

Introdução às forças atômicas.

Os estudos anteriores ao quântico foram marcantes no sentido de que mostraram que o átomo possui três partículas importantes para o estudo no nível médio:

Elétrons

Prótons

Nêutrons

Embora alguns alunos ainda pensem que estes entes sejam as partículas fundamentais do átomo (*isto não é mais verdade a pelo menos 40 anos*), eles têm sua importância didática para a compreensão do funcionamento básico da estrutura do átomo. Sobre os elétrons é razoável dizer, por hora, que é uma partícula de carga com sinal negativo que circunda o núcleo do átomo em certas regiões definidas. Mais tarde será imperativo que se compreenda a dinâmica no qual se dá a interação núcleo-elétrons. Ainda sobre o elétron sua massa é de $9,11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ (no SI). O próton é carregado positivamente e possui uma massa mais avantajada em relação ao elétron, é de $1,67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$. O nêutron é uma estrutura que não apresenta carga líquida e sua massa é praticamente igual ao de um próton. Tanto o elétron quanto o próton apresentam o mesmo valor de carga elementar, $1,60 \times 10^{-19} \text{ Coulombs}$, embora o elétron seja (-) e o próton seja (+).

Sabe-se, por outros estudos sobre a eletrostática, que cargas de sinais opostos se atraem. É o caso dos elétrons (-) e dos prótons (+) residentes no núcleo do átomo. Os prótons do núcleo atraem os elétrons que os circundam. Pode-se aplicar a Lei de Coulomb para definir a força eletrostática de atração entre

eles: $F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{d^2}$, onde F é a força de atração neste caso; ϵ_0 é permissividade elétrica no vácuo cujo

valor é $8,85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$; d é a distância entre as cargas e q1 e q2 são as cargas envolvidas. No caso de um átomo, podemos definir um d médio, que não representa a precisão da localização das camadas energéticas ocupadas pelos elétrons, mas sim, uma aproximação boa para cálculos estimativos. Suponha

que q1 seja np^+ e q2 sejam ne^- no átomo de Ferro, d seja o raio médio, r, que é em torno de $1,241 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$), é possível estimar a força de atração entre os seus elétrons e seus prótons com esta equação:

$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{np^+ \cdot ne^-}{r^2}$. Na Tabela Periódica encontram-se as informações quanto ao número de elétrons e de

prótons que o átomo de Ferro tem: são 26 prótons. Logo, são 26 elétrons para que haja a neutralidade.

Agora é possível o cálculo...

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{np^+ \cdot ne^-}{r^2} = 9 \times 10^9 \frac{(26 \cdot 1,6 \times 10^{-19})(26 \cdot 1,6 \times 10^{-19})}{(1,241 \times 10^{-10})^2} = \frac{1,73 \times 10^{-35}}{1,54 \times 10^{-20}} = 1,12 \times 10^{-15} \text{ N}$$
 que é a força com que

os elétrons são atraídos pelos prótons do núcleo no caso em que o átomo de Fe está neutro.

No caso do átomo de Fe(III), onde se tem 23 elétrons, a força é dada assim...

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{np^+ \cdot ne^-}{r^2} = 9 \times 10^9 \frac{(26 \cdot 1,6 \times 10^{-19})(23 \cdot 1,6 \times 10^{-19})}{(1,241 \times 10^{-10})^2} = \frac{1,53 \times 10^{-35}}{1,54 \times 10^{-20}} = 0,99 \times 10^{-15} \text{ N}$$
 . Analisando estas

forças, estão em concordância com a mecânica clássica, mas não correspondem aos fatos: ao diminuir a força, os elétrons estão mais dispersivos e o Fe(III) deveria ser maior que o Fe(0), o que não é verdade. O raio iônico de Fe(III) é de $0,65 \text{ \AA}$, notoriamente menor.

Uma outra forma de abordagem é encarar os prótons como sendo cargas estacionárias, tem-se então:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

, mas os elétrons não podem estar parados em torno do núcleo, porque eles cairiam em direção ao núcleo em espiral, ocorrendo um colapso da matéria, deixando de existir. Os elétrons estão em movimento, logo possuem energia cinética, que pode ser dada por

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2$$

, gerando uma força centrípeta de

$$F = \frac{mv^2}{r}$$

, logo...

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2 = mv^2 r$$

onde

$$r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mv^2}.$$

Um subproduto do estudo da trajetória do elétron vem de Niels Böhr que diz que

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

onde n são múltiplos inteiros da função $\frac{h}{2\pi}$ e podem ser encarados como sendo o número quântico da órbita do elétron. Isolando as velocidades, tem-se que:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2 = mv^2 r \Rightarrow v^2 = e^2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0 mr}$$

e ainda que

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow v = n \frac{h}{2\pi mr} \Rightarrow v^2 = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m^2 r^2}.$$

Igualando as duas velocidades...

$$n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} = e^2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0 mr}$$

donde se tira que

$$r = n^2 \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}$$

mas pelos estudos de Böhr só existem órbitas permitidas, então $\frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = r_0$, donde se tira que:

$$r = n^2 r_0$$

que é uma aproximação bem mais razoável.

Agora, os parâmetros das equações acima:

h – constante de Planck, $6,62 \times 10^{-34}$ J.s;

ϵ_0 – permissividade elétrica, $8,85 \times 10^{-12}$ C²/Nm²;

m – massa do elétron, $9,1 \times 10^{-31}$ Kg;

e – carga elementar, $1,60 \times 10^{-19}$ C.