

## Mais Fórmulas Gerais

Transformações coordenadas cartesianas  $\Leftrightarrow$  coordenadas esféricas

$$\begin{aligned}r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} & x &= r \cdot \cos \theta \cdot \cos \phi \\ \theta &= \cos^{-1} \frac{z}{r} = \cos^{-1} \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} & y &= r \cdot \cos \theta \cdot \sin \phi \\ \phi &= \tan^{-1} \frac{y}{x} & z &= r \cdot \sin \theta\end{aligned}$$

Lei de Bragg:  $2d \cdot \sin \theta = n\lambda$

Relações de de Broglie:  $\nu = \frac{E}{h}$ ,  $\lambda = \frac{h}{p}$

Princípios de indeterminação de Heisenberg:  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ ,  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

onde  $\Delta x/p/E/t =$  Indeterminação na/no posição/momento linear/energia/tempo

Densidade da probabilidade de estadia de uma partícula entre  $x$  e  $x + dx$  descrita pela

função de onda  $\psi(x)$ :  $P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx = \psi(x)^* \psi(x) dx$

Condição de normalização:  $\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \psi(x) dx = 1$

Equação de Schrödinger independente do tempo:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$

Números mágicos no modelo nuclear de camadas: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126

possíveis números mágicos adicionais: 16 e/ou 40

## Átomo de Bohr

Fórmula de Rydberg:  $\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ , ( $n_2 > n_1$ ),  $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

Força de Coulomb núcleo-elétron:  $F_e = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

Momento angular da  $n$ -ésima órbita:  $L_n = n \cdot \hbar$

Raio da  $n$ -ésima órbita:  $r_n = \frac{n^2}{Z} \cdot a_0$

Energia da  $n$ -ésima órbita:  $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0$

vale  $E_0 = hcR_H$

Para elétrons internos em átomos pesados:  $Z \rightarrow Z - b$

(camada K:  $b = 1$ , camada L:  $b = 7.4$ )

## Átomo de Hidrogênio

Potencial:  $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Funções de onda:  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \phi)$

Relações entre os números quânticos:  $n = 1, 2, \dots$ ;

$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ;  $m_l = -l, -(l - 1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$

Código para camadas com  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ : K, L, M, N, ...

Código para subcamadas com  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ : s, p, d, f, g, h, ...

Níveis de energia:  $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0$

Distâncias médias do núcleo:  $\langle r_n \rangle \approx \frac{n^2}{Z} \cdot a_0$

Momento angular orbital:  $L = \sqrt{l(l + 1)} \cdot \hbar$

Componente  $z$  do momento angular orbital:  $L_z = m_l \cdot \hbar$

Spin do elétron:  $m_s = \pm \frac{1}{2}$

Regras de seleção:  $\Delta n$  livre;  $\Delta l = \pm 1$ ;  $\Delta m_l = 0$  ou  $\pm 1$

Ordem (energia crescente) dos orbitais atômicos em átomos com mais de um elétron:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

## Moléculas

Carga formal:  $f = V - L - \frac{1}{2} \cdot P$ , onde  $V$  = no. de elétrons de valência,

$L$  = no. de  $e^-$  em pares isolados,  $P$  = no. de  $e^-$  compartilhados

Hibridizações dos orbitais do nível 2 do átomo de carbono:

$$sp: h_1 = s + p_z, h_2 = s - p_z$$

$$sp^2: h_1 = s + \sqrt{2}p_y, h_2 = s + \sqrt{\frac{3}{2}}p_x - \sqrt{\frac{1}{2}}p_y, h_3 = s - \sqrt{\frac{3}{2}}p_x - \sqrt{\frac{1}{2}}p_y$$

$$sp^3: h_1 = s + p_x + p_y + p_z, h_2 = s - p_x - p_y + p_z, h_3 = s - p_x + p_y - p_z, h_4 = s + p_x - p_y - p_z$$

Ordem (energia crescente) dos orbitais moleculares (mol. diatômicos homonucleares):

$$\text{Li}_2\text{-N}_2 (Z = 3, \dots, 7): 1\sigma = \sigma_{2s}, 2\sigma = \sigma_{2s}^*, 1\pi = \pi_{2p}, 3\sigma = \sigma_{2p}, 2\pi = \pi_{2p}^*, 4\sigma = \sigma_{2p}^*$$

$$\text{O}_2\text{-"Ne}_2" (Z = 8, 9, 10): 1\sigma = \sigma_{2s}, 2\sigma = \sigma_{2s}^*, 3\sigma = \sigma_{2p}, 1\pi = \pi_{2p}, 2\pi = \pi_{2p}^*, 4\sigma = \sigma_{2p}^*$$

Ordem de ligação:  $b = \frac{1}{2}(n - n^*)$ ,

onde  $n$  = no. de  $e^-$  em orbitais ligantes,  $n^*$  = no. de  $e^-$  em orbitais antiligantes

Espectroscopia de fotoelétrons:  $I_i = -\varepsilon_i = E_\nu - E_{\text{cin},e^-} = h\nu - \frac{m_e v^2}{2} = h\nu - \frac{reE}{2}$ ,

onde  $I_i$  = energia de ionização de um  $e^-$  no orbital  $i$ ,  $\varepsilon_i$  = energia de um  $e^-$  no

orbital  $i$ ,  $\nu$  = frequência do fóton incidente,  $E_{\text{cin},e^-}$  = energia cinética do  $e^-$  ejetado

## Interações Intermoleculares

Momento dipolo para partículas neutras:  $\vec{\mu} = \delta_+ \vec{l} = |\delta_-| \vec{l}$ ,

Unidade frequentemente usada: Debye:  $1 \text{ D} = 3.335640952 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$

Momento dipolo em função da diferença de eletronegatividades de Pauling:  $\mu[D] \approx \Delta\chi_P$

$\Delta\chi_P > 1$ : polar,  $\Delta\chi_P > 1.7$ : iônico

Intensidades das interações intra- e intermoleculares:

ligações iônicas: 625-1550 kJ/mol, ligações covalentes: 520-1250 kJ/mol,

ligações metálicas: 100-800 kJ/mol;

íon-íon: 250 kJ/mol, ligações de hidrogênio: 20 kJ/mol,

íon-dipolo: 15 kJ/mol, dipolo-dipolo estacionários: 2 kJ/mol,

dipolo-dipolo induzidos: 2 kJ/mol, dipolo-dipolo com rotação livre: 0.6 kJ/mol.

Energia de rede de um mol de um sal:  $E_p = -A \cdot \frac{|Z_1 Z_2| N_A e^2}{4\pi\epsilon_0 d}$ ,

onde  $Z_{1,2}$  = cargas dos íons (em  $e$ ),  $d = r_{\text{cation}} + r_{\text{anion}}$ ,

$A$  = constante de Madelung (da ordem de 1.7)