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 média de dipolos $\vec{\mu}$ (rot. livre) com um campo elétrico $\vec{E}$: $< \mu_{\|} >= \frac{\mu^2 E}{3kT}$
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: $\alpha' = \frac{\alpha}{4\pi\varepsilon_0}$
Potencial elétrico de um monopolo: $V = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r}$
de um dipolo: $V = \frac{\cos\theta\cdot\mu}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$, 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): $V = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$
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 disperção 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 necessária para mudar a superfície por $d\sigma$,
γ = (coeficiente da) tensão superficial
Equação de Laplace (superfície curvada): $p_{\text{dentro}} = p_{\text{fora}} + \frac{2\gamma}{r}$, onde
$p_{\text{dentro/fora}}$ = pressão dentro/fora da superfície curvada, r = raio de curvatura
Força capilar: $\frac{2\gamma}{r} = \rho g h$, ρ = densidade do líquido, h = altura da coluna de líquido
Fluxo na direção z de momento linear $p_x = m v_x$: $J_z(p_x) = \frac{dp_x}{dA\cdot dt}$ ($dA \perp z$)
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

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 (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: $E = -E_{\text{p}} = A \cdot \frac{|Z_1 Z_2| N_A e^2}{4\pi\varepsilon_0 d}$, onde $Z_{1,2}$ = cargas dos íons (em e), $d = r_{\text{cation}} + r_{\text{anion}}$, A = constante de Madelung
Estrutura de césio-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 μ = potencial químico
Distribuição de Boltzman: $P = e^{-\frac{E-\mu}{kT}}$
Ganho de um transistor: $\beta = \frac{i_{\text{C}}}{i_{\text{B}}}$, 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, $\mathcal{N} = \frac{N}{V} = \frac{N_A}{V_m}$,
ξ = magnetizabilidade, m = momento dipolo magnético das moléculas
Susceptibilidade magnética molar: $\chi_m = \chi V_m$
Lei de Curie: $\chi_m = A + \frac{C}{T} = N_A \mu_0(\xi + \frac{m^2}{3kT})$