

Tema 03: Princípios da Mecânica Quântica – Orbitais

Recomendada a Bibliografia 1, 2 e 3 das Informações Gerais

Contexto:

- ❑ Como visto anteriormente no Tema 02, o modelo do átomo de Bohr foi desenvolvido aplicando conceitos da física clássica considerando o elétron girando ao redor do núcleo em órbitas circulares.
- ❑ Bohr, entretanto, aplicou princípios de quantização neste modelo e postulou os “estados estacionários” desconstruindo assim a instabilidade que teria uma partícula elétrica em movimento.
- ❑ Neste modelo foi possível estabelecer as orbitas dos estados estacionários, e o que é mais importante, a energia do elétron em cada um destes estados estacionários.
- ❑ As linhas de emissão do hidrogênio podem ser obtidas segundo esse modelo, assim como a energia de ionização deste átomo.
- ❑ Este modelo, entretanto, não se aplica para átomos com mais de um elétron e não é possível correlacionar, por exemplo, o espectro de emissão de outros átomos através deste modelo.
- ❑ O fato do modelo do átomo de Bohr se aplicar apenas para o hidrogênio, e para os íons dos átomos com apenas um elétron (como He^+ , Li^{2+}), levou a um questionamento deste modelo e novos conceitos foram necessários para a formulação do modelo de estrutura eletrônica nos átomos, até o estabelecimento da mecânica quântica que é o modelo vigente.

1) Em 1925 *Louis de Broglie* ao igualar a equação de Einstein ($E = mc^2$) com a equação de Planck ($E = h\nu$) desenvolveu uma equação que associa o comprimento de onda de um objeto de massa m que se encontra a uma velocidade v e afirmou que:

“todo objeto em movimento apresenta propriedades ondulatórias”

- i) como você interpreta esta afirmação?
- ii) Explique como a afirmação de *de Broglie* se correlaciona com a interpretação da luz de Einstein.
- iii) Usando a equação de *de Broglie*:
 - a) Calcule o seu comprimento de onda usando sua massa em kg e supondo que você se encontra a $50 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ (o que equivale no sistema SI a $13,89 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$);
 - b) Calcule o comprimento de onda de um elétron ($m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$) que se encontra em movimento a uma velocidade de $1,3 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$;
 - c) Em que região do espectro eletromagnético se situa seu comprimento de onda e o do elétron?

2) Difração é um fenômeno ondulatório:

i) Defina difração e explique qual a condição necessária para que uma onda apresente difração.

ii) Quando se joga uma pedra pequena na água, se forma uma onda circular de água que se propaga radialmente a partir do centro que corresponde ao ponto onde a pedra atingiu a água. Desenhe o padrão de difração resultante de uma onda circular de água ao encontrar uma barreira que possui aberturas estreitas, ou seja, menores que a frente de onda.

3) Em 1927 Davisson e Germer ao incidirem um feixe de elétrons acelerado em um cristal de níquel observaram que ocorria difração deste feixe de elétrons. Qual a evidência principal deste experimento? Comente.

4) O Princípio da Incerteza de Heisenberg diz que para partículas subatômicas não é possível se determinar simultaneamente a posição e o *momento** (ou de forma simplificada a energia/velocidade) com precisão; quanto mais precisa a medida, por exemplo, da posição, maior o erro na medida do momento e vice-versa.

*(*momentum*; definido como o produto da massa pela velocidade).

i) No que se baseia Heisenberg, em linhas bem gerais, para dizer que ao se tentar determinar o *momento* de uma partícula subatômica necessariamente alteramos sua posição, e vice-versa. Explique.

ii) O modelo eletrônico de Bohr está de acordo ou não com o princípio da incerteza de Heisenberg? Comente.

5) Pelo desenvolvimento dos questionamentos anteriores, se chega então à conclusão de que o elétron pode ser caracterizado como partícula ou como onda, tal qual a luz pode ser caracterizada sob o ponto de vista de onda ou partícula (fóton).

Levando em consideração a natureza ondulatória do elétron, Erwin Schrödinger propõe um modelo ondulatório conhecido como mecânica ondulatória (também denominada mecânica quântica) e desenvolve a “Equação de Onda do Elétron”. Para tal, Schrödinger assume um tratamento de onda estacionária:

i) O que é uma onda estacionária?

ii) Por que o elétron é convenientemente tratado como uma onda estacionária?

iii) O que é um “nó” e um “anti-nó” de uma onda estacionária?

iv) O que são modos permitidos de vibração?

6) A “Equação de Onda do Elétron”, mais propriamente denominada “Função de Onda (ψ)” representa a função que descreve os modos permitidos de vibração do elétron. As funções de onda são equações diferenciais, o que implica que existem várias soluções para esta função. Estas soluções são denominadas de “números quânticos”; estes números quânticos vão definir as características da onda, que no caso do elétron é denominada de “orbital”.

i) Os números quânticos são grupos de soluções e são representados pelas letras n , ℓ , $m\ell$. Complete a Tabela abaixo:

Número Quântico	Nome	Significado/ Propriedade que define no orbital	Valores numéricos assumidos pelo número quântico
n			
ℓ			
$m\ell$			

ii) Existe uma correlação entre os números quânticos, ou seja, para um determinado valor de n , são possíveis alguns valores de ℓ e $m\ell$. Complete a Tabela abaixo:

n	ℓ	$m\ell$
1		
2		
3		
4		

iii) Descreva as características do orbital que é caracterizado pelos números quânticos:

a) $n= 2$; $\ell = 0$; **b)** $n= 2$; $\ell = 1$; $m\ell = -1$; **c)** $n= 4$; $\ell = 2$; $m\ell = 2$

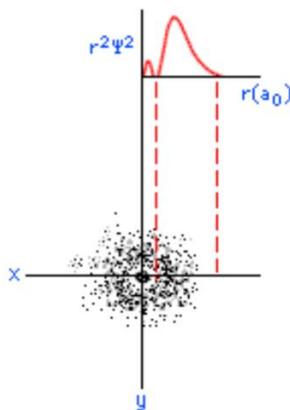
7) A função de onda quadrática (ψ^2) é denominada “função de distribuição de probabilidade” e multiplicando esta função pela área superficial esférica ($4\pi r^2\psi^2$) temos a “função de distribuição de probabilidade radial”.

i) Comente sobre o significado destas duas funções.

ii) Explique como a partir da função de distribuição radial surge o conceito de nuvem eletrônica/densidade eletrônica.

iii) Defina superfície limite.

iv) Analisando a densidade eletrônica do orbital 2s representada abaixo, por exemplo, vemos que a onda tridimensional do elétron não é contínua. Explique esta afirmação em função dos nós das ondas estacionárias. A partir disso indique na figura abaixo qual é a superfície nodal do orbital 2s.



Representação da nuvem eletrônica/densidade eletrônica do orbital 2s

8) Explique por que a descrição ondulatória do elétron segundo a mecânica quântica obedece ao princípio da incerteza de Heisenberg (dica: pense no conceito das funções de distribuição de probabilidade).