

TLQ - Teoria da Ligação Química

Felipe B. Pinto 61387 - MIEQB

17 de dezembro de 2021

Conteúdo

I – Anotações	3	4	Difração	9
Slide 1 Teoria Atômica I	3	5	Efeito fotoelétrico	9
1 Do grego: Átomos	3	6	Comprimento de onda do eletron	11
2 Teoria Atômica de Dalton	3	7	Equação de Rydberg	12
3 J. J. Thomson: modelo pudim de passas	4	8	Generalizando para além do hidrogênio	13
4 Experimento da folha de ouro de Rutherford	5	II – Exercícios		15
5 Teoria orbital de Bohr	5	Lista 1		15
Slide 2 Teoria Atômica II	8	Questão 1		15
1 Teoria orbital de Bohr (cont.)	8	Questão 2		15
2 Refração	8	Questão 3		16
3 Interferencia	9	Questão 4		16

I – Anotações

Slide 1 – Teoria Atômica I

História

1 Do grego: Átomos

No 5º Século A.C o filosofo Leucippus de Miletus originou a filosofia atômica, seu discípulo Democritus de Abdera nomeou átomo significando literalmente indivisível, e caracterizou os átomos por possuírem tamanhos e formas diferentes atribuindo a matéria que eles formam suas características.

A filosofia atômica nunca foi aceita por Aristotles e como sua filosofia deu origem a igreja cristã na europa, a igreja perseguiu aqueles que iam contra a filosofia aristotélica, atrasando bastante o desenvolvimento da teoria atômica.

2 Teoria Atômica de Dalton

Apenas no século 19 d.c a teoria atômica foi retomada com a publicação do livro *A New System of Chemical Philosophy* de John Dalton com base no princípio da conservação de massa em reações químicas de Lavoisier, elevando o conceito filosófico de átomo para uma teoria química. Dentre os conteúdos de sua publicação se discutiam o seguinte:

2.1 Postulados

1. Elementos consistem de minúsculas partículas sem carga, indestrutíveis e indivisíveis;
2. Todos os átomos do mesmo elemento são iguais, diferentes elementos possuem diferentes tipos de átomos;
3. Átomos não são nem criados nem destruídos;
4. Diferentes átomos podem se juntar em simples proporções para formar “átomos compostos”.

3 J. J. Thomson: modelo pudim de passas

3.1 Pretexto: Experimentos com ampola de Crooks

Ampolas alongadas e vedadas onde se podia inserir gases e reduzir sua pressão com uma bomba de vácuo, além de possuir um cátodo e um anodo de pilhas em cada uma das suas extremidades.

Ao diminuir a pressão a 10 mmHg no interior de uma ampola preenchida com hidrogênio uma luz rosa passou a ser emitida pela ampola.

...

- átomos possuem pequenas partículas carregadas negativamente (elétrons)
- núcleo positivo constitui praticamente toda a massa do átomo

4 Experimento da folha de ouro de Rutherford

Bloco contendo Rádio emissor de partículas (positivas) que colidem com uma fina lamina de ouro, verificando o desvio das partículas que poderiam apenas ser explicadas pela interação elétrica com o campo gerado pelo núcleo dos átomos de ouro, que para possuir um campo suficientemente forte precisa ser pequeno.

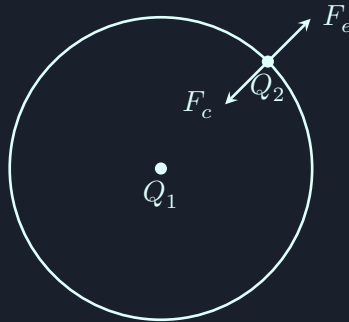
Para que o núcleo seja pequeno, os elétrons tem que orbitar ao seu redor, e se esse for o caso pelas leis de Maxwell partículas carregadas em aceleração perdem energia em forma de ondas eletromagnéticas e os elétrons se colidiria com o núcleo causando a em alguns milésimos o que obviamente não ocorre.

A conclusão desse experimento contraria Maxwell, e por isso Rutherford descontinuou seus estudos atômicos.

5 Teoria orbital de Bohr

Usando o “*insight*” de Rutherford

1. Elétrons existem em estados estacionários
2. Qualquer variação do elétron no estado estacionário implica em absorção e emissão de ondas eletromagnéticas
3. momento angular do elétron é quantizado ou $L = |m_e \vec{v} \times \vec{r}| = n \hbar \quad \forall n \in \mathbb{K}$
onde $\hbar = h/2\pi$



Raio da orbita

$$m_e v^2 / r = F_c = F_e = \frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 r^2} \wedge m_e v r = \frac{n h}{2 \pi} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow r = \frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 m_e \left(\frac{n h}{2 \pi m_e r} \right)^2} \Rightarrow r = \frac{\varepsilon_0 n^2 h^2}{e^2 \pi m_e}$$

velocidade do elétron

$$m_e v r = \frac{n h}{2 \pi} \Rightarrow v = \frac{n h}{2 \pi m_e \left(\frac{\varepsilon_0 n^2 h^2}{e^2 \pi m_e} \right)} = \frac{e^2}{2 \varepsilon_0 n h}$$

Energia Cinética

$$E_c = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{m_e}{2} \left(\frac{e^2}{2 \varepsilon_0 n h} \right)^2 = \frac{\left(\frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \right)}{n^2} = k / n^2$$

Energia Potencial

$$E_p = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 \left(\frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{e^2 \pi m_e}\right)} = \frac{-2m_e e^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2} = -2k/n^2$$

Energia total

$$E_t = E_c + E_p = k/n^2 - 2k/n^2 = -k/n^2$$

k

$$\begin{aligned} k &= \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = \\ &= \frac{9.10938356 * 10^{-31} \text{ kg} * (1.60217662 * 10^{-19} \text{ C})^4}{8 * (8.8541878128 * 10^{-12} \text{ F m}^{-1})^2 * (6.62607015 * 10^{-34} \text{ J Hz}^{-1})^2} \cong \\ &\cong 2.179872251033439 * 10^{-18} \frac{\text{kgC}^4\text{m}^2\text{Hz}^2}{\text{F}^2\text{J}^2} \cong 2.17987 * 10^{-18} \frac{\text{kgC}^4\text{m}^2\text{Hz}^2}{\text{F}^2\text{J}^2} \end{aligned}$$

Slide 2 – Teoria Atômica II

1 Teoria orbital de Bohr (cont.)

Energia de Ionização do Hidrogênio

$$E_i = \lim_{n \rightarrow \infty} |E_{t0} - E_{tn}| = \lim_{n \rightarrow \infty} k |1^{-2} - n^{-2}| = k \cong 2.179\,87 * 10^{-18}$$

Espectro de emissão do Hidrogênio

Apesar das derivações da teoria de Bohr, ela permite prever o espectro de emissão do hidrogênio

...

Fenômenos Ondulatórios

2 Refração

Quando uma onda passa a se propagar em um meio diferente.
Consequencias

- Alteração do comprimento de onda e consequentemente a velocidade de propagação (a frequência depende apenas da origem).
- Alteração da direção de propagação.

regra geral matéria interfere negativamente com a propagação de onda, diminuindo sua velocidade e comprimento de onda e aumentando o desvio.

3 Interferencia

Interação dentre ondas de mesmas características.

Tipos:

Construtiva

Momento de sincronização onde suas amplitudes se somam

Destrutiva

Momento de sincronização onde suas amplitudes se subtraem

4 Difração

Ocorre quando uma onda passa por um obstáculo com ordem de grandeza próxima do comprimento de onda.

5 Efeito fotoelétrico

Fenômeno que ocorre quando placas carregadas recebem emissão eletromagnéticas liberam elétrons

- Energia cinética dos elétrons depende da frequência da onda eletromagnética
- A quantidade de elétrons depende da intensidade da onda.

Foton (Quanta)

Energia associada a uma dada frequência.

Explicando o efeito fotoelétrico pela característica dos elétrons de apenas receberem uma quantidade fixa de energia (chamada de “quanta” por Einstein e substituída por “foton” pela aceitação do conceito da dualidade partícula-onda dos elétrons proposto pelo príncipe Louis de Broglie (1924))

$$E = h \nu$$

h : Constante de Plank = $662.61 \times 10^{-36} \text{ J s}$

ν : Frequencia da radiação

Dualidade partícula-onda (Príncipe Louis de Broglie)

$$\begin{aligned} \lambda \nu = c \wedge E = h \nu &\implies E = \frac{h c}{\lambda} = m_e c^2 \implies E = \frac{h v}{\lambda} = m_e v^2 \implies \\ &\implies \lambda = h/m_e v = h/P \end{aligned}$$

6 Comprimento de onda do eletron

O perímetro de uma determinada orbita de um eletron ao redor do núcleo terá de ser sempre um múltiplo inteiro do comprimento de onda do eletron

$$P = n \lambda = 2 \pi r \implies \lambda = 2 \pi r / n$$

Quantização do momento angular

$$\begin{aligned} |\vec{L}| &= |m_e \vec{v} \times \vec{r}| = m_e v r \sin \theta = \frac{m_e v}{h} \cdot 2 \pi r = \frac{n}{2 \pi r} \implies \\ \implies |\vec{L}| &= n \frac{h}{2 \pi} = n \hbar \end{aligned}$$

7 Equação de Rydberg

$$\bar{\nu}_H = R_H(n^{-2} - m^{-2}) \quad \forall \{n, m\} \in \mathbb{K} : m > n$$

R_H : Constante de Rydberg $109678.746 \text{ cm}^{-1}$

$\bar{\nu}$: Número de onda

Comparação com Variação de energia do elétron

$$\begin{aligned} \bar{\nu} = \lambda^{-1} \wedge \lambda \nu = c \wedge h \nu = \Delta E = k |n_1^{-2} - n_2^{-2}| &\implies \\ \implies \bar{\nu} = \frac{k}{h c} |n_1^{-2} - n_2^{-2}| \end{aligned}$$

Massa reduzida do átomo

Levando em consideração a massa do elétron e átomo

$$\begin{aligned} R_H &= 109678.764 \text{ cm}^{-1} \cong R \mu_H = (k/h c) \left(\frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \right) = \\ &= \left(\frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c} \right) \left(\frac{m_e (1836 m_e)}{m_e + (1836 m_e)} \right) = \frac{m_e^2 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c} \frac{1836}{1837} \cong 109677.6 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

8 Generalizando para além do hidrogênio

$$F_e = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \rightarrow \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \forall \{Z\} \in \mathbb{K}$$

II – Exercícios

Lista 1 –

Questão 1

Q1.1)

$$\begin{aligned} E_c &= E - E_{ion} = (h\nu - 738 * 10^3 / 602.21 * 10^{21}) \text{J} \frac{\text{eV}}{160.28 * 10^{-21} \text{J}} = \\ &= (662.61 * 10^{-36} * 2.63 * 10^{16} - 1.23 * 10^{-18}) \text{eV} / 160.28 * 10^{-21} \cong 95.11 \text{ eV} \end{aligned}$$

Q1.2)

$$E_c = E - E_{ion} : E > E_{ion}$$

Questão 2

Q2.1)

$$E_{ion} = E - E_c = h\nu - E_c = 662.61 * 10^{-36} * 4 * 10^{14} \cong 265.04 * 10^{-21} \text{ J}$$

Q2.2)

$$\lambda_{max} = c/\nu = 299.79 * 10^6 / 4 * 10^{14} \cong 749.48 \text{ nm}$$

Q2.3)

Não há relação da intensidade de uma radiação com a energia cinética adquirida pelos elétrons, esta irá apenas variar o número de elétrons afetados

Questão 3**Q3.1)**

$$E = h\nu; \lambda\nu = c \implies \\ \implies E = hc/\lambda = 6.626 * 10^{-34} \text{ J s } 2.9979 * 10^8 \text{ m s}^{-1} / 600 \text{ nm}$$

Questão 4

E