

ESTRUTURA DOS MATERIAIS

noções básicas

Estruturas dos sólidos

- Formas principais com que os átomos se organizam




vítrea

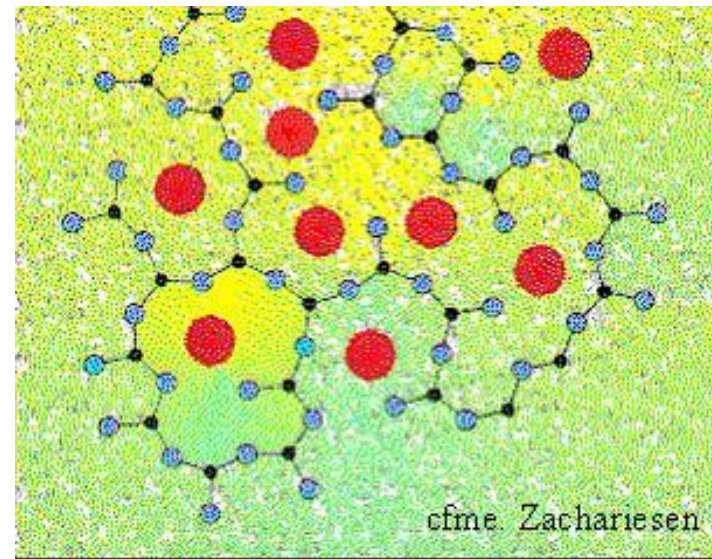
cristalina

molecular

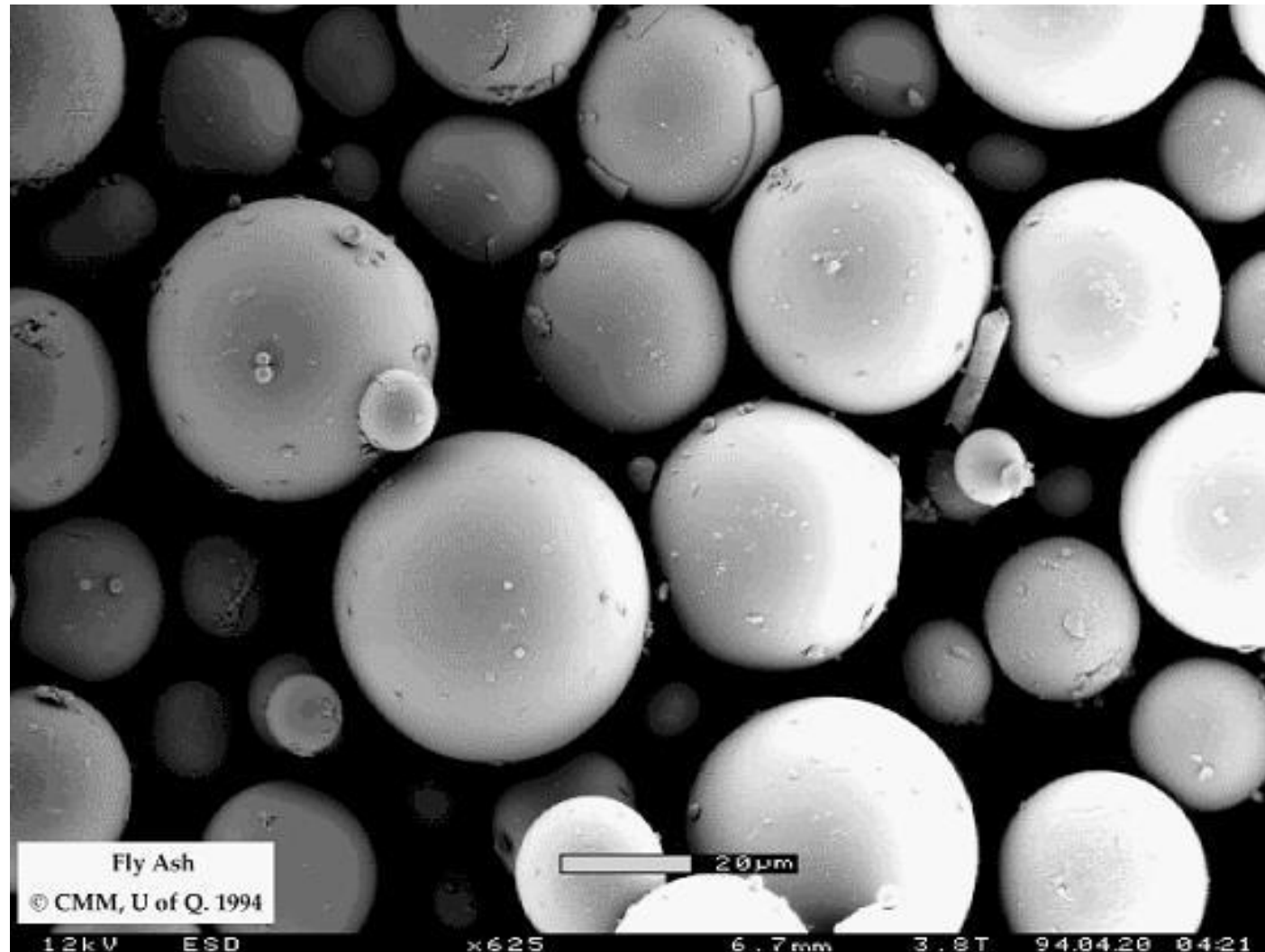
Sólidos vítreos ou amorfos

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

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



Sólidos vítreos ou amorfos



pozolana

Sólidos Cristalinos

- Ordem
- Simetria
- Repetição
- Metais é o caso normal
- Sólidos iônicos ou covalentes mais difícil
- Planos de clivagem
- Estáveis
- Anisotrópicos
- Alto ponto de fusão
- Resistentes
- Duros



Sólidos cristalinos

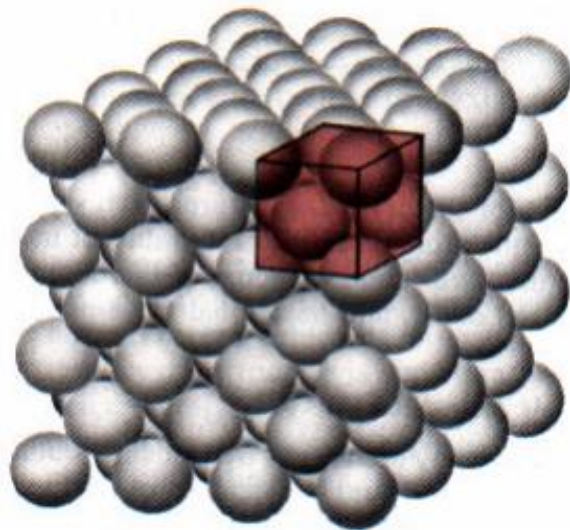
- Centro de simetria
- Eixo(s) de simetria
- Plano de simetria
- Forma células cristalinas



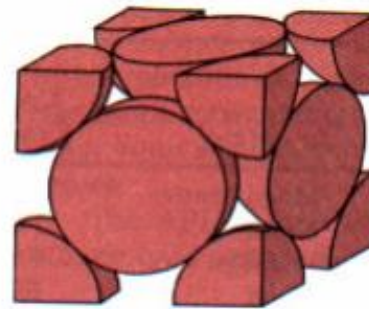
Célula unitária cristalina

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

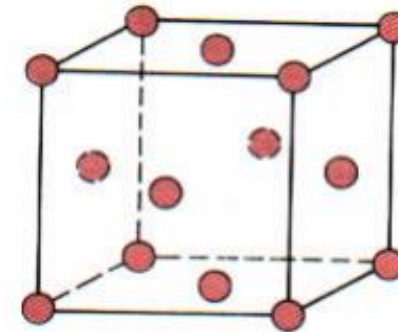
Célula Unitária



Sólido cristalino CFC

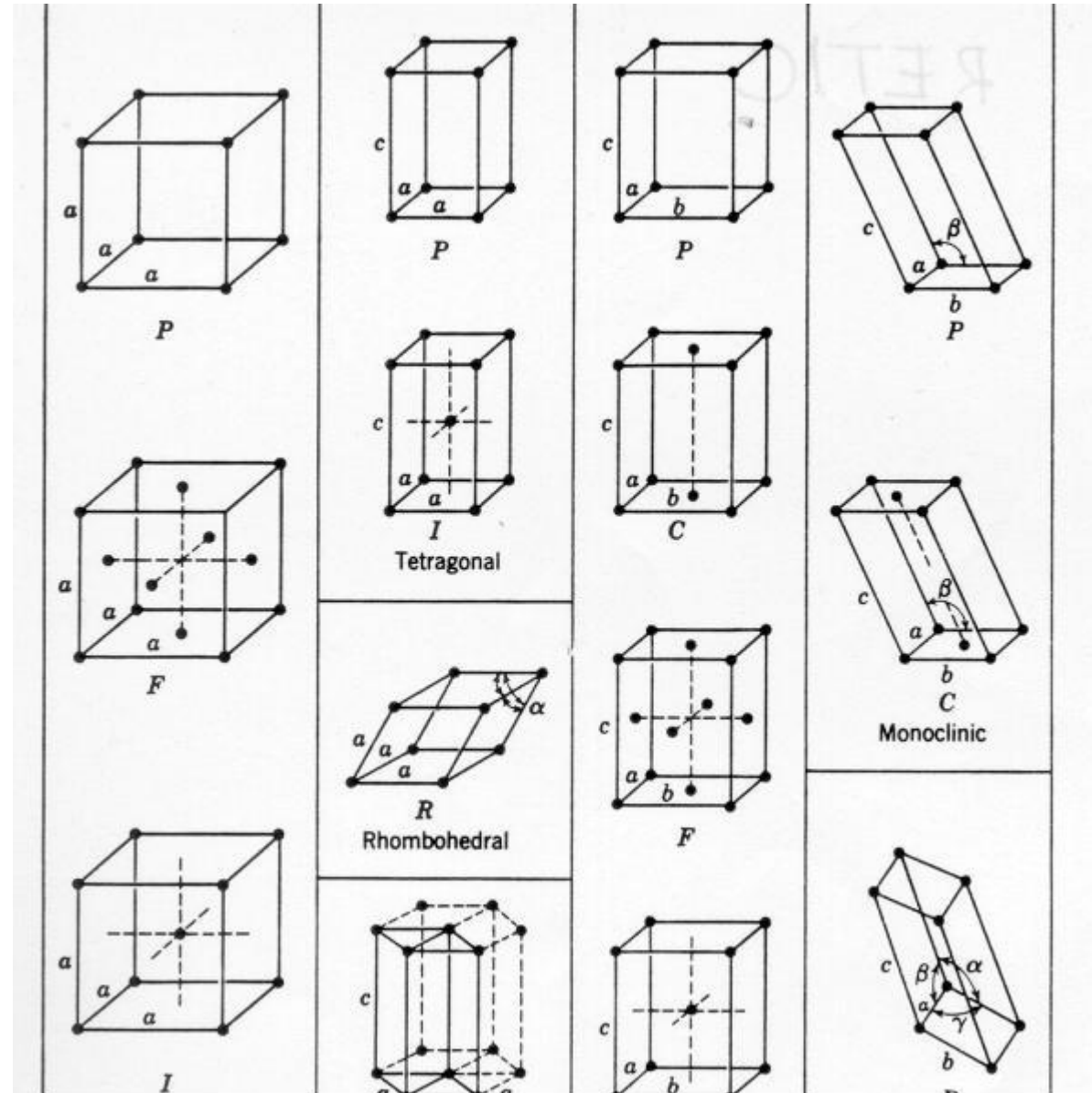


Célula unitária representada por esferas rígidas (em escala)



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

Exemplos de arranjos cristalinos



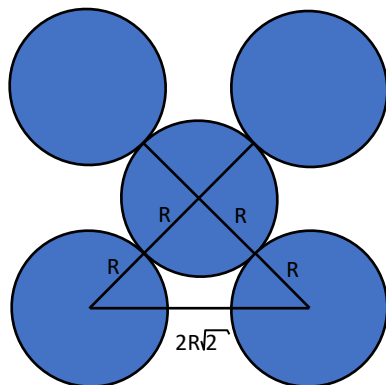
Sólidos cristalinos

- Empacotamento dos átomos (FEA)

Volume dos átomos na unidade de volume da célula

Volume da célula

- Ex. CFC



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

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

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

Sólidos cristalinos

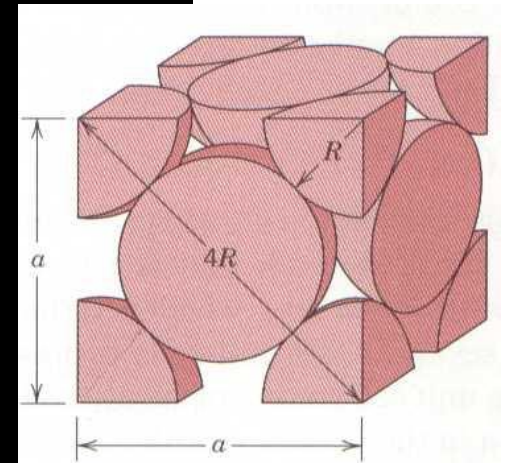
- Cálculo da densidade teórica $\rho = n.A/V_c.N_A$
 - $n = n^\circ$ de átomos na célula cristalina
 - $A =$ massa atômica do íon
 - $V_c =$ volume da célula cristalina
 - $N_A = n^\circ$ de Avogadro
- Ex. Ferro α
 - Raio atômico = 0,1241nm; estrutura CCC; $A = 55,847\text{g/mol}$
 - $\rho = (2 \times 55,847)/[(4 \times 1,241 \times 10^{-8} / \sqrt{3})^3 \times 6,023 \times 10^{23}]$
 - $\rho = 7,85\text{g/cm}^3$

Sólidos cristalinos

- Cálculo da densidade teórica $\rho = n.A/Vc.N_A$
 - $n = n^\circ$ de átomos na célula cristalina
 - $A =$ massa atômica do íon
 - $Vc =$ volume da célula cristalina
 - $N_A = n^\circ$ de Avogadro

- Ex. Cobre

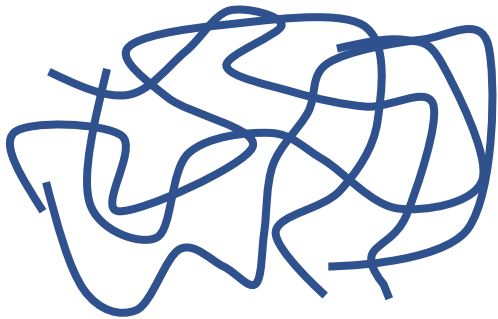
- Raio atômico = 0,128nm; estrutura CFC; $A = 63,5\text{g/mol}$
- $\rho = (4 \times 63,5)/[(2 \times 1,28 \times 10^{-8} \sqrt{2})^3 \times 6,023 \times 10^{23}]$
- $\rho = 8,89\text{g/cm}^3$



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

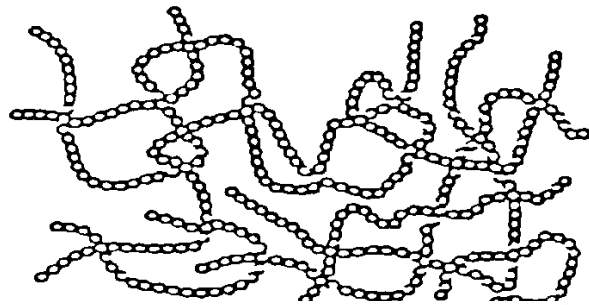
Sólidos moleculares

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

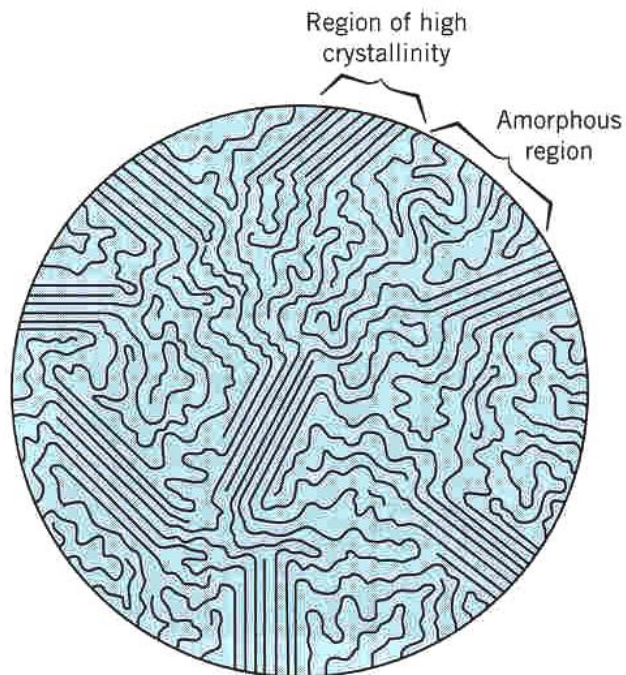
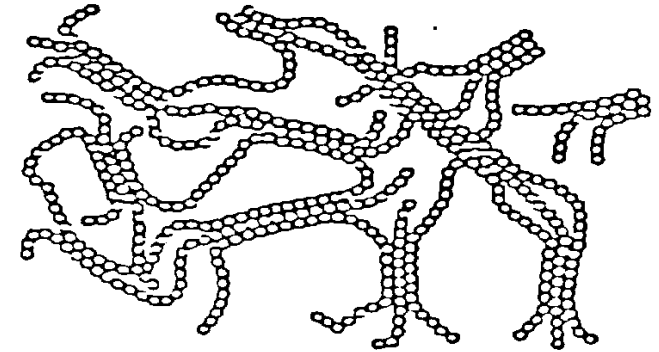


Microestrutura

100% Amorfo



Semi-cristalino



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

Termoplásticos x temperatura

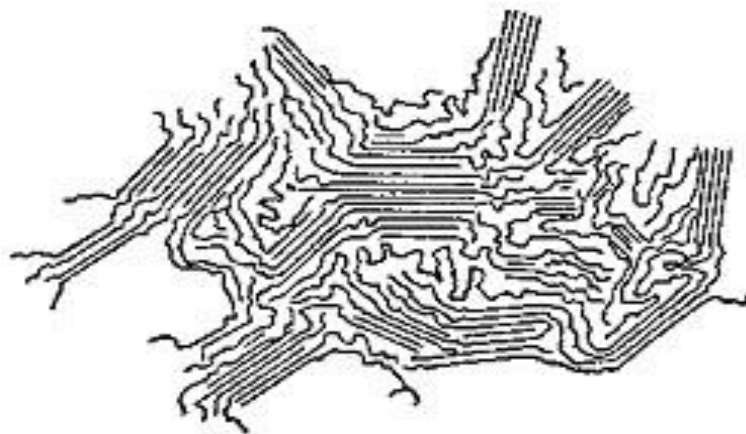
- Temperatura de transição vítrea (T_g)

Abaixo da T_g :

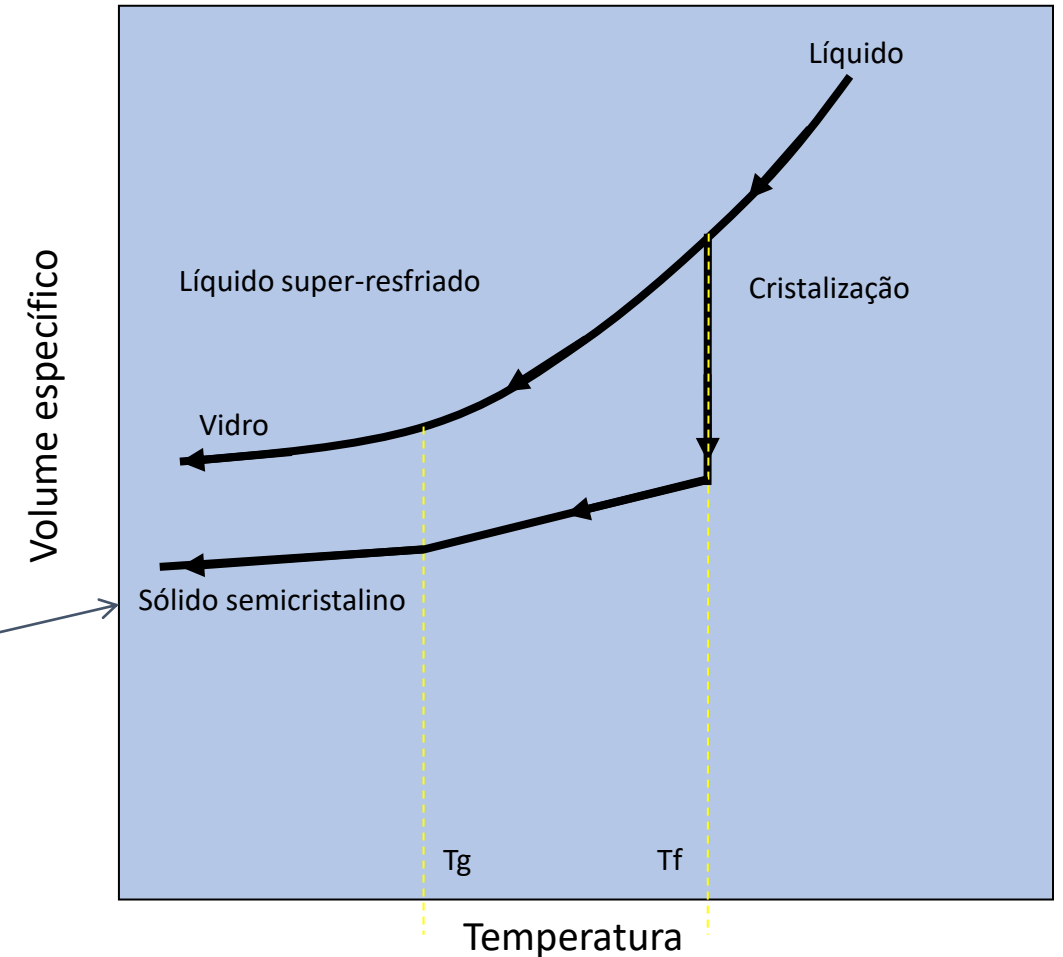
tornam-se frágeis

< deformação térmica

< deformação elasto-plástica

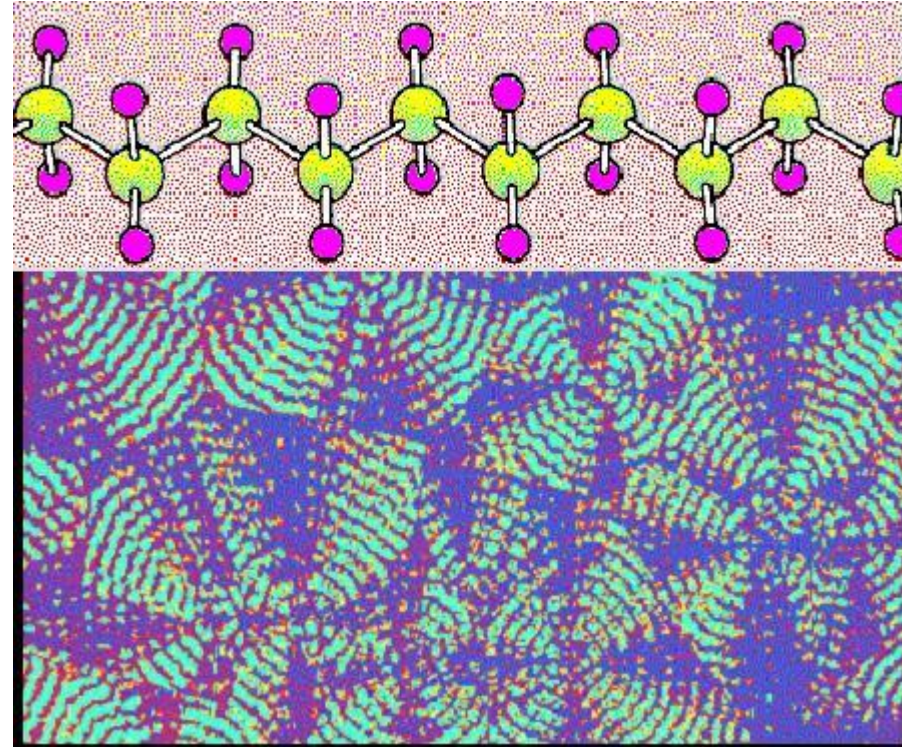


http://ospolimeros.blogspot.com/2010_06_01_archive.html



Sólidos cristalinos de base polimérica

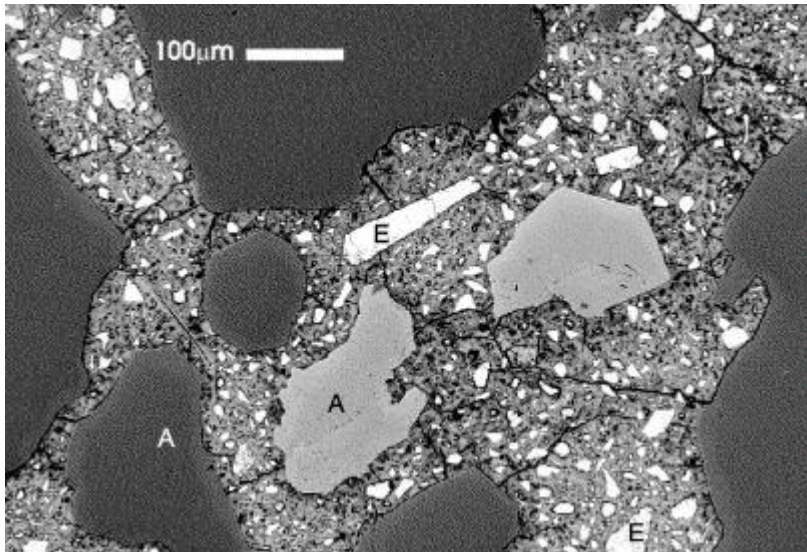
- moleculares
 - moles
 - baixo ponto de fusão
 - > expansão térmica



polietileno

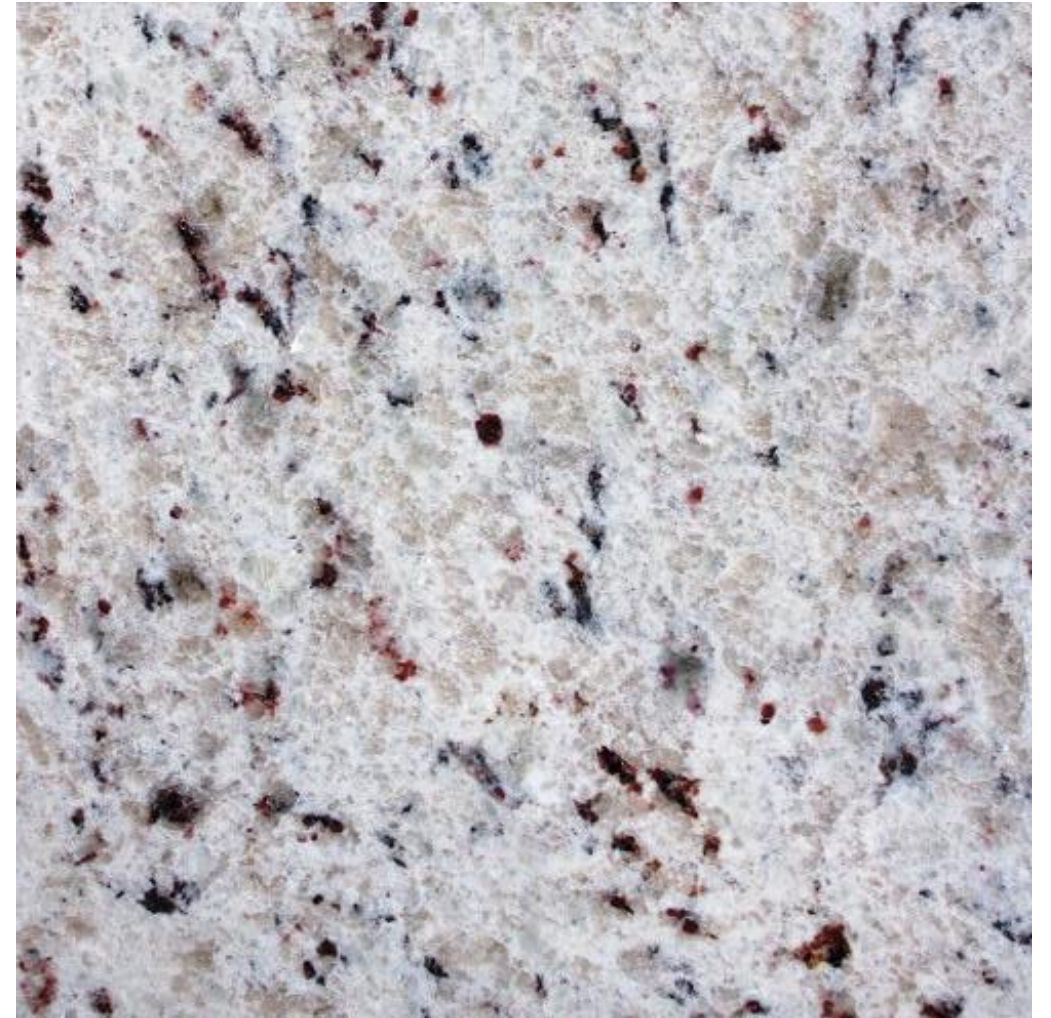
Fases

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



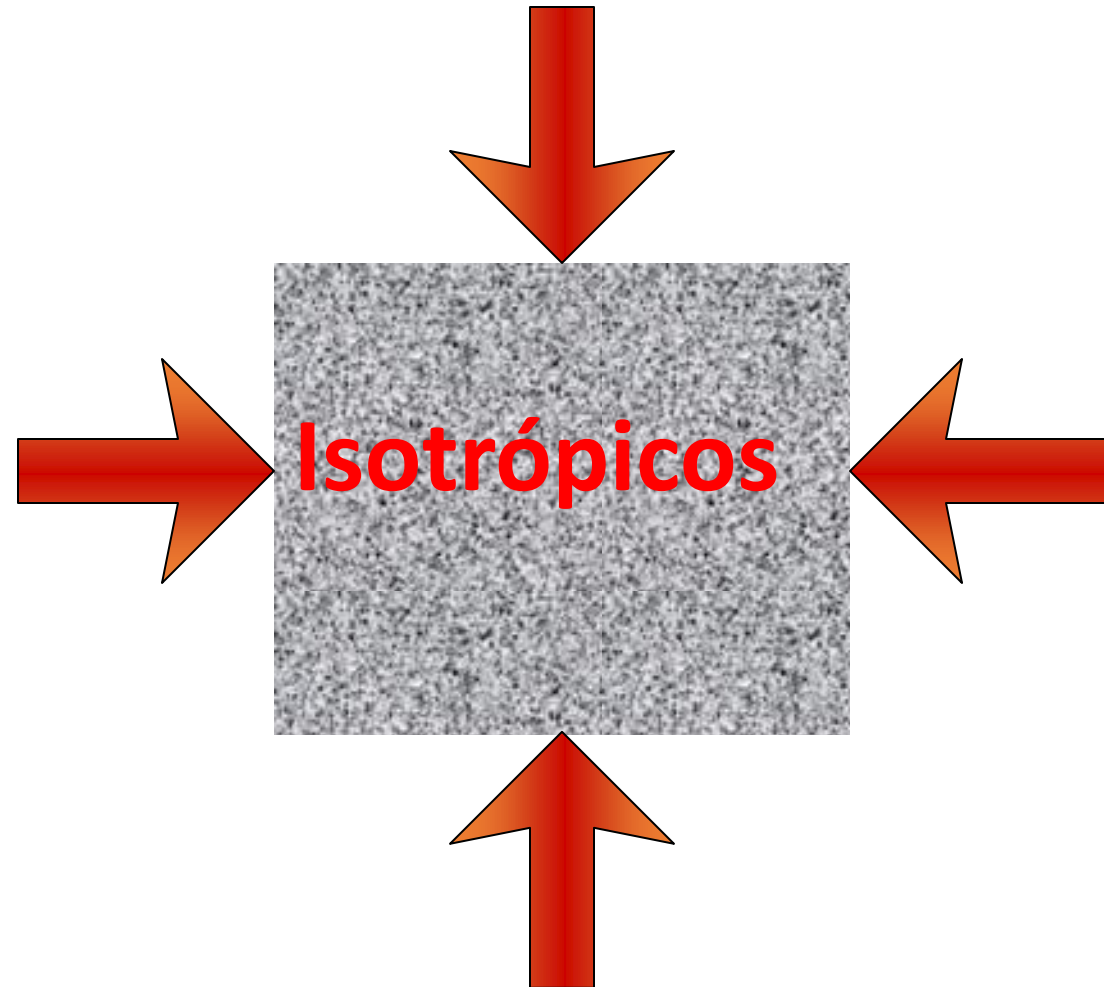
Formação de materiais policristalinos ou cristalinos polifásicos

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



Materiais polifásicos e isotropia

- Agregados
- Argamassas
- Concreto
- Compósitos
- Metais



Estrutura cristalina dos metais



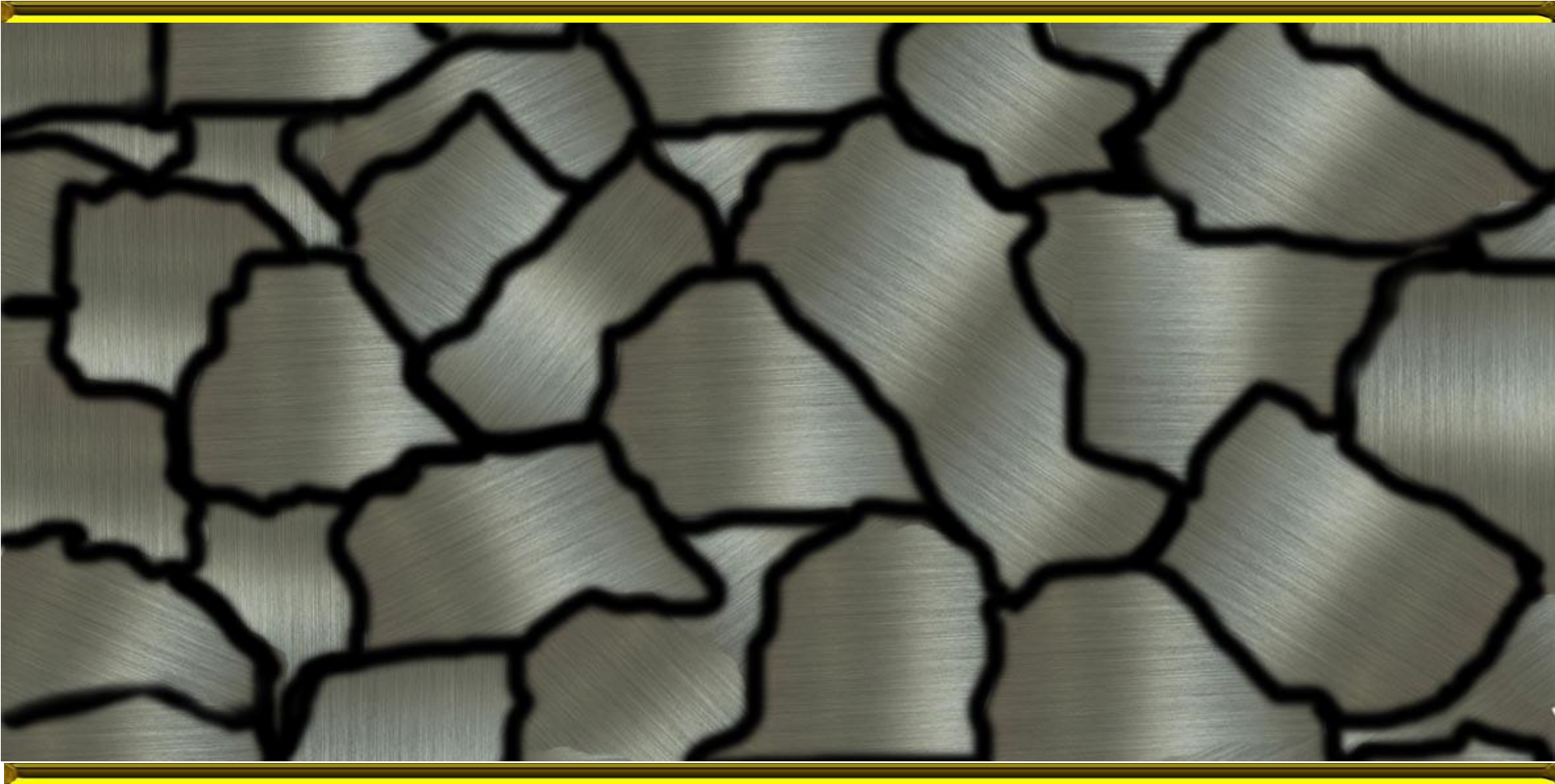
Estrutura cristalina dos metais



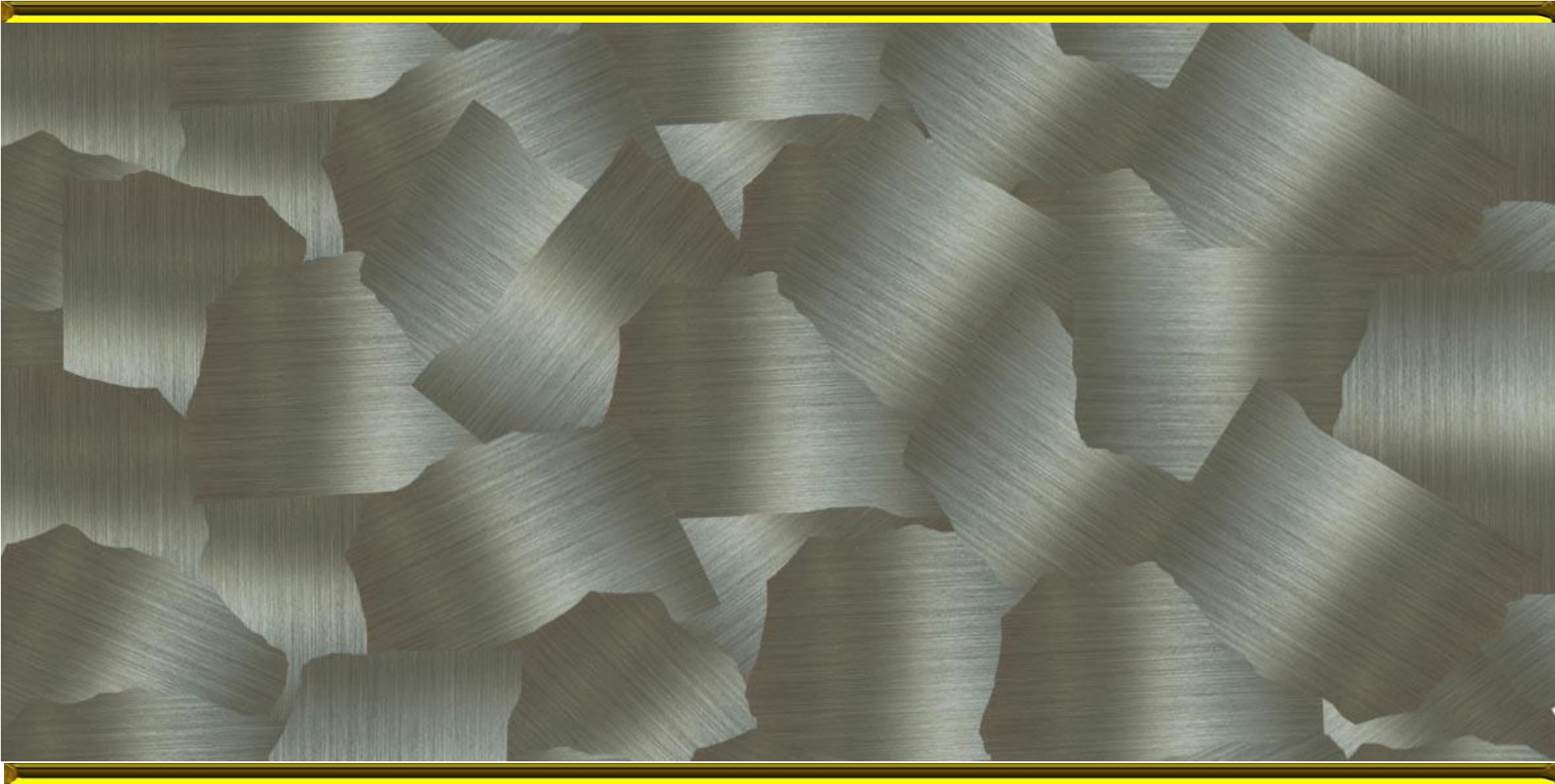
Estrutura cristalina dos metais



Estrutura cristalina dos metais



Estrutura cristalina dos metais



Estrutura cristalina dos metais



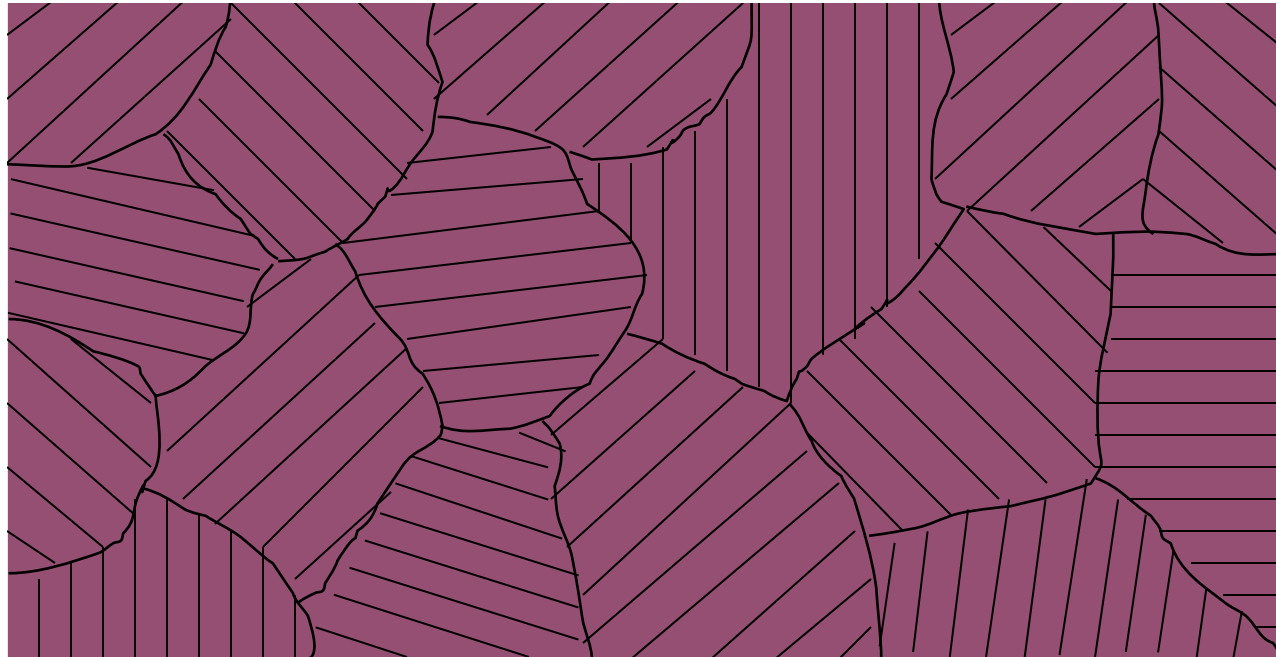
Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



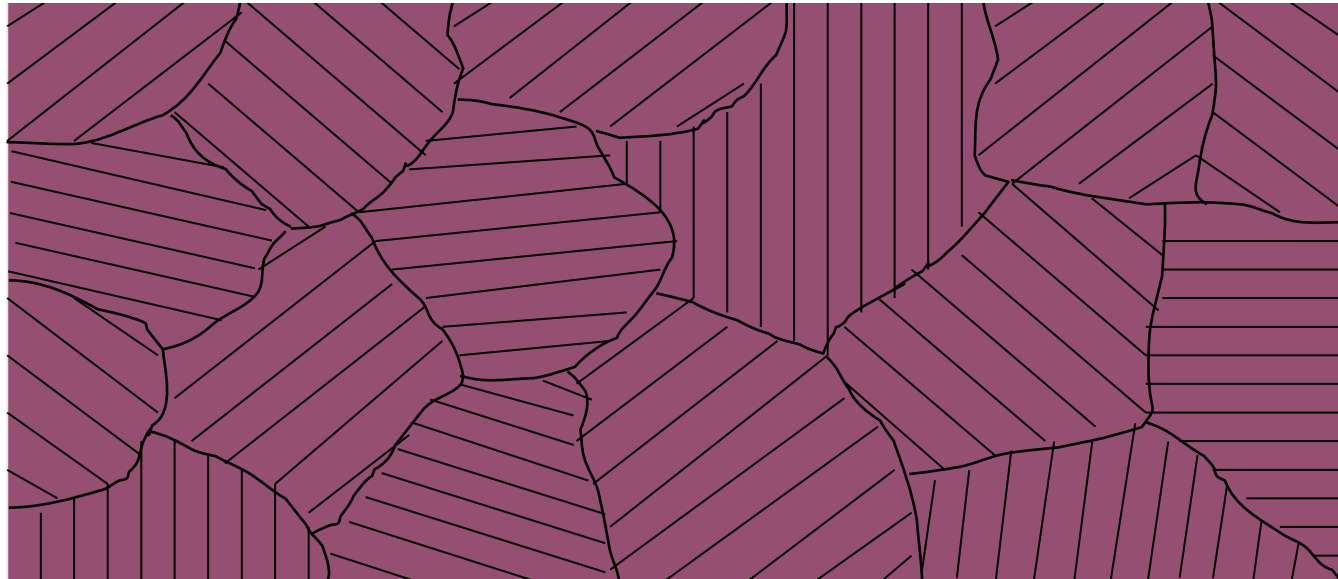
Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



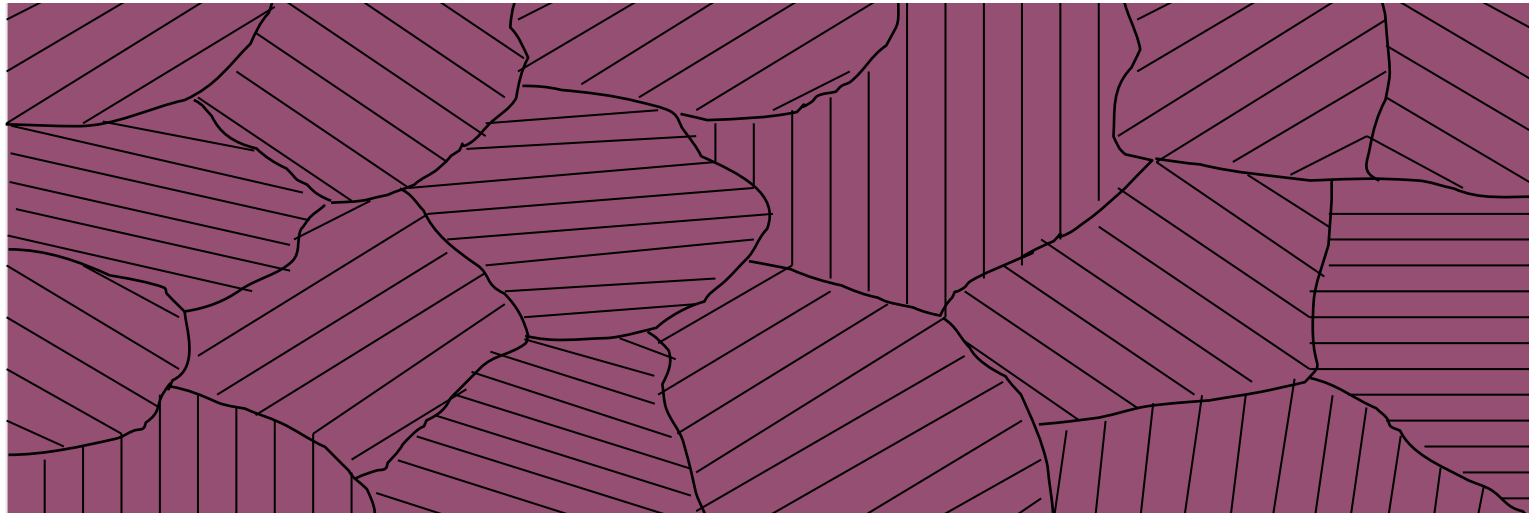
Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



Estrutura cristalina polifásica dos metais (formação)



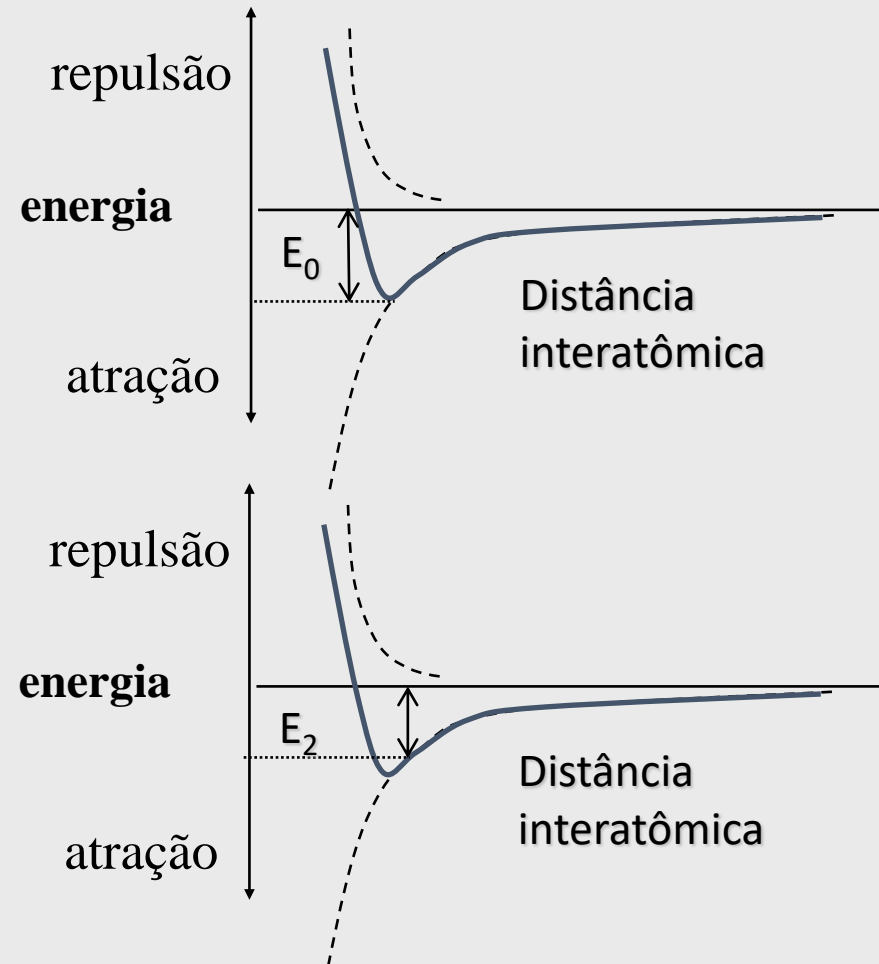
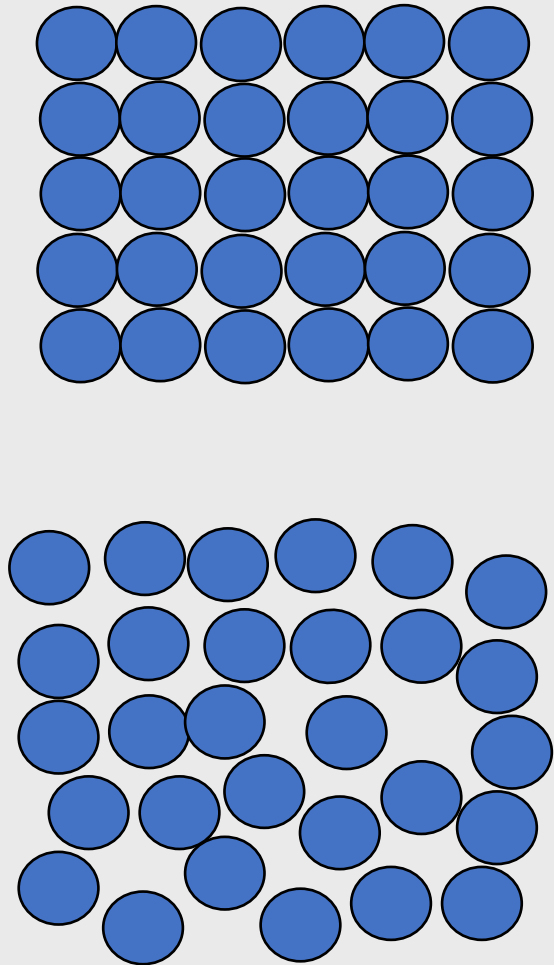
Estrutura cristalina dos metais

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

Pergunta:

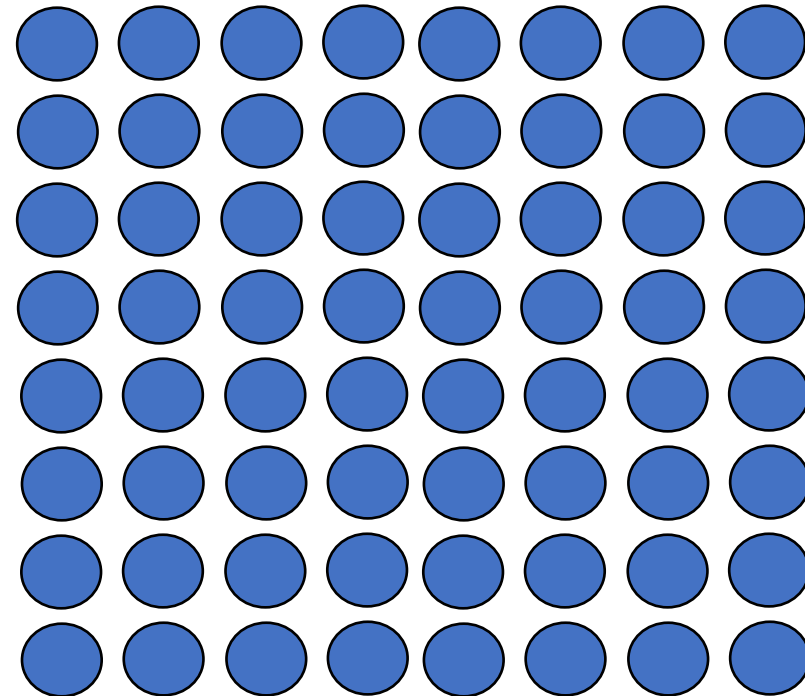
Se um material cristalino recebe um tratamento que deixa sua estrutura mais amorfa há alguma alteração nas suas propriedades?

Equilíbrio das estruturas cristalina e amorfa



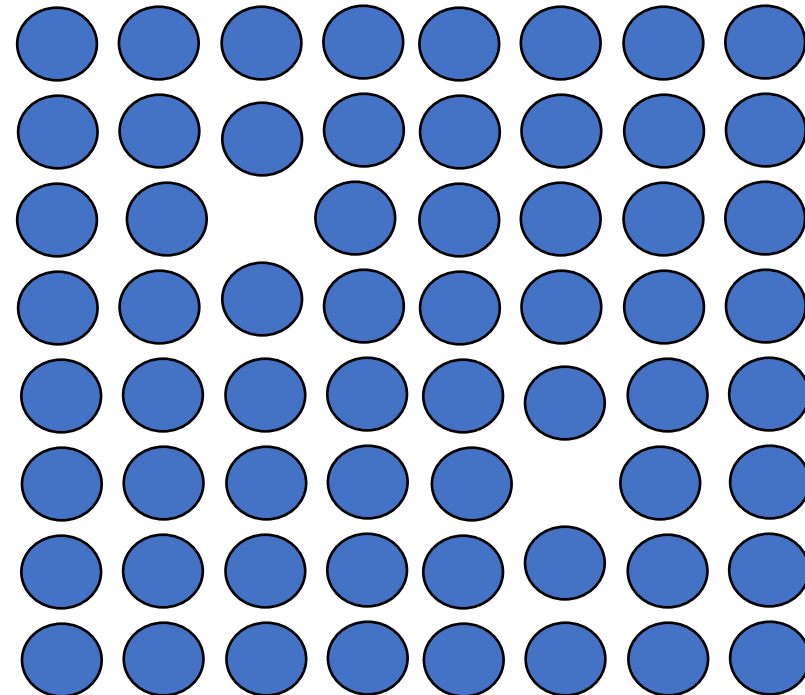
Falhas cristalinas

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



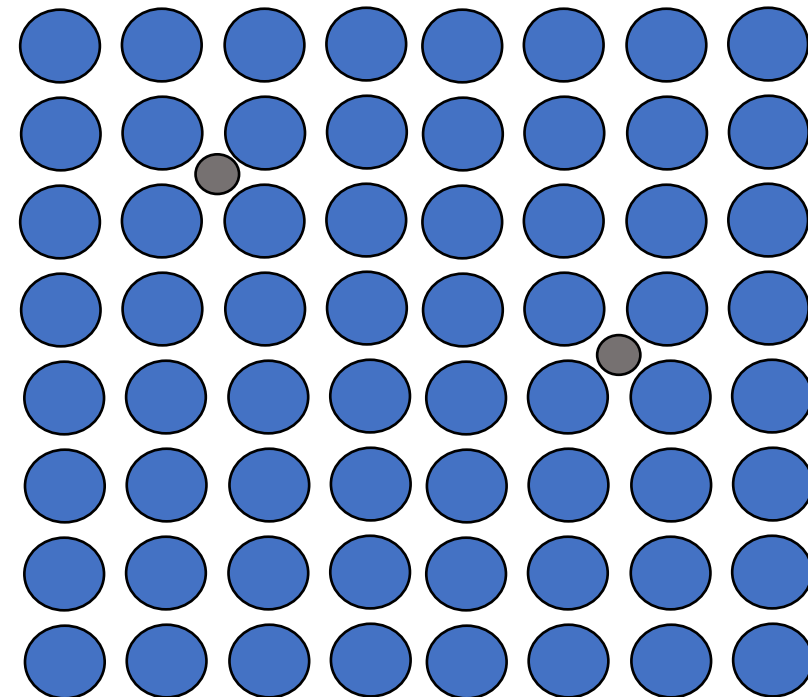
Falhas cristalinas

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



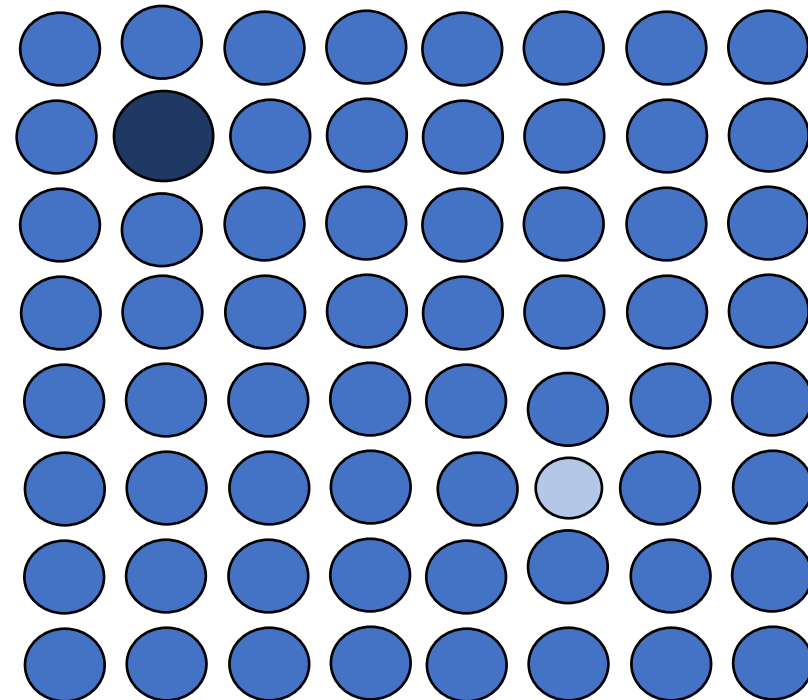
Falhas cristalinas

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



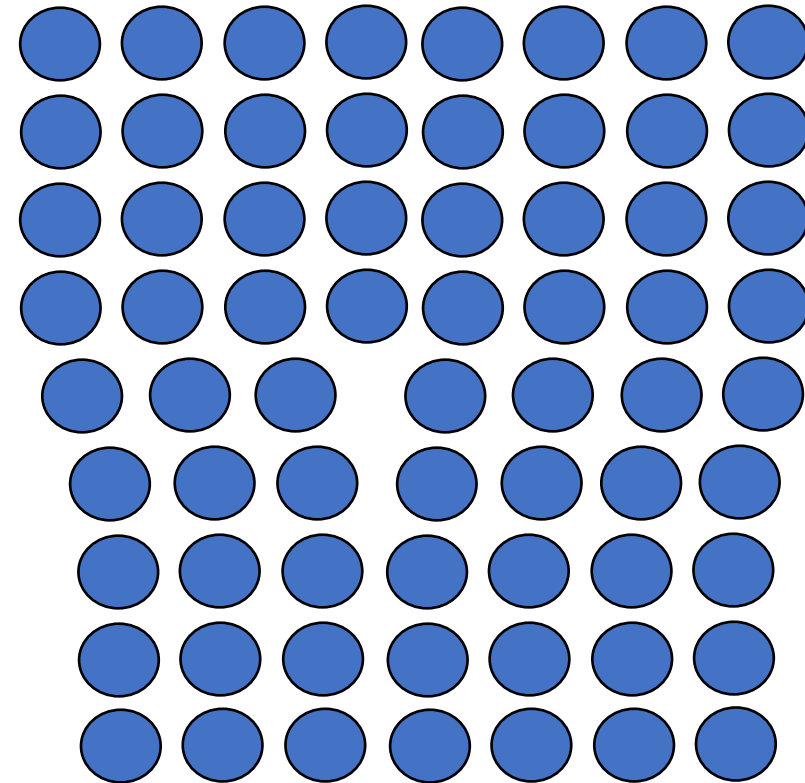
Falhas cristalinas

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

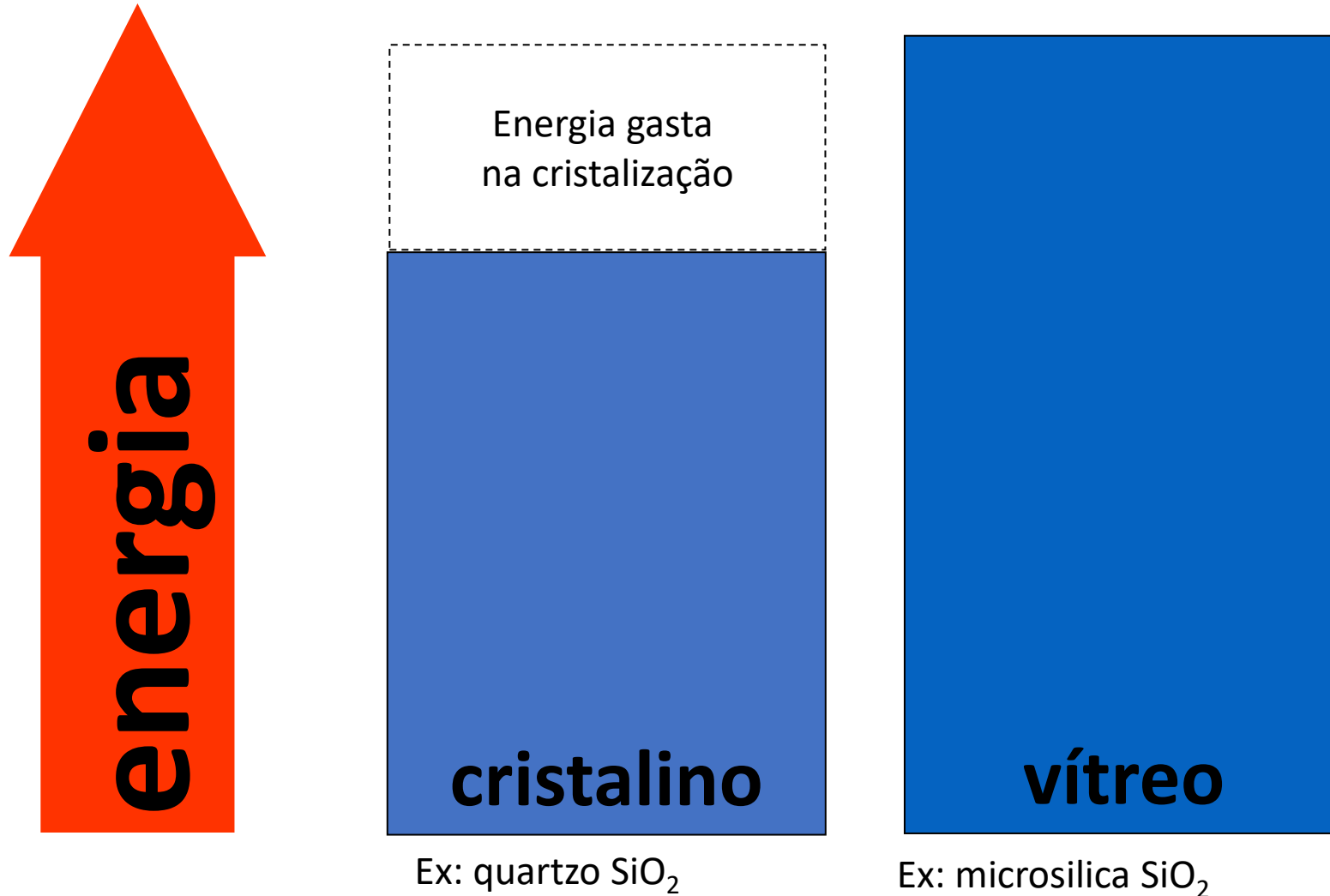


Falhas cristalinas

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



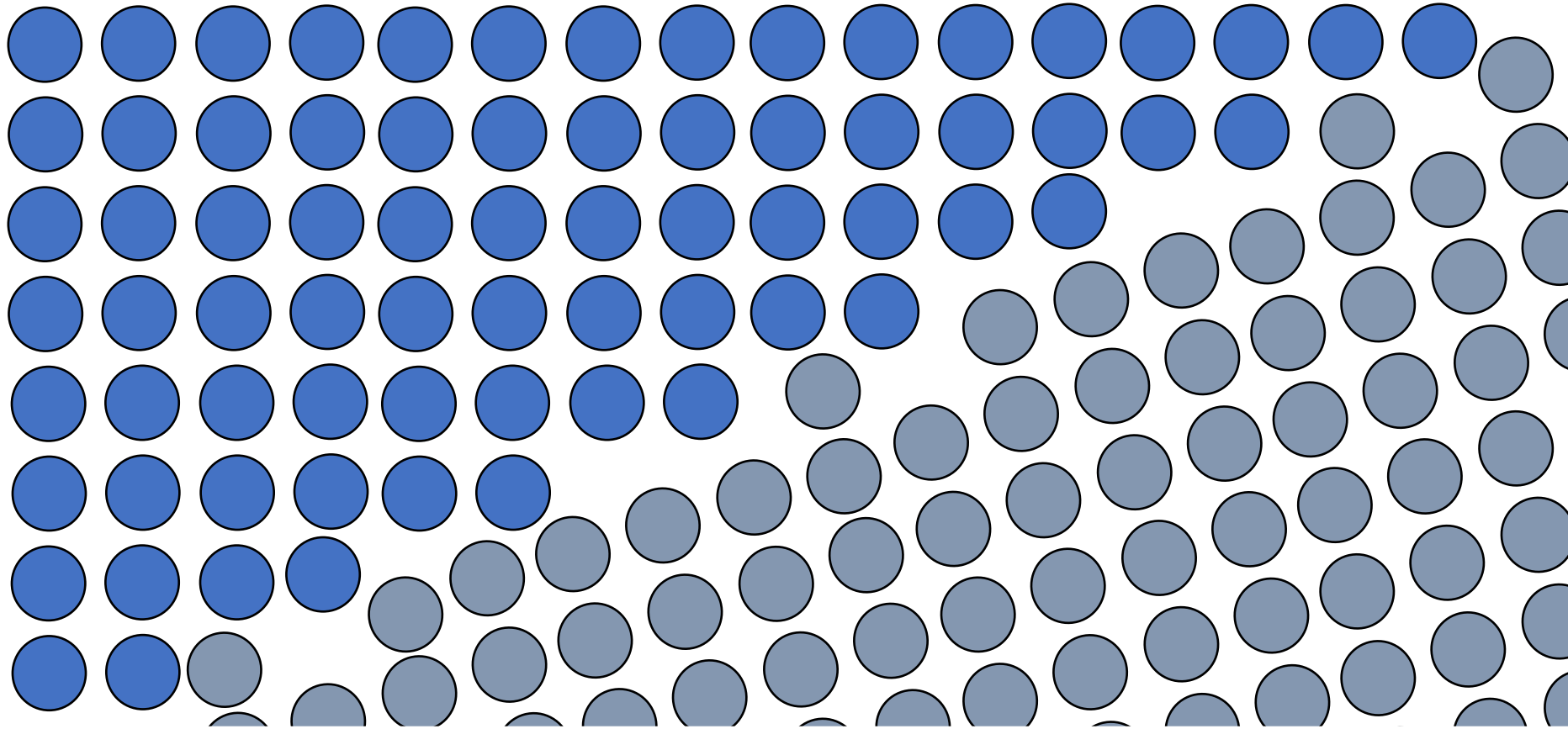
Estrutura dos Sólidos x Nível de Energia



Interfaces/boundaries

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

Defeitos de interface de grãos cristalinos



Superfície

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

Superfície

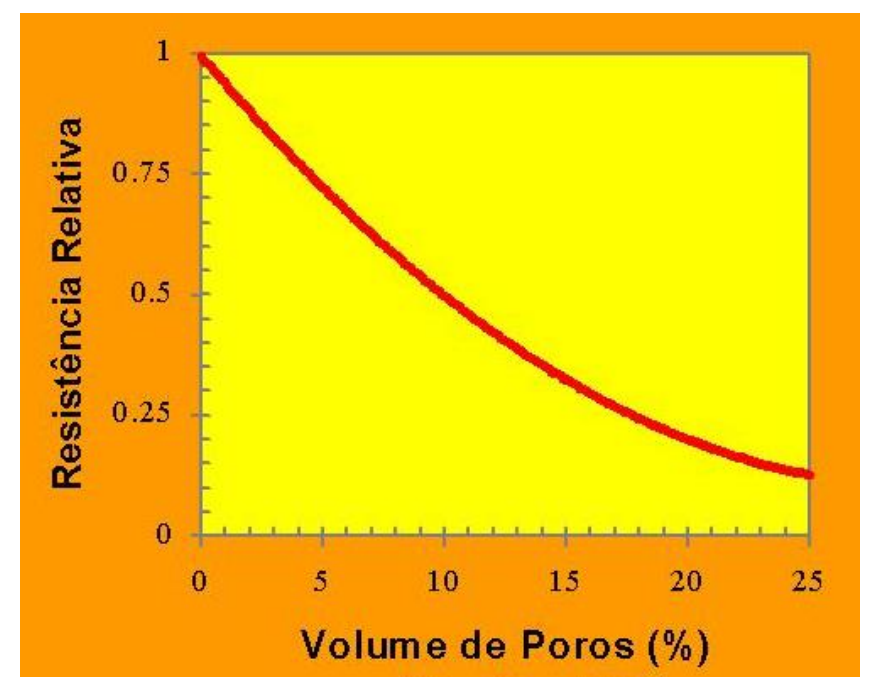
- Da área superficial depende:
 - ✓ reatividade
 - ✓ água de molhagem
 - ✓ características reológicas dos compósitos

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

Defeitos volumétricos

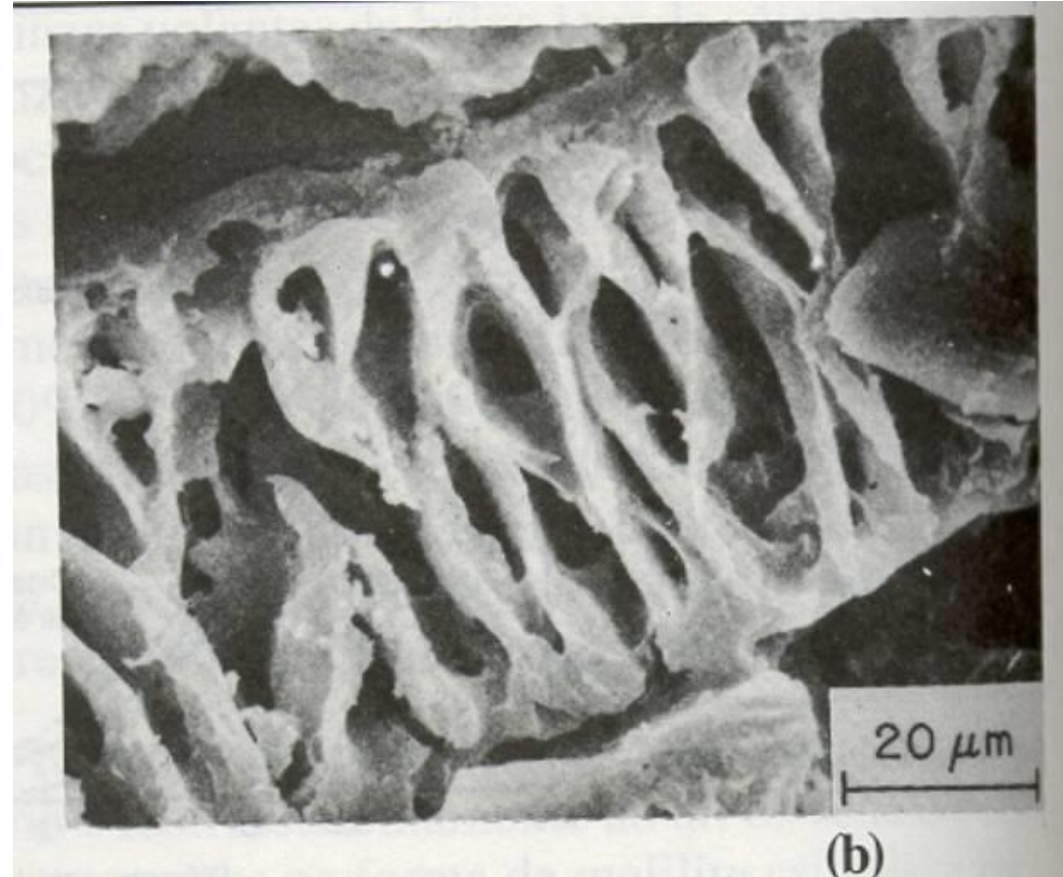
- Porosidade
 - fator água/cimento
 - fator água/gesso
- Fissuras
- Interfaces
- Superfícies

S. Chinchón-Payá; SI. Oliveira; A. Aguado; S. Chinchón Yepes. The Sulfate Attack in Concrete by Degradation of Iron Sulfides and the Effect of the Host Rock. Conference: XII DBMC. International Conference on Durability of Building Materials and Components. April 2011.



Poros

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



Estrutura dos sólidos x reatividade

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

Importância dos defeitos

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

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

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