



NÚMEROS QUÂNTICOS E DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA

Nesta apostila, vamos estudar um pouco sobre a eletrosfera de um átomo, que é a região ao redor do núcleo do átomo onde podem ser encontrados os elétrons.

Entenderemos o que são os números quânticos e como eles explicam os orbitais atômicos. Aprenderemos a distribuir os elétrons nesses orbitais e a identificar e localizar os elétrons através de seus números quânticos.

NÚMEROS QUÂNTICOS

Como já vimos, o modelo atômico mais atual é o modelo de Schrödinger, que, aliado à mecânica quântica, descreve o elétron simultaneamente como uma onda e partícula, localizado ao redor de um núcleo de carga positiva e altíssima densidade.

Dado o caráter onda-partícula do elétron, seu comportamento pode ser descrito por uma função de onda (ψ , Ψ). Se tratando de uma matemática muito complexa, surgiram algumas regularidades, alguns “números mágicos” que permitiam a resolução dessa equação. Esses números foram chamados de números quânticos.

Utilizamos os números quânticos principalmente para entender o átomo e as ligações químicas. Eles determinam os níveis de energia em que um elétron se encontra, o formato do orbital, e a sua orientação no espaço.

NÚMERO QUÂNTICO PRINCIPAL: N

Representado por n , é o número quântico que corresponde às camadas do átomo: os níveis de energia, muitas vezes chamados de camadas K, L, M, N, O... Cada uma delas comporta um número máximo de elétrons, e a maioria dos átomos é composta de várias camadas.

Energia							
Número Quântico	1	2	3	4	5	6	7
Camada	K	L	M	N	O	P	Q
Número de elétrons	2	8	18	32	32	18	8

Distância do Núcleo

Perceba que com o aumento da distância do núcleo, mais energética a camada.

A camada mais externa do átomo, com maior número quântico n , é chamada de camada de valência. É desta camada que tiramos ou colocamos elétrons, pois é a camada mais “acessível” do átomo. Também é ela que participa das ligações químicas entre os átomos.



NÚMERO QUÂNTICO SECUNDÁRIO: ℓ

Além dos níveis de energia representados pelo número quântico principal, existem também subníveis de energia, representados por ℓ . Este número quântico representa, então esses subníveis, identificados por letras, s, p, d e f, cada qual com seu formato específico, e associado a um valor de ℓ .

ℓ	0	1	2	3
Orbital	s	p	d	f

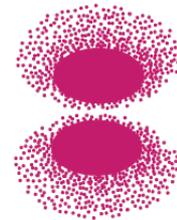
Lembre-se que um orbital é delimitado pela probabilidade de se encontrar um elétron. Veja no exemplo abaixo a representação de um orbital s ($\ell = 0$) em torno do núcleo:



s

Imagine que cada pontinho representa uma chance de se encontrar um elétron naquele local. Percebemos que na região central, as chances são muito altas, e conforme nos afastamos dela, a densidade de pontinhos diminui, representando que a chance de se encontrar um elétron ali também diminuiu. Observamos que esse subnível tem formato esférico.

Agora, vamos olhar para o subnível p. Imagine essa mesma esfera do subnível s, mas agora, vamos cortá-la ao meio uma vez; o resultado é o subnível p ($\ell = 1$):



p

Nesse caso, vemos que no local onde “cortamos”, não existe nenhuma chance de encontrar um elétron. Essa região central é correspondente ao núcleo do átomo. Por isso, o subnível p tem um formato de halter.

Indo mais além, podemos “cortar” novamente o subnível p, e o resultado será o formato de um subnível d ($\ell = 2$). Agora, fizemos “dois cortes”:



d

O mesmo pode ser feito para o subnível f, mas não se preocupe! Os vestibulares costumam abordar apenas os subníveis s e p.

Ao final da apostila, você encontrará uma tabela mostrando os demais orbitais e suas formas, de acordo com o subnível e camada.

NÚMERO QUÂNTICO MAGNÉTICO (m_ℓ).

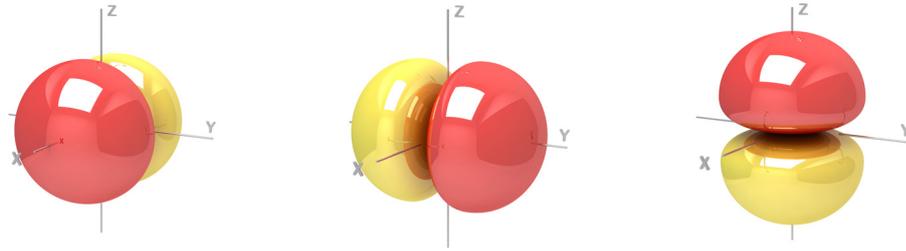
Também chamado de número quântico terciário, ele representa as “subdivisões” dos subníveis, chamados de orbitais. Para cada subnível, ele varia de $-\ell$ a $+\ell$:

Subnível	ℓ	m_ℓ
s	0	0
p	1	-1 0 +1
d	2	-2 -1 0 +1 +2
f	3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3

Por isso, temos três orbitais p, cinco orbitais d, e sete orbitais f.



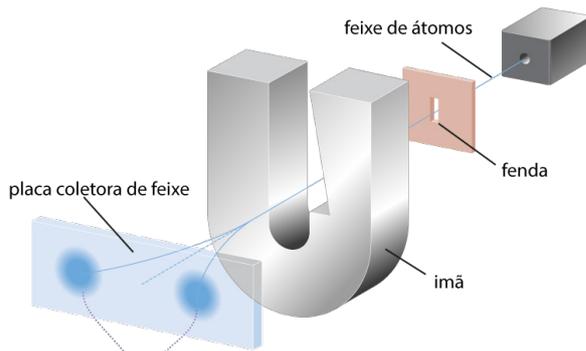
Veja na imagem abaixo essa representação para os orbitais p. Lembrando que todos eles têm a mesma energia, pois estão na mesma camada (número quântico principal n).



Os três orbitais p que podem ter valores +1, 0 ou -1.

NÚMERO QUÂNTICO DE SPIN (MS)

Este número quântico não diz mais respeito aos orbitais, mas agora, aos elétrons. Um experimento realizado por Stern e Gerlach mostrou que, sob a ação de um campo magnético, um feixe de átomos que tinham elétrons em números ímpares se dividia em dois, como na figura abaixo:



átomos tendo elétrons desemparelhados com número quântico de spin $m_s = +1/2$, defletem em uma direção; aqueles que têm elétrons desemparelhados com $m_s = -1/2$ deflexão na direção oposta

Essa propriedade foi atribuída aos elétrons, e foi chamada de spin. Como o feixe era sempre dividido em dois, e nunca em outras proporções, foram atribuídos através de modelos matemáticos somente dois valores de spin, $+1/2$ e $-1/2$, que representamos com meias setas para cima ou para baixo (1 ou ↓).

CAMADAS, SUBNÍVEIS E ORBITAIS

Veja jubialuno(a), na tabela abaixo, que para cada camada (n), existem somente alguns subníveis de energia permitidos (l). E dentro de cada subnível, existem os orbitais, que podem ter valores que variam de $+l$ a $-l$.

Camada	1	2					3					4																		
	s	s	p		s	p		d			s	p		d			f													
Orbital	0	0	1	0	-1	0	1	0	-1	2	1	0	-1	-2	0	1	0	-1	2	1	0	-1	-2	3	2	1	0	-1	-2	-3



- ▶ **Na camada 1**, temos somente um subnível. Na química, o chamamos subnível 1s.
- ▶ **Na camada 2**, temos dois subníveis: um s, e um p. Chamamos esses subníveis de 2s e 2p, respectivamente.
- ▶ **Na camada 3**, temos subníveis s, p, d. Identificamos esses subníveis por 3s, 3p e 3d.
- ▶ **Na camada 4**, existem subníveis de s até f; então, identificamos eles por 4s, 4p, 4d e 4f.

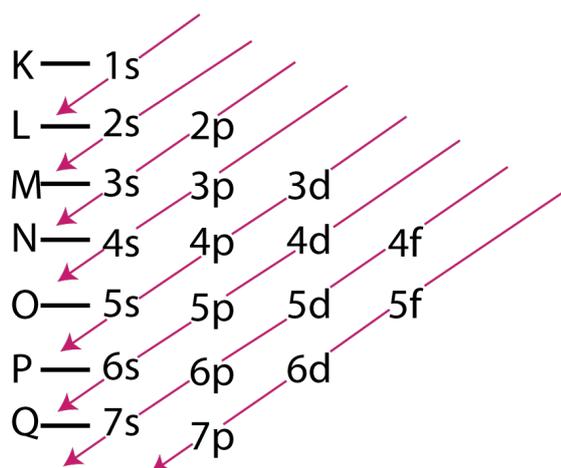
Porém, ainda não falamos dos orbitais! Como podemos ver na tabela, o subnível p, por exemplo, é composto por três orbitais. Cada orbital comporta até dois elétrons, de spins diferentes. Esse é o **princípio de exclusão de Pauli**, que diz que dois elétrons não podem ter os mesmos 4 números quânticos; então, se eles ocuparem o mesmo orbital (mesmo n, mesmo ℓ , e mesmo m_ℓ), seus spins têm que ser diferentes (diferente ms).

Isso é muito importante para entendermos a distribuição eletrônica dos elementos: como seus elétrons estão distribuídos nas camadas, subníveis e orbitais.

DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA

Vamos começar a entender agora como os elétrons de um átomo estão distribuídos ao longo das camadas, subníveis e orbitais. Lembre-se que cada camada tem uma energia diferente, como vimos na primeira tabela. Cada subnível também tem uma energia diferente, associado à sua camada.

Para começarmos a distribuir os elétrons, temos que considerar essas diferenças de energia, de acordo com o diagrama abaixo:



Esse diagrama é chamado de diagrama de Pauling, e as setas indicam a direção do crescimento de energia. Podemos observar, então, que a energia cresce nesse sentido:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p \dots$$

Aumento de energia

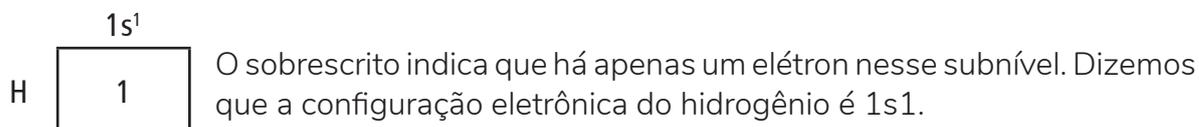
É exatamente nesta ordem que devemos distribuir os elétrons; sempre começando com o subnível 1s, depois o 2s, etc., seguindo a ordem de aumento de energia.

Para facilitar o entendimento e a distribuição eletrônica, representamos os subníveis e orbitais através de caixinhas:

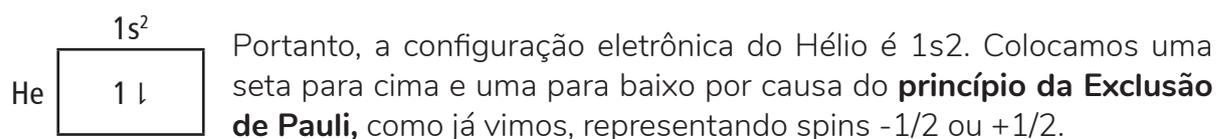




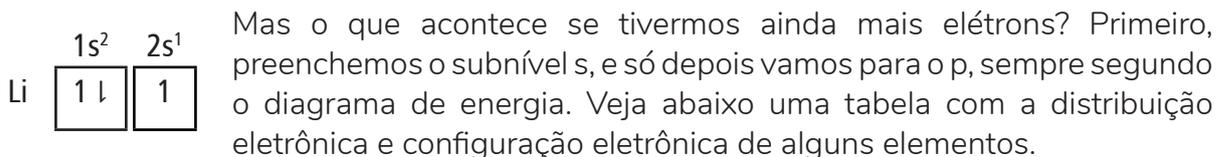
É nestas “caixinhas” que podemos começar a colocar os elétrons. Para isso, usaremos o exemplo do Hidrogênio, H, que tem número atômico 1. Lembre-se que o número atômico (número de prótons) é igual ao número de elétrons; então, o hidrogênio tem um elétron para distribuímos nas “caixinhas”.



O Hélio, He, tem dois elétrons:



Mas, e se tivermos mais elétrons? Aí, precisamos começar a ocupar o subnível $2s$, que é o próximo subnível segundo o diagrama. Veja o exemplo do Lítio, que tem três elétrons, e, portanto, configuração $1s^2 2s^1$:



Configurações eletrônicas de vários elementos mais leves

Elementos	Elétrons totais	Diagrama orbital				Configuração eletrônica
		1s	2s	2p	3s	
Li	3	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	$\square \square \square$	\square	$1s^2 2s^1$
Be	4	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\square \square \square$	\square	$1s^2 2s^2$
B	5	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \square \square$	\square	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \square$	\square	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$	\square	$1s^2 2s^2 2p^3$
Ne	10	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	\square	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	11	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	\uparrow	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Observe a distribuição eletrônica do Nitrogênio (N). Veja que cada elétron está em um orbital; nunca colocamos dois elétrons juntos, antes que cada orbital esteja ocupado por pelo menos um elétron. Esta é a regra de Hund:

Ao preencher os orbitais de um mesmo subnível, os elétrons entrarão em orbitais vazios, até que cada orbital contenha um elétron. Somente então cada orbital receberá o novo elétron.



Veja o exemplo abaixo:

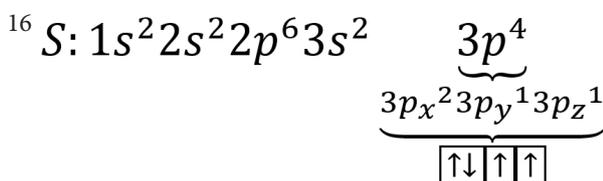
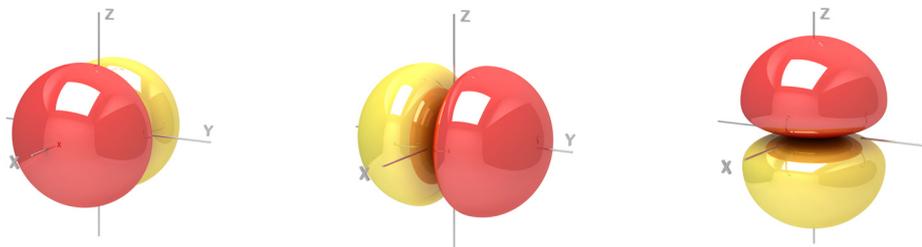
(UECE 2015) A regra de Hund, como o próprio nome indica, foi formulada pela primeira vez, em 1927, pelo físico alemão Friedrich Hund. Ele partiu diretamente da estrutura nuclear, já conhecida e medida, das moléculas e tentou calcular as orbitais moleculares adequadas por via direta, resultando na regra de Hund. Essa regra afirma que a energia de um orbital incompleto é menor quando nela existe o maior número possível de elétrons com spins paralelos.

Considerando a distribuição eletrônica do átomo de enxofre em seu estado fundamental ($Z=16$), assinale a opção que apresenta a aplicação correta da regra de Hund.

- a. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3px^2 3py^2 3pz^0$
- b. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3px^2 3py^1 3pz^1$
- c. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3px^2 3py^0 3pz^2$
- d. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3px^1 3py^2 3pz^1$

Resolução:

Pelo número de elétrons, vemos que sobram 4 para distribuímos no subnível p. Observe também que foi utilizada a nomenclatura px, py e pz, que representam as três possibilidades de m_l para o subnível p. São utilizados x, y e z como índices pois os orbitais p podem estar em três orientações diferentes no espaço; sobre o eixo x, y ou z, como vemos nesta imagem:



Voltando à distribuição eletrônica, a maneira correta de fazê-la segundo a regra de Hund é preencher primeiro cada um desses orbitais p com um elétron, e só depois colocar os que faltaram nos respectivos orbitais. Veja abaixo:

DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA – ÍONS

Como já vimos, íons são átomos que perderam ou ganharam elétrons, adquirindo carga elétrica positiva ou negativa, respectivamente.

Já vimos também que sempre que sempre que o número de elétrons de um átomo é alterado, essa alteração acontece na sua camada de valência, que é a camada mais energética com maior número quântico n.



Por isso, temos que ficar atentos ao fazer a distribuição eletrônica de um íon, pois não tiramos os elétrons do subnível mais energético segundo o diagrama de Pauli, e sim, da camada com maior valor de n .

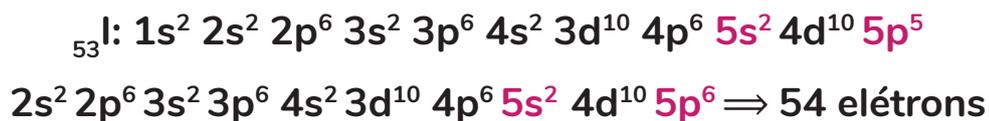
Veja um exemplo de distribuição eletrônica no átomo de prata. Ao total, o átomo neutro tem 47 elétrons (número atômico $Z = 47$). Então, sua distribuição eletrônica fica:



Veja que o subnível mais energético é o 4d. Porém, a camada com maior n é a camada 5, correspondendo à configuração $5s^2$. Então, a configuração eletrônica para o cátion Ag^+ (retirada de um elétron) fica a seguinte:



Agora vamos ver a distribuição eletrônica em um ânion. Um exemplo pode ser o Iodo, com número atômico $Z = 53$. Observe que a camada de valência continua sendo a de $n = 5$, mas agora o subnível mais energético é o 5p, e não o 5s. É no subnível p, então, que adicionamos um elétron.

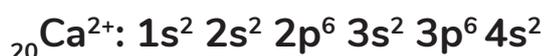


REGRA DO OCTETO

Mas por que esses átomos tendem a perder ou ganhar elétrons? Podemos justificar esse “comportamento” pela regra do Octeto. Ela é uma tendência geral que diz que o átomo fica mais estável quando existem 8 elétrons em sua camada de valência, quando ela é composta apenas pelos subníveis s e p.

Vejamos novamente o exemplo do Iodo. Vimos que no estado fundamental, o estado neutro, a configuração de sua camada de valência é $5s^2 5p^5$, totalizando $2 + 5 = 7$ elétrons. Quando ele recebe um elétron, passando a ser $\ell - 1$, sua camada de valência fica $5s^2 5p^6$, totalizando 8 elétrons. Dizemos que a regra do octeto foi obedecida.

O mesmo é verdadeiro para muitos cátions. Veja abaixo o exemplo do cálcio, que possui 20 elétrons no estado fundamental.



Note que a configuração de sua camada de valência é $4s^2$. Se fôssemos adicionar elétrons para que ele obedecesse a regra do octeto, precisaríamos adicionar seis elétrons no subnível p, completando $4s^2 4p^6$. No entanto, se apenas retirarmos dois elétrons da camada 4, a regra do octeto é mais facilmente obedecida, isto é, com menor gasto de energia.

Assim, a configuração da camada de valência do íon Ca^{2+} é $3s^2 3p^6$, e não mais a camada 4.

