

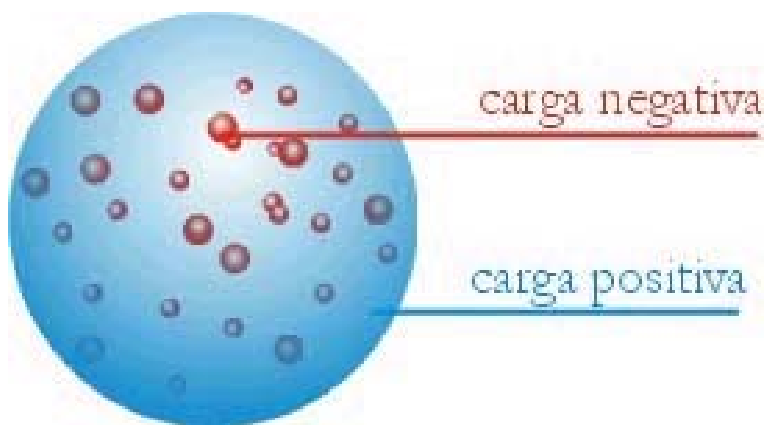
Chapter 4

Como Construir um Átomo

Rutherford já havia ganhado o Prêmio Nobel de 1908 pelas suas “investigações sobre o decaimento dos elementos e...a química de substâncias radioativas”. Ele trabalhava duro e era um físico muito talentoso, cheio de disposição e auto-confiança. Em uma carta que escreveu em certa ocasião, o já então Lord Rutherford, revela: “estive lendo alguns de meus primeiros trabalhos e, você sabe, quando terminei eu disse para mim mesmo, ‘Rutherford, meu garoto, você era um bocado esperto’ ”. Embora estivesse satisfeito por ter ganhado o Nobel, não o estava com o fato de ter sido um prêmio de química, e não um de física (qualquer pesquisa com elementos era considerada química e não física). Em seu discurso de recebimento do Prêmio Nobel, enfatizou que durante o seu trabalho observou muitas transformações com radioatividade, mas nenhuma tão rápida quanto a de si próprio, de físico para químico! (**Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles**, R. Eisberg e R. Resnick, John Wiley and Sons, New York, 1974)

4.1 A Estrutura do Átomo

A idéia de que a matéria é formada por partículas muito pequenas e “indivisíveis”, ou *átomos*, é muito antiga. Demócrito, que viveu quase 400 anos antes de Cristo, já pensava nessas coisas. Ele propôs um modelo atômico onde os átomos se encaixavam mais ou menos como as peças de um Lego. Mas, a verdadeira estrutura do átomo só foi revelada no início do século XX com o trabalho de Rutherford. Hoje o átomo não pode ser compreendido sem a mecânica quântica (é como diz a máxima: “fora da mecânica quântica não há salvação!”).



No modelo do “pudim de passas” os elétrons atômicos distribuem-se uniformemente em um substrato contínuo positivo.

No início do século XX já se “apostava” que existiam elétrons dentro dos átomos; só não se sabia como eles se distribuía. Havia um

modelo devido a J.J. Thompson, conhecido como o *modelo do pudim de passas*. Neste modelo os elétrons, partículas com carga negativa, eram distribuídos em uma massa uniforme com carga positiva. Os elétrons seriam as “passas”, e a massa o “pudim”. Ernest Rutherford, inglês originário da Nova Zelândia, tentava descobrir como estas cargas se distribuíam dentro do átomo bombardeando folhas metálicas muito finas com partículas alfa, e observando os desvios nas suas trajetórias. Partículas alfa, como descoberto posteriormente, nada mais são do que átomos de hélio duplamente ionizados, ou seja, que perderam dois elétrons. Portanto, partículas alfa possuem uma carga positiva igual a $+2e$. A idéia por detrás dos experimentos de Rutherford era muito simples. Imagine que você tenha uma partícula de carga Q parada, fixa em uma posição. Você arremessa (de alguma forma!) e tenta acertar nesta partícula uma outra com carga q . Como sabemos do capítulo um, partículas carregadas exercem forças elétricas umas sobre as outras, sendo a força proporcional ao produto das cargas e inversamente proporcional ao quadrado da distância entre elas. Então, a carga q que você arremessou interagirá eletricamente com a carga fixa Q de acordo com a força:

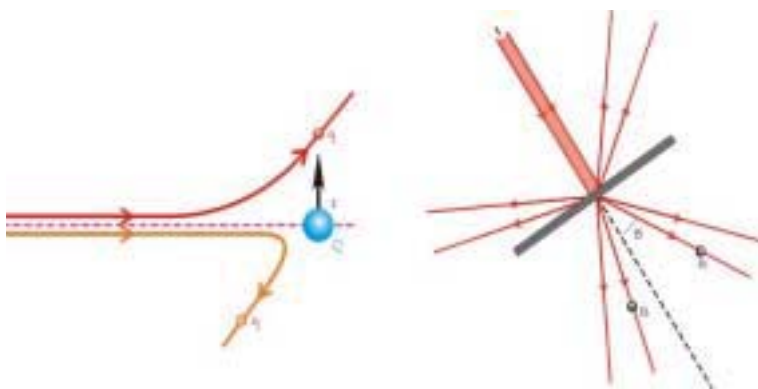
$$\mathbf{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qQ}{r^2} \mathbf{e}_r$$

Se q e Q tiverem o mesmo sinal (ambas positivas ou ambas negativas), a força será repulsiva; caso contrário será atrativa. Obviamente em se tratando de partículas microscópicas, é muito difícil acertar uma na outra, pois para início de conversa, sequer conseguimos enxergar essas coisas! Por isso o negócio tem que ser feito na base da “tentativa e

erro” . Traduzindo: bombardeia-se o alvo com um *feixe* de partículas alfa; algumas delas vão ser mais desviadas do que outras. Do outro lado do alvo posicionam-se detectores de partículas cuja finalidade é medir os desvios nas trajetórias das partículas que atravessam o alvo. Esses desvios são quantificados por uma grandeza chamada *ângulos de espalhamento*. Finalmente, faz-se uma análise estatística dos resultados (a propósito, a seguinte frase é atribuída a Rutherford: “se o seu experimento precisa de estatística, é melhor você fazer outro”). Mas, imagine por simplicidade, que você consiga acelerar a partícula com carga q exatamente na direção daquela com carga Q . Conforme a distância r entre elas for encurtando, a força elétrica F aumentará, e se elas chegarem muito próximas uma da outra, F se tornará imensa, e causará um grande *desvio* na trajetória da partícula com carga q . A partir das medidas dos ângulos de espalhamento, Rutherford tentava “adivinhar” como era a distribuição de partículas com carga Q do alvo.

Os alvos utilizados por Rutherford em seus experimentos eram folhas metálicas muito finas. A idéia era que, ao penetrar na folha, as cargas das partículas alfa interagiriam com a distribuição de cargas dos átomos da folha, e sairiam do outro lado dela com um certo ângulo de espalhamento em relação à direção de incidência. Dentro do modelo do pudim de passas o espalhamento causado por um átomo da folha era estimado ser da ordem de apenas 0,0057 graus. No entanto, ao atravessar a folha, uma determinada partícula alfa sofre espalhamento causado por diversos átomos. O desvio total das partículas emergindo do outro lado da folha não era esperado ultrapassar ângulos em torno de 3 graus. Qual não foi a surpresa de Rutherford ao verificar que não só o

ângulo de espalhamento de algumas partículas era muito maior do que o previsto pelo modelo de Thompson, mas algumas delas chegavam até mesmo a ser refletidas pela folha de volta sobre a direção de incidência, ou seja, sofriam espalhamento de 180 graus! Mais tarde ele compararia a situação como se jogássemos um tijolo sobre uma folha fina de papel e o tijolo fosse rebatido de volta!



Em um experimento de espalhamento, um feixe de átomos incide sobre um alvo. A interação dos átomos do feixe com os átomos do alvo ocasiona o desvio, ou espalhamento, do feixe incidente.

A partir da análise de seus dados, Rutherford foi levado à conclusão inevitável de que o átomo teria uma carga positiva concentrada em um núcleo com dimensões incrivelmente pequenas, da ordem de 10^{-15} m (= 1 femtometro), e a carga negativa, os elétrons, estaria distribuída em uma região da ordem de 10^{-10} m (= 1 angstrom). Era uma conclusão bastante bizarra para a época. Se comparássemos o núcleo com uma

bolinha com 1 cm de diâmetro, a eletrosfera teria um raio de cerca de 1 km. Ou seja, o átomo encontrado por Rutherford era um grande vazio!

Obviamente os resultados de Rutherford foram debatidos exaustivamente até que se chegasse a um quadro de consenso. A idéia que temos de átomo hoje em dia é o resultado dessas discussões. Um átomo possui um *núcleo* que concentra praticamente toda a sua massa, e retém a carga positiva. O diâmetro de um átomo é cerca de 100 000 vezes o diâmetro do seu núcleo. O núcleo é circundado por elétrons, que são os portadores de carga negativa. A massa do elétron é igual a $9,10939 \times 10^{-31}$ kg. O núcleo é composto por dois tipos de partículas: os *prótons*, e os *nêutrons*. Os nêutrons não possuem carga elétrica e portanto não interagem eletricamente com os prótons do núcleo, mas exercem um papel fundamental na sua estabilidade. Um próton possui uma carga igual à do elétron, mas de sinal contrário: $+1,602 \times 10^{-19}$ C; sua massa é de $1,67262 \times 10^{-27}$ kg, cerca de 1836 vezes maior do que o elétron. A massa do nêutron, por sua vez, é muito próxima à do próton: $1,67482 \times 10^{-27}$ kg. O número total de prótons no núcleo é chamado de *número atômico*, em geral representado pela letra Z . Portanto, a carga elétrica total de um núcleo com número atômico Z é igual a $+Ze$. O número de prótons mais o número de nêutrons (representado por N) de um núcleo é igual ao seu *número de massa*, representado por A :

$$A = Z + N$$

Em seu estado normal, um átomo é sempre neutro, ou seja, não possui carga elétrica. Isso obviamente ocorre porque o número de elétrons é igual ao número de prótons. Não é muito difícil arrancar elétrons

de certos átomos (contudo é extremamente difícil arrancar prótons!). Cada elétron que sai do átomo aumenta a carga deste de $+e$ (correspondendo à carga do próton que ficou em excesso). Um átomo carregado é chamado de íon. Às vezes também é possível que um átomo neutro capture um elétron, tornando-se negativo. Átomos com excesso de carga positiva são chamados de *cátions*, e com excesso de carga negativa de *ânions*. Então, íons podem ser cátions ou ânions.

Se você quer saber, eu acho estas definições todas um “saco”, mas elas são necessárias para a classificação dos átomos. Imagine, tudo que vemos em volta da gente nesse mundão de Deus: plantas, animais, carros, o mar, o Sol, cerveja, o ar, a Lua, feijoada, balas juquinha, e até aquela vizinha boazuda do 907 é construído a partir de uns poucos tipos de átomos!

4.2 Orbitais Quânticos

Assim como qualquer outro objeto microscópico, átomos devem ser descritos pela mecânica quântica. Como dissemos no capítulo anterior, todas as informações sobre uma partícula que se move em um potencial V estão contidas na sua função de onda ψ . No caso de um átomo, cada elétron está sujeito à ação da força coulombiana exercida pela carga do núcleo. Por sua vez, os prótons e nêutrons que compõem o núcleo também estão sujeitos a um potencial, chamado *potencial nuclear*, que determina a forma da função de onda do núcleo. Na seção 4.8 voltaremos ao problema do núcleo. No momento queremos entender somente como os elétrons de um átomo se comportam.

Os estados eletrônicos em um átomo são descritos por *orbitais quânticos*. No capítulo anterior representamos uma partícula com coordenada x em um estado quântico a por $\psi_a(x)$. O subíndice ‘ a ’ representa um estado genérico; ele bem poderia ser o vetor de onda \mathbf{k} de uma partícula livre com momento $p = \hbar k$ e energia $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Neste caso, indexaríamos a função de onda com k : $\psi_k(x)$. O subíndice k representa o estado quântico da partícula neste caso. O módulo quadrado $|\psi_k(x)|^2$ representa a distribuição de probabilidades (no espaço) para o estado \mathbf{k} . Números que representam estados quânticos de partículas são chamados de *números quânticos*. Indexamos os orbitais de um elétron em um átomo de modo semelhante. Só que agora as energias não são indexadas por k , mas por números inteiros n , chamados de *números quânticos principais*. O caso mais simples é o de um átomo que só possui 1 único elétron. Este poderia ser o caso do átomo da substância mais simples e mais abundante do Universo, o hidrogênio. O átomo de hidrogênio consiste em um elétron orbitando em torno de um próton. Mas, podemos também pensar em um átomo cujo núcleo possua uma carga Ze com apenas um elétron orbitando à sua volta. Qualquer que seja o caso, as energias possíveis dos elétrons no átomo serão dadas por:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

sendo μ uma quantidade chamada de *massa reduzida*, definida por:

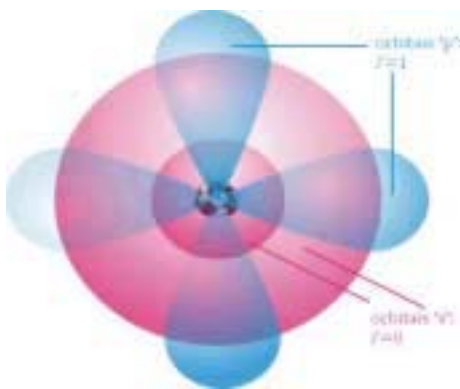
$$\mu = \frac{mM}{m + M}$$

onde m é a massa do elétron, e M a do núcleo. Usa-se esta quantidade ao invés da massa do elétron pura e simples porque o núcleo também se

move sob a ação da interação coulombiana, e não só o elétron. Contudo, o movimento do núcleo é pequeno comparado ao do elétron, devido à sua massa ser muito maior. Se, por exemplo, considerássemos o núcleo muito mais pesado que o elétron, ou seja, $M \gg m$, poderíamos desprezar m no denominador, e a massa reduzida seria igual à massa do elétron. Para o átomo de hidrogênio, com um único próton no seu núcleo, $M \approx 1836m$, e a massa reduzida se torna:

$$\mu \approx \frac{1836m^2}{1837m} = 0,9995m$$

ou seja, a massa reduzida do átomo de hidrogênio é cerca de 99,95% a massa do elétron. Tudo se passa como se uma partícula com a carga do elétron, mas com uma massa ligeiramente menor do que a dele orbitasse em torno de um núcleo parado¹.



Os elétrons de um átomo se distribuem em *orbitais quânticos*. Cada orbital representa uma distribuição de probabilidades.

¹Eventualmente o leitor terá notado a semelhança entre a expressão da massa reduzida e àquela da resistência equivalente a dois resistores ligados em paralelo!

Outro comentário a respeito da fórmula para E_n : o fator $4\pi\epsilon_0$ no denominador daquela fórmula é proveniente da expressão da interação coulombiana (capítulo 1): $V = -Ze^2/4\pi\epsilon_0r$.

O número n no denominador de E_n é chamado *número quântico principal*. Ele só pode adquirir valores naturais não negativos: $n = 1, 2, 3, \dots$. A cada um desses valores corresponde uma energia E_n . Note que quanto maior for o valor de n , menor será o valor de E_n . Note também o sinal negativo de E_n : ele representa o fato de que o elétron está preso ao núcleo. Quanto mais negativa for a energia, mais preso estará o elétron. O estado de energia mais baixo é aquele correspondente a $n = 1$. Quando o elétron ocupa este estado de energia, dizemos que o átomo está em seu *estado fundamental*. Um elétron no estado fundamental estará mais fortemente ligado ao núcleo do que outro com energia E_{10} ($n = 10$). Se n for muito grande, E_n tende à zero, e o elétron se liberta do átomo. Os níveis de energia mais baixos são bem separados uns dos outros; à medida que n aumenta eles vão se tornando cada vez mais próximos um do outro, até formar um *contínuo de energia*. Como ilustração vamos calcular a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio. Basta substituímos os seguintes valores numéricos na fórmula de E_n :

$$n = 1$$

$$\mu = 0,99m = 0,99 \times 9,11 \times 10^{-31} = 9,02 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e^4 = (1,60 \times 10^{-19})^4 = 6,55 \times 10^{-76} \text{ C}^4$$

$$\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} = \frac{1}{(4 \times 3,14 \times 8,85 \times 10^{-12})^2} = 8,09 \times 10^{19} \frac{\text{N}^2\text{m}^4}{\text{C}^2}$$

$$\frac{1}{\hbar^2} = \frac{1}{(1,05 \times 10^{-34})^2} = 0,91 \times 10^{68} \text{ J}^{-2}\text{s}^{-2}$$

Com isso obtemos:

$$E_1 = -43,50 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Este valor é melhor expresso em unidades de eletronsvolts. 1 eletronsvolt (1 eV) é definido como a energia que um elétron adquire ao atravessar uma diferença de potencial de 1 volt, e numericamente é igual à carga do elétron:

$$1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Logo, em unidades de eV, o valor de E_1 será:

$$E_1 = -\frac{43,50 \times 10^{-19}}{1,60 \times 10^{-19}} = -13,6 \text{ eV}$$

Esta é a energia necessária para ionizar um átomo de hidrogênio, ou seja, remover completamente seu elétron.

E as funções de onda correspondentes aos valores de E_n ? O leitor “esperto” já terá adivinhado que essas deverão ser indexadas pelos mesmos números quânticos: ψ_n . Contudo, faltam ainda algumas “coisinhas” a serem ditas. O primeiro fato a ser notado é que agora temos um problema em 3 dimensões, e isso não dá para simplificar (átomos unidimensionais feito uma linha, também já é demais, não é? Pois

aguarde até o fim do livro!). Logo ψ_n dependerá de x , y e z , e não apenas de x . Acontece que, por razões técnicas, é mais vantajoso expressarmos ψ_n não em termos de *coordenadas retangulares* x , y e z , mas em termos de *coordenadas esféricas* r , θ e φ (se você ainda não sabe o que é isto, reclame com o MEC e dê uma olhada no painel X). As relações entre x , y e z , e r , θ e φ são:

$$x = r \operatorname{sen} \theta \cos \varphi$$

$$y = r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

PAINEL X
COORDENADAS RETANGULARES vs. ESFÉRICAS

A posição de qualquer objeto pontual no espaço (como um elétron em um átomo) é completamente determinada por 3 números, ou *coordenadas*. De uma maneira geral representamos estas coordenadas por x , y e z . O sistema de coordenadas mais usual é aquele em que, a partir de uma origem, simplesmente fornecemos as distâncias ao longo dos três eixos coordenados mutuamente perpendiculares. Por exemplo, suponha que estejamos em um quarto cujas dimensões sejam de $3\text{ m} \times 3\text{ m} \times 3\text{ m}$. Podemos dizer que a posição da lâmpada no centro do teto do nosso quarto, tomando como origem um dos cantos do cômodo é dada pelo vetor:

$$\mathbf{r} = \frac{3}{2}\mathbf{i} + \frac{3}{2}\mathbf{j} + 3\mathbf{k}$$

A distância da lâmpada à origem do sistema de coordenadas é dada pelo módulo de \mathbf{r} :

$$|\mathbf{r}| = r = \sqrt{\frac{9}{4} + \frac{9}{4} + 9} = 3,67\text{ m}$$

Se tomássemos como origem o centro do quarto, justamente em baixo da lâmpada, teríamos $\mathbf{r} = 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + 3\mathbf{k}$, e a distância da lâmpada até a origem seria obviamente igual a 3 m .

Em muitos problemas esta representação retangular das coordenadas é inconveniente. Por exemplo, se quiséssemos descrever as posições de uma formiga que anda em cima de uma bola, o sistema retangular seria complicado pelo fato de que sobre uma superfície esférica as coordenadas x , y e z não são mais independentes uma da outra, mas estão relacionadas por:

$$R^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

onde R é o raio da bola. Seria muito mais fácil neste caso fornecermos os ângulos azimutal θ e meridional φ associados à posição da formiga. O ângulo θ varia de 0 a π , e φ varia de 0 a 2π . Assim, suas coordenadas seriam dadas por R , θ e φ (sendo R constante), ao invés de x , y e z . Estas coordenadas são chamadas de *esféricas*. No

caso em que há variação do raio da esfera teremos também que fornecer o valor de r , além dos ângulos θ e φ . Podemos sempre transformar de coordenadas esféricas para retangulares, e vice-versa, através das relações:

$$x = r \operatorname{sen} \theta \cos \varphi$$

$$y = r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

Portanto, a função de onda do elétron será representada por $\psi_n(r, \theta, \varphi)$; ela descreve o elétron que se encontra no estado de energia E_n , e possui coordenadas r , θ e φ . O módulo quadrado $|\psi_n(r, \theta, \varphi)|^2$, representa, como antes, a distribuição de probabilidades de encontrarmos um elétron, com coordenadas r , θ e φ , no estado quântico n . Mas ainda falta algo (não se desespere! Nada de pânico!). Para uma mesma energia, ou seja, para um valor fixo de n , o elétron pode “girar” de várias maneiras diferentes em torno do núcleo, ou seja, pode ter diferentes momentos angulares. Para cada uma dessas maneiras haverá uma função de onda diferente. O que falta é especificarmos na função de onda o estado de momento angular do elétron. Vimos no capítulo anterior que os estados de momento angular de uma partícula são especificados por l e m_l , e que para cada valor de l podemos ter $2l + 1$ valores de m_l , que são dados por $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$. Então, para especificarmos completamente o estado orbital do elétron no átomo temos que incluir l e m_l na função de onda, que se torna então indexada por 3 números quânticos (l e m_l são respectivamente chamados de números quânticos orbital e azimutal). A função de onda fica portanto indexada por três números quânticos:

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$$

Estas funções de onda são chamadas de *orbitais quânticos*, ou *orbitais atômicos*. É instrutivo neste ponto fazermos uma comparação entre a visão quântica e a visão clássica do átomo. Em um átomo clássico o estado do elétron seria especificado por 3 componentes de posição $x(t)$, $y(t)$ e $z(t)$, e 3 de momento: $p_x(t)$, $p_y(t)$ e $p_z(t)$. A energia correspon-

dente seria dada por:

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Todas estas quantidades seriam obtidas a partir da segunda lei de Newton. Na mecânica quântica o estado é especificado não pelas variáveis dinâmicas \mathbf{r} e \mathbf{p} , mas por números quânticos associados a funções de onda. Dados os números n , l e m_l sabemos descrever qual a região do espaço onde um elétron pode ser encontrado (calculando $|\psi|^2$), seu momento angular, momento linear, energia, etc.

Note que a função de onda do estado depende de n , l e m_l , mas sua energia só depende de n . Isso quer dizer que para um dado valor de energia haverá, em geral, vários orbitais quânticos possíveis para um elétron. Lembre que cada uma dessas funções representa uma distribuição de probabilidades; elas descrevem a “região do espaço” onde os elétrons em um dado estado específico podem ser encontrados. Alguns exemplos de funções de onda atômicas são:

$$\psi_{100} = Ae^{-Zr/a_0}$$

$$\psi_{210} = Bre^{-Zr/2a_0} \cos\theta$$

$$\psi_{32\pm 2} = Cr^3 e^{-Zr/3a_0} \text{sen}^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$$

onde A , B e C são constantes. As amplitudes de probabilidade correspondentes a estes orbitais são dadas por:

$$|\psi_{100}|^2 = A^2 e^{-2Zr/a_0}$$

$$|\psi_{210}|^2 = B^2 r^2 e^{-Zr/a_0} \cos^2\theta$$

$$|\psi_{32\pm 2}|^2 = C^2 r^6 e^{-2Zr/3a_0} \text{sen}^4 \theta$$

Note que $\psi_{32\pm 2}$ depende da variável ϕ , mas $|\psi_{32\pm 2}|^2$ não.

Leitor (aos prantos): “Mas que diabos! Tá pensando que eu tô maluco? De onde saíram essas funções esquisitas? Vou jogar essa droga de livro fora!” Calma, calma. O cálculo para a obtenção dessas funções é muito complicado; elas estão simplesmente sendo apresentadas ao leitor como exemplos. Tecnicamente falando, estas funções são soluções da equação de Schrödinger para um potencial coulombiano. Só isso. Não é minha culpa que elas pareçam tão complicadas; é culpa da Natureza, de Deus, sei lá!

Seque as suas lágrimas e coloque a arma de volta na gaveta. Vamos resumir a situação: o átomo é composto por um núcleo que concentra praticamente toda sua massa. Essa massa é a soma das massas dos nêutrons (partículas sem cargas) e dos prótons (partículas com carga positiva). Como o núcleo é positivamente carregado, ele exerce uma força coulombiana atrativa sobre os elétrons que orbitam a sua volta. Como resultado dessa atração entre o núcleo e os elétrons, surgem os orbitais quânticos. Cada orbital é caracterizado por uma energia E_n , e uma função de onda $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$. Os números quânticos n , l e m especificam os estados de um elétron no átomo.

Existem relações entre os valores que os números quânticos podem adquirir. Para cada valor de n existem n valores possíveis para l , que variam de 0 a $n - 1$; e para cada valor de l , existem $2l + 1$ valores possíveis para m_l . Por exemplo, se $n = 2$, teremos duas possibilidades para l : $l = 0$ ou $l = 1$. Para $l = 0$, a única possibilidade para m_l é $m_l = 0$. Por outro lado, para $l = 1$ teremos três possibilidades

para o número quântico azimutal: $m_l = -1, 0, 1$. Então, para $n = 2$ existem 4 funções de onda possíveis: ψ_{200} , ψ_{21-1} , ψ_{210} , e ψ_{211} . Cada uma dessas funções descreve uma distribuição espacial de probabilidades. Um elétron cuja função de onda seja ψ_{211} poderá ser encontrado em uma região do espaço diferente de outro com função ψ_{210} . Mas, como as funções representam o mesmo estado n , as energias dos dois elétrons serão iguais. Quando um dado estado de energia tem a ele associado mais de uma função de onda, dizemos que ele é *degenerado*. No exemplo acima de $n = 2$, a degenerescência do estado é igual a 4.

Até este ponto da discussão não mencionamos o spin dos elétrons. Além dos números quânticos n, l e m_l , o elétron possui um número quântico que caracteriza seu spin, m_s , que pode ser $\pm 1/2$. Esse número deve também ser incluído como subíndice da função de onda, completando assim a especificação do estado quântico:

$$\psi_{nlm_l m_s}(r, \theta, \phi)$$

Devemos manter em mente, contudo, que o spin é uma variável interna das partículas, independente dos valores de n, l, m_l .

Quando falamos em spin, devemos falar de princípio de exclusão de Pauli. Vimos no capítulo anterior que os estados orbitais de dois elétrons só podem ser iguais se os spins forem opostos. Poderíamos enunciar isso da seguinte maneira: “duas partículas (férmions) não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos”. Isso obviamente inclui o spin. Então, se o estado de um elétron no átomo for² ψ_{211+} , ou seja, $n = 2$, $l = 1$, $m_l = 1$ e $m_s = +1/2$, a única maneira de

²O subíndice ‘+’ aqui representa o estado de spin $m_s = +1/2$.

outro elétron ocupar o mesmo estado orbital n, l e m_l , é ele possuir spin $m_s = -1/2$. A função correspondente será ψ_{211-} . Ou seja, cada conjunto n, l, m_l pode acomodar no máximo dois elétrons.

Com exceção do hidrogênio, todos os átomos possuem mais de um elétron. Dados N elétrons, como eles se distribuem no átomo? É fácil: começamos a preencher os estados a partir daquele com energia mais baixa ($n = 1$), e vamos aumentando as energias, sempre obedecendo o princípio de exclusão. Por exemplo, suponha que queiramos distribuir 5 elétrons. O estado $n = 1$ possui $l = 0$ e $m_l = 0$, e pode acomodar dois, dos cinco elétrons. Sobram três. Passamos então para o nível $n = 2$, que possui $l = 0, 1$ e $m_l = 0$ (relativo a $l = 0$) ou $m_l = -1, 0, 1$ (relativo a $l = 1$). Então, no nível $n = 2$ temos um total de 4 possibilidades, e portanto 8 vagas para os 3 elétrons restantes.

De uma maneira geral, para um valor qualquer de l , podemos ter até $2 \times (2l + 1)$ elétrons. É comum representarmos os estados de momento angular l pelas letras s, p, d, f , etc., correspondendo respectivamente a $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Note que $l = 3$ pode acomodar até $2 \times (2 \times 3 + 1) = 14$ elétrons. Por outro lado, é comum representarmos os valores de n pelas letras maiúsculas K, L, M , etc. Assim, representamos o estado com $n = 1$ e $l = 1$ por $1s^2$, onde o sobrescrito '2' representa o número máximo de elétrons que o orbital pode acomodar. Esta classificação pode ser resumida no familiar esquema de ocupação eletrônica nos átomos que aprendemos nos cursos elementares de química:

n					
1	K	s^2			
2	L	s^2	p^6		
3	M	s^2	p^6	d^{10}	
4	N	s^2	p^6	d^{10}	f^{14}
5	O	s^2	p^6	d^{10}	f^{14}
6	P	s^2	p^6	d^{10}	
7	Q	s^2			

Agora ficou simples; dado um átomo com, por exemplo, 9 elétrons, como esses se distribuem nos orbitais quânticos? Começamos a preencher os orbitais da energia mais baixa, ou seja, $n = 1$, obedecendo ao princípio de exclusão. Colocamos primeiramente dois elétrons no estado $1s$ (estes dois elétrons terão momento angular zero, e spins opostos). Depois colocamos mais 2 no estado $2s$, e 5 no estado $2p$. A configuração do átomo será então $1s^2 2s^2 2p^5$. Note que ainda caberia 1 elétron no nível $2p$.

O estado fundamental de um átomo com muitos elétrons é obtido distribuindo-se os elétrons nos níveis de energia do mais baixo para o mais alto, obedecendo ao princípio de exclusão. Podemos retirar um átomo de seu estado fundamental promovendo um elétron para um nível de energia mais alto; dizemos neste caso que o átomo está em um *estado excitado*. Por exemplo, o átomo de hidrogênio em seu estado fundamental possui a configuração eletrônica $1s^1$. Todos os estados acima deste são estados excitados. Se por algum meio fornecermos energia para o elétron “pular” do estado $1s$ para o $2p$, o átomo estará em um estado excitado. A energia necessária para se induzir uma transição igual a esta pode ser facilmente calculada. Ela é dada simplesmente pela

diferença $E_2 - E_1$:

$$E_2 - E_1 = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} \left(\frac{1}{4} - 1 \right) = \frac{3\mu e^4}{2(8\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}$$

Acontece que a Natureza detesta desperdício de energia. Observa-se que um elétron excitado não permanece no estado de energia mais alta, mas “decai” após um certo intervalo de tempo. No exemplo acima, ele volta para o estado com energia E_1 , e o átomo retorna ao seu estado fundamental. A energia que o elétron possuía no estado excitado é liberada sob a forma de um fóton cuja frequência é dada por (vide Capítulo 3):

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\mu e^4}{2(8\pi\epsilon_0)^2\hbar^3}$$

Obviamente esta frequência pode ser calculada para quaisquer pares de estados. Vamos fazer uma estimativa numérica. Substituindo $\mu \approx 9,11 \times 10^{-31}$ kg (= massa do elétron), $e = 1,60 \times 10^{-19}$ C, $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$ C/Nm², $\hbar = 1,05 \times 10^{-34}$ Js obtemos:

$$\omega = \frac{3 \times 9,11 \times 10^{-31} \times (1,60 \times 10^{-19})^4}{2(8 \times 3,14 \times 8,854 \times 10^{-12})^2 \times (1,05 \times 10^{-34})^3}$$

$$\omega \approx 1,5 \times 10^{16} \text{ rad/s} \Rightarrow f = \frac{\omega}{2\pi} \approx 25 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

Esta frequência está próxima daquela da luz visível.

4.3 A Matéria do Universo em uma Tabela

A matéria de que somos feitos (e o resto das coisas) começou a ser criada durante os primeiros 500 000 anos do Universo, após o “Big Bang”, ou

Grande Explosão, que teria ocorrido há cerca de 15 bilhões de anos (pode ser que alguns dos átomos de seu cérebro tenham pertencido a algum dinossauro que viveu há milhões de anos!). Esta é apenas uma minúscula fração de tempo se comparada à idade do Universo. Desta “engenharia atômica” surgiram 92 elementos estáveis, sendo o mais simples (e mais abundante) o hidrogênio, e o mais complexo o urânio. Mas qual a diferença entre o hidrogênio e o urânio? Simplesmente o número de prótons, nêutrons e elétrons; o hidrogênio é formado por um único próton, circundado por um único elétron. Ou seja, o núcleo do hidrogênio não possui nêutrons. Seu número atômico é $Z = 1$, que é igual ao seu número de massa. No estado fundamental do H, esse elétron ocupa o estado de energia mais baixa, ou seja, $n = 1$, um orbital s , com momento angular zero. A distribuição eletrônica do hidrogênio é então $1s^1$. O isótopo estável mais abundante do urânio, por outro lado, possui um núcleo com 92 prótons e 146 nêutrons, e portanto seu número de massa é $A = 238$. Seus elétrons se distribuem da seguinte maneira: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4f^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^4$.

Consideremos agora um segundo elemento, o lítio (Li), que possui 3 prótons e 4 nêutrons no seu núcleo. Sua configuração eletrônica é $1s^2 2s^1$. Portanto, o Li possui o orbital mais interno $1s$ completo, e 1 elétron solitário em um orbital externo $2s$. O elemento seguinte em complexidade é o sódio (Na), com $Z = 11$ e $N = 23$, com seus elétrons distribuídos de acordo com $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Novamente aqui temos as camadas internas $1s$, $2s$ e $2p$ cheias, e 1 único elétron na camada externa $3s$. A mesma coisa ocorre com o potássio (K), o rubídio (Rb), o céσιο (Cs) e o frâncio (Fr). Todos terminam com um único elétron s no orbital

mais externo. Este fato torna esses elementos muito parecidos do ponto de vista químico, pois são os elétrons mais externos que formam ligações químicas. Este tipo de regularidade é encontrada também entre outros elementos, e sugere um esquema classificatório dos elementos.

Embora as primeiras tentativas de se alcançar tal classificação dos elementos de acordo com as suas semelhanças químicas datem do século XVIII, com os trabalhos de Lavoisier na França, foi um cientista russo que viveu entre 1834 e 1907, chamado Dimitry Ivanovitch Mendeleiev, quem descobriu que se os elementos fossem organizados de uma determinada maneira em uma tabela, interessantes propriedades periódicas seriam evidenciadas. A tabela que Mendeleiev organizou ficou conhecida como *tabela periódica dos elementos*. Um fato histórico interessante é que ao organizar sua tabela, Mendeleiev notou lacunas nas posições correspondentes aos elementos de número atômico $Z = 21$ e $Z = 32$, que ainda não eram conhecidos na época. A tabela periódica, então, estava de certa forma *prevendo* a existência de tais elementos, que de fato foram descobertos posteriormente. Estes foram o escândio (Sc) e o germânio (Ge).

O grande triunfo da tabela de Mendeleiev foi não somente sua capacidade de acomodar os elementos conhecidos na época em um esquema que ressaltava as suas semelhanças químicas, mas também (e principalmente!) de fazer previsões sobre a existência de elementos que ainda não eram conhecidos. Com isso, a tabela ultrapassou os limites de um mero esquema classificatório de substâncias químicas, para se tornar um instrumento de pesquisa científica! Cada vez que um novo elemento era descoberto, a tabela tinha que ser revisada a fim de acomodá-lo.

Particularmente interessante foi a descoberta do argônio (Ar) em 1894 por William Ramsay e John William Strutt (Lord Rayleigh). O argônio é um dos gases nobres, assim chamados por serem pouco reativos quimicamente. Nos anos subsequentes foram descobertos o hélio (He), o neônio (Ne), o criptônio (Kr) e o xenônio (Xe). Como Mendeleiev não havia previsto a existência desses elementos com a sua tabela, pensou-se que eles não fizessem parte do sistema periódico. Foram seis anos de pesquisa e intensa discussão até que os químicos da época pudessem finalmente encaixar os gases nobres na tabela periódica.

4.4 Esticando a Tabela Periódica

Em 1934, Enrico Fermi, trabalhando na Universidade de Roma, propôs que novos elementos poderiam ser criados bombardeando-se núcleos atômicos com nêutrons. Sob certas condições, nêutrons podem ser capturados por núcleos. Uma vez dentro do núcleo, o nêutron capturado decai emitindo um elétron e se transforma em um próton. Este processo é chamado de *decaimento beta*. Ao se transformar em um próton, o “ex-nêutron” acaba por aumentar de 1 unidade o número atômico do átomo que o capturou, fazendo-o “pular” uma casa para a direita na tabela periódica.

Utilizando a técnica de captura de nêutrons, seguida de decaimento beta, Edwin McMillan e Phillip Abelson, trabalhando na Universidade de Berkeley, produziram em 1940 o primeiro elemento transurânico, o netúnio (Np), de número atômico $Z = 93$. Durante as décadas de 40 e 50 os elementos plutônio (Pu, $Z = 94$), amerício (Am, $Z = 95$),

cúrio (Cm, $Z = 96$), berquélio (Bk, $Z = 97$), califórnio (Cf, $Z = 98$), einstênio (Es, $Z = 99$) e férmio (Fm, $Z = 100$), foram produzidos utilizando a mesma técnica. Foi por esta época que o mitológico Niels Bohr afirmou que o férmio seria o último elemento da tabela periódica. Errou feio.

Logo percebeu-se que acima de $Z = 100$, a técnica de captura de nêutrons não produziria novos elementos. Passou-se então a utilizar a técnica de fusão, na qual dois núcleos colidem a altas energias, e fundem-se formando um núcleo mais pesado. Esta técnica utiliza aceleradores de partículas (capítulo nove), que são equipamentos altamente sofisticados e caros. Em 1955 o grupo de Berkeley produziu o mendelévio (Md, $Z = 101$), fundindo um átomo de hélio (He, $Z = 2$) com um de einstênio (Es, $Z = 99$). Entre 1958 e 1974 foram criados, com a mesma técnica, o nobélio (No, $Z = 102$), o laurêncio (Lr, $Z = 103$), e os elementos com $Z = 104$ (candidato a se chamar rutherfórdio, Rf), o de número atômico $Z = 105$ (candidato a se chamar dúbnio, Db) e o com $Z = 106$ (candidato a seabórgio, Sg). Neste ponto descobriu-se que este seria o provável limite para a técnica de fusão usual.

No início dos anos 80 Peter Armbruster e Fritz Peter Hessberger, trabalhando em Darmstadt, na Alemanha, desenvolveram uma nova técnica de fusão que eles chamaram de *fusão fria*. Esta técnica nada tem a ver com o suposto fenômeno de fusão fria alardeado há uns anos atrás por dois químicos americanos pouco cautelosos! Com a técnica inventada por eles, Armbruster e Hessberger conseguiram produzir os elementos com $Z = 107$, $Z = 108$ e $Z = 109$ (que eventualmente virão a

se chamar bório [Bh], hássínio [Hs] e meitnério [Mt], respectivamente). Para dar uma idéia da complexidade da técnica, para produzir 1 único átomo de meitnério, foram necessárias duas semanas ininterruptas de experimento! Entre 1994 e 1996 os mesmos autores produziram novos elementos (ainda sem propostas de nomes; vamos torcer para que não sejam chamados de ‘armsbrusterésio’, ‘herssbergerício’, ou coisas do gênero!) com $Z = 110, 111, 112$ e 113 . No momento eles tentam produzir um novo elemento com $Z = 114$. Deve-se mencionar que todos estes elementos são extremamente instáveis, e decaem em bilionésimos de segundo. Há, contudo, razões teóricas para se acreditar que alguns deles sobreviveriam em uma “ilha de estabilidade”.

O leitor pode, com muita razão, estar se perguntando: para que serve isso? Para que criar elementos que a Natureza eliminou ao longo do caminho? A resposta para essa pergunta possui muitas facetas, e de certa forma se aplica a toda ciência básica, de um modo geral. Primeiramente, novos elementos possuem novas propriedades físicas e químicas. Pode ser que algumas dessas propriedades venham a se tornar úteis para produção de novos materiais, substâncias farmacológicas, etc. Em segundo lugar, a complexidade envolvida na produção desses novos elementos, força o desenvolvimento tecnológico com a criação de novos aparelhos de medidas, produção de campos magnéticos, programas de computador, eletrônica de detectores, etc. Mas para um físico, a razão fundamental para essas pesquisas tem um caráter menos utilitário, e mais profundo: até onde podemos ir? Qual o nosso limite? Pense nisso!

4.5 Ligações Químicas

A partir dos 92 átomos estáveis da tabela periódica, a Natureza constrói a imensa variedade de objetos que existem, vivos ou inanimados. Os átomos de carbono no grafite de um lápis são idênticos aos átomos de carbono nos neurônios do seu cérebro. Mas como a Natureza faz esse truque? Resposta: ligando os átomos de maneiras diferentes. Átomos se combinam para formar objetos maiores, chamados de *moléculas*. Moléculas, por sua vez, se combinam para formar objetos macroscópicos. Por exemplo, quando dois átomos de hidrogênio se combinam com um átomo de oxigênio, criam uma molécula muito especial para nós seres vivos: a molécula de água, representada simbolicamente por H_2O . A água que bebemos (sem contar a inevitável sujeira misturada) é o resultado da ligação de uma infinidade de moléculas de H_2O .

O que determina o tipo de ligação química entre dois ou mais átomos são as suas *configurações eletrônicas*; são os elétrons mais externos dos átomos que participam das ligações químicas. Por exemplo, considere o átomo de cloro (Cl), que possui 17 elétrons, distribuídos em uma configuração que termina com os orbitais $3s^23p^5$. Considere, por outro lado, o átomo de sódio (Na) com seus 11 elétrons distribuídos de modo que o último orbital é $3s^1$. Quando um átomo de sódio chega perto de um de cloro, se torna energeticamente mais favorável para o conjunto se o elétron $3s$ do sódio “pular” para o orbital $3p$ do cloro. O que queremos dizer com *energeticamente mais favorável* é que há uma “economia” de energia no processo. Ou seja, a energia do sistema dos

dois átomos juntos será menor do que se eles estiverem separados, se o elétron pular do Na para o Cl. O cloro então ficará com uma carga negativa (ou seja, se transformará no ânion Cl^-), e o sódio ficará positivo (se transformará no cátion Na^+). Como cargas de sinais opostos se atraem, o Cl^- “grudará” no Na^+ e formará a *molécula iônica* NaCl , conhecida popularmente como sal de cozinha. Este tipo de ligação é chamada de *ligação iônica*, por razões óbvias. Outros exemplos de substâncias formadas através da ligação iônica são o CsCl , o CsBr , e o RbBr .

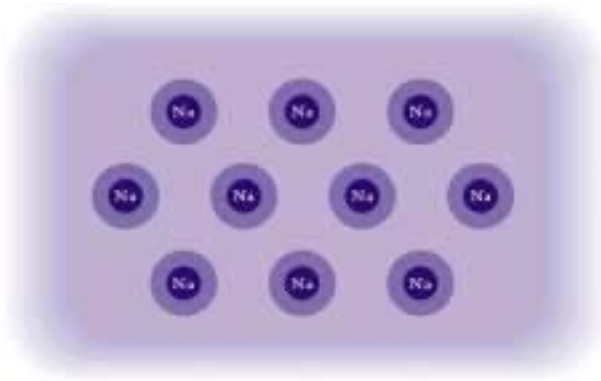
Mas a ligação iônica não é o único tipo de ligação química entre átomos. Quando, por exemplo, aproximamos átomos de sódio entre si, algo curioso acontece. Os elétrons dos orbitais $3s$ de cada átomo se desprendem de seus átomos originais e começam a “passear” entre os íons de sódio (Na^+). Em uma linguagem mais precisa, dizemos que isso ocorre porque as funções de onda dos elétrons destes orbitais (que poderíamos representar por ψ_{300}) se superpõem, permitindo que o elétron de um dado átomo passe para o outro, e do outro para o outro, etc. Este tipo de ligação química é chamada de *ligação metálica*. Nesta ligação os elétrons mais externos dos átomos ficam livres para se deslocar dentro do material. É como se todos os elétrons pertencessem a todos os átomos, formando uma espécie de “geléia negativa”, responsável pela coesão do metal. Isto é o que ocorre com o metal da moeda no seu bolso, ou na tampa da sua marmita! Que chique, hein! Imagine você dizendo pros colegas que as funções de onda dos elétrons da tampa da sua marmita se superpõem, e é por isso que a tampa é daquele jeito! A gororoba fica até mais gostosa!

Outro tipo de ligação química tanto importante quanto esquisita é a ligação por *pontes de hidrogênio*. Este tipo de ligação está associada a algumas características próprias do hidrogênio. Como vimos, o átomo de hidrogênio possui somente um próton no seu núcleo, com um elétron girando em volta. Não é fácil arrancar esse elétron do hidrogênio, mas quando um H chega perto de um átomo que possui “apetite” para elétrons³, o seu elétron é fortemente atraído fazendo com que o hidrogênio “cole” na superfície do outro átomo. Um terceiro átomo pode então ser atraído por este hidrogênio “careca”. Neste tipo de ligação os dois átomos grandes quase se tocam; devido ao pequeno tamanho do próton em comparação aos outros átomos, torna-se impossível para um quarto átomo se juntar ao grupo. Então, nas pontes de hidrogênio o próton é sempre “sanduichado” por dois átomos grandes. O melhor exemplo de substância formada por pontes de hidrogênio é a água, principalmente na sua fase sólida (gelo). No gelo, cada átomo de oxigênio é cercado por outros quatro, formando um tetraedro; a ligação entre esses tetraedros se dá por pontes de hidrogênio.

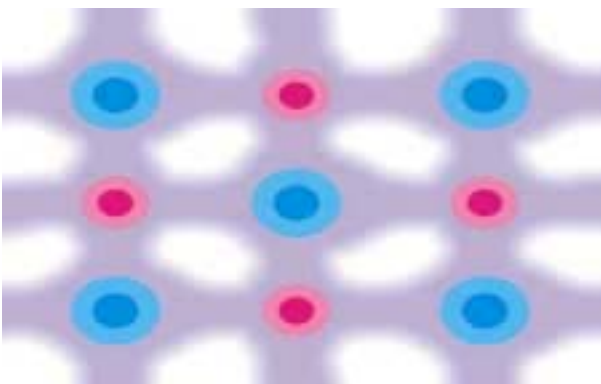
Existe um tipo de ligação química que sob certos aspectos se parece com a ligação metálica: a *ligação covalente*. Assim como na metálica, a ligação covalente ocorre devido ao compartilhamento de elétrons por átomos próximos, ou, tecnicamente falando, devido à superposição de funções de onda de átomos vizinhos. A diferença é essencialmente no caráter das funções que se superpõem. No caso metálico, a superposição é muito maior, cobrindo várias posições atômicas, enquanto que na covalente esta superposição é menor, envolvendo apenas átomos

³Os químicos chamam esta propriedade de ‘eletronegatividade’.

vizinhos próximos. Enquanto que a metálica em geral envolve elétrons em orbitais s (ou seja, com momento angular zero), a covalente envolve elétrons do tipo p ($l = 1$) e do tipo d ($l = 2$). Quanto maior o momento angular do elétron (ou seja, quanto maior for o valor de l), menor será o raio da função de onda correspondente, portanto diminuindo as chances de superposição para a formação de ligações químicas. Por exemplo, funções de onda do tipo f ($l = 3$) não se superpõem, e consequentemente os elétrons que ocupam esses orbitais permanecem praticamente inalterados, quando os átomos se juntam para formar uma molécula em uma substância. Exemplos de substâncias que apresentam ligação covalente são o silício (Si) o germânio (Ge) e o carbono (C) sob a forma de diamante.



Em um metal simples como o sódio, os elétrons se distribuem uniformemente entre os átomos.



A principal característica da ligação covalente é seu aspecto “direcional”. Os elétrons concentram-se em certas regiões entre os átomos.

4.6 ADN: uma Molécula muito Especial

Do ponto de vista da física teórica, é desejável que *todos* os fenômenos da Natureza sejam descritos através das mesmas leis, se possível em número mínimo. No entanto, existe uma abismal e óbvia diferença entre os fenômenos que ocorrem em “objetos inanimados”, como gases, líquidos, sólidos, átomos, etc., e fenômenos que ocorrem com “objetos vivos”, como plantas, animais e pessoas. Os primeiros são objetos de estudo da física, e os segundos são tradicionalmente estudados pela biologia. A física atual possui métodos capazes de explicar todas as propriedades de um cristal de diamante ou de um pedaço de cobre, mas não tem a menor idéia de como funciona uma ameba! Como definir o que está vivo e o que não está a partir de equações matemáticas que descrevem movimento?

Em princípio, o fato de que uma ameba (ou qualquer outro sistema vivo) não possa no momento ser descrita através das equações da física, não quer dizer - repito, *em princípio* - que ela não seja governada pelas leis da física. Pode ser que as dificuldades sejam meramente técnicas, tais como a ausência de computadores suficientemente rápidos ou de métodos matemáticos suficientemente poderosos. Descrever uma ameba do ponto de vista da física teórica significaria resolver um conjunto inimaginável de equações interdependentes, que descrevessem o movimento de cada átomo constituinte da ameba. As soluções de tal sistema colossal de equações, em tese, descreveria o comportamento do animal. Isto pode ser tecnicamente impossível de ser realizado - e talvez, de fato, nunca venhamos a realizar completamente - mas em

princípio poderia ser feito. Esta idéia de que todos os fenômenos da Natureza podem em última instância ser descritos pelas leis da física é chamada de *reducionismo*.

Mais recentemente começou-se a explorar a idéia de que certas propriedades de conjuntos muito grandes de moléculas (como é o caso da ameba, um animal unicelular) não podem ser compreendidas a partir das propriedades dos seus constituintes individuais isolados; são *propriedades do todo*. Segundo essa visão, sistemas complexos contendo um número muito grande de partes interagentes adquirem certos “padrões de funcionamento” que não podem ser explicados a partir do comportamento das partes isoladamente. Assim, não adiantaria, por exemplo, esmiuçarmos uma molécula fora de um organismo porque isto nada nos informaria a respeito do funcionamento do organismo como um todo. Para fazer uma analogia, seria mais ou menos como uma pintura em um quadro, que não é apenas um conjunto de cores misturadas, tanto quanto uma peça musical não é apenas uma seqüência de notas e acordes. Inspirados por abordagens deste tipo, alguns cientistas defendem a idéia de que talvez não seja possível reduzir o comportamento de um ser vivo ao mero movimento individual dos átomos e moléculas que o compõe, e levantam a interessante questão se a biologia não deveria ter leis próprias, independentes das leis da física!

Este tipo de interconexão entre as partes de um sistema complexo que gera padrões globais de funcionamento é observada em ecossistemas, sistemas econômicos, fenômenos atmosféricos, etc., e tem recentemente chamado a atenção de muitos cientistas, estimulando discussões técnicas e filosóficas que resultaram no que ficou conhecido

como *Complexidade*⁴. Embora esta seja uma área que tem gerado bons frutos, vale lembrar que o tradicional método analítico empregado pela física, que esmiuça e isola sistemas, é até agora o que tem gerado resultados práticos, gerado tecnologia, além de oferecer uma compreensão objetiva da Natureza. Nada impede que a visão que hoje se tem sobre esta abordagem dos fenômenos naturais venha a mudar. Mas, quaisquer que sejam os *métodos* de investigação científica do futuro, eles necessariamente se basearão sobre os atuais.

Cadeias de moléculas são sistemas físicos infinitamente mais simples do que um ser vivo, como uma ameba. Ainda assim, podem apresentar um grau de complexidade que torna sua descrição teórica muito difícil, senão impossível. Dentre estas cadeias, está o ADN, uma molécula muito especial.

Somente seis elementos básicos formam as moléculas de organismos vivos: carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O), nitrogênio (N), fósforo (P) e enxofre (S). Estes elementos constituem moléculas muito pequenas, como o dióxido de carbono (CO₂), a água (H₂O) e o oxigênio (O₂), que por sua vez são a base de outros quatro tipos de moléculas importantes para a vida: *carboidratos*, *proteínas*, *lipídios* e *ácidos nucleicos*. Cada uma destas últimas possui um papel diferente no organismo. Carbohidratos são uma espécie de “gasolina” do organismo; fornecem

⁴A chamada “Complexidade” surgiu como uma área interdisciplinar que logo atraiu físicos, biólogos, químicos, matemáticos, etc. Apesar do grande entusiasmo inicial em torno deste novo ramo da ciência, parece haver no momento um certo ceticismo em torno deste tipo de abordagem, pelo menos no que diz respeito a sistemas biológicos. A razão reside justamente na dificuldade em se modelar sistemas biológicos matematicamente sem introduzir simplificações que os tornem meras curiosidades numéricas, distantes da realidade.

energia, e também formam tecidos. Proteínas formam tecidos e desempenham um papel importante no metabolismo celular. Elas são feitas de cadeias contendo 300 a 400 aminoácidos, moléculas formadas a partir de átomos de hidrogênio e nitrogênio. Existem milhares de tipos diferentes de proteínas, cada uma delas com um papel específico. Ácidos nucleicos possuem a informação crucial para a operação da célula. Existem dois tipos: o chamado *ácido desoxiribonucleico*, ou *ADN*, e o *ácido ribonucleico* (ARN). Ambos são formados por imensas cadeias de moléculas menores chamadas nucleotídeos, sendo que o ARN possui dezenas de milhares de moléculas, enquanto que o ADN possui milhões delas.

É precisamente o ADN que faz a diferença entre o que está vivo e o que não está. É nele onde a Natureza escreveu o manual de instruções de, por exemplo, “como fazer uma ameba”. A sua estrutura pode ser comparada (abusando da simplicidade) à estrutura de uma frase. Se eu escrevo uma seqüência de letras como esta:

AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA

e pergunto a você qual seu significado, você diz: “ora bolas, uma seqüência de letras ‘A’ ”. Mas, se eu escrevesse a seqüência:

O MENGÃO É O MELHOR DO BRASIL.

você responderia: “esta é uma frase da lingua portuguesa escrita por um doido mal informado”. A diferença entre as duas seqüências está na variedade de letras utilizadas, e na maneira como elas são organizadas. Com as mesmas letras poderíamos ainda ter escrito a estranha frase:

O LADRÃO É O MEMBRO LEGHONIS.

(eventualmente “Leghonis” será o nome ou sobrenome de alguém! Se eu for azarado a tal ponto, registro aqui os meus pedidos de desculpa). Embora a terceira frase seja mais esdrúxula do que a segunda, ela transmite uma idéia clara - a de que algum infeliz com o nome “Leghonis”, faz parte de alguma associação ou comitê, e roubou alguma coisa -, totalmente diferente daquela contida na segunda.

A variedade de letras na segunda ou terceira seqüências permite a codificação de mais informações do que no caso da primeira (que de fato não permite codificação alguma!). Com o ADN ocorre algo semelhante. A molécula é formada por duas cadeias que se entrelaçam formando uma hélice. Os dois lados da cadeia são ligados entre si através de quatro tipos de moléculas que os biólogos representam pelas letras: A, G, C e T. Por razões de afinidade química, moléculas do tipo ‘A’ só se ligam com as do tipo ‘T’, e as do tipo ‘C’ com as do tipo ‘G’. Todo o truque do ADN está na seqüência com que essas ligações (ou letras) aparecem ao longo da cadeia. Durante a divisão da célula, a seqüência é duplicada, e as características daquele organismo são transmitidas para outro. Se durante a duplicação uma “letra” sai fora do lugar, a nova célula sai ligeiramente diferente.

Nos seres humanos o ADN se encontra distribuído entre os 46 cromossomos que existem dentro do núcleo de cada célula (existem cerca de 5 trilhões de células em uma pessoa adulta). Na medida em que cada um de nós se desenvolve a partir de uma única célula (zigoto), cada uma das 5 trilhões de células que formam o nosso corpo possui exatamente a mesma informação genética. Um dos mistérios atuais

da biologia molecular é exatamente a respeito da diferenciação celular ao longo do desenvolvimento. Como, em um dado momento, células idênticas começam a dar origem a tecidos diferentes no organismo?

Para dar uma idéia de quão compactadas as moléculas de ADN estão dentro do núcleo, se pudéssemos esticar e enfileirar todas elas, retirando-as de uma única célula, o comprimento total seria de quase dois metros! Isso quer dizer que cada ser humano possui cerca de 10 bilhões de quilômetros de ADN, o que daria para cobrir a distância entre a Terra e o Sol quase 100 vezes! É realmente notável como tal estrutura consegue se organizar com uma forma geométrica tão simples quanto a de uma hélice, e ainda participar de uma série de reações químicas durante a divisão celular cujo resultado final será uma réplica perfeita de si mesmo.

O ADN é um sistema físico imensamente complexo, cuja história tem a ver com um famoso físico que já conhecemos: Erwin Schrödinger. No ano de 1943 Schrödinger proferiu uma série de palestras na universidade de Dublin na Irlanda, onde ocupava a cátedra de física teórica. O título daquelas palestras era algo audacioso mesmo para um físico do porte de Schrödinger: *O que é vida?* Ele estava fundamentalmente interessado no modo pelo qual características hereditárias eram transmitidas de geração para geração. Schrödinger sugeriu que estas informações estariam contidas em *cristais aperiódicos*, que de alguma forma as armazenavam em sua estrutura. As palestras foram publicadas em 1944 sob a forma de um pequeno livro chamado **What is Life?** pela Cambridge University Press, que logo se tornou uma das obras mais lidas e influentes da história da ciência. No prefácio do livro

Schrödinger se justifica:

Espera-se que um cientista conheça completa e perfeitamente um dado assunto, e portanto normalmente não escreva sobre algo que não domine. Isto é considerado um ‘compromisso nobre’. Para o presente propósito, eu renuncio a ‘nobreza’, se é que existe alguma, e me liberto deste compromisso.

Em 1953 Francis Crick e James Watson desvendaram o segredo dos cristais aperiódicos propostos por Schrödinger: eram o que hoje chamamos ADN. Portanto, as idéias de Schrödinger sobre hereditariedade acabaram se tornando o centro da biologia molecular moderna, embora até hoje não se tenha uma resposta satisfatória para a principal pergunta endereçada nas suas palestras.

4.7 Magnetismo do Átomo

Deixemos de lado a biologia e voltemos à física. Por que certos materiais são magnéticos e outros não? O ímã gruda na geladeira, mas a moeda não. Qual a diferença entre os materiais que formam o ímã e a moeda? Não é tudo feito de átomos? É preciso distinguir a origem do magnetismo nos átomos da origem do magnetismo nos materiais macroscópicos, embora obviamente os dois fenômenos estejam estreitamente relacionados.

O magnetismo nos átomos surge dos elétrons nos orbitais quânticos. Quando falamos em spin no capítulo anterior, introduzimos a idéia

de momento magnético. Relembrando, o momento magnético é uma grandeza proporcional ao momento angular, seja ele extrínseco (\mathbf{L}) ou intrínseco (\mathbf{S}). O átomo será magnético se possuir momento magnético total diferente de zero, e portanto momento angular total diferente de zero. Considere, por exemplo, o átomo de hidrogênio. No seu estado fundamental, o seu único elétron ocupa um orbital s . Portanto, $l = 0$ e $S = 1/2$ para este átomo. Conseqüentemente, o átomo de hidrogênio não terá um momento magnético orbital, mas terá um momento magnético de spin. Logo, o átomo de hidrogênio é magnético. Isso vale para o estado fundamental; se o elétron fosse promovido para um orbital p , por exemplo, o átomo adquiriria um momento magnético orbital que se somaria ao de spin. Considere agora o átomo de magnésio (Mg). A sua última camada tem a configuração $3s^2$ e, portanto, está completa. Ambos os elétrons terão $l = 0$, e novamente o momento magnético orbital neste átomo é nulo. Mas agora, além disto, o princípio de exclusão obriga os dois elétrons a possuírem spins opostos, um deles no estado $+1/2$ e o outro no estado $-1/2$. Conseqüentemente o spin total (igual à soma dos spins individuais) será zero, anulando o momento magnético de spin. Então, o átomo de magnésio no seu estado fundamental não possui momento magnético, de spin ou orbital, e portanto é não magnético. Considere agora um exemplo curioso: o átomo de ferro (Fe). Ele possui uma configuração eletrônica externa igual a $3d^64s^2$. Ou seja, a sua camada eletrônica mais externa (s) está completa e portanto não contribui para o momento magnético do átomo, mas a camada mais interna (d), que pode acomodar até 10 elétrons, só possui 6, e portanto está incompleta. Esta

camada contribui tanto para o momento magnético de spin quanto para o orbital. Como os elétrons se distribuem nos estados dentro desta camada? Primeiramente notamos que como $l = 2$ para um orbital d , podemos ter $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$. Temos então 6 elétrons para serem distribuídos em 5 estados orbitais, que podem acomodar no máximo 10 elétrons. Para sabermos o momento angular e de spin totais neste caso, distribuimos os elétrons nesses estados m_l obedecendo ao princípio de exclusão, e a duas importantes regras chamadas de *regras de Hund*:

Primeira regra de Hund: Distribua os elétrons nos estados m_l de modo a maximizar o spin total (ou seja, na medida do possível tente manter todos os spins apontando para a mesma direção).

Segunda regra de Hund: Mantendo a primeira regra mandatória, distribua os elétrons nos estados m_l de modo a maximizar o momento angular total (ou seja, mantenha a soma dos valores de m_l a maior possível).

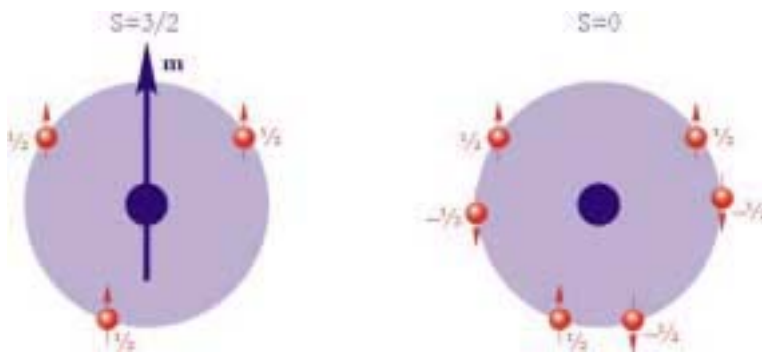
Aplicando as regras no caso do Fe, começamos colocando 1 elétron com spin $S = +1/2$ no estado $m_l = 2$. Para maximizar o spin total (primeira regra) o segundo elétron não pode entrar no mesmo orbital, pois nesse caso ele teria que ter $S = -1/2$. Colocamo-lo então no segundo orbital $m_l = 1$, também com spin $S = +1/2$. Assim por diante até chegarmos em $m_l = -2$. Então, a distribuição dos 5 primeiros elétrons será:

$$\begin{array}{cccccc} m_l & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ S & +1/2 & +1/2 & +1/2 & +1/2 & +1/2 \end{array}$$

Se só tivéssemos 5 elétrons, a tarefa estaria terminada. O momento angular total, L , seria a soma dos valores de m_l , ou seja $-2 - 1 + 0 + 1 + 2 = 0$, e o spin total seria a soma dos spins: $S = +1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 = 5/2$. Este é de fato o caso do átomo de manganês (Mn), que é vizinho do Fe, e possui uma configuração eletrônica externa igual a $3d^5 4s^2$. Mas, o Fe tem 1 elétron a mais. De acordo com a segunda regra de Hund, este elétron deve entrar em $m_l = 2$. Porém, por causa do princípio de exclusão ele terá spin igual a $-1/2$. Ficamos então com a seguinte distribuição:

m_l	-2	-1	0	1	2
S	+1/2	+1/2	+1/2	+1/2	+1/2
					-1/2

Conseqüentemente o momento angular total será $L = -2 - 1 + 0 + 1 + 1 + 2 + 2 = 2$ e o momento de spin total será $S = +1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 - 1/2 = 2$.



Em um átomo os spins dos elétrons se acoplam para produzir o spin do átomo.

Com essas duas regras podemos obter os valores de L e S para qualquer número de elétrons em uma camada eletrônica de um átomo isolado. Mas, como momentos angulares se somam vetorialmente, se um átomo possui momento de spin, \mathbf{S} , e momento orbital, \mathbf{L} , ambos diferentes de zero, podemos definir uma nova grandeza, o seu *momento angular total*, denotado por \mathbf{J} :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Esta quantidade é muito útil para o estudo do magnetismo nos materiais (capítulo seis).

A partir do cálculo de L e S através das duas regras de Hund acima, como obtermos o valor da magnitude do momento angular total J ? O maior valor possível será aquele para o qual \mathbf{S} e \mathbf{L} estão paralelos. Neste caso, $J = L + S$. Ao contrário, o menor valor possível corresponderá a \mathbf{S} e \mathbf{L} antiparalelos, e neste caso $J = |L - S|$ (o módulo é necessário porque J é sempre positivo). Mas, dada uma configuração eletrônica, como sabermos qual entre essas duas possibilidades será o valor de J ? Para isso aplicamos a *terceira regra de Hund*:

Terceira regra de Hund: Se o número de elétrons na camada for maior do que a metade do número total de estados, o valor de J será igual a $L + S$; caso contrário, o valor será $J = |L - S|$.

Aplicando ao caso do Fe, como o número de elétrons na camada d é igual a 6, e a camada comporta no máximo 10, ela está mais da metade cheia, e teremos $J = L + S = 2 + 2 = 4$. No caso do átomo de Mn, como

$L = 0$, teremos $J = S = 5/2$. Este será o caso de qualquer camada com um número de elétrons exatamente igual a metade de sua capacidade total.

Agora, como o magnetismo dos átomos se relaciona com o magnetismo na matéria macroscópica, como por exemplo, em um ímã? Uma das condições para que um material seja magnético (como um ímã) é que haja momento magnético nos átomos. Mas essa condição não é suficiente. Em um ímã permanente os momentos magnéticos atômicos dentro do material apontam na mesma direção, dando origem a uma grandeza macroscópica que chamamos de *magnetização*, \mathbf{M} . A magnetização de um material é definida como o número de momentos magnéticos por unidade de volume do material. Simbolicamente escrevemos:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{m}_i$$

onde \mathbf{m}_i é o momento magnético do i -ésimo átomo, e V o volume do material. Note que enquanto o momento magnético é uma grandeza *microscópica*, ou seja, diz respeito ao átomo, a magnetização é uma grandeza *macroscópica*, ou seja, diz respeito ao material. No capítulo seis veremos o que faz os momentos magnéticos dos átomos em um material magnético como um ímã apontarem para a mesma direção.

4.8 Força Nuclear

Podemos dizer que o que mantém um átomo coeso, isto é, os elétrons presos aos núcleos, é a força coulombiana exercida pelo núcleo sobre

os elétrons. Mas, o que mantém o núcleo em si coeso? Núcleos são formados de prótons e nêutrons, cada próton carregando uma carga igual a $+e$. É claro que sendo os prótons partículas com cargas de mesmo sinal, haverá dentro do núcleo uma força coulombiana repulsiva entre eles. Vamos estimar a magnitude desta força para dois prótons separados por uma distância de $r \approx 10^{-14}$ m, a ordem de grandeza para o diâmetro de um núcleo:

$$F = \frac{(1,60 \times 10^{-19})^2}{4 \times 3,14 \times 8,85 \times 10^{-12} \times (10^{-14})^2} \approx 2 \text{ N}$$

Vamos comparar com a força entre um próton e um elétron separados por uma distância de 10^{-10} m, a ordem de grandeza para distâncias atômicas:

$$F = -\frac{(1,60 \times 10^{-19})^2}{4 \times 3,14 \times 8,85 \times 10^{-12} \times (10^{-10})^2} \approx 2 \times 10^{-8} \text{ N}$$

Ou seja, a força repulsiva entre prótons no núcleo é imensamente maior (cerca de 100 milhões de vezes) do que a força atrativa entre o núcleo e os elétrons do átomo. Diante desta força repulsiva enorme, porque os núcleos simplesmente não “explodem”? Resposta: por causa da *força nuclear*.

A força nuclear está associada à chamada interação forte, uma das quatro interações fundamentais da Natureza (capítulo nove). As outras três são: a gravitacional, a eletromagnética e a interação fraca. A força nuclear possui algumas características muito peculiares:

(i) A distâncias pequenas a força nuclear é muito maior que a coulombiana, mas cai muito rapidamente com o aumento da distância. Ela atua praticamente somente na região do núcleo ($10^{-15} - 10^{-14}$ m);

(ii) A força nuclear é *independente da carga* da partícula. Então, enquanto a força coulombiana repulsiva dentro do núcleo só atua entre os prótons, a força nuclear ocorre tanto entre prótons, quanto entre nêutrons ou entre prótons e nêutrons;

(iii) A força nuclear entre duas partículas no núcleo depende do spin das partículas;

(iv) Elétrons são imunes à força nuclear, ou seja, os elétrons do átomo não sentem a presença desta força.

Vamos resumir a situação até aqui: o átomo é formado por um núcleo positivo e elétrons negativos que orbitam à sua volta. O que mantém os elétrons em suas órbitas é a interação coulombiana entre eles e o núcleo. Esta interação é de natureza eletromagnética, e de longo alcance. As partículas do núcleo são prótons e nêutrons, e são mantidas unidas pela ação da força nuclear, uma interação de curto alcance e muito mais intensa do que a interação coulombiana.

Podemos até certo ponto descrever o comportamento de prótons e nêutrons dentro do núcleo, da mesma forma que foi feito para os elétrons no átomo. À força nuclear está associado um potencial nuclear V que dá origem a *orbitais quânticos nucleares* (equivalentes aos orbitais quânticos eletrônicos do átomo), que são ocupados pelos prótons e nêutrons, obedecendo ao princípio de exclusão. Isso dá origem a uma estrutura de camadas semelhante àquela dos elétrons atômicos (prótons e nêutrons possuem spin $1/2$ e portanto são férmions). Em particular, os spins e momentos angulares dessas partículas do núcleo se combinam para dar origem a um momento angular nuclear total, e conseqüentemente a um *momento magnético nuclear*. Como veremos

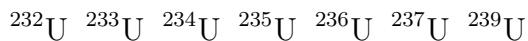
no capítulo seis, é a existência de momento magnético nos núcleos o que possibilita a observação da *ressonância magnética nuclear*, importante fenômeno, base da *tomografia por ressonância magnética nuclear*.

4.9 O Indivisível pode ser Dividido!

A palavra “átomo” significa *indivisível*. Isto quer dizer que não podemos dividir um átomo? Não. Um átomo pode ser dividido, e se transformar em outro. Cada elemento é classificado de acordo com seu número atômico, ou seja, seu número de prótons. Assim, o urânio (U), por exemplo, é aquele elemento que possui $Z = 92$. Acontece que para um mesmo número atômico, uma dada espécie atômica pode ter números de massa diferentes (ou seja, Z se mantém, mas N varia). Chamamos de *isótopos* átomos que possuem o mesmo número atômico, mas números de massa diferentes. No caso do urânio existem vários isótopos diferentes. Um deles é o isótopo com $A = 238$, que dissemos ser o átomo estável mais pesado da tabela periódica. É comum representarmos um isótopo com o seu símbolo químico e seu número de massa sobrescrito. Por exemplo, o isótopo 238 do urânio é representado por:



Outros isótopos do urânio são:



Todos eles possuem $Z = 92$, mas o número de nêutrons aumenta de 1 em 1 de $N = 140$ até $N = 147$.

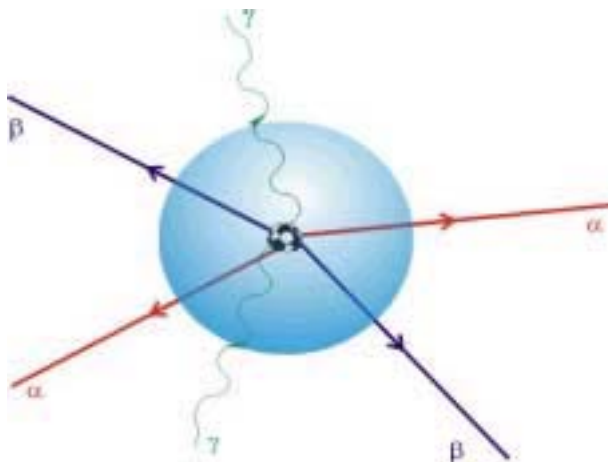
Acontece uma coisa curiosa com alguns isótopos: nem todos “vivem” para sempre. Alguns espontaneamente se transformam em outros átomos (capítulo sete), sofrendo uma transmutação. Diz-se dos átomos que apresentam esta propriedade que são “instáveis”⁵. O processo pode levar milhões de anos para alguns, e frações de segundos para outros. Chamamos de *meia-vida* o tempo característico para um átomo instável sofrer uma transmutação ou *decaimento*. Por exemplo, o ^{233}U possui uma meia-vida de 0,16 milhão de anos, enquanto a do ^{237}U é de apenas 6,75 dias. Já o ^{239}U tem uma meia-vida de 23,5 minutos.

Existem basicamente três tipos de decaimento nuclear: por emissão alfa, por emissão beta e por emissão gama. Partículas alfa, como já mencionamos, são núcleos de átomos de hélio, ou átomos de hélio duplamente ionizados. Possuem dois prótons e dois nêutrons ($Z = 2$, $N = 2$, $A = 4$). Portanto, quando um núcleo emite uma partícula alfa, sua carga (e portanto seu número atômico) decresce de 2 unidades, enquanto sua massa decresce de 4 unidades. Um exemplo típico de emissor alfa é o ^{232}U , que tem meia-vida de 72 anos. Ao emitir uma partícula alfa, sua massa passa de 232 para 228 e seu número atômico de 92 para 90, se transformando no tório (^{228}Th). No capítulo sete falaremos mais sobre este e os outros tipos de decaimento.

Os isótopos que “vivem para sempre” são chamados de isótopos estáveis. No caso do urânio existem dois isótopos estáveis, o ^{235}U e o ^{238}U , mas eles não existem na mesma proporção na Natureza; o primeiro representa apenas 0,72% do total, e o segundo 99,275%. Chamamos de

⁵Esta instabilidade é uma propriedade do núcleo, como veremos com mais detalhes no capítulo sete.

abundância isotópica estes percentuais. O isótopo ^{235}U é muito especial, e será explorado posteriormente no capítulo sete, quando falarmos de energia nuclear. Ele possui a capacidade de capturar nêutrons e se dividir, em um processo chamado de *fissão nuclear*. Cada vez que se divide, libera energia, e mais nêutrons, que podem ser capturados novamente por outros isótopos do mesmo tipo, levando por sua vez a mais energia e mais nêutrons. Este fenômeno é a base para o funcionamento de uma *bomba nuclear* (ou *bomba atômica*) ou de um *reator nuclear*. Mais sobre isso no capítulo sete.



Núcleos instáveis emitem partículas de diversos tipos. O fenômeno é chamado de *radioatividade*, porque foi primeiro observado no elemento químico rádio. Sua existência prova que o átomo não é indivisível, como a palavra sugere.

Onde saber mais: deu na Ciência Hoje.

1. *Caos no Mundo Atômico e Subatômico*, H. Moysés Nussenzveig, vol. 14, no.

80, p 6.

2. *Os Segredos do Átomo*, Vanderlei Salvador Bagnato, vol. 10, no. 60, p 10.
3. *Átomos à Vista*, George G. Kleiman, vol. 5, no. 28, p. 22.
4. *Controlando Átomos com Luz*, Vanderlei Salvador Bagnato e Sérgio C. Zílio, vol. 9, no. 53, p. 41.
5. *Colorindo o Invisível: quando os Átomos se Somam*, Gilberto Fernandes de Sá e Petrus d'Amorim Santa-Cruz, vol. 7, no. 38, p. 34.
6. *Prisão de Luz para os Átomos*, Luiz Davidovich, vol. 23, no. 134, p. 15.
7. *O Elétron faz 100 Anos*, Vicente Pleitzer e Rogério Rosenfeld, vol. 22, no. 131, p. 24.
8. *Raios X. Descoberta Casual ou Criterioso Experimento?*, Carlos Alberto dos Santos, vol. 19, no. 114, p. 26.
9. *Controle do Átomo: Passos em Direção aos Avanços do Próximo Século*, Vanderlei S. Bagnato, Maria Tereza de Araújo, Ilde Guedes, Débora Milori e Sergio C. Zilio vol. 17, no. 101, p. 28.

Resumo - Capítulo Quatro

Átomos são compostos por duas partes principais: o núcleo e a eletrosfera. O núcleo é formado por prótons e nêutrons. Prótons são partículas carregadas positivamente, enquanto que nêutrons não possuem carga. Praticamente toda a massa de um átomo está concentrada no seu núcleo. O número de prótons do núcleo de um átomo é chamado de número atômico, e representado por Z . O número de nêutrons é representado por N , e a quantidade $Z + N$ é chamada número de massa, e representada por A . A interação que mantém os prótons e nêutrons ligados no núcleo é chamada de interação forte; esta força é muito intensa na região do núcleo, ou seja dentro de um diâmetro da ordem de 10^{-15} m, e cai muito rapidamente fora dele. Ela não distingue carga, e atua igualmente entre prótons e nêutrons. A força que mantém os elétrons ligados ao átomo é a interação coulombiana entre a carga negativa dos elétrons e a positiva do núcleo. Portanto, essa força é de natureza eletromagnética. Diâmetros de átomos são da ordem de 10^{-10} m, ou angstroms (\AA). Então, diâmetros atômicos são cerca de 100 000 vezes maiores que diâmetros nucleares. Os elétrons em torno do núcleo ocupam orbitais atômicos. Cada orbital é caracterizado por uma função de onda que descreve uma distribuição espacial de probabilidades para as posições do elétrons naquele orbital. Átomos se ligam entre si para formar moléculas e objetos maiores. O tipo de ligação depende das características dos elétrons que ocupam os orbitais mais externos dos átomos envolvidos. Elétrons em átomos possuem momento angular orbital, além do momento angular intrínseco, ou spin. Esses momentos angulares se somam para dar origem a um momento angular total do átomo. Este por sua vez confere ao átomo um momento magnético. Átomos não são indivisíveis, como o nome sugere. A emissão espontânea de partículas pelos núcleos de certos átomos é uma prova disso.