

BC1105 Materiais e Suas Propriedades

3º Quadrimestre de 2016

Ciência e Engenharia de Materiais

Erika Fernanda Prados
erika.prados@ufabc.edu.br

OBJETIVOS

- Mostrar a relação entre Ciência e Engenharia dos Materiais.
- Explicar a relação entre estrutura, propriedade, processamento e 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.

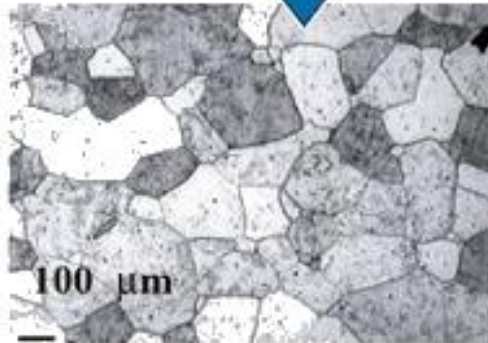
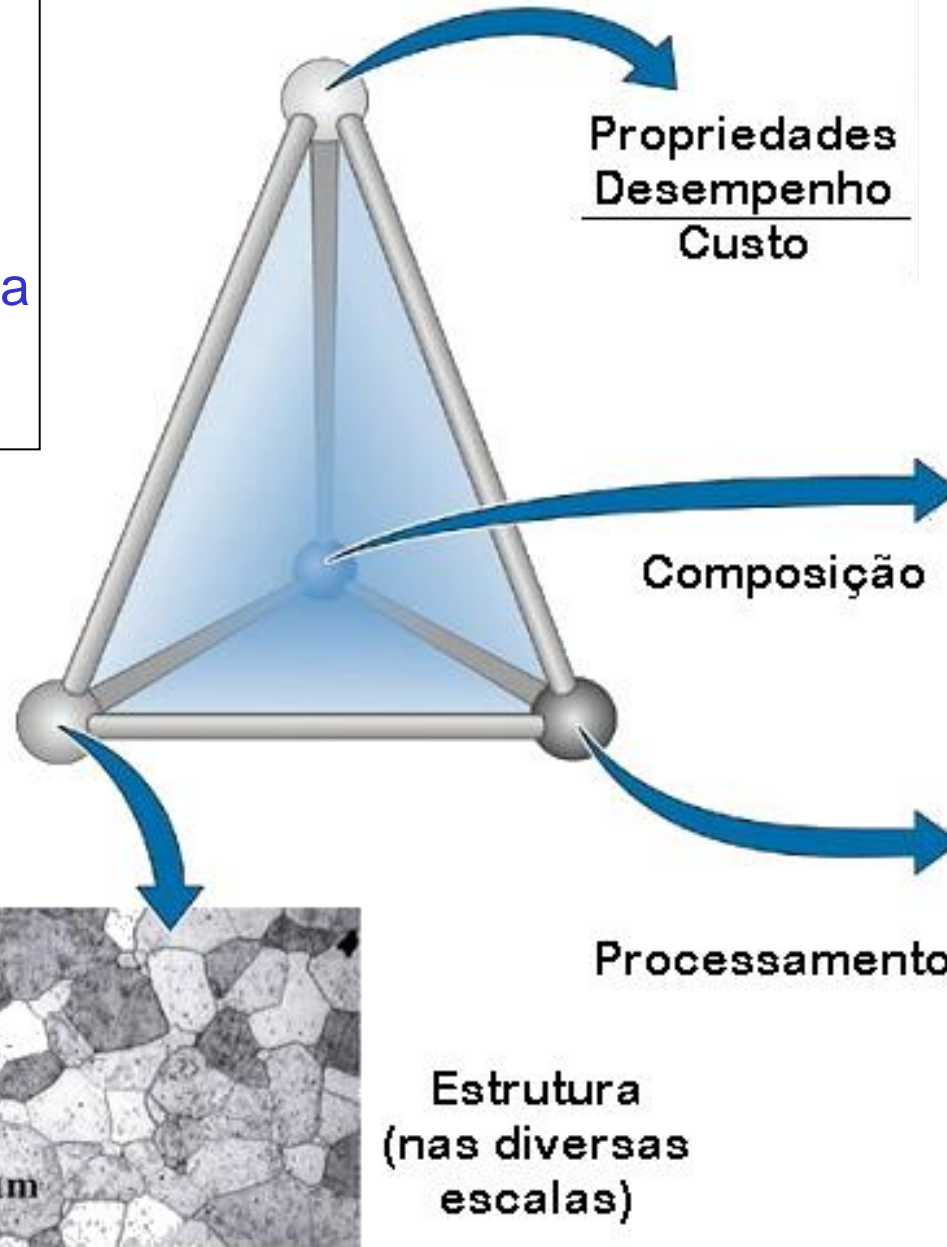
Definições

- 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																	
<div> <div></div> Metal <div></div> Nonmetal <div></div> Intermediate </div>																	
IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII	VIII	IX	X	XI	XII	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0
1 H 1.008	2 He 4.003	3 Li 6.941	4 Be 9.012	5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 18.99	10 Ne 20.18	11 Na 22.99	12 Mg 24.31	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.88	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.64	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	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 98.91	44 Ru 101.07	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	53 I 126.91	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	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 173.05	71 Lu 174.97	
87 Fr 223.02	88 Ra 226.03	89 Ac 227.03	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np 237.05	94 Pu 244.06	95 Am 243.06	96 Cm 247.07	97 Bk 247.07	98 Cf 251.08	99 Es 252.08	100 Fm 257.10	101 Md 258.10	102 No 259.10	103 Lr 262.10	



- Estrutura

- ✓ Associada ao arranjo dos componentes internos do material.
- ✓ Ela se distingue quanto a escala de observação:

Escala (m)	Unidade	Estrutura
$<10^{-9}$	Å	Atômica
10^{-9} a 10^{-6}	nm	Nano
10^{-6} a 10^{-3}	μm	Micro
$\geq 10^{-3}$	mm, m, ...	Macro

Exemplos:

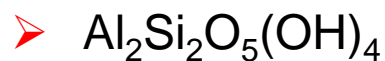
- Estrutura atômica: elétrons, prótons e nêutrons.
- Estrutura molecular: átomos iguais, ou distintos, ligados entre si.

- Composição

- ✓ Corresponde aos tipos, às proporções, e à disposição dos átomos que estão em uma molécula; ou,
- ✓ As substâncias presentes em um material.

Exemplos:

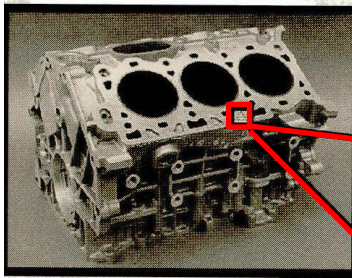
- Nanocompósito híbrido polimérico: nano partícula mineral, ou metálica, em uma matriz polimérica.



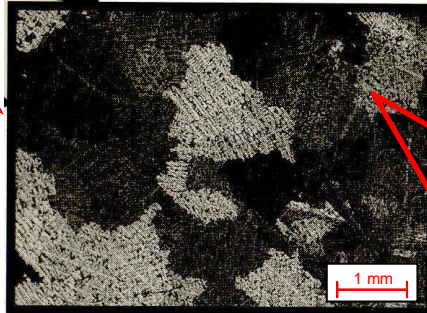
Caulinita: branco, cristal pseudo-hexagonal;

Haloisita: branco, verde amarelo, azul, cinza, cristal monoclínico.

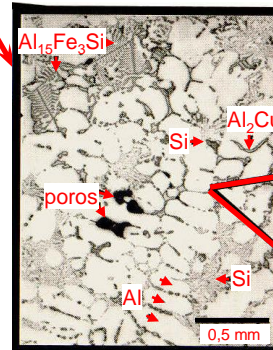
Escalas de observação de um bloco de motor em liga de Al



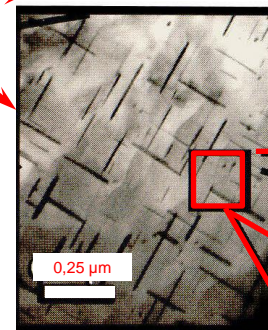
Escala “Macro”
até $\cong 1m$



Escala
“Micro”
grãos
 $\cong 1$ a 10 mm

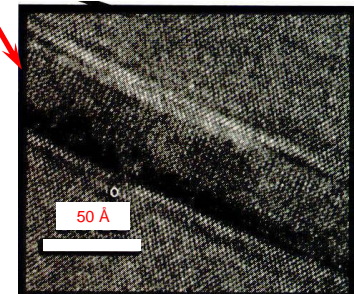
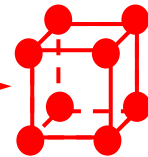


Escala
“Micro”
Fases e
Dendritos
 $\cong 50$ a $500\text{ }\mu m$



Escala “Nano”
Precipitados
 $\cong 3$ a 100 nm

Célula unitária



Escala Atômica
 $\cong 1$ a $100\text{ }\text{\AA}$

PROPRIEDADES DE UM MATERIAL

- ✓ Propriedades intensivas, as vezes quantitativas, de um sólido ou quase sólido.
- ✓ Podem ser constantes ou ser uma função de uma ou mais variáveis independentes.
- ✓ Em sistemas **anisotrópicos** podem variar conforme a direção.

Principais
propriedades do
estado sólido

Mecânicas;

Elétricas;

Térmicas;

Magnéticas;

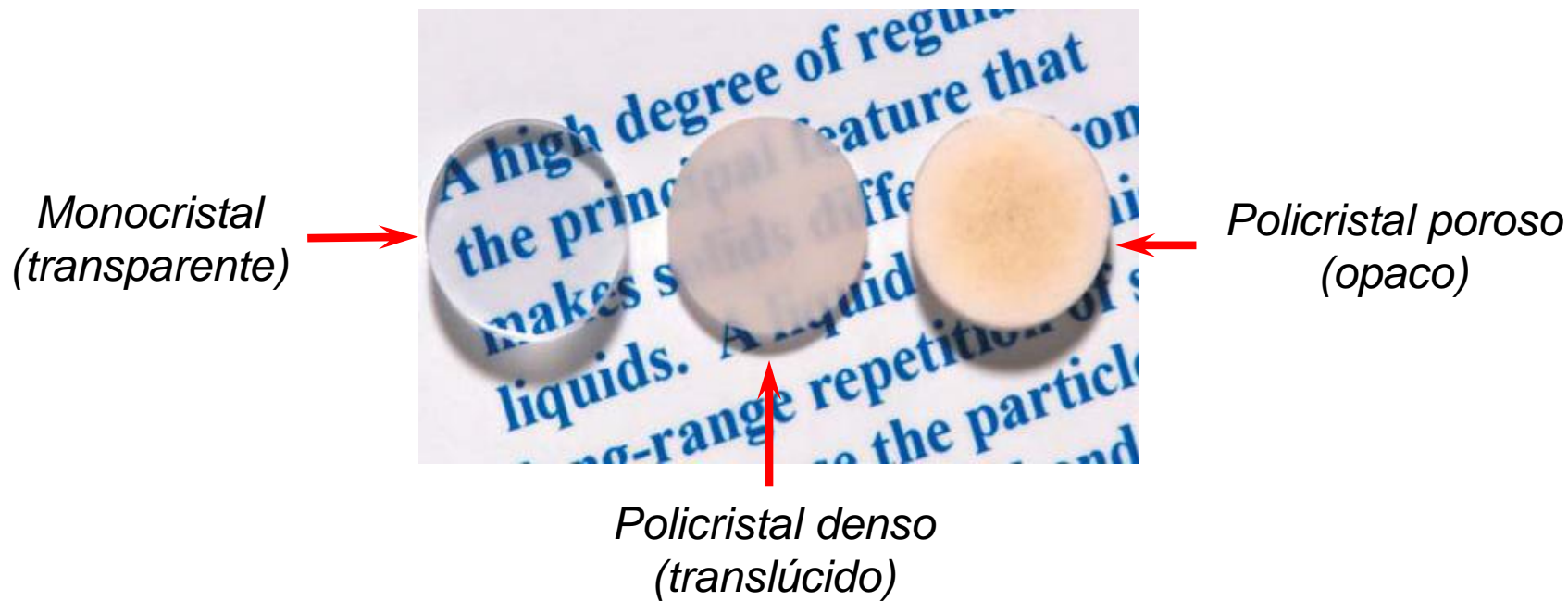
Ópticas;

Estabilidade (temporal, dimensional,
ambiental).

Processamento: conjunto de técnicas para obtenção de materiais com formas e propriedades específicas.

Desempenho: rendimento do material durante o seu uso.

Exemplo: Amostras de óxido de alumínio (Al_2O_3) processadas por diferentes rotas.



Dispositivos Ópticos (uso em tecnologia de laser)



...e em telas de *smartphones*

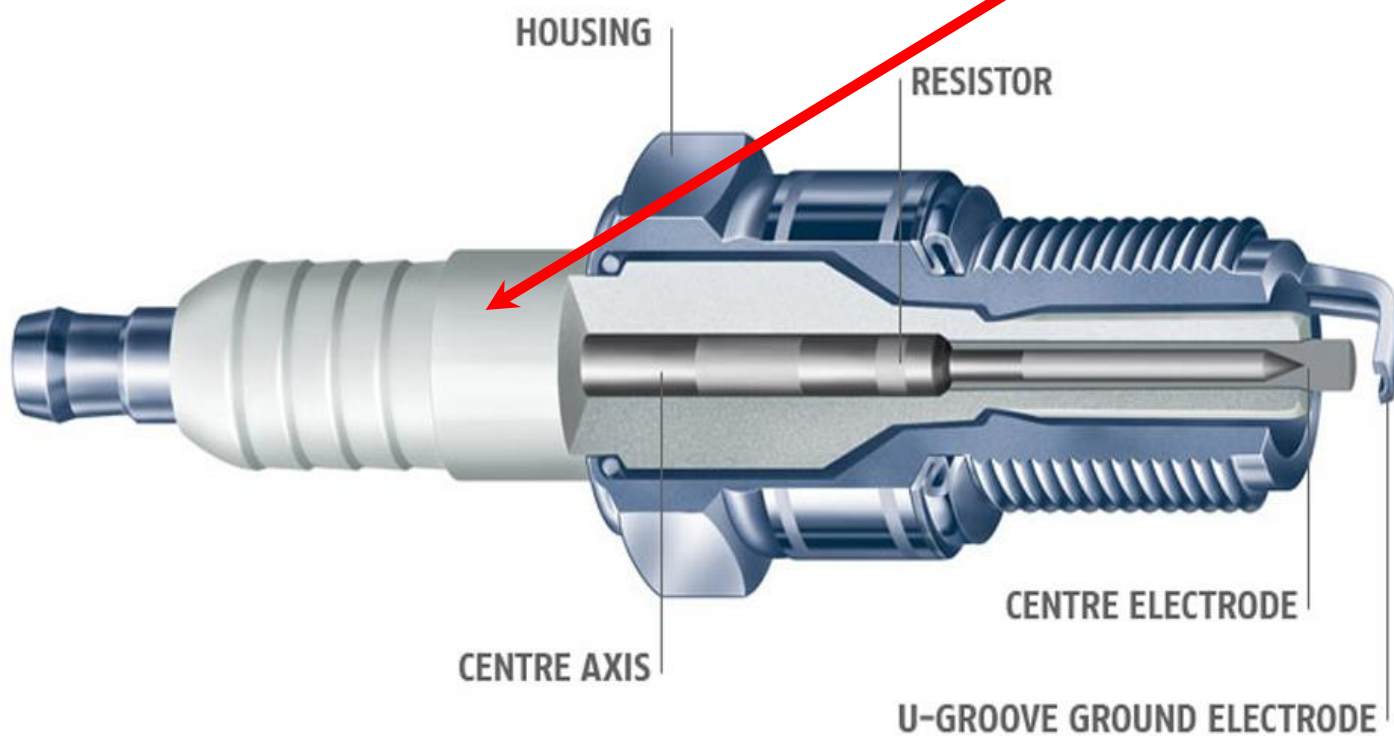




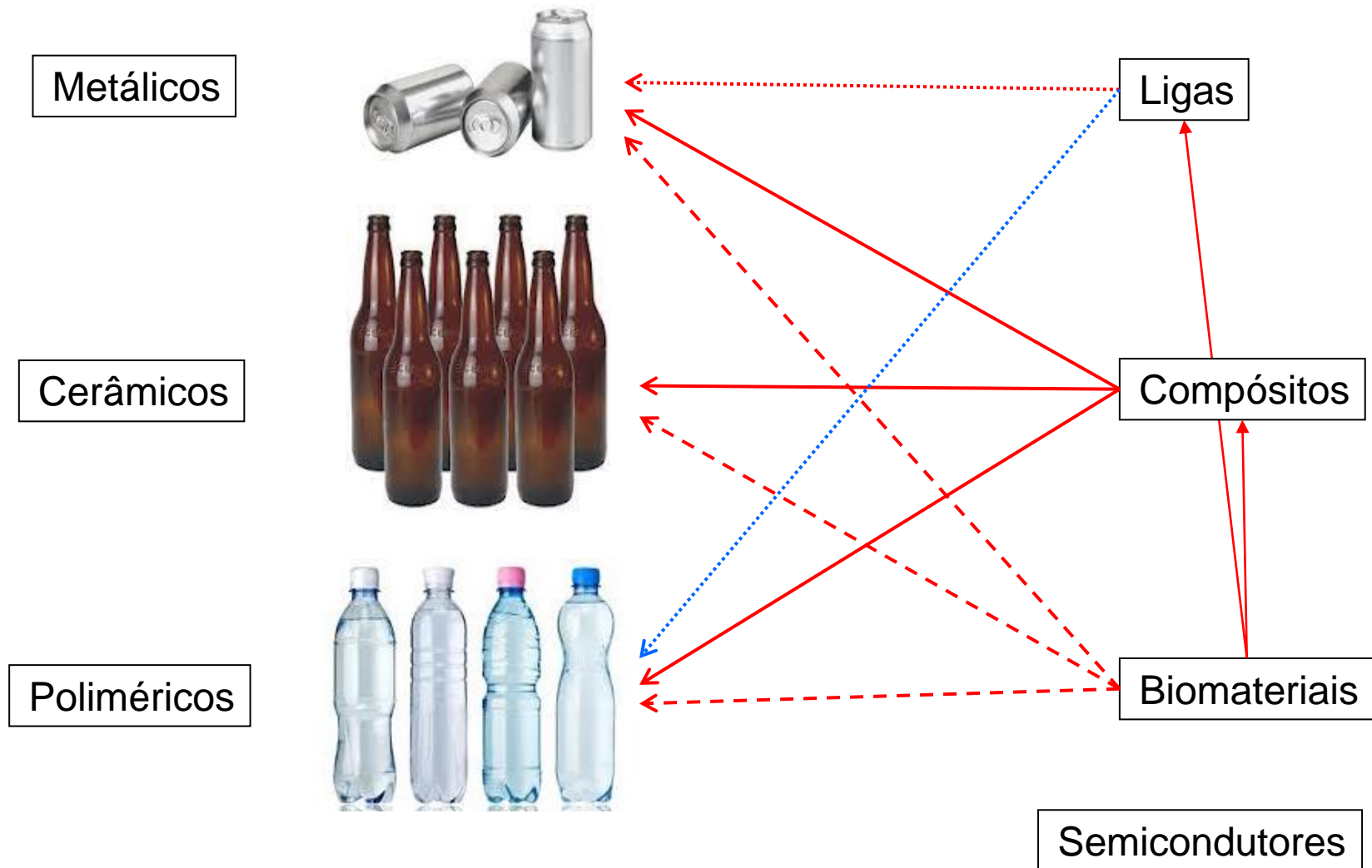
Lâmpada
de
Vapor de Sódio



Vela de Ignição



2. CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS



LIGAÇÕES QUÍMICAS

As ligações entre átomos podem ser classificadas quanto a suas intensidades em:

- ✓ **Ligações primárias**, ou fortes, dependem da diferença do caráter eletronegativo (A^{\ominus}), ou eletropositivo (C^{\oplus}), dos elementos envolvidos e são:
 - Ligação iônica ($C^{\oplus} + A^{\ominus} \therefore C^{\oplus} \neq A^{\ominus}$ e a diferença $> 1,7$);
 - Ligação covalente ($A^{\ominus} + A^{\ominus} \therefore A^{\ominus} \cong A^{\ominus}$ e a diferença entre eles está entre 0,3 e 1,7);
 - Ligação metálica ($C^{\oplus} + C^{\oplus}$).

LIGAÇÕES QUÍMICAS

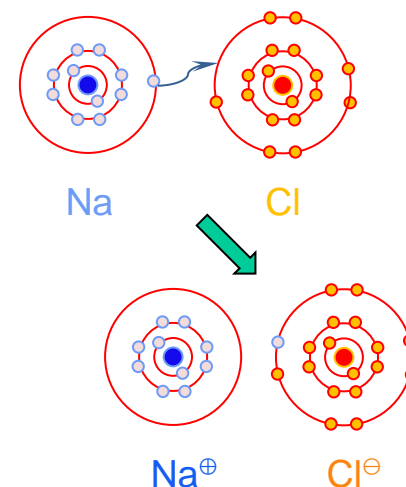
- ✓ **Ligações secundárias**, ou fracas, dão origem a atrações entre uma molécula qualquer e suas vizinhas e as principais são:
 - Interações dipolo-dipolo;
 - Pontes de hidrogênio;
 - Forças de dispersão de London;
 - Forças de van der Waals.

- ✓ Propriedades importantes, como o ponto de fusão e solubilidade, são influenciadas pelas forças eletrostáticas secundárias que atuam entre as moléculas.

LIGAÇÃO PRIMÁRIA IÔNICA

- ✓ Envolve a *transferência de elétrons* de um átomo para outro. Ou seja, envolve uma atração eletrostática entre dois íons de cargas opostas.
- ✓ A ligação é *não-direcional* (atração eletrostática estende-se igualmente em todas direções).
- ✓ Grande diferença de eletronegatividade entre os elementos.

Exemplo: cloreto de sódio (NaCl): $\chi_r \text{Na} = 0,9$
; $\chi_r \text{Cl} = 3,0$.



- ✓ Materiais muito duros. Alto ponto de fusão e ebulição (requer energia considerável para romper o retículo).
- ✓ Compostos iônicos conduzem corrente quando a substância se encontra fundida ou dissolvida. No estado sólido conduzem somente quando apresentam defeitos.
- ✓ Os grupos IA, IIA, VIA e VIIA são fortemente iônicos; outros compostos inorgânicos são parcialmente iônico-covalente (SiO_2).

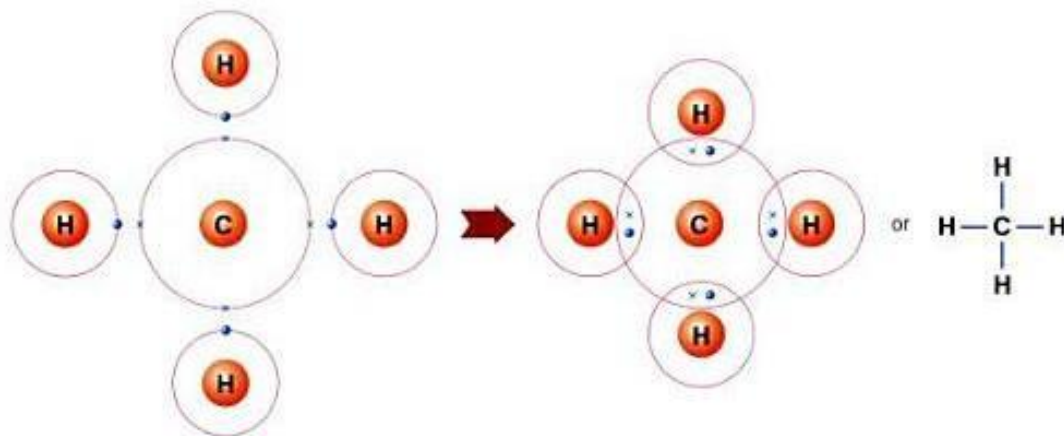
[illegible]

LIGAÇÃO PRIMÁRIA COVALENTE

- ✓ Envolve o *compartilhamento* de um par de elétrons entre dois átomos e a força de ligação depende da sobreposição entre eles.
- ✓ A ligação resultante é *altamente direcional*.
- ✓ Menor diferença de eletronegatividade entre os elementos do que aquela observada em ligações iônicas.
- ✓ A densidade eletrônica dentro de uma ligação não é atribuída aos átomos individuais, mas em vez é *distribuída* entre os átomos.

LIGAÇÃO PRIMÁRIA COVALENTE

- ✓ O número de ligações covalentes (N_{lc}) que é possível para um determinado átomo é determinado pelo seu número de elétrons de valência (N') que será subtraído do número de elétrons que completa a camada eletrônica. Ex.:
- Hidrogênio (H): $Z = 1$, $1s^1$ e na camada K são 2 elétrons ➔ $N_{lc} = 2 - 1 = 1$
- Carbono (C): $Z=6$, $1s^2 2s^2 2p^2$ e a camada L são 8 elétrons ➔ $N_{lc} = 8 - 4 = 4$



LIGAÇÃO PRIMÁRIA METÁLICA

- ✓ Os metais possuem de 1 a 3 elétrons de valência.
- ✓ Resulta do compartilhamento de um número variável de elétrons com um número variável de átomos.
- ✓ Os elétrons de valência passam a se comportar como elétrons “livres”.
- ✓ A ligação resultante é não-direcional.
- ✓ Apresentam a mesma probabilidade de se associar a um grande número de átomos vizinhos, formando uma “nuvem eletrônica” de baixa densidade.

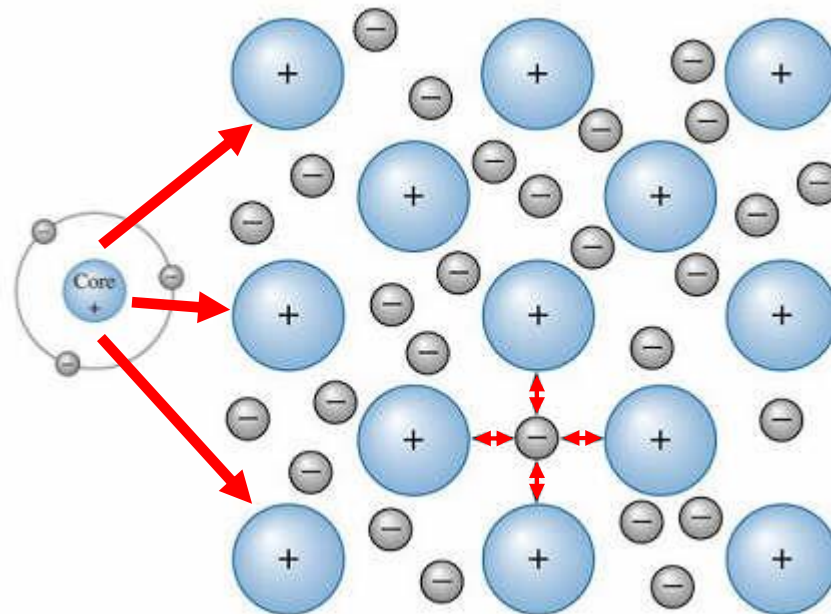


Ilustração esquemática da ligação metálica

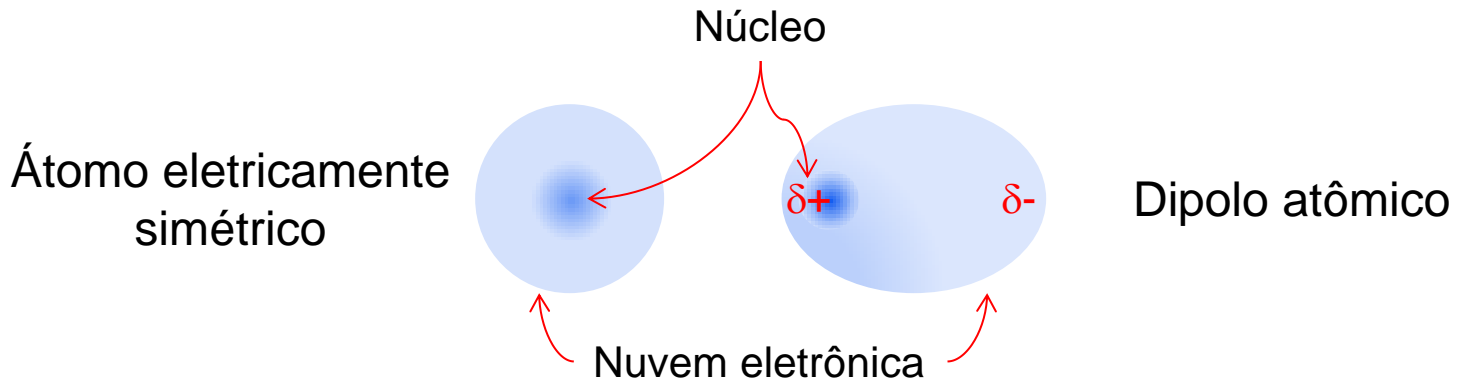
LIGAÇÃO SECUNDÁRIA DE VAN DER WAALS

- ✓ Uma força de atração fraca entre átomos ou moléculas não polares causada por **mudanças temporárias** no momento de dipolo (μ); esta atração vista como **dipolos elétricos**.
- ✓ A mudança de μ tem origem no breve deslocamento dos elétrons para um lado do átomo ou molécula, criando um deslocamento similar nos átomos ou moléculas adjacentes
- ✓ A atração é muito mais fraca que uma ligação primária.
- ✓ As forças de van der Waals são forças intermoleculares que promove a coesão nos estados líquido e sólido da matéria.
- ✓ É importante em propriedades tais como tensão superficial, ponto de ebulição e efeito capilar.

DIPOLos ELÉTRICOS

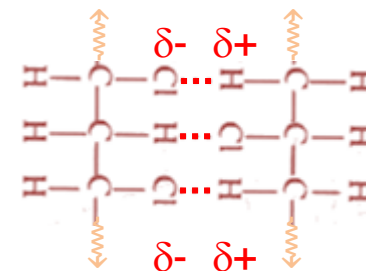
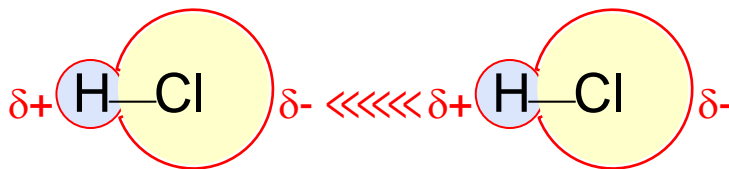
✓ Interações dipolares:

1. Dipolo induzido \rightleftharpoons Dipolo induzido



1. Dipolo induzido \rightleftharpoons Molécula polar (com dipolo permanente)

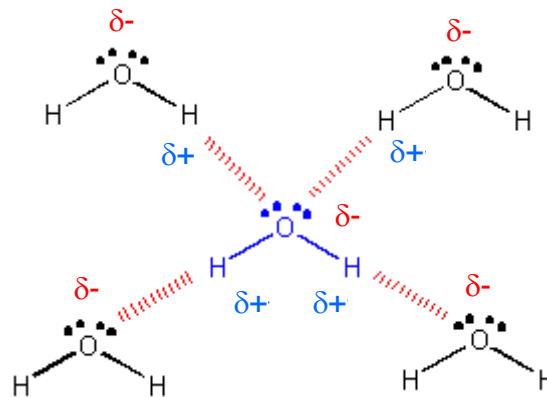
2. Molécula polar \rightleftharpoons Molécula polar



PVC

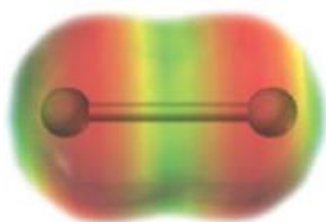
PONTE DE HIDROGÊNIO

- ✓ 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 ($\chi_r \text{F} = 4$) (como no HF), ao oxigênio ($\chi_r \text{O} = 3,5$) (como na H_2O) ou ao nitrogênio ($\chi_r \text{N} = 3$) (por exemplo, NH_3).
- ✓ Ela é responsável pelas propriedades particulares da água.

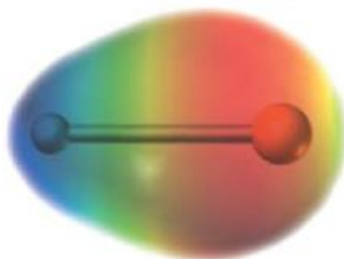


$$\chi_r \text{ F} = 4 ; \chi_r \text{ Br} = 2,8 ; \chi_r \text{ H} = 2,1 ; \chi_r \text{ Na} = 0,9$$

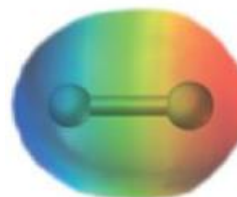
$$\Delta\chi = 0$$



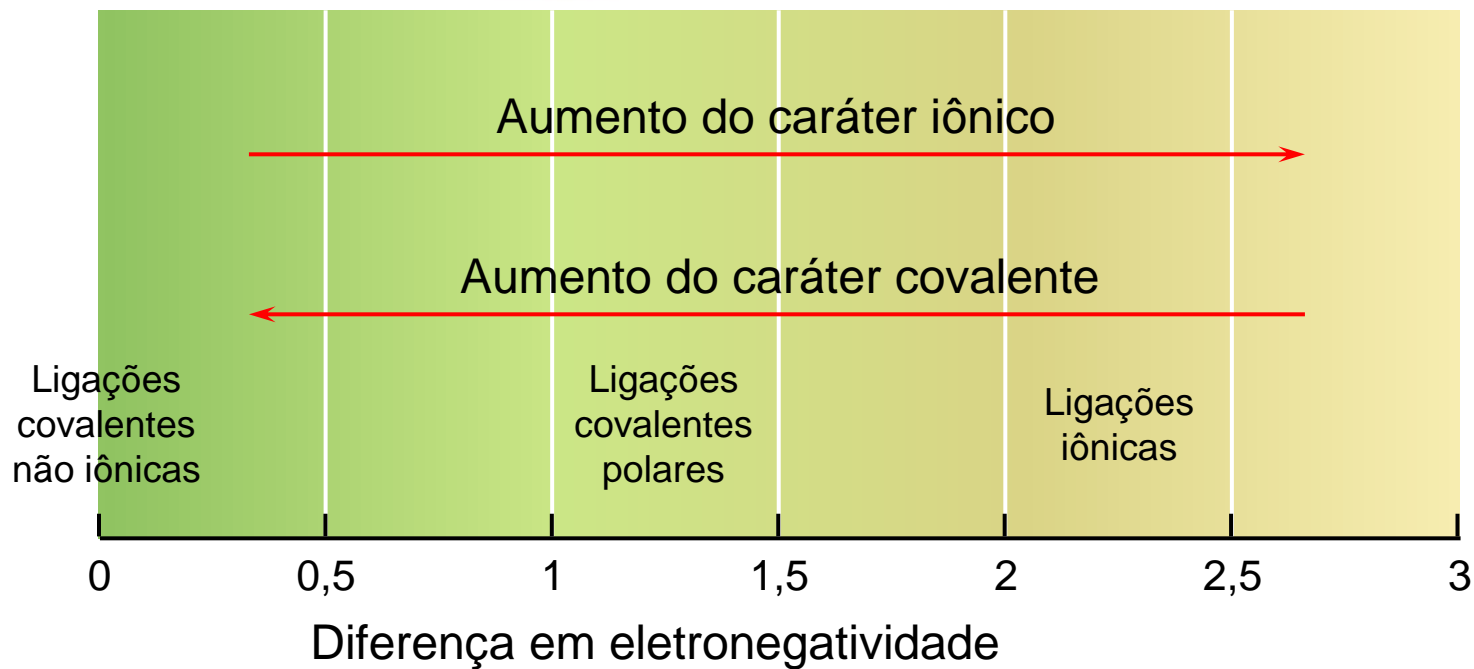
$$\Delta\chi = 0,7$$



$$\Delta\chi = 1,9$$

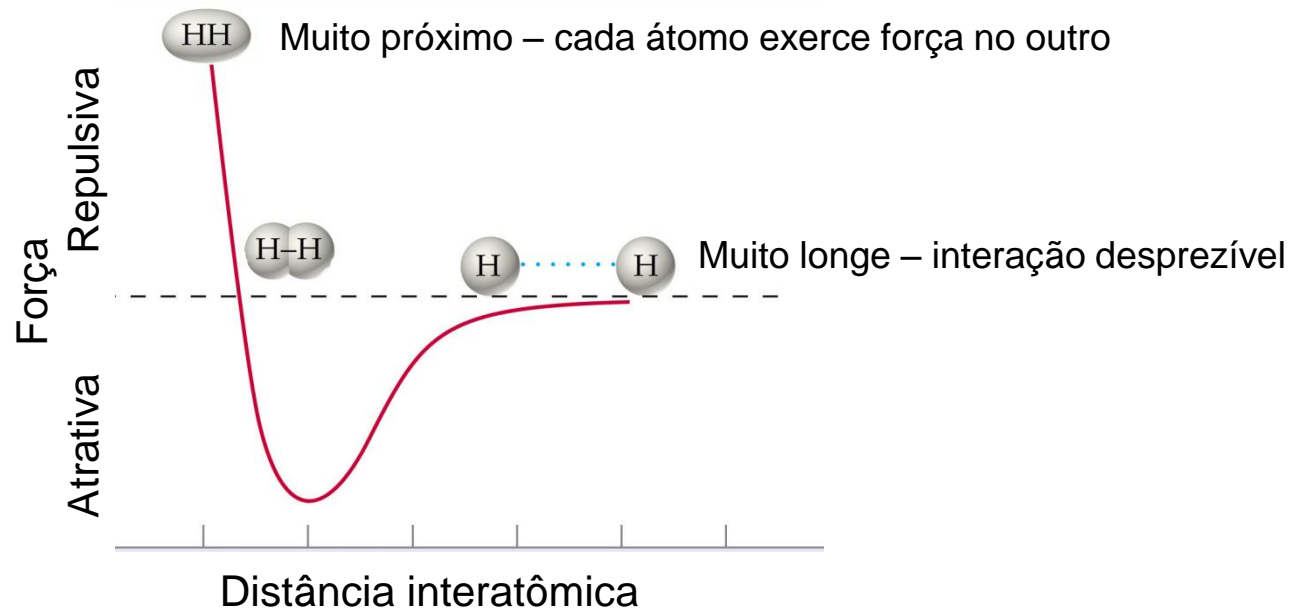


$$\Delta\chi = 3,1$$



FORÇAS E ENERGIAS DE LIGAÇÃO

- ✓ Conhecer as forças interatômicas que ligam os átomos em uma molécula, ajudam o entendimento de muitas das propriedades físicas dos materiais.
- ✓ As forças são de dois tipos e suas grandezas dependem da separação ou **distância interatômica** (r).



Forças interatômicas

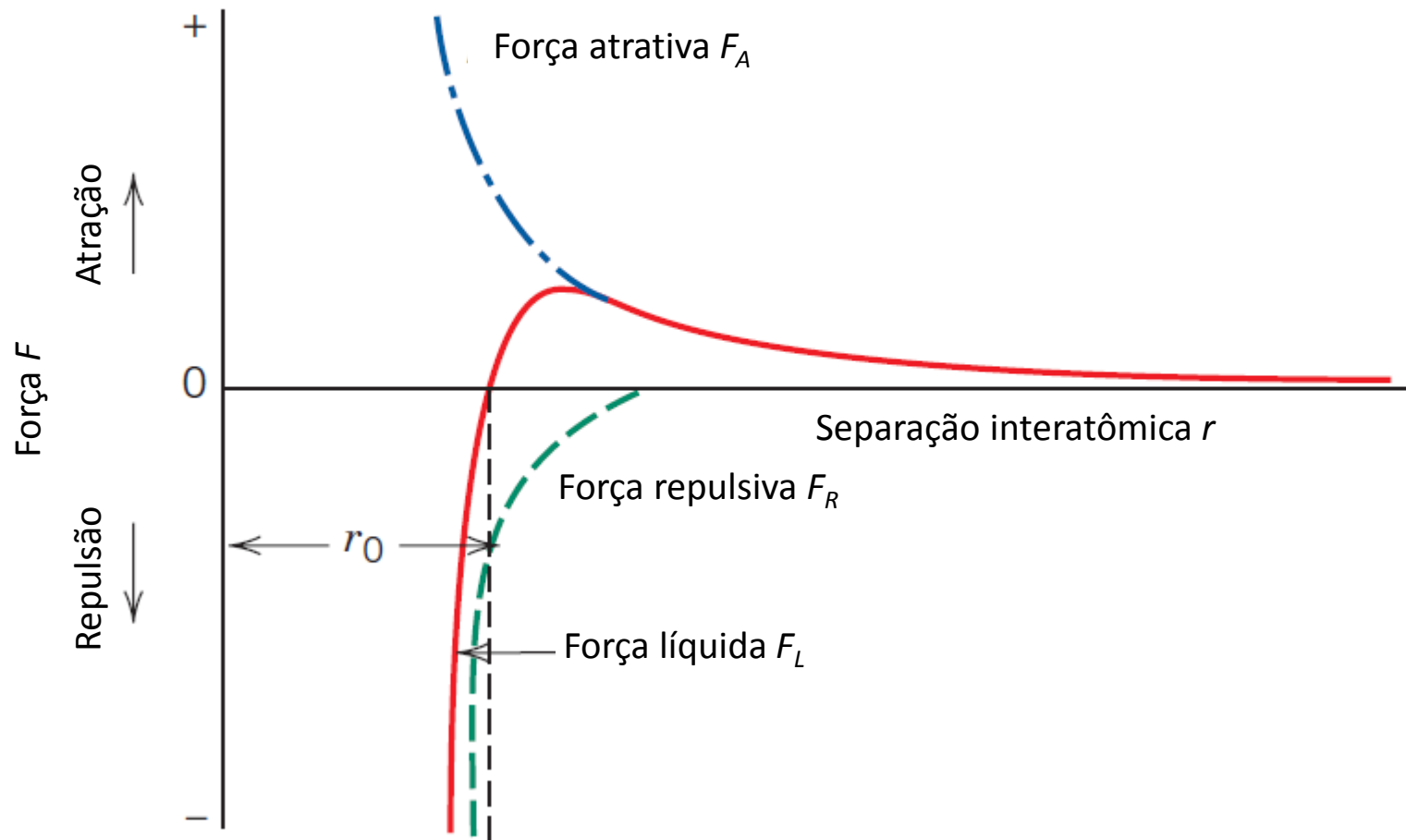
- **Atrativa** (F_A): depende do tipo de ligação que existe entre os dois átomos.
- **Repulsiva** (F_R): tem a sua origem na interação entre as nuvens eletrônicas carregadas negativamente dos dois átomos.

A força líquida (F_L) entre dois átomos é:

$$F_L = F_R + F_A$$

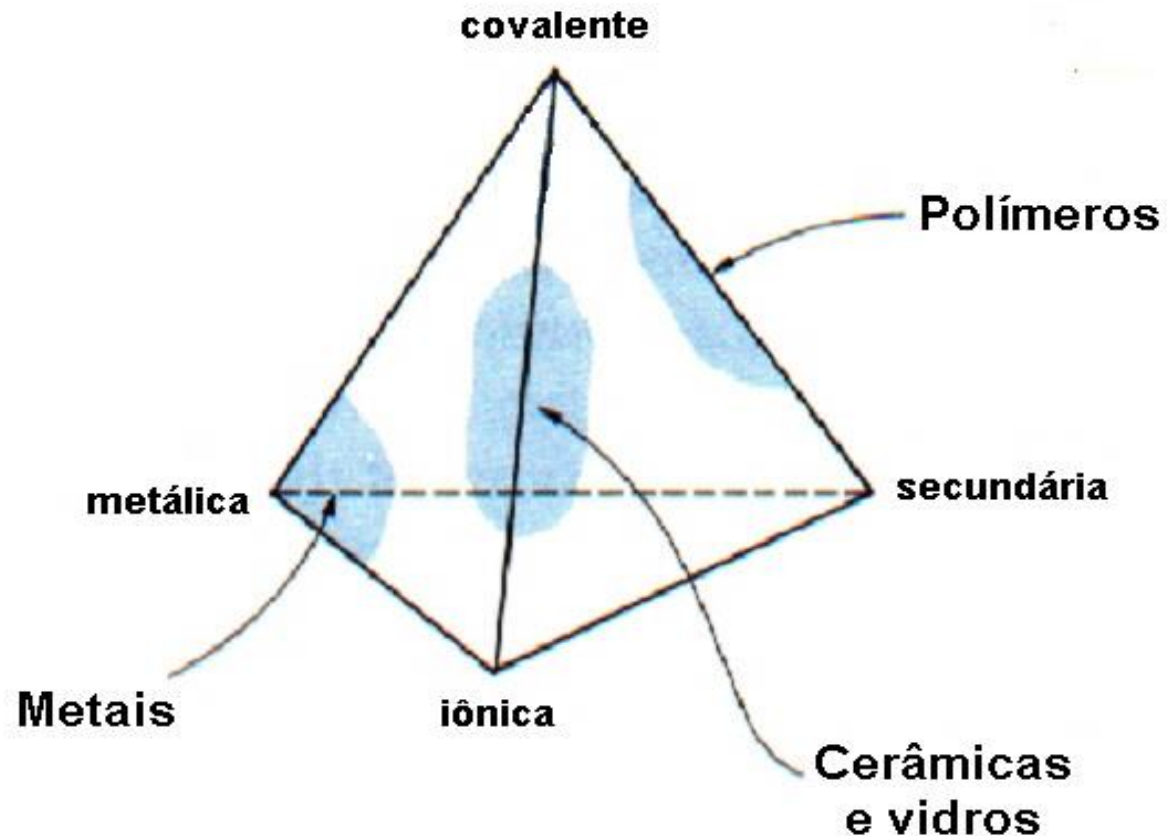
A energia (E) também é função da separação interatômica. E e F estão relacionadas matematicamente:

$$E_L = \int_{\infty}^r F_L dr = \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_B dr = E_A + E_R$$



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

Classificação dos 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)

Bibliografia

William D. Callister, Jr., Materials Science and Engineering – An Introduction, John Wiley, N.Y..

Capítulo 1: Introdução

Capítulo 2: Estrutura atômica e ligações químicas

Outras referências

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 ed. 2003. Caps. 1 e 2.