

O modelo atômico atual

Teoria do orbital atômico

Modelo quântico ou mecânico-ondulatório



Louis de Broglie (1924)

De Broglie sugeriu que todas as partículas materiais poderiam, eventualmente, manifestar propriedades ondulatórias. Em particular, pequenas partículas como os elétrons, movendo-se com velocidade v , teriam, por hipótese, um caráter ondulatório a eles associado, com um comprimento de onda λ , relacionado à sua massa m e à sua velocidade.

$$E = h\nu \text{ (Planck)}$$

como, $\nu = (c/\lambda)$:

$$E = h (c/\lambda) \quad \text{eq (1)}$$

Partindo da teoria da relatividade ($E = mc^2$), L. De Broglie deduziu uma relação entre o momento da luz p , sua velocidade c , e sua energia:

$$E = cp \quad \text{eq (2)}$$

Combinando as equações (1) e (2):

$$h (c/\lambda) = cp$$

$$h/\lambda = p \quad \text{eq (3)}$$

L. De Broglie sugeriu que a equação (3) poderia ser usada para calcular o comprimento de onda associado a qualquer partícula, cujo momento fosse mv :

$$\lambda = (h / mv)$$

A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Em 1926, o físico austríaco **Erwin Schrödinger** sugeriu que todas as partículas em movimento podiam ser descritas por uma equação que havia estabelecido, a equação de onda. A teoria completa do comportamento de partículas subatômicas, mediante a equação de onda, é a mecânica ondulatória.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)\psi = 0,$$

E= energia cinética

V= energia potencial

m = massa do elétron

ψ Não tem significado físico

ψ^2 é a expressão matemática de como a probabilidade de encontrar uma partícula varia de lugar para lugar.

Cada solução da equação de SCHRÖDINGER corresponde a um orbital eletrônico que define níveis e subníveis de um elétron em um orbital.

Significado dos Números Quânticos

Número quântico principal, n : representa o nível principal de energia do elétron e pode assumir valores inteiros e positivos a partir de 1, ou seja 1, 2, 3, 4...

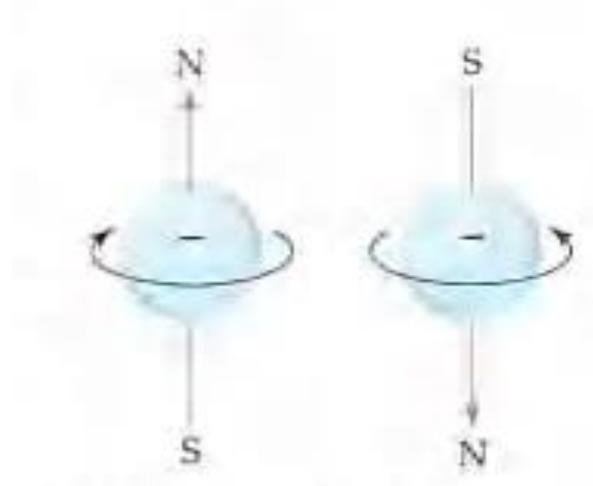
- Por que o valor de n não pode ser zero?

Número quântico azimutal, l : determina a forma do orbital (ou da densidade de carga negativa). Assim, para cada particular valor de l associa-se uma determinada forma da nuvem eletrônica. O valor numérico de l depende do valor de n no sentido de que ele pode assumir valores inteiros desde zero até $(n-1)$.

$l = 0$	1	2	3	4	5
s	p	d	f	g	h

Número quântico magnético, m :
especifica a orientação permitida para uma nuvem eletrônica no espaço, sendo que o número de orientações permitidas está diretamente relacionado à forma da nuvem (que é designada por l). Assim sendo, este número quântico é limitado pelo valor de l , podendo assumir valores inteiros de $-l$, passando por zero, até $+l$.

Existe ainda um quarto número quântico, que é chamado de **número quântico de spin**. Este número quântico é representado por s e tem somente dois valores permitidos para cada valor de m , ou seja, $-1/2$ e $+1/2$. Isso significa que um elétron em qualquer orbital tem somente duas orientações permitidas de spin no seu próprio eixo.



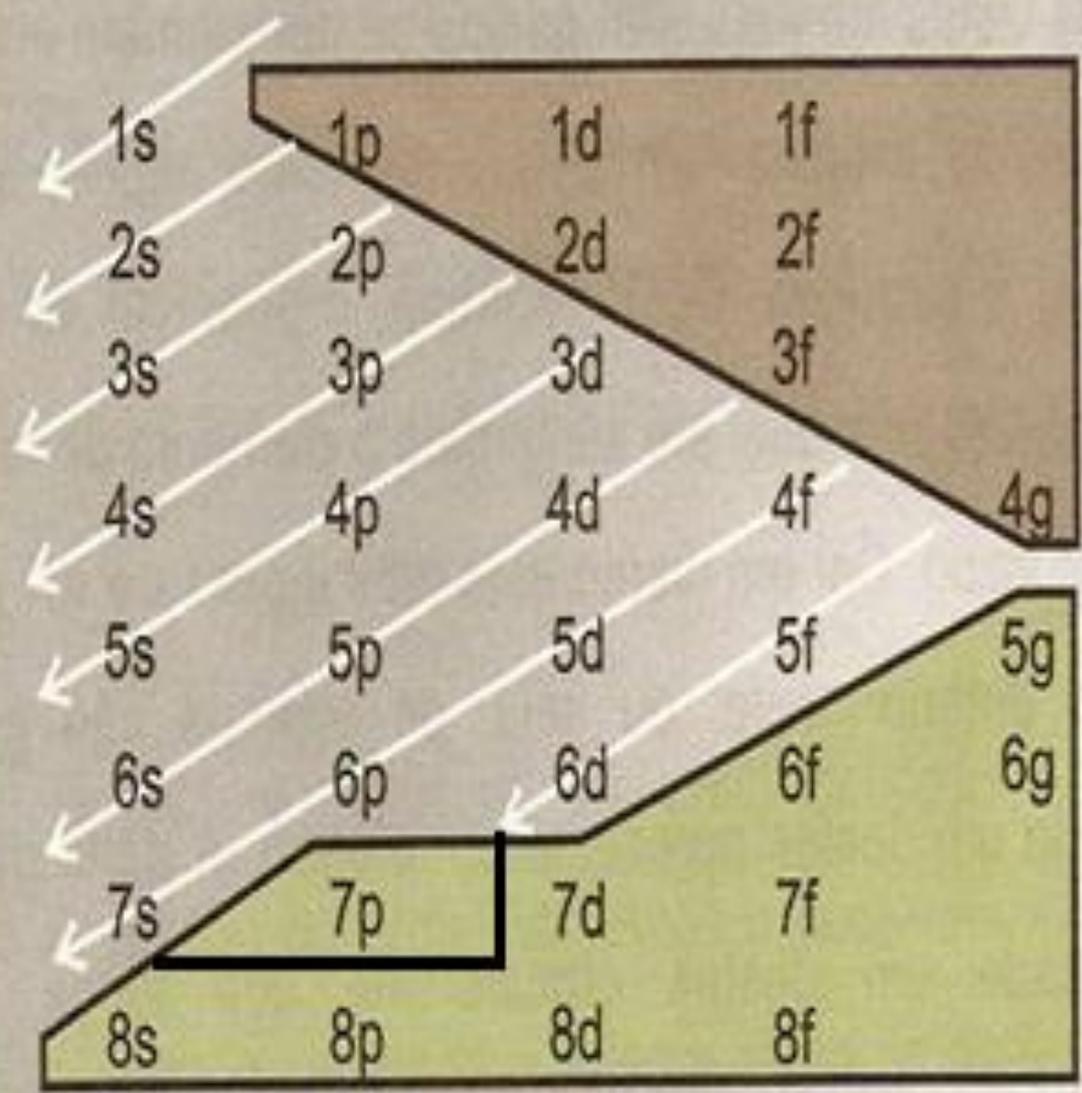
O princípio da exclusão de Pauli

Qualquer par de elétrons pode ter até três números quânticos iguais, porém o quarto número quântico, necessariamente, deve ser diferente, ou seja, dois elétrons ocupando o mesmo orbital deverá apresentar spins opostos.

Pratique

l = 0 1 2 3
s p d f

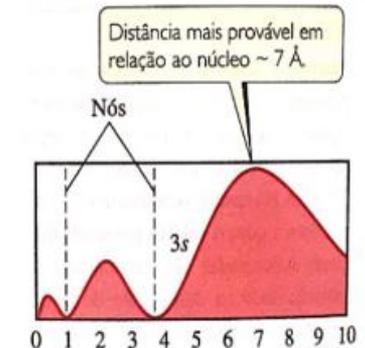
n	l	m	Número de orbitais na camada	Total de elétrons na camada
1	0 (s)	0	1	2
2	0 (s) 1 (p)	0 -1, 0, +1	1 3	8
3	0 (s) 1 (p) 2 (d)	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2	1 3 5	18
4	0 (s) 1 (p) 2 (d) 3 (f)	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	1 3 5 7	32



● estes orbitais não existem

● estes orbitais não se encontram ocupados

Representações dos orbitais



Probabilidade

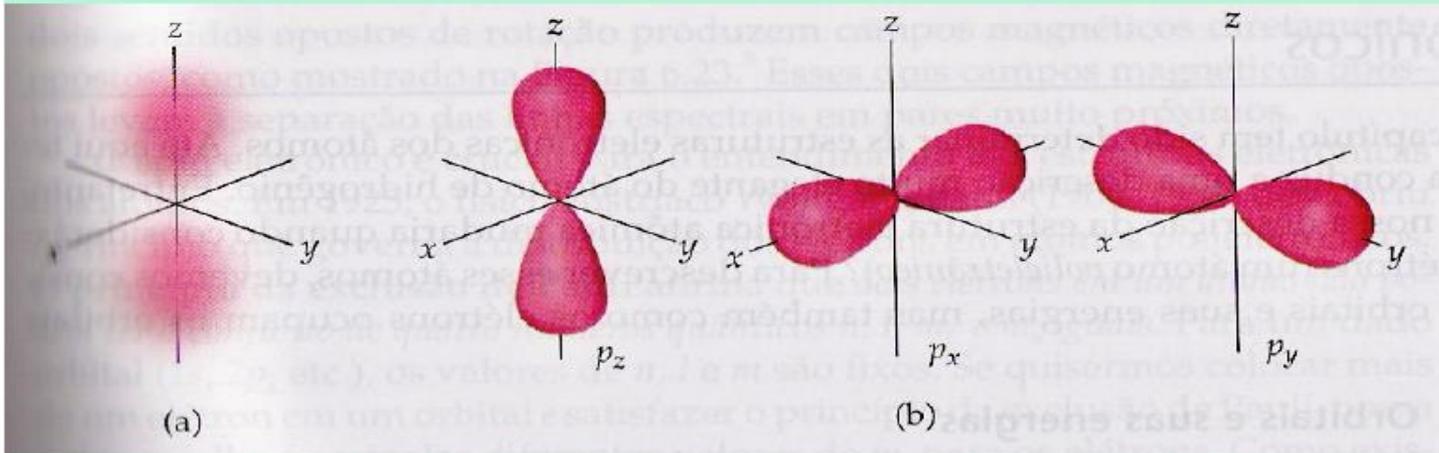
Distância em relação ao núcleo, r (Å)

Representações de superfícies limite



- Para um orbital ns , o número de picos é igual a n , e o pico mais externo é maior que os internos.
- Para um orbital ns , o número de **nós** (número de pontos em que a função de probabilidade é igual a zero) é igual a $n-1$.
- À medida que n aumenta, a densidade eletrônica torna-se mais espalhada, ou seja, existe maior probabilidade de localizar o elétron mais distante do núcleo.

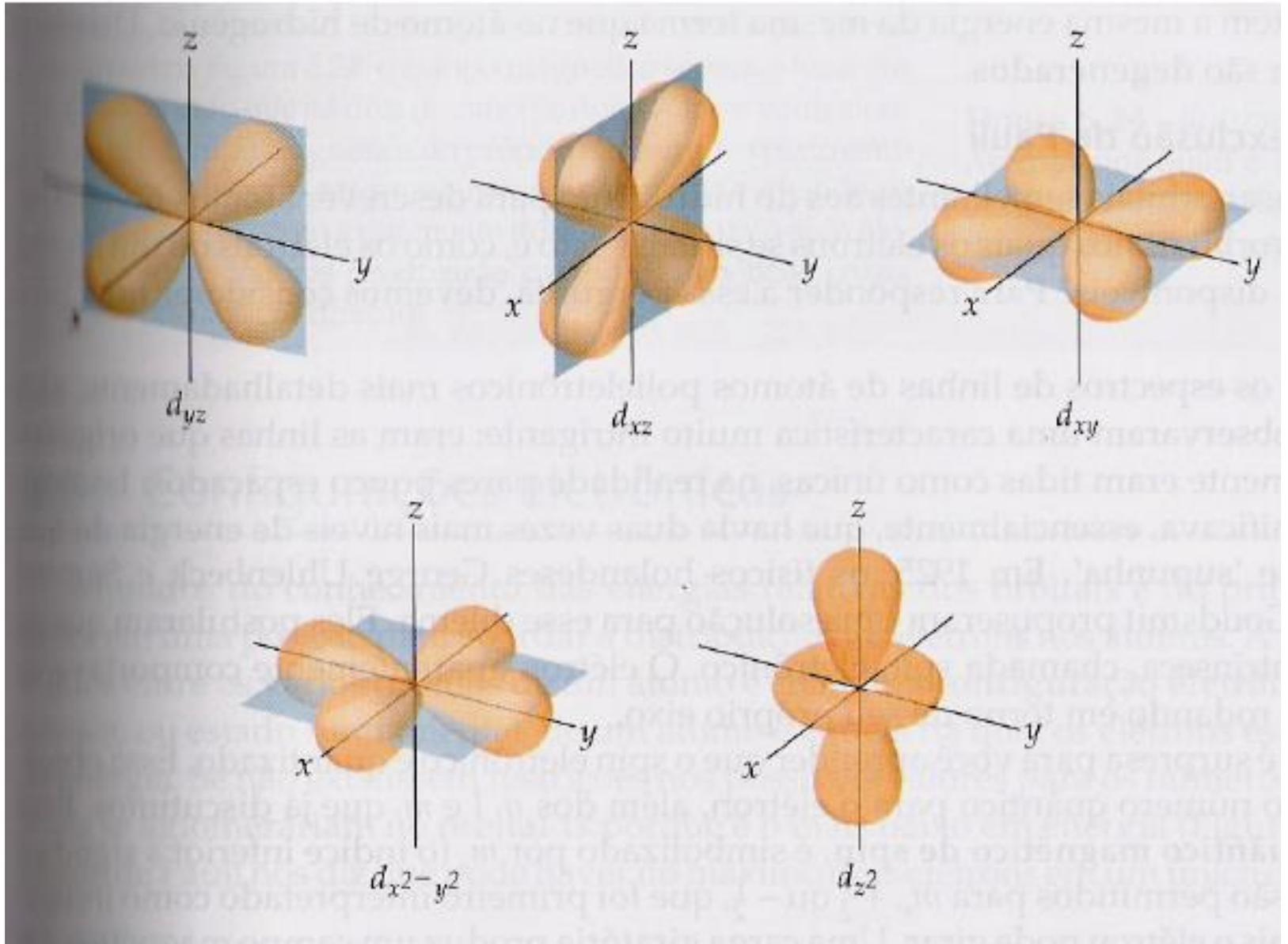
ORBITAIS p



- a) Distribuição de densidade eletrônica de um orbital $2p$.
- b) Representações dos três orbitais p .

A densidade eletrônica para um orbital p está concentrada em duas regiões ao lado do núcleo, separada por um nó localizado no núcleo.

Os orbitais d



“Um orbital atômico corresponde a uma função de onda que pode ser representada de várias formas. O que realmente nos interessa é o quadrado da função de onda (a densidade de probabilidade). É possível representar a densidade de elétrons por pontos. Apenas para simplificar, o que fazemos normalmente é traçar um contorno nas regiões com maior concentração de pontos.”

Portanto, deve-se ter em mente que estas representações são apenas funções matemáticas. O contorno que é traçado acaba sendo utilizado como a representação do orbital atômico

Pratique

Mostre o conjunto dos quatro números quânticos para cada elétron do átomo de oxigênio ($Z = 8$) no estado fundamental.

1s

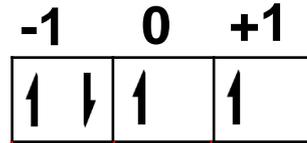


2s



2p

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



n

1 1

2 2

2 2 2 2

l

0 0

0 0

1 1 1 1

m

0 0

0 0

-1 -1 0 +1

s

+1/2 -1/2

+1/2 -1/2

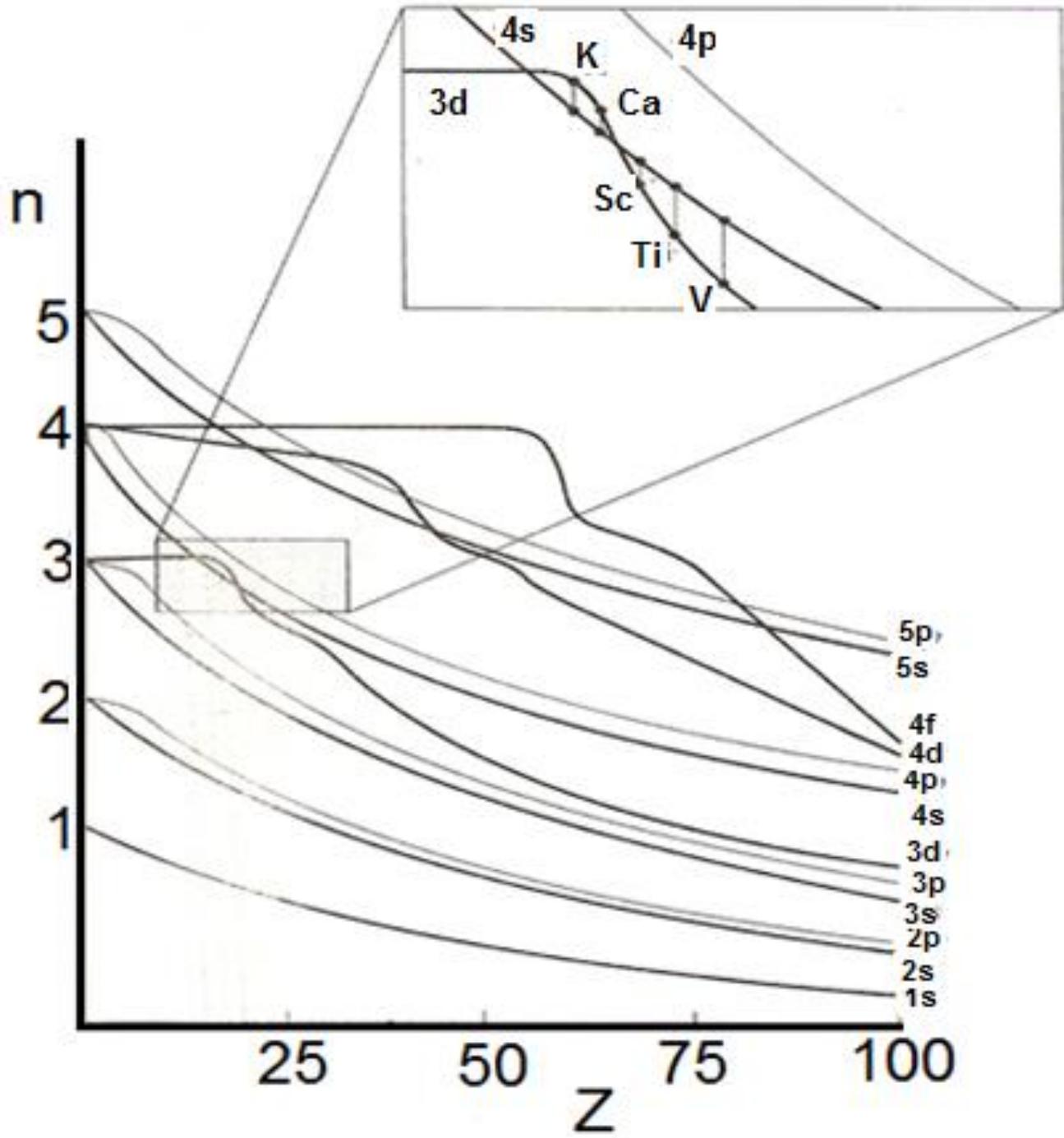
+1/2 -1/2 +1/2 +1/2

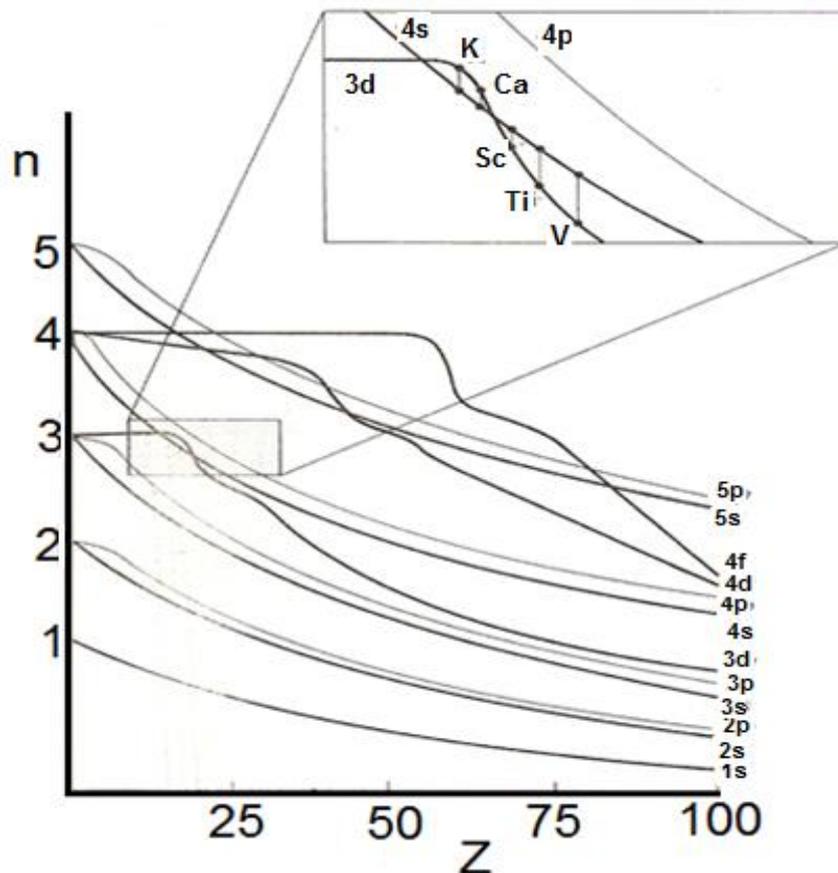
Configurações eletrônicas

Configurações eletrônicas

Elemento	Z	Diagrama de orbital				Configuração eletrônica
		1s	2s	2p	3s	
H	1	↑				1s ¹
He	2	↑↓				1s ²
Li	3	↑↓	↑			1s ² 2s ¹
Be	4	↑↓	↑↓			1s ² 2s ²
B	5	↑↓	↑↓	↑		1s ² 2s ² 2p ¹
C	6	↑↓	↑↓	↑ ↑		1s ² 2s ² 2p ²
N	7	↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑		1s ² 2s ² 2p ³
O	8	↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑		1s ² 2s ² 2p ⁴
F	9	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑		1s ² 2s ² 2p ⁵
Ne	10	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓		1s ² 2s ² 2p ⁶
Na	11	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹ [Ne]3s¹
Mg	12	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² [Ne]3s²







n=1
n=2
n=3
n=4
n=5
n=6
n=7

ns^1
 ns^2

$(n-1)d ns^2$

ns^2np^1
 ns^2np^2
 ns^2np^3
 nc^2nn^4
 ns^2np^5
 ns^2np^6

H	ns^2																He				
Li	Be	$(n-1)d ns^2$														B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	$(n-1)d ns^2$														Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn				
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt													

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Configurações eletrônicas dos elementos de transição

V d^3s^2	Cr d^5s^1	Mn d^5s^2	Fe d^6s^2	Co d^7s^2	Ni d^8s^2	Cu $d^{10}s^1$
Nb d^4s^1	Mo d^5s^1	Tc d^6s^1	Ru d^7s^1	Rh d^8s^1	Pd $d^{10}s^0$	Ag $d^{10}s^1$
Ta d^3s^2	W d^4s^2	Re d^5s^2	Os d^6s^2	Ir d^7s^2	Pt d^9s^1	Au $d^{10}s^1$

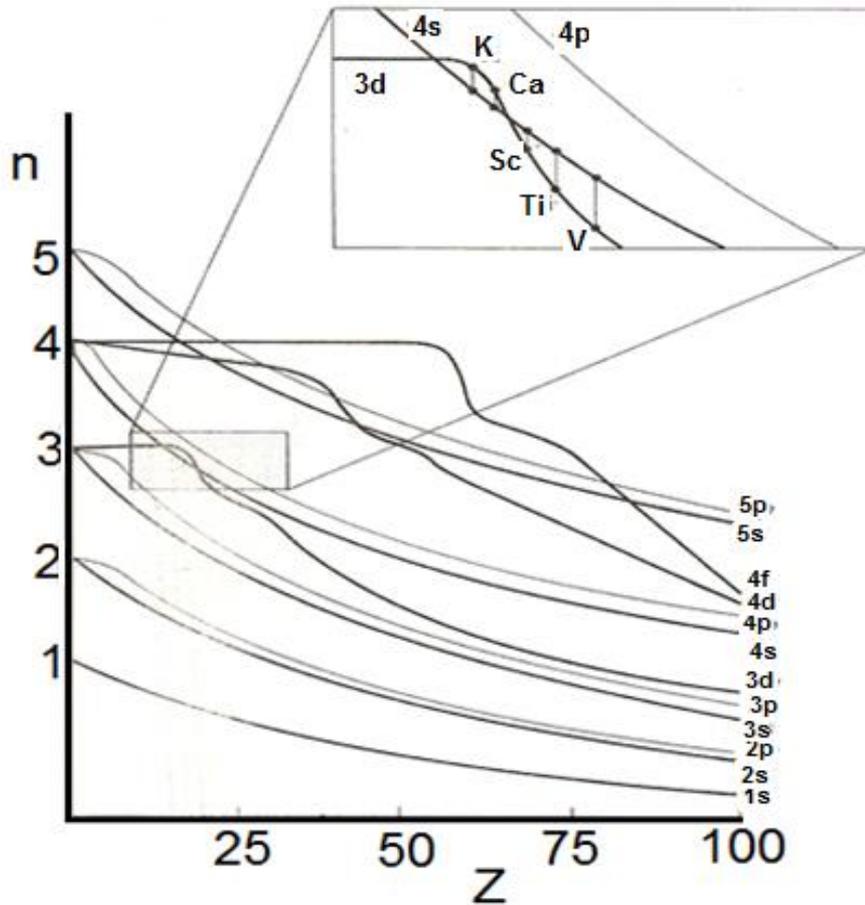
A Química dos elementos dos Blocos d e f. Chris J. Jones; Trad. Maria Vargas. Porto Alegre: Bookman, 2002.

- A configuração eletrônica do cálcio ($Z = 20$) é $[\text{Ar}]4s^2$
- A configuração eletrônica do íon Ca^{2+} é $[\text{Ar}]4s^0 = [\text{Ar}]$
- A configuração eletrônica do Ti ($Z = 22$) é $[\text{Ar}] 4s^2 3d^2$
- Qual é a configuração eletrônica do íon Ti^{3+} ?

$4s^1 3d$

$4s 3d^1$





Ti ($Z = 22$) é $[\text{Ar}] 4s^2 3d^2$

- A configuração eletrônica do íon Ti^{3+} é:

