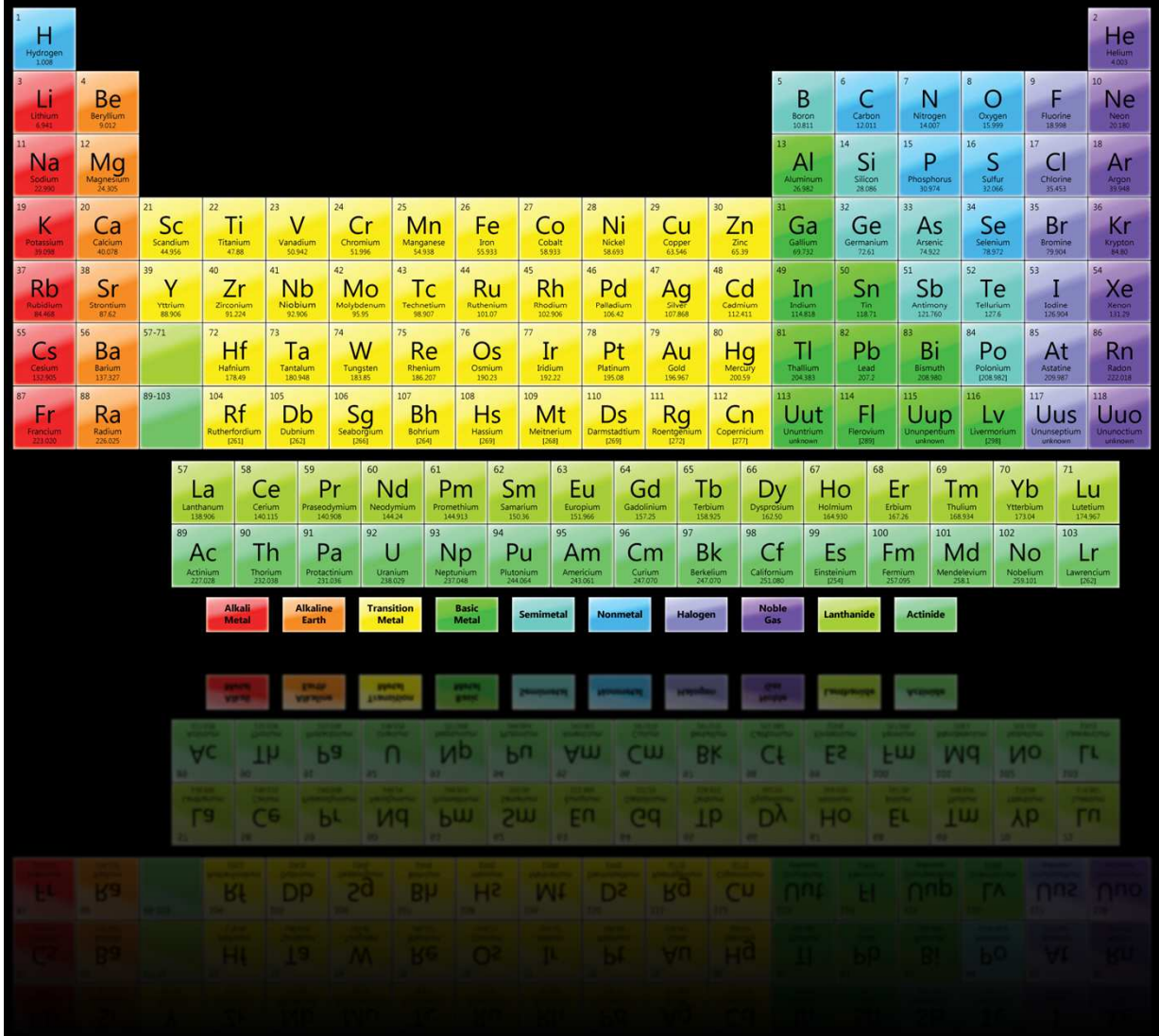
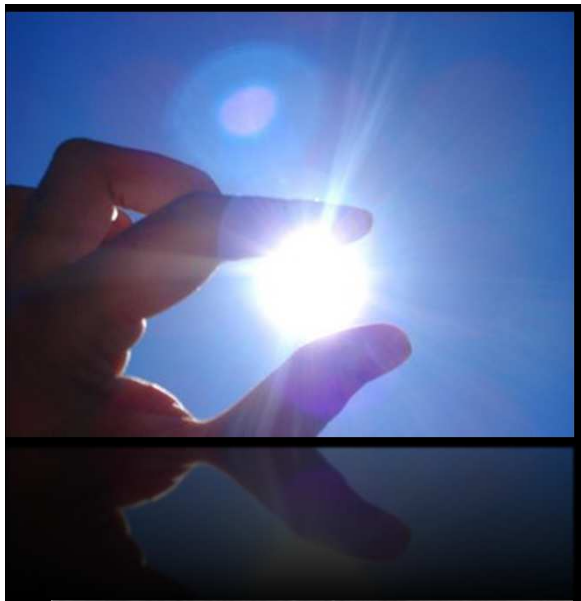


Estrutura dos átomos e tendências periódicas

Aula 3

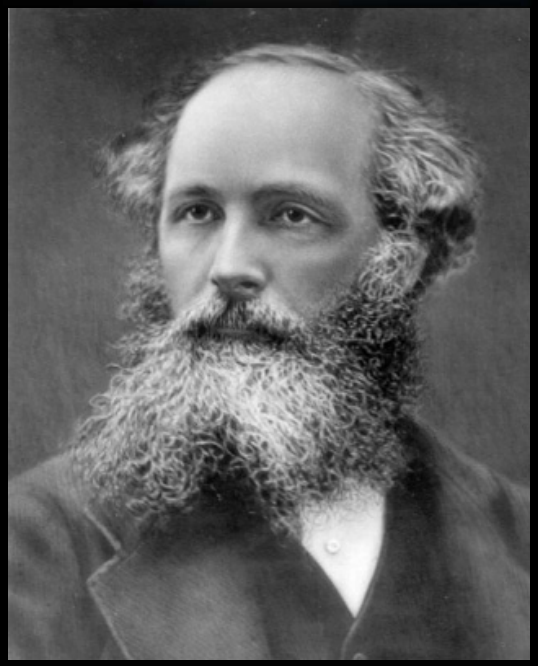


Radiação electromagnética

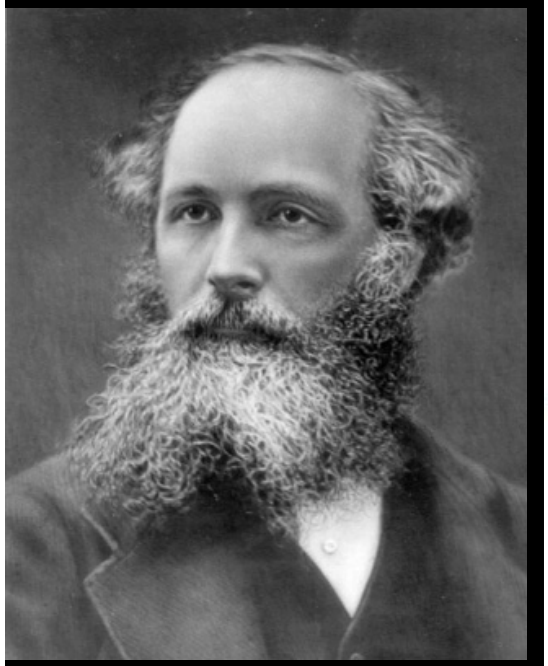
LUZ

Em 1864 **James Clerk Maxwell** desenvolveu uma teoria matemática para descrever a luz e a outras formas de radiação - oscilação ou tipo de onda, campo eléctrico e magnético.

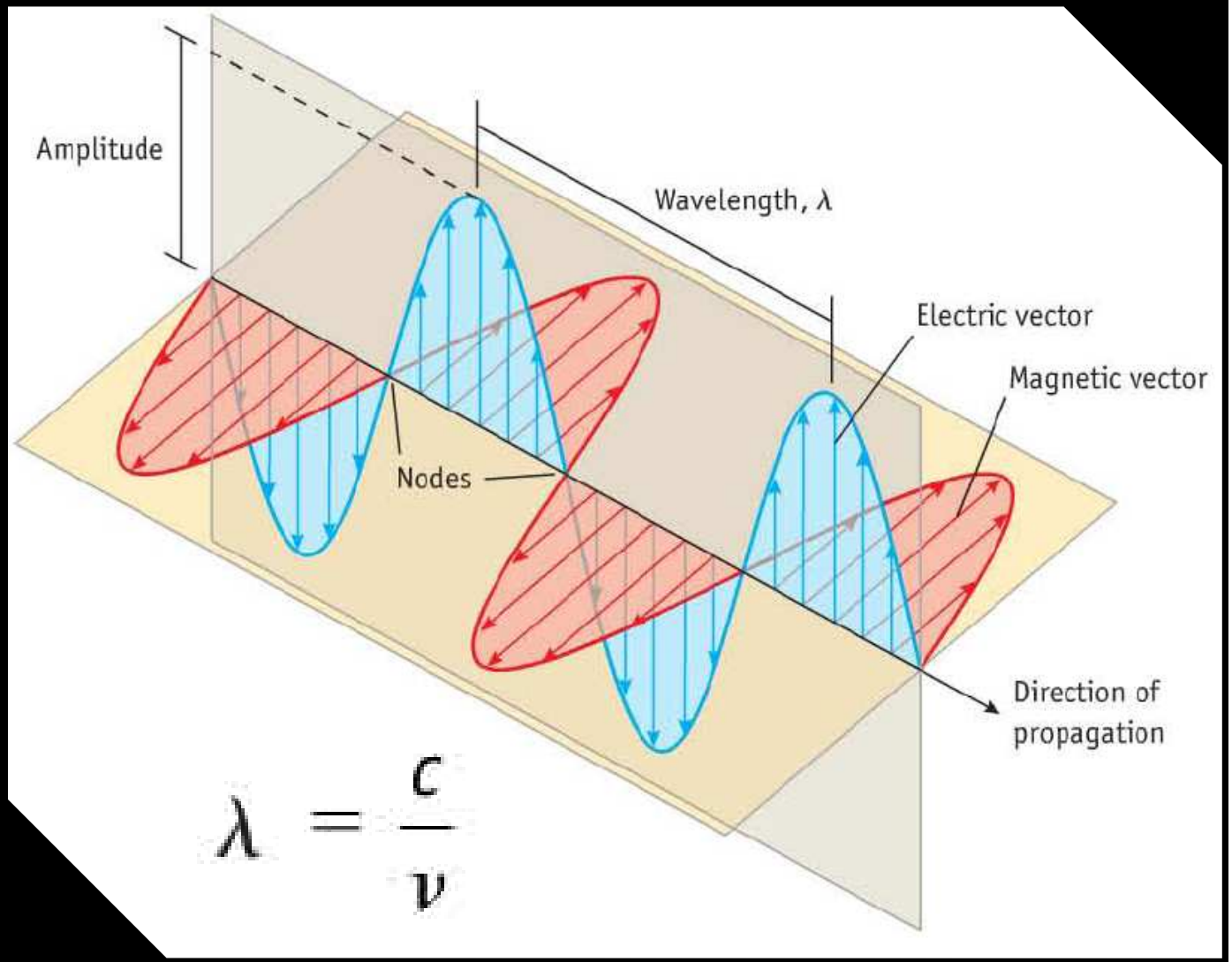
Luz visível, raio x microondas sinais de radio e televisão passaram a denominar-se de Radiação Electromagnética



James Clerk Maxwell
1831-1879



James Clerk Maxwell
1831-1879

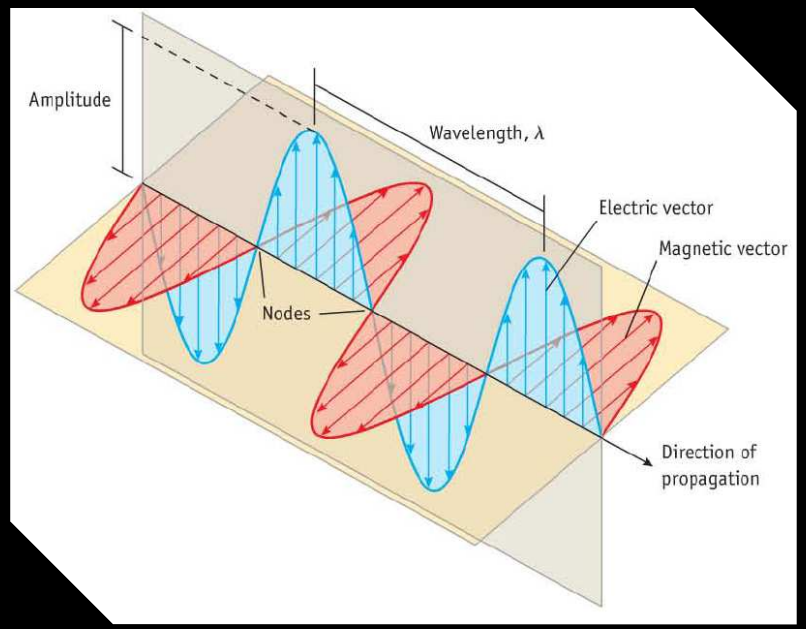


$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

Radiação electromagnética

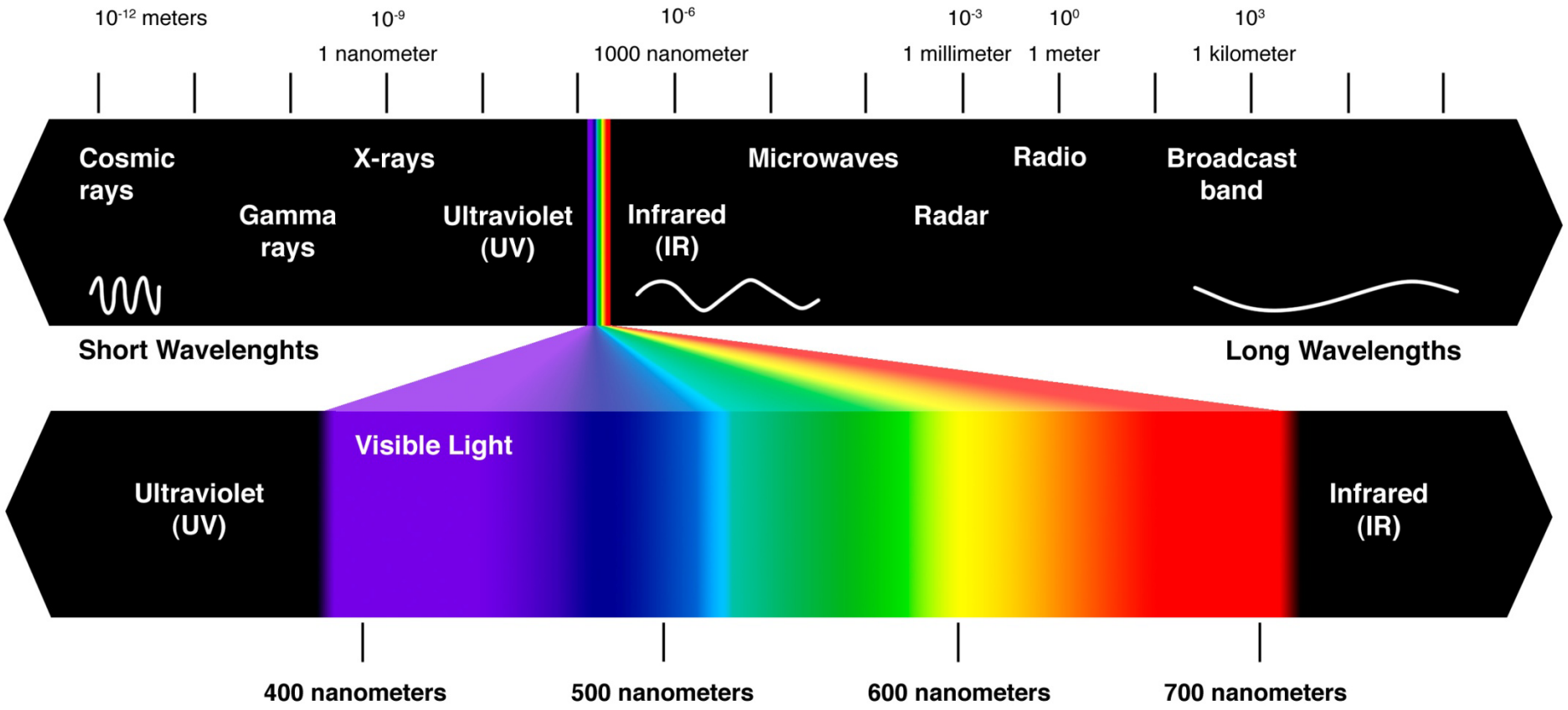
$$c\left(\frac{m}{s}\right) = \lambda(m) \times \nu\left(\frac{1}{s}\right)$$

Comprimento de onda – lambda (λ) é definido com a distancia entre um determinado ponto sobre uma onda e o ponto correspondete no proximo ciclo de onda – distanicas entre cristas



Frequência - niu (ν) - que se refere ao número de ondas que passam por um determinado ponto em alguma unidade de tempo, geralmente por segundo 1/s - Hertz

A velocidade da luz visível e de todas as formas de radiação no vácuo e de $c=1{,}079 \times 10^{8}\ ms^{-1}$



C – C

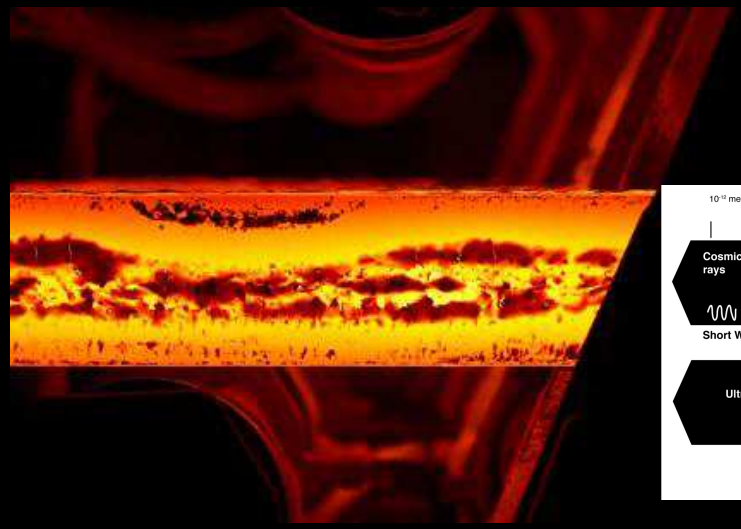
0,15 nm

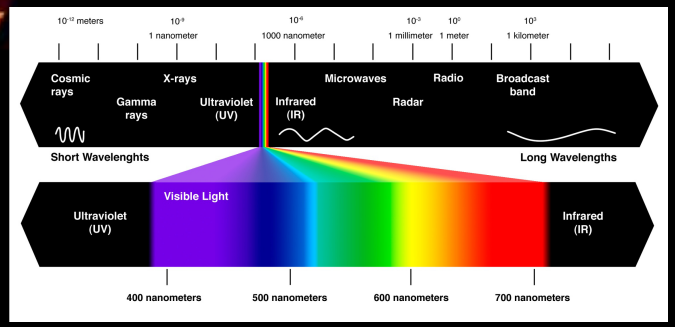
Luz visível não permite ter resolução a este nível

Raio-X tem comprimentos de onda entre 0,01 - 10 nm

Quantização: Planck, Einstein, Energia e fotos

Max Planck
1858-1946





- Corpos quando são aquecidos emitem luz
- Aço quando aquecido tem várias cores de acordo com a temperatura
- Transformação da energia térmica em luz

Qual era o problema?

física clássica -a intensidade da luz deveria aumentar até que o aço passa-se a emitir luz ultravioleta que é invisível para o olho humano. Este facto não sucede - catástrofe ultravioleta.

Equação de planck

Planck veio com a ideia de que a radiação electromagnética produzida por um compor aquecido provinha da vibração dos átomos - ***oscilador***. Nem todos vibrariam com a mesma frequência…

Oscilador - frequência fundamental de oscilação – e só podiam *vibrar nessa frequência* ou em alguma que fosse um múltiplo de um numero inteiro da primeira

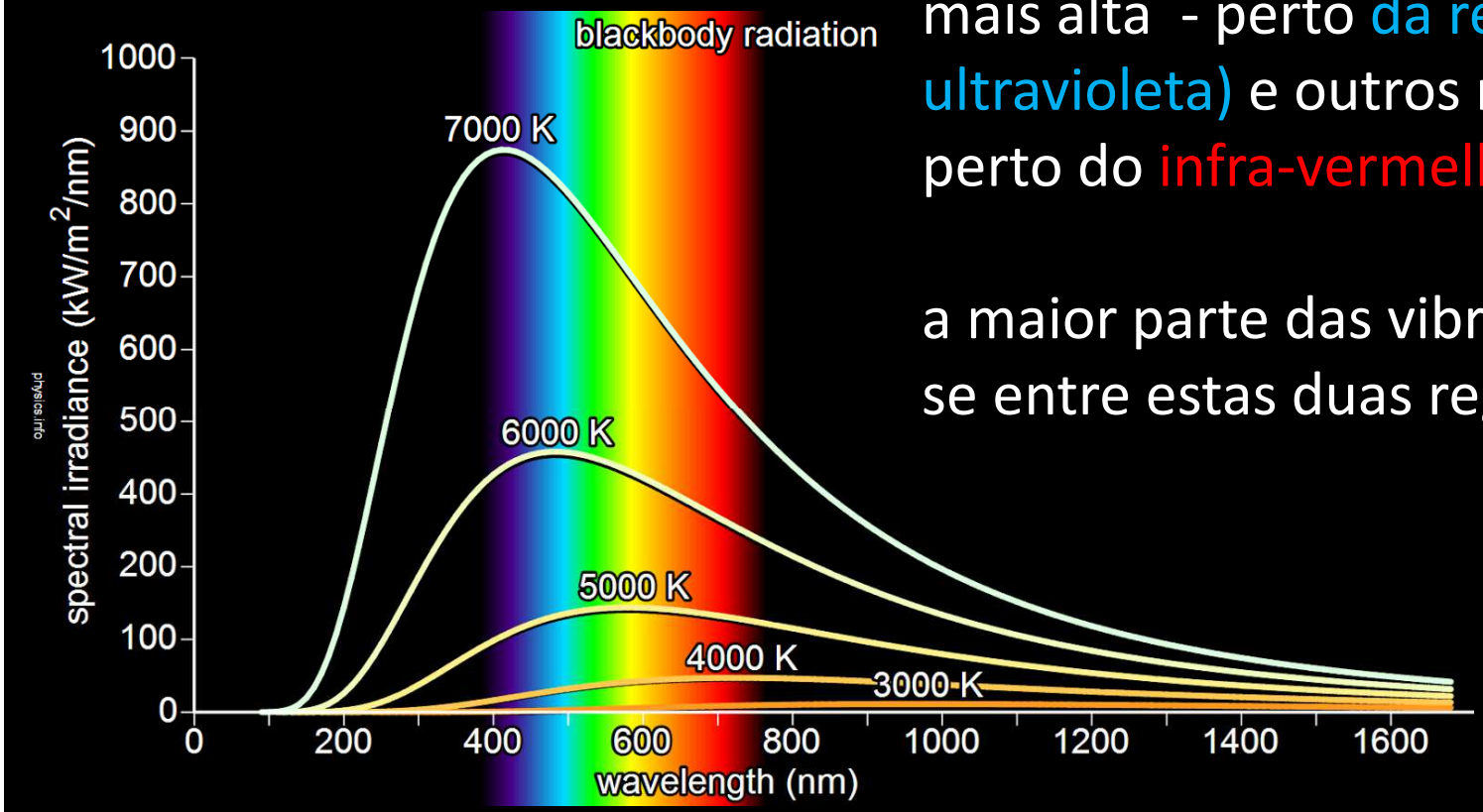
$E = nh\nu$; h=6,6260693x10^{-34} J.s – constante de Planck

Plank quantizou as energias - apenas são determinadas energias são permitidas - Mecânica quantica

Equação de planck

$E = nh\nu$; h=6,6260693x10^{-34} J.s – constante de Planck

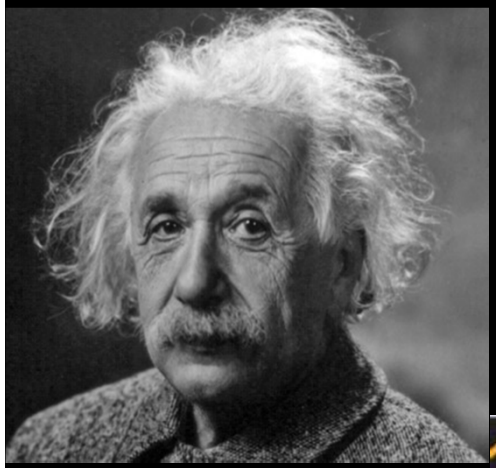
apenas são determinadas energias são permitidas



Uns vibrariam com uma frequência mais alta - perto da região azul (ou ultravioleta) e outros mais baixo perto do infra-vermelho.

a maior parte das vibrações situava-se entre estas duas regiões

Einstein e o efeito fotoeléctrico

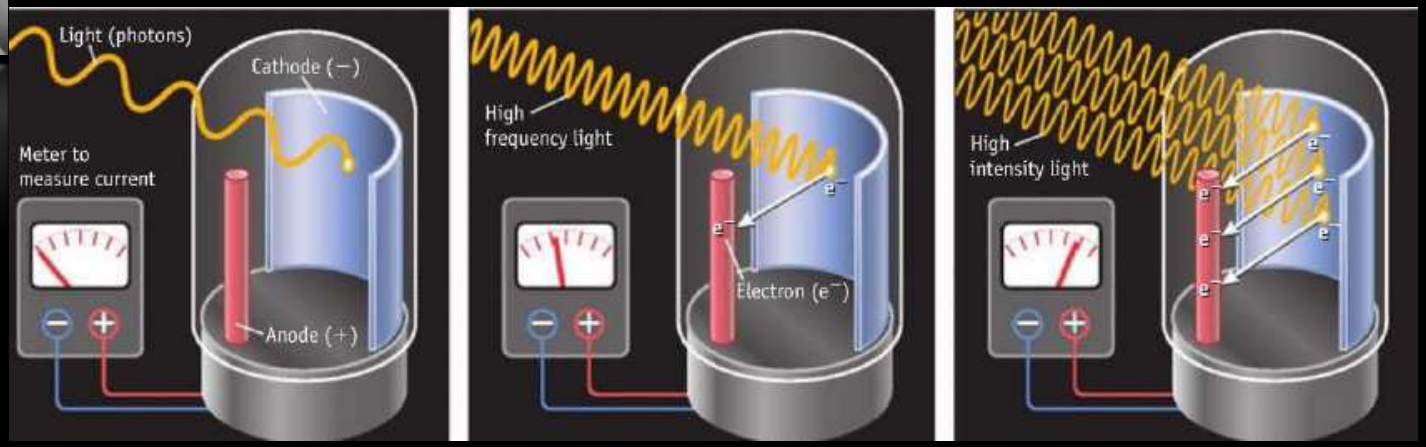


Albert Einstein
1879-1955

*"Duas coisas **não têm limites**: o universo e a **estupidez** humana. ... Mas, no que respeita ao universo, ainda não adquiri a certeza absoluta."*

Einstein incorporou as ideias de Plank para o a explicação do efeito fotoeléctrico

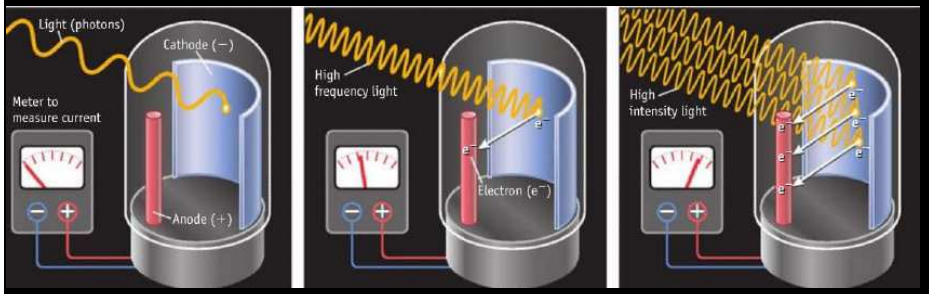
Efeito é uma observação de que muitos metais emitem electrons quando a luz incide sobre eles



frequência baixa nenhum electron é emitido

frequência está acima de um mínimo - frequência critica,

aumentando a intensidade da



Einstein conclui que as observações experimentais poderiam ser explicadas pela combinação da equação de Planck

Que luz apresenta propriedades semelhantes ás partículas.

Einstein chamou a estas *partículas sem massa* - **FOTONS**

Radiação electromagnética tem propriedades de **onda** mas pelo efeito fotoeléctrico a luz comporta-se como uma **partícula**

<u>Como é possível a radiação electromagnética ser ambas?</u>

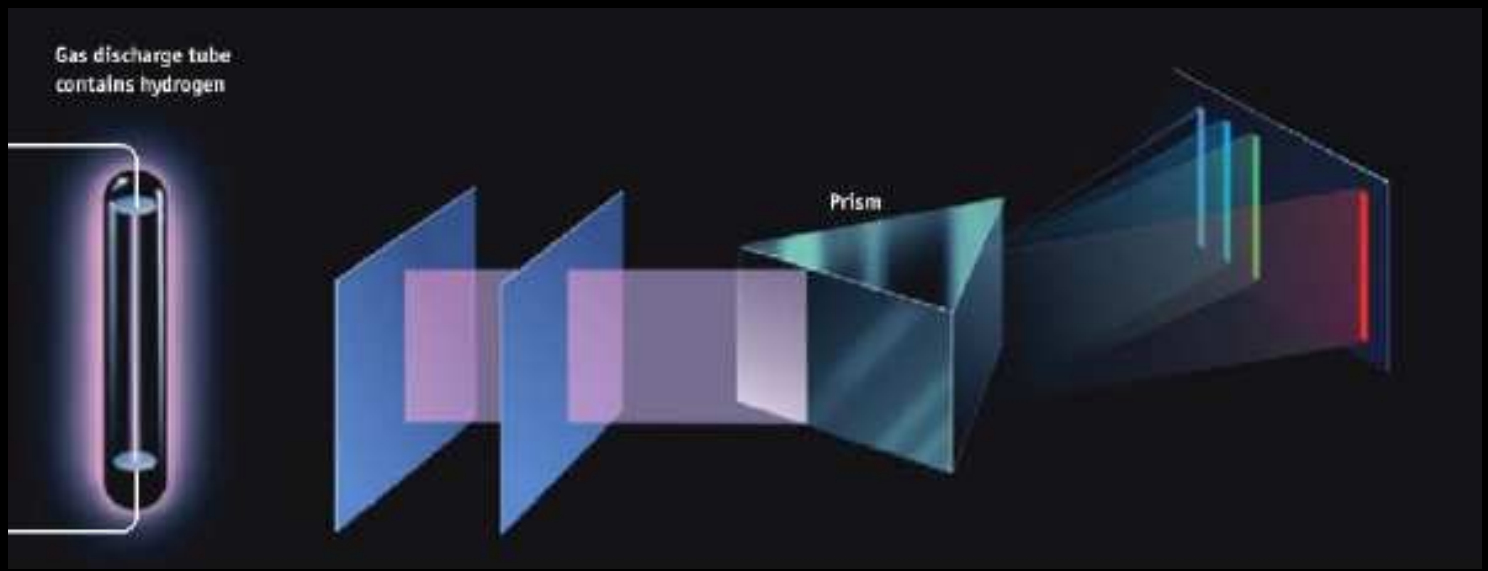
Dualidade onda-partícula

Espectros de linhas atômicas e Niels Bohr

Niels Bohr
1885-1962

Se uma alta voltagem é aplicada aos átomos de um elemento em fase gasosa a baixa pressão, os átomos observem energia e são ditos excitados . Luz dos “neons”

A luz emitida pelos átomos excitados era composta por apenas alguns valores discretos de comprimento de onda.



Espectro de emissão de linhas
Contrario a emissão da luz do sol
E da luz que emite por um corpo quente.

Cada elemento apresenta um espectro de emissão único.
Este facto permite inclusive a análise química de um determinado composto

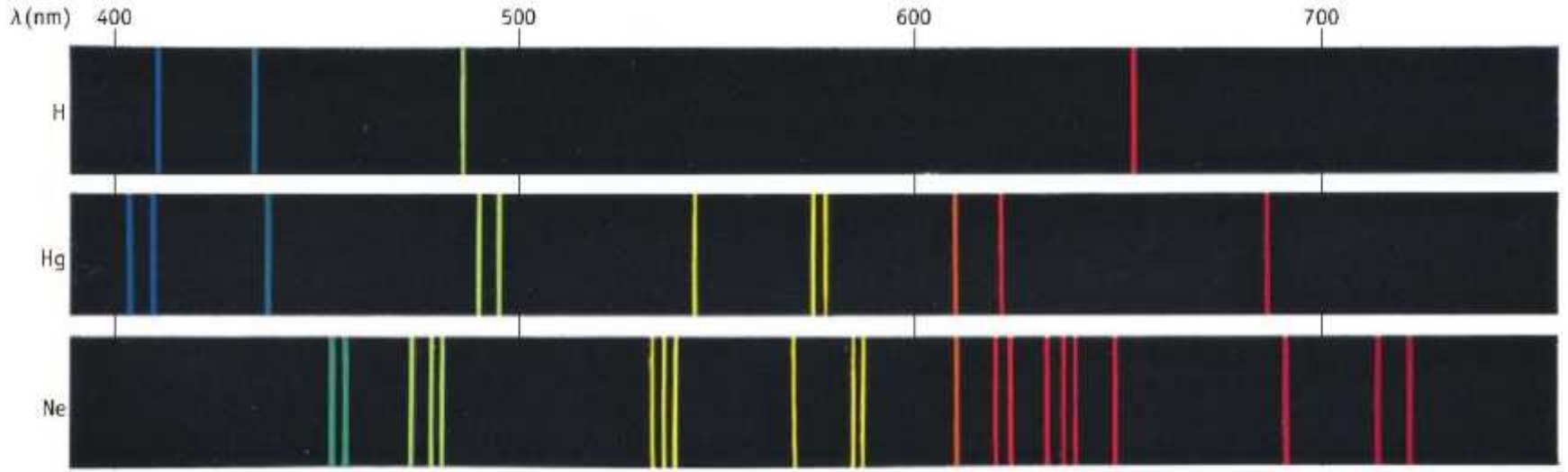


FIGURE 6.7 Line emission spectra of hydrogen, mercury, and neon. Excited gaseous elements produce characteristic spectra that can be used to identify the elements as well as to determine how much of each element is present in a sample.

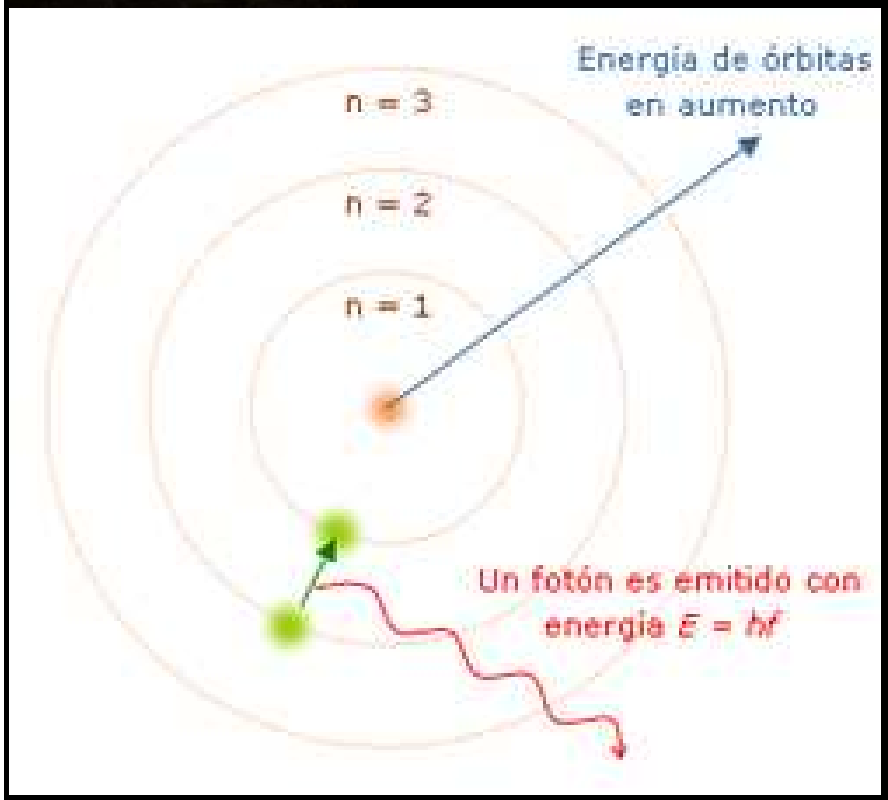
Um dos objectivos do seculo XIX - explicar o porque de os átomos gasosos emitirem luz apenas em determinadas frequências

Relação matemática entre os comprimentos de onda observados. Padrão regular implica uma explicação logica.

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) em\ que\ n > 2$$

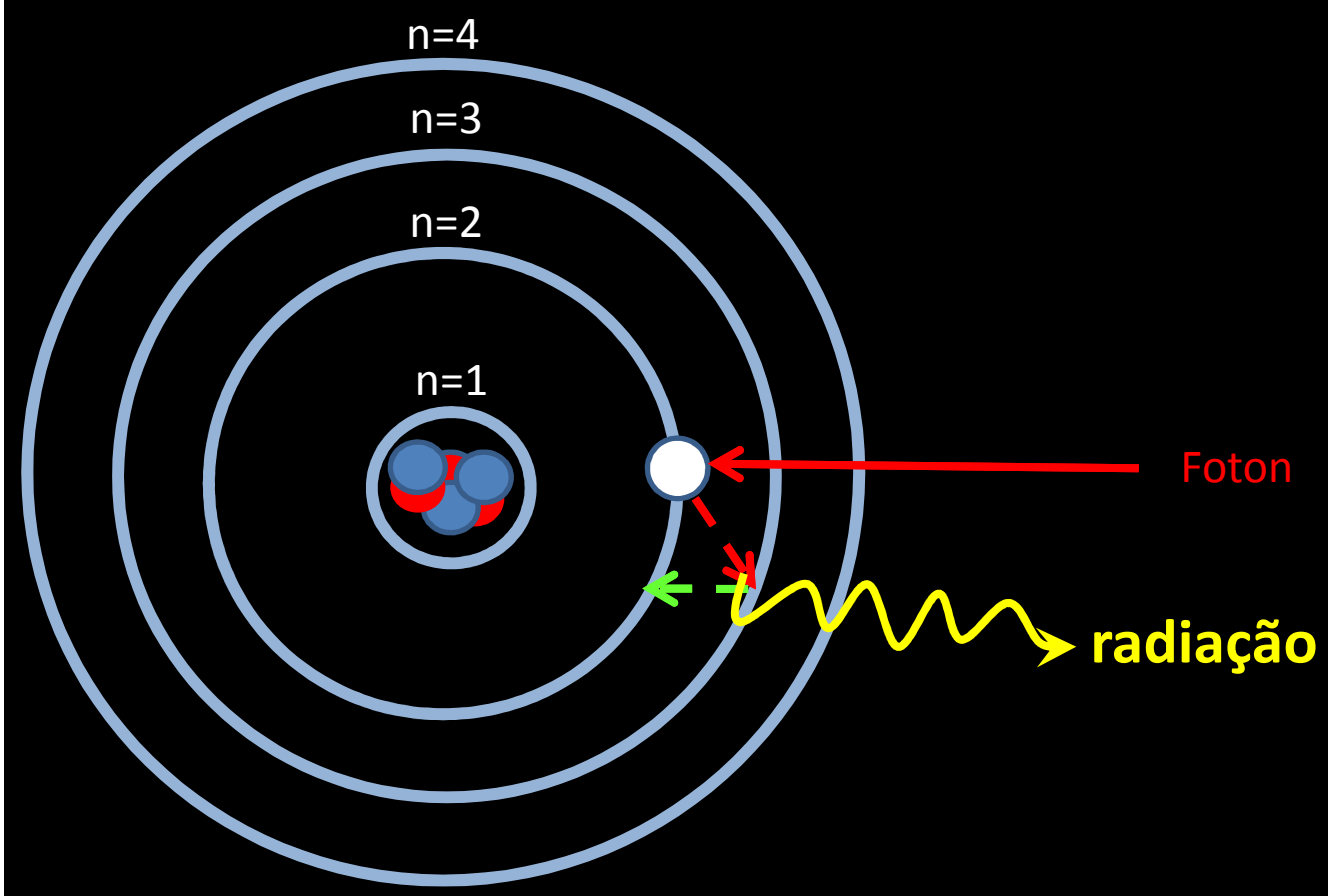
e R é a constante de Rydberg = $1{,}0974 * 10^7\ m^{-1}$.

O comprimento de onda da radiação emitida quando um dado electron é excitado esta relacionada com o **nível energético** para onde esse electrão foi enviado.

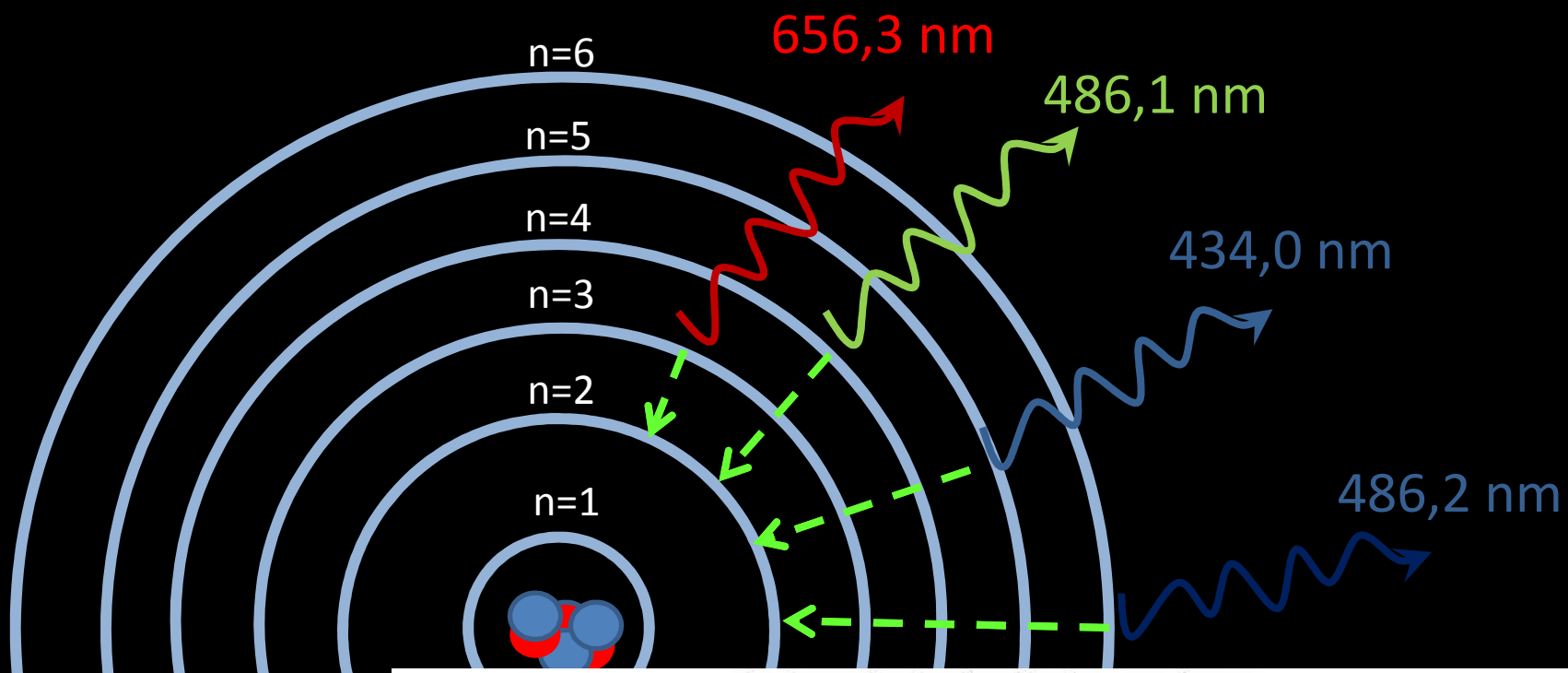


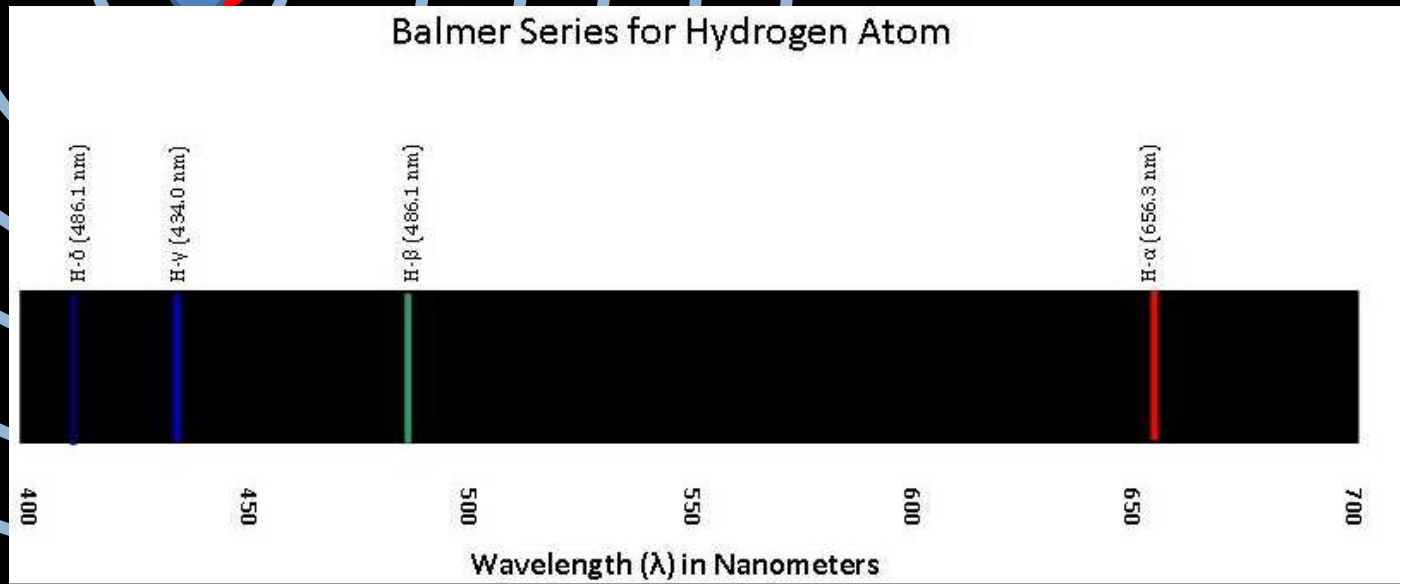
Niel Bohr que idealizou um modelo para estrutura electrónica dos átomos - explicar o porquê de os átomos apresentarem espectros de emissão característicos

Espectros de linhas atômicas e Niels Bohr

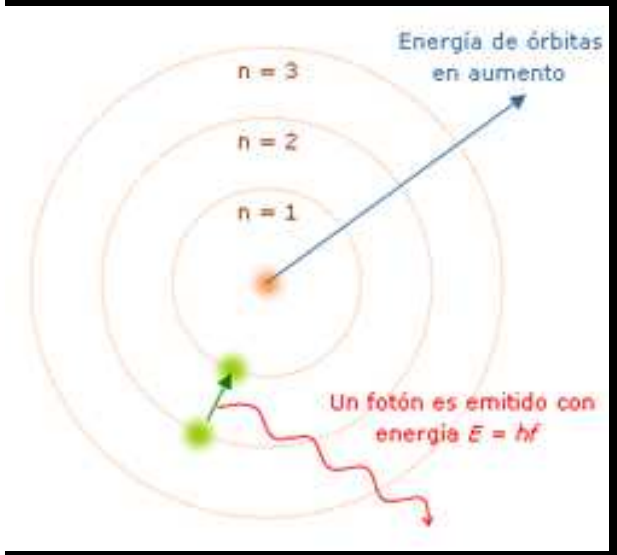


Espectros de linhas atômicas e niels bohr





Modelo de borh do átomo de hidrogénio



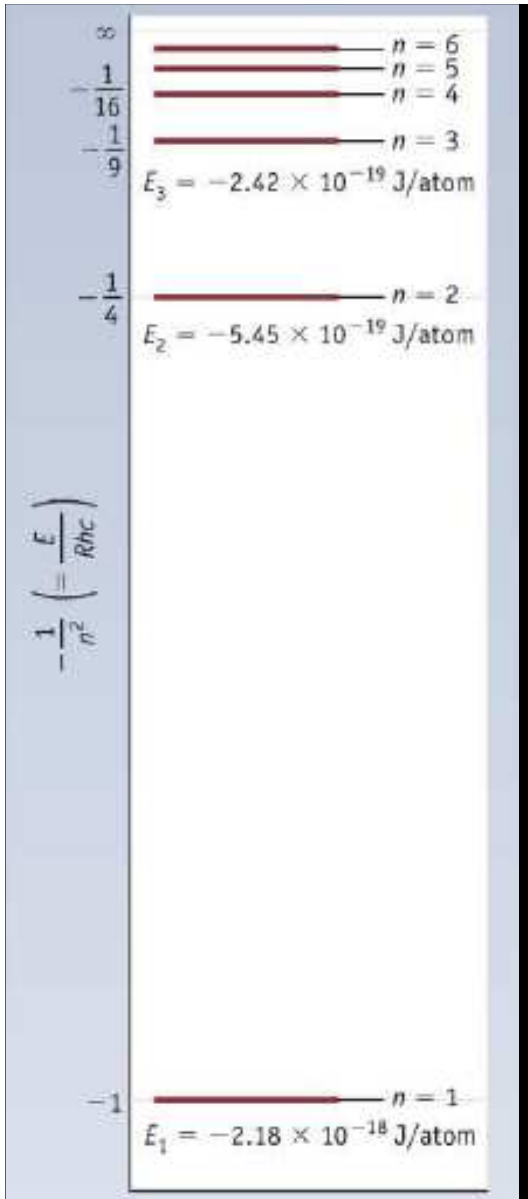
Bohr introduziu a ***quantização*** na descrição da ***estrutura electrónica***

Existência de orbitas correspondentes a níveis de energia específicos - quando o electron está em um deste níveis o sistema está estável.

Combinação da quantização da energia com as leis da física clássica

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$$

Onde En é a energia total do electron no enésimo nível
R é a constante de Ryberg
h é a constante de Planck
c é a velocidade da Luz
n é o número quântico principal



- Estado Fundamental

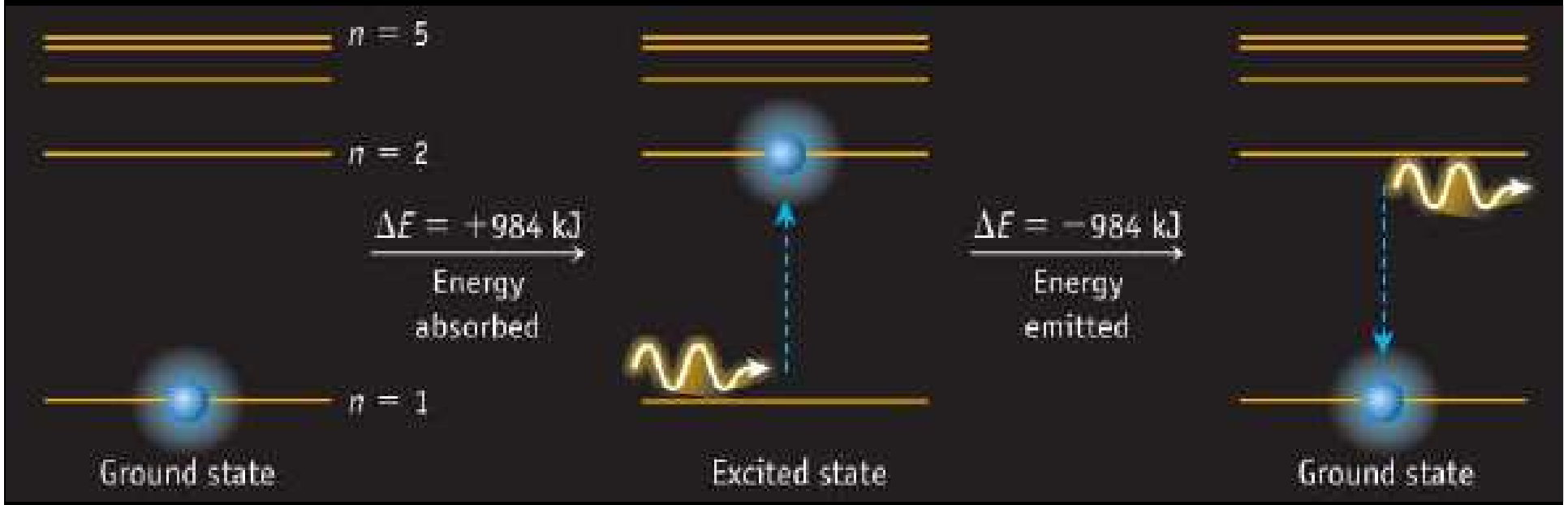
- n é o *número quântico principal* define as energias das orbitas que são permitidas no átomo de H

- A energia de um electron em uma orbita tem valor negativo porque o electron em uma orbita tem uma energia menor quando está livre.

- O *zero da energia* ocorre quando este está completamente livre do núcleo

- o átomo com os electrons no seu *nível mais baixo* diz-se no seu estado fundamental

- Uma vez que a energia depende **1/n2** os níveis de energia são progressivamente mais próximos entre si com o aumento do n



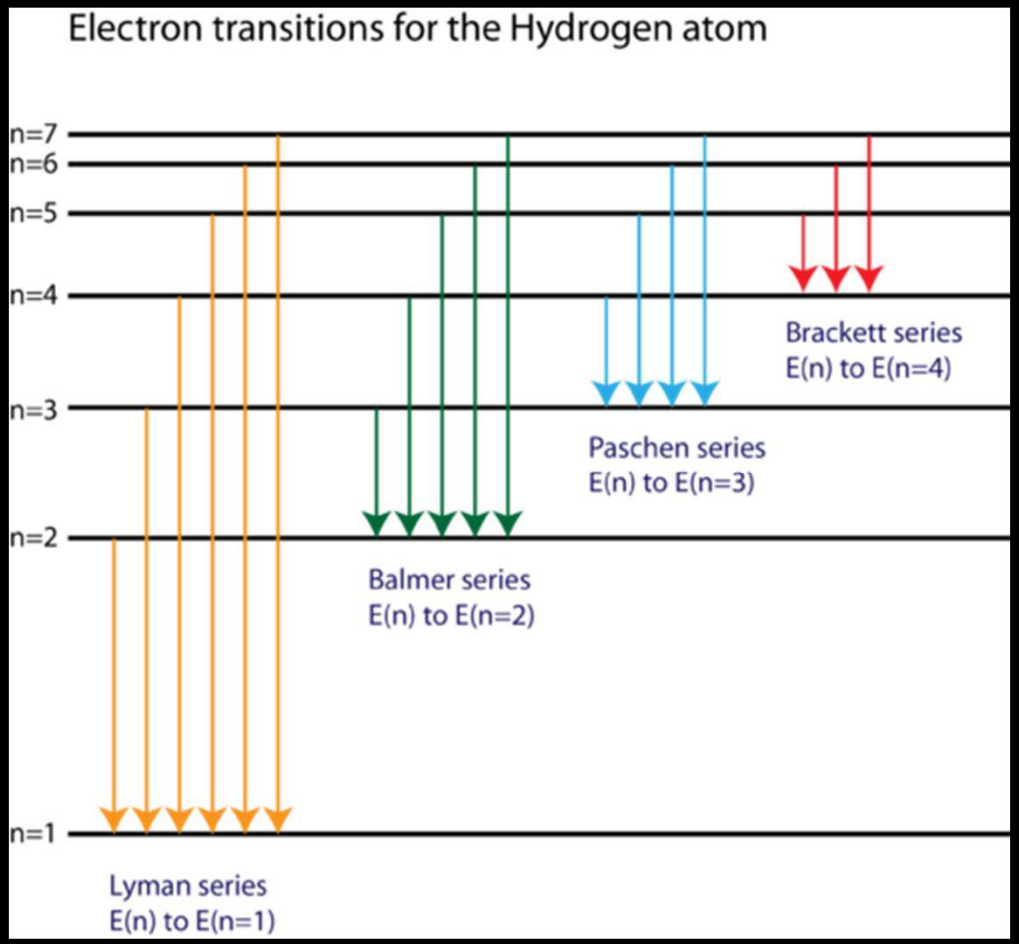
RESUMO

A teoria de Bohr descreve os electrons com tendo somente orbitas e enérgicas especificas.

Um electron move-se de um nível para o para o outro se a energia for absorvida ou libertada

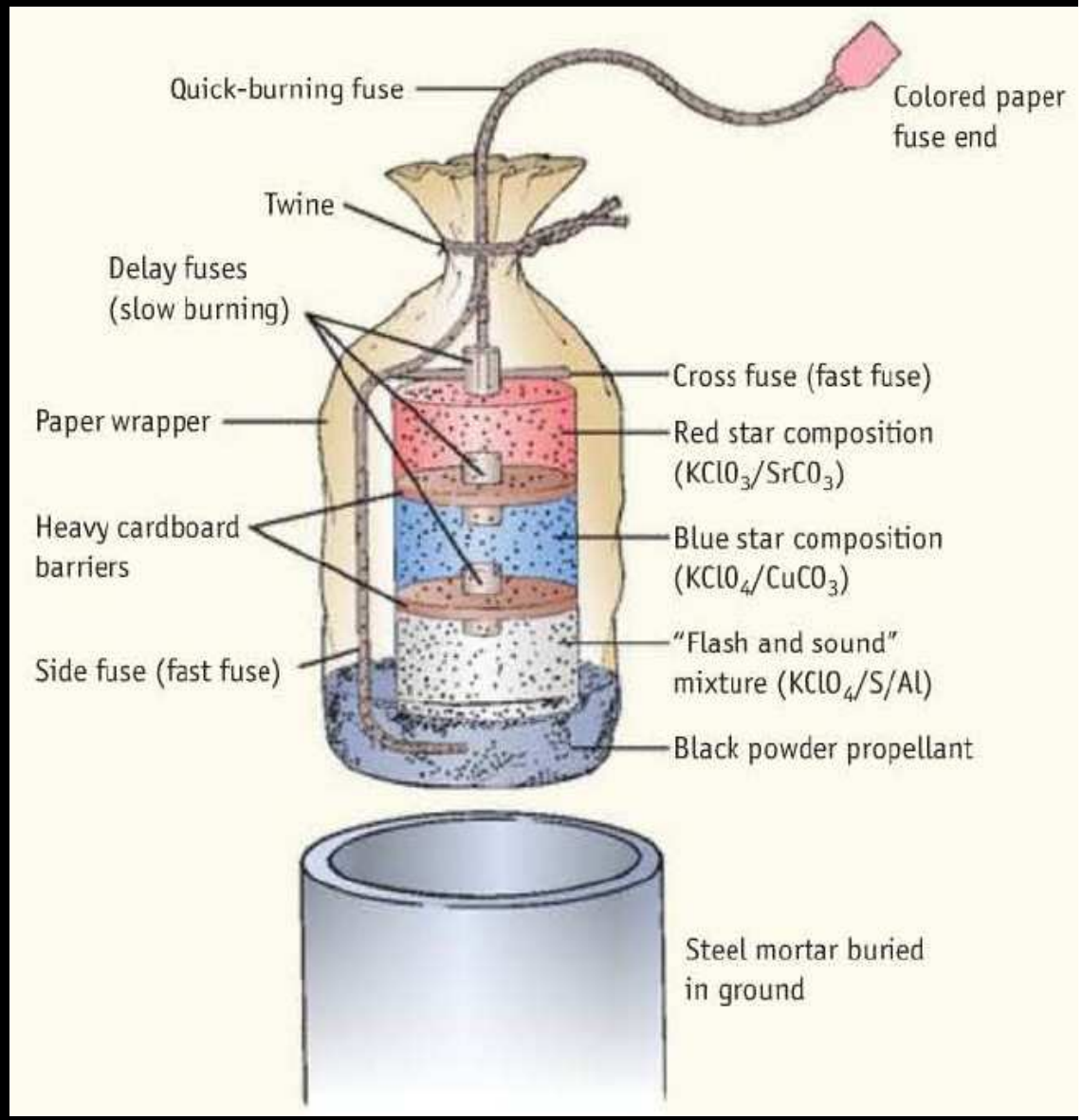
Teoria de Bohr e os espectros dos átomos excitados

$$\Delta E = E_{final} - E_{inicial} = -Rhc\left(\frac{1}{n^2 final} - \frac{1}{n^2 inicial}\right)$$



Emissão Atômica

NaCl $SrCl_2$ H_3BO_3



Dualidade partícula-onda

O Einstein através do efeito fotoeléctrico demonstrou que a *luz que geralmente era considerada uma onda também podia exibir propriedades de uma partícula*.

Louis Victor de Broglie questionou se a **matéria** também poderia **exibir propriedades de onda**?

E em 1925 propôs que um elemento livre de massa m movendo-se a uma veloicdade v dever ter um comprimento de onda λ

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

"onda de matéria"

Louis Victor de Broglie
1892-1987

Revolucão – ligou as propriedade do electron com **partícula** (massa e velocidade) **às propriedades de onda** (comprimentode onda)

Clinton Joseph Davisson
1881 -1958
Lester Germer
1896 -1971

Massa de um electron
$9{,}1093897 \times 10^{-31}$ Kg

As comprovações experimentais de Broglie foram obtidas em 1927 por C.J Davidson e L.H Germer

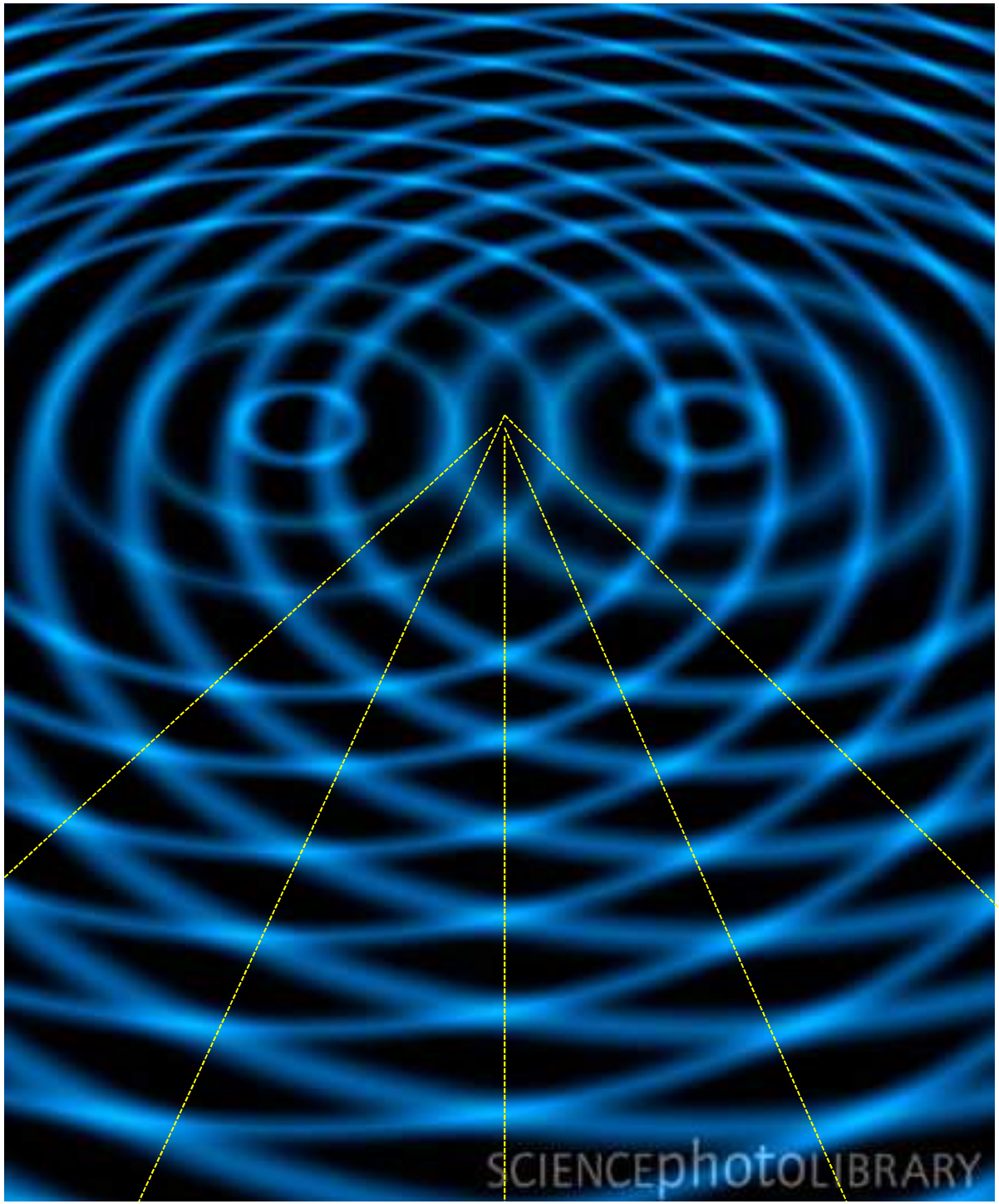
Descobriram qua a **difração**, uma propriedade de ondas era igualmente possível em um **feixe de electrons**

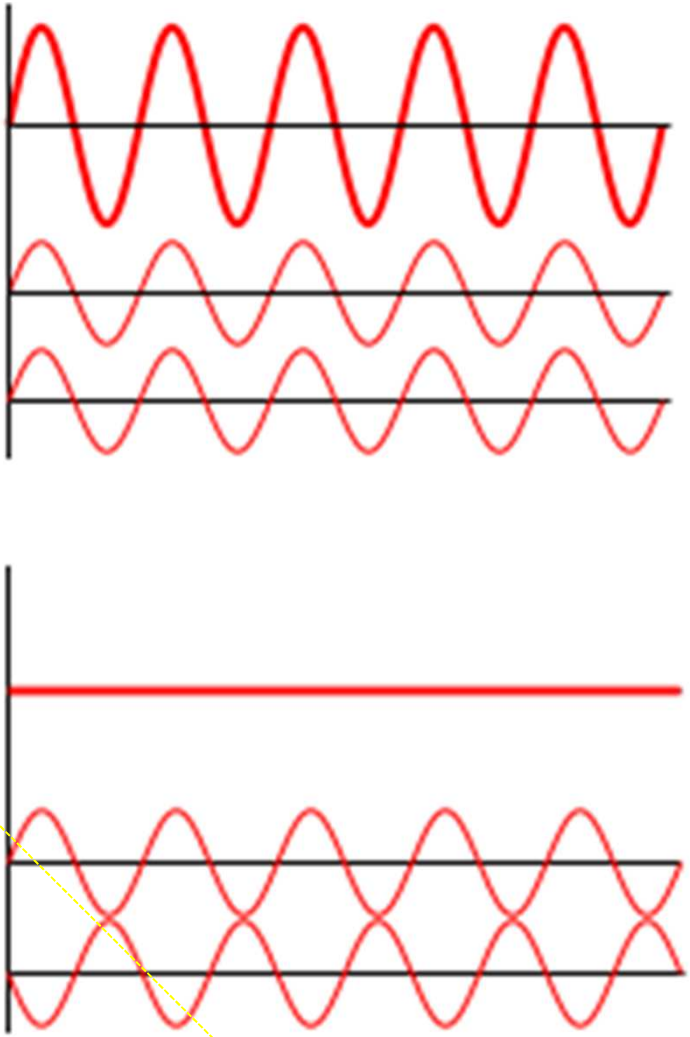
Como a radiação electromagnética a matéria apresenta igualmente uma dualidade onda-partícula.

Em um caso a *matéria comporta-se com partículas em outros comportam-se como ondas*

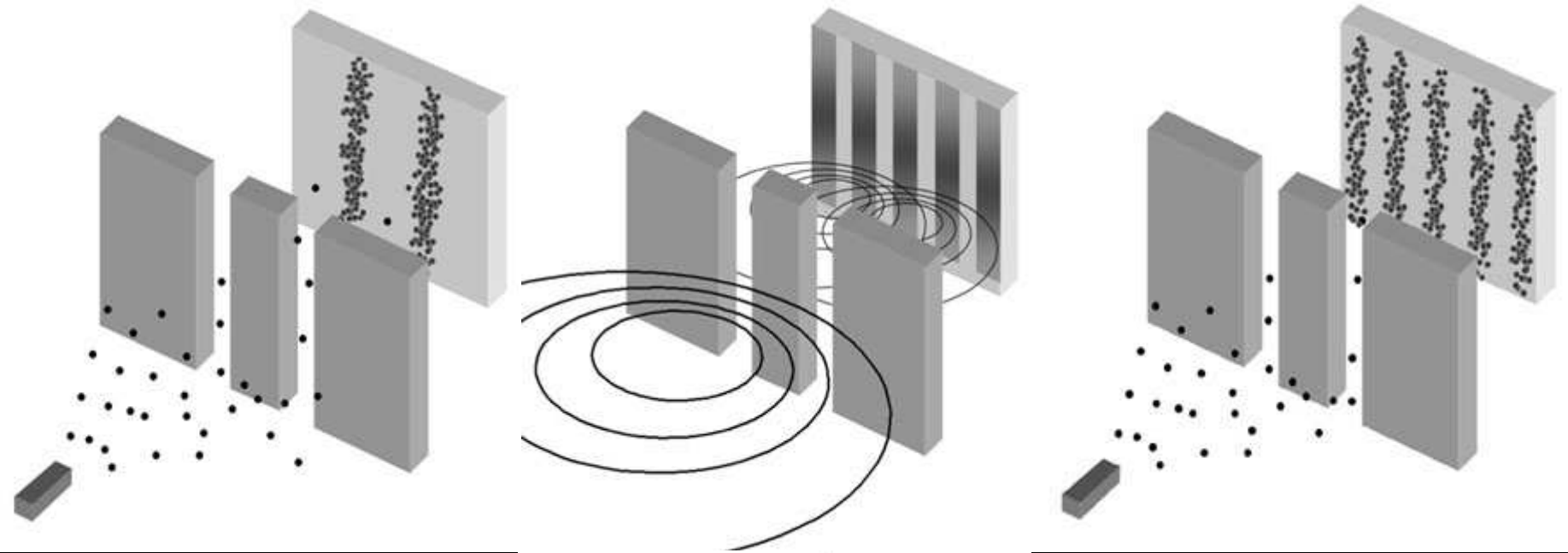
Difração
as ondas cooperar entre si.

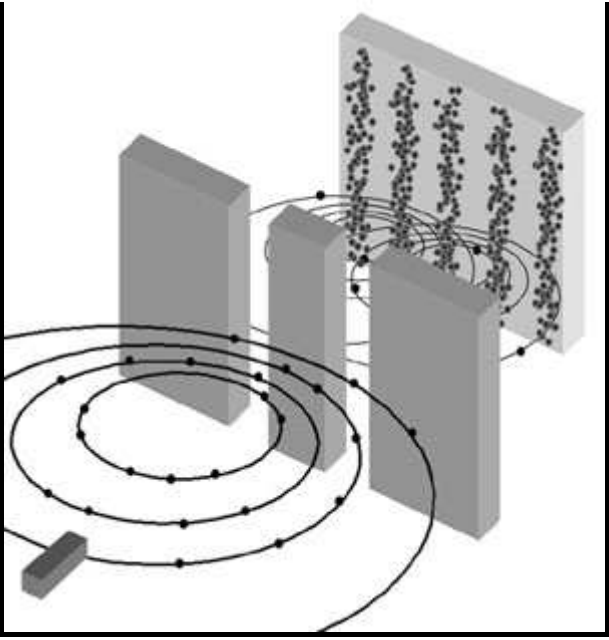
Interferência



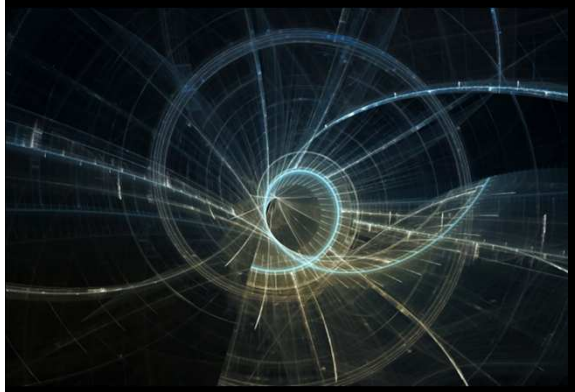


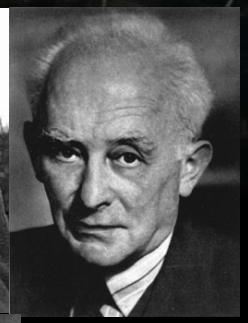
As comprovações experimentais de Broglie





Mecânica quântica



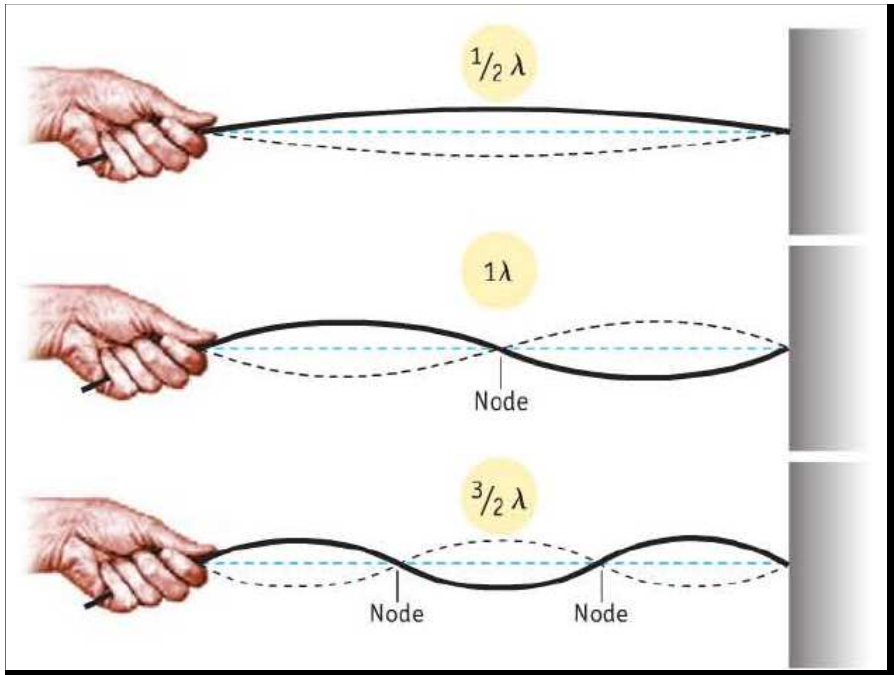


Como a dualidade partícula onda afecta o nosso modelo de arranjo dos electrons nos átomos ?

Erwin Schrodinger (1887-1961)
Max Born (1882-1970)
Werner Heisernberg (1901-1976)

Schrondiger - um electron pode ser descrito com um onda de matéria e de desenvolveu um modelo para os electrons nos átomos que veio a ser denominado de **mecânica quântica** ou **ondulatória**

O ideal para entender o comportamento ondulatório é pensar num sistema de cordas fixas e.g. como uma guitarra

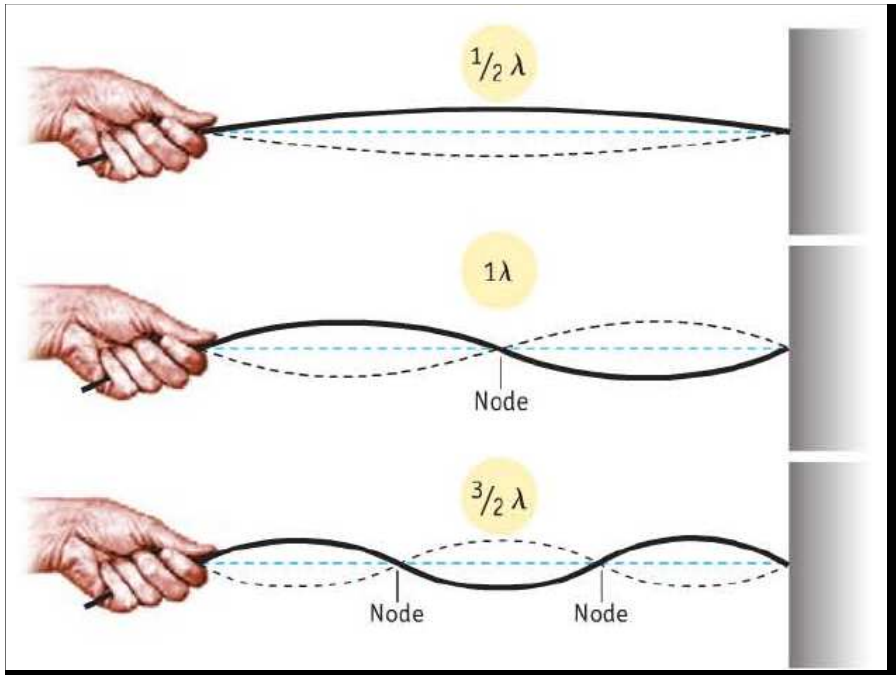


Corda estacionaria – onde apenas algumas vibrações são permitidas para essas ondas estacionarias. **- vibrações são quantizadas**

Schrodinger mostrou apenas certas ondas de matéria são possível para um electron no atomo.

Para descrever essas ondas de matéria foram desenvolvidas **funções de onda** designada pela letra grega Psi (ψ) .

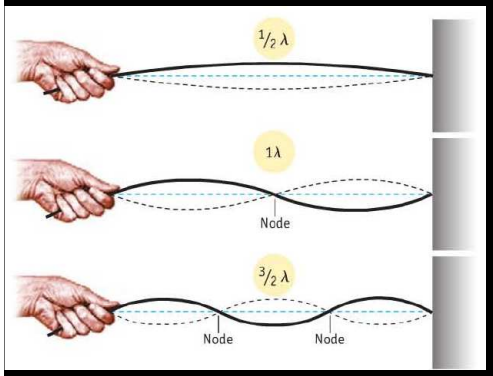
Somente **certas funções são consideráveis aceitáveis** e cada uma esta associada a um valor de energia - energia de um electron no átomo é quantizada



As soluções para equação de Schordinger num espaço tridimensional dependem de:

3 números inteiros

n, l, m_l – números quânticos.



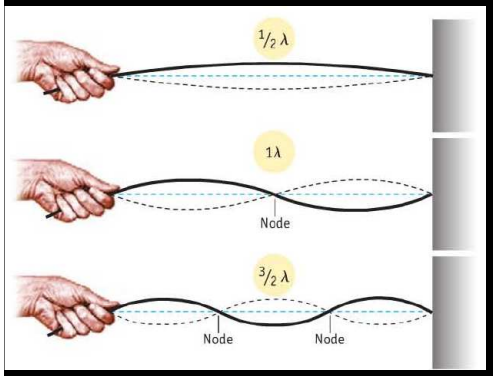
O próximo passo para entender o ponto de vista da mecânica quântica é explorar o **significado fisico da onda psi(Ψ)**

Max Born

O valor da *função de onda e um dado ponto do espaço (x,y,z)* é a *amplitude* (altura) de onde de matéria do electron . E esse valor tem uma magnitude e pode ter sinal positivo ou negativo

psi(Ψ) descreve todas as propriedade espaciais de uma partícula (frequência , comprimento de onda, amplitude)

A função de onde diz nos que a partícula comporta-se como tivesse distribuída no espaço.



O *quadrado do valor da função de onda* Ψ^2 está relacionado com a probabilidade de encontrar um electron em uma pequena região do espaço – $\boldsymbol{\Psi^2}$ – **densidade de probabilidade**

Pode-se calcular a massa de um objecto a partir da *densidade* e do *volume* e podemos calcular a probabilidade de encontrar o electrão a partir de um pequeno volume e $\boldsymbol{\Psi^2}$.

A probabilidade de encontrar um electron em um determinado volume é proporcional a $\boldsymbol{\Psi^2}$

Quanto maior for $\boldsymbol{\Psi^2}$ maior será a probabilidade de encontrar o electron

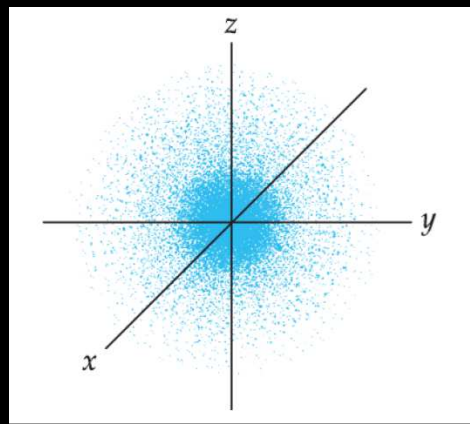
A probabilidade de encontrar um electron em um determinado volume é proporcional a Ψ^2

Quanto maior for Ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron.

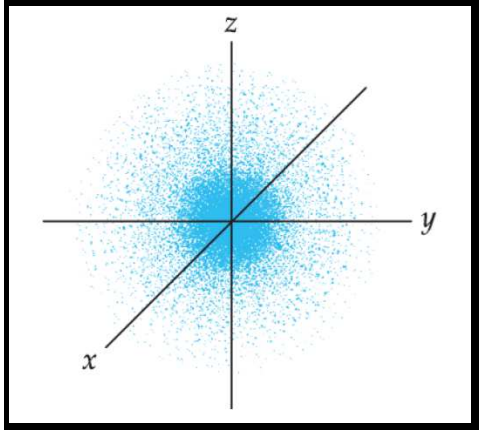
Heisenberg - que para um pequeno objecto como um átomo é impossível determinar com precisão a sua posição e a a sua energia

.

Princípio da incerteza de Heisenberg



Números quânticos e orbitais



A **função de onda** para um electron em um átomo descreve um **orbital atómico**.

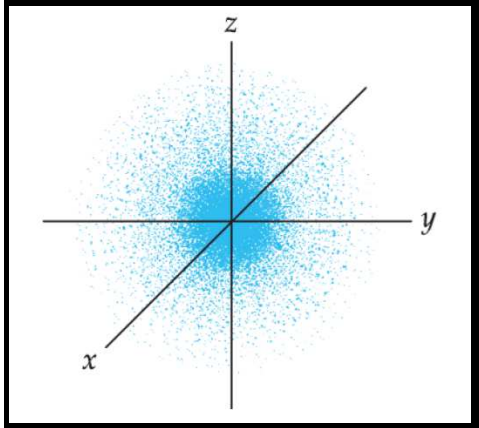
Conhecemos a energia desse electron mas apenas a região do espaço em que provavelmente esteja localizado.

Quando um electron tem uma *função de onda particular* diz-se que "ocupa " um determinado orbital.

Cada orbital é descrito por 3 números quânticos N, l m_l

Numero quântico principal n – pode ter qq numero inteiro de 1 ate infinito ele tb define o tamanho do orbital. Quanto maior for n maior será o tamanho do

Números quânticos e orbitais

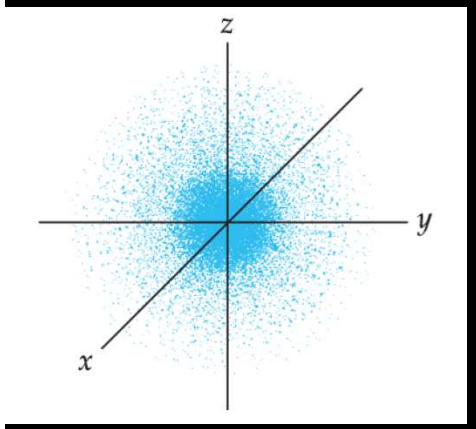


Numero quântico principal n – pode ter qualquer numero inteiro de 1 até infinito - define o tamanho do orbital.

Quanto **maior for n maior** será o **tamanho do orbital**

Átomo que tem mais que um electron dois ou mais electrons pode ter o mesmo valor de n -

Esses electrons estão na **mesma camada electrónica.**



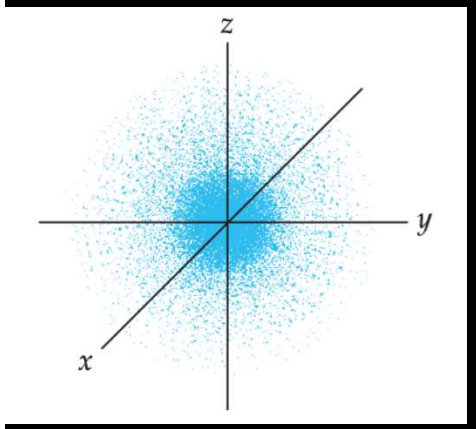
l é o número quantico de **momento angular** da orbital

Os orbitais de uma camada electrónica podem estar agrupados em subcamdas cada um das quais caracterizadas por um valor de l diferente -

Valor de l	Classificação subcamada
0	s
1	p
2	d
3	f

Momento angular orbital que define a forma característica de um orbital – diferentes valores de l correspondem a diferentes formas de orbitais

O valor n limita o numero de subcamdas possiveis para cada camada. l= n-1



m_l - é o *número quântico magnético* e

E está relacionado com a orientação no espaço dos orbitais dentro de uma subcamda.

Orbitais em uma determinadas subcamada diferem na sua orientação.

O valor de m_l l pode variar entre **+ l** e **- l** com 0 incluído

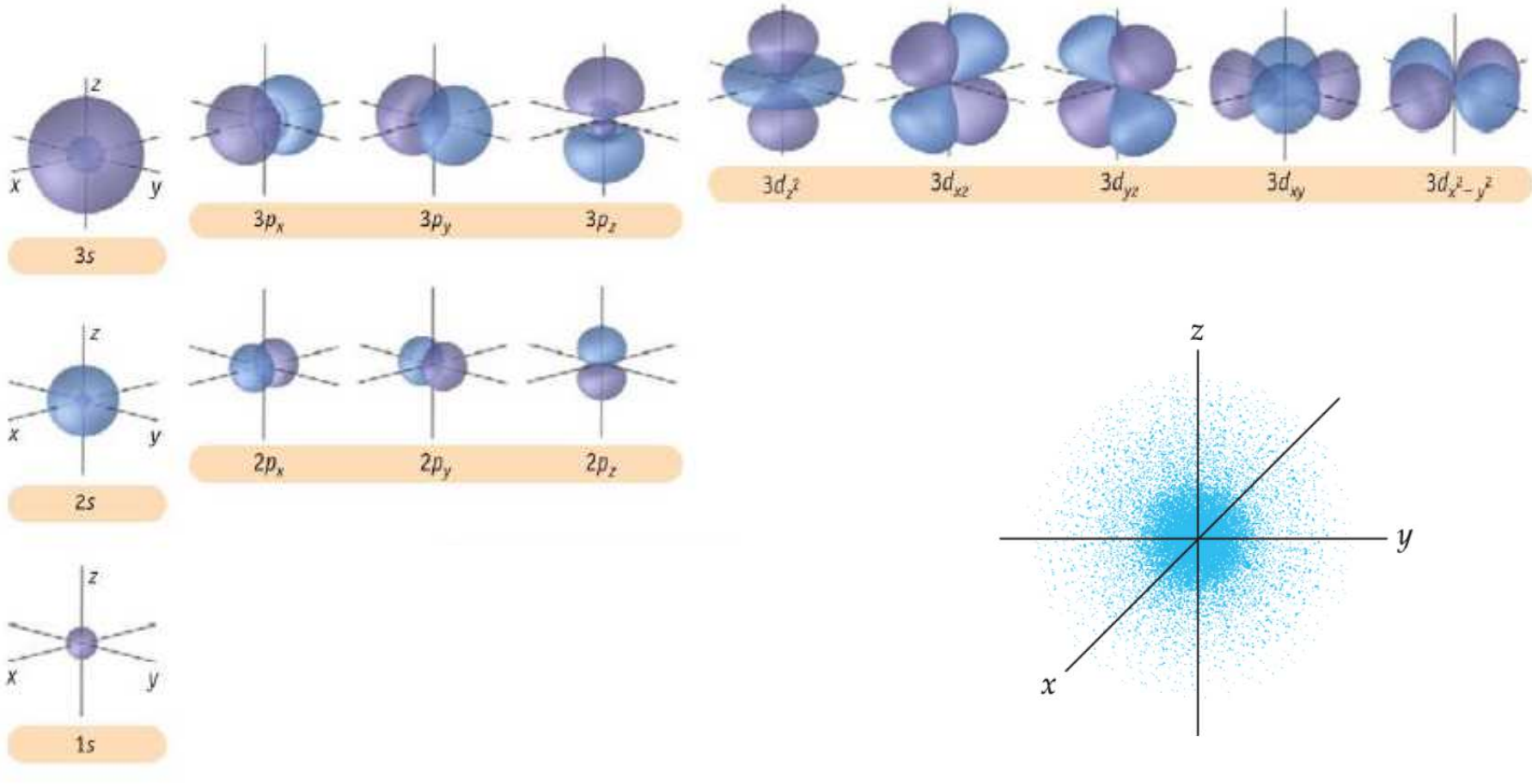
n= 3→ $l = 2$ → m_l pode ter a 5 valores -2,-1, 0, 1, 2,

	Numero quântico
Camada	n
subcamada	l
Orbital	ml

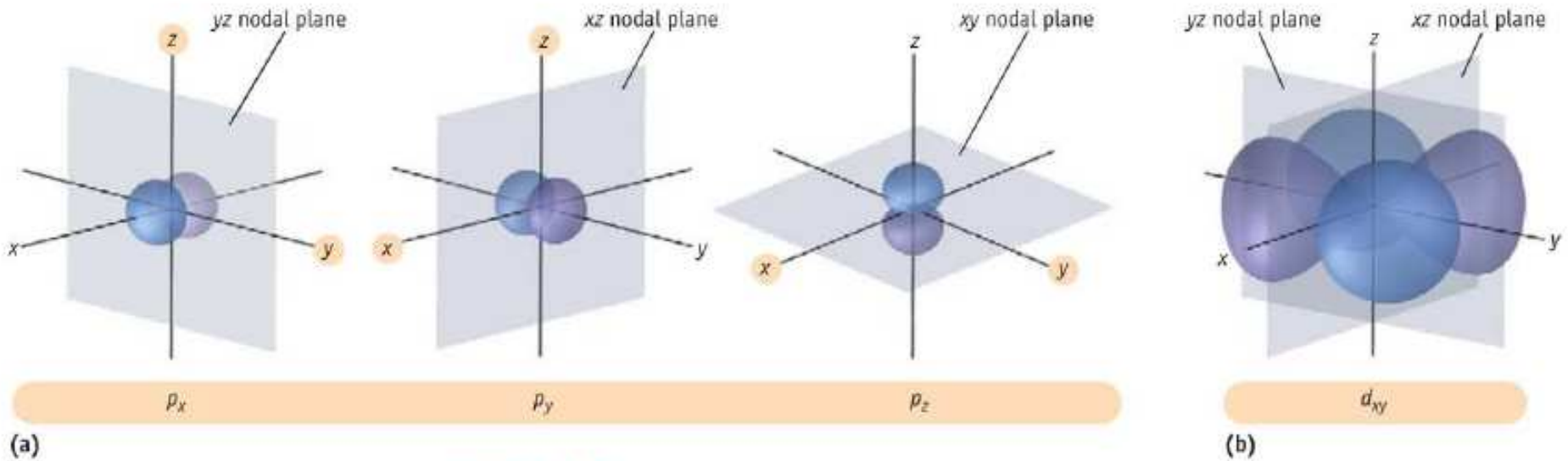
TABLE 6.1 Summary of the Quantum Numbers, Their Interrelationships, and the Orbital Information Conveyed

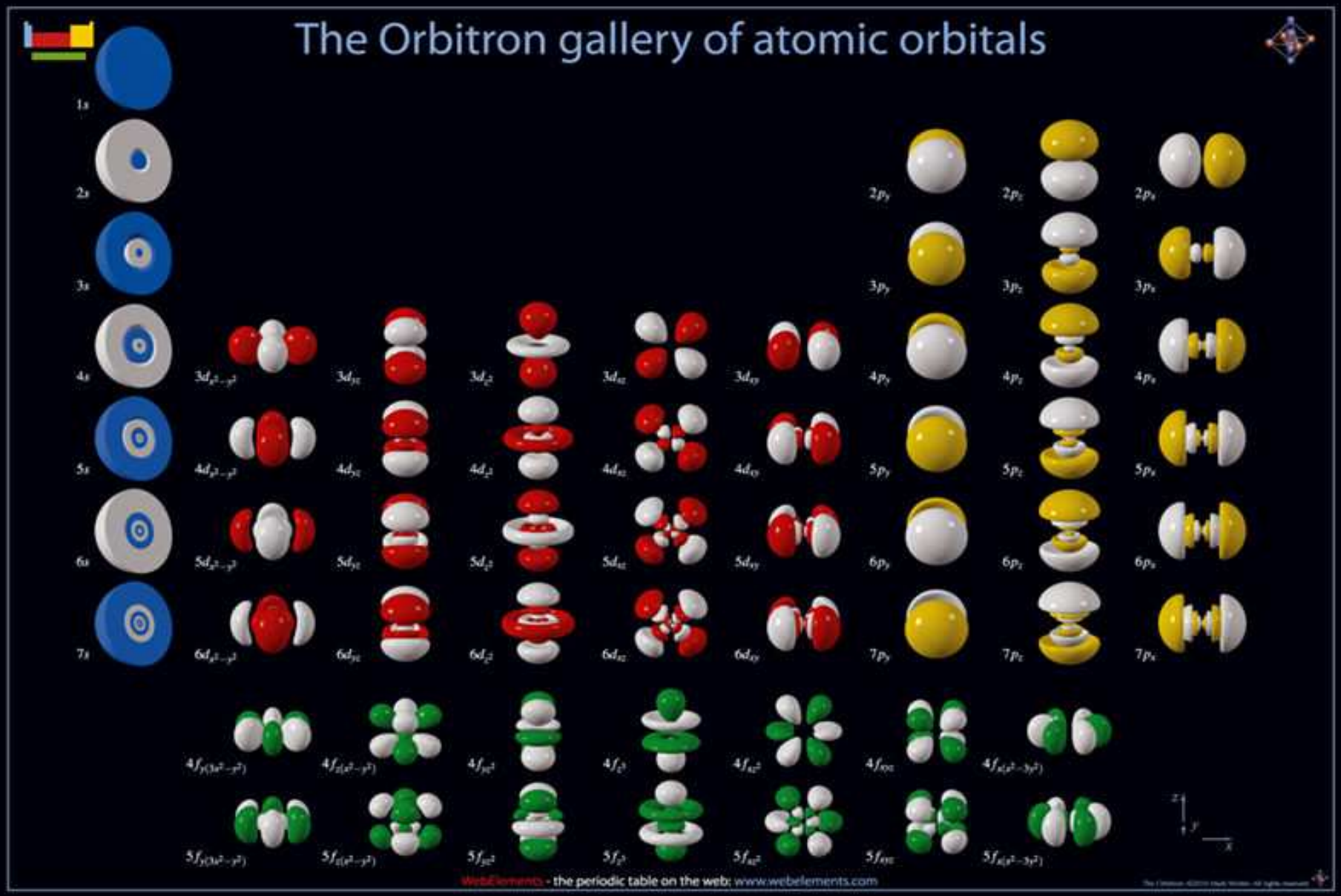
Principal Quantum Number	Azimuthal Quantum Number	Magnetic Quantum Number	Number and Type of Orbitals in the Subshell
Symbol = n Values = 1, 2, 3, . . . n = number of subshells	Symbol = ℓ Values = 0 . . . $n - 1$	Symbol = m_ℓ Values = $+\ell$ . . . 0 . . . $-\ell$	Number of orbitals in shell = n^2 and number of orbitals in subshell = $2\ell + 1$
1	0	0	one 1*s* orbital (one orbital of one type in the $n = 1$ shell)
2	0	0	one 2*s* orbital
	1	+1, 0, −1	three 2*p* orbitals (four orbitals of two types in the $n = 2$ shell)
3	0	0	one 3*s* orbital
	1	+1, 0, −1	three 3*p* orbitals
	2	+2, +1, 0, −1, −2	five 3*d* orbitals (nine orbitals of three types in the $n = 3$ shell)
4	0	0	one 4*s* orbital
	1	+1, 0, −1	three 4*p* orbitals
	2	+2, +1, 0, −1, −2	five 4*d* orbitals
	3	+3, +2, +1, 0, −1, −2, −3	seven 4*f* orbitals (16 orbitals of four types in the $n = 4$ shell)
Camada	subcamada	Orbital	

Formas dos orbitais atomicos

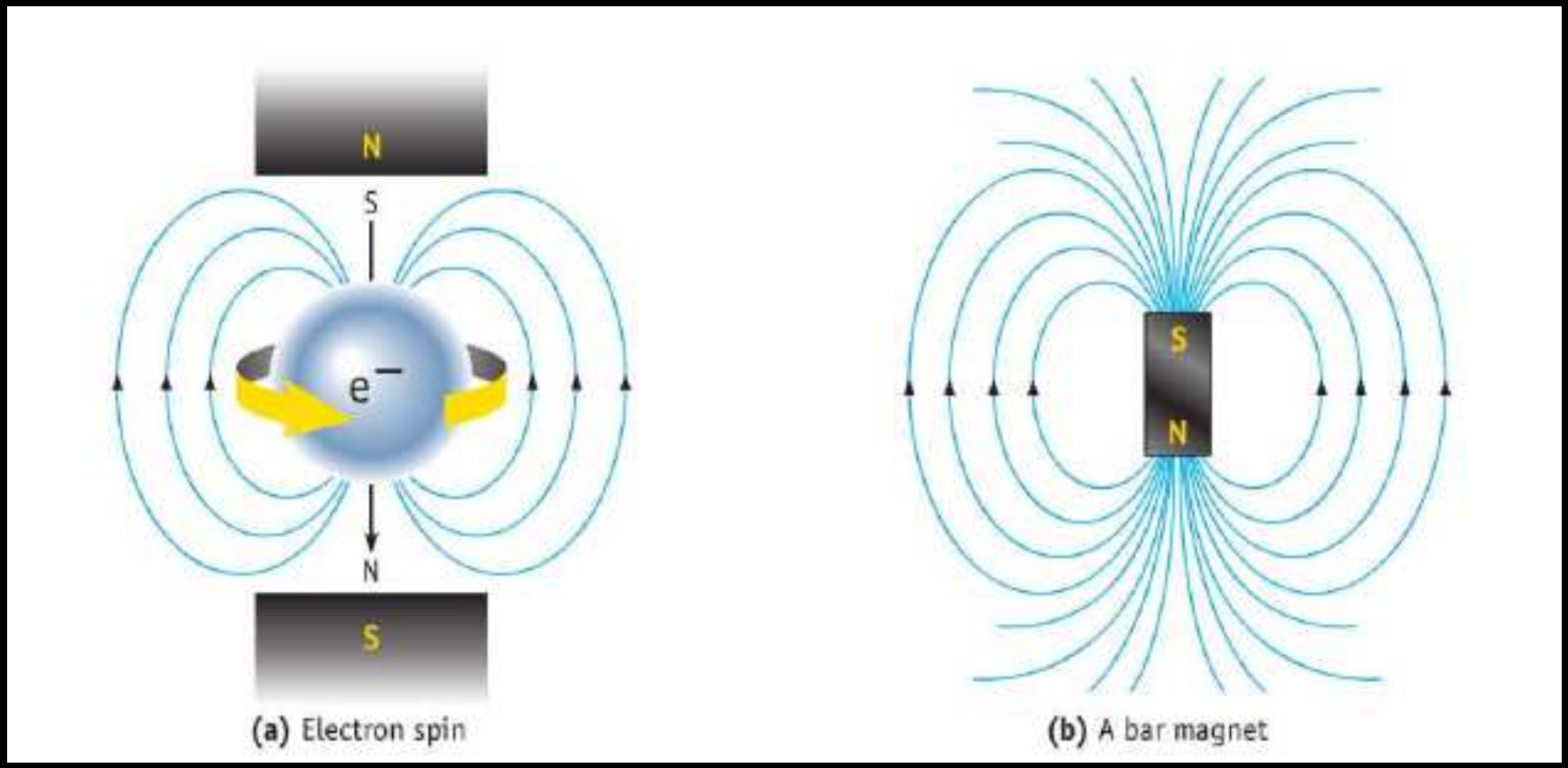


Orbitais p

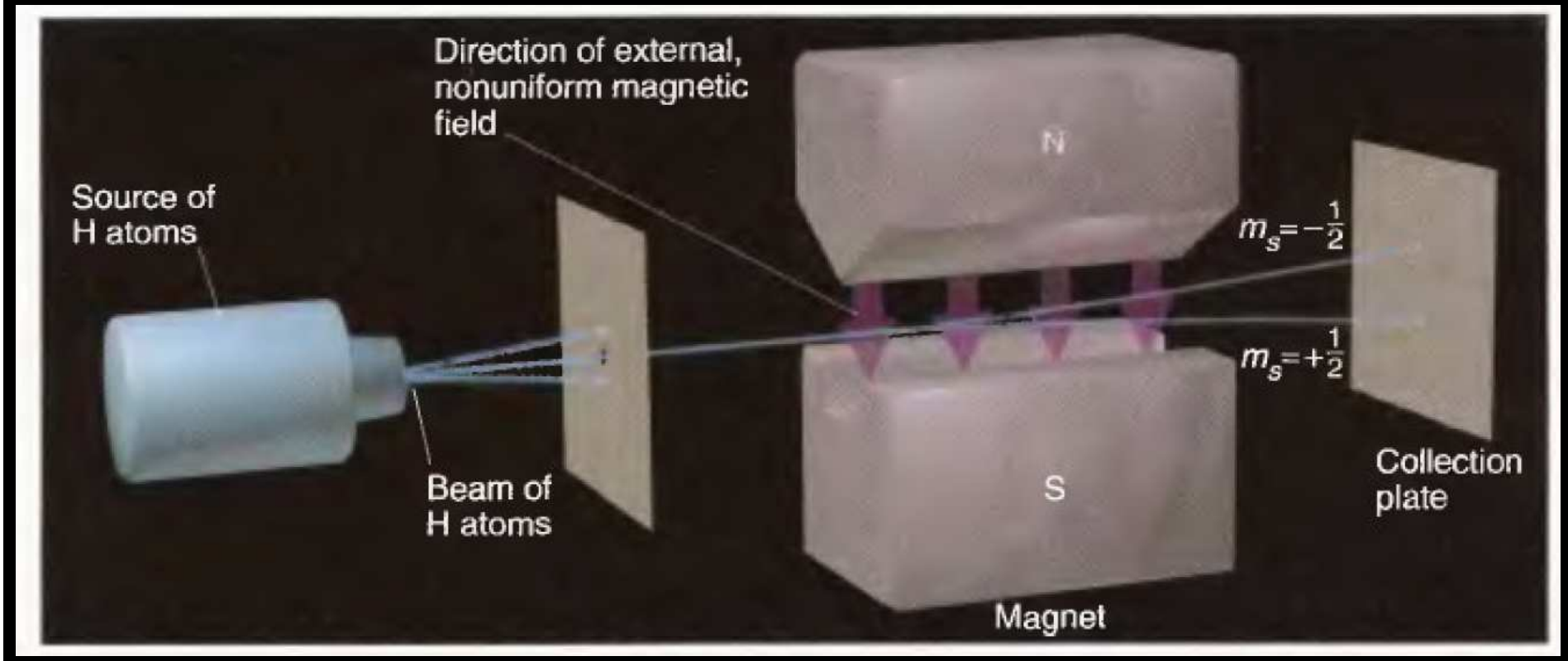

yz nodal plane
xz nodal plane
xy nodal plane
yz nodal plane
xz nodal plane
z
x
y
p_x
p_y
p_z
d_{xy}
(a)
(b)


The Orbitron gallery of atomic orbitals
1s
2s
3s
4s
5s
6s
7s
2p
3p
4p
5p
6p
7p
3d
4d
5d
6d
4f
5f
WebElements - the periodic table on the web: www.webelements.com

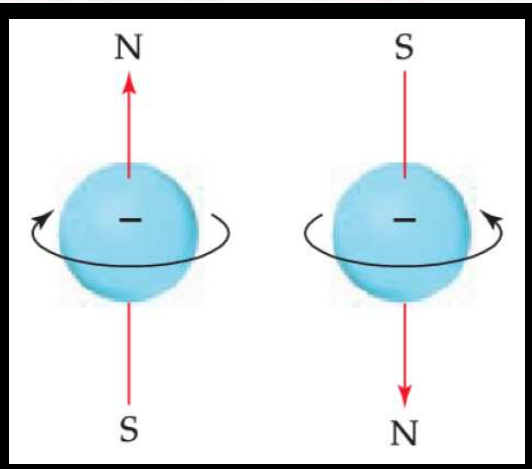
Spin – rotação do electron



(a) Electron spin (b) A bar magnet


Direction of external, nonuniform magnetic field
Source of H atoms
N
$m_s = -\frac{1}{2}$
$m_s = +\frac{1}{2}$
Beam of H atoms
S
Collection plate
Magnet

$m_s = +1/2$

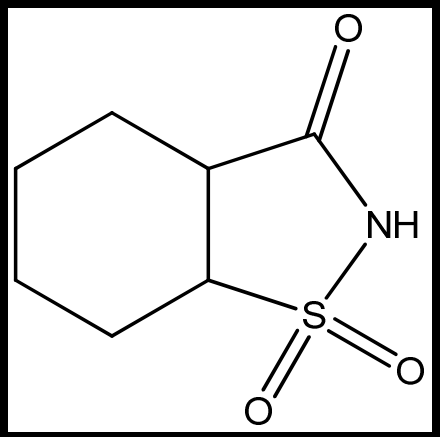

N
S
S
N

$m_s = -1/2$

15 - O sulfato e magnésio tem diversas aplicações. Geralmente este sal vem na sua forma hidratada $MgSO_4 . 7H_2O$. No enanto, a agua de hidratação é perdida por aquecimento e sendo que a quantidade perdida irá depender da temperatura. Supondo que se aquece uma amostra de 1,394 de $MgSO_4$ a 100ºC e se obtém uma massa final de 0,855 g. Quantas águas permanecem ainda na estruturar do $MgSO_4$?

19 - A sacarina cuja estrutura molecular está abaixo representada. Esta molécula foi sintetizada pela primeira vez 1897 onde era prática comum dos químicos experimentarem todas as substancias que sintetizavam no laboratório.

a) Escreva a formula molecular do composto,
b) Se você ingerir 125 mg de sacarina, qual é a quantidade de matéria (mols) de sacarina ingerida?
c) Qual massa de enxofre está contida em 125 mg de sacarina.



24 -O urânio é utilizado como combustível, principalmente sob a forma de oxido de uranio (IV), em centrais nucleares.

Uma pequena amostra de metal de uranio (0,169 g)é aquecida em 800-900ºC no ar para gerar 0,199 g de oxido verde-escuro U_xO_y.

Quantos mols de uranio metálico forma utilizados?

Qual é a formula empírica do oxido U_xO_y?

Qual é o nome do oxido?

Quantos moles de U_xO_y devem ser obtidos?

Os isótopos naturais são ^{234}U, ^{235}U e ^{238}U. Sabendo que o peso atómico do uranio é de 238,02 g/mol qual deve ser o isótopo mais abundante?

Se o composto hidratado $UO_2(NO_3)_2 \cdot zH_2O$ for ligeiramente aquecido a água de hidratação será perdida. Se você tem 0,865 g do composto hidratado e obtém 0,679 g de $UO_2(NO_3)_2$ após o aquecimento, quantas águas de hidratação estão presentes em cada formula unitária do composto inicial?

25 -Um pedaço de uma folha de níquel com 0,550 mm de espessura e 1,25 cm^2 é colocado para reagir com fluor (F_2) para obter fluoreto de níquel.

Quantos moles de níquel foram usados para reagir com o fluor? A densidade do níquel é de 8,902 g/cm3

Se você isolar 1,261 g de fluoreto de níquel, qual é a sua formula? Qual o seu nome completo?

22 -O poliestireno pode ser preparado por aquecimento de estireno com peroxido de tribromobenzoíla na ausência de ar. Uma amostra preparada por esse método tem uma formula empírica $Br_3C_6H_3(C_8H_8)n$, em que o valor de n pode variar de amostra para amostra. Se uma amostra contiver 0,105% de bromo qual será o valor de n?

21 -Considere um átomo de ^{64}Zn.

Calcule a densidade do núcleo em gramas por centímetro cúbico, sabendo que o raio nuclear é de $4,8x10^{-6}$ nm e a massa do átomo ^{64}Zn é de $1,06*10^{-22}$ g.

Calcule a densidade do espaço ocupado pelos eléctrons no átomo de zinco sabendo que o raio atómico é de 0,125 nm e a massa de eléctrons é de $9,11x10^{-28}$.

Tendo calculado essas densidades, o que você pode dizer sobre as densidades relativas das partes do átomo.

23 - Você recebe um cubo de chumbo que apresenta 1 cm de lado. A densidade do chumbo é de 11,35 g/cm3.

Quantos átomos de chumbo há na amostra?

Os átomos são esféricos portanto os átomos de chumbo não podem preencher todo o espaço disponível. Com a aproximação suponha que 60% do espaço do cubo seja preenchido por átomos esférico de chumbo. Calcule o volume de um átomo de chumbo a partir destas informações.