

# O Átomo Quântico

Vimos até aqui que vários cientistas se dedicaram a tentar explicar certas características da natureza da matéria e que estas tentativas tiveram fracassos e êxitos, dependendo do tempo e do contexto histórico em que o modelo é colocado sob investigação. Por exemplo, o modelo de Dalton era muito bom na sua época porque conseguia explicar, de forma teórica, muitas características da matéria verificadas experimentalmente. Mas quando o homem descobriu a eletricidade, o magnetismo e as reações nucleares, o modelo teve de sofrer modificações. Atualmente um dos modelos mais bem aceitos pela comunidade científica é o quântico, cujo nome veio da *teoria dos quanta* proposta por Niels Böhr, que galgou uma repercussão muito positiva em certos aspectos, mas não em todos, passando forçosamente por uma evolução. É este modelo quântico da matéria que vamos tentar explicar aqui.

Em primeiro lugar algumas colocações importantes:

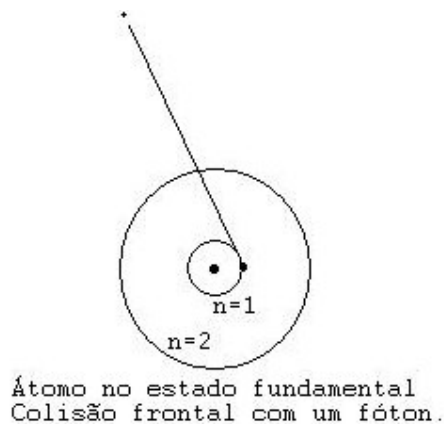
- 1ª - Rutherford previu órbitas circulares para o elétron do Hidrogênio, H. Coisa infeliz! Ao se basear na teoria clássica da atração eletrostática:

$$F = m.a = q.vB$$

(onde  $m$  é a massa do elétron,  $a$  é a aceleração,  $q$  é a carga do elétron,  $v$  é a velocidade do elétron e  $B$  o módulo do vetor campo eletromagnético) o corpo em movimento circular cai até o centro de atração eletromagnética, sendo assim, o elétron cairia em espiral até o núcleo e a matéria entraria em colapso no universo inteiro. Mas isto não ocorre, a prova é que você existe e está lendo este texto, então as coisas ainda estão nos seus devidos lugares e a matéria ainda não colapsou. Logo a idéia da órbita circular teve de ser abandonada em prol de uma outra.

- 2ª - Ainda pensando na mecânica clássica, um elétron orbitando circularmente ao redor de um núcleo positivo, teria a frequência das ondas de emissão de um elétron em uníssono com a frequência de revolução deste mesmo elétron, gerando um espectro contínuo de emissão de ondas. Mas o que se observou na prática não foi um espectro contínuo, mas um espectro descontínuo, chamado de espectro de raios. Então, mais uma adaptação teve de ser feita aqui.

Por meio de cálculos matemáticos intrincados, Niels Böhr viu a possibilidade de um elétron girar em órbitas específicas sem emitir energia radiante, contrariando as previsões da teoria de Rutherford. Aliás, disse também que um elétron só irradia energia quando vai de um destes níveis até outro de maior energia, emitindo posteriormente um *quantum* de energia e, a esta transição, deu-se o nome de 'salto quântico'.



Estas órbitas são quantizadas, ou seja, os elétrons não estão ocupando qualquer nível (*entenda-se que nível de energia é a distância que os elétrons estão do núcleo*), mas têm-se níveis permitidos para os elétrons a girar em torno do núcleo, que pode ser calculado pela seguinte expressão:

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

onde  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica ( $= 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$ );  $h$  é a constante de Planck ( $= 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ );  $m$  é a massa do elétron ( $= 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ );  $e$  é a carga do elétron ( $= 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ );  $n$  é o número quântico principal que trata das camadas eletrônicas, ou seja, trata da distância do elétron ao núcleo. Se tratarmos de apenas um elétron, podemos fazer uma drástica redução nesta equação (*lembrando que o texto é para alunos do ensino médio*) porque tirando o valor de  $n$ , todos os outros são constantes, ficando...

$$r = 5,296 \cdot 10^{-11} \cdot n^2$$

Falou-se que as energias são quantizadas, o que se permite dizer que a energia cinética de um elétron em órbita é dada pela expressão...

$$E_{cin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m e^4}{8 h^2 n^2}$$

e a energia potencial deste elétron é dada por:

$$E_{pot} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m e^4}{8 h^2 n^2}$$

Sabe-se que a energia total de um sistema é dado por...

$$E = E_{cin} + E_{pot} = -\frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m e^4}{8 h^2 n^2} = -2,18 \cdot 10^{-18} \frac{1}{n^2}$$

Os resultados que estas equações teóricas dão, são muito próximos aos resultados experimentais a que os cientistas que estudam partículas de altas energias chegaram. Faz-se um pequeno cálculo agora para demonstrar uma idéia importante. Toma-se o primeiro nível de energia,  $n=1$ , qual o seu raio e qual a sua energia? Depois para o nível 2, depois para o nível 3, etc e coloca-se num gráfico para analisar.

Cálculo do raio para  $n=1$   $\rightarrow r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \cdot (1)^2 \rightarrow 5,29 \cdot 10^{-11}$  metros ou 0,529 angstroms

Cálculo da E para  $n=1$   $\rightarrow E_1 = -2,18 \cdot 10^{-18} \cdot (1)^{-2} \rightarrow -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

Cálculo do raio para  $n=2$   $\rightarrow r_2 = 5,29 \cdot 10^{-11} \cdot (2)^2 \rightarrow 2,11 \cdot 10^{-10}$  metros ou 2,116 angstroms

Cálculo da E para  $n=2$   $\rightarrow E_2 = -2,18 \cdot 10^{-18} \cdot (2)^{-2} \rightarrow -5,45 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

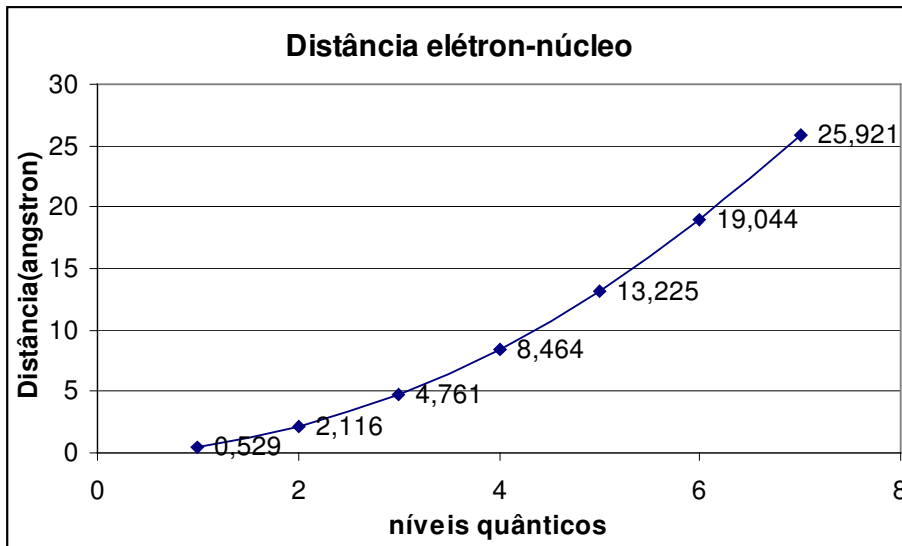
Cálculo do raio para  $n=3$   $\rightarrow r_3 = 5,29 \cdot 10^{-11} \cdot (3)^2 \rightarrow 4,761 \cdot 10^{-10}$  metros ou 4,761 angstroms

Cálculo da E para  $n=3$   $\rightarrow E_3 = -2,18 \cdot 10^{-18} \cdot (3)^{-2} \rightarrow -2,42 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

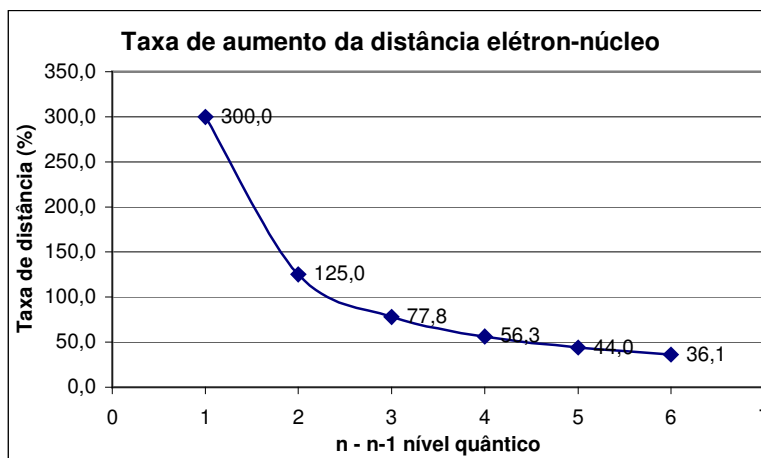
Cálculo do raio para  $n=4$   $\rightarrow r_4 = 5,29 \cdot 10^{-11} \cdot (4)^2 \rightarrow 8,464 \cdot 10^{-10}$  metros ou 8,464 angstroms

Cálculo da E para  $n=4$   $\rightarrow E_4 = -2,18 \cdot 10^{-18} \cdot (4)^{-2} \rightarrow -1,36 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

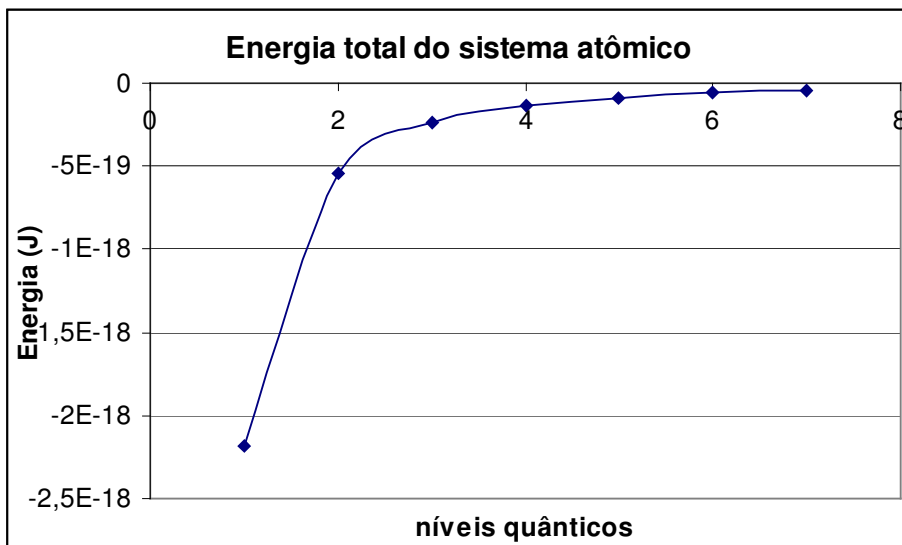
Bem, você já deve ter entendido como é feito o cálculo, vamos direto ao gráfico agora, lembrando que se quer explicar uma idéia com isto...



Observe que o raio das órbitas aumenta, mas não é uma reta, o que demonstra que a taxa de aumento vai diminuindo a medida em que o elétron se afasta do núcleo, ou seja, as órbitas são cada vez mais próximas umas às outras. Observe como a taxa decai no gráfico abaixo:



Analise agora este gráfico com a energia total do sistema...



Percebe-se que para  $n = 1$  o valor negativo é máximo, e a medida em que se avança no número quântico, há uma diminuição no valor da energia total, mostrando que a energia do elétron aumenta. Então, à medida que o elétron se afasta do núcleo sua energia potencial aumenta (*e sua energia cinética diminui*).

Niels Böhr afirmou, em um de seus postulados, que um quantum de energia pode ser emitido se um elétron transitar de um nível mais energético para outro menos energético, no retorno do 1º salto quântico. Mas quando se procura na literatura especializada como esta energia pode ser calculada, ela é fornecida na forma de frequência (dada em Hertz, Hz). Bem, se considerarmos que um elétron é uma partícula isto não faz nenhum sentido, mas um cientista chamado De Broglie mostrou com um conjunto de cálculos que veio da Teoria da Relatividade de Einstein, que um elétron, por ser uma partícula muito pequena, tem comportamento ondulatório. A sua equação, famosa na mecânica quântica, é:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda da partícula (**no caso o elétron**),  $h$  é a já conhecida constante de Planck ( $6,626 \cdot 10^{-34}$  Js),  $m$  é a massa da partícula e  $v$  é a velocidade da partícula (*geralmente é a velocidade da luz, cerca de  $3 \cdot 10^8$  m/s*). Deve-se lembrar que temos uma outra equação útil nestes casos, que relaciona o comprimento de onda a frequência da onda:  $v = \lambda \cdot f$ , onde  $f$  é a frequência da onda, e há ainda uma outra relação útil:  $\Delta E = h \cdot f$ , que discute a transição de energia na hora da emissão de quanta de energia pelo elétron, que nos leva a esta equação:

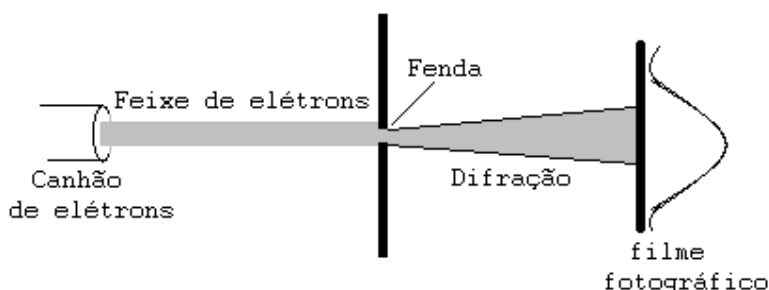
$$f = \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{me^4}{8h^2} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

Mais uma vez tem-se uma coleção de constantes, então a equação pode ser reduzida para:

$$f = 3,29 \cdot 10^{15} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

Embora estas medidas possam ser encontradas fora da teoria de Böhr com dados experimentais, se compararmos com os resultados dados pelas equações, tem-se valores muito próximos dos experimentais, coisa que reforça a teoria de Niels Böhr. Outro ponto importante: parece contraditório escrever e falar em uma partícula tendo uma frequência e uma onda tendo massa. Seria, se estivéssemos lidando com a física clássica, mas na mecânica quântica, teve-se uma comprovação deste fato logo em seguida a sua publicação (*que causou um alvoroço na época*) pelos estudos da refração de raios X em cristais, que mostraram ser fortemente refletidos quando atingem uma estrutura cristalina em um certo ângulo, reforçando a onda neste ângulo particular. O ponto importante desta constatação é que a existência dessas reflexões fortes é um indício da natureza ondulatória dos raios X, coisa que na época nem se cogitava antes de De Broglie.

A consequência da idéia de De Broglie sobre o entendimento da matéria pode ser resumida num experimento simples, mostrado abaixo:



O experimento mostra que uma boa parte dos elétrons sofrem difração, ora, este fenômeno é característico para ondas, mas o importante neste contexto é o que Heisenberg viu nele: uma partícula teria uma localização exata no espaço e não sofreria difração, e isto é verdade para a maioria das partículas no macro-mundo (*mundo das grandes massas, mundo dos grandes volumes, etc...*). Mas seria impossível pensar de forma clássica num mundo muito pequeno (*mundo dos elétrons, prótons, léptons, quarks, etc...*) onde existem limitações fundamentais na precisão com a qual a posição e a velocidade de uma partícula podem ser descritas; a alguns aspectos do comportamento de uma partícula que só podem ser dados e entendidos em termos de probabilidade (*possibilidades*). Então não temos certeza, com razoável precisão, sobre as informações básicas de um elétron, por exemplo, porque para poder vê-lo é necessário que luz o atinja, um detector interprete a reflexão desta luz sobre o elétron e informe a localização dele. Mas isto não é possível pelo fato de que a luz é feita de fótons - e os fótons interagem com os elétrons - acabando com qualquer certeza sobre o movimento dele e a sua localização. Estudando o assunto, Heisenberg desenvolveu a seguinte equação:

$$\Delta p_y a = h$$

Singela, simples de esse olhar, mas de grande profundidade em seu princípio, diz que a largura da fenda  $a$  representa a incerteza na posição de um elétron quando ele passa por ela, porque não se sabe por qual parte da fenda o elétron passou. Brilhante não? Este princípio ficou conhecido como “*Princípio da Incerteza de Heisenberg*”, onde não sabemos, ao mesmo tempo, a velocidade e a posição de um elétron.

Ufa!!! Mas a coisa não pára por aí. Como se viu, a natureza dual onda-partícula dos elétrons e de outras partículas fundamentais requer a generalização da linguagem usada para se descrever a posição e o momento da partícula. Uma boa generalização passa pelo entendimento de que se deve encontrar nas equações da ondulatória, um bom norte para iniciar este estudo. Pode-se, então, tratar o movimento de uma partícula dual da seguinte forma:

$$y = f(x, y, z, t)$$

onde  $y$  é a trajetória da partícula;  $x$ ,  $y$  e  $z$  são os eixos de direção por onde esta partícula passa e  $t$  é o tempo que ela leva nesta trajetória pelos eixos de direção. Normalmente o símbolo usado para descrever uma função de onda é o psi, ( $\psi$ ), então a função de onda que descreve o comportamento de uma partícula dual pode ser expresso, em termos gerais assim...

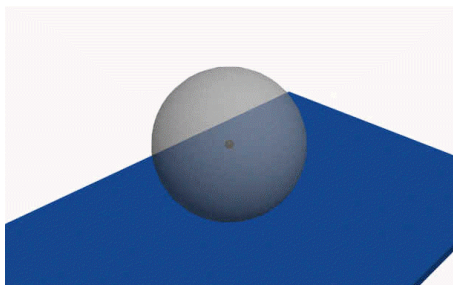
$$\psi = (x, y, z, t)$$

Mas pode-se perguntar: qual é o significado de  $\psi$ ? É difícil responder a esta pergunta sem que se tenha de abrir mão de complicados processos matemáticos, mas em princípio, representa a solução de uma equação desenvolvida por Erwin Schrödinger em 1925:

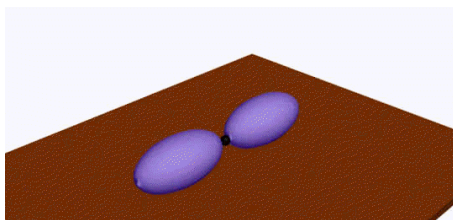
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_p \psi = E \psi$$

Se elevarmos ao quadrado esta solução,  $\psi^2$ , temos uma região no espaço onde se tem uma grande chance de se encontrar um elétron, logo,  $\psi^2$ , representa um *orbital*, que substitui o termo órbita do modelo de Niels Böhr, por causa da inadequação, por princípio, gerada pela Incerteza de Heisenberg. É interessante pensar que a equação está ligada ao número quântico principal,  $n$ . Antes desta equação não havia como prever os níveis de energia a partir de uma teoria fundamental, exceto pela limitadíssima teoria de Böhr, que só tem sucesso para o átomo de Hidrogênio, H.

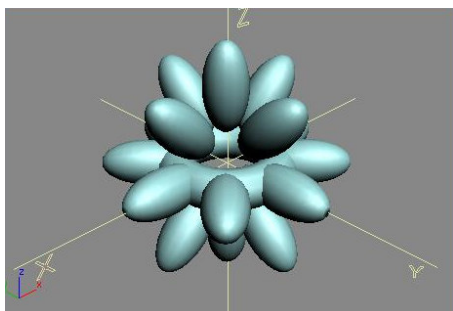
Outro ponto muito interessante sobre esta equação, é que ela nos dá uma região tridimensional para o orbital, gerando algumas figuras que faz com que se entenda melhor esta distribuição de probabilidade. Eis algumas...



Uma região esférica, este orbital foi batizado de sharp, s.

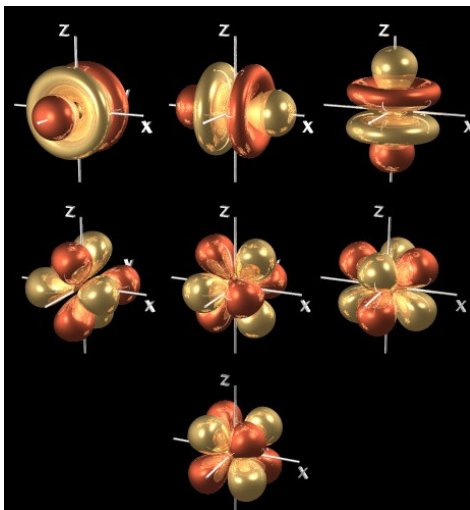


Uma região com dois lóbulos que foi batizada de orbital principal, p.



Uma região muito complexa que foi chamada de orbital diffuse, d.

Há ainda uma outra região, muito citada nos estudos do ensino médio, que é o orbital do tipo f, de fundamental.



retirado de <http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/AOs/4f/index.html>

Os termos usados vêm da espectroscopia.

Cada um destes orbitais tem energia suficiente para conter uma certa quantidade específica de elétrons, como exemplo, podemos citar os mais conhecidos na seguinte tabela:

ORBITAL DO TIPO...	NÚMERO MÁXIMO DE ELÉTRONS
s	2
p	6
d	10
f	14

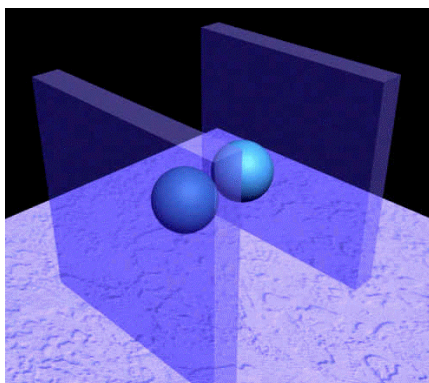
Cada um dos orbitais recebe um número quântico que o define, chamado de Número Quântico Angular Orbital, notado por  $\ell$ . Os  $\ell$  para os orbitais citados acima são:

ORBITAL DO TIPO...	$\ell$
s	0
p	1
d	2
f	3

Quando se colocam os elétrons sob a ação de um campo magnético, os cientistas notaram que houve uma diferenciação de energia. Aparelhos mais sensíveis a estas pequenas variações de energia foram desenvolvidos, confirmando esta hipótese. Então, os elétrons nos orbitais podem sofrer modificações em suas energias de forma quantizada, gerando um terceiro número quântico chamado Número Quântico Magnético,  $m\ell$ . Cada orbital tem um número de orientações para  $m\ell$ , a saber: s, tem uma região; p, tem três regiões; d, tem cinco regiões e f tem sete regiões, o que nos leva a calcular que em cada região tem-se a possibilidade de encontrar apenas dois elétrons no máximo. Veja:

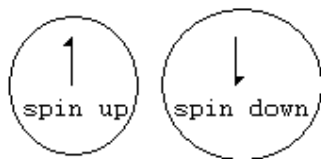
Orbital	Orientações possíveis para o vetor $m\ell$
s	0
p	+1 0 -1
d	+2 +1 0 -1 -2
f	+3 +2 +1 0 -1 -2 -3

O que se tem no orbital são os elétrons, que são partículas duais com carga negativa. Ora, um dos princípios básicos da eletricidade diz que duas cargas negativas sofrem repulsão. Como se explica que duas cargas negativas podem coexistir numa região tão pequena do espaço sem sofrer forte repulsão? A explicação que a física clássica dá a este impasse é que os elétrons não estão parados, mas giram sob seu próprio eixo de forma oposta um ao outro, gerando campos magnéticos opostos que sustentam a sua permanência no orbital sem a repulsão (*não se tem, ainda, uma interpretação quântica para o fato*).



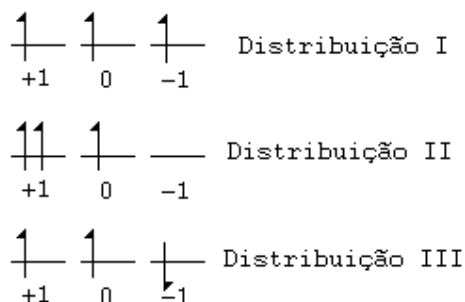
Este movimento é quantizado e é chamado de Número Quântico do Momento Angular de Spin, notado por  $s$ . O interessante sobre este número quântico é que ele pode assumir um de dois valores possíveis:

$+1/2$ , chamado de spin up e  $-1/2$ , chamado de spin down. Muitas vezes representamos estes estados de spin por setas que representam o giro do elétron, desta forma:



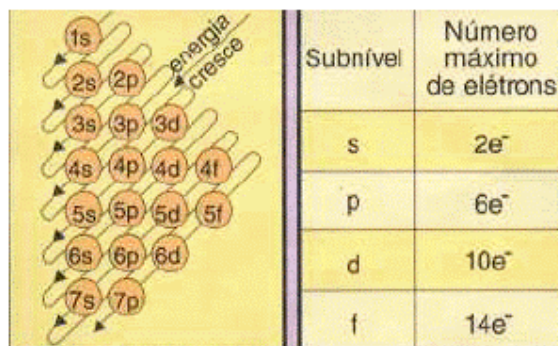
Uma das facetas mais bonitas da química é que estuda-la nos dá a chance de entender o mundo que nos rodeia em detalhes fascinantes, porque se preocupa em compreender uma partícula que está presente em tudo o que forma o universo – o átomo. Se desejar compreender como os elementos se ligam um ao outro, por que alguns elementos reagem mais e outros menos, como podemos sintetizar novas moléculas, novos combustíveis, gerar mais energia, combater a poluição e o desperdício de recursos do planeta, deve-se estudar química e, um dos primeiros passos para galgar mais conhecimentos sobre ela é o que vem agora – o estudo do arranjo dos elétrons nos níveis e orbitais. Graças a dois cientistas, que já se vai escrever sobre eles, este estudo ficou bem inteligível e de fácil compreensão, pois se trata de um princípio e de um diagrama bem simples de ser explicados.

Começasse por estudar como os elétrons podem ser dispostos nas regiões dos orbitais, levando-se em conta as suas cargas eletrônicas negativas (*em última instância seus spins up e spins down*) de forma a causar as menores repulsões possíveis entre os elétrons. Veja este exemplo de distribuição de três elétrons num orbital do tipo *p*:



Ao analisarmos estas distribuições podemos perceber claramente que a segunda distribuição coloca dois elétrons numa mesma orientação de spin, gerando uma forte repulsão entre eles, culminando num aumento drástico na energia total do sistema e o átomo fica instável. Podemos acomodar melhor o elétron nas distribuições I e III. Mas, a distribuição III tem uma energia um pouco maior do que a I, então a distribuição de mais baixa energia é a I, que se chama *estado fundamental*. Do jeito que é interpretado, à primeira vista, poder-se-ia esperar que no estado fundamental de um átomo com mais de um elétron, todos os elétrons estivessem neste estado, gerando propriedades físicas e químicas de caráter gradual, à medida que o número de elétrons nos átomos fosse aumentando. Mas as experiências mostram que isto não ocorre, denotando que nem todos os elétrons estão distribuídos de forma a gerar o estado fundamental. Ainda em 1925, um físico suíço, chamado Wolfgang Pauli, deu a solução deste quebra-cabeça no que foi chamado de “*Princípio de Exclusão de Pauli*”, onde ele afirma que dois elétrons não podem ter os quatro números quânticos iguais. Os estados são diferenciados pelas distâncias do elétron ao núcleo (*n*), forma de distribuição espacial ao redor do núcleo (*l*), diferenças energéticas quanto a interferência de campos eletromagnéticos (*m<sub>l</sub>*) e giro do elétron (*s*), que são conhecidos como os *Quatro Números Quânticos*.

Outro cientista, que não podemos deixar de mencionar, foi o saudoso *Linus Pauling*, que inventou um diagrama que facilita distribuir os elétrons pelos vários números quânticos possíveis. Seu diagrama é esquemático e fácil de usar, tanto na forma diagramada quanto na estendida...



Forma diagramada retirada de <http://www.mundodoquimico.hpg.ig.com.br/modelo%20atual.htm>

Ou:



em sua forma estendida.

Outra questão a se considerar no momento em que distribuímos estes elétrons, é um conjunto de regras que são as seguintes:

1ª Regra – Devemos distribuir os elétrons de forma a termos semipreenchimentos das orientações  $m_l$  com spins up.

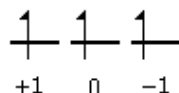
2ª Regra – Depois de semipreencher as orientações, se ainda tivermos elétrons para popular, estes serão colocados com spin down.

A este conjunto de regras dá-se o nome de **Regras de Hund**.

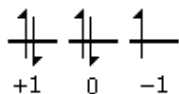
Veja um exemplo de distribuição:

(Exemplo 1) Coloque, corretamente cinco elétrons num orbital do tipo  $p$ .

R: Colocar corretamente significa respeitar o Princípio de Exclusão de Pauli e as Regras de Hund, então primeiramente colocamos os elétrons com spin up...



Ainda estão faltando dois elétrons para completar a configuração pedida, agora colocamos os spins downs...



Esta é a resposta correta respeitando os princípios e as regras citadas.

(Exemplo 2) Distribua os elétrons para o átomo de Oxigênio, usando o diagrama de Linus Pauling.

R: Procurando na tabela pelo Oxigênio, encontra-se um elemento que tem oito prótons. Logo, no estado fundamental ele tem oito elétrons, logo usando o diagrama temos:  $1s^2, 2s^2, 2p^4$ . **Na última camada, não colocamos os seis elétrons porque não é necessário, lembrando que não se pode passar da quantidade máxima de elétrons, mas não há impedimento que se coloque menos elétrons do que o máximo permitido.**