

Interações Moleculares

Multipolos (n -polos):

Momento monopolo ($n = 1$): carga total q

Momento dipolo ($n = 2$) para partículas neutras: $\vec{\mu} = \delta_+ \vec{l} = |\delta_-| \vec{l}$,

onde \vec{l} = vetor entre os centros de distribuição das cargas negativa e positiva

Alinhamento médio de dipolos $\vec{\mu}$ (rot. livre) com um campo elétrico \vec{E} : $\langle \mu_{\parallel} \rangle = \frac{\mu^2 E}{3k_B T}$

Momento dipolo total: $\vec{\mu} = \vec{\mu}_0 + \vec{\mu}^*$, onde $\vec{\mu}_0$ = m. d. permanente, $\vec{\mu}^*$ = m. d. induzido

Momento dipolo induzido: $\vec{\mu}^* = \alpha \vec{E}$, α = polarizabilidade do material,

\vec{E} = campo elétrico externo

Volume de polarizabilidade: $\alpha' = \frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0}$

Potencial elétrico de um monopolo: $V = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r}$

de um dipolo: $V = \frac{\cos\theta \cdot \mu}{4\pi\epsilon_0 r^2}$, θ = ângulo entre $\vec{\mu}$ e \vec{r}

de um n -polo: $V \propto \frac{1}{r^n}$

Energia potencial da interação entre 2 íons (monopolos): $U = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$

íon - dipolo estacionário: $U = \frac{\cos\theta \cdot \mu_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

2 dipolos estacionários paralelos: $U = \frac{(1-3\cos^2\theta) \cdot \mu_1 \mu_2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$

2 n -polos estacionários: $U \propto \frac{1}{r^{n_1+n_2-1}} \Rightarrow F \propto \frac{1}{r^{n_1+n_2}}$

íon - dipolo induzido: $U = -\frac{\alpha q_1^2}{16\pi^2 \epsilon_0^2 r^4} \Rightarrow F \propto \frac{1}{r^5}$

íon - dipolo com rotação livre: $U \propto -\frac{1}{r^4} \Rightarrow F \propto \frac{1}{r^5}$

dipolo - dipolo induzido, 2 dipolos com rotação livre (interação Keesom),

2 dipolos induzidos (forças de dispersão de London): $U \propto -\frac{1}{r^6} \Rightarrow F \propto \frac{1}{r^7}$

\Rightarrow Forças van der Waals

Intensidades: 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.

Permissividade elétrica num dielétrico (constante dielétrica κ_e): $\epsilon = \kappa_e \epsilon_0$

Potencial de Lennard-Jones: $V_{LJ} = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\} = \epsilon \left\{ \left(\frac{r^*}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r^*}{r} \right)^6 \right\}$

Potencial de Mie: $V = \frac{C_n}{r^n} - \frac{C_m}{r^m}$

Líquidos

Tensão superficial: $dA = \gamma d\sigma$, dA = trabalho necessária para mudar a superfície por $d\sigma$,

γ = (coeficiente da) tensão superficial

Equação de Laplace (superfície curvada): $P_{dentro} = P_{fora} + \frac{2\gamma}{r}$, onde

$P_{dentro/fora}$ = pressão dentro/fora da superfície curvada, r = raio de curvatura

Força capilar: $\frac{2\gamma}{r} = \rho gh$, ρ = densidade do líquido, h = altura da coluna de líquido

Corrente: $\vec{p} = m\vec{v}$, onde m , \vec{v} : massa, velocidade do fluido em movimento

Fluxo na direção z de momento linear $p_x = mv_x$: $J_z(p_x) = \frac{dp_x}{dA \cdot dt} (dA \perp z)$

Viscosidade: $J_z(p_x) = -\eta \frac{dv_x}{dz}$, onde η = (coeficiente da) viscosidade

Gases perfeitos: $\eta \propto \sqrt{T}$

Líquidos: $\eta \propto e^{\frac{E_a}{RT}}$, onde E_a = energia de ativação

Função distribuição radial: $g(r) = \frac{\text{no. partículas entre distancias } r \text{ e } r+dr}{4\pi r^2 \rho dr}$, onde $\rho = \frac{N}{V}$

Em distâncias pequenas: $g(r) = e^{-V(r)/k_B T}$

Sólidos

Fator de empacotamento: $\frac{\text{volume dos átomos/esferas}}{\text{volume total}}$

Metais: Número de coordenação n : número de vizinhos mais próximos de cada átomo

Estruturas hcp e ccp/fcc: f. d. e. = 0,74, $n = 12$

Estrutura cúbico I ou bcc: f. d. e. = 0,68, $n = 8$

Sólidos iônicos (sais): Razão de raios dos íons: $\gamma = \frac{r_{\text{menor}}}{r_{\text{maior}}}$

Coordenação: (n_+, n_-) , onde $n_{+/-}$ = número de vizinhos mais próximos de carga oposta de cada cátion/ânion

Energia reticular: $E = -E_p = A \cdot \frac{|Z_1 Z_2| N_A e^2}{4\pi\epsilon_0 d}$, onde $Z_{1,2}$ = cargas dos íons (em e),
 $d = r_{\text{cation}} + r_{\text{anion}}$, A = constante de Madelung

Estrutura de cério-clorídio: $\gamma > \sqrt{3} - 1 = 0.732$, coord. = (8, 8), $A = 1.763$

Estrutura de sal de cozinha: $\sqrt{2} - 1 < \gamma < \sqrt{3} - 1$, (6, 6), $A = 1.748$

Estrutura de blenda (esfalerita), $\gamma < \sqrt{2} - 1$, (4, 4), $A = 1.638$

Distância origem - plano (hkl), resp., entre os planos da família $\{hkl\}$ ($\vec{a} \perp \vec{b} \perp \vec{c} \perp \vec{a}$)

($\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$: arestas da célula unitária, h, k, l : índices de Miller): $d_{hkl} = \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{-1/2}$

Em uma estrutura cúbica (aresta a): $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

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

Distribuição de Fermi-Dirac: $P = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$, onde $\mu = E_F$ = potencial químico

Distribuição de Boltzman: $P = e^{-\frac{E-\mu}{k_B T}}$

Ganho de um transistor: $\beta = \frac{i_C}{i_B} = \frac{V_{EC}}{V_{EB}}$, i_B = corrente do emissor, i_C = corrente do coletor, V_{EB} = diff. pot. emissor-base, V_{EC} = diff. pot. emissor-coletor

cor de um semiconductor: luz absorvida a partir de $\nu_{\min} = \frac{E_g}{h}$

Tensão mecânica em corpos rígidos: $\frac{F}{A}$, onde F = força uniaxial/transversal/
hidrostática (pressão), A = área de atuação da força

Deformação: $\frac{\Delta l}{l_0}$ ou $\frac{\Delta x}{h}$ ou $\frac{\Delta V}{V}$

Deformação uniaxial: Módulo de Young: $E = \frac{F/A}{\Delta l/l_0}$

transversal: Módulo de cisalhamento: $G = \frac{F/A}{\Delta x/h}$

hidrostática: Módulo de compressibilidade: $K = \frac{F/A}{\Delta V/V} = \frac{P}{\Delta V/V}$

Razão de Poisson: $\nu_P = \frac{\text{deformacao transversal}}{\text{deformacao uniaxial}} \Rightarrow G = \frac{E}{2(1+\nu_P)}$, $K = \frac{E}{3(1-2\nu_P)}$

Campo magnético dentro de um sólido: $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0(1 + \chi)\vec{H}$, onde

\vec{H} = campo externo, $\vec{M} = \chi\vec{H}$ = magnetização/momento induzido,

$\chi = \mathcal{N}\mu_0\left(\xi + \frac{\mu^2}{3k_B T}\right)$ = susceptibilidade magnética por volume, $\mathcal{N} = \frac{N}{V} = \frac{N_A}{V_m}$,

ξ = magnetizabilidade, μ = momento dipolo magnético permanente das moléculas

Susceptibilidade magnética molar: $\chi_m = \chi V_m$

Lei de Curie: $\chi_m = A + \frac{C}{T} = N_A \mu_0 \left(\xi + \frac{\mu^2}{3k_B T}\right)$