

FRENTE: QUÍMICA

PROFESSOR(A): SÉRGIO MATOS

ASSUNTO: ESTRUTURA ATÔMICA

## EAD – ITA

### AULA 6 A 8



### Resumo Teórico

#### Estrutura atômica

##### O modelo atômico atual

Os átomos não são esferas maciças e indivisíveis como pensava Dalton, mas sistemas compostos por várias partículas. Prótons e nêutrons (ambos chamados **núcleons**) compõem o **núcleo**, enquanto a **eletrosfera** é formada pelos elétrons. A massa do átomo está praticamente toda concentrada no núcleo, uma vez que a massa do elétron é muito pequena em relação às massas do próton e do nêutron. O modelo atual é baseado ainda em **orbitais** — regiões onde os elétrons mais provavelmente podem ser encontrados.

- Partículas atômicas fundamentais (partículas elementares):

Partícula	Massa	Massa Relativa	Carga	Carga Relativa
Próton	$1,6726 \cdot 10^{-27}$ kg	1	$+1,6022 \cdot 10^{-19}$ C	+1
Nêutron	$1,6749 \cdot 10^{-27}$ kg	1	0	0
Elétron	$9,1095 \cdot 10^{-31}$ kg	1/1836	$-1,6022 \cdot 10^{-19}$ C	-1

##### Níveis e subníveis de energia

Os postulados de Bohr diziam que o elétron se move em órbitas circulares de energias fixas, às quais chamamos **níveis de energia**. Cada nível corresponde um número quântico principal (n), que varia de 1 a  $+\infty$ .

Camada	n
K	1
L	2
M	3
N	4
O	5
P	6
Q	7
...	...

Pelo modelo atômico de Sommerfeld, os níveis energéticos se dividem em **subníveis**, ou **subcamadas**, cada uma correspondendo a um **número quântico secundário** ( $\ell$ ), também chamado **azimutal**.

As subcamadas são designadas pelas letras **s, p, d, f, g, h, i, j** etc. As quatro primeiras letras vêm do inglês: **s** – *sharp*, **p** – *principal*, **d** – *diffuse*, **f** – *fundamental*.

Teoricamente, cada nível possui **n** subníveis, de modo que  $\ell$  varia de 0 a  $n-1$ .

Camada	n	Valores de $\ell$	Subcamadas
K	1	0	s
L	2	0, 1	s, p
M	3	0, 1, 2	s, p, d
N	4	0, 1, 2, 3	s, p, d, f
O	5	0, 1, 2, 3, 4	s, p, d, f, g
P	6	0, 1, 2, 3, 4, 5	s, p, d, f, g, h
Q	7	0, 1, 2, 3, 4, 5, 6	s, p, d, f, g, h, i
...	...	...	...

O número quântico secundário ( $\ell$ ) assume, portanto, os seguintes valores:

Subnível	$\ell$
s	0
p	1
d	2
f	3
g	4
h	5
i	6
...	...

Representando cada subnível por uma das letras (s, p, d, f etc.) precedida pelo número que indica o nível a que pertence, teremos o seguinte esquema:

Nível	Subníveis						
1	1s						
2	2s	2p					
3	3s	3p	3d				
4	4s	4p	4d	4f			
5	5s	5p	5d	5f	5g		
6	6s	6p	6d	6f	6g	6h	
7	7s	7p	7d	7f	7g	7h	7i
...				...			

## O Caráter Ondulatório Do Elétron

Um grande desafio dos físicos no início do século XX era compreender a natureza da luz, ora entendida como um movimento ondulatório, ora como um fluxo de partículas. Assim como a luz, os objetos também apresentam este duplo caráter, corpuscular e ondulatório, conforme sugeriu em 1924 o Príncipe Louis de Broglie, um físico francês. A cada objeto e partícula, de um modo geral, está associado um comprimento de onda dado pela equação de de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

Sendo:

$\lambda$  = comprimento de onda;

$h$  = constante de Planck =  $6,626 \times 10^{-34}$  J·s;

$m$  = massa da partícula;

$v$  = velocidade da partícula.

Isso foi provado ao se realizar experimentalmente a **difração** de elétrons (espalhamento dos elétrons ao atravessarem uma fenda), característica típica de fenômenos ondulatórios como a luz.

O elétron passou a ser considerado, então, uma **partícula-onda**, ora exibindo comportamento corpuscular, ora ondulatório, de acordo com o **Princípio da Dualidade de de Broglie**:

"A toda partícula em movimento está associada uma onda característica."

## O Princípio da Incerteza

Para reforçar ainda mais a ideia de que o elétron não deve ser tratado apenas como partícula, em 1926, o físico alemão Werner Heisenberg enunciou o chamado **Princípio da Incerteza de Heisenberg**:

"É impossível determinar com exatidão a posição e a velocidade de um elétron simultaneamente."

O Princípio da Incerteza de Heisenberg se traduz por meio da equação:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

Sendo:

$\Delta x$  = incerteza na posição do elétron, em metros;

$\Delta p$  = incerteza no momento linear do elétron =  $m \cdot \Delta v$ , medido em kg·m/s;

$\Delta v$  = incerteza na velocidade do elétron, em m/s;

$m$  = massa do elétron, em kg;

$h$  = constante de Planck.

## Orbitais

Considerando a natureza ondulatória do elétron, pela teoria de Broglie, e seu comportamento probabilístico, pela teoria de Heisenberg, chegou-se ao conceito de **orbital**:

**Orbital** é a região do espaço em que é maior a probabilidade de se encontrar o elétron.

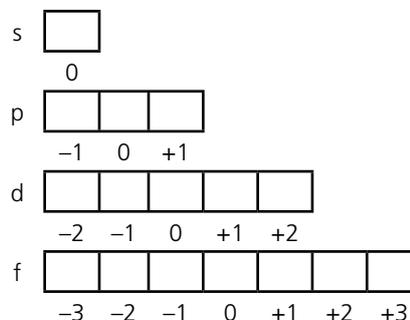
A cada orbital está associado um **número quântico magnético** ( $m_l$  ou  $m$ ), também chamado **terciário**, que varia de  $-\ell_a + \ell$ , sendo  $\ell$  o número quântico secundário do subnível ao qual pertence.

Subnível	Valor de $\ell$	Valores de $m$	Nº de orbitais
s	0	0	1
p	1	-1, 0, +1	3
d	2	-2, -1, 0, +1, +2	5
f	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7
g	4	-4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4	9
h	5	-5, -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4, +5	11
i	6	-6, -5, -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4, +5, +6	13
...	...	...	...

Deste modo, o número de orbitais por subcamada é dado pela fórmula:

$$N_{o/s} = 2 \cdot \ell + 1$$

Os orbitais, com seus respectivos números quânticos magnéticos, podem ser representados assim:



Podemos também estabelecer o número de orbitais por camada:

Camada	Valor de $n$	Subcamadas	Nº teórico de orbitais	Nº de orbitais nos átomos conhecidos
K	1	s	1	1
L	2	s, p	1+3 = 4	4
M	3	s, p, d	1+3+5 = 9	9
N	4	s, p, d, f	1+3+5+7 = 16	16
O	5	s, p, d, f, g	1+3+5+7+9 = 25	16
P	6	s, p, d, f, g, h, i	1+3+5+7+9+11 = 36	9
Q	7	s, p, d, f, g, h, i, j	1+3+5+7+9+11+13 = 49	4

Deste modo, o número de orbitais por camada, teoricamente, é:

$$N_{o/c} = n^2$$

Em 1927, o físico austríaco Erwin Schrödinger, levando em consideração a incerteza na posição do elétron em um átomo, bem como seu caráter ondulatório, propôs uma equação matemática cuja resolução permite descrever o formato e a orientação dos orbitais no espaço.

A equação de Schrödinger é usualmente escrita na forma:

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - V)\psi = 0$$

Sendo:

$\psi$  = função de probabilidade que descreve a forma do orbital

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

x, y e z = coordenadas retangulares

E = energia total do elétron

V = energia potencial do elétron

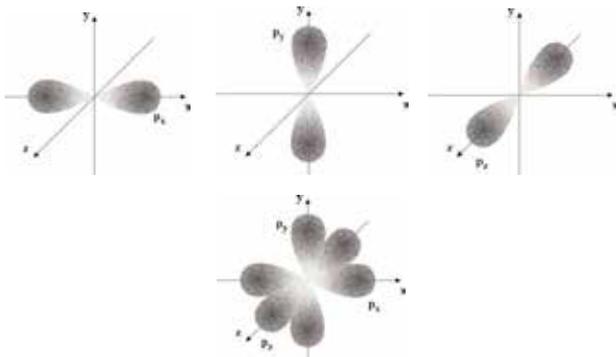
O orbital s tem formato **esférico**, e os orbitais **p**, **d** e **f** têm forma de halteres e são ditos halteromorfos. Cada uma das partes de um orbital é chamada de **lóbulo** ou **lobo**.

Orbital s

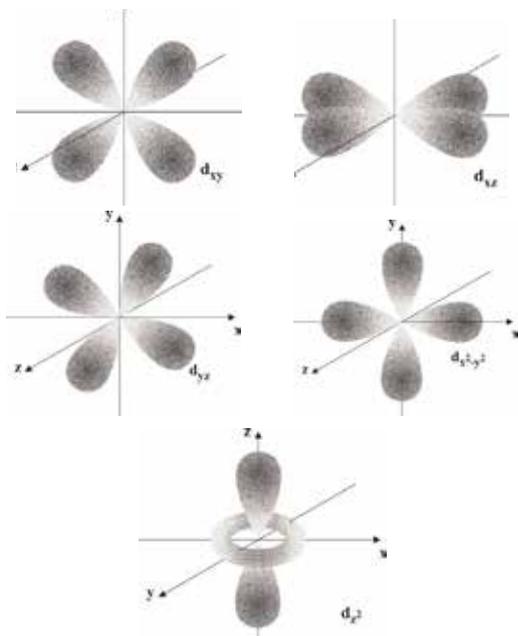


**ARTE**

Orbital p



Orbital d

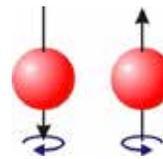


Funções de onda (contorno de orbitais) para o átomo de hidrogênio.

Os orbitais apresentam o que se chama de superfícies nodais — regiões onde a probabilidade de encontrar o elétron é nula. O número de superfícies nodais de um orbital é igual ao seu número quântico principal. Por exemplo: o orbital 1s tem apenas uma superfície nodal (no infinito), o orbital 2p tem duas (uma no infinito e a outra é um plano passando pelo núcleo e que é perpendicular ao eixo que contém os lóbulos).

## O spin do elétron

Um quarto número quântico está associado ao movimento de rotação do elétron em torno de seu próprio eixo. É o **número quântico de spin** ( $m_s$  ou  $s$ ), que assume apenas dois valores: **-1/2 e +1/2**.



Sentidos de rotação do elétron.

**Spin** é a rotação de uma partícula em torno de seu próprio eixo.

O físico alemão Wolfgang Pauli estabeleceu em 1925 o chamado Princípio da Exclusão de Pauli:

“Dois elétrons em um mesmo átomo não podem possuir os quatro números quânticos iguais.”

Este princípio também pode ser escrito do seguinte modo:

“Em um orbital existem, no máximo, dois elétrons, estes com spins opostos.”

Costuma-se representar um orbital contendo dois elétrons da seguinte maneira:



Estabelece-se, por convenção:

- 1 elétron no orbital  $\Rightarrow s = -\frac{1}{2}$
- 2 elétrons no orbital  $\Rightarrow$  1º elétron:  $s = -\frac{1}{2}$ ; 2º elétron:  $s = +\frac{1}{2}$

Com isso, pode-se dizer quantos elétrons podem existir, no máximo, em cada subcamada:

Subcamada	$\ell$	Nº de orbitais	Nº máximo de elétrons
s	0	1	2
p	1	3	6
d	2	5	10
f	3	7	14
g	4	9	18
h	5	11	22
i	6	13	26
...	...	...	...

Deste modo, o número máximo de elétrons por subcamada é dado pela expressão:

$$N_{e/s} = 2 \cdot (2\ell + 1) = 4\ell + 2$$

Pode-se também dizer o número máximo de elétrons que cada camada pode conter:

Camada	Subcamadas	Nº máximo de elétrons
K	s	2
L	s, p	2 + 6 = 8
M	s, p, d	2 + 6 + 10 = 18
N	s, p, d, f	2 + 6 + 10 + 14 = 32
O	s, p, d, f, g	2 + 6 + 10 + 14 + 18 = 50
P	s, p, d, f, g, h	2 + 6 + 10 + 14 + 18 + 22 = 72
Q	s, p, d, f, g, h, i,	2 + 6 + 10 + 14 + 18 + 22 + 26 = 98
...	...	...

Assim, o número máximo de elétrons por camada é dado por:

$$N_{e/c} = 2n^2$$

Os átomos conhecidos hoje, no entanto, não possuem elétrons suficientes para o preenchimento completo de todas essas camadas, de tal modo que os valores conhecidos são:

Camada	Subcamadas	No máximo de elétrons
K	1s	2
L	2s 2p	8
M	3s 3p 3d	18
N	4s 4p 4d 4f	32
O	5s 5p 5d 5f	32
P	6s 6p 6d	18
Q	7s 7p	8

## Distribuição eletrônica em camadas e subcamadas

A energia do elétron depende dos valores de  $n$  e  $\ell$ :

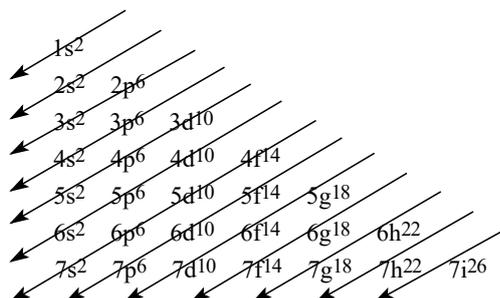
$$E \propto (n + \ell)$$

Deste modo, poder-se estabelecer a seguinte regra prática:

- Quanto maior a soma  $n + \ell$ , maior a energia do elétron;
- Em caso de "empate", o mais energético será o subnível de maior número quântico principal.

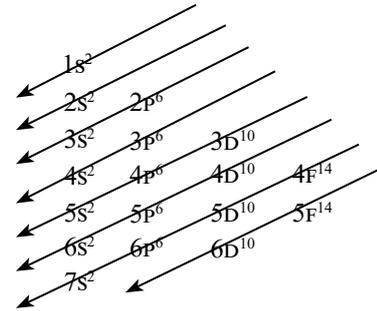
Calculando-se a soma  $n + \ell$  para todos os subníveis, chega-se ao **diagrama de energia**:

OS SUBNÍVEIS EM ORDEM CRESCENTE DE ENERGIA



Representando apenas os subníveis existentes nos átomos conhecidos, obtemos:

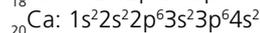
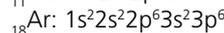
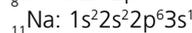
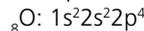
O DIAGRAMA DE MADELUNG



Ao se fazer a configuração eletrônica de um átomo no estado fundamental, os elétrons devem ser distribuídos seguindo-se a sequência das setas, a partir de 1s, completando-se a quantidade máxima permitida por subnível, até se ter colocado todos os elétrons. A sequência completa é:



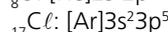
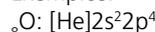
Exemplos:



Outra maneira de representar as configurações eletrônicas dos átomos é levar em consideração as configurações dos gases nobres. É a chamada notação espectral ou configuração cerne do gás nobre.

Gás nobre	Z
He	2
Ne	10
Ar	18
Kr	36
Xe	54
Rn	86

Exemplos:



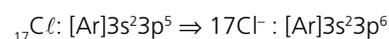
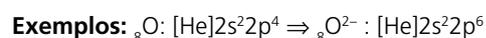
### Observação:

O preenchimento sucessivo dos subníveis em ordem crescente de energia e com a sua quantidade de elétrons máxima permitida é conhecido como **princípio do aufbau** ou **princípio de construção**.

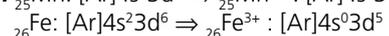
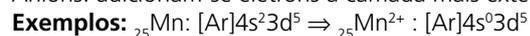
## Distribuição eletrônica em íons

Para escrevermos a configuração de um íon no estado fundamental, procedemos da seguinte maneira:

Ânions: adicionam-se elétrons à camada mais externa.



Ânions: adicionam-se elétrons à camada mais externa.



## Distribuição eletrônica em orbitais – Regra de Hund

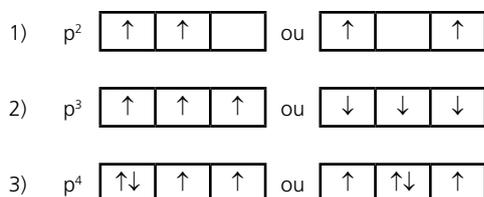
Considerações acerca da estabilidade de estruturas eletrônicas em subníveis conduzem à **Regra de Hund**, também chamada **Regra de Máxima Multiplicidade**, elaborada por Friedrich Hund, físico alemão, em 1927.

“Em uma mesma subcamada os elétrons tendem a ocupar orbitais diferentes com spins paralelos.”

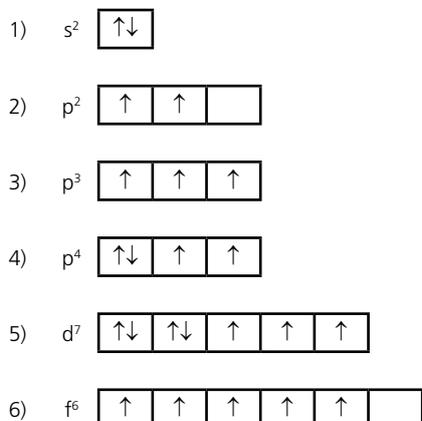
ou

“Só podemos completar um orbital quando todos os outros orbitais do mesmo subnível tiverem um elétron.”

A representação é feita por meio de **diagramas de quadrículas**. Exemplos:



Ao se distribuir os elétrons em um subnível deve-se, por convenção, colocar um elétron em cada orbital, da esquerda para a direita, até o último orbital, e só então retornar ao início para completar os orbitais com os elétrons restantes. Deve-se também obedecer ao Princípio da Exclusão de Pauli. Exemplos:



### Observação:

As definições abaixo são muito utilizadas no estudo das distribuições eletrônicas:

1. Subnível mais energético — é o último subnível da distribuição eletrônica, seguindo o diagrama de energia.
2. Camada mais externa — camada mais afastada do núcleo e representada pelo maior número quântico principal que aparece na distribuição eletrônica.
3. Subnível mais externo — último subnível da camada mais externa.
4. Camada de valência — a camada mais externa; a última camada.
5. Elétrons mais energéticos — elétrons pertencentes ao subnível mais energético.
6. Elétrons mais externos — elétrons pertencentes ao subnível mais externo.
7. Elétrons de valência — elétrons pertencentes à camada de valência.

8. Quando dois elétrons ocupam um mesmo orbital, dizemos que eles estão emparelhados, ou que o orbital está preenchido.
9. Quando um elétron ocupa sozinho um orbital, dizemos que ele está desemparelhado, ou que o orbital está semipreenchido.
10. Elétron de diferenciação é o último elétron colocado nos orbitais na distribuição. Ele pertence ao subnível mais energético.

Exemplo:  ${}_{20}\text{Ca} \Rightarrow Z = 20$  (20 elétrons):

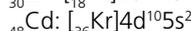
- Por subcamadas:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
- Por camadas: K = 2, L = 8, M = 8, N = 2;
- Subnível mais energético: 4s;
- Camada mais externa (camada de valência): N (4ª camada);
- Subnível mais externo: 4s;
- Elétrons mais energéticos: 2 elétrons ( $4s^2$ );
- Elétrons mais externos: 2 elétrons ( $4s^2$ );
- Elétrons de valência: 2 elétrons (camada N);
- Elétron de diferenciação: o último elétron colocado no subnível 4s.

## Casos especiais de distribuição eletrônica

A energia dos subníveis decresce com o aumento do número atômico, em decorrência do aumento da força atrativa nuclear. A partir do número atômico **21**, pode ficar invertida a ordem energética de alguns subníveis:

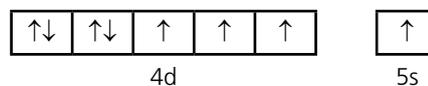
Ordem esperada	Ordem real
4s 3d	3d 4s
5s 4d	4d 5s
6s 4f 5d	4f 5d 6s

Exemplos:

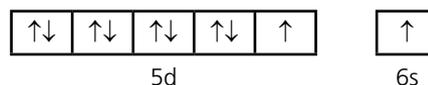


Em alguns casos, as energias dos subníveis são tão próximas que estes são tratados como se fossem um único subnível com vários orbitais. Por exemplo:

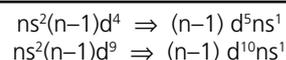
${}_{44}\text{Ru}: [{}_{36}\text{Kr}]4d^7 5s^1$  (4d e 5s se comportam como um único subnível de 6 orbitais).



${}_{78}\text{Pt}: [{}_{54}\text{Xe}]4f^{14} 5d^9 6s^1$  (5d e 6s se comportam como um único subnível de 6 orbitais)



As configurações eletrônicas de alguns elementos de transição, como o cromo ( ${}_{24}\text{Cr}$ ), o molibdênio ( ${}_{42}\text{Mo}$ ), o cobre ( ${}_{29}\text{Cu}$ ), a prata ( ${}_{47}\text{Ag}$ ) e o ouro ( ${}_{79}\text{Au}$ ), merecem atenção especial. Pelo diagrama de energia essas configurações terminariam em  $ns^2(n-1)d^4$  para os dois primeiros e  $ns^2(n-1)d^9$  para os três últimos elementos. No entanto, ocorre o seguinte:





09. (ProfSM) A configuração eletrônica correta para um átomo de molibdênio ( $_{42}\text{Mo}$ ) no estado de oxidação +1 no estado fundamental é:

- A)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^5$
- B)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^4$
- C)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^0 4d^5$
- D)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^3$
- E)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^5$

10. (ProfSM) Sobre o vanádio ( $_{23}\text{V}$ ) e o níquel ( $_{28}\text{Ni}$ ), são feitas as afirmações:

- I. O vanádio possui maior susceptibilidade magnética no estado sólido.
- II. O vanádio possui maior susceptibilidade magnética no estado gasoso.
- III. O níquel possui maior susceptibilidade magnética no estado sólido.
- IV. O níquel possui maior susceptibilidade magnética no estado gasoso.
- V. Ambos possuem a mesma susceptibilidade magnética no estado líquido.

Estão corretas:

- A) I e IV, somente.
- B) II e III, somente.
- C) I e II, somente.
- D) III e IV, somente.
- E) II e V, somente.

11. (ProfSM) O conhecimento de que os subníveis energéticos de um átomo são compostos por orbitais é devido, em parte,

- A) à estrutura fina do espectro de átomos polieletrônicos que fundamenta o modelo atômico de Sommerfeld.
- B) ao desdobramento das raias espectrais pela aplicação de um campo magnético externo ao átomo.
- C) ao experimento de Stern e Gerlach para a comprovação do spin eletrônico.
- D) ao espalhamento de partículas  $\alpha$  por lâminas metálicas finíssimas.
- E) às diferentes energias emitidas por átomos monoelétrônicos quando ocorrem saltos quânticos em um mesmo subnível.

12. (ProfSM) Escreva a configuração eletrônica por subníveis para os átomos a seguir:

- A)  $_{79}\text{X}$
- B)  $_{44}\text{Y}^{2+}$

13. (ProfSM) O zircônio,  $_{40}\text{Zr}$ , é um metal branco-acinzentado brilhante, duro e resistente à corrosão. É empregado no revestimento de reatores nucleares e como aditivo em aços.

- A) Indique os números quânticos do elétron de diferenciação do zircônio.
- B) Indique a fórmula mais provável do óxido de zircônio.

14. (ProfSM) O Princípio da Exclusão de Pauli estabelece a quantidade de elétrons em cada orbital.

- A) Dê um enunciado para tal princípio.
- B) Explique como é possível dois elétrons (cargas de mesmo sinal) compartilharem o mesmo orbital.

15. (ProfSM) Faça a configuração eletrônica usando o cerne do gás nobre e indique o número quântico do momento angular orbital do elétron de menor penetrância, considerando o estado fundamental:

- A)  $_{33}\text{As}^+$
- B)  $_{21}\text{Sc}^{2+}$

## Gabarito

01	02	03	04	05
A	D	A	D	B
06	07	08	09	10
B	E	A	C	B
11	12	13	14	15
B	–	–	–	C

– Demonstração.



## Anotações