

O modelo atômico de Schrödinger

Lavoisier (1783): a água é composta por duas substâncias simples, o oxigênio e o hidrogênio (produtor de água)

Dalton (1808): Hipótese atômica moderna, 20 elementos.
(hoje conhecem-se 118 elementos)

Átomo: elétrons (Thomson, 1897), prótons (Rutherford, 1919)
neutrões (Chadwick, 1932).

número de massa

A

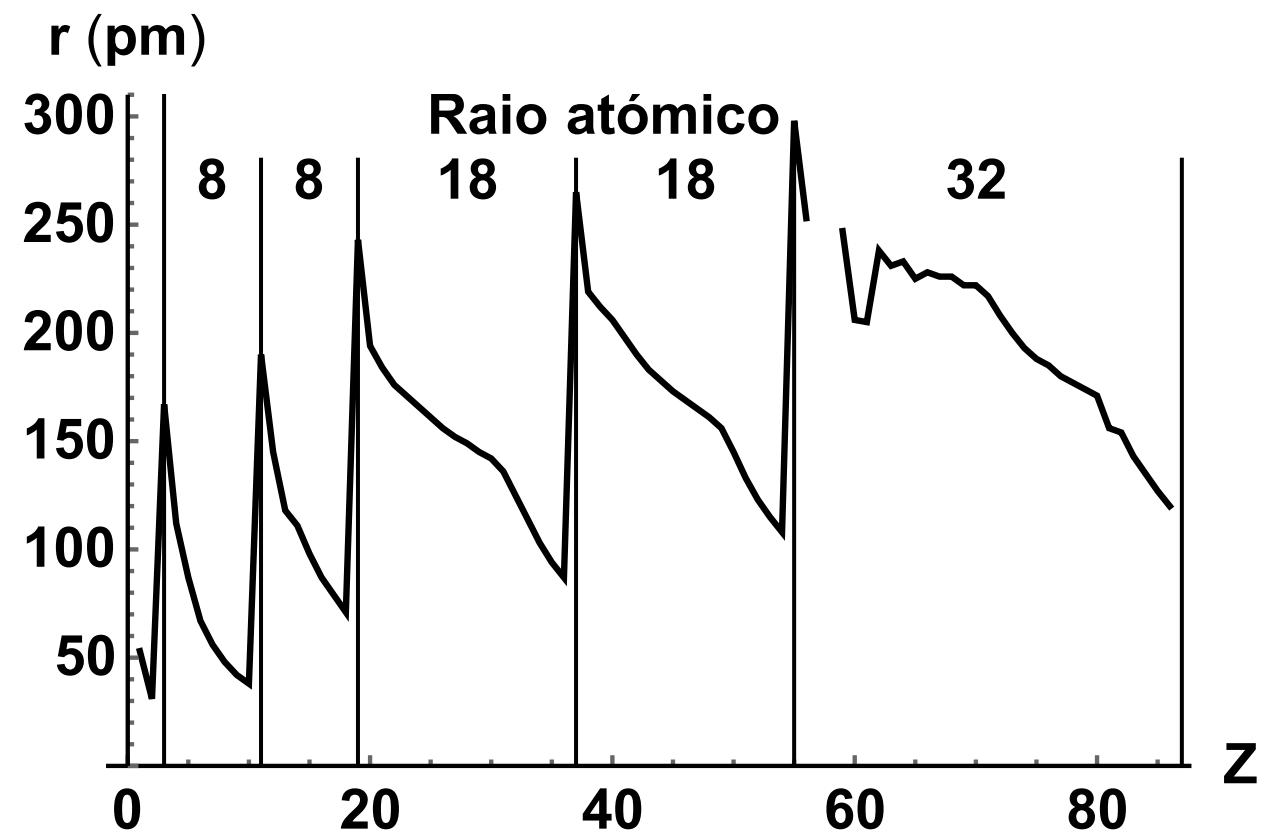
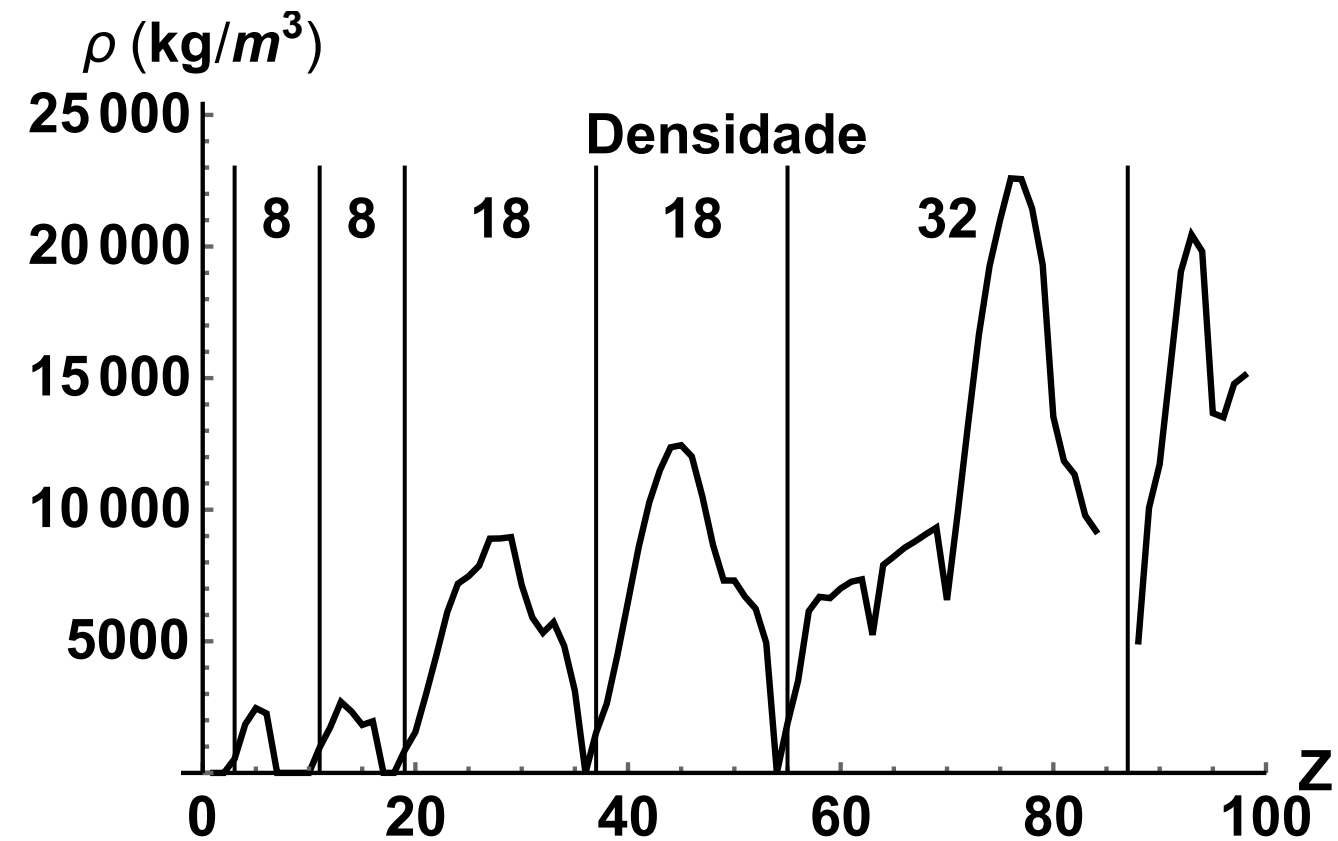
X

$A = Z + N$ (n.º de neutrões); ${}^{12}_6\text{C}$

número atômico

Z

Mendeleiev (1889): Os elementos quando ordenados de acordo com o seu número atômico apresentam periodicidades em algumas das suas propriedades.



| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
|---|-------------------|-------------------|------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 1 | 1 H 1.0 | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He 4.0 |
| 2 | 3 Li 6.9 | 4 Be 9.0 | | | | | | | | | | | 5 B 10.8 | 6 C 12.0 | 7 N 14.0 | 8 O 16.0 | 9 F 19.0 | 10 Ne 20.2 |
| 3 | 11 Na 23.0 | 12 Mg 24.3 | | | | | | | | | | | 13 Al 27.0 | 14 Si 28.1 | 15 P 31.0 | 16 S 32.1 | 17 Cl 35.5 | 18 Ar 39.9 |
| 4 | 19 K 39.1 | 20 Ca 40.1 | 21 Sc 45.0 | 22 Ti 47.9 | 23 V 50.9 | 24 Cr 52.0 | 25 Mn 54.9 | 26 Fe 55.8 | 27 Co 58.9 | 28 Ni 58.7 | 29 Cu 63.5 | 30 Zn 65.4 | 31 Ga 69.7 | 32 Ge 72.6 | 33 As 74.9 | 34 Se 79.0 | 35 Br 79.9 | 36 Kr 83.8 |
| 5 | 37 Rb 85.5 | 38 Sr 87.6 | 39 Y 88.9 | 40 Zr 91.2 | 41 Nb 92.9 | 42 Mo 96.0 | 43 Tc 97.0 | 44 Ru 101.1 | 45 Rh 102.9 | 46 Pd 106.4 | 47 Ag 107.9 | 48 Cd 112.4 | 49 In 114.8 | 50 Sn 118.7 | 51 Sb 121.8 | 52 Te 127.6 | 53 I 126.9 | 54 Xe 131.3 |
| 6 | 55 Cs 132.9 | 56 Ba 137.3 | | 72 Hf 178.5 | 73 Ta 180.9 | 74 W 183.8 | 75 Re 186.2 | 76 Os 190.2 | 77 Ir 192.2 | 78 Pt 195.1 | 79 Au 197.0 | 80 Hg 200.6 | 81 Tl 204.4 | 82 Pb 207.2 | 83 Bi 209.0 | 84 Po 209.0 | 85 At 210.0 | 86 Rn 222.0 |
| 7 | 87 Fr 223.0 | 88 Ra 226.0 | | 104 Rf 267.0 | 105 Db 270.0 | 106 Sg 269.0 | 107 Bh 270.0 | 108 Hs 270.0 | 109 Mt 278.0 | 110 Ds 281.0 | 111 Rg 281.0 | 112 Cn 285.0 | 113 Nh 286.0 | 114 Fl 289.0 | 115 Mc 289.0 | 116 Lv 293.0 | 117 Ts 293.0 | 118 Og 294.0 |

gás
 líquido
 sólido
 desconhecido

| | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 57 La 138.9 | 58 Ce 140.1 | 59 Pr 140.9 | 60 Nd 144.2 | 61 Pm 145.0 | 62 Sm 150.4 | 63 Eu 152.0 | 64 Gd 157.3 | 65 Tb 158.9 | 66 Dy 162.5 | 67 Ho 164.9 | 68 Er 167.3 | 69 Tm 168.9 | 70 Yb 173.0 | 71 Lu 175.0 |
| 89 Ac 227.0 | 90 Th 232.0 | 91 Pa 231.0 | 92 U 238.0 | 93 Np 237.0 | 94 Pu 244.0 | 95 Am 243.0 | 96 Cm 247.0 | 97 Bk 247.0 | 98 Cf 251.0 | 99 Es 252.0 | 100 Fm 257.0 | 101 Md 258.0 | 102 No 259.0 | 103 Lr 262.0 |

O modelo atômico de Schrödinger (hidrogênio)

Schrödinger: As energias de ligação dos elétrons atômicos estão quantizadas e o estado mais estável de cada elemento é descrito por quatro números quânticos (n, l, m, s)

1) n - número quântico principal, $n=1,2,\dots$. Determina a energia dos estados quânticos do átomo de hidrogênio

$$E_n = - \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (\text{energia de Bohr})$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ ou K, L, M, N, \dots

1) modelo atômico de Schrödinger (hidrogênio)

2) $l=0, 1, \dots, n-1$, número quântico azimutal ou secundário

(Determina a simetria dos orbitais atômicos, $l=0$ circular)

$$L = |\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \text{ orbitais } s, p, d, f$$

Se $m=0$, $l=0$,

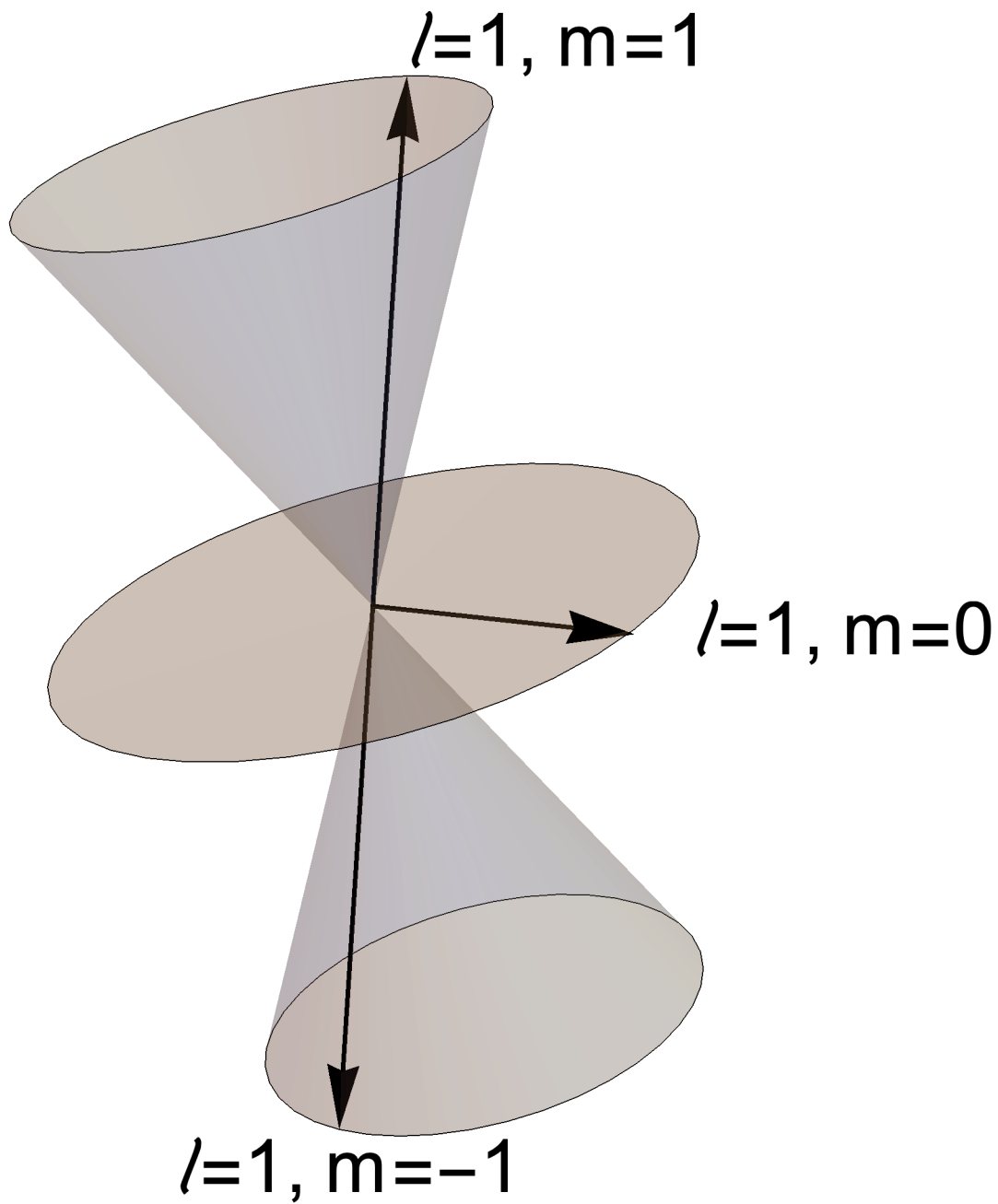
Se $m=1$, $l=0, \text{ ou } 1, \dots$

$l=0$ $l=1$ $l=2, \dots$

3) Número quântico magnético $m = -l, \dots, 0, \dots, l$

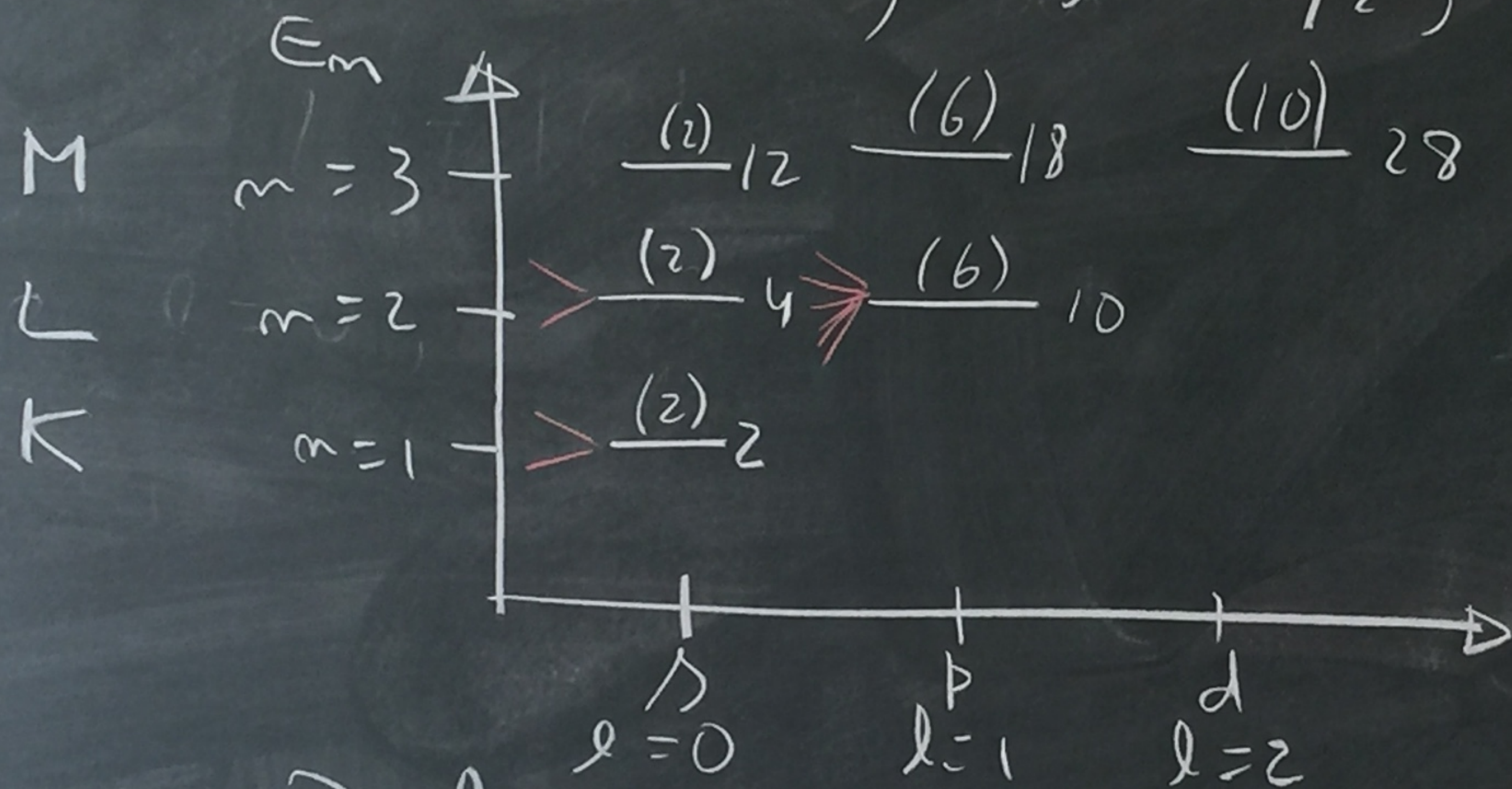
$$L_z = m \hbar$$

($2l+1$ valores)



O modelo atômico de Schrödinger (hidrogénio)

4) Número quântico de spin, associados ao momento dipolar magnético do electrão, $s = -1/2, 1/2$. $S = \hbar \sqrt{|s|(s+1)} = \hbar \sqrt{3/4}$



Princípio de Exclusão de Pauli: Num átomo não existem electrões com o mesmo conjunto de números quânticos

O modelo atômico de Schrödinger (hidrogênio)

Inversão na ocupação dos níveis de energia:

| | | | | | | | | |
|----------|-----------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Potássio | 19 K | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^6$ | $3s^2$ | $3p^6$ | $4s^1$ | |
| Calcio | 20 Ca | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^6$ | $3s^2$ | $3p^6$ | $4s^2$ | |
| Escândio | 21 Sc | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^6$ | $3s^2$ | $3p^6$ | $3d^1$ | $4s^2$ |
| Titânio | 22 Ti | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^6$ | $3s^2$ | $3p^6$ | $3d^2$ | $4s^2$ |

A estrutura atômica de Schrödinger baseia-se num modelo atômico em que os elétrons não têm uma trajetória bem definida e a sua localização é determinada por uma densidade de probabilidade.

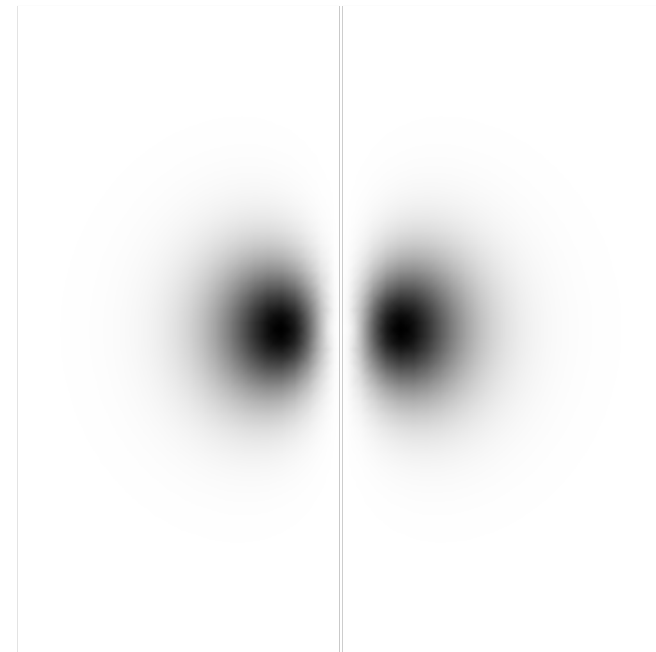
1s



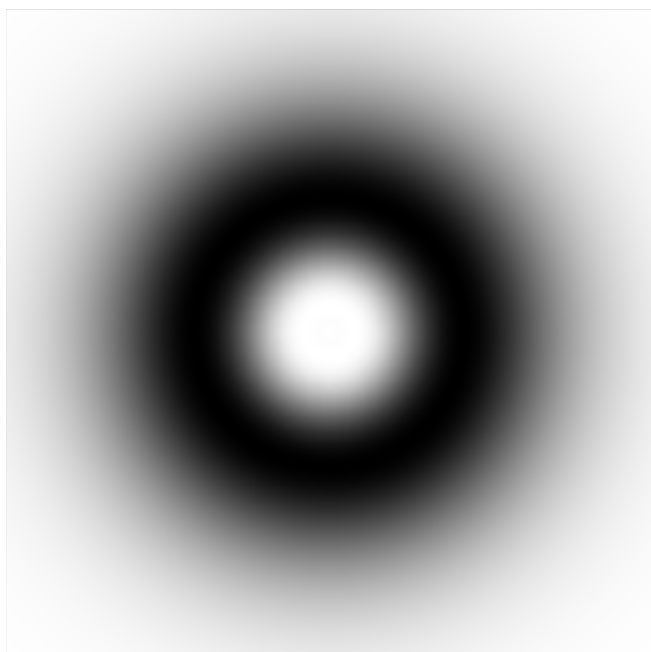
2s



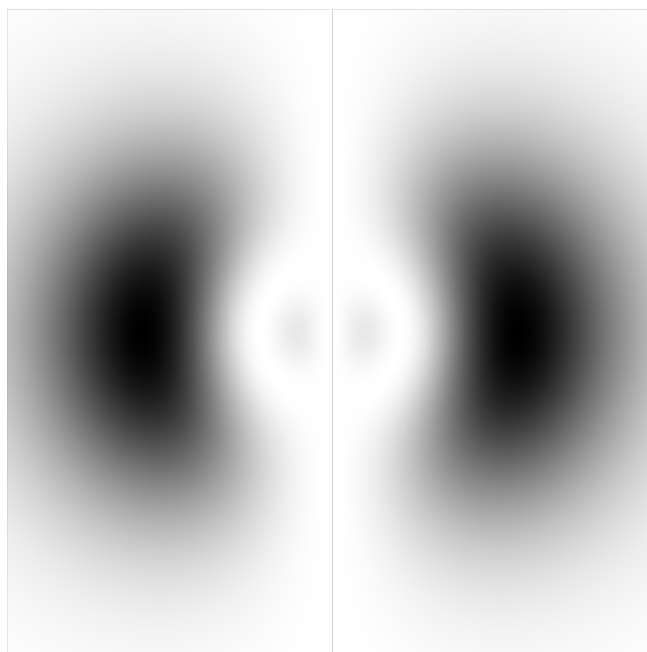
2p (m=1)



3s



3p (m=1)



3d (m=2)

