



Fórmula da
Química

CAPÍTULO 3

ESTRUTURA ATÔMICA

ESTRUTURA ATÔMICA

TEÓRIA ATÔMICA DE DALTON

John Dalton (1766-1844) era filho de um tapeceiro inglês. Começou a dar aulas quando tinha 12 anos. Passou a maior parte de sua vida em Manchester, onde lecionou tanto na escola secundária quanto na faculdade. Durante toda a sua vida seu interesse em meteorologia o conduziu a estudar gases e, conseqüentemente, química. Estudava a teoria atômica eventualmente. Quando os químicos aprenderam a medir a quantidade de matéria que reagia com outra para formar uma nova substância, a base para a teoria atômica estava proposta. Essa teoria surgiu durante o período 1803- 1807 no trabalho de um professor inglês, John Dalton. Argumentando a partir de um grande número de observações, Dalton estabeleceu os seguintes postulados:

- Cada elemento químico é composto de partes extremamente pequenas chamadas átomos.
- Todos os átomos de um dado elemento são idênticos: os átomos de diferentes elementos são diferentes e têm propriedades e massas diferentes.
- Os átomos de um elemento não se convertem em diferentes tipos de átomos por meio de reações químicas; os átomos não são criados nem destruídos nas reações químicas.
- Os compostos são formados quando átomos de mais de um elemento se combinam; um determinado composto tem sempre o mesmo número relativo dos mesmos tipos de átomos.
- Reações químicas são processos de rearranjos de átomos.

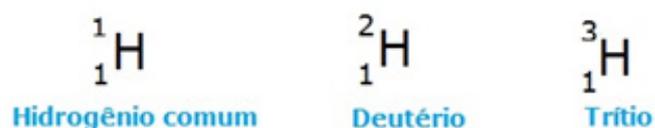
De acordo com a teoria atômica de Dalton, átomos são os componentes básicos da matéria. Eles são as menores partes de um elemento que mantêm a identidade química desse elemento. Como observado na teoria atômica de Dalton, um elemento é composto de apenas uma espécie de átomo, enquanto um composto contém átomos de dois ou mais elementos.



John Dalton

CRÍTICAS À CONCEPÇÃO ATÔMICA DE DALTON

- Segundo John Dalton, átomos de um elemento químicos são idênticos, com massas, tamanhos e propriedades semelhantes. No entanto, mais de um século depois, o fenômeno da isotopia foi descoberto com o elemento hidrogênio. Isótopos são átomos de um mesmo elemento químico que possuem o mesmo número de prótons e diferentes números de nêutrons e de massa. Veja os isótopos do hidrogênio:



- A teoria atômica de Dalton prevê que átomos de elementos químicos diferentes possuem massas, tamanhos e propriedades diferentes. Entretanto, também no século XX, foram descobertos os Isóbaros que são átomos de elementos químicos diferentes e que possuem o mesmo número de massa. Observe os isóbaros dos elementos carbono e nitrogênio:



- De acordo com a teoria atômica, Dalton considerava que os átomos eram indivisíveis. No entanto, as descobertas das partículas subatômicas como elétron, próton e nêutrons provaram que os átomos são divisíveis.

O QUE A TEORIA ATÔMICA DE DALTON PODE EXPLICAR?

• COMPORTAMENTO DOS GASES IDEAIS TEORIA CINÉTICA MOLECULAR

Para entender as propriedades físicas dos gases, precisamos de um modelo que nos ajude a imaginar o que acontece às partículas de gás à proporção que condições como a pressão ou temperatura variem. Tal modelo, conhecido como Teoria Cinética Molecular, foi desenvolvido durante um período de aproximadamente cem anos, culminando em 1857 quando Rudolf Clausius (1822-1888) publicou uma forma completa e satisfatória da teoria. A teoria cinética molecular (a teoria das moléculas em movimento) é resumida pelas seguintes afirmações:

- Os gases consistem em grande número de moléculas que estão em movimento contínuo e aleatório.
- O volume de todas as moléculas do gás é desprezível comparado ao volume total no qual o gás está contido.
- As forças atrativas e repulsivas entre as moléculas de gás são desprezíveis.
- A energia pode ser transferida entre as moléculas durante as colisões, mas a energia cinética média das moléculas não varia com o tempo, desde que a temperatura permaneça constante. Em outras palavras, as colisões são perfeitamente elásticas.
- A energia cinética média das moléculas é proporcional à temperatura absoluta. Para certa temperatura, as moléculas de todos os gases têm a mesma energia cinética média.
- A pressão de um gás é provocada pelas colisões das moléculas com as paredes do recipiente. A magnitude da pressão é determinada tanto pela frequência quanto pela força com que as moléculas batem nas paredes.

• LEI DA CONSERVAÇÃO DA MASSA

Segundo Lavoisier, a massa total dos materiais presentes depois da reação química é igual à massa total antes da reação.



Antoine Lavoisier

• LEI DA COMPOSIÇÃO CONSTANTE OU LEI DAS PROPORÇÕES DEFINIDAS

A lei das proporções constantes foi divulgada primeiro pelo químico francês Joseph Louis Proust (1754-1826) por volta de 1800. Apesar de essa lei ser conhecida há mais de 200 anos, permanece entre algumas pessoas a crença geral de que existe uma diferença básica entre compostos preparados em laboratório e seus correspondentes encontrados na natureza. Entretanto, um composto puro tem a mesma composição e propriedades independentemente de sua origem. Tanto os químicos quanto a natureza têm de usar os mesmos elementos e trabalhar sob as mesmas leis.



Joseph Louis Proust

• LEI DAS PROPORÇÕES MÚLTIPLAS

Dalton usou a sua teoria para deduzir a lei das proporções múltiplas: se dois elementos, A e B, se combinam para formar mais de um composto, as massas de B, que podem combinar com a massa de A, estão na proporção de números inteiros pequenos.

DESCOBERTA DOS RAIOS CATÓDICOS

No século XIX houve um grande número de experimentos com plasmas, através de descargas elétricas em gases. Na realidade, muitos dos efeitos observados nos tubos, ligados à morfologia e coloração da luminosidade emitida não se ligam a espectros fundamentais da estrutura da matéria, mas são complexos efeitos do plasma que se forma na descarga. Estes experimentos deram origem, no entanto, a alguns experimentos fundamentais. Um desses aparatos, a ampola de Crookes, permitiu a observação dos chamados raios catódicos. Estes raios provocavam uma luminescência no vidro onde incidiam. William Crookes (1832-1919) aventou a possibilidade de os raios serem constituídos por um fluido material. Tais raios podiam ser barrados por objetos de diversos formatos, produzindo uma “sombra” correspondente à sombra geométrica, mostrando sua propagação retilínea.

A demonstração mais convincente da materialidade dos raios catódicos foi sua capacidade de movimentar um pequeno “cata-vento”. Em 1895, Crookes demonstrou que os raios catódicos eram constituídos por cargas elétricas negativas, da mesma natureza das que se moviam em circuitos elétricos. Além disso, suas trajetórias eram desviadas por um campo magnético. Os raios catódicos mostraram também ser idênticos às partículas beta emitidas em processos de desintegração radioativa.



William Crookes



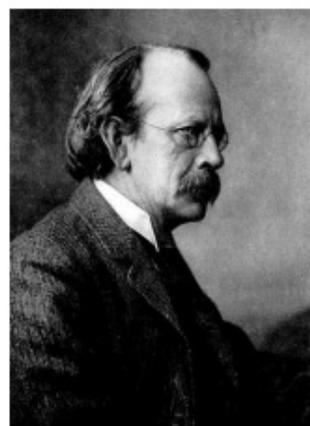
ÂMPOLA DE CROOKES

DESCOBERTA DOS ELÉTRONS

Os cientistas, na segunda metade do século XIX, defendiam opiniões divergentes sobre a natureza dos raios catódicos. Não era muito claro inicialmente se os raios eram uma nova forma de radiação ou mais propriamente consistiam de um jato de partículas.

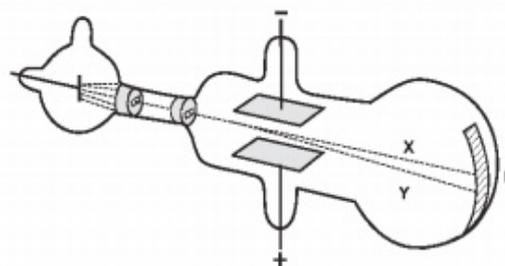
Experimentos mostraram que os raios catódicos eram desviados por campos elétricos ou magnéticos, sugerindo que continham certa carga elétrica. O cientista britânico J.J. Thomson observou muitas propriedades dos raios, inclusive o fato de que sua natureza é a mesma independentemente da identidade do material do catodo, e que uma lâmina metálica exposta a raios catódicos adquire carga elétrica negativa.

Em um artigo publicado em 1897, ele apresentou suas observações e concluiu que os raios catódicos são jatos de partículas com massa, carregadas negativamente. O artigo de Thomson é conhecido como a ‘descoberta’ daquilo que chamamos de elétron.



J.J. Thomson

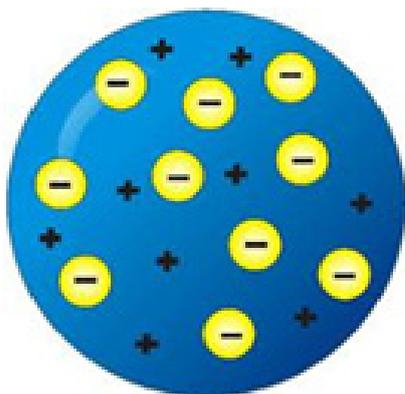
Thomson construiu um tubo de raios catódicos com uma tela fluorescente, de modo que ele pôde medir de maneira quantitativa os efeitos de campos elétricos e magnéticos no jato fino de elétrons que passava através de um orifício em um eletrodo carregado positivamente. Essas medidas possibilitaram calcular um valor de $1,76 \times 10^8$ coulomb por grama para a proporção de carga elétrica do elétron em relação a sua massa.



Na ausência das placas eletricamente carregadas, os raios catódicos, gerados no compartimento menor, seguem a trajetória X. No entanto, na presença de campos elétricos gerados por placas eletricamente carregadas, os raios catódicos eram desviados na direção da placa positiva, descrevendo a trajetória Y.

TEÓRIA ATÔMICA DE THOMSON

Um dos primeiros modelos para o átomo foi proposto por J.J. Thomson em 1910, segundo o qual os elétrons carregados negativamente estariam localizados no interior de uma distribuição esférica contínua de carga positiva, com um raio da ordem de grandeza do raio de um átomo, 10^{-10} m. Este modelo é conhecido também como “pudim de ameixas” ou “pudim de passas”.



CRÍTICAS À CONCEPÇÃO ATÔMICA DE THOMSON

O modelo de Thomson não fornecia uma concordância quantitativa com os espectros observados experimentalmente. A demonstração da inadequação do modelo de Thomson foi obtida em 1911 por Ernest Rutherford, a partir da análise de experiências sobre o espalhamento de partículas por átomos. Rutherford mostrou que em vez de estar espalhada por todo o átomo, a carga positiva estava concentrada em uma região muito pequena, ou núcleo, no centro do átomo. Este foi um dos progressos mais importantes da física atômica e foi a base da física nuclear.

DESCOBERTA DA RADIOATIVIDADE

Em 1896, o cientista francês Henri Becquerel (1852-1908) estava estudando o mineral urânio, conhecido como blenda resinosa, quando descobriu que ele espontaneamente emitia radiação de alta energia. Essa **emissão espontânea de radiação é chamada de radiatividade**. Com a sugestão de Becquerel, Marie Curie e seu marido, Pierre, começaram experimentos para isolar os componentes radioativos do mineral.

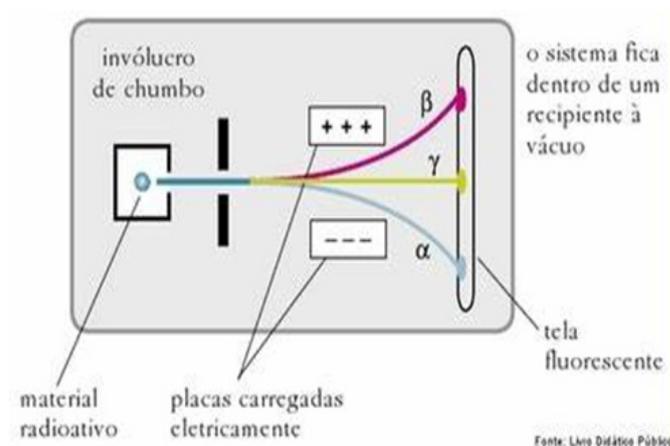


Henri Becquerel

Marie Curie

Pierre Curie

Estudos posteriores sobre a natureza da radioatividade, principalmente os do cientista britânico Ernest Rutherford, revelaram três tipos de radiação: radiação alfa, beta e gama. Cada tipo difere uma da outra quanto a sua reação a um campo elétrico. O caminho das radiações alfa e beta é desviado pelo campo elétrico, apesar de estar em sentidos opostos, enquanto a radiação gama não é afetada.

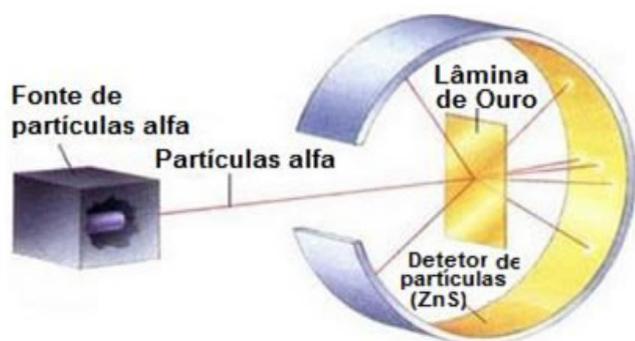


Rutherford mostrou que os raios alfa e beta consistem de partículas de movimento rápido nomeadas partículas alfa e beta. Na realidade, partículas beta são elétrons em alta velocidade e podem ser consideradas o análogo radioativo dos raios catódicos; portanto são atraídas para a placa positiva. As partículas alfa são muito mais compactadas do que as partículas beta e têm cargas positivas; portanto são atraídas para a placa negativa.

Rutherford mostrou posteriormente que partículas alfa combinam-se com elétrons para formar átomos de hélio. Além disso, ele concluiu que a radiação gama é de alta energia, similar à dos raios X; ela não consiste de partículas e não possui carga.

- **EXPERIÊNCIA DE ESPALHAMENTO DE PARTÍCULAS RADIOATIVAS EM LÂMINAS METÁLICAS**

Em 1910, Rutherford fez um experimento em que “bombardeava” uma fina lâmina de ouro com partículas alfa (de carga positiva, emitidas de polônio radioativo) e estas incidiam numa chapa fluorescente (ZnS), manchando-a, de acordo com a figura abaixo.



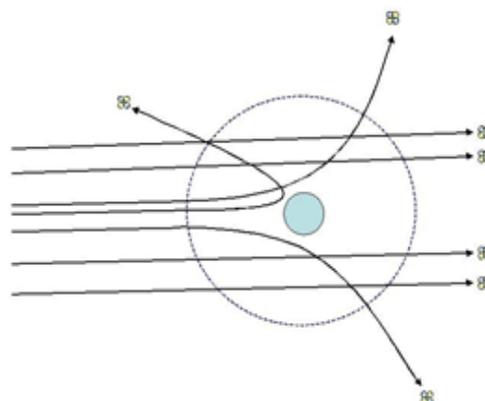
Rutherford e seus colaboradores estavam estudando os ângulos em que as partículas alfa eram dispersadas à medida que elas passavam por uma folha de ouro de poucas milhares de camadas atômicas de espessura. Ele e seus colaboradores descobriram que quase todas as partículas alfa passavam direto através da folha sem dispersão. Descobriu-se que uma pequena porcentagem dispersava na ordem de um grau, o que era coerente com o modelo atômico de Thomson.

Apenas por preciosismo, Rutherford sugeriu que Ernest Marsden, um estudante de graduação que trabalhava em seu laboratório, procurasse com afincos por evidências de dispersão com ângulos grandes. Para completa surpresa de todos, observou-se uma pequena quantidade de partículas que se dispersavam em ângulos grandes. Algumas partículas foram refletidas até para trás, na direção de onde proviam. A explicação para esses resultados não foi imediatamente óbvia, mas eles eram claramente incoerentes com o modelo “pudim de ameixa” de Thomson.

• A DESCOBERTA DO NÚCLEO ATÔMICO EM 1911

Rutherford conseguiu explicar essas observações, postulando que a maioria da massa do átomo e toda a sua carga positiva residiam em uma região muito pequena e extremamente densa, que ele chamou de núcleo. A maior parte do volume do átomo é espaço vazio, no qual os elétrons movem-se ao redor do núcleo.

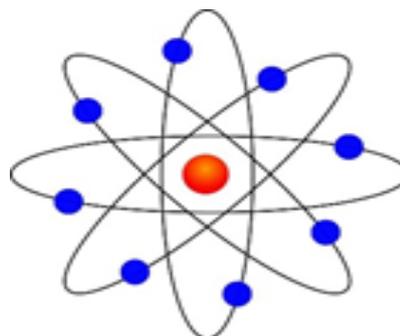
No experimento de dispersão alfa, a maioria das partículas alfa passa diretamente através da folha porque elas não encontram o minúsculo núcleo e simplesmente passam pelo espaço vazio do átomo. Ocasionalmente uma partícula alfa entra na vizinhança de um núcleo do ouro. A repulsão entre o núcleo altamente carregado do ouro e as partículas alfa é forte o suficiente para refletir a partícula alfa menos densa.



Estudos experimentais subsequentes levaram à descoberta de ambas as partículas no núcleo, as partículas positivas (prótons) e as partículas neutras (nêutrons). Os prótons foram descobertos em 1919 por Rutherford. Os nêutrons foram descobertos em 1932 pelo cientista britânico James Chadwick (1891-1932).

TEORIA ATÔMICA DE RUTHERFORD

O elétron orbitaria o núcleo de forma semelhante a um planeta em torno do sol, mas numa escala muito menor devido a força principal de atração do núcleo ser elétrica, que é muito mais forte que a gravitacional. Assim, o modelo Atômico de Rutherford se assemelhava a uma versão microscópica do modelo planetário, mas ao invés da força gravitacional, a força elétrica é a principal responsável pela atração elétron- núcleo. Este é o modelo atômico mais comumente encontrado na literatura moderna, embora verificou-se incompleto.



CRÍTICAS À CONCEPÇÃO ATÔMICA DE RUTHERFORD

A existência do núcleo não foi contestada pelos físicos do início do século XX. No entanto, havia um problema. Verifica-se que quando cargas são aceleradas, acabam perdendo energia por emissão de radiação eletromagnética. Como um elétron em órbita de um núcleo está sempre sob aceleração, deve emitir energia também, diminuindo assim o raio de sua órbita. Fazendo os cálculos desta perda de energia os cientistas verificaram que os elétrons colapsariam no núcleo em um intervalo de tempo extremamente pequeno. Se isso acontecesse, o universo teria deixado de existir logo após sua criação.

Para complicar ainda mais o modelo planetário outro fenômeno incomum aparece quando se estuda a luz emitida ou absorvida pelo átomo. Os resultados sugeriam que o elétron não poderia estar em qualquer órbita em torno do núcleo. Foi o que propôs o físico dinamarquês Niels Bohr em 1913.

ESPECTRO DE LINHAS E O MODELO ATÔMICO DE BOHR

Os trabalhos de Planck e Einstein abriram caminho para a compreensão de como os elétrons são distribuídos nos átomos. Em 1913, o físico dinamarquês Niels Bohr propôs uma explicação teórica dos espectros de linha, outro fenômeno que intrigava os cientistas no século XIX

• ESPECTRO DE LINHAS

Uma fonte específica de energia radiante pode emitir um comprimento de onda único, como na luz de um laser. A radiação composta por um único comprimento de onda é chamada monocromática. Entretanto, a maioria das radiações comuns, incluindo lâmpadas incandescentes e estrelas, produz radiação contendo muitos comprimentos de onda diferentes.

Quando a radiação como essa é separada em seus diferentes comprimentos de onda componentes, um espectro é produzido. Quando a luz de uma lâmpada incandescente ou do sol incidem em um prisma, o espectro produzido constitui-se de uma faixa contínua de cores: o violeta funde-se ao azul; o azul, ao verde, e assim por diante, sem nenhum ponto branco. Esse arco-íris, contendo luz de todos os comprimentos de onda, é chamado espectro contínuo.



Nem todas as fontes de radiação produzem um espectro contínuo. Quando gases diferentes são colocados sob pressão em um tubo e uma alta voltagem é aplicada, os gases emitem diferentes cores de luz. A luz emitida pelo gás neônio é a familiar incandescência vermelho-alaranjado de muitos letreiros luminosos, enquanto o vapor de sódio emite a luz característica de algumas luzes de rua modernas. Quando a luz vinda de tais tubos passa através de um prisma, apenas linhas de poucos comprimentos de onda estão presentes nos espectros resultantes.

Um espectro contendo apenas radiações de comprimentos de onda específicos é chamado espectro de linhas.

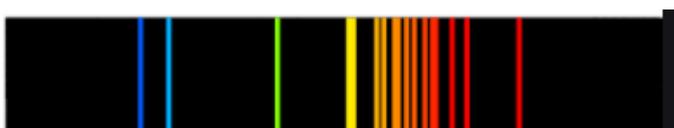
Observe as figuras abaixo que representam os espectros descontínuos dos átomos de hidrogênio, hélio, neônio e sódio:



HIDROGÊNIO



HÉLIO



NEÔNIO



SÓDIO

Em 1913 Niels Bohr desenvolveu um modelo atômico que apresentava concordância quantitativa com os dados espectroscópicos obtidos para o átomo de hidrogênio. Outro aspecto interessante do modelo de Bohr é que a matemática envolvida era de fácil compreensão. O modelo de Bohr explicava a estabilidade do átomo postulando que a energia total do elétron é constante quando este se encontra em uma das órbitas permitidas, caracterizadas por números inteiros denominados números quânticos ($n = 1, 2, 3, \dots$).

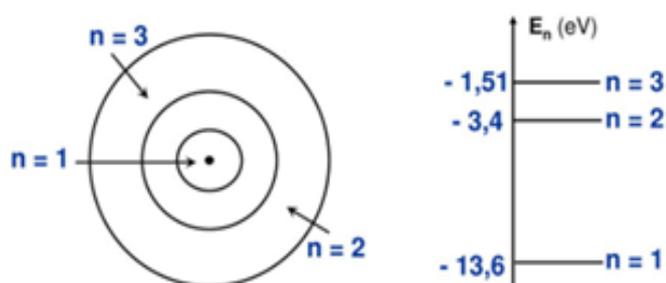
TEORIA ATÔMICA DE BOHR

Niels Bohr, em 1913, a partir das análises do espectro da luz emitida pelo gás hidrogênio, quando submetido à descarga elétrica, propôs os postulados que constituem sua concepção atômica:



Niels Bohr

- O elétron pode se mover em determinadas órbitas sem irradiar. Essas órbitas estáveis são denominadas estados estacionários.

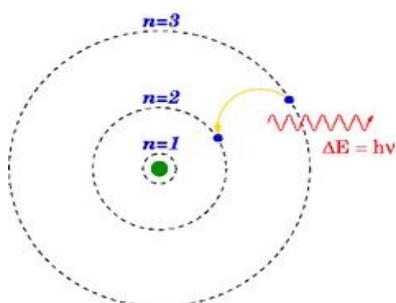


- O elétron, quando absorve quantidades específicas de energia, se afasta do núcleo, passando a descrever uma órbita de raio maior e mais afastada do núcleo.
- O elétron irradia quando passa de um estado estacionário para outro mais interno, sendo a energia irradiada dada pela diferença entre os estados final e inicial.

$$\text{Energia emitida} = \text{energia inicial} - \text{energia final}$$

$$\text{Energia emitida} = h \cdot \nu$$

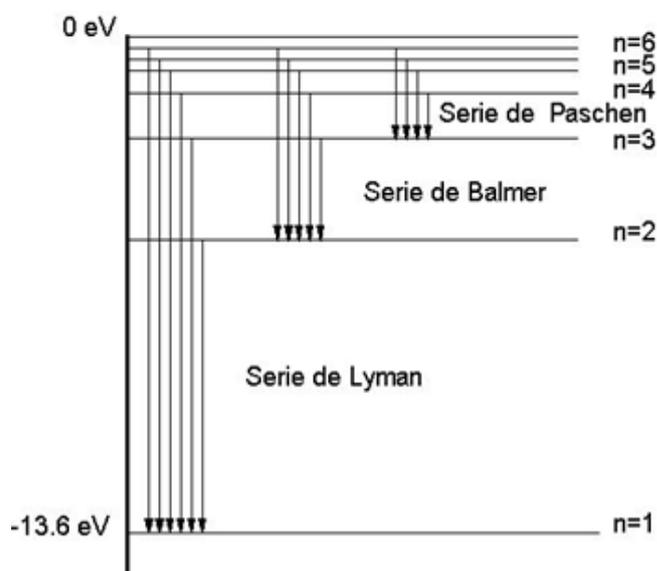
Em que h é a constante de Planck e ν é a frequência da radiação emitida.



- A energia do elétron no átomo é quantizada, isto é, restrita a valores específicos de energia.

ESPECTRO DO HIDROGÊNIO E DIAGRAMA DE NÍVEIS DE ENERGIA DO ÁTOMO

O átomo de hidrogênio possui um elétron que pode ser excitado diante da absorção de quantidades específicas de energia que correspondem, exatamente, às diferenças entre as energias dos níveis quantizados envolvidos na transição eletrônica. Quando o elétron retorna para estados inferiores de energia, emite de forma descontínua fótons de radiações eletromagnéticas nas faixas do ultravioleta, visível e infravermelho.



Por exemplo, o elétron do hidrogênio ao ser excitado para o nível 6, absorve exatamente a quantidade de energia correspondente à diferença de energias desses níveis quânticos. Ao retornar para o estado fundamental de energia (nível 1), emite fótons de radiação ultravioleta, constituindo uma linha espectral da série de Lyman que reúne transições eletrônicas de níveis superiores de energia para o nível 1 de menor energia.

Se a transição eletrônica envolver a passagem para o nível 2, a partir de qualquer estado superior de energia, ocorre emissão de luz visível com frequências específicas da série de Balmer.

A série de Paschen compreende radiações infravermelhas emitidas quando o elétron, inicialmente excitado para níveis superiores de energia, sofre transição para o nível 3 de energia.

As transições eletrônicas dos níveis 6 e 5 para o nível 4 e a transição do nível 6 para o nível 5 ocorrem com emissão de radiação infravermelha com comprimentos de onda com frequências menores em relação àquelas da série de Paschem.

DESCOBERTA DO PRÓTON

Em 1886, Goldstein obteve os raios canais, que se propagam em sentido oposto ao dos raios catódicos. Experiências posteriores mostram que:

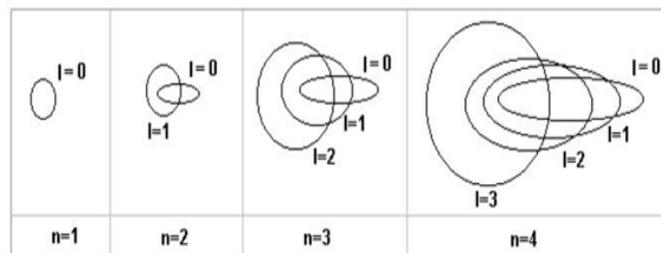
- Os raios canais são constituídos por partículas positivas denominadas prótons.
- A massa das partículas constituintes dos raios canais é aproximadamente igual à massa das moléculas do gás residual (gás contido no interior da ampola de Goldstein).
- Quando o gás residual é o hidrogênio, a massa das partículas dos raios canais é a menor e aproximadamente 1836 vezes maior que a massa do elétron, e a carga dessas partículas é igual à do elétron, com sinal contrário.

Em 1919, baseado nesses experimentos, Rutherford admitiu que as menores partículas com carga elétrica positiva (denominada prótons) eram as constituintes dos raios canais, quando o gás residual era o hidrogênio.

TEORIA ATÔMICA DE SOMMERFELD

ARNOLD SOMMERFELD (1868 - 1951), físico alemão, foi professor na Universidade de Munique, ocupou-se de física atômica e modificou o modelo de Bohr, introduzindo a notação de orbitas eletrônicas elípticas. Obteve o Prêmio Nobel da Física em 1924.

Procurando dar maior generalização a teoria de Bohr, Sommerfeld “concedeu” aos elétrons maior liberdade, permitindo a estes moverem-se não somente em orbitas circulares, mas também elípticas. Deste modo procurava explicar o caso de átomos mais complicados. No átomo de Bohr, a posição do elétron ficava definida pelo ângulo descrito. Ao aceitar as idéias de Sommerfeld (órbitas elípticas) supondo o núcleo no foco da elipse descrita, a distância do núcleo (r) varia, assim como o ângulo descrito (q) teremos duas variáveis.



Sommerfeld manteve invariável a primeira órbita de Bohr (circular), mas adicionou uma elíptica à segunda circular; duas órbitas elípticas à terceira, introduzindo o chamado número quântico azimutal ℓ , além do número quântico principal n .

Assim, para as diferentes órbitas:

$$\begin{array}{ccc} n = 1 & n = 2 & n = 3 \\ \ell = 0 & \ell = 0, \ell = 1 & \ell = 0, \ell = 1, \ell = 2 \end{array}$$

Sommerfeld também procurou explicar o fato de algumas raias especiais de elementos mais complexos que o hidrogênio serem formadas realmente por várias raias, explicando que, devido às interações dos elétrons, certas órbitas elípticas teriam energias ligeiramente diferentes das órbitas circulares. Apesar destas ideias, Sommerfeld não acrescentou nenhuma contribuição básica ao modelo de Bohr. A Física Quântica interpretou as observações de raias finas de Sommerfeld através da proposição de subníveis de energia, representados pelas letras **s**, **p**, **d** e **f**.

TEORIA DA DUALIDADE DA MATÉRIA

Na década de 20 do século XX, uma certeza da física é que a radiação eletromagnética tem um comportamento dual. A necessidade da hipótese do fóton, ou partícula localizada, para interpretar processos que envolvem a interação com a matéria é clara, mas ao mesmo tempo é necessária uma teoria ondulatória da radiação para explicar os fenômenos de interferência e difração. É importante considerar que a radiação não possui um comportamento puramente ondulatório nem meramente se comporta como um feixe de partículas. A radiação se apresenta como uma onda em certas circunstâncias e como uma partícula em outras. A dualidade evidente na natureza onda-partícula da radiação é uma característica geral de todos os entes físicos. Veremos que elétrons, por exemplo, têm a mesma natureza dual dos fótons. A conciliação da existência de aspectos ondulatórios com a de aspectos corpusculares, para qualquer ente físico, é conseguida com o auxílio da mecânica quântica.

Em 1924, Louis De Broglie propôs a existência de ondas de matéria. A hipótese de De Broglie era de que cada partícula de matéria teria associada a ela uma onda de matéria que governa seu movimento sendo este o comportamento dual onda-partícula da radiação. Foi proposto que os aspectos ondulatórios da matéria fossem relacionados com seus aspectos corpusculares exatamente da mesma forma quantitativa com que esses aspectos são relacionados para a radiação. Assim, tanto para a matéria quanto para a radiação, as seguintes relações são válidas: $E = h\nu$ e $p = h/\lambda$ onde E e p são respectivamente a energia total e momento linear da partícula. O comprimento de onda de De Broglie é, portanto definido como:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

Sendo m e v a massa e a velocidade da partícula respectivamente. Apesar da relação de De Broglie ser aplicada a todas as substâncias físicas, o comprimento de onda associado a partículas macroscópicas é muito pequeno, não sendo possível observar comportamento ondulatório (difração, interferência etc.).

O postulado de De Broglie foi comprovado experimentalmente através de estudos de difração de elétrons. A necessidade de introduzir conceitos ondulatórios na descrição do comportamento de partículas microscópicas levou a uma reformulação da mecânica de Newton.

No início de 1926, atendendo a um pedido de Peter Debye durante um seminário no seu laboratório na Suíça, Erwin Schrödinger demonstrou que a expressão de De Broglie podia ser generalizada para abranger partículas ligadas, tais como os elétrons nos átomos. A relação que a dualidade partícula-onda tem com os elétrons nos átomos coube a Werner Heisenberg e Max Born responder em 1927. O elétron passou a ser entendido como uma partícula-onda e o seu movimento é descrito como uma onda estacionária de energia.



Louis De Broglie Werner Heisenberg Peter Debye



Erwin Schrödinger

Max Born

PRINCÍPIO DA INCERTEZA

O princípio da incerteza, desenvolvido pelo físico alemão Werner Heisenberg, em 1927, estabelece que é impossível conhecer simultaneamente a posição e a energia de uma partícula tal como o elétron. Isso porque, para se estudar uma partícula, é preciso interagir de alguma maneira com esta partícula. Nenhum instrumento pode “sentir” ou “ver” um elétron sem influenciar intensamente o seu movimento. Se, por exemplo, construíssemos um microscópio tão poderoso, capaz de localizar um elétron, teríamos de usar uma radiação com um comprimento de onda muito menor que o da luz. (Para que um objeto diminuto possa ser visto num microscópio, o comprimento da luz utilizado deve ser menor que o diâmetro do objeto.) Esse super microscópio imaginário deveria, para isso, usar raios x ou raios gama. Mas a energia destas radiações é tão grande que modificaria a velocidade e, conseqüentemente, o momento do elétron, numa quantidade grande e incerta. O princípio da incerteza pode ser assim interpretado: quanto mais perto tentamos olhar uma partícula diminuta, tanto mais difusa se torna a visão da mesma.

O Princípio da Incerteza deixa clara a impossibilidade de determinar a exata trajetória do elétron a partir da energia e velocidade. Por esse motivo, buscou-se, então, trabalhar com a provável região onde é possível encontrá-lo.

Erwin Schrödinger (1887 - 1961) baseado nestes dois princípios criou o conceito de Orbital. Orbital é a região onde é mais provável encontrar um elétron. A forma de um orbital é definida através da resolução de uma equação matemática para o que se conhece na química quântica como Função de Onda (Ψ^2). Dirac calculou estas regiões de probabilidade e determinou os quatro números que são: **principal, secundário, magnético e de spin.**

NÚMEROS QUÂNTICOS

De onde surgem os números quânticos? Na teoria de Bohr era necessário postular a existência de números quânticos. Contudo, na mecânica quântica, estes números surgem naturalmente da solução matemática da equação de Schrödinger. Estes números são de enorme relevância quando se trata de descrever a posição dos elétrons nos átomos.

Existem quatro números quânticos: o número quântico principal, o número quântico de momento angular (também utilizado com a designação de azimutal ou secundário) e o número quântico magnético. Estes três números são usados na descrição dos orbitais atômicos e na caracterização dos elétrons que nelas se encontram. O quarto número quântico, número quântico de spin, é utilizado na descrição do comportamento específico de cada elétron. Estes quatro números quânticos, além de se complementarem, permitem-nos fazer uma descrição completa dos elétrons nos átomos.

NÚMERO QUÂNTICO PRINCIPAL

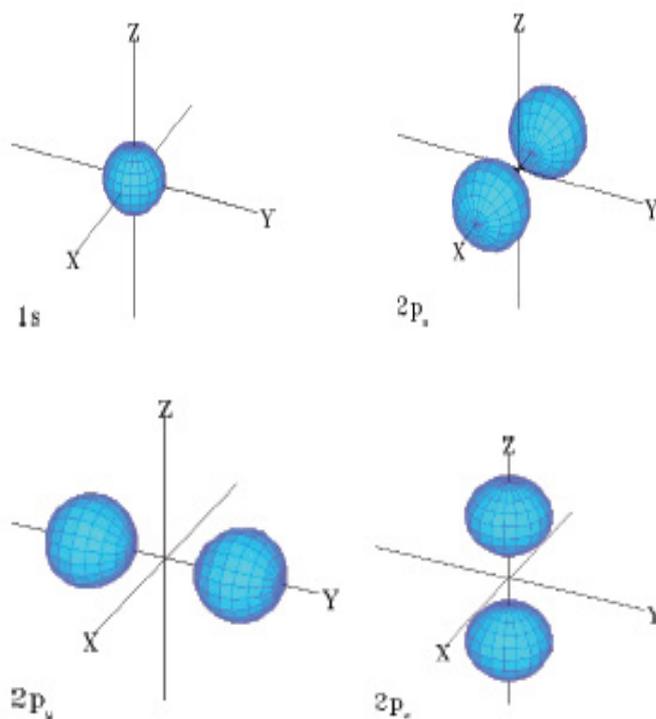
O número quântico principal (n) pode tomar como valores quaisquer números inteiros positivos, começando no 1, 2, 3, 4, etc.. Como o próprio nome o sugere, este número quântico é o mais importante, pois o seu valor define a energia do átomo de hidrogênio. No caso de átomos polieletrônicos, o número quântico principal está relacionado com a distância média do elétron ao núcleo, num determinado orbital. Quanto maior for n , maior é a distância média de um elétron num orbital, ao núcleo e portanto maior e menos estável é esse orbital.

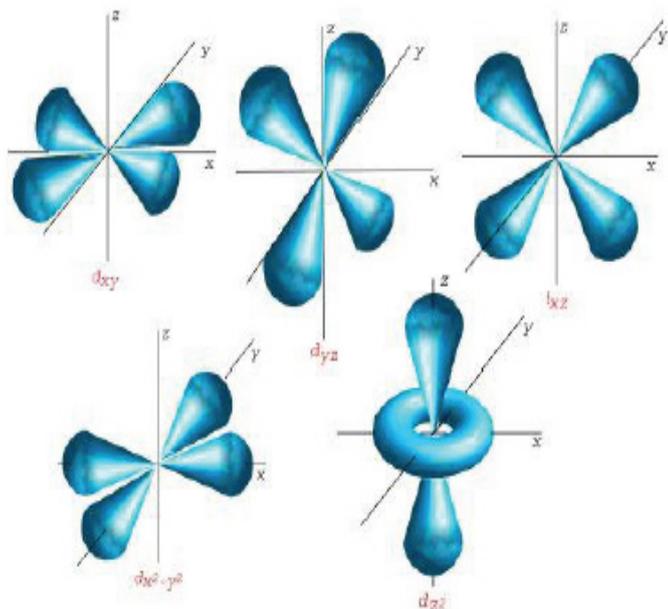
NÚMERO QUÂNTICO PRINCIPAL

O número quântico de momento angular, ou azimutal, ℓ , informa-nos sobre a forma das orbitais. Como o próprio nome o indica, o valor de ℓ define o momento angular do elétron, sendo que o aumento do seu valor implica o aumento correspondente do valor do momento angular. Deste modo a energia cinética do elétron é associada ao movimento angular e está dependente da energia total do elétron, pelo que é natural que os valores permitidos de ℓ estejam associados ao número quântico principal. Para um dado valor de n , ℓ pode ter como valores possíveis os números inteiros de 0 a $(n - 1)$. Por exemplo, se $n = 1$, existe apenas um único valor de número quântico de momento angular possível ($\ell = n - 1 = 1 - 1 = 0$). Se $n = 2$, existem dois valores de ℓ possíveis, 0 e 1. Se $n = 3$, há três valores de ℓ , nomeadamente 0, 1 e 2. O valor de ℓ é geralmente designado pelas letras s, p, d, f,... da seguinte maneira:

Número Quântico Secundário (ℓ)	Subnível de Energia
0	s
1	p
2	d
3	f

FORMATO DOS ORBITAIS ATÔMICOS





NÚMERO QUANTICO MAGNÉTICO (m ou mℓ)

Localiza o elétron no orbital e dá a orientação espacial dos orbitais. O número quântico magnético pode assumir valores que vão desde - ℓ até + ℓ, passando pelo zero.

Subnível s: Subnível p: Subnível d:

m=0 m=-1 m=0 m=+1 m=-2 m=-1 m=0 m=+1 m=+2

Subnível f:

m=-3 m=-2 m=-1 m=0 m=-1 m=-2 m=+3

NÚMERO QUÂNTICO DE SPIN (s ou ms)

Numerosos fenômenos observados tais como a dupla estrutura das raias ou linhas espectrais dos metais alcalinos e outros, levaram à idéia que associa ao elétron um momento angular intrínseco (“spin”). Com efeito, observando-se na ilustração abaixo na qual se representam os espectros dos átomos dos metais alcalinos (um único elétron de valência), notaremos a estrutura dupla das raias ou linhas espectrais de sua serie principal. Isto é, na realidade os níveis de energia, para este caso, são constituídos de “sub-níveis de energia muito próximos que aparecem como duas linhas quase iguais”.

A explicação dada a este fenômeno é “uma interação magnética entre o momento angular orbital (ℓ) e o momento angular intrínseco ou “spin” do elétron.

Todos os elétrons possuem o mesmo número quântico de “spin”, $s = 1/2$, então a medida do momento angular intrínseco ou “spin”, S, A existência do “spin” introduz outro número quântico: m_s (número quântico magnético de “spin”, que dá duas possíveis orientações para S, ou seja, $m_s = + 1/2$ e $m_s = - 1/2$).

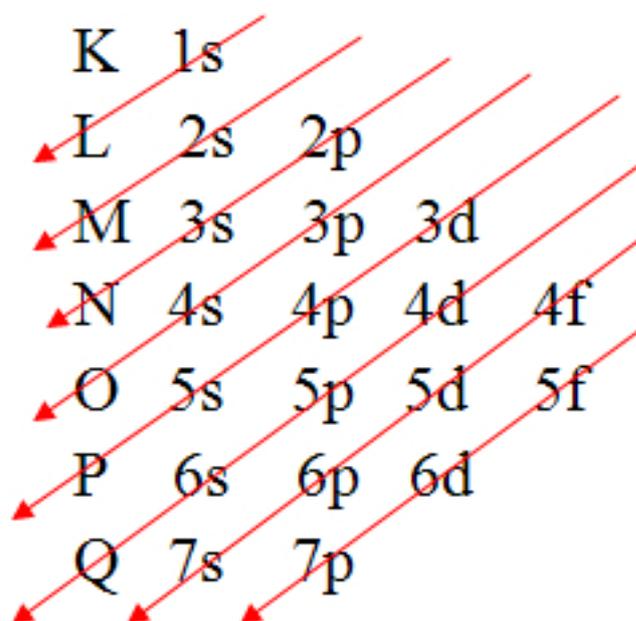
PRINCÍPIO DA EXCLUSÃO DE PAULI

O princípio de exclusão de Pauli, 1926, ajuda-nos a estabelecer as configurações de átomos mais complexos que o hidrogênio. De acordo com o princípio de Pauli, “dois elétrons não podem existir num átomo nos mesmos estados quânticos”. Isto é, cada elétron num átomo deve ter um grupo diferente de números quânticos n, ℓ, mℓ, ms.

REGRA DE HUND

Cada orbital do subnível que está sendo preenchido recebe inicialmente apenas um elétron. Somente depois de o último orbital desse subnível receber o seu primeiro elétron, começa o preenchimento de cada orbital com o seu segundo elétron, que terá spin contrário ao primeiro.

PRINCÍPIO DA CONSTRUÇÃO ELETRÔNICA DE LINUS PAULING





01. (Fórmula da Química)

Considere o elemento químico cobre de número atômico igual a 29. Informe:

- A) Configuração eletrônica por subníveis de energia.
- B) Configuração eletrônica por níveis quantizados de energia.
- C) Configuração eletrônica do íon mais estável.
- D) Subnível mais externo
- E) Subnível mais energético
- F) Números quânticos do orbital de maior energia.
- G) Números quânticos do orbital mais afastado do núcleo.
- H) Propriedades magnéticas.
- I) Classificação quanto ao elétron diferencial

02. (Fórmula da Química)

Repita o mesmo procedimento para os elementos cromo, samário, iodo, chumbo e prata.

03. (Fórmula da Química)

Para expressar suas idéias, a Ciência utiliza modelos teóricos que hoje são usados como analogias no ensino. O problema é que o uso de modelos como “pudim de passas” e “sistema planetário”, por exemplo, para a compreensão da estrutura do átomo, tem levado a algumas interpretações diferentes da concepção atômica que originou o modelo. As alternativas abaixo contêm comentários de alunos sobre o átomo e seus modelos. ASSINALE a afirmativa que melhor interpreta a concepção original do modelo histórico de J. J. Thomson a partir da analogia “pudim de passas”:

- A) O átomo é um elemento esférico, que contém partes menores, que são as cargas negativas e os fluidos positivos, que no caso do pudim, seriam as passas.
- B) O átomo possui cargas elétricas negativas distribuídas em uma massa uniforme carregada positivamente.
- C) O átomo é como se fosse um panetone com as passas no meio, no seu interior. As passas seriam os elétrons.
- D) O átomo é constituído por uma esfera maciça e positiva (pudim) com os elétrons na superfície (as passas).

04. (UFMG - 2004)

O teste de chama é uma técnica utilizada para a identificação de certos átomos ou íons presentes em substâncias. Nesse teste, um fio metálico é impregnado com a substância a ser analisada e, em seguida, é colocado numa chama pouco luminosa, que pode assumir a cor característica de algum elemento presente nessa substância.

Este quadro indica os resultados de testes de chama, realizados num laboratório, com quatro substâncias:

Substância	Cor da chama
HCl	Não se observa cor
CaCl ₂	Vermelho-tijolo (ou alaranjado)
SrCl ₂	Vermelho
BaCl ₂	Verde-amarelado

1. **INDIQUE**, em cada caso, o elemento responsável pela cor observada.

2. Utilizando um modelo atômico em que os elétrons estão em níveis quantizados de energia, **EXPLIQUE** como um átomo emite luz no teste de chama. (Deixe claro, em sua resposta, o motivo pelo qual átomos de elementos diferentes emitem luz de cor diferente.)

05. (UFMG - 1999)

Na chamada experiência de Rutherford, uma lâmina fina de ouro foi bombardeada com um feixe de partículas alfa (He²⁺). Esperava-se que todas as partículas atravessassem a lâmina, sofrendo, no máximo, pequenos desvios em sua trajetória. Surpreendentemente, porém, foi observado que uma pequena fração das partículas alfa sofria grandes desvios em relação às suas trajetórias originais. Para explicar esse resultado, Rutherford propôs a existência do núcleo atômico.

1- **JUSTIFIQUE** por que a introdução do conceito do núcleo atômico permite explicar os grandes desvios nas trajetórias das partículas alfa.

2- Suponha que, em vez de uma lâmina de ouro, se usasse uma lâmina de alumínio. Nesse caso, a fração de partículas alfa que sofreria grandes desvios seria menor, igual ou maior do que na experiência com a lâmina de ouro? **JUSTIFIQUE** sua resposta.



06. (UFC - 2007)

Quando fótons com energia $\geq \emptyset$ atingem uma superfície metálica, elétrons são ejetados (removidos) dessa superfície com uma certa energia cinética (E_c) (efeito fotoelétrico). Em experimentos separados, fótons de mesma energia são incididos em superfícies de Ti, Ni e Zn. Sabendo-se que a energia incidida (E_{inc}) é dada pela fórmula $E_{inc} = \emptyset + E_c$, em que \emptyset = energia de “ligação” do elétron ao átomo (característica de cada espécie e dependente do potencial de ionização), responda ao que pede.

A) Em qual das espécies os elétrons serão ejetados com maior energia cinética?

B) Justifique sua resposta ao item A.

Leia o texto para responder às questões 07 e 08. A luz branca é composta por ondas eletromagnéticas de todas as frequências do espectro visível. O espectro de radiação emitido por um elemento, quando submetido a um arco elétrico ou a altas temperaturas, é descontínuo e apresenta uma de suas linhas com maior intensidade, o que fornece “uma impressão digital” desse elemento. Quando essas linhas estão situadas na região da radiação visível, é possível identificardiferentes elementos químicos por meio dos chamados testes de chama. A tabela apresenta as cores características emitidas por alguns elementos no teste de chama:

Elemento	Cor
Sódio	Laranja
Potássio	Violeta
Cálcio	Vermelho-tijolo
Cobre	Azul-esverdeada

07. (UNESP - 2016)

Em 1913, Niels Bohr (1885-1962) propôs um modelo que fornecia uma explicação para a origem dos espectros atômicos. Nesse modelo, Bohr introduziu uma série de postulados, dentre os quais, a energia do elétron só pode assumir certos valores discretos, ocupando níveis de energia permitidos ao redor do núcleo atômico. Considerando o modelo de Bohr, os diferentes espectros atômicos podem ser explicados em função.

- (A) do recebimento de elétrons por diferentes elementos.
- (B) da perda de elétrons por diferentes elementos.
- (C) das diferentes transições eletrônicas, que variam

(D) da promoção de diferentes elétrons para níveis mais energéticos.

(E) da instabilidade nuclear de diferentes elementos

08. (UNESP - 2016)

Uma estudante preparou 10,0 mL de uma solução 1,00 mol·L⁻¹ de cloreto de um dos metais apresentados na tabela do texto a fim de realizar um teste de chama em laboratório. No teste de chama houve liberação de luz vermelha intensa. A partir das informações contidas no texto e utilizando a classificação periódica dos elementos, assinale a alternativa que apresenta a massa do sal utilizado pela estudante, em gramas, e a sua fórmula.

- (A) 1,11 e CaCl₂.
- (B) 7,56 e CaCl.
- (C) 11,1 e CaCl₂.
- (D) 0,756 e CaCl.
- (E) 0,111 e CaCl₂.

09. (FUVEST - 98)

Há exatos 100 anos, J.J. Thomson determinou, pela primeira vez, a relação entre massa e a carga do elétron, o que pode ser considerado como a descoberta do elétron. É reconhecida como uma contribuição de Thomson ao modelo atômico:

- A) o átomo ser invisível;
- B) a existência de partículas sub-atômicas;
- C) os elétrons ocuparem níveis discretos de energia;
- D) os elétrons girarem em órbitas circulares ao redor do núcleo;
- E) o átomo possuir um núcleo com carga positiva e uma eletrosfera;

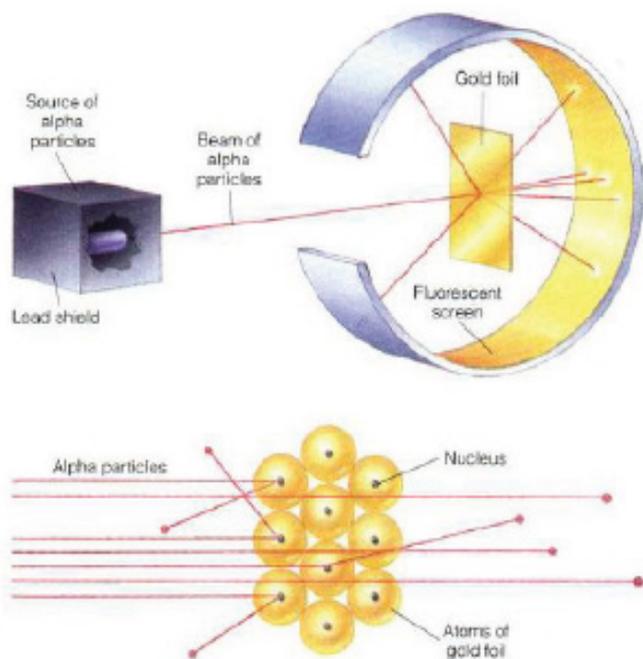
10. (Fórmula da Química)

De acordo com o modelo atômico de Bohr, um elétron no estado fundamental de um átomo de hidrogênio move-se em órbita ao redor do núcleo com um raio específico de 0,53 angstrom. Na descrição do átomo de hidrogênio pela mecânica quântica, a distância mais provável do elétron ao núcleo é 0,53 angstrom. Por que essas duas afirmativas são diferentes?



11. (Fórmula da Química)

Em 1911, o cientista Rutherford fez uma experiência muito importante, que veio a melhorar profundamente a visão de modelo atômico. Resumidamente, a experiência consistiu no seguinte:



Em relação à experiência de Rutherford e suas conclusões sobre o átomo, não se pode afirmar:

- A) A maior parte da massa do átomo se encontra em uma pequena região central (que chamaremos de núcleo) dotada de carga positiva.
- B) A contagem do número de partículas que atravessam e que ricocheteiam permite fazer uma estimativa de que o raio de um átomo de ouro (núcleo+eletrosfera) é cerca de dez mil vezes maior que o raio do núcleo.
- C) O modelo de Rutherford (1911), apesar de esclarecer satisfatoriamente os resultados da experiência de dispersão de partículas alfa, possuía algumas deficiências, como, por exemplo, não explicava os espectros atômicos.
- D) Os elétrons nos átomos movimentam-se ao redor do núcleo em trajetórias circulares, chamadas de camadas ou níveis.

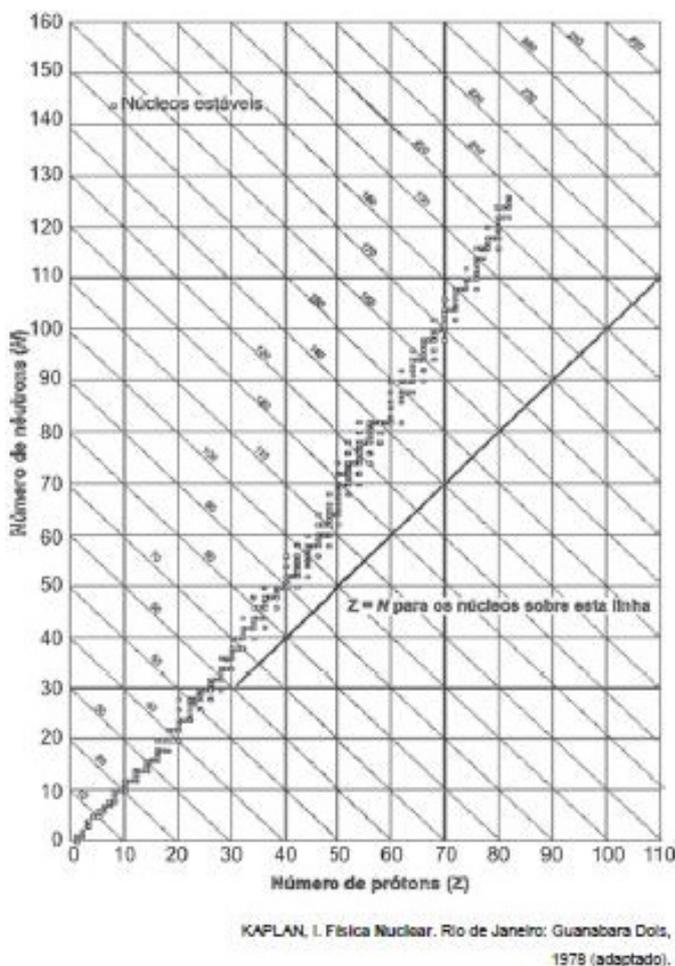
12. (UFC - 2009)

Assinale a opção que corretamente expressa o número de elétrons desemparelhados em um átomo de sódio, elemento número 11.

- A) 1
- B) 2
- C) 3
- D) 4
- E) 5

13. (ENEM - 2009)

Os núcleos dos átomos são constituídos de prótons e nêutrons, sendo ambos os principais responsáveis pela sua massa. Nota-se que, na maioria dos núcleos, essas partículas não estão presentes na mesma proporção. O gráfico mostra a quantidade de nêutrons (N) em função da quantidade de prótons (Z) para os núcleos estáveis conhecidos.



O antimônio é um elemento químico que possui 50 prótons e possui vários isótopos - átomos que só se diferem pelo número de nêutrons. De acordo com o gráfico, os isótopos estáveis do antimônio possuem

- A) entre 12 e 24 nêutrons a menos que o número de prótons.
- B) exatamente o mesmo número de prótons e nêutrons.
- C) entre 0 e 12 nêutrons a mais que o número de prótons.
- D) entre 12 e 24 nêutrons a mais que o número de prótons.
- E) entre 0 e 12 nêutrons a menos que o número de prótons.



14. (UFRGS)

Considere as duas colunas abaixo, colocando no espaço entre parênteses o número do enunciado da primeira coluna que mais relação tem com o da segunda coluna.

- Existência do núcleo atômico
 - Determinação da carga do elétron
 - Caráter corpuscular da luz
 - Caráter ondulatório das partículas
- () Hipótese de de Broglie
() Efeito fotoelétrico
() Experimento de Millikan
() Experimento de Rutherford

A relação numérica correta, de cima para baixo, na coluna da direita, que estabelece a associação proposta, é:

- (A) 4 - 3 - 2 - 1
(B) 1 - 3 - 2 - 4
(C) 4 - 2 - 3 - 1
(D) 4 - 3 - 1 - 2
(E) 4 - 1 - 2 - 3

15. (UFRGS)

Considere as seguintes afirmações sobre a estrutura do átomo:

I - A energia de um elétron ligado a um átomo não pode assumir qualquer valor.

II - Para separar um elétron de um átomo é necessária uma energia bem maior do que para arrancar um próton do núcleo.

III - O volume do núcleo de um átomo é aproximadamente igual à metade do volume do átomo todo. Quais estão corretas?

- (A) Apenas I
(B) Apenas II
(C) Apenas I e III
(D) Apenas II e III
(E) I, II e III

16. (UNESP - 2012)

A Lei da Conservação da Massa, enunciada por Lavoisier em 1774, é uma das leis mais importantes das transformações químicas. Ela estabelece que, durante uma transformação química, a soma das massas dos reagentes é igual à soma das massas dos produtos. Esta teoria pôde ser explicada, alguns anos mais tarde, pelo modelo atômico de Dalton. Entre as ideias de Dalton, a que oferece a explicação mais apropriada para a Lei da Conservação da Massa de Lavoisier é a de que:

- (A) Os átomos não são criados, destruídos ou convertidos em outros átomos durante uma transformação química.
(B) Os átomos são constituídos por 3 partículas fundamentais: prótons, nêutrons e elétrons.
(C) Todos os átomos de um mesmo elemento são idênticos em todos os aspectos de caracterização.
(D) Um elétron em um átomo pode ter somente certas quantidades específicas de energia.
(E) Toda a matéria é composta por átomos.

17. (UFF - 2010)

Em 1913, o físico dinamarquês Niels Bohr mostrou que as leis da Física Clássica não eram válidas para sistemas microscópicos, tais como o átomo e suas partículas constituintes. Bohr criou um novo modelo atômico, fundamentado na teoria dos quanta de Max Planck, estabelecendo alguns postulados. Assinale a opção que apresenta corretamente um dos postulados de Bohr.

- (A) O elétron pode-se mover em determinadas órbitas sem irradiar. Essas órbitas estáveis são denominadas “estados estacionários”.
(B) É impossível determinar com precisão a posição e a velocidade instantâneas de uma partícula.
(C) Um mesmo orbital não pode ter mais do que dois elétrons. Num orbital com dois elétrons, um deles tem spin + $\frac{1}{2}$ e o outro - $\frac{1}{2}$.
(D) O elétron ao saltar de um nível de energia interno E1 para outro mais externo E2 emite um quantum de energia.
(E) Num átomo, não existem dois elétrons com os quatro números quânticos iguais.

18. (FCM-MG - 2008)

Com relação ao modelo atômico moderno, um estudante fez as seguintes afirmativas:

- A posição de um elétron, no átomo, pode ser determinada com exatidão;
 - Em um átomo, os orbitais são regiões do espaço que podem ser ocupadas por elétrons;
 - A cada orbital atômico podem ser associados 4 números quânticos com valores definidos.
- Analisando as afirmativas do estudante, conclui-se que:

- A) nenhuma é correta.
B) todas são corretas.
C) apenas uma é correta.
D) apenas duas são corretas.



19. (FCM-MG - 2011)

Em 1913, pouco antes da Primeira Guerra Mundial, o físico dinamarquês Niels Bohr propôs, com base em estudos feitos sobre o átomo de hidrogênio, um novo modelo atômico com algumas alterações ao modelo atômico de Rutherford. Para o seu modelo, Bohr estabeleceu alguns postulados segundo os quais:

- Um elétron só pode estar em movimento ao redor do núcleo, se estiver em órbitas circulares, específicas e definidas.
- Uma carga negativa em movimento irradia (perde) energia constantemente, emitindo radiação.
- Quanto maior a energia do elétron mais próximo ele está do núcleo. Com relação às conclusões, pode-se afirmar:

- A) Apenas uma está correta.
- B) Apenas duas estão corretas.
- C) Todas estão corretas.
- D) Todas estão erradas.

20. (ENEM - 2019)

Em 1808, Dalton publicou o seu famoso livro o intitulado Um novo sistema de filosofia química (do original A New System of Chemical Philosophy), no qual continha os cinco postulados que serviam como alicerce da primeira teoria atômica da matéria fundamentada no método científico.

Esses postulados são numerados a seguir:

1. A matéria é constituída de átomos indivisíveis.
2. Todos os átomos de um dado elemento químico são idênticos em massa e em todas as outras propriedades.
3. Diferentes elementos químicos têm diferentes tipos de átomos; em particular, seus átomos têm diferentes massas.
4. Os átomos são indestrutíveis e nas reações químicas mantêm suas identidades.
5. Átomos de elementos combinam com átomos de outros elementos em proporções de números inteiros pequenos para formar compostos.

Após o modelo de Dalton, outros modelos baseados em outros dados experimentais evidenciaram, entre outras coisas, a natureza elétrica da matéria, a composição e organização do átomo e a quantização da energia no modelo atômico.

OXTOBY, D.W.; GILLIS, H. P.; BUTLER, L. J. Principles of Modern Chemistry. Boston: Cengage Learning, 2012 (adaptado).

Com base no modelo atual que descreve o átomo, qual dos postulados de Dalton ainda é considerado correto?

- A) 1
- B) 2
- C) 3
- D) 4
- E) 5

21. (ENEM - 2019)

Um teste de laboratório permite identificar alguns cátions metálicos ao introduzir uma pequena quantidade do material de interesse em uma chama de bico de Bunsen para, em seguida, observar a cor da luz emitida.

A cor observada é proveniente da emissão de radiação eletromagnética ao ocorrer a

- A) mudança da fase sólida para a fase líquida do elemento metálico.
- B) combustão dos cátions metálicos provocada pelas moléculas de oxigênio da atmosfera.
- C) diminuição da energia cinética dos elétrons em uma mesma órbita na eletrosfera atômica.
- D) transição eletrônica de um nível mais externo para outro mais interno na eletrosfera atômica.
- E) promoção dos elétrons que se encontram no estado fundamental de energia para níveis mais energéticos.