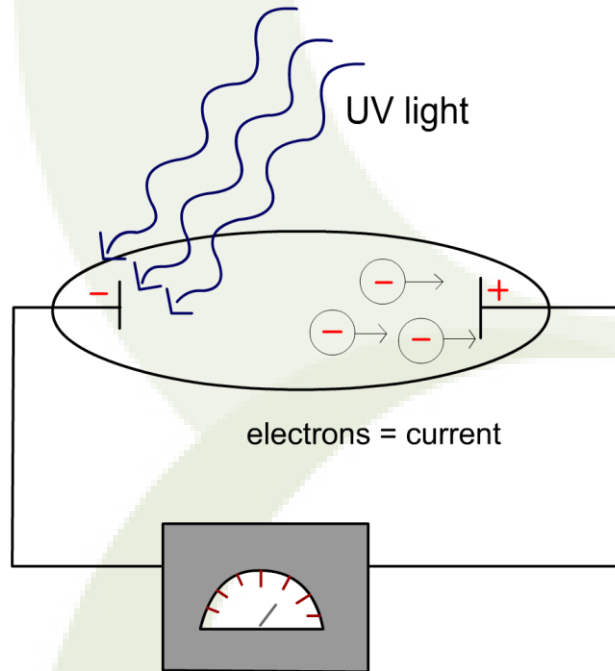



# MODELO QUÂNTICO



# PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS DO ELÉTRON

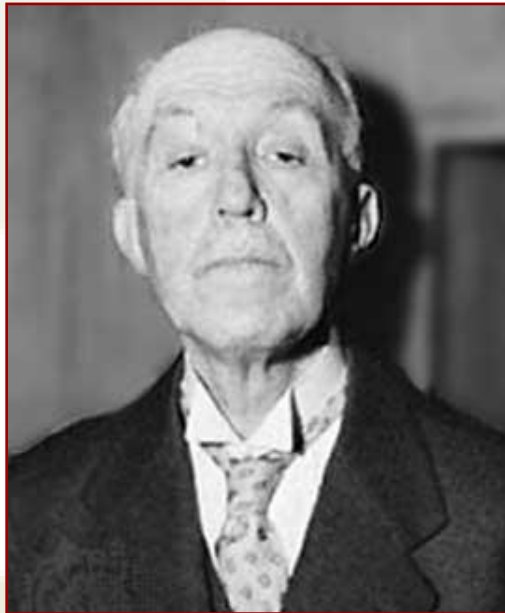
## Photoelectric Effect



  
photon = wave particle of light

- EINSTEIN: usou o efeito fotoelétrico para demonstrar que a luz, geralmente imaginada como tendo propriedades de onda, pode também ter propriedades de partícula.

# LOWIS DE BROGLIE (1929)



- Propôs que um elétron livre de massa  $m$ , que se move com velocidade  $v$ , tem um comprimento de onda associado, dado pela equação:

$$\lambda = h/mv$$

- O momento,  $mv$ , é uma propriedade de partícula, enquanto  $\lambda$  é uma propriedade ondulatória.
- de Broglie resumiu os conceitos de ondas e partículas, com efeitos notáveis se os objetos são pequenos.

# PRINCÍPIO DA INCERTEZA (1925-1927)

- **O princípio da incerteza de Heisenberg:** na escala de massa de partículas atômicas, não podemos determinar *exatamente* a posição, a direção do movimento e a velocidade simultaneamente.
- Para os elétrons: não podemos determinar seu momento e sua posição simultaneamente.
- Se  $\Delta x$  é a incerteza da posição e  $\Delta mv$  é a incerteza do momento, então:

$$\Delta x \cdot \Delta mv \geq \frac{h}{4\pi}$$

# A DESCRIÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO PELA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER

- **Schrödinger** propôs uma equação que contém os termos onda e partícula.
- A resolução da equação leva às funções de onda.
- A função de onda fornece o contorno do orbital eletrônico.
- O quadrado da função de onda fornece a probabilidade de se encontrar o elétron, isto é, dá a densidade eletrônica para o átomo.

# A DESCRIÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO PELA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER

1. O comportamento do elétron no átomo é mais bem descrito como uma onda estacionária – somente determinadas funções de onda são permitidas para o elétron no átomo.
2. Cada função de onda é associada com um valor permitido de energia para o elétron.
3. Decorre de 1 e 2 que a energia do elétron no átomo é quantizada.
4. O quadrado da função de onda,, está relacionado com a probabilidade de encontrar o elétron dentro de uma determinada região do espaço – densidade eletrônica.

# A DESCRIÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO PELA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER

5. A região do espaço em que há a probabilidade de encontrar um elétron de determinada energia é chamada de **orbital**.
6. Para resolver a equação de Schrodinger para um elétron no espaço tridimensional três numero inteiros – os números quânticos  $n$ ,  $l$  e  $m_l$  são parte integral da resolução matemática.

# NÚMEROS QUÂNTICOS

## 1. Número quântico principal, $n$ ( $n = 1, 2, 3 \dots$ )

- É o fator primário na determinação da energia do elétron.
- Define o tamanho de um orbital; quanto maior for o valor de  $n$ , maior é o orbital e maior é a distância média entre o elétron e o núcleo.
- Elétrons com o mesmo valor de  $n$  ocupam o mesmo nível eletrônico.



# NÚMEROS QUÂNTICOS

## 2. Número quântico de momento angular, $\ell$ ( $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ )

- Cada valor de  $\ell$  caracteriza uma subcamada (os eletrons em uma determinada camada podem ser agrupados em subcamadas).
- Cada valor de  $\ell$  corresponde a um orbital.

Valor de $\ell$	Orbital
0	s
1	p
2	d
3	f

# NÚMEROS QUÂNTICOS

## 3. Número quântico de magnético, $m_\ell$ ( $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$ )

- $m_\ell$  está relacionado à orientação espacial dos orbitais em uma subcamada.
- Para uma determinada subcamada,  $m_\ell = 2\ell + 1$ , especifica o número de orbitais na subcamada.

Valor de $\ell$	Orbital	Número de orbitais ( $2\ell + 1$ )
0	s	1
1	p	3
2	d	5
3	f	7

# NÚMEROS QUÂNTICOS

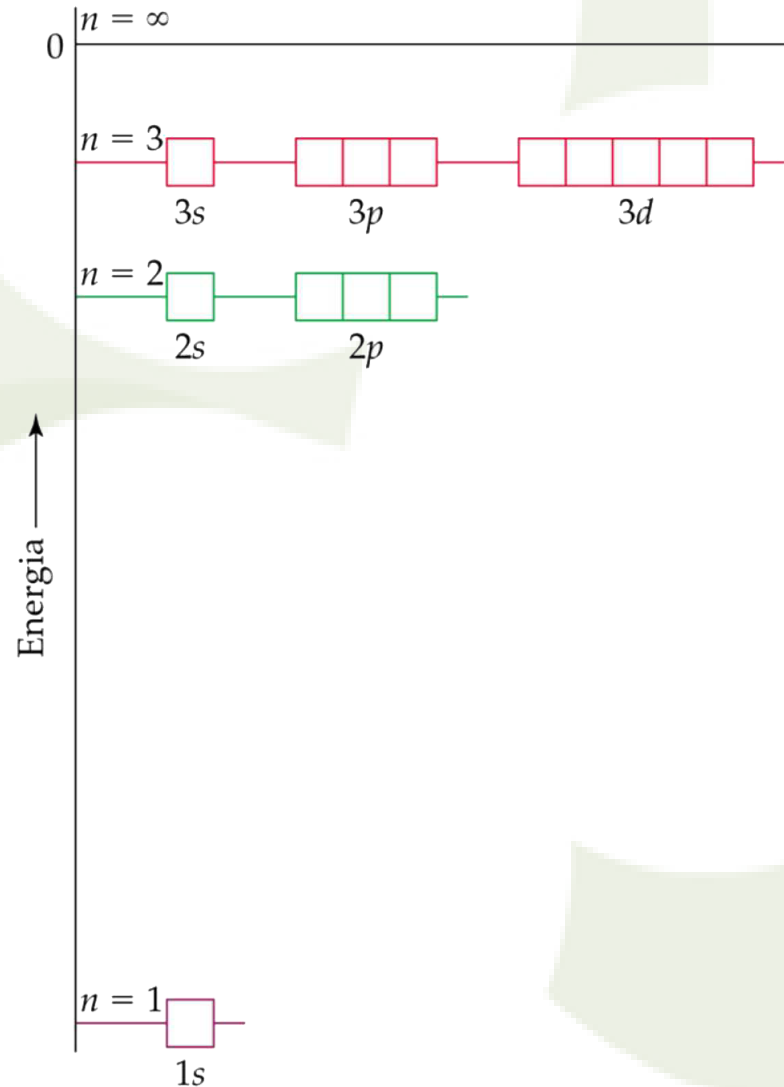
## 4. Número quântico de magnético de spin eletrônico, $m_s$ ( $m_s = +1/2, -1/2$ )

- Um elétron em um átomo apresenta as propriedades magnéticas esperadas para uma partícula carregada em rotação.
- A rotação do elétron deve ser representada por um quarto número quântico,  $m_s$ .

# VALORES PERMITIDOS DE $n$ , $\ell$ e $m_\ell$ , DESIGNAÇÃO DO SUBNÍVEIS E NÚMERO DE ORBITAIS

Camada eletrônica ( $n = 1, 2, 3, \dots$ )	Subcamada ( $\ell = 1, 2, \dots, n-1$ )	Designação do subnível	Valores de $m_\ell$ ( $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ )	Nº de orbitais ( $m_\ell = 2\ell + 1$ )
$n = 1$	s ( $\ell = 0$ )	1s	0	1
$n = 2$	s ( $\ell = 0$ )	2s	0	1
	p ( $\ell = 1$ )	2p	0, $\pm 1$	3
$n = 3$	s ( $\ell = 0$ )	3s	0	1
	p ( $\ell = 1$ )	3p	0, $\pm 1$	3
	d ( $\ell = 2$ )	3d	0, $\pm 1$ , $\pm 2$	5
$n = 4$	s ( $\ell = 0$ )	4s	0	1
	p ( $\ell = 1$ )	4p	0, $\pm 1$	3
	d ( $\ell = 2$ )	4d	0, $\pm 1$ , $\pm 2$	5
	f ( $\ell = 3$ )	4f	0, $\pm 1$ , $\pm 2$ , $\pm 3$	7

# DIAGRAMA DE *aufbau* PARA O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO



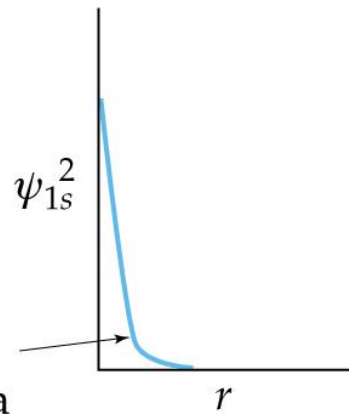
# O FORMATO DOS ORBITAIS ATÔMICOS

## 1. Orbitais $s$ ( $\ell = 0$ )

- Todos os orbitais  $s$  são esféricos.
- À medida que  $n$  aumenta, os orbitais  $s$  ficam maiores.
- À medida que  $n$  aumenta, aumenta o número de nós **radiais**.
- Um nó é uma região no espaço onde a probabilidade de se encontrar um elétron é zero.
- Em um nó,  $\Psi^2 = 0$ .
- Para um orbital  $s$ , o número de nós é  $n-1$ .

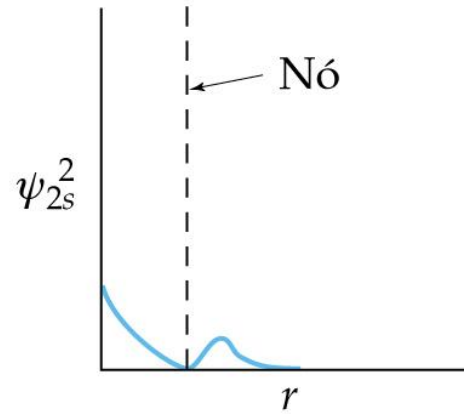
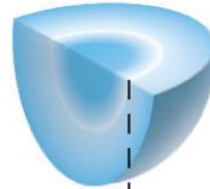
# ORBITAIS s

1s  
 $n = 1, l = 0$



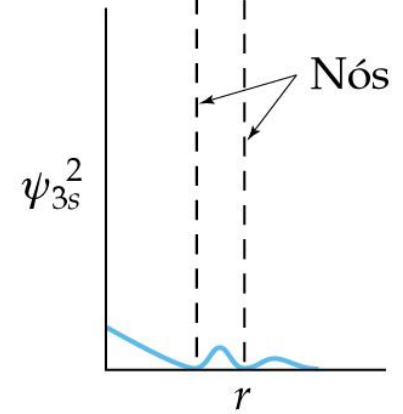
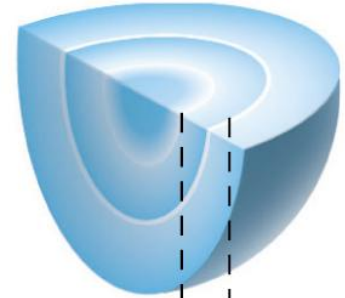
(a)

2s  
 $n = 2, l = 0$



(b)

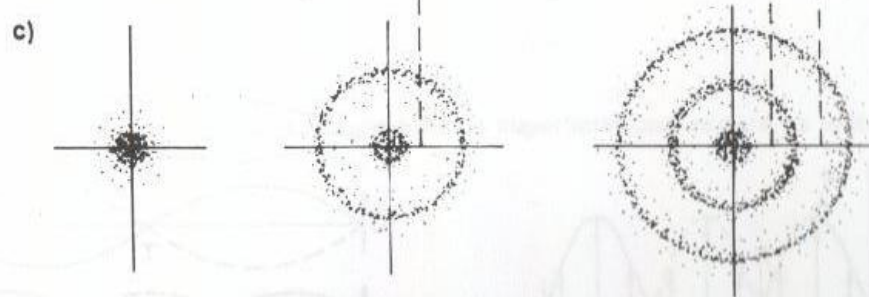
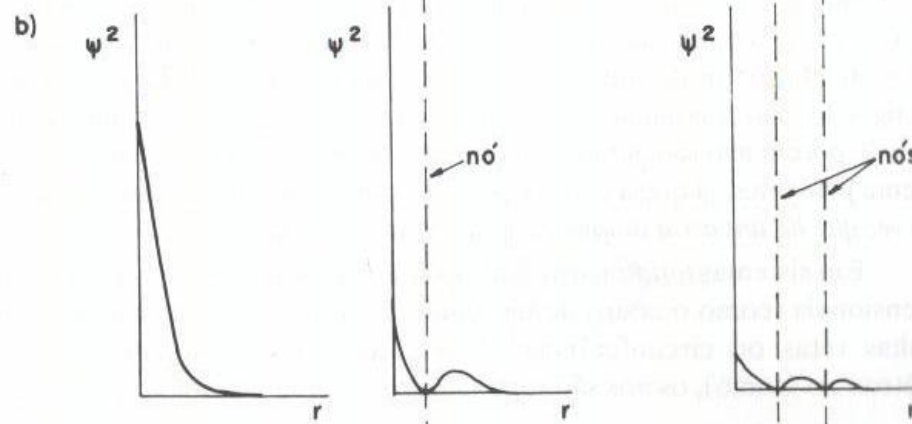
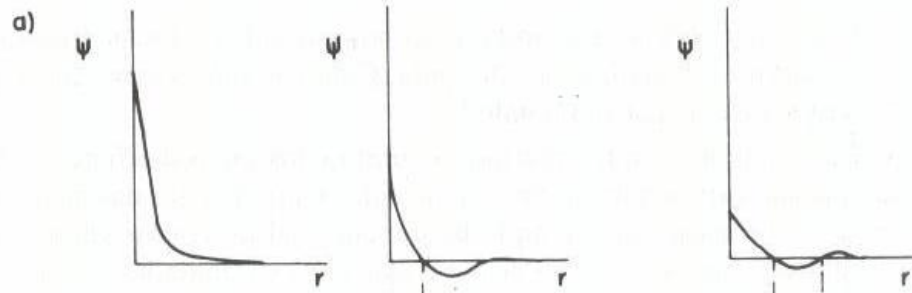
3s  
 $n = 3, l = 0$



(c)

A altura do gráfico indica a densidade de pontos à medida que ocorre afastamento da origem

# ORBITAIS s





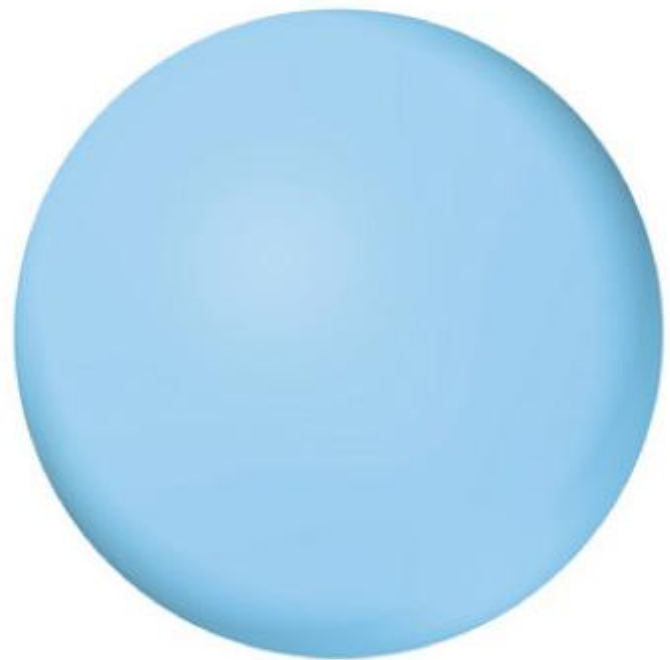
# ORBITAIS s



1s



2s



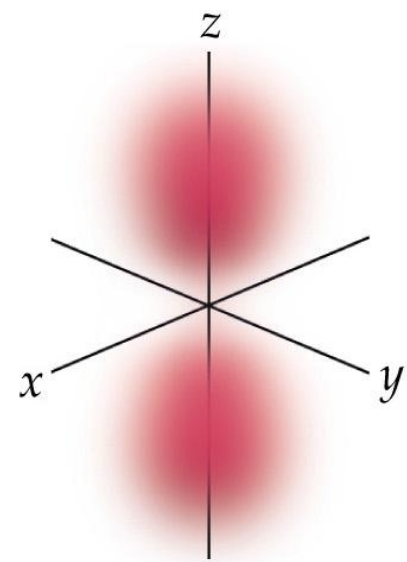
3s

# O FORMATO DOS ORBITAIS ATÔMICOS

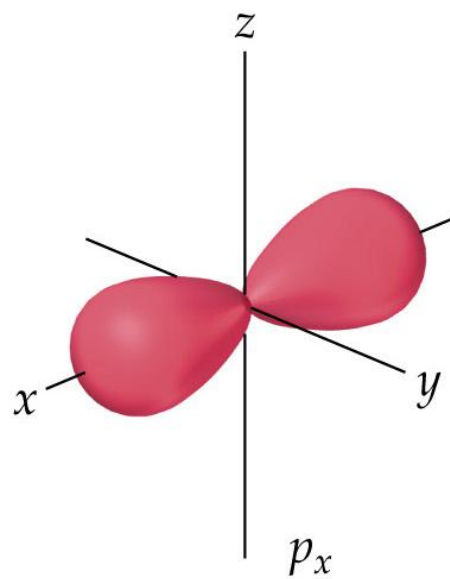
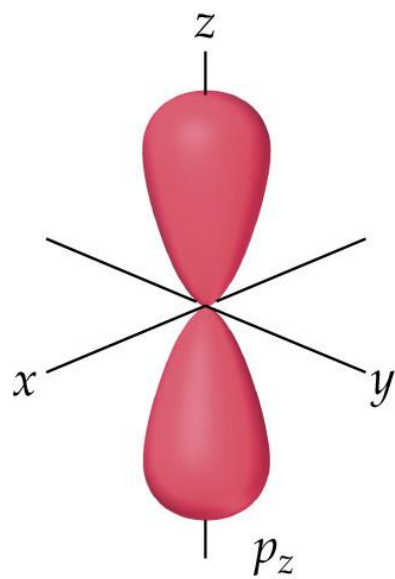
## 2. Orbitais $p$ ( $\ell = 1$ )

- Existem três orbitais  $p$ ,  $p_x$ ,  $p_y$ , e  $p_z$ .
- Os três orbitais  $p$  localizam-se ao longo dos eixos  $x$ -,  $y$ - e  $z$ - de um sistema cartesiano.
- As letras correspondem aos valores permitidos de  $m_l$ ,  $-1$ ,  $0$ , e  $+1$ .
- Os orbitais têm a forma de halteres.
- À medida que  $n$  aumenta, os orbitais  $p$  ficam maiores.
- Todos os orbitais  $p$  têm um plano nodal que passa no núcleo.

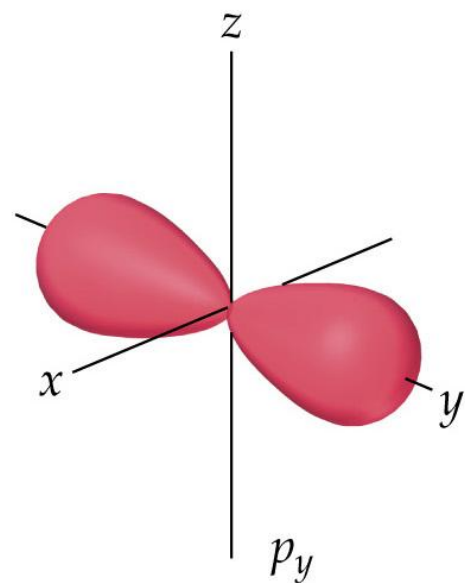
# ORBITAIS $p$



(a)



(b)

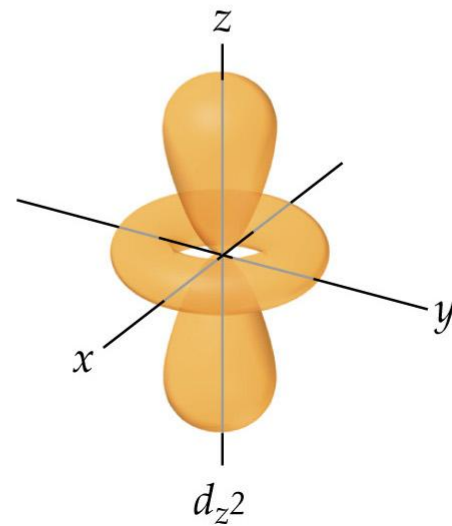
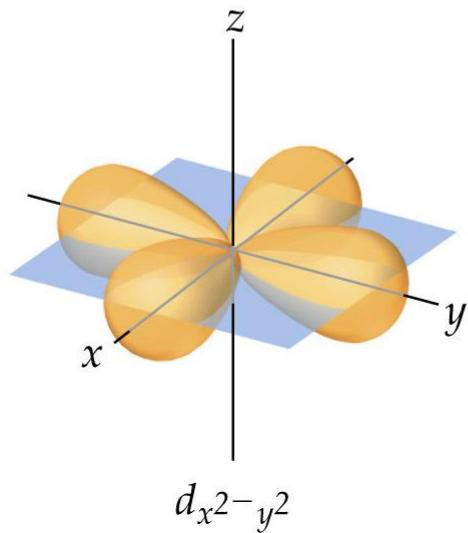
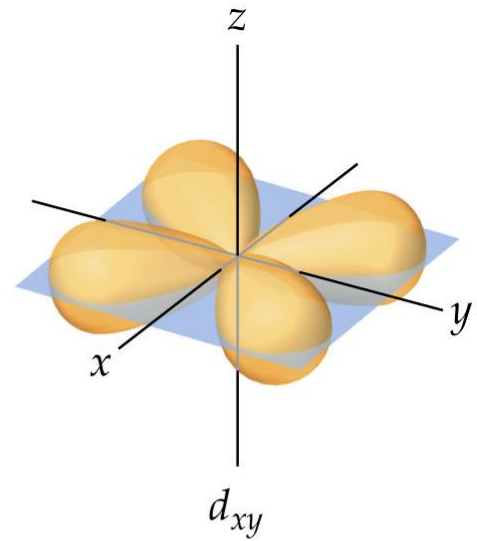
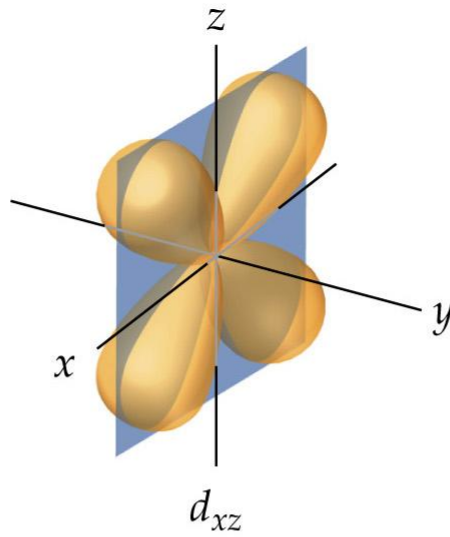
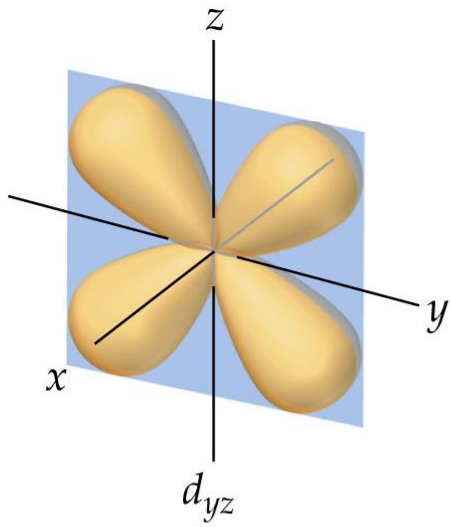


# O FORMATO DOS ORBITAIS ATÔMICOS

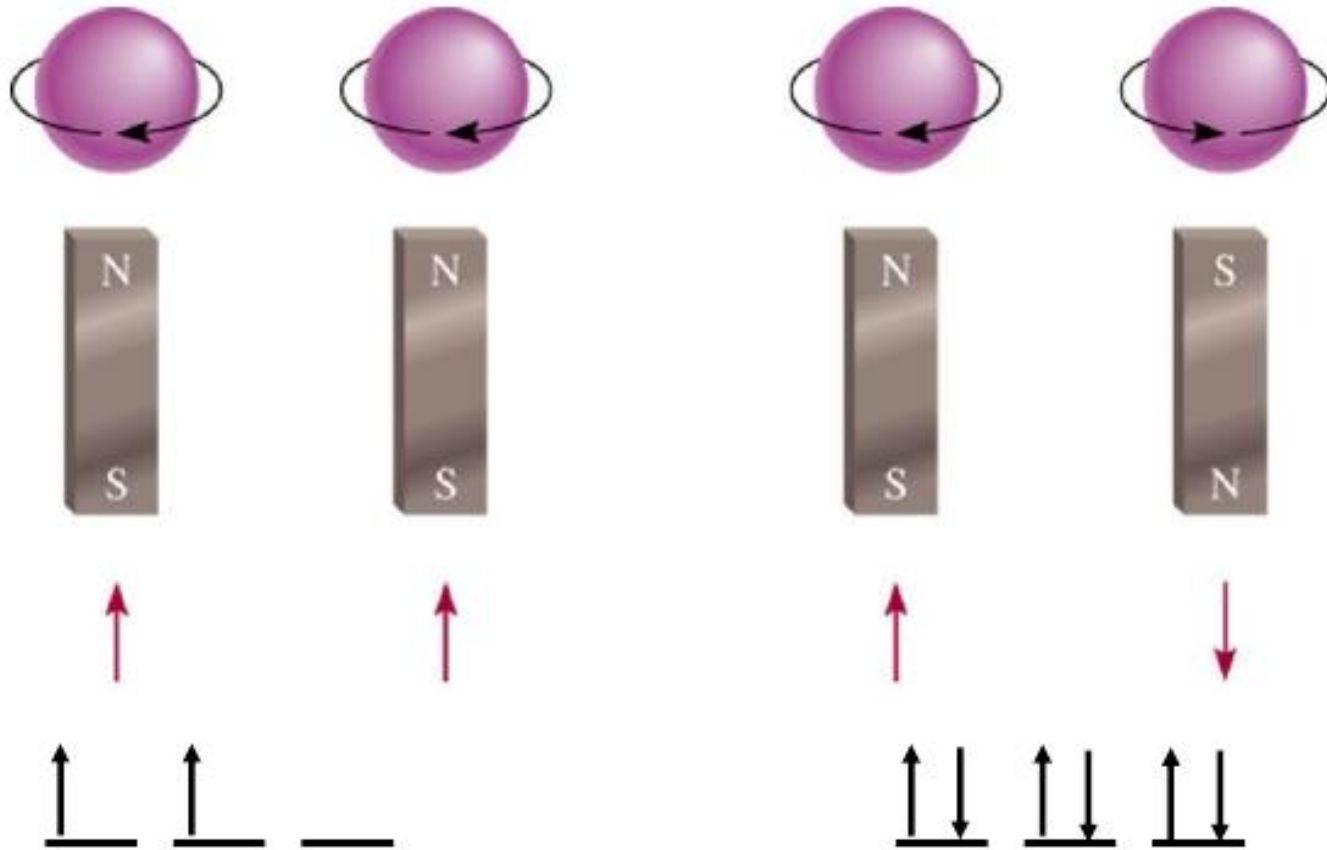
## 3. Orbitais $d$ ( $\ell = 2$ )

- Existem cinco orbitais  $d$ .
- Três dos orbitais  $d$  encontram-se em um plano bissecante aos eixos  $x$ -,  $y$ - e  $z$ .
- Dois dos orbitais  $d$  se encontram em um plano alinhado ao longo dos eixos  $x$ -,  $y$ - e  $z$ .
- Quatro dos orbitais  $d$  têm quatro lóbulos cada.
- Um orbital  $d$  tem dois lóbulos e um anel.

# ORBITAIS d



# PARAMAGNETISMO



Paramagnético

Diamagnético