

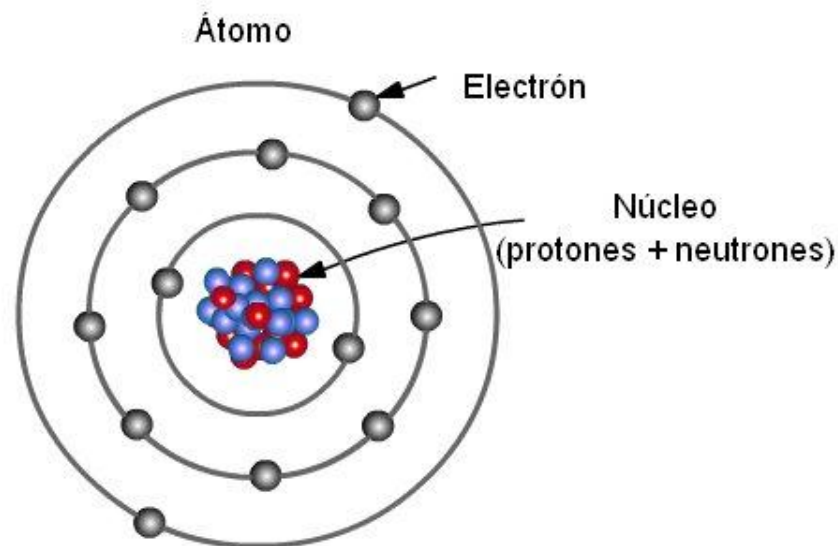
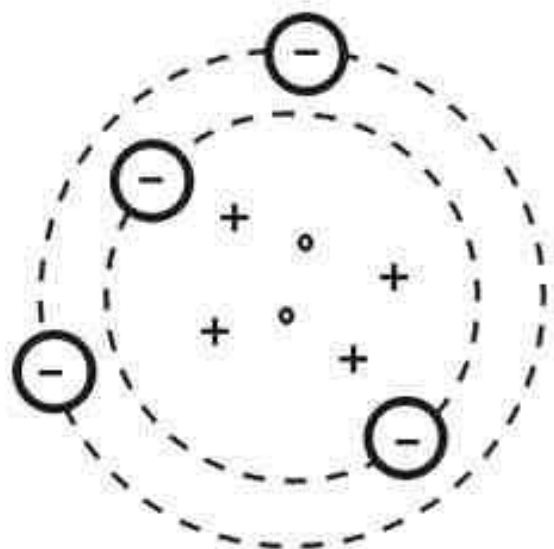
# Estrutura eletrônica dos átomos

Mestranda Daniele Potulski – [danielepotulski@ufpr.br](mailto:danielepotulski@ufpr.br)

Disciplina Química Madeira I

# Estrutura geral dos átomos

Partícula	Localização	Carga
Elétron	Eletrosfera	- 1
Próton	Núcleo	+1
Neutron	Núcleo	0



- PRÓTONS situados no núcleo do átomo (representados por +)
- NÊUTRONS também situados no núcleo (representados por o)
- ELÉTRONS girando em torno do núcleo (representados por -)

# Níveis eletrônicos de energia

- Segundo a Mecânica Quântica a estrutura eletrônica dos átomos se deduz através de um conjunto de níveis de energias quantizadas, que os elétrons podem possuir.

**Orbitais:** Os orbitais correspondem a regiões do átomo com maior probabilidade de se encontrar determinado elétron (maior manifestação eletrônica). Cada orbital acomoda no máximo dois elétrons e, quando os elétrons ocupam um mesmo orbital, são ditos emparelhados e devem possuir sentidos de rotação (spins) contrários.

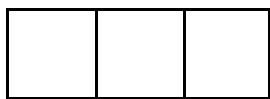
- Dois elétrons com spins em direções opostas são ditos spins antiparalelos.

# Subníveis de energia

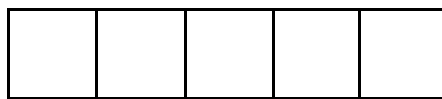
- Os orbitais em um átomo são agrupados em subcamadas e, na ausência de qualquer campo magnético aplicado externamente, todos os orbitais de uma mesma subcamada têm a mesma energia.
- Em átomos no seu estado fundamental podem existir quatro tipos de subcamadas, designadas pelas letras s , p , d , f , que consistem em 1, 3, 5 e 7 orbitais, respectivamente.



s



p



d



f

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

- Para designar a camada, a subcamada e o orbital de um elétron podemos utilizar os **números quânticos**.
- Esses números identificam cada elétron do átomo;
- Porém, não existem dois elétrons com o mesmo conjunto de números quânticos - ***princípio da exclusão de Pauli***.

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

### *Primeiro Número Quântico ou Número Quântico Principal ( $n$ )*

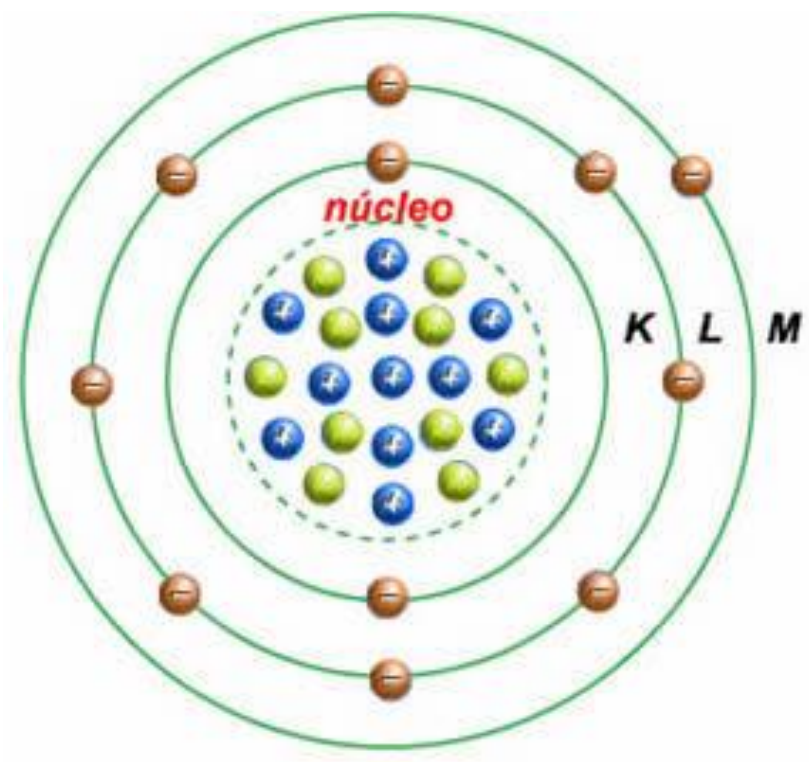
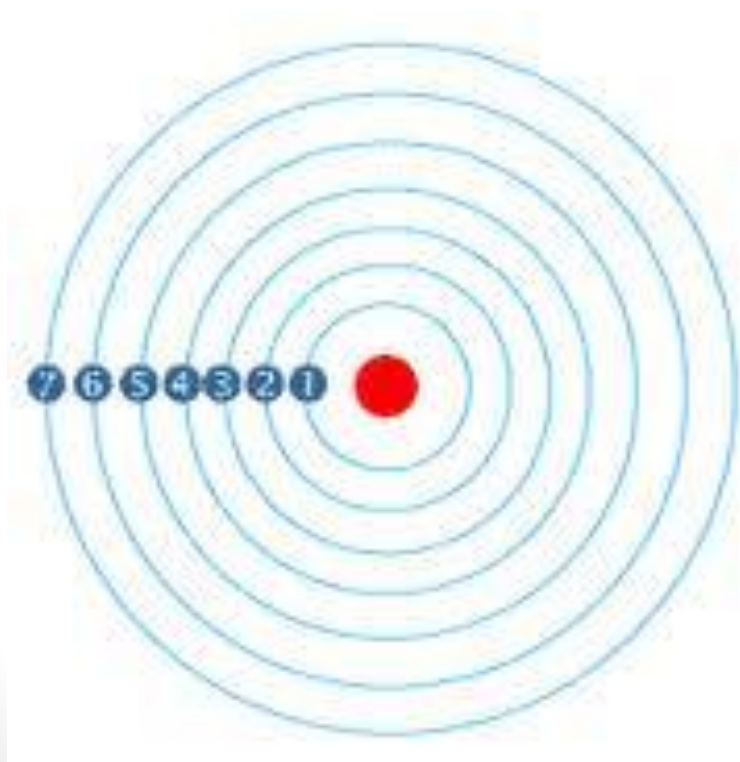
- Indica a camada em o elétron se encontra;
- Reflete a *distância* média elétron-núcleo;
- É importante na determinação da energia de um elétron;
- Só pode assumir valores inteiros e positivos :  $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  (**camadas: K, L, M, N, O, P**);
- Elétrons com o mesmo valor de  $n$  movem-se na mesma região em torno do núcleo (estão no mesmo nível ou camada);
- Quanto maior o valor de  $n$  maior a sua distância do núcleo e, conseqüentemente, maior a sua energia.



# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Primeiro Número Quântico ou Número Quântico Principal ( $n$ )*



# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Segundo Número Quântico, Número Quântico Secundário ou Número Quântico Azimutal ( $\ell$ )*

- Determina a geometria da nuvem eletrônica associada com um elétron;
- Representa os subníveis ou subcamadas presentes em um nível ou camada;
- Está relacionado com  $n$ , de modo que para um dado valor de  $n$ ,  $\ell$  é limitado pelos valores:  **$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots (n - 1)$** ;



# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Segundo Número Quântico, Número Quântico Secundário ou Número Quântico Azimutal ( $\ell$ )*

- Os subníveis associados com os valores de  $\ell = 0, 1, 2$  e  $3$  são designados **s, p, d e f**, nessa ordem;
- Observam-se diferenças de energia em subníveis de um mesmo nível;
- Elétrons de um mesmo subnível possuem a mesma quantidade de energia;

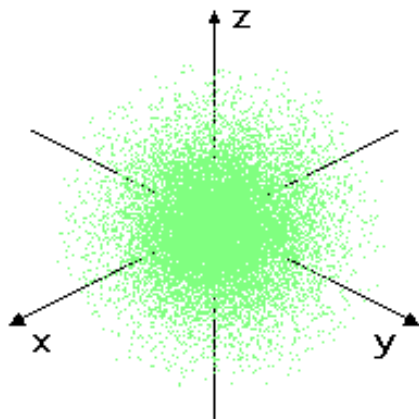
# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

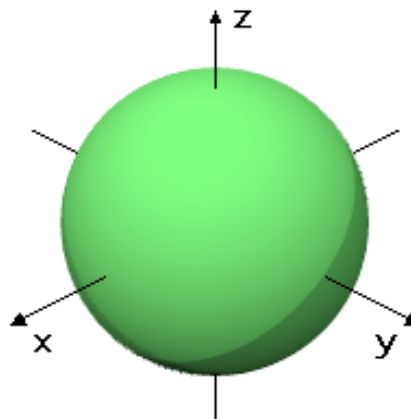
### *Segundo Número Quântico ( $\ell$ )*

$\ell = 0$ : corresponde ao subnível s, onde existe somente uma orientação ( $m_\ell = 0$ ).

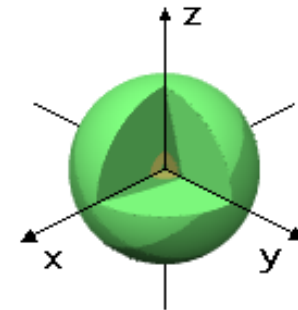
*Subnível s: possui forma esférica e portanto apenas uma orientação.*



Orbital s ( $\ell = 0, m_\ell = 0$ )



$n = 1$  (H)



$n =$

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

### *Segundo Número Quântico ( $\ell$ )*

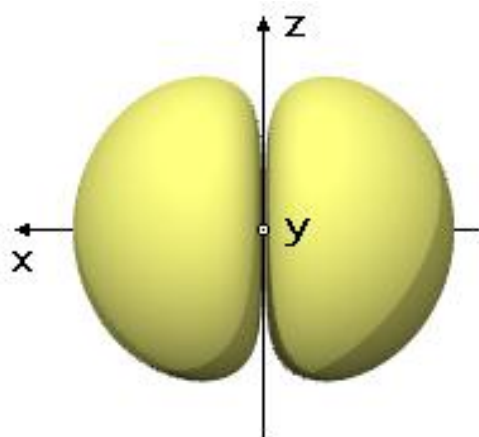
$\ell=1$ : corresponde ao subnível  $p$ , onde existem três orientações permitidas, que surgem em decorrência dos três valores de  $m_\ell$  (+1, 0, -1). Os três orbitais  $p$  são denominados  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$  e são orientados de acordo com os três eixos cartesianos (x, y e z).

# Estrutura eletrônica dos átomos

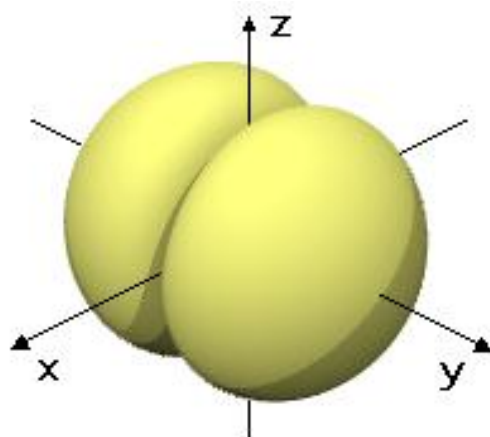
## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Segundo Número Quântico ( $\ell$ )*

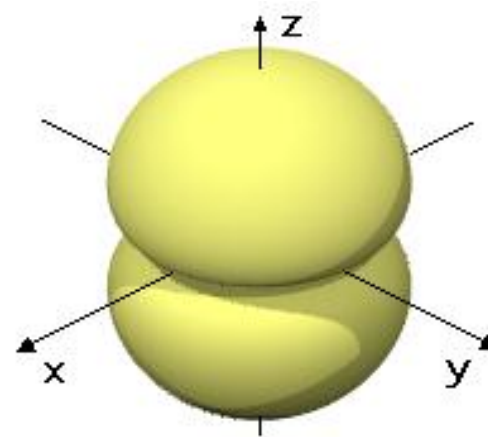
Subníveis p: três orientações possíveis, que coincidem com os três eixos cartesianos.



Orbital  $p_x$



Orbital  $p_y$



Orbital  $p_z$

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

### *Segundo Número Quântico ( $\ell$ )*

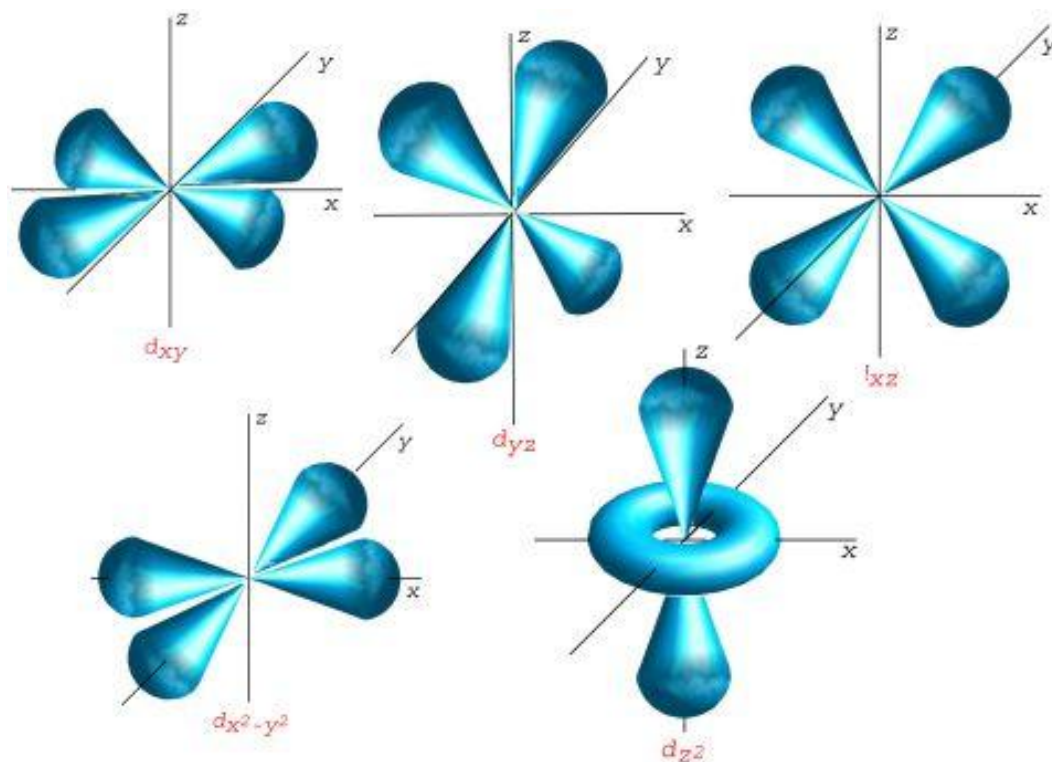
$\ell=2$ : corresponde ao subnível **d** onde existem cinco orientações permitidas, ou seja, cinco valores de  $m_\ell$  (-2, -1, 0, +1, +2). São designados por  $d_z^2$  (orientação coincidente com o eixo z),  $d_{x^2-y^2}$  (orientação coincidente com os eixos x e y, simultaneamente),  $d_{xy}$  (orientado entre os eixos x e y),  $d_{yz}$  (orientado entre os eixos y e z) e  $d_{xz}$  (orientado entre os eixos x e z).

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Segundo Número Quântico ( $\ell$ )*

Orbitais d: cinco orientações possíveis.



# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

### *Segundo Número Quântico ( $\ell$ )*

$\ell=3$ : corresponde ao subnível **f** onde existem sete orientações permitidas, ou seja, sete valores de  $m_\ell$  (-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3). Os orbitais **f** apresentam formas ainda mais exóticas, que podem ser derivadas da adição de um plano nodal às formas dos orbitais **d**. Apresentam  $n-4$  nós radiais.

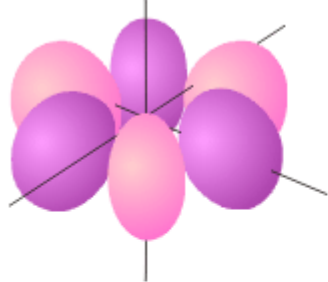
# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

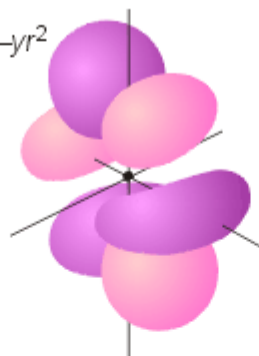
*Segundo Número Quântico ( $l$ )*

Orbital f: sete orientações possíveis.

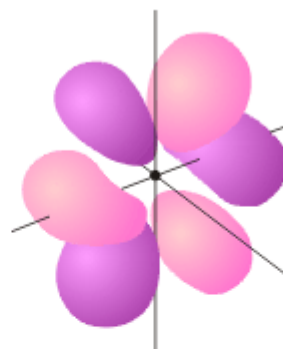
$4f_{y^3-3yx^2}$



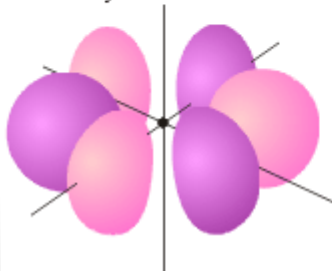
$4f_{5yz^2-yr^2}$



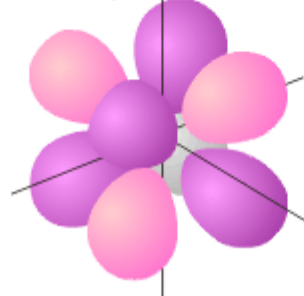
$4f_{5xz^2-3xr^2}$



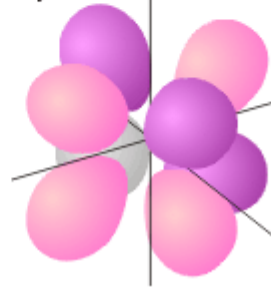
$4f_{x^3-3xy^2}$



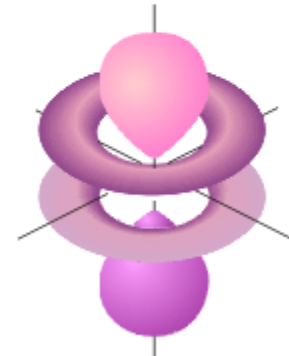
$4f_{zx^2-zy^2}$



$4f_{xyz}$



$4f_{5z^3-3zr^2}$





# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Terceiro Número Quântico, Número Quântico Terciário ou Número Quântico Magnético ( $m\ell$ )*

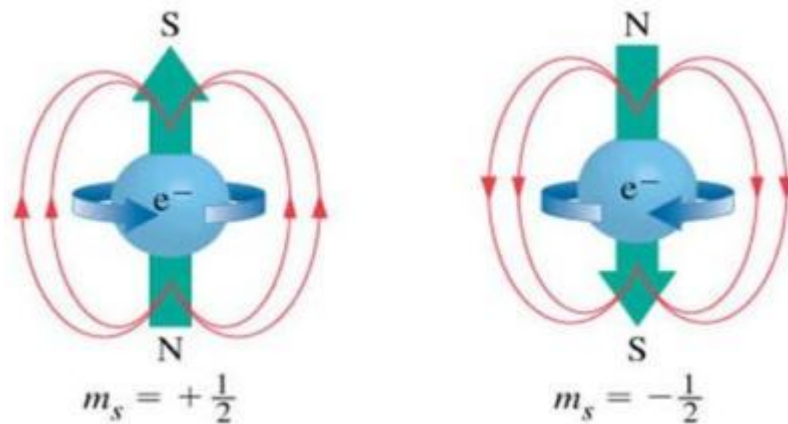
- Está associado com a orientação da nuvem eletrônica em relação a uma determinada direção;
- Cada subnível contém um ou mais orbitais, sendo cada um deles limitado pelos valores:  $m\ell = \ell, \ell - 1, \ell - 2, \ell - 3, \dots, 0, -1, -2, \dots, -\ell$ ;
- Existe um único orbital para cada valor de  $m\ell$  ;
- Orbitais do mesmo subnível (mesmo valor de  $\ell$ ) possuem a mesma energia;

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

*Quarto Número Quântico, Número Quântico Quaternário ou Número Quântico de Spin ( $m_s$ )*

- Especifica o spin do elétron;
- Está associado com a rotação do elétron em torno do seu próprio eixo;
- Não está relacionado com os valores dos demais números quânticos;
- Valores de  **$m_s$  : + 1/2 , -1/2**.



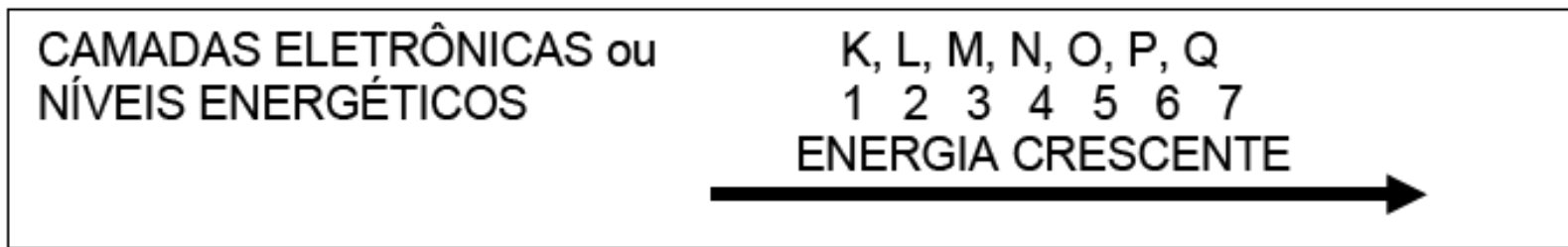
# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

nível ( $\eta$ )	subnível ( $\iota$ )	orbitais ( $m_{\iota}$ )
1	s (0)	0
2	s (0)	0
	p (1)	-1, 0, 1
3	s (0)	0
	p (1)	-1, 0, 1
	d (2)	-2, -1, 0, 1, 2
4	s (0)	0
	p (1)	-1, 0, 1
	d (2)	-2, -1, 0, 1, 2
	f (3)	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3

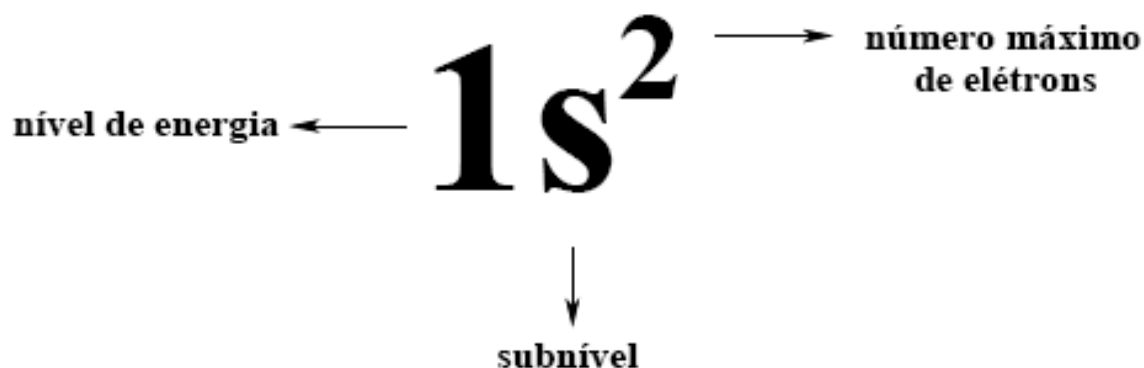
# Estrutura eletrônica dos átomos

## Níveis de energia



# Estrutura eletrônica dos átomos

## Diagrama de orbitais



→ A representação  $1s^2$  significa 2 elétrons colocados no subnível s do 1º nível.

# Estrutura eletrônica dos átomos

Número máximo de elétrons para cada nível de energia

		Número máximo de elétrons
1 ° nível	$n = 1$	$2 n^2 = 2 \cdot 1^2 = 2$
2 ° nível	$n = 2$	$2 n^2 = 2 \cdot 2^2 = 8$
3 ° nível	$n = 3$	$2 n^2 = 2 \cdot 3^2 = 18$
4 ° nível	$n = 4$	$2 n^2 = 2 \cdot 4^2 = 32$

		Número máximo de elétrons	
		Teórico	Conhecido
5 ° nível	$n = 5$	$2 n^2 = 2 \cdot 5^2 = 50$	32
6 ° nível	$n = 6$	$2 n^2 = 2 \cdot 6^2 = 72$	18
7 ° nível	$n = 7$	$2 n^2 = 2 \cdot 7^2 = 98$	8

# Estrutura eletrônica dos átomos

## Relação entre níveis, subníveis e orbitais

C a m a d a s	N í v e i s (n)	Subníveis ( $\ell$ )				Número máximo de		
		0	1	2	3	subníveis	orbitais	$\bar{e}$ reais
		s	p	d	f			
K	1	1s				1	1	2
L	2	2s	2p			2	4	8
M	3	3s	3p	3d		3	9	18
N	4	4s	4p	4d	4f	4	16	32
O	5	5s	5p	5d	5f	4	16	32
P	6	6s	6p	6d		3	9	18
Q	7	7s				1	1	2

# Configurações eletrônicas

## Regra de Hund

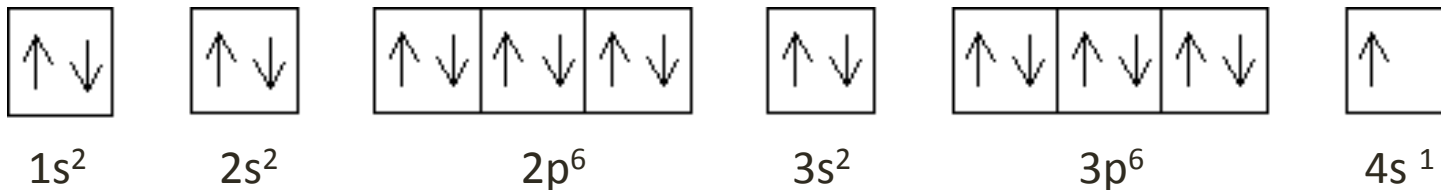
- *Ao ser preenchida uma subcamada, cada orbital dessa subcamada recebe **inicialmente apenas um elétron**; somente depois de o último orbital dessa subcamada ter recebido seu primeiro elétron começa o preenchimento de cada orbital semicheio com o segundo elétron.*
- *O **elétron de maior energia**, chamado **elétron de diferenciação**, é o último elétron distribuído no preenchimento dos orbitais.*
- A distribuição dos elétrons ao redor do núcleo é feita de modo a ocupar os orbitais de mais baixa energia. Portanto, o preenchimento desses orbitais é feito observando-se a ordem crescente de energia dos subníveis.



# Configurações eletrônicas

## Diagrama de orbitais

**Exemplo:** átomo de potássio ( ${}_{19}\text{K}$ ):  ${}_{19}\text{K} 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$



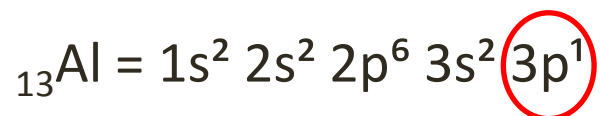
- Cada seta indica um elétron e em cada orbital, quando existem dois elétrons, são sempre de spins opostos;
- Nesse caso, o potássio pode perder seu elétron 4s, ficando assim com 5 subcamadas completas;

$\overset{\text{A}}{\underset{\text{Z}}{\text{X}}} \longrightarrow$  Notação utilizada para identificar átomos de um elemento químico X.  
A: número de massa  
Z: número atômico

# Estrutura eletrônica dos átomos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

### EXEMPLOS:



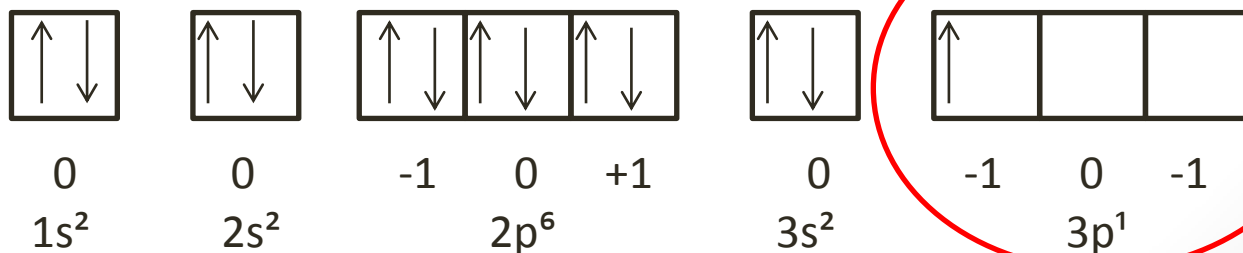
Logo os n<sup>o</sup>s quânticos são referentes ao elétron de 3p<sup>1</sup>:

Primeiro número quântico - n = 3 (terceiro nível – camada M)

Segundo número quântico - ℓ = p = 1

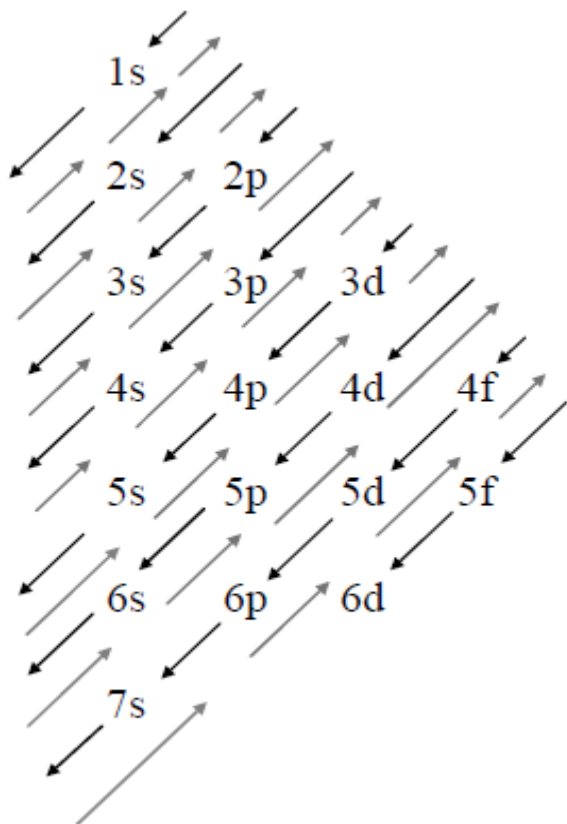
Terceiro número quântico - mℓ = -1 (primeiro orbital p)

Quarto número quântico - m<sub>s</sub> = 1/2 (rotação)



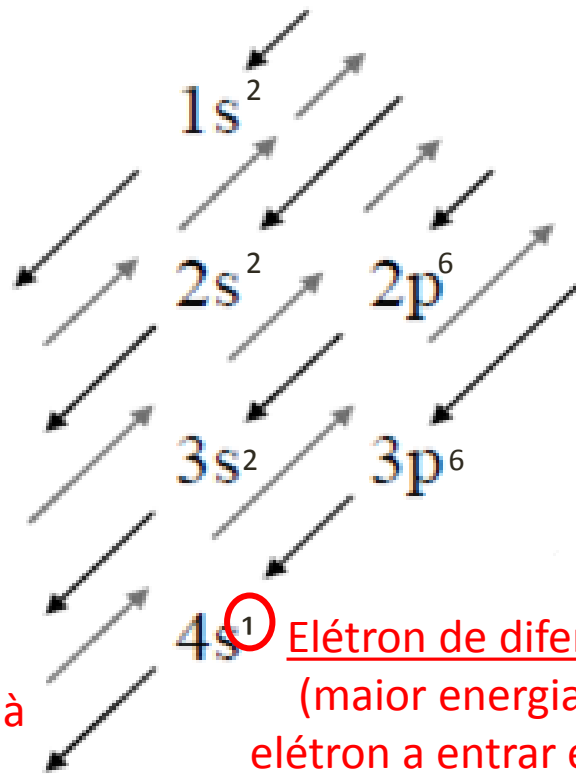
# Configurações eletrônicas

## Diagrama de construção



Camada de valência – corresponde à última camada com elétrons de um átomo.

EXEMPLO:  ${}_{19}\text{K}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$



Elétron de diferenciação  
(maior energia) – é o último elétron a entrar em um orbital do subnível mais energético.

# Princípio da incerteza de Heisenberg

- É impossível conhecer simultaneamente a posição e a energia de uma partícula tal como o elétron. Isso porque, para se estudar uma partícula, é preciso interagir de alguma maneira com esta partícula;
- Nenhum instrumento pode "sentir" ou "ver" um elétron sem influenciar intensamente o seu movimento;
- Se, por exemplo, construíssemos um microscópio tão poderoso, capaz de localizar um elétron, teríamos de usar uma radiação com um comprimento de onda muito menor que o da luz.
- Esse super microscópio imaginário deveria, para isso, usar raios x ou raios gama. Mas a energia destas radiações é tão grande que modificaria a velocidade e, conseqüentemente, o momento do elétron, numa quantidade grande e incerta.

# Princípio da incerteza de Heisenberg

*O princípio da incerteza pode ser assim interpretado: quanto mais de perto tentarmos olhar uma partícula diminuta, tanto mais difusa se torna a visão da mesma.*

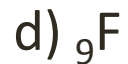
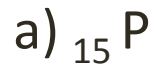
# Dualidade partícula-onda do elétron

- Admite-se que assim como a luz, o elétron tem natureza dupla (dual): ora se comporta como partícula e ora se comporta como se fosse uma onda;
- De acordo com a relação de De Broglie, todas as partículas deveriam ter propriedades ondulatórias;
- Os objetos relativamente grandes como bolas de futebol e automóveis provavelmente têm propriedades de ondas. Porém, estes objetos têm massas tão grandes que seus comprimentos de onda são extremamente pequenos, e seu caráter ondulatório é desprezível.

# Configurações eletrônicas

## Exercícios

Quais os números quânticos ( $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ ) do último elétron (elétron de diferenciação)? Faça os diagramas de orbitais e de construção.



Obrigada pela atenção!