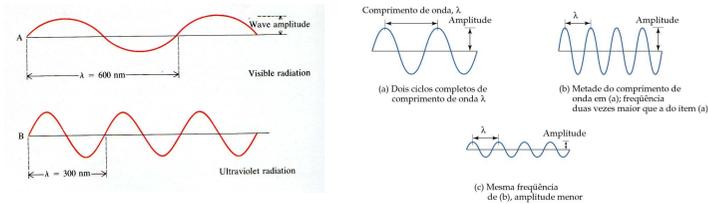


Natureza ondulatória da luz

- Todas as ondas têm um comprimento de onda característico, λ , e uma amplitude, A .
- A frequência, ν , de uma onda é o número de ciclos que passam por um ponto em um segundo.
- A velocidade de uma onda, v , é dada por sua frequência multiplicada pelo seu comprimento de onda.
- Para a luz, velocidade = c .

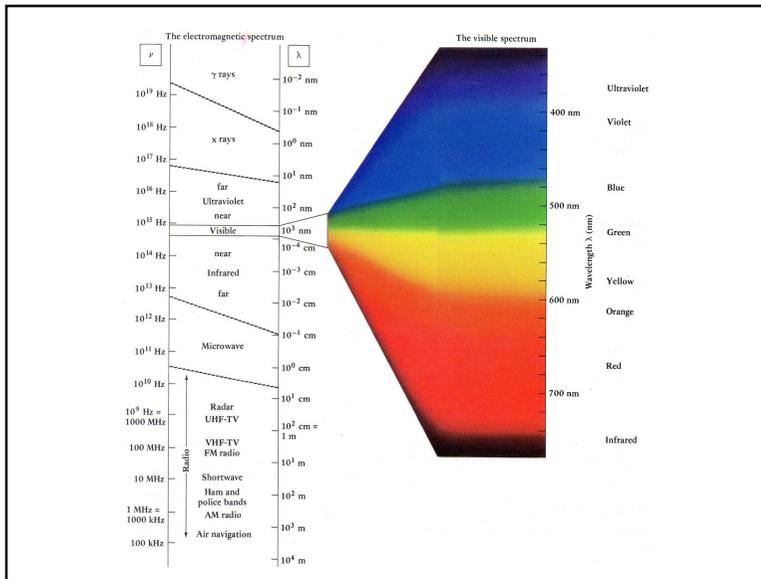


Natureza ondulatória da luz

- A teoria atômica moderna surgiu a partir de estudos sobre a interação da radiação com a matéria.
- A radiação eletromagnética se movimenta através do vácuo com uma velocidade de $3,00 \times 10^8$ m/s.
- As ondas eletromagnéticas têm características ondulatórias semelhantes às ondas que se movem na água.
- Por exemplo: a radiação visível tem comprimentos de onda entre 400 nm (violeta) e 750 nm (vermelho).

TABELA 6.1 Unidades de comprimentos de onda comuns para radiações eletromagnéticas

Unidade	Símbolo	Comprimento (m)	Tipo de radiação
Angström	Å	10^{-10}	Raios X
Nanômetro	nm	10^{-9}	Ultravioleta, visível
Micron	μm	10^{-6}	Infravermelho
Milímetro	mm	10^{-3}	Infravermelho
Centímetro	cm	10^{-2}	Microondas
Metro	m	1	TV, rádio

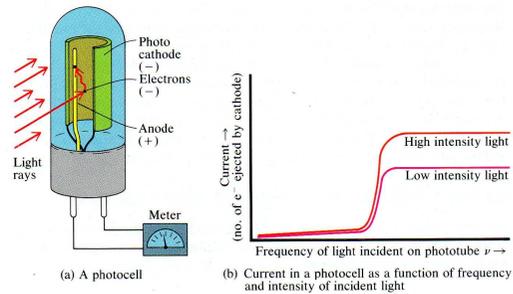


Energia quantizada e fótons

- **Planck:** a energia só pode ser liberada (ou absorvida) por átomos em certos pacotes de tamanhos mínimos, chamados **quantum**.
- A relação entre a energia e a frequência é $E = h\nu$
onde h é a constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34}$ J s).
- Para entender a quantização, considere a subida em uma rampa *versus* a subida em uma escada:
- Para a rampa, há uma alteração constante na altura, enquanto na escada há uma alteração gradual e quantizada na altura.

Energia quantizada e fótons

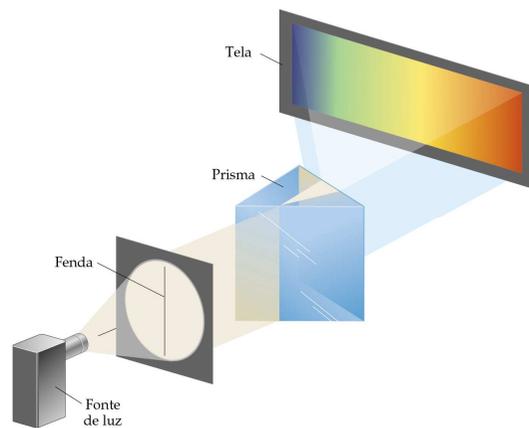
Efeito Fotoelétrico



Espectros de linhas e o modelo de Bohr

Espectro Contínuo

- A radiação composta por um único comprimento de onda é chamada de monocromática.
- A radiação que se varre uma matriz completa de diferentes comprimentos de onda é chamada de contínua.
- A luz branca pode ser separada em um espectro contínuo de cores.
- Observe que não há manchas escuras no espectro contínuo que corresponderiam a linhas diferentes.

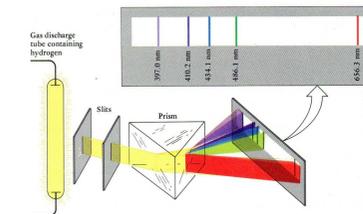


Espectros de linhas

- **Balmer**: descobriu que as linhas no espectro de linhas visíveis do hidrogênio se encaixam em uma simples equação.
- Mais tarde, Rydberg generalizou a equação de Balmer para:

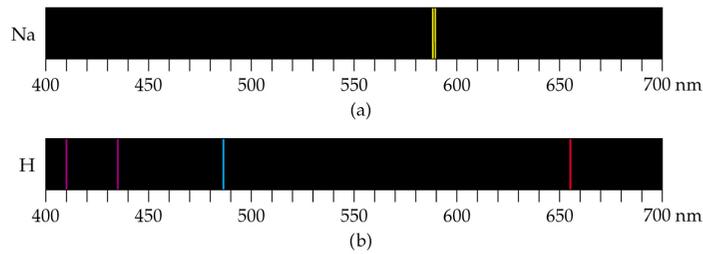
$$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{R_H}{h} \right) \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

onde R_H é a constante de Rydberg ($1,096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$), h é a constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$), n_1 e n_2 são números inteiros ($n_2 > n_1$).



O modelo de Bohr

- As cores de gases excitados surgem devido ao movimento dos elétrons entre os estados de energia no átomo.

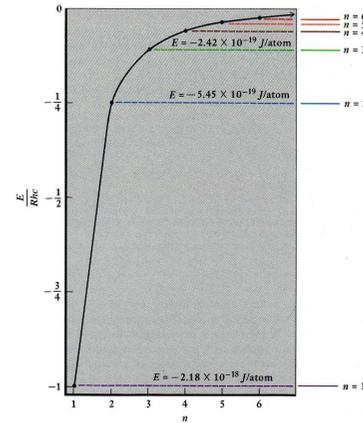


O modelo de Bohr

- Já que os estados de energia são quantizados, a luz emitida por átomos excitados deve ser quantizada e aparecer como espectro de linhas.
- Após muita matemática, Bohr mostrou que

$$E = \left(-2.18 \times 10^{-18} \text{ J}\right) \left(\frac{1}{n^2}\right)$$

onde n é o número quântico principal (por exemplo, $n = 1, 2, 3, \dots$ e nada mais).



Espectros de linhas e o modelo de Bohr

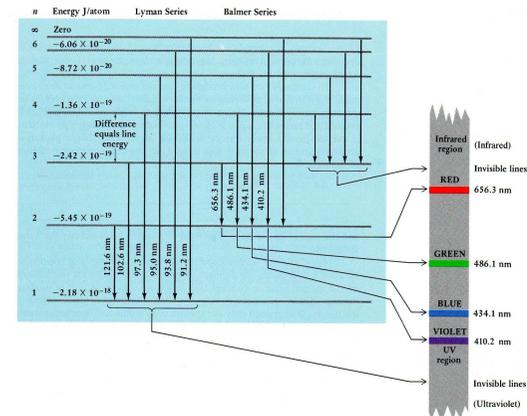
O modelo de Bohr

- Podemos mostrar que

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \left(-2.18 \times 10^{-18} \text{ J}\right) \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

- Quando $n_i > n_f$, a energia é emitida.
- Quando $n_f > n_i$, a energia é absorvida.

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



O Comportamento ondulatório da matéria – Dualidade Onda-Partícula

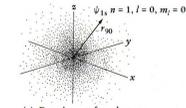
- Sabendo-se que a luz tem uma natureza de partícula, parece razoável perguntar se a matéria tem natureza ondulatória.
- Utilizando as equações de Einstein e de Planck, De Broglie mostrou:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

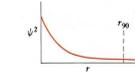
- O momento, mv , é uma propriedade de partícula, enquanto λ é uma propriedade ondulatória.
- De Broglie resumiu os conceitos de ondas e partículas, com efeitos notáveis se os objetos são pequenos.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

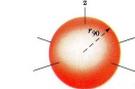
- Schrödinger propôs uma equação que contém os termos onda e partícula.
- A resolução da equação leva às funções de onda.
- A função de onda fornece o contorno do orbital eletrônico.
- O quadrado da função de onda fornece a probabilidade de se encontrar o elétron, isto é, dá a densidade eletrônica para o átomo.



(a) Dot picture of an electron with a 1s atomic orbital. Each dot represents the position of the electron at a different instant in time. Note that the dots cluster closest to the nucleus. r_{90} is the radius within which the electron is found 90% of the time.



(b) A plot of the probability density as a function of distance for a one-electron atom with a 1s electron curve.



(c) The surface of the sphere within which the electron is found 90% of the time for a 1s orbital.
Figure 8.13 Different views of a 1s ($n = 1$ and $l = 0$) orbital.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

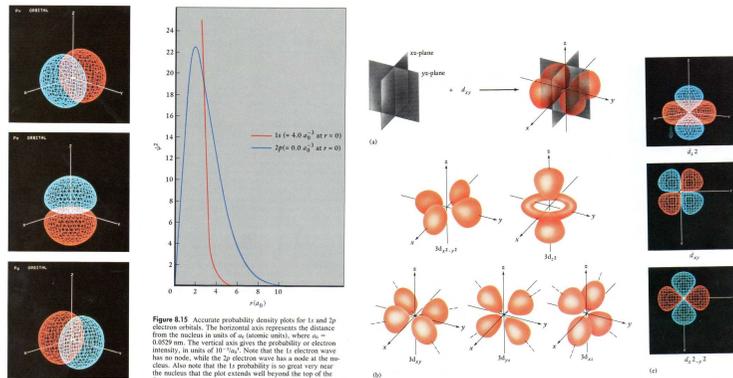


Figure 8.15 Accurate probability density plots for 1s and 2p electron orbitals. The horizontal axis represents the distance from the nucleus in units of a_0 (atomic units), where $a_0 = 0.529$ nm. The vertical axis gives the probability of electron intensity, in units of 10^{-30} . Note that the 1s electron wave has no node, while the 2p electron wave has a node at the nucleus. Also note that the 1s probability is so great very near the nucleus that the plot extends well beyond the top of the y-axis.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

Orbitais e números quânticos

- Se resolvermos a equação de Schrödinger, teremos as funções de onda e as energias para as funções de onda.
- Chamamos as funções de onda de *orbitais*.
- A equação de Schrödinger necessita de três números quânticos:
 - Número quântico principal, n . Este é o mesmo n de Bohr. À medida que n aumenta, o orbital torna-se maior e o elétron passa mais tempo mais distante do núcleo.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

Orbitais e números quânticos

2. O número quântico azimutal, l . Esse número quântico depende do valor de n . Os valores de l começam de 0 e aumentam até $n-1$. Normalmente utilizamos letras para l (s, p, d e f para $l = 0, 1, 2, e 3$). Geralmente nos referimos aos orbitais s, p, d e f .
3. O número quântico magnético, m_l . Esse número quântico depende de l . O número quântico magnético tem valores inteiros entre $-l$ e $+l$. Fornecem a orientação do orbital no espaço.

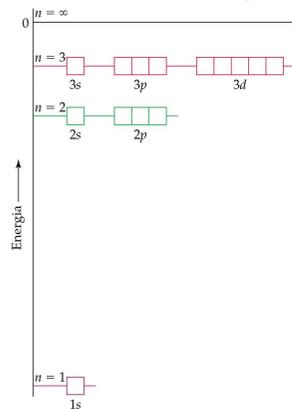
Mecânica quântica e orbitais atômicos

Orbitais e números quânticos

- Os orbitais podem ser classificados em termos de energia para produzir um diagrama de Aufbau.
- Observe que o seguinte diagrama de Aufbau é para um sistema de um só elétron.
- À medida que n aumenta, o espaçamento entre os níveis de energia torna-se menor.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

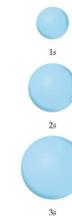
Orbitais e números quânticos



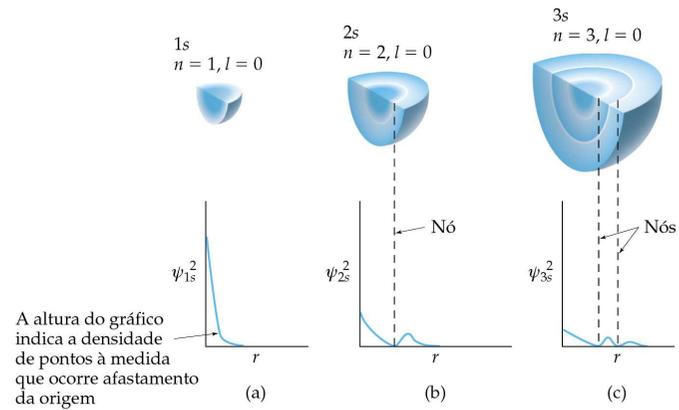
Representações orbitais

Orbitais s

- Todos os orbitais s são esféricos.
- À medida que n aumenta, os orbitais s ficam maiores.
- À medida que n aumenta, aumenta o número de nós.
- Um nó é uma região no espaço onde a probabilidade de se encontrar um elétron é zero.
- Em um nó, $\psi^2 = 0$
- Para um orbital s , o número de nós é $n-1$.

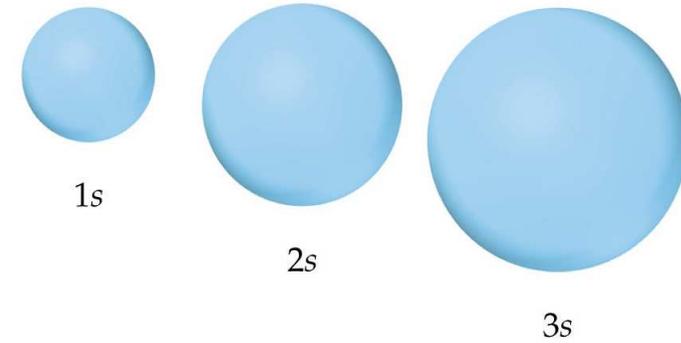


Representações orbitais



Representações orbitais

Orbitais s



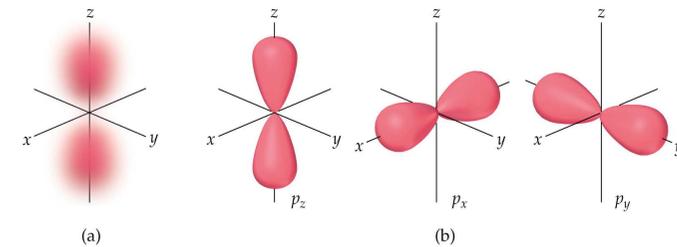
Representações orbitais

Orbitais p

- Existem três orbitais p , p_x , p_y , e p_z .
- Os três orbitais p localizam-se ao longo dos eixos x -, y - e z - de um sistema cartesiano.
- As letras correspondem aos valores permitidos de m_l , -1 , 0 , e $+1$.
- Os orbitais têm a forma de halteres.
- À medida que n aumenta, os orbitais p ficam maiores.
- Todos os orbitais p têm um nó no núcleo.

Representações orbitais

Orbitais p

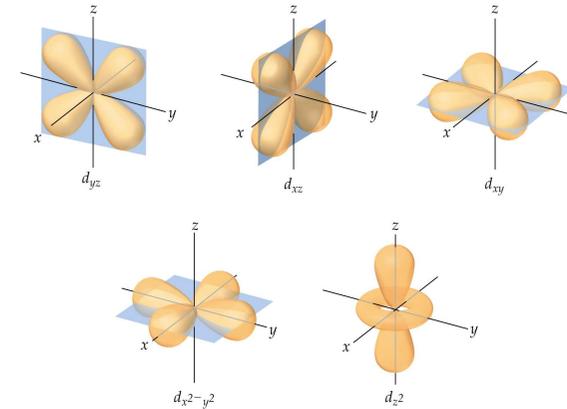


Representações orbitais

Orbitais d e f

- Existem cinco orbitais d e sete orbitais f .
- Três dos orbitais d encontram-se em um plano bissecante aos eixos x -, y - e z .
- Dois dos orbitais d se encontram em um plano alinhado ao longo dos eixos x -, y - e z .
- Quatro dos orbitais d têm quatro lóbulos cada.
- Um orbital d tem dois lóbulos e um anel.

Representações orbitais



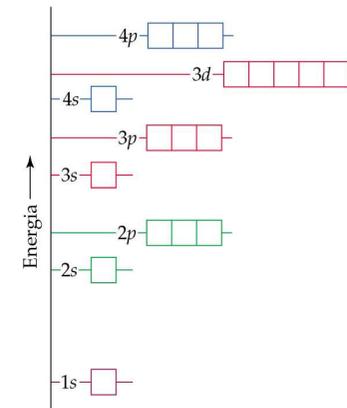
Átomos polieletrônicos

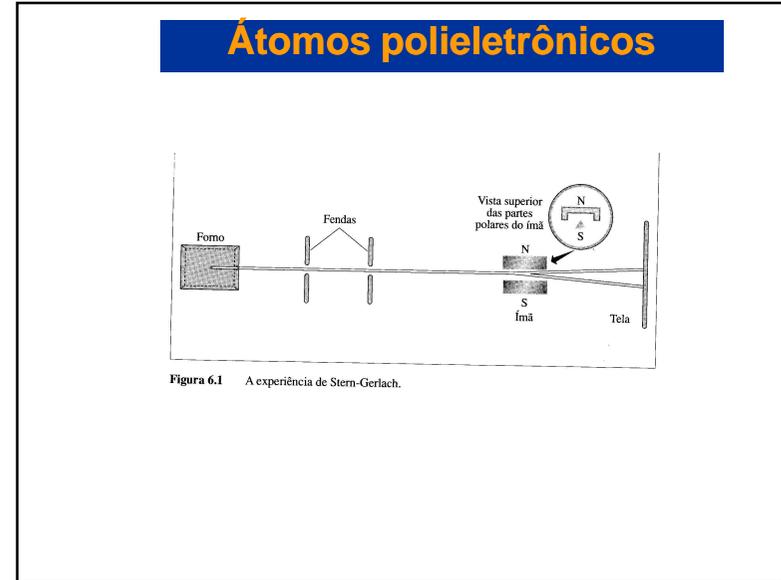
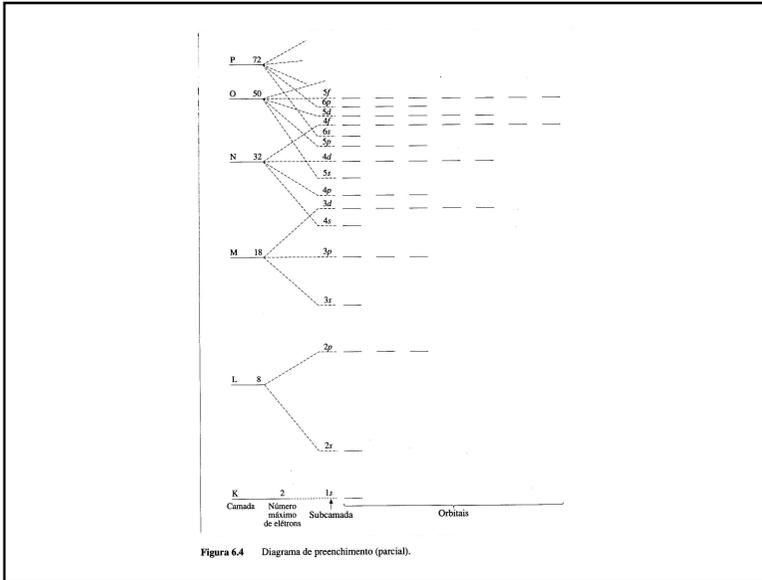
Orbitais e suas energias

- Orbitais de mesma energia são conhecidos como degenerados.
- Para $n \geq 2$, os orbitais s e p não são mais degenerados porque os elétrons interagem entre si.
- Portanto, o diagrama de Aufbau apresenta-se ligeiramente diferente para sistemas com muitos elétrons.

Átomos polieletrônicos

Orbitais e suas energias





Átomos polieletrônicos

Spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli

Diagrama que ilustra o spin eletrônico em campos magnéticos norte e sul. No polo norte, o campo magnético aponta para cima, e o elétron gira no sentido horário. No polo sul, o campo magnético aponta para baixo, e o elétron gira no sentido anti-horário.

North pole of a magnet producing a magnetic field

Electron spinning clockwise

Electron spinning counterclockwise

South pole of a magnet producing a magnetic field

Átomos polieletrônicos

Spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli

- Já que o spin eletrônico é quantizado, definimos m_s = número quântico de rotação = $\pm \frac{1}{2}$.
- O princípio da exclusão de Pauli:** dois elétrons não podem ter a mesma série de 4 números quânticos. Portanto, dois elétrons no mesmo orbital devem ter spins opostos.

