

Mecânica quântica

Estudo do comportamento e das leis do movimento para partículas microscópicas

ANTECEDENTES:

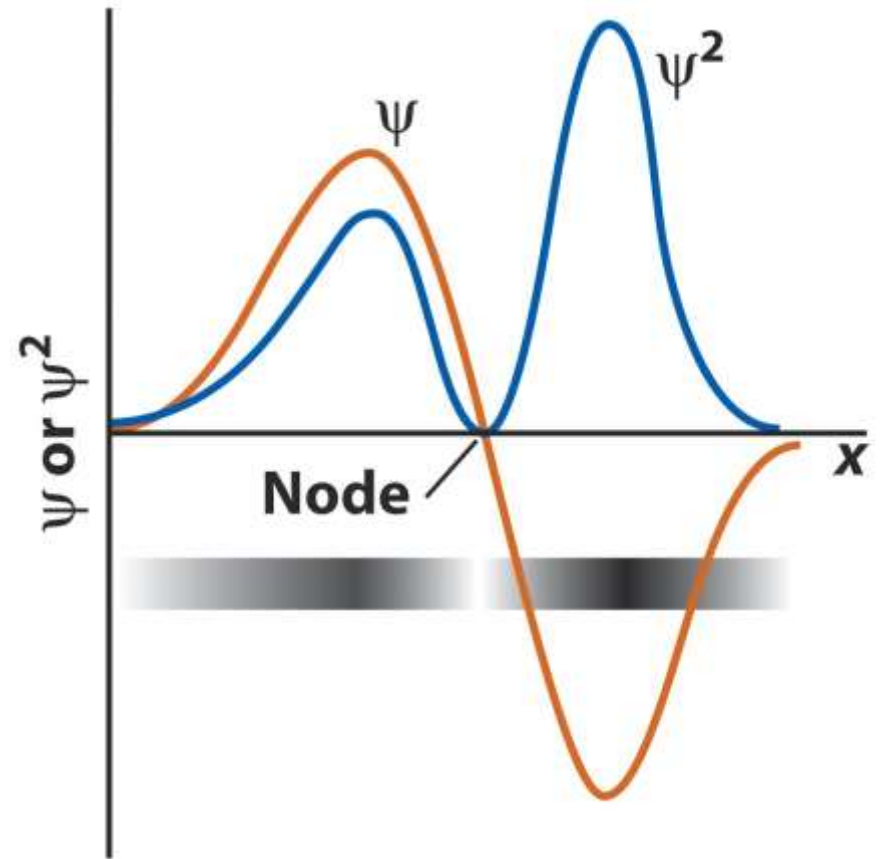
- Teoria da quantização da energia (M. Planck): $E = h \cdot \nu$
- Dualidade onda-partícula (L. de Broglie): $\lambda = h / p$
- Princípio de incerteza (Heisenberg): $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4 \cdot \pi}$

Estabelece um limite na precisão com que a posição e o momento de uma partícula podem ser determinados simultaneamente.

Funções de Onda e Níveis de Energia



Erwin Schrödinger



Postulados da mecânica quântica

- A energia do átomo está quantizada. Só alguns estados energéticos são permitidos (números quânticos).
- Mudança entre estados: $\Delta E = h \cdot \nu$
- Aproximação estatística à posição do e⁻: **ORBITAL**
- Descrição de estado e movimento do e⁻ mediante uma **função de onda**: $\Psi_{n,l,m} = \Psi(x,y,z)$

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER:

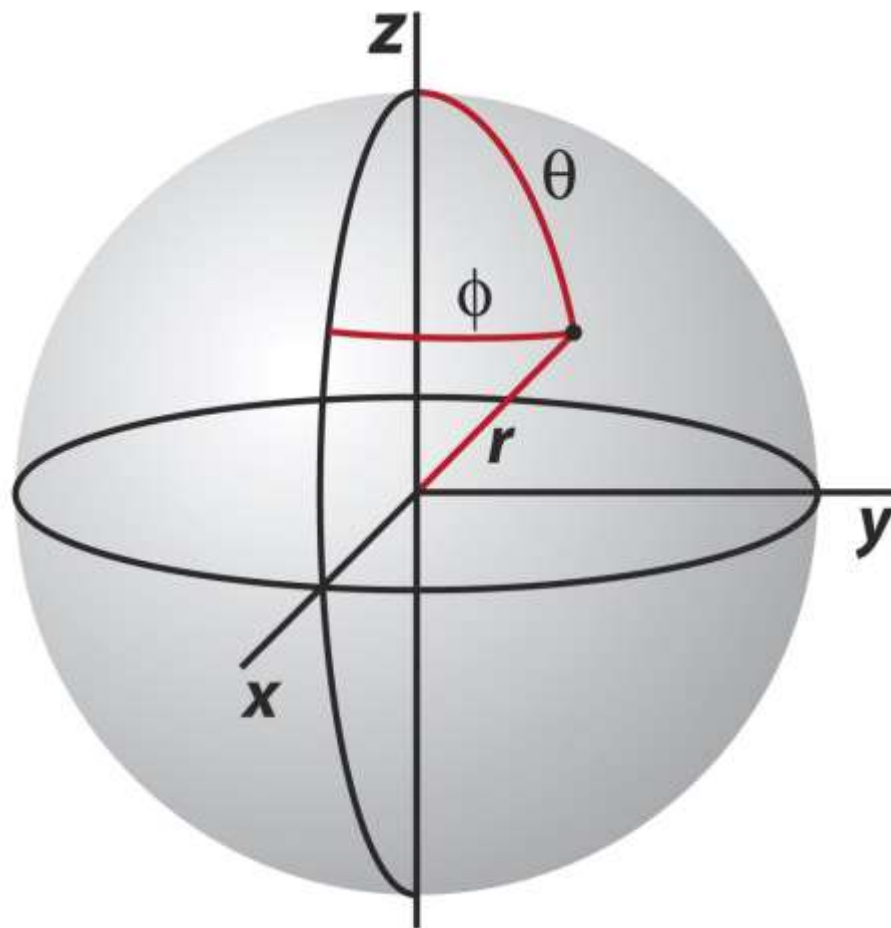
$$\nabla^2 \psi + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (E - V) \cdot \psi = 0$$

TABELA 6.2 Relação entre os valores de n , l e m_l até $n = 4$

n	Valores possíveis de l	Designação do subnível	Valores possíveis de m_l	Número de orbitais no subnível	Número total de orbitais no nível
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	

n	l	m	Função	Orbital
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s
	1	-1	$\Psi_{2,1,-1}$	2p ($2p_x, 2p_y, 2p_z$)
		0	$\Psi_{2,1,0}$	
+1		$\Psi_{2,1,1}$		
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	3s
	1	-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 ($3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz}, 3d_{yz}$)
		-1	$\Psi_{3,2,-1}$	
0		$\Psi_{3,2,0}$		
+1		$\Psi_{3,2,1}$		
+2		$\Psi_{3,2,2}$		

Coordenadas Esféricas Polares



Orbitais Atômicos

Só pra se ter uma ideia !!!

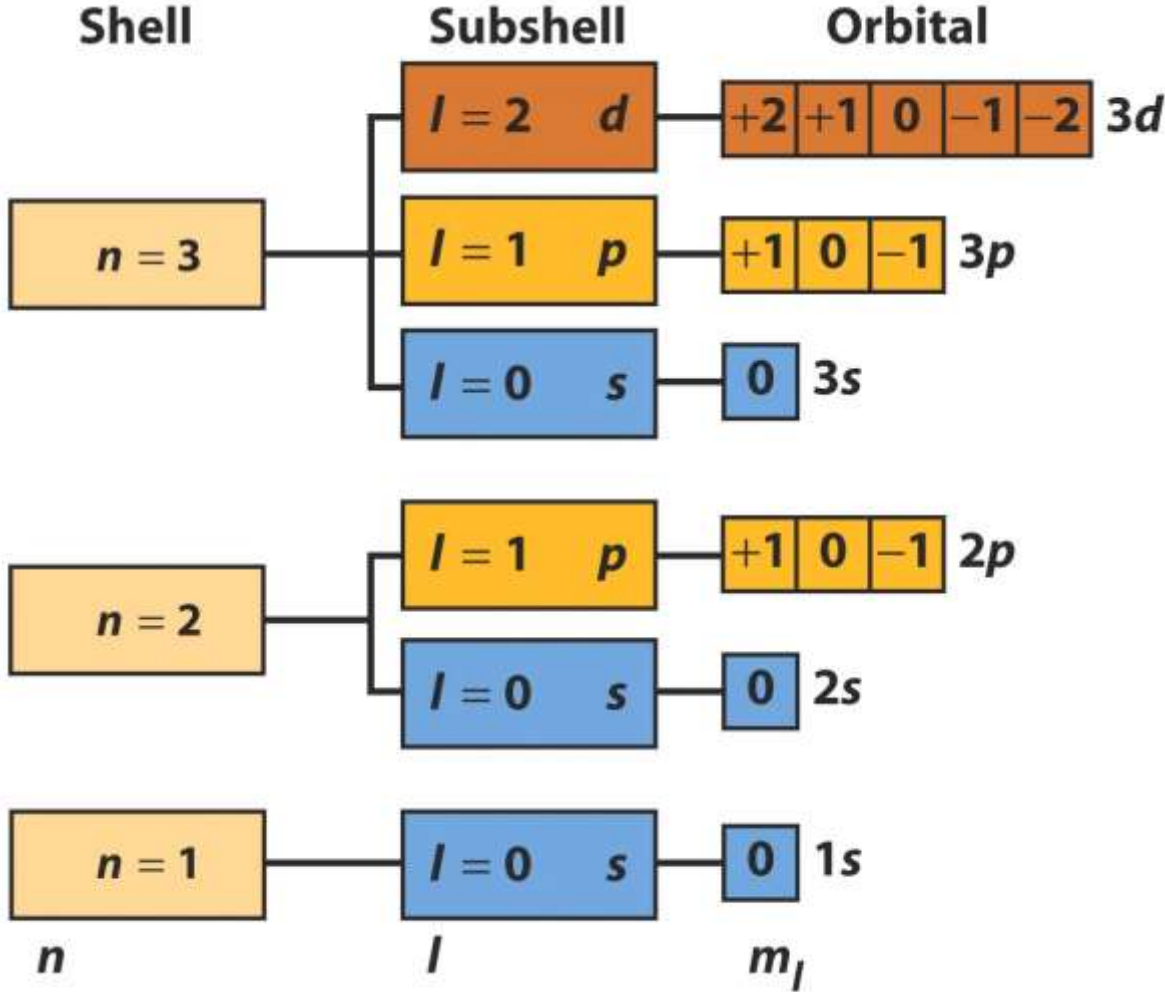
TABLE 1.2 Hydrogen Wavefunctions (Atomic Orbitals), $\psi = RY$

(a) Radial wavefunctions, $R_{nl}(r)$			(b) Angular wavefunctions, $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$		
n	l	$R_{nl}(r)$	l	" m_l "*	$Y_{lm_l}(\theta, \phi)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$	1	x	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$
	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$		y	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$
3	0	$\frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(3 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-Zr/3a_0}$	2	z	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
	1	$\frac{2}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}$		xy	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$
	2	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$		yz	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \sin \phi$
				zx	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \cos \phi$
				$x^2 - y^2$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$
				z^2	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$

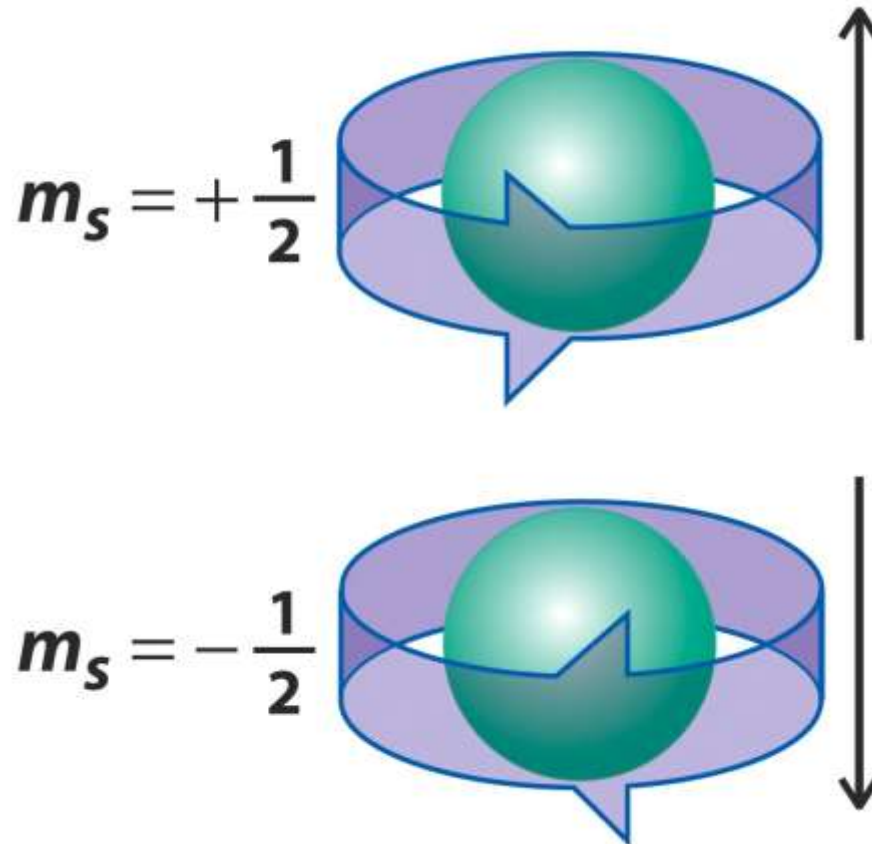
Note: In each case, $a_0 = 4\pi\epsilon_0^2/m_e e^2$, or close to 52.9 pm; for hydrogen itself, $Z = 1$.

*In all cases except $m_l = 0$, the orbitals are sums and differences of orbitals with specific values of m_l .

Arranjos



O ultimo número quântico: Spin do Elétron



TAB1 Quantum Numbers for Electrons in Atoms

Name	Symbol	Values	Specifies	Indicates
principal	n	$1, 2, \dots$	shell	size
orbital angular momentum*	l	$0, 1, \dots, n - 1$	subshell: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ s, p, d, f, g, \dots	shape
magnetic	m_l	$l, l - 1, \dots, -l$	orbitals of subshell	orientation
spin magnetic	m_s	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	spin state	spin direction

*Also called the *azimuthal quantum number*.

Orbitais p

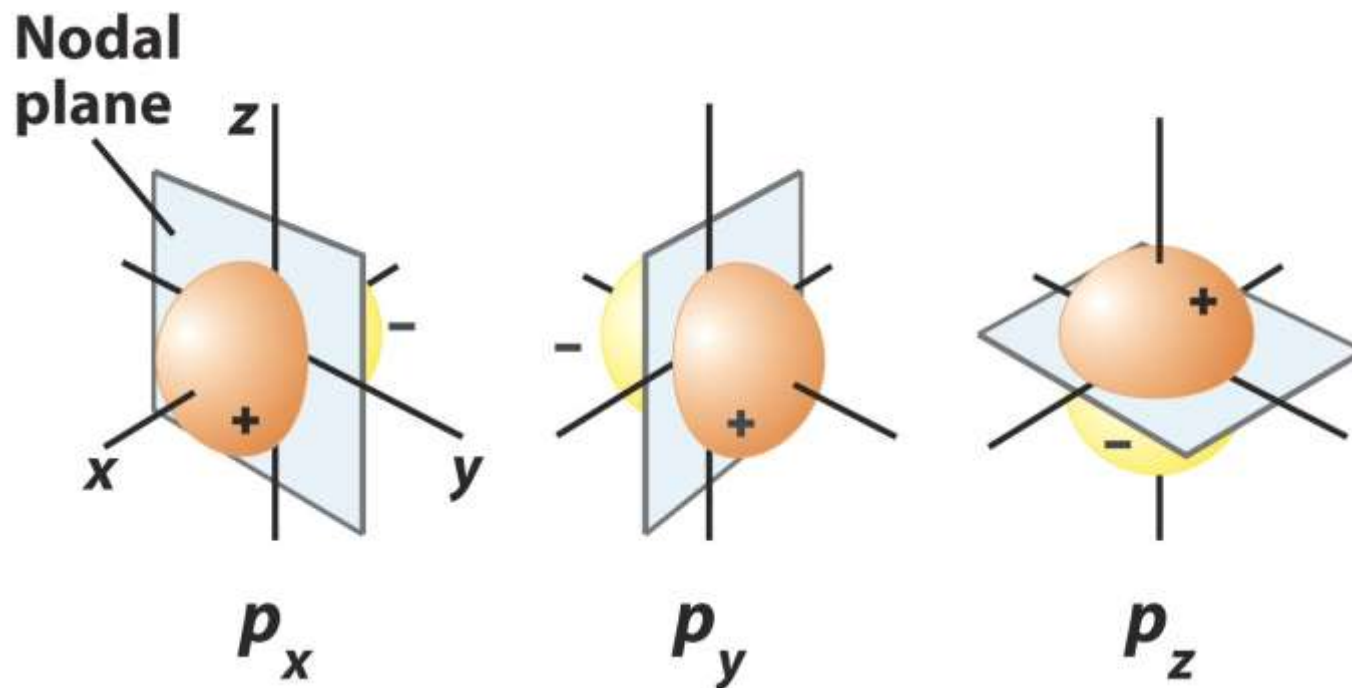


TABELA 6.2 Relação entre os valores de n , l e m_l até $n = 4$

n	Valores possíveis de l	Designação do subnível	Valores possíveis de m_l	Número de orbitais no subnível	Número total de orbitais no nível
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	

Orbitais d

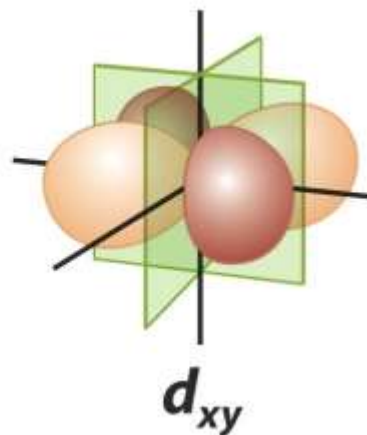
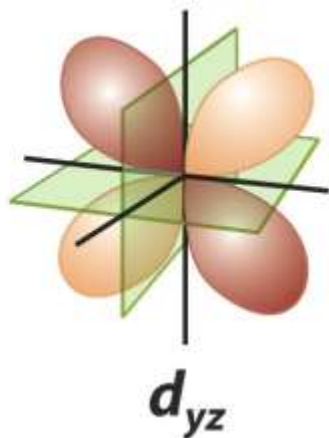
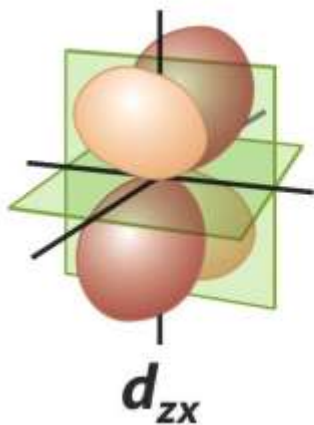
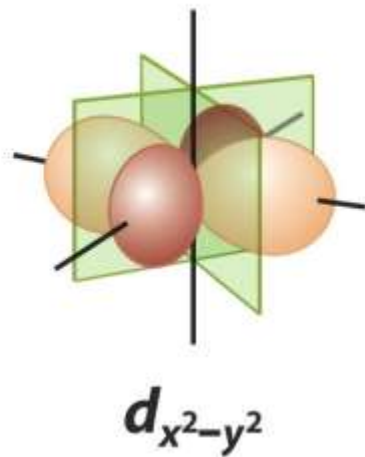
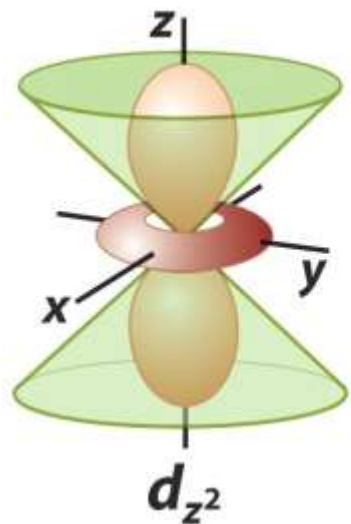
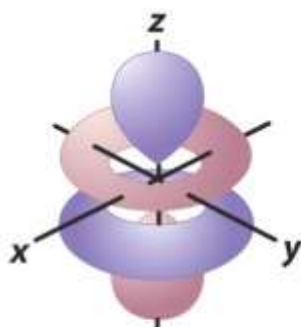


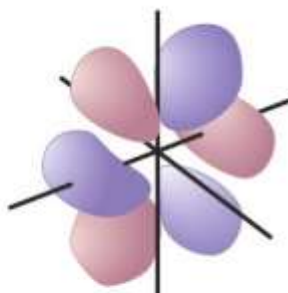
TABELA 6.2 Relação entre os valores de n , l e m_l até $n = 4$

n	Valores possíveis de l	Designação do subnível	Valores possíveis de m_l
4	0	4s	0
	1	4p	1, 0, -1
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3

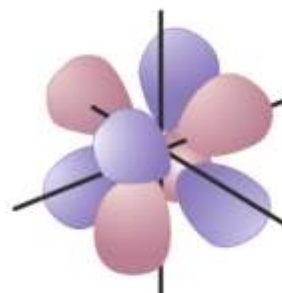
Orbitais f



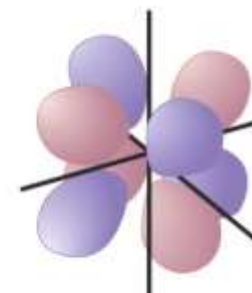
$$5z^3 - 3zr^2$$



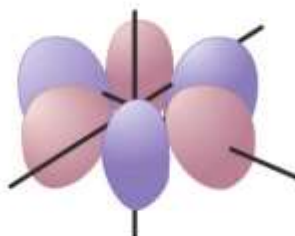
$$5xz^2 - xr^2$$



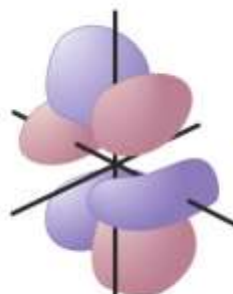
$$zx^2 - zy^2$$



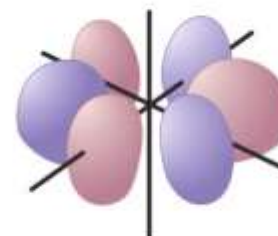
$$xyz$$



$$y^3 - 3yx^2$$



$$5yz^2 - yr^2$$



$$x^3 - 3xy^2$$

TABELA 6.2 Relação entre os valores de n , l e m_l até $n = 4$

n	Valores possíveis de l	Designação do subnível	Valores possíveis de m_l
4	0	4s	0
	1	4p	1, 0, -1
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3

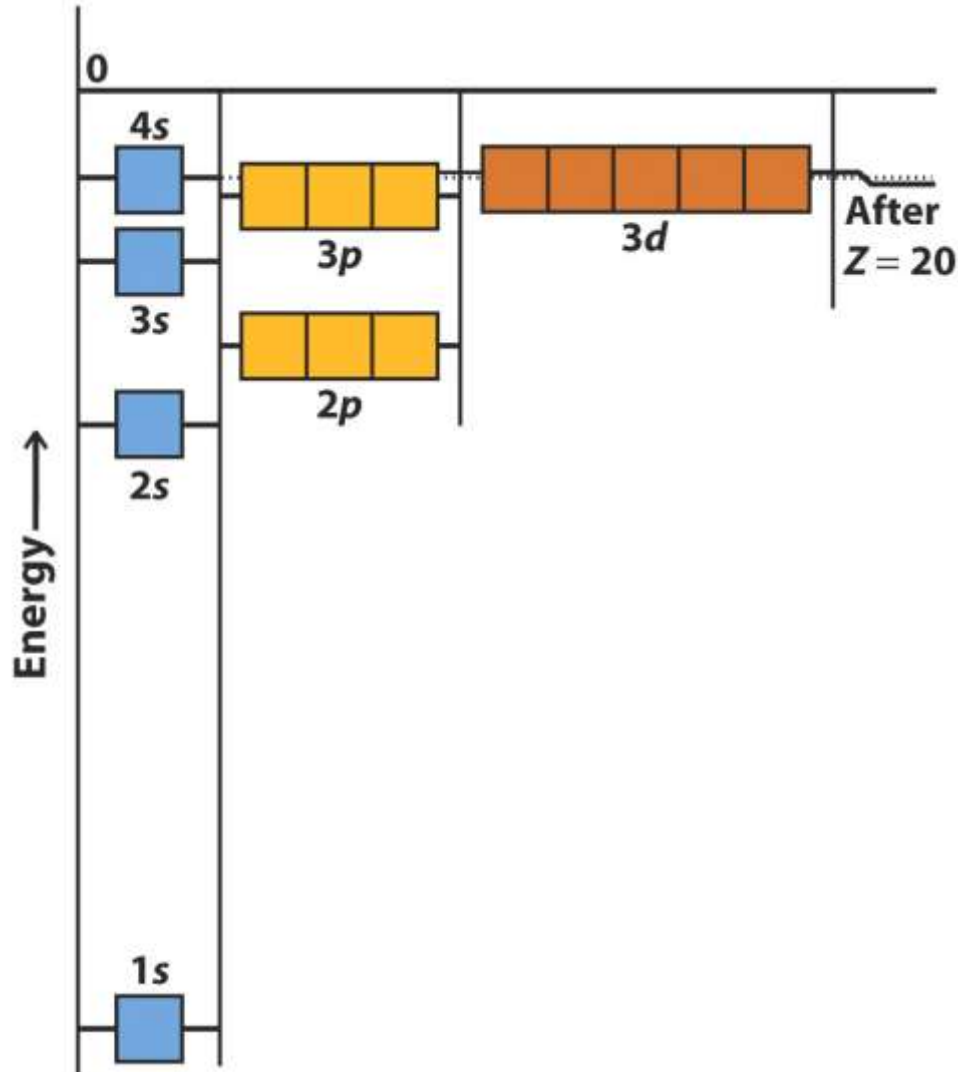
O significado de cada número quântico !!!

TABLE 1.3 Quantum Numbers for Electrons in Atoms

Name	Symbol	Values	Specifies	Indicates
principal	n	1, 2, ...	shell	size
orbital angular momentum*	l	0, 1, ..., $n - 1$	subshell: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ s, p, d, f, g, \dots	shape
magnetic	m_l	$l, l - 1, \dots, -l$	orbitals of subshell	orientation
spin magnetic	m_s	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	spin state	spin direction

*Also called the *azimuthal quantum number*.

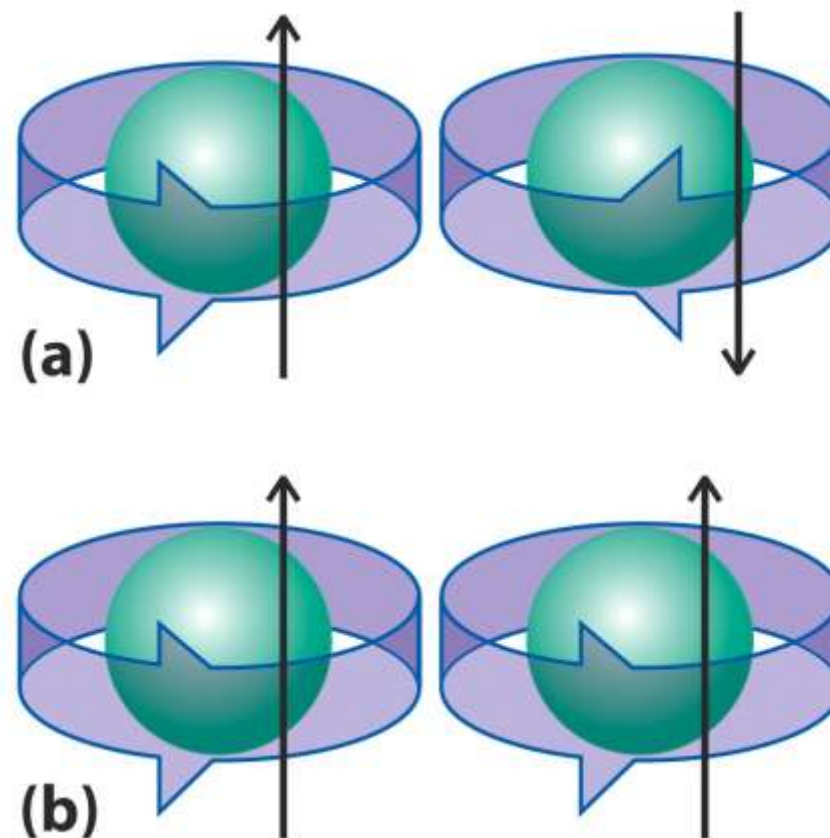
Energias Relativas das Camadas



No estado fundamental de um átomo com muitos elétrons, os elétrons ocupam os orbitais atômicos disponíveis, de modo a tornar a energia total do átomo a menor possível.

Princípio da Exclusão de Pauli

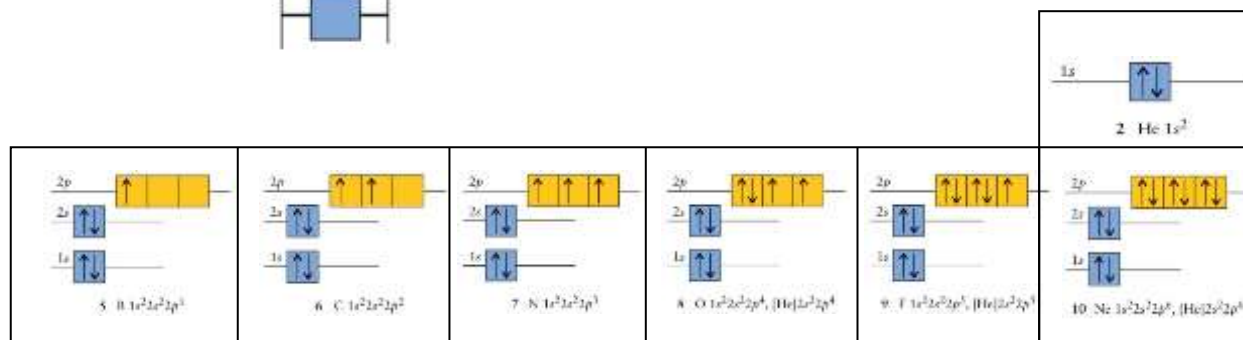
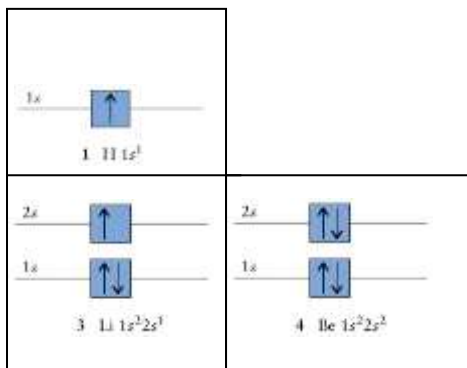
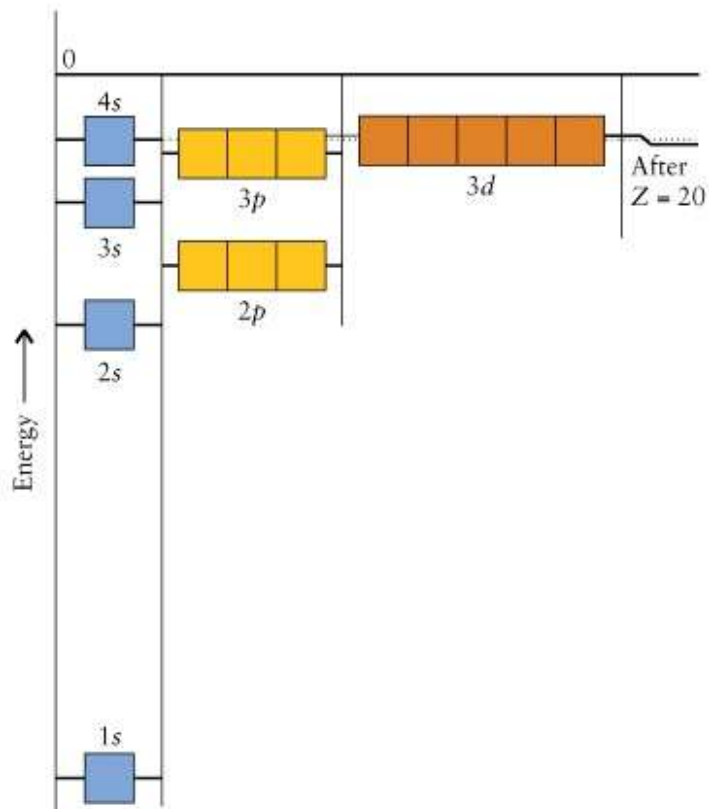
- Dois elétrons, no máximo, podem ocupar um dado orbital.
- Dois elétrons, em um átomo, não podem ter o mesmo conjunto de quatro números quânticos.



Distribuição Eletrônica

Princípio da Construção e Regra de Hund

Energias relativas das camadas



Dê as configurações eletrônicas do estado fundamental do átomo de Ti e do íon Ti^{3+} .

TABELA PERIÓDICA... Percebendo a perfeição...

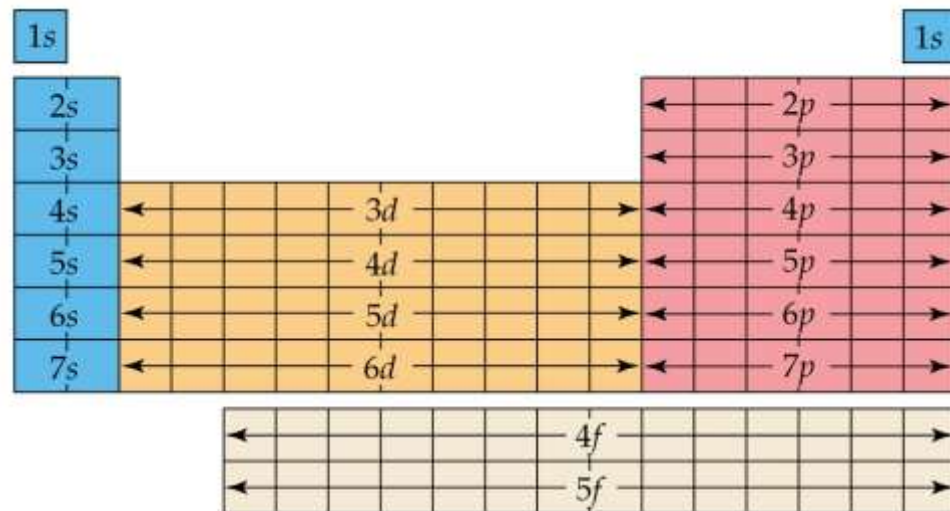


Dimitri Ivanovich Mendeleev

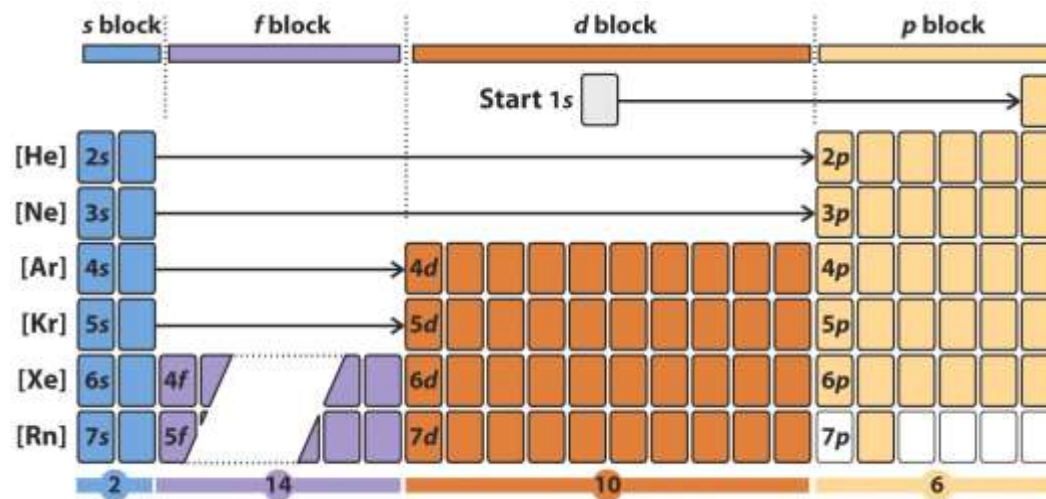
O formato da tabela periódica

- *A forma moderna da tabela periódica reflete a estrutura eletrônica fundamental dos elementos.*
- *Os blocos da tabela periódica refletem a identidade dos últimos orbitais que são ocupados no processo de preenchimento. O número do período é o número quântico principal da camada de valência. O número do grupo está relacionado ao número dos elétrons de valência.*

Estrutura Eletrônica e Tabela Periódica



- Elementos representativos do bloco s
- Elementos representativos do bloco p
- Metais de transição
- Metais do bloco f



Figuras e gráficos destes slides:

Atkins cap. 1 e Brown, caps. 6 e 7.