

Física Quântica (BCK0103-15)

aula 14 - 2019 – (Final)



Luciano Cruz

Sala 609 – Torre 3 – Bloco A

luciano.cruz@ufabc.edu.br

SOLVAY CONFERENCE 1927

colourized by pastincolour.com

A. PICARD	E. HENRIOT	P. EHRENFEST	Ed. HERSEN	Th. DE DONDER	E. SCHRÖDINGER	E. VERSCHAFFELT	W. PAULI	W. HEISENBERG	R.H FOWLER	L. BRILLOUIN
P. DEBYE	M. KNUDSEN	W.L. BRAGG	H.A. KRAMERS	P.A.M. DIRAC	A.H. COMPTON	L. de BROGLIE	M. BORN	N. BOHR		
I. LANGMUIR	M. PLANCK	Mme CURIE	H.A. LORENTZ	A. EINSTEIN	P. LANGEVIN	Ch.E. GUYE	C.T.R. WILSON	O.W. RICHARDSON		

Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL

Na última aula (26/11/19)

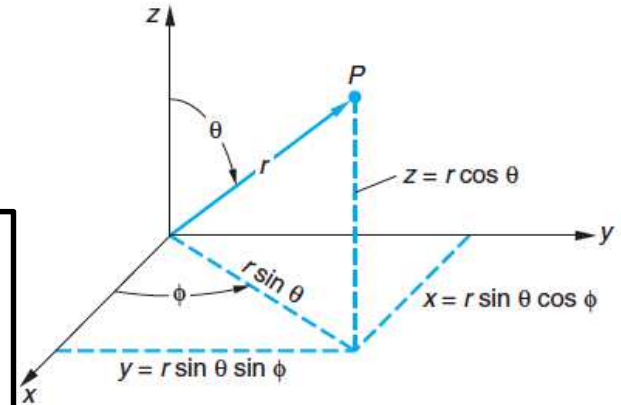
- Funções de ondas do átomo de Hidrogênio;
- Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos;
- Imagens, Abstrações e Interpretações.

Na aula de hoje (28/11/19)

- Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons;
- Spin (quarto número quântico atômico);
- Tabela periódica;
- O fim de um começo.

A equação de Schrodinger (independente do tempo) para o átomo de Hidrogênio em coordenadas esféricas para potenciais centrais

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$



Separação de variáveis: $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ e $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right] R(r) = 0 \\ \frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \beta \sin^2 \theta = m^2 \\ \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \end{array} \right.$$

RESUMO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Resumindo, para o átomo de hidrogênio, as energias são dadas por:

$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

Ou seja, temos os espectros de linhas de emissão como visto na primeira parte da disciplina.

As funções de onda são definidas por três números quânticos:

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

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

$$m = -l, (-l + 1), (-l + 2), \dots, 0, 1, 2, \dots, l$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

O Papel dos Números Quânticos Atômicos

n está associado a energia do elétron e define a sua “proximidade” do núcleo

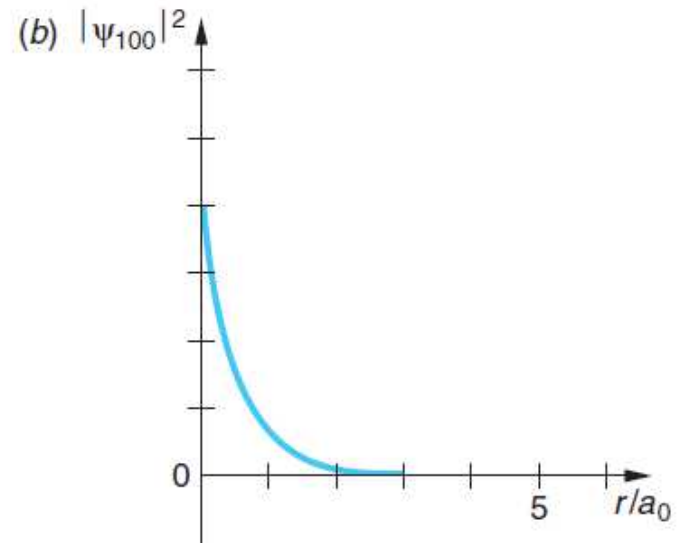
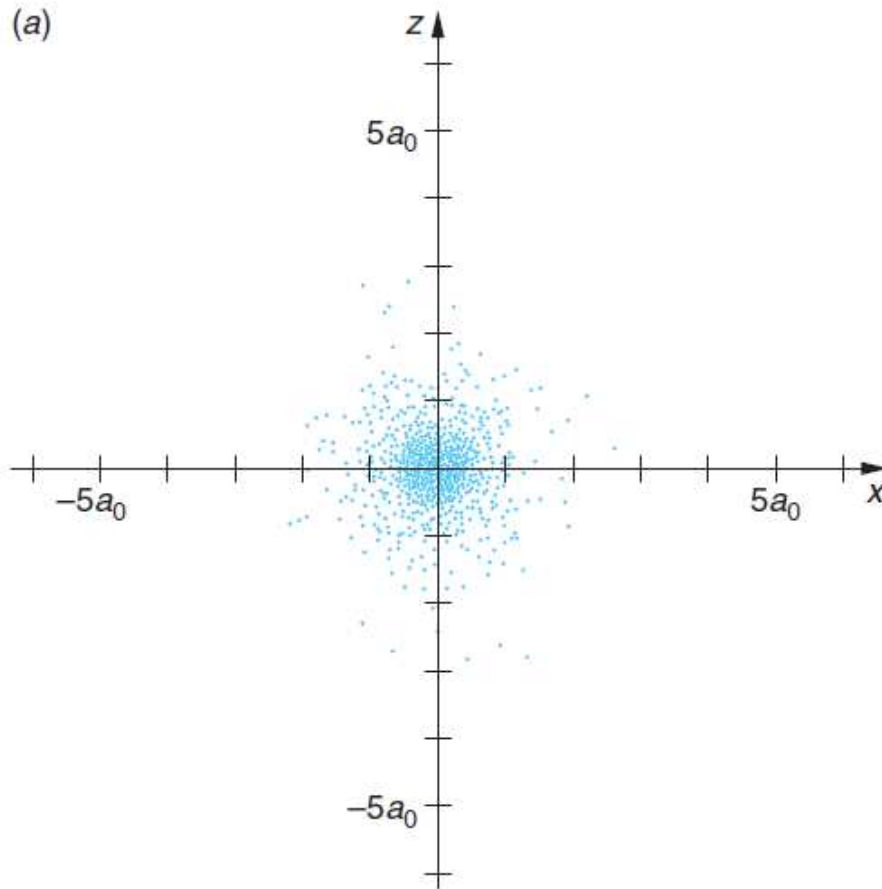
l está associado ao momento angular do elétron e define o “tipo” de forma do orbital

m está associado à projeção do momento angular (número quântico magnético) do elétron e define a “orientação” do orbital no espaço.

O conjunto de número quânticos associados a um elétron pode ser entendido como um “endereço”. Devido a característica dos elétrons, que são férmions, não existem dois elétrons no Universo que ocupem exatamente os mesmos números quânticos.

Orbitais Atômicos

Os orbitais atômicos representam os estados estacionários dos elétrons ligados ao átomo e definem a região no espaço (3D), na qual é distribuída a probabilidade de se encontrar estes elétrons após ser realizada uma medida.



**Look at me as many times as you wish,
but you won't get to know me !
Since you have last seen me,
I've changed a hundred times !**

Rumi =)

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$n=1$	$l=0$	$m=0$	$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$	
$n=2$	$l=0$	$m=0$	$\psi_{200} = \frac{1}{8} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} (2 - r/a_0) e^{-r/2a_0}$	
$n=2$	$l=1$	$m=0$	$\psi_{210} = \frac{1}{8} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r e^{-r/2a_0} \cos \theta$	
$n=2$	$l=1$	$m=\pm 1$	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	
$n=3$	$l=0$	$m=0$	$\psi_{300} = \frac{1}{243} \left(\frac{3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} (27 - 18r/a_0 + 2r^2/a_0^2) e^{-r/3a_0}$	
$n=3$	$l=1$	$m=0$	$\psi_{310} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r(6 - r/a_0) e^{-r/3a_0} \cos \theta$	
$n=3$	$l=1$	$m=\pm 1$	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r(6 - r/a_0) e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	
$n=3$	$l=2$	$m=0$	$\psi_{320} = \frac{1}{486} \left(\frac{6}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r^2 e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$	
$n=3$	$l=2$	$m=\pm 1$	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r^2 e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$	
$n=3$	$l=2$	$m=\pm 2$	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} r^2 e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$	

HYDROGEN-ATOM WAVE FUNCTIONS,

$$n \leq 3$$

$$\rho \equiv \frac{r}{a_0}$$

$$\psi_{211} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{243} \left(\frac{3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} (27 - 18\rho + 2\rho^2) e^{-\rho/3}$$

$$\psi_{310} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho(6 - \rho) e^{-\rho/3} \cos \theta$$

$$\psi_{311} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho(6 - \rho) e^{-\rho/3} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{486} \left(\frac{6}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$\psi_{321} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{322} = \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}$$



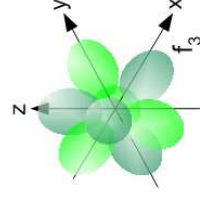
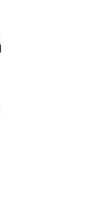
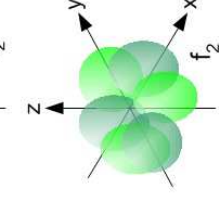
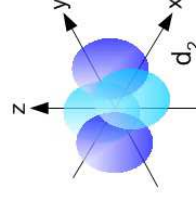
$$\psi_{211} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho(6 - \rho) e^{-\rho/3} \sin \theta e^{-i\varphi}$$



$$\psi_{321} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$$



$$\psi_{322} = \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}$$



Em resumo:

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm}$$

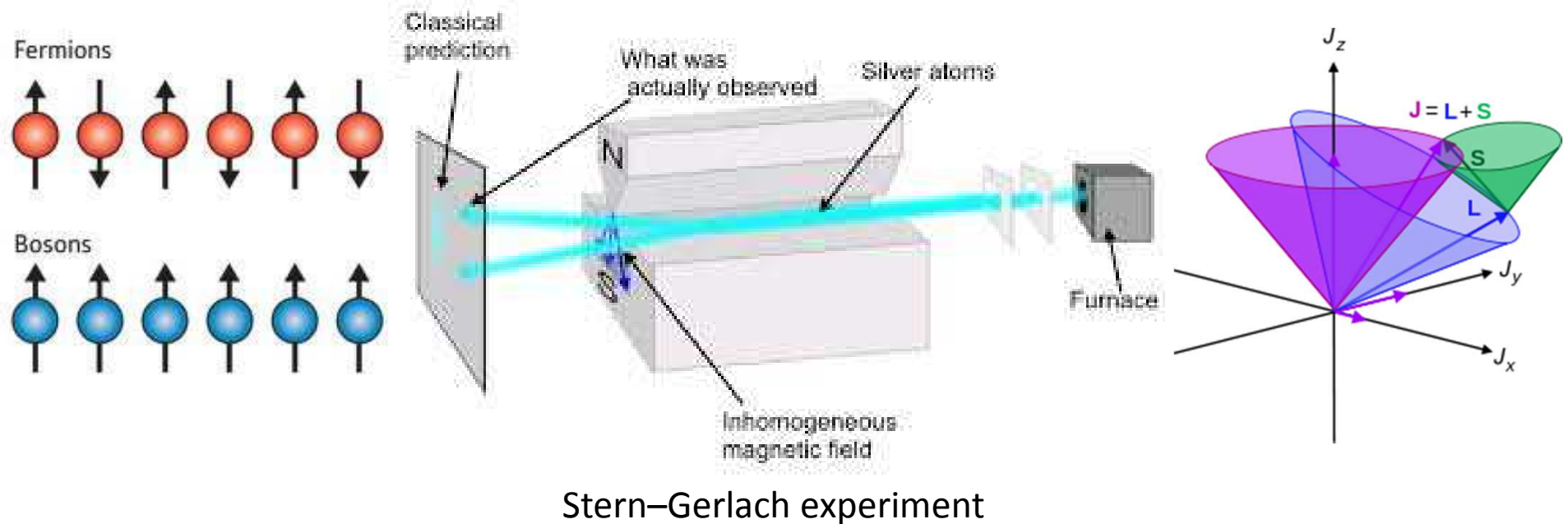
$$\hat{L}^2\psi_{nlm} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm}$$

$$\hat{L}_3\psi_{nlm} = \hbar m\psi_{nlm}$$

n	l	m	Função	Orbital
1	0	0	$\psi_{1,0,0}$	1s
2	0	0	$\psi_{2,0,0}$	2s
		-1	$\psi_{2,1,-1}$	2p (2p _x , 2p _y , 2p _z)
		0	$\psi_{2,1,0}$	
3	1	+1	$\psi_{2,1,1}$	
		0	$\psi_{3,0,0}$	3s
		-1	$\psi_{3,1,-1}$	3p (3p _x , 3p _y , 3p _z)
		0	$\psi_{3,1,0}$	
		+1	$\psi_{3,1,1}$	
	2	-2	$\psi_{3,2,-2}$	3d (3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{z²})
		-1	$\psi_{3,2,-1}$	
		0	$\psi_{3,2,0}$	
		+1	$\psi_{3,2,1}$	
		+2	$\psi_{3,2,2}$	

$$l = 0 \rightarrow S$$
$$l = 1 \rightarrow P$$
$$l = 2 \rightarrow D$$
$$\vdots$$

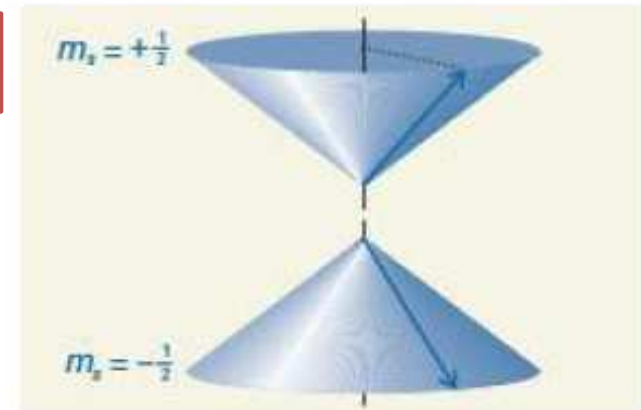
O que acontece quando um átomo tem mais de um elétron?



Manifestação de um “novo” número quântico: **SPIN**

O quarto número quântico: Spin

$$|\mathbf{S}| = S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$



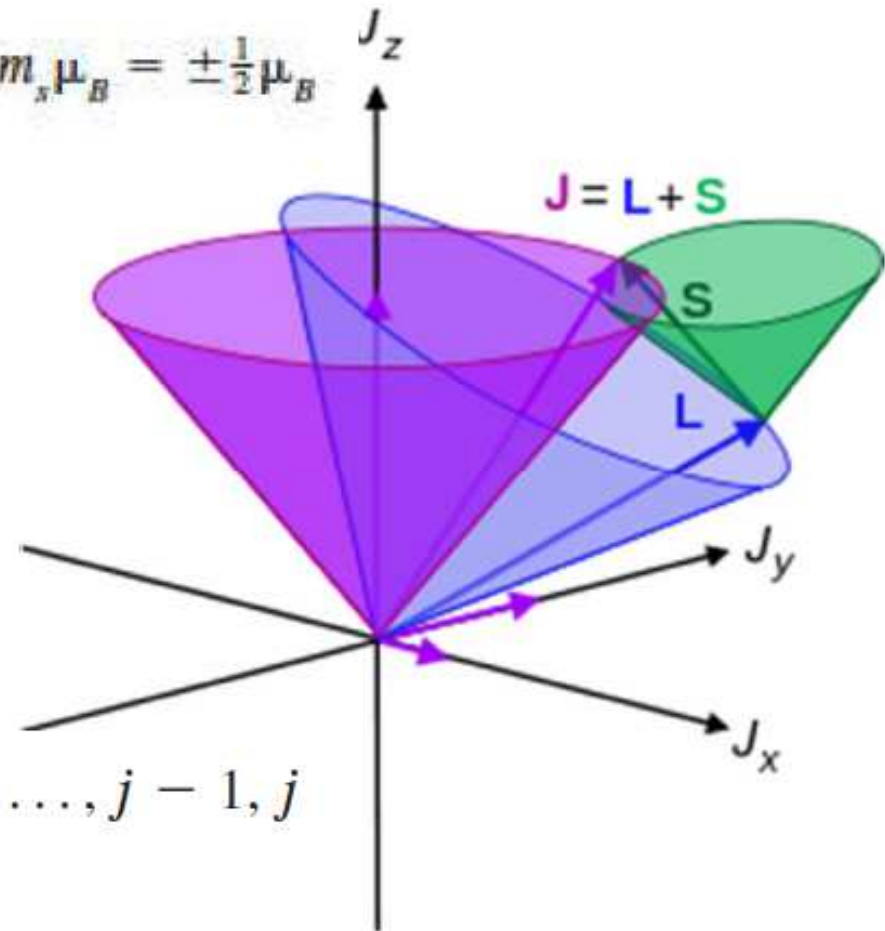
$$\mu = \sqrt{s(s+1)}\mu_B = \sqrt{\frac{3}{4}}\mu_B \quad \text{and} \quad \mu_z = m_s\mu_B = \pm\frac{1}{2}\mu_B$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

$$|\mathbf{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

$$j = \ell + s \quad \text{or} \quad j = |\ell - s|$$

$$J_z = m_j\hbar \quad \text{onde} \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$



A Física do Spin

Spin é o equivalente a um momento angular **intrínseco** que partículas elementares possuem.

Por analogia ao momento angular orbital, temos:

$$|S| = [s(s + 1)]^{1/2}\hbar$$

$$S_z = m_s \hbar \quad \text{where } m_s = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$$

Para o caso do elétron: $s = \frac{1}{2}$, $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

Para escrever a função completa do átomo de hidrogênio, incluindo o spin, usamos as funções alfa para spin $+1/2$ e beta para spin $-1/2$:

$$\hat{S}^2\alpha = \frac{3}{4}\hbar^2\alpha, \quad \hat{S}^2\beta = \frac{3}{4}\hbar^2\beta, \quad \hat{S}_z\alpha = \frac{1}{2}\hbar\alpha, \quad \hat{S}_z\beta = -\frac{1}{2}\hbar\beta$$

No caso do átomo de hidrogênio, em boa aproximação, a existência do spin não altera o valor da energia do estado, mas apenas duplica a degenerescência para cada estado. Isso não é verdade para átomos de muitos elétrons ($n > 2$).

Por exemplo, para o orbital 1s, teremos:

$$1s\alpha \quad \text{e} \quad 1s\beta, \quad \text{onde} \quad 1s = \pi^{-1/2} (Z/a)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

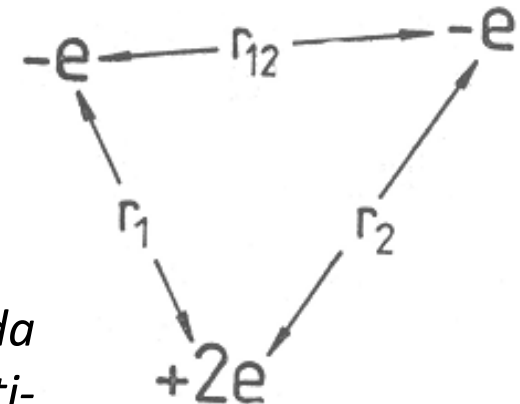
As funções que incluem a distribuição espacial e o spin são denominadas funções **spin-orbital**

Átomos polieletrônicos: O caso do Hélio

$$H = -\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \left(\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right) - \left(\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}\right) + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}\right)$$

Em um caso mais geral:

$$H = -\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)\left(\sum_i \nabla_i^2\right) - \sum_i \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$



Embora a equação de Schrödinger possa ser resolvida exatamente para sistemas de 1 elétron, para espécies multi-eletrônicas isto não é possível pois o hamiltoniano de tal átomo não pode ser separado exatamente nas contribuições de cada elétron.

$$H \neq \sum_i H_i$$

Isto ocorre, em especial, devido aos efeitos de correlação eletrônica (interação entre elétrons), de modo que importantes aproximações devem ser feitas.

O Teorema da estatística do SPIN

A função de onda completa (incluindo ambas, coordenadas espaciais e do spin) de um sistema de partículas idênticas com spin semi-inteiro tem que ser anti-simétrica em relação a troca de todas as coordenadas de quaisquer duas partículas. Para um sistema de partículas idênticas com spin inteiro, a função de onda completa tem que ser simétrica em relação a tal troca.

$$\psi \approx 1s(1)1s(2) \cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

$$\psi \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) \end{vmatrix}$$

Determinante:

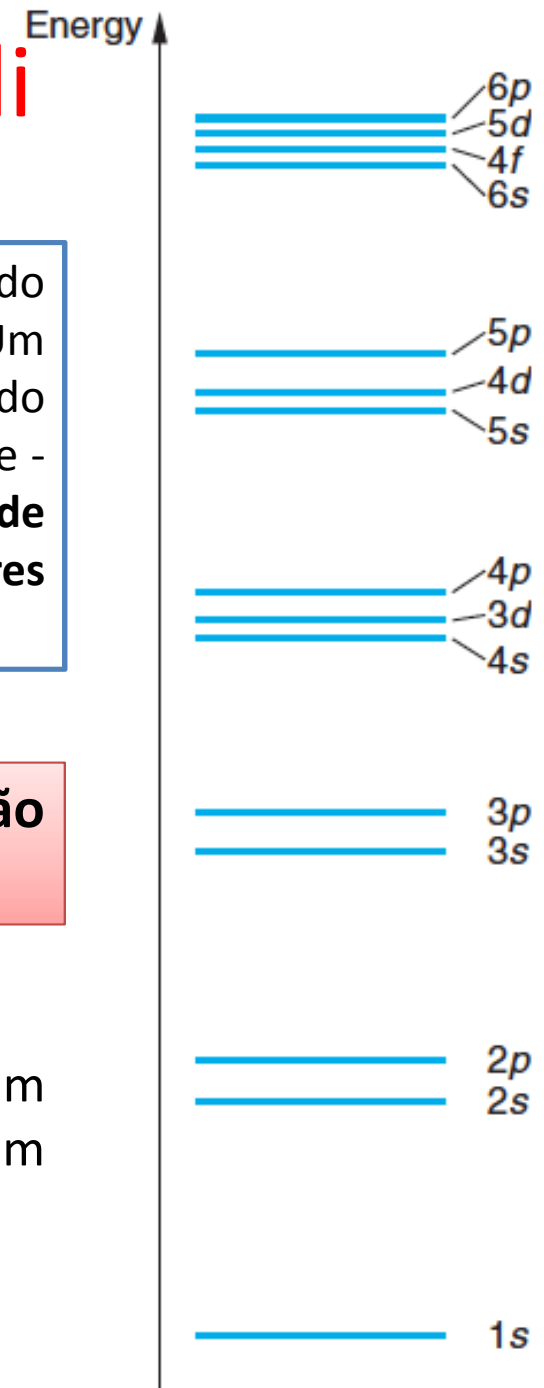
$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \equiv ad - bc$$

Princípio de Exclusão de Pauli

Um orbital (ou função de onda espacial monoelétrica) é definido dando-se seus três números quânticos (n, l, m em um átomo). Um spin-orbital é definido dando-se os três números quânticos do orbital e o número quântico m_s ($+1/2$ para a função de spin alfa e $-1/2$ para a função de spin beta). Desse modo, **o princípio de exclusão exige que dois elétrons não tenham os mesmos valores para todos os quatro números quânticos n, l, m e m_s .**

Em resumo: Dois elétrons de um mesmo átomo não podem ter os quatro números quânticos iguais.

Desse modo, para átomos com mais de um elétron existe um modo de “configuração” dos elétrons em para que cada um tenha números quânticos distintos entre si.



$$\psi_{n l m m_s}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{l m}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}$$

$$n=1 \quad l=0 \quad m=0 \quad \psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-\rho}$$

$$n=2 \quad l=0 \quad m=0 \quad \psi_{200} = \frac{1}{8} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} (2-\rho) e^{-\rho/2}$$

$$n=2 \quad l=1 \quad m=0 \quad \psi_{210} = \frac{1}{8} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho e^{-\rho/2} \cos \theta$$

$$n=2 \quad l=1 \quad m=\pm 1 \quad \psi_{211} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{21-1} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

**HYDROGEN-ATOM
WAVE FUNCTIONS,
 $n \leq 3$**

$$\rho \equiv \frac{r}{a_0}$$

$$n=3 \quad l=0 \quad m=0 \quad \psi_{300} = \frac{1}{243} \left(\frac{3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} (27 - 18\rho + 2\rho^2) e^{-\rho/3}$$

$$n=3 \quad l=1 \quad m=0 \quad \psi_{310} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho(6-\rho) e^{-\rho/3} \cos \theta$$

$$n=3 \quad l=1 \quad m=\pm 1 \quad \psi_{311} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho(6-\rho) e^{-\rho/3} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{31-1} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho(6-\rho) e^{-\rho/3} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

$$n=3 \quad l=2 \quad m=0 \quad \psi_{320} = \frac{1}{486} \left(\frac{6}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} (3\cos^2 \theta - 1)$$

$$n=3 \quad l=2 \quad m=\pm 1 \quad \psi_{321} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$$

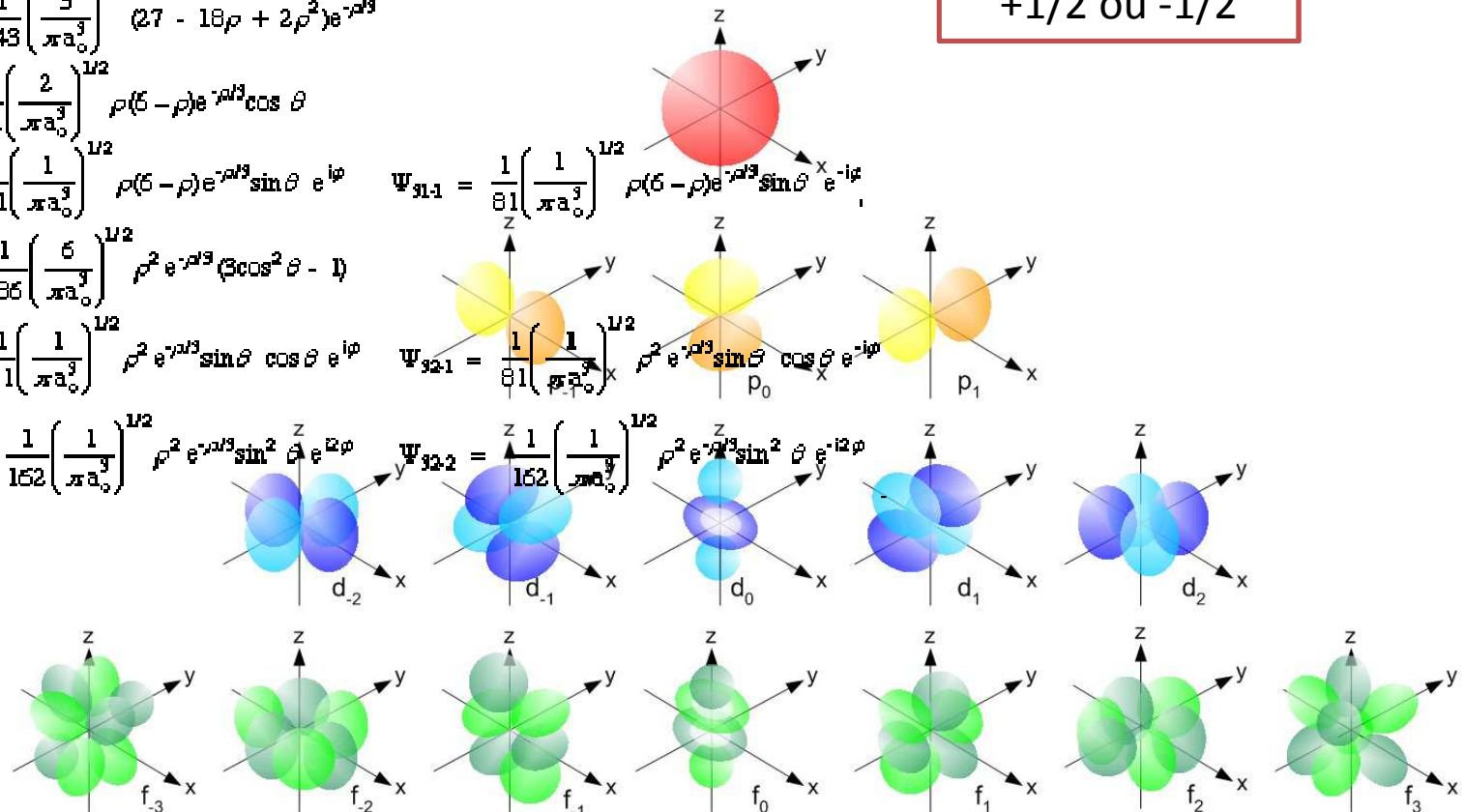
$$\psi_{32-1} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}$$

$$n=3 \quad l=2 \quad m=\pm 2 \quad \psi_{322} = \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin^2 \theta e^{i2\varphi}$$

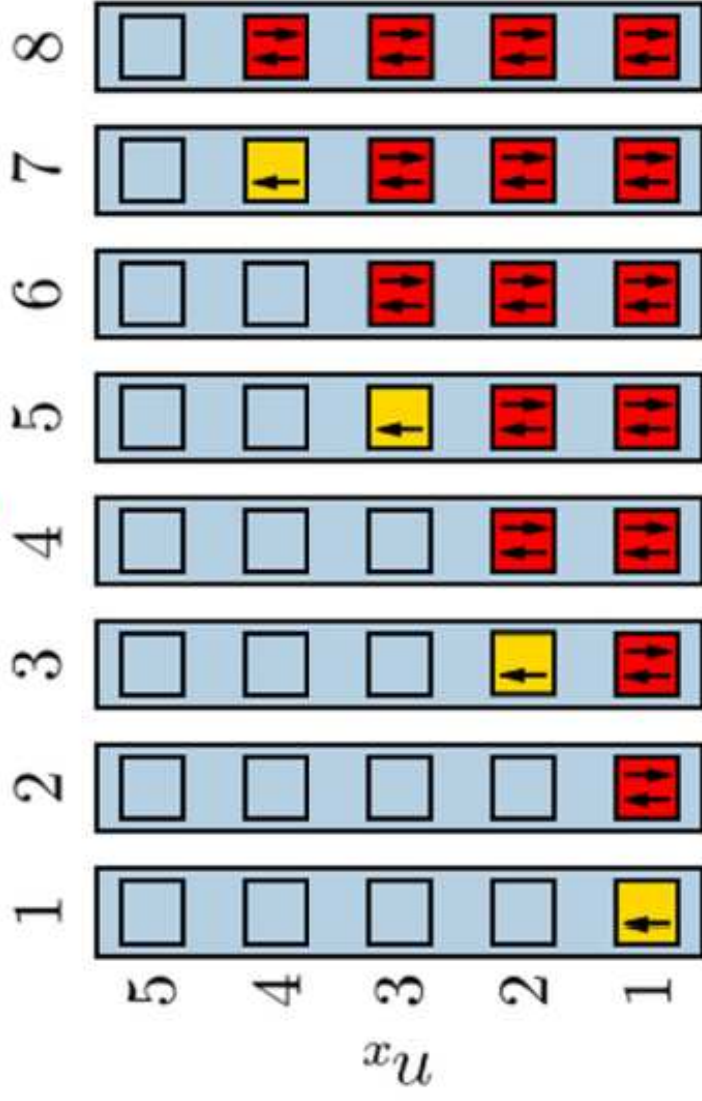
$$\psi_{32-2} = \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin^2 \theta e^{-i2\varphi}$$

$\left\{ \begin{matrix} \alpha \\ \beta \end{matrix} \right\}$

Referente a spin
+1/2 ou -1/2



Distribuição de elétrons nos orbitais

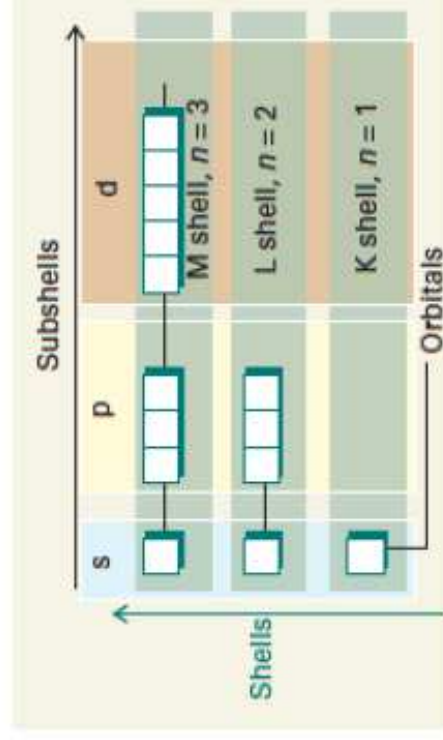


Camada	Subcamadas
1	s
2	s p
3	s p d
4	s p d f
5	s p d f
6	s p d f
7	s p d f

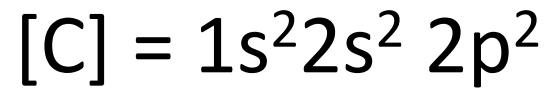
Princípio de Aufbau

$n = 1 \ 2 \ 3 \ 4 \dots$
K L M N...

$l = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \dots$
s p d f g h i...



Escreva a configuração eletrônica de mais baixa energia (estado fundamental) para o átomo carbono (C). Escreva os números quânticos correspondentes a cada configuração.



orbital	n	l	m	ms
1s ²	1	0	0	+1/2
	1	0	0	-1/2
2s ²	2	0	0	+1/2
	2	0	0	-1/2
2p ²	2	1	-1	+1/2
	2	1	0	+1/2



Energia



2p²



2s²



1s²

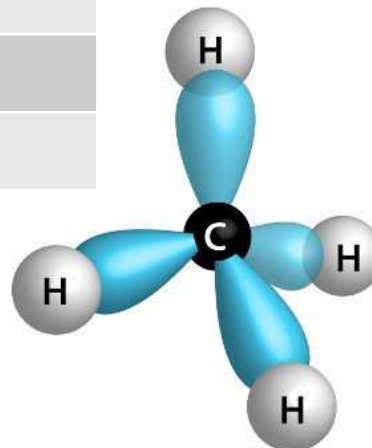


Tabela Periódica

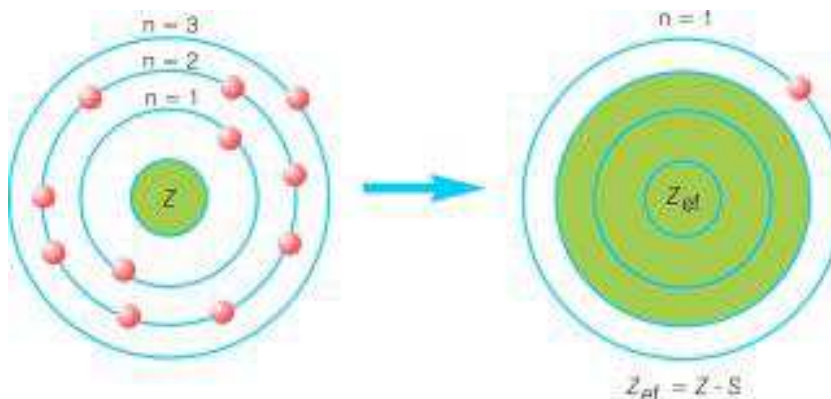
O entendimento qualitativo e semi-quantitativo da estrutura eletrônica pode ser obtido a partir da aproximação orbital. Começamos escrevendo uma função de onda aproximada que atribui elétrons aos spin-orbitais hidrogenares. Em cada orbital, a carga nuclear é substituída por um parâmetro variacional que representa a carga nuclear efetiva e permite a blindagem do elétron. Para satisfazer a exigência de antissimétrica, a função de onda é escrita como um determinante de Slater.

Dois elétrons no mesmo orbital tem que ter spins anti-paralelos (princípio de exclusão de Pauli).

A energia do elétron em um orbital é dada por:

$$\varepsilon \approx -(Z_{\text{eff}}^2/n^2)(13.6 \text{ eV}) \quad Z_{\text{eff}} = Z - s$$

s : **constante de blindagem**, que é dada por subcamada e provém do somatório das contribuições dos outros elétrons do átomo.



Uma imagem incorreta, mas o conceito certo...

Tabela Periódica

1

IA

1A

1

H

Hydrogen

1.008

-252.762

2

IIA

2A

2

He

Helium

4.003

-268.93

3

Li

Lithium

6.941

1342

4

Be

Beryllium

9.012

2471

11

Na

Sodium

22.990

882.940

12

Mg

Magnesium

24.305

1090

19

K

Potassium

39.098

759

20

Ca

Calcium

40.078

1484

37

Rb

Rubidium

84.468

688

38

Sr

Strontium

87.62

1382

55

Cs

Cesium

132.905

671

56

Ba

Barium

137.327

1897

87

Fr

Francium

223.020

677

88

Ra

Radium

226.025

1737

21

Sc

Scandium

44.956

2836

22

Ti

Titanium

47.88

3287

23

V

Vanadium

50.942

3407

24

Cr

Chromium

51.996

2671

25

Mn

Manganese

54.938

2061

26

Fe

Iron

55.933

2861

27

Co

Cobalt

58.933

2927

28

Ni

Nickel

58.693

2913

29

Cu

Copper

63.546

2562

30

Zn

Zinc

65.39

907

31

Ga

Gallium

69.732

2404

32

Ge

Germanium

72.61

2833

33

As

Arsenic

74.922

616 SP

34

Se

Selenium

78.972

685

35

Br

Bromine

79.904

58.8

36

Kr

Krypton

84.80

-153.34

39

Y

Yttrium

88.906

3345

40

Zr

Zirconium

91.224

4409

41

Nb

Niobium

92.906

4744

42

Mo

Molybdenum

95.95

4639

43

Tc

Technetium

98.907

4265

44

Ru

Ruthenium

101.07

4150

45

Rh

Rhodium

102.906

3695

46

Pd

Palladium

106.42

2963

47

Ag

Silver

107.868

2162

48

Cd

Cadmium

112.411

767

49

In

Indium

114.818

2072

50

Sn

Tin

118.71

2602

51

Sb

Antimony

121.760

1587

52

Te

Tellurium

127.6

988

53

I

Iodine

126.904

184.4

54

Xe

Xenon

131.29

-108.09

72

Hf

Hafnium

178.49

4603

73

Ta

Tantalum

180.948

5458

74

W

Tungsten

183.85

5555

75

Re

Rhenium

186.207

5596

76

Os

Osmium

190.23

5012

77

Ir

Iridium

192.22

4428

78

Pt

Platinum

195.08

3825

79

Au

Gold

196.967

2856

80

Hg

Mercury

200.59

356.2

81

Tl

Thallium

204.383

1473

82

Pb

Lead

207.2

1749

83

Bi

Bismuth

208.980

1564

84

Po

Polonium

[208.982]

962

85

At

Astatine

209.987

337

86

Rn

Radon

222.018

-61.7

104

Rf

Rutherfordium

[261]

unknown

105

Db

Dubnium

[262]

unknown

106

Sg

Seaborgium

[266]

unknown

107

Bh

Bohrium

[264]

unknown

108

Hs

Hassium

[269]

unknown

109

Mt

Meitnerium

[268]

unknown

110

Ds

Darmstadtium

[269]

unknown

111

Rg

Roentgenium

[272]

unknown

112

Cn

Copernicium

[277]

unknown

113

Uut

Ununtrium

unknown

114

Fl

Flerovium

[289]

unknown

115

Uup

Ununpentium

unknown

116

Lv

Livermorium

[298]

unknown

117

Uus

Ununseptium

unknown

118

Uuo

Ununoctium

unknown

Lanthanide Series

57

La

Lanthanum

138.906

3464

58

Ce

Cerium

140.115

3443

59

Pr

Praseodymium

140.908

3520

60

Nd

Neodymium

144.24

3074

61

Pm

Promethium

144.913

3000

62

Sm

Samarium

150.36

1794

63

Eu

Europium

151.966

1529

64

Gd

Gadolinium

157.25

3273

65

Tb

Terbium

158.925

3230

66

Dy

Dysprosium

162.50

2567

67

Ho

Holmium

164.930

2700

68

Er

Erbium

167.26

2868

69

Tm

Thulium

168.934

1950

70

Yb

Ytterbium

173.04

1196

71

Lu

Lutetium

174.967

3402

89

Ac

Actinium

227.028

3198

90

Th

Thorium

232.038

4788

91

Pa

Protactinium

231.036

4027

92

U

Uranium

238.029

4131

93

Np

Neptunium

237.048

4174

94

Pu

Plutonium

244.064

3228

95

Am

Americium

243.061

2011

96

Cm

Curium

247.070

3100

97

Bk

Berkelium

247.070

2627

98

Cf

Californium

251.080

unknown

99

Es

Einsteinium

[254]

unknown

100

Fm

Fermium

257.095

unknown

101

Md

Mendelevium

258.1

unknown

102

No

Nobelium

259.101

unknown

103

Lr

Lawrencium

[262]

unknown

Alkali Metal

Alkaline Earth

Transition Metal

Basic Metal

Semimetal

Nonmetal

Halogen

Noble Gas

Lanthanide

Actinide

© 2014 Todd Helmenstine
sciencenotes.org

Click any element to see hundreds of pictures, stories and facts

Oxygen

Atomic Weight	15.9994
Density	1.429g/l
Melting Point	-218.3°C
Boiling Point	-182.9°C

At -183.0°C oxygen is a beautiful pale blue liquid, but at room temperature it is a colorless gas. It's only 21% of the atmosphere—the 21% we all need if we want to live more than a few minutes longer.

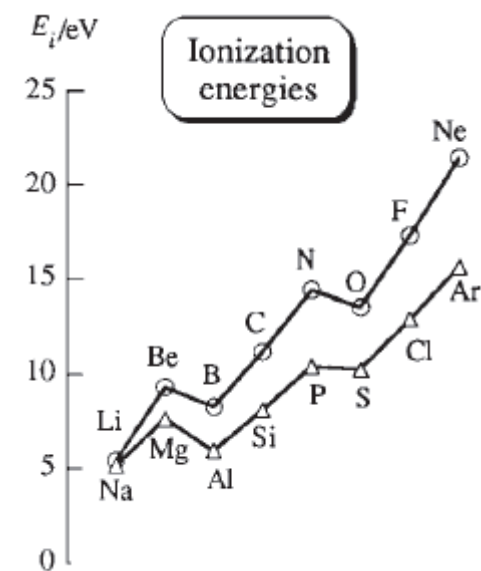
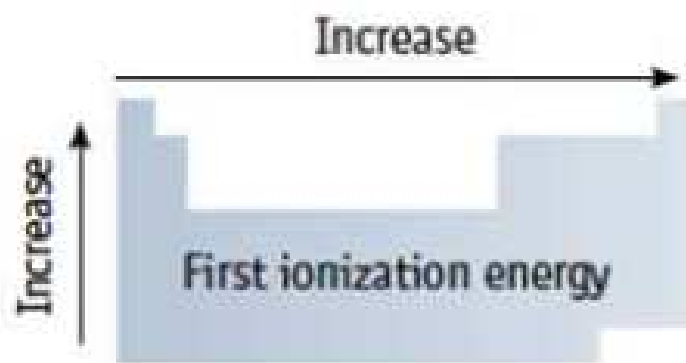
[For Students](#) [For Teachers](#) [For Scientists](#) [Audio and Video](#) [The whole table](#) [The whole table](#)

<https://www.youtube.com/watch?v=VgVQKCcfwnU>

Propriedades atômicas: Energias de ionização



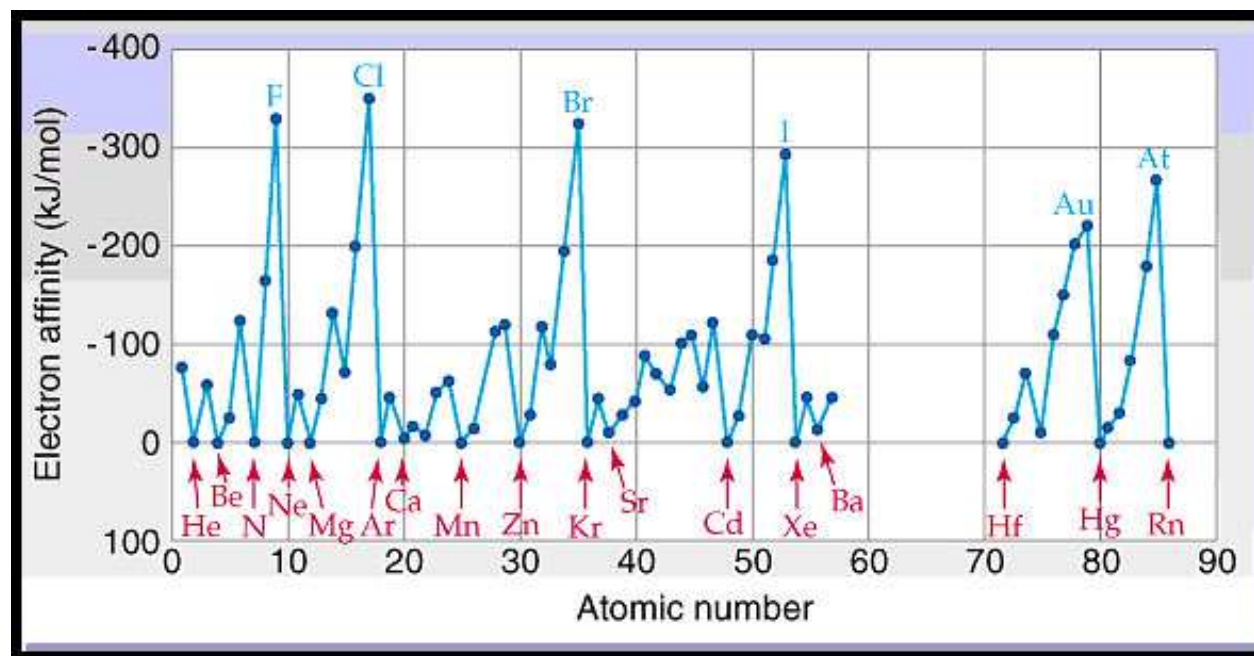
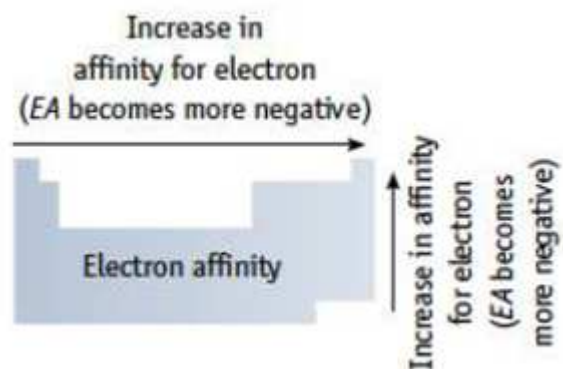
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na
13.6	24.6	5.4	9.3	8.3	11.3	14.5	13.6	17.4	21.6	5.1
	54.4	75.6	18.2	25.2	24.4	29.6	35.1	35.0	41.0	47.3
		122.5	153.9	37.9	47.9	47.4	54.9	62.7	63.4	71.6



Propriedades atômicas: Afinidade Eletrônica

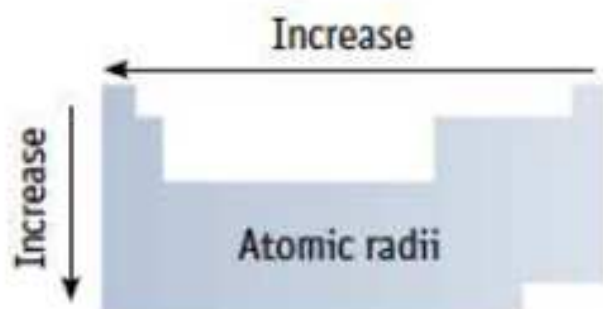
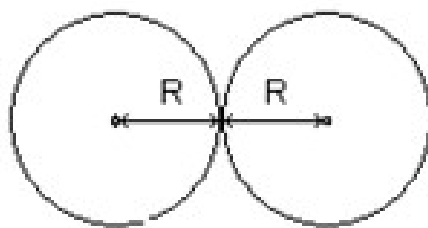
Energia liberada no processo $A + e^- \rightarrow A^-$. Abaixo alguns valores em eV.

H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na
0.8	<0	0.6	<0	0.3	1.3	-0.1	1.5	3.4	<0	0.5



Propriedades atômicas: Raio Atômico

O raio atômico de um orbital não é um valor tão bem definido, mas a partir das distâncias entre átomos em suas ligações moleculares, podemos determinar valores aproximados.



Algumas propriedades atômicas importantes:

Energia de Ionização: energia requerida para remover um elétron de um átomo em sua fase gasosa.

Afinidade eletrônica: é uma medida da energia liberada quando um átomo recebe um elétron em sua fase gasosa.

Raio Atômico: é a distância média entre o núcleo e o elétron mais externo.

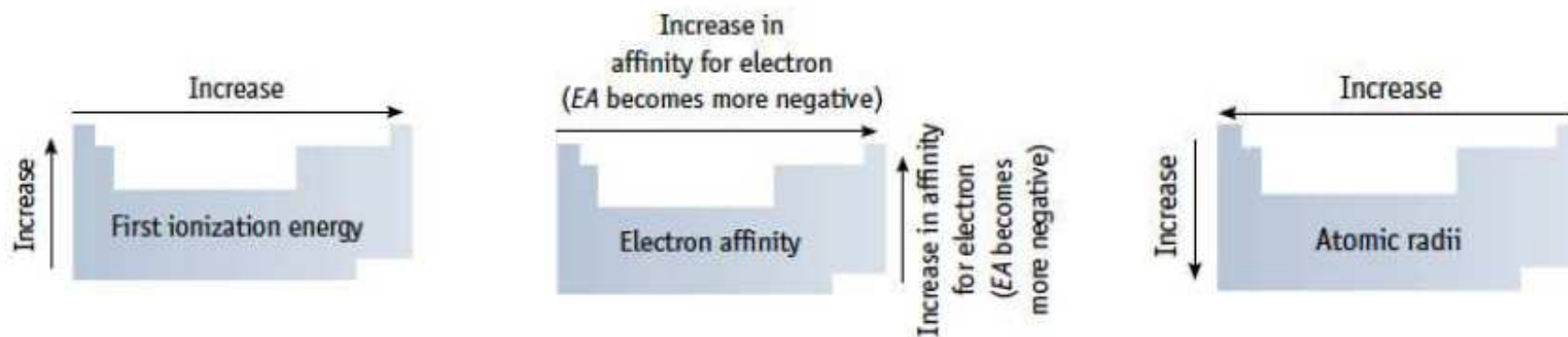


Tabela Periódica

As propriedades dos diferentes tipos de átomos estão fortemente relacionadas aos seus orbitais “mais externos”.

The periodic table is color-coded by blocks:

- s-block** (Red): Groups 1 and 2, plus Helium.
- p-block** (Blue): Groups 13 to 18.
- d-block** (Yellow): Groups 3 to 10.
- f-block** (Green): Lanthanide and Actinide series.

Large letters 's', 'p', 'd', and 'f' are overlaid on the corresponding blocks to indicate the type of atomic orbital involved in the bonding.

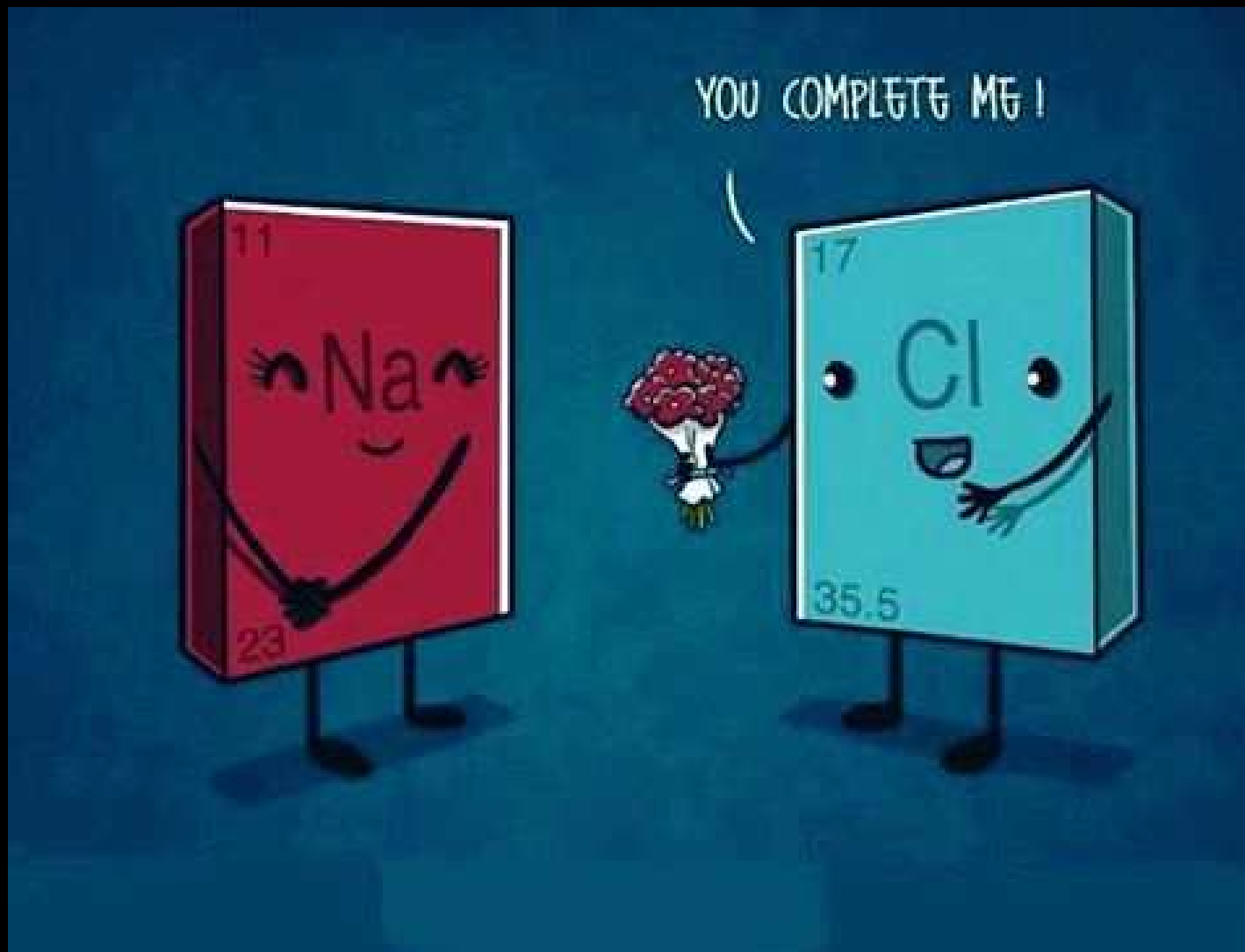
Lanthanide series:

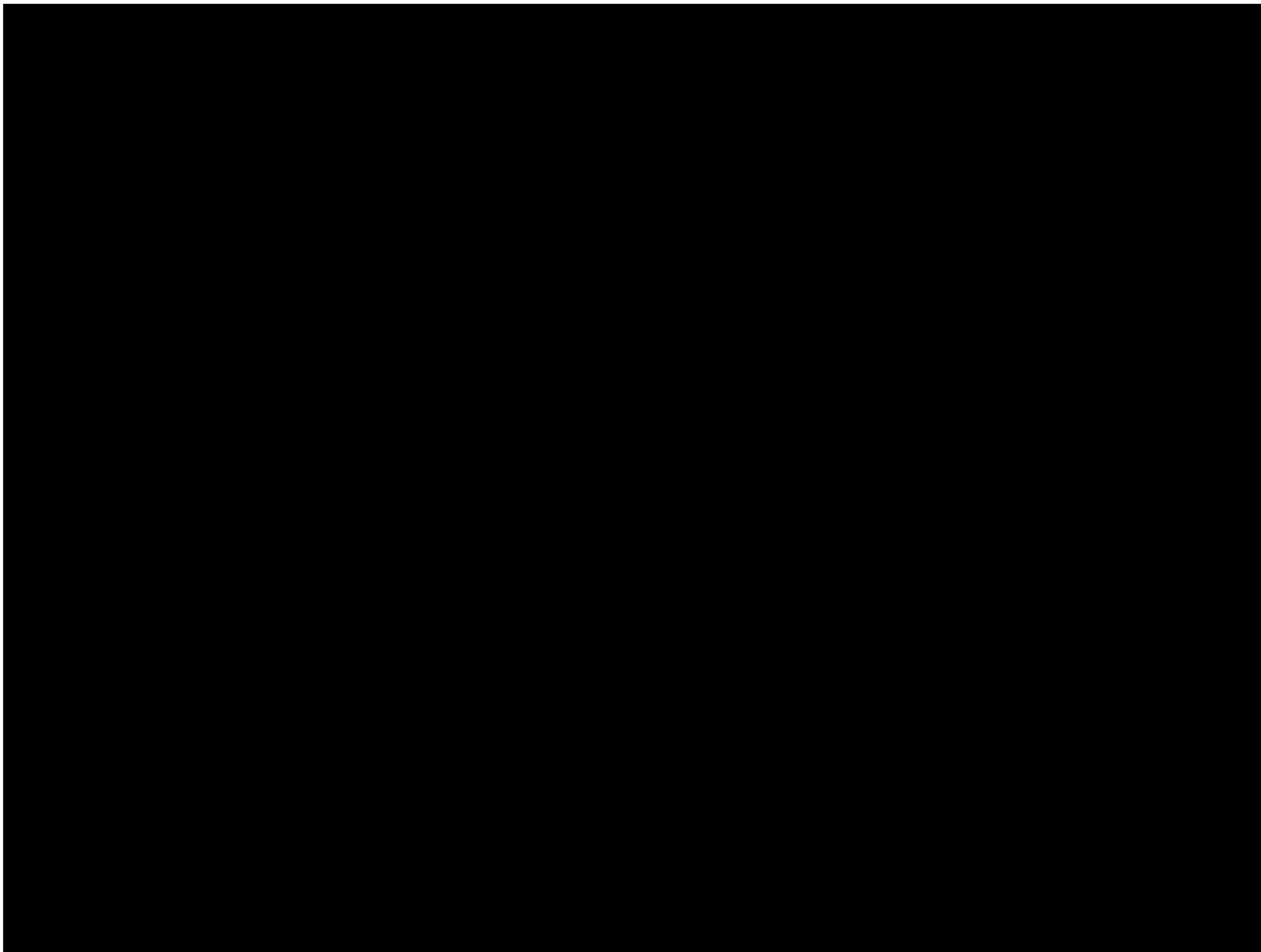
57	58	59	60	61	62	63
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd
140.12	140.91	144.24	(144.91)	150.36	151.97	157.25
cerium	praseodymium	neodymium	promethium	samarium	europium	gadolinium

Actinide series:

89	90	91	92	93	94	95
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm
232	231	238	237	(244)	(243)	(247)
thorium	protactinium	uranium	neptunium	plutonium	americium	curium

Ligações Químicas





Veja mais em:

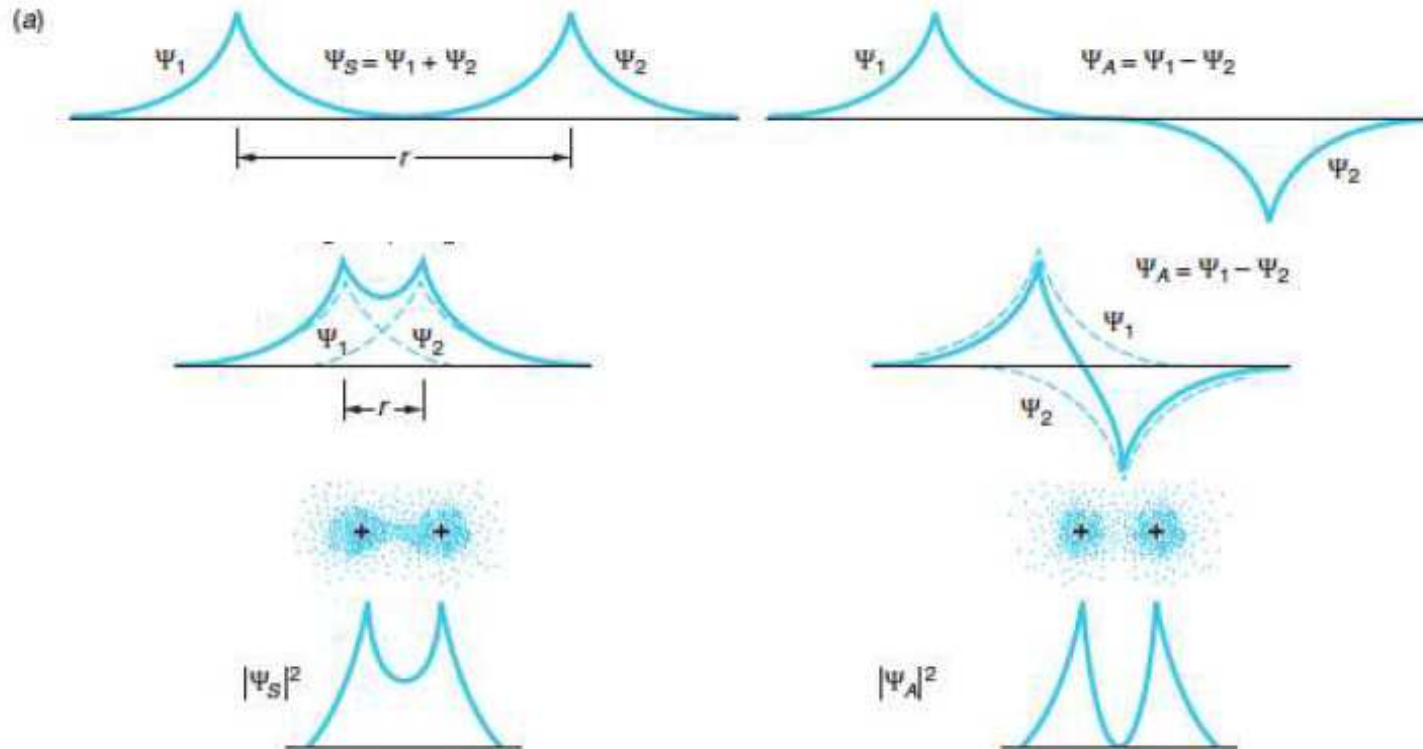
<https://www.youtube.com/watch?v=qzdRPv4Ns4>

Estado fundamental da molecula de Hidrogênio

$$\Psi_S = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(\Psi_{100}(r_1) + \Psi_{100}(r_2))$$

$$\sigma_-(1,2) = (1/2^{1/2})\{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\}$$

$$\Psi_A = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(\Psi_{100}(r_1) - \Psi_{100}(r_2))$$



Assunto que será visto em detalhes em Interações atômicas e moleculares...

O conhecimento mais profundo da matéria e suas relações com a energia é um dos fundamentos do desenvolvimento da sociedade atual e provavelmente de nossas futuras gerações...



Contudo, já havia bastante conhecimento em gerações anteriores....

Átomo algum interrompe jamais o seu movimento no vácuo,
antes se move sem cessar, empurrando e sendo empurrado
Em várias direcções, e as suas colisões provocam,
Consoante o caso, maior ou menor ressalto.
Quando combinamos da forma mais densa,
A intervalos muito próximos, com o espaço entre si
Mais obstruído pelo entrelaçado da figura,
Dão-nos a rocha, o diamante, o ferro,
Coisas dessa natureza. (Não existem muitas espécies de átomos
Que errem, pequenos e solitários, através do vácuo.)

Apesar de se encontrarem em constante movimento,
O seu todo aparenta absoluta quietude,
Salvo, aqui e ali, alguma oscilação particular.
A sua natureza está além do alcance dos nossos sentidos,
Muito, muito além. Já que não somos capazes de ver
As coisas como são na realidade, elas são obrigadas a esconder-nos os
seus movimentos,
Especialmente porque, mesmo as que conseguimos ver, muitas vezes
Nos ocultam também os seus movimentos, quando à distância.



Os ritos de Avaliação

Avaliação 2: Dia 03/12

Turma A2: sala 205-0 das 8 às 10 hs

Turma B2: sala 108-0 das 10 às 12 hs

Os alunos deverão fazer a prova em sua turma e horário correspondentes

Conteúdo: Desde equação de **Schrodinger** até a aula de hoje.

Vistas de Avaliações: **Dia 06/12 (sexta feira)**

Notas serão divulgadas assim que as avaliações estejam corrigidas.

Todas as turmas: sala 609-3 das 14 às 16hs

Obs: Não haverá atendimento dia 05/12 !

Avaliação SUB ou REC: Dia 10/12

Turma A2: sala 205-0 das 8 às 10hs.

Turma B2: sala 108-0 das 10 às 12hs

Os alunos deverão fazer a prova em sua turma e horário correspondentes (caso precisem mudar, entrar em contato por email).

Conteúdo: Sub 1: mesma matéria da P1; Sub 2: mesma matéria da P2; Rec: toda a matéria

Obs: Alunos que fizerem a SUB e precisarem de REC serão contatados após fechamento dos conceitos, para marcar data da REC em 2020.1



Assuntos abordados na segunda parte da disciplina:

Equação de Schrodinger em 1D:

- Equação dependente do tempo;
- Equação independente do tempo;
- Solução do potencial do poço infinito;
- Solução do potencial do poço finito;
- Solução do potencial de oscilador harmônico;
- Solução do potencial de degrau (conceitos de reflexão e transmissão);
- Solução do potencial de barreira (conceito de tunelamento);

Equação de Schrodinger em mais de uma dimensão:

- Solução do potencial do poço infinito em 2D ou 3D;
- Solução de oscilador harmônico em 2D ou 3D
- Solução do átomo de hidrogênio;
- Orbitais Atômicos;
- Spin, átomos de muitos elétrons e tabela periódica.

Estamos chegando ao fim de nossa última aula da disciplina de Física Quântica em 2019.3, devemos lembrar aqueles que fizeram esta disciplina possível



SOLVAY CONFERENCE 1927

colourized by pastincolour.com

A. PICARD	E. HENRIOT	P. EHRENFEST	Ed. HERSEN	Th. DE DONDER	E. SCHRÖDINGER	E. VERSCHAFFELT	W. PAULI	W. HEISENBERG	R.H FOWLER	L. BRILLOUIN
P. DEBYE	M. KNUDSEN	W.L. BRAGG	H.A. KRAMERS	P.A.M. DIRAC	A.H. COMPTON	L. de BROGLIE	M. BORN	N. BOHR		
I. LANGMUIR	M. PLANCK	Mme CURIE	H.A. LORENTZ	A. EINSTEIN	P. LANGEVIN	Ch.E. GUYE	C.T.R. WILSON	O.W. RICHARDSON		

Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL



A conferência Solvay de 1927, sobre a **teoria de elétrons e fótons**. Dos 29 participantes, 17 foram laureados com o Prêmio Nobel.



A Física Quântica também pode ser entendida como a jornada do herói (Joseph Campbell)

A Jornada do Herói e a Física Quântica



Temos o desafio dos Físicos que são compelidos pelos novos resultados experimentais a abandonar certos aspectos da física clássica (mundo conhecido) para embarcar na jornada da física quântica.

Durante as últimas décadas, cada vez mais temos adentrado nos meandros do Mundo Quântico e buscamos revelar a sua complexidade da melhor forma possível.

Ao voltar do mundo desconhecido, como efeito da jornada resgatamos novos conceitos, não apenas como o conhecimento, mas com novos “artefatos tecnológicos” inbuídos de “poder quântico”. Estes mesmos artefatos nos trazem a possibilidade de novas expedições ao Mundo Quântico.

Esta é uma saga de muitos heróis, alguns alcançaram grande “fama” e seus nomes são celebrados, outros se mantiveram como aventureiros anônimos, mas isso não diminui suas contribuições.

Ainda existente muitas jornadas e buscas para uma melhor compreensão do universo quântico.

Durante todo o processo de consolidação da física quântica houve momentos de genialidade e avanço rápido e outros de muito trabalho duro e ganhos pequenos. Contudo, sempre prosseguimos para a estruturação de uma teoria cada vez mais sólida e consistente. Ainda temos muitas questões em aberto, mas também muitos pesquisadores em todos os locais do mundo atuando para resolvê-las.

A física quântica ainda tem um grande futuro em aberto no qual você poderá contribuir...





"Tenha em mente que tudo que você aprende na escola é trabalho de muitas gerações.

Receba essa herança, honre-a, acrescente a ela e, um dia, finalmente deposite-a nas mãos de seus filhos."

(Albert Einstein)

Na aula de hoje (28/11/19)

- Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons;
- Spin (quarto número quântico atômico);
- Tabela periódica;
- O fim de um começo.

Dia 03/12/19: Segunda Avaliação

Dia 10/12/19: Avaliação Substitutiva e Recuperação (Consepe 181 e 182)

	== == == == == == == == == == == == == == ==	
	FIM DA DISCIPLINA – Edição 2019.3	
	== == == == == == == == == == == == == == ==	

“E esse - interveio sentenciosamente o Diretor - é o segredo da felicidade e da virtude: amar o que se é obrigado a fazer. Tal é a finalidade de todo o condicionamento: fazer as pessoas amarem o destino social a que não podem escapar.”



Perguntas, dúvidas, comentários, aflições?

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 1)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
1	24/09 (Ter)	1	Apresentação a disciplina; Evidências experimentais da teoria quântica : radiação do Corpo Negro.
	---	---	-----
2	01/10 (Ter)	2	Evidências experimentais da teoria quântica: efeito foto-elétrico, efeito Compton, espectros atômicos
	03/10 (Qui)	3	Modelos atômicos, Modelo quântico de Bohr, Experimento de Franck-Hertz, Hipótese de de Broglie e ondas de matéria.
3	08/10 (Ter)	4	Revisitando ondas; interferência (fótons e elétrons) e interferômetros; dualidade onda-partícula e princípio de complementaridade; Princípio de incerteza de Heisenberg.
	---	---	-----
4	15/10 (Ter)	5	Interferômetros e fótons únicos, polarização da luz, postulados da física quântica e notação de Dirac
	17/10 (Qui)	6	Relação entre estados quânticos e funções de onda. Espaços discretos e contínuos na física quântica. Probabilidade e interpretações em Física Quântica. Gato de Schrodinger. e estados emaranhados.
5	22/10 (Ter)	7	Mecânica Quântica Ondulatória, Determinação eurística da Equação de Schrodinger, propriedades da equação de Schrodinger e funções de ondas.
	---	---	-----
6	29/10 (Ter)	P1	Primeira Avaliação
	31/10 (Qui)	8	Potenciais simples: poço de potencial, Espaço de estados e transições entre estados de energia; Elétrons em currais quânticos e o

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 2)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
7	05/11 (Ter)	9	Potenciais simples: poço quadrado finito; operadores e valores médios de observáveis, pontos quânticos e suas aplicações.
	---	---	-----
8	12/11 (Ter)	10	Potenciais simples: potenciais degraus, reflexão, Transmissão de Ondas, Tunelamento. Tempo de tunelamento em uma barreira (revisitando o princípio de incerteza de Heisenberg). Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.
	14/11 (Qui)	11	Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico. Armadilhas de íons e princípios de informação quântica. Requisitos essenciais de um computador quântico.
9	19/11 (Ter)	12	Equação de Schrodinger em três dimensões: O cubo quântico (coordenadas cartesianas), O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas), Separação de variáveis e a quantização de Momento Angular e Energia.
	---	---	-----
10	26/11 (Ter)	13	Funções de ondas do átomo de Hidrogênio; Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos. Imagens, Abstrações e Interpretações.
	28/11 (Qui)	14	Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons, spin (quarto número quântico atômico) e tabela periódica. O fim de um começo.
11	03/12 (Ter)	P2	Segunda Avaliação da Disciplina
	---	---	-----
12	10/12 (Ter)	Psub\REC	Avaliação Substitutiva ou Avaliação de Recuperação
13			
	14 a 21/9		Lançamento de conceitos e faltas