

Capítulo 6

Estrutura eletrônica dos átomos

Atabela periódica, abordada no Capítulo 2, surgiu basicamente de observações experimentais. Os elementos que exibem propriedades similares foram colocados juntos na mesma coluna da tabela. Mas quais são as razões fundamentais para essas similaridades? Por que, por exemplo, tanto o sódio quanto o potássio são metais leves e reativos? Por que tanto o hélio quanto o neônio são gases não-reativos? Por que todos os halogênios reagem com o hidrogênio para formar compostos que contêm um átomo de hidrogênio e um átomo de halogênio?

Quando os átomos reagem, são os elétrons que interagem. O segredo para responder a perguntas como as propostas no parágrafo anterior está no entendimento do comportamento dos elétrons no átomo. A distribuição dos elétrons em um átomo é chamada **estrutura eletrônica**. A estrutura eletrônica de um átomo aplica-se não apenas ao número de elétrons que um átomo possui, mas também a suas distribuições ao redor do núcleo e a suas energias.

Como veremos, os elétrons não se comportam como nada que estamos acostumados no mundo macroscópico. O conhecimento de estrutura eletrônica é resultado de um dos principais desenvolvimentos da ciência no século XX, a *teoria quântica*. Neste capítulo descreveremos o desenvolvimento da teoria quântica e como esta levou a uma descrição consistente das estruturas eletrônicas dos elementos. Exploraremos algumas ferramentas usadas na *mecânica quântica*, a nova física que teve de ser desenvolvida para descrever os átomos corretamente. Nos capítulos seguintes, veremos como esses conceitos são usados para explicar as tendências na tabela periódica e a formação de ligações entre os átomos.

6.1 Natureza ondulatória da luz

Muito do entendimento atual sobre a estrutura eletrônica dos átomos veio da análise da luz emitida ou absorvida pelas substâncias. Para entender a base para o modelo atual de estrutura eletrônica, consequentemente, devemos primeiro compreender mais sobre a luz. A luz que podemos ver com nossos olhos, *luz visível*, é um tipo de **radiação eletromagnética**. Como a radiação eletromagnética transporta energia pelo espaço, ela é também conhecida como *energia radiante*. Existem vários tipos de radiação eletromagnética além da luz visível. Essas diferentes formas — como ondas de rádio que “transportam” música, a radiação infravermelha (calor) de lareiras

► O que está por vir ◀

- O entendimento de como a luz (energia radiante, ou *radiação eletromagnética*) interage com a matéria fornece uma compreensão clara do comportamento dos elétrons no átomo.
- A radiação eletromagnética tem propriedades ondulatórias caracterizadas por seu *comprimento de onda*, sua *frequência* e sua *velocidade*.
- Estudos da radiação liberada por objetos quentes e da maneira pela qual a luz atinge uma superfície metálica desprendendo elétrons indicam que a radiação eletromagnética também tem característica de partículas e pode ser descrita em termos de *fôtons*.
- O fato de os átomos desprendem cores características de luz (*espectro de linhas*) fornece pistas sobre como os elétrons estão arranjados nos átomos, levando a dois importantes conceitos: os elétrons existem apenas em certos níveis de energia ao redor do núcleo e a energia está envolvida na movimentação de um elétron de um nível para outro.
- A matéria também tem propriedades ondulatórias e é impossível determinar simultaneamente a exata posição e o movimento preciso de um elétron em um átomo (*princípio da incerteza de Heisenberg*).
- A maneira como os elétrons estão distribuídos nos átomos é descrita pela mecânica quântica em termos de *orbitais*.
- O conhecimento das energias dos orbitais bem como algumas características fundamentais dos elétrons permitem-nos determinar os modos pelos quais os elétrons estão distribuídos entre vários orbitais em um átomo (*configurações eletrônicas*).
- A configuração eletrônica de um átomo está relacionada com a localização do elemento na tabela periódica.

incandescentes e os raios X usados por um dentista — podem *parecer* muito diferentes umas das outras, porém elas compartilham certas características fundamentais.

Todos os tipos de radiações eletromagnéticas movem-se no vácuo a uma velocidade de $3,00 \times 10^8$ m/s, a *velocidade da luz*. Além disso, todas têm características ondulatórias semelhantes às das ondas que se movem na água. As ondas de água são o resultado da energia transferida para a água, talvez pela queda de uma pedra ou o movimento de um barco em sua superfície (Figura 6.1). Essa energia é expressa como movimentos da água para cima e para baixo.

Uma seção transversal de onda de água (Figura 6.2) mostra que ela é periódica: o padrão de picos e depressões repetem-se a intervalos regulares. A distância entre picos (ou depressões) é chamada **comprimento de onda**. O número de comprimentos de onda completo, ou **ciclos**, que passam por determinado ponto a cada segundo, é a **frequência** da onda. Podemos medir a frequência da onda contando o número de vezes por segundo que uma rolha oscilando em sua superfície se move por um ciclo completo de movimentos para cima e para baixo.

As características ondulatórias de uma radiação eletromagnética devem-se a oscilações periódicas de intensidades de forças eletrônicas e magnéticas associadas com a radiação. Podemos apontar a frequência e o comprimento de onda para essas ondas eletromagnéticas, como ilustrado na Figura 6.3. Como a radiação eletromagnética se move à velocidade da luz, o comprimento de onda e a frequência estão relacionados. Se o comprimento de onda é longo, existirão menos ciclos da onda passando por um ponto por segundo; logo, a frequência será baixa. De maneira inversa, para uma onda que tem frequência alta, a distância entre os picos da onda deverá ser menor (comprimento de onda curto). Essa relação inversa entre a frequência e o comprimento de onda de uma radiação eletromagnética pode ser expressa pela seguinte equação:

$$v\lambda = c \quad [6.1]$$

onde v (ni) é a frequência, λ (lambda) é o comprimento de onda e c é a velocidade da luz.

A Figura 6.4 mostra os vários tipos de radiação eletromagnética distribuídos em ordem crescente de comprimento de onda, um mostrador chamado *espectro eletromagnético*. Note que os comprimentos de onda se estendem por uma faixa enorme. Os comprimentos de onda dos raios gama são parecidos com os diâmetros dos núcleos atômicos, enquanto os de ondas de rádio podem ser mais longos do que um campo de futebol. Note também que a luz visível, que compreende os comprimentos de onda de aproximadamente 400 a 700 nm, é uma porção extremamente pequena do espectro eletromagnético.

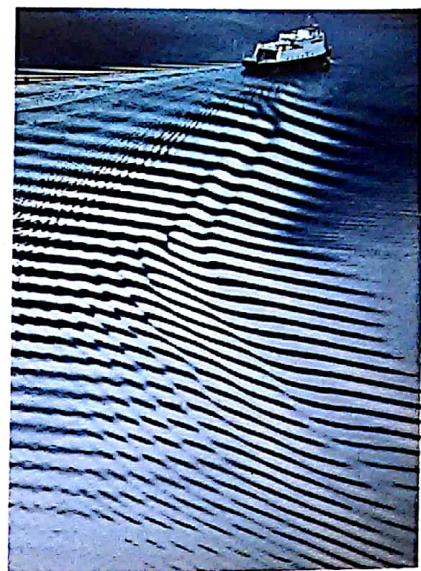
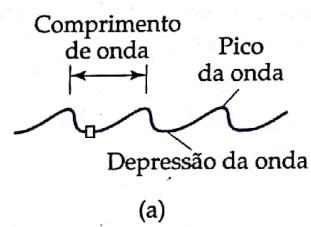
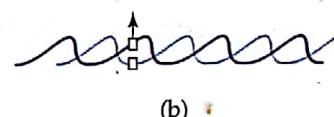


Figura 6.1 As ondas são formadas a partir do movimento de barcos. A variação regular dos picos e depressões permitem-nos perceber o movimento, ou a *propagação*, das ondas.

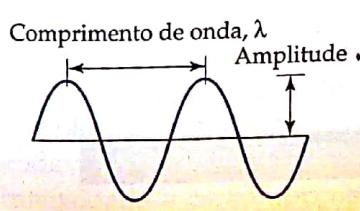


(a)

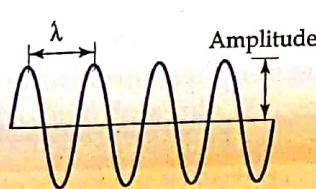


(b)

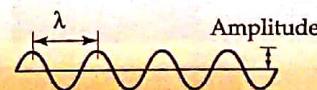
Figura 6.2 Ondas características de água. (a) A distância entre os pontos correspondentes em cada onda é chamado *comprimento de onda*. (b) O número de vezes por segundo que a rolha emerge ou afunda é chamado *frequência*.



(a) Dois ciclos completos de comprimento de onda λ



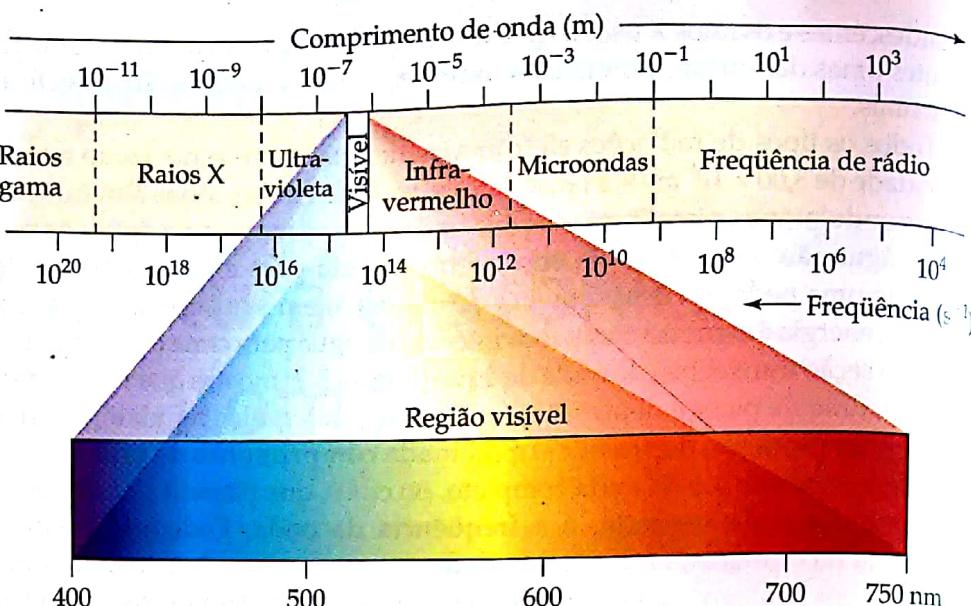
(b) Metade do comprimento de onda em (a); frequência duas vezes maior que a do item (a)



(c) Mesma frequência de (b), amplitude menor

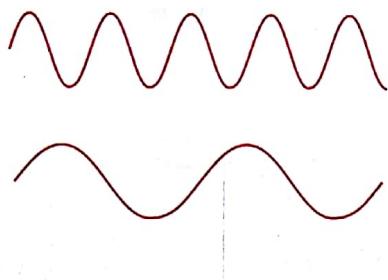
Figura 6.3 A energia radiante tem características de onda e constitui-se de ondas eletromagnéticas. Note que quanto mais curto o comprimento de onda, λ , mais alta é a frequência, v . O comprimento de onda no item (b) tem a metade do comprimento da do item (a), e sua frequência é, portanto, duas vezes maior. A *amplitude* das ondas está relacionada com a intensidade da radiação. Ela é a extensão máxima da oscilação de uma onda. Nesses diagramas, ela é medida como a distância vertical da linha média da onda até seu pico. As ondas em (a) e (b) têm a mesma amplitude. A onda em (c) tem a mesma frequência daquela de (b), mas sua amplitude é mais baixa.

Figura 6.4 Comprimentos de onda de radiação eletromagnética característicos de várias regiões do espectro eletromagnético. Note que a cor pode ser expressa quantitativamente pelo comprimento de onda.



Podemos ver a luz visível por causa das reações químicas que ela provoca em nossos olhos. A unidade de comprimento normalmente escolhida para expressar o comprimento de onda depende do tipo de radiação, como mostrado na Tabela 6.1.

A freqüência é expressa em ciclos por segundo, uma unidade também chamada *hertz* (Hz). Como se entende que ciclos estão envolvidos, as unidades de freqüência são geralmente dadas como ‘por segundo’, indicado por s^{-1} . Por exemplo, uma freqüência de 820 quilohertz (kHz), típica de estação de rádio AM, poderia ser escrita como $820.000\ s^{-1}$.



COMO FAZER 6.1

Duas ondas eletromagnéticas são representadas ao lado. (a) Qual onda tem a maior freqüência? (b) Se uma onda representa a luz visível e a outra, a radiação infravermelho, qual é uma e qual é outra?

Solução (a) A onda de baixo tem comprimento de onda mais longo (maior distância entre os picos). Quanto maior o comprimento de onda, menor a freqüência ($v = c/\lambda$). Portanto, a onda de baixo tem freqüência menor, e a onda de cima tem freqüência maior.

(b) O espectro eletromagnético (Figura 6.4) indica que a radiação infravermelho tem comprimento de onda mais longo do que a luz visível. Assim, a onda de baixo seria a radiação infravermelho.

PRATIQUE

Se uma das ondas na margem representa a luz azul e a outra, a vermelha, qual seria qual?

Resposta: a onda de baixo tem comprimento de onda mais longo (menor freqüência) e seria a luz vermelha.

TABELA 6.1 Unidades de comprimentos de onda comuns para radiações eletromagnéticas

| Unidade | Símbolo | Comprimento (m) | Tipo de radiação |
|------------|---------|-----------------|-----------------------|
| Angström | Å | 10^{-10} | Raios X |
| Nanômetro | nm | 10^{-9} | Ultravioleta, visível |
| Mícron | μm | 10^{-6} | Infravermelho |
| Milímetro | mm | 10^{-3} | Infravermelho |
| Centímetro | cm | 10^{-2} | Microondas |
| Metro | m | 1 | TV, rádio |

COMO FAZER 6.2

A luz amarela emitida por uma lâmpada de vapor de sódio usada para iluminação pública tem um comprimento de onda de 589 nm. Qual é a freqüência dessa radiação?

Solução

Análise: foi dado o comprimento de onda, λ , da radiação e pede-se calcular a freqüência, v .

Planejamento: a relação entre o comprimento de onda e a freqüência é dada pela Equação 6.1:

$$v\lambda = c$$

Podemos resolver para freqüência, v , uma vez que conhecemos tanto λ quanto c . (A velocidade da luz, c , é uma constante fundamental cujo valor é dado no texto ou na tabela de constantes fundamentais no encarte que acompanha este livro.)

$$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m/s}$$

Resolução: a resolução da Equação 6.1 para freqüência fornece:

$$v = c/\lambda$$

Quando inserirmos os valores de c e λ , observamos que as unidades de comprimento nessas duas grandezas são diferentes. Podemos converter o comprimento de onda de nanômetros para metros, de forma que as unidades se cancelam:

$$v = \frac{c}{\lambda} = \left(\frac{3,00 \times 10^8 \text{ m/s}}{589 \text{ nm}} \right) \left(\frac{1 \text{ nm}}{10^{-9} \text{ m}} \right) = 5,09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

Conferência: a freqüência alta é razoável por causa do comprimento de onda curto. A unidade é apropriada porque a freqüência tem unidade de 'por segundo' ou s^{-1} .

PRATIQUE

(a) Um laser usado em cirurgia de olhos, para reparar retinas descoladas, produz radiação com comprimento de onda de 640,0 nm. Calcule a freqüência dessa radiação. (b) Uma estação de rádio FM transmite radiação eletromagnética a uma freqüência de 103,4 MHz (megahertz; 1 MHz = 10^6 s^{-1}). Calcule o comprimento de onda dessa radiação.

Respostas: (a) $4,688 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$; (b) 2,901 m.

6.2 Energia quantizada e fótons

Apesar de o modelo ondulatório da luz explicar muitos aspectos de seu comportamento, existem vários fenômenos que ele não pode explicar. Três desses são especialmente pertinentes para o entendimento de como a radiação eletromagnética e os átomos interagem. Esses três fenômenos são (1) a emissão de luz por objetos quentes (chamada *radiação de corpo preto* porque os objetos estudados parecem pretos antes do aquecimento), (2) a emissão de elétrons a partir de uma superfície metálica onde a luz incide (*o efeito fotoelétrico*) e (3) a emissão de luz a partir de átomos de gás excitados eletronicamente (*espectros de emissão*). Examinaremos os dois primeiros a seguir e o terceiro na Seção 6.3.

Objetos quentes e quantização da energia

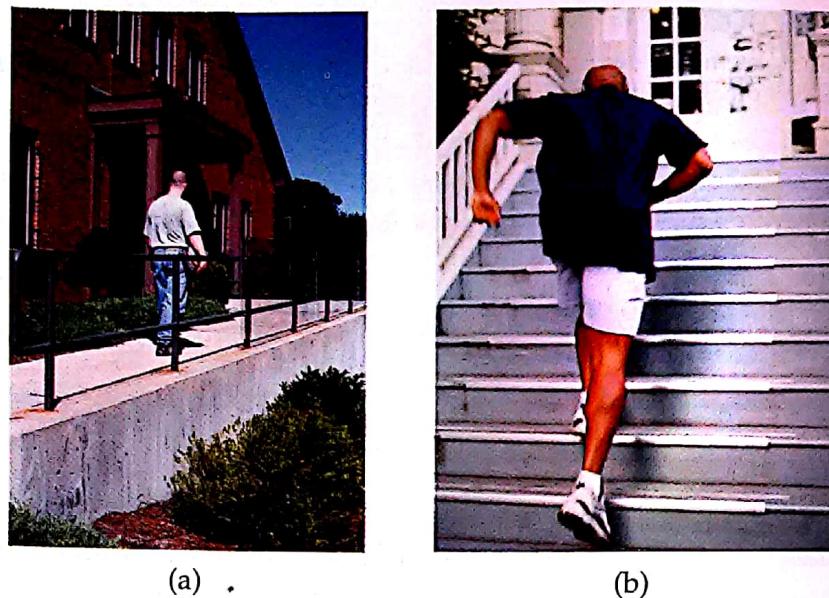
Quando os sólidos são aquecidos, eles emitem radiação, como visto na incandescência vermelha das trempes de um fogão elétrico e a luz branca brilhante de lâmpadas de tungstênio. A distribuição do comprimento de onda de uma radiação depende da temperatura, um objeto 'vermelho quente' que é mais frio que um objeto 'quente branco' (Figura 6.5). No final do século XIX alguns físicos estudavam esse fenômeno, tentando entender a relação entre a temperatura e a intensidade e os comprimentos de onda da radiação emitida. As leis predominantes da física não podiam explicar essas observações.

Em 1900, um físico alemão chamado Max Planck (1858–1947) resolveu o problema fazendo uma suposição audaciosa: ele propôs que a energia podia ser liberada (ou absorvida) por átomos apenas em 'pedaços' distintos de tamanhos mínimos. Planck deu o nome **quantum** (significando 'quantidade fixa') para a menor quantidade de energia que podia ser emitida ou absorvida como radiação eletromagnética. Ele considerou que a energia, E , de um único quantum é igual à constante multiplicada pela freqüência.



Figura 6.5 A cor e a intensidade de luz emitidas por um objeto quente depende da temperatura do objeto. A temperatura é mais alta no centro desse derramamento de aço fundido. Como resultado, a luz emitida do centro é mais intensa e de comprimento de onda mais curto.

Figura 6.6 A energia potencial de uma pessoa subindo uma rampa (a) aumenta de maneira uniforme e contínua, ao passo que a de uma pessoa subindo escada (b) aumenta de maneira gradual e quantizada.



$$E = hv$$

[6.2]

A constante h , conhecida como **constante de Planck**, tem valor de $6,63 \times 10^{-34}$ joule segundos (J s). De acordo com a teoria de Planck, a energia é sempre emitida ou absorvida pela matéria em múltiplos inteiros de hv , $2hv$, $3hv$ e assim por diante. Se a quantidade de energia emitida por um átomo for $3hv$, por exemplo, dizemos que foram emitidos três quanta de energia (quanta é o plural de quantum). Além disso, dizemos que as energias permitidas são quantizadas, isto é, seus valores são restritos a determinadas quantidades. A proposta revolucionária de Planck sobre a energia ser quantizada foi comprovada e ele ganhou o Prêmio Nobel de Física em 1918 por seu trabalho sobre teoria quântica.

Se a noção de energias quantizadas lhe parece estranha, pode ser útil fazer uma comparação entre uma rampa e uma escada (Figura 6.6). À medida que você sobe a rampa, sua energia potencial aumenta uniformemente, de maneira contínua. Quando você sobe uma escada, você pode pisar apenas *em* degraus individuais, não *entre* eles, de modo que sua energia potencial está restrita a determinados valores e, portanto, é quantizada.

Se a teoria quântica de Planck está correta, por que seus efeitos não são mais óbvios no nosso dia-a-dia? Por que as variações de energia parecem ser contínuas em vez de quantizadas? Observe que a constante de Planck é um número extremamente pequeno. Portanto um quantum de energia, hv , será uma quantidade extremamente pequena. As regras de Planck com respeito à obtenção ou perda de energia são sempre as mesmas se estivermos preocupados com objetos na escala de tamanho de nossas experiências cotidianas ou com objetos microscópicos. Para objetos macroscópicos como os seres humanos, a obtenção ou a perda de energia de um único quantum de energia passa completamente despercebido. Entretanto, quando lidamos com matéria em nível atômico, o impacto das energias quantizadas é muito mais significativo.

O efeito fotoelétrico e fótons

Poucos anos após Planck apresentar sua teoria, os cientistas começaram a ver sua aplicabilidade para um grande número de observações experimentais. Rapidamente se tornou aparente que a teoria de Planck tinha com ela as sementes de uma revolução no modo como o mundo físico era visto. Em 1905, Albert Einstein (1879–1955) usou a teoria quântica de Planck para explicar o **efeito fotoelétrico**, ilustrado na Figura 6.7. Os experimentos tinham mostrado que a luz incidindo em uma superfície metálica limpa leva-a emitir elétrons. Para cada metal existe uma frequência mínima de luz abaixo da qual nenhum elétron é emitido. Por exemplo, a luz com frequência de $4,60 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ou maior faz com que o césio metálico emita elétrons, mas a luz de frequências mais baixas não tem efeito.

Para explicar o efeito fotoelétrico, Einstein supôs que a energia radiante atingindo a superfície metálica é um fluxo de pacotes minúsculos de energia. Cada pacote de energia, chamado **fóton**, comporta-se como uma partícula minúscula. Ampliando a teoria quântica de Planck, Einstein deduziu que cada fóton deveria ter uma energia proporcional à frequência da luz: $E = hv$. Portanto, a própria energia radiante é quantizada.

$$\text{Energia do fóton} = E = hv$$

[6.3]

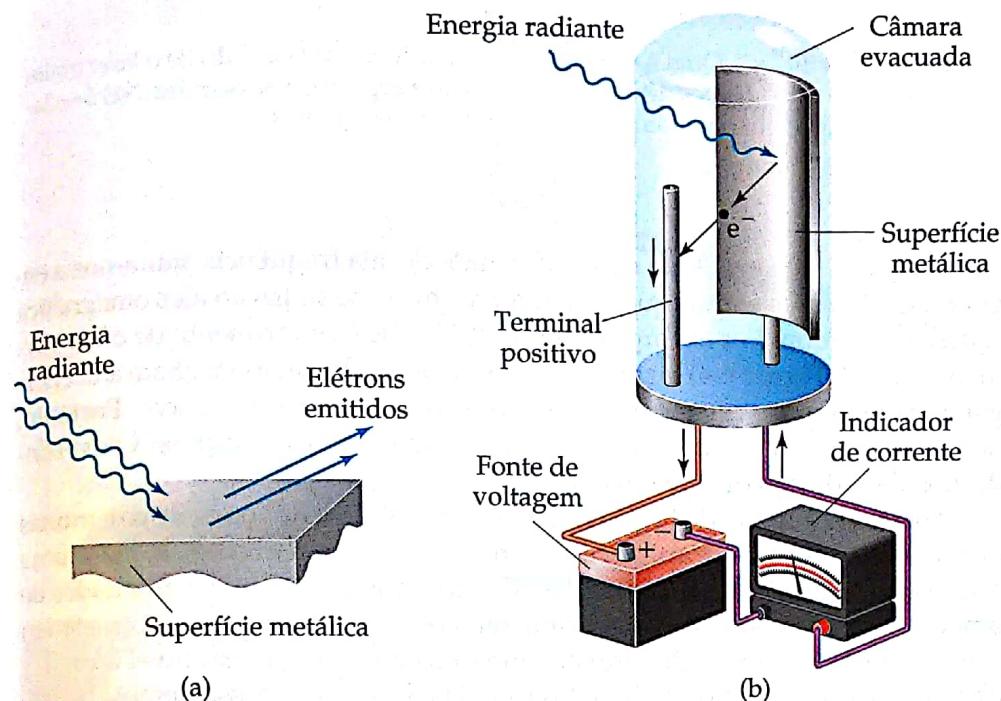


Figura 6.7 Efeito fotoelétrico. Quando fótons de energia suficientemente alta colidem com uma superfície metálica, elétrons são emitidos do metal, como em (a). O efeito fotoelétrico é a base da fotocélula mostrada em (b). Os elétrons emitidos são puxados para o terminal positivo. Como resultado, a corrente flui no circuito. As fotocélulas são usadas em medidores de luz para fotografia, bem como em numerosos outros dispositivos eletrônicos.

ANIMAÇÃO
Efeito fotoelétrico

Quando um fóton atinge o metal, ele pode literalmente desaparecer. Quando isso acontece, sua energia pode ser transferida para um elétron no metal. É necessária uma determinada quantidade de energia para que o elétron vença as forças atrativas que o prendem ao metal. Se os fótons da radiação têm menos energia do que o limiar de energia, os elétrons não adquirem energia suficiente para sair da superfície do metal, mesmo que o feixe de luz seja intenso. Se os fótons têm energia suficiente, os elétrons são emitidos. Se os fótons têm mais do que a energia mínima necessária para liberar os elétrons, o excesso aparece como energia cinética dos elétrons emitidos.

Para entender melhor o que é um fóton, imagine que você tem uma fonte de luz que produz radiação com um único comprimento de onda. Suponha também que você pode ligar e desligar a luz cada vez mais rapidamente de modo a fornecer manifestações repentinas e contínuas de energia. A teoria de fótons de Einstein nos diz que eventualmente você atingiria a menor manifestação repentina de energia, dada por $E = hv$. A menor manifestação de energia consiste em um único fóton de luz.

COMO FAZER 6.3

Calcule a energia de um fóton amarelo cujo comprimento de onda é 589 nm.

Solução

Análise: o objetivo é calcular a energia, E , de um fóton considerando $\lambda = 589 \text{ nm}$.

Planejamento: podemos usar a Equação 6.1 para converter o comprimento de onda em freqüência:

$$v = c/\lambda$$

Podemos, a seguir, usar a Equação 6.3 para calcular a energia:

$$E = hv$$

O valor da constante de Planck é dado tanto no texto quanto na tabela de constantes físicas no encarte que acompanha este livro:

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

Resolução: a freqüência, v , é calculada a partir do comprimento de onda dado, como mostrado em "Como fazer 6.2":

$$v = c/\lambda = 5,09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

Portanto, temos:

$$E = (6,63 \times 10^{-34} \text{ J s})(5,09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}) = 3,37 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Comentário: se um fóton de energia radiante fornece $3,37 \times 10^{-19} \text{ J}$, um mol desses fótons fornecerá:

$$(6,02 \times 10^{23} \text{ fótons/mol}) (3,37 \times 10^{-19} \text{ J/fóton}) = 2,03 \times 10^5 \text{ J/mol}$$

Essa é a ordem de grandeza de entalpias de reações (Seção 5.4), de forma que a radiação pode romper ligações químicas, produzindo as chamadas *reações fotoquímicas*.

PRATIQUE

(a) Um laser emite luz com freqüência de $4,69 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Qual é a energia da radiação desse laser? (b) Se o laser emite uma explosão ou pulso de energia contendo $5,0 \times 10^{17}$ fótons de radiação, qual é a energia total desse pulso? (c) Se o laser emite $1,3 \times 10^{-2} \text{ J}$ de energia durante um pulso, quantos fótons são emitidos durante o pulso?

Respostas: (a) $3,11 \times 10^{-19} \text{ J}$; (b) $0,16 \text{ J}$; (c) $4,2 \times 10^{16}$ fótons.

FILME

Testes de chama para metais



Figura 6.8 Niels Bohr (à direita) com Albert Einstein. Bohr (1885–1962) fez importantes contribuições para a teoria quântica. De 1911 a 1913 estudou na Inglaterra, trabalhando primeiro com J. J. Thomson, na Universidade de Cambridge, e mais tarde com Ernest Rutherford, na Universidade de Manchester. Publicou sua teoria quântica do átomo em 1914 e recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1922.

A idéia de que a energia da luz depende de sua freqüência ajuda-nos a entender os diversos efeitos que os diferentes tipos de radiação eletromagnética causam à matéria. Por exemplo, altas freqüências (comprimento de onda curto) de raios X (Figura 6.4) fazem com que os fótons desse tipo tenham alta energia, suficiente para causar danos aos tecidos e até mesmo câncer. Portanto normalmente são colocados avisos perto de equipamentos de raios X advertindo-nos da radiação de alta energia.

Apesar de a teoria de luz de Einstein explicar o efeito fotoelétrico e muitas outras observações, ela apresentou uma situação embarracosa. A luz é uma onda ou ela compõe-se de partículas? O fato é que ela possui propriedades de ambos. Comporta-se macroscopicamente como uma onda, mas consiste em um conjunto de fótons. Quando examinamos o fenômeno em nível atômico observamos suas propriedades de partículas. É como se passássemos da descrição de uma praia inteira para começar a examinar os grãos de areia de quais a praia é constituída.

6.3 Espectros de linhas e o modelo de Bohr

Os trabalhos de Planck e Einstein abriram caminho para a compreensão de como os elétrons são distribuídos nos átomos. Em 1913 o físico dinamarquês Niels Bohr (Figura 6.8) propôs uma explicação teórica dos espectros de linhas, outro fenômeno que intrigava os cientistas no século XIX. Vamos a princípio examinar esse fenômeno e, em seguida, estudar como Bohr usou as idéias de Planck e Einstein.

Espectros de linhas

Uma fonte específica de energia radiante pode emitir um comprimento de onda único, como na luz de um laser (Figura 6.9). A radiação composta por um único comprimento de onda é chamada *monocromática*. Entretanto, a maioria das radiações comuns, incluindo lâmpadas incandescentes e estrelas, produz radiação contendo muitos comprimentos de onda diferentes. Quando a radiação de fontes como essas é separada em seus diferentes comprimentos de onda componentes, um **espectro** é produzido. A Figura 6.10 mostra como um prisma dispersa a luz de uma lâmpada incandescente. O espectro produzido constitui-se de uma faixa contínua de cores: o violeta funde-se ao azul; o azul, ao verde, e assim por diante, sem nenhum ponto branco. Esse arco-íris, contendo luz de todos os comprimentos de onda, é chamado **espectro contínuo**. O exemplo mais comum de um espectro contínuo é o arco-íris produzido pela dispersão da luz do sol através dos pingos de chuva ou neblina.

Nem todas as fontes de radiação produzem um espectro contínuo. Quando diferentes gases são colocados sob pressão em um tubo e uma alta voltagem é aplicada, os gases emitem diferentes cores de luz (Figura 6.11). A luz emitida pelo gás neônio é a familiar incandescência vermelhado-alaranjada de muitos letreiros luminosos, enquanto o vapor de sódio emite a luz característica de algumas luzes de rua modernas. Quando a luz vinda de tais tubos passa através de um prisma, apenas linhas de poucos comprimentos de onda estão presentes nos espectros resultantes, como mostrado na Figura 6.12. As linhas coloridas são separadas por regiões pretas, que correspondem a comprimentos de onda ausentes na luz. Um espectro contendo apenas radiações de comprimentos de onda específicos é chamado **espectro de linhas**.

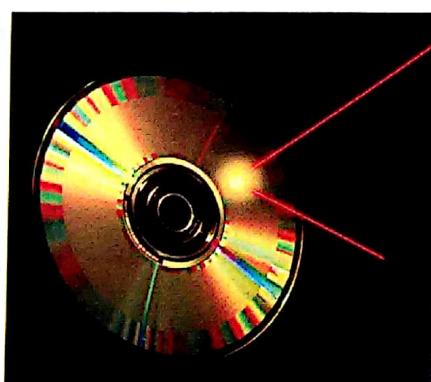


Figura 6.9 Um feixe de laser refletido a partir da superfície de um disco de CD. Aparelhos de CD e similares usam um pequeno feixe de laser para ler a informação no disco.

emitida pelo gás neônio é a familiar incandescência vermelhado-alaranjada de muitos letreiros luminosos, enquanto o vapor de sódio emite a luz característica de algumas luzes de rua modernas. Quando a luz vinda de tais tubos passa através de um prisma, apenas linhas de poucos comprimentos de onda estão presentes nos espectros resultantes, como mostrado na Figura 6.12. As linhas coloridas são separadas por regiões pretas, que correspondem a comprimentos de onda ausentes na luz. Um espectro contendo apenas radiações de comprimentos de onda específicos é chamado **espectro de linhas**.

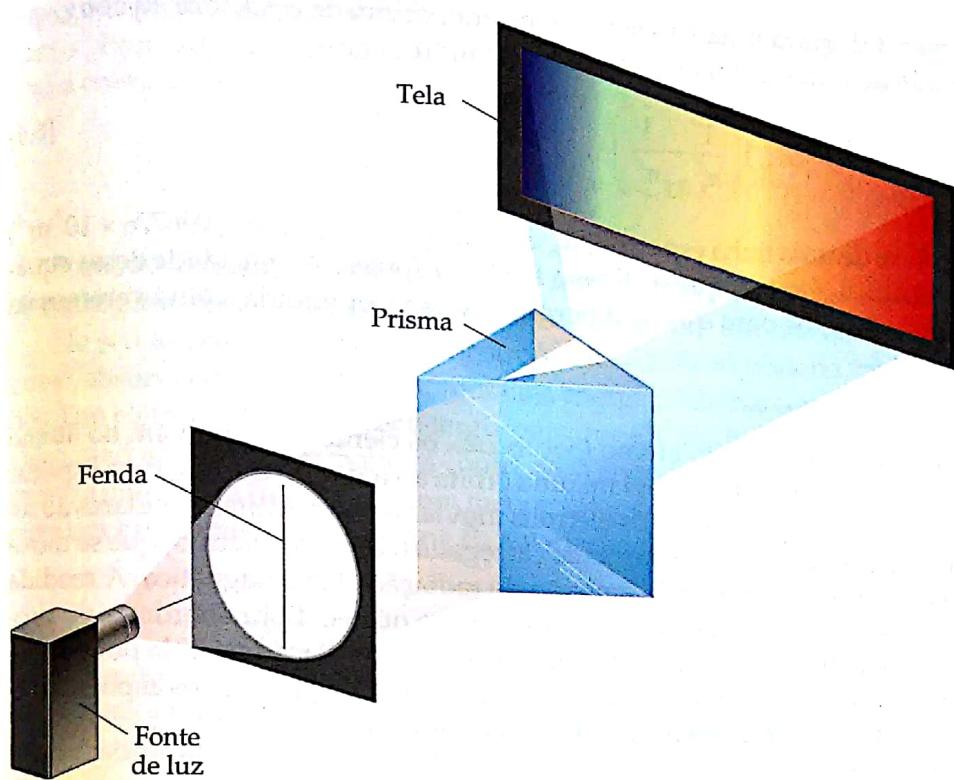


Figura 6.10 Um espectro visível contínuo é produzido quando um feixe estreito de luz branca atravessa um prisma. A luz branca poderia ser a luz do sol ou a luz de uma lâmpada incandescente.



Figura 6.11 Gases diferentes emitem luz de cores características diferentes a partir da excitação com uma descarga elétrica: (a) hidrogênio; (b) neônio.

Quando os cientistas detectaram pela primeira vez o espectro de linhas do hidrogênio na metade do século XIX, ficaram fascinados pela sua simplicidade. Em 1885 um professor suíço chamado Johann Balmer observou que os comprimentos de onda das quatro linhas do hidrogênio mostrado na Figura 6.12 encaixa de maneira intrigante em uma fórmula simples. Descobriu-se que linhas adicionais ocorriam nas regiões do ultravioleta e do infravermelho.

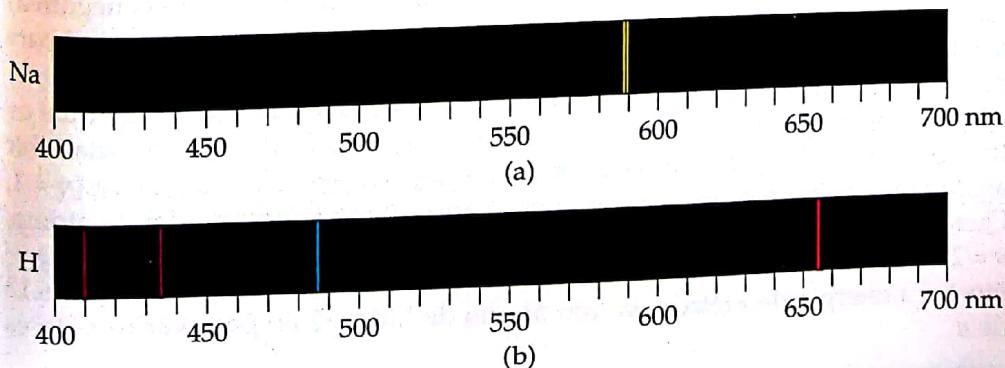


Figura 6.12 O espectro de linhas de (a) Na; (b) H.

Rapidamente a equação de Balmer foi estendida para uma equação mais geral, chamada *equação de Rydberg*, que permitiu calcular os comprimentos de onda de todas as linhas espectrais do hidrogênio:

$$\frac{1}{\lambda} = (R_H) \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad [6.4]$$

Nessa fórmula, λ é o comprimento de onda de uma linha espectral, R_H é a constante de Rydberg ($1,096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$) e n_1 e n_2 são números inteiros e positivos, sendo n_2 é maior que n_1 . Como a extraordinária simplicidade dessa equação poderia ser explicada? Passaram-se mais 30 anos para que essa pergunta fosse respondida, como veremos na próxima seção.

O modelo de Bohr

Depois que Rutherford descobriu a natureza nuclear do átomo (Seção 2.2), os cientistas pensavam no átomo como um ‘sistema solar microscópico’ no qual os elétrons descreviam uma órbita ao redor do núcleo. Para explicar o espectro de linhas do hidrogênio, Bohr começou supondo que os elétrons moviam-se em órbitas circulares ao redor do núcleo. Entretanto, de acordo com a física clássica, uma partícula carregada (como um elétron) que se move em uma trajetória circular perderia energia continuamente pela emissão de radiação eletromagnética. À medida que o elétron perde energia, ele deve mover-se em forma de espiral em direção ao núcleo. Bohr abordou esse problema quase da mesma forma que Planck tinha abordado o problema da natureza da radiação emitida por objetos quentes: Assumindo que as leis predominantes da física eram inadequadas para descrever todos os aspectos dos átomos. Além disso, ele adotou a idéia de Planck de que as energias eram quantizadas.

Bohr baseou seu modelo em três postulados:

1. Somente órbitas de certos raios, correspondendo a certas energias definidas, são permitidas para os elétrons em um átomo.
2. Um elétron em certa órbita permitida tem certa energia específica e está em um estado de energia ‘permitido’. Um elétron em estado de energia permitido não irradiará energia e, portanto, não se moverá em forma de espiral em direção ao núcleo.
3. A energia só é emitida ou absorvida por um elétron quando ele muda de um estado de energia permitido para outro. Essa energia é emitida ou absorvida como fóton, $E = h\nu$.

Os estados de energia do átomo de hidrogênio

Começando com seus três postulados e usando as equações clássicas de movimento e para interação entre cargas elétricas, Bohr calculou as energias correspondentes a cada órbita permitida. Essas energias encaixavam-se na seguinte fórmula:

$$E = (-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}) \left(\frac{1}{n^2} \right) \quad [6.5]$$

O número inteiro n , que pode assumir valores de 1 a infinito, é chamado *número quântico*. Cada órbita corresponde a um valor diferente de n e o raio da órbita aumenta à medida que n aumenta. Dessa forma, a primeira órbita permitida (a órbita mais próxima ao núcleo) tem $n = 1$, a próxima órbita permitida (a segunda mais próxima do núcleo) tem $n = 2$, e assim por diante.

As energias do elétron de um átomo de hidrogênio dadas pela Equação 6.5 são negativas para todos os valores de n . Quanto mais baixa (mais negativa) for a energia, mais estável será o átomo. A energia é mais baixa (mais negativa) para $n = 1$. À medida que n aumenta, a energia torna-se sucessivamente menos negativa e aumenta. Podemos comparar essa situação a uma escada na qual os degraus são numerados da base para cima. Quanto mais alto uma pessoa subir (maior o valor de n), maior a energia. O estado de energia mais baixa ($n = 1$, analogamente ao degrau da base) é chamado **estado fundamental** do átomo. Quando o elétron está em uma órbita de energia mais alta (menos negativa) — $n = 2$ ou mais alta — diz-se que o átomo está em **estado excitado**. A Figura 6.13 mostra a energia do elétron em um átomo de hidrogênio para vários valores de n .

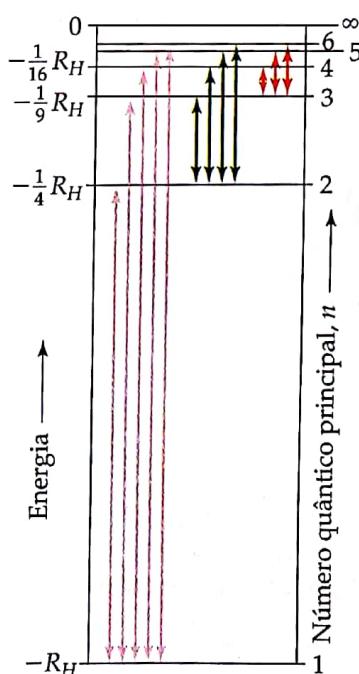


Figura 6.13 Níveis de energia no átomo de hidrogênio a partir do modelo de Bohr. As setas referem-se às transições do elétron de um estado de energia permitida para outro. Os estados mostrados são aqueles para os quais $n = 1$ a $n = 6$, e o estado para $n = \infty$, para o qual a energia, E , é igual a zero.

O que acontece ao raio da órbita e à energia na medida em que n se torna infinitamente grande? O raio aumenta com n^2 . Prontamente atingimos um ponto no qual o elétron está completamente separado de seu núcleo. Quando $n = \infty$, a energia é zero.

$$E = (-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}) \left(\frac{1}{n^2} \right) = 0$$

Portanto, o estado no qual o elétron é removido do núcleo é o estado de referência, ou energia zero, do átomo de hidrogênio. Esse estado de energia zero é mais alto em energia que os estados com energias negativas.

No seu terceiro postulado, Bohr supôs que o elétron poderia ‘pular’ de um estado de energia permitido para outro, absorvendo ou emitindo fótons cuja energia radiante corresponda exatamente à diferença entre os dois estados. Um elétron deve absorver energia para que ele mude para um estado de mais alta energia (um estado com um valor mais alto de n). De maneira contrária, a energia radiante é emitida quando o elétron pula para um estado de energia mais baixa (um estado com menor valor de n). Assim, se o elétron pula de um estado inicial, com energia E_i , para um estado final, com energia E_f , a variação de energia é dada pela seguinte relação:

$$\Delta E = E_f - E_i = E_{\text{fóton}} = h\nu \quad [6.6]$$

Portanto, o modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio afirma que apenas freqüências específicas de luz que satisfazem a Equação 6.6 podem ser absorvidas ou emitidas pelo átomo.

Substituindo a expressão de energia da Equação 6.5 na Equação 6.6 e recalculando $\nu = c/\lambda$, temos:

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = (-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}) \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad [6.7]$$

Nessa equação, n_i e n_f são os números quânticos principais dos estados inicial e final do átomo, respectivamente. Se n_f é menor que n_i , o elétron move-se para mais perto do núcleo e ΔE é um número negativo, indicando que o átomo libera energia. Por exemplo, se o elétron move-se de $n_i = 3$ para $n_f = 1$, temos:

$$\Delta E = (-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}) \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) = (-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}) \left(\frac{8}{9} \right) = -1,94 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Sabendo a energia para o fóton emitido, podemos calcular sua freqüência ou seu comprimento de onda. Para o comprimento de onda, temos:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J s})(3,00 \times 10^8 \text{ m/s})}{1,94 \times 10^{-18} \text{ J}} = 1,03 \times 10^{-7} \text{ m}$$

Não incluímos o sinal negativo da energia nesse cálculo porque o comprimento de onda e a freqüência são sempre fornecidos como grandezas positivas. O sentido do fluxo de energia é indicado quando se diz que o fóton de comprimento de onda $1,03 \times 10^{-7} \text{ m}$ foi *emitido*.

Se resolvemos a Equação 6.7 para $1/\lambda$ e excluirmos o sinal negativo, teremos que essa equação derivada da teoria de Bohr corresponde à equação de Rydberg, Equação 6.4, obtida com dados experimentais:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{2,18 \times 10^{-18} \text{ J}}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

De fato, a combinação das constantes, $(2,18 \times 10^{-18} \text{ J})/hc$ é igual à constante de Rydberg, R_H , para três algarismos significativos, $1,10 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. Portanto, a existência de linhas espectrais pode ser atribuída aos pulos quantizados de elétrons entre os níveis de energia.

COMO FAZER 6.4

Usando a Figura 6.13, determine qual das seguintes transições eletrônicas produz a linha espectral de comprimento de onda mais longo: $n = 2$ para $n = 1$, $n = 3$ para $n = 2$ ou $n = 4$ para $n = 3$.

Solução O comprimento de onda aumenta à medida que a freqüência diminui ($\lambda = c/v$). Naturalmente o comprimento de onda mais longo estará associado à menor freqüência. De acordo com a equação de Planck, $E = hv$, a freqüência mais baixa está associada à energia mais baixa. Na Figura 6.13, a linha mais curta representa a menor variação de energia. Portanto, a transição $n = 4$ para $n = 3$ produz a linha de comprimento de onda mais longa (freqüência mais baixa).

PRATIQUE

Indique se cada uma das seguintes transições eletrônicas emite energia ou necessita de absorção de energia: (a) $n = 3$ para $n = 1$; (b) $n = 2$ para $n = 4$.

Respostas: (a) emite energia; (b) necessita de absorção de energia.

Limitações do modelo de Bohr

Enquanto o modelo de Bohr oferece uma explicação para o espectro de linhas do átomo de hidrogênio, ele não pode explicar o espectro de outros átomos, a não ser de uma maneira muito incipiente. Além disso, existe um problema em descrever um elétron meramente como uma partícula circulando ao redor do núcleo. Como vimos na Seção 6.4, o elétron exibe propriedades de ondas, fato que nosso modelo de estrutura eletrônica deve contemplar. O modelo de Bohr é apenas um importante passo em direção ao desenvolvimento de um modelo mais abrangente. O mais importante sobre a teoria de Bohr é que ela apresenta duas idéias principais que também são incorporadas por nosso modelo atual: (1) os elétrons existem apenas em níveis de energia distintos, que são descritos pelos números quânticos. (2) A energia está envolvida na movimentação de um elétron de um nível para outro. Além disso, parte do vocabulário associado com o novo modelo remonta ao modelo de Bohr. Por exemplo, ainda usamos a idéia de estados fundamentais e excitados para descrever as estruturas eletrônicas dos átomos.

6.4 Comportamento ondulatório da matéria

Nos anos posteriores ao desenvolvimento do modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio, a natureza dual da energia radiante tornou-se um conceito familiar. Dependendo das circunstâncias experimentais, a radiação parece ter um caráter ondulatório ou de partícula (fóton). Louis De Broglie (1892–1987), quando trabalhava em sua tese de doutoramento em física na Sorbonne, em Paris, corajosamente ampliou essa idéia. Se a energia radiante pudesse se comportar, sob condições apropriadas, como um feixe de partículas, a matéria, sob condições apropriadas, poderia possivelmente mostrar propriedades de uma onda? Suponha que o elétron girando em órbitas ao redor de um átomo de hidrogênio fosse visto como uma onda, com um comprimento de onda característico. De Broglie sugeriu que o elétron, em seu movimento ao redor do núcleo, tinha associado a ele um comprimento de onda particular. Ele propôs que o comprimento de onda característico do elétron ou qualquer outra partícula depende de sua massa, m , e de sua velocidade, v .

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad [6.8]$$

(h é a constante de Planck.) A grandeza mv para qualquer objeto é chamada seu **momento**. De Broglie usou o termo **ondas de matéria** para descrever as características ondulatórias das partículas materiais.

Como a hipótese de De Broglie é aplicável a toda matéria, qualquer objeto de massa m e velocidade v daria origem a uma onda de matéria característica. Entretanto, a Equação 6.8 indica que o comprimento de onda associado a um objeto de tamanho comum, como uma bola de golfe, é tão minúsculo que estará fora da faixa de qualquer observação possível. Esse não é o caso de um elétron porque sua massa é muito pequena, como veremos em “Como fazer 6.5”.

COMO FAZER 6.5

Qual é o comprimento de onda de um elétron com velocidade de $5,97 \times 10^6 \text{ m/s}$? (A massa do elétron é $9,11 \times 10^{-31} \text{ g}$.)

Solução

Análise: dadas a massa, m , e a velocidade, v , do elétron, devemos calcular seu comprimento de onda de De Broglie, λ .

Planejamento: o comprimento de onda de uma partícula em movimento é dado pela Equação 6.8; o λ é calculado simplesmente pela substituição das grandezas conhecidas, h , m e v . Entretanto, ao fazer isso devemos prestar atenção nas unidades.

Resolução: usando o valor da constante de Planck, $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$ e lembrando que $1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2/\text{s}^2$, temos:

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{mv} \\ &= \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J s})}{(9,11 \times 10^{-31} \text{ g})(5,97 \times 10^6 \text{ m/s})} \left(\frac{1 \text{ kg m}^2/\text{s}^2}{1 \text{ J}} \right) \left(\frac{10^3 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \right) \\ &= 1,22 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,122 \text{ nm}\end{aligned}$$

Comentário: comparando esses valores com os comprimentos de onda de radiações eletromagnéticas mostrados na Figura 6.4, observamos que o comprimento de onda desse elétron é aproximadamente o mesmo do comprimento de onda dos raios X.

PRATIQUE

Calcule a velocidade de um nêutron cujo comprimento de onda de De Broglie é 500 pm. A massa de um nêutron é dada na tabela que consta no encarte deste livro.

Resposta: $7,92 \times 10^2 \text{ m/s}$

Poucos anos após De Broglie publicar sua teoria, as propriedades ondulatórias do elétron foram demonstradas experimentalmente. Os elétrons eram difratados pelos cristais, do mesmo modo que os raios X sofriam difração. Assim, um fluxo de elétrons em movimento exibe os mesmos tipos de comportamento ondulatório que a radiação eletromagnética.

A técnica de difração de elétrons tem se desenvolvido enormemente. No microscópio eletrônico as características ondulatórias do elétron são usadas para obter fotos de objetos minúsculos. Esse microscópio é uma importante ferramenta para estudar os fenômenos superficiais com ampliações muito grandes. A Figura 6.14 é uma fotografia de uma imagem de microscópio eletrônico, demonstrando que partículas minúsculas de matéria podem se comportar como ondas.

O princípio da incerteza

A descoberta das propriedades ondulatórias da matéria levantou algumas questões novas e interessantes sobre a física clássica. Considere, por exemplo, uma bola descendo uma rampa. Usando a física clássica, podemos calcular sua posição, direção de movimento e velocidade a qualquer momento, com grande exatidão. Podemos fazer o mesmo para um elétron que exibe propriedades ondulatórias? Uma onda estende-se no espaço e sua localização não é definida de maneira precisa. Dessa forma, podemos antecipar que é impossível determinar exatamente onde um elétron está localizado em um tempo determinado.

O físico alemão Werner Heisenberg (Figura 6.15) concluiu que a natureza dual da matéria coloca uma limitação fundamental em como podemos determinar precisamente a posição e o momento de qualquer objeto. A limitação torna-se importante apenas quando trabalhamos com matéria em nível subatômico (isto é, com massas tão pequenas quanto a de um elétron). O princípio de Heisenberg é chamado de **princípio da incerteza**. Quando aplicado aos elétrons em um átomo, esse princípio afirma que é inherentemente impossível para nós saber de maneira simultânea tanto o exato momento do elétron quanto sua posição específica no espaço.

Heisenberg relacionou matematicamente a incerteza da posição (Δx) e o momento exatos (Δmv) para uma quantidade envolvendo a constante de Planck:

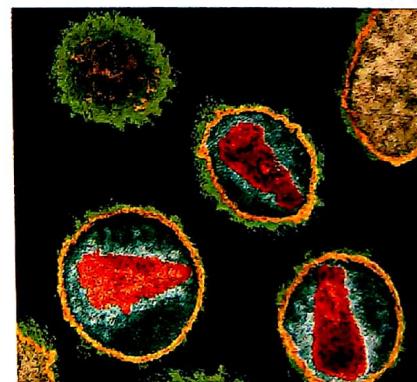


Figura 6.14 Imagem de microscopia eletrônica, em cores realçadas, de vírus da imunodeficiência humana (HIV) com ampliação de 240 mil. Em um microscópio eletrônico, o comportamento ondulatório de um feixe de elétrons é utilizado do mesmo modo que um microscópio convencional usa o comportamento ondulatório de um feixe de luz.



Figura 6.15 Werner Heisenberg (1901–1976). Durante seu estágio de pós-doutorado com Niels Bohr, Heisenberg formulou seu famoso princípio da incerteza. Aos 25 anos de idade, tornou-se o chefe da cadeira de física teórica na Universidade de Leipzig. Aos 32 anos, foi um dos mais jovens cientistas a receber o Prêmio Nobel.

aplicável. Nessa nova abordagem, qualquer tentativa de definir precisamente a localização e o momento instantâneos do elétron é abandonada. A natureza ondulatória do elétron é reconhecida, e seu comportamento é descrito em termos apropriados para ondas. O resultado é um modelo que descreve precisamente a energia do elétron enquanto define sua localização em termos de probabilidades.

$$\Delta x \cdot \Delta mv \geq \frac{h}{4\pi} \quad [6.9]$$

Um cálculo rápido ilustra as implicações dramáticas do princípio da incerteza. O elétron tem massa de $9,11 \times 10^{-31}$ kg e move-se a uma velocidade média de aproximadamente 5×10^6 m/s em um átomo de hidrogênio. Vamos supor que conhecemos a velocidade para uma incerteza de 1% (isto é, uma incerteza de $(0,01)(5 \times 10^6 \text{ m/s}) = 5 \times 10^4 \text{ m/s}$) e que essa é a única fonte importante de incerteza no momento para que $\Delta mv = m\Delta v$. Podemos usar a Equação 6.9 para calcular a incerteza na posição do elétron:

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi m\Delta v} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J s})}{4\pi(9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(5 \times 10^4 \text{ m/s})} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$$

Uma vez que o diâmetro de um átomo de hidrogênio é apenas 2×10^{-10} m, a incerteza é muito maior do que o tamanho do átomo. Portanto, essencialmente, não temos idéia de onde o elétron está localizado no átomo. Por outro lado, se fôssemos repetir os cálculos com um objeto de massa ordinária, como uma bola de tênis, a incerteza seria tão pequena que isso não teria importância. Nesse caso, m é grande, e Δx está fora do domínio da medida, portanto sem consequência prática.

A hipótese de De Broglie e o princípio da incerteza de Heisenberg estabeleceram a base para uma nova teoria de estrutura atômica e mais largamente



Uma olhar mais de perto Medição e o princípio da incerteza

Sempre que qualquer medida é feita, existe alguma incerteza. A experiência com objetos de dimensões comuns, como bolas ou trens, ou equipamentos de laboratório, indica que a incerteza de uma medição pode ser diminuída com o uso de instrumentos mais precisos. De fato, podemos esperar que a incerteza na medida possa tornar-se indefinidamente pequena. No entanto, o princípio da incerteza afirma que há um limite real para a precisão das medições. Esse limite não é uma restrição à precisão com que os instrumentos podem ser feitos; mas propriamente, é inerente à natureza. Esse limite não tem consequências práticas quando lidamos com objetos de tamanho usual, mas suas implicações são enormes quando lidamos com partículas subatômicas, como os elétrons.

Para medir um objeto, devemos perturbá-lo, ao menos um pouco, com nosso aparelho de medição. Imagine o uso de uma lanterna para localizar uma grande bola de borracha em um quarto escuro. Você vê a bola quando a luz da lanterna pula da bola e bate em seus olhos. Quando um feixe de fôtons colide com um objeto desse tamanho, ele não altera sua posição ou momento em nenhuma extensão prática. Imagine, no entanto, que você queira localizar um elétron de forma similar, fazendo a luz pulsar dele para um detector qualquer. Os objetos podem ser localizados a uma precisão que não é maior que o comprimento de onda da radiação usada.

Assim, se desejamos uma medida precisa da posição de um elétron, devemos usar um comprimento de onda curto. Isso significa que fôtons de alta energia devem ser empregados. Quanto mais energia os fôtons têm, maior o momento que eles concedem ao elétron quando eles colidem, o que altera o movimento do elétron de forma imprevisível. A tentativa para se medir corretamente a posição do elétron introduz incertezas consideráveis em seu momento; o ato de medir a posição do elétron em um instante torna nosso conhecimento sobre sua futura posição impreciso.

Suponha, dessa forma, que utilizemos fôtons de comprimento de onda longo. Uma vez que esses fôtons têm energia mais baixa, a cinética do elétron não é tão primorosamente alterada durante a medição, mas sua posição será correspondentemente conhecida com menor precisão. Essa é a essência do princípio da incerteza: há uma incerteza em saber se a posição ou o momento do elétron que não pode ser reduzido além de um certo nível mínimo. Quanto mais corretamente um é conhecido, menos precisamente o outro o é. Apesar de não podermos nunca saber a posição e o momento exatos de um elétron, podemos falar sobre a probabilidade de ele estar em determinados lugares no espaço. Na Seção 6.5, introduzimos um modelo do átomo que fornece a probabilidade de encontrarmos elétrons de energias específicas em certas posições em átomos.

6.5 Mecânica quântica e os orbitais atômicos

Em 1926 o físico Austríaco Erwin Schrödinger (1887–1961) propôs uma equação, conhecida atualmente como equação de onda de Schrödinger, que incorpora tanto o comportamento ondulatório como o de partícula do elétron. Seu trabalho abriu uma nova maneira de lidar com partículas subatômicas conhecida como *mecânica quântica* ou *mecânica ondulatória*. A aplicação da equação de Schrödinger requer cálculos avançados, e não nos preocuparemos com os detalhes de sua abordagem. Entretanto, consideraremos qualitativamente os resultados que esse cientista obteve, porque eles nos fornecem uma maneira nova e poderosa de ver a estrutura eletrônica. Vamos começar examinando a estrutura eletrônica do átomo mais simples, o hidrogênio.

A resolução da equação de Schrödinger leva a uma série de funções matemáticas chamadas **funções de onda** que descrevem a questão ondulatória do elétron. Essas funções são geralmente representadas pelo símbolo ψ (a letra grega minúscula psi). Apesar de a função de onda em si não ter um significado físico direto, o quadrado da função de onda, ψ^2 , fornece informações importantes sobre a localização de um elétron quando ele está em estado de energia permitido.

Para o átomo de hidrogênio, as energias permitidas são as mesmas previstas pelo modelo de Bohr. Contudo, o modelo de Bohr supõe que o elétron está em órbita circular com alguns raios específicos ao redor do núcleo. No modelo da mecânica quântica, a localização do elétron não pode ser descrita de maneira tão simples. De acordo com o princípio da incerteza, quando determinamos o momento do elétron com grande precisão, o conhecimento simultâneo de sua localização é muito incerto. Não podemos especificar a localização exata de um elétron individual ao redor do núcleo. Mais propriamente, devemos nos contentar com uma espécie de conhecimento estatístico. No modelo da mecânica quântica, por essa razão falamos da *probabilidade* de o elétron ser encontrado em certa região do espaço em determinado instante. Resulta que o quadrado da função de onda, ψ^2 , em um ponto determinado do espaço representa a probabilidade de o elétron ser encontrado nessa posição. Por essa razão, ψ^2 é chamado **densidade de probabilidade**.

Uma maneira de representar a probabilidade de encontrar o elétron em várias regiões de um átomo é mostrada na Figura 6.16. Nessa figura a densidade de pontos representa a probabilidade de encontrar o elétron. As regiões com densidade alta de pontos correspondem a valores relativamente altos para ψ^2 . A **densidade eletrônica** é outra maneira de expressar a probabilidade: as regiões onde existe alta probabilidade de encontrar o elétron são regiões de alta densidade eletrônica. Na Seção 6.6 falaremos mais sobre os modos de representar a densidade eletrônica.

Orbitais e números quânticos

A solução da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio produz um conjunto de funções de onda e energias correspondentes. Essas funções de onda são chamadas **orbitais**. Cada orbital descreve uma distribuição específica de densidade eletrônica no espaço, como determinado pela probabilidade de densidade. Cada orbital, consequentemente, tem energia e forma características. Por exemplo, o orbital de mais baixa energia no átomo de hidrogênio tem energia de $-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$ e o formato ilustrado na Figura 6.16. Observe que um *orbital* (modelo da mecânica quântica) não é o mesmo que *órbita* (modelo de Bohr). O modelo da mecânica quântica não se refere a órbitas porque o movimento do elétron em um átomo não pode ser medido ou localizado com precisão (princípio da incerteza de Heisenberg).

O modelo de Bohr introduziu um único número quântico, n , para descrever certa órbita. O modelo da mecânica quântica usa três números quânticos, n, l e m_l , para descrever um orbital. Consideraremos quais informações podemos obter a partir de cada um desses e como eles estão relacionados entre si.

1. O *número quântico principal*, n , pode ter valores positivos e inteiros de 1, 2, 3, e assim por diante. À medida que n aumenta, o orbital torna-se maior, e o elétron passa mais tempo mais distante do núcleo. Um aumento em n significa também que o elétron tem energia alta e, por isso, está menos fortemente preso ao núcleo. Para o átomo de hidrogênio, $E_n = -(2,18 \times 10^{-18} \text{ J})(1/n^2)$, como também previsto pelo modelo de Bohr.
2. O segundo número quântico — o *número quântico azimutal*, l — pode ter valores inteiros de 0 a $n - 1$ para cada valor de n . Esse número quântico define o formato do orbital. (Consideraremos esses formatos na

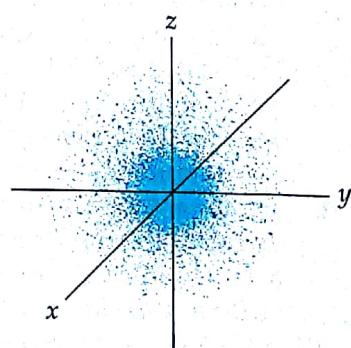


Figura 6.16 Distribuição da densidade eletrônica no estado fundamental do átomo de hidrogênio.