

## Moléculas diatômicas heteronucleares

Eletronegatividade de Pauling:  $|\chi_{P,A} - \chi_{P,B}| = 0.102\sqrt{\{D(A-B) - 0.5[D(A-A) + D(B-B)]\}}$ ,

onde  $D(X-Y)$ =energia de dissociação de uma ligação X-Y

Eletronegatividade de Mulliken:  $\chi_M = \frac{1}{2}(I + E_{ea})$ ,

onde  $I$  = energia de ionização,  $E_{ea}$  = afinidade eletrônica

Conversão entre as duas eletronegatividades:  $\chi_P \simeq 1.35 \cdot \sqrt{\chi_M} - 1.37$

## Interações Moleculares

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

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

$\vec{E}$  = campo elétrico externo

Volume de polarizabilidade:  $\alpha' = \frac{\alpha}{4\pi\varepsilon_0}$

Potencial elétrico de um monopolo:  $V = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r}$

de um dipolo:  $V = \frac{\cos\theta \cdot \mu}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$ ,  $\theta$  = 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):  $V = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

íon - dipolo estacionário:  $V = \frac{\cos\theta \cdot \mu_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$

2 dipolos estacionários paralelos:  $V = \frac{(1-3\cos^2\theta) \cdot \mu_1 \mu_2}{4\pi\varepsilon_0 r^3}$

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

íon - dipolo induzido:  $V = -\frac{\alpha q_1^2}{16\pi^2\varepsilon_0^2 r^4} \Rightarrow F \propto \frac{1}{r^5}$

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

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

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

$\Rightarrow$  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.

## Líquidos

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

$\gamma$  = (coeficiente da) tensão superficial

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

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

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

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  $\eta$  = (coeficiente da) viscosidade

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

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

## Sólidos

Fator de empacotamento:  $V_{\text{atomos/esferas}}/V_{\text{tot}}$

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 (saís): 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 célio-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),  $A = 1.638$

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

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

Ganho de um transistor:  $\beta = \frac{i_C}{i_B}$ ,  $i_B$  = corrente do emissor,  $i_C$  = corrente do coletor

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,

$\chi = \mathcal{N}\mu_0(\xi + \frac{m^2}{3kT})$  = susceptibilidade magnética por volume,  $\mathcal{N} = \frac{N}{V} = \frac{N_A}{V_m}$ ,

$\xi$  = magnetizabilidade,  $m$  = momento dipolo magnético das moléculas

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

Lei de Curie:  $\chi_m = A + \frac{C}{T} = N_A \mu_0 (\xi + \frac{m^2}{3kT})$