

Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

Aula 7:
Mecânica Quântica e
Os Elementos

E-mail da turma: emufabc@gmail.com
Senha: **ufabcsigma**

<https://sites.google.com/site/estruturabc0102/>

Mecânica Quântica

Estudo do comportamento e das leis do movimento para partículas microscópicas

Antecedentes

Teoria da quantização da energia (M. Planck): $E = h \cdot f$

Dualidade onda-partícula (L. de Broglie): $\lambda = h / p$

Princípio de incerteza (Heisenberg): $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$, $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$

Energias de Bohr: $E_n = -(Z^2/n^2) \cdot E_0$

Se o elétron é uma onda, qual é esta onda?

Na última aula. conhecemos o **princípio de incerteza**: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

=> A posição de uma partícula não é definida com precisão.

Ela se encontra com certa probabilidade no lugar \mathbf{x}_1 , com certa probabilidade no lugar \mathbf{x}_2 , etc.

A probabilidade de estadia da partícula depende da posição $\mathbf{x} = (x, y, z)$.

Ela é descrita por uma função, que depende da posição, a **função de onda** $\psi(\mathbf{x})$ (letra grega psi).

A Função de Onda

A função de onda é complexa, quer dizer os valores dela têm uma parte real e uma parte imaginária.

A **probabilidade** de encontrar a partícula entre a posição \mathbf{x} e $\mathbf{x}+d\mathbf{x} = (x+dx, y+dy, z+dz)$, $P(\mathbf{x})d\mathbf{x}$, é dada pelo **quadrado do módulo da função de onda**:

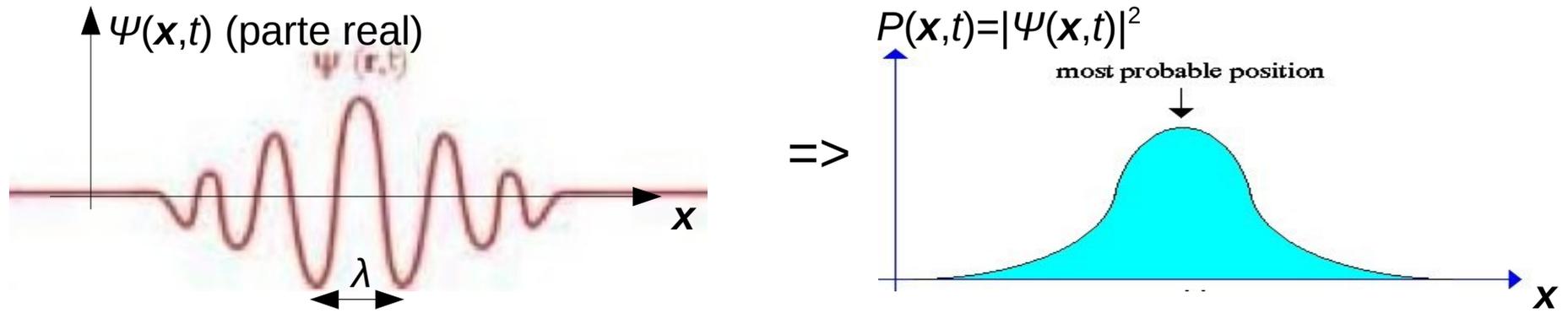
$$P(\mathbf{x})d\mathbf{x} = |\Psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

Como a distribuição da probabilidade de estadia da partícula pode mudar com o tempo, em geral a função de onda também depende do tempo:

$$\Psi(\mathbf{x}, t), \quad P(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x} = |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$$

A Função de Onda

Exemplo de uma função de onda e a distribuição de probabilidade correspondente

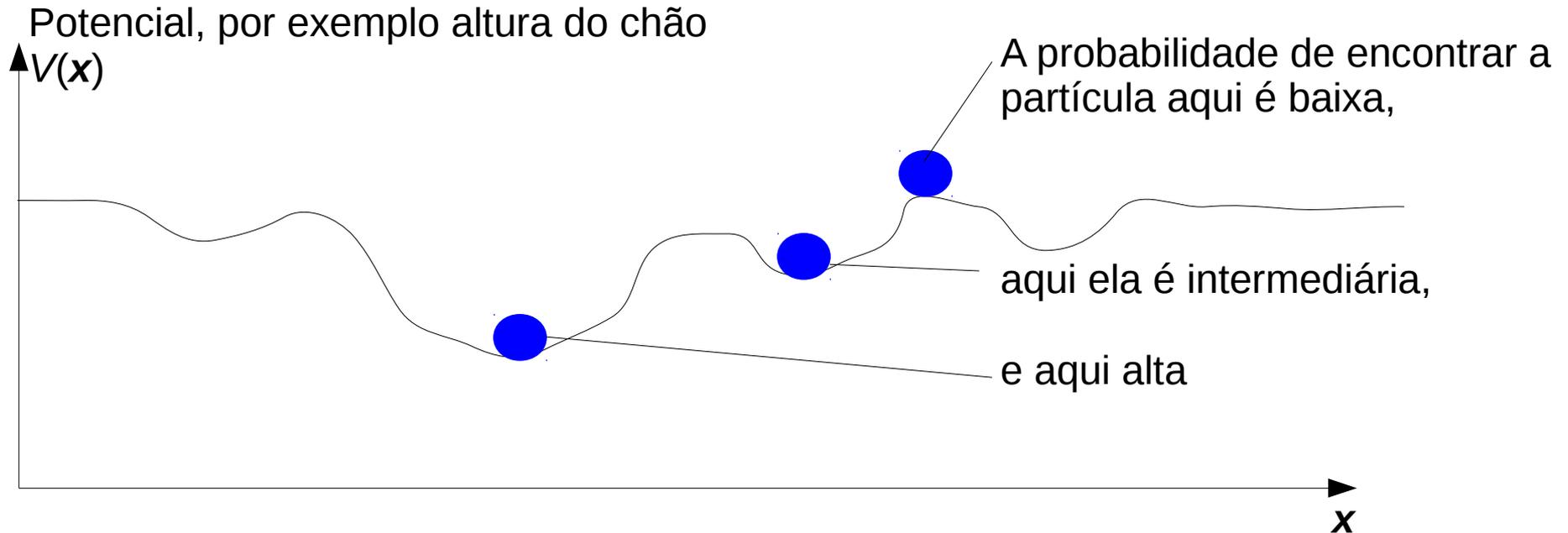


Neste caso, os máximos e mínimos da parte real da função de onda coincidem com os pontos zero da parte imaginária, e vice-versa. Como a distribuição de probabilidade é a soma dos quadrados das partes real e imaginária, os mínimos e máximos não aparecem na distribuição de probabilidade.

Todos os **fenômenos quânticos** que já conhecemos, a quantização da energia, a dualidade onda-partícula, o princípio de incerteza, etc., **podem ser deduzidos a partir das propriedades das funções de onda.**

Como determinar a função de onda?

Física Clássica



A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição x depende do potencial naquela posição, $V(x)$.

Como determinar a função de onda?

Física Quântica

Na física quântica também:

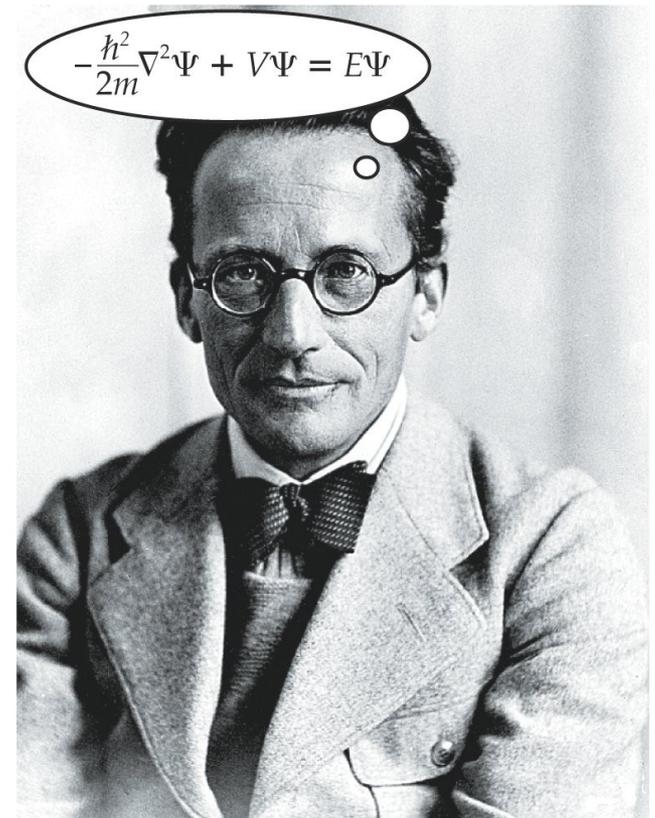
A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição \mathbf{x} , e então, **a função de onda $\Psi(\mathbf{x})$, depende do potencial $V(\mathbf{x})$.**

Esta dependência é dada pela **Equação de Schrödinger (1925)**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

onde m é a massa da partícula, e E é uma constante. Pode se mostrar que E é a **energia** da partícula.

Uma função de onda corresponde a uma certa energia.



Erwin Schrödinger

A Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Isto é a equação de Schrödinger **independente do tempo**, que vale quando $V(x)$, e, então, $\psi(x)$ não variam com o tempo.

Para funções de onda independentes do tempo, normalmente se usa a letra psi minúscula, $\psi(x)$.

Para o caso independente do tempo, freqüentemente é possível encontrar soluções, q. d. funções de onda, reais (sem parte imaginária).

Da mesma maneira que a equação $7+x = 13$ serve para determinar a incógnita x , **a equação de Schrödinger serve para determinar uma função incógnita, a função de onda $\psi(x)$, quando o potencial $V(x)$ é dado**. Procura-se funções que satisfazem esta equação.

A Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

A Equação de Schrödinger relaciona a função procurada $\psi(\mathbf{x})$ com o seu **derivado** $d^2\psi(\mathbf{x})/d\mathbf{x}^2$.

Uma equação deste tipo é chamada **equação diferencial**, e existem métodos para resolver equações deste tipo, em alguns casos simples.

=> Quando se sabe o potencial $V(\mathbf{x})$ (por exemplo o potencial elétrico) de uma partícula em função da sua posição \mathbf{x} , pode-se determinar, usando a equação de Schrödinger, a função de onda $\psi(\mathbf{x})$ e, então, a função probabilidade de estadia $P(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$ da partícula.

A Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Normalmente, há mais de uma solução $\psi_i(\mathbf{x})$, $i=1, \dots$

Isto significa que existem várias funções de onda possíveis, (análogo às diferentes órbitas no átomo de Bohr).

Cada função de onda ψ_i tem seu próprio valor de energia E_i .

Quando as energias de duas funções de onda, $\psi_i(\mathbf{x})$ e $\psi_j(\mathbf{x})$, onde $i \neq j$, são iguais, $E_i = E_j$, se diz que este nível de energia é **degenerado**.

A Equação de Schrödinger é **linear** em ψ , o que significa que, se as funções de onda ψ_1 e ψ_2 são soluções (satisfazem a equação), então $a \cdot \psi_1 + b \cdot \psi_2$, onde a e b são constantes, também é uma solução.

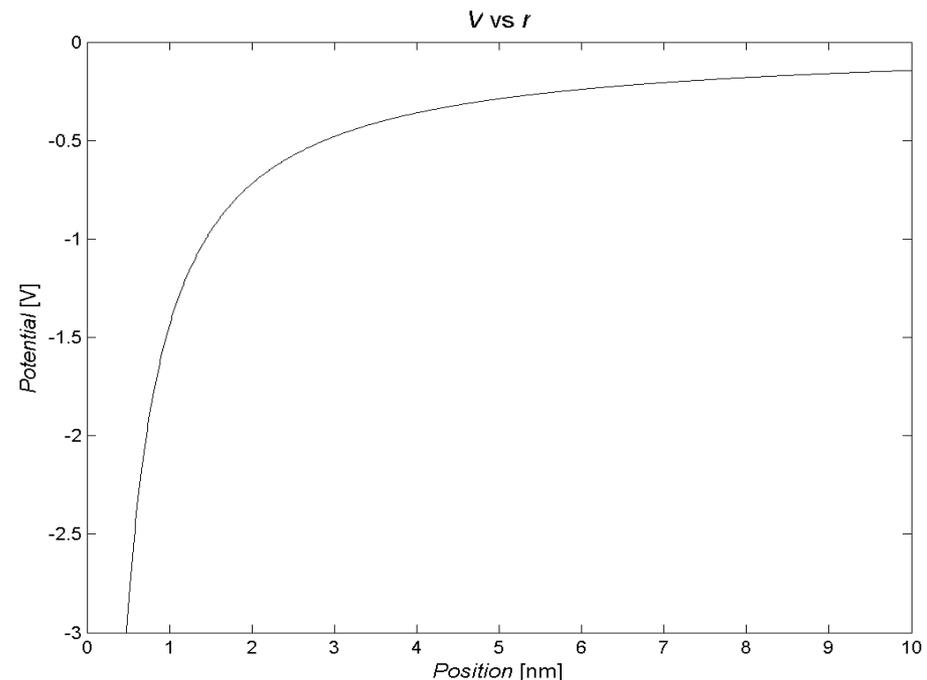
O Átomo de Hidrogênio

Um problema que pode ser resolvido usando a equação de Schrödinger e aquele de encontrar a **função de onda do elétron num átomo de hidrogênio** (ou de um outro átomo com um só elétron), ou seja, determinar a probabilidade de encontrar o elétron na posição \mathbf{x} , para cada posição \mathbf{x} .

Como a massa do núcleo é muito maior do que aquela do elétron, o **núcleo** pode ser tido como **parado no ponto zero** do sistema de coordenadas.

Num átomo com um elétron, o **potencial elétrico** é dado pela **distância entre o núcleo e o elétron**, $r = |\mathbf{x}|$:

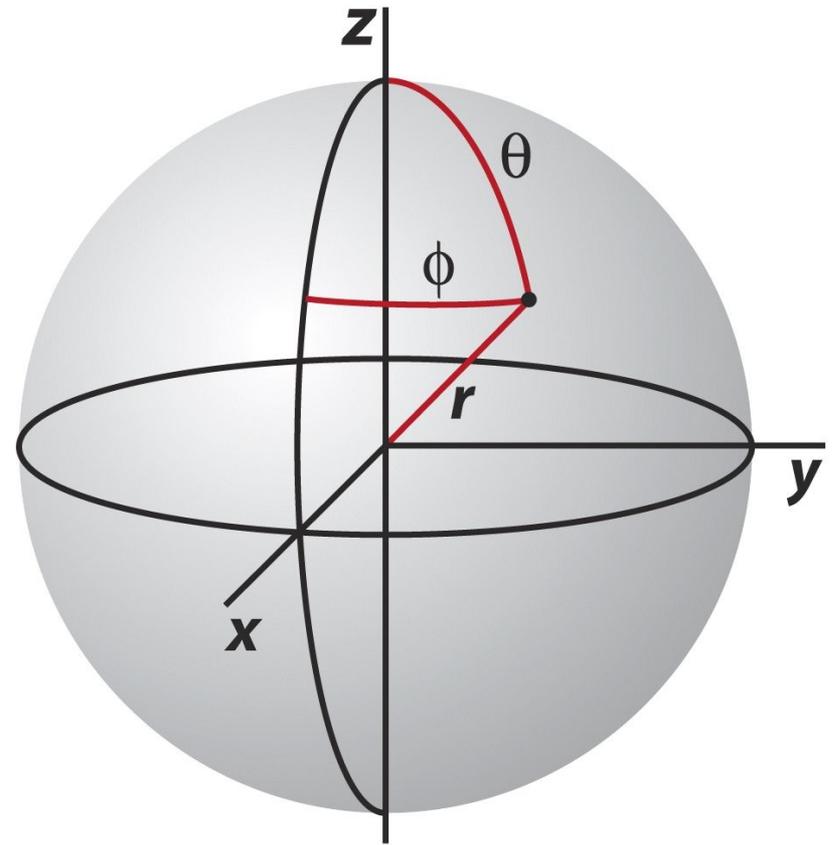
$$V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$$



O Átomo de Hidrogênio

Este potencial é **esféricamente simétrico**.

=> É mais prático usar coordenadas esféricas polares, r , θ , φ .



O Átomo de Hidrogênio

Agora o problema é **resolver a equação de Schrödinger** para o átomo de hidrogênio, ou seja, **encontrar as funções de onda $\psi(\mathbf{x})$** que satisfazem:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad \text{com } V(x) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0|x|$$

Após alguns passos de matemática complicada, encontra-se que as soluções, as funções de onda do elétron, são da forma

$$\psi(\mathbf{x}) := \psi_{nlm}(\mathbf{x}) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \text{onde}$$

$R_{nl}(r)$ **depende só de r ,**

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (= harmônicas esféricas) **só depende de θ e φ ,**

n, l, m são **números quânticos**, que caracterizam as funções de onda:

$n = 1, 2, 3, \dots$: número quântico **principal**

$l = 0, 1, \dots, n-1$: número quântico do **momento angular**, ou **secundário**

m (ou m_l) = $-l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$: número quântico **magnético**

O Átomo de Hidrogênio

As funções probabilidade de estadia do elétron P_{nlm} que correspondem às soluções n, l, m ,

$$P_{nlm}(\mathbf{x}) = |\psi_{nlm}(\mathbf{x})|^2,$$

são chamadas **orbitais**, e são o análogo quanto-mecânico das orbitas dos elétrons.

Como os orbitais têm valores > 0 para regiões 3-dimensionais em torno do núcleo, as distâncias que os elétrons têm do núcleo não são bem definidas. Só se pode determinar distâncias médias $\langle r \rangle$.

O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

1. o número quântica principal n

$n = 1, 2, 3, \dots$: determina a **energia** do elétron: $E_n = -(Z^2/n^2) \cdot E_0$,
onde E_0 = energia de Bohr.

As energias do Átomo de Hidrogênio mecanico-quântico são as mesmas do que no modelo de Bohr! Até bom, senão a mecânica quântica não conseguiria explicar o espectro de hidrogênio.

Todos as funções de onda com o **mesmo n** têm a **mesma energia E_n** (são n^2).

O conjunto das funções de onda com o mesmo n é se chama **camada**.

Deram letras às camadas.

Exemplo: Se diz que um elétron com $n=3$ encontra-se na camada M.

n	1	2	3	4	5	...
camada	K	L	M	N	O	...

O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

1. o número quântica principal n

n também é uma medida para a distância média $\langle r \rangle$ entre o elétron e o núcleo.

Esta é da ordem de $r_n = (n^2/Z) \cdot r_1$,

onde r_1 = raio de Bohr

As distâncias médias que os elétrons no Átomo de Hidrogênio mecanico-quântico têm do núcleo são da ordem dos raios das órbitas no modelo de Bohr!

O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

2. o número quântico do momento angular, ou secundário, l

$l = 0, 1, \dots, n-1$: determina o **momento angular** orbital do elétron:

$L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$, onde \hbar = constante de Planck reduzida

São quase os valores de Bohr, mas ao contrário do modelo de Bohr, não é o número quântico n que determina o momento angular.

As funções de onda com o

mesmo n e l são da mesma **subcamada**. Deram letras também.

l	0	1	2	3	4	5	...
subcamada	s	p	d	f	g	h	...

Exemplo: a subcamada com $n=3$, $l=2$ se chama $3d$.

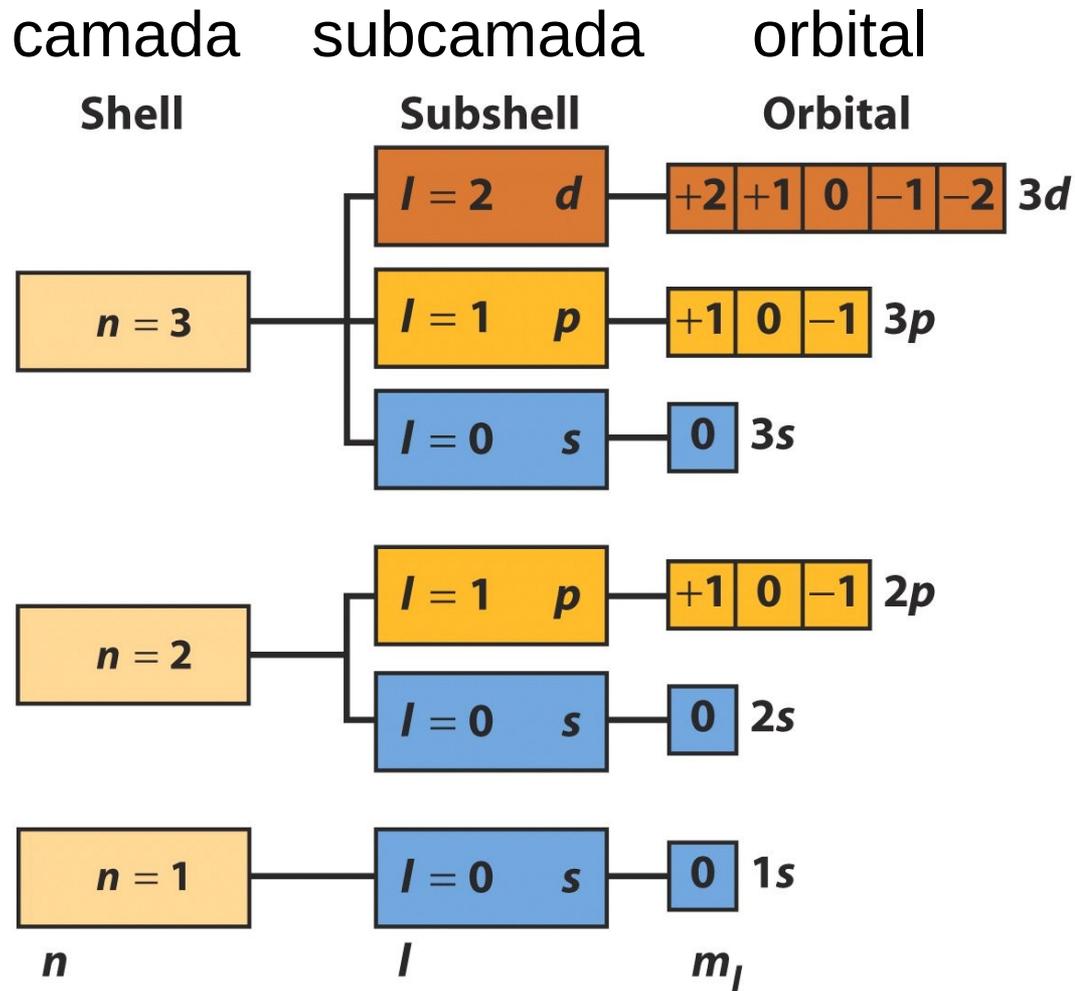
3. o número quântico magnético m (ou m_l)

m (ou m_l) = $-l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$: determina a componente z do momento angular: $L_z = m \cdot \hbar$.

Quanto maior $|m|$, tanto mais achatado é o orbital na direção dos z .

O Átomo de Hidrogênio

Resumo dos orbitais ($n = 1, 2, 3$)



O Átomo de Hidrogênio

Resumo dos orbitais ($n = 4$)

camada subcamada orbital

$n = 4$

4f	+3	+2	+1	0	-1	-2	-3
4d	+2	+1	0	-1	-2		
4p	+1	0	-1				
4s	0						16

etc.

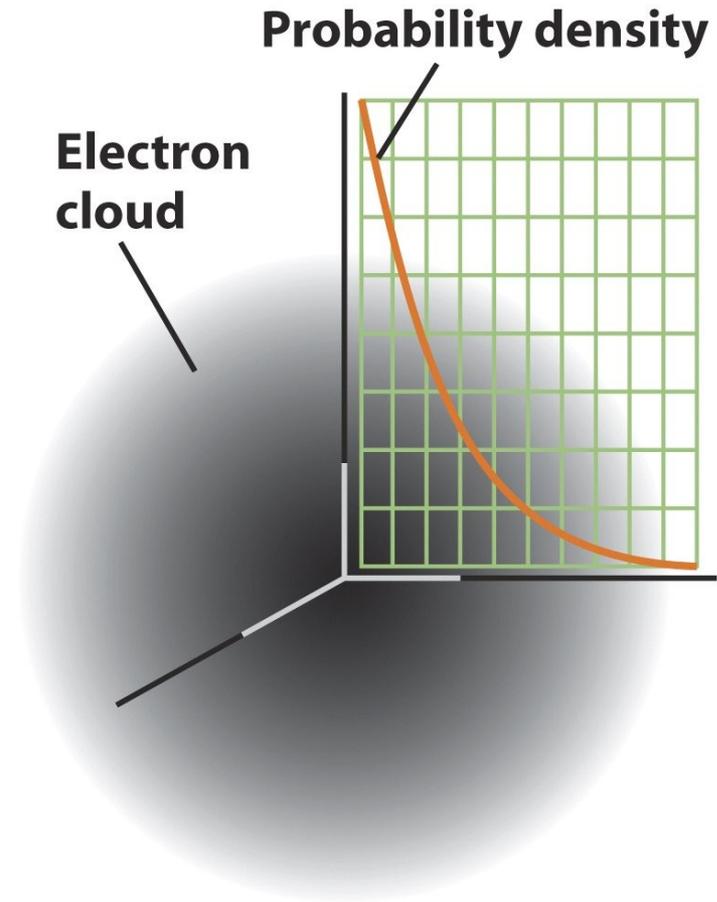
O Átomo de Hidrogênio

Os orbitais

O estado fundamental 1s: $n=1, l=m=0$

$$\Rightarrow E = -E_0, L = 0, \langle r \rangle = r_1$$

- Esfericamente simétrica
- A probabilidade de estadia do elétron cai exponencialmente com a distância do núcleo.



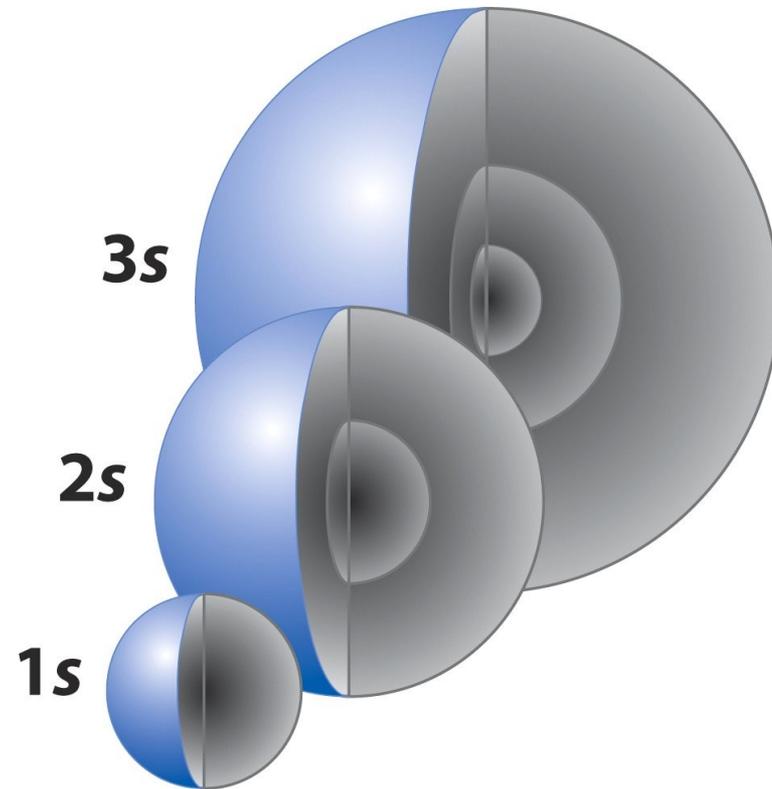
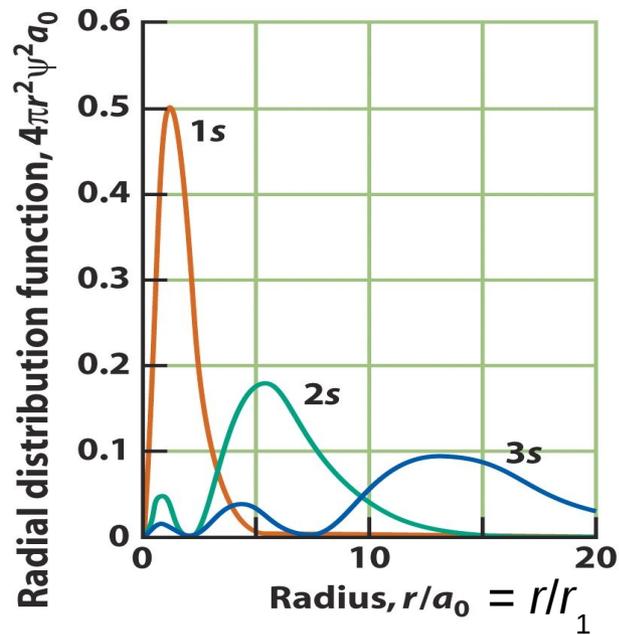
O Átomo de Hidrogênio

Os orbitais

Os outros orbitais s : $l=m=0$

$\Rightarrow L = 0$

- Esfericamente simétricas



O Átomo de Hidrogênio

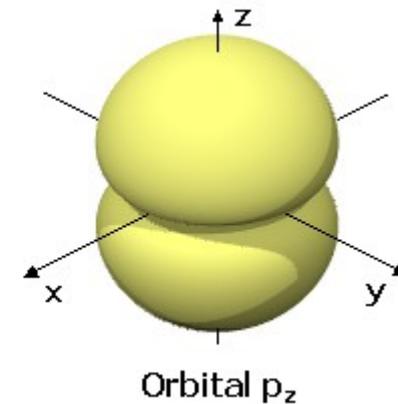
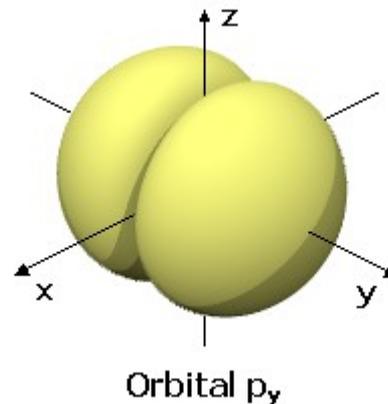
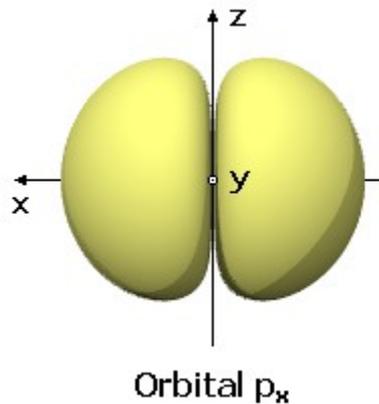
Os orbitais

Os orbitais p : $l=1$ (aqui $2p$)

$$\Rightarrow L = \sqrt{2} \cdot \hbar$$

- Formas de halteres

- existem 3 orbitais $2p$, já que há 3 valores de m possíveis:
 $m = -1, 0, 1$



O Átomo de Hidrogênio

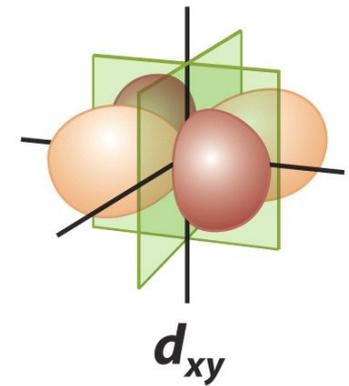
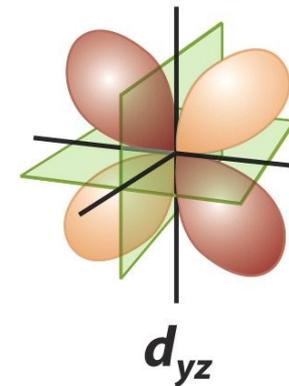
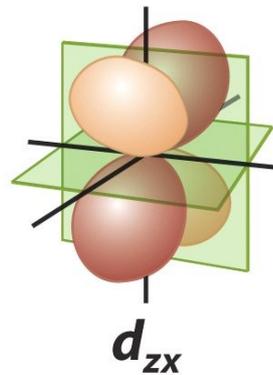
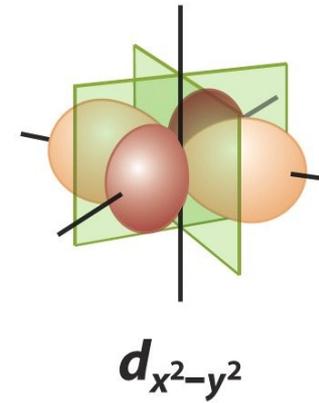
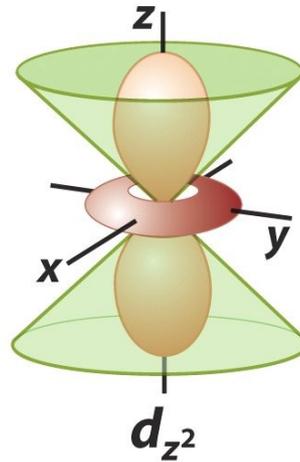
Os orbitais

Os orbitais d : $l=2$ (aqui $3d$)

$$\Rightarrow L = \sqrt{6} \cdot \hbar$$

- Existem 5

($m = -2, -1, 0, 1, 2$)



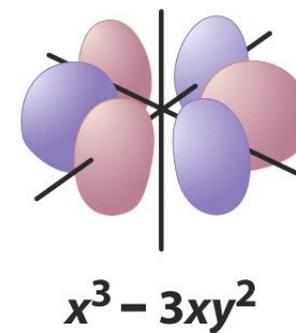
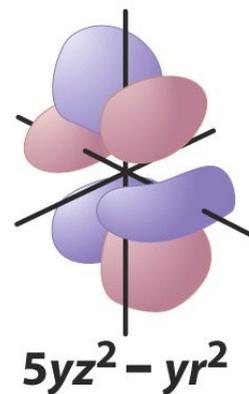
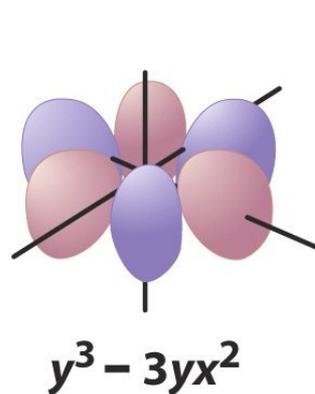
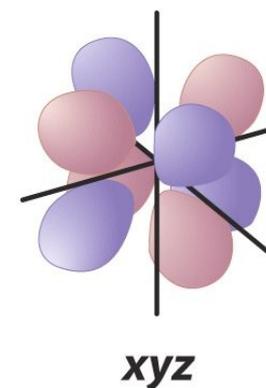
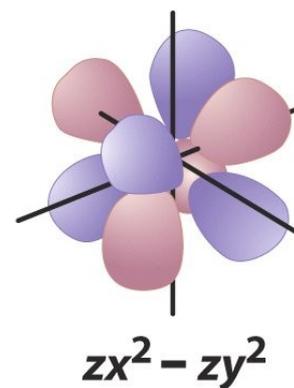
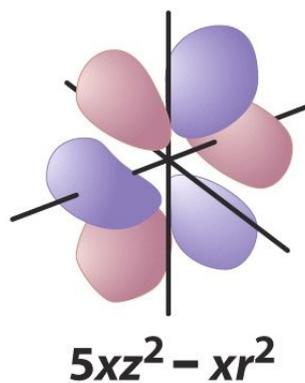
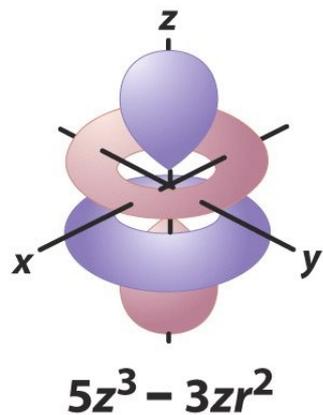
O Átomo de Hidrogênio

Os orbitais

Os orbitais f : $l=3$ (aqui $4f$)

$$\Rightarrow L = \sqrt{12} \cdot \hbar$$

- Existem 7
($m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$)



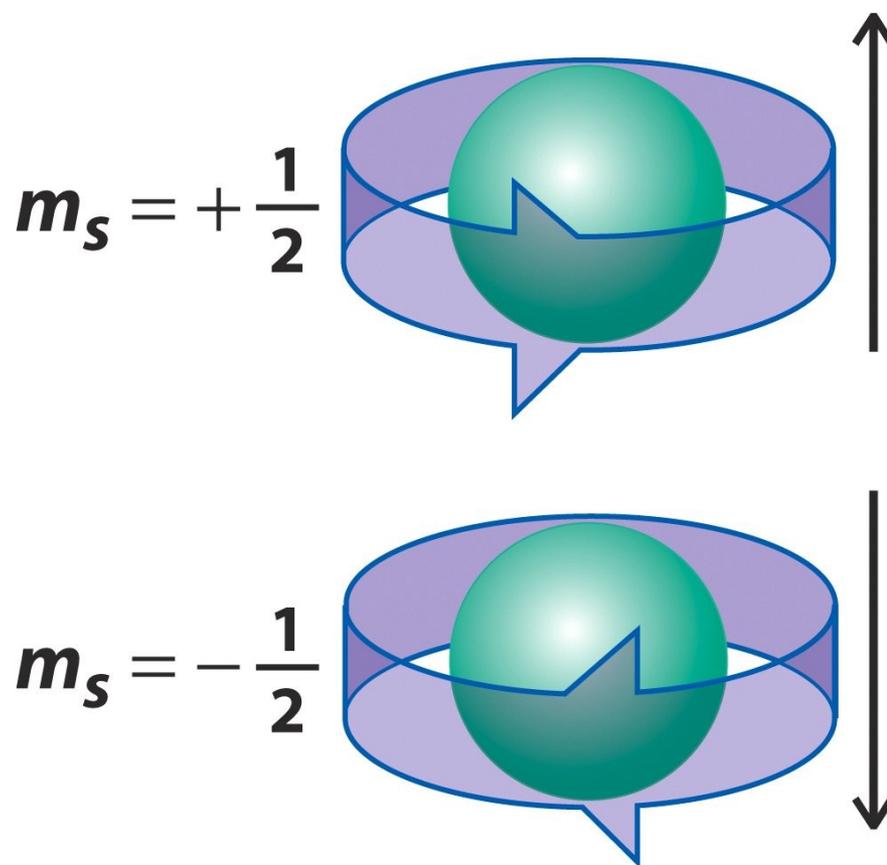
O Átomo de Hidrogênio

O spin do elétron

Os elétrons ainda têm um quarto número quântico, o número do **spin**, m_s , ou momento angular intrínseco (ao contrário do momento angular orbital),

ou seja, do momento angular da rotação do elétron em torno do próprio eixo, e não da revolução em torno do núcleo. (análogo à Terra no Sistema Solar)

O número quântico do spin de um elétron pode assumir apenas **dois valores**: $m_s = \frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$. Se diz: “spin pra cima” ou “spin pra baixo”.



O Átomo de Hidrogênio

O Estado fundamental do átomo de Hidrogênio

Resumo: O átomo de hidrogênio **normalmente** encontra-se no **estado fundamental**, quer dizer o estado de **menor energia**.

O único elétron está na camada 1s,
 $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, e seu spin é pra cima ou pra baixo,
 $m_s = \pm 1/2$ (tanto faz).

O Sistema periódico

E os outros átomos? Aqueles com mais de um elétron?

Como a camada K (=1s) é a camada de menor energia, será que todos os elétrons se encontram lá, alguns com spin pra cima e alguns com spin pra baixo?

Não, devido ao **princípio de exclusão de Pauli**, que diz que **cada estado quântico** n, l, m_l, m_s , pode ser ocupado por **apenas um elétron**.

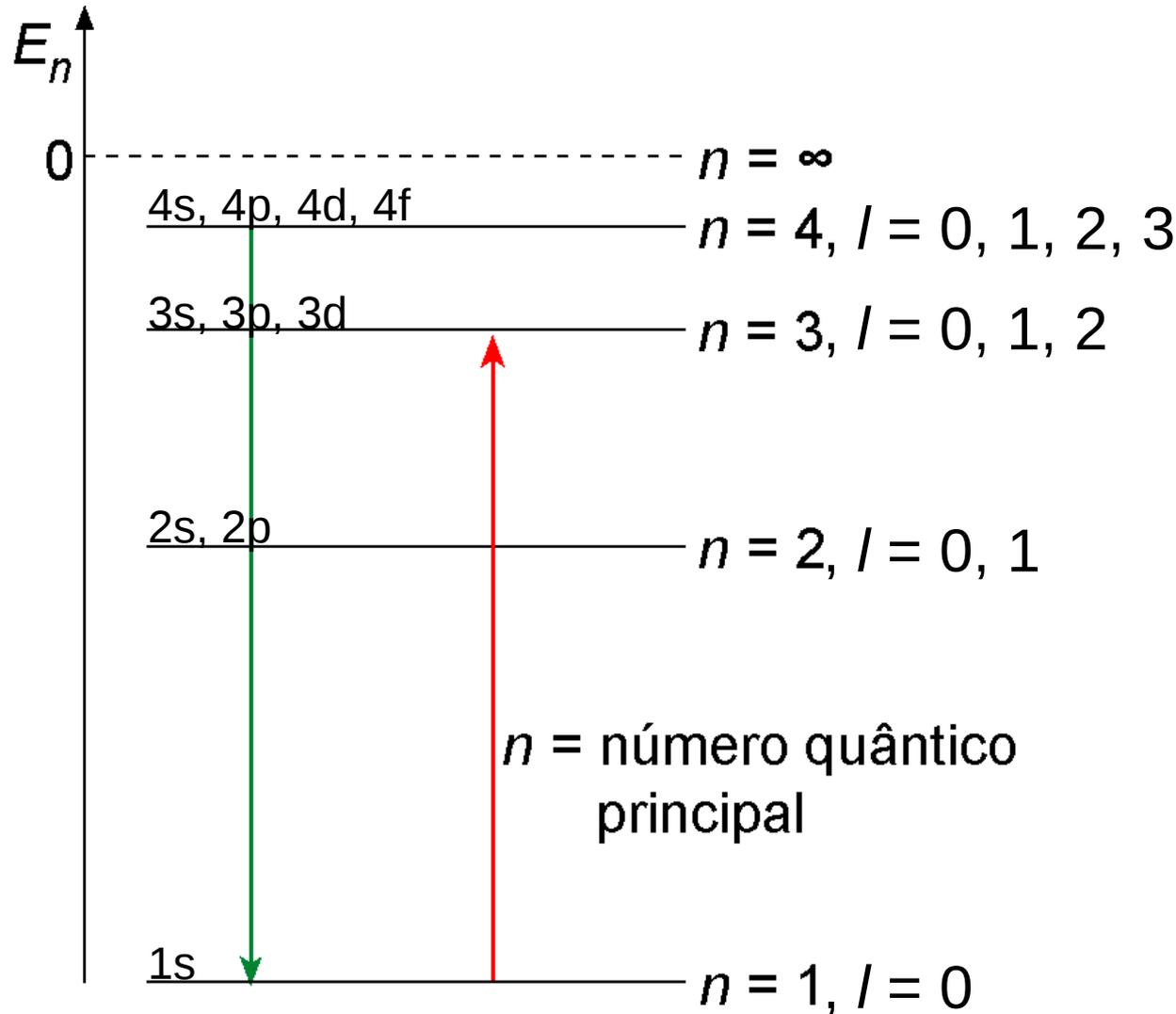
Ou seja: Cada orbital n, l, m_l pode conter só dois elétrons, um com spin pra cima e um com spin pra baixo.

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.

Quando se adiciona elétrons a um átomo, as camadas se enchem **de baixo pra cima**.

O Sistema periódico

Diagrama de energias de um átomo com um elétron



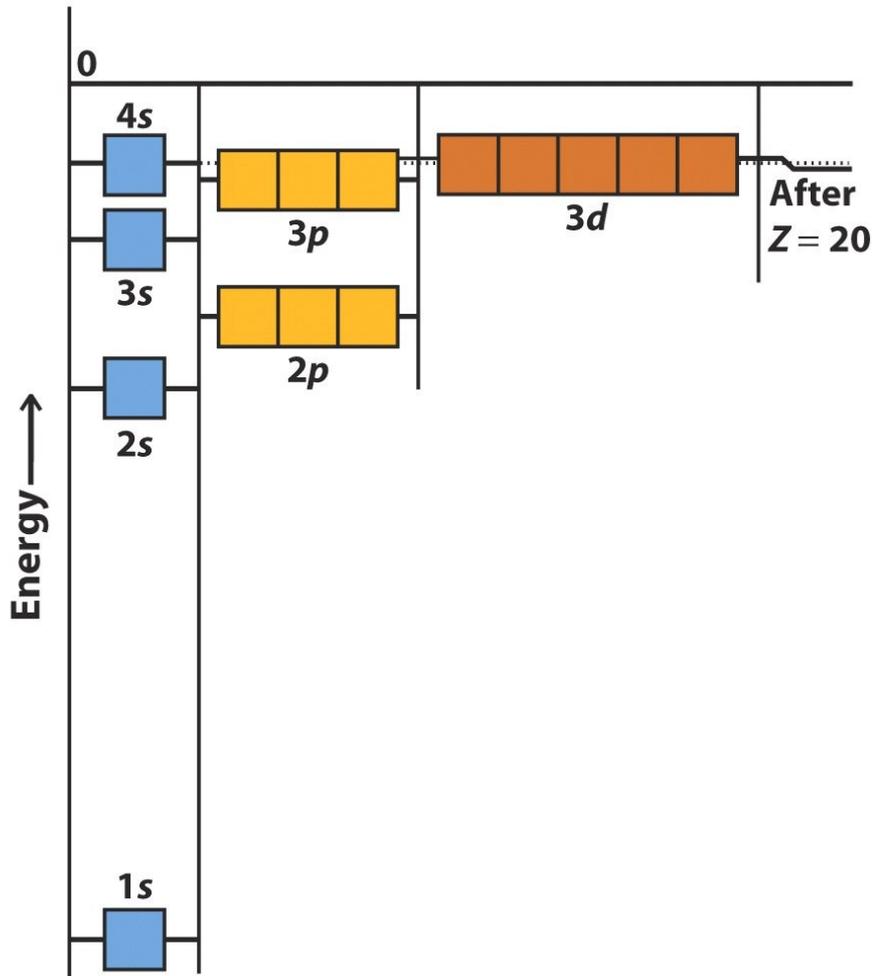
Num átomo com um elétron, todos os orbitais com o mesmo n têm a mesma energia. Os níveis de energia são degenerados.

Porém, quando há mais de um elétron, os elétrons se repelem entre si, o que modifica os níveis de energia.

=> Desdobramento de níveis de energia.

O Sistema periódico

Diagrama de energias em átomos multieletrônicos



Desdobramento de níveis de energia:

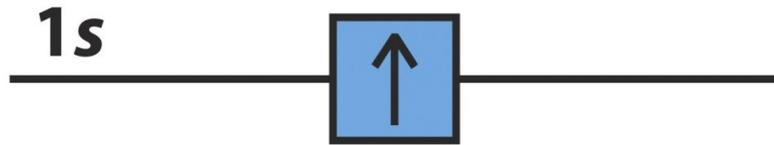
Em átomos multieletrônicos, para um dado n , as energias das subcamadas (dos orbitais com diferentes valores de l) aumentam quando l aumenta:

$$s < p < d < f.$$

Agora podemos “encher o sistema periódico”, ou seja, encher as camadas e subcamadas de elétrons de baixa pra cima, simbolizando os elétrons por flechas, \uparrow ou \downarrow , dependendo do spin.

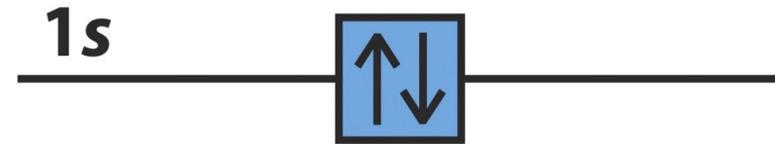
O Sistema periódico

Princípio da Construção (aumentando Z)



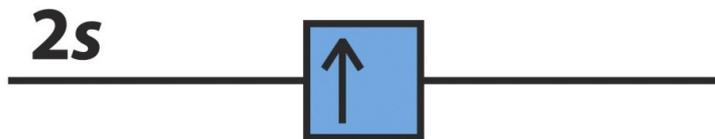
1 H $1s^1$

$Z=1$: Hidrogênio: 1 e^- na camada 1s, p. e. com spin pra cima



2 He $1s^2$

$Z=2$: Hélio: 2 e^- na camada 1s, um com spin pra cima, e um pra baixo



3 Li $1s^2 2s^1, [\text{He}] 2s^1$

$Z=3$: Lítio: 2 e^- na camada 1s, 1 na 2s



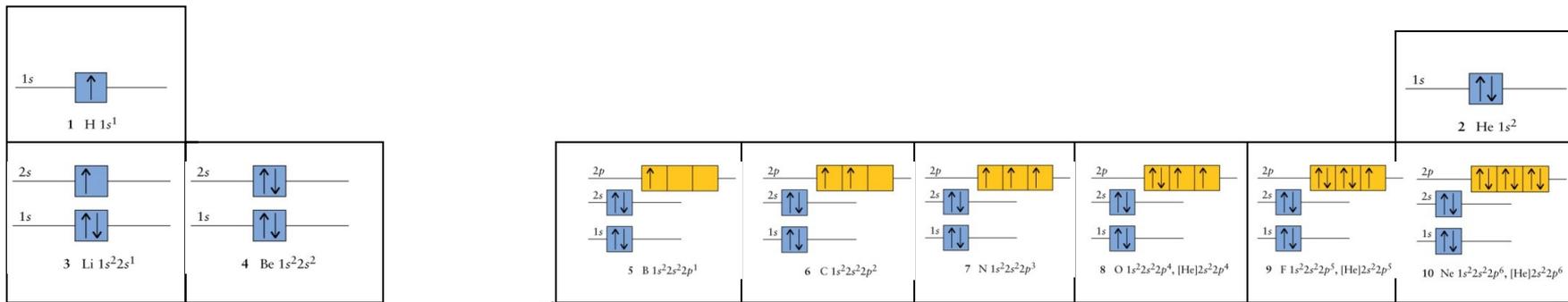
4 Be $1s^2 2s^2, [\text{He}] 2s^2$

$Z=4$: Berílio: 2 e^- na camada 1s, 2 na 2s

O Sistema periódico

Princípio da Construção (aumentando Z)

Continuando...



Regra de Hund (1927):

"Os elétrons são emparelhados com spins contrários."

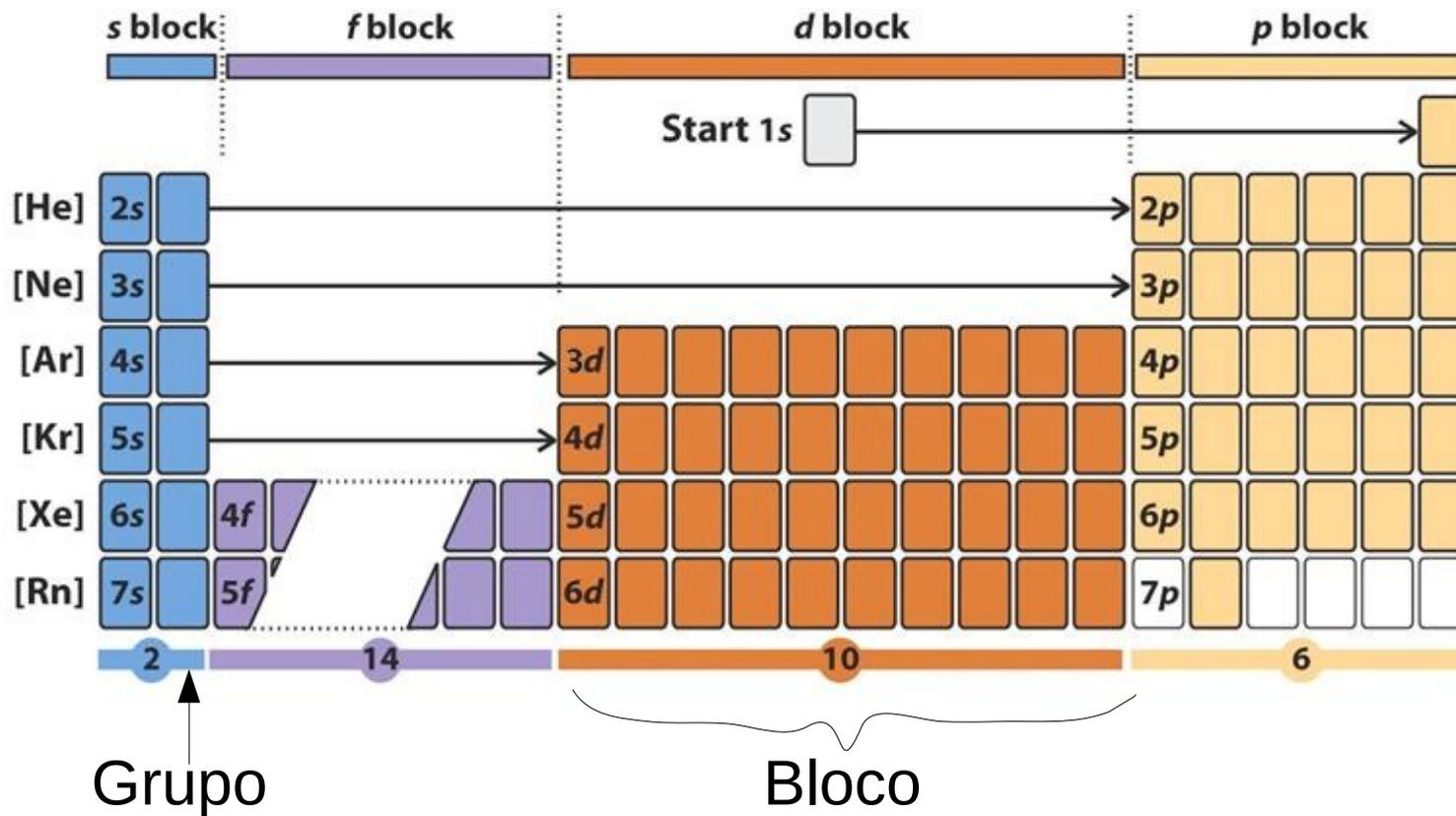
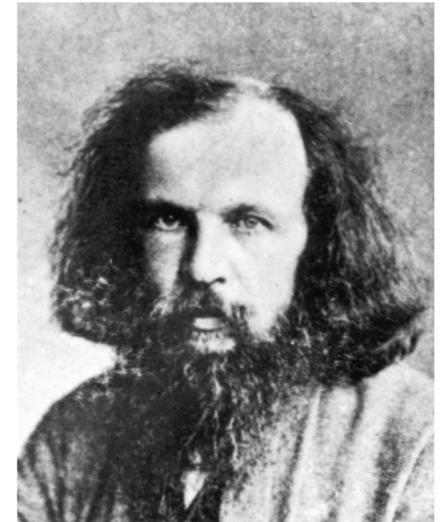
Ou seja, durante o preenchimento das orbitais de um mesmo nível energético, deve-se colocar em primeiro lugar em todas elas um só elétron, todos com o mesmo spin, antes de se proceder à lotação completa dessas orbitais. Os próximos elétrons a serem colocados deverão apresentar spins antiparalelos em relação aos já presentes.

O Sistema periódico

Princípio da Construção (aumentando Z)

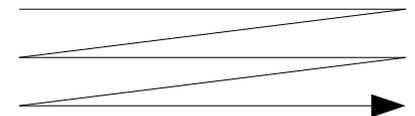
Continuando até o fim

=> A tabela periódica de Dimitri Ivanovich Mendeleev (1869)



← Período

Z aumenta:



O Sistema periódico

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** (da linha horizontal) é o **número quântico principal** da camada de valência. O número do **grupo** (coluna) está relacionado ao **número dos elétrons de valência**.

Elementos no **mesmo período** têm **números atômicos da mesma ordem**.

Elementos no **mesmo grupo** têm **propriedades químicas similares**, por terem o mesmo número de elétrons de valência ou de buracos na camada de valência (a última camada que contém elétrons).

O Sistema periódico

Tabela periódica atual www.iupac.org/reports/periodic_table/

IUPAC Periodic Table of the Elements

1																	18
1 H hydrogen 1.007 94(7)																	2 He helium 4.002 602(2)
3 Li lithium 6.941(2)	4 Be beryllium 9.012 182(3)											5 B boron 10.811(7)	6 C carbon 12.0107(8)	7 N nitrogen 14.0067(2)	8 O oxygen 15.9994(3)	9 F fluorine 18.998 4032(5)	10 Ne neon 20.1797(6)
11 Na sodium 22.989 770(2)	12 Mg magnesium 24.3050(6)											13 Al aluminium 26.981 538(2)	14 Si silicon 28.0855(3)	15 P phosphorus 30.973 761(2)	16 S sulfur 32.065(5)	17 Cl chlorine 35.453(2)	18 Ar argon 39.948(1)
19 K potassium 39.0983(1)	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.955 910(8)	22 Ti titanium 47.867(1)	23 V vanadium 50.9415(1)	24 Cr chromium 51.9961(6)	25 Mn manganese 54.938 049(9)	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933 200(9)	28 Ni nickel 58.6934(2)	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.409(4)	31 Ga gallium 69.723(1)	32 Ge germanium 72.64(1)	33 As arsenic 74.921 60(2)	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.4678(3)	38 Sr strontium 87.62(1)	39 Y yttrium 88.905 85(2)	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906 38(2)	42 Mo molybdenum 95.94(2)	43 Tc technetium [98]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.905 50(2)	46 Pd palladium 106.42(1)	47 Ag silver 107.8682(2)	48 Cd cadmium 112.411(8)	49 In indium 114.818(3)	50 Sn tin 118.710(7)	51 Sb antimony 121.760(1)	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.904 47(3)	54 Xe xenon 131.293(6)
55 Cs caesium 132.905 45(2)	56 Ba barium 137.327(7)	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.9479(1)	74 W tungsten 183.84(1)	75 Re rhenium 186.207(1)	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.217(3)	78 Pt platinum 195.078(2)	79 Au gold 196.966 55(2)	80 Hg mercury 200.59(2)	81 Tl thallium 204.3833(2)	82 Pb lead 207.2(1)	83 Bi bismuth 208.980 38(2)	84 Po polonium [209]	85 At astatine [210]	86 Rn radon [222]
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium [261]	105 Db dubnium [262]	106 Sg seaborgium [266]	107 Bh bohrium [264]	108 Hs hassium [277]	109 Mt meitnerium [268]	110 Ds darmstadtium [271]	111 Rg roentgenium [272]							
		57 La lanthanum 138.9055(2)	58 Ce cerium 140.116(1)	59 Pr praseodymium 140.907 85(2)	60 Nd neodymium 144.24(3)	61 Pm promethium [145]	62 Sm samarium 150.36(3)	63 Eu europium 151.964(1)	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.925 34(2)	66 Dy dysprosium 162.500(1)	67 Ho holmium 164.930 32(2)	68 Er erbium 167.259(3)	69 Tm thulium 168.934 21(2)	70 Yb ytterbium 173.04(3)	71 Lu lutetium 174.967(1)	
		88 Ac actinium [227]	90 Th thorium 232.0381(1)	91 Pa protactinium 231.036 88(2)	92 U uranium 238.028 91(3)	93 Np neptunium [237]	94 Pu plutonium [244]	95 Am americium [243]	96 Cm curium [247]	97 Bk berkelium [247]	98 Cf californium [251]	99 Es einsteinium [252]	100 Fm fermium [257]	101 Md mendelevium [258]	102 No nobelium [259]	103 Lr lawrencium [262]	



Notes

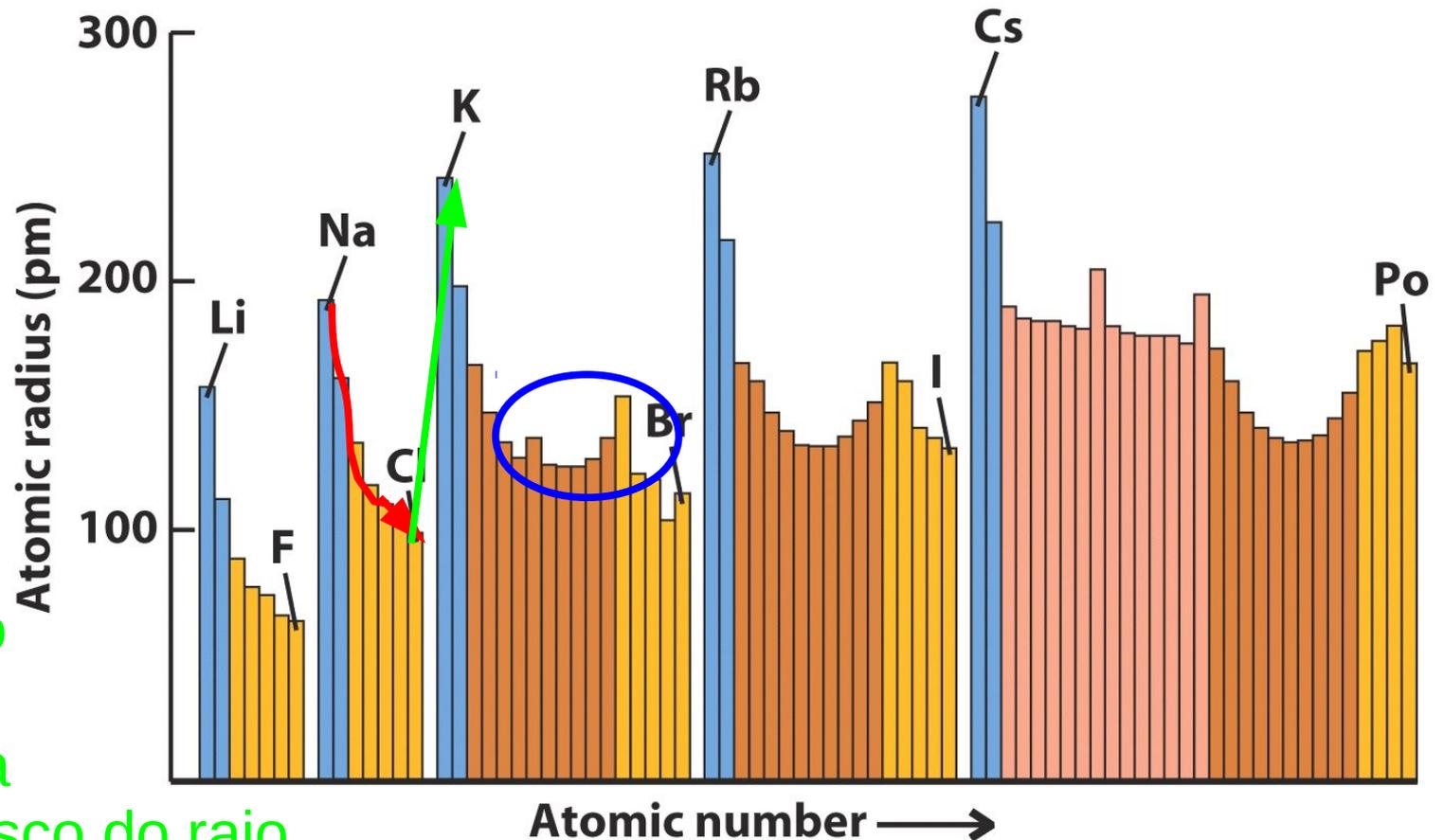
- "Aluminium" and "caesium" are commonly used alternative spellings for "aluminum" and "cesium."
- IUPAC 2001 standard atomic weights (mean relative atomic masses) are listed with uncertainties in the last figure in parentheses [R. D. Loss, *Pure Appl. Chem.* 75, 1107-1122 (2003)]. These values correspond to current best knowledge of the elements in natural terrestrial sources. For elements that have no stable or long-lived nuclides, the mass number of the nuclide with the longest confirmed half-life is listed between square brackets.
- Elements with atomic numbers 112, 113, 114, 115, and 116 have been reported but not fully authenticated.

O Sistema periódico

Raio Atômico em função do Número Atômico Z

Z aumenta
=> carga do núcleo aumenta
=> Os elétrons são atraídos mais fortemente
=> raio diminui

Quando uma camada está cheia, o próximo elétron vai pra próxima camada
=> aumento brusco do raio



As subestruturas surgem devido às subcamadas.

O Sistema periódico

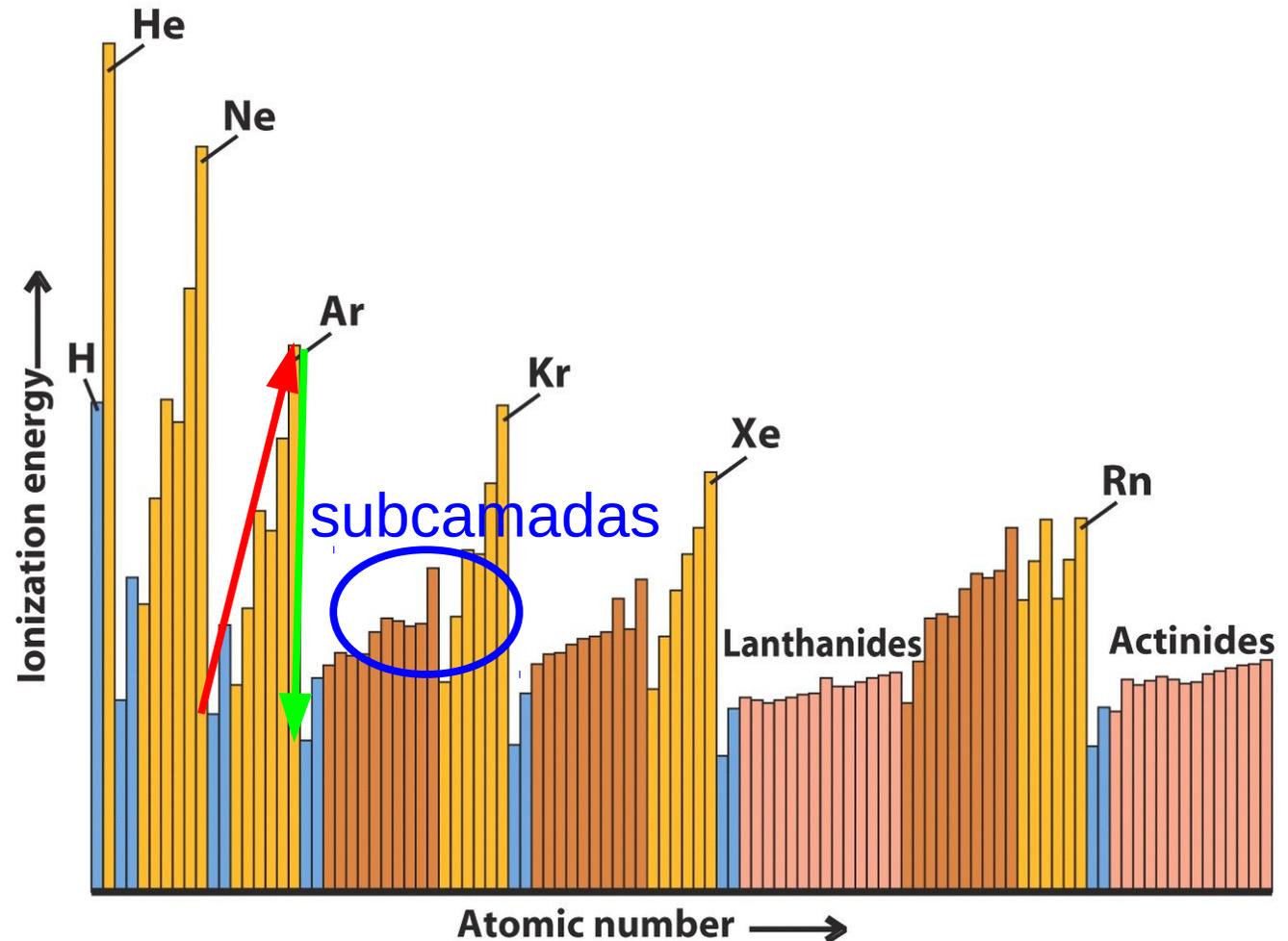
Energia de Ionização em função do Número Atômico Z

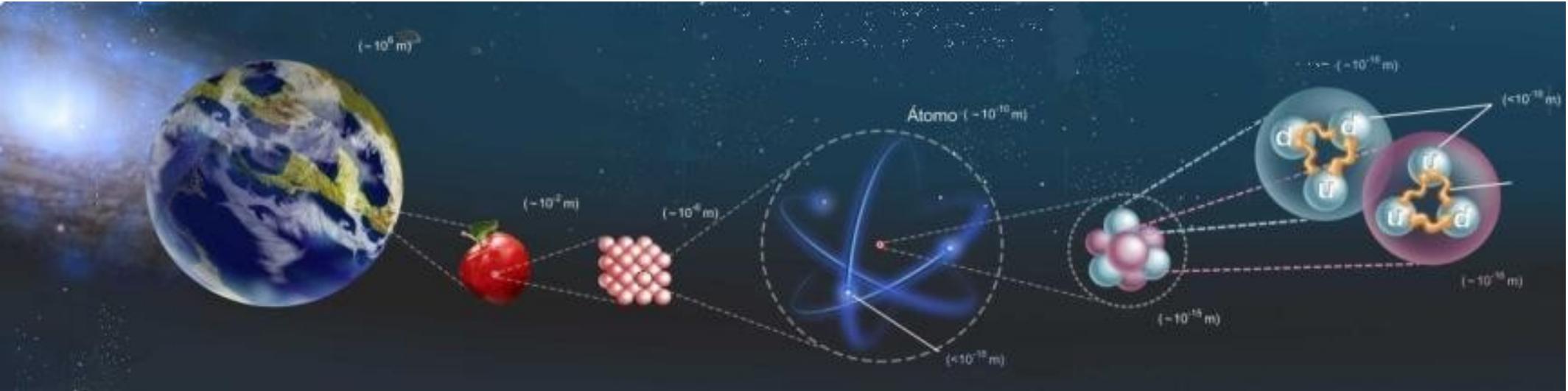
Z aumenta
=> carga do núcleo aumenta
=> Os elétrons são atraídos mais fortemente
=> E_i aumenta

Quando uma camada está cheia, o próximo elétron vai pra próxima camada

=> muito menos fortemente ligado => Queda brusca de E_i

=> Anti-correlação entre raio atômico e energia de ionização.





Universidade Federal do ABC

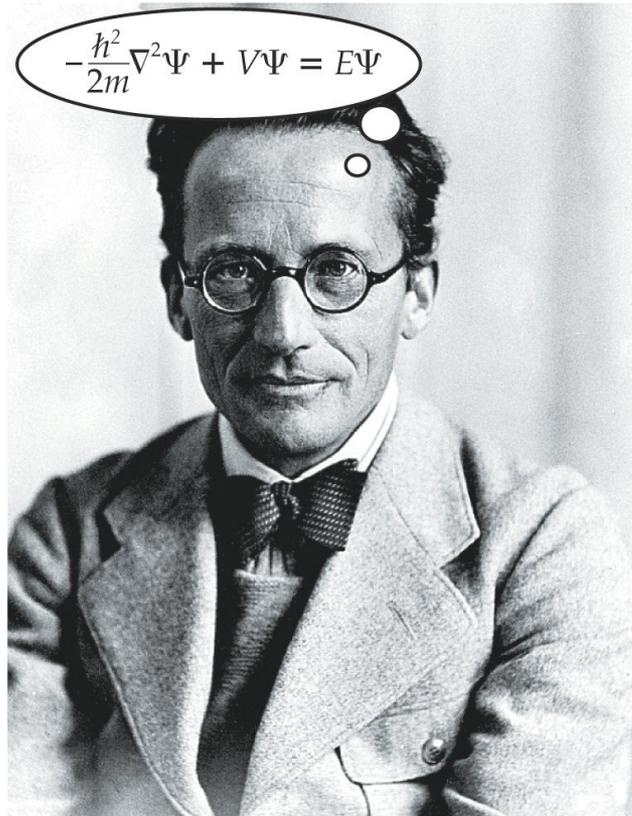
Estrutura da Matéria

FIM pra hoje

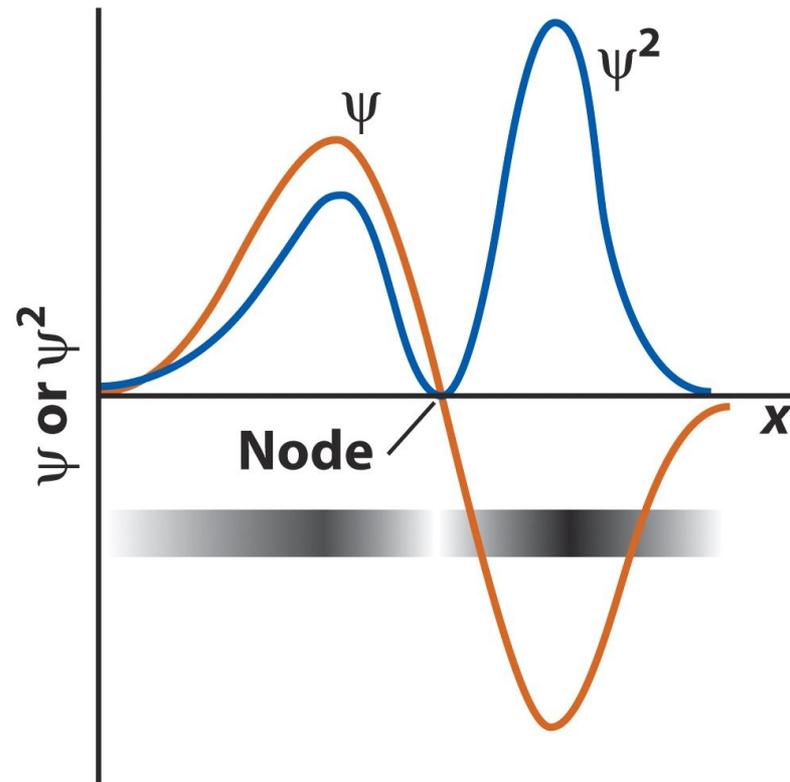
<https://sites.google.com/site/estruturabc0102/>

O Átomo de Hidrogênio

O Que a função de onda do elétron quer dizer?



Erwin Schrödinger



O Átomo de Hidrogênio

Soluções para o átomo de Hidrogênio

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 (2px, 2py, 2pz)
		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 (3px, 3py, 3pz)
		0	$\psi_{3,1,0}$	
		+1	$\psi_{3,1,1}$	
	2	-2	$\psi_{3,2,-2}$	3d (3d_{xy}, 3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz}, 3d_{z²})
		-1	$\psi_{3,2,-1}$	
0		$\psi_{3,2,0}$		
+1		$\psi_{3,2,1}$		
+2	$\psi_{3,2,2}$			

O Átomo de Hidrogênio

Soluções para o átomo de Hidrogênio

$$E = - \frac{hW}{n^2}$$

$$\Omega = \frac{m_e e^4}{8h^3 e_0^2}$$

O Átomo de Hidrogênio

Orbitais atômicos

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

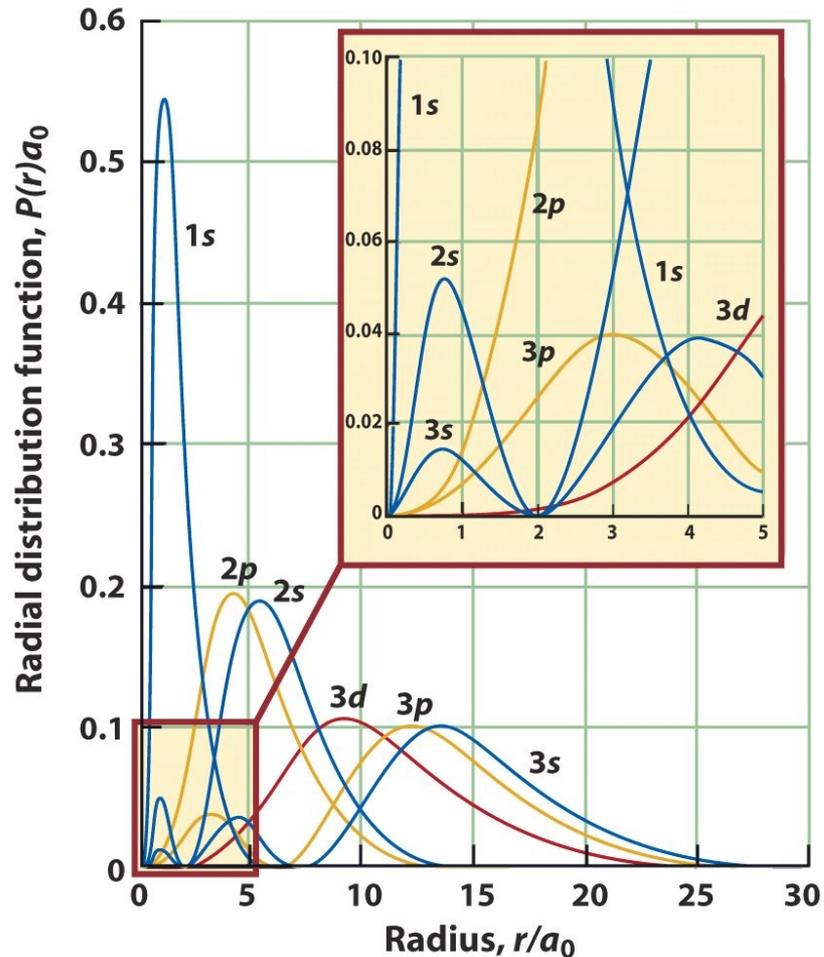
(a) Radial wavefunctions, $R_{nl}(r)$			(b) Angular wavefunctions, $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$		
n	l	$R_{nl}(r)$	l	" m_l "*	$Y_{lm_l}(\theta, \phi)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$	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 .

O Átomo de Hidrogênio

Distribuição Radial dos Orbitais s , p e d e Carga Nuclear Efetiva



$$E \propto - \frac{Z_{ef} h W}{n^2}$$

O Átomo de Hidrogênio

TABLE 1.3 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

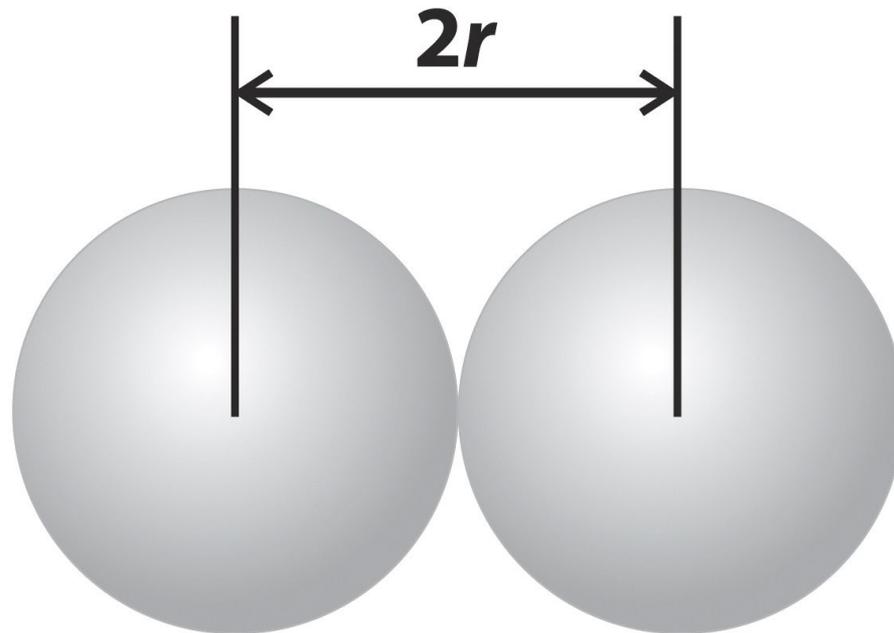
*Also called the *azimuthal quantum number*.

Exercícios

1. Aponte uma razão para o aumento de Z_{ef} ser menor para um elétron 2p entre N e O do que entre C e N, dado que as configurações dos três átomos são C: $[\text{He}]2s^2 2p^2$, N: $[\text{He}]2s^2 2p^3$ e O: $[\text{He}]2s^2 2p^4$.
2. Dê as configurações eletrônicas do estado fundamental do átomo de Ti e do íon Ti^{3+} .

Propriedades Periódicas

Raio Atômico



11 Atomic radius

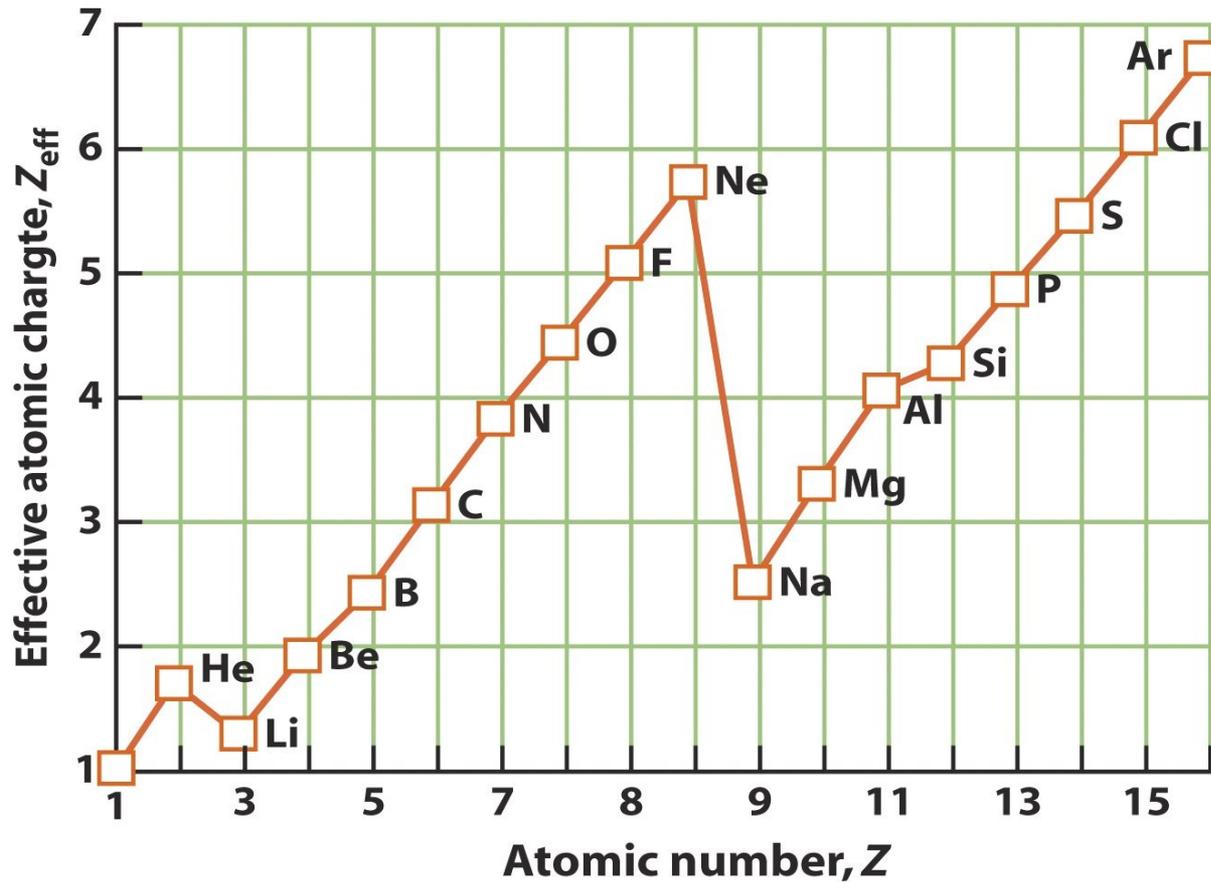
Propriedades Periódicas

Raio Atômico



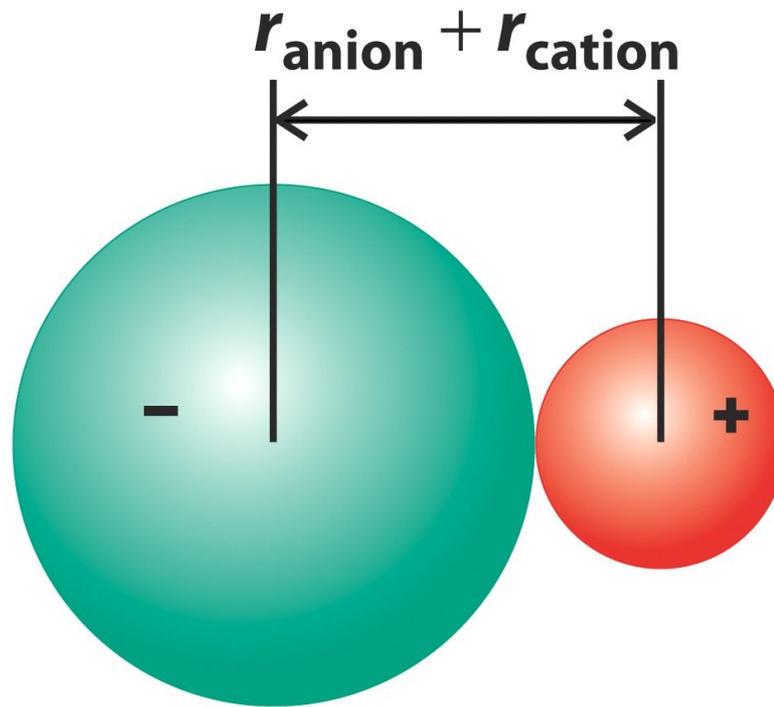
Propriedades Periódicas

Carga Efetiva



Propriedades Periódicas

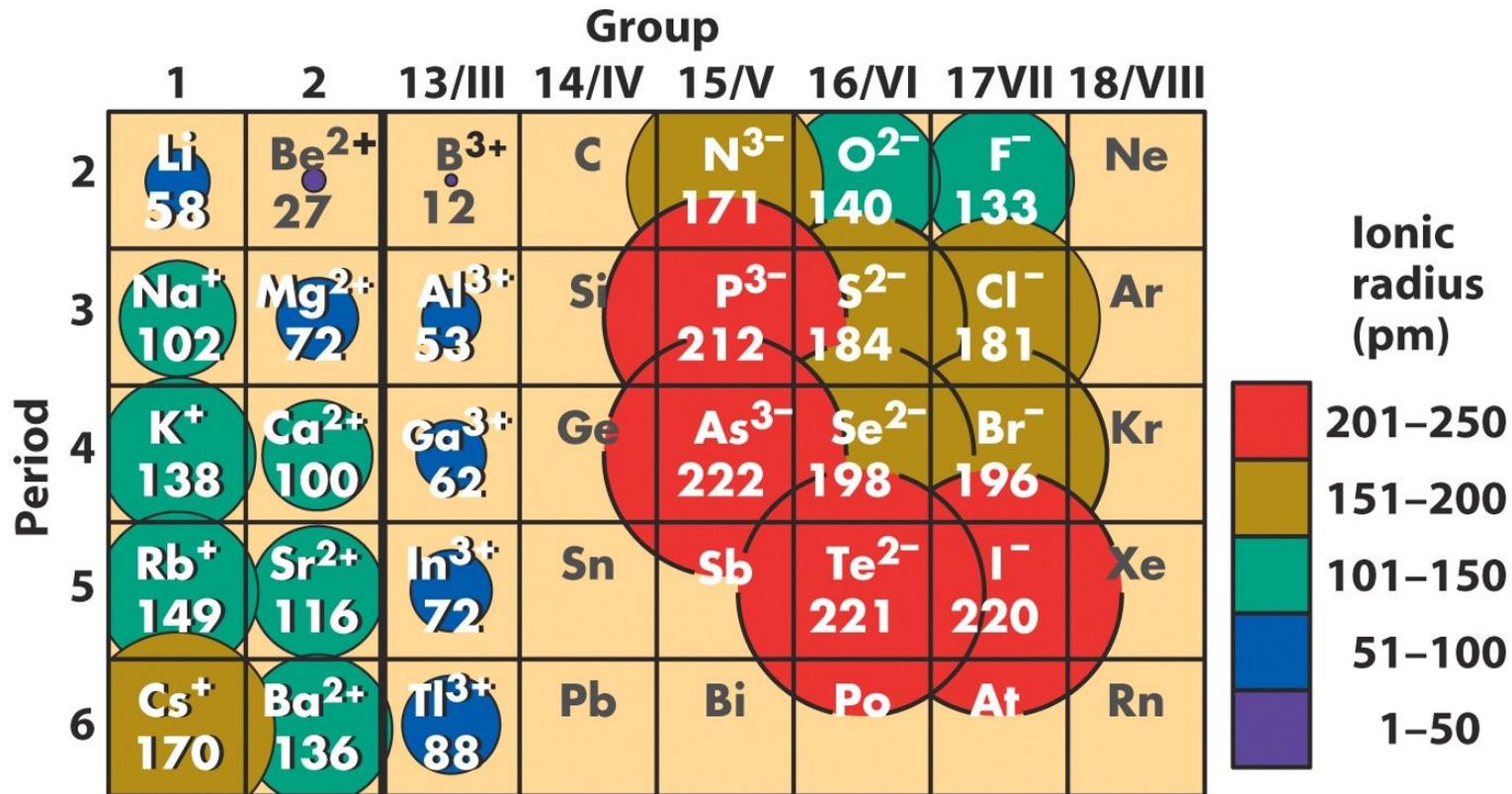
Raio Iônico



12 Ionic radius

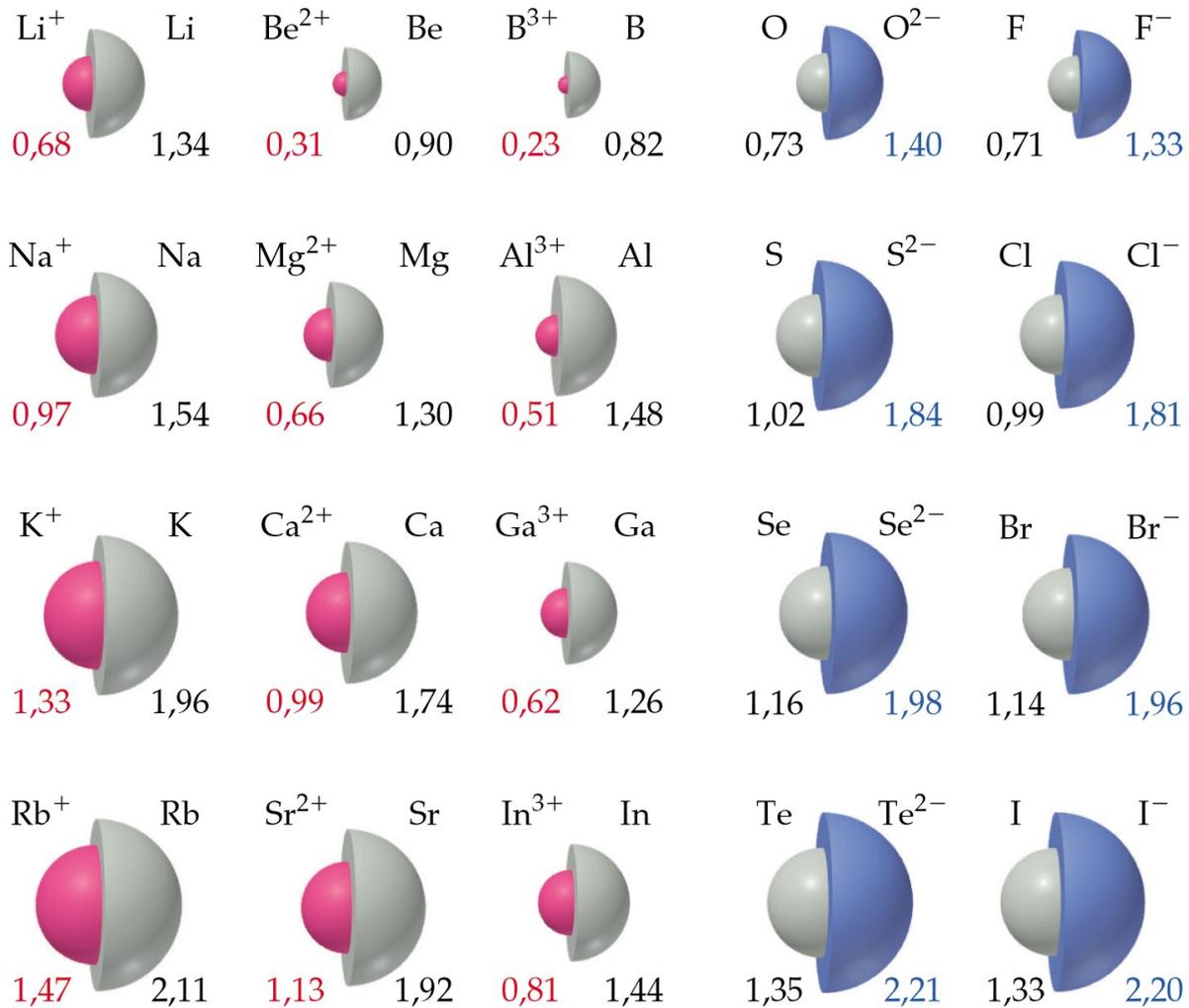
Propriedades Periódicas

Raio Iônico



Propriedades Periódicas

Raio Iônico



Exercício

3. Arranje cada um dos seguintes pares de íons na ordem crescente do raio iônico: (a) Mg^{2+} e Ca^{2+} ; (b) O^{2-} e F^- .

Propriedades Periódicas

Energia de Ionização

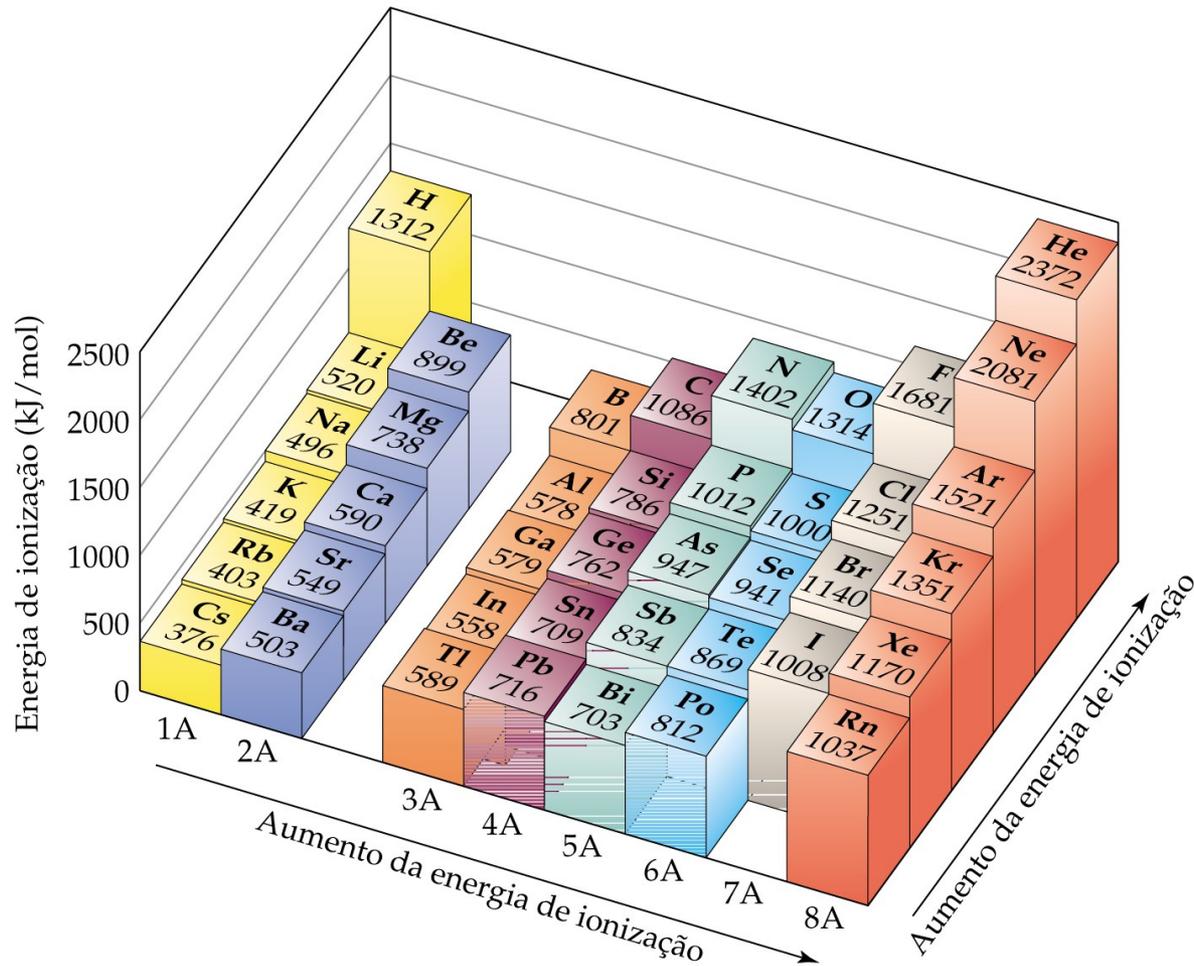
		Group							18/VIII
		1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	
		<div style="display: flex; justify-content: space-between; align-items: center;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; background-color: #008080; color: white;"> H 1310 </div> <div style="border-top: 1px solid black; width: 300px;"></div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; background-color: #ff0000; color: white;"> He 2370 </div> </div>							
Period	2	Li 519	Be 900	B 799	C 1090	N 1400	O 1310	F 1680	Ne 2080
3	Na 494	Mg 736	Al 577	Si 786	P 1011	S 1000	Cl 1255	Ar 1520	
4	K 418	Ca 590	Ga 577	Ge 784	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1350	
5	Rb 402	Sr 548	In 556	Sn 707	Sb 834	Te 870	I 1008	Xe 1170	
6	Cs 376	Ba 502	Tl 590	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 1037	Rn 1036	

Ionization energy (kJ·mol⁻¹)

- 2001–2500
- 1501–2000
- 1001–1500
- 501–1000
- 1–500

Propriedades Periódicas

Energia de Ionização



Propriedades Periódicas

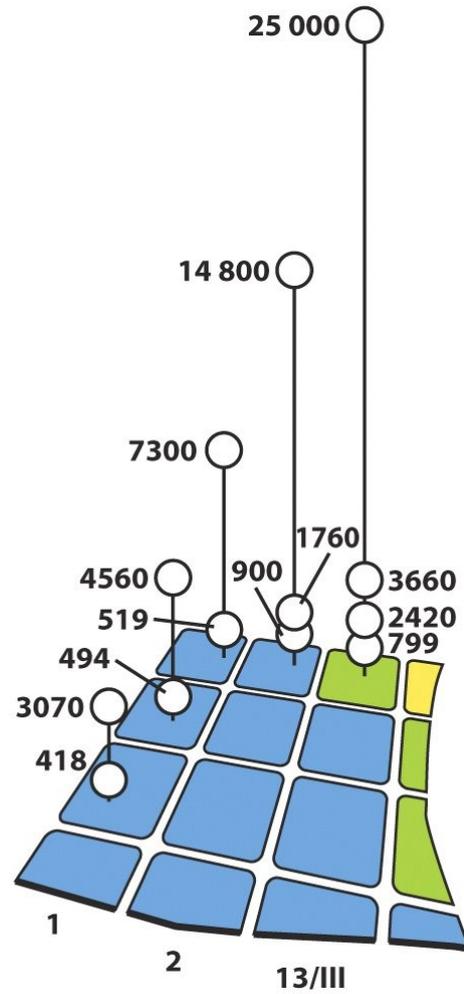
Energia de Ionização

TABELA 7.2 Valores das energias de ionização sucessivas, I , para os elementos do sódio até o argônio (kJ/mol)

Elemento	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	
Na	496	4.560	elétrons dos níveis mais internos					
Mg	738	1.450	7.730					
Al	578	1.820	2.750	11.600				
Si	786	1.580	3.230	4.360	16.100			
P	1.012	1.900	2.910	4.960	6.270	22.200		
S	1.000	2.250	3.360	4.560	7.010	8.500	27.100	
Cl	1.251	2.300	3.820	5.160	6.540	9.460	11.000	
Ar	1.521	2.670	3.930	5.770	7.240	8.780	12.000	

Propriedades Periódicas

Energia de Ionização



Exercício

4. Justifique o decréscimo na primeira energia de ionização entre o fósforo e o enxofre.

Propriedades Periódicas

Afinidade Eletrônica

É a variação da entalpia padrão por mol de átomos quando um átomo na fase gasosa ganha um elétron.

		Group							18/VIII
		1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	He
						H +73			<0
2		Li +60	Be ≤0	B +27	C +122	N -7	O +141 -844	F +328	Ne <0
3		Na +53	Mg ≤0	Al +43	Si +134	P +72	S +200 -532	Cl +349	Ar <0
4		K +48	Ca +2	Ga +29	Ge +116	As +78	Se +195	Br +325	Kr <0
5		Rb +47	Sr +5	In +29	Sn +116	Sb +103	Te +190	I +295	Xe <0
6		Cs +46	Ba +14	Tl +19	Pb +35	Bi +91	Po +174	At +270	Rn <0

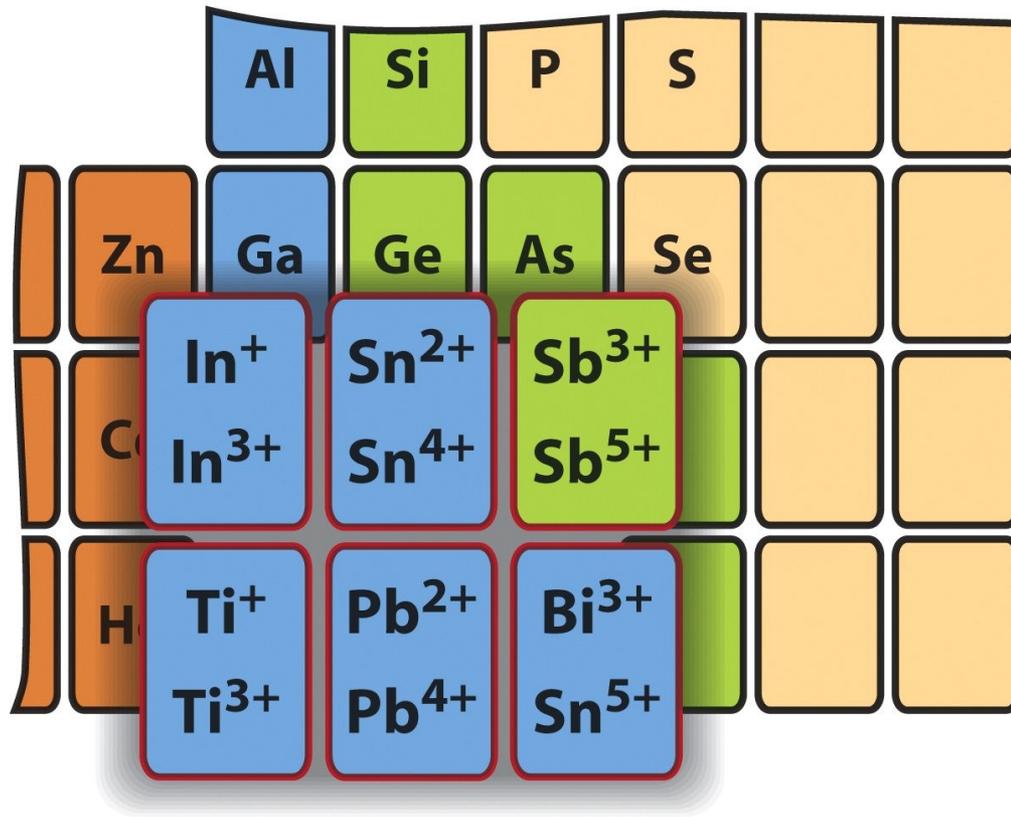
Electron affinity (kJ·mol⁻¹)

- >300
- 200-300
- 100-200
- 0-100
- <0

Propriedades Periódicas

Efeito do Par Inerte

A tendência a formar íons com carga duas unidades mais baixa do que a esperada para o número do grupo.



Propriedades Periódicas

Impacto das Propriedades Periódicas sobre os Materiais

CARACTERÍSTICAS DOS METAIS E NÃO-METAIS	
Metais	Não-Metais
Propriedades Físicas	
Bons condutores de eletricidade	Maus condutores de eletricidade
Maleáveis	Não Maleáveis
Dúcteis	Não Dúcteis
Lustrosos	Não Lustrosos
Tipicamente:	Tipicamente:
Sólido	Sólido, líquido ou gás
Alto ponto de fusão	Baixos pontos de fusão
Bons condutores de calor	Maus condutores de calor
Propriedades Químicas	
Reagem com ácidos	Não reagem com ácidos
Formam óxidos básicos	Formam óxidos ácidos
Formam cátions	Formam ânions
Formam halogenetos iônicos	Formam halogenetos covalentes

Propriedades Periódicas

Tabela Periódica

The diagram illustrates the periodic table with the following structure:

- Period number:** 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 (vertical labels on the left).
- Group number:** 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13/III, 14/IV, 15/V, 16/VI, 17/VII, 18/VIII (horizontal labels at the top).
- Alkali metals:** Group 1 (blue blocks).
- Alkaline earth metals:** Group 2 (blue blocks).
- Transition metals:** Groups 3-10 (orange blocks).
- Lanthanides:** A row of 14 purple blocks below the main table, connected to the bottom of the first two columns.
- Actinides:** A row of 14 purple blocks below the Lanthanides, connected to the bottom of the first two columns.
- Halogens:** Group 17 (yellow blocks).
- Noble gases:** Group 18 (yellow blocks).
- Hydrogen:** A single yellow block in the top row, connected to the noble gas column by a horizontal line.

Princípios gerais de mecânica quântica (revisão)

·Feynman Lectures, Cap. 3, Vol III

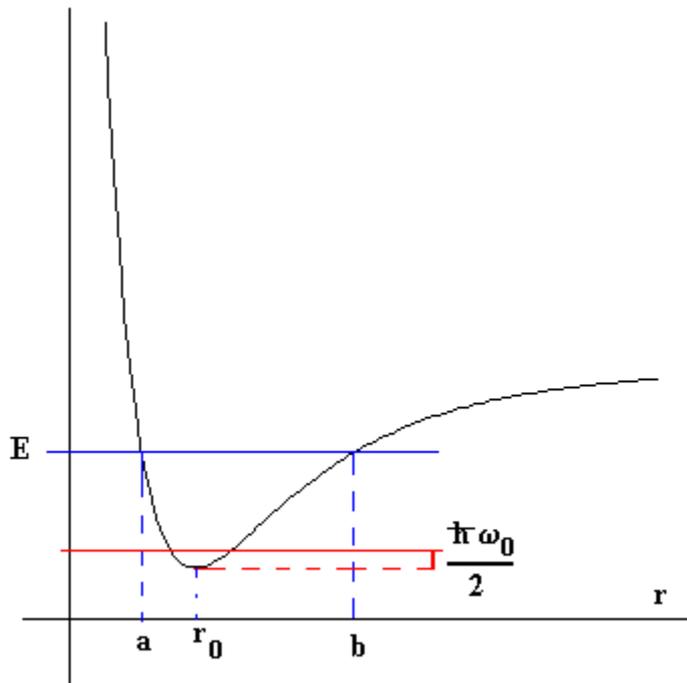
·1. A probabilidade de um evento ocorrer pode ser representada quantitativamente pelo valor absoluto de um número complexo, chamado de amplitude de probabilidade.

·2. Quando houver mais de uma maneira de um evento ocorrer, a amplitude de probabilidade é a soma da amplitude de cada uma das possíveis maneiras.

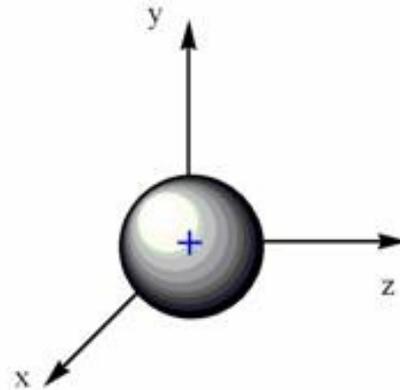
·3. A amplitude de um evento pode ser escrita como o produto de amplitudes de eventos intermediários. Por exemplo: a amplitude, A_{31} , de uma partícula chegar na posição 3 a partir da posição 1, tendo passado pela posição 2 será $A_{31} = A_{32} A_{21}$

·4. Se duas partículas não interagem, a amplitude total é o produto das amplitudes individuais.

Orbitais Atômicos



Orbitais s ($l = 0$):
esfericamente simétricos



Orbitais p ($l = 1$):

