



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
CENTRO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS E DA NATUREZA
INSTITUTO DE QUÍMICA

JAQUELINE DA SILVA OLIVEIRA

**Proposta de um novo programa de Atomística
para o ensino médio, com a inserção de conceitos
de Química Quântica**

Rio de Janeiro

2016

JAQUELINE DA SILVA OLIVEIRA

**Proposta de um novo programa de Atomística
para o ensino médio, com a inserção de conceitos
de Química Quântica**

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Química do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito para a obtenção do grau de Licenciado em Química.

Orientador: Prof. Mauro Carvalho.

Rio de Janeiro

2016

JAQUELINE DA SILVA OLIVEIRA

**Proposta de um novo programa de Atomística
para o ensino médio, com a inserção de conceitos
de Química Quântica**

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Química do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito para a obtenção do grau de Licenciado em Química.

Orientador: Prof. Mauro Carvalho.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Mauro Carvalho
IQ-UFRJ

Prof. Sérgio de Paula Machado
IQ-UFRJ

Prof. Milton Roedel Salles
IQ-UFRJ

AGRADECIMENTO

Agradeço à minha mãe, Josefa Albina, que esteve comigo, incentivando-me durante todos os momentos difíceis da graduação.

Agradeço ao meu namorado, Renato Silva, pela paciência e incentivo durante o período final da graduação.

“A ciência poderá ter encontrado a cura para a maioria dos males, mas não achou ainda remédio para o pior de todos: a apatia dos seres humanos”.

Helen Keller

RESUMO

Este trabalho apresenta uma proposta de programa de atomística para o ensino médio com inserção de conceitos da Química quântica. Baseadas nessa alternativa de programa são descritos os modelos atômicos, com seus conceitos, seus autores, momento histórico, assim como as aplicações tecnológicas do modelo quântico. Essa proposta é uma alternativa para o atual programa de atomística que se mostra incompleto, fragmentado, descontextualizado e sem historicidade. Essa proposta leva em consideração a necessidade de uma aprendizagem efetiva e uma correta noção da realidade dos alunos para que com elas, os alunos se tornem cidadãos críticos na sociedade.

Palavras chaves: Programa de atomística, química quântica e modelos atômicos

SUMÁRIO

Conteúdo

1- Introdução.....	8
2- Objetivo.....	11
3- Objetivos específicos.....	11
4- Proposta de programa de atomística para o ensino médio.....	12
5- Abordagem conceitual dos tópicos formulados na proposta.....	20
5.1- O momento histórico do período do nascimento do conceito da quantização para os fenômenos microscópicos	20
5.2- Sequência de fatos científicos que levaram a elaboração dos diferentes modelos atômicos.....	22
5.2.1- Período pré-Quântico	22
5.2.2- Modelo de Leucipo	23
5.2.3- Modelo de Dalton.....	24
5.2.4- Modelo de Thomson	27
5.3- Química do fim do século XIX.....	37
5.3.1- Modelo de Rutherford.....	37
5.4- Consequências e técnicas das novas reflexões acerca dos experimentos realizados no fim do século XIX.....	43
5.5- Bases nas quais se fundamenta a Química Quântica e suas consequências em termos da elaboração do modelo atômico moderno.	58
5.5.1- Nascimento da Química Quântica	58
5.5.2 - Átomo de Schrödinger	66
5.6 - Os resultados relevantes da mecânica quântica para a obtenção e descrição das propriedades atômicas e moleculares	92
6- Alguns desdobramentos tecnológicos baseados nos conceitos da Química Quântica.	131
7- Conclusão	134
8- Bibliografia.....	136

1- Introdução

O presente trabalho é uma proposta inicial e abrangente de todo o conteúdo de atomística que seria passível de inclusão num currículo completo e avançado para o ensino médio. Ele consiste na descrição geral dos modelos atômicos propostos, desde a noção do átomo indivisível até o conceito de quantização, explicando a sequência de fatos científicos e descrição histórica que levaram à elaboração desses modelos e finalmente, da mecânica quântica. Além da descrição geral dos modelos, o trabalho em questão apresentará os tópicos importantes dos modelos atômicos a serem trabalhados na grade curricular dos alunos do ensino médio.

A apresentação dos conteúdos dessa proposta abrangente poderá substanciar a discussão de que partes poderiam ser incluídas numa proposta mais adequada e realística, servindo de base de consulta para os educadores e professores interessados no tema. O programa oficial sobre atomística do ensino médio, assim como os demais programas de Química, preconiza que os conteúdos sejam trabalhados de forma clara e contextualizada para que os alunos consigam entender e relacionar os conteúdos, tanto com sua vivência particular quanto com a vivência social num todo, como assim descrito no PCN (Plano curricular nacional).

Em relação ao conteúdo de atomística, essas prerrogativas já impõem dificuldades em virtude da natureza dos fenômenos do mundo microscópico serem bastante diferentes da vivência das bases clássicas da Física com as quais os alunos se deparam durante toda a sua formação.

Além disso, o programa de atomística para o ensino médio visa abordar as primeiras noções e reflexões acerca do mundo macroscópico e microscópico que permeou o homem, incluindo as limitações histórico-sociais. Visa abordar também a curiosidade que as primeiras reflexões geraram, as

investigações e primeiras hipóteses que culminaram nos modelos atômicos mais simples, explorando esses modelos e sua importância para a ciência.

Abordar as experiências, as inconsistências, a contínua busca por respostas, todo o processo de construção do modelo quântico, não apenas a apresentação dos seus conceitos e definições desprovidas da devida contextualização, é o que realmente contribui para o efetivo conhecimento dos alunos.

Diferentemente da proposta de ensino descrita no PCN, os livros didáticos não contextualizam os fatos, no intuito de apresentar o mais simplificada possível o conteúdo e acabam se afastando do que verdadeiramente é a atomística. Os modelos mais simples são apresentados de maneira superficial e sem conexão histórica, apresentam a descoberta dos elétrons, por exemplo, como se fosse um fato isolado, que surgiu do nada, atrelado a nenhum contexto.

Além de várias simplificações conceituais erradas, que geram dúvidas e confusões aos alunos, os experimentos realizados são mal descritos ou apenas citados. A Química Quântica, citada nos livros, aparece limitada e pouco trabalhada, seus conceitos principais não são explicados, induzindo a simples memorização.

Pelo que foi exposto anteriormente, nota-se que o programa atual do ensino médio se mostra deficiente em função do seu afastamento de base científica, acarretando uma omissão dos conceitos corretos obtidos pela Química Quântica.

Essas deficiências foram sempre atreladas a uma pressuposta impossibilidade de transmissão dos conceitos quanto-mecânicos pela falta de base matemática dos alunos do ensino médio. Aqui também é possível atrelar essa realidade a outros fatores, como a própria formação dos professores e do arcabouço estabelecido que vigora há muito no cotidiano do ensino médio e dos respectivos livros textos adotados.

O fato mais desconfortável é que os conceitos utilizados são muito afastados e até errôneos fazendo com que haja uma grave distorção da verdadeira base da atomística e do que é veiculado em sala de aula.

É fundamental que o conteúdo, corretamente atrelado à ciência, seja adequadamente tratado e que seja encontrada uma proposta de mediação didática efetiva para o nível do ensino médio, para que os alunos tenham uma noção correta da realidade. O afastamento da realidade causa prejuízo na formação geral e específica de nossa sociedade.

Levando em consideração os pontos citados anteriormente, este trabalho pretende auxiliar os futuros professores a ensinarem de maneira coerente, aos alunos, o processo de construção dos modelos atômicos e seus desdobramentos científicos.

Uma continuação desse trabalho diria respeito à extração em si dos conceitos que realmente deverão contemplar o programa de atomística do ensino médio.

O trabalho será dedicado fundamentalmente ao desenvolvimento de seis blocos principais. O primeiro tópico principal tratará da proposta de programa de atomística para o ensino médio, com os tópicos básicos que devem compor a grade curricular mínima de estrutura atômica do ensino médio.

O segundo tópico principal tratará do momento histórico do período do nascimento do conceito da quantização para os fenômenos microscópicos. O terceiro tópico principal tratará da Química pré-quântica, com a descrição dos modelos atomistas mais simples, seus desdobramentos, contribuições e deficiências, além de tratar também das consequências e técnicas das novas reflexões acerca dos experimentos realizados no fim do século XIX, com a descrição das contribuições de Planck, Einstein, De Broglie etc.

O quarto tópico principal tratará das bases nas quais se fundamenta a Química Quântica e suas consequências em termos da elaboração do modelo atômico moderno. O quinto tópico principal apresentará os resultados relevantes da mecânica quântica para a obtenção e descrição das propriedades atômicas e moleculares.

Por fim, o sexto tópico principal apresentará os desdobramentos tecnológicos baseados nos conceitos da Química Quântica.

2- Objetivo

Formular uma proposta de programa de Atomística para o Ensino Médio baseado nos conceitos de Química Quântica, incluindo a descrição dos conceitos abordados, sua importância histórica e cronológica relacionando os fatos que culminaram no nascimento da Química Quântica e seus desdobramentos em termos das propriedades atômicas e moleculares, assim como de suas aplicações tecnológicas.

3- Objetivos específicos

Listar os tópicos relevantes de forma abrangente para serem abordados em um programa de ensino de atomística para o ensino médio, com a inclusão dos conceitos de Química Quântica.

Apresentar os conceitos para o entendimento do momento histórico do período do nascimento do conceito da quantização para os fenômenos microscópicos.

Explicar a sequência de fatos científicos que levaram a elaboração dos diferentes modelos atômicos.

Explicar as bases nas quais se fundamenta a Química Quântica e suas consequências em termos da elaboração do modelo atômico moderno.

Apresentar os resultados relevantes para a obtenção e descrição das propriedades atômicas e moleculares.

Apresentar os desdobramentos tecnológicos baseados nos conceitos da Química Quântica.

4- Proposta de programa de atomística para o ensino médio

Como escrito no PCN, a Química é um instrumento da formação humana que amplia os horizontes culturais e a autonomia no exercício da cidadania, se o conhecimento químico for promovido como um dos meios de interpretar o mundo e intervir na realidade, se for apresentado como ciência, com seus conceitos, métodos e linguagens próprios, e como construção histórica, relacionada ao desenvolvimento tecnológico e aos muitos aspectos da vida em sociedade (BRASIL, 2002).

O atual programa de atomística do ensino médio é fragmentado, descontextualizado e sem historicidade (BAZZAN, 2009). Os primeiros modelos atômicos, como o de Dalton não são apresentados e sendo assim não contribuem para o conhecimento histórico da construção da idéia de átomo além de não contribuir para uma concepção adequada do que seja um modelo científico. Quando o caráter histórico não é levado em consideração, os alunos não conseguem perceber que a ciência é algo em constante construção e não algo acabado (MELO e NETO, 2013).

Além disso, o programa atual de atomística do ensino médio não introduz os conceitos da mecânica quântica e nem sua natureza probabilística. O que acontece em consequência a esse fato é que os livros didáticos

indicados pelo PNLD (Guia do plano nacional do livro didático), produzidos a partir do programa de atomística, são incompletos. Em MELZER et al, por exemplo, vemos que os livros de Química indicados pelo PNLD/2007 apresentam vários obstáculos epistemológicos e falta de historicidade do desenvolvimento dos modelos atômicos. Isso acarreta um entendimento errôneo de como a ciência se desenvolve além de contribuir para o não entendimento coerente dos conceitos.

O livro didático é uma das ferramentas mais utilizadas pelos professores e pelos alunos (ASSIS e BELLO, 2012) e isso demonstra a importância de uma proposta mais eficiente, que possa nortear a elaboração de livros com conteúdos mais coerentes. Em seu artigo, ASSIS e BELLO chamam atenção, principalmente, para o fato de que alguns livros tratam de maneira superficial o modelo quântico ou simplesmente sequer tratam deste assunto.

Diante dos obstáculos à aprendizagem, há uma necessidade de mudança da proposta atomística atual. Tal mudança pode e deve ser realizada, incorporando-se os conceitos base e importantes para o correto aprendizado dos alunos. Além disso, deve-se inserir o contexto histórico, para que o aluno consiga entender como a ciência se desenvolveu e que esta, é, sem dúvidas, uma construção humana.

É importante que cada professor, mesmo fazendo uso do livro didático, perceba a necessidade de um conhecimento coerente que deve ser fornecido ao aluno e para isso, faz-se necessário definir o que constituirá a base curricular mínima nacional para cada disciplina. No nosso caso, abordaremos uma base curricular mínima para Química, em particular, modelos de constituição da matéria.

O que deve ser deixado claro também é que os tópicos listados nessa proposta alternativa de programa de atomística para o ensino médio visa a uma interpretação coerente dos modelos atômicos e que em nenhum momento,

exclui a necessidade de uma contextualização com a realidade de cada grupo escolar, com exemplos e uma didática voltada para o cotidiano de cada grupo.

Abaixo se encontra um quadro com uma proposta alternativa de programa de atomística, com a inserção de conceitos da química quântica que por vezes são negligenciados, mas que são de suma importância para um entendimento coerente e mais completo sobre o átomo e as moléculas.

Conceito Químico	Objetivo
Primeiras idéias sobre a constituição da matéria: modelo de Leucipo e Demócrito.	Perceber que as idéias de filósofos de antes de cristo culminaram nas primeiras noções de átomo, inclusive nas idéias de John Dalton.
Modelo de Dalton; Lei da conservação da massa; Lei das proporções definidas; Lei das proporções múltiplas.	Compreender a importância de Dalton ter estudado uma química de natureza quantitativa e compreender as constatações de Dalton acerca dos átomos.
Natureza elétrica da matéria.	Compreender que a carga é uma propriedade física fundamental e que os objetos eletricamente carregados são acelerados pelas forças elétricas.
Testes em tubos de descarga em gás e os raios catódicos; Modelo de Thomson.	Compreender a natureza dos raios catódicos e o primeiro “surgimento” dos elétrons e das partículas

	positivas.
Experiência de Millikan.	Interpretar como se deu a determinação da carga e da massa do elétron.
Radioatividade (raios- X).	Utilizar como ferramenta para compreender de forma coerente o modelo de Rutherford.
Modelo de H. Nagaoka e Rutherford.	Compreender o modelo de Rutherford, que se inspirou na idéia de átomo de Nagaoka.
Experiência de descoberta do nêutron.	Compreender como se deu a conclusão da composição do átomo
Falhas da mecânica clássica; Radiação do corpo negro (catástrofe do ultravioleta); Efeito fotoelétrico; Espectros atômicos e moleculares.	Compreender onde e por que a física clássica não é eficiente para explicar determinados fenômenos.
Quantização da energia.	Compreender o conceito fundamental da mecânica quântica.
Modelo atômico de Bohr; O átomo de hidrogênio.	Compreender corretamente a interpretação dos espectros atômicos, em particular, dos átomos de

	hidrogênio cujo átomo é o mais simples, com apenas um elétron.
Princípio da incerteza de Heisenberg.	Conhecer um dos resultados mais famosos da mecânica quântica, percebendo as diferenças entre o mundo microscópico e o macroscópico no que diz respeito à medição da trajetória.
Modelo de Schrödinger.	Conhecer a equação desenvolvida para calcular a energia dos sistemas quânticos, em particular o comportamento dos elétrons nos átomos a partir da mecânica ondulatória.
Números quânticos.	Perceber que os números quânticos, resultados da equação de Schrödinger, definem o estado do átomo. Compreender os significados dos números quânticos.
Orbital atômico; Autofunções de Schrödinger.	Compreender que o orbital é uma função de onda proveniente da equação de Schrödinger.

Proposta de Bohr e os espectros.	Compreender as linhas observadas no espectro de hidrogênio.
Sistemas com mais de um elétron; Regra de Hund; Princípio de exclusão de Pauli; Tabela periódica.	Interpretar a periodicidade das propriedades químicas em termos da sucessiva ocupação de níveis quânticos em elementos de número atômico crescente.
Propriedades atômicas Raio atômico; Energia de ionização; Afinidade eletrônica.	Compreender as propriedades atômicas e como elas, relacionadas com as estruturas dos átomos, organizam os elementos na tabela periódica.
Ligações químicas; Teoria de repulsão eletrônica entre os pares de elétrons na camada de valência (VSEPR); Eletronegatividade; Método de ligação de valência (VB); Método orbital-molecular (OM); Ligação iônica e covalente.	Compreender as ligações químicas como resultantes das interações eletrostáticas que associam átomos e moléculas de forma a dar às moléculas resultantes maior estabilidade.
Propriedades moleculares	Estabelecer relação entre as

Geometria molecular; Energia de ionização molecular; Energia de dissociação; Barreira rotacional; Densidade de probabilidade eletrônica; Função de Hartree-Fock.	propriedades moleculares e a equação de Schrödinger, com suas devidas aproximações. Compreender corretamente as propriedades moleculares.
Desdobramentos tecnológicos baseados nos conceitos da Química quântica.	Conhecer exemplos de contribuições da química quântica para as invenções tecnológicas que fazem parte da vida.

O quadro acima foi montado levando-se em consideração toda a descrição atômica que será posteriormente apresentada, mas que não deve ser o único recurso disponível para um professor que queira ensinar atomística para seus alunos. Toda a descrição que será feita pode servir como uma base para o entendimento dos tópicos da proposta acima, não excluindo o uso de outras fontes para aprofundamento ou para complementação.

Os conteúdos escritos no quadro acima foram escolhidos levando-se em consideração alguns aspectos. Primeiramente foram escolhidos os principais modelos atômicos que contribuíram para a explicação atual do átomo e das moléculas, além do contexto histórico. Sendo assim, levou-se também em consideração todas as ferramentas necessárias para que os alunos compreendessem os modelos e essas ferramentas foram inseridas no quadro. Por exemplo, o modelo de Rutherford é importante para a construção do modelo atual do átomo e em seu modelo, Rutherford utilizou o conceito de radioatividade. A ferramenta radioatividade deve ser trabalhada no ensino de atomística, assim como o modelo de Rutherford.

Tentando mostrar aos alunos aplicações da mecânica quântica na vida humana, também se optou por tratar, no quadro, de alguns desdobramentos

tecnológicos baseados na química quântica. Não necessariamente os mesmos exemplos devem ser fornecidos, mas considera-se importante que exemplos deste tipo sejam comentados para que os alunos possam se sentir mais familiarizados e mais contextualizados.

De maneira geral, no quadro, a sequência de conteúdos obedeceu à ordem cronológica dos modelos atômicos. Alguns conceitos que serviram de ferramentas para modelos seguiram a sequência ferramenta – modelo. Normalmente explicar-se-á as ferramentas utilizadas por determinado autor para que a idéia do mesmo seja melhor compreendida pelos alunos.

Nos tópicos posteriores, toda a sequência de conceitos presentes no quadro tomará corpo e se poderá ver que todos os tópicos listados são necessários para a correta aprendizagem dos alunos.

Optou-se por trabalhar todos os tópicos posteriormente para que se consiga ter noção do porque a proposta contém os conceitos presentes no quadro e, além disso, para que possa ter uma opção de material auxiliar de atomística, com um conteúdo histórico e conceitual importante.

A grande preocupação dessa proposta é a de que os alunos possam desenvolver um caráter reflexivo sobre a realidade que o cerca e que consiga ter os conhecimentos prévios e necessários para isso. Uma base conceitual correta e completa poderá fornecer aos alunos, mais do que simplesmente conteúdo curricular, capacidade de entender o mundo e de modificá-lo.

A seguir serão apresentados os conceitos correspondentes aos tópicos descritos na proposta, com o intuito de focalizar e consubstancializar o conteúdo programático que deve atender à proposta formulada.

Com isso, temos um ponto de partida para a discussão e posterior definição do melhor conteúdo a ser consolidado para que a atomística seja uma base para que o cidadão possa entender as questões relativas à química dos níveis atômicos e moleculares.

5- Abordagem conceitual dos tópicos formulados na proposta

5.1- O momento histórico do período do nascimento do conceito da quantização para os fenômenos microscópicos

No período que vai até 1900, a Física clássica era suficiente para explicar a maioria dos fenômenos macroscópicos. No século XIX foram obtidos vários resultados experimentais que a física clássica não conseguia explicar. Esses resultados levaram ao desenvolvimento de uma teoria, conhecida como teoria Quântica.

Os resultados que não puderam ser explicados foram chamados de falhas da mecânica clássica.

A primeira falha da mecânica clássica, da antiga teoria ondulatória, ocorreu na explicação da radiação do corpo negro. O melhor corpo negro, criado no laboratório, é uma cavidade capaz de absorver e emitir uniformemente todas as frequências da radiação. A radiação de um corpo negro ideal é emitida por um pequeno orifício feito em uma cavidade com paredes isolantes. Essa radiação é emitida e absorvida diversas vezes pelas paredes externas da cavidade, a uma temperatura constante (LEVINE, 2012; ATKINS e JONES, 2008).

Segundo a física clássica, a quantidade de energia irradiada aumentaria sem limite à medida que a frequência aumentasse também. Entretanto, os resultados experimentais mostraram que a quantidade de energia atingia um máximo e em seguida, caía a zero à medida que a frequência aumentava. A física clássica falhou ao deixar de prever o espectro de radiação do corpo negro. Esta falha dos princípios da mecânica clássica quando aplicados à radiação foi encarada com desânimo pelos físicos da época. Eles a denominaram catástrofe do ultravioleta (MOORE, 2006).

Em outubro de 1900, o físico Max Planck obteve a teoria que fornecia a fórmula da radiação do corpo negro que também havia sido encontrada por ele. Planck considerou as paredes do corpo negro como contendo cargas elétricas que vibravam em várias frequências. Para obter sua expressão teórica, Planck supôs que a energia de cada carga oscilante só poderia assumir valores múltiplos de $h\nu$ (onde h foi posteriormente conhecida como constante de Planck e ν é a frequência). Essa grandeza $h\nu$ foi chamada de quantum de energia (quantum = quantidade de algo) (MOORE, 2006; ATKINS e JONES, 2008).

Esse foi um ponto extremamente importante para a ciência, Planck introduziu a ideia de uma quantização de energia, que num primeiro momento, estava limitada apenas ao caso da radiação do corpo negro.

Outra falha da mecânica quântica diz respeito ao fenômeno conhecido como efeito fotoelétrico. O efeito fotoelétrico consiste em um fenômeno onde um feixe de radiação eletromagnética (luz) incide sobre uma superfície metálica e faz o metal emitir elétrons. Os elétrons absorvem energia do feixe de radiação, adquirindo assim energia suficiente para escapar do metal.

Em 1900, o trabalho experimental tinha mostrado alguns aspectos importantes acerca do efeito fotoelétrico (ATKINS e JONES, 2008):

- a) Os elétrons só são emitidos quando a frequência da luz excede certa frequência mínima e o valor dessa frequência difere para diferentes metais e localiza-se no ultravioleta para a maioria dos metais.
- b) Ao aumentar a intensidade da luz, aumenta-se o número de elétrons emitidos, mas a energia cinética dos elétrons emitidos não se altera.
- c) Para aumentar a energia cinética dos elétrons emitidos é necessário aumentar a frequência da radiação.

As observações descritas acima não podem ser entendidas usando a imagem clássica da luz como uma onda. Esperava-se que a energia cinética dos elétrons emitidos aumentasse com o aumento da intensidade luminosa e

fosse independente da frequência da luz porque a energia em uma onda é proporcional à sua intensidade e independente em sua frequência. Além disso, a imagem da luz como uma onda previa que o efeito fotoelétrico ocorreria em qualquer frequência, contanto que a luz fosse suficientemente intensa.

Em 1905, o efeito fotoelétrico foi explicado por Einstein. Ele realizou uma extensão do conceito de Planck de quantização de energia à radiação eletromagnética (Planck havia aplicado a quantização de energia aos osciladores no corpo negro, mas tinha considerado a radiação eletromagnética como uma onda) (LEVINE, 2012).

Einstein propôs que, além de ter propriedades semelhantes a uma onda, a luz também poderia ser considerada como consistindo em entidades semelhantes a partículas (quanta), tendo cada quantum de luz uma energia $h\nu$, onde h é a constante de Planck e ν é a frequência da luz. As entidades com propriedades semelhantes às partículas foram chamadas de fótons. A energia em um feixe luminoso é o somatório das energias dos fótons individuais e é, portanto, quantizada (LEVINE, 2012).

A forma como a mecânica obedece aos sistemas microscópicos foi denominada mecânica quântica, uma vez que o elemento principal dessa área é a quantização de energia.

5.2- Sequência de fatos científicos que levaram a elaboração dos diferentes modelos atômicos.

5.2.1- Período pré-Quântico

Durante toda a história da humanidade, a constituição da matéria sempre foi motivo de curiosidade e interesse dos homens, estando entre as primeiras especulações filosóficas (FILGUEIRAS, 2004). Várias concepções

acerca da constituição da matéria surgiram em diversas épocas e culturas diferentes.

No período conhecido como primeiro milênio antes de Cristo, tanto no ocidente, como no oriente, diversas ideias acerca de partículas que constituiriam a matéria surgiram, entretanto, levar-se-amos em consideração as ideias surgidas no ocidente. Isso se dará pelo fato de tais ideias terem culminado nas primeiras noções de átomo.

5.2.2- Modelo de Leucipo

No início do século V a. C, surgiu em Eléia (sul da Itália) uma escola de pensamento representado por Zenão e Parmênides, dois filósofos. A preocupação principal desses filósofos era com o mundo material, para esses filósofos, o movimento seria uma ilusão dos nossos sentidos, sendo assim, a matéria seria contínua e o vazio não existiria (FILGUEIRAS, 2004).

Contrariamente aos eleatas, o grego Leucipo de Abdera acreditava que a matéria não podia ser contínua e então, seria constituída de átomos, que seriam partículas fundamentais. Os átomos, para Leucipo, seriam indivisíveis, sólidos, compactos e poderiam ter diversas formas e fazendo diferentes combinações, constituiriam tudo que é existente.

Contribuindo para as idéias de Leucipo, Demócrito de Abdera acreditava também que os átomos tinham peso, seriam inquebráveis e participariam da constituição de todos os corpos, os quais possuíam cada qual um tipo de átomo. Não se tem certeza se a origem da ideia de constituição da matéria veio de Leucipo ou de Demócrito, uma vez que o que se conhece deles veio por meio de outros filósofos que os citaram, assim como Aristóteles (FILGUEIRAS, 2004).

Aristóteles citou Demócrito e Leucipo ao se posicionar contra suas idéias de átomo, para ele, o atomismo desses pensadores era limitado uma vez que o

mundo material não seria apenas constituído de matéria, mas também de coisas imateriais. Aristóteles criticava, principalmente, a idéia de que cada substância teria seu próprio átomo específico, assim sendo, não poderia haver transformação Química, o que esbarrava com a evidência.

O Atomismo ressurgiu com Epicuro e Lucrecio, entretanto durante a idade média e o Renascimento, o atomismo se tornou uma teoria inaceitável porque o principal filósofo das universidades e da cristandade ocidental (Aristóteles) não reconhecia tal teoria (FILGUEIRAS, 2004). A possibilidade de existência dos átomos só voltou a ser tratada com importância com a revolução científica.

5.2.3- Modelo de Dalton

Em 1803, John Dalton resgatou o conceito de átomo e o sustentou com evidências experimentais que ele e outros obtiveram.

Porque é importante que os alunos tenham conhecimento sobre a teoria atômica de Dalton, mesmo sabendo que seu modelo de átomo indivisível não satisfaz nossas observações químicas atuais? Essa é uma pergunta que frequentemente norteia os alunos que já tomaram conhecimento dos modelos atômicos mais atuais, uma vez que a noção de átomo de Dalton não consegue ser eficiente para explicar, por exemplo, as transformações químicas.

Dalton possui, em seu modelo, uma importância fundamental que gera a ciência, a química por ele estudada é de natureza quantitativa, Dalton realizava cálculos quantitativos baseados em dados experimentais inferidos em laboratório. Sua teoria, portanto, difere enormemente de outras anteriores que tinham uma natureza apenas especulativa, surgiam na imaginação e reflexão dos homens, sem nenhuma observação experimental. Além disso, Dalton foi capaz de explicar alguns fatos já existentes e prever leis ainda não descobertas.

O modelo de Dalton é apresentado nos livros do ensino médio unicamente como o modelo do átomo indivisível, conhecido como “bola de bilhar”. Por essa apresentação simplória e pelos alunos terem conhecimento de modelos atômicos mais atuais que propõem um modelo de átomo não mais indivisível, o modelo de Dalton é tido pelos alunos como um modelo errôneo e sem importância. Além disso, a simples comparação do modelo atômico com uma bola de bilhar não auxilia a compreensão das concepções que permeiam a teoria de Dalton.

Algumas informações acerca do modelo de Dalton são importantes para que alunos, posteriormente, consigam perceber quais foram as contribuições desse autor para a Química (RUSSEL, 2006):

- Toda e qualquer matéria é constituída de partículas fundamentais; os átomos.
- Os átomos são indivisíveis e permanentes, não podem ser criados nem destruídos.
- Todos os átomos de um dado elemento têm as mesmas propriedades (tamanho, massa, forma), as quais diferem das propriedades de outros elementos.
- Uma reação química consiste num rearranjo dos átomos de uma combinação para outra. Porém átomos individuais permanecem intactos

Como citado anteriormente, Dalton explicou fatos já existentes e previu leis ainda não descobertas. A teoria de Dalton considera a lei da conservação da massa. Se uma reação química consiste apenas num rearranjo de átomos e nenhum átomo é perdido, a massa total deve ser constante durante a reação. Isso, de fato, está de acordo com as reações químicas.

A teoria de Dalton também explicou a lei das proporções definidas. Supõe-se uma molécula com um átomo **A** e um átomo **B**, se a massa de **A** é duas vezes a massa do átomo **B**, então a razão mássica de **A** para **B** é **2/1**.

Independente da quantidade dessa molécula que se utilize, a razão mássica sempre permanece a mesma.

Além disso, a teoria de Dalton predisse a lei das proporções múltiplas. Esta lei estabelece que, quando dois compostos diferentes são formados pelos mesmos dois elementos, as massas de um elemento, que reagem com a massa fixa dos outros, encontram-se numa proporção de pequenos números inteiros (BRADY e HUMISTON, 1986). Isto está de acordo com a teoria atômica uma vez que considera que, por exemplo, o monóxido de carbono contém um átomo de carbono e um de oxigênio, enquanto o dióxido de carbono contém um átomo de carbono e dois átomos de oxigênio. Como o dióxido de carbono tem duas vezes mais átomos de oxigênio ligados a um átomo de carbono, o peso de oxigênio em uma molécula de dióxido de carbono tem que ser duas vezes o peso do oxigênio em uma molécula de monóxido de carbono.

Normalmente, no ensino médio, os modelos atômicos são ensinados anteriormente às ligações químicas e reações e por isso, certos comentários poderão parecer vagos aos alunos como os termos “monóxido de carbono” e “dióxido de carbono”. Entretanto, o importante é frisar a possibilidade de um átomo de oxigênio ou mais poderem se ligar a um átomo de carbono, a propriedade de um átomo de um elemento poder se ligar a um ou mais átomos de outro elemento. Posteriormente, em outro momento da vida escolar, maiores detalhes aparecerão para os alunos e o tema fundamental de ligação já não parecerá estranho.

Tornar claro alguns postulados importantes da teoria atômica de Dalton pode assegurar que o aluno relembre posteriormente que Dalton deixou explicações coerentes e razoáveis para sua época e que mesmo que seu modelo de átomo indivisível tenha se tornado obsoleto, ele semeou uma interpretação quantitativa de fenômenos químicos. Dalton trabalhou sua teoria com base em múltiplas influências de físicos e químicos renomados de sua época.

5.2.4- Modelo de Thomson

Dalton fez conclusões e interpretações de resultados experimentais e ao longo do tempo, à medida que novos detalhes apareceram, as interpretações de Dalton se mostraram insuficientes, inclusive pelo fato dele não contemplar a natureza elétrica da matéria.

Desde a antiguidade, o homem tem conhecimento da eletricidade. Thales de Mileto (624 a.C - 558 a.C.), filósofo grego, atritava um bastão de âmbar com pele de gato e em seguida esse bastão passava a atrair objetos leves e essa experiência é realizada até os dias atuais (YOUNG e FREEDMAN, 2009). Muitos anos depois, alguns cientistas começaram a tentar explicar a natureza da eletricidade e após investigações, convenceram-se que a eletricidade tinha que ser parte da matéria.

Muito se fala de carga para o aluno ao se introduzir as partículas subatômicas e é interessante que o aluno realmente entenda que a carga é uma propriedade física tão fundamental quanto à massa e que os objetos eletricamente carregados são acelerados pelas forças elétricas. No ano de 600 a.C, os gregos descobriram que, atritado com a lã, o âmbar adquiria a propriedade de atrair outros objetos, experiência similar à realizada por Thales de Mileto. Hoje se pode afirmar que o âmbar adquiria uma carga elétrica ou se tornava carregado (YOUNG e FREEDMAN, 2009).

Algumas experiências demonstraram que existem dois tipos de cargas elétricas, cargas negativas e cargas positivas. Além disso, a atração e repulsão entre dois corpos carregados é comumente generalizada como “duas cargas de sinais iguais se repelem e duas cargas de sinais diferentes se atraem”. As cargas com o mesmo sinal algébrico não são idênticas, elas se assemelham apenas no sinal.

Michael Faraday fez descobertas experimentais no campo da eletricidade e do magnetismo e descobriu as leis da eletrólise, popularizando os termos catodo, anodo e íons. Na mesma época, Benjamin Franklin realizou uma experiência controversa empinando uma pipa em dia de tempestade, com a descarga elétrica sofrida, ele constatou que o relâmpago era de origem elétrica. Então, os cientistas estavam ávidos para controlar o efeito elétrico no laboratório (YOUNG e FREEDMAN, 2009).

A fim de analisar o efeito elétrico, William Crookes começou a fazer testes em tubos de vidro de descarga em gás. Os tubos de vidro eram totalmente vedados com uma peça de metal, chamada eletrodo (utilizado para proporcionar transferência de carga entre o meio no qual está inserido, através de uma corrente elétrica) (BRADY e HUMISTON, 1986). Um amperímetro ligado ao tubo permitia que, dependendo da pressão no tubo, da distância entre os eletrodos e da diferença de potencial, os gases conduzissem corrente elétrica (**figura 1**). Percebeu-se que, produzindo certo grau de vácuo no interior do tubo e aplicando alta tensão em suas extremidades, uma região do tubo apresentava uma luminescência esverdeada. Aumentando o vácuo, observou-se apenas uma mancha luminosa no lado oposto ao cátodo (**figura 2**).

Crookes concluiu que a luminescência era algum tipo de radiação que partia do cátodo e ia para o anodo, as radiações foram denominadas raios catódicos, entretanto sua natureza não fora determinada por ele.

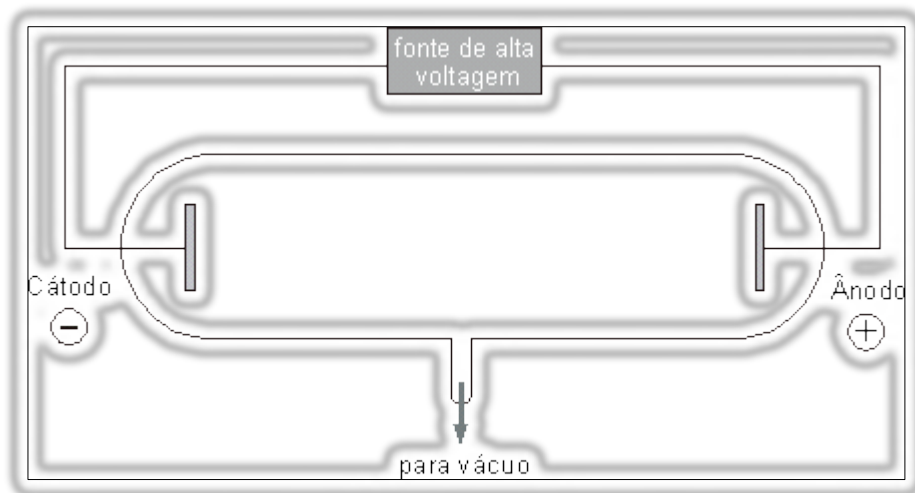


Figura 1- (imagem disponível em <http://www.mundovestibular.com.br/articles/778/1/OS-PRIMEIROS-MODELOS-ATOMICOS/Paacutegina1.html>).

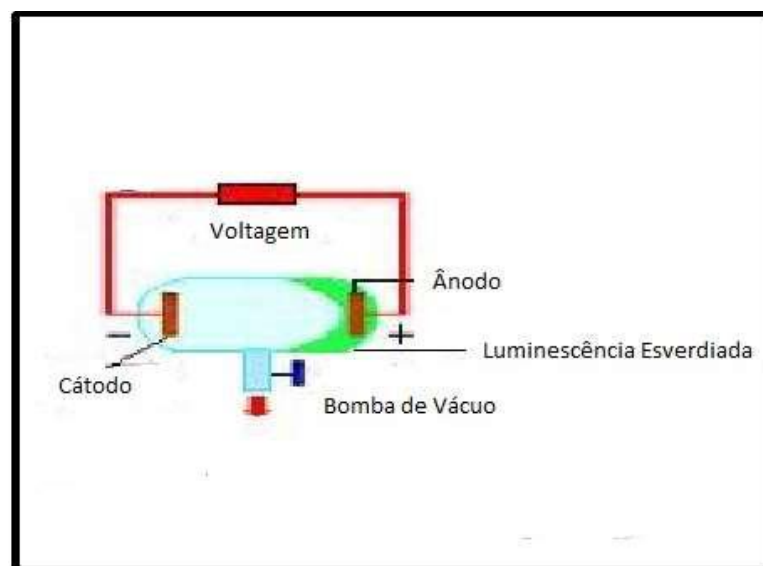


Figura 2- (imagem disponível em <http://rafaguiron.blogspot.com.br/2010/11/o-tubo-de-crookes.html>).

Thomson realizou experimentos posteriores com tubos de raios catódicos e observou que esses raios (BRADY e HUMISTON, 1986):

- Normalmente caminham em linha reta;
- Esboçam sombras;
- Podem girar um pequeno moinho colocado em seu caminho, sugerindo então, que sejam formados por partículas;
- Aquecem uma folha metálica colocada entre os eletrodos;
- São sempre os mesmos, independente da natureza do material que compõe os eletrodos ou da espécie do gás presente no interior do tubo;
- Podem ser curvados por um campo elétrico ou magnético, numa direção tal que se deduz serem partículas eletricamente carregadas e que a carga é negativa (**figura 3**).

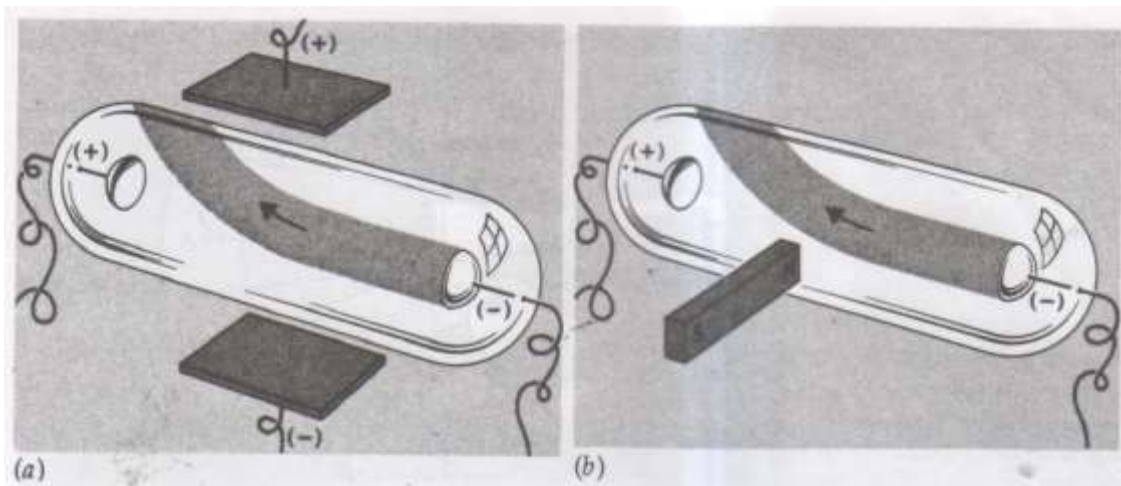


Figura 3- Algumas propriedades dos raios catódicos. (a) Os raios catódicos são defletidos por um campo elétrico e (b) por um campo magnético (BRADY e HUMISTON, 1986).

Thomson, então, determinou a natureza dos raios catódicos que seriam formados por partículas energéticas carregadas negativamente e essas partículas foram posteriormente chamadas de elétrons. J.J. Thomson utilizou um tubo de raios catódicos (**figura 4**), para calcular a razão entre a carga e a massa de um elétron.

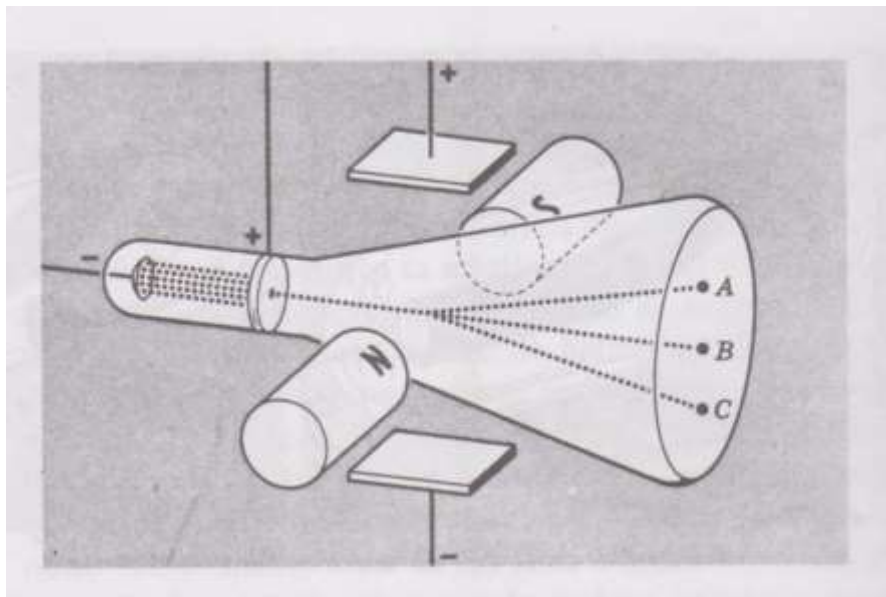


Figura 4- tubo de raios catódicos para calcular a razão entre a carga e a massa de um elétron (BRADY e HUMISTON, 2006).

Os elétrons produzidos no catodo são acelerados para o anodo perfurado. Alguns dos elétrons passam através do orifício e se chocam com a parede do tubo **(B)**, recoberto com substância fosforescente, e produzindo assim um ponto brilhante (BRADY e HUMISTON, 1986).

Quando placas com cargas opostas são colocadas acima e abaixo do tubo, o feixe de elétrons é defletido em direção à placa positiva e chocando-se com a parede do tubo **(A)** (BRADY e HUMISTON, 1986).

A quantidade de deflexão que uma partícula sofre é diretamente proporcional à sua carga, quanto maior a carga, mais fortemente atraída pela placa ela será. Por outro lado, a quantidade de deflexão é inversamente proporcional à massa da partícula. Quanto maior a massa da partícula, menos afetada pela atração eletrostática ela será.

Pode-se dizer que a quantidade de deflexão observada depende da razão entre a carga (**e**) e a massa (**m**) das partículas. Esta razão carga massa é simbolizada por **e/m**.

Thomson aplicou um campo magnético de intensidade conhecida através do tubo e verificou a deflexão do feixe de elétrons, também aplicou carga à placa até o feixe de elétrons retornar ao ponto **B**. A partir das intensidades dos campos elétrico e magnético, Thomson calculou a razão carga massa **e/m** para o elétron igual a **-1,76 x 10⁸ coulombs/ grama**, onde o Coulomb (**C**) é a unidade de carga elétrica no Sistema Internacional de Medidas (**SI**). Thomson não pôde determinar independentemente uma da outra, a carga e a massa do elétron, isso ficou a cargo de Millikan (BRADY e HUMISTON, 1986).

Em 1908, Robert Andrews Millikan determinou experimentalmente a carga do elétron e sua massa. Duas placas metálicas foram colocadas em paralelo e uma fina bluma de gotículas de óleo foi borrifada sobre as placas, como ilustrada na **figura 5**. As gotículas de óleo passaram através de um pequeno orifício na placa superior e o ar entre as placas foi irradiado por **raios x** durante certo espaço de tempo. Os **raios x** percorreram, então, os elétrons do gás e esses elétrons foram captados pelas gotículas de óleo, dando a elas carga negativa (BRADY e HUMISTON, 1986).

Aplicando uma carga elétrica (placa superior positiva e inferior negativa), Millikan percebeu que a queda das gotas de óleo carregada negativamente poderia ser interrompida ou tornada mais lenta. Dado o conhecimento da massa de uma gota e da quantidade de carga nas placas necessárias para manter a gota suspensa, permitiram a Millikan calcular a quantidade de carga negativa (BRADY e HUMISTON, 1986).

Após repetir a experiência inúmeras vezes, Millikan observou que a quantidade de carga nas gotas de óleo era sempre um múltiplo de **- 1,60 x10⁻¹⁹ coulombs**. Sendo assim, como cada gota de óleo poderia adquirir um, dois ou mais elétrons, a carga total de qualquer gota, deveria ser um múltiplo de

carga do elétron isolado. Esperava-se que a carga do elétron fosse $-1,60 \times 10^{-19}$ coulombs. Já tendo a razão carga massa (e/m) do elétron e sua carga, sua massa foi calculada e é igual a $9,11 \times 10^{-28}$ g (BRADY e HUMISTON, 1986).

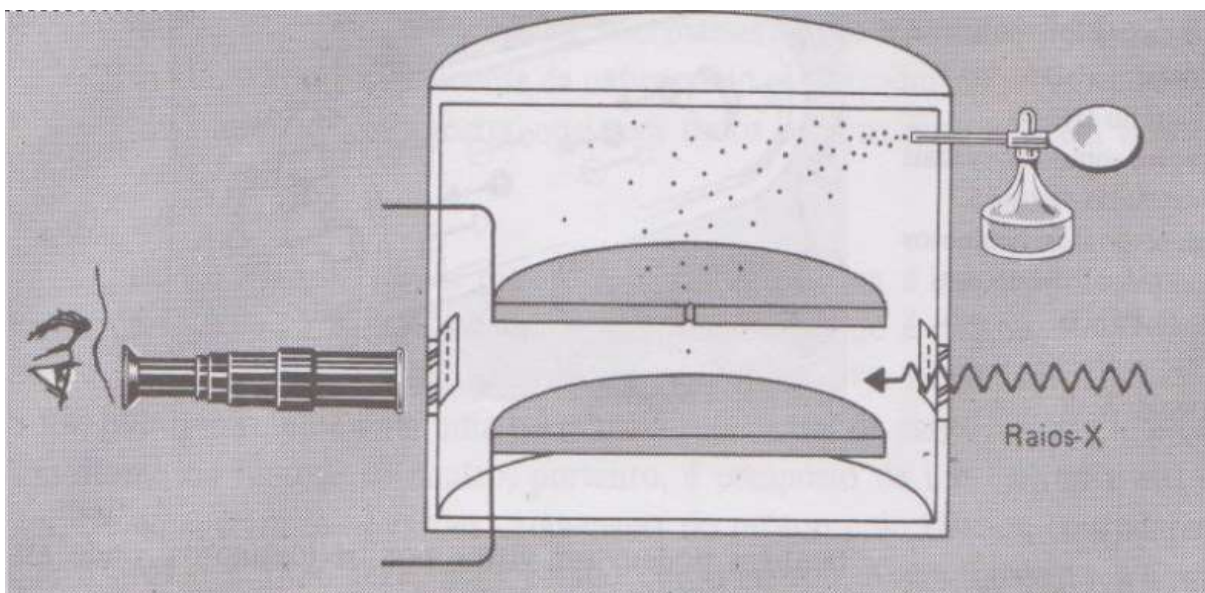


Figura 5- Experimento da gota de Milikan (BRADY e HUMISTON, 1986).

Nesse momento, é importante lembrar ao aluno o que esses números significam. Uma massa igual a $9,11 \times 10^{-28}$ g significa que a massa do elétron é imensamente pequena. Fazendo a comparação com a massa de um grão de arroz cru que tem massa de, aproximadamente, **0,0208 gramas**, percebe-se porque não podemos ver o elétron.

As coisas que encontramos corriqueiramente são eletricamente neutras, ou seja, possuem a mesma quantidade de cargas positivas e negativas, que se anulam entre si. Uma vez que os elétrons são partículas carregadas negativamente e fazem parte de todas as coisas, deve haver, em toda matéria, partículas carregadas positivamente para que as coisas sejam neutras (BRADY e HUMISTON, 1986).

Experiências com tubos de descarga em gás com catodos perfurados foram utilizados para pesquisa de partículas positivas. Com essas experiências, constatou-se que os átomos neutros que perdiam elétrons tornavam-se íons carregados positivamente. Os íons são partículas carregadas eletricamente que se formam quando elétrons são removidos ou adicionados.

Para pesquisa de partículas positivas, o tubo de descarga de gás (**figura 6**) recebia uma descarga elétrica e então, os elétrons emitidos no catodo colidiam com os átomos neutros do gás, arrancando-lhe elétrons. Os átomos do gás se tornavam, então, íons carregados positivamente. Estes íons positivos eram atraídos em direção ao catodo. Alguns desses íons colidiam com o catodo e outros passavam pela perfuração e emergiam na parte de trás, onde se observava o que foi chamado de “raios canais”. Se a parte de trás estivesse coberta por uma substância fosforescente, observava-se pontos luminosos onde estas partículas positivas se chocavam com a parede (BRADY e HUMISTON, 1986).

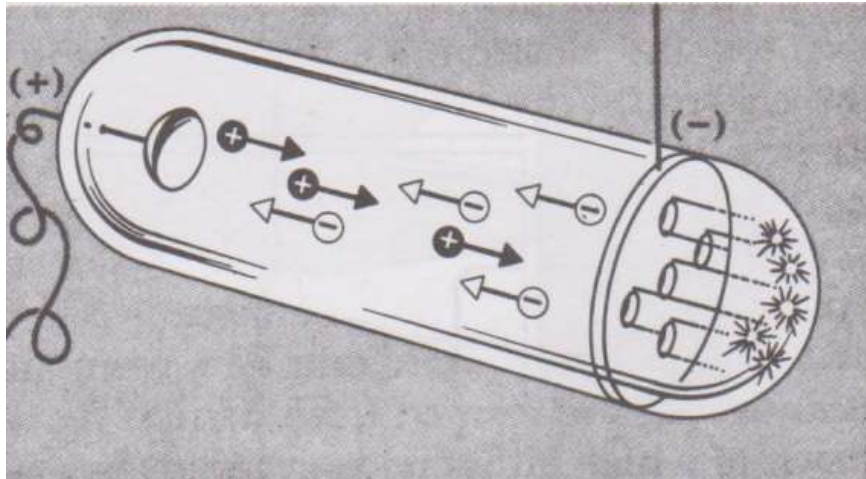


Figura 6- Raios canais. Íons positivos, que passam através dos orifícios no catodo, aparecem como raios canais por detrás do eletrodo. Vêem-se pontos luminosos quando eles colidem com uma substância fosforescente, na extremidade do tubo (BRADY e HUMISTON, 1986).

Já investigada a razão carga massa do elétron, precisa-se determinar a razão carga massa dos íons positivos. O instrumento projetado para determinar essa razão foi o espectrômetro de massa (**figura 7**). O material em estado gasoso é introduzido em **A** e convertido em íons pela descarga elétrica através dos eletrodos **B** e **C**. Esses íons positivos são revelados através da grade **E**. À medida que eles passam através das fendas **F** e **G**, formam um feixe estreito que é “alimentado” entre os polos de um poderoso imã. Esse campo magnético age defletindo as partículas em trajetória circular (BRADY e HUMISTON, 1986).

Quando os íons possuem a mesma carga, os raios de curvatura dependem de suas massas, sendo uma partícula leve mais defletida do que uma mais pesada. Quando os íons possuem a mesma massa, o grau de curvatura da trajetória é diretamente proporcional às suas cargas. Os íons com qualquer razão carga massa desejada podem ser focalizadas no detector **H** se a intensidade do campo magnético for ajustado. Íons com altas razões **e/m** são mais defletidos e os com **e/m** menores são menos defletidos (BRADY e HUMISTON, 1986).

A medição da **e/m** para partículas positivas mostram que os íons positivos têm razões **e/m** muito menores que a dos elétrons. Então a massa dos íons positivos é muito maior que as dos elétrons. Os íons são formados a partir de átomos neutros pela retirada de elétrons, portanto a carga que transportam é igual à magnitude da carga do elétron ou a um múltiplo inteiro desta, sendo assim, para que a razão **e/m** do íon positivo seja menor que a do elétron, sua massa deve ser muito maior (BRADY e HUMISTON, 1986).

. Além disso, a razão **e/m** depende da natureza do gás introduzido no espectrômetro de massa, sendo assim, nem todos os íons positivos têm a mesma razão **e/m** (BRADY e HUMISTON, 1986).

A maior **e/m** observada para qualquer íon positivo é a **e/m** do íon hidrogênio que é $+9,63 \times 10^4 \text{ Cg}^{-1}$. Sendo assim, o íon hidrogênio é considerado uma partícula fundamental de carga positiva, o próton. Um único

átomo de hidrogênio neutro é composto de um elétron e um próton. O número de prótons presentes em um determinado átomo recebe o nome de número atômico (BRADY e HUMISTON, 1986).

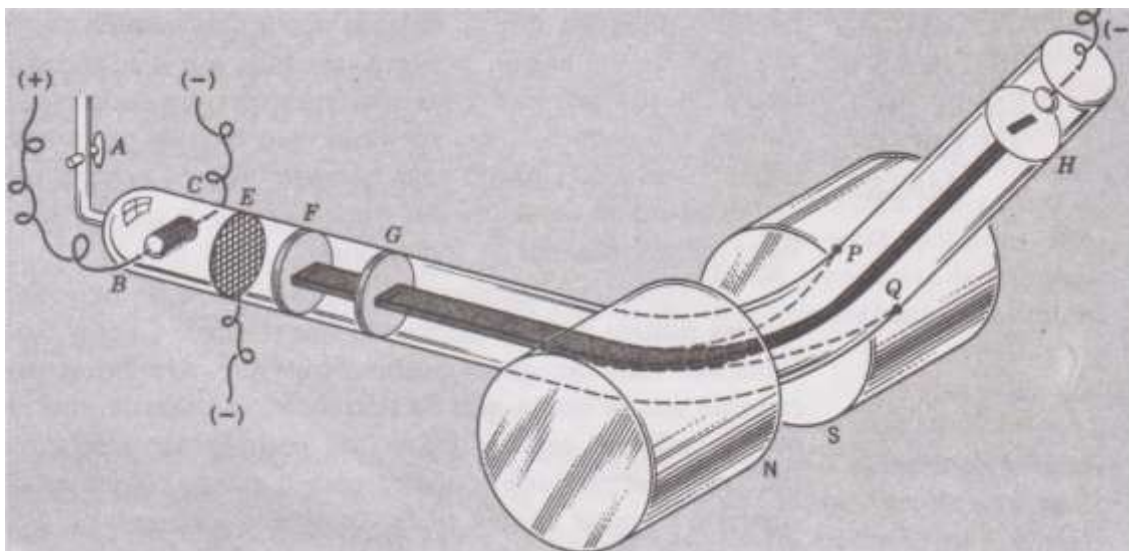


Figura 7. Espectrômetro de massa (BRADY e HUMISTON, 1986).

O mais importante, ao explicar como se deram os experimentos e observações anteriores, é mostrar aos alunos que essas informações foram obtidas a partir de dados experimentais e não frutos de invenções a esmo, de pressupostos duvidosos.

J.J Thomson sugeriu que todo átomo poderia ser uma esfera carregada positivamente na qual alguns elétrons estão incrustados, assim como ilustrado na **figura 8** (RUSSEL, 2006).

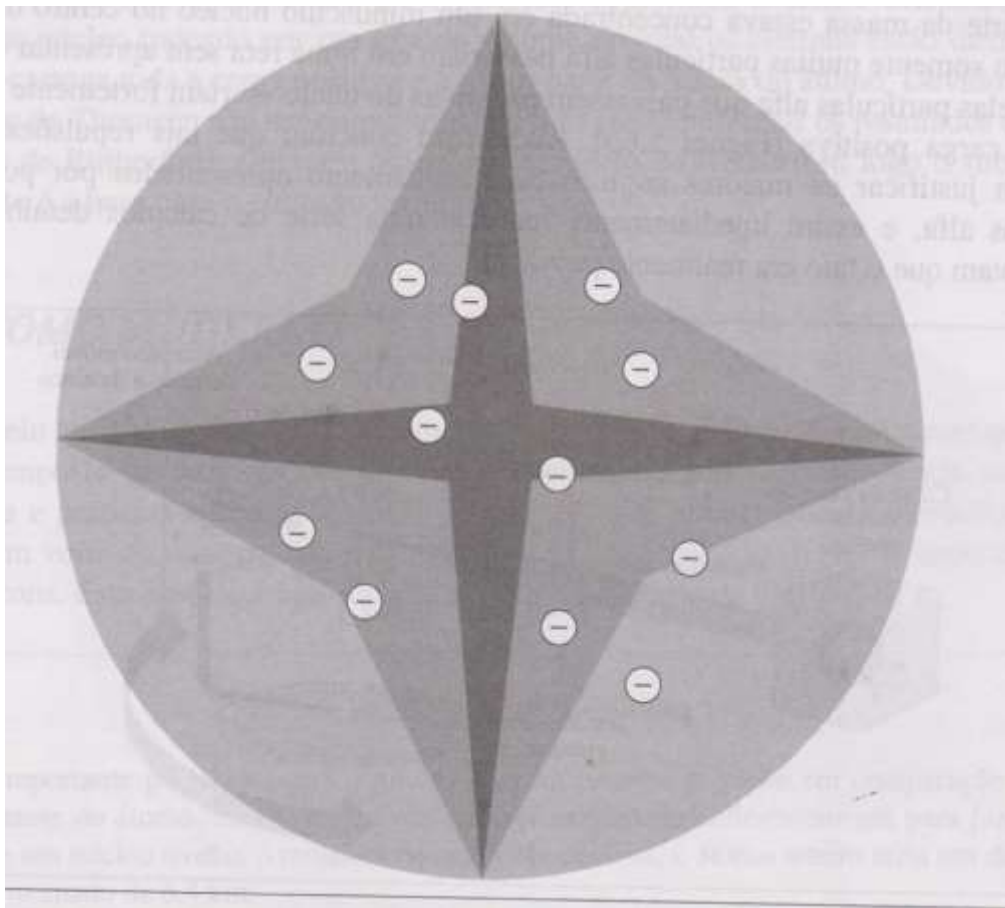


Figura 8- modelo de Thomson (RUSSEL, 2006).

5.3- Química do fim do século XIX

5.3.1- Modelo de Rutherford

Antes de apresentar, aos alunos, o modelo atômico proposto por Rutherford, é importante que os alunos entendam e conheçam o fenômeno da radioatividade, que serviu de base experimental para Rutherford fazer suas conclusões acerca do átomo, sem tal informação, o modelo de Rutherford seria mal compreendido.

Em 1895, Wilhelm C. Röntgen (físico alemão) estudava a condutividade dos gases, em tubos de Crookes (**figura 9**), estando, principalmente, interessado nos raios catódicos.

Röntgen observou que quando seu tubo de Crookes, recoberto por um papelão preto, sofria descarga elétrica, um papel com platinocianeto de bário que estava perto era revelado com uma linha preta, que possivelmente seria uma sombra de um fio metálico posicionado entre o tubo e o papel. Röntgen observava o experimento em uma sala completamente escura. Ele, então, passou a investigar as propriedades e a origem do que seria essa radiação que conseguia ultrapassar o papelão preto e revelar o papel com platinocianeto de bário (XAVIER et al, 2006).

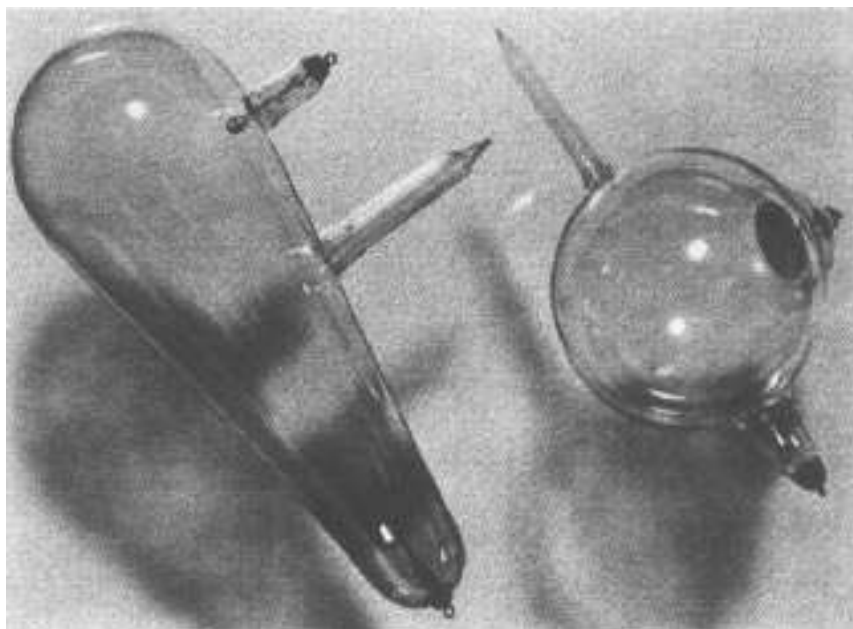


Figura 9 - Dois tubos de descarga usados por Röntgen. Nesses tubos, o feixe de raios catódicos atinge o vidro e não o ânodo (MARTINS, 1998).

Röntgen, com suas experimentações e observações, conseguiu distinguir bem que esse tipo de radiação diferia da Luz e dos raios catódicos,

conseguindo observar que essa radiação é muito mais penetrante que os raios catódicos, não podiam ser refletidos, se propagavam em linha reta e por isso, delineavam sombras regulares, além de não poderem ser desviados por imãs e serem capazes de impressionar chapas fotográficas. Chamou essa radiação de **raios-X**. Abaixo (**figura 10**) está a radiografia da mão da esposa de Röntgen, primeira imagem impressa de um estrutura interna do corpo humano (MARTINS, 2005).



Figura 10- Radiograma da mão da esposa de Röntgen

(MARTINS, 2005).

Antoine Henri Becquerel observou, mais tarde, com experimentos utilizando urânio, que a radiação (**raios-X**) era originária do próprio elemento (XAVIER et al., 2006).

O termo radioatividade só surgiu com Marie Sklodowska Curie, em 1895. Curie e seu marido, Pierre Curie, observaram que o urânio não era o único elemento que apresentava a propriedade de radioatividade. Além disso, Marie trabalhou com um minério (pechblenda) e conseguiu isolar dele o polônio e o rádio (XAVIER et al., 2006).

Em 1900, Rutherford identificou dois tipos de emissões provenientes de elemento radioativo, essas emissões receberam o nome de partículas alfa (**α**) e beta (**β**). Pouco tempo depois, o físico Paul Villard identificou outro tipo de radiação eletromagnética proveniente de elementos radioativos, que chamou de radiação gama (**γ**) (XAVIER et al., 2006). Os experimentos realizados para identificação de **α** , **β** e **γ** são similares ao mostrado na **figura 11**.

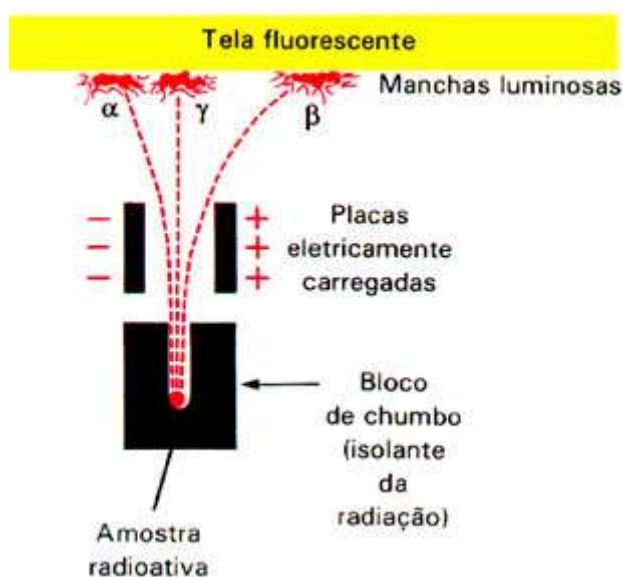


Figura 11 – Experimento de identificação de α , β e γ (imagem disponível em <http://www.brasilecola.com/quimica/radioatividade-estrutura-atomo.htm>).

O experimento mostrava como a radiação proveniente de um elemento radioativo se comportava ao ser submetida a uma diferença de potencial. O bloco de chumbo servia, unicamente, para impedir que a radiação saísse descontroladamente pelo ambiente.

Observou-se, na tela, três pontos de luminescência, que teriam os trajetos mostrados na **figura 11**. A partícula atraída pelo polo positivo teria então uma carga negativa e foi chamada de beta (β). A partícula atraída pelo polo negativo teria carga positiva e foi chamada de alfa (α). Como o raio de curvatura da partícula alfa é menor que a da partícula beta, pôde-se concluir que a massa da partícula alfa é maior que a da partícula beta. A radiação gama não sofreu atração por nenhum polo e concluiu-se, então, que não possuía carga e, além disso, não possuía massa, não podendo ser denominada como partícula. Rutherford concluiu que as emissões alfa eram na verdade átomos de hélio totalmente ionizados.

Tendo em mãos as novas informações sobre a radioatividade, Rutherford, Geiger e Mardsen lançaram um fluxo de partículas alfa emitidas por uma pequena quantidade de polônio (elemento radioativo) em folhas finas de alguns materiais como o ouro, papel e mica.

Os três observaram que a maioria das partículas alfa atravessou as folhas em linha reta, entretanto, algumas foram espalhadas ou desviadas. Intrigados com essa observação, os cientistas projetaram um aparelho para medir o ângulo de desvio sofrido pelas partículas alfa, quando estas passavam através de uma folha extremamente fina de ouro. A **figura 12** indica o experimento realizado. O ouro era utilizado nos experimentos, pois é um metal de fácil manejo e possui os melhores coeficientes de espalhamento.

As partículas alfa eram percebidas por um clarão formado sobre um anteparo revestido com uma camada de sulfeto de zinco fosforescente. O anteparo de sulfeto de zinco era móvel e o espalhamento das partículas através de diferentes ângulos pode ser detectado e seus ângulos, medidos (RUSSEL, 2006).

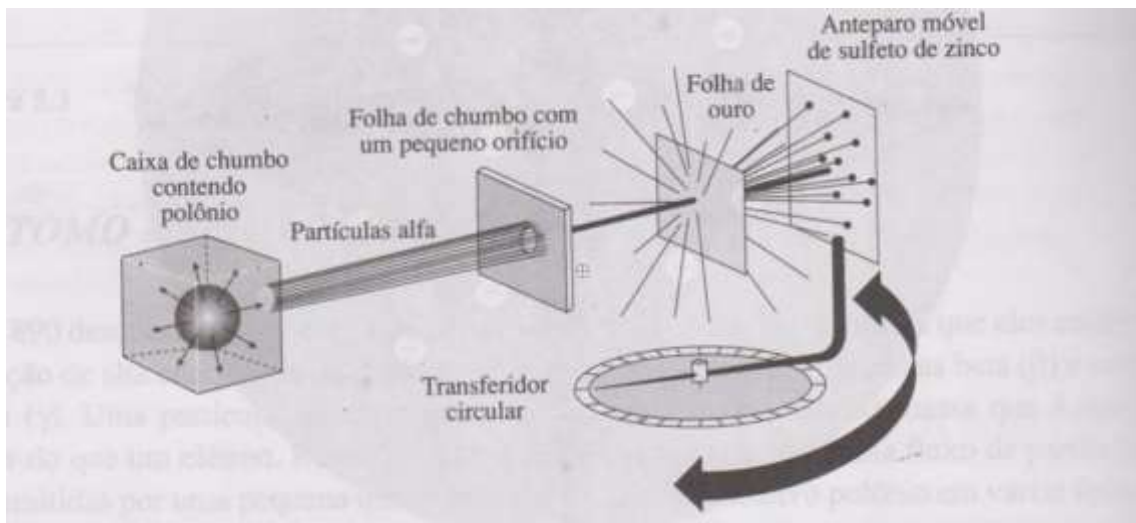


Figura 12- Experimento de Rutherford, Geiger e Marsden (RUSSEL, 2006).

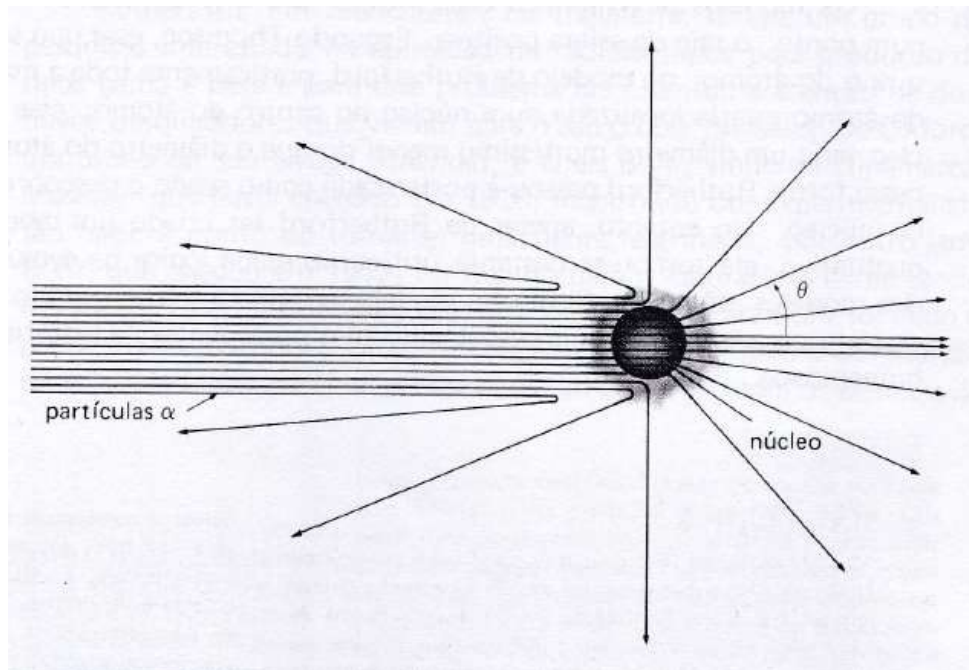


Figura 13- Espalhamento de partículas α por um átomo. Para explicar o espalhamento a grandes ângulos Rutherford sugeriu que praticamente toda a massa do átomo estaria concentrada num núcleo de carga positiva e com dimensões bem menores do que as do átomo (PEIXOTO, 1988).

Em 1904, H. Nagaoka propôs que um átomo poderia ser composto por um pequeno núcleo carregado positivamente envolto por uma região maior que possuía os elétrons. Rutherford recobrou, então, a idéia de Nagaoka e concluiu que, se os elétrons ocupavam a maior parte do átomo e se a carga positiva (maior parte da massa) ocupava um minúsculo núcleo no centro do átomo, as partículas alfa que passassem próximas ao núcleo seriam fortemente repelidas pela sua carga positiva, uma vez que a partícula alfa possuía carga positiva e muitas destas passariam pela linha reta sem apresentar reflexão.

De maneira geral, o átomo (no modelo de Rutherford) seria formado por um núcleo positivo envolto por um grande volume onde os elétrons estariam distribuídos.

5.4- Consequências e técnicas das novas reflexões acerca dos experimentos realizados no fim do século XIX

Neste momento, a Química se depara com uma nova e importantíssima informação que fundamentou a noção do átomo moderno concebido. É importante que o aluno se veja apresentado a essa ideia para que, futuramente, perceba a importância dos autores até aqui apresentados, Rutherford não tirou conclusões com base apenas no que imaginou, suas idéias foram fundamentadas por seus estudos e os dos demais autores que o antecederam, assim como muitos outros cientista fizeram.

Rutherford continuou sua investigação acerca do átomo e, observou a existência dos prótons, que seriam partículas com carga de mesma grandeza do elétron, mas com sinal oposto. Até o momento não havia evidências experimentais de que a carga do próton seria $+ 1$, era apenas uma hipótese ainda. O próton seria, então, positivo e com massa muito maior que a do elétron. A descoberta do próton não se deu facilmente, não veio de observação de um único experimento e não se deu em um momento preciso.

Rutherford continuou realizando experimentos, e em 1911, concluiu que o átomo de hidrogênio teria a estrutura mais simples possível, com apenas uma unidade de carga. Uma década depois, o próton foi considerado uma partícula nuclear em experiência posterior, com bombardeio de núcleo de nitrogênio com partículas alfa. A experiência tinha como produto o elemento oxigênio e o próton, que seria o núcleo do hidrogênio, lembrando que o hidrogênio só possui um elétron. Essa experiência foi a primeira núcleo-síntese causada pelo homem (RUSSEL, 2006)

Ainda pesquisando sobre a constituição do átomo, Rutherford concluiu que somente os prótons não poderiam compor a massa do núcleo, embora contivessem toda sua carga. Ele não conseguiu explicar o que comporia o restante da massa do núcleo, mas, em 1930, outros cientistas conseguiram explicar.

Em 1930, W.G.F. Bothe e H. Becker publicaram um trabalho que descrevia que o bombardeio de partículas alfa provenientes do polônio dava origem a uma radiação com alto poder de penetração (**Figura 14**). Pouco tempo depois, Irene Curie Joliot e Frederic Joliot repetiram a experiência de Bothe e Becker e observaram que o bombardeio de lâmina de parafina (**figura 15**) pela radiação com alto poder de penetração resultava numa intensa emissão de prótons.



Figura 14- Bombardeio de partículas alfa provenientes do polônio (imagem disponível em <http://www.seara.ufc.br/donafifi/neutron/neutron4.htm>).

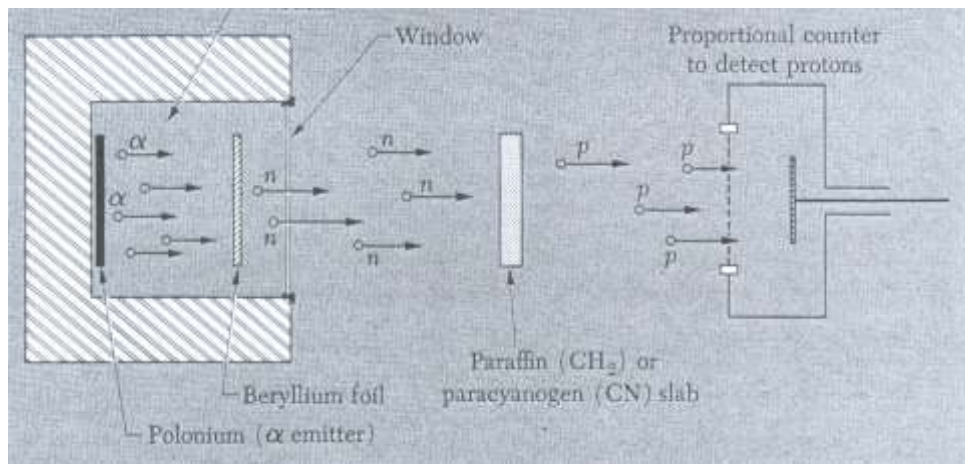


Figura 15- Dentro de uma câmara mantida em vácuo, partículas alfa de uma fonte de polônio incidem sobre um filme de berílio, de onde saem os nêutrons. Esses nêutrons atravessam uma janela fina que isola a câmara mantida em vácuo. Os nêutrons incidem sobre uma camada fina de parafina (CH_2) de onde arrancam prótons (imagem disponível em http://wiki.stoa.usp.br/Como_foi_descoberto_o_nêutron%3F).

Da experiência da **figura 15**, a massa do nêutron pode ser determinada considerando as energias e massas envolvidas nas colisões. No caso de usarem paracianogênio (CN) no lugar da parafina, foram detectados núcleos de nitrogênio em vez de prótons.

Chadwick repetiu o experimento do casal Joliot e propôs que os fenômenos observados por Bothe e Becker só poderiam ser explicados se

houvesse a existência de uma partícula não carregada (neutra) e com a massa próxima a do próton, essa radiação foi chamada de radiação de Bothe, posteriormente modificada para nêutron. O nêutron tem massa de **1, 674927 x 10⁻²⁴ g**, ligeiramente maior do que a de um próton. A região do núcleo é muito pequena, se houvesse nessa região apenas prótons, a repulsão entre elas seria enorme, o nêutron diminui a repulsão, aumentando a estabilidade (XAVIER et al, 2006).

Convencionou-se, então, que o próton teria carga **+ 1**, o elétron **-1** e o nêutron **Zero**. Os nêutrons e os prótons estariam no núcleo, enquanto os elétrons estariam na região extranuclear (em torno do núcleo). O modelo de Rutherford foi aceito no mundo científico porque respondia a algumas questões de autores anteriores, entretanto não conseguia explicar suficientemente as questões relativas ao átomo (RUSSEL, 2006).

Com as descobertas sobre o átomo até o modelo de Rutherford, o mundo científico ficou ávido de novas informações e respostas acerca do átomo. Com o modelo de Rutherford, novas questões surgiram, como por exemplo: “O que faziam os elétrons na eletrosfera do átomo?”. Rutherford sugeriu, inicialmente, que o átomo teria uma estrutura “planetária”, onde o núcleo seria comparado ao sol no nosso sistema solar e os elétrons comparados aos planetas, que se moviam em órbitas fixas (RUSSEL, 2006). Há a necessidade de se ter muito cuidado com as comparações, porque assim como foi visto com o modelo de Dalton, a simples comparação do modelo de Rutherford com o sistema solar, sem a devida discussão, poderá induzir o aluno a uma compreensão incoerente da realidade.

Esse modelo de átomo sugeria que a atração elétrica do núcleo carregado positivamente mantinha um elétron carregado negativamente em órbita. Os elétrons precisariam estar em constante movimento para escapar da atração positiva do núcleo. Pensando dessa forma, quanto maior fosse a carga nuclear, mais rapidamente o elétron teria que se mover (maior velocidade)

(RUSSEL, 2006). Sendo assim, os elétrons perderiam energia e colapsariam com o núcleo.

A velocidade de qualquer elétron do átomo não pode ser maior que a velocidade da luz e, portanto, a carga nuclear não pode aumentar indefinidamente, tendo, portanto, um número máximo. Com essas informações, concluiu-se que devia existir um número finito de elementos na natureza (RUSSEL, 2006).

O modelo de Rutherford, como pôde ser observado, tem características extremamente importantes. O modelo contradiz as leis do eletromagnetismo clássico e conduziu a formulação da mecânica quântica, como poderá ser visto posteriormente.

Pode-se observar, também, que o movimento dos elétrons no interior do átomo se tornou uma grande incógnita e aparentemente, a mecânica clássica não seria capaz de explicar tal fenômeno.

A física clássica era eficiente para tratar e explicar sistemas com objetos grandes, não com partículas pequenas como os elétrons. " Na física clássica é possível prever a trajetória exata das partículas e especificar a posição e o momento em cada instante e é possível excitar os modos dos movimentos de translação, de rotação e de vibração para qualquer valor de energia pelo simples controle das forças aplicadas" (ATKINS e JONES, 2008).

Ao chegar nesse ponto do ensino dos modelos atômicos, os alunos serão apresentados a uma nova química, com interpretações de um novo ponto de vista científico, onde a física clássica não é mais suficiente para explicar os fenômenos e é relevante que os alunos vejam em que pontos a física clássica falha ao tentar explicar os fenômenos.

Uma falha definitiva da mecânica clássica diz respeito à teoria ondulatória da luz. Na física clássica, a luz é descrita como uma radiação eletromagnética, ou seja, uma radiação que é caracterizada em termos de um campo eletromagnético. A luz seria uma perturbação elétrica e magnética

oscilante que se espalha como uma onda harmônica através do espaço vazio, o vácuo. Um exemplo de vibração harmônica simples, deslocamento de x em função do tempo t é mostrado na **figura 17**. Esse campo eletromagnético é composto por um campo elétrico (atua sobre partículas carregadas, em movimento ou não) e por um campo magnético (atua sobre partículas carregadas que se movimentam) (MOORE, 2006).

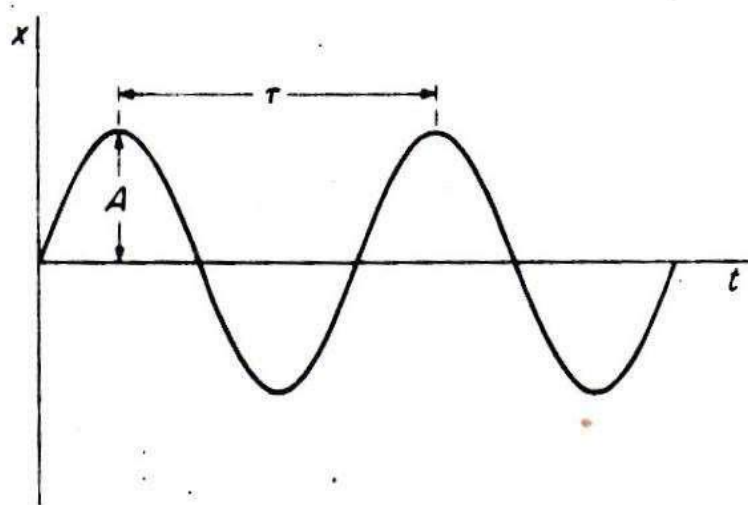


Figura 16- Uma vibração harmônica simples. Deslocamento de x em função do tempo t (MOORE, 2006).

Mas o que são ondas? Essa é uma pergunta que à primeira vista pode não parecer importante, mas é fundamental que os alunos consigam entender o conceito que será posteriormente utilizado.

Ondas são perturbações que se deslocam ou se propagam de uma região para outra do sistema. Quando uma onda se propaga, ele carrega energia (YOUNG e FREEDMAN, 2009). Temos vários tipos de onda, as mecânicas (que se deslocam através de um meio), como por exemplo, as que se propagam em uma corda, ondas do mar, entre outras.

Para produzir uma onda mecânica é necessário fornecer energia mediante um trabalho realizado sobre o sistema, portanto as ondas transmitem energia. Diferentes tipos de onda são caracterizadas por sua frequência (ν) ou seu comprimento de onda (λ), como visto na **figura 17**.



Figura 17- Comprimento de onda (imagem disponível em <http://quiprocura.net/wordpress/portfolio-item/radiacao-eletrornagnetica/>).

λ é a distância entre dois “picos” sucessivos de onda, T o tempo necessário para uma onda percorrer uma distância igual ao seu comprimento de onda e ν seria a quantidade de vezes, em um segundo, que um pico passa por um determinado ponto da corda, por exemplo. Para encontrar a velocidade de propagação de onda (v), pode-se escrever que (NASCIMENTO, 2007):

$$0.1) \quad v = \frac{\lambda}{T}$$

A frequência da onda é inversamente proporcional ao período:

$$0.2) \quad \nu = \frac{1}{T}$$

Diante das informações básicas acerca das ondas, os alunos poderão ser melhores introduzidos à primeira falha da mecânica quântica.

A primeira falha definitiva da mecânica clássica ocorreu na explicação da radiação do corpo negro. Todos os objetos existentes estão absorvendo e emitindo radiação continuamente, porém as propriedades de absorção e emissão de um mesmo objeto podem ser diferentes. Um objeto pode absorver pouco da luz visível e absorver muito do ultravioleta. Na **figura 18** é mostrado o espectro eletromagnético e a classificação das regiões espectrais:

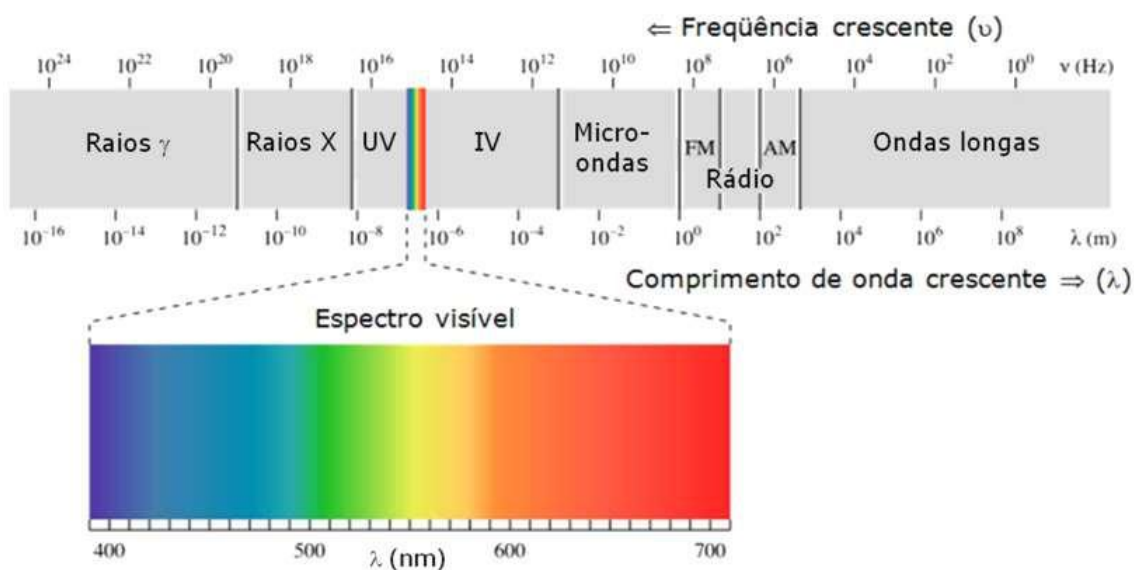


Figura 18- Espectro eletromagnético (imagem disponível em <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?author=1&paged=2>).

Para um corpo estar em equilíbrio com o seu ambiente, a radiação por ele emitida deve ser equivalente (em comprimento de onda e energia) à radiação que absorve (MOORE, 2006). É possível criar objetos que sejam perfeitos absorventes de radiação, esses objetos são chamados de corpos negros ideais.

Num laboratório, o melhor corpo negro é uma cavidade capaz de emitir e absorver uniformemente todas as frequências da radiação. Essa cavidade é construída com paredes isolantes e, numa delas, um pequeno orifício é feito. Por esse orifício, o corpo emite uma radiação que foi absorvida e reemitida muitas vezes pelas paredes internas da cavidade, a uma temperatura constante T . Essa seria a radiação de um corpo negro ideal (MOORE, 2006).

As radiações emitidas pelo corpo negro ideal possuem várias oscilações e, as frequências estão distribuídas entre essas oscilações. Otto Lummer e E. Pringsheim (1877-1900) exploraram experimentalmente, pela primeira vez, o problema das frações da energia total que é irradiada dentro de cada intervalo de comprimento de onda. Os resultados podem ser vistos na **figura 19** abaixo (MOORE, 2006):

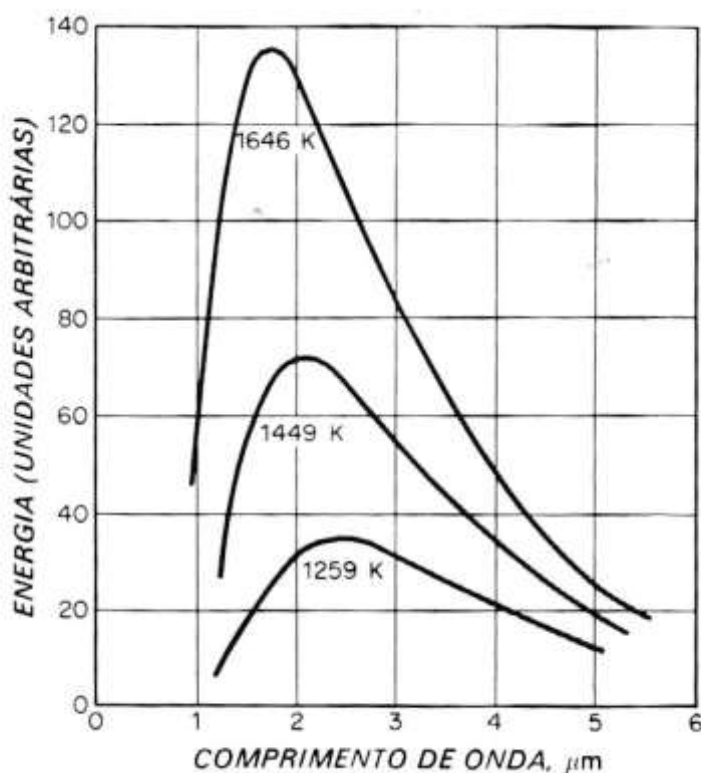


Figura 19 – Medidas experimentais de Lummer e Pringsheim sobre a distribuição espectral da radiação do corpo negro a três temperaturas diferentes (MOORE, 2006).

Cabe lembrar aos alunos, nesse momento, que um oscilador é qualquer sistema que apresenta um movimento oscilatório (movimento de vai-e-vem) em torno de um ponto de equilíbrio.

Segundo a teoria clássica, a energia média não depende da frequência do oscilador e sim da determinação do número de vibrações permitidas nas faixas de frequência. Um teorema chamado de Princípio de equipartição, conceito da mecânica clássica, prevê que todas as frequências teriam a mesma energia média, sendo assim, quando um corpo fosse aquecido, a intensidade I da radiação também aumentaria (MOORE, 2006). Por exemplo, um aço aquecido emite diferentes cores conforme sua temperatura aumenta (ocorre transformação de energia térmica em energia luminosa). De acordo com a física clássica, o aço deveria, então, emitir mais energia ao ter sua temperatura aumentada até emitir radiação ultravioleta que o olho humano não consegue ver. Em outras palavras, o aço se tornaria invisível, mas sabe-se que isso não ocorre, o aço sempre permanece visível. Essa falha da mecânica clássica recebeu o nome de Catástrofe do ultravioleta.

Em 1900, Max Planck (físico inglês), assim como outros cientistas, tentou explicar os resultados obtidos no experimento de Lummer e Pringsheim (MOORE, 2006).

Planck era um estudioso e defensor da mecânica clássica, entretanto não encontrou nela as respostas de que precisava. Planck concluiu que, ao invés do que propunha a mecânica clássica, se a energia de cada oscilador eletromagnético tivesse limitada a valores discretos, poder-se-ia explicar os resultados experimentais que o haviam intrigado.

O fato de a energia só poder ter valores discretos foi chamado de quantização de energia. Seriam como “pacotes descontínuos de energia”, chamados de “quanta”, plural de quantum (do latim que significa quantidade).

Para reproduzir a distribuição de valores da **figura 19**, Planck admitiu que a energia fosse múltiplo inteiro de (MOORE, 2006):

0.3) $E = h \nu$

O h é uma constante chamada de constante de Planck, que possui dimensão de energia vezes tempo. No **S.I.** $h = (6,6262) \times 10^{-34} \text{ J.s}$ (MOORE, 2006).

Com essa hipótese de os osciladores só se excitarem quando pudessem adquirir energia pelo menos igual a $h\nu$, os osciladores de frequência muito alta precisariam de muita energia, e não há energia suficiente disponível, assim extingue-se as contribuições dos osciladores de alta frequência, como mostrado novamente na **figura 19**.

Voltando ao assunto de radiação, um corpo qualquer quando é aquecido (energia térmica), se livra dessa energia que absorveu por um processo chamado de radiação. A radiação que é emitida por um corpo qualquer devido à sua temperatura é chamada de radiação térmica (NASCIMENTO, 2007).

Essa radiação térmica pode e é eliminada, por alguns corpos, na forma de emissão de luz.

O que ocorre quando um corpo emite luz é algo aparentemente peculiar. Ao ver um objeto, por exemplo, azul, enxerga-se uma cor apenas, entretanto há, na verdade, uma combinação de várias cores. A cor mais intensa que é emitida é a que se observa, essa cor varia de acordo com a temperatura do corpo, como já dito anteriormente.

Um bom exemplo de decomposição da luz é quando um CD é apontado para uma fonte de luz (uma lâmpada, por exemplo) , sendo inclinado de várias maneiras até a observação de várias cores, essas cores formam um conjunto chamado espectro (NASCIMENTO, 2007).

Outro exemplo está na **figura 20** abaixo: a decomposição da luz por um prisma (dispositivo usado para separar a radiação).

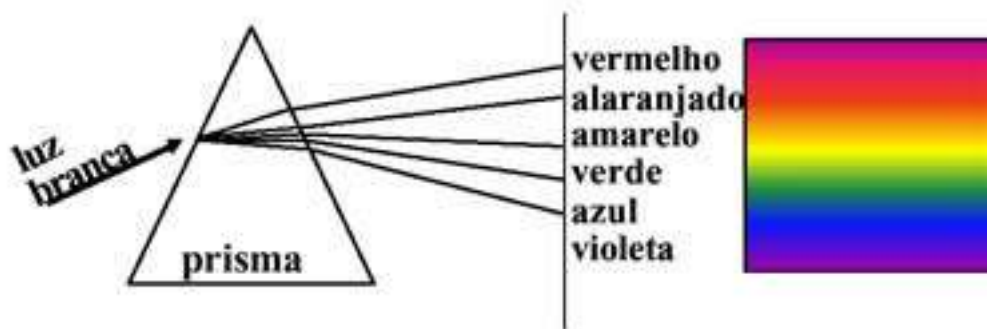


Figura 20- Decomposição da luz por um prisma (imagem disponível em http://www.sobiologia.com.br/conteudos/oitava_serie/optica2.php).

A figura acima mostra parte do espectro da luz solar, denominada de espectro visível (que se pode ver). O olho humano só consegue perceber certas componentes, as demais estão em outras regiões do espectro que não se pode ver.

No século XVII, Isaac Newton começou a estudar óptica e anos depois resolveu comprar um prisma de vidro para tentar entender os fenômenos das cores:

"Tendo meu quarto escurecido e feito um pequeno orifício no anteparo da janela, para permitir a entrada de uma quantidade conveniente de luz solar, coloquei meu prisma à sua entrada de modo que pudesse ser refratado para a parede oposta" (MOORE, 2006).

A partir de várias experiências, Newton deduziu que a luz branca era decomposta pelo prisma em espectro de cores, ele foi o primeiro a interpretar corretamente esse fenômeno. Essa constatação marcou o começo da Espectroscopia (MOORE, 2006).

Após a interpretação coerente de Newton sobre as coisas, descobertas que envolviam a espectroscopia aconteceram. Os raios infravermelhos e ultravioletas foram descobertos experimentalmente.

Nessa mesma época, muitos cientistas e pesquisadores estudaram os espectros. Um desses foi o Kirchhoff que enunciou sua lei “A relação entre o poder de emissão e o poder de absorção para raios do mesmo comprimento de onda é constante para todos os corpos à mesma temperatura”. Portanto, se um corpo absorve luz de um dado comprimento de onda, também emite luz nesse mesmo comprimento de onda (MOORE, 2006).

De modo geral, observa-se até agora que as energias dos átomos e do campo eletromagnético são quantizadas. Resultados experimentais dessa época levaram a conclusões interessantes. Uma das experiências mostra que a radiação eletromagnética (tratada como onda pela física clássica) exibe características de partículas. Outra experiência mostra que os elétrons (tratados como partícula pela física clássica) também exibem características de ondas (ATKINS e JONES, 2008).

Uma das experiências mais notáveis que mostrava que a radiação corpuscular possuía características de partículas foi o efeito fotoelétrico. E no que consiste esse efeito fotoelétrico?

Primeiramente, vale lembrar que a radiação eletromagnética possuía somente energias quantizadas, como se fossem partículas, cada uma com energia $h\nu$. Essas partículas são chamadas, atualmente, de fótons.

O efeito fotoelétrico consiste na emissão de elétrons por uma superfície (metálica) quando se incide sobre essa uma determinada radiação eletromagnética, geralmente a radiação ultravioleta.

Segundo o modelo ondulatório da luz, ao aumentar a intensidade da luz, os elétrons deveriam sair com maior energia, entretanto não foi o observado no efeito fotoelétrico.

Em 1902, Lenard observou, por meio de experiências, que aumentando a intensidade (brilho) da radiação, mais elétrons eram emitidos, mas nada mudava no que diz respeito à energia dos elétrons. Ele observou também que, aumentando a frequência da luz, a energia dos elétrons aumentava. Ou seja,

experimentalmente, a energia cinética máxima dos elétrons dependia da frequência da luz incidente (PINHEIRO et al, 2012).

Em 1905, Albert Einstein elaborou uma teoria para o efeito fotoelétrico, tendo em mãos os dados experimentais de Lenard e a teoria de Planck, que admitia que os osciladores que compunham o corpo negro eram quantizados (MOORE, 2006).

Segundo Einstein, a própria radiação seria quantizada, a energia seria discreta e se propagaria por pacotes. Para um elétron ser arrancado da superfície do metal, ele deve colidir com uma partícula que tenha energia suficiente para arrancá-lo, no efeito fotoelétrico, essa partícula seria um fóton (MOORE, 2006).

O elétron está “preso” ao metal por uma função trabalho (Φ) e o fóton tem que possuir uma energia maior que a função trabalho para que o elétron possa ser emitido (ATKINS e JONES, 2008).

Sabe-se que a energia de um fóton é igual a (ATKINS e JONES, 2008):

$$0.4) \quad E_{\text{fóton}} = h \nu$$

Se a $E_{\text{fóton}}$ for maior que Φ , há emissão de elétrons.

Se a $E_{\text{fóton}}$ for menor que Φ , não há emissão de elétrons.

A conservação de energia exige que a energia cinética do elétron emitido seja, portanto (ATKINS e JONES, 2008):

$$0.5) \quad \frac{1}{2} m_{\text{elétron}} \cdot v^2 = h \nu - \Phi$$

Lembrando que:

$$0.6) \quad E_{\text{cinética}} = \frac{1}{2} m \cdot v^2$$

Onde $m = \text{massa}$ e $v = \text{velocidade}$.

O efeito fotoelétrico mostrou que o fóton (radiação eletromagnética) também tem caráter corpuscular.

Em 1927, Clinton Davsson e Lester`Germer realizaram a experiência decisiva para a observação do caráter ondulatório das partículas (ATKINS e JONES, 2008).

Eles observaram que um cristal de níquel (cristalizado por acidente) teve os planos ordenados dos seus átomos atuando como uma rede de difração. A difração é a interferência por um corpo no caminho das ondas, ou seja, é uma característica das ondas. A **figura 21** a seguir mostra o que foi observado (ATKINS e JONES, 2008):



Figura 21- experiência de Davisson- Germer. O espalhamento de um feixe de elétrons por um cristal de níquel mostra uma variação de intensidade característica de uma difração, na qual as ondas interferem construtiva ou destrutivamente em diferentes direções no espaço (ATKINS e JONES, 2008).

A experiência foi repetida com outras partículas e elas também comprovaram que de as partículas possuem propriedades ondulatórias.

O retoque que faltava para as conclusões sobre o caráter ondulatório das partículas foi feito pelo físico Louis de Broglie. Ele sugeriu que qualquer partícula, não apenas os fótons possuem um comprimento de onda, ou seja, a matéria e a radiação têm um duplo caráter, de onda e de partícula. Esse duplo caráter foi chamado de dualidade onda-partícula (ATKINS e JONES, 2008).

A falha da física clássica no tratamento de corpos pequenos mostrou a necessidade de uma nova mecânica para atender às novas necessidades.

5.5- Bases nas quais se fundamenta a Química Quântica e suas consequências em termos da elaboração do modelo atômico moderno.

5.5.1- Nascimento da Química Quântica

Apesar do desenvolvimento da espectroscopia, a correta interpretação dos espectros atômicos só foi possível através do físico Niels Bohr.

Bohr acabou unindo duas correntes principais da física, a escola alemã de física teórica, representada por Planck e Einstein, e a escola inglesa dos físicos experimentais, de Thomson e Rutherford (MOORE, 2006).

Analisando o modelo de Rutherford, concluiu que, os antigos princípios da física teórica deveriam ser falsos. Bohr queria entender a estabilidade do átomo de Rutherford. Bohr resolveu o problema do espectro atômico aproveitando as idéias antigas que estavam corretas, entre elas, aplicou a regra de Ehrenfest ao momentum angular do elétron e sendo assim, o momentum angular é $L = n(h/2\pi)$, onde n é um número inteiro (MOORE, 2006).

Bohr supôs que os elétrons girariam ao redor do núcleo, movendo-se em trajetória circular, como mostrado na **figura 22**:

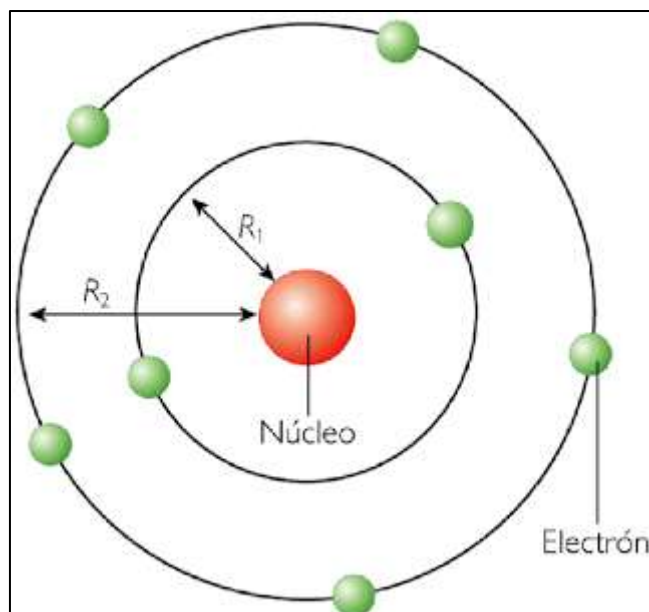


Figura 22 – Proposição de Bohr (imagem disponível em <http://emissaodeluz.blogspot.com.br/>).

A trajetória sendo circular, o elétron giraria em torno do núcleo a uma distância fixa \vec{R} , só restava saber qual seria o valor desse \vec{R} (NASCIMENTO, 2007).

Numa trajetória circular, a velocidade do elétron sempre está mudando de direção, pois caso não mudasse, percorreria uma trajetória retilínea e não circular. Como a velocidade sempre está mudando, o elétron está sendo acelerado e para acelerar qualquer corpo, é preciso que haja uma força atuando sobre este. De acordo com a segunda lei de Newton, a relação entre a força que atua sobre o corpo e a massa do corpo \mathbf{m} é (NASCIMENTO, 2007):

$$0.7) \quad \vec{F} = m \cdot \vec{a}$$

Onde **a** é a aceleração do corpo.

A pergunta que se faz é qual é a força que atua sobre o elétron para mantê-lo numa trajetória circular ao redor do núcleo?

A força responsável pela aceleração do núcleo é a força centrípeta, sempre dirigida na direção do núcleo. A força, no movimento circular, tem a mesma direção da aceleração. A equação da força é dada por (NASCIMENTO, 2007):

$$\mathbf{0.8) \quad F = k \cdot \frac{q_e \cdot q_q}{R^2}}$$

Onde q_e e q_q são cargas do elétron e do próton e **k** uma constante introduzida para que as duas últimas equações estejam nas mesmas unidades (NASCIMENTO, 2007).

Lembrando que numa trajetória circular de raio **R**, a aceleração é dada por:

$$\mathbf{0.9) \quad A = \frac{v^2}{R}}$$

Onde **v** é a velocidade, em módulo.

Substituindo a equação **0.9** na equação **0.7**, em módulo e igualando na equação **0.8**, obtêm-se (NASCIMENTO, 2007):

$$\mathbf{0.10) \quad R = \frac{K \cdot q^2}{mv^2} \quad \text{ou} \quad v^2 = \frac{K \cdot q^2}{mR}}$$

Levando em consideração que, em módulo, as cargas são iguais.

Analisando as equações acima, verifica-se que, em princípio, se a velocidade puder ser medida e a carga e massa do elétron for conhecida, Bohr poderia determinar a distância do elétron ao núcleo do átomo de hidrogênio (o átomo mais simples). Além disso, como **K** é constante e a massa e carga não variam, somente poder-se-á variar a velocidade do elétron. Sendo assim, para

mudar o raio da trajetória, dever-se-á mudar o valor da velocidade. (NASCIMENTO, 2007). Mudando a velocidade do elétron significa mudar o valor de sua energia, como se pôde observar na **equação 0.6** (energia cinética), vista anteriormente.

Nesse ponto pode parecer complicada a inserção de várias equações, entretanto essas equações são de fácil compreensão para os alunos do ensino médio, que já estão habituados com equações de primeiro e segundo grau na disciplina matemática. O importante é que as equações sejam apresentadas em seus devidos contextos. Não necessariamente há a necessidade de desenvolvimento de todas as equações, pois a ideia é ser uma apresentação mais geral.

A energia total do elétron no átomo de hidrogênio é composta por energia cinética e energia potencial. Lembrando que o átomo de hidrogênio é, nesse momento, o “objeto” de estudo, pois é o átomo mais simples, composto apenas por um elétron. A equação referente à energia cinética já foi mostrada. A energia potencial (dependente da posição do elétron em relação ao núcleo) é associada à força de Coulomb e é então chamada de potencial de Coulomb, definida como (NASCIMENTO, 2007):

$$0.11) E_p = K \cdot \frac{q_e \cdot q_q}{R} = -K \frac{q^2}{R}$$

Onde $q_p = -q_e$. A energia total do elétron seria, então, a soma da energia cinética e potencial (NASCIMENTO, 2007):

$$0.12) E_t = E_c + E_p = -K \frac{q^2}{2R}$$

Pela equação **0.11**, podemos determinar o raio da trajetória do elétron caso o valor de sua energia seja conhecido. Só nos resta saber como medir a energia de átomo.

Já vimos anteriormente que Planck relacionou a energia com o comprimento de onda, assim, medindo o comprimento de onda, poderemos saber quanto de energia foi absorvida ou emitida pelos átomos de um determinado material.

Bohr observou experimentalmente o espectro do átomo de hidrogênio e, percebeu que, diferentemente do espectro visível da luz solar, o átomo de hidrogênio só tinha quatro componentes que corresponderiam a certas tonalidades de vermelho, verde, azul e violeta. O espectro visível da luz solar é contínuo, enquanto que o espectro do átomo de hidrogênio é discreto, como mostrado na **figura 23** abaixo:

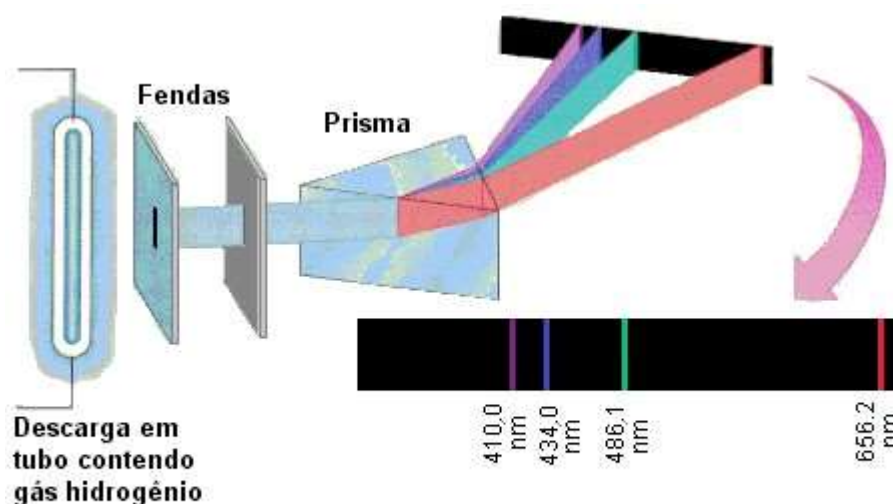


Figura 23- Espectro do átomo de hidrogênio (disponível em http://www.feiradeciencias.com.br/sala23/23_MA02.asp).

Para realizar experiências com átomos de outros elementos é mais complicado, mas mesmo assim é possível fazer e o resultado é semelhante, todos os espectros são discretos. Além disso, pede-se observar que nenhum espectro é igual ao outro, sendo assim, um elemento pode ser identificado pelo seu espectro (NASCIMENTO, 2007).

Os átomos de hidrogênio só emitem certas quantidades de energias, isso implica em dizer que eles só são capazes de absorver certas quantidades de energia. De acordo com a **equação 0.12**, se eles só emitem certas quantidades de energia, seus elétrons só podem girar em certas órbitas também, com valores de raio bem definidos (NASCIMENTO, 2007).

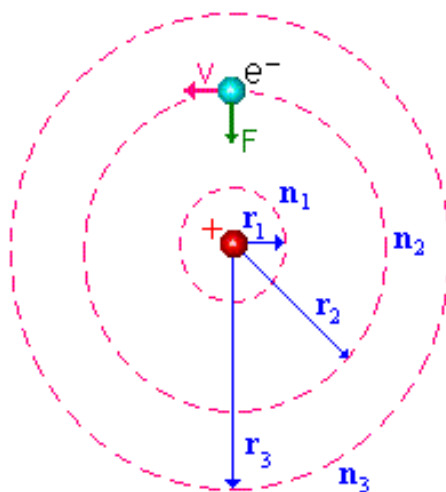


Figura 24- Átomo de Bohr: órbitas circulares e estáveis (disponível em <http://ensinoadistancia.pro.br/EaD/QG/aula-5/aula-5.html>).

Bohr tentou explicar a origem do espectro de hidrogênio . Bohr propôs que, inicialmente, os elétrons estariam em seu estado de menor energia possível (E_1) , girando em torno do núcleo a uma distância fixa r_1 , esse estado de menor energia foi chamado de estado fundamental. Com a passagem de descarga elétrica, alguns átomos absorveriam certas quantidades bem definidas de energia e então, passariam a ocupar estados de maior energia do átomo ($E_2, E_3...$), com elétrons em raios respectivamente r_2, r_3 etc, esses estados foram chamados de estados excitados. Após a passagem da descarga

elétrica, os átomos se livrariam da energia em forma de radiação eletromagnética (luz), voltando ao estado fundamental com elétrons retornando à órbita de raio r_1 (NASCIMENTO, 2007).

Pode-se calcular o quanto de energia um átomo absorveu raciocinando da seguinte forma: se um átomo foi pro estado de energia E_2 , então ele absorveu uma quantidade de energia $\Delta E_{12} = E_2 - E_1$. Após o processo de absorção de energia, os átomos ficam com excesso de energia igual a ΔE_{12} , ΔE_{13} , ΔE_{14} etc e como se livram desse excesso de energia emitindo luz, essa terá componentes com energias iguais a ΔE_{12} , ΔE_{13} , ΔE_{14} etc. A energia da luz, como visto anteriormente, está relacionada com seu comprimento de onda e com a sua frequência (NASCIMENTO, 2007):

$$\mathbf{0.13) \quad \Delta E_{12} = h \nu_{12} \quad \Delta E_{13} = h \nu_{13} \quad \Delta E_{14} = h \nu_{14} \quad \text{etc.}}$$

Portanto, ao se determinar os comprimentos de onda das componentes da luz emitida pelos átomos de hidrogênio, estararar-se-á determinando as diferenças de energia entre o estado fundamental e os estados excitados do átomo de hidrogênio (NASCIMENTO, 2007).

A energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio é igual à energia necessária para criar o íon H^+ , isto é, para separar completamente o elétron do núcleo do átomo. Essa energia é chamada de energia de ionização ou de potencial de ionização. Bohr encontrou uma expressão matemática que lhe possibilitou calcular o comprimento de onda e a frequência de todas as componentes do espectro do átomo de hidrogênio, e, segundo esses cálculos conseguiu achar que o elétron estaria girando numa órbita circular de raio igual a **0,529 Å** (NASCIMENTO, 2007).

Nesse ponto se consegue explicar o espectro observado do átomo de hidrogênio pela mudança de estado de energia dos átomos, mas o que se precisa verificar é se realmente os elétrons se movem ao redor do núcleo, em órbitas circulares, com raios bem definidos.

É importante lembrar que, diferentemente do que faz parte do mundo macroscópico, precisa-se medir a posição dos elétrons, em intervalos de tempo pequenos, para ter certeza de que ele realiza uma trajetória circular.

No mundo macroscópico, consegue-se ver os objetos, pois estes refletem a luz incidente sobre eles, sem a luz, não se conseguiria observar nada.

Para tentar determinar a posição do elétron, tentou-se iluminar o elétron, para com isso, detectar a luz que ele defletiria. Sabendo de onde a luz vinha, poder-se-ia saber onde o elétron se encontrava no instante em que foi iluminado. A radiação necessária para iluminar o elétron deveria ter o menor comprimento de onda possível, que implicaria em possuir a maior energia possível. Tomando como base o raio da órbita de Bohr para o estado fundamental, que seria nosso comprimento de luz a se utilizar. Observando o espectro eletromagnético (**figura 18**), vê-se que esse comprimento de onda está na região dos **raios- X** (NASCIMENTO, 2007).

A grande questão que aqui se estabelece é que um feixe de **raios-X**, com muita energia, incidindo sobre o elétron que é extremamente pequeno faria com que este fosse arremessado para uma posição impossível de se determinar. Poderíamos saber exatamente a posição do elétron no instante em que parte da luz incidente fosse refletida e detectada mas no instante posterior, não poderíamos saber. Ou seja, o processo de medida interfere na trajetória do elétron (NASCIMENTO, 2007).

Não há, nesse momento, a possibilidade de se testar se o elétron gira realmente numa órbita circular em torno do núcleo. Nem, ao menos, pode-se saber qual o tipo de trajetória, se é circular, elíptica ou qualquer outra.

Um dos resultados mais famosos da mecânica quântica foi o princípio da Incerteza de Heisenberg, que dizia: É impossível especificar, simultaneamente e com a precisão que se quiser, o momento e a posição de uma partícula (ATKINS e JONES, 2008).

5.5.2 - Átomo de Schrödinger

Após a apresentação do modelo de Bohr, suas contribuições e suas insuficiências, os alunos serão apresentados a um modelo de átomo que não se preocupa em fazer hipóteses sobre a trajetória dos elétrons ao redor no núcleo do átomo.

Antes de apresentar o próximo modelo do átomo, é importante apresentar aos alunos alguns conceitos que serão de grande importância para seu entendimento. Os conceitos serão o de probabilidade e o de função, com esses, teremos as ferramentas necessárias para auxiliar os alunos na compreensão do tema proposto.

A palavra probabilidade, do Aurélio, qualidade de provável, significa que há possibilidade de alguma coisa acontecer. Pode-se exemplificar da seguinte forma; é bem provável que o inverno no Rio de Janeiro desse ano seja muito quente, ao dizer isto, indica-se que há boas possibilidades disso acontecer, mas não há a eliminação da possibilidade disso não acontecer, sendo assim, o inverno no Rio de Janeiro pode não ser muito quente, mas a chance disso acontecer é menor. Há um grau de incerteza sobre o acontecimento.

Normalmente o conceito de probabilidade é quantificado (NASCIMENTO, 2007), por exemplo, ouve-se dizer que em tal dia a probabilidade de chuva é de 70%. Uma das maneiras mais simples de definir a probabilidade de determinado evento ocorrer é obter a razão entre o número de casos favoráveis pelo total de casos possíveis.

Por exemplo, você está passando patê em um biscoito e esse biscoito cai no chão, há duas possibilidades para a queda dele, levando-se em consideração que ele não quebre, o biscoito pode cair com a parte do patê pra baixo ou para cima:

Possibilidade da parte do patê para cima: $\frac{1}{2} = 0,5$ ou 50 %

Possibilidade da parte do patê para baixo: $\frac{1}{2} = 0,5$ ou 50%

O outro conceito muito importante é o de função. Nesse ponto, pode parecer repetitivo ou dispensável falar sobre as funções, uma vez que se pressupõe que os alunos o tenham aprendido na disciplina de matemática, mas um leve resumo ajudará o aluno a entender melhor o desenvolver da teoria Quântica

As funções podem e são aplicadas a várias situações cotidianas, mesmo que não sejam percebidas de maneira direta. As funções podem ser usadas para calcular, por exemplo, o total a se pagar numa loja de vestuário, ao se adquirir peças de roupas. Supondo que uma loja vende saias a R\$ 50,00 e blusas a R\$ 30,00 e uma moça resolve comprar, nessa loja, duas saias e quatro blusas, a vendedora pode, facilmente, calcular o total a ser recebido, pela cliente, da seguinte forma:

$$\mathbf{0.14) \text{“Total a pagar”} = (2) \times (50,00) + (4) \times (30,00)}$$

A cliente pagaria, então, 220 reais. A expressão acima define a função por meio da qual podemos obter o total a ser pago, sabendo a quantidade de peças compradas. O total a pagar é uma função do número de peças. Para simplificar ainda mais a expressão acima, utiliza-se símbolos para representar as quantidades. O símbolo pode ser qualquer um, normalmente letras do alfabeto são utilizadas. O importante é definir distintamente o que cada símbolo significa e não utilizar o mesmo símbolo para representar coisas diferentes. Assim, pode-se escrever a expressão acima da seguinte forma:

$$\mathbf{0.15) W = 50,00 k + 30,00 x}$$

Onde **w** é o total a pagar, **k** a quantidade de saias e **x** a quantidade de blusas. O **x** antes utilizado para sinalizar a operação de multiplicação foi suprimido para que não fosse confundido com o símbolo **x** que representa a quantidade de blusas, **30,00 x** significa 30 vezes o valor de **x**. A função acima

depende então de duas variáveis, o k e o x e os preços das peças são constantes.

O valor de w dependerá dos valores das variáveis k e x , isso quer dizer que a variável w é dependente e as variáveis k e x são independentes. O que é preciso reparar é que se pode escolher qualquer valor inteiro e positivo para as variáveis independentes. O conjunto de valores de k e x , para os quais $w = f(k, x)$ pode ser definida, é chamado de domínio da função e o conjunto de valores da função é chamado de contradomínio.

O que foi visto até agora no que diz respeito às funções foi por meio da sua expressão matemática, que fornece um valor exato. Porém, algumas vezes o que importa é o comportamento da função à medida que sua variável independente assume inúmeros valores (NASCIMENTO, 2007).

A representação gráfica de uma função de única variável $y = f(x)$, com um ponto P_1 está na **figura 25** abaixo. Lembrando que, a escala de eixo horizontal é chamada de abscissa e é onde é marcado um determinado valor da variável independente. A escala do eixo vertical é chamada de ordenadas e é onde é marcado o valor da variável dependente corresponde.

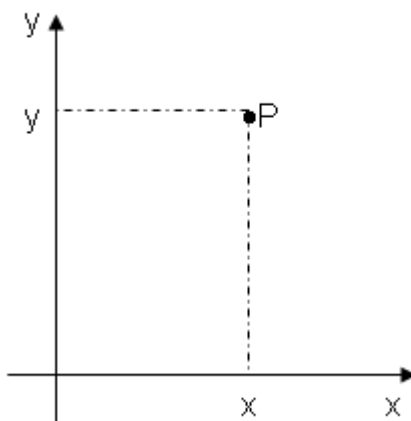


Figura 25- Representação gráfica de uma função de uma única variável $y = f(x)$ (imagem disponível em <http://www.ebah.com.br/content/ABAAAfZzsAB/coordenadas-polares>).

De maneira similar, determinando a posição de muitos outros pontos, ficando próximos uns dos outros e ligando todos eles por uma linha, obtém-se a representação gráfica da função $f(x)$.

Para uma função com uma única variável, observa-se que a representação gráfica se apresenta somente em dois eixos coordenados, sendo sempre linhas (curvas ou retas) no plano definido pelos dois eixos coordenados. Já com uma função com mais de uma variável, por exemplo, $z = f(x, y)$, existem três eixos coordenados, um para o valor da função z e dois para as variáveis independentes x e y , como pode ser observado na **figura 26** abaixo:

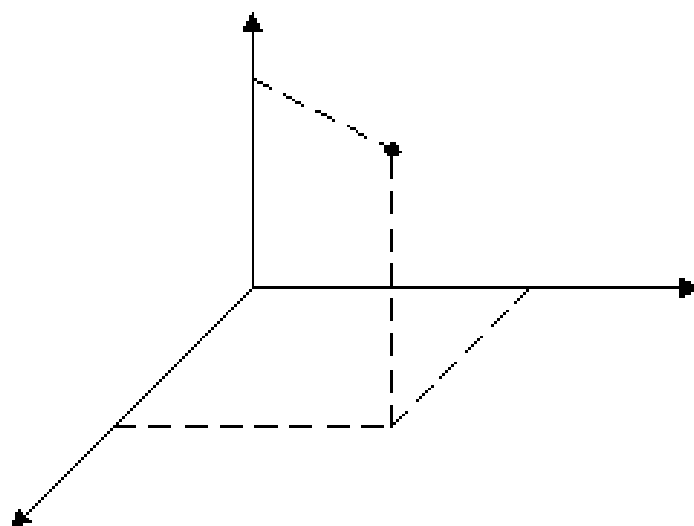


Figura 26- função com mais de uma variável $z = f(x, y)$ (imagem disponível em <http://www.ebah.com.br/content/ABAAAAsAkAl/apostila-dinamica>).

Um exemplo de função com uma variável seria $f(x) = x - 1$ está mostrado na **figura 27** abaixo,

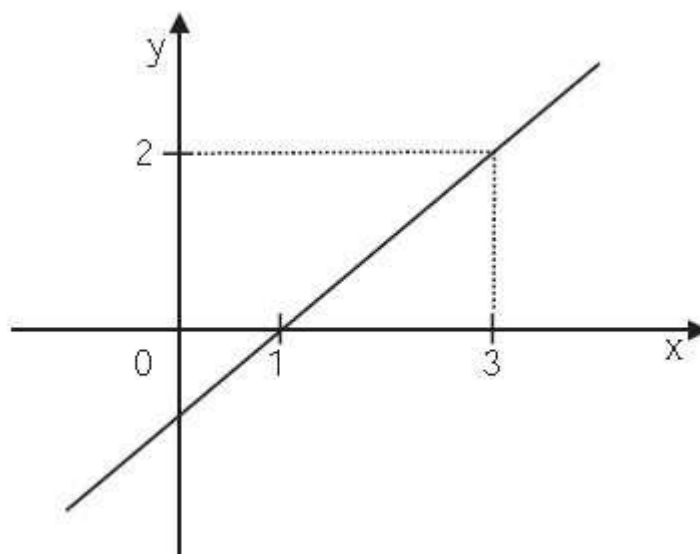


Figura 27- Função $f(x) = x - 1$ (imagem disponível em <http://carlinhosmatematica.blogspot.com.br/2014/06/o-grafico-abaixo-representa-uma-funcao.html>).

Um exemplo de função com mais de uma variável seria $f(x, y) = x^2 - 2y^2$ está mostrado na **figura 28** abaixo,

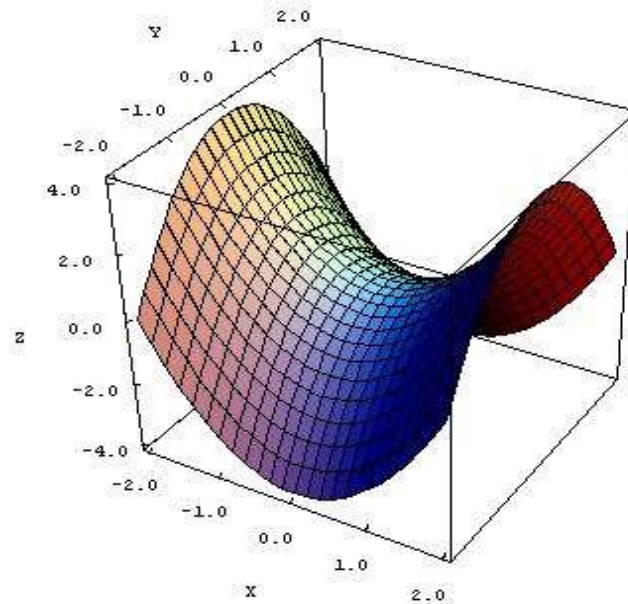


Figura 28- Função $f(x, y) = x^2 - 2y^2$ (imagem disponível em http://www.igm.mat.br/aplicativos/index.php?option=com_content&view=article&id=615:curvanivel&catid=91:cdi2).

Pode-se representar um ponto **P** do gráfico de uma função em coordenadas polares como mostrado na **figura 29** abaixo:

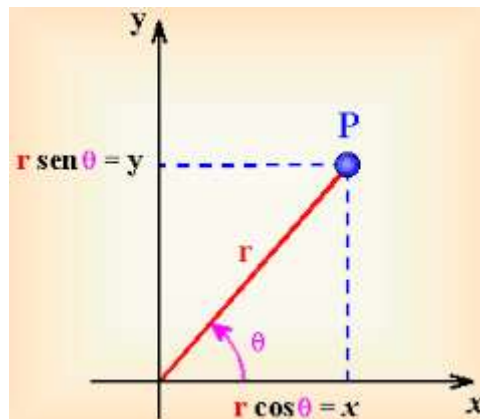


Figura 29- Representação de um ponto P em coordenadas polares (imagem disponível em http://www.igm.mat.br/aplicativos/index.php?option=com_content&view=article&id=429%3Apolares&catid=72%3Aplano&Itemid=44).

Por definição:

0.16) $\text{sen } (\theta) = \text{cateto oposto ao ângulo} / \text{hipotenusa}$

0.17) $\text{cos } (\theta) = \text{cateto adjacente ao ângulo} / \text{hipotenusa}$

A partir das definições acima, obtêm-se que,

$$\mathbf{0.18) \text{ sen } \theta = \frac{y}{r} \quad \text{ou} \quad y = r \text{ sen } \theta}$$

$$\mathbf{0.19) \text{ cos } \theta = \frac{x}{r} \quad \text{ou} \quad x = r \text{ cos } \theta}$$

As coordenadas (r, θ) são chamadas de polares e as (x, y) são chamadas de cartesianas.

No caso de uma função com duas variáveis também podemos representar em coordenadas polares. A **figura 30** exemplifica:

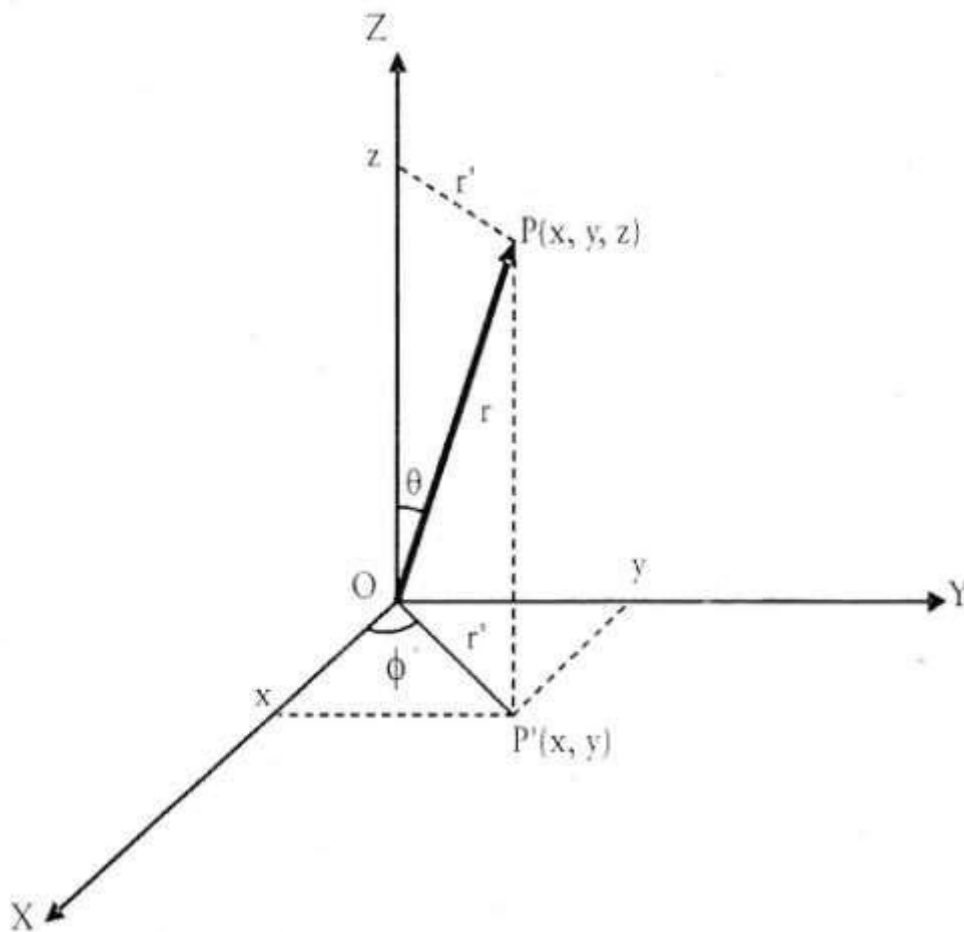


Figura 30- Representação de um ponto P qualquer em termos das suas coordenadas cartesianas (x, y, z) e polares (r, θ, ϕ) (NASCIMENTO, 2007)

Onde,

$$0.20) X = r \operatorname{sen} \theta \cos \Phi$$

$$0.21) Y = r \operatorname{sen} \theta \cos \Phi$$

$$0.22) Z = r \cos \theta$$

Tendo compreendido os conceitos anteriores, entrar-se-á, de fato na apresentação do modelo proposto por Schrödinger.

O que é importante salientar, antes da apresentação do modelo, é a necessidade de abstração que este exigirá, uma vez que esse modelo pretende descrever o comportamento dos átomos e moléculas, que não se tem acesso direto. Além disso, é importante lembrar que esse modelo não incorpora a noção de trajetória (NASCIMENTO, 2007).

Erwin Schrödinger desenvolveu uma equação que calculava a energia dos sistemas quânticos, priorizando o comportamento dos elétrons nos átomos a partir da mecânica ondulatória, os átomos e moléculas são tratados como criações mais ou menos temporárias dentro do campo de ondas (NASCIMENTO, 2007; SILVA e CUNHA, 2008).

Os detalhes matemáticos da equação de Schrödinger são extremamente complexos para o ensino de Química do segundo grau, entretanto, os resultados da aplicação da equação são completamente passíveis de entendimento pelos alunos.

A equação de Schrödinger é denominada equação de autovalor, a solução desse tipo de equação fornece um conjunto de funções chamadas de autofunções representadas por autovalores, conjunto de números (NASCIMENTO, 2007).

Os autovalores da equação de Schrödinger correspondem aos possíveis valores de energia do átomo. É importante saber que a equação de Schrödinger só tem solução possível para certos valores de energia do átomo e de momento angular do átomo, isso confirma a discretização da energia, como já mostrava Bohr (NASCIMENTO, 2007).

A expressão, obtida da equação de Schrödinger, a seguir fornece os possíveis valores de energia para o átomo de hidrogênio (NASCIMENTO, 2007):

$$0.23) E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$$

Onde, **h** é a constante de Planck, já vista anteriormente, **c** a velocidade da luz, **R** uma constante chamada de constante de Rydberg e **n** um número inteiro, cujo menor valor é um (podendo ser $n = 1, 2, 3, 4, 5$ etc.) (NASCIMENTO, 2007).

Na expressão acima, o **n** é chamado de número quântico principal, por ele ser a única variável e só poder ter valores discretos, variando **n**, varia-se a energia, portanto ele define o valor da energia. A unidade de medida de energia dependerá do sistema de unidades escolhido (NASCIMENTO, 2007).

O **n**, geralmente, é apresentado aos alunos de forma simplória e sem significado. Os alunos aprendem a fazer a distribuição eletrônica utilizando os valores de **n** sem entender bem de onde esse número surge. Por isso é importante mostrar o significado dele na expressão.

Os possíveis valores de momento angular para o elétron no átomo de hidrogênio, também obtidos da equação de Schrödinger, são (NASCIMENTO, 2007):

$$0.24) L = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)}$$

Onde **l** é um número inteiro cujo menor valor é igual a **zero** (podendo ser $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ etc.). O **l** é chamado de número quântico de momento angular ou número quântico orbital e ele quantifica o valor do momento angular (NASCIMENTO, 2007).

Da resolução da equação de Schrödinger, há um terceiro número quântico, m , chamado de número quântico magnético. Os possíveis valores de m são (NASCIMENTO, 2007):

$$0.25) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4 \text{ etc.}$$

O m recebe o nome de número quântico magnético porque um átomo tem seus níveis de energia modificados quando interage com um campo magnético externo, os níveis de energia passam a depender de m (NASCIMENTO, 2007).

Os valores de n , l e m não são independentes entre si, e isso também vem da resolução da equação de Schrödinger. Para um dado valor de n , os possíveis valores de l são (NASCIMENTO, 2007):

$$0.26) \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

Da mesma forma, para um dado valor de l , os possíveis valores de m são (NASCIMENTO, 2007):

$$0.27) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Por exemplo, para $n = 1$,

$$0.28) \quad l = 0 \text{ e } m = 0$$

O valor de l é apresentado para os alunos com uma notação espectroscópica, que existia antes de Schrödinger. Tal notação se dá em forma de letras. Assim, como na tabela 1 (ATKINS e JONES, 2008):

l	0	1	2	3	4	5	6...
Letra	s	p	d	f	g	h	i

A letra j é pulada, pois esta já é utilizada para outra finalidade, como será mostrada mais adiante (NASCIMENTO, 2007).

Uma importante informação a ser fornecida aos alunos nesse ponto do estudo de modelos atômicos, é que qualquer espécie atômica com um único elétron tem as autofunções similares ao do átomo de hidrogênio, o que diferencia é o número atômico z , por exemplo, o átomo de hidrogênio tem $z = 1$ e o Hélio (He^+) tem $z = 2$ (NASCIMENTO, 2007).

Viu-se até o momento, que o estado do átomo de hidrogênio pode ser definido pelo valor de energia do átomo (n), do momento angular (l) e, na presença de um campo magnético externo e constante, também é definido pelo número quântico magnético (m). A cada estado possível do átomo, está associada uma autofunção correspondente, Schrödinger representou as autofunções pelo símbolo Ψ e essas funções são da posição dos elétrons nos átomos. Temos, então, a notação $\Psi_{n,l,m}(x, y, z)$ (NASCIMENTO, 2007).

As expressões dessas funções são também obtidas da resolução da equação de Schrödinger, essas não serão mostradas aqui, pois são de difícil entendimento por parte dos alunos. Nesse momento seria muita informação.

Para se ter uma noção de como essas expressões se parecem, a representação gráfica em coordenadas polares será utilizada.

As autofunções em coordenadas polares e notação espectroscópica podem ser escritas como um produto de dois fatores, um dependente do raio (r) e outra dependente da parte angular (θ, ϕ). Um exemplo de expressão desse tipo está abaixo (NASCIMENTO, 2007):

$$0.29) \Psi_{2s} = N_{2s} \left(2 - \frac{zr}{a_0} \right) \exp \left(-\frac{zr}{a_0} \right)$$

Com o fato da função Ψ poder ser separada numa parte angular e numa parte radial simplifica a representação gráfica e veremos a seguir essas representações (NASCIMENTO, 2007).

Um conceito extremamente importante, que por vezes é mal apresentado aos alunos, é o conceito de orbital. Um orbital atômico é uma

função de onda de um elétron para um elétron num átomo (ATKINS e PAULA, 2008). Ou seja, os orbitais são as autofunções da equação de Schrödinger [$\Psi_{n, l, m}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$]. Os orbitais não têm relação com as órbitas (NASCIMENTO, 2007).

Os orbitais podem ser escritos como um produto de uma parte radial e uma parte angular: $\Psi_{n, l, m}(r, \theta, \Phi) = R_{n, l}(r) Y_{l, m}(\theta, \Phi)$ e podem ser representados em um sistema de dois eixos desde que a origem coincida com a posição do núcleo atômico (NASCIMENTO, 2007). Abaixo, na **figura 31**, estão os exemplos da representação da parte radial de alguns orbitais:

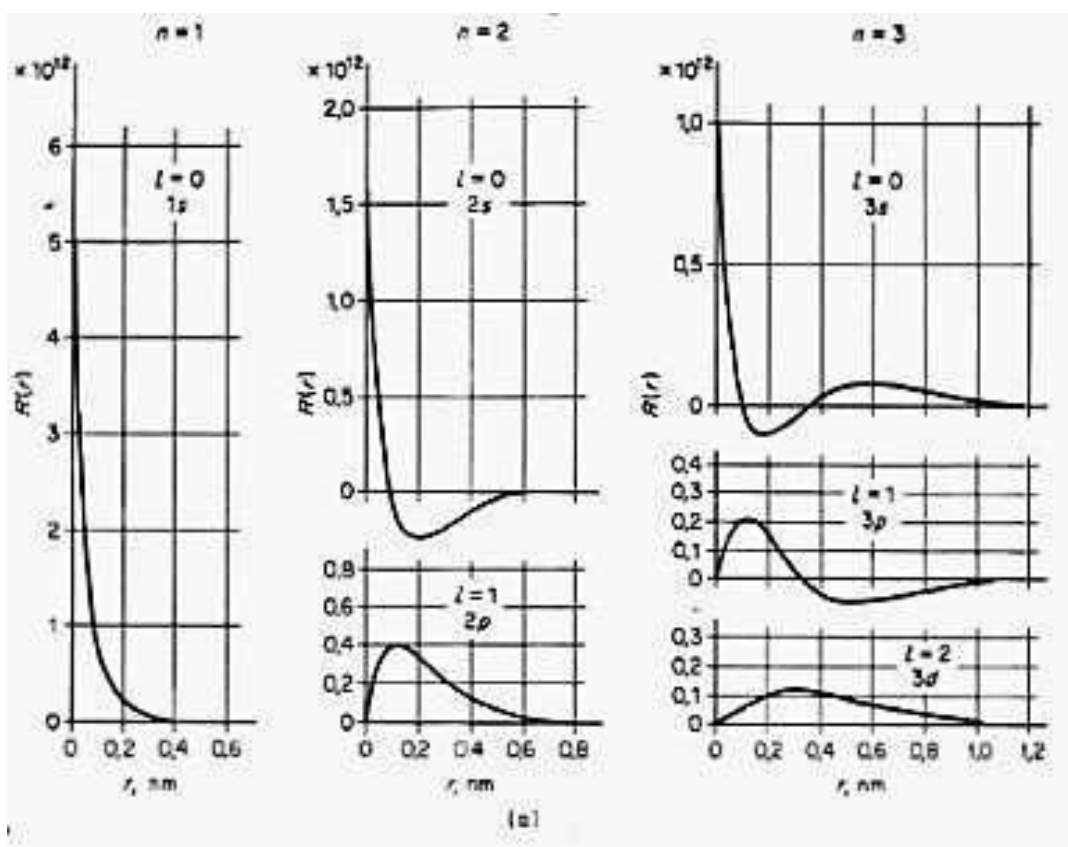
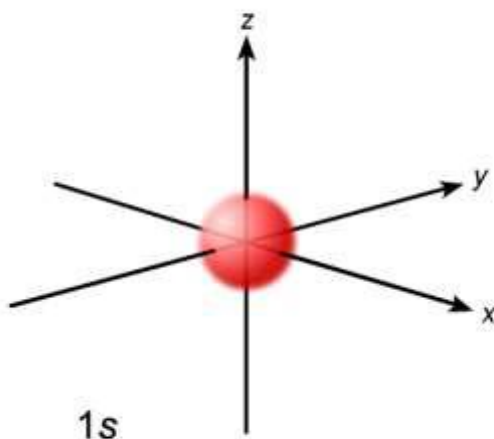


Figura 31- Parte radial das funções de onda para o átomo de hidrogênio (MOORE, 2006).

A representação angular dos orbitais atômicos daria origem a superfícies tridimensionais, entretanto a representação se dará apenas com a parte angular em coordenadas polares. Abaixo está a representação da parte angular do orbital Ψ_{1s} (figura 32). Esse orbital é a representação de uma função que possui o mesmo valor em todas as direções, pois seu valor de parte angular é constante. Sendo assim, a representação desse orbital é uma esfera (NASCIMENTO, 2007).



©NCSSM 2003

Figura 32- Representação da parte angular do orbital Ψ_{1s} (imagem disponível em <https://naomisbell.wordpress.com/2012/11/05/lesson-8-electronic-structure/>).

O que é importante ratificar é que a figura acima não representa o orbital **s** e sim somente sua parte angular.

Da mesma maneira, temos a representação da parte angular do orbital Ψ_{2pz} ou Ψ_{2p0} .

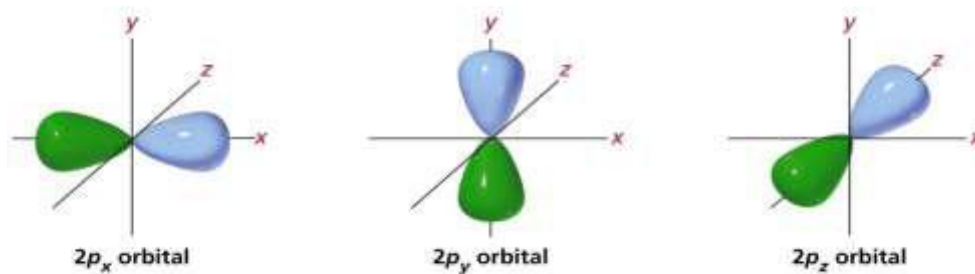


Figura 33- Representação da parte angular do orbital Ψ_{2p_z} ou Ψ_{2p_0} .

(imagem disponível em

<http://www.todasasconfiguracoes.com/tag/particulas/>).

Abaixo, na **figura 34**, outras representações das partes angulares de alguns orbitais:

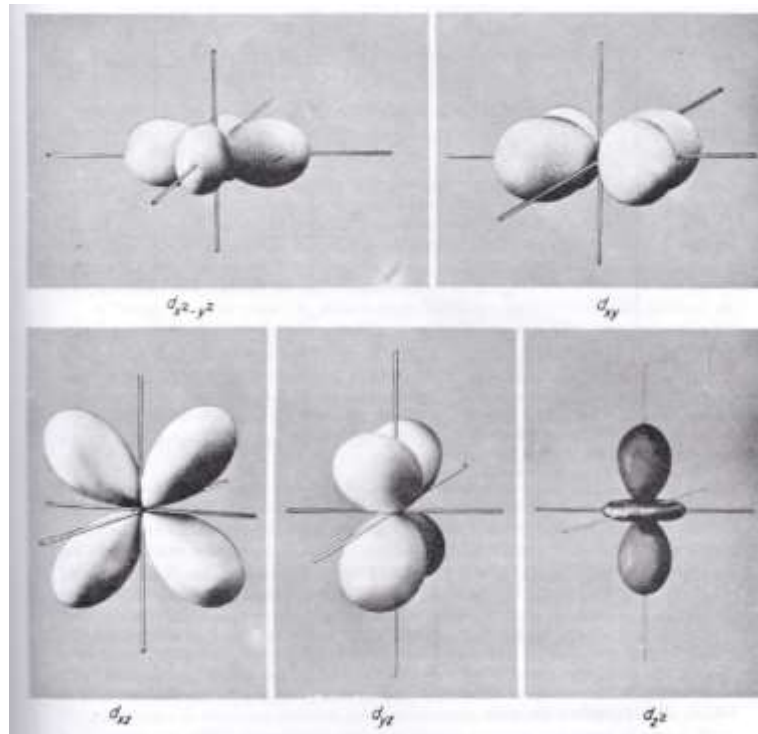


Figura 34- Os orbitais atômicos d (análogos aos do hidrogênio) (MOORE, 2006).

As autofunções de Schrödinger careciam de um significado que nem mesmo ele pudera fornecer. Em 1926, Max Born interpretou as funções de Schrödinger aplicando estas ao processo de colisão de um elétron com um átomo. Para estabelecer uma conexão entre seus dados experimentais e as funções de Schrödinger, Born interpretou o quadrado do módulo da função, $[\Psi(\mathbf{r}, \theta, \Phi)]^2$, como a probabilidade de se encontrar o elétron numa dada região do espaço (NASCIMENTO, 2007).

A partir das autofunções de Schrödinger, podemos calcular todas as propriedades de um sistema quântico, incluindo níveis de energia e probabilidade. As autofunções são também chamadas de funções de onda (NASCIMENTO, 2007).

É importante salientar aos alunos que, ao ter sido aceita pela comunidade científica, a interpretação probabilística de Born atestou o fato de

que, no mundo microscópico, jamais se poderá prever com exatidão o valor de qualquer propriedade do sistema em estudo. O que se poderá prever é a probabilidade de que esta propriedade tenha um determinado valor para o sistema.

Com a interpretação probabilística, já se pode ter uma possibilidade de informação de como os elétrons se distribuem em torno do núcleo. A probabilidade de encontrar um elétron a uma distância r do núcleo é dada pelo quadrado da parte radial da função $[R_{n,l}(r) R_{n,l}^*(r)]$, para cada valor possível de θ e Φ . Se todos os pontos possíveis forem considerados, a mesma distância r do núcleo, eles definem uma esfera de área igual a $4\pi r^2$. Portanto, a probabilidade de se encontrar o elétron a uma distância r do núcleo, independente da direção no espaço e é uma função chamada de função de distribuição radial expressa pela **equação 0.30** a seguir (NASCIMENTO, 2007):

$$\mathbf{0.30) P_{n,l}(r) = 4\pi r^2 R_{n,l}(r) R_{n,l}^*(r)}$$

Abaixo, na **figura 35**, está a representação gráfica da distribuição de funções radiais para alguns estados do átomo de hidrogênio:

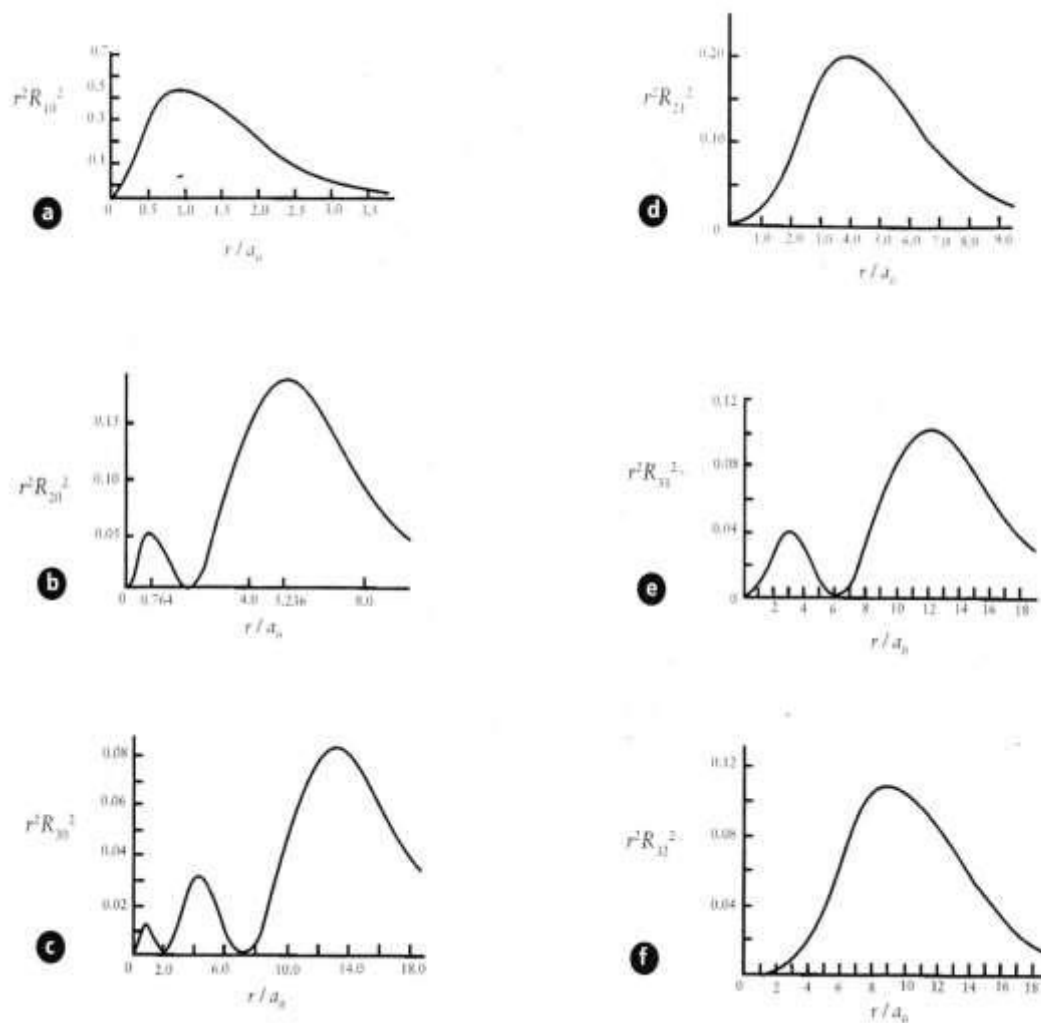


Figura 35- Distribuição radial para os estados (a) Ψ_{1s} (b) Ψ_{2s} (c) Ψ_{3s} (d) Ψ_{2p} (e) Ψ_{3p} (f) Ψ_{3d} (NASCIMENTO, 2007).

Há muitas coisas importantes, sobre a **figura 35** acima, que devemos identificar.

Observando as representações da figura acima é possível perceber que a função distribuição radial cresce à medida que r aumenta, passa por um valor máximo e, depois tende a zero à medida que a distância do elétron ao núcleo continua aumentando. Diferentes valores de n e l apresentam diversas

quantidades de ciclos de aumento e diminuição de valor (NASCIMENTO, 2007).

Para qualquer estado do átomo, a probabilidade de encontrar o elétron no intervalo $0 \leq r \leq \infty$ tem que ser igual a 1. Olhando-se para as distribuições radiais para os estados Ψ_{2s} e Ψ_{3s} , pode-se perceber que as distâncias para as quais a probabilidade de se encontrar o elétron é máxima aumentam com o valor de n (NASCIMENTO, 2007).

Comparando as curvas **a**, **b** e **c** (com mesmo número quântico l), por exemplo, pode-se observar que aumentando o valor de n , há um deslocamento do máximo de distribuição para maiores valores de r , acarretando num aumento da probabilidade de o elétron ser encontrado em regiões próximas ao núcleo. Isso também ocorre comparando **d** e **f** (NASCIMENTO, 2007).

Comparando também as curvas **b** e **d** (com mesmo n), por exemplo, pode-se observar que aumentando o valor de l , há um deslocamento do máximo de distribuição para menores valores de r , acarretando numa diminuição da probabilidade de o elétron ser encontrado em regiões mais próximas do núcleo. Isso também ocorre comparando as curvas **e** e **f** (NASCIMENTO, 2007).

Utilizando a proposta de Bohr de que a origem do espectro tem a ver com a mudança de estado do átomo, examinar-se-á novamente o espectro de hidrogênio (NASCIMENTO, 2007).

A resolução da equação de Schrödinger fornece um conjunto discreto de níveis de energia pra o átomo, como visto anteriormente. Os valores possíveis de energia são dados pela **equação 0.31**, aplicando essa equação na equação de frequência da radiação de Bohr [$\nu_{fi} = (E_f - E_i) / h$], obtêm-se a seguinte expressão (NASCIMENTO, 2007):

$$\mathbf{0.31) \quad \nu_{fi} = Rhc \left[-\frac{1}{n_f^2} + \frac{1}{n_i^2} \right]}$$

E_f e E_i são as energias dos estados final e inicial. Quando um átomo qualquer absorve energia, sua energia aumenta e $n_f > n_i$, assim como se ele emite radiação, sua energia diminui e $n_f < n_i$ (NASCIMENTO, 2007).

A energia do átomo de hidrogênio depende unicamente do número quântico n , na ausência de um campo externo. Assim sendo, pode-se ter vários estados do átomo com o mesmo valor de energia e esse estado é chamado de degenerado (NASCIMENTO, 2007).

Dada a **equação 0.31**, pode-se representar o diagrama de níveis de energia que nada mais é do que os níveis de energia do átomo de hidrogênio. O diagrama é mostrado na **figura 36**:

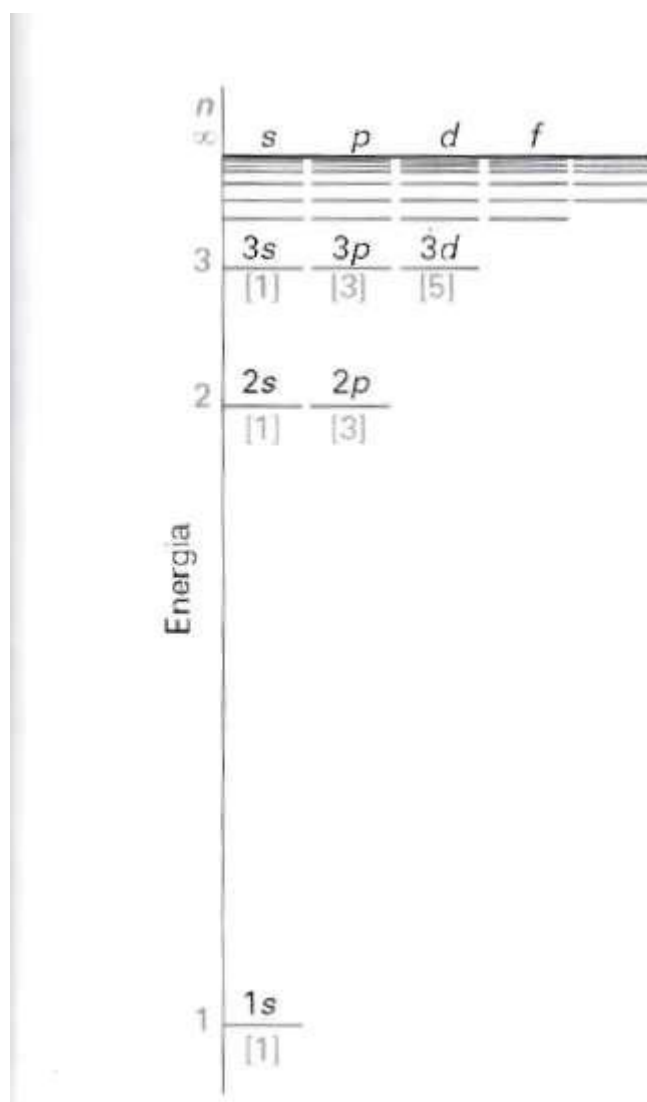


Figura 36- Níveis de energia do átomo de hidrogênio mostrando as subcamadas e (entre colchetes) os números de orbitais em cada camada. Nos átomos hidrogenóides todos os orbitais de uma mesma camada têm a mesma energia (ATKINS e JONES, 2008).

Existem algumas informações muito importantes que devem ser passadas aos alunos para que estes consigam interpretar bem o diagrama da **figura 36**. Primeiramente, para simplificação de notação, os estados do átomo são indicados pelos valores de n e l no lugar de $\Psi_{n,l}$ (por exemplo, o estado Ψ_{3s} é escrito como **3s**), além disso, verticalmente, estão os estados do sistema quântico em ordem crescente de energia (NASCIMENTO, 2007).

O que se pode observar no diagrama é que, quando n aumenta, a diferença entre os níveis de energia do átomo diminui. Também se pode observar que para um dado valor de n o átomo tem n^2 estados degenerados, por exemplo, para $n = 3$, têm-se nove estados com a mesma energia. A ocorrência de degenerescência está relacionada com a simetria do sistema (NASCIMENTO, 2007).

Quando um elétron sofre uma transição (mudança de estado), passando de um orbital com os números quânticos n_i , l_i , m_{li} para um outro orbital (de energia menor) com os números quânticos n_f , l_f , m_{lf} , ele sofre uma variação eletromagnética ΔE , e o excesso de energia aparece como um fóton de radiação eletromagnética com a frequência ν dada pela condição de frequência de Bohr (**expressão 0.4**). Algumas transições espectroscópicas são permitidas, enquanto outras são proibidas (NASCIMENTO, 2007).

Para justificar o número correto de linhas observadas no espectro do átomo de hidrogênio, Bohr elaborou certas regras de seleção, essas regras estabeleciam certas restrições a variações dos números quânticos sob as quais as transições são permitidas (NASCIMENTO, 2007).

Segundo essas regras, a partir do estado fundamental Ψ_{n_i, l_i, m_i} e Ψ_{n_f, l_f, m_f} , por absorção ou emissão de radiação eletromagnética, só pode ocorrer se (NASCIMENTO, 2007):

$$\mathbf{0.32) \Delta n = n_f - n_i \text{ qualquer}}$$

$$\mathbf{0.33) \Delta l = \pm 1}$$

$$\mathbf{0.34) \Delta m = 0, \pm 1}$$

Na mecânica quântica, essas regras de seleção surgiram de cálculos do operador momento dipolo de transição, que não será aqui mostrado, o que é importante ser comentado com os alunos é o fato das regras de seleção também serem provenientes de cálculos matemáticos.

Na **figura 37** abaixo, são mostradas algumas transições permitidas, pelas regras de seleção, para o átomo de hidrogênio (ATKINS e PAULA, 2008). As setas indicam os estados envolvidos na transição. O sentido das setas indica que as transições são de maior energia para os estados de menor energia ($n_f > n_i$) mas as mesmas transições são permitidas no sentido inverso ($n_f < n_i$) (NASCIMENTO, 2007).

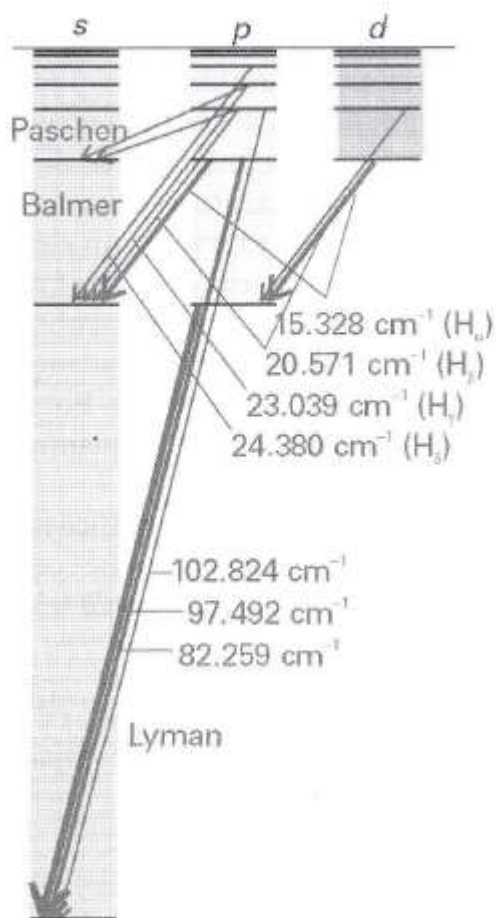


Figura 37- Diagrama de Grotrian resumindo as energias e as transições do hidrogênio atômico. Quanto maior a espessura do gráfico, mais intensa a transição (ATKINS e JONES, 2008).

As séries representadas na figura acima receberam os nomes dos cientistas que as descobriram. Balmer descobriu a série com $n = 2$, Lyman a série com $n = 1$ e Paschen com $n = 3$.

A série de Balmer corresponde a um conjunto de transições de estados que formam o espectro visível do átomo de hidrogênio. A série de Lyman corresponde à região do ultravioleta do espectro eletromagnético e a de Paschen corresponde à do infravermelho do espectro.

É importante salientar que, em um espectro de emissão ($n_f < n_i$), o que caracteriza uma série é o fato de um número quântico final ser o mesmo para todas elas enquanto que para um espectro de absorção ($n_f > n_i$), o número quântico do estado inicial é o mesmo para todas as transições da série (NASCIMENTO, 2007).

Para completar as observações, vale lembrar que, como dito anteriormente, para um átomo isolado, a energia só depende do valor de n . Entretanto, na presença de um campo magnético, os níveis de energia passam a depender também do número quântico m . Sendo assim, pode-se ter uma transição entre dois estados com o mesmo valor de n , mas diferentes valores de m .

Na região entre os estados Ψ_{1s} e Ψ_{2p} , no espectro do átomo de hidrogênio, os três estados Ψ_{2p} são degenerados e, portanto, só se deveria observar uma única linha nessa região do espectro (na ausência de um qualquer perturbação externa). Se a experiência for realizada com um equipamento de baixa resolução espectral (baixa capacidade de separar duas frequências muito próximas), é exatamente uma única linha que será observada, porém, se a experiência for realizada com um equipamento de alta resolução, ver-se-á duas linhas muito próximas, como mostrado na **figura 38**, a seguir (NASCIMENTO, 2007):

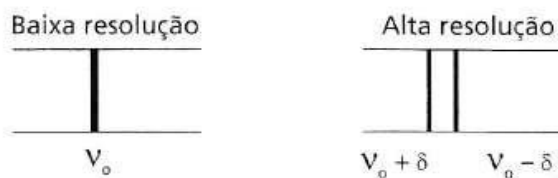


Figura 38- Espectro do átomo de hidrogênio, na região de frequência correspondente a transição entre os estados Ψ_{1s} e Ψ_{2p} , em alta e baixa resolução (NASCIMENTO, 2007):

Para explicar a observação de duas linhas espectrais, Pauli sugeriu a existência de um quarto número quântico, que, para cada elétron, só poderia assumir dois valores, $\pm 1/2$, além de não ter nenhuma relação com os outros três números quânticos (n, l, m) (NASCIMENTO, 2007).

Os três números quânticos tiveram seus significados já expostos, sabe-se que, o n está associado à energia do átomo, l quantiza o momento angular e m determina a variação dos níveis de energia do átomo na presença de um campo magnético constante e externo.

Pauli não conseguiu relacionar o m_s com alguma propriedade do átomo ou do elétron mas com esse quarto número quântico, poderia-se ter estados $\Psi_{n, l, m, 1/2}$ e $\Psi_{n, l, m, -1/2}$, possivelmente muito próximos em energia (NASCIMENTO, 2007).

Alguns cientistas tentaram associar este m_s a uma propriedade do átomo. Uhlenbeck e Goudsmit propuseram que o elétron teria um movimento de rotação em torno de um eixo próprio e esse movimento foi chamado de spin. Com esse spin, o elétron teria o momento angular devido à sua rotação em torno do núcleo (momento angular orbital) e mais uma fonte adicional de momento angular, proveniente da rotação em torno de um eixo próprio. O momento angular de spin representado por s e o momento angular total do elétron seria uma combinação desses dois momentos (NASCIMENTO, 2007). O momento total é representado por j . l e s se acoplam magneticamente para dar origem a um novo número quântico interno j , associado ao momento angular total que é a soma vetorial dos momentos do spin e do orbital:

$$0.35) \quad j = l + s$$

O número quântico de spin é muito importante, sem considerá-lo, não há como explicar nem mesmo o espectro do átomo mais simples.

Esse novo número quântico não se pode obter da equação de Schrödinger mas se pode entender o espectro do átomo de hidrogênio a partir dos estados obtidos da solução de Schrödinger se o momento angular do elétron for corrigido, levando-se em conta o momento de spin, como mostrado na **figura 39**. Nessa figura são mostradas as modificações causadas pelo spin eletrônico, no espectro do átomo de hidrogênio, na região de transição entre os estados ψ_{2p} e ψ_{1s} (NASCIMENTO, 2007).

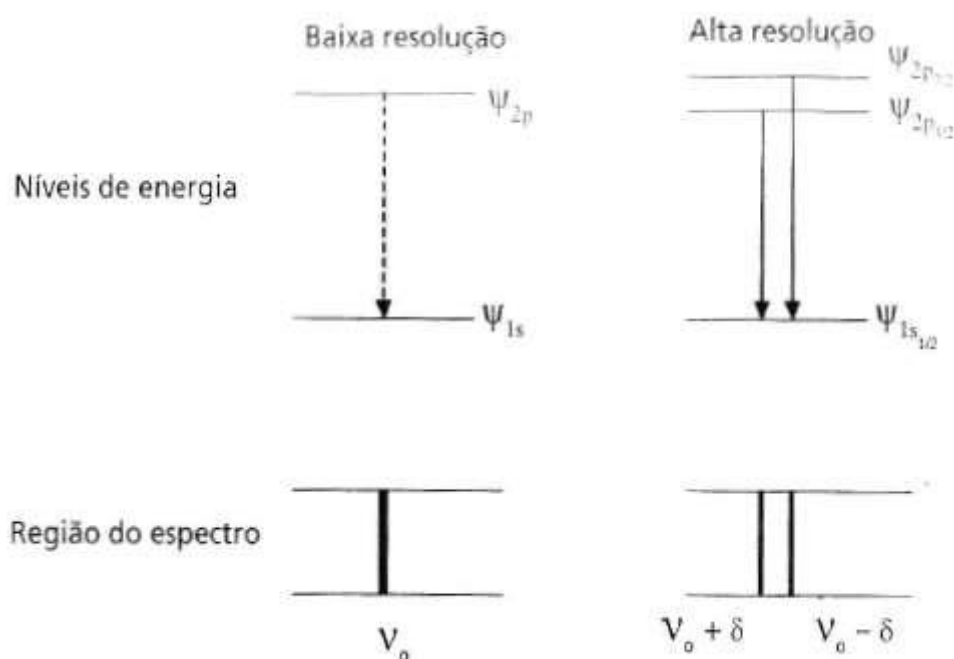


Figura 39- Modificações causadas pelo spin eletrônico, no espectro do átomo de hidrogênio, na região da transição entre os estados ψ_{2p} e ψ_{1s} (NASCIMENTO, 2007):

Esse é um ponto muito delicado e importante de ser conversado com os alunos. A ideia de Uhlenbeck e Goudsmit de que o spin teria a ver com um

movimento de rotação do elétron em torno de um eixo próprio está equivocada. Ao calcular o momento angular proveniente deste tipo de movimento, percebe-se que o resultado é muito diferente do obtido experimentalmente (NASCIMENTO, 2007).

A grande questão a ser explicitada ao aluno é que, na verdade, não se sabe realmente a origem do spin, mas que este tem que ser levado em consideração para o entendimento do comportamento dos átomos e moléculas.

5.6 - Os resultados relevantes da mecânica quântica para a obtenção e descrição das propriedades atômicas e moleculares

Vimos acima as bases nas quais a química quântica se fundamentou e terminamos o tópico falando sobre os números quânticos, em particular sobre o número quântico de spin.

Incluindo o número quântico de spin na função de onda, o ψ de um sistema de n elétrons se torna uma função de $4n$ variáveis, onde $3n$ são coordenadas espaciais e n coordenadas de spin (LEVINE, 2012). Estudamos apenas sistemas de átomos com apenas um elétron, em especial, o hidrogênio. Entretanto sabemos que, na natureza, existem átomos com mais elétrons e, a química quântica precisava explicar também esses outros sistemas. Para outros sistemas, há uma aproximação na função de onda, ela se torna um produto de funções de onda hidrogenóides (um elétron).

O módulo do momento angular orbital do elétron em um átomo monoelétrônico é dado por $[l (l + 1)]^{1/2} \hbar$, onde $l = 0, 1, 2...$ Para um átomo com mais de um elétron, os vetores do momento angular somam-se, dando um momento angular orbital eletrônico total L , cujo valores são simbolizados por letras similares às da tabela 1 exceto que são letras maiúsculas (**tabela 2**) (LEVINE, 2012) :

L	0	1	2	3	4	5
Letra	S	P	D	F	G	H

O momento angular total **S** do spin eletrônico de um átomo (ou molécula) é o somatório vetorial dos momentos angulares de spin. **S** tem os valores possíveis $[\mathbf{S}(\mathbf{S} + 1)]^{1/2} \hbar$, onde o número quântico total **S** do spin eletrônico pode ser **0**, $1/2$, **1**, $3/2$... A componente **S** ao longo do eixo Z tem valores possíveis $M_s \hbar$, onde $M_s = -\mathbf{S}, -\mathbf{S} + 1, \dots, \mathbf{S} - 1, \mathbf{S}$ (LEVINE, 2012).

Para um sistema de dois elétrons (por exemplo, o He), cada elétron tem número quântico de spin $s = 1/2$ e o número total **S** de spin pode ser **0** ou **1**, dependendo de os dois vetores do spin eletrônico apontarem em direções opostas ou em aproximadamente mesmas direções (LEVINE, 2012).

Quando diversos elétrons são envolvidos no cálculo, precisamos ter o número quântico do momento angular de spin total **S**, onde (ATKINS e JONES, 2008):

$$0.36) \quad \mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 - 1, \dots, |\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|$$

Para termos os valores de **S**. Cada elétron tem $s = 1/2$, o que dá, no caso de dois elétrons $\mathbf{S} = 1, \mathbf{S} = 0$. Se forem três elétrons, obteremos o momento do terceiro spin a cada valor de **S** dos dois primeiros. Temos então $\mathbf{S} = 3/2, 1/2$ e $\mathbf{S} = 1/2$. A multiplicidade de um termo é o valor $2\mathbf{S} + 1$ que é sobrescrito à esquerda do símbolo para **L**. O termo mais inferior na **figura 40** tem funções de onda do spin que correspondem do número quântico total de spin $\mathbf{S} = 1$ (ATKINS e JONES, 2008).

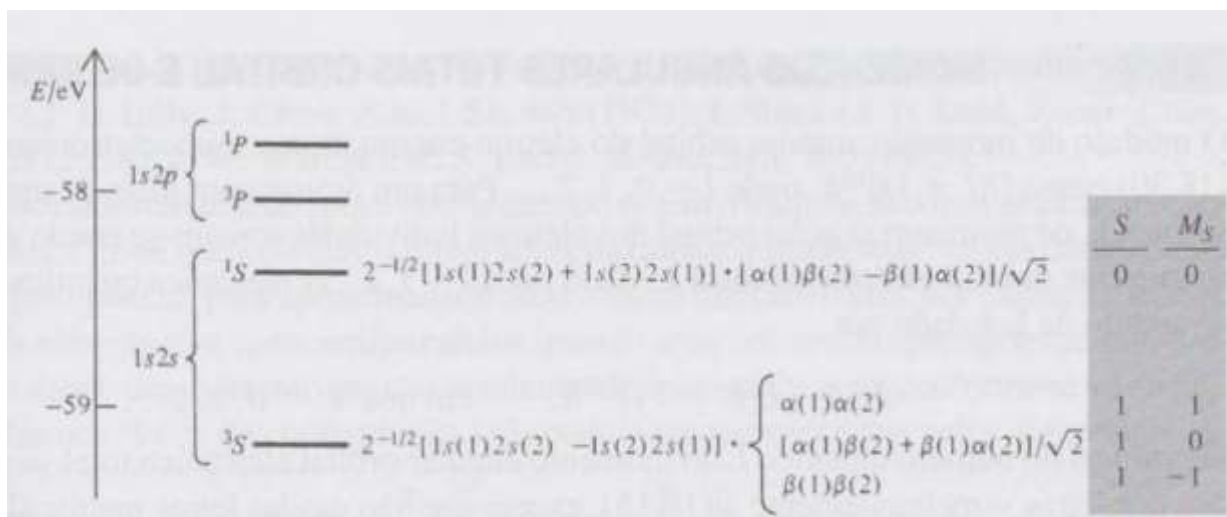


Figura 40: Energias dos termos que surgem das configurações eletrônicas 1s2s e 1s2p do átomo de hélio (LEVINE, 2012).

Portanto, $2S + 1$ é igual a 3 para esse termo, e o termo é representado por 3S (triplete). O segundo termo mais inferior na **figura 41** tem a função do spin $S = 0$ e, assim tem $2S + 1$. Esse é um termo 1S (singlete). Os números quânticos totais S e M_s do spin encontram-se listados na **figura 40** para cada estado (função de onda) dos termos 1S e 3S (LEVINE, 2012).

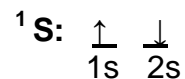
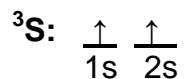
Podemos observar que o termo triplete da configuração **1s2s** tem localização inferior ao termo singlete. O mesmo acontece com o termo da configuração **1s2p**. Isso ilustra a regra de Hund (LEVINE, 2012):

"Para um conjunto de termos que surgem de uma dada configuração eletrônica, o termo de localização mais inferior geralmente é aquele com a multiplicidade máxima de spin".

Existem várias exceções à regra de Hund (LEVINE, 2012).

Quando se tem o número máximo de elétrons com spin paralelos, obtêm-se a multiplicidade máxima de spin. Quando os vetores de momento de spin apontam para aproximadamente a mesma direção, diz-se que dois

elétrons têm spins paralelos (exemplo na **figura 41. a**). Dois elétrons têm spins antiparalelos quando seus vetores de spin apontam em direções opostas dando um momento angular resultante do spin igual a zero (**figura 41.b**). Os termos $^1\mathbf{S}$ e $^3\mathbf{S}$ da configuração $1s2s$ podem ser representados pelos diagramas (LEVINE, 2012):



Onde os spins são paralelos em $^3\mathbf{S}$ e antiparalelos em $^1\mathbf{S}$.

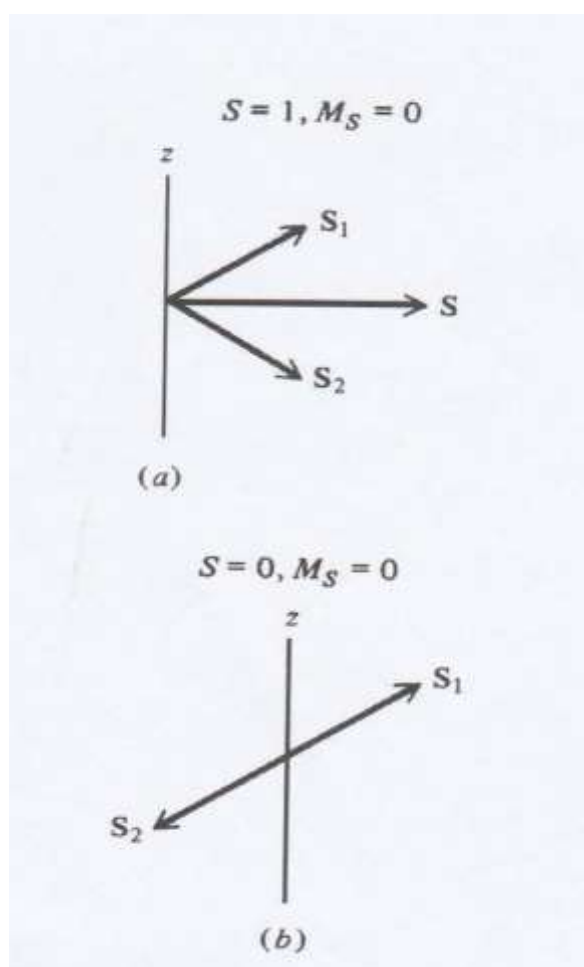


Figura 41- Orientações do spin correspondentes às funções de spin (a) $2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$ e (b) $2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$. S é o momento angular total eletrônico de spin (LEVINE, 2012).

Os elétrons em uma subcamada cheia (por exemplo, os elétrons em $2p^6$) têm todos seus spins emparelhados e contribuem com zero para o momento angular total eletrônico do spin. Para cada elétron em uma subcamada fechada com um valor positivo para o número quântico m existe um elétron com o valor negativo correspondente de m (Por exemplo, em $2p^6$ existem dois elétrons com $m = +1$ e dois com $m = -1$.) Portanto, os elétrons em uma subcamada cheia contribuem com zero para o momento angular orbital eletrônico total. Assim, os elétrons em subcamadas fechadas podem ser ignorados ao determinarmos os valores possíveis dos números quânticos L e S para os momentos angulares orbital total e do spin total. Por exemplo, a configuração eletrônica $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p$ do Mg dá origem aos mesmos termos que a configuração $1s 2p$ do hélio, a saber 3P e 1P (LEVINE, 2012).

Na **figura 40**, por exemplo, o termo 3P está dividido em três níveis muito próximos, isso ocorre por causa da interação spin-órbita, cada um dos três outros termos é ligeiramente deslocado por essa interação, mas não é desdobrado. A interação spin-órbita se origina da interação entre o spin e movimentos orbitais dos elétrons (LEVINE, 2012).

A interação spin-órbita é muito pequena (exceto em átomos pesados), mas remove parcialmente a degenerescência de um termo, dividindo o peso atômico em uma série de níveis de energia muito próximos. Por causa desse desdobramento spin-órbita, as energias mostradas na **figura 40** não correspondem completamente ao padrão real de níveis de energia atômica, e as energias nessa figura são, portanto, chamados termos, ao invés de níveis de energia (LEVINE, 2012).

Voltando ao assunto de spin, uma vez que duas partículas idênticas não podem ser distinguidas uma da outra na mecânica quântica, a troca de duas partículas idênticas na função de onda tem que deixar todas as propriedades fisicamente observáveis inalteradas. Em particular, a densidade de probabilidade $|\psi|^2$ tem que ficar também inalterada. Portanto, espera-se que a ψ fosse multiplicada por $+1$ ou -1 por essa troca ou renomeação. Apenas

uma dessas possibilidades ocorre dependendo do spin das partículas. Quando se diz que uma partícula tem spin inteiro é porque o número quântico s do spin é um inteiro ($s=0$ ou 1 ou 2 ou...), e quando uma partícula tem $s= \frac{1}{2}$ ou $\frac{3}{2}$ ou ...diz-se que tem spin semi- inteiro. A evidência experimental mostra que (LEVINE, 2012):

“A função de onda completa (incluindo ambas, coordenadas espaciais e do spin) de um sistema de partículas idênticas com spin semi-inteiro tem que ser antissimétrica (função multiplicada por -1) em relação à troca de todas as coordenadas (espaciais e de spin) de quaisquer duas partículas. Para um sistema de partículas idênticas com spin inteiro, a função de onda completa tem que ser simétrica em relação a tal troca.”

Essa afirmativa recebe o nome de teorema da estatística do spin (a palavra estatística é empregada porque a exigência de simetria ou antissimetria da função de onda de partículas idênticas leva a resultados diferentes para partículas de spin inteiro em relação às partículas de spin semi- inteiro na determinação de quantas partículas podem ocupar um dado estado) (LEVINE, 2012).

Como informação adicional, partículas que exigem funções de onda antissimétricas e têm spin semi-inteiro são chamados de férmions (do sobrenome do físico Ítalo-americano Enrico Fermi). Partículas que requerem funções de onda simétricas e têm spin inteiro são chamados bósons (do sobrenome do físico indiano Satyendra Nath Bose). Os elétrons têm $s=1/2$ e são férmions (LEVINE, 2012).

O que se percebeu é que para átomos com três ou mais elétrons, a exigência de antissimetria não pode ser satisfeita escrevendo-se uma função de onda que seja o produto de fatores espacial e do spin separados (LEVINE, 2012).

Para construir uma função de onda antissimétrica para três ou mais elétrons, utiliza-se a função de onda do hélio no estado fundamental sendo

escrito como um determinante. Lembrando da regra matemática do determinante, trocando-se duas fileiras do determinante, muda-se o sinal deste. A troca de fileiras equivale à troca de elétrons, assim o determinante Ψ é multiplicado por -1 por essa troca e, Ψ satisfaz à exigência de antissimetria (LEVINE, 2012).

A exigência de que a função de onda eletrônica seja antissimétrica leva a uma conclusão(LEVINE, 2012):

“Não mais de um elétron pode ocupar um dado spin-orbital”.

Esse é o princípio de exclusão de Pauli, primeiramente proposto por Pauli em 1925. Um orbital (ou função de onda espacial monoelétrica) é definido dando-se seus três números quânticos (n , l , m em um átomo). Um spin-orbital é definido dando-se os três números quânticos do orbital e o número quântico m_s ($+1/2$ para a função de spin α e $-1/2$ para β). Desse modo, em um átomo, o princípio de exclusão de Pauli exige que dois elétrons não tenham os mesmos valores para todos os quatro números quânticos n , l , m e m_s (LEVINE, 2012).

"Não há qualquer fato no mundo físico que tenha um impacto maior sobre a maneira pela qual as coisas são do que o princípio de exclusão de Pauli. A esse grande Princípio creditamos a própria existência da hierarquia da matéria, tanto nuclear quanto atômica, conforme ordenada na tabela periódica de Mendeleev dos elementos químicos, que possibilita toda a física nuclear atômica, química, biologia e o mundo macroscópico que vemos". (I. Duck e E. C. G. Sudarshan, Pauli and the Spin-Statistics theorem, world Scientific, 1997, P. 21)

No começo do século XIX, muitos elementos e compostos foram descobertos com semelhanças e tendências em suas propriedades. Com as informações acerca do átomo e a descoberta das massas atômicas de diversos elementos, houve a generalização pertinente às propriedades dos elementos, o que se chamou lei periódica (RUSSELL, 2006).

Posteriormente, algumas tabelas periódicas foram construídas. A lei periódica estabelece que quando os elementos são listados, seqüencialmente, em ordem crescente do número atômico, é observada uma repetição periódica em suas propriedades (RUSSELL, 2006) A repetição observada na lei periódica é a base da estrutura da tabela periódica moderna (**figura 42**).

A tabela é dividida em colunas verticais (grupos) onde há elementos com propriedades químicas semelhantes. As filas horizontais são chamadas períodos. Normalmente o hidrogênio é posicionado isoladamente porque suas propriedades são particulares.

A tabela periódica é uma consequência do padrão de níveis de energia hidrogenóide dos números quânticos eletrônicos permitidos e do princípio de exclusão, já observado. É importante que os alunos percebam que a Química quântica auxiliou e serviu de base para a elaboração da tabela periódica.

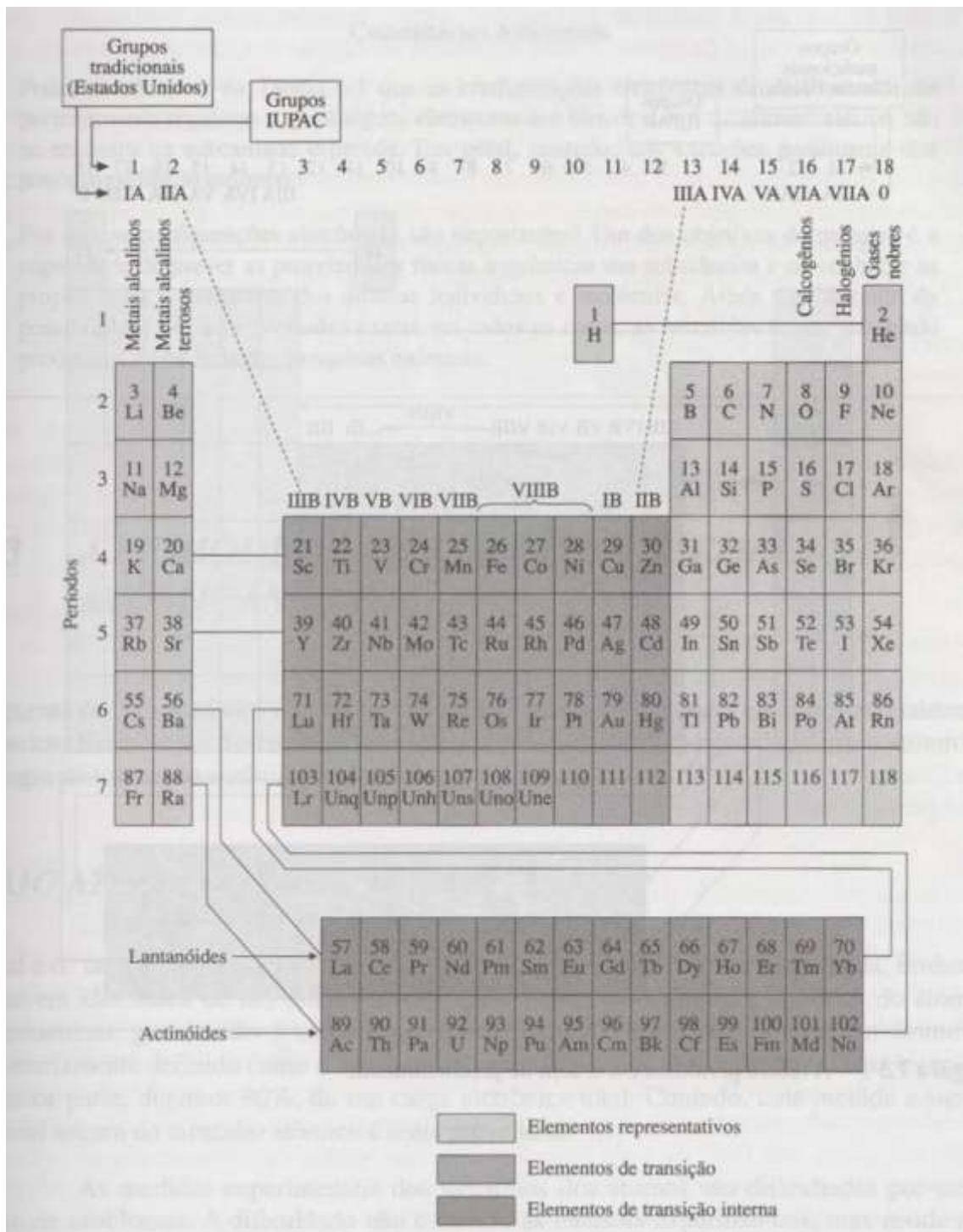


Figura 42: Tabela periódica (RUSSEL, 2006).

Visto como se deu a construção da tabela, ver-se-á agora as propriedades atômicas que algumas vezes mostram variações periódicas em função do número atômico.

Uma das propriedades atômicas é o raio e este não é uma grandeza bem definida. A partir de comprimentos de ligação observado em moléculas e distâncias interatômicas em cristais, vários tipos de raios atômicos podem ser deduzidos (LEVINE, 2012).

As medidas experimentais dos tamanhos dos átomos são complicadas e a dificuldade reside na interpretação dos resultados (RUSSELL, 2006).

Normalmente há uma pequena discrepância entre os valores de raio esperados e os valores obtidos experimentalmente entretanto é possível reunir um conjunto de dados de raios atômicos aproximados obtidos de medidas de distâncias interatômicas (RUSSELL, 2006).

O que ocorre é que o raio efetivo do átomo não é constante, a contribuição de cada átomo na distância de ligação total depende, em parte, das propriedades dos átomos.

Observando a tabela periódica é possível perceber que o raio atômico diminui através dos períodos. Isso ocorre porque prótons são adicionados ao núcleo, aumentando a carga nuclear. Este aumento atrai os elétrons, diminuindo o raio atômico.

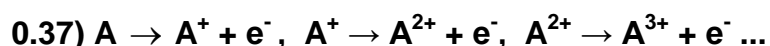
Ao longo de um mesmo grupo da tabela periódica, os raios atômicos aumentam. Isso ocorre porque o número total de elétrons nas camadas aumenta, causando um aumento na distância entre a camada de valência (camada mais externa) e o núcleo (RUSSELL, 2006).

Outra importante propriedade atômica é a energia de ionização, já citada anteriormente. Quando um átomo isolado, em seu estado fundamental, absorve energia, o elétron pode se transferir de um nível energético para outro. Se a energia fornecida for suficiente, o elétron pode ser completamente

removido do átomo ($n=\infty$) originando um íon positivo. A ionização é o processo de formação de um íon positivo pela remoção de um elétron (RUSSELL, 2006).

A energia de ionização é a mínima energia necessária para remover um elétron de um átomo isolado (livre de influência de átomos vizinhos, átomos no estado gasoso) em seu estado fundamental (RUSSELL, 2006).

As primeiras, segunda, terceira... energias de ionização de um átomo **A** são as energias para os processos (LEVINE, 2012):



As energias são tradicionalmente expressam em elétrons-volt (ev). Os números correspondentes em volts são chamados de potenciais de ionização (LEVINE, 2012).

A primeira energia de ionização diminui descendo um grupo na tabela periódica porque o aumento do número quântico **n** do elétron de valência aumenta a distância média do elétron ao núcleo, facilitando a remoção. A primeira energia de ionização geralmente aumenta ao longo de um período, como apresentado na **figura 43** (LEVINE, 2012).

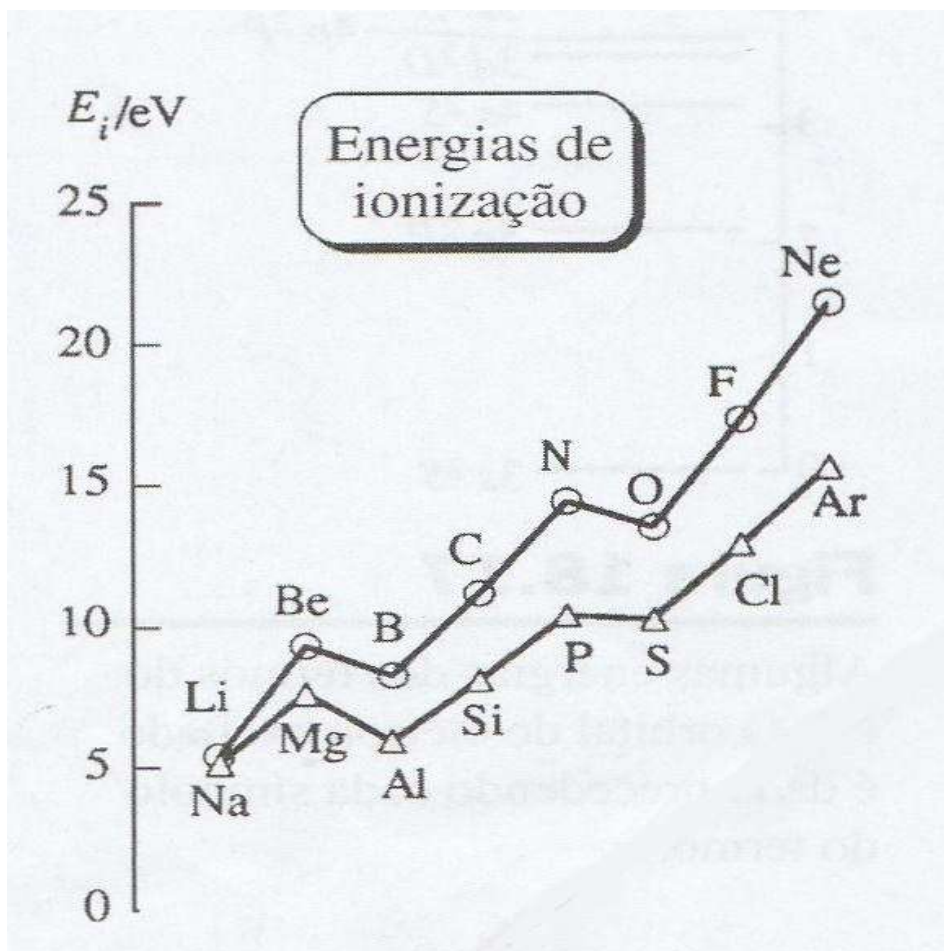


Figura 43- Energias de ionização dos elementos do segundo e terceiro períodos (LEVINE, 2012).

A carga nuclear efetiva (Z_{ef}) difere para diferentes subcamadas no mesmo átomo. $Z_{ef} = Z - S$, onde Z é o número atômico e a constante de blindagem S para uma dada subcamada é o somatório das contribuições de outros elétrons no átomo.

A próxima figura (45), similar à vista acima, mostra a variação da energia de ionização com o número atômico para os seis primeiros períodos. Nesta outra figura, podem-se notar algumas irregularidades. Por exemplo, a tabela da **figura 44** mostra que a energia de ionização do boro ($Z=5$) é menor do que a do berílio ($Z=4$), isto ocorre porque no boro o elétron a ser removido está no orbital $2p$, enquanto o berílio está no orbital $2s$ (RUSSELL, 2006).

Um elétron **2s** está mais firmemente “preso” ao núcleo do que um elétron **2p**, o que conduz à baixa energia de ionização do boro. Menor energia é requerida para remover o elétron **2p** do boro, do que o elétron **2s** do berílio mesmo com a maior carga nuclear do boro (RUSSELL, 2006).

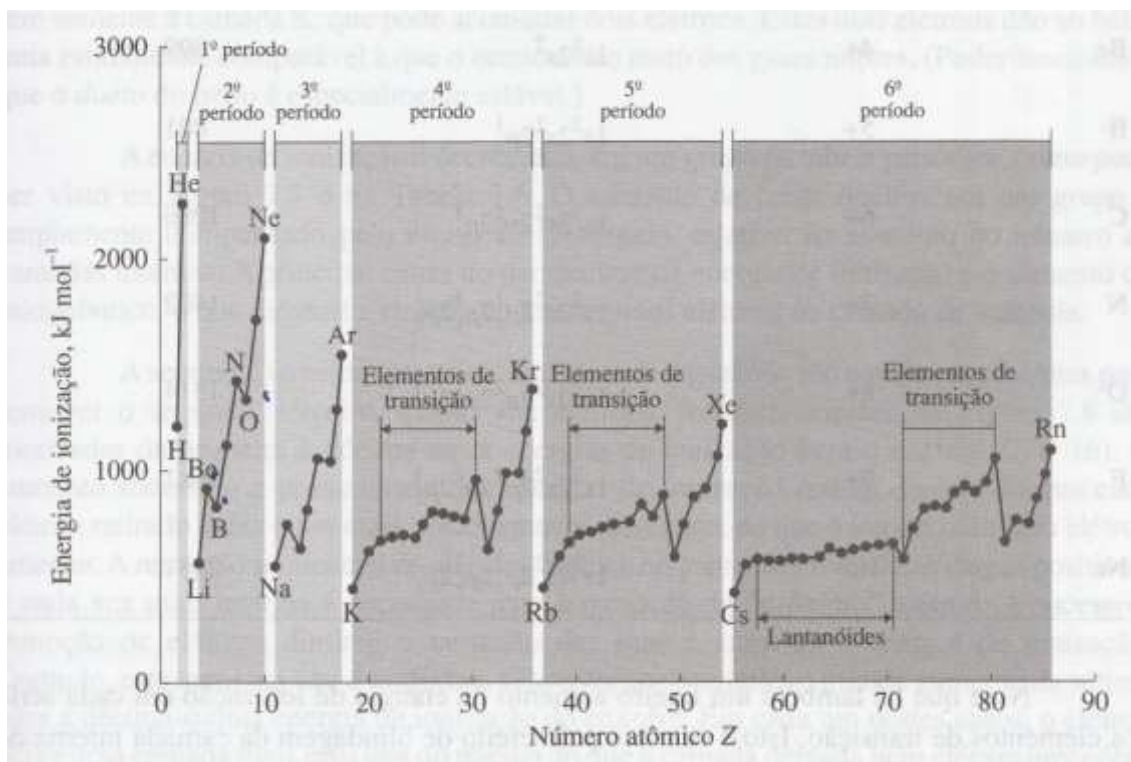


Figura 44- Primeiras energias de ionização (RUSSEL, 2006).

Outro exemplo é o caso do oxigênio. A primeira energia de ionização é mais baixa do que a esperada, porque o elétron é removido de um orbital **2p** que contém um segundo elétron. Dois elétrons no mesmo orbital ocupam a mesma região do espaço e se repelem com maior intensidade do que se estivessem em orbitais diferentes. A repulsão inter-eletrônica facilita a remoção do elétron do átomo de oxigênio. No átomo de nitrogênio não há tal repulsão (RUSSELL, 2006).

Demais irregularidades análogas às encontradas no boro e oxigênio são igualmente explicáveis nos demais períodos sucessivos.

A última propriedade atômica que trataremos é a afinidade eletrônica.

A afinidade eletrônica de um átomo **A** é a energia liberada no processo $A + e^- \rightarrow A^-$ (LEVINE, 2012). Na **tabela 3**, pode-se observar alguns valores em eV:

H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na
0,8	< 0	0,6	< 0	0,3	1,3	- 0,1	1,5	3,4	< 0	0,5

Pode-se perceber que a convenção é oposta nas definições de energia de ionização e afinidade eletrônica. A energia de ionização é ΔE que acompanha a perda de um elétron. A afinidade eletrônica é $-\Delta E$ que acompanha o ganho de um elétron (LEVINE, 2012).

Quando um átomo tenta ganhar um elétron, energia é liberada e a quantidade de energia para o processo é negativo. Quanto mais negativo o valor da afinidade eletrônica, maior é a tendência do átomo a receber o elétron (RUSSELL, 2006).

Vimos até agora o tratamento quântico do átomo, mas um tratamento completo e correto das moléculas também tem que ser baseado na mecânica quântica. Existem diversas dificuldades matemáticas envolvidas na aplicação da mecânica quântica e devido a elas, os químicos desenvolveram alguns conceitos empíricos para descrever as ligações químicas.

Diversas forças podem agir entre os átomos, as mais fortes destas forças são chamadas de ligações químicas, são forças que unem átomos formando moléculas (agrupamentos de átomos ou sólidos iônicos).

O comprimento de uma ligação em uma molécula é a distância entre os núcleos dos átomos que formam a ligação. Para medir o comprimento das ligações, faz-se uso de métodos espectroscópicos e de difração. Observa-se que o comprimento de um dado tipo de ligação é aproximadamente constante de molécula para molécula. Além disso, observa-se que o comprimento de ligação d_{BC} entre os átomos **B** e **C** é aproximadamente igual a $\frac{1}{2} (d_{BB} + d_{CC})$, na d_{BB} e d_{CC} são os típicos comprimentos de ligação **B-B** e **C-C**. o termo $\frac{1}{2} d_{BB}$ é o raio de ligação r_B para o átomo **B** (LEVINE, 2012).

O método da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência (siga em inglês VSEPR) estima os ângulos das ligações no átomo **A** pela contagem do número de pares de elétrons de valência que circundam o átomo **A** na fórmula de Lewis da molécula em que os elétrons de valência são representados por pontos. Os pares de valência em torno de **A** são distribuídos no espaço para minimizar as repulsões eletrostáticas entre os pares. Na **figura 45**, pode-se observar vários arranjos de diversos números de pares de acordo com a teoria VSEPR (LEVINE, 2012).

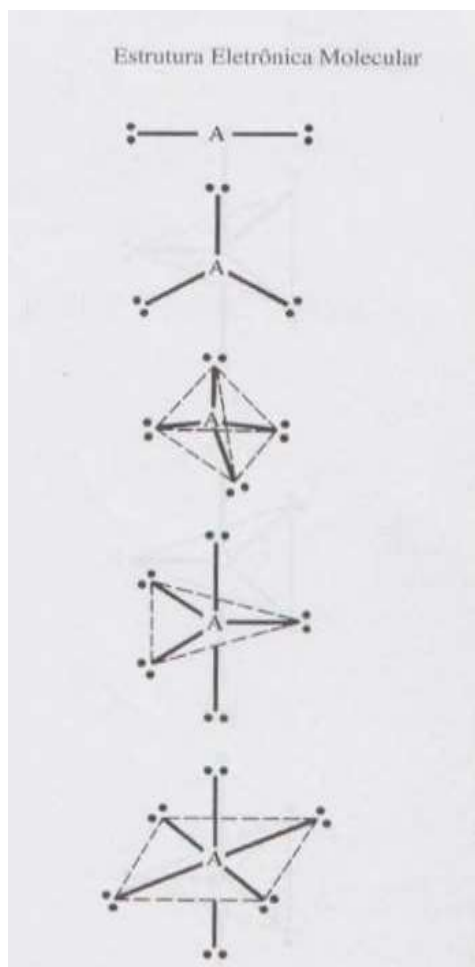


Figura 45- Arranjos de pares de elétrons de valência em torno de um átomo central (LEVINE, 2012)

Para cinco pares de elétrons de valência, os pares isolados são colocados na(s) posição(ões) equatorial(is), como pode ser visto na **figura 46** (LEVINE, 2012)..

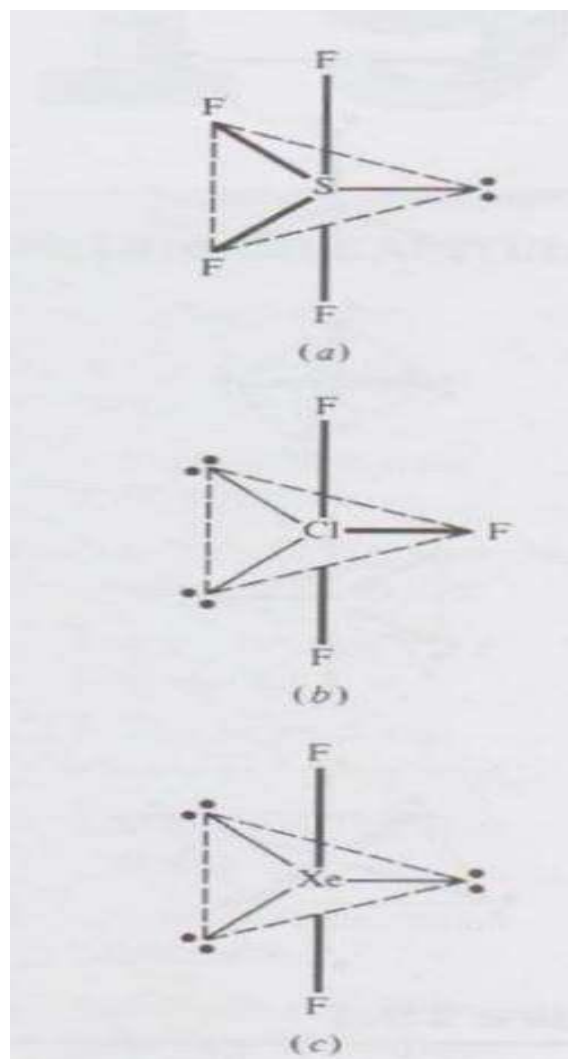


Figura 46- Algumas moléculas com cinco pares de elétrons de valência em torno do átomo central (LEVINE, 2012)

E como podemos medir a força de uma ligação química? Para saber a força de uma ligação, precisa-se medir a energia necessária para romper essa ligação. A energia necessária para romper uma ligação específica numa molécula é denominada energia de ligação, normalmente positiva e expressa como ΔH para a dissociação de um mol de ligações.

É muito complicado determinar a energia de ligação de moléculas com mais de dois átomos, pois a força de ligação entre dois átomos é influenciada pela presença de outros átomos que estão ligados a eles. Pensemos na molécula de **CH₄** (metano), todas as ligações **C-H** no metano são equivalentes sob todos os aspectos, entretanto, a cada remoção de um dos quatro átomos de **H**, as vizinhanças do átomo de carbono variam, resultando assim na mudança de energia necessária para remover cada átomo de **H**. A **Tabela 4** ilustra a variação ΔH do **CH₄** (RUSSELL, 2006).

<i>Processo</i>	$\Delta H^\circ, \text{kJ mol}^{-1} (25^\circ\text{C})$
$\text{CH}_4(\text{g}) \rightarrow \text{CH}_3(\text{g}) + \text{H}(\text{g})$	430
$\text{CH}_3(\text{g}) \rightarrow \text{CH}_2(\text{g}) + \text{H}(\text{g})$	473
$\text{CH}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CH}(\text{g}) + \text{H}(\text{g})$	422
$\text{CH}(\text{g}) \rightarrow \text{C}(\text{g}) + \text{H}(\text{g})$	339

Tabela 4- Energias médias de ligação simples a 25° C
(RUSSELL, 2006)

Tirando-se a média das medidas de energias de ligação feitas com compostos diferentes que contêm uma dada ligação em questão, obtêm-se uma energia de ligação média. Exemplos de algumas energias médias de ligação encontram-se na **tabela 5** (RUSSELL, 2006).

Ligação	ΔH°
C=C	613
C≡C	845
N≡N	945
O=O	498
C=O	799
C≡N	879

Tabela 5- Energias médias de ligações múltiplas a 25°
C (RUSSELL, 2006).

Os traços duplos e tripos indicam ligações duplas e triplas.

Numa molécula, os átomos dos elementos envolvidos têm a capacidade de atrair os elétrons em uma ligação. A eletronegatividade **X** de um elemento é justamente uma medida da capacidade que um átomo daquele elemento tem de atrair os elétrons em uma ligação. O grau de polaridade de uma ligação **A-B** está relacionado com a diferença de eletronegatividade dos átomos que formam a ligação (LEVINE, 2012).

Por exemplo, na molécula do cloro:



Figura 47 - (disponível em
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Elektronenformel_Punkte_Cl_Cl_2.svg).

O par de elétrons é igualmente compartilhado, pois os dois possuem a mesma eletronegatividade, a nuvem eletrônica é igualmente distribuída entre os dois núcleos. Porém, outro exemplo, como na molécula de cloreto de bromo:



Figura 48 (RUSSEL, 2006).

Neste caso, o cloro é mais eletronegativo e atrai mais fortemente o par de elétrons, assim a nuvem eletrônica se localiza mais próximo do cloro.

Muitas escalas de eletronegatividade foram propostas. A mais conhecida é a escala de Pauling, baseada em energias de ligação. Na **tabela 6** estão mostradas algumas eletronegatividades na escala de Pauling. Descendo-se ao longo de um grupo na tabela periódica, as eletronegatividades tendem a diminuir porque ao longo do grupo, os elétrons de valência estão cada vez mais afastados do núcleo. Além disso, ao longo de um período, as eletronegatividades tendem a aumentar porque, principalmente, a carga nuclear efetiva crescente resulta da menor blindagem por elétrons adicionados à mesma camada (LEVINE, 2012).

Algumas Eletronegatividades de Pauling^a

H 2,2	Li 1,0	Be 1,6	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,4	F 4,0
	Na 0,9	Mg 1,3	Al 1,6	Si 1,9	P 2,2	S 2,6	Cl 3,2
	K 0,8	Ca 1,0	Ga 1,8	Ge 2,0	As 2,2	Se 2,6	Br 3,0
	Rb 0,8	Sr 0,9	In 1,8	Sn 2,0	Sb 2,1	Te 2,6	I 2,7

^aDados de A. L. Allred, *J. Inorg. Nucl. Chem.*, **17**, 215 (1961).

Tabela 6- Algumas eletronegatividades de Pauling (LEVINE, 2012)

Inicialmente todas as propriedades moleculares são calculáveis pela resolução da equação de Schrödinger para a molécula. A solução da equação molecular de Schrödinger possui muitas dificuldades matemáticas e por isso, aproximações têm que ser realizadas (LEVINE, 2012).

O operador hamiltoniano para uma molécula é (LEVINE, 2012):

$$0.38) \hat{H} = \hat{K}_N + \hat{K}_e + \hat{V}_{N/N} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee}$$

Onde \hat{K}_N e \hat{K}_e são operadores de energia cinética para os núcleos e os elétrons, respectivamente, $\hat{V}_{N/N}$ é a energia potencial de repulsão entre os núcleos, \hat{V}_{Ne} é a energia potencial de atração entre os elétrons e os núcleos e \hat{V}_{ee} é a energia potencial de repulsão entre os elétrons (LEVINE, 2012).

A equação molecular de Schrödinger $\hat{H} \Psi = E \Psi$ é extremamente complicada (\hat{H} é o operador hamiltoniano) e seria quase impossível tentar uma solução exata, mesmo que para moléculas pequenas (LEVINE, 2012).

Em 1927, Max Born e J. Robert Oppenheimer mostraram que tratar os movimentos eletrônicos e nucleares separadamente era uma ótima aproximação. A matemática da aproximação é muito complicada e não será mostrada aqui (LEVINE, 2012).

As massas dos núcleos são muito maiores que a dos elétrons e sendo assim, os núcleos movem-se muitíssimo mais lentamente. Os elétrons “vêm” os núcleos pesados, de movimento lento, como cargas pontuais quase estacionárias, e os núcleos “vêm” os elétrons de movimento rápido, principalmente como uma distribuição tridimensional de carga (LEVINE, 2012).

Admite-se uma configuração fixa dos núcleos, e para essa configuração se resolve uma equação de Schrödinger de modo a determinar a energia eletrônica molecular e a função de onda. Esse processo se repete para muitas configurações nucleares fixas diferentes para dar a energia eletrônica como uma função de posições dos núcleos. A configuração nuclear que corresponde ao valor mínimo da energia eletrônica é a geometria de equilíbrio da molécula (LEVINE, 2012).

Tendo encontrado o modo que a energia eletrônica varia como uma função da configuração nuclear, utiliza-se, então, essa função da energia eletrônica como a função de energia potencial em uma equação de Schrödinger para o movimento nuclear, obtendo daí, os níveis de energia vibracional e rotacional molecular para um dado estado eletrônico (LEVINE, 2012).

A equação eletrônica de Schrödinger é formulada para um conjunto fixo de localizações para os núcleos. Assim sendo, o operador da energia cinética nuclear \hat{K}_N é omitido do hamiltoniano. O hamiltoniano eletrônico e a equação eletrônica de Schrödinger descritos nas equações abaixo nos fornecem a energia eletrônica, incluindo a energia de repulsão nuclear (LEVINE, 2012).

$$\mathbf{0.39) \hat{H} = \hat{K}_N + \hat{K}_e + \hat{V}_{N/N} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee}}$$

$$0.40) \hat{H} \Psi = E \Psi$$

A função de onda eletrônica Ψ_e é uma função das $3n$ coordenadas espaciais e n coordenadas do spin dos n elétrons da molécula. A energia eletrônica E_e contém as energias potenciais e cinéticas dos elétrons e a energia potencial do núcleo (LEVINE, 2012).

Tendo resolvido a equação de Schrödinger para obter a energia eletrônica como uma função de coordenadas nucleares, usamo-la como a função energia potencial na equação de Schrödinger para o momento nuclear (LEVINE, 2012):

$$0.41) (\hat{K}_N + E_e) \Psi_n \equiv \hat{H}_n \Psi_n = E \Psi_n$$

O hamiltoniano \hat{H}_n para o momento nuclear é igual ao operador da energia cinética nuclear \hat{K}_N mais a função energia eletrônica E_e , sendo assim E inclui ambas as energias eletrônica e nuclear e é a energia total da molécula. A função de onda nuclear Ψ_n é uma função das $3n$ coordenadas espaciais e N coordenadas de spin dos N núcleos. E_e é a energia potencial para a vibração nuclear (LEVINE, 2012).

À medida que os núcleos relativamente lentos vibram, os elétrons, que se movem rapidamente, quase instantaneamente ajustam sua função de onda Ψ_e e energia E_e para acompanhar o movimento nuclear. Os elétrons agem de forma semelhante a molas, conectando os núcleos. À medida que as distâncias internucleares variam, a energia armazenada nas “molas” varia (LEVINE, 2012).

O tratamento de Born-Oppenheimer mostra que a função de onda molecular completa Ψ é, com boa aproximação, igual ao produto das funções de onda eletrônica e nuclear: $\Psi = \Psi_e \Psi_n$ (LEVINE, 2012).

Falaremos agora de duas forças de interação mais fortes, a ligação iônica e a ligação covalente.

Na ligação iônica, as forças eletrostáticas atraem os íons de cargas opostas. Quando um cátion e um ânion apresentam cargas opostas, eles se atraem eletrostaticamente formando um par iônico como se pode ver abaixo (RUSSELL, 2006):



Onde **M** é um átomo de metal que perdeu um elétron e **X** é um átomo de um não metal.

Podem-se encontrar pares iônicos em alguns gases a temperaturas muito altas e em soluções concentradas que contém íons. Já as ligações iônicas são mais encontradas em sólidos iônicos, que não possuem pares iônicos (RUSSELL, 2006).

Na ligação covalente, dois átomos têm a mesma tendência de ganhar e perder elétrons. Sob essas condições, a transferência total de um elétron não acontece. Em vez disso, os elétrons ficam compartilhados entre os átomos (RUSSELL, 2006).

A molécula mais simples conhecida é $\mathbf{H_2^+}$, que consiste em dois prótons e um elétron.

A aproximação Born-Oppenheimer é adotada para a molécula $\mathbf{H_2^+}$, assim os núcleos são mantidos a uma distância fixa **R** e a equação de Schrödinger eletrônica ($\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e$) é considerada (LEVINE, 2012).

O hamiltoniano eletrônico incluindo a repulsão nuclear para $\mathbf{H_2^+}$ é dado como (LEVINE, 2012):

$$\mathbf{0.43) \hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}}$$

Em que r_a e r_b são as distâncias do elétrons até os núcleos **A** e **B** e **R** é a distância internuclear. O primeiro termo do lado direito da equação **0.43** é o operador para a energia cinética do elétron. O segundo e o terceiro termos são as energias potenciais de atração entre o elétron e os núcleos. O último termo é a repulsão entre os núcleos. Como H_2^+ só tem um elétron, não há repulsão intereletrônica (LEVINE, 2012).

A equação de Schrödinger eletrônica $\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e$ pode ser resolvida para o H_2^+ entretanto as soluções são complicadas e por esse motivo será usado um tratamento aproximado. O estado eletrônico mais baixo do H_2^+ se dissociará em um átomo de **H(1s)** no estado fundamental e um próton a medida que **R** tende a infinito (LEVINE, 2012).

De maneira geral, uma função de onda aproximada para o estado eletrônico fundamental do H_2^+ é uma combinação linear dos orbitais atômicos $1s_a$ e $1s_b$ (LEVINE, 2012).

Cálculos provenientes da função de onda (função $1s_a + 1s_b$) mostram que há um aumento da densidade de probabilidade eletrônica (ocasionada por regiões internuclear) que faz com que o elétron sinta as atrações de ambos os núcleos de uma vez só, diminuindo a energia média e produzindo uma ligação covalente estável. A ligação se deve à superposição dos orbitais atômicos $1s_a$ e $1s_b$. A função $1s_a - 1s_b$ tem um plano nodal entre os núcleos, diminuindo a densidade de probabilidade eletrônica entre os núcleos (LEVINE, 2012).

Um orbital é uma função de onda espacial monoelétrica. Um orbital para um átomo é chamado de orbital atômico (**OA**) e um orbital para uma molécula é um orbital molecular (**OM**). Cada orbital molecular pode conter dois elétrons de spins opostos (LEVINE, 2012).

Como já vimos anteriormente, os orbitais hidrogenóides com cargas nucleares efetivas são úteis para todos os átomos polieletrônicos, já os orbitais do tipo H_2^+ com cargas nucleares efetivas são diretamente aplicáveis somente para moléculas com dois núcleos idênticos, isto é, moléculas diatômicas homonucleares (LEVINE, 2012).

Para diferentes estados excitados do H_2^+ , escreve-se funções de onda aproximadas (orbitais moleculares) onde a constante de normalização (N) difere para estados diferentes (LEVINE, 2012).

$$\mathbf{0.44) N(2s_A + 2s_B), N(2s_A - 2s_B), N(2p_{xA} + 2p_{xB}), N(2p_{xA} - 2p_{xB}), \text{ etc.}}$$

Uma função de onda como $2s_A$ e $2s_B$ expressa o fato de haver probabilidade 50/50 de quanto para qual núcleo o elétron irá quando a molécula se dissociar ($R \rightarrow \infty$). Os orbitais moleculares na **equação 0.44** são combinações lineares de **OM** \rightarrow **CLOA**. Na **figura 49** são mostrados os contornos de densidade de probabilidade constante para os dois orbitais moleculares (LEVINE, 2012).

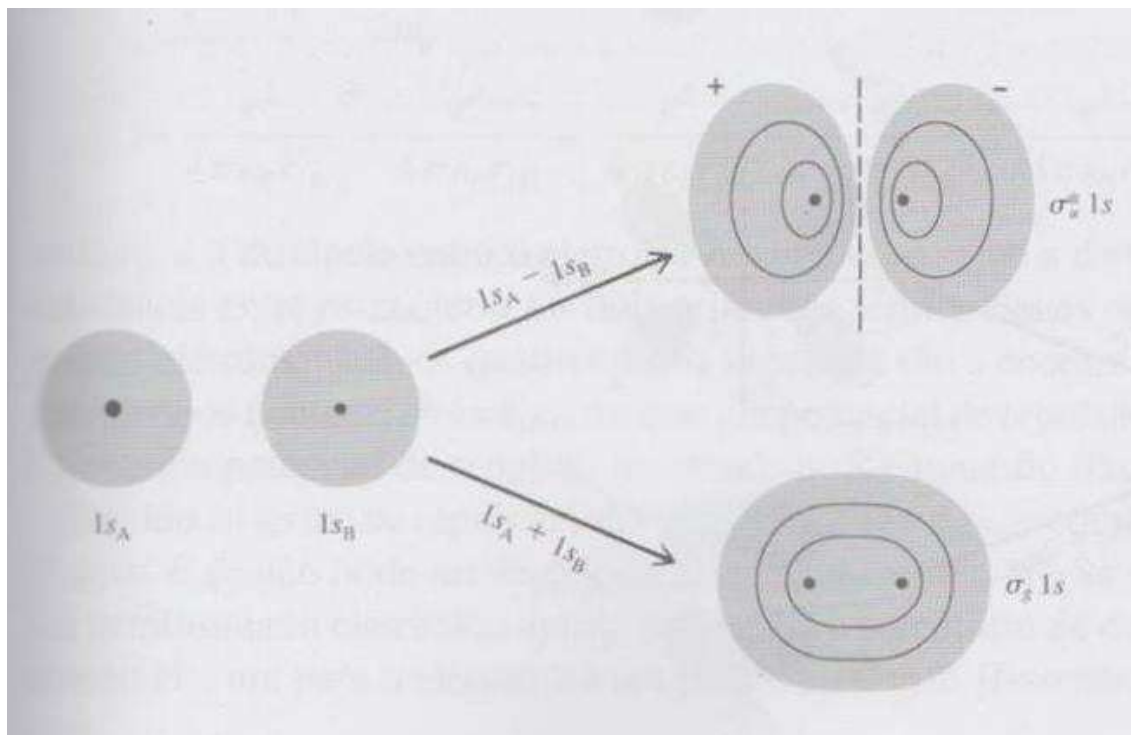


Figura 49- Formação de OM diatômicos homonucleares a partir de AO 1s. A linha tracejada indica um plano nodal (LEVINE, 2012).

Pode-se mostrar que a componente do momento angular orbital eletrônico ao longo do eixo internuclear (Z) do H_2^+ tem os valores possíveis $L_z = m\hbar$, onde $m = 0, \pm 1, \pm 2...$ (diferente do átomo de H , não há um número quântico l no H_2^+ , pois a magnitude do momento angular orbital eletrônico total não é fixa no H_2^+ . Isso ocorre porque existe simetria esférica no H , mas apenas simetria axial no H_2^+) (LEVINE, 2012). O valor de $|m|$ está na **tabela 7**:

$ m $	0	1	2	3	...
Letra	σ	π	δ	ϕ	...

Esses são os equivalentes gregos de **s, p, d, f**.

Os orbitais atômicos $1s_A$ e $1s_B$ têm momento angular orbital eletrônico zero ao longo do eixo molecular e, dessa forma, os dois orbitais moleculares formados a partir desses orbitais atômicos tem $m=0$ e a partir dos equivalentes são orbitais moleculares σ (sigma). São chamados **OM $\sigma_g 1s$** e **OM $\sigma_u^* 1s$** , o $1s$ indica que eles se originam de **OA $1s$** de átomos separados. O asterisco indica o caráter antiligante do **OM $1s_A - 1s_B$** , associado com o plano nodal e remoção de carga entre os núcleos (LEVINE, 2012).

O subscrito **g** (do alemão gerade, “par”) significa que o orbital tem o mesmo valor em dois pontos que estão em lados diagonalmente opostos do centro da molécula e equidistantes do centro. O subscrito **u** (ungerade, “ímpar”) significa que os valores dos orbitais diferem em um fator de **-1** nesses dois pontos (LEVINE, 2012).

Uma função par de **x, y** e **z** é aquela para qual **$f(-x, -y, -z) = f(x, y, z)$** . Uma função ímpar é aquela que satisfaz a **$f(-x, -y, -z) = -f(x, y, z)$** (LEVINE, 2012).

As combinações lineares **$2s_A + 2s_B$** e **$2s_A - 2s_B$** dão os orbitais moleculares **$\sigma_g 2s$** e **$\sigma_u^* 2s$** , cuja formas se assemelham àquelas dos **OM $\sigma_g 1s$** e **$\sigma_u^* 1s$** (LEVINE, 2012).

As **figuras 50 e 51** mostram a formação de orbitais moleculares diatômicos homonucleares a partir dos orbitais **$2p_z$** e **$2p_x$** .

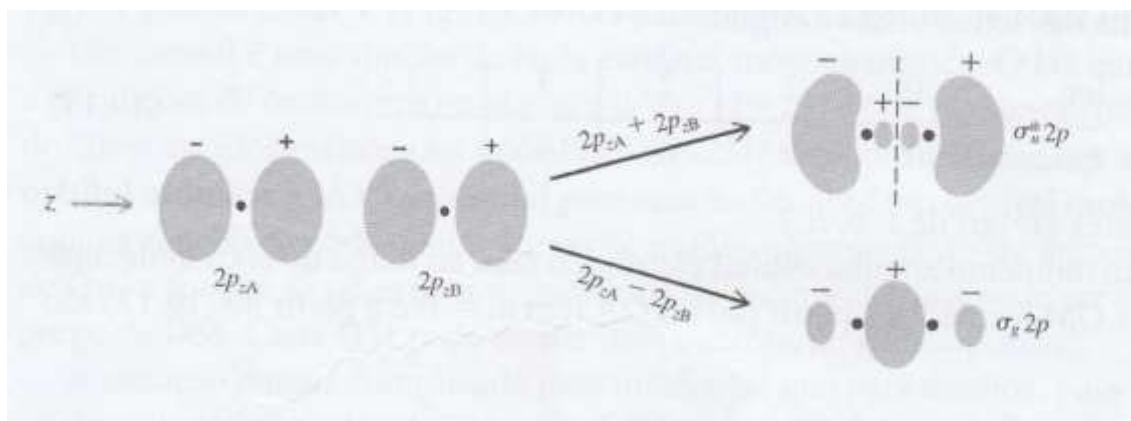


Figura 50- Formação de OM diatômicos homonucleares a partir dos OA $2p_z$ (LEVINE, 2012).

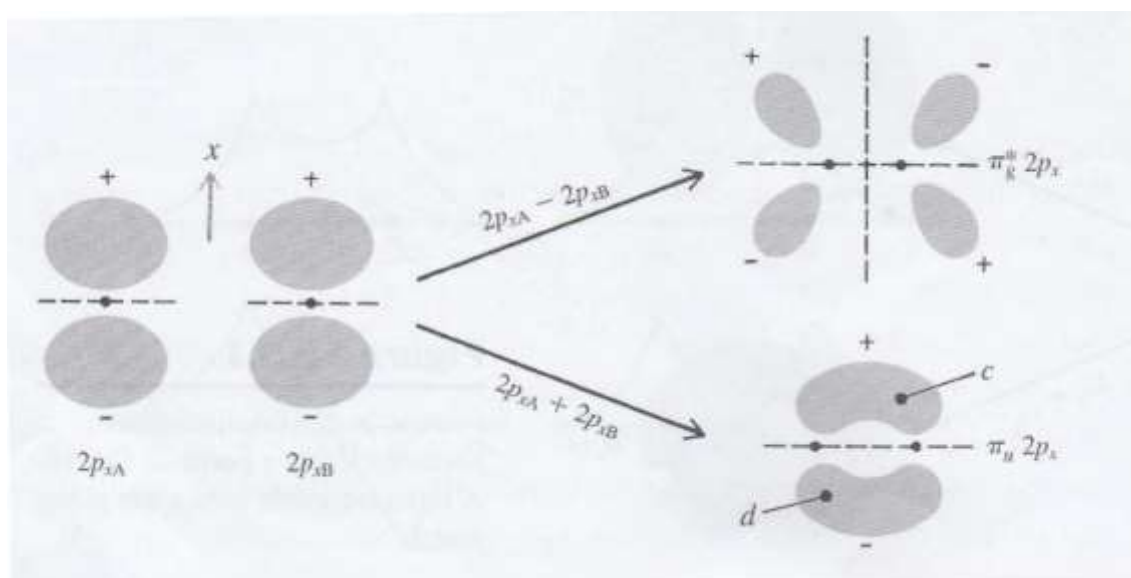


Figura 51- Formação de OM diatômicos homonucleares a partir dos OA $2p_x$ (LEVINE, 2012).

O método orbital molecular simples para moléculas diatômicas não será tratado aqui mas seria interessante se aprofundar num material auxiliar.

A melhor função de onda possível com elétrons fixados nos orbitais é a função de Hartree-Fock. Os orbitais Hartree-Fock (ϕ_i) de uma molécula têm

que ser determinados pela resolução das equações de Hartree-Fock (LEVINE, 2012).

Cada orbital molecular Hartree-Fock é expresso como uma combinação linear de um conjunto de funções chamado base. Essa aproximação de Hartree-Fock é usada, com outros métodos, para chegar à verdadeira função de onda molecular. Qualquer função de onda determinada pela resolução da equação de Hartree-Fock é chamada de função de onda de campo autoconsistente (Sigla em inglês **SCF**). Apenas se a base for muito grande é uma função de onda **SCF** é exatamente igual à função de onda Hartree-Fock (LEVINE, 2012).

Até o momento, a discussão de estrutura eletrônica molecular se baseou na aproximação orbital molecular. Historicamente, o primeiro tratamento quantomecânico de ligação molecular foi o tratamento de Heitler-London do H_2 em 1927. Sua abordagem foi ampliada por Slater e Pauling dando o método de ligação de valência (sigla em inglês **VB**) (LEVINE, 2012).

Heitler e London começaram com a ideia de que uma molécula de H_2 no estado fundamental é formada a partir de dois átomos $1s$ do **H**. Se todas as interações entre os átomos de **H** fossem ignoradas, a função de onda para o sistema de dois átomos seria o produto das funções de onda separadas de cada átomo (LEVINE, 2012).

A função de onda gerada da primeira aproximação da função de onda espacial de H_2 como produto é insatisfatória, pois distingue entre os elétrons idênticos, dizendo que o elétron **1** está no núcleo **A** e o elétron **2** no núcleo **B**. Para levar em conta a indistinguibilidade dos elétrons, deve-se escrever a aproximação da função de onda espacial do H_2 no estado fundamental na forma de uma combinação linear que seja simétrica com relação à troca dos elétrons e, portanto, exija a função de spin de dois elétrons antissimétrica. As equações e seus devidos cálculos não serão apresentados, pois há mais relevância neste momento no significado teórico, não impedindo pesquisas além deste material para a parte matemática (LEVINE, 2012).

A função de onda **VB** de Heitler London para o H_2 no estado fundamental é uma combinação linear de dois determinantes que diferem por darem spins diferentes aos orbitais $1s_A$ e $1s_B$ envolvidos na ligação (LEVINE, 2012).

A função orbital molecular dá, então, uma probabilidade de 50% de uma molécula de H_2 dissociar-se em H^- e H^+ e uma probabilidade de 50% para dissociação em $\text{H} + \text{H}$. Na realidade, uma molécula de H_2 no estado fundamental sempre se dissocia em dois átomos de H neutros. Essa previsão incorreta de dissociação está relacionada às fracas energias de dissociação previstas pelo método orbital molecular. Em contraste, a função **VB** prediz corretamente a dissociação em $\text{H} + \text{H}$ (LEVINE, 2012).

Em moléculas poliatômicas, para aplicar o método **VB** escrevem-se todas as maneiras possíveis de emparelhar os elétrons desemparelhados dos átomos que formam a molécula. Cada maneira de emparelhar uma das estruturas de ressonância da molécula. Para cada estrutura de ressonância, escreve-se uma função (chamada de autofunção de ligação) que se assemelha à função de Heitler-London e a função de onda molecular é considerada na forma de uma combinação linear das autofunções de ligação (LEVINE, 2012).

Em muitos casos, consideram-se orbitais atômicos híbridos (mistura de diferentes **OA** do mesmo átomo) para formar as autofunções de ligação (LEVINE, 2012).

Por exemplo, para a molécula tetraédrica CH_4 , combinam-se quatro **OA** híbridos Sp^3 no carbono com o **OA** $1s$ dos hidrogênios (LEVINE, 2012).

Para moléculas poliatômicas, a função de onda **VB** é difícil. Por exemplo, CH_4 tem quatro ligações e a autofunção de ligação correspondente à estrutura de ressonância simples mais importante passa a ser uma combinação linear de $2^4=16$ determinantes. A inclusão de outras estruturas de ressonância complica ainda mais a função de onda (LEVINE, 2012).

Os cálculos do método **VB** são mais difíceis que os do método **OM**. Entretanto, a linguagem da teoria **VB** oferece aos químicos orgânicos uma ferramenta qualitativa simples para racionalizar muitas tendências observadas (LEVINE, 2012).

A partir de funções de onda moleculares aproximadas, são realizados os cálculos de propriedades moleculares.

A primeira propriedade a ser tratada é a geometria molecular. A geometria de equilíbrio de uma molécula é a configuração espacial dos núcleos para os quais a energia eletrônica (incluindo a repulsão nuclear E_e na equação eletrônica de Schrödinger é um mínimo. Para determinar a geometria de equilíbrio teoricamente, calculando-se a função de onda molecular e a energia eletrônica para muitas configurações diferentes dos núcleos, variando as distâncias de ligação, ângulos de ligação e ângulos de diedro para determinar a configuração de energia mínima (LEVINE, 2012).

Uma forma muito eficiente de determinar a geometria de equilíbrio envolve o cálculo das derivadas da energia eletrônica com relação a cada uma das coordenadas nucleares (esse conjunto de derivadas é chamada de gradiente de energia) para uma geometria inicialmente proposta. Então, utilizam-se os valores dessas derivadas para alterar as coordenadas nucleares para novos valores, que provavelmente são mais próximos da geometria de equilíbrio e, em seguida, calculam-se a função de onda, a energia e o gradiente de energia da nova geometria. Esse processo é repetido até que as componentes do gradiente de energia estejam todas muito próximas de zero, indicando que o mínimo de energia foi determinado (LEVINE, 2012).

Observa-se que, mesmo que a função de onda OM Hartree-Fock seja diferente significativamente da função de onda verdadeira, ela dá distâncias de ligação e ângulos de ligação geralmente exatos. Alguns exemplos de geometrias Hartree-Fock calculadas ou aproximadas com seus valores experimentais entre parênteses estão escritos abaixo (LEVINE, 2012).

$$H_2O: r(OH) = 0,94 \text{ \AA} (0,96 \text{ \AA}), \quad HOH \text{ \AA ngulo} = 106,1^\circ (104,5^\circ)$$

$$H_2CO: r(CH) = 1,10 \text{ \AA} (1,12 \text{ \AA}), \quad r(CO) = 1,22 \text{ \AA} (1,21 \text{ \AA})$$

$$HCH \text{ \AA ngulo} = 114,8^\circ (116,5^\circ)$$

$$C_6H_6: r(CC) = 1,39 \text{ \AA} (1,40 \text{ \AA}), \quad r(CH) = 1,08 \text{ \AA} (1,08 \text{ \AA})$$

Tem-se observado que, para obter uma geometria exata, é preciso apenas uma aproximação da função de onda Hartree-Fock. Funções de onda **SCF** de base mínima geralmente dão geometrias acuradas, mas eventualmente apresentam grandes erros. Para obter uma geometria confiável é necessário um cálculo algo maior que a função de onda **SCF** de base mínima (LEVINE, 2012).

Quando uma ligação é formada entre dois átomos que diferem em eletronegatividade, há um acúmulo de carga negativa no átomo mais eletronegativo, deixando uma carga positiva no átomo mais eletropositivo. A ligação então constitui um dipolo elétrico que por definição é formado de uma carga positiva e de uma carga negativa igual, $\pm Q$, separadas por uma distância r . Um dipolo é caracterizado por seu momento dipolar μ , um vetor de grandeza Qr e de direção segundo a linha que une a carga negativa à positiva, como mostrado na **figura 52** (MOORE, 2006).

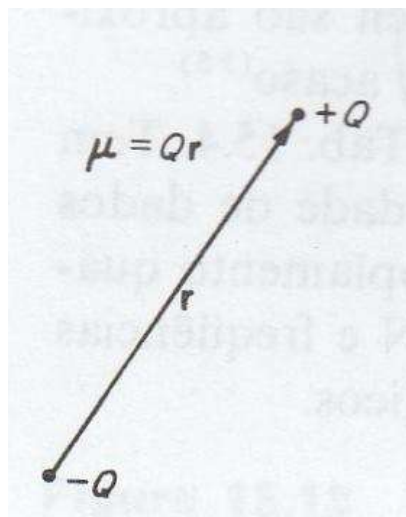


Figura 52- Definição do momento dipolar (MOORE, 2006).

Se uma molécula contém dois ou mais dipolos em diferentes ligações, o momento dipolar total da molécula é a resultante da direção vetorial dos momentos das ligações individuais, como mostrado na **figura 53** (MOORE, 2006).

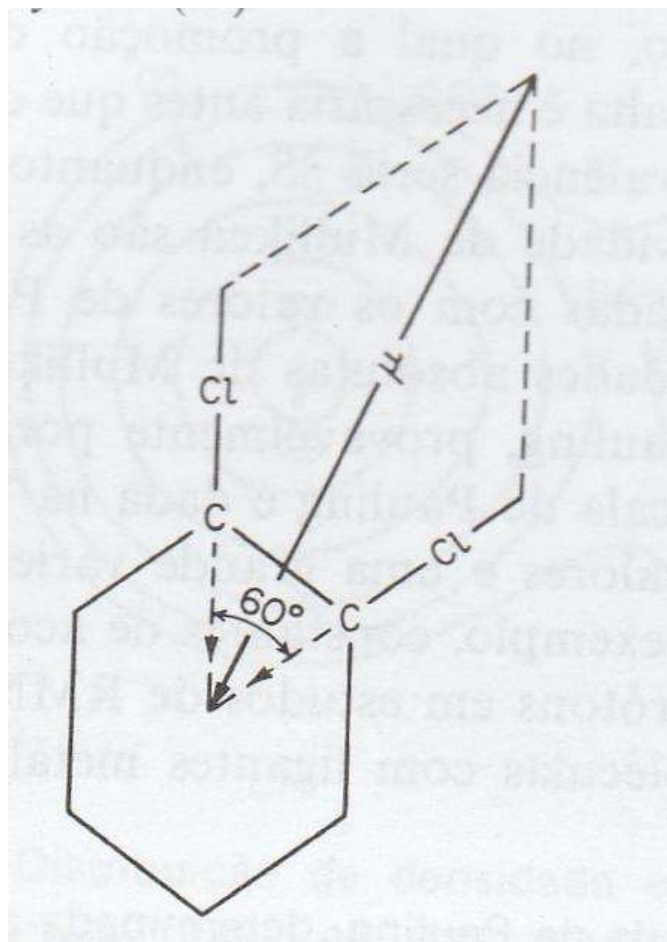


Figura 53- Adição vetorial dos momentos dipolares das ligações no ortodichlorobenzeno (MOORE, 2006)

Os momentos dipolares fornecem dois tipos de informação sobre a estrutura molecular: a extensão dentro da qual uma ligação é permanentemente polarizada e uma compreensão sobre a geometria da molécula, especialmente sobre os ângulos de ligação (LEVINE, 2012).

Assim como para os átomos, a energia de ionização molecular I é a energia necessária para remover da molécula o elétron mais fracamente ligado. T. C. Koopmans provou em 1933 que a energia necessária para remover um elétron de um orbital de um átomo ou moléculas de camadas fechadas é bem aproximada por menos a energia orbital Hartree-Fock (ϵ_i). A energia de

ionização molecular pode, portanto, ser estimada tomando-se $-\epsilon_i$ do **OM** ocupado mais alto. Há um bom acordo entre as energias de ionização de Hartree-Fock do teorema de Koopmans e energias de ionização experimentais (LEVINE, 2012).

Além das energias de ionização, existem as energias de dissociação. Para calcular as energias de dissociação (D_e) teoricamente, subtrai-se a energia molecular de Hartree-Fock calculada na geometria de equilíbrio das energias Hartree-Fock dos átomos separados que formam a molécula (LEVINE, 2012).

Mais uma propriedade molecular é a barreira rotacional. A barreira pode ser determinada experimentalmente a partir de dados termodinâmicos ou do espectro no infravermelho. Para calcular a barreira rotacional **B** teoricamente, calculam-se as funções de onda e energias para as geometrias alternadas e eclipsadas e toma-se a diferença de energia entre essas conformações. Funções de onda **SCF** são barreiras rotacionais bem acuradas, contanto que se empregue uma base substancialmente maior que a mínima. Alguns resultados podem ser vistos na **tabela 8** (LEVINE, 2012).

	C_2H_6	CH_3CHO	CH_3OH	CH_3NH_2	CH_3SiH_3
$B_{exp}/(kcal/mol)$	2,9	1,2	1,1	2,0	1,7
$B_{calc}/(kcal/mol)$	3,2	1,1	1,4	2,4	1,4

Tabela 8- Alguns resultados de barreiras rotacionais (LEVINE, 2012)

O método Hartree Fock funciona bem em cálculos de barreira porque não são quebradas ou formadas quaisquer ligações ao se passar da conformação alternada para a eclipsada e a energia de correlação (que se trata do erro da energia no método Hartree-Fock) é quase a mesma para as duas conformações. Por outro lado, quando uma molécula se dissocia, as ligações

são quebradas e a energia de correlação varia de forma substancial. Portanto a função de onda Hartree-Fock não pode tratar de dissociação (LEVINE, 2012).

Ainda que energia de dissociação de moléculas em átomos calculadas pelo método Hartree-Fock sejam muito imprecisas, as energias relativas das moléculas isoméricas geralmente são previstas com exatidão por funções de onda Hartree-Fock. As energias relativas de isômeros são calculadas da mesma maneira que são calculadas barreiras rotacionais (LEVINE, 2012).

Uma aplicação importante dos cálculos de energia **SCF** e de geometria é para os intermediários de reação, os quais muitas vezes têm vida curta demais para terem suas estruturas determinadas por espectroscopia (LEVINE, 2012).

Uma conformação de uma molécula é definida especificando-se os ângulos de diedro de rotação em torno das ligações simples. Uma configuração que corresponde a um mínimo de energia é chamada confôrmero. A **figura 55** Mostra os confôrmeros gauche e trans do butano ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), que ocorrem os ângulos de diedro **CCCC** de cerca de **65°** (conforme mostrado por cálculos quantomecânicos) e **180°**, respectivamente. As diferenças de energia entre os confôrmeros de uma molécula geralmente são pequenas (Tipicamente **0 a 2 Kcal/mol** para confôrmeros que diferem na rotação em torno de uma ligação), e as barreiras de rotação interna para a interconversão de confôrmeros geralmente são pequenas (LEVINE, 2012).

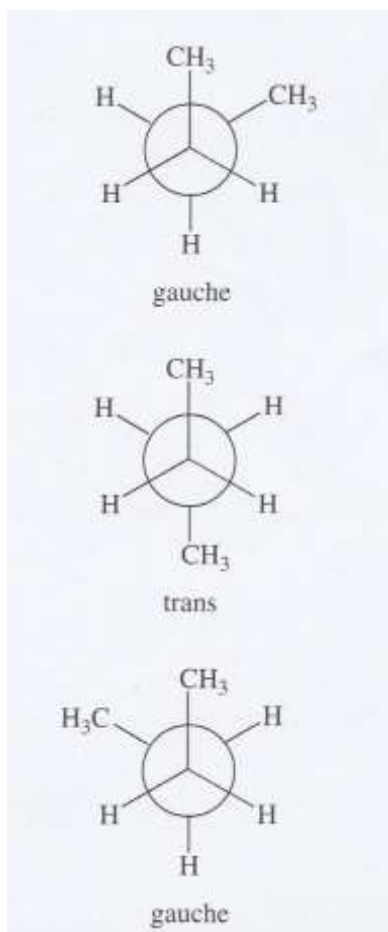


Figura 54- Confômeros do butano $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
(LEVINE, 2012).

Portanto, os diferentes confômeros de uma molécula não são geralmente isoláveis, e uma molécula com rotação interna em torno de ligações simples consiste em uma mistura de confômeros cujas quantidades relativas são determinadas pela lei de distribuição de Boltzmann. Os cálculos **SCF** de base mínima não são confiáveis para prever diferenças de energia entre confômeros, e são necessários cálculos **SCF** com bases grandes para se obter resultados razoavelmente confiáveis aqui. A **figura 55** representa graficamente a energia eletrônica do butano em função do ângulo de diedro **CCCC** (LEVINE, 2012).

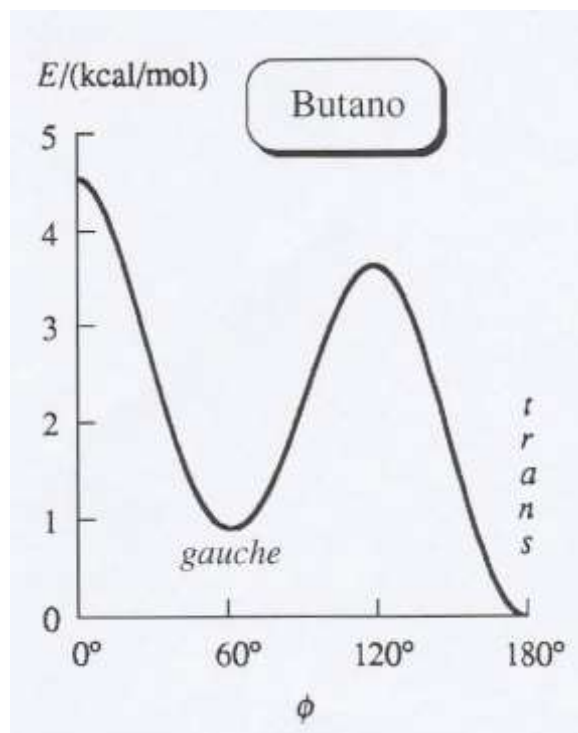


Figura 55- Energia eletrônica incluindo repulsão nuclear do butano (figura 53) em função do ângulo ϕ de rotação interna (LEVINE, 2012).

Por último, veremos a densidade de probabilidade eletrônica. Seja $\rho(x, y, z)dx dy dz$ a probabilidade de se encontrar um elétron de uma molécula polieletrônica na região em forma de caixa localizada em x, y, z e tendo arestas dx, dy, dz por “um elétron”, querendo dizer qualquer elétron, não em particular. A densidade de probabilidade eletrônica $\rho(x, y, z)$ pode ser calculada teoricamente a partir da função de onda eletrônica molecular Ψ_e , integrando-se $|\Psi_e|^2$ sobre as coordenadas do spin de todos os elétrons e sobre as coordenadas espaciais de todos menos um elétron multiplicando-se o resultado pelo número de elétrons na molécula (LEVINE, 2012).

Pode-se determinar ρ experimentalmente analisando-se dados de difração de **raios X** de cristais. As densidades eletrônicas calculadas a partir de funções de onda de Hartree-Fock para pequenas moléculas apresentam um

bom acordo com densidades experimentalmente determinadas, ρ desempenha um papel fundamental na teoria funcional da densidade, um dos mais importantes métodos para calcular propriedades moleculares (LEVINE, 2012).

6- Alguns desdobramentos tecnológicos baseados nos conceitos da Química Quântica.

É importante que os alunos saibam que a mecânica quântica é responsável por várias invenções tecnológicas que permitem e melhoram a vida moderna. Alguns exemplos são citados abaixo

A teoria quântica sustenta quase toda a ciência e a tecnologia modernas. Como vimos, a química quântica descreve de modo satisfatório as estruturas moleculares, sendo assim, o uso do laser e da ressonância paramagnética de spin tem muitas aplicações na medicina diagnóstica e corretiva (NUNES, 2007).

Na arqueologia a física quântica oferece uma contribuição inestimável com várias técnicas experimentais, que inicialmente foram destinadas aos estudos de estruturas atômicas e subatômicas, mas são destinadas a caracterizar objetos encontrados em sítios arqueológicos e a datação de objetos. Como exemplo, pode-se destacar o teste do carbono 14, por onde é realizada a descoberta da idade através do decaimento radioativo C^{14} que está presente nos seres vivos (NUNES, 2007).

No campo de desenvolvimento tecnológico, a eletrônica pode ser considerada o fruto mais promissor da física quântica. A eletrônica se faz presente nos computadores, satélites, televisores, sistemas bancários, semáforos, alarmes, telefonia, elevadores, aviões etc. As telecomunicações por fibras ópticas estão associadas à descoberta do laser (NUNES, 2007).

A origem dos aparelhos eletrônicos remonta às pesquisas que demonstraram a formação de uma corrente elétrica fraca no vácuo parcial entre um filamento aquecido e uma placa metálica. A corrente era unidirecional e cessava se a polaridade do potencial entre o filamento e a chapa fosse invertida. Ficou comprovado, assim, que os transmissores de eletricidade estavam eletrizados. Mais tarde esses transmissores foram nomeados de elétrons. Apesar deles permitirem o início da eletrônica, havia diversas desvantagens em seu uso por causa do tamanho extremamente grande dos aparelhos eletrônicos, necessidade de manutenção constante, alto consumo de energia, etc. (NUNES, 2007).

Os primeiros computadores surgiram durante a década de 40, com propósitos militares. Os principais usos eram a codificação e decodificação de mensagens e cálculos de artilharia. O computador mais famoso daquela época foi o ENIAC (Electronic Numerical integrator Analyzer and Computer). O ENIAC era composto por 17, 468 válvulas, ocupando um galpão imenso. Mesmo com todo o tamanho, o poder de processamento do ENIAC é irrisório comparado para os padrões atuais, comparado até mesmo à calculadora de bolso atual, das mais simples (NUNES, 2007).

Aplicando os conhecimentos da física quântica, também foi possível se descobrir e desenvolver os materiais semicondutores (NUNES, 2007).

Na mecânica quântica, vimos que a matéria apresenta comportamento ondulatório e com isso, há uma possibilidade não nula de a onda atravessar a barreira de potencial, esse fenômeno recebeu o nome de tunelamento. A probabilidade de elétron aparecer do outro lado da barreira se obtêm com a equação de Schrödinger.

Esse princípio de tunelamento eletrônico descrito acima serve de conceituação básica para o microscópio de tunelamento (**STM**), que consiste em uma técnica de observação ampliada de superfície e na medição e manipulação de átomos e moléculas. A invenção do **STM** desencadeou o desenvolvimento de uma grande variedade de microscópicos de varredura por

sonda (**SPM**) tais como o microscópio de força atômica (**AFM**), o microscópio de força magnética (**MFM**), o microscópio de força eletrostática (**EFM**), o microscópio ótico de campo próximo (**SNOM**), e todos os derivados. Um aspecto muito importante do **STM** é o fato de sua natureza de análise não ser destrutiva, não provocando assim, danos irreversíveis na amostra a ser analisada.

Além dos microscópios de varredura, outro avanço tecnológico obtido coma mecânica quântica foi o grande colisor de Hádrons. O grande colisor de Hádrons é o maior acelerador de partículas e o de maior energia existente no mundo. Nesta máquina, as partículas são aceleradas, em um túnel abaixo do nível do solo, campos elétricos e “guiadas” por campos magnéticos (Campos elétricos dão energia para partículas carregadas enquanto campos magnéticos desviam as trajetórias dessas partículas) (CASAS, 2010).

As colisões podem mostrar partículas previstas teoricamente, mas que não foram observadas. Procura-se detectar, identificar as partículas e extrair delas todas as informações acerca da constituição do universo

Outra importante aplicação tecnológica dos princípios da física quântica foi o desenvolvimento da engenharia nuclear. Bombardeando urânio com nêutrons, os cientistas Hahn e Strassmann, na Alemanha, tentavam obter elementos transurânicos. Foi desta forma que eles, em 1938, acabaram por fissurar o urânio pela primeira vez. Frisck e Lise Meitner interpretaram as experiências de Hahn afirmando que, se um núcleo pesado sofre fissão, obtêm-se átomos de massa mediana e enorme quantidade de energia (GRIEBELER e MOREIRA, 2012).

Os principais experimentos foram realizados com U^{235} e Pu^{239} . A fissão nuclear é o mecanismo que possibilita a construção dos reatores nucleares e da bomba atômica. De fato, uma bomba nuclear e um reator nuclear são mecanismos totalmente diversos. As bombas de Hiroshima e Nagasaki fazem parte do passado, mas elas ensinaram uma lição muito importante para a humanidade: há a possibilidade de os seres humanos serem exterminados

como espécie, não simplesmente mortes individuais, mas o fim dos seres humanos, o que torna de grande relevância a ética no desenvolvimento das descobertas científicas (NUNES, 2007).

7- Conclusão

Neste trabalho é apresentada uma proposta abrangente de programa de atomística contemplando todos os tópicos que compõem um entendimento científico completo do assunto. Essa proposta deverá ser adequada em um segundo momento para um programa consistente e adequado para o ensino médio.

Também foram apresentados os conceitos e inserção histórica dos modelos atômicos e sua evolução, culminando com a inserção de conceitos da química quântica, geralmente não trabalhados ou não de forma adequada no ensino médio que deverão servir de base para educadores e professores a fim de depurar a forma definitiva de um programa passível de ser aplicado e utilizado no ensino médio.

A necessidade dessa reformulação em relação ao modelo atual é que a falta da inserção da química quântica leva ao entendimento errôneo de muitos conceitos, prejudicando a correta interpretação da realidade.

Outro fator importante para os alunos na fase do ensino médio é a possibilidade do professor poder trabalhar o sentido filosófico de um modelo, que contempla os seus embasamentos teóricos e, ou empíricos e as suas contribuições para a interpretação correta dos fatos sendo, ao mesmo tempo, conscientizado das limitações e insuficiências inerentes ao processo científico de explicar os fatos.

Ficando claro, assim, que a ciência é uma construção humana que se modifica a cada dia, não existindo verdades absolutas e sim interpretações

mais coerentes com nossa percepção atual de realidade. Os modelos científicos são modelos, acima de tudo, históricos.

O passo seguinte é formular uma base adequada, baseada na presente proposta, de um programa adequado para o ensino médio, buscando uma mediação didática adequada para auxiliar os professores de química que atuam no ensino médio.

Essa é, portanto, uma contribuição inicial para uma longa e mais profunda discussão acerca do modo como a atomística pode ser apresentada aos alunos do ensino médio de forma coerente para se tornar uma ferramenta efetiva da interpretação da natureza que os rodeia.

8- Bibliografia

ALMEIDA, E, C, S., SILVA, M, F, C., LIMA, J, P., SILVA, M, L., BRAGA, C, F., BRASILINO, M, G, A., Contextualização do ensino de química: motivando alunos de ensino médio, Centro de ciências exatas e da natureza, departamento de química, X encontro de extensão (UFPB-PRAC).

ASSIS, A, M, A, D., BELLO, M, E, R, B., O conteúdo “modelos atômicos” em livros didáticos do ensino médio de diferentes PNLEM, Divisão de ensino de química da sociedade brasileira de química (ED/SBQ), Instituto de química da universidade federal da Bahia (IQ/UFBA), XVI Encontro nacional de ensino de química (XVI ENEQ) e X Encontro de educação química da Bahia (X Eduqui), Salvador, BA, julho de 2012.

ASSIS, V, S., SANTOS, L, D., CRUZ, M, C, P., Cor como contextualização para o ensino de transição eletrônica segundo o modelo atômico de Bohr, VI Colóquio Internacional “Educação e Contemporaneidade”, Sergipe, setembro de 2012.

ATKINS, P.; Paula, J., Físico-Química, volume 1. Tradução de Edilson Clemente Silva, 8ª Edição, Rio de Janeiro: LTC, 2008.

BAZZAN, A, C, Envolvimento dos estudantes do ensino médio com a química – conversas de professores, Universidade regional do noroeste do estado do Rio Grande do Sul (UNIJUÍ), 2009.

BRADY, J, E., HUMISTON, G. E., Química geral, editora Livros técnicos e científicos editora, volume 1, 2ª edição, 1986.

BRASIL, Lei de Diretrizes e Bases da Educação Nacional, Lei nº 9.394, de 20 de dezembro de 1996.

BRASIL, Parâmetros Curriculares Nacionais para o Ensino Médio- Ciência da Natureza, Matemáticas e suas Tecnologias (PCNEM), Ministério da Educação e Cultura, 2000.

BRASIL, Orientações curriculares para o ensino médio, Ciências da natureza, matemática e suas tecnologias, Secretaria de Educação Básica, Ministério da Educação, Secretaria de Educação Básica, vol. 2, 2006.

CASAS, R, L; O grande colisor de Hádrons (LHC), Observatório Astronômico Frei Rosário (UFMG), Maio de 2010.

CHASSOT, A.I., Sobre prováveis modelos atômicos, Química nova na escola, nº 3, maio de 1996.

CHAVES, L, M, M, P., SANTOS, W, L, P., CARNEIRO, M, H, S., Concepções de ciência reveladas nos conteúdos sobre modelos atômicos de livros didáticos de química, Universidade de Brasília (UnB).

CICLINI, G, A., SILVEIRA, H, E., Modelos atômicos e representações no ensino de química, Faculdade de educação/ instituto de Química, Universidade federal de Uberlândia, Enseñanza de las ciencias, 2005, nº extra, VII congreso.

DAMASCENO, H, C., WARTHA, E, J., BRITO, M, S., Conteúdos e programas de química no Ensino Médio: O que realmente se ensina nas escolas, XIV Encontro Nacional de Ensino de Química (XIV ENEQ), Julho de 2008.

DUARTE, F, C; Microscópio de tunelamento com varredura (STM) e microscópio de força atômica (AFM), Disponível em http://www.dsif.fee.unicamp.br/~furio/IE607A/STM_AFM.pdf , acessado em 10 de dezembro de 2015.

FARIAS, P, A, M., Leucipo de Mileto e Demócrito de Abdera.

FERREIRA, G, R., Percepções sobre modelos e modelagens no ensino de modelos atômicos presentes em livros didáticos de química, trabalho de conclusão de curso licenciatura em ciências naturais, Universidade de Brasília, junho de 2013.

FERRY, A, S., NAGEM, R, L., Analogia & contra-analogia: Um estudo sobre a viabilidade da comparação entre o modelo atômico de Bohr e o sistema solar por meio de um júri simulado, AMTEC/CNPq - Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Experiências em ensino de ciências, Vol. 4(3), dezembro de 2009.

FERRY, A, S., NAGEM, R, L., O modelo atômico de Thomson em livros didáticos: um estudo sobre o análogo “pudim de passas”, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

FILGUEIRAS, C, A, L., Duzentos anos da teoria atômica de Dalton, Química Nova na Escola, N° 20, Novembro de 2004.

GRIEBELER, A., MOREIRA, M, A., Tópicos de física Quântica para o ensino médio a partir de uma unidade de ensino potencialmente significativa, Instituto de Física (UFRGS), Programa de Pós Graduação em Ensino de Física, vol. 26, N° 6, 2012.

GOMES, H, J, P., OLIVEIRA, O, B., Obstáculos epistemológicos no ensino de ciências: um estudo sobre suas influências nas concepções de átomo, Ciências e cognição, vol. 12, dezembro de 2007.

GRECA, I, M., MOREIRA, M, A., HERSCITZ, V, E., Uma proposta pra o ensino de mecânica quântica, Instituto de física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Revista Brasileira de ensino de física, vol. 23, n° 4, Dezembro de 2001.

GREENE, B; Além dos cosmos - Mecânica Quântica, Créditos pertencentes à Natinal Geography Channel Company, Disponível em <https://www.youtube.com/watch?v=C2WEPI9qWcc>, acessado em outubro de 2015.

HOLANDA, A, B., Dicionário Aurélio da Língua Portuguesa., editora Positivo Editora., 5ª edição, 2010.

JOSHUA, G, C., A short history of atomism from Democritus to Bohr, revista de filosofia & ciência 5, Centro de filosofia da Universidade de Lisboa, 2012.

JUNIOR, O, P., As interpretações da mecânica quântica, *Ciência hoje*, vol. 42, nº 250, julho de 2008.

JUNIOR, O, P., A representação pictórica de entidades quânticas da Química, *Química nova na escola*, nº 7, dezembro de 2007.

LEVADA, C, L., LEVADA, M, M, O., A experiência de Rutherford completa 100 anos, *Ágora revista eletrônica*, ano VI, Nº 12, Junho de 2011, disponível em www.agora.ceedo.com.br .

LEVINE, I, N., *Físico-Química, LTC*, 6ª edição, vol. 2, 2012.

LONDERO, L., O modelo atômico de Bohr e as abordagens para seu ensino na escola média, *Enseñanza Aprendizaje de las ciencias*, vol. 9, nº 1, janeiro/junho de 2014.

LOPES, C, V, M., Modelos atômicos do século XX: da física clássica à introdução da teoria quântica, tese de doutorado em história da ciência, Pontifícia Universidade Católica de São Paulo (PUC- SP), 2009.

MATSON, J; "What is Quantum Mechanics Good for?", *Scientific American*, November 2, 2010.

MARTINS, R, A., A descoberta dos Raios X: O primeiro comunicado de Röntgen, *Revista brasileira de ensino de Física*, vol. 20, Nº 4, Dezembro de 1998.

MARTINS, W, D., Wilhelm Conrad Roentgen e a descoberta dos Raios-x, *Revista de Clínica e Pesquisa Odontológica.*, v.1, nº 3, jan./mar. De 2005.

MELO, M, R., NETO, E, G, L., Dificuldades de ensino e aprendizagem dos modelos atômicos em química, *Química nova na escola*, vol. 35, nº 2, maio de 2013.

MELZER, E, E, M., AIRES, J, A., A história do desenvolvimento da teoria atômica: um percurso de Dalton a Bohr.

MELZER, E, E, M., CASTRO, L., AIRES, J, A., GUIMARÃES, O, M., Modelos atômicos nos livros didáticos de química: obstáculos à aprendizagem?, VIIENpec – Encontro nacional de pesquisa em educação em ciências, Florianópolis, novembro de 2009.

MOORE, W, J., Físico Química, editora Edgard Blucher, volume 2, tradução da 4ª edição, 2006.

NASCIMENTO, M, A, C., Química I, Centro de educação à distância do estado do Rio de Janeiro, 2007.

NUNES, A, L; A Física Quântica para todos, XVII Simpósio nacional de ensino de física, CEFET-Química (Unidade de Nilópolis, RJ), 2007.

OLIVEIRA, I, S., Revisitando a estranha, Centro brasileiro de pesquisas físicas do Rio de Janeiro, Ciência hoje, vol. 47, nº 282, junho de 2011.

PEDUZZI, L, O, Q., BASSO, A, C., Para o ensino do átomo de Bohr no nível médio, Departamento de ensino, Faculdade de educação, Universidade de Pelotas, Revista brasileira de ensino de física, vol. 27, nº 4, 2005.

PEIXOTO, E, M, A., Teoria quântica, 1988.

PINHEIRO, L, A., COSTA, S, S, C., MOREIRA, M, A., Textos de apoio ao professor de física- do átomo grego ao modelo padrão: os indivisíveis de hoje, Programa de Pós – Graduação em ensino de física, Mestrado profissional em ensino de física, Instituto de Física (UFRGS), VOL. 22, Nº 6, 2012.

ROCHA, J, R, C., CAVICCHIOLI, A., Uma abordagem alternativa para o aprendizado dos conceitos de átomo, molécula, elemento químico, substância simples e substância composta, nos ensinos fundamental e médio, Química nova na escola, nº 21, maio de 2005.

RUSSEL, J, B., Química geral, editora Pearson editora, volume 1, 2ª edição, 2006.

SALGADO, T, D, M., EICHLER, M, L., CALVENTE, M, H, H., Módulos para o ensino de radioatividade, Universidade federal do Rio grande do sul, Instituto de química, área de educação química.

SANTANA, K, V, R., SARMENTO, V, H, V., WARTHA, E, J., Modelos atômicos e e estrutura celular: uma análise das ideias dos estudantes de química do ensino médio, Revista de ensino de ciências e matemática, vol. 2, nº 2, julho/dezembro 2011.

SENA, J, A, S., JUNIOR, D, F, S., ANTAS, F, P, S., OLIVEIRA, K, B., SANTOS, R, P., Compreensão de modelos atômicos, formulação da mecânica quântica e suas aplicabilidades contemporâneas, VII Congresso norte nordeste de pesquisa e inovação, Tocantins, 2012.

SILVA, J, L, P, B., CUNHA, M, B, M., Para compreender o modelo atômico quântico, XIV Encontro nacional de ensino de química (XIV ENEQ), Universidade federal do Paraná, julho de 2008.

SOARES, S., PAULO, I, C., MOREIRA, M, A., Textos de apoio ao professor de física- do átomo grego ao modelo padrão: sugestões ao professor de física para abordar tópicos de mecânica quântica no ensino médio, Programa de Pós – Graduação em ensino de física, Mestrado profissional em ensino de física, Instituto de Física (UFRGS), VOL. 19, Nº 4, 2008.

SOUSA, J., SANTOS, M., SILVA, P., Trabalho experimental de Espectroscopia da radiação gama, Disciplina de física da radiação, Mestrado integrado em engenharia biomédica, 5º ano, 1º semestre 2012/2013.

SOUZA, V, C, A., JUSTI, R, S., FERREIRA, P, F, M., Analogias utilizadas no ensino dos modelos atômicos de Thomson e Bohr: uma análise crítica sobre o que os alunos pensam a partir delas, Universidade Federal de Minas Gerais, Investigações em ensino de ciências, Vol. 11(1), 2006.

TOLENTINO, M., ROCHA-FILHO, R, C., O átomo e a tecnologia, Química nova na escola, nº 3, maio de 1996.

TOLENTINO, M., ROCHA-FILHO, R, C., O núcleo síntese dos metais transurânicos, departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, Química Nova, 18(4), 1995.

VIANA, H, E, B., PORTO, P, A., O processo de elaboração da teoria atômica de John Dalton, Química Nova na Escola, N° 7, Dezembro de 2007.

XAVIER, A, M., LIMA, A, G., VIGNA, C, R, M., VERBI, F, M., BORTOLETO, G, G., CORAIEB, K., COLLINS, C, H., BUENO, M, I, M, S., Marcos da história da radioatividade e tendências atuais, Química nova, Vol. 30, N°1, 83-91, 2007.

YANG, D, H., FREEDMAN, R, A., Física III – Eletromagnetismo, editora Pearson, 12ª edição, 2009.

ZANON, L, B; MALDANER, O, A; GAUCHE, R; SANTOS, W, L, P; Química, Ministério da educação (MEC), Disponível em <http://portal.mec.gov.br/seb/arquivos/pdf/09Quimica.pdf>, Acessado em 03 de janeiro de 2016.

