

Aula 2

MECÂNICA QUÂNTICA

META

- Apresentar a origem da mecânica quântica e suas conseqüências;
- Contextualizar os fundamentos da mecânica quântica nas quais as propriedades de partículas e ondas são consideradas simultaneamente.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá:

- Reconhecer:
 - a) A hipótese quântica de Max Planck e sua aplicação nos estudos dos espectros atômicos;
 - b) Os postulados da teoria atômica de Bohr.

PRÉ-REQUISITOS

- Conceito de matéria reconhecendo sua classificação e propriedades.
- Os experimentos mais importantes que levaram a descoberta do elétron e ao modelo nuclear atômico.

INTRODUÇÃO

A força da ciência é proveniente das conclusões tiradas a partir da argumentação lógica dos fatos, obtidas a partir de experimentos bem elaborados. A ciência foi capaz de produzir uma descrição tão detalhada e refinada da estrutura microscópica dos átomos, é preciso usar a imaginação e mergulhar nos átomos para descobrir sua estrutura interna. Para entendê-la e poder relacioná-la às propriedades químicas dos elementos, é preciso compreender a **estrutura eletrônica** de um átomo, isto é, como os elétrons se arranjam em torno do seu núcleo. Para isso, temos que examinar vários experimentos e verificar como eles contribuíram para o desenvolvimento da teoria atômica. É interessante compararmos a evolução da lógica sobre a teoria da estrutura atômica com a seqüência em que os experimentos mais significativos foram realizados. Esta evolução ocorreu essencialmente em três etapas: a descoberta da natureza da matéria e da natureza do elétron (1900), a constatação de que o átomo consiste de um pequeno núcleo rodeado de elétrons e o desenvolvimento das equações mecânico-quânticas (**Mecânica Quântica**) que explicam o comportamento dos elétrons nos átomos (1925). A mecânica quântica foi desenvolvida em várias décadas por muitos cientistas, várias descobertas ajudaram a formulação dos conceitos de mecânica quântica.

DESENVOLVIMENTO

É preciso imaginação pensar como um químico, para poder entender e relacionar as propriedades químicas dos elementos é preciso compreender a **estrutura eletrônica** de um átomo, isto é, como os elétrons se arranjam em torno do seu núcleo. Assim quando Rutherford propôs, no começo do século XX, um modelo nuclear para o átomo, ele esperava poder usar a **mecânica clássica**, isto é, as leis de movimento propostas por Newton, no século XVII, para descrever a estrutura dos elétrons. Afinal, a mecânica clássica tinha obtido enorme sucesso na descrição do movimento de objetos visíveis, como bolas e planetas, por exemplo. Entretanto, logo ficou claro que a mecânica clássica falhava quando aplicada aos elétrons dos átomos. Novas leis, que passaram a ser conhecidas como **mecânica quântica** tiveram de ser desenvolvidas.

Para investigar a estrutura interna de objetos do tamanho dos átomos é preciso observá-los indiretamente, por meio das propriedades da radiação eletromagnética que eles emitem e depois construir um modelo da estrutura do átomo que explique essas propriedades.

CARACTERÍSTICAS DA RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA

Um feixe de radiação eletromagnética é o produto de campos elétricos e magnéticos oscilantes (isto é, que variam com o tempo) que atravessam o vácuo a $3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Essa velocidade tem o símbolo c e é chamada de velocidade da luz. A luz visível é uma forma de radiação eletromagnética, como também são as ondas de rádio, as microondas e os raios X.

Uma fotografia instantânea de uma onda eletromagnética que viaja pelo espaço seria semelhante à Figura 1. A onda se caracteriza pela amplitude e pelo comprimento de onda. A **amplitude** é a altura da onda em relação à linha central. O **comprimento de onda** (λ), é a distância entre dois máximos sucessivos. A **Freqüência** (ν) é o número de vezes que um comprimento de onda completo passa por um ponto de referência numa unidade de tempo (s). A unidade de freqüência é o inverso de segundo (s^{-1}) e é chamada de Hertz (Hz). A relação inversa entre a freqüência e o comprimento de onda de uma radiação eletromagnética pode ser expressa pela seguinte equação:

$$c = \lambda \nu$$

onde ν é a freqüência, λ é o comprimento de onda e c é a velocidade da luz.

Comprimentos de onda diferentes correspondem a regiões diferentes do espectro eletromagnético (Figura 2). Nossos olhos detectam a radiação eletromagnética de comprimento de onda entre 700 nm (luz vermelha) e 400 nm (luz violeta). Nesse intervalo, a radiação é chamada de luz visível e a freqüência da luz determina sua cor. A Chamada luz branca, que inclui a luz do sol, é a mistura de todos os comprimentos de onda da luz visível.

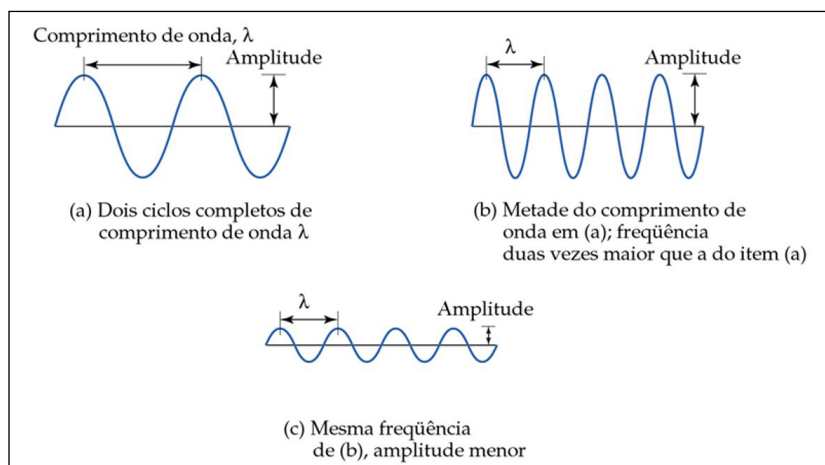


Figura 1: A energia radiante tem características de onda e constitui-se de ondas eletromagnéticas. Note que quanto mais curto o comprimento de onda, mais alta é a freqüência. (Fonte: Bibliografia 6)

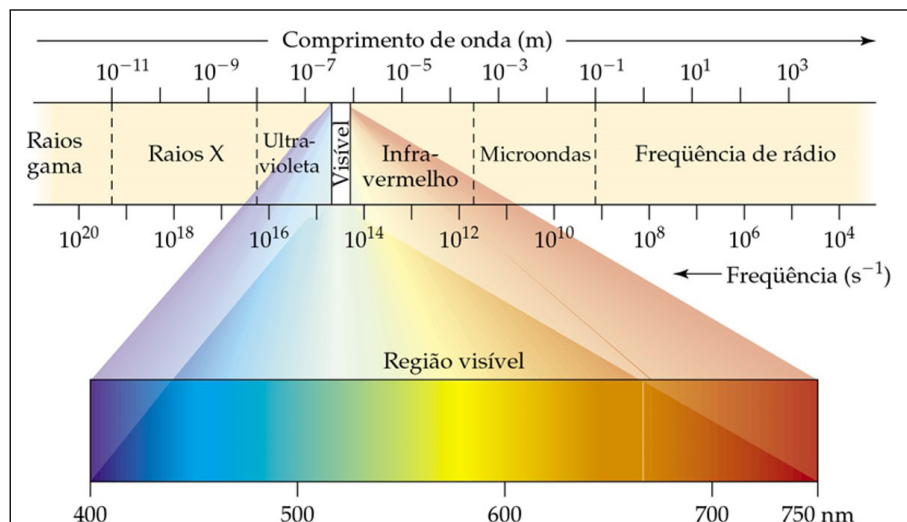


Figura 2: Comprimentos de onda de radiação eletromagnética característicos de várias regiões do espectro eletromagnético. Note que a cor pode ser expressa quantitativamente pelo comprimento de onda. (Fonte: Bibliografia 6)

PRINCÍPIOS DE MECÂNICA QUÂNTICA

ENERGIA QUANTIZADA E FÓTONS

Apesar do modelo ondulatório da luz explicar muitos aspectos de seu comportamento, existem vários fenômenos que ele não pode explicar. Três desses são especialmente pertinentes para o entendimento de como a radiação eletromagnética e os átomos interagem. Esses três fenômenos são: (1) a emissão de luz por objetos quentes (chamada *radiação do corpo negro porque* os objetos estudados parecem pretos antes do aquecimento); (2) a emissão de elétrons a partir de uma superfície metálica onde a luz incide (efeito fotoelétrico) e (3) a emissão de luz a partir de átomos de gás excitados eletronicamente (*espectros de emissão*).

Objetos quentes e quantização da energia

Quando sólidos são aquecidos, eles emitem radiação, a distribuição do comprimento de onda de uma radiação depende da temperatura, um objeto “vermelho quente” que é mais frio do que um objeto “quente branco”. No final do século XIX alguns físicos estudavam esse fenômeno, tentando entender a relação entre a temperatura e a intensidade e os comprimentos de onda da radiação emitida. As leis predominantes da *física clássica* não podiam explicar essas observações.

Em 1900, um físico alemão **Max Planck** (Figura 3) resolveu o problema fazendo uma suposição audaciosa: ele propôs que a energia podia ser liberada (ou absorvida) por átomos apenas em `pedaços` distintos de tamanhos mínimos. Desenvolveu a fórmula teórica que descrevia a intensidade da luz de várias frequências emitida por um corpo sólido em diferentes temperaturas. Planck deu o nome de **quantum** (significando “quantidade fixa”) para a menor quantidade de energia que podia ser emitida ou absorvida como radiação eletromagnética; observou que os átomos oscilantes de um sólido só poderiam ter certas energias dadas por:

$$E = n h \nu \text{ (Hipótese quântica de Planck)}$$

onde h é uma constante chamada de constante de Planck, cujo valor é $6,63 \times 10^{-34}$ J.s. O valor de n pode ser 1, 2, 3, ... (qualquer número inteiro). Assim, a energia é emitida ou absorvida pela matéria em múltiplos inteiros de $h\nu$, $2h\nu$, $3h\nu$ e assim por diante. Além disso, dizemos que as energias permitidas são quantizadas, isto é, seus valores são restritos a determinadas quantidades. A proposta revolucionária de Planck sobre a energia ser quantizada foi comprovada e ele ganhou o Prêmio **Nobel de Física** em 1918 por seu trabalho sobre teoria quântica.

Se a teoria quântica de Planck está correta, porque seus efeitos não são tão óbvios no nosso dia-a-dia? Por que as variações de energia parecem ser contínuas em vez de quantizadas? Observe que a constante de Planck é um número extremamente pequeno. Portanto um quantum de energia, $h\nu$, será uma quantidade extremamente pequena. As regras de Planck com respeito à obtenção ou perda de energia são sempre as mesmas se estivermos preocupados com objetos na escala do tamanho de nossas experiências cotidianas ou com objetos microscópicos. Para objetos macroscópicos como os seres humanos, a obtenção ou a perda de energia de um único quantum de energia passa completamente despercebido. Entretanto, quando lidamos com matéria em nível atômico, o impacto das energias quantizadas é muito mais significativo.

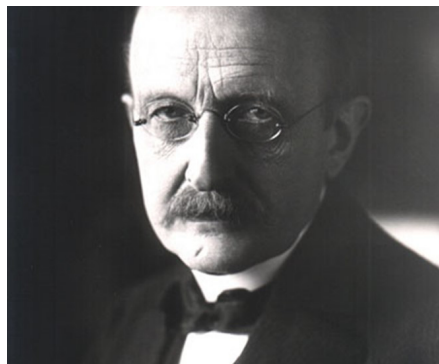


Figura 3: Um dos grandes nomes da Mecânica Quântica – Max Planck.
(Fonte: www.exitfish.com)

Efeito Fotoelétrico e fótons

Em 1905, Albert Einstein usou a teoria quântica de Planck para explicar o **efeito fotoelétrico**, ilustrado na Figura 4. Os experimentos tinham mostrado que a luz incidindo em uma superfície metálica limpa leva-a emitir elétrons. Para cada metal existe uma frequência mínima de luz abaixo da qual nenhum elétron é emitido. Por exemplo, a luz com frequência de $4,60 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ou maior faz com que o césio metálico emita elétrons, mas a luz de frequência mais baixa não tem efeito.

Para explicar o efeito fotoelétrico, Einstein supôs que a energia radiante atingindo a superfície metálica é um fluxo de pacotes minúsculos de energia. Cada pacote de energia, chamado de **fóton**, comporta-se como uma partícula minúscula. Ampliando a teoria quântica de Planck, Einstein deduziu que cada fóton deveria ter uma energia proporcional à frequência da luz. Portanto, a própria energia radiante é quantizada.

Energia do fóton = $E = h\nu$

Então, o efeito fotoelétrico é a emissão de elétrons pela superfície de um metal iluminado por luz. Por exemplo, a luz violeta provoca a emissão de elétrons da superfície do potássio metálico, mas a luz vermelha, que possui uma frequência menor, não provoca. Para ocorrer o efeito fotoelétrico, os fótons que atingem a superfície do metal têm que ter energia suficiente para arrancar o elétron. Se a energia não for suficiente, não importa o número de fótons que atinge a superfície, nenhum elétron é arrancado. Quando o fóton atinge a superfície, sua energia é incorporada ao elétron e o fóton desaparece.

Apesar de a teoria da luz de Einstein explicar o efeito fotoelétrico e muitas outras observações, ela apresentou uma situação embaraçosa. A luz é uma onda ou ela compõe-se de partículas? O fato é que ela possui propriedades de ambos. Comporta-se macroscopicamente como uma onda, mas consiste em um conjunto de fótons. Quando examinamos o fenômeno em nível atômico, observamos suas propriedades de partículas. É como se passássemos da descrição de uma praia inteira para começar a examinar os grãos de areia dos qual a praia é constituída.

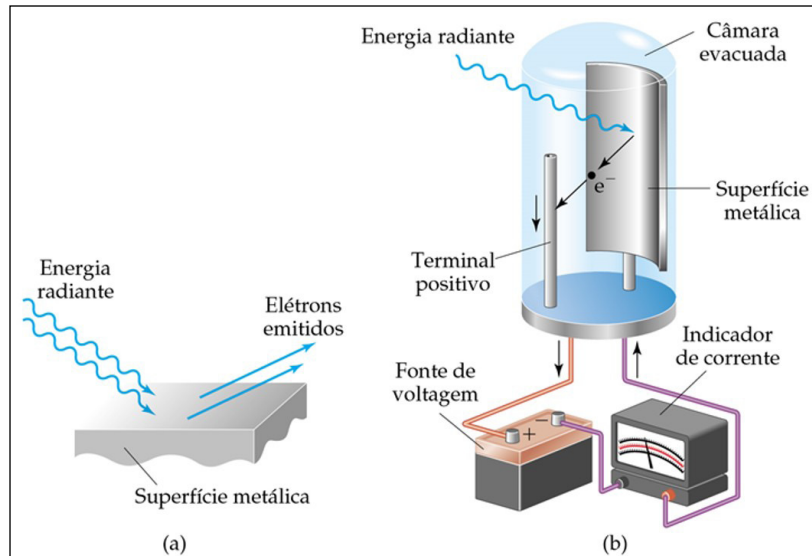


Figura 4: Efeito fotoelétrico. Quando fótons de energia suficientemente alta colidem com uma superfície metálica, elétrons são emitidos do metal, como em (a). O efeito fotoelétrico é a base da fotocélula mostrada em (b). Os elétrons emitidos são puxados para o terminal positivo. Como resultado, a corrente flui no circuito. As fotocélulas são usadas em medidores de luz para fotografia, bem como em dispositivos eletrônicos.
(Fonte: Bibliografia 6)

ESPECTROS DE LINHAS E O MODELO DE BOHR

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

Espectro de linhas

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 ondas diferentes. Quando a radiação de fontes como essa é separada em seus diferentes comprimentos de onda componentes, um **espectro** é produzido (Figura 5). Um **espectro contínuo** que contém luz de todos os comprimentos de ondas, como o arco-íris, mas nem todas as fontes de radiação produzem um espectro contínuo.

Quando diferentes gases 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-alaranjada de muitos letreiros luminosos. Quando a luz vinda de tais fontes passa através de um prisma, apenas linhas de poucos comprimentos de onda estão

presentes nos espectros resultantes, como mostrado na Figura 6. As linhas coloridas são separadas por regiões pretas, que correspondem a comprimentos de onda ausentes na luz. Um espectro contendo apenas radiações de comprimentos de onda específicos é chamado de **espectro de linhas**.

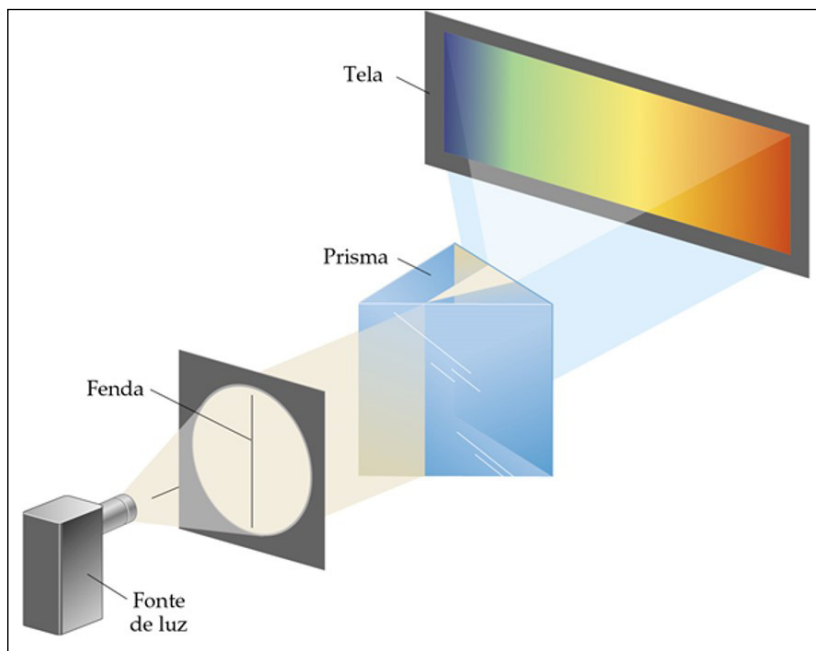


Figura 5: Um espectro visível contínuo é produzido quando um feixe estreito de luz branca atravessa um prisma. A luz branca poderia ser a luz do sol ou a luz de uma lâmpada incandescente.
(Fonte: Bibliografia 6)

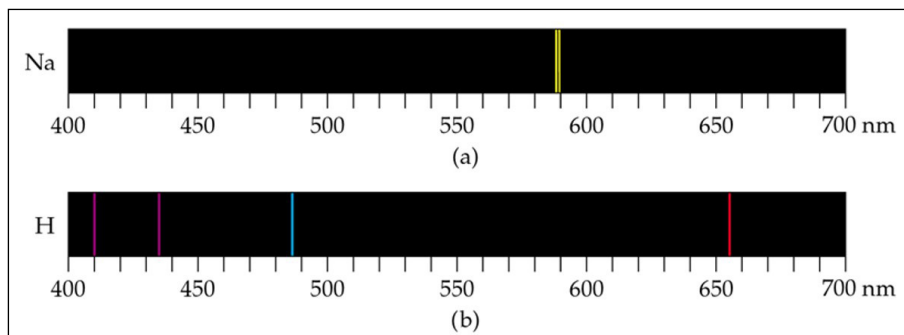


Figura 6: O espectro de linhas de (a) Na, (b) H.
(Fonte: Bibliografia 6)

Quando os cientistas detectaram pela primeira vez o espectro de linhas do hidrogênio na metade do séc. XIX, ficaram fascinados pela sua simplicidade. Em 1885, um professor chamado Johann Balmer observou que os comprimentos de onda das quatro linhas na região do visível, mostrado na Figura 6 encaixam de maneira intrigante em uma fórmula simples. Rapi-

damente a equação de Balmer foi estendida para uma equação mais geral, chamada de equação de Rydberg, que permitiu calcular os comprimentos de onda de todas as linhas espectrais do hidrogênio:

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

Onde, λ é o comprimento de onda de uma linha espectral, R_H é a constante de Rydberg ($1,096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$) e n_1 e n_2 são números inteiros e positivos, sendo n_2 maior que n_1 .

Como a extraordinária simplicidade dessa equação poderia ser explicada?

OS POSTULADOS DE BOHR

Depois que Rutherford descobriu a natureza nuclear do átomo, os cientistas pensavam no átomo como um 'sistema solar microscópico' no qual os elétrons descreviam uma órbita ao redor do núcleo. Para explicar o espectro de linhas do hidrogênio, Bohr começou supondo que os elétrons moviam-se em órbitas circulares ao redor do núcleo. Entretanto, de acordo com a física clássica, uma partícula carregada (como um elétron) que se move em uma trajetória circular perderia energia continuamente pela emissão de radiação eletromagnética. À medida que o elétron perde energia, ele deve mover-se em forma de espiral em direção ao núcleo. Bohr abordou esse problema quase da mesma forma que Planck tinha abordado o problema da natureza da radiação emitida por objetos quentes. Assumindo que as leis predominantes da física eram inadequadas para descrever todos os aspectos dos átomos. Além disso, ele adotou a idéia de Planck de que as energias eram quantizadas.

Bohr baseou seu modelo em três postulados:

1. Somente órbitas de certos raios, correspondendo a certas energias definidas, são permitidas para os elétrons em um átomo.
2. Um elétron em certa órbita permitida tem certa energia específica e está em um estado de energia "permitido". Um elétron em estado de energia permitido não irradiará energia e, portanto, não se moverá em forma de espiral em direção ao núcleo.
3. A energia só é emitida ou absorvida por um elétron quando ele muda de um estado de energia permitido para outro. Essa energia é emitida ou absorvida como fóton, $E = h\nu$.

Os estados de energia do átomo de hidrogênio

Em um átomo, um elétron só pode ter certos valores de energia, que são chamados de níveis de energia. Bohr calculou as energias correspondentes a cada órbita permitida. Essas energias encaixavam-se na seguinte fórmula:

$$E = \frac{R_H}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \infty \text{ (para o átomo de hidrogênio)}$$

onde R_H é uma constante (expressa em unidades de energia) valendo $-2,179 \times 10^{-18}$ J. Os valores possíveis de energia dos elétrons são obtidos na fórmula com diferentes valores de n (inteiros).

O número inteiro n , que pode assumir valores de 1 a infinito, é chamado número quântico. O estado de energia mais baixa ($n=1$) é chamado **estado fundamental** do átomo. Quando o elétron está em uma órbita de energia mais alta (menos negativa), diz-se que o átomo está em **estado excitado**. A Figura 7 mostra a energia do elétron em um átomo de hidrogênio para vários valores de n .

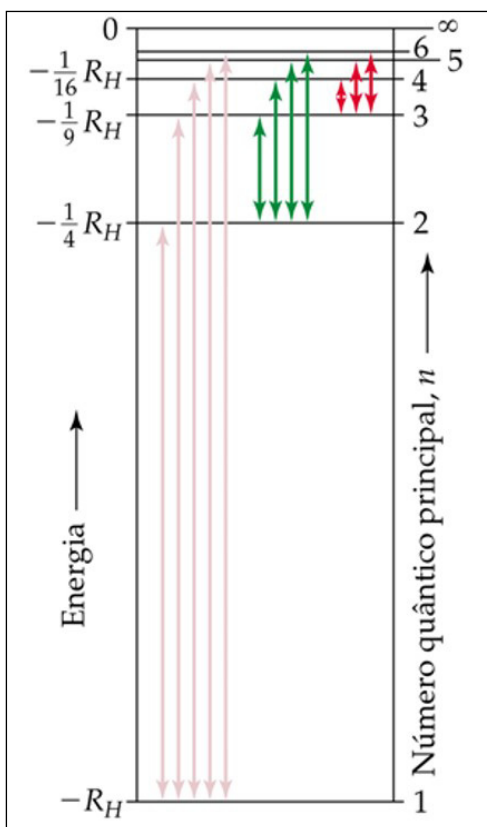


Figura 7: Níveis de energia no átomo de hidrogênio a partir do modelo de Bohr. As setas referem-se às transições do elétron de um estado de energia permitido para outro. Os estados mostrados são aqueles para os quais $n=1$ a $n=6$, e o estado para $n=\infty$, para o qual a energia, $E=0$. (Fonte: Bibliografia 6)

As transições entre os níveis de energia de um elétron, num átomo, só pode alterar a sua energia passando de um nível de energia ao outro. Esta passagem é chamada de *transição*.

No seu terceiro postulado, Bohr supôs que o elétron poderia ‘pular’ de um estado de energia permitido para outro, absorvendo ou emitindo fótons cuja energia radiante corresponda exatamente à diferença entre os dois estados. Um elétron deve absorver energia para que ele mude para um estado de mais alta energia (um estado com um valor mais alto de n). De maneira contrária, a energia radiante é emitida quando o elétron pula para um estado de energia mais baixa (um estado com menor valor de n). Assim, se o elétron pula de um estado inicial, com energia E_i para um estado final, com energia E_f , a variação de energia é dada pela seguinte relação:

$$\Delta E = E_f - E_i = E_{\text{fóton}} = h\nu$$

Portanto, o modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio afirma que apenas frequências específicas de luz que satisfazem a equação acima, podem ser absorvidas ou emitidas pelo átomo.

O modelo de Bohr oferece uma explicação para o espectro de linhas do átomo de hidrogênio, ele não pode explicar o espectro de outros átomos, a não ser de uma maneira muito incipiente. Esse modelo é apenas um importante passo em direção ao desenvolvimento de um modelo mais abrangente, principalmente para átomos multieletrônicos.

Exemplo: Qual a diferença entre dois níveis de energia do átomo de sódio, sabendo-se que a luz emitida tem o comprimento de onda de 589 nm?

$$h\nu = E_f - E_i$$

$$c = \lambda\nu$$

$$\text{Dados: } \lambda = 589 \text{ nm} = 5,89 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$h\nu = hc/\lambda = \Delta E = E_f - E_i$$

$$\Delta E = (6,626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 3,00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}) / 5,89 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$\Delta E = 3,38 \times 10^{-19} \text{ J}$$

COMPORTAMENTO ONDA E PARTÍCULA

Nossa próxima tarefa é combinar as propriedades ondulatórias dos elétrons com o modelo nuclear dos átomos e explicar o estranho diagrama de níveis de energia observado experimentalmente no átomo de hidrogênio. Agiremos em duas etapas. Em primeiro lugar, iremos desenvolver um modelo quântico-mecânico do átomo de hidrogênio. Em seguida, usaremos o

modelo para explicar as estruturas dos átomos que tem mais de um elétron (átomos multieletrônicos), para ver como algumas idéias simples explicam não apenas os espectros atômicos, mas também os números quânticos e a distribuição eletrônica dos átomos.

Veremos que as maneiras como os elétrons estão distribuídos nos átomos é descrita pela mecânica quântica em termos de **orbitais atômicos**. O conhecimento das energias dos orbitais bem como algumas características fundamentais dos elétrons permite-nos determinar os modos pelos quais os elétrons estão distribuídos entre vários orbitais em um átomo.

COMPORTAMENTO ONDULATÓRIO DA MATÉRIA

Nos anos posteriores ao desenvolvimento do modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio, a natureza dual onda-partícula da energia radiante tornou-se um conceito familiar. Dependendo das circunstâncias experimentais, a radiação parece ter um caráter ondulatório ou de partícula (fóton). Louis De Broglie, quando trabalhava em sua tese de doutoramento em física em Sorbonne, em Paris, corajosamente ampliou essa idéia. Se a energia radiante pudesse se comportar, sob condições apropriadas, como um feixe de partículas, a matéria, sob condições apropriadas, poderia possivelmente mostrar propriedades de uma onda?

Relação de De Broglie

Em 1923 Louis de Broglie sugeriu que, se a luz (considerada uma onda) tem propriedades corpusculares, então, talvez as partículas da matéria, em circunstâncias apropriadas, também pudessem exibir aspectos **ondulatórios**. Sugeriu que o elétron, em seu movimento ao redor do núcleo, tinha associado a ele um comprimento de onda particular. Postulou então que uma partícula de massa m e velocidade v estaria associada a um comprimento de onda λ dado, em analogia com as partículas de luz, por:

$$\lambda = h / mv$$

Essa equação é denominada equação de De Broglie. A grandeza mv para qualquer objeto é chamado de **momento**. De Broglie usou o termo **ondas de matéria** para descrever as características ondulatórias das partículas materiais.

Se a matéria tem propriedades ondulatórias, porque não são comumente observadas?

O cálculo com a relação de De Broglie mostra que uma bola comum ($m = 0,145 \text{ kg}$) movendo-se a 96 km/h (27 m/s) tem um comprimento

de onda da ordem de 10^{-34} m, valor muito pequeno para ser detectado. Já para os elétrons, obtém-se um valor de picômetros (10^{-12} m) que, em circunstâncias especiais, pode ser medido.

Em 1927, C. Davisson e L. H. Germer nos EUA e G. P. Thomson (filho de J. J. Thomson) na Inglaterra mostraram que um feixe de elétrons, tal e qual um feixe de raios-X, pode ser difratado por um cristal, demonstrando assim experimentalmente as propriedades ondulatórias do elétron.

O Princípio da Incerteza

A descoberta das propriedades ondulatórias da matéria levantou algumas questões novas e interessantes sobre a física clássica.

No quotidiano, a trajetória de uma bola, a cada instante, é dada pela sua posição e velocidade (ou momento, massa x velocidade). Pensamos assim, numa trajetória contínua para corpos em movimento. Na teoria de Bohr, o elétron, assim se imagina, órbita em torno do núcleo, da maneira parecida com o movimento da Terra em torno do Sol. A mecânica quântica altera em muito esta visão.

Em 1927, Werner Heisenberg mostrou que era impossível conhecer, simultaneamente, com absoluta exatidão, a posição e o momento de uma partícula como o elétron. **O princípio da incerteza de Heisenberg** é uma relação que afirma que o produto da incerteza na posição pela incerteza no momento de uma partícula não pode ser menor que a constante de Planck dividida por 4π . Sendo Δx a incerteza na coordenada x da partícula e sendo Δp_x a incerteza da componente do momento na direção x , temos:

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq h / 4\pi$$

O princípio da incerteza afirma que quanto mais precisamente se conhece a posição (isto é, quanto menor for Δx), menos precisamente se conhece o momento da partícula (isto é, maior será Δp_x). Em outras palavras, se soubermos muito bem onde está a partícula, não podemos saber para onde ela irá.

EQUAÇÃO DE ONDA DE SCHRÖDINGER

Em 1926, o físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) propôs uma equação, conhecida com **equação de onda de Schrödinger**, que incorpora tanto o comportamento ondulatório como o de partícula do elétron. Este ramo da física ficou conhecido como a *mecânica quântica ou mecânica ondulatória*. A maior parte da mecânica quântica tem como objetivo encontrar meios de resolver esta equação de forma simples.

A equação fundamental da mecânica quântica é:

$$H\Psi_i = E_i \Psi_i$$

As energias permitidas E_1, E_2, E_3 , etc. são obtidos quando o operador Hamiltoniano (H) é aplicado sobre as funções de onda Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 , etc. O resultado numérico obtido é, denominado auto-valor ou valor-próprio: somente quando H operar sobre uma função adequada Ψ_i , a resultante será o produto da função inicial Ψ_i com seu auto-valor E_i .

Não vamos nesta disciplina resolver esta equação complexa, porém considerando uma partícula numa única dimensão, a partir da equação fundamental encontramos a forma geral da **equação de Schrödinger** que pode ser expressa:

$$-\frac{\hbar^2}{8m\pi^2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V.\psi = E.\psi$$

Os termos conhecidos dessa equação são a massa da partícula m e sua energia potencial (V) expressa como uma função de x . Se considerarmos a equação tridimensional, na qual o termo que representa a energia cinética inclui os momentos da partícula nas direções x, y e z . Neste caso temos de utilizar derivadas parciais, como mostrado abaixo:

$$-\frac{\hbar^2}{8m\pi^2} \left(\frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta z^2} \right) + V.\psi = E.\psi$$

A mecânica quântica não nos permite descrever o elétron do átomo de hidrogênio como se movendo numa órbita. O que nos permite são enunciados estatísticos sobre a posição do elétron no átomo. Podemos calcular a **probabilidade** de encontrarmos o elétron na vizinhança de certo ponto do átomo. A informação sobre uma partícula num certo nível de energia (como um elétron num átomo) está expressa numa função matemática. Esta função é a **função de onda** e se representa pela letra grega Ψ (psi). A função de onda se obtém pela resolução da equação de Schrödinger. O seu quadrado (Ψ^2) dá a probabilidade de se encontrar a partícula numa certa região do espaço.

Uma maneira de representar a probabilidade de encontrar o elétron em várias regiões de um átomo é mostrada na Figura 8. Nessa figura a densidade de pontos representa a probabilidade de encontrar o elétron. As regiões com alta densidade de pontos correspondem a valores relativamente altos para Ψ^2 . A **densidade eletrônica** é outra maneira de expressar a probabilidade: as regiões onde existe alta probabilidade de encontrar o elétron são regiões de alta densidade eletrônica.

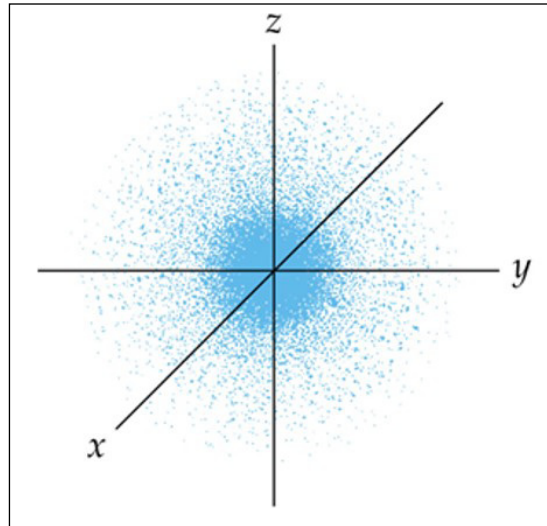


Figura 8: Distribuição da densidade eletrônica no estado fundamental do átomo de hidrogênio. (Fonte: Bibliografia 6)

CONCLUSÃO

A estrutura eletrônica de um átomo descreve as energias e os arranjos dos elétrons ao redor do átomo. Max Planck propôs que a quantidade mínima de energia radiante que um objeto pode ganhar ou perder está relacionado com a frequência da radiação: $E = h\nu$. Essa menor quantidade de energia é chamada **quantum** de energia. Na teoria quântica, a energia é quantizada, o que significa que ela pode ter certos valores permitidos. A dispersão da radiação em seus comprimentos de onda componentes produz um espectro, se contiver apenas certos comprimentos de onda específicos é chamado de espectro de linhas. Nesse modelo, a energia do átomo de hidrogênio depende do valor de um número n , chamado número quântico principal.



RESUMO

Introduzimos alguns aspectos da teoria atual da estrutura atômica, a *mecânica quântica*. Felizmente, esta poderosa teoria considera os conceitos da quantização da energia eletrônica, a mais importante contribuição de Bohr, sendo que a idéia das órbitas de elétrons deve ser modificada. Toda matéria, como o elétron, deve exibir propriedades ondulatórias, que levou ao princípio da incerteza de Heisenberg, que afirmou existir um limite próprio para a exatidão com a qual a posição e a energia cinética de uma partícula podem ser medidas simultaneamente.



ATIVIDADES

1) Usando a Figura 7, determine qual das seguintes transições eletrônicas produz a linha espectral de comprimento de onda maior: $n=2$ para $n=1$, $n=3$ para $n=2$ ou $n=4$ para $n=3$?

2) Qual é o comprimento de onda de um elétron com velocidade de $5,97 \times 10^6$ m/s? (A massa do elétron é $9,11 \times 10^{-28}$ g).

Resolução: O comprimento de onda de uma partícula em movimento é dado pela equação de De Broglie; o λ é calculado simplesmente pela substituição das grandezas conhecidas, h , m e v . Entretanto, ao fazer isso devemos prestar atenção nas unidades. Usando o valor da constante de Planck, $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J.s e lembrando que $1 \text{ J} = 1 \text{ kg.m}^2/\text{s}^2$, temos:

$$\begin{aligned} \lambda &= h/mv \\ &= \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J.s})}{(9,11 \times 10^{-28} \text{ g})(5,97 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1})} \left(\frac{1 \text{ kg.m}^2.\text{s}^{-2}}{1 \text{ J}} \right) \left(\frac{10^3 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \right) \\ &= 1,22 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,122 \text{ nm} \end{aligned}$$

COMENTÁRIOSOBRE AS ATIVIDADES

O comprimento de onda aumenta à medida que a frequência diminui ($\lambda = c/v$). Naturalmente o comprimento de onda mais longo estará associado à menor frequência. De acordo com a equação de Planck, $E = h\nu$, a frequência mais baixa está associada à energia mais baixa. Na Figura 6, a linha mais curta representa a menor variação de energia. Portanto, a transição $n=4$ para $n=3$ produz a linha de comprimento de onda mais longa (frequência mais baixa).

Comparando esses valores com os comprimentos de onda de radiações eletromagnéticas, observamos que o comprimento de onda desse elétron é aproximadamente o mesmo do comprimento de onda dos raios X.



AUTO-AVALIAÇÃO

- 1) Organize os seguintes tipos de energia eletromagnética em ordem crescente de comprimento de onda: infravermelho, luz verde, luz vermelha, ondas de rádio, raios X, luz ultravioleta.
- 2) Qual é o comprimento de onda da luz amarela do sódio, cuja frequência é $5,09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$?
- 3) Qual a diferença entre dois níveis de energia do átomo de sódio, sabendo-se que a luz emitida tem o comprimento de onda de 589 nm?
- 4) (a) O que significa dizer que a energia é quantizada? (b) Por que não notamos a quantização da energia nas atividades cotidianas?
- 5) Uma das linhas de emissão do átomo de hidrogênio tem comprimento de onda de 93,8 nm. (a) Em qual região do espectro eletromagnético essa emissão é encontrada? (b) Determine os valores inicial e final de n associados a essa emissão?
- 6) Explique como a existência de espectro de linhas é consistente com a teoria de Bohr sobre energias quantizadas para o elétron no átomo de hidrogênio.
- 7) Utilize a relação de De Broglie para determinar os comprimentos de onda dos seguintes objetos: **(a)** um pessoa de 85 kg esquiando a 50 Km/h; **(b)** uma bala de revólver de 10,0 g detonada a 250 m/s; **(c)** um átomo de lítio movimentando-se a $2,5 \times 10^5 \text{ m/s}$.
- 8) **(a)** Na descrição do átomo de hidrogênio pela mecânica quântica, qual é o significado do quadrado da função de onda, Ψ^2 ? **(b)** O que significa a expressão 'densidade eletrônica'? **(c)** O que é um orbital?



PRÓXIMA AULA

Os números quânticos e os orbitais atômicos vão possibilitar o entendimento da distribuição eletrônica dos elementos.

REFERÊNCIAS

1. MAHAN, B. M.; MYERS, R. J. **Química um curso universitário**. 4ª Edição, São Paulo, Editora Edgard Bücher LTDA, 1995.
2. SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; LANGFORD, C. H. **Inorganic Chemistry**. 2ª edition, Oxford, Oxford University Press. 1994.
3. BARROS, H.L.C. **Química inorgânica, uma introdução**. Belo Horizonte: SEGRAC, 1995.

4. LEE, J. D. **Química Inorgânica não tão concisa**. 5ª Edição, Editora Edgard Blücher, 1997.
5. ATKINS, P.; JONES, L. **Princípios de Química. Questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 3ª Edição, Editora Bookman, 2006.
6. BROWN, T. L.; LEMAY Jr, H. E.; BURSTEN, B. E.; BURDGE, J. R. **Química, A Ciência Central**. 9ª Edição, Editora Pearson Prentice Hall, São Paulo, 2005.