

Estrutura Atômica

- ▶ Para entender a estrutura interna de uma substância e relacioná-la às suas propriedades é preciso compreender sua estrutura eletrônica, isto é, como os elétrons se distribuem em torno de seu núcleo.

O que é um modelo

- ▶ Um modelo é construído a partir de conhecimentos e experiências disponíveis em uma dada época e evoluem através do tempo.

Cronologia

- ▶ Tales de Mileto (sec. VI a.C)

“Do que é feito o mundo? Como as coisas acontecem?”

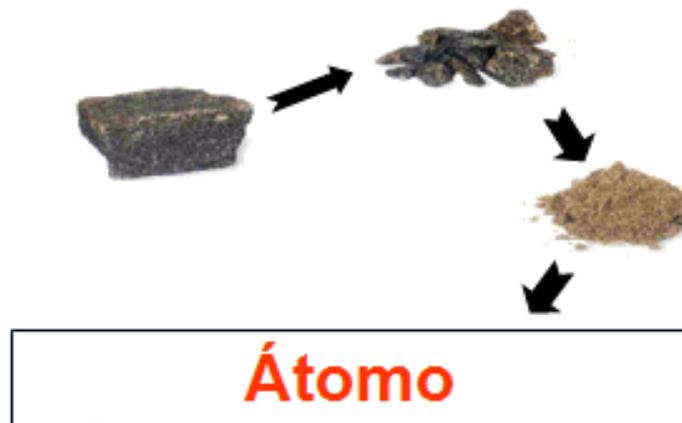
As respostas deveriam ser formuladas em termos de matéria básica.

Matéria é tudo aquilo que existe e ocupa lugar no espaço.

- ▶ Toda matéria existente no universo é formada por átomos, mas a constituição desses átomos ainda é indefinida.

- ▶ Em 430 a.C, Leucipo formula a primeira teoria científica sobre a composição da matéria. Esta teoria foi confirmada por seu discípulo Demócrito em 400 a.C:

“A matéria é constituída por partículas minúsculas e indivisíveis.”

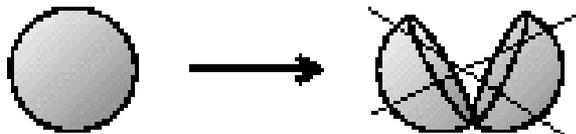


Teoria proposta por Demócrito

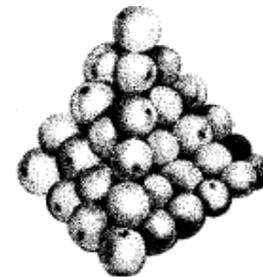
- Toda a matéria é constituída por átomos e vazio;
 - O átomo é uma partícula pequeníssima, invisível e que não pode ser dividida;
 - Os átomos encontram-se em constante movimento;
 - Universo é constituído por um número infinito de átomos, indivisíveis e eternos;
- 

Modelo Atômico de Dalton 1803-1804

- ▶ Descreveu o átomo como esferas puras, sem uma estrutura interna.
- ▶ Hoje sabemos que os átomos são formados por partículas subatômicas ainda menores. As mais importantes são o elétron, o próton e o nêutron.

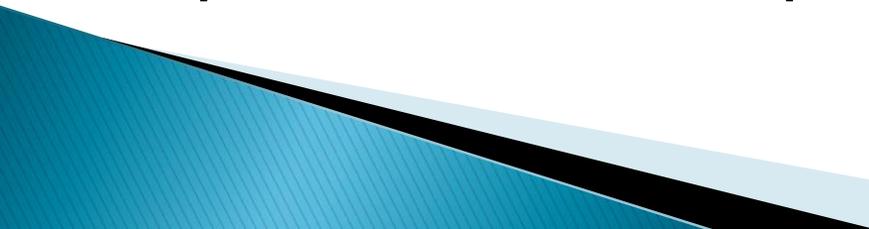


Não dá para dividir átomos



A estrutura atômica

O Modelo de Thomson (1897)

- ▶ A descoberta do elétron em 1897 foi a primeira evidência experimental da estrutura interna do átomo.
 - ▶ Thomson mostrou que os raios catódicos são fluxos de partículas negativas.
 - ▶ Essas partículas foram posteriormente chamadas de elétrons e eram as mesmas independente do metal usado como catodo, portanto faziam parte de todos os átomos.
- 

A estrutura atômica

O Modelo de Thomson (1897)

- ▶ A carga de um elétron foi determinada em $1,602 \times 10^{-19}$ Coulombs (C).
- ▶ Se os elétrons possuem carga negativa e a carga total do átomo é zero, isso significa que o átomo deve conter carga positiva o suficiente para neutralizar a carga negativa.
- ▶ Thomson sugeriu então que os elétrons estariam impregnados em torno do núcleo positivo, como um pudim de passas.

A estrutura atômica

O Modelo de Thomson (1897)

- ▶ O modelo de Dalton não menciona nada sobre a estrutura do átomo.
- ▶ Thomson demonstrou que o átomo não era indivisível através de um tubo com gás e 2 eletrodos ligados a uma fonte externa.
- ▶ Ao ligar o sistema, surgia um feixe de raios provenientes do catodo para o anodo, que era desviado na direção do polo positivo de um campo elétrico.

Tubo de raios catódicos

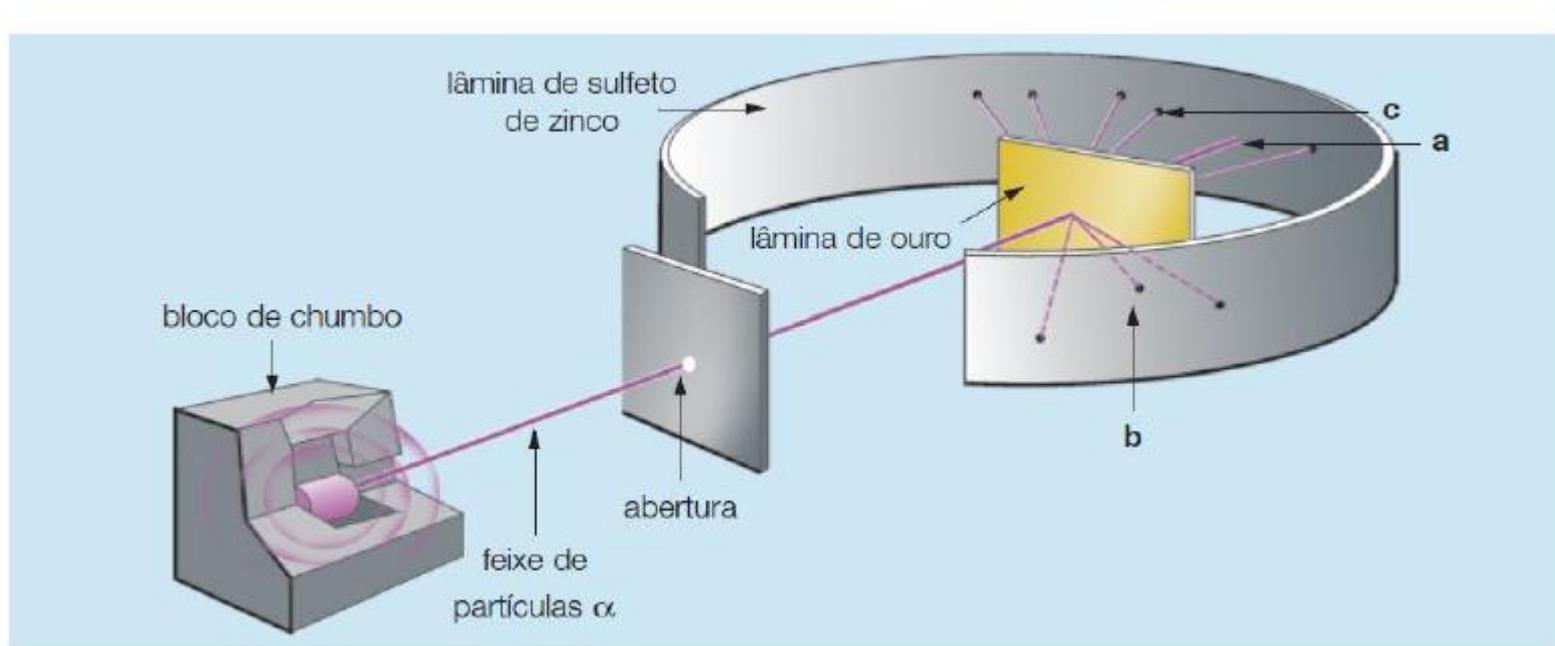
A experiência de Thomson



Modelo de Rutherford

- ▶ O modelo de Thomson foi descartado por Rutherford através de um experimento que consistia em lançar partículas positivas (α) emitidas por alguns elementos radioativos contra um anteparo de chumbo.

A Experiência de Rutherford



Conclusões de Rutherford

Observação	Conclusão
a) A maior parte das partículas α atravessava a lâmina sem sofrer desvios.	A maior parte do átomo deve ser vazio. Nesse espaço (eletrosfera) devem estar localizados os elétrons.
b) Poucas partículas α (1 em 20 000) não atravessavam a lâmina e voltavam.	Deve existir no átomo uma pequena região onde está concentrada sua massa (o núcleo).
c) Algumas partículas α sofriam desvios de trajetória ao atravessar a lâmina.	O núcleo do átomo deve ser positivo, o que provoca uma repulsão nas partículas α (positivas).

- ▶ O modelo de Rutherford foi bem aceito e os cientistas direcionaram seus estudos para a distribuição dos elétrons na eletrosfera do átomo.

Radiação Eletromagnética

- ▶ Uma vez aceito o modelo de Rutherford, a nova incógnita era: como os elétrons se arranjam ao redor do núcleo?
- ▶ Este estudo utilizou as propriedades de luz que os átomos emitem quando estimulados por calor ou descarga elétrica. Esta análise é chamada de espectroscopia.

Radiação Eletromagnética

- ▶ A luz é uma forma de radiação eletromagnética que consiste em campos elétricos e magnéticos oscilantes que atravessam o vácuo a 3×10^8 m/s.
- ▶ Outros tipos de radiação eletromagnética são:

Luz visível (700– 400 nm)

Ondas de rádio

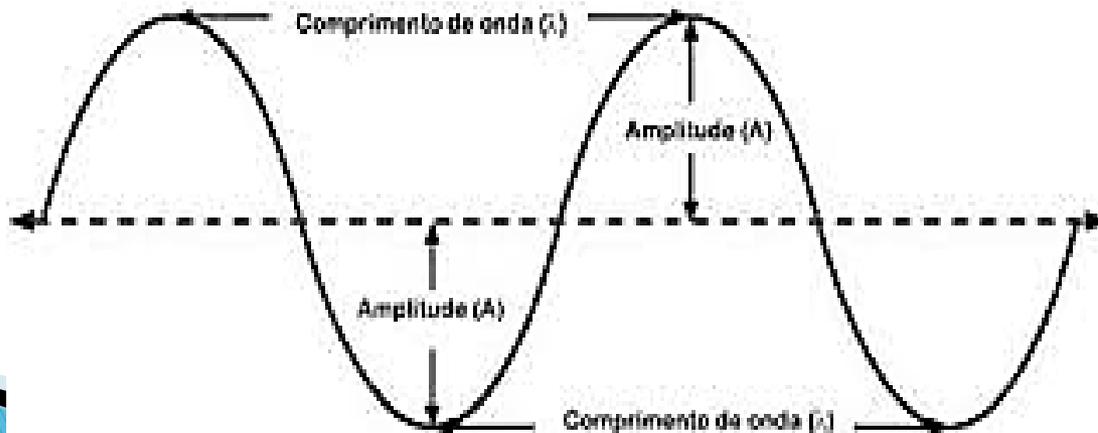
Micro-ondas

Raios X

- ▶ Essas formas de radiação transferem energia de uma região do espaço para outra.

Radiação Eletromagnética

- ▶ A frequência (ν) é a quantidade de ciclos por unidade de tempo ($\text{Hz} = 1/\text{s}$);
- ▶ Se o comprimento de onda (λ) for pequeno, a frequência é alta;
- ▶ Se o comprimento de onda (λ) grande, a frequência é baixa.



Radiação Eletromagnética

- ▶ A relação entre a frequência e o comprimento de onda é dada por:

$$\lambda \cdot \nu = c$$

Onde, λ é o comprimento de onda,
 ν é a frequência
 c é a velocidade da luz no vácuo,
 3×10^8 m/s

A cor da luz depende de sua frequência ou de seu comprimento de onda.

Radiação Eletromagnética

▶ Exemplo 1

Que radiação tem maior λ , a luz vermelha, cuja frequência é $4,3 \times 10^{14}$ Hz, ou a luz azul, cuja frequência é $6,4 \times 10^{14}$ Hz (1/s)?

Luz vermelha:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{4,3 \times 10^{14} \left(\frac{1}{s}\right)} = 6,977 \times 10^{-7} \text{ m} \cong 7 \times 10^{-9} \text{ m} = \mathbf{700 \text{ nm}}$$

Luz azul

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{6,4 \times 10^{14} \left(\frac{1}{s}\right)} = 4,688 \times 10^{-7} \text{ m} \cong 5 \times 10^{-9} \text{ m} = \mathbf{500 \text{ nm}}$$

▶ Calcule os comprimentos de onda das luzes de trânsito que mudam. Suponha que as frequências sejam: verde, $5,75 \times 10^{14}$ Hz; amarelo, $5,15 \times 10^{14}$ Hz; vermelho, $4,3 \times 10^{14}$ Hz.

▶ Resposta: Verde 521 nm; amarelo 582 nm; vermelho 700 nm.

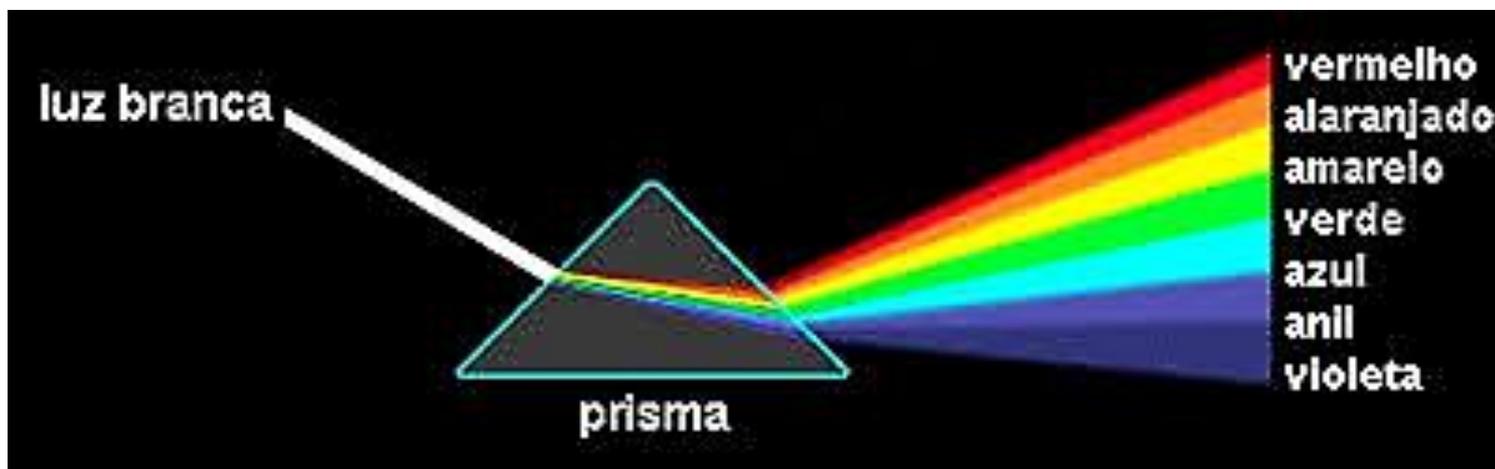
▶ Qual é o comprimento de onda utilizado por uma estação de rádio que transmite em 98,4 MHz?

▶ Resposta: 3,05 m



Espectros Atômicos

- ▶ A luz branca, que é formada por todos os comprimentos de onda da radiação visível, ao passar por um prisma, forma um espectro contínuo de luz.

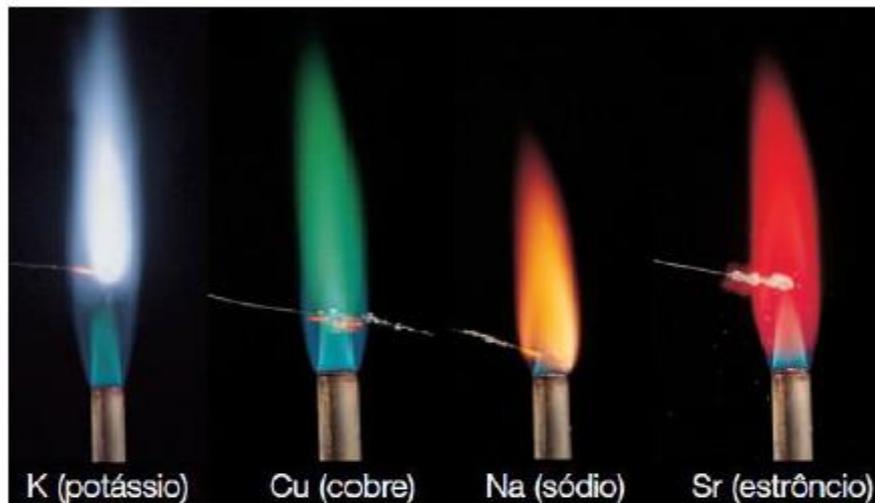


Espectros Atômicos

- ▶ Quando a luz emitida pelos átomos excitados de hidrogênio passa por um prisma, a radiação mostra um número discreto de componentes, isto é, linhas espectrais.
- ▶ A linha mais brilhante é em 656 nm, é vermelha e os átomos excitados do gás brilham com esta cor.



Elementos diferentes emitem luz diferente



K (potássio) Cu (cobre) Na (sódio) Sr (estrôncio)

Elementos diferentes produzem luz com cores diferentes.



As cores brilhantes dos fogos de artifício são produzidas pela queima de diferentes elementos químicos.

Espectros descontínuos

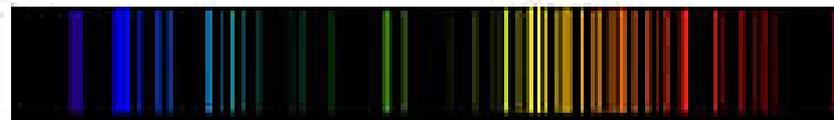
- ▶ O estudo da luz emitida pelos elementos químicos deu origem aos espectros descontínuos.



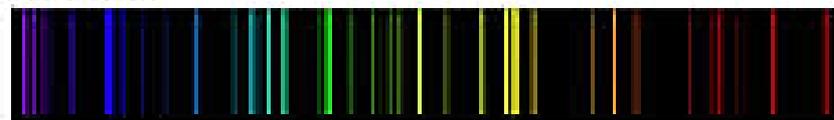
Hidrogênio



Hélio



Neônio



Mercúrio

A série de Balmer

- ▶ Johann Balmer identificou essa tendência nas linhas espectrais da região do visível e elaborou a seguinte equação :

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

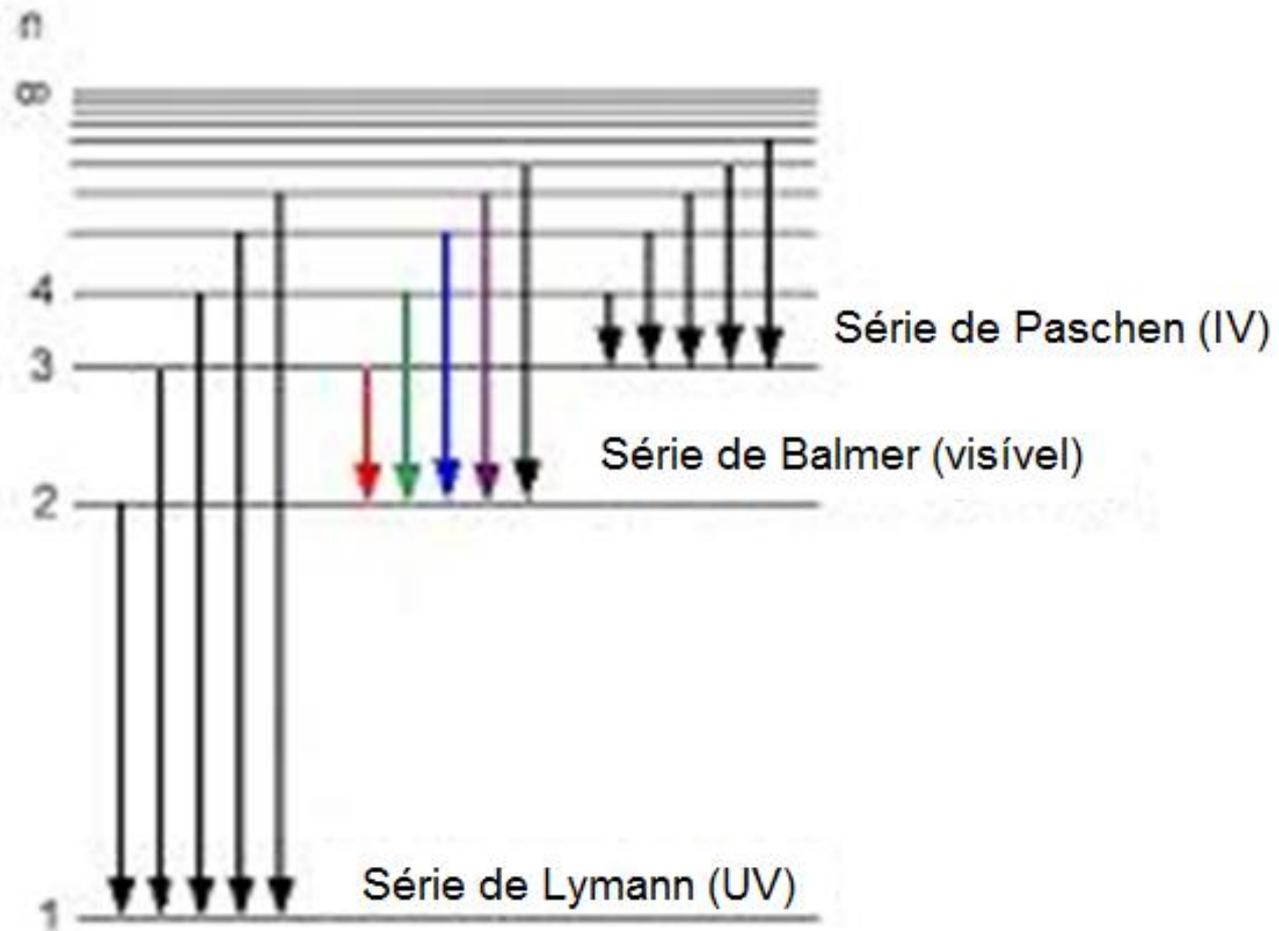
ν é a frequência

R é a constante de Rydberg ($3,29 \times 10^{15}$ Hz)

$n_1 = 1, 2, \dots$

$n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2 \dots$

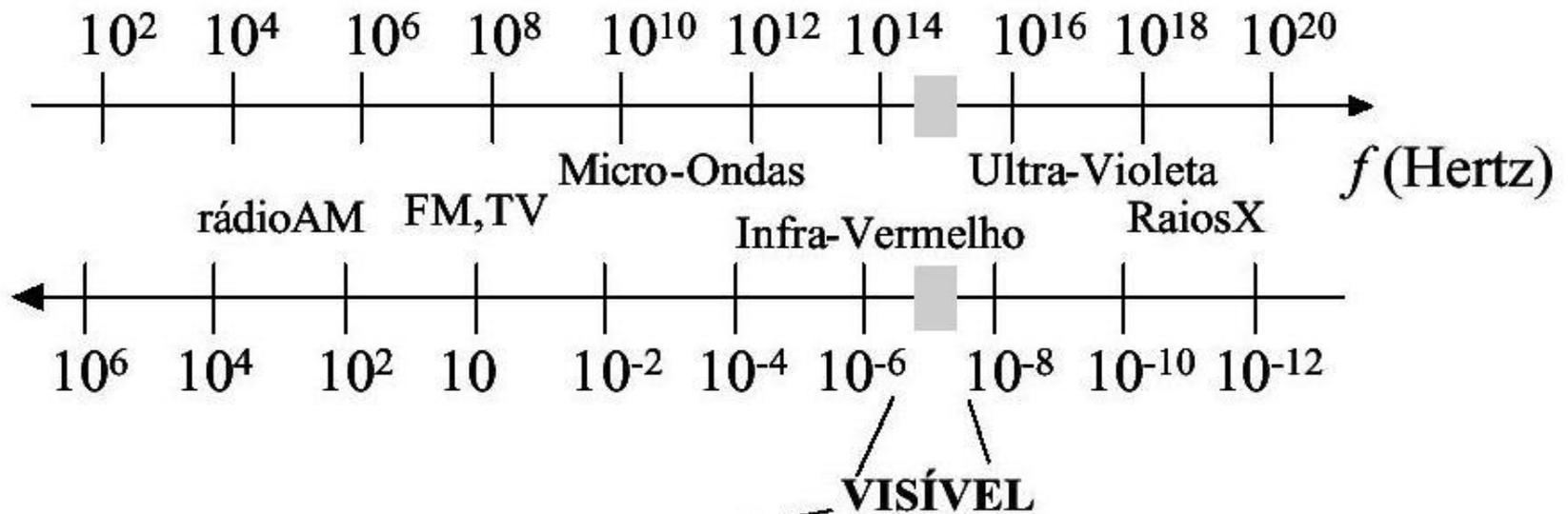
- ▶ A série de Balmer corresponde a um conjunto de linhas com $n_1 = 2$ e $n_2 = 3, 4, 5 \dots$
- ▶ A série de Lyman corresponde a um conjunto de linhas na região do ultravioleta com $n_1 = 1$ e $n_2 = 2, 3, 4 \dots$
- ▶ A série de Paschen corresponde a um conjunto de linhas na região do infravermelho, com $n_1 = 3$ e $n_2 = 4, 5, 6 \dots$



Cores do espectro visível

Cor	Comprimento de onda	Frequência
vermelho	~ 625-740 nm	~ 480-405 THz
laranja	~ 590-625 nm	~ 510-480 THz
amarelo	~ 565-590 nm	~ 530-510 THz
verde	~ 500-565 nm	~ 600-530 THz
ciano	~ 485-500 nm	~ 620-600 THz
azul	~ 440-485 nm	~ 680-620 THz
violeta	~ 380-440 nm	~ 790-680 THz

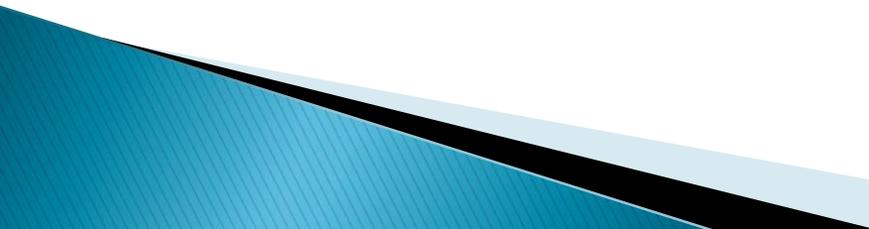
Espectro Eletromagnético



vermelho (4.3×10^{14} Hz), laranja, amarelo,..., verde, azul, violeta (7.5×10^{14} Hz)



O Modelo de Niels-Bohr (1913)

- ▶ Este modelo relaciona a distribuição dos elétrons na eletrosfera com sua energia.
 - ▶ Os elétrons devem descrever órbitas circulares ao redor do núcleo e essas órbitas devem ter energia constante (estacionária);
 - ▶ Elétrons mais distantes do núcleo apresentam maior quantidade de energia;
 - ▶ ao absorver energia o elétron salta para uma órbita mais energética e ao retornar ele libera a mesma quantidade de energia na forma de luz.
- 

- ▶ As órbitas foram denominadas níveis de energia e hoje são denominadas camadas

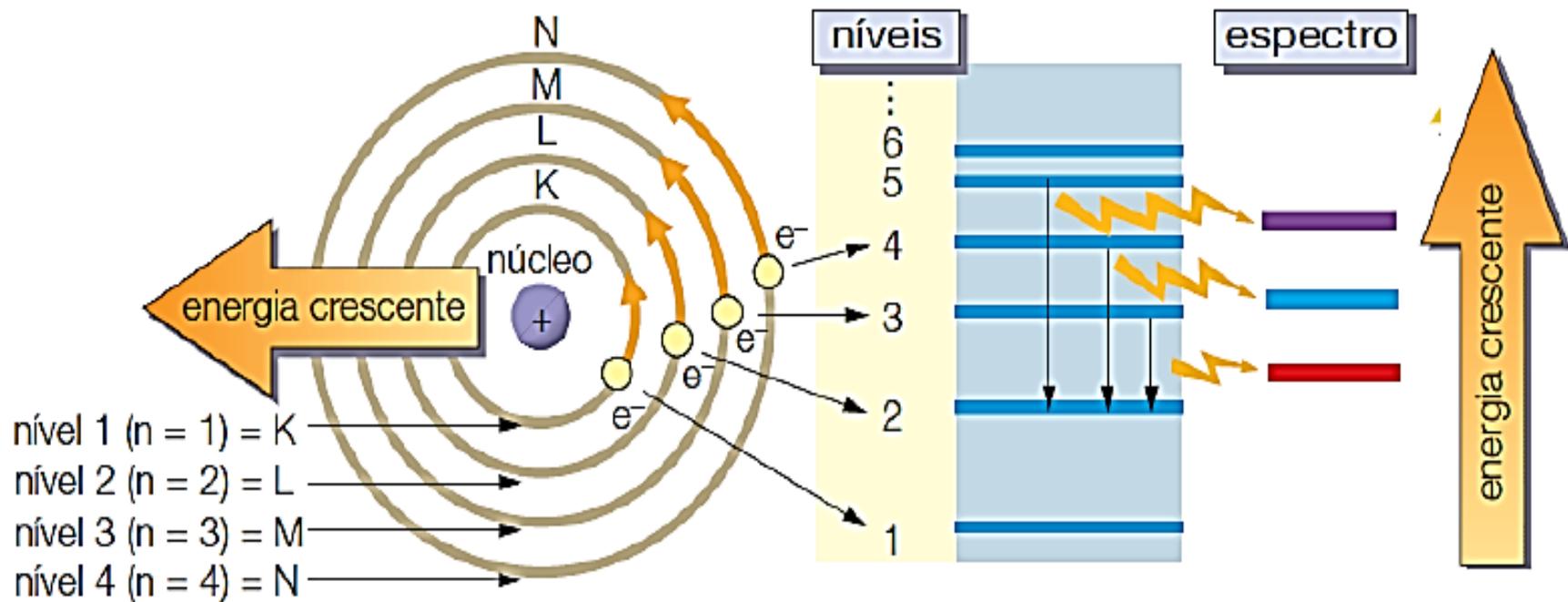
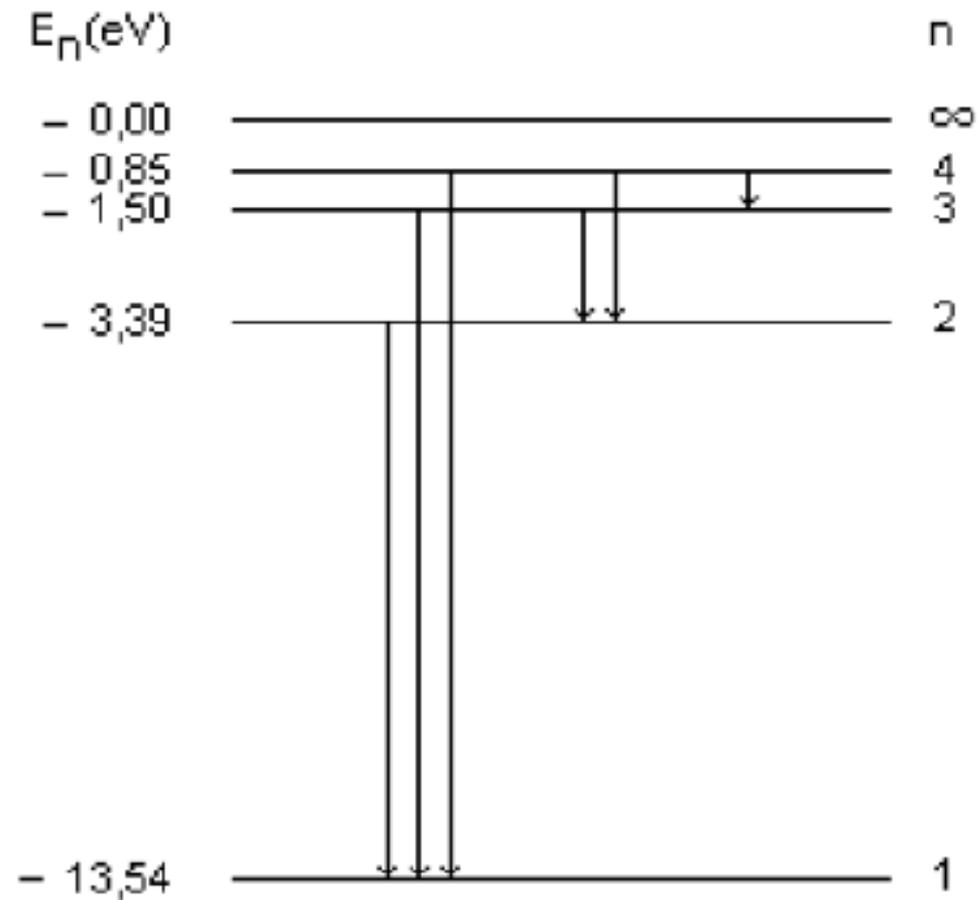


Diagrama para o átomo de Hidrogênio



A quantização da energia

▶ Exemplo

Calcule o comprimento de onda da radiação emitida por um átomo de hidrogênio para $n_1 = 2$ e $n_2 = 3$ e identifique a linha espectral.

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) = \frac{5}{36} R$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{c}{\frac{5}{36} R} = \frac{36 \times (3 \times 10^8)}{5 \times (3,29 \times 10^{15})} = 6,565 \times 10^{-7}$$

= 657 nm Vermelho

- ▶ Calcule o comprimento de onda para um átomo onde $n_1 = 2$ e $n_2 = 5$. Identifique a linha espectral.

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{25} \right) = \frac{21}{100} R$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{c}{\frac{21}{100} R} = \frac{100 \times (3 \times 10^8)}{21 \times (3,29 \times 10^{15})} = 4,34 \times 10^{-7} m$$

- ▶ Resposta: 434 nm, luz violeta

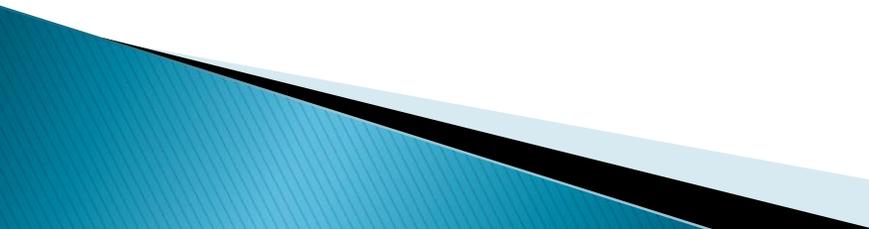
Quantização da energia

- ▶ Um espectro descontínuo sugere que o elétron possa existir apenas com certas energias e as linhas do espectro de emissão são provenientes das transições entre duas energias permitidas.
 - ▶ Estas frequências específicas sugerem que a energia do átomo está restrita a valores discretos chamados níveis de energia.
- 

Efeito fotoelétrico

- ▶ Até o fim do século XIX as linhas do espectro do hidrogênio ainda não tinham explicação definitiva.
- ▶ Após estudos sobre a radiação de corpo negro, Max Planck propôs que a troca de energia entre a matéria e a radiação ocorre em *quanta*, isto é, em pacotes de energia.
- ▶ Isto ficou equacionado como $E = h\nu$, onde h é a constante de Planck, igual a $6,626 \times 10^{-34}$ J.s

Efeito fotoelétrico

- ▶ Planck descreveu o efeito fotoelétrico, que é a ejeção de elétrons de um metal quando a superfície é exposta à radiação ultravioleta.
 - ▶ Efeito fotoelétrico
 - ▶ Einstein propôs então que a radiação eletromagnética é feita de partículas, mais tarde chamadas de fótons.
- 

- ▶ Cada fóton pode ser entendido como um pacote de energia e sua energia se relaciona com a frequência da radiação pela equação $E = h\nu$.
- ▶ A intensidade da radiação é uma indicação do número de fótons e $E = h\nu$ é uma medida da energia de cada fóton.

▶ Exemplo

Qual é a energia de um fóton de luz azul de frequência $6,4 \times 10^{14}$ Hz? Qual é a energia por mol de fótons?

Para 1 fóton:

$$E = h\nu = (6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}) \times \left(\frac{6,4 \times 10^{14}}{\text{s}} \right)$$
$$= 4,2 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Para 1 mol de fótons

1 mol de fótons = $6,02 \times 10^{23}$ fótons

$$E = (6,02 \times 10^{23}) \times (4,2 \times 10^{-19}) = 2,5 \times 10^5 \text{ J/mol}$$

Efeito fotoelétrico

- ▶ Estudos sobre a radiação do corpo negro levaram à hipótese de Planck sobre a quantização da radiação eletromagnética.
- ▶ O efeito fotoelétrico forneceu a evidência sobre a natureza de partícula da radiação eletromagnética.

Dualidade partícula- onda

- ▶ Neste ponto, muitas pesquisas mostravam que a radiação eletromagnética consiste de fótons que se comportavam como partículas.
 - ▶ Outros experimentos porém evidenciavam que a radiação eletromagnética se comportava como onda.
 - ▶ Esses experimentos levaram ao conceito da dualidade partícula-onda da radiação eletromagnética.
- 

Dualidade partícula- onda

- ▶ Enquanto onda, a intensidade da radiação é proporcional ao quadrado da amplitude da onda.
 - ▶ Enquanto partícula, a intensidade é proporcional ao número de fótons presentes em cada instante.
- 

Dualidade partícula- onda

- ▶ O cientista Louis de Broglie propôs então que todas as partículas deveriam ser entendidas como tendo propriedades de onda e elaborou a relação

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

Onde mv é o momento linear p de uma partícula.
Reescrevendo,

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

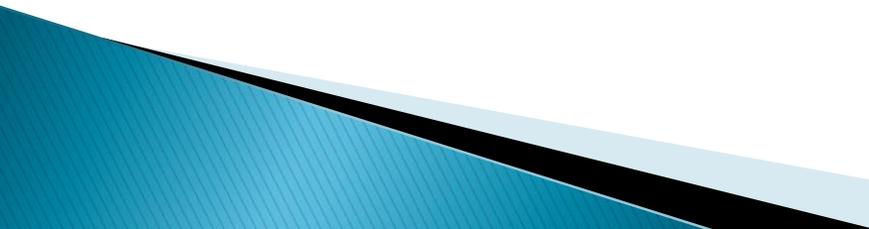
▶ Exemplo

Demonstre com cálculo matemático porque as propriedades de onda das partículas não podem ser facilmente detectadas calculando o comprimento de onda de uma partícula de 1g que viaja a 1m/s. (1J= 1kg.m²/s²)

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ kg.m}^2/\text{s}^2}{0,001 \text{ Kg} \times 1 \text{ m/s}} = 6,626 \times 10^{-31} \text{ m}$$

O comprimento de onda é muito pequeno para ser detectado. Isso é válido para qualquer objeto macroscópico que viaje em velocidades normais.

Dualidade partícula-onda

- ▶ Ao demonstrar que os elétrons sofrem difração, os cientistas Clinton Davisson e Leslie Gerner comprovaram o caráter ondulatório dos elétrons.
 - ▶ Experimento da Dupla Fenda
 - ▶ Os elétrons, e portanto, a matéria, têm propriedades de onda e de partículas.
- 

Princípio da Incerteza

- ▶ Na mecânica clássica, uma partícula tem uma trajetória definida onde sua localização e seu momento linear são especificados a cada instante.
- ▶ Entretanto, não é possível especificar a localização precisa de uma partícula se ela se comporta como uma onda.
- ▶ Esta dificuldade não pode ser resolvida. A dualidade partícula-onda elimina a possibilidade de descrever a localização se o momento linear é conhecido.

Princípio da Incerteza

- ▶ O princípio da incerteza da Heisenberg formulado em 1927 expressa quantitativamente essa complementariedade:

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Onde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ e $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

Funções de onda e níveis de energia

- ▶ Como as partículas têm propriedade de onda, elas não se comportam como objetos pontuais que se movem em trajetórias precisas.
- ▶ O cientista Erwin Schrödinger substituiu a trajetória precisa de uma partícula por sua função de onda ψ , cujos valores variam com a posição.

Funções de onda e níveis de energia

- ▶ Max Born interpretou fisicamente ψ dizendo que a probabilidade de encontrar uma partícula em uma região é proporcional a ψ^2 , isto é ψ^2 é uma **densidade de probabilidade**.
- ▶ Quando ψ , e conseqüentemente $\psi^2 = 0$, a região do espaço é chamada de nodo, e dizemos que a partícula tem densidade de probabilidade zero nos nodos de uma função.

Funções de onda e níveis de energia

- ▶ Para calcular a função de onda de uma partícula e sua energia E utilizamos a Equação de Schrödinger:

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

Ou

$$H\psi = E\psi$$

Toda a parte esquerda da equação pode ser representada pelo hamiltoniano H .

Números Quânticos

- ▶ Todos os experimentos realizados e suas conclusões levaram à construção de um modelo quantomecânico do átomo de hidrogênio.
- ▶ Este modelo combina o conhecimento de que o e⁻ tem propriedades de onda e é descrito por uma função de onda, com o modelo nuclear do átomo e explica a série de níveis de energia sugeridos pela espectroscopia.

Números Quânticos

- ▶ Os níveis de energia de um átomo são definidos pelo número quântico principal $n = 1, 2, 3, \dots$
- ▶ A energia em um dado nível n é expressa por:

$$E_n = \frac{Z^2 h R}{n^2}$$

Onde: Z é o número atômico; h é a constante de Planck; R é a constante de Rydberg; n é o número quântico principal

O sinal negativo representa a atração do núcleo: quanto mais perto do núcleo ($<n$), menor a energia do elétron; quanto mais distante ($>n$) maior a energia do elétron

Números Quânticos

- ▶ As funções de onda de elétrons em átomos são chamadas de orbitais atômicos e são soluções da equação de Schrödinger.
- ▶ As funções de onda permitem determinar não só as energias permitidas para o elétron mas também sua distribuição ao redor do núcleo.
- ▶ A resolução detalhada da equação de Schrödinger mostra que são necessários 3 números quânticos para caracterizar cada função de onda, porque o átomo tem três dimensões.

Números Quânticos

- ▶ Esses números são chamados de n , l e m :

n – número quântico principal; especifica a energia do orbital.

l – número quântico do momento angular; é uma medida da velocidade com que o elétron circula ao redor do núcleo.

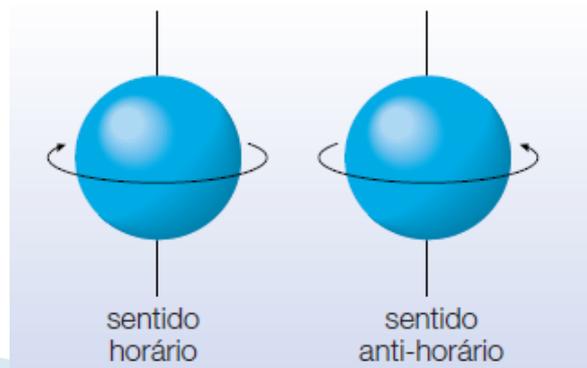
m – número quântico magnético; distingue entre si os orbitais de uma sub camada.

Números Quânticos

- ▶ Ainda assim, as linhas espectrais observadas não tinham exatamente a frequência predita por Schrödinger.
- ▶ Dois físicos holandeses sugeriram que o elétron poderia se comportar como uma esfera que gira em torno de seu eixo. Essa propriedade foi chamada de **spin**.

Números Quânticos

- ▶ De acordo com a mecânica quântica, um elétron tem dois estados de spin \uparrow e \downarrow e esses estados são distinguidos por um 4º número quântico, chamado de número quântico magnético de spin, s .
- ▶ O spin pode assumir dois valores, $+1/2$ (\uparrow) e $-1/2$ (\downarrow).



Quantidade de elétrons por subnível

