

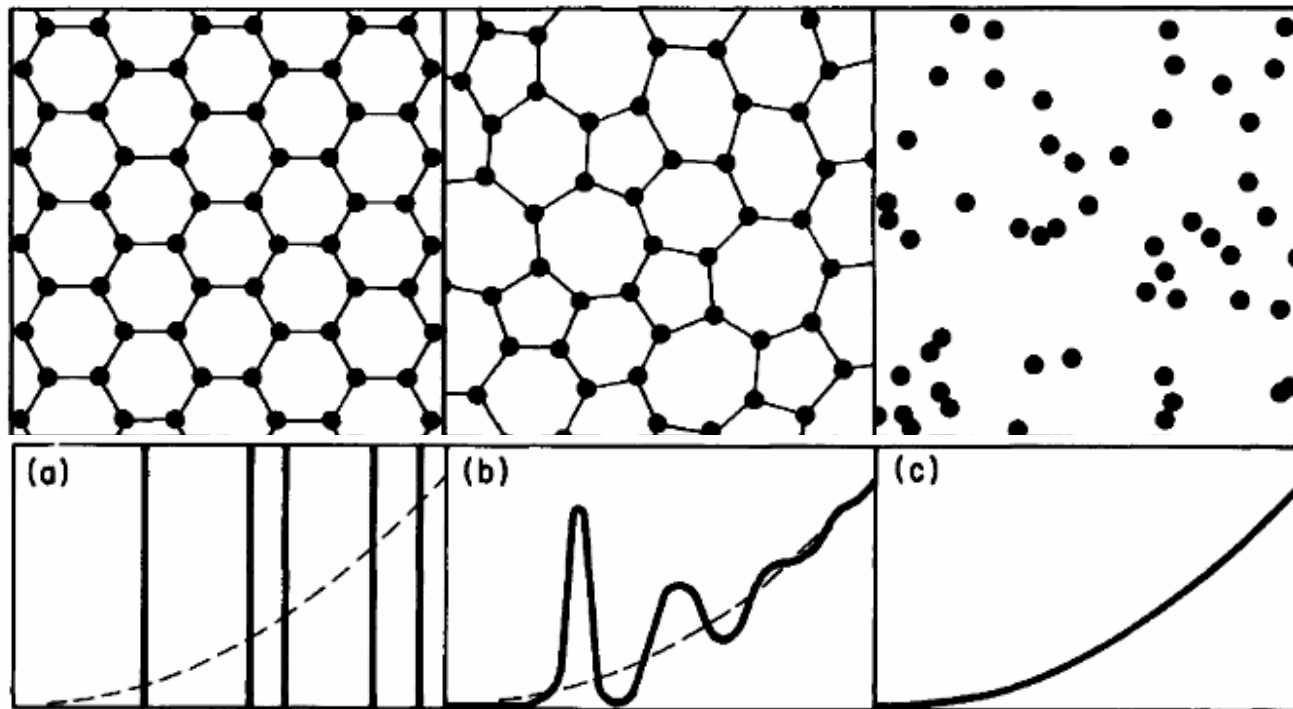
Introdução

Estados de Matéria ou Tipos de Substâncias

Sólidos	Mantém o seu volume e a sua forma São difíceis de comprimir Oferecem resistência a uma deformação de desvio	Interacções fortes entre as partículas; $K \ll U$
Gases	Tomam o volume e a forma do recipiente Possuem alta compressibilidade, propriedades totalmente isotrópicas	Interacção fraca entre as partículas, insuficiente para manter a coesão do sistema; $K \gg U$
Líquidos	Mantém o seu volume mas não a sua forma São difíceis de comprimir mas não oferecem resistência significativa a uma deformação de desvio	Interacção com intensidade intermédia; $K \approx U$

Introdução

Sólidos Cristalinos e Amorfos



Distribuição atômica no espaço e função de correlação de pares de átomos:
(a) sólido cristalino, (b) sólido amorfo, (c) gás.

Introdução

Sólidos Cristalinos

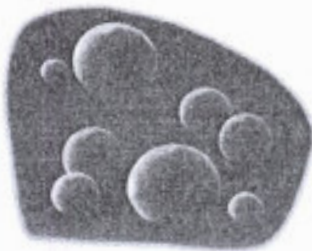
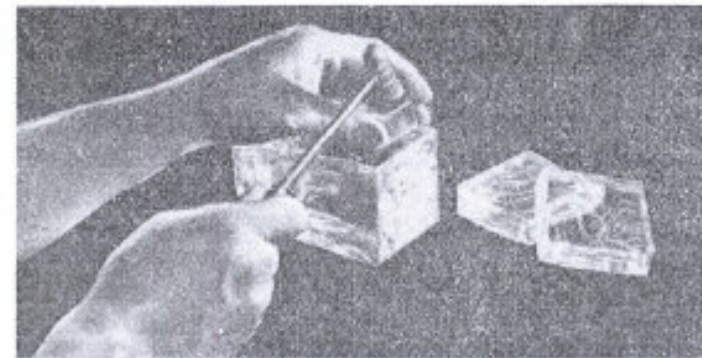
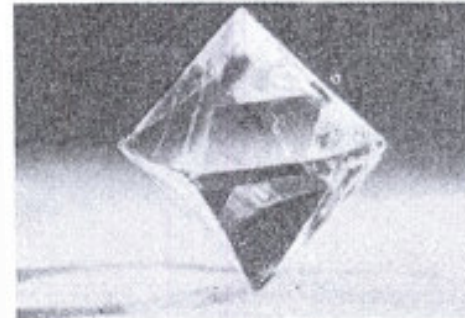
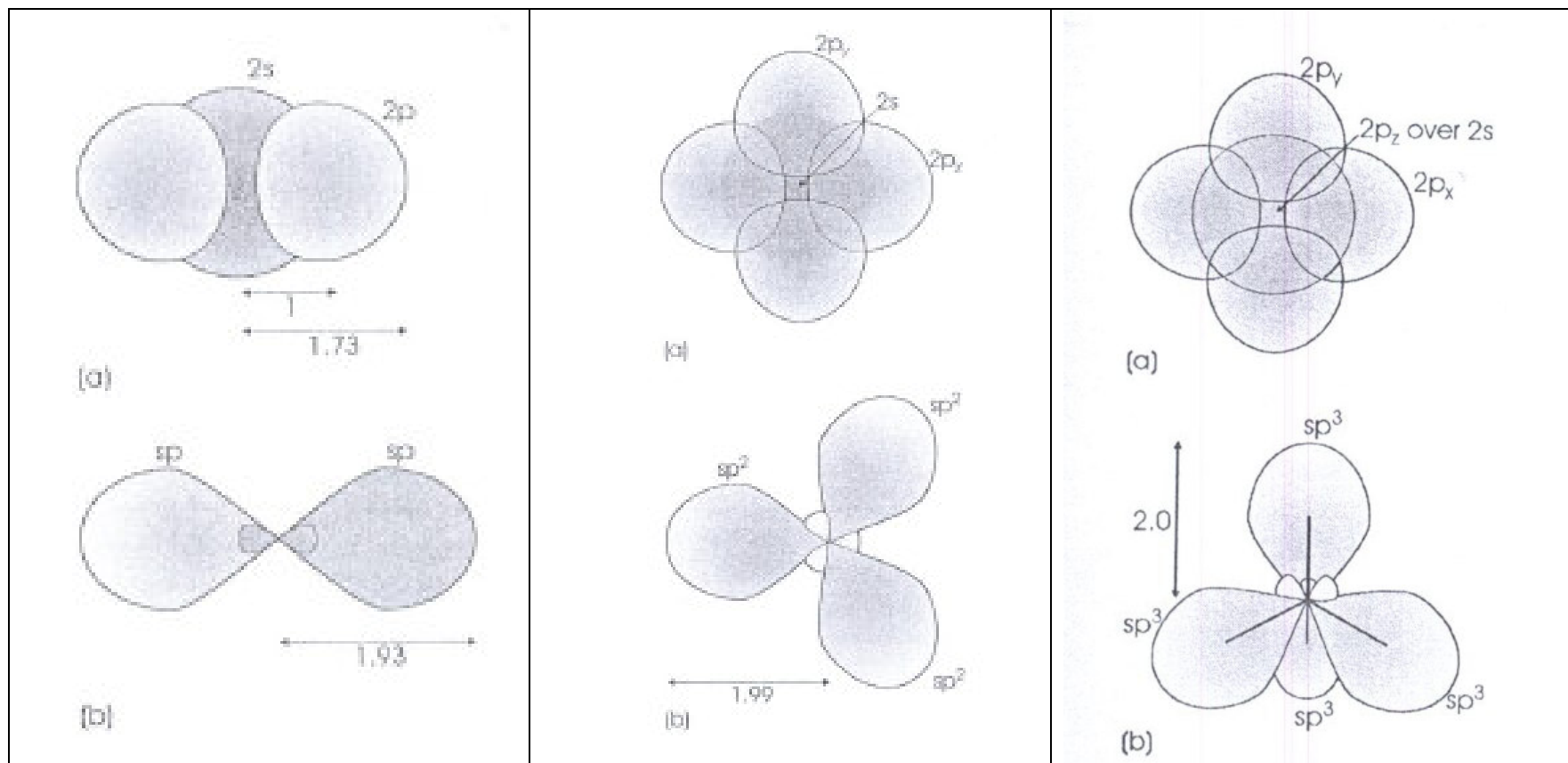


Figure 1.1. (A) Naturally occurring crystals of iron pyrite, showing the intersection of flat faces at definite angles that characterizes the external appearance of all crystals. (Courtesy of J. Sharp, University of Texas.) (B) Small equilibrium crystals of gold at 1000°C , roughly $5\ \mu\text{m}$ in diameter, showing alternating smooth and faceted surfaces. [Source: Heyraud and Métois (1980), p. 571.] (C) Equilibrium crystal of solid ^4He at 0.8 K. (Courtesy of S. G. Lipson, Technion; see Lipson (1987).)



Hibridização

Formação de orbitais de simetria mista (hibridizados s - p) está na base das ligações covalentes dirigidas. No caso do carbono, existem orbitais dirigidos sp , sp^2 e sp^3 .



Tipos de Ligação nos Sólidos

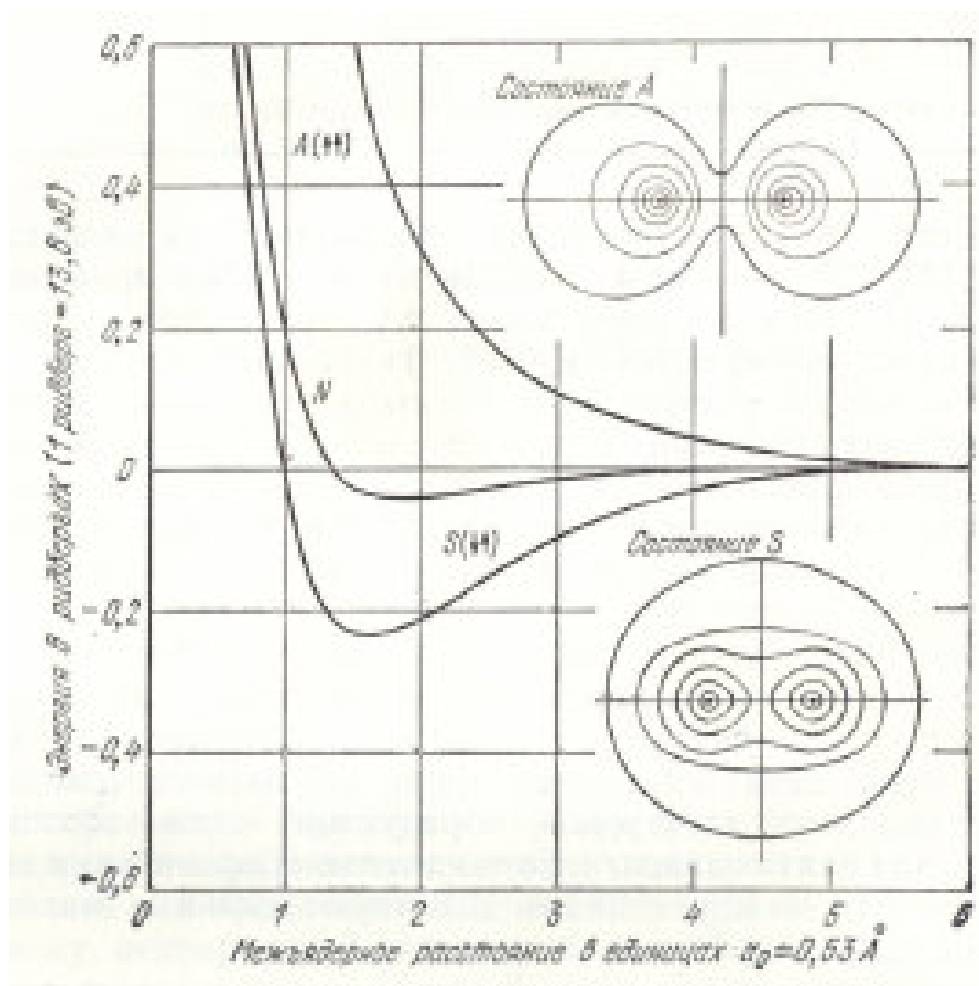
1. Iónica
2. Covalente
3. Metálica
4. Molecular (tipo van der Waals)

Table 3.1 Forces between atoms, ions and molecules

Type of bond	Approximate energy/kJ mol ⁻¹	Species involved
Covalent	350	Atoms with partly filled orbitals
Ionic	250	Ions only
Metal	200	Metal atoms
Ion–dipole	15	Ions and polar molecules
Dipole–dipole	2	Stationary polar molecules
Dipole–dipole	0.3	Rotating polar molecules
Dispersion	2	All atoms and molecules
Hydrogen bond	20	N, O or F plus H

Ligação Covalente

Orbitais ligante e antiligante de molécula H_2



Energia da molécula (medida em Rydbergs) em função da distância (medida em raios de Bohr) entre os prótons nos estados simétrico (S) [com spins dos electrões paralelos] e antisimétrico (A). Curva N é o resultado de cálculo clássico utilizando distribuição de carga dos átomos isolados. A distribuição da carga electrónica nos dois casos está mostrada pelas linhas da densidade constante.