



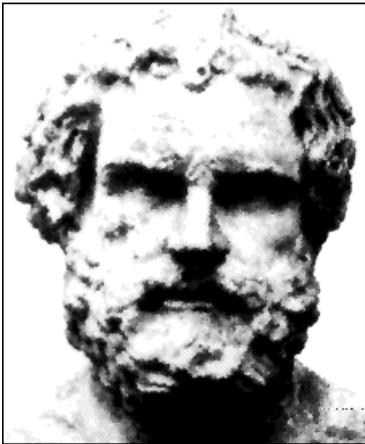
Modelo Atômico

www.greencat.ufscar.br



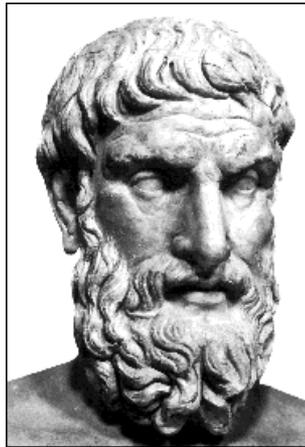
Filosofía grega

Demócrito



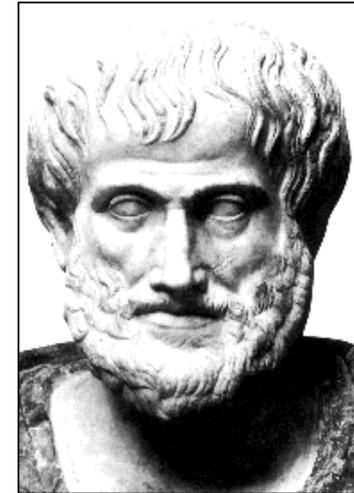
Abdera
(460-371 AC)

Epicuro



Samos
(341-270 AC)

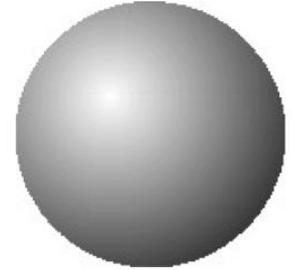
Aristóteles



Stagira- Macedonia
(384-322 AC)

Filosofia grega – Teoria atômica de Demócrito

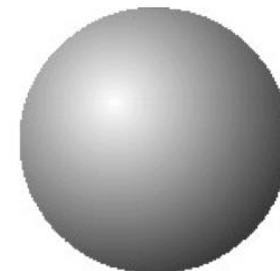
Matéria pode ser dividida até atingir uma partícula “indivisível”, o átomo (*ἄτομος*)



- 1. Toda matéria é composta de átomos, que são muito pequenos para serem vistos. Os átomos não podem ser divididos em porções menores.**
- 2. Entre os átomos há espaços vazios.**
- 3. Os átomos são completamente sólidos.**
- 4. Os átomos são homogêneos, sem nenhuma estrutura interna.**
- 5. Os átomos diferem uns dos outros quanto:**
 - a) aos seus tamanhos;**
 - b) às suas formas;**
 - c) às suas massas.**

Filosofia grega – Epicuro

Os átomos se encontram, fortuitamente, por causa de uma leve inclinação em sua trajetória (clinâmen), o que os faria chocar-se uns com os outros para constituir a matéria.



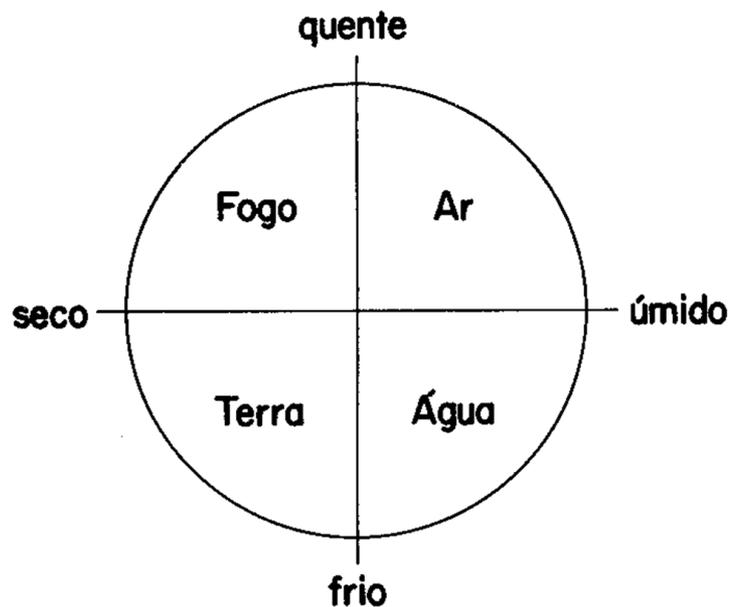
Acredita que o átomo é composto por matéria, assim como Demócrito.

Filosofia grega – Aristóteles

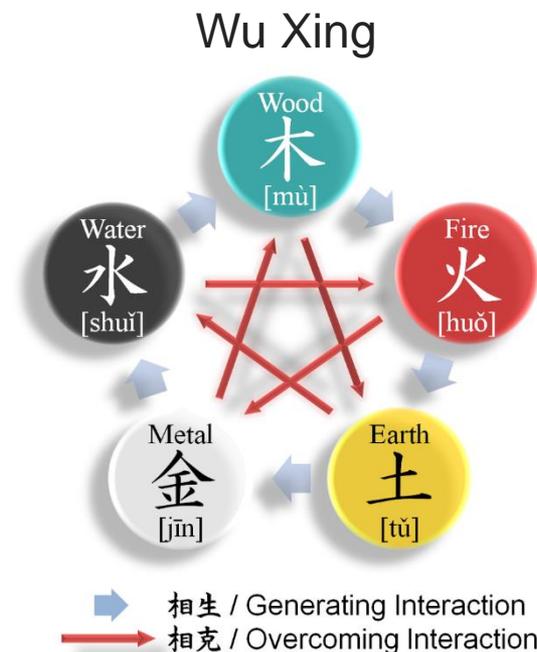
Era contra a teoria atômica!

Usou a teoria cosmogênica de Empédocles (Agrigento, 490 a.C. - 430 a.C.), de que os elementos fundamentais eram terra, fogo, água e ar (bastante aceita até século XVIII)

Esses elementos explicam a natureza e a complexidade da toda matéria.



Aristotle adicionou um quinto elemento, o éter;



Atomismo no renascimento

Girolamo Fracastoro (1478-1553): médico que escreveu sobre atomismo

Giordano Bruno (1588): “A divisão das coisas naturais tem um limite; algo indivisível existe. A divisão de coisas naturais atinge as menores e últimas partes, que não são perceptíveis com a ajuda de instrumentos humanos.”

Atomistas da época:

Rene Descartes (1595-1650) - Filósofo;

Francis Bacon (1561-1626) – Filósofo e cientista;

Isaac Newton (1624-1727) - cientista;

Robert Boyle (1627-1691) – filósofo e cientista;

Pierre Gassendi (1592-1655) – filósofo e cientista considerado o reavivador do atomismo: Átomos têm algumas das propriedades físicas dos objetos visíveis e eles definem sua extensão, tamanho, forma, peso e solidez. Os átomos colidem e aglomeram, resultando em eventos perceptíveis no mundo.

Escreveu o tratado “*De vita, moribus, et doctrina Epicuri libri octo* “.

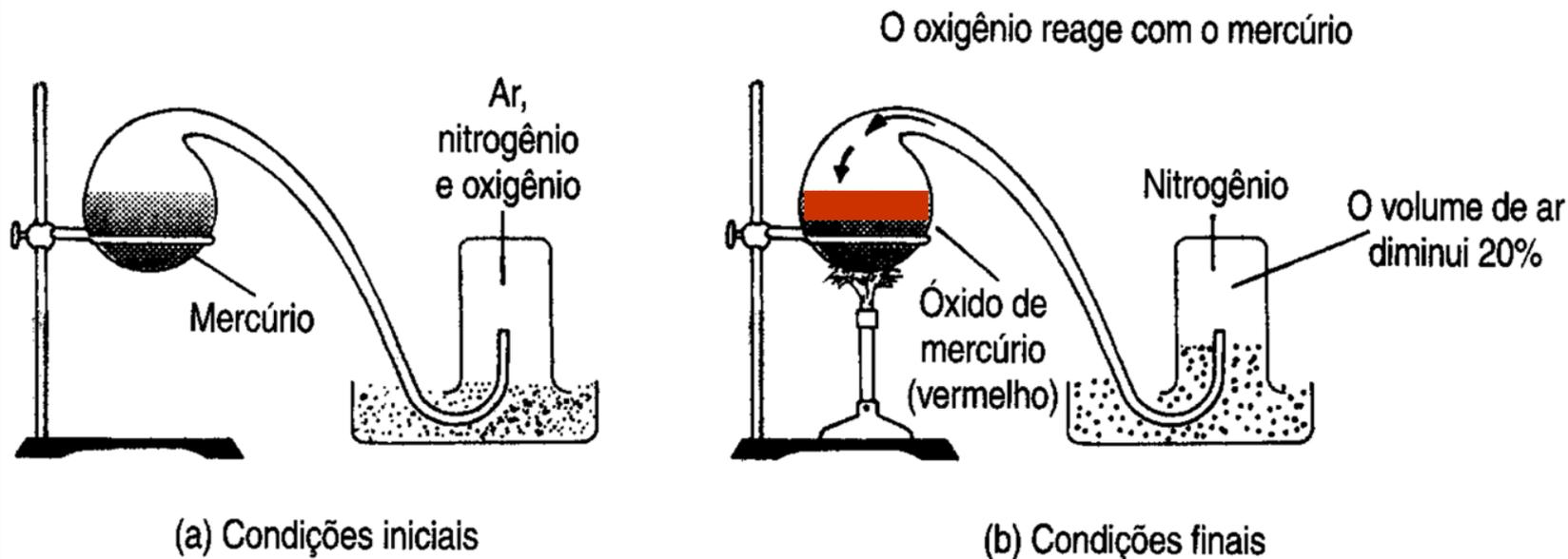


Entendendo a matéria



Antoine Laurent Lavoisier (1736-1806)

“Em uma reação química que se processa em um sistema fechado, a soma das massas dos reagentes é igual à soma das massas dos produtos.”

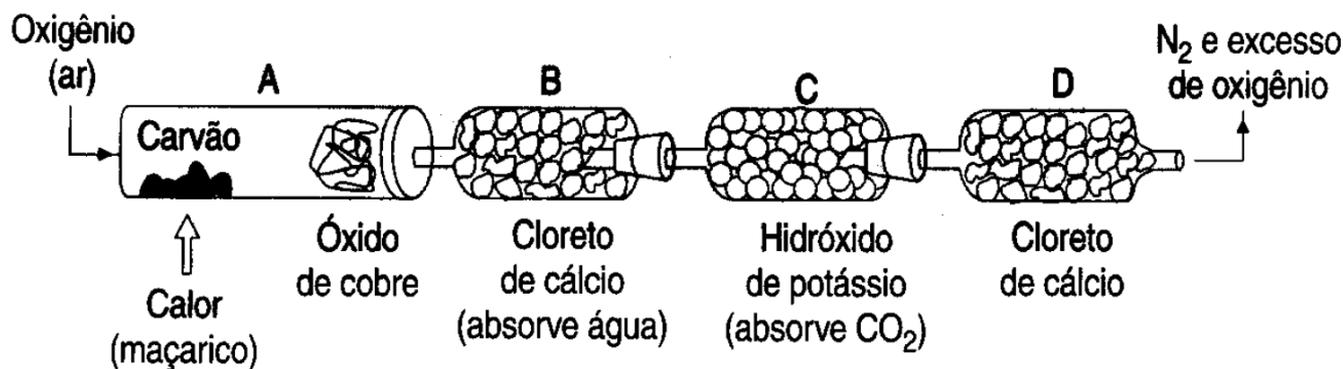


Entendendo a matéria



Joseph Louis Proust (1756-1826)

“A proporção em massa das substâncias que reagem e que são produzidas em uma reação química é sempre constante e invariável”



Aparato para absorção de dióxido de carbono. O tubo A é o reator. A função do CuO é converter o CO , produzido pela combustão incompleta do carvão, em CO_2 . Os tubos B e D eliminam a água que entra com o ar por qualquer uma das extremidades do aparelho. No tubo C é absorvido todo o CO_2 produzido.

Entendendo a matéria



Jeremias Benjamin Richter (1762-1807)

" A massa de dois elementos que se combinam separadamente com a mesma massa de um elemento, são as mesmas, suas múltiplas ou submúltiplas, com que eles se combinam entre si, caso isso seja possível."



$$m\text{Cl}_2/m\text{O}_2 = 71/16$$

Modelo atômico de Dalton



John Dalton (1766-1844)

Baseado nos estudos de proporcionalidade de Proust e Ritchen

Retoma o Átomo de Demócrito!

1. **Uma substância elementar pode ser subdividida até se conseguir partículas indivisíveis chamadas átomos.**
2. **Os átomos de um mesmo elemento são todos idênticos.**
3. **Os átomos de elementos diferentes têm massas diferentes.**
4. **É impossível criar ou destruir um átomo de um elemento. (Os átomos trocam de “parceiros” para produzir novas substâncias.)**

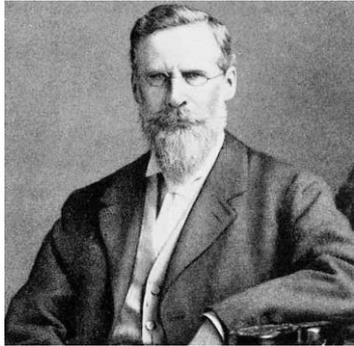
5. **A menor porção de um composto é um “átomo composto”.**
6. **Quando dois átomos se combinam para formar um certo composto químico, formam “átomos compostos” idênticos, com a mesma proporção de átomos de cada um dos elementos.**
7. **Dois ou mais átomos podem se combinar de maneiras diferentes para formar mais de um tipo de “átomo composto”.**
8. **Os compostos mais estáveis e abundantes formados por dois elementos consistem em “átomos compostos” formados por um átomo de cada tipo.**

Modelo atômico de Dalton

-  Hidrogênio
-  Oxigênio
-  Nitrogênio
-  Carbono
-  Enxofre
-  Cobre
-  Fósforo
-  Água
-  Monóxido de carbono
-  Dióxido de carbono
-  Amônia
-  Ácido sulfúrico

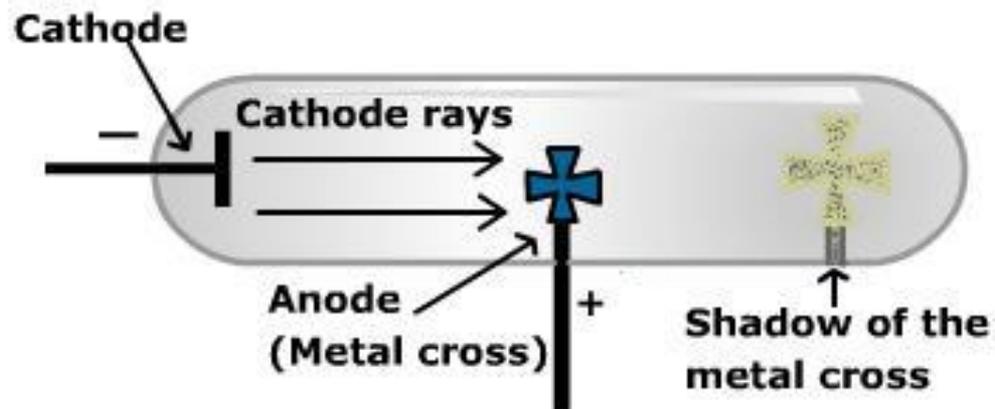
Símbolo	Nome	Massa
	hidrogênio	1
	nitrogênio	5
	carbono	54
	oxigênio	7
	magnésio	20
	ferro	50
	ouro	190

Mas o átomo é mesmo indivisível?

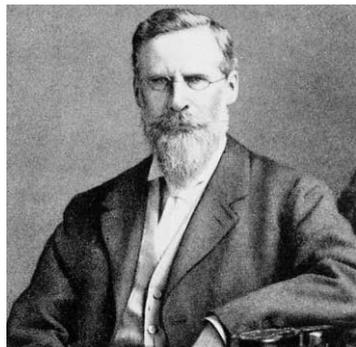


William Crookes (1832-1919)

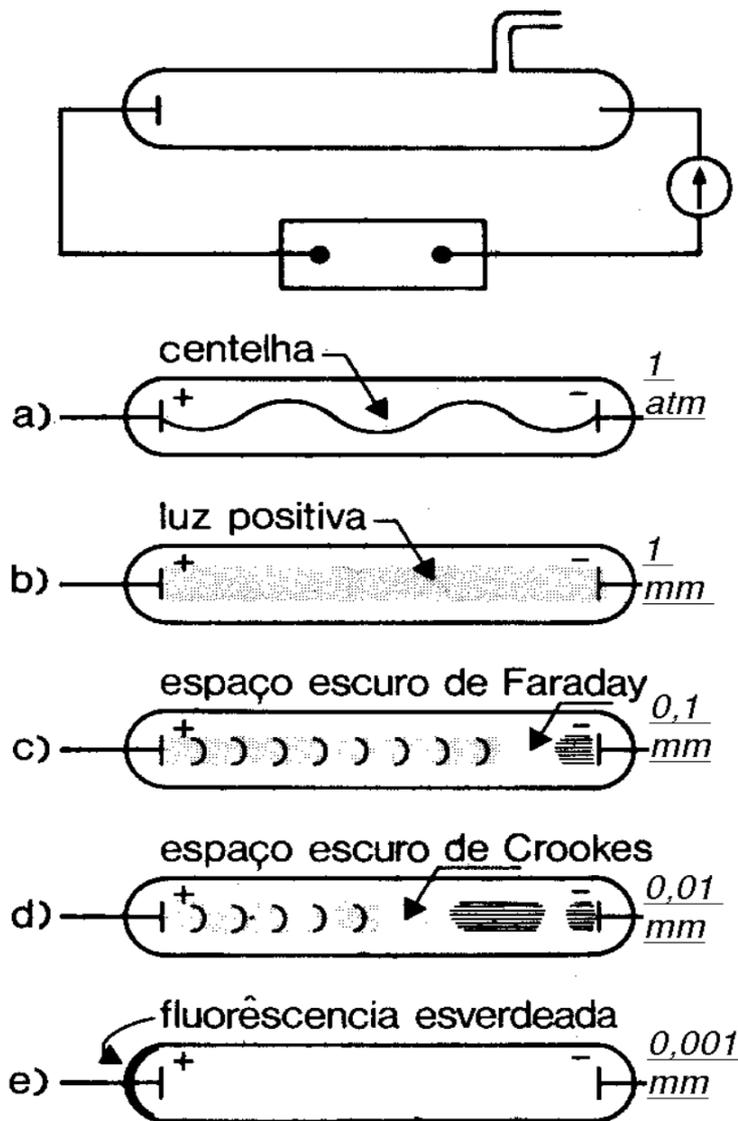
Inventa o tubo de raio catódico



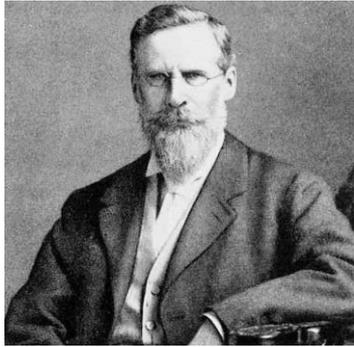
Mas o átomo é mesmo indivisível?



William Crookes



Mas o átomo é mesmo indivisível?



William Crookes (1832-1919)



O experimento dá um indício de que, mesmo em vácuo, existe um transporte de energia entre cátodo e ânodo. De onde isso se origina?

Em pressões positivas, há emissão de cor do ar quando há descarga elétrica. Porque?

Descoberta do elétron

- 1) Se um objeto é colocado no caminho do raio catódico, uma sombra é formada no fim do tubo => os raios viajam em linha reta.
- 2) O raio catódico pode empurrar uma palheta, inclinando-a contra a força da gravidade => pode executar trabalho.
- 3) O raio catódico é deslocado do caminho de uma linha reta na presença de campos magnéticos, significando que estão de alguma forma relacionados (1855).
- 4) Em 1895 (dois anos antes de Thomson anunciar o elétron) mostrou-se que os raios são carregados negativamente.
- 5) J.J. Thomson é o primeiro a defletir o raio catódico com um campo elétrico (1897). Os raios defletem na direção do positivo, confirmando ser negativamente carregado.



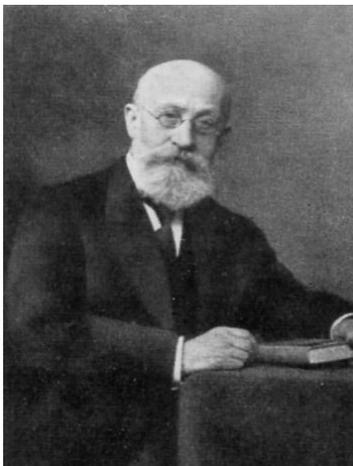
Joseph John Thomson (1856-1940)

“Visto que os raios catódicos transportam uma quantidade de eletricidade negativa, são desviados por uma força eletrostática como se fossem negativamente carregados, e sofrem a ação de uma força, exatamente, como se fosse um corpo carregado negativamente, movendo-se ao longo do caminho seguido pelos raios, não vejo como fugir à explicação de que eles são cargas de eletricidade negativa transportadas por partículas de matéria.”



Descoberta do Próton

Eugen Goldstein (1850-1930)

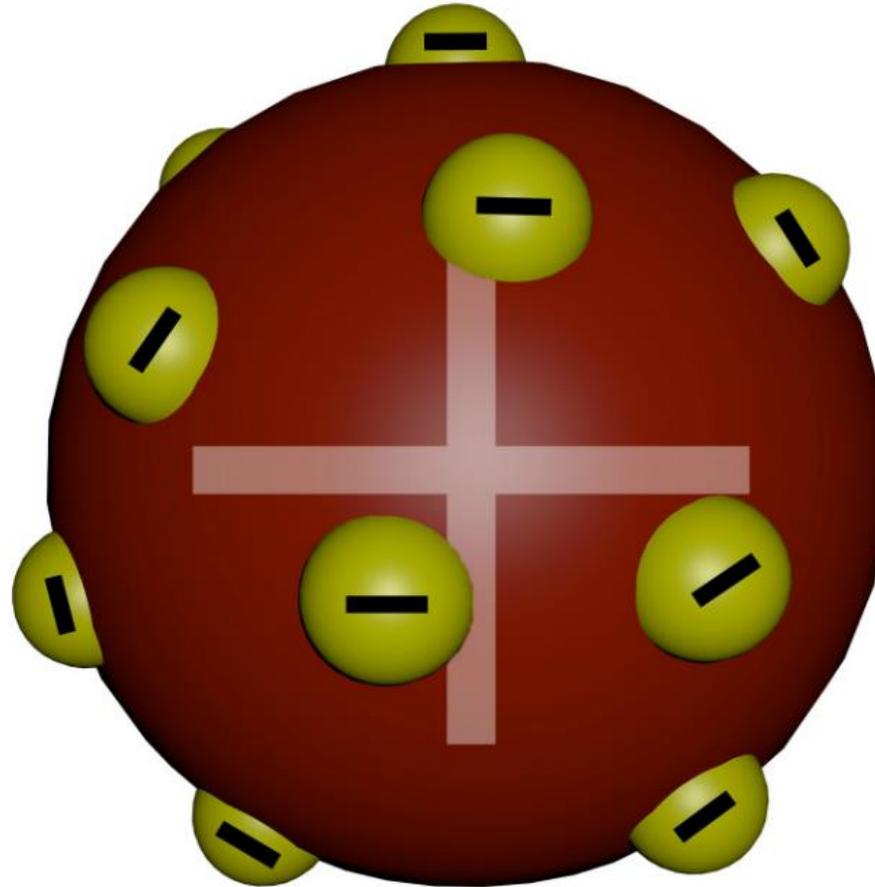


Canal Rays

Experimento com o tubo catódico, porém contendo baixa pressão de hidrogênio (H_2). Junto com o fluxo de partículas em direção ao anodo, observa-se também fluxo de partículas em direção ao cátodo.

Fluxo de elétrons colide com H_2 , causa sua ionização para próton, que então segue para o cátodo

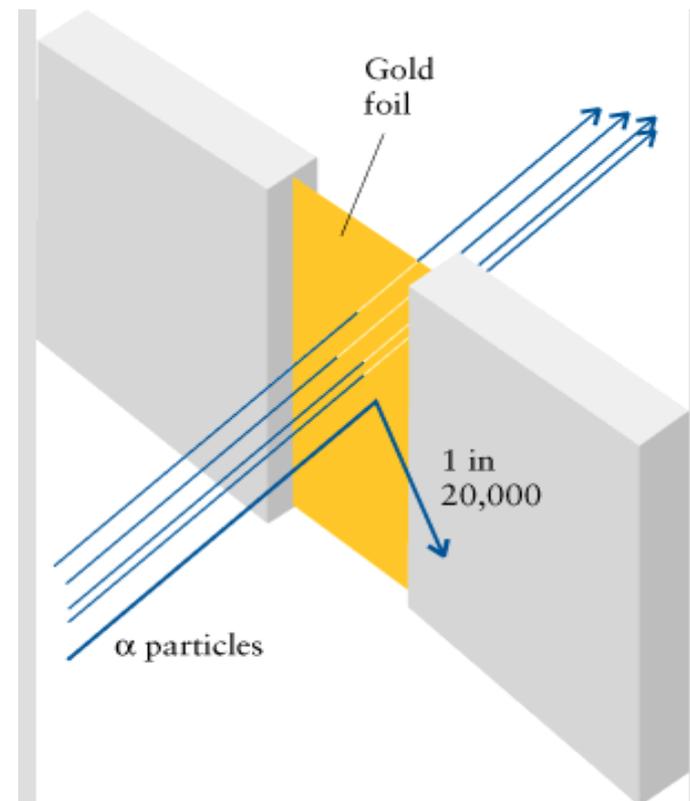
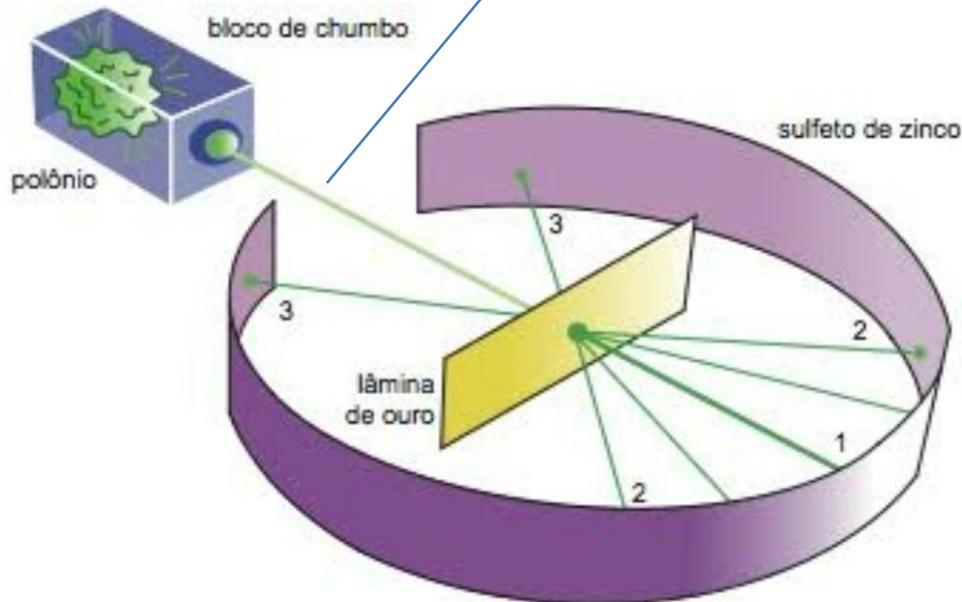
Modelo atômico de Thompson (Prêmio Nobel 1906)



Centro positivo com pequenas partículas negativas ligadas

Experimento de Rutherford

Radiação α (núcleo do He)

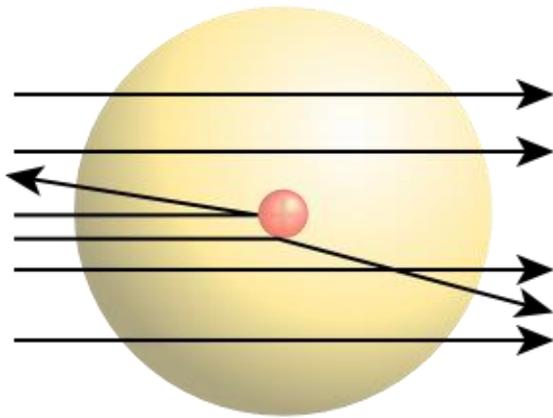


Maioria das partículas atravessam a folha de ouro, porém algumas defletiam em mais de 90 °!!!!

Conclusão de Rutherford:

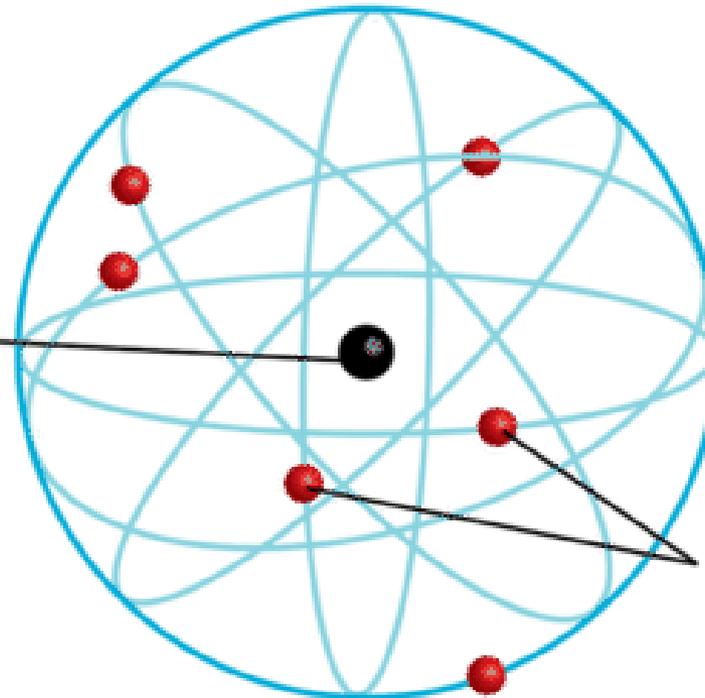
A maior parte do átomo é feito de espaço vazio, e a massa deste é concentrada em um minúsculo núcleo positivo.

Teoria atômica de Rutherford (Prêmio Nobel 1908)



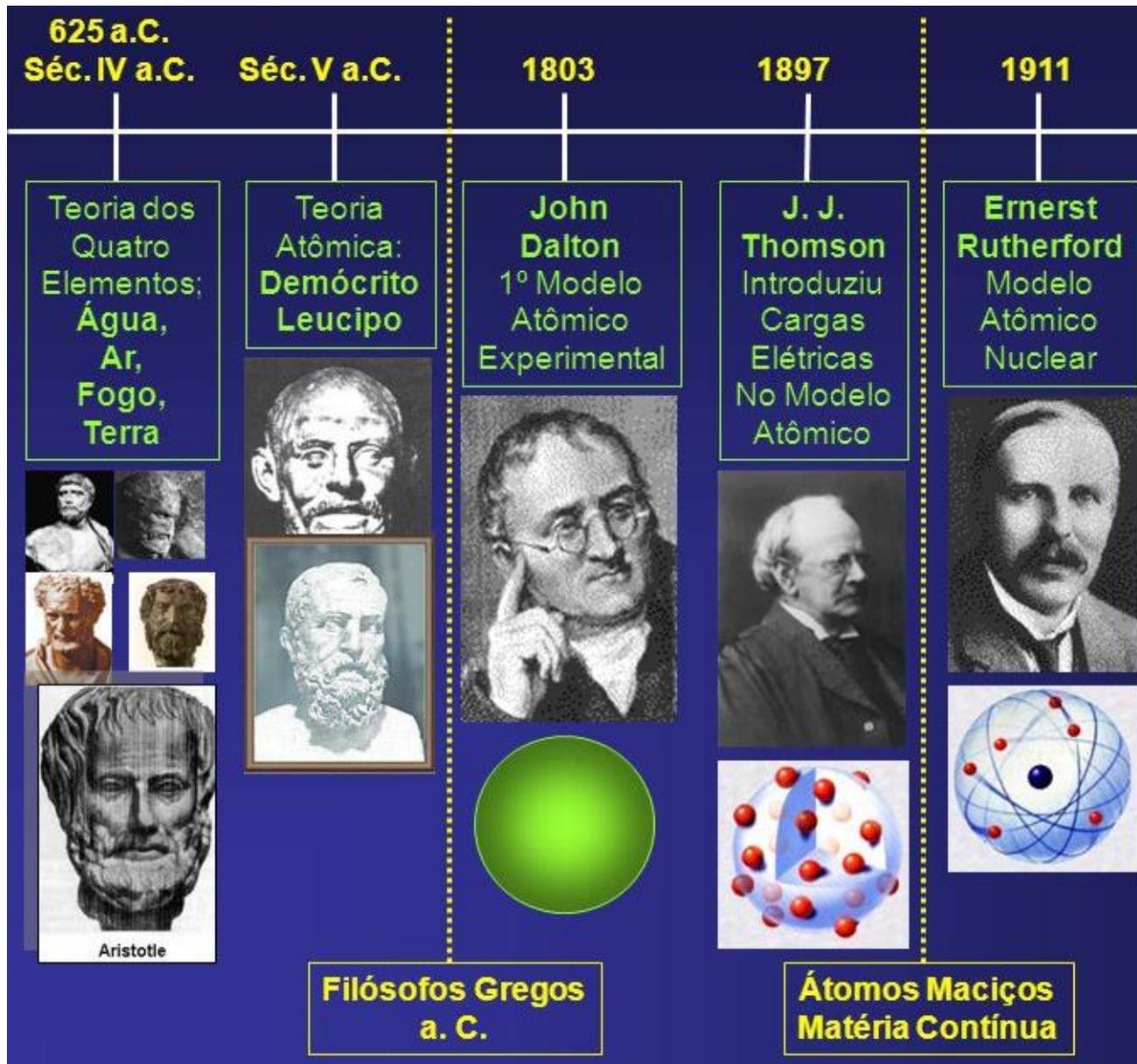
The Planetary Model
of an Atom

Positively Charged
Nucleus



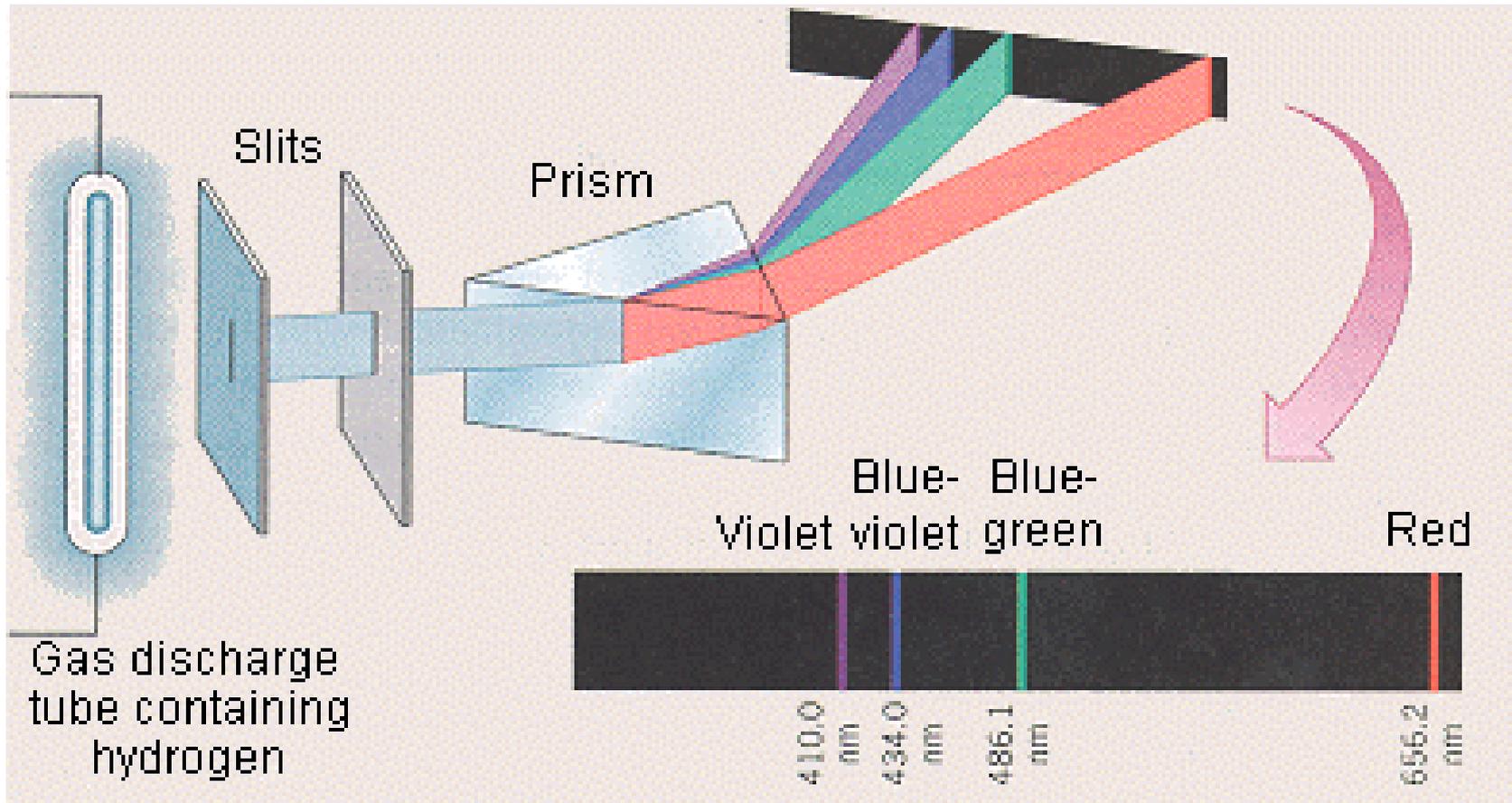
Negatively Charged
Electrons

Linha do tempo da teoria atômica

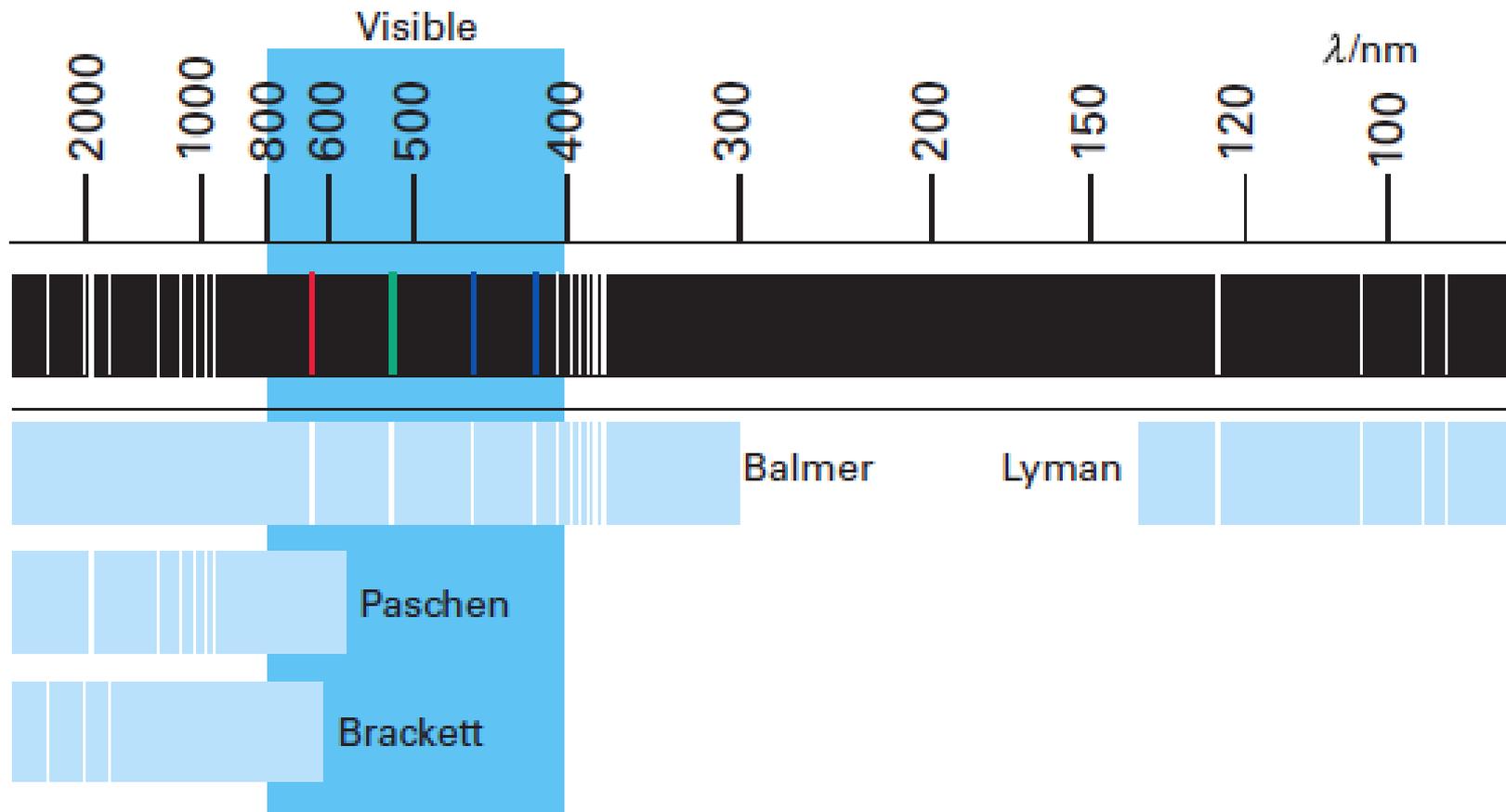


Voltando um pouco no tempo: Experimento de Balmer

1885 – Balmer identifica espectros de emissão do H_2 .



Linhas de absorção do átomo de hidrogênio



Equação de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = 109.667 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{ cm}^{-1}$$

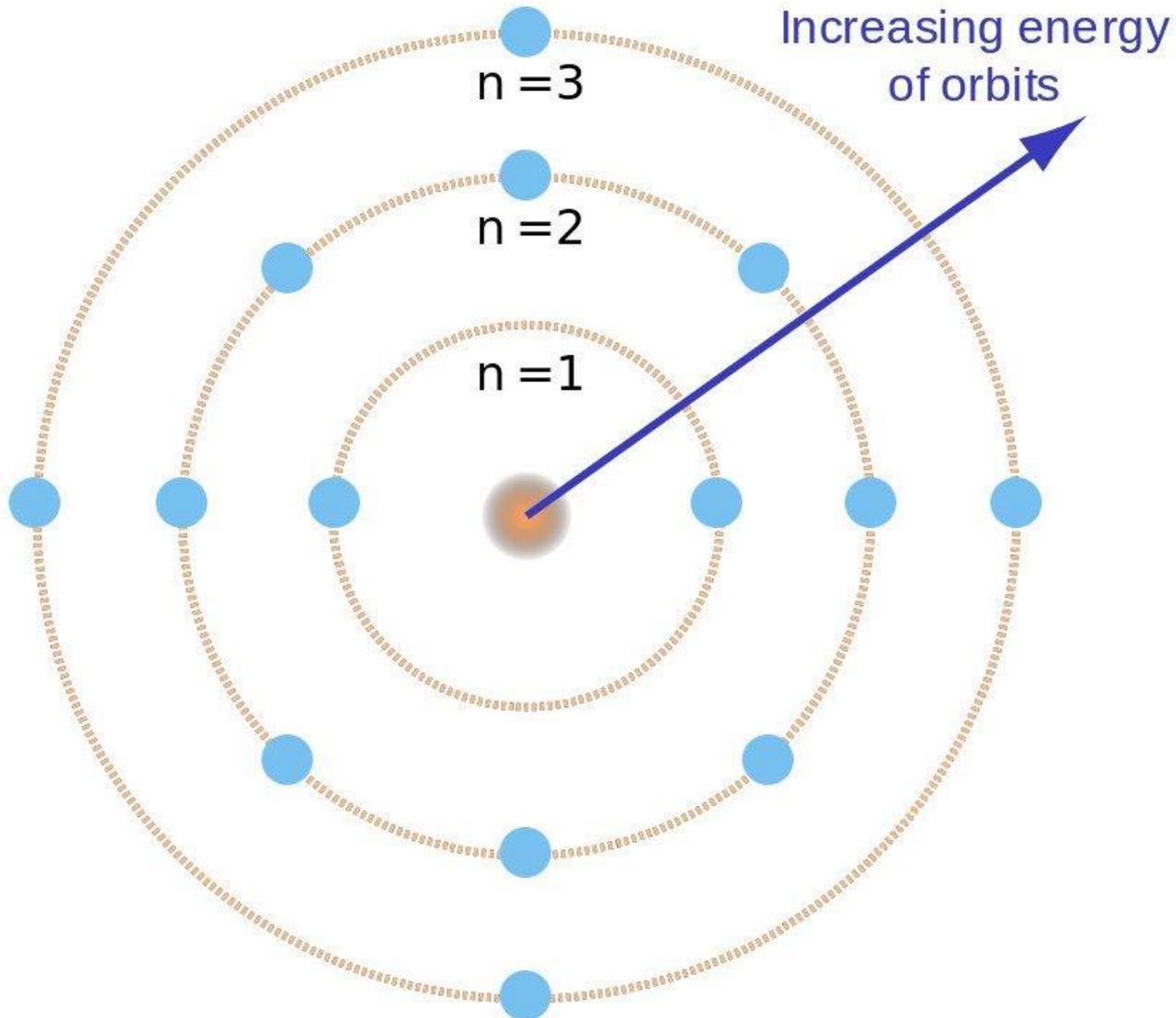
$R = \text{constante de Rydberg} = 109\,677,581 \text{ cm}^{-1}$

$n_1 = \text{número inteiro maior } n_2$

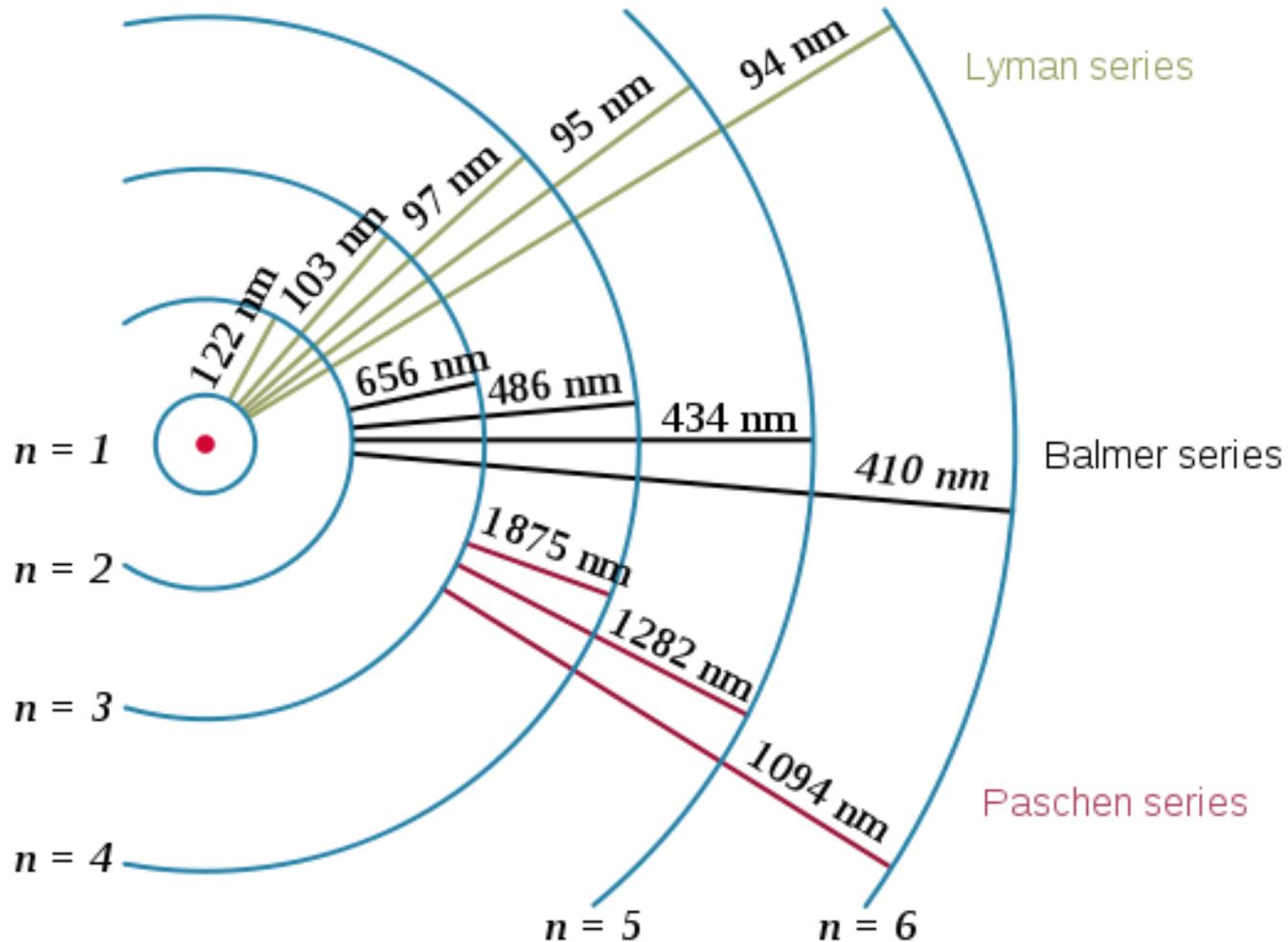
$n_2 = \text{número inteiro maior } 0$

- Essa equação consegue prever todos os comprimentos de onda de emissão do hidrogênio.
- Mas por que “n” tem que ser um número inteiro?

Modelo Atômico de Bohr (Nobel de Física de 1922)



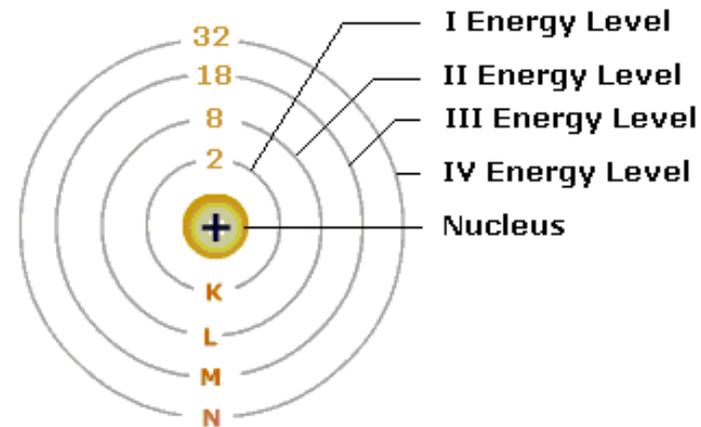
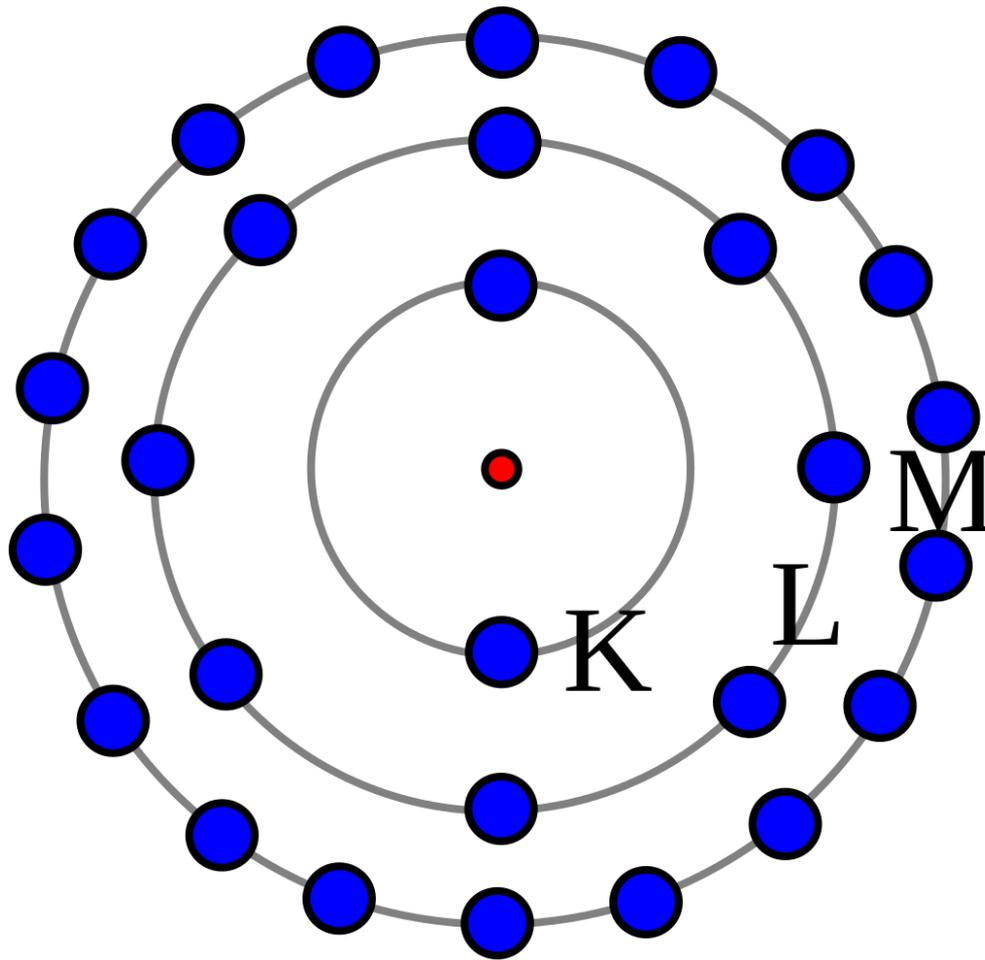
Modelo Atômico de Bohr



Lembrando que menor comprimento de onda significa maior energia

Modelo Atômico de Bohr

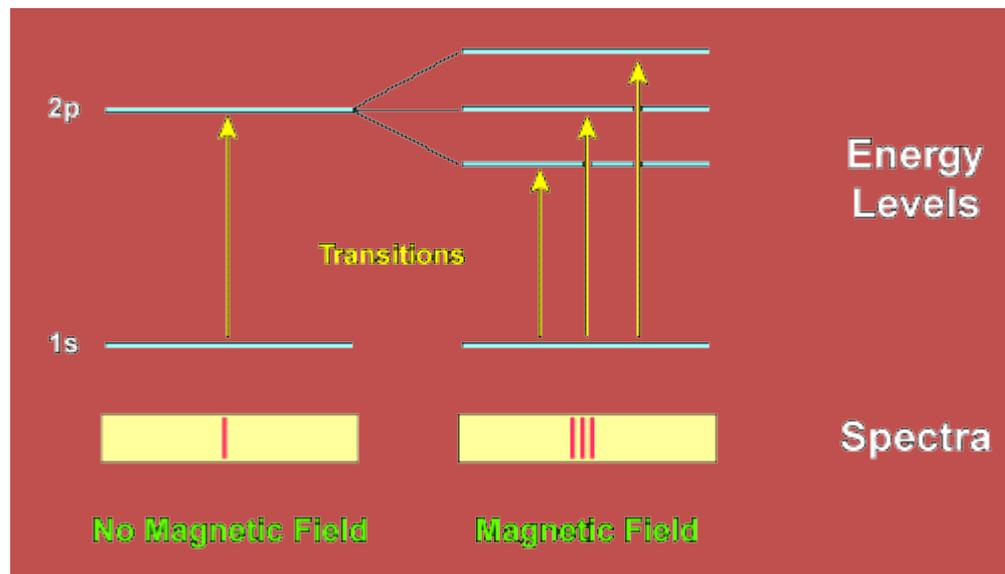
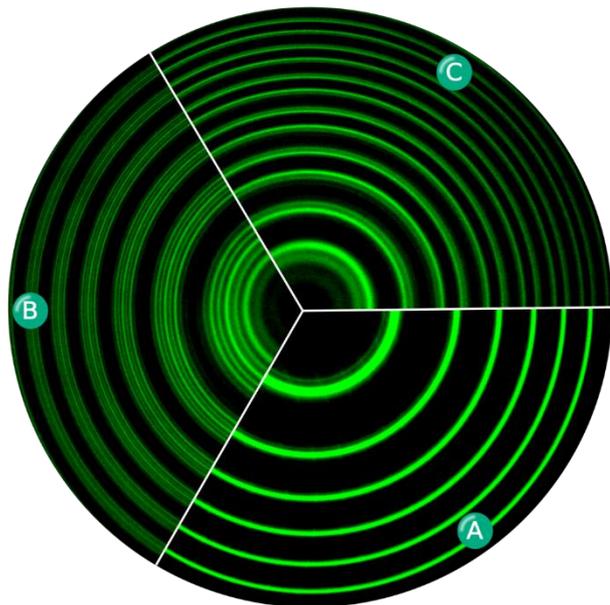
Número quântico principal (n) - 1913



Eficiente para explicar o átomo de hidrogênio

Efeitos inexplicáveis no átomo de Bohr

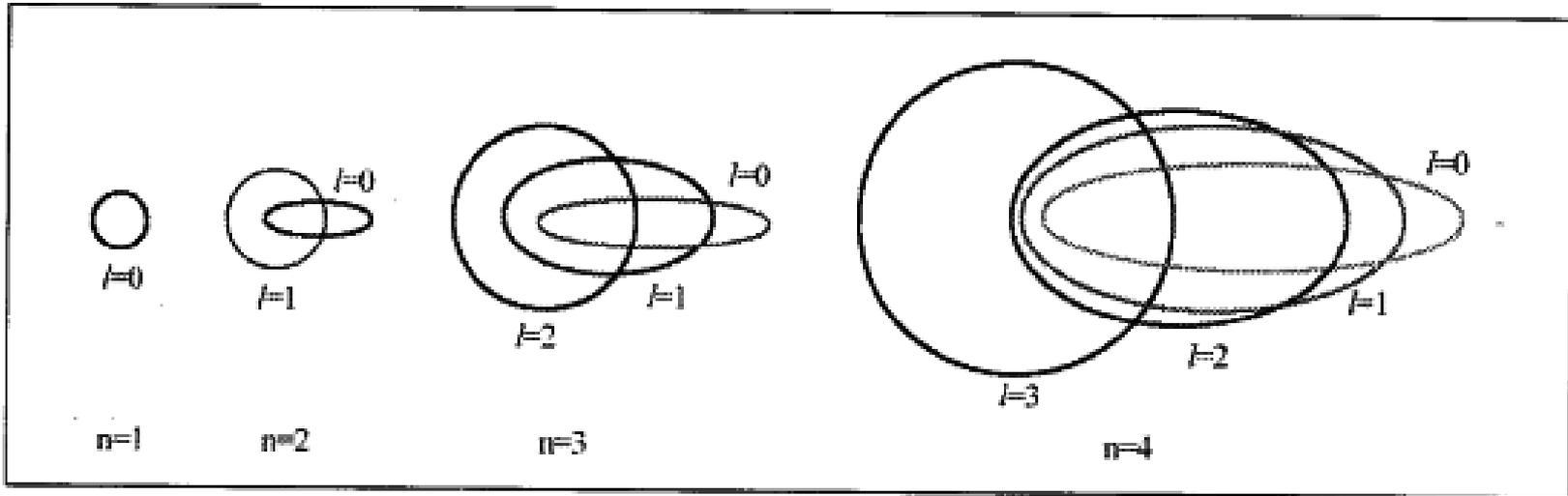
Efeito de Zeeman (Prêmio Nobel em 1902) – desdobramento das linhas espectrais na presença de campo magnético



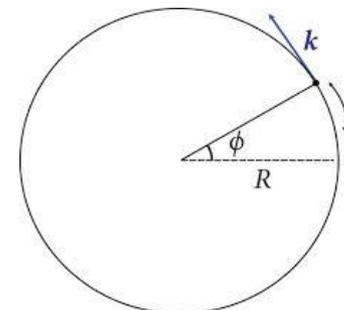
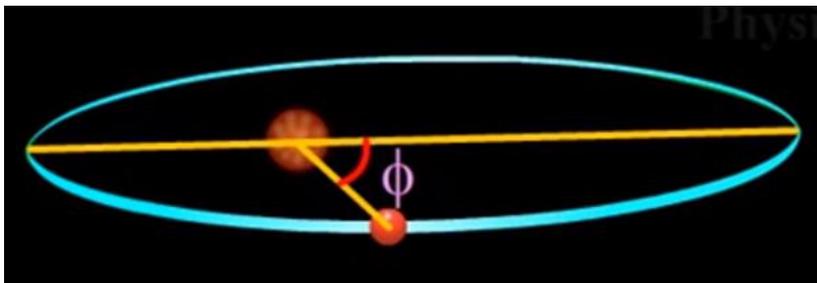
Efeito Stark – desdobramento das linhas espectrais na presença de campo elétrico

Modelo Atômico de Bohr-Sommerfeld

- Sommerfeld indicado ao Nobel 84 vezes



- Elétrons no mesmo nível de energia principal podem assumir diferentes orbitas.
- Poderiam existir diferenças de energia dentro do mesmo nível de energia principal. Isso estava ligado ao momento angular da orbita.



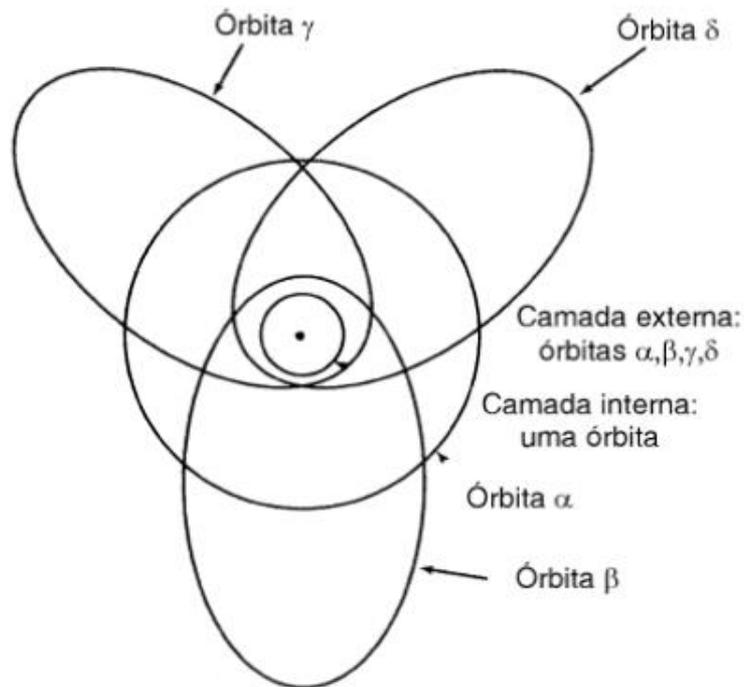
Número Quântico Azimutal (l) (Momento angular) - 1915

- Determina a forma do orbital
- Para um dado nível de energia (número quântico principal) são possíveis n-1 orbitais
- $l = n - 1$

Número quântico Principal (n)	Número Quântico Momento Angular l	Subcamadas
1	$l = 0$	s
2	$l = 0$ $l = 1$	s p
3	$l = 0$ $l = 1$ $l = 2$	s p d
4	$l = 0$ $l = 1$ $l = 2$ $l = 3$	s p d f

Número quântico magnético (m_l)

Sommerfeld- 1915



- **As orbitas elípticas podem assumir diferentes posições no espaço**
- **Descreve a orientação do orbital no espaço**
- **Descreve a orientação do orbital no espaço**
- $m_l = l, l-1, \dots, 0, \dots, +l$

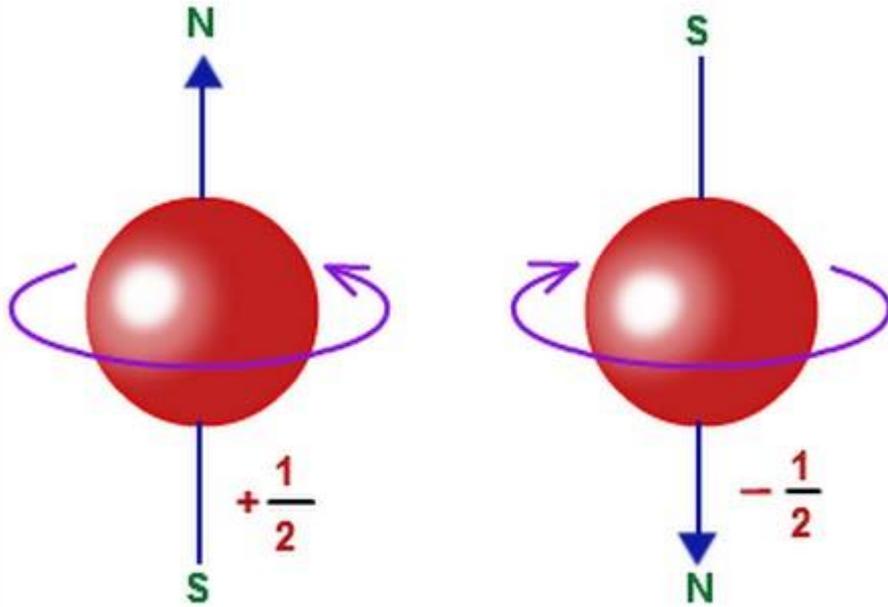
Número quântico magnético (m_l)

Sommerfield- 1915

n	l	Orbital designation	m_l	# of orbitals
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
	1	2p	-1, 0, 1	3
3	0	3s	0	1
	1	3p	-1, 0, 1	3
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5
4	0	4s	0	1
	1	4p	-1, 0, 1	3
	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5
	3	4f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7



Pauli (Nobel de Física de 1925) e o Número quântico de Spin (m_s)

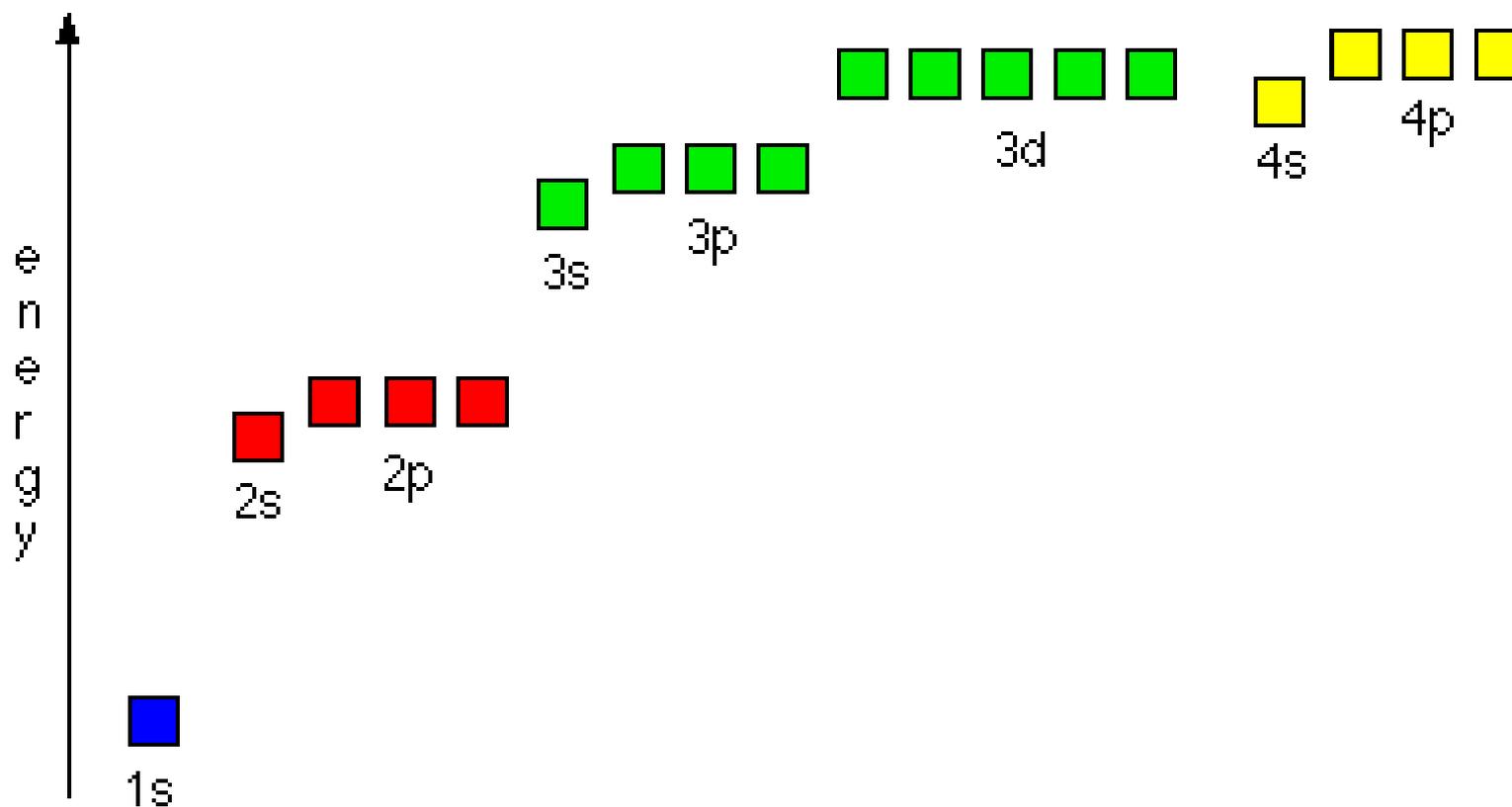


- Cada orbital pode ter, no máximo, 2 elétrons
- Elétrons podem girar em sentidos opostos ($m_s = -1/2$ ou $+1/2$)
- Apenas elétrons com spin contrários podem ocupar o mesmo orbital

Números quânticos

n	l	Orbital	m_l	m_s	Número de Combinações
1	0	1s	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2
2	0	2s	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2
2	1	2p	+1, 0, -1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6
3	0	3s	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2
3	1	3p	+1, 0, -1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6
3	2	3d	+2, +1, 0, -1, -2	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	10
4	0	4s	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2
4	1	4p	+1, 0, -1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6
4	2	4d	+2, +1, 0, -1, -2	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	10
4	3	4f	+3, +2, +1, 0, -1, -2, -3	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	14

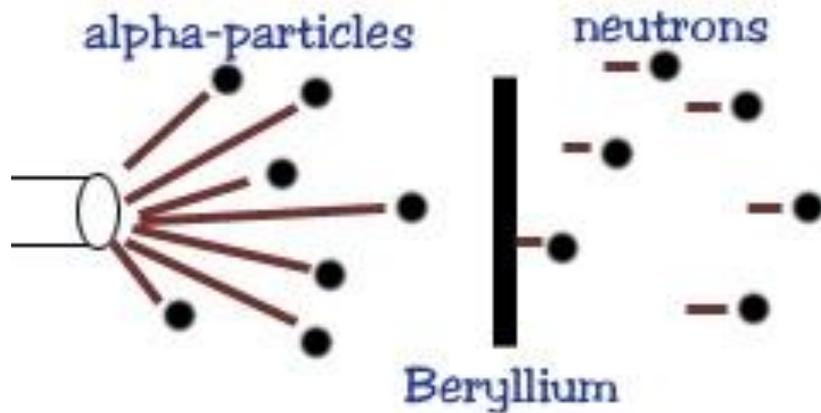
Diagrama de Energia



Descoberta dos nêutrons

James Chadwick (1932)

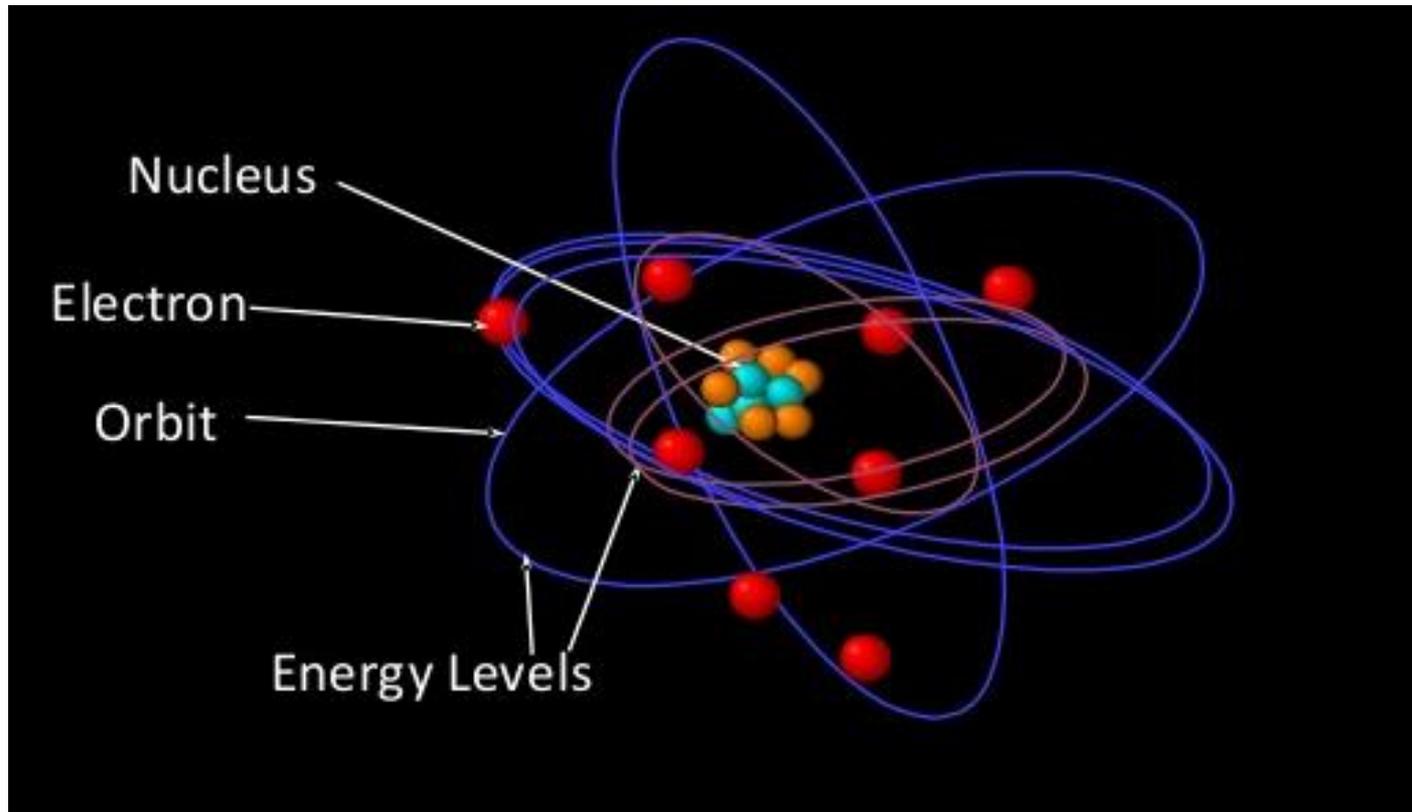
(Nobel de Física de 1935)



- Desloca prótons com alta velocidade, portanto deve ter uma massa alta!
- Mesma massa dos prótons, porém com carga neutra.

Átomo até esse momento

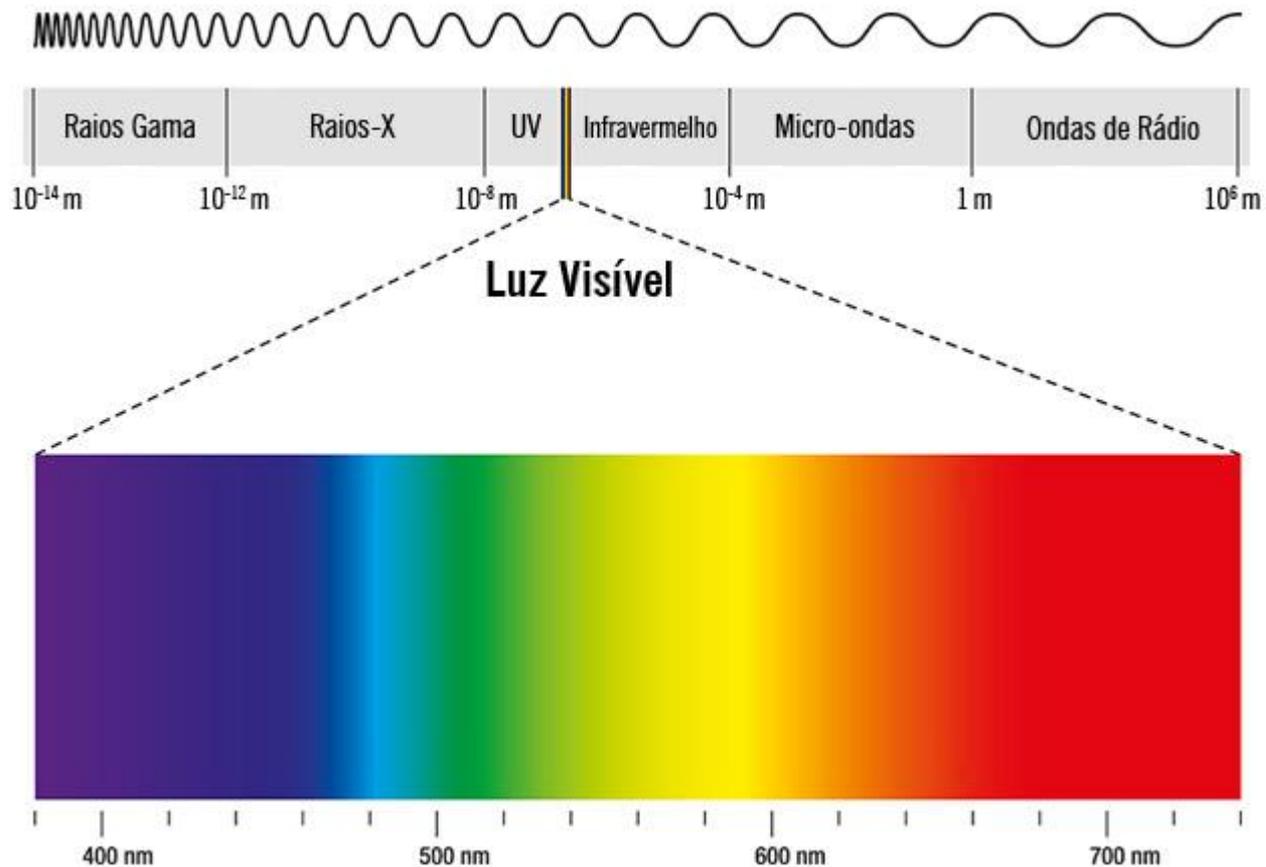
- Formado por um núcleo contendo prótons (carga positiva) e nêutrons (carga neutra)
- Núcleo circundado por elétrons em orbitas com diferentes energias (n), formas (l) e orientações no espaço (m_l)



Mas, de fato, o que é o elétron?

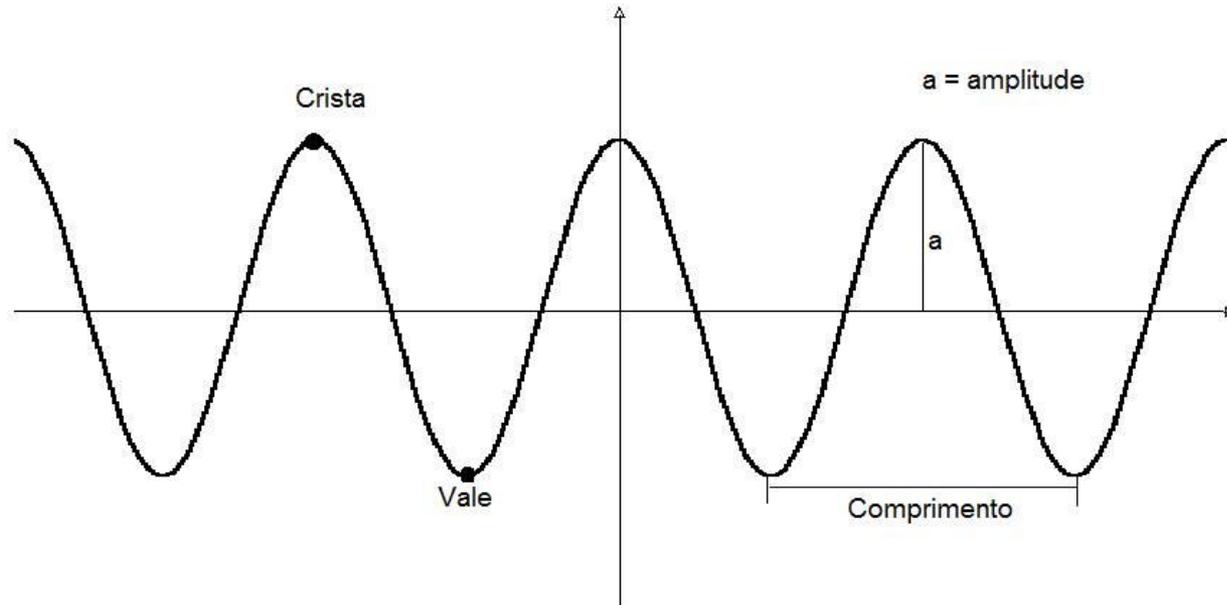
Uma partícula? Uma onda eletromagnética?

- Entendendo o que é uma radiação eletromagnética



- $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$

Onda eletromagnética

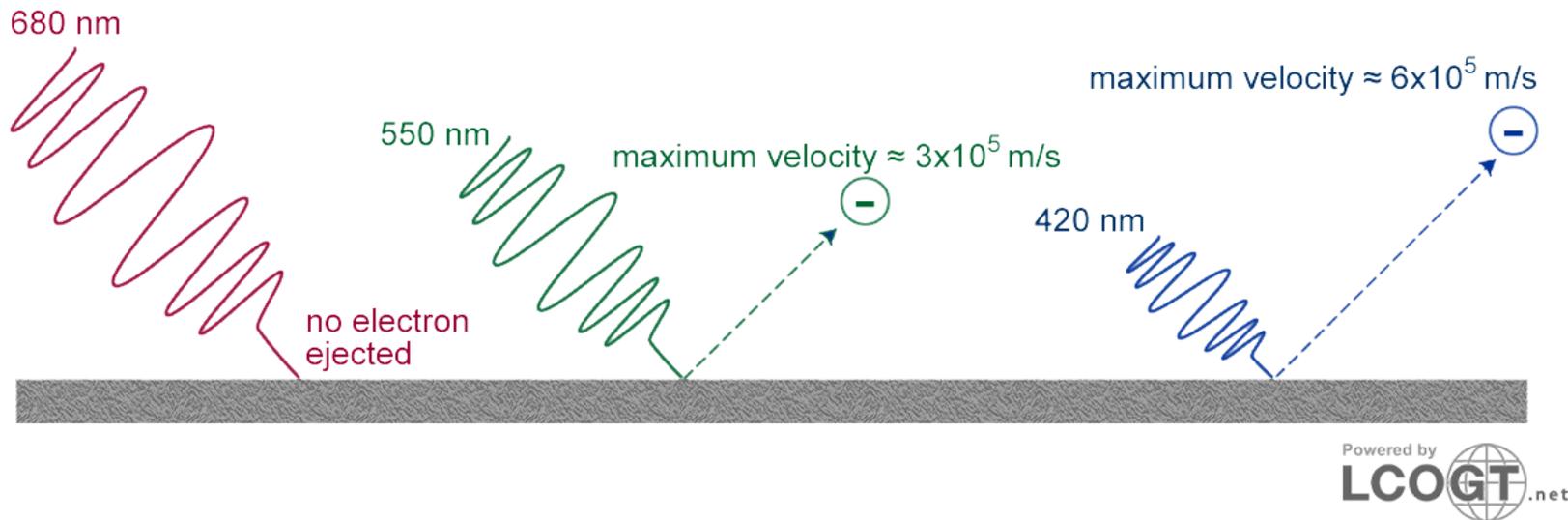


- λ é o comprimento de onda
- $c = 3 \times 10^8$ m/s
- ν é a frequência, ou seja, número de ciclos que a radiação completa por segundo

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

$$\uparrow \nu = \downarrow \lambda$$

Efeito fotoelétrico



- **A matéria só interage com ondas eletromagnéticas com comprimentos de onda muito específicos**
- **Lembra dos experimentos de Balmer??? O Hidrogênio emite luzes em comprimentos de onda muito específicos!**

Efeito fotoelétrico



Efeito fotoelétrico

- Max Planck (Nobel de Física de 1918) propões que a troca de energia entre radiação eletromagnética e matéria acontece em “quanta”, ou seja, pacotes de energia.
- Albert Einstein (Nobel de Física de 1921) propões que as radiações eletromagnéticas consistem de partículas denominadas fótons

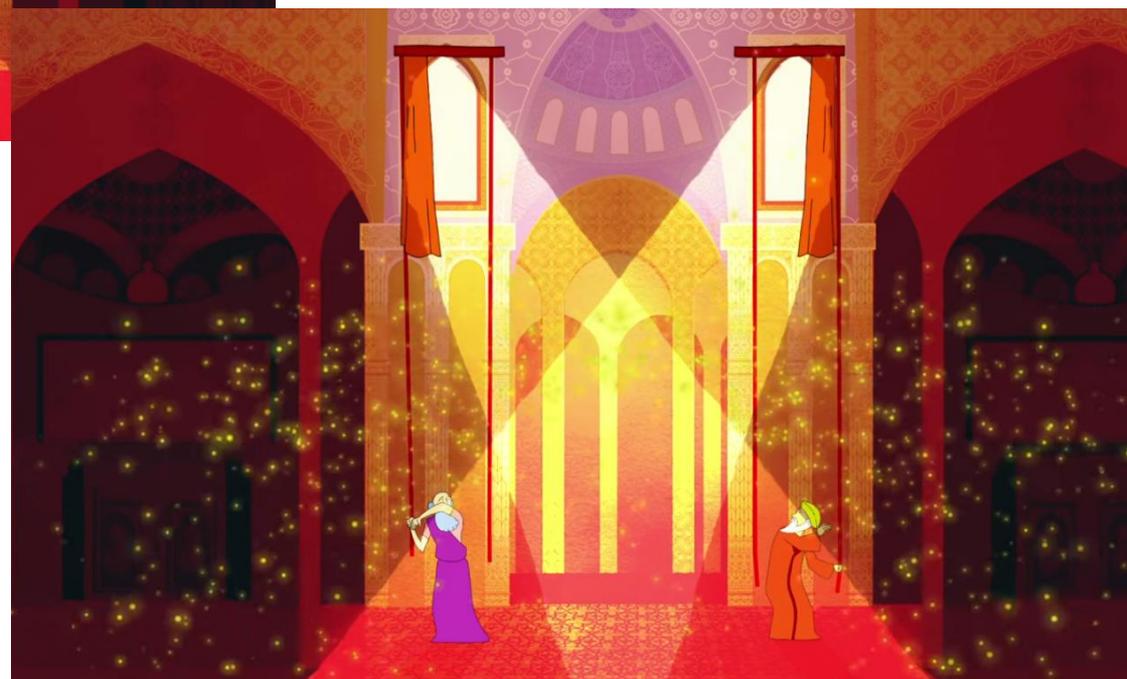
$$E = h\nu \quad h = \text{constante de Planck, } 6,62607004 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$$

$$\uparrow \nu = \uparrow E$$

$$\text{Como } \nu = \frac{c}{\lambda}, \text{ então } E = \frac{hc}{\lambda}$$

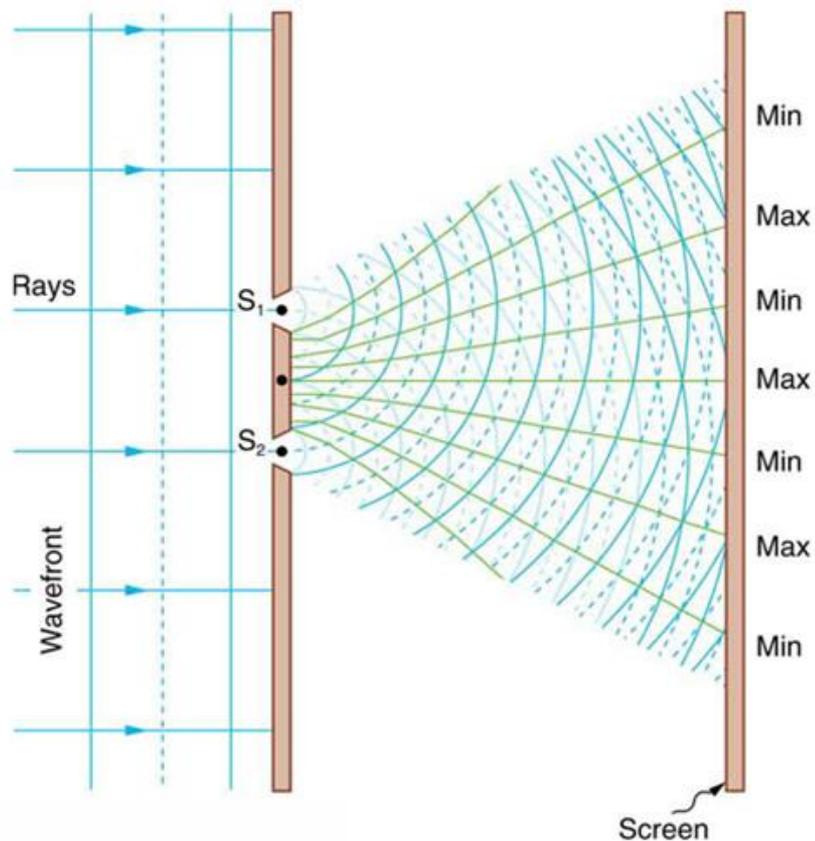
$$\uparrow \nu = \uparrow E = \downarrow \lambda$$

Mas se é partícula...

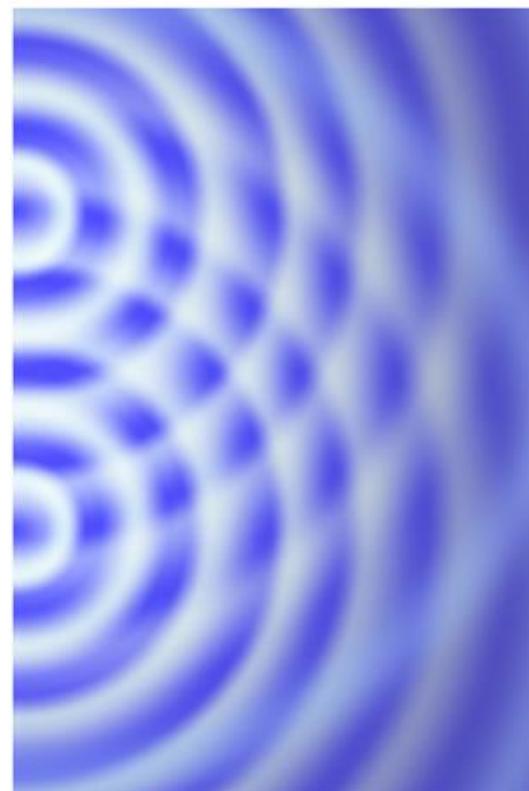


Experimento da dupla fenda

Quando a radiação eletromagnética se comporta como onda



(a)



(b)



(c)

E o elétron, é onda ou partícula?

- Elétron tem massa ($9.10938356 \times 10^{-31}$ kg)



Dualidade onda Partícula

Louis de Broglie (Prêmio Nobel da Física 1929)

- Toda matéria tem comportamento ondulatório

$$\lambda = \frac{h}{mv} \qquad \uparrow \lambda = \downarrow mv$$

h =constante de Planck, $6,62607004 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$

- Então quer dizer que tudo, tudo mesmo, tem comportamento ondulatório? Então porque quando chuto uma bola não vejo ela andando na forma de onda?

Exercício 1: Calcule o comprimento de onda de uma bola de baseball com massa de 142 g arremessada à uma velocidade de 169 km/h (47 m/s). O que se pode concluir do resultado sabendo que o raio da bola é de 4,6 cm?

Exercício 2: Calcule o comprimento de onda de um elétron ($m=9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$) viajando a $3 \times 10^5 \text{ m/s}$ (ou seja 1/1000 da velocidade da luz). Sabendo que o raio do elétron é $2,82 \times 10^{-15} \text{ m}$?

E como existe a onda no átomo?

For a hydrogen atom:

Electron wave resonance

$n = 1$

 $\lambda_1 = 2\pi r_1 = 6.28a_0$

$n = 2$

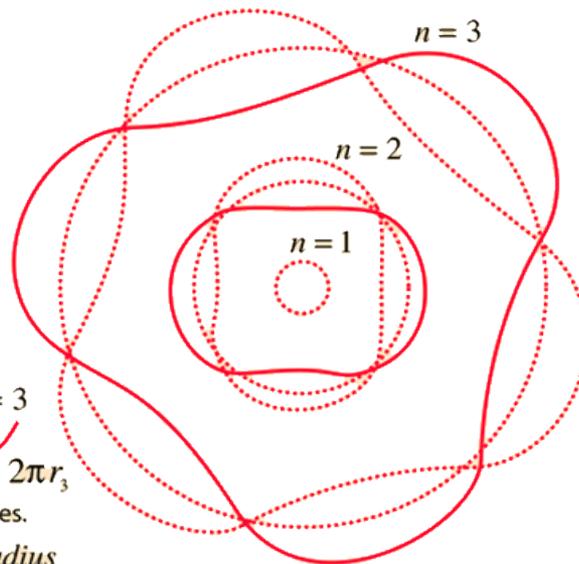
 $2\lambda_2 = 2\pi r_2$
 $\lambda_2 = 12.57a_0$

$n = 3$

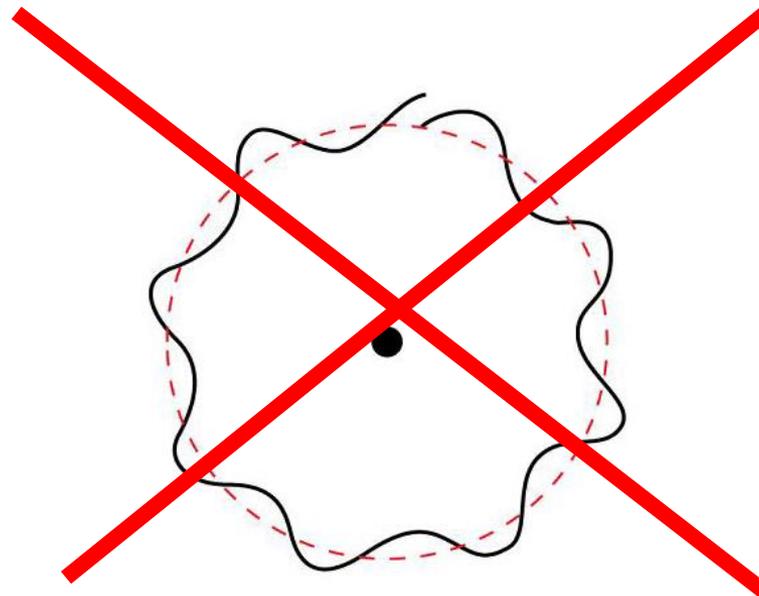
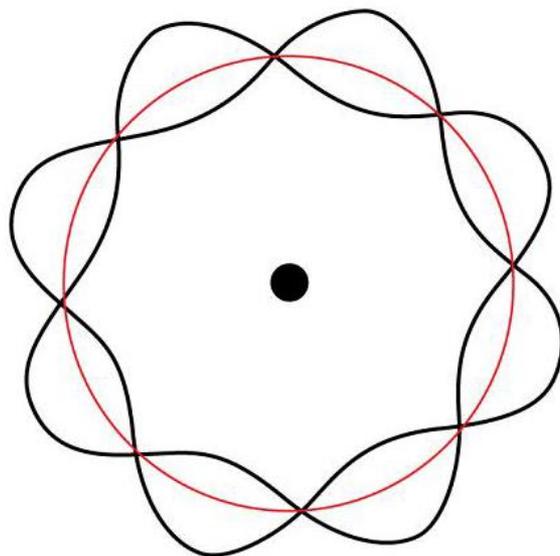
 $3\lambda_3 = 2\pi r_3$
 $\lambda_3 = 18.85a_0$

Wavelengths for hydrogen states.

$a_0 = 0.0529\text{nm} = \text{Bohr radius}$



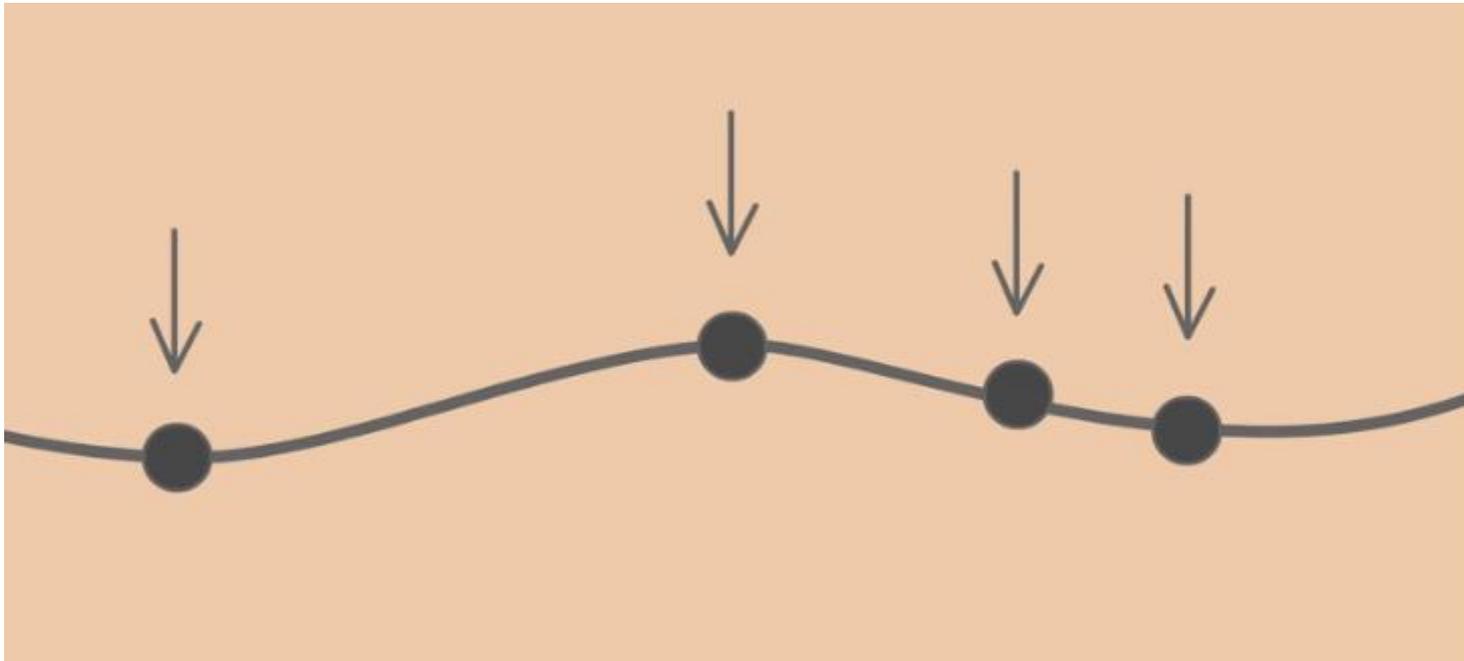
- Ondas estacionárias circulares
- Ondas perfeitas onde o final e o início coincidem
- Para ondas coincidirem, devem, obrigatoriamente, ter numero de ondas inteiro
- Número quântico (n) principal indica o número de ondas



Princípio da Incerteza de Heisenberg

Werner Heisenberg (Prêmio Nobel da Física 1932)

- Não é possível determinar a posição e o momento (velocidade) exatos de uma partícula!
- Se eu sei o momento, não tenho certeza sobre a posição. E vice-versa



- Opaaaaaaaaa, mas eu sei onde estou e sei minha velocidade!

Princípio da Incerteza de Heisenberg

Werner Heisenberg (Prêmio Nobel da Física 1932)

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi} \quad \Delta p = m \cdot \Delta v$$

h =constante de Planck, $6,62607004 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$

Exercício 1: Calcule a incerteza na posição de uma bola de baseball com massa de 142 kg arremessada à uma velocidade de 169 km h^{-1} (47 m s^{-1}). O que se pode concluir do resultado sabendo que o raio da bola é de 4,6 cm?

Exercício 2: Calcule o comprimento de onda de um elétron ($m=9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$) viajando a $3 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$ (ou seja 1/1000 da velocidade da luz). Sabendo que o raio do elétron é $2,82 \times 10^{-15} \text{ m}$?

Equação de Schrödinger

Erwin Schrödinger (Prêmio Nobel da Física 1933)

- Descreve o elétron com uma função de onda (Ψ , letra grega psi)

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

Second derivative with respect to X

Shrodinger Wave Function

Position

Energy

Potential Energy

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$

n principal quantum number

ℓ orbital quantum number

m_ℓ magnetic quantum number

Equação de Schrödinger

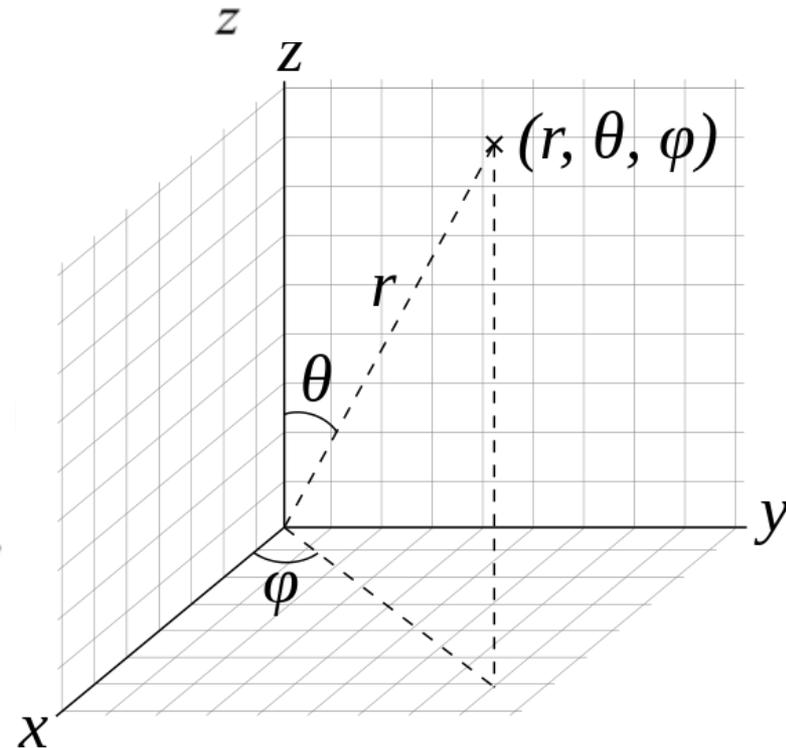
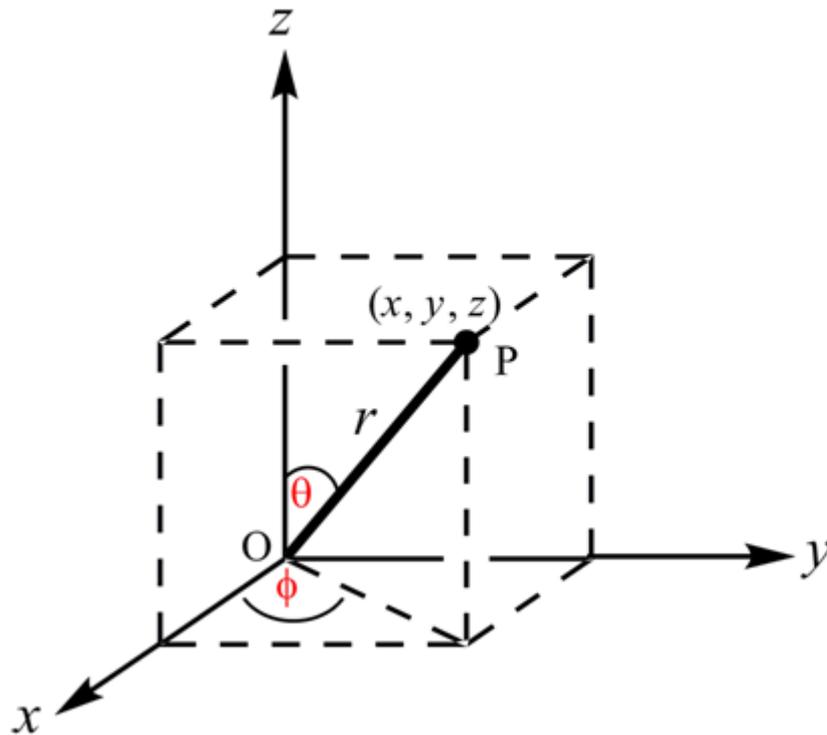
Função radial Função angular

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$

n ℓ m_ℓ

principal quantum number orbital quantum number magnetic quantum number

- R é a distância do elétron a partir do núcleo
- θ é ângulo a partir do eixo z (latitude)
- ϕ é ângulo a partir do eixo x (longitude)

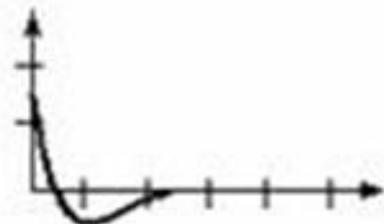


$\Psi(r)$ – Fundação Radial

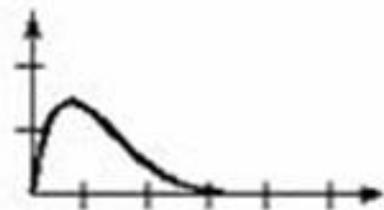
1s



2s



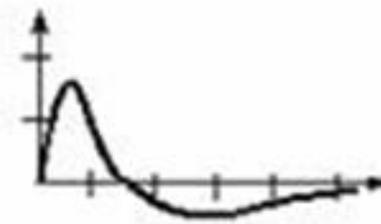
2p



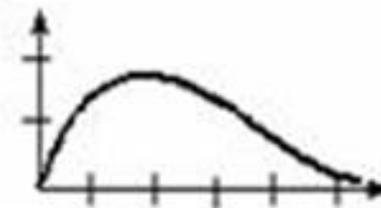
3s



3p



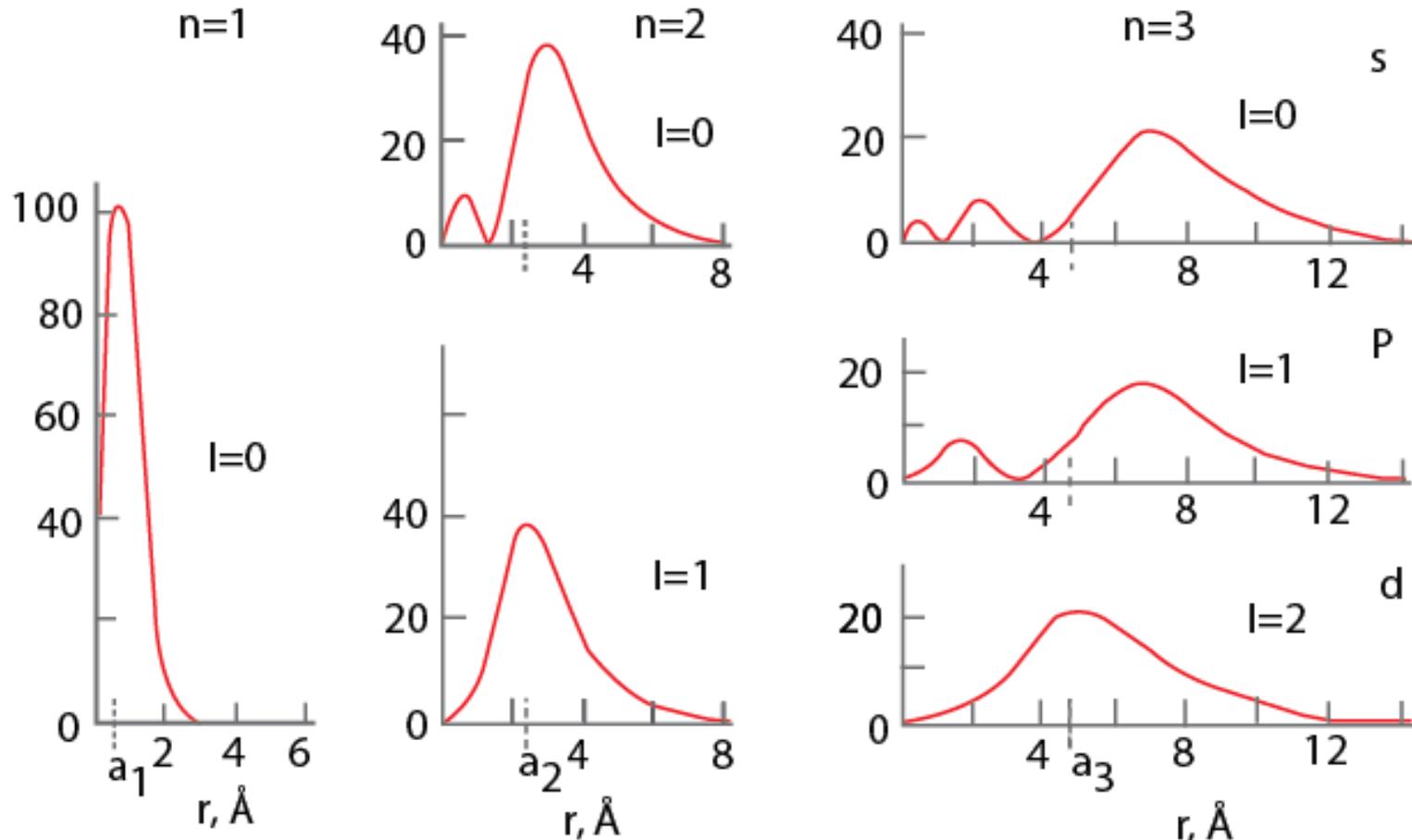
3d



Densidade de probabilidade

Max Born (Prêmio Nobel da Física 1954)

- O quadrado da função radia dá a densidade de probabilidade de se encontrar um elétron em uma dada região (Ψ^2)

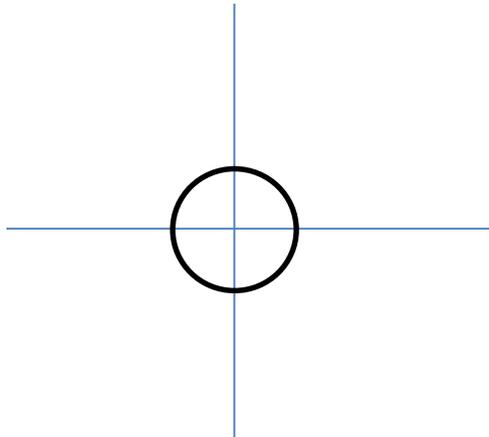


- Nós (nodes em inglês) são regiões que a função cruza 0. definido como # nós = $n-l-1$

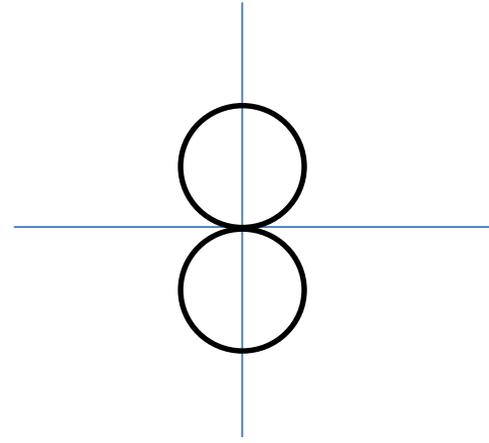


$\Psi(\text{angular})$

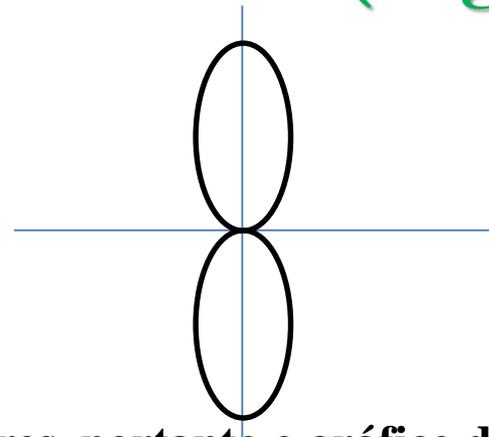
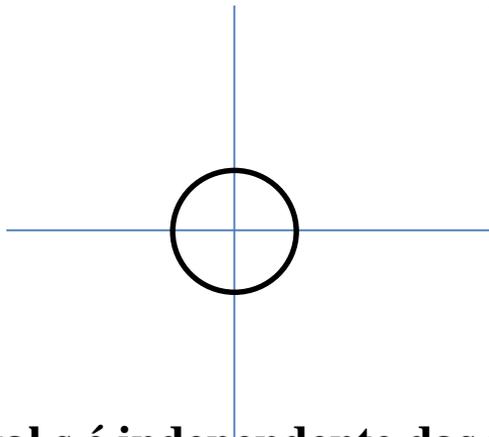
$l=0$
Orbital s



$l=1$
Orbital p



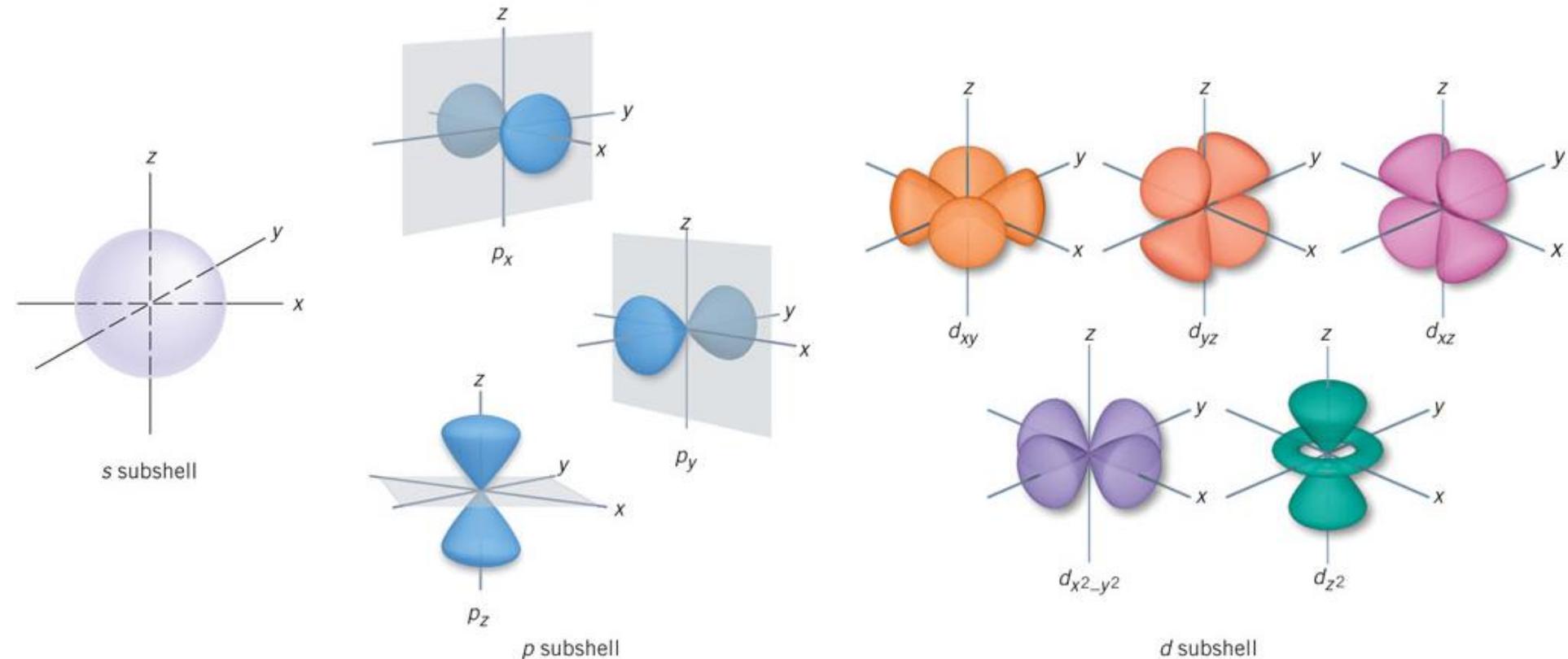
Densidade de probabilidade - $\Psi(\text{angular})^2$



- Orbital s é independente das funções angulares, portanto o gráfico da função de onda é circular
- Orbital p composto por funções tangentes em lados opostos do eixo

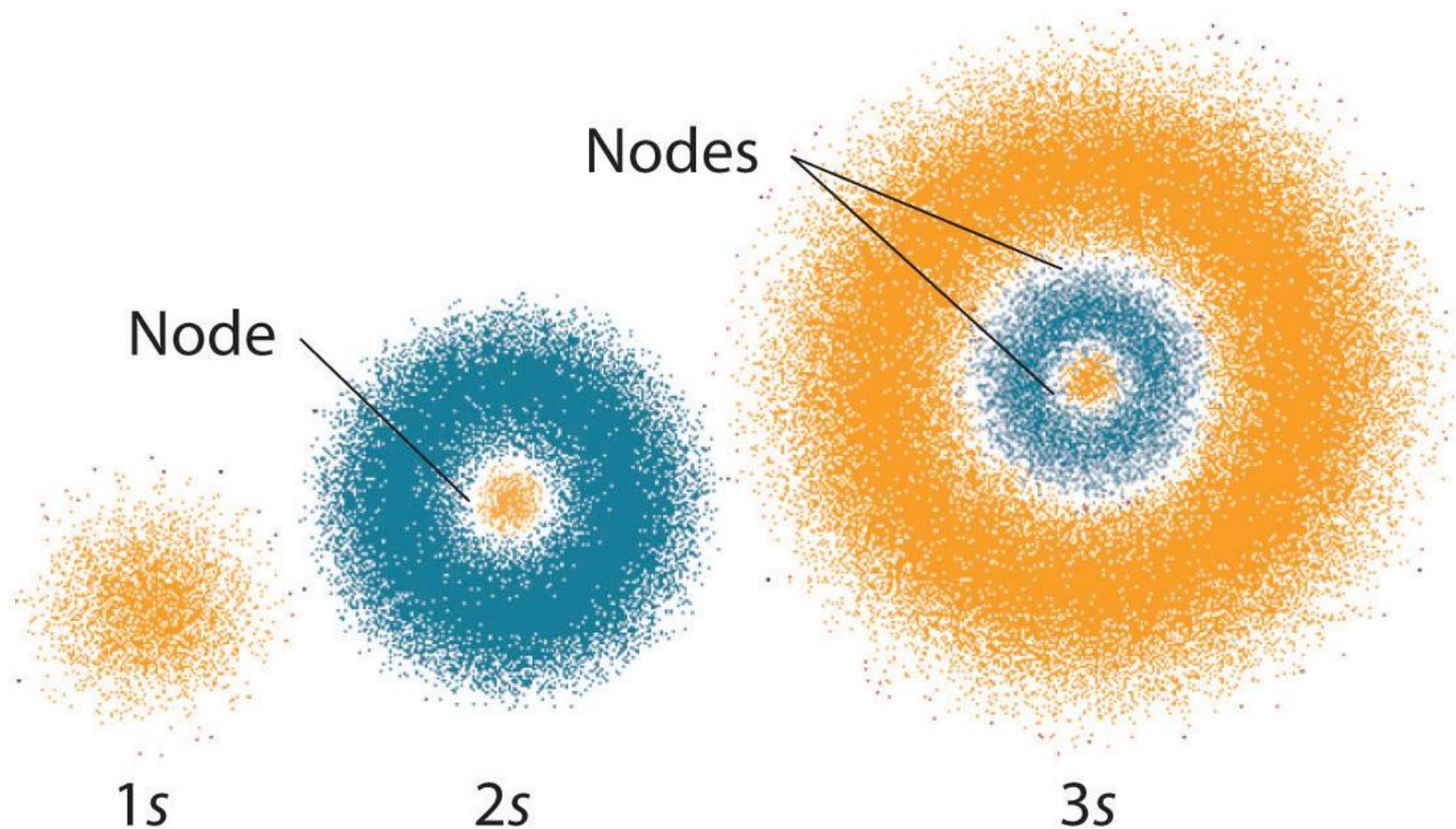
Densidade de probabilidade - $\Psi(\text{angular})^2$

- O quadrado da função radia dá a densidade de probabilidade de se encontrar um elétron em uma dada região (Ψ^2)



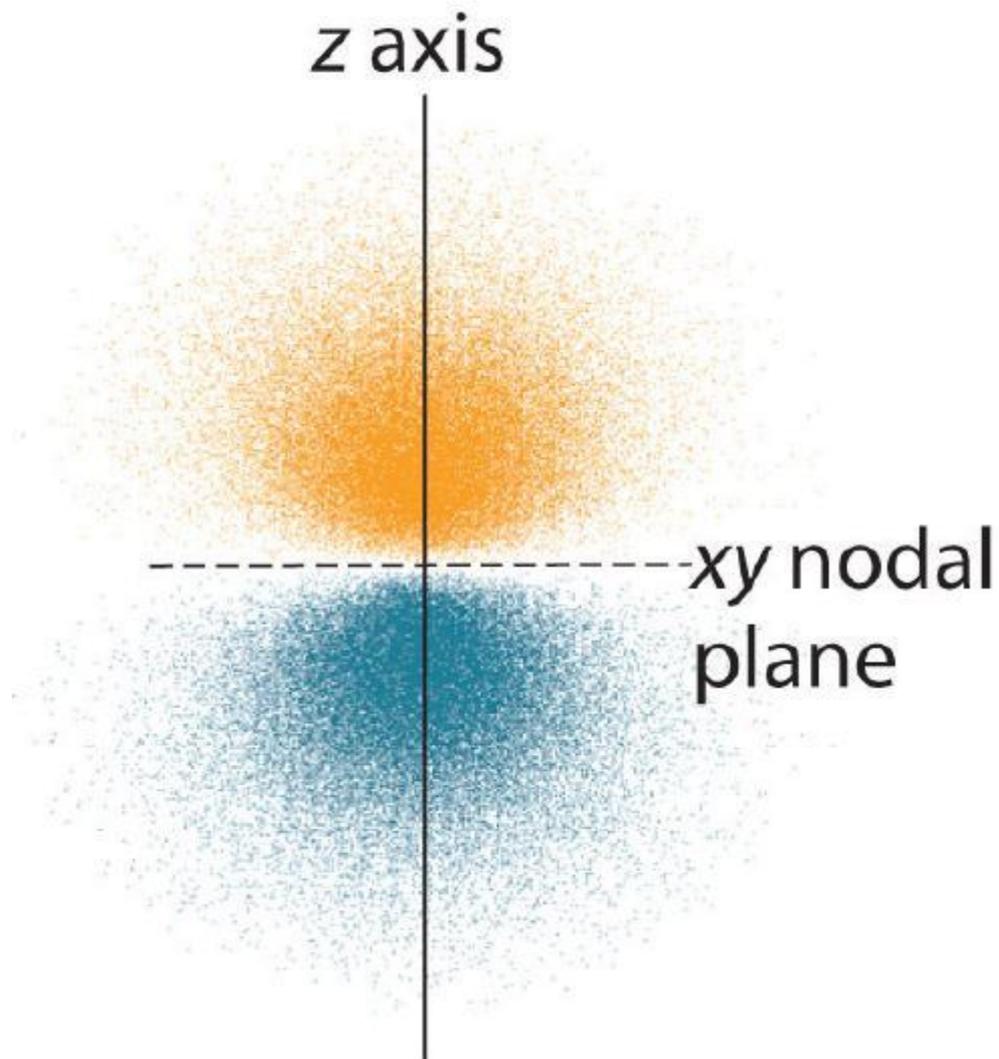
- Forma que usamos para representar os orbitais
- # de nós da função angular = L

Densidade de probabilidade



- **Orbital s é independente das funções angulares, portanto o gráfico da função de onda é circular**

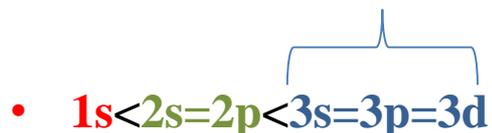
Densidade de probabilidade - $\Psi(\text{angular})^2$



Energia dos orbitais

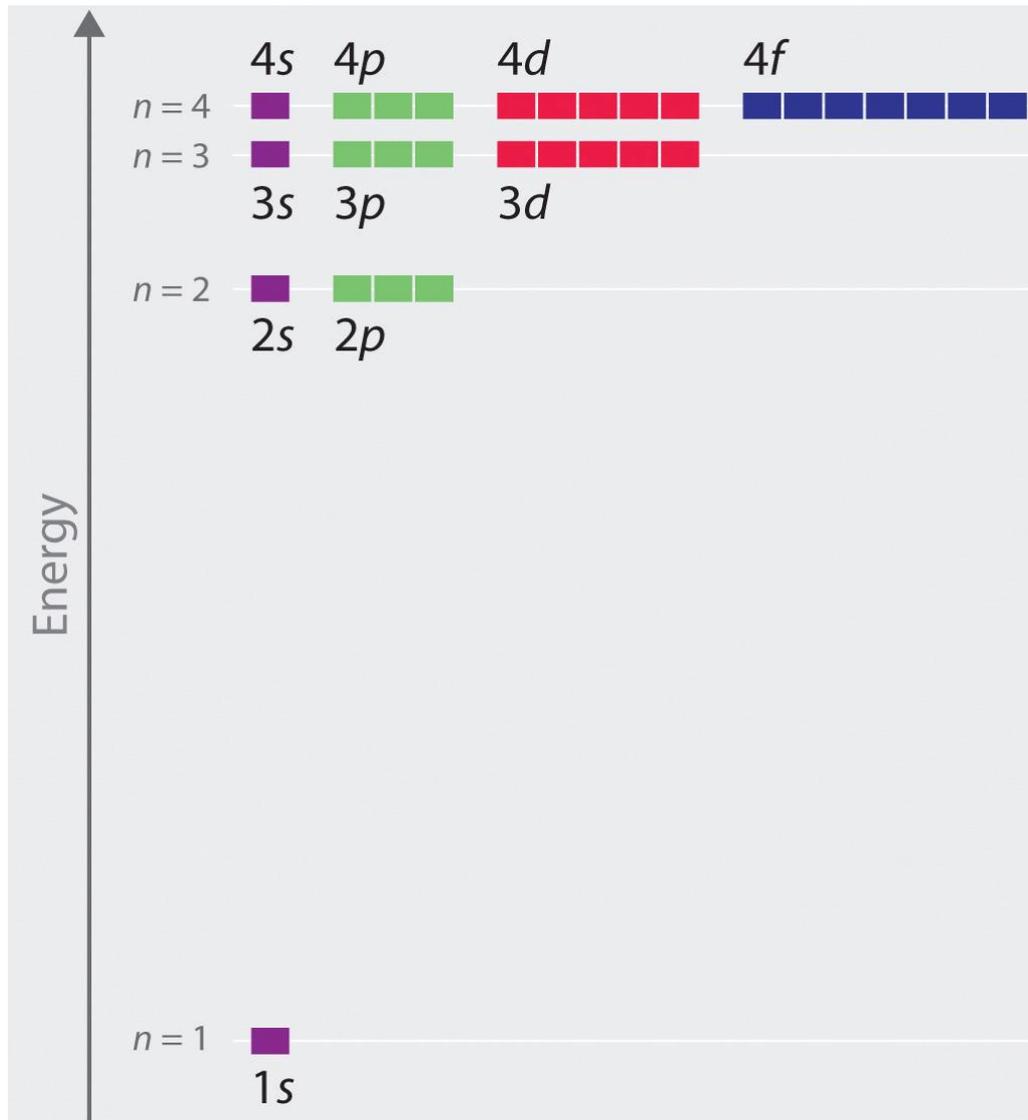
- No átomo de **Hidrogênio** e **apenas no átomo de Hidrogênio** a energia do orbital é dada apenas pelo número quântico principal (n)

Degenerados (mesma energia)



- Se o único elétron do hidrogênio é excitado para orbitais de maior energia, é indiferente que ocupe orbitais s, p ou d

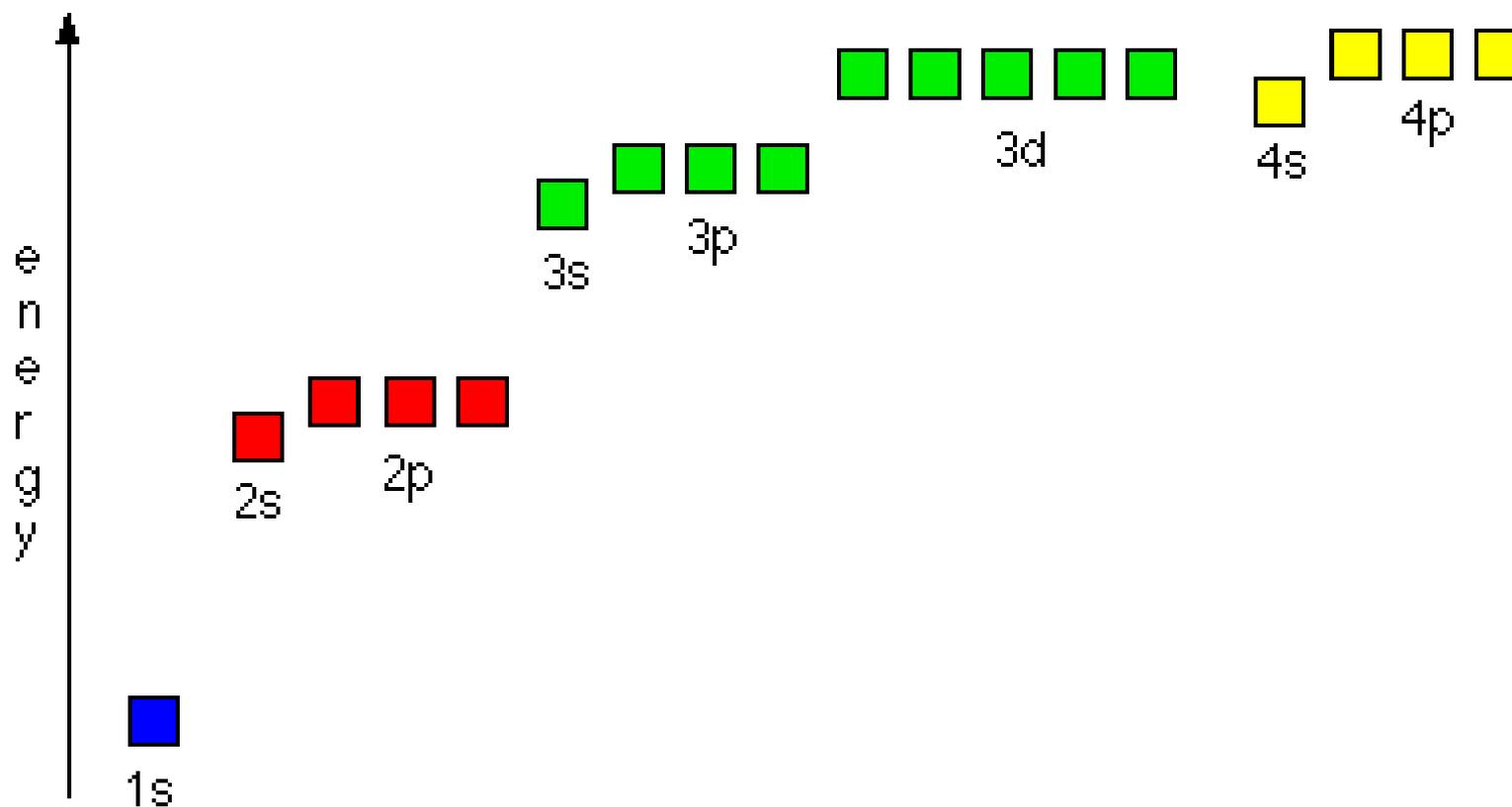
Diagrama de Energia para H



Átomos polieletrônicos

- Quando mais elétrons são introduzidos no átomo, existe uma combinação de forças de atração e de repulsão.
- No He, por exemplo, que tem 2 elétrons existem as forças:
 - Atração núcleo pelo **elétron 1**
 - Atração núcleo pelo **elétron 2**
 - Repulsão do **elétron 1** pelo **elétron 2**
- Nesse caso, temos que a energia dos orbitais no mesmo nível quântico se dê por:
 $s < p < d < f$
- Porém, é normal que a energia do orbital $nd > (n+1)s$, devido a grande repulsão de elétrons em níveis de energia com muitos elétrons.

Diagrama de Energia



Energia dos orbitais em função do número atômico

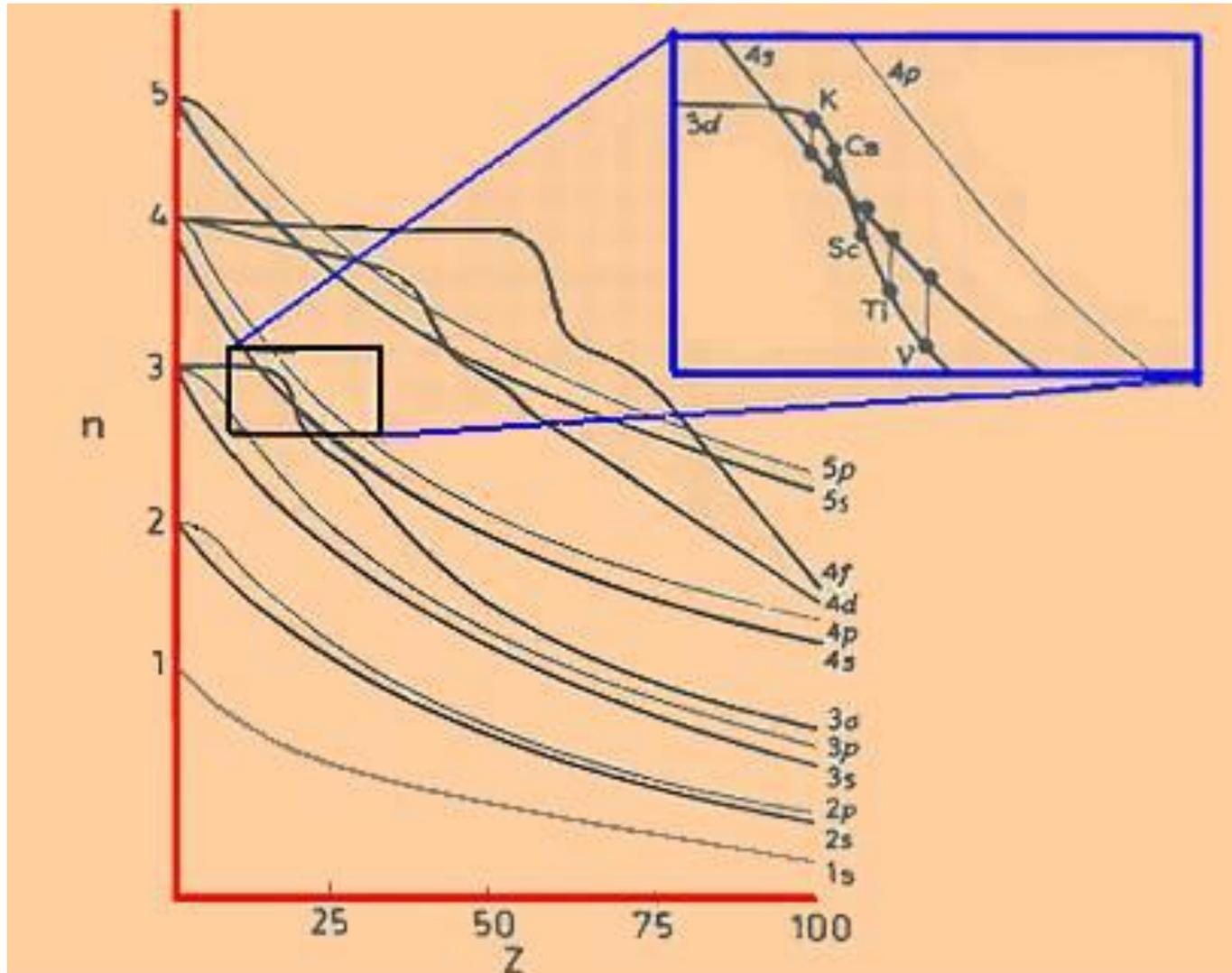


Diagrama de Energia para átomos polieletrônicos

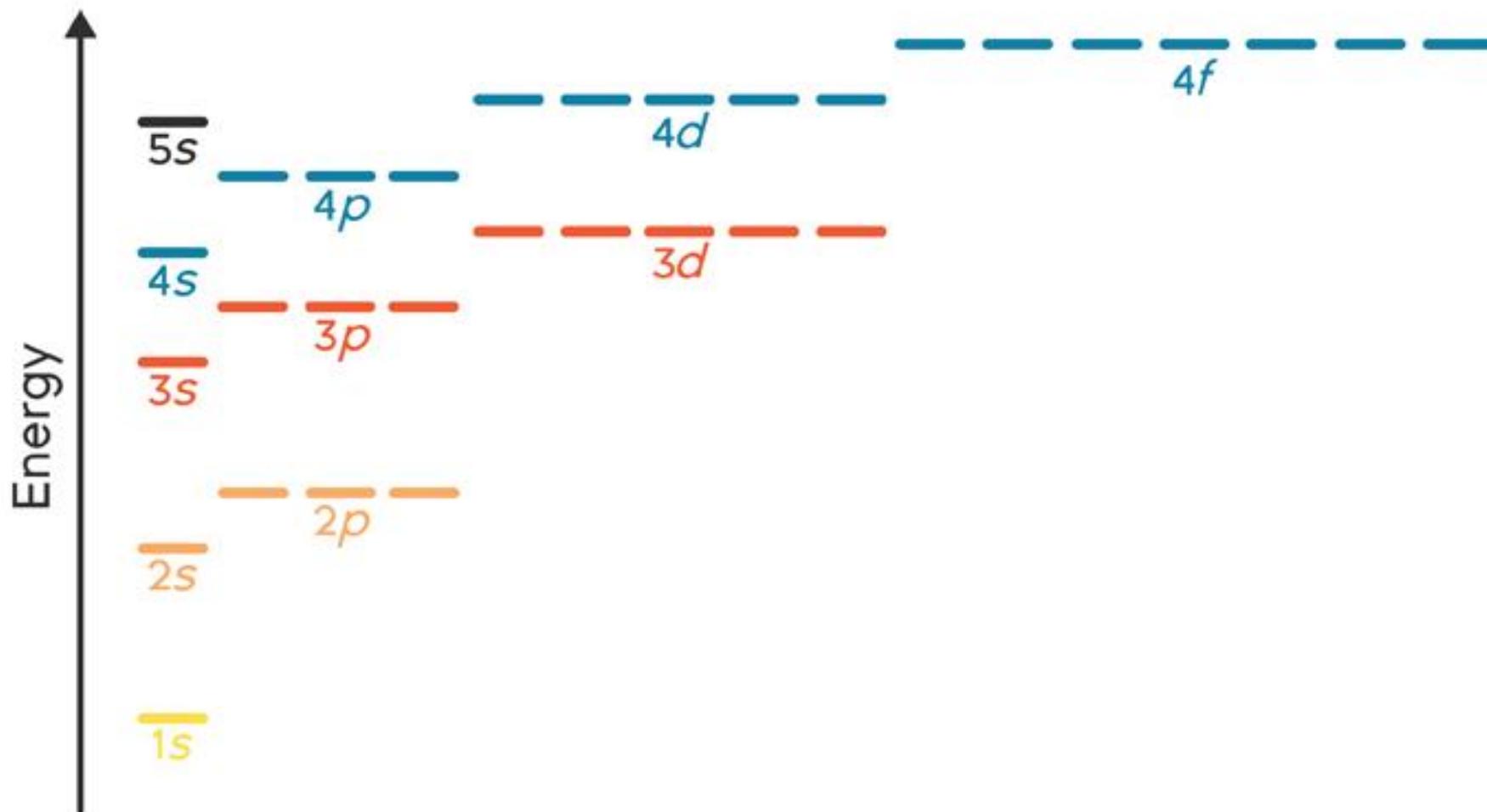
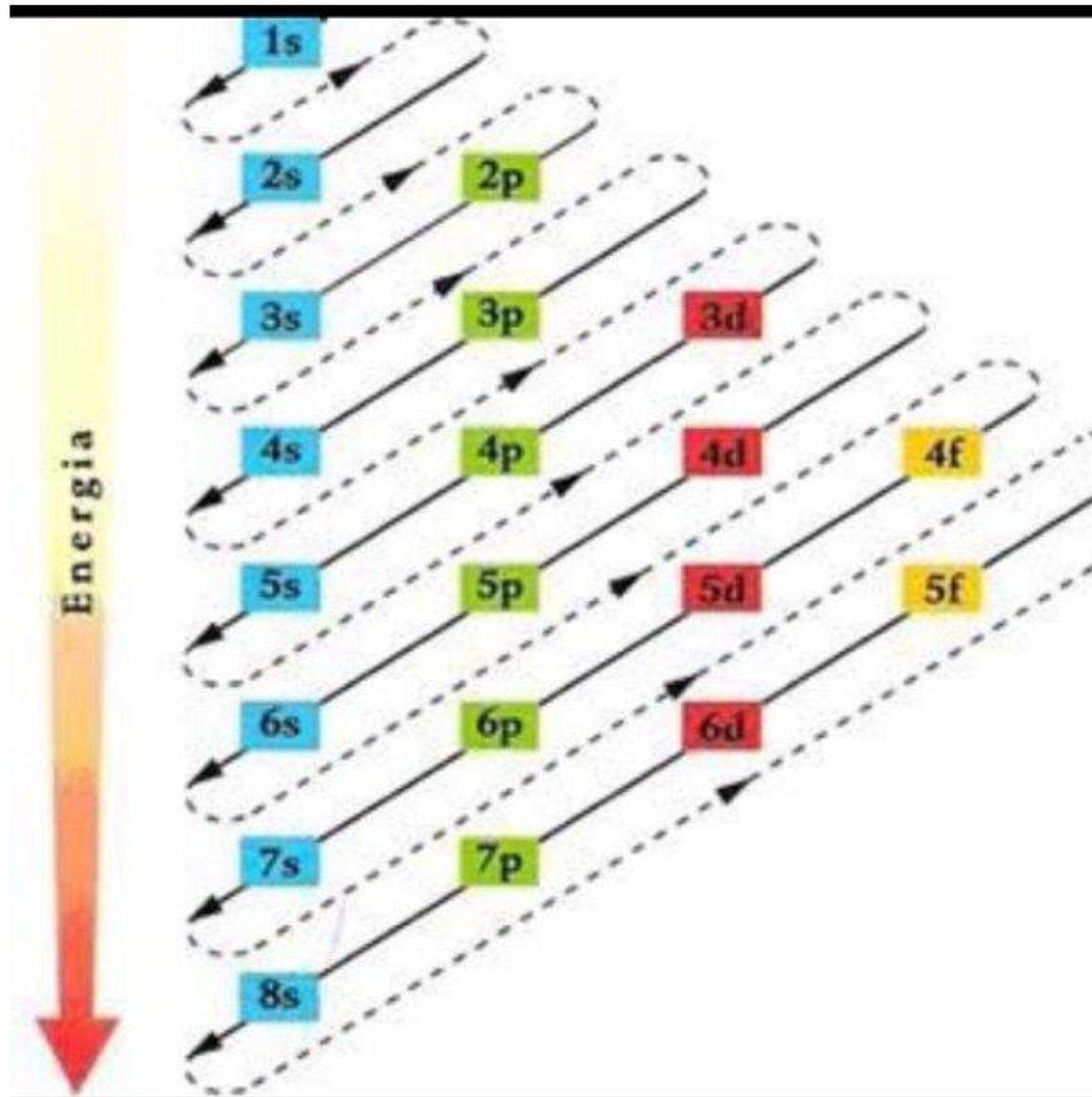


Diagrama de Pauli



Preenchendo orbitais

- **Princípio de exclusão de Pauli:** para ocupar o mesmo orbital, elétrons devem ter spin opostos
- **Regra de Hund:** no estado fundamental o átomo procura a maior multiplicidade possível, ou seja, o maior número de spin paralelos. Dessa forma, dois elétrons só ocupam o mesmo orbital (ml) quando todos os outros do mesmo L estiverem ocupados.
- **Elétron sozinho em um orbital se chama desemparelhado**
- **Dois elétrons no mesmo orbital estão emparelhados.**
- **Diamagnético são elementos que todos os elétrons estão emparelhados**
- **Paramagnético são elementos que contêm elétrons desemparelhados e, assim, são atraídos por campos magnéticos**

Preenchendo orbitais

- **Exercícios:**

1. **Al até Cl – 13 a 17 elétrons**

2. **K ate Mn – 19 até 25 elétrons**

- **Como explicar o Cr?**

- **Energia de emparelhamento maior que a diferença de energia do 4s ao 3d!**

- **O mesmo ocorre com o Cu, pq orbital d cheio tem maior atração pelo núcleo!**