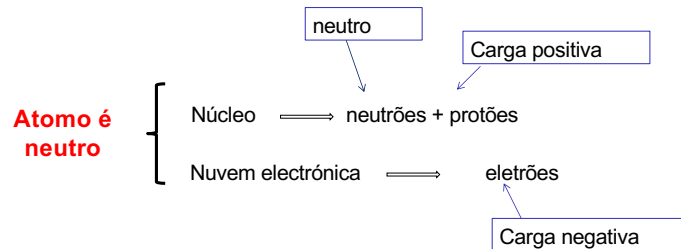


## Estrutura eletrónica dos átomos



1

## Equação de Onda de Schrodinger

Em 1926, Schrodinger escreveu uma equação que descrevia simultaneamente a natureza ondulatória e corpuscular do eletrão.

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

A função de onda  $\Psi$  (psi) é denominada **orbital** ou **orbital atómica**

A função de onda  $\Psi$  (psi) é caracterizada por três **números quânticos** (são a solução matemática da equação de Schrodinger para o átomo de hidrogénio)

$\Psi^2$  define a distribuição da densidade eletrónica  
(dá a probabilidade de localizar o eletrão no espaço)

7.5

2

## Números quânticos

Caracterizam a **orbital**

Nº quântico principal -  **$n$**

Nº quântico de momento angular (ou azimutal) -  **$l$**

Nº quântico magnético -  **$m_l$**

Nº quântico de spin -  **$m_s$**

Caracterizam o **eletrão**

3

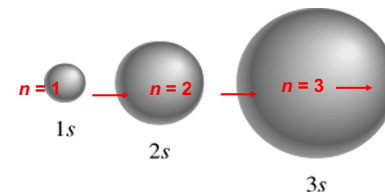
## Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

**$n$**  = número quântico principal

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$

distância de  $e^-$  a partir do núcleo



Define o nível de energia

7.6

4

### Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

$l$  número quântico de momento angular ou azimuthal

Relacionado com a forma da orbital

para um dado valor de  $n \Rightarrow l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

$n = 1 \Rightarrow l = 0$

$n = 2 \Rightarrow l = 0, 1$

$n = 3 \Rightarrow l = 0, 1, 2$

Relação entre  $l$  e a orbital

$l = 0$  orbital s

$l = 1$  orbital p

$l = 2$  orbital d

$l = 3$  orbital f

7.6

5

### Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

$m_l$  número quântico magnético

orientação da orbital no espaço

para um dado valor de  $l \Rightarrow m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$

Se  $l = 0$  (orbital s),  $m_l = 0$

se  $l = 1$  (orbital p),  $m_l = -1, 0, 1$

se  $l = 2$  (orbital d),  $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$

7.6

6

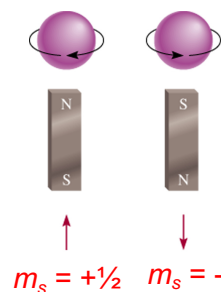
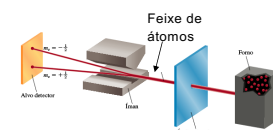
### Equação de Onda de Schrodinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

$m_s$  número quântico de spin

$m_s = +\frac{1}{2}$  ou  $-\frac{1}{2}$

Spins de um  $e^-$  a rodar no sentido dos ponteiros do relógio e c/ sentido contrário. As setas para cima e para baixo são usadas para representar os dois sentidos do spin



$m_s = +\frac{1}{2}$   $m_s = -\frac{1}{2}$

7.6

7

### Números quânticos e orbitais atômicas

Relação entre n's quânticos e orbitais atômicas

$n$	$l$	$ml$	Nº orbitais	Nome da orbital
1	0	0	1	1s
2	0	0	1	2s
	1	-1, 0, 1	3	2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub> , 2p <sub>z</sub>
3	0	0	1	3s
	1	-1, 0, 1	3	3p <sub>x</sub> , 3p <sub>y</sub> , 3p <sub>z</sub>
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	3d <sub>xy</sub> , 3d <sub>yz</sub> , 3d <sub>xz</sub> , 3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> , 3d <sub>z<sup>2</sup></sub>

8



**Camada** — elétrons com o mesmo valor de  $n$

**Subcamada** — elétrons com os mesmos valores de  $n$  e  $l$

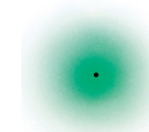
**Orbital** — elétrons com os mesmos valores de  $n, l$  e  $m_l$

9

### Qual é a forma das orbitais?

#### Orbitais s

- A função de onda estende-se do núcleo até ao infinito.
- O e- pode encontrar-se em qualquer lugar do espaço



Densidade eletrônica de 1s

- A probabilidade de encontrar o e- perto do núcleo é maior.
- Há cerca de 90% de probabilidade de se encontrar o e- numa esfera de raio 100pm

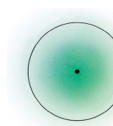


Diagrama de superfície de fronteira de 1s

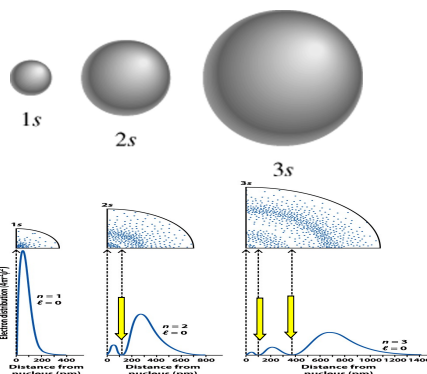
10

### Qual é a forma das orbitais?

#### Orbitais s $l = 0$

- As orbitais s tem todas a forma esférica
- O tamanho da orbital aumenta com o n° quântico principal

Diagramas de superfície de fronteira de orbitais s



Superfície nodal

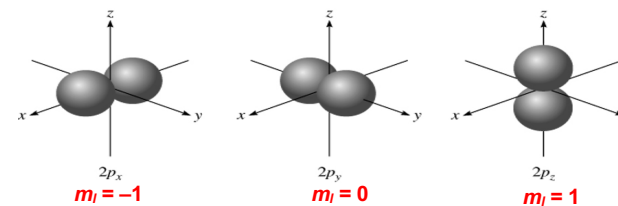
11

### Qual é a forma das orbitais?

#### Orbitais p $l = 1$

- Só existem orbitais p a partir de  $n=2$   $n = 2$   $l = 0, 1$

- As orbitais p tem a forma representada abaixo encontrando-se orientadas sobre os eixos coordenados.
- O tamanho aumenta com o n° quântico principal
- Orbitais do mesmo nível de energia n tem energia igual



Diagramas de superfície de fronteira de orbitais 2p

12

### Qual é a forma das orbitais?

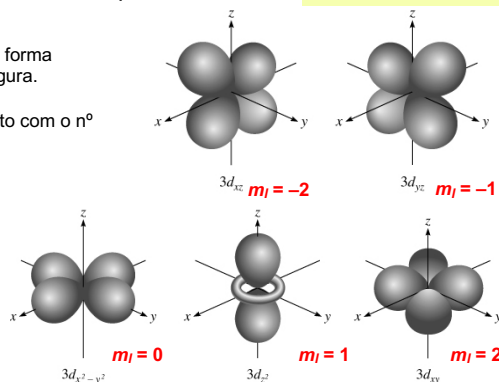
#### Orbitais d $l = 2$

- Só existem orbitais d a partir de  $n=3$

$$n = 3 \quad l = 0, 1, 2$$

As orbitais d tem a forma representada na figura.

O tamanho aumenta com o nº quântico principal



13



Ex.: Escrever os valores de  $n$ ,  $l$  e  $m_l$  para as orbitais 4d?

Ex: Qual o nº total de orbitais associadas ao nº quântico principal  $n=3$ ?

14

### Caracterização de um eletrão num átomo

- Um eletrão é caracterizado por uma única função de onda  $\Psi$
- Cada função de onda tem uma solução única (um conjunto único de números quânticos)

**Princípio de exclusão de Pauli** — nenhum par de electrões num átomo pode ter os quatro números quânticos iguais.



Quantos electrões se podem alojar numa orbital?

Se  $n$ ,  $l$  e  $m_l$  são fixos, então  $m_s = \frac{1}{2}$  ou  $-\frac{1}{2}$

$(n, l, m_l, \frac{1}{2})$  ou  $(n, l, m_l, -\frac{1}{2})$

Uma orbital pode alojar 2 electrões

7.6

15

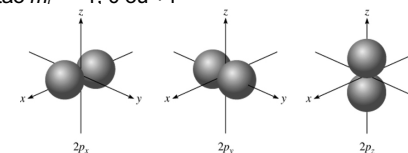


Quantas orbitais 2p existem num átomo?

$$n = 2 \\ \downarrow \\ 2p \\ \uparrow \\ l = 1$$

Se  $l = 1$ , então  $m_l = -1, 0$  ou  $+1$

3 orbitais



$$n = 3 \\ \downarrow \\ 3d \\ \uparrow \\ l = 2$$

Se  $l = 2$ , então  $m_l = -2, -1, 0, +1$  ou  $+2$

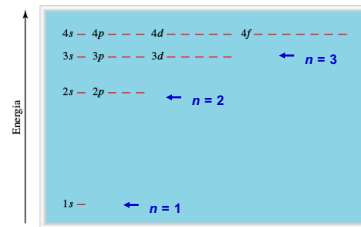
5 orbitais que podem conter um total de 10  $e^-$

7.6

16

### Energia das orbitais num átomo com um único electrão

- A energia apenas depende do número quântico principal  $n$
- Quanto maior  $n$  maior a energia
- Orbitais no mesmo nível possuem a mesma energia
- orbitais degeneradas possuem igual energia



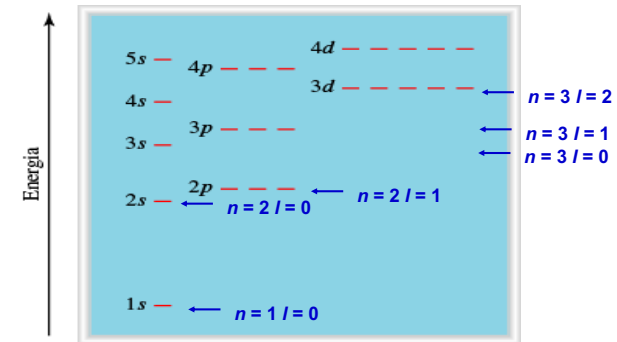
- Níveis energéticos das orbitais num átomo de hidrogénio.  
- Cada linha horizontal representa uma orbital

7.7

17

### Energia das orbitais num átomo com vários electrões

- A energia depende de  $n$  e  $l$
- Os e- exercem repulsão entre si

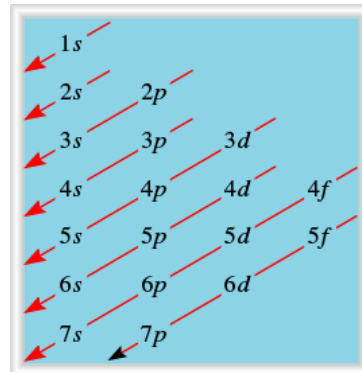


7.7

18

### Ordem de preenchimento das orbitais num átomo polieletrónico

Diagrama de Pauling



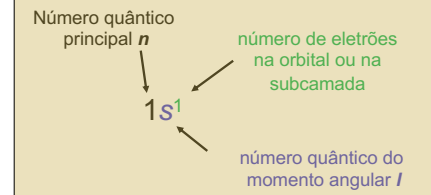
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s$$

7.7

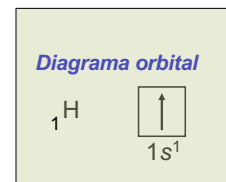
19

A **configuração eletrónica** é o modo como os electrões estão distribuídos pelas várias orbitais atómicas num átomo.

### Átomo de hidrogénio

 $1\text{H}$ 

s	<input type="checkbox"/>
p	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
d	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
f	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>



20

## Regras para preenchimento de orbitais

- 1 - Os elétrons começam a distribuir-se pelas orbitais de menor energia
- 2 - Cada orbital comporta apenas 2 elétrons
- 3 - Quando as orbitais de menor energia estiverem completas passa-se para a orbital de energia imediatamente seguinte
- 4 - Em orbitais de igual energia começa-se por distribuir um elétron em cada orbital com spins paralelos. Em seguida começa-se a emparelhar os e-.

21

3

Li

1s<sup>2</sup> 2s<sup>1</sup>

Ou

[He] 2s<sup>1</sup>

**Cerne de gás nobre:**

[He] = 1s<sup>2</sup>

[Ne] = 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup>

**TABELA 7.3**

**As Configurações Eletrónicas dos Estados Fundamentais dos Elementos\***

Numero Atômico	Simbolo	Configuração Eletrónica	Numero Atômico	Simbolo	Configuração Eletrónica	Numero Atômico	Simbolo	Configuração Eletrónica
1	H	1s <sup>1</sup>	38	Sr	[Kr]5s <sup>2</sup>	75	Re	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup>
2	He	1s <sup>2</sup>	39	Y	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>1</sup>	76	Os	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup>
3	Li	[He]2s <sup>1</sup>	40	Zr	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup>	77	Ir	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup>
4	Be	[He]2s <sup>2</sup>	41	Nb	[Kr]5s <sup>1</sup> 4d <sup>4</sup>	78	Pt	[Xe]6s <sup>1</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup>
5	B	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	42	Mo	[Kr]5s <sup>1</sup> 4d <sup>5</sup>	79	Au	[Xe]6s <sup>1</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>
6	C	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	43	Tc	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>5</sup>	80	Hg	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>
7	N	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	44	Ru	[Kr]5s <sup>1</sup> 4d <sup>6</sup>	81	Tl	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>1</sup>
8	O	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	45	Rh	[Kr]5s <sup>1</sup> 4d <sup>6</sup>	82	Pb	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>2</sup>
9	F	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	46	Pd	[Kr]4d <sup>10</sup>	83	Bi	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>3</sup>
10	Ne	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	47	Ag	[Kr]5s <sup>1</sup> 4d <sup>10</sup>	84	Po	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>4</sup>
11	Na	[Ne]3s <sup>1</sup>	48	Cd	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup>	85	At	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>5</sup>
12	Mg	[Ne]3s <sup>2</sup>	49	In	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>1</sup>	86	Rn	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>6</sup>
13	Al	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	50	Sn	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>2</sup>	87	Fr	[Rn]7s <sup>1</sup>
14	Si	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	51	Sb	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>3</sup>	88	Ra	[Rn]7s <sup>2</sup>
15	P	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	52	Te	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>4</sup>	89	Ac	[Rn]7s <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup>
16	S	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	53	I	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>5</sup>	90	Th	[Rn]7s <sup>2</sup> 6d <sup>2</sup>
17	Cl	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	54	Xe	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>6</sup>	91	Pa	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup>
18	Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	55	Cs	[Xe]6s <sup>1</sup>	92	U	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup>
19	K	[Ar]4s <sup>1</sup>	56	Ba	[Xe]6s <sup>2</sup>	93	Np	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup>
20	Ca	[Ar]4s <sup>2</sup>	57	La	[Xe]6s <sup>2</sup> 5d <sup>1</sup>	94	Pu	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>6</sup>
21	Sc	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>1</sup>	58	Ce	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup>	95	Am	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>7</sup>
22	Ti	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>2</sup>	59	Pr	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>3</sup>	96	Cm	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup>
23	V	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>3</sup>	60	Nd	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>4</sup>	97	Bk	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>7</sup>
24	Cr	[Ar]4s <sup>1</sup> 3d <sup>5</sup>	61	Pm	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>5</sup>	98	Cf	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>10</sup>
25	Mn	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>5</sup>	62	Sm	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>6</sup>	99	Es	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>11</sup>
26	Fe	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>6</sup>	63	Eu	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>7</sup>	100	Fm	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>12</sup>
27	Co	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>7</sup>	64	Gd	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup>	101	Md	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>13</sup>
28	Ni	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>8</sup>	65	Tb	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>9</sup>	102	No	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup>
29	Cu	[Ar]4s <sup>1</sup> 3d <sup>10</sup>	66	Dy	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>10</sup>	103	Lr	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup>
30	Zn	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup>	67	Ho	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>11</sup>	104	Rf	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup>
31	Ga	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>1</sup>	68	Er	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>12</sup>	105	Db	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>3</sup>
32	Ge	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>2</sup>	69	Tm	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>13</sup>	106	Sg	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>4</sup>
33	As	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>3</sup>	70	Yb	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup>	107	Bh	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>5</sup>
34	Se	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>4</sup>	71	Lu	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup>	108	Hs	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>6</sup>
35	Br	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>5</sup>	72	Hf	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup>	109	Mt	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup>
36	Kr	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>6</sup>	73	Ta	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup>	110	Ds	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>8</sup>
37	Rb	[Kr]5s <sup>1</sup>	74	W	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup>			

7.8

22



Qual é a configuração eletrónica do Mg?

Mg 12 electrões

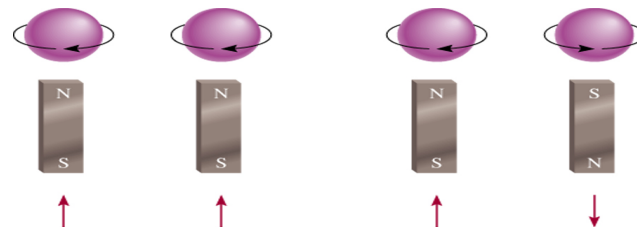
Quais são os números quânticos possíveis para um dos elétrons de maior energia no Cl?

Cl 17 electrões

7.8

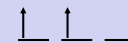
23

## Configuração eletrónica e propriedades dos átomos



**Paramagnético**

elétrons não emparelhados



2p

Atraídas por imanes

**Diamagnético**

todos os elétrons estão emparelhados



2p

Levemente repelidas por imanes

24

## Exercício 2

 $^{11}\text{Na}$  $^{12}\text{Mg}$  $^{13}\text{Al}$  $^{14}\text{Si}$  $^{15}\text{P}$  $^{16}\text{S}$  $^{17}\text{Cl}$  $^{18}\text{Ar}$ 

25

## Exercícios extra

1- Que orbital, em cada um dos seguintes pares, tem menor energia num átomo **polieletrónico**?

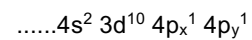
- a) 2s, 2p
- b) 3p, 3d
- c) 3d, 4s
- d) 4d, 5s

2- Que orbital, em cada um dos seguintes pares, tem menor energia num átomo **monoeletrónico**?

- a) 2s, 2p
- b) 3p, 3d
- c) 3d, 4s
- d) 4d, 5s

26

3- Considere a configuração eletrónica de um átomo:



O conjunto de números quânticos que representa os dois eletrões de maior energia é:

- a)  $(4, 1, 1, +1/2)$  e  $(4, 1, 0, +1/2)$
- b)  $(4, 1, 1, -1/2)$  e  $(4, 1, 1, -1/2)$
- c)  $(4, 1, 1, +1/2)$  e  $(4, 1, -1, -1/2)$
- d)  $(3, 1, 1, +1/2)$  e  $(3, 1, 1, +1/2)$

27