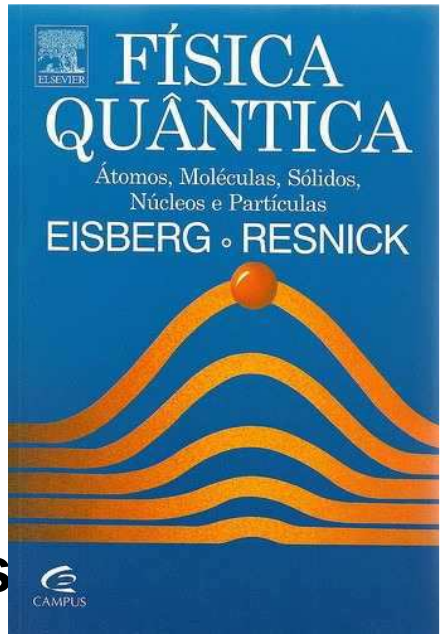
CAPÍTULO 29: Física Atômica



- ❑ A Equação de Schrödinger
- ❑ Modelos Estruturais Primitivos do átomo
- ❑ O Átomo de Hidrogênio (H)
- ❑ **Os Números Quânticos**
- ❑ **Interpretação Física dos Números Quânticos**
- ❑ **O Número Quântico Orbital**
- ❑ **O Spin do Elétron**
- ❑ **As funções de onda para o Hidrogênio**
- ❑ O Princípio da Exclusão e a Tabela Periódica
- ❑ Espectros Atômicos no Visível e de Raios-X

Lista de exercícios sugerida – Capítulo 29:

29.2, 4, 7, 9, 10, 17, 18, 15, 27, 29, 37, 25, 39, 44, 49, 51, 53, 55, 56

Um **estado quântico** em **qualquer átomo** é especificado por **quatro números quânticos:** ***n, l, ml, ms***

$n = 1, 2, 3...$ número quântico principal

$l = 0, 1, 2, ...n-1$ número quântico orbital

$m_l = -l, -l+1, ...0, ...+l-1,\ l$ número quântico magnético orbital

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ número quântico magnético do spin

$n = 1, 2, 3...$ quantização da energia

$l = 0, 1, 2, ...n-1$ quantização do módulo do momento angular

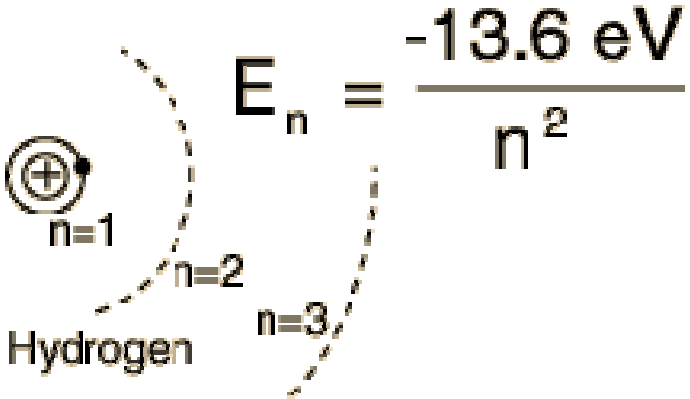
$m_l = -l, -l+1, ...0, ...+l-1,\ l$ quantização da direção do momento angular

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ quantização do spin

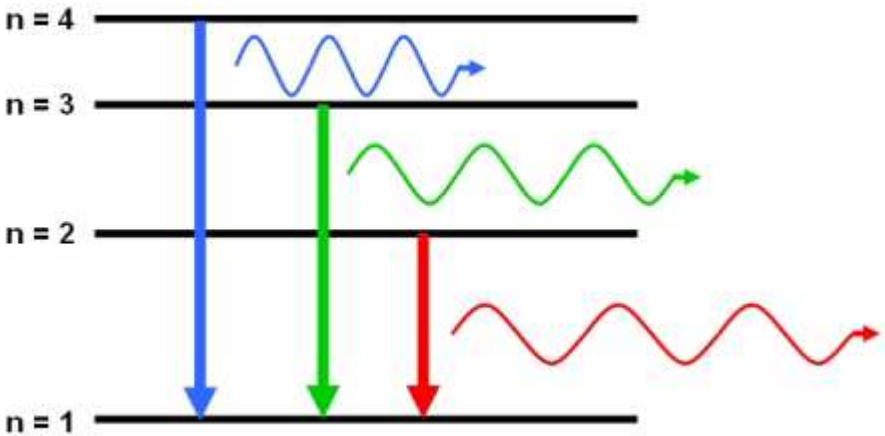
A interpretação Física dos números quânticos

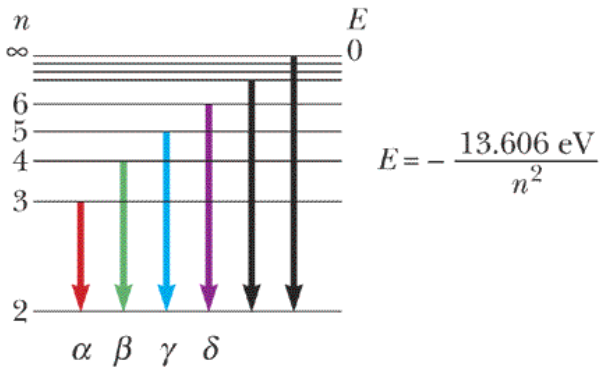
A **energia** de um estado particular do **átomo de Hidrogênio (H)** depende do **número quântico principal "n"**

$$E_n = -\left(\frac{k_e e^2}{2a_0}\right)\frac{1}{n^2} = -\frac{13.6eV}{n^2} \qquad \mathrm{n} = 1,2,3...$$



Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure P29.2



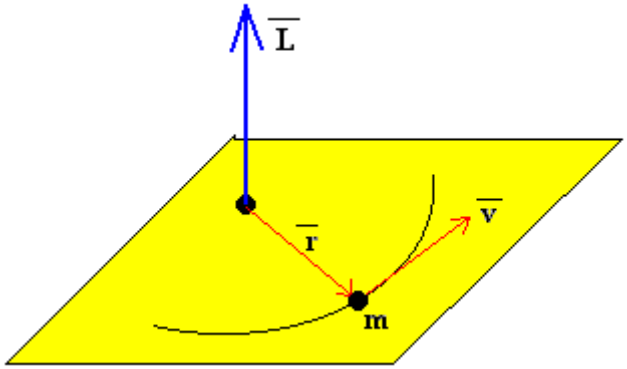


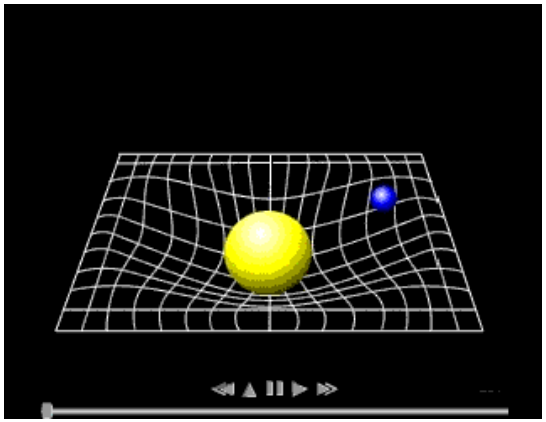
Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

A interpretação Física dos números quânticos

Se define **momento angular de uma partícula** o **produto vetorial** do vetor **posição** pelo vetor **momento linear**

$$\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$$





Se uma partícula se desloca em um círculo de raio "r", o **módulo** do seu **momento angular** é igual a:

$$L = mvr$$

A **direção** de "L" é perpendicular ao plano do círculo e o **sentido de *"L"*** é dado pela **regra da mão direita**.

De acordo com a **Física Clássica** **"*L*" pode ter qualquer valor**.
Pela **Mecânica Quântica**, **módulo e direção** **são quantizados**.

O **modelo de Bohr** para **o Hidrogênio** postula que o momento angular (**módulo**) está restrito a **múltiplos inteiros de ħ**; isto é:

$$m\mathrm{vr} = \mathrm{n}\hbar$$

Esse modelo precisa ser modificado porque prevê incorretamente que o estado fundamental do hidrogênio (n=1) tem uma unidade de momento angular.

$$m\mathrm{vr} = \hbar \qquad (n = 1 \Rightarrow l = 0)$$

O **modelo quântico** **derivado da equação de Schrödinger** mostra que o menor valor do **número quântico orbital**, que está relacionado com o **momento orbital**, é ***l=0*** (que corresponde a um momento angular nulo).

De acordo com o **modelo quântico**, um átomo em um estado cujo número quântico principal é "n" pode ter os seguintes valores "discretos" **para o módulo do vetor momento angular:**

$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0, 1, 2..., n-1$$

$$L = \sqrt{0(0+1)}\hbar = 0$$

Quantização do módulo

Solução matemática da equação de Schrödinger e da aplicação das condições de contorno angulares.

Ex. 29.6: Calcule o módulo do momento angular orbital "L" para um estado "2p" do Hidrogênio (H).

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}\, J \cdot s$$

$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \quad l = 0, 1, 2..., n-1$$

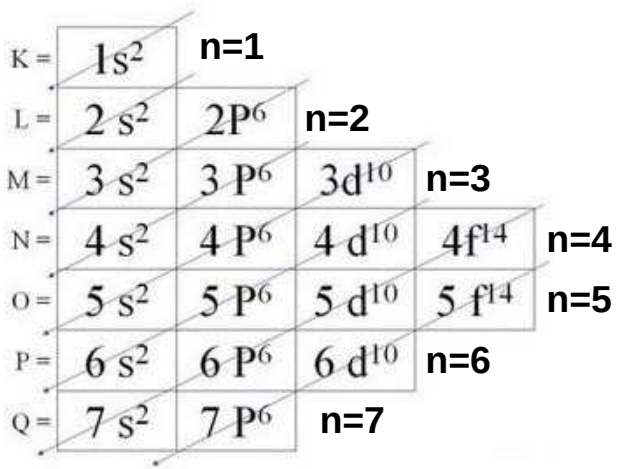
quantização do módulo do momento angular orbital

$n = 1, 2, 3...$ número quântico principal

$l = 0, 1, 2, ...n-1$ número quântico orbital

$m_l = -l, -l+1, ...0, ... +l-1,\ l$ número quântico magnético orbital

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ número quântico magnético do spin



Exemplo 29.6 Calcule o módulo do momento angular orbital “L” para um estado “2p” do hidrogênio (H).

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}\, J \cdot s$$

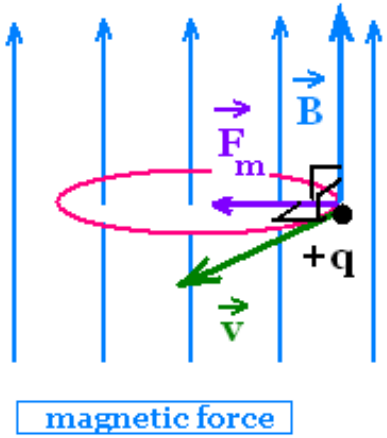
$$\text{com } l = 1 \text{ para um estado "p"}$$

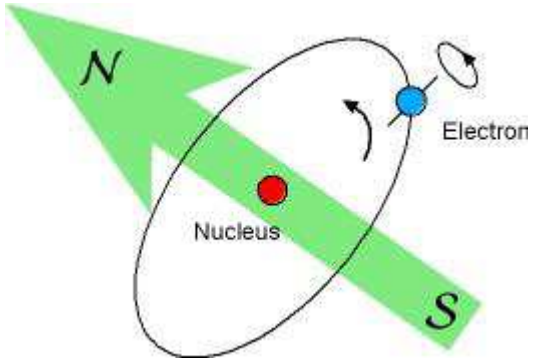
$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar$$

$$\sqrt{2}\hbar = 1.49 \times 10^{-34}\,\mathrm{J} \cdot \mathrm{s}$$

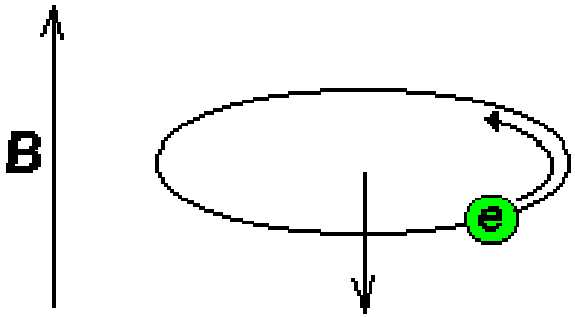
O número quântico magnético orbital:

Um **elétron em órbita** pode ser considerado como uma **espira de corrente efetiva com um momento magnético correspondente**.

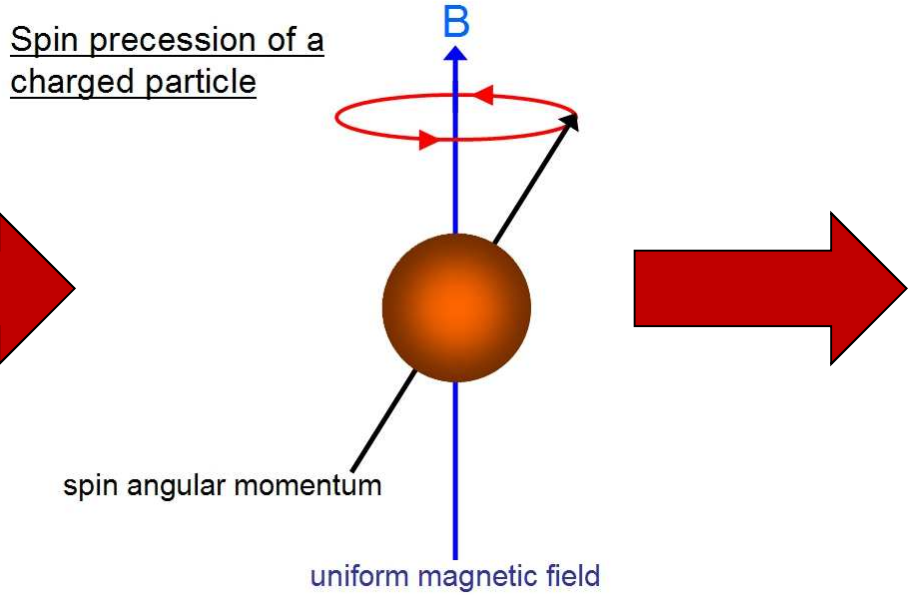




Esse **momento magnético** colocado em um campo "***B***" interagirá com o campo.

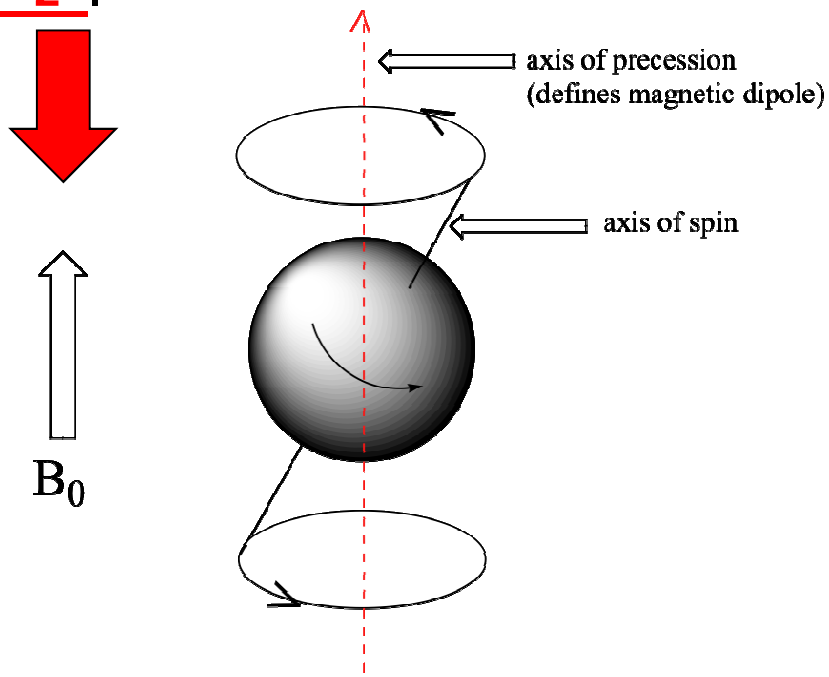


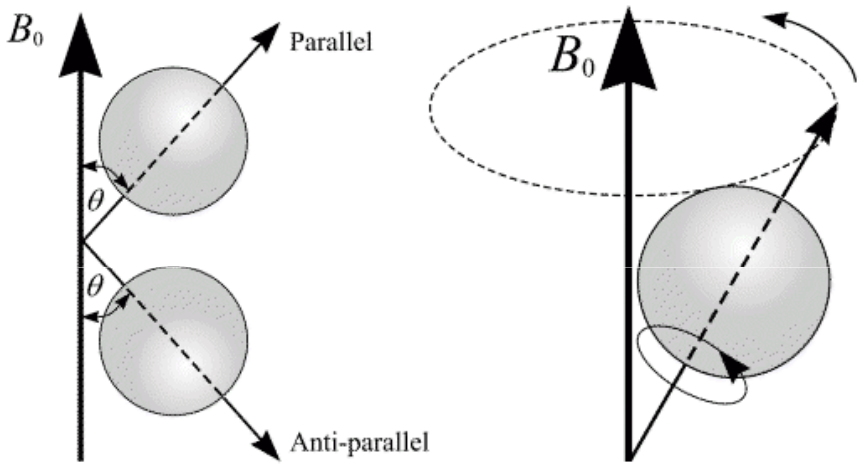
Campo magnético produzido pela circulação de um elétron



O número quântico magnético orbital:

Suponha que um campo magnético fraco é aplicado ao átomo e que definimos a direção do campo como sendo o **eixo "z"**.





De acordo com a Mecânica Quântica encontramos que:

a direção do vetor momento angular em relação ao eixo "z" é quantizada.

Uma vez que o eixo "z" está especificado, o vetor momento angular só pode apontar em certas direções em relação a esse eixo.

O número quântico magnético orbital

Uma vez que o eixo "z" está especificado, **o vetor momento angular só pode apontar em certas direções** **em relação a esse eixo.**

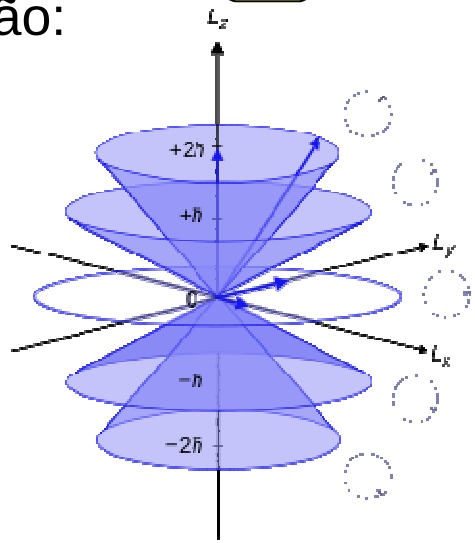
Utilizamos o termo **"quantização espacial"** porque a **direção de *L*** **é quantizada.**

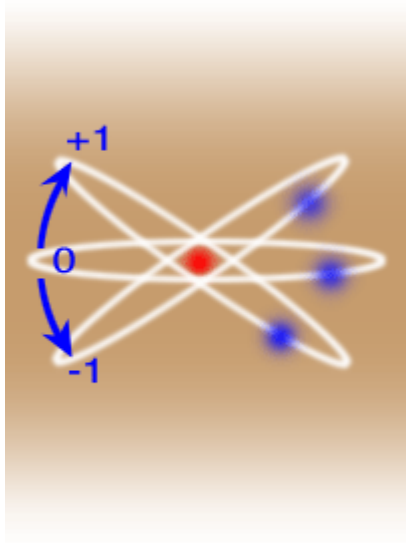
A quantização da direção de L é dada pelas componentes "z" permitidas para o vetor *L*

O **número quântico magnético orbital** m_l especifica os valores permitidos de **"*Lz*"** de acordo com a expressão:

$$L_z = m_l \hbar$$

componente do vetor *L* na direção "z"





Ex. 29.7 Quantização espacial para o Hidrogênio (H)

Para o átomo de hidrogênio nos estados *l=0, l=1, l=2* calcule os **módulos** de **L** e os **valores permitidos de Lz**. Podem deixar as respostas em termos de ħ.

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}\, J \cdot s$$

$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \quad l = 0, 1, 2..., n-1$$

quantização do módulo do momento angular orbital

$$L_z = m_l \hbar$$

$$-l \le m_l \le l$$

quantização da direção do momento angular orbital

Ex. 29.7 Quantização espacial para o Hidrogênio (H)

Para o átomo de hidrogênio no estado l=0, l=1 e l=2, calcule os módulos de **L** e os valores permitidos de Lz. Podem deixar as respostas em termos de ħ.

$$L_z = m_l \hbar \qquad \left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0, 1, 2..., n-1$$

$$-l \le m_l \le l$$

Se $l = 0$, então $L = 0$ e não existe vetor para o qual considerar uma direção.

Se $l = 1$, então os possíveis valores de m_l são

$-1, 0, 1$ de tal forma que Lz

pode valer:

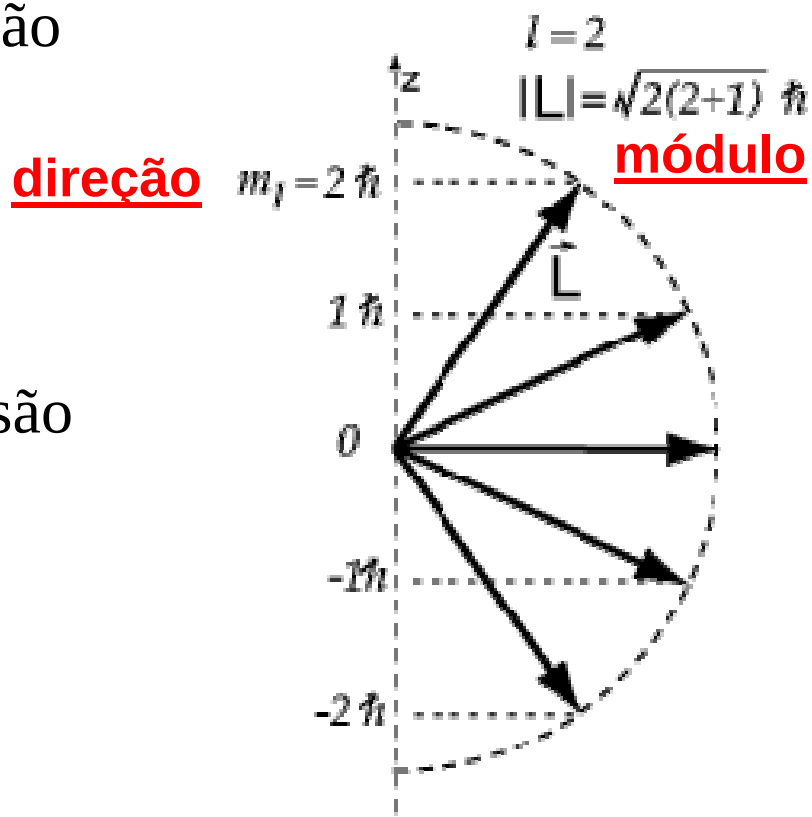
$L_z = -\hbar, 0$ ou $\hbar$

Se $l = 2$, então os possíveis valores de m_l são

$-2, -1, 0, 1, 2$ de tal forma que Lz

pode valer:

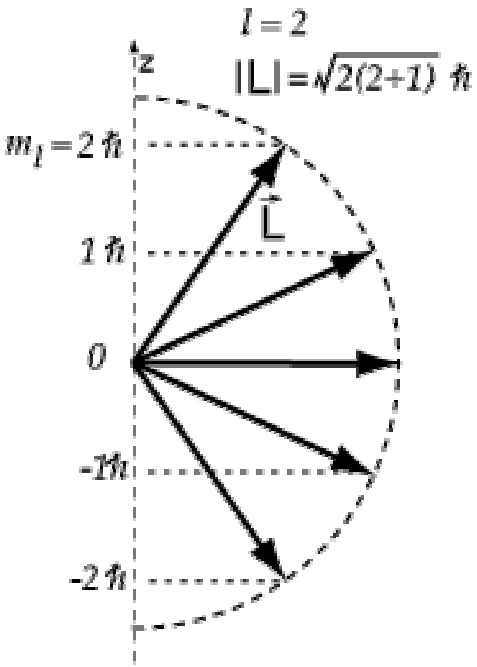
$L_z = -2\hbar, -\hbar, 0$ ou $\hbar, 2\hbar$

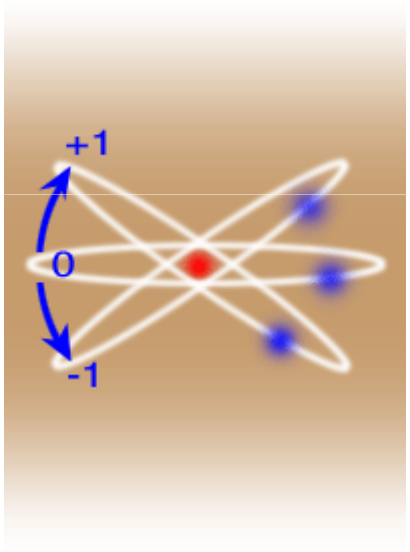


O número quântico magnético orbital:

Observe que ***"L"*** nunca se alinha paralela ou antiparalelamente com o eixo "z", pois ***"Lz"*** tem de ser menor que o módulo do momento angular "***L***".

O vetor "**L**" pode ser perpendicular ao eixo "z" que é o caso em que $m_l = 0$





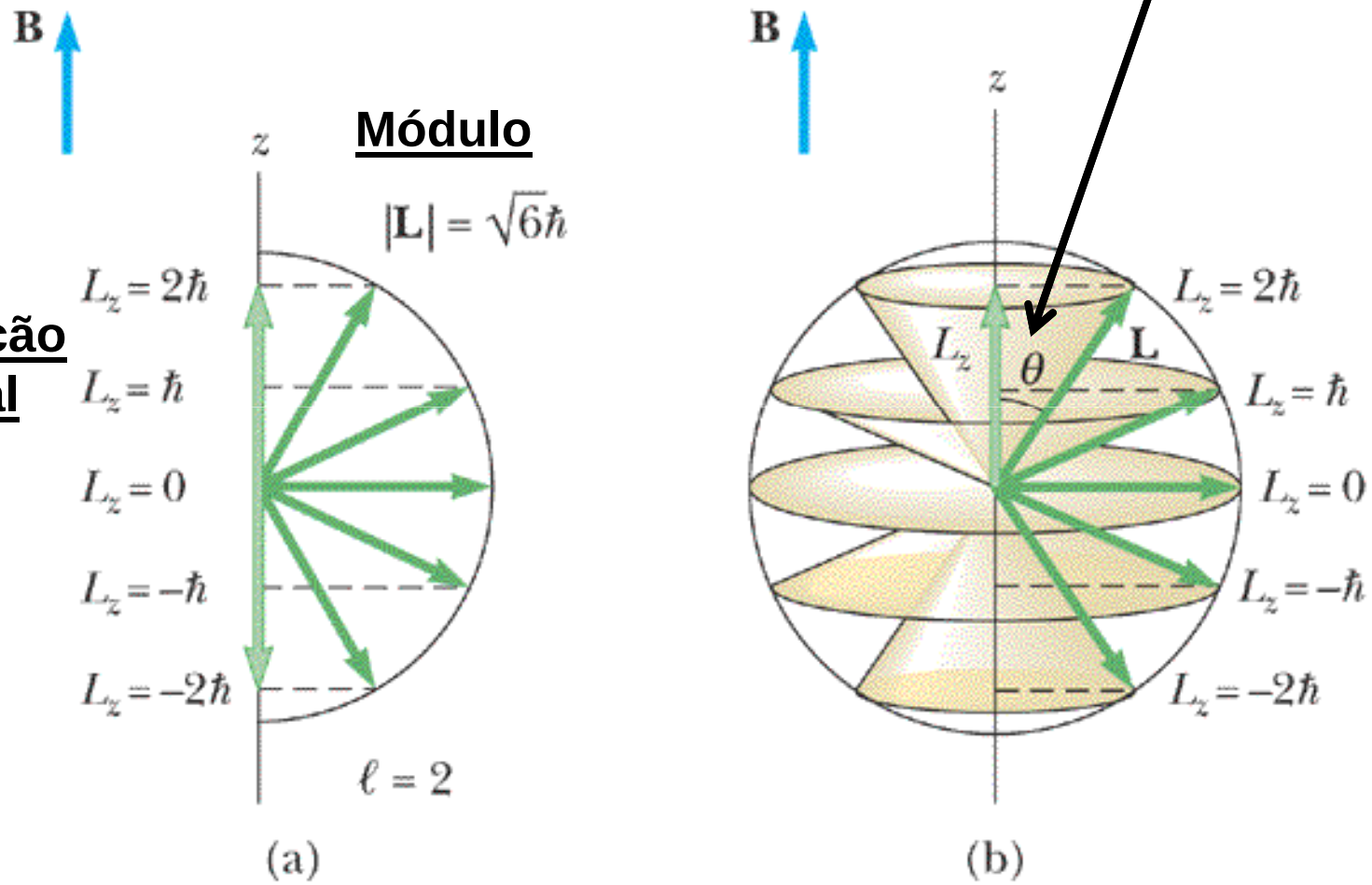
De um ponto de vista tridimensional, ***L*** está sobre a superfície de um cone que faz um ângulo θ com o eixo "z" como mostrado na figura:

Observe que θ também é quantizado

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.8

Módulo

Quantização Espacial



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

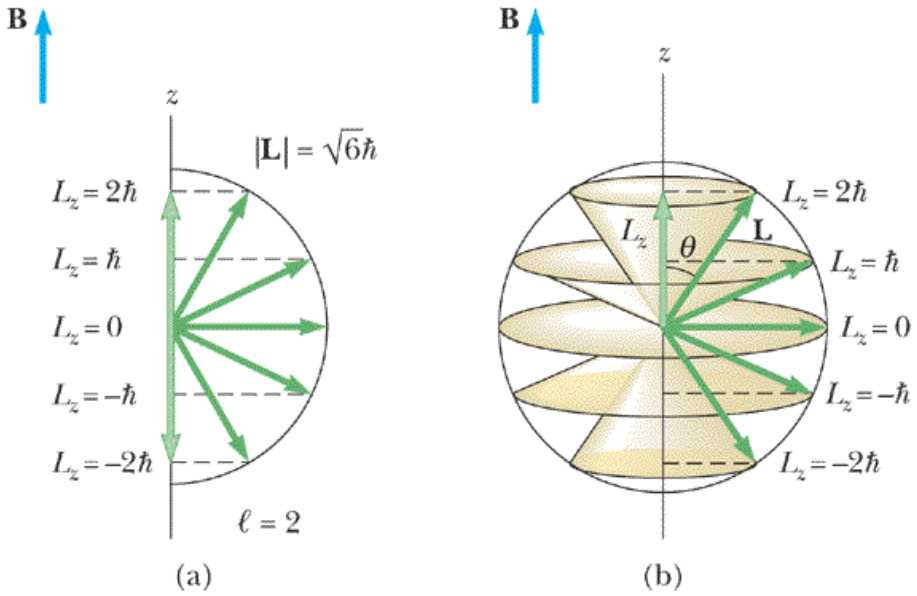
O número quântico magnético orbital:

A partir da figura temos que **θ também é quantizado** e que seus valores são especificados por uma relação baseada em um modelo geométrico de triângulo com o vetor "**L**" como hipotenusa e a componente "z" como um cateto de tal forma que:

$$\cos\theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_l\hbar}{\sqrt{l(l+1)}\hbar} \Rightarrow \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Observe que "*ml" nunca é maior do que "l"* e portanto θ nunca pode se anular, o que é consistente com a restrição de que "L" não é paralelo ao eixo "z"

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.8



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

Exemplo 29.7 Quantização espacial para o Hidrogênio (H)

Para o átomo de hidrogênio no estado l=3, calcule o módulo de **L** e os valores permitidos de Lz e θ. Os resultados podem ser escritos como função de ħ.

$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \quad l = 0,1,2...,n-1$$

$$L_z = m_l \hbar$$

$$-l \le m_l \le l$$

$$\cos\theta = \frac{L_z}{\left|\vec{L}\right|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Exemplo 29.7 Quantização espacial para o Hidrogênio (H)

Para o átomo de hidrogênio no estado l=3, calcule o módulo de **L** e os valores permitidos de Lz e θ.

Solução:

$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0,1,2...,n-1$$

$$L = \sqrt{3(3+1)}\,\hbar = 2\sqrt{3}\hbar$$

$$\text{Os valores permitidos de } \mathrm{L_z} \text{ são } \mathrm{L_z} = m_l\hbar$$

$$\text{com } \mathrm{m_l} = -3,-2,-1,0,1,2,3$$

$$L_z = -3\hbar,-2\hbar,-1\hbar,0,1\hbar,2\hbar,3\hbar$$

Exemplo 29.7 Quantização espacial para o Hidrogênio (H)

Para o átomo de hidrogênio no estado l=3, calcule o módulo de **L** e os valores permitidos de Lz e θ.

Solução:

$$\cos\theta = \frac{L_z}{\left|\vec{L}\right|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

$$\text{como, em unidades de } \hbar,\ \mathrm{L} = 2\sqrt{3} \quad \text{temos:}$$

$$\cos\theta = \frac{m_l}{2\sqrt{3}}$$

$$\text{A substituição dos valores permitidos de } \mathrm{m_l} \text{ fornece:}$$

$$\cos\theta = \pm 0.866, \pm 0.577, \pm 0.289, 0$$

$$\theta = 30{,}0^{\circ}; 54{,}8^{\circ}; 73{,}2^{\circ}; 90^{\circ}; 107^{\circ}; 125^{\circ}; 150^{\circ}$$

Seção 29.5 Interpretação Física dos Números Quânticos

Encontre todos os valores possíveis de L, Lz, θ para um elétron em um estado 3d do hidrogênio.

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

$$L_z = m_l \hbar$$

$$\cos\theta = \frac{L_z}{L}$$

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}\ J \cdot s$$

$n = 1, 2, 3...$ número quântico principal

$l = 0, 1, 2, ...n-1$ número quântico orbital

$m_l = -l, -l+1, ...0, ...+l-1,\ l$ número quântico magnético orbital

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ número quântico magnético do spin

Seção 29.5 Interpretação Física dos Números Quânticos

Encontre todos os valores possíveis de L, Lz, θ para um elétron em um estado 3d do hidrogênio.

Solução:

$$n = 3 \quad \text{e} \quad l = 2$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar = 2.58 \times 10^{-34}\, J \cdot s$$

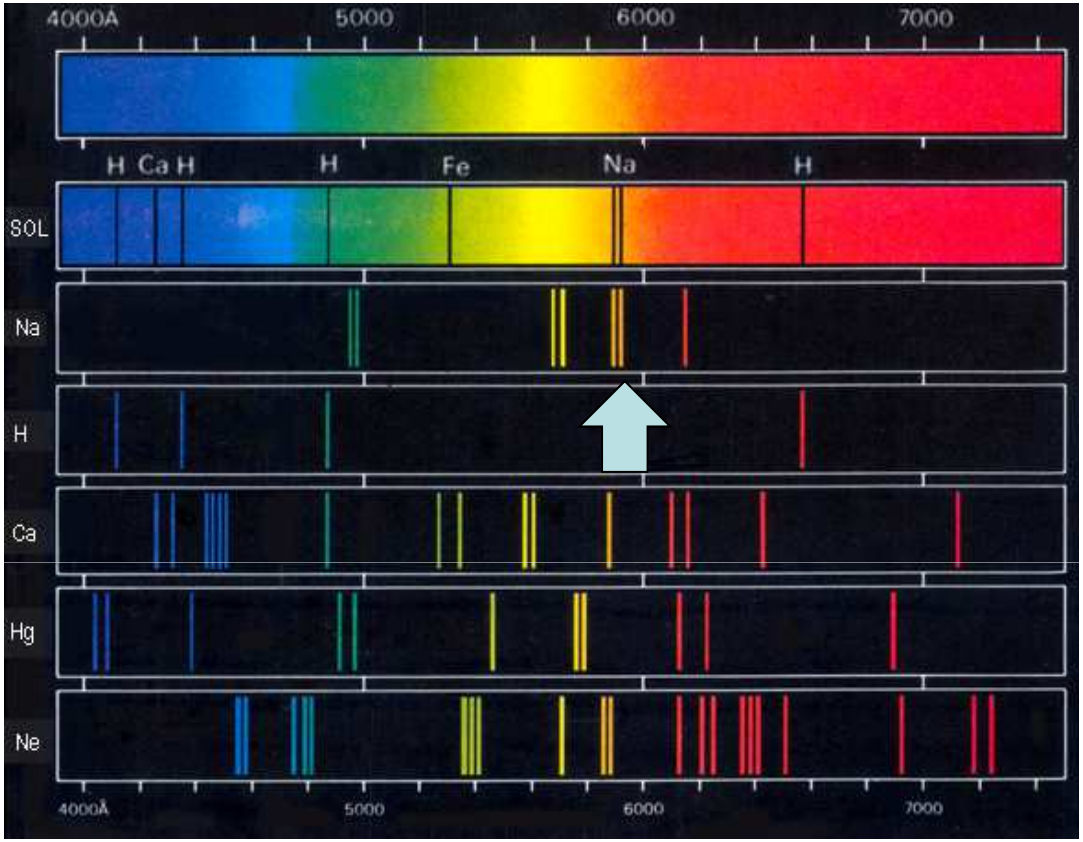
$$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$$

$$L_z = m_l \hbar = -2\hbar, -1\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$$

$$\cos\theta = \frac{L_z}{L}$$

$$\theta \sim 145^{\circ}, 90^{\circ}, 66^{\circ}, 114^{\circ} \;\; e \;\; 35^{\circ}$$

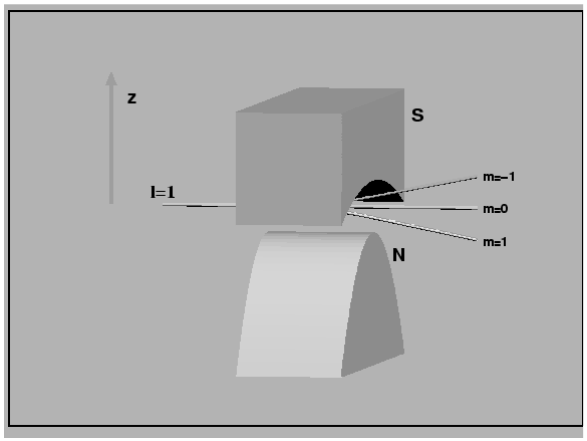
❑ O número quântico magnético do spin

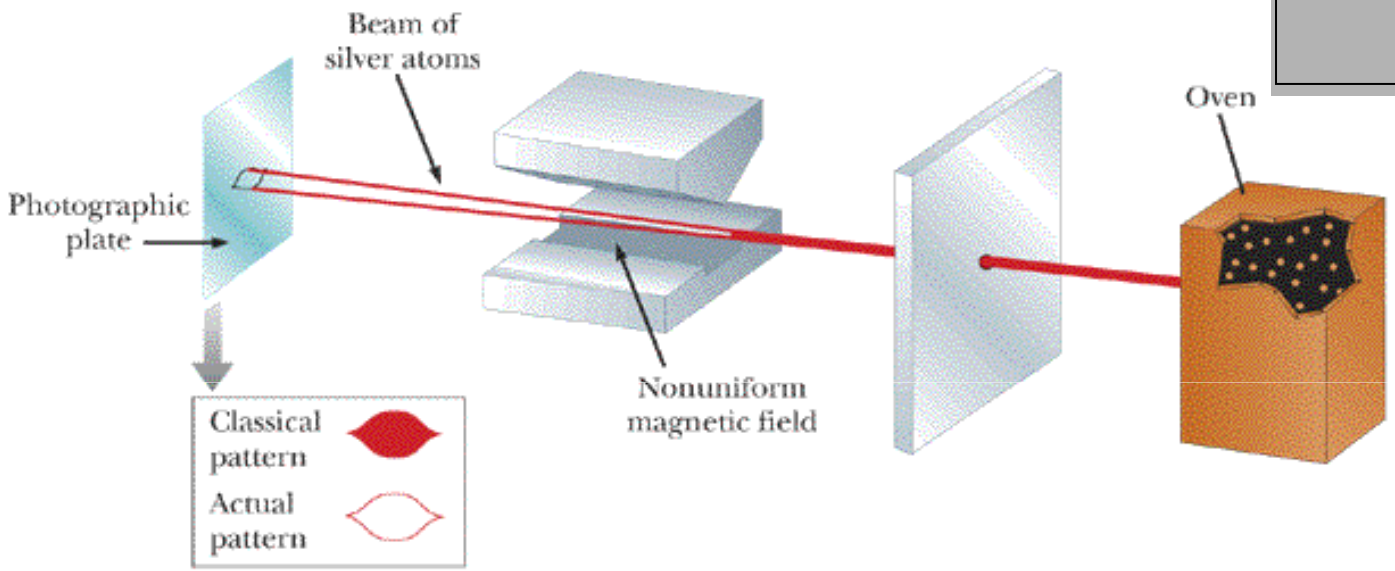


Os números quânticos ***n, l, ml*** são gerados pela **resolução da Equação de Schrödinger.**

A evidência da necessidade de um **novo número quântico (ms)** surgiu a partir de uma característica não usual dos espectros de certos gases, como o vapor de sódio. A presença de um **"dubleto" de linhas** próximas a 589nm

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.9



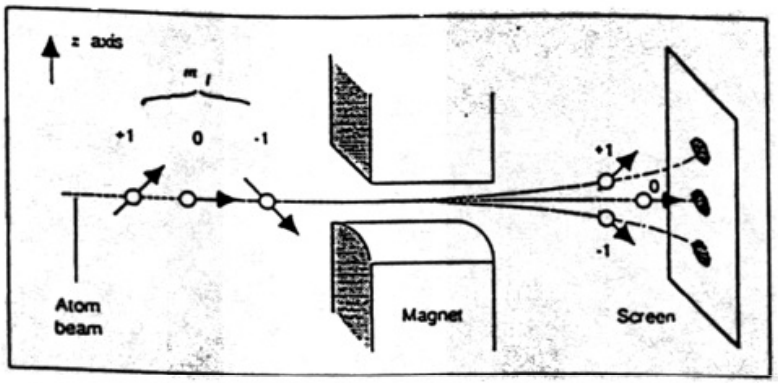


O aparelho utilizado por Stern e Gerlach para
verificar a quantização espacial do momento angular magnético.

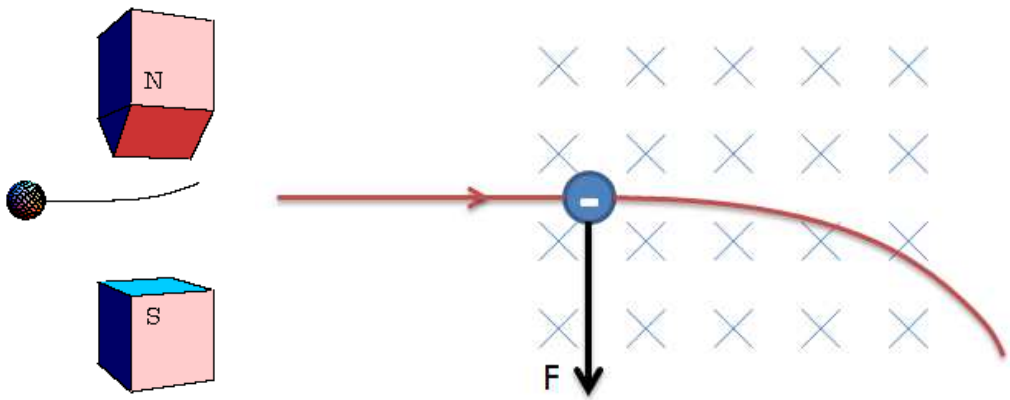
Um feixe de **átomos de prata, neutros,** é dividido em **duas componentes discretas** por um **campo magnético não uniforme** como mostrado pelo padrão projetado no anteparo.

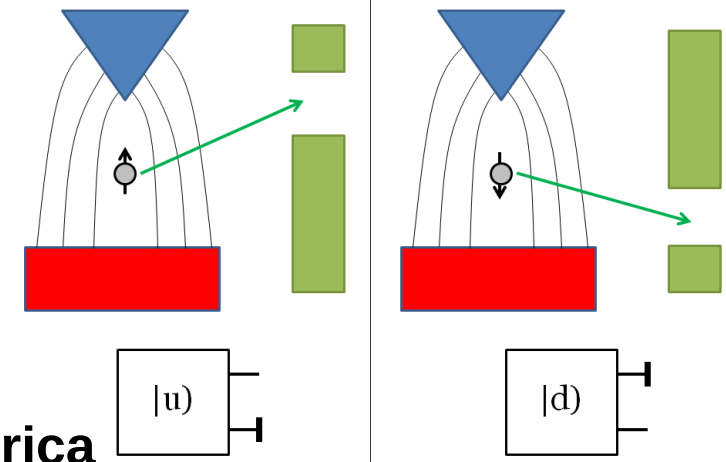
O spin do elétron

❑ Com alguns metais não houve desvio do feixe, enquanto outros, como o **<u>sódio, a prata, ou o hidrogênio</u>** sofreram desvio.



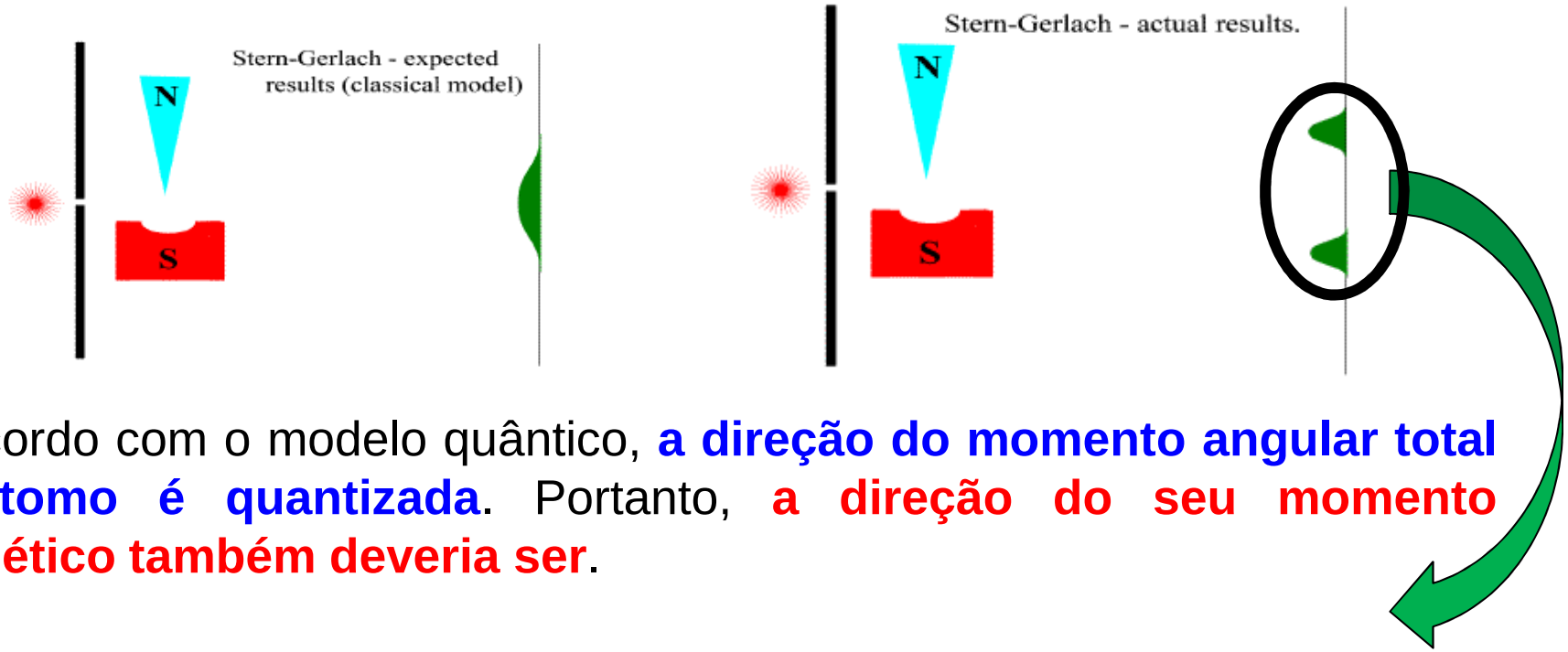
❑ Era sabido que um feixe de **<u>partículas como elétrons ou íons</u>**, sofre desvio ao passar por um campo magnético.





❑ Contudo, **átomos nêutros não têm carga elétrica**

<u>Classicamente</u>, se esperava que o feixe se espalha-se em uma distribuição contínua sobre o filme fotográfico pois **são permitidas <u>todas as posições (orientações) possíveis dos momentos magnéticos atômicos</u>.**



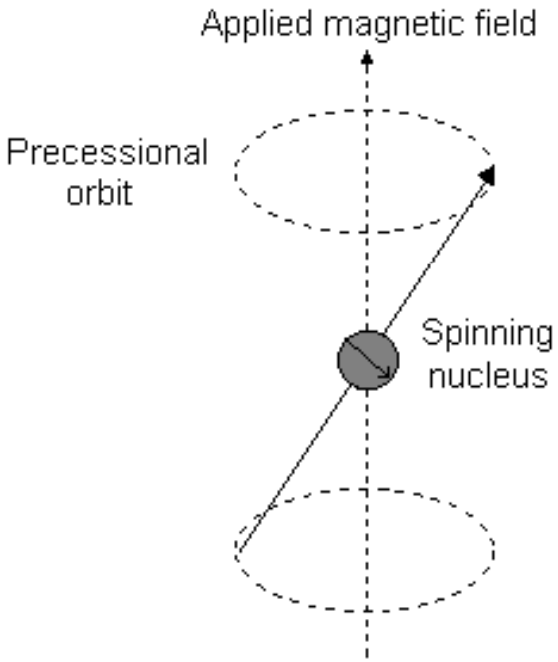
De acordo com o modelo quântico, **a direção do momento angular total do átomo é quantizada**. Portanto, **a direção do seu momento magnético também deveria ser**.

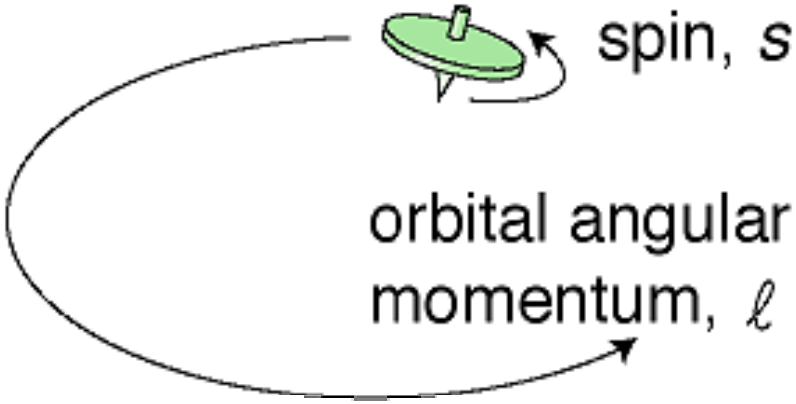
Assim, os **<u>feixes desviados</u>** tinham **<u>um número inteiro de componentes</u>** discretas e o número de componentes determina o número de possíveis valores de momento magnético: μ_z

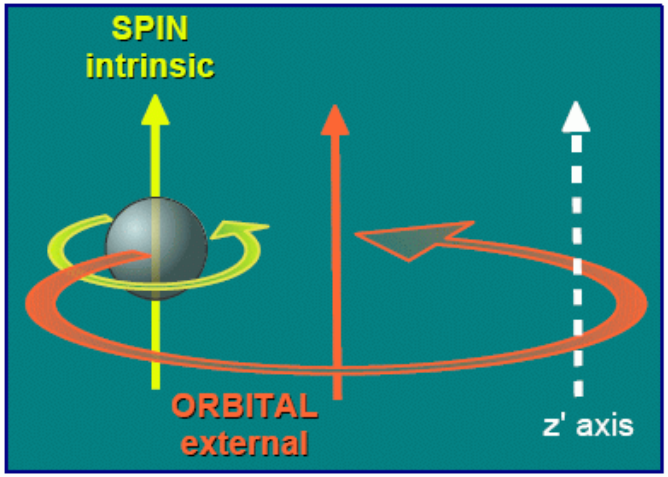
O experimento mostrava ao menos uma quantização qualitativa – (mesmo módulo duas direções diferindo de uma unidade de ħ).

Em 1925, Goudsmit e Uhlenbeck propuseram que o elétron tem um **momento angular intrínseco** além de seu **momento angular orbital.**

Esse momento angular intrínseco é o **spin do elétron**.





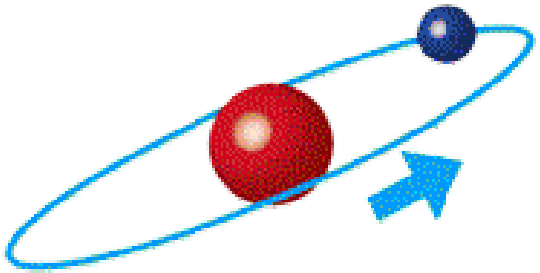


O **momento angular total do átomo** contém tanto a contribuição **orbital L** como a contribuição de **spin S (onde L e S são vetores)**.

Da mesma forma que o vetor momento angular "L", **o vetor momento angular do spin "S" tem que obedecer as regras do modelo quântico.**

Existe um número quântico "s" para o spin que é análogo ao momento angular orbital *"l"*.

Contudo o valor de "s" para o elétron é sempre 1/2, diferente de "l" que varia para estados diferentes do átomo.

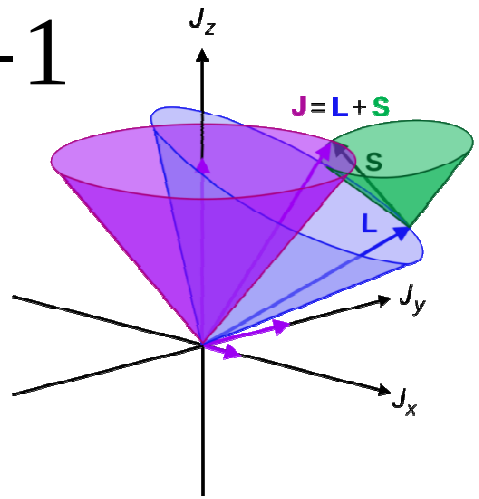


Em analogia com a equação:

$$\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \qquad l = 0, 1, 2..., n-1$$

o **<u>módulo do momento angular</u>** do spin **S** é dado por:

$$\left|\vec{S}\right| = S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar$$



O **número quântico** m_s especifica os valores permitidos de **"*Sz*"** de acordo com a expressão:

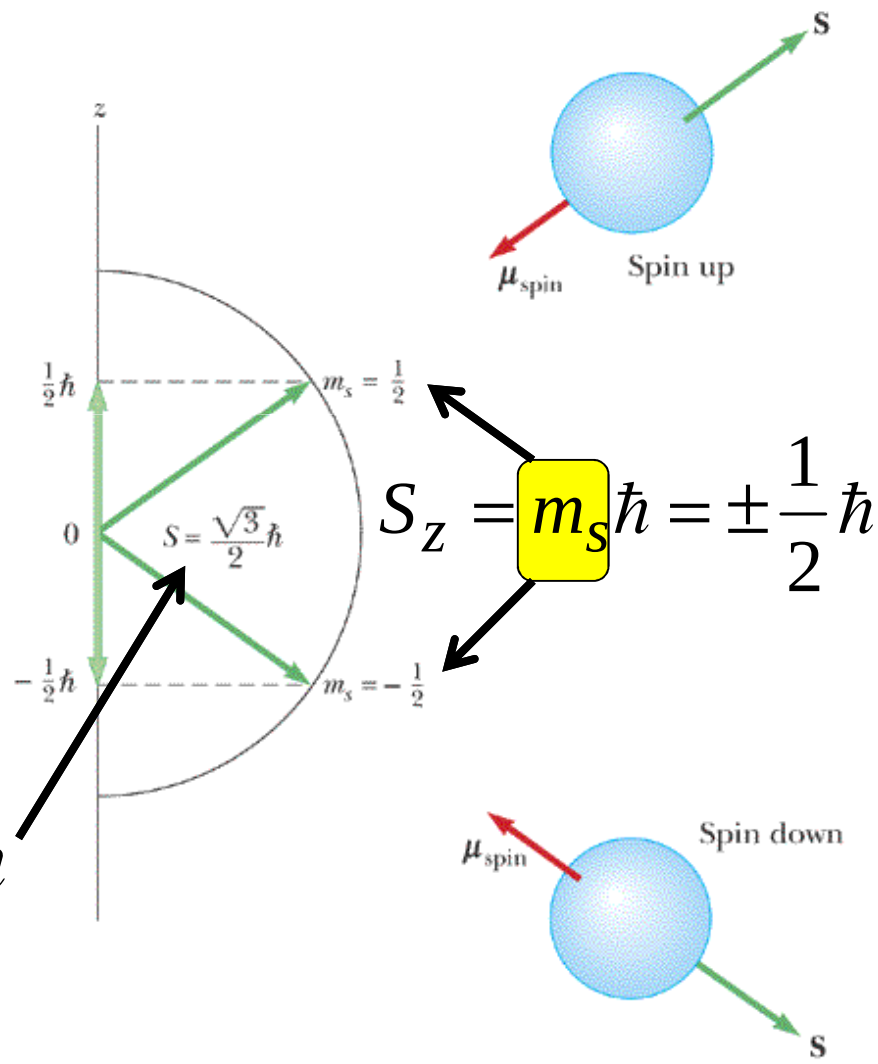
$$S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar \qquad \left(\mathrm{m_s} = \pm\frac{1}{2}\right)$$

O momento angular do SPIN **S** também exibe **quantização espacial.**

A figura mostra as **duas orientações permitidas** do vetor **momento angular do spin S** e o vetor

$$\left|\vec{S}\right| = S = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}\,\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.10



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

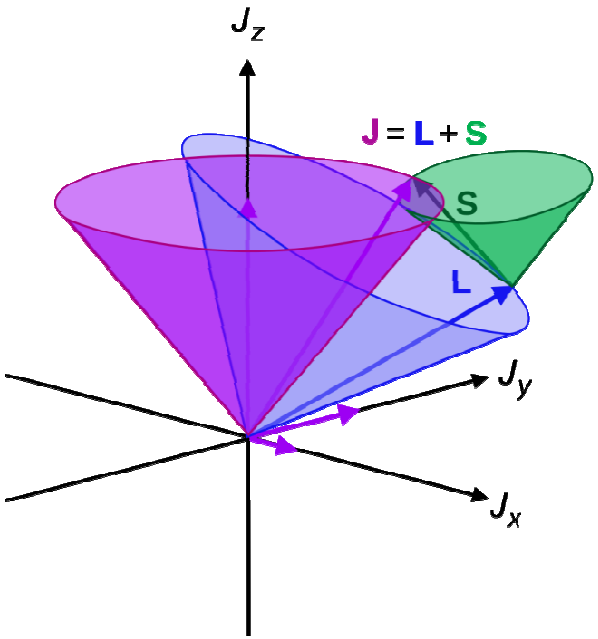
momento magnético do spin μs do elétron está relacionado com seu **momento angular do spin S** por:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e}\vec{S}, \quad \text{como } S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

a componente μ_z pode ter os valores:

$$\mu_{sz} = \pm\frac{e\hbar}{2m_e} \text{ conhecido como magnéton de Bohr}$$

cujo valor é: $9{,}274\times10^{-24}\ J/T$



O momento magnético (de um imã) é uma quantidade que determina o torque que este irá experimentar em um campo magnético exterior.

- **Seção 29.3**

Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons

- **(a) na subcamada 3p e**
- **(b) na subcamada 3d**

As letras s,p,d,f,g,h…são usadas para designar as subcamadas para as quais l=0,1,2,3,4,5…

A subcamada identificada por 3p tem números quânticos:
n=3 e l=1

A subcamada 3d tem números quânticos n=3 e l=2

$$|m_l| = 0,1,2,3...$$

$$l = |m_l|, |m_l|+1,\ |m_l|+2,\ |m_l|+3...$$

$$n = l+1,\ l+2,\ l+3...$$

Essas condições são expressas de forma mais conveniente como:

$$n = 1, 2, 3...$$

$$l = 0, 1, 2, ...n-1$$

$$m_l = -l, -l+1, ...0, ...+l-1,\ l$$

- **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

- **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3p**

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

n	3	3	3	3	3	3
l	1	1	1	1	1	1
ml	1	1	0	0	-1	-1
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

<u>Um total de 6 estados para a subcamada 3p</u>

- **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

- **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3d**

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

n	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
l	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
ml	2	2	1	1	0	0	-1	-1	-2	-2
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

<u>Um total de 10 estados para a subcamada 3d</u>

As funções de onda para o Hidrogênio

É conveniente definir a função densidade de probabilidade radial P(r) como a probabilidade por unidade de distância de encontrar o elétron em uma casca esférica de raio r e espessura dr:

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.5

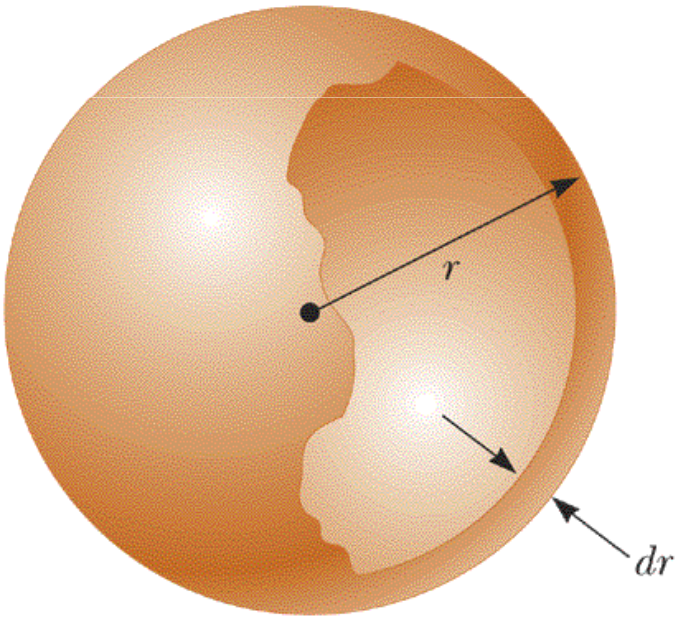
O volume desta casca é igual à sua área superficial multiplicada pela espessura dr

$$4\pi r^2 dr$$

De tal forma que:

$$P(r)dr = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$$

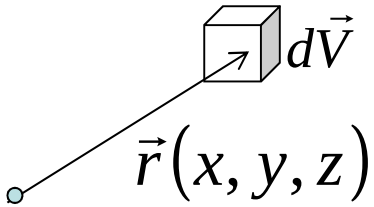
$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2$$



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

As funções de onda para o Hidrogênio

A probabilidade de encontrar o elétron em qualquer região (elemento) de volume dV



$$P(r)dr = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$$

é igual à integral do módulo ao quadrado da sua função de onda, sobre a região,

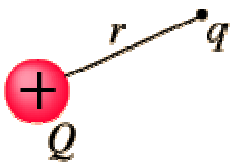
$$\int_0^r |\Psi|^2 4\pi r^2 dr$$

no caso da função de onda estar normalizada: $\int |\Psi|^2 dV = 1$

Na equação de Schrödinger temos:

A energia potencial do átomo de hidrogênio depende apenas da distância “r” entre o núcleo e o elétron.

$$U = \frac{kQq}{r}$$



A **função de onda mais simples para o átomo de hidrogênio descreve o estado 1s** $\psi_{1s}(r)$

$$\psi_{1s}(r \to \infty) \to 0$$

$$\psi_{1s}(r \to 0) \to \ finita \to \text{Probabilidade finita de encontrar o elétron em "r"}$$

e deve satisfazer a equação de Schrödinger com dependência radial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\Psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}\right) - \frac{k_e e^2}{r}\Psi = E\Psi$$

Seção 29.4 As funções de onda para o Hidrogênio (H)

A função de onda do estado fundamental para o elétron em um átomo de hidrogênio é:

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \qquad a_0 \text{ é o raio de Bohr}$$

(a) Mostre que essa função de onda está normalizada.

(b) Mostre que essa função de onda satisfaz a equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\Psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}\right) - \frac{k_e e^2}{r}\Psi = E\Psi$$

(c) Descubra a probabilidade de encontrar o elétron entre: $r_1 = \frac{a_0}{2}$ e $r_2 = \frac{3a_0}{2}$

$$(a)\int |\Psi|^2 dV = 4\pi\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr = -\frac{2}{a_0^2}\left[e^{-2r/a_0}\left(r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2}\right)\right]_0^\infty$$

$$(c)4\pi\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)\int_{a_0/2}^{3a_0/2} r^2 e^{-2r/a_0} dr = -\frac{2}{a_0^2}\left[e^{-2r/a_0}\left(r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2}\right)\right]_{a_0/2}^{3a_0/2}$$

$$(a)\int|\Psi|^2 dV = 4\pi\int_0^\infty |\Psi|^2 r^2 dr = 4\pi\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

$$\int|\Psi|^2 dV = -\frac{2}{a_0^2}\left[e^{-2r/a_0}\left(r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2}\right)\right]_0^\infty = \left(-\frac{2}{a_0^2}\right)\left(-\frac{a_0^2}{2}\right) = 1$$

$$(b)\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr} = -\frac{2}{r\sqrt{\pi a_0^5}} e^{-r/a_0} = \frac{2}{r a_0}\Psi$$

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^7}} e^{-r/a_0} = \frac{1}{a_0^2}\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{r a_0}\right)\Psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi = E\Psi$$

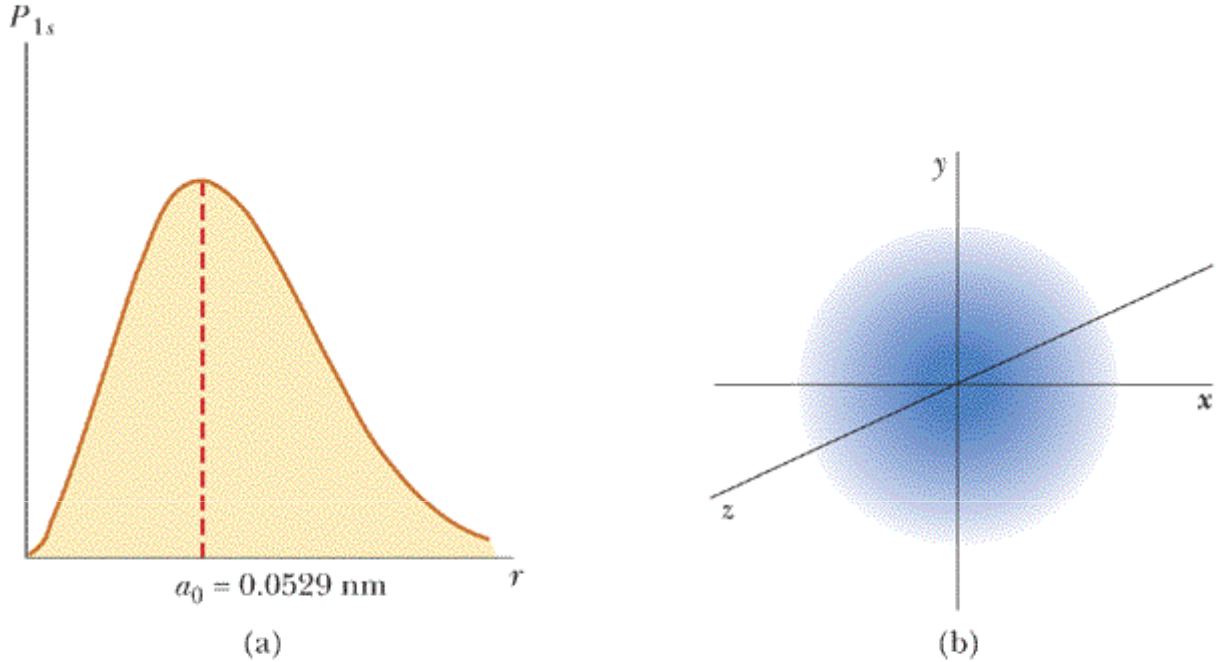
$$a_0 = \frac{\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)}{m_e e^2} \Rightarrow -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0} = E \text{ ou } E = -\frac{k_e e^2}{2a_0}$$

$$(c)\ P_{a_0/2\to 3a_0/2} = 4\pi \int_{a_0/2}^{3a_0/2} |\Psi|^2 r^2 dr = 4\pi \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) \int_{a_0/2}^{3a_0/2} r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

$$P_{a_0/2\to 3a_0/2} = -\frac{2}{a_0^2}\left[e^{-2r/a_0}\left(r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2}\right)\right]_{a_0/2}^{3a_0/2} =$$

$$-\frac{2}{a_0^2}\left[e^{-3}\left(\frac{17a_0^2}{4}\right) - e^{-1}\left(\frac{5a_0^2}{4}\right)\right] = 0.497$$

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.6



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

Probabilidade de encontrar o elétron como uma função da distância “r” até o núcleo para o átomo de hidrogênio no estado fundamental 1s. Observe que a probabilidade tem seu valor máximo quando “r” é igual ao primeiro raio de Bohr: a_0 (exemplo 29.3)

(b) Distribuição esférica de carga eletrônica do estado 1s para o átomo de H.

Exemplo 29.3 O Estado fundamental do Hidrogênio (H)

Calcule o valor mais provável de “r” para um átomo de hidrogênio no seu estado fundamental.

Solução: O valor mais provável de “r” corresponde ao pico da função P(r) em função de r. Portanto a inclinação da curva é nula neste ponto de tal forma que:

$$\frac{dP}{dr} = 0$$

$$\frac{dP_{1s}(r)}{dr} = \frac{d}{dr}\left[\left(\frac{4r^2}{a_0^3}\right)e^{-2r/a_0}\right] = 0$$

$$e^{-2r/a_0}\frac{d}{dr}\left(r^2\right) + r^2\frac{d}{dr}\left(e^{-2r/a_0}\right) = 0$$

$$2re^{-2r/a_0} + r^2\left(-\frac{2}{a_0}\right)e^{-2r/a_0} = 0$$

$$2r\left[1-\left(\frac{r}{a_0}\right)\right]e^{-2r/a_0} = 0 \quad \text{esta expressão é satisfeita se}$$

$$1-\left(\frac{r}{a_0}\right) = 0 \rightarrow r = a_0$$

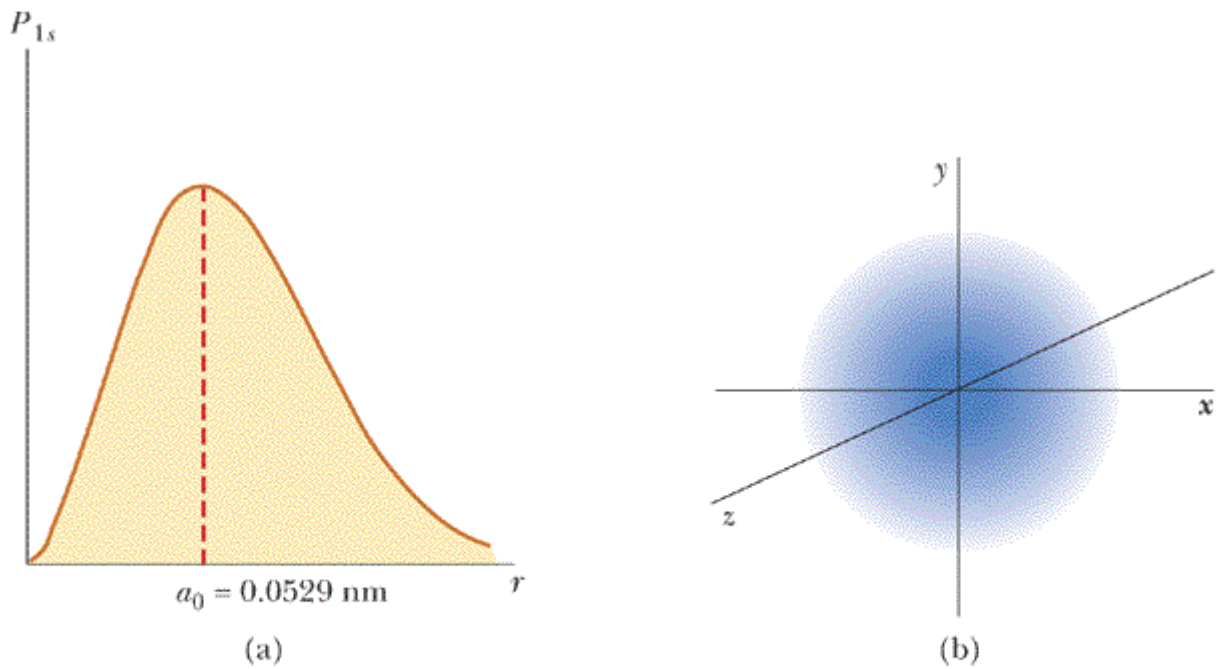
Embora o modelo quântico difira do modelo de Bohr, já que o elétron tem uma probabilidade finita de estar a qualquer distância do núcleo, a distância mais provável é a mesma que o raio orbital do modelo de Bohr.

As funções de onda para o Hidrogênio

Uma representação gráfica da função $P_{1s}(r) = \left(\frac{4r^2}{a_0^3}\right)e^{-2r/a_0}$ é apresentada na figura.

O pico da curva corresponde ao valor mais provável de “r” para este estado.

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.6



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

Exemplo 29.4 A probabilidade do elétron no Hidrogênio (H)

Calcule a probabilidade de que o elétron no estado fundamental do hidrogÊnio esteja além do raio de Bohr.

Solução: a probabilidade é encontrada integrando-se a densidade de probabiidade radial para esse estado desde o raio de Bohr até o infinito:

$$P = \int_{a_0}^{\infty} P_{1s}(r)dr = \frac{4}{a_0^3}\int_{a_0}^{\infty} r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

Podemos colocar a integral em forma adimensional mudando variáveis de r para z=2r/a0.

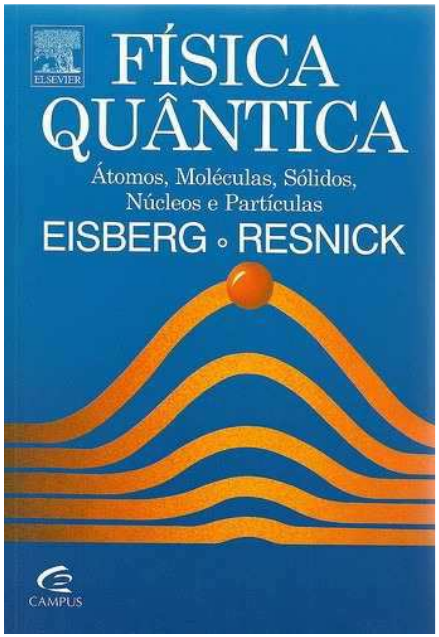
$$z = \frac{2r}{a_0} \quad \text{observando que:}$$

$$z = 2 \ \text{ para } r = a_0 \text{ e que } dr = \left(\frac{a_0}{2}\right)dz$$

$$P = \frac{1}{2}\int_{2}^{\infty} z^2 e^{-z} dz = -\frac{1}{2}\left(z^2 + 2z + 2\right)e^{-z}\Big|_{2}^{\infty}$$

$$P = 5e^{-2} = 0.677 \quad \text{ou} \quad 67.7\%$$

CAPÍTULO 29: Física Atômica



- ❑ A Equação de Schrödinger
- ❑ Modelos Estruturais Primitivos do átomo
- ❑ O Átomo de Hidrogênio (H)
- ❑ O Números Quânticos
- ❑ As funções de onda para o Hidrogênio
- ❑ Interpretação Física dos Números Quânticos
- ❑ O Número Quântico Orbital
- ❑ O Spin do Elétron
- ❑ **O Princípio da Exclusão e a Tabela Periódica**
- ❑ Espectros Atômicos no Visível e de Raios-X

Lista de exercícios sugerida – Capítulo 29:

29.2, 4, 7, 9, 10, 17, 18, 15, 27, 29, 37, 25, 39, 44, 49, 51, 53, 55, 56

Um **estado quântico** em **qualquer átomo** é especificado por **quatro números quânticos:** ***n, l, ml, ms***

$n = 1, 2, 3...$ número quântico principal

$l = 0, 1, 2, ...n-1$ número quântico orbital

$m_l = -l, -l+1, ...0, ...+l-1,\ l$ número quântico magnético orbital

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ número quântico magnético do spin

$n = 1, 2, 3...$ quantização da energia

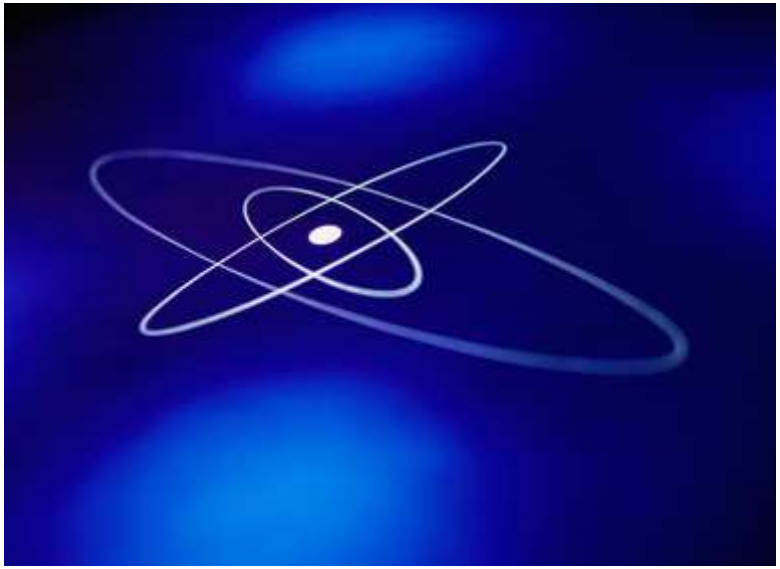
$l = 0, 1, 2, ...n-1$ quantização do módulo do momento angular

$m_l = -l, -l+1, ...0, ...+l-1,\ l$ quantização da direção do momento angular

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ quantização do spin

Um **estado quântico** em **qualquer átomo** é especificado por
quatro números quânticos: ***n, l, ml, ms***

Quantos elétrons em um átomo podem ter um conjunto particular de números quânticos?

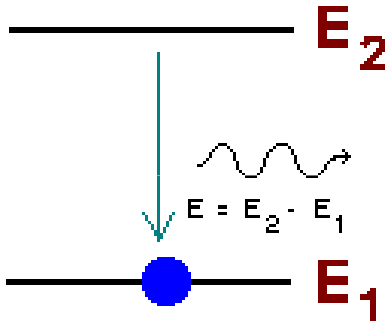


Princípio da Exclusão de Pauli (1925): Dois elétrons quaisquer em um átomo NUNCA podem estar no mesmo estado quântico;

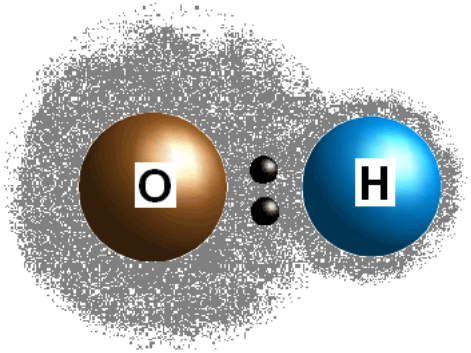
isto é <u>dois elétrons quaisquer no mesmo átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos</u>.

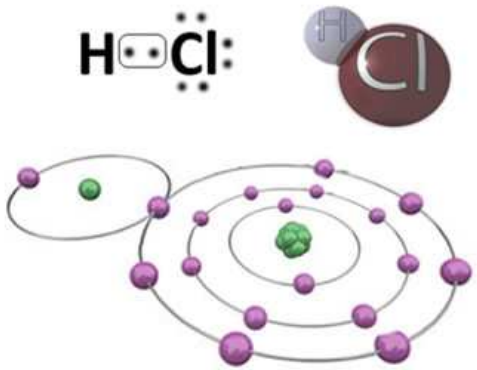
Princípio da Exclusão de Pauli (1925): Dois elétrons quaisquer em um átomo NUNCA podem estar no mesmo estado quântico; isto é dois elétrons quaisquer no mesmo átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos.

Se este princípio não fosse válido, todo átomo irradiaria energia por meio de fótons e seus elétrons terminariam **TODOS** no estado de menor energia.



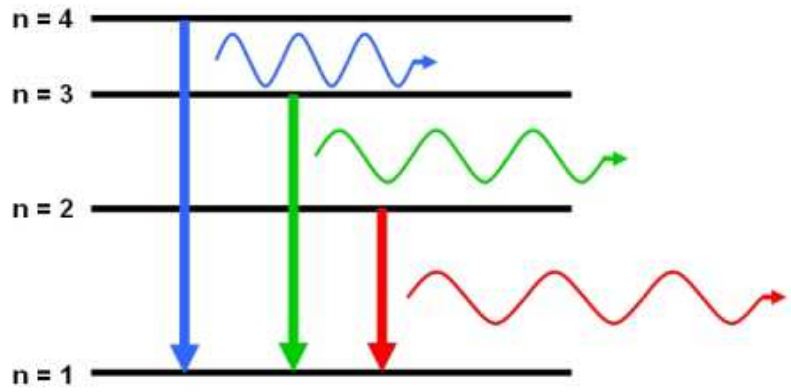
O **comportamento químico** dos átomos seria profundamente modificado, pois este comportamento depende da **estrutura eletrônica**.



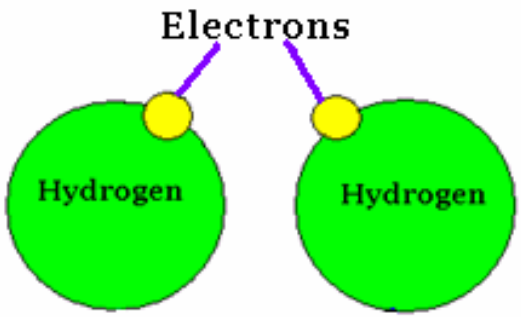


Princípio da Exclusão de Pauli (1925): Dois elétrons quaisquer em um átomo NUNCA podem estar no mesmo estado quântico; isto é dois elétrons quaisquer no mesmo átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos.

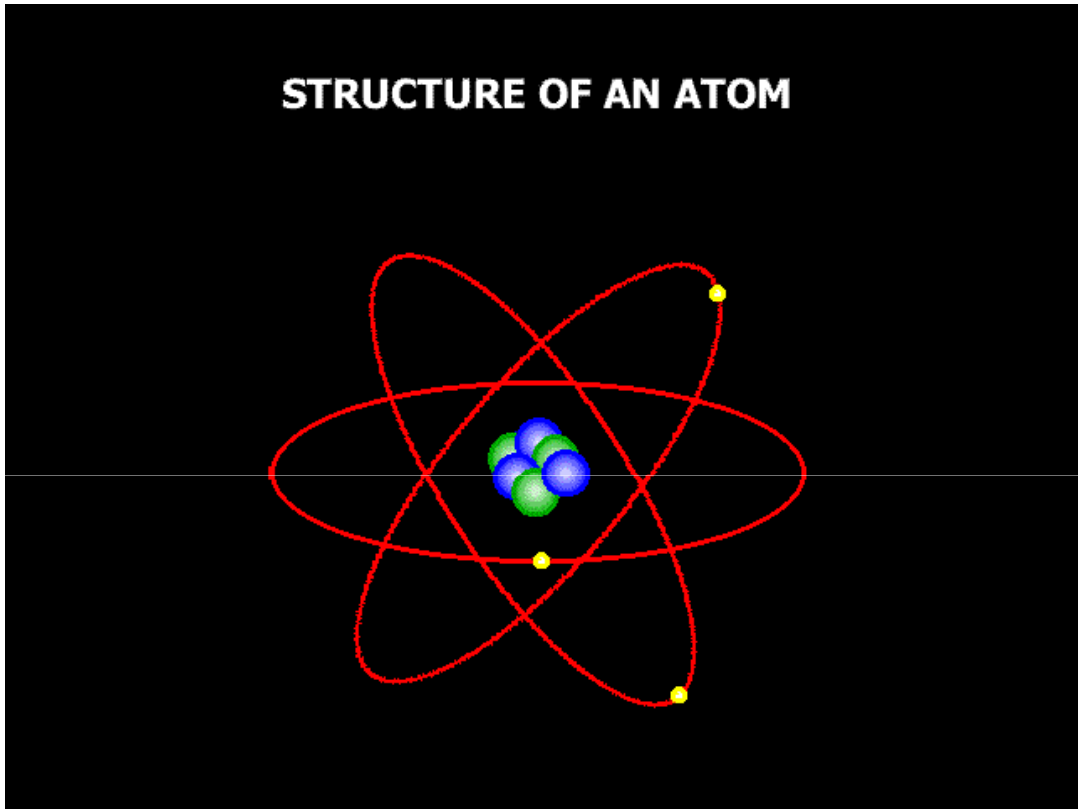
Desta forma, é possível considerar a estrutura eletrônica de átomos complexos como uma sucessão de níveis quânticos preenchidos,



onde os elétrons externos são os principais responsáveis pelas propriedades químicas dos elementos



Imagine construir um átomo formando inicialmente o núcleo (Z+N=A) e então preencher os **<u>estados quânticos disponíveis</u>** com elétrons até que o átomo fique neutro.



Começando do **estado fundamental "1s" [n=1 – l=0],** uma vez completa uma subcamada, o próximo elétron vai para a seguinte subcamada vazia.

LEMBRE-SE: Para cada "n" existe um número possível de estados quânticos

❑ **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

❑ **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3p**

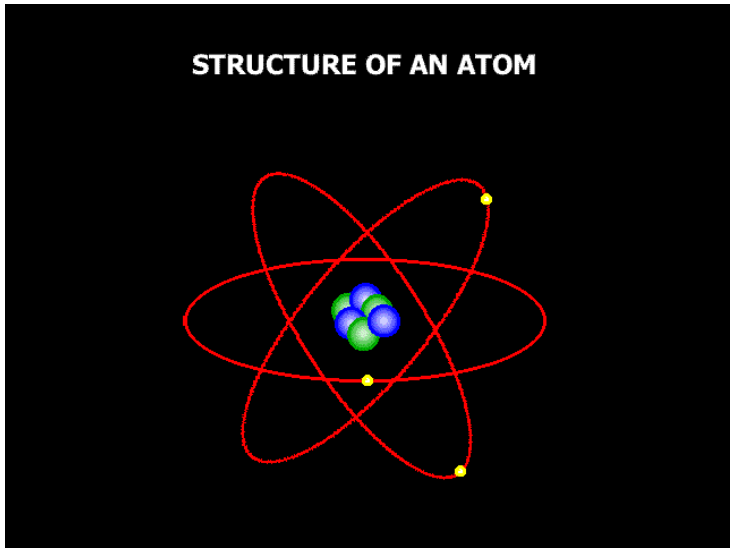
n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

n	3	3	3	3	3	3
l	1	1	1	1	1	1
ml	1	1	0	0	-1	-1
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

l=1 (6 estados)

<u>Um total de 6 estados para a subcamada 3p</u>

Orbital (Definição): O estado quântico de um elétron caracterizado pelos números quânticos ***n, l e ml***



A partir do Princípio de Exclusão de Pauli **no máximo dois elétrons podem estar em qualquer orbital.** Ou seja, para o mesmo conjunto ***n, l e ml*** em um orbital, somente podemos ter dois elétrons **caracterizados pela diferença de spin.**

$$m_s = -\frac{1}{2} \quad \text{e} \quad m_s = +\frac{1}{2}$$

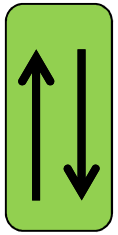
Como **cada orbital está limitado a dois elétrons**,
o número de elétrons que pode ocupar as camadas **(n)** também é limitado.

Orbital (Definição): O estado quântico de um elétron caracterizado pelos números quânticos ***n, l e ml***

A camada n=1 pode acomodar apenas dois elétrons, pois só é permitido um orbital com *ml=0*. ***n=1 – l=0 – ml=0***

1 orbital
2 estados

camada	*n*	*l*	*m*	*s*
1s	1	0	0	½, - ½
2s	2	0	0	½, - ½
2p	2	1	1, 0, -1	½, - ½
3s	3	0	0	½, - ½
3p	3	1	1, 0,-1	½, - ½
3d	3	2	2, 1, 0, -1, -2	½, - ½
4s	4	0	0	½, - ½
4p	4	1	1, 0, -1	½, - ½
4d	4	2	2, 1, 0, -1, -2	½, - ½
4f	4	3	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	½, - ½



- **A camada n=2 tem duas subcamadas, com l=0 e l=1.**
- **A subcamada l=0 (s) é limitada a apenas dois elétrons porque *ml=0*.**
- **A subcamada l=1 (p) tem três orbitais permitidos, correspondendo a *ml=1, 0, -1***

Como cada orbital pode acomodar <u>dois elétrons</u>, a subcamada l=1 (p) pode ter 6 elétrons (e a camada n=2 pode ter oito elétrons).

❑ **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

❑ **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3p**

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

n	3	3	3	3	3	3
l	1	1	1	1	1	1
ml	1	1	0	0	-1	-1
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

l=1 (6 estados)

<u>Um total de 6 estados para a subcamada 3p→6elétrons</u>

❑ **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

❑ **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3p**

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

3 orbitais

n	3	3	3	3	3	3
l	1	1	1	1	1	1
ml	1	1	0	0	-1	-1
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

l=1 (6 estados)

<u>Um total de 3 orbitais para a subcamada 3p</u>

- **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

- **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3d**

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

n	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
l	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
ml	2	2	1	1	0	0	-1	-1	-2	-2
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

<u>Um total de 10 estados para a subcamada 3d→10 elétrons</u>

- **Seção 29.3 O número quântico magnético do spin**

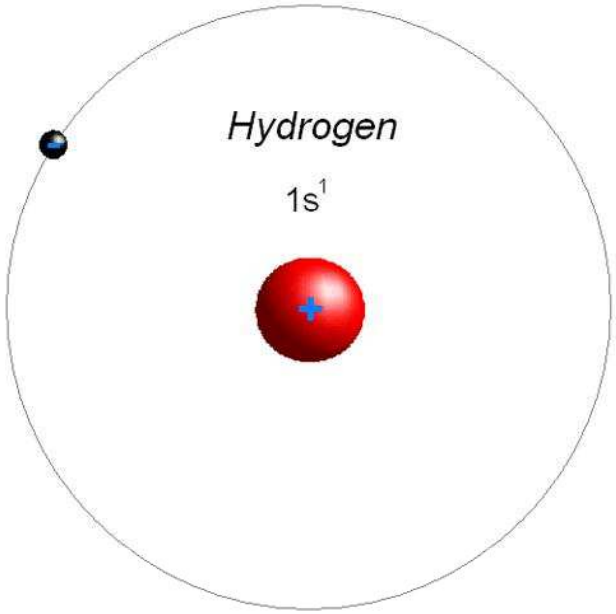
- **Liste os conjuntos possíveis de números quânticos para elétrons (a) na subcamada 3d**

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

n	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
l	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
ml	2	2	1	1	0	0	-1	-1	-2	-2
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

<u>Um total de 5 orbitais para a subcamada 3d</u>

O Hidrogênio tem apenas um elétron, o qual no estado fundamental pode ser descrito por qualquer um dos **dois conjuntos de números quânticos:**



$$1, 0, 0, +\frac{1}{2}$$

$$1, 0, 0, -\frac{1}{2}$$

1 orbital
2 estados possíveis

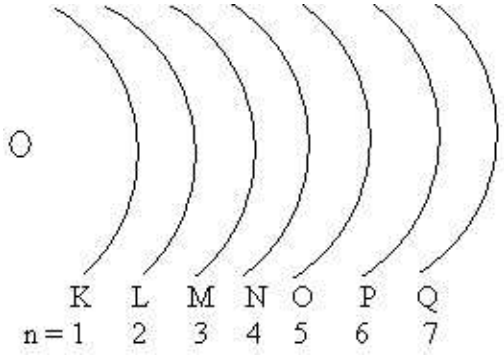
A configuração eletrônica do hidrogênio é frequentemente descrita por

$$1s^{1}$$

n=1 ← 1s; 1s → ***l=0***; 1^{1} → **elétron**

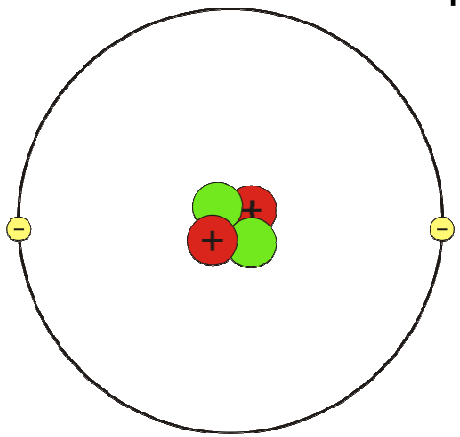
A notação 1s refere-se a n=1 e l=0 e o número sobrescrito indica que um elétron está presente na subcamada "s".

O Hélio neutro tem dois elétrons. No estado fundamental os números quânticos para estes dois elétrons são:



$$1, 0, 0, +\frac{1}{2} \uparrow$$

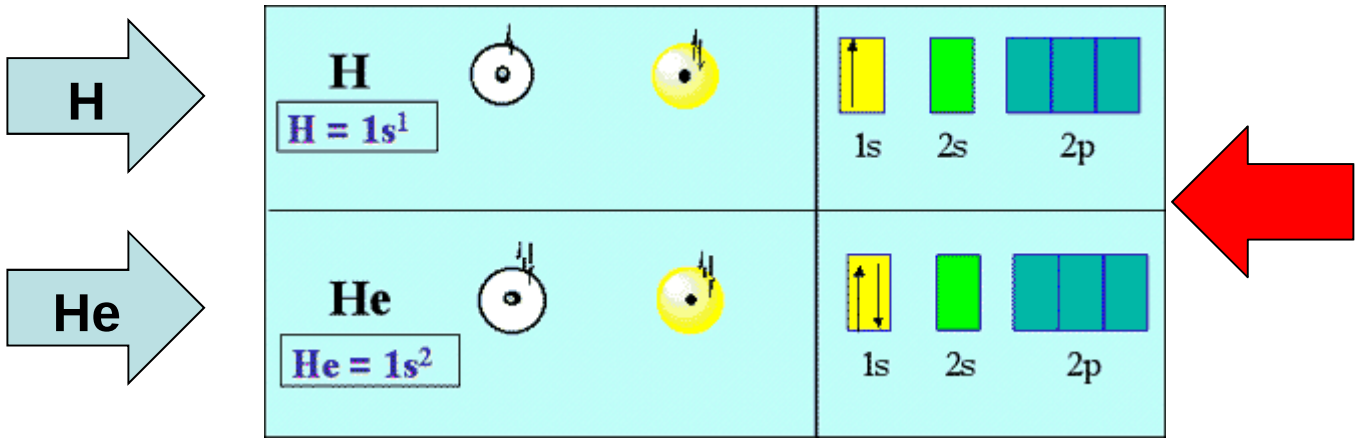
$$1, 0, 0, -\frac{1}{2} \downarrow$$



$\uparrow\downarrow$

Não são possíveis outras combinações dos números quânticos para esse nível e dizemos que <u>a camada K (n=1) está preenchida</u>.

A configuração eletrônica do Helio (He) é frequentemente descrita por:



$$1s^2 \uparrow\downarrow$$

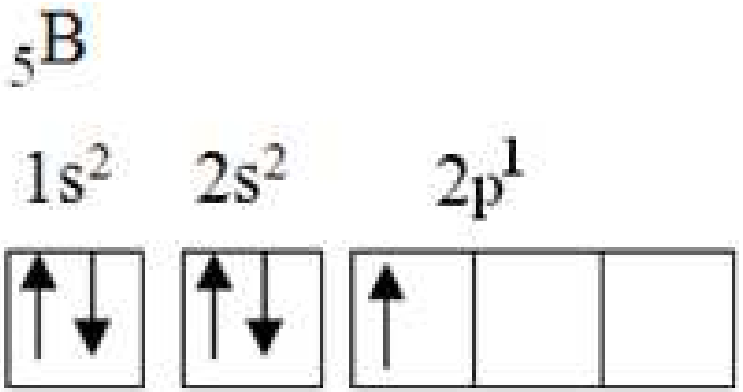
A notação 1s refere-se a n=1 e l=0 e o número sobrescrito indica que os dois elétrons estão presentes na subcamada "s" (tendo spin opostos).

n	ℓ	Designação orbital	Orientação – m_ℓ	N.° de orbitais	N.° de orbitais por camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	−1 0 +1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	−1 0 +1	3	
	2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	

	Element	Total Electrons	Orbital Diagram (1s 2s 2p 3s)	Electron Configuration
Z=1	H	1	↑	$1s^1$
Z=2	He	2	↑↓	$1s^2$
Z=3	Li	3	↑↓ ↑	$1s^2\,2s^1$
Z=4	Be	4	↑↓ ↑↓	$1s^2\,2s^2$
Z=5	B	5	↑↓ ↑↓ ↑	$1s^2\,2s^2\,2p^1$

O Boro neutro tem cinco elétrons.

A configuração eletrônica do Boro (B) é frequentemente descrita por:



O elétron 2p no Boro pode ser descrito por um entre seis conjuntos de números quânticos, correspondendo a seis estados de mesma energia.

EXERCÍCIO: Quais são estes estados?? Quantos e quais são os orbitais?

O elétron 2p no Boro pode ser descrito por um entre seis conjuntos de números quânticos, correspondendo a seis estados de mesma energia.

EXERCÍCIO: Quais são estes estados?? Quantos e quais são os orbitais?

n	2	2	2	2	2	2
l	1	1	1	1	1	1
ml	-1	-1	0	0	1	1
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2

Element	Total Electrons	Orbital Diagram (1s, 2s, 2p, 3s)	Electron Configuration
H	1	↑	$1s^1$
He	2	↑↓	$1s^2$
Li	3	↑↓ ↑	$1s^2\,2s^1$
Be	4	↑↓ ↑↓	$1s^2\,2s^2$
B	5	↑↓ ↑↓ ↑	$1s^2\,2s^2\,2p^1$

Seção 29.6 O Princípio da Exclusão de Pauli e a Tabela Periódica

Exercício 21:

(a) Apresente a configuração eletrônica para o estado fundamental do oxigênio (Z=8).

(b) Apresente os valores para o conjunto de números quânticos ***n, l, ml, ms*** para cada elétron no oxigênio.

Seção 29.6 O Princípio da Exclusão de Pauli e a Tabela Periódica

Exercício 21:

(a) Apresente a configuração eletrônica para o estado fundamental do oxigênio (Z=8).

(b) Apresente os valores para o conjunto de números quânticos ***n, l, ml, ms*** para cada elétron no oxigênio.

$$(a)\, 1s^2 2s^2 2p^4$$

$$(b)\, \text{Para os dois elétrons da camada 1s temos}$$

$$\mathrm{n} = 1, \mathrm{l} = 0, \mathrm{m_l} = 0, \mathrm{m_s} = +\frac{1}{2} \text{ e } \mathrm{m_s} = -\frac{1}{2}$$ **2 de 2**

$$\text{Para os dois elétrons da camada 2s temos}$$

$$\mathrm{n} = 2, \mathrm{l} = 0, \mathrm{m_l} = 0, \mathrm{m_s} = +\frac{1}{2} \text{ e } \mathrm{m_s} = -\frac{1}{2}$$ **2 de 2**

$$\text{Para os quatro elétrons da camada 2p temos}$$

$$\mathrm{n} = 2, \mathrm{l} = 1, \mathrm{m_l} = -1, 0, +1 \quad \mathrm{m_s} = +\frac{1}{2} \text{ e } \mathrm{m_s} = -\frac{1}{2}$$ **4 de 6**

O Carbono neutro tem seis elétrons.

A configuração eletrônica do Carbono (C) é frequentemente descrita por:

$$1s^2, 2s^2, 2p^2$$

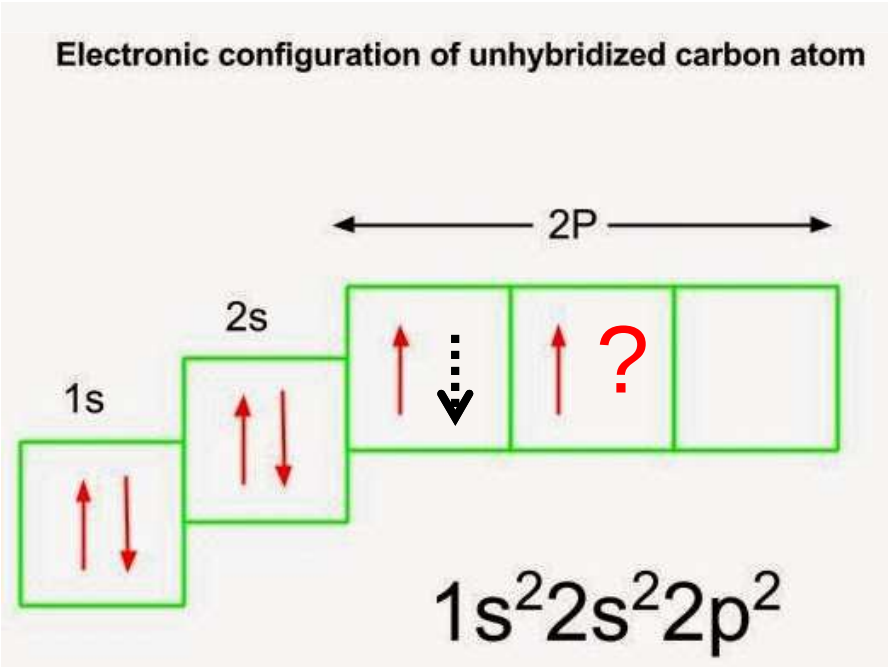
Element	Total Electrons	Orbital Diagram 1s	2s	2p			3s	Electron Configuration
H	1	↑						$1s^1$
He	2	↑↓						$1s^2$
Li	3	↑↓	↑					$1s^2\,2s^1$
Be	4	↑↓	↑↓					$1s^2\,2s^2$
B	5	↑↓	↑↓	↑	?			$1s^2\,2s^2\,2p^1$

Como vão os dois elétrons? Emparelhados no mesmo orbital ou eles ocupam orbitais diferentes com spins desemparelhados?

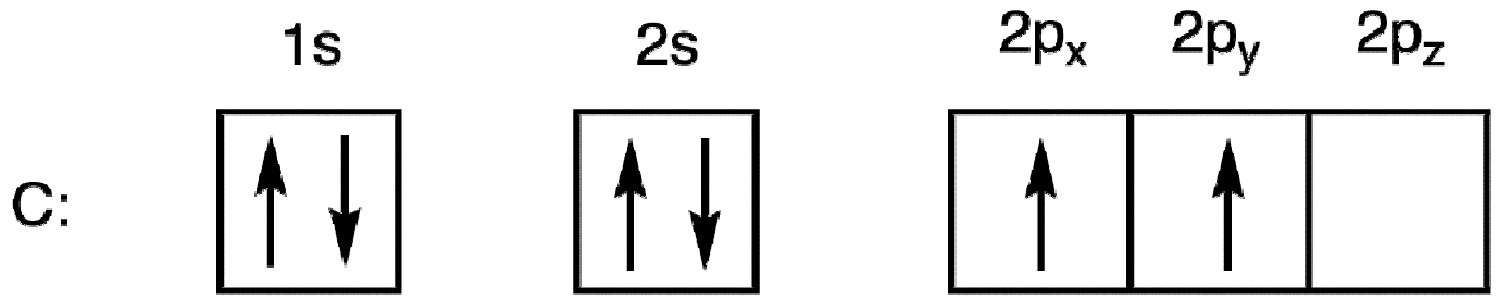
Orbital (Definição): O estado quântico de um elétron caracterizado pelos números quânticos *n, l e ml*

Orbital (Definição): O estado quântico de um elétron caracterizado pelos números quânticos *n, l e ml*

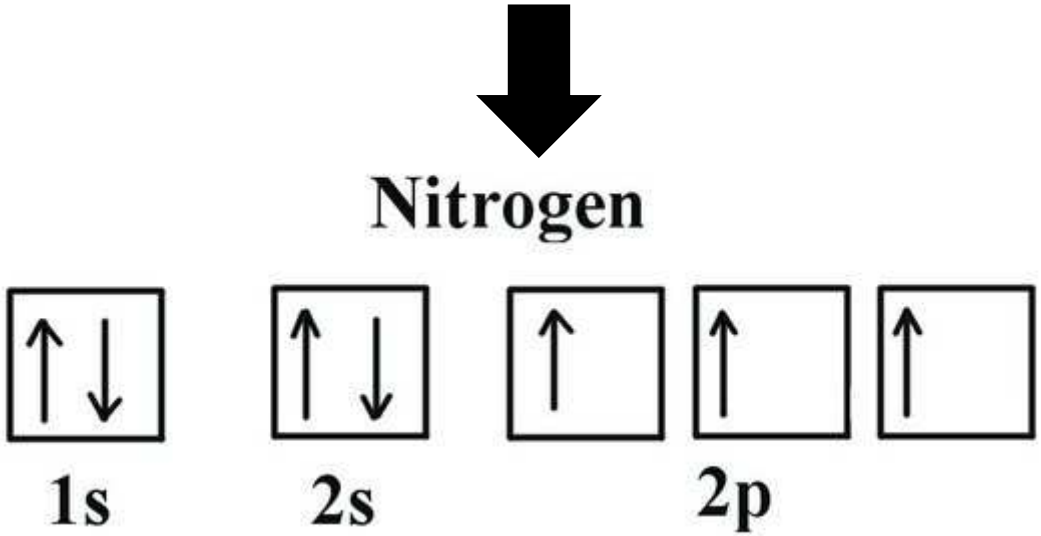
n	2	2	2	2	2	2
l	1	1	1	1	1	1
ml	-1	-1	0	0	1	1
ms	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2	-1/2



Dados experimentais validam a opção em **vermelho** **como a situação de menor energia**



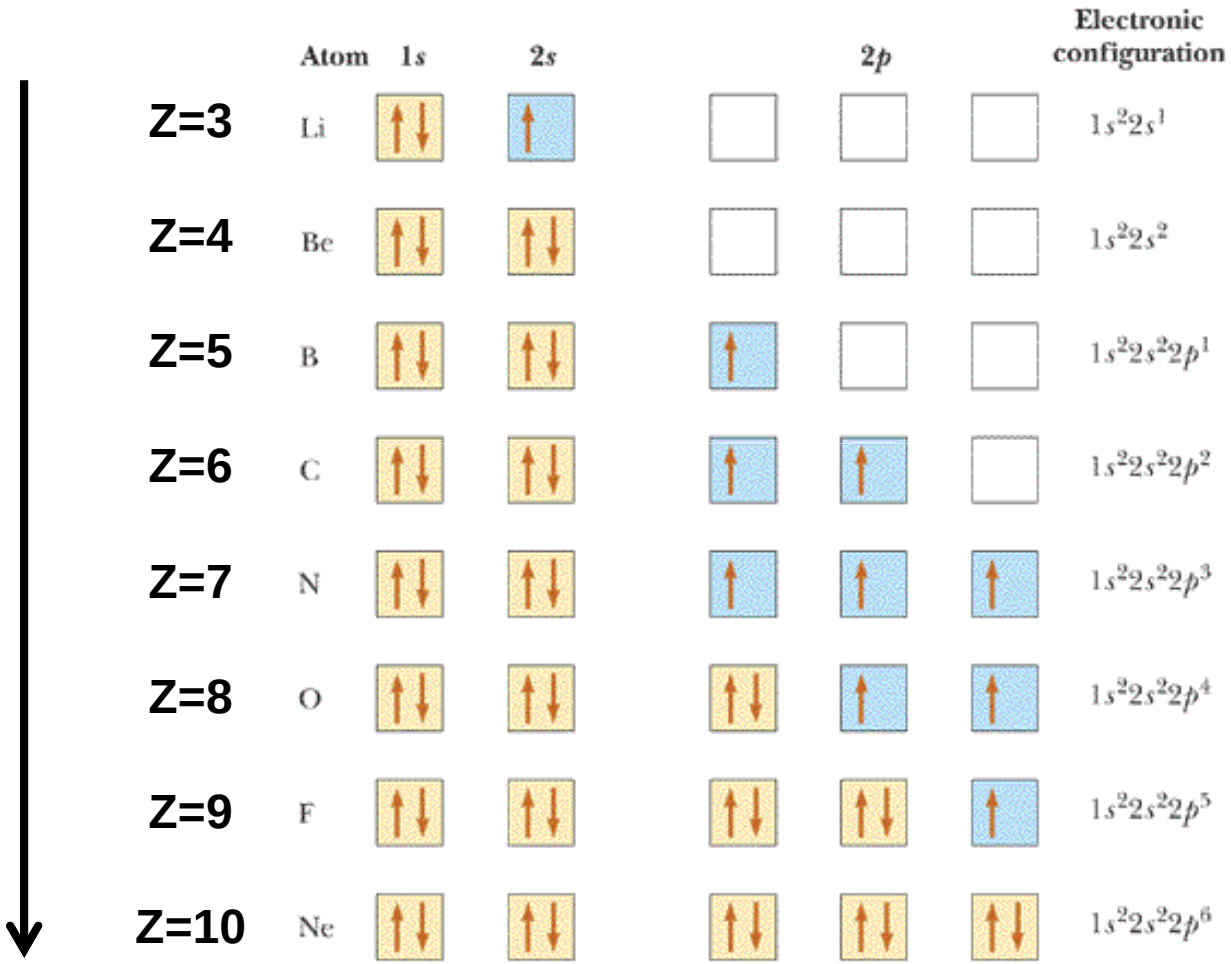
ANALOGAMENTE



As regras gerais que governam tais situações por toda a tabela periódica são as chamadas regras de Hund.

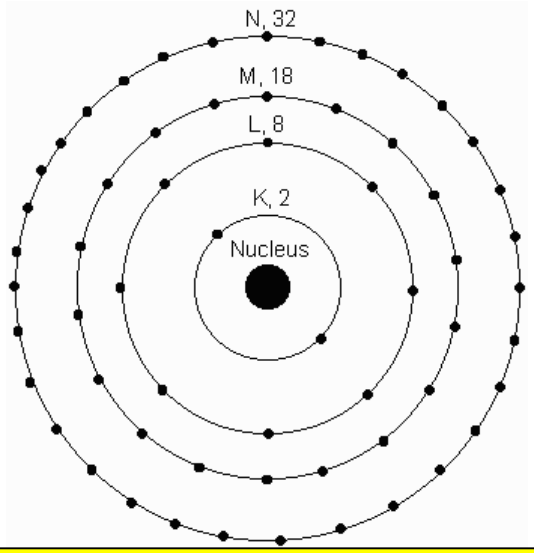
Quando um átomo tem orbitais de mesma energia, a ordem na qual eles são preenchidos pelos elétrons é a que possibilita o maior número de elétrons com spins desemparelhados.

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.11



Harcourt, Inc. items and derived items copyright © 2002 by Harcourt, Inc.

Na tabela periódica os elétrons preenchem as sub-camadas de acordo com as seguintes regras:



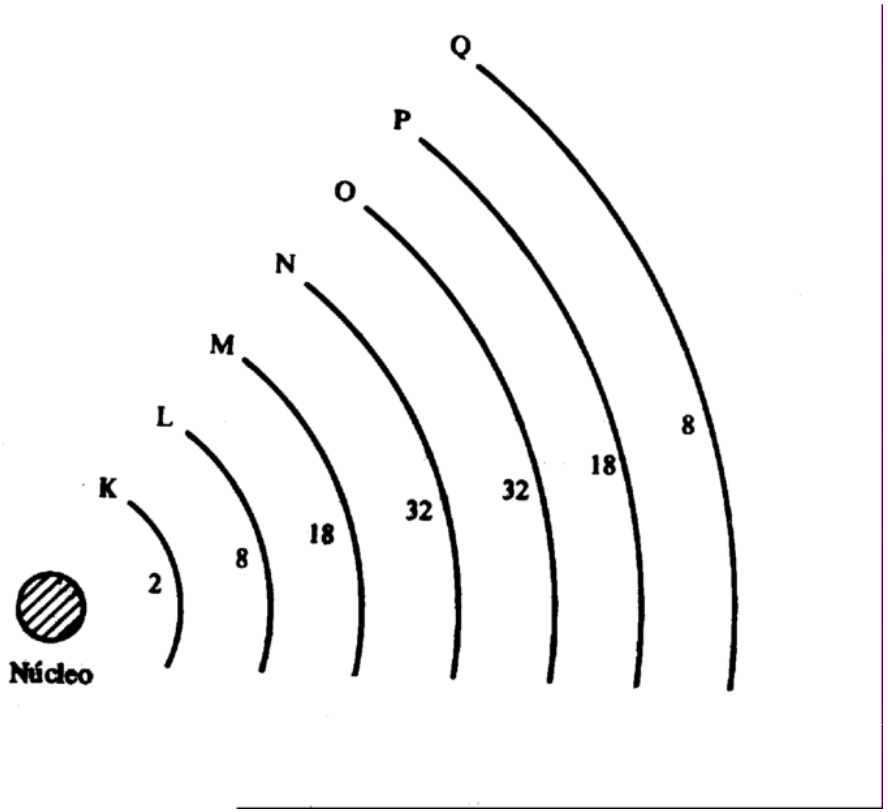
1. As sub-camadas com os menores valores de n+l são preenchidas em primeiro lugar.

2. Se duas sub-camadas têm o mesmo valor de n+l, a camada com o menor valor de n é preenchida em primeiro lugar.

EXERCÍCIO: **Utilizando estas duas regras, apresente a ordem na qual as subcamadas são preenchidas desde n+l=1 até n+l=7.**

1s, 2s, 2p …(lembre-se de que l<n ou *lmax=n-1*)

Faça uma previsão da configuração eletrônica e valência química para o elemento que tem número atômico (Z=26).



As letras s,p,d,f,g,h…são usadas para designar as subcamadas para as quais l=0,1,2,3,4,5…

Por exemplo a subcamada identificada por 3p tem números quânticos: n=3 e l=1
A subcamada 2s tem números quânticos n=2 e l=0

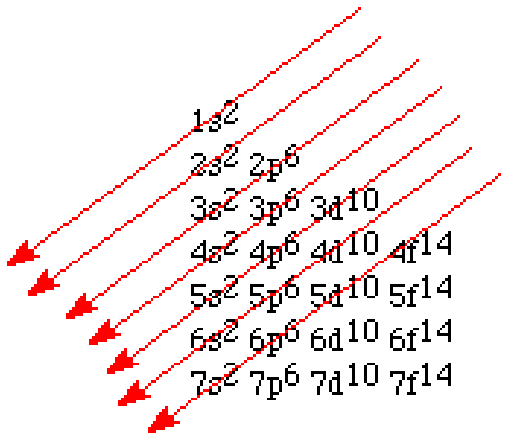
Os elétrons preenchem as sub-camadas de tal forma que:

1. As sub-camadas com os menores valores de n+l são preenchidas em primeiro lugar.

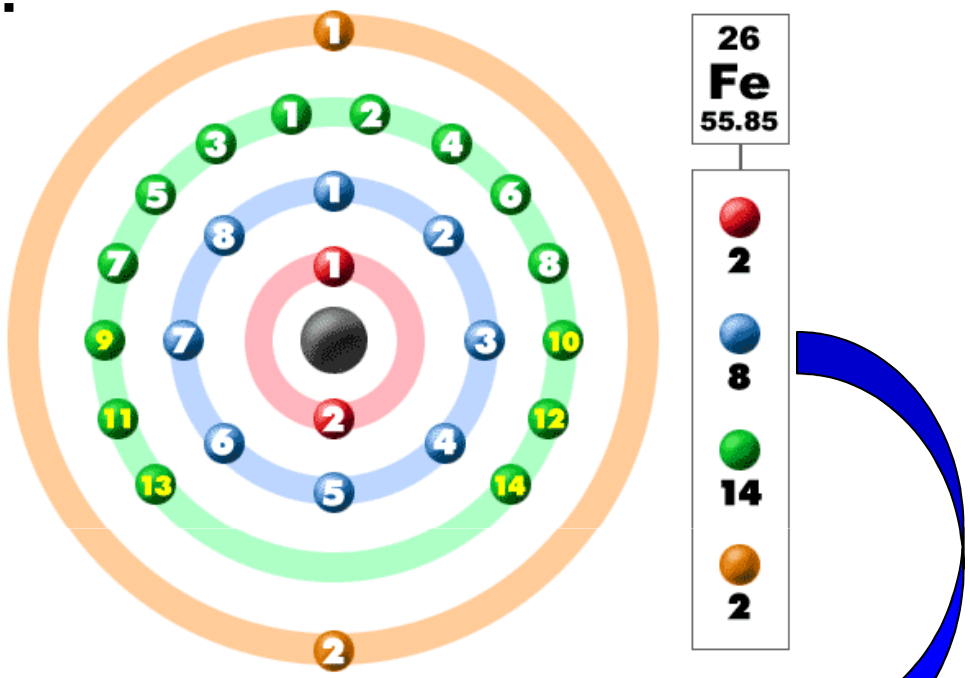
2. Se duas sub-camadas têm o mesmo valor de n+l, a camada com o menor valor de n é preenchida em primeiro lugar.

Utilizando estas duas regras, apresente a ordem na qual as subcamadas são preenchidas desde n+l=1 até n+l=7.

n+l	1	2	3	4	5	6	7
subcamada	1s	2s	2p, 3s	3p, 4s	3d, 4p, 5s	4d, 5p, 6s	4f, 5d, 6p, 7s



Configuração de preenchimento dos orbitais eletrônicos do Ferro (Z=26):



n=2 (8 elétrons)

n=1

$^{56}_{26}Fe$

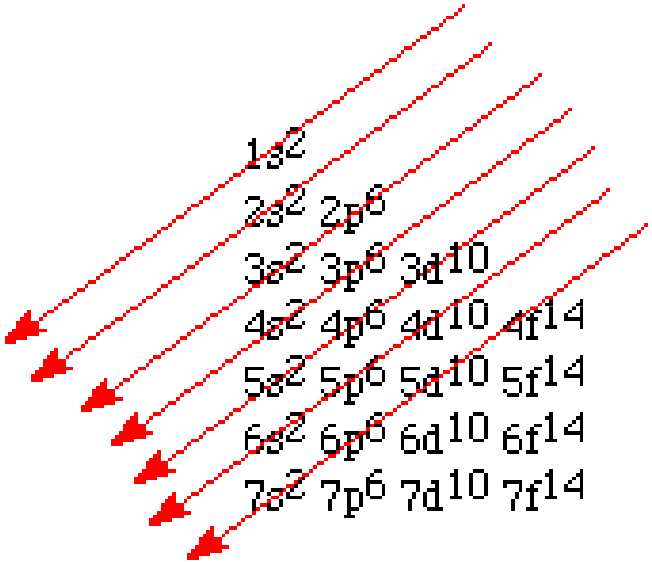
$$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6\,4s^2\,3d^6$$

l=0 (2 estados)

l=1 (6 estados)

Seção 29.6 O Princípio da Exclusão de Pauli e a Tabela Periódica

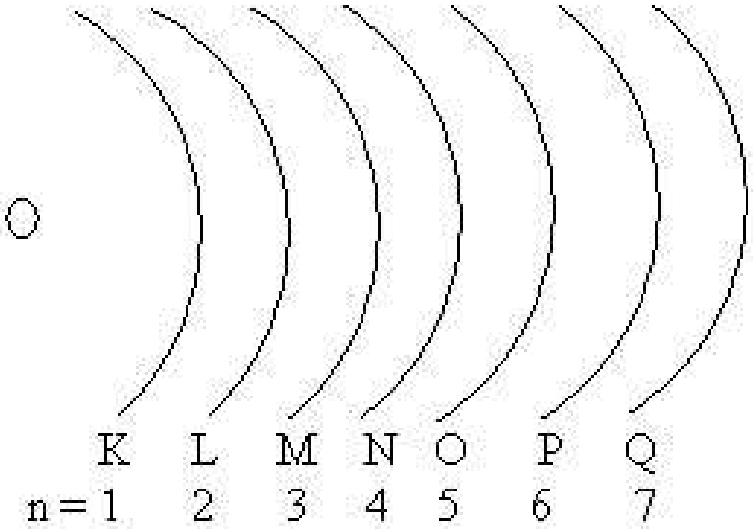
Exercício 28: Para um átomo neutro de um elemento Z=110, qual seria a provável configuração eletrônica do estado fundamental?

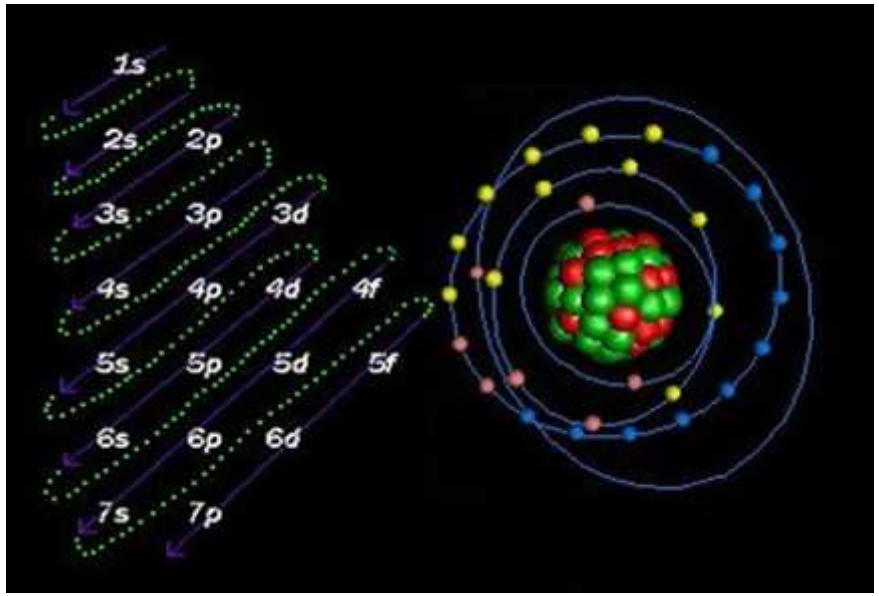


$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^8$$

Nível (n)	Camada	Nº máximo de elétrons
1	K	2
2	L	8
3	M	18
4	N	32
5	O	32
6	P	18
7	Q	8

K =	$1s^2$				n=1
L =	$2s^2$	$2P^6$			n=2
M =	$3s^2$	$3P^6$	$3d^{10}$		n=3
N =	$4s^2$	$4P^6$	$4d^{10}$	$4f^{14}$	n=4
O =	$5s^2$	$5P^6$	$5d^{10}$	$5f^{14}$	n=5
P =	$6s^2$	$6P^6$	$6d^{10}$		n=6
Q =	$7s^2$	$7P^6$			n=7





FIM