

Estudo dos materiais e ligações químicas

PCC5726

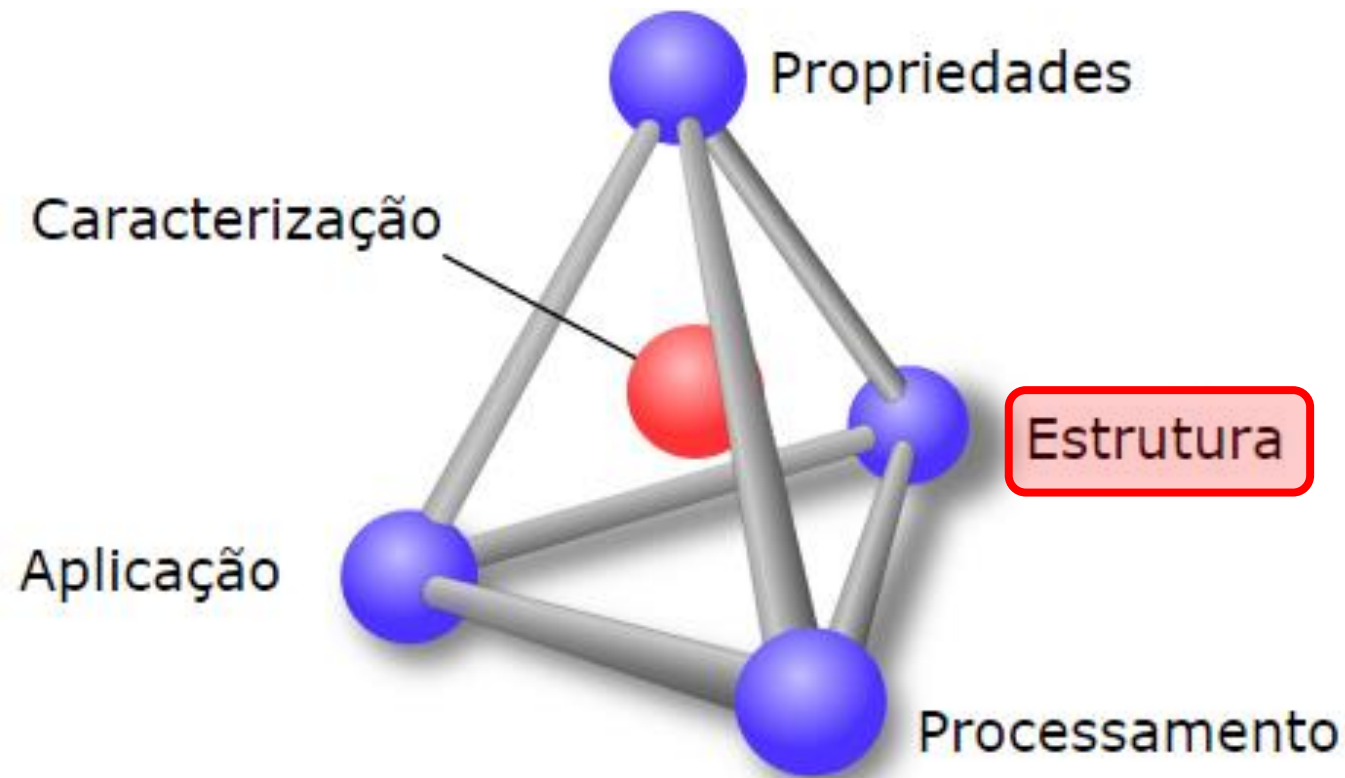
Estrutura dos materiais

- 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.

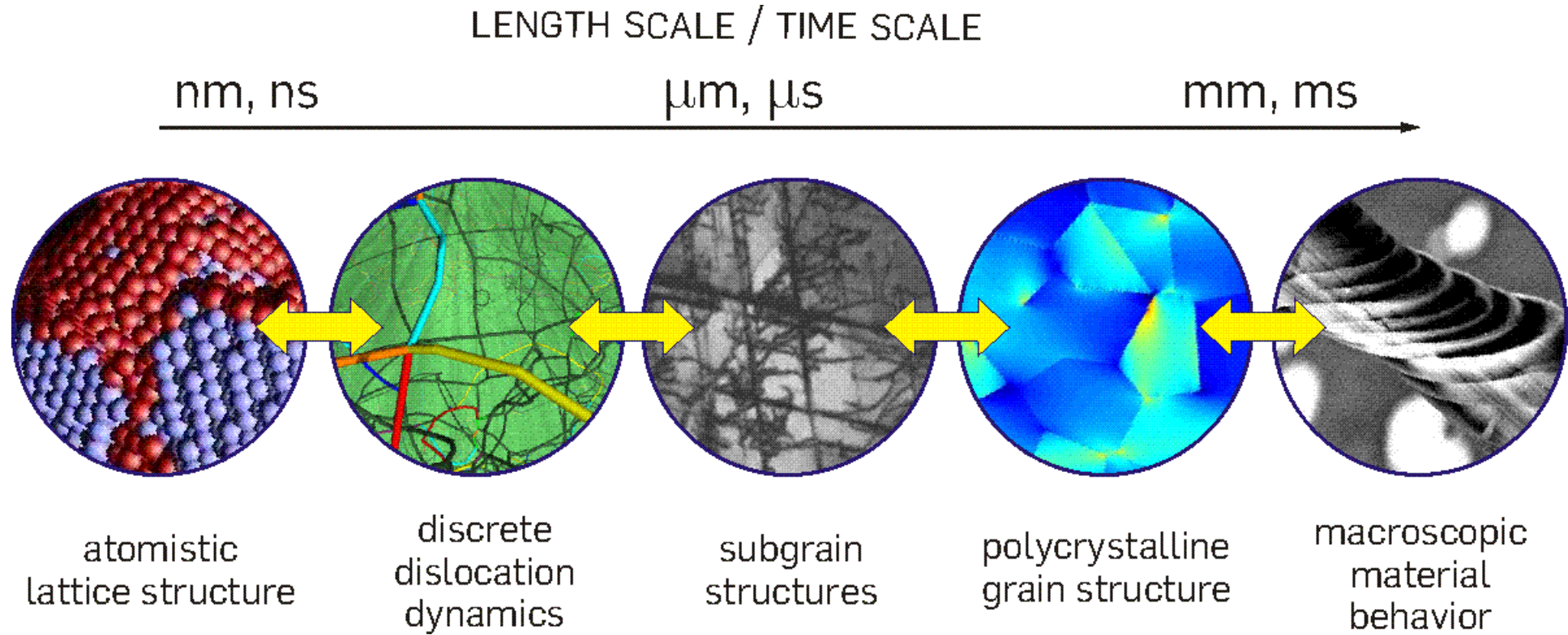
Princípio básico

**O comportamento do
material depende da
microestrutura**

O Tetraedro das Ciências dos Materiais

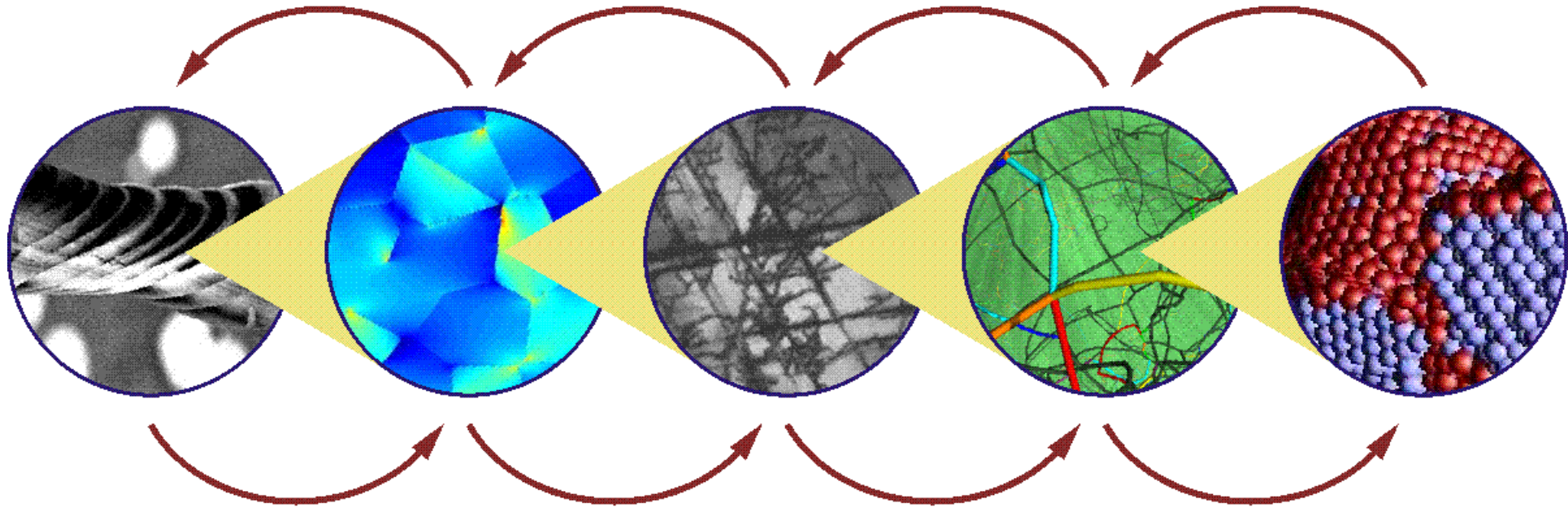


Multi-escala



Multi-escala

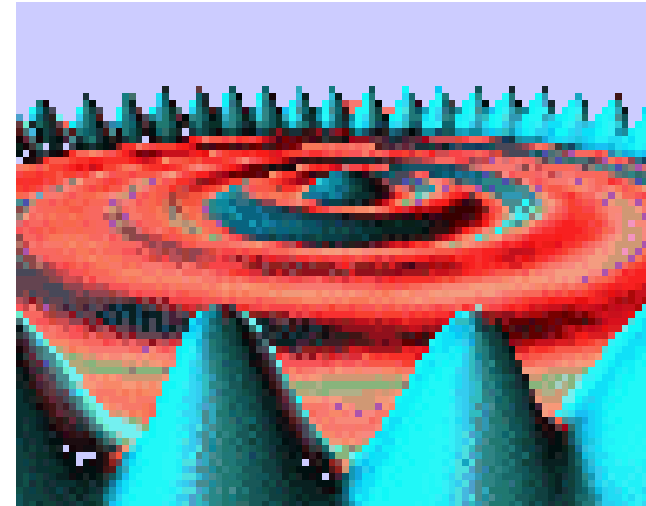
Modeling and Simulation of Material Behavior across the Scales



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



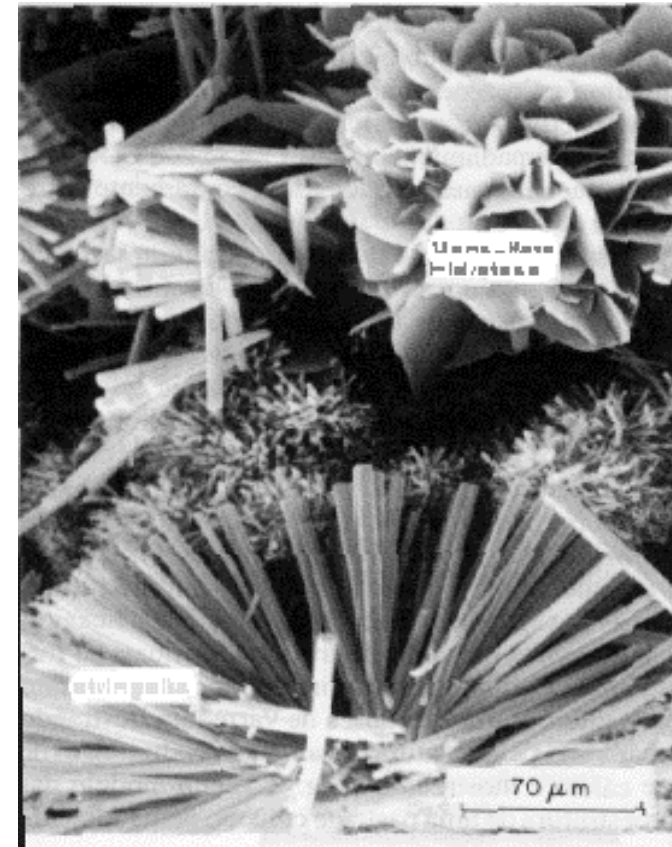
Níveis de estudo dos materiais

- **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

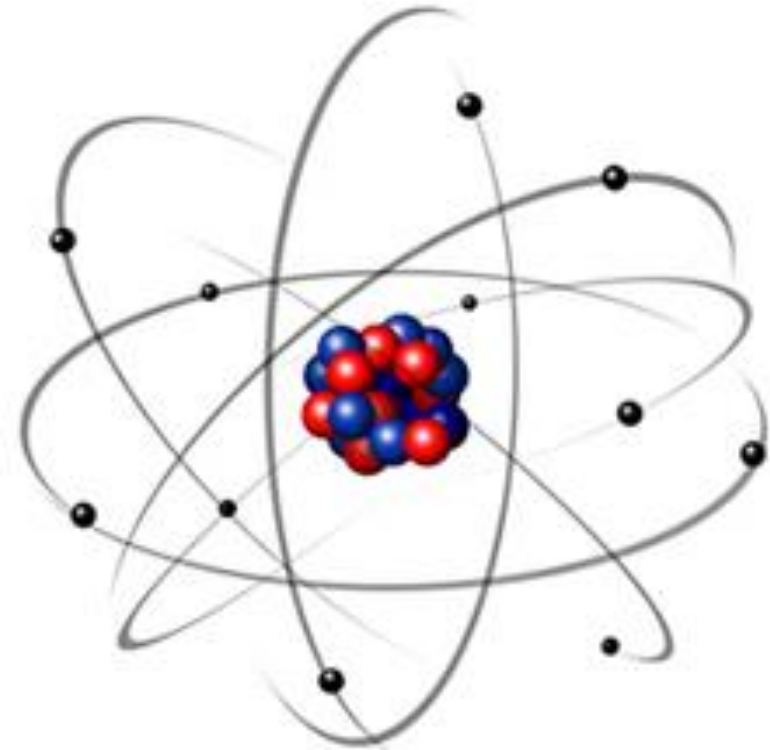
- Cerâmicos
 - Cimento, cal, cerâmica vermelha e branca e vidros.
- Polímeros
 - Plásticos, borrachas, betumes, celulose, etc.
- Metais
 - Ferro, aço, alumínio, cobre, zinco e suas ligas
- Compósitos
 - Madeira, materiais reforçados com fibras, aglomerados.

LIGAÇÕES ATÔMICAS

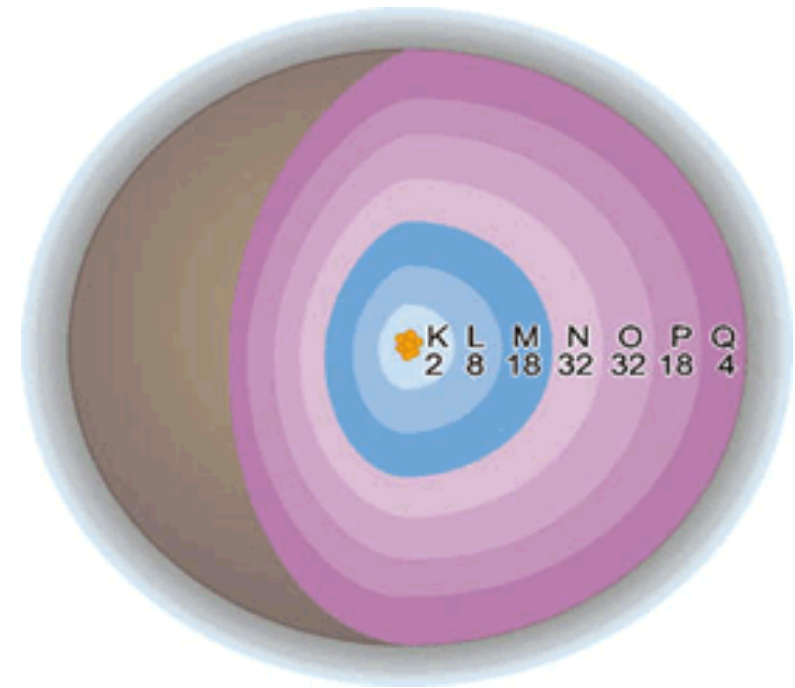
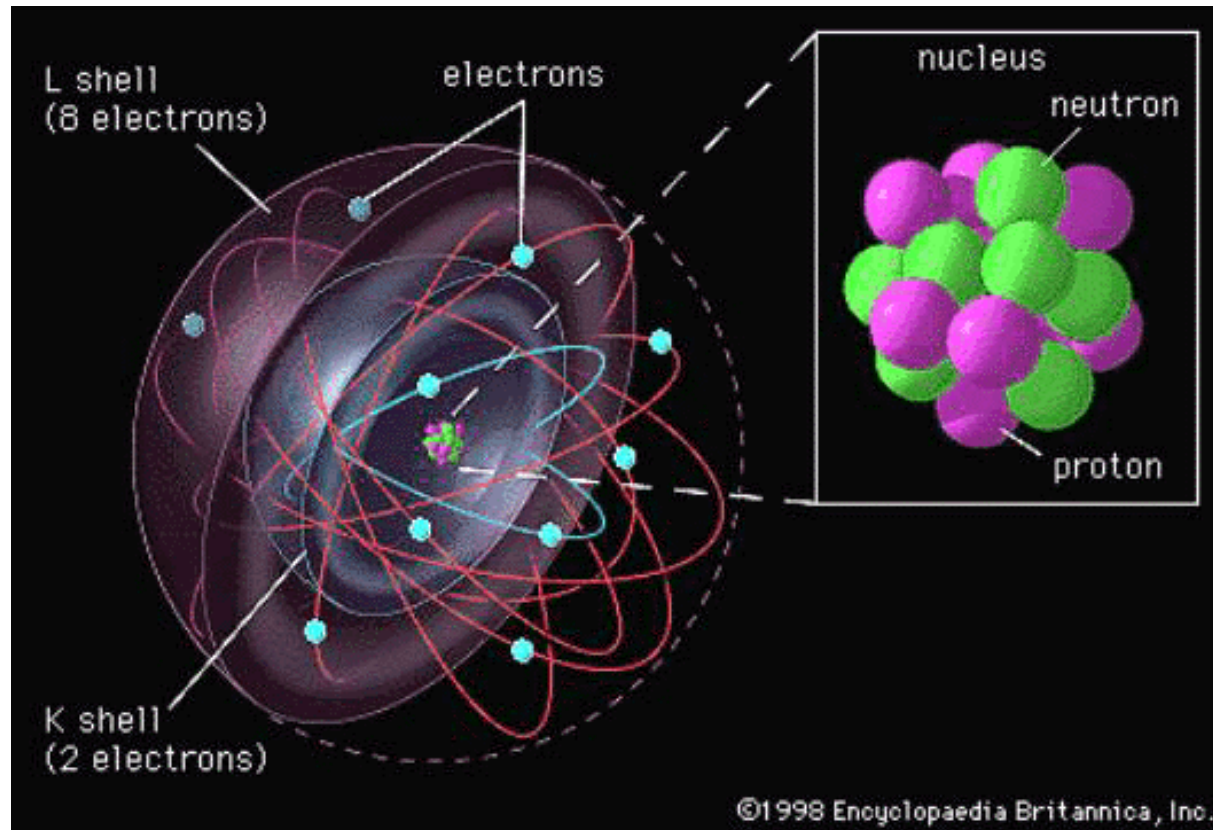
noções básicas

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:

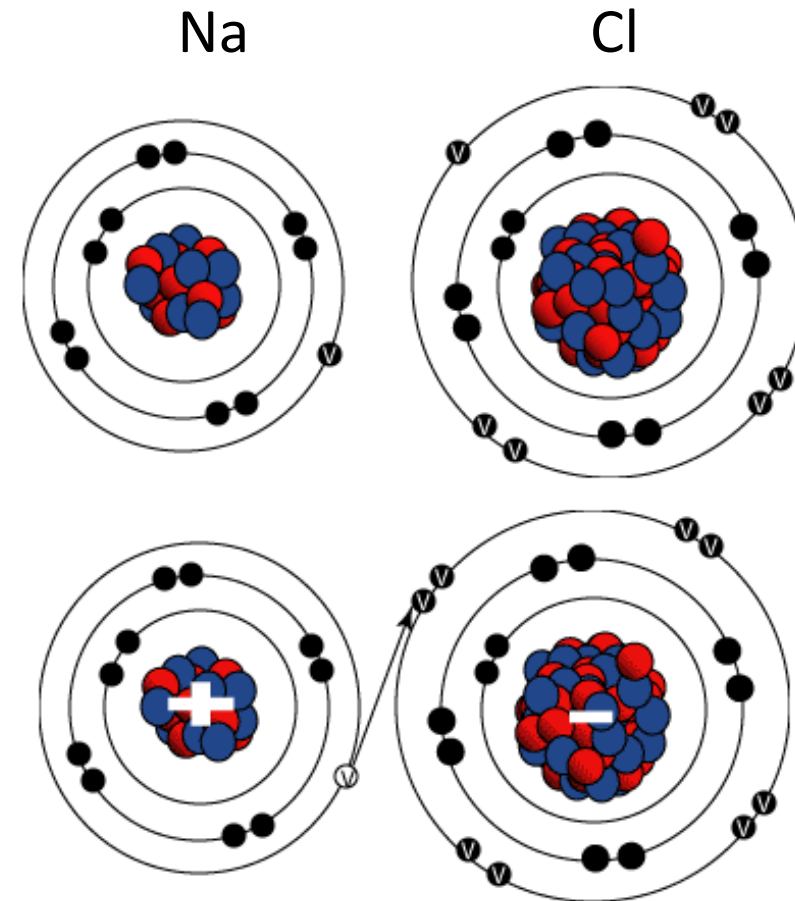
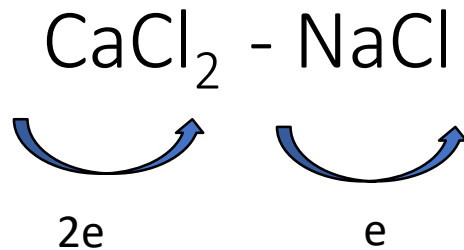
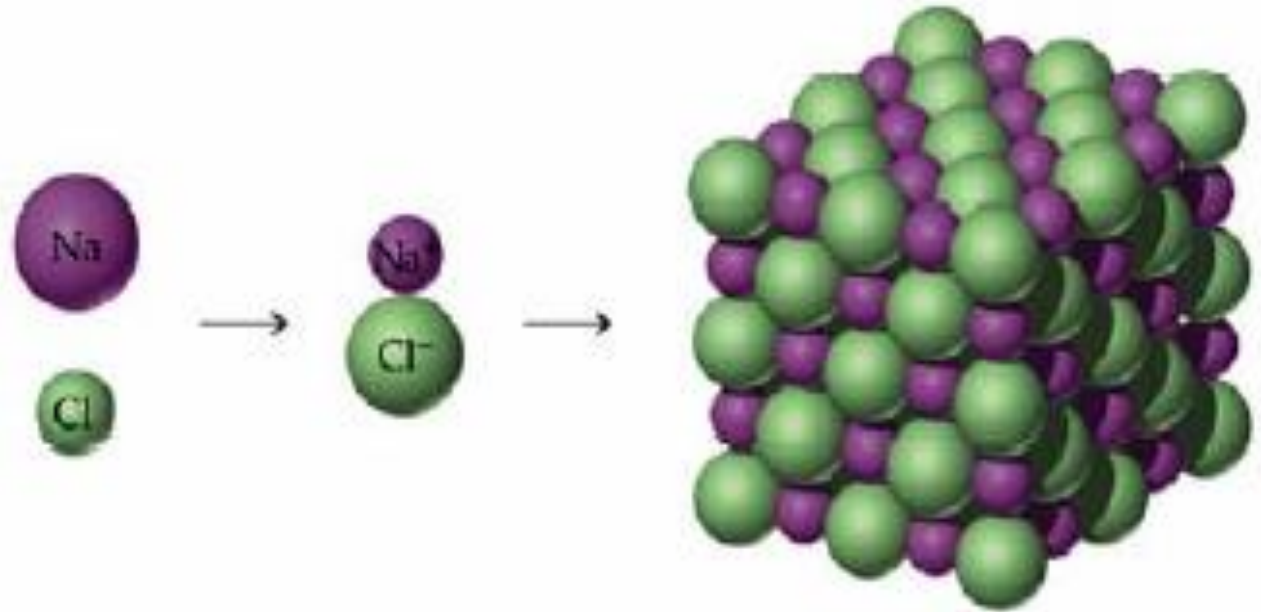


Tabela periódica

	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... -10,023	Mg Magnésio 24,305 -10,023																
4	K Potássio 39,0983 -10,023	Ca Cálcio 40,078 -10,023	Sc Escândio 44,955912 -10,023	Ti Titânio 47,867 -10,023	V Vanádio 50,9415 -11,023	Cr Cromo 51,9961 -10,023	Mn Manganês 54,938045 -10,023	Fe Ferro 55,845 -10,023	Co Cobalto 58,933195 -10,023	Ni Níquel 58,6934 -10,023	Cu Cobre 63,546 -10,023	Zn Zinco 65,38 -10,023	Ga Gálio 69,723 -10,023	Ge Germanício 72,63 -10,023	As Arsênio 74,9216 -10,023	Se Selênio 78,96 -10,023	Br Bromo 79,904 -10,023	Kr Criptônio 83,798 -10,023
5	Rb Rubídio 85,4678 -10,023	Sr Estrôncio 87,62 -10,023	Y Ítrio 88,90585 -10,023	Zr Zircônio 91,224 -10,023	Nb Nióbio 92,90638 -10,023	Mo Molibdênio 95,96 -10,023	Tc Tecnécio (98) -10,023	Ru Rutênio 101,07 -10,023	Rh Ródio 102,9055 -10,023	Pd Paládio 106,42 -10,023	Ag Prata 107,8682 -10,023	Cd Cádmio 112,411 -10,023	In Índio 114,818 -10,023	Sn Estanho 118,71 -10,023	Sb Antimônio 121,76 -10,023	Te Telúrio 127,6 -10,023	I Iodo 126,90447 -10,023	Xe Xenônio 131,293 -10,023
6	Cs Césio 132,9054... -10,023	Ba Bário 137,327 -10,023	57–71 *	Hf Háfnio 178,49 -10,023	Ta Tântalo 180,94788 -10,023	W Tungstênio 183,84 -10,023	Re Rênio 186,207 -10,023	Os Osmio 190,23 -10,023	Ir Íridio 192,217 -10,023	Pt Platina 195,084 -10,023	Au Ouro 196,966569 -10,023	Hg Mercúrio 200,59 -10,023	Tl Tálio 204,3833 -10,023	Pb Chumbo 207,2 -10,023	Bi Bismuto 208,9804 -10,023	Po Polônio (209) -10,023	At Astato (210) -10,023	Rn Radônio (222) -10,023
7	Fr Frâncio (223) -10,023	Ra Rádío (226) -10,023	89–103 **	Rf Rutherfordio (267) -10,023	Db Dubnio (268) -10,023	Sg Seabörgio (271) -10,023	Bh Bório (272) -10,023	Hs Hásio (270) -10,023	Mt Meitnério (278) -10,023	Ds Darmstádio (281) -10,023	Rg Roentgênio (280) -10,023	Cn Copernício (285) -10,023	Uut Ununtrio (284) -10,023	Uuq Ununquádrão (289) -10,023	Uup Ununpentio (288) -10,023	Uuh Ununhéxio (293) -10,023	Uus Ununséptio (294) -10,023	Uuo Ununoctio (294) -10,023
			*	La Lantânio 138,90547 -10,023	Ce Cério 140,116 -10,023	Pr Praseodímio 140,90765 -10,023	Nd Neodímio 144,242 -10,023	Pm Promécio (145) -10,023	Sm Samário 150,36 -10,023	Eu Európio 151,964 -10,023	Gd Gadolínio 157,25 -10,023	Tb Térbio 158,92535 -10,023	Dy Disprósio 162,5 -10,023	Ho Hólmio 164,93032 -10,023	Er Érbio 167,259 -10,023	Tm Túlio 168,93421 -10,023	Yb Íterbio 173,054 -10,023	Lu Lutécio 174,9688 -10,023
		**		Ac Actínio (227) -10,023	Th Tório 232,03806 -10,023	Pa Protactínio 231,03688 -10,023	U Urânio 238,02891 -10,023	Np Neptúnio (237) -10,023	Pu Plutônio (244) -10,023	Am Americônio (243) -10,023	Cm Cúrio (247) -10,023	Bk Berquélio (247) -10,023	Cf Califórnia (251) -10,023	Es Einstênio (252) -10,023	Fm Férmio (257) -10,023	Md Mendelévio (258) -10,023	No Nobelônio (259) -10,023	Lr Laurêncio (262) -10,023

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

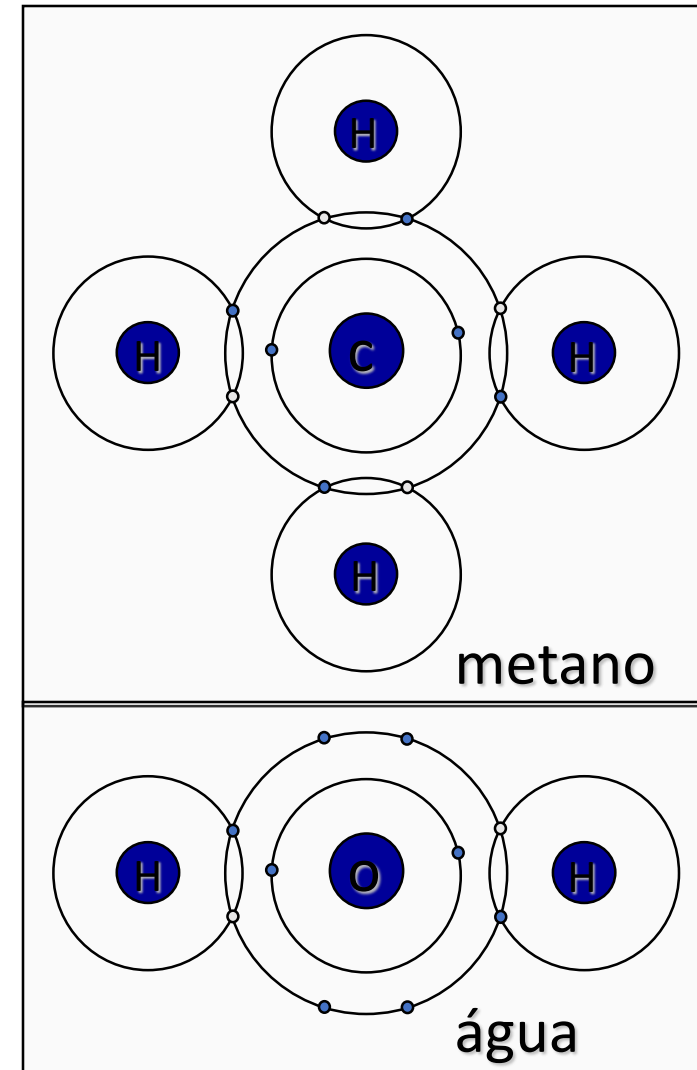
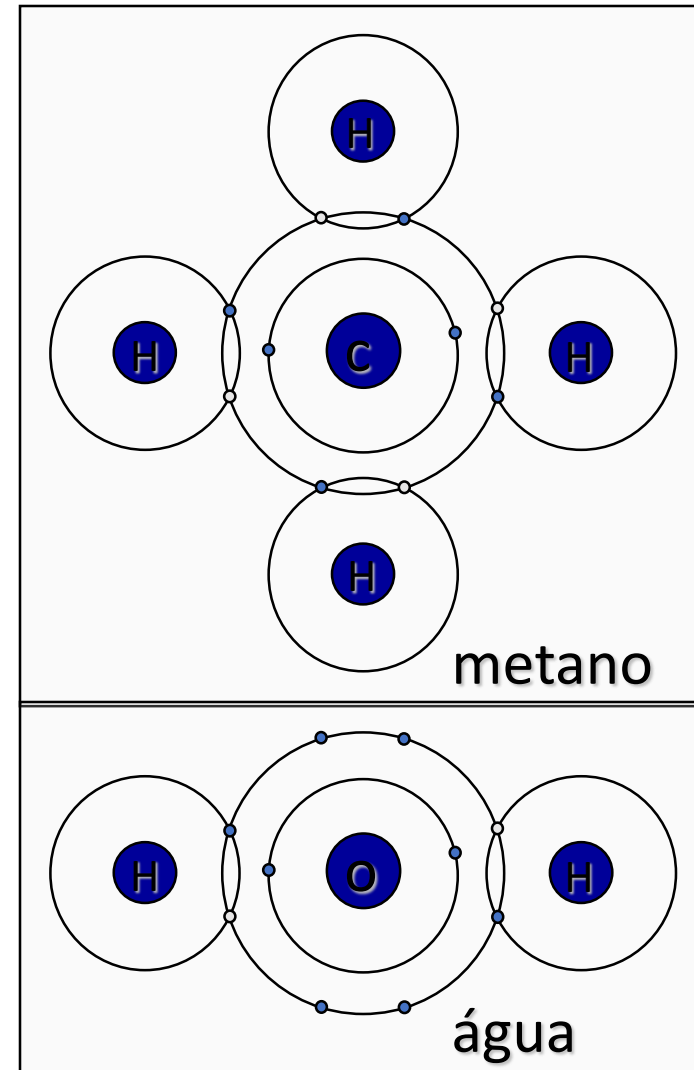


Tabela periódica

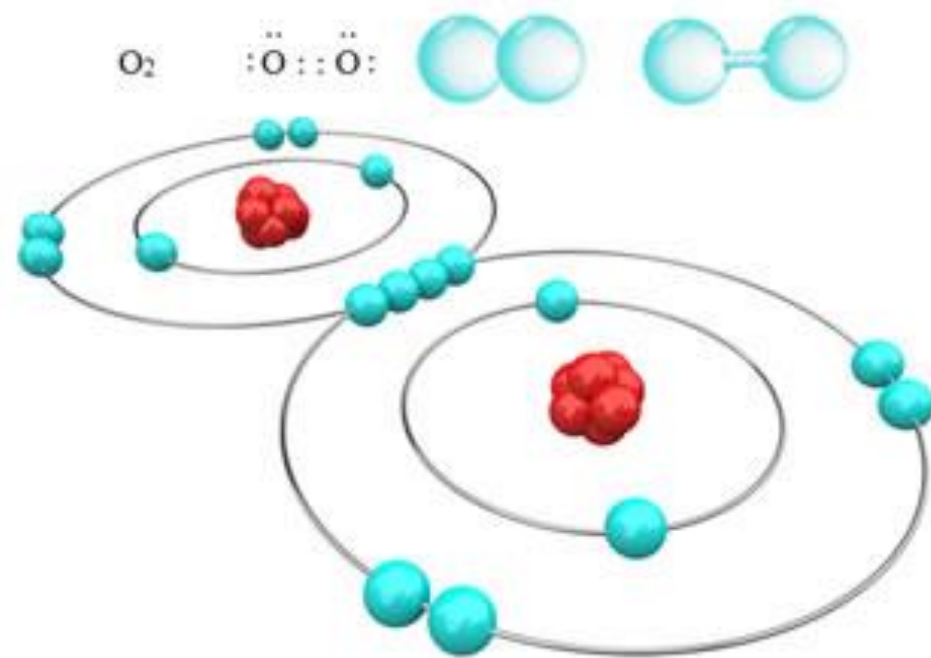
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	1A																	8A
1	H Hidrogênio 1,00784																	He Hélio 4,002602
2	Li Lítio 6,941	Be Berílio 9,012182																
3	Na Sódio 22,98976... -10,002	Mg Magnésio 24,305 -10,002																
4	K Potássio 39,0983 -10,002	Ca Cálcio 40,078 -10,002	Sc Escândio 44,955912 -10,002	Ti Titânio 47,867 -11,002	V Vanádio 50,9415 -11,002	Cr Cromo 51,9961 -10,002	Mn Manganês 54,938045 -10,002	Fe Ferro 55,845 -10,002	Co Cobalto 58,933195 -10,002	Ni Níquel 58,6934 -10,002	Cu Cobre 63,546 -10,002	Zn Zinco 65,38 -10,002	Ga Gálio 69,723 -10,002	Ge Germanício 72,63 -10,002	As Arsênio 74,9216 -10,002	Se Selênio 78,96 -10,002	Br Bromo 79,904 -10,002	Kr Criptônio 83,798 -10,002
5	Rb Rubídio 85,4678 -10,002	Sr Estrôncio 87,62 -10,002	Y Ítrio 88,90585 -10,002	Zr Zircônio 91,224 -10,002	Nb Nióbio 92,90638 -10,002	Mo Molibdênio 95,96 -10,002	Tc Tecnécio (98) -10,002	Ru Rutênio 101,07 -10,002	Rh Ródio 102,9055 -10,002	Pd Paládio 106,42 -10,002	Ag Prata 107,8682 -10,002	Cd Cádmio 112,411 -10,002	In Índio 114,818 -10,002	Sn Estanho 118,71 -10,002	Sb Antimônio 121,76 -10,002	Te Telúrio 127,6 -10,002	I Iodo 126,90447 -10,002	Xe Xenônio 131,293 -10,002
6	Cs Césio 132,9054... -10,002	Ba Bário 137,327 -10,002	57–71 *	Hf Háfnio 178,49 -10,002	Ta Tântalo 180,94788 -10,002	W Tungstênio 183,84 -10,002	Re Rênio 186,207 -10,002	Os Osmio 190,23 -10,002	Ir Íridio 192,217 -10,002	Pt Platina 195,084 -10,002	Au Ouro 196,966569 -10,002	Hg Mercúrio 200,59 -10,002	Tl Talho 204,3833 -10,002	Pb Chumbo 207,2 -10,002	Bi Bismuto 208,9804 -10,002	Po Polônio (209) -10,002	At Astato (210) -10,002	Rn Radônio (222) -10,002
7	Fr Frâncio (223) -10,002	Ra Rádío (226) -10,002	89–103 **	Rf Rutherfordio (267) -10,002	Db Dubnio (268) -10,002	Sg Seabörgio (271) -10,002	Bh Bório (272) -10,002	Hs Hásio (270) -10,002	Mt Meitnério (278) -10,002	Ds Darmstádio (281) -10,002	Rg Roentgênio (280) -10,002	Cn Copernício (285) -10,002	Uut Ununtrio (284) -10,002	Uuq Ununquádro (289) -10,002	Uup Ununpentio (288) -10,002	Uuh Ununhéxio (293) -10,002	Uus Ununséptio (294) -10,002	Uuo Ununoctio (294) -10,002
			*	La Lantânio 138,90547 -10,002	Ce Cério 140,116 -10,002	Pr Praseodímio 140,90765 -10,002	Nd Neodímio 144,242 -10,002	Pm Promécio (145) -10,002	Sm Samário 150,36 -10,002	Eu Európio 151,964 -10,002	Gd Gadolínio 157,25 -10,002	Tb Térbio 158,92535 -10,002	Dy Disprósio 162,5 -10,002	Ho Hólmio 164,93032 -10,002	Er Érbio 167,259 -10,002	Tm Túlio 168,93421 -10,002	Yb Íterbio 173,054 -10,002	Lu Lutécio 174,9688 -10,002
		**		Ac Actínio (227) -10,002	Th Tório 232,03806 -10,002	Pa Protactínio 231,03688 -10,002	U Urânio 238,02891 -10,002	Np Neptúnio (237) -10,002	Pu Plutónio (244) -10,002	Am Americio (243) -10,002	Cm Cúrio (247) -10,002	Bk Berquélio (247) -10,002	Cf Califórnia (251) -10,002	Es Einstênio (252) -10,002	Fm Férmio (257) -10,002	Md Mendelévio (258) -10,002	No Nobelio (259) -10,002	Lr Laurêncio (262) -10,002

Ligação covalente

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

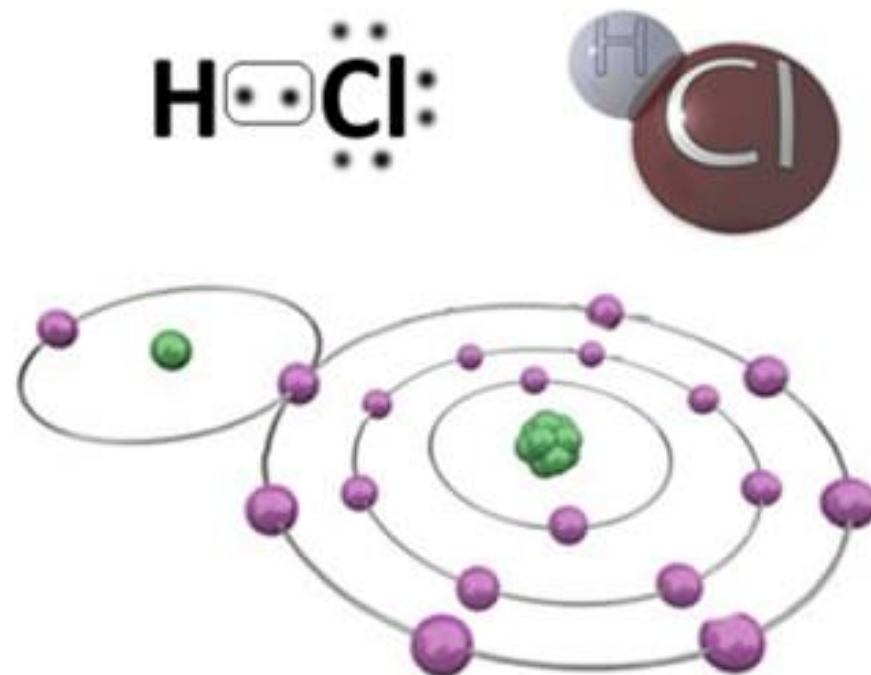


Ligação Covalente - Apolar



Molécula O_2

Ligação Covalente - Polar



Molécula HCl

Ligação Iônica x Covalente

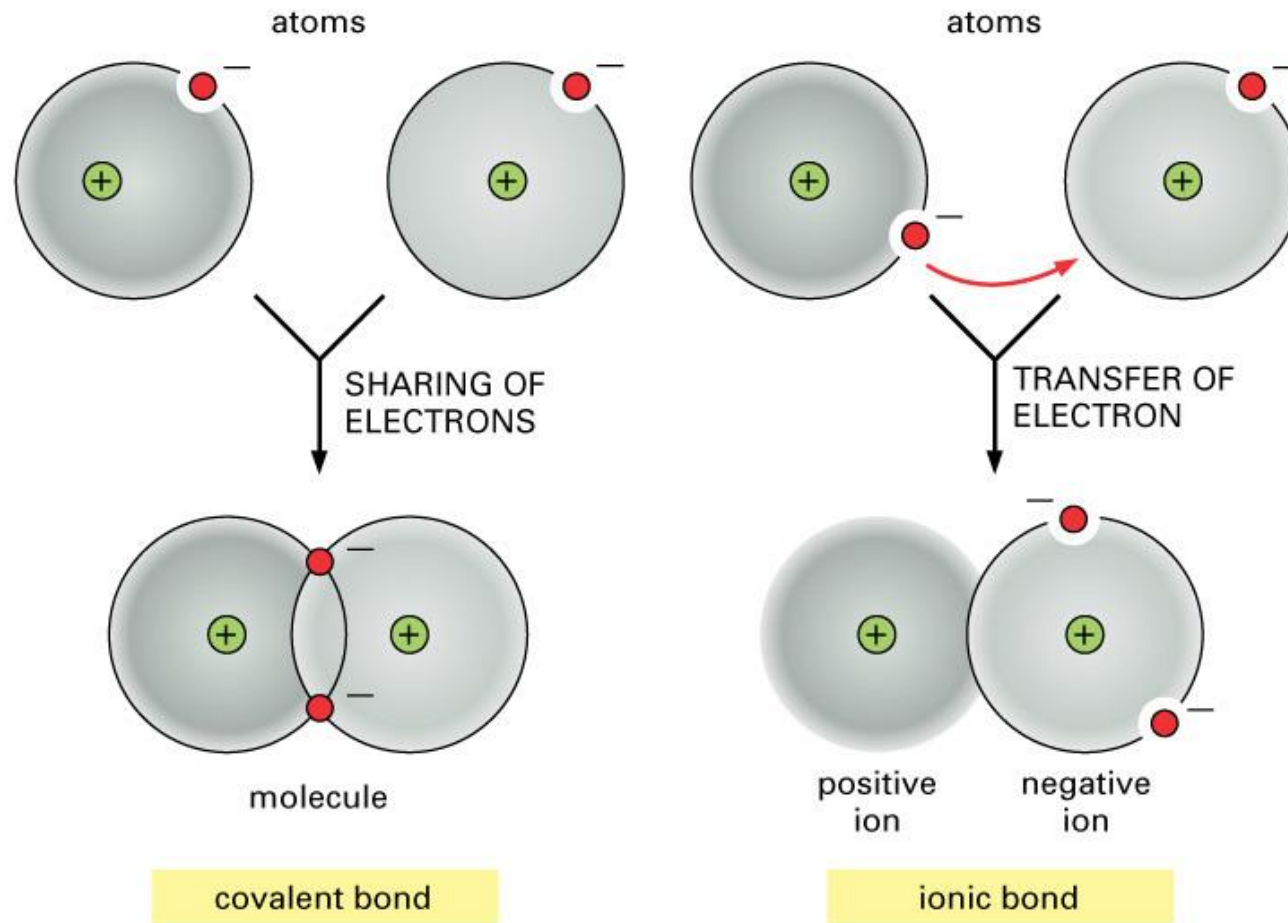
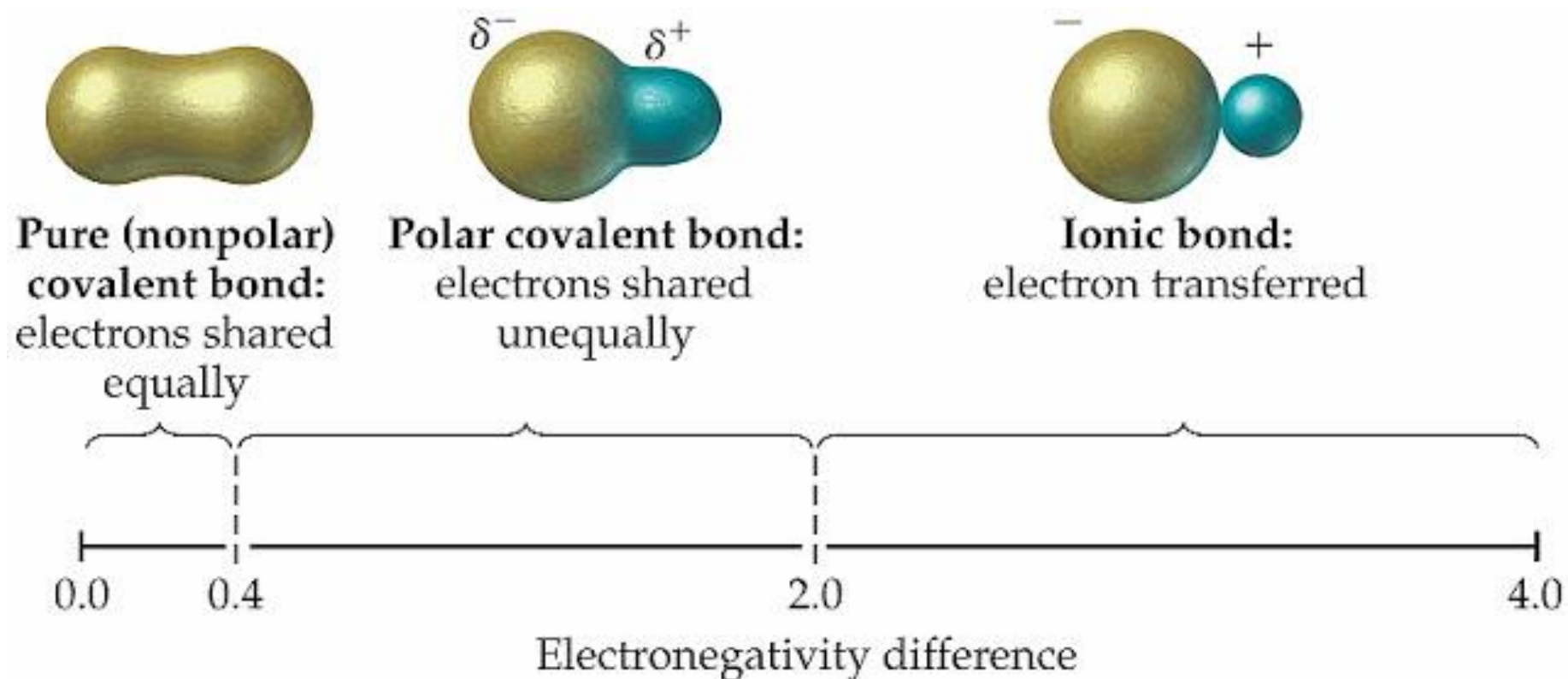


Figure 2.6 Essential Cell Biology, 2/e. (© 2004 Garland Science)

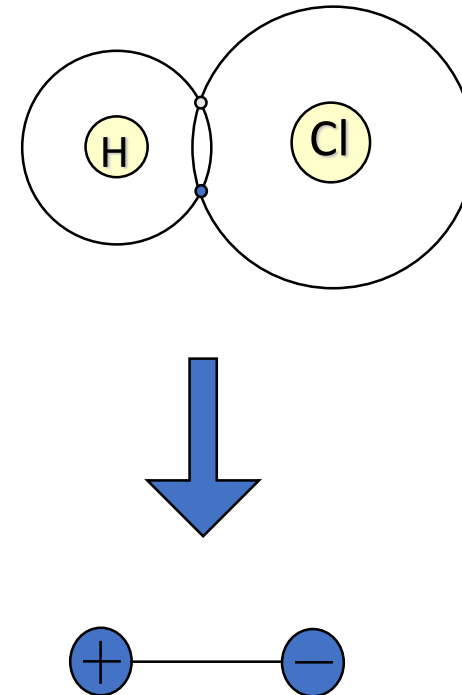
Ligação Iônica x Covalente



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

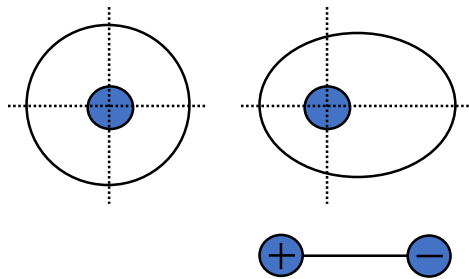
Forças de Van der Waals

- 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

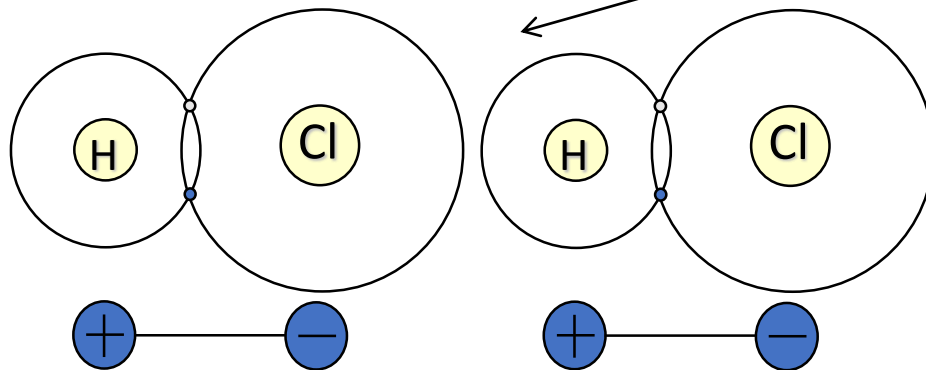
- Dipolo induzido



- Moléculas polarizadas por indução ou permanentes:

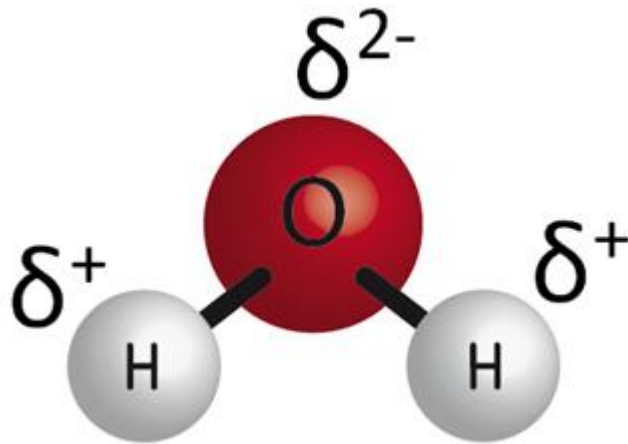
- Exemplo: Pontes de H
- (moléculas compostas por H – polo positivo)

- Moléculas polares



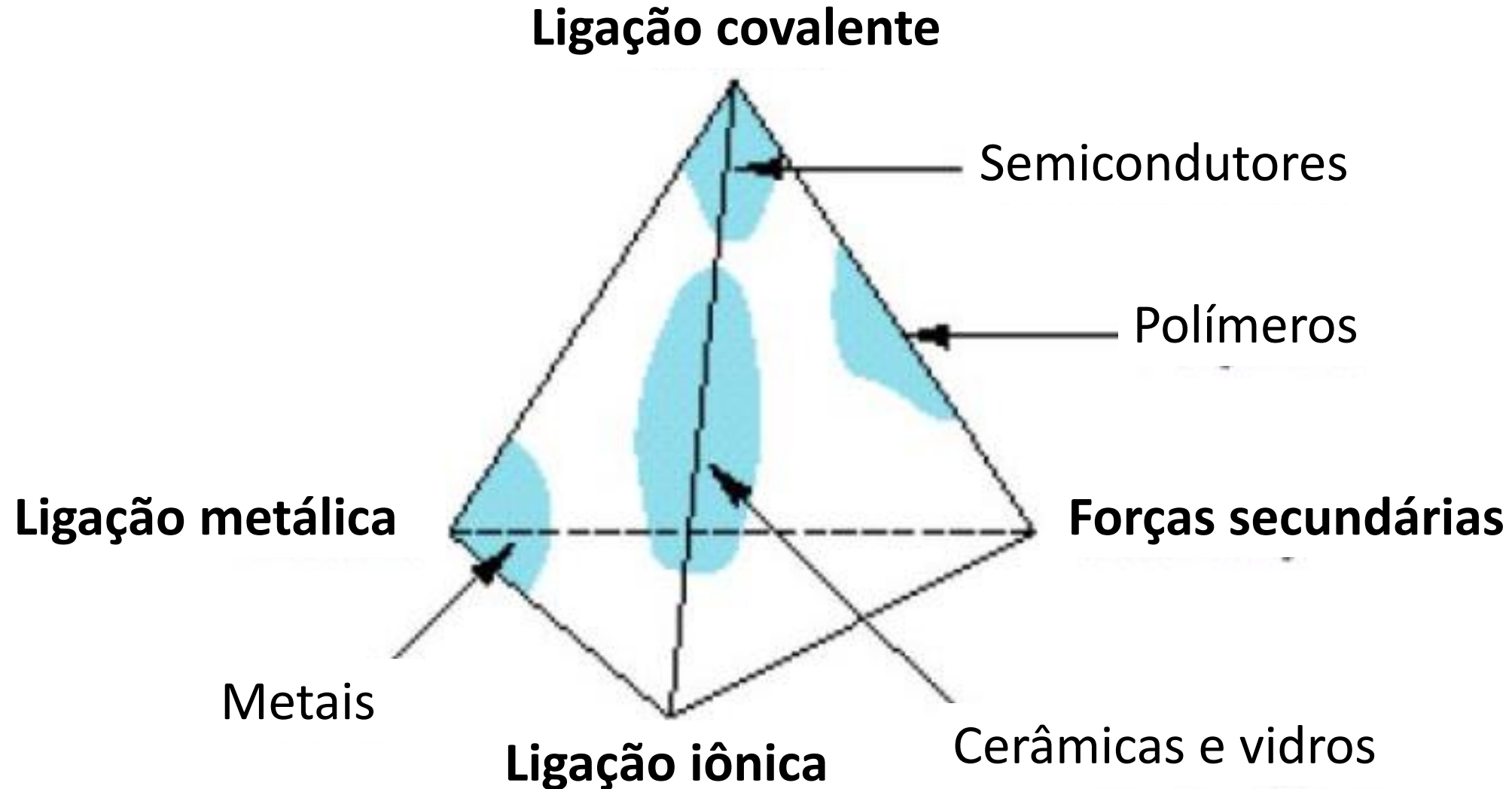
Moléculas polares: água

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

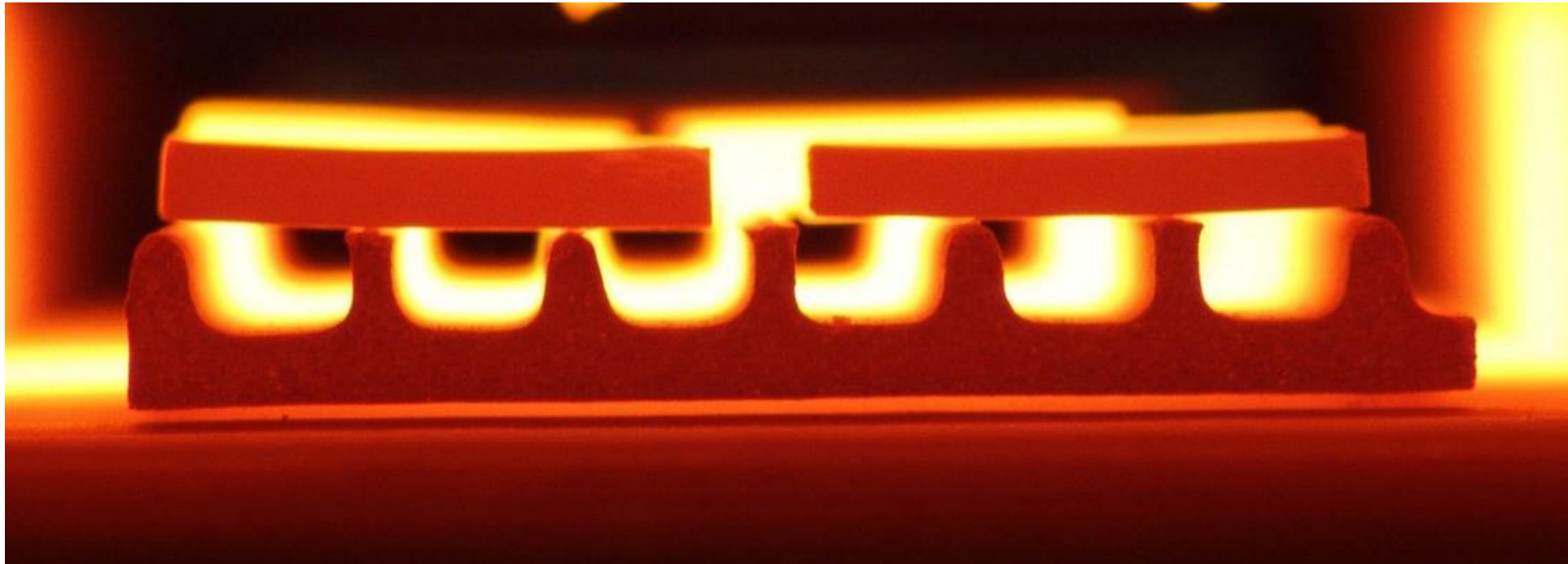


www.alunosonline.com.br/fisica/tensao-superficial.html

Ligações predominantes & Famílias de materiais



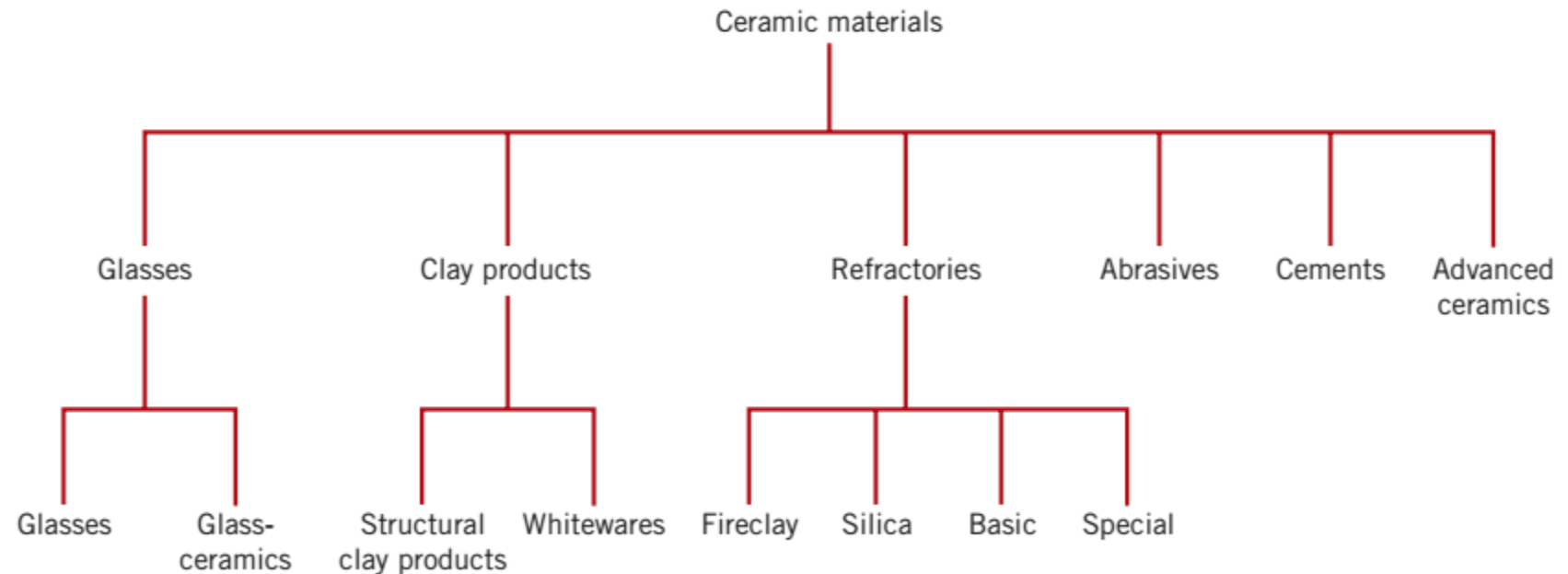
Materiais Cerâmicos



Definição e classes de materiais cerâmicos

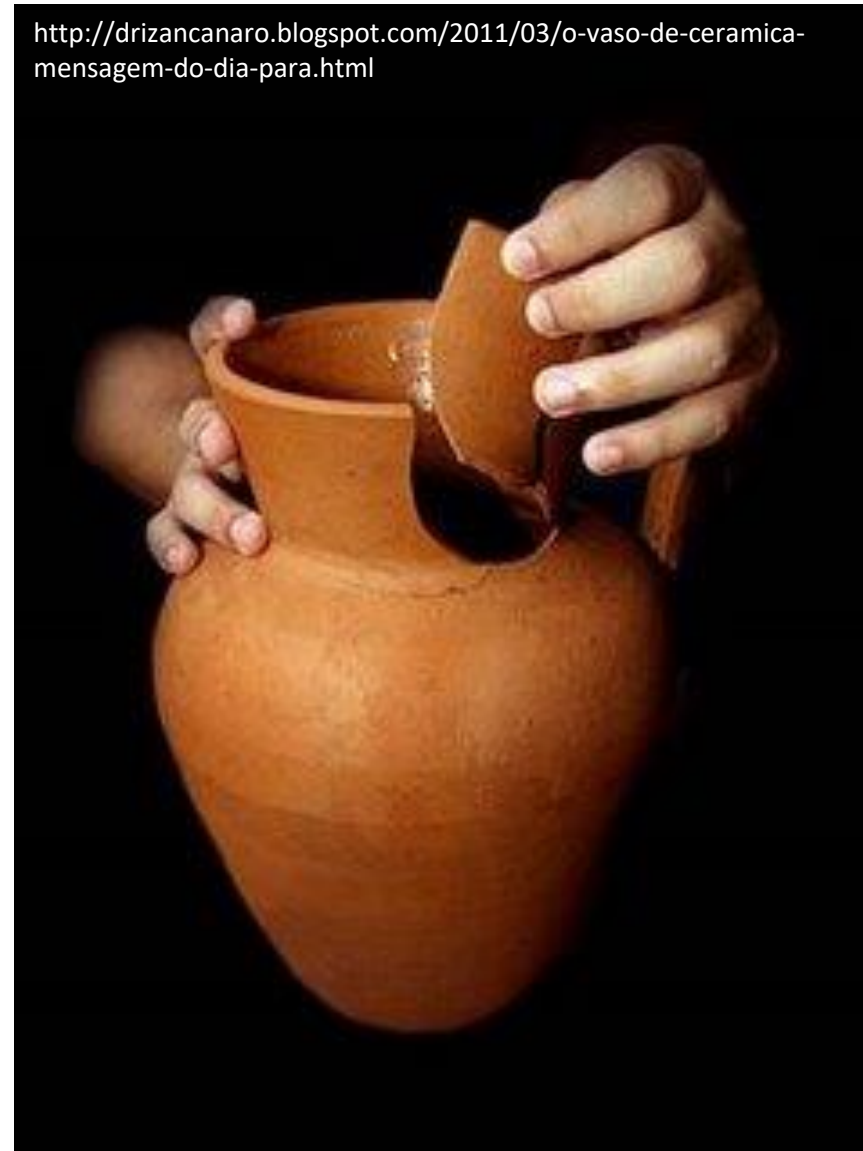
Grego: “KERAMOS” - COISA QUEIMADA

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



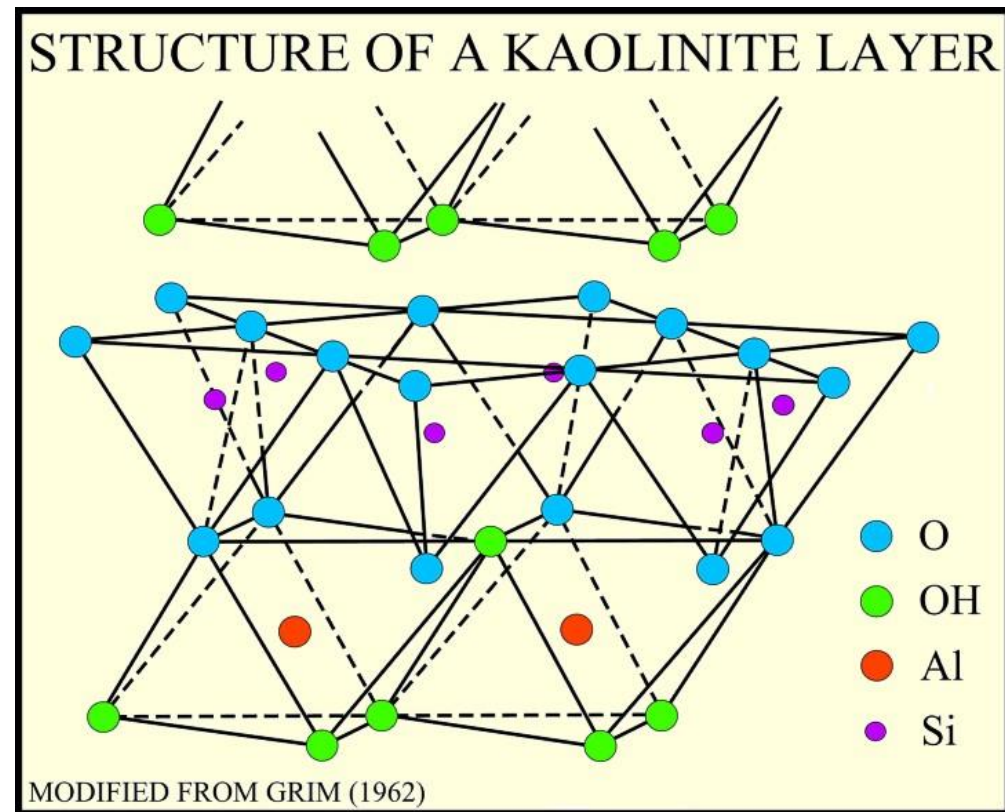
Comportamento básico das Cerâmicas

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

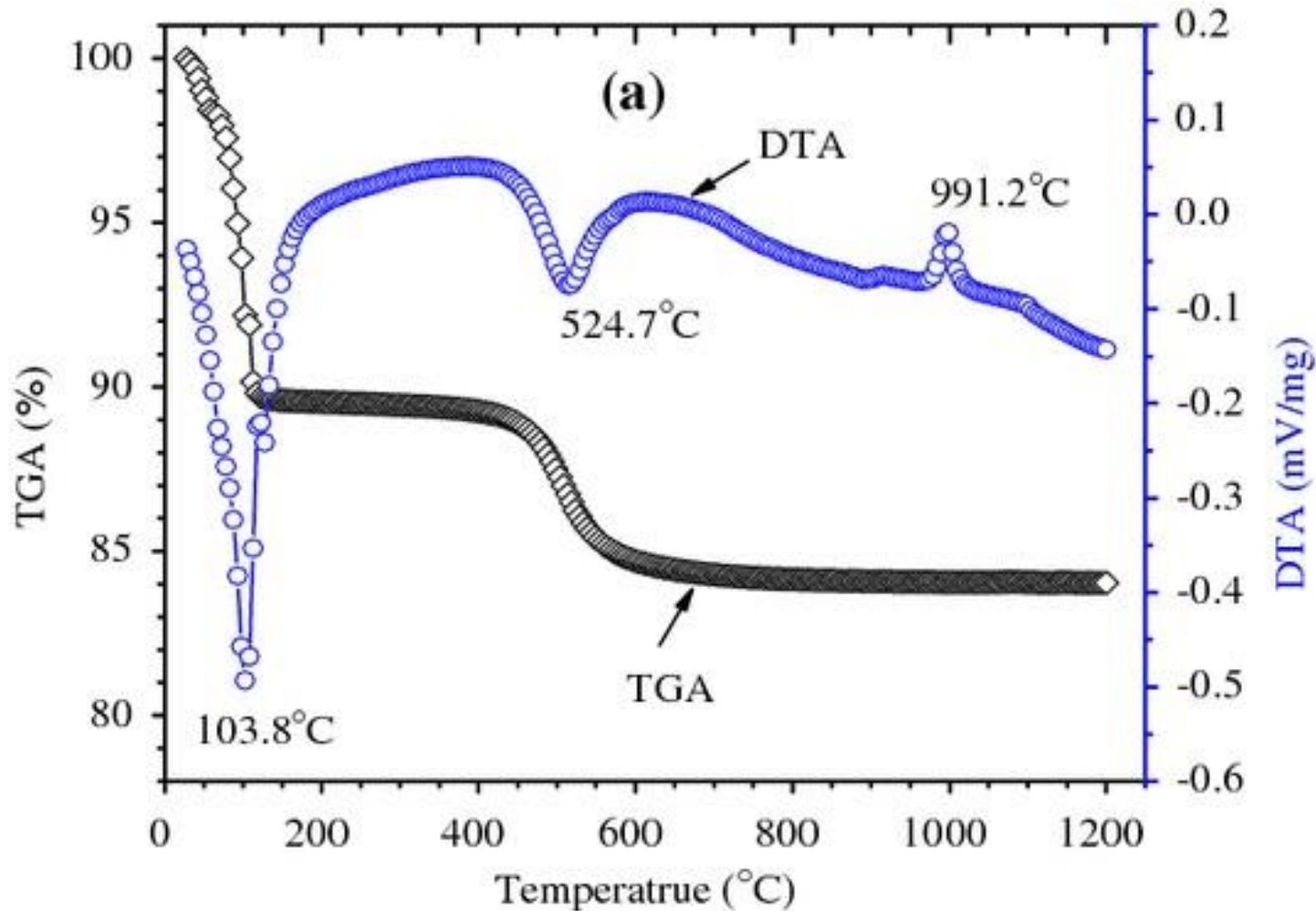


Constituintes principais das argilas

↳ 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

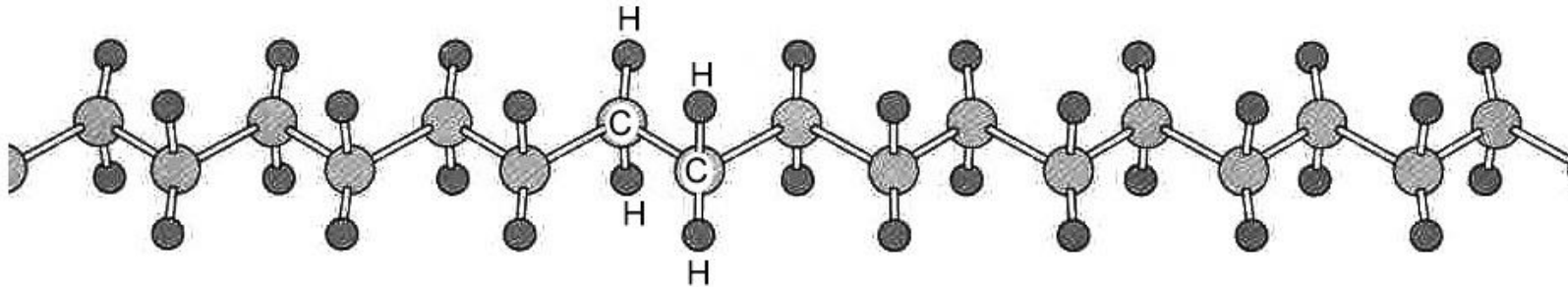
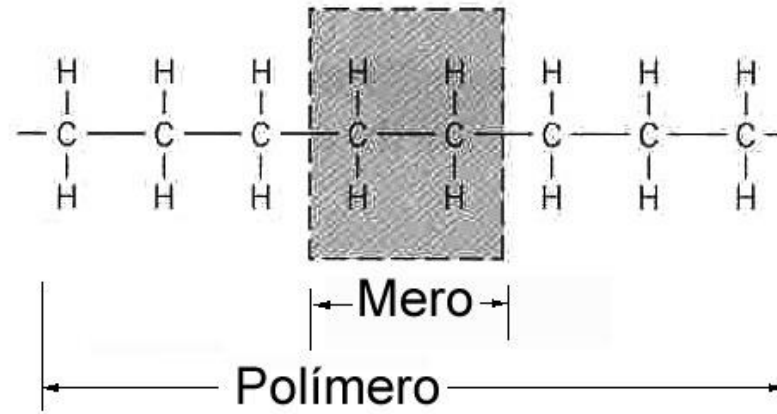
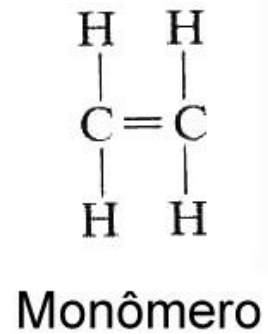
Materiais poliméricos



Principais tipos de plásticos usados
nos produtos e sistemas construtivos

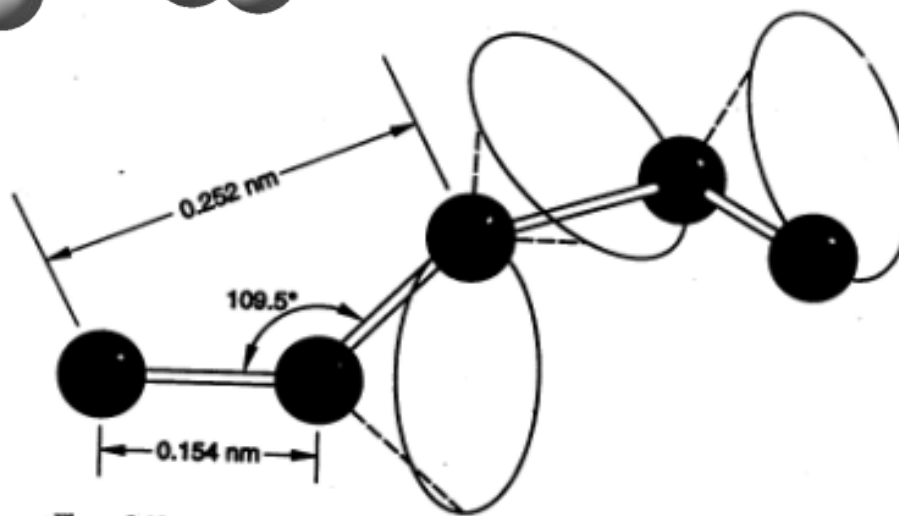
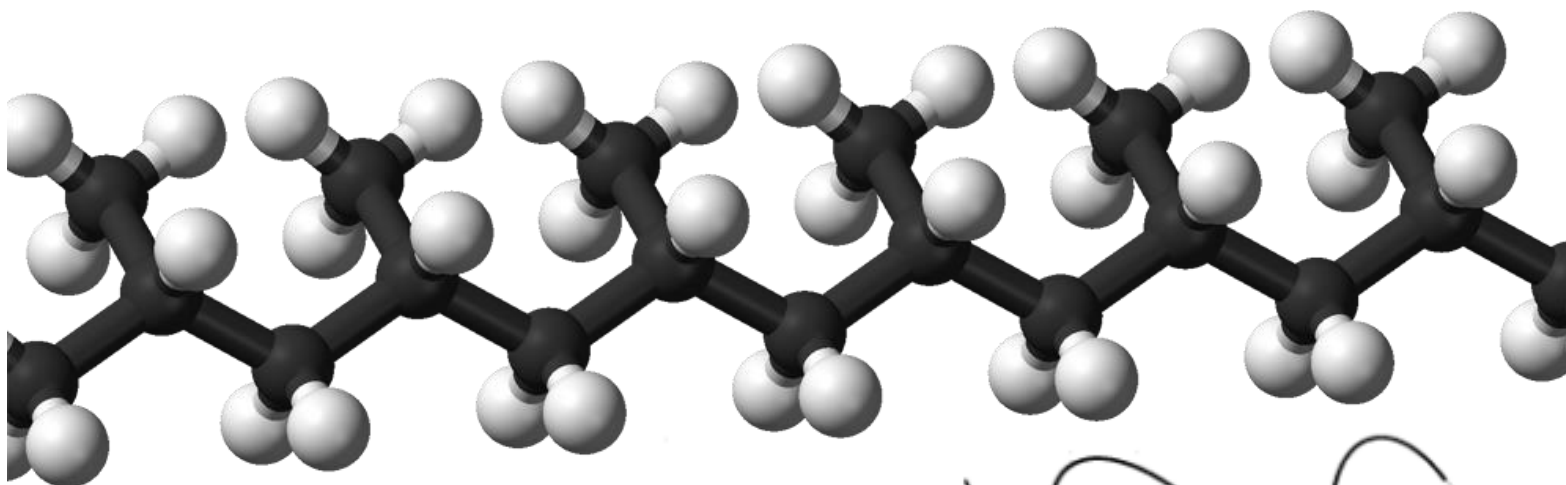
<http://cobec.com.br/principais-tipos-de-plasticos-usados-nos-produtos-e-sistemas-construtivos/>

Monômero, Mero e Polímero



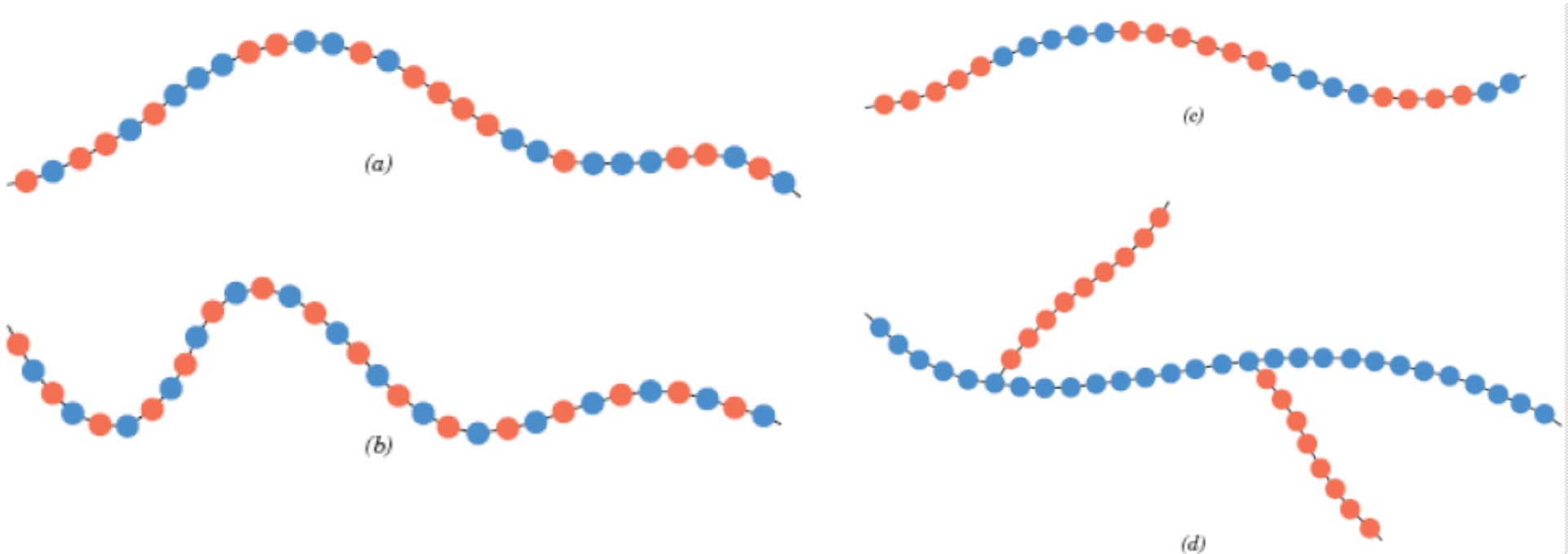
Molécula de polietileno

Ligação covalente é direcional: influencia comportamento dos polímeros



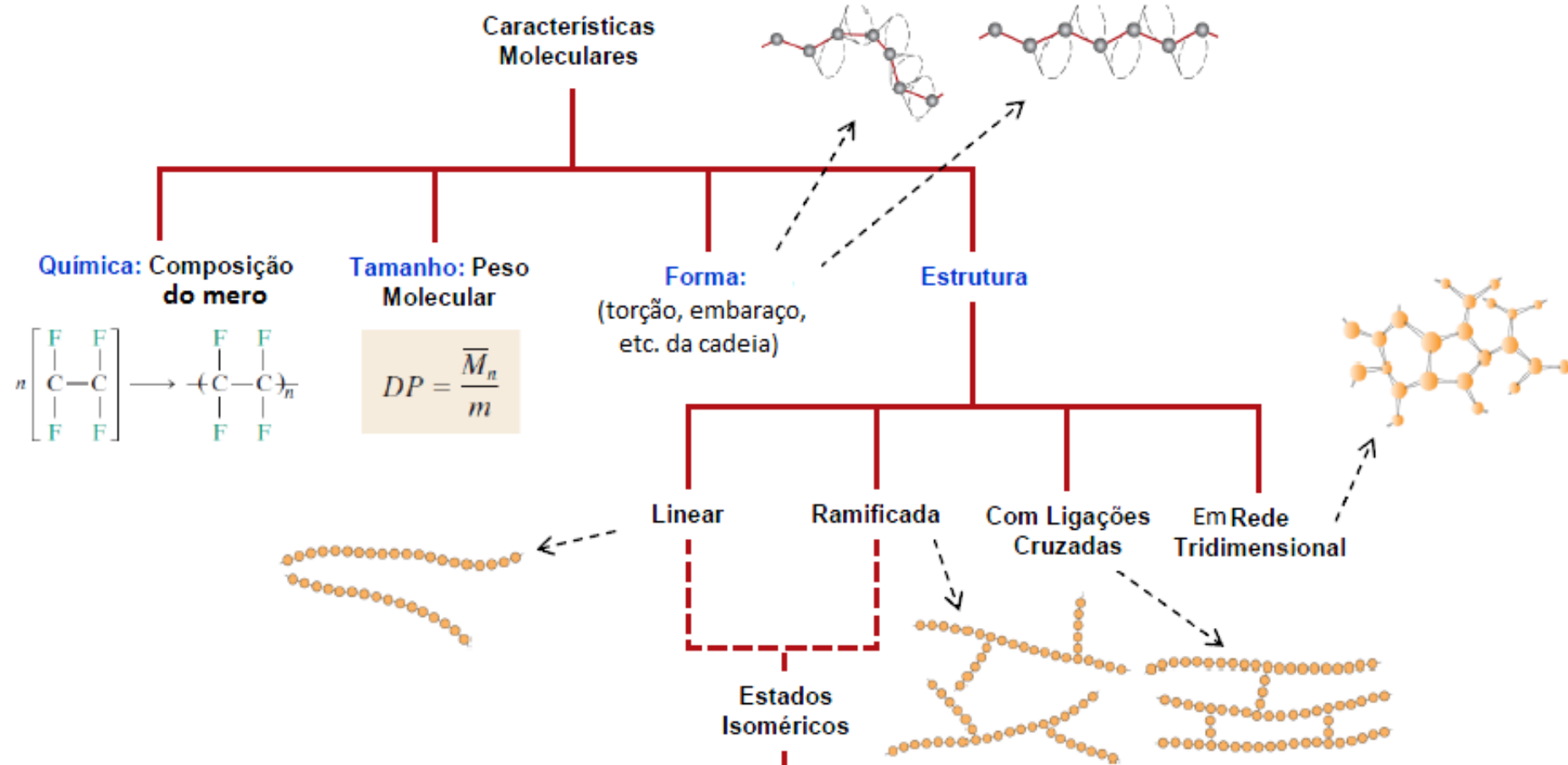
Copolímeros

- **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

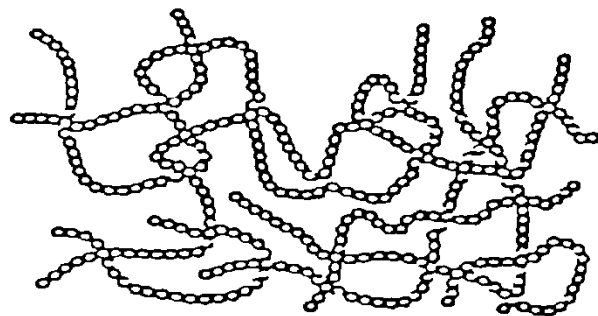
- Lineares ou ramificados.
- Podem ser conformados mecanicamente repetidas vezes, desde que reaquecidos (são facilmente *recicláveis*).
- Parcialmente cristalinos ou totalmente amorfos.

Termofixos

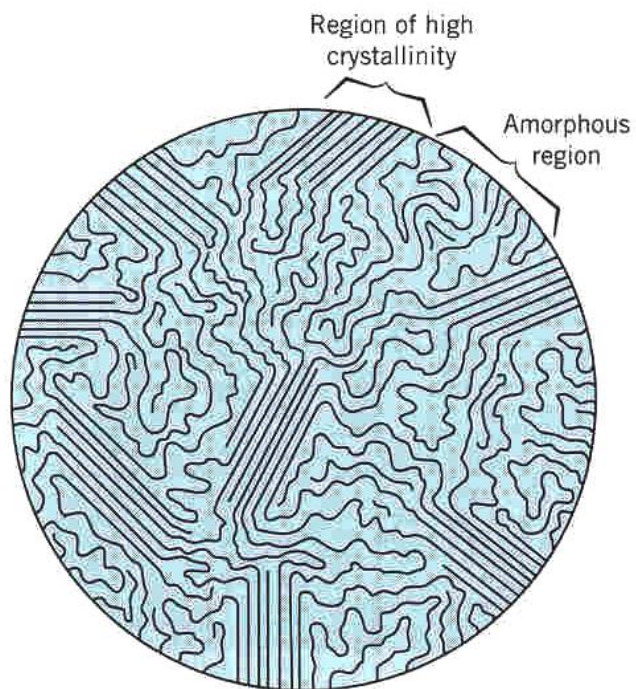
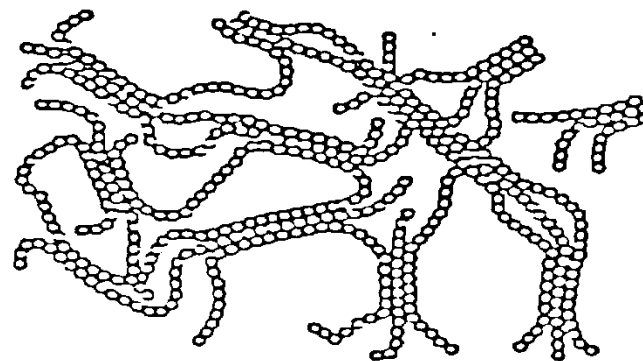
- Possuem uma estrutura tridimensional em rede com ligações cruzadas.
- Podem ser conformados plasticamente apenas em um estágio intermediário de sua fabricação.
- O produto final é duro e não amolece com o aumento da temperatura.
- Eles são insolúveis e infusíveis.
- Mais resistentes ao calor do que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

Microestrutura

100% Amorfo



Semi-cristalino



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

Termoplásticos x temperatura

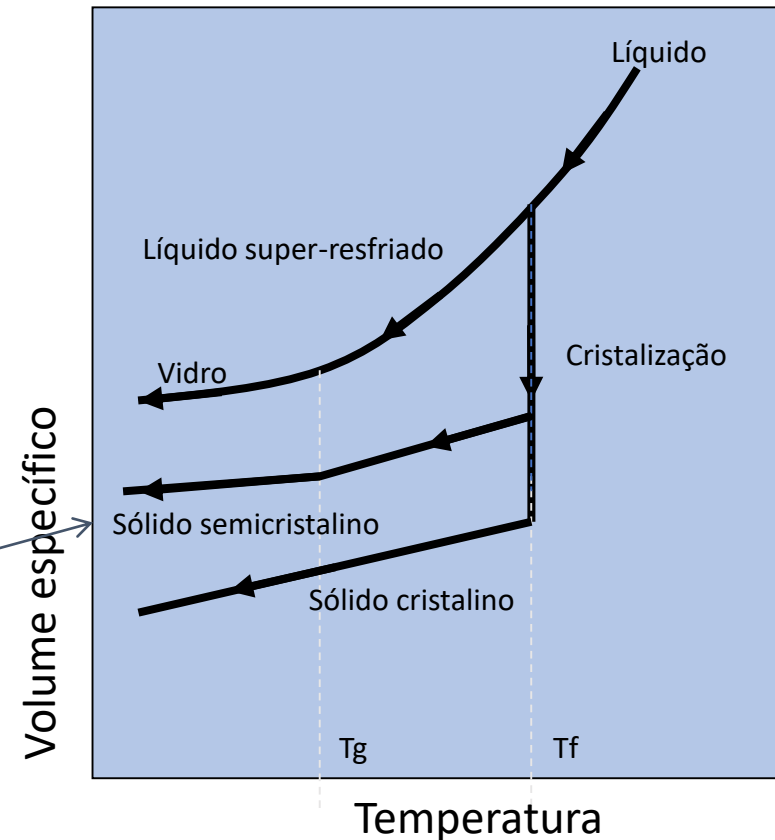
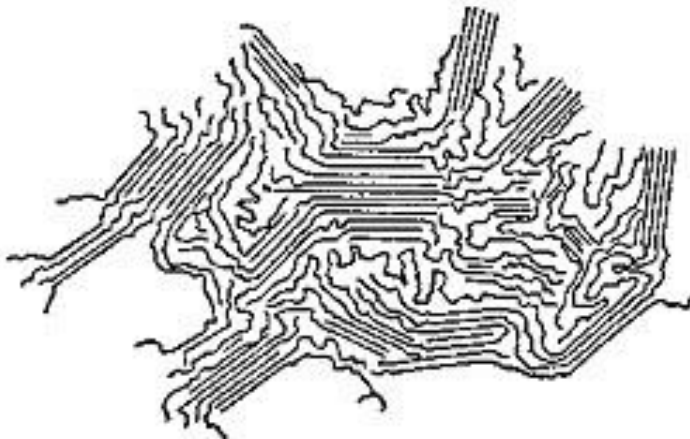
- Temperatura de transição vítrea (T_g)

Abaixo da T_g :

tornam-se frágeis

< deformação térmica

< deformação elasto-plástica



Quais características
dos polímeros que
contribuem para o
seu uso?

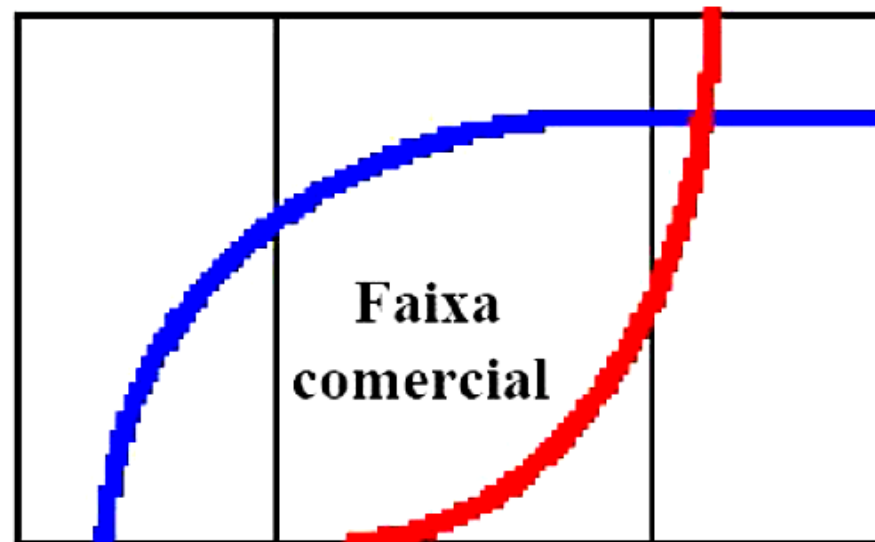
Resposta

- 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**



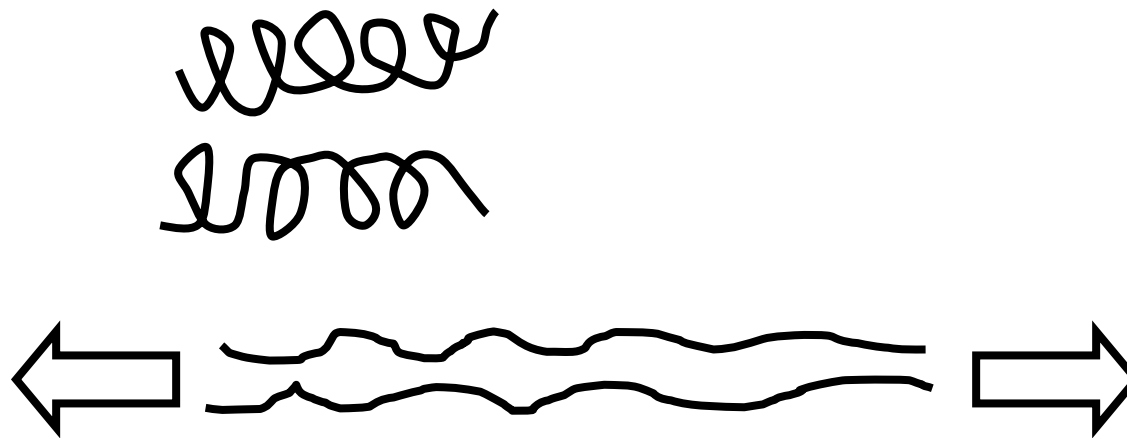
**Faixa
comercial**

**Viscosidade
de
Fluxo**

Grau de Polimerização

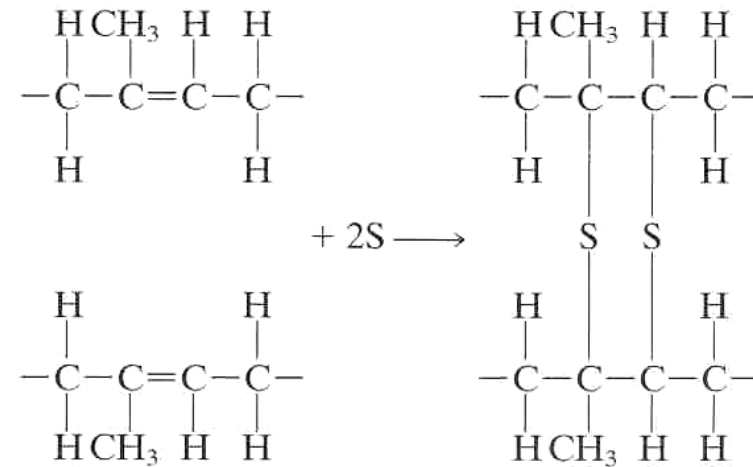
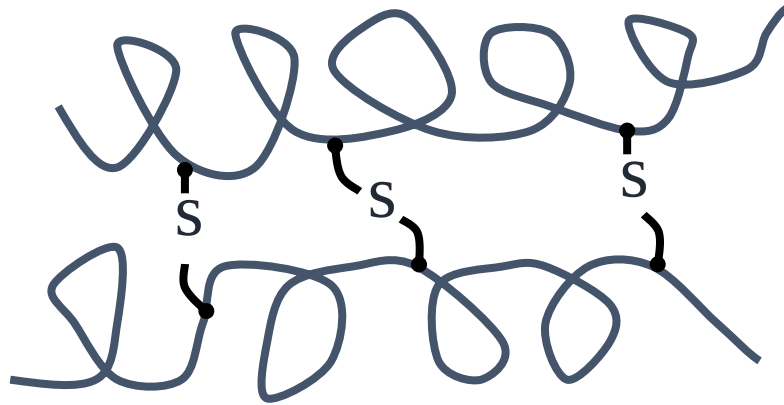
Elastômeros

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



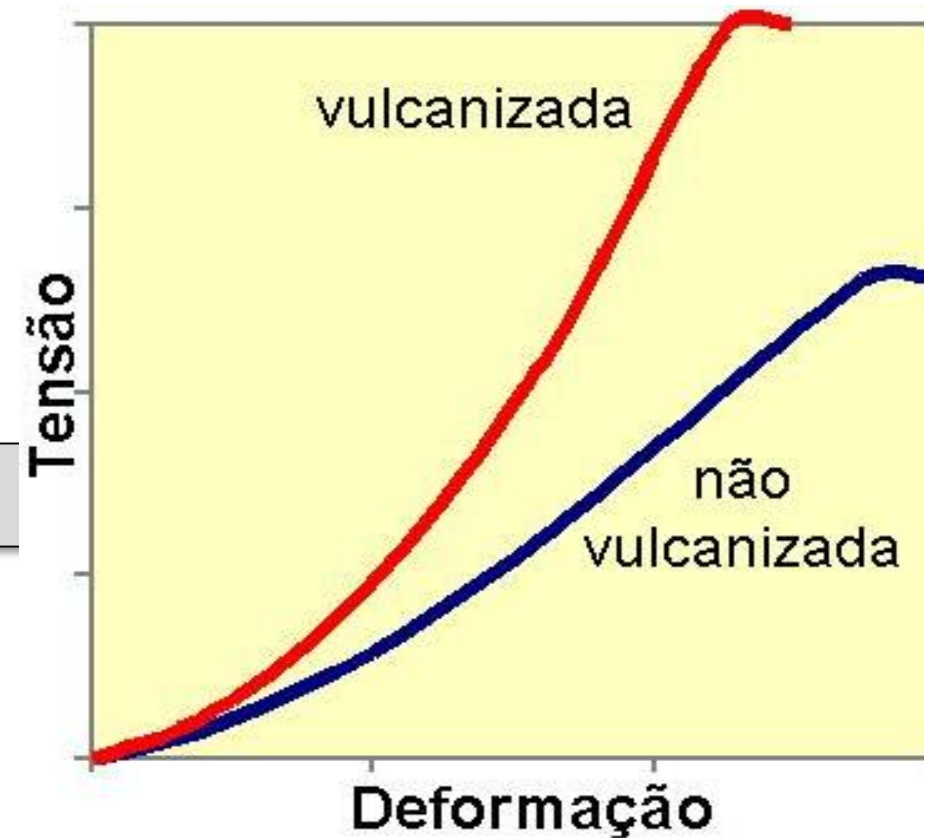
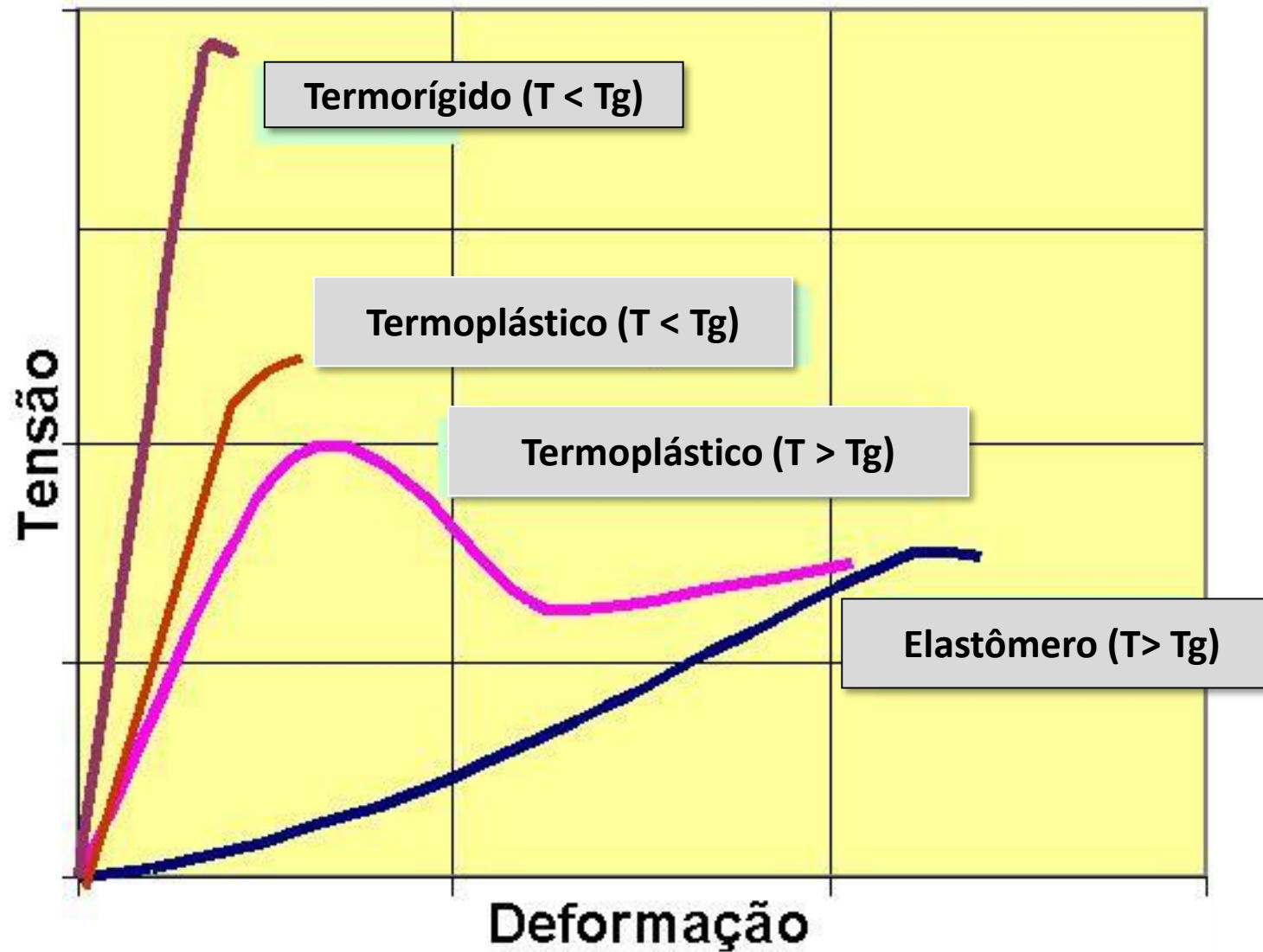
Elastômeros

- 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

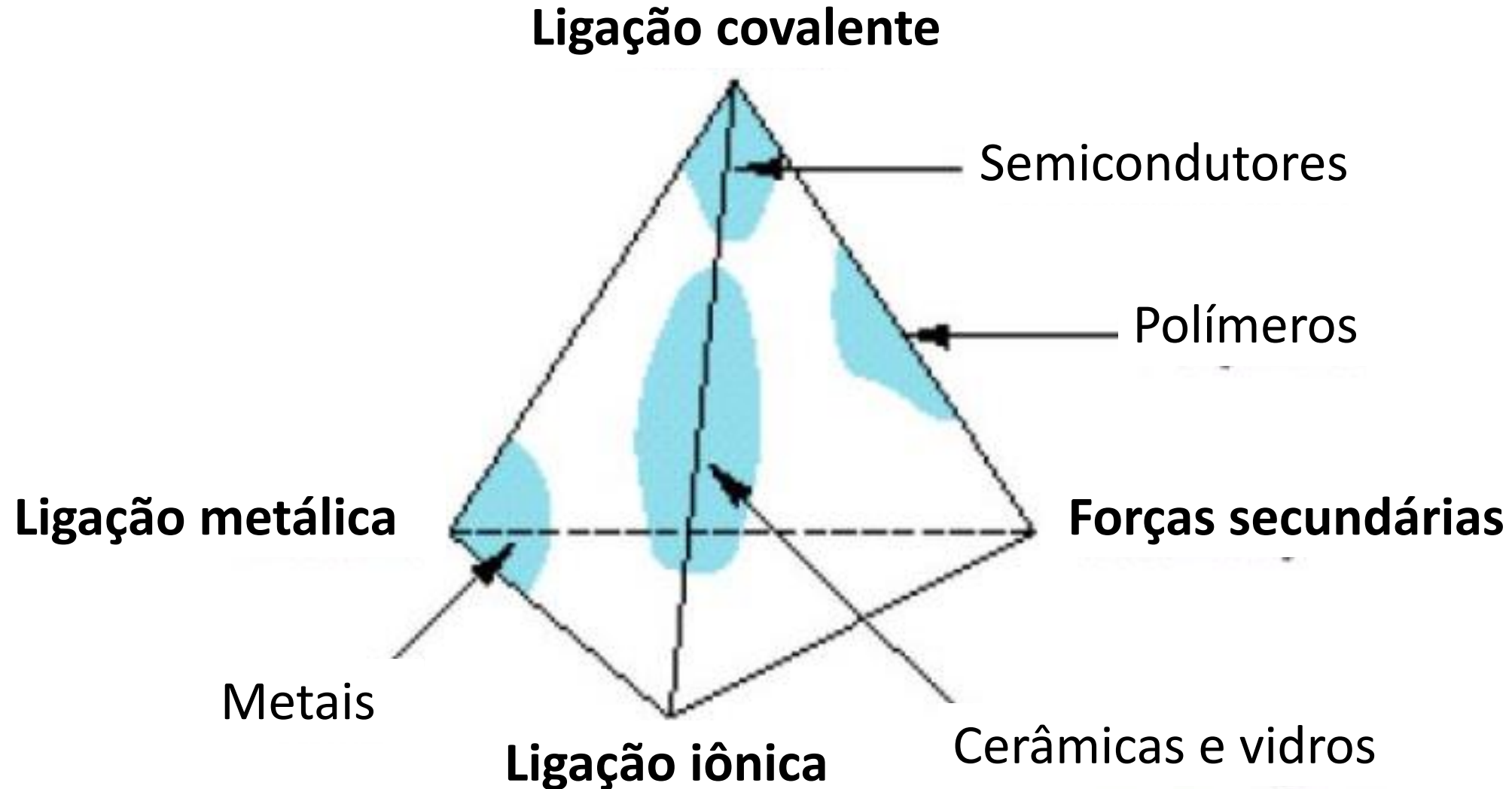


Metais



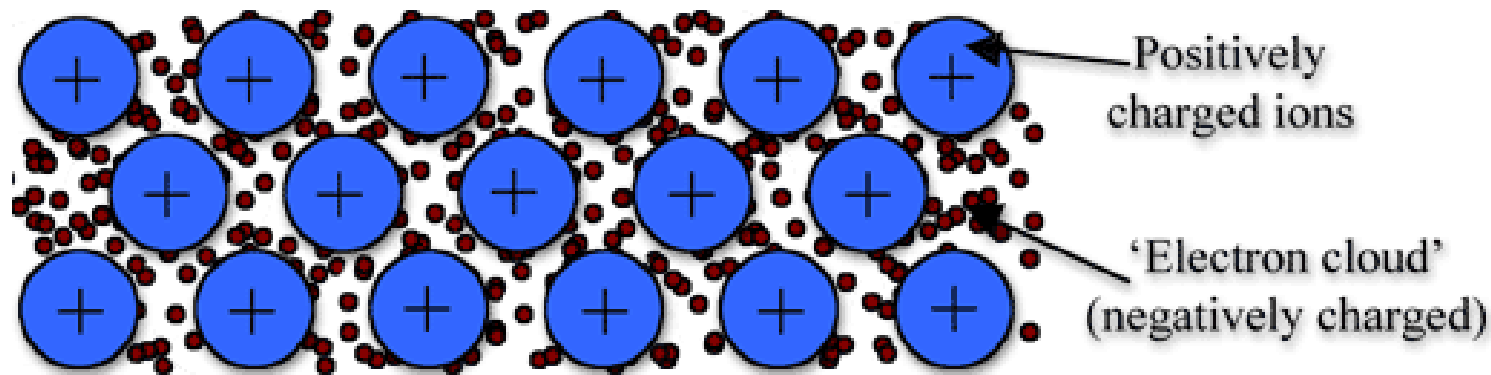
http://static.wixstatic.com/media/43cc43_607b9ceb24ac4f4e83400d45715ef1fd.jpg

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>

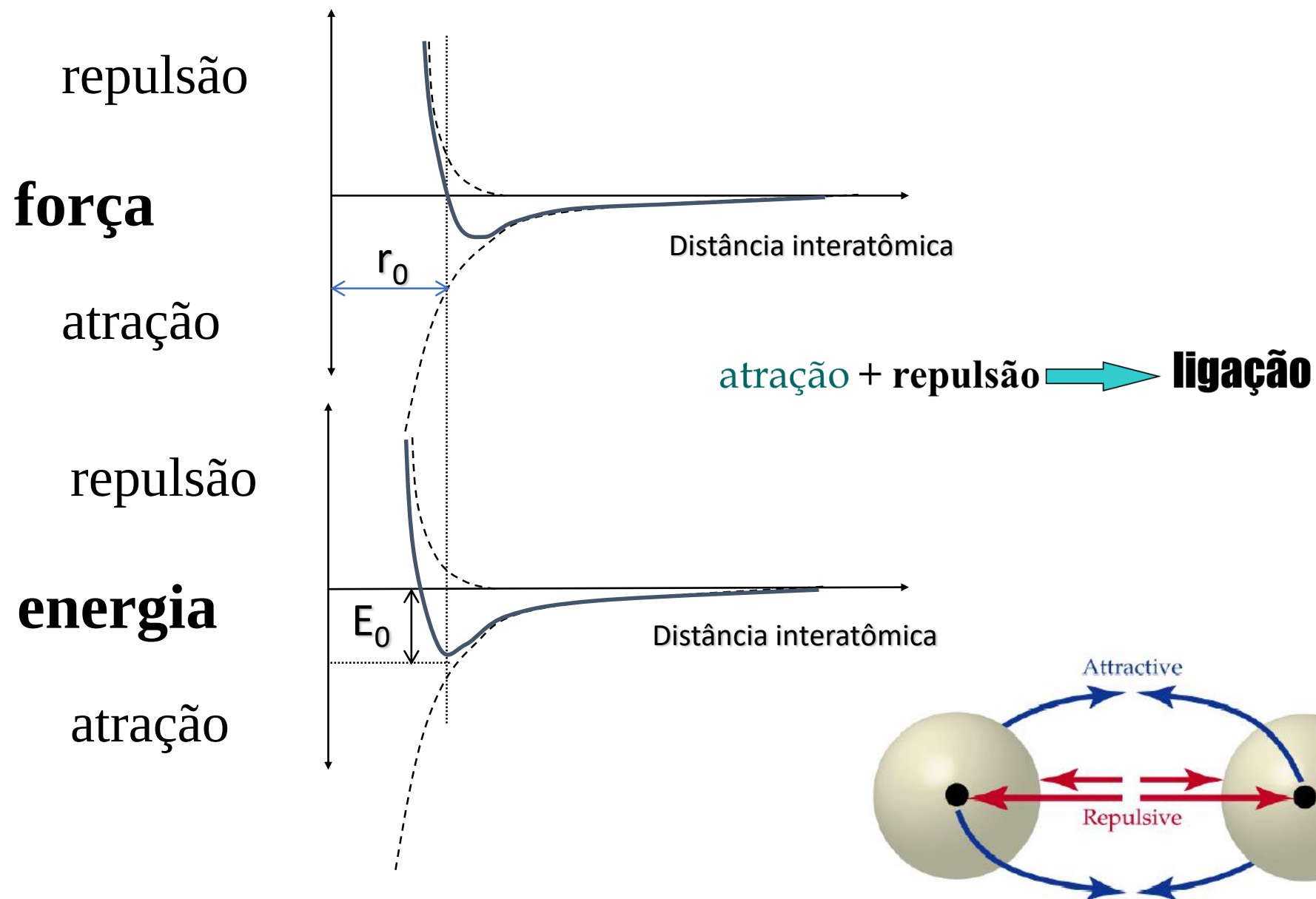
Pergunta:

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



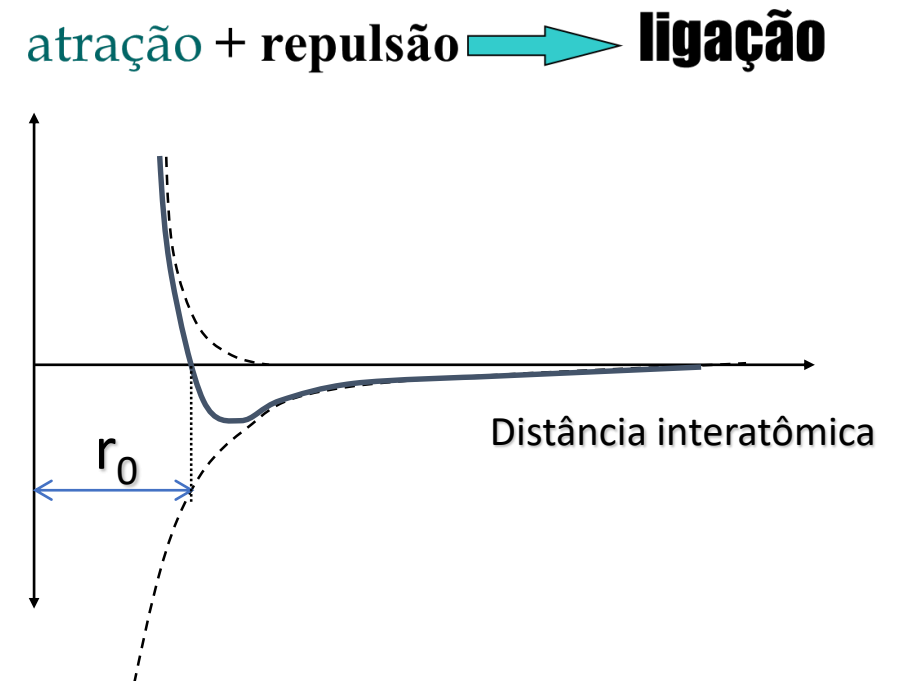
Átomo x Esforços Mecânicos

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

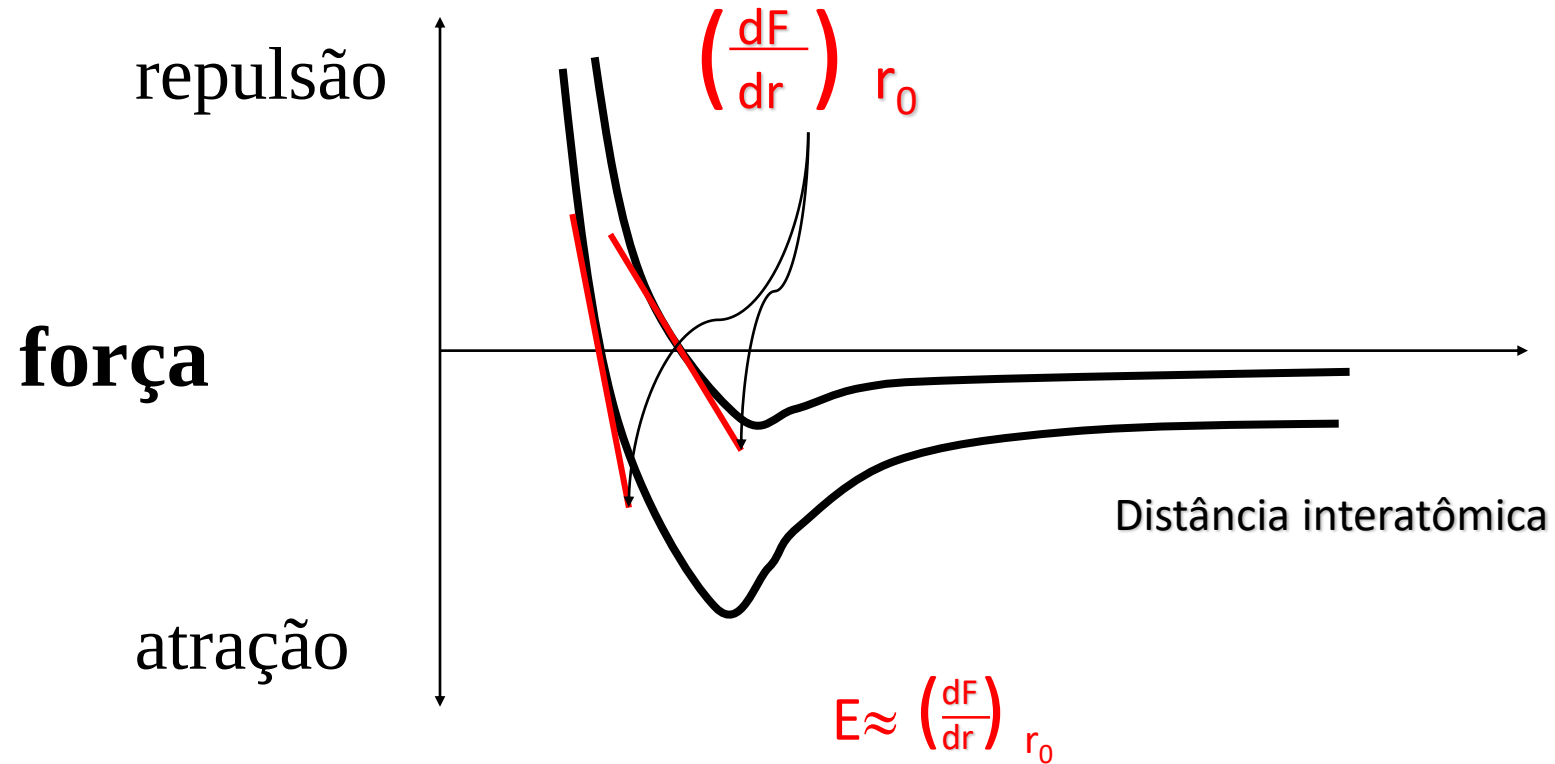
repulsão

força

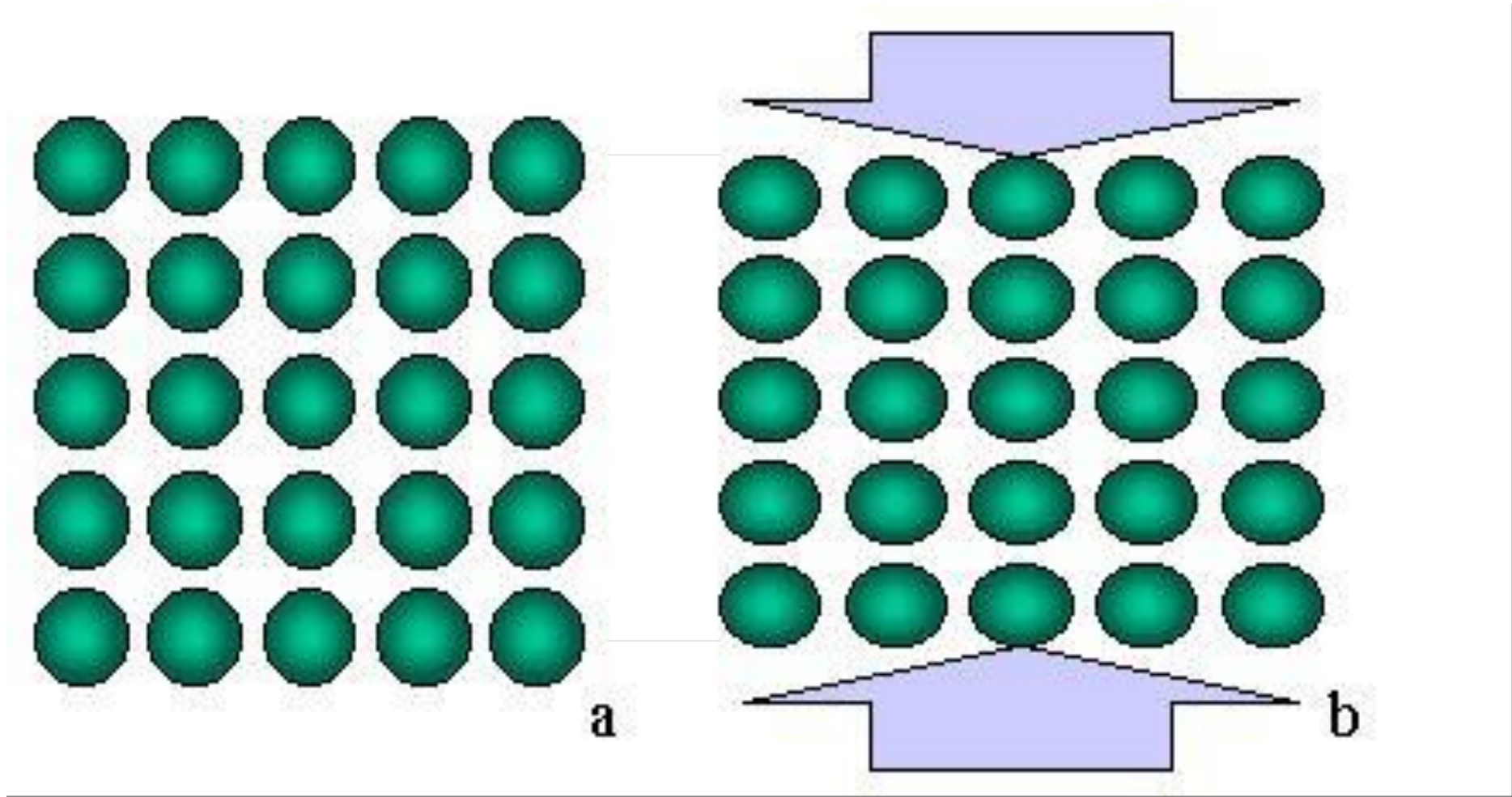
atração



Vinculação de força e energia

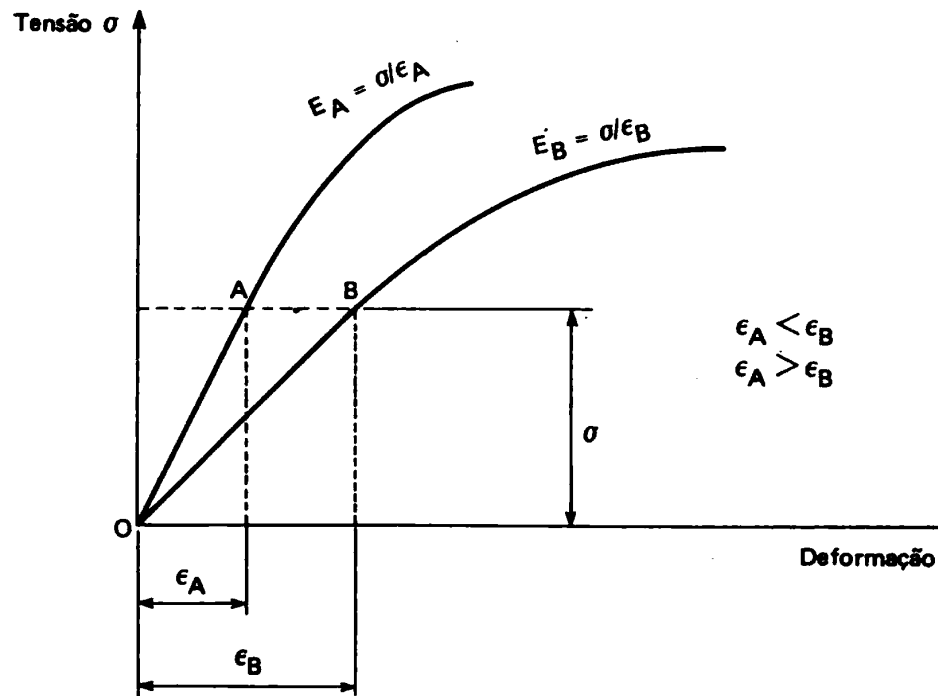


Influência da estrutura



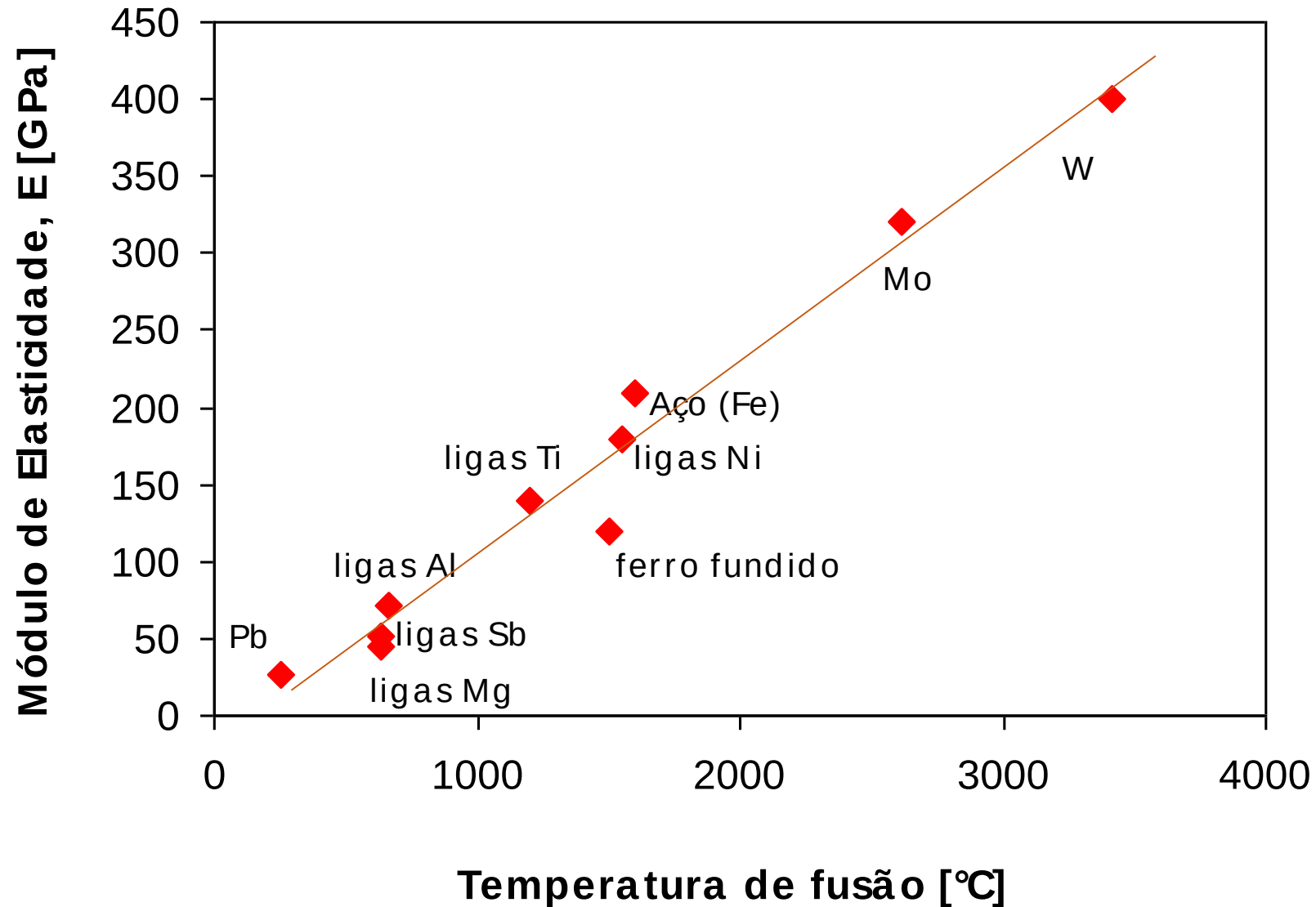
Módulo de elasticidade

Definição de E

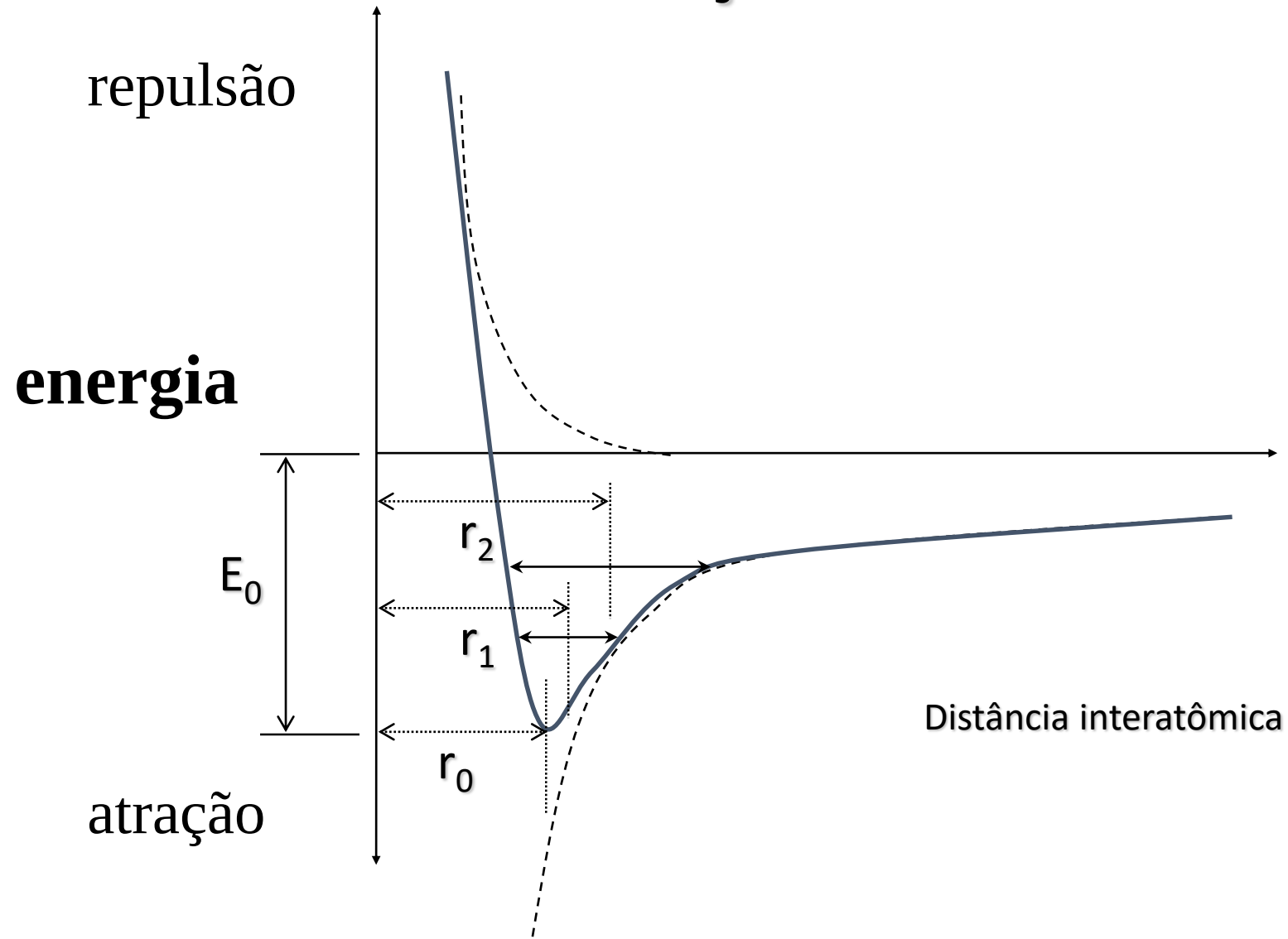


Liga	Módulo de elasticidade (kgf/mm ²)
Aços-carbono e aços-liga em geral	21 000
Aços inoxidáveis austeníticos	19 600
Ferro fundido nodular	14 000
Bronzes e latões	(média)
Bronzes de manganês e ao silício	7 700-11 900
Bronzes de alumínio	10 500
Ligas de alumínio	(média)
Monel (liga de níquel)	8 400-13 300
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

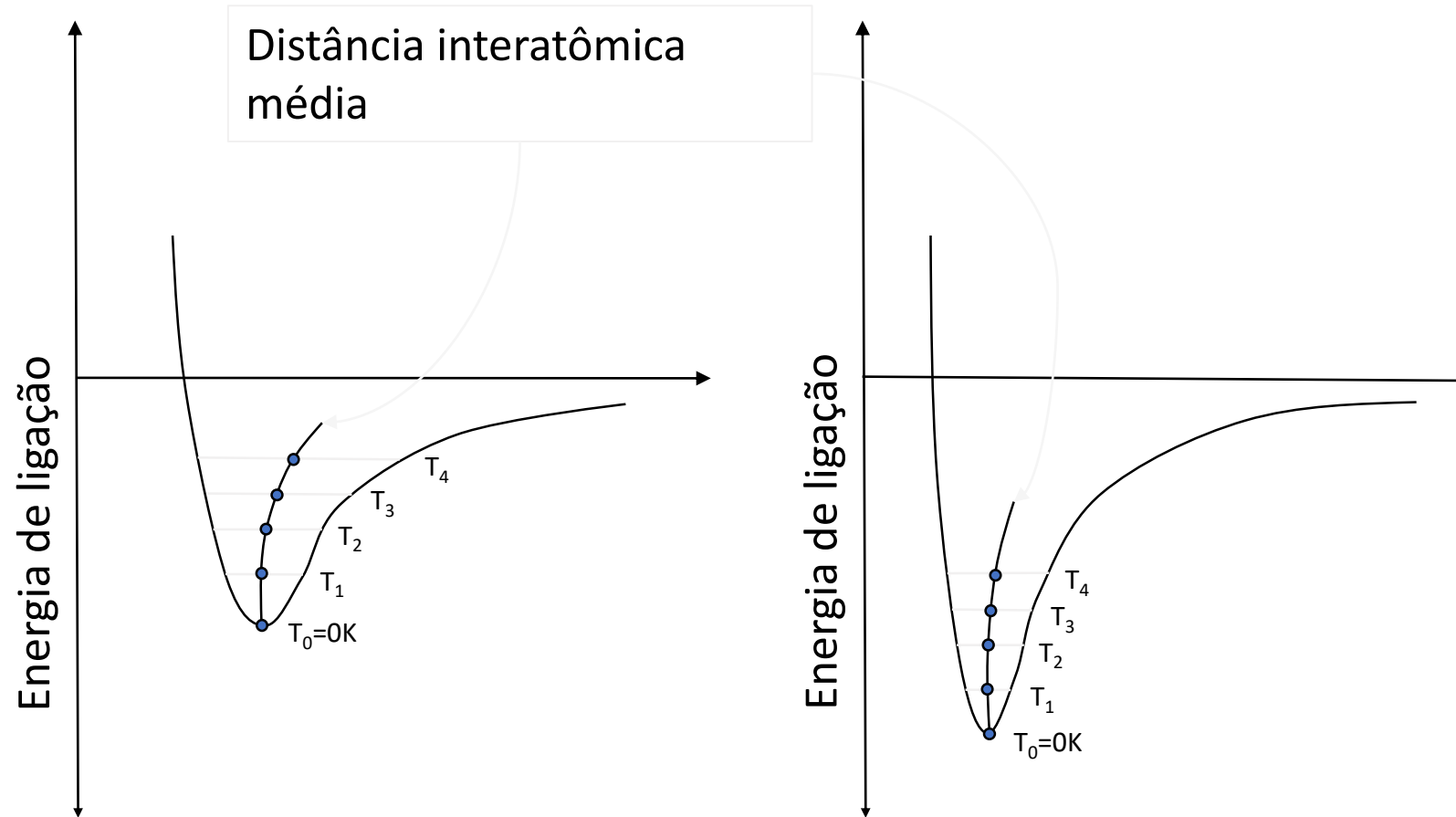
Módulo de elasticidade



Vinculação de distância interatômica e coeficiente de dilatação térmica

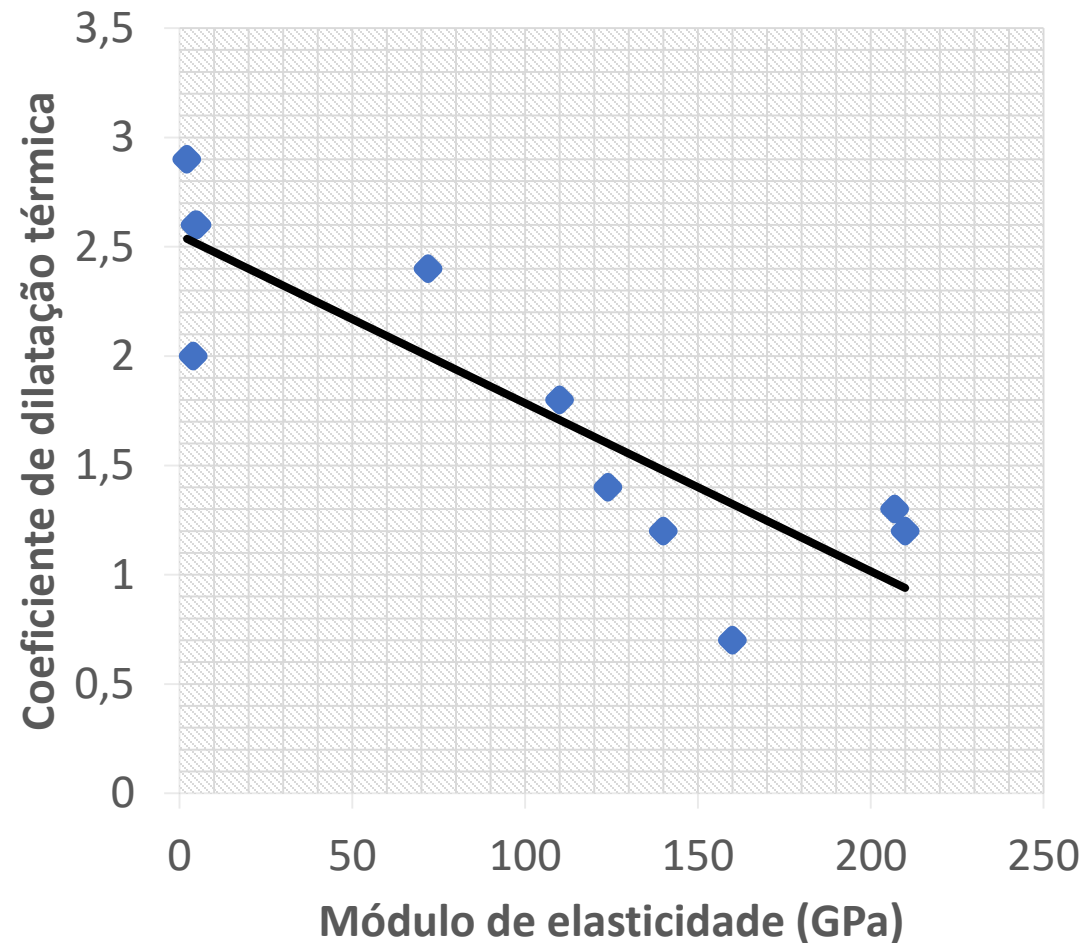


Vinculação de distância interatômica e coeficiente de dilatação térmica

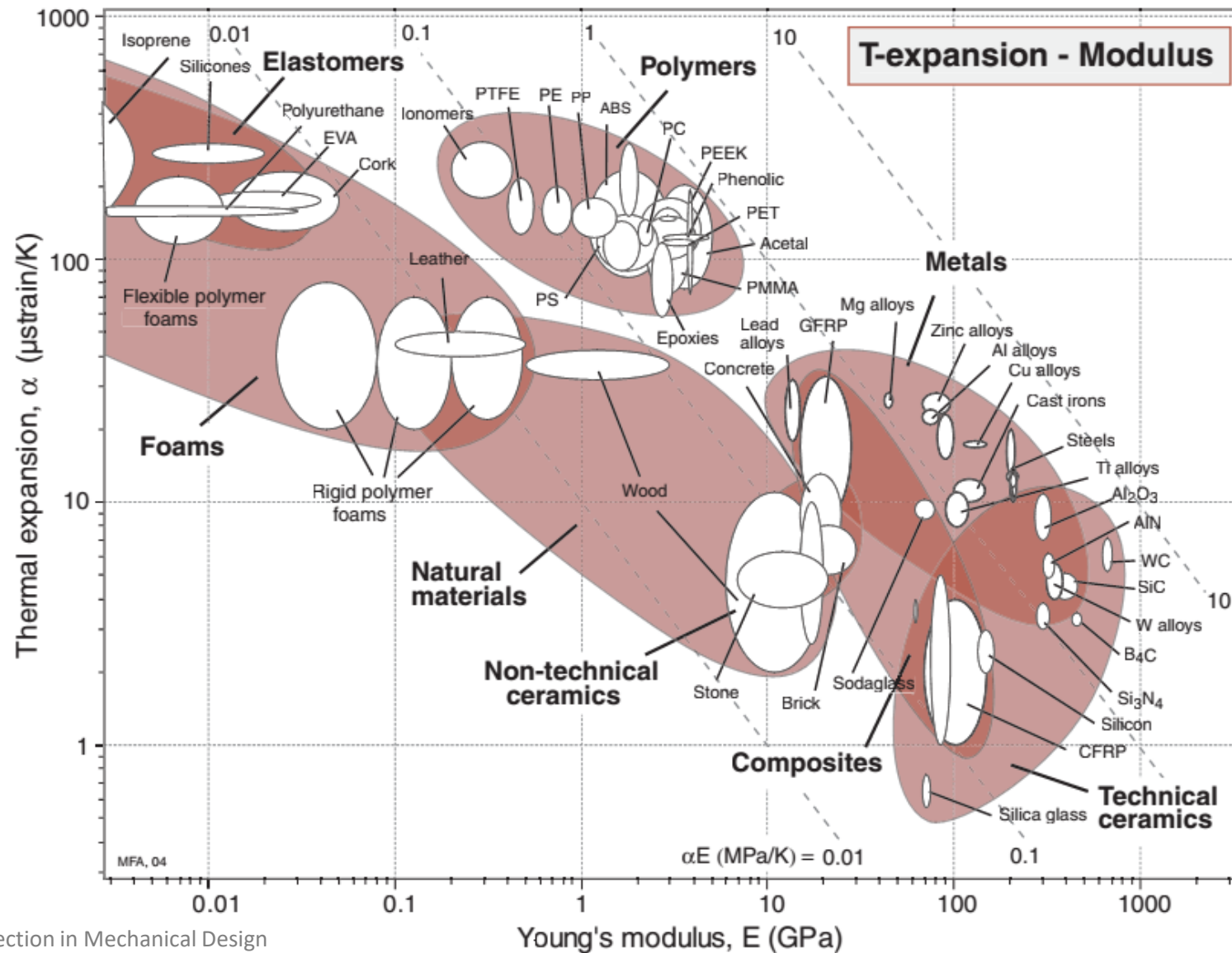


Correlação entre E e α

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

QUESTION

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

