

# ORBITAIS ATÔMICOS

## 4 aula

### **META**

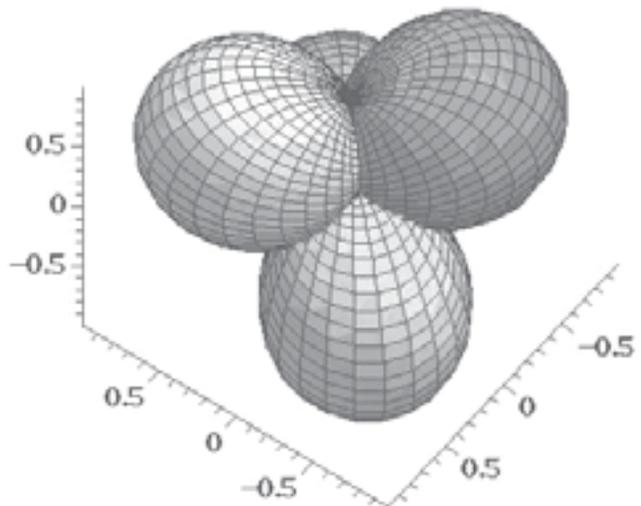
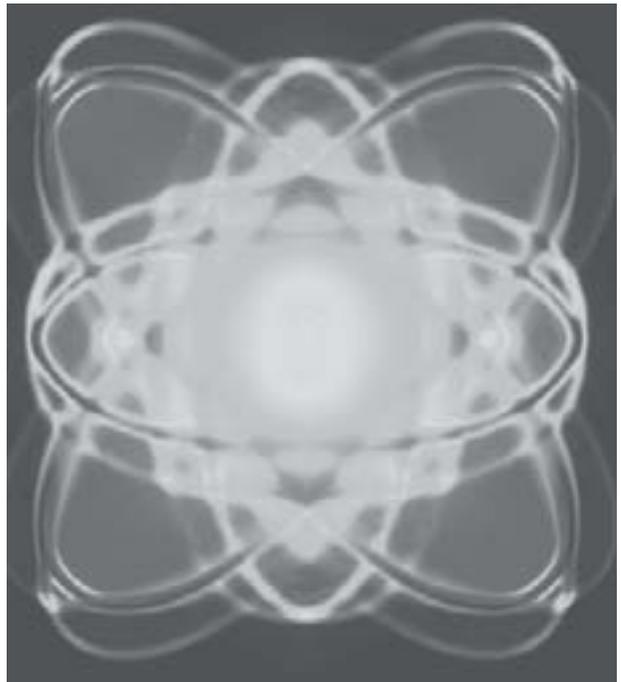
Descrever a distribuição dos elétrons nos átomos

### **OBJETIVOS**

Ao final da aula, o aluno deverá: reconhecer os números quânticos e estabelecer suas relações; representar a distribuição dos elétrons nos orbitais.

### **PRÉ-REQUISITOS**

Conceitos da hipótese quântica de Max Planck e sua aplicação nos estudos dos espectros atômicos; os postulados de Bohr e suas principais implicações.

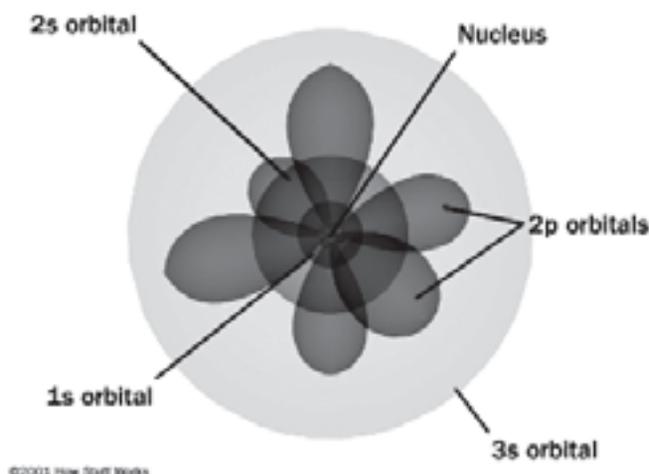


Nossa próxima tarefa é combinar as propriedades ondulatórias dos elétrons com o modelo nuclear dos átomos e explicar o estranho diagrama de níveis de energia observado experimentalmente no átomo de hidrogênio. Agiremos em duas etapas: Em primeiro lugar, iremos desenvolver um modelo

## INTRODUÇÃO

quantomecânico do átomo de hidrogênio. Em seguida, usaremos o modelo para explicar as estruturas dos átomos que têm mais de um elétron (átomos multieletrônicos), para ver como algumas idéias simples explicam não apenas os espectros atômicos, mas também os números quânticos e a distribuição eletrônica dos átomos.

Veremos que a maneira como os elétrons estão distribuídos nos átomos é descrita pela mecânica quântica em termos de orbitais. O conhecimento das energias dos orbitais, bem como algumas características fundamentais dos elétrons, permite-nos determinar os modos pelos quais os elétrons estão distribuídos entre vários orbitais em um átomo.



(Fonte: [www.physforum.com](http://www.physforum.com))

## COMPORTAMENTO ONDULATÓRIO DA MATÉRIA

Nos anos posteriores ao desenvolvimento do modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio, a natureza dual onda-partícula da energia radiante tornou-se um conceito familiar. Dependendo das circunstâncias experimentais, a radiação parece ter um caráter ondulatório ou de partícula (fóton). **Louis De Broglie**, quando trabalhava em sua tese de doutoramento em física na Sorbonne, em Paris, corajosamente ampliou essa idéia. Se a energia radiante pudesse se comportar, sob condições apropriadas, como um feixe de partículas, a matéria, sob condições apropriadas, poderia possivelmente mostrar propriedades de uma onda?

### ORBITAIS ATÔMICOS



Louis De Broglie

Físico francês (1892-1987). Contribuiu decisivamente para o desenvolvimento da Mecânica Quântica, ao afirmar, em 1924, que toda a matéria (e não apenas a luz) tem um comportamento ondulatório. Esta hipótese foi comprovada numa experiência em que se fez incidir um feixe de raios catódicos (elétrons) numa fenda dupla, observando-se no alvo de incidência do feixe uma figura de difração, típica dos fenômenos ondulatórios.

### RELAÇÃO DE LOUIS DE BROGLIE

Em 1923 Louis de Broglie sugeriu que, se a luz (considerada uma onda) tem propriedades corpusculares, então, talvez as partículas da matéria, em circunstâncias apropriadas, também pudessem exibir aspectos ondulatórios. Sugeriu que o elétron, em seu movimento ao redor do núcleo, tinha associado a ele um comprimento de onda particular. Postulou então que uma partícula de massa  $m$  e velocidade  $v$  estaria associada a um comprimento de onda  $\lambda$  dado, em analogia com as partículas de luz, por:

$$\lambda = h / mv.$$

Essa equação é denominada equação de De Broglie. A grandeza  $mv$  para qualquer objeto é chamado de momento. De Broglie usou o termo ondas de matéria para descrever as características ondulatórias das partículas materiais.

Se a matéria tem propriedades ondulatórias, por que não são comumente observadas?

O cálculo com a relação de De Broglie mostra que uma bola comum ( $m = 0,145 \text{ kg}$ ) movendo-se a  $96 \text{ km/h}$  ( $27 \text{ m/s}$ ) tem



G. P. Thomson

Cientista britânico (1892-1975). Filho de J. J. Thomson, realizou trabalhos sobre a difração por folhas finas de metais. Recebeu o Prêmio Nobel em 1937.

um comprimento de onda da ordem de  $10^{-34}$  m, valor muito pequeno para ser detectado. Já para os elétrons, obtém-se um valor de picômetros ( $10^{-12}$  m) que, em circunstâncias especiais, pode ser medido.

Em 1927, C. Davisson e L. H. Germer nos EUA e **G. P. Thomson** (filho de J. J. Thomson) na Inglaterra mostraram que um feixe de elétrons, tal e qual um feixe de raios-X, pode ser difratado por um cristal, demonstrando assim, experimentalmente, as propriedades ondulatórias do elétron.

## O PRINCÍPIO DA INCERTEZA

A descoberta das propriedades ondulatórias da matéria levantou algumas questões novas e interessantes sobre a física clássica.

No cotidiano, a trajetória de uma bola, a cada instante, é dada pela sua posição e velocidade (ou momento, massa x velocidade). Pensamos, assim, numa trajetória contínua para corpos em movimento. Na teoria de Bohr, o elétron, assim se imagina, orbita em torno do núcleo, de maneira parecida com o movimento da Terra em torno do Sol. A mecânica quântica altera em muito esta visão.

Em 1927, **Werner Heisenberg** mostrou que era impossível conhecer, simultaneamente, com absoluta exatidão, a posição e o momento de uma partícula como o elétron. O princípio da incerteza de Heisenberg é uma relação que afirma que o produto da incerteza na posição pela incerteza no momento de uma partícula não pode ser menor que a constante de Planck dividida por  $4\pi$ . Sendo  $D_x$  a incerteza na coordenada  $x$  da partícula, e sendo  $D_{p_x}$  a incerteza da componente do momento na direção  $x$ , temos:

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq h / 4\pi.$$

O princípio da incerteza afirma que quanto mais precisamente se conhece a posição (isto é, quanto menor for  $\Delta x$ ), menos precisamente se conhece o momento da partícula (isto é, maior será  $\Delta p_x$ ).



Werner Heisenberg

Físico alemão (1901-1976). Em 1925, desenvolveu a mecânica matricial, que constituiu o primeiro desenvolvimento da mecânica quântica. Enunciou o Princípio da Incerteza ou Princípio de Heisenberg, segundo o qual é impossível medir, simultaneamente e com precisão absoluta, a posição e a velocidade de uma partícula. Recebeu o Nobel de Física de 1932, pela criação da mecânica quântica.

Em outras palavras, se soubermos muito bem onde está a partícula, não podemos saber para onde ela irá.

## FUNÇÕES DE ONDA

Em 1926, o físico austríaco **Erwin Schrödinger** (1887-1961) propôs uma equação, conhecida como equação de onda de Schrödinger, que incorpora tanto o comportamento ondulatório como o de partícula do elétron. Este ramo da física ficou conhecido como a mecânica quântica ou mecânica ondulatória.

A mecânica quântica altera a maneira de pensarmos sobre o movimento das partículas.

A mecânica quântica não nos permite descrever o elétron do átomo de hidrogênio como se movendo numa órbita. O que nos permite são enunciados estatísticos sobre a posição do elétron no átomo. Podemos calcular a probabilidade de encontrarmos o elétron na vizinhança de certo ponto do átomo. A informação sobre uma partícula num certo nível de energia (como um elétron num átomo) está expressa numa função matemática. Esta função é a função de onda e se representa pela letra grega  $\Psi^2$  (psi). A função de onda se obtém pela resolução da equação de Schrödinger. O seu quadrado ( $\Psi^2$ ) dá a probabilidade de se encontrar a partícula numa certa região do espaço.

Uma maneira de representar a probabilidade de encontrar o elétron em várias regiões de um átomo é mostrada na Figura 15. Nessa figura, a densidade de pontos representa a probabilidade de encontrar o elétron. As regiões com alta densidade de pontos correspondem a valores relativamente altos para  $\Psi^2$ . A **densidade eletrônica** é outra maneira de ex-



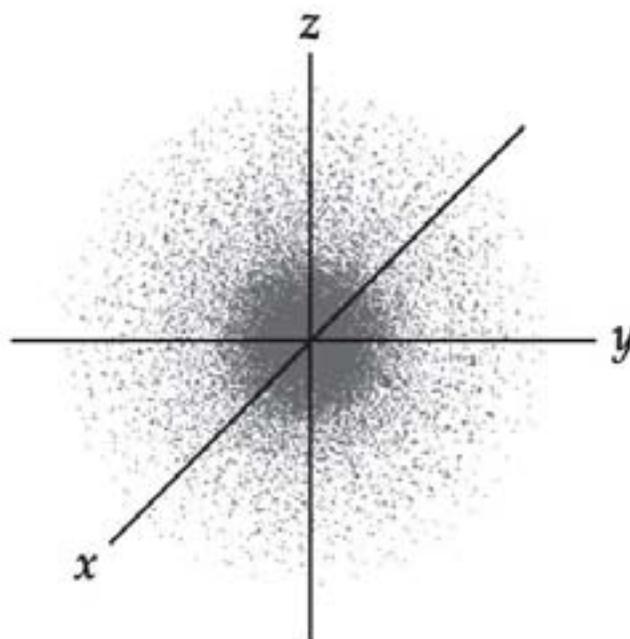
**Erwin Schrödinger**

Físico austríaco (1887-1961). Realizou trabalhos de mecânica ondulatória. Compartilhou com o físico inglês Paul Dirac o Prêmio Nobel de Física de 1933, por suas pesquisas sobre mecânica ondulatória aplicadas à elucidação da estrutura atômica.

### Densidade eletrônica

Valor que representa a probabilidade de que um elétron seja encontrado em um determinado ponto no espaço.

pressar a probabilidade: as regiões onde existe alta probabilidade de encontrar o elétron são regiões de alta densidade eletrônica.



**Figura 15** - Distribuição da densidade eletrônica no estado fundamental do átomo de hidrogênio.

## NÚMEROS QUÂNTICOS E ORBITAIS ATÔMICOS

Cada elétron, num átomo, é descrito por quatro números quânticos diferentes, três dos quais ( $n$ ,  $l$  e  $m$ ) especificam a função de onda do elétron. As *funções de onda* de um elétron num átomo é o que se chama de orbital atômico. Um orbital atômico pode ser imaginado como a descrição qualitativa das regiões do espaço onde é elevada a probabilidade de se encontrar elétrons.

O modelo de Bohr introduziu um único número quântico,  $n$ , para descrever certa órbita. O modelo da mecânica quântica usa três números quânticos,  $n$ ,  $l$  e  $m_l$ , para descrever um orbital, e um quarto número quântico ( $m_s$ ). Consideremos quais informações podemos obter a partir de cada um desses e como eles estão relacionados entre si.

**1. Número Quântico Principal ( $n$ ):** este número quântico é o que determina, em grande parte, a energia do elétron no átomo. Pode ter qualquer valor inteiro positivo: 1, 2, 3, .... Quanto menor  $n$ , mais baixa a energia. O tamanho do orbital também depende de  $n$ .

Letra	K	L	M	N
$l$	1	2	3	4

Quanto maior for o valor de  $n$ , maior será o orbital. Os orbitais que têm o estado quântico com o mesmo  $n$  constituem uma camada. As camadas são identificadas pelas letras:

**2. Número Quântico Azimutal ou Secundário ( $L$ ):** Este número quântico caracteriza orbitais que têm o mesmo  $n$ , mas formas diferentes; pode ter qualquer valor inteiro entre 0 e  $n-1$ . Dentro de cada camada com o número quântico  $n$  há diferentes espécies de orbitais, cada qual com uma forma bem definida, caracterizado pelo número quântico  $l$ . Por exemplo, se um elétron tem o número quântico principal 3, os valores possíveis de  $l$  são: 0, 1 e 2. Assim, dentro da camada 3 há três espécies de orbitais. Os orbitais

Letra	s	p	d	f	g
$l$	0	1	2	3	4

com o mesmo  $n$ , mas diferentes  $l$ , pertencem a diferentes subcamadas de uma dada camada. As diferentes subcamadas são identificadas por letras:

Para identificar uma subcamada numa certa camada escreve-se o valor do número quântico  $n$  da camada seguido pela identificação da subcamada. Assim, 2p identifica a subcamada com os números quânticos  $n = 2$  e  $l = 1$ .

**3. Número Quântico Magnético ( $m$ ):** este número quântico diferencia orbitais com o mesmo  $n$  (energia) e mesmo  $l$  (forma), mas tendo orientações diferentes no espaço. Os valores permitidos são inteiros desde  $-l$  até  $+l$ .

Para  $l = 0$  (subcamada s), o número quântico permitido  $m$  é apenas 0, isto é, só há um orbital na subcamada s. Para  $l = 1$

**Nível eletrônico**

Conjunto de orbitais que têm o mesmo valor de  $n$ . Por exemplo, os orbitais com  $n = 3$  ( $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ ) constituem o terceiro nível.

**Subnível**

Um ou mais orbitais com o mesmo conjunto de números quânticos  $n$  e  $l$ . Por exemplo, do subnível  $2p$  ( $n=2$  e  $l=1$ ), que é composto de três orbitais ( $2p_x$ ,  $2p_y$  e  $2p_z$ ).

(subcamada  $p$ ),  $m_l = -1, 0, +1$ , há três orbitais. Cada orbital, numa mesma subcamada, tem a mesma energia.

**4. Número Quântico Magnético de Spin ( $m_s$ ):** este número quântico refere-se a duas orientações possíveis para o eixo do spin de um elétron. Os valores possíveis são:  $+1/2$  e  $-1/2$ . Estes valores indicam o sentido de rotação do elétron sobre o seu próprio eixo.

O conjunto de orbitais com o mesmo valor de  $n$  é chamado **nível eletrônico**. Por exemplo, todos os orbitais que têm  $n = 3$  é chamado terceiro nível. Além disso, o conjunto de orbitais que têm os mesmos valores de  $n$  e  $l$  é chamado **subnível**. A Tabela 3 resume os possíveis valores dos números quânticos  $l$  e  $m_l$  para os valores de  $n$  até  $n = 4$ .

**Tabela 3** - Relação entre os valores de  $n$ ,  $l$  e  $m_l$  até  $n = 4$ .

$n$	Valores possíveis de $l$	Designação do subnível	Valores possíveis de $m_l$	Número de orbitais no subnível	Número total de Orbitais no nível
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1,0,-1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1,0,-1	3	
	2	3d	2,1,0,-1,-2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1,0,-1	3	
	2	4d	2,1,0,-1,-2	5	
	3	4f	3,2,1,0,-1,-2,-3	7	

A Figura 16 mostra as energias relativas dos orbitais do átomo de hidrogênio até  $n = 3$ . Cada quadrícula representa um orbital; os orbitais de mesmo subnível, como os do  $2p$ , estão agrupados juntos. Quando o elétron está em um orbital de energia mais baixa (o orbital  $1s$ ), diz-se que o átomo de hidrogênio está no seu *estado fundamental*. Quando o elétron está em qualquer outro orbital, o átomo está em *estado excitado*. A temperaturas ordinárias pratica-

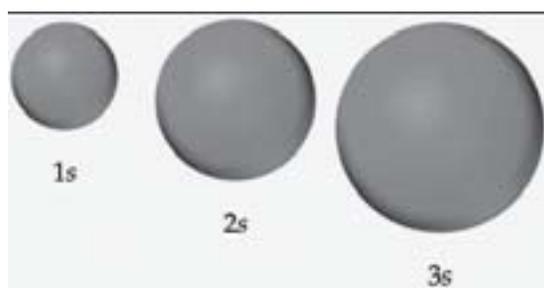
mente todos os átomos de hidrogênio estão em seus estados fundamentais. O elétron pode ser excitado para um orbital de mais alta energia pela absorção de um fóton de energia apropriada.

## FORMAS DOS ORBITAIS ATÔMICOS

Na discussão sobre orbitais, enfatizamos até agora suas energias. No entanto, a função de onda também fornece informações sobre a localização do elétron no espaço quando ele está em estado específico de energia permitido. Vamos examinar as maneiras pelas quais podemos visualizar os orbitais.

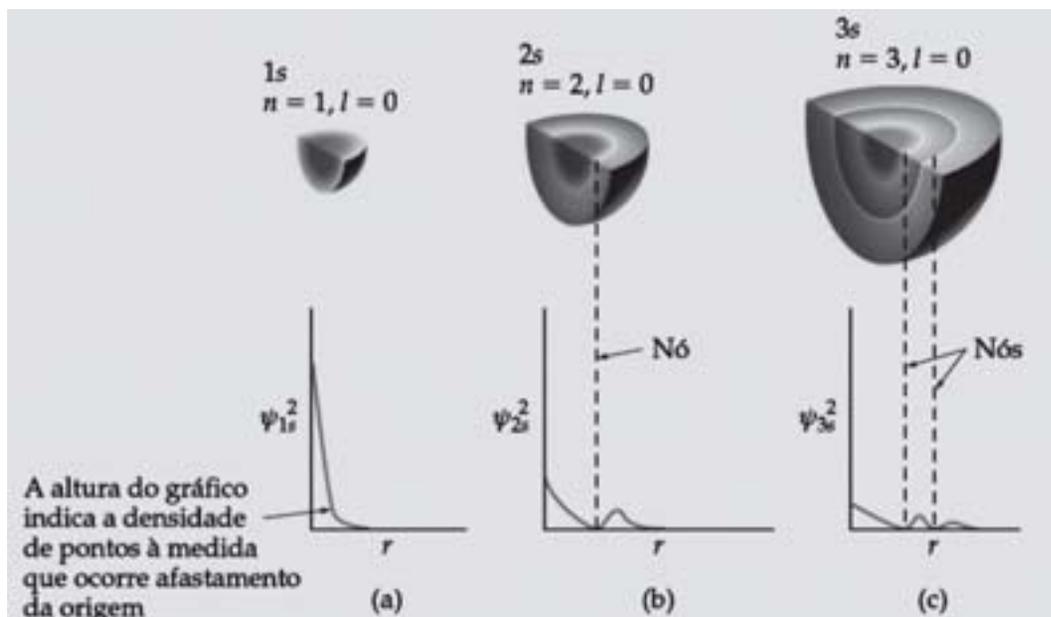
### ORBITAL s

O orbital de mais baixa energia, o 1s, é esférico, como mostrado nas Figuras 16 e 17. As figuras desse tipo, mostrando a densidade eletrônica, são um dos vários modos usados para auxílio na visualização dos orbitais. Essa figura indica que a probabilidade de encontrar o elétron diminui à medida que nos afastamos do núcleo em qualquer direção específica. Quando a função de probabilidade,  $\Psi^2$ , para o orbital 1s é colocado em um gráfico como função da distância a partir do núcleo,  $r$ , ela aproxima-se de zero rapidamente, como mostrado na Figura 17. As regiões intermediárias onde  $\Psi^2$  é zero são chamados nós.



Fonte: Livro – Química: A ciência central

Figura 16: Representações de superfícies limite para os orbitais 1s, 2s e 3s. Os raios relativos das esferas correspondem à probabilidade de 90% de se encontrar o elétron dentro de cada esfera.



Fonte: Livro – Química: A ciência central

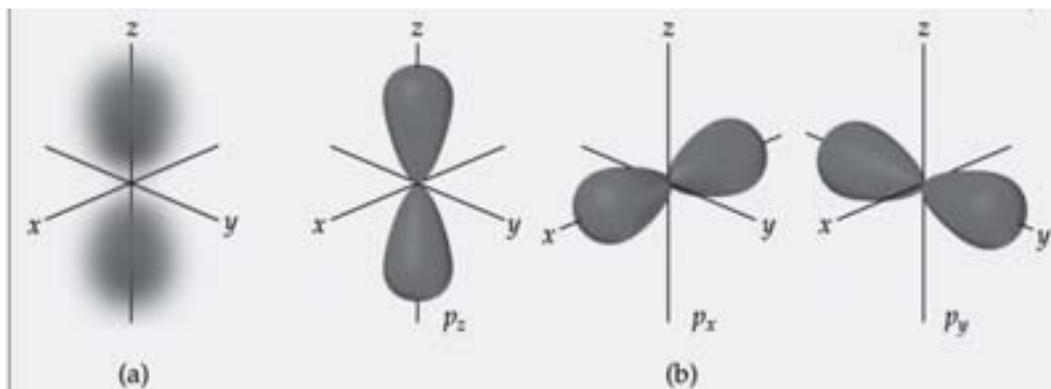
Figura 17 - Distribuição de densidade eletrônica nos orbitais 1s, 2s e 3s. A parte inferior da figura mostra como a densidade eletrônica, representada por  $\psi^2$ , varia como função da distância  $r$  ao núcleo. Nos orbitais 2s e 3s a função de densidade eletrônica cai para zero a certas distâncias do núcleo. As superfícies ao redor do núcleo nas quais  $\psi^2$  é zero são chamados nós.

## ORBITAL $p$

A distribuição da densidade eletrônica para um orbital 2p é mostrada na Figura 18 (a). Como podemos ver a partir dessa figura, a densidade eletrônica não está distribuída de forma esférica como em um orbital s. Em vez disso, a densidade eletrônica está concentrada em duas regiões em ambos os lados do núcleo, separados por um nó no núcleo. Dizemos que esse orbital na forma de halteres tem dois *lóbulos*. É útil lembrar que não estamos fazendo afirmações de como o elétron está se movendo dentro do orbital; a Figura 18 (b) retrata a distribuição média da densidade eletrônica em um orbital 2p.

Geralmente representamos os orbitais  $p$  desenhando o formato e a orientação de suas funções de onda, como mostrado na Figura 18 (b). É conveniente rotulá-los como

orbitais  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$ . Estes três orbitais são ortogonais entre si, como o sistema ortogonal de eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ .



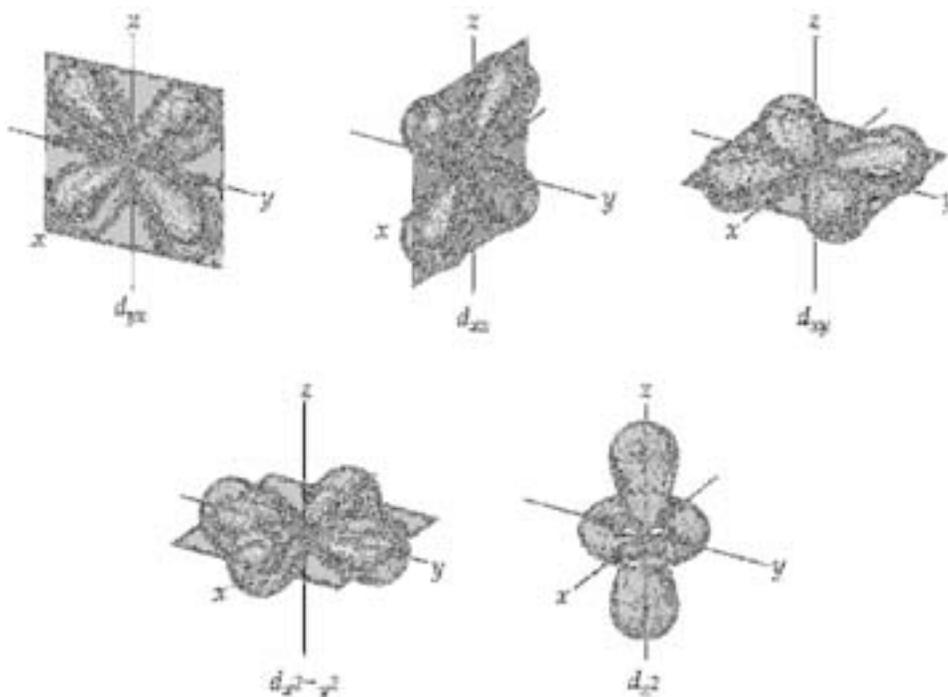
Fonte: Livro – Química: A ciência central

Figura 18 - (a) Distribuição de densidade eletrônica de um orbital 2p. (b) Representações dos três orbitais p. Observe que o índice inferior nos símbolos dos orbitais indica o eixo ao longo do qual o orbital se encontra.

## ORBITAIS $d$ E $f$

Quando  $n$  é igual ou maior que 3, encontramos os orbitais  $d$  (para o qual  $l = 2$ ). Existem cinco orbitais 3d, cinco orbitais 4d, etc. Os diferentes orbitais  $d$ , em determinado nível, têm diferentes formatos e orientações no espaço, como mostrado na Figura 19. Quatro das superfícies limites dos orbitais  $d$  têm formato de “trevo de quatro folhas” e cada uma se encontra principalmente em um plano. Os  $d_{xy}$ ,  $d_{xz}$  e  $d_{yz}$ , situam-se nos planos  $xy$ ,  $xz$  e  $yz$ , respectivamente, como os lóbulos orientados entre os eixos. Os lóbulos do orbital  $d_{x^2-y^2}$  também se situam no plano  $xy$ , mas os lóbulos localizam-se ao longo dos eixos. O orbital  $dz^2$  é um pouco diferente, dois lóbulos ao longo do eixo  $z$  e uma “rosquinha” no plano  $xy$ .

Quando  $n$  é maior ou igual a 4, existem sete orbitais  $f$  equivalentes (para os quais  $l = 3$ ). As formas dos orbitais  $f$  são ainda mais complicadas do que as dos orbitais  $d$ . Não apresentaremos as formas dos orbitais  $f$ .



Fonte: Livro – Química: A ciência central  
 Figura 19 - Representações dos cinco orbitais d.

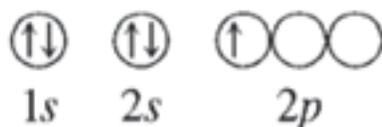
## CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS

Vimos, então, que um elétron, num átomo, é representado por quatro números quânticos  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ . Os três primeiros caracterizam o orbital que descreve a região do espaço onde é mais provável encontrar o elétron. Dizemos que o elétron ocupa o orbital. O número quântico magnético de spin ( $m_s$ ) descreve a rotação do elétron.

A configuração eletrônica de um átomo é a distribuição dos elétrons entre as subcamadas (ou subníveis) disponíveis. Por exemplo, a configuração eletrônica do átomo de lítio (número atômico 3), com dois elétrons na subcamada 1s e um elétron na 2s é  $1s^2 2s^1$ .

É conveniente um diagrama para mostrar a ocupação, pelos elétrons, dos orbitais da camada. Este diagrama é um *diagrama de orbitais*. O orbital é

representado por um círculo. Cada grupo de orbitais de uma subcamada é identificado pelo símbolo da subcamada. Cada elétron num orbital é simbolizado por uma pequena seta, apontada para cima quando  $m_s = +1/2$  e para baixo, quando  $m_s = -1/2$  (por convenção). Assim, a representação abaixo



mostra a estrutura eletrônica de um átomo que tem dois elétrons na subcamada, ou orbital, 1s (um deles com  $m_s = +1/2$  e outro com  $-1/2$ ); dois elétrons na subcamada 2s ( $m_s = +1/2$  e  $m_s = -1/2$ ) e um elétron na subcamada 2p ( $m_s = +1/2$ ). A configuração eletrônica é  $1s^2 2s^2 2p^1$ .

## PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO DE PAULI

O princípio de exclusão de Pauli afirma que dois elétrons de um mesmo átomo não podem ter os mesmos quatro números quânticos. Se um elétron, num átomo, tem os números quânticos  $n=1$ ,  $l=0$ ,  $m_l=0$  e  $m_s=+1/2$ , nenhum outro elétron pode ocupar o mesmo orbital, com número quântico de spin  $+1/2$ . Como só são possíveis dois valores de  $m_s$ , um orbital pode ter, no máximo, dois elétrons. Num diagrama de orbitais, o orbital que tiver dois elétrons os terá com as setas em direção opostas.

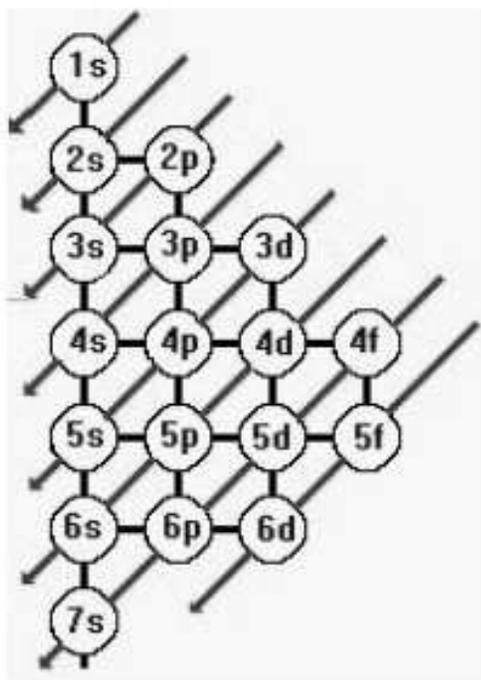
Cada subcamada pode ter, no máximo, tantos elétrons quanto for o dobro do número de orbitais. Assim, a subcamada 2p, tem 3 orbitais ( $m_l = -1, 0, +1$ ), pode ter, no máximo, 6 elétrons.

Subcamada	Número de Orbitais	Número Máximo
s ( $l=0$ )	1	2
p ( $l=1$ )	3	6
d ( $l=2$ )	5	10

## PRINCÍPIO DA CONSTRUÇÃO E TABELA PERIÓDICA

Cada átomo tem número infinito de configurações eletrônicas possíveis. A configuração associada ao menor nível de energia do

átomo, corresponde ao estado quântico denominado *estado fundamental*. Outras configurações correspondem a *estados excitados*, com níveis de energia mais elevados. Por exemplo: o estado fundamental do átomo de sódio (Na) tem configuração eletrônica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . A configuração  $1s^2 2s^2 2p^6 3p^1$  corresponde a um estado excitado.



**Figura 20** - Diagrama de energia para reproduzir a ordem de ocupação das subcamadas (regra da diagonal) (Fonte: www.geocities.com)

### PRINCÍPIO DE CONSTRUÇÃO

A maioria das configurações eletrônicas do estado fundamental pode ser explicada em termos do *princípio de construção* (*Aufbau*, do alemão). É o método de reproduzir as configurações eletrônicas nos estados fundamentais dos átomos, enchendo-se sucessivamente as subcamadas com elétrons, numa ordem (a ordem da construção).

Segundo este princípio, as configurações eletrônicas dos átomos formam-se pelo preenchimento sucessivo das subcamadas na ordem 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f. Um método prático para se obter esta seqüência é apresentado na Figura 20.

A ordem da construção corresponde à ordem da energia crescente das subcamadas, como exemplificado pelos elementos abaixo:

Z = 3	lítio	$1s^2 2s^1$	ou	$[\text{He}]2s^1$
Z = 4	berílio	$1s^2 2s^2$	ou	$[\text{He}]2s^2$
Z = 5	boro	$1s^2 2s^2 2p^1$	ou	$[\text{He}]2s^2 2p^1$
Z = 6	carbono	$1s^2 2s^2 2p^2$	ou	$[\text{He}]2s^2 2p^2$

Louis De Broglie propôs que a matéria, como o elétron, deve exibir propriedades ondulatórias; essa hipótese de ondas de matéria foi provada experimentalmente pela observação da difração de elétrons (dualidade onda-partícula) e a descoberta das propriedades ondulatórias do elétron que levou ao princípio da incerteza de Heisenberg. No modelo da mecânica quântica do átomo de hidrogênio, o comportamento do elétron é descrito por funções matemáticas chamadas de funções de onda ( $\Psi$ ) e a probabilidade de ele estar em um ponto específico no espaço é dada pela **densidade de probabilidade** ( $\Psi^2$ ). As funções de onda permitidas do átomo de hidrogênio são chamadas de orbitais. Um orbital é descrito pela combinação de um número inteiro e uma letra, correspondendo aos valores de três números quânticos para o orbital. Diagramas de superfície de limite são úteis para visualizar as características (formas) dos orbitais. Os orbitais no mesmo subnível são **degenerados**, ou seja, eles possuem a mesma energia. A configuração eletrônica de um átomo descreve como os elétrons são distribuídos entre os orbitais do átomo.

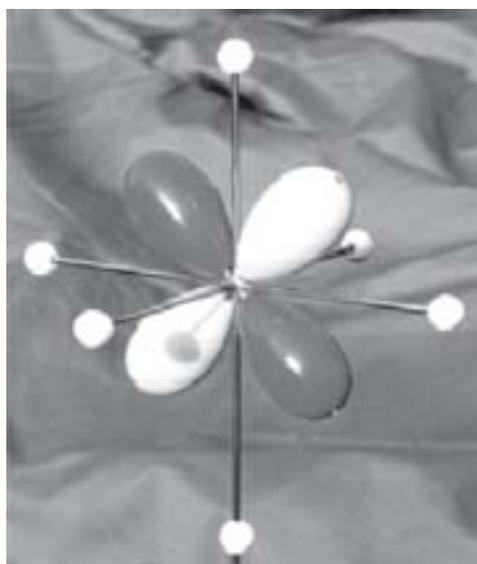
## CONCLUSÃO

### Densidade de probabilidade

( $\Psi^2$ ) Valor que representa a probabilidade de que um elétron seja encontrado em um determinado ponto no espaço.

### Degenerado

Que tem a mesma energia (em vários orbitais).



(Fonte: <http://www.crystalstructures.com>).

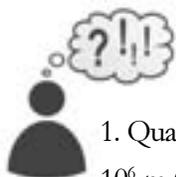
## RESUMO



## Função de onda

Descrição matemática de um estado de energia permitido (um orbital) para um elétron no modelo da mecânica quântica do átomo; ela é geralmente simbolizada pela letra grega  $\psi$ .

Toda matéria, como o elétron, deve exibir propriedades ondulatórias, e conforme o *princípio da incerteza de Heisenberg*, que afirmou existe um limite próprio para a exatidão com a qual a posição e a energia cinética de uma partícula podem ser medidas simultaneamente. No modelo da mecânica quântica, cada **função de onda** permitida tem uma energia precisamente conhecida, mas a localização do elétron não pode ser determinada com exatidão. A probabilidade de ele estar em um ponto específico no espaço é dada pela densidade de probabilidade ( $\Psi^2$ ). As funções de onda permitidas do átomo de hidrogênio são chamadas de orbitais, descritos pela combinação de um número inteiro e uma letra, correspondendo aos valores de três números quânticos para o orbital e o número quântico magnético de spin. Os orbitais no mesmo subnível são degenerados, ou seja, eles possuem a mesma energia. O princípio de exclusão de Pauli afirma que dois elétrons em um átomo não podem ter os mesmos valores para  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ . Esse princípio coloca um limite de dois para o número de elétrons que podem ocupar qualquer orbital atômico. A configuração eletrônica de um átomo descreve como os elétrons são distribuídos entre os orbitais do átomo. As configurações eletrônicas do estado fundamental são geralmente obtidas colocando-se os elétrons nos orbitais atômicos de mais baixa energia possível com a restrição de que cada orbital não pode comportar mais de dois elétrons.



## ATIVIDADES

1. Qual é o comprimento de onda de um elétron com velocidade de  $5,97 \times 10^6 \text{ m/s}$ ? (A massa do elétron é  $9,11 \times 10^{-28} \text{ g}$ ).

Resolução: O comprimento de onda de uma partícula em movimento é dado pela equação de De Broglie; o  $\lambda$  é calculado simplesmente pela substituição das grandezas conhecidas,  $h$ ,  $m$  e  $v$ . Entretanto, ao fazer isso devemos prestar atenção nas unidades. Usando o valor da constante de Planck,  $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$  e lembrando que  $1 \text{ J} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}^2$ , temos:

$$\begin{aligned} \lambda &= h/mv \\ &= \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})}{(9,11 \times 10^{-28} \text{ g})(5,97 \times 10^6 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})} \left( \frac{1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}}{1 \text{ J}} \right) \left( \frac{10^3 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \right) \\ &= 1,22 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,122 \text{ nm} \end{aligned}$$

2. Faça a configuração eletrônica para o oxigênio, número atômico 8. Quantos elétrons desemparelhados o átomo de oxigênio possui?

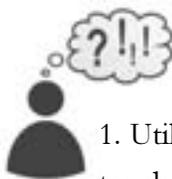
Resolução: Os elétrons são colocados nos orbitais, começando com o orbital  $1s$  de mais baixa energia. Cada orbital pode comportar no máximo dois elétrons. Então, dois pares de elétrons vão para os orbitais  $1s$  e  $2s$  com seus spins emparelhados. Com isso sobram quatro elétrons para os três orbitais degenerados  $2p$ . Seguindo a **regra de Hund**, colocamos um elétron em cada orbital  $2p$  até todos os três terem um cada. O quarto elétron é emparelhado com um dos três que já estão em um orbital  $2p$ , de tal modo que a representação seja:  $1s^2 2s^2 2p^4$

## Regra de Hund

Regra que afirma que os elétrons ocupam orbitais degenerados para maximizar o número de elétrons com o mesmo spin. Ou seja, cada orbital tem um elétron colocado nele antes de ocorrer o emparelhamento de elétrons nos orbitais. Observe que essa regra aplica-se apenas aos orbitais que são degenerados, o que significa que eles têm a mesma energia.

## COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

1. Comparando esses valores com os comprimentos de onda de radiações eletromagnéticas, observamos que o comprimento de onda desse elétron é aproximadamente o mesmo do comprimento de onda dos raios X.
2. Portanto, o átomo tem dois elétrons desemparelhados.



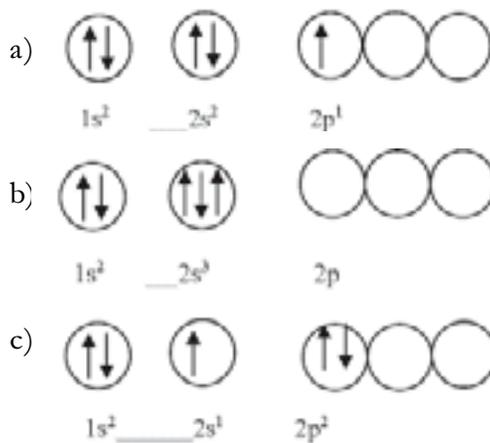
## ATIVIDADES

1. Utilize a relação de De Broglie para determinar os comprimentos de onda dos seguintes objetos: (a) um pessoa de 85 kg esquiando a 50 Km/h; (b) uma bala de revólver de 10,0 g detonada a 250 m/s; (c) um átomo de lítio movimentando-se a  $2,5 \times 10^5$  m/s.

2. (a) Na descrição do átomo de hidrogênio pela mecânica quântica, qual é o significado do quadrado da função de onda,  $\psi^2$ ? (b) O que significa a expressão **densidade eletrônica**? (c) O que é um **orbital**?

3. Entre os seguintes diagramas de orbitais ou de configurações eletrônicas, quais são possíveis e quais impossíveis, de acordo com o princípio de exclusão de Pauli? Justifique.

4. Em um determinado estado, os três números quânticos do elétron de um átomo de hidrogênio são  $n= 4$ ,  $l= 2$  e  $m_l= -1$ . Em que tipo de orbital esse elétron está localizados?



5. (a) Qual é a designação para o **subnível**  $n= 5$  e  $l= 1$ ? (b) Quantos orbitais existem nesse subnível? (c) Indique os valores de  $m_l$  para cada um desses orbitais.

6. Qual dos números quânticos governa (a) a forma de um orbital; (b) a energia de um orbital; (c) a propriedades de spin de um elétron; (d) a orientação espacial do orbital?

7. Qual é o número máximo de elétrons que podem ocupar cada um dos seguintes subníveis: (a)  $3d$ ; (b)  $4s$ ; (c)  $2p$ ; (d)  $4f$ .

### Densidade eletrônica

Probabilidade de encontrar um elétron em um determinado ponto em particular em um átomo; essa probabilidade é igual a  $\psi^2$ , o quadrado da função de onda.

### Orbital

Estado de energia permitido de um elétron no modelo mecânico quântico do átomo; o termo orbital é também usado para descrever a distribuição espacial do elétron. Um orbital é definido pelos valores de três números quânticos:  $n$ ,  $l$  e  $m_l$ .

### Subnível

Um ou mais orbitais com o mesmo conjunto de números quânticos  $n$  e  $l$ . Por exemplo, do subnível  $2p$  ( $n= 2$  e  $l= 1$ ), que é composto de três orbitais ( $2p_x$ ,  $2p_y$  e  $2p_z$ ).

8. (a) Escreva a configuração eletrônica do fósforo, elemento com número atômico 15. (b) Quantos elétrons desemparelhados um átomo de fósforo possui?
9. Escreva a configuração eletrônica de um átomo de arsênio no estado fundamental.
10. As seguintes configurações eletrônicas representam estados excitados. Identifique o elemento e escreva sua configuração eletrônica condensada para o estado fundamental. (a)  $1s^2 2s^2 3p^2 4p^1$ ; (b)  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1 4p^4 5s^1$ ; (c)  $[\text{Kr}] 4d^6 5s^2 5p^1$ .

---

## REFERÊNCIAS

- ATKINS, P.; JONES, L. **Princípios de Química. Questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 3. ed. Porto Alegre: Bookman, 2006.
- BROWN, T. L. et al. **Química, a ciência central**. 9 ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005. KOTZ, J. C.; TREICHEL JR., P. M. **Química Geral**. v. 1 e 2. Trad. 5 ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2005.
- MAHAN, B. M.; MYERS, R. J. **Química: um curso universitário**. 4 ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1995.
- RUSSEL, J. B. **Química Geral**. v. 1 e 2. São Paulo: Ed. Makron Books do Brasil, 1994.