



ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

CIÊNCIA E ENGENHARIA DOS MATERIAIS
LIGAÇÕES QUÍMICAS
CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

PMT3110 - Introdução à Ciência dos Materiais para Engenharia

Parte I

Ciência e Engenharia dos Materiais : Definições Classificação dos Materiais

OBJETIVOS

- Apresentar a relação entre Ciência dos Materiais e Engenharia de Materiais.
- Apresentar a relação entre composição, estrutura, processamento e propriedades/desempenho de um material.
- Apresentar uma classificação dos diferentes tipos de materiais.

Definições

- **Ciência dos Materiais**
 - Investigação das relações entre composição/estrutura e propriedades dos materiais
- **Engenharia dos Materiais**
 - Projeto, desenvolvimento ou aperfeiçoamento de técnicas de processamento de materiais (= técnicas de fabricação) com base nas relações composição/estrutura e propriedades.
 - E também:
 - Desenvolvimento de formas de produção de materiais socialmente desejáveis a custo socialmente aceitável.

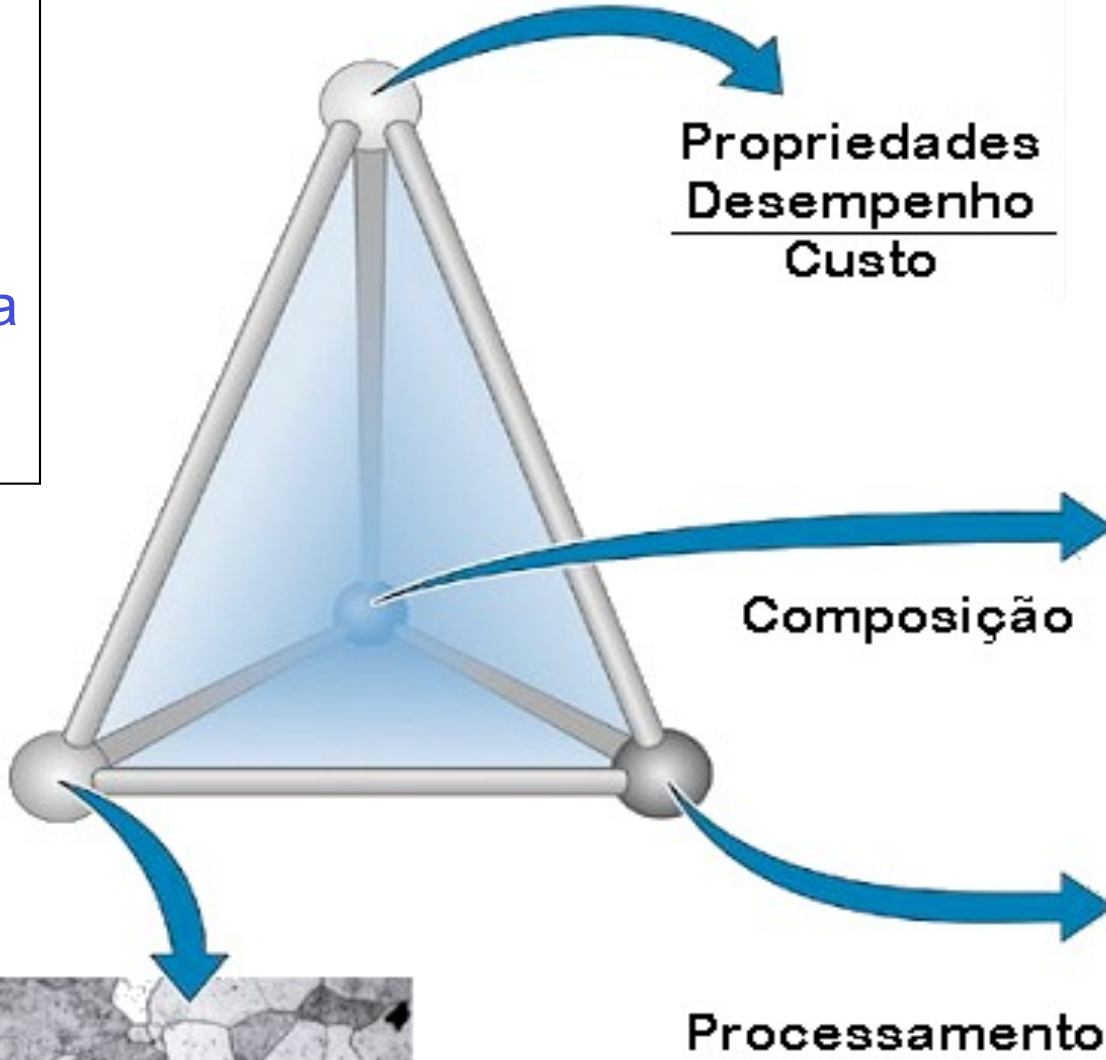
Definições

- Ciência e Engenharia dos Materiais são campos intimamente interligados e interdisciplinares.
- “Ciência e Engenharia dos Materiais é a área da atividade humana associada com a geração e a aplicação de conhecimentos que relacionem composição, estrutura e processamento de materiais às suas propriedades e usos.”

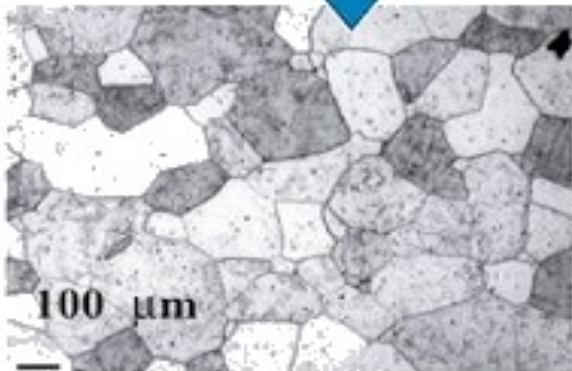
Morris Cohen, MIT (in Padilha, A.F. – Materiais de Engenharia, Hemus, 1997, cap. 1)

- Objetivos:
 - Desenvolvimento de materiais já conhecidos visando novas aplicações ou visando melhorias no desempenho.
 - Desenvolvimento de novos materiais para aplicações conhecidas.
 - Desenvolvimento de novos materiais para novas aplicações.

Objeto da Ciência e Engenharia de Materiais



Key																																																																																																																																																																																																																																																																																						
Metal																																																																																																																																																																																																																																																																																						
Nonmetal																																																																																																																																																																																																																																																																																						
Intermediate																																																																																																																																																																																																																																																																																						
Atomic number																																																																																																																																																																																																																																																																																						
Symbol																																																																																																																																																																																																																																																																																						
Atomic weight																																																																																																																																																																																																																																																																																						
1	H	1.0080	2	He	4.0026	3	Li	6.941	4	Be	9.0122	5	B	10.811	6	C	12.011	7	N	14.007	8	O	15.999	9	F	18.998	10	Ne	20.183																																																																																																																																																																																																																																																									
11	Na	22.990	12	Mg	24.305	13	Al	26.982	14	Si	28.086	15	P	30.974	16	S	32.064	17	Cl	35.453	18	Ar	39.948	19	K	39.098	20	Ca	40.078	21	Sc	44.956	22	Ti	47.87	23	V	50.942	24	Cr	51.996	25	Mn	54.938	26	Fe	55.845	27	Co	58.933	28	Ni	58.69	29	Cu	63.54	30	Zn	65.41	31	Ga	69.72	32	Ge	72.64	33	As	74.922	34	Se	78.96	35	Br	79.904	36	Kr	83.80	37	Rb	85.47	38	Sr	87.62	39	Y	88.91	40	Zr	91.22	41	Nb	92.91	42	Mo	95.94	43	Tc	98	44	Ru	101.07	45	Rh	102.91	46	Pd	106.4	47	Ag	107.87	48	Cd	112.41	49	In	114.82	50	Sn	118.71	51	Sb	121.76	52	Te	127.60	53	I	126.90	54	Xe	131.30	55	Cs	132.91	56	Ba	137.34	57	La	138.91	58	Ce	140.12	59	Pr	140.91	60	Nd	144.24	61	Pm	144.91	62	Sm	150.36	63	Eu	151.96	64	Gd	157.25	65	Tb	158.93	66	Dy	162.50	67	Ho	164.93	68	Er	167.26	69	Tm	168.93	70	Yb	173.04	71	Lu	174.97	72	Hf	178.49	73	Ta	180.95	74	W	183.84	75	Re	186.2	76	Os	190.23	77	Ir	192.22	78	Pt	195.08	79	Au	196.97	80	Hg	200.59	81	Tl	204.38	82	Pb	207.19	83	Bi	208.98	84	Po	(209)	85	At	(210)	86	Rn	(222)	87	Fr	(223)	88	Ra	(226)	89	Ac	(227)	90	Th	232.04	91	Pa	231.04	92	U	238.03	93	Np	(237)	94	Pu	(244)	95	Am	(243)	96	Cm	(247)	97	Bk	(247)	98	Cf	(251)	99	Es	(252)	100	Fm	(257)	101	Md	(258)	102	No	(259)	103	Lr	(262)



Estrutura (nas diversas escalas)

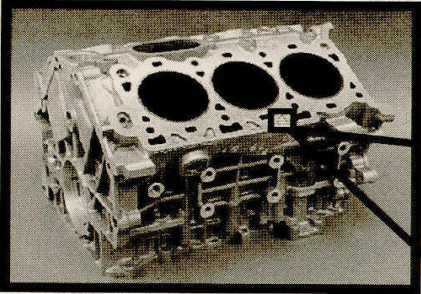


Composição e Estrutura

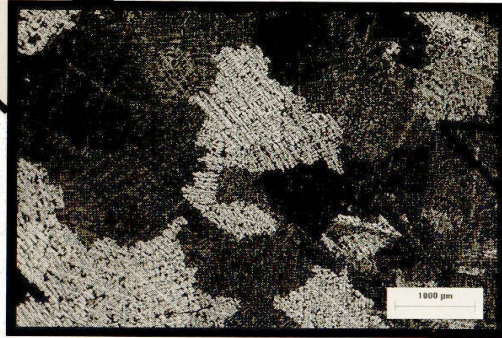
- **Composição**
 - Natureza química dos materiais
- **Estrutura**
 - Associada ao arranjo dos componentes do material em estudo
 - Pode (e deve) ser analisada em diferentes *ESCALAS*
 - Estrutura em escala atômica (menor ou igual a $\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$)
 - Nanoestrutura (da ordem de nm)
 - Sólidos Amorfos (alguns nm) e Sólidos Cristalinos ($\sim >100\text{nm}$ até $\text{mm} = 10^{-3}\text{m}$)
 - Microestrutura (alguns $\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$ até mm)
 - Macroestrutura (normalmente igual ou maior que mm)

Estruturas

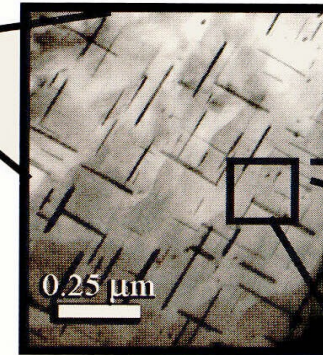
Escala "Macro"



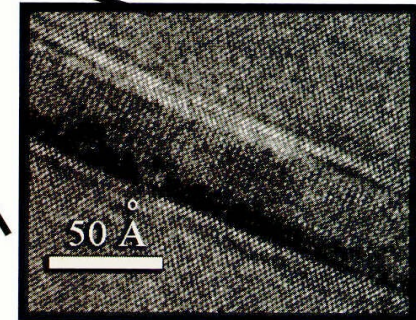
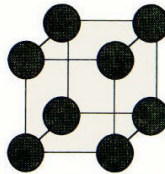
Escala "Micro"



Escala "Nano"



Escala Atômica



Macro-Scale Structure
Engine Block
 ≅ upto 1 meter

Performance Criteria

- Power generated
- Efficiency
- Durability
- Cost

Microstructure
 - Grains
 ≅ 1 – 10 millimeters

Properties affected

- High cycle fatigue
- Ductility

Microstructure
 - Dendrites & Phases
 ≅ 50 – 500 micrometers

Properties affected

- Yield strength
- Ultimate tensile strength
- High cycle fatigue
- Low cycle fatigue
- Thermal Growth
- Ductility

Nano-structure
 - Precipitates
 ≅ 3-100 nanometers

Properties affected

- Yield strength
- Ultimate tensile strength
- Low cycle fatigue
- Ductility

Atomic-scale structure
 ≅ 1-100 Angstroms
Property affected

- Young's modulus
- Thermal Growth

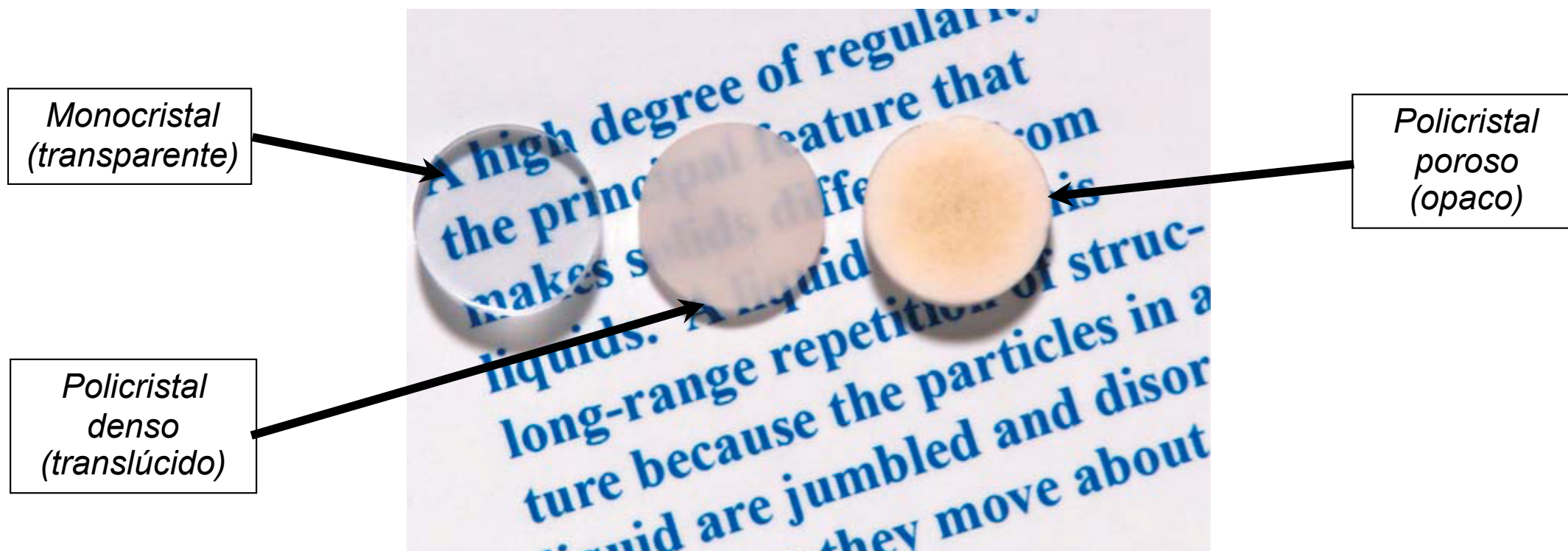
*Bloco de motor em liga
 de alumínio fundido
 (material em desenvolvimento)
 Ford Motor Company*

Propriedades de um Material

- Propriedade
 - Tipo e intensidade da resposta a um estímulo que é imposto ao material
- As principais propriedades dos materiais podem ser agrupadas em:
 - Mecânicas
 - Elétricas
 - Térmicas
 - Magnéticas
 - Ópticas
 - Químicas
 - de Degradação (corrosão, oxidação, desgaste)

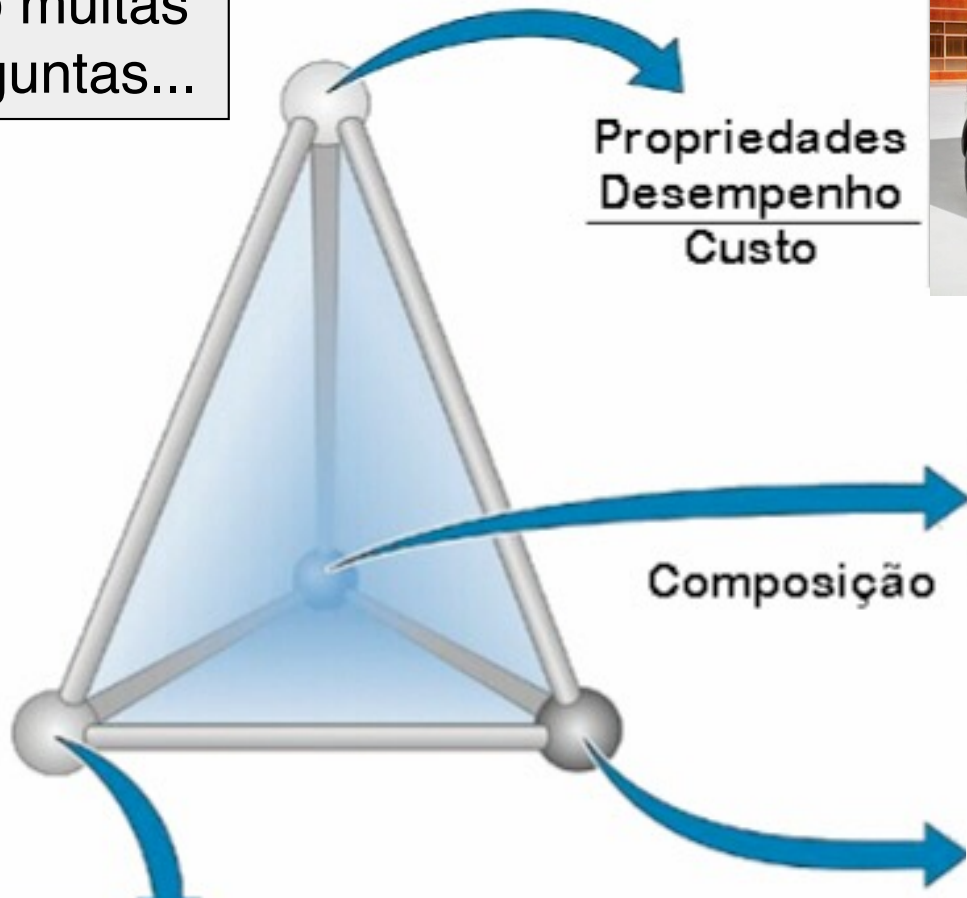
Processamento e Desempenho

- **Processamento:** conjunto de técnicas para obtenção de materiais com formas e propriedades específicas.
- **Desempenho:** resposta do material a um estímulo externo, presente nas condições reais de utilização.



Exemplo : Três amostras de óxido de alumínio (Al₂O₃) processadas por diferentes rotas.

São muitas perguntas...



Propriedades Desempenho
Custo



> qual a relação resistência mecânica/densidade?
 > qual é a facilidade de conformação?
 > como os materiais envolvidos se comportam sob impacto?
 > qual é o custo?

Composição

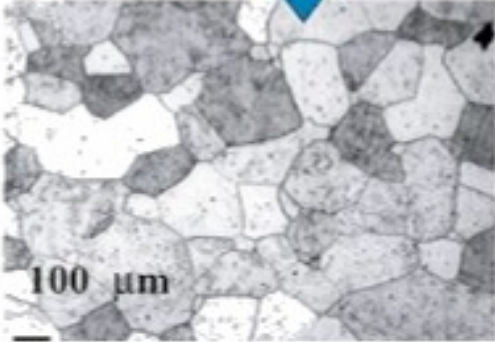
Key		Metal		Nonmetal		Intermediate	
IA	IIA	IIIB	IIIB	IIIB	IIIB	IIIB	IIIB
1	2	3	4	5	6	7	8
1	2	3	4	5	6	7	8
9	10	11	12	13	14	15	16
17	18	19	20	21	22	23	24
29	30	31	32	33	34	35	36
39	40	41	42	43	44	45	46
53	54	55	56	57	58	59	60
67	68	69	70	71	72	73	74
79	80	81	82	83	84	85	86
89	90	91	92	93	94	95	96
101	102	103	104	105	106	107	108
113	114	115	116	117	118	119	120
122	123	124	125	126	127	128	129
133	134	135	136	137	138	139	140
145	146	147	148	149	150	151	152
157	158	159	160	161	162	163	164
167	168	169	170	171	172	173	174
179	180	181	182	183	184	185	186
189	190	191	192	193	194	195	196
199	200	201	202	203	204	205	206
210	211	212	213	214	215	216	217
220	221	222	223	224	225	226	227
232	233	234	235	236	237	238	239
243	244	245	246	247	248	249	250

> ligas de aço ou de alumínio?
 > quais elementos de liga usar?
 > quanto de cada elemento de liga usar?
 > polímeros? quais?
 > compósitos? matriz? fibra?

Processamento



> como produzir chapas de forma a obter ao mesmo tempo conformabilidade e resistência?



Estrutura (nas diversas escalas)

> como controlar a estrutura?
 > que aspectos da estrutura controlam as propriedades desejadas?

...a serem **RESPONDIDAS** em cada caso!

Parte II

Ligações Químicas

OBJETIVO

- Relacionar o tipo de ligação química com as principais propriedades dos materiais.

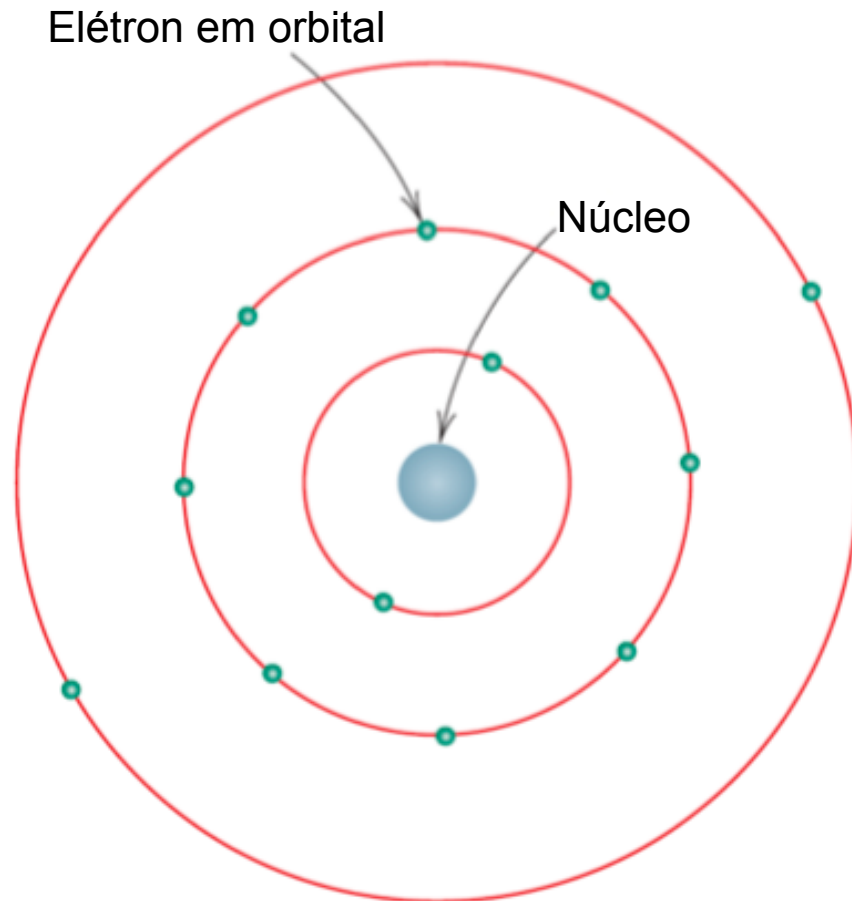
ROTEIRO

- Recordar conceitos básicos:
 - Conceitos fundamentais da estrutura atômica
 - Modelo atômico de Bohr e o da mecânica quântica.
 - Eletronegatividade
- Recordar os tipos de ligações químicas.
- Energia de Ligação
- Relacionar propriedades com os tipos de ligações químicas.

Conceitos Fundamentais

- Cada átomo é composto por:
 - Núcleo → prótons e nêutrons.
 - Elétrons, que circundam o núcleo.
- Elétrons e prótons são carregados eletricamente.
 - Elétrons tem carga *negativa*; prótons tem carga *positiva*; nêutrons não tem carga.
 - A magnitude da carga do próton e do elétron é $1,602 \times 10^{-19}\text{C}$.
- As massas são muito pequenas:
 - Prótons e nêutrons possuem massas quase iguais e que valem respectivamente $1,673 \times 10^{-27}\text{kg}$ e $1,675 \times 10^{-27}\text{kg}$.
 - Elétrons tem massa igual a $9,1095 \times 10^{-31}\text{kg}$.
- Cada elemento é caracterizado:
 - Pelo seu *número atômico* → número de prótons dentro do núcleo.
 - Pela sua *massa atômica* → soma do número de prótons e do número de nêutrons dentro do núcleo.

MODELO ATÔMICO: o Átomo de Bohr

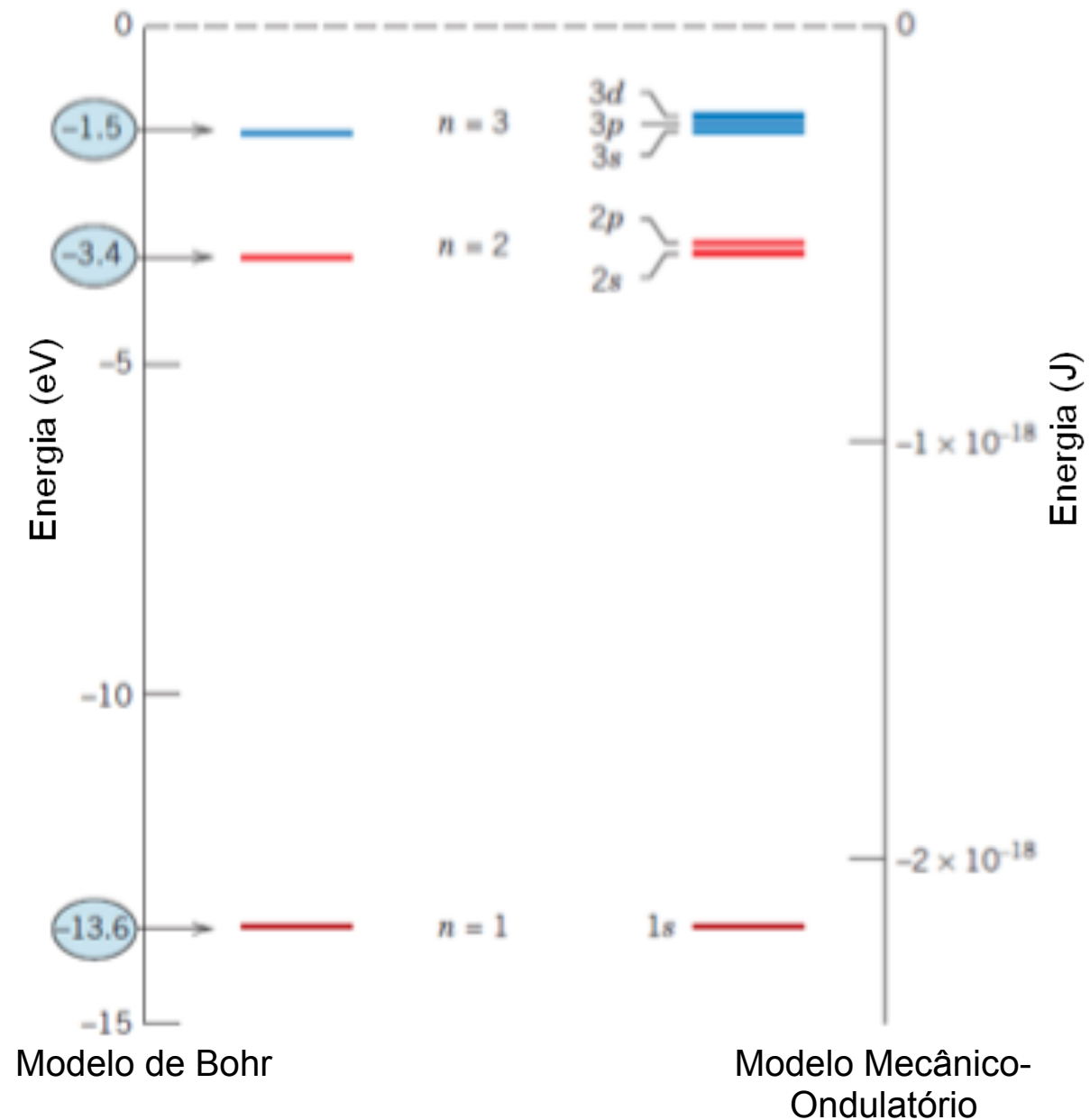


Modelo de Bohr

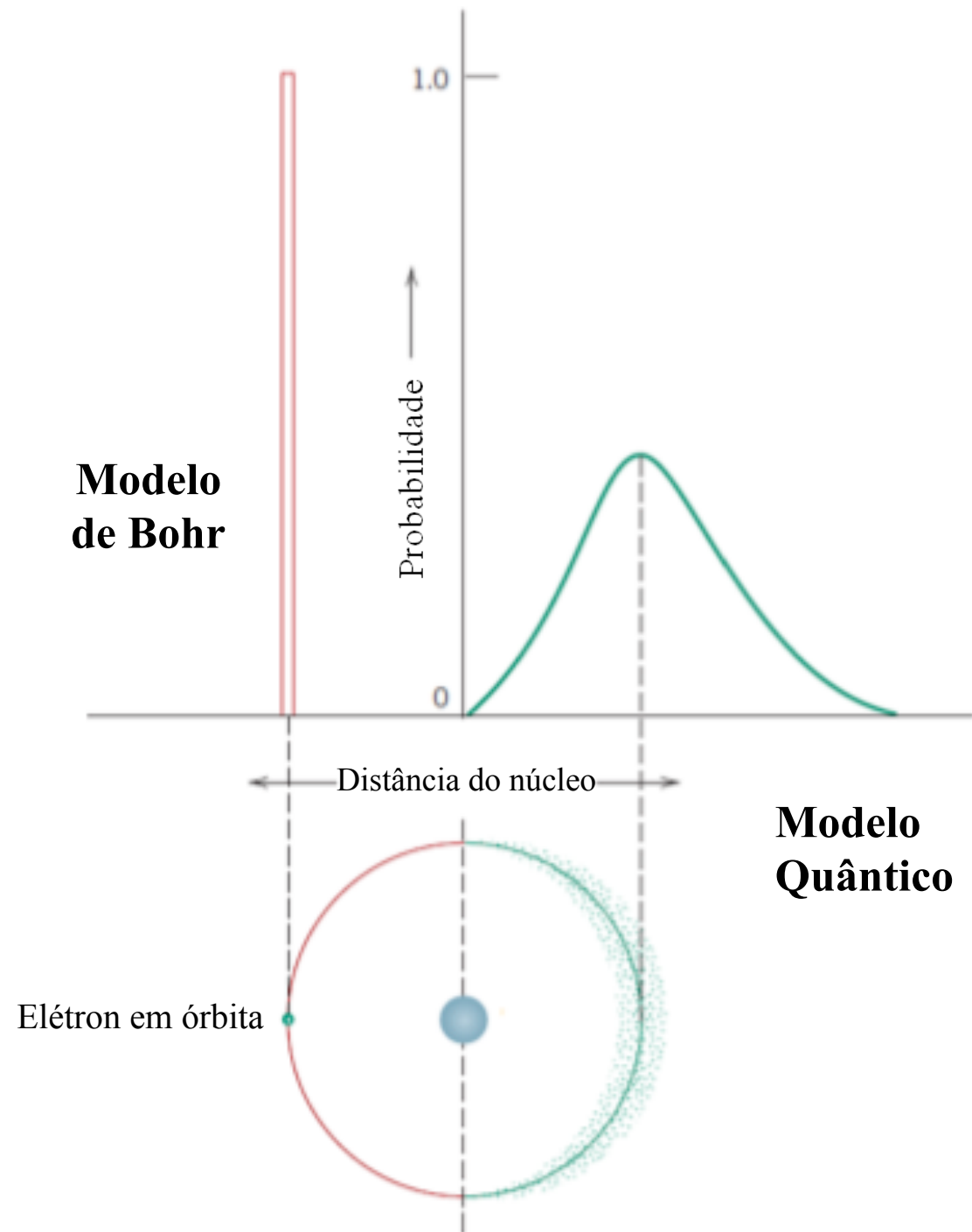
- Posição de cada elétron em particular é mais ou menos bem definida em termos do seu orbital.
- Energias dos elétrons são quantizadas → mudança de orbital é possível, com absorção (maior energia) ou emissão (menor energia) de energia.
- Estados adjacentes são separados por energias finitas.
- O modelo de Bohr apresenta limitações significativas, não servindo para explicar vários fenômenos envolvendo os elétrons.

Modelo Mecânico-Ondulatório

- As deficiências do modelo de Bohr foram supridas pelo modelo atômico da Mecânica Quântica.
- Nesse modelo, o elétron apresenta características tanto de onda, quanto de partícula.
- O elétron não é mais tratado como uma partícula que se movimenta num orbital discreto.
- A posição do elétron passa a ser considerada como a probabilidade deste ser encontrado em uma região próxima do núcleo.

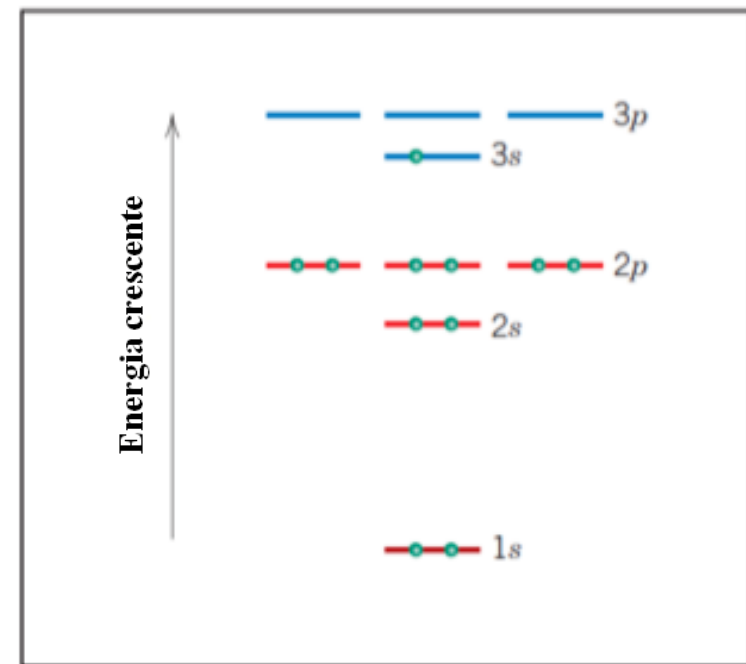
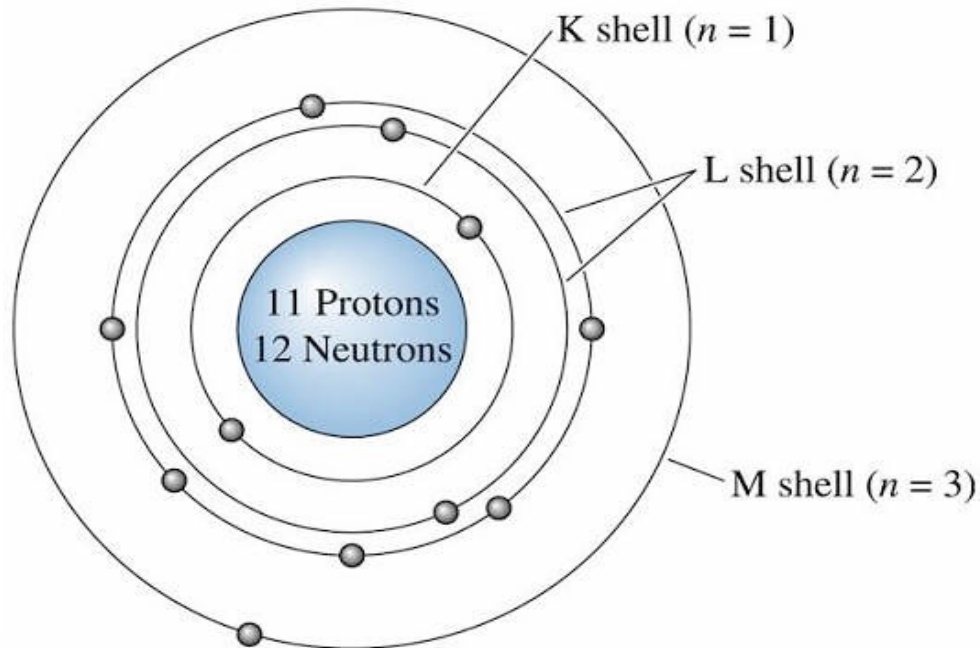


- Comparação entre as distribuições eletrônicas:
 - Segundo o modelo atômico de Bohr
 - Segundo o modelo mecânico-ondulatório (mecânica quântica)



Números Quânticos

- Cada elétron em um átomo é caracterizado por quatro parâmetros → os números quânticos.
- Não existem dois elétrons com os mesmos números quânticos.
- Número quântico principal n
 $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ (camadas K, L, M, N, O,.....)
- Número quântico orbital (ou secundário) l
 $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n - 1)$ (subcamadas s, p, d, f,.....)
- Número quântico orbital magnético (ou terceiro) m_l
 $m_l = -l, (-l + 1), \dots, (l - 1), l$
- Número quântico de spin (ou quarto)
 $m_s = -1/2, +1/2.$



3s ¹	electron 11	$n = 3, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$
2p ⁶	electron 10	$n = 2, l = 1, m_l = +1, m_s = -\frac{1}{2}$
	electron 9	$n = 2, l = 1, m_l = +1, m_s = +\frac{1}{2}$
	electron 8	$n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$
	electron 7	$n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$
	electron 6	$n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2}$
	electron 5	$n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = +\frac{1}{2}$
2s ²	electron 4	$n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$
	electron 3	$n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$
1s ²	electron 2	$n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$
	electron 1	$n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$

EXEMPLO

Configuração
Eletrônica do
Átomo de Sódio

Elétrons de Valência - Configurações Estáveis

- **Elétrons de Valência**
 - São aqueles que ocupam a camada eletrônica mais externa.
- **Configurações Eletrônicas Estáveis**
 - As camadas eletrônicas mais externas estão completamente preenchidas.

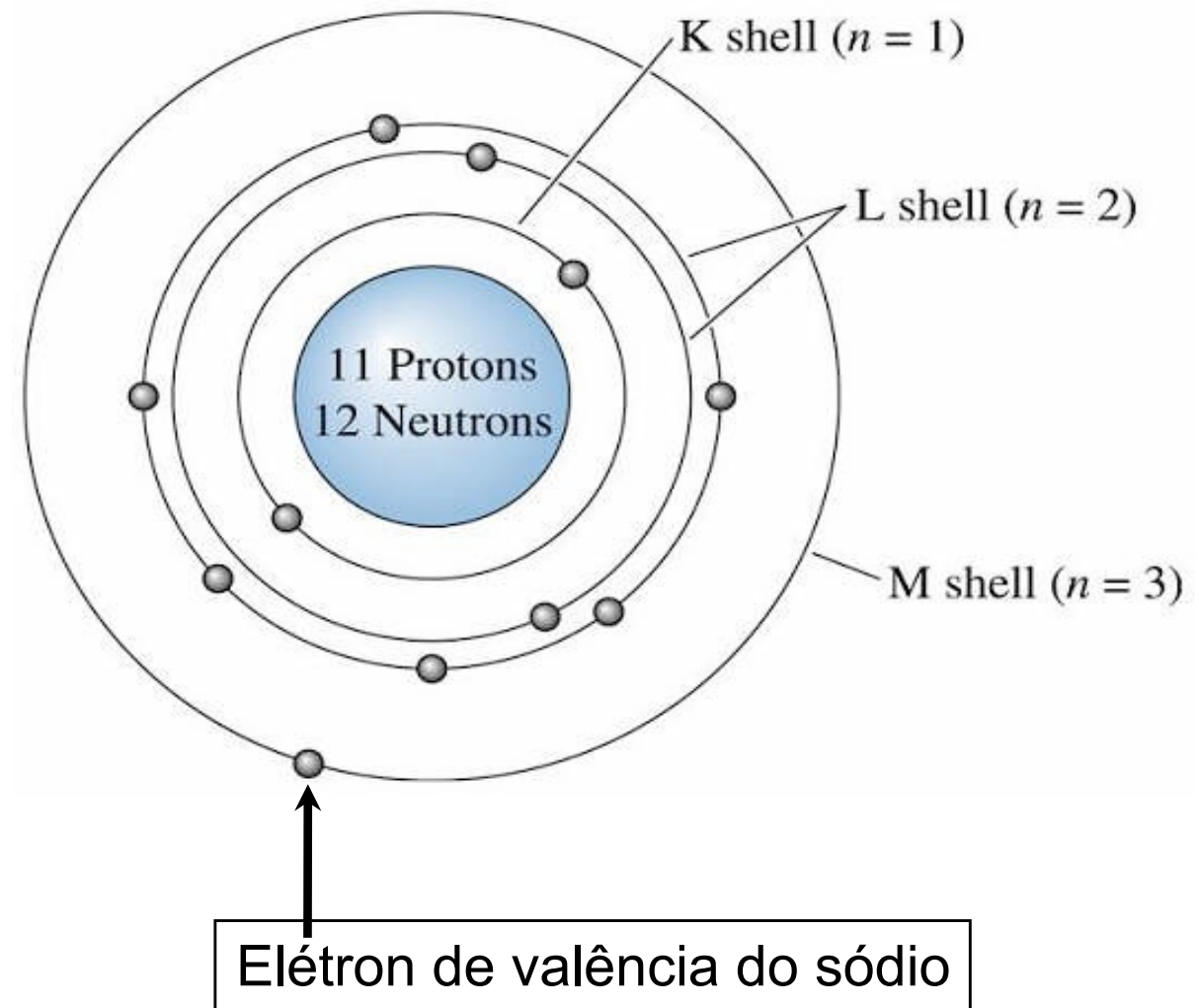


Tabela Periódica

Os elementos químicos são classificados de acordo com a sua configuração eletrônica

Legenda

- 29 ← Número atômico
- Cu ← Símbolo
- 63.54 ← Peso Atômico

Metal
 Ametal
 Intermediário

IA		IIA												III A	IV A	V A	VI A	VII A	0			
1 H 1.0080																					2 He 4.0026	
3 Li 6.941	4 Be 9.0122												5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180				
11 Na 22.990	12 Mg 24.305												13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.064	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948				
								VIII														
19 K 39.098	20 Ca 40.08	21 Sc 44.956	22 Ti 47.87	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.69	29 Cu 63.54	30 Zn 65.41	31 Ga 69.72	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80					
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30					
55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	Série das terras-raras	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.2	76 Os 190.23	77 Ir 192.2	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)					
87 Fr (223)	88 Ra (226)	Série dos actinídeos	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (281)													

Série das terras-raras

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lw

Série dos actinídeos

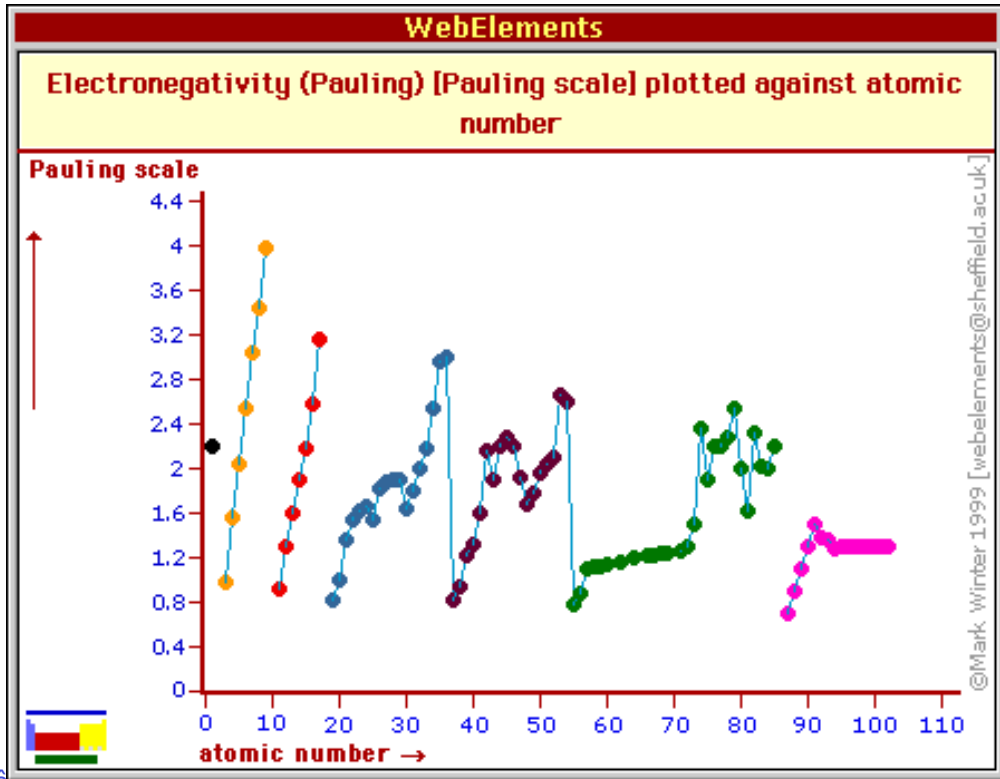
...para saber mais : <http://www.webelements.com/>

Eletronegatividade

Escala de Eletronegatividade de Pauling

IA 1 H 2.1																	0 2 He -
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
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	VIII 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															

- Eletronegatividade → “poder que um átomo tem de atrair elétrons para si”
- Primeira escala → definida por Pauling (existem outras, por ex.: Mulliken, Alfred-Rochow)
- Escala de Pauling → define-se arbitrariamente a eletronegatividade de um elemento → a dos outros é dada em relação a esse elemento.

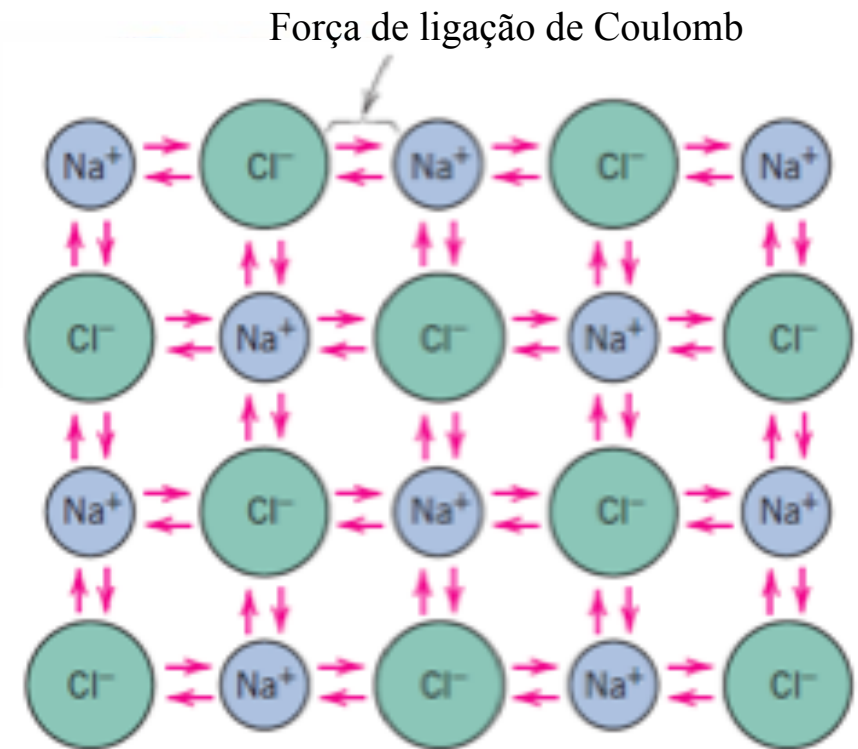
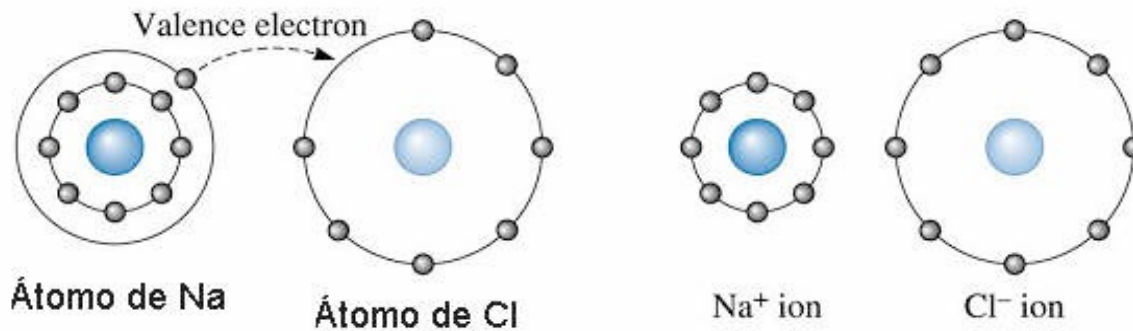


Maior “facilidade” em ceder elétrons = CÁTIONS

Inertes – Gases Nobres

Maior facilidade em ganhar elétrons = ÂNIONS

Ligações Primárias – Ligação Iônica

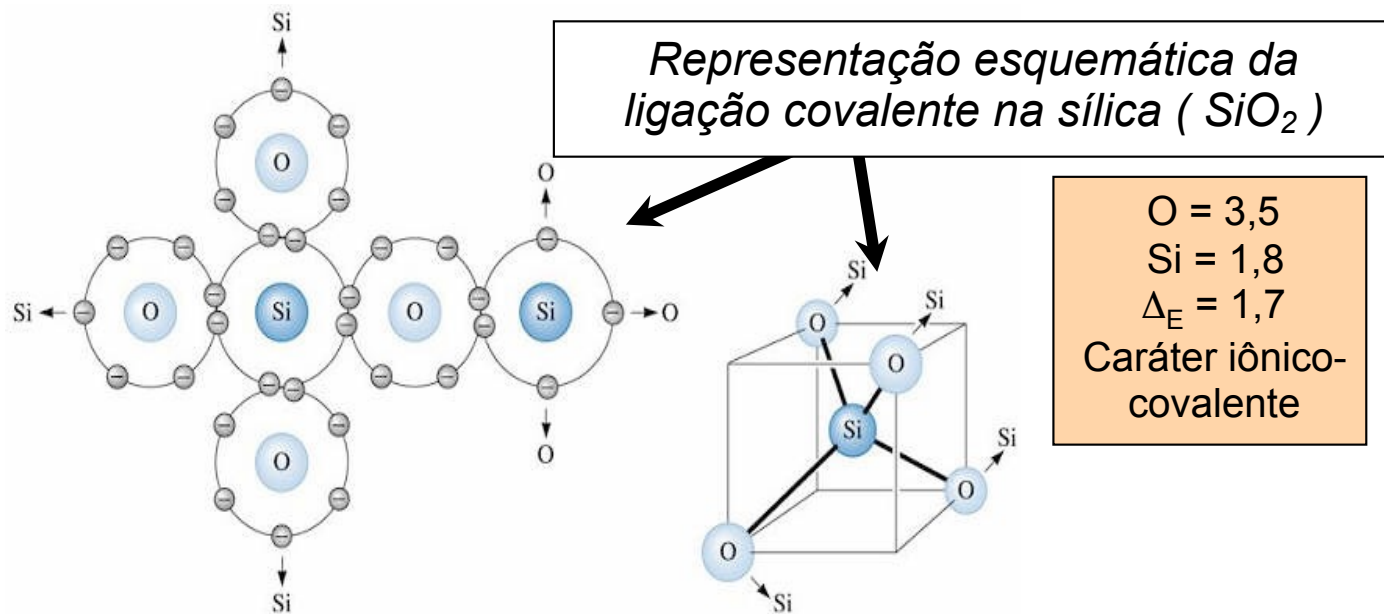


Exemplo: Cloreto de sódio → tanto o cátion Na⁺ quanto o ânion Cl⁻ ficam com seus orbitais externos completos.

- Envolve a *transferência de elétrons* de um átomo para outro.
- A ligação é *não-direcional*.
- Grande diferença de eletronegatividade entre os elementos:
 - Na = 0,9 ; Cl = 3,0
- A ligação iônica resulta da atração eletrostática entre dois íons de cargas opostas.

- Forças de atração Coulombianas (variam com o quadrado do inverso da distância interatômica).

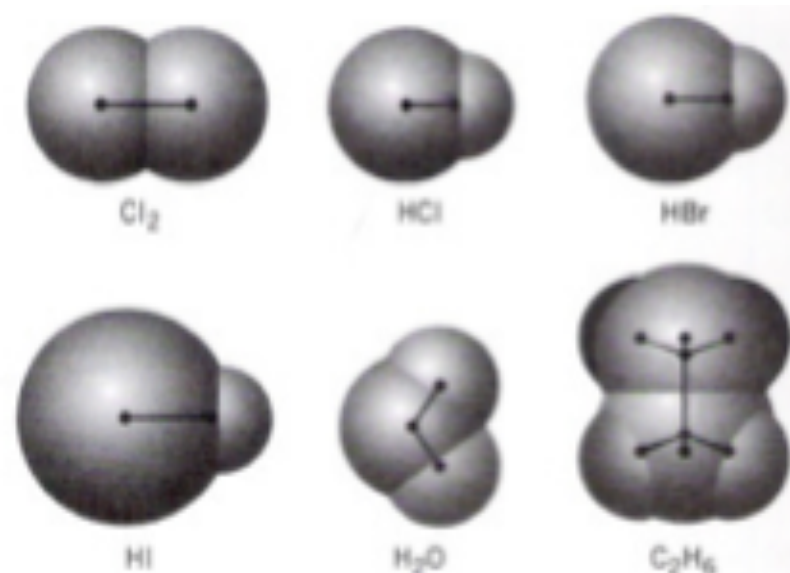
Ligações Primárias – Ligação Covalente



Geometria molecular de acordo com a distribuição eletrônica

sp	linear
sp ²	trigonal planar
sp ³	tetraédrico

- Envolve o *compartilhamento* dos elétrons de valência de átomos adjacentes.
- A ligação resultante é *altamente direcional*.
- Menor diferença de eletronegatividade entre os elementos do que o observado em ligações iônicas.



C = 2,5
H = 2,1
 $\Delta_E = 0,4$
Forte caráter covalente

Ligações Primárias – Ligação Metálica

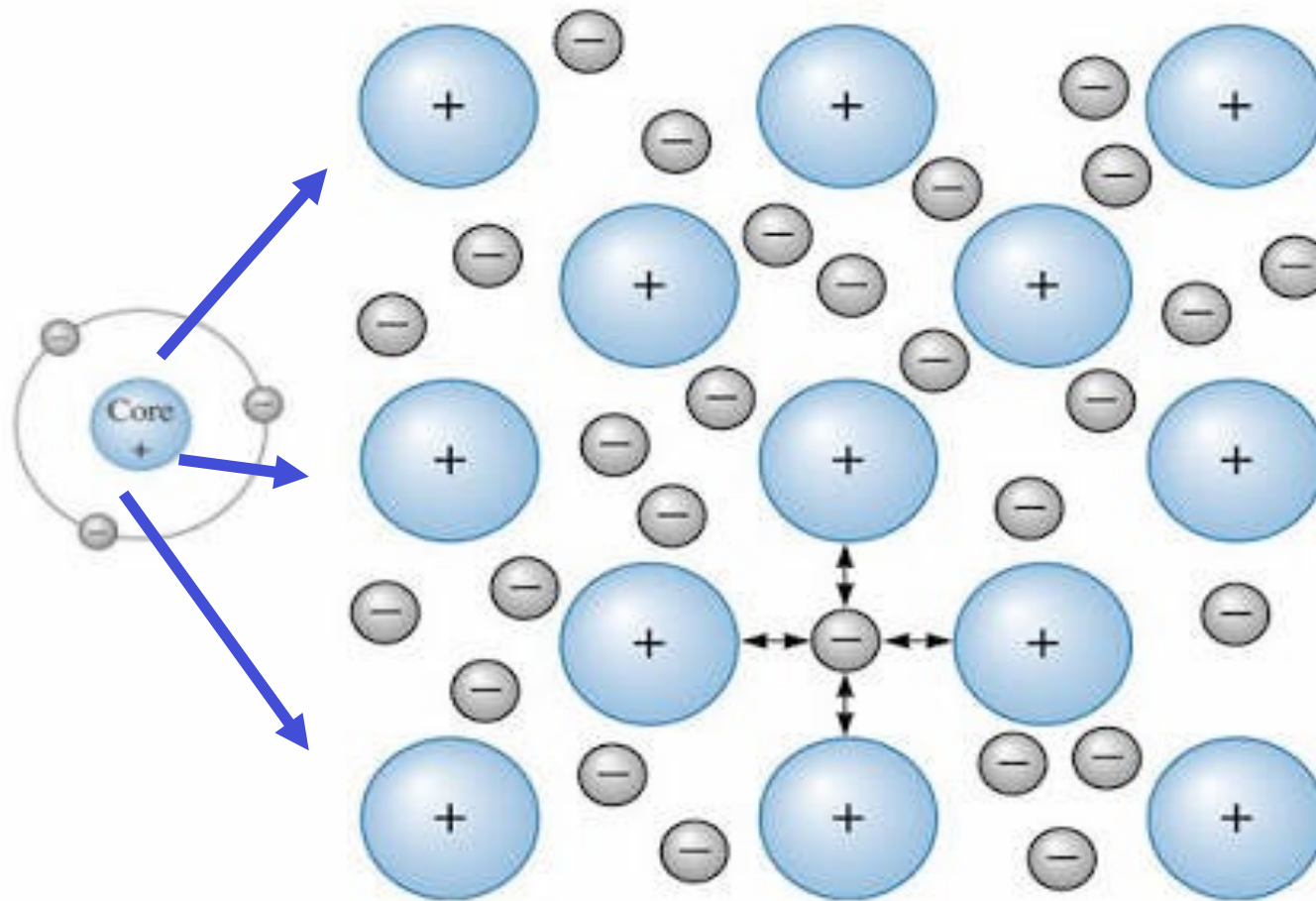


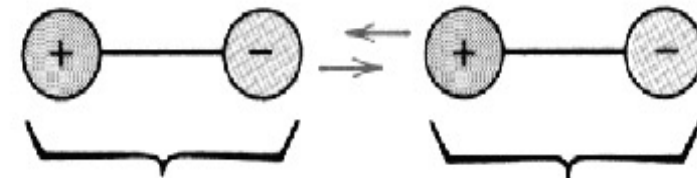
Ilustração esquemática da ligação metálica

Modelo Simplificado

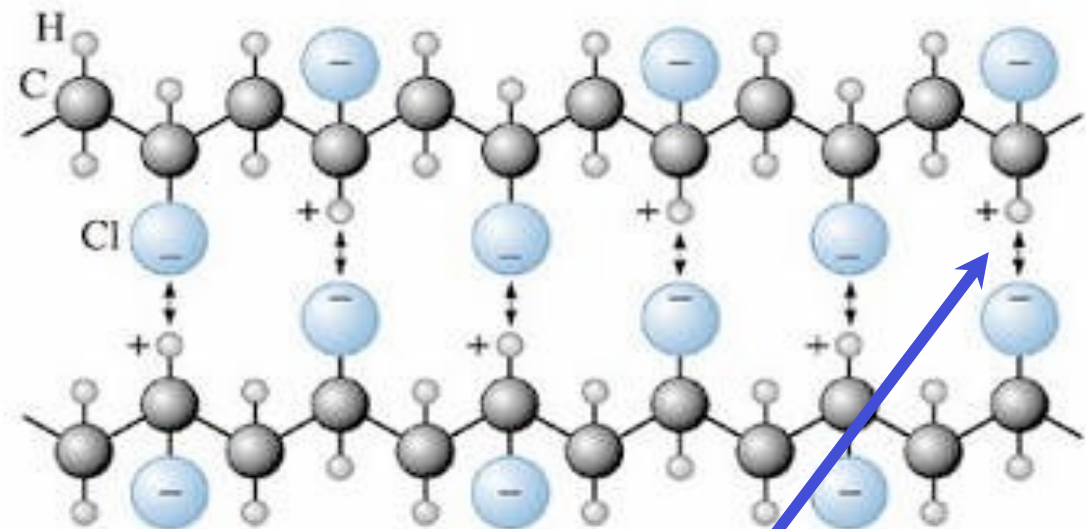
- Átomos dos metais possuem de um a três elétrons de valência.
- A ligação resultante é *não-direcional*.
- Os elétrons de valência passam a se comportar como *elétrons “livres”* :
 - Apresentam a mesma probabilidade de se associar a um grande número de átomos vizinhos.
 - Formam uma “nuvem eletrônica” .

Ligações Secundárias ou de Van der Waals

- Ocorrem atrações entre dipolos gerados pela assimetria de cargas.
- O mecanismo dessas ligações é similar ao das ligações iônicas, porém não existem elétrons transferidos.
- As ligações dipolares podem ser entre:
 - dipolos permanentes.
 - dipolos permanentes e induzidos.
 - dipolos induzidos flutuantes.

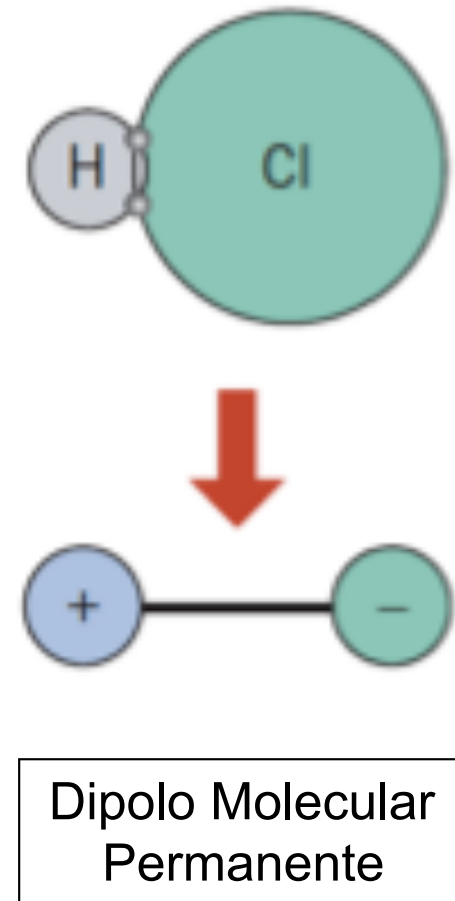
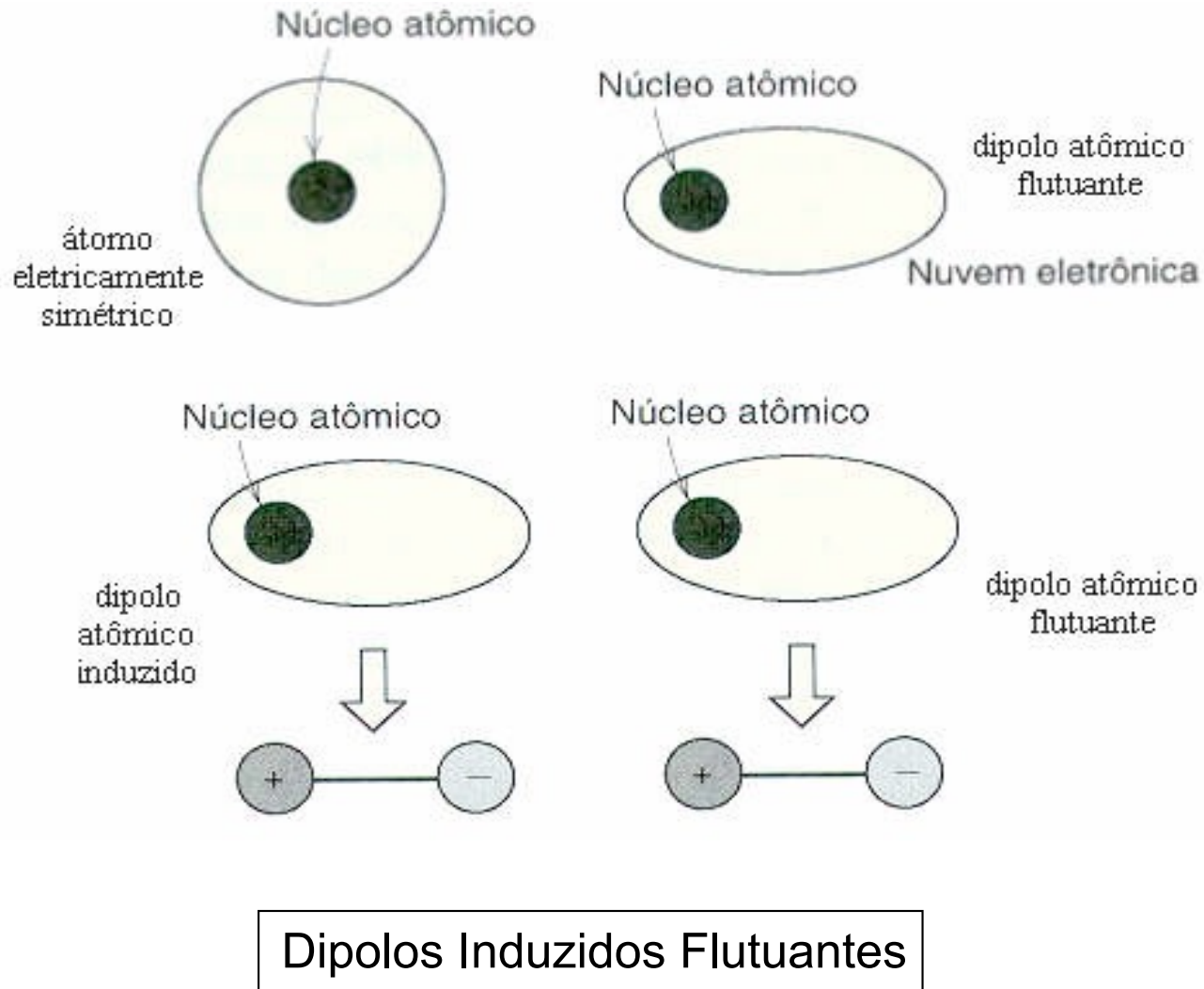


Atomic or molecular dipoles



Ligações de Van de Waals no PVC
(entre duas moléculas distintas)

Ligações Secundárias ou de Van der Waals

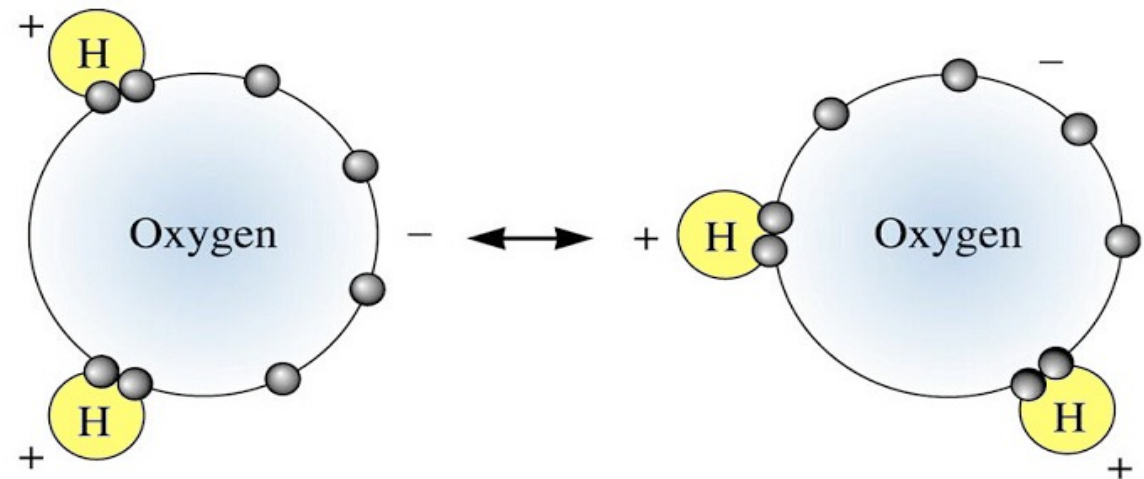


Ponte de Hidrogênio

- É um caso especial de ligação entre moléculas polares.
- É o tipo de ligação secundária mais forte.
- Ocorre entre moléculas em que o H está ligado covalentemente ao flúor (como no HF), ao oxigênio (como na água) ou ao nitrogênio (por exemplo, NH_3).



Ponte de hidrogênio no HF



Ponte de hidrogênio na molécula da água

Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640	3.3	801
	MgO	1000	5.2	2800
Covalent	Si	450	4.7	1410
	C (diamond)	713	7.4	>3550
Metallic	Hg	68	0.7	-39
	Al	324	3.4	660
	Fe	406	4.2	1538
	W	849	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7	0.08	-189
	Cl ₂	31	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35	0.36	-78
	H ₂ O	51	0.52	0

Forças e Energias de Ligação (Caso Unidimensional)

- Quando dois átomos se aproximam, eles exercem uma força um no outro:

$$\mathbf{F}_N = \mathbf{F}_A + \mathbf{F}_R$$

onde:

$F_A \equiv$ força de atração

$F_R \equiv$ força de repulsão

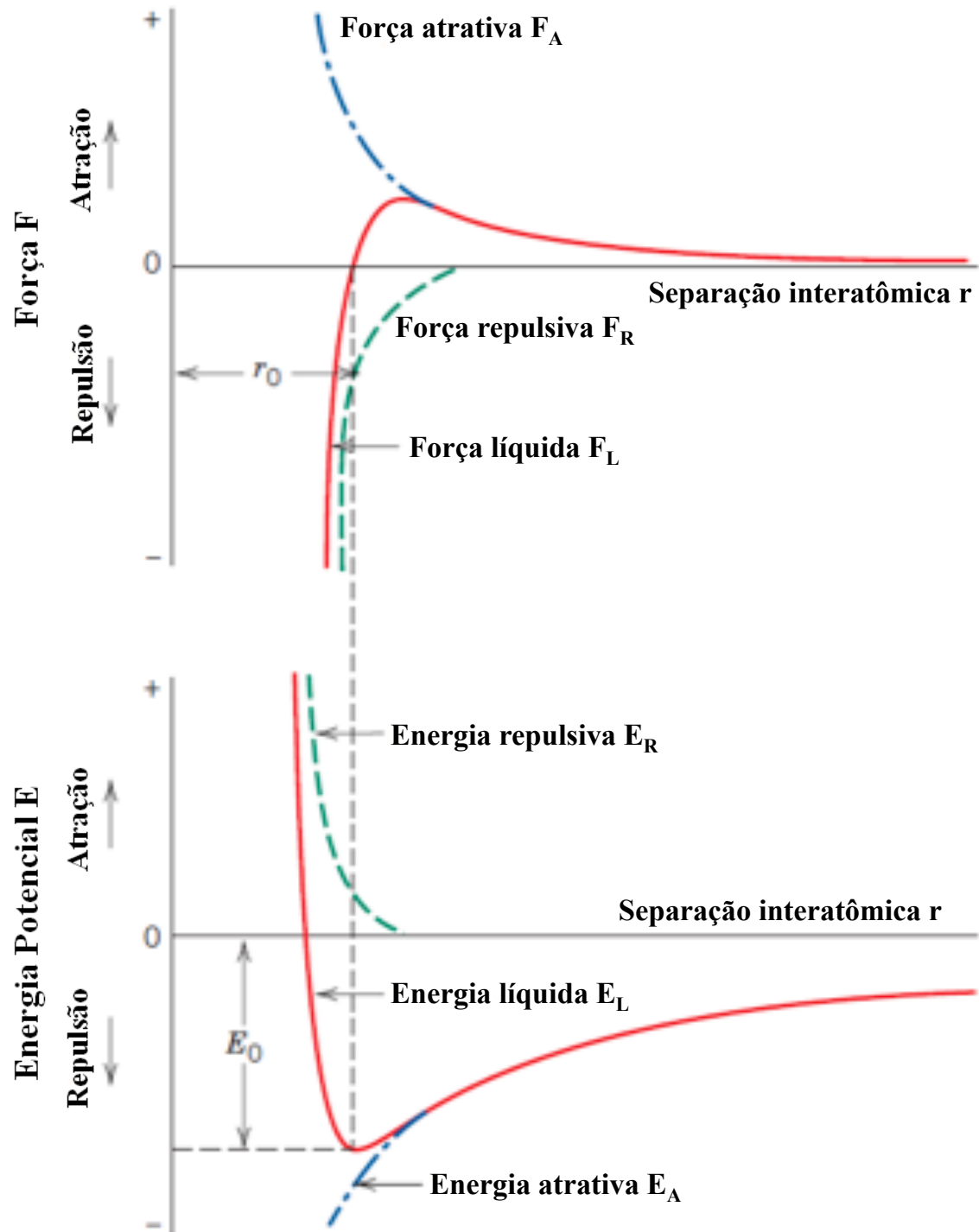
$F_N \equiv$ força resultante

- A energia potencial (E_N) será dada por:

$$E_N = \int_{\infty}^r F_N dr = \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_R dr$$

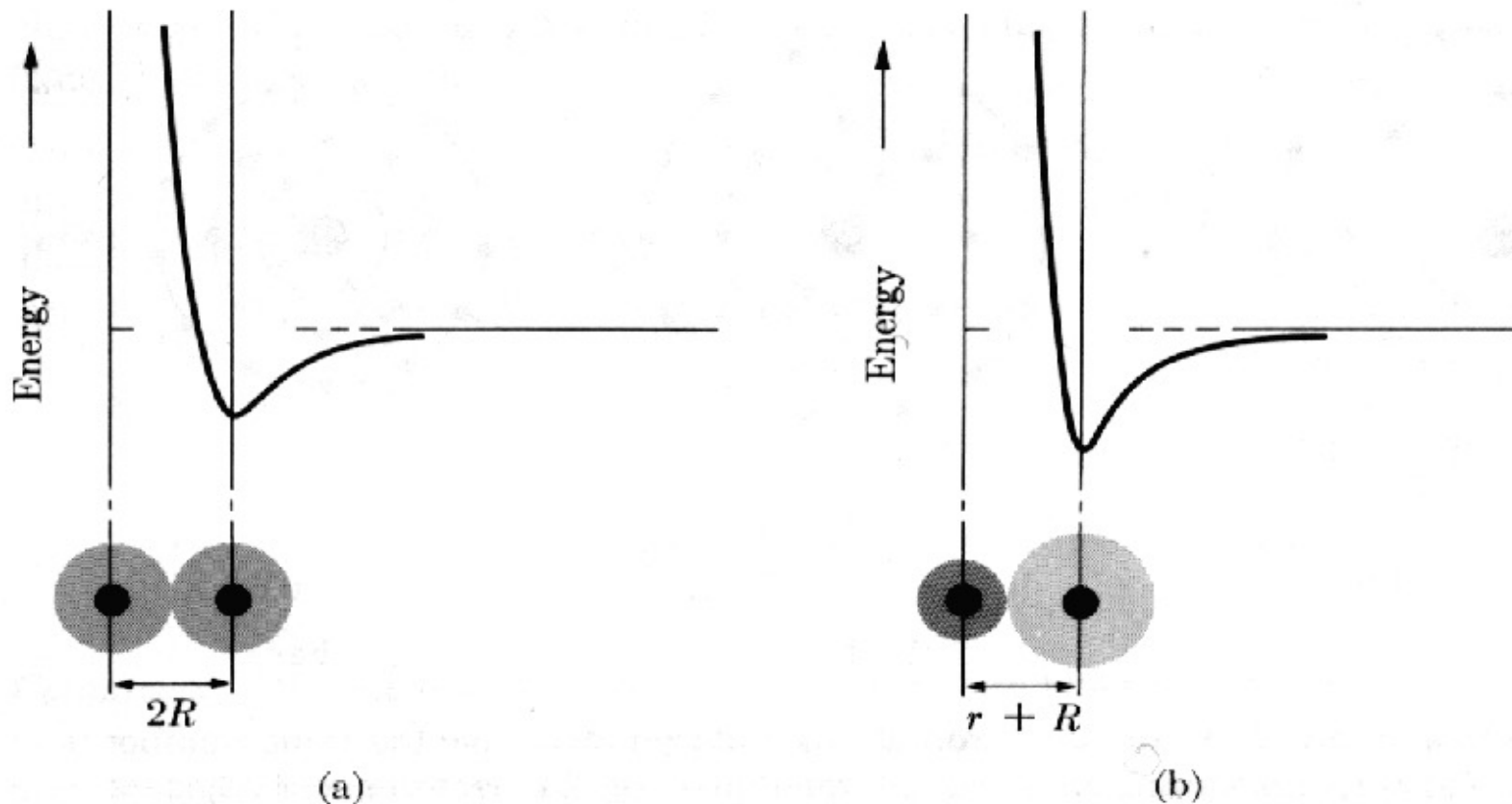
onde:

$r \equiv$ distância interatômica



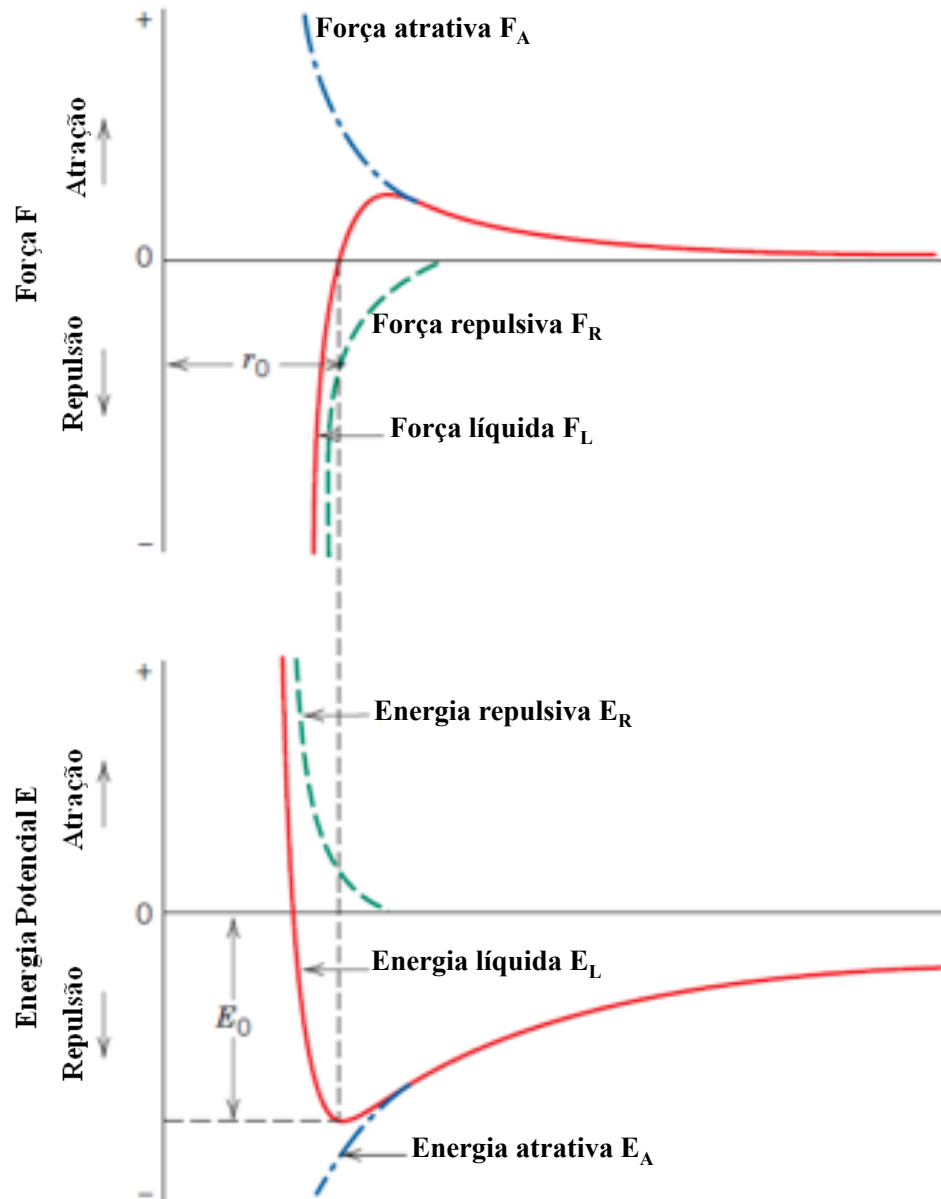
Forças de atração e de repulsão em função da distância interatômica (r) para dois átomos isolados

Energia Potencial em função da distância interatômica (r) para dois átomos isolados



A distância de ligação entre dois átomos é a distância correspondente ao ponto de mínima energia (soma dos dois raios atômicos). (a) *Para metais puros*, todos os átomos têm o mesmo raio atômico. (b) *Para sólidos iônicos*, os raios atômicos são diferentes, uma vez que íons adjacentes nunca são idênticos.

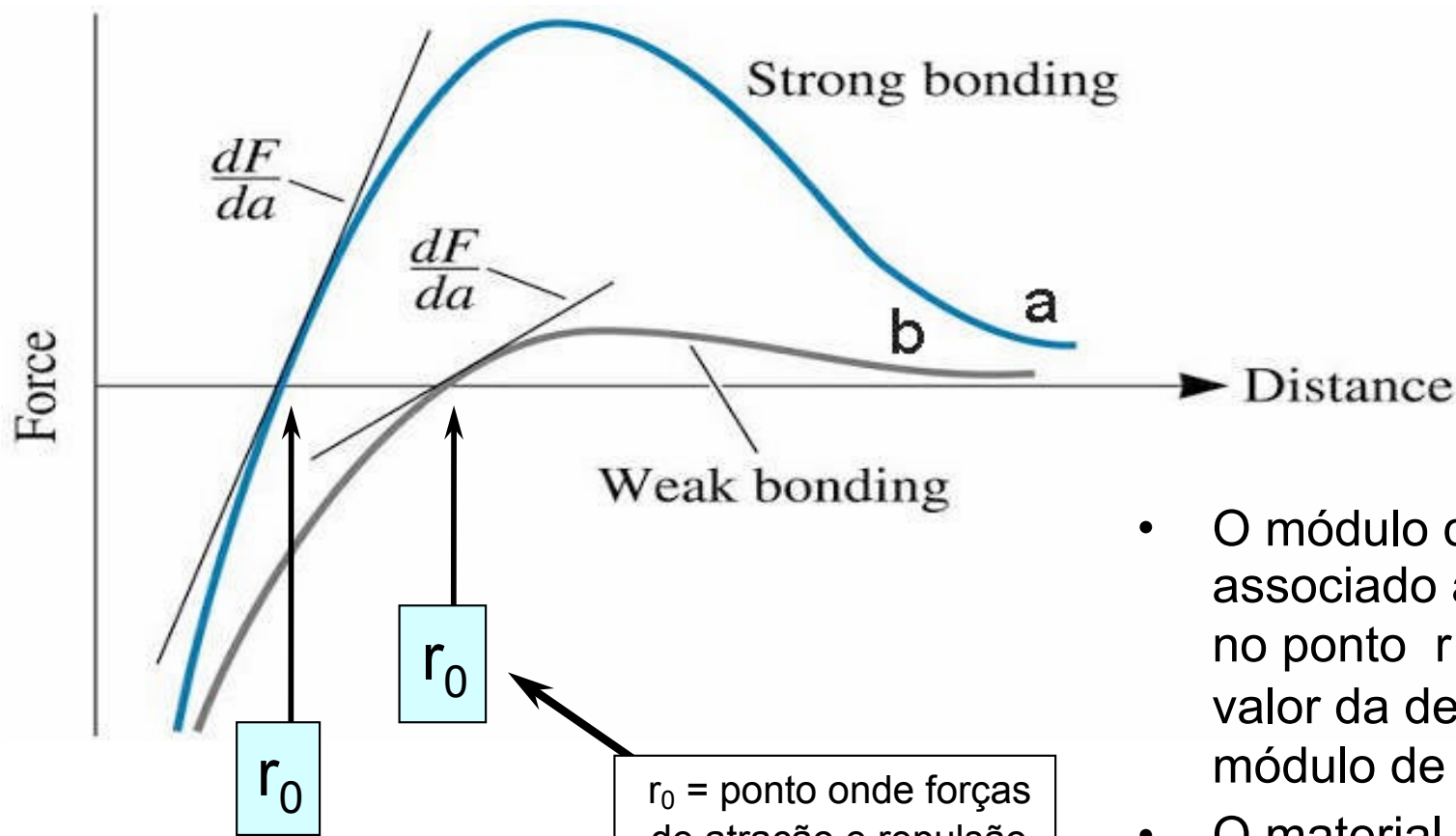
Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação



• Propriedades Mecânicas

- Em escala atômica, a **DEFORMAÇÃO ELÁSTICA** é manifestada como uma pequena alteração na distância interatômica e na energia da ligação.
- A profundidade do poço de potencial é uma medida da energia de ligação; quanto maior for sua profundidade, maior será a energia de ligação e, portanto, também maior será a resistência à deformação elástica (RIGIDEZ).
- O **MÓDULO DE ELASTICIDADE** é uma medida da rigidez de um material.

Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação



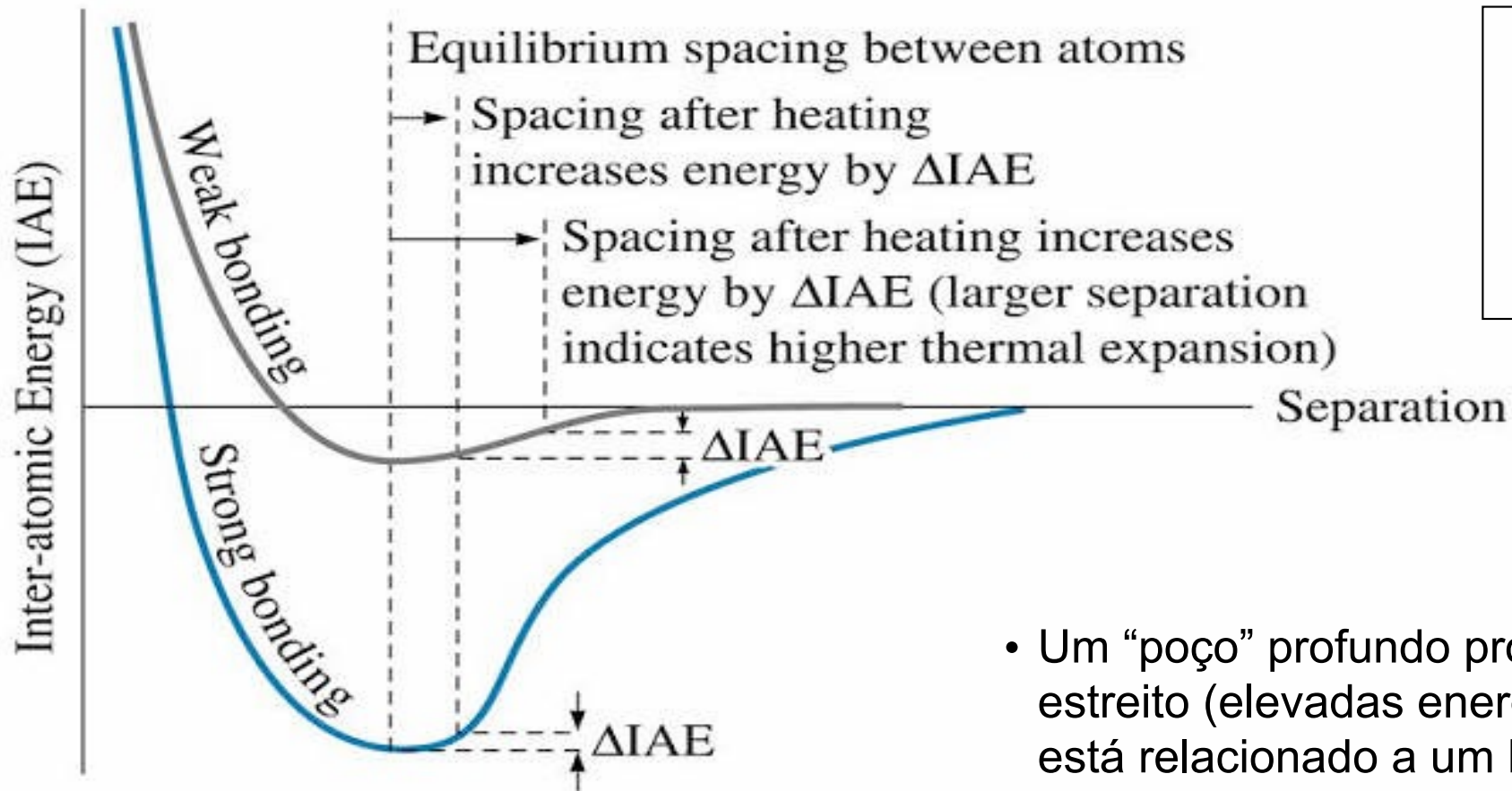
Módulo
de
Elasticidade

- O módulo de elasticidade pode ser associado à derivada da curva $F(r)$ no ponto $r = r_0$; quanto maior for o valor da derivada, maior será o módulo de elasticidade.
- O material a apresenta *maior rigidez* do que o material b.

Obs.: o módulo de elasticidade é uma propriedade mecânica que será estudada em detalhe mais à frente no curso

r_0 = ponto onde forças de atração e repulsão são iguais

Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação

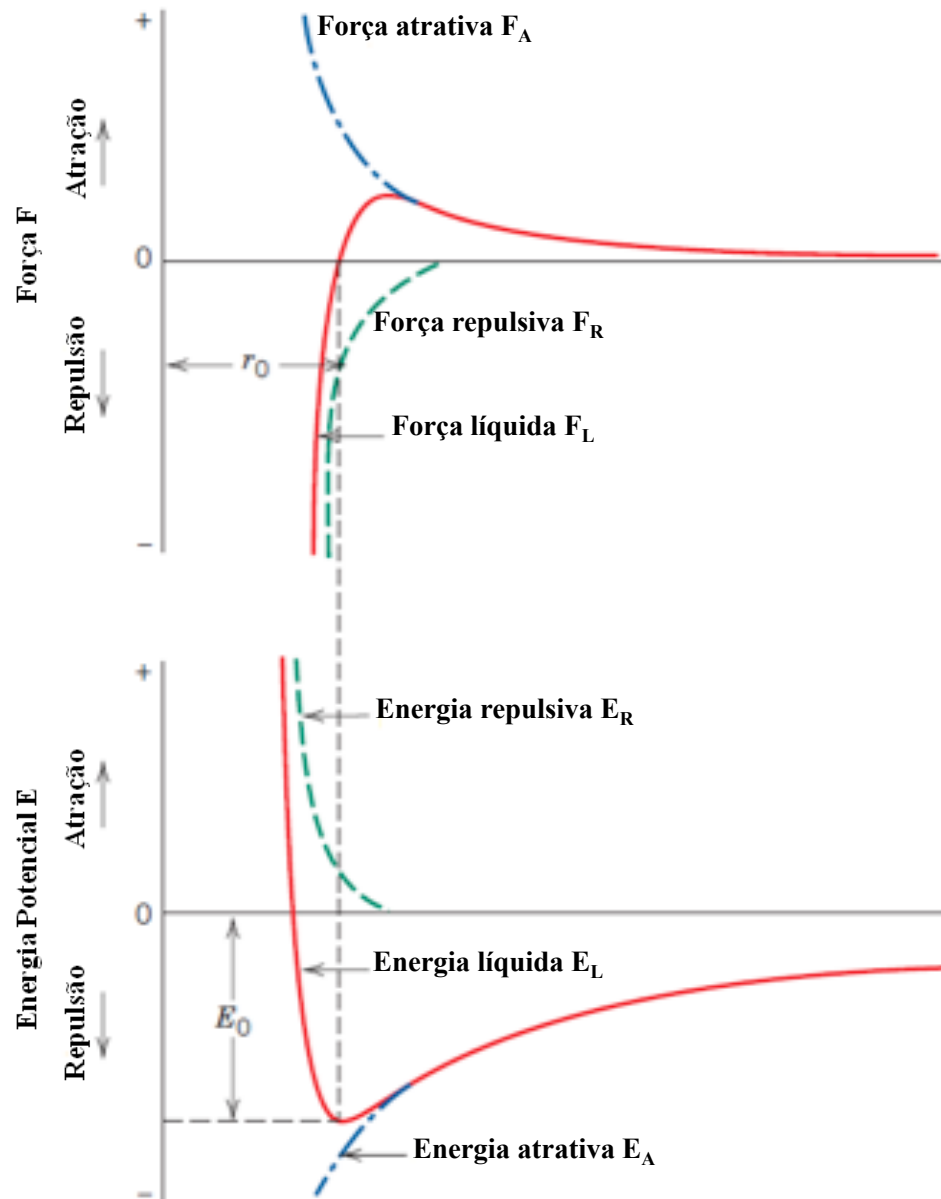


Coeficiente de Expansão Térmica

- Um “poço” profundo e estreito (elevadas energias de ligação) está relacionado a um baixo coeficiente de expansão térmica.

Obs.: IAE = interatomic energy

Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação



Pontos de fusão e de ebulição

- Materiais que apresentam grandes energias de ligação (ou seja, poços de potencial profundos) também apresentam temperaturas de fusão e de ebulição elevadas.

Classificação dos Materiais

Metálicos →



← Cerâmicos

Poliméricos →



- Os materiais podem ser classificados de diversas formas.
- Uma classificação muito utilizada, é baseada na composição:
 - *Metálicos*
 - *Cerâmicos*
 - *Poliméricos*
- Outras classificações
 - *Compósitos*
 - *Materiais Avançados*

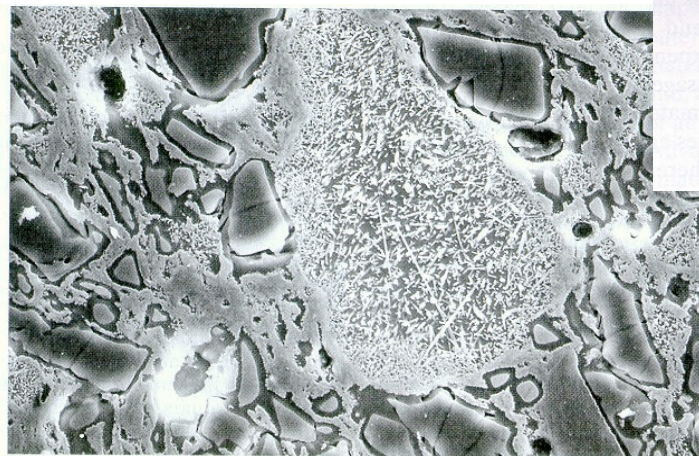
Cerâmicas

- Composição : combinação de elementos metálicos e não-metálicos (óxidos, carbetos e nitretos), incluindo Si e Ge, semicondutores.
- Tipos de ligações
 - Caráter misto, iônico-covalente
- Tipos de materiais :
 - Cerâmicas tradicionais.
 - Cerâmicas de alto desempenho.
 - Vidros e vitro-cerâmicas.
 - Cimentos
- Propriedades gerais :
 - Isolantes térmicos e elétricos.
 - Refratários.
 - Inércia química.
 - Corpos duros e frágeis.

IA																	O		
1																	2		
H																	He		
3	IIA											III A	IV A	V A	VIA	VII A	10		
Li	4											5	6	7	8	9	Ne		
11	12						VIII							13	14	15	16	17	18
Na	Mg	III B	IV B	V B	VI B	VII B						IB	II B	Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
87	88	89																	
Fr	Ra	Ac																	

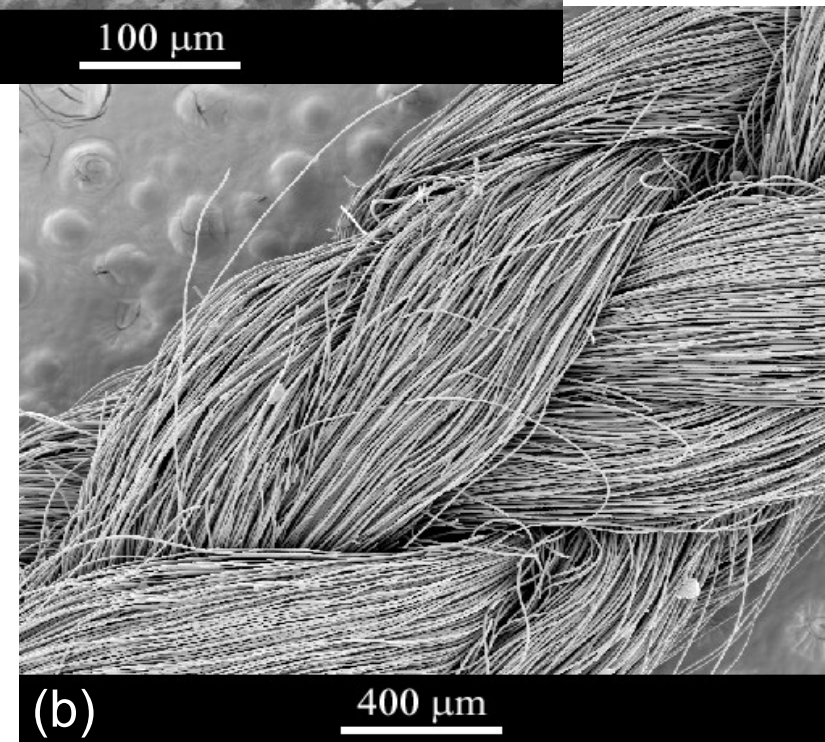
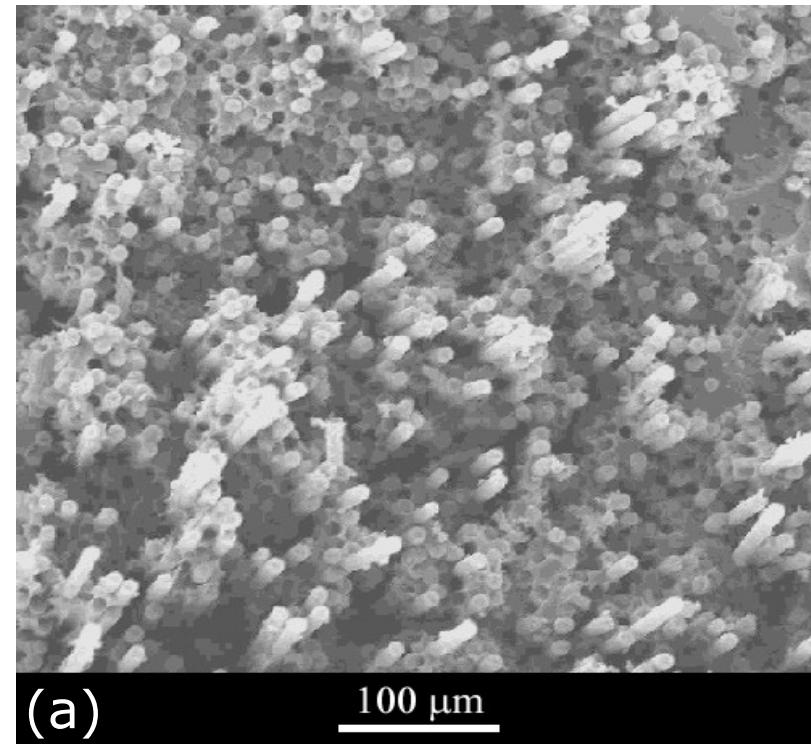
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw

Micrografia eletrônica de varredura de uma amostra de porcelana calcinada (atacada por HF a 5°C durante 15s)



Compósitos

- Constituídos por mais de um tipo de material:
 - Matriz
 - Reforçador
- Projetados para apresentar as melhores características de cada um dos materiais envolvidos.
- Exemplos:
 - Produtos fabricados em “fibras de vidro” (“fiberglass”) → são constituídos por fibras de um material cerâmico (vidro) reforçando uma matriz de material polimérico.

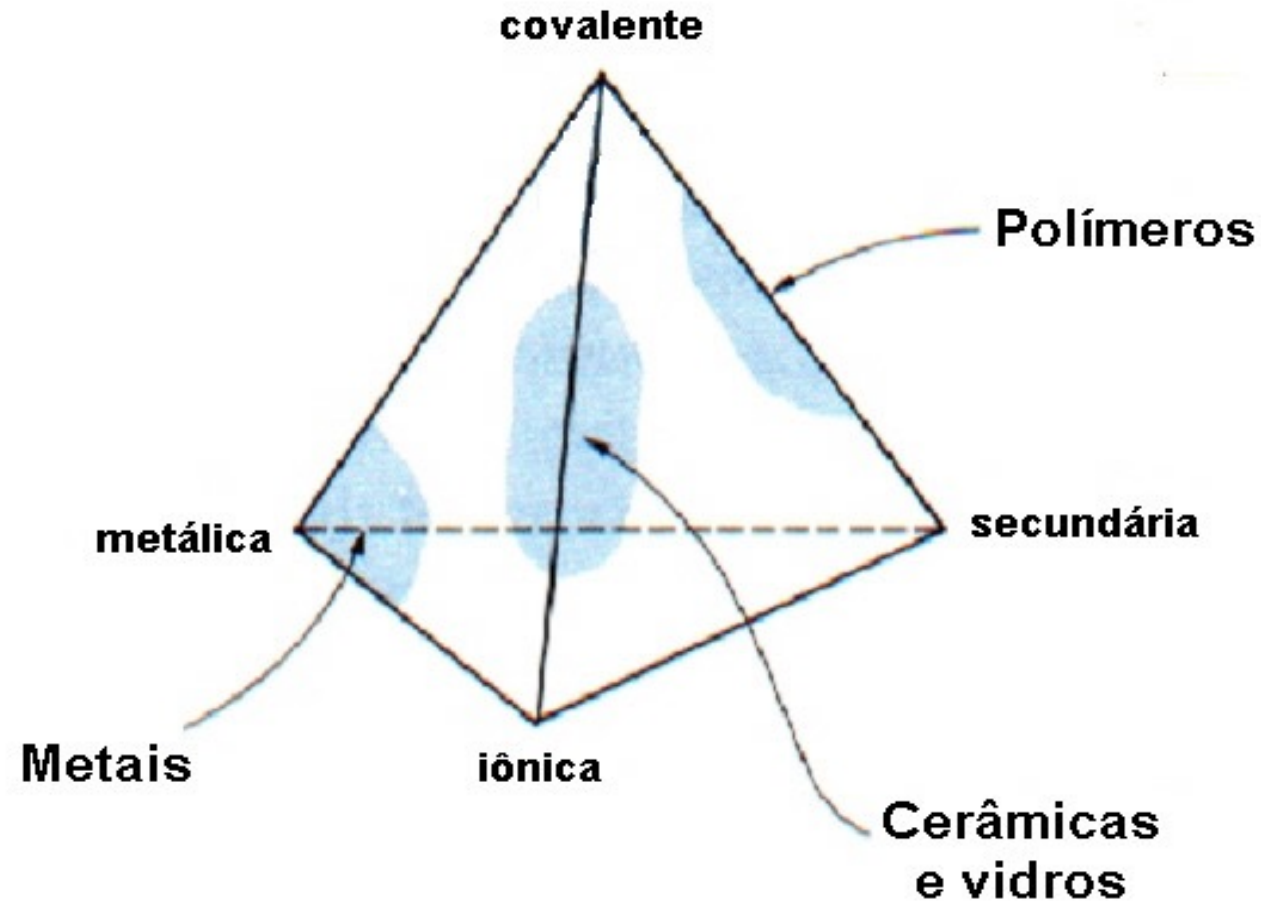


Duas micrografias eletrônicas de varreduras de:
(a) superfície de fratura de um compósito de matriz polimérica com reforço de fibras de carbono;
(b) fibras de carbono trançadas, usadas em compósitos de matriz polimérica.

Materiais Avançados

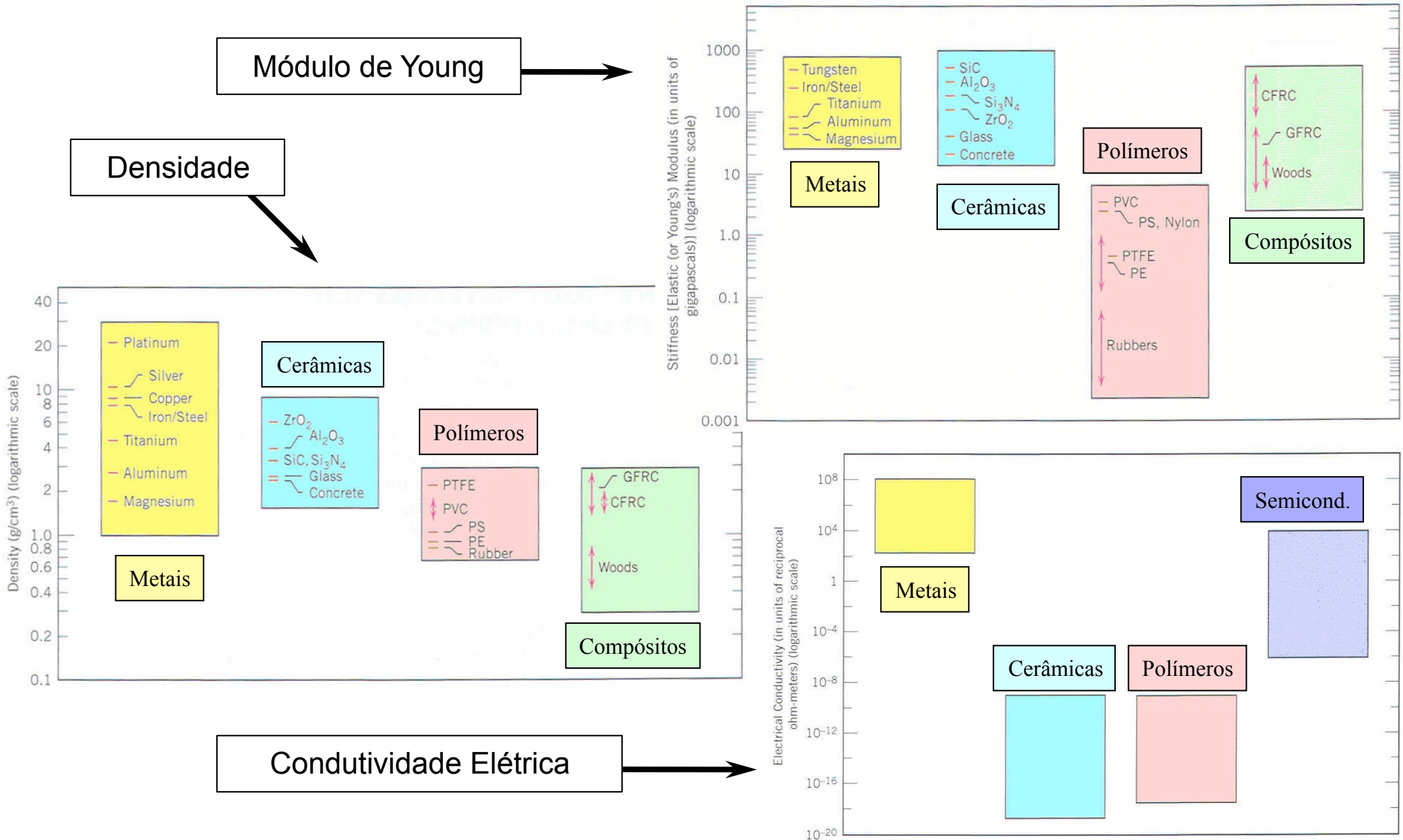
- Materiais Avançados são uma categoria de materiais utilizados em aplicações de alta tecnologia como, por exemplo:
 - circuitos integrados; lasers; fibras ópticas; telas LED, LCD e plasma, aeronaves, espaçonaves, dentre outros.
- São materiais tradicionais com propriedades refinadas, ou novos materiais de alto desempenho, recém desenvolvidos.
- Em termos químicos e estruturais, podem ser metais, cerâmicas ou polímeros.
- Materiais avançados incluem:
 - semicondutores: possuem condutividade elétrica intermediária entre a dos isolantes e a dos condutores;
 - biomateriais: compatíveis com os tecidos do corpo humano;
 - materiais inteligentes: sensíveis a alterações no meio ambiente e a elas respondendo de maneiras pre-determinadas;
 - nanomaterias: possuem características estruturais na escala nanométrica, sendo que alguns podem ser desenhados em nível atômico/molecular.

Materiais Segundo o Tipo de Ligação



Tetraedro que representa a contribuição relativa dos diferentes tipos de ligação para categorias de Materiais de Engenharia (metais, cerâmicas e polímeros)

Comparação entre valores de algumas propriedades em diferentes materiais



- As **propriedades dos materiais** dependem da sua **composição e estrutura**
- Os elementos químicos combinam-se formando sólidos cuja coesão depende de diferentes tipos de ligações **primária** e **secundária**.
- As **ligações primárias** são fortes e, dependendo do tipo de **compartilhamento eletrônico**, dividem-se em três tipos principais : iônica, metálica e covalente
- As **ligações secundárias** referem-se a **ligações intermoleculares** e são classificadas em: forças de van de Waals ou interações dipolares (induzidos e permanentes) e ligações de hidrogênio.
- Nos metais as curvas de força e energia interatômica refletem a sua rigidez mecânica e expansão térmica.
- Nas cerâmicas estão presentes as ligações iônicas com característica covalente direcional.
- Nos polímeros, as ligações covalentes direcionais predominam na cadeia e as ligações secundárias intermoleculares e o embaraçamento das longas cadeias dão coesão ao sólido.

- **Capítulos do Callister (7ª ed., 2008) tratados nesta aula**
 - Capítulo 1, completo : Introdução
 - Capítulo 2, completo : Estrutura atômica e ligações químicas
 - Item 6.3, Deformação elástica: Considerações a respeito do módulo de elasticidade em relação à energia de ligação
 - Item 19.3, Expansão térmica: Considerações a respeito do coeficiente de expansão térmica
- Outras referências importantes
 - Shackelford, J. F. – Ciência dos Materiais, 6ª ed., 2008. Cap. 1 a 2.
 - Apostilas sobre ligações químicas do curso de PQI-2110
 - Van Vlack , L. - Princípios de Ciência dos Materiais, 3ª ed., Cap. 2.
 - Padilha, A.F. – Materiais de Engenharia. Hemus. São Paulo. 1997. Caps.1 a 3.
 - Askeland, D.R. e Phulé, P.P. - The Science and Engineering of Materials. Thomson Brooks/Cole. 4ª edição. 2003. Caps. 1 e 2.