

MATERIAIS DE ENGENHARIA - (SEM 5908) -

Aula 02 – Ligações Atômicas e Estrutura Cristalina

Prof. Dr. Carlos Alberto Fortulan
Prof. Dr. João Manuel Domingos de Almeida Rollo

Classificação Periódica dos Elementos Químicos

chemkeys

<http://www.chemkeys.com>

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H 1,0079																	2 He 4,0026
2 Li 6,941(2)	4 Be 9,0122											5 B 10,811(7)	6 C 12,011	7 N 14,007	8 O 15,999	9 F 18,998	10 Ne 20,180
3 Na 22,990	12 Mg 24,305											13 Al 26,982	14 Si 28,086	15 P 30,974	16 S 32,065(5)	17 Cl 36,453	18 Ar 39,948
4 K 39,098	20 Ca 40,078(4)	21 Sc 44,956	22 Ti 47,867	23 V 50,942	24 Cr 51,996	25 Mn 54,938	26 Fe 55,845(2)	27 Co 58,933	28 Ni 58,693	29 Cu 63,546(3)	30 Zn 65,41	31 Ga 69,723	32 Ge 72,64(1)	33 As 74,922	34 Se 78,96(3)	35 Br 79,904	36 Kr 83,80
5 Rb 85,468	38 Sr 87,62	39 Y 88,906	40 Zr 91,224(2)	41 Nb 92,906	42 Mo 95,94	43 Tc 98,906*	44 Ru 101,07(2)	45 Rh 102,91	46 Pd 106,42	47 Ag 107,87	48 Cd 112,41	49 In 114,82	50 Sn 118,71	51 Sb 121,76	52 Te 127,60(3)	53 I 126,90	54 Xe 131,29
6 Cs 132,91	56 Ba 137,33	57 - 71 La-Lu	72 Hf 178,49(2)	73 Ta 180,95	74 W 183,84	75 Re 186,21	76 Os 190,23(3)	77 Ir 192,22	78 Pt 195,08(3)	79 Au 196,97	80 Hg 200,59	81 Tl 204,38	82 Pb 207,2	83 Bi 208,98	84 Po 209,98*	85 At 209,99*	86 Rn 222,02*
7 Fr 223,02*	88 Ra 226,03*	89 - 103 Ac-Lr	104 Rf 261*	105 Db 262*	106 Sg 266*	107 Bh 264*	108 Hs 277*	109 Mt 268*	110 Ds 271*	111 Rg 272*	112						

LANTANÍDIOS

57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,91	60 Nd 144,24(3)	61 Pm 146,92*	62 Sm 150,36(3)	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25(3)	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,04(3)	71 Lu 174,97
--------------------	--------------------	--------------------	-----------------------	---------------------	-----------------------	--------------------	-----------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	-----------------------	--------------------

ACTINÍDIOS

89 Ac 227,03*	90 Th 232,04*	91 Pa 231,04*	92 U 238,03*	93 Np 237,05*	94 Pu 239,05*	95 Am 241,06*	96 Cm 244,06*	97 Bk 249,08*	98 Cf 252,08*	99 Es 252,08*	100 Fm 257,10*	101 Md 258,10*	102 No 259,10*	103 Lr 262,11
---------------------	---------------------	---------------------	--------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	----------------------	----------------------	----------------------	---------------------

Número atômico	25	
Nome	Mn	Símbolo
	MANGANÊS	
	54,938	

Massa atômica relativa. A incerteza no último dígito é 1, exceto quando indicado entre parênteses. Os valores com * referem-se ao isótopo mais estável.

Revisão da Estrutura Atômica

Átomo = núcleo (prótons e nêutrons) + elétrons

Cargas:

Elétrons e prótons tem cargas negativa e positiva de mesma magnitude,
 1.6×10^{-19} Coulombs.

Nêutrons são eletricamente neutros.

Massas:

Prótons e Nêutrons tem a mesma massa, 1.67×10^{-24} g.

A Massa de elétron é muito menor, 9.11×10^{-28} g e pode ser negligenciada no cálculo da massa atômica.

- ✓ prótons dão a identificação química do elemento
- ✓ **nº de prótons = número atômico (Z);** → = nº elétrons para ser eletricamente neutro
- ✓ nêutrons definem número do isótopo

Isotópos, materiais com mesmo número de prótons podem ter diferentes números de massa (A).

Exemplo:

- Hidrogênio ${}_1\text{H}^1$ (nenhum neutron)
- Deutério ${}_1\text{H}^2$ (um neutron)
- Trítio ${}_1\text{H}^3$ (dois neutrons)



Curiosidade: no filme *Homem Aranha II* o *Dr. Otto Octavius* utiliza de trítio (*tritium*) como combustível para a fusão nuclear sob controle.....o total inventariado de tritium no mundo é de menos de 20kg.

Unidade de massa Atômica. Peso Atômico.

A **massa atômica (M)** = massa de prótons + massa de nêutrons.

A **Unidade de massa Atômica (amu)** é freqüentemente usada para expressar o peso atômico.

1 amu é definida como 1/12 da massa atômica do mais comum isótopo de átomo de carbono que tem 6 prótons ($Z=6$) e seis nêutrons ($N=6$).

$m_{\text{próton}} \approx m_{\text{nêutron}} = 1.66 \times 10^{-24} \text{g} = 1 \text{ amu}$.

A massa atômica do átomo ^{12}C é 12 amu.

O **peso atômico de um elemento** = a média da massa atômica dos átomos naturalmente ocorrendo isótopos. O peso atômico do carbono é 12.011 amu.

O peso atômico é frequentemente especificado em massa por mol.

Mol

Um **mol** é a quantidade de matéria que tem uma massa em gramas igual para a massa atômica em amu de átomos (um mol de carbono tem uma massa de 12 gramas).

O número de átomos em um mol é chamado de número de Avogadro,

$$N_{av} = 6.023 \times 10^{23}.$$

$$N_{av} = 1 \text{ grama/1 amu.}$$

Exemplos:

Peso atômico do ferro = 55.85 amu/átomo = 55.85 g/mol

O número de átomos por cm³, n, para material de densidade d(g/cm³) e massa atômica M (g/mol):

$$n = N_{\text{av}} \times d / M$$

Grafite (carbono): d = 2.3 g/cm³, M = 12 g/mol

$$n = 6 \times 10^{23} \text{ átomos/mol} \times 2.3 \text{ g/cm}^3 / 12 \text{ g/mol} = 11.5 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3$$

Diamante (carbono): d = 3.5 g/cm³, M = 12 g/mol

$$n = 6 \times 10^{23} \text{ átomos/mol} \times 3.5 \text{ g/cm}^3 / 12 \text{ g/mol} = 17.5 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3$$

Água (H₂O) d = 1 g/cm³, M = 18 g/mol

$$n = 6 \times 10^{23} \text{ moléculas/mol} \times 1 \text{ g/cm}^3 / 18 \text{ g/mol} = 3.3 \times 10^{22} \text{ moléculas/cm}^3$$

Exercício

- 1- Calcule o número de prótons, nêutrons e elétrons que existem, respectivamente, no átomo de mercúrio $_{80}\text{Hg}^{200}$.
- 2 - O número de elétrons do cátion X^{2+} de um elemento X é igual ao do número de elétrons do átomo neutro de um gás nobre. Est átomo de gás nobre apresenta número atômico 10 e número de massa 20. Qual o número atômico do elemento X.
3. A zircônia (ZrO_2) aditivada com 8mol% de Ytria (Y_2O_3) quando calcinada estabiliza a fase cúbica.
Qual percentual em massa devo adicionar de Ytria na Zircônia em uma formulação.

Elétrons nos átomos

Os elétrons se movem não em órbitas circulares, mas em órbitas 'fuzzy'.

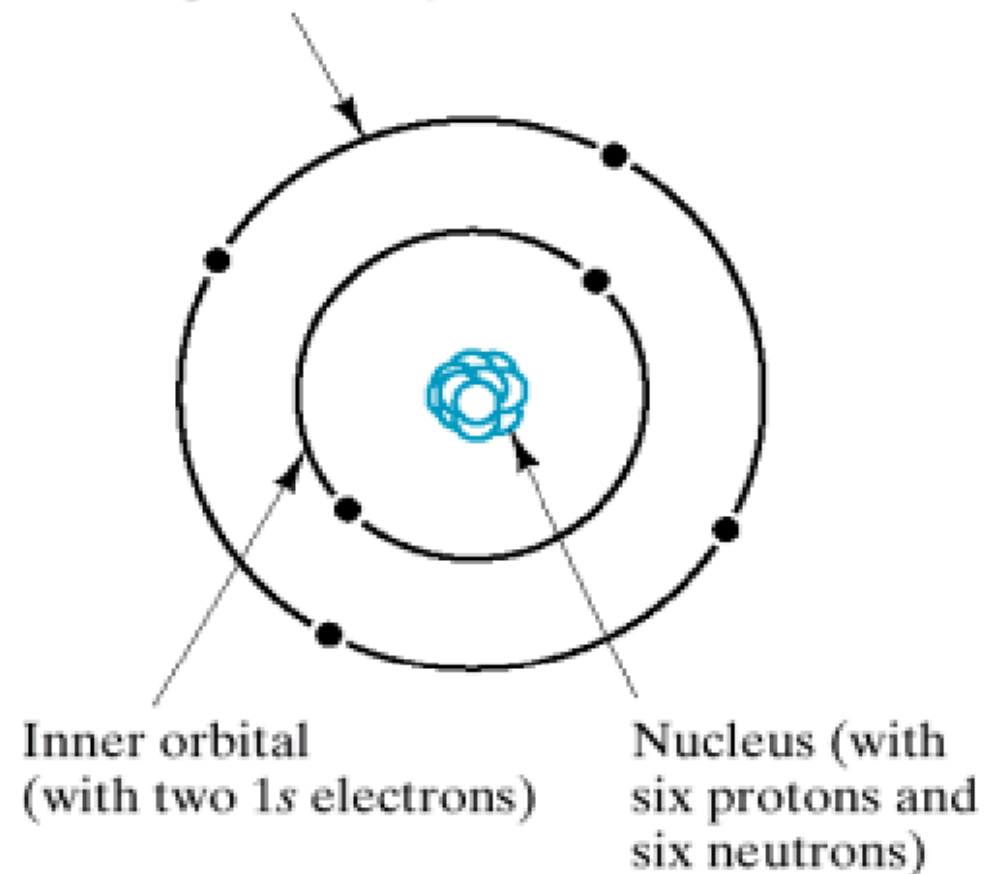
Não se pode afirmar onde eles estão se movendo, apenas a probabilidade de encontrá-los a alguma distância do núcleo.

Apenas certas órbitas ou camadas de probabilidade de densidade de elétrons são permitidas.

As camadas são identificadas por um **número quântico principal n** , o qual pode ser relatado para o número da camada, $n = 1$ é o menor delas; $n = 2, 3$ são mais largas. O **segundo Número quântico l** , define a subcamada dentro de cada camada. Dois ou mais números quânticos caracterizam estados dentro das subcamadas.

Os elétrons formam uma nuvem em torno do núcleo, de raio 0,05 – 2nm.

Outer orbital
(with four sp^3 hybrid
bonding electrons)



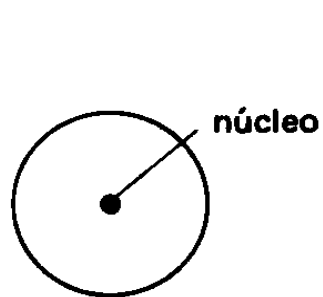
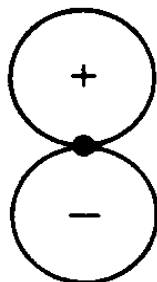
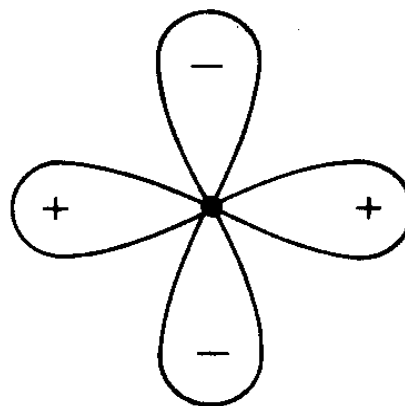
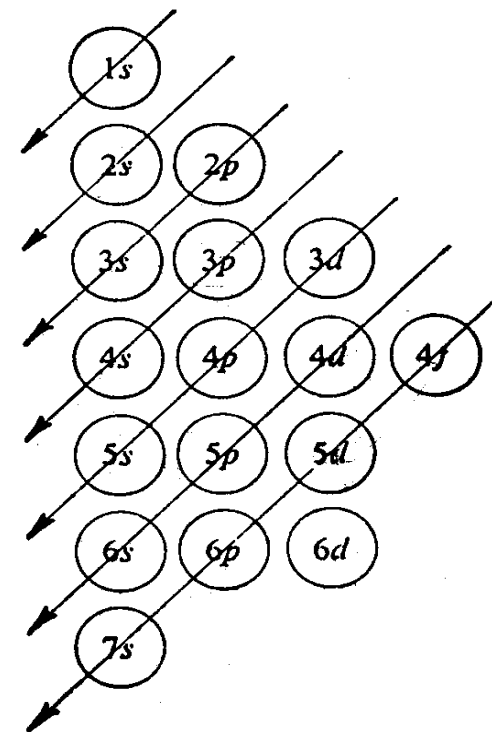
Os números quânticos originam da solução da equação de “Schrodinger”

Princípio da Exclusão de Pauli: não pode haver em um átomo dois elétrons com os quatro números quânticos iguais.

O número de estado disponível de um elétron em uma mesma camada e subcamada eletrônica.

Principal Q. N., n	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
			Per Subshell	Per Shell
1 (l=0)	s	1	2	2
2 (l=0)	s	1	2	8
2 (l=1)	p	3	6	
3 (l=0)	s	1	2	18
3 (l=1)	p	3	6	
3 (l=2)	d	5	10	
4 (l=0)	s	1	2	32
4 (l=1)	p	3	6	
4 (l=2)	d	5	10	
4 (l=3)	f	7	14	

Elétrons de Valência – são os Elétrons que ocupam as camadas mais externas não preenchidas – eles são os responsáveis pela ligação.

orbital *s*orbital *p*orbital *d*

Sequência do preenchimento dos níveis energéticos

" Elétrons preenchem os níveis quânticos na ordem de aumentar a energia"

Exemplo: Sódio, $Z = 11$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Ferro, $Z = 26$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

Estado de oxidação

Principais II, III

$Fe^{+2} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$ – o mais estável e existe em solução aquosa

$Fe^{+3} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$

Raro IV

Fe^{+4}

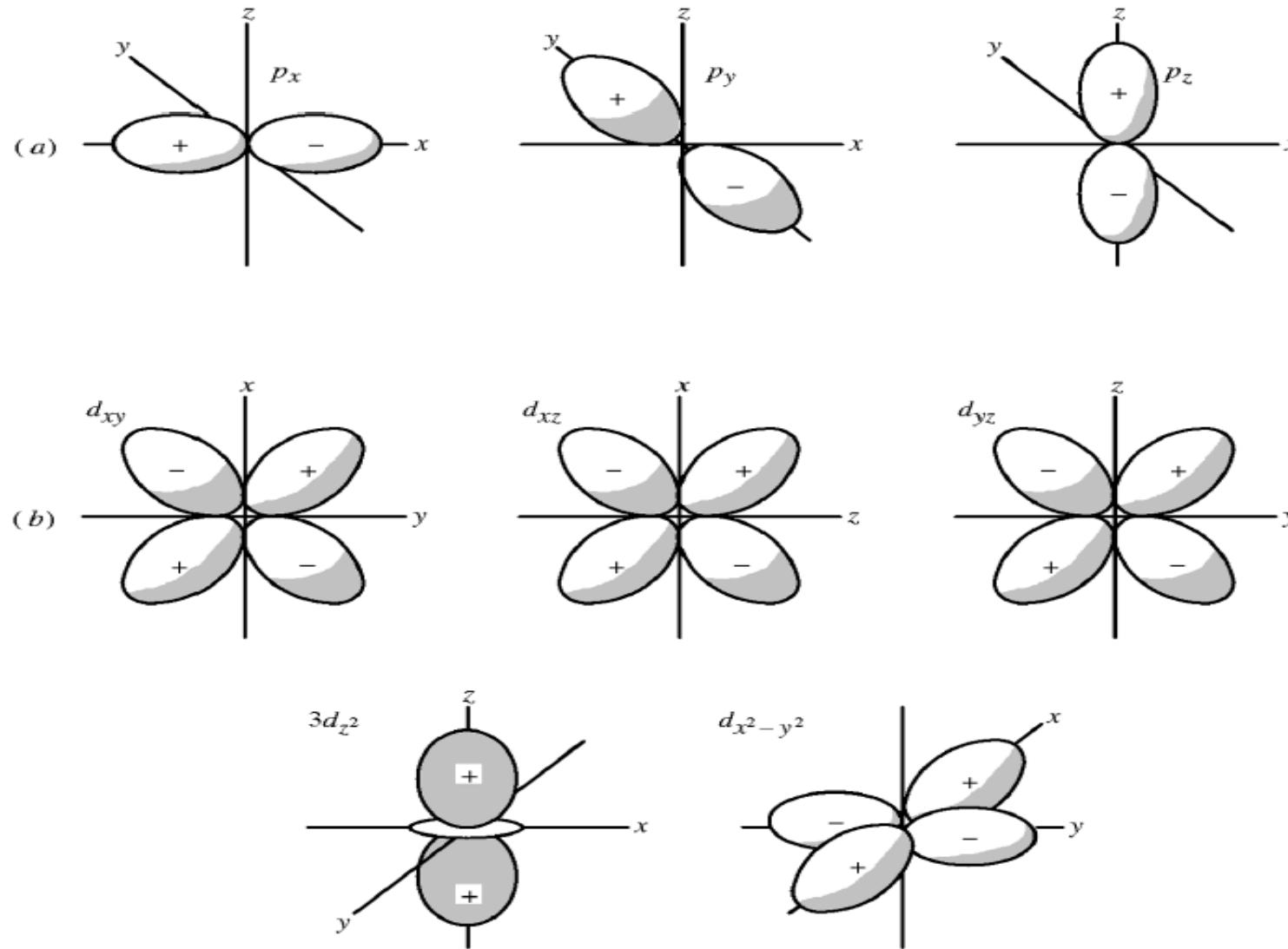


Tabela Periódica

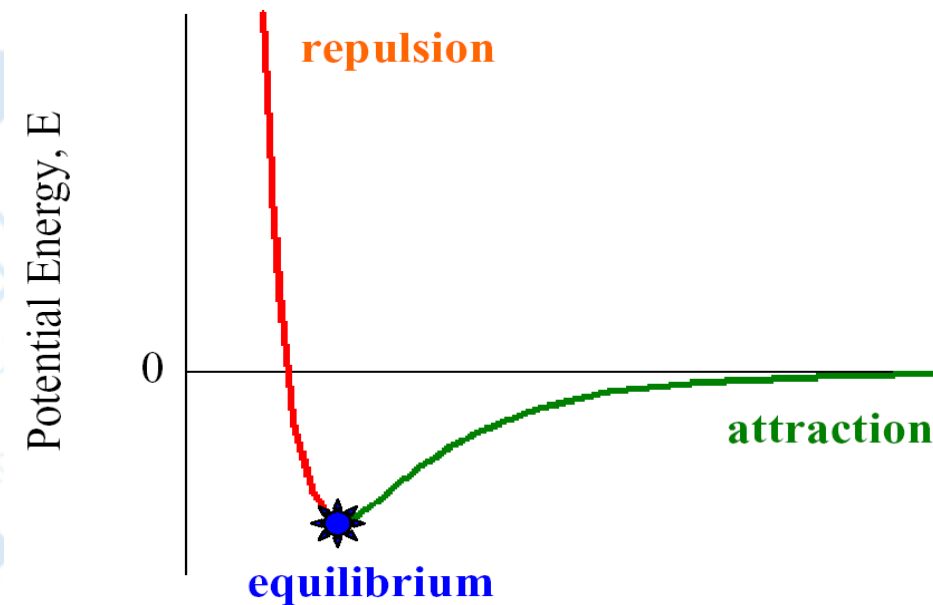
I A												0					
1	II A											III A	IV A	V A	VIA	VII A	2
H 1.008												5	6	7	8	9	10
3	4											13	14	15	16	17	18
Li 6.941	Be 9.012											Al	Si	P	S	Cl	Ar
11	12											26.98	28.09	30.97	32.06	35.45	39.95
Na 22.99	Mg 24.31	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII				I B	II B	31	32	33	34	35
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K 39.10	Ca 40.08	Sc 44.96	Ti 47.90	V 50.94	Cr 52.00	Mn 54.94	Fe 55.85	Co 58.93	Ni 58.71	Cu 63.55	Zn 65.38	Ga 69.72	Ge 72.59	As 74.92	Se 78.96	Br 79.90	Kr 83.80
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb 85.47	Sr 87.62	Y 88.91	Zr 91.22	Nb 92.91	Mo 95.94	Tc 98.91	Ru 101.07	Rh 102.91	Pd 106.4	Ag 107.87	Cd 112.4	In 114.82	Sn 118.69	Sb 121.75	Te 127.60	I 126.90	Xe 131.30
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs 132.91	Ba 137.33	La 138.91	Hf 178.49	Ta 180.95	W 183.85	Re 186.2	Os 190.2	Ir 192.22	Pt 195.09	Au 196.97	Hg 200.59	Tl 204.37	Pb 207.2	Bi 208.98	Po (210)	At (210)	Rn (222)
87	88	89															
Fr (223)	Ra 226.03	Ac (227)															

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce 140.12	Pr 140.91	Nd 144.24	Pm (145)	Sm 150.4	Eu 151.96	Gd 157.25	Tb 158.93	Dy 162.50	Ho 164.93	Er 167.26	Tm 168.93	Yb 173.04	Lu 174.97
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th 232.04	Pa 231.04	U 238.03	Np 237.05	Pu (244)	Am (243)	Cm (247)	Bk (247)	Cf (251)	Es (254)	Fm (257)	Md (258)	No (259)	Lw (260)

Elementos em uma mesma coluna (Grupo Elementar) apresentam propriedades similares. O número do grupo indicam o número de elétrons disponíveis.

- 0: gases inertes (He, Ne, Ar...) tem as subcamadas preenchidas: quimicamente inertes;
- IA: Metais alcalinos (Li, Na, K...) tem um elétron a mais na camada mais externa – quimicamente ativo;
- VIIA: Halogênios (F, Br, Cl...) falta um elétron na camada mais externa – quer ganhar um elétron – quimicamente ativo

Energias e Forças de União



Potencial para interação de dois átomos.

A repulsão entre átomos, quando eles estão se aproximando um do outro, é relatado pelo princípio de Pauli quando a nuvem eletrônica envolve os átomos iniciais para superposição, a energia do sistema aumenta abruptamente.

A origem da parte atrativa, domina em distâncias maiores, e depende do tipo particular de união.

Eletro Negatividade

Eletro negatividade – uma medida de como os átomos estão dispostos a aceitarem elétrons

Subcamadas com um elétron → baixa eletro negatividade

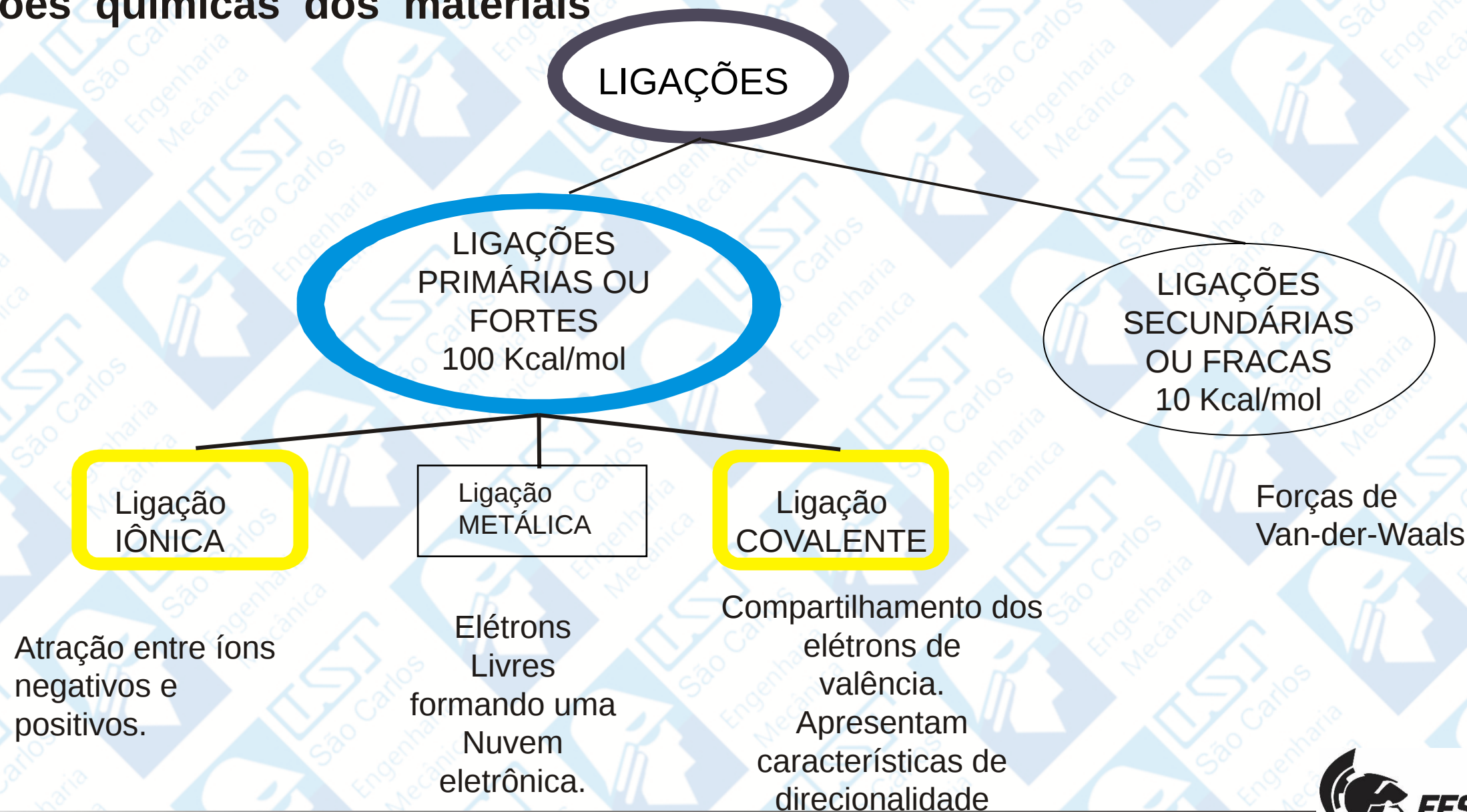
Subcamadas com falta de um elétron → alta eletro negatividade

A **Eletro Negatividade** aumenta da esquerda para a direita

Metais são eletro positivos → eles podem doar seus poucos elétrons de valência e se tornar íons carregados positivamente

IA																	0
1 H 2.1																	2 He -
IIA																	
3 Li 1.0	4 Be 1.5																
11 Na 0.9	12 Mg 1.2																
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															

Ligações químicas dos materiais



Ligação Iônica

A ligação iônica resulta da atração entre íons positivos e negativos. Os elétrons de valência cedidos pelo átomo ionizado negativamente, forma pólos eletrostáticos de atração coulombiana.

1. Ionização mútua ocorre pela transferência de elétrons

- Íon = átomo carregado
- Anion = átomo carregado negativamente
- Cátion = átomo carregado positivamente

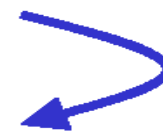
2. Íons são atraídos pela forte interação coulombiniana

- Átomos carregados opostamente são atraídos
- Uma união iônica é não-direcional (íons podem ser atraídos para qualquer direção)

Exemplo: NaCl

Na tem 11 elétrons, 1 a mais que o necessário para preencher a última camada (Neon)

11 Protons Na $1S^2 2S^2 2P^6 3S^1$
11 Protons Na⁺ $1S^2 2S^2 2P^6$



donates e⁻
10 e⁻ left

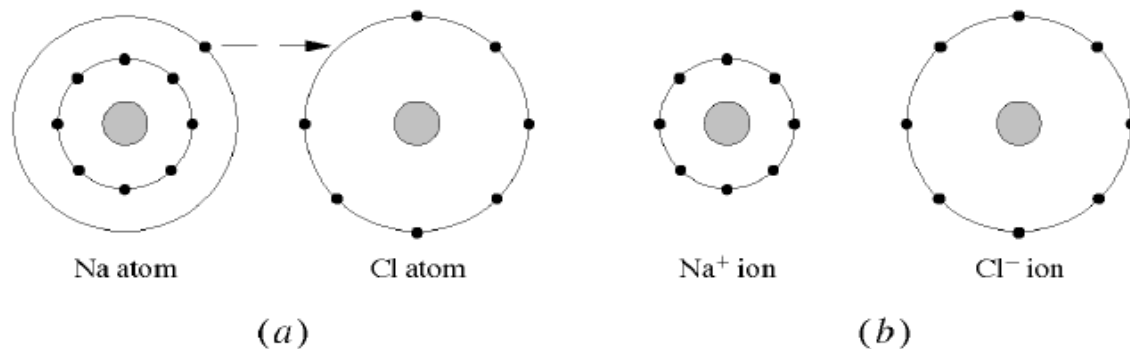
Cl tem 17 elétrons, 1 a menos que o necessário para preencher a última camada (Argônio)

17 Protons Cl $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^5$
17 Protons Cl⁻ $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6$

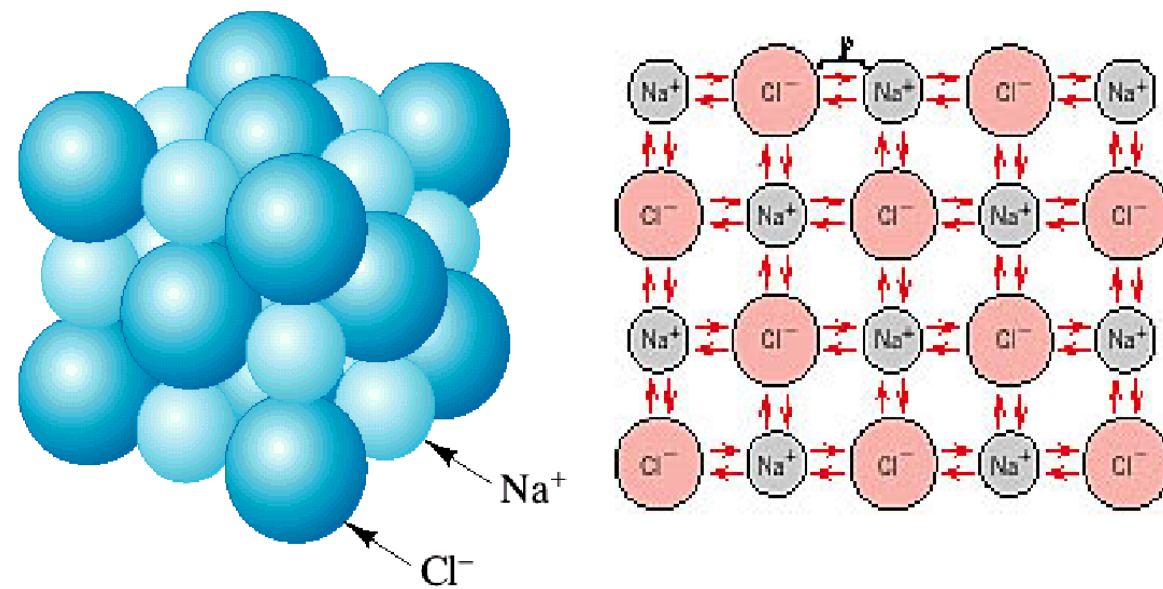
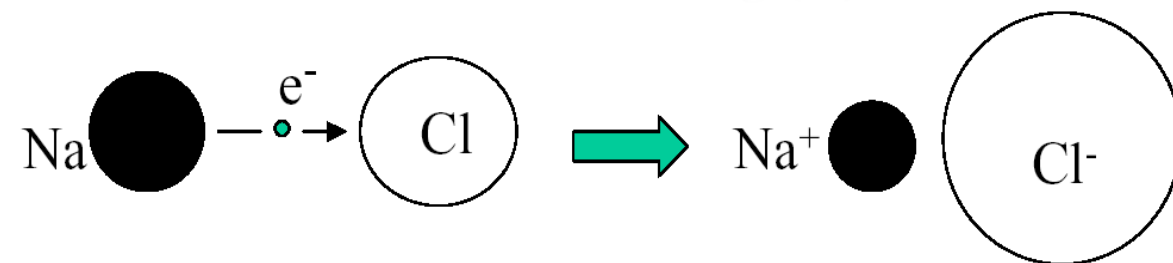


receives e⁻
18 e⁻

Ligações iônicas



(a) Transfer of an electron from Na atom to Cl atom results in the formation of (b) a cation and an anion. Note that the cation is smaller than the atom and vice versa for the anion.



Ligação Iônica: ligações muito forte, não direcional

As ligações iônicas são características nos cristais de sais inorgânicos em geral:

Cloreto de Sódio,
Cloreto de Magnésio,
Fluoreto de Lítio, etc.

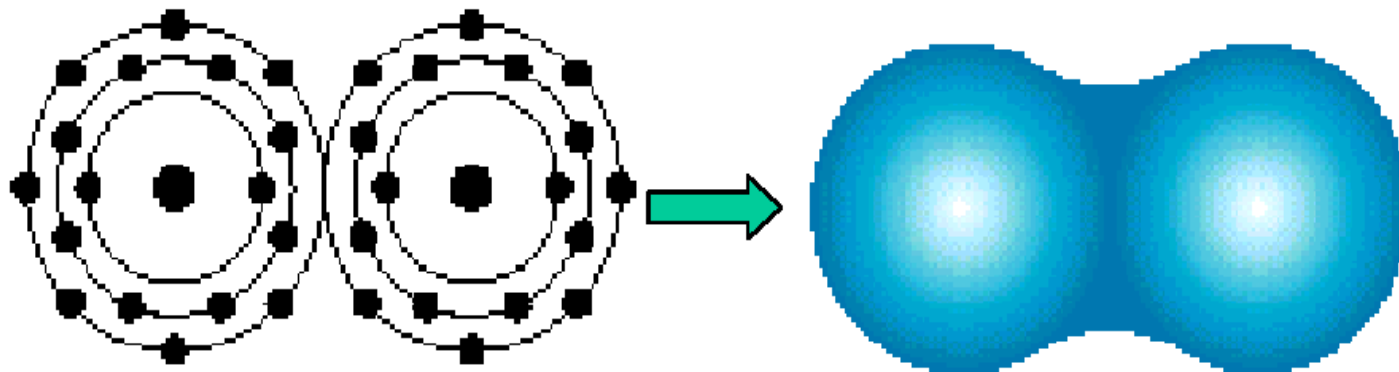
e de certos compostos cerâmicos:

Óxido de Alumínio,
Óxido de Magnésio,
Óxido de Titânio, etc.)

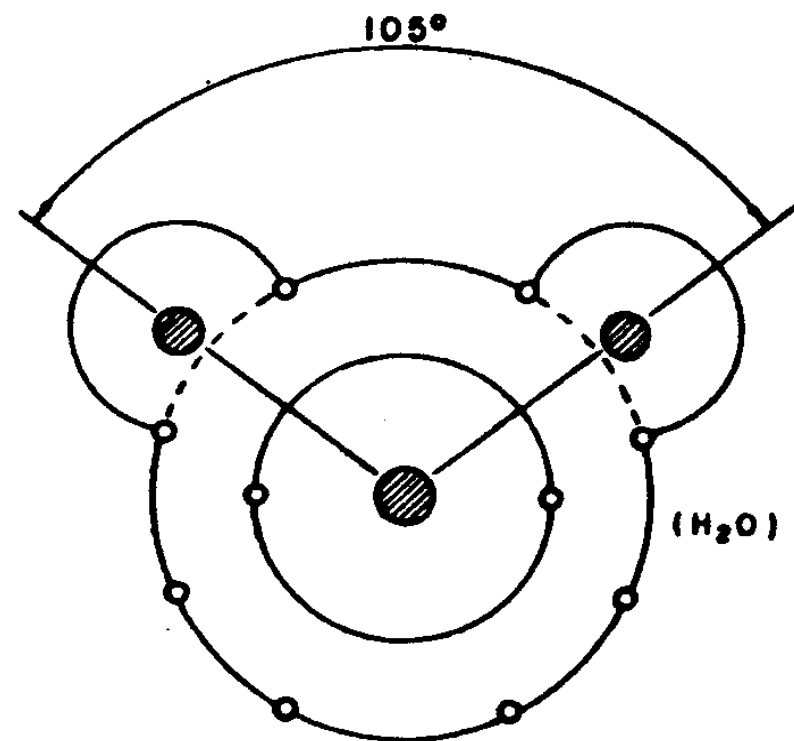
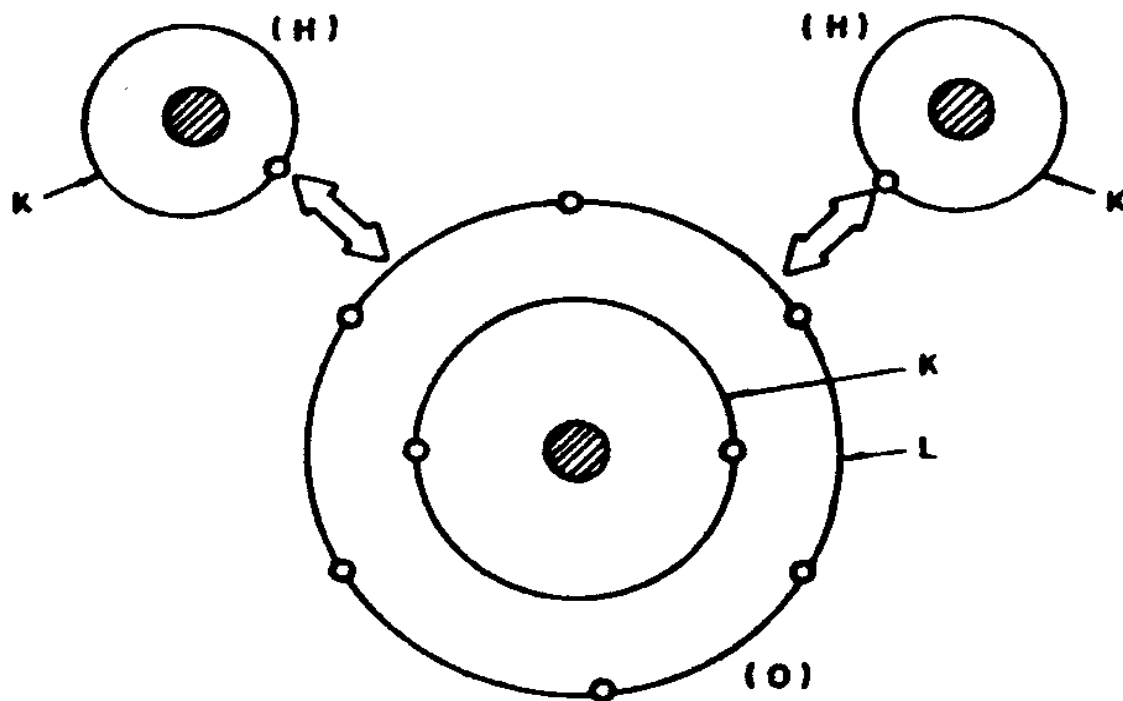
Ligação covalente

A ligação covalente resulta da interação de átomos que apresentam suas órbitas de valência quase saturadas de elétrons (E_{max}). Nestas condições, os átomos de valência, isto é, seus elétrons de valência passam a orbitar indiferentemente nos átomos envolvidos (daí o nome). Este tipo de ligação é bastante potente, mas apresenta características de direcionalidade preferencial.

O exemplo mais simples é a molécula de H_2 onde os elétrons gastam mais tempo entre os núcleos que fora deles, então produz a ligação.



Água



Formação da ligação covalente:

- Compartilhamento dos elétrons de valência
- Podem ser descritos por órbitas superpostas
- Ligações covalentes são ALTAMENTE direcionais
- Ligação – na direção do maior sobreposição orbital
- Modelo de ligação covalente: um átomo pode covalentemente unir com no máximo $8 - N'$, $N' =$ número de elétrons de valência

Exemplo: molécula Cl_2 . $Z_{\text{Cl}} = 17$ ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$)

$N' = 7$, $8 - N' = 1 \rightarrow$ pode formar apenas uma ligação covalente

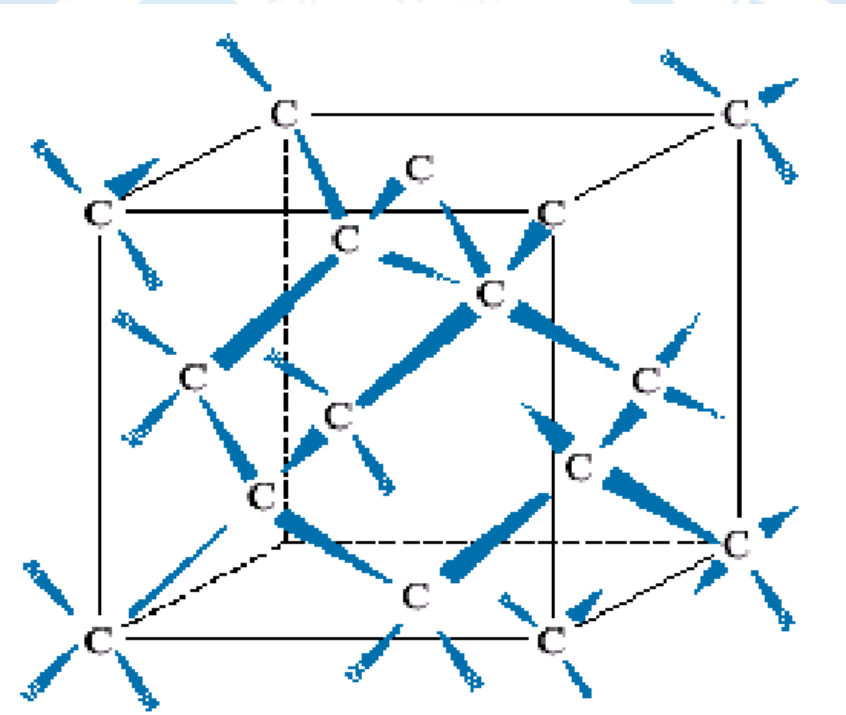
Exemplo:

Carbono: $ZC = 6$ ($1S^2 2S^2 2P^2$)

$N' = 4$, $8 - N' = 4 \rightarrow$ pode formar quatro ligações covalentes

Diamante:

cada átomo de C tem quatro ligações covalentes
com quatro outros átomos de carbono



Combinando-se a energia dos orbitais s e p , formam-se dois híbridos de mesma forma e energia. A combinação de um orbital s e um orbital p é chamada de hibridização sp , e os orbitais resultantes de orbitais híbridos sp possuem um lóbulo bem maior que o outro, apontando em sentidos opostos

Somente pode ocorrer hibridização entre orbitais de energia semelhante. Conclui-se que não é possível hibridizar orbitais $2s$ ou $2p$ com orbitais $3s$, ou orbitais $3s$ e $3p$ com $4s$.

Ligação Covalente do Diamante

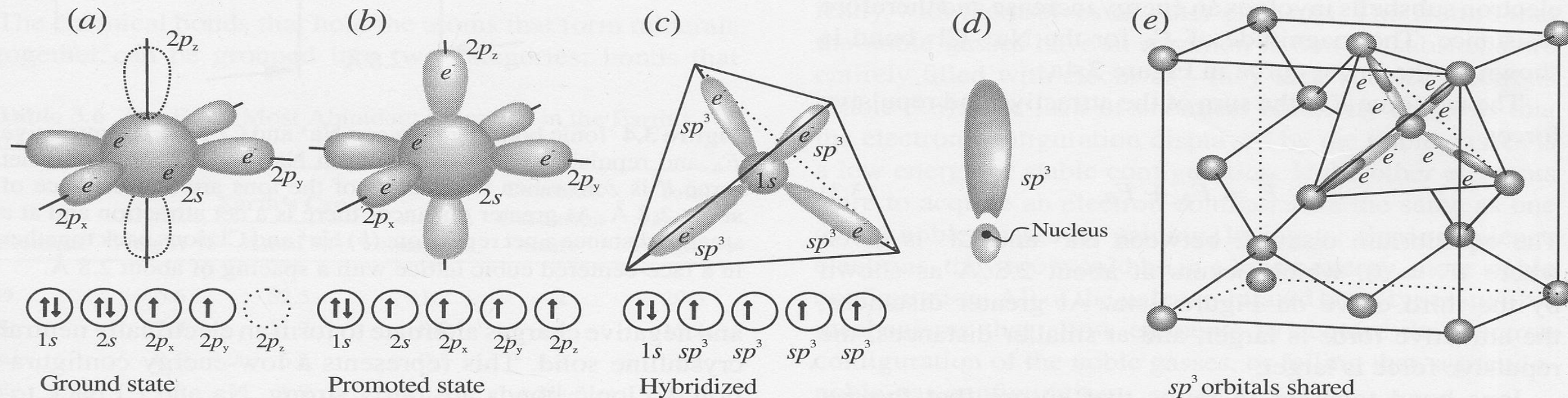
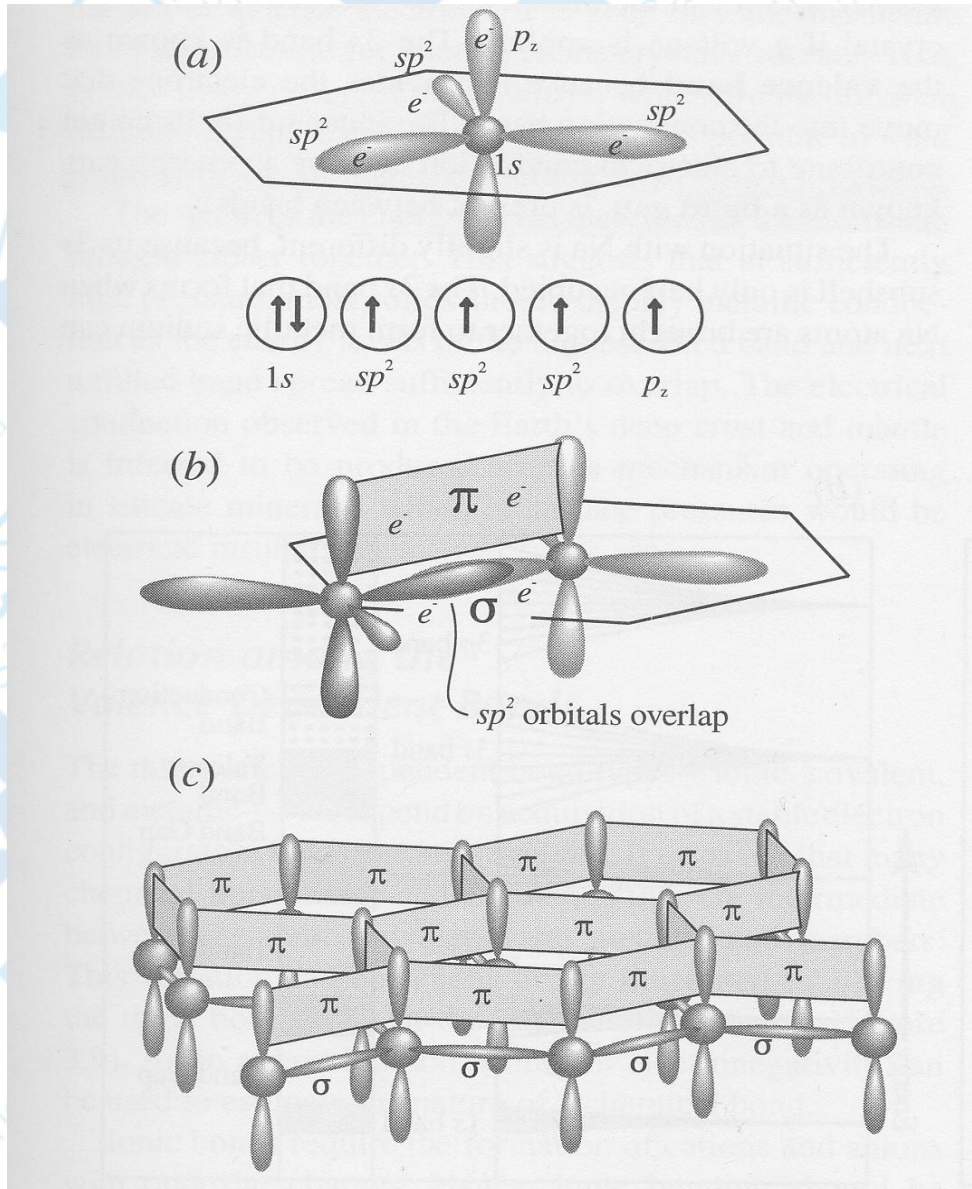


Figure 3.5 Formation of covalent sigma (σ) bonds with carbon in diamond. (a) Ground-state electron configuration of carbon. The $2s$ orbital contains two electrons, the $2p_x$ and $2p_y$ orbitals each contain one electron, and the $2p_z$ orbital is vacant. (b) One electron from the $2s$ orbital is promoted to the $2p_z$ orbital so that four orbitals are partially filled. (c) Hybridization of the half-filled orbitals into four identical sp^3 orbitals arrays to point to the corners of a tetrahedron. (d) Each sp^3 orbital consists of a large lobe and a small lobe on the opposite sides of the nucleus. The small lobes are not shown in (c). (e) Bonding of carbon atoms in diamond by sharing electrons between hybridized $2sp^3$ orbitals on adjacent atoms. Four pairs of overlapping sp^3 orbitals reaching a carbon atom are shown; similar bonds occur along each of the solid lines. The small lobes are omitted for clarity.

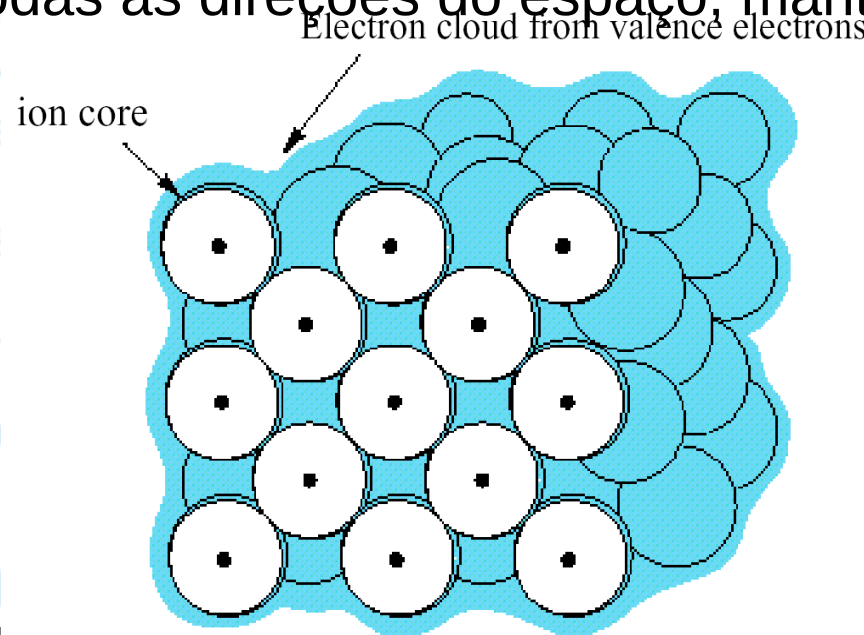
Ligação Covalente no Grafite



- Apenas os orbitais hibridizados p_x e p_y formam um plano de orbitais híbridos.
- Apenas estes três orbitais são compartilhados – formando estrutura parecida com uma folha.
- O orbital não hibridizado p_z compartilha seus elétrons laterais – Estas são as ligações π .
- Elétrons nas ligações π não são unidos com nenhum átomo, e podem mover de átomo para átomo facilmente (similar a ligação metálica).

Ligação metálica

A ligação metálica resulta da interação de átomos iguais ou muito similares que apresentam tendência de ionizar positivamente. Nestas condições, os átomos perdem seus elétrons de valência e formam íons positivos. Os elétrons assim liberados, denominados de ELÉTRONS LIVRES, formam uma espécie de "gás eletrônico" ao redor dos íons, criando um aglomerante eletro-magnético que atrai os íons em todas as direções do espaço, mantendo-os ligados



- ✓ São os elétrons livres, resultante da ligação metálica, que concedem aos metais suas principais características: alta condutividade elétrica, alta condutividade térmica, opacidade, brilho superficial e deformabilidade plástica.
- ✓ Como exemplo de materiais resultantes de ligações metálicas podem ser citados não só os metais (chumbo, estanho, zinco, alumínio, cobre, ferro, níquel, titânio, etc.) mas também as ligas metálicas (latões, bronzes, aços, etc.) - decorrentes da combinação de diferentes metais ou de metais com semicondutores.

A ligação metálica praticamente inexistente na formação de compostos orgânicos e inorgânicos.

Os sais inorgânicos são essencialmente formados por ligações iônicas, como o Fluoreto de Lítio (LiF) por exemplo.

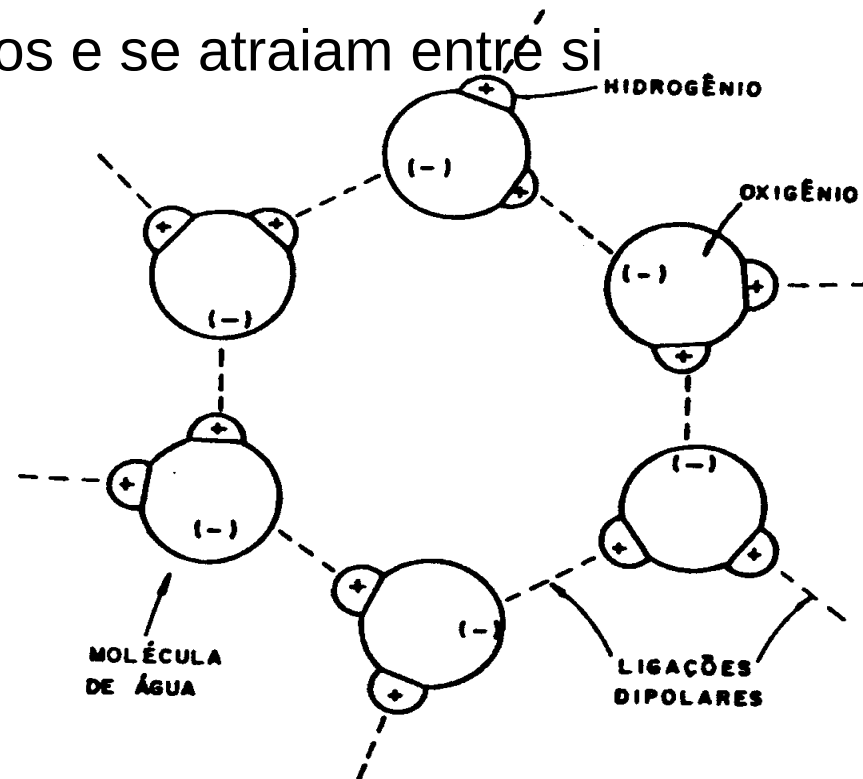
Os Compostos cerâmicos são formados por ligações iônicas coadjuvadas por ligações covalentes.

O Óxido de Magnésio (MgO) é formado predominantemente por ligações iônicas com uma pequena parcela de participação de ligações covalentes;

Óxido de Silício (SiO_2) é um cerâmico formado por ligações iônicas e covalentes em parcelas iguais.

Ligações secundárias

Ligações secundárias ou fracas estão geralmente associadas a ligações primárias covalentes como, por exemplo, nas estruturas moleculares. A direcionalidade característica das ligações covalentes da molécula causa um desbalanceamento de carga elétrica, fazendo com que as moléculas atuem como dipolos elétricos e se atraíam entre si



Nos compostos cerâmicos as ligações covalentes reforçam as ligações iônicas, concedendo a estes materiais alta dureza e alto ponto de fusão.

No caso dos compostos orgânicos, em particular os polímeros que formam os plásticos e borrachas, predominam totalmente as ligações covalentes coadjuvadas por ligações secundárias do tipo dipolar (fracas).

A ausência de ligações metálicas na formação estrutural dos materiais cerâmicos e dos moleculares (onde há ausência de elétrons livres), explica a baixa condutividade elétrica e térmica destes materiais, muitas vezes empregados com isolantes térmicos ou elétricos.

Estruturas cristalinas

A estrutura cristalina se caracteriza pela formação de cristais, isto é, arranjos ordenados e simétricos dos átomos nas três dimensões do espaço. É a estrutura típica dos metais, que constituem cerca de 2/3 dos elementos conhecidos. Também os semicondutores e diversos compostos orgânicos são cristalinos. O material de estrutura pode ser MONOCRISTALINO (um único cristal) ou POLICRISTALINO (diversos cristais unidos entre si pelos seus limites [contornos]), sendo esta forma a mais comumente encontrada na prática, devido às dificuldades tecnológicas de se obter monocristais de grandes dimensões.

Número de Coordenação (NC)

Um dos parâmetros que determinam o tipo de estrutura cristalina é o NÚMERO DE COORDENAÇÃO (NC), definido como o número de átomos vizinhos a qualquer átomo da estrutura. O número de coordenação de uma estrutura cristalina vai depender fundamentalmente da relação dos raios atômicos envolvidos

$r_{\text{menor}}/r_{\text{maior}}$	NC (máximo)
Abaixo de 0,155	2
de 0.155 a 0.225	3
de 0.225 a 0.414	4
de 0.414 a 0,732	6
de 0,732 a 1,000	8
igual a 1 (raios iguais)	12

C.N.

r_C/r_A

Geometry

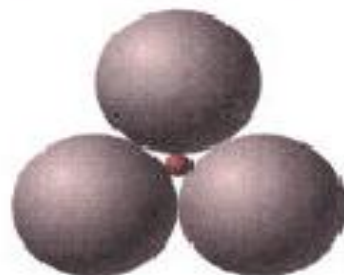
2

<0.155



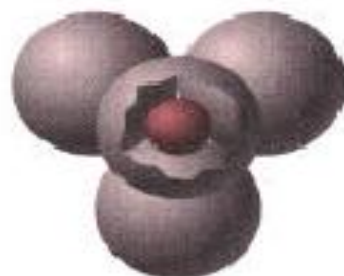
3

0.155-0.225



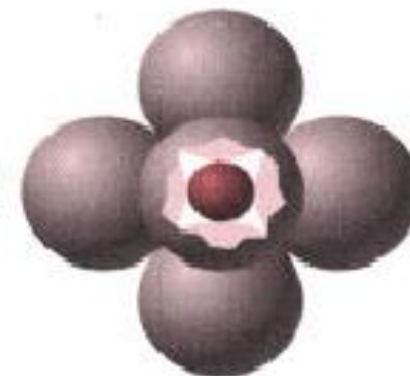
4

0.225-0.414



6

0.414-0.732



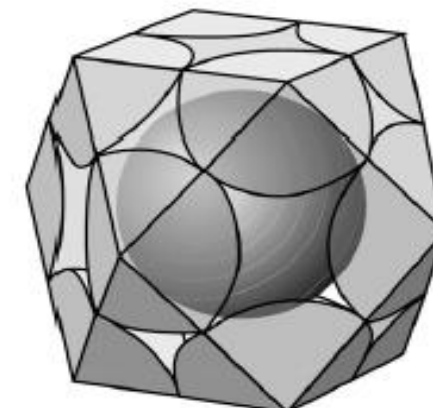
8

0.732-1.0



12

~ 1.0



Na estrutura cristalina, também denominada de REDE CRISTALINA, a menor unidade geométrica tridimensional que se repete sistematicamente no espaço é denominada de CÉLULA ELEMENTAR ou LÁTICE da rede.

Na rede cristalina podem ser definidos PLANOS ATÔMICOS e DIREÇÕES ATÔMICAS, segundo um sistema referencial de coordenadas lineares nas três direções do espaço (x,y,z), associado às arestas principais da célula elementar, cujos comprimentos são denominados de PARÂMETROS DE REDE.

O tipo de célula elementar da estrutura cristalina define o SISTEMA CRISTALINO sob o qual o material cristalizou.

Existem sete tipos possíveis de sistemas cristalinos definidos pelos parâmetros de rede e pelos ângulos de referência da célula elementar. Estes sete sistemas, denominados de REDES DE BRAVAIS

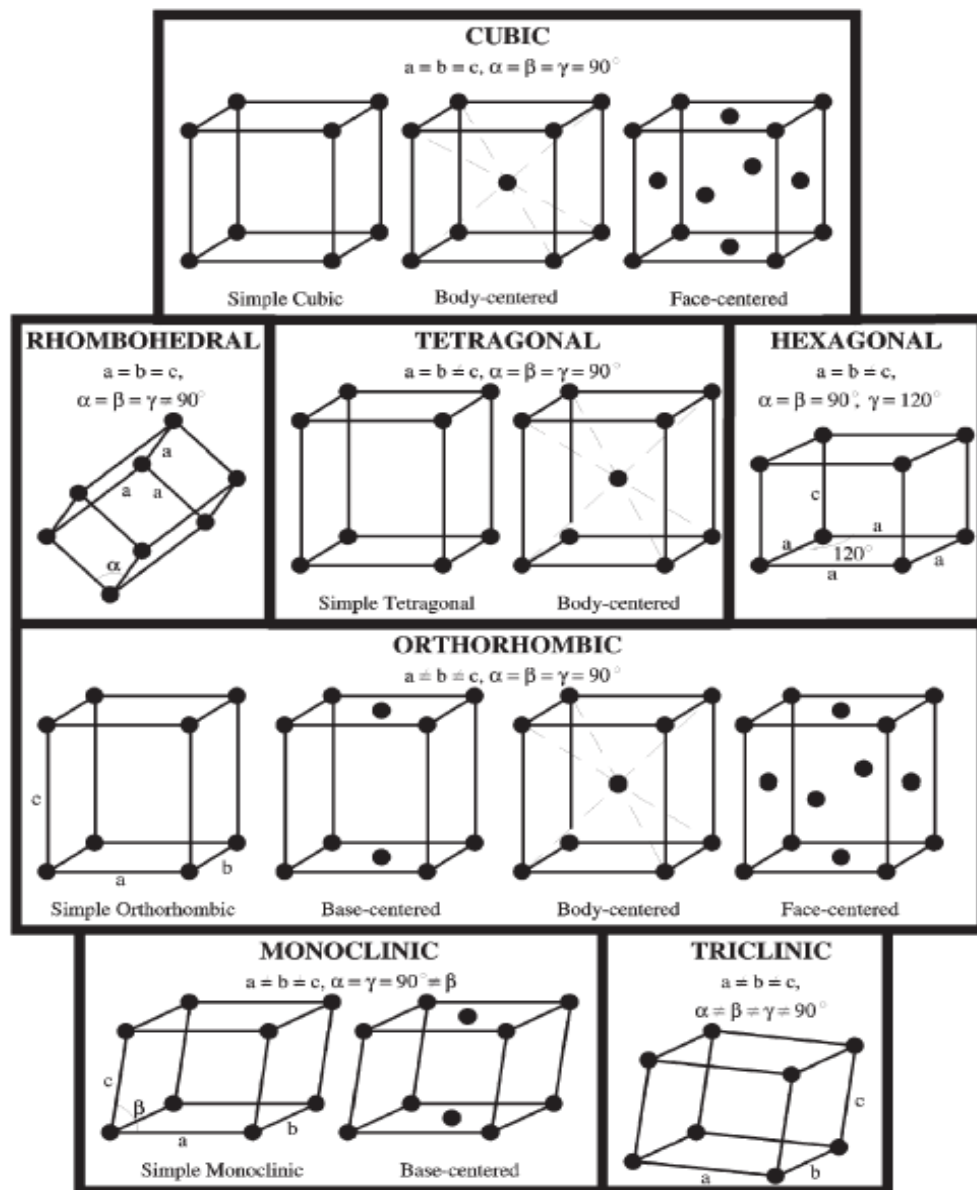
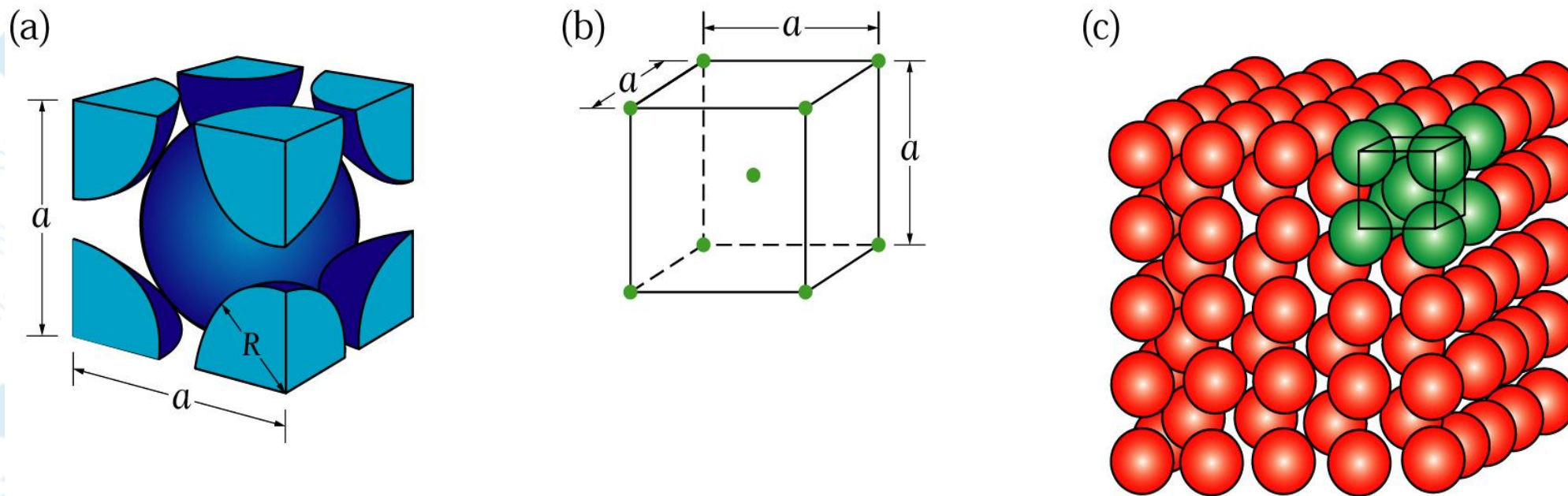


Figura 1.1 Geometric characteristics of the 7 crystal systems and 14 Bravais lattices.

Dentre os sete sistemas cristalinos de Bravais os mais freqüentes entre os materiais de construção mecânica, em particular os metais, são os sistemas CÚBICO e HEXAGONAL com algumas variações.

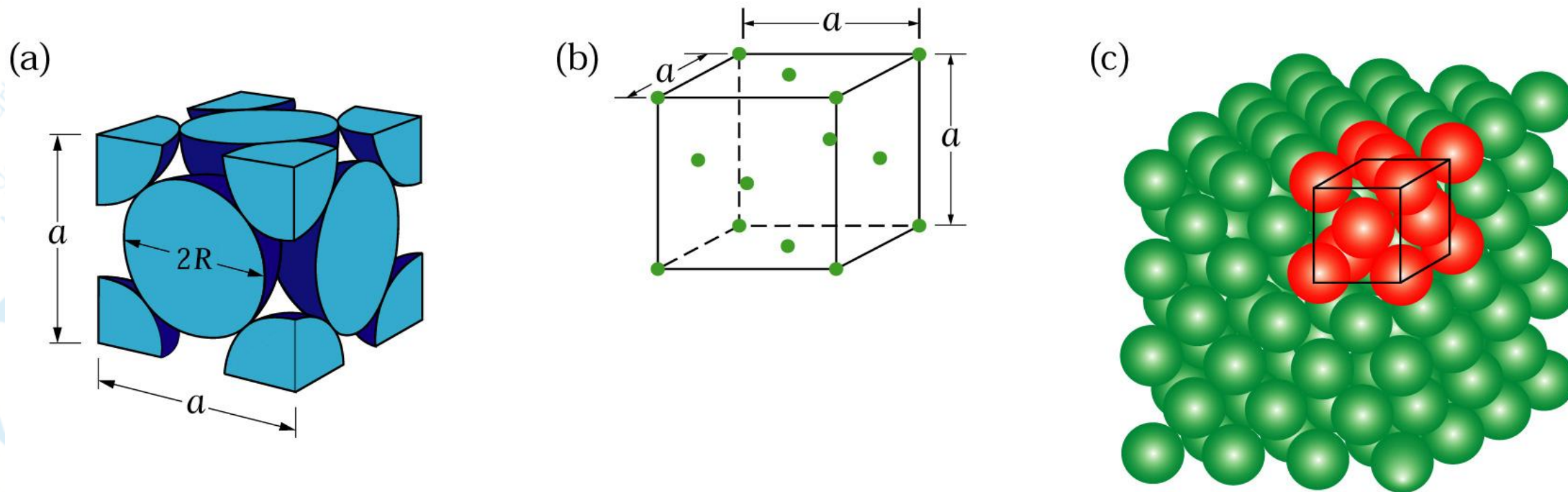
Estrutura Cúbica de Corpo Centrado - CCC



Estrutura ccc: (a) Modelo de esferas; (b) célula unitária; e (c) Monocristal com muitas células.

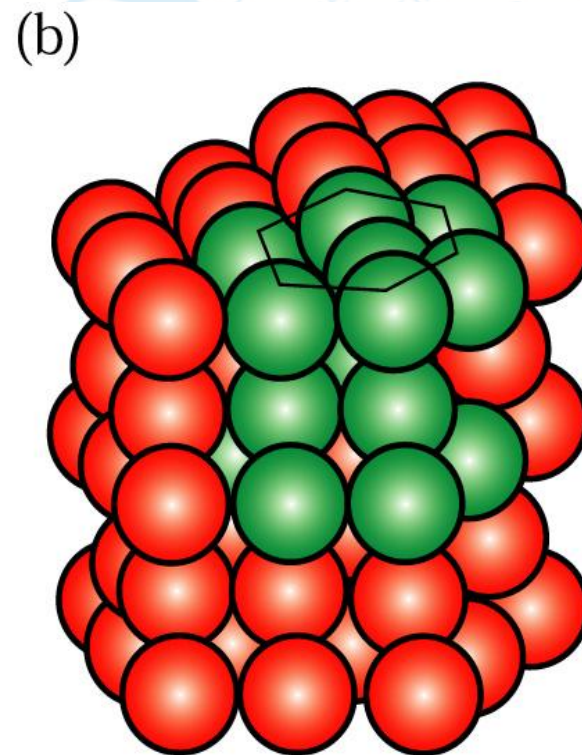
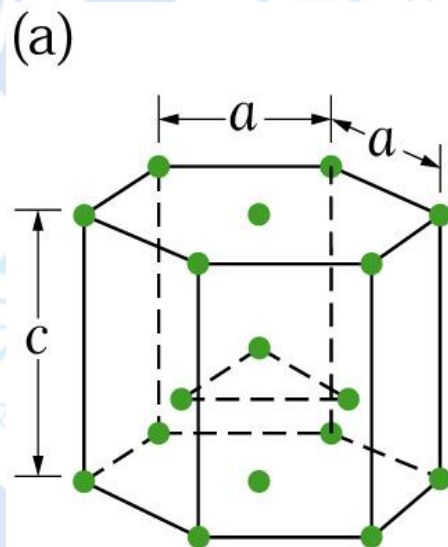
Fonte: W. G. Moffatt, et al., *The Structure and Properties of Materials*, Vol. 1, John Wiley & Sons, 1976.

Estrutura Cúbica de Face Centrada - CFC



Estrutura cfc: (a) Modelo de esferas; (b) célula unitária; e (c) Monocristal com muitas células.

Estrutura Hexagonal Compacta - HC

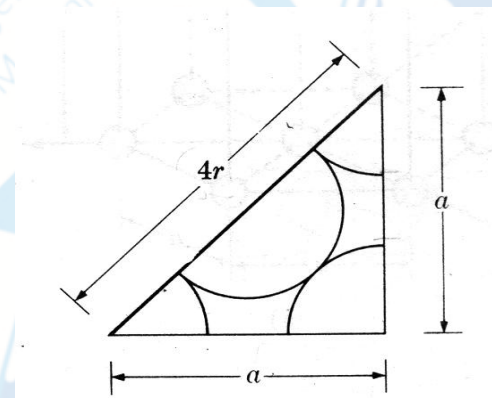
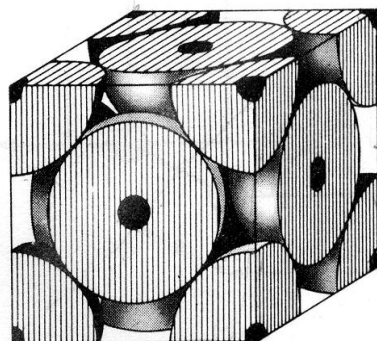


(b) célula unitária; e (c) Monocristal com muitas células.

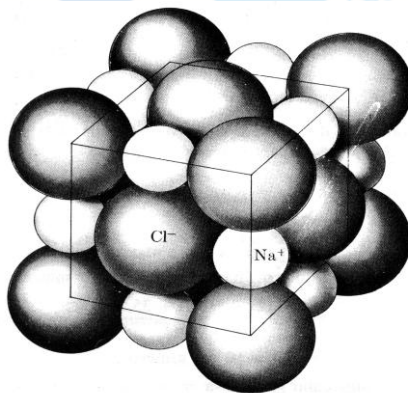
Exercício:

Calcule o fator de empacotamento:

a) para um metal cfc.



b) e para o NaCl (cfc)?



Materias Isoestruturais

Dois materiais que tem estruturas cristalinas idênticas são materiais Isoestruturais

Exemplo: Galena e Halita são isoestruturais

Isto significa que a galena e a halita tem as mesmas direções de clivagem, e ambos tendem a formar cristais cúbicos.

Contudo, outras propriedades (como peso específico) que não dependem da estrutura cristalina são muito diferentes.

Polimorfismo

Polimorfismo é a capacidade de uma substância em se cristalizar em mais que uma estrutura.

Em geral, temperatura e pressão ditam quais são as formas polimórficas.

Alta pressão resultará em estruturas que são mais empacotadas.

Alta temperatura favorecerá a uma estrutura mais aberta e conseqüentemente menos densa.

Exemplos de Polimorfismo

SiO_2 - α quartzo, β quartzo, α e β tridimita, cristobalita, coesita, e stishovite

FeS_2 – pirita e marcasita

C – diamante e grafite

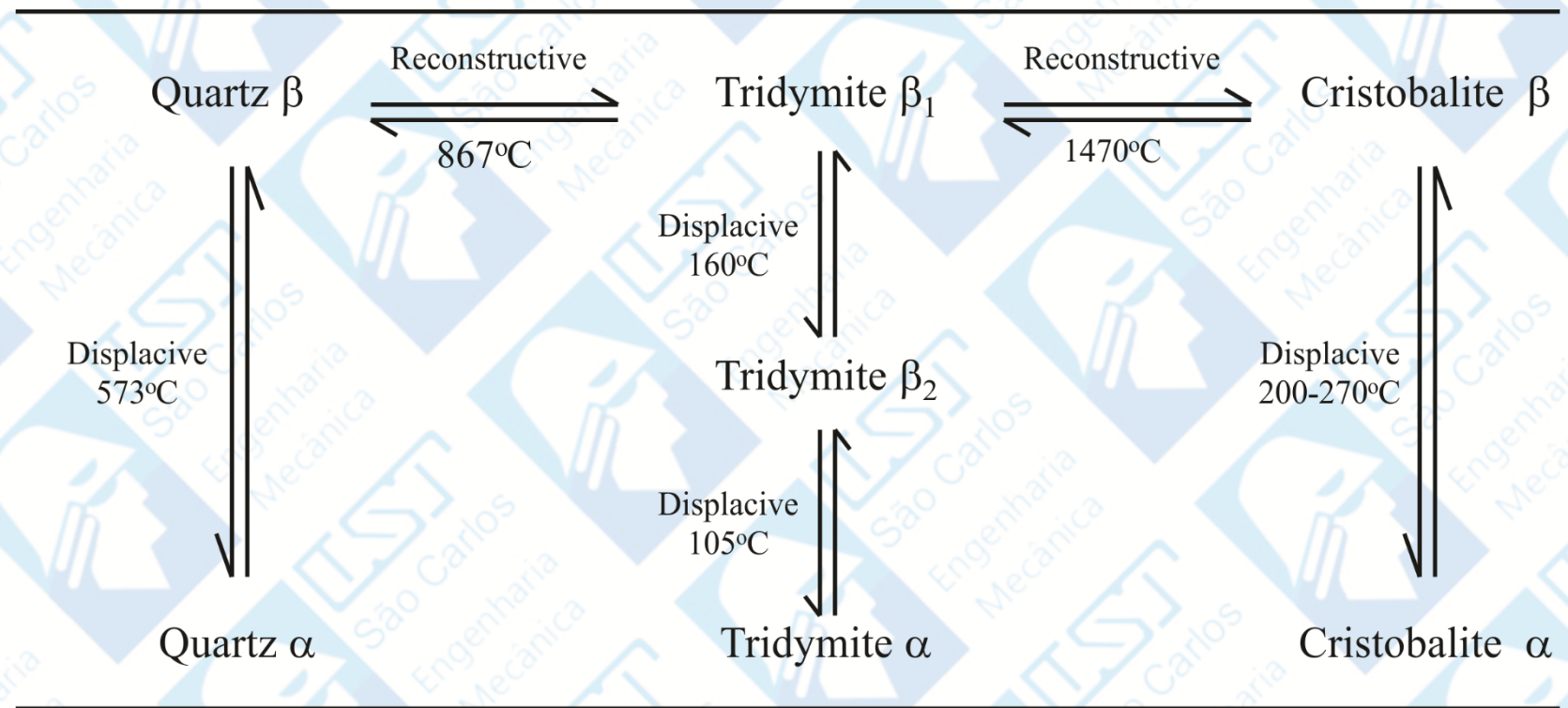
Tipos de Polimorfismo

Reconstrutivo

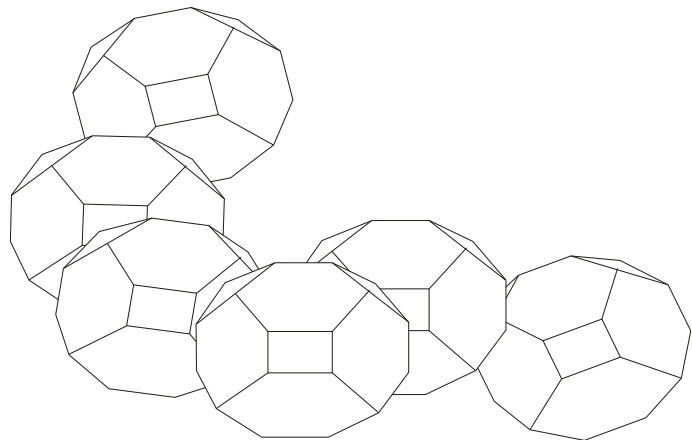
Displacivo

Ordem-Desordem

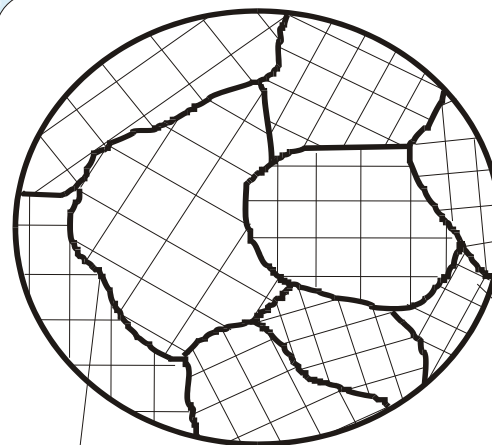
Politipismo



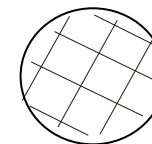
Estruturas Policristalinas



Grãos cristalinos



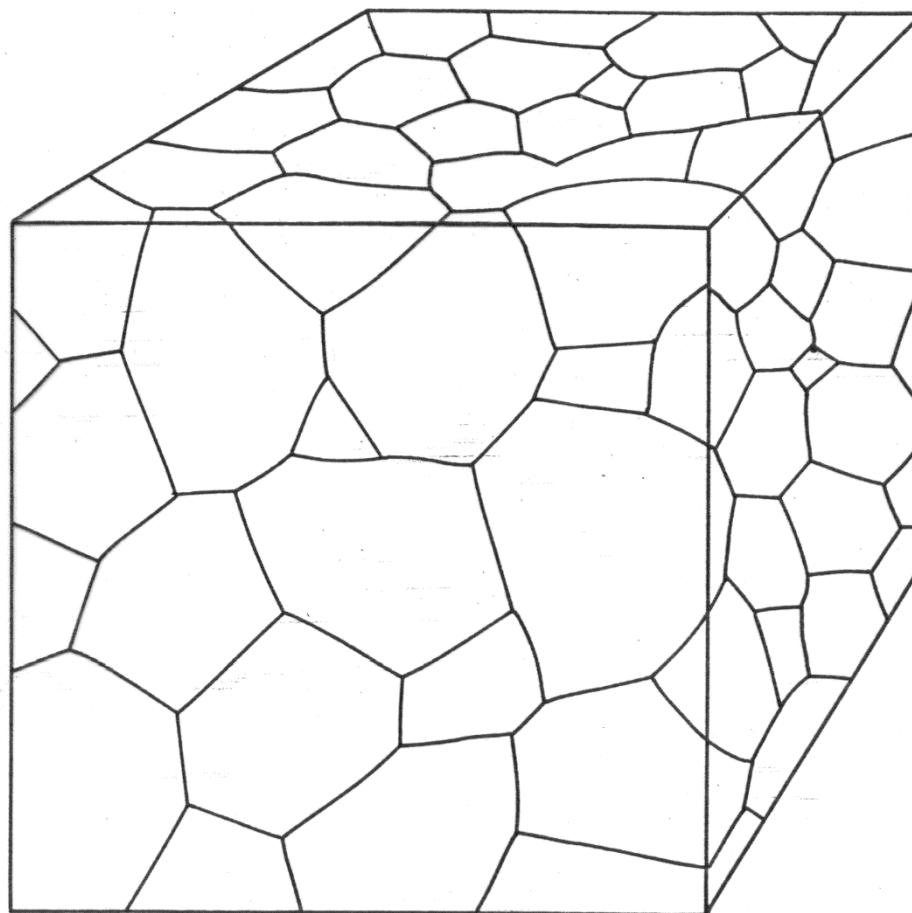
Grão cristalino



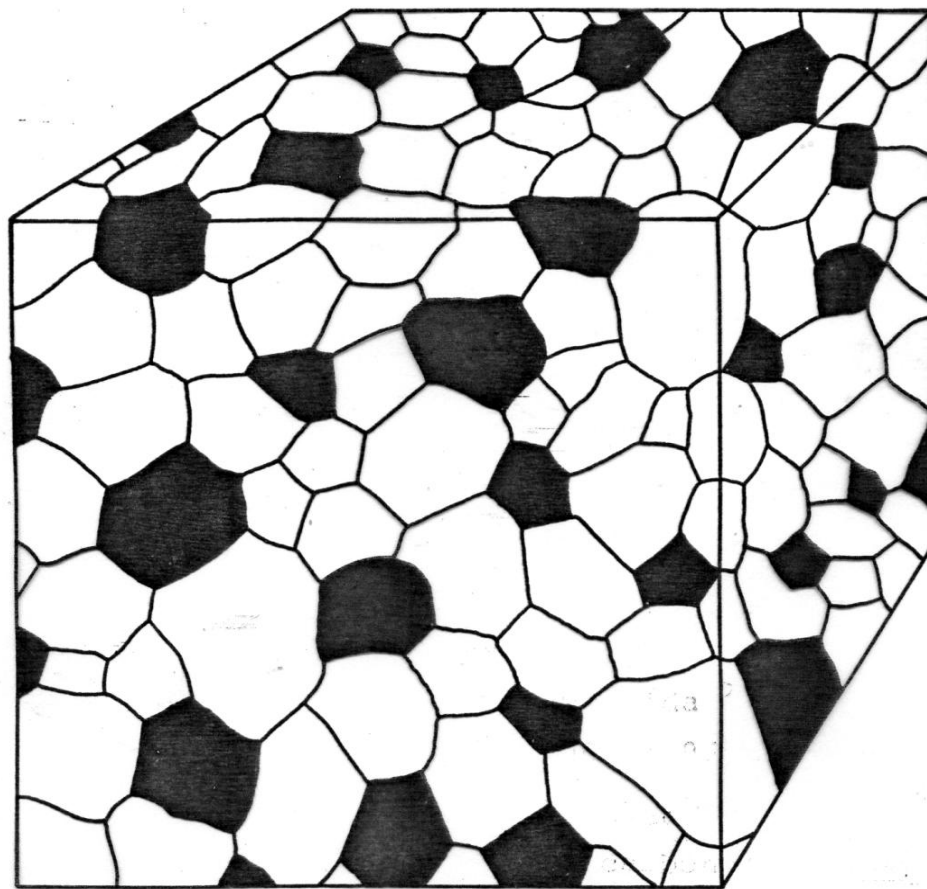
Orientação cristalográfica

Limite de grão

Corte de uma estrutura policristalina



Microestrutura monofásica policristalina vista em três dimensões.



Microestrutura bifásica policristalina vista em três dimensões

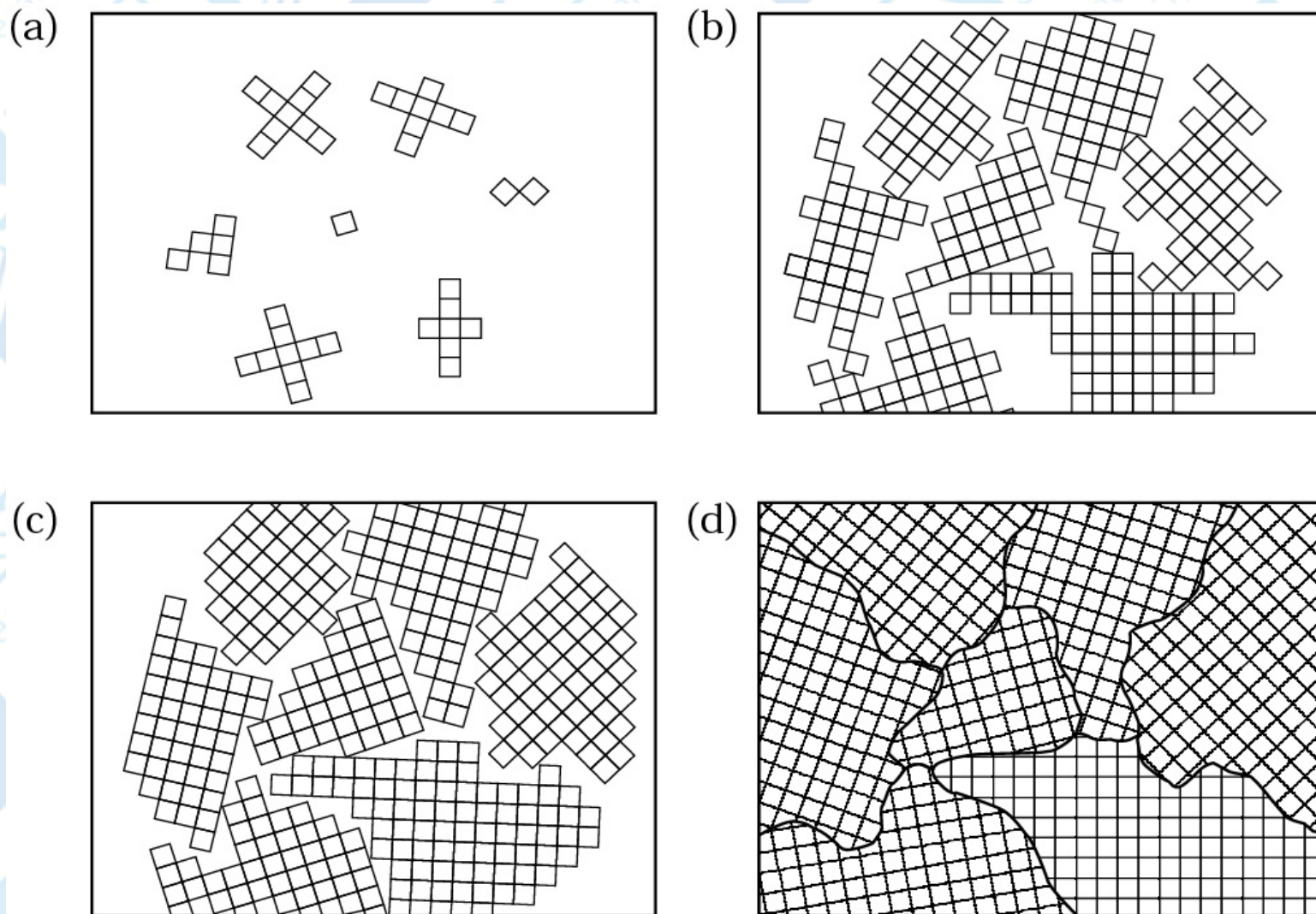
Solidificação

Ilustração esquemática dos estágios de nucleação durante a solidificação.

(a) Nucleação dos cristais.

(b) e (c) Crescimento dos cristais como continuidade da solidificação.

(d) Metal solidificado mostrando os grão individuais e os contornos de grãos. Note os diferentes ângulos em relação aos grãos vizinhos.



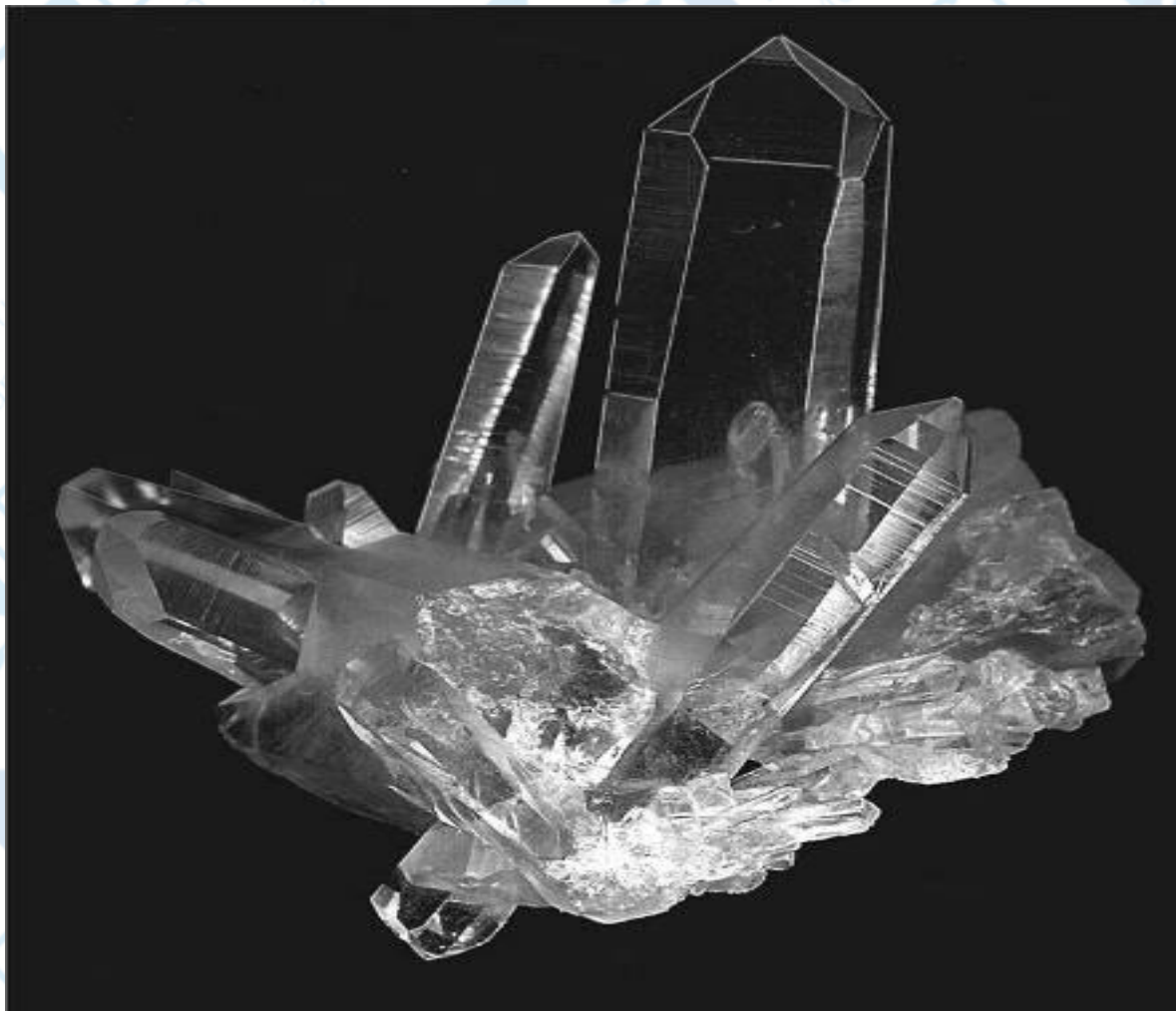
Fonte: W. Rosenhain

Tamanho dos Grãos

TABLE 1.1

ASTM No.	Grains/mm ²	Grains/mm ³
–3	1	0.7
–2	2	2
–1	4	5.6
0	8	16
1	16	45
2	32	128
3	64	360
4	128	1,020
5	256	2,900
6	512	8,200
7	1,024	23,000
8	2,048	65,000
9	4,096	185,000
10	8,200	520,000
11	16,400	1,500,000
12	32,800	4,200,000

Monocristal



- Não-Metálico
- Inorgânico
- Cristalino
- Ocorrência na Natureza
- Mineral/Cerâmica

Microestrutura

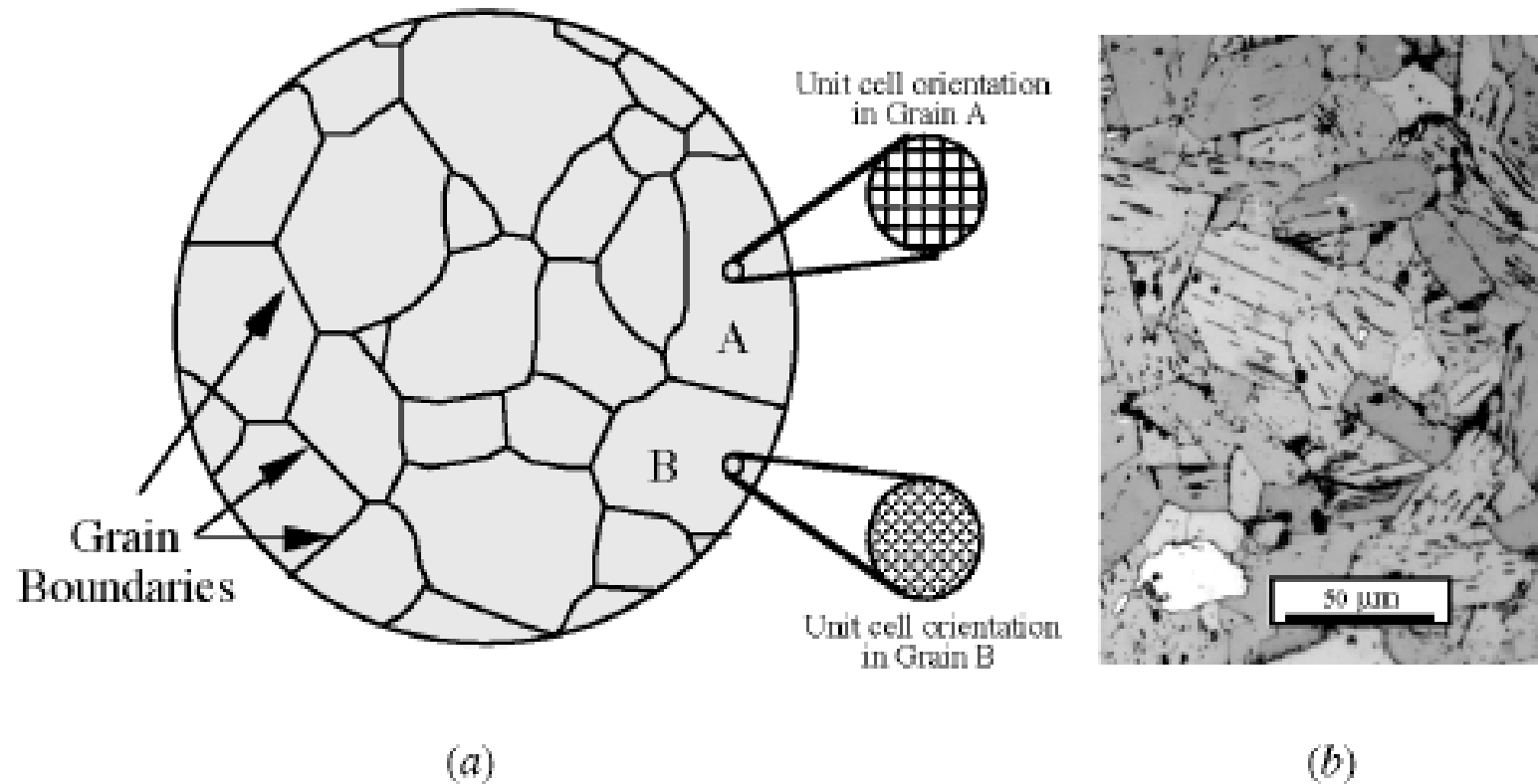
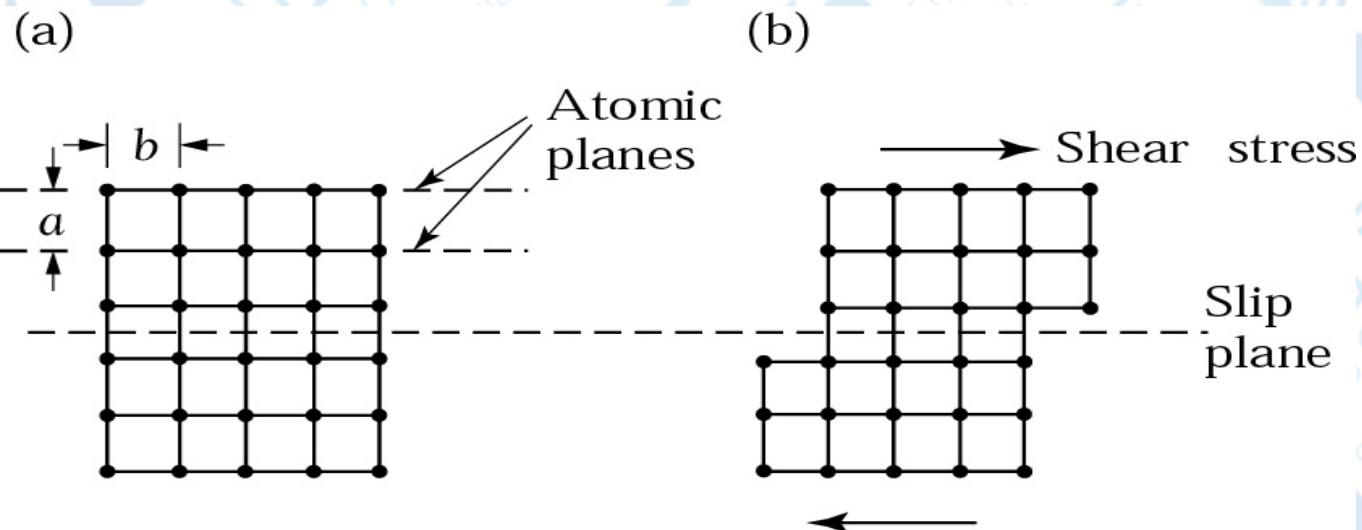


FIGURE 1.3 (a) Schematic of a polycrystalline sample. A polycrystal is made up of many grains separated from one another by regions of disorder known as grain boundaries. (b) typical microstructure as seen through an optical microscope.

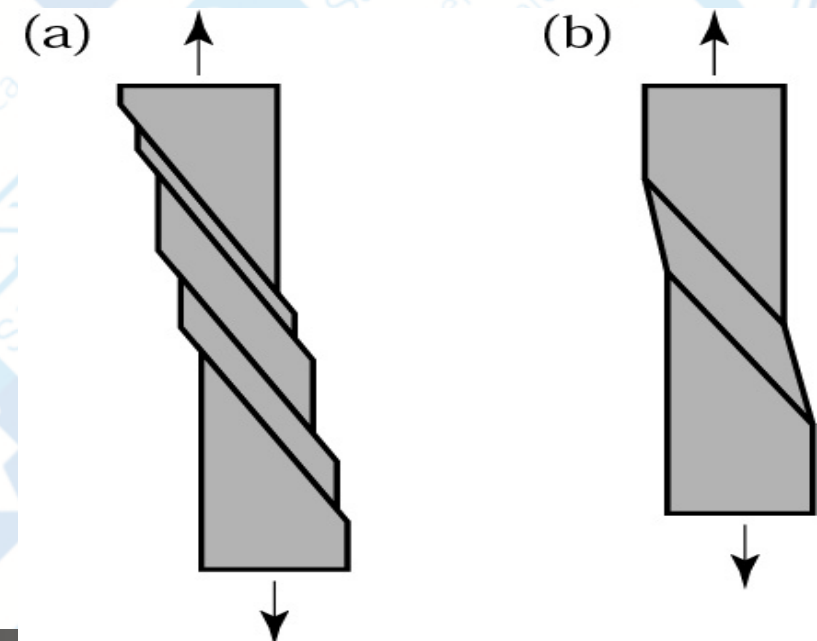
Deformação e escorregamento



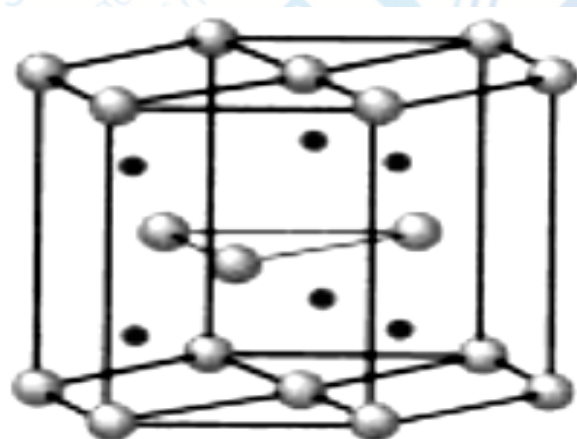
Deformação permanente (deformação plástica) de um simples cristal sujeito à tensão de cisalhamento:

- (a) estrutura antes da deformação;
 - (b) deformação permanente por escorregamento.
- O tamanho da influência da razão b/a na magnitude da tensão de cisalhamento necessária para causar o escorregamento.

- a) Deformação permanente de um simples cristal sob tensão de tração. Note que um plano em escorregamento tende a alinhar a direção das forças de tração. Este comportamento por ser simulado com um maço de cartas com um elástico em torno delas.
- b) (b) distorção em um único cristal.

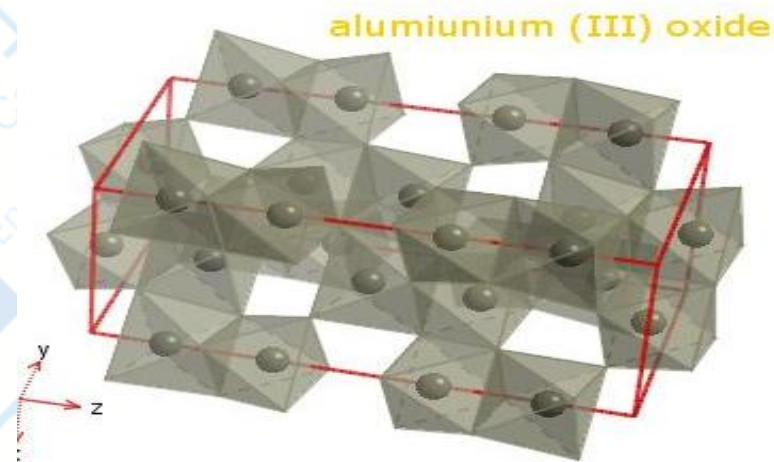


ALUMINA (Al_2O_3)

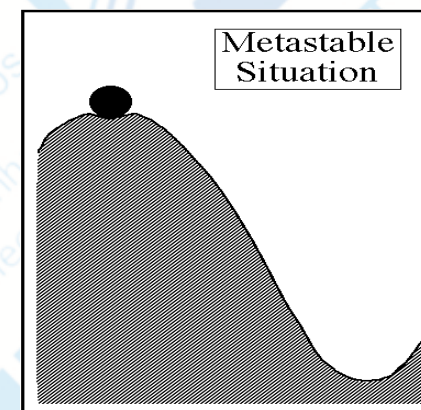


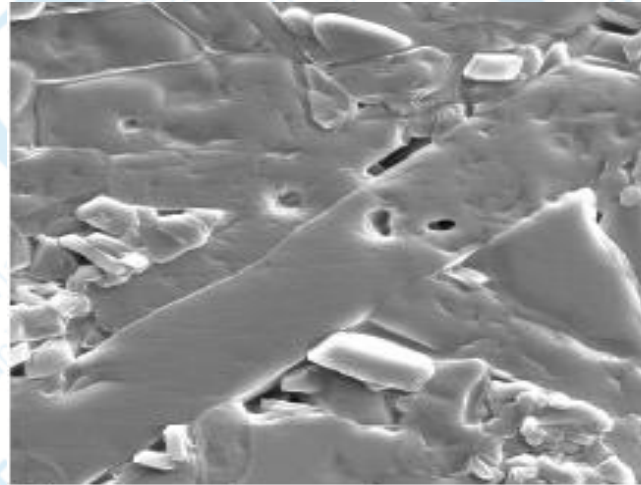
● O^{2-} atoms
● Octahedral sites
occupied by Al^{3+}

Al_2O_3 — α Célula unitária: hexagonal compacta

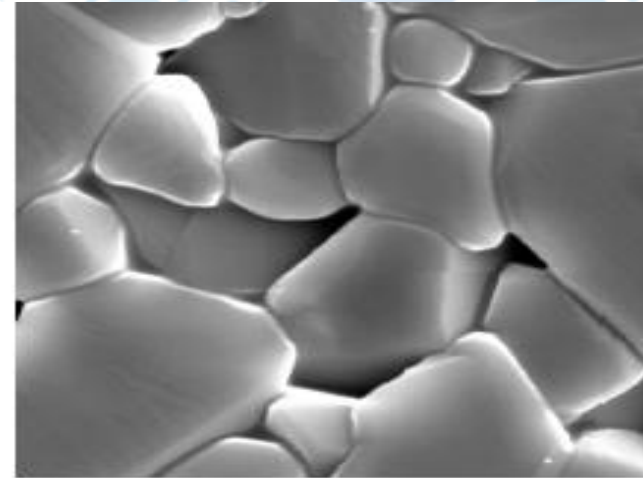


aluminium (III) oxide

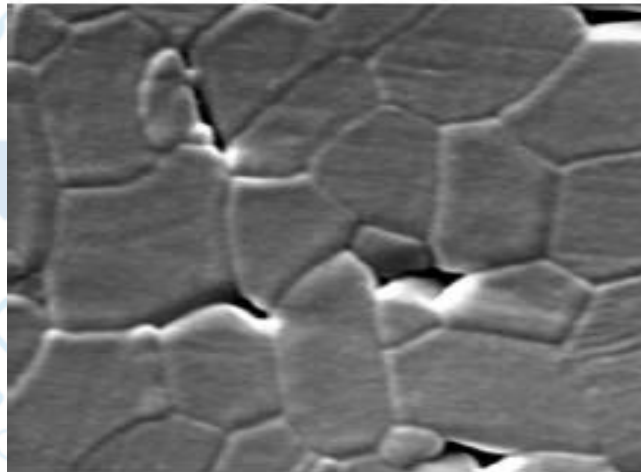




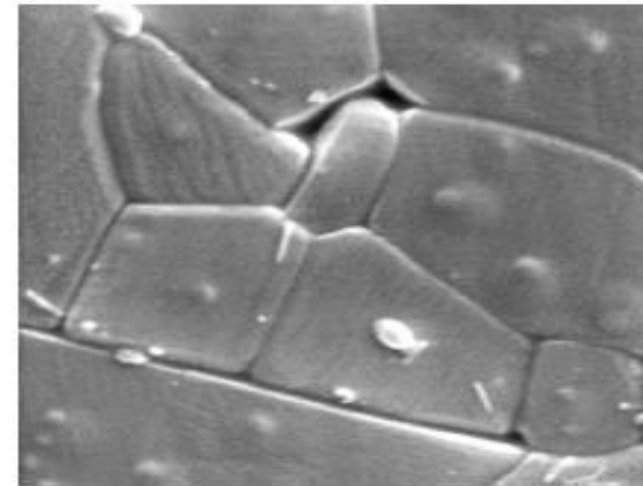
Alumina 96% - Alumina Técnica Comercial



Alumina 99 - Obtida por Injeção

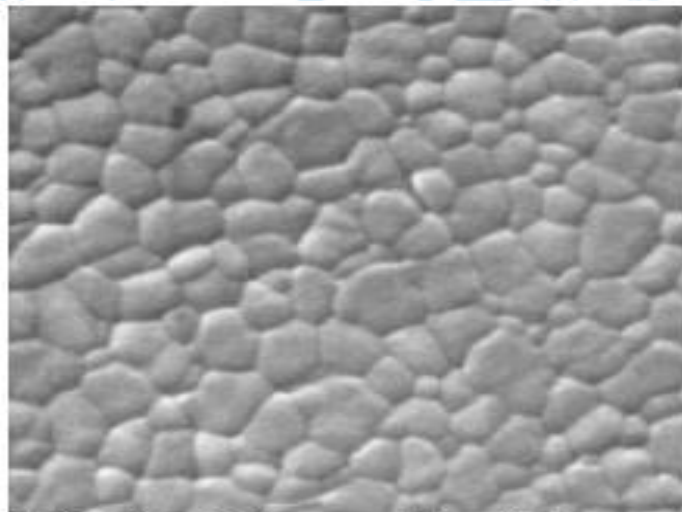


Alumina 99,9 - Dureza, Inércia Química

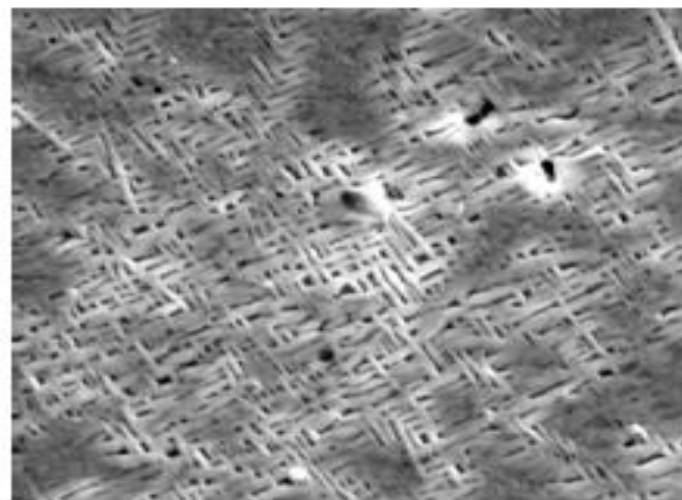


Alumina 99 - Obtida por Prensagem Isostática

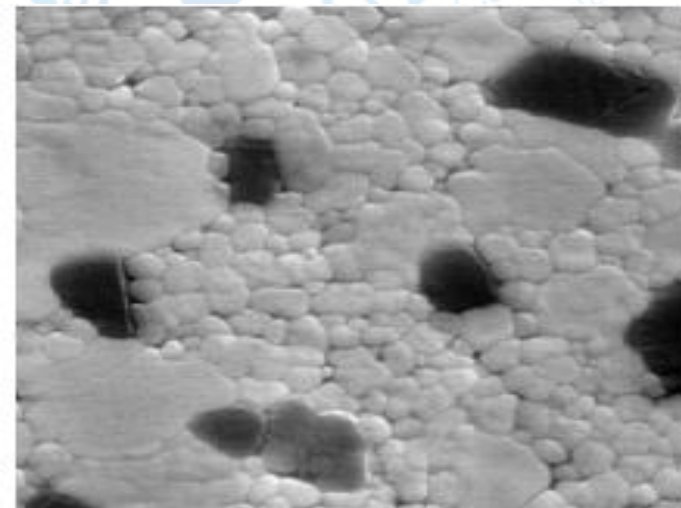
ZIRCÔNIA



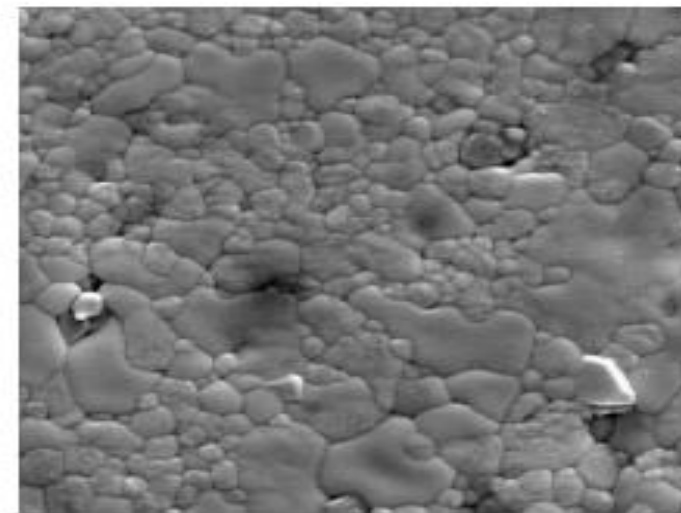
Zircônia 3Y ~ 100% tetragonal - Tenacidade



Zircônia - sensor de oxigênio - Siderurgia
Choque Térmico

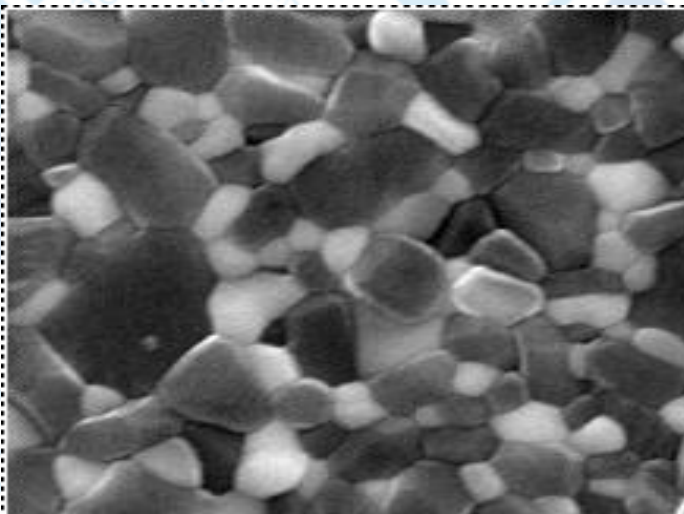


Zircônia 8Y - para sensor Lâmbda - Choque Térmico

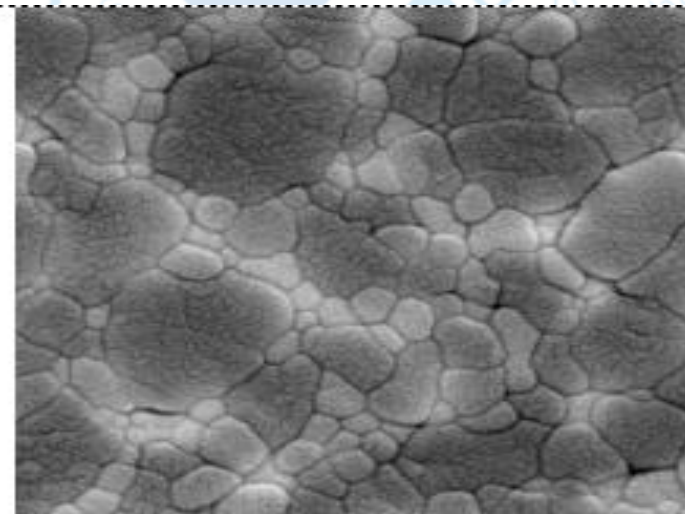


Zircônia 8Y - Sensor de Oxigênio - Sonda Lambda

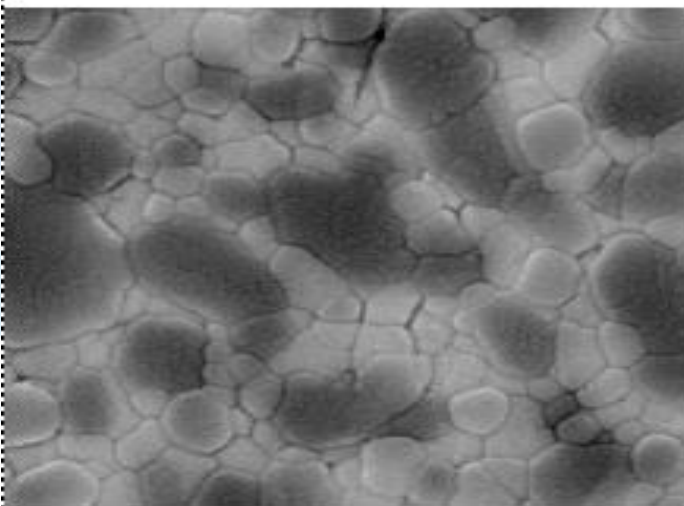
ATZ



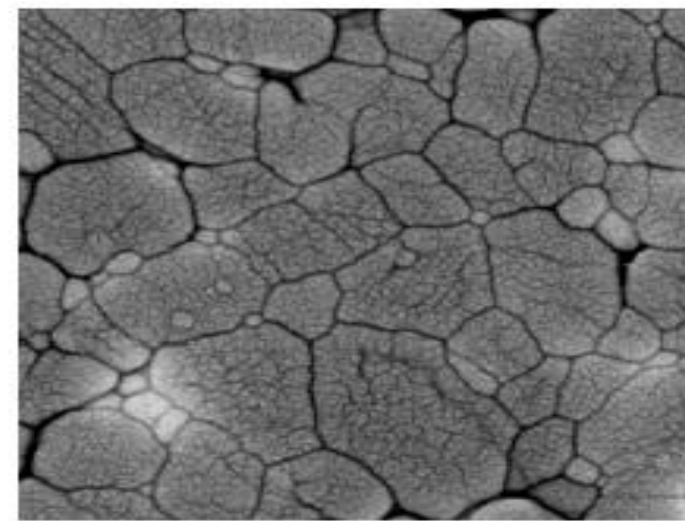
Alumina Reforçada com Zircônia Monoclínica - Tenacidade



Alumina Reforçada com Zircônia Tetragonal (3Y)

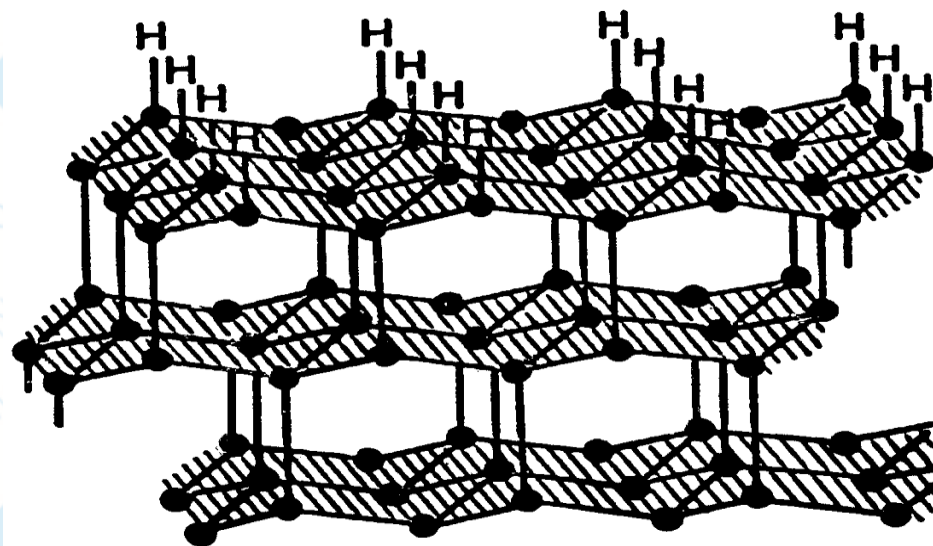


Alumina/Zircônia (ZrO₂ (3Y)) 50%x50%

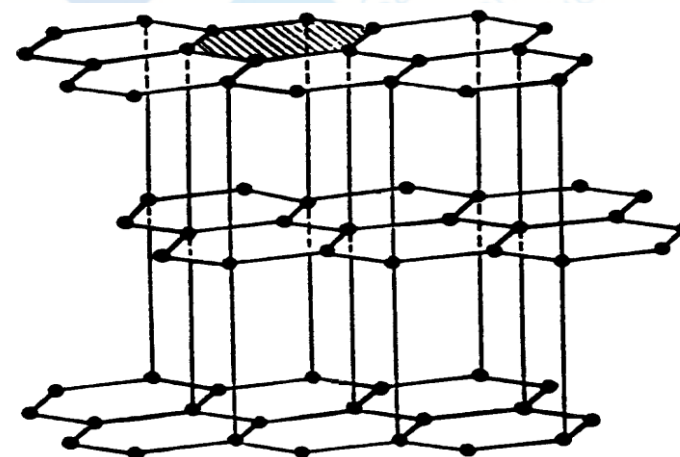


Alumina Reforçada com t-ZrO₂ (3Y)

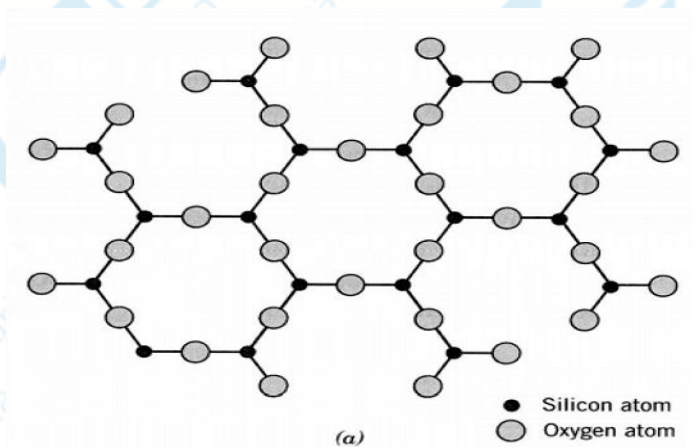
DIAMANTE



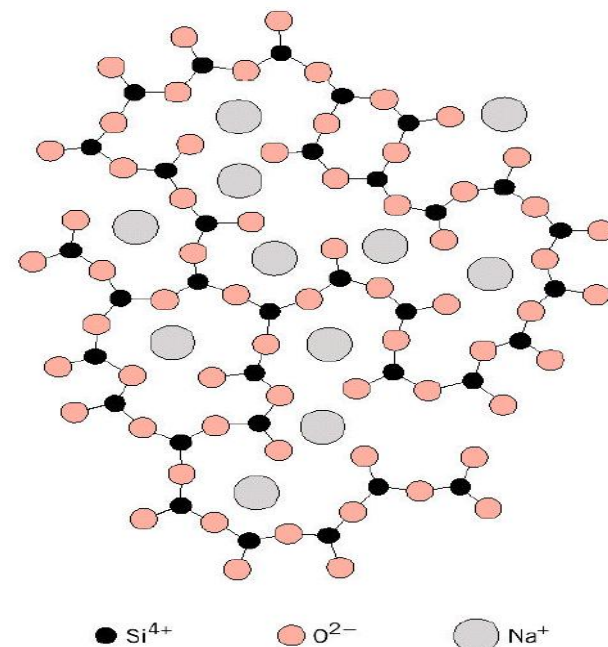
GRAFITE



ESTRUTURA AMORFA OU VÍTREA



Alta ordem

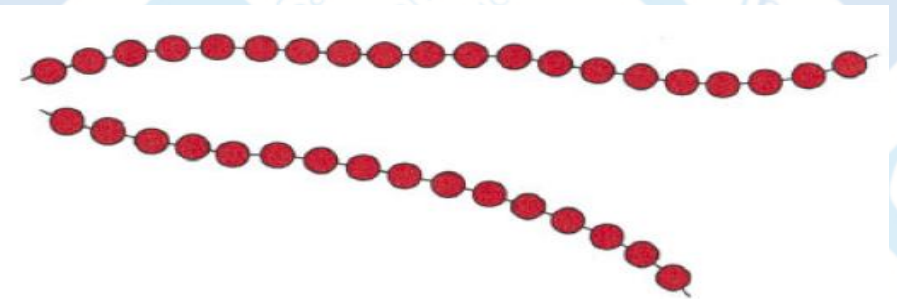


Baixa ordem

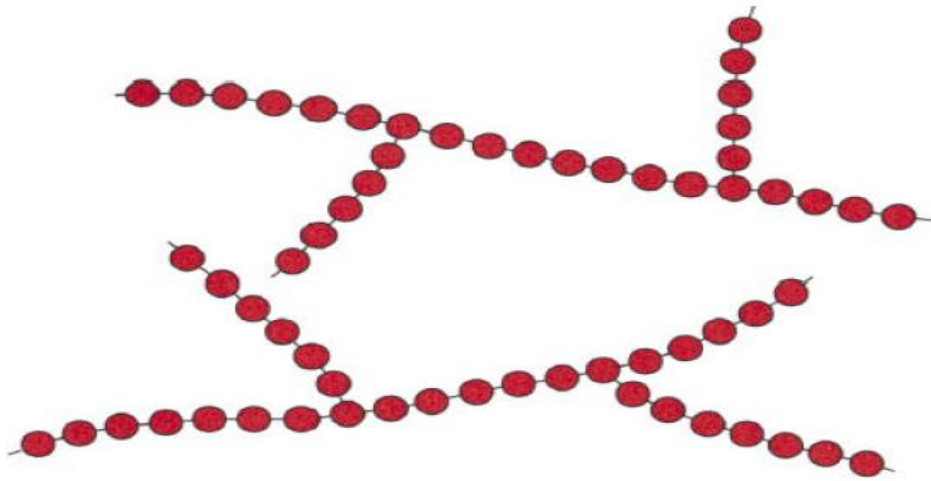
ESTRUTURA MOLECULAR

As características físicas de material polimérico dependem não somente do peso molecular e da forma, mas também de sua estrutura molecular:

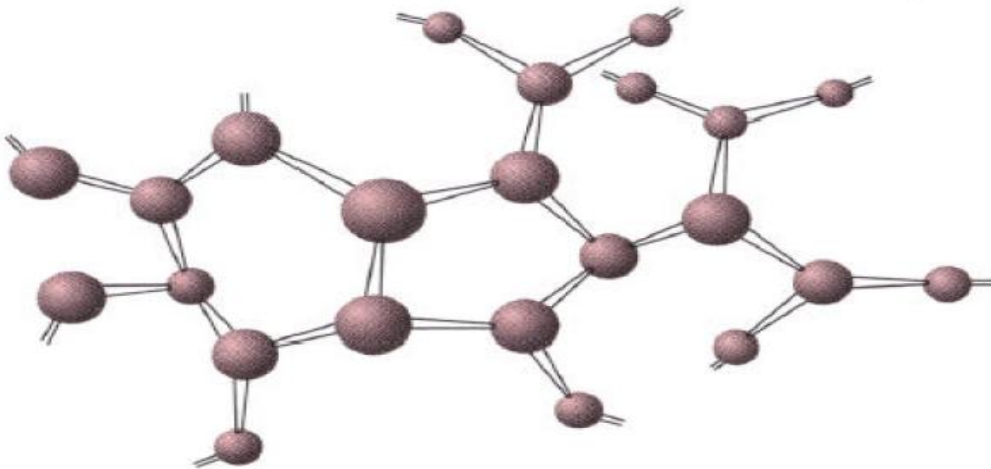
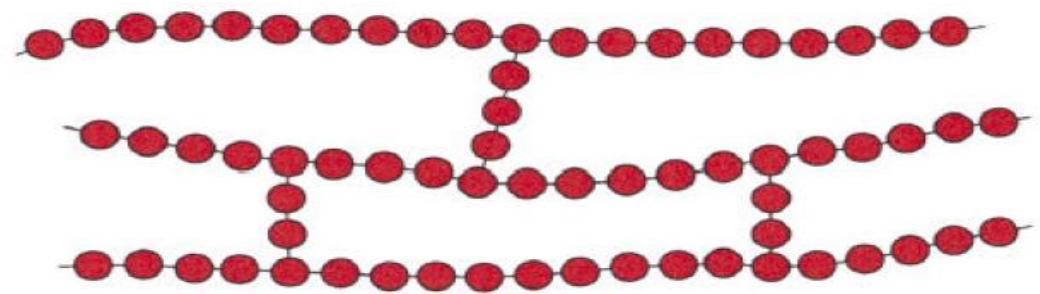
1 Polímeros lineares: União de Van der Waals entre as cadeias. Exemplos: polietileno, nylon.



2 Polímeros ramificados: a eficiência de empacotamento é reduzida em comparação com os polímeros lineares - menor densidade.



3 Polímeros com ligações cruzadas: as cadeias conectadas por ligações covalentes. Frequentemente obtidas pela adição de átomos ou moléculas que formam ligações entre as cadeias. Muitas borrachas tem esta estrutura.



4 Polímeros em rede: redes tridimensionais obtidos de meros trifuncionais.

Exemplos: epoxies, fenolformaldeído.

Referências

- Shackelford JF. Introdução à Ciência dos Materiais para engenheiros. 6.ed. 2008. Pearson Education do Brasil.
- Ashby MF. Materials selection in mechanical design. Ed. Pergamon Press, 311p. 1992.
- Callister WDJR. Materials science and engineering: an introduction. Ed. John Wiley & Sons, Inc. Ed.3, 811p, 1994.
- Padilha AF. Materiais de Engenharia Microestrutura-Propriedades. Hemus Editora limitada, 349p, 1997.
- Mano EB. Polímeros como materiais de engenharia. Ed. Edgard Blücher Ltda. 1991