

Estudo dos materiais e ligações químicas

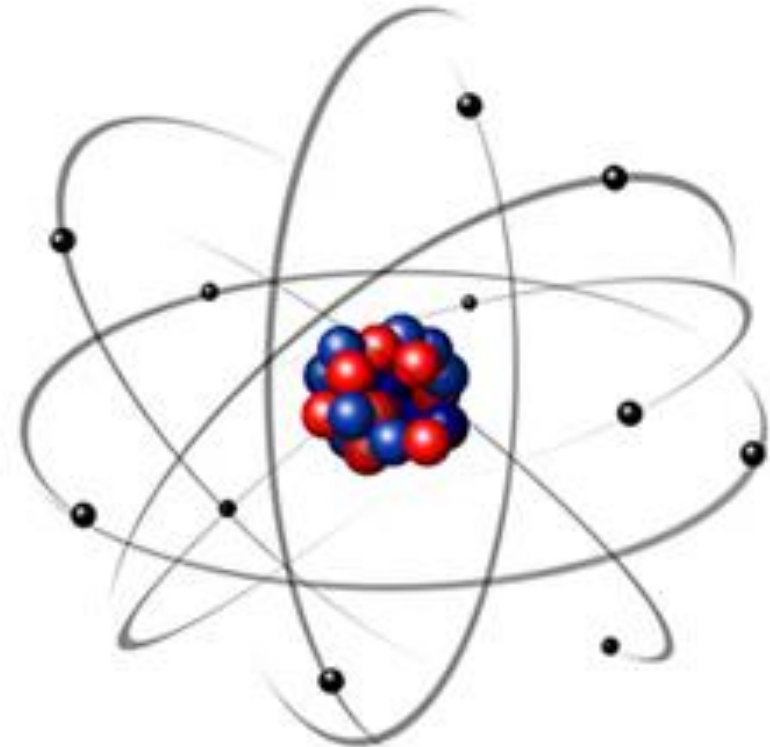
PCC5726

LIGAÇÕES ATÔMICAS

noções básicas

Estrutura do átomo

Modelo



Estrutura do átomo

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

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

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

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

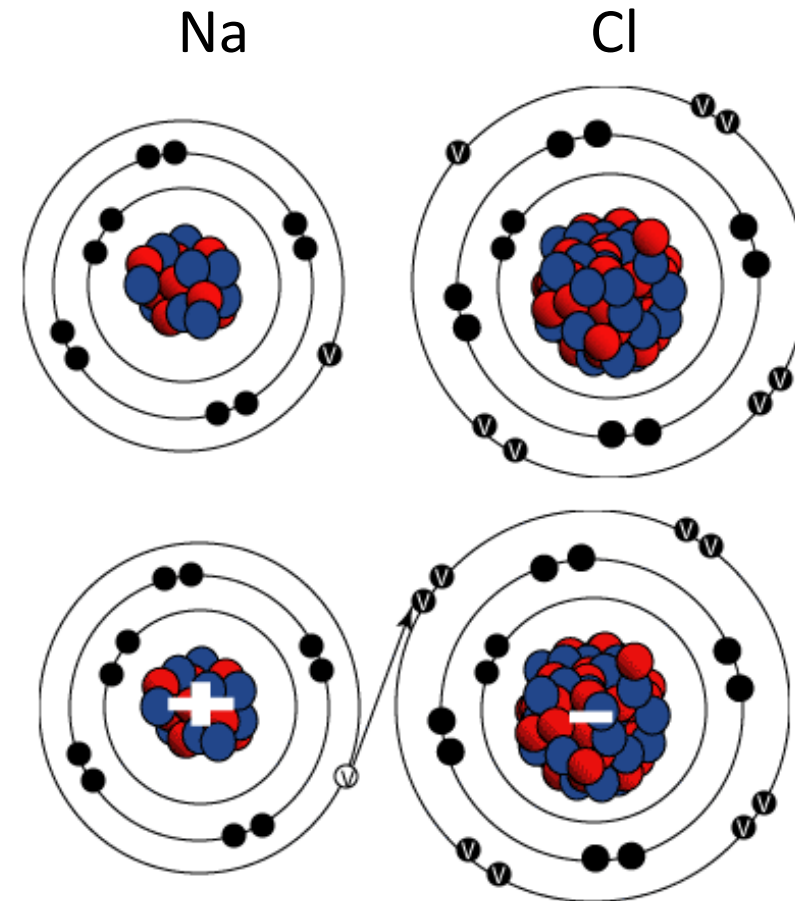
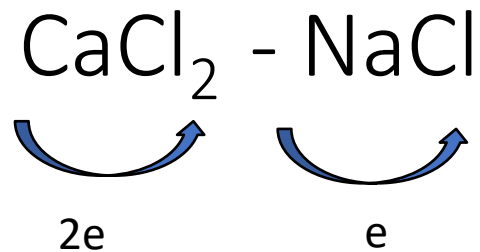
- **Massa** esta concentrada no núcleo.
- Núcleo ocupa pequena parte do volume total do átomo!
- Eletrosfera ocupa maior parte do volume.
- Eletrosfera tem pouca massa.
- Eletrosfera é **deformável**.

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

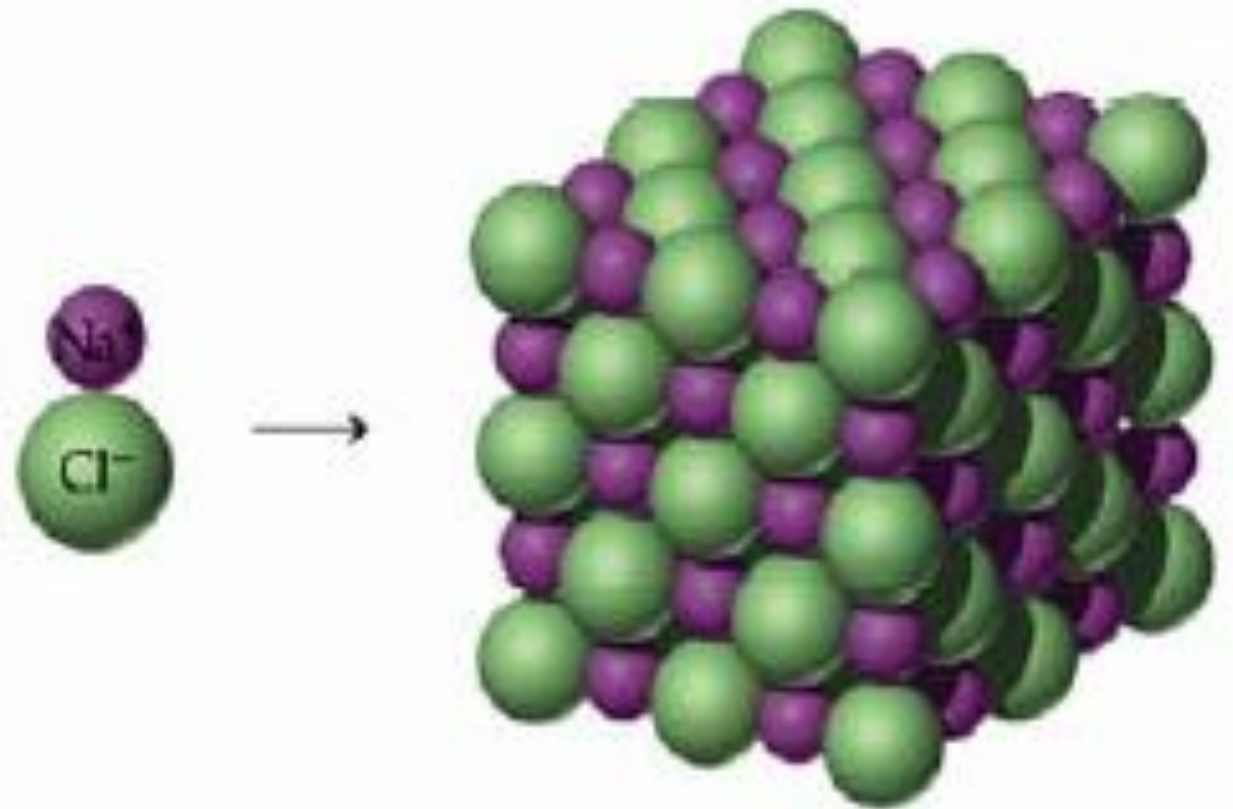
Ligação iônica

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



Ligação iônica

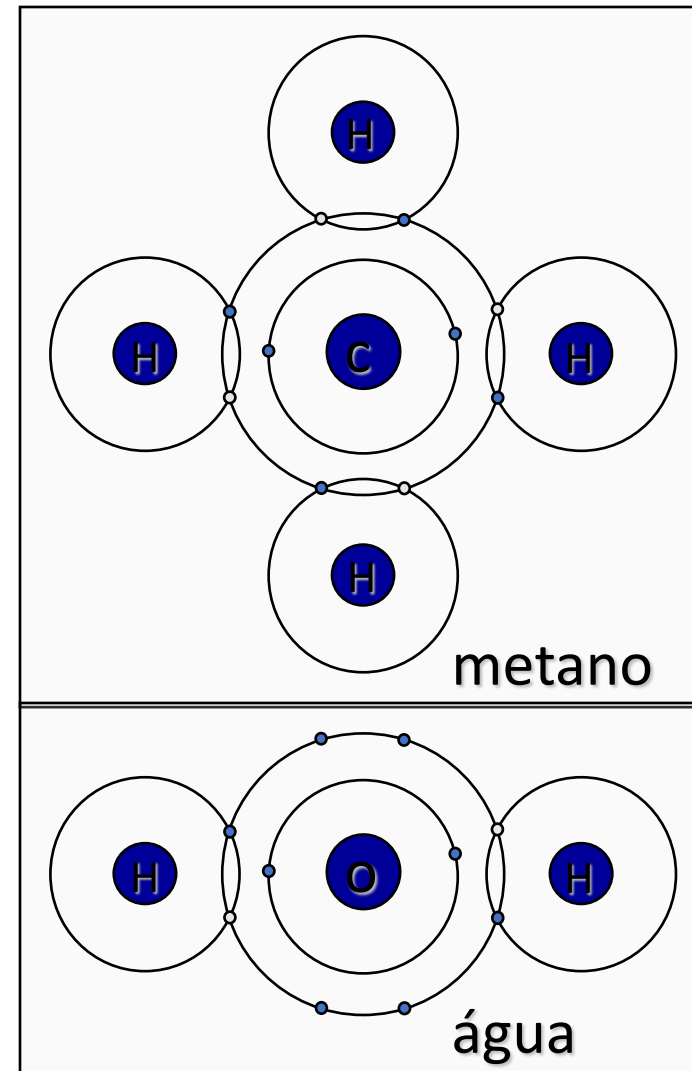
- **atração eletrostática**
perda de elétrons +
ganho de elétrons -
- **não direcional**
- **compactação depende do tamanho relativo dos íons**
- **sólido**
- **solúveis (solventes polares)**
- **Isolantes**



Não permite deslocamentos relativos dentro dos planos cristalinos

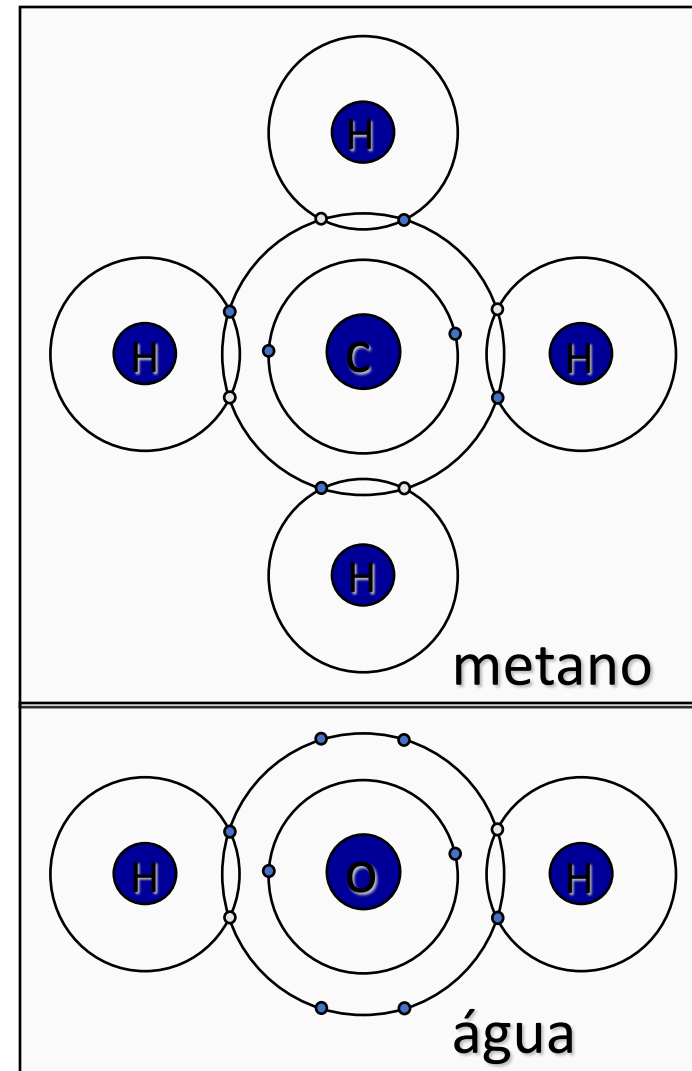
Ligação covalente

- 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 semimetais

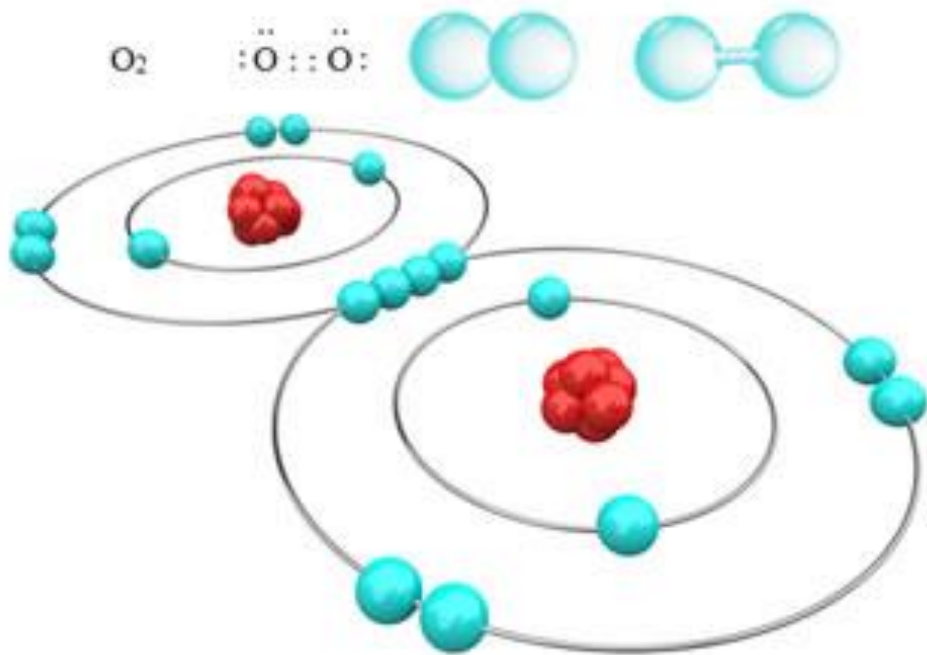


Ligação covalente

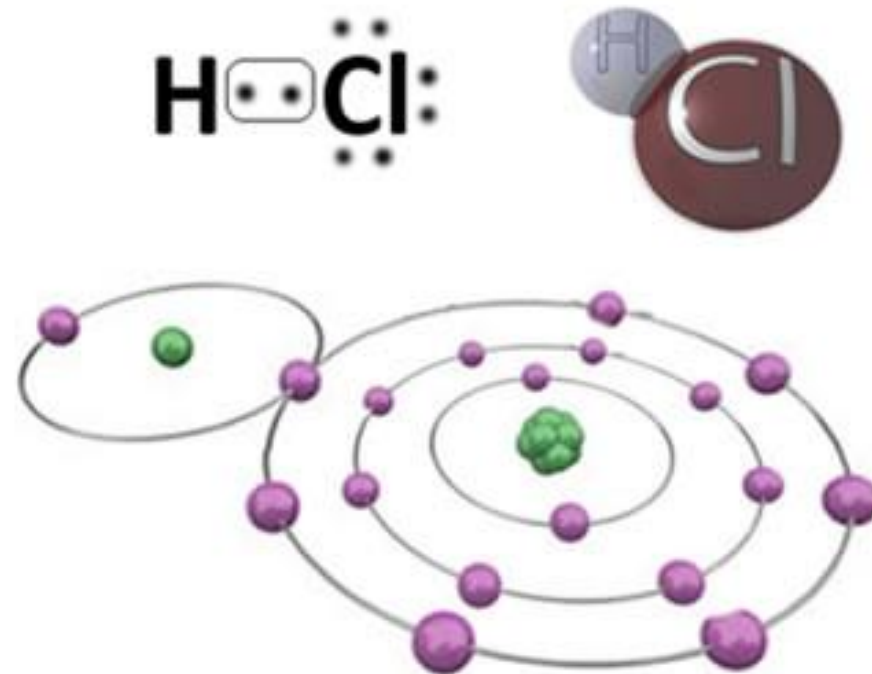
- Elétrons compartilhados em orbitais específicos
- N° de ligações depende do N° de valência
- Isolantes
 - direcional
 - exemplo: polímeros



Ligação Covalente



Apolar – Molécula O_2



Polar – Molécula HCl

Ligação Covalente x Iônica

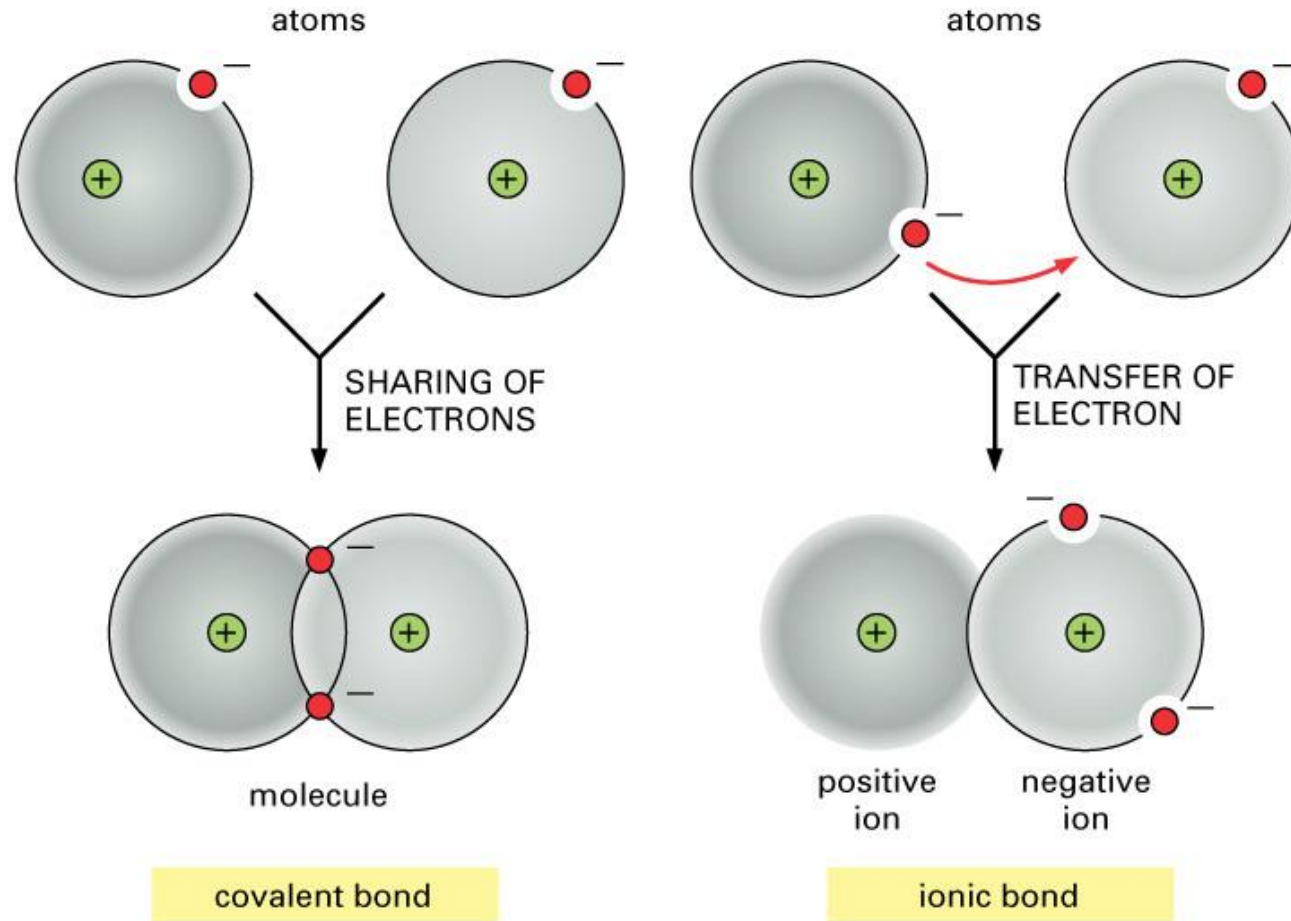
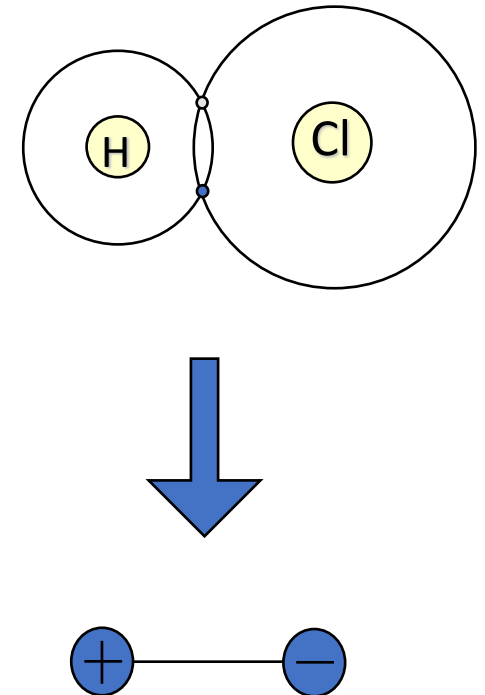


Figure 2.6 Essential Cell Biology, 2/e. (© 2004 Garland Science)

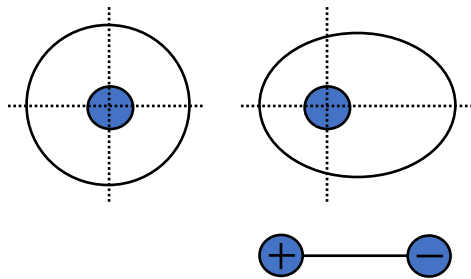
Forças de Van der Waals

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



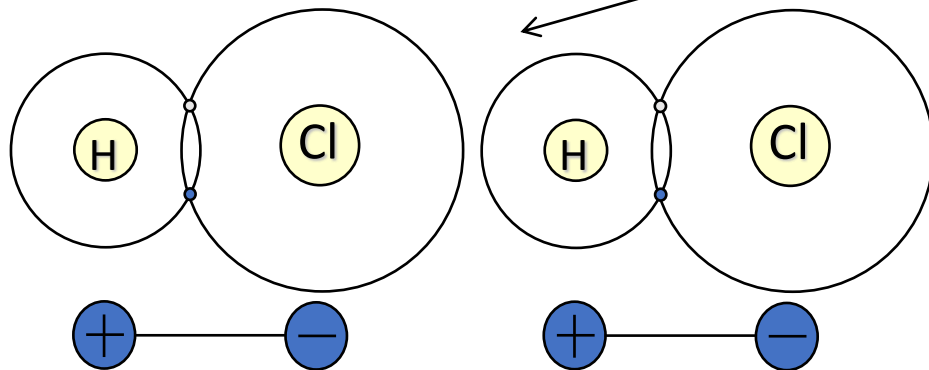
Forças de Van der Waals

- Dipolo induzido



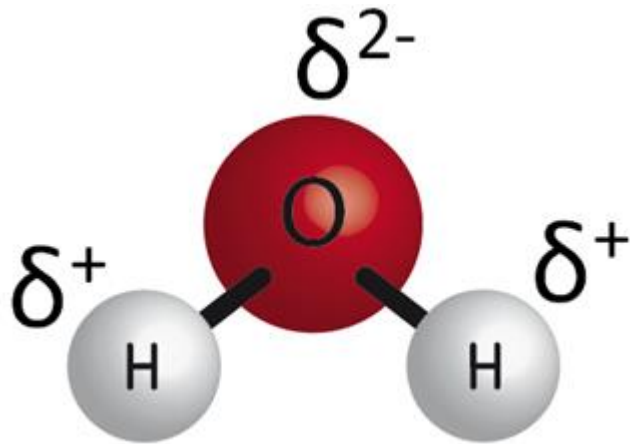
- Moléculas polarizadas por indução ou permanentes:
 - Exemplo: Pontes de H
 - (moléculas compostas por H – polo positivo)

- Moléculas polares

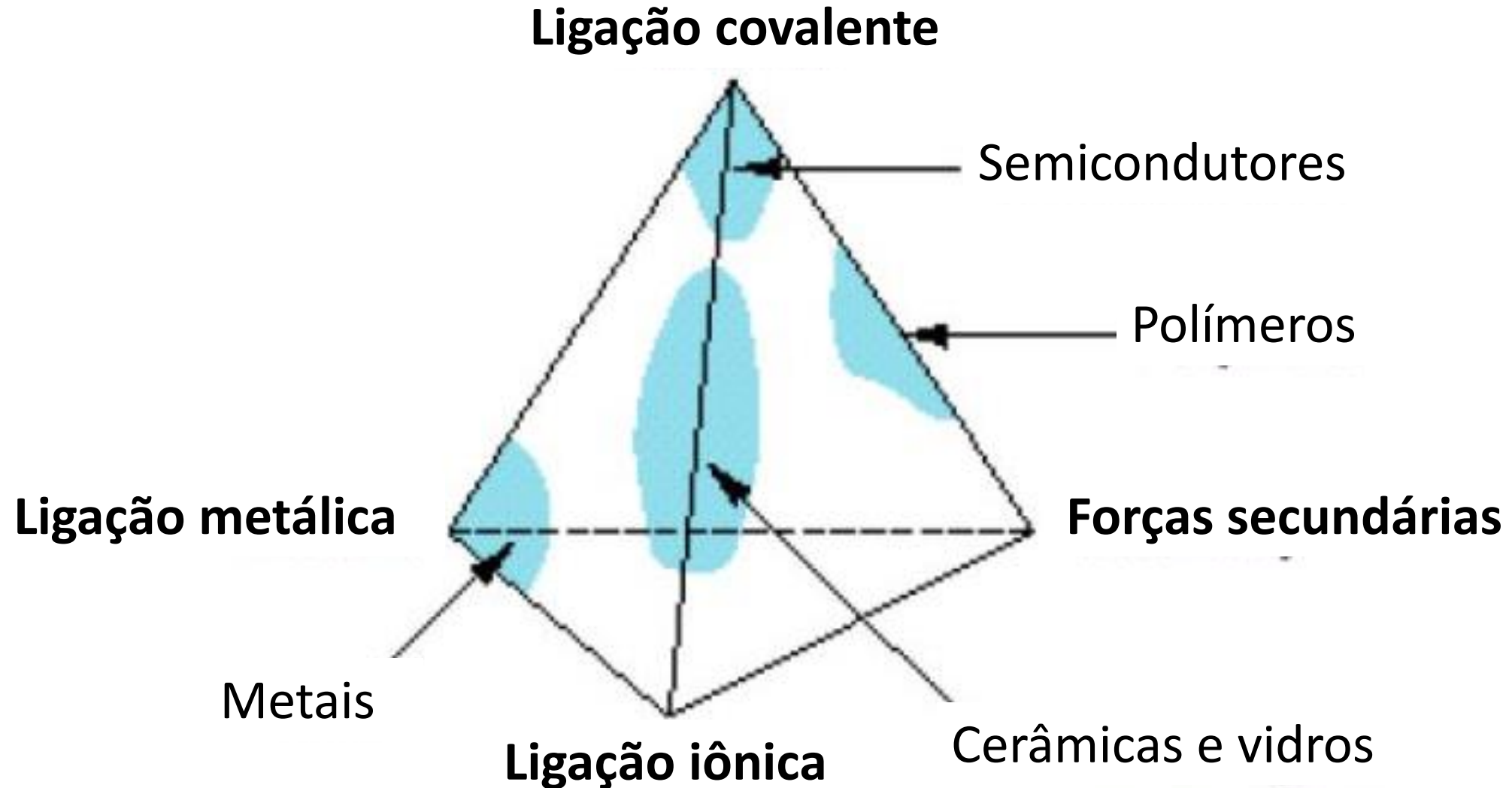


Moléculas polares: água

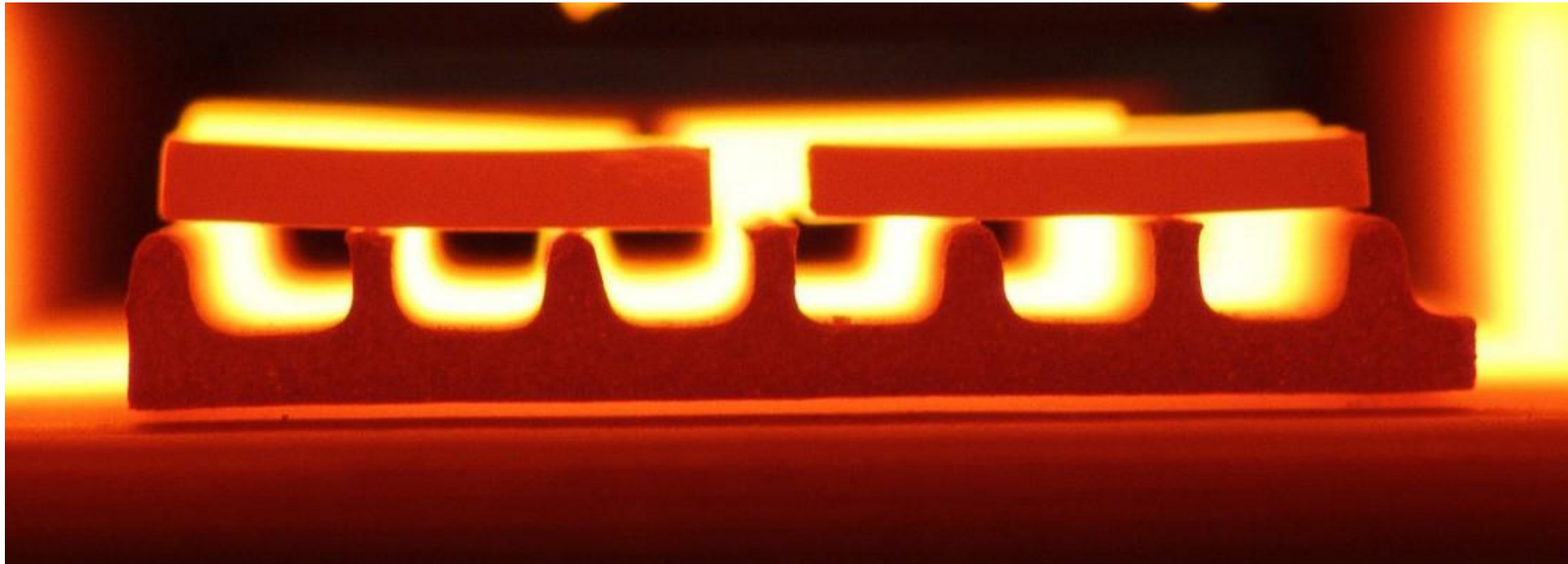
- As moléculas acabam por serem atraídas umas às outras pelo efeito de dipolo.



Ligações predominantes & Famílias de materiais



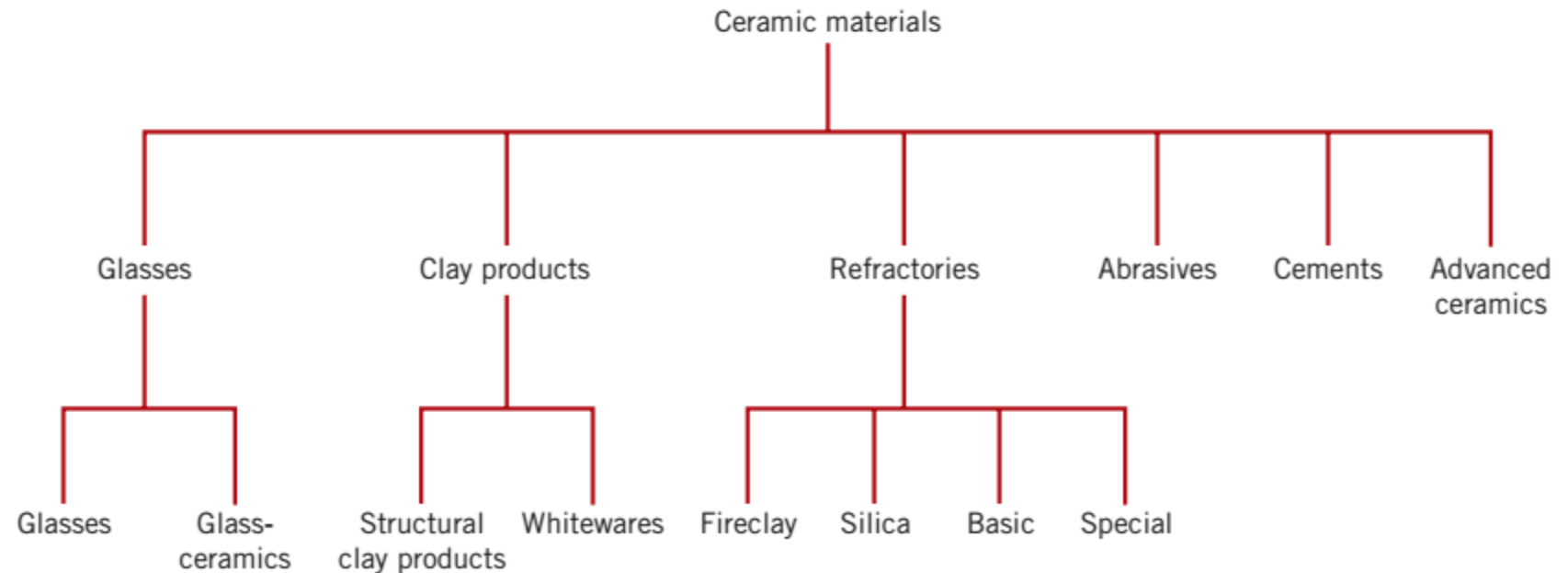
Materiais Cerâmicos



Definição e classes de materiais cerâmicos

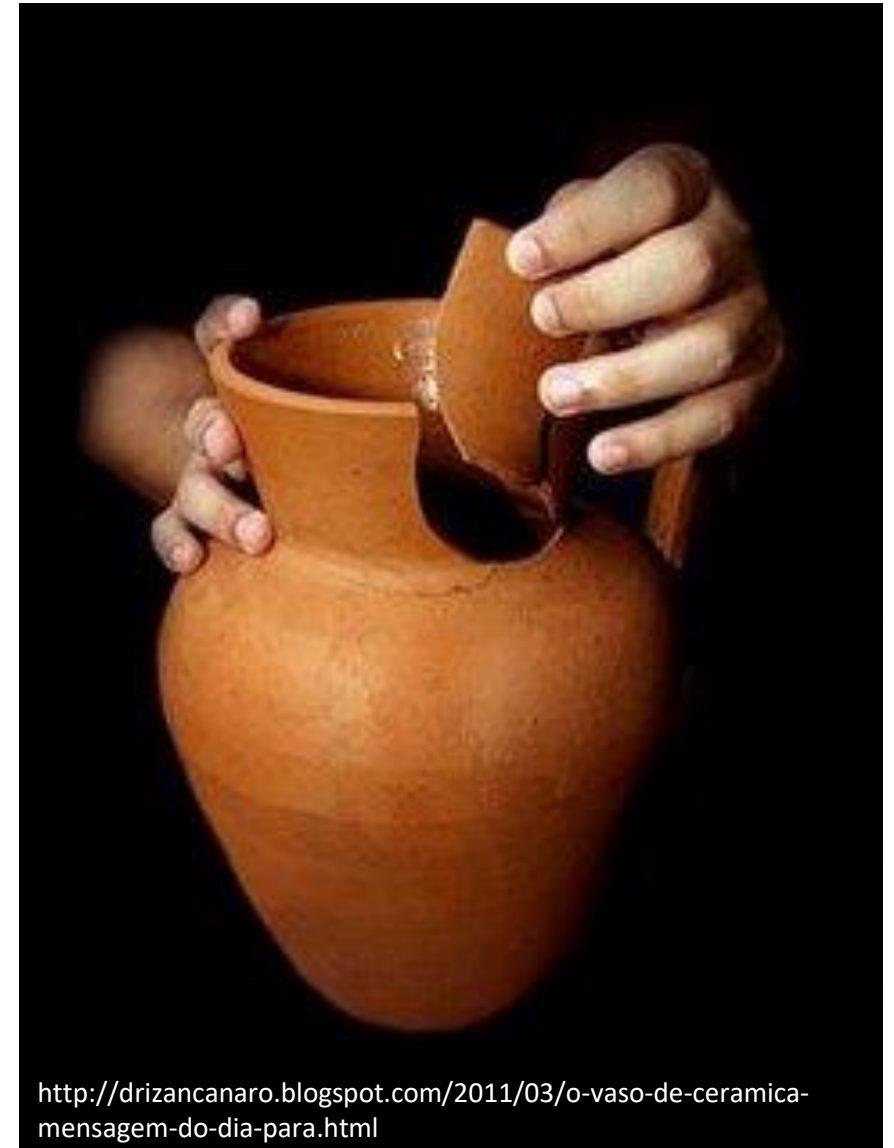
Grego: “KERAMOS” - COISA QUEIMADA

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



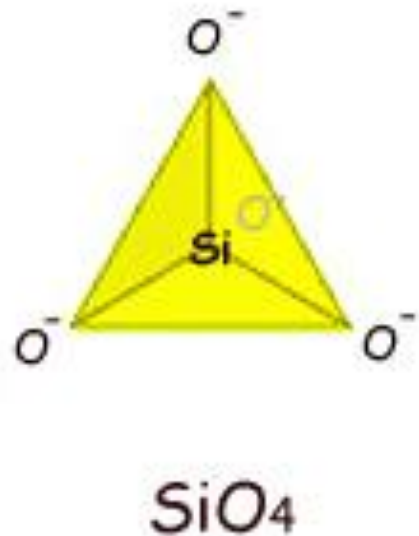
Comportamento básico das Cerâmicas

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

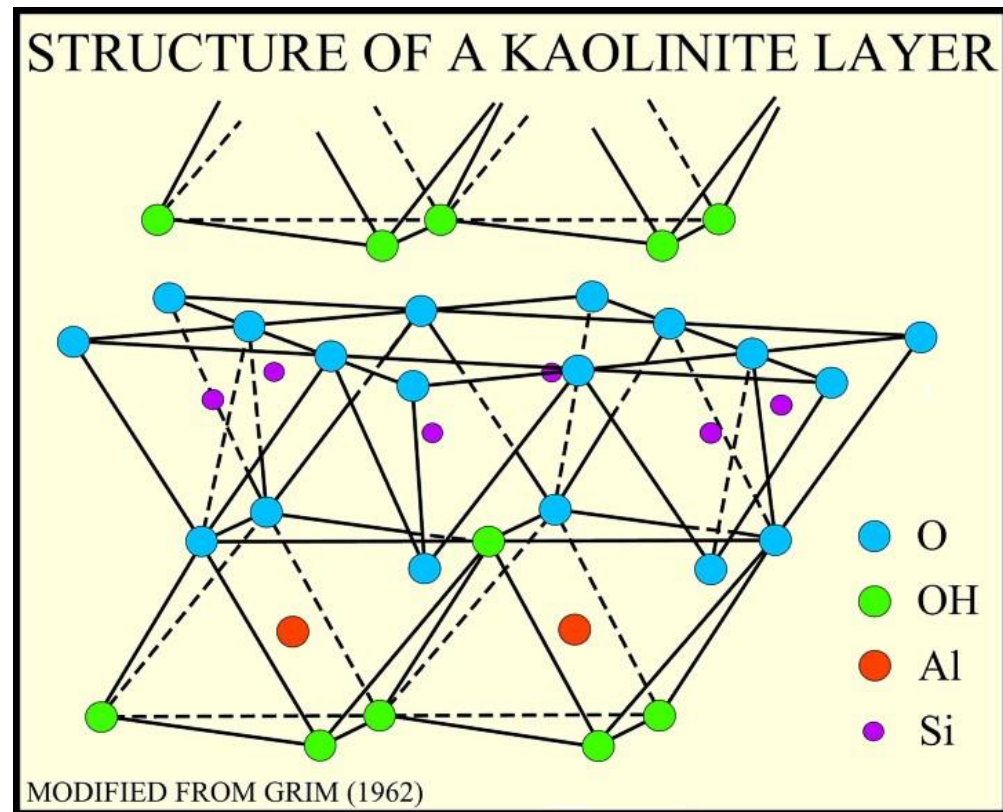


Constituintes principais das argilas

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

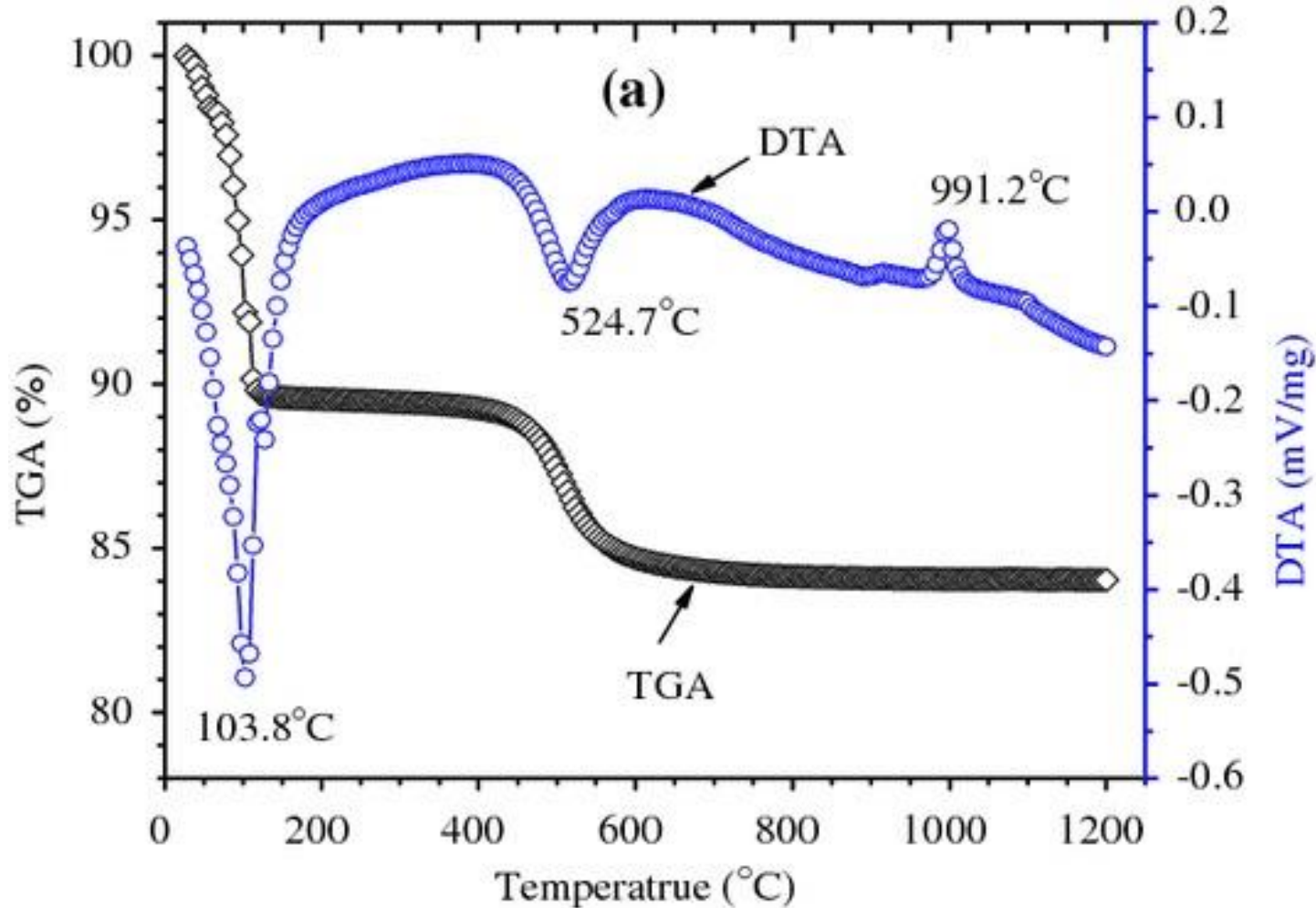


geologia.byethost7.com



pubs.usgs.gov

Calcinação das argilas



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

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

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

573 °C – inversão quartzo α para β , expansão volumétrica

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

950 °C – formação espinélio e mulita a partir caulinita

1100 °C – início da fusão de feldspato e mica em fase vítrea

1200 °C – vitrificação completa, retração volumétrica máxima

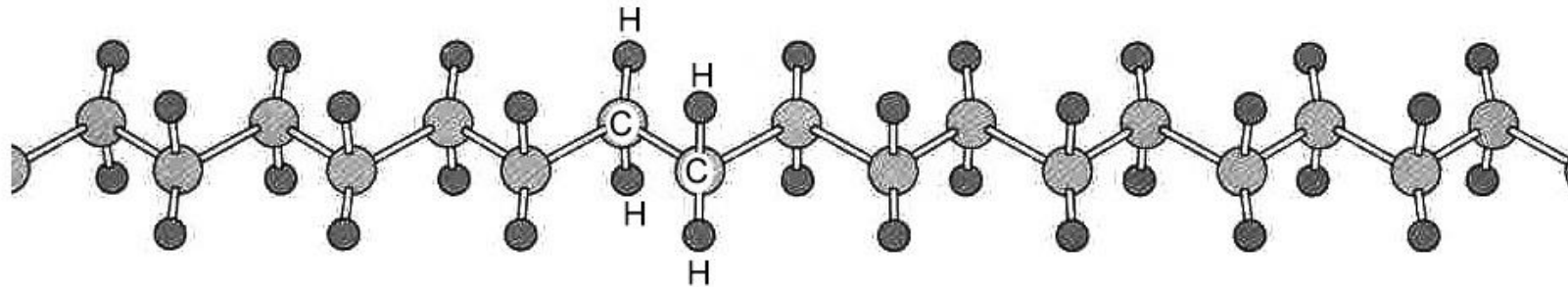
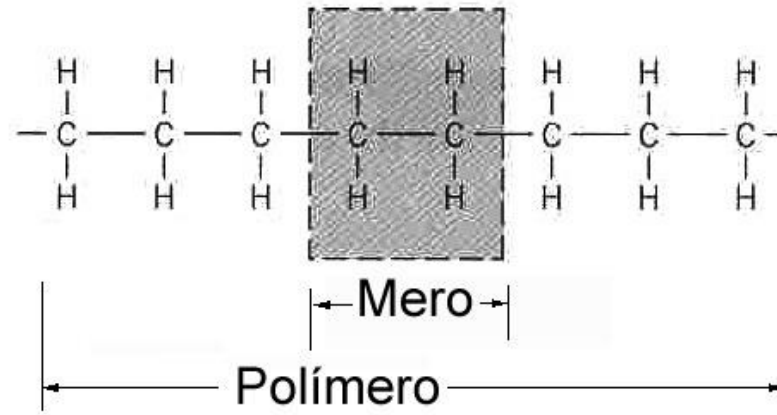
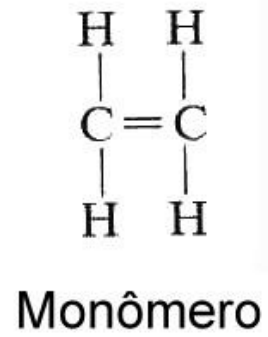
Materiais poliméricos



Principais tipos de plásticos usados
nos produtos e sistemas construtivos

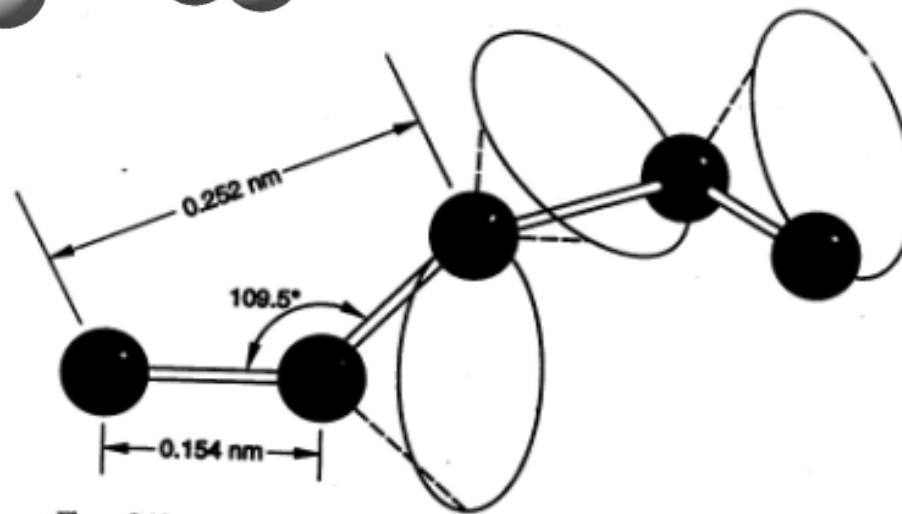
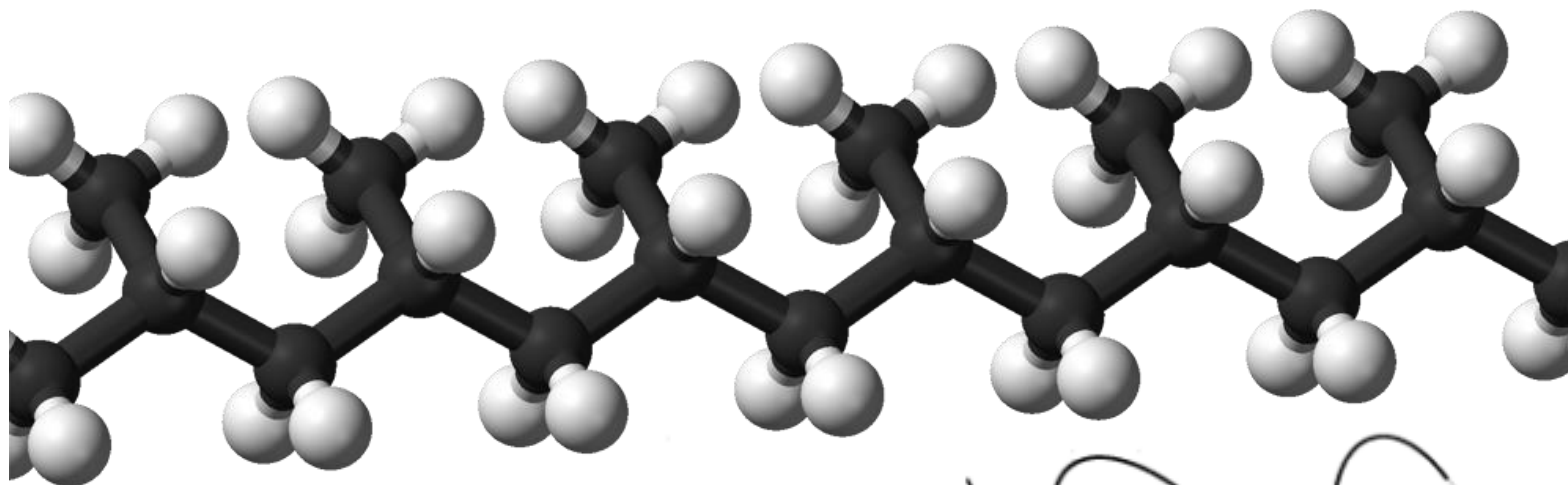
<http://cobec.com.br/principais-tipos-de-plasticos-usados-nos-produtos-e-sistemas-construtivos/>

Monômero, Mero e Polímero

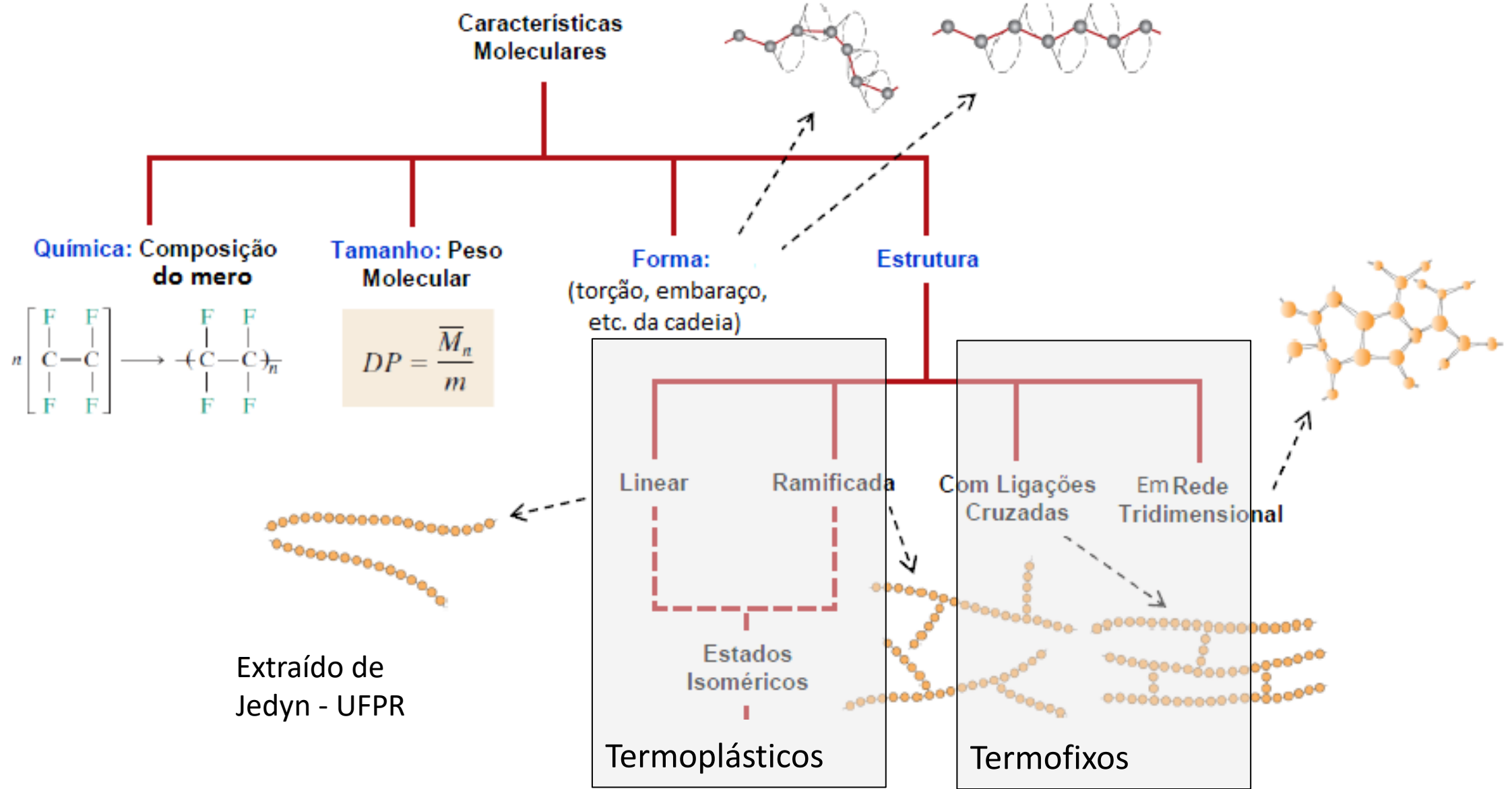


Molécula de polietileno

Ligação covalente é direcional: influencia comportamento dos polímeros



Características Moleculares



Polímeros termoplásticos e termofixos

Termoplásticos

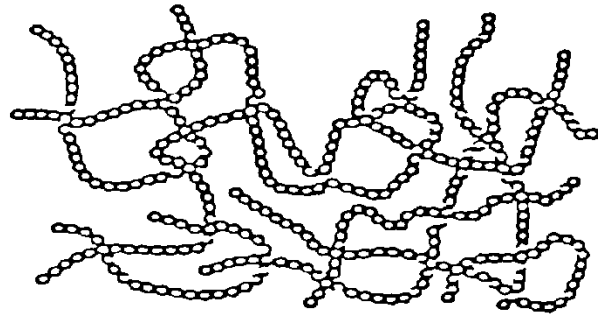
- Lineares ou ramificados.
- Podem ser conformados mecanicamente repetidas vezes, desde que reaquecidos (são facilmente *recicláveis*).
- Parcialmente cristalinos ou totalmente amorfos.

Termofixos

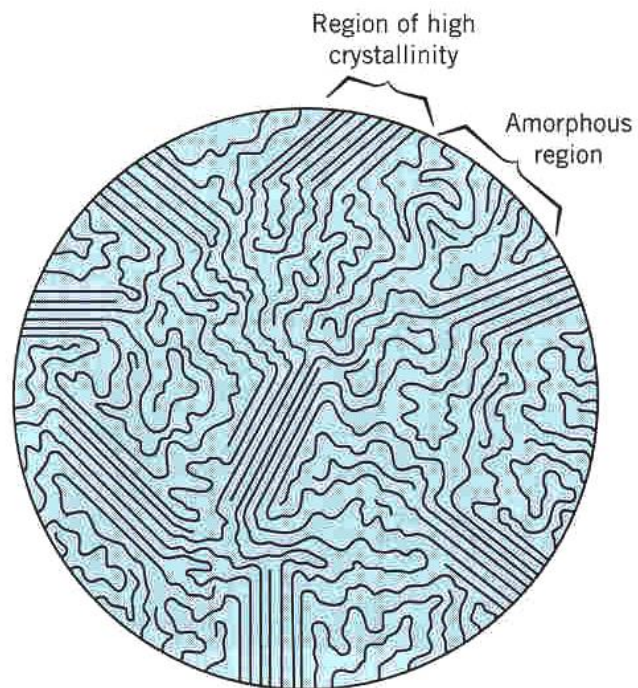
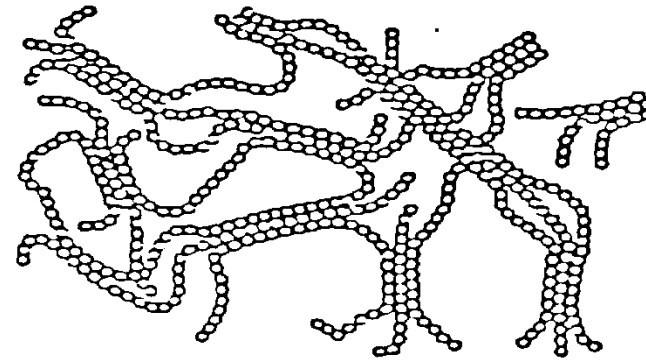
- Possuem uma estrutura tridimensional em rede com ligações cruzadas.
- Podem ser conformados plasticamente apenas em um estágio intermediário de sua fabricação.
- O produto final é duro e não amolece com o aumento da temperatura.
- Eles são insolúveis e infusíveis.
- Mais resistentes ao calor do que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

Microestrutura

100% Amorfo



Semi-cristalino



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

Termoplásticos x temperatura

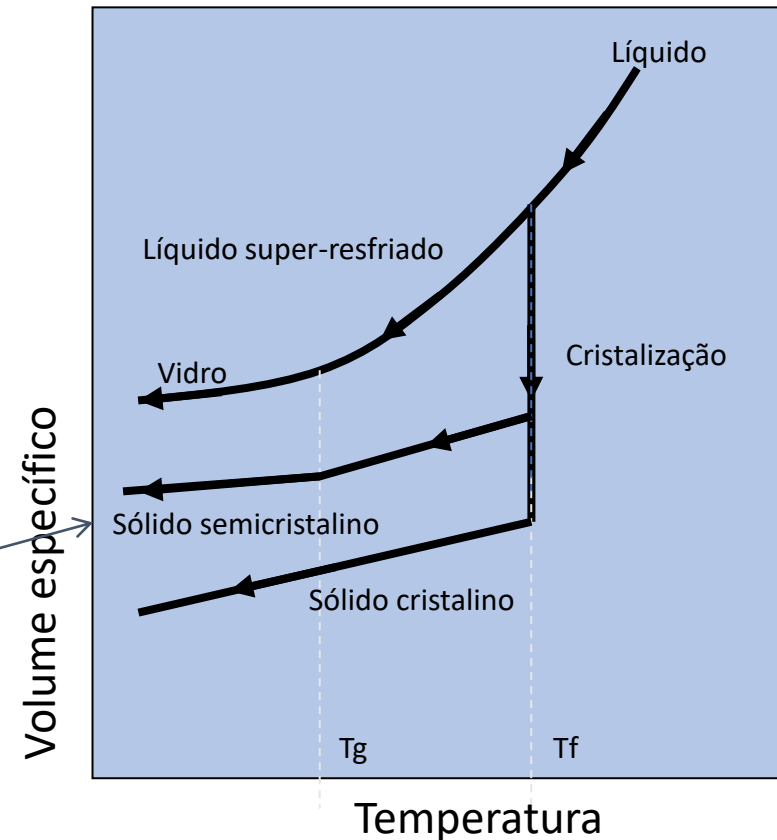
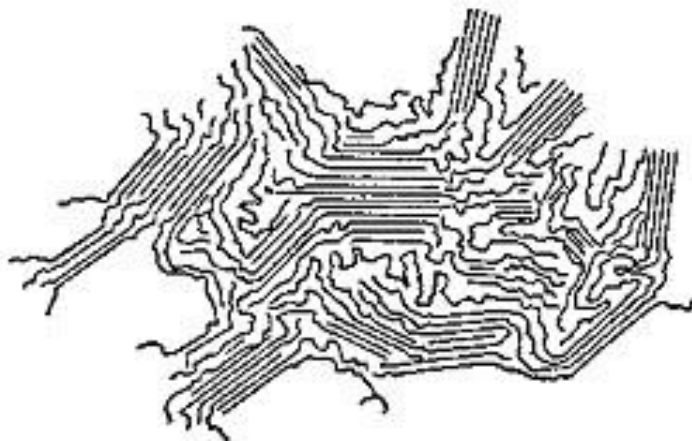
- Temperatura de transição vítrea (T_g)

Abaixo da T_g :

tornam-se frágeis

< deformação térmica

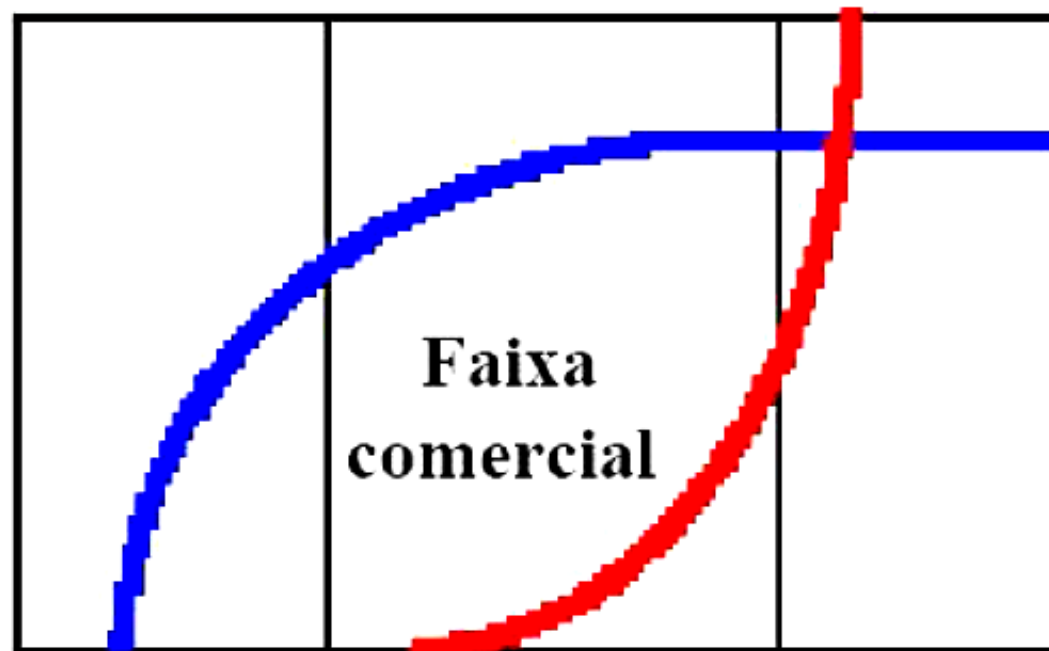
< deformação elasto-plástica



Pontos importantes

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

**Propriedades
Mecânicas**



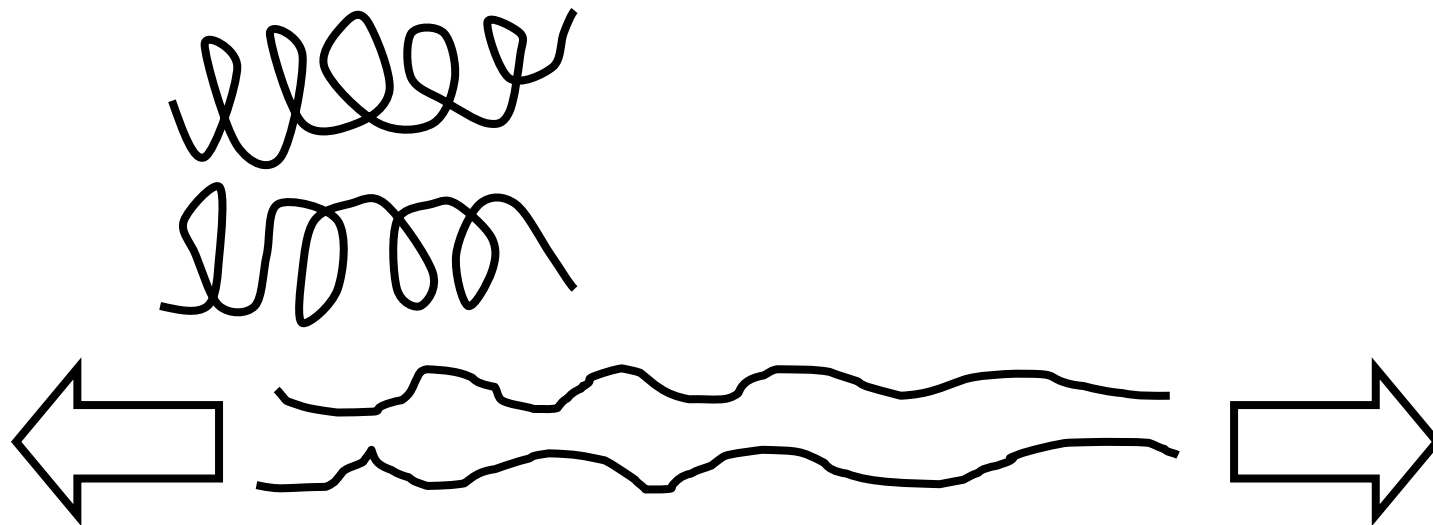
**Faixa
comercial**

**Viscosidade
de
Fluxo**

Grau de Polimerização

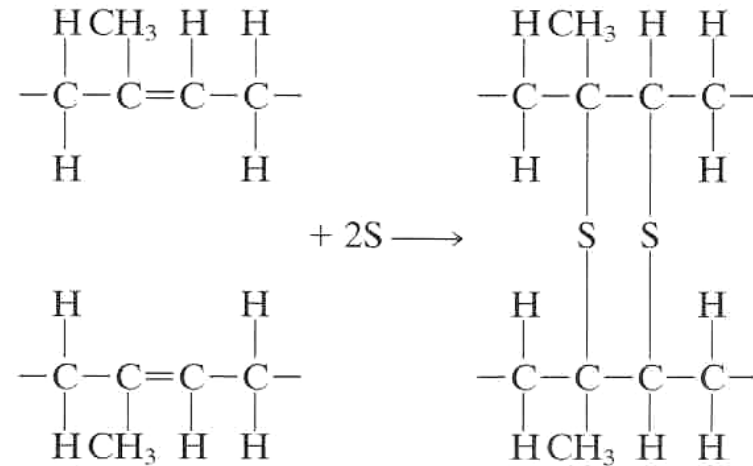
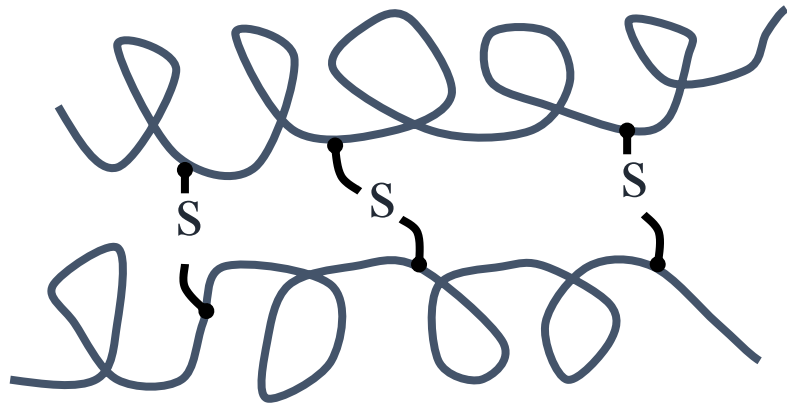
Elastômeros

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



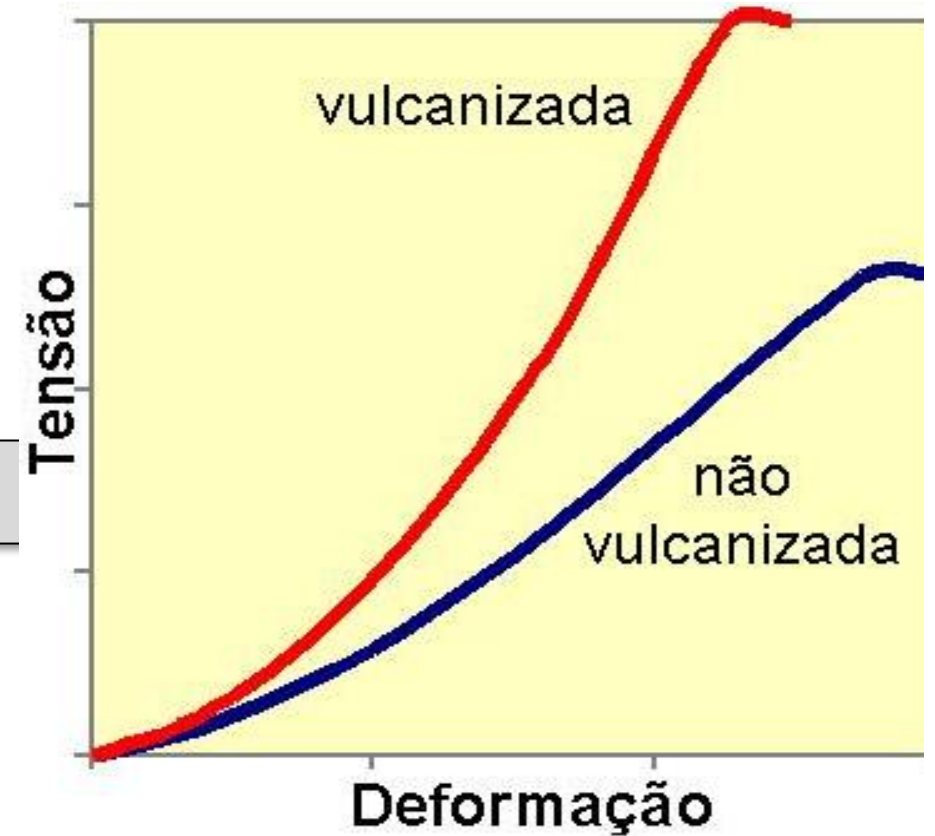
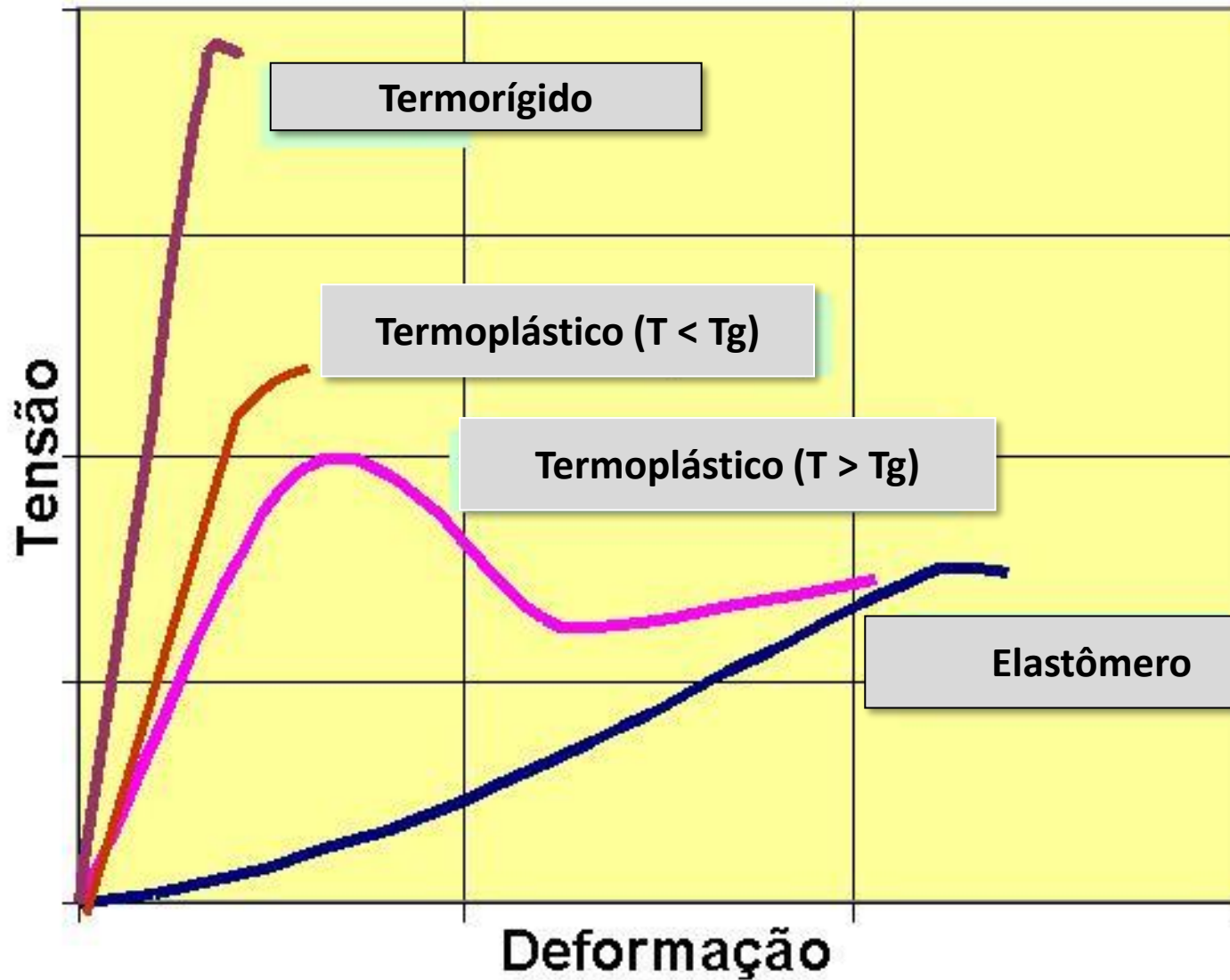
Elastômeros

- 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

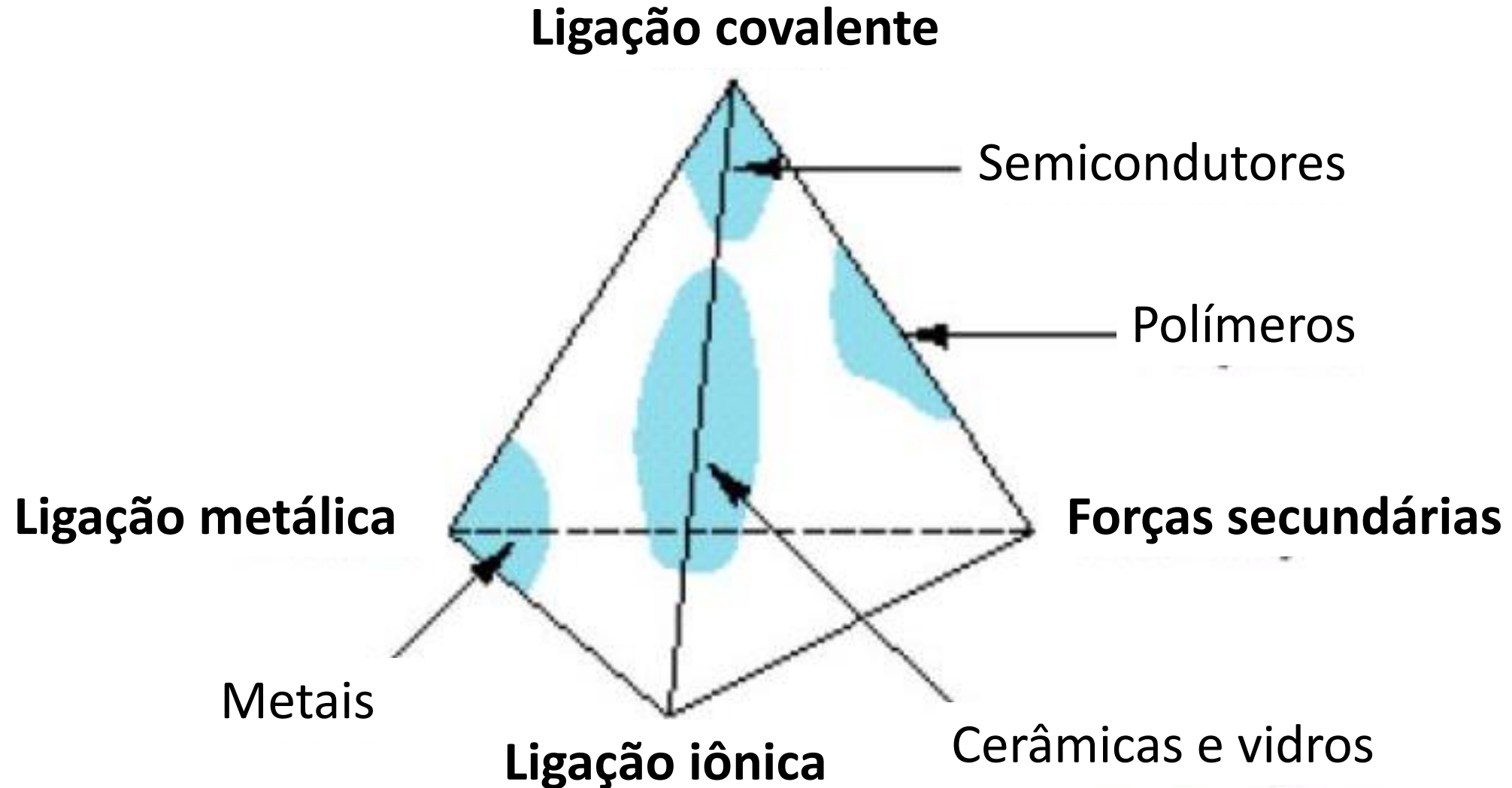


Metais



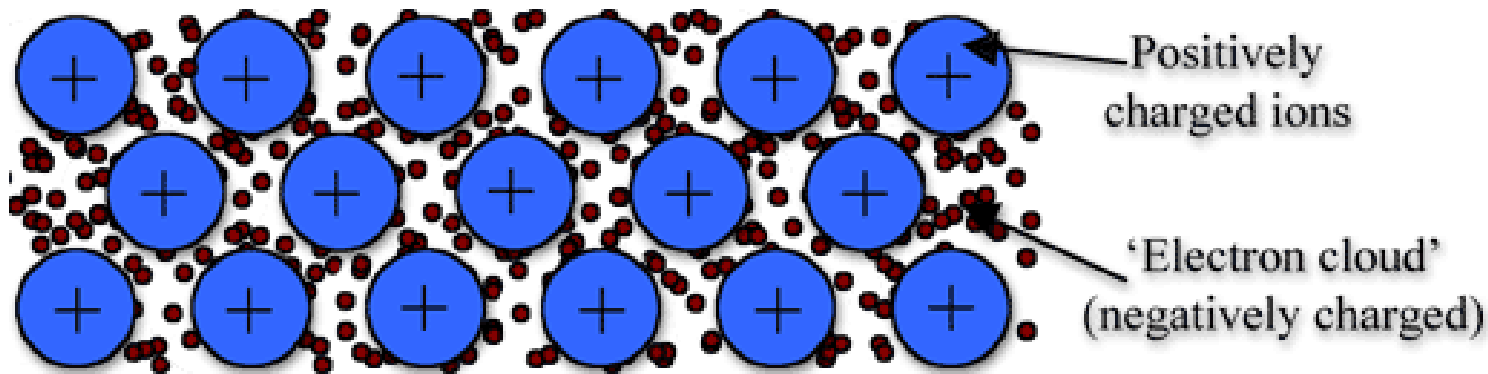
http://static.wixstatic.com/media/43cc43_607b9ceb24ac4f4e83400d45715ef1fd.jpg

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



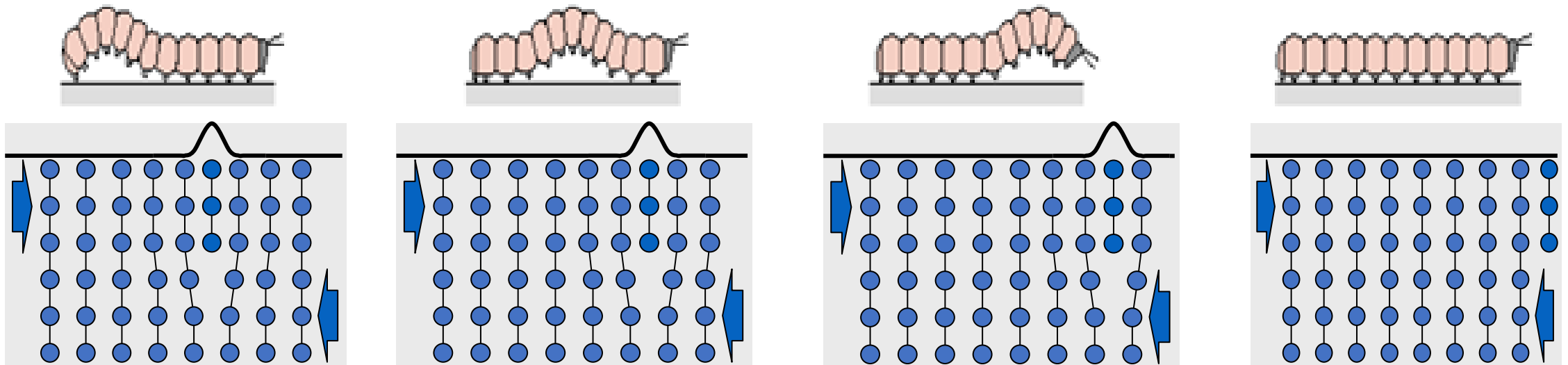
Propriedades dos metais

- ✓ Maleáveis
- ✓ Dúcteis



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

O aumento do teor de carbono dificulta o movimento das discordâncias



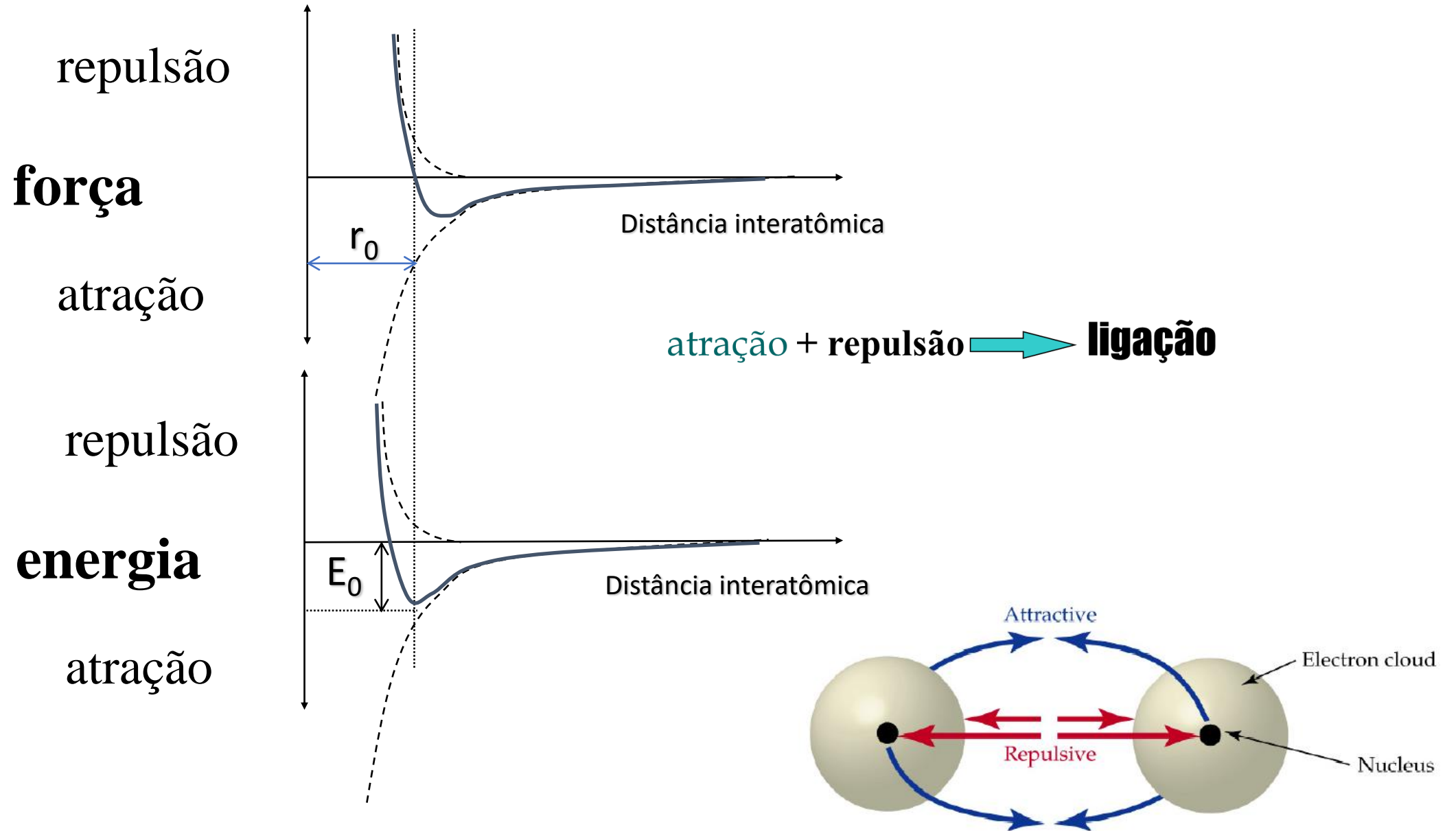
Pergunta:

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

Pergunta:

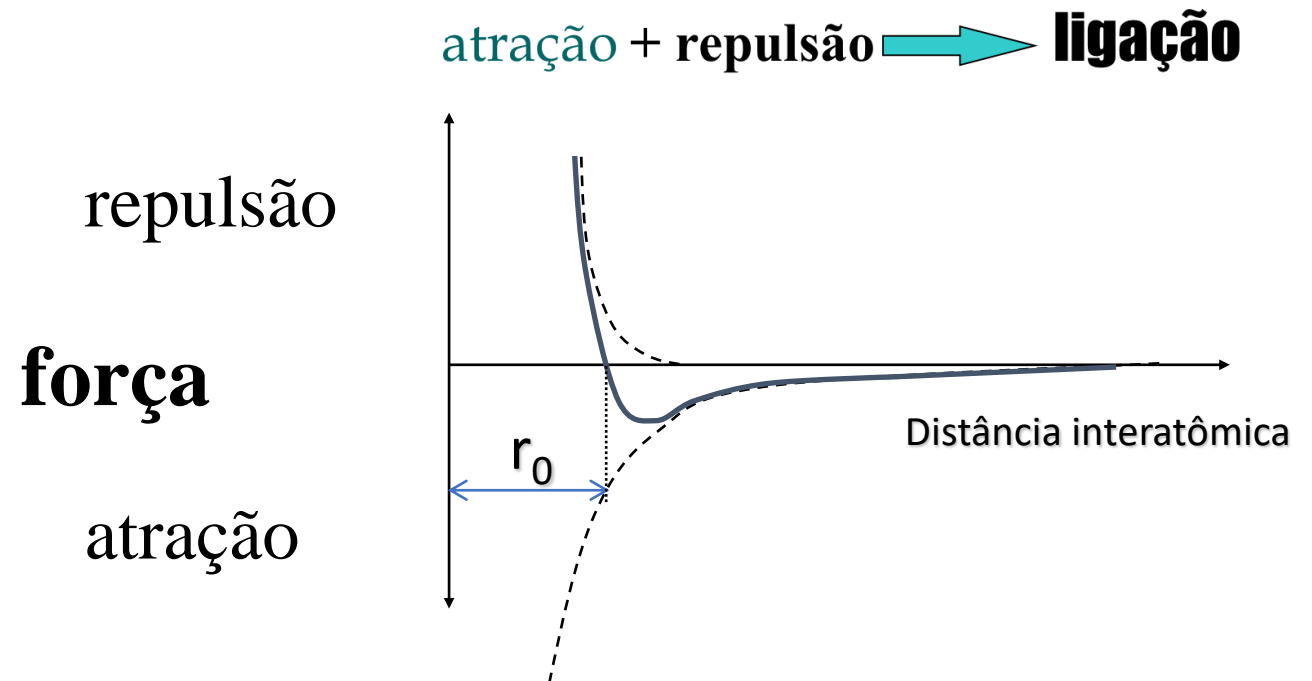
Como você definiria distância interatômica?

Vinculação de força e energia

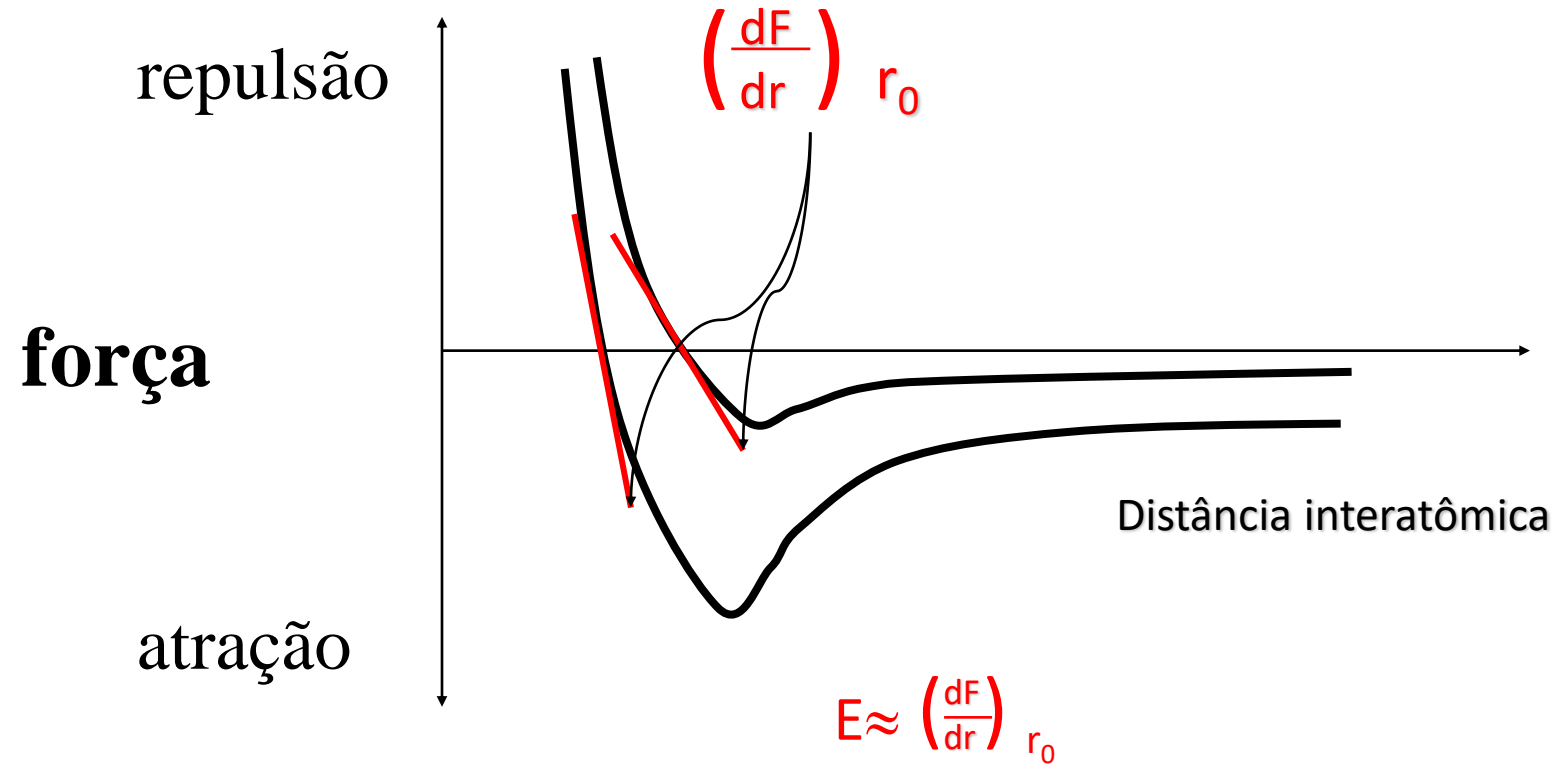


Átomo x Esforços Mecânicos

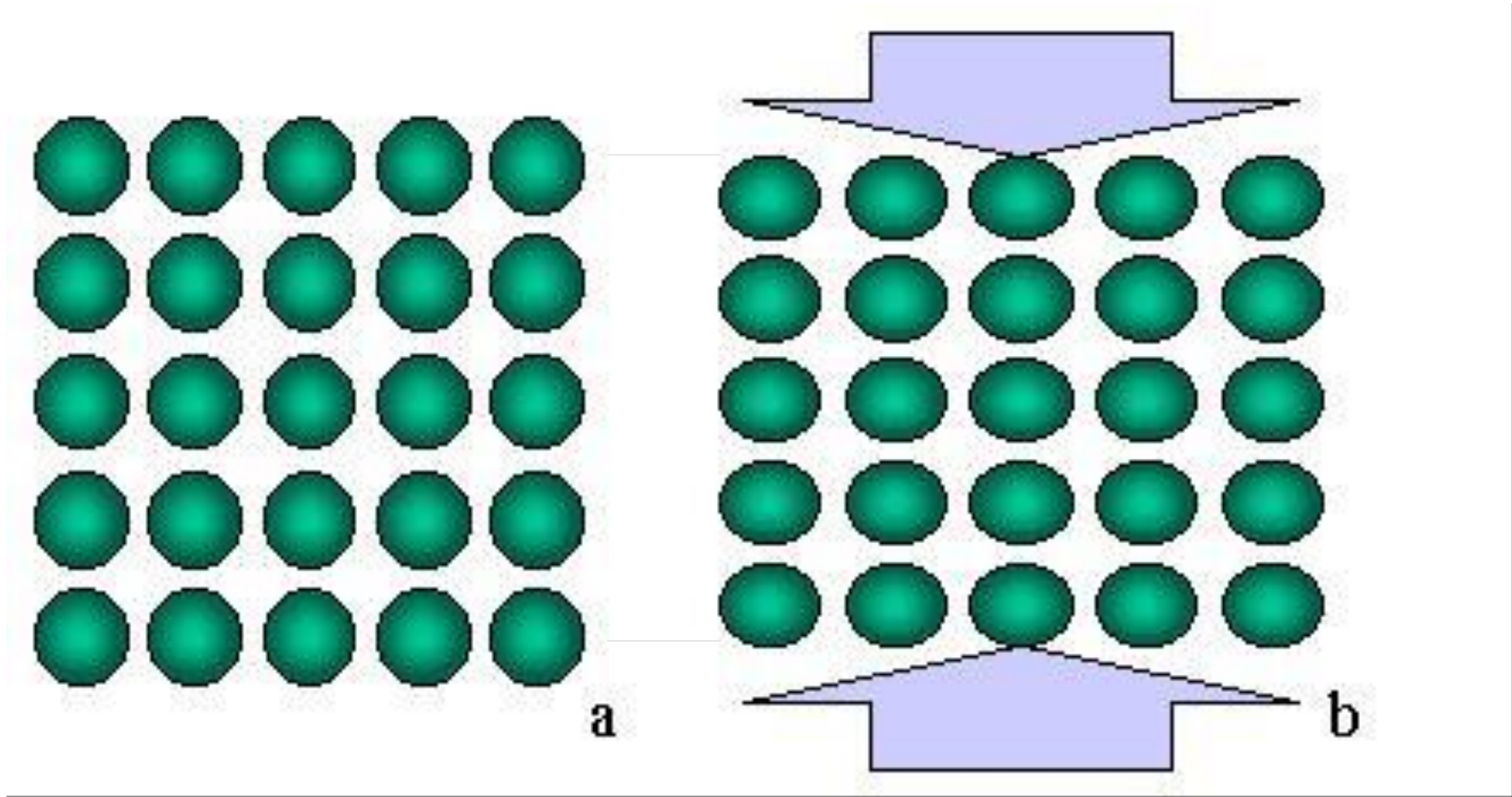
- Eletrosfera deformável
 - Compressão → aproxima os núcleos
 - Tração → afasta os núcleos
 - **Elasticidade**
- Esforço \gg força de ligação
 - **Ruptura das ligações**
 - Ruptura do material



Vinculação de força e energia

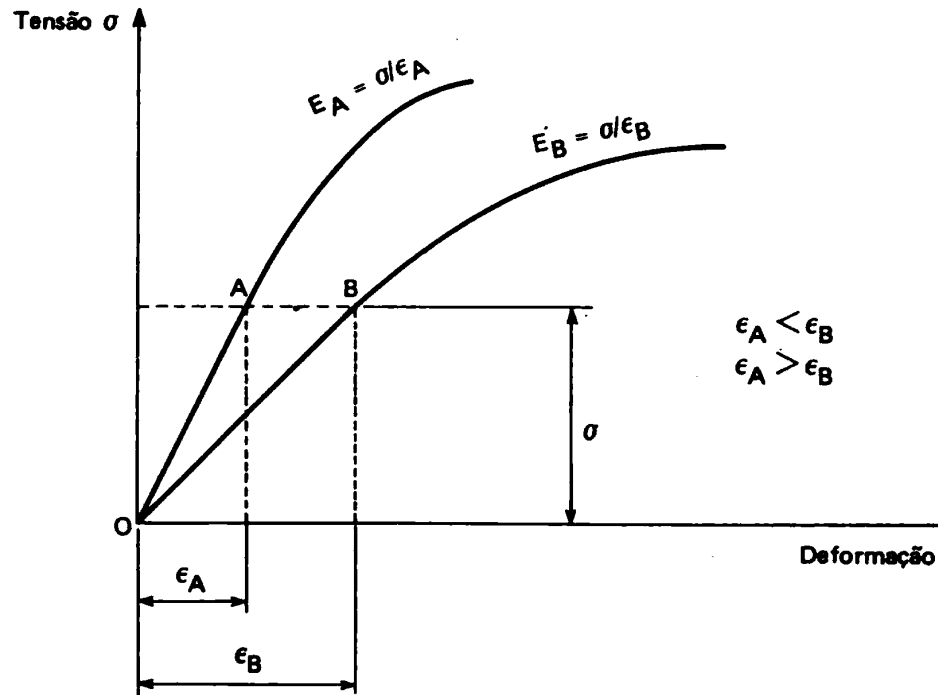


Influência da estrutura



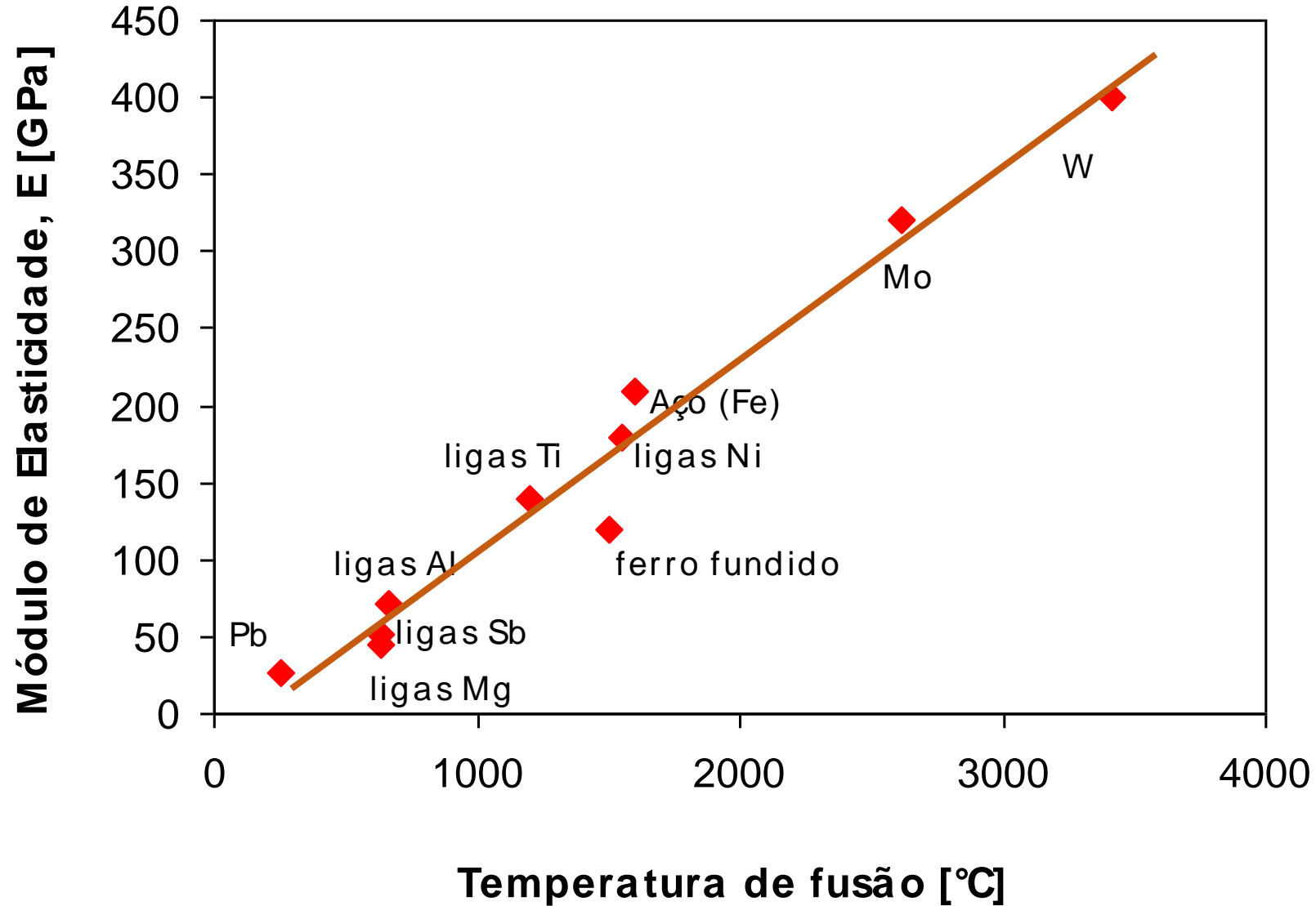
Módulo de elasticidade

Definição de E

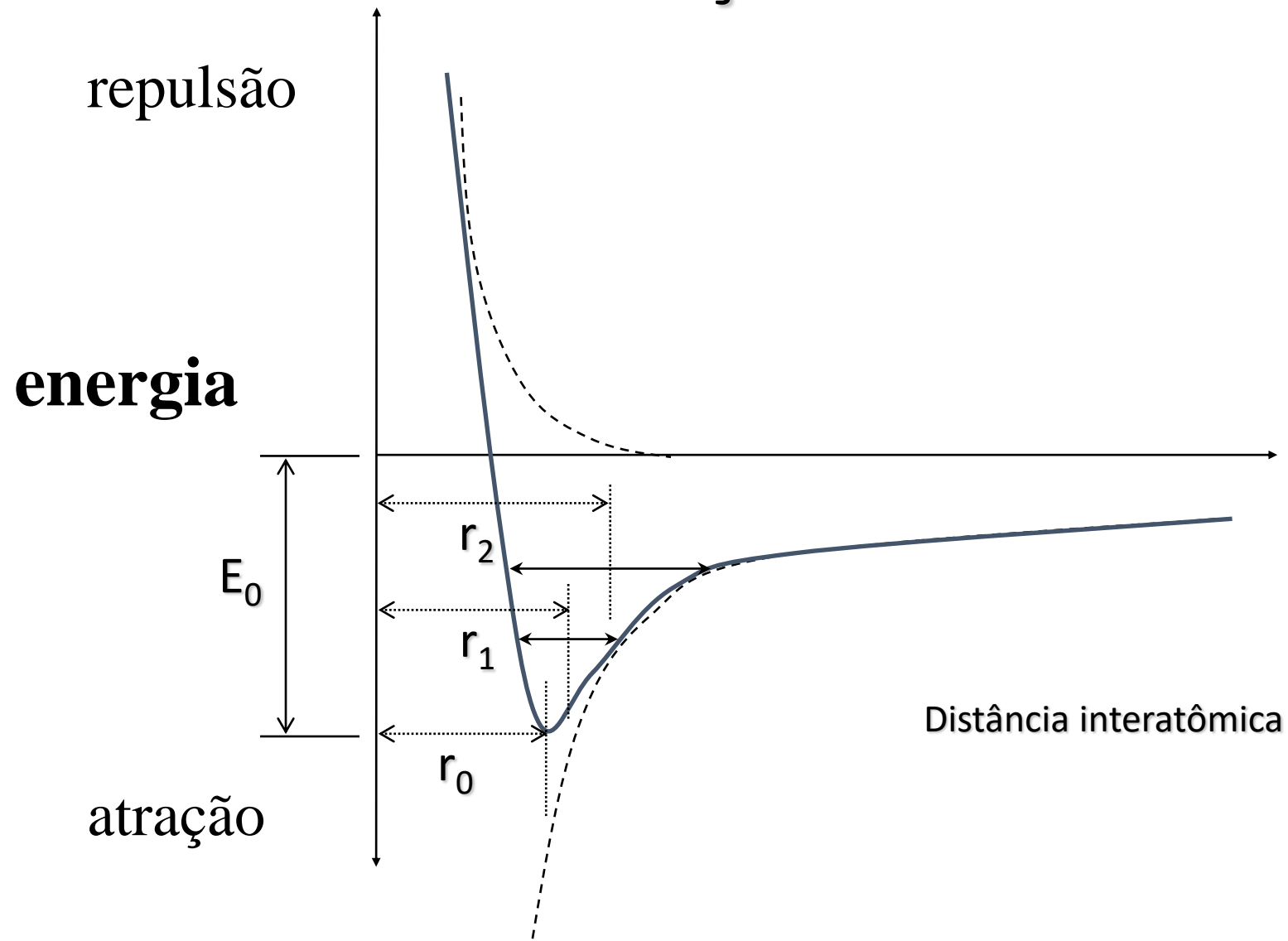


Liga	Módulo de elasticidade (kgf/mm ²)
Aços-carbono e aços-liga em geral	21 000
Aços inoxidáveis austeníticos	19 600
Ferro fundido nodular	14 000
Bronzes e latões	(média) 7 700-11 900
Bronzes de manganês e ao silício	10 500
Bronzes de alumínio	(média) 8 400-13 300
Ligas de alumínio	7 000- 7 450
Monel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

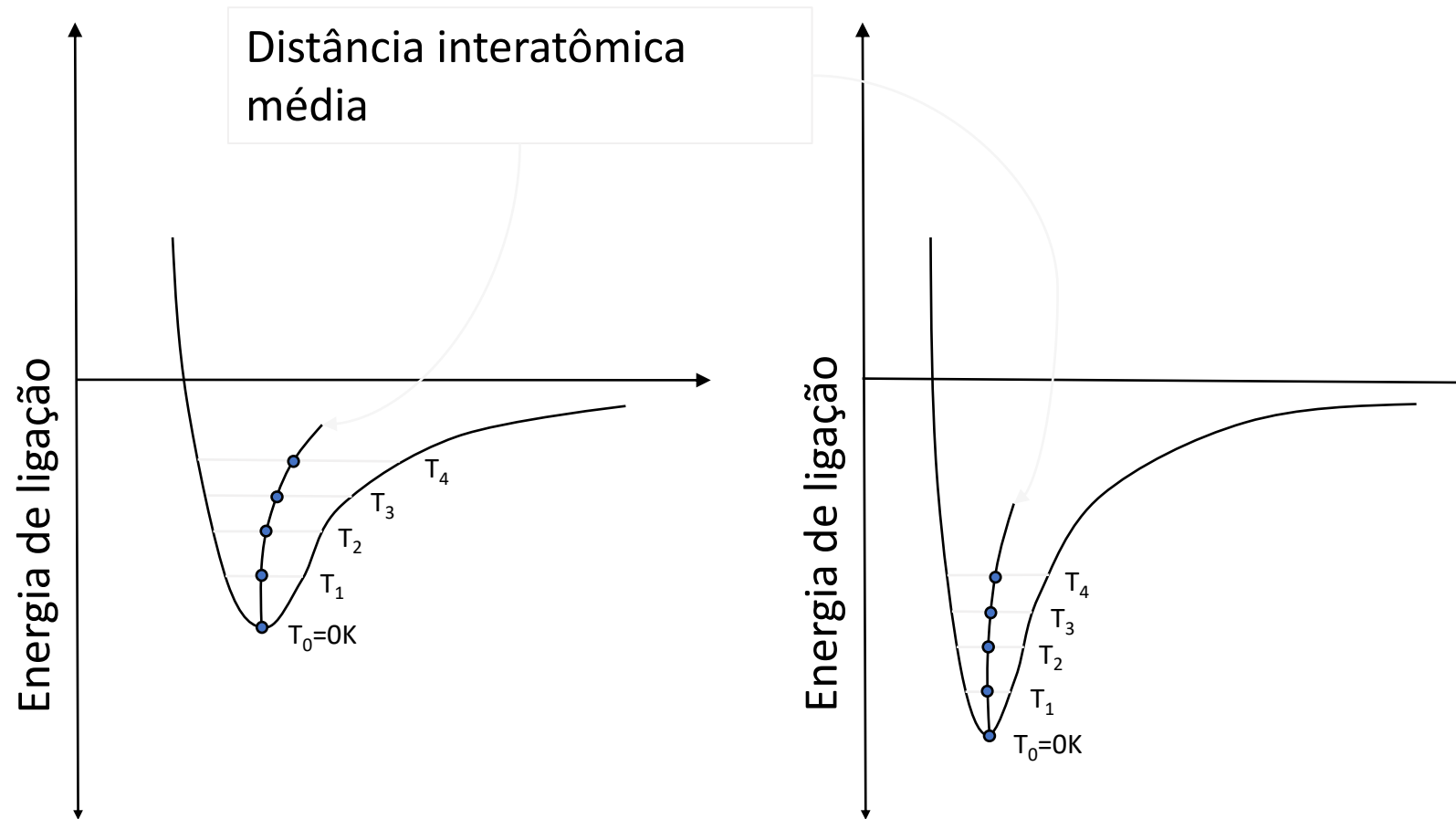
Módulo de elasticidade



Vinculação de distância interatômica e coeficiente de dilatação térmica

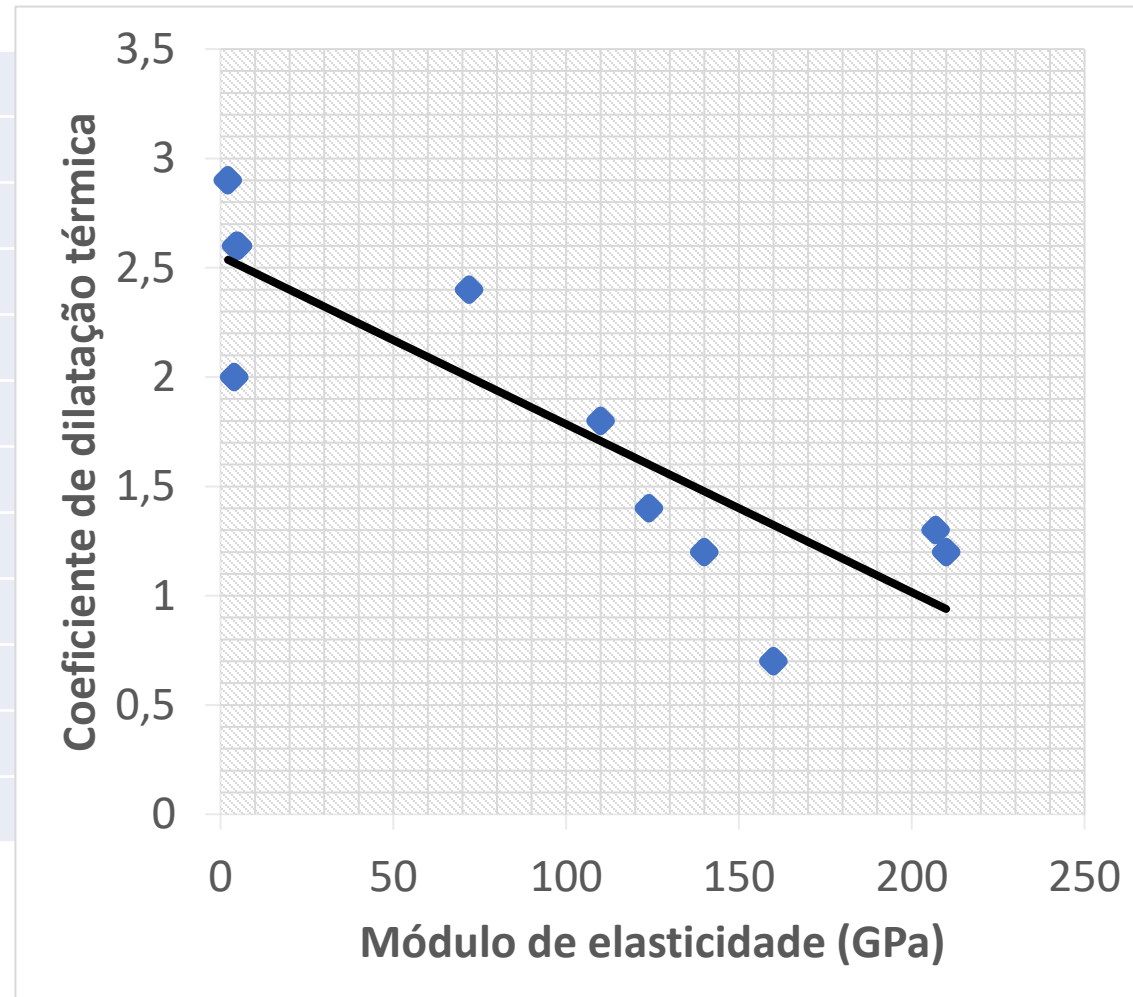


Vinculação de distância interatômica e coeficiente de dilatação térmica

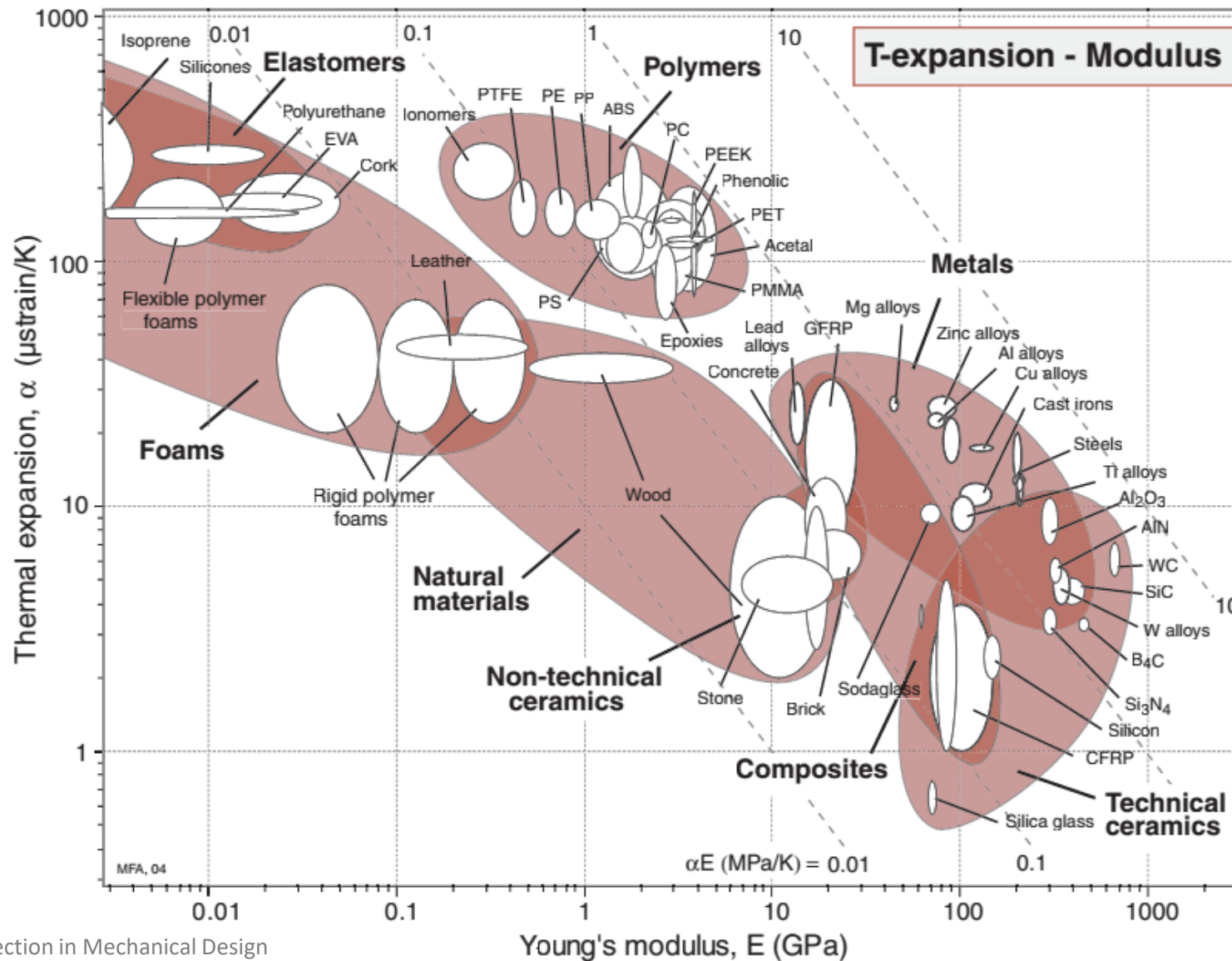


Correlação entre E e α

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



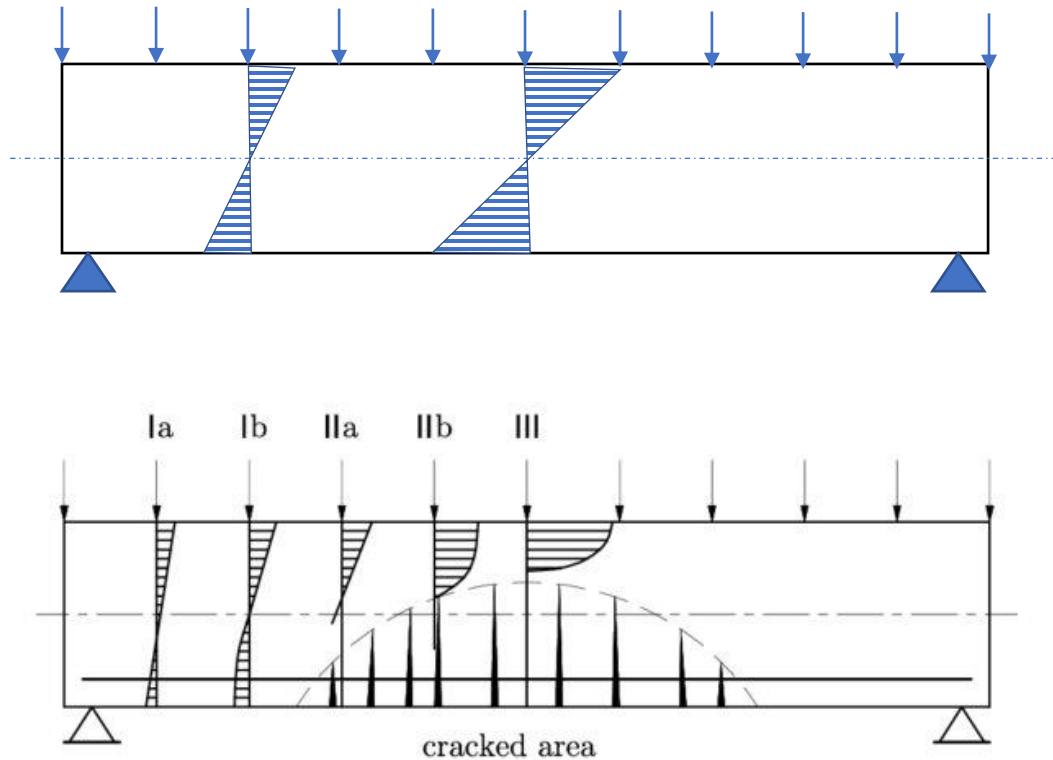
Energia de ligação e ponto de fusão

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

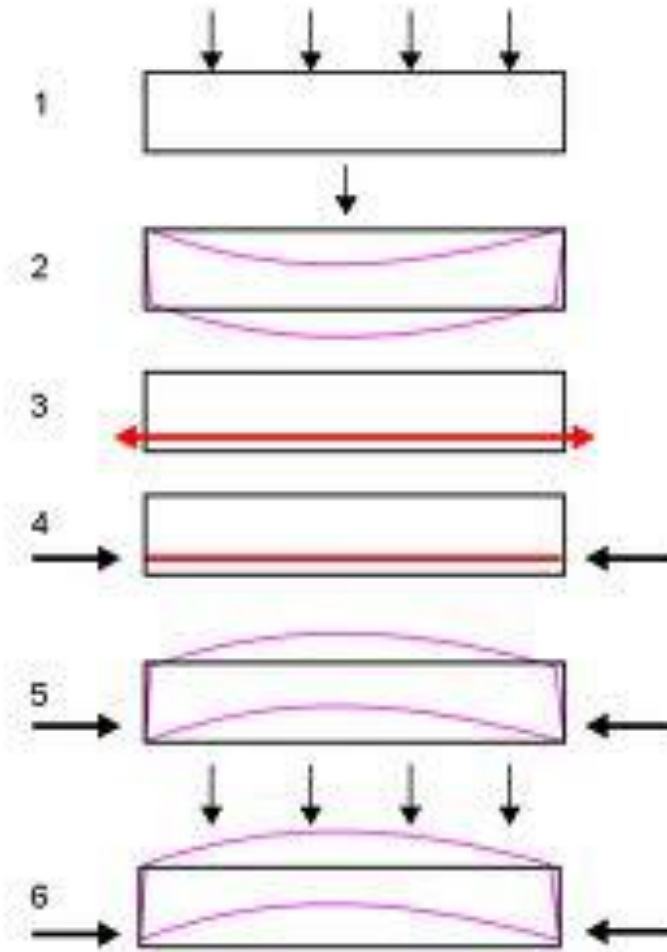
Pergunta:

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 e protendido?



Agnieszka Jędrzejewska. Stiffness-oriented numerical model for non-linear reinforced concrete beam systems. Master Thesis. Silesian University of Technology. 2011.



http://dbpedia.org/page/Prestressed_concrete

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	$< 30 \text{GPa}$	210GPa
Durabilidade	Resiste à ação da água	Sofre corrosão eletrolítica
Manutenção	Baixa	Pintura contra corrosão

Outras possibilidades?

- Compósitos

