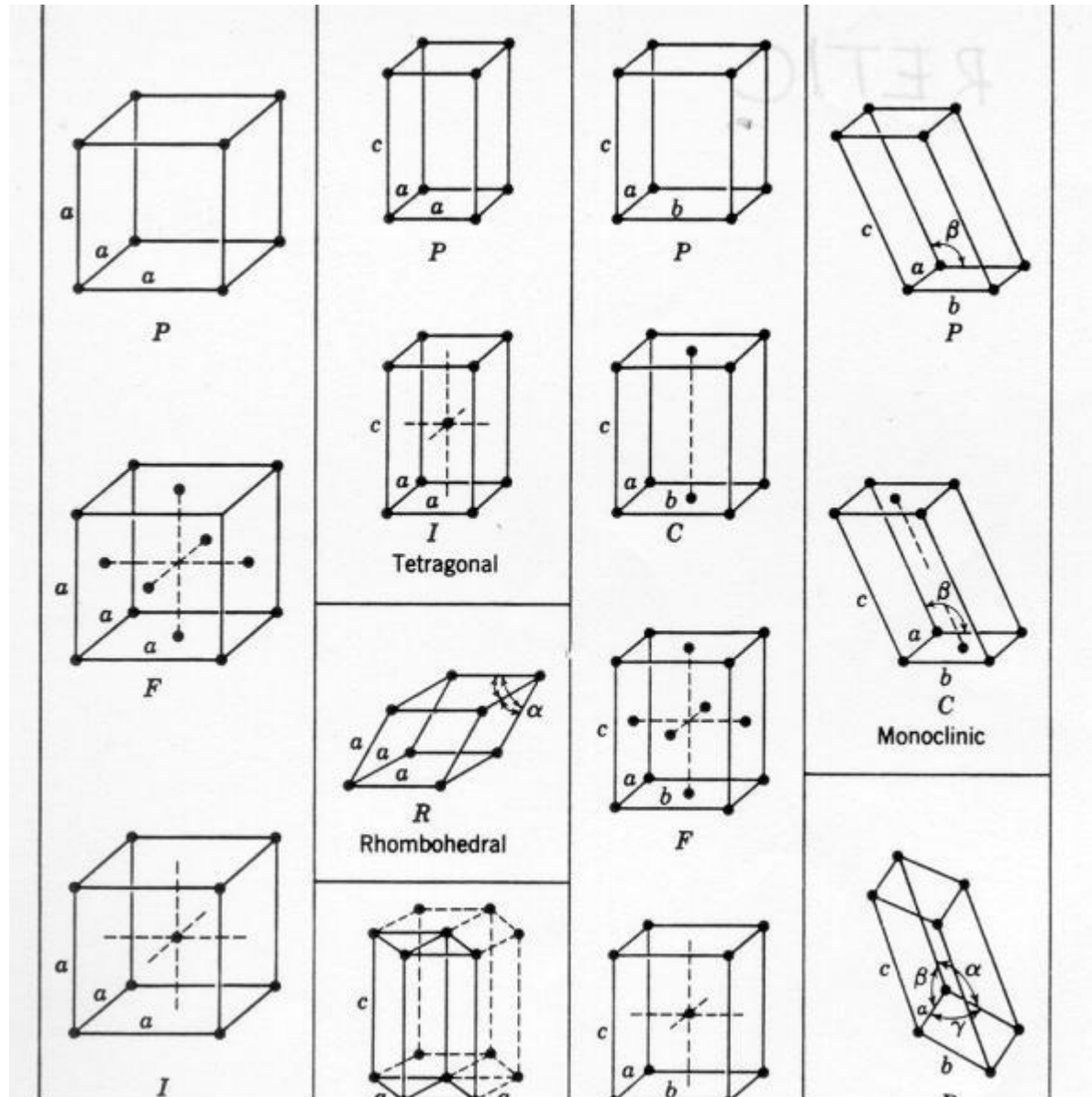


*Célula unitária
representada por
esferas rígidas (em
escala)*



*Outra representação da
célula unitária. Os círculos
representam as posições
ocupadas pelos átomos*

Exemplos de arranjos cristalinos



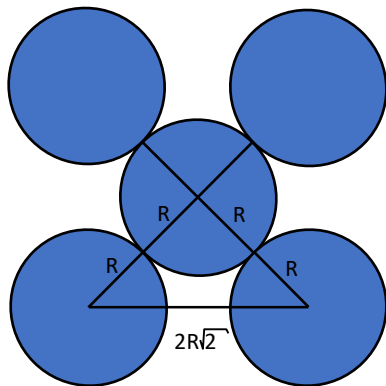
Sólidos cristalinos

- Empacotamento dos átomos (FEA)

Volume dos átomos na unidade de volume da célula

Volume da célula

- Ex. CFC



$$\text{Volume do átomo} = \frac{4 \pi R^3}{3}$$

$$\text{FEA}_{\text{CFC}} = \frac{\left[\frac{4 \times 4 \pi R^3}{3} \right]}{\left[2R\sqrt{2} \right]^3} = 0,74$$

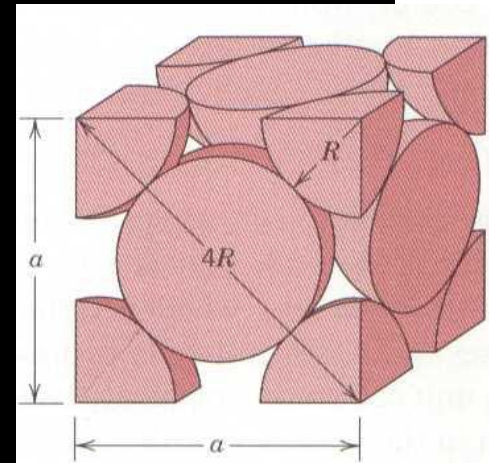
$$\text{FEA}_{\text{CCC}} = 0,68$$

Sólidos cristalinos

- Cálculo da densidade teórica $\rho = n.A/V_c.N_A$
 - n = nº de átomos na célula cristalina
 - A = massa atômica do íon
 - V_c = volume da célula cristalina
 - N_A = nº de Avogadro
- Ex. Ferro α
 - Raio atômico = 0,1241nm; estrutura CCC; $A = 55,847\text{g/mol}$
 - $\rho = (2 \times 55,847)/[(4 \times 1,241 \times 10^{-8} / \sqrt{3})^3 \times 6,023 \times 10^{23}]$
 - $\rho = 7,85\text{g/cm}^3$

Sólidos cristalinos

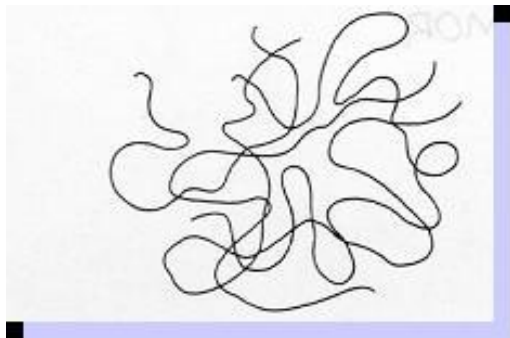
- Cálculo da densidade teórica $\rho = \frac{n \cdot A}{V_c \cdot N_A}$
 - $n = n^\circ$ de átomos na célula cristalina
 - $A =$ massa atômica do íon
 - $V_c =$ volume da célula cristalina
 - $N_A = n^\circ$ de Avogadro
- Ex. Cobre
 - Raio atômico = 0,128nm; estrutura CFC; $A = 63,5\text{g/mol}$
 - $\rho = (4 \times 63,5) / [(2 \times 1,28 \times 10^{-8} \sqrt{2})^3 \times 6,023 \times 10^{23}]$
 - $\rho = 8,89\text{g/cm}^3$



$$a = 2R (2)^{1/2}$$

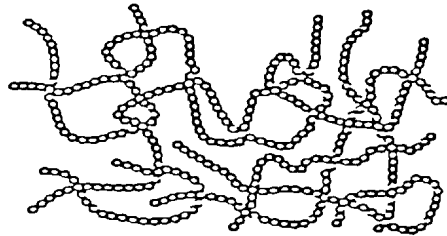
Sólidos moleculares

- Molécula
 - Grupos de átomos c/ forte ligação
- Sólido
 - moléculas c/ ligação fraca
 - depende do GP
- Deformação
 - moléculas deslizam (termo-plásticos)
 - moléculas rompem (termo-fixos)
- Exemplo:
 - Betumes e alguns plásticos
- Podem ser
 - cristalinos (termo-plásticos)
 - vítreos (termo-plásticos ou termo-fixos)

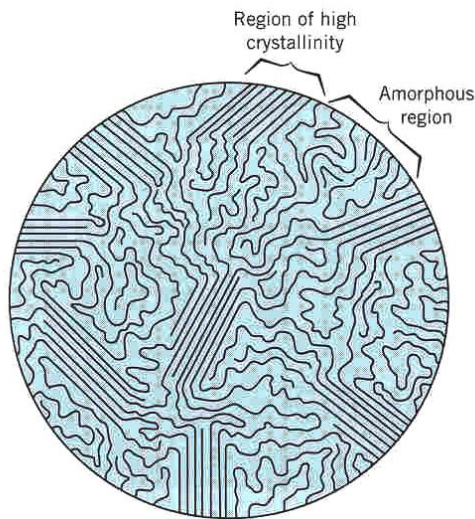
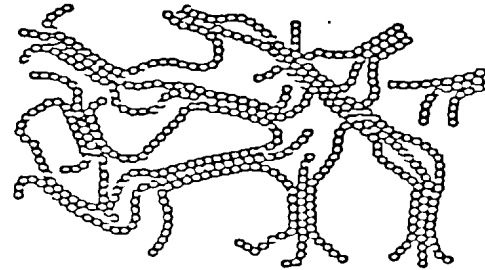


Microestrutura

100% Amorfo



Semi-cristalino



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

Termoplásticos x temperatura

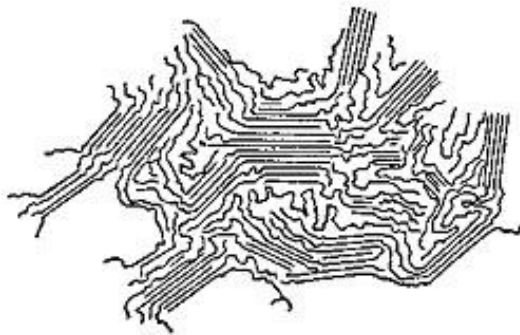
- Temperatura de transição vítrea (T_g)

Abaixo da T_g :

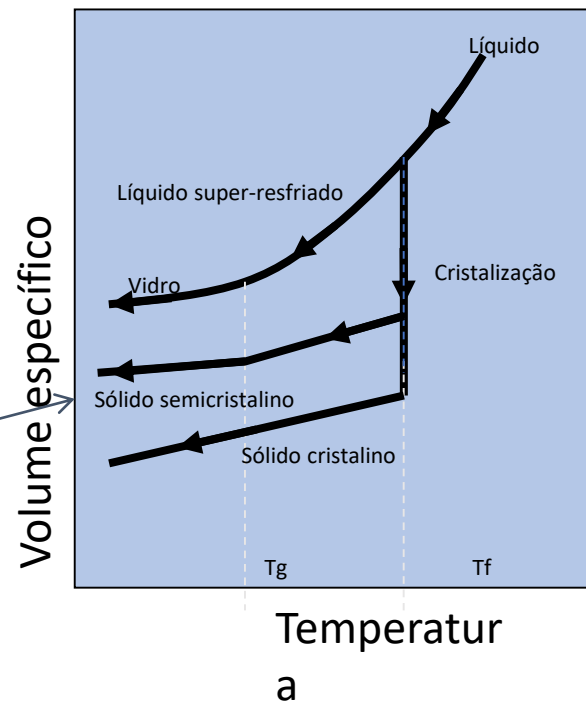
tornam-se frágeis

< deformação térmica

< deformação elasto-plástica

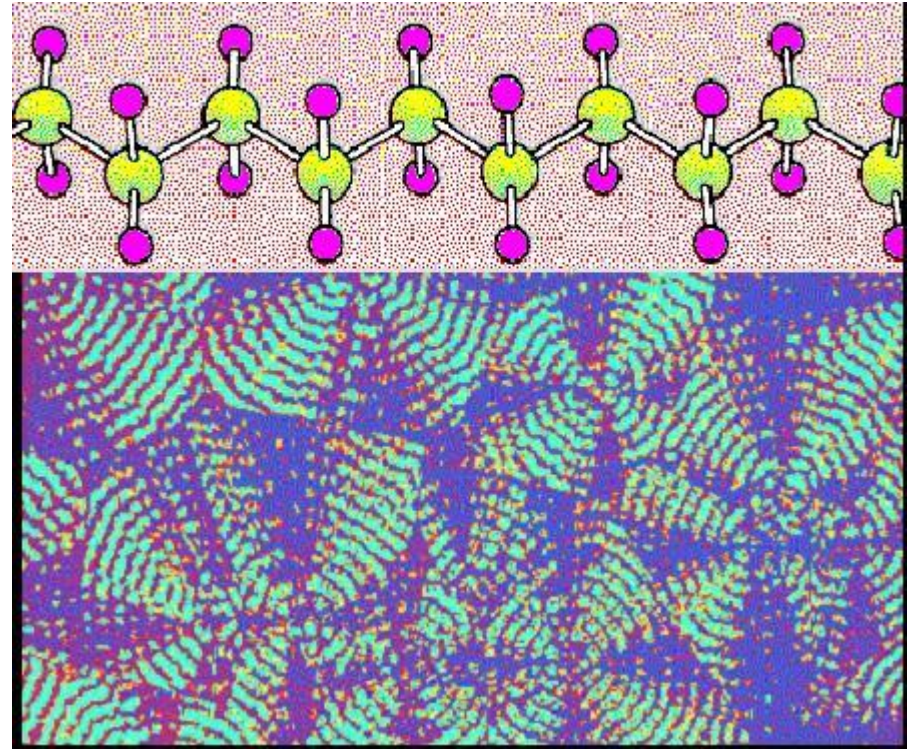


http://ospolimeros.blogspot.com/2010_06_01_archive.html



Sólidos cristalinos de base polimérica

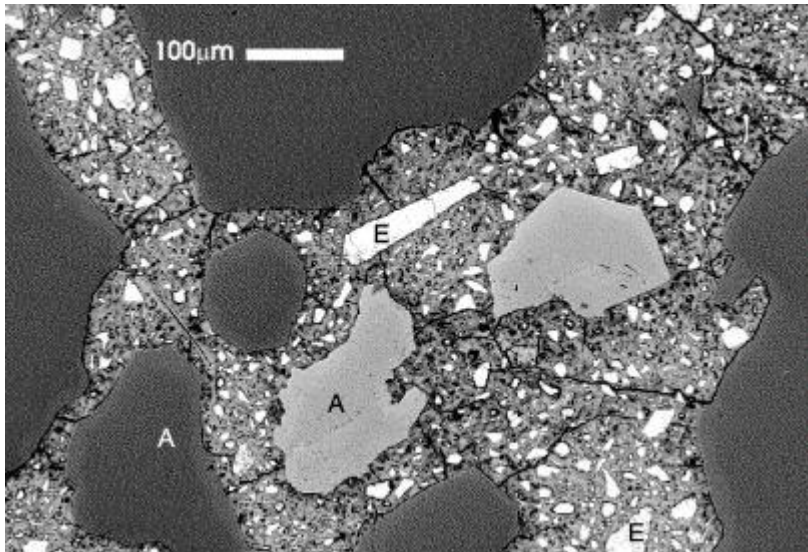
- moleculares
 - moles
 - baixo ponto de fusão
 - > expansão térmica



polietileno

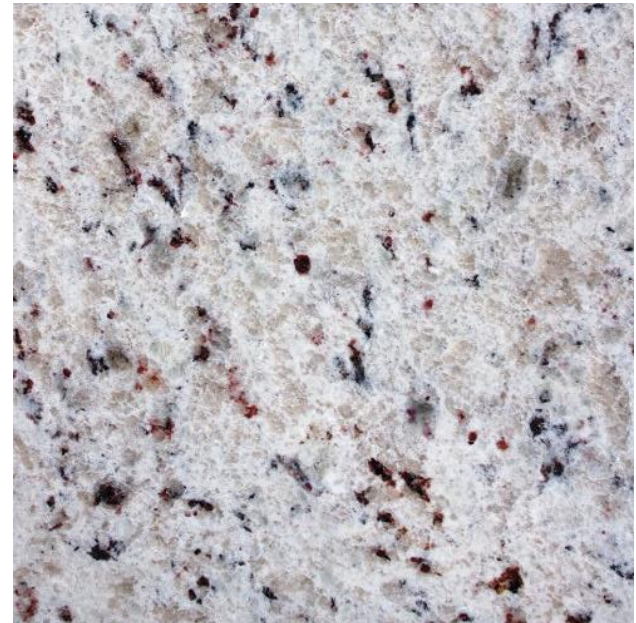
Fases

- Parte homogênea
 - Superfícies definidas
 - Sistema heterogêneo
 - Ex. clínquer Portland
- Característica dos sólidos
 - Têm propriedades diferenciadas
 - O comportamento do material depende das propriedades e da interação das fases



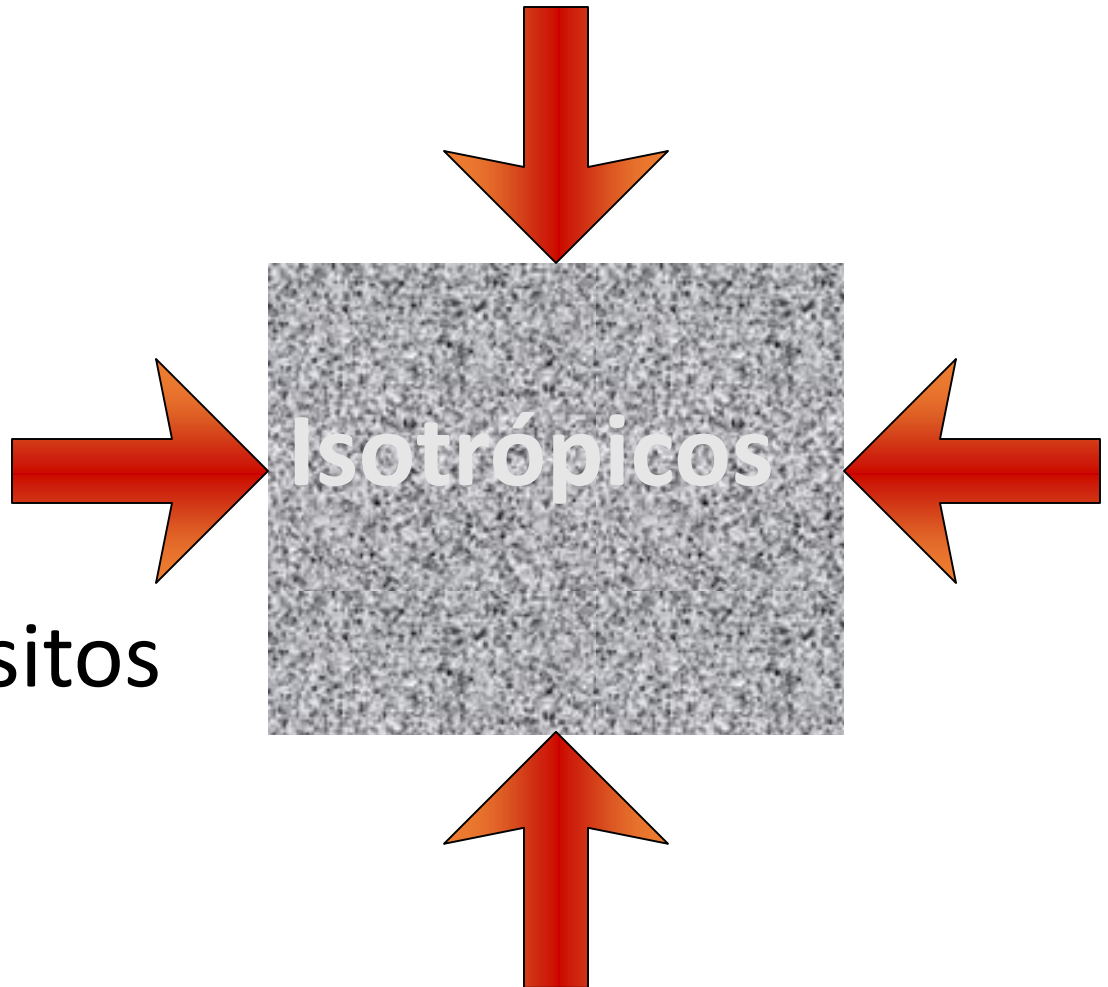
Formação de materiais policristalinos ou cristalinos polifásicos

- Cristalização lenta (rochas ígneas)
- Indução (formação de compósitos)



Materiais polifásicos e isotropia

- Agregados
- Argamassas
- Concreto
- Alguns compósitos
- Metais



Estrutura cristalina dos metais



Estrutura cristalina dos metais



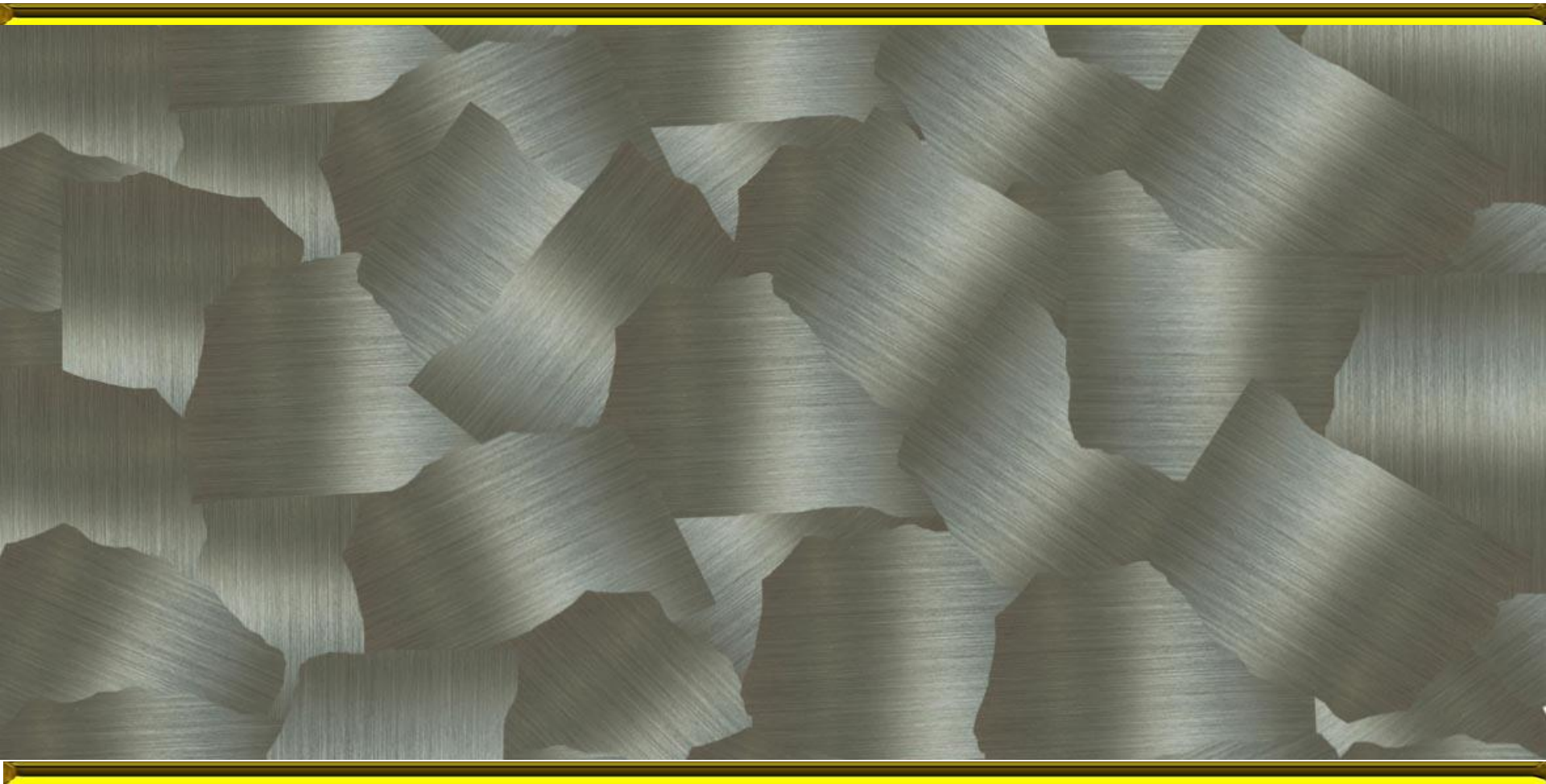
Estrutura cristalina dos metais



Estrutura cristalina dos metais



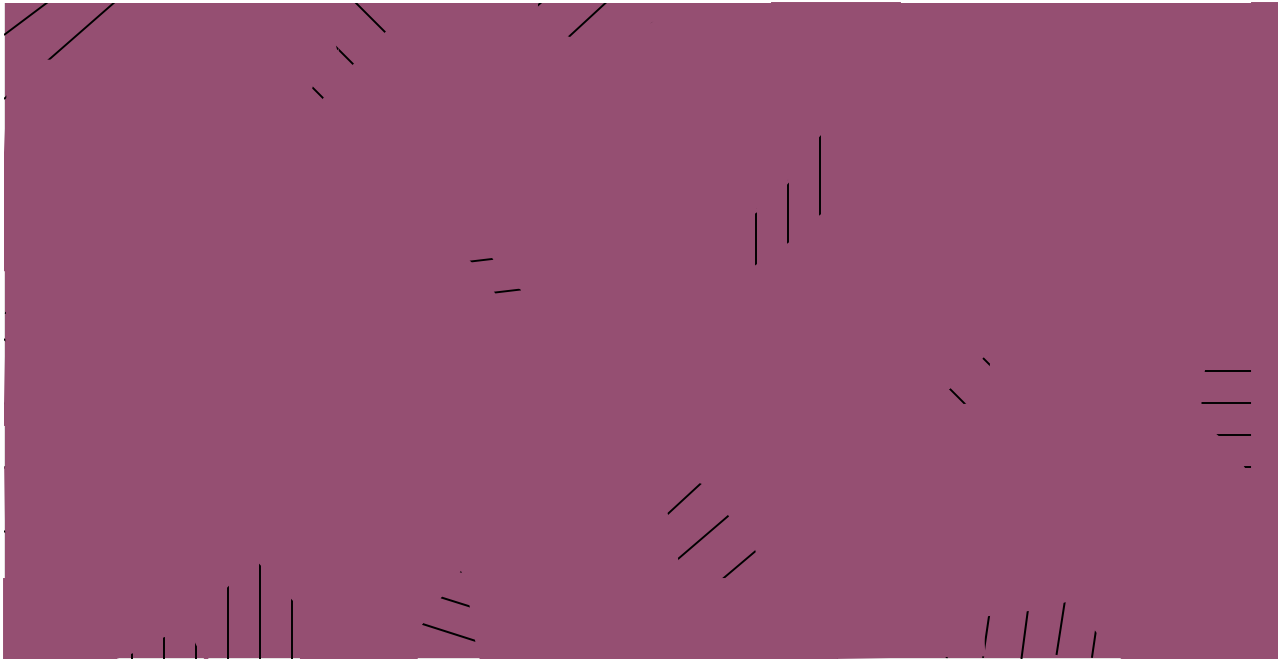
Estrutura cristalina dos metais



Estrutura cristalina dos metais



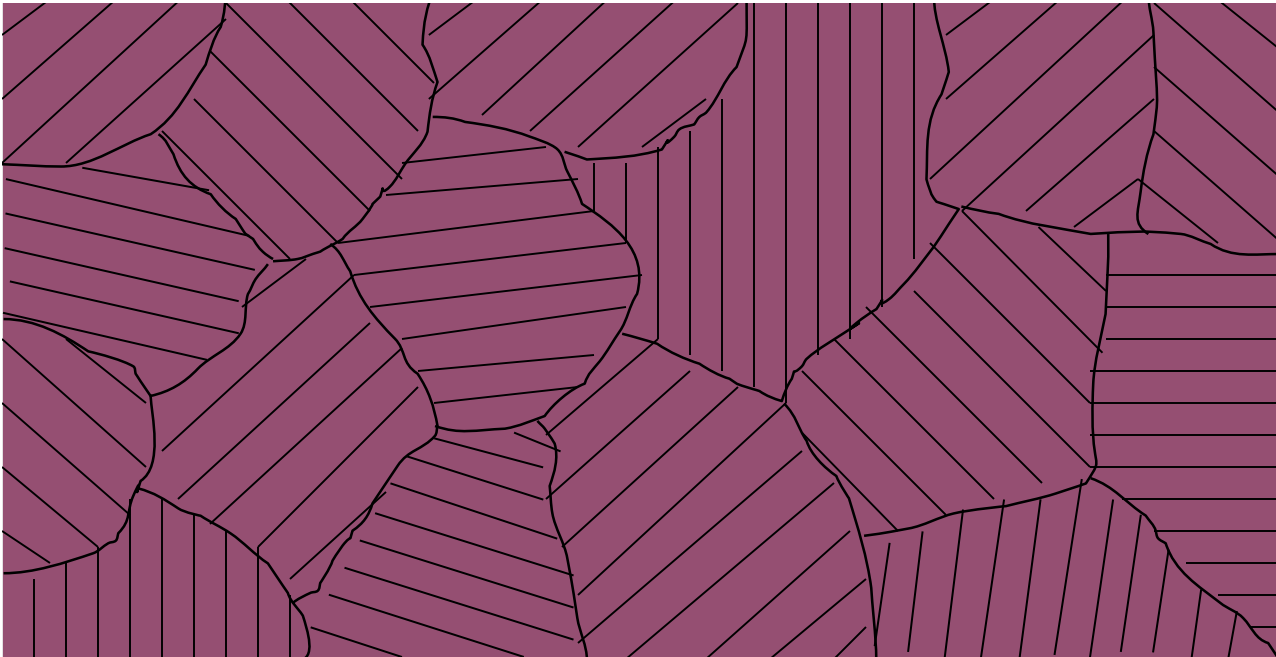
Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



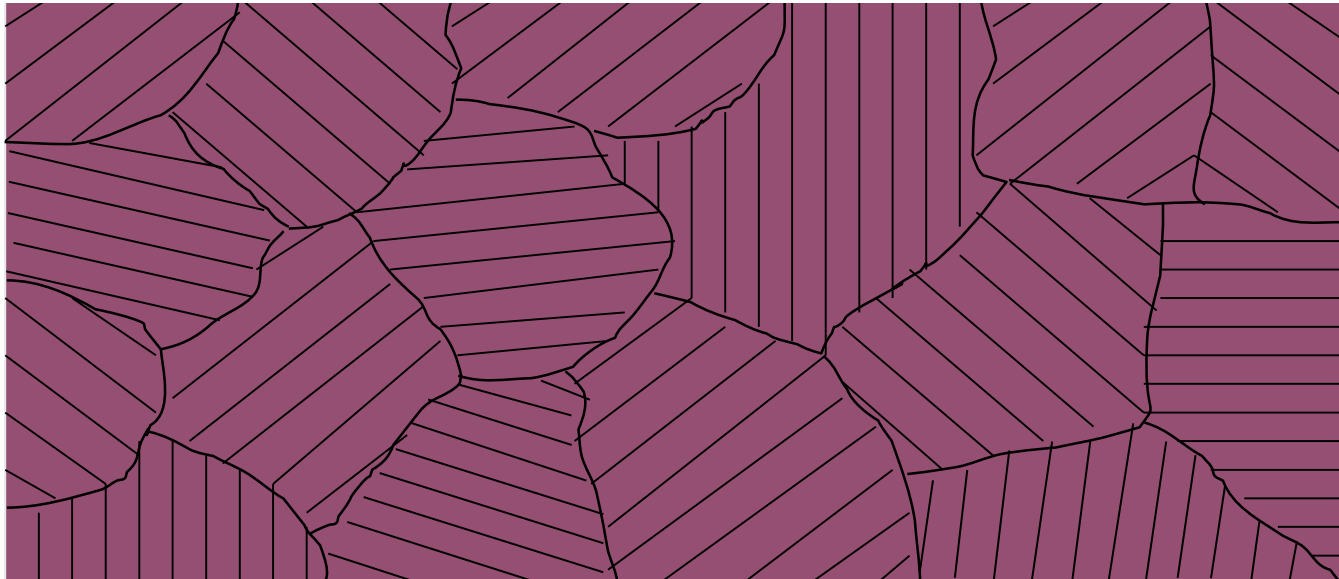
Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



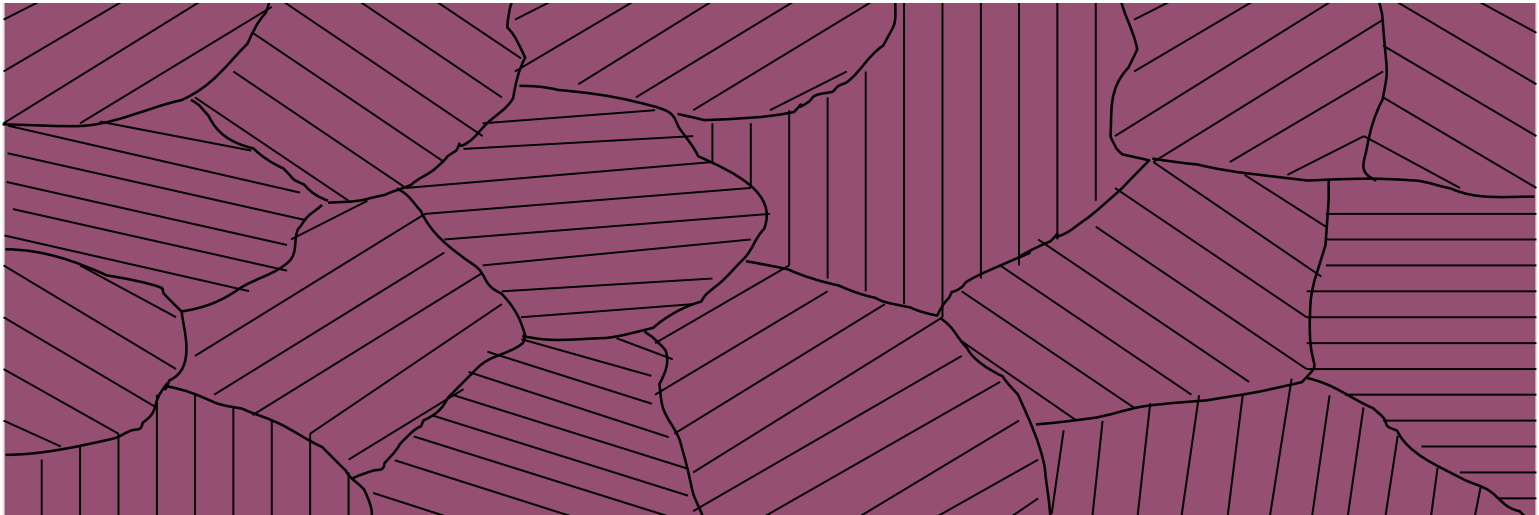
Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



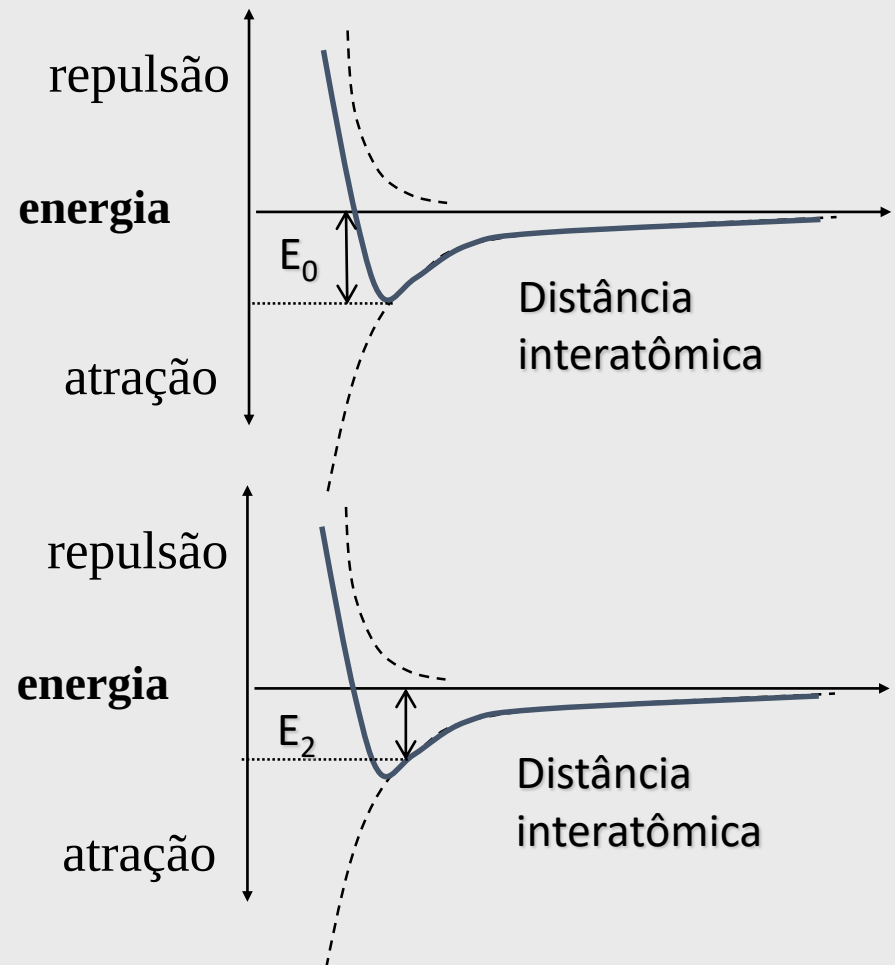
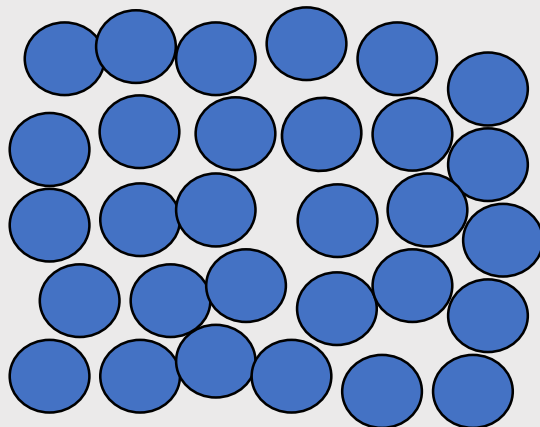
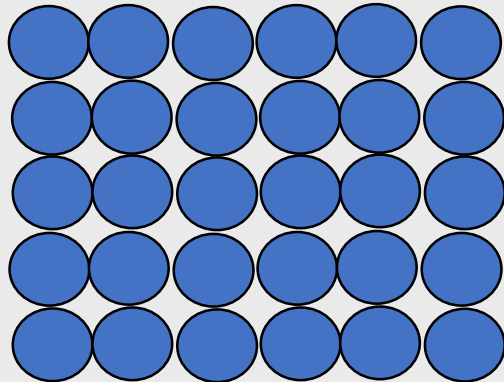
Estrutura cristalina dos metais

- Polifásica: orientação dos cristais formando grãos
 - MATERIAIS ISOTRÓPICOS EM GERAL
- Contorno dos grãos é a fase com maior concentração de defeitos (corrosão intercristalina)



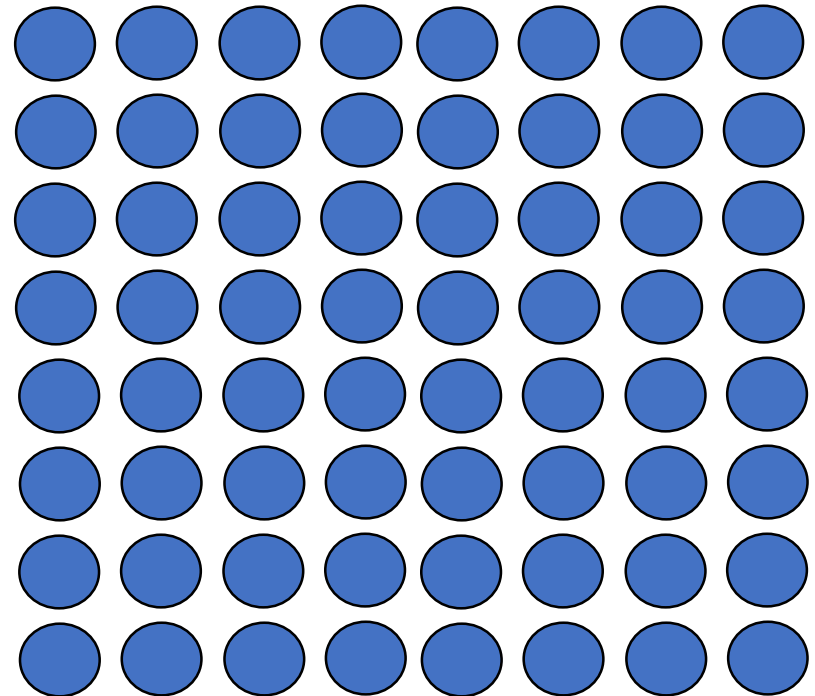
Pergunta:
Se um material cristalino recebe um
tratamento que deixa sua estrutura
“amorfisada” há alguma alteração nas
suas propriedades?

Equilíbrio das estruturas cristalina e amorfa



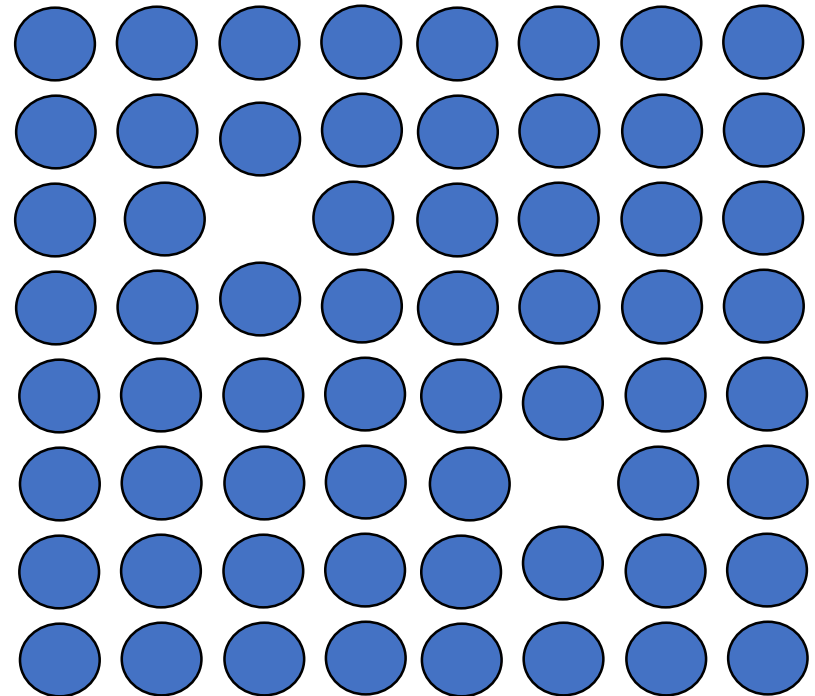
Falhas cristalinas

- Defeitos pontuais
 - Lacunas
 - Auto-intersticial
 - Soluções sólidas
- Defeitos lineares:
Discordâncias
 - Em linha
 - Helicoidais



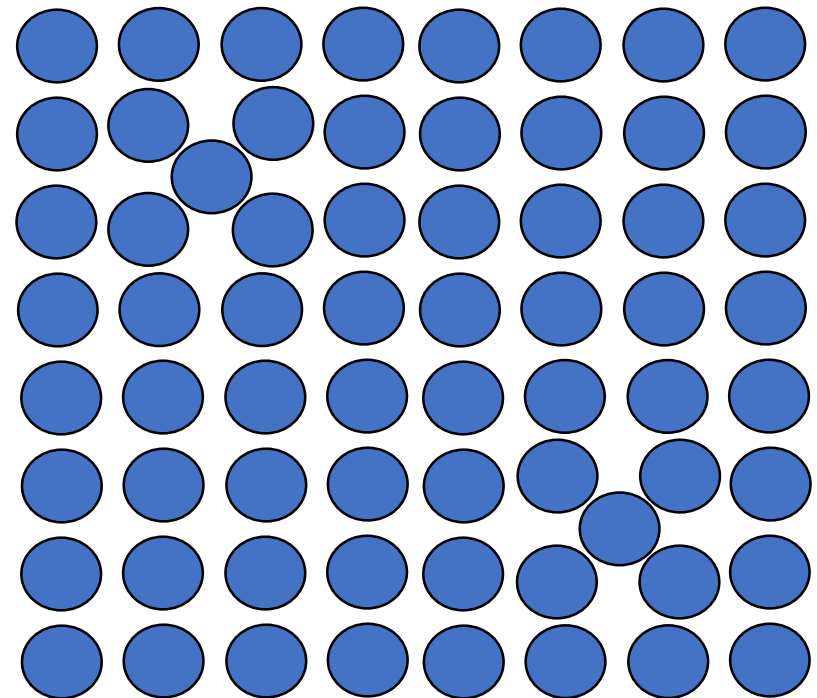
Falhas cristalinas

- Defeitos pontuais
 - Lacunas
 - Auto-intersticial
 - Soluções sólidas
- Defeitos lineares:
Discordâncias
 - Em linha
 - Helicoidais



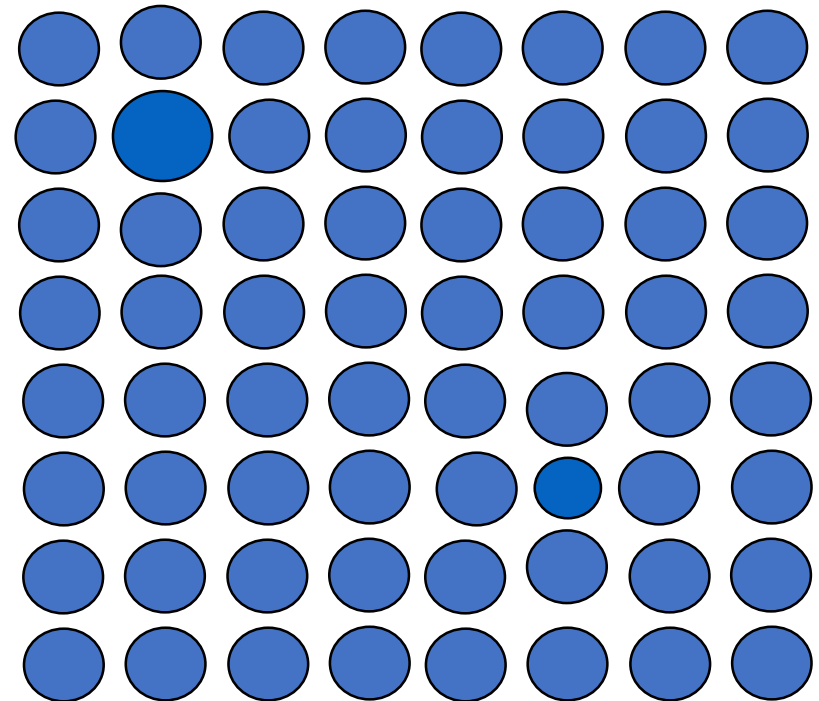
Falhas cristalinas

- Defeitos pontuais
 - Lacunas
 - Auto-intersticial
 - Soluções sólidas
- Defeitos lineares:
Discordâncias
 - Em linha
 - Helicoidais



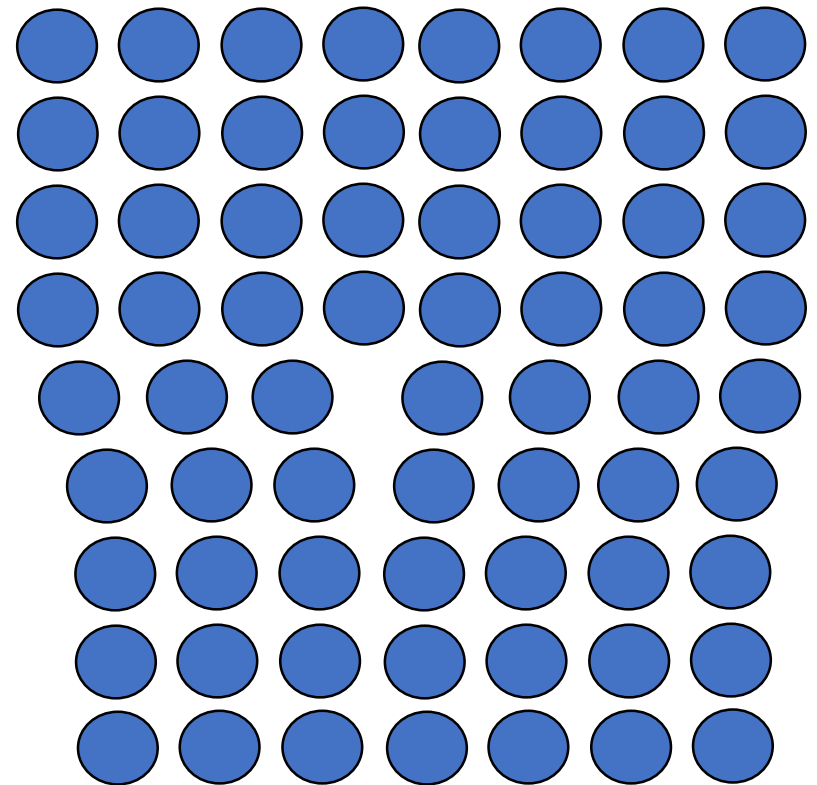
Falhas cristalinas

- Defeitos pontuais
 - Lacunas
 - Auto-intersticial
 - Soluções sólidas
- Defeitos lineares:
Discordâncias
 - Em linha
 - Helicoidais

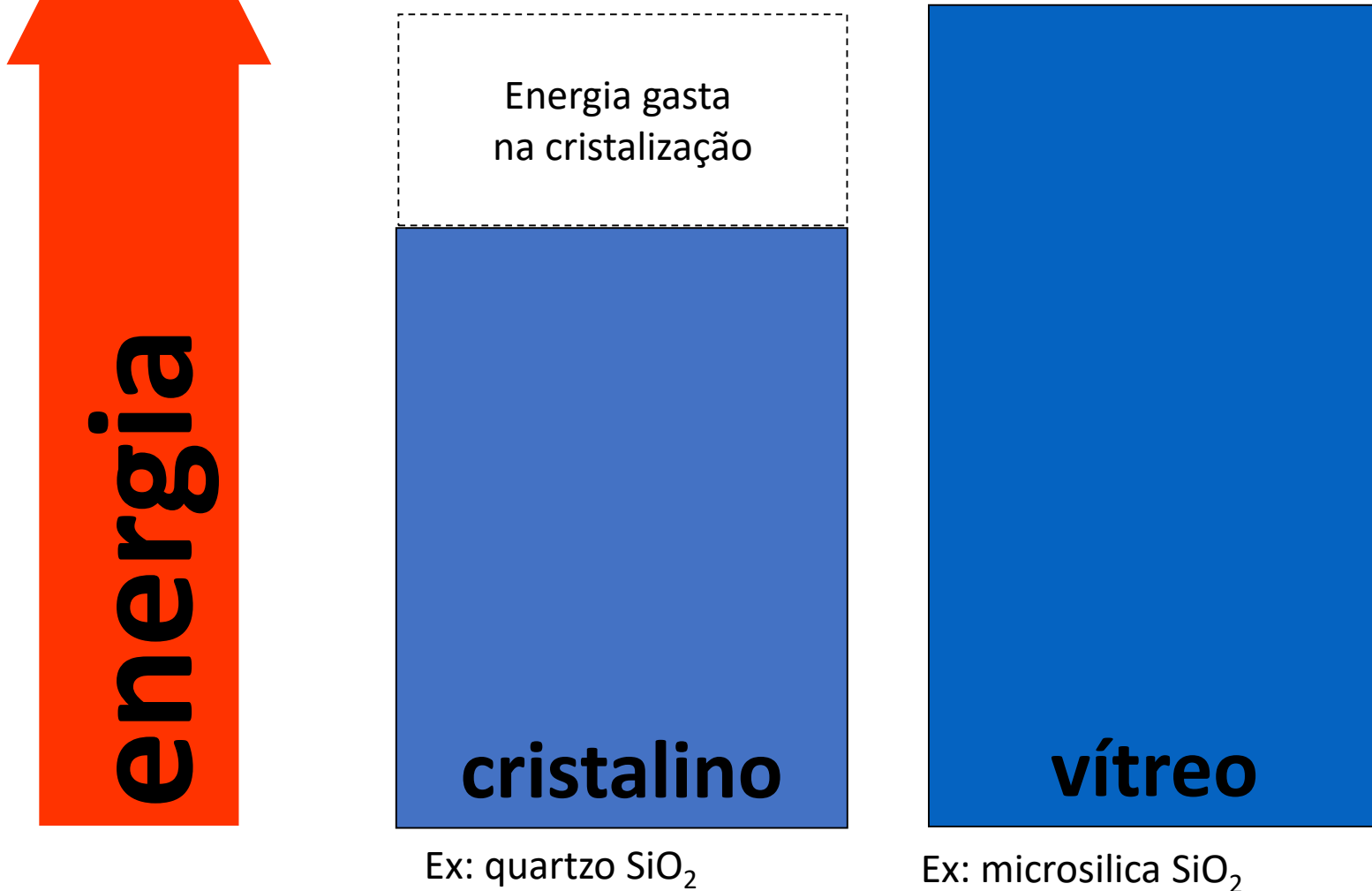


Falhas cristalinas

- Defeitos pontuais
 - Lacunas
 - Auto-intersticial
 - Soluções sólidas
- Defeitos lineares:
Discordâncias
 - Em linha
 - Helicoidais



Estrutura dos Sólidos x Nível de Energia



Interfaces

- Interfaces são os contornos das fases
- Interferem nas propriedades finais:
 - parte mais amorfa do material policristalino (mais reativa)
 - barreira para progressão de deformações nos metais
 - menor o volume de cada grão (parte distinguível da fase) maior a área de interface total

Superfície

- Superfície é a área externa dos grãos dos materiais particulados
- Materiais particulados são frequentemente utilizados como reagentes (cimento, cal, gesso, argila calcinada) e também como inertes (agregados, cargas)

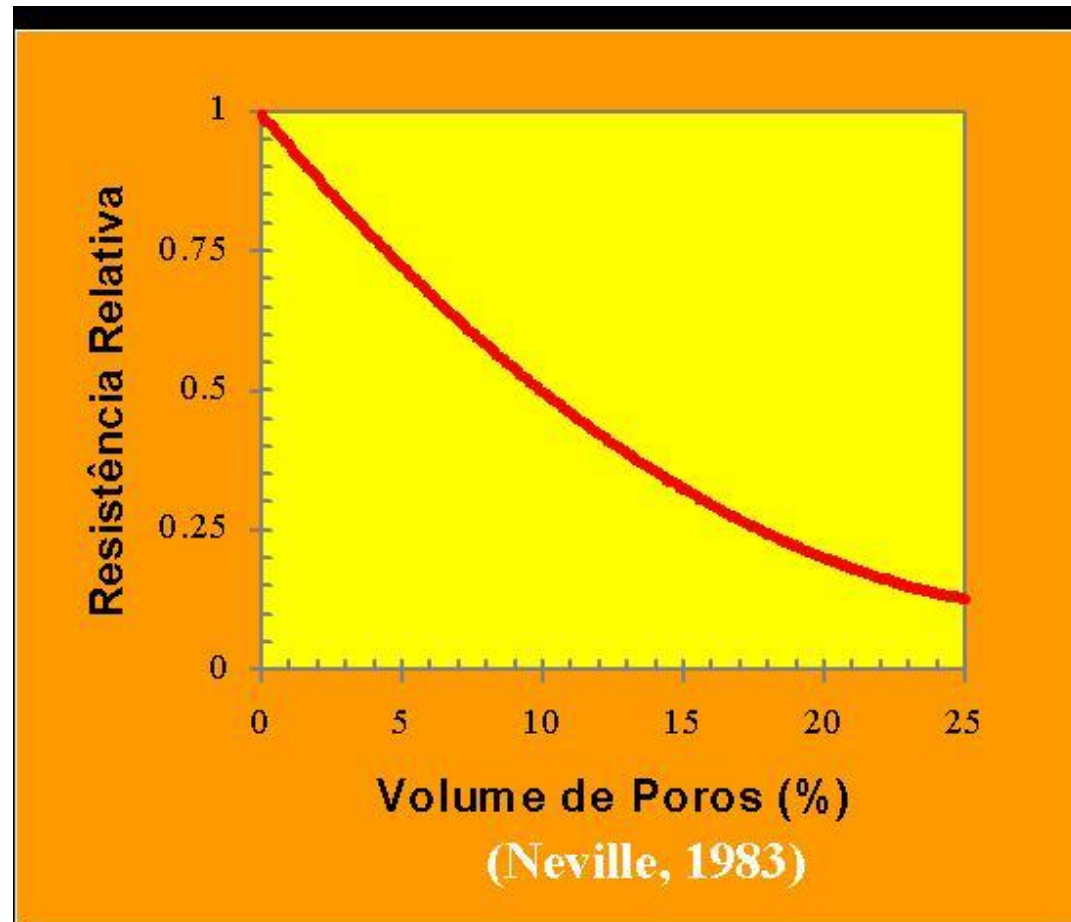
Superfície

- Da área superficial depende:
 - ✓ reatividade
 - ✓ água de molhagem
 - ✓ características reológicas dos compósitos

<i>Dimensão dos grãos dos agregados (mm)</i>	<i>Superfície específica (m²/m³)</i>	<i>Água de molhagem (l/m³)</i>
0,15 a 0,30	26670	300
2,4 a 4,8	1680	56
9,5 a 19	420	40
38 a 76	105	10

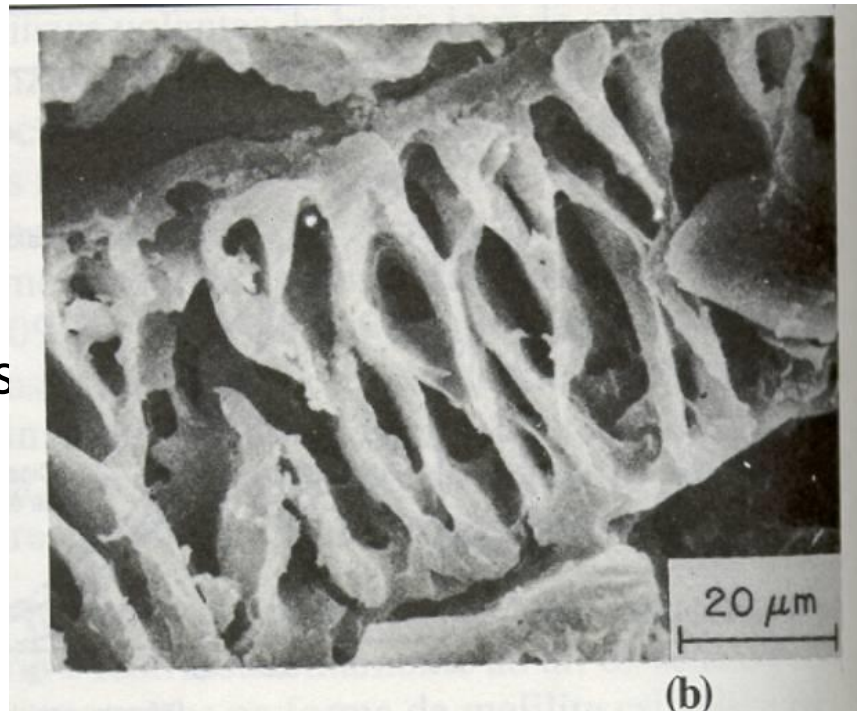
Defeitos volumétricos

- Porosidade
 - fator água/cimento
 - fator água/gesso
- Fissuras
- Interfaces
- Superfícies



Poros

- Fase especial dos sólidos
- Preenchido por fluídos
- Interferem em
 - características físicas
 - propriedades mecânicas
 - durabilidade



Estrutura dos sólidos x reatividade

- Nível de energia superficial é maior do que no interior do cristal:
 - Materiais com grãos cristalinos menores são mais reativos
 - Materiais mais porosos são mais reativos
 - Materiais mais finamente moídos são mais reativos

Importância dos defeitos

- Movimentação iônica X defeitos
 - Naturais = $f(\text{resfriamento})$
 - Induzidos $\Rightarrow$ ligas metálicas (Ex.: Al)
- Reatividade = $f(\text{nível de cristalização})$
- Resistência = $f(\text{nível de cristalização})$

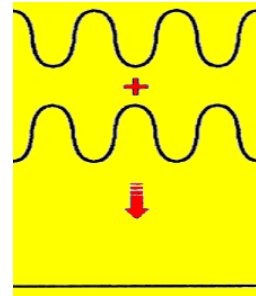
Pergunta 1: a estrutura interna dos materiais afeta seu comportamento?

Pergunta 2: é importante caracterizar a estrutura interna dos materiais?

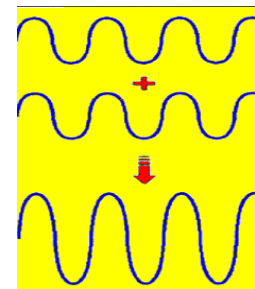
Difração de Raios X

identifica organização cristalina

- Penetram nos sólidos
- Difractados pelos planos cristalinos
- Interferência de ondas
 $f(\text{distância percorrida})$
- Interferência
 - $f(\text{características dos cristais})$
 - distância entre planos cristalinos
 - átomos presentes



destrutiva



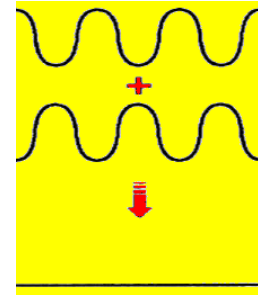
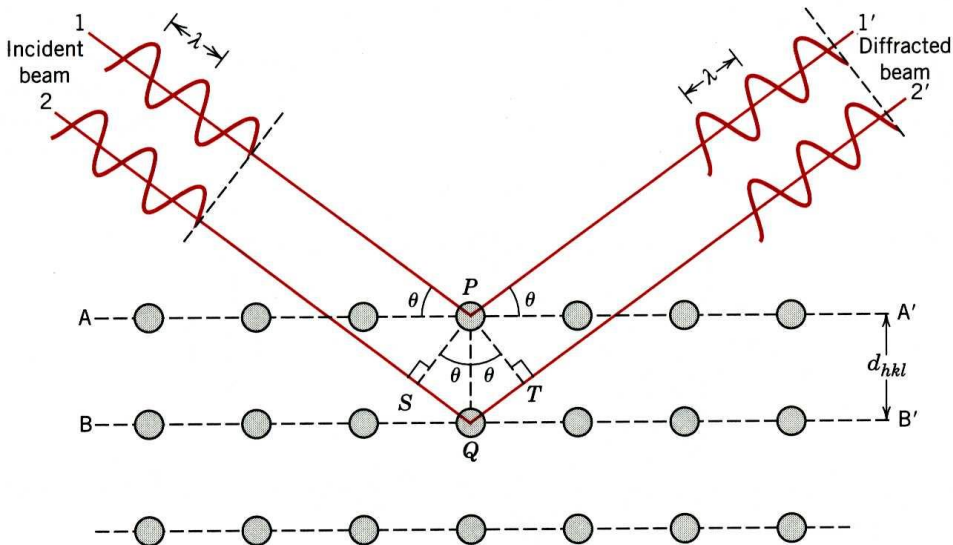
construtiva

USOS:

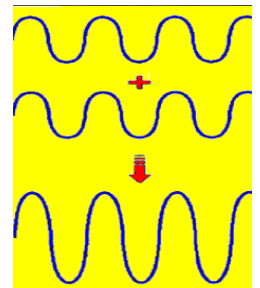
identificação de minerais
avaliação do teor de vidro

Difração de Raios X

identifica organização cristalina

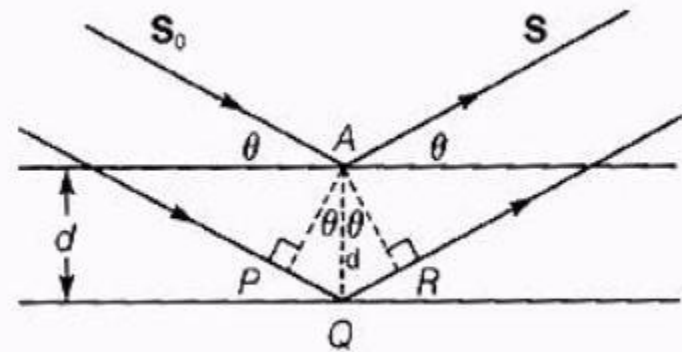
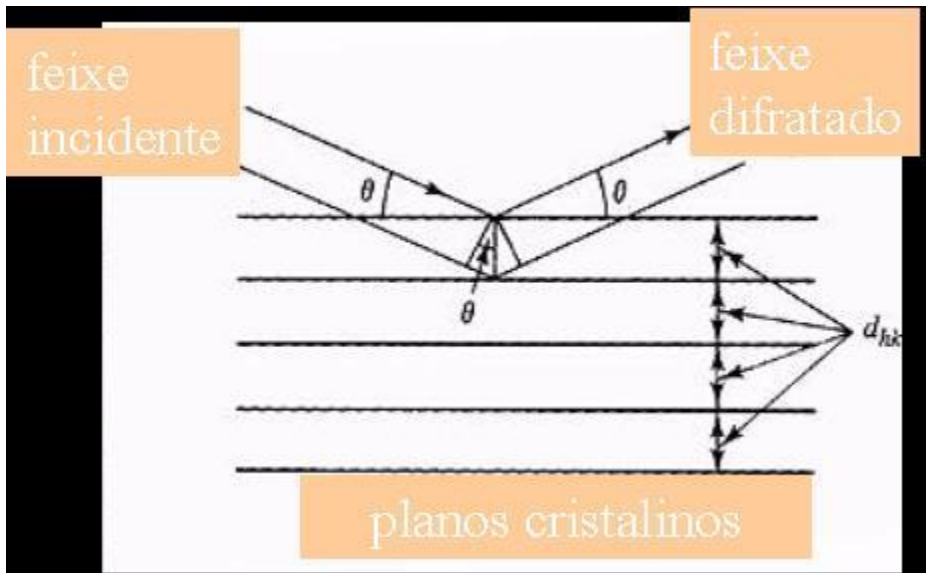


destrutiva



construtiva

Lei de Bragg



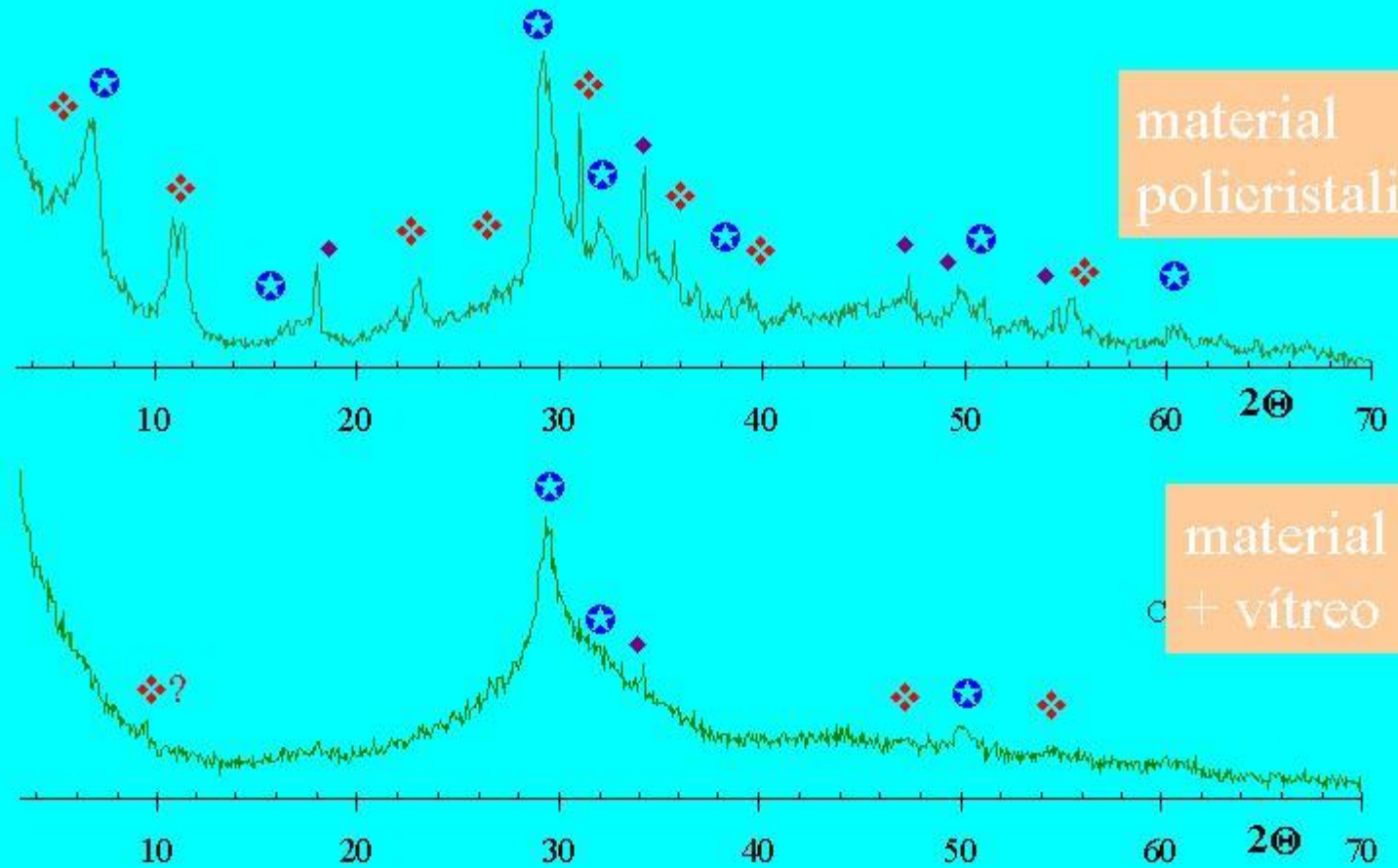
distância percorrida até o detector é f() do plano de refração

Interferência construtiva quando:

$$n\lambda = 2 d \sin \Theta$$

n - número inteiro, λ comprimento de onda e Θ ângulo de incidência

Difratograma de Raios X



Porosimetria de Mercúrio

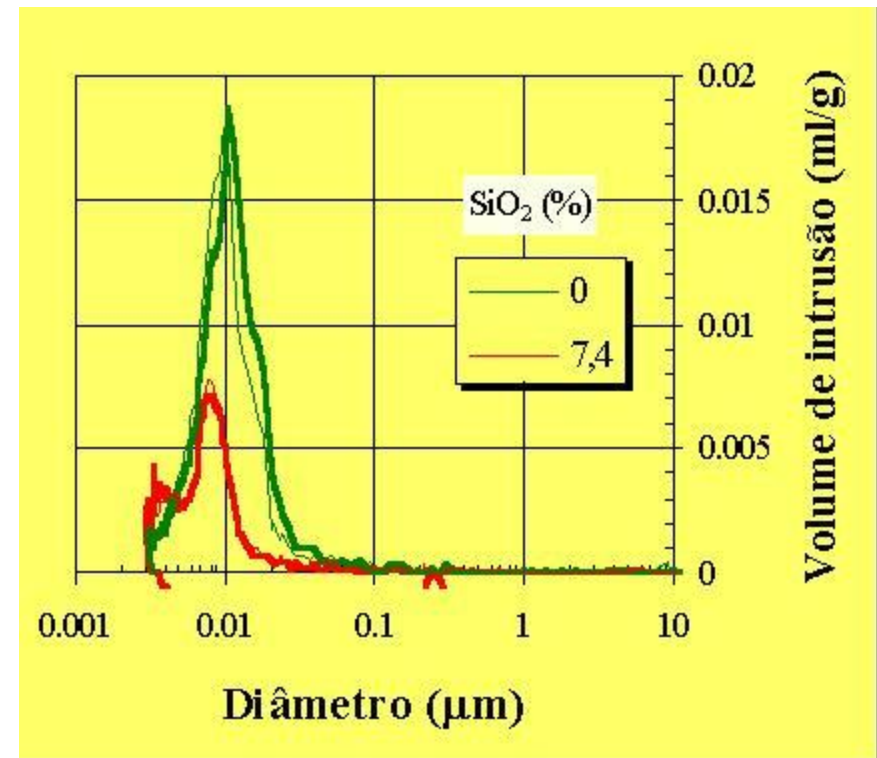
pressão de intrusão de mercúrio é função das características dos materiais e do **diâmetro** de poros

$$D = (-4\gamma \cos \theta) P^{-1}$$

D - diâmetro γ Tensão superficial

θ ângulo de contato P pressão

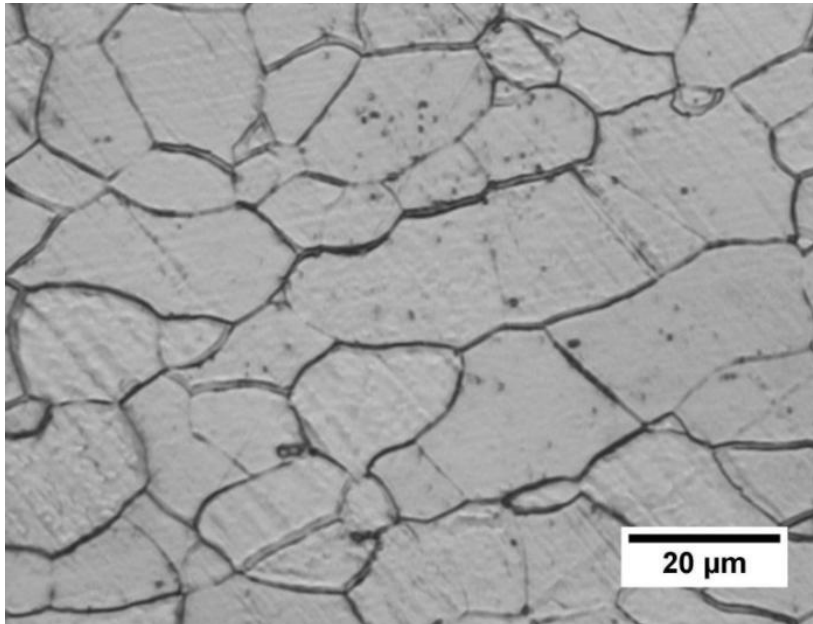
- Poros $> 2,4\mu\text{m}$
 - volume
 - distribuição
- Comparativo
 - destroi estrutura do material



MICROSCOPIA

- Ótica

- baixas magnificações (1000 vezes)
- materiais no estado natural

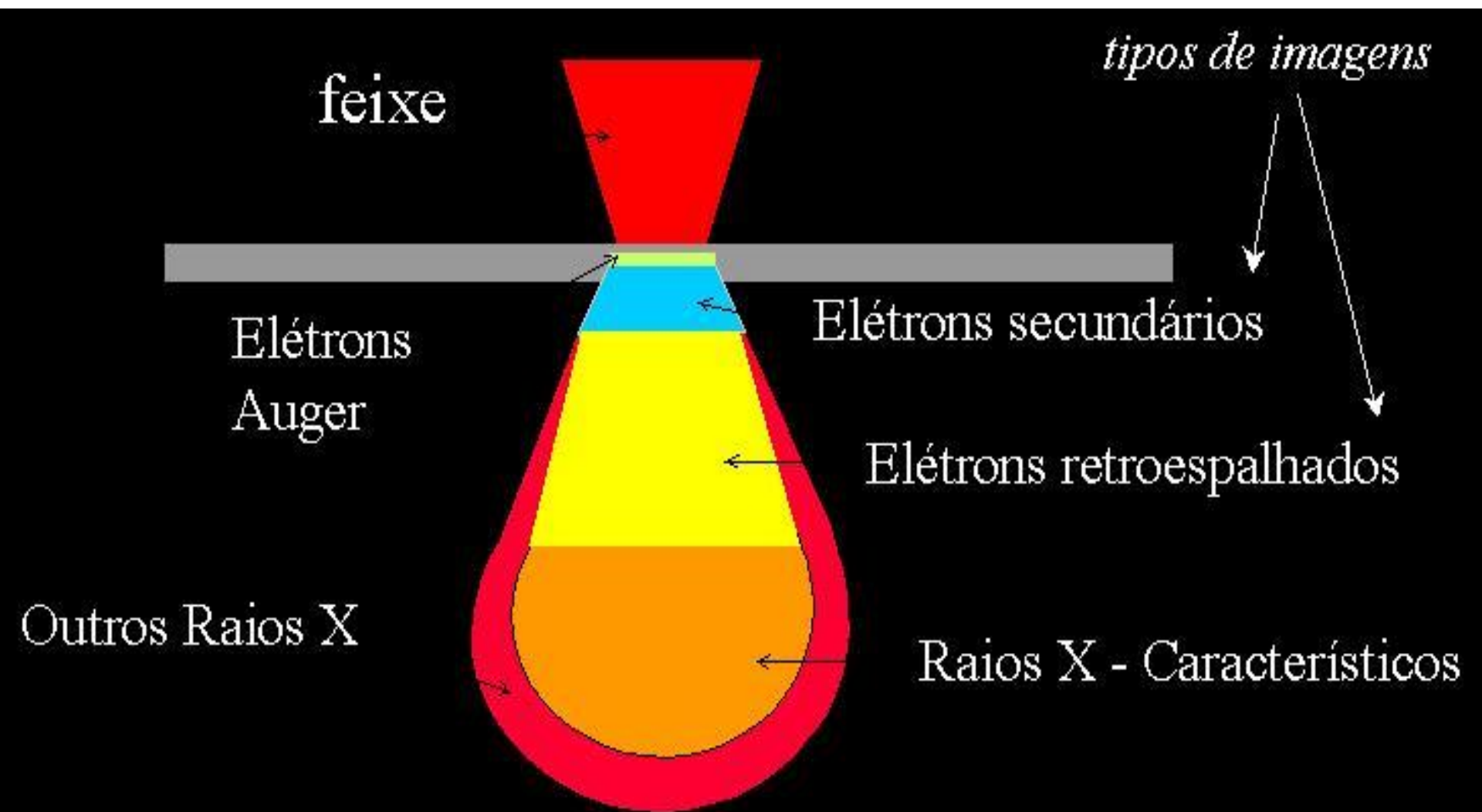


- Eletrônica de varredura

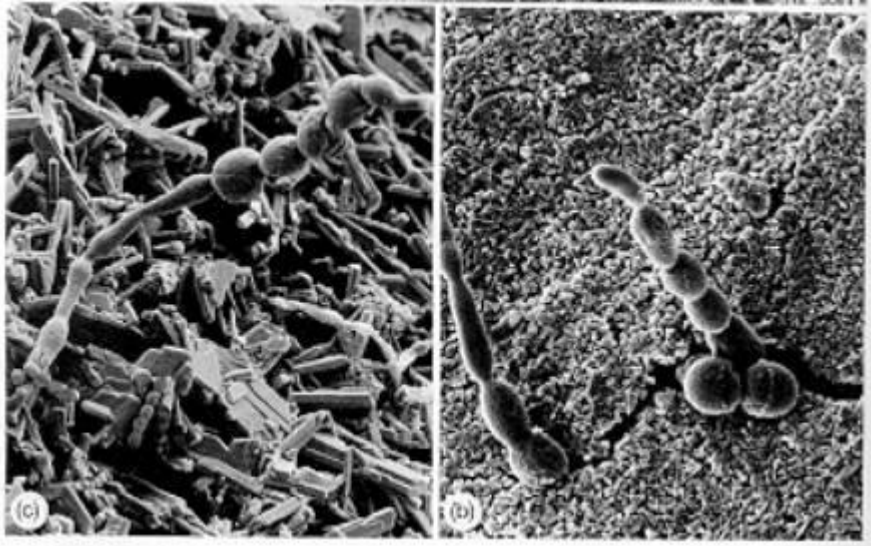
- magnificações acima de 1000 vezes
- alto vácuo
 - amostras desidratadas
- feixe de elétrons interage com amostra
 - vários tipos de imagens
- faz análises químicas por Raios X

Microscopia óptica para o aço bake hardening préconformado , ataque com 2% Nital por 13 segundos, aumento de 500X

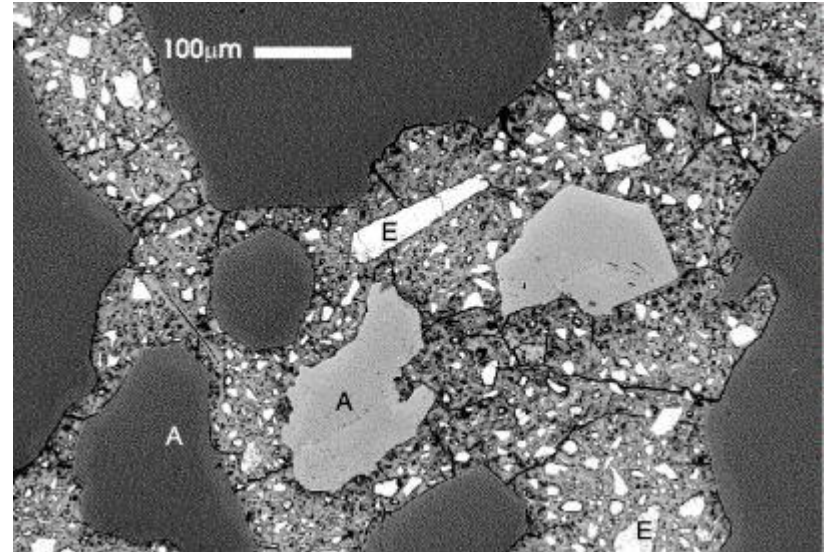
Microscopia eletrônica de varredura



Microscopia ótica e eletrônica



fungos sobre gesso e papel de parede

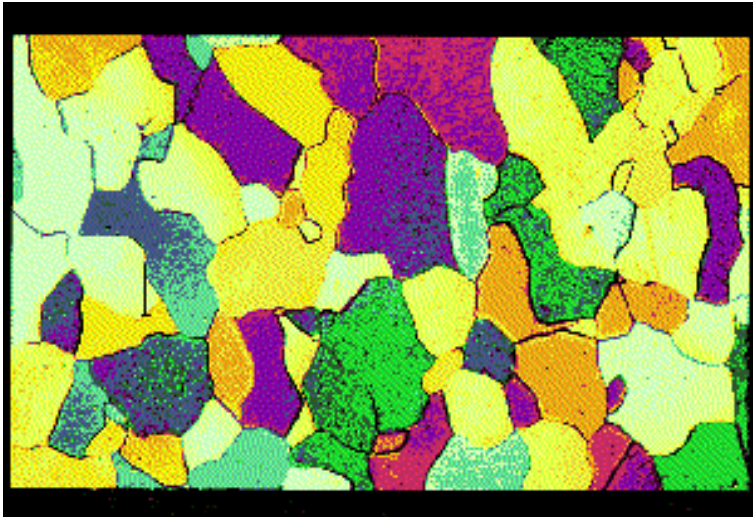


Diferentes tipos de imagem

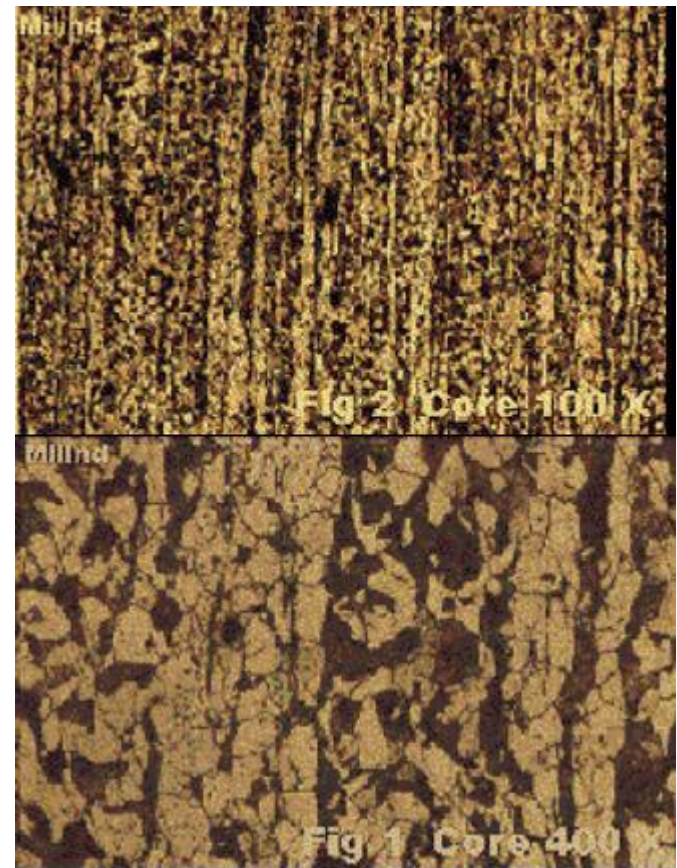
Elétrons secundários
relevo
morfologia

Elétrons retroespalhados
fases c/diferentes
nº atômico médio
quantitativos

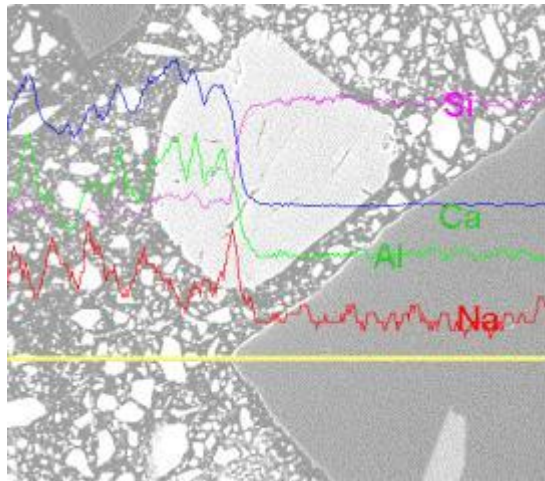
Microscopia ótica de um metal



Ataque químico na interface

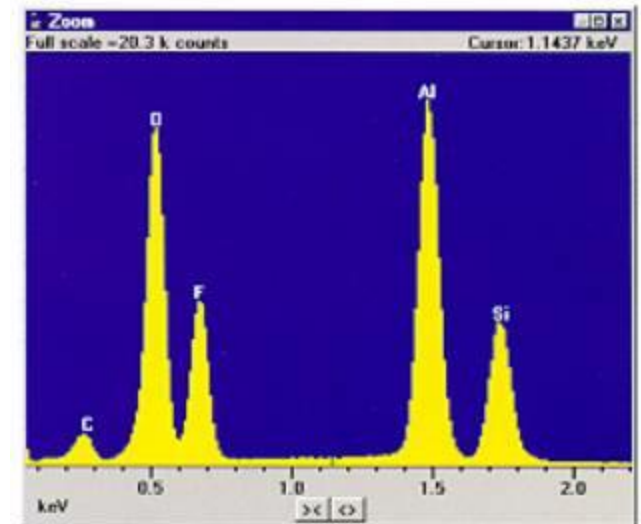


Determinação da composição química



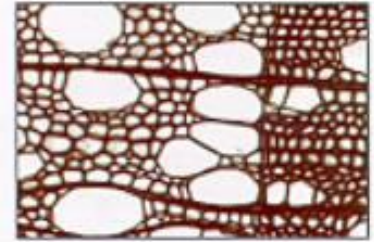
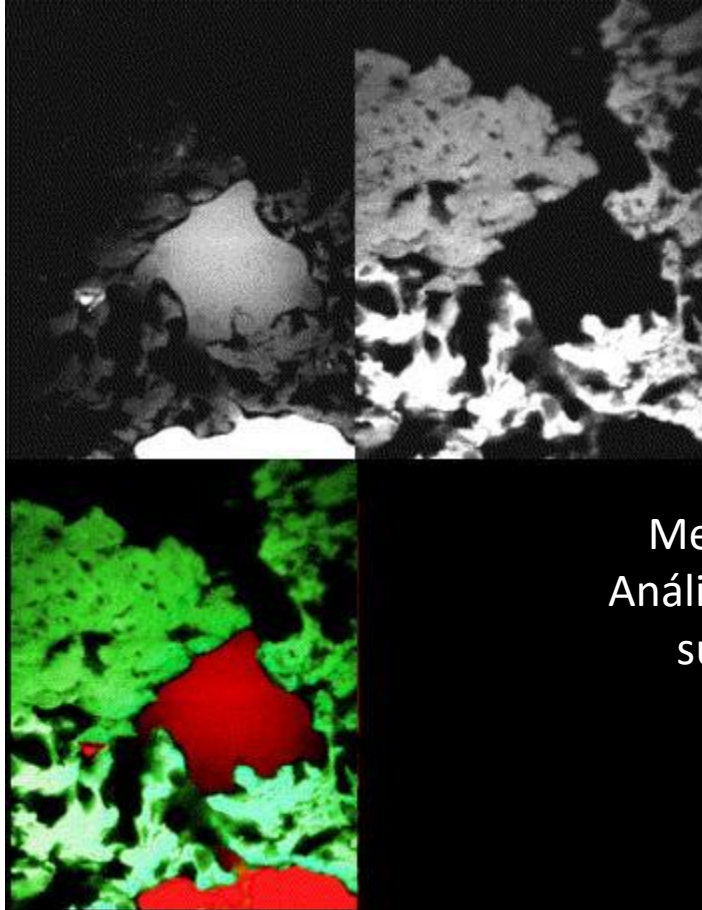
Concentração sobre a linha amarela

Si Ca Al Na

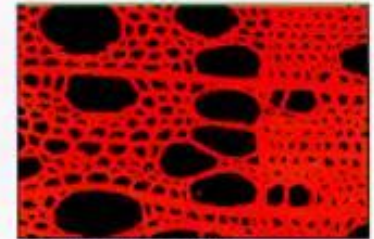


Raios X de um ponto
EDS

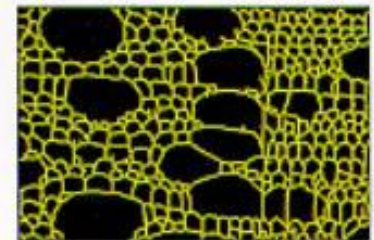
Análise de imagem



Tree stem cross-section.



Detection of pore walls.



Skeleton of wall network.

