

Unidade 2 – Aula 6

Física Atômica*

* Tradução e adaptação livre das aulas do Professor Rick Trebino em: www.physics.gatech.edu/frog

- 6.1 Algumas Propriedades dos Átomos
- 6.2 Números Quânticos
- 6.3 Momento Angular Total
- 6.4 Estrutura Atômica
- 6.5 Tabela Periódica
- 6.6 Espectros de Raios X e o Número Atômico



Dimitri Mendeleev

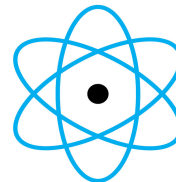
What distinguished Mendeleev was not only genius, but a passion for the elements. They became his personal friends; he knew every quirk and detail of their behavior.

J. Bronowski

<http://www.if.ufrgs.br/~marcia/textos.html>

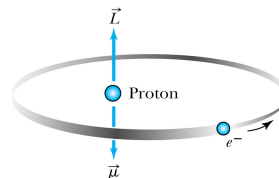
Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

6.1: Algumas Propriedades dos Átomos



- São estáveis;
- Se combinam entre si \longrightarrow moléculas e sólidos;
- Átomos podem ser agrupados em famílias – semelhanças nas propriedades químicas e físicas \longrightarrow Tabela Periódica;
- Emitem e absorvem luz $\longrightarrow hf = E_{alta} - E_{baixa}$;
- Possuem momento angular e magnetismo.

Física Quântica pode explicar estas propriedades!!



Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

6.2: Números Quânticos

Os **números quânticos** descrevem as energias dos elétrons nos átomos e são de enorme relevância quando se trata de descrever a posição dos elétrons nos átomos.

A tabela abaixo resume os significados de cada número quântico e os valores que eles podem assumir.

| nome | símbolo | significado do orbital | faixa de valores |
|---------------------------|----------|-------------------------|--|
| número quântico principal | n | camada | 1, 2, 3... |
| número quântico azimutal | ℓ | subnível | 0, 1, 2, ..., $n - 1$ |
| número quântico magnético | m_ℓ | deslocamento de energia | $-\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \ell - 1, \ell$ |
| número quântico de spin | m_s | spin | $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Números Quânticos

1. Número quântico principal, n \longrightarrow ENERGIA

Para o átomo de hidrogênio (ou de qualquer outro átomo monoelétrico de carga nuclear Z) a energia é dada por:

$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} = -\frac{E_0}{n^2}$$

2. Número quântico de momento angular, l \longrightarrow FORMA DAS ÓRBITAS

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$$

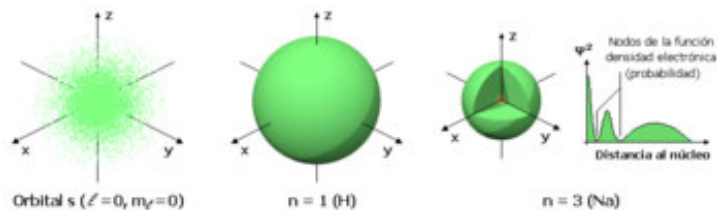
Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Números Quânticos

3. Número quântico magnético, m_l

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

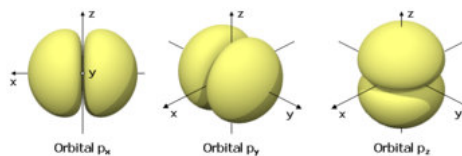
$l = 0$: corresponde ao subnível s, onde existe somente uma orientação ($m_l = 0$).



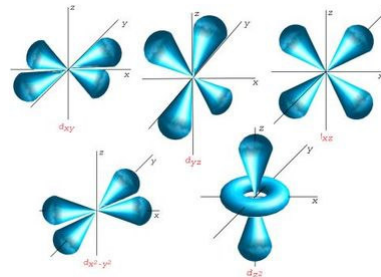
Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

3. Número quântico magnético, m_l

$l = 1$: corresponde ao subnível p, onde existem três orientações permitidas, que surgem em decorrência dos três valores de m_l (+1, 0, -1). Os três orbitais p são denominados p_x , p_y e p_z e são orientados de acordo com os três eixos cartesianos (x, y e z).



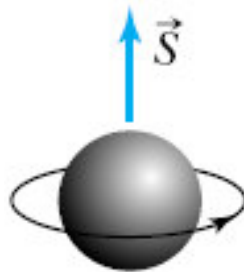
$l = 2$: corresponde ao subnível d onde existem cinco orientações permitidas, ou seja, cinco valores de m_l (-2, -1, 0, +1, +2).



Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

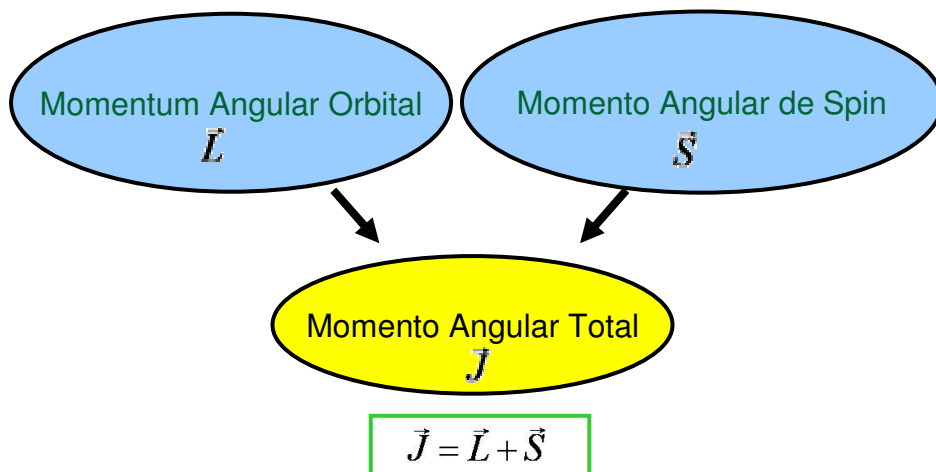
4. Número quântico de spin, m_s

O número quântico de spin indica a orientação do elétron ao redor do seu próprio eixo. Como existem apenas dois sentidos possíveis, este número quântico assume apenas os valores $-1/2$ e $+1/2$, indicando a probabilidade de 50% do elétron estar girando em um sentido ou no outro.



Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

6.3: Momento Angular Total



L , L_z , S , S_z , J , e J_z são quantizados.

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Momento Angular Total

Se j e m_j são números quânticos para o átomo de hidrogênio:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

$$J_z = m_j\hbar$$

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$$

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

O número quântico para o momento angular total para um único elétron pode ter somente os valores

$$j = \ell \pm s$$

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Princípio de Exclusão de Pauli

Para entender dados experimentais de espectroscopia atômica, Pauli propôs seu princípio de exclusão:

Dois elétrons num átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos (n , ℓ , m_ℓ , m_s).

Isto se aplica a todas as partículas com spin $\frac{1}{2}$, que são chamadas de férmions.

A tabela periódica pode ser entendida usando-se duas regras:

- Os elétrons num átomo tendem a ocupar o estado de mais baixa energia disponíveis para eles.
- Princípio de Exclusão de Pauli.

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

6.4: Estrutura Atômica

Hidrogênio: $(n, \ell, m_\ell, m_s) = (1, 0, 0, \pm 1/2)$ no estado fundamental.

Na falta de um campo magnético, o estado $m_s = 1/2$ é degenerado com o estado $m_s = -1/2$.

Hélio: $(1, 0, 0, 1/2)$ para o primeiro elétron.

$(1, 0, 0, -1/2)$ para o segundo elétron.

Elétrons tem spins anti-alinhados ($m_s = +1/2$ and $m_s = -1/2$).

Podemos associar letras ao número quântico principal:

$n =$ 1 2 3 4...
 Letra = K L M N...

$n =$ **camadas** (eg: camada K, camada L, etc.)

$n\ell =$ **subcamadas** (e.g.: 1s, 2p, 3d)

Elétrons dos átomos de H e He estão na camada K.
H: $1s^2$
He: $1s^1$ or $1s$

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Estrutura Atômica

Quantos elétrons podem estar em cada subcamada?

| | Total |
|--|----------------|
| Para cada m_ℓ : dois valores de m_s | 2 |
| Para cada ℓ : $(2\ell + 1)$ valores of m_ℓ | $2(2\ell + 1)$ |

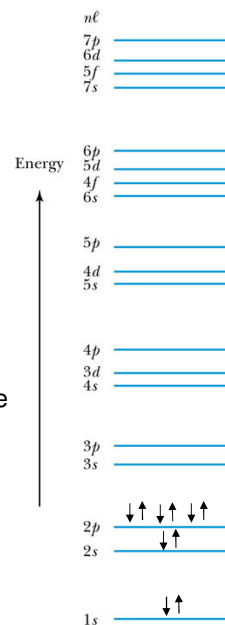
Lembrando: $\ell = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ \dots$
 letra = *s p d f g h* ...

$\ell = 0$, (estado *s*) pode ter dois elétrons.

$\ell = 1$, (estado *p*) pode ter seis elétrons.

Os mais baixos valores de ℓ tem mais órbitas elípticas que os valores mais altos de ℓ .

- Elétrons com valores maiores de ℓ sofrem menos o efeito da carga nuclear.
- Elétrons ficam com energia maior que aqueles com valores de ℓ mais baixos.
- 4s é preenchido antes que 3d.



Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Átomos podem ser agrupados em famílias – semelhanças nas propriedades químicas e físicas

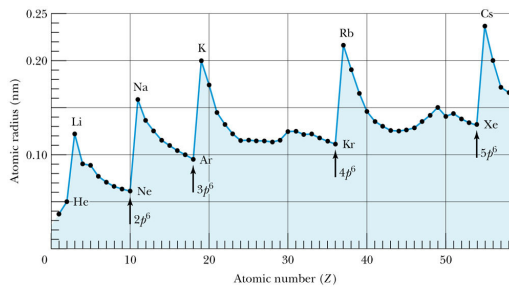
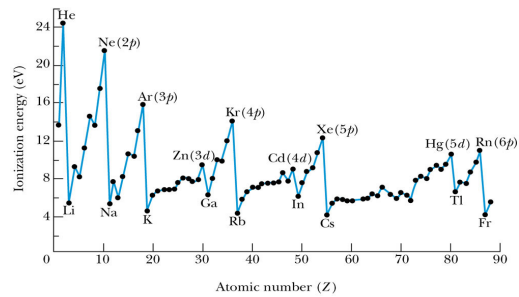
Grupos e Períodos

Grupos:

- Colunas Verticais.
- Mesmo número de elétrons numa órbita ℓ .
- Podem formar ligações químicas similares.

Período:

- Linhas Horizontais.
- Correspondem ao preenchimento das subcamadas.



Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

6.5: Tabela Periódica

Estado do elemento nas (CNTP):

aqueles com o número atômico em **vermelho** são gases;

aqueles com o número atômico em **azul** são líquidos;

aqueles com o número atômico em **preto** são sólidos.

Ocorrência natural:

Sem borda indica existência de isótopo mais antigo que a Terra (elemento primordial).

Borda tracejada indica que o elemento surge do decaimento de outros.

Borda sólida indica que o elemento é produzido artificialmente (elemento sintético).

A cor mais clara indica elemento ainda não descoberto.

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Grupo ? 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18
Período

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 1 | 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 |
| 1 | H | | | | | | | | | | | | | | | | | He |
| 2 | 3 | 4 | | | | | | | | | | | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| 2 | Li | Be | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne |
| 3 | 11 | 12 | | | | | | | | | | | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
| 3 | Na | Mg | | | | | | | | | | | Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 4 | 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 | 31 | 32 | 33 | 34 | 35 | 36 |
| 4 | K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 5 | 37 | 38 | 39 | 40 | 41 | 42 | 43 | 44 | 45 | 46 | 47 | 48 | 49 | 50 | 51 | 52 | 53 | 54 |
| 5 | Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 6 | 55 | 56 | * | 72 | 73 | 74 | 75 | 76 | 77 | 78 | 79 | 80 | 81 | 82 | 83 | 84 | 85 | 86 |
| 6 | Cs | Ba | ** | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 7 | 87 | 88 | ** | 104 | 105 | 106 | 107 | 108 | 109 | 110 | 111 | 112 | 113 | 114 | 115 | 116 | 117 | 118 |
| 7 | Fr | Ra | ** | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Uub | Uut | Uuq | Uuh | Uus | Uuo | |

| | | | | | | | | | | | | | | | |
|---------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|
| * Lantanídeos | 57 | 58 | 59 | 60 | 61 | 62 | 63 | 64 | 65 | 66 | 67 | 68 | 69 | 70 | 71 |
| | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu |
| ** Actinídeos | 89 | 90 | 91 | 92 | 93 | 94 | 95 | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 | 101 | 102 | 103 |
| | Ac | Th | Pa | U | Np | Pu | Am | Cm | Bk | Cf | Es | Fm | Md | No | Lr |

| Séries químicas da tabela periódica | | | |
|-------------------------------------|--|--------------------------|----------------------------------|
| Metais alcalinos ² | Metais alcalinos-terrosos ² | Lantanídeos ¹ | Actinídeos ¹ |
| Metais Representativos | Metalóides | Não-Metais | Metais de transição ² |
| | | Halogênios ³ | Gases nobres ³ |

¹ Actinídeos e lantanídeos são conhecidos coletivamente como "Metais-terrosos raros".
² Metais alcalinos, metais alcalinos-terrosos, metais de transição, actinídeos e lantanídeos são conhecidos coletivamente como "Metais".
³ Halogênios e gases nobres também são não-metais.

Tabela Periódica (Merck)

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

A Tabela Periódica

Gases Inertes :

Último grupo da tabela periódica;
Subcamada p fechada exceto para o Hélio;
Spin líquido zero e grande energia de ionização;
Estes átomos interagem fracamente com os outros.

Alcalinos:

Um único elétron s electron for a de uma camada interna;
Facilmente formam íons positivos com carga $+1e$;
Mais baixa energia de ionização;
Condutividade elétrica é relativamente boa.

Alcalinos Terrosos:

Dois elétrons s nas camadas mais externas;
Maior raio atômico;
Alta condutividade elétrica.

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

A Tabela Periódica

Halogêneos:

Precisam de mais de um elétron para preencher a subcamada mais externa;
Formam ligações iônicas fortes com os alcalinos;
Configurações mais estáveis ocorrem quando a subcamada p é preenchida.

Metais de Transição:

Três linhas de elementos onde $3d$, $4d$, e $5d$ são preenchidos;
Propriedades são determinadas em primeiro lugar pelos elétrons s , em vez dos elétrons da subcamada d que começa a ser preenchida;
Tem elétrons d com spins não pareados;
Quando a subcamada d é preenchida, os momentos magnéticos, e a tendência para que átomos vizinhos alinhem seus spins fica reduzida.

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

A Tabela Periódica

Lantanídeos (*terras raras*):

Tem a subcamada mais externa $6s^2$ completa;
Assim como ocorre na subcamada $3d$, os elétrons na subcamada $4f$ tem elétrons não pareados que se auto alinham;
O grande momento angular orbital contribui para um grande efeito ferromagnético.

Actinídeos:

Subcamadas mais internas começam a ser preenchidas enquanto a subcamada $7s^2$ está completa;
Difícil obter dados químicos porque todos são radioativos;
Tem meias-vidas longas

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

6.6: Espectros de Raios X e o Número Atômico

Lembrando:

camada K para $n = 1$

camada L para $n = 2$

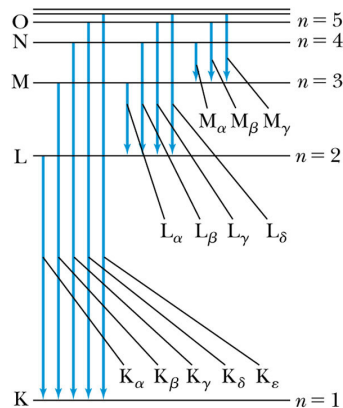
⋮

O átomo é mais estável no seu estado fundamental.

Um elétron de camadas mais externas irá preencher a vacância da camada mais interna, de mais baixa energia.

Quando isto ocorre num átomo pesado, a radiação emitida é um **raio X** E a sua energia é dada por:

$$E(\text{raio x}) = E_{\text{alta}} - E_{\text{baixa}}$$

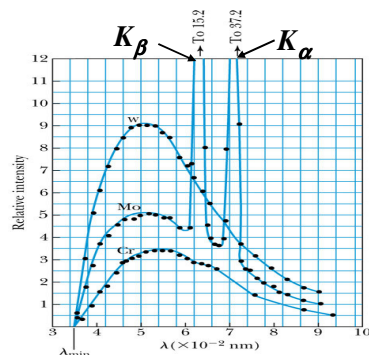


Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Espectro Contínuo de Raios X

Produção do espectro contínuo de Raio X:

- elétron que colide com o alvo (emissor de raios X) tem uma energia cinética K_0 e neste processo o elétron perde uma energia ΔK , que aparece como a energia de um fóton de raio X;
- elétron agora com energia $K_0 - \Delta K$, pode colidir com outro átomo, produzindo um segundo fóton e assim ocorre até o elétron perder toda a sua energia \rightarrow isto produz o espectro contínuo (Bremsstrahlung)



Radiação produzida quando elétrons acelerados são freados bruscamente contra um alvo.

$$K_0 = hf = \frac{hc}{\lambda_{\min}} \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{hc}{K_0}$$

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Espectro Característico de Raios X

Os Raios X tem nomes:

Raio X K_{α} : camada L para camada K

Raio X K_{β} : camada M para camada K

.....

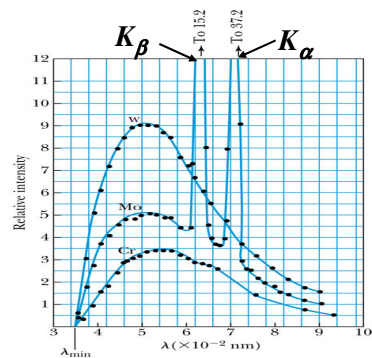
G.J. Moseley estudou emissão de Raios X em 1913.

Encontrou uma relação entre as freqüências dos raios X característicos e o número atômico Z (= número de prótons no núcleo)

Moseley determinou uma relação para a freqüência $\nu_{K_{\alpha}}$ da linha K_{α} :

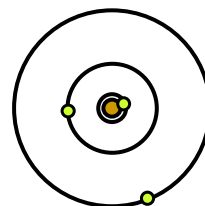
$$\nu_{K_{\alpha}} = \frac{3cR}{4}(Z-1)^2 \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} c &= 3 \times 10^8 \text{ m/s} \\ R &= 0,01097 \text{ nm}^{-1} \\ &(\text{constante de Rydberg}) \end{aligned}$$

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS



Resultados Empíricos de Moseley

A linha K_{α} é produzida pela transição de $n = 2$ para $n = 1$.



A série K para os comprimentos de onda de raios X são dados por:

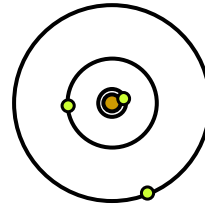
$$\frac{1}{\lambda_K} = R(Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R(Z-1)^2 \left(1 - \frac{1}{n^2} \right)$$

Usamos $Z-1$ em vez de Z porque como já existe um elétron na camada K, este vai blindar um próton do núcleo e o que o elétron que ocupa a vacância na camada K vai efetivamente "sentir", é uma carga no núcleo de $Z-1$.

Pesquisa de Moseley esclareceu a importância do número atômico e as camadas de elétrons para todos os elementos permitindo que a Tabela Periódica fosse reorganizada de acordo com o Número Atômico.

Márcia Russman Gallas (FIS01184) IF-UFRGS

Resultados Empíricos de Moseley



Pesquisa de Moseley esclareceu a importância do número atômico e as camadas de elétrons para todos os elementos.

Espectro característico de raios X se tornou a “assinatura” universalmente aceita de um elemento, levando os cientistas a rever a posição dos elementos na Tabela Periódica, que seguia a ordem dos pesos atômicos. Com os estudos de Moseley houve uma reorganização da Tabela Periódica, agora em função do Número Atômico (Z), como se conhece hoje em dia e inclusive novos elementos foram previstos e descobertos!!