

Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

Interações Intermoleculares e Materiais

<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Estrutura.html>

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

para moléculas neutras, o momento dipolo μ é o **vetor** apontando do **centro** da distribuição de **carga negativa** para o **centro** da distribuição de **carga positiva**, multiplicado pelo **módulo** da carga positiva, δ_+ , ou da carga negativa, $|\delta_-|$, que são iguais.

Unidade: $[\mu] = [l \cdot q] = \text{m} \cdot \text{C}$

Para moléculas é frequentemente usado o Debye:

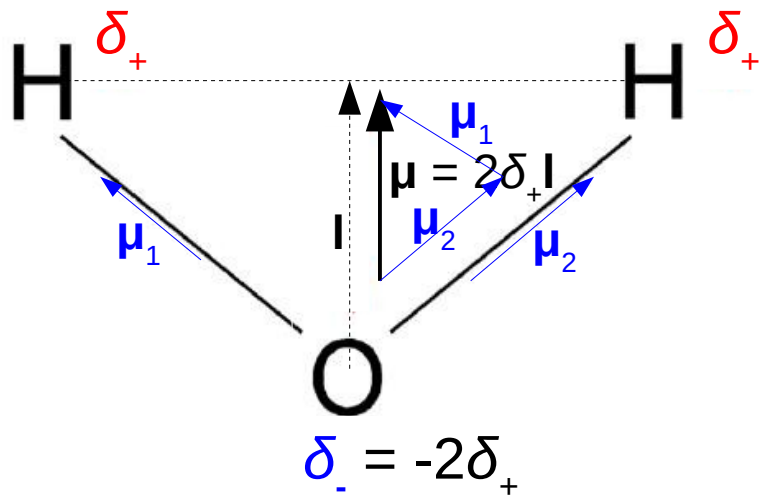
$$1 \text{ D} = 3.335 \cdot 10^{-30} \text{ m} \cdot \text{C}$$

Moléculas com **momento dipolo permanente** $\neq 0$ são chamadas moléculas **polares**.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Exemplo: Molécula de água (H_2O)



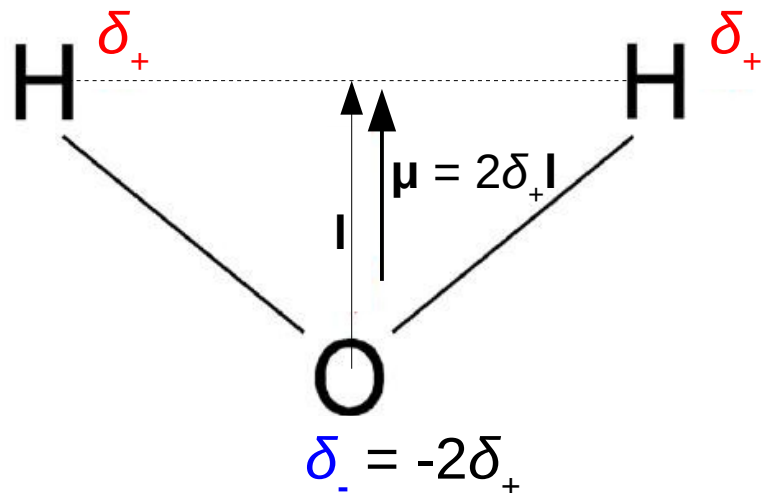
Oxigênio tem **eletronegatividade alta**, e hidrogênio, **baixa**.
=> Os **elétrons** das ligações O-H se **concentram** no átomo de O.
=> **carga parcial negativa δ_-** no O, **cargas parciais positivas δ_+** nos Hs.

Uma maneira de calcular o **momento dipolo** da **molécula** é como a **soma vetorial** dos **momentos** das **ligações interatômicas individuais**, aqui μ_1 e μ_2 .

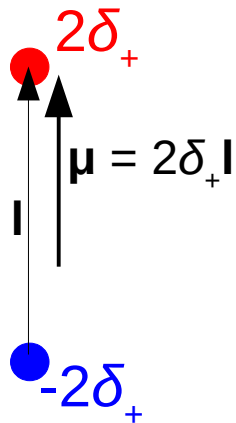
Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Exemplo: Molécula de água (H_2O)



Oxigênio tem **eletronegatividade alta**, e **hidrogênio, baixa**.
=> Os **elétrons** das ligações O-H se **concentram** no átomo de O.
=> **carga parcial negativa δ_-** no O, **cargas parciais positivas δ_+** nos Hs.

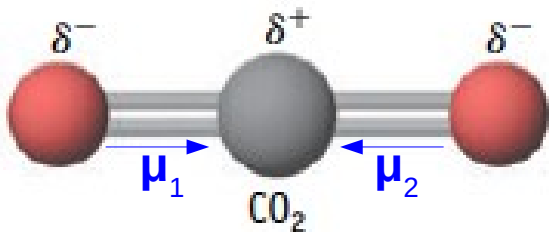


Para facilitar, podemos representar o dipolo como duas cargas encontrando-se nos centros das distribuições das cargas negativa e positiva.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Exemplo: **Dióxido de carbono** (CO_2 , anidrido carbônico, gás carbônico)



Pela **simetria** da molécula, dióxido de carbono **não** tem momento dipolo

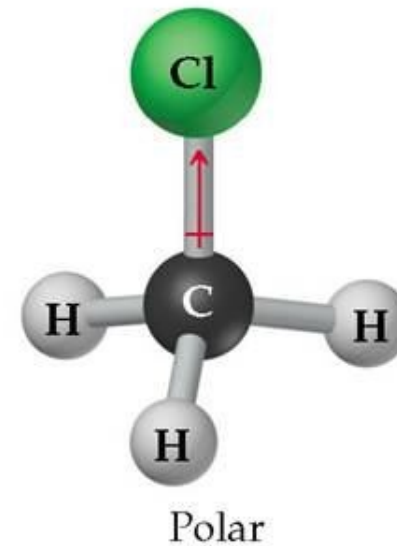
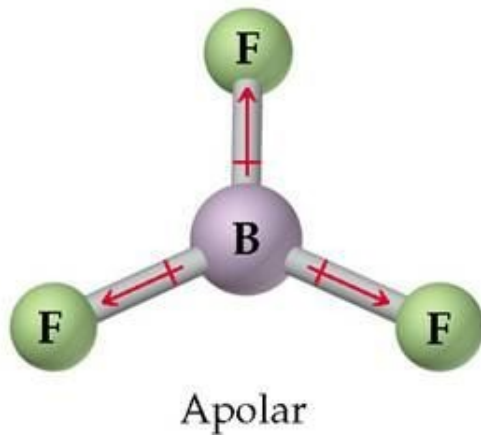
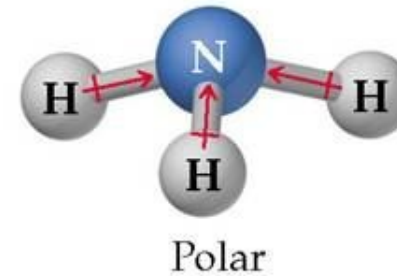
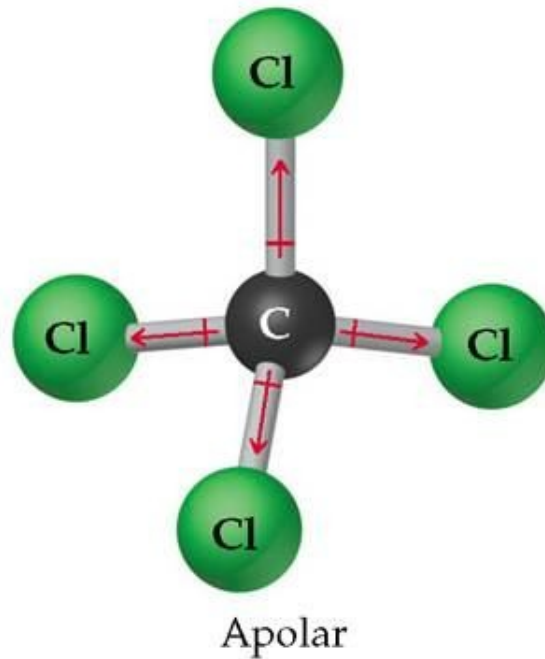
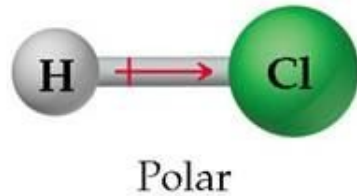
Isto pode ser entendido de duas maneiras:

- Os **centros** da **carga positiva** e da **carga negativa coincidem** (no meio da molécula / no átomo de C) $\Rightarrow \mathbf{I} = 0$
- As duas **ligações interatômicas** têm **dipolos** do **mesmo módulo** mas **direções opostas**. \Rightarrow A **soma é nula**.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Alguns outros exemplos



! As flechas apontam para onde os elétrons estão, na direção oposta do momento dipolo

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

O momento dipolo de uma **ligação** entre **dois átomos** (por exemplo, de cada uma das ligações O-H na molécula de H₂O) em **Debye** equivale aproximadamente à **diferença** de **eletronegatividade** dos dois átomos A e B:

$$\mu[\text{D}] \approx \chi_A - \chi_B = \Delta\chi$$

apontando do átomo com eletronegatividade maior para aquele com eletronegatividade menor.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Os momentos dipolo de algumas moléculas

TABLE 8.7 Dipole Moments of Selected Molecules

Molecule (AX)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₂)	Moment (μ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H ₂ O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H ₂ S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO ₂	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO ₂	0	linear
H ₂	0	linear			
Molecule (AX ₃)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₄)	Moment (μ , D)	Geometry
NH ₃	1.47	trigonal pyramidal	CH ₄	0	tetrahedral
NF ₃	0.23	trigonal pyramidal	CH ₃ Cl	1.92	tetrahedral
BF ₃	0	trigonal planar	CH ₂ Cl ₂	1.60	tetrahedral
			CHCl ₃	1.04	tetrahedral
			CCl ₄	0	tetrahedral

Interações Intermoleculares

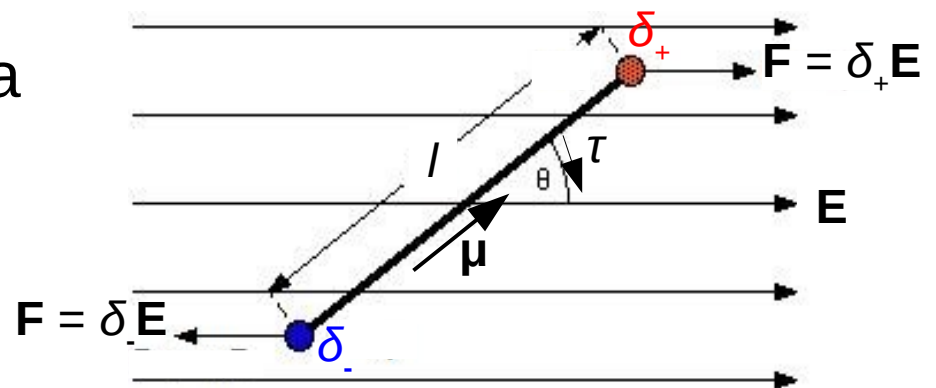
Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

Moléculas polares com rotação livre (como em gases e líquidos)

Na carga positiva age uma força na direção do campo e na carga negativa, na direção oposta.

=> A **força total** sobre a molécula é **nula**, mas há uma **torque** agindo.

Dipolos tendem a se **alinhar** com o campo.



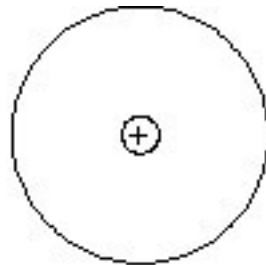
Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

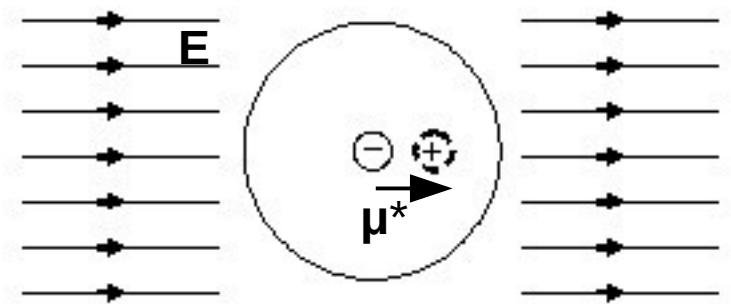
Moléculas não-polares: O momento dipolo induzido

Os (orbitais dos) **elétrons** são **deslocados** na **direção oposta** ao **campo** (e os núcleos dos átomos minimamente na direção do campo, tal que o centro de massa da molécula não se mexe; afinal a força total que o campo aplica é zero para moléculas neutras).

Sem campo



Com campo



=> Moléculas não-polares ganham um **momento dipolo induzido** μ^* na **direção** do **campo** **E**.

Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

O momento dipolo induzido

O mesmo acontece com moléculas polares estacionários (como em sólidos) num campo externo \mathbf{E} .

Neste caso, o **momento induzido** μ^* é **somado** ao **momento permanente** μ_0 :

$$\mu = \mu_0 + \mu^*,$$

causando um **aumento** ($\mu^* \parallel \mu_0$), uma **redução** ($\mu^* \text{ anti-} \parallel \mu_0$) e/ou uma **mudança de direção** ($\mu^* \nparallel \mu_0$) do **momento da molécula**.

Deve acontecer até em em moléculas polares com rotação livre. Neste caso, o momento induzido é na mesma direção que o alinhamento do momento permanente, $\parallel \mathbf{E}$.

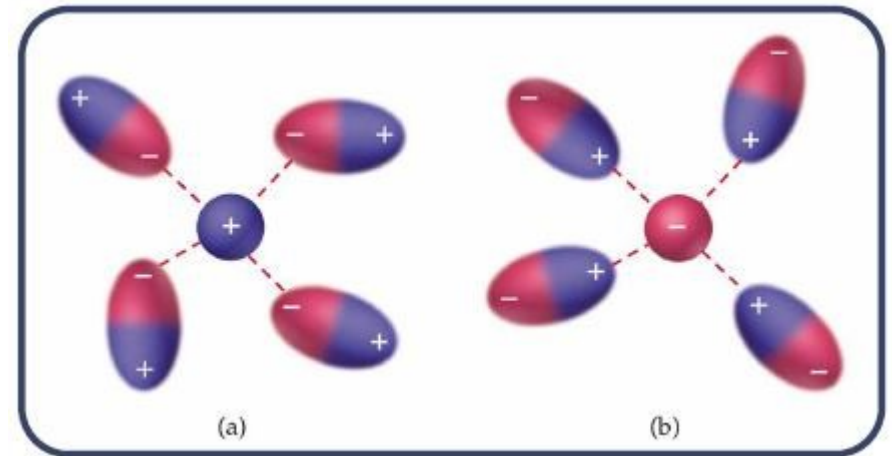
Interações Intermoleculares

Força Íon-Dipolo

Em **gases** ou **líquidos**, naqueles há **íons** e dipolos (permanentes), isto é, **dipolos** com **rotação livre**, os dipolos se **alinham** tal, que eles acabam sendo **atraídos** pelos **íons**.

Ou: Em **substâncias**, naqueles há **íons** e **moléculas apolares**, os íons **induzem** um **momento dipolo** nas moléculas apolares, também tal, que estas são **atraídos** pelos **íons**.

Estas forças são, então, sempre **atrativas**, **mais fracas** que as forças **íon-íon**, e caem com a 5ª potência das distâncias intermoleculares (a energia potencial correspondente cai com a 4ª potência das distâncias intermoleculares).



Interações Intermoleculares

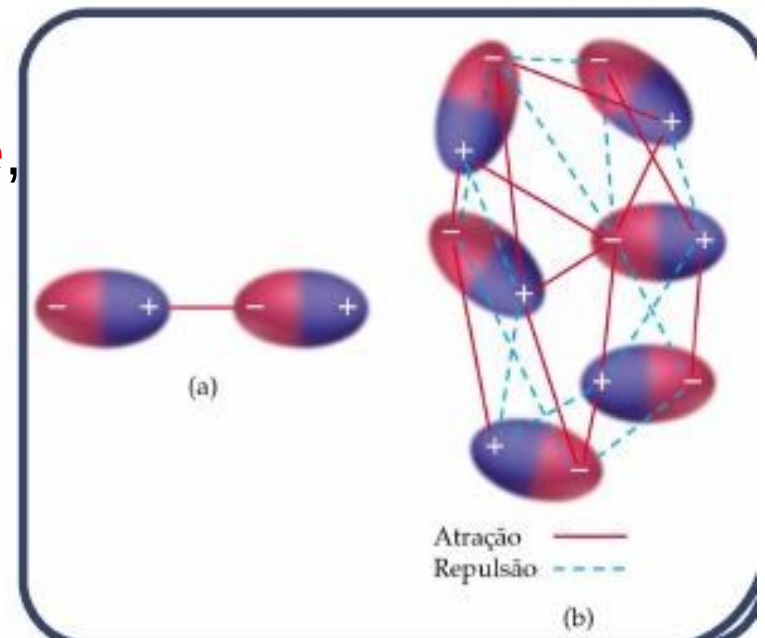
Forças entre Dipolos com Rotação Livre, de Keesom

De maneira análoga, em **gases** ou **líquidos**, naqueles há dipolos (permanentes), isto é, com **rotação livre**, os dipolos se **alinham** tal, que eles acabam, em média, se **atraindo**.

Estas forças são, então, também **atrativas**, ainda **mais fracas**, e caem com a 7ª potência das distâncias intermoleculares

(a energia potencial correspondente cai com a 6ª potência das distâncias intermoleculares).

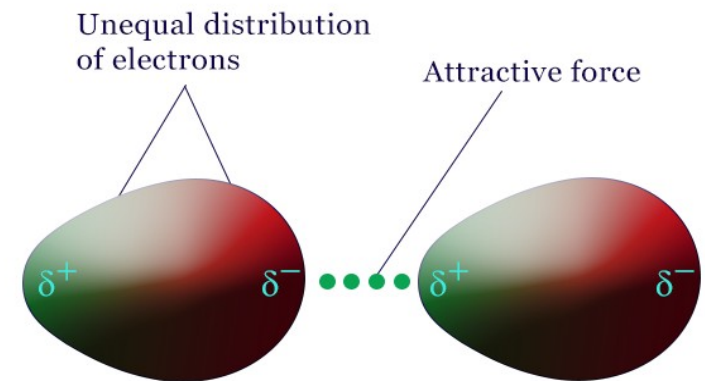
As forças de Keesom fazem parte das **Forças Van der Waals** (=> Fenômenos Térmicos, sobre a termodinâmica de gases reais).



Interações Intermoleculares

Forças de Dispersão de London

Acontecem em **todas** as **substâncias**:
Flutuações na **distribuição** dos e^- na molécula 1 causam um **momento dipolo aleatório** nesta, que **induz** um **momento** na molécula 2, os dois sendo **alinhados** tal que eles se mantêm um o outro e, em média, as moléculas se **atraem**.



Temporary dipoles

Estas forças são, então, também **atrativas**, **fracas**, e também caem com a 7^a potência das distâncias intermoleculares (a energia potencial caindo com a 6^a potência das distâncias).

As forças de London também são **Forças Van der Waals**.

Interações Intermoleculares

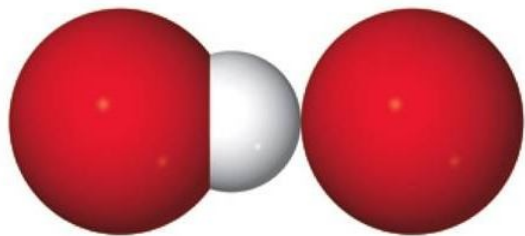
Ligações de Hidrogênio (Pontes de Hidrogênio)

Moléculas que contêm átomos de **hidrogênio** (p. e. H_2O) podem interagir de uma maneira adicional, a **ligação de hidrogênio**, também chamada de ponte de hidrogênio.

São ligações do tipo $\text{A}-\text{H}\cdots\text{B}$, onde A e B são **altamente eletronegativas**, principalmente N, O, F e espécies aniônicas (Cl^- , ...).

Vista “clássica”

δ_- δ_+



- os e^- do $\text{A}-\text{H}$ ficam **mais pertos** do **A**

=> **carga parcial positiva** no **H**

=> **atração eletrostática** entre **H** e **B** (que tem uma carga parcial positiva devida à molécula, daquela B participa).

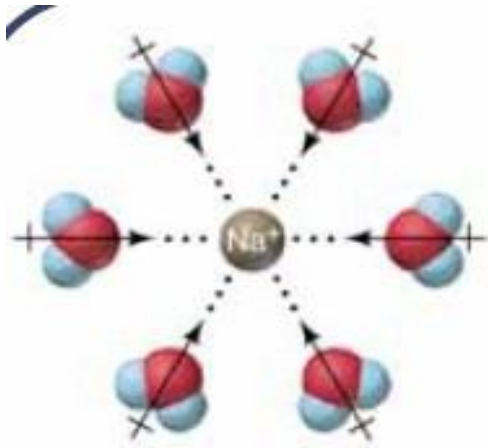
Interações Intermoleculares

Ligações de Hidrogênio

- A **força** da ligação é da ordem de 20 kJ/mol, **mais forte** que as **outras interações** (tirando íon-íon).
=> quando ela acontece, ela **domina** a interação entre as moléculas
- O comprimento da ligação H...B é da ordem da **distância** de **ligações interatômicas** em **moléculas**.
=> interação “de **contato**”, a **curta distância**.
- As pontes de hidrogênio são responsáveis, e. o., pelas **ligações intermoleculares** na **água** e no **gelo**, e pela **estrutura cristalina hexagonal** do **gelo** (=> flocos de neve), e
- pelas **ligações** entre **pares de genes** no **DNA**, ...

Interações Intermoleculares

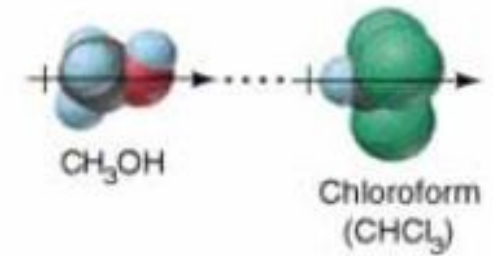
Resumo



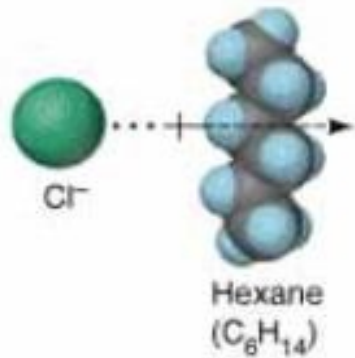
Íon-Dipolo



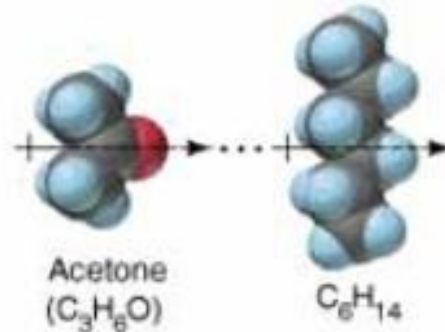
Ligação de Hidrogênio



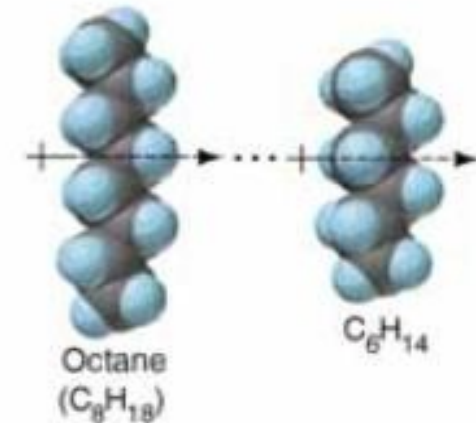
Dipolo-dipolo



Íon - dipolo induzido



dipolo - dipolo induzido



Dispersão

Interações Intermoleculares

Intensidades e Dependência da Distância das Interações Intermoleculares

Interação	Intensidade	$U(r)$
Íon-íon	250 kJ/mol	$1/r$
Ponte de H	20 kJ/mol	“de contato”
íon-dipolo	15 kJ/mol	$1/r^2$
dipolo-dipolo (estacionários)	2 kJ/mol	$1/r^3$
dip. ind.- dip. ind. (London)	2 kJ/mol	$1/r^6$
dip. - dip. com rotação livre (Keesom)	0.6 kJ/mol	$1/r^6$

} Forças Van der Waals

Em comparação, as **ligações iônicas**, **covalentes** e **metálicas** são de 625-1550 kJ/mol, 520-1250 kJ/mol e 100-800 kJ/mol, respectivamente.

Interações Intermoleculares

Interações Intermoleculares vs. Interações Intramoleculares

A ligação que mantém os átomos de uma molécula unidos é uma força **intra**molecular.

=> **Transformações Químicas**

Quando uma substância funde ou entra em ebulição, forças **inter**moleculares são quebradas.

=> **Transformações Físicas**

Lembrete: Aula 3

Os Estados Físicos da Matéria

Definições Wikipédia

Estado sólido considera-se que a matéria do corpo **mantém** a **forma** macroscópica e as **posições relativas** das suas **partículas**, as **moléculas** se encontram **próximas** umas das outras com **forte atração** entre elas, nestas condições, possui **forma** e **volume próprio**, independentemente do corpo onde se encontra e ainda o **movimento** é **praticamente nada**. É particularmente estudado nas áreas da estática e da dinâmica.

No **Estado líquido**, o corpo **mantém** a sua **quantidade** de matéria e aproximadamente o seu **volume**. A **forma** e **posição relativa** das suas **partículas** é **variável** se adaptando conforme o corpo. As **moléculas** estão **relativamente próximas**, e a **força** de **atração** é **mediana**, assim como os **movimentos**. É particularmente estudado nas áreas da hidrostática e da hidrodinâmica.

Lembrete: Aula 3

Os Estados Físicos da Matéria

Estado gasoso, o corpo **mantém** apenas a **quantidade** de matéria, podendo **variar** amplamente a **forma** e o **volume** (**compressível**), as partículas possuem **força** de **atração nula** e **movimentos bruscos** (agitação térmica).

É particularmente estudado nas áreas da aerostática e da aerodinâmica.

Outros Estados, parcialmente hipotéticos

Plasma (gás ionizado, maioria da matéria do Universo se encontra neste estado), **Condensado de Bose-Einstein** (átomos vibrando como um corpo único, só ocorre em temperaturas perto de zero absoluto), Superfluido, Fluidos supercríticos, Colóide, Matéria degenerada, Neutrônio, Plasma de quarks-glúons, Matéria estranha ou matéria de quark, Excitonium.

Lembrete: Aula 3

Os Estados Físicos da Matéria

três slides sobre
as consequências
das forças intermoleculares para
líquidos

Líquidos Moleculares

Tensão Superficial

Já que, em **líquidos**, as **forças intermoleculares** (forças van der Waals, pontes de hidrogênio, ...) são **atrativas**, os líquidos se arranjam tal, que as moléculas têm o **maior número** de **vizinhos** possíveis, isto é, tal, que o número de moléculas, que não têm vizinhos “por todos os lados” (as da superfície) é o menor possível.

=> A **superfície** é **minimizada**

A forma que minimiza a razão área de superfície : volume é a forma **esférica**.

=> líquidos tendem a formas redondas.

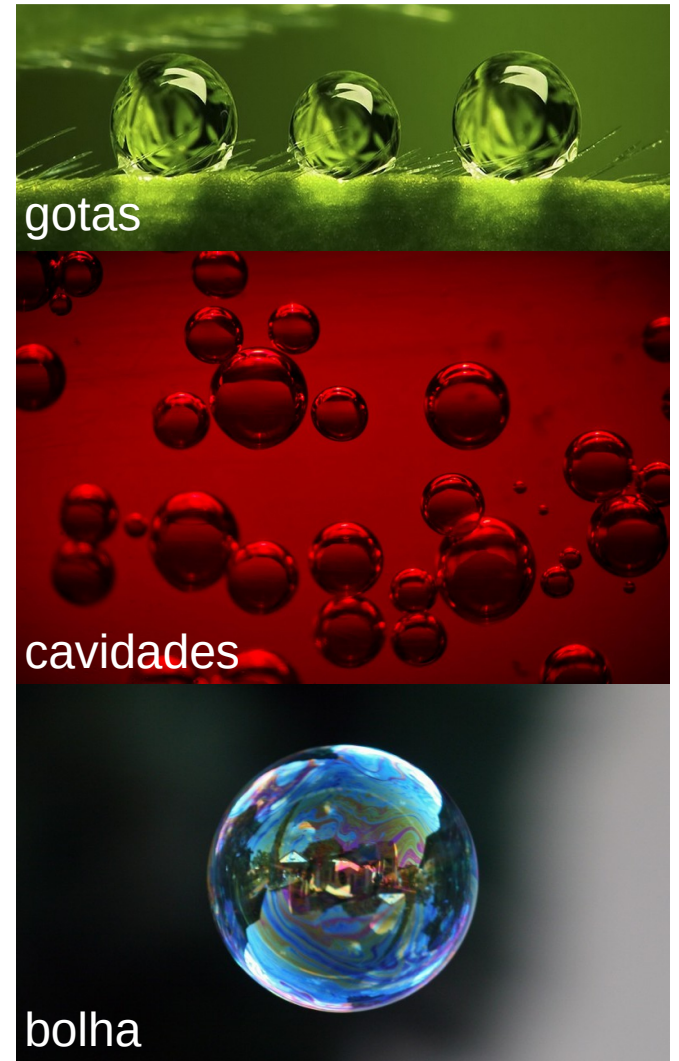
Líquidos Moleculares

Tensão Superficial

Exemplos:

- **gotas**: líquidos dentro de um gás ou no vácuo
- **cavidades**: gás em líquidos
- **bolhas**: filmes finos de um líquido com um gás (ar) dentro e fora

! As “bolhas” no refrigerante são, na verdade, cavidades e não bolhas.



Líquidos Moleculares

Viscosidade

Outra consequência das interações intermoleculares é a **viscosidade** dos fluidos (por exemplo, líquidos).

A viscosidade pode ser entendida como a “**capacidade** do fluido para a **transferência transversal de momento**”, ou “a **resistência ao cisalhamento**” ou “**grosseira**”.

Para mais detalhes sobre Tensão Superficial e Viscosidade, vide IAM.

Lembrete: Aula 3

Os Estados Físicos da Matéria

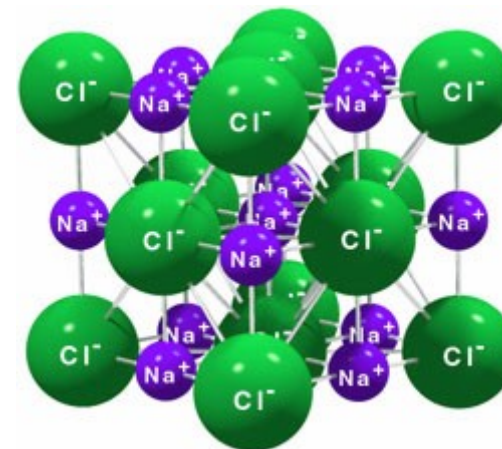
No restante desta aula,
tratamos de **sólidos**

Compostos Iônicos

Sais são **cristais** de **ânions** e **cátions**, todos ligados por **ligações iônicas**.

Participantes dos Compostos Iônicos

- Metal com:
 - Hidrogênio
 - Semimetal
 - Ametal
 - Radical salino (SO_4^{-2})
- Radical Catiônico (NH_4^+) com os ânions listados para os metais.



Estrutura cristalina de NaCl (sal de cozinha)

Configurações eletrônicas de íons dos elementos representativos

Esses são derivados da **configuração eletrônica** dos elementos com o **número necessário** de **elétrons adicionados** ou **removidos** do orbital mais acessível.

As configurações eletrônicas podem prever a formação de íon estável:

Mg: $[\text{Ne}]3s^2$ \Rightarrow Mg^+ : $[\text{Ne}]3s^1$: **não estável**; Mg^{2+} : $[\text{Ne}]$: **estável**

Cl: $[\text{Ne}]3s^23p^5$ \Rightarrow Cl^- : $[\text{Ne}]3s^23p^6 = [\text{Ar}]$: **estável**

Compostos Iônicos

Íons Poliatômicos Comuns

(a) *Cátions*

NH_4^+
 H_3O^+

(b) *Ânions (Sinônimos entre parênteses)*

CO_3^{-2}	Carbonato	ClO_2^-	Clorito
HCO_3^-	Hidrogenocarbonato (bicarbonato)	$\text{ClO}^- (\text{OCl}^-)$	Hipoclorito
$\text{C}_2\text{O}_4^{-2}$	Oxalato	PO_4^{-3}	Fosfato (ortofosfato)
NO_3^-	Nitrato	HPO_4^{-2}	Hidrogenofosfato
NO_2^-	Nitrito	H_2PO_4^-	Dihidrogenofosfato
OH^-	Hidróxido	CrO_4^-	Cromato
SO_4^{-2}	Sulfato	$\text{Cr}_2\text{O}_7^{-2}$	Dicromato
HSO_4^-	Hidrogenossulfato (bissulfato)	MnO_4^-	Permanganato
SO_3^{-2}	Sulfito	$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	Acetato
HSO_3^-	Hidrogenossulfito (bissulfito)		
ClO_4^-	Perclorato		
ClO_3^-	Clorato		

Compostos Iônicos

Estequiometrias Comuns dos Compostos Iônicos

	X^-	X^{2-}	X^{3-}
M^+	MX	M_2X	M_3X
M^{2+}	MX_2	MX	M_3X_2
M^{3+}	MX_3	M_2X_3	MX

A **carga total** do composto é sempre **nula**.

Compostos Iônicos

Energia de Rede

A **energia de rede** (energia **eletrostática**), isto é, a energia necessária para **separar completamente** um mol de um sal em **íons gasosos** é

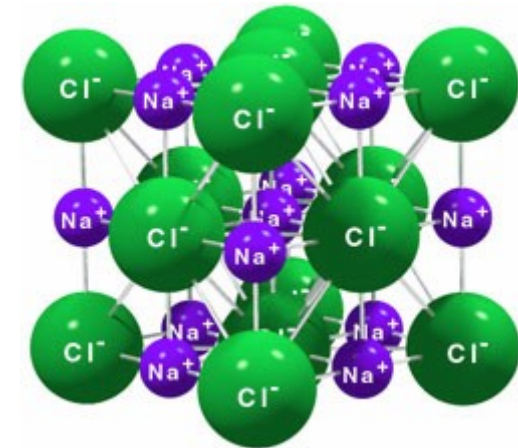
$$E_p = -A \cdot |Z_1 \cdot Z_2| \cdot N_A \cdot e^2 / 4\pi\epsilon_0 d, \text{ onde}$$

$Z_{1,2}$ = **cargas** dos dois **íons** em unidades da

carga elementar e (não são os números atômicos!),

d = **constante de rede** (aresta de uma **célula unitária**, aqui a distância entre um átomo de Na e um átomo vizinho de Cl, já que estes se “tocam”, isto corresponde a $r_{\text{cátion}} + r_{\text{ânion}}$),

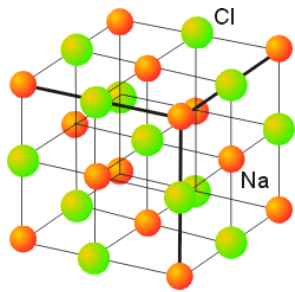
A = **constante de Madelung**, depende da estrutura cristalina (NaCl: $A = 1.748$)



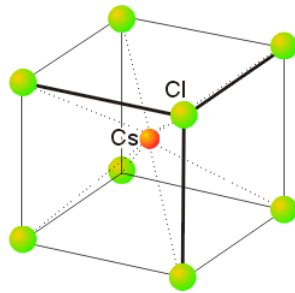
Estrutura cristalina de NaCl (sal de cozinha)

Compostos Iônicos

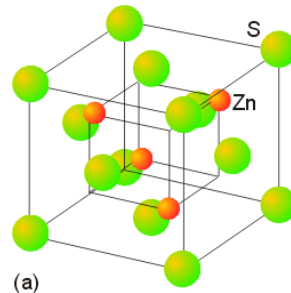
Estruturas Cristalinas de Sais



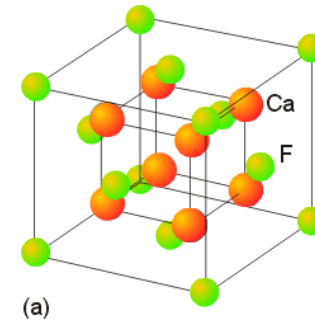
NaCl (cfc)



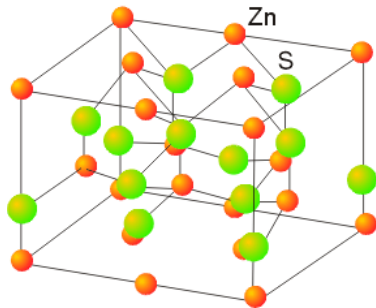
CsCl (cs)



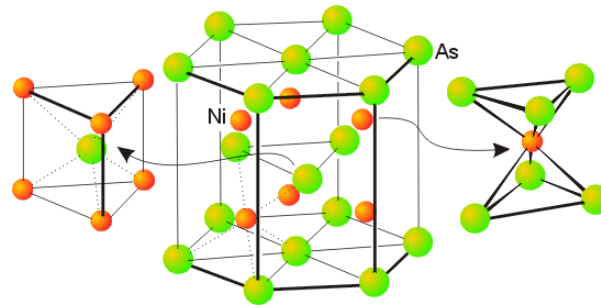
esfarelita (ZnS)



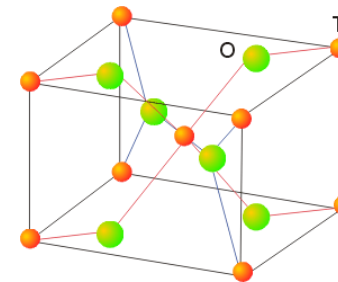
fluorita (CaF₂)



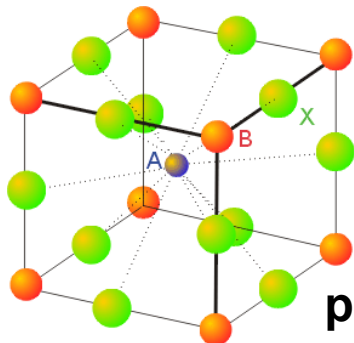
wurtzita (ZnS)



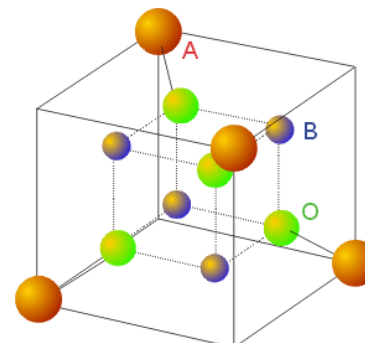
arseneto de níquel



rutilo



perovskita



espinélio, AB₂O₄

Compostos Iônicos

Energia de Rede

TABELA 8.2 Energias de rede para alguns compostos iônicos

Composto	Energia de rede (kJ/mol)	Composto	Energia de rede (kJ/mol)
LiF	1.030	MgCl ₂	2.326
LiCl	834	SrCl ₂	2.127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3.795
NaCl	788	CaO	3.414
NaBr	732	SrO	3.217
NaI	682		
KF	808	ScN	7.547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

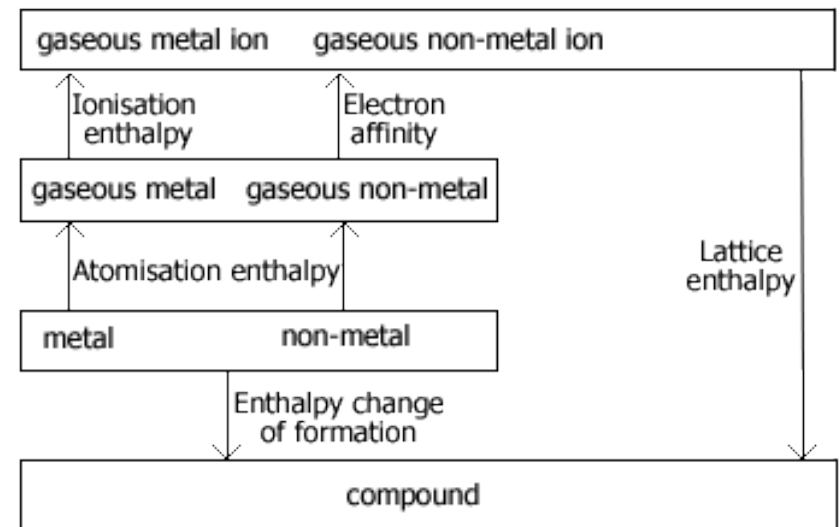
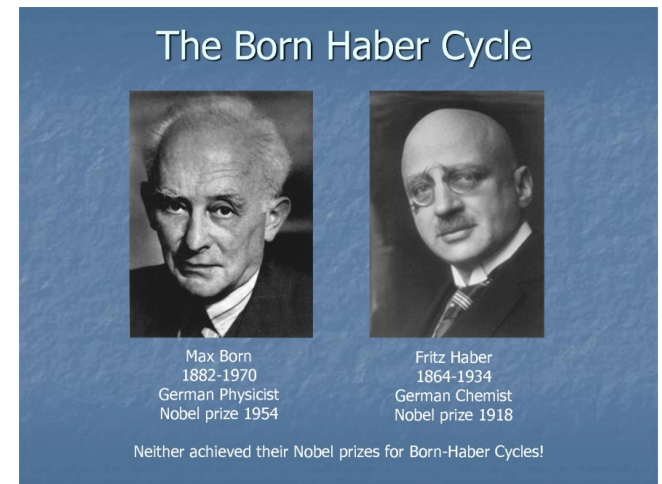
Compostos Iônicos

O Ciclo Born-Haber

Proposta para calcular a **energia liberada** (por mol) na **formação** de um **composto iônico** a partir do **metal** e do **não-metal**.

Consiste de dividir o processo em **passos simples** e **somar** as **energias** liberadas em **cada passo**:

- Passos **exotérmicos**, que **liberam energia** (esquentam o ambiente), entram com sinal **negativo** e aparecem com flecha pra **cima** no diagrama correspondente
 - Para passos **endotérmicos**, que "custam" energia, é o **oposto**.
- Se a soma **final** é **positiva**, o processo como um todo é **exotérmico**, e a formação do sal **pode** ocorrer.



Compostos Iônicos

O Ciclo Born-Haber

Tipicamente, os passos são:

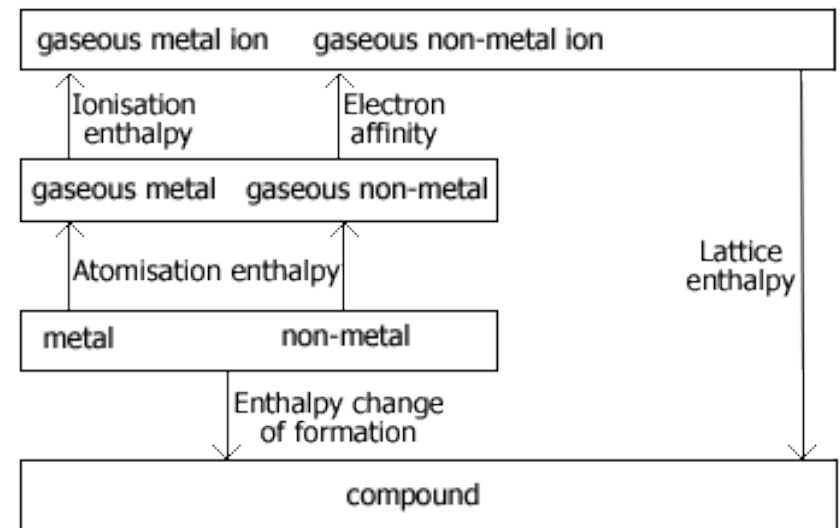
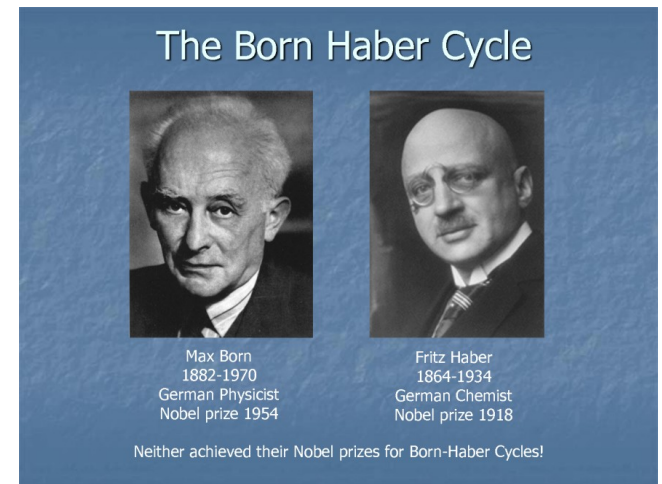
- A “**atomização**” das substâncias iniciais, i. e. a **transformação** do **estado inicial** (sólido, molecular, etc.) pro estado **atômico gasoso**, normalmente endotérmico.

- A **formação** dos **íons** a partir destes gases atômicos:

- No caso dos **metais**, a **ionização** (em geral endotérmico)

- no **não-metal**, a **captura** do(s) **elétron(s)**: É exotérmica, caso a **afinidade eletrônica** é positiva

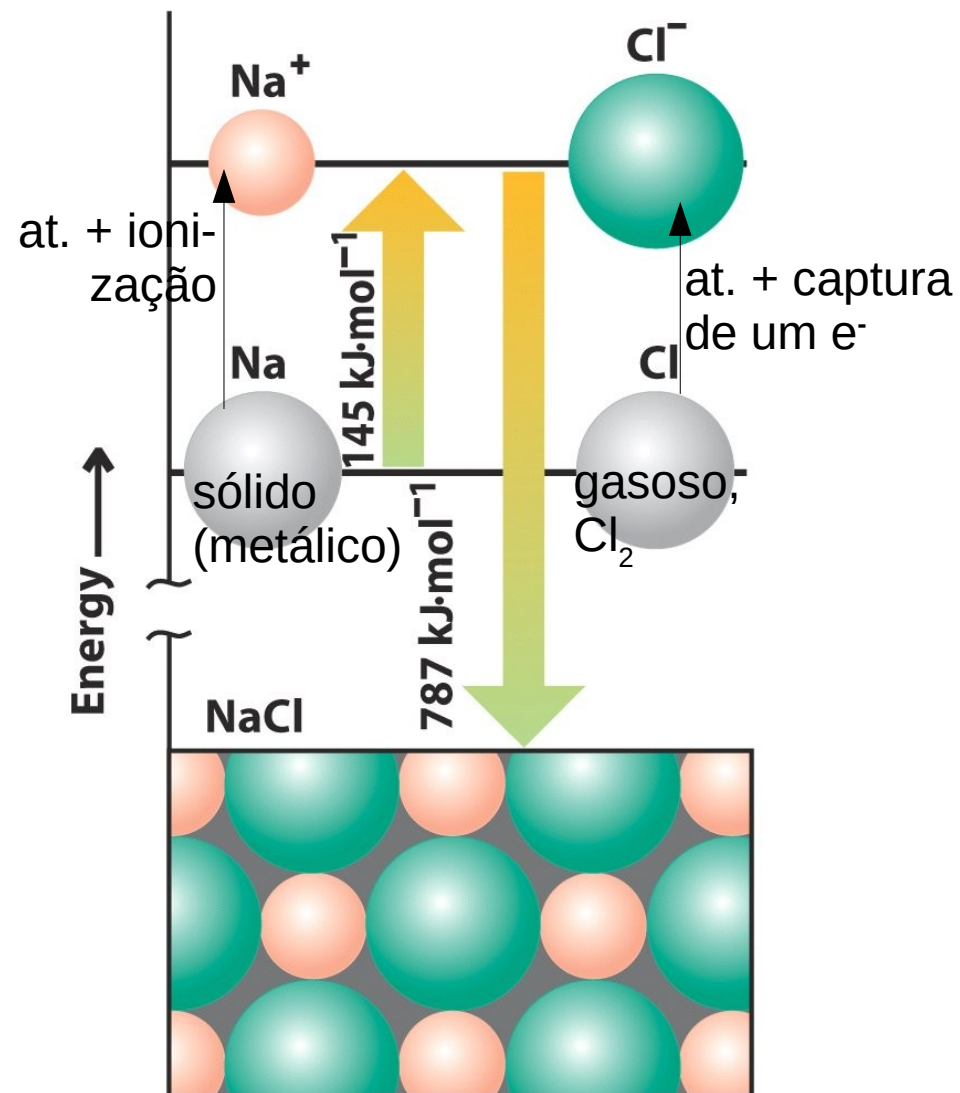
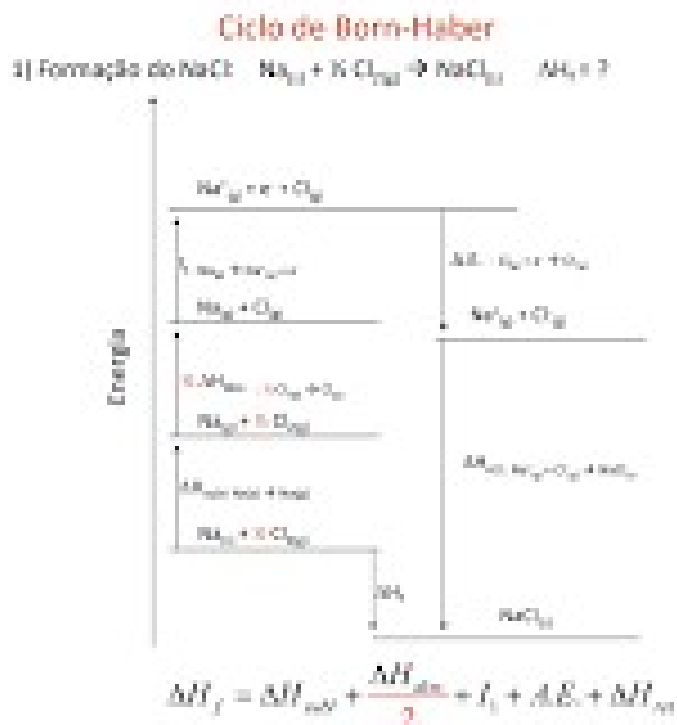
- A formação da **estrutura cristalina** a partir destes íons gasosos, nada outro que a **energia de rede** de 4 slides atrás, normalmente **exotérmica**.



Compostos Iônicos

O Ciclo Born-Haber

Exemplo: A formação de sal de cozinha (NaCl)
 (No diagrama à direita, os passos "atomização" e formação de íons são juntados em um).



Compostos Iônicos

Características dos Compostos Iônicos

- **Sólidos** a temperatura ambiente.
- Duros e Quebradiços
- Pontos de **Fusão** e **Ebulição** muito **elevados**.
- **Não conduzem corrente** elétrica no estado sólido, mas **sim**, **fundidos** ou em **solução aquosa**.
- **Solúvel** em **solventes polares**:
Melhor solvente é a **água**
(as ligações iônicas são 78 mais fracas na água, do que no vácuo ou no ar).



Compostos Metálicos

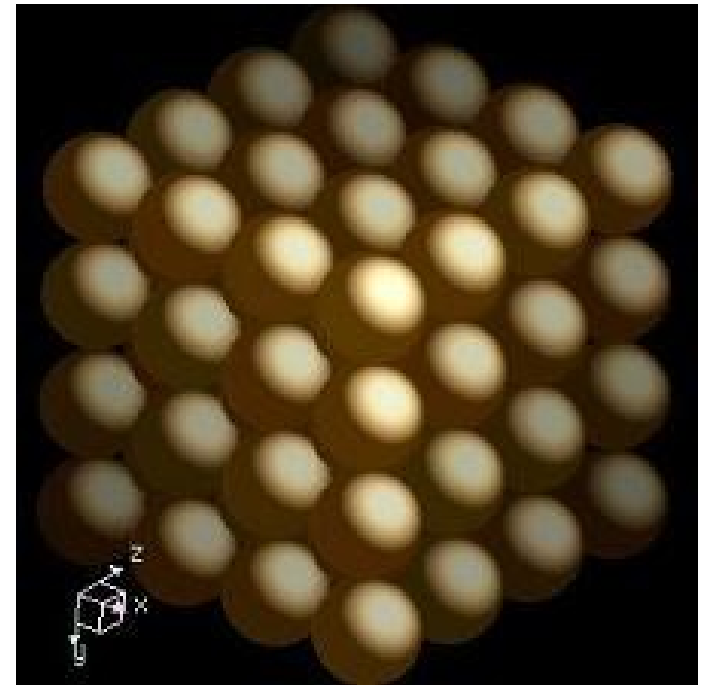
Em **metais**, os átomos têm **poucos elétrons** na camada de valência.

=> Eles facilmente **perdem** estes elétrons e se tornam **íons positivos** (cátions).

Metais consistem de **cristais**, estruturas regulares e periódicas, de **cátions**, com **elétrons** movendo-se **livremente** pelo material, como se fossem **orbitais delocalizados** pelo material inteiro.

Por isto, metais são bons **condutores de eletricidade**.

Mais sobre estruturas cristalinas de metais na disciplina Fenômenos Eletromagnéticos.



Estrutura cristalina de ferro

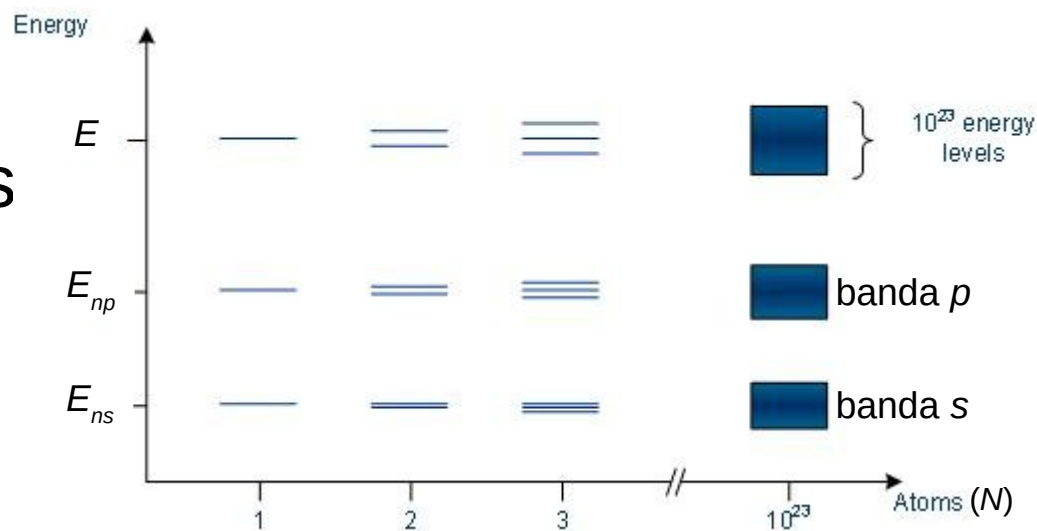
Propriedades Elétricas dos Sólidos

Na analogia de um pedaço de metal como “molécula gigante”, N orbitais atômicos formam N orbitais moleculares.

No caso de um corpo (fio) macroscópico, N é tão grande que temos espaçamento “infinitamente fino” (zero).

=> **bandas de energia**

Bandas compostas de orbitais s são chamadas bandas s , aquelas compostas de orbitais p , bandas p , etc.

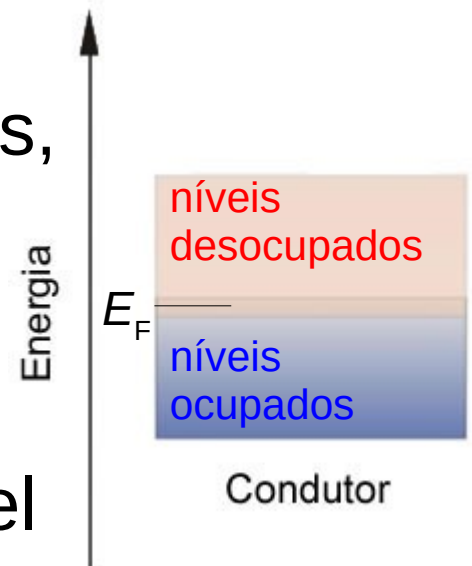


Propriedades Elétricas dos Sólidos

Em metais/**condutores**, a **banda de valência** é **parcialmente ocupada**, por ser composta por orbitais atômicos parcialmente ocupados, ou, por ser uma sobreposição de bandas.

=> Os **níveis desocupados** ficam **imediatamente** a cima dos **ocupados**, e é muito **fácil excitar** um **elétron** de um nível ocupado para um nível desocupado.

=> **elétrons** quase **livres** e **condutividade alta**



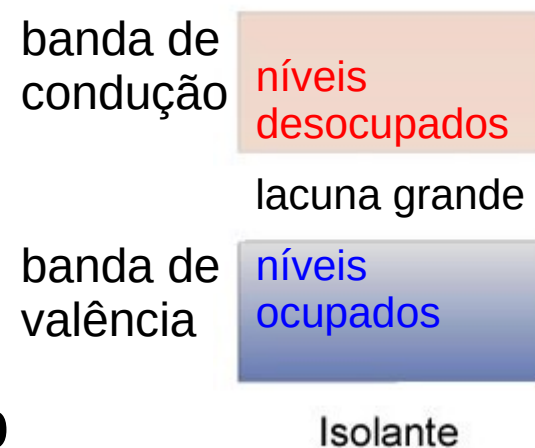
A **resistividade** se dá por **choques** com os **átomos** (cátions) da rede, que vibram mais e apresentam **seções de choque maiores** em **temperaturas altas**, o que explica o **aumento da resistividade** com a **temperatura**.

Propriedades Elétricas dos Sólidos

Em **semicondutores**, a **banda de valência** é **cheia** e a **próxima**, a **de condução**, **vazia**.

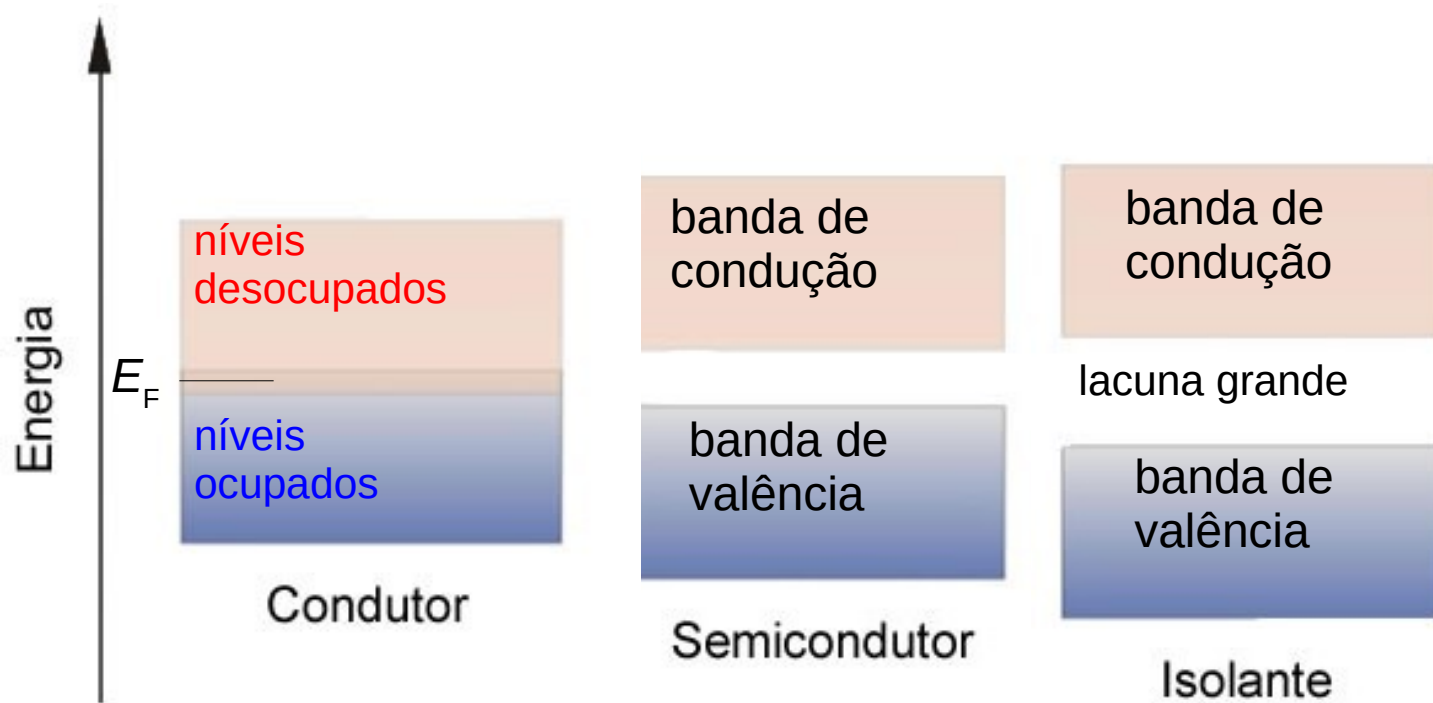
Mas se a **lacuna** (ingl. *gap*) entre as duas bandas **não** é muito **grande**, i. e. ≤ 2 eV, um número razoável de **elétrons** é **excitado** da b. d. v. pra b. d. c. em temperatura ambiente, e o material consegue **conduzir eletricidade** (embora menos bem que um condutor). Quanto **maior** é a **temperatura**, tanto **mais elétrons** são **excitados**, tanto **maior** é a **condutividade** => semicondutor
exemplos: silício, germânio

Se a **lacuna** é **grande**, **poucos elétrons** são **excitados** e temos um **isolante**.



Propriedades Elétricas dos Sólidos

Comparando as posições das bandas



Propriedades Elétricas dos Sólidos

Valores típicos de **resistividades** são

- **condutores**: $10^{-8} \Omega \cdot m$
exemplos: cobre, alumínio, prata, ouro, magnésio, níquel, ferro, ...
- **semicondutores**: 10^{-4} a $10^5 \Omega \cdot m$
exemplos: silício, carbono, germânio, arsenieto de gálio (GaAs), ...
- **isolantes**: $10^{16} \Omega \cdot m$
exemplos: vidro, cerâmico, polímeros, ...



silício



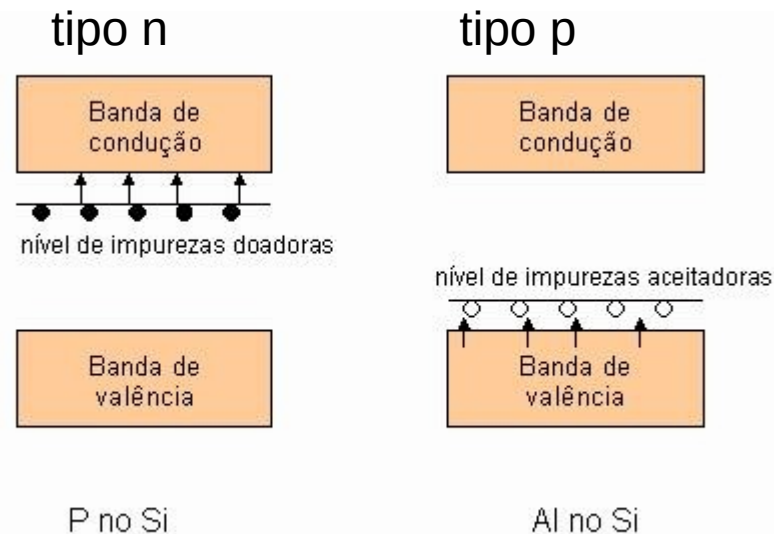
isolante de
cerâmico

Propriedades Elétricas dos Sólidos

Semicondutores Dopados

Semicondutores (p. e. Si) com ~ 1 em cada 10^9 **átomos substituídos** por um **outro elemento** que tem

- **níveis** (parcialmente) **desocupados pouco a cima** da **banda de valência** (tipo p) ou
- **níveis** (parcialmente) **ocupados pouco a baixo** da **banda de condução** (tipo n).

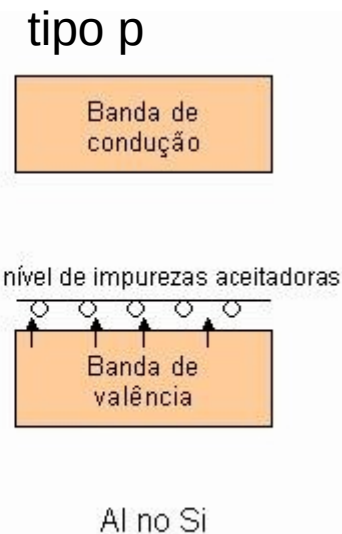


Propriedades Elétricas dos Sólidos

Semicondutores Dopados

Semicondução tipo p

Os **átomos dopantes** têm **níveis desocupados** **perto** das energias da **banda de valência** do semicondutor, às vezes chamados **banda de aceitação** ou **receptora**, que podem **fácilmente tirar elétrons** desta banda, assim deixando **buracos** nela, que se comportam como **cargas positivas** ($p = \text{positivo}$) **livres**, **aumentando** a **condutividade**.

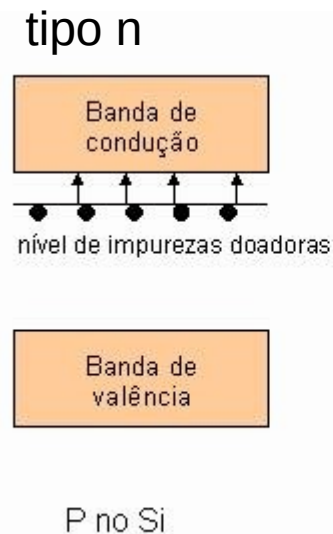


Propriedades Elétricas dos Sólidos

Semicondutores Dopados

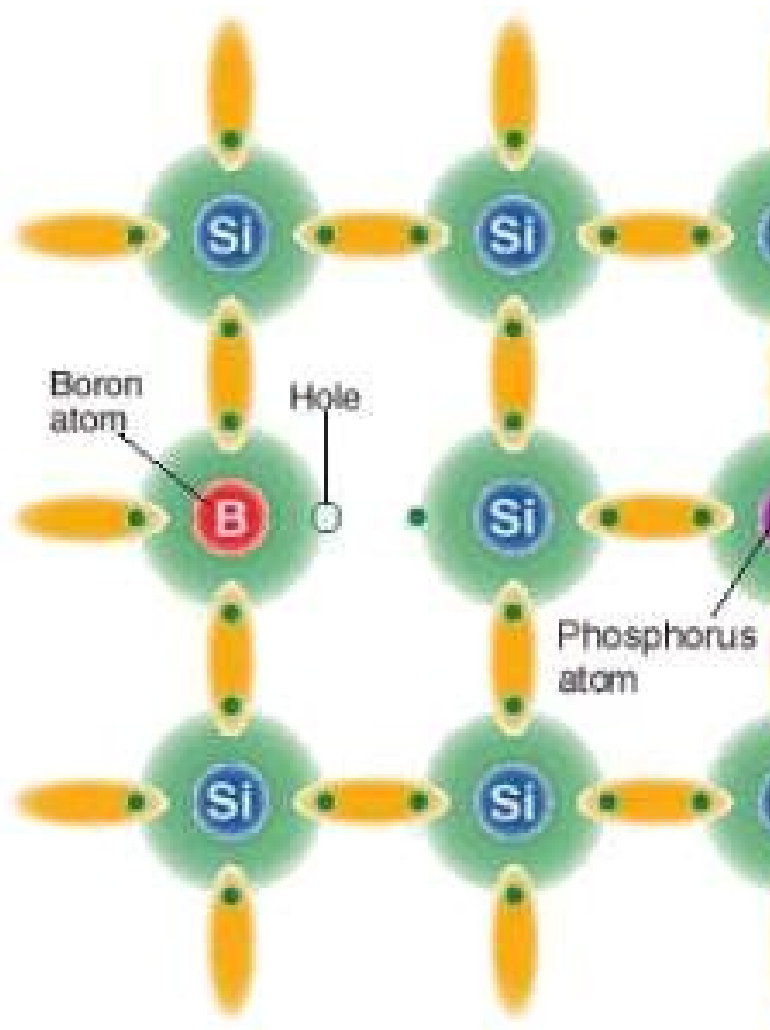
Semicondução tipo n

Os **átomos dopantes** têm **níveis ocupados** **perto** das energias da **banda de condução** do semicondutor, às vezes chamados **banda doadora**, e podem **fácilmente doar elétrons** para esta banda, que assim se tornam **cargas negativas** (n = negativo) **livres**, também **aumentando a condutividade**.

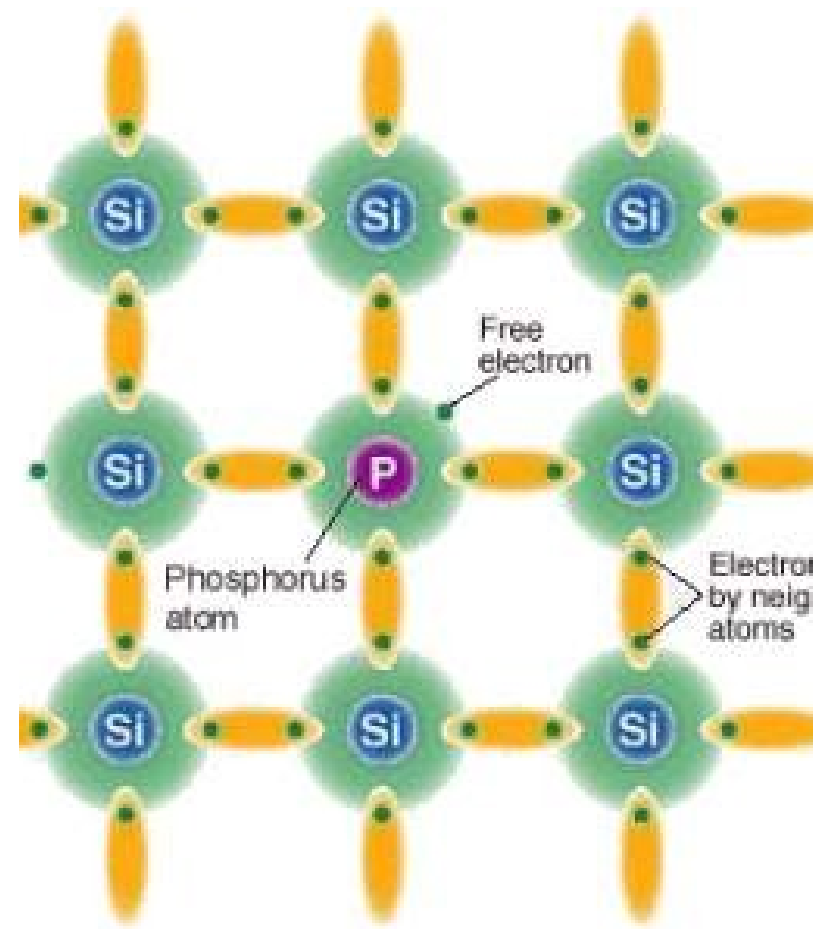


Propriedades Elétricas dos Sólidos

Semicondutores Dopados tipo p



tipo n



Sólidos Covalentes

Enquanto em **metais** e **sais**, as **interações** entre os átomos (íon-íon) dependem apenas das **distâncias interatômicas**, isto é, **não** são **direcionadas**, em **sólidos covalentes** as **ligações** são de natureza **covalente** (=> teoria das moléculas) e, então, **direcionados**, o que determina a **estrutura**.

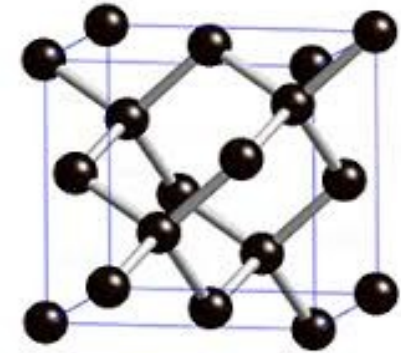
Sólidos Covalentes

Exemplos: Carbono

- **diamante**: átomos de C **hibridizados sp^3**
(=> aula anterior)
=> estrutura **tetraédrica**



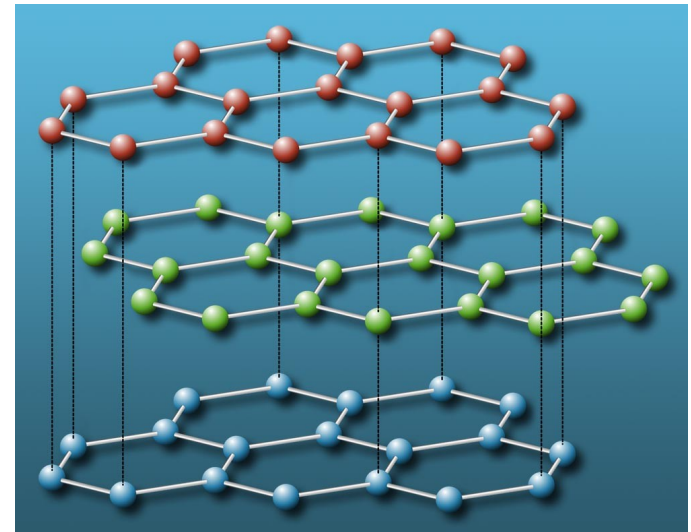
diamante



Sólidos Covalentes

Exemplos: Carbono

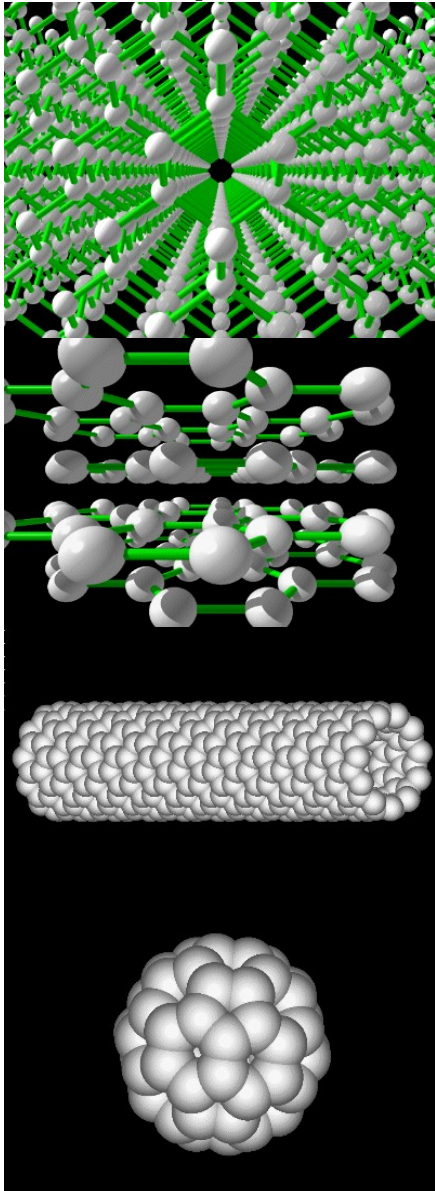
- **grafite**: C hibridizados sp^2
=> **camadas** com **estruturas hexagonais**,
que podem facilmente
deslizar uma sobre a outra
=> bom lubrificante



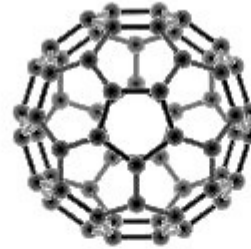
grafite

Sólidos Covalentes

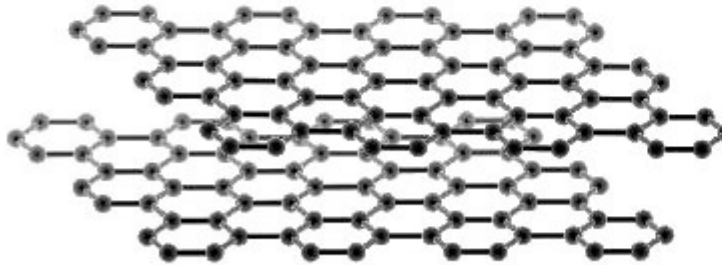
Exemplos: Carbono Outras formas



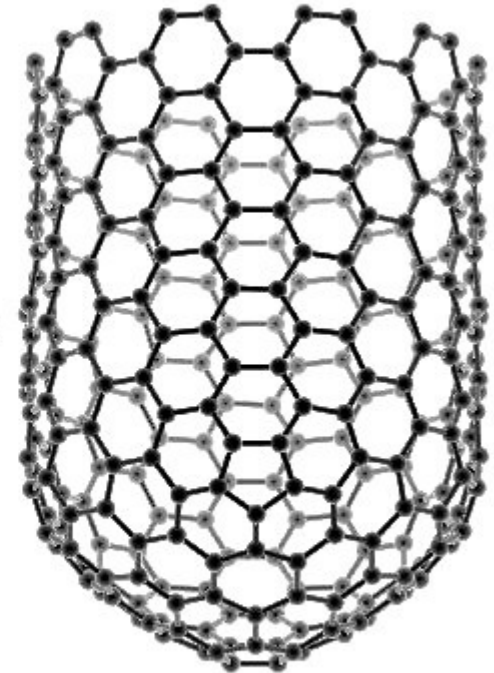
diamond



C_{60}
"buckminsterfullerene"
Fulerenos



graphite



(10,10) tube
Nanotubos

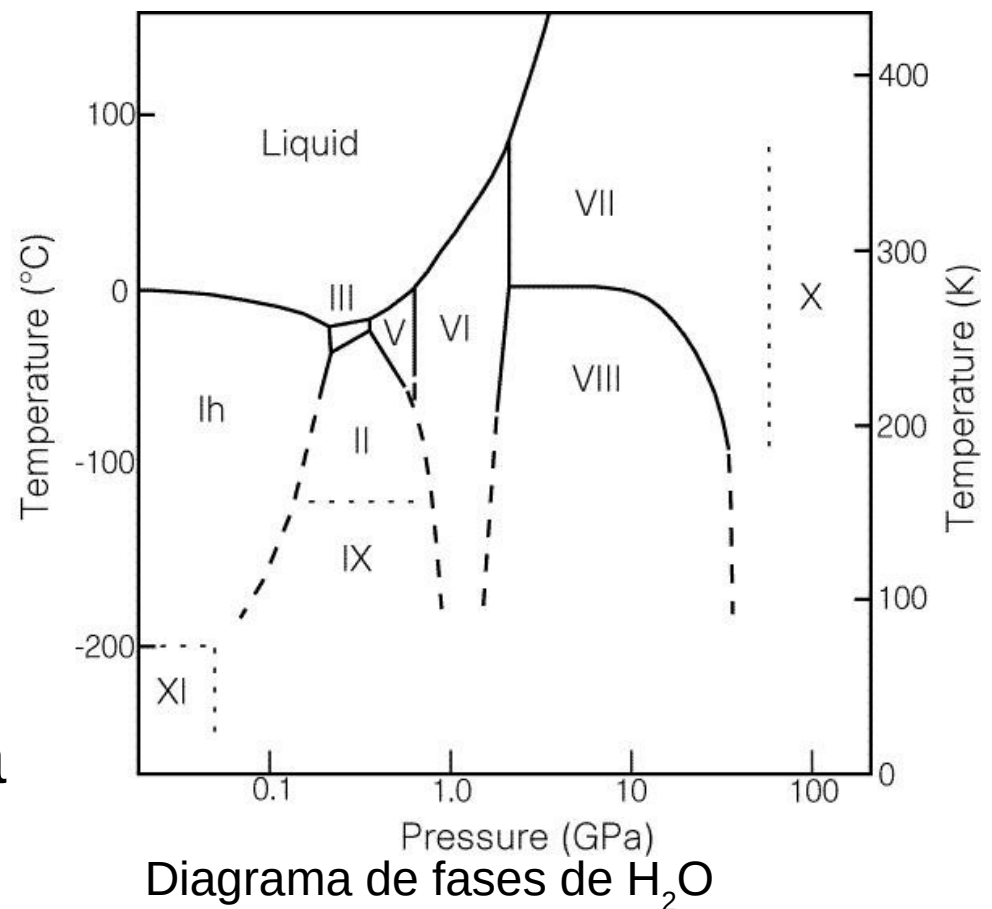
Sólidos Moleculares

Consistem de **moléculas** ligadas por **forças Van der Waals** e/ou **pontes de hidrogênio**.

As **estruturas** dependem das **formas** das **moléculas**, são difíceis de prever e podem variar com a temperatura e a pressão.

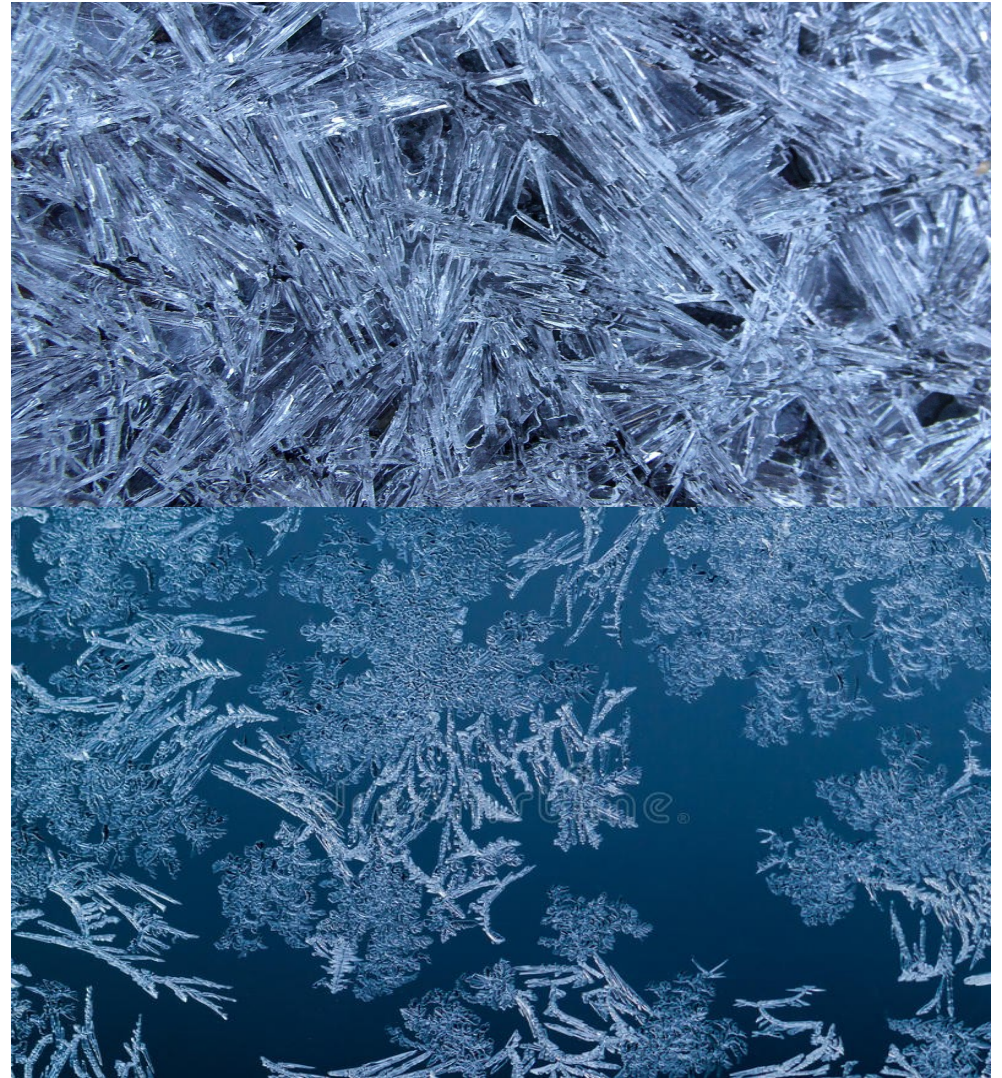
Exemplo: gelo:

Existem 17 fases cristalinas conhecidas, e gelo também pode aparecer com estrutura amorfa.



Sólidos Moleculares

Duas das fases cristalinas de gelo



Sólidos Moleculares

Características

- **Sólidos**, **líquidos** ou **gasosos** a temperatura ambiente.
- Ponto de **Fusão** e **Ebulição inferiores** aos dos compostos **iônicos**.
- Bons **isolantes**: térmico e elétrico, **exceto** quando sofrem **ionização**, por ex. H₂O.
- Na maioria são **solúveis** em solvente **orgânico**.

Sólidos: Tipos Cristalinos

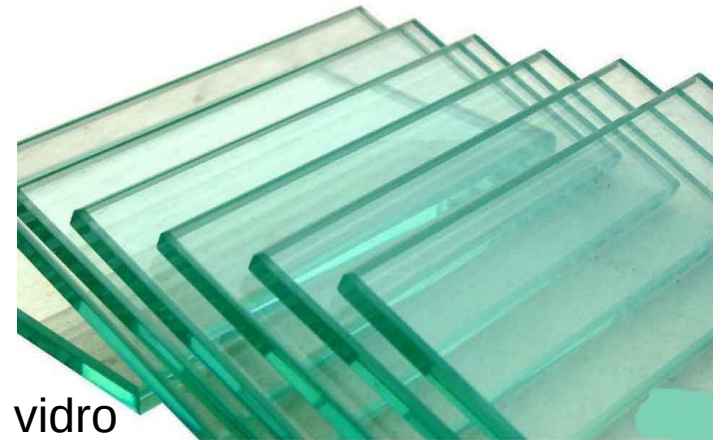
Formas Intermediárias

Existem **formas transitórias** entre os tipos de sólidos cristalinos, por exemplo entre metálico e covalente, entre iônico e covalente, etc.

Sólidos: Tipos Não-Cristalinos

Vidros

São sólidos **amorfos**, sem estrutura regular/cristalina, como a estrutura de um líquido “congelado”.



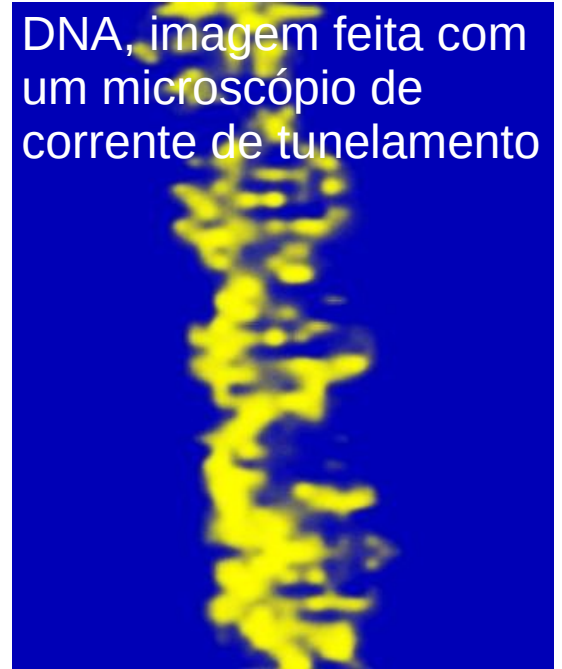
vidro

Sólidos: Tipos Não-Cristalinos

Polímeros Orgânicos

São **macromoléculas** formadas a partir de 1000 a 150 000 **unidades** estruturais **menores**, os **monômeros**, em geral do tipo cadeias de carbono, anéis aromáticos, etc., por exemplo DNA. Eles são **maus condutores (isolantes)**.

DNA, imagem feita com um microscópio de corrente de tunelamento



Sólidos: Tipos Não-Cristalinos

Polímeros Orgânicos: O DNA

Ácido DesoxirriboNucleico

Estudos de Chargaff:

- Conteúdo de adenina é igual ao de timina
- Conteúdo de citosina é igual ao de guanina

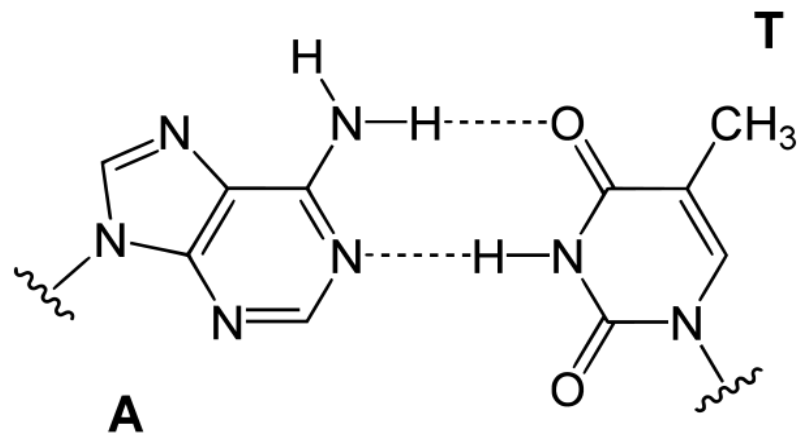
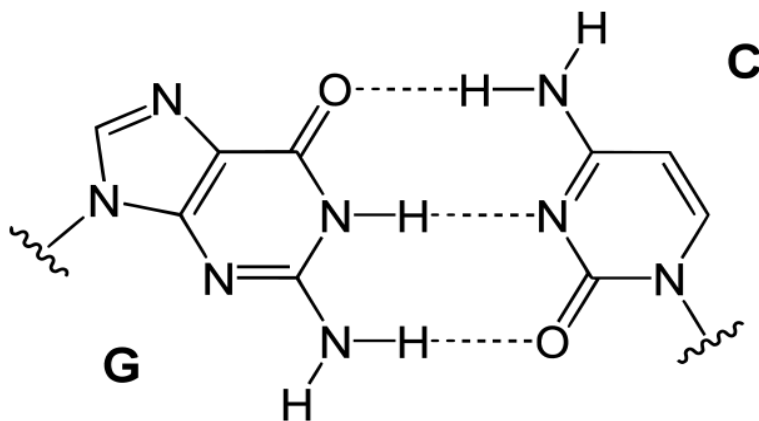
Estudos por Raios X:

- DNA como sendo uma **molécula longa e fina**
- Possui **dois filamentos** associados entre si
- Molécula **helicoidal**.



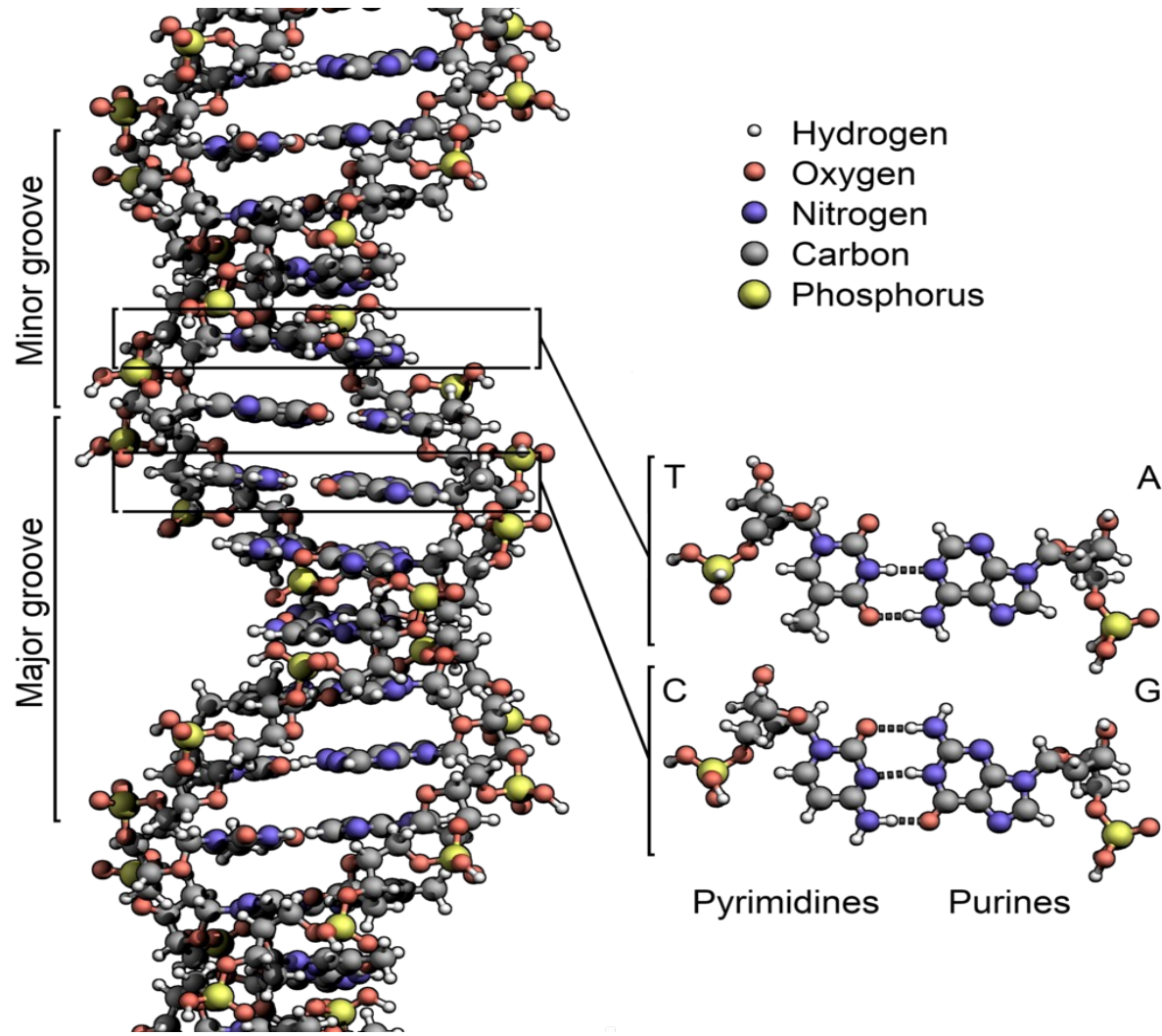
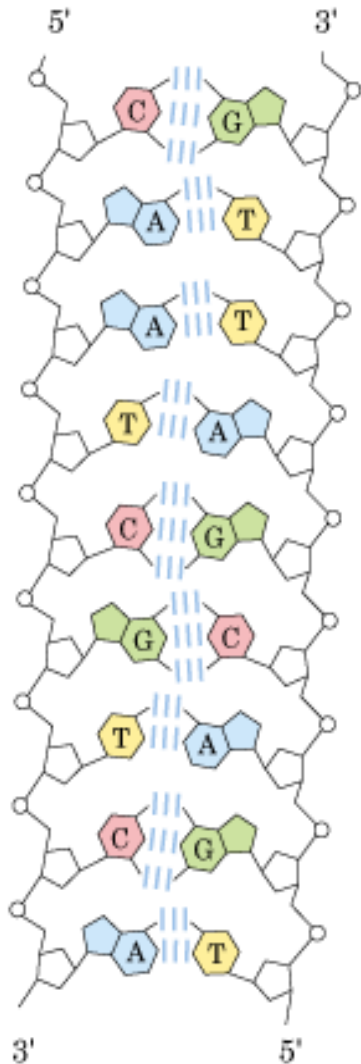
James Watson & Francis Crick (1953)

Formação de **Pontes de hidrogênio** entre as Bases Nucleotídicas



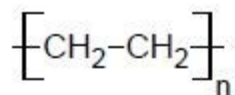
Sólidos: Tipos Não-Cristalinos

Polímeros Orgânicos: O DNA

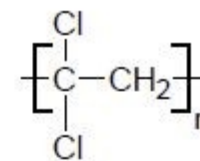


Sólidos: Tipos Não-Cristalinos

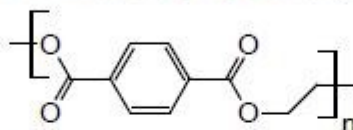
Polímeros Orgânicos



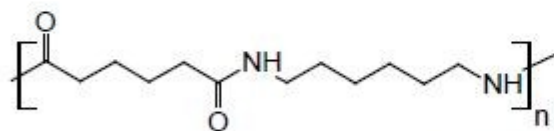
Poli(etileno) (PE)



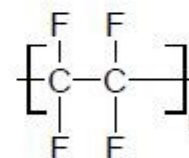
Poli(cloreto de vinila) (PVC)



Poli(tereftalato de etileno) (PET)

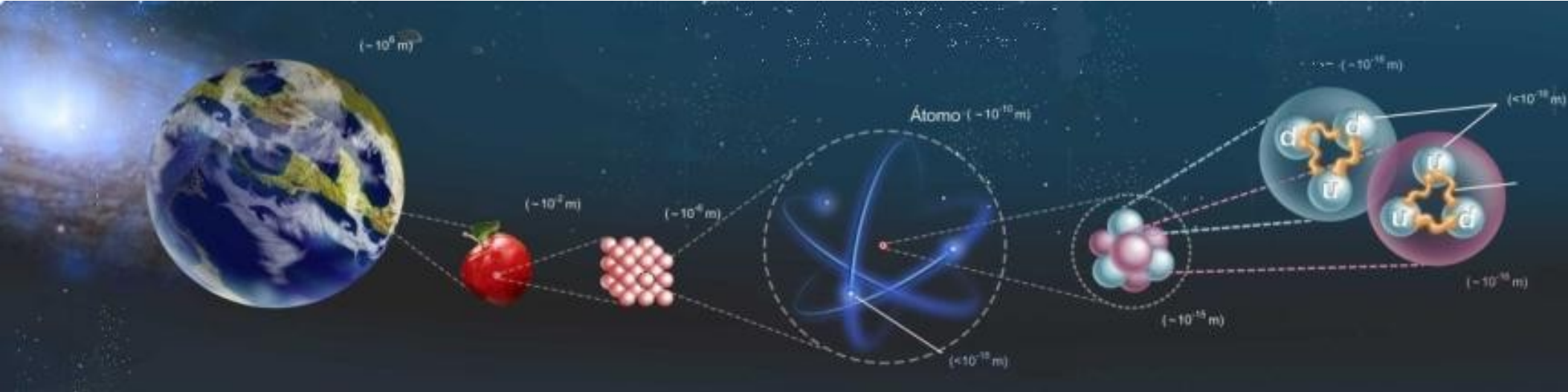


Nylon 66



Poli(tetrafluoretileno) (PTFE)





Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

FIM pra hoje

<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Estrutura.html>