

# Física Quântica

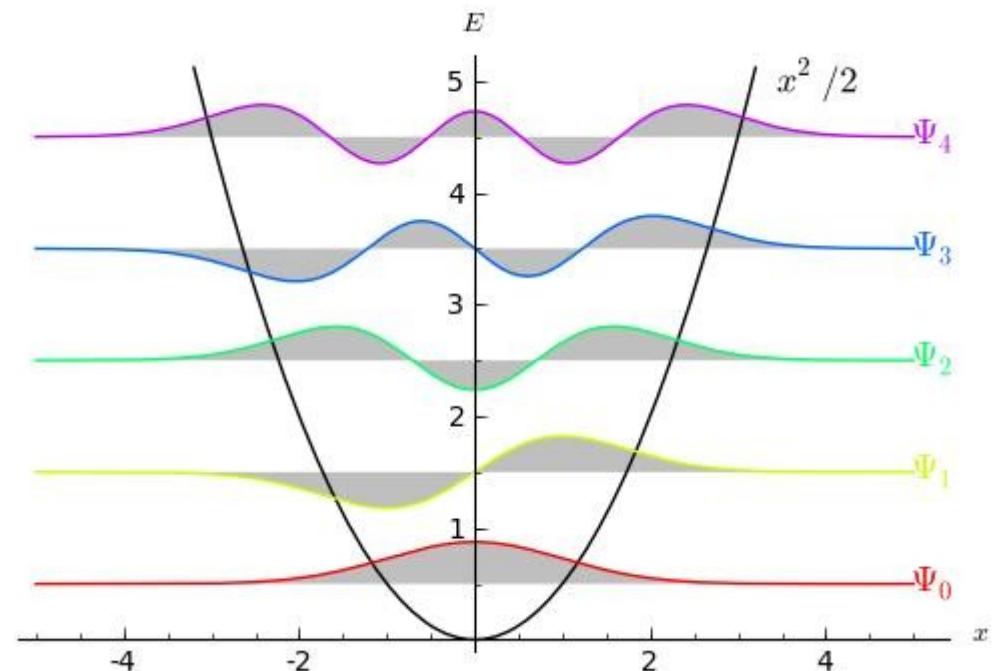
## Aula 12: Sistema Periódico

Pieter Westera

[pieter.westera@ufabc.edu.br](mailto:pieter.westera@ufabc.edu.br)



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>

# Átomos Multi-Eletrônicos

A meta desta aula é determinar a **configuração eletrônica** dos elementos no seu **estado atômico “normal”** em função do **número atômico  $Z$** .

O número atômico é o **número de prótons** no **núcleo**.

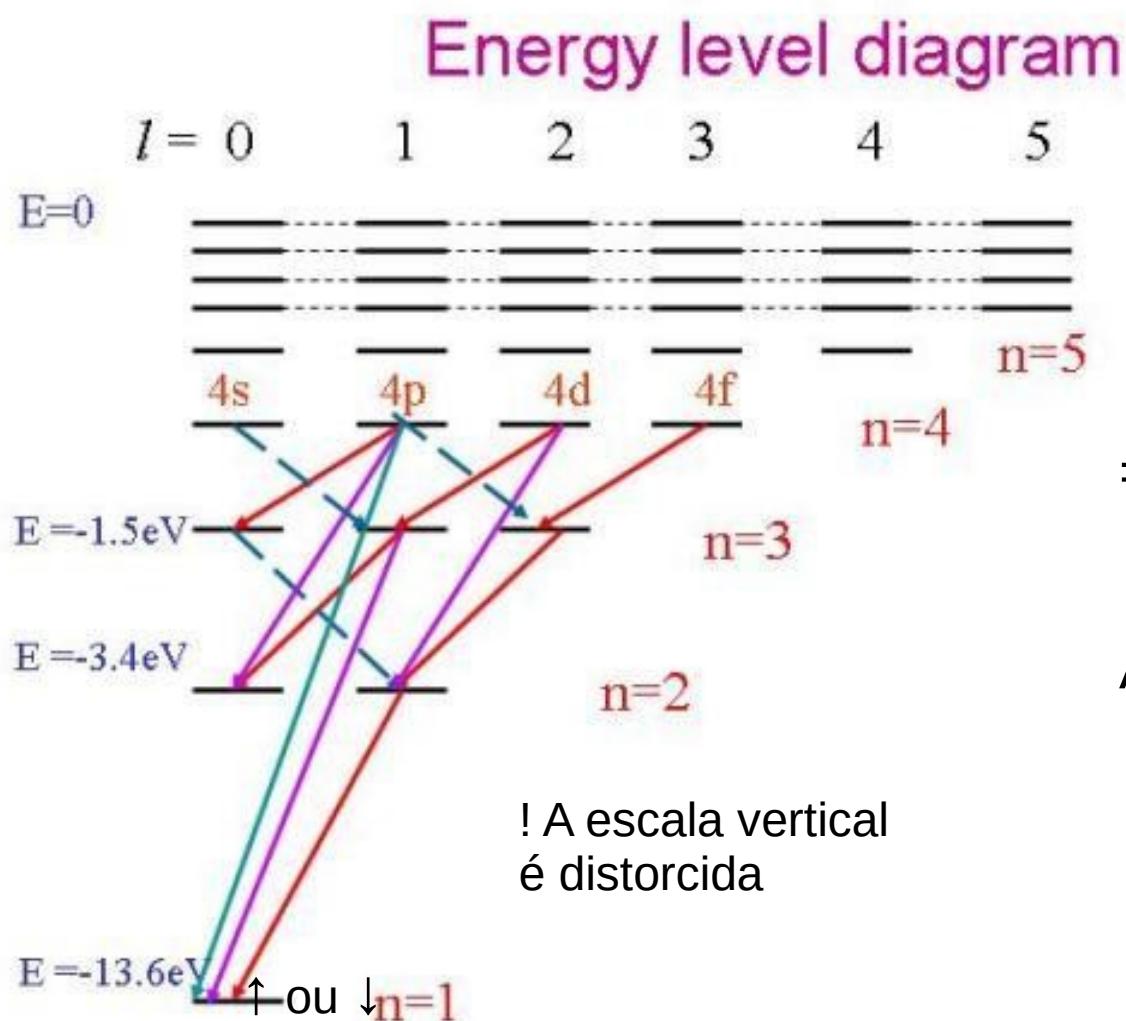
No caso do átomo **néutro**,  $Z$  também é o no. de **elétrons** na eletrosfera.

O estado “normal” procurado é o estado de **menor energia**, também chamado **estado fundamental**.

Temos que levar em conta o **princípio de exclusão de Pauli**:

- **Nenhum par** de elétrons pode estar no **mesmo estado**, ou
- Cada **orbital** comporta apenas **2 elétrons**,  
um com spin pra cima e um com spin pra baixo

# $Z = 1$ : Hidrogênio



Este elemento  
conhecemos de sobra

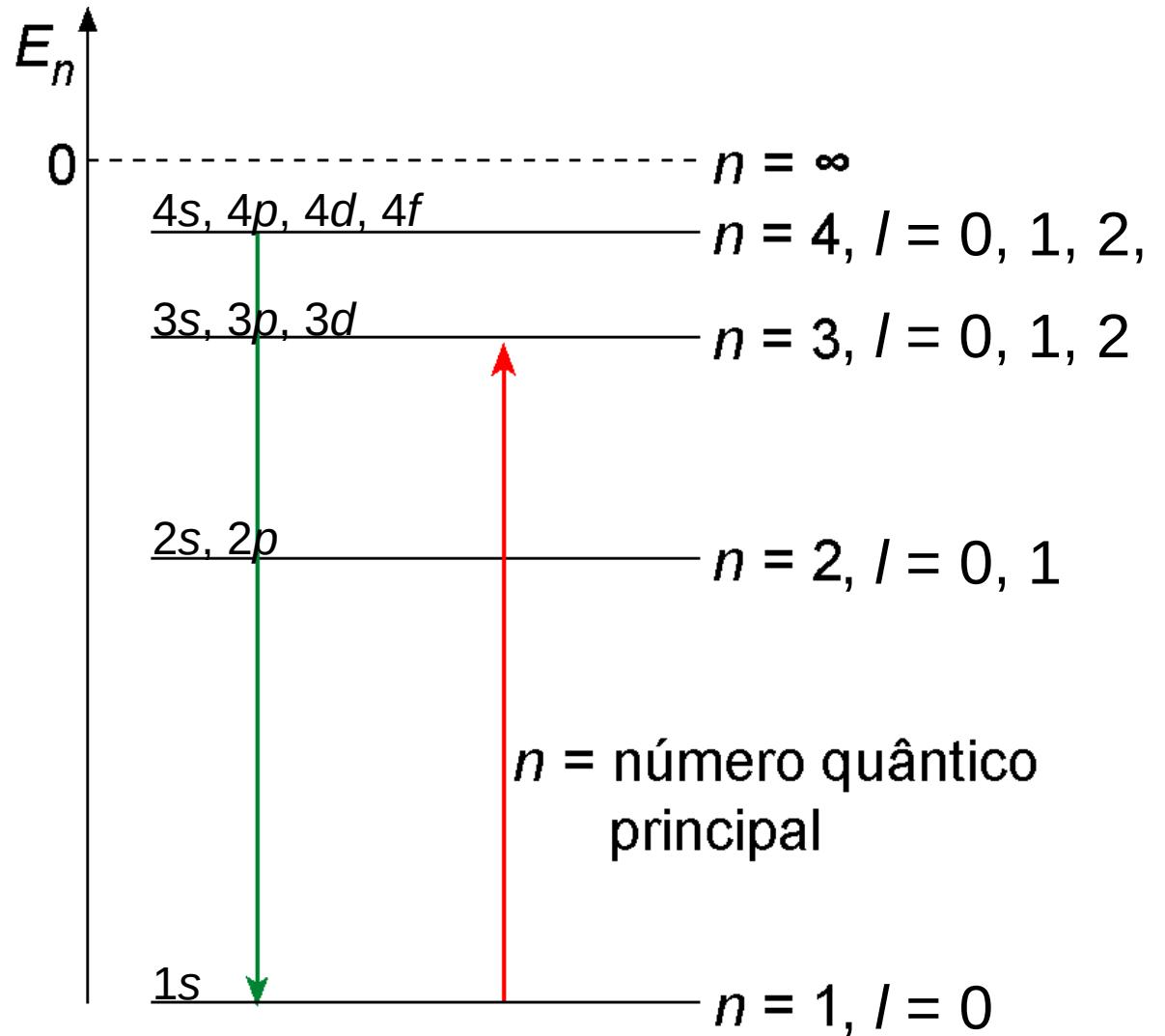
$n=\infty$  O estado fundamental tem o único elétron na camada  $1s$

=> configuração eletrônica:  
 $H 1s^1$

A energia eletrônica é  $-13.6 \text{ eV}$

# Hidrogenóides em geral

Diagrama de energias de um átomo com um elétron



Num átomo com **um elétron**, um hidrogenóide, **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 **altera** as **energias** dos orbitais.

=> **Desdobramento de níveis de energia**.

# Átomos Multi-Eletrônicos

Em átomos com **mais de um elétron**, temos **interações entre os elétrons**, o que modifica o potencial que cada elétron “sente”.

Cada elétron está submetido ao **potencial do núcleo**, diminuído pelo **potencial** devido aos **demais elétrons**, efeito chamado **blindagem**.

Notícia ruim: Isto **modifica os orbitais** e as **energias**,  
e a equação de Schrödinger não tem soluções analíticas para sistemas maiores que 1 núcleo + 1 elétron.

Notícia boa: Mesmo assim, dá para **identificar** os **orbitais** com os orbitais do **átomo de hidrogênio**, e podemos **manter** a notação 1s, 2s, 2p, etc.

Como achar as funções de onda e energias de átomos multi-eletônicos, já que a equação de Schrödinger não tem soluções analíticas?

Método **numérico**: Aproximação de Hartree-Fock

# Átomos Multi-Eletrônicos

Aproximação de Hartree-Fock (processo iterativo)

1. **Chutar** um **jogo inicial** de f.d.o.  $\psi_i^{(0)}(\mathbf{r}_i)$  ( $i = 1, \dots, n$ ;  $n$  = no. de e<sup>-</sup>)
2. **Calcular**, para cada elétron  $i$ , o **potencial** devido ao **núcleo** e aos outros **elétrons**  $j$ , tratando estes como **distribuições contínuas de carga**, dadas pelas suas cargas totais, -e, e seus orbitais,  $P_j(\mathbf{r})$ :  $-e \cdot P_j(\mathbf{r})$ :

$$\begin{aligned} V_{\text{SCF},i}^{(n)}(\mathbf{r}_i) &= -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r_i + \sum_{j \neq i} \int e^2/4\pi\epsilon_0 r_{ij} \cdot |\psi_j^{(n)}(\mathbf{r}_j)|^2 d\mathbf{r}_j \\ &= e^2/4\pi\epsilon_0 [-Z/r_i + \sum_{j \neq i} \int |\psi_j^{(n)}(\mathbf{r}_j)|^2/r_{ij} \cdot d\mathbf{r}_j], \quad \text{onde } r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \end{aligned}$$

O índice SCF vem de *self-consistent field*, campo auto-consistente.

3. **Resolver**, para cada e<sup>-</sup>, a **Equação de Schrödinger** usando este campo auto-consistente numericamente, com computadores:  
$$-\hbar^2/2m_e \cdot \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}_i) + V_{\text{SCF},i}^{(n)}(\mathbf{r}_i) \cdot \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \cdot \psi_i(\mathbf{r}_i) \Rightarrow \psi_i^{(n+1)}(\mathbf{r}_i)$$
4. **Avaliar**, se a **diferença** entre  $\psi_i^{(n+1)}(\mathbf{r}_i)$  e  $\psi_i^{(n)}(\mathbf{r}_i)$  é **pequena o suficiente**:  
- senão, volte para o passo 2  
- caso sim, o **jogo**  $\psi_i^{(n+1)}(\mathbf{r}_i)$  é a **solução**, e  
 $|E_i|$  é a **energia de ionização** do  $i$ -ésimo e<sup>-</sup> ( $E_i$  é negativo para e<sup>-</sup> ligados ao átomo)

# Átomos Multi-Eletrônicos

Aproximação de Hartree-Fock (processo iterativo)

O método descrito no slide anterior é a aproximação de Hartree

Adicional de Fock:

Levar em conta o **princípio de exclusão** de Pauli (2 e<sup>-</sup> não podem se encontrar no mesmo estado) incluindo no campo auto-consistente um **termo repulsivo** para o caso  $\psi_i^{(n)}(\mathbf{r}_i) = \psi_j^{(n)}(\mathbf{r}_j)$ , o **potencial de troca**  $K_{ij}$ :

$$V_{\text{SCF},i}^{(n)}(\mathbf{r}_i) = e^2/4\pi\epsilon_0 [-Z/r_i + \sum_{j \neq i} \int |\psi_j^{(n)}(\mathbf{r}_j)|^2/r_{ij} \cdot d\mathbf{r}_j] + \sum_{j \neq i} K_{ij}$$

=> Método de Hartree-Fock

# Átomos Multi-Eletrônicos

## Energias em átomos multieletônicos

Exemplo: 2 elétrons

Num átomo com **2 elétrons** (i.e. Hélio neutro), os dois ficam no orbital **1s**, já que este é o orbital de **menor energia**.

Sem interação entre os elétrons, a energia seria  $2(-Z^2/1^2)E_0 = -2Z^2E_0$ .

No caso de hélio ( $Z = 2$ ), isto dá  $-8E_0 = -108,8 \text{ eV}$

Tirar uma delas custaria uma energia de 54,4 eV

Porém, os **elétrons se repelem** => **Aumento de energia**

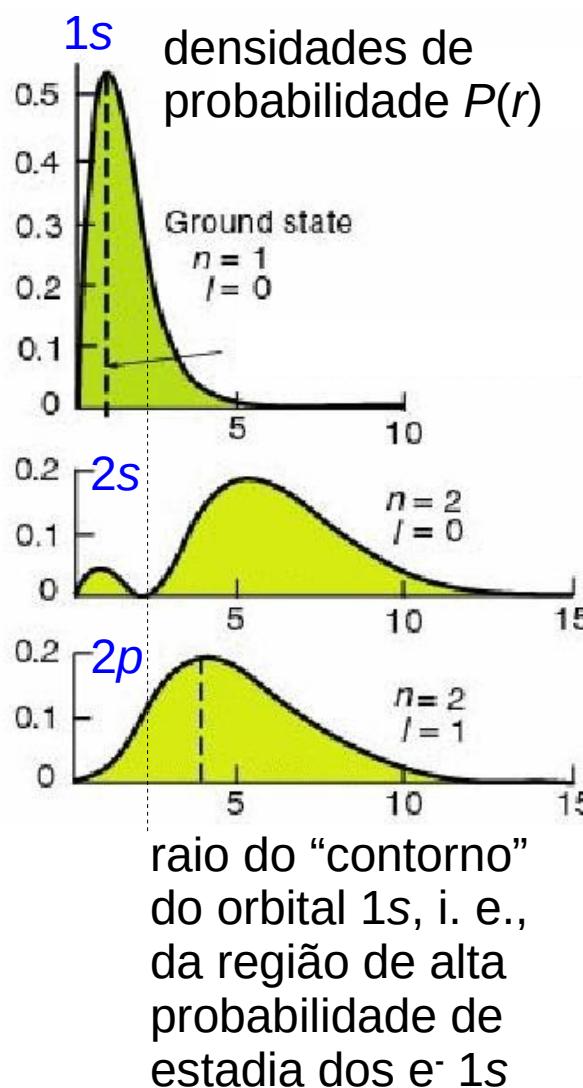
O **primeiro elétron é mais fácil de tirar**,  
a **energia de primeira ionização** é 24,6 eV, **menor** que 54,4 eV.

Após tirado o primeiro elétron, o átomo é um hidrogenóide, e a energia necessário para tirar o segundo elétron é mesmo 54,4 eV.

=> A **energia eletrônica total** do átomo de Hélio, isto é, a energia em relação ao estado “núcleo e todos os elétrons separados” é  
 $- 24,6 \text{ eV} - 54,4 \text{ eV} = - 79 \text{ eV}$

# Átomos Multi-Eletrônicos

## Energias em átomos multieletônicos



**Exemplo (qualitativo): 3 elétrons**

Num átomo com **3 elétrons** (i.e. Lítio neutro), **2** deles no orbital **1s**, onde se encontrará o terceiro, no orbital **2s** ou no **2p**?

Um e<sup>-</sup> **2p** “enxergaria” maior parte do tempo o núcleo **blindado** pelos **elétrons 1s**, isto é, se “sentiria” **atraído** por um **núcleo com carga Z - 2**.

Um e<sup>-</sup> **2s penetra** com **mais frequência** na região dos **1s**, e “veria” o núcleo **menos blindado**, se “sentiria” **atraído** por um núcleo com carga um pouco **maior que Z - 2** (mais forte que um e<sup>-</sup> **2p**).

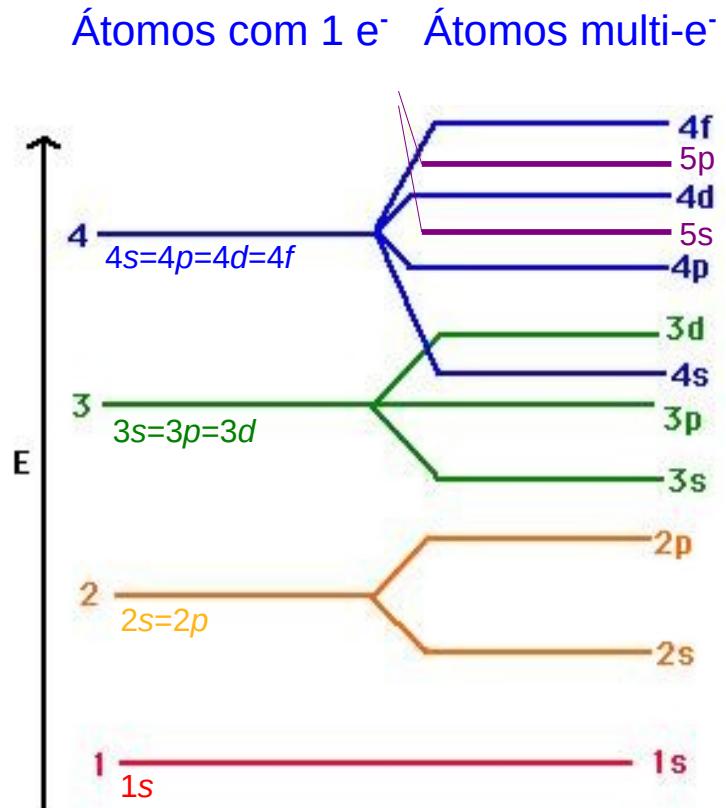
=> No orbital **2s**, o **3º e<sup>-</sup>** tem **energia menor** que no **2p**.

Ou simplesmente:

O orbital **2s** tem **menor energia** que o **2p**.

# Átomos Multi-Eletrônicos

## Diagrama de energias em átomos multieletônicos



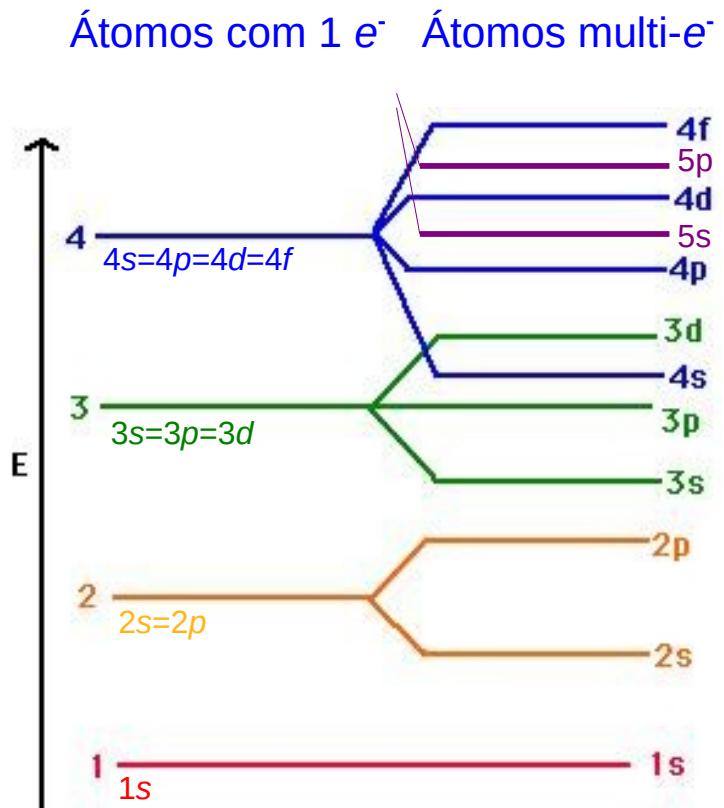
### Resultados

Para **átomos multi-eletônicos**, ocorre **desdobramento** de níveis de energia com o **mesmo  $n$**  e  **$l$  diferentes**, mas para a mesma combinação de  $n$  e  $l$ , ainda ocorre **degenerescência** em  $m_l$ .

Para um **dado  $n$** , as **energias** das **subcamadas** (dos orbitais com diferentes valores de  $l$ ) **aumentam** quando  $l$  **aumenta**:  
 $s < p < d < f < \dots$ .

# Átomos Multi-Eletrônicos

## Diagrama de energias em átomos multieletônicos



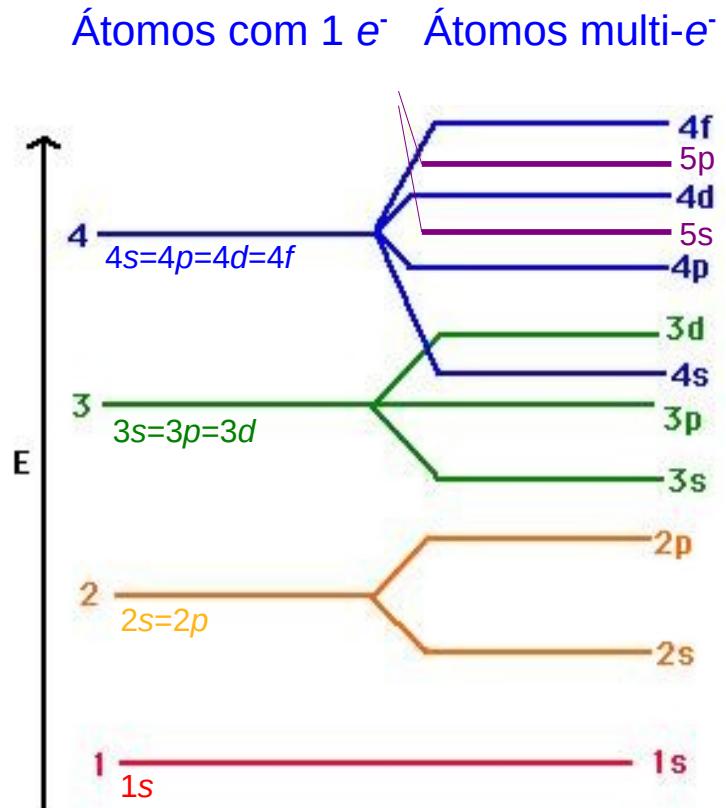
## Resultados

Este desdobramento em / leva à **Regra de Madelung:**

1. Os orbitais são ordenados por  $n + l$  crescente.
2. Para orbitais com o mesmo valor de  $n + l$ , a ordem é por  $n$  crescente.  
Exemplo: 2p vem antes de 3s.

# Átomos Multi-Eletrônicos

## Diagrama de energias em átomos multieletônicos



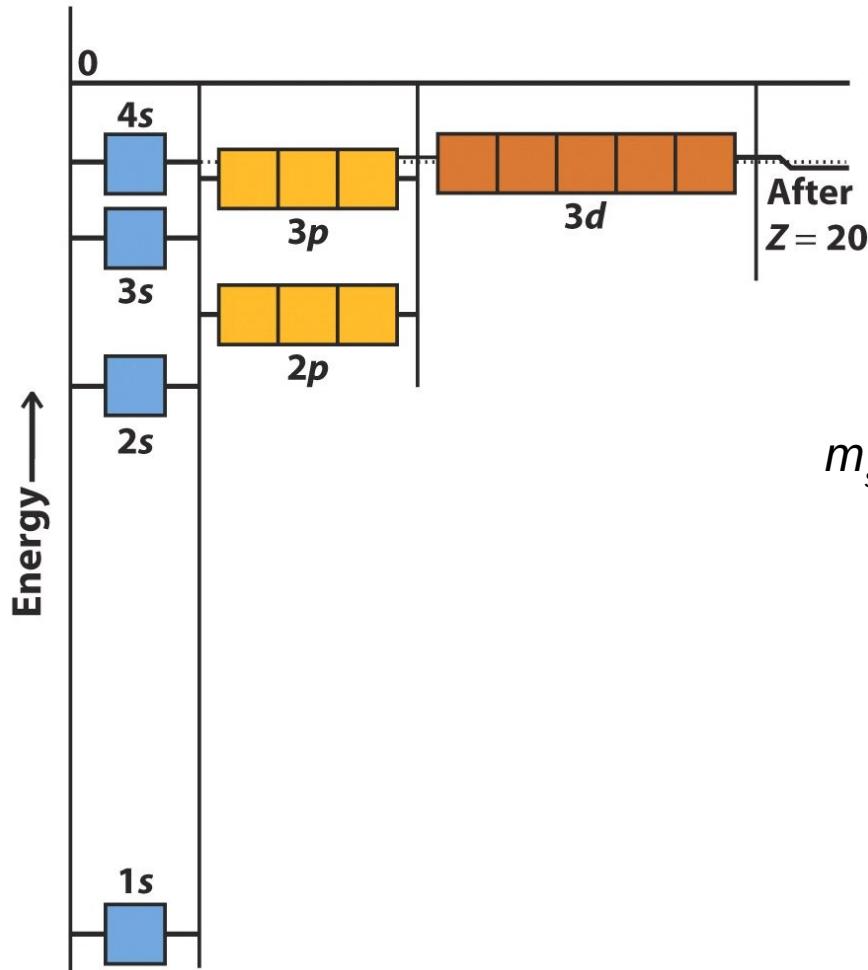
## Resultados

Tabela que facilita memorizar a ordem das subcamadas.

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
7	s p

# O Sistema periódico

## Diagrama de energias em átomos multieletônicos



Pelo **princípio de exclusão**, cada **orbital**  $n, l, m,$  pode ser ocupado por apenas **2 elétrons**, um com spin pra cima e um com spin pra baixo, ou cada subcamada  $n, l$  pode conter  $2 \cdot (2l + 1)$  elétrons

$m_s = \pm 1$        $m_l = -l, \dots, l$   
(camadas s: 2 e<sup>-</sup>, p: 6 e<sup>-</sup>, d: 10 e<sup>-</sup>, etc.)

Agora podemos “encher o sistema periódico”, ou seja, encher as camadas e subcamadas de elétrons **de baixo pra cima** (**princípio de construção**), simbolizando os elétrons por flechas,  $\uparrow$  ou  $\downarrow$ , de acordo com o spin.

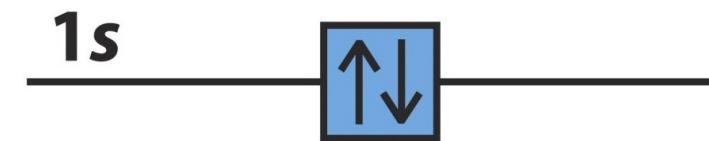
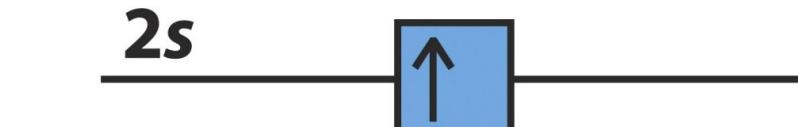
# O Sistema periódico

## Princípio da Construção (aumentando $Z$ )



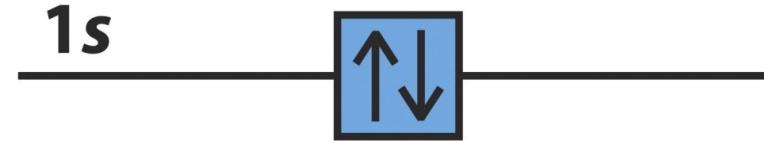
**1 H  $1s^1$**

$Z = 1$ : Hidrogênio: 1 e<sup>-</sup> na camada 1s, por exemplo com spin pra cima



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

$Z = 3$ : Lítio: 2 e<sup>-</sup> na camada 1s, 1 na 2s



**2 He  $1s^2$**

$Z = 2$ : Hélio: 2 e<sup>-</sup> na camada 1s, um com spin pra cima, e um pra baixo



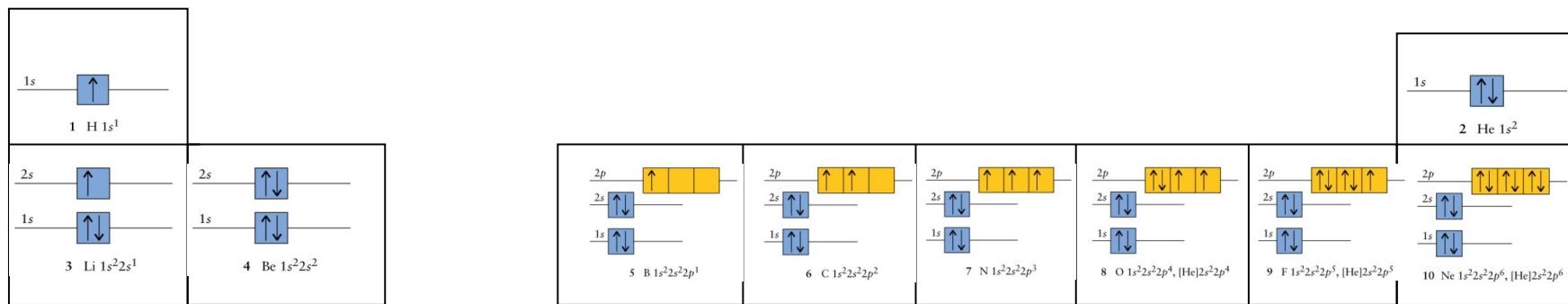
**4 Be  $1s^2 2s^2, [\text{He}] 2s^2$**

$Z = 4$ : Berílio: 2 e<sup>-</sup> na camada 1s, 2 na 2s

# O Sistema Periódico

# Princípio da Construção (aumentando Z)

Podemos preencher os  $2 \cdot (2l + 1)$  vagas em uma dada subcamada em qualquer ordem?



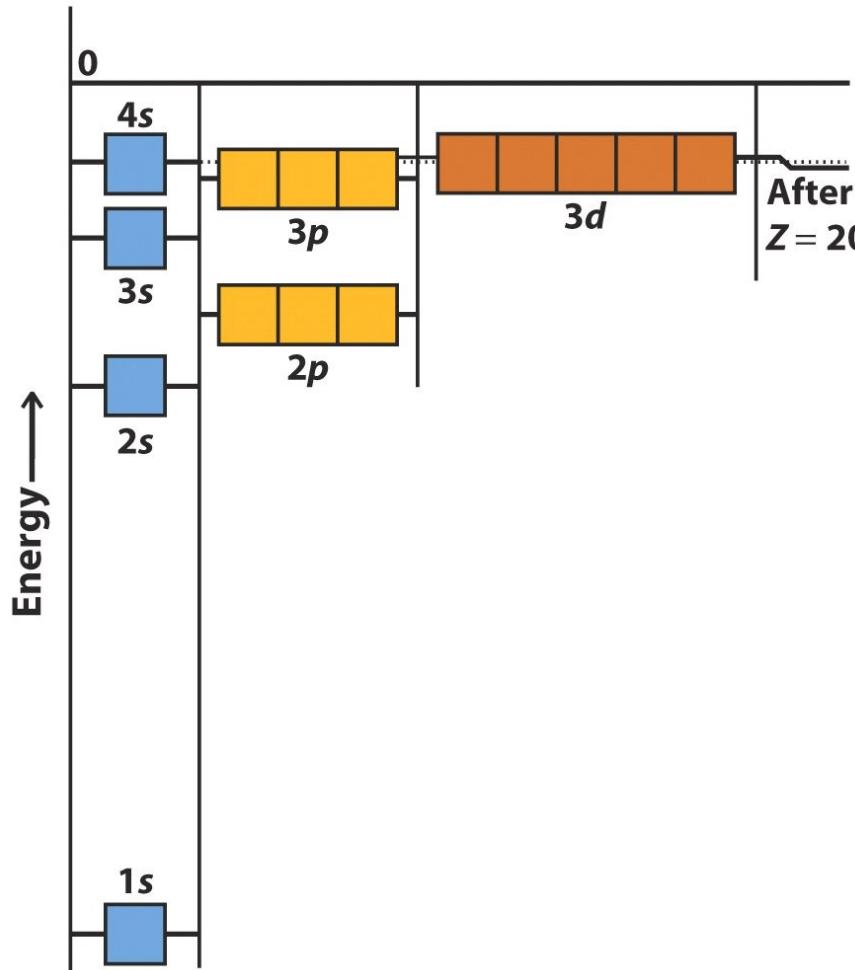
## Regra de Hund (1927):

"A configuração do **estado fundamental** é aquela com **máximo número de spins desemparelhados**."

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

## Configuração dos primeiros 11 elementos



H:  $1s^1$

A **energia** do **átomo** de H (a energia comparado ao estado “núcleo e elétron separado”) é  $E(H) = -Z^2/n^2 \cdot E_0 = -1^2/1^2 \cdot E_0 = -E_0 = -13,6 \text{ eV}$  e a **energia de ionização**, a energia necessária para tirar o  $e^-$ :  $E_i(H) = E(H^+) - E(H) = 0 - (-E_0) = 13,6 \text{ eV}$

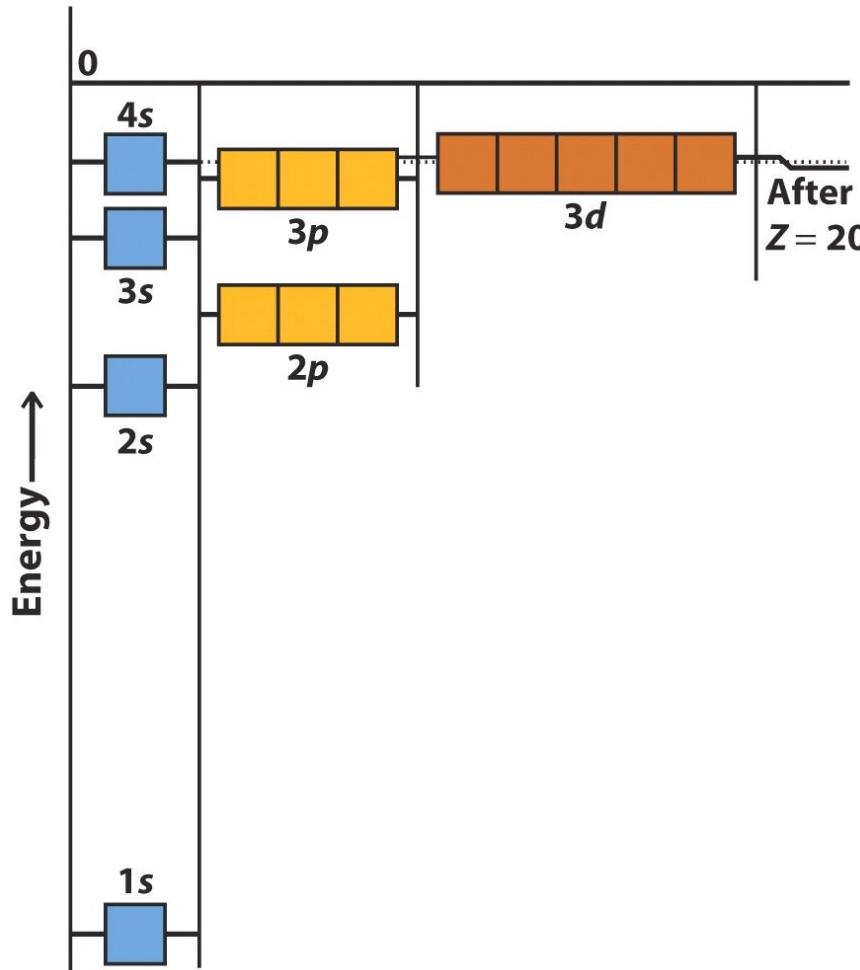
He:  $1s^2$

A **energia** do **átomo** de He não é  $-2 \cdot Z^2/n^2 \cdot E_0 = -2 \cdot 2^2/1^2 \cdot E_0 = -8E_0 = -108,8 \text{ eV}$  Ela é **maior** por causa da **repulsão entre os  $e^-$** :  $E(He) = -79 \text{ eV}$  e a **energia de (primeira) ionização**, a energia necessária para tirar o (primeiro)  $e^-$ :  $E_i(He) = E(He^+) - E(He) = -4E_0 - (-79 \text{ eV}) = 24,6 \text{ eV}$

Este é um hidrogenóide, tal que vale  $E = -Z^2/n^2 \cdot E_0$

# O Sistema Periódico

## Configuração dos primeiros 11 elementos



H:  $1s^1$

He:  $1s^2$

Li:  $1s^2 2s^1$

ou  $[He]2s^1$

Be:  $1s^2 2s^2$

ou  $[He]2s^2$

B:  $1s^2 2s^2 2p^1$

...

C:  $1s^2 2s^2 2p^2$  (os 2 e<sup>-</sup> 2p têm spins paralelos)

N:  $1s^2 2s^2 2p^3$  (os 3 e<sup>-</sup> 2p têm spins paralelos)

O:  $1s^2 2s^2 2p^4$  (dos 4 e<sup>-</sup> 2p, 3 têm spins paralelos)

F:  $1s^2 2s^2 2p^5$

Ne:  $1s^2 2s^2 2p^6$

Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  ou  $[Ne]3s^1$

etc.

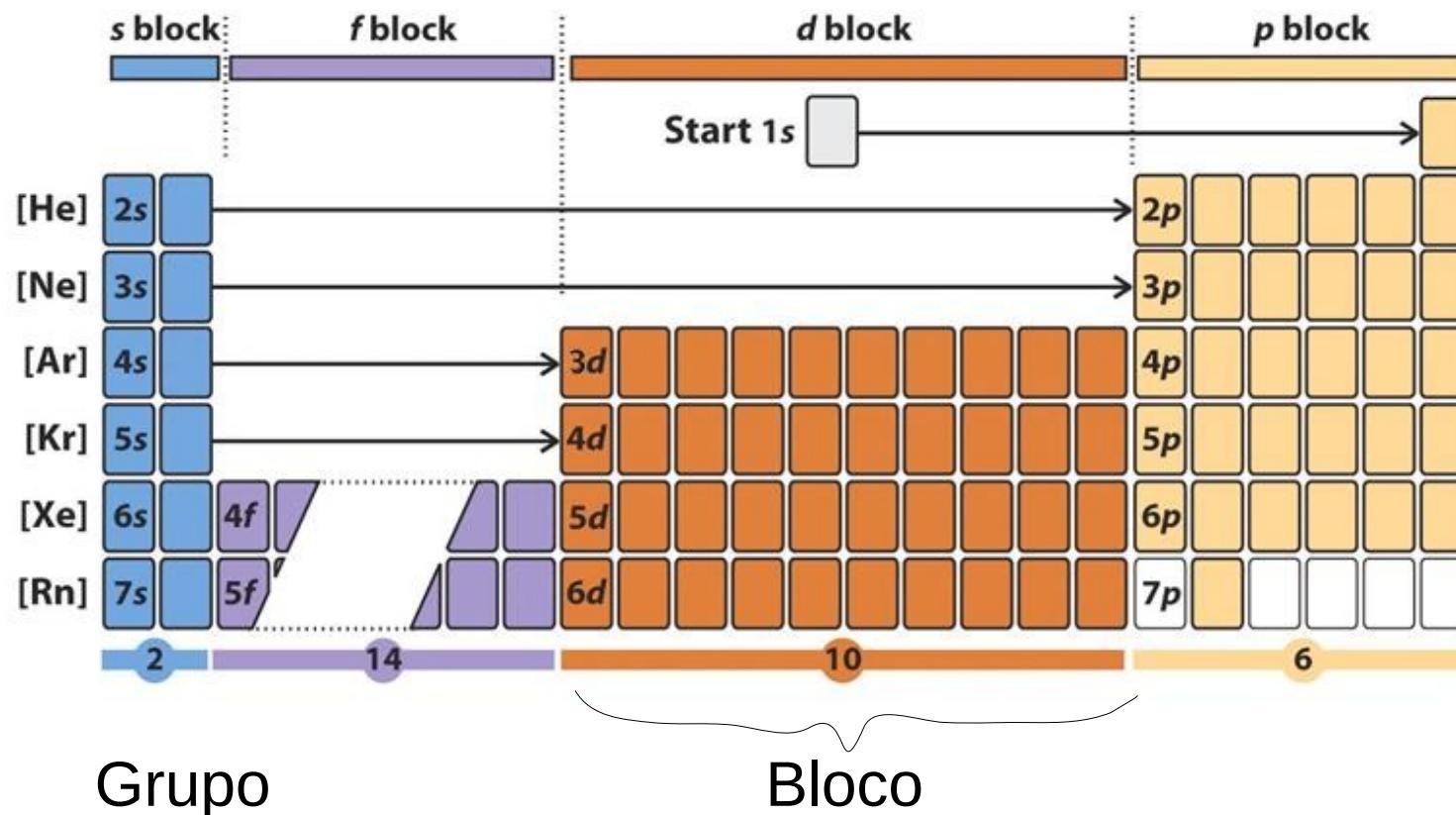
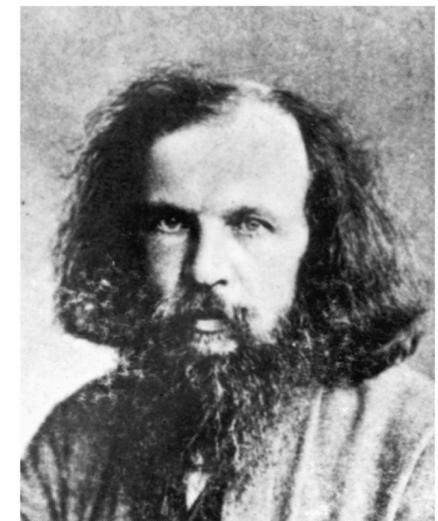
Os **números de elétrons** e “buracos” na camada externa (de valência) determina as propriedades químicas do elemento.

# 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 atômicas 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

## Exceções

!!! A configuração eletrônica de um elemento (no estado fundamental) **nem sempre** é aquela **prevista** pelo **princípio de construção** usando a **regra de Madelung**. Às vezes é **energeticamente mais favorável** um elétron (ou mais) estar em uma **outra subcamada** que **previsto**, por exemplo um e<sup>-</sup> que seria *ns* pela teoria apresentada é na verdade (*n*-1)*d*.

Exemplos (3º e 4º períodos):

Crômio: seria [Ar]3d<sup>4</sup>4s<sup>2</sup>, mas é [Ar]3d<sup>5</sup>4s<sup>1</sup>

Cobre: " [Ar]3d<sup>9</sup>4s<sup>2</sup> " [Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>1</sup>

Nióbio: " [Kr]4d<sup>3</sup>5s<sup>2</sup> " [Kr]4d<sup>4</sup>5s<sup>1</sup>

Molibdénio: " [Kr]4d<sup>4</sup>5s<sup>2</sup> " [Kr]4d<sup>5</sup>5s<sup>1</sup>

Ruténio: " [Kr]4d<sup>6</sup>5s<sup>2</sup> " [Kr]4d<sup>7</sup>5s<sup>1</sup>

Ródio: " [Kr]4d<sup>7</sup>5s<sup>2</sup> " [Kr]4d<sup>8</sup>5s<sup>1</sup>

Paládio: " [Kr]4d<sup>8</sup>5s<sup>2</sup> " [Kr]4d<sup>10</sup>

Prata: " [Kr]4d<sup>9</sup>5s<sup>2</sup> " [Kr]4d<sup>10</sup>5s<sup>1</sup>

A partir do quinto período, este fenômeno é cada vez mais frequente, e outras substituições também ocorrem ((*n*-1)*p* em lugar de *ns* ou (*n*+1)*d* em lugar de *nf*, ...)

# O Sistema Periódico

Tabela periódica atual [www.iupac.org/reports/periodic\\_table/](http://www.iupac.org/reports/periodic_table/)

IUPAC Periodic Table of the Elements																	
1																	18
1 <b>H</b> hydrogen 1.007 94(7)	2 <b>Be</b> beryllium 9.012 182(3)	3 <b>Li</b> lithium 6.941(2)	4 <b>Be</b> beryllium 9.012 182(3)	5 <b>V</b> scandium 44.955 910(8)	6 <b>Cr</b> chromium 50.945 1(6)	7 <b>Mn</b> manganese 54.938 049(8)	8 <b>Fe</b> iron 55.845(2)	9 <b>Co</b> cobalt 58.933 200(9)	10 <b>Ni</b> nickel 58.6934(2)	11 <b>Cu</b> copper 63.546(3)	12 <b>Zn</b> zinc 65.409(4)	13 <b>B</b> boron 10.811(7)	14 <b>C</b> carbon 12.0107(8)	15 <b>N</b> nitrogen 14.0067(2)	16 <b>O</b> oxygen 15.9994(3)	17 <b>F</b> fluorine 18.998 4032(5)	10 <b>Ne</b> neon 20.1797(6)
11 <b>Na</b> sodium 22.989 770(2)	12 <b>Mg</b> magnesium 24.3050(6)	3 <b>Sc</b> scandium 44.955 910(8)	4 <b>Ti</b> titanium 47.867(1)	5 <b>V</b> vanadium 51.995 1(6)	6 <b>Cr</b> chromium 51.995 1(6)	7 <b>Mn</b> manganese 54.938 049(8)	8 <b>Fe</b> iron 55.845(2)	9 <b>Co</b> cobalt 58.933 200(9)	10 <b>Ni</b> nickel 58.6934(2)	11 <b>Cu</b> copper 63.546(3)	12 <b>Zn</b> zinc 65.409(4)	13 <b>Al</b> aluminium 26.981 538(2)	14 <b>Si</b> silicon 28.0855(3)	15 <b>P</b> phosphorus 30.973 761(2)	16 <b>S</b> sulfur 32.065(5)	17 <b>Cl</b> chlorine 35.453(2)	10 <b>Ar</b> argon 39.948(1)
19 <b>K</b> potassium 39.0983(1)	20 <b>Ca</b> calcium 40.078(4)	21 <b>Sc</b> scandium 44.955 910(8)	22 <b>Ti</b> titanium 47.867(1)	23 <b>V</b> vanadium 51.995 1(6)	24 <b>Cr</b> chromium 51.995 1(6)	25 <b>Mn</b> manganese 54.938 049(8)	26 <b>Fe</b> iron 55.845(2)	27 <b>Co</b> cobalt 58.933 200(9)	28 <b>Ni</b> nickel 58.6934(2)	29 <b>Cu</b> copper 63.546(3)	30 <b>Zn</b> zinc 65.409(4)	31 <b>Ga</b> gallium 69.723(1)	32 <b>Ge</b> germanium 72.64(1)	33 <b>As</b> arsenic 74.921 60(2)	34 <b>Se</b> selenium 78.96(3)	35 <b>Br</b> bromine 79.904(1)	36 <b>Kr</b> krypton 83.798(2)
37 <b>Rb</b> rubidium 85.4678(3)	38 <b>Sr</b> strontium 87.62(1)	39 <b>Y</b> yttrium 88.905 85(2)	40 <b>Zr</b> zirconium 91.224(2)	41 <b>Nb</b> niobium 92.906 38(2)	42 <b>Mo</b> molybdenum 95.94(2)	43 <b>Tc</b> technetium [98]	44 <b>Ru</b> ruthenium 101.07(2)	45 <b>Rh</b> rhodium 102.905 50(2)	46 <b>Pd</b> palladium 106.42(1)	47 <b>Ag</b> silver 107.8882(2)	48 <b>Cd</b> cadmium 112.411(8)	49 <b>In</b> indium 114.818(3)	50 <b>Sn</b> tin 118.719(7)	51 <b>Sb</b> antimony 121.760(1)	52 <b>Te</b> tellurium 127.80(3)	53 <b>I</b> iodine 126.904 47(3)	54 <b>Xe</b> xenon 131.293(6)
55 <b>Cs</b> caesium 132.905 45(2)	56 <b>Ba</b> barium 137.327(7)	57-71 <b>lanthanoids</b> lanthanoids 178.49(2)	72 <b>Hf</b> hafnium 180.9479(1)	73 <b>Ta</b> tantalum 183.84(1)	74 <b>W</b> tungsten 186.207(1)	75 <b>Re</b> rhodium 190.23(3)	76 <b>Os</b> osmium 192.217(3)	77 <b>Ir</b> iridium 195.078(2)	78 <b>Pt</b> platinum 196.986 55(2)	79 <b>Au</b> gold 198.059(2)	80 <b>Hg</b> mercury 200.59(2)	81 <b>Tl</b> thallium 204.3833(2)	82 <b>Pb</b> lead 207.2(1)	83 <b>Bi</b> bismuth 208.980 38(2)	84 <b>Po</b> polonium [209]	85 <b>At</b> astatine [210]	86 <b>Rn</b> radon [222]
87 <b>Fr</b> francium [223]	88 <b>Ra</b> radium [226]	89-103 <b>actinoids</b> actinoids [261]	104 <b>Rf</b> rutherfordium [262]	105 <b>Db</b> dubnium [266]	106 <b>Sg</b> seaborgium [268]	107 <b>Bh</b> bohrium [264]	108 <b>Hs</b> hassium [277]	109 <b>Mt</b> meitnerium [268]	110 <b>Ds</b> darmstadtium [271]	111 <b>Rg</b> roentgenium [272]							
		57 <b>La</b> lanthanum 138.9055(2)	58 <b>Ce</b> cerium 140.116(1)	59 <b>Pr</b> praseodymium 140.907 65(2)	60 <b>Nd</b> neodymium 144.24(3)	61 <b>Pm</b> promethium [145]	62 <b>Sm</b> samarium 150.36(3)	63 <b>Eu</b> europium 151.964(1)	64 <b>Gd</b> gadolinium 157.25(3)	65 <b>Tb</b> terbium 158.925 34(2)	66 <b>Dy</b> dysprosium 162.500(1)	67 <b>Ho</b> holmium 164.930 32(2)	68 <b>Er</b> erbium 167.259(3)	69 <b>Tm</b> thulium 169.934 21(2)	70 <b>Yb</b> ytterbium 173.04(3)	71 <b>Lu</b> lutetium 174.987(1)	
		89 <b>Ac</b> actinium [227]	90 <b>Th</b> thorium 232.0381(1)	91 <b>Pa</b> protactinium 231.036 89(2)	92 <b>U</b> uranium 238.028 91(3)	93 <b>Np</b> neptunium [237]	94 <b>Pu</b> plutonium [244]	95 <b>Am</b> americium [243]	96 <b>Cm</b> curium [247]	97 <b>Bk</b> berkelium [247]	98 <b>Cf</b> californium [251]	99 <b>Es</b> einsteinium [252]	100 <b>Fm</b> fermium [257]	101 <b>Md</b> mendelevium [258]	102 <b>No</b> nobelium [259]	103 <b>Lr</b> lawrencium [262]	

Notes

- "Aluminum" and "cesium" are commonly used alternative spellings for "aluminium" and "caesium."
- IUPAC 2001 standard atomic weights (mean relative atomic masses) are listed with uncertainties in the last figure in parentheses [R. D. Liss, *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.

Copyright © 2005 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry. For updates to this table, see [http://www.iupac.org/reports/periodic\\_table/](http://www.iupac.org/reports/periodic_table/). This version is dated 4 February 2005.



# O Sistema Periódico

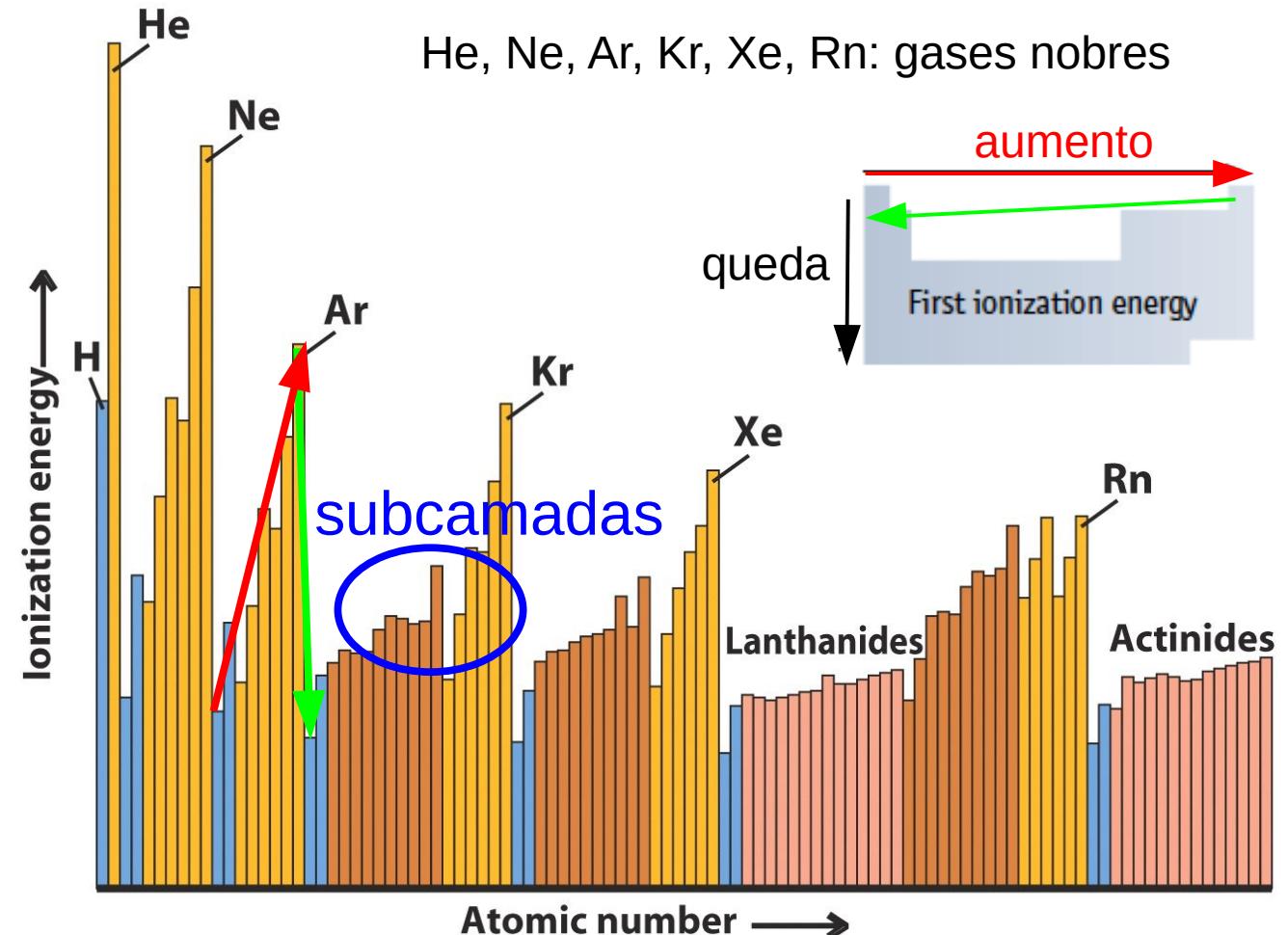
Primeira Energia de Ionização em função do Número Atômico  $Z$   
energia requerida para remover um eletrón de um átomo em sua fase gasosa

$Z$  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

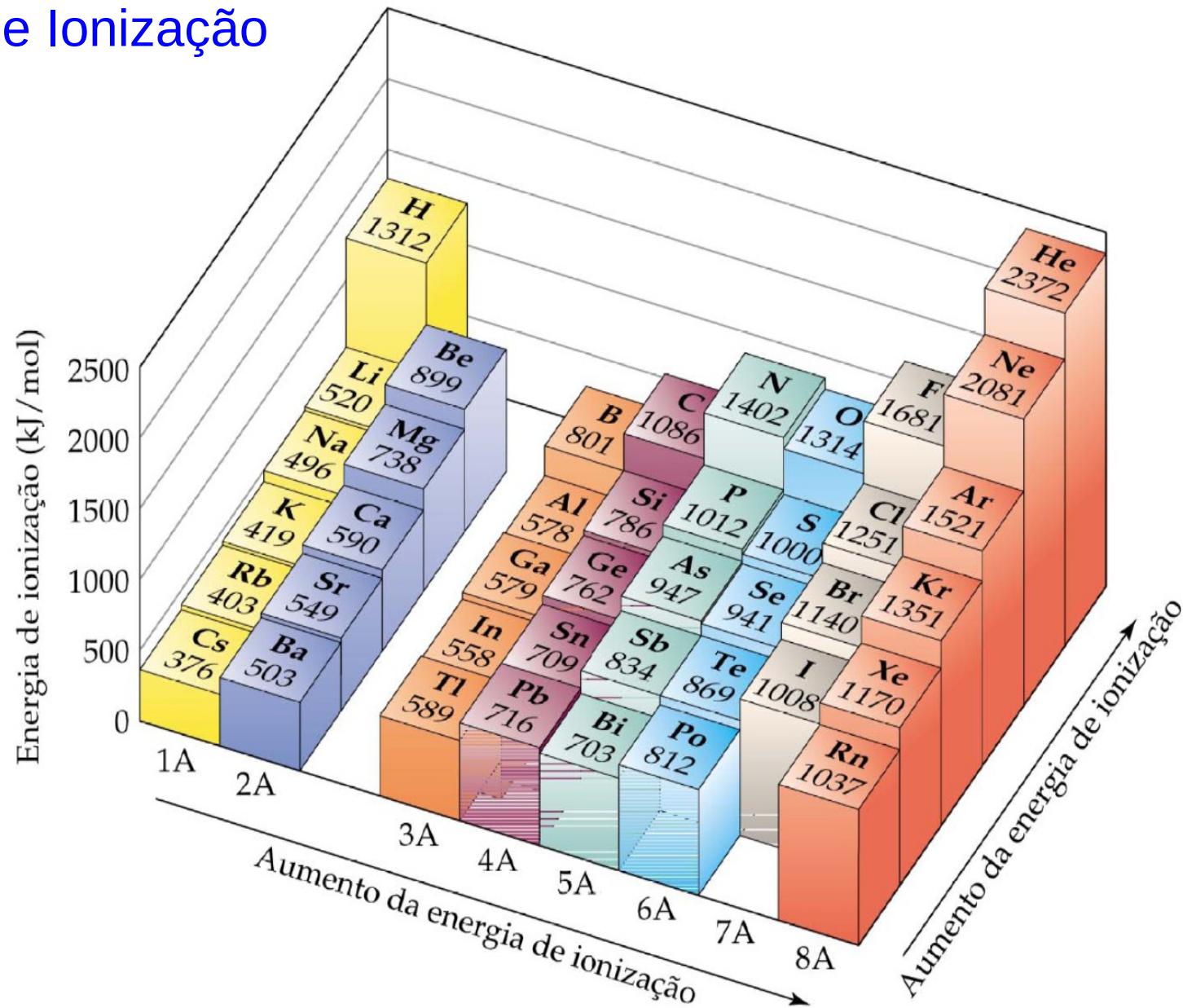
=> muito menos fortemente ligado => Queda brusca de  $E_i$

As subestruturas surgem devido às subcamadas.



# O Sistema Periódico

## Energia de Ionização



# O Sistema Periódico

## Energia de Ionização

TABELA 7.2 Valores das energias de ionização sucessivas,  $I_i$ , 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

# O Sistema Periódico

Raio Atômico em função do Número Atômico  $Z$

a distância mais provável entre o núcleo e o elétron mais externo

$Z$  aumenta

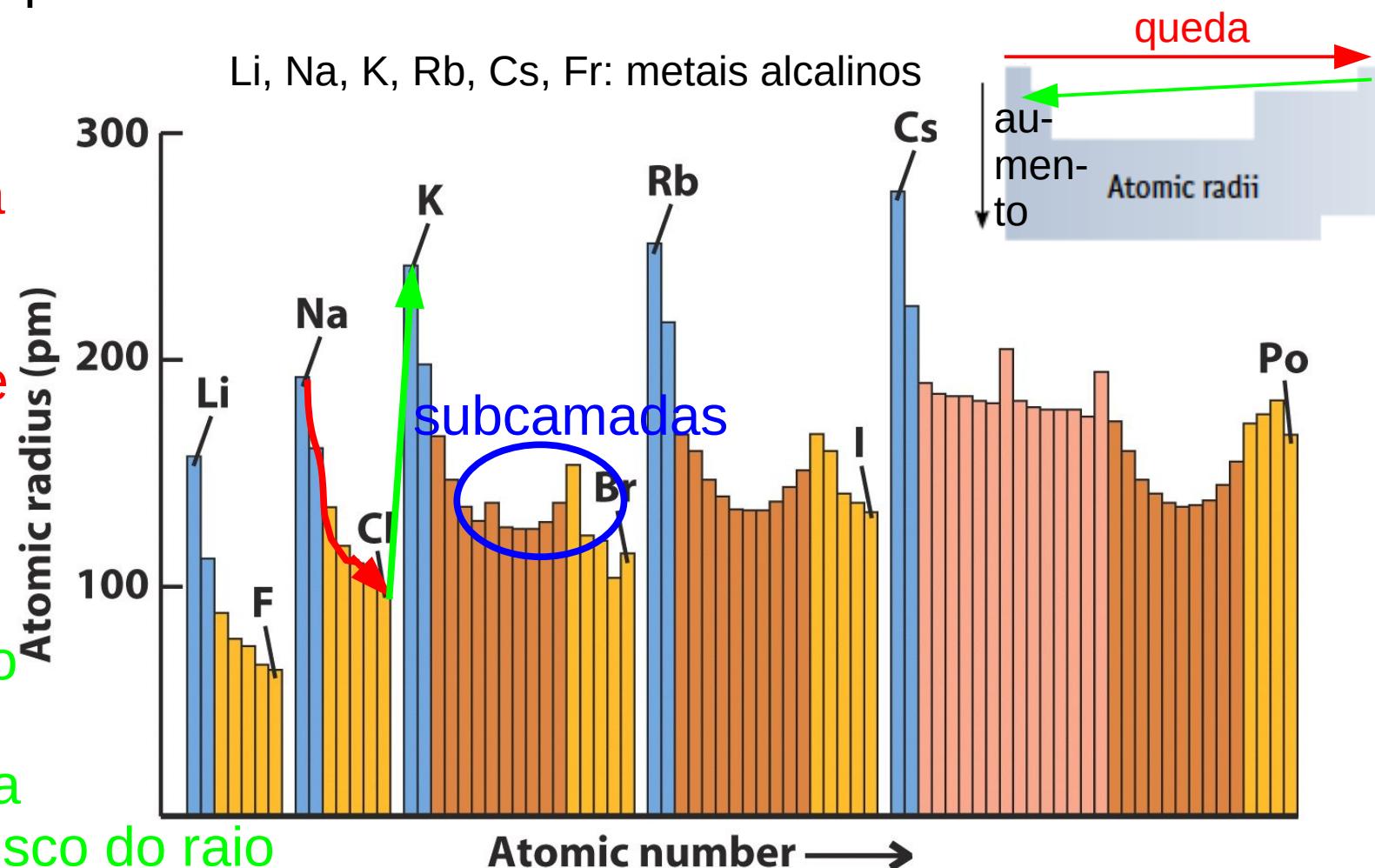
=> carga do  
núcleo aumenta

=> Os elétrons  
são atraídos  
mais fortemente

=> raio diminui

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

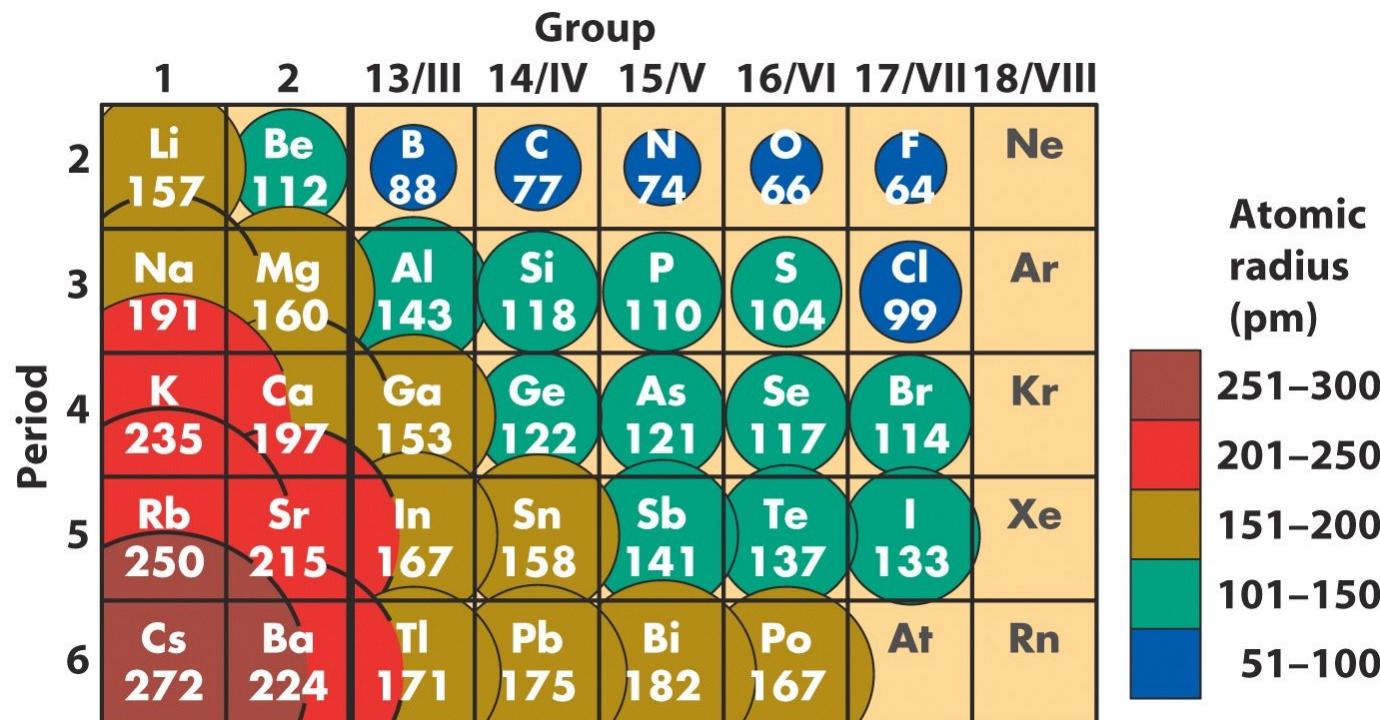
=> aumento brusco do raio



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

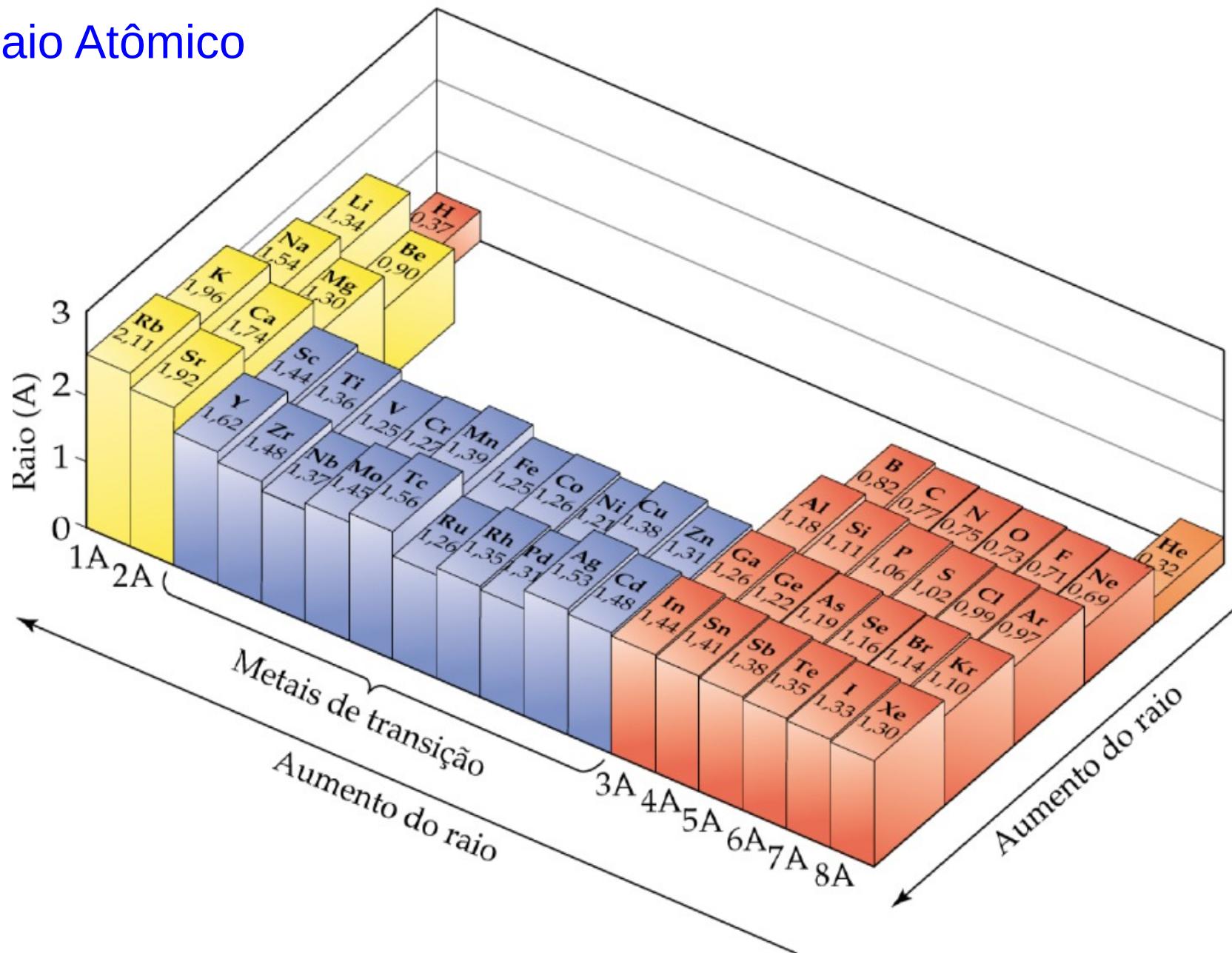
# O Sistema Periódico

## Raio Atômico



# O Sistema Periódico

Raio Atômico



# Física Quântica

**FIM PARA HOJE**



Universidade Federal do ABC

