

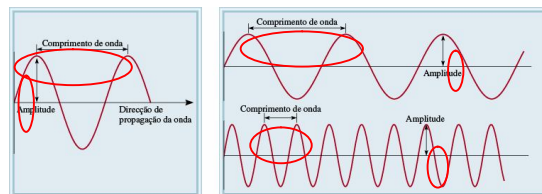
Capítulo 7

Teoria Quântica e Estrutura Electrónica dos Átomos

- Da Física Clássica à Teoria Quântica
- Efeito Fotoeléctrico
- Teoria de Bohr do Átomo de Hidrogénio
- Natureza Dual do Electrão
- Mecânica Quântica
- Números Quânticos
- Orbitais Atómicas
- Configuração Electrónica
- Princípio de Preenchimento

Cópia baseada na apresentação fornecida pelo editor e não dispensa a consulta do livro "QUÍMICA GERAL", Chang, McGraw-Hill

Propriedades das Ondas

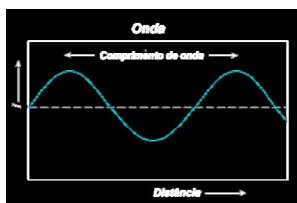


Comprimento de onda (λ) — distância entre pontos idênticos em ondas sucessivas.

Amplitude — distância vertical entre o meio da onda e a crista ou a cava.

7.1

Propriedades das Ondas

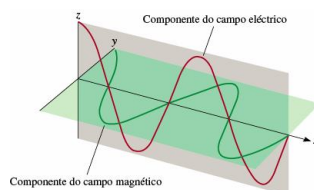


Frequência (ν) — número de ondas que passam por um determinado ponto durante 1 segundo ($\text{Hz} = 1 \text{ ciclo/s}$).

Velocidade (u) da onda = $\lambda \times \nu$

7.1

Maxwell (1873) — a luz visível é constituída por ondas electromagnéticas.

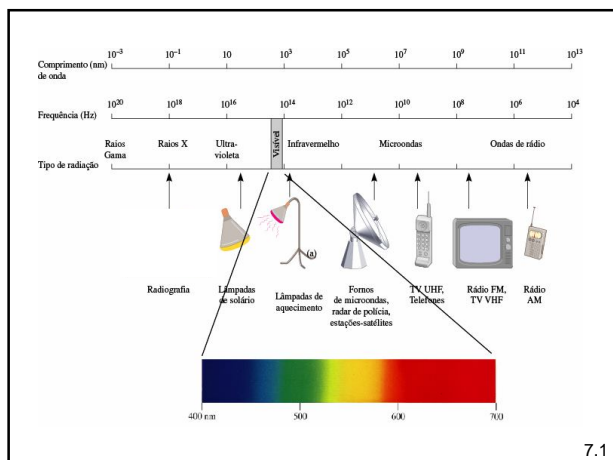


Radiação electromagnética: emissão e transmissão de energia na forma de ondas electromagnéticas.

Velocidade da luz (c) no vácuo = $3,00 \times 10^8 \text{ m/s}$

Toda a radiação electromagnética
 $\lambda \times \nu = c$

7.1



7.1

A frequência de um fotão é $6,0 \times 10^4 \text{ Hz}$. Converta esta frequência em comprimento de onda (nm). Esta frequência está na região visível?

$$\lambda \times \nu = c$$

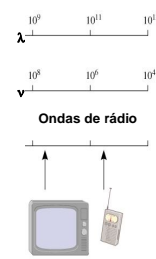
$$\lambda = c/\nu$$

$$\lambda = 3,00 \times 10^8 \text{ m/s} / 6,0 \times 10^4 \text{ Hz}$$

$$\lambda = 5,0 \times 10^3 \text{ m}$$

$$\lambda = 5,0 \times 10^{12} \text{ nm}$$

Ondas de rádio



7.1

Mistério #1: Problema do Corpo Negro Resolvido por Planck em 1900

A energia (luz) é emitida ou absorvida em unidades discretas (quantum).

$$E = h \times \nu$$

$$h = \text{constante de Planck}$$

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

7.1

Mistério #2: Efeito Fotoelétrico Resolvido por Einstein em 1905

A luz tem simultaneamente:

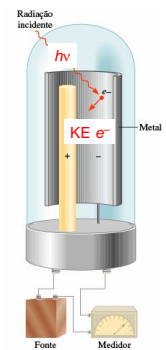
1. Natureza ondulatória
2. Natureza corpuscular (de partícula)

O **fotão** é uma «partícula» da luz

$$h\nu = EC + EL$$

$$EC = h\nu - EL$$

EC-energia cinética do electrão
EL- energia de ligação do electrão ao metal



7.2

Quando o cobre é bombardeado com electrões de alta energia são emitidos raios X. Calcule a energia (em joules) associada com os fotões se o comprimento de onda dos raios X for de 0,154 nm.

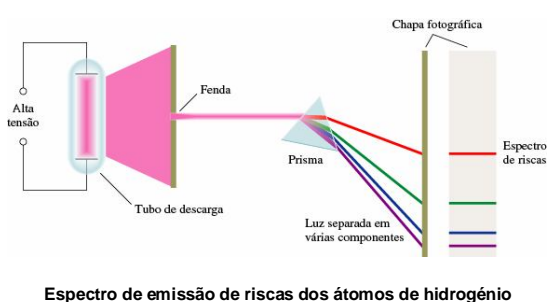
$$E = h \times \nu$$

$$E = h \times c / \lambda$$

$$E = 6,63 \times 10^{-34} \text{ (J} \cdot \text{s)} \times 3,00 \times 10^8 \text{ (m/s)} / 0,154 \times 10^{-9} \text{ (m)}$$

$$E = 1,29 \times 10^{-15} \text{ J}$$

7.2



Espectro de emissão de riscas dos átomos de hidrogénio



7.3

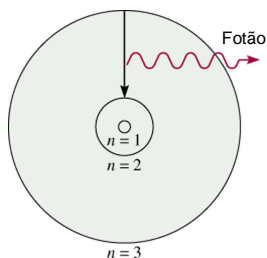
Modelo do Átomo de Bohr (1913)

1. Os e^- apenas podem ter valores específicos (quantizados) de energia.
2. A radiação é emitida devido ao decaimento do e^- de um nível de maior energia para outro nível de energia mais baixo.

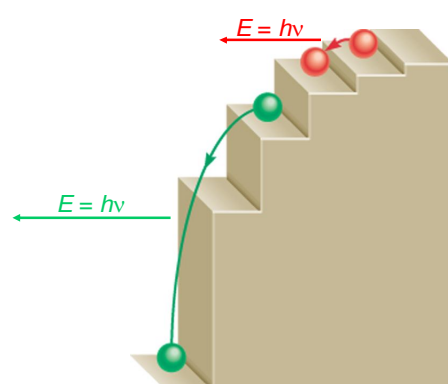
$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

n (número quântico principal) = 1, 2, 3, ...

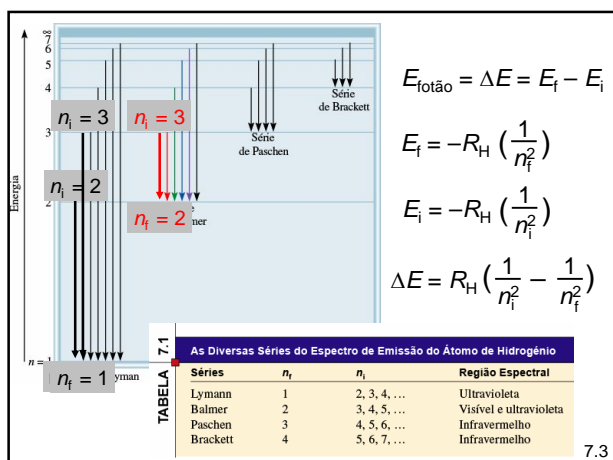
R_H (constante de Rydberg) = $2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$



7.3



7.3



Calcule o comprimento de onda (em nm) de um fóton emitido por um átomo de hidrogénio quando o seu electrão passa do estado $n = 5$ para o estado $n = 3$.

$$E_{\text{fotão}} = \Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$E_{\text{fotão}} = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} \times (1/25 - 1/9)$$

$$E_{\text{fotão}} = \Delta E = -1,55 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_{\text{fotão}} = h \times c / \lambda$$

$$\lambda = h \times c / E_{\text{fotão}}$$

$$\lambda = 6,63 \times 10^{-34} \text{ (J} \cdot \text{s)} \times 3,00 \times 10^8 \text{ (m/s)} / 1,55 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\lambda = 1280 \text{ nm}$$

7.3

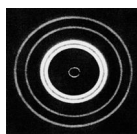
Equação de Onda de Schrodinger

Em 1926, Schrodinger escreveu uma equação que descrevia simultaneamente a natureza ondulatória e corpuscular do electrão.

A função de onda Ψ (psi) descreve:

1. Energia de e^- com uma dada Ψ ,
2. Probabilidade de encontrar e^- num dado volume do espaço.

A equação de Schrodinger apenas pode ser resolvida com exactidão para o átomo de hidrógeno.



7.5

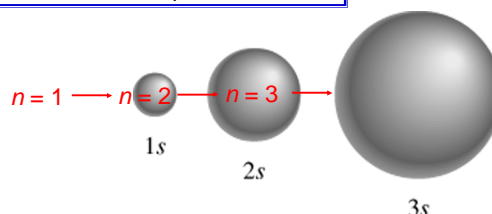
Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

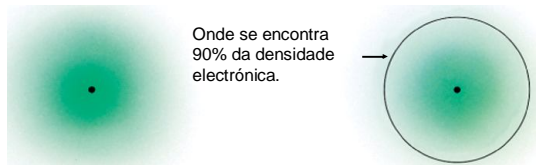
n = número quântico principal

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$

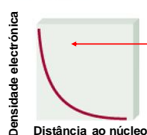
distância de e^- a partir do núcleo



7.6



Onde se encontra 90% da densidade electrónica.



A densidade electrónica (orbital 1s) diminui rapidamente à medida que a distância ao núcleo aumenta.

7.6

Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

l = número quântico de momento angular

para um dado valor de n , $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

$$n = 1, l = 0$$

$$l = 0 \text{ orbital } s$$

$$n = 2, l = 0 \text{ ou } 1$$

$$l = 1 \text{ orbital } p$$

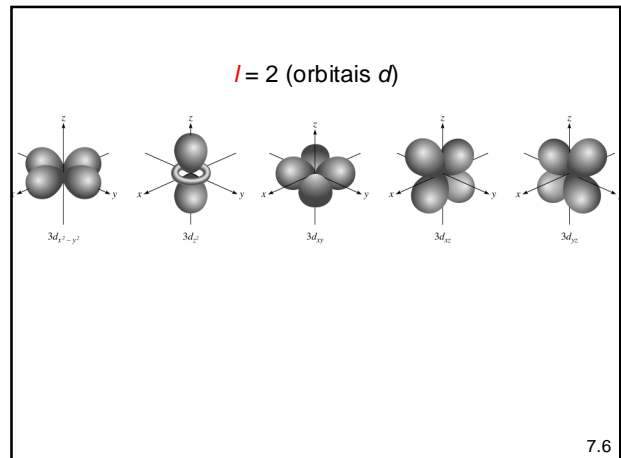
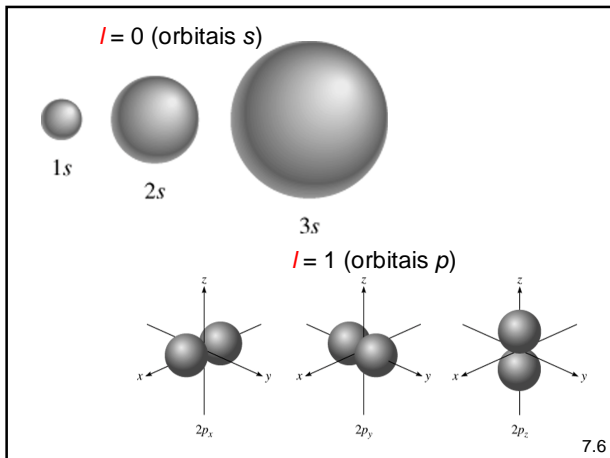
$$n = 3, l = 0, 1 \text{ ou } 2$$

$$l = 2 \text{ orbital } d$$

$$l = 3 \text{ orbital } f$$

Dão forma ao «volume» de espaço que o e^- ocupa

7.6



Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

m_l número quântico magnético

para um dado valor de l

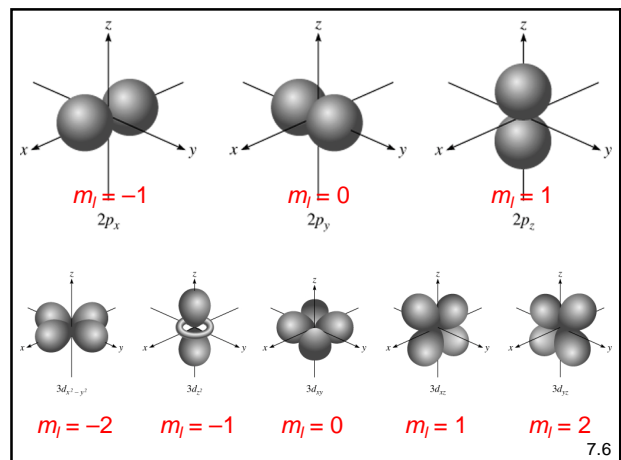
$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

se $l = 1$ (orbital p), $m_l = -1, 0$ ou 1

se $l = 2$ (orbital d), $m_l = -2, -1, 0, 1$ ou 2

orientação da orbital no espaço

7.6



Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

m_s número quântico de spin

$m_s = +\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$

Alvo detector Feixe atômico Ímã Fumo

$m_s = +\frac{1}{2}$ $m_s = -\frac{1}{2}$

7.6

Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

A existência (e a energia) de um electrão num átomo pode apenas ser descrita por uma **única** função de onda Ψ .

Princípio de exclusão de Pauli — nenhum par de electrões num átomo pode ter os quatro números quânticos iguais.

7.6

TABELA 7.2

Relação Entre os Números Quânticos e as Orbitais Atômicas

n	ℓ	m_ℓ	Número de Orbitais	Designações das Orbitais Atômicas
1	0	0	1	1s
2	0	0	1	2s
	1	-1, 0, 1	3	2p _x , 2p _y , 2p _z
3	0	0	1	3s
	1	-1, 0, 1	3	3p _x , 3p _y , 3p _z
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	3d _{xy} , 3d _{xz} , 3d _{yz} , 3d _{z²-y²} , 3d _{x²-y²}
.
.

7.6

Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

Camada — electrões com o mesmo valor de n

Subcamada — electrões com os mesmos valores de n e l

Orbital — electrões com os mesmos valores de n, l e m_l

Quantos electrões se podem alojar numa orbital?

SE n, l e m_l são fixos, então $m_s = \frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$

$$\Psi = (n, l, m_l, \frac{1}{2}) \quad \text{ou} \quad \Psi = (n, l, m_l, -\frac{1}{2})$$

Uma orbital pode alojar 2 electrões

7.6

Quantas orbitais 2p existem num átomo?

$n = 2$
 \downarrow
 2p
 \uparrow
 $l = 1$

Se $l = 1$, então $m_l = -1, 0$ ou $+1$

3 orbitais

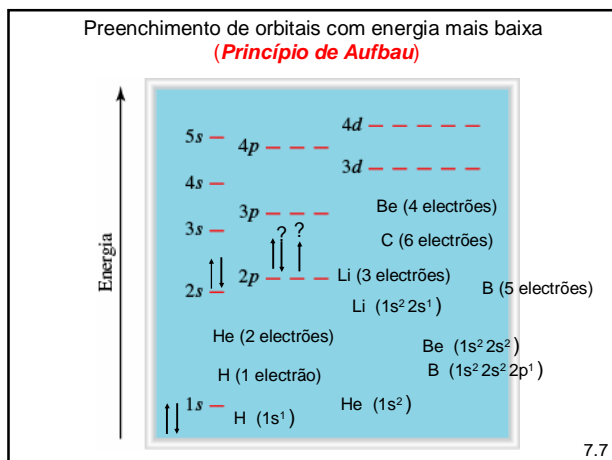
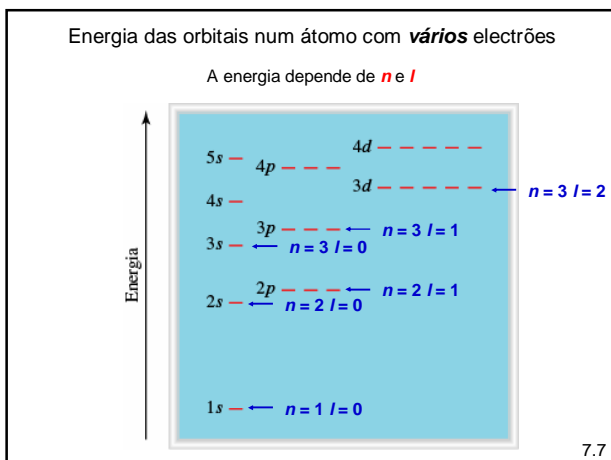
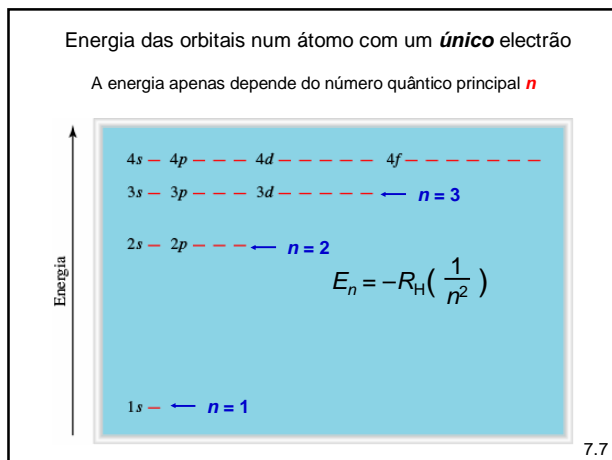
Quantos electrões podem ser colocados na subcamada 3d?

$n = 3$
 \downarrow
 3d
 \uparrow
 $l = 2$

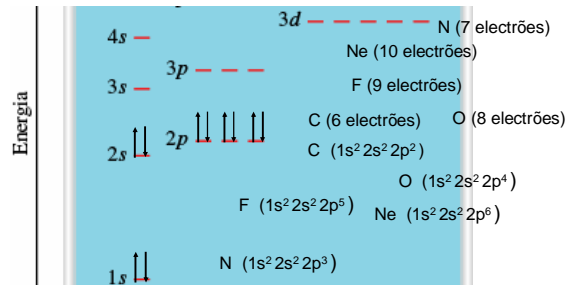
Se $l = 2$, então $m_l = -2, -1, 0, +1$ ou $+2$

5 orbitais que podem conter um total de 10 e⁻

7.6

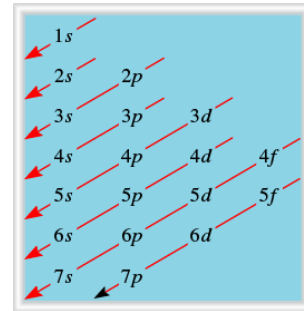


O arranjo mais provável de electrões em subcamadas é aquele que contém o maior número de spins paralelos (**Regra de Hund**).



7.7

Ordem das orbitais (preenchimento) num átomo polieletrónico



$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s$

7.7

A **configuração electrónica** é o modo como os electrões estão distribuídos pelas várias orbitais atómicas num átomo.

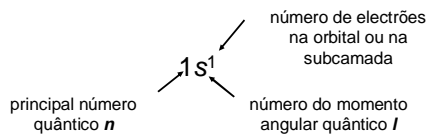


Diagrama orbital



7.8

Qual é a configuração electrónica do Mg?

Mg 12 electrões

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ $2 + 2 + 6 + 2 = 12$ electrões

Abreviado [Ne]3s²

Quais são os números quânticos possíveis para o último electrão (mais afastado do centro) no Cl?

Cl 17 electrões $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s$

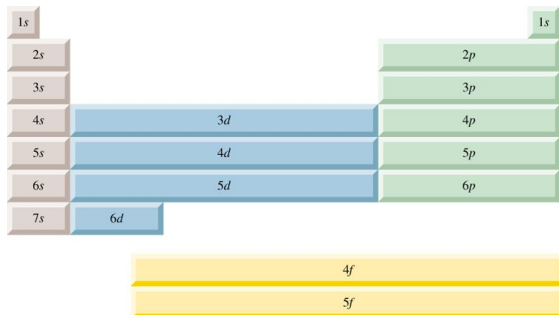
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ $2 + 2 + 6 + 2 + 5 = 17$ electrões

O último electrão é adicionado à orbital 3p

$n = 3$ $l = 1$ $m_l = -1, 0$ ou $+1$ $m_s = \frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$

7.8

Subcamada mais afastada do centro sendo preenchida com electrões



7.8

Número Atómico	Elemento	Configuração Electrónica	Número Atómico	Elemento	Configuração Electrónica	Número Atómico	Elemento	Configuração Electrónica
1	H	1s¹	36	Kr	[Kr]4d¹⁰	75	Re	[Xe]4f¹⁴ 5d⁵ 6s²
2	He	1s²	37	Rb	[Kr]4d¹⁰ 5s¹	76	Os	[Xe]4f¹⁴ 5d⁵ 6s²
3	Li	[He]2s¹	40	Zr	[Kr]4d¹ 5s²	77	Ir	[Xe]4f¹⁴ 5d⁷ 6s²
4	Be	[He]2s²	41	Nb	[Kr]4d¹ 5s²	78	Pt	[Xe]4f¹⁴ 5d⁹ 6s¹
5	B	[He]2s² 2p¹	42	Mo	[Kr]4d⁵ 5s¹	79	Au	[Xe]4f¹⁴ 5d⁹ 6s¹
6	C	[He]2s² 2p²	43	Tc	[Kr]4d⁵ 5s²	80	Hg	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s²
7	N	[He]2s² 2p³	44	Ru	[Kr]4d⁷ 5s¹	81	Tl	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p¹
8	O	[He]2s² 2p⁴	45	Rh	[Kr]4d⁸ 5s¹	82	Pb	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p²
9	F	[He]2s² 2p⁵	46	Pd	[Kr]4d¹⁰	83	Bi	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p³
10	Ne	[He]2s² 2p⁶	47	Ag	[Kr]4d¹⁰ 5s¹	84	Po	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p⁴
11	Na	[Ne]3s¹	48	Cd	[Kr]4d¹⁰ 5s²	85	At	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p⁵
12	Mg	[Ne]3s²	49	In	[Kr]4d¹⁰ 5s² 5p¹	86	Rn	[Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p⁶
13	Al	[Ne]3s² 3p¹	50	Sn	[Kr]4d¹⁰ 5s² 5p²	87	Fr	[Rn]7s¹
14	Si	[Ne]3s² 3p²	51	Sb	[Kr]4d¹⁰ 5s² 5p³	88	Ra	[Rn]7s²
15	P	[Ne]3s² 3p³	52	Te	[Kr]4d¹⁰ 5s² 5p⁴	89	Ac	[Rn]7s²
16	S	[Ne]3s² 3p⁴	53	I	[Kr]4d¹⁰ 5s² 5p⁵	90	Th	[Rn]7s² 7p⁶
17	Cl	[Ne]3s² 3p⁵	54	Xe	[Kr]4d¹⁰ 5s² 5p⁶	91	Pa	[Rn]7s² 7p⁶ 5f²
18	Ar	[Ne]3s² 3p⁶	55	Cs	[Xe]6s¹	92	U	[Rn]7s² 7p⁶ 5f³
19	K	[Ar]4s¹	56	Ba	[Xe]6s²	93	Np	[Rn]7s² 7p⁶ 5f⁴
20	Ca	[Ar]4s²	57	La	[Xe]5d¹ 6s²	94	Pu	[Rn]7s² 7p⁶ 5f⁶
21	Sc	[Ar]4s² 3d¹	58	Ce	[Xe]4f¹ 5d¹ 6s²	95	Am	[Rn]7s² 7p⁶ 5f⁷
22	Ti	[Ar]4s² 3d²	59	Pr	[Xe]4f³ 6s²	96	Cm	[Rn]7s² 7p⁶ 5f⁸
23	V	[Ar]4s² 3d³	60	Nd	[Xe]4f⁴ 6s²	97	Bk	[Rn]7s² 7p⁶ 5f⁹
24	Cr	[Ar]4s¹ 3d⁵	61	Pm	[Xe]4f⁵ 6s²	98	Cf	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁰
25	Mn	[Ar]4s² 3d⁵	62	Sm	[Xe]4f⁶ 6s²	99	Es	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹¹
26	Fe	[Ar]4s² 3d⁶	63	Eu	[Xe]4f⁷ 6s²	100	Fm	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹²
27	Co	[Ar]4s² 3d⁷	64	Gd	[Xe]4f⁷ 5d¹ 6s²	101	Md	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹³
28	Ni	[Ar]4s² 3d⁸	65	Tb	[Xe]4f⁹ 6s²	102	No	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁴
29	Cu	[Ar]4s¹ 3d¹⁰	66	Dy	[Xe]4f¹⁰ 6s²	103	Lr	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁵
30	Zn	[Ar]4s² 3d¹⁰	67	Ho	[Xe]4f¹¹ 6s²	104	Rf	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁶
31	Ga	[Ar]4s² 3d¹⁰ 4p¹	68	Er	[Xe]4f¹² 6s²	105	Db	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁷
32	Ge	[Ar]4s² 3d¹⁰ 4p²	69	Tm	[Xe]4f¹³ 6s²	106	Sg	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁸
33	As	[Ar]4s² 3d¹⁰ 4p³	70	Yb	[Xe]4f¹⁴ 6s²	107	Hs	[Rn]7s² 7p⁶ 5f¹⁹
34	Se	[Ar]4s² 3d¹⁰ 4p⁴	71	Lu	[Xe]4f¹⁴ 5d¹ 6s²	108	Ht	[Rn]7s² 7p⁶ 5f²⁰
35	Br	[Ar]4s² 3d¹⁰ 4p⁵	72	Hf	[Xe]4f¹⁴ 5d² 6s²	109	Mt	[Rn]7s² 7p⁶ 5f²¹
36	Kr	[Ar]4s² 3d¹⁰ 4p⁶	73	Ta	[Xe]4f¹⁴ 5d³ 6s²	110	Ds	[Rn]7s² 7p⁶ 5f²²
37	Rb	[Kr]5s¹	74	W	[Xe]4f¹⁴ 5d⁴ 6s²			

7.8

