

Aula 2 – Átomos e suas teorias

“A matéria é feita de átomos”: Apesar de ser um conhecimento comum nos dias atuais, nem sempre essa ideia foi muito bem aceita pela comunidade científica.

Leucipo e Demócrito (420 aC) - a matéria deve ser feita de partículas indivisíveis que denominaram de átomos. Leucipo disse “Não existe nada, exceto átomos e vazio”

Eles propuseram que diferentes materiais teriam diferentes tipos de átomos, (ex. ferro era feito de átomos de ferro, argila era feito de átomos de argila e sal era feito de partículas de sal), e cada átomo teria propriedades diferentes. O que diferia do pensamento da época defendido por Platão e Aristóteles que a matéria seria feita por combinações dos elementos fogo, água, terra e ar. A ideia dos átomos ficou desacreditada por aproximadamente 2000 anos.

Com o desenvolvimento de ideias mais precisas sobre elementos, compostos e misturas, os cientistas começaram a investigar como e por que as substâncias reagem. O químico francês Lavoisier lançou uma das bases para a investigação científica da matéria ao descrever que as substâncias reagem seguindo certas leis. Essas leis são chamadas de leis da combinação química. Estes eventualmente formaram a base da Teoria Atômica da Matéria de Dalton.

Antoine Lavoisier (1789) – mudou para sempre a química, tanto teórica quanto prática, criando uma série de novas análises laboratoriais que trariam ordem ao caos do conhecimento gerado ao longo de séculos de filosofia grega e alquimia medieval. Lavoisier é amplamente reconhecido por transformar a química de uma perspectiva qualitativa para uma quantitativa. Ele estabeleceu a lei da conservação da massa, demonstrando que a massa total de uma reação química permanece constante. “Na natureza, nada se perde, nada se cria, tudo se transforma”. Em outras palavras: em uma reação química, mesmo que a matéria mude sua forma, a massa total das substâncias envolvidas não muda.



Principais contribuições de Lavoisier para a química moderna:

- Descoberta do Papel do Oxigênio na Combustão: Lavoisier **refutou** a teoria flogística ao identificar o papel do oxigênio na combustão. Ele também nomeou os elementos oxigênio e hidrogênio.
- Experimento da mistura de gases para formar água (o ar seria uma mistura de gases).
- Reforma da Nomenclatura Química: Lavoisier colaborou na reforma da nomenclatura química e escreveu a primeira lista de elementos químicos (identificou mais de 50 elementos diferentes).
- Previsão do Silício: Ele previu a existência do silício.
- Conservação da Matéria: Lavoisier descobriu que, apesar das mudanças de forma, a massa continua a mesma.
- Sistema Métrico: Ele ajudou na construção do sistema métrico.
- Publicou o "Traité Élémentaire de Chimie" - é considerado o primeiro livro de química moderna.

A Lei da Composição Constante, descoberta por **Joseph Proust** (1794), também é conhecida como Lei das Proporções Definidas. Proust afirmou esta lei da seguinte maneira: "Um composto químico sempre contém os mesmos elementos combinados na mesma proporção em massa. "



Por exemplo, a água pura obtida de diferentes fontes, como um rio, um poço, uma nascente, o mar, etc., sempre contém hidrogênio e oxigênio juntos na proporção de 1:8 em massa. Da mesma forma, o dióxido de carbono (CO_2) pode ser obtido por diferentes métodos, tais como: Queima de carbono, Aquecimento de pedra calcária entre outros. Cada amostra de CO_2 contém carbono e oxigênio em uma proporção de 3:8.



John Dalton (1803) afirmou: "'Quando dois elementos se combinam para formar dois ou mais compostos, as proporções das massas de um elemento que se combina com a massa fixa do outro são números inteiros simples'.

Monóxido de carbono (CO): 12 partes em massa de carbono se combinam com 16 partes em massa de oxigênio.

Dióxido de carbono (CO_2): 12 partes em massa de carbono se combinam com 32 partes em massa de oxigênio.

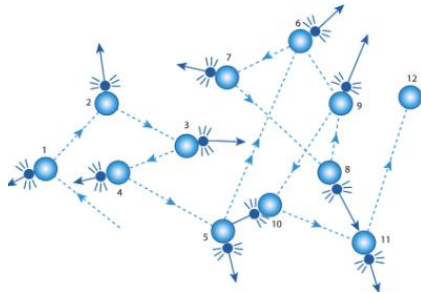
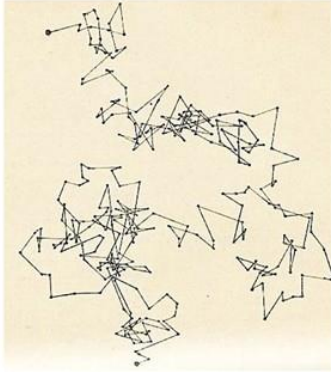
Razão das massas de oxigênio que se combinam com uma massa fixa de carbono (12 partes): 16:32 ou 1:2.

John Dalton, um professor de escola britânica, publicou sua teoria sobre os átomos em 1808. Suas descobertas foram baseadas em experimentos e nas leis da combinação química.

1. Toda a matéria consiste em partículas indivisíveis chamadas átomos.
2. Os átomos do mesmo elemento são semelhantes em forma e massa, mas diferem dos átomos de outros elementos.
3. Os átomos não podem ser criados ou destruídos.
4. Átomos de diferentes elementos podem se combinar uns com os outros em proporções fixas, simples e inteiras para formar átomos compostos.
5. Átomos do mesmo elemento podem se combinar em mais de uma proporção para formar dois ou mais compostos.
6. O átomo é a menor unidade de matéria que pode participar de uma reação química.

Movimento Browniano

Robert Brown observou ao microscópio que grânulos de pólen pareciam se mexer. Como o movimento não se interrompia, Brown acreditou que os grânulos estivessem submetidos à ação de uma força misteriosa (o tal princípio da força vital). O que mais podia ser, uma vez que não se tinha como explicar que energia era aquela que movia aquelas partículas, senão a própria vida? No entanto, a sua pesquisa tomou outros rumos quando Robert Brown repetiu o experimento com outras substâncias suspensas em água e, em alguns casos, em gim: fibras de vitela em decomposição, teias de aranha e até mesmo o próprio muco. Mas o fator determinante foi quando substâncias inorgânicas mostraram o mesmo fenômeno: cobre, bismuto, antimônio, manganês e asbesto. Isso provava que o movimento não estava ligado à questão da vida.



O trabalho de Einstein demonstrou como o movimento browniano poderia ser usado para provar experimentalmente que as moléculas existem. Também permitiu o cálculo de certas constantes, como o número de Avogadro, com base em observações do movimento browniano.

Quantitativamente, Einstein mostrou que a raiz quadrada média do deslocamento de uma partícula suspensa aumenta com a raiz quadrada do tempo. Antes de Einstein, presumia-se que o deslocamento variava linearmente. Portanto, várias constantes fundamentais da natureza não puderam ser determinadas com precisão até que Einstein forneceu a resposta correta de como o movimento browniano se comporta ao longo do tempo. O trabalho sobre as leis que governam o *movimento browniano* e a brilhante confirmação experimental por Jean Baptiste Perrin alguns anos depois foram decisivos para a aceitação da realidade de átomos e moléculas.

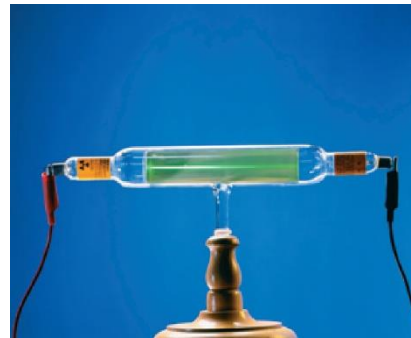
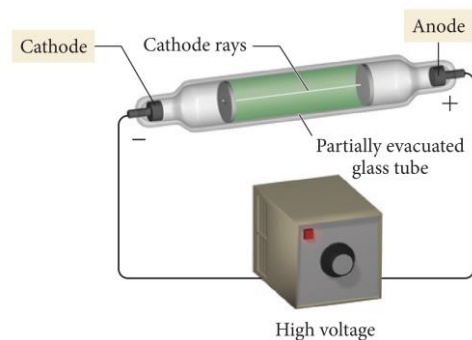
Por que os átomos agem dessa forma?

Investigação da estrutura interna dos átomos

Com as descobertas sobre o comportamento da matéria e a aceitação da teoria de que a matéria é constituída por átomos e moléculas iniciou-se um movimento para compreender como seria o interior de um átomo.

Descoberta dos elétrons

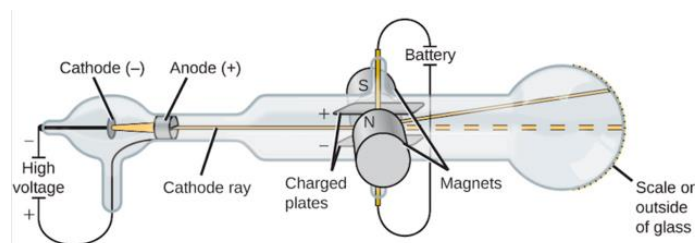
Em 1886 J J Thomson realizou experimentos usando tubos de raios catódicos, que consistiam de tubos fechados a vácuo preenchidos com gases contendo eletrodos nas extremidades.



Ao aplicar uma alta voltagem ele percebeu a formação de um feixe de partículas (raios catódicos) que se deslocavam do cátodo (-) para o ânodo (+). Ao avaliar as características dos raios ele chegou as seguintes conclusões:

- Se propagam em linha reta
- Independem da composição do material de origem.
- Transportam carga negativa

Ao seguir com os estudos ele percebeu que o tubo gerava calor e conseguiu medir esse calor liberado. Também estudou o efeito dos raios na presença de um campo elétrico e um campo magnético, os raios sempre sofriam desvios na presença de um campo. A partir de seus estudos ele conseguiu estimar a “relação massa/carga do raio catódico” em $-0,71 \times 10^8 \text{ C.g}^{-1}$ que hoje sabemos que é de $-1,76 \times 10^8 \text{ C.g}^{-1}$

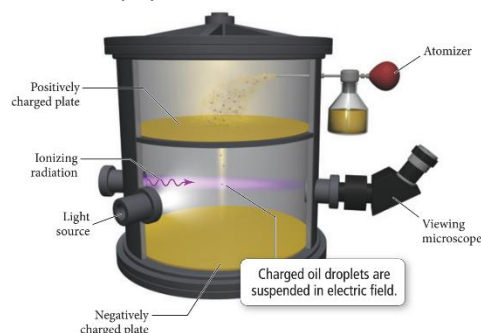


A massa estimada para os raios deveria ser 1000 vezes mais leve que o átomo de Hidrogênio. Com isso ele concluiu que esses raios não deveriam ser raios ou ondas, mas sim partículas carregadas negativamente muito pequenas e muito leves. Ela denominou estas partículas de corpúsculos e hoje os conhecemos como elétrons.

“Logo os átomos podem ser divididos e toda matéria deve ser feita destas partículas.”

Em 1909 o físico Robert Millikan fez um experimento conhecido hoje como experimento da gota de óleo de Millikan. Ele borrifou gotículas de óleo em um equipamento e as deixava cair sob o efeito da gravidade. Ao passar um feixe de energia (radiação ionizante), as gotas se tornavam carregadas negativamente.

Na parte inferior foram colocadas placas carregadas negativamente. Millikan tinha o controle da intensidade do campo elétrico, onde podia diminuir ou até inverter a queda livre das gotas (repulsão de cargas). Quando ele quantificou o campo elétrico necessário para reter a queda livre das gotas ele conseguiu determinar a massa da própria gota. Ele supôs que cada gota deveria ter um número inteiro de elétrons (quantização da carga elétrica) e a carga de cada gota deveria ser um múltiplo de $-1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$ que seria a carga fundamental de um único elétron.



Com esse número em mãos e utilizando a relação massa/carga de Thomson foi possível determinar a massa de um elétron.

$$\text{massa} = \text{carga} \times \frac{\text{massa}}{\text{carga}} = -1,60 \times 10^{-19} \text{ C} \times \frac{g}{-176 \times 10^8 \text{ C}} = 9,10 \times 10^{-28} \text{ g}$$

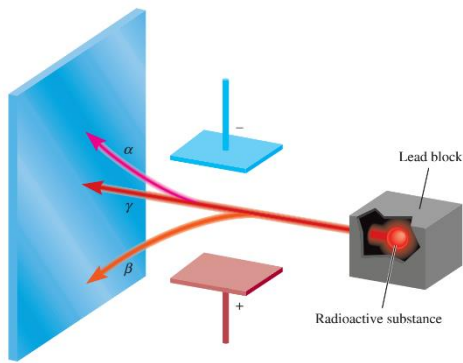
Radioatividade, a Descoberta.

Em 1895, William Röntgen notou que os raios catódicos faziam com que o vidro e os metais emitissem raios muito incomuns. Essa radiação altamente energética penetrou na matéria, escureceu as chapas fotográficas cobertas e causou a **fluorescência** de uma variedade de substâncias. Como esses raios não podem ser desviados por um ímã, eles não podem conter partículas carregadas como os raios catódicos. Röntgen os chamou de raios X.

Becquerel – percebeu que os raios do sal de urânio eram altamente energéticos e não podiam ser desviados por um ímã, mas diferiam dos raios X porque eram gerados espontaneamente.

Marie Curie (Aluna de Becquerel), sugeriu o nome radioatividade para descrever essa emissão espontânea de partículas e/ou radiação.

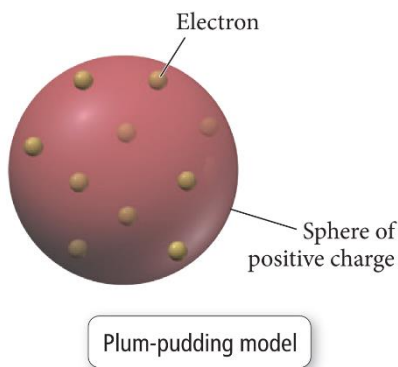
Posteriormente foram identificados três tipos de raios são produzidos pelo decaimento, ou quebra, de substâncias radioativas como o urânio. Dois dos três tipos são desviados por placas de metal com cargas opostas (Figura).



Os raios alfa (a) consistem em partículas carregadas positivamente, chamadas de partículas alfa, e, portanto, são desviadas pela placa carregada positivamente. Os raios beta (b), ou partículas beta, são elétrons e são desviados pela placa carregada negativamente. O terceiro tipo de radiação radioativa consiste em raios de alta energia chamados raios gama (g). Como os raios X, os raios gama não têm carga e não são afetados por um campo elétrico ou magnético externo.

O modelo atômico do Pudim de Passas

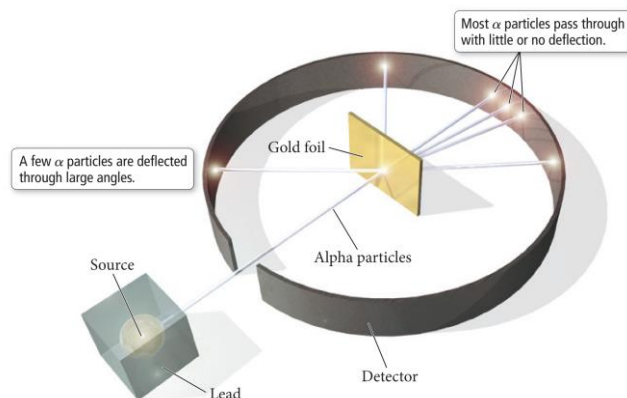
Com a descoberta dos elétrons a grande questão para entender os átomos era: “Como estão dispostos em um átomo?” Thomson, sabendo que os átomos são substâncias neutras, ele imaginou que alguma coisa neutralizava a carga dos elétrons. Ele visualizou um modelo de acordo com algo familiar a ele, uma sobremesa tradicional inglesa, o pudim de passas.



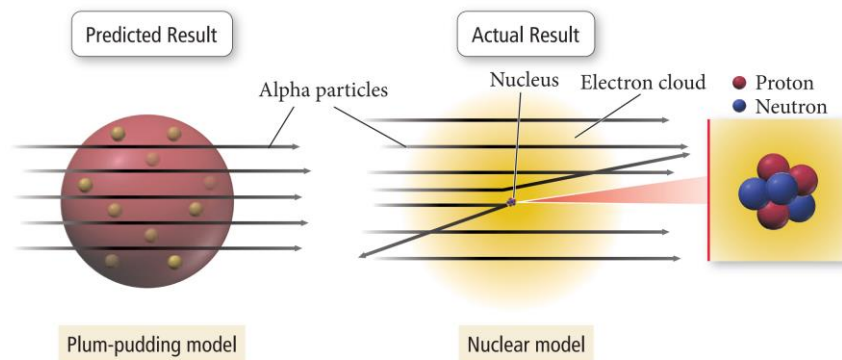
Neste modelo, os elétrons ficariam envoltos em uma matriz carregada positivamente. Nesse modelo os elétrons não eram fixos, e poderiam se movimentar por essa matriz. E esse modelo tinha uma satisfatória explicação para os fenômenos até então conhecidos.

Em 1909, Ernst Rutherford, na tentativa de confirmar o modelo de Thomson, ele realizou um experimento utilizando partículas alfa.

Bombardeou uma folha ultrafina de ouro (esquema a seguir):



Com estes resultados deste experimento: A maioria das partículas passou diretamente pela folha, mas algumas partículas foram desviadas e algumas (aproximadamente 1 em 20.000) até voltaram.



Rutherford percebeu que, para explicar as deflexões que observou, a massa e a carga positiva de um átomo devem estar concentradas em um espaço muito menor que o tamanho do próprio átomo. Ele concluiu que o átomo deve conter grandes regiões de espaço vazio pontilhadas com pequenas regiões de matéria muito densa. Com base nessa ideia, ele propôs a teoria nuclear do átomo, com três partes básicas:

1. A maior parte da massa do átomo e toda a sua carga positiva estão contidas em um pequeno núcleo chamado núcleo;
2. A maior parte do volume do átomo é espaço vazio, ao longo do qual minúsculos elétrons carregados negativamente estão dispersos;
3. Existem tantos elétrons carregados negativamente fora do núcleo quanto partículas carregadas positivamente dentro do núcleo, então o átomo é eletricamente neutro.
4. Dúvida – por que os elétrons não colidem com o núcleo ao dissipar energia pelo seu movimento em torno do núcleo?

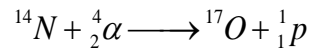
Os Protons

Inicialmente, o próton foi observado em 1886 por Eugen Goldstein. Enquanto trabalhava com os tubos de descarga (raios catódicos), observou que os raios viajavam do cátodo para o ânodo e também notou que algumas ondas viajavam na direção oposta. Essas ondas são raios anódicos e sua relação carga/massa é a mais baixa. Ele afirmou que essas eram as características do gás no tubo. Ele afirmou que estes são compostos de íons de hidrogênio, agora chamados de prótons.

Depois de vários anos, Ernest Rutherford realizou experimentos (bombardeou gases com partículas alfa) e revelou que em todos os elementos, um núcleo de hidrogênio está presente em seu interior e concluiu que esses átomos de Hidrogênio na verdade eram uma partícula fundamental, o próton. Assim, a existência do próton foi finalmente verificada por Rutherford e principalmente o crédito é dado a ele e não a Goldstein.

- Ernest Rutherford observou que seus detectores captavam núcleos de hidrogênio quando um feixe de partículas alfa era disparado no ar.
- Ele então disparou feixes de partículas alfa em gás nitrogênio puro e observou que um número maior de núcleos de hidrogênio foi produzido.

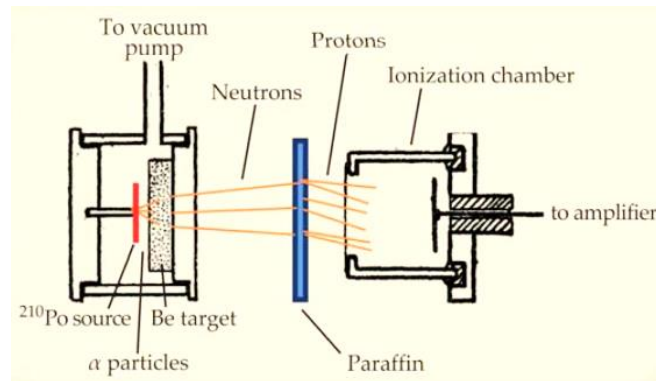
- Ele concluiu que os núcleos de hidrogênio se originaram do átomo de nitrogênio, provando que o núcleo de hidrogênio fazia parte de todos os outros átomos.



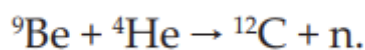
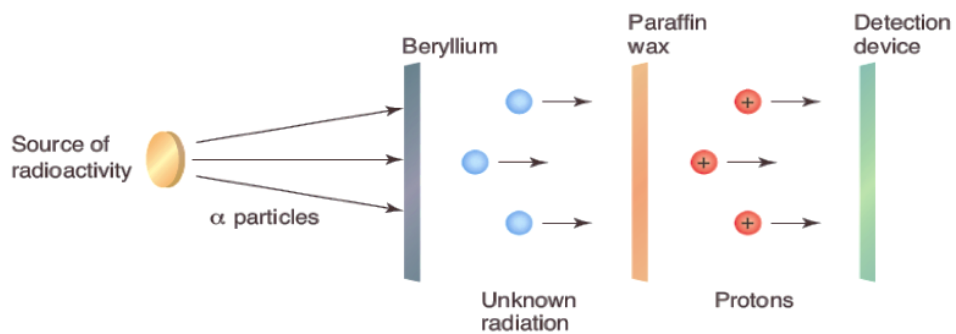
O Neutron

O modelo de estrutura atômica de Rutherford deixou uma dúvida. Sabia-se que o hidrogênio, contém apenas um próton e que o átomo de hélio contém dois prótons. Portanto, a razão entre a massa de um átomo de hélio e a de um átomo de hidrogênio deve ser de 2:1. Na realidade, porém, a proporção é de 4:1. O que estava faltando?

James Chadwick (1932), bombardeou uma fina folha de berílio com partículas alfa, e uma radiação de energia muito alta (semelhante a raios gama) foi emitida pelo metal. Experimentos posteriores mostraram que os raios realmente consistiam em partículas eletricamente neutras (não eram defletidas por campos elétricos), e com uma massa ligeiramente maior que a dos prótons. Chadwick chamou essas partículas de nêutrons.



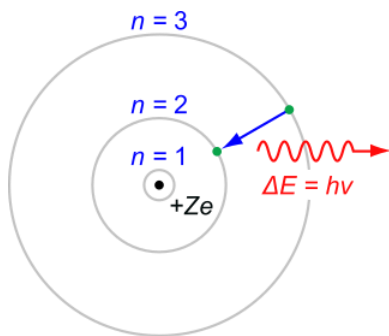
Anteriormente Joliot e Curie haviam realizado um experimento semelhante. Acreditava-se que o que fora emitido pela folha de Berílio seria “radiação gamma”. Joliot e Curie mostraram que para ejetar prótons da parafina seriam necessários 50 MeV. Chadwick determinou que a energia das partículas alfa (α) ejetadas era de 5,7 MeV. Então, a partir da lei de conservação de Energia das colisões que ejetaram prótons da parafina, ele concluiu que a radiação do alvo de berílio bombardeado com partículas alfa só poderia ser um tipo de partículas neutras com massa próxima à do próton. Ele havia descoberto o nêutron, liberado na reação:



O mistério da proporção de massa agora poderia ser explicado. No núcleo de hélio há dois prótons e dois nêutrons, mas no núcleo de hidrogênio há apenas um próton e nenhum nêutron; portanto, a proporção é de 4:1.

O modelo Planetário (Bohr)

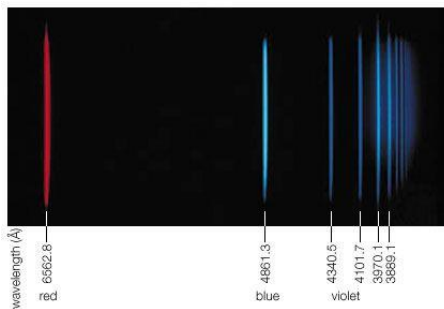
O físico Dinamarquês Niels Bohr, foi aluno de Rutherford (1913) e adaptou a estrutura nuclear do modelo de Rutherford à teoria quântica de Max Planck e então criou o seu próprio modelo do átomo. Ele introduziu a ideia de que um elétron poderia "descer" de uma órbita de maior energia para uma de menor energia, emitindo um quantum de energia discreta durante o processo. Esse raciocínio tornou-se a base do que eventualmente veio a ser conhecido como a antiga teoria quântica.



Ele fez uma análise matemática dos trabalhos de Rutherford com a folha de ouro e introduziu os conceitos de que em um átomo a energia é quantizada, onde apresentou seu modelo atômico planetário.

Ao analisar os trabalhos de Balmer e Rydberg com os espectros de emissão do Hidrogênio ele conseguiu explicar o comportamento dos espectros de emissão de vários elementos mesmo quando ionizados (como o He²⁺). Esse fato

foi reconhecido como um grande avanço pela comunidade científica da época.

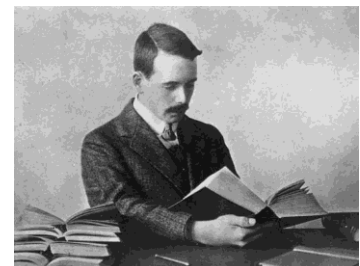


$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{para } n = 3, 4, 5, 6$$

$$R = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c}$$

Classificação dos átomos – o número atômico

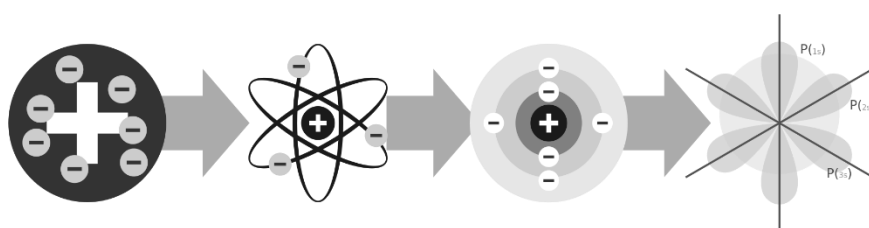
Em 1913, **Henry Moseley**, descobriu, em 1913, uma relação entre o espectro de raios X de um elemento químico e seu número atômico. Foi o primeiro a conseguir determinar os números atômicos dos elementos com precisão. Mostrou que, quando os átomos eram bombardeados pelos raios catódicos, eles emitiam raios X, e, já que cada um tinha sua propriedade, determinava os valores dos números atômicos, e ainda previu lugares na tabela periódica para outros elementos, que foram descobertos anos mais tarde.



Ainda em 1913 enunciou a lei de Moseley, que estabelece a relação entre a frequência de um raio röntgen (*Wilhelm C Rontgen, descobridor dos raios X*), emitido por um átomo, e os níveis de energia entre os quais um elétron salta. Moseley planejou continuar sua pesquisa sobre física em Oxford, assim renunciou a Manchester. Mas seus planos não seguiram em frente, pois, quando a Primeira Guerra Mundial estourou, ele decidiu se alistar no exército britânico. Morreu em combate em 1915, durante a Campanha de Galípoli, na Turquia.

Graças aos seus estudos a tabela periódica adquiriu sua forma definitiva. Algumas pessoas especularam que Moseley poderia ter sido laureado com o Nobel de Física de 1916, caso não houvesse morrido servindo o exército britânico.

Evolução dos modelos atômicos.



Os elétrons – nem tudo era como se pensava.

O problema dos elétrons se inicia quando usamos a física clássica aplicada a partículas muito pequenas (10^{-10} m). Na mecânica clássica, as partículas possuem uma trajetória definida. Elas seguem um caminho em que sua posição e seu momento linear (quantidade de movimento $-q = m \cdot v$ (kg.m.s⁻¹)). Mas partículas muito pequenas também se comportam como ondas, logo sua trajetória não é definida. O que impossibilita prever a posição dos elétrons como órbitas, invalidaria o modelo de Bohr.

Esta dificuldade não pode ser resolvida, e essa impossibilidade de se conhecer a posição e a velocidade de uma partícula (momento linear) é conhecida como princípio da Incerteza de Heisenberg.

Δx é a incerteza na posição

Δv Incerteza na velocidade (momento linear)

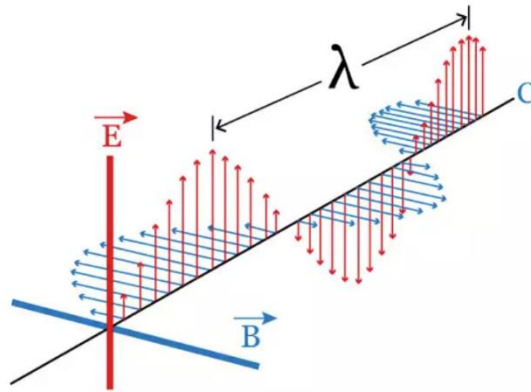
$$\Delta x \times m\Delta v \geq \frac{h}{4\pi}$$

O princípio da certeza é uma grandeza complementar, o que significa

que quanto mais se conhece uma grandeza, menos pode se saber da outra.

A natureza da Luz

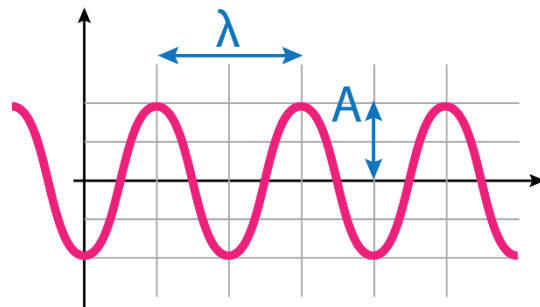
A luz é uma forma de radiação eletromagnética, um tipo de energia contida em campos elétricos e magnéticos. A radiação eletromagnética é descrita como uma onda composta de dois campos perpendiculares e oscilantes (campo elétrico (E) e campo magnético (B)).



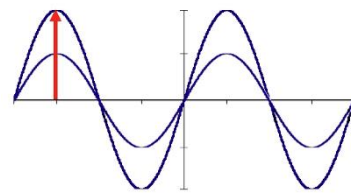
No vácuo essas ondas se movem a uma velocidade de $3,00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$. As ondas podem ser caracterizadas por 3 variáveis e por uma constante.

- 1- Frequência - é o número de ondas completas, ou ciclos, que passam por um determinado ponto por segundo, expresso pela unidade s^{-1} ; também chamado de hertz (Hz)

- 2- Comprimento de onda - é a distância entre qualquer ponto em uma onda e o ponto correspondente na próxima crista (ou depressão) da onda, ou seja, a distância que a onda percorre durante um ciclo. Unidade mais comum (nanometro 10^{-9} m).



- 3- Amplitude - A amplitude de uma onda é a altura da crista (ou profundidade do vale). Para uma onda eletromagnética, a amplitude está relacionada à intensidade da radiação, ou seu brilho no caso da luz visível. A luz de uma determinada cor tem uma frequência específica, mas, como mostra a Figura a seguir, sua amplitude pode variar; a luz pode ser mais fraca (amplitude menor, menos intensa) ou mais brilhante (amplitude maior, mais intensa).



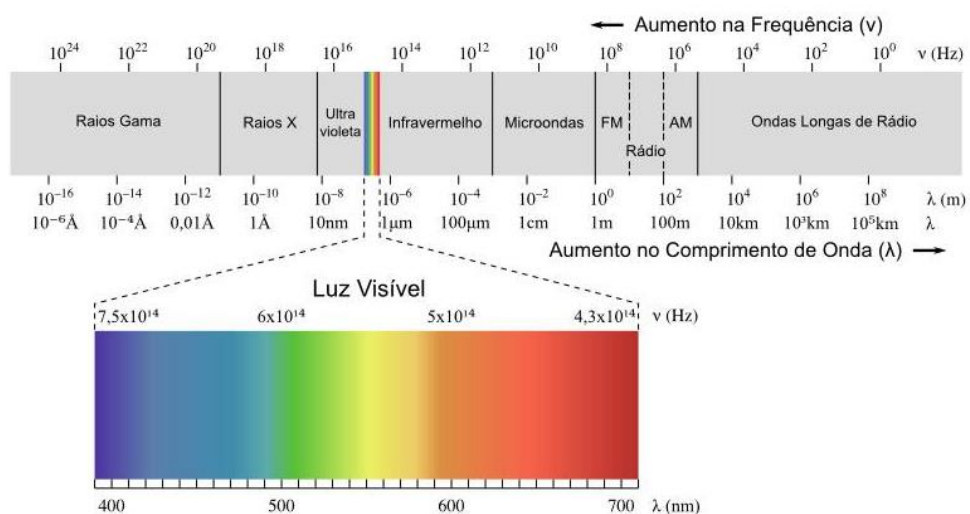
- 4- Velocidade - é a distância que a onda percorre por unidade de tempo (metros por segundo). O produto de sua frequência (ciclos por segundo) e o comprimento de onda (metros por ciclo). No vácuo, a radiação eletromagnética se move a $2,99792458 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$ ($3,00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$ com três algarismos significativos), uma constante física chamada velocidade da luz (c):

$$c = \nu \times \lambda$$

Como o produto de ν e λ é uma constante, eles têm uma relação inversa - a radiação com alta frequência tem um comprimento de onda curto e a radiação com baixa frequência tem um comprimento de onda longo:

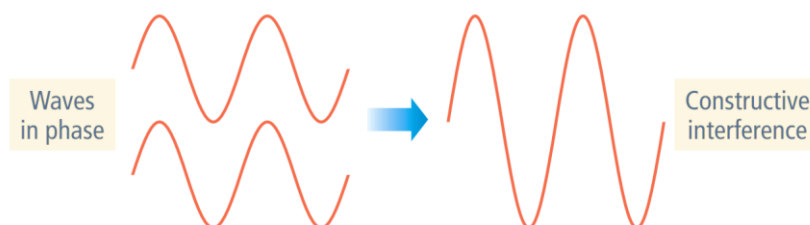
O espectro eletromagnético

O espectro eletromagnético envolve ondas de todos comprimentos de onda (figura). Quanto maior o comprimento de onda menor a energia. Desta forma o infravermelho que tem uma faixa de comprimento de onda aproximadamente 10^{-5} m tem uma baixa energia, enquanto a luz ultravioleta está na faixa de 10^{-7} m e é muito mais energética.

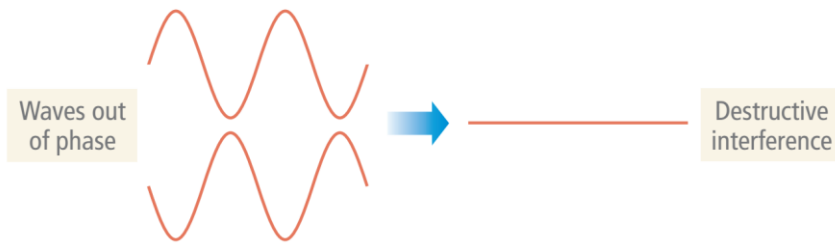


Propriedades de ondas – interferência e difração

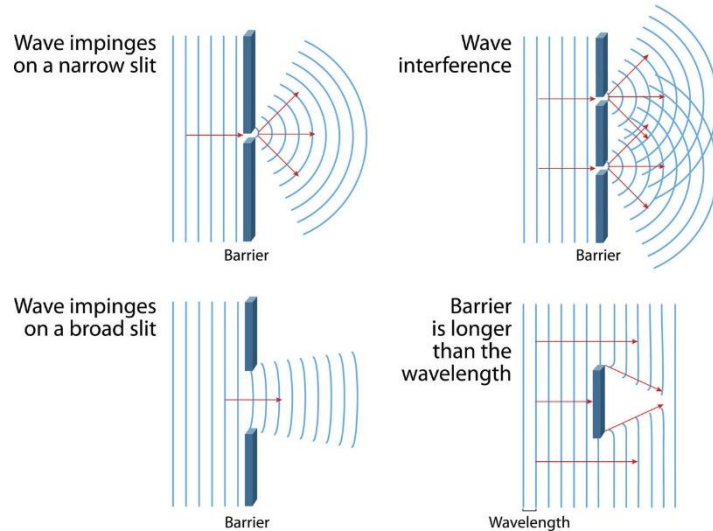
Ondas interagem umas com as outras de uma forma característica chamada interferência: elas se anulam ou se acumulam, dependendo de seu alinhamento na interação. Por exemplo, se duas ondas de igual amplitude estiverem em fase e interagem, resulta em uma onda com o dobro da amplitude. Isso é chamado de interferência construtiva.



Caso duas ondas estiverem completamente fora de fase quando interagem, elas se alinham de modo que o pico de uma fonte se sobreponha ao vale da outra fonte - as ondas se cancelam por interferência destrutiva.



Difração - Quando uma onda encontra um obstáculo ou uma fenda comparável em tamanho ao seu comprimento de onda, ela se curva (ou difrata) em torno dele.



A natureza corpuscular (partícula) da Luz

Antes do início dos anos 1900, e especialmente após a descoberta da difração da luz, pensava-se que a luz era puramente um fenômeno ondulatório. Seu comportamento foi descrito adequadamente pela teoria eletromagnética clássica, que tratou os campos elétrico e magnético que constituem a luz como ondas que se propagam no espaço.

Em 1905, Philip Lenard observou que ao incidir luz UV sobre uma placa metálica levava a que elétrons “voavam” da placa (figura esq), e logo esse fenômeno foi chamado de efeito fotoelétrico. O efeito fotoelétrico é a observação de que muitos metais emitem elétrons quando a luz incide sobre eles (figura dir.). A teoria eletromagnética clássica atribuiu esse efeito à transferência de energia da luz para um elétron no metal, o que resulta na emissão de um elétron.

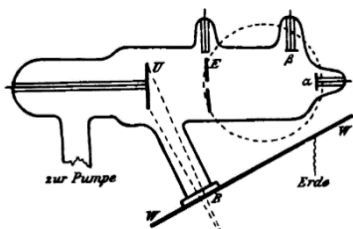
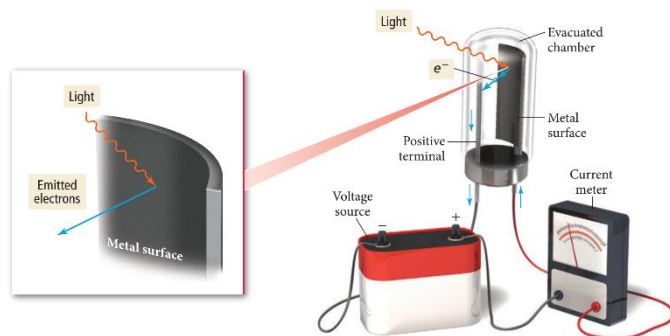


Fig. 10 (ca. 1/8 natürl. Gr.).



As principais observações experimentais deste efeito são:

- Nenhum elétron é ejetado até que a frequência da luz incidente seja acima de um determinado valor.
- Os elétrons são ejetados imediatamente após a incidência da luz.
- A energia cinética dos elétrons ejetados aumenta linearmente com a frequência da radiação incidente.

Einstein encontrou uma explicação para este efeito, ao propor que a radiação eletromagnética é feita de partículas, posteriormente chamados de fótons. O fóton é descrito como um pacote de energia, que é relacionada com a frequência da radiação ($E = h \cdot \nu$). A partir dessa compreensão definimos o efeito fotoelétrico hoje como: "Um elétron será ejetado da superfície de um metal com energia cinética (E_c) somente quando a energia do fóton for maior do que a energia necessária para ionizar o metal (função trabalho).

$$E_c = h\nu - \phi$$

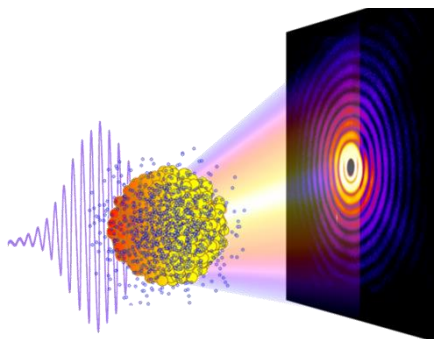
Dualidade onda-partícula

Com a proposta de Einstein da natureza corpuscular dos elétrons, gerou uma grande agitação na comunidade científica. Somando as propriedades de difração da luz (onda) com o efeito fotoelétrico (partícula), os cientistas tiveram que aceitar a dualidade onda-partícula que vez a radiação eletromagnética como onda e partícula.

Em 1925, Louis de Broglie sugeriu que qualquer partícula poderia ser expressa como uma onda, sendo que seu comprimento de onda seria inversamente proporcional a sua massa.

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{de Broglie relation}$$

Também em 1925, Clinton Davisson e Lester Germer, ao focalizar um feixe de elétrons em um monocristal de Níquel, perceberam um padrão de difração.



No arranjo regular de átomos de Ni, os núcleos são separados por 250 pm, que funcionam como fendas e difratam os elétrons incidentes. Este descobrimento foi de grande importância para a aceitação que elétrons atuam como ondas e partículas.

Mapas de distribuição de indeterminação e probabilidade

De acordo com a física clássica, as partículas se movem em uma trajetória que é determinada pela velocidade da partícula, sua posição e as forças que atuam sobre ela. As leis do movimento de Newton são determinísticas – o presente determina o futuro.

O mesmo não ocorre com os elétrons. Sabemos que não podemos conhecer simultaneamente a posição e a velocidade de um elétron; portanto, não podemos conhecer sua trajetória. Na mecânica quântica, as trajetórias são substituídas por mapas de distribuição de probabilidade.



Se um elétron fosse arremessado de um ponto A para um ponto B, ele chegaria em um “ponto B” diferente a cada vez, mesmo que fosse lançado exatamente da mesma maneira. Esse comportamento é chamado de **indeterminação**. O caminho futuro de um elétron é indeterminado e só pode ser descrito estatisticamente.

Mecânica Quântica e o modelo atômico

Para explicar o espectro de emissão do átomo de hidrogênio e de outros elementos, os cientistas do início do século XX tiveram de revisar a descrição da matéria do século XIX para levar em conta a dualidade onda-partícula. Uma das primeiras pessoas a formular uma teoria bem-sucedida (1927) foi o cientista austríaco Erwin Schrödinger, que introduziu um conceito central da teoria quântica.



Como as partículas apresentam propriedades de ondas, não podemos esperar que se comportem segundo a física clássica. A abordagem de Schrödinger era substituir a trajetória precisa de uma partícula por uma função de onda (psi ψ)

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

Max Born sugeriu como a função de onda deveria ser interpretada fisicamente, onde a função de onda seria a probabilidade de encontrar a partícula em uma região e é proporcional ao valor de ψ^2 . Este valor seria a **densidade de probabilidade**, a probabilidade de que a partícula será encontrada em uma pequena região dividida pelo volume da região.

Soluções para a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio

Quando a equação de Schrödinger é resolvida, ela produz muitas soluções (várias funções de onda possíveis). Para compreender a solução da equação de Schrödinger podemos usar representações gráficas dos orbitais que correspondem às funções de onda. Cada orbital é especificado por três números quânticos inter-relacionados: “n” o número quântico principal;

“l”, o número quântico do momento angular e “m_l”, o número quântico magnético. Um quarto número quântico, “m_s”, o número quântico de spin, especifica a orientação do spin do elétron.

Número quântico principal (n) – está relacionado com o tamanho geral e a energia de um orbital. Para o átomo de hidrogênio, a energia de um elétron em um orbital com número quântico n é dada pela equação:

$$E_n = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

A energia é negativa porque a energia do elétron é reduzida por sua interação com o núcleo (lei de Coulomb). A constante, $2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$, é conhecida como constante de Rydberg para hidrogênio (R_H). De uma forma mais ampla podemos usar a equação abaixo para os níveis de energia para o átomo de hidrogênio.

$$E = - \frac{me^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2},$$

Número quântico do momento angular (l) - é um número inteiro que está relacionado a forma do orbital. Define o momento angular, sendo que o aumento de seu valor implica num aumento do momento angular. Os valores possíveis de l são 0, 1, 2, n-1. Em outras palavras, para um determinado valor de n, l pode ser qualquer número inteiro (incluindo 0) até n - 1.

Value of l	Letter Designation
l = 0	s
l = 1	p
l = 2	d
l = 3	f

Número Quântico Magnético (m_l) - é um número inteiro que especifica a orientação do orbital. Podemos entender o momento magnético como uma carga elétrica que se movimenta numa trajetória definida. Visto que, ele aparece devido ao momento angular do elétron, é normal que seu valor (m_l) dependa do valor de “l”. Os valores possíveis de m_l são os valores inteiros (incluindo zero) variando de -l a +l. Por exemplo, se l = 1, teremos 2l+1 valores, logo -1, 0, +1.

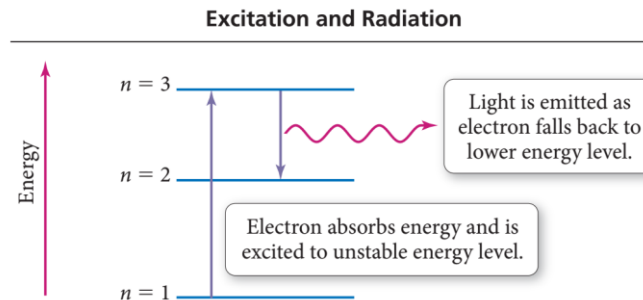
Número quântico de Spin (m_s) - especifica a orientação do spin do elétron (momento de spin). O spin do elétron é uma propriedade fundamental de um elétron (como sua carga negativa). Um elétron não tem mais ou menos spin do que outro - todos os elétrons têm a mesma quantidade de spin. A orientação do spin do elétron é quantizada, havendo apenas duas possibilidades: que podemos chamar de spin up (m_s = +1/2) e spin down (m_s = -1/2).

O momento de spin apenas aparece ao resolvermos a eq. De Schrödinger dependente do tempo. Essa resolução foi necessária para conseguir explicar os resultados dos experimentos de *Stern e Gerlach*, onde um átomo neutro de prata ao atravessar um campo magnético era desviado em duas direções opostas.

Em termos gerais, cada elétron em um átomo pode ser descrito por estes quatro números quânticos. Cada elétron, obrigatoriamente é descrito por uma única combinação destes números. Dois elétrons diferentes nunca terão os mesmos quatro números quânticos!!

Espectroscopia atômica explicada

A teoria quântica explica os espectros de absorção/emissão dos átomos. Cada comprimento de onda no espectro de emissão de um átomo corresponde a uma transição eletrônica entre os orbitais da mecânica quântica. Quando um átomo absorve energia, um elétron em um orbital de menor energia é excitado ou promovido a um orbital de maior energia.



Nessa nova configuração, o átomo é instável (excitado) e o elétron rapidamente decai ou relaxa para um orbital de menor energia. Ao fazer isso, ele libera um fóton de luz contendo uma quantidade de energia exatamente igual à diferença de energia entre os dois níveis de energia. A diferença de energia entre dois níveis n_{inicial} e n_{final} é dada por $\Delta E = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}}$. Se substituirmos a expressão para E_n na expressão para ΔE , obtemos a seguinte expressão importante para a mudança de energia que ocorre em um átomo de hidrogênio quando um elétron muda de nível de energia:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}} \\ &= -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{n_f^2} \right) - \left[-2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{n_i^2} \right) \right] \\ \Delta E &= -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)\end{aligned}$$

A energia carrega um sinal negativo porque o átomo emite a energia conforme relaxa de $n + 1$ para n . Como a energia deve ser conservada, a quantidade exata de energia emitida pelo átomo é transportada pelo fóton:

$$\Delta E_{\text{atom}} = -E_{\text{photon}}$$

Essa energia determina a frequência e o comprimento de onda do fóton. Como o comprimento de onda do fóton está relacionado à sua energia como E , podemos calcular o comprimento de onda do fóton:

$$\lambda = \frac{hc}{E}$$

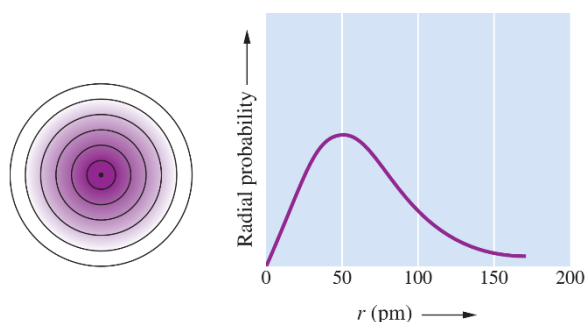
Desta forma, podemos calcular o comprimento de onda de qualquer transição eletrônica entre os possíveis níveis de energia.

A provável localização de um elétron

Cada solução da equação de Schrödinger fornece um estado de energia do átomo associado a um determinado orbital atômico. Um ponto importante a ter em mente é que um “orbital” no modelo da mecânica quântica não tem nenhuma semelhança com uma “órbita” no modelo de Bohr.

A representação gráfica de um orbital é uma imagem tridimensional da função de onda ao quadrado (ψ^2), que representa a densidade de probabilidade, a probabilidade (por unidade de volume) de encontrar o elétron em um ponto no espaço. Se pudéssemos tirar uma fotografia de tempo de exposição do elétron em movimento ondulatório ao redor do núcleo, ela se assemelharia a uma “nuvem” de posições.

Para encontrar a distribuição de probabilidade radial, ou seja, a probabilidade total de encontrar o elétron a uma certa distância r do núcleo, primeiro dividimos mentalmente o volume ao redor do núcleo em regiões esféricas finas, concêntricas, como as camadas de uma cebola.



Perto do núcleo, o volume de cada camada aumenta mais rapidamente do que sua densidade de pontos diminui ($d = \psi^2/\text{volume}$). O resultado desses efeitos opostos é que a probabilidade total atinge o pico em uma camada próxima, mas não no núcleo.

Não podemos atribuir um volume definido a um átomo. No entanto, podemos visualizar um átomo com um contorno de probabilidade de 90%, isso significa que o elétron está em algum lugar dentro desse volume 90% do tempo.

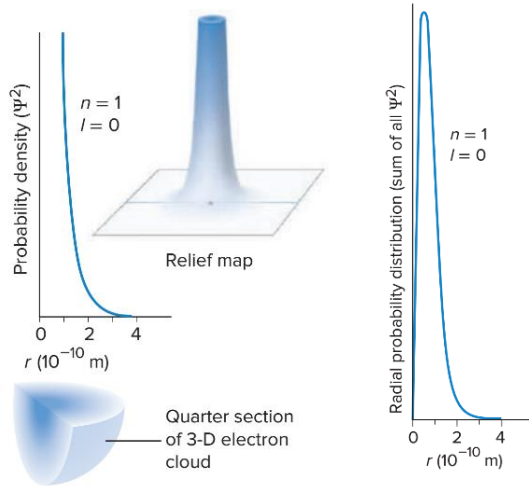
A tabela abaixo contém as expressões para as partes radial e angular da função de onda para átomos monoelétrônicos.

Parte Angular, $\chi(\theta, \phi)$	Parte Radial,* $R_{nl}(r)$
$\chi(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$R(1s) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$
$\chi(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \cos \phi$	$R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma/2}$
$\chi(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \text{sen } \phi$	$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$
$\chi(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	
$\chi(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$	
$\chi(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \cos \theta \cos \phi$	$R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2)e^{-\sigma/2}$
$\chi(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \cos \theta \sin \phi$	$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma)\sigma e^{-\sigma/2}$
$\chi(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \text{sen}^2 \theta \cos 2\phi$	$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$
$\chi(d_{xy}) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \text{sen}^2 \theta \text{sen } 2\phi$	

* $\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$; $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$

Formas de Orbitais Atômicos

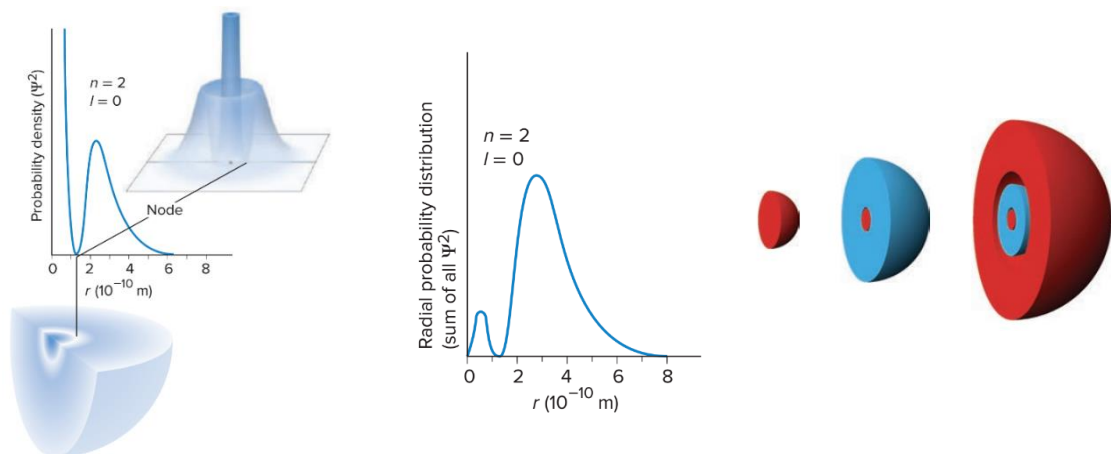
Cada subnível do átomo de H consiste em um conjunto de orbitais com formas características.



O Orbital s - Um orbital com $l = 0$ tem uma forma esférica com o núcleo em seu centro e é chamado de orbital s. Como uma esfera tem apenas uma orientação, um orbital s tem apenas um valor m_l : para qualquer orbital s, $m_l = 0$.

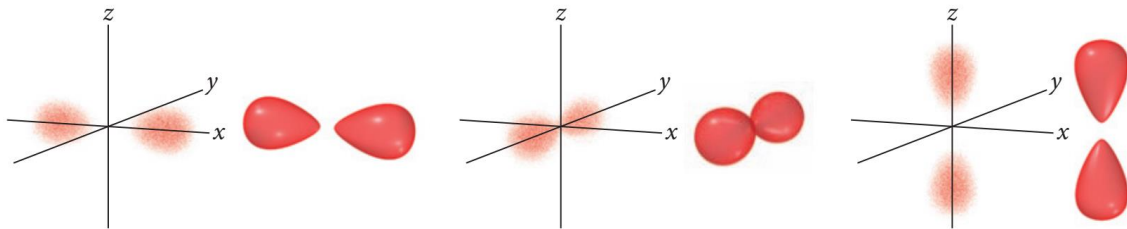
A figura mostra graficamente (topo) um mapa de relevo de densidade de elétrons (inserção) e descreve a curva do gráfico em

três dimensões. Observe que a seção de um quarto de uma representação tridimensional da nuvem de elétrons (abaixo) tem o sombreado mais escuro no núcleo. O gráfico de distribuição de probabilidade radial (direita) é mais alto ligeiramente fora do núcleo. Ambos os gráficos caem suavemente com a distância do núcleo. O orbital **2s** (Figura ao lado) tem duas regiões de maior densidade eletrônica. A distribuição de probabilidade radial da região mais distante é maior do que a mais próxima porque a soma de Ψ^2 é tomada sobre um volume muito maior. Entre as duas regiões existe um nó esférico, onde a probabilidade de encontrar o elétron cai para zero. Como o orbital 2s é maior que o 1s, um elétron no 2s passa mais tempo longe do núcleo (na maior das duas regiões) do que quando ocupa o 1s.

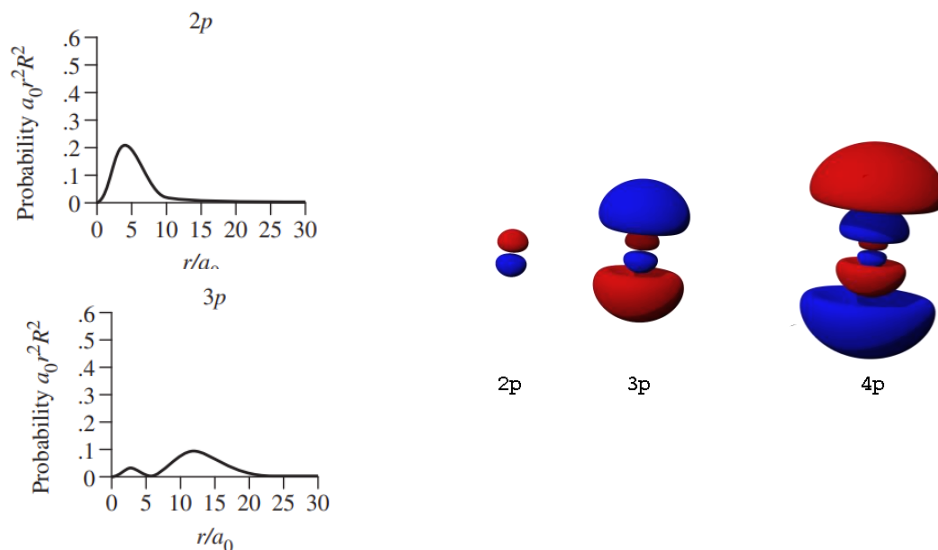


Para o orbital 1s, $R(s)$ é sempre positivo exceto na origem. Para cada tipo de orbital (p, d e f) quando aparecem pela primeira vez também apresentam esse comportamento de apresentar $R(r)$ positivo, exceto na origem.

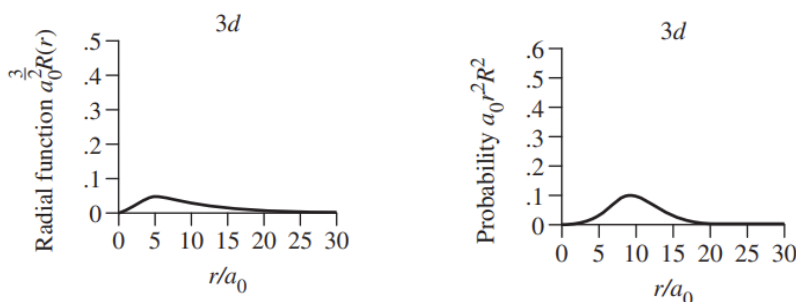
O Orbital p - Um orbital com $l = 1$ é chamado de orbital “**p**” e tem duas regiões (lóbulos) de alta probabilidade, uma de cada lado do núcleo. O núcleo está no plano nodal deste orbital em forma de haltere. Como o valor máximo de l é $n - 1$, apenas os níveis com $n = 2$ ou superior possuem um orbital p: o orbital p de menor energia (o mais próximo do núcleo) é o $2p$. Um orbital p consiste em dois lóbulos, e o elétron gasta o mesmo tempo em ambos. Semelhante ao padrão para orbitais s, um orbital $3p$ é maior que um $2p$, um $4p$ é maior que um $3p$ e assim por diante.

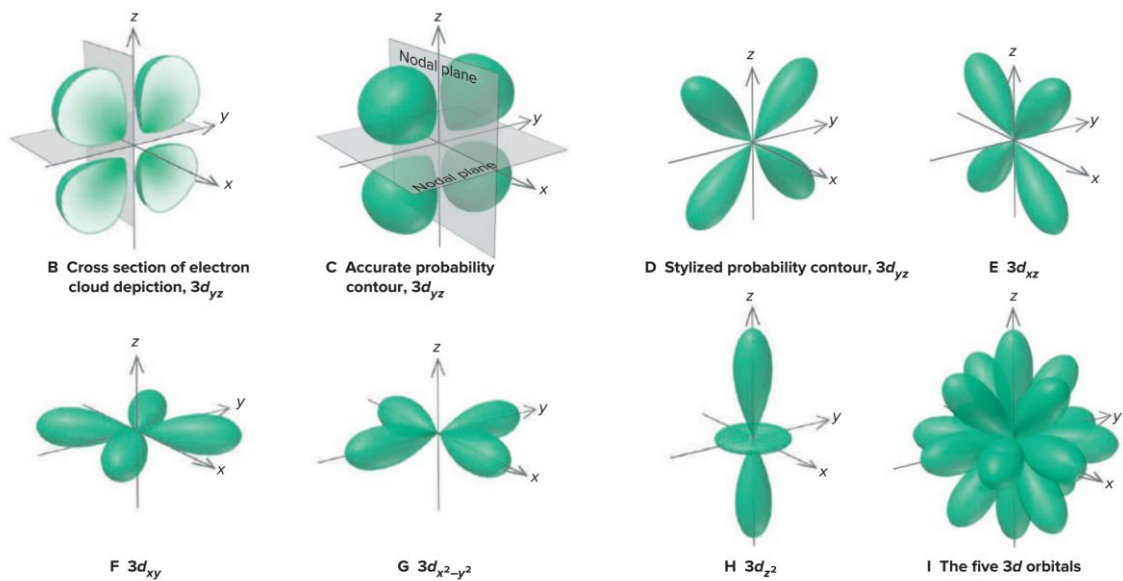


Ao contrário dos orbitais s, os orbitais p têm diferentes orientações espaciais. Os três valores m_l possíveis de $-1, 0$ e $+1$ referem-se a três orientações mutuamente perpendiculares; isto é, embora idênticos em tamanho, forma e energia, os três orbitais p diferem em orientação. Associamos os orbitais p aos eixos x, y e z : o orbital p_x está ao longo do eixo x , o p_y ao longo do eixo y e o p_z ao longo do eixo z .

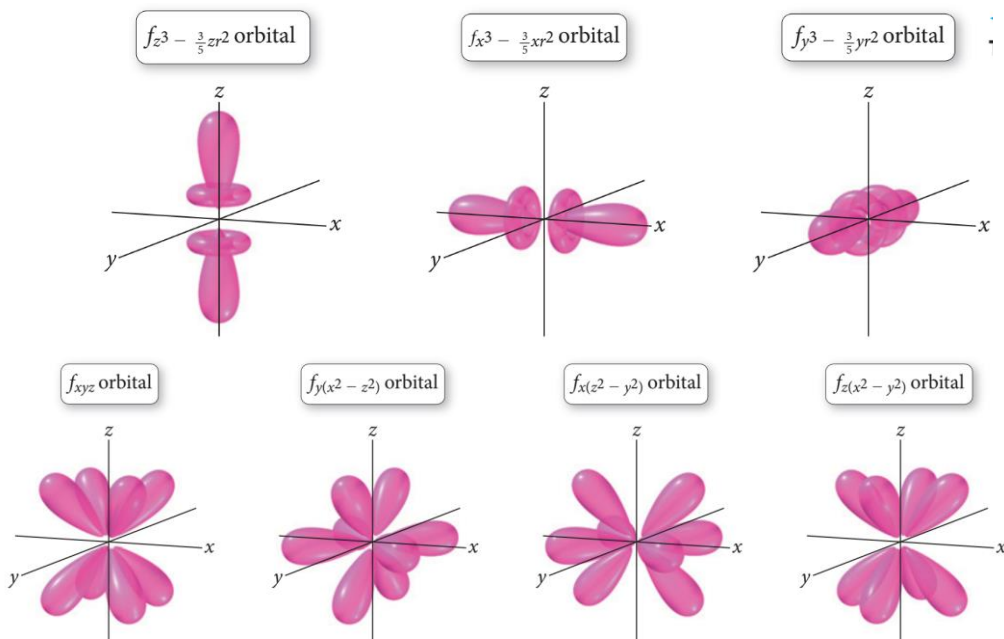


O Orbital d - Um orbital com $l = 2$ é chamado de orbital “**d**”. Existem cinco valores m_l possíveis para $l = 2$: $-2, -1, 0, +1$ e $+2$. Assim, um orbital d tem qualquer uma das cinco orientações (Figura). Quatro dos cinco orbitais d têm quatro lóbulos (uma forma de trevo) com dois planos nodais mutuamente perpendiculares entre eles e o núcleo na junção dos lóbulos.





O Orbital f - Um orbital com $l = 3$ é chamado de orbital f e tem um número quântico principal de pelo menos $n = 4$. Para o subnível $l = 3$, $m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$; valores de sete m_l indicam sete orbitais f no subnível, com sete orientações. A figura mostra os sete orbitais f; cada orbital f tem uma forma complexa multilobulada com vários planos nodais



Divisão de energia de subnível em átomos multieletrônicos

Uma diferença importante nas soluções (aproximadas) para a equação de Schrödinger para átomos multieletrônicos em comparação com as soluções para o átomo de hidrogênio é a ordenação de energia dos orbitais. No átomo de hidrogênio, a energia de um orbital depende apenas de n , o número quântico principal (orbitais s, p e d seriam degenerados).

Os orbitais em um determinado nível principal de um átomo multieletrônico, em contraste, não são degenerados – sua energia depende do valor de l . Dizemos que as energias dos subníveis são divididas. Em geral, quanto menor o valor de l dentro de um nível principal, menor a energia (E) do orbital correspondente. Assim, para um dado valor de n :

$$E(s \text{ orbital}) < E(p \text{ orbital}) < E(d \text{ orbital}) < E(f \text{ orbital})$$

Para entender por que os subníveis se dividem dessa maneira, devemos examinar três conceitos-chave associados à energia de um elétron nas proximidades de um núcleo:

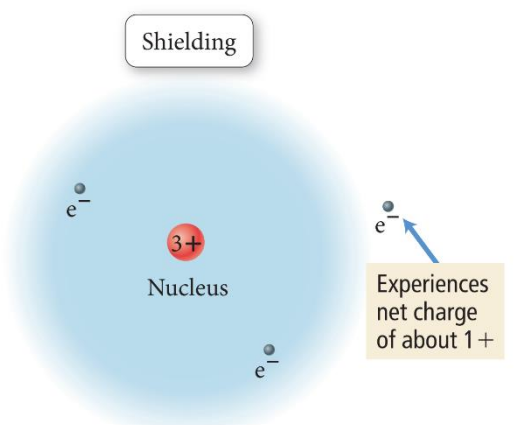
Lei de Coulomb - As atrações e repulsões entre partículas carregadas são descritas pela lei de Coulomb, que afirma que a energia potencial (E) de duas partículas carregadas depende de suas cargas (q_1 e q_2) e de sua separação (r):

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1q_2}{r}$$

- Para cargas iguais, a energia potencial (E) é positiva e diminui à medida que as partículas se distanciam. Como os sistemas tendem a energia potencial mais baixa, cargas iguais se repelem.
- Para cargas opostas, a energia potencial é negativa e se torna mais negativa à medida que as partículas se aproximam (à medida que “ r ” diminui).
- A magnitude da interação entre as partículas carregadas aumenta à medida que as cargas das partículas aumentam. Consequentemente, um elétron com carga 1^- é mais fortemente atraído por um núcleo com carga 2^+ do que por um núcleo com carga 1^+ .

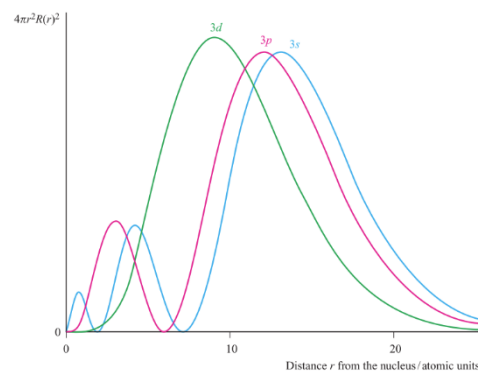
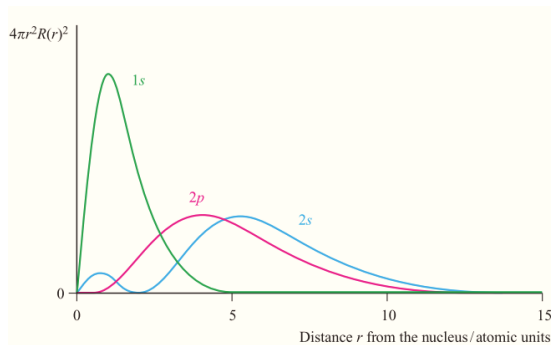
Blindagem - Em átomos multieletrônicos, qualquer elétron experimenta tanto a carga positiva do núcleo (atração) quanto a carga negativa dos outros elétrons (repulsão). Podemos pensar na repulsão de um elétron por outros elétrons como uma blindagem ou blindagem desse elétron dos efeitos totais da carga nuclear.

Imagine o terceiro elétron no átomo de lítio. Como ele está longe do núcleo, ele experimenta a carga 3^+ do núcleo, porém com a blindagem da carga 2^- dos dois elétrons $1s$, conforme mostrado na Figura. Podemos pensar no terceiro elétron como sentindo uma carga nuclear efetiva (Z_{eff}) de aproximadamente 1^+ (3^+ do núcleo e 2^- dos elétrons). Os elétrons internos, na verdade, protegem o elétron externo da carga nuclear total.



Penetração - Agora imagine permitir que esse terceiro elétron se aproxime do núcleo. À medida que o terceiro elétron penetra na nuvem eletrônica dos elétrons $1s$, ele começa a experimentar a carga 3^+ do núcleo mais plenamente porque os elétrons intermediários o protegem menos. Se o elétron pudesse de alguma forma se aproximar do núcleo do que os elétrons $1s$, ele experimentaria a carga 3^+ completa, conforme mostrado na Figura. Em outras palavras, à medida que o elétron externo penetra na região

ocupada pelos elétrons internos, ele experimenta uma carga nuclear maior e, portanto (de acordo com a lei de Coulomb) uma energia menor.



Princípio de Exclusão de Pauli

O princípio de exclusão de Pauli ajuda a explicar uma grande variedade de fenômenos físicos. Um destes fenômenos é a "rigidez" ou "resiliência" da matéria ordinária: o princípio proíbe que partículas idênticas sejam espremidos uns contra os outros, e por isso nossas observações cotidianas do mundo macroscópico mostram que objetos materiais colidem, ao invés de atravessar uns aos outros, e de que somos capazes de nos apoiar de pé sobre o solo sem nele afundar.

Outra consequência deste princípio é a elaborada estrutura das camadas eletrônicas dos átomos e a maneira como átomos partilham elétrons para formar moléculas. Um átomo eletricamente neutro contém elétrons ligados em número igual ao de prótons de seu núcleo. O princípio de exclusão de Pauli os proíbe de ocupar o mesmo estado quântico, e por isso os elétrons tem que se "empilhar" em estados quânticos diversos no interior de um átomo. Desta forma entendemos hoje que dois elétrons em um átomo não podem ter os mesmos quatro números quânticos. Como existem apenas dois valores possíveis de spin (m_s), um orbital não pode conter mais do que dois elétrons, e somente se os dois elétrons tiverem números quânticos de spin diferentes.

Distribuições Espaciais Eletrônicas e Divisão de Subníveis

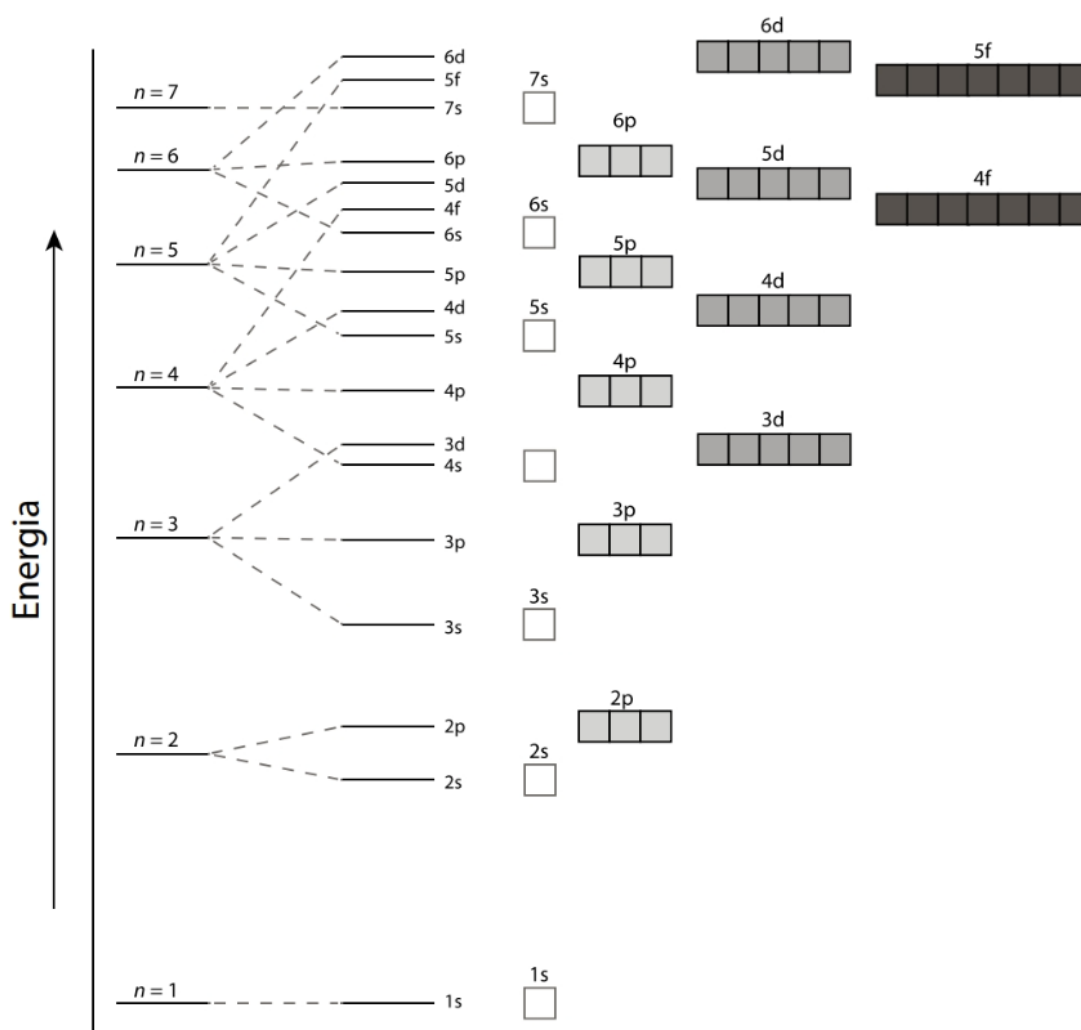
A divisão é resultado das distribuições espaciais de elétrons dentro de um subnível. Lembre-se de que a função de distribuição radial para um orbital atômico mostra a probabilidade total de encontrar o elétron dentro de uma casca esférica fina a uma distância r do núcleo.

Fazendo uma generalização, orbitais que possuem um alto grau de penetração, irão sentir a carga positiva do núcleo mais intensamente, o que pela lei de Coulomb vai fazer com que tenham uma energia média menor (mais negativa). Com isso podemos fazer três observações importantes.

- Por causa da penetração, os subníveis de cada nível principal não são degenerados para átomos multieletrônicos.

- No quarto e no quinto níveis ($n = 4$ e 5), os efeitos da penetração tornam-se tão importantes que o orbital $4s$ tem menos energia que os orbitais $3d$ e o orbital $5s$ tem menos energia que os orbitais $4d$.
- As separações de energia entre um conjunto de orbitais e o próximo tornam-se menores para orbitais $4s$ e acima, e a ordem de energia relativa desses orbitais pode variar entre os elementos. Essas variações resultam em irregularidades nas configurações eletrônicas dos metais de transição e seus íons.

Ordenação Geral de Energia de Orbitais para Átomos Multieletrônicos

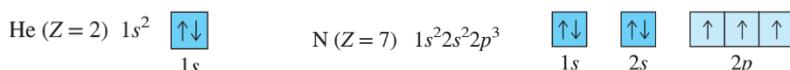


Configurações eletrônicas e diagramas orbitais

Uma configuração eletrônica de um átomo é uma distribuição dos elétrons entre os subníveis de energia disponíveis. A notação para uma configuração lista os símbolos do subnível, um após o outro, com um sobrescrito dando o número de elétrons naquele subnível.

Ex: $1s^2, 2s^2, 2p^4$

Podemos representar orbitais como caixas, descrevendo as quantidades máximas de elétrons que cada grupo de orbitais pode conter. Cada orbital individualmente pode conter máximo 2 elétrons.



Princípio de Construção (Aufbau Principle)

É uma maneira de reproduzir as configurações eletrônicas dos estados fundamentais dos átomos, preenchendo sucessivamente os subníveis de energia com elétrons em uma ordem específica (experimental).

Ao preencher os orbitais de menor energia primeiro, você geralmente obtém a menor energia total (estado fundamental) do átomo. Lembre-se de que a energia de um orbital depende apenas dos números quânticos n e l . A ordem desses subníveis por energia, de $1s$ a $3p$, segue a ordem de construção listada anteriormente.

Quando as subcamadas têm quase a mesma energia, no entanto, a ordem de construção não é estritamente determinada pela ordem de suas energias. As configurações do estado fundamental, que estamos tentando prever pela ordem de construção, são determinadas pelas energias totais dos átomos. A energia total de um átomo depende não apenas das energias dos subníveis, mas também das energias de interação entre os diferentes subníveis. Acontece que para todos os elementos com $Z = 21$ ou maior, a energia do subnível $3d$ é menor que a energia do subnível $4s$ (efeitos eletrônicos).

$Z = 3$	lithium	$1s^2 2s^1$ or $[\text{He}]2s^1$
$Z = 4$	beryllium	$1s^2 2s^2$ or $[\text{He}]2s^2$
$Z = 13$	aluminum	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ or $[\text{Ne}]3s^2 3p^1$
$Z = 18$	argon	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ or $[\text{Ne}]3s^2 3p^6$

Configurações eletrônicas e a tabela periódica

A essa altura, vemos um padrão se desenvolver entre as configurações eletrônicas do estado fundamental dos átomos. Este padrão ajuda a explicar o entendimento atual de como a tabela periódica é compreendida e foi construída.

helium	$1s^2$	beryllium	$1s^2 2s^2$	or	$[\text{He}]2s^2$
neon	$1s^2 2s^2 2p^6$	magnesium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	or	$[\text{Ne}]3s^2$
argon	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	calcium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$	or	$[\text{Ar}]4s^2$
krypton	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$				

boron	$1s^2 2s^2 2p^1$	or	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
aluminum	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	or	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
gallium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$	or	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$

Um elétron em um átomo presente nos níveis de energia mais externos é chamado de elétron de valência. Esses elétrons estão envolvidos principalmente em reações químicas, e as semelhanças entre os elétrons de valência (as configurações da camada de valência) explicam as semelhanças das propriedades químicas entre os grupos de elementos.

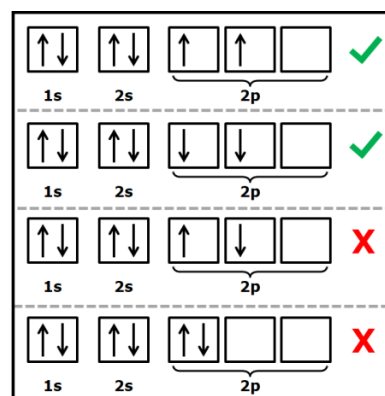
Regra de Hund

A Regra de Hund, ou Princípio da Máxima Multiplicidade, foi desenvolvida pelo físico alemão Friedrich Hermann Hund. Ela descreve como os elétrons se distribuem nos orbitais de um átomo. Vamos explorar os detalhes:

A regra de Hund afirma que, quanto maior o número de elétrons com spin paralelo em um orbital incompleto, menor será a energia. Os elétrons são distribuídos individualmente no orbital incompleto, até que o orbital esteja completo com a distribuição dos elétrons individuais e spins no mesmo sentido. Se ainda houver elétrons para distribuir, voltamos ao início do orbital incompleto e distribuimos os elétrons restantes da mesma forma, mas com spin no sentido oposto.

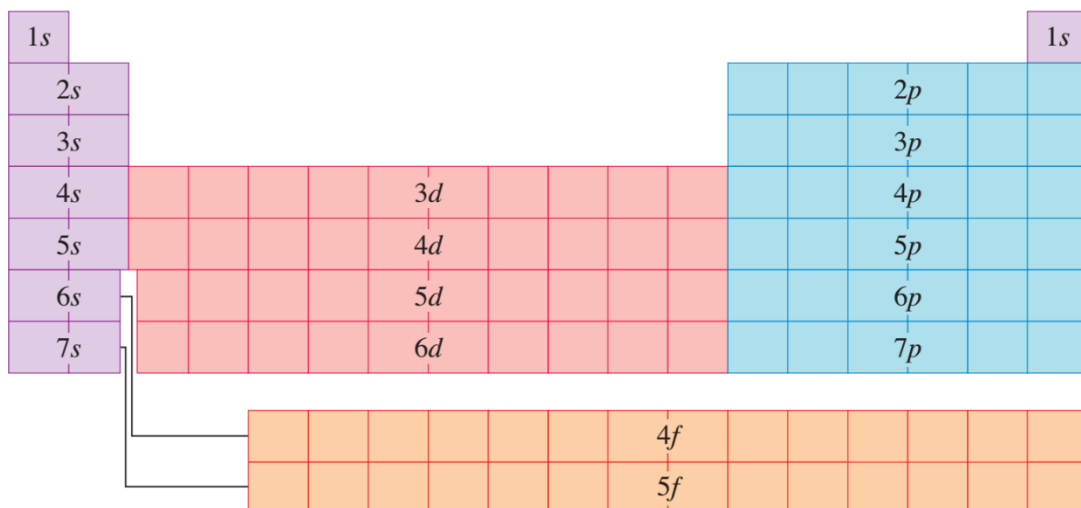
Essa regra é fundamental para entender a estrutura eletrônica dos átomos e a formação de ligações químicas. Resultados experimentais mostram que as configurações eletrônicas dos átomos no estado fundamental tendem a ocupar orbitais de menor energia, minimizando a energia total do átomo.

A regra de Hund resume essa constatação experimental: elétrons numa mesma subcamada tendem a permanecer desemparelhados (em orbitais separados), com spins paralelos. Essa regra, junto com o princípio da exclusão de Pauli, é utilizada no princípio da construção (distribuição dos elétrons nos diagramas de orbitais).



		s subshell fills										p subshell fills												
		Transition Metals d subshell fills										Inner Transition Metals f subshell fills												
		Lanthanides										Actinides												
1	IA	1 H 1s ¹																					2 He 1s ²	VIIIA
2		3 Li 2s ¹	4 Be 2s ²											5 B 2s ² 2p ¹	6 C 2s ² 2p ²	7 N 2s ² 2p ³	8 O 2s ² 2p ⁴	9 F 2s ² 2p ⁵	10 Ne 2s ² 2p ⁶					
3		11 Na 3s ¹	12 Mg 3s ²											13 Al 3s ² 3p ¹	14 Si 3s ² 3p ²	15 P 3s ² 3p ³	16 S 3s ² 3p ⁴	17 Cl 3s ² 3p ⁵	18 Ar 3s ² 3p ⁶					
4		19 K 4s ¹	20 Ca 4s ²	21 Sc 3d ¹ 4s ²	22 Ti 3d ² 4s ²	23 V 3d ³ 4s ²	24 Cr 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn 3d ⁵ 4s ²	26 Fe 3d ⁶ 4s ²	27 Co 3d ⁷ 4s ²	28 Ni 3d ⁸ 4s ²	29 Cu 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga 4s ² 4p ¹	32 Ge 4s ² 4p ²	33 As 4s ² 4p ³	34 Se 4s ² 4p ⁴	35 Br 4s ² 4p ⁵	36 Kr 4s ² 4p ⁶					
5		37 Rb 5s ¹	38 Sr 5s ²	39 Y 4d ¹ 5s ²	40 Zr 4d ² 5s ²	41 Nb 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc 4d ⁵ 5s ²	44 Ru 4d ⁷ 5s ¹	45 Rh 4d ⁸ 5s ¹	46 Pd 4d ¹⁰	47 Ag 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd 4d ¹⁰ 5s ²	49 In 5s ² 5p ¹	50 Sn 5s ² 5p ²	51 Sb 5s ² 5p ³	52 Te 5s ² 5p ⁴	53 I 5s ² 5p ⁵	54 Xe 5s ² 5p ⁶					
6		55 Cs 6s ¹	56 Ba 6s ²	71 Lu 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	72 Hf 5d ² 6s ²	73 Ta 5d ³ 6s ²	74 W 5d ⁴ 6s ²	75 Re 5d ⁵ 6s ²	76 Os 5d ⁶ 6s ²	77 Ir 5d ⁷ 6s ²	78 Pt 5d ⁹ 6s ¹	79 Au 5d ¹⁰ 6s ¹	80 Hg 5d ¹⁰ 6s ²	81 Tl 6s ² 6p ¹	82 Pb 6s ² 6p ²	83 Bi 6s ² 6p ³	84 Po 6s ² 6p ⁴	85 At 6s ² 6p ⁵	86 Rn 6s ² 6p ⁶					
7		87 Fr 7s ¹	88 Ra 7s ²	103 Lr 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²	104 Rf 6d ² 7s ²	105 Db 6d ³ 7s ²	106 Sg 6d ⁴ 7s ²	107 Bh 6d ⁵ 7s ²	108 Hs 6d ⁶ 7s ²	109 Mt 6d ⁷ 7s ²	110 Uun 6d ⁸ 7s ²	111 Rg 6d ⁹ 7s ²	112 Uub 6d ¹⁰ 7s ²	113 Uut 7s ² 7p ¹	114 Uuq 7s ² 7p ²	115 Uup 7s ² 7p ³	116 Uuh 7s ² 7p ⁴	118 Uuo 7s ² 7p ⁶						

Para discutir a ligação e a química dos elementos de forma coerente, você deve ser capaz de reproduzir as configurações atômicas, seguindo facilmente o princípio de construção. Tudo o que você precisa é de alguma facilidade para recordar a ordem de construção dos subníveis. Uma abordagem é recordar a estrutura da tabela periódica. Como essa estrutura é básica, ela oferece uma boa maneira de lembrar a ordem de construção.



Propriedades Periódicas

A lei periódica afirma que, quando os elementos são organizados por número atômico, suas propriedades físicas e químicas variam periodicamente.

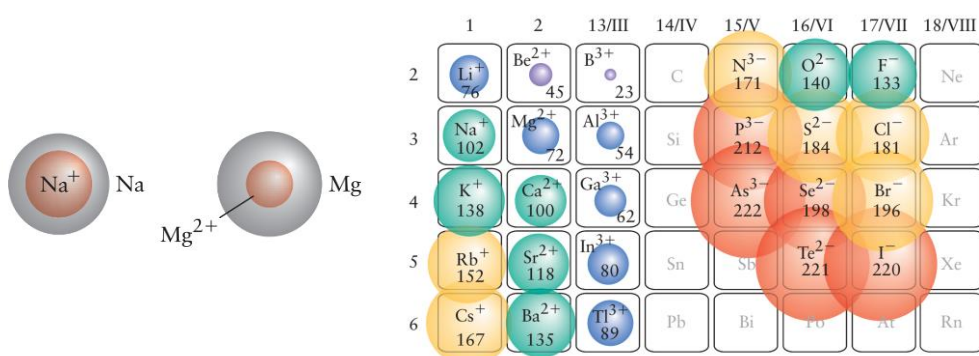
Raio atômico - Definimos o tamanho atômico (a extensão do contorno esférico para um determinado átomo) em termos de quão perto um átomo está próximo ao outro. Mas, na prática, medimos a distância entre os núcleos atômicos em uma amostra de um elemento e dividimos essa distância pela metade.

Li	Be											B	C	N	O	F
157	112											88	77	74	73	71
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
191	160											143	118	110	104	99
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
235	197	164	147	135	129	137	126	125	125	128	137	140	122	122	117	114
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
250	215	182	160	147	140	135	134	134	137	144	152	150	140	141	135	133
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi		
272	224	188	159	147	141	137	135	136	139	144	155	155	154	152		

* The values refer to coordination number 12 for metallic radii (see Section 3.2).

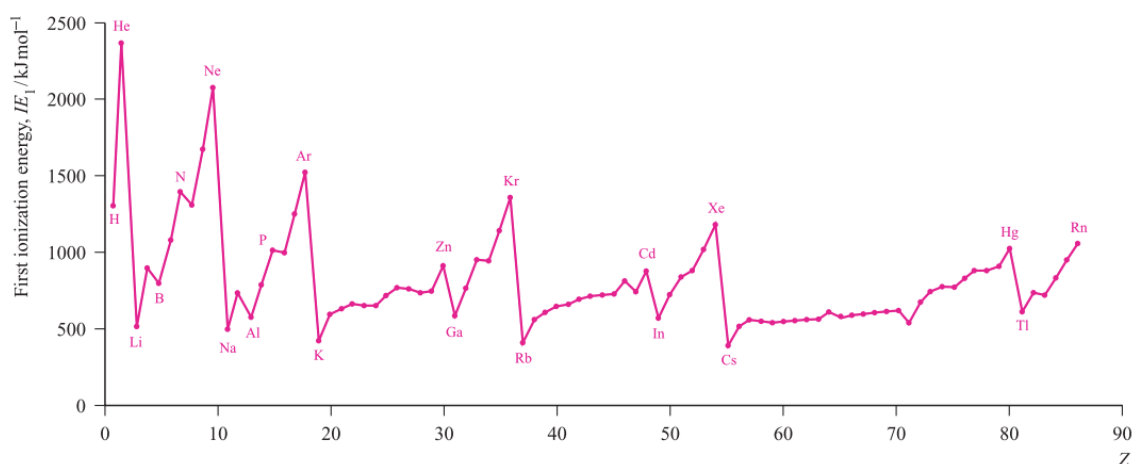
Os dados da Tabela acima mostram que os raios atômicos aumentam ao longo de um grupo e diminuem da esquerda para a direita ao longo de um período. Estas tendências são facilmente interpretadas em termos da estrutura eletrônica dos átomos. Ao descer um grupo, os elétrons de valência são encontrados em orbitais de números quânticos principais sucessivamente mais elevados. Os átomos dentro do grupo têm um número maior de camadas completas de elétrons em períodos sucessivos e, portanto, seus raios aumentam ao longo do grupo. Ao longo de um período, os elétrons de valência entram em orbitais da mesma camada; entretanto, o aumento na carga nuclear efetiva ao longo do período atrai os elétrons e resulta em átomos progressivamente mais compactos. O aumento geral do raio ao longo de um grupo e a diminuição ao longo de um período devem ser lembrados, pois se correlacionam bem com tendências em muitas propriedades químicas.

Raio Iônico



Energia de ionização - A primeira energia de ionização, IE_1 , é a energia necessária para remover o elétron menos fortemente ligado do átomo neutro. A primeira energia de ionização é maior para elementos próximos ao hélio e menor para elementos próximos ao célio. As segundas energias de ionização são maiores que as primeiras energias de ionização (do mesmo elemento) e muito maiores se o elétron for removido de uma camada fechada. Os metais são encontrados no canto inferior esquerdo da tabela periódica porque esses elementos têm baixas energias de ionização e podem facilmente perder seus elétrons.

Z	Element	Number of Valence Electrons	Ionization Energy (MJ/mol)*									
			IE_1	IE_2	IE_3	IE_4	IE_5	IE_6	IE_7	IE_8	IE_9	IE_{10}
3	Li	1	0.52	7.30	11.81	CORE ELECTRONS						
4	Be	2	0.90	1.76	14.85	21.01	CORE ELECTRONS					
5	B	3	0.80	2.43	3.66	25.02	32.82	CORE ELECTRONS				
6	C	4	1.09	2.35	4.62	6.22	37.83	47.28	CORE ELECTRONS			
7	N	5	1.40	2.86	4.58	7.48	9.44	53.27	64.36	CORE ELECTRONS		
8	O	6	1.31	3.39	5.30	7.47	10.98	13.33	71.33	84.08	CORE ELECTRONS	
9	F	7	1.68	3.37	6.05	8.41	11.02	15.16	17.87	92.04	106.43	
10	Ne	8	2.08	3.95	6.12	9.37	12.18	15.24	20.00	23.07	115.38	131.43
11	Na	1	0.50	4.56	6.91	9.54	13.35	16.61	20.11	25.49	28.93	141.37



Vários padrões repetidos são aparentes e alguns detalhes a serem observados são:

Os elevados valores de IE1 associados aos gases nobres; Os valores superficiais de IE1 associados ao elemento do grupo 1; O aumento geral dos valores de IE1 à medida que um determinado período é atravessado; A descontinuidade nos valores de IE1 ao passar de um elemento do grupo 15 para seu vizinho do grupo 16 (preenchimento subnível); A diminuição dos valores de IE1 ao passar de um elemento do grupo 2 ou 12 para o seu vizinho do grupo 13 (preenchimento do subnível); Os valores bastante semelhantes de IE1 para uma determinada linha de elementos do bloco d.

Afinidade Eletrônica - A afinidade eletrônica (EA) é a mudança de energia que acompanha a adição de 1 mol de elétrons a 1 mol de átomos ou íons gasosos.

Assim como ocorre com a energia de ionização, há uma primeira afinidade eletrônica, uma segunda e assim por diante. O primeiro elétron é atraído pelo núcleo atômico, portanto, na maioria dos casos, EA1 é negativo (energia é liberada), análogo ao ΔH negativo para uma reação exotérmica. Mas, a afinidade do segundo elétron (EA2) é sempre positiva porque a energia deve ser absorvido para superar as repulsões eletrostáticas e adicionar outro elétron a um íon negativo.

No grupo. Podemos esperar uma diminuição suave (menor número negativo) em um grupo porque o tamanho atômico aumenta e o núcleo está mais longe de um elétron adicionado.

Ao longo de um período. Podemos esperar um aumento regular (maior número negativo) ao longo de um período porque o tamanho atômico diminui e Z_{eff} mais alto deve atrair o elétron adicionado com mais força.

1A (1)	2A (2)	3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)
H -72.8	He (0.0)	B -26.7	C -122	N +7	O -141	F -328	Ne (+29)
Li -59.6	Be ≤0	Al -42.5	Si -134	P -72.0	S -200	Cl -349	Ar (+35)
Na -52.9	Mg ≤0	Ga -28.9	Ge -119	As -78.2	Se -195	Br -325	Kr (+39)
K -48.4	Ca -2.37	In -28.9	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe (+41)
Rb -46.9	Sr -5.03	Tl -19.3	Pb -35.1	Bi -91.3	Po -183	At -270	Rn (+41)
Cs -45.5	Ba -13.95						

Caráter metálico - Todos os comportamentos físicos e químicos dos elementos e seus compostos são baseados em suas configurações eletrônicas e em sua carga nuclear efetiva.

As três classes gerais de elementos têm propriedades distintas:

- Os metais, encontrados nos três quartos esquerdos e inferiores da tabela periódica, são tipicamente sólidos brilhantes, têm pontos de fusão moderados a altos, são bons condutores de calor e eletricidade, podem ser usinados em fios e folhas e perdem elétrons para não-metais.
- Os não-metais, encontrados no canto superior direito da tabela, normalmente não são brilhantes, têm pontos de fusão relativamente baixos, são maus condutores, são principalmente sólidos ou gases quebradiços e tendem a ganhar elétrons dos metais.
- Os semi-metais, encontrados entre as outras duas classes, possuem propriedades intermediárias.

Como principais características do caráter metálico temos a tendência de **perder elétrons** e formar cátions. Intimamente relacionado com a tendência de um elemento de perder

ou ganhar elétrons está seu **comportamento redox** – isto é, se ele se comporta como um agente oxidante ou redutor e as mudanças associadas em seu número de oxidação.

Comportamento Ácido-Base de Óxidos. Os metais também se distinguem dos não-metais pelo comportamento ácido-base de seus óxidos em água: A maioria dos metais do grupo principal **transfere elétrons para o oxigênio**, então seus óxidos são iônicos. Esses óxidos agem como bases na água, produzindo íons OH- a partir do O²⁻ e reagindo com ácidos.

Previsões de Mendeleev da Tabela Periódica

Uma das tabelas periódicas de Mendeleev é reproduzida na Figura a seguir. Embora um pouco diferente das tabelas modernas, mostra essencialmente o mesmo arranjo. Nesta forma inicial da tabela periódica, dentro de cada coluna, alguns elementos foram colocados no lado esquerdo e outros no lado direito.

T a b e l e II.								
Reihen	Gruppe I. — R ² O	Gruppe II. — RO	Gruppe III. — R ² O ³	Gruppe IV. RH ⁴ RO ²	Gruppe V. RH ³ R ² O ⁵	Gruppe VI. RH ² RO ³	Gruppe VII. RH R ² O ⁷	Gruppe VIII. — RO ⁴
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	— — — —
9	(—)	—	—	—	—	—	—	— — — —
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	— — — —
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	— — — —

A tabela foi construída inicialmente em ordem crescente de massas atômicas e agrupada de acordo com as reatividades dos elementos. Mendeleev acreditava fortemente na periodicidade das propriedades dos elementos. A partir dessa premissa ele compreendeu que os buracos faltantes na tabela dele seriam elementos ainda não descobertos, e a partir de seus estudos ele previu a descoberta dos elementos Gálio e germânio.

<i>Property</i>	<i>Predicted for Eka-Aluminum</i>	<i>Found for Gallium</i>
Atomic weight	68 amu	69.7 amu
Formula of oxide	Ea ₂ O ₃	Ga ₂ O ₃
Density of the element	5.9 g/cm ³	5.91 g/cm ³
Melting point of the element	Low	30.1°C
Boiling point of the element	High	1983°C