A. Gil Santos FCT/UNL

Teoria da Ligação Química

Lic. em Química Aplicada
e
M.I. em Eng. Química e Bioquímica

A. Gil Santos FCT/UNL

Teoria da Ligação Química

Programa

1. Estrutura atómica: Revisão histórica. Modelo de Bohr aplicado ao átomo de hidrogénio. Comportamento ondulatório. Princípio de incerteza de Heisenberg. A equação de Schrödinger. Valores próprios e funções próprias. Normalização da função de onda. Partícula numa caixa unidimensional. Números quânticos e dimensionalidade da caixa. Orbitais atómicas e níveis de energia. Função de distribuição radial. Momentos angulares. Átomos polieletrónicos. Propriedades periódicas.
2. Moléculas. Estruturas de Lewis. Geometria molecular. Estrutura molecular: Ligação iónica e energia da rede cristalina. Ligação covalente. Teoria de enlace de valência. Combinação linear de orbitais atómicas. Teoria das Orbitais Moleculares. Diagramas de energia de orbitais moleculares de moléculas diatómicas e poliatómicas. A reatividade química segundo a teoria de orbitais fronteira. Ácidos e bases de Lewis. Formação de adutos. Nucleófilos e electrófilos.

Teoria da Ligação Química

Bibliografia

1. R. L. Deckock, H. B. Gray, Chemical Structure and Bonding, University Science Books, Sausalito, California, 1989.
2. Slides das aulas TP.

Teoria da Ligação Química

Avaliação

1. Avaliação global da Unidade Curricular:

Ao longo do semestre os alunos realizarão 2 (dois) testes parciais obrigatórios. A classificação final (nota global) será a média das notas dos testes parciais, com a soma ou subtração da correção de nota devido a faltas às aulas TP e P (ver abaixo, Frequência). Só poderão ser aprovados à Unidade Curricular, os alunos que obtenham pelo menos 9.50 valores na nota global.

2. Frequência:

As faltas às aulas TP e P serão diretamente repercutidas na nota global, de acordo com a tabela apresentada no documento "Faltas_Regras.pdf", disponível no Clip, em "Documentação de Apoio/Outros". Este sistema aplica-se a todos os alunos, independentemente do número de inscrições na UC. Os alunos que tenham uma penalização por faltas superior a 10.5 valores (soma da penalização nas aulas TP com a penalização nas aulas P), não terão frequência à UC.

3. Exame de Recurso:

Os alunos que não tenham obtido nota global igual ou superior a 9.50 valores durante a avaliação contínua, terão acesso a uma única época de exame - Recurso. O exame de recurso incide sobre toda a matéria. A nota global será obtida pela soma da correção de nota devido a faltas às aulas TP e P (ver acima, Frequência) com a nota obtida no exame de recurso. Só serão aprovados os alunos que obtenham pelo menos 9.50 valores na nota global.

Calendário das aulas práticas

CALENDÁRIO DAS AULAS PRÁTICAS		
Dia	Turno	Sala
18 de Outubro (2ª Feira)	op.1	Remoto
25 de Outubro (2ª Feira)	op.1	Remoto
8 de Novembro (2ª Feira)	op.1	Remoto
15 de Novembro (2ª Feira)	op.1	Remoro
25 de Novembro (5ª Feira)	tp.1	4.2/Ed. D
25 de Novembro (5ª Feira)	tp.2	3.4/Ed. VII
2 de Dezembro (5ª Feira)	tp.1	4.2/Ed. D
2 de Dezembro (5ª Feira)	tp.2	3.4/Ed. VII
9 de Dezembro (5ª Feira)	tp.1	4.2/Ed. D
9 de Dezembro (5ª Feira)	tp2	3.4/Ed. VII
16 de Dezembro (5ª Feira)	tp.1	4.2/Ed. D
16 de Dezembro (5ª Feira)	tp.2	3.4/Ed. VII
20 de Dezembro (2ª Feira)	op.1	Remoto
6 de Janeiro (5ª Feira)	tp.1	4.2/Ed. D
6 de Janeiro (5ª Feira)	tp2	3.4/Ed. VII

Aula 1

Teoria da Ligação Química

- Esta Unidade Curricular (UC) pretende introduzir os alunos aos conceitos modernos que permitem racionalizar e prever a estrutura e a reatividade químicas de qualquer tipo de composto.
- Sabemos hoje, os compostos químicos são formados por moléculas que, por sua vez, são formadas por átomos.
- Então, para estudarmos a reatividade química de moléculas implica conhecermos como se ligam os átomos entre si, de modo a formarem essas mesmas moléculas.
- Evidentemente, compreendermos como os átomos se ligam entre si, implica compreendermos também a constituição desses mesmos átomos.
- Logo, antes de abordarmos a Teoria de Ligação Química, necessitamos de discutir, com algum detalhe, aquilo que se designa por Teoria Atómica.

Teoria atómica

- O conceito de átomo é um conceito muito antigo, tendo sido introduzido pela filosofia grega (Leucippus e Democritus, séc. V a.c.) para designar a mais ínfima partícula em que um determinado material podia ser dividido.
- De facto, a palavra grega ἄτομον (*atomon*) significa indivisível.
- Segundo o atomismo grego, haveria uma enorme quantidade de átomos, com diferentes formas e tamanhos, que se combinavam para formar todas as substâncias existentes no Universo.
- Entretanto, com Aristóteles e outros filósofos que se seguiram, houve grande oposição a esta teoria, que foi esquecida até ao século XVIII, quando algumas experiências químicas (alquímicas) mostraram que substâncias puras, como o óxido de mercúrio (HgO) ou a água (H_2O) eram facilmente decompostas noutras substâncias, ou formadas a partir delas.

Teoria atómica

- Assim, em 1744, Joseph Priestley descobriu que o aquecimento de HgO (sólido vermelho ou amarelo) originava Hg líquido e um gás que, muito mais tarde, foi identificado como sendo oxigénio. Foi também mostrado que a combinação de oxigénio com mercúrio metálico originava de novo o óxido de mercúrio.

- Por outro lado, em 1789, Jan Rudolph Deiman e Adriaan Paets van Troostwijk descobriram a electrólise de água por ação duma corrente elétrica. Mais tarde foi demonstrado que a combinação dos dois gases formados originava água, tendo os gases sido designados como hidrogénio e oxigénio (o nome do primeiro reflete a sua origem a partir da água).

- Todas estas descobertas culminaram nos trabalhos de Lavoisier, que originaram a célebre Lei de Lavoisier (1789).

Teoria atómica

- É hoje evidente que o conceito original do átomo grego corresponde ao nosso conceito de molécula, tendo o termo átomo passado a ser utilizado para designar os componentes das moléculas que, à época, eram pressupostos serem indivisíveis (*atomon*).

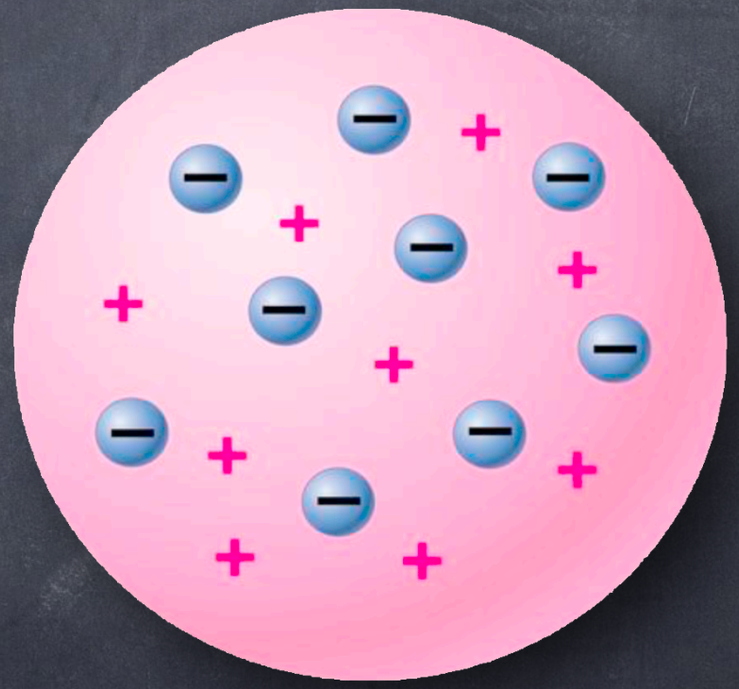
- No entanto, com a constatação da periodicidade do comportamento químico dos elementos (tabela periódica publicada por Dmitri Mendeleev em 1869), e com a descoberta de que os átomos contêm partículas carregadas, positiva e negativamente (1900), estavam reunidas todas as condições para a proposta de teorias atómicas.

- Também nessa altura, Sir Joseph John Thomson descobriu que as partículas carregadas positivamente continham praticamente toda a massa dos átomos, enquanto que as partículas carregadas negativamente eram milhares de vezes mais leves.

Teoria atómica

- Também nessa altura, Sir Joseph John Thomson descobriu que as partículas carregadas positivamente continham praticamente toda a massa dos átomos, enquanto que as partículas carregadas negativamente eram milhares de vezes mais leves.

- Surgiu então a primeira proposta (Thomson) de estrutura atómica, que sugeria que os átomos seriam constituídos por uma estrutura do tipo "pudim ou bolo de passas", em que a carga positiva constituiria a base do átomo, estando as partículas negativas nela embebidas (como as passas embebidas na massa dum bolo ou pudim).



Modelo atómico proposto por Thomson (1900)

Teoria atómica

- Também nessa altura, Sir Joseph John Thomson descobriu que as partículas carregadas positivamente continham praticamente toda a massa dos átomos, enquanto que as partículas carregadas negativamente eram milhares de vezes mais leves.

- Surgiu então a primeira proposta (Thomson) de estrutura atómica, que sugeria que os átomos seriam constituídos por uma estrutura do tipo "pudim ou bolo de passas", em que a carga positiva constituiria a base do átomo, estando as partículas negativas nela embebidas (como as passas embebidas na massa dum bolo ou pudim).

- No entanto, a proposta de Thomson foi rapidamente abandonada, devido a uma série de experiências conduzidas por Ernest Rutherford, entre 1906 e 1909, que evidenciaram a impossibilidade do modelo de Thomson.

Teoria atómica

- No entanto, a proposta de Thomson foi rapidamente abandonada, devido a uma série de experiências conduzidas por Ernest Rutherford, entre 1906 e 1909, que evidenciaram a impossibilidade do modelo de Thomson.

- Em 1906 Rutherford descobriu que quando bombardeava uma folha de metal muito fina (cerca de 6×10^{-5} cm) com um feixe de partículas alfa (α), emitidas por um material radioativo, quase todas elas atravessavam o alvo, sofrendo apenas pequenos desvios na sua trajetória. Nessa altura sabia-se que as partículas α eram positivas. Hoje sabemos que são núcleos de hélio (He^{2+}).

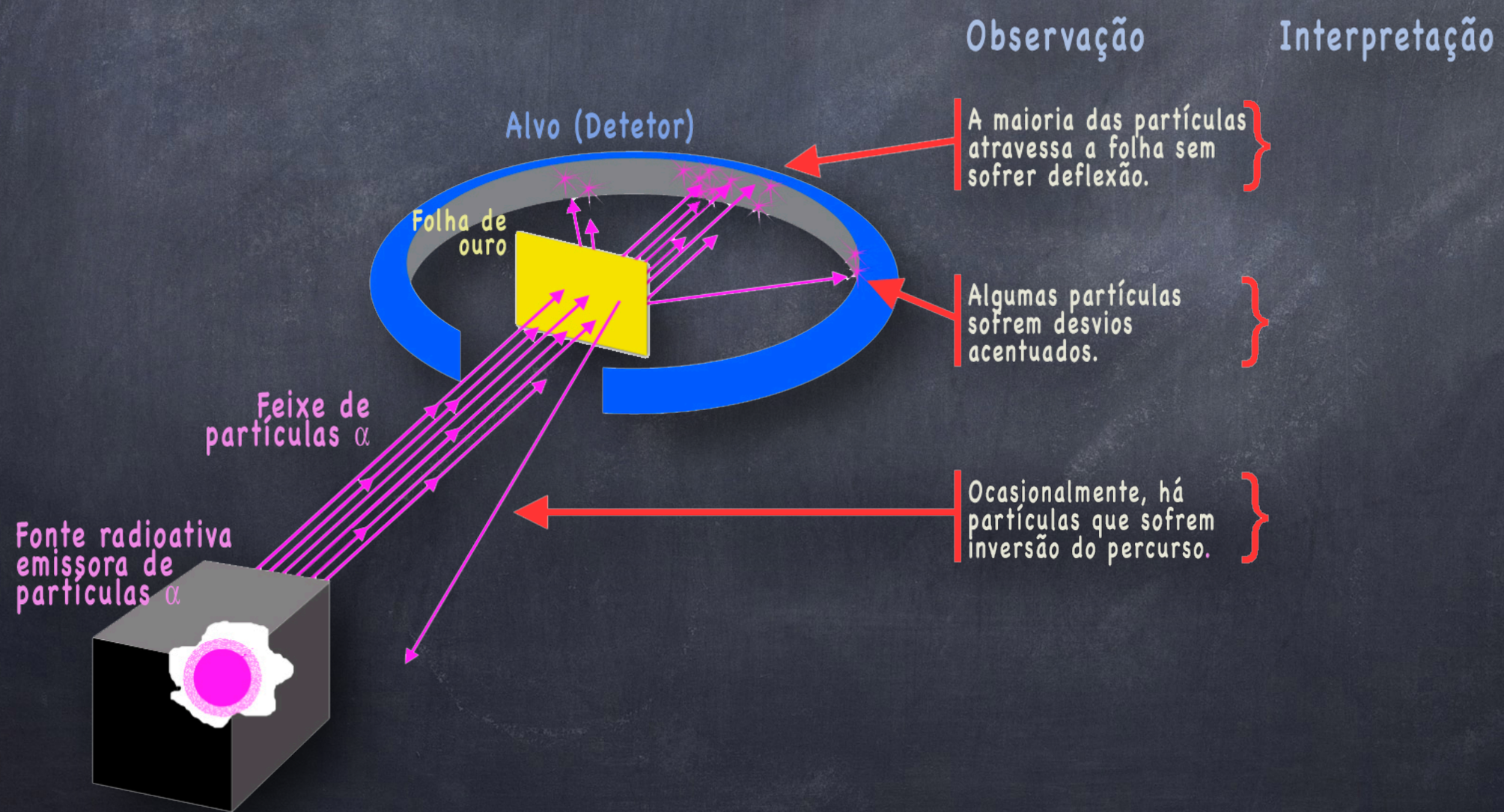
- Em 1909, por sugestão de Rutherford, Hans Geiger e Ernest Marsden confirmaram que a experiência de Rutherford, executada sobre uma folha de ouro (espessura semelhante), mostrava que a grande maioria das partículas α não alteravam, de facto, o seu percurso.

Teoria atómica

- Em 1909, por sugestão de Rutherford, Hans Geiger e Ernest Marsden confirmaram que a experiência de Rutherford, executada sobre uma folha de ouro (espessura semelhante), mostrava que a grande maioria das partículas α não alteravam, de facto, o seu percurso.
- No entanto, algumas delas eram deflectidas em ângulos até 90º, sendo um número pequeno deflectido em ângulos mais elevados.

Teoria atómica

- A grande maioria das partículas α não alteravam, de facto, o seu percurso. No entanto, algumas delas eram deflectidas em ângulos até 90º, sendo um número pequeno deflectido em ângulos mais elevados.



Teoria atómica

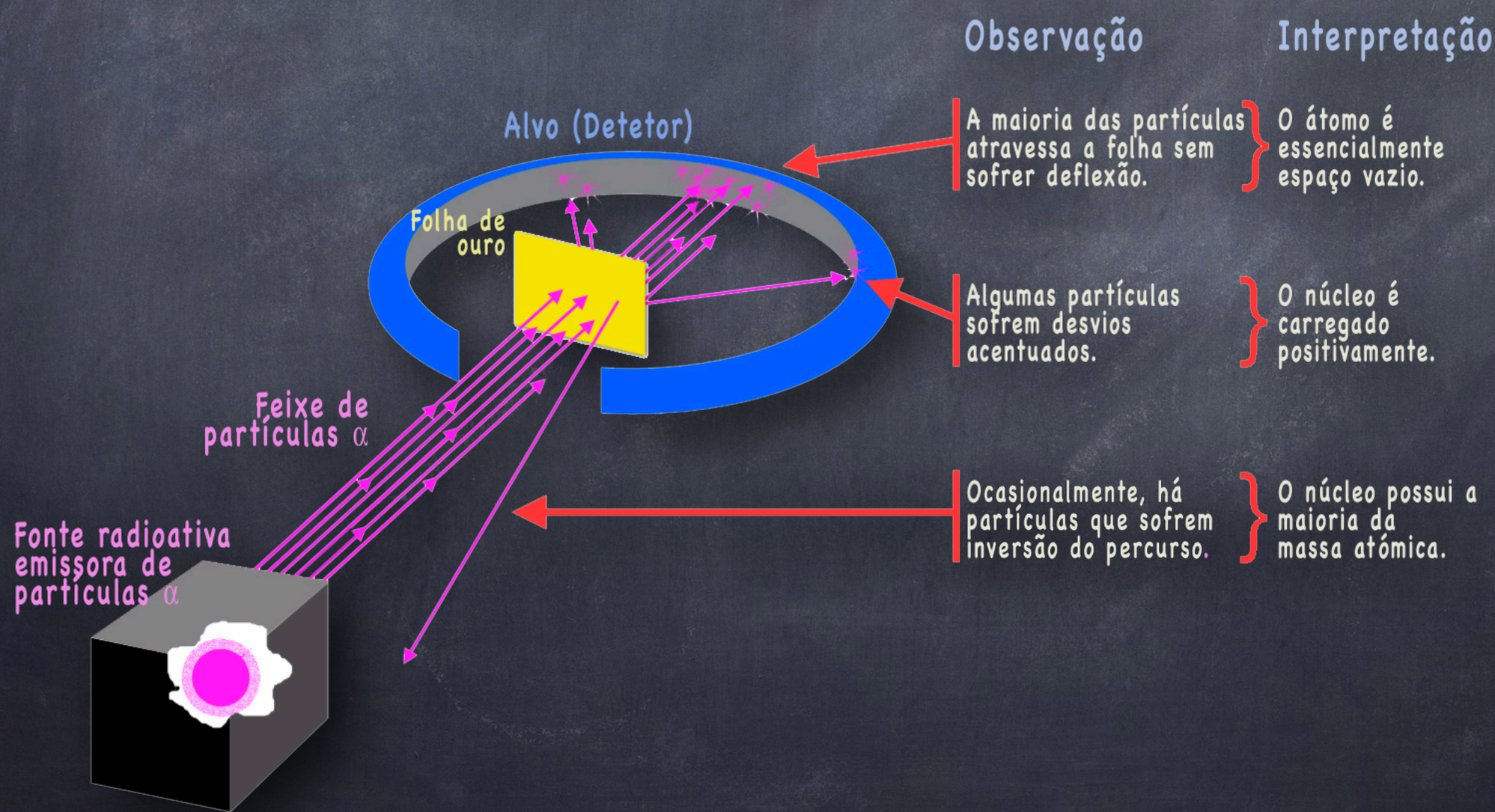
- Em 1909, por sugestão de Rutherford, Hans Geiger e Ernest Marsden confirmaram que a experiência de Rutherford, executada sobre uma folha de ouro (espessura semelhante), mostrava que a grande maioria das partículas α não alteravam, de facto, o seu percurso.

- No entanto, algumas delas eram deflectidas em ângulos até 90º, sendo um número pequeno deflectido em ângulos mais elevados.

- Considerando a massa e a velocidade muito elevada das partículas α, era estranho que pudessem sofrer desvios tão fortes nas suas trajetórias, provocadas apenas pela incidência numa folha de ouro com espessura tão baixa (6×10^{-5} cm). De facto, para se produzir um efeito semelhante através dum campo magnético, seria necessário um campo extremamente forte.

Teoria atómica

- Com base nestes resultados, Rutherford propôs um novo modelo de átomo, que permitia interpretar todas as observações experimentais conhecidas até à data.



Teoria atómica

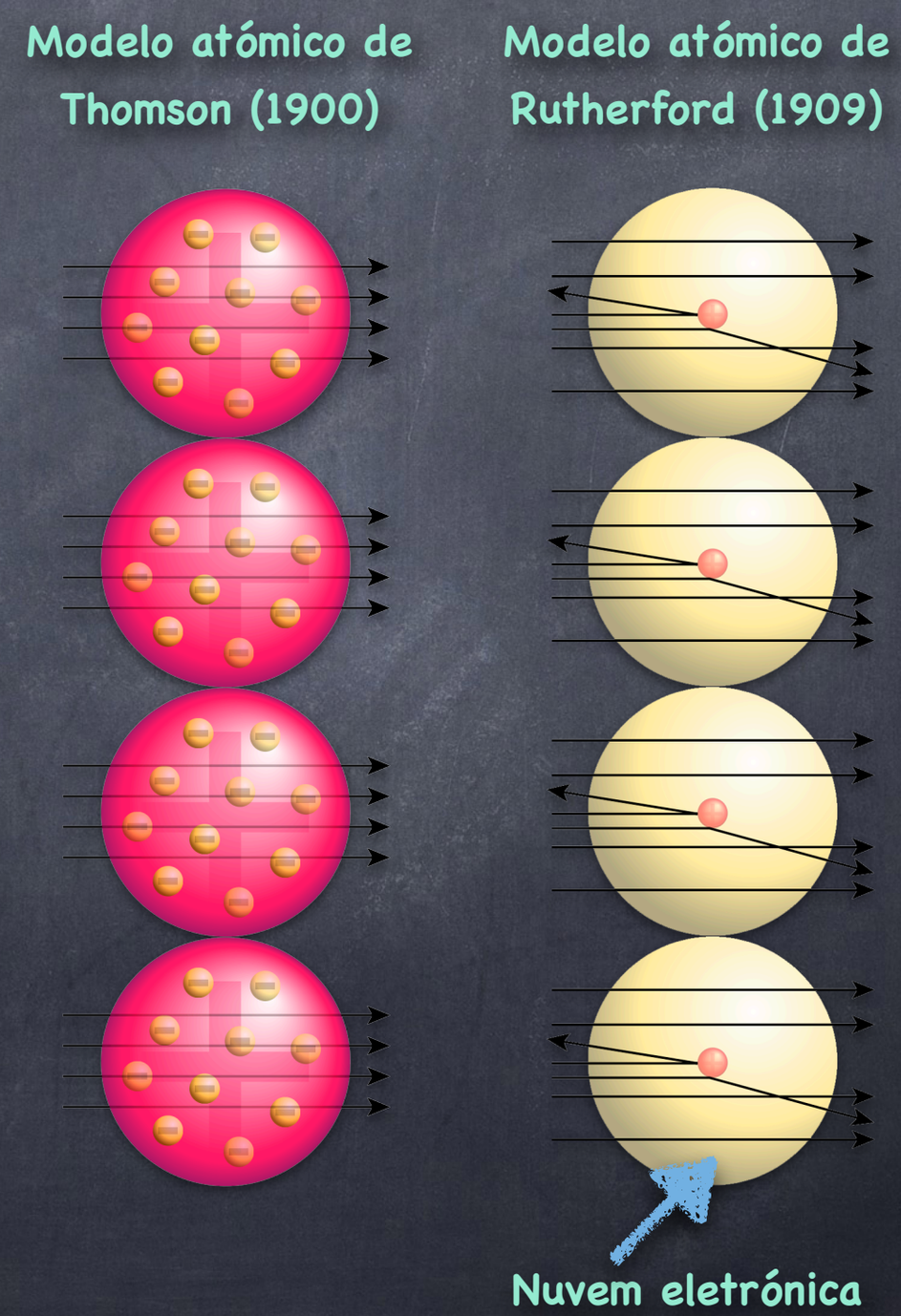
- Com base nestes resultados, Rutherford propôs um novo modelo de átomo, em que a massa estaria quase totalmente localizada num núcleo central, com carga positiva, que seria rodeado por partículas carregadas negativamente, com massa milhares de vezes inferiores à do núcleo, e que se manteriam juntas por forças eletrostáticas.

- O volume efetivo do núcleo seria muito pequeno, quando comparado com o volume total do átomo, concluindo que a folha de ouro seria, na realidade, essencialmente espaço vazio.

- Este modelo permitia explicar perfeitamente os dados experimentais: Assim, a maioria das partículas α passariam afastadas dos núcleos positivos, não sofrendo qualquer tipo de repulsão. Um pequeno número, que passava perto dos núcleos, sofria uma forte repulsão. Algumas, que incidiam diretamente nos núcleos, revertiam o percurso.

Teoria atómica

- Na figura ao lado esquematiza-se o comportamento esperado nas trajetórias de radiação α, considerando a folha metálica constituída por átomos com a estrutura proposta pelos modelos de Thomson (esquerda) e de Rutherford (direita). Enquanto no primeiro, todas as partícula α se deveriam comportar de modo análogo (movimento em linha reta), no segundo cada partícula pode sofrer desvios na sua trajetória, em função da distância a que passa dum determinado núcleo atómico da folha metálica.



Teoria atómica

- A partir dos valores medidos experimentalmente para os ângulos de deflexão das partículas α, quando incidiam em diversas folhas metálicas, e assumindo que a força de repulsão entre essas partículas e os núcleos dos átomos das folhas metálicas obedece à lei de Coulomb, Rutherford calculou a carga de diversos núcleos atómicos, dos elementos que constituíam as folhas metálicas. Como o número de partículas carregadas negativamente (eletrões) terá de ser igual ao número de partículas carregadas positivamente (protões), foi assim possível, pela primeira vez, calcular o hoje designado *número atómico* de diversos elementos.

- Experiências subsequentes permitiram também calcular as *massas atómicas* desses elementos.

Teoria atómica

- A estrutura atómica proposta por Rutherford é hoje universalmente aceite. Assim, consideramos que todos os átomos são formados por um núcleo central, que possui carga e massa características do elemento e isótopo respetivo, com um diâmetro muito reduzido (na ordem de 10^{-13} cm), rodeado por uma nuvem eletrónica muito dispersa, ocupando um volume muito mais elevado do que o do núcleo (diâmetro da ordem de 10^{-8} cm).

- Claro que, depois da aceitação generalizada do modelo de Rutherford, era necessário perceber-se como poderiam os eletrões "orbitar" os núcleos atómicos, sem com eles colidirem.

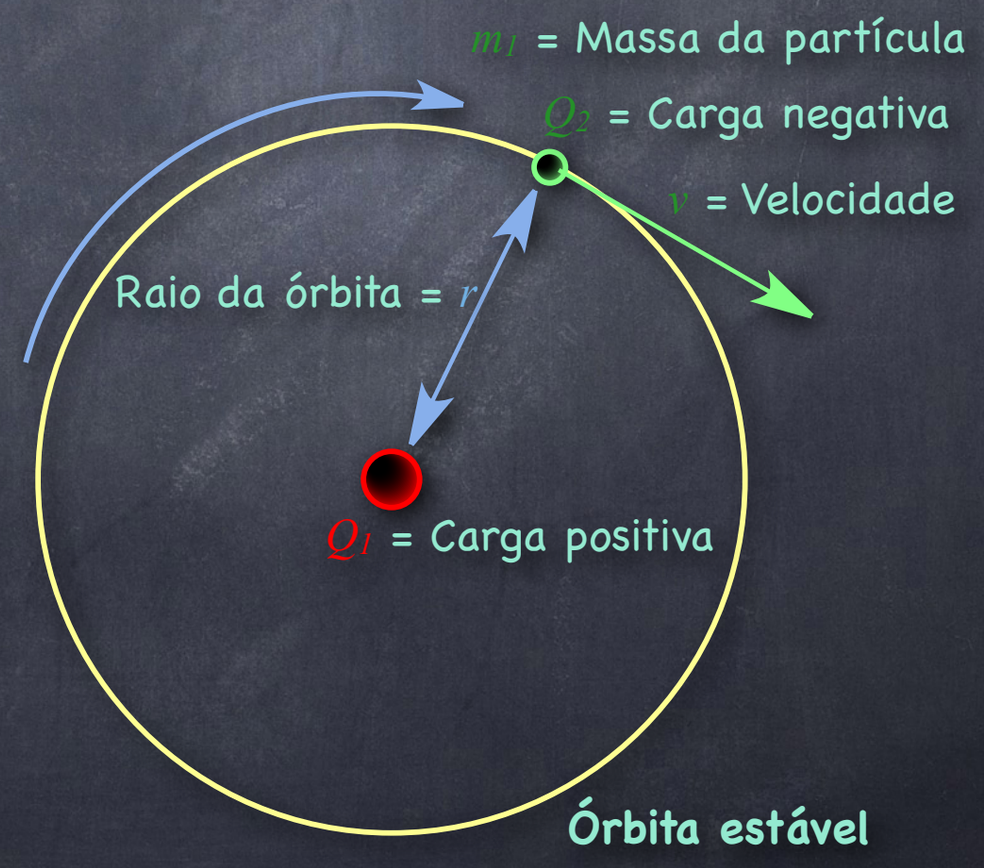
Teoria atómica

- De facto, é relativamente fácil, depois de conhecermos a carga e a massa do eletrão, calcularmos uma órbita "estável" em torno dum determinado núcleo, de carga conhecida. Para isso usa-e a mesma abordagem que é usada para o cálculo das órbitas gravíticas, mas substituindo a força de atração gravítica pela força de atração eletrostática.

- Vejamos o caso geral de duas partículas com cargas opostas, possuindo a partícula positiva uma massa muito mais elevada do que a partícula negativa. Nesta situação, podemos considerar a partícula positiva como estacionária, e a partícula negativa em movimento orbital em torno da carga positiva.

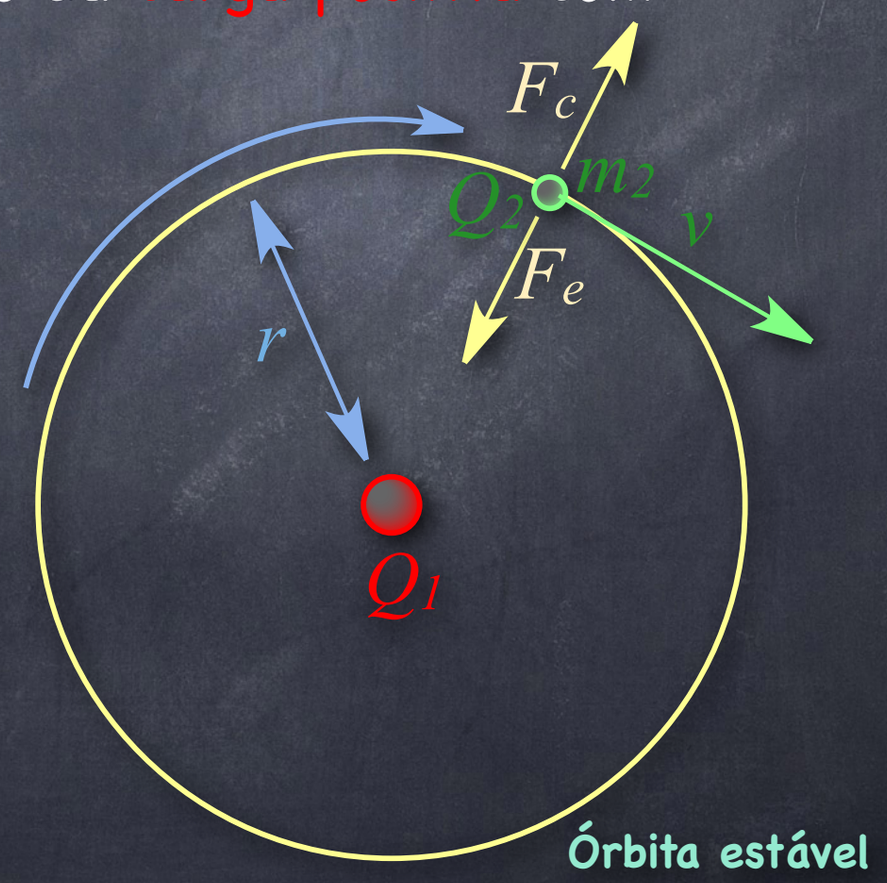
Teoria atómica

- Vejamos o caso geral de duas partículas com cargas opostas (Q_1 e Q_2), possuindo a partícula positiva (Q_1) uma massa muito mais elevada do que a partícula negativa (Q_2). Nesta situação, podemos considerar a partícula positiva como estacionária, e a partícula negativa, possuindo massa m_2, em movimento orbital em torno da carga positiva com velocidade v, numa órbita de raio r.



Teoria atómica

- Vejamos o caso geral de duas partículas com cargas opostas (Q_1 e Q_2), possuindo a partícula positiva (Q_1) uma massa muito mais elevada do que a partícula negativa (Q_2). Nesta situação, podemos considerar a partícula positiva como estacionária, e a partícula negativa, possuindo massa m_2, em movimento orbital em torno da carga positiva com velocidade v, numa órbita de raio r.
- Para que haja uma órbita estável, a força centrífuga (F_c) criada pelo movimento da massa m_2, terá de ser exatamente igual, com a mesma direção e sentido oposto, à da força centrípeta (F_e), criada pela atração entre as duas cargas opostas (Q_1 e Q_2).



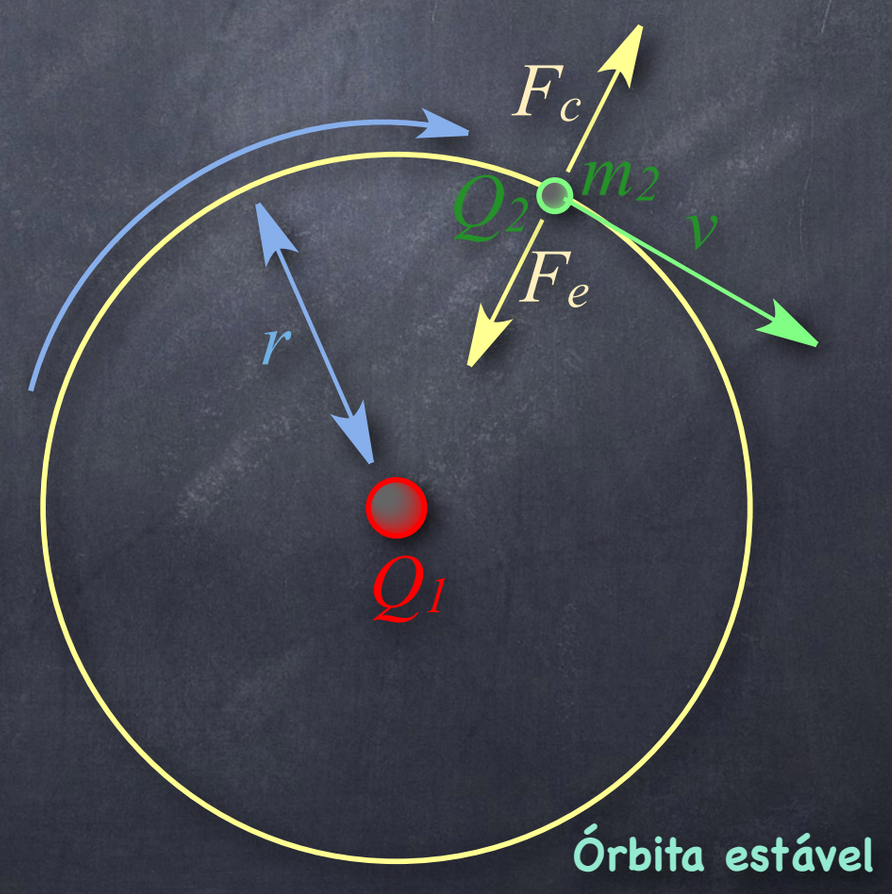
Teoria atómica

- Das leis da mecânica, sabemos que a força centrífuga é dada pela expressão:

$$F_c = \frac{m_2 v^2}{r}$$

- e que a força centrípeta é dada pela expressão:

$$F_e = -\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$



Teoria atómica

- Se em vez deste sistema genérico, particularizarmos para o caso do átomo de hidrogénio, do mesmo modo que apresentado por Bohr, teremos a dedução duma série de expressões matemáticas, genericamente designadas como Teoria de Bohr (1913):

Teoria atómica

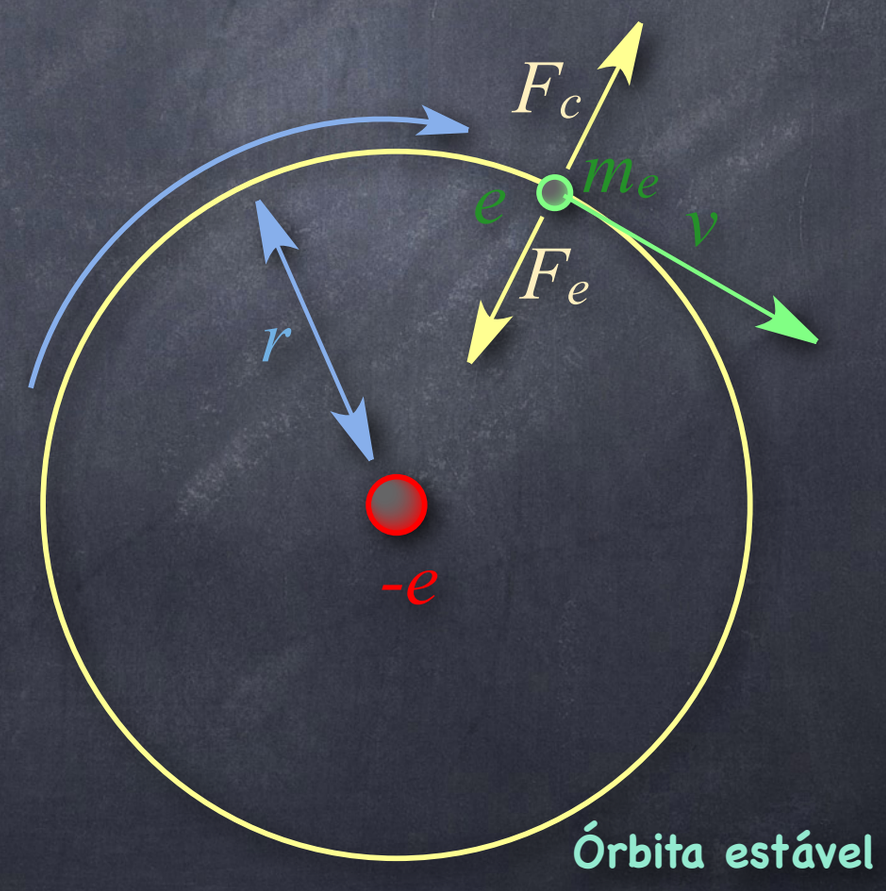
- Assim, a expressão da força centrífuga devida ao movimento do eletrão no átomo de hidrogénio, será:

$$F_c = \frac{m_e v^2}{r}$$

- sendo m_e a massa do eletrão.

- Por outro lado, se designarmos a carga do eletrão por e, então a carga nuclear, resultante dum único protão, terá o mesmo valor mas sinal oposto, sendo designada por $-e$. A expressão para a força centrípeta será então:

$$F_e = \frac{-e \times e}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

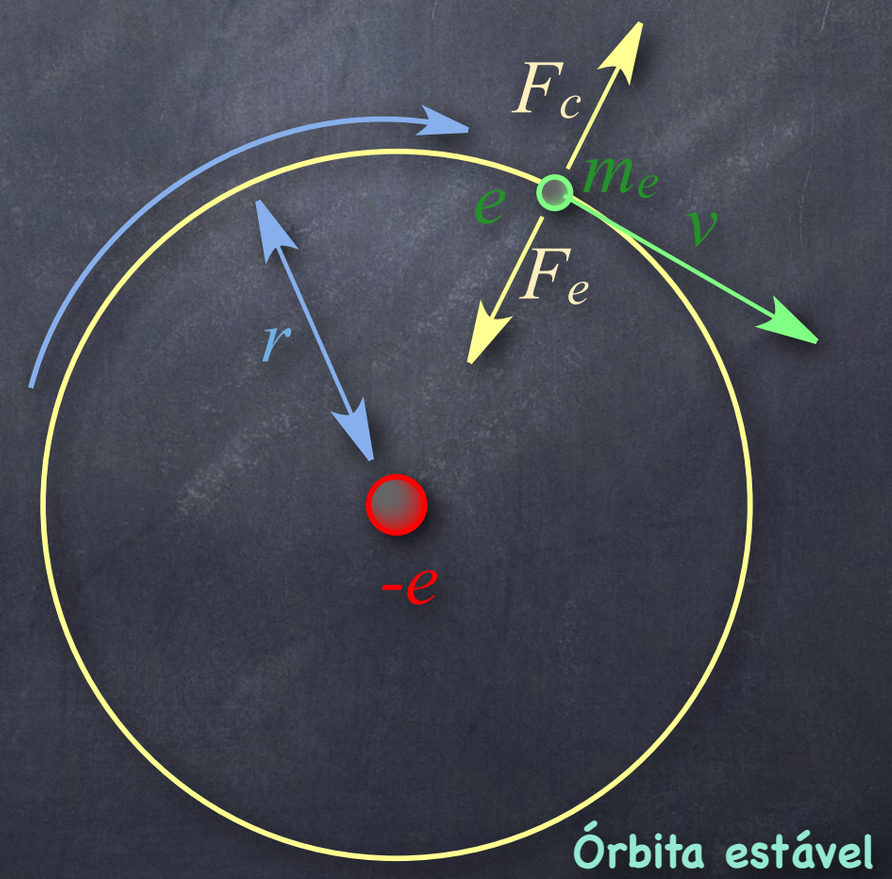


Teoria atómica

$$F_c = \frac{m_e v^2}{r} \qquad F_e = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

- Como dissemos antes que, para a existência duma órbita estável, $F_c + F_e = 0$ então:

$$\frac{m_e v^2}{r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = 0$$



Teoria atómica

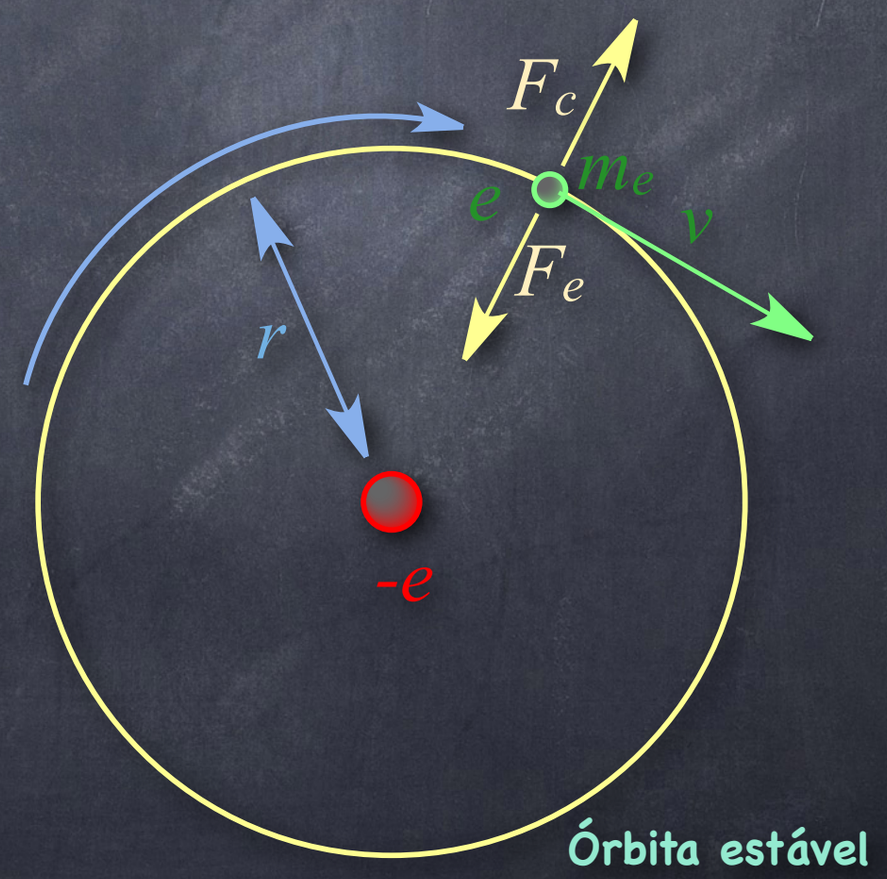
$$F_c = \frac{m_e v^2}{r} \qquad F_e = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

- Como dissemos antes que, para a existência duma órbita estável, $F_c + F_e = 0$ então:

$$\frac{m_e v^2}{r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = 0$$

- Ou, reordenando:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$



Teoria atómica

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

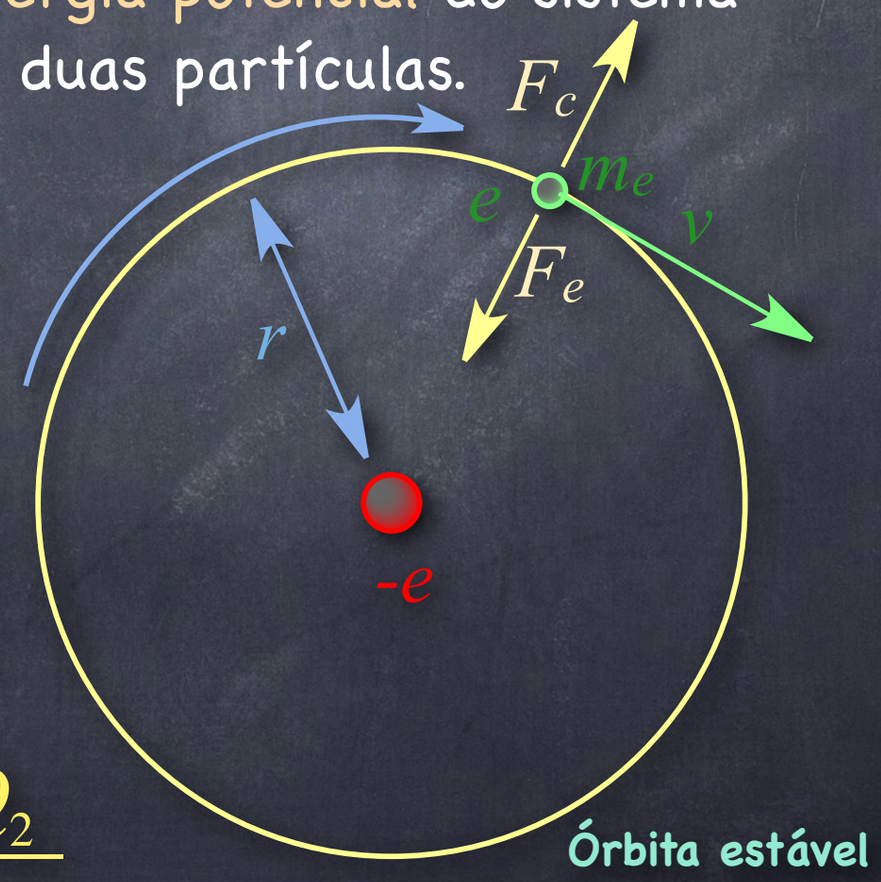
- Podemos agora derivar facilmente uma expressão genérica para a energia total do sistema (E_t), sabendo que será resultante da soma da energia cinética do eletrão (E_c) com a energia potencial do sistema (E_p), resultando esta da atração entre as duas partículas.

- Sabemos que a energia cinética dum eletrão é dada pela expressão:

$$E_c = \frac{m_e v^2}{2}$$

- enquanto a energia potencial dum sistema formado por duas cargas pontuais, com sinais opostos, será:

$$E_p = -\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



Teoria atómica

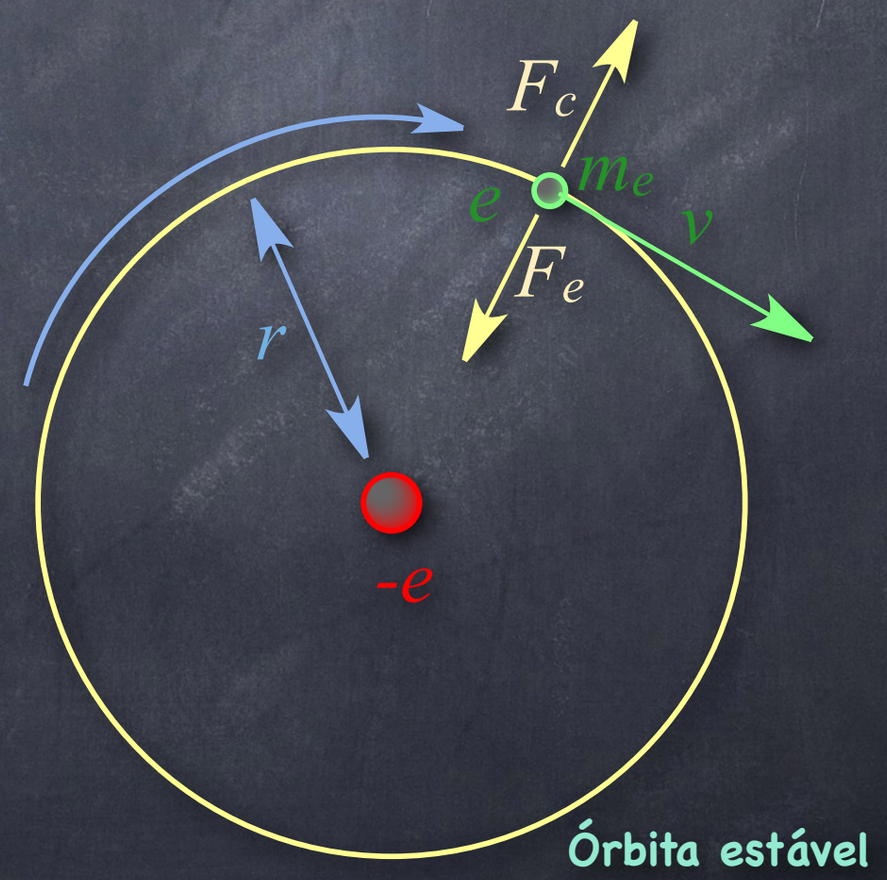
$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad E_c = \frac{m_e v^2}{2}$$

- No caso concreto do átomo de hidrogénio, a expressão da energia potencial reduz-se a:

$$E_p = -\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Leftrightarrow E_p = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

- Repare-se que o valor da energia potencial toma o valor zero quando as duas partículas se encontram infinitamente afastadas:

$$E_{p(r=\infty)} = 0$$



Teoria atómica

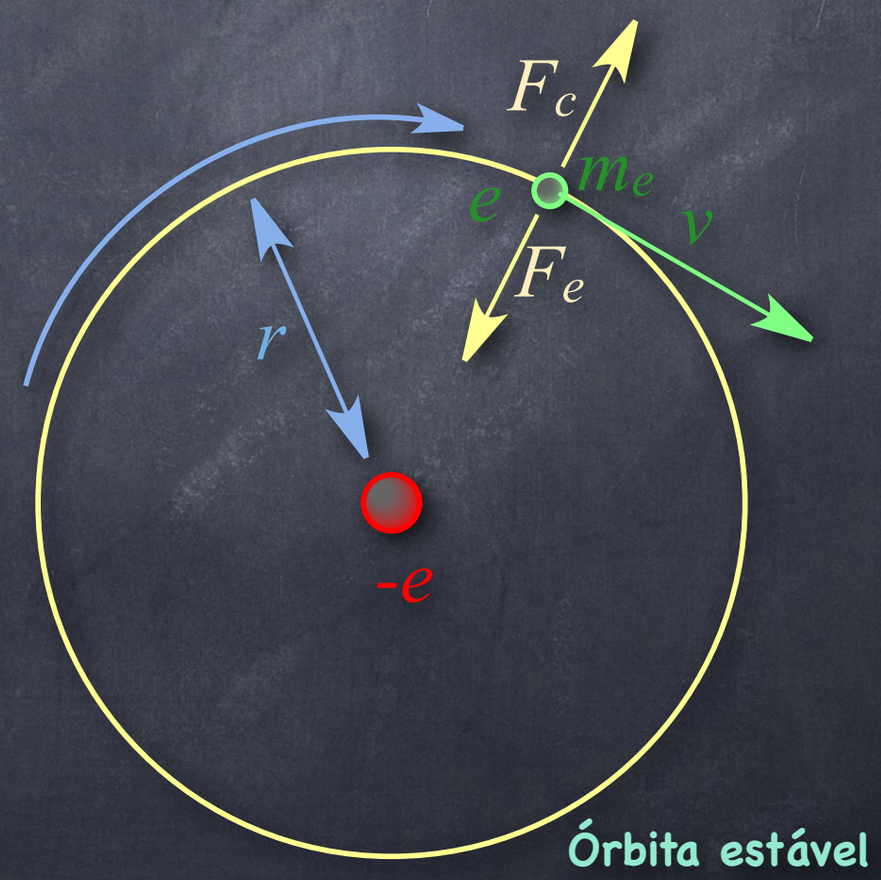
$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad E_c = \frac{m_e v^2}{2}$$

- No caso concreto do átomo de hidrogénio, a expressão da energia potencial reduz-se a:

$$E_p = -\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Leftrightarrow E_p = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

- Então, a energia total (E_t), será:

$$E_t = E_c + E_p \Leftrightarrow \frac{m_e v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



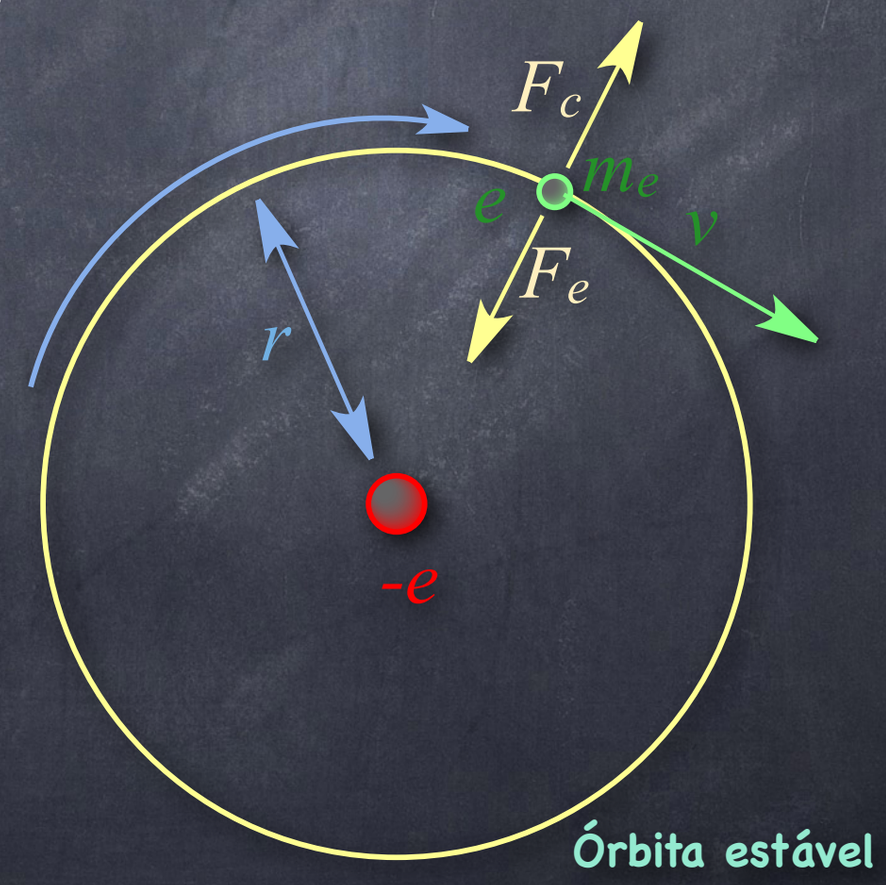
Teoria atómica

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

× r

- Então, a energia total (E_t), será: $E_t = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$
- No entanto, da primeira expressão acima:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \Leftrightarrow m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



Teoria atómica

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

× r

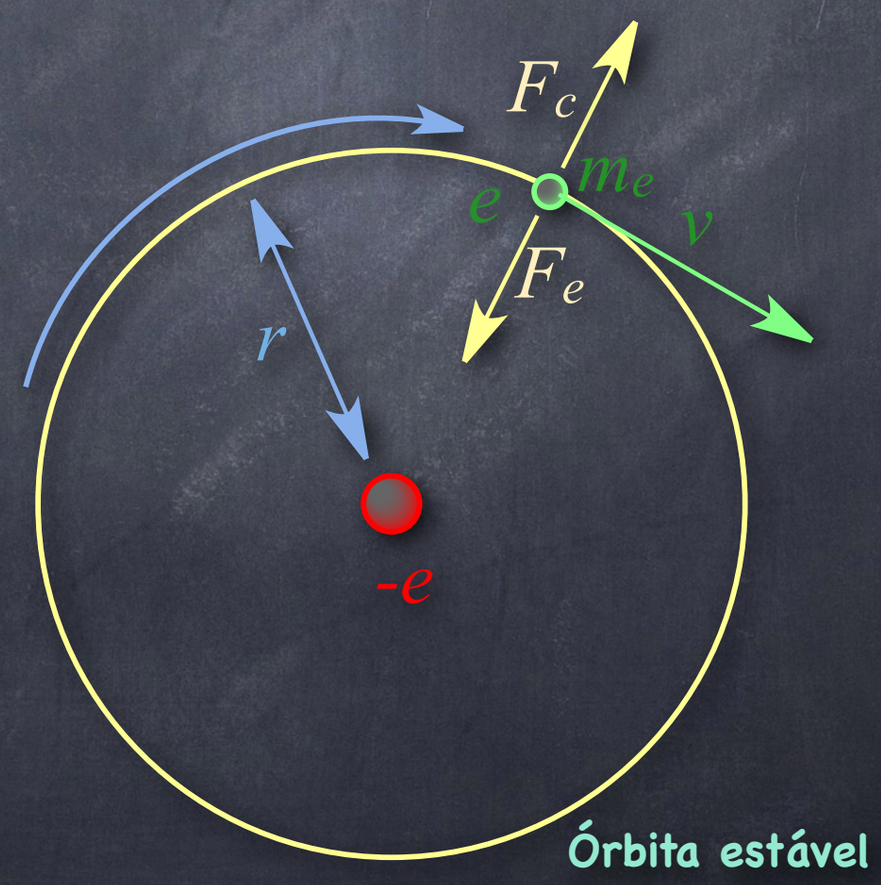
- Então, a energia total (E_t), será: $$E_t = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$
- No entanto, da primeira expressão acima:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \Leftrightarrow m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

- Ou seja, a energia total será:

$$E_t = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Leftrightarrow -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

× 2



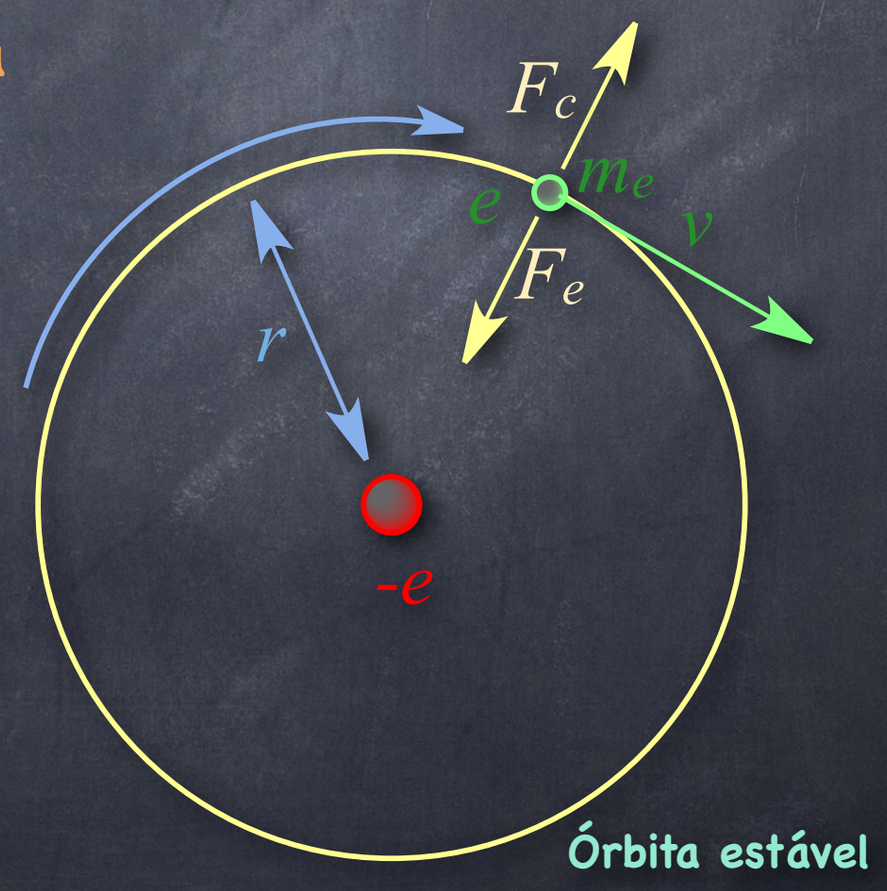
Teoria atómica

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- Significa isto que, para conhecermos a energia total do átomo de hidrogénio, só necessitamos de conhecer o raio da órbita do eletrão.

- O problema é que, em princípio, o raio da órbita pode tomar qualquer valor, o que implica que a energia também poderá tomar qualquer valor arbitrário.

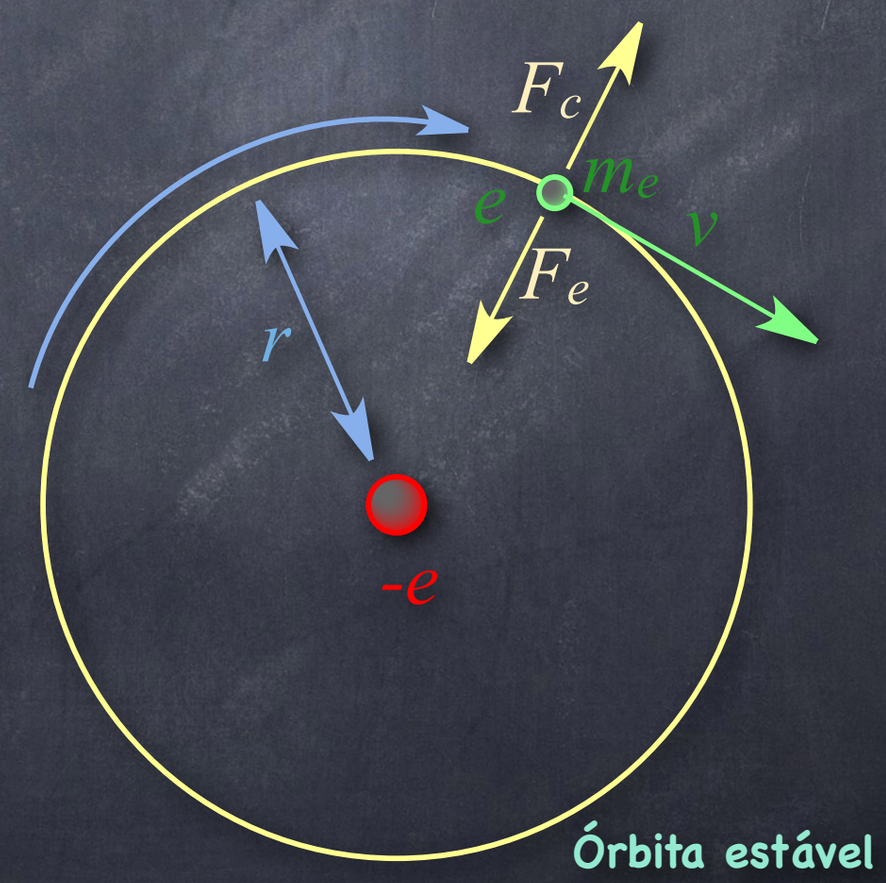
- Mais: Este sistema, formado por uma carga negativa em movimento orbital relativamente a uma carga positiva, deve perder energia constantemente, o que significa que o raio da órbita diminui até que o eletrão colida com o núcleo.



Teoria atómica

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- Ou seja, atingimos um impasse matemático, apesar de sabermos que, fisicamente, o eletrão não cai no núcleo. Se isso acontecesse, não haveria matéria.
- Para resolver este impasse, Bohr formulou três postulados:



Teoria atómica

1. Os eletrões no átomo existem em estados estacionários. Os eletrões orbitam o núcleo sem emitirem radiação electromagnética. Qualquer alteração do seu movimento implica a transição dum estado estacionário para outro. (Bohr não tinha explicação para este postulado, mas sabia que só assim os átomos poderiam existir.)

Teoria atómica

1. Os eletrões no átomo existem em estados estacionários. Os eletrões orbitam o núcleo sem emitirem radiação electromagnética. Qualquer alteração do seu movimento implica a transição dum estado estacionário para outro.

2. Transições entre estados estacionários originam absorção ou emissão de energia. Energia é emitida quando o eletrão transita para um estado estacionário de energia mais baixa, e absorvida quando acontece a transição oposta. (Nesta altura já eram conhecidos os espectros de emissão e absorção dos elementos atómicos, o que implicava que este postulado fosse muito razoável.)

Teoria atómica

1. Os eletrões no átomo existem em estados estacionários. Os eletrões orbitam o núcleo sem emitirem radiação electromagnética. Qualquer alteração do seu movimento implica a transição dum estado estacionário para outro.

2. Transições entre estados estacionários originam absorção ou emissão de energia. Energia é emitida quando o eletrão transita para um estado estacionário de energia mais baixa, e absorvida quando acontece a transição oposta.

3. O momento angular dum eletrão num estado estacionário é quantizado.

- O momento angular é o produto do momento linear pelo raio de curvatura:

(Momento linear)

$$p = mv$$

(Momento angular)

$$L = p \times r$$

Teoria atómica

1. Os eletrões no átomo existem em estados estacionários. Os eletrões orbitam o núcleo sem emitirem radiação electromagnética. Qualquer alteração do seu movimento implica a transição dum estado estacionário para outro.

2. Transições entre estados estacionários originam absorção ou emissão de energia. Energia é emitida quando o eletrão transita para um estado estacionário de energia mais baixa, e absorvida quando acontece a transição oposta.

3. O momento angular dum eletrão num estado estacionário é quantizado.

- Então, o 3º postulado de Bohr diz simplesmente que:

$$L = m_e v r = nk \qquad n = 1, 2, \ldots, \infty$$

- Com este postulado Bohr evitava que o eletrão caísse no núcleo ($n \geq 1$).

Teoria atómica

1. Os eletrões no átomo existem em estados estacionários. Os eletrões orbitam o núcleo sem emitirem radiação electromagnética. Qualquer alteração do seu movimento implica a transição dum estado estacionário para outro.

2. Transições entre estados estacionários originam absorção ou emissão de energia. Energia é emitida quando o eletrão transita para um estado estacionário de energia mais baixa, e absorvida quando acontece a transição oposta.

3. O momento angular dum eletrão num estado estacionário é quantizado.

- Mas persistia um problema: O valor de k era desconhecido!

$$L = m_e v r = nk \qquad n = 1, 2, \ldots, \infty$$

Teoria atómica

- De facto, Bohr conseguiu deduzir e propor o valor de k, com base numa série de premissas que, hoje, sabemos não estarem correctas. Mais tarde veremos como podemos facilmente deduzir esse valor com base em conhecimentos científicos obtidos depois de Bohr. No entanto, por agora, vamos simplesmente aceitar o valor k sem apresentarmos a sua dedução.
- O valor de k é dado pela expressão:

$$k = \frac{h}{2\pi}$$

- Pelo que, podemos escrever a expressão para o terceiro postulado de Bohr ($L = m_e vr = nk$) como:

$$m_e vr = \frac{nh}{2\pi}$$

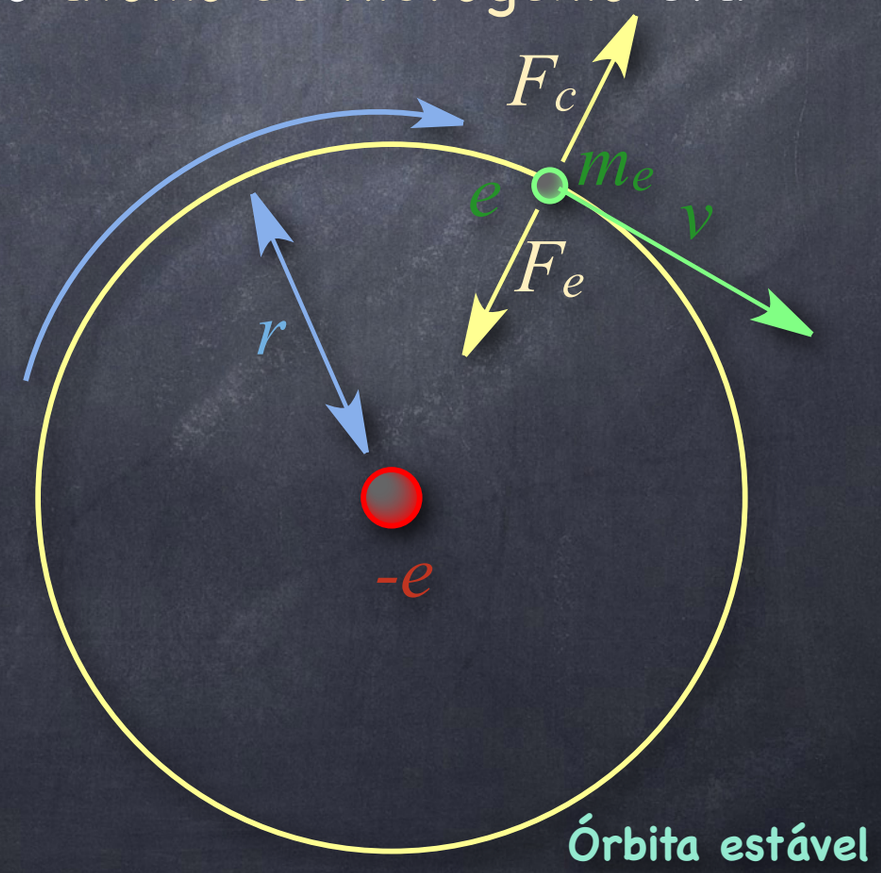
Teoria atómica

$$m_e v r = nk = \frac{nh}{2\pi}$$

- Com base nesta equação, podemos então calcular a energia dum átomo de hidrogénio, segundo o modelo atómico de Bohr.

- Havíamos concluído que a energia total do átomo de hidrogénio era dada pela expressão:

$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$



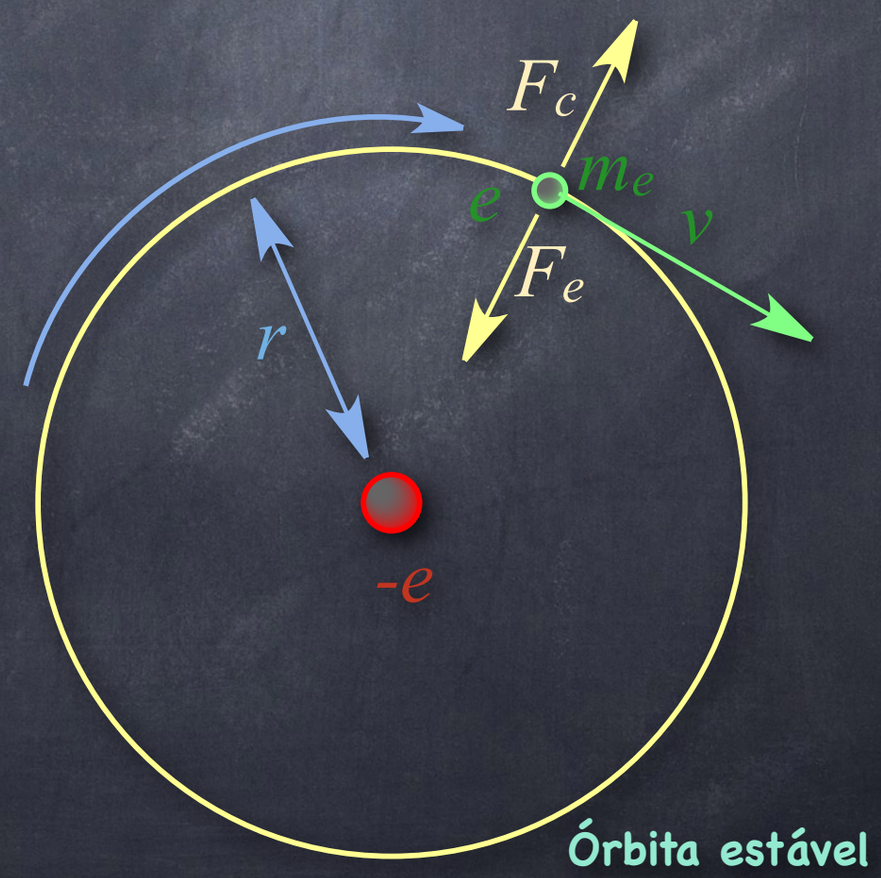
Teoria atómica

$$m_e v r = \frac{nh}{2\pi}$$

- Com base nesta equação, podemos então calcular a energia dum átomo de hidrogénio, segundo o modelo atómico de Bohr.
- Havíamos concluído que a energia total do átomo de hidrogénio era dada pela expressão:

$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- Sendo apenas necessário conhecer o valor do raio (r), uma vez que tudo o resto são constantes.



Teoria atómica

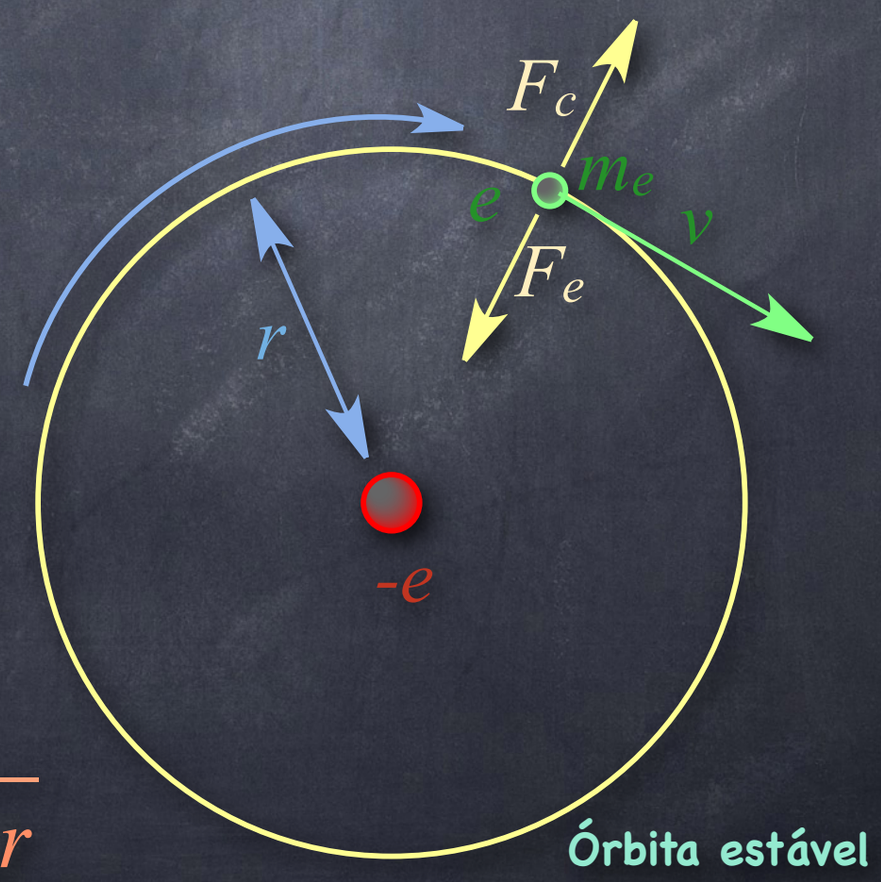
$$m_e v r = \frac{nh}{2\pi}$$

- Com base nesta equação, podemos então calcular a energia dum átomo de hidrogénio, segundo o modelo atómico de Bohr.
- Havíamos concluído que a energia total do átomo de hidrogénio era dada pela expressão:

$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- Sendo apenas necessário conhecer o valor do raio (r).
- Da expressão antes deduzida, podemos derivar a velocidade do eletrão (v):

$$m_e v r = \frac{nh}{2\pi} \Leftrightarrow v = \frac{nh}{2\pi m_e r}$$



Teoria atómica

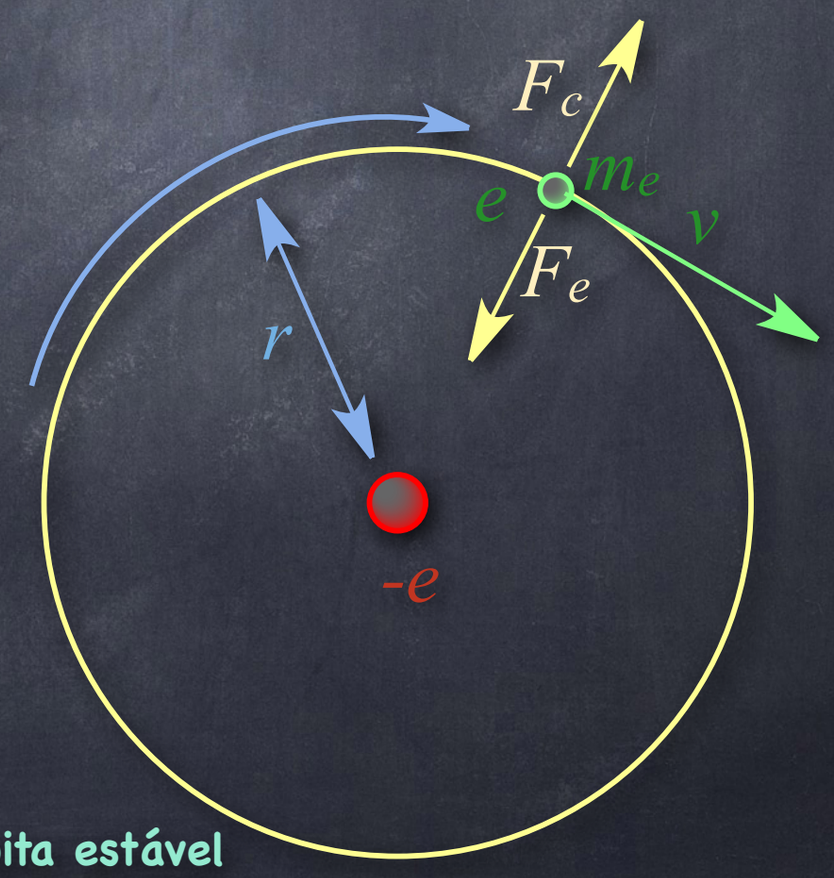
$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad v = \frac{nh}{2\pi m_e r}$$

- Por outro lado, da condição para a existência duma órbita estável ($F_c = F_e$), tínhamos derivado a expressão:

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

- Se, nesta expressão, substituirmos a velocidade pela expressão acima à direita, poderemos derivar o valor do raio (r).

$$\left.\begin{aligned} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} &= \frac{m_e v^2}{r} \\ v &= \frac{nh}{2\pi m_e r} \end{aligned}\right\} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e\left(\dfrac{n^2h^2}{4\pi^2 m_e^2 r^2}\right)}{r}$$



Teoria atómica

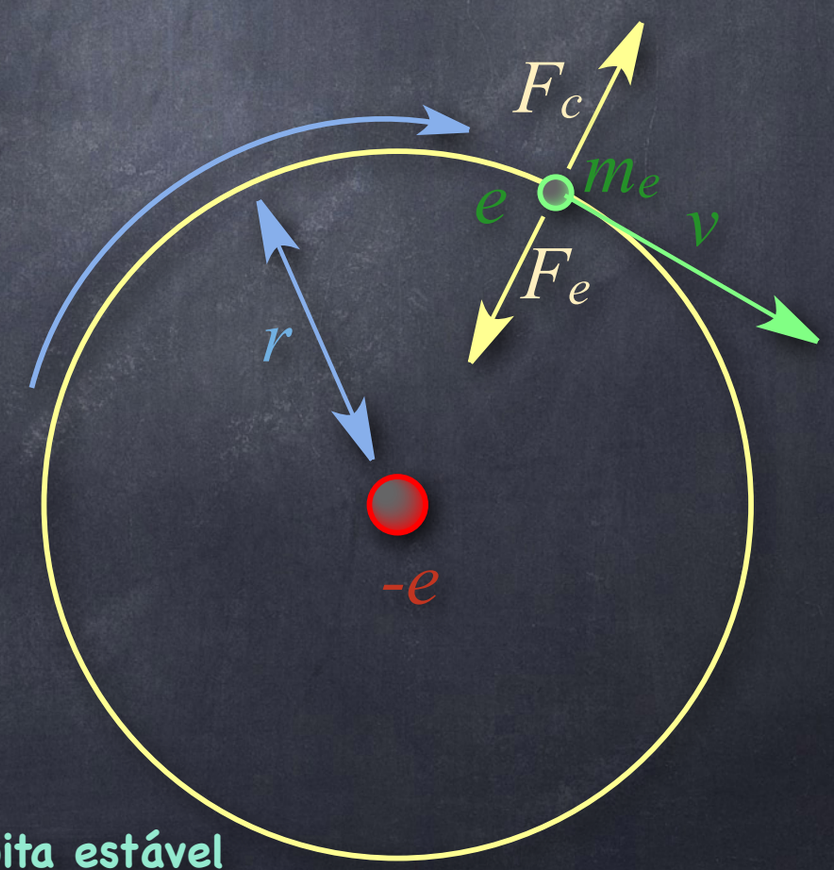
$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} &= \frac{m_e v^2}{r} \\ v &= \frac{nh}{2\pi m_e r} \end{aligned}\right\} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e\left(\frac{n^2h^2}{4\pi^2 m_e^2 r^2}\right)}{r}$$

- Então:

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{n^2h^2}{4\pi^2 m_e r^3} \Leftrightarrow \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{n^2h^2}{4\pi^2 m_e r}$$

$$r = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2 h^2}{4\pi^2 m_e e^2} \Leftrightarrow r = \frac{n^2\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$$



Órbita estável

Teoria atómica

$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad r = \frac{n^2\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$$

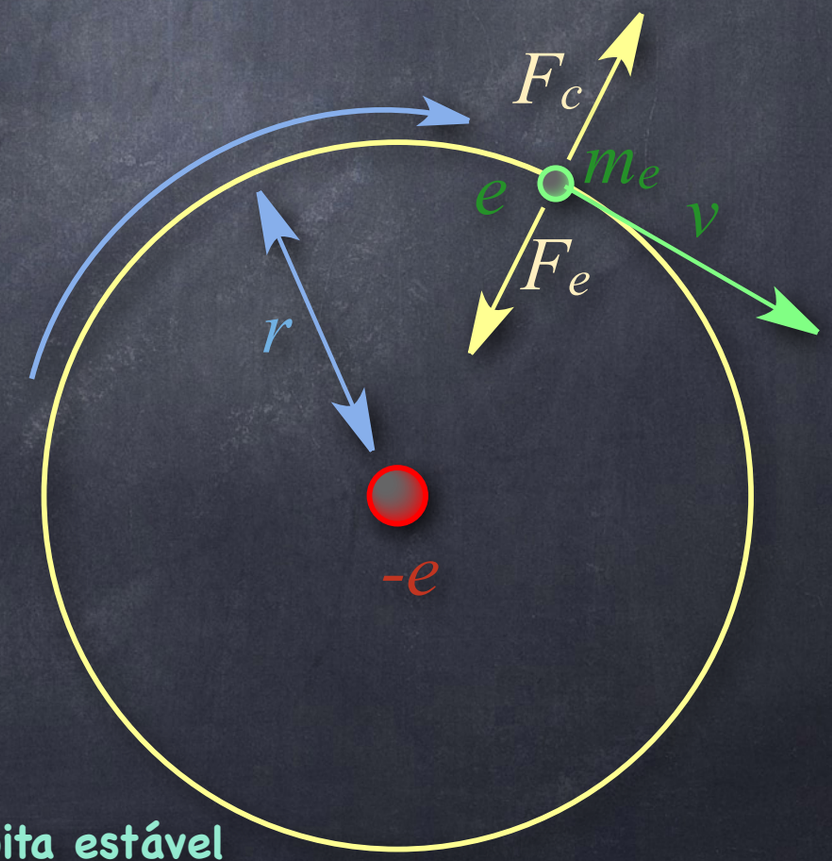
- Finalmente, se substituirmos a equação do raio na expressão da energia total, obtemos:

$$E_t = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\left(\frac{n^2\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}\right)} \Leftrightarrow E_t = -\frac{e^2}{\frac{8n^2\varepsilon_0^2 h^2}{m_e e^2}} \Leftrightarrow E_t = -\frac{m_e e^4}{8n^2\varepsilon_0^2 h^2}$$

- Como a única variável na equação é o número quântico (n), podemos escrever:

$$E_t = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \Leftrightarrow E_t = -\frac{k}{n^2}$$

$$k = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$



Órbita estável

Teoria atómica

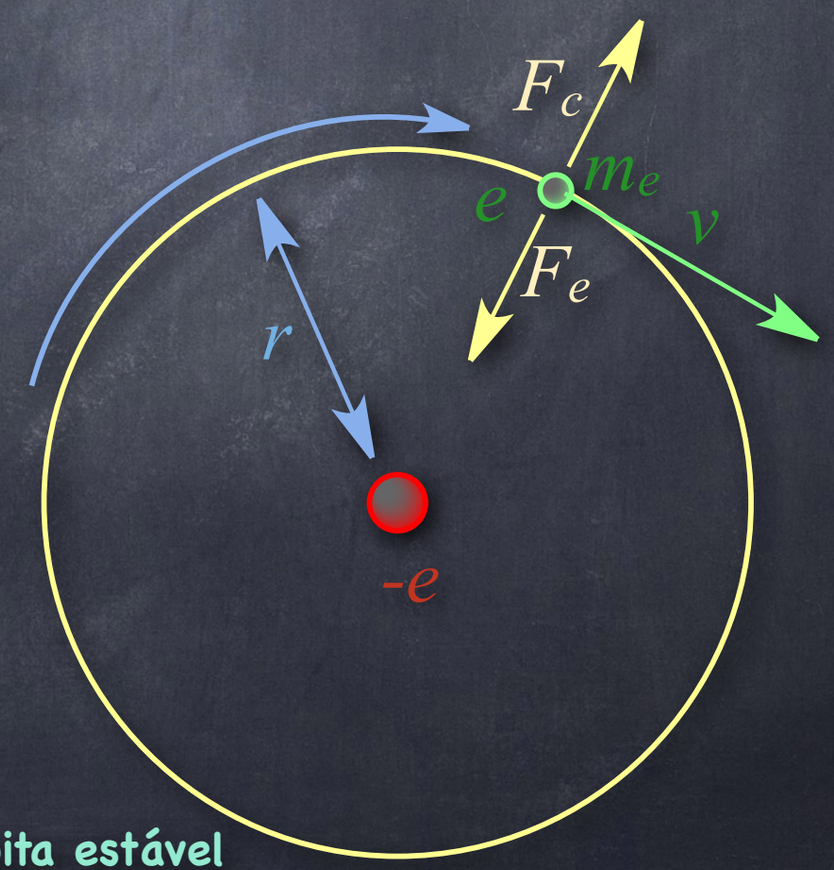
$$E_t = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \qquad r = \frac{n^2 \varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$$

- Podemos também derivar uma expressão para a energia cinética do eletrão como função do número quântico n. Como já sabemos que o valor da velocidade do eletrão (v) é dado pela expressão:

$$v = \frac{nh}{2\pi m_e r}$$

- Podemos substituir o valor do raio (r), que é dado pela expressão acima (direita):

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



Órbita estável

Teoria atómica

$$E_t = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \qquad r = \frac{n^2 \varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$$

- Como a energia cinética (E_c) é dada pela expressão:

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2$$

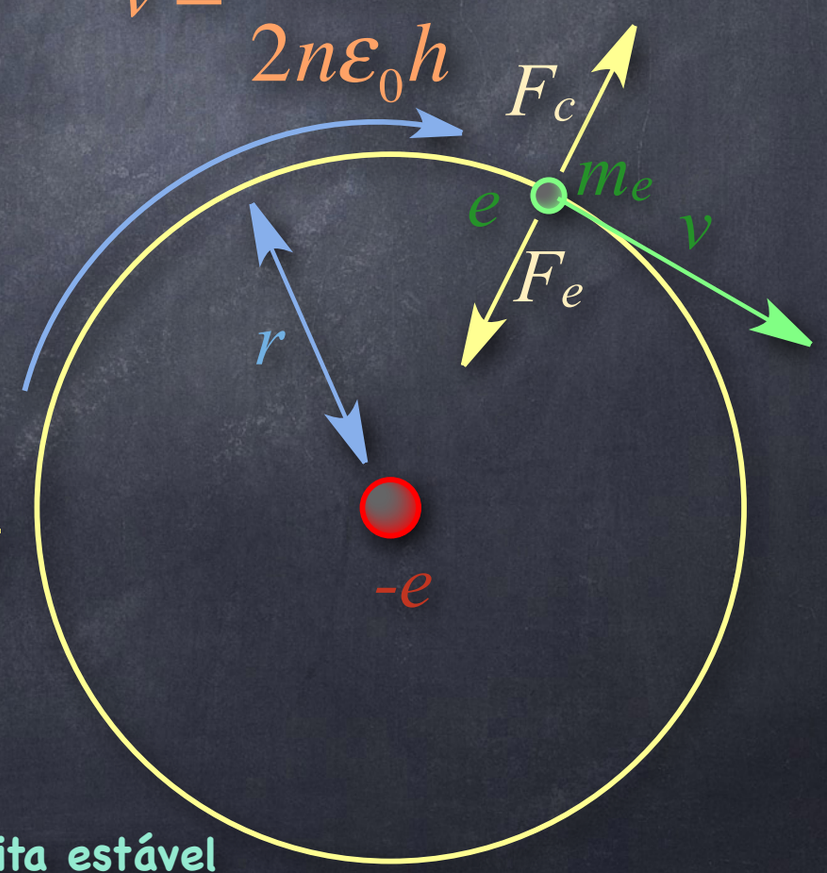
- Obtemos:

$$v = \frac{e^2}{2n\varepsilon_0 h}$$

$$E_c = \frac{m_e \left(\frac{e^2}{2n\varepsilon_0 h}\right)^2}{2} \Leftrightarrow E_c = \frac{\frac{m_e e^4}{4n^2\varepsilon_0^2 h^2}}{2} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow E_c = \frac{m_e e^4}{8n^2\varepsilon_0^2 h^2} \Leftrightarrow E_c = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \Leftrightarrow E_c = \frac{k}{n^2}$$

$$k = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$



Órbita estável

Teoria atómica

$$E_t = -\frac{k}{n^2} \quad E_c = \frac{k}{n^2} \quad r = \frac{n^2 \varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$$

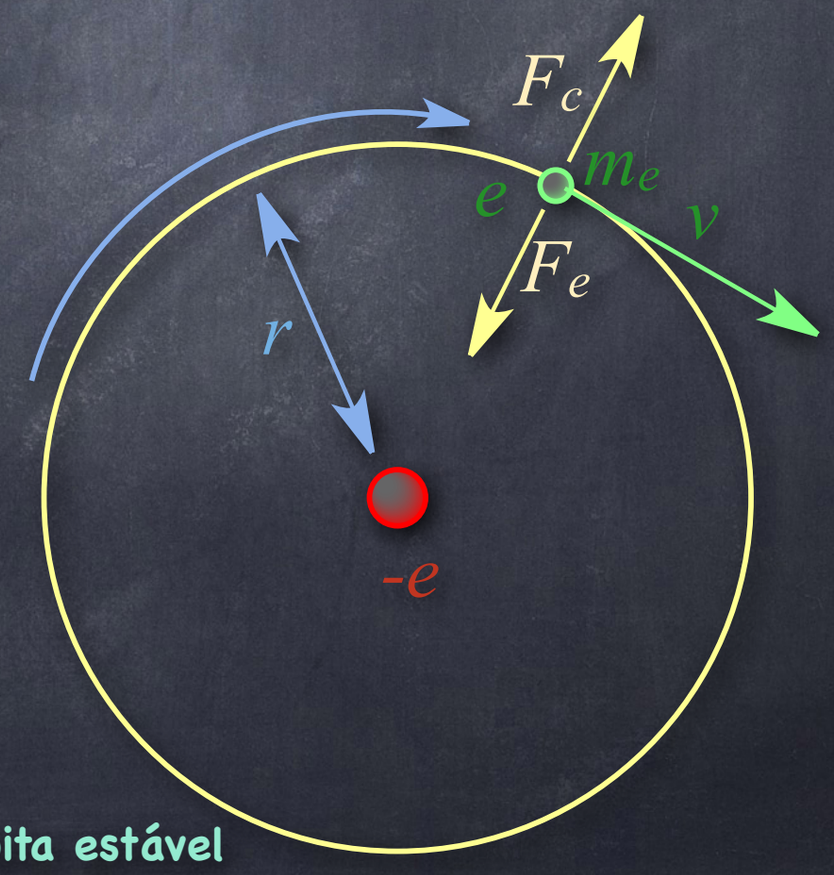
- Finalmente, podemos derivar uma expressão para a energia potencial do átomo de hidrogénio. Como sabemos que a energia potencial é dada pela expressão:

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

- Podemos substituir o valor do raio:

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

$$\Leftrightarrow E_p = -\frac{m_e e^4}{4\varepsilon_0^2 h^2 n^2} \Leftrightarrow E_p = -\frac{2k}{n^2} \qquad k = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$



Teoria atómica

- Ou seja, concluímos que a energia total (E_t), a energia cinética do eletrão (E_c) e a energia potencial (E_p) do átomo de hidrogénio dependem unicamente do valor do número quântico (n).

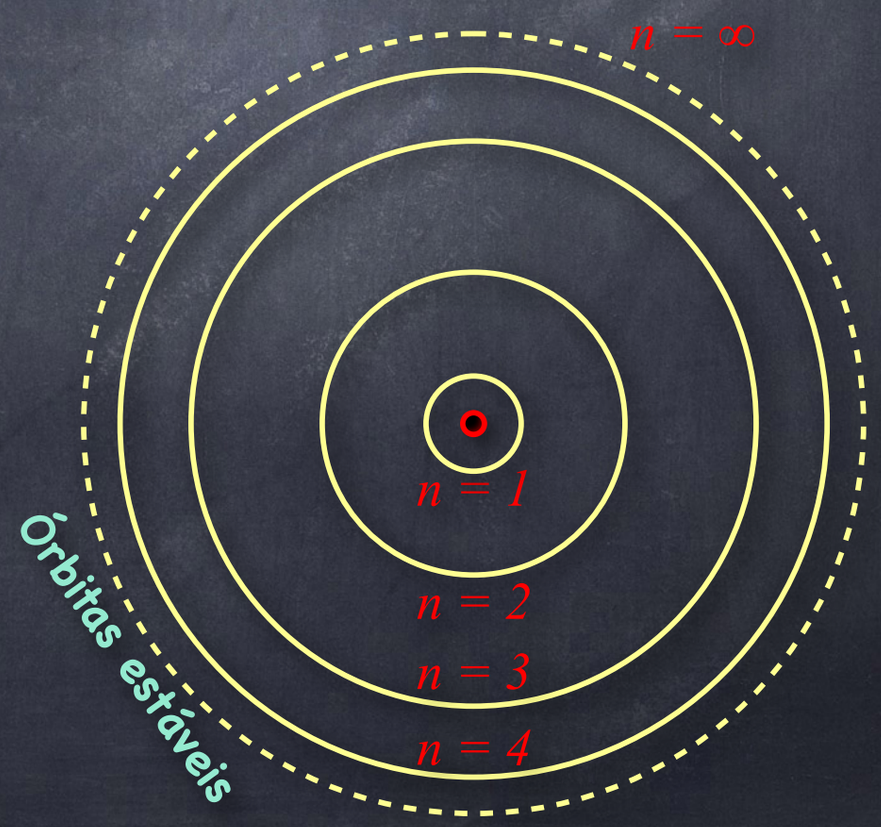
$$E_t = -\frac{k}{n^2} \qquad E_c = \frac{k}{n^2} \qquad E_p = -\frac{2k}{n^2} \qquad k = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$

- Poderíamos ter chegado à expressão de E_p, mais facilmente, se considerarmos que:

$$E_p = E_t - E_c$$

- Logo:

$$E_p = -\frac{k}{n^2} - \frac{k}{n^2} = -\frac{2k}{n^2}$$

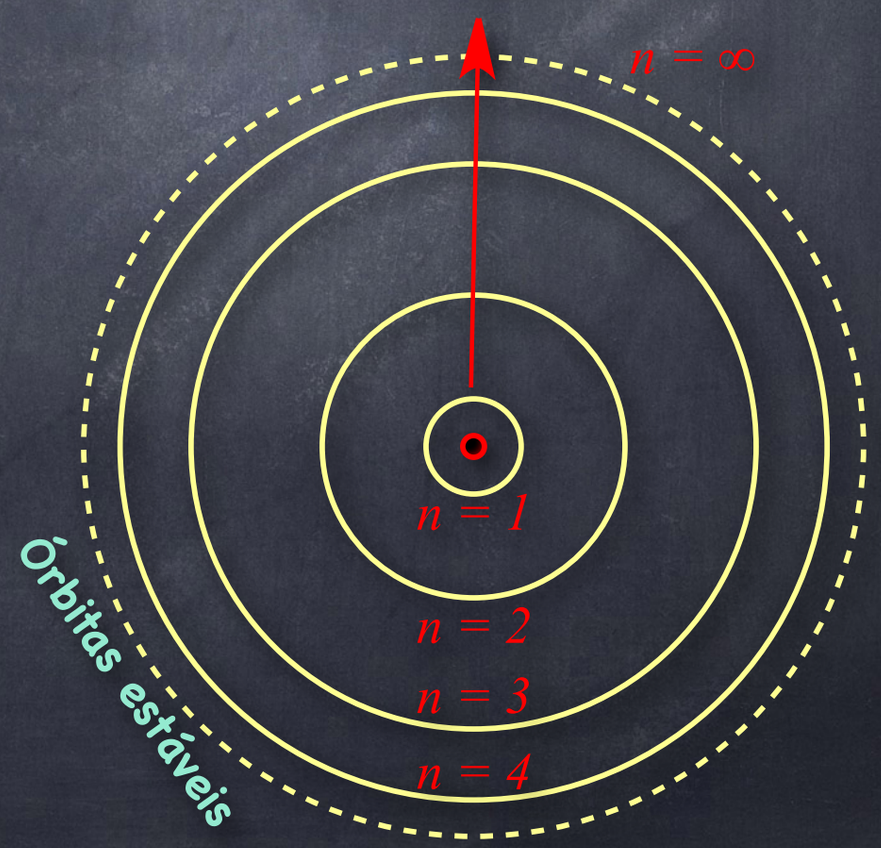


Teoria atómica

- Concluímos que a energia total (E_t), a energia cinética do eletrão (E_c) e a energia potencial (E_p) do átomo de hidrogénio dependem unicamente do valor do número quântico (n).

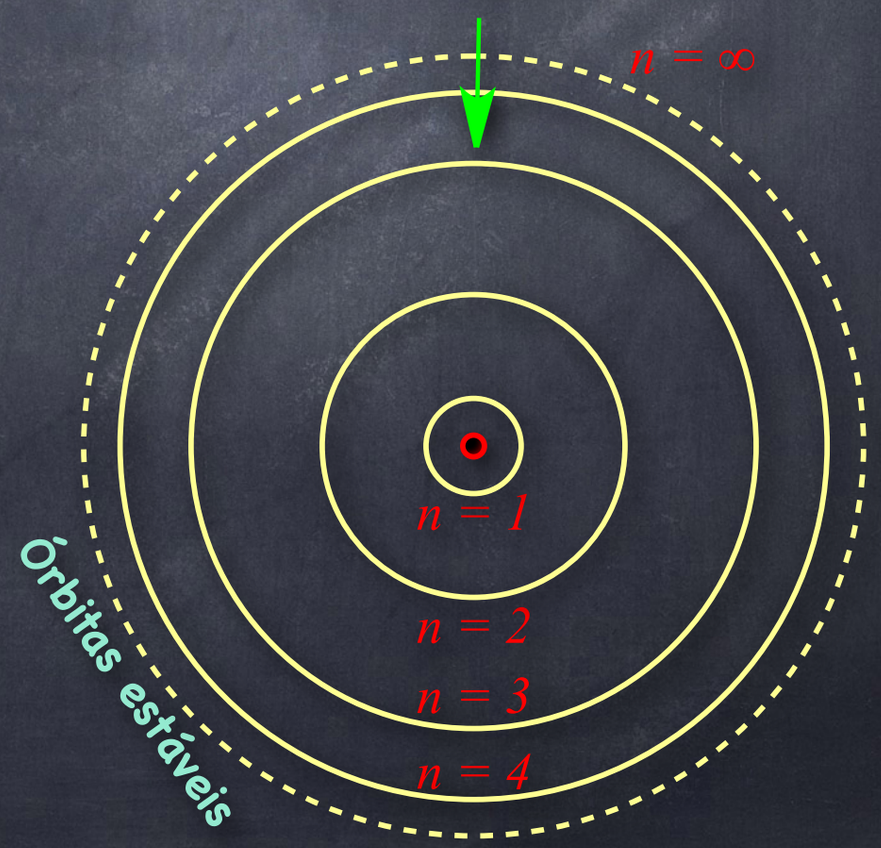
$$E_t = -\frac{k}{n^2} \qquad E_c = \frac{k}{n^2} \qquad E_p = -\frac{2k}{n^2} \qquad k = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$

- Concluímos também que quando $n = \infty$, todos os valores de energia são nulos. Isto é, se fornecermos a energia necessária e suficiente a um eletrão para o levar até $n = \infty$, então a sua velocidade será nula (E_c = 0) e a sua interação com o núcleo será também nula (E_p = 0). Logo, a energia total do sistema será também nula (E_t = 0).



Teoria atómica

- Concluímos que a energia total (E_t), a energia cinética do eletrão (E_c) e a energia potencial (E_p) do átomo de hidrogénio dependem unicamente do valor do número quântico (n).

$$E_t = -\frac{k}{n^2} \qquad E_c = \frac{k}{n^2} \qquad E_p = -\frac{2k}{n^2} \qquad k = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$

- Por outro lado, à medida que n diminui, a velocidade do eletrão aumenta ($E_c > 0$), passando a interagir atrativamente com o núcleo ($E_p < 0$). No entanto, como a energia potencial diminui duas vezes mais rapidamente do que a energia cinética aumenta, a energia total do sistema diminui ($E_t < 0$).