

Estrutura e propriedades atômicas

Introdução e teorias atômicas

É possível ver um átomo?

- Microscopia óptica: conseguiria ver objetos da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda da luz (400 a 800 nm = 4000 a 8000 Å).

É possível ver um átomo?

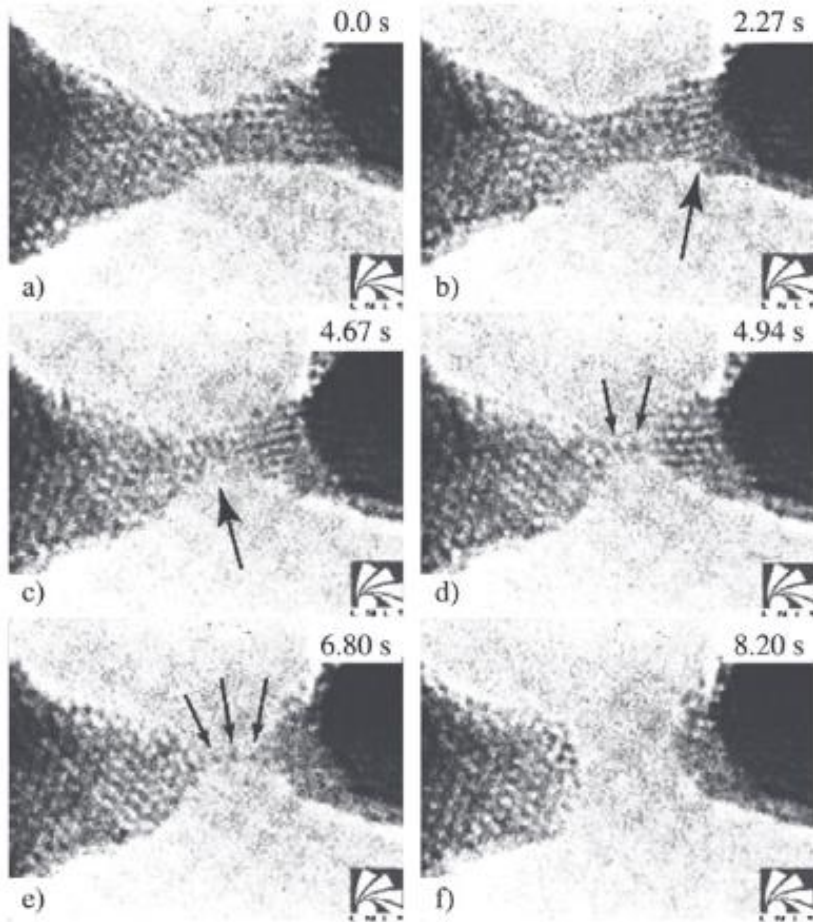
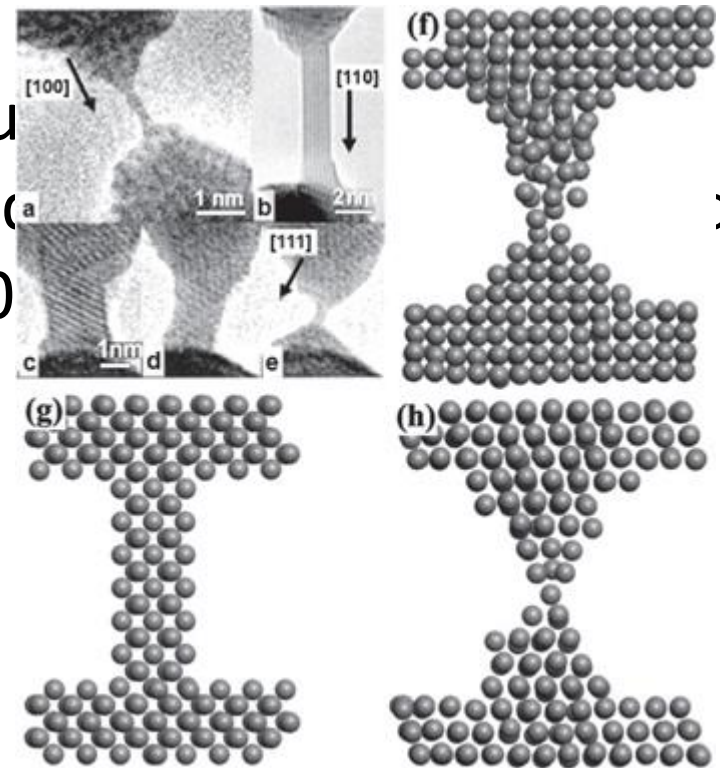


Figure 1. Gold nanowire time evolution. An ATC with two atoms is formed in (d), and in (e) the number of atoms have increased to three in the linear chain (indicated by arrows). See text for discussions.

igu
za (c
100



la

Galvão *et al. Materials Research*, 7, pp. 339-342, 2004.

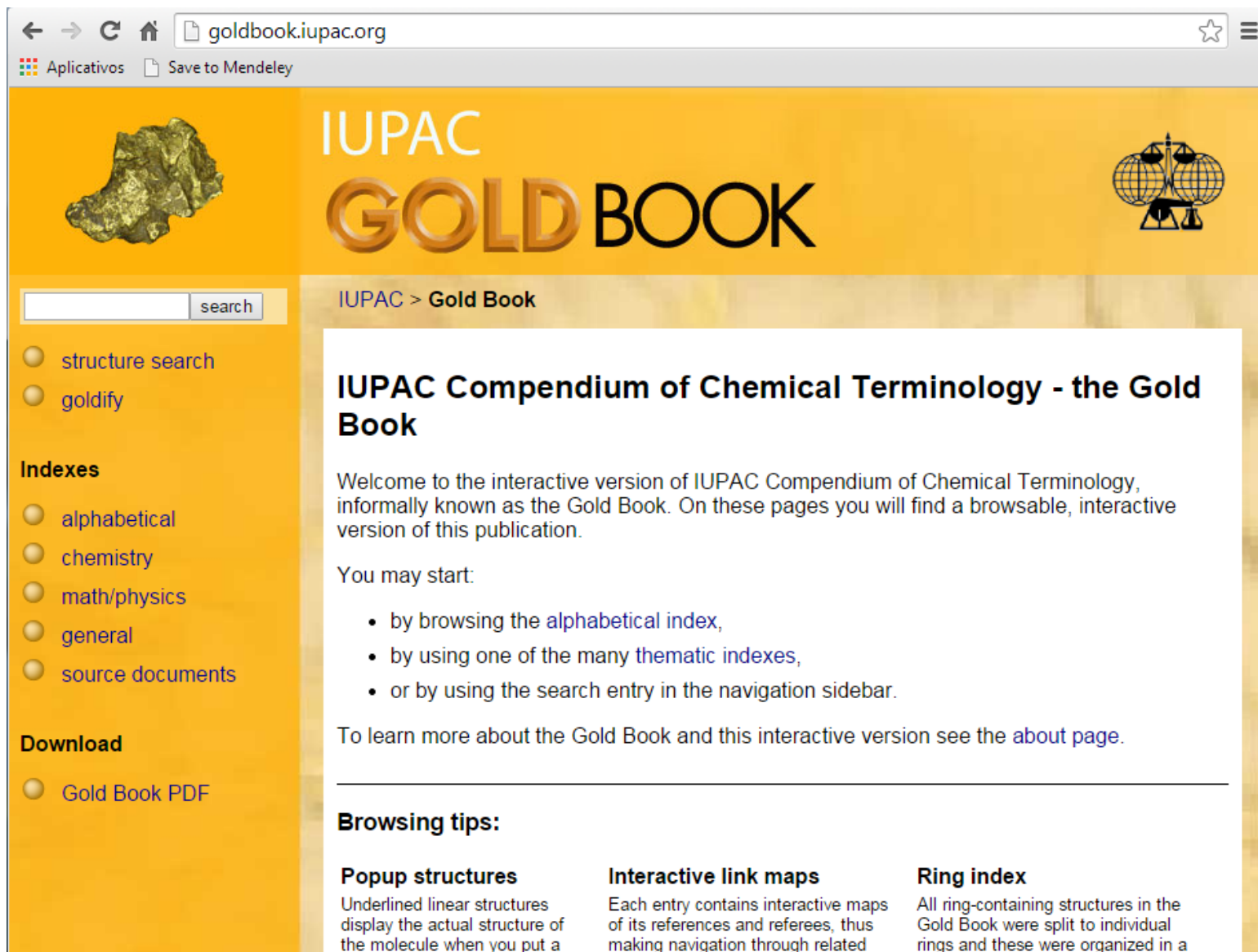


Química

Durante o curso, veremos um pouco mais do enfoque da química:

- Formação e quebra de ligações
- Rearranjo dos átomos formando elementos com características muito diferentes
- Tabela periódica
- Quantos compostos existem?

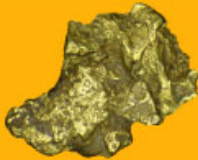
Algumas definições formais



The screenshot shows the IUPAC Gold Book website in a web browser. The browser's address bar displays 'goldbook.iupac.org'. The website has a yellow header with the IUPAC logo (a balance scale) on the right and a large 'GOLD BOOK' title in the center. Below the header, there is a search bar and a sidebar on the left with navigation links. The main content area features the title 'IUPAC Compendium of Chemical Terminology - the Gold Book' and a welcome message. Below this, there are sections for 'Browsing tips' including 'Popup structures', 'Interactive link maps', and 'Ring index'.

← → ↻ 🏠 goldbook.iupac.org ☆ ☰

Aplicativos Save to Mendeley



IUPAC
GOLD BOOK



IUPAC > Gold Book

search

- structure search
- goldify

Indexes

- alphabetical
- chemistry
- math/physics
- general
- source documents

Download

- Gold Book PDF

IUPAC Compendium of Chemical Terminology - the Gold Book

Welcome to the interactive version of IUPAC Compendium of Chemical Terminology, informally known as the Gold Book. On these pages you will find a browsable, interactive version of this publication.

You may start:

- by browsing the [alphabetical index](#),
- by using one of the many [thematic indexes](#),
- or by using the search entry in the navigation sidebar.

To learn more about the Gold Book and this interactive version see the [about page](#).

Browsing tips:

Popup structures Underlined linear structures display the actual structure of the molecule when you put a	Interactive link maps Each entry contains interactive maps of its references and referees, thus making navigation through related	Ring index All ring-containing structures in the Gold Book were split to individual rings and these were organized in a
---	---	---

Definindo as espécies envolvidas

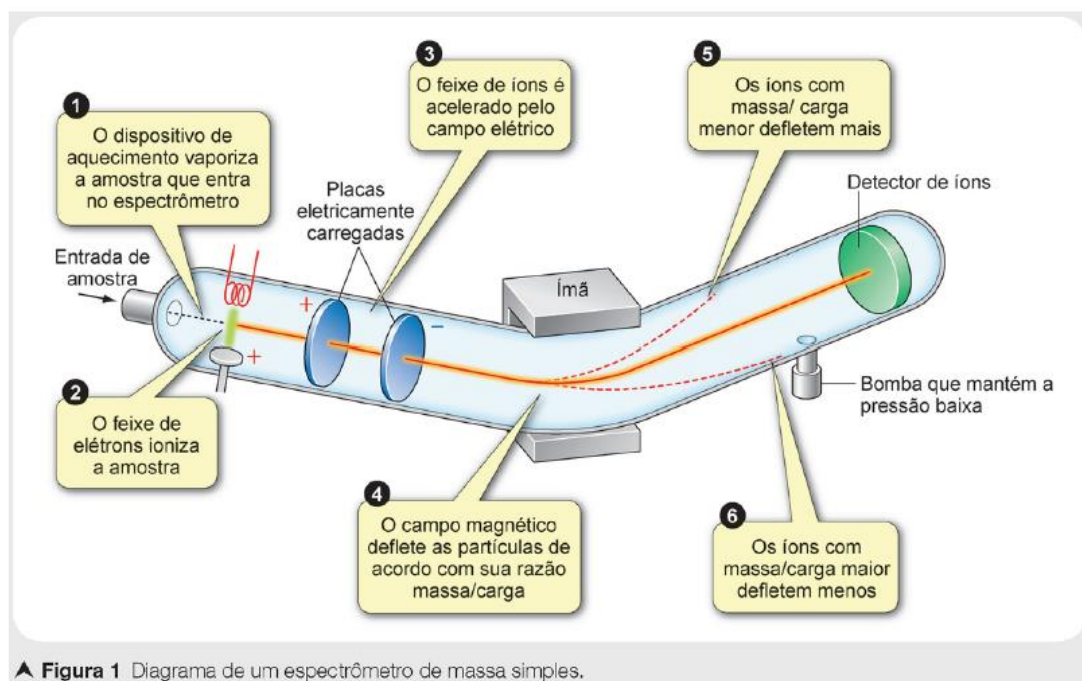
- Átomo:
 - Smallest particle still characterizing a chemical element. It consists of a nucleus of a positive charge (is the proton number and the elementary charge) carrying almost all its mass (more than 99.9%) and electrons determining its size.
- Próton:
 - Nuclear particle of charge number +1, spin quantum number $\frac{1}{2}$ and rest mass of 1.007276470 (12) u.
- Elétron:
 - Elementary particle not affected by the strong force having a spin quantum number $\frac{1}{2}$, a negative elementary charge and a rest mass of 0.000548579903(13)u.

Isótopos

Tabela 1.5 Massas relativas e abundâncias naturais de isótopos de elementos selecionados

Elemento	Isótopo	Massa isotópica relativa	Abundância/%
H	^1H	1,0078	99,9885
	^2H	2,0141	0,0115
C	^{12}C	12 (exatamente, por definição)	98,93
	^{13}C	13,0034	1,07
N	^{14}N	14,0031	99,64
	^{15}N	15,0001	0,36
O	^{16}O	15,9949	99,757
	^{17}O	16,9991	0,038
	^{18}O	17,9992	0,205
F	^{19}F	18,9984	100
Mg	^{24}Mg	23,9850	78,99
	^{25}Mg	24,9858	10,00
	^{26}Mg	25,9826	11,01
P	^{31}P	30,9738	100
Cl	^{35}Cl	34,9689	75,76
	^{37}Cl	36,9659	24,24
Br	^{79}Br	78,9183	50,69
	^{81}Br	80,9163	49,31
I	^{127}I	126,9045	100

Detectando isótopos



▲ **Figura 1** Diagrama de um espectrômetro de massa simples.

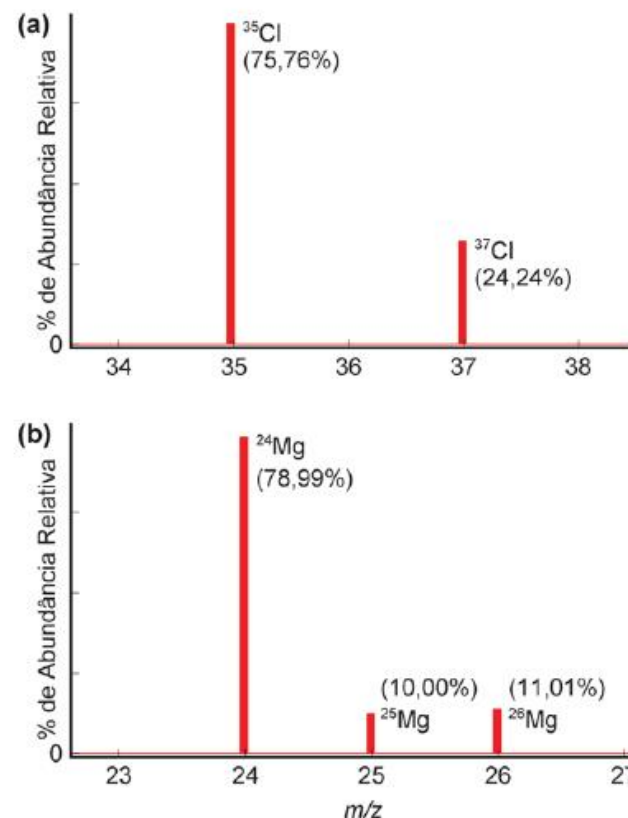


Figura 2 Espectros de massa de (a) cloro e (b) magnésio, mostrando a presença de isótopos.

Tamanho de um átomo

- **Raio covalente:** Distância do centro do núcleo até a fronteira externa da camada de elétrons quando esse átomo está ligado covalentemente a outro. Distância da ligação = soma dos dois raios covalentes. (Essa distância não é homogênea)
- **Raio de van der Waals:** Raio do átomo não ligado, supondo-o como uma esfera rígida
- **Raio iônico:** O raio nominal de um íon de um elemento em um determinado estado de ionização, deduzido a partir do espaço ocupado pelo átomo na estrutura cristaliza do sal que contém aquele íon.

Tamanho de um átomo

INCREASING ATOMIC RADIUS

INCREASING ATOMIC RADIUS

1 H Hydrogen 1.00794																	2 He Helium 4.003
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012182											5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.0107	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.9984032	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.989770	12 Mg Magnesium 24.3050											13 Al Aluminum 26.981538	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973761	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.4527	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955910	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938049	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933200	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.61	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29
55 Cs Cesium 132.90545	56 Ba Barium 137.327	57 La Lanthanum 138.9055	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.9479	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platinum 195.078	79 Au Gold 196.96655	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98038	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 Ac Actinium (227)	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (263)	107 Bh Bohrium (262)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (266)	110 (269)	111 (272)	112 (277)						

Definindo as espécies envolvidas

- Molécula:
 - An electrically neutral entity consisting of more than one atom ($n > 1$). Rigorously, a molecule, in which $n > 1$ must correspond to a depression on the potential energy surface that is deep enough to confine at least one vibrational state.
- Ânion:
 - A monoatomic or polyatomic species having one or more elementary charges of the electron.
- Cátion:
 - A monoatomic or polyatomic species having one or more elementary charges of the proton.

Estrutura e propriedades atômicas

Introdução e teorias atômicas



Entendendo o átomo

Histórico

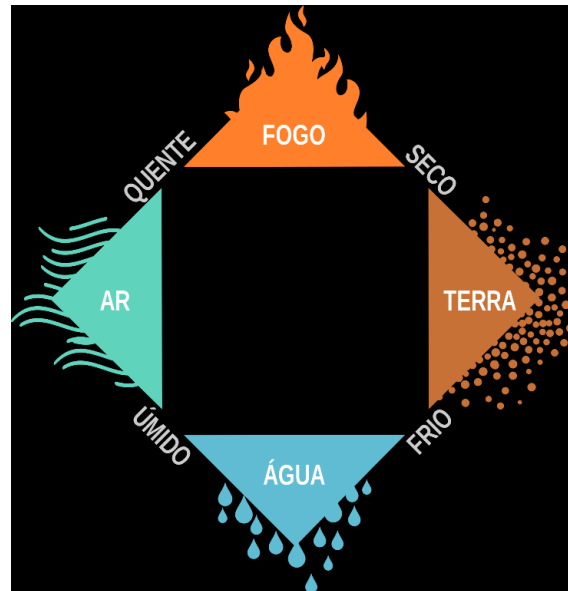
Como tudo começou...

Empédocles 490 – 430 a.C.) sintetizou as quatro substâncias como as raízes básicas a partir das quais todas as coisas se constituem

[Heráclito de Efeso 540
– 470 a.C.]
- Fogo -

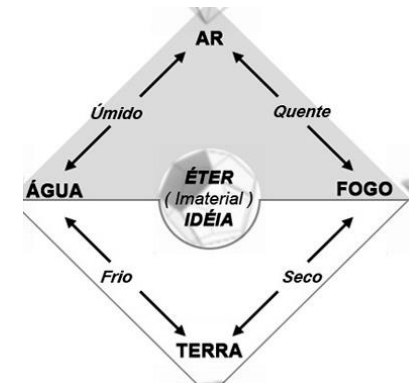
[Anaxímenes de Mileto
558 – 524 a.C.]

- No ar -



[Xenófanos 570 – 470 a.C.]

- Terra -



[Tales de Mileto 624(?) – 558 (?) a.C.]

Princípio único – uma substância primordial para toda variedade da matéria. Origem de tudo
- água

A origem da palavra átomo

Acreditava que todo tipo de matéria fosse formado por diminutas partículas que denominou de átomos (indivisível).



Demócrito
(460-370 a.C.)

Ex. ouro

Se o **Au** fosse dividido em pedaços cada vez menores chegaria a um minúscula partícula de **Au** que não poderia mais ser dividida, porém que ainda teria as propriedades do ouro.

Propriedades das substâncias:

- A grande densidade e maleabilidade do **Pb** - em forma esferas (numa caixa).
- **Fe** mais denso e duro - em forma de hélice que deixava a estrutura mais rígida e mais leve.

Conhecido como 1º modelo atômico, mas meramente filosófico!

Teorias atômicas

- **Dalton:**

- Pai da teoria atômica;
- Matéria é composta de átomos, sólidos e indivisíveis;
- Existem tantos átomos quanto o número de elementos químicos e cada um tem massa diferente;

Teorias atômicas

- **Dalton (1803):**

- Pai da teoria atômica;
- Matéria é composta de átomos, sólidos e indivisíveis;
- Existem tantos átomos quanto o número de elementos químicos e cada um tem massa diferente;
- Explica pela primeira vez, em escala microscópica, a lei da conservação das massas (Lavoisier, Proust etc).
- Reação química: forma de reagrupar átomos (eles não são criados ou destruídos durante uma reação) – a massa dos produtos e dos reagentes deve ser a mesma.

Teoria de Dalton

ELEMENTS.

Simple

Binary

Ternary

Quaternary

Quinquenary & Sexenary

Septenary

EXPLANATION OF THE PLATES. 219

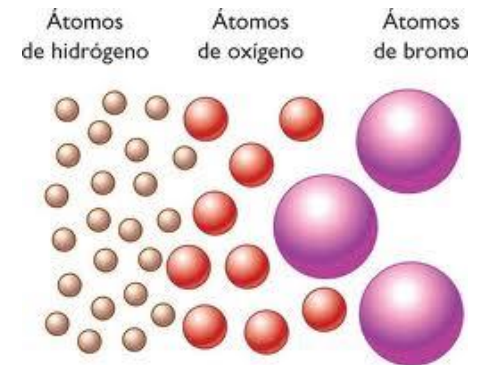
PLATE IV. This plate contains the arbitrary marks or signs chosen to represent the several chemical elements or ultimate particles.

Fig. 1 Hydrog. its rel. weight 1 | 11 Strontites - - - 46
 2 Azote, - - - - - 5 | 12 Barytes - - - - 68
 3 Carbone or charcoal, - 5 | 13 Iron - - - - - 56
 4 Oxygen, - - - - - 7 | 14 Zinc - - - - - 56
 5 Phosphorus, - - - - 9 | 15 Copper - - - - 56
 6 Sulphur, - - - - - 13 | 16 Lead - - - - - 95
 7 Magnesia, - - - - - 20 | 17 Silver - - - - 100
 8 Lime, - - - - - 21 | 18 Platina - - - - 100
 9 Soda, - - - - - 28 | 19 Gold - - - - - 140
 10 Potash, - - - - - 42 | 20 Mercury - - - - 167

21. An atom of water or steam, composed of 1 of oxygen and 1 of hydrogen, retained in physical contact by a strong affinity, and supposed to be surrounded by a common atmosphere of heat; its relative weight = - - - - 8
 22. An atom of ammonia, composed of 1 of azote and 1 of hydrogen - - - - - 6
 23. An atom of nitrous gas, composed of 1 of azote and 1 of oxygen - - - - - 12
 24. An atom of olefiant gas, composed of 1 of carbone and 1 of hydrogen - - - - - 6
 25. An atom of carbonic oxide composed of 1 of carbone and 1 of oxygen - - - - - 12
 26. An atom of nitrous oxide, 2 azote + 1 oxygen - 17
 27. An atom of nitric acid, 1 azote + 2 oxygen - 19
 28. An atom of carbonic acid, 1 carbone + 2 oxygen 19
 29. An atom of carburetted hydrogen, 1 carbone + 2 hydrogen - - - - - 7
 30. An atom of oxynitric acid, 1 azote + 3 oxygen 20
 31. An atom of sulphuric acid, 1 sulphur + 3 oxygen 34
 32. An atom of sulphuretted hydrogen, 1 sulphur + 3 hydrogen - - - - - 16
 33. An atom of alcohol, 3 carbone + 1 hydrogen - 16
 34. An atom of nitrous acid, 1 nitric acid + 1 nitrous gas - - - - - 31
 35. An atom of acetous acid, 2 carbone + 2 water - 26
 36. An atom of nitrate of ammonia, 1 nitric acid + 1 ammonia + 1 water - - - - - 33
 37. An atom of sugar, 1 alcohol + 1 carbonic acid - 33

Teoria de Dalton

- Dalton (1803) concebia os átomos como esferas perfeitas (bola de bilhar).
- Acreditava que todo tipo de matéria fosse formado por diminutas partículas que denominou de átomos (indivisível).

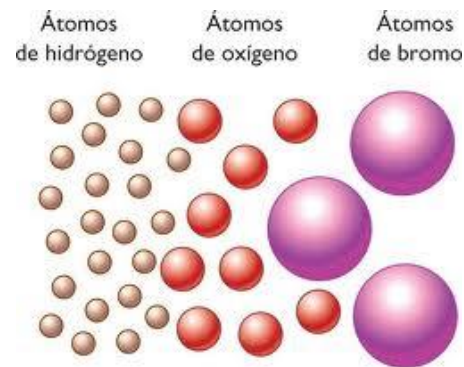
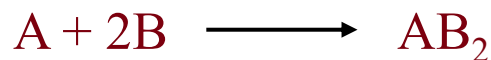
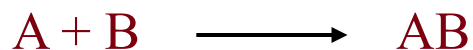


Teoria de Dalton

- Dalton (1803) concebia os átomos como esferas perfeitas (bola de bilhar).
- Acreditava que todo tipo de matéria fosse formado por diminutas partículas que denominou de átomos (indivisível).

IMPORTÂNCIA:

- Lei da conservação da matéria (Lavoisier)
- Lei das proporções definidas (Proust)
- Lei das proporções múltiplas (Dalton)





Entendendo o átomo

Modelo atual

Chegando no modelo atômico atual

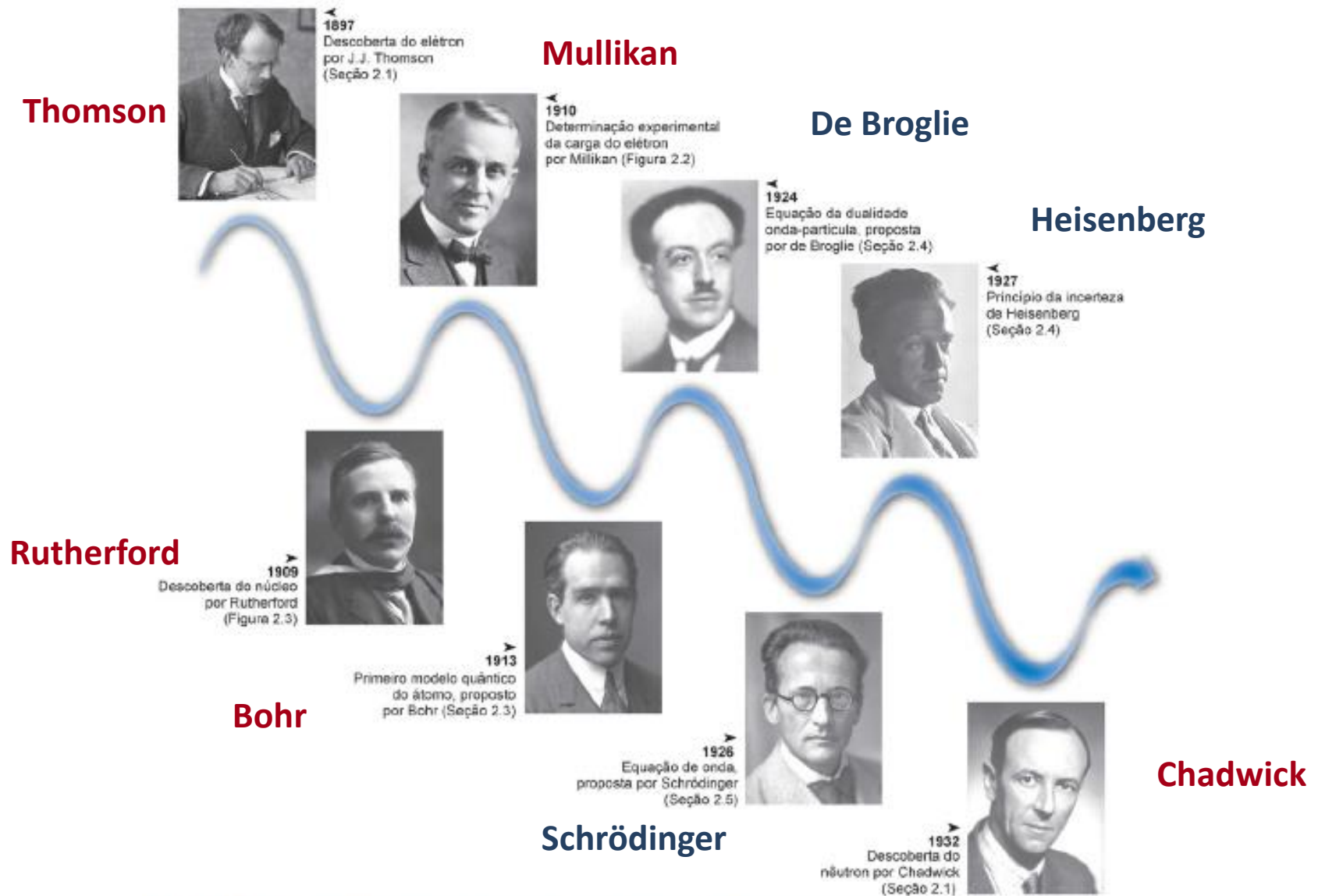


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Chegando no modelo atômico atual

- A Teoria de Dalton foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- Thomsom:
 - 1897 – Descoberta do elétron, a partir de sua pesquisa com raios catódicos;

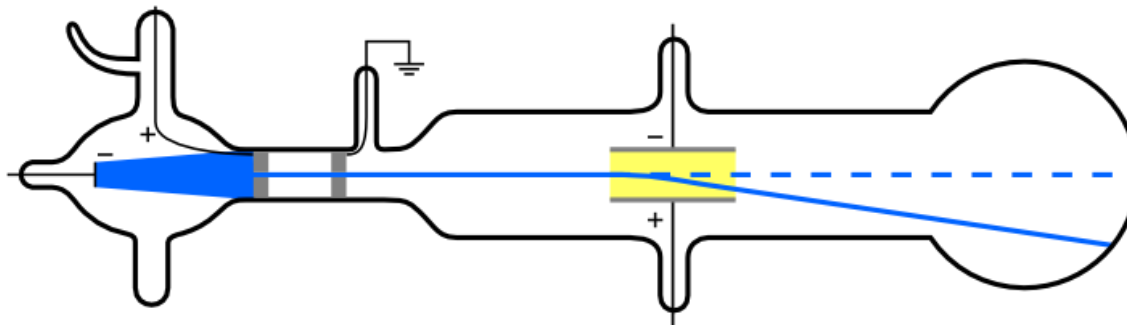
Chegando no modelo atômico atual

- A Teoria de Dalton foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- Thomsom:
 - 1897 – Descoberta do elétron, a partir de sua pesquisa com raios catódicos;

Modelo de Thomsom



Recipiente selado com gás em baixa pressão!

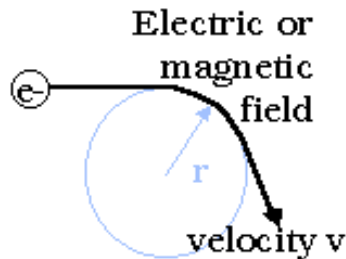


Thomson concluiu que esses raios, ao invés de ser uma forma de luz, são compostos por partículas muito leves carregadas negativamente, que ele chamou de “corpuscles”.

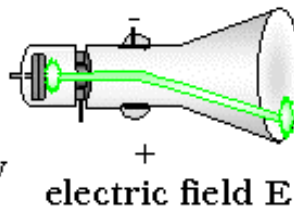
Modelo de Thomsom

Discovery of the Electron

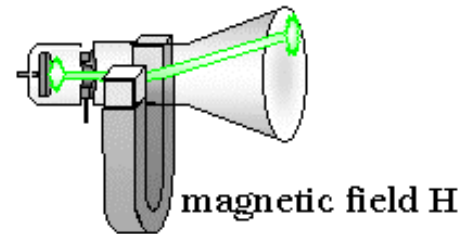
❖ measurement of **mass-to-charge** ratio (m/e) for electrons



force on electron
 $= mv^2/r$



force on electron
 $= Ee$



force on electron
 $= Hev$

r : raio da trajetória circular

m : massa do elétron

v : velocidade do elétron

$B = H$: campo magnético

q : carga do elétron

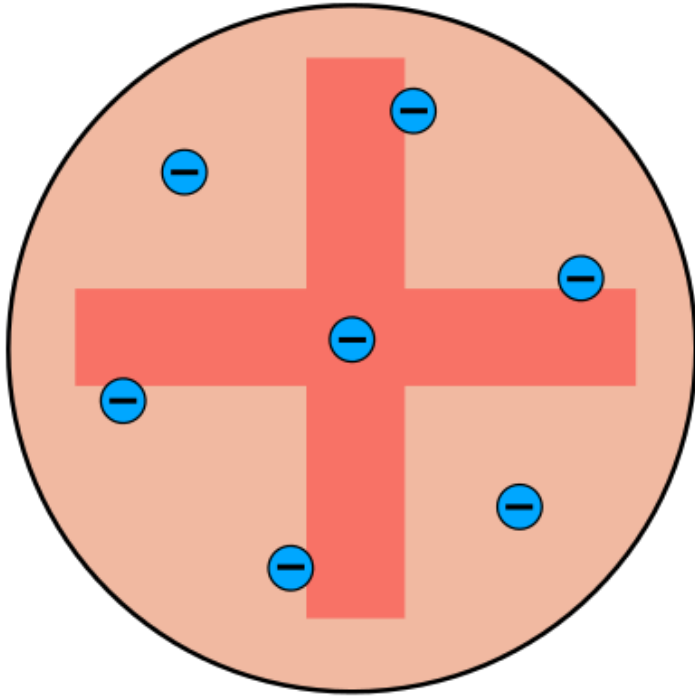
Relação carga/massa do "e-"

$$\begin{aligned}\frac{e}{m_e} &= \frac{1,602 \times 10^{-19} C}{9,109 \times 10^{-31} kg} \\ &= 1,759 \times 10^{11} C / kg\end{aligned}$$

Chegando no modelo atômico atual

- A **Teoria de Dalton** foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- **Thomsom:**
 - 1897 – Descoberta do elétron, a partir de sua pesquisa com raios catódicos;
 - O átomo não era mais indivisível, mas esses “corpuscles” eram seus *building blocks*;
 - Calcula a massa o elétron, concluindo ser cerca de 1800 vezes menor que a do H, elemento mais leve.
 - Como era conhecido que os átomos eram eletricamente neutros, ele propõe a existência de partículas com carga positivas: **Pudim de passas**

Você já viu um pudim de passas?

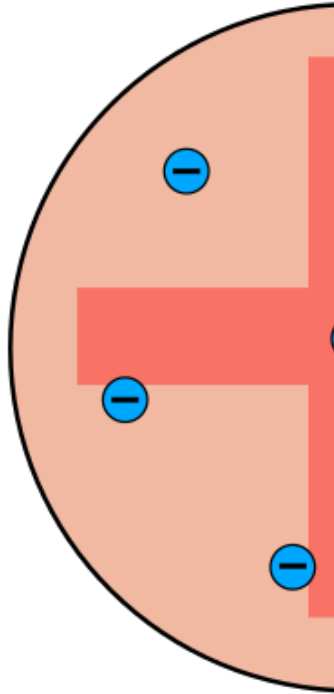


Modelo atômico de Thomson



Plum pudding ou Christmas pudding

Você já viu um pudim de passas?



Modelo atômico



Christmas pudding

Reconhecimento



- Philipp Eduard Anton von Lenard
 - Prêmio Nobel de Física em 1909 : “for his work on cathode rays”
- Joseph John Thomson
 - Prêmio Nobel de Física em 1910: "in recognition of the great merits of his theoretical and experimental investigations on the conduction of electricity by gases"

Chegando no modelo atômico atual

- A Teoria de Dalton foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- **Millikan:**
 - Treze anos depois, determina a carga do elétron, observando a velocidade de queda de gotículas de óleo eletricamente carregadas;

Chegando no modelo atômico atual

Thomson

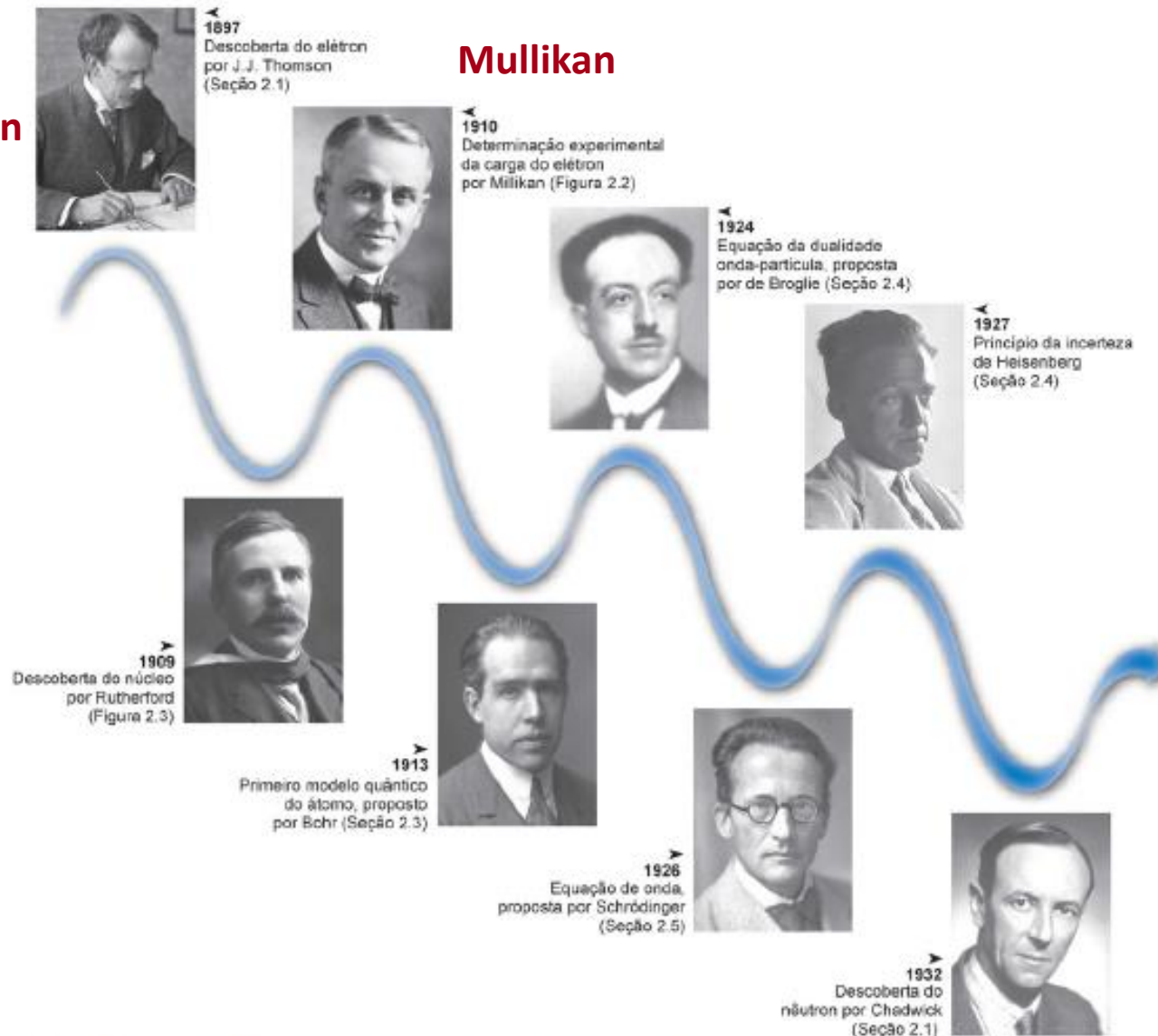
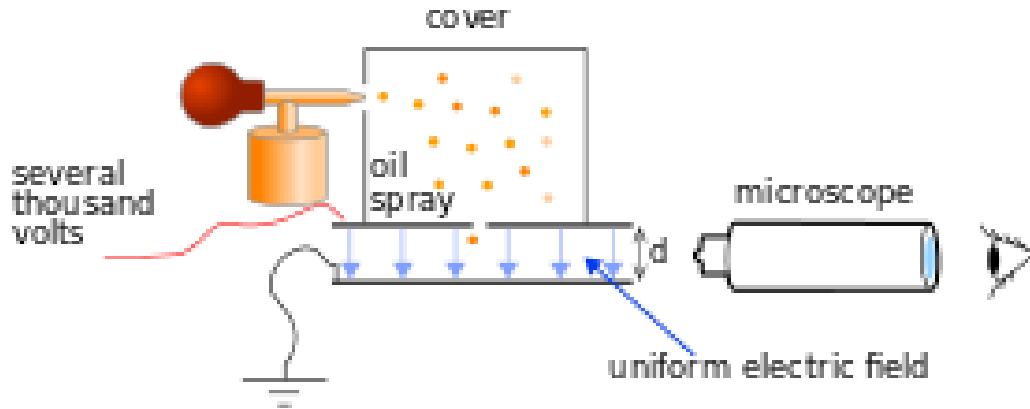


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Experimento de Millikan

Partículas de óleo em equilíbrio mecânico entre a força gravitacional (movendo para baixo) e a força elétrica (movendo para cima).

Como a densidade do óleo era conhecida, a força gravitacional podia ser calculada observando-se o raio da gota.



**Oil droplet experiment:
Robert A. Millikan and
Harvey Fletcher, 1909**



Experimento de Millikan

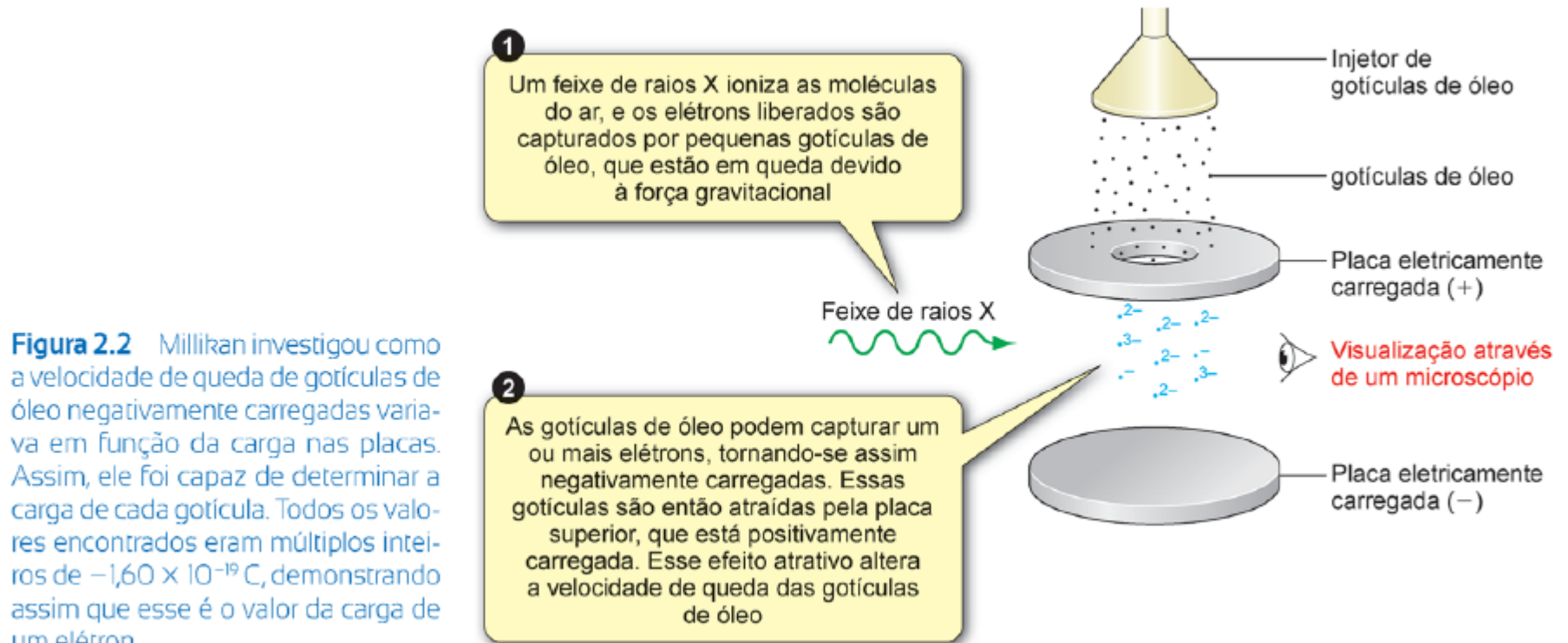
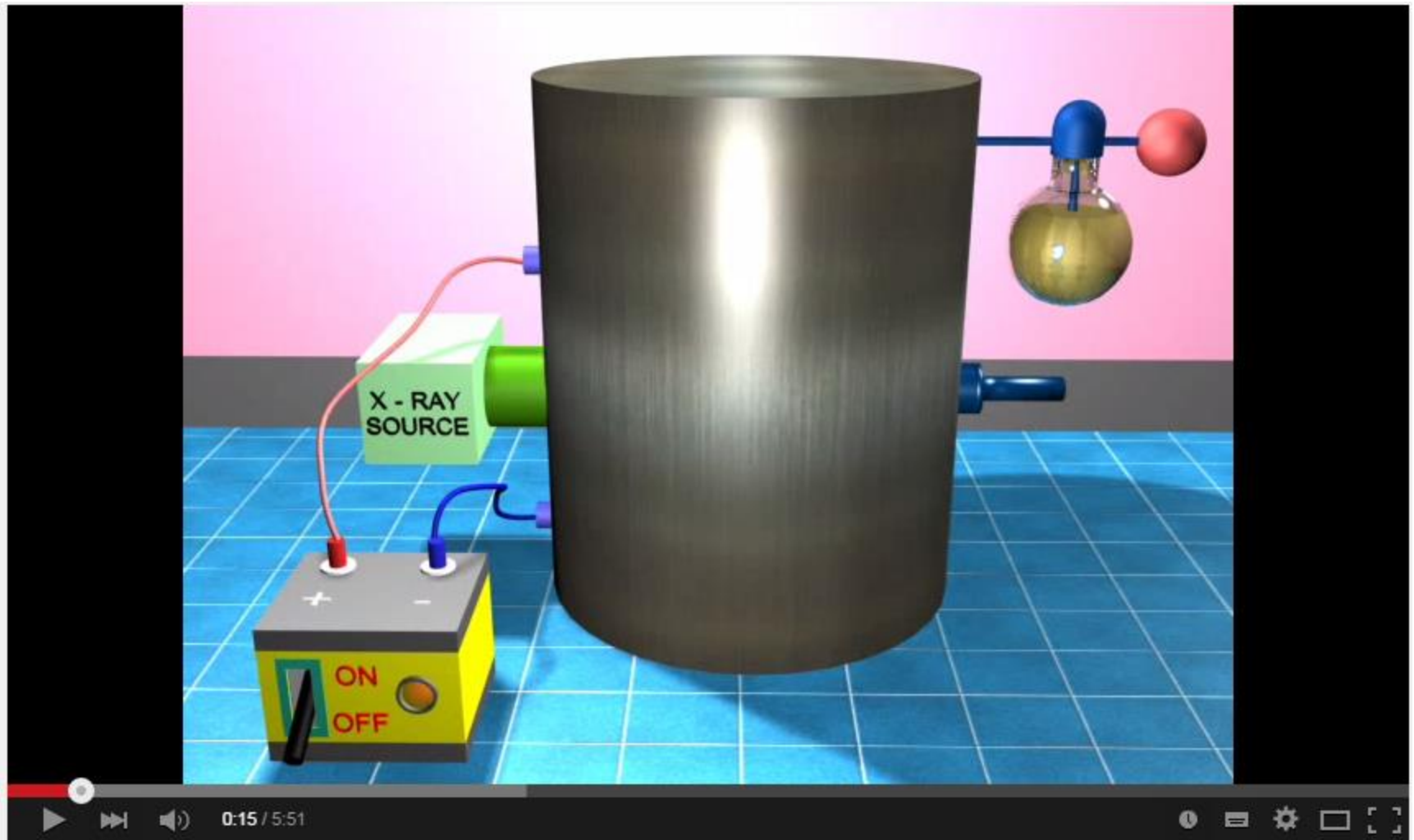


Figura 2.2 Millikan investigou como a velocidade de queda de gotículas de óleo negativamente carregadas variava em função da carga nas placas. Assim, ele foi capaz de determinar a carga de cada gotícula. Todos os valores encontrados eram múltiplos inteiros de $-1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$, demonstrando assim que esse é o valor da carga de um elétron.

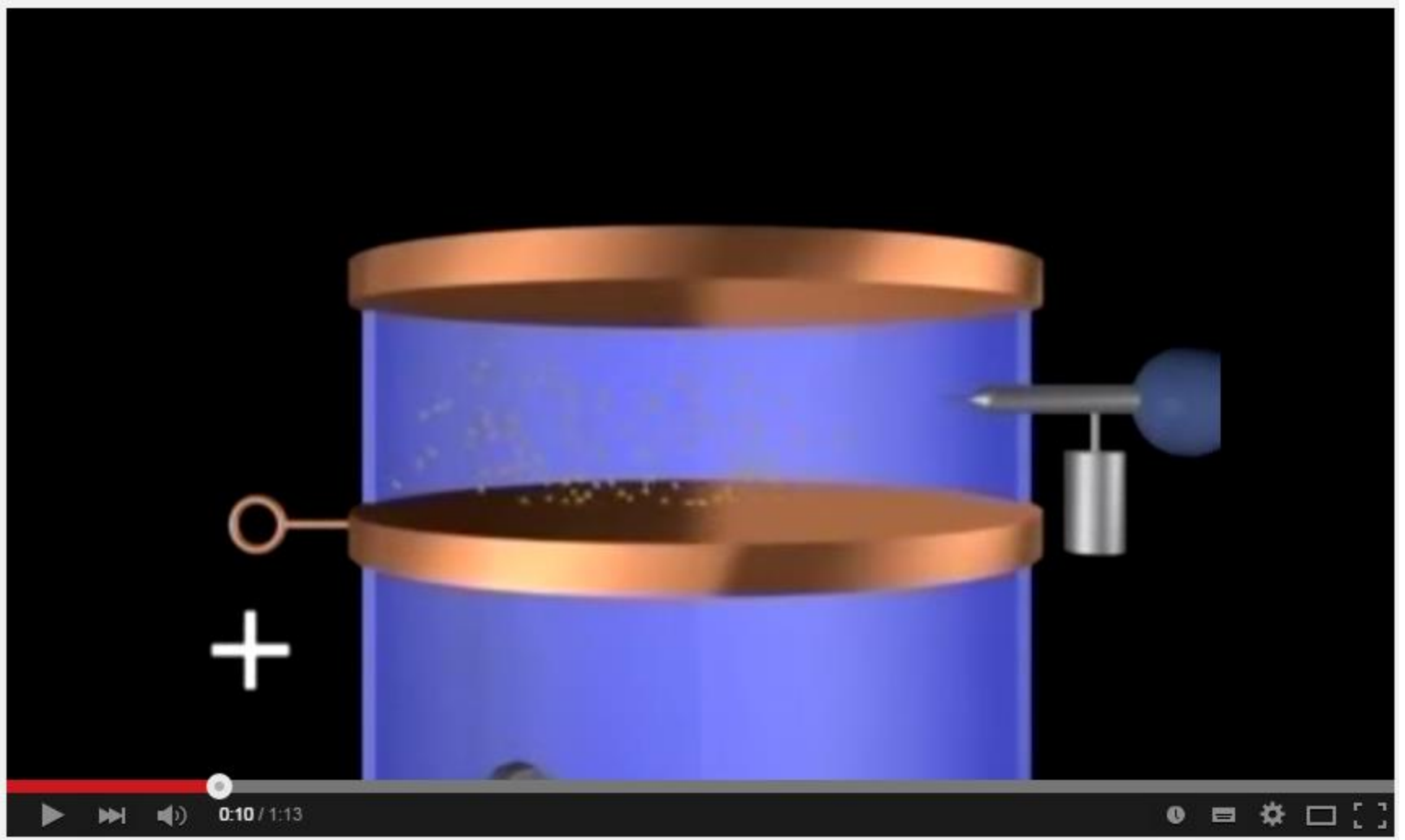
Repetindo o experimento para diferentes gotas, conclui-se que todos os valores encontrados são múltiplos de um valor fundamental: $1.5924(17) \times 10^{-19} \text{ C}$.

Experimento de Millikan



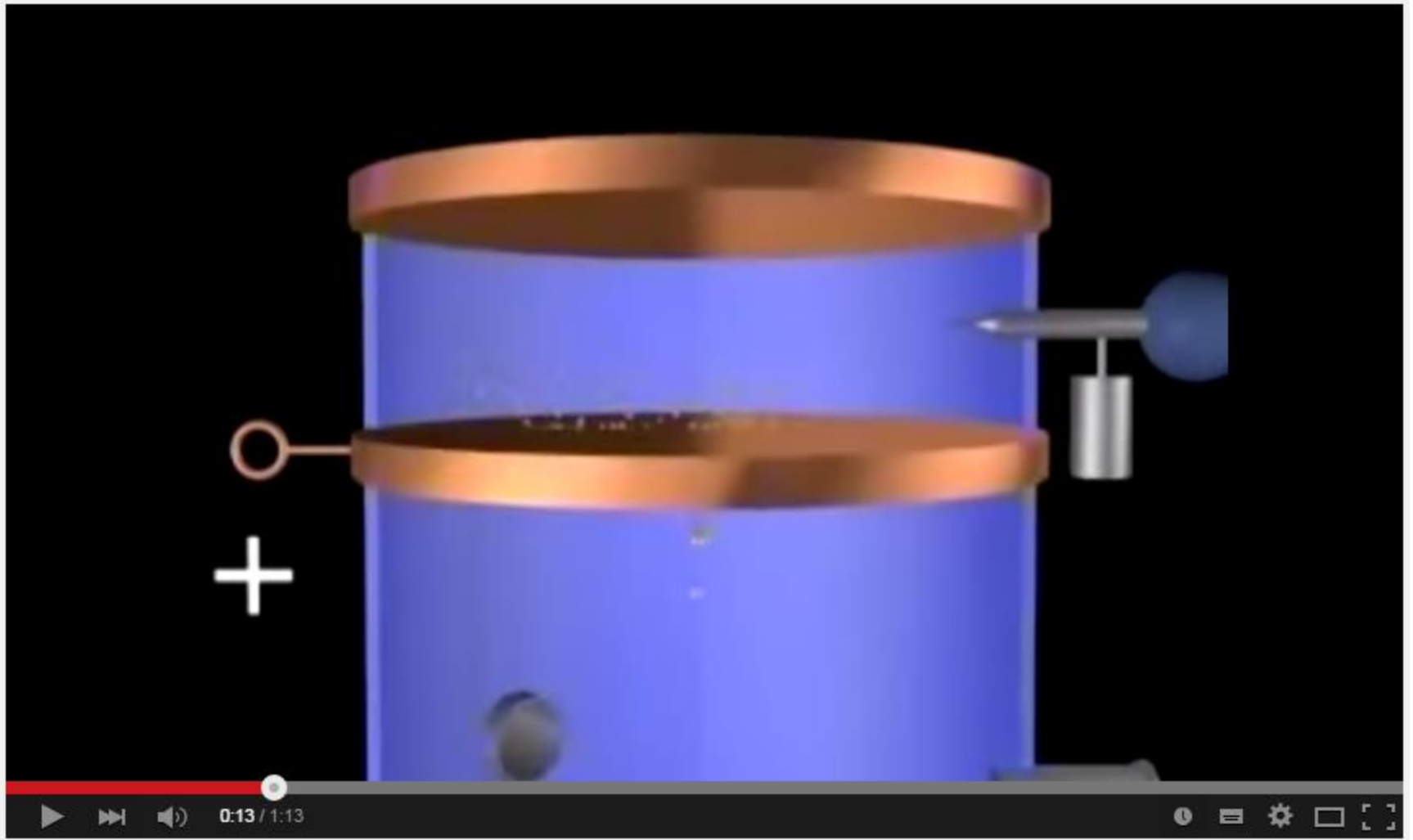
<https://www.youtube.com/watch?v=ijHKu6iXiRk>

Experimento de Millikan



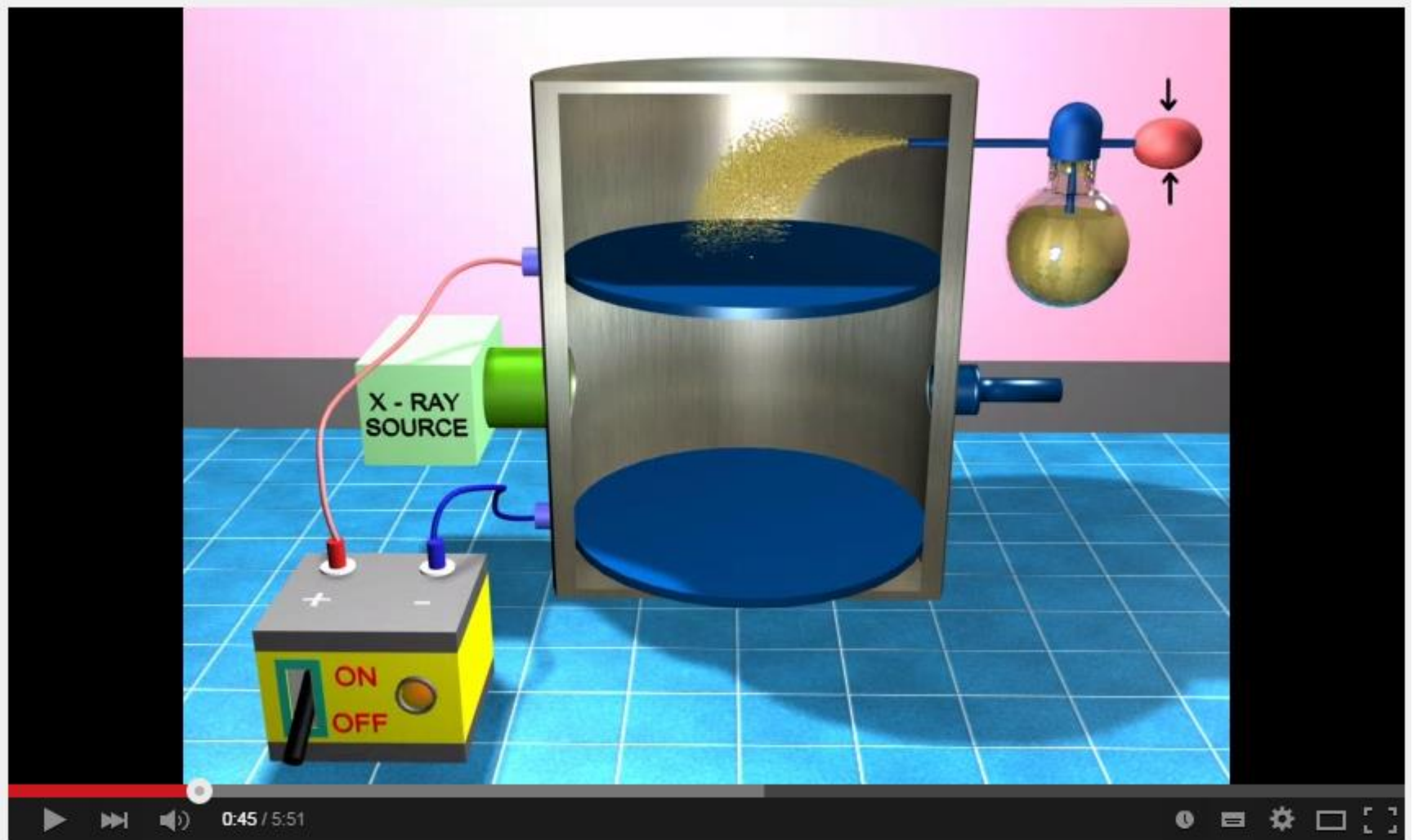
<https://www.youtube.com/watch?v=XMfYHag7Liw>

Experimento de Millikan



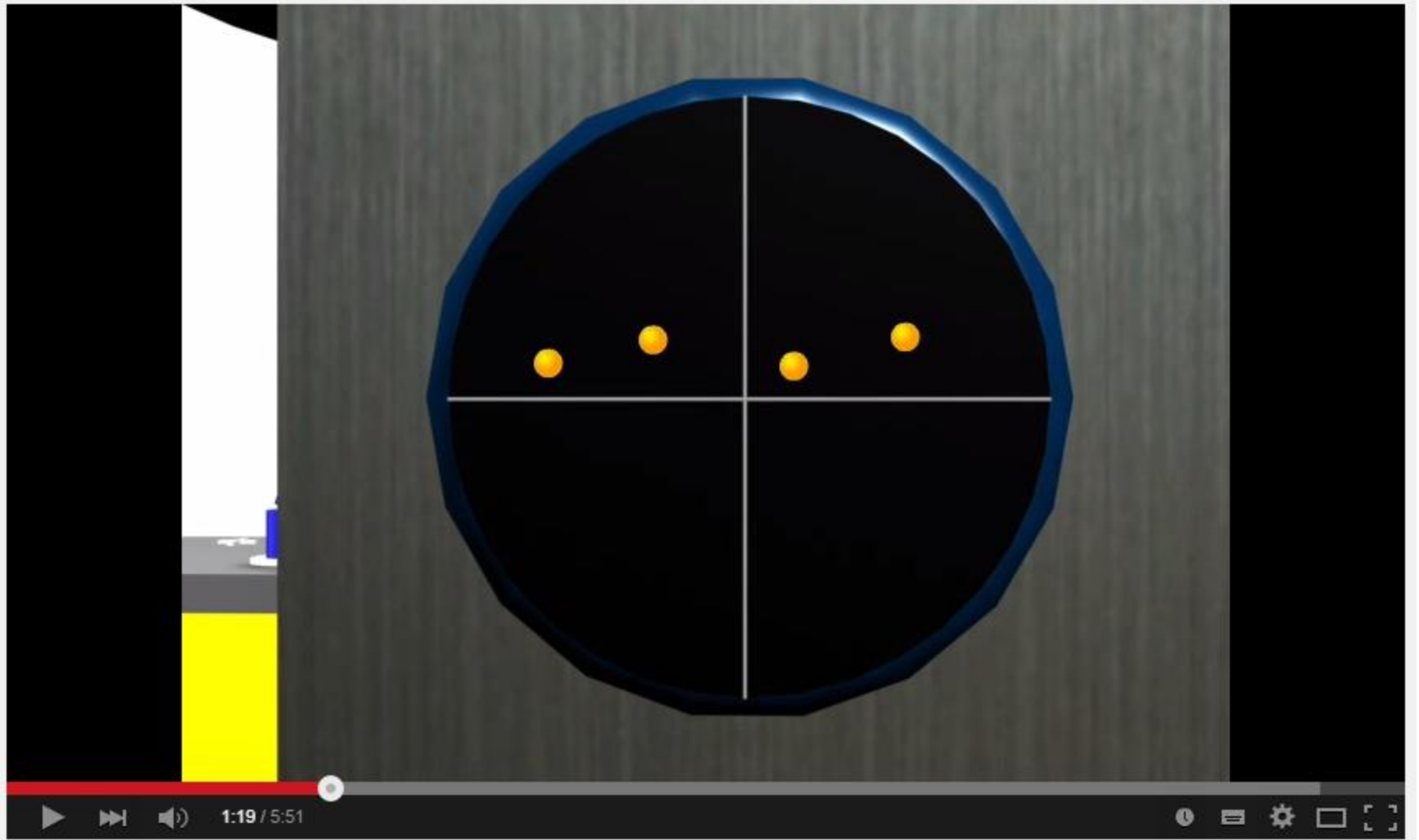
<https://www.youtube.com/watch?v=XMfYHag7Liw>

Experimento de Millikan



<https://www.youtube.com/watch?v=ijHKu6iXiRk>

Experimento de Millikan



<https://www.youtube.com/watch?v=ijHKu6iXiRk>

Reconhecimento



- **Philipp Eduard Anton von Lenard**
 - Prêmio Nobel de Física em 1909 : *“for his work on cathode rays”*
- **Joseph John Thomson**
 - Prêmio Nobel de Física em 1910: *“in recognition of the great merits of his theoretical and experimental investigations on the conduction of electricity by gases”*
- **Robert Andrews Millikan**
 - Prêmio Nobel de Física em 1923: *“for his work on the elementary charge of electricity and on the photoelectric effect”*.

Chegando no modelo atômico atual

- A Teoria de Dalton foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- Com as descobertas de Thomson e Millikan, fica claro a existência de partículas de cargas positivas, chamadas de íons.
- A massa desses íons dependia do gás utilizado, sendo o menor valor encontrado para o hidrogênio.
- Os valores das massa dos demais gases eram múltiplos do encontrado para o hidrogênio: **prótons!**

Chegando no modelo atômico atual

- A Teoria de Dalton foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- **James Chadwick**
 - 1932: Descoberta os nêutrons;
 - Essa partícula já era prevista através da relação entre carga e massa dos átomos, mas demorou para ser observada;
 - Bombardeio de berílio e boro com partículas α (posteriormente, entendida como dois prótons e dois nêutrons).

Reconhecimento



- James Chadwick
 - Prêmio Nobel de Física em 1935 : *“for the discovery of the neutron”*

Chegando no modelo atômico atual

- A Teoria de Dalton foi modificada com a descoberta das partículas subatômicas:
- **Rutherford:**
 - Ao contrário do proposto pela teoria do “pudim de passas”, ele conclui que a massa se concentra toda no núcleo: “modelo planetário”;
 - Núcleo: região pequena e densa, com carga positiva.
 - Ao redor do núcleo havia uma região maior e de baixa densidade, em que se concentrava a carga negativa.

Chegando no modelo atômico atual

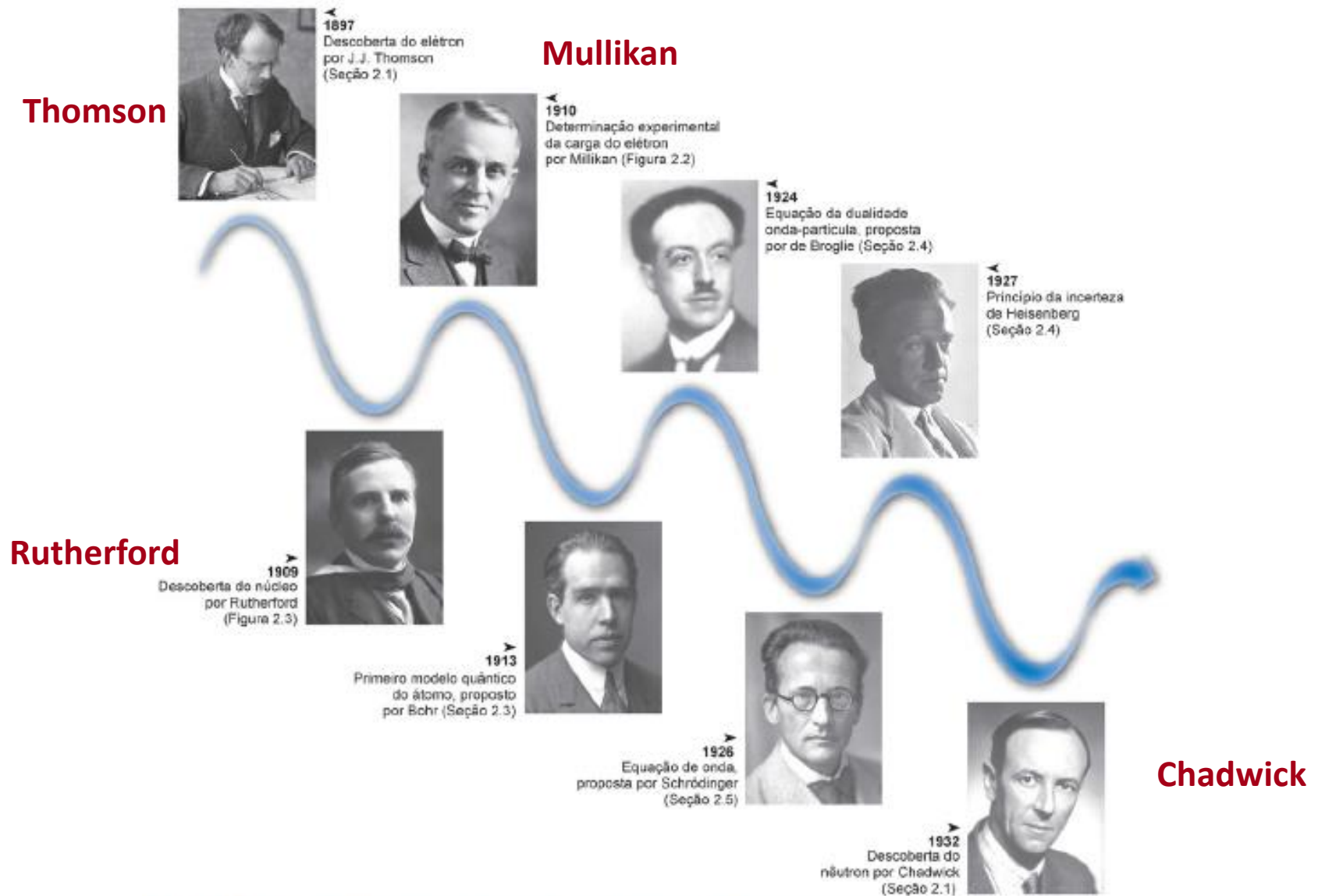
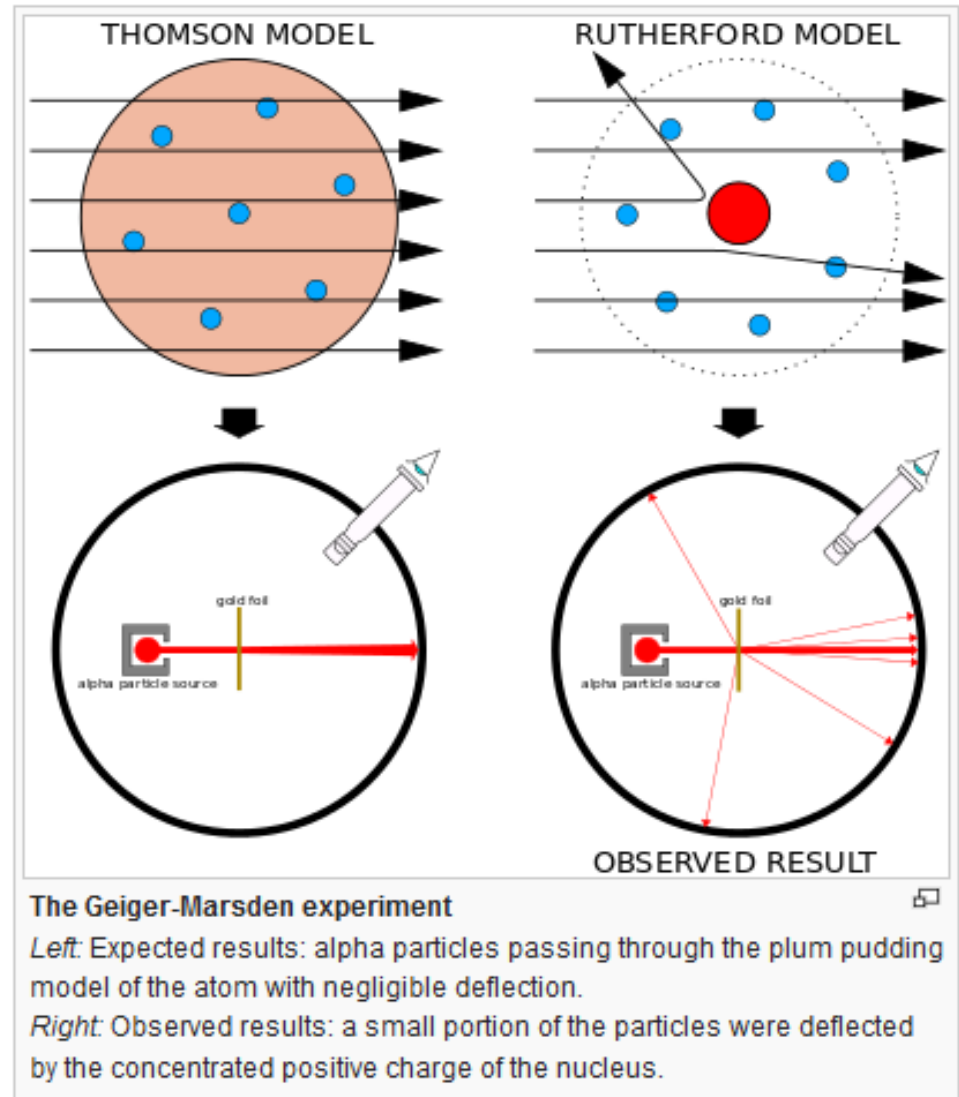


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Modelo de Rutherford

Experimento de Geiger-Marsden (colaboradores de Rutherford)

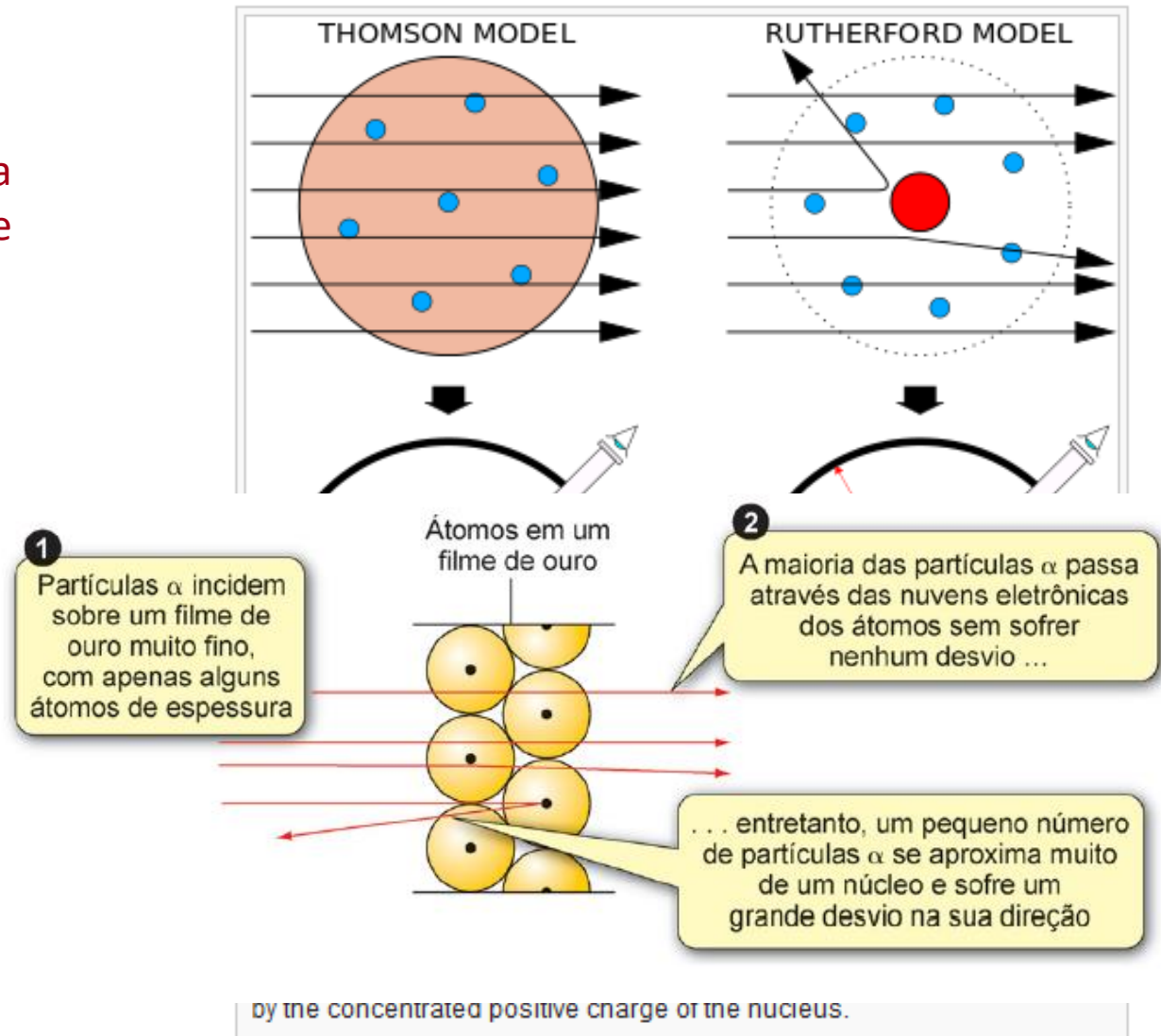
Borbardeamento de um filme fino de ouro com partículas α .



Modelo de Rutherford

Cerca de 1 em cada 20.000 partículas sofre desvio maior que 90° .

Figura 2.3 A maioria das partículas α que apresentam carga positiva passa através de um filme metálico sem praticamente nenhuma mudança na sua direção. Entretanto, cerca de uma em cada 20.000 partículas sofre um desvio de um ângulo muito grande devido às interações repulsivas com os núcleos que têm carga positiva. O número ínfimo de partículas desviadas indica que o tamanho do núcleo é muito menor do que o tamanho do átomo.



Modelo de Rutherford

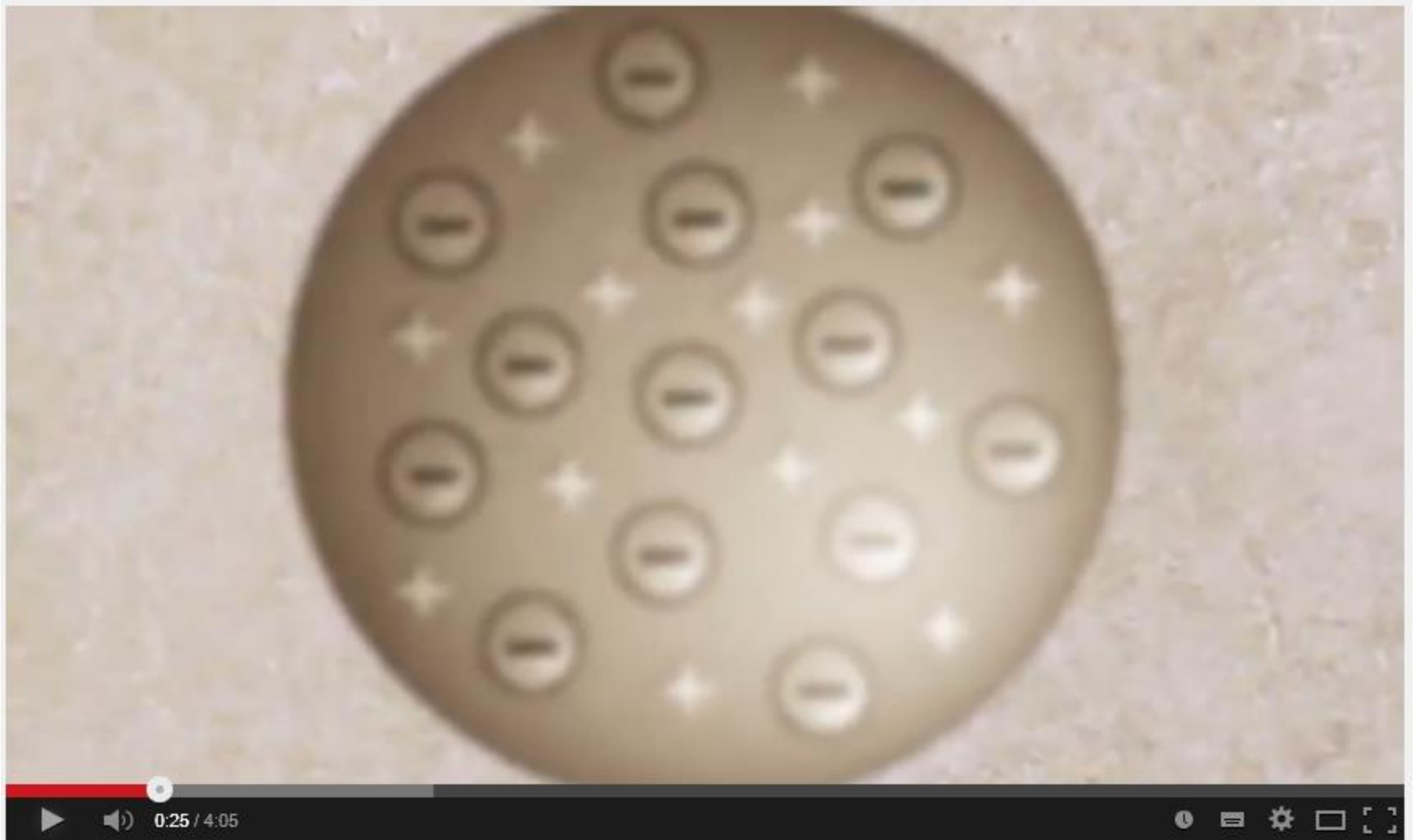
**It's 100 years since Ernest Rutherford
'discovered' the atomic nucleus.**

**The experiment he used is part of
science folklore.**

Here's a modern reconstruction...

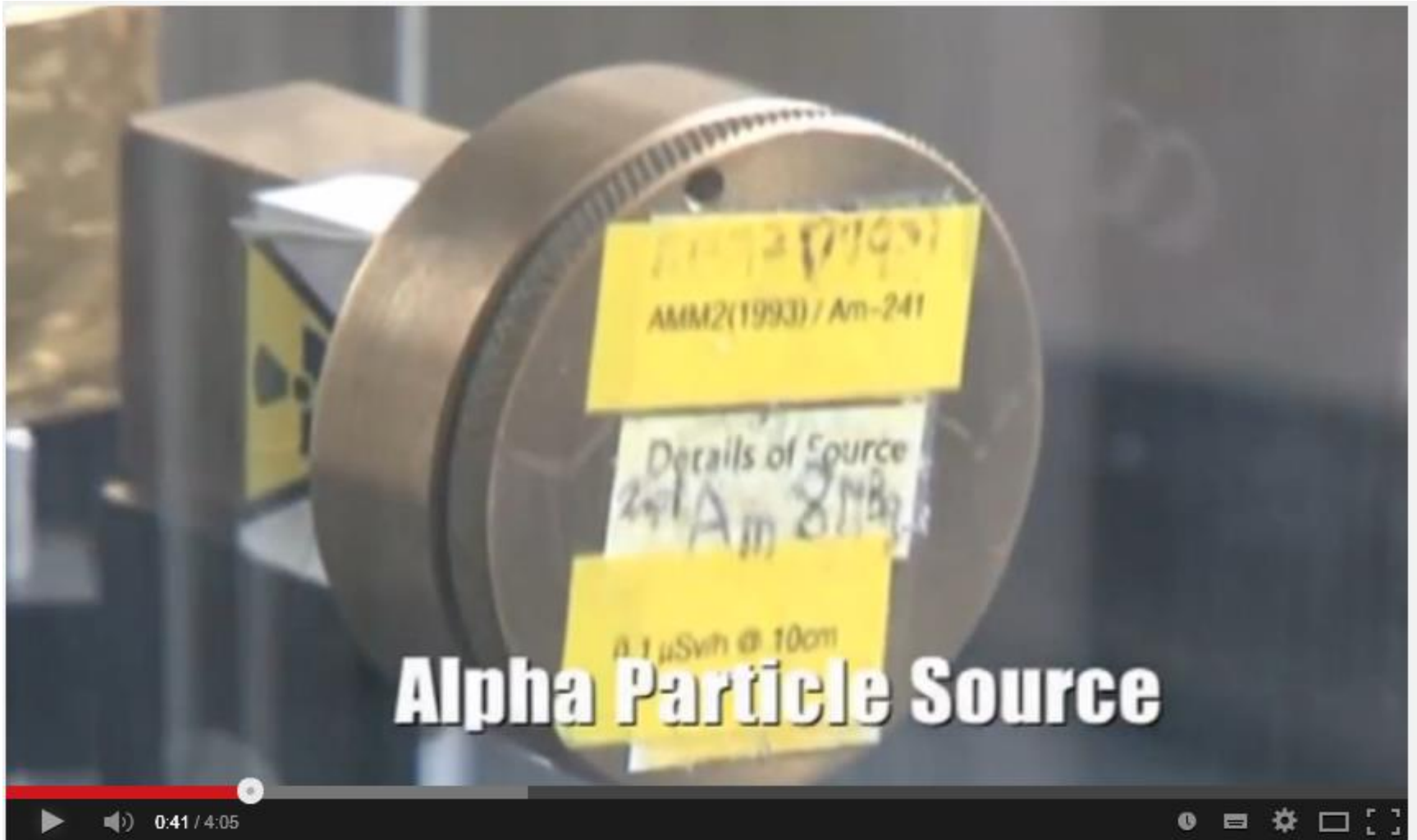


Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford

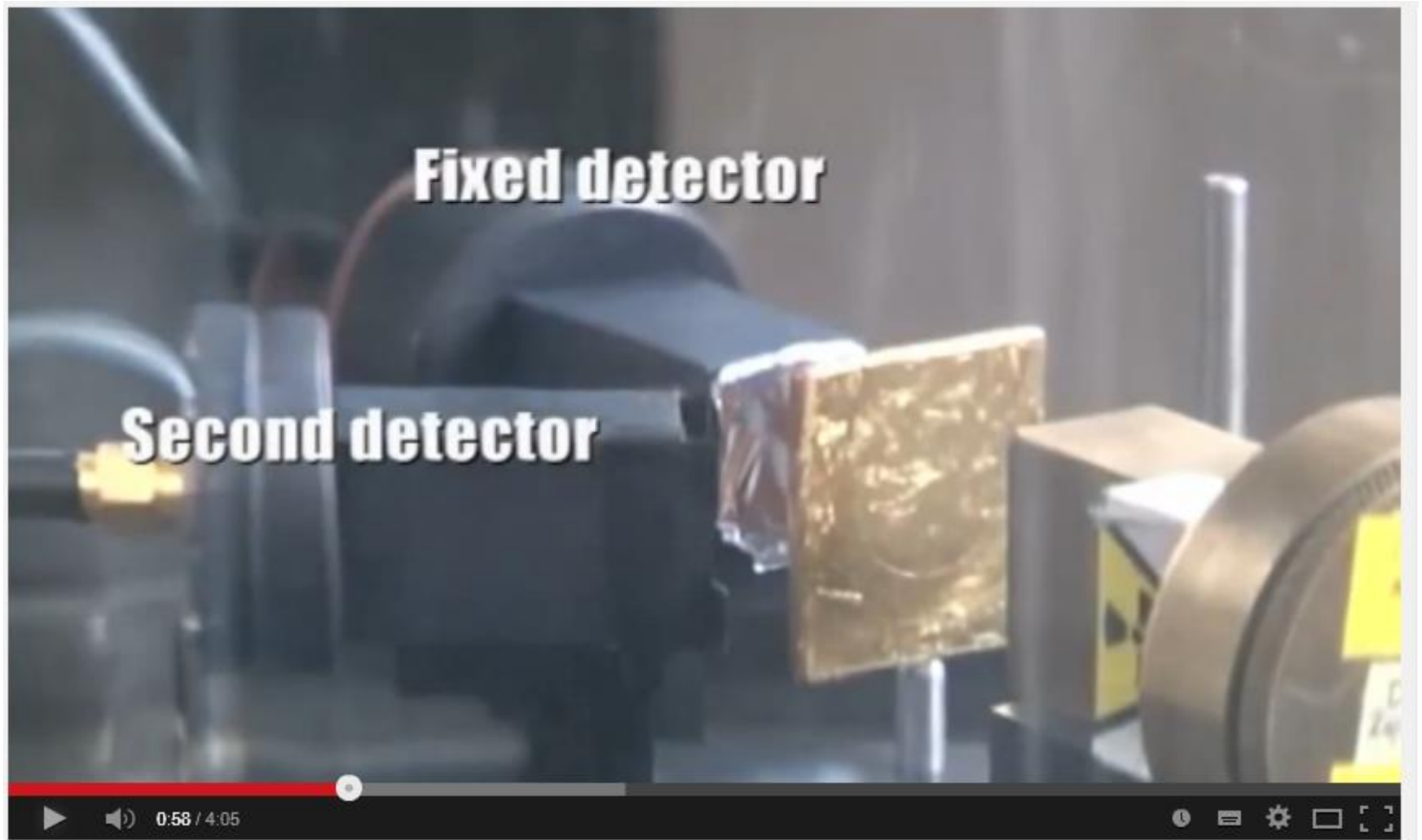


Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



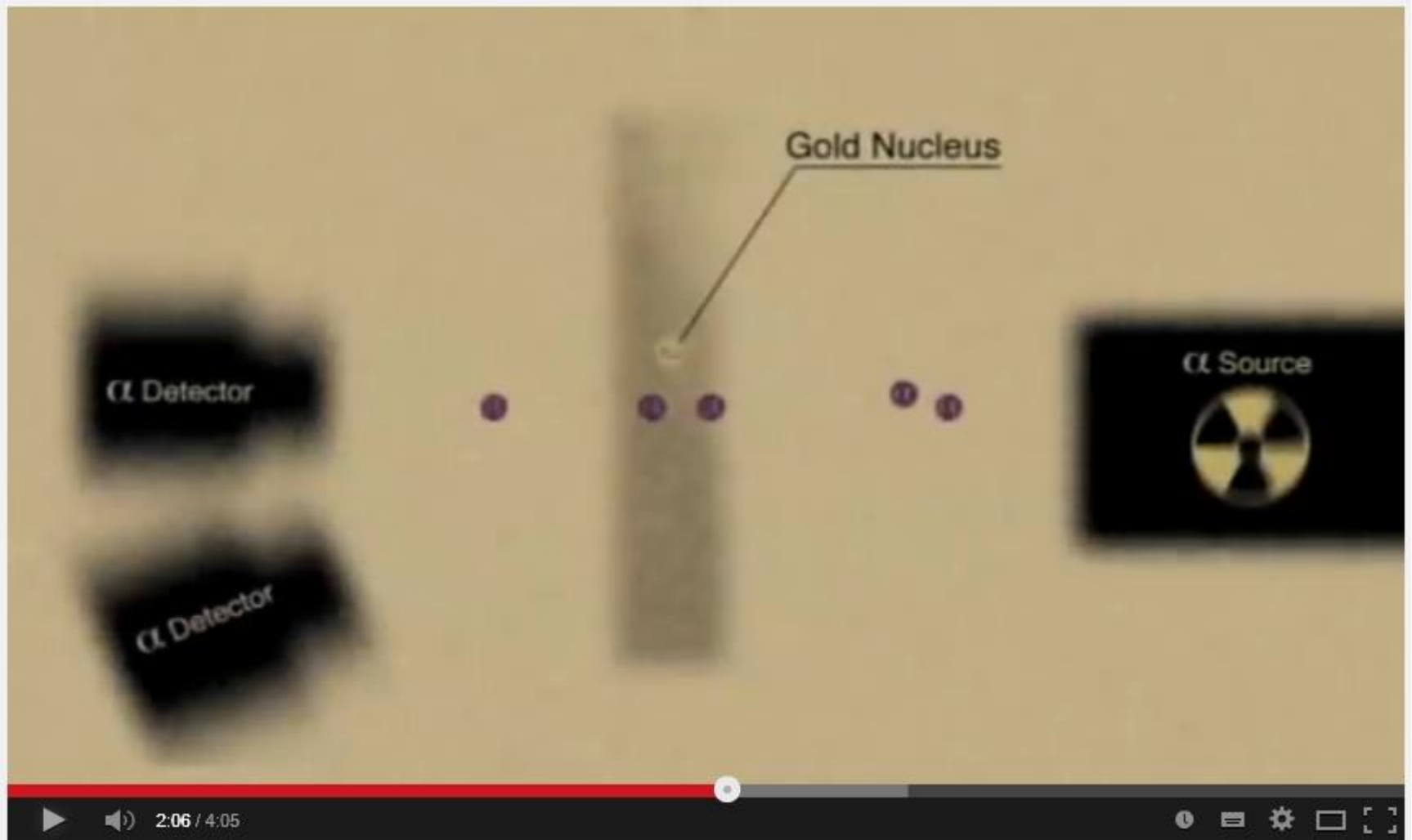
<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



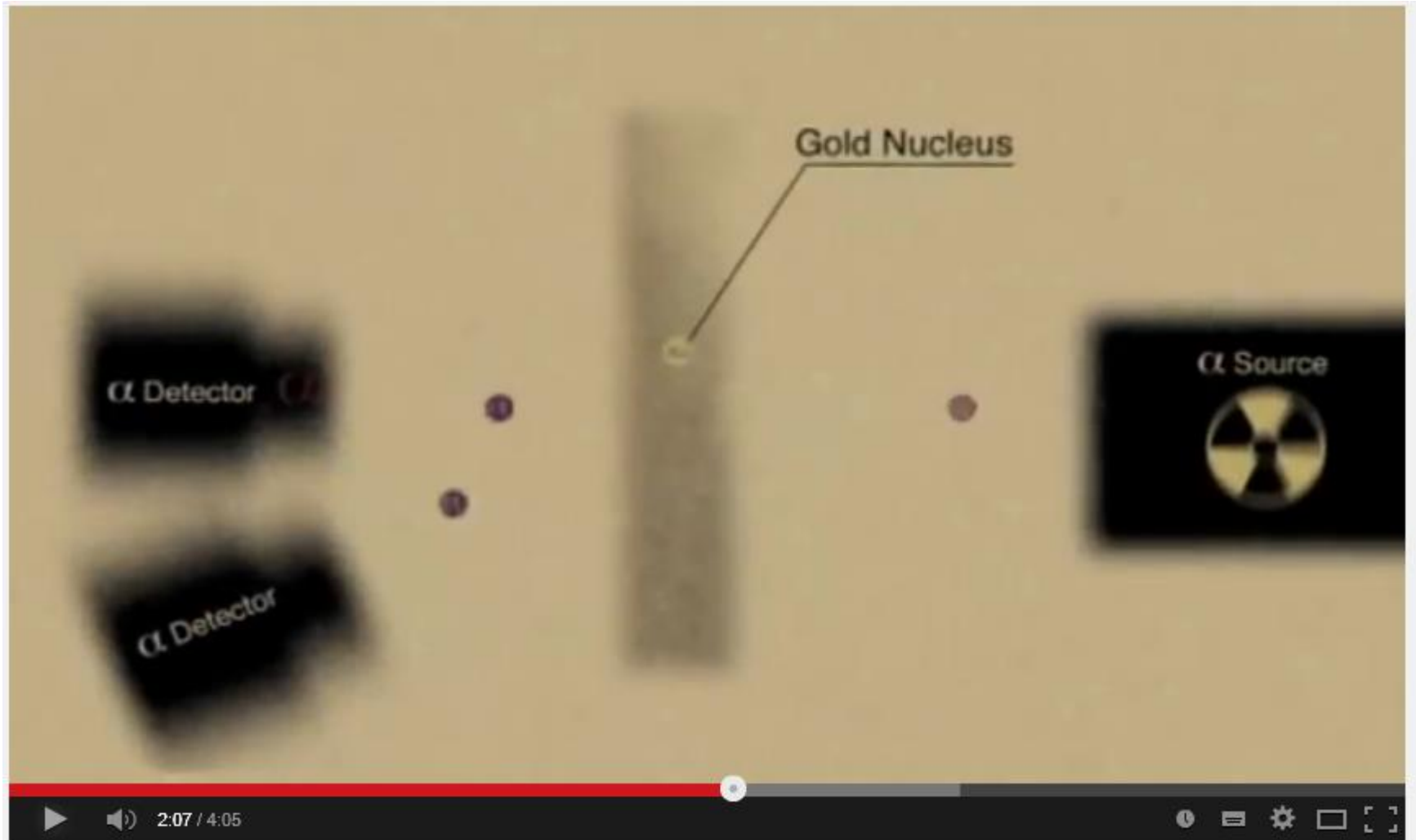
<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



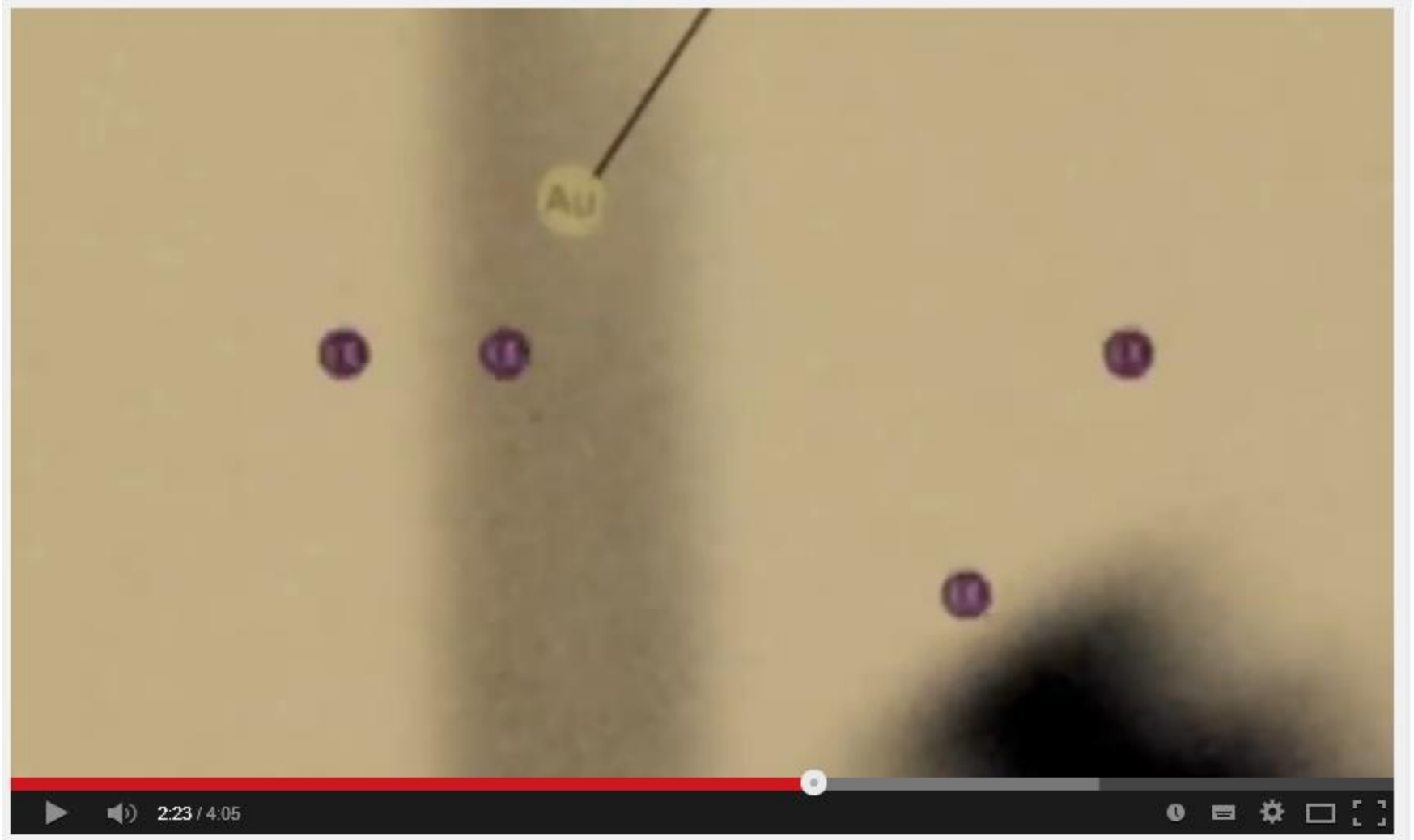
<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



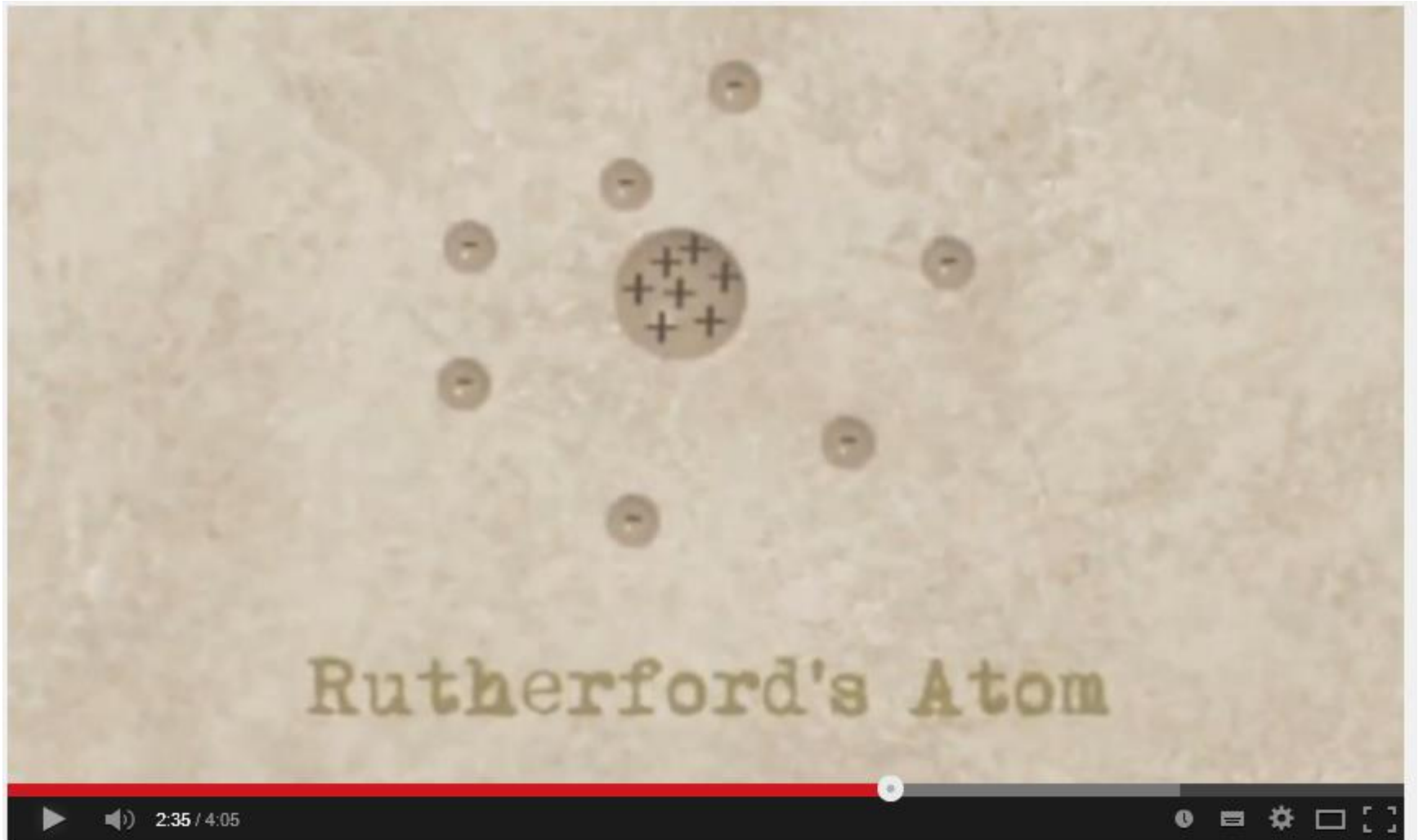
<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford



<https://www.youtube.com/watch?v=XBqHkraf8iE>

Modelo de Rutherford

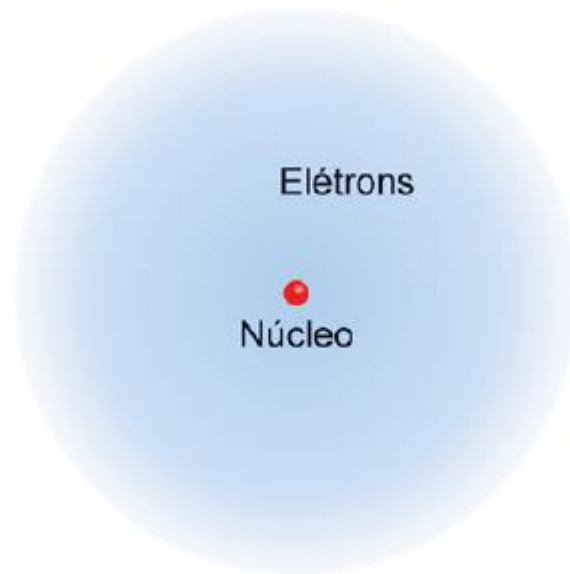


Figura 1.6 Modelo clássico simples do átomo. Os elétrons com carga negativa circundam um núcleo com carga positiva, de modo que, no todo, o átomo é eletricamente neutro.

Reconhecimento



- James Chadwick
 - Prêmio Nobel de Física em 1935 : *“for the discovery of the neutron”*
- Ernest Rutherford
 - Prêmio Nobel de Química em 1908: *“for his investigations into the disintegration of the elements, and the chemistry of radioactive substances”*.

Propriedades das partículas subatômicas

Tabela 2.1 Propriedades das partículas subatômicas

	Massa/kg	Massa relativa	Carga/C	Carga relativa
Elétron, e	$9,1094 \times 10^{-31}$	1	$-1,602 \times 10^{-19}$	-1
Próton, p	$1,6726 \times 10^{-27}$	1836	$+1,602 \times 10^{-19}$	+1
Nêutron, n	$1,6749 \times 10^{-27}$	1839	0	0

Introdução ao modelo Quântico

- O **átomo de Bohr**:
- O **modelo de Rutherford** tinha duas lacunas importantes:
 - **1)** Diferentemente de planetas orbitando ao redor do sol, elétrons são partículas carregadas. Sabe-se que uma carga elétrica acelerando emite ondas eletromagnéticas (Princípio de Larmor, do eletromagnetismo). Por que o elétron não perde energia, se aproximando do núcleo em órbita elíptica até colidir?
 - **2)** Como explicar as bandas finas observadas nos espectros de emissão e absorção dos átomos?

Estrutura e propriedades atômicas

Átomo de Bohr



Estrutura e propriedades atômicas

Conceitos iniciais

Chegando no modelo atômico atual

Thomson Descoberta do elétron

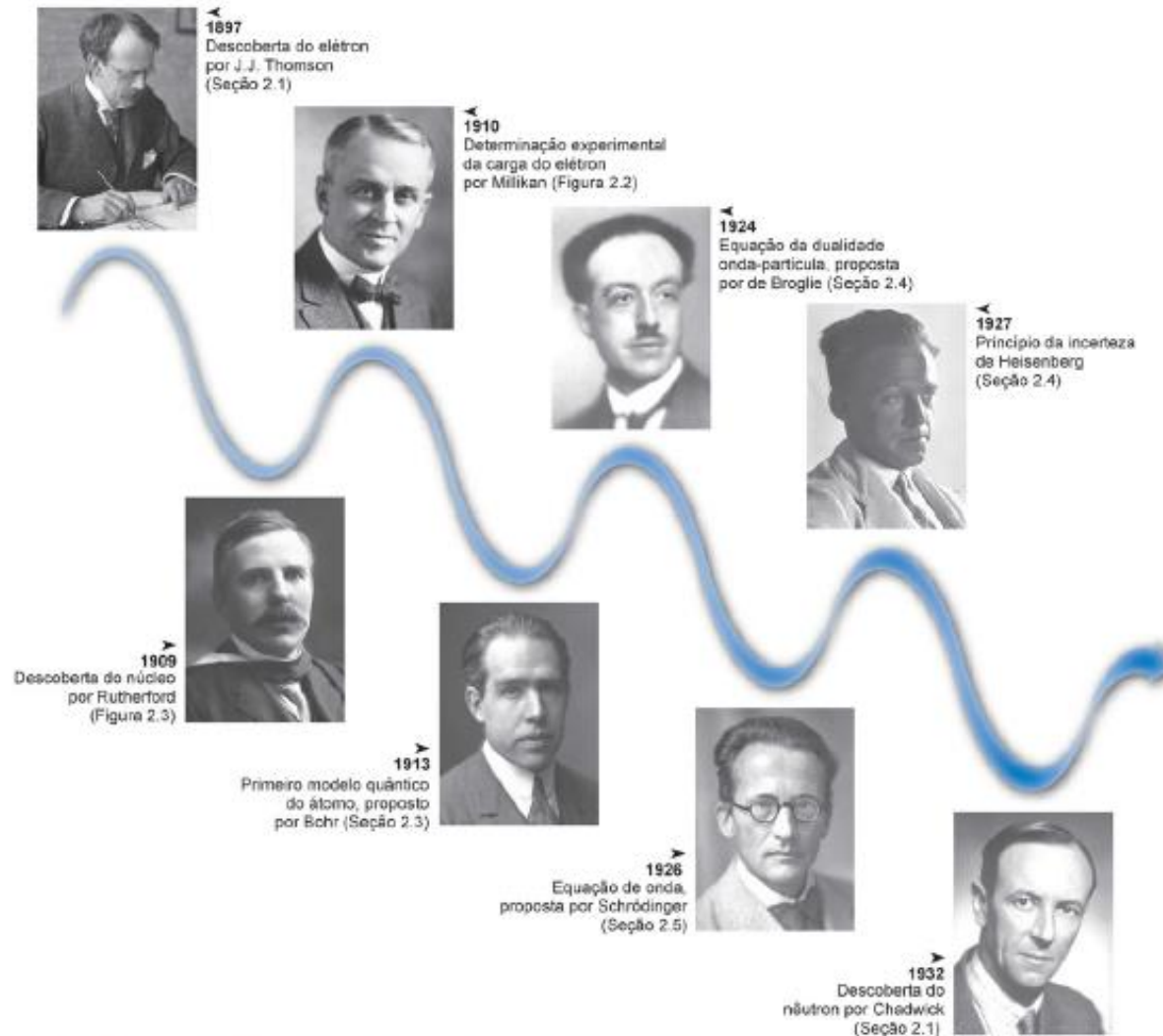


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Chegando no modelo atômico atual

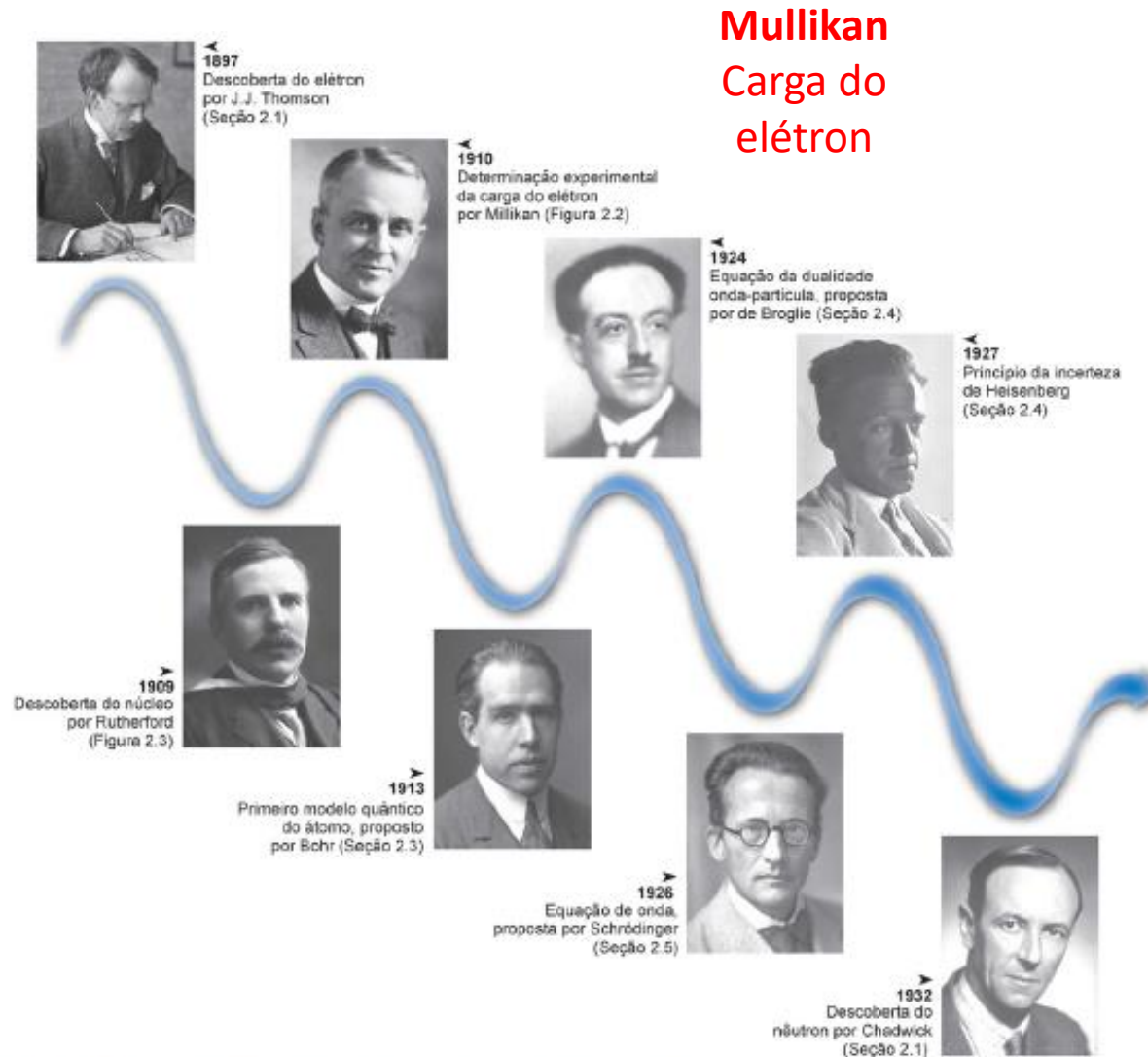
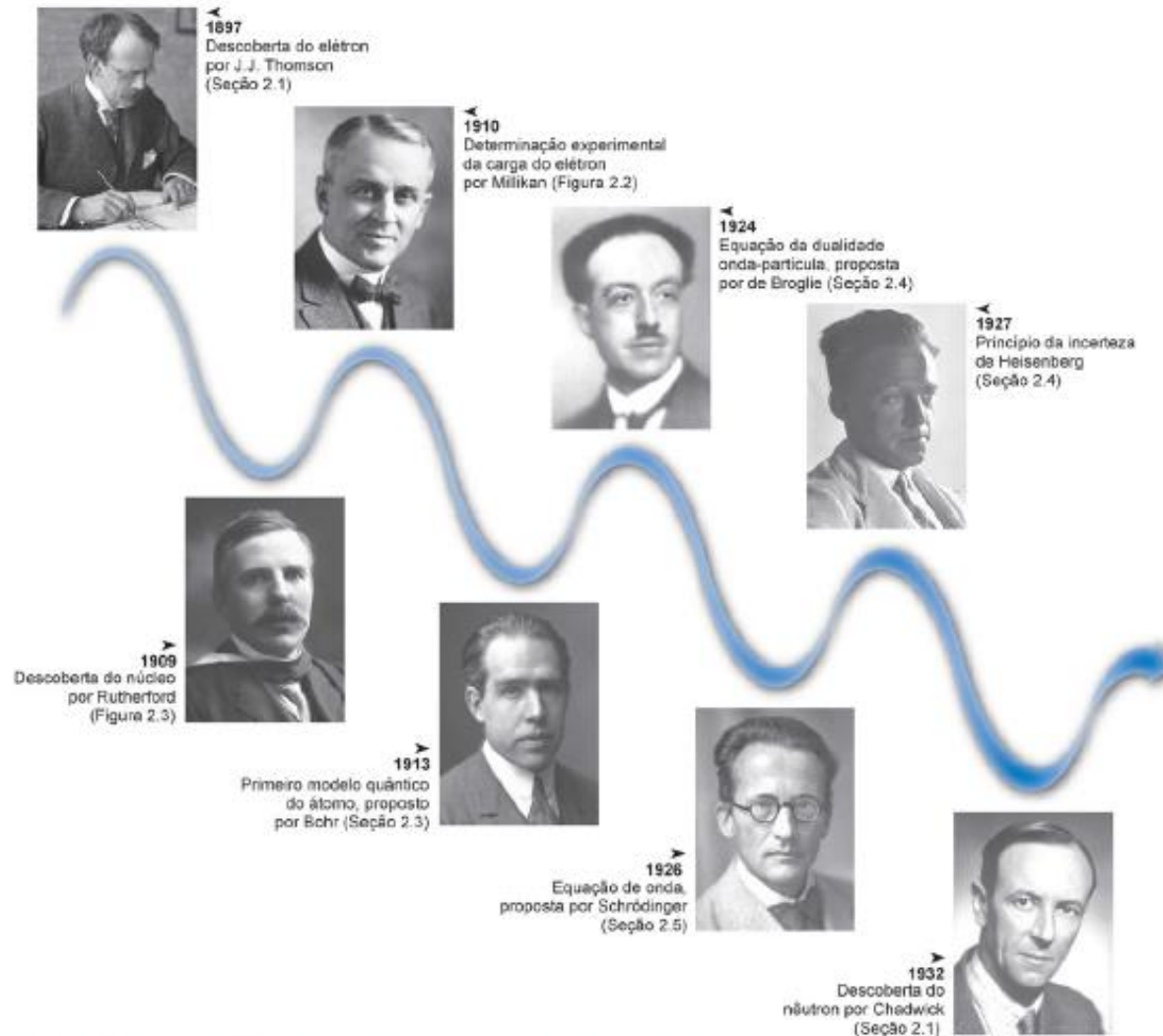


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Chegando no modelo atômico atual



Chadwick
Descoberta do
nêutron

Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Chegando no modelo atômico atual

Rutherford
Descoberta do
núcleo

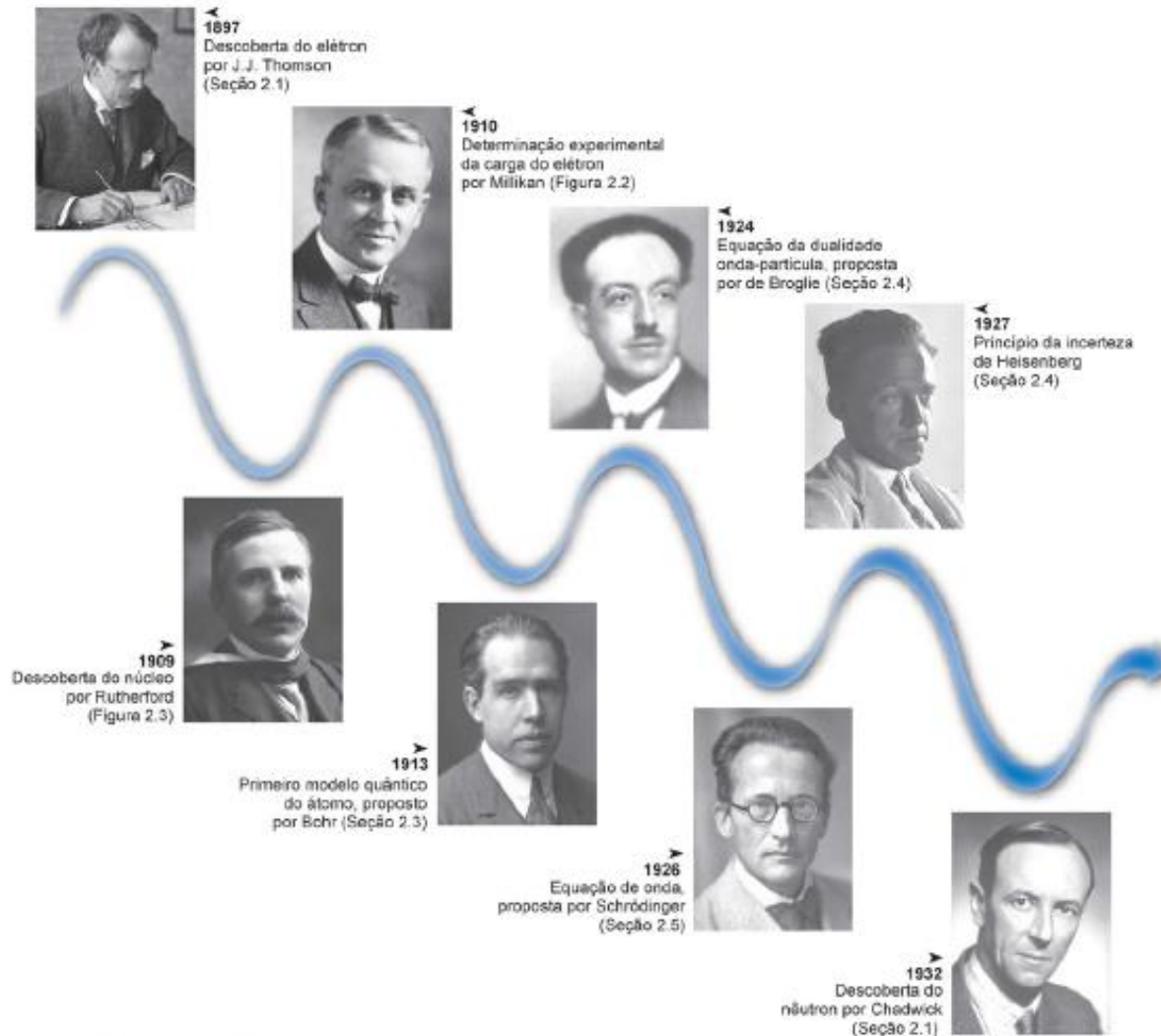


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Chegando no modelo atômico atual

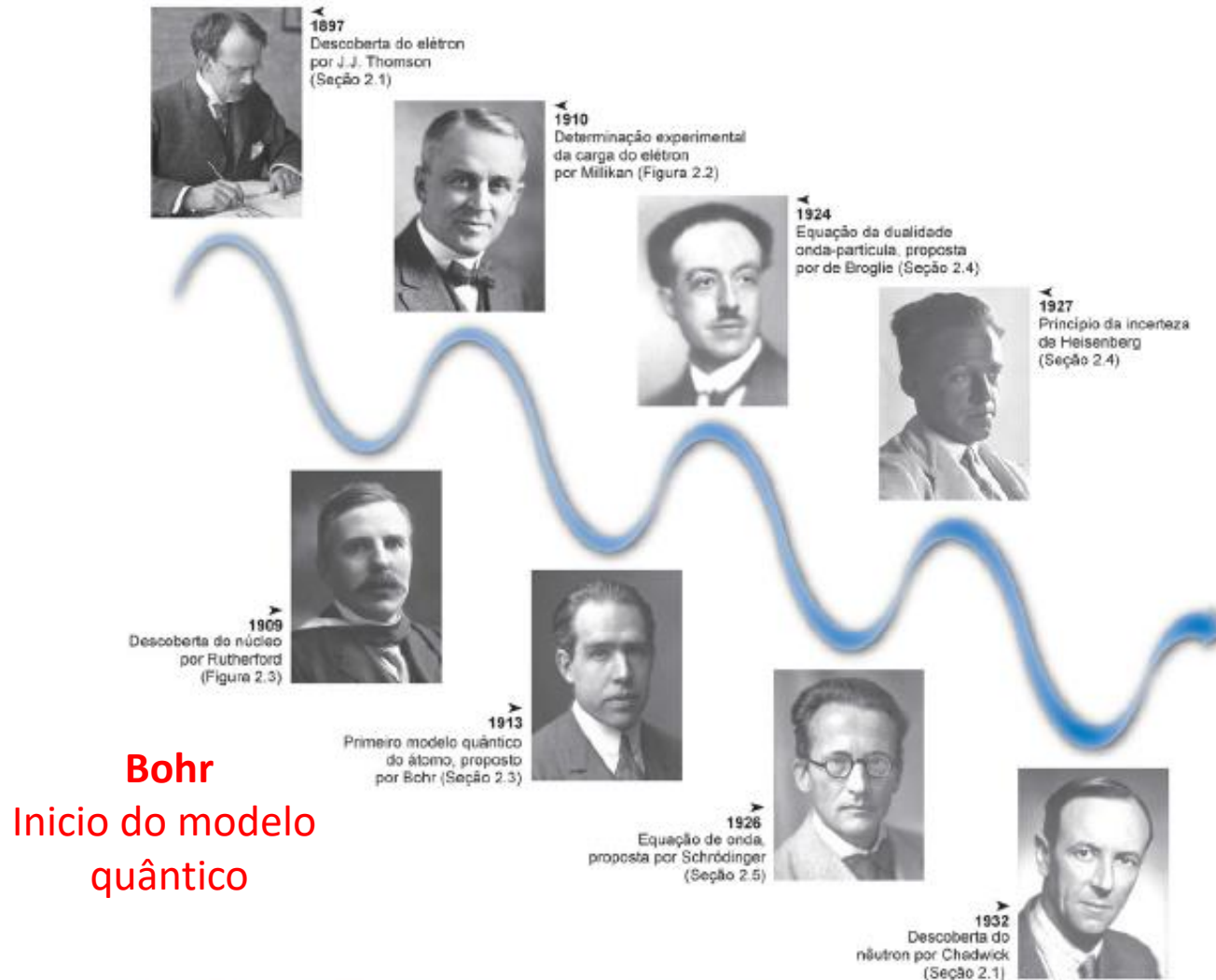


Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Introdução ao modelo Quântico

- O **átomo de Bohr**:
- O **modelo de Rutherford** tinha duas lacunas importantes:
 - **1)** Diferentemente de planetas orbitando ao redor do sol, elétrons são partículas carregadas. Sabe-se que uma carga elétrica acelerando emite ondas eletromagnéticas (Princípio de Larmor, do eletromagnetismo). Por que o elétron não perde energia, se aproximando do núcleo em órbita elíptica até colidir?
 - **2)** Como explicar as bandas finas observadas nos espectros de emissão e absorção dos átomos?

Interação Luz - Matéria

Tabela 2.3 Exemplos de técnicas espectroscópicas

Radiação eletromagnética utilizada	Tipo de espectroscopia	Transição envolvida	Seção
Ondas de rádio	Ressonância magnética nuclear (RMN)	Entre estados de spin nuclear em um campo magnético	11.7, 13.3
Micro-ondas	Ressonância de spin eletrônico (ESR)	Entre estados de spin eletrônico em um campo magnético	Boxe 2.6, 11.7
Micro-ondas	Rotacional	Entre estados rotacionais moleculares	11.4
Infravermelho	Infravermelho (IV)	Entre estados vibracionais moleculares	11.5, 13.2
Visível, ultravioleta	Ultravioleta-visível (UV-VIS)	Entre níveis de energia eletrônica molecular	11.6, 12.4, 28.6
Infravermelho, visível, ultravioleta e raios X	Atômica	Entre níveis de energia eletrônica atômica	2.3, Boxes 2.2 e 2.3, 12.5

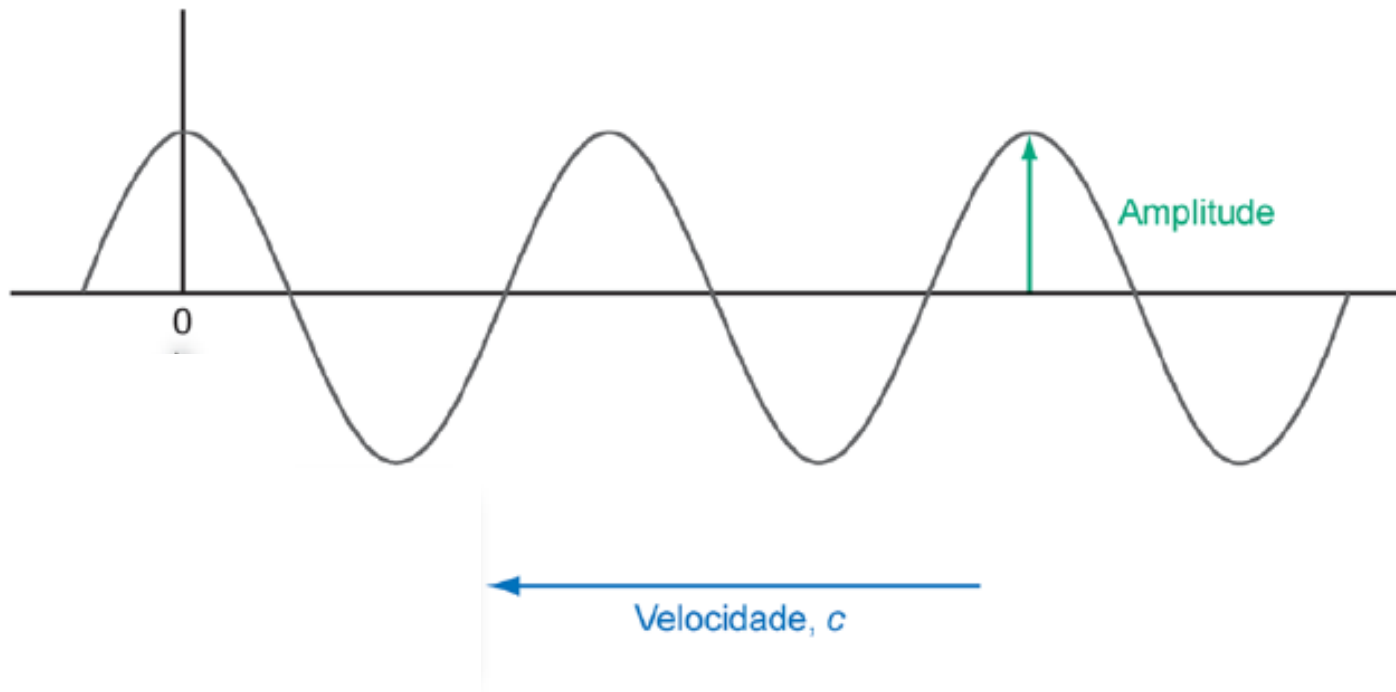
Radiação eletromagnética e Quantização

- Grande parte do que se conhece sobre átomos veio de sua interação com a radiação eletromagnética;
- Em particular, a **espectroscopia atômica** teve grande contribuição!
- Dessa forma, para entendermos mais o desenvolvimento do modelo atômico, é interessante entender mais da radiação eletromagnética e sua interação com átomos.

Radiação eletromagnética e Quantização

- Alguns conceitos iniciais:
 1. Radiação eletromagnética

Radiação eletromagnética



Radiação eletromagnética

O que difere cada
“tipo de radiação”?

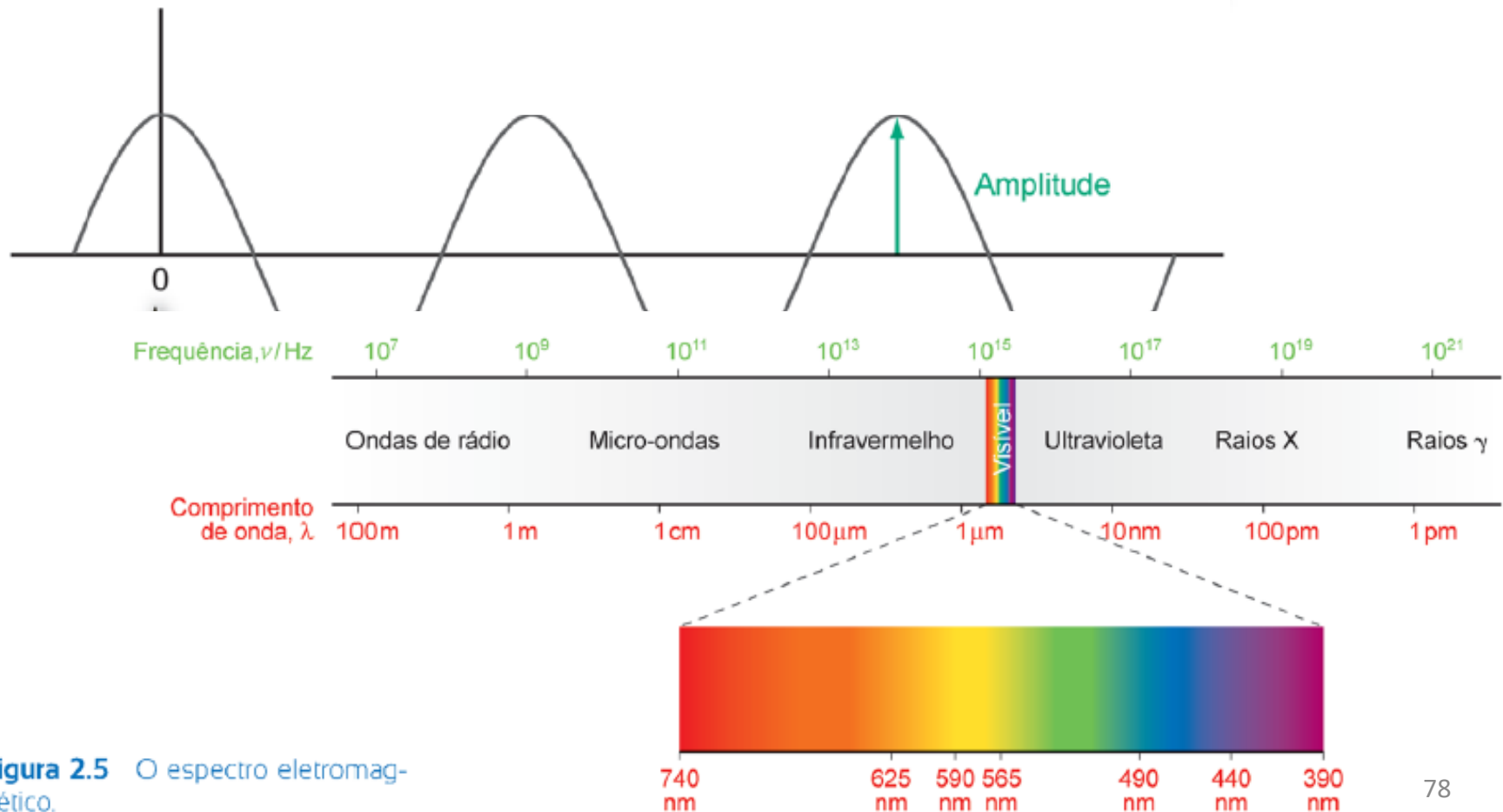
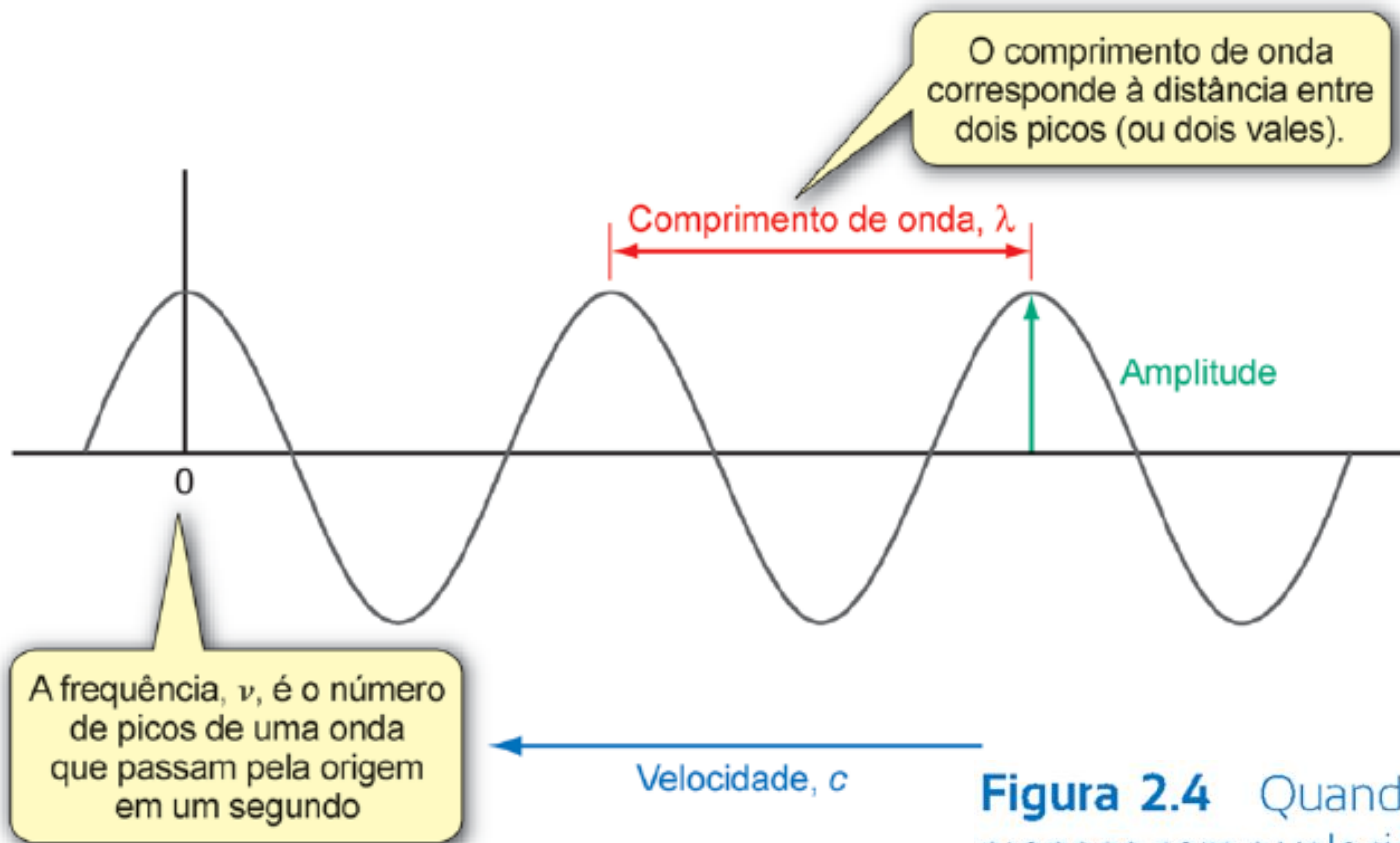


Figura 2.5 O espectro eletromagnético.

Radiação eletromagnética



$$c = \lambda \nu$$

Figura 2.4 Quando uma onda se propaga com a velocidade c , a frequência, ν , é igual ao número de picos da onda (pontos de máximo) que passam pela origem (0) por segundo.

Radiação eletromagnética

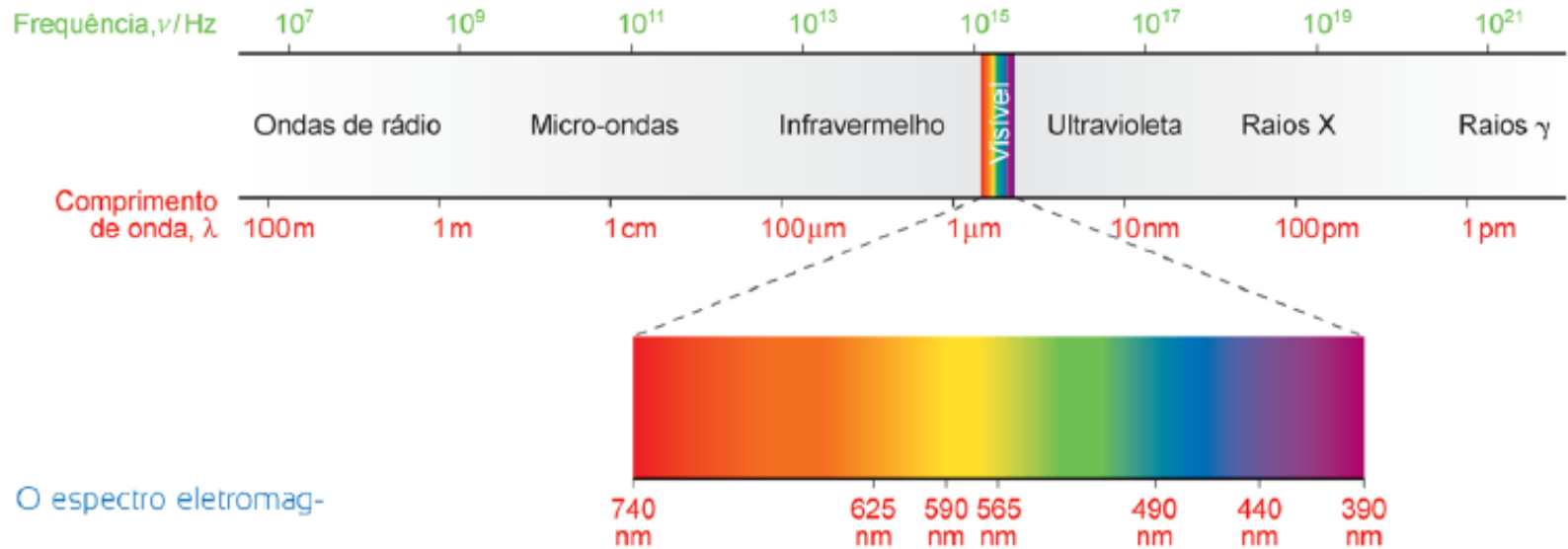


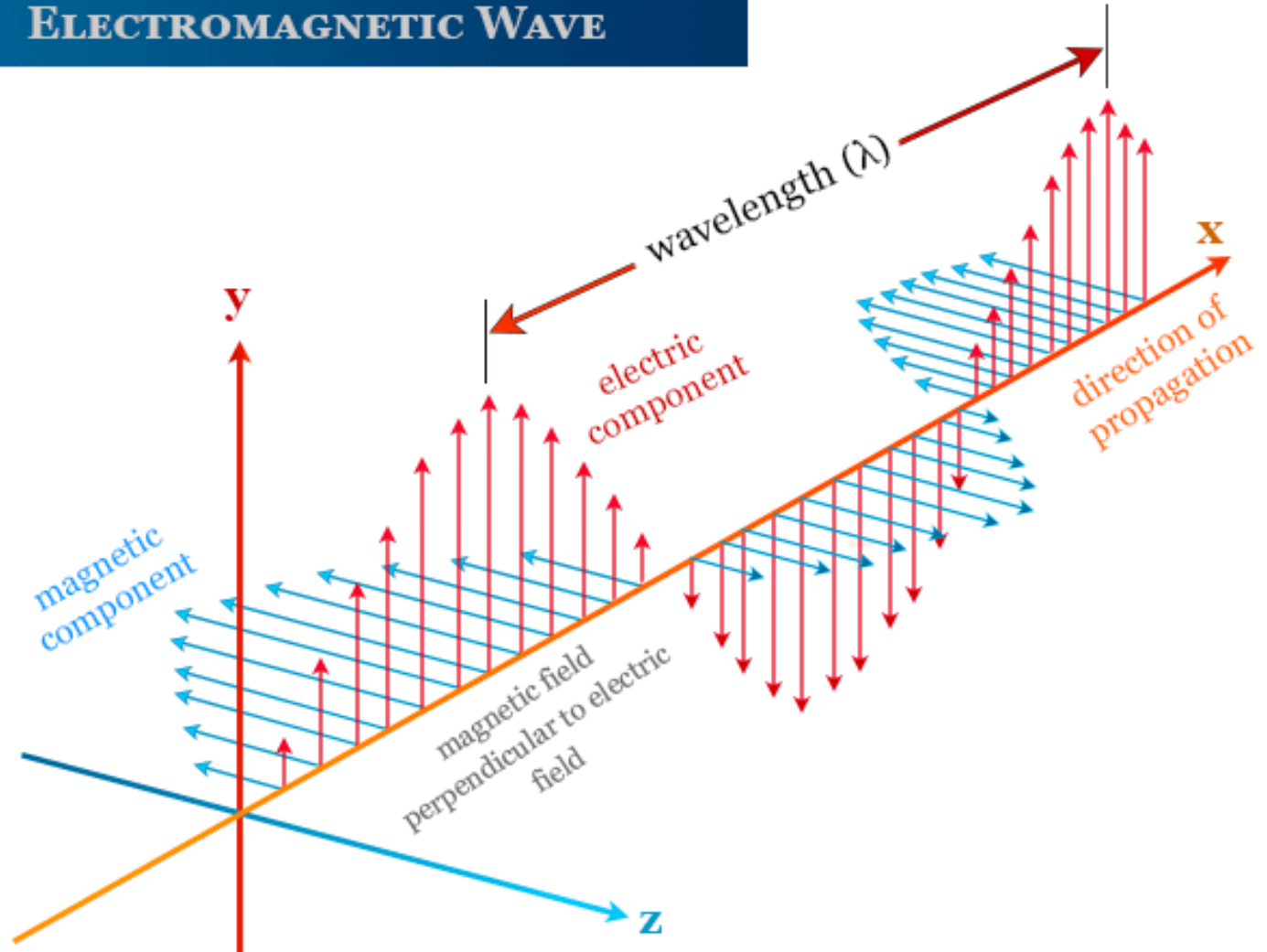
Figura 2.5 O espectro eletromagnético.

Tabela 2.2 As cores da luz visível

Cor	Faixa de comprimento de onda/nm
Vermelho	740–625
Laranja	625–590
Amarelo	590–565
Verde	565–490
Azul	490–440
Violeta	440–390

Radiação eletromagnética

ELECTROMAGNETIC WAVE



Radiação eletromagnética e Quantização

- Alguns conceitos iniciais:
 1. Radiação eletromagnética
 2. Quantização

Quantização

- Tratando a luz como partícula, podemos explicar alguns fenômenos envolvidos.
- Em 1900, Max Plank propõe que a luz só poderia ser emitida ou absorvida em pacotes, ou **quanta**, de radiação, que mais tarde foram denominados fótons.

Quantização

- Tratando a luz como partícula, podemos explicar alguns fenômenos envolvidos.
- Em 1900, Max Plank propõe que a luz só poderia ser emitida ou absorvida em pacotes, ou **quanta**, de radiação, que mais tarde foram denominados fótons.

$E = hv$, com $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ (constante de Planck).

Quantização

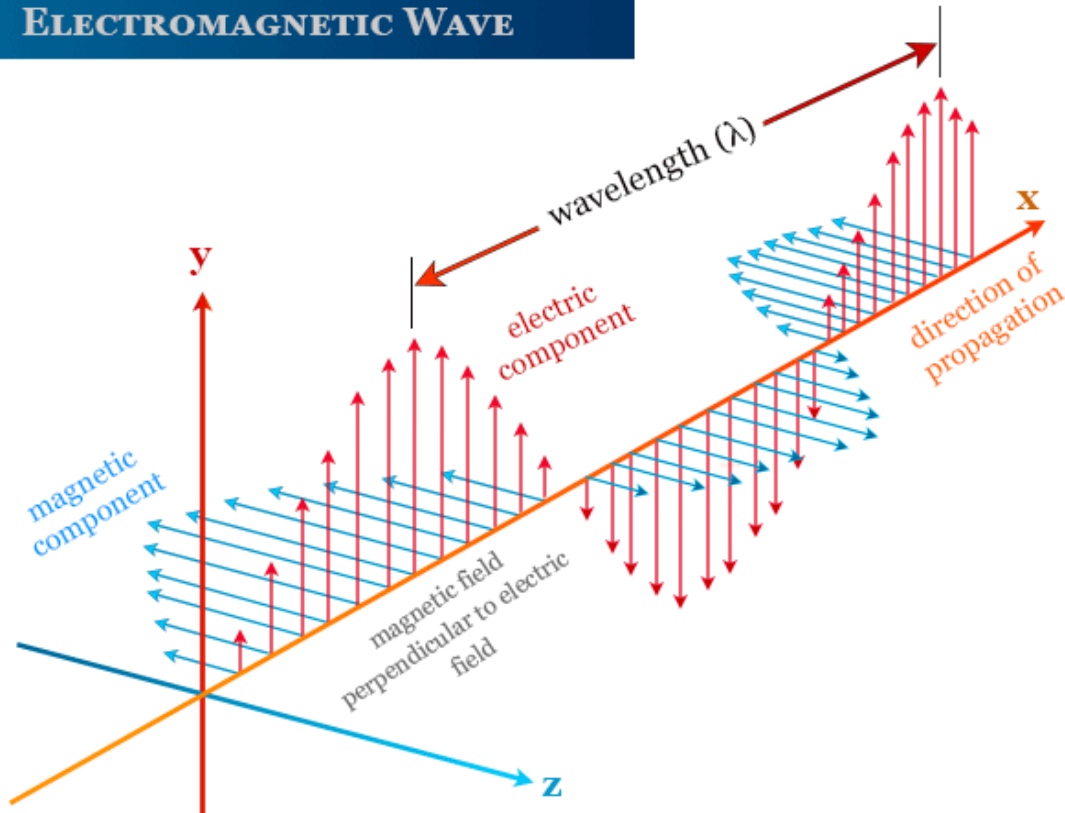
- Tratando a luz como partícula, podemos explicar alguns fenômenos envolvidos.
- Em 1900, Max Plank propõe que a luz só poderia ser emitida ou absorvida em pacotes, ou **quanta**, de radiação, que mais tarde foram denominados fótons.

$E = h\nu$, com $h = 6,626 \times 10^{-34}$ J s (constante de Planck).

Espectroscopia: diferentes faixas de energia = diferentes efeitos na matéria

Radiação eletromagnética

ELECTROMAGNETIC WAVE



Priyamstudycentre.com

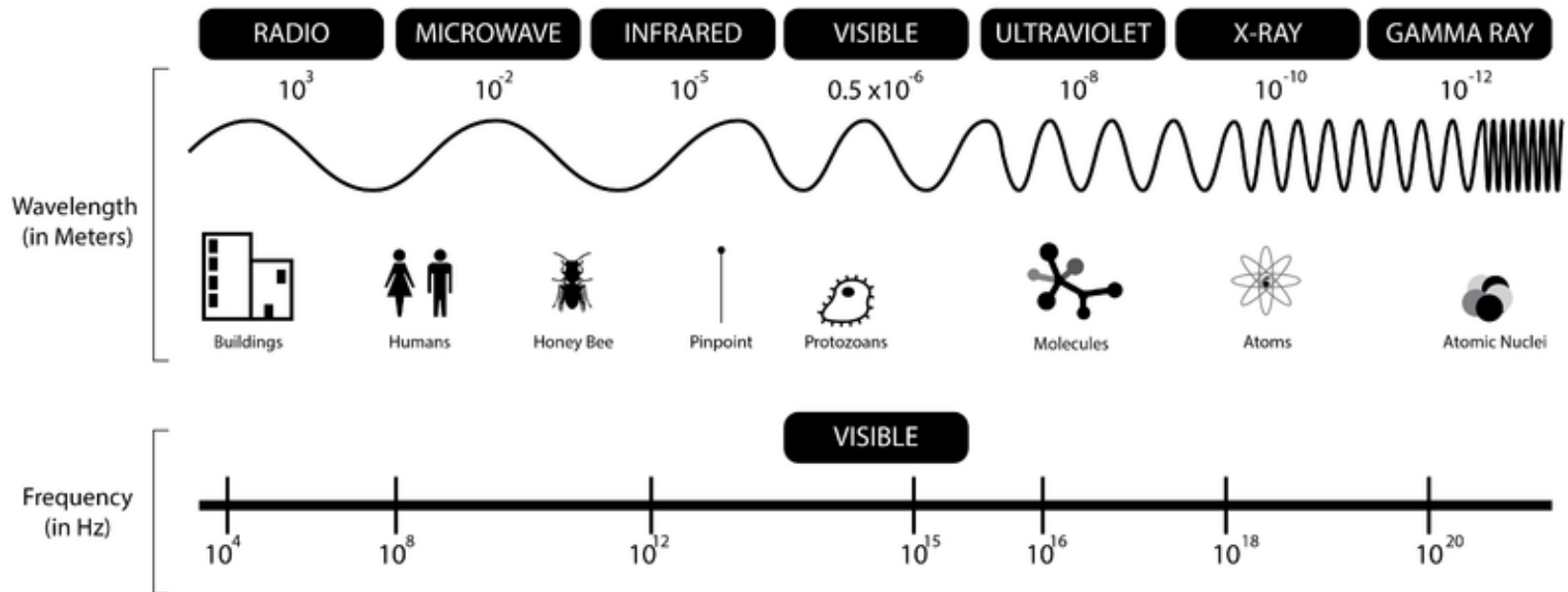
$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$h \cong 6,6 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

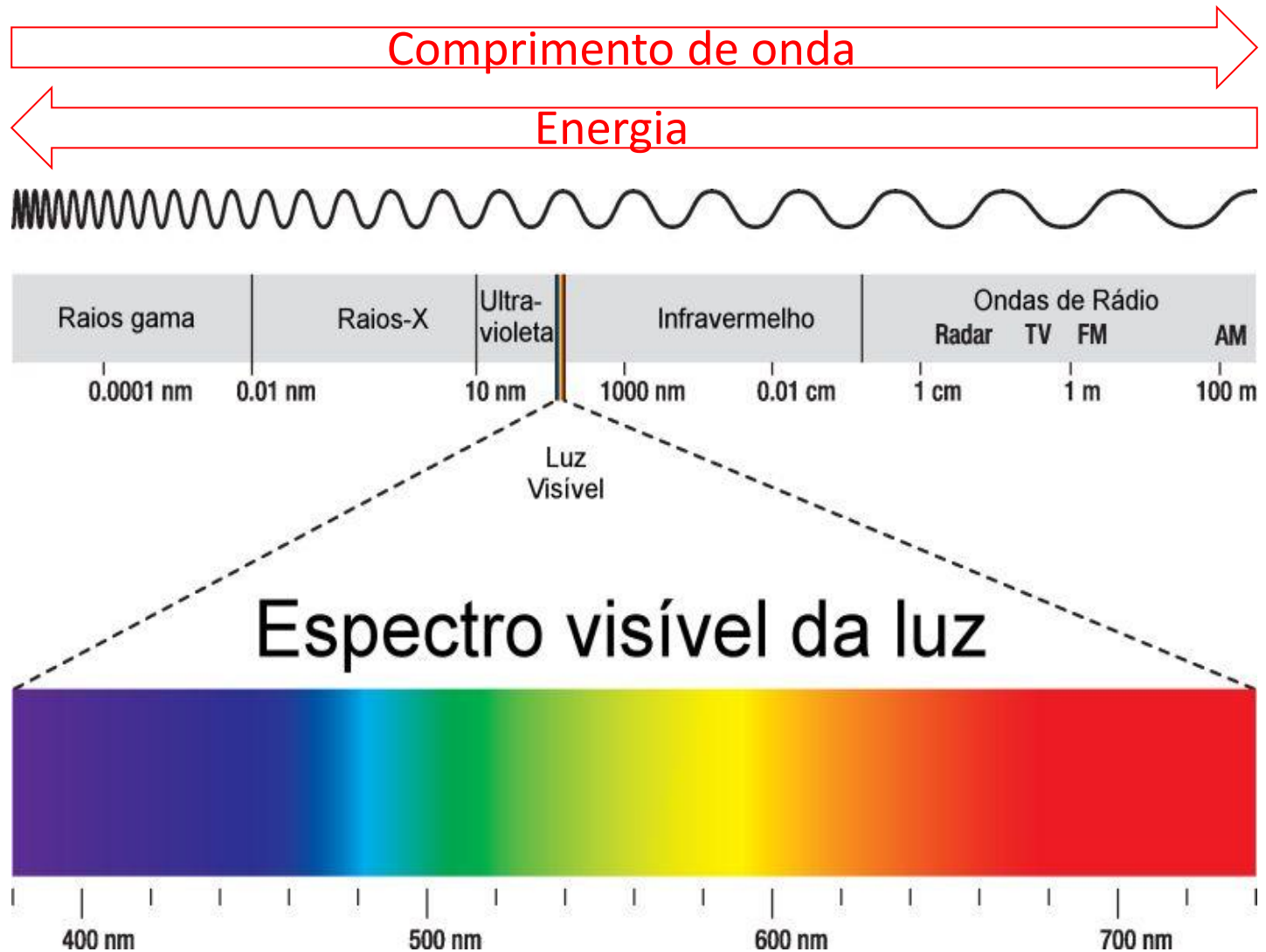
$$c \cong 3,0 \times 10^8 \text{ m/s}$$

Spectroscopia

THE ELECTROMAGNETIC SPECTRUM



Espectroscopia



Reconhecimento



- Max Planck
 - Prêmio Nobel de Física em 1918 : *“in recognition of the services rendered to the advancement of Physics by his discovery of energy quanta”*

Radiação eletromagnética e Quantização

- Alguns conceitos iniciais:
 1. Radiação eletromagnética
 2. Quantização
 3. Efeito fotoelétrico

Efeito fotoelétrico

- Quando radiação ultravioleta atinge uma superfície metálica, há a emissão de elétrons.
- Há uma frequência de corte (específica de cada metal), sendo que acima dela não há emissão.

Efeito fotoelétrico

- Quando radiação ultravioleta atinge uma superfície metálica, há a emissão de elétrons.
- Há uma frequência de corte (específica de cada metal), sendo que acima dela não há emissão.

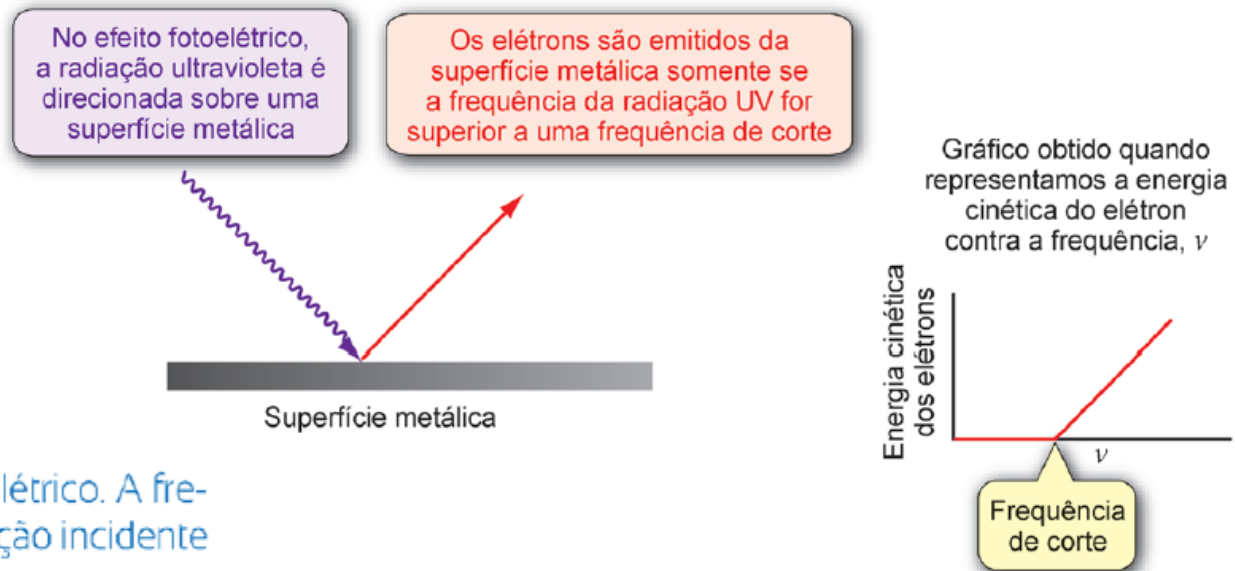
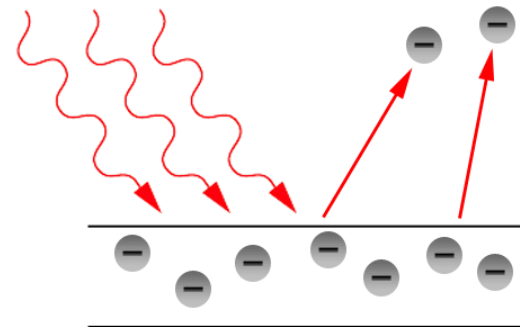


Figura 2.6 Efeito fotoelétrico. A frequência de corte da radiação incidente é característica do metal.

Efeito fotoelétrico

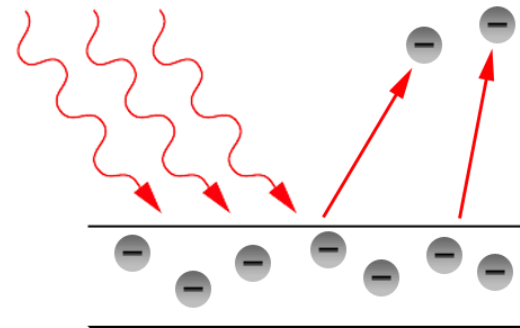
- Observado por Becquerel em 1839 e confirmado por Hertz em 1887, só foi explicado por Einstein em 1905.
- Einstein: os elétrons só podem ser emitidos por uma superfície quando os fótons incidentes forem capazes de transmitir um valor mínimo de energia para os átomos da superfície metálica (abordagem quântica).



Efeito fotoelétrico

- Observado por Becquerel em 1839 e confirmado por Hertz em 1887, só foi explicado por Einstein em 1905.
- Einstein: os elétrons só podem ser emitidos por uma superfície quando os fótons incidentes forem capazes de transmitir um valor mínimo de energia para os átomos da superfície metálica (abordagem quântica).

$$h\nu = \Phi + E_c$$



Reconhecimento



- Max Planck
 - Prêmio Nobel de Física em 1918: *“in recognition of the services rendered to the advancement of Physics by his discovery of energy quanta”*
- Albert Einstein
 - Prêmio Nobel de Física em 1921: “for his services to Theoretical Physics, and especially for his discovery of the law of the photoelectric effect”



Estrutura e propriedades atômicas

A natureza da luz

Radiação eletromagnética e Quantização

- Alguns conceitos iniciais:
 1. Radiação eletromagnética
 2. Quantização
 3. Efeito fotoelétrico
 4. Dualidade onda-partícula

A natureza da Luz

- Pelo efeito fotoelétrico: radiação se comportando como partícula. Mas há intensa comprovação experimental da radiação se comportando como onda.

Natureza ondulatória da Luz

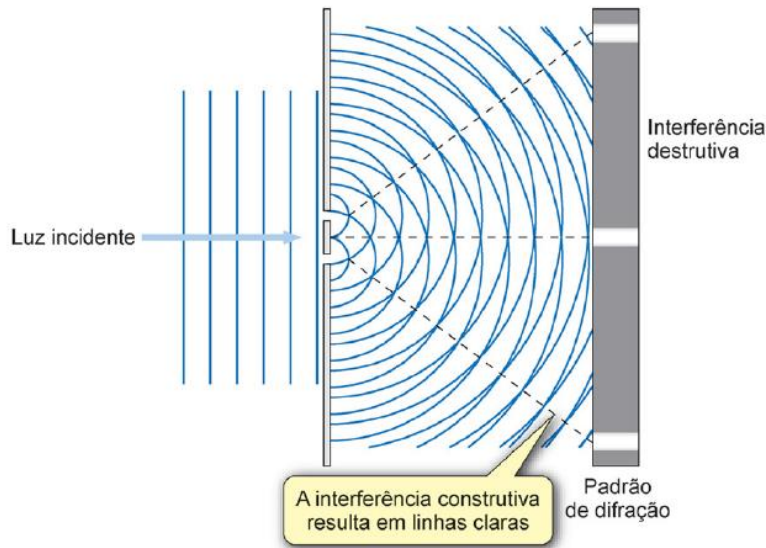
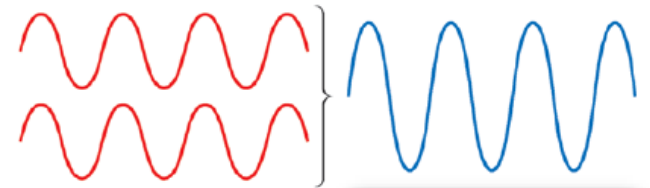


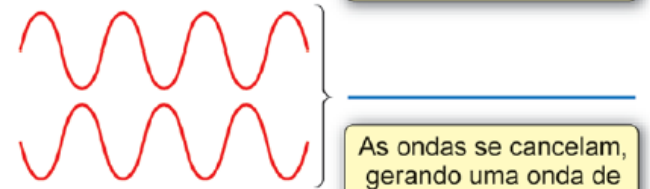
Figura 2.7 Uma dupla fenda e o padrão de difração observado. As linhas azuis representam os picos das ondas. Quando as ondas passam através de duas fendas muito próximas, cada uma das fendas gera uma onda circular. Essas ondas sofrem interferência entre si. Quando ocorre uma interferência construtiva, observam-se linhas claras no anteparo atrás das fendas.

(a) Interferência construtiva – ondas em fase



As ondas se somam, gerando uma onda de maior amplitude

(b) Interferência destrutiva – ondas fora de fase



As ondas se cancelam, gerando uma onda de menor amplitude ou de amplitude nula

Figura 2.8 (a) Interferência construtiva (ondas em fase) e (b) interferência destrutiva (ondas fora de fase).

A natureza da Luz

- Pelo efeito fotoelétrico: radiação se comportando como partícula. Mas há intensa comprovação experimental da radiação se comportando como onda.
- Ambas as evidências estão corretas! A onda tem propriedades tanto de onda como de partícula!

A natureza da Luz

- Pelo efeito fotoelétrico: radiação se comportando como partícula. Mas há intensa comprovação experimental da radiação se comportando como onda.
- Ambas as evidências estão corretas! A onda tem propriedades tanto de onda como de partícula!

Dualidade onda - partícula

O espectro atômico de Bohr

- Experimental: um átomo pode emitir ou absorver radiação eletromagnética apenas para algumas frequências. Ou seja, apenas certos valores de energia eletrônica são possíveis. Por que?

O espectro atômico de Bohr

- Experimental: um átomo pode emitir ou absorver radiação eletromagnética apenas para algumas frequências. Ou seja, apenas certos valores de energia eletrônica são possíveis. Por que?

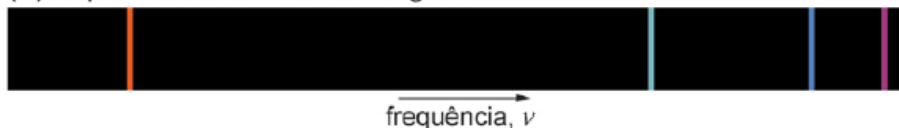
Espectro contínuo X espectro do hidrogênio

(a) Espectro contínuo



Em um espectro contínuo, todas as frequências são emitidas

(b) Espectro do átomo de hidrogênio



Em um espectro atômico, somente frequências discretas são emitidas. Cada elemento químico possui um espectro distinto e característico

Figura 2.9 (a) O espectro contínuo da luz branca e (b) o espectro do átomo de hidrogênio.

O átomo de Hidrogênio

Quim. Nova, Vol. 30, No. 7, 1773-1775, 2007

UMA INTRODUÇÃO À ESPECTROSCOPIA ATÔMICA – O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

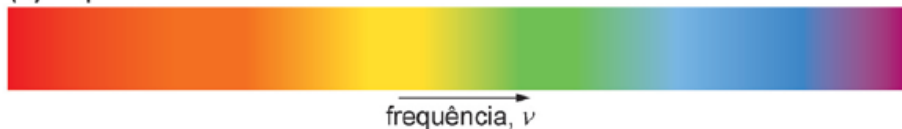
Oswaldo Sala

Departamento de Química Fundamental, Universidade de São Paulo, CP 26077, 05599-970 São Paulo – SP, Brasil

Recebido em 1/9/06; aceito em 1/2/07; publicado na web em 29/8/07

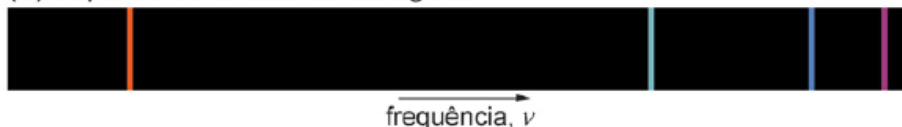
Espectro contínuo X espectro do hidrogênio

(a) Espectro contínuo



Em um espectro contínuo, todas as frequências são emitidas

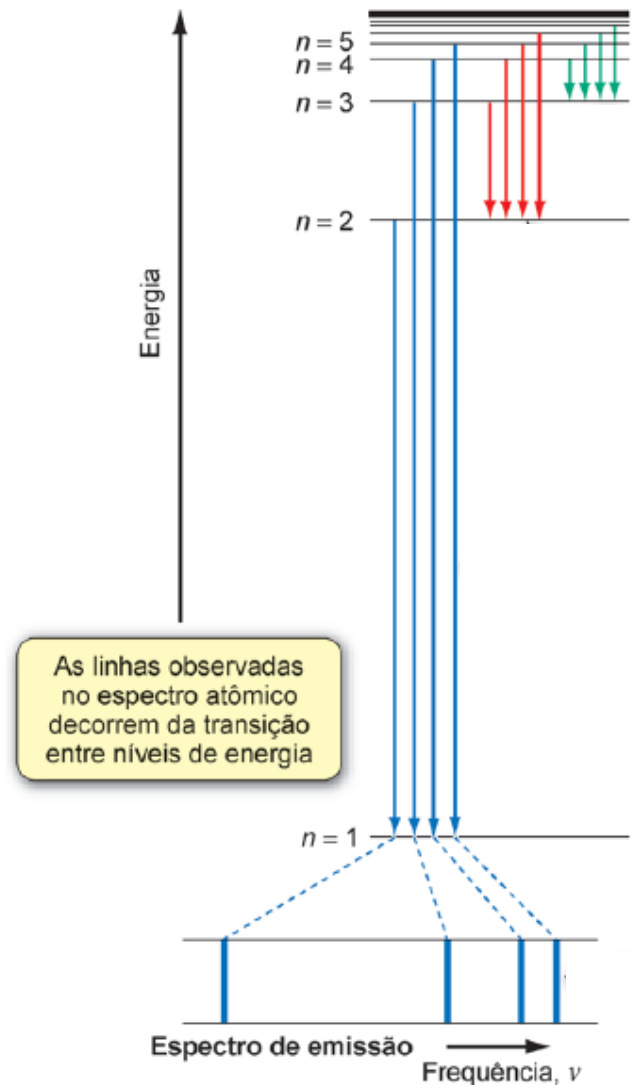
(b) Espectro do átomo de hidrogênio



Em um espectro atômico, somente frequências discretas são emitidas. Cada elemento químico possui um espectro distinto e característico

Figura 2.9 (a) O espectro contínuo da luz branca e (b) o espectro do átomo de hidrogênio.

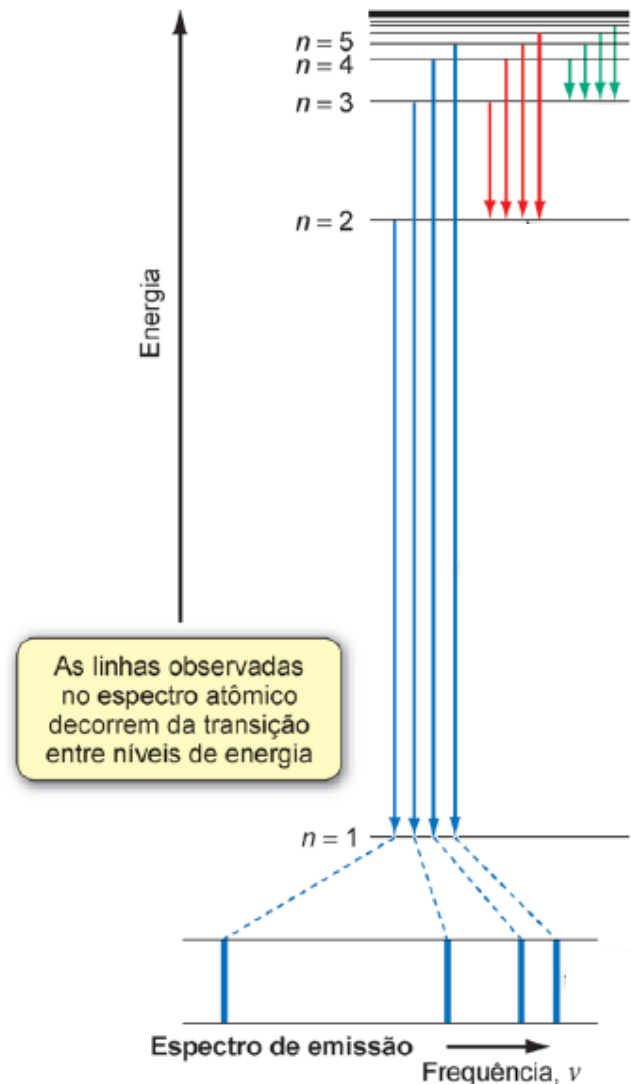
O átomo de Hidrogênio



- Johann Balmer (matemático suíço): Primeiro a identificar um padrão nos espectros do H.
- $\nu \propto \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}$, com $n = 3, 4, 5 \dots$
- Linhas denominadas Série de Balmer.

Diferença entre níveis de energia: $E = h\nu = E_2 - E_1$, com $E_2 > E_1$

O átomo de Hidrogênio



- Johann Balmer (matemático suíço): Primeiro a identificar um padrão nos espectros do H.

$$\nu \propto \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}, \text{ com } n = 3, 4, 5 \dots$$

- Linhas denominadas Série de Balmer.
- Rydberg: equação empírica

$$\nu = RH \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right], \text{ com } n_2 > n_1$$

$$R_H = 3,29 \times 10^{15} \text{ Hz (Const. Rydberg)}$$

Diferença entre níveis de energia: $E = h\nu = E_2 - E_1$, com $E_2 > E_1$

O átomo de Hidrogênio

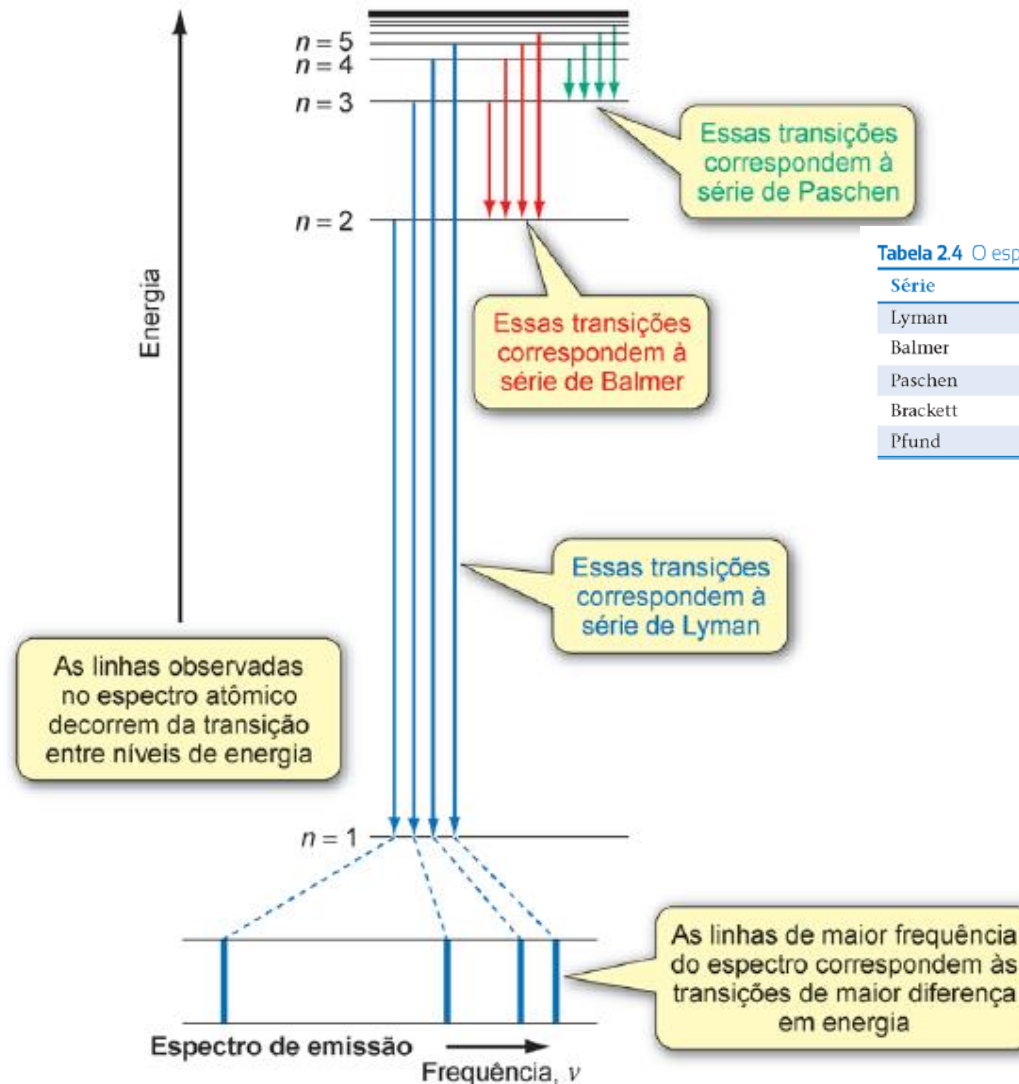


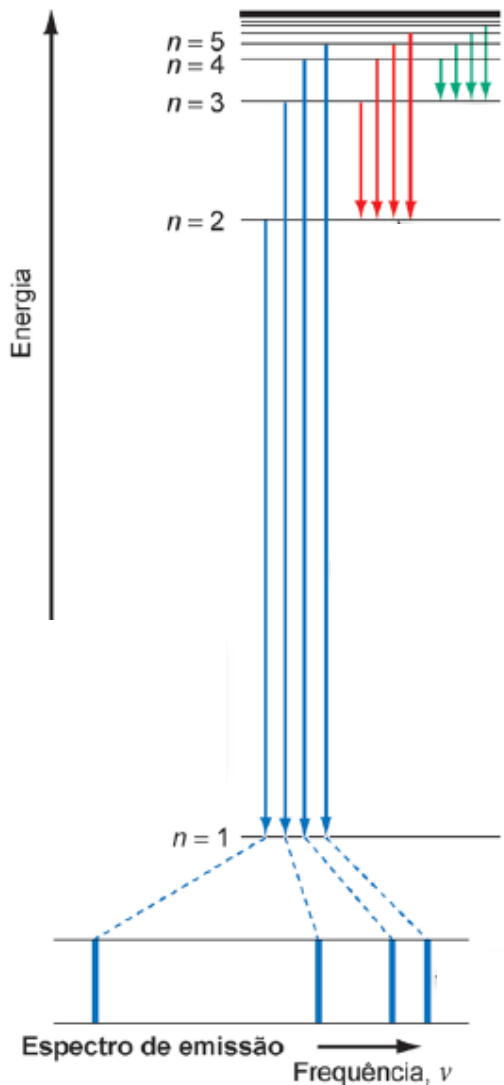
Tabela 2.4 O espectro atômico do hidrogênio

Série	Região do espectro eletromagnético	n_1	n_2
Lyman	Ultravioleta	1	2, 3, 4, ...
Balmer	Visível	2	3, 4, 5, ...
Paschen	Infravermelho	3	4, 5, 6, ...
Brackett	Infravermelho	4	5, 6, 7, ...
Pfund	Infravermelho	5	6, 7, 8, ...

Figura 2.10 Os níveis de energia do átomo de hidrogênio e as transições entre eles. Cada transição corresponde a uma linha no espectro de emissão atômica do hidrogênio. A diferença de energia entre dois níveis é igual à energia da linha espectral resultante. A parte do espectro de emissão que é mostrada corresponde à série de Lyman, na região do ultravioleta, que resulta das transições para o nível de energia $n = 1$.

Diferença entre níveis de energia: $E = h\nu = E_2 - E_1$, com $E_2 > E_1$

O átomo de Hidrogênio

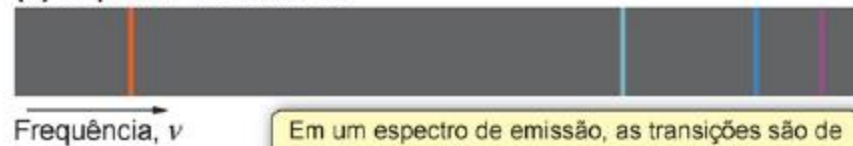


- Átomo tem infinitos orbitais (infinitos n), com distância que varia com $\frac{1}{n^2}$;
- Assim, quanto maior n , menor a diferença de energia entre os orbitais;
- Se $n \rightarrow \infty$, o elétron não pertence mais àquele átomo => **Energia de Ionização.**

Diferença entre níveis de energia: $E = h\nu = E_2 - E_1$, com $E_2 > E_1$

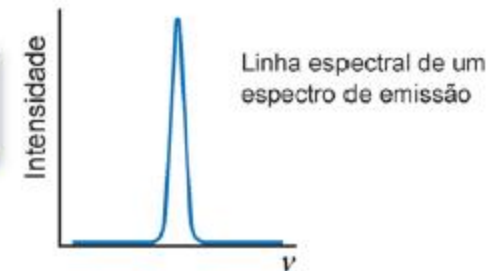
Emissão X Absorção da radiação

(a) Espectro de emissão



Em um espectro de emissão, as transições são de um nível de maior energia para um nível de menor energia, e ocorre a emissão de radiação

As transições são vistas como linhas claras sobre um fundo escuro



(b) Espectro de absorção



Em um espectro de absorção, as transições são de um nível de menor energia para um nível de maior energia, e ocorre a absorção de radiação

As transições são vistas como linhas escuras sobre um fundo claro

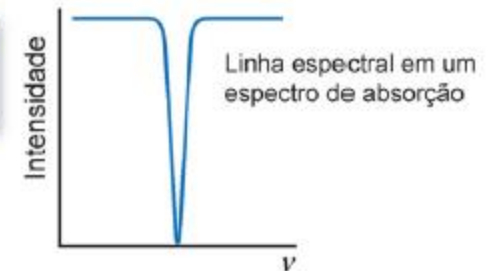
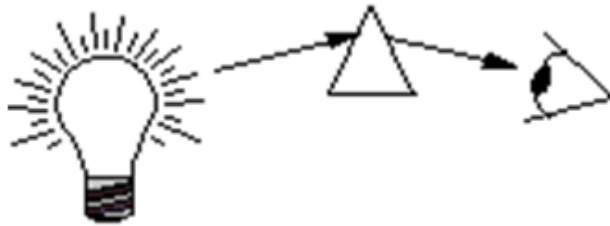
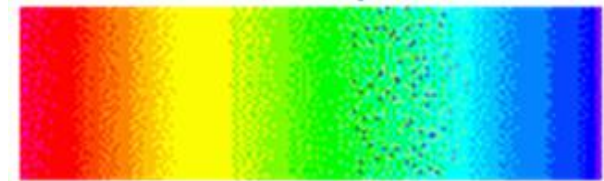


Figura 2.11 (a) Espectro de emissão e (b) espectro de absorção do átomo do hidrogênio. (O espectro de absorção apresentado é para o átomo excitado com $n = 2$. Para o hidrogênio no estado fundamental, o espectro de absorção está na região ultravioleta.)

Emissão X Absorção da radiação

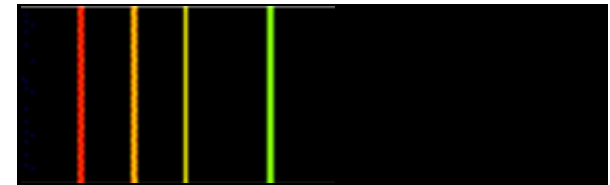


Espectro contínuo

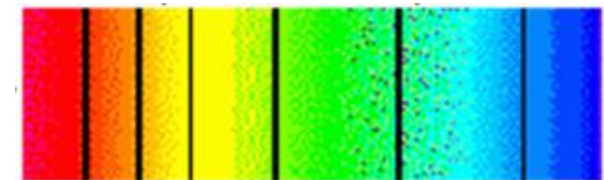


Amostra
Excitação

Espectro de emissão



Espectro de absorção



Emissão X Absorção da radiação

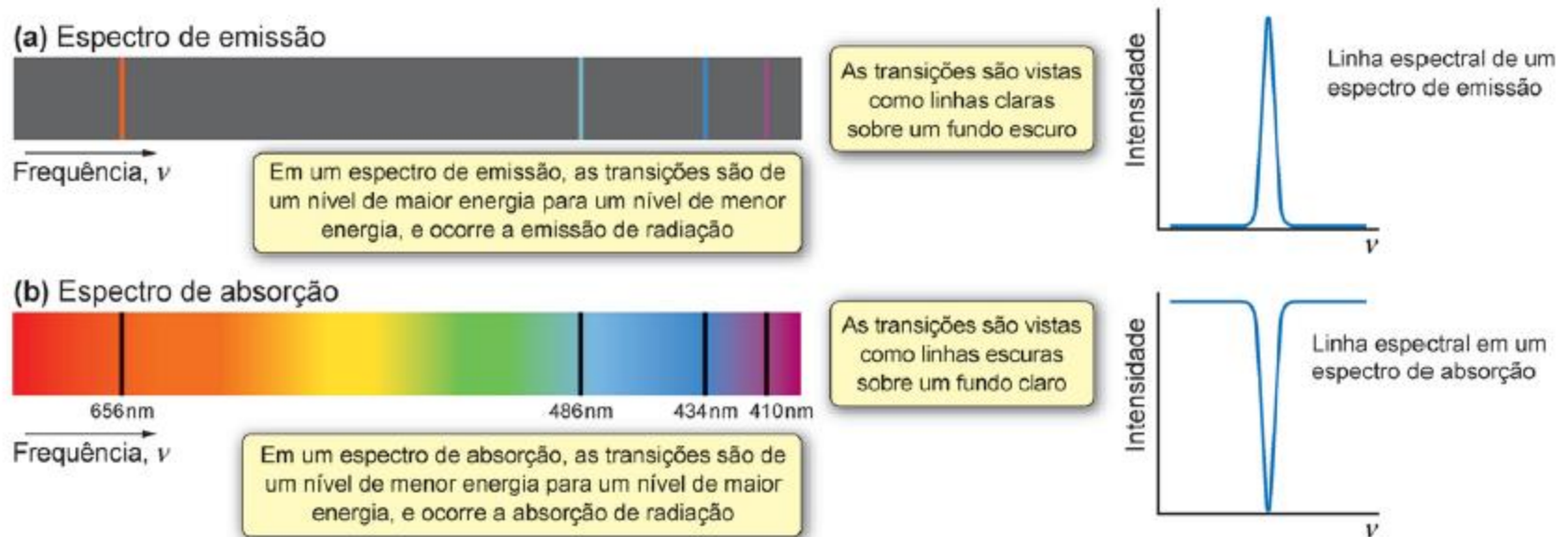
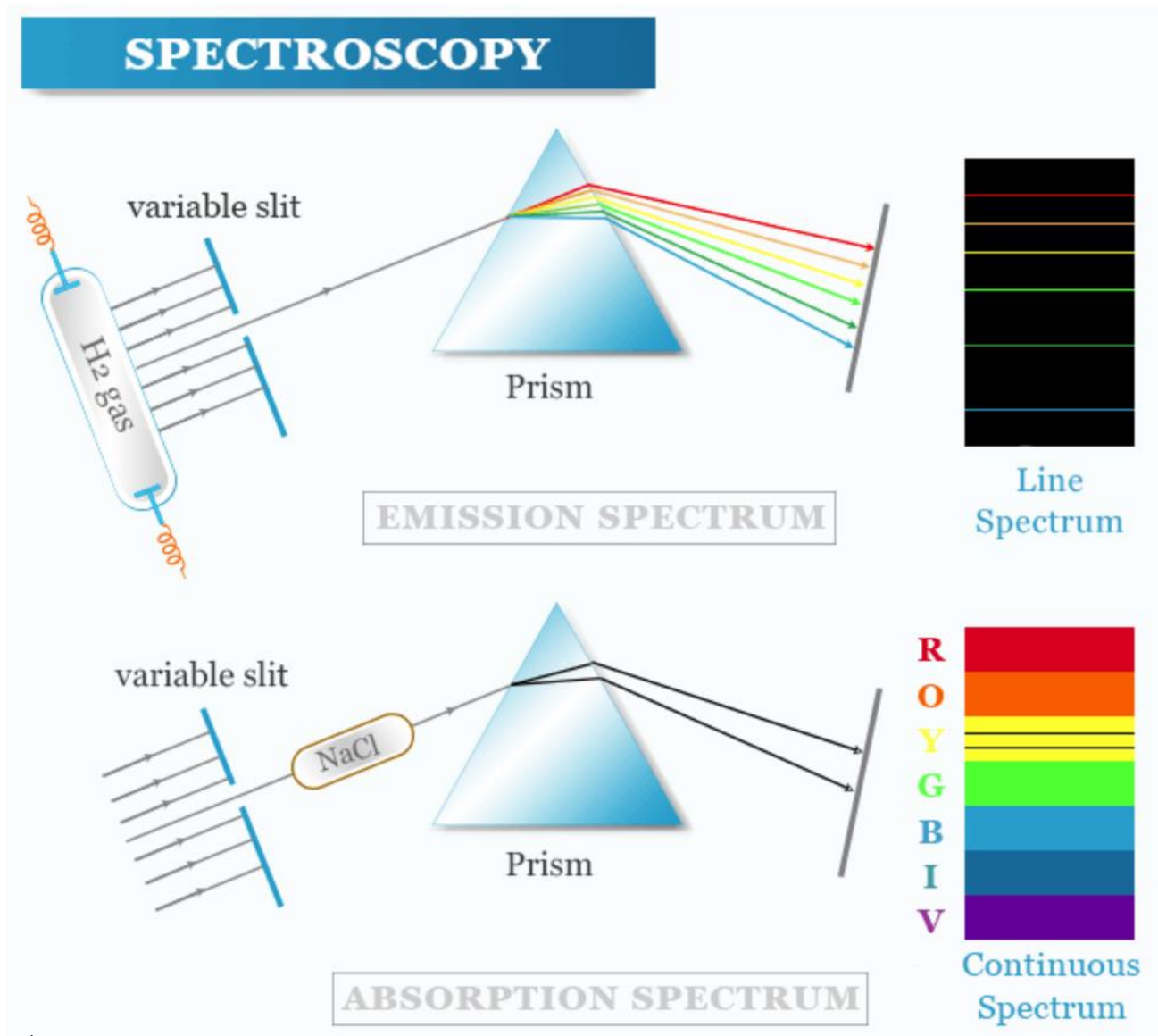


Figura 2.11 (a) Espectro de emissão e (b) espectro de absorção do átomo do hidrogênio. (O espectro de absorção apresentado é para o átomo excitado com $n = 2$. Para o hidrogênio no estado fundamental, o espectro de absorção está na região ultravioleta.)

As frequências são as mesmas, pois correspondem às mesmas transições!
Estado fundamental – estado excitado

Emissão X Absorção da radiação



O átomo de Bohr

- Elétrons girando em torno do núcleo em órbita fixa e cada órbita tem valor constante.

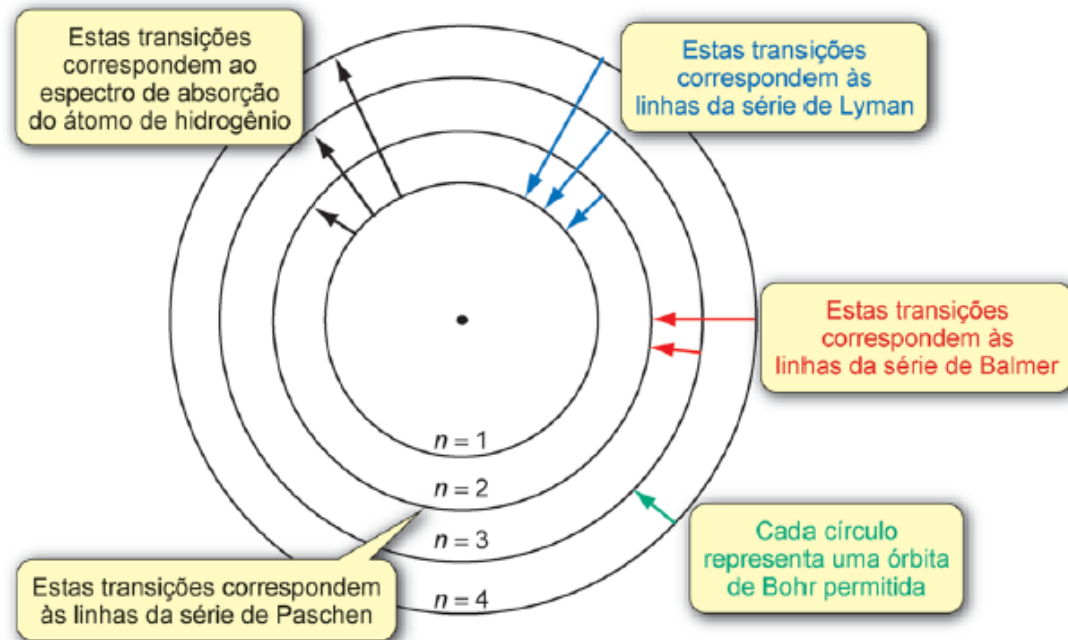


Figura 2.12 O átomo de Bohr. Bohr sugeriu que as transições dos elétrons entre as órbitas produziram o espectro atômico.

O átomo de Bohr

- Elétrons girando em torno do núcleo em órbita fixa e cada órbita tem valor constante.

$$E = -K \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, 3, 4...$$

$$\text{ou } E = -\frac{2\pi^2 m_e e^4}{n^2 h^2}$$

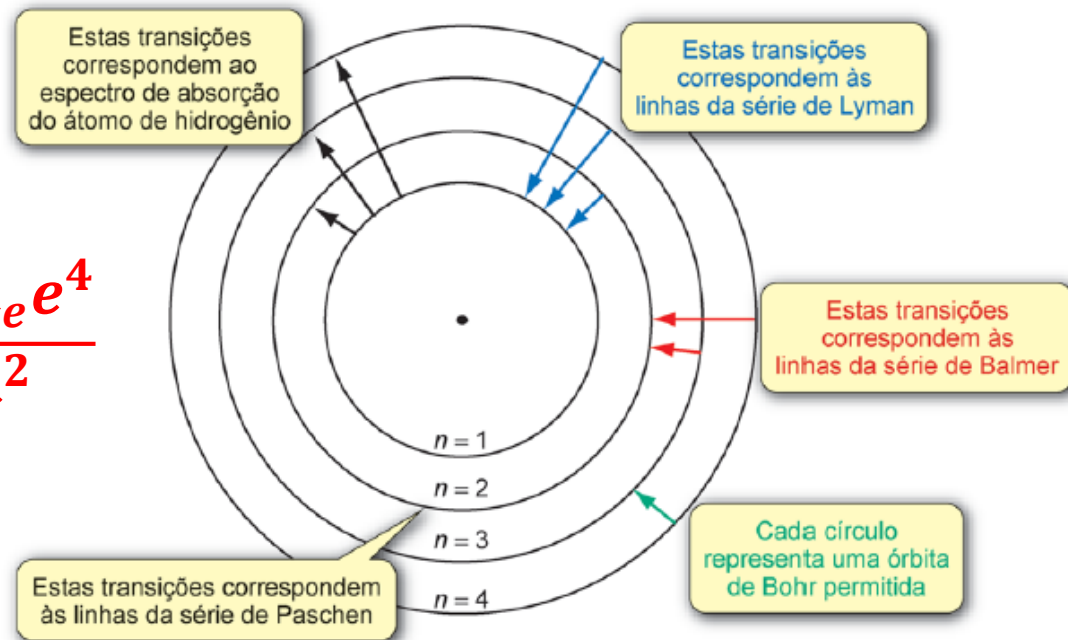


Figura 2.12 O átomo de Bohr. Bohr sugeriu que as transições dos elétrons entre as órbitas produziram o espectro atômico.

Reconhecimento



- Niels Bohr
 - Prêmio Nobel de Física em 1922: “for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them”

O átomo de Bohr

- Bohr foi bem sucedido a explicação do átomo de hidrogênio, mas não conseguiu estender a explicação para outros átomos;
- Também não foi capaz de explica por que apenas certas órbitas eram permitidas.

O átomo de Bohr

- Bohr foi bem sucedido a explicação do átomo de hidrogênio, mas não conseguiu estender a explicação para outros átomos;
- Também não foi capaz de explica por que apenas certas órbitas eram permitidas.
- Mas da sua teoria, dois conceitos fundamentais permaneceram:
 - A quantização dos níveis de energia;
 - O conceito de números quânticos.



Estrutura e propriedades atômicas

A natureza do elétron

Radiação eletromagnética e Quantização

1. Radiação eletromagnética
2. Quantização
3. Efeito fotoelétrico
4. Dualidade onda-partícula
5. Natureza do elétron

A natureza do elétron

- Dualidade onda-partícula vale para o elétron e para toda a matéria;

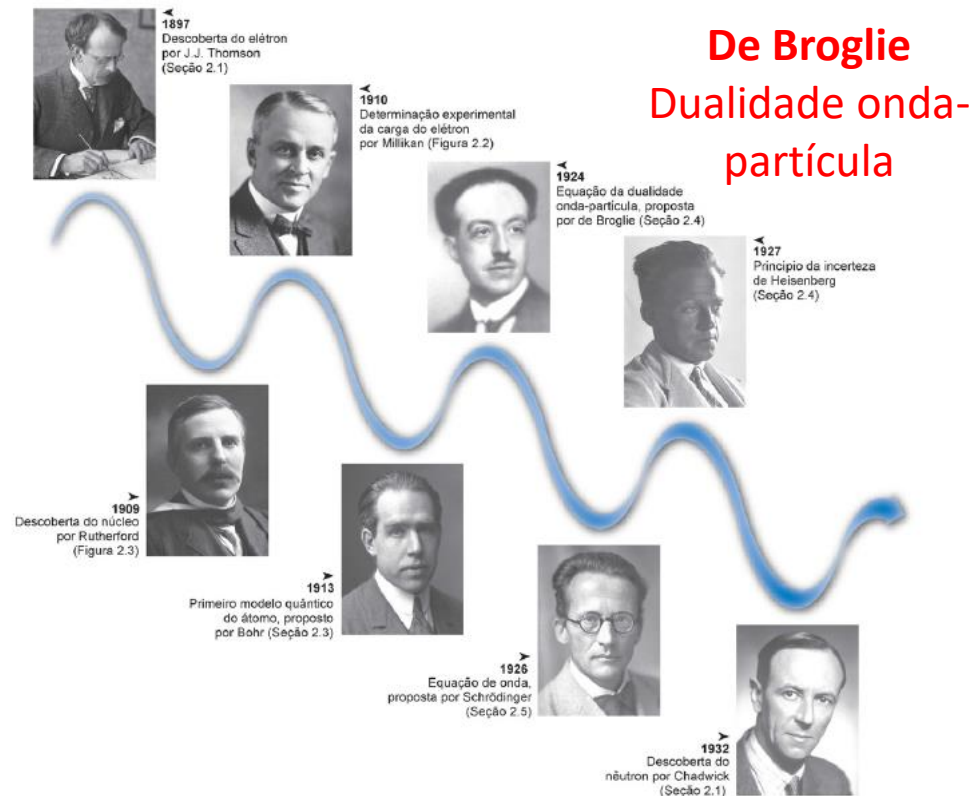


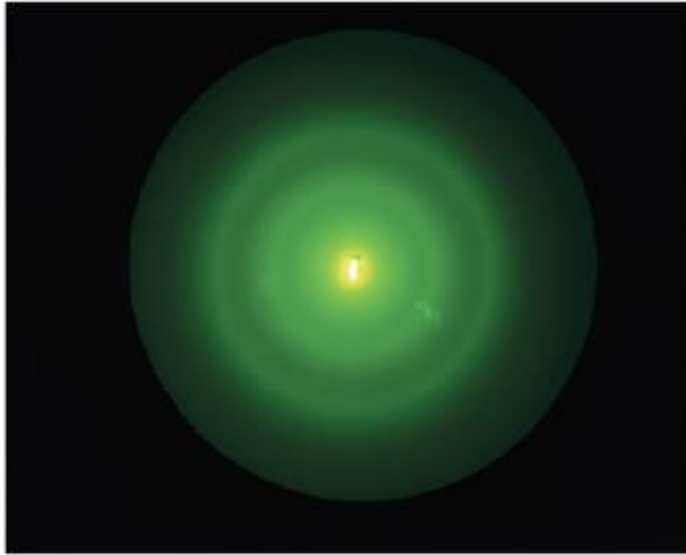
Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Reconhecimento



- Niels Bohr
 - Prêmio Nobel de Física em 1922: “for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them”
- Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie
 - Prêmio Nobel de Física em 1929: “for his discovery of the wave nature of electrons”.

A natureza do elétron



Primeiras evidências: experimentos com difração de elétrons em cristais.

Figura 2.13 Padrão de difração devido ao bombardeamento de um feixe de elétrons sobre uma folha de grafite. Os elétrons, após atravessarem a folha de grafite, atingem uma tela luminescente e produzem um padrão de difração em forma de anéis. Essa experiência demonstra que os elétrons podem se comportar como ondas.

Reconhecimento



- Clinton Joseph Davisson e George Paget Thomson
 - Prêmio Nobel de Física em 1937: “for their experimental discovery of the diffraction of electrons by crystals”

Reconhecimento



- Clinton Joseph Davisson e George Paget Thomson
 - Prêmio Nobel de Física em 1937: “for their experimental discovery of the diffraction of electrons by crystals”

J.J. Thomson (pai) ganhou o Nobel em 1906 por ter descoberto que elétrons são partículas e G.P. Thomson (filho) ganhou o Nobel em 1937 por mostrar que o elétron pode ser onda. E ambos estavam certos...

Radiação eletromagnética e Quantização

1. Radiação eletromagnética
2. Quantização
3. Efeito fotoelétrico
4. Dualidade onda-partícula
5. Natureza do elétron
6. Princípio de incerteza de Heisenberg

Reconhecimento



- Clinton Joseph Davisson e George Paget Thomson
 - Prêmio Nobel de Física em 1937: “for their experimental discovery of the diffraction of electrons by crystals”
- Werner K. Heisenberg
 - Prêmio Nobel de Física em 1932: “for the creation of quantum mechanics, the application of which has, inter alia, led to the discovery of the allotropic forms of hydrogen”.

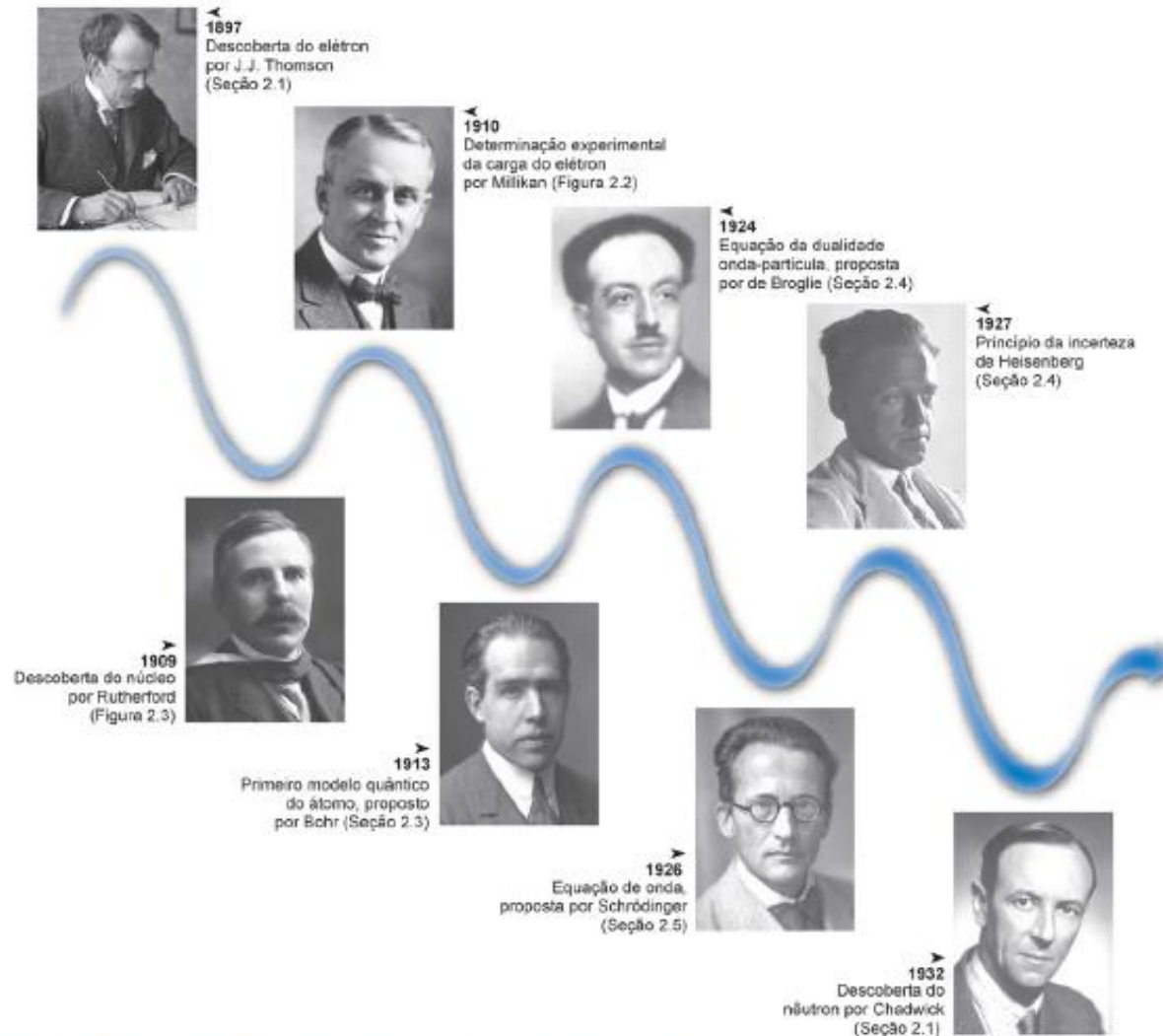
Funções de onda e orbitais atômicos

- Heisenberg desenvolveu a primeira formulação da mecânica quântica, baseada em partículas.
- Entretanto, sua formulação matemática é complexa e a abordagem de Schrödinger, baseada em funções de onda (**mecânica ondulatória**), se tornou mais popular.
- Ambas são equivalente!

Estrutura e propriedades atômicas

Modelo Quântico

Chegando no modelo atômico atual



Heisenberg
Princípio de
Incerteza

Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Modelo atômico atual



Figura 2.1 Linha do tempo mostrando as etapas mais importantes para o entendimento da estrutura do átomo.

Funções de onda e orbitais atômicos

- Heisenberg desenvolveu a primeira formulação da mecânica quântica, baseada em partículas.
- Entretanto, sua formulação matemática é complexa e a abordagem de Schrödinger, baseada em funções de onda (**mecânica ondulatória**), se tornou mais popular.
- Ambas são equivalente!

Funções de onda e orbitais atômicos

- Schrödinger:
 - Introduziu o conceito de função de onda (Ψ), como função da posição da partícula. **Equação de Schrödinger.**

operador $\hat{H} \Psi = E \Psi$

$\Psi(x, y, z)$ *$\hat{H} \Rightarrow$ Hamiltoniano*

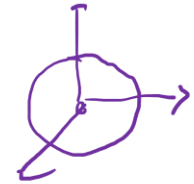
$$\underbrace{\frac{-\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{E \text{ cinética}} \Psi + \underbrace{E_p \Psi}_{E \text{ potencial}} = \underbrace{E \Psi}_{E \text{ total}}$$

Reconhecimento



- Erwin Schrödinger and Paul A.M. Dirac
 - Prêmio Nobel de Física em 1932: “for the discovery of new productive forms of atomic theory”.

Funções de onda e orbitais atômicos



$$\psi(x, y, z)$$

- Schrödinger:
 - Introduziu o conceito de função de onda (Ψ), como função da posição da partícula. **Equação de Schrödinger.**
 - Só conseguimos resolver a equação analiticamente para a interação de dois corpos. Para sistemas maiores, é preciso $\downarrow$ fazer aproximações.
 H, He^+, Li^{2+}
 - Na prática: métodos computacionais para química quântica.

Reconhecimento



- Erwin Schrödinger and Paul A.M. Dirac
 - Prêmio Nobel de Física em 1932: “for the discovery of new productive forms of atomic theory”.
- Walter Kohn e John A. Pople
 - Prêmio Nobel de Química em 1998, respectivamente: “for his development of the density-functional theory” e “for his development of computational methods in quantum chemistry”

Interpretação da função de onda

$$\int_0^{\infty} \psi^2(x) dx = 1 // \Rightarrow 100\%$$

- Embora a função de onda contenha todas as informações relativas ao comportamento do elétron, ela não pode ser medida diretamente e também não tem nenhuma interpretação física.
 $\psi^2 \Rightarrow \text{probabilidade}$ $\psi^2 \text{ grande} \rightarrow \text{prob. alta}$ $\psi^2 \text{ pequeno} \rightarrow \text{prob. baixa}$
- Max Born relacionou a função de onda a uma grandeza mensurável (**Interpretação de Born**):
 - O quadrado da função de onda é proporcional à probabilidade de se encontrar um elétron em um volume infinitesimal do espaço $d\tau$.

Interpretação da função de onda

- Na mecânica quântica, trabalhamos com probabilidade de se encontrar o elétron em determinada região do espaço, conhecida como:

Interpretação da função de onda

- Na mecânica quântica, trabalhamos com probabilidade de se encontrar o elétron em determinada região do espaço, conhecida como:



Densidade eletrônica

BORN ψ^2

Reconhecimento



- Erwin Schrödinger and Paul A.M. Dirac
 - Prêmio Nobel de Física em 1932: “for the discovery of new productive forms of atomic theory”.
- Max Born
 - Prêmio Nobel de Física em 1954: “for his fundamental research in quantum mechanics, especially for his statistical interpretation of the wavefunction”

Funções de onda e orbitais atômicos

- Schrödinger:
 - 1927: Schrodinger resolve a equação e mostra que apenas alguns valores de energia são possíveis para o elétron em um átomo de H.

$$E_n = -\frac{h R}{n^2}, \quad R = \frac{m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_0^2}$$

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$

$R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Hz} = \text{cte Rydberg}$

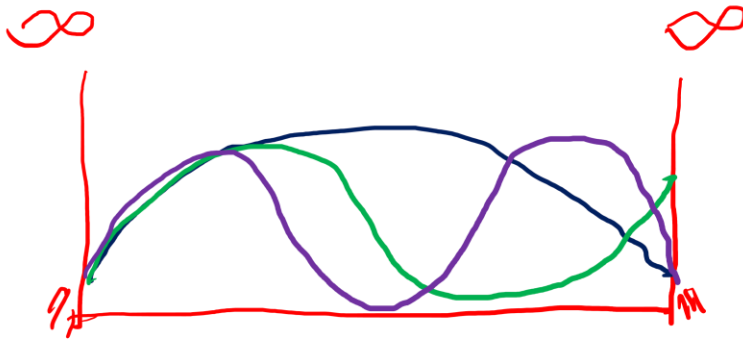
$m_e = \text{massa } e^-$
 $e = \text{carga } e^-$
 $h = \text{cte Planck}$
 $\epsilon_0 = \text{permissividade vácuo}$

Bohr $E_n = -\frac{K}{n^2}$

$$\nu = R_H \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\psi(x)$$

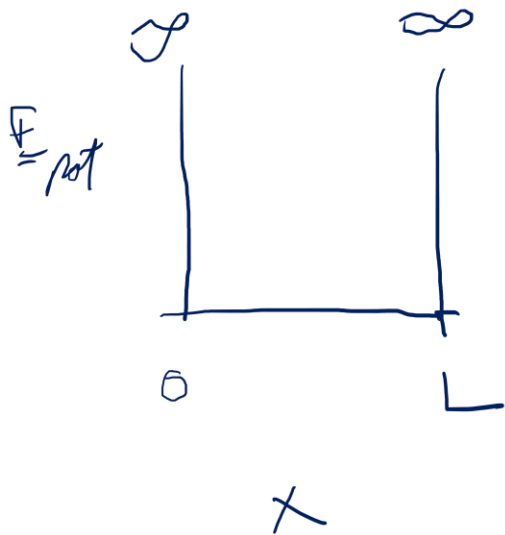


$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -E\psi(x)$$

2e onde surge n ?

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\cos(nx)$$



$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -E \psi(x)$$

$$\frac{d}{dx} \sin(Kx) = K \cdot \cos(Kx)$$

$$\frac{d}{dx} \cos(Kx) = -K \sin(Kx)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \sin(Kx) = -K^2 \sin(Kx)$$

$$\psi_n = N \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n=1, 2, 3$$

$\hookrightarrow$ const. de normalização

$$\int_0^L \psi^2 dx = 1 \Rightarrow 100\% \text{ probab.}$$

NORMALIZAÇÃO

$$N^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = L$$

$$\psi_n = (2L)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$\int \sin^2(ax) dx = \frac{1}{2}x - \frac{\sin(2ax)}{4} + \text{const}$$

entre 0 et L

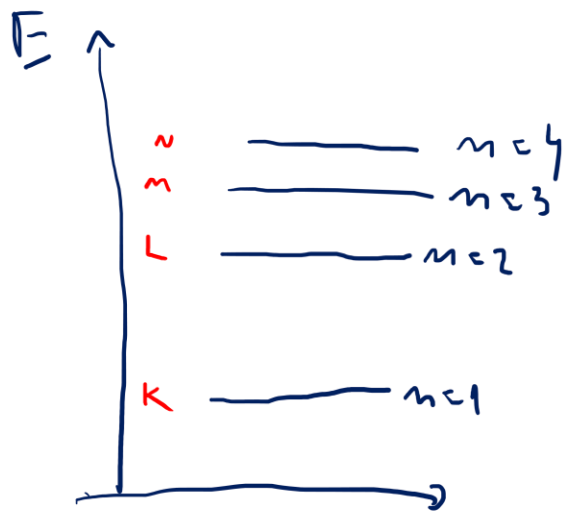
$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \frac{1}{2}L$$

$$N^2 \times \frac{1}{2}L = L \Rightarrow N = (2L)^{1/2}$$

$$E \propto n^2$$

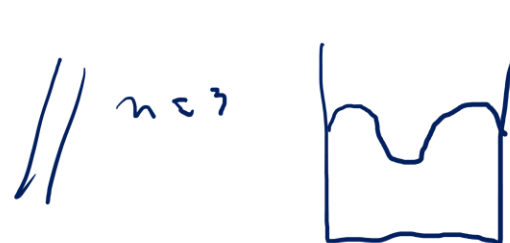
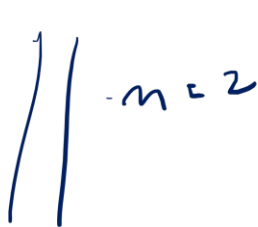
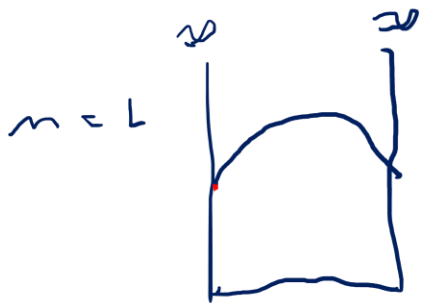
$$\frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = -\frac{n^2\pi^2}{L^2} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$\hat{H}\psi = E\psi$



$$\frac{d}{dx} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$\frac{d}{dx} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = -\frac{n\pi}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$



Funções de onda e orbitais atômicos

- Aparece n , o número quântico principal!
- Mas na verdade há 4 números quânticos:

– n : número quântico principal

os mais conhecidos: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7...

varia 1, 2, 3 ... ∞ DETERMINA A ENERGIA DO ORBITAL

– l = número quântico secundário (ou angular, orbital ou azimuthal)

varia de 0 a $(n-1)$

os principais: 0, 1, 2 + 3

– m_l = número quântico magnético

varia de $-l$ a $+l$

fora do orbital

– m_s = número quântico de spin

$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

$$l = 0 \text{ a } (n-1)$$

$$m_l = -l \text{ a } +l$$

$$m_s = -1/2 \text{ ou } +1/2$$

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

$$l = 0 \text{ a } (n-1)$$

$$m_l = -l \text{ a } +l$$

$$m_s = -1/2 \text{ ou } +1/2$$

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

$$l = 0 \text{ a } (n-1)$$

$$m_l = -l \text{ a } +l$$

$$m_s = \underline{-1/2 \text{ ou } +1/2}$$

$$\text{se } n=1 \Rightarrow l=0 \Rightarrow m_l=0 \quad 1 \text{ orbital } 1s$$

$$\text{se } n=2 \Rightarrow l=0 \Rightarrow m_l=0 \quad 1 \text{ orbital } 2s$$

$$l=1 \Rightarrow -1, 0, +1 = m_l \quad 3 \text{ orbitais } 2p$$

$$2p_x, 2p_y, 2p_z$$

$$\text{se } n=3 \Rightarrow l=0 \Rightarrow m_l=0 \quad 1 \text{ orbital } 3s$$

$$l=1 \Rightarrow m_l = -1, 0, 1 \quad 3 \text{ orbitais } 3p$$

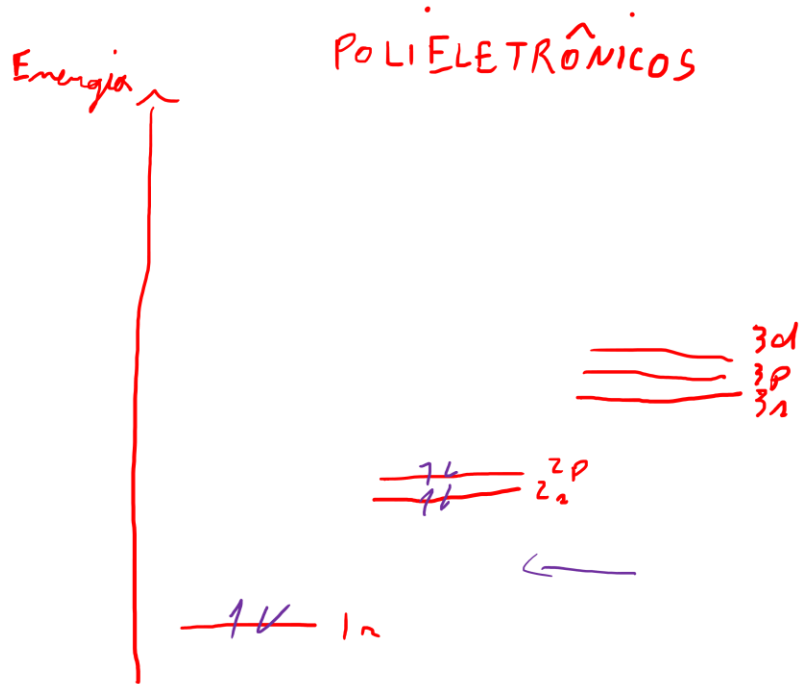
$$l=2 \Rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \quad 5 \text{ orbitais } 3d$$

- , .

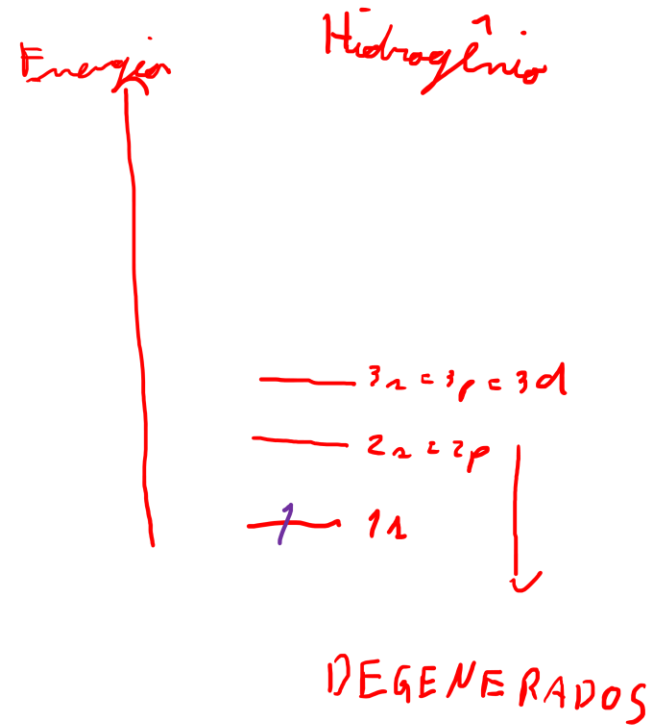
- .

Revisão...

	Nome	Valor	Designação	Define
n	Principal	1, 2, 3, 4, 5...	K, L, M, N, O...	A energia do orbital
l	Secundário ou angular	$0 \leq l \leq n-1$	S, p, d, f	A forma do orbital
m_l	Magnético	$-l \leq m_l \leq +l$	-	A orientação do orbital
m_s	spin	-1/2, +1/2	-	A orientação do spin



quebra de
degenerescência



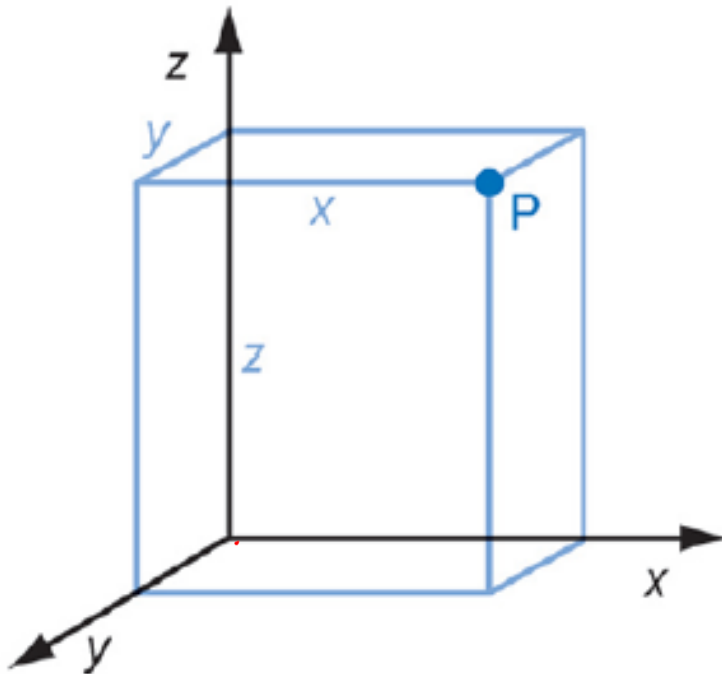
$$\psi(x, y, z)$$

=>

$$R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

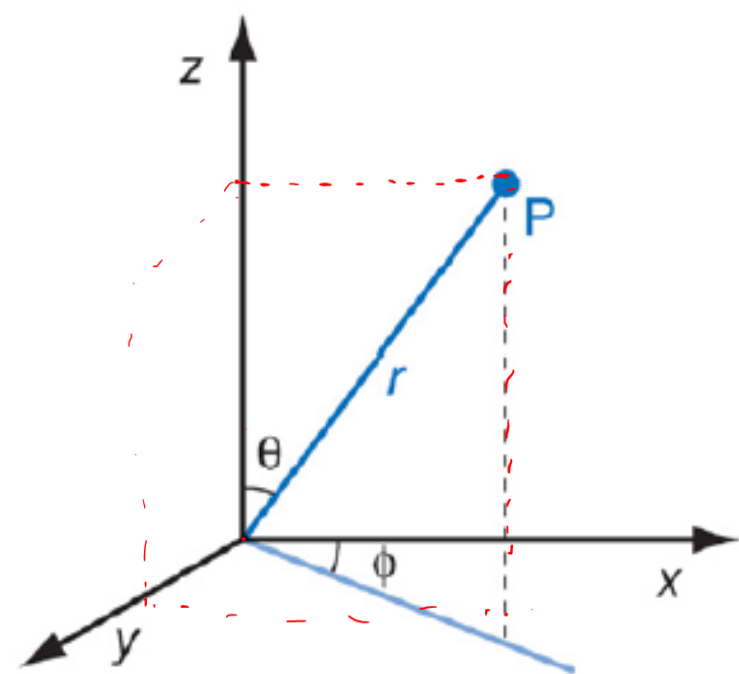
Radial Angular

Coordenadas cartesianas



A posição do ponto P é definida em termos de x , y e z

Coordenadas esféricas

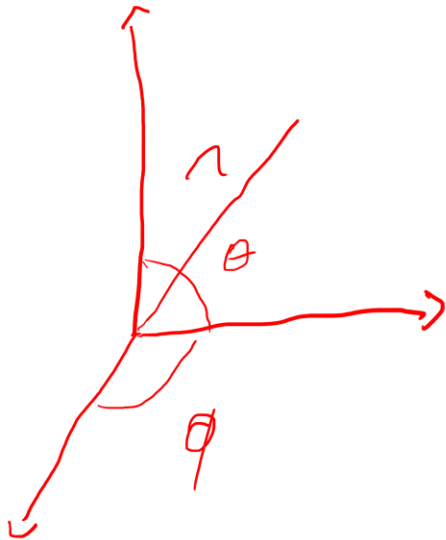


A posição do ponto P é definida em termos da distância r e dos ângulos θ e ϕ

Figura 2.14 Coordenadas cartesianas e esféricas.

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(r, \theta, \phi) = \underbrace{R(r)}_{\text{Radial}} \cdot \underbrace{Y(\theta, \phi)}_{\text{angular}}$$

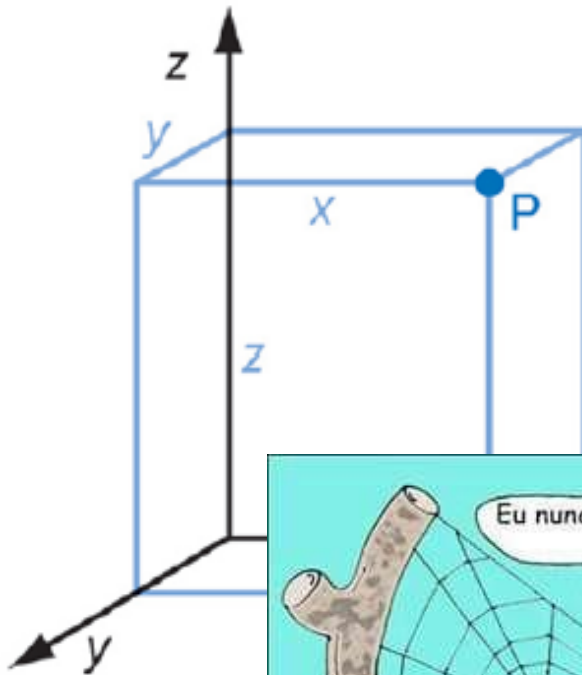
Radial angular



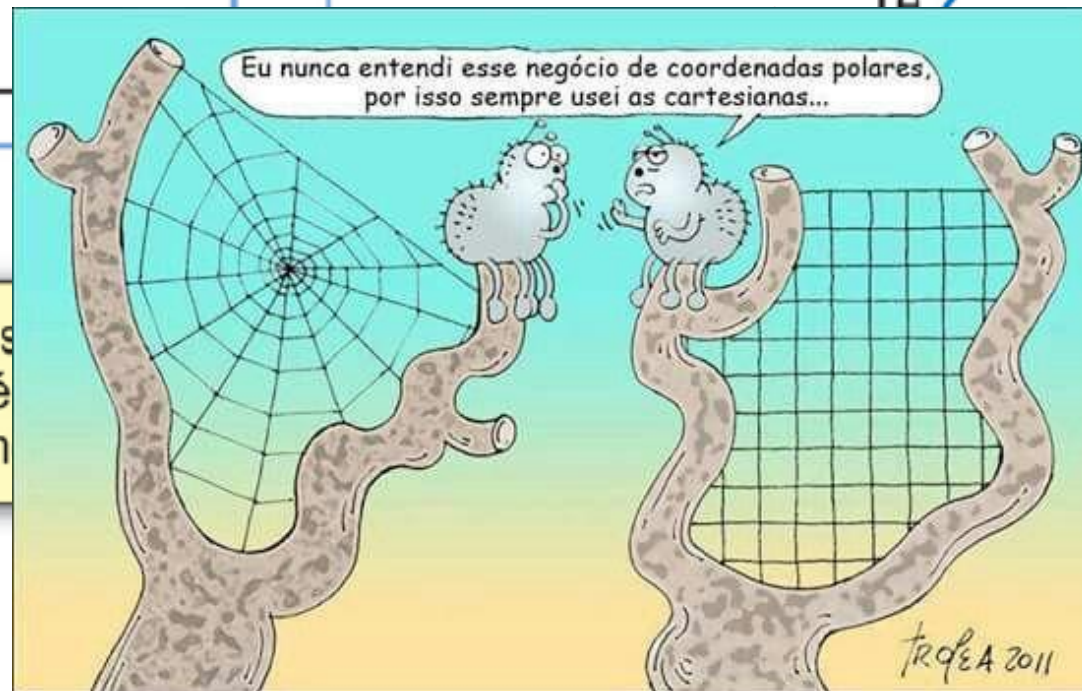
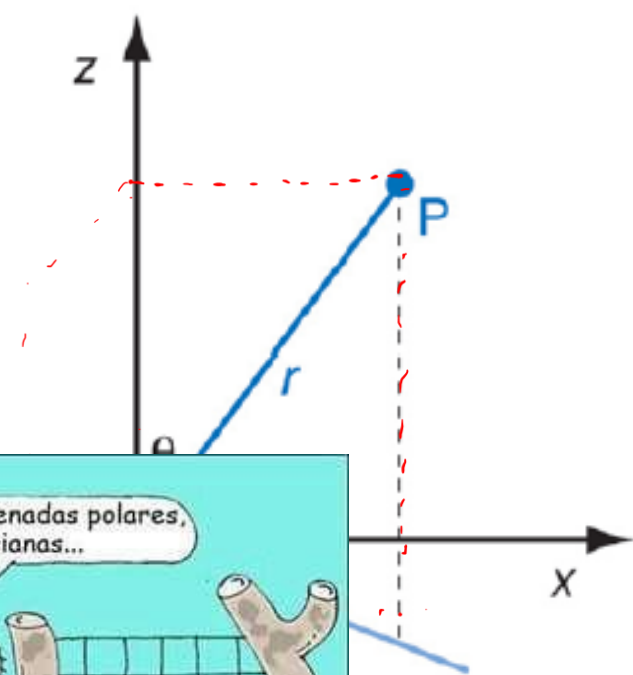
$R(r) \Rightarrow$ comport. da função com a distância

$Y(\theta, \phi) \Rightarrow$ forma do orbital

Coordenadas cartesianas

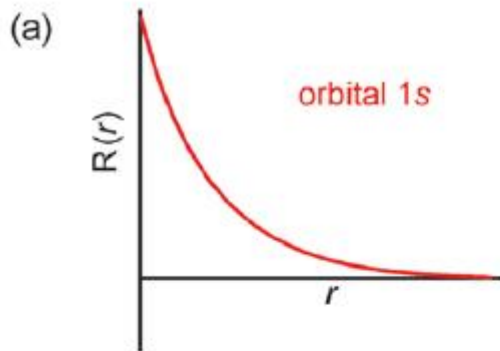


Coordenadas esféricas



A pos
P é
term

P é definida
stância r e
 θ e ϕ



$$\Rightarrow \Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times Y(\theta, \phi) = \left(\frac{4}{a_0^3}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \times \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

indep. θ, ϕ

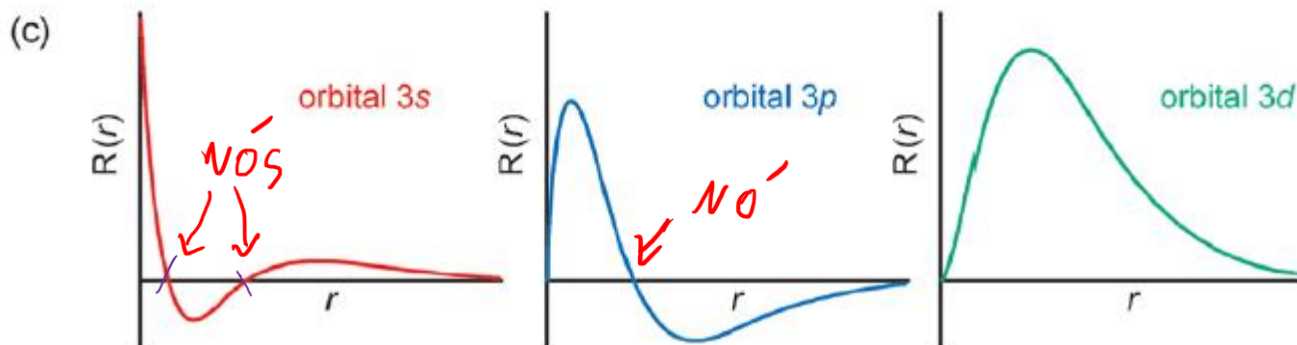
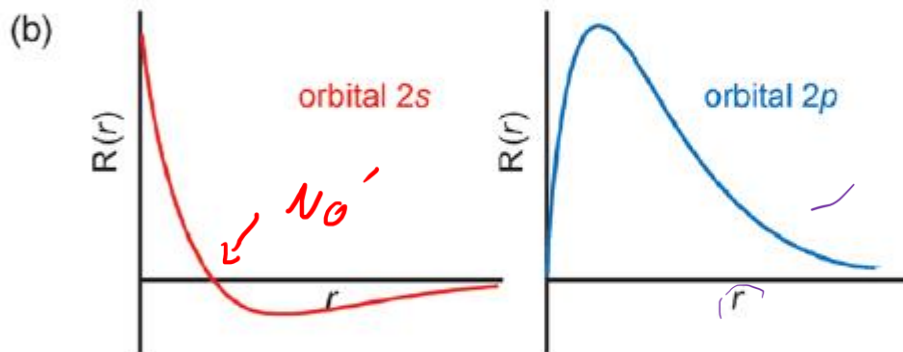


Figura 2.15 Gráficos das funções de distribuição radiais $R(r)$ em função de r para orbitais atômicos do átomo de hidrogênio (a) $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 3$. (Observe que os gráficos não estão todos na mesma escala.)

$a_0 \Rightarrow$ Raio de Bohr

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = 52,9 \text{ pm}$$

$R(n) = 0 \Rightarrow$ NO' RADIAL

Orbital $s \Rightarrow (n-1)$ nós radiais

$p \Rightarrow (n-2)$ nós radiais

$d \Rightarrow (n-3)$ nós "

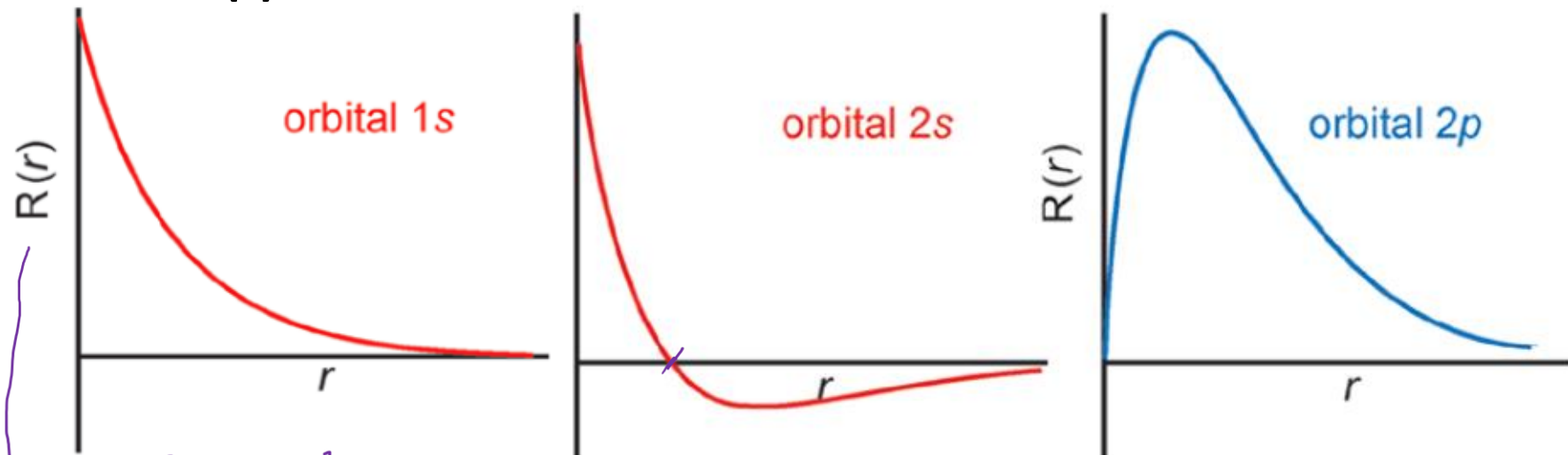
$f \Rightarrow (n-4)$ nós "

$1s \Rightarrow 0$ nós || $2s \Rightarrow 1$ NO' || $3s \Rightarrow 2$ NO'S

$2p \Rightarrow 0$ nós || $3p \Rightarrow 1$ nós || $4p \Rightarrow 2$ nós

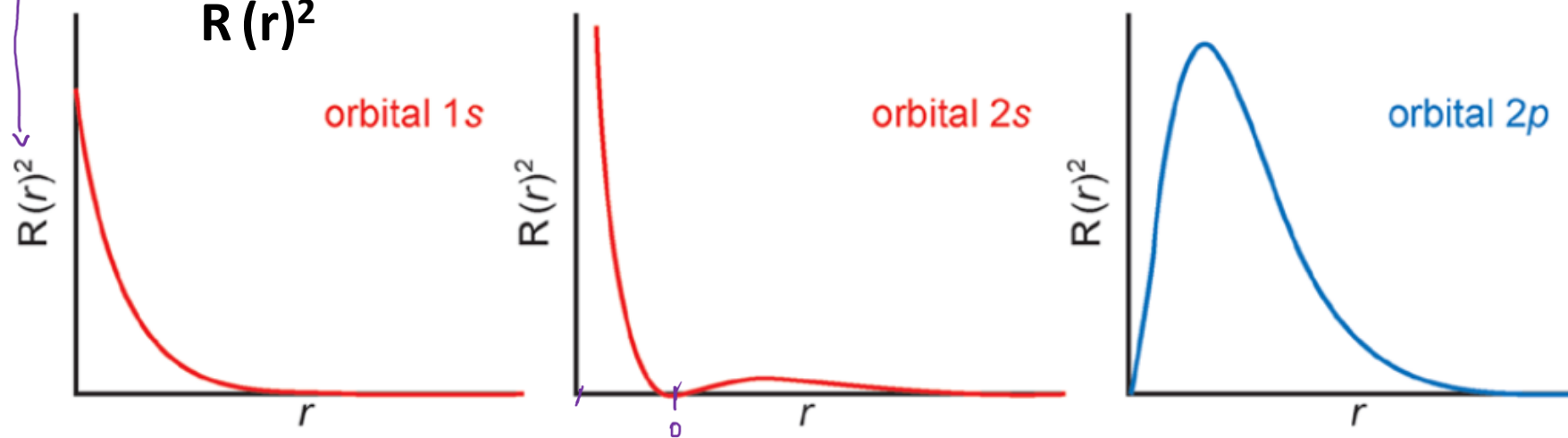
$3d \Rightarrow 0$ nós || $4d \Rightarrow 1$ nós

$R(r)$



Born $\propto \psi^2$

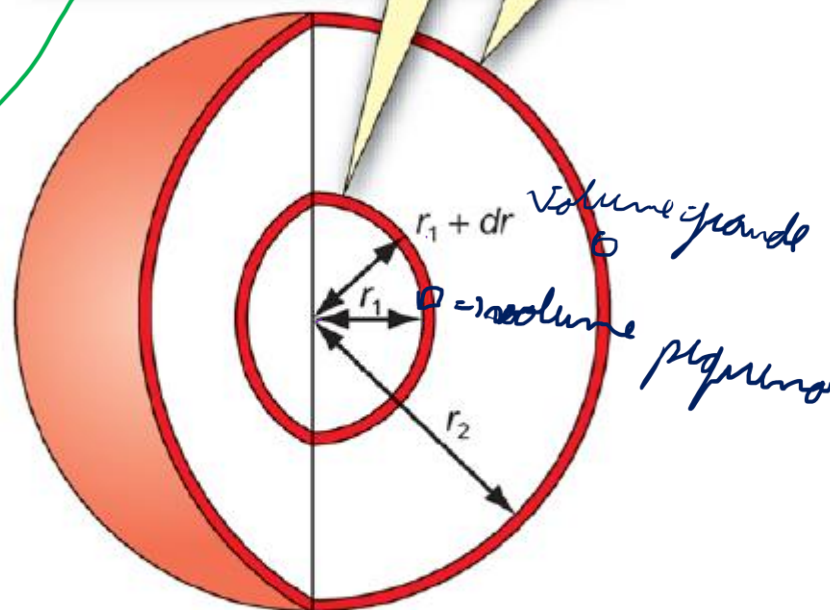
$R(r)^2$



TUNELAMENT

* função de distribuição = $4\pi n^2 R^2(r)$
 radial espessura probab.

A espessura da casca esférica é dr

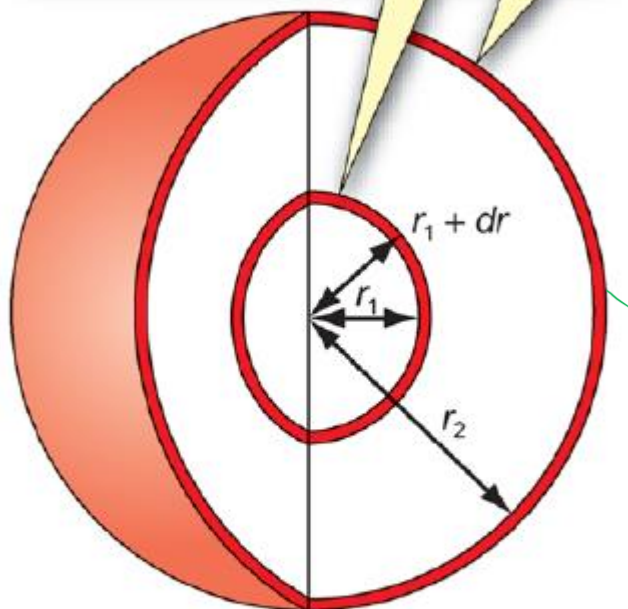


Volume de uma casca esférica
 muito fina de espessura dr localizada
 a uma distância radial $r =$
 área superficial da esfera $\times dr =$
 $4\pi r^2 dr$

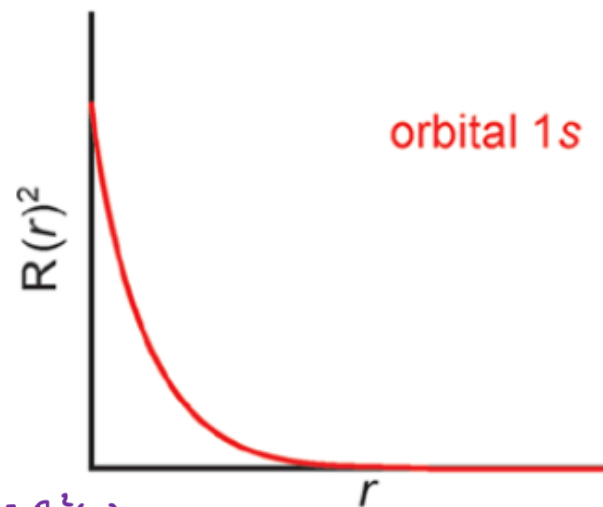
$$4\pi n^2 R^2(r)$$

Figura 2.17 O volume de uma casca esférica muito fina a uma distância radial r_2 é maior do que a uma distância radial r_1 .

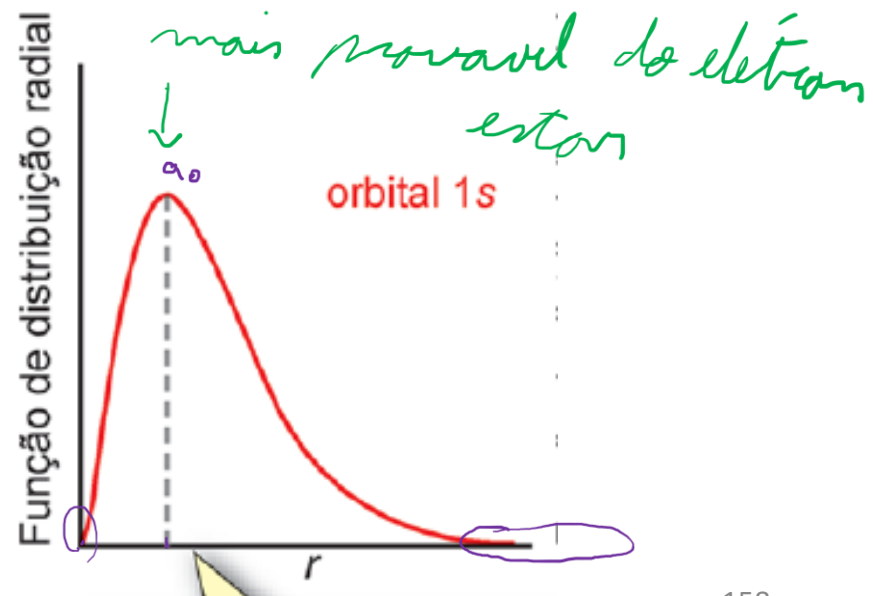
A espessura da casca esférica é dr



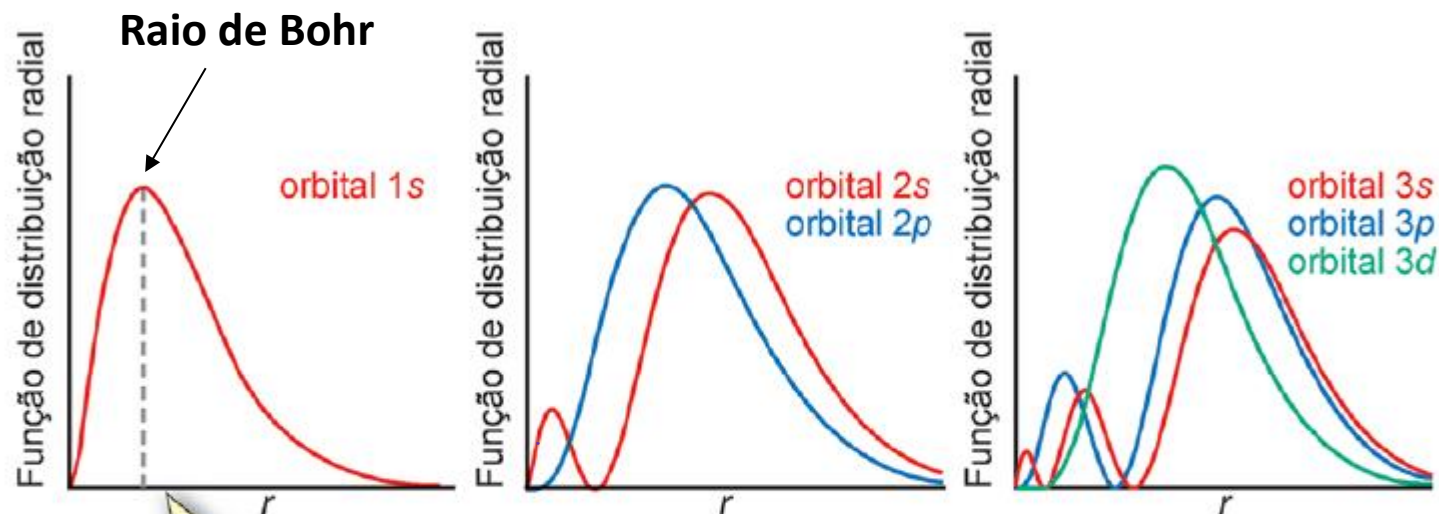
Volume de uma casca esférica muito fina de espessura dr localizada a uma distância radial $r =$
 área superficial da esfera $\times dr = 4\pi r^2 dr$



$$4\pi r^2 R^2(r)$$



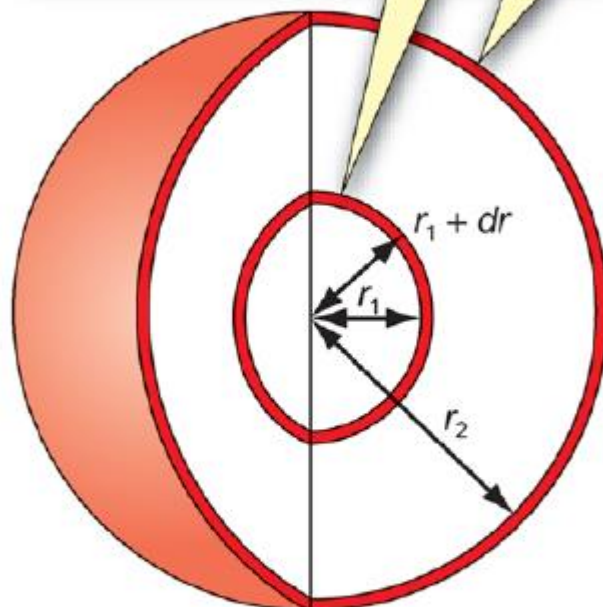
$$4\pi r^2 R^2(r)$$



O valor do máximo da função de distribuição radial corresponde à distância mais provável de se encontrar o elétron, em relação ao núcleo.

Figura 2.18 Gráficos das funções de distribuição radial em função de r dos orbitais atômicos do átomo de hidrogênio para $n = 1, 2$ e 3 .

A espessura da casca esférica é dr



Volume de uma casca esférica muito fina de espessura dr localizada a uma distância radial $r =$
 área superficial da esfera $\times dr =$
 $4\pi r^2 dr$

Figura 2.17 O volume de uma casca esférica muito fina a uma distância radial r_2 é maior do que a uma distância radial r_1 .

Os orbitais s são esféricos e apresentam o mesmo sinal para a função de onda em toda a superfície de contorno

1s



2s



A seção retirada do orbital 2s mostra a presença de um nó esférico. Essa função de onda apresenta sinais opostos em cada lado do nó.

Figura 2.19 As superfícies de contorno dos orbitais 1s e 2s do hidrogênio. O corte mostra o nó radial do orbital 2s.

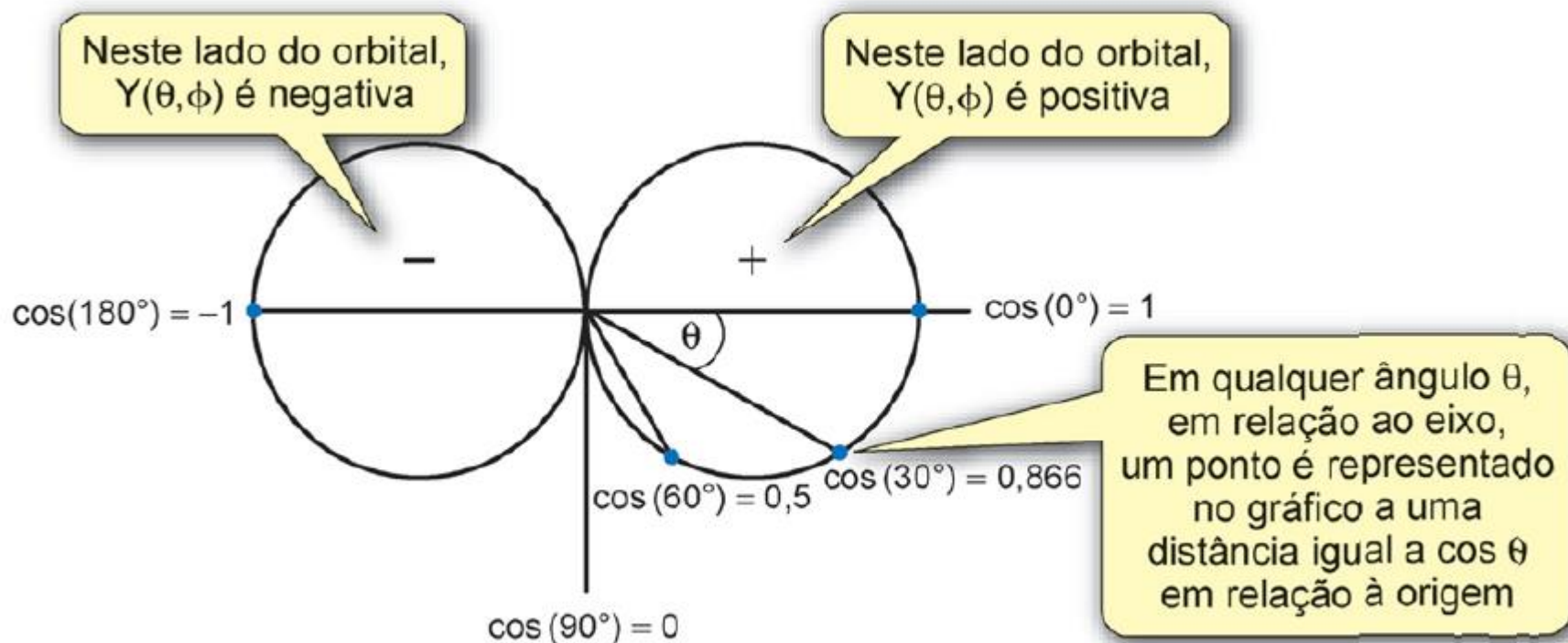


Figura 2.20 A função de onda angular $Y(\theta, \phi)$ de um orbital p . O gráfico mostra $\cos \theta$ versus θ , de modo que para cada ângulo θ marcamos um ponto que apresenta uma distância, em relação à origem, igual ao valor do $\cos \theta$. A forma mais familiar dos orbitais p decorre quando eles descrevem a densidade eletrônica, a qual está relacionada a $\cos^2 \theta$.

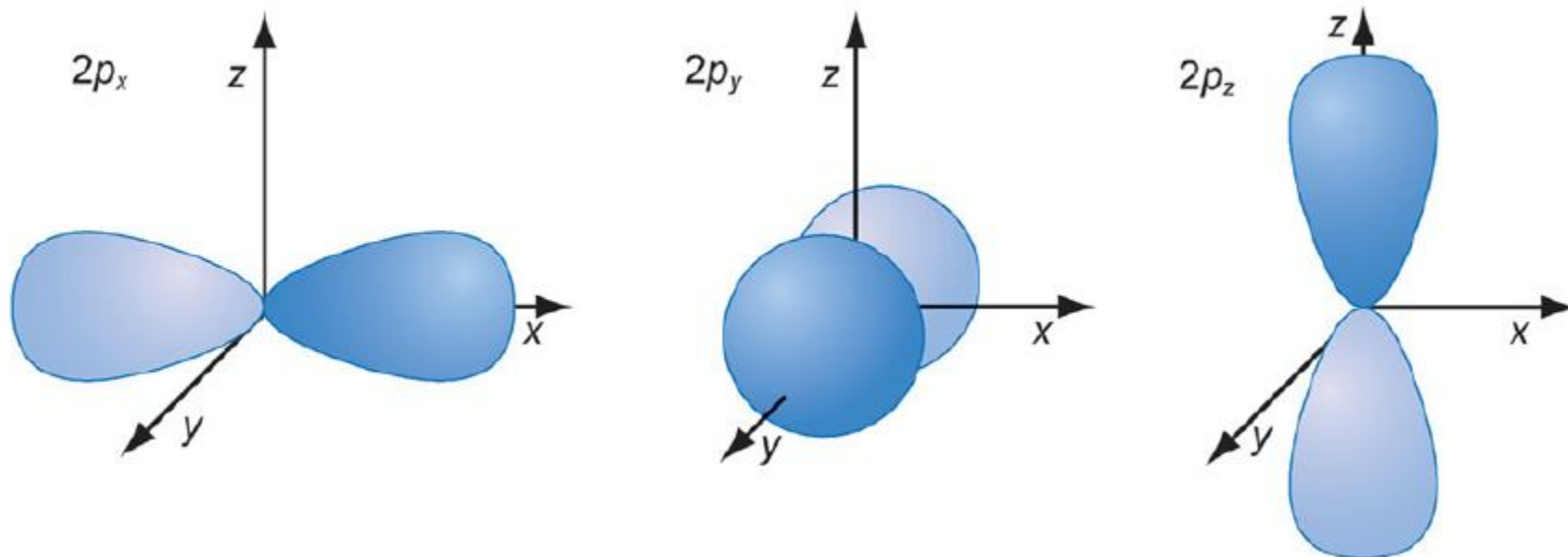


Figura 2.21 Superfícies de contorno para os três orbitais $2p$ do hidrogênio. O orbital $2p_y$ tem a mesma forma que o orbital $2p_x$ e é mostrado saindo da página do livro.

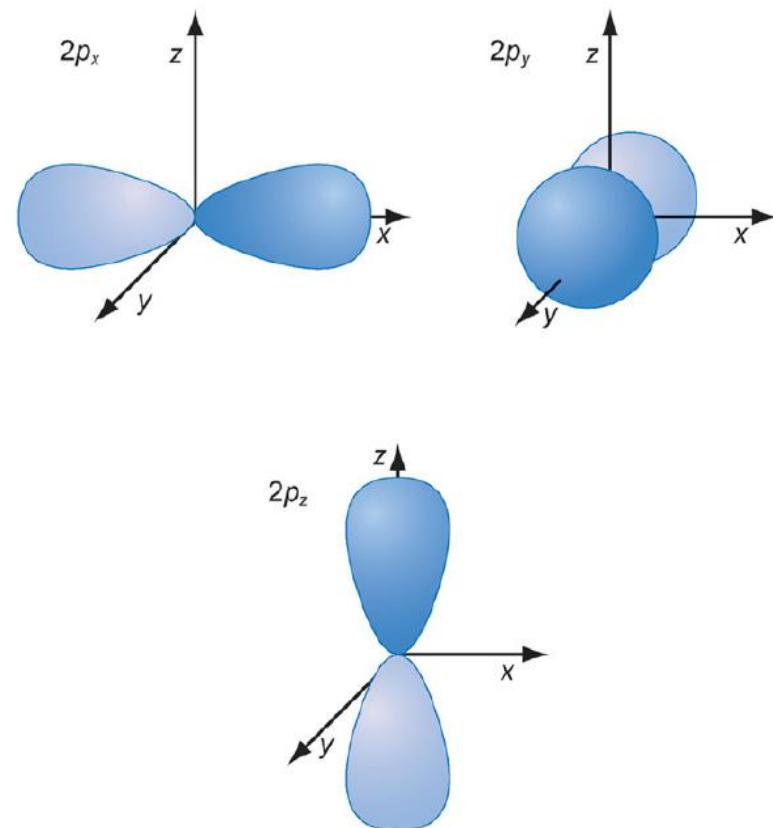
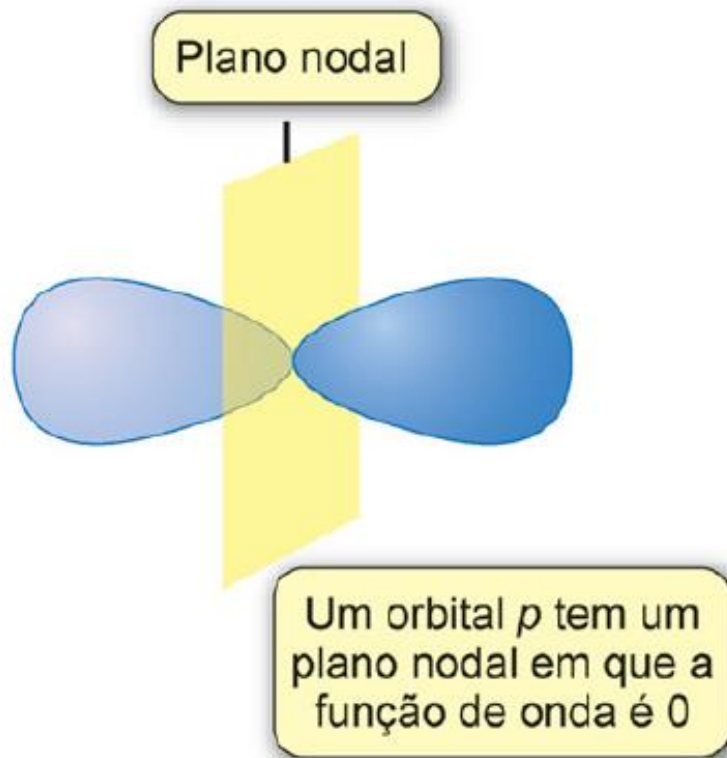


Figura 2.22 A superfície de contorno para um orbital mostrando a posição do plano nodal.

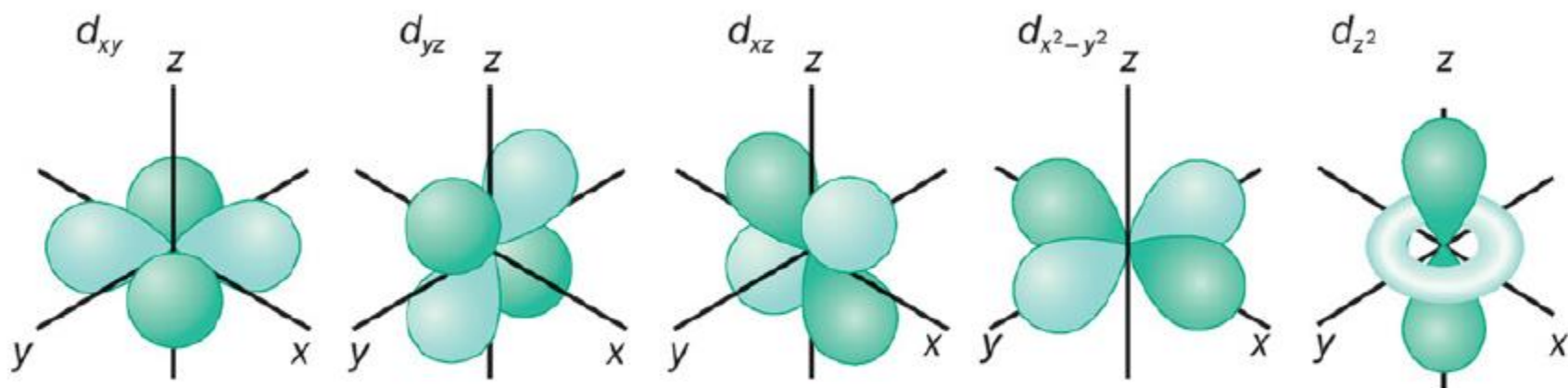


Figura 2.23 Superfícies de contorno para os cinco orbitais 3d.

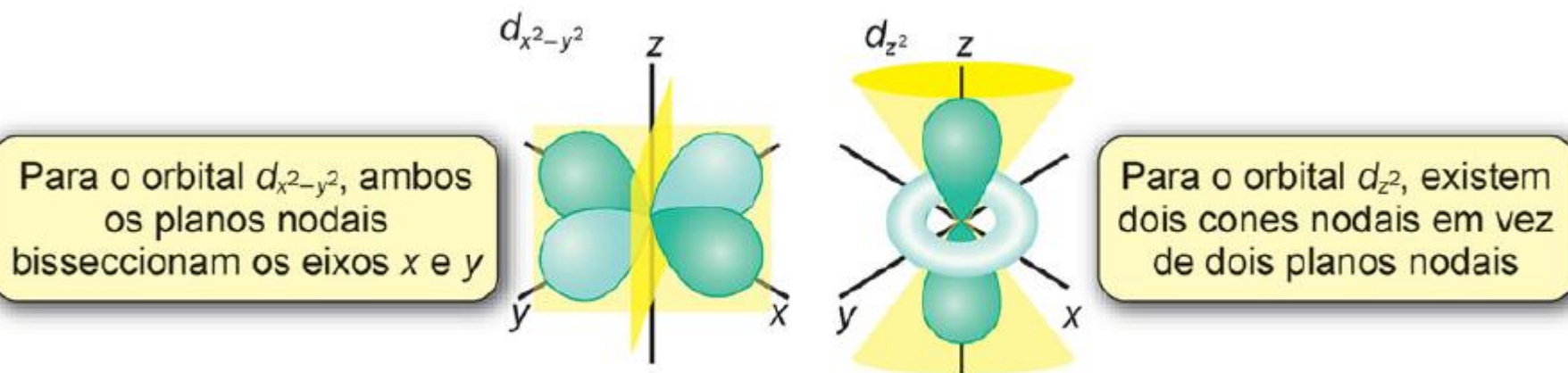
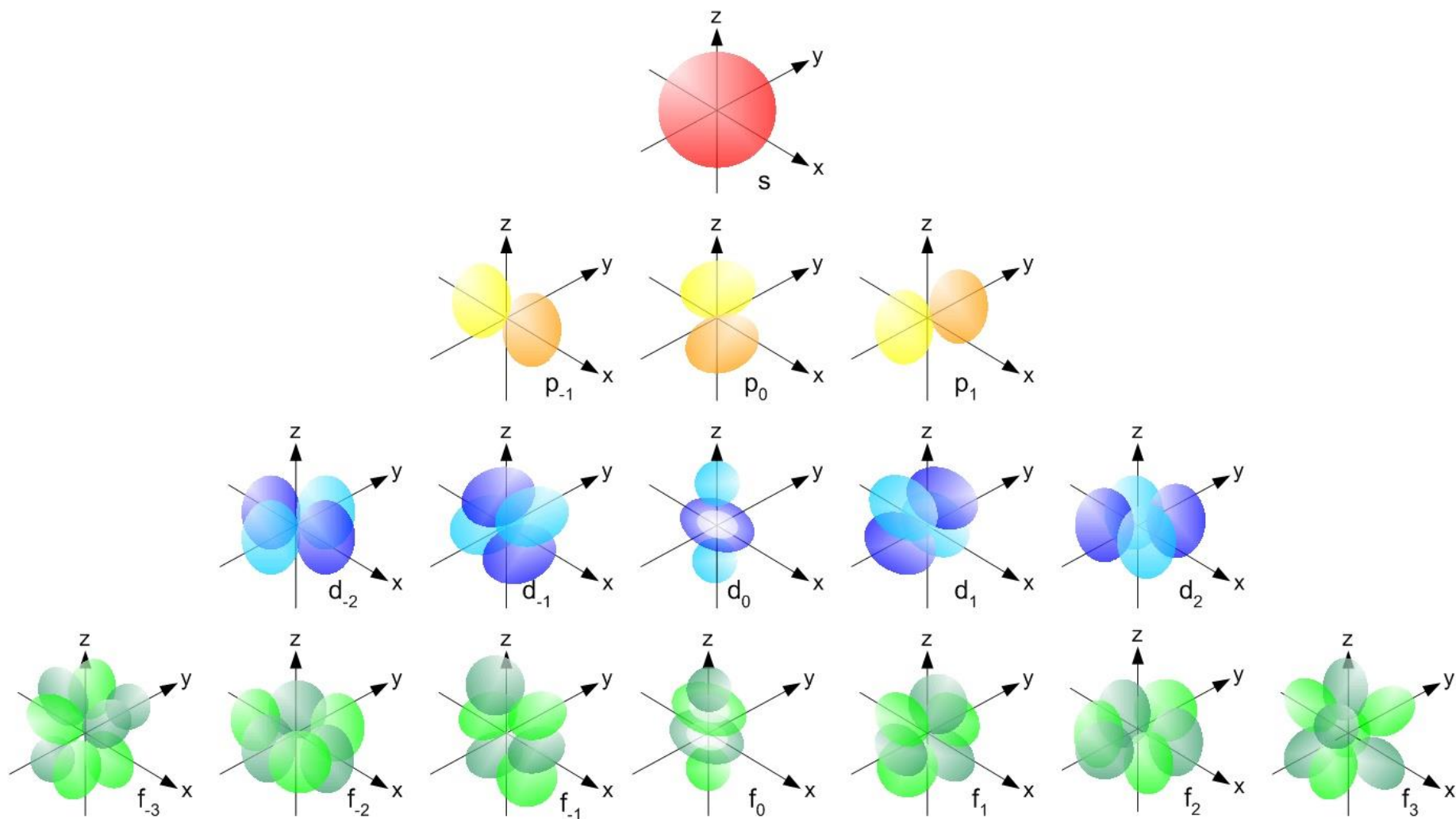
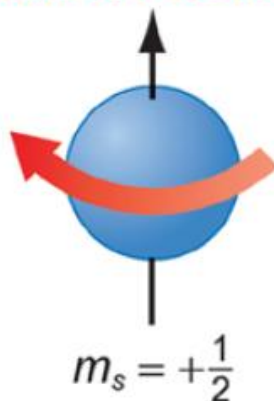


Figura 2.24 Superfícies de contorno para os orbitais $d_{x^2-y^2}$ e d_{z^2} do hidrogênio mostrando as posições dos nós angulares.

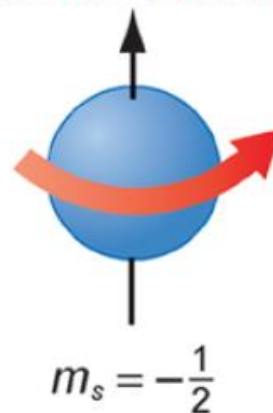


Rotação no
sentido horário
em torno do
eixo do elétron



Isto é
representado
por $\uparrow$

Rotação no
sentido anti-horário
em torno do
eixo do elétron



Isto é
representado
por $\downarrow$

Figura 2.26 Os dois números quânticos magnéticos de spin, $m_s = +\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, podem ser representados por uma rotação no sentido horário e uma rotação no sentido anti-horário em torno do eixo do elétron.

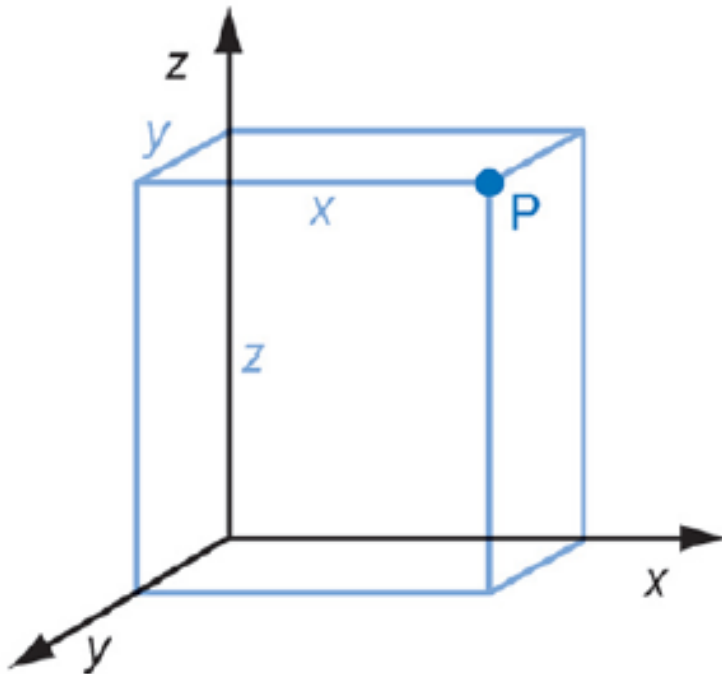
Orbitais atômicos

Átomos Polieletrônicos

Revisão...

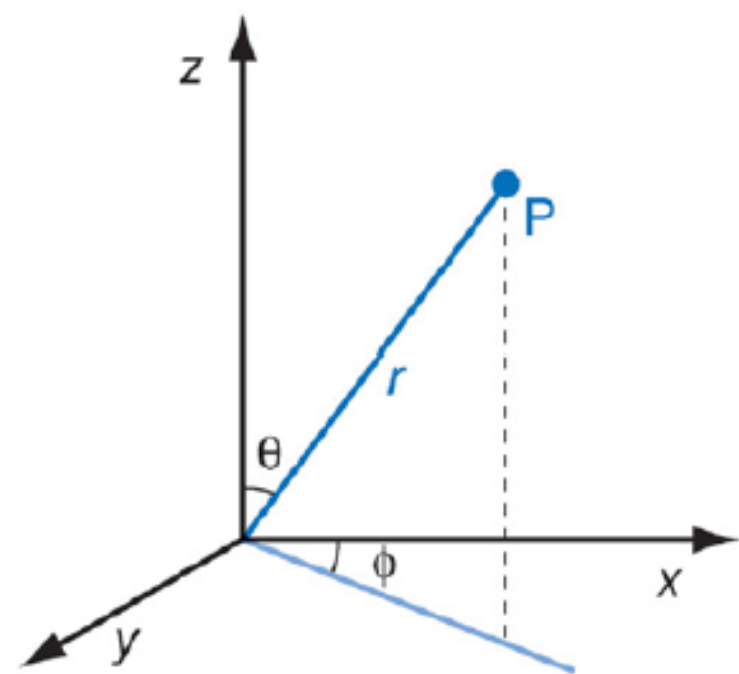
	Nome	Valor	Designação	Define
n	Principal	1, 2, 3, 4, 5...	K, L, M, N, O...	A energia do orbital
l	Secundário ou angular	$0 \leq l \leq n-1$	S, p, d, f	A forma do orbital
m_l	Magnético	$-l \leq m_l \leq +l$	-	A orientação do orbital
m_s	spin	-1/2, +1/2	-	A orientação do spin

Coordenadas cartesianas



A posição do ponto P é definida em termos de x , y e z

Coordenadas esféricas



A posição do ponto P é definida em termos da distância r e dos ângulos θ e ϕ

Figura 2.14 Coordenadas cartesianas e esféricas.

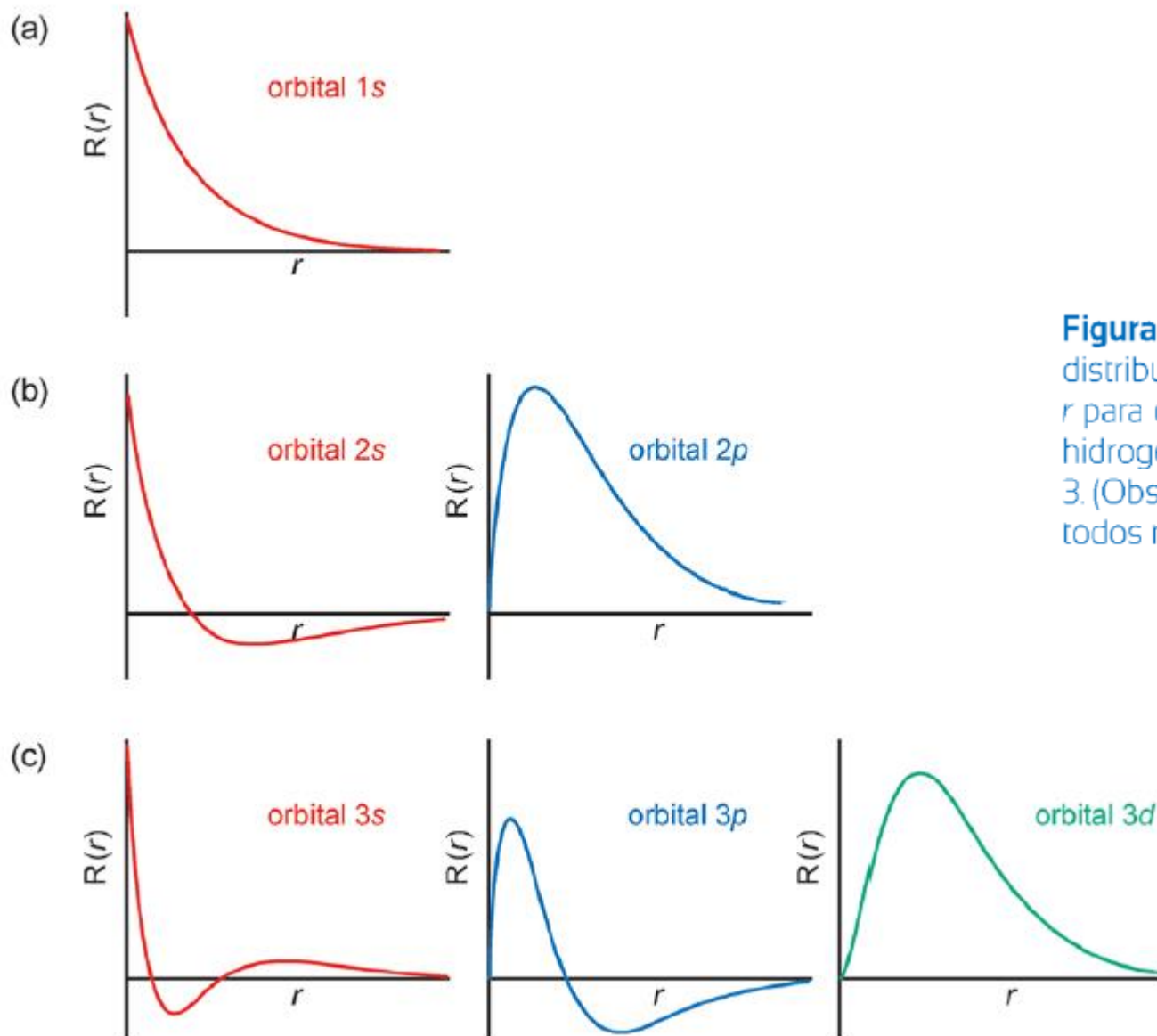
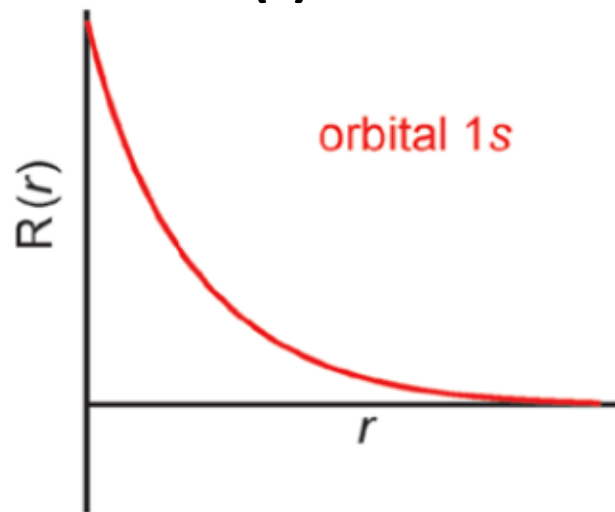
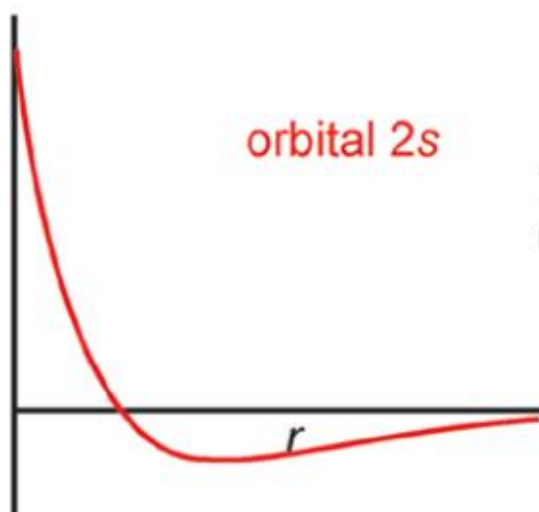


Figura 2.15 Gráficos das funções de distribuição radiais $R(r)$ em função de r para orbitais atômicos do átomo de hidrogênio (a) $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 3$. (Observe que os gráficos não estão todos na mesma escala.)

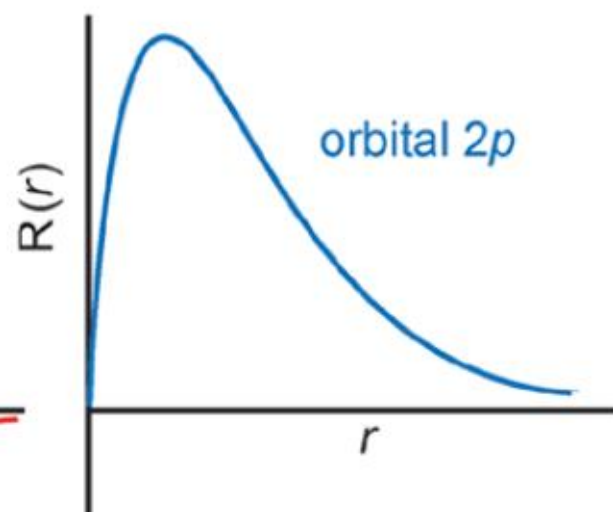
$R(r)$



orbital 1s

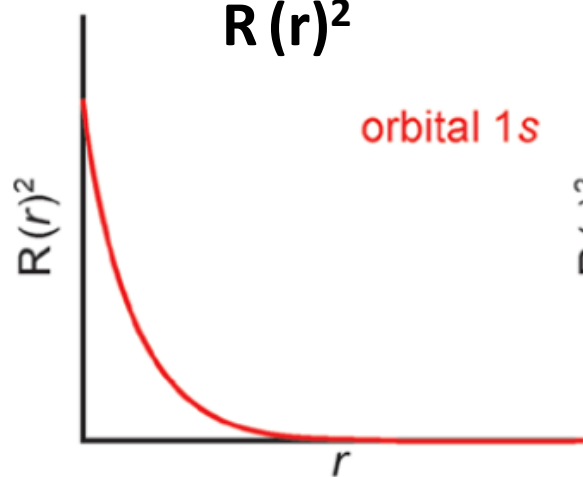


orbital 2s

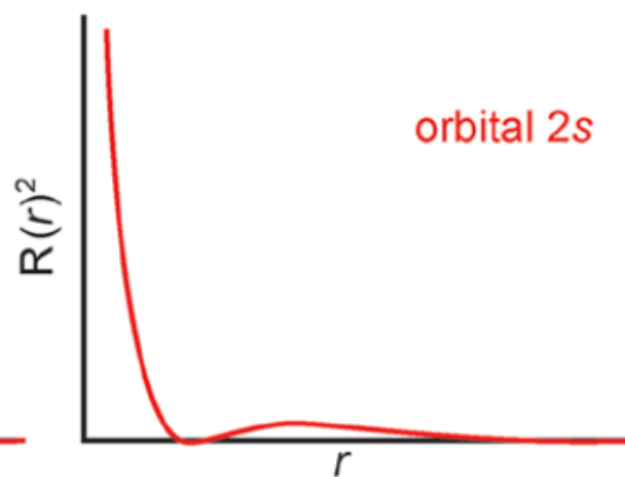


orbital 2p

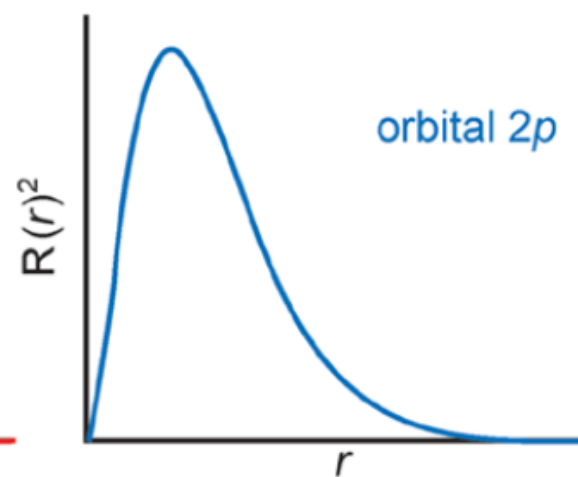
$R(r)^2$



orbital 1s

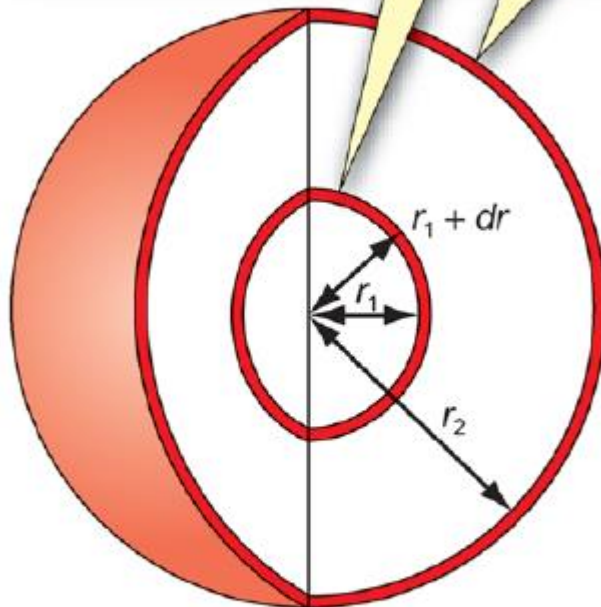


orbital 2s



orbital 2p

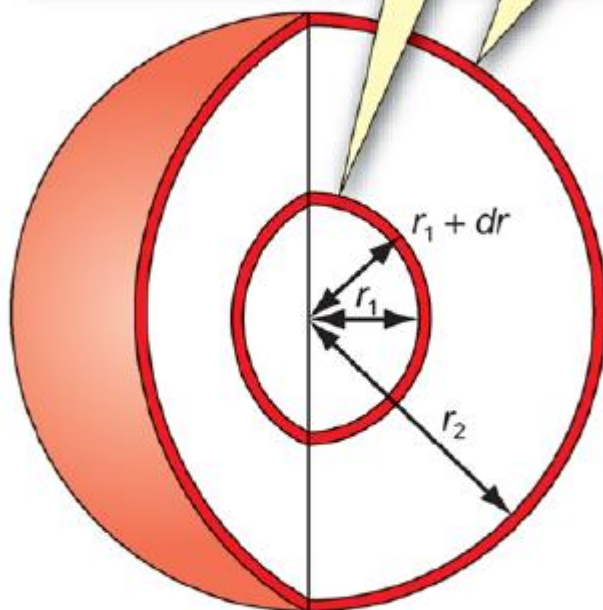
A espessura da casca esférica é dr



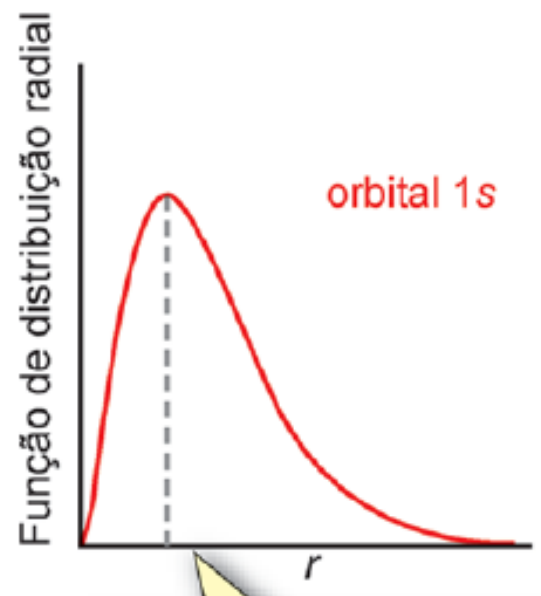
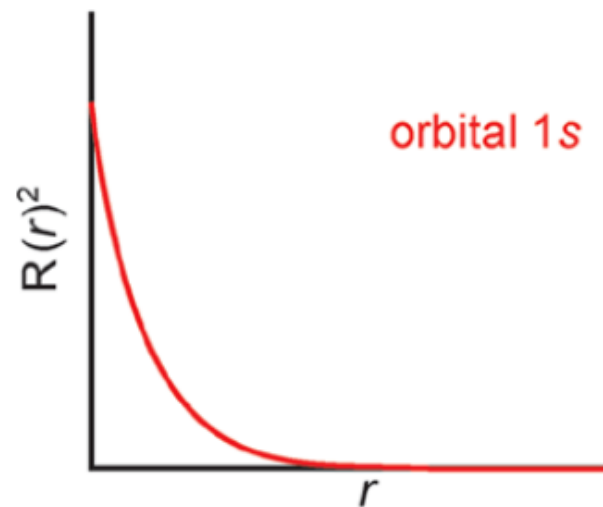
Volume de uma casca esférica muito fina de espessura dr localizada a uma distância radial $r =$
área superficial da esfera $\times dr =$
 $4\pi r^2 dr$

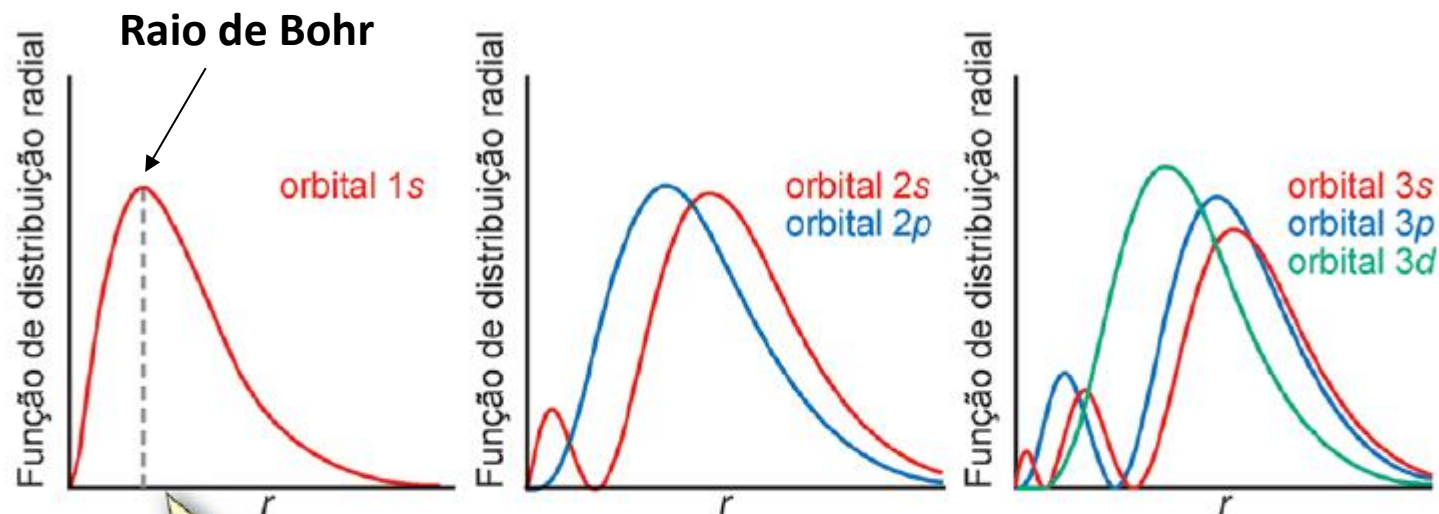
Figura 2.17 O volume de uma casca esférica muito fina a uma distância radial r_2 é maior do que a uma distância radial r_1 .

A espessura da casca esférica é dr



Volume de uma casca esférica muito fina de espessura dr localizada a uma distância radial $r =$
 área superficial da esfera $\times dr = 4\pi r^2 dr$

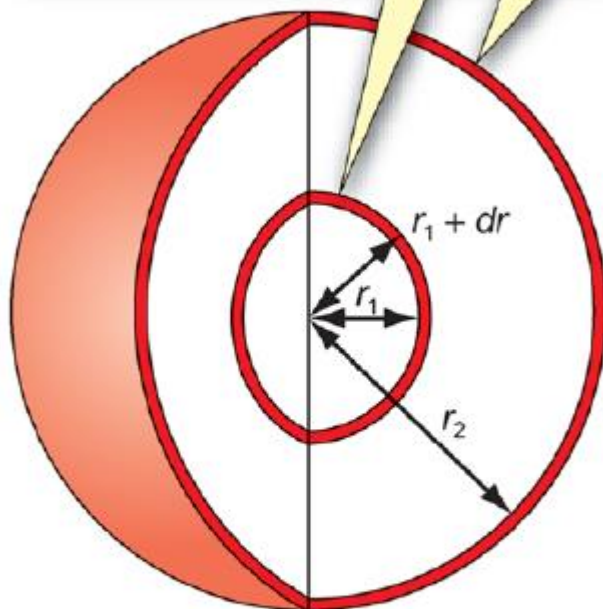




O valor do máximo da função de distribuição radial corresponde à distância mais provável de se encontrar o elétron, em relação ao núcleo.

Figura 2.18 Gráficos das funções de distribuição radial em função de r dos orbitais atômicos do átomo de hidrogênio para $n = 1, 2$ e 3 .

A espessura da casca esférica é dr



Volume de uma casca esférica muito fina de espessura dr localizada a uma distância radial $r =$ área superficial da esfera $\times dr = 4\pi r^2 dr$

Figura 2.17 O volume de uma casca esférica muito fina a uma distância radial r_2 é maior do que a uma distância radial r_1 .

Os orbitais s são esféricos e apresentam o mesmo sinal para a função de onda em toda a superfície de contorno

1s



2s



A seção retirada do orbital 2s mostra a presença de um nó esférico. Essa função de onda apresenta sinais opostos em cada lado do nó.

Figura 2.19 As superfícies de contorno dos orbitais 1s e 2s do hidrogênio. O corte mostra o nó radial do orbital 2s.

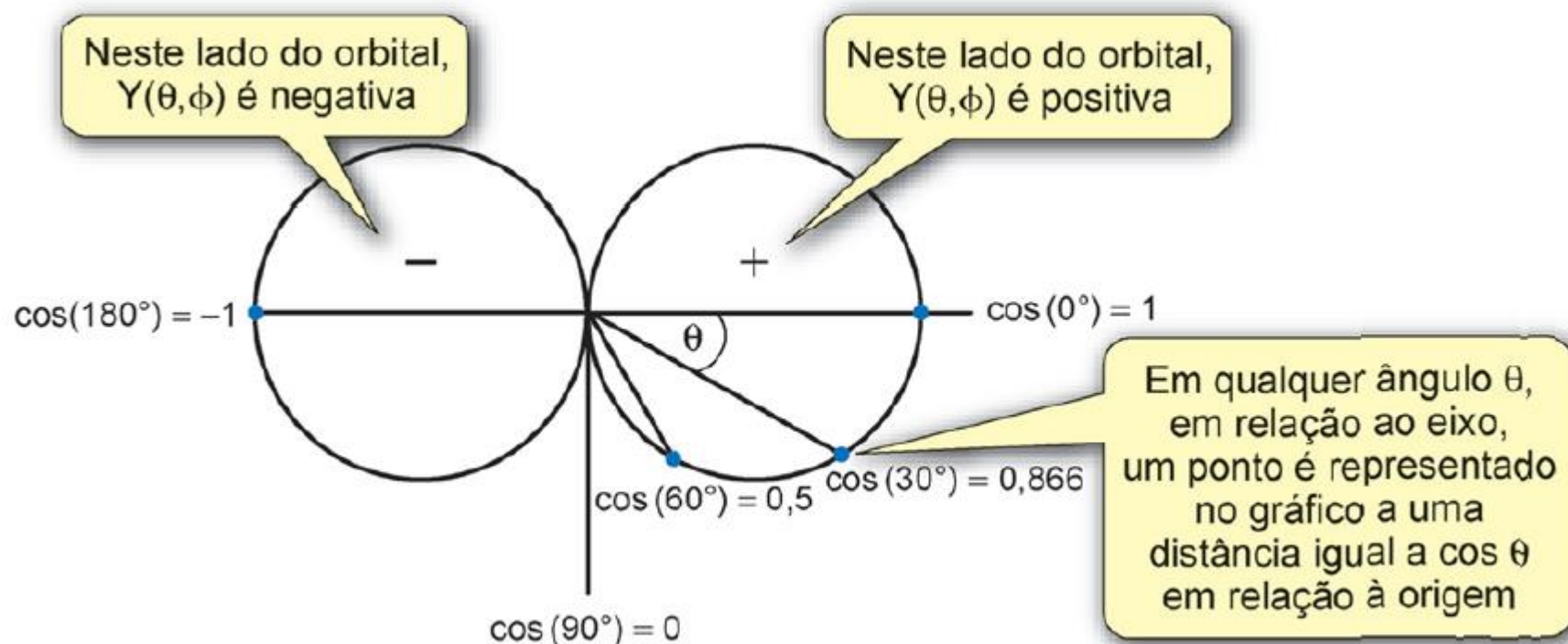


Figura 2.20 A função de onda angular $Y(\theta, \phi)$ de um orbital p . O gráfico mostra $\cos \theta$ versus θ , de modo que para cada ângulo θ marcamos um ponto que apresenta uma distância, em relação à origem, igual ao valor do $\cos \theta$. A forma mais familiar dos orbitais p decorre quando eles descrevem a densidade eletrônica, a qual está relacionada a $\cos^2 \theta$.

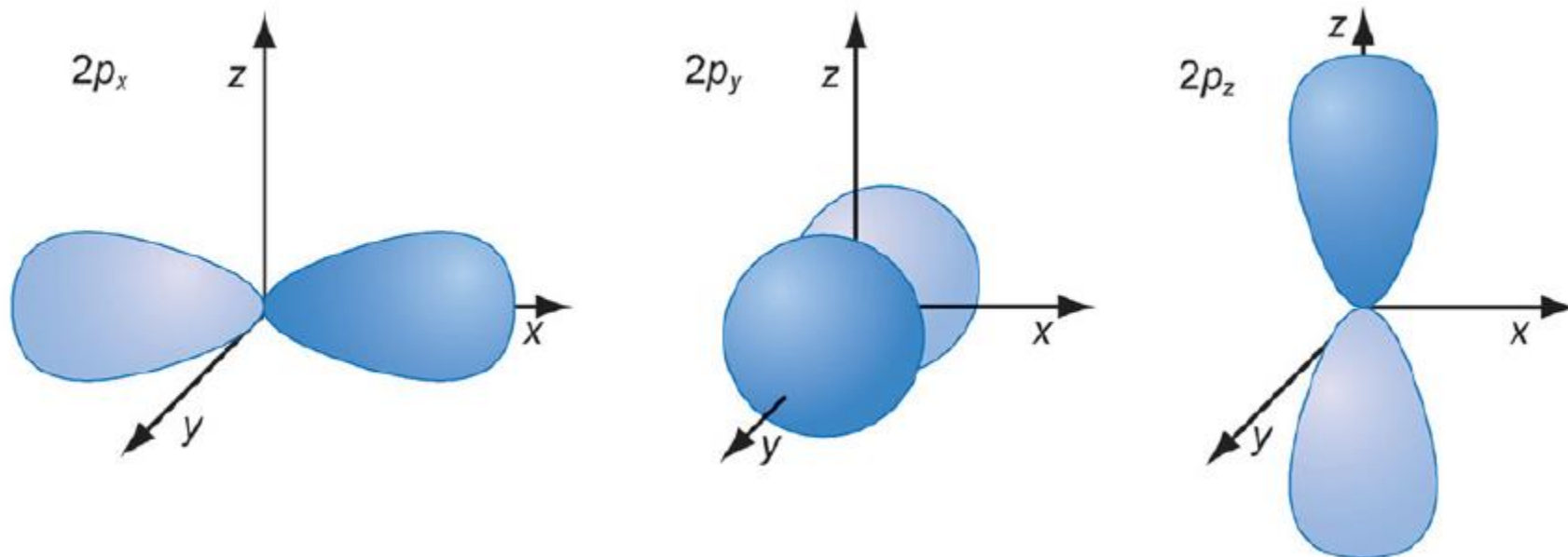


Figura 2.21 Superfícies de contorno para os três orbitais $2p$ do hidrogênio. O orbital $2p_y$ tem a mesma forma que o orbital $2p_x$ e é mostrado saindo da página do livro.

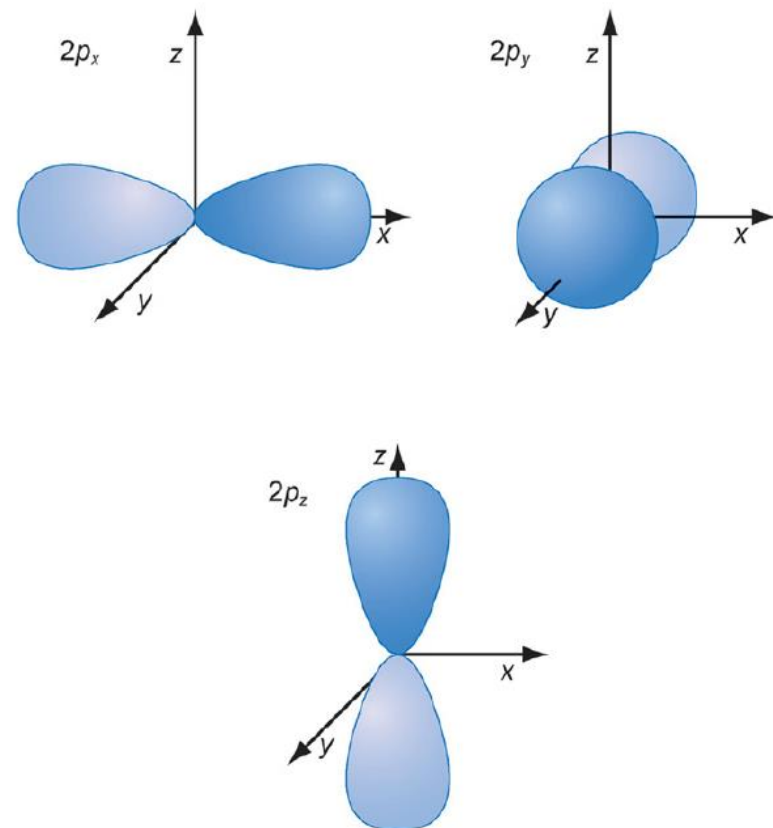
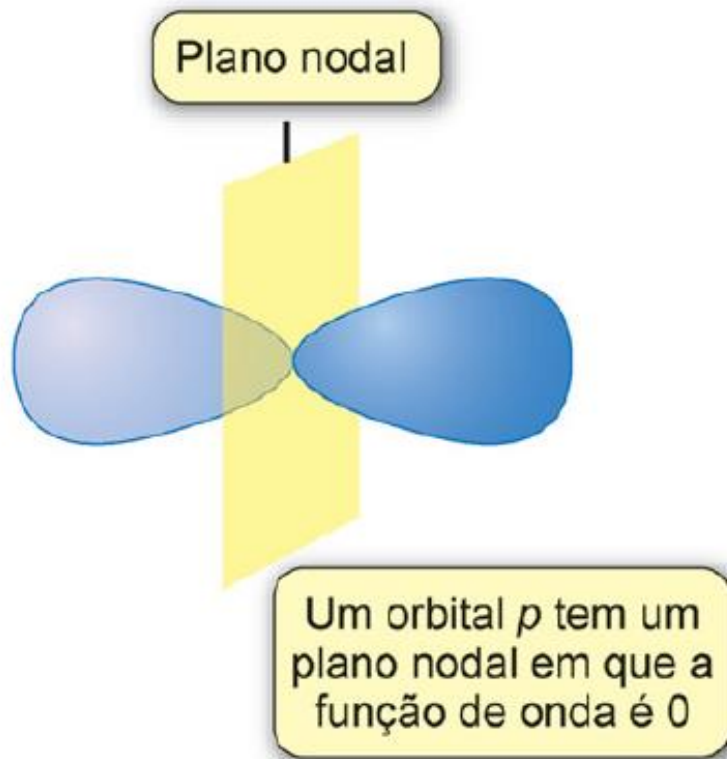


Figura 2.22 A superfície de contorno para um orbital mostrando a posição do plano nodal.

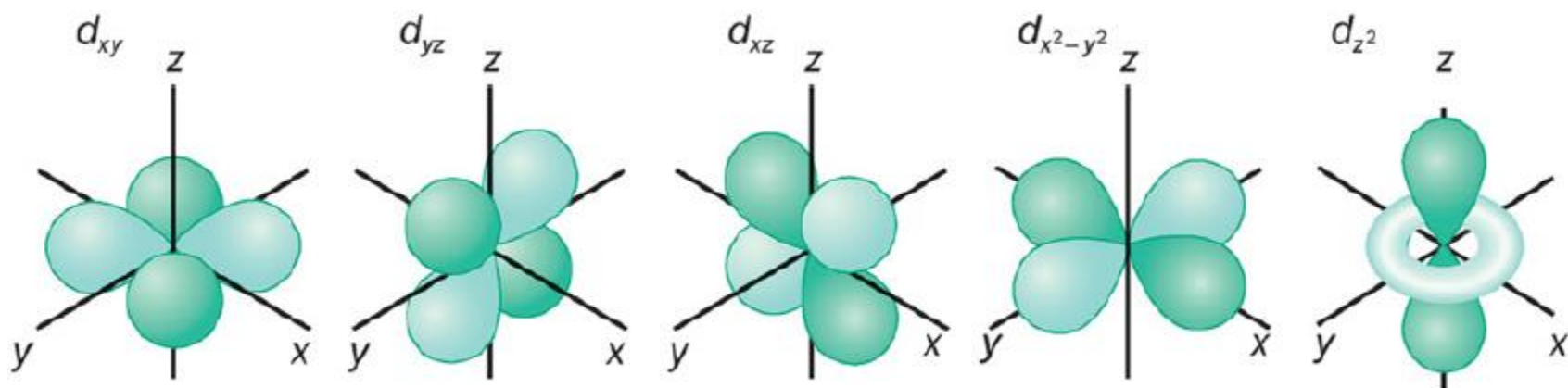


Figura 2.23 Superfícies de contorno para os cinco orbitais 3d.

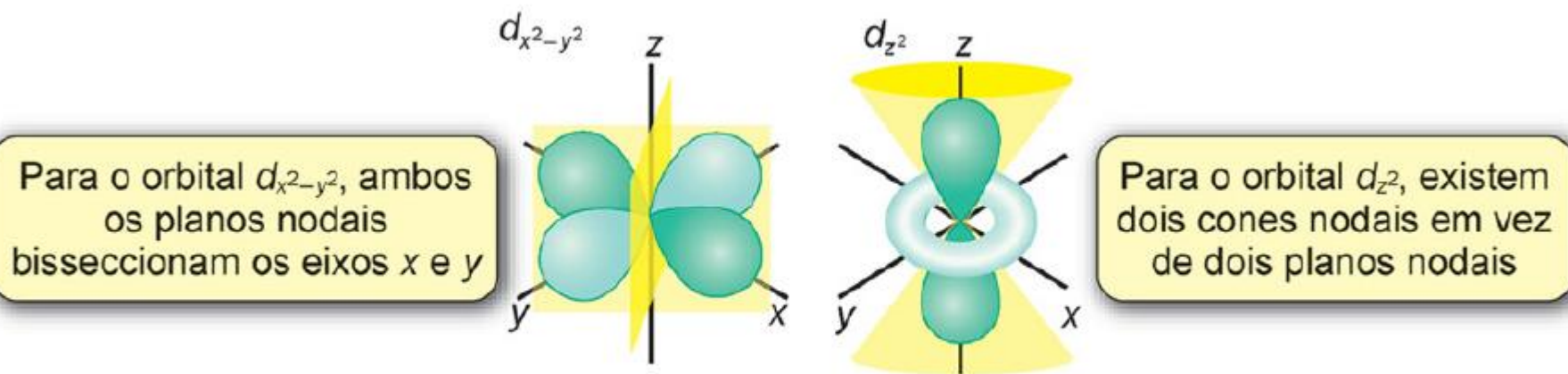
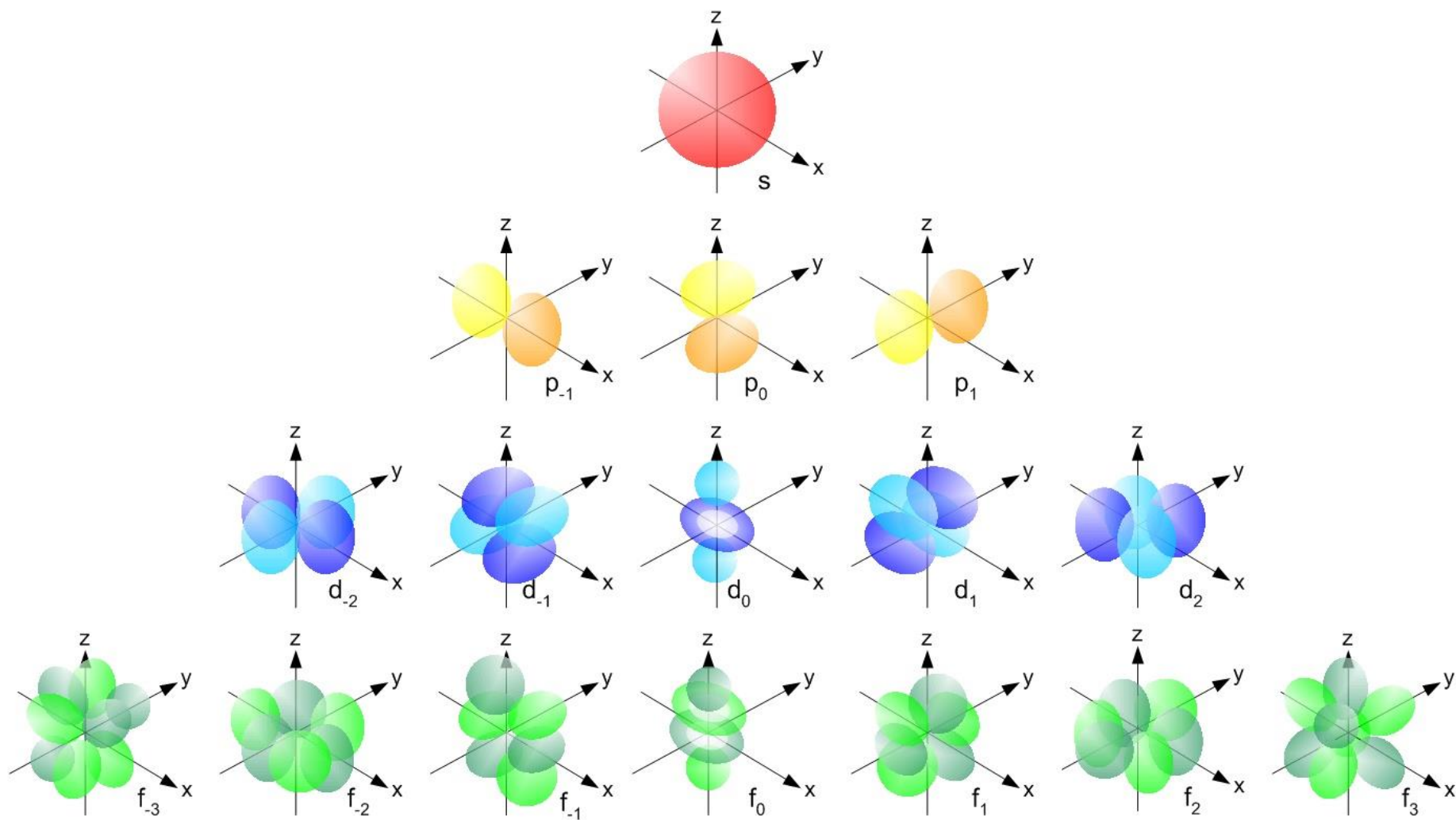
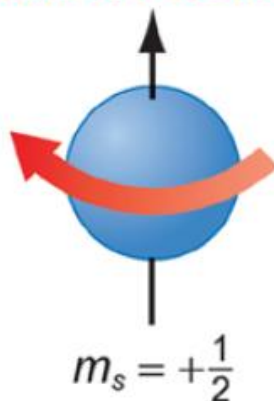


Figura 2.24 Superfícies de contorno para os orbitais $d_{x^2-y^2}$ e d_{z^2} do hidrogênio mostrando as posições dos nós angulares.

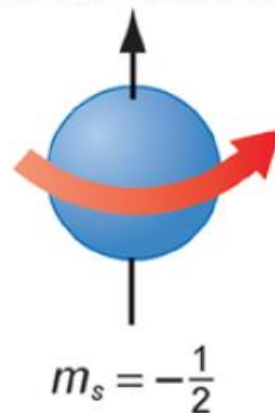


Rotação no
sentido horário
em torno do
eixo do elétron



Isto é
representado
por $\uparrow$

Rotação no
sentido anti-horário
em torno do
eixo do elétron



Isto é
representado
por $\downarrow$

Figura 2.26 Os dois números quânticos magnéticos de spin, $m_s = +\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, podem ser representados por uma rotação no sentido horário e uma rotação no sentido anti-horário em torno do eixo do elétron.

Átomos polieletrônicos

- Até agora, estávamos tratando do átomos hidrogenóides, que possuem o núcleo e 1 elétron;
- Para átomos polieletrônicos (mais de 1 elétron), é preciso usar aproximações.
- A principal: aproximação orbital

Para o H, a energia depende apenas do número quântico n , enquanto para os polieletrônicos, não. Para eles há também dependência de l (quanto maior l , maior a energia)

Por quê?

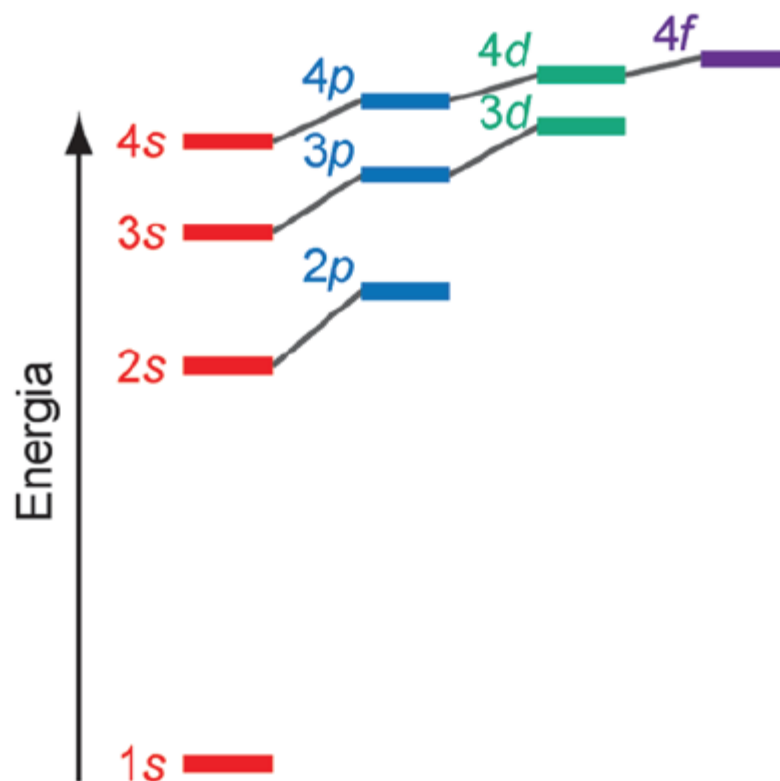
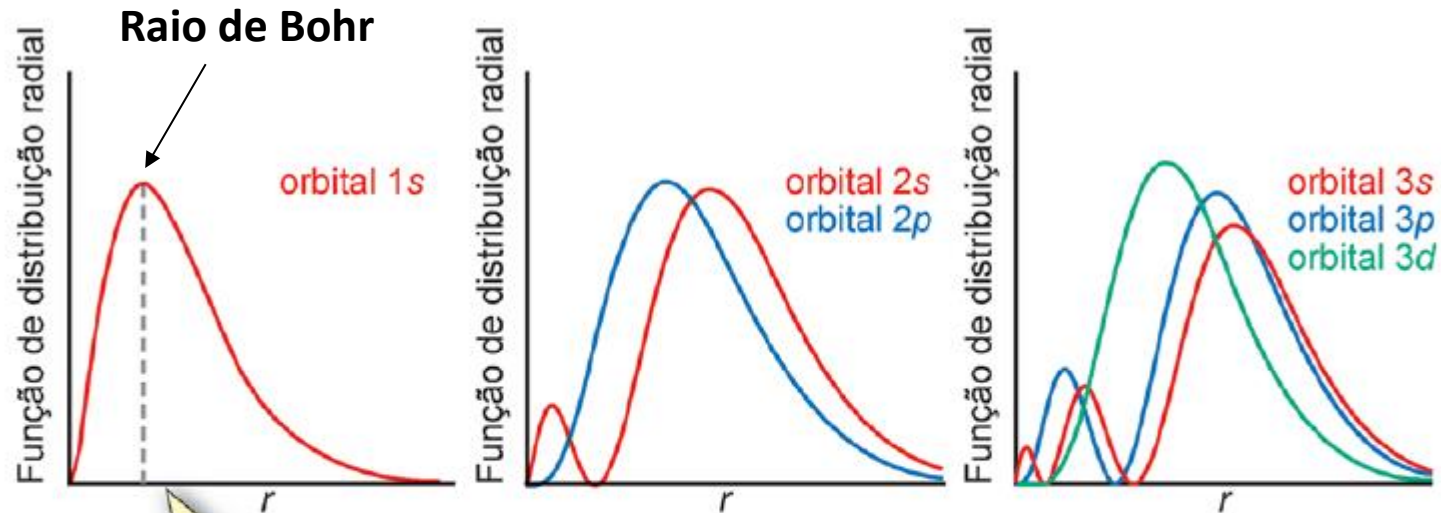


Figura 2.25 A ordem das energias dos orbitais atômicos para átomos polieletrônicos. A energia de um orbital não depende somente de n como no caso do hidrogênio, ela também é afetada pelo valor de l .

Blindagem e penetração



O valor do máximo da função de distribuição radial corresponde à distância mais provável de se encontrar o elétron, em relação ao núcleo.

Figura 2.18 Gráficos das funções de distribuição radial em função de r dos orbitais atômicos do átomo de hidrogênio para $n = 1, 2$ e 3 .

Tudo depende da carga nuclear efetiva!!!!



Preenchimento dos orbitais atômicos

Preenchimento dos orbitais atômicos

- Princípio do Aufbau (em alemão, construir)

Preenchimento dos orbitais atômicos

- Princípio do Aufbau (em alemão, construir)
- Princípio de exclusão de Pauli

Preenchimento dos orbitais atômicos

- Princípio do Aufbau (em alemão, construir)
- Princípio de exclusão de Pauli
- Regra de Hund

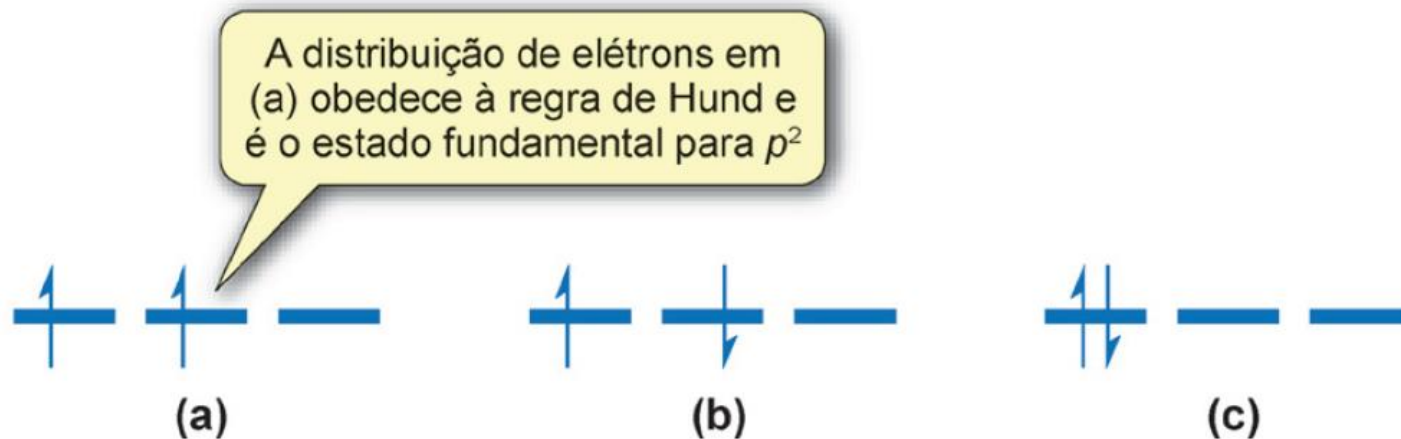


Figura 2.27 As distribuições (a), (b) e (c) representam três maneiras possíveis de se distribuírem dois elétrons nos orbitais p . Usando a regra de Hund, chega-se à conclusão de que (a) tem a menor energia, pois ela tem o maior número de spins de elétrons paralelos.

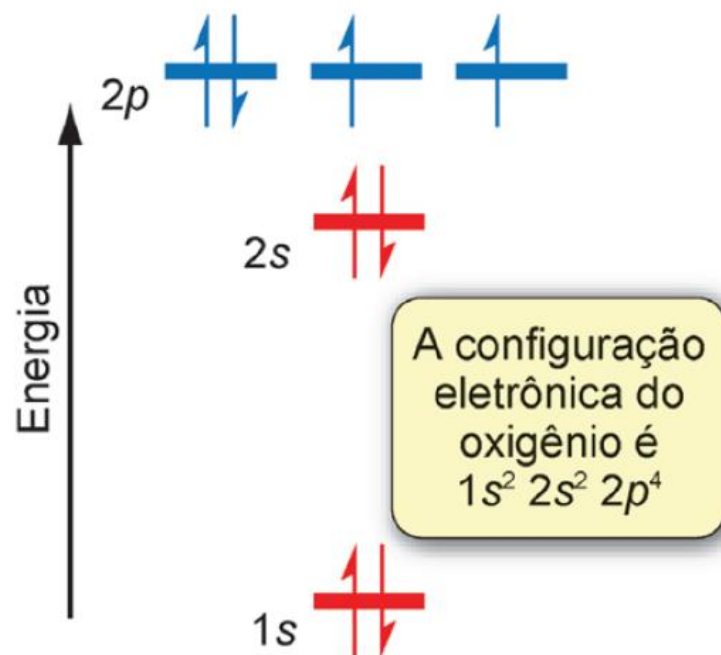


Figura 2.28 A configuração eletrônica do estado fundamental do átomo de oxigênio. O átomo tem dois elétrons desemparelhados.

Tabela 2.5 Configurações eletrônicas dos elementos com $Z = 1$ até $Z = 20$

Z	Elemento	Configuração completa	Configuração simplificada
1	H	$1s^1$	$1s^1$
2	He	$1s^2$	$1s^2$
3	Li	$1s^2 2s^1$	[He] $2s^1$
4	Be	$1s^2 2s^2$	[He] $2s^2$
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	[He] $2s^2 2p^1$
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	[He] $2s^2 2p^2$
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	[He] $2s^2 2p^3$
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	[He] $2s^2 2p^4$
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	[He] $2s^2 2p^5$
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	[He] $2s^2 2p^6$
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	[Ne] $3s^1$
12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	[Ne] $3s^2$
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	[Ne] $3s^2 3p^1$
14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	[Ne] $3s^2 3p^2$
15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	[Ne] $3s^2 3p^3$

(a)

		Grupos																		
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Período	1							1s											1s	
	2	2s													2p					
	3	3s													3p					
	4	4s							3d							4p				
	5	5s							4d							5p				
	6	6s							5d							6p				
	7	7s							6d											
		4f 5f																		

Os elementos do bloco *f* normalmente são mostrados, por conveniência, na parte de baixo da tabela

(b)

1			1s					1s
2	2s							2p
3	3s							3p
4	4s	3d				3d		4p
5	5s	4d				4d		5p
6	6s	5d	4f			5d		6p
7	7s	6d	5f			6d		

Nesta versão da Tabela Periódica, os elementos do bloco *f* são mostrados nas suas posições corretas

Carga nuclear efetiva

- Como consequência da blindagem e da penetração, os elétrons não sentem a carga nuclear da mesma forma!
- Carga nuclear efetiva (Z_{ef}) $\neq Z$
- Regra de Slater: $Z_{\text{ef}} = Z - S$
 - S é uma constante de blindagem

Regra de Slater

- $Z_{\text{ef}} = Z - S$

(1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d) (4f) (5s,5p) (5d) etc.

Se o elétron mais externo é um elétron *s* ou *p*:

- cada um dos outros elétrons no mesmo grupo (*ns*, *np*) contribui com 0,35 para *S*;
- cada um dos elétrons na camada (*n* - 1) contribui com 0,85 para *S*;
- cada um dos elétrons na camada (*n* - 2) ou menor contribui com 1,0 para *S*.

Se o elétron mais externo está em um orbital *d* ou *f*:

- cada um dos outros elétrons no grupo (*nd*) ou (*nf*) contribui com 0,35 para *S*;
- cada um dos elétrons nos grupos à esquerda contribui com 1,0 para *S*.

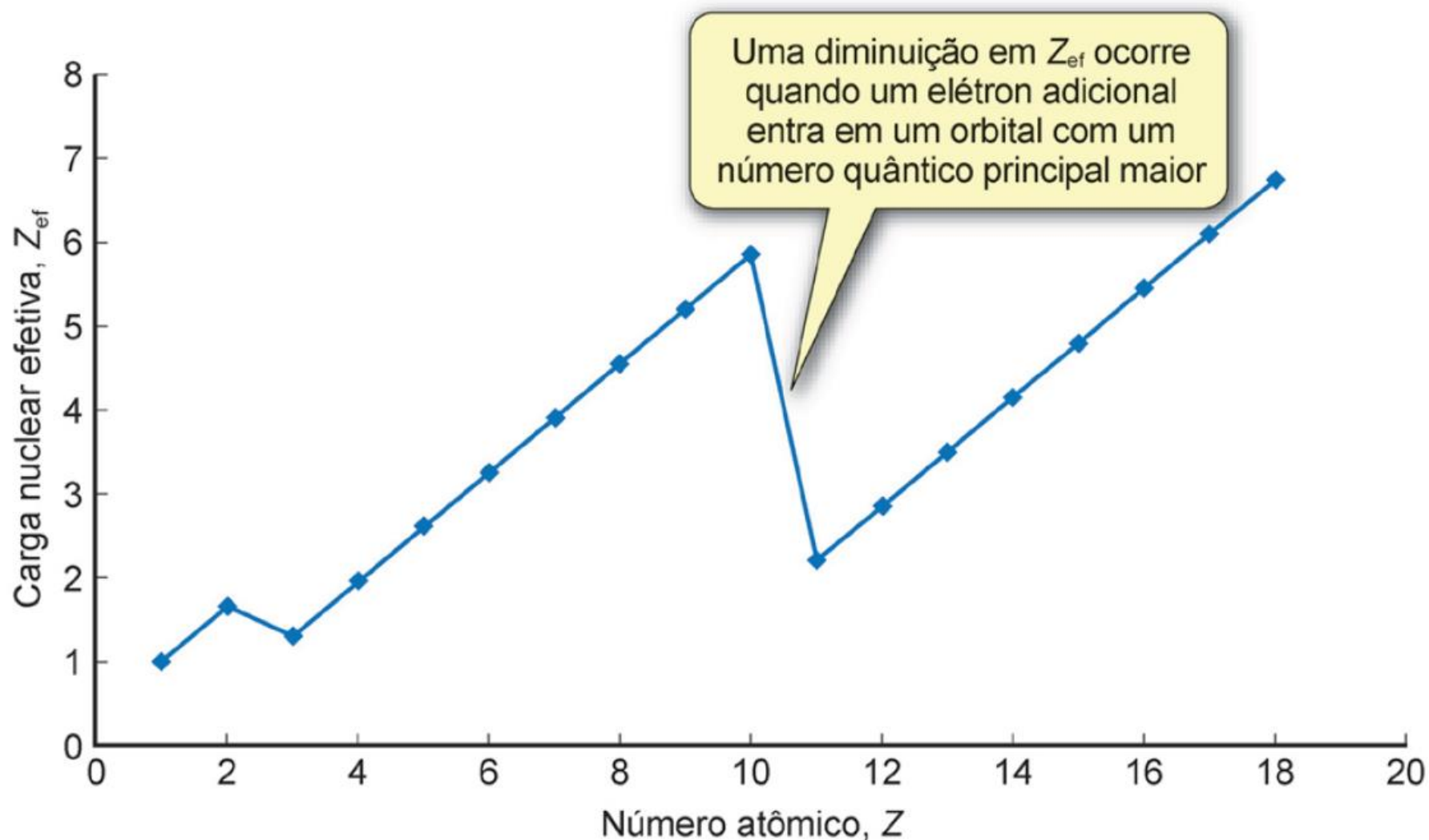


Figura 2.30 A variação da carga nuclear efetiva (Z_{ef}) para os elementos do hidrogênio até o argônio. Os valores são calculados usando-se as regras de Slater.

Propriedades periódicas

Raio atômico/pm

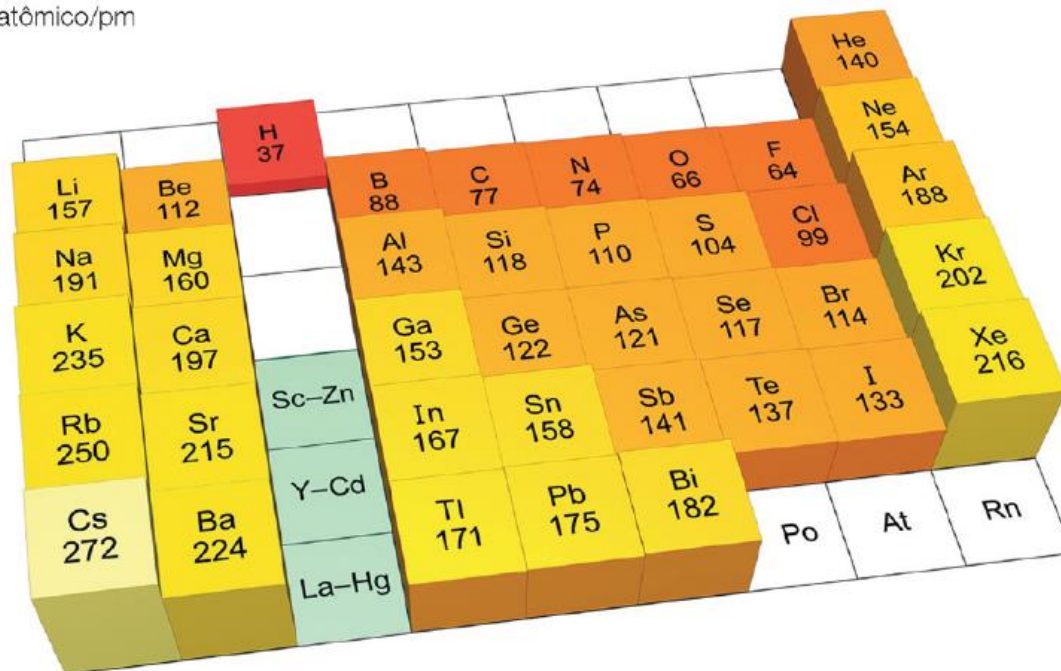


Figura 2.31 Os raios atômicos dos elementos do bloco *s* e do bloco *p*.

Propriedades periódicas

Primeira energia de ionização,
 I_1/kJmol^{-1}

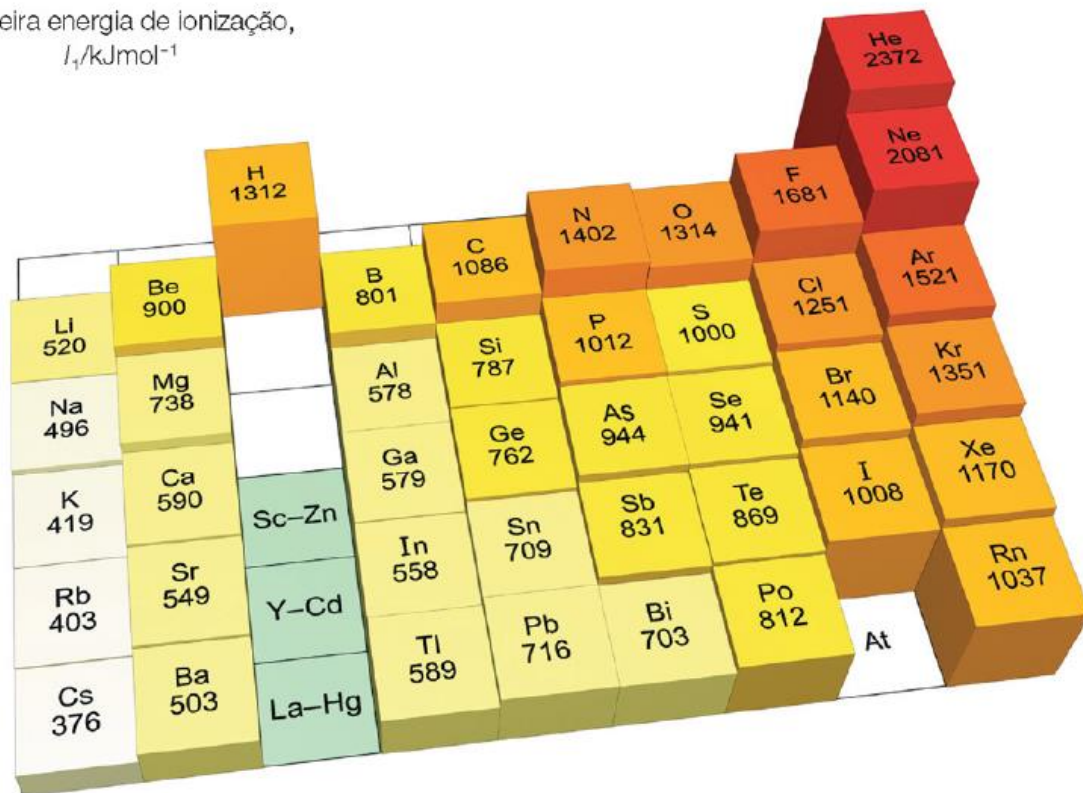


Figura 2.32 As primeiras energias de ionização para os elementos do bloco s e do bloco p.

Tabela 2.6 Energias de ionização (kJ mol^{-1}) para os elementos com $Z = 1$ até $Z = 20$. Para um determinado átomo, a linha vermelha representa a remoção de um elétron da camada mais baixa, daí o grande salto no valor observado de I .

Elemento	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8
H	1312							
He	2372	5251						
Li	520	7298	11815					
Be	900	1757	14849	21007				
B	801	2427	3660	25026	32827			
C	1086	2353	4620	6223	37831	47277		
N	1402	2856	4578	7475	9445	53567	64360	
O	1314	3389	5300	7469	10990	13327	71331	84078
F	1681	3374	6050	8408	11023	15164	17868	92038
Ne	2081	3952	6122	9371	12177	15238	19999	23070
Na	496	4562	6910	9543	13354	16613	20117	25496
Mg	738	1451	7733	10543	13630	18020	21711	25661
Al	578	1817	2745	11577	14842	18379	23326	27466
Si	787	1577	3232	4356	16091	19806	23780	29287
P	1012	1907	2914	4964	6274	21267	25431	29872
S	1000	2252	3357	4556	7004	8496	27107	31720
Cl	1251	2298	3822	5159	6540	9362	11018	33604
Ar	1521	2666	3931	5771	7238	8781	11995	13842
K	419	3052	4420	5877	7975	9590	11343	14944
Ca	590	1145	4972	6491	8153	10496	12270	14206

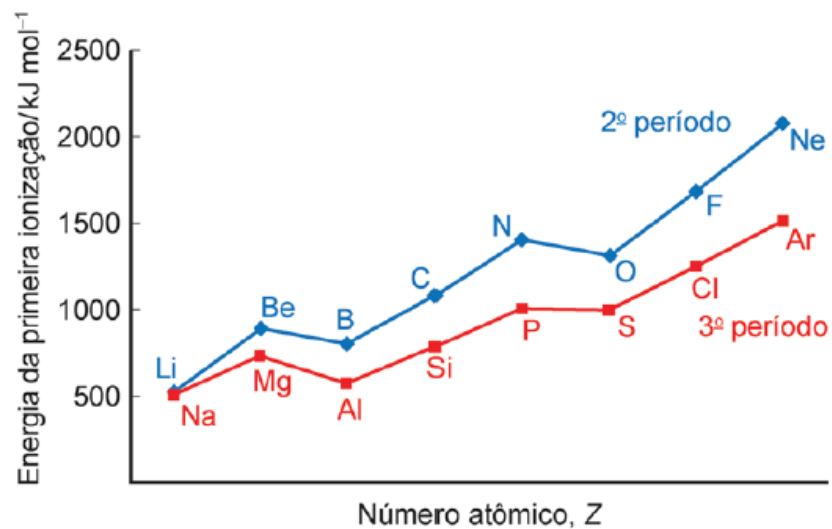


Figura 2.33 A variação da primeira ionização para os elementos do segundo e terceiro períodos.

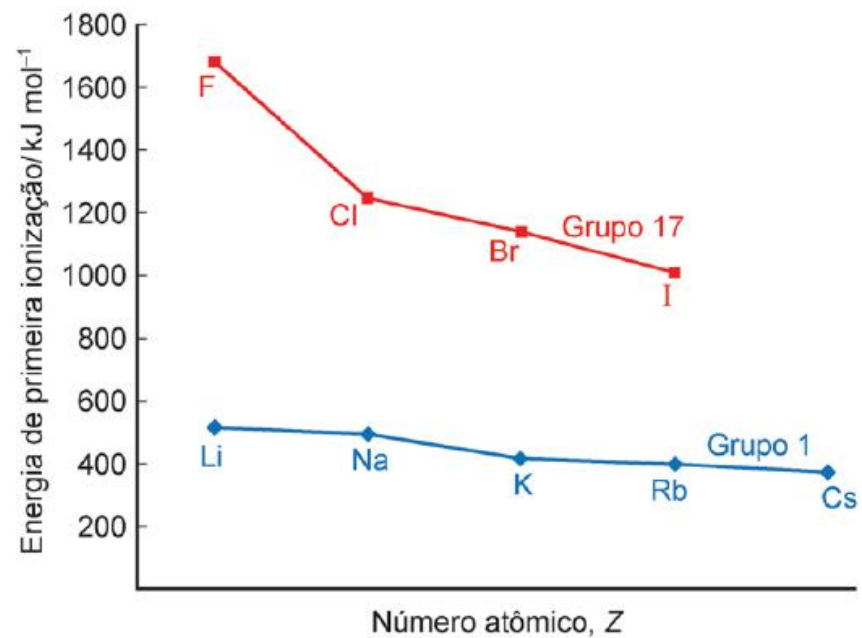


Figura 2.34 A variação das primeiras energias de ionização para os elementos dos Grupos 1 e 17.

Propriedades periódicas

Primeiras energias de ganho de elétrons, $E_{ge}/\text{kJ mol}^{-1}$

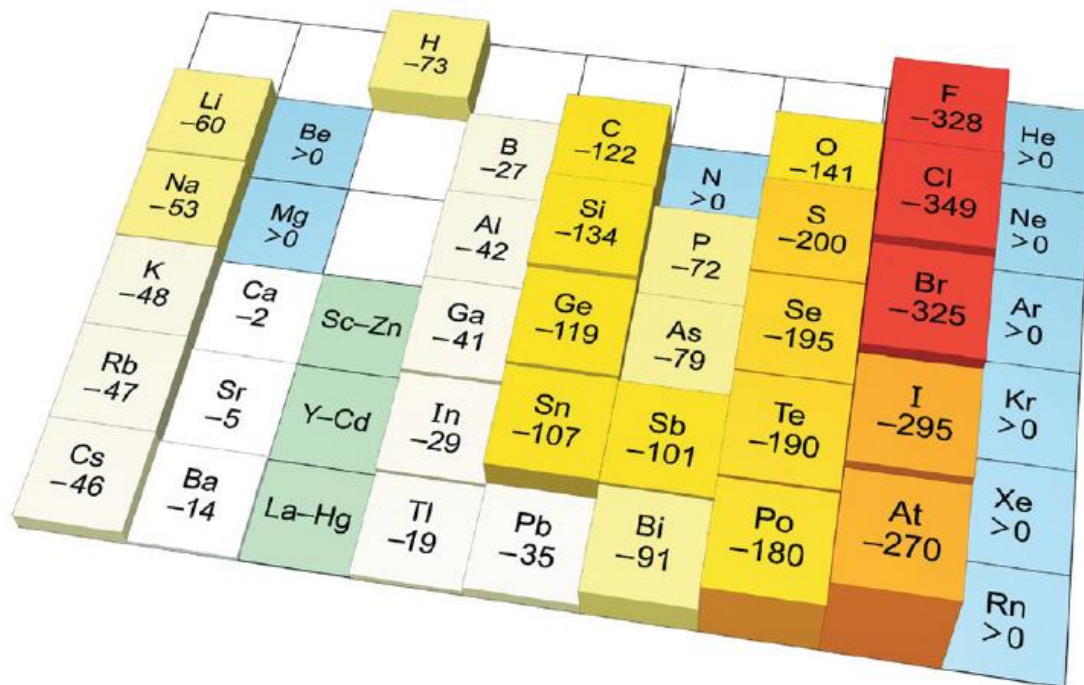


Figura 2.35 As primeiras energias de ganho de elétrons para os elementos do bloco s e do bloco p. Para os elementos com valores endotérmicos, E_{ge} não é conhecida com exatidão.