

# Força de Troca e o átomo de He

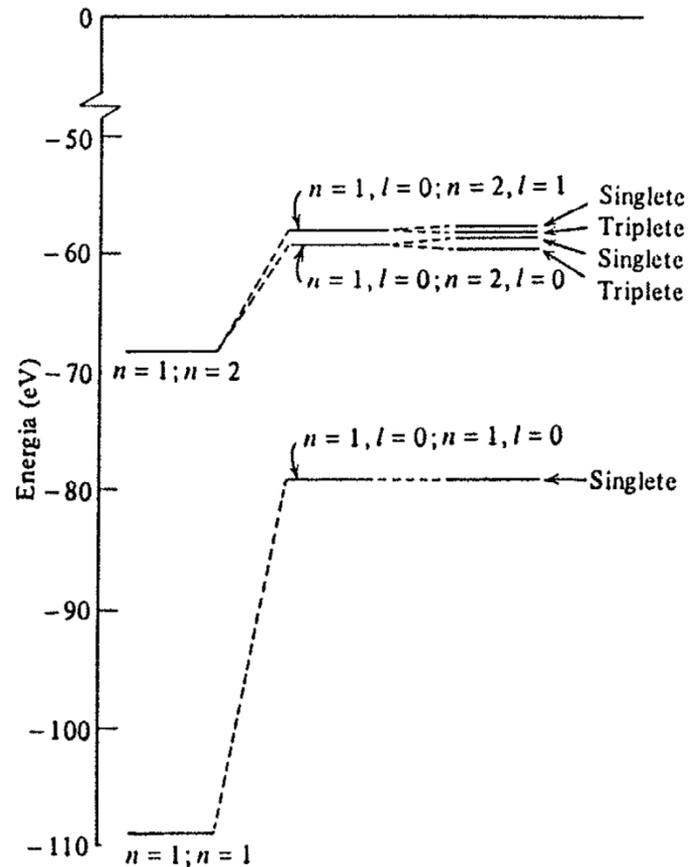


FIGURA 9-7. Níveis de energia mais baixos do hélio. *Esquerda*: níveis que seriam encontrados caso não existisse interação entre seus elétrons. *Centro*: níveis que seriam encontrados considerando-se esta interação coulombiana mas ignorando-se as forças de troca. *Direita*: níveis que seriam encontrados considerando-se a interação coulombiana e as forças de troca. Estes níveis estão em acordo excelente com os observados experimentalmente, e mostrados à direita da figura 9-6.

---

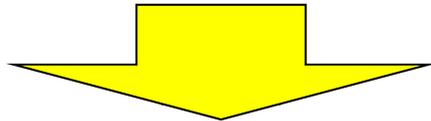
# Estrutura Atômica e da Tabela Periódica

*What distinguished Mendeleev was not only genius, but a passion for the elements. They became his personal friends; he knew every quirk and detail of their behavior.*

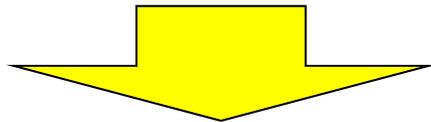
- J. Bronowski

- 
- O que acontece se houver mais do que um elétron?

um núcleo com carga  $+ze$  atrai os elétrons.  
os elétrons se repelem mutuamente.



- Não é possível resolver os problemas exatamente com a equação por causa das potenciais interações complexas Schrödinger.



- Embora seja possível calcular numericamente as funções de onda usando métodos aproximado, é possível compreender o comportamento geral dos átomos sem calcular as funções de onda dos átomos de muitos elétrons, aplicando as condições de contorno e as regras de seleção.

---

# Princípio de Exclusão de Pauli

- Forma fraca geralmente é suficiente em análises qualitativas.

**Não pode haver dois elétrons em um átomo com o mesmo conjunto de números quânticos ( $n$ ,  $\ell$ ,  $m_l$ ,  $m_s$ ).**

A tabela periódica pode ser compreendida usando duas regras:

- Os elétrons em um átomo tendem a ocupar os níveis mais baixos de energia disponíveis.
- Princípio de exclusão de Pauli.

# Estrutura Atômica

**Hidrogênio:**  $(n, \ell, m_\ell, m_s) = (1, 0, 0, \pm 1/2)$  no estado fundamental.

Na ausência de campo magnético, o estado com  $m_s = 1/2$  é degenerado com o estado com  $m_s = -1/2$ .

**Helium:**  $(1, 0, 0, 1/2)$  para o primeiro elétron.

$(1, 0, 0, -1/2)$  para o segundo elétron.

Elétrons com spins antiparalelos ( $m_s = +1/2$  e  $m_s = -1/2$ ) para satisfazer o princípio da exclusão de Pauli.

Notações.

$n =$             1   2   3   4...

Letter =        K   L   M   N...

$n =$  **camadas** (eg: K, L, M, etc.)

$n\ell =$  **subcamadas** (1s, 2p, 3d)

**Elétrons para átomos de H e He  
estão em camadas K.**

**H:  $1s^2$**

**He:  $1s^1$  or  $1s$**

# Estrutura Atômica

Quantos elétrons podem estar em cada subcamada?

	Total
Para cada $m_\ell$ : dois valores de $m_s$	2
Para cada $\ell$ : $(2\ell + 1)$ valores de $m_\ell$	$2(2\ell + 1)$

$\ell = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ \dots$

letra =  $s \ p \ d \ f \ g \ h \ \dots$

$\ell = 0$ , (estado  $s$ ) pode ter dois elétrons.

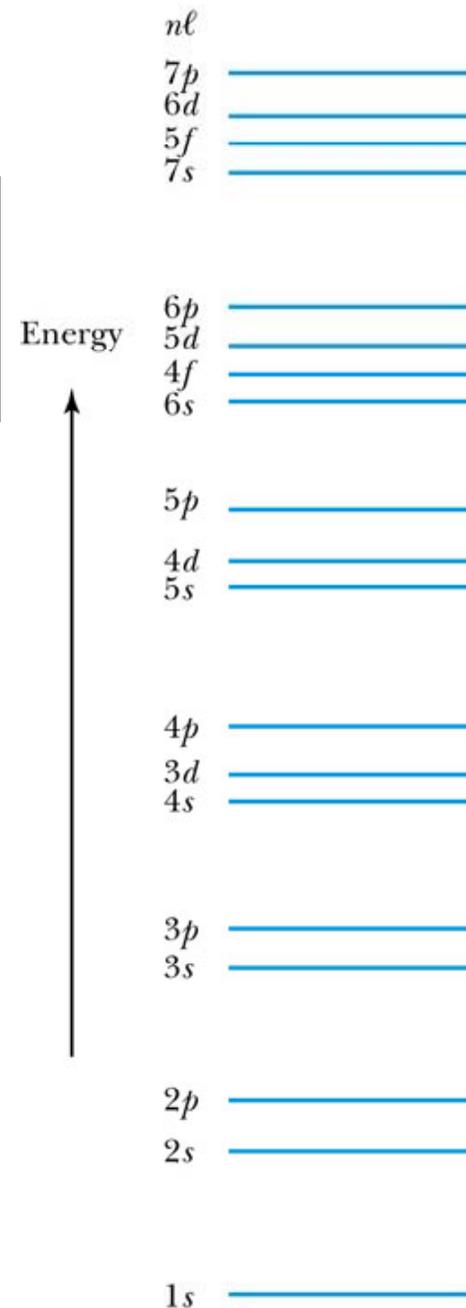
$\ell = 1$ , ( $p$  state) pode ter seis elétrons.

Os orbitais com menores valor de  $\ell$  values apresentam simetria mais próximo da “elíptica” que aqueles com maiores valores de  $\ell$ .

Elétrons com maiores valores de  $\ell$  são mais blindados da carga do núcleo..

Elétrons em níveis com maior energia pode haver predominância os valores de  $\ell$ .

4s são preenchidos antes de 3d.



# The Periodic Table

Periodic Table of Elements

Closed shells	Alkalies	Alkaline earths	Transition elements										Rare Halogens gases									
Groups:	1	2											13	14	15	16	17	18				
	1 <b>H</b> $1s^1$																	2 <b>He</b> $1s^2$				
	3 <b>Li</b> $1s^2 2s^1$	4 <b>Be</b> $2s^2$											5 <b>B</b> $2s^2 2p^1$	6 <b>C</b> $2s^2 2p^2$	7 <b>N</b> $2s^2 2p^3$	8 <b>O</b> $2s^2 2p^4$	9 <b>F</b> $2s^2 2p^5$	10 <b>Ne</b> $2s^2 2p^6$				
	11 <b>Na</b> $2s^2 2p^6 3s^1$	12 <b>Mg</b> $3s^2$											13 <b>Al</b> $3s^2 3p^1$	14 <b>Si</b> $3s^2 3p^2$	15 <b>P</b> $3s^2 3p^3$	16 <b>S</b> $3s^2 3p^4$	17 <b>Cl</b> $3s^2 3p^5$	18 <b>Ar</b> $3s^2 3p^6$				
	19 <b>K</b> $3s^2 3p^6 4s^1$	20 <b>Ca</b> $4s^2$	21 <b>Sc</b> $3d^1 4s^2$	22 <b>Ti</b> $3d^2 4s^2$	23 <b>V</b> $3d^3 4s^2$	24 <b>Cr</b> $3d^5 4s^1$	25 <b>Mn</b> $3d^5 4s^2$	26 <b>Fe</b> $3d^6 4s^2$	27 <b>Co</b> $3d^7 4s^2$	28 <b>Ni</b> $3d^8 4s^2$	29 <b>Cu</b> $3d^{10} 4s^1$	30 <b>Zn</b> $3d^{10} 4s^2$	31 <b>Ga</b> $3d^{10} 4s^2 4p^1$	32 <b>Ge</b> $3d^{10} 4s^2 4p^2$	33 <b>As</b> $3d^{10} 4s^2 4p^3$	34 <b>Se</b> $3d^{10} 4s^2 4p^4$	35 <b>Br</b> $3d^{10} 4s^2 4p^5$	36 <b>Kr</b> $3d^{10} 4s^2 4p^6$				
	37 <b>Rb</b> $3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^1$	38 <b>Sr</b> $5s^2$	39 <b>Y</b> $4d^1 5s^2$	40 <b>Zr</b> $4d^2 5s^2$	41 <b>Nb</b> $4d^4 5s^1$	42 <b>Mo</b> $4d^5 5s^1$	43 <b>Tc</b> $4d^5 5s^2$	44 <b>Ru</b> $4d^7 5s^1$	45 <b>Rh</b> $4d^8 5s^1$	46 <b>Pd</b> $4d^{10}$	47 <b>Ag</b> $4d^{10} 5s^1$	48 <b>Cd</b> $4d^{10} 5s^2$	49 <b>In</b> $4d^{10} 5s^2 5p^1$	50 <b>Sn</b> $4d^{10} 5s^2 5p^2$	51 <b>Sb</b> $4d^{10} 5s^2 5p^3$	52 <b>Te</b> $4d^{10} 5s^2 5p^4$	53 <b>I</b> $4d^{10} 5s^2 5p^5$	54 <b>Xe</b> $4d^{10} 5s^2 5p^6$				
	55 <b>Cs</b> $4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^1$	56 <b>Ba</b> $6s^2$	57 <b>La</b> $5d^1 6s^2$	72 <b>Hf</b> $4f^{14} 5d^2 6s^2$	73 <b>Ta</b> $4f^{14} 5d^3 6s^2$	74 <b>W</b> $4f^{14} 5d^4 6s^2$	75 <b>Re</b> $4f^{14} 5d^5 6s^2$	76 <b>Os</b> $4f^{14} 5d^6 6s^2$	77 <b>Ir</b> $4f^{14} 5d^7 6s^1$	78 <b>Pt</b> $4f^{14} 5d^9 6s^1$	79 <b>Au</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^1$	80 <b>Hg</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2$	81 <b>Tl</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$	82 <b>Pb</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$	83 <b>Bi</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$	84 <b>Po</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^4$	85 <b>At</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$	86 <b>Rn</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$				
	87 <b>Fr</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6 7s^1$	88 <b>Ra</b> $7s^2$	89 <b>Ac</b> $6d^1 7s^2$	104 <b>Rf</b> $5f^{14} 6d^2 7s^2$	105 <b>Db</b> $5f^{14} 6d^3 7s^2$	106 <b>Sg</b> $5f^{14} 6d^4 7s^2$	107 <b>Bh</b> $5f^{14} 6d^5 7s^2$	108 <b>Hs</b> $5f^{14} 6d^6 7s^2$	109 <b>Mt</b> $5f^{14} 6d^7 7s^2$	110 <b>Ds</b> $5f^{14} 6d^8 7s^1$	111 <b>Rg</b> $5f^{14} 6d^{10} 7s^1$	112										
			Lanthanides																			
			58 <b>Ce</b> $4f^2 6s^2$	59 <b>Pr</b> $4f^3 6s^2$	60 <b>Nd</b> $4f^4 6s^2$	61 <b>Pm</b> $4f^5 6s^2$	62 <b>Sm</b> $4f^6 6s^2$	63 <b>Eu</b> $4f^7 6s^2$	64 <b>Gd</b> $4f^7 6s^2 5d^1$	65 <b>Tb</b> $4f^9 6s^2$	66 <b>Dy</b> $4f^{10} 6s^2$	67 <b>Ho</b> $4f^{11} 6s^2$	68 <b>Er</b> $4f^{12} 6s^2$	69 <b>Tm</b> $4f^{13} 6s^2$	70 <b>Yb</b> $4f^{14} 6s^2$	71 <b>Lu</b> $4f^{14} 5d^1 6s^2$						
			Actinides																			
			90 <b>Th</b> $6d^2 7s^2$	91 <b>Pa</b> $5f^2 6d^1 7s^2$	92 <b>U</b> $5f^3 6d^1 7s^2$	93 <b>Np</b> $5f^4 6d^1 7s^2$	94 <b>Pu</b> $5f^6 7s^2$	95 <b>Am</b> $5f^7 7s^2$	96 <b>Cm</b> $5f^7 6d^1 7s^2$	97 <b>Bk</b> $5f^9 6d^1 7s^2$	98 <b>Cf</b> $5f^{10} 7s^2$	99 <b>Es</b> $5f^{11} 7s^2$	100 <b>Fm</b> $5f^{12} 7s^2$	101 <b>Md</b> $5f^{13} 7s^2$	102 <b>No</b> $5f^{14} 7s^2$	103 <b>Lr</b> $5f^{14} 6d^1 7s^2$						

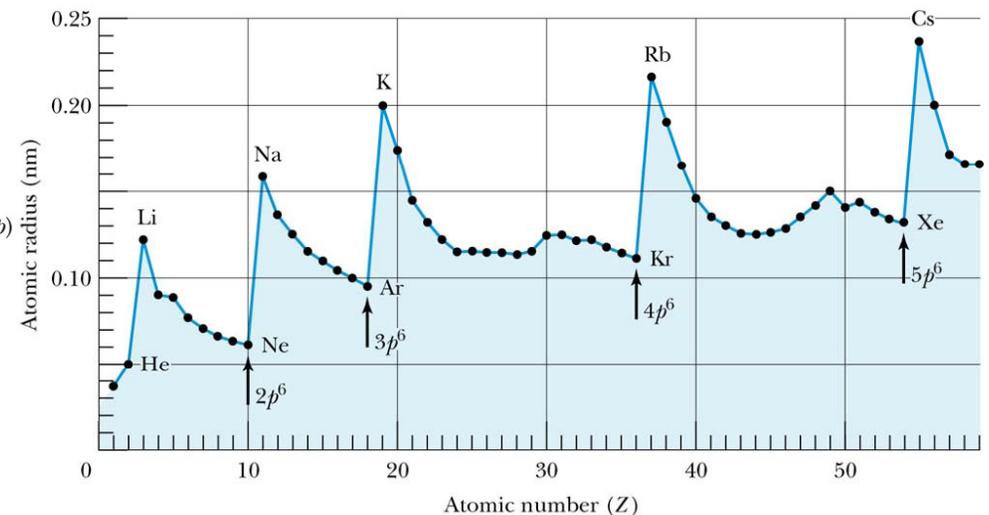
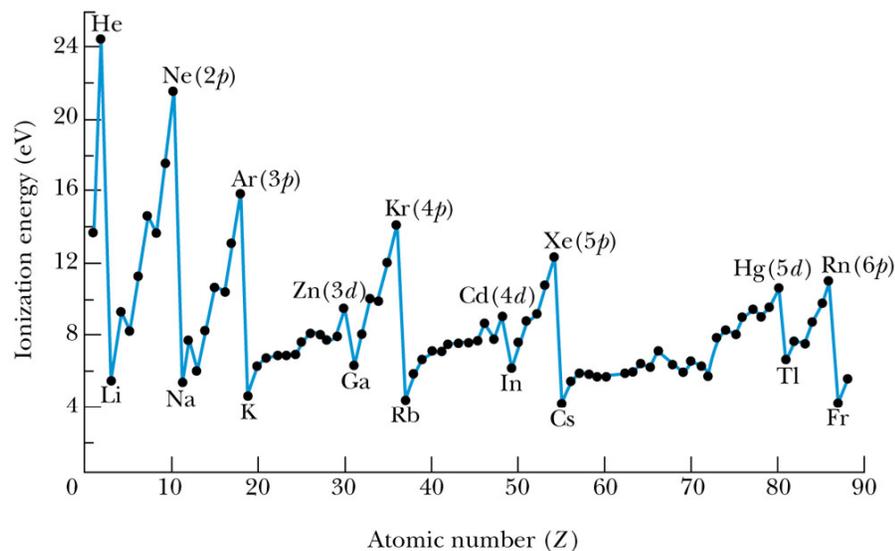
# Grupos e Períodos

## Grupos:

- ❑ Colunas Verticais.
- ❑ mesmo número de elétrons em um orbital  $\ell$ .
- ❑ Podem formar ligações químicas similares.

## Períodos:

- ❑ Linhas horizontais.
- ❑ Correspondem ao preenchimento das camadas.
- Algumas propriedades dos elementos tem comportamento semelhantes como as energias de ionização e raio atômico.



---

## Exemplos de propriedades na tabela periódica

### **Gases inertes:**

Último grupo da tabela periódica

Subnível p fechado exceto hélio

Momento angular total nulo e grande energia de ionização

Seus átomos interagem fracamente com o outro

### **Metais Alcalinos:**

Único elétron s em camada mais externa.

Forma facilmente íons positivos com uma carga + 1e

Mais baixas energias de ionização

Condutividade elétrica é relativamente boa

### **Alcalinos Terrosos:**

Dois s elétrons em subnível externo

Maiores raios atômicos

Alta condutividade elétrica

---

---

# Exemplos de propriedades na tabela periódica

## **Halogênios:**

Precisa de mais um elétron para preencher a subcamada mais externa.

Forma fortes ligações iônicas com os metais alcalinos

Configurações mais estáveis ocorrem quando o subnível p está cheio

## **Metais de Transição:**

Três fileiras de elementos em que os 3d, 4d e 5d estão sendo preenchidos

Propriedades determinada principalmente pelos electrons s, em vez de pela subcamada d sendo preenchido

Têm elétrons na camada subcamada d com spins desemparelhados

Como a d subcamada está cheia, os momentos magnéticos, e a tendência para átomos para alinhar rotações vizinho são reduzidos

---