

Trabalho de Conclusão de Curso

Estudando os modelos atômicos, a tabela periódica e a física moderna

Danilo Baracho Nunes danilobaracho@gmail.com

Orientador: Dr. André de Lima Moura

Maceió, abril de 2021

Danilo Baracho Nunes

Estudando os modelos atômicos, a tabela periódica e a física moderna

Monografia apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de licenciado em Física Licenciatura EaD do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas.

Orientador:

Dr. André de Lima Moura

Maceió, abril de 2021

Catalogação na fonte Universidade Federal de Alagoas **Biblioteca Central** Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário Responsável: Valter dos Santos Andrade - CRB-4 - 1251

N972e Nunes, Danilo Baracho.

Estudando os modelos atômicos, a tabela periódica e a física moderna / Danilo Baracho Nunes. - 2021. 52 f.

Orientador: André de Lima Moura. Monografia (Trabalho de conclusão de curso em licenciatura em Física) -Universidade Federal de Alagoas, Instituto de Física. Maceió, 2021.

Bibliografia: f. 52.

1. Átomos - Modelos. 2. Tabela periódica. 3. Física – Estudo e ensino. I. Título.

CDU: 578.72

Resumo

Temos cargas produzindo ondas eletromagnéticas, as quais interagem com átomos a todo instante. Logo, temos átomos recebendo e emitindo fótons em grande escala. Para compreender esses fenômenos físicos devemos pensar como os átomos e elétrons estão organizados, sua estrutura e seus movimentos, considerar a dualidade onda partícula, entender o modelo de Schröndinger, aprender o que é o spin das partículas e então estudar a tabela periódica do prisma quântico. Nesse trabalho faremos uma revisão de todos esses aspectos o que pode servir como texto base para revisões de conceitos e, até mesmo, para a introdução desse conteúdo à pessoas sem conhecimento prévio.

Abstract

We have charges producing electromagnetic waves, which interact with atoms throughout instant. Therefore, we have atoms receiving and emitting photons on a large scale. To understand these physical phenomena we must think about how the atoms and electrons are organized, their structure and their movements, consider the wave particle duality, understand the Schröndinger's model, learn what the particle spin is and then study the periodic table of the quantum prism. In this work, we will review all of these aspects. which can serve as a base text for revisions of concepts and even for the introduction of this content to people without prior knowledge.

Agradecimentos

Agradeço a Ila Andréia de Oliveira Baracho Silva e José Giseldo Nunes da Silva, meus pais, por todo esforço que fez para que eu e Daniel Baracho Nunes, meu irmão, tivéssemos uma boa educação. Agradeço ao meu orientador e demais ou todos professores, servidores e terceirizados do instituto de física por ter ajudado de forma direta ou indireta para o pleno funcionamento da instituição. Me possibilitando avançar em meu grau de conhecimento e nível profissional. Aos meus amigos de graduação que compartilharam todos tramites legais, burocracia e outras dificuldades, com o intuito de galgar a licenciatura em física.

Danilo Baracho Nunes

Conteúdo

	Conteúdo
Li	sta de Figuras Lista de Figuras
Li	sta de Tabelas viii
	Lista de labelas
1	Introdução 1
	1.1Primeiros modelos atômicos1
	1.1.1Modelo de Thomson2
	1.1.2 Modelo de Rutherford4
	1.2 Nêutrons
	1.3 Tamanho do núcleo
	$1.4 \text{Número atômico} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $
	1.5 Elemento químico 9 1.6 Námerra da manaza 9
	1.6 Numero de massa 9 1.7 fama 10
	1.7 IONS
	1.0 Considerações 10 1.0 Madala da Pahr 11
	1.9 Modelo de Bolli
	1.5.1 Quent for Bonn
	1.10 Modelo Solilineriela
	1.11 Diagrama de l'adming
	1.12 Espectros continuos e descontinuos
	1.13 Considerações
	1 14 1 Efeito fotoelétrico
	1.14.2 Efeito Compton
	1.15 Princípio da incerteza de Heizenberg
	1.16 Equação de Schrödinger
	1.17 Átomo de hidrogênio
	1.17.1 Movimento do elétron
	1.18 Dipolo magnético
	1.18.1 Vetor de dipolo magnético
	1.19 Átomo de hidrogênio revisitado
	1.19.1 Momento de dipolo magnético
	1.19.2 Momento magnético e angular
	1.19.3 Magnéton de Bohr

 1.23 Interação spin orbital		1.20 Dipolo elétrico nas moléculas1.21 Experimento de Stern-Gerlach1.22 Momento angular do elétron	26 27 29
 2 Tabela periódica 2.1 Tabela periódica		1.23 Interação spin orbital	31
 2.1 Tabela periódica	2	Tabela periódica	33
 2.2 Famílias ou grupos 2.2.1 Família ou grupo A ou zero 2.2.2 Família ou grupo B 2.3 Períodos 2.4 Localização na tabela periódica 2.5 Outras classificações 2.6 Tabela periódica quântica 2.7 Equação de Schrödinnger para dois elétrons 2.8 Partículas idênticas 2.9 Princípio de exclusão de Pauli 2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica 2.11 Notação espectroscópica 2.12 Estados fundamentais dos átomos 2.13 Física molecular 2.14 Ligação iônica 2.15 Ligação covalente 3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências 		2.1 Tabela periódica	33
2.2.1Família ou grupo A ou zero 2.2.22.2.2Família ou grupo B2.3Períodos2.4Localização na tabela periódica2.5Outras classificações2.6Tabela periódica quântica2.7Equação de Schrödinnger para dois elétrons2.8Partículas idênticas2.9Princípio de exclusão de Pauli2.10Notação espectroscópica e tabela periódica2.12Estados fundamentais dos átomos2.13Física molecular2.14Ligação iônica2.15Ligação covalente3Conclusão4Referências4.1Referências		2.2 Famílias ou grupos	36
2.2.2 Família ou grupo B 2.3 Períodos 2.4 Localização na tabela periódica 2.5 Outras classificações 2.6 Tabela periódica quântica 2.7 Equação de Schrödinnger para dois elétrons 2.8 Partículas idênticas 2.9 Princípio de exclusão de Pauli 2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica 2.11 Notação espectroscópica e tabela periódica 2.12 Estados fundamentais dos átomos 2.13 Física molecular 2.14 Ligação iônica 2.15 Ligação covalente 3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências		2.2.1 Família ou grupo A ou zero	36
2.3Períodos2.4Localização na tabela periódica2.5Outras classificações2.6Tabela periódica quântica2.7Equação de Schrödinnger para dois elétrons2.8Partículas idênticas2.9Princípio de exclusão de Pauli2.10Notação espectroscópica e tabela periódica2.11Notação espectroscópica2.12Estados fundamentais dos átomos2.13Física molecular2.14Ligação iônica2.15Ligação covalente3Conclusão4Referências4.1Referências		2.2.2 Família ou grupo B	37
2.4Localização na tabela periódica2.5Outras classificações2.6Tabela periódica quântica2.7Equação de Schrödinnger para dois elétrons2.8Partículas idênticas2.9Princípio de exclusão de Pauli2.10Notação espectroscópica e tabela periódica2.11Notação espectroscópica2.12Estados fundamentais dos átomos2.13Física molecular2.14Ligação iônica2.15Ligação covalente3Conclusão4Referências4.1Referências		2.3 Períodos	38
 2.5 Outras classificações 2.6 Tabela periódica quântica 2.7 Equação de Schrödinnger para dois elétrons 2.8 Partículas idênticas 2.9 Princípio de exclusão de Pauli 2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica 2.11 Notação espectroscópica 2.12 Estados fundamentais dos átomos 2.13 Física molecular 2.14 Ligação iônica 2.15 Ligação covalente 3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências 		2.4 Localização na tabela periódica	39
 2.6 Tabela periódica quântica		2.5 Outras classificações	39
 2.7 Equação de Schrödinnger para dois elétrons 2.8 Partículas idênticas 2.9 Princípio de exclusão de Pauli 2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica 2.11 Notação espectroscópica 2.12 Estados fundamentais dos átomos 2.13 Física molecular 2.14 Ligação iônica 2.15 Ligação covalente 3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências 		2.6 Tabela periódica quântica	40
 2.8 Partículas idênticas		2.7 Equação de Schrödinnger para dois elétrons	40
 2.9 Princípio de exclusão de Pauli 2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica 2.11 Notação espectroscópica 2.12 Estados fundamentais dos átomos 2.13 Física molecular 2.13 Física molecular 2.14 Ligação iônica 2.15 Ligação covalente 3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências 		2.8 Partículas idênticas	41
 2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica		2.9 Princípio de exclusão de Pauli	42
 2.11 Notação espectroscópica		2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica	43
 2.12 Estados fundamentais dos átomos 2.13 Física molecular 2.13 Física molecular 2.14 Ligação iônica 2.15 Ligação covalente 3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências 		2.11 Notação espectroscópica	43
 2.13 Física molecular		2.12 Estados fundamentais dos átomos	45
 2.14 Ligação iônica		2.13 Física molecular	46
 2.15 Ligação covalente		2.14 Ligação iônica	46
3 Conclusão 3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências		2.15 Ligação covalente	47
3.1 Conclusão 4 Referências 4.1 Referências	3	Conclusão	50
4 Referências 4.1 Referências	Ŭ	3.1 Conclusão	50
4.1 Referências	4	Referências	52
		4.1 Referências	52

v

Lista de Figuras

1.1	Demócrito de Abdera	2
1.2	Joseph John Thomson	2
1.3	Tubo de raios catódicos	3
1.4	Modelo de Thomson	4
1.5	Ernest Rutherford	5
1.6	Marie Curie	5
1.7	Radiações	6
1.8	Experimento placa de ouro	7
1.9	Átomos de ouro	7
1.10	Modelo de Rutherford	8
1.11	Nêutron	9
1.12	Massa atômica	10
1.13	Modelo de Bohr	12
1.14	Niels Bohr	12
1.15	Diagrama de Pauling	14
1.16	Subníveis	14
1.17	Espectros contínuo e descontínuo	14
1.18	Espectro hidrogênio	15
1.19	Orbitas elípticos de Sommerfeld	15
1.20	Experimento de Young	17
1.21	Experimento de fenda, partículas	17
1.22	Efeito fotoelétrico	18
1.23	Efeito Compton	19
1.24	Dipolo elétrico e magnético	22
1.25	Campo magnético	22
1.26	Campo magnético da terra	23
1.27	Vetor campo magnético	23
1.28	Vetor campo magnético espira	24
1.29	Torque em uma espira	24
1.30	Momentos do elétron	25
1.31	Molécula HCl	27
1.32	Experimento Stern Gerlach	27
1.33	Experimento Stern Gerlach	28
1.34	Experimento Stern Gerlach	28
1.35	Momentos de spin	30
1.36	Referencial de spin	31
2.1	Tabela periódica	34
2.2	Grupos e famílias	34

2.3	família IA e hidrogênio	35
2.4	família IIA	35
2.5	família IIIA	36
2.6	Família B	37
2.7	Distribuição do cobre	37
2.8	Blocos da tabela	38
2.9	Periodos e grupos	39
2.10	Diagrama de Pauli	14
2.11	Energias de uma ligação iônica	18
2.12	Densidade de probabilidade 4	18
2.13	Densidade de probabilidade	19

Lista de Tabelas

1.1	Massa das partículas subatômicas	10
1.2	Características particulares como carga e massa das radiações corpusculares .	10
1.3	Distribuição eletrônica	13
1.4	Momentos de diplo	29
1.5	Estados quânticos	32
2.1	Família A	37
2.2	Família A	39
2.3	Momento e distribuição eletrônica	43
2.4	Distribuição eletrônica número quântico	43
2.5	Distribuição eletrônica	43
2.6	distribuição eletrônica	44

1

Introdução

Uma indagação simples é como é composta a matéria, como é composta em escalas cada vez menores até chegar na escala atômica. Durante o desenvolvimento da física e da química ao longo da história, muitos pensadores tentaram descrever a escala atômica e seu comportamento gerando vários modelos atômicos que tentaram explicar como seria a composição dos átomos e como estariam ligados nas diferentes espécies de substâncias. Nesse contexto, o intuito deste trabalho é avaliar os principais modelos e o desenvolvimento do conhecimento sobre as propriedades da matéria ao longo da história.

1.1 Primeiros modelos atômicos

Desde a antiguidade pensadores gregos tentam explicar a estrutura da matéria. De suas filosofias conseguimos algumas teorias e conhecimentos, como os pensadores Demócrito de Abdera (420 a.C.) e Leucipo (450 a.C.). Segundo Demócrito, o universo está composto de dois elementos básicos: o vácuo e os átomos. Logo, descreve a matéria composta de átomos pequenos e indivisíveis de diferentes formas que interagem através de processos mecânicos.



Figura 1.1: Demócrito De Abdera retirada de: https://www.todamateria.com.br/democrito/

1.1.1 Modelo de Thomson

Quem foi Thomson

Joseph John Thomson foi um físico britânico que propôs um modelo atômico conhecido como "pudim de ameixas". Além disso, Thomson é considerado o descobridor do elétron. Nasceu em 1856 e morreu em 1940. Portanto, foi o primeiro que identificou as partículas subatômicas. Em 1892 nasceu seu filho George Paget Thomson, que posteriormente recebeu o Prêmio Nobel de Física.



Figura 1.2: Joseph John Thomson https://edukavita.blogspot.com/2015/06/biografia-de-joseph-john-thomson-

retirada de: fisico.html

Modelo atômico de Thomson

Em seu estudo da escala atômica e subatômica conseguiu comprovar a existência de partículas menores do que o átomo: os elétrons. As primeiras experiências surgiram por volta de 1900. Segundo (Okuno, 1986, p. 28): "Esse modelo atômico foi proposto em 1903 e consistia de um volume esférico positivamente carregado, com elétrons uniformemente distribuídos pelo volume. Foi denominado "pudim de ameixa", sendo os elétrons representados pelas ameixas.". Estudando a descarga elétrica em tubos semelhantes a lâmpadas fluorescentes, em aparelhos iguais ou similares ao da figura 3.2, que continham gases a pressões reduzidas (gazes rarefeitos), foram feitas descobertas importantes:

- As descargas elétricas partiam do polo negativo (cátodo) em direção ao polo positivo, de onde vem a denominação de raios catódicos.
- Os raios eram partículas menores que o átomo.
- Os raios catódicos eram retilíneos.
- Os raios catódicos eram desviados por um campo elétrico gerado por placas carregadas, permitindo concluir que os raios catódicos eram constituídos de partículas negativas que foram denominadas elétrons.



Figura 1.3: Tubo de raios catódicos

retirada de: https://quizlet.com/br/511062381/leis-ponderais-e-modelos-atomicos-flash-cards/

Logo, quando um gás rarefeito, em baixa pressão, é submetido a alta tensão elétrica (por exemplo, 15000 V), produz um feixe de luz (composto por cargas elétricas) que parte do cátodo (polo negativo) em direção ao ânodo (polo positivo). A maneira pela qual Thomson interpretou os resultados dessa experiência tornou-se histórica: ele sugeriu que os elétrons estariam mergulhados em uma massa homogênea e positiva, como ameixas em um pudim. Essa proposta foi denominada modelo atômico de Thomson (Fig. 3.3).



Figura 1.4: Modelo de Thomson retirada de: https://www.todamateria.com.br/modelos-atomicos/

Thomson em seu experimento desenvolveu o conceito de carga, onde o átomo era composto de uma esfera fluida positiva contendo elétrons negativos mergulhados na mesma. Podemos então atribuir a Thomson a descoberta do elétron, seu tipo de carga elética negativa e estudos sobre a massa do elétron. Porém, não explicava o movimento do elétron em torno do núcleo que só foi satisfatoriamente explicado pela física quântica. O modelo de Thomson já contia o conceito de cargas e do elétron. Porém, a estrutura e propriedades do átomo ainda não era satisfatória.

1.1.2 Modelo de Rutherford

Ernest Rutherford (1871-1937) foi um físico neozelandês, naturalizado britânico, que se tornou conhecido como o pai da física nuclear com seus trabalhos e estudos sobre radiação. Rutherford foi premiado em 1908 com o Prêmio Nobel de Química por sua teoria da estrutura atômica.



Figura 1.5: Ernest Rutherford retirada de: https://www3.unicentro.br/petfisica/2015/12/22/ernest-rutherford-1871-1937/

Radioatividade

Marie Curie nasceu com o nome de Maria Salomea Skłodowska, em 1867, em Varsóvia, Polônia, em uma época em que a cidade era parte do Império Russo. Marie Curie foi uma das mulheres que mudaram a história e os rumos do estudo da radioatividade. Ela chegou a visitar o Brasil em agosto de 1926 para uma convenção em Belo Horizonte. Marie Curie através de seus estudos com urânio e tório é considerada a descrubidora da radioatividade.



Figura 1.6: Marie Curie

retirada de: https://aventurasnahistoria.uol.com.br/noticias/reportagem/historia-marie-curie-morte-ao-alcance-das-maos.phtml

A radioatividade começou a ser descoberta e ter seus estudos desenvolvidos efetivamente em 1896 com o estudo de compostos de urânio de Becquerel, que passou a ser desenvolvido posteriormente por J. J. Thomson e Ernest Rutherford. Becquerel percebeu que os compostos de urânio manchavam filmes fotográficos e então levantou a hipótese que o urânio deveria emitir radiações de maneira espontânea. Tais radiações foram inicialmente chamadas de raios de Becquerel. Pouco tempo após a descoberta de Becquerel, Rutherford descobriu a existência de três tipos de radiações, as quais foram denominadas alfa (α), beta (β), e gama (γ). Partículas alfa nada mais são do que átomos de hélio duplamente ionizados, ou seja, que perdem dois elétrons. Já os raios beta são elétrons (e^-) e pósitrons (e^+), partículas idênticas ao elétron, exceto no sinal de carga), que são muito mais penetrantes que as partículas alfa."(Okuno, 1984, p. 9).

Já os raios gama segundo Okuno (1984, p. 9) consistem de ondas eletromagnéticas extremamente penetrantes. Eles interagem com a matéria pelo efeito fotoelétrico, pelo efeito Compton ou pela produção de pares, e nesses efeitos são emitidos elétrons ou pares elétronpósitron que, por sua vez, ionizam a matéria.

Podemos ver na figura a seguir um experimento que define a carga de cada radiação. Logo, as partículas alfas são atraídas por cargas negativas; as partículas betas por cargas



Figura 1.7: Experimento radiações retirada de: https://brasilescola.uol.com.br/quimica/emissao-alfa.htm

negativas; enquanto que as partículas gamas não são desvidadas por campos elétricos.

Estudo e desenvolvimento do modelo de Rutherford

Em suas pesquisas sobre substâncias radioativas, Rutherford verificou a possível influência da radiação alfa sobre vários materiais. Ao bombardear uma placa de ouro muito fina, quase transparente, chegou aos seguintes resultados:

- A maioria das partículas alfa atravessavam a placa sem sofrer desvios, como se a maior parte da placa fosse um imenso vazio.
- Um número pequeno de partículas alfa sofria desvios acentuados ou não atravessava a placa de ouro.



Figura 1.8: Experimento placa de ouro

retirada de:https://www.em.com.br/app/noticia/especiais/educacao/enem/2015/09/25/noticia-especial-enem,691867/o-experimento-de-rutherford.shtml

Logo, as partículas alfas possuíam carga positiva e os núcleos dos átomos da folha de ouro possuíam a mesma carga positiva. Assim, se o feixe alfa incidia no núcleo dos átomos, o mesmo era desviado, já que cargas de mesmo sinal se repelem e caso contrário seguiam sua trajetória retilínea. Portanto, se o feixe de partículas positiva passa pelo núcleo ou próximo ao núcleo, o mesmo será desviado. Caso contrário, segue sua trajetória retilínea, como na figura a seguir.



Figura 1.9: Átomos de ouro

retirada de:https://querobolsa.com.br/enem/quimica/modelo-atomico

Em 1911, Rutherford explicou os resultados dessa experiência com uma proposta a ser chamada de modelo atômico de Rutherfod:

- A estrutura geral do átomo teria duas partes principais: núcleo e eletrosfera.
- O núcleo seria positivo e conteria praticamente toda a massa do átomo. Essa seria a região ocupada pelos prótons.
- A eletrosfera seria uma região com carga negativa que envolveria o núcleo.

A eletrosfera seria, portanto, a região onde estariam os elétrons - partículas com carga negativa e com massa muito menor que a de um próton. O modelo de Rutherford previa que o átomo teria uma organização semelhante à do sistema solar: os elétrons girariam ao redor do núcleo como planetas ao redor do sol.



Figura 1.10: Modelo de Rutherford retirada de:https://brasilescola.uol.com.br/quimica/o-atomo-rutherford.htm

1.2 Nêutrons

A proposta de que o núcleo atômico é composto de prótons apresenta uma inconsistência, pois sabemos que cargas de mesmo sinal se repelem. Logo, o núcleo atômico seria instável. Surge então a questão: o que tornaria o núcleo estável, sendo formado por partículas de mesma carga? A resposta é que o núcleo deveria conter também partículas neutras. Tais partículas, denominadas nêutrons, serviria para anular as repulsões entre prótons no núcleo atômico.

A descoberta do nêutron foi atribuída no ano de 1932 ao físico inglês James Chadwick. Utilizando a conservação da quantidade de movimento, realizou uma experiência que comprovou a existência do nêutron. Chadwick percebeu que o núcleo do berílio radioativo emitia partículas neutras, sem carga elétrica e com a massa praticamente igual à massa dos prótons.

1.3 Tamanho do núcleo

A experiência de Rutherford permitiu também que fosse calculado o tamanho aproximado do núcleo atômico, apontando um diâmetro entre 10.000 e 100.000 vezes menor que o diâmetro do átomo. Logo, o núcleo é definitivamente muito pequeno em relação ao tamanho total do átomo, pois os prótons estão muito unidos e próximos. Assim, a eletrosfera é responsável pela maior parte do diâmetro do átomo. Porém, a massa do átomo está concentrada no núcleo. Logo, os elétrons orbitam a uma distância do núcleo muito maior do que o tamanho do próprio núcleo.



Figura 1.11: Nêutron retirada de: https://www.preparaenem.com/quimica/neutrons.htm

1.4 Número atômico

A descoberta dos prótons levantou uma questão imediata: quantos prótons existiam no núcleo? Conseguindo determinar a carga do núcleo e conhecendo a carga do próton, foi possível estabelecer a quantidade de prótons em qualquer núcleo atômico, o que foi denominado número atômico (*Z*). *Z* = número de prótons no núcleo atômico. Logo, como os átomos isolados são sistemas eletricamente neutros, o número atômico indicaria também o número de elétrons na eletrosfera.

1.5 Elemento químico

Desde o início do século XIX, os cientistas já admitiam que substâncias simples, como o gás hidrogênio e ouro puro, eram constituídas por átomos de mesma espécie, ou seja, por um único elemento químico. O modelo de Rutherford permitiu uma ampliação espetacular desses conceitos: ao se observar que cada elemento químico era constituído por átomos com o mesmo número de prótons, isto é, o mesmo número atômico. **Elemento químico:** conjunto de átomos de mesmo número atômico (Z).

1.6 Número de massa

Sabemos que o elétron possui massa desprezível em relação aos prótons e nêutrons, conforme pode ser observado na tabela a seguir.

Assim, como a massa de um átomo está praticamente concentrada no núcleo, a quantidade total de prótons e nêutrons foi denominada número de massa (A). A figura a seguir resume as informações sobre um dado elemento químico.

	carga relativa	massa relativa	carga (C)	Massa(g)
Próton	+1	1	$+1,6 \times 10^{-19}$	$1,673 \times 10^{-24}$
Nêutron	0	1	0	$1,675 \times 10^{-24}$
Elétron	—1	$\frac{1}{1836}$	$-1,6 \times 10^{-19}$	9×10^{-28}

	-	-	-	.,
tron	—1	$\frac{1}{1836}$	$-1,6 imes 10^{-19}$	9×10^{-2}

	alfa	elétron	pósitron	nêutron	próton
carga	+2e	-e	+e	0	+e
massa(kg)	$6,644 \times 10^{-27}$	$9,109 \times 10^{-31}$	$9,109 \times 10^{-31}$	$1,675 \times 10^{-27}$	$1,672 \times 10^{-27}$

Tabela 1.2: Características particulares como carga e massa das radiações corpusculares





De onde podemos deduzir as seguintes relações:

$$A = p + n \Rightarrow A = Z + n \Rightarrow n \text{úmeroden} \hat{e}utrons = A - Z$$
(1.1)

, onde o número de massa é sempre maior ou igual ao número atômico.

1.7 Íons

O átomo tem a capacidade de ganhar e perder elétrons que estão na camada de valência a camada mais afastada do núcleo. Quando isto acontece, o átomo deixa de ser neutro e adquire carga que pode ser positiva, se perde elétrons, ou negativa quando ganha elétrons. Átomos que possuem carga elétrica total diferente de zero são denominados íons, que podem ser cátions quando possuem carga positiva ou ânions quando possuem carga negativa.

Considerações 1.8

O modelo de Rutherford define a estrutura do átomo, núcleo e eletrosfera melhor que o modelo de Thomson, definindo o que é o núcleo e sua composição de prótons e nêutrons, e também define o movimento orbital dos elétrons em torno do núcleo, uma definição mais ponderada e avançada do que o modelo do pudim de passas.

1.9 Modelo de Bohr

Rutherford descreveu bem a estrutura do átomo, com um núcleo positivo e elétrons realizando movimento orbital em torno do mesmo. Porém, faltou trabalhar questões da estabilidade deste modelo atômico, como por que os prótons no núcleo não se repelem e por que os elétrons não perdem energia em seu movimento orbital e colidem com o núcleo.

Quando você passa de carro sob fios de alta tensão pode notar a interferência na recepção do rádio. Isso ocorre porque a passagem de corrente elétrica no fio libera energia na forma de ondas eletromagnéticas. Porém, os cientistas já sabiam que elétrons em movimento liberam energia, fato que, evidentemente, causava dificuldades para aceitação do modelo de Rutherford. A dúvida era: se o elétron está girando ao redor do núcleo, não deveria também perder energia, com consequente queda (colapso) do elétron no núcleo?

A primeira tentativa de responder a essa questão surgiu em 1913, quando Niels Bohr propôs um conjunto de ideias que passaram a constituir o chamado modelo atômico de Bohr:

- 1. O elétron estaria em órbita circular ao redor do núcleo.
- 2. Ao redor do núcleo, um elétron poderia assumir apenas determinados valores de energia, que foram denominados níveis ou camadas de energia. De acordo com a teoria de Bohr, os átomos conhecidos teriam sete níveis de energia, designado por um número de 1 a 7 ou pelas letras K, L, M, N, O, P, Q, relacionados a partir do núcleo.
- O elétron, em seu movimento ao redor do núcleo, teria energia constante, correspondente ao nível de energia que estaria sendo ocupado.
- 4. Ao receber energia, um elétron poderia saltar para um nível mais energético, ou seja, mais afastado do núcleo. Essa situação, porém, não seria estável e teríamos um átomo ativo ou excitado. Ao retornar naturalmente para sua camada original, o elétron devolveria a energia recebida sob forma de ondas eletromagnéticas por exemplo, na forma de luz.



Figura 1.13: Modelo de Bohr retirada de: https://www.todoestudo.com.br/quimica/modelo-atomico-de-bohr

1.9.1 Quem foi Bohr

Niels Bohr (1885-1962) foi um físico dinarmaquês, estudou em seu país até 1911, partindo então para Inglaterra, onde trabalhou com Thomson e Rutherford. De volta à Dinamarca, dirigiu o Instituto de Física Teórica de Copenhague até 1940, quando escapou do nazismo e foi trabalhar nos Estados Unidos. Recebeu o prêmio Nobel de Física em 1922.



Figura 1.14: Niels Bohr retirada de: https://citacoes.in/autores/niels-bohr/

1.10 Modelo Sommerfeld

O trabalho de Bohr despertou interesse de vários cientistas para o estudo dos espectros descontínuos. Um deles, Sommerfeld, percebeu, em 1916, que as raias orbitais obtidas por Bohr eram, na verdade, um conjunto de raias mais finas e supôs então que os níveis de energia estariam divididos em regiões ainda menores, por ele denominadas subníveis de energia. O número de cada nível indica quantidade de subníveis nele existentes. Por exemplo, o nível 1 apresenta um subnível, o nível 2 apresenta dois subníveis, e assim por diante. Esses subníveis são representados pelas letras s, p, d, f, iniciais de termos técnicos de espectroscopia (sharp, principal, diffuse, fundamental). Podendo também apresentar subníveis teóricos representados por outras letras como g, h e i. Podemos afirmar que:

- Existe uma ordem crescente de energia nos subníveis: s p d f;
- Os elétrons de mesmo subnível contêm a mesma quantidade de energia;
- Os elétrons se distribuem pela eletrosfera ocupando o subnível de menor energia disponível;

Nível	Camada	N° máximo de elétrons	Subníveis conhecidos
1	K	2	1s ²
2	L	8	2s ² e 2p ⁶
3	М	18	3s ² , 3p ⁶ e 3d ¹⁰
4	N	32	4s ² , 4p ⁶ , 4d ¹⁰ e 4f ¹⁴
5	0	32	5s ² , 5p ⁶ , 5d ¹⁰ e 5f ¹⁴
6	Р	18	6s ² , 6p ⁶ e 6d ¹⁰
7	Q	8	7s ² e 7p ⁶

• A ordem de distribuição dos níveis e subníveis de energia é mostrada na tabela a seguir.

Tabela 1.3: Distribuição eletrônica

1.11 Diagrama de Pauling

A criação de uma representação gráfica para os subníveis facilitou a visualização da sua ordem crescente de energia. Essa representação é conhecida como diagrama de Linus Pauling. Como mostrado nas figuras abaixo.

Para ler a informação de cada subnível de energia, utilize a representação da figura abaixo.

O preenchimento da eletrosfera pelos elétrons em subníveis obedece ordem crescente de energia definida pelo diagrama de Pauling:

Camada	is ou nív	eis Subníveis (s, p, d ou f)	Número máximo de
			elétrons por nível
К	1	1s ²	2
L	2	2s ² 2p ⁶	8
Μ	3	3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰	18
Ν	4	4s ² 4p ⁶ 4d ¹⁰ 4f ¹⁴	32
0	5	5s ² 5p ⁶ 5d ¹⁰ 5f ¹⁴	32
Р	6	6s ² 6p ⁶ 6d ¹⁰	18
Q	7	7s ²	2

Figura 1.15: Diagrama de Pauling

retirada de: https://registrodemarca.arenamarcas.com.br/educacao/diagrama-de-linus-pauling/



Figura 1.16: representação do nível e subníveis com as respectivas quantidades de elétrons retirada de: https://www.infoescola.com/quimica/distribuicao-eletronica/

1.12 Espectros contínuos e descontínuos

Observando a decomposição da luz do sol ou de uma lanterna comum verificamos que não há separação brusca entre as cores. Esse tipo de espectro é chamado de contínuo. Se da mesma forma observássemos a luz de lâmpadas de sódio, mercúrio ou hidrogênio, notaríamos a formação de riscas bem definidas, denominadas raias. Um conjunto de raias constitui um espectro descontínuo, como ilustrado na figura a seguir.



Figura 1.17: Espectros contínuo e descontínuo retirada de: https://querobolsa.com.br/enem/quimica/modelo-atomico

Logo, experimentos avaliando o espectro de cores dos elementos químicos foi de grande valia para conclusão das teorias dos cientistas que descreveram o átomo como Bohr.



ESPECTRO ÁTOMO DE HIDROGÉNIO

Figura 1.18: Espectros do átomo de hidrogênio retirada de: https://slideplayer.com.br/slide/1802954/

1.13 Considerações

O modelo atômico de Bohr explicava de maneira satisfatória o comportamento do elétron no átomo de hidrogênio. Porém, ao tentar replicar a teoria nos átomos que possuíam mais elétrons, encontraram discrepâncias entre o postulado teórico e a realidade obtida nos espectros de emissão. Os espectros de emissão de átomos com mais elétrons apresentavam uma singularidade: eram formados por um conjunto de linhas. A este conjunto denominouse espectro de raia e a análise dos mesmos permitiu aos cientistas concluir que, uma vez excitados, elétrons de uma mesma camada apresentam comportamento espectral semelhante. Logo, dos experimentos espectrais os cientistas chegaram a conclusão que as camadas enunciadas por Bohr (K, L, M, N, O, P, Q) eram constituídas por subcamadas, de órbitas elípticas e de diferentes momentos angulares, conforme exibe a figura a seguir:



Figura 1.19: Orbitas elípticos de Sommerfeld

retirada de: https://www.infoescola.com/quimica/modelo-atomico-de-sommerfeld/

Logo, Bohr apresentou o modelo atômico com os níveis de energia e suas respectivas camadas, e estudos posteriores de cientistas como Sommerfield através de novas observações experimentais constataram a existência de subníveis de energia s, p, d e f.

1.14 Comportamento onda partícula

Foi observado que em alguns fenômenos o elétron se comportava como um corpo microscópico e em outros o elétron tinha de ser compreendido como uma onda, pois era possível medir sua frequência (f) e seu comprimento de onda (λ). Na década de 1920, Louis de Broglie propôs que matéria apresentava um comportamento dual: ora como onda e ora como partícula. Estudos experimentais posteriores demostraram que o comportamento dual se aplicava a partículas como o elétron. Logo, o elétron apresentava um comportamento duplo de partícula e de onda. de Broglie afirmou que o movimento do elétron está associado a um dado comprimento de onda. Daí surge a questão de qual comprimento de onda a partícula deve ter para que a sua natureza ondulatória se manifeste. Como resposta a esta questão, o físico francês propôs a seguinte fórmula:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu} \tag{1.3}$$

 $\lambda = \frac{h}{p}$, onde λ representa o comprimento de onda de de Broglie, h representa a constante de Planck (tamanho de um quantum) e p o momento linear (produto da massa m pela velocidade da partícula v). Segundo Okuno (1984, p. 4), o caráter corpuscular é representado pelo produto mv, pois m e v são respectivamente massa e velocidade do corpúsculo; enquanto que $\frac{h}{\lambda}$ representa o caráter ondulatório, pois λ é o comprimento de onda da onda associado ao corpúsculo..

Se realizarmos o experimento de difração com a luz passando por uma fenda ou uma fenda dupla pequenas suficiente notaremos um padrão de interferência no anteparo de verificação de franjas claras e escuras, como na figura abaixo.



retirada de: https://brasilescola.uol.com.br/fisica/experimento-das-duas-fendas.htm

Caso realizemos o mesmo experimento com partículas como os elétrons, com um feixe com grande quantidades de partículas, notaremos um padrão de interferência semelhante ao da luz no anteparo de verificação.



Figura 1.21: Experimento de fenda, partículas

retirada de: https://www.blogs.unicamp.br/cienciapop/2019/05/02/o-que-o-guia-do-mochileiro-das-galaxias-tem-a-dizer-sobre-mecanica-quantica/

1.14.1 Efeito fotoelétrico

A descoberta do efeito fotoelétrico foi atribuída aos estudos sobre a natureza eletromagnética da luz por Heinrich Hertz. O efeito fotoelétrico pode ser observado quando uma placa metálica é submetida a um feixe de luz: os elétrons podem receber energia suficiente para escapar do metal, como na figura a seguir.



Figura 1.22: Efeito fotoelétrico retirada de: https://www.todoestudo.com.br/fisica/efeito-fotoeletrico

Nesse fenômeno podemos observar a lei de conservação da energia:

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{f} = \mathbf{K}_{\max} + \mathbf{\phi} \tag{1.4}$$

1.14.2 Efeito Compton

Mais uma evidência experimental que veio a reforçar a ideia da quantização e uma possível propriedade corpuscular da luz foi obtida por Arthur H. Compton entre 1919 e 1923. Em seu experimento foi incidido um feixe de raio-X de comprimento de onda λ_0 sobre uma amostra de grafita que espalhava a radiação em todas as direções, sendo por sua vez detectada por um espectrômetro a fim de se medir a variação do comprimento de onda em função da direção de espalhamento. Quantidade esta chamada de deslocamento de Compton:

$$\Delta \lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 \cdot c} (1 - \cos(\theta))$$
(1.5)



Figura 1.23: Efeito Compton retirada de: https://www.infoescola.com/fisica/efeito-compton/

O termo $\frac{h}{m_0 \cdot c}$ é denominado comprimento de onda de Compton do elétron, designado por λ_c . Seu valor numérico é obtido substituindo os valores numéricos da constante de Planck $h = 6,62607004 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$, da massa de repouso do elétron $m_0 = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ e da velocidade da luz c = 299.792.458 $\frac{\text{m}}{\text{s}}$, de forma que se obtém:

$$\lambda_{\rm c} = \frac{\rm h}{\rm m_0 \cdot c} = 2,43 {\rm x} 10^{-12} {\rm m}$$
(1.6)

1.15 Princípio da incerteza de Heizenberg

Em 1926, Wern Heisenberg demonstrou, usando os conceitos quânticos (mecânica quântica), que é impossível determinar, simultaneamente, com absoluta precisão, a velocidade e a posição de um elétron em um átomo. Este princípio, conhecido por princípio da incerteza, estabelece que não se pode afirmar que exista uma órbita definida para o elétron. O mais adequado é considerar que existam regiões, denominadas orbitais, em torno do núcleo nas quais é máxima a probabilidade de se encontrar o elétron. Logo, podemos definir orbital como sendo a região de máxima probabilidade de se encontrar o elétron no átomo. Podemos expressar matematicamente da seguinte forma:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{h}{2\pi} \tag{1.7}$$

$$\Delta \mathbf{y} \cdot \Delta \mathbf{p}_{\mathbf{y}} \geqslant \frac{\mathbf{n}}{2\pi} \tag{1.8}$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geqslant \frac{h}{2\pi} \tag{1.9}$$

1.16 Equação de Schrödinger

O significado da função de onda tem a ver com o fato de que as ondas de matéria, como as ondas luminosas, são ondas de probabilidade. As ondas de matéria obedecem à equação de Schrödinger, proposta em 1926 pelo físico austríaco Erwin Schrödinger. Para uma partícula de massa m que está se movendo no eixo x com energia total constante E em uma região em que a força a que a partícula está sujeita faz com que a partícula possua uma energia potencial U(x), a função ψ pode ser obtida resolvendo a equação de Schrödinger simplificada:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left[E - U(x) \right] \psi = 0$$
(1.10)

Para cada tipo de potencial, a função de onda terá uma forma diferente. Por exemplo, para uma partícula livre o potencial é igual a zero em todo o espaço; para um oscilador harmônico em uma dimensão, o potencial é proporcional ao quadrado do deslocamento da partícula, e assim por diante.

 ψ^2 , a chamada densidade de probabilidade, possui significado físico, e não ψ . Esse significado é a probabilidade de uma partícula ser detectada em um pequeno elemento de comprimento dx centrado num dado ponto x é proporcional ao valor de ψ^2 nesse ponto (Halliday, p. 423).

1.17 Átomo de hidrogênio

O átomo considerado mais simples é o hidrogênio, pois possui número atômico e número de massa iguais a 1. Portanto, possui apenas um elétron em sua eletrosfera. Assim, é o átomo mais fácil de se fazer observações e foi isso que Bohr e Schrödinger fizeram. Então Bohr postulou:

- O elétron gira em torno do núcleo em uma órbita circular, como um satélite em torno de um planeta, mantendo-se nessa órbita às custas da força elétrica atrativa entre cargas de sinais opostos.
- A órbita circular do elétron não pode ter qualquer raio. Só alguns valores são permitidos para os raios das órbitas.
- Em cada órbita permitida, o elétron tem uma energia constante e bem definida, dada por: $E = \frac{E1}{n^2}$, onde E1 é dado por:

$$E_1 = -\frac{-2\pi m e^4}{h^2} = -13,6eV$$
(1.11)

Observemos o sinal negativo nessa fórmula. Quanto menor o n, mais interna será a órbita (menor o raio) e mais negativa será a energia do elétron.

- Enquanto estiver em uma de suas órbitas permitidas, o elétron não emite nem recebe nenhuma energia.
- Quando um elétron muda de órbita, o átomo emite ou absorve um "quantum" de energia luminosa, onde o "quantum" pode ser visto como um pacote de energia.

A equação de Schrödinger citada acima conduz a um conjunto de funções de onda e a um conjunto de energias correspondentes aos estados do elétron permitidos no átomo. As expressões matemáticas das funções de onda possibilitam determinar a probabilidade de encontrar o elétron na vizinhança de um ponto próximo do núcleo. No caso do átomo de hidrogênio, a energia potencial eletrostática é dada por:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{1.12}$$

, onde *e* é a carga elementar, ϵ_0 é a constante elétrica de permissividade no vácuo e r é a distância ao centro do átomo. Este é um potencial no espaço tridimensional. Aplicando a equação de Schrödinger ao átomo de hidrogênio notaremos que os valores de energia são quantizados e são os mesmos obtidos pelo modelo de Bohr:

$$E_n = \frac{-2,180 \times 0^{-18} J}{n^2} = \frac{-13,6eV}{n^2}, \text{ para } n = 1,2,3,\dots$$
(1.13)

O nível n=1 é o estado fundamental, os outros níveis são estados excitados. O elétron pode receber energia e subir para um desses estados, mas depois de um curto intervalo de tempo volta para o estado fundamental. Se o elétron estiver no nível fundamental e receber uma energia de por -13,61 eV, é arrancado do átomo. Temos, neste caso, um elétron livre e um íon do hidrogênio. Logo, verificamos a validade da teoria dos níveis de energia aplicada ao átomo de hidrogênio pela equação de Schrödinger.

1.17.1 Movimento do elétron

Vimos nos modelos atômicos que muitos cientistas tentaram e descreveram o movimento do elétron em torno do núcleo. Vimos também a equação de Schrödinger que tenta definir a posição do elétron em parâmetro de sua energia. Logo, neste documento tentaremos nos aprofundar no movimento do elétron no átomo. Se o elétron possui velocidade e massa o mesmo tem momento e se possui carga também pode apresentar um momento magnético. Logo, tentaremos avaliar os momentos e características do elétron e tentar associá-los matematicamente.

1.18 Dipolo magnético

Uma configuração elétrica importante é o dipolo elétrico que consiste em um campo elétrico gerado por duas cargas opostas uma positiva e outra negativa como na figura a seguir. Também temos o dipolo magnético que pode ser gerado, por exemplo, pela passagem de corrente elétrica em uma espira, conforme representado na figura a seguir.



Figura 1.24: Dipolo elétrico e magnético retirada de: https://www.ufrgs.br/tesauros/index.php/thesa/c/12645/75

Já no caso de um imã, podemos ver as linhas de campo saindo da extremidade norte e entrando na extremidade a figura a seguir.



Figura 1.25: Campo magnético retirada de: https://mundoeducacao.uol.com.br/fisica/campo-magnetico.htm

Outro grande exemplo é a própria terra, onde temos a funcionalidade de uma bússola, pois a terra possui um norte geográfico ou sul magnético, que atrai o norte da bússola, e possui um sul geográfico ou norte magnético, que atrai o sul da bússola, como na figura a seguir.

Um dipolo magnético é importante pois é a estrutura magnética mais simples, no sentido de que não exite monopolo magnético.



Figura 1.26: Campo magnético da terra

retirada de: https://super.abril.com.br/ciencia/terra-ja-esteve-perto-de-perder-seu-campomagnetico/

1.18.1 Vetor de dipolo magnético

Dada as linhas de campo magnético, podemos representar o vetor campo magnético \vec{B} como tangentes a essas linhas de campo.



O vetor campo magnético (\overrightarrow{B}) é sempre tangente às linhas de campo magnético

Figura 1.27: Vetor campo magnético retirada de: https://guiadoestudante.abril.com.br/curso-enem-play/conceitos/

No caso de uma bobina por onde passa uma corrente i também é gerando um campo magnético com linhas de campo similares ao de um dipolo magnético, no sentido de que saem de um lado e entram no outro. O campo magnético em pontos próximos ao eixo da bobina é representado na figura a seguir.



Figura 1.28: Vetor campo magnético espira retirada de: https://brasilescola.uol.com.br/fisica/campo-magnetico-no-solenoide.htm

Logo, o campo magnético gerado por uma espira circular se assemelha ao produzido por um dipolo magnético. Caso o dipolo ou a espira sejam submetidos a um campo magnético \vec{B} , será gerado um torque, como na figura a seguir.



Figura 1.29: Torque em uma espira retirada de: https://pt.wikipedia.org/wiki/Magnetismo

Na figura acima podemos notar o torque sofrido por uma espira percorrida por uma corrente i quando imersa em um campo magnético \vec{B} . Agora se nomearmos o vetor magnético da espira de \vec{u} e submetermos a uma campo magnético que denominaremos de \vec{B} , poderemos definir o torque como o produto vetorial de ambos como a seguir:

$$\vec{\tau} = \vec{u} \times \vec{B} \tag{1.14}$$

1.19 Átomo de hidrogênio revisitado

O átomo de hidrogênio possui número atômico 1. Logo, é constituído de um núcleo com apenas um próton de carga positiva e apenas um elétron com carga negativa. Pelo modelo

de Bohr, o elétron executa um movimento circular em torno do núcleo, como na figura a seguir.





Do movimento circular do elétron, com vetor de velocidade \vec{v} , será produzido um momento angular \vec{L} . Como o elétron possui carga *e* será gerada uma corrente elétrica similar a uma espira. Desta forma, tem-se um momento de dipolo magnético μ_l . O raio da óbita do elétron (de massa m) é o raio de Bohr (r).

1.19.1 Momento de dipolo magnético

Podemos então calcular o módulo do momento de dipolo magnético do elétron seguindo a seguinte fórmula.

$$\mu_{l} = i \cdot A = \left(\frac{e}{T}\right) \left(\pi r^{2}\right) = e\left(\frac{\nu}{2\pi r}\right) \left(\pi r^{2}\right) = \frac{e\nu r}{2}$$
(1.15)

Nesta equação, i é a corrente proveniente do movimento do elétron, A a área delimitada pelo movimento circular do elétron, *e* a carga do elétron, T o período para o elétron completar uma volta em torno do núcleo, e r o raio da órbita (a distância entre o elétron e o núcleo).

1.19.2 Momento magnético e angular

Sabemos da física clássica que o momento angular pode ser descrito da seguinte forma:

$$L = m_e v r \tag{1.16}$$

Agora relacionando com a fórmula de momento magnético obteremos:

$$\mu_{\rm l} = \frac{e}{2m_e} L \tag{1.17}$$

Logo, de posse dos dados do elétron rotacionando em torno do núcleo, podemos relacionar o momento magnético com o momento angular. É importante enfatizar que a razão do momento de dipolo magnético magnético e o momento angular depende de duas constantes que é a carga do elétron e a massa do elétron.

1.19.3 Magnéton de Bohr

Podemos escrever a razão

 $\frac{\mu_{\rm L}}{\rm L} \tag{1.18}$

Da seguinte forma:

$$\frac{\mu_{l}}{L} = \frac{g_{l}\mu_{b}}{\hbar}$$
(1.19)

, onde

$$\mu_b = \frac{eh}{4\pi m_e} \tag{1.20}$$

 μ_b é chamado de magnéton de Bohr e g_l é chamado de fator orbital. Na forma vetorial, levando em consideração a carga do elétron, podemos escrever da seguinte forma:

$$\vec{\mu_l} = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \vec{L}$$
(1.21)

Agora fazendo o vetor L em função do orbital:

$$\mathbf{L} = \sqrt{\mathbf{l}(\mathbf{l}+1)}\hbar\tag{1.22}$$

Teremos então:

$$\mu_{l} = g_{l}\mu_{b}\sqrt{l(l+1)} \tag{1.23}$$

Agora levando em consideração a componente ao longo do eixo z:

$$\mu_{lz} = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} L_z = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \mathfrak{m} \hbar = -g_l \mu_b \mathfrak{m}$$
(1.24)

1.20 Dipolo elétrico nas moléculas

Seja uma molécula formada por dois átomos de diferentes elementos químicos, principalmente em uma ligação iônica, onde um dos elementos possui carga positiva e o outro possui carga negativa, podemos ver esta molécula como um dipolo elétrico, como a molécula HCl.

 $H - \overline{CI} \longrightarrow H^+ + |\overline{CI}|$

Figura 1.31: Molécula HCl retirada de: https://brainly.com.br/tarefa/5698859

1.21 Experimento de Stern-Gerlach

Stern e Gerlach fizeram estudos e experimentos importantes sobre quantização do momento angular angular atômico. Vimos que o movimento circular do elétron em torno do núcleo dá origem a um momento angular e, como o elétron tem carga elétrica, a um momento dipolar magnético. Logo, a quantização do momento angular leva a quantização do momento dipolar magnético (associado ao movimento do elétron). O experimento de Stern e Gerlach consistiu na emissão de feixes proveniente do aquecimento de um gás de prata. Esses feixes passam por colimadores para manter sua estabilidade e caminho retilíneo e, após isso, passa por um campo magnético não-uniforme com um gradiente espacial. Sabese do eletromagnetismo que esse campo não-uniforme pode exercer forças magnéticas os átomos de prata, caso esses possuam algum dipolo magnético. Foi observado que o feixe se divide em dois, devido a geração de uma força vertical como na figura a seguir.



Figura 1.32: Experimento Stern Gerlach retirada de: Link da imagem

Supondo que $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ seja constante, tem-se que a força é constante ao longo de todo o trajeto dentro do gradiente de campo magnético. Logo,

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \tag{1.25}$$

Observou-se que o feixe de átomos de prata foi dividido em dois: um para cima, que corresponde a $\mu_z = +\mu_b$ e outro para baixo, que corresponde a $\mu_z = -\mu_b$. Isso estava em desacordo com a teoria clássica, a qual previa uma distribuição uniforme dos átomos de prata no anteparo. Dessa forma, podemos ver que o momento dipolar magnético é uma grandeza quantizada - apenas dois valores são observados. Hoje entendemos que para um dado átomo, o feixe defletido pode se separar em várias componentes, a depender do número quântico m que está associado ao momendo angular atômico. Matematicamente, temos $\mu_l = -g_l\mu_b m$, onde $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$



Figura 1.33: Experimento Stern Gerlach retirada de: Link da imagem

Podemos ver, segundo a figura a abaixo, a diferença entre a previsão clássica e a quântica obtida.



Figura 1.34: Experimento Stern Gerlach retirada de: Link da imagem

De acordo com a teoria quântica, para m=0, o feixe de átomos não é desviado. Assim, repetindo o mesmo experimento para átomos de hidrogênio no estado fundamental (l=0 e m=0) era esperado apenas um feixe sem deflexão. Entretanto, verificou-se o mesmo resultado de deflexão com dois feixes no anteparo. Conclui-se que estes átomos sofreram a ação do campo magnético e a intensidade do momento de dipolo é dada por:

$$\mu_{\rm l} = \frac{e\hbar}{2m} \tag{1.26}$$

Diante do que aconteceu no experimento de Stern-Gerlach, onde a previsão quântica é dividia em dois feixes distintos um para cima e outro para baixo, chegou-se na conclusão

que o elétron apresenta momento de dipolo angular intrínseco S, o qual não está associado ao movimento de rotaçao em torno do núcleo. Tentou-se explicar esse momento angular intrínseco do elétron pelo movimento dele em torno do próprio eixo - por isso foi chamado de "spin"ou em português "giro". Porém, hoje entendemos que é uma quantidade intrínseca ao elétron e o termo spin foi mantido.

Atualmente entendemos que outras partículas elementares apresentam momento angular intrínseco que pode ser representdo matematicamente por

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \tag{1.27}$$

Para sua componente em no eixo z

$$S_z = m_s \hbar \tag{1.28}$$

Agora fazendo a tabela de comparação do momento de dipolo:

Momentos de dipolo				
$S^2 = s(s+1)\hbar^2$	$L^2 = l(l+1)\hbar^2$			
$S_z = m_s \hbar$	$L_z = m\hbar$			
$m_s = -s, -s + 1, \dots, 0, \dots, s, s + 1$	$m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l, l + 1$			

Tabela 1.4: Momentos de diplo

Para o elétron, s = 1/2 e desta forma m_s pode assumir os valores +1/2 ou -1/2 que representamos como spin up e spin down. Isso explica a deflexão do feixe de átomos de hidrogênio no estado (l = 0, m=0) em dois.

1.22 Momento angular do elétron

O elétron possui dois momentos angulares, um orbital orbital associado ao movimento em torno do núcleo, e o momento angular intrínseco (spin). Como essas grandezas são vetoriais, podemos definir um momento angular total que podemos chamar de \vec{J} conforme equação a seguir.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{1.29}$$

Assim,

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \tag{1.30}$$

, onde

$$j = l + s \text{ ou } j = |l - s|$$
 (1.31)

Para a componente do eixo z do momento angular total, tem-se

$$J_z = m_j \hbar \tag{1.32}$$

, onde: $m_j = -j, -j + 1, \dots, 0, \dots, j - 1, j$.

Como exemplo, considere o átomo de hidrogênio no estado descrito por l = 2 e s $= \frac{1}{2}$. Os valores permitido de j (spin up) são:

$$j = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2} \tag{1.33}$$

$$m_j = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}, +\frac{5}{2}$$
 (1.34)

Já para a configuração de spin down, s = $\frac{1}{2}$. Temos então

$$2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \tag{1.35}$$

$$m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$$
 (1.36)



Figura 1.35: Momentos de spin retirada de: Link da imagem

1.23 Interação spin orbital

Vimos que o átomo apresenta dois momentos angulares: um associado ao movimento em tono do núcleo, e outro de spin intrínseco do elétron, configurando assim dois dipolos magnéticos. Observaremos então a interação destes dois dipolos no átomo e então realizaremos o estudo quantitativo desta interação. Começaremos primeiramente com a mudança de referencial.



Figura 1.36: Referencial de spin retirada de: Link da imagem

Podemos ver então o elétron com sua carga rotacionando em torno do núcleo o que dá origem a um campo magnético o qual pode interagir com o momento magnético de spin. Por questões de álgebra e matemática modificaremos o referencial de movimento para facilitar os cálculos. O campo magnético \vec{B} gerado pelo movimento do núcleo pode ser expresso por

$$\vec{B} = \mu_0 \frac{\vec{i} \times \vec{r}}{4\pi r^3} = -Ze\mu_0 \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{4\pi r^3}$$
(1.37)

, onde

$$\vec{i} = -Ze\vec{v} \tag{1.38}$$

Utilizando da fórmula da lei de Coulomb podemos obter o campo elétrico e expressar da seguinte forma

$$\vec{\mathsf{E}} = \mathsf{Z}e\frac{\vec{\mathsf{r}}}{4\pi\epsilon_0\mathsf{r}^3} \tag{1.39}$$

Substituindo na expressão anterior teremos:

$$\vec{B} = -\epsilon_0 \mu_0 \vec{v} \times \vec{E} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}$$
(1.40)

Então podemos montar a tabela com os estados quânticos de Elétron atômico:

Tabela 1.5: Estados quânticos

Estados quânticos					
Número quântico Símbolo Valores permitidos		Relacionados a			
Principal	n	1,2,3,	Distância do núcleo		
Orbital	1	$1, 2, 3, \ldots, (n-1)$	Momento angular orbital		
Magnético orbital	ml	$0,\pm 1,\pm 2,\ldots,\pm l$	Momento angular orbital		
Spin	S	$\frac{1}{2}$	Momento angular de spin		
Magnético de Spin	Sl	$\pm \frac{1}{2}$	spin(componente z)		

2

Tabela periódica

2.1 Tabela periódica

Do mesmo jeito que organizamos objetos em uma coleção como livros mantendo determinado ordenamento, o mesmo fazemos com os elementos químicos. O melhor modelo organizacional dos elementos químicos é a tabela periódica, onde organiza os elementos por períodos e famílias. Esse modelo evoluiu com o tempo e o modelo de tabela periódica que conhecemos atualmente foi proposto pelo químico russo Dmitri Mendeleiev (1834-1907), no ano de 1869. Estudamos nos capítulos iniciais o movimento do elétron e os campos magnéticos gerado pelo mesmo, vendo o momento angular orbital, momento de spin e momento total. Vimos como esses momentos interagem e como descrever a energia em função dos respectivos números quânticos. Porém, ficou um salto entre um conteúdo e outro. Nesses próximos capítulos estudaremos a tabela periódica, e veremos a associação dos assuntos, como os números quânticos estão relacionados com a distribuição eletrônica.



Figura 2.1: Tabela periódica link da imagem

Assim como acontece com vários fatos no cotidiano, muitas propriedades físicas e químicas dos elementos químicos também se repetem com interessante regularidade. Observe, por exemplo, que os períodos da tabela começam com um metal (com exceção do hidrogênio) e terminam com um gás nobre. As propriedades que se repetem regularmente, e que podem ser previstas na tabela periódica, denomina-se propriedades periódicas. As propriedades periódicas são funções do número atômico do elemento.

As principais descobertas e organização da tabela periódica é atribuída a Dimitri Ivanovich Mendeleev. Ele organizou os elementos com propriedades semelhantes em colunas verticais, chamadas grupos ou famílias, e em linhas horizontais, chamadas períodos, em ordem crescente de MA (massa atômica), em que as propriedades variam. Em nosso exemplo, teríamos:



Em 1913, o inglês Moseley (1887-1915) verificou que as propriedades de cada elemento eram determinadas pelo número de prótons, ou seja, pelo número atômico (Z). Sabendo-se que em um átomo o número de prótons é igual ao número de elétrons. Ao fazermos suas distribuições eletrônicas, verificamos que a semelhança de suas propriedades químicas está relacionada com o número de elétrons de sua camada de valência, ou seja, pertencem à mesma família. Como exemplo, na família IA temos as configuração dos hidrogênio (H), sódio (Na) e rubídio (Rb) mostradas na figura a seguir. Nota-se que todos esses elementos possuem um elétron na camada de valência.



link da imagem

Já na família IIA temos os elementos berílio (Be), cálcio (Ca) e rádio (Ra). Nota-se na figua a seguir que esses elementos possuem dois elétrons na camada de valência.



Figura 2.4: família IIA link da imagem Por fim, na família IIIA, ilustramos na figura a seguir a distribuição eletrônica dos elementos alumínio (Al) e índio (In). Nota-se que a camada de valência é constituída de três elétrons.



2.2 Famílias ou grupos

A tabela periódica apresenta 18 famílias no total, podendo ser representada por algarismos romanos seguidos da letra A ou B, como IA, IIA e VB, as letras A e B indicam a posição do elétron mais energético nos subníveis. No final da década de 80, a IUPAC propôs outra maneira: as famílias seriam indicadas por algarismos arábicos de 1 a 18, eliminando-se as letras A e B.

2.2.1 Família ou grupo A ou zero

Os elementos que constituem essas famílias são denominados elementos representativos, e seus elétrons mais energéticos estão situados em subníveis s ou p. Nas famílias A, o número da família indica a quantidade de elétrons na camada de valência. Elas recebem ainda nomes característicos. A tabela a seguir resume as principais informações sobre essa família. Logo os elétrons que estão na camada n, que será a camada de valência, se encontram distribuídos nos subníveis s e p para os elementos da família A.

	Fam	ília A	
Família	Elétrons na ca-	Distribuição ele-	Nome
	mada de valência	trônica camada de	
		valência	
IA	1	ns ¹	metais alcalinos
IIA	2	ns ²	metais alcalinos-
			terrosos
IIIA	3	ns ² np ¹	família do boro
IVA	4	ns ² np ²	família do carbono
VA	5	ns ² np ³	família do nitrogê-
			nio
VIA	6	ns ² np ⁴	calco gênios
VIIA	7	ns ² np ⁵	halogênios
VIIIA	8	ns ² np ⁶	gases nobres

Tabela 2.1: Família A

2.2.2 Família ou grupo B

Os elementos dessas famílias são denominados genericamente elementos de transição. Uma parte deles ocupa o bloco central da tabela periódica, de IIIB até IIB (10 colunas), e apresenta seu elétron mais energético em subníveis d.

IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB
d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}

Figura 2.6: Família B link da imagem

Como exemplo, temos a distribuição do cobre que termina com 3d⁹, conforme figura a seguir.



Figura 2.7: Distribuição do cobre link da imagem

A outra parte deles está deslocada do corpo central, constituindo as séries dos lantanídeos e dos actinídeos. Essas séries apresentam 14 colunas. O elétron mais energético está contido em subnível f (f¹ a f¹⁴). O esquema a seguir mostra o subnível ocupado pelo elétron mais energético dos elementos da tabela periódica.



link da imagem

Logo, os elementos da tabela periódica podem ser classificados de acordo com os subníveis que os elétrons mais energético ocupam no nível ou camada de valência como na figura acima.

2.3 Períodos

Na tabela atual existem sete períodos os quais estão associados à quantidade de níveis (camadas) eletrônicos que os elementos químicos apresentam. A figura a seguir mostra alguns exemplos.



Figura 2.9: Periodos e grupos link da imagem

Fica evidente a importância da distribuição eletrônica tanto para classificação da família quanto do período. Podemos ver acima que o período corresponde o último nível e é igual à quantidade de camadas.

2.4 Localização na tabela periódica

A distribuição eletrônica do átomo de um dado elemento químico permite que determinemos sua localização na tabela. Vejamos um exemplo de como se pode localizar o elemento químico a partir da distribuição eletrônica:

$$O_8 \to 1s^2, \ 2s^2, \ 2p^4.$$
 (2.1)

Camadas (níveis): K = 2; L = 6.

Tabela	2.2:	Família	А

Localização na tabela							
Característica da distribuição eletrônica	Localização e classificação						
2 camadas (K, L)	2º período						
Elétron de maior energia situado no subnível (2p ⁴)	Bloco p (elemento representativo)						
6 elétrons na camada de valência $(2s^22p^4)$	Família VIA (calcogênios) = grupo 16						

2.5 Outras classificações

Os elementos da tabela periódica podem ser classificados e agrupados, segundo suas propriedades físicas e químicas, em: metais, ametais, semimetais, gases nobres e hidrogênio.

2.6 Tabela periódica quântica

Aqui trabalharemos a parte da quântica para átomos com mais de um elétron. Logo, vamos ampliar o conteúdo dos capítulos anteriores para átomos mais complexo, aplicar o estudo da quântica para estes átomos e associar a tabela periódica.

2.7 Equação de Schrödinnger para dois elétrons

Vimos nos capítulos anteriores a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio com apenas um elétron. Agora veremos como essa equação se adapta para um átomo com dois elétrons, como o átomo de Hélio. Quando estudamos a equação de Schrödringer para um elétron, vimos que apresentava solução analítica. Já neste momento para um átomo com mais de um elétron isto não acontece. A equação de Schrödinger para dois elétrons pode ser escrita como segue.

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla_1^2\Psi(r_1,r_2) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\Psi(r_1,r_2) + V(r_1,r_2)\Psi(r_1,r_2) = E_T\Psi(r_1,r_2)$$
(2.2)

, onde

$$\nabla^2 = \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}$$
(2.3)

, ħ é a constante de Planck dividida por 2π , m a massa do elétron, Ψ a função de onda, V a energia potencial, E_T a energia total, r_1 e r_2 as distâncias do elétron um e dois em relação ao centro do átomo. Para átomos com mais de dois elétrons acontece analogamente, adicionando mais um termo cinético e a distância radial r_3 , adicionando assim mais um termo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_3^{\ 2}\Psi(r_1,r_2,r_3) \tag{2.4}$$

Para elétrons não interagentes, que estão a distância suficientemente grande, a energia potencial pode ser expressada da seguinte forma: $V = V(r_1) + V(r_2)$, onde V será a soma da energia potencial entre o núcleo e o elétron 1 mais a energia potencial entre o núcleo e o elétron 2. Nesse caso, a funçao de onda pode ser escrita como segue.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2) \tag{2.5}$$

Lembrando que o elétron apresenta quatro números quânticos: principal, magnético, orbital e spin. Agora fazendo α e β para representar o estado desse números quânticos teremos a seguinte expressão:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1)\psi_{\beta}(\mathbf{r}_2) \tag{2.6}$$

Agora levando em consideração a interação dos elétrons além da interação com o núcleo,

a energia potencial apresentará termos cruzados para os elétrons interagentes, e podemos expressar esse termo da seguinte forma:

$$\frac{ke^2}{|r_2 - r_1|}$$
(2.7)

2.8 Partículas idênticas

Pelo princípio da incerteza de Heisenberg, tem-se que na mecânica quântica as partículas são indistinguíveis, pois não podemos traçar uma trajetória para uma partícula quântica com certeza. Logo, não conseguimos distinguir dois elétrons em um átomo. Assim, alterar a ordem da equação dos elétrons não afetaria o resultado. Ou seja, a equação a baixo violaria esse princípio, pois podemos notar que o resultado não será o mesmo se alterarmos a ordem $r_1 e r_2$.

$$\Psi(r_1, r_2) = \psi_{\alpha}(r_1)\psi_{\beta}(r_2) \neq \Psi(r_2, r_1) = \psi_{\alpha}(r_2)\psi_{\beta}(r_1)$$
(2.8)

e

$$|\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|^2 \neq |\Psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)|^2$$
 (2.9)

Logo, precisamos encontrar uma equação com uma combinação linear que não viole esse princípio. Para solucionar o problema utilizaremos as seguintes equações:

$$\Psi_{\rm S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{\alpha}(1) \psi_{\beta}(2) + \psi_{\beta}(1) \psi_{\alpha}(2) \right]$$
(2.10)

e

$$\Psi_{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{\alpha}(1) \psi_{\beta}(2) - \psi_{\beta}(1) \psi_{\alpha}(2) \right]$$
(2.11)

Agora fazendo a permuta das ordens dos termos:

$$\Psi_{S} \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{\alpha}(2) \psi_{\beta}(1) + \psi_{\beta}(2) \psi_{\alpha}(1) \right]$$
(2.12)

Teremos:

$$\Psi_{\rm S} \Leftrightarrow = \Psi_{\rm S} \tag{2.13}$$

Assim,

$$|\Psi_{S}(r_{1},r_{2})|^{2} = |\Psi_{S}(r_{2},r_{1})|^{2}$$
(2.14)

$$\Psi_{A} \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{\alpha}(2) \psi_{\beta}(1) - \psi_{\beta}(2) \psi_{\alpha}(1) \right]$$
(2.15)

$$\Psi_A \Leftrightarrow = -\Psi_A \tag{2.16}$$

Como estamos tratando do módulo quadrático teremos:

$$|\Psi_{A}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2})|^{2} = |\Psi_{A}(\mathbf{r}_{2},\mathbf{r}_{1})|^{2}$$
(2.17)

E podemos denominar Ψ_S de função de onda simétrica e Ψ_A de função de onda antissimétrica.

2.9 Princípio de exclusão de Pauli

Sabemos que um elétron pode ter um estado quântico definido pelos números quânticos: principal, magnético, orbital e spin. Logo, o estado do elétron é definido pela combinação dos quatro números. Em um átomo multieletrônico, ou seja, com mais de um elétron, dois ou mais elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico ao mesmo tempo. Logo, devem diferenciar em, pelo menos, um número quântico dos quatro. De posse da função antissimétrica

$$\Psi_{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{\alpha}(1) \psi_{\beta}(2) - \psi_{\beta}(1) \psi_{\alpha}(2) \right]$$
(2.18)

, avaliaremos dois elétrons no mesmo estado quântico para validar o que foi dito acima. Ou seja,

$$\Psi_{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2) - \psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2) \right]$$
(2.19)

Logo, segundo a função de onda antissimétrica, os dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico pois a equação se anula. Portanto, as partículas que obedecem o princípio de exclusão de Pauli:

- Possuem função de onda antissimétrica (Elétrons, prótons, nêutrons, pósitrons e etc.);
- Apresentam spin semi-inteiro (Elétron tem spin $\frac{1}{2}$);
- São chamadas de Férmions.
- J

á as partículas que não obedecem o princípio de exclusão de Pauli:

- Possuem função de onda simétrica (Fótons, Méson π , etc.);
- Apresentam spin inteiro;
- São chamadas de Bósons.

Logo, as partículas que não seguem o princípio da exclusão de Pauli podem ocupar todas o mesmo estado quântico.

2.10 Notação espectroscópica e tabela periódica

Agora abordaremos a tabela periódica pelo prisma dos estados quânticos.

2.11 Notação espectroscópica

A espectroscopia estuda a luz emitida pelos elementos químicos. Então chegaremos em uma convenção para representar os números quânticos dos momentos angulares: \vec{L} , \vec{S} , \vec{J} , onde \vec{L} é o momento orbital, \vec{S} o de spin e \vec{J} o momento angular total. Começando com o número quântico orbital (l = 0, ..., n - 1). Para cada número quântico orbital associamos uma letra

Mon	Momento e distribuição eletrônica							
l=0	S							
l=1	р							
l=2	d							
l=3	f							
l=4	g							

Tabela 2.3: Momento e distribuição eletrônica

que indica o estado do elétron. Já para o número quântico principal n = 1, 2, ... Portanto,

Distribuição eletrônica número quântico						
n=1	К					
n=2	L					
n=3	М					
n=4	Ν					
n=5	0					

Tabela 2.4: Distribuição eletrônica número quântico

temos um estado representado por uma letra para cada número quântico principal. Através da notação dos números quânticos poderemos chegar na distribuição eletrônica como na tabela a seguir:

Tabela 2.5: Distribuição eletrônica

Distribuição eletrônica														
n	1	2					3							
1	0	0		1		0		1		2				
m	0	0	-1	0	1	0	-1	0	1	-2	-1	0	1	2
m _s	$\pm \frac{1}{2}$													
nº elétrons	2	2		<u>6 2 6 10</u>										

Para entender esta tabela veja o exemplo de n=1. Para esse número quântico, temos apenas uma opção para l, ou número quântico orbital, que é l=0, pois l vai de 0 até n-1. Já para o número quântico m, teremos uma opção m=0, pois varia de -l até +l. Por fim, para

o número quântico de spin teremos duas opções $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, ou seja, um spin up e um spin down. Assim resultando um total de dois estados possíveis ou dois elétrons. Tem-se um elétron (n=1, l=0, m=0 e m_s = $+\frac{1}{2}$) e outro elétron (n=1, l=0, m=0 e m_s = $-\frac{1}{2}$).

Já para a camada n=2, teremos duas opções para l, l=0 e l=1, se escolhermos l=0, m só poderá ser 0 e para o spin duas opções $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, dando um total de dois estados ou dois elétrons. Já se escolhermos l=1 teremos 3 opções para m e para cada opção de m teremos duas opções de spin dando um total de 6 estados ou seis elétrons para l=1. Consequentemente, tem-se um total de 8 elétrons para n=2. Fazemos o mesmo raciocínio para a camada n=3 e chegaremos num total de 18 estados diferentes ou 18 elétrons. Fazendo a transposição para notação espectroscópica:

distribuição eletrônica										
n	K]	L M							
1	S	S	р	S	р	d				
nº e ⁻	1s ²	2s ²	2p ⁶	3s ²	3p ⁶	3d ¹⁰				

Tabela 2.6: distribuição eletrônica

Agora notaremos a associação dos números quânticos com a tabela periódica dos capítulos anteriores: as camadas K, L, M e os subníveis s, p, d. Então, podemos nos perguntar: qual o ordenamento ou sequência dos elétrons em um átomo. Utilizando da notação espectroscópica, temos a regra de Madelung que é representada graficamente pelo diagrama de Pauli, conforme figura a seguir.



Figura 2.10: Diagrama de Pauli retirada de: Link da imagem

Para distribuir os elétrons de um átomo pelas camadas e subníveis basta seguir a ordem das setas presentes no gráfico. Dispondo então em ordem crescente de energia teremos a seguinte sequência: 1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d < 7p

2.12 Estados fundamentais dos átomos

Consideraremos o elétron sob a ação de um único campo central, independente dos demais elétrons. Começando com o átomo de hidrogênio, que é o mais simples, e possui configuração eletrônica $1s^1$ e configuração quântica: n=1, l=0 e m=0, tendo assim apenas um elétron. A energia do estado fundamental é dada por:

$$E_{n} = \frac{\mu Z^{2} e^{4}}{(4\pi\epsilon_{0})^{2} 2\hbar^{2}} \left(\frac{1}{n^{2}}\right) = \frac{-13,6eV}{n^{2}}$$
(2.20)

Fazendo n=1: $E_1 = -13, 6eV$ onde eV é a unidade de medida elétron-volt. Portanto, sabemos agora que o estado fundamental do átomo de hidrogênio -13,6 eV.

Agora vamos estudar o estado fundamental do próximo átomo na tabela periódica que é o Hélio. Sabemos que o número atômico deste átomo é dois. Logo, possui dois prótons e dois elétrons. Pela distribuição de Pauli teremos a camada K com subnível 1s² ocupado. Considerando estes dois elétrons não interagentes:

$$\mathsf{E} = \frac{\mu \mathsf{Z}^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right) = -\frac{4\mathsf{E}_1}{n_1^2} - \frac{4\mathsf{E}_1}{n_2^2} \tag{2.21}$$

Essa expressão é obtida a partir do átomo de hidrogênio. Uma vez que foi desconsiderara a interação entre os elétrons. A energia do estado fundamental do Hélio é

$$E_{\rm He} \approx -108, 8eV \tag{2.22}$$

Já levando em consideração a interação dos elétrons teremos um termo

$$V_{\rm int} = \frac{ke^2}{|\vec{r_2} - \vec{r_1}|}$$
(2.23)

, que terá valor: $\langle V_{int} \rangle$ =+34eV Agora subtraindo da energia sem interação: E \approx -108,8+34 = -74,8eV. Logo, a energia fundamental final do hélio é -74,8 eV.

Agora dando sequência aos átomos na tabela periódica, teremos o Lítio (Li) e o berílio (Be). O Lítio possui 3 elétrons e sua distribuição será $1s^2 2s^1$. Já o Berílio possui 4 elétrons e terá sua distribuição $1s^2 2s^2$. Vemos então que estamos falando em mais de uma camada, K e L, e energia dessas camadas podem influenciar uma a outra. A camada K acaba gerando

uma diferença de energia nos subníveis s e p da camada L. Agora do elemento Boro (B) até o Neônio (Ne), temos a camada 2p. Essa camada vai adquirindo elétrons a medida que avançamos a direita até o Neônio que possui a camada 2p completa com seis elétrons. A medida que os elementos aumentam de número atômico ou de elétrons na camada 2p a energia de 2p diminuirá. Como exemplo o potencial de ionização ou energia necessária para retirar o último elétron do Neônio é de 21,6 eV.

2.13 Física molecular

Os átomos dos elementos interagem, e podemos nos perguntar como é essa interação? Logo, os átomos interagentes formam o que podemos chamar de moléculas. Podemos ter como exemplo de substâncias moleculares:

- H₂O (água): composta por dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio.
- NaCl (cloreto de sódio): formada por um átomo de sódio e outro de cloro.
- CH₄ (Metano): composto por um átomo de carbono e quatro de hidrogênio.
- O₂ (Oxigênio).

Podemos nos perguntar como é feita a união dos átomos para formar uma molécula. Estudaremos os principais tipos de ligações: ligação iônica e covalente. Um conceito que devemos ter em mente é que as ligações se devem ao fato de que a energia da molécula é menor que a energia dos átomos separadamente. E os principais mecanismos associados às ligações moleculares são interações eletrostáticas, propriedades ondulatórias dos elétrons e o princípio de exclusão de Pauli.

2.14 Ligação iônica

Quando estudamos a ligação iônica no ensino médio vemos que este fenômeno é apenas uma doação de elétrons entre os átomos, que acontece principalmente na formação de sais, onde um átomo possui facilidade em ceder elétron e outro em receber elétron. Porém, aqui deveremos nos aprofundar mais no assunto e avaliar a energia dos átomos. Levando em consideração a energia dos átomos, quanto maior a diferença de energia total da molécula e a soma da energia dos átomos constituintes, mais forte será a ligação. Como exemplo, analisaremos a molécula de cloreto de potássio (KCl).

Podemos notar que o potássio (K) possui energia de ionização de 4,34 eV produzindo um íon positivo radialmente simétrico de estrutura $(1s^22s^22p^63s^23p^64s^1)$. Logo podemos notar que possui número atômico 19. Pela distribuição eletrônica tem-se que sua última camada e subnível será a 4s com apenas um elétron $4s^1$. Sabemos que a camada 4s suporta até dois elétrons. Logo, ela não está completa. Para se retirar este último elétron necessitaremos de uma energia de 4,34 eV. Já o cloro (Cl) possui número atômico 17, com distribuição eletrônica $1s^22s^22p^63s^23p^5$. Logo, possui o seu último subnível faltando um elétron para se completar, o que produz um íon negativo radialmente esférico. A capacidade que o cloro tem em receber um elétron é chamada afinidade eletrônica, sendo a energia liberada ao receber um elétron de 3,62 eV. Podemos observar que a energia cedida e a energia recebida, não são iguais. A energia que o cloro tem para ceder não é suficiente para retirar o elétron do potássio, o que geraria um desfavorecimento para formação da molécula. Essa diferença é

$$E_t = (4, 34 - 3, 62) = 0,72eV$$
(2.24)

Então podemos nos pergunta com a molécula KCl é formada. Com a aproximação dos átomos constituintes, surgem outros tipos de interações para superar esta diferença:

- Repulsão, devido ao princípio de exclusão Pauli;
- Potencial Coulombiano, devido as cargas dos íons, um positivo e outro negativo.

O potencial coulombiano pode ser expresso da seguinte forma:

$$-\frac{\mathrm{k}e^2}{\mathrm{r}^2} \tag{2.25}$$

E então teremos um potencial total:

$$U(r) = -\frac{ke^2}{r} + E_{exc} + E_{liq}$$
 (2.26)

, onde a energia líquida vale 0,72 eV e a energia de exclusão pode ser calculada como abaixo:

$$E_{exc} = \frac{A}{r^n}$$
(2.27)

Podemos notar que quanto mais distantes os átomos, menor o potencial, já ao aproximarmos os átomos, maior o modulo do potencial. Traçando o gráfico com os elementos acima teremos:

Podemos notar o referencial zero como a energia correspondente ao potássio e o cloro infinitamente separados. Então levando todos os elementos que influenciam o potencial podemos notar em r_0 uma energia suficiente para que seja formada a molécula estável.

2.15 Ligação covalente

No ensino médio vimos a ligação covalente como o compartilhamento de elétrons entre os átomos presente em moléculas como H_2 , N_2 e H_2O . Vimos na ligação iônica que alguns



Figura 2.11: Energias de uma ligação iônica retirada de: link imagem

átomos têm tendência ou facilidade em ceder elétrons e outros em receber elétrons. Agora podemos nos perguntar como isso acontece com átomos de um mesmo elemento ou átomos iguais. A ligação covalente se caracteriza pelo compartilhamento de pares de elétrons. O que favoreceria a formação de moléculas com este tipo de ligação já que não são íons com cargas opostas e sem atração Coulombiana?

Responderemos com uma descrição quântica relacionada as funções de onda. Logo, os elétrons dos átomos interagentes combinam suas funções de ondas, como na figura a seguir.



Figura 2.12: superposição da função de onda dos elétrons e densidade de probabilidade retirada de: link imagem

Temos então nesta figura a função de onda do elétron 1 e a função de onda do elétron 2, ambas simétricas. A superposição da posição de onda dos dois elétrons acontece para uma posição r pequena. O módulo quadrático da função de onda resultante da superposição das funções de onda dos átomos nos dá que a probabilidade de onde o par de elétrons serem encontrados é maior entre dois átomos. Agora para elétrons com funções de ondas assimétricas teremos o resultado da figura a seguir.



Figura 2.13: superposição da função de onda dos elétrons e densidade de probabilidade retirada de: link imagem

Vemos que o resultado da combinação da função de onda dos elétrons é diferente, gerando uma probabilidade diferente, que nos mostra que a probabilidade do par de elétrons estarem entre os núcleos é mínima.

Logo, elétrons com funções de ondas simétricas favorecem o surgimento de uma nuvem eletrônica entre os núcleos. E para que o resultado da combinação das ondas seja antissimétrico, é preciso que os elétrons sejam antiparalelos. Logo, o momento de spin dos elétrons tem influência na sua combinação de ondas.

3

Conclusão

3.1 Conclusão

Ao longo da história tivemos vários estudos e experimentos para explicar a estrutura da matéria em escala cada vez menores. Vários cientistas realizaram as conclusões das suas observações propondo um modelo atômico. Começamos por Thomson, seu modelo não definia bem a estrutura atômica propondo o modelo do "pudim", onde o núcleo era maciço e continha os elétrons mergulhados. Porém, Thomson em seus estudos conseguiu verificar a existência do elétron e sua carga. Posteriormente, Rutherford, com seu estudo incidindo partículas alfas em uma placa de fina de ouro, chegou a conclusão que o átomo era composto de núcleo e eletrosfera, onde os elétrons orbitavam em torno do núcleo.

Logo, um modelo mais ponderado e coerente que o de Thomson, descrevendo o movimento dos elétrons. Porém, o modelo de Rutherford era instável, pois ssabia-se do eletromagnetismo que elétrons acelerados emitem radiação. Assim, o elétron deveria perder energia ao orbitar em torno do núcleo e, assim, perder colapsar para o núcleo atômico. Então, surge o modelo de Bohr que sugere as camadas de energias estáveis K, L, M, N, O, P, Q. Nesses níveis de energia o núcleo seria estável e existiam órbitas bem definidas para o elétron, nas quais ele não perderia energia. Os elétrons poderiam saltar entre as órbitas permitidas ao receber ou emitir energia. Posteriormente foi verificado a existência de subníveis de energia onde as camadas de energia apresentaria subníveis denominados s, p, d, f. Podemos realizar a distribuição eletrônica nas camadas e subcamadas de acordo com o diagrama de Pauling.

As várias descobertas experimentais e o desenvolvimento de novos caminhos matemáticos conduziram à formação de um campo do conhecimento denominado mecânica quântica. Depois do princípio da incerteza, onde foi postulado que não temos a precisão exata de onde está o elétron em seus orbitais e suborbitais, surgiu o modelo matemático ou equação de Schrödinger, onde a função de onda é determinada pelo conhecimento da energia potencial. O módulo ao quadrado da função de onda é uma densidade de probabilidade de encontrar o elétron em determinadas posições.

Aprendemos no ensino médio a tabela periódica como o ordenamento dos elementos pelo seu número atômico, chegamos a ver o diagrama de Pauli e aprender a distribuição eletrônica. Vimos outras características como energia de ionização e afinidade eletrônica. Porém, não aprendemos detalhadamente sobre o spin do elétron e outros fatores quânticos. Conseguimos associar os números quânticos a distribuição eletrônica, e vimos que a ligação covalente pode ser descrita como um fenômeno quântico de combinação de ondas dos elétrons.

Por fim, o presente trabalho pode servir como base para professores de física e química e estudantes diversos como uma introdução aos conceitos quânticos relacionados aos átomos e a organização da tabela periódica.

Д

Referências

4.1 Referências

- 1. USBERCO, J.; SALVADOR, E.. Química Vol. Único. Ed. 5ª. pp. 619 632. São Paulo: Editora Saraiva, 2002.
- 2. HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; KRANE, K. S. Fundamentos de Física. 9. ed., Rio de Janeiro: LTC, 2014, v. 4.
- OLIVEIRA, Ivan S. Física Moderna para Iniciados, Interessados e Aficionados, 1ª. d. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.
- 4. LEMBO, A. Química Realidade e Contexto. Volume 2. São Paulo: Editora Ática, 1999.
- OKUNO, E; CALDAS, I. L.; CHOW, C. Física para Ciências Biológicas e Biomédicas física para ciências biológicas e biomédicas. 1ª Ed. São Paulo: Editora Harper e Row do Brasil, 1982.
- 6. MAGALHÃES, L. Modelo Atômico de Rutherford. Toda Matéria. Disponível em <<u>https:</u> //www.todamateria.com.br/modelo-atomico-de-rutherford/>. Acesso em 17/05/2021.
- 7. KÍTOR, G. L. Dualidade onda-partícula. InfoEscola. Disponível em <<u>https://www.infoescola.com/fisica/dualidade-onda-particula/></u> Acesso em 17/05/2021.
- 8. CARDOSO, M. Modelo atômico de Broglie. InfoEscola. Disponível em <<u>https://www.infoescola.com/quimica/modelo-atomico-de-broglie</u>/> Acesso em 17/05/2021.
- Fauth, A. C. Propriedades ondulatórias das partículas. Matéria e Radiação Prof. Fauth. Disponível em https://www.ifi.unicamp.br/~fauth/10rigensMecanicaQuantica/30atomodeSchrodinger/OatomodeSchrodinger.html> Acesso em 17/05/2021.



Este trabalho foi redigido em LATEX utilizando uma modificação do estilo IC-UFAL. As referências bibliográficas foram preparadas no JabRef e administradas pelo BIBTEX com o estilo LaCCAN. O texto utiliza fonte Fourier-GUT*enberg*em corpo de 12 pontos. A numeração dos capítulos segue com a família tipográfica Art Nouveau Caps.