# **Átomos Polieletrônicos**

#### **Gabriel Braun**

Colégio e Curso Pensi, Coordenação de Química



# Sumário

1	O átomo de hidrogênio		1
	1.1	Os níveis de energia	1
	1.2	Os números quânticos, as camadas e as subcamadas	1
	1.3	O spin do elétron	2
	1.4	A estutura eletrônica do hidrogênio	3
2	Os átomos polieletrônicos		3
	2.1	A energia dos orbitais	3
	2.2	O princípio da construção	3

# 1 O átomo de hidrogênio

Nossa tarefa é construir um modelo mecânico quântico do átomo coerente com as observações experimentais, tomando como base as propriedades de onda do elétron e sua função de onda.

# 1.1 Os níveis de energia

Um elétron em um átomo é como uma partícula em uma caixa, no sentido de que ele está confinado ao átomo, não devido a paredes, mas pela atração do núcleo. Portanto, é possível esperar que as funções de onda do elétron obedeçam a algumas condições de contorno. No caso da partícula em uma caixa, essas restrições resultam na quantização da energia e na existência de níveis discretos de energia. Mesmo neste primeiro momento, você deve esperar que o elétron esteja confinado a certos níveis de energia, exatamente como exigido pelas observações espectroscópicas resumidas no Tópico 1A.

Para encontrar as funções de onda e os níveis de energia de um elétron em um átomo de hidrogênio, é necessário resolver a equação de Schrödinger apropriada. Para formular esta equação, que permite o movimento em três dimensões, usamos a expressão da energia potencial de um elétron de carga -e na distância r de um núcleo com carga +e, esta energia potencial de *Coulomb* é

$$V=-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Resolver a equação de Schrödinger para uma partícula com essa energia potencial é difícil, mas Schrödinger o conseguiu em 1927. Ele descobriu que os níveis de energia permitidos para um elétron em um átomo de hidrogênio são

$$E_n = -\frac{hc\Re}{n^2} = -\frac{13,6\,\text{eV}}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$
 (2a)

com

$$\mathcal{R} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2 c}$$

Esses níveis de energia têm exatamente a forma sugerida pela espectroscopia (Tópico 1A), mas agora a constante de Rydberg,  $\Re$ ,

está relacionada a diversas constantes fundamentais. Na ciência, é sempre gratificante perceber que uma variável experimental tem relação com uma combinação de constantes fundamentais. Quando os valores adequados das constantes são inseridos, o valor obtido é  $\Re=1,1\times10^7\,\text{m}^{-1}$ , o mesmo valor determinado experimentalmente. A concordância foi um triunfo para a teoria de Schrödinger e para a mecânica quântica. É fácil imaginar a emoção que Schrödinger sentiu quando chegou a esse resultado. Uma expressão muito semelhante se aplica a outros íons com um elétron, como He $^+$  e mesmo C $^{5+}$ , com o número atômico Z:

$$E_n = -\frac{Z^2 h c \mathcal{R}}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \tag{2b}$$

O QUE ESTA EQUAÇÃO REVELA? Primeiro, observe que todas as energias são negativas, isto é, um elétron tem energia menor no átomo do que quando está distante do núcleo. Outro aspecto é que n é um número quântico, que só pode ter valores inteiros, o que significa que as energias só podem ter valores discretos. Como n aparece no denominador, à medida que n aumenta, as energias dos níveis sucessivos também sobem (isto é, tornamse menos negativas), aproximando-se de zero quando o elétron está a ponto de escapar do átomo. Além disso, como Z aparece no numerador da Equação 1b, vemos que quanto maior for a carga do núcleo, mais fortemente o elétron estará ligado a ele.

É importante pensar nas razões pelas quais determinada propriedade depende de diversos parâmetros de modo particular. Você deve estar se perguntando: por que a energia depende de  $Z^2$  e não de  $Z^2$  A razão pode ser atribuída a dois fatores que se complementam. Primeiro, um núcleo de número atômico Z e carga Ze dá origem a um campo que é Z vezes mais forte do que o de um único próton. Segundo, o elétron é atraído pela carga mais alta e está Z vezes mais próximo do núcleo do que no átomo de hidrogênio. Os dois fatores atuam em conjunto para promover um abaixamento global de energia, proporcional a  $Z^2$ .

O nível de energia mais baixo, que é o mais negativo possível para o elétron em um átomo de hidrogênio, é obtido quando n=1 e é  $-hc\mathcal{R}=13,6$  eV. Esse estado de energia é conhecido como o estado **fundamental do átomo**. Um átomo de hidrogênio normalmente é encontrado em seu estado fundamental, com o elétron no nível n=1. Quando o elétron ligado é excitado pela absorção de um fóton ou é bombardeado por outras partículas, sua energia aumenta a um nível maior de n. Ele atinge E=0, quando n tende a infinito. Nesse ponto, o elétron efetivamente se liberou do átomo, no processo denominado ionização. A energia de ionização, discutida em detalhes no Tópico 1C, é a energia necessária para atingir a ionização a partir do estado fundamental. Qualquer energia adicional, além da energia de ionização, simplesmente se soma à energia cinética do elétron liberado.

Os níveis de energia de um átomo de hidrogênio são definidos pelo número quântico principal,  $n=1,2,\ldots$  e formam uma série convergente.

# 1.2 Os números quânticos, as camadas e as subcamadas

Quando a equação de Schrödinger é resolvida para um átomo tridimensional, observa-se que são necessários três números quân-

<sup>\*</sup>Contato: gabriel.braun@pensi.com.br, (21) 99848-4949

ticos para caracterizar cada função de onda. Os três números quânticos são chamados de  $n, l \in m_1$ :

- n está associado ao tamanho e à energia do orbital
- l está associado a sua forma
- m<sub>l</sub> está associado com sua orientação espacial

Você já conhece n, o número quântico principal, que especifica a energia do orbital em um átomo de um elétron (veja a Equação 1). Em um átomo com um elétron, todos os orbitais atômicos com o mesmo valor de n têm a mesma energia e dizemos que eles pertencem à mesma **camada** do átomo. O termo reflete o fato de que quando n aumenta, a região de máxima densidade de probabilidade parece-se com uma concha oca de raio progressivamente maior. A distância média entre um elétron e o núcleo aumenta com o valor de n.

O segundo número quântico necessário para especificar um orbital é l, o **número quântico do momento angular do orbital**. Esse número quântico pode ter os valores

$$l = 0, 1, 2, ..., n - 1$$

Existem n valores diferentes de l para cada valor de n. Para n=3, por exemplo, l pode assumir qualquer um dos valores 0, 1 e 2. Os orbitais de uma camada com número quântico principal n, portanto, são classificados em n subcamadas, grupos de orbitais que têm o mesmo valor de l. Existe somente uma subcamada no nível n=1 (l=0), duas no nível n=2 (l=0 e l=1), três no nível n=3, e assim por diante. Todos os orbitais com l=0 são chamados de orbitais s, os de l=1 são chamados de orbitais p, os de l=1 são chamados de orbitais l=10 são chamados de orbitais l=11 são chamados de orbitais l=12 são chamados de orbitais l=13 são chamados de orbitais l=14 são chamados de orbitais l=15 são chamados de orbitais de o

Embora valores maiores de l (correspondentes aos orbitais  $g, h, \ldots$ ) sejam possíveis, os valores menores (0, 1, 2 e 3) são os únicos que os químicos precisam na prática.

Assim como os valores de n podem ser usados para calcular a energia de um elétron, os valores de l permitem o cálculo de outra propriedade física. Como o nome sugere, l nos dá o momento angular orbital do elétron, uma medida da velocidade com que o elétron "circula" (em termos clássicos) ao redor do núcleo:

$$\text{momento angular orbital} = \overbrace{\frac{h}{2\pi}}^{\text{h}} \sqrt{l(l+1)}$$

Um elétron em um orbital s (um "elétron s"), para o qual l=0, tem momento angular do orbital igual a zero. Isso significa que você deve imaginar o elétron não como se estivesse circulando em redor do núcleo, mas simplesmente distribuído igualmente em volta dele. Um elétron em um orbital p (l=1) tem momento angular diferente de zero, de magnitude  $\hbar\sqrt{2}$ ; logo, diferentemente de um elétron s, podemos imaginá-lo como se estivesse circulando ao redor do núcleo. Um elétron em um orbital d (l=2) tem momento angular maior,  $\hbar\sqrt{6}$ ; um elétron em um orbital f (l=3) tem momento angular ainda maior,  $\hbar\sqrt{12}$ , e assim por diante.

Um aspecto importante do átomo de hidrogênio (mas não de átomos com mais de um elétron) é que todos os orbitais de uma mesma camada têm a mesma energia, independentemente do valor do momento angular (observe na Equação 1 que l não aparece na expressão da energia). Os orbitais de uma camada de um átomo de hidrogênio são chamados de degenerados, isto é, têm a mesma energia. Essa degenerescência de orbitais com o mesmo valor de n e diferentes valores de l só é verdadeira no caso do átomo de hidrogênio e dos íons de um elétron (como He<sup>+</sup> e C<sup>5+</sup>).

O terceiro número quântico necessário para especificar um orbital é  $m_1$ , o número quântico magnético, que distingue os

orbitais de uma subcamada. Este número quântico pode assumir os seguintes valores

$$m_1 = -l + 1, -l, \dots, l - 1, l$$

Existem 2l+1 valores diferentes de  $m_l$  para um dado valor de l e, portanto, 2l+1 orbitais em uma subcamada de número quântico l. Por exemplo, para um orbital p, l=1 e  $m_l=-1,0,+1$ ; logo, existem três orbitais p em uma camada. Dito de outro modo, uma subcamada com l=1 tem três orbitais. Orbitais com o mesmo valor de l e diferentes valores de  $m_l$  são degenerados mesmo em átomos de muitos elétrons. Logo, os três orbitais p de uma camada são degenerados tanto no hidrogênio como em outros átomos.

**NOTA DE BOA PRÁTICA** Como o número quântico magnético pode ter valor negativo ou positivo, sempre escreva o sinal + explicitamente no caso de valores positivos de  $m_l$ . Por exemplo, escreva  $m_l = +1$ , não  $m_l = 1$ .

O número quântico magnético especifica a orientação do movimento orbital do elétron. Mais especificamente, ele revela que o momento angular do orbital em torno de um eixo arbitrário é igual a  $\mathfrak{m}_l\mathfrak{h}$ , enquanto o restante do movimento orbital, para completar a quantidade  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ , está em torno de outros eixos. Assim, por exemplo, se  $\mathfrak{m}_l=+1$ , então o momento angular do orbital do elétron em torno do eixo arbitrário é  $+\hbar$ , ao passo que se  $\mathfrak{m}_l=-1$ , o momento angular do orbital do elétron em torno do mesmo eixo arbitrário é  $-\hbar$ . A diferença de sinal simplesmente significa que a direção do movimento é a contrária: o elétron em um estado circula em torno do eixo no sentido horário e um elétron no outro estado circula no sentido anti-horário. Se  $\mathfrak{m}_l=0$ , então o elétron não está circulando em torno do eixo arbitrário selecionado, mas está distribuído uniformemente ao redor dele em determinado raio.

Os orbitais atômicos são representados pelos números quânticos  $n, l e m_l, e$  se dividem em camadas e subcamadas.

# 1.3 O spin do elétron

O cálculo das energias dos orbitais do hidrogênio proposto por Schrödinger foi um marco no desenvolvimento da teoria atômica moderna. Entretanto, as linhas espectrais observadas não tinham exatamente a mesma frequência predita por ele. Em 1925 (antes do trabalho de Schrödinger, mas após o desenvolvimento, por Bohr, do primeiro modelo do átomo), dois físicos holandeses, naturalizados americanos, Samuel Goudsmit e George Uhlenbeck, propuseram uma explicação para essas pequenas diferenças. Eles sugeriram que o elétron possuía uma propriedade chamada de **spin**. A teoria de Schrödinger não levava em conta o spin, mas isso acabou acontecendo naturalmente quando o físico britânico Paul Dirac encontrou um modo (em 1928) de combinar a teoria da relatividade de Einstein com o procedimento de Schrödinger.

De acordo com a mecânica quântica, um elétron tem dois estados de spin, representados pelas setas  $\uparrow$  (para cima) e  $\downarrow$  (para baixo). Os dois estados de spin são distinguidos por um quarto número quântico, o número quântico magnético de spin,  $m_s$ . Este número quântico só pode assumir dois valores: -1/2 indica um elétron  $\uparrow$  e +1/2 indica um elétron  $\downarrow$ .

Dois cientistas alemães, Otto Stern e Walter Gerlach, foram os primeiros a detectar o spin do elétron experimentalmente, em 1922. Como uma carga elétrica em movimento gera um campo magnético, eles previram que um elétron com spin deveria se comportar como um pequeno ímã. Em seu experimento (veja a ilustração), Stern e Gerlach removeram todo o ar de um recipiente e fizeram passar por ele um campo magnético muito pouco uniforme. Depois, eles dispararam um feixe fino de átomos de prata

pelo recipiente na direção de um detector. Um átomo de prata tem um elétron desemparelhado. Os 46 elétrons restantes são emparelhados. Por isso, o átomo se comporta como um elétron desemparelhado que se desloca sobre uma plataforma pesada.

Se o elétron tem spin, ele se comportaria como um ímã capaz de adotar qualquer orientação em relação ao campo magnético aplicado. Nesse caso, uma faixa larga de átomos de prata deveria aparecer no detector, porque o campo atrairia os átomos de prata diferentemente, de acordo com a orientação do spin. Foi exatamente isso que Stern e Gerlach observaram quando fizeram o experimento pela primeira vez.

Um elétron tem a propriedade de spin. O número quântico  $m_s$  descreve o spin,  $m_s=\pm 1/2$ .

# 1.4 A estutura eletrônica do hidrogênio

No estado fundamental, o elétron está no nível de energia mais baixo, o estado com n=1. O único orbital com n=1 é o orbital s. Dizemos que o elétron **ocupa** um orbital 1s, ou que é um "elétron 1s". O elétron do átomo de hidrogênio no estado fundamental é descrito por quatro números quânticos, cujos valores são:

$$\label{eq:normalized} \mathfrak{n} = 1 \quad \mathfrak{l} = 0 \quad \mathfrak{m}_{\mathfrak{l}} = 0 \quad \mathfrak{m}_{s} = +\tfrac{1}{2} \mbox{ ou } -\tfrac{1}{2}$$

O elétron pode adotar qualquer um dos estados de spin.

Quando o átomo adquire energia suficiente (pela absorção de um fóton de radiação, por exemplo) para que seu elétron atinja a camada em que  $\mathfrak{n}=2$ , ele pode ocupar qualquer um de quatro orbitais. Nessa camada, existem um orbital 2s e três orbitais 2p e, no hidrogênio, todos têm a mesma energia. Quando um elétron é descrito por uma dessas funções de onda, dizemos que ele ocupa um orbital 2s ou um orbital 2p, ou, então, que ele é um "elétron 2s" ou um "elétron 2p", respectivamente. A distância média de um elétron ao núcleo quando ele ocupa um dos orbitais da camada  $\mathfrak{n}=2$  é maior do que quando ele ocupa a camada  $\mathfrak{n}=1$ . Podemos, então, imaginar que o átomo aumenta de tamanho quando é excitado pela energia.

Se o átomo adquire ainda mais energia, o elétron move-se para a camada em que n=3 e o átomo aumenta ainda mais. Nessa camada, o elétron pode ocupar qualquer um de nove orbitais (um 3s, três 3p e cinco 3d). Quando o átomo absorve mais energia ainda, o elétron se afasta novamente do núcleo e ocupa a camada em que n=4, na qual 16 orbitais estão disponíveis (um 4s, três 4p, cinco 4d e sete 4f). A absorção de energia prossegue, até ser suficiente para que o elétron possa escapar da atração do núcleo e, assim, deixar o átomo.

O estado de um elétron em um átomo de hidrogênio é definido pelos quatro números quânticos n, l,  $m_l$  e  $m_s$ . À medida que o valor de n aumenta, aumenta também o tamanho do átomo.

# 2 Os átomos polieletrônicos

Todos os átomos neutros, exceto o hidrogênio, têm mais de um elétron e são conhecidos como **átomos polieletrônicos**. Esta seção se baseia na descrição do átomo de hidrogênio para explicar como a presença de mais de um elétron afeta as energias dos orbitais atômicos e o modo como eles são ocupados. As estruturas eletrônicas resultantes são a chave das propriedades periódicas dos elementos e da capacidade dos átomos de formar ligações químicas. Este material, portanto, embasa quase todos os aspectos da química.

# 2.1 A energia dos orbitais

No átomo de hidrogênio, com um elétron, não ocorre repulsão elétron-elétron e todos os orbitais de uma determinada camada são degenerados (têm a mesma energia). Por exemplo, o orbital 2s e os três orbitais 2p têm a mesma energia. No entanto, cálculos e experimentos em espectroscopia com átomos polieletrônicos mostraram que as repulsões elétron-elétron tornam a energia dos orbitais 2p mais alta do que a de um orbital 2s. O mesmo ocorre na camada n 53, em que os três orbitais 3p ficam acima do orbital 3s e os cinco orbitais 3d ficam ainda mais altos. Como explicar essas diferenças de energia?

Assim como é atraído pelo núcleo, cada elétron de um átomo de muitos elétrons é repelido pelos demais elétrons. Como resultado, ele está menos fortemente ligado ao núcleo do que estaria na ausência dos outros elétrons. Cada elétron é blindado pelos demais contra a atração total do núcleo. A blindagem reduz efetivamente a atração entre o núcleo e os elétrons. A carga nuclear efetiva,  $Z_{\rm ef}$ , sentida pelo elétron, é sempre menor do que a carga nuclear real,  $Z_{\rm e}$ , porque as repulsões elétron-elétron trabalham contra a atração do núcleo. Uma aproximação grosseira da energia de um elétron em um átomo polieletrônico é uma versão da Equação 2b, em que a carga nuclear verdadeira é substituído pelo carga nuclear efetiva:

$$E_n = -\frac{Z_{ef}^2 h c \mathcal{R}}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$
 (3)

Observe que os demais elétrons não *bloqueiam* a influência do núcleo. Eles criam simplesmente um interação repulsiva coulombiana adicional que corrige parcialmente a atração do núcleo sobre os elétrons. A atração do núcleo sobre os elétrons no átomo de hélio, por exemplo, é menor do que aquela que a carga +2e deveria exercer, mas é maior do que a carga +e que seria esperada se cada elétron balanceasse exatamente uma carga positiva.

Um elétron s de qualquer das camadas pode ser encontrado em uma região muito próxima do núcleo (lembre-se de que  $\phi^2$ , para um orbital s, é diferente de zero no núcleo), e dizemos que ele penetra as camadas internas. Um elétron p penetra muito menos, porque o momento angular do orbital impede a aproximação entre o elétron e o núcleo (Figura 1). Vimos que sua função de onda se anula no núcleo; logo, a densidade de probabilidade do elétron no núcleo é zero para um elétron p. Como o elétron p penetra menos que um elétron s as camadas internas do átomo, ele está mais efetivamente blindado em relação ao núcleo e, por isso, experimenta uma carga efetiva menor do que a de um elétron s. Em outras palavras, um elétron s está mais firmemente ligado ao núcleo do que um elétron p e tem energia ligeiramente menor (mais negativa). Um elétron d está menos firmemente ligado ao núcleo do que um elétron p da mesma camada, porque o momento angular orbital é maior e o elétron é menos capaz ainda de se aproximar do núcleo. Isso significa que os elétrons d têm energia mais alta do que os elétrons p da mesma camada, que, por sua vez, têm energia mais alta do que os elétrons s daquela camada.

Os efeitos da penetração e da blindagem podem ser grandes. Um elétron 4s costuma ter energia muito mais baixa do que um elétron 4p ou 4d. Ele pode até ter energia inferior à de um elétron 3d do mesmo átomo. A ordem precisa da energia dos orbitais depende do número de elétrons no átomo, como será explicado a seguir.

Por causa dos efeitos da penetração e da blindagem, a ordem das energias dos orbitais em uma dada camada em um átomo polieletrônico é s < p < d < f.

# 2.2 O princípio da construção

A estrutura eletrônica de um átomo determina suas propriedades químicas e, por isso, é preciso ser capaz de descrever essa estrutura. Para isso, você escreve a **configuração eletrônica** do átomo — uma lista de todos os orbitais ocupados, com o número de elétrons que cada um contém. No estado fundamental de um átomo com muitos elétrons, os elétrons ocupam os orbitais atômicos disponíveis, de modo a tornar a energia total do átomo a menor possível. À primeira vista, poderíamos esperar que um átomo tivesse a menor energia quando todos os seus elétrons estivessem no orbital de menor energia (o orbital 1s). Porém, exceto para o hidrogênio e o hélio, que só têm dois elétrons, isso não pode acontecer. Em 1925, o cientista austríaco Wolfgang Pauli descobriu uma regra fundamental sobre os elétrons e orbitais, conhecida hoje como **princípio da exclusão de Pauli**:

 Dois elétrons, no máximo, podem ocupar um dado orbital. Quando dois elétrons ocupam um orbital, seus spins devem estar emparelhados.

Diz-se que os spins de dois elétrons estão emparelhados se um é  $\uparrow$  e o outro,  $\downarrow$ . Os spins emparelhados são representados como  $\uparrow \downarrow$ , e os elétrons com spins emparelhados têm números quânticos magnéticos de spin de sinais opostos. Como um orbital atômico é determinado por três números quânticos (n, l e  $m_l$ ) e os dois estados de spin são especificados por um quarto número quântico,  $m_s$ , outra forma de expressar o princípio da exclusão de Pauli é:

• Dois elétrons em um átomo nunca podem ter o mesmo conjunto de quatro números quânticos.

O átomo de hidrogênio tem, no estado fundamental, um elétron no orbital 1s. Essa estrutura é representada por uma seta no orbital 1s de um *diagrama de caixas*, que mostra cada orbital como uma *caixa* que pode conter, no máximo, dois elétrons:

Sua configuração eletrônica, isto é, uma lista dos orbitais ocupados, é representada por  $1s^1$  ("um s um"). No estado fundamental do átomo de hélio (Z=2), os dois elétrons estão em um orbital 1s, que é descrito como  $1s^2$  ("um s dois"):

Como se pode ver, os dois elétrons estão emparelhados. Nessa situação, o orbital 1s e a camada n=1 estão completamente ocupados. O átomo de hélio no estado fundamental tem a **camada fechada**, isto é, uma camada em que o número de elétrons é o máximo permitido pelo princípio da exclusão.

**NOTA DE BOA PRÁTICA** Quando um único elétron ocupa um orbital, escrevemos, por exemplo, 1s¹ e não 1s, de forma abreviada.

O lítio (Z = 3) tem três elétrons. Dois elétrons ocupam o orbital 1s e completam a camada n=1. O terceiro elétron deve ocupar o próximo orbital de mais baixa energia disponível, o orbital 2s. Logo, o estado fundamental de um átomo de lítio é Li :  $1s^22s^1$ :

$$\mathbf{Li}: \begin{bmatrix} \uparrow \downarrow \\ 1s^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \uparrow \\ 2s^1 \end{bmatrix}$$

Imagine que a estrutura eletrônica deste átomo é formada pelo caroço, parte central que contém os elétrons de orbitais totalmente preenchidos, circundado pelos elétrons de valência (os da camada mais externa). No lítio, o caroço é formado por uma camada fechada semelhante ao caroço 1s² do átomo de hélio, representado por [He]. Este caroço é rodeado por uma camada externa que contém um elétron 2s, de energia mais alta. Assim, a configuração do lítio é [He] 2s¹. Em geral, somente os elétrons

de valência podem se envolver em reações químicas porque os elétrons do caroço estão nos orbitais internos de menor energia e, portanto, estão muito fortemente ligados. Isso significa que o lítio perde somente um elétron ao formar compostos, isto é, ele forma normalmente íons  $\mathrm{Li}^+$ , e não íons  $\mathrm{Li}^{2+}$  ou  $\mathrm{Li}^{3+}$ .

O elemento com Z=4 é o berílio, Be, com quatro elétrons. Os primeiros três elétrons tomam a configuração  $1s^22s^1$ , como o lítio. O quarto elétron emparelha-se com o elétron 2s, para dar a configuração  $1s^22s^2$ , ou, mais simplesmente, [He]  $2s^2$ :

Um átomo de Be tem, então, um caroço semelhante ao do hélio, rodeado por uma camada de valência com dois elétrons emparelhados. Como o lítio — e pela mesma razão —, um átomo de Be só pode perder seus elétrons de valência em reações químicas. Assim, ele perde ambos os elétrons 2s para formar o íon Be<sup>2+</sup>.

O boro (Z=5) tem cinco elétrons. Dois ocupam o orbital 1s e completam a camada n=1. Dois ocupam o orbital 2s. O quinto elétron ocupa um orbital da próxima subcamada disponível, que é um orbital 2p. Este arranjo de elétrons corresponde à configuração  $1s^22s^22p^1$  ou [He]  $2s^22p^1$ :

$$Be: \left[ \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ 1s^2 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ 2s^2 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} \uparrow \\ 2p^1 \end{array} \right]$$

que mostra que o boro tem três elétrons de valência em torno de um caroço semelhante ao do hélio.

Temos de tomar outra decisão no caso do carbono (Z=6): o sexto elétron pode ficar junto ao anterior no orbital 2p ou deve ocupar um orbital 2p diferente? (Lembre-se de que existem três orbitais p na subcamada, todos com a mesma energia.) Para responder essa questão, é preciso reconhecer que os elétrons estão mais longe um do outro e se repelem menos quando ocupam orbitais p diferentes do que quando ocupam o mesmo orbital. Portanto, o sexto elétron ocupa um dos orbitais 2p vazios e o estado fundamental do carbono é  $1s^22s^22p_v^12p_v^1$ 

$$C: \begin{tabular}{|c|c|c|c|c|}\hline $\uparrow$ & \hline $\downarrow$ & \hline $\uparrow$ & \hline $\downarrow$ & \hline $\downarrow$$$

Os orbitais são representados desta forma somente quando é necessário enfatizar que os elétrons ocupam orbitais diferentes da mesma subcamada. Na maior parte das situações, a forma compacta, como em  $[He]\ 2s^22p^2$ , é suficiente. Observe que, no diagrama de orbitais, os dois elétrons 2p foram representados com **spins paralelos** ( $\uparrow\uparrow$ ), para indicar que eles têm os mesmos números quânticos magnéticos de spin. Por razões baseadas na mecânica quântica, dois elétrons com spins paralelos tendem a se repelir. Portanto, esse arranjo tem energia ligeiramente menor do que a do arranjo com elétrons emparelhados. Entretanto, esse tipo de arranjo só é possível quando os elétrons ocupam orbitais diferentes.

Este procedimento é chamado de princípio da construção e pode ser resumido em duas regras. Para predizer a configuração do estado fundamental de um elemento com o número atômico Z e seus Z elétrons:

- 1. Adicione Z elétrons, um após o outro, aos orbitais, na ordem da Figura 3, porém, não coloque mais de dois elétrons em um mesmo orbital.
- Se mais de um orbital em uma subcamada estiver disponível, adicione elétrons com spins paralelos aos diferentes orbitais daquela subcamada até completá-la, antes de emparelhar dois elétrons em um dos orbitais.

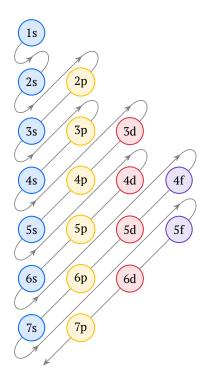


FIGURA 1 Ordem de preenchimento dos orbitais.

A primeira regra leva em conta o princípio da exclusão de Pauli. A segunda regra é conhecida como **regra de Hund**, em homenagem ao espectroscopista alemão Friedrich Hund, que a propôs. Esse procedimento dá a configuração do átomo que corresponde à energia total mais baixa, levando em conta a atração dos elétrons pelo núcleo e a repulsão dos elétrons. Quando os elétrons de um átomo estão em estados de energia mais altos do que os preditos pelo princípio da construção, dizemos que o átomo está em um **estado excitado**. A configuração eletrônica [He] 2s¹2p³, por exemplo, representa um ,estado excitado do átomo de carbono.

Um estado excitado é instável e emite um fóton quando o elétron retorna ao orbital que restabelece o estado de energia mínima do átomo.

Em geral, você deveria imaginar um átomo de qualquer elemento como um caroço de gás nobre rodeado pelos elétrons da camada de valência, a camada ocupada mais externa. A camada de valência é a camada ocupada com o maior valor de n.

O nitrogênio tem Z=7 e mais um elétron do que o carbono, o que dá [He]  $2s^22p^3$ . Cada elétron p ocupa um orbital diferente e os três têm spins paralelos:

$$N: \begin{bmatrix} \uparrow \downarrow \\ \downarrow c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \uparrow \downarrow \\ \uparrow c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{bmatrix}$$

O oxigênio tem Z=8 e mais um elétron do que o nitrogênio, logo, sua configuração é [He]  $2s^22p^4$  e dois dos elétrons 2p estão emparelhados:

$$O: \left[ \begin{array}{c|c} \uparrow \downarrow \\ \hline \\ 1s^2 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c|c} \uparrow \downarrow \\ \hline \\ 2s^2 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c|c} \uparrow \downarrow \\ \hline \\ 2p^4 \end{array} \right]$$

O flúor, por sua vez, com Z = 9, tem mais um elétron do que o oxigênio, e a configuração [He]  $2s^22p^5$ , com um elétron desemparelhado.

O neônio, com Z = 10, tem mais um elétron do que o flúor. Esse elétron completa a subcamada 2p, levando a  $[He] 2s^2 2p^6$ :

$$Ne: \left[ \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ 1s^2 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ 2s^2 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ 2p^6 \end{array} \right]$$

De acordo com a Figura 1, o próximo elétron ocupa o orbital 3s, o orbital de menor energia na próxima camada. A configuração do sódio é, então, [He] 2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>1</sup>, ou, de forma mais resumida, [Ne]3s<sup>1</sup>, em que [Ne] é um caroço semelhante ao do neônio.

**EXEMPLO 1** Determinação da configuração eletrônica de um átomo no estado fundamental

**Apresente** a configuração eletrônica dos átomos no estado fundamental.

- a. Magnésio
- b. Alumínio

**Etapa 1**. (a) Adicione  $Z_{\rm Mg}=12$  elétrons, um após o outro, aos orbitais na ordem mostrada na Figura 1, mas não coloque mais de dois elétrons em um mesmo orbital.

 $Mg : [Ne] 3s^2$ 

**Etapa 2**. (b) Adicione  $Z_{\rm Al}=13$  elétrons, um após o outro, aos orbitais na ordem mostrada na Figura 1, mas não coloque mais de dois elétrons em um mesmo orbital.

Al : [Ne] 
$$3s^23p^1$$

Os orbitais s e p da camada n=3 se completam no argônio, [Ne]  $3s^23p^6$ , um gás incolor, sem cheiro, não reativo, que lembra o neônio. A energia do orbital 4s é ligeiramente menor do que a dos orbitais 3d. Isso faz com que o próximo orbital a ser preenchido depois do 3 p seja o 4s. Então, as duas próximas configurações eletrônicas são [Ar]  $4s^1$  para o potássio e [Ar]  $4s^2$  para o cálcio, em que [Ar] representa um caroço semelhante ao do argônio,  $1s^22s^22p^63s^23p^6$ . Neste ponto, entretanto, os orbitais 3d começam a ser ocupados.

Em função da ordem do aumento da energia (Figura 1), os próximos 10 elétrons (do escândio, com Z = 21, até o zinco, com Z = 30) ocupam os orbitais 3d. A configuração eletrônica do estado fundamental do escândio, por exemplo, é [Ar] 3d¹4s², e a de seu vizinho, o titânio, é [Ar] 3d<sup>2</sup>4s<sup>2</sup>. Observe que, a partir do escândio, os elétrons 4s são escritos depois dos elétrons 3d: assim que contiverem elétrons, os orbitais 3d terão menor energia do que os orbitais 4s (a mesma relação é verdadeira para os orbitais nd e (n + 1)s). Essas diferenças em energia são resultado das complexidades causadas pela repulsão entre elétrons. Os elétrons são adicionados sucessivamente aos orbitais d à medida que Z aumenta. Entretanto, existem duas exceções: a configuração eletrônica experimental do cromo é [Ar] 3d<sup>5</sup>4s<sup>1</sup>, não [Ar] 3d<sup>4</sup>4s<sup>2</sup>, e a do cobre é [Ar] 3d<sup>10</sup>4s<sup>1</sup>, não [Ar] 3d<sup>9</sup>4s<sup>1</sup>. Essa discrepância aparente ocorre porque a configuração com a subcamada semipreenchida d<sup>5</sup> e a configuração com a subcamada completa d<sup>10</sup>, segundo a mecânica quântica, têm energia mais baixa do que a indicada pela teoria simples. Como resultado, pode-se alcançar uma energia total mais baixa quando um elétron ocupa um orbital 3d, em vez do orbital 4s esperado, se esse arranjo completa uma meia subcamada ou uma subcamada completa.

Os elétrons só ocupam os orbitais 4p se os orbitais 3d estiverem completos. A configuração do germânio, [Ar]  $3d^{10}4s^24p^2$ , por exemplo, é obtida pela adição de dois elétrons aos orbitais 4p depois de completar a subcamada 3d. O arsênio tem mais um elétron e a configuração é [Ar]  $3d^{10}4s^24p^3$ .

O próximo da fila para ocupação é o orbital 5s, seguido pelos orbitais 4d. Nesse caso, a energia do orbital 4d cai abaixo da energia do orbital 5s após a acomodação de dois elétrons no orbital 5s.

Um efeito semelhante ocorre quando outro conjunto de orbitais internos, os orbitais 4f, começa a ser ocupado. O cério, por exemplo, tem a configuração [Xe] 4f<sup>1</sup>5d<sup>1</sup>6s<sup>2</sup>. Os elétrons continuam a ocupar os sete orbitais 4f, que se completam após a adição de 14 elétrons no itérbio, [Xe]4f<sup>14</sup>6s<sup>2</sup>. Em seguida, os orbitais 5d são ocupados. Os orbitais 6p só são ocupados depois que os orbitais 6s, 4f e 5d estão completos no mercúrio. O tálio, por exemplo, tem configuração [Xe]  $4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$ . Existe uma série de discrepâncias aparentes na ordem de preenchimento dos orbitais 4f. Essas discrepâncias aparentes ocorrem porque os orbitais 4f e 5d têm energias muito próximas. Na verdade, níveis de energia muito próximos são responsáveis pelo fato de aproximadamente um quarto dos elementos terem configurações eletrônicas que, de algum modo, se desviam dessas regras. Entretanto, para a maior parte dos elementos, elas são um guia útil e um bom ponto de partida para todos eles.

**EXEMPLO 2** Determinação da configuração eletrônica de um átomo pesado no estado fundamental

**Apresente** a configuração eletrônica dos átomos no estado fundamental.

- a. Vanádio
- b. Chumbo

**Etapa 1**. (a) Adicione  $Z_V=23$  elétrons, um após o outro, aos orbitais na ordem mostrada na Figura 1, mas não coloque mais de dois elétrons em um mesmo orbital.

$$V : [Ar] 3d^34s^2$$

**Etapa** 2. (b) Adicione  $Z_{Pb}=82$  elétrons, um após o outro, aos orbitais na ordem mostrada na Figura 1, mas não coloque mais de dois elétrons em um mesmo orbital.

Pb: [Xe] 
$$4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$$

A configuração eletrônica do estado fundamental de um átomo é predita usando o princípio da construção (junto com a Figura 3), o princípio da exclusão de Pauli e a regra de Hund.

# **Problemas**

### **PROBLEMA 1**

Em um determinado estado, os três números quânticos do elétron de um átomo de hidrogênio são n = 4, l = 2 e  $m_l = -1$ .

**Assinale** a alternativa com o tipo de orbital que esse elétron está localizado.

**A** 3p

**B** 3d

**C** 4p

**D** 4d

**E** 4f

# PROBLEMA 2

Em um determinado estado, os três números quânticos do elétron de um átomo de hidrogênio são  $\mathfrak{n}=3,\,\mathfrak{l}=1$  e  $\mathfrak{m}_{\mathfrak{l}}=-1$ .

**Assinale** a alternativa com o tipo de orbital que esse elétron está localizado.

**A** 3p

**B** 3d

**c** 4p

**D** 4d

**E** 4f

#### **PROBLEMA 3**

Considere as subcamadas 2d, 4d, 4g e 6f.

**Assinale** a alternativa que relaciona as subcamadas que podem existir em um átomo.

**A** 4d

**B** 6f

**c** 4d e 6f

**D** 2d, 4d e 6f

**E** 4d, 4g e 6f

#### **PROBLEMA 4**

Considere as subcamadas 1p, 5f, 5g e 6g

**Assinale** a alternativa que relaciona as subcamadas que podem existir em um átomo.

**A** 5f e 5g

**B** 5f e 6g

**c** 5g e 6g

**D** 5f, 5g e 6g

**E** 1p, 5f, 5g e 6g

#### **PROBLEMA 5**

Considere as proposições

- 1. Para o orbital 6p, n = 6, l = 1 e os valores permitidos para  $m_1$  são -1, 0 e 1.
- 2. Para o orbital 3d, n=3, l=2 e os valores permitidos para  $m_l$  são -2, -1, 0, +1 e +2.
- 3. Para o orbital 2p, n=2, l=1 e os valores permitidos para  $m_l$  são -1, 0 e 1.
- 4. Para o orbital 5f, n = 5, l = 3 e os valores permitidos para  $m_l$  são -3, -2, -1, 0, +1, +2 e +3.

**Assinale** a alternativa que relaciona as proposições *corretas*.

A 1, 2 e 3

**B** 1, 2 e 4

**c** 1, 3 e 4

D 2, 3 e 4

E 1, 2, 3 e 4

# **PROBLEMA 6**

**Assinale** a alternativa com o número de orbitais em subcamadas com número quântico l igual a 0, 1, 2 e 3, respectivamente.

**A** 0; 2; 4; 8

**B** 1; 2; 3; 4

**c** 1; 3; 5; 7

**D** 1; 5; 9; 13

**E** 2; 6; 10; 14

#### PROBLEMA 7

**Assinale** a alternativa com o número de orbitais em subcamadas com número quântico n igual a 3, 4, 5 e 6, respectivamente.

**A** 2; 3; 4; 5

**B** 3; 4; 5; 6

**c** 4; 9; 16; 25

**D** 7; 9; 11; 13

**E** 9; 16; 25; 36

Considere as proposições

- 1. São permitidos 7 valores para o número quântico l quando  $\mathfrak{n}=7$ .
- 2. São permitidos 5 valores para o número quântico  $\mathfrak{m}_1$  para a subcamada 6d.
- 3. São permitidos 3 valores para o número quântico  $\mathfrak{m}_l$  para a subcamada 3 $\mathfrak{p}$ .
- 4. Existem 3 subcamadas na camada com n = 4.

Assinale a alternativa que relaciona as proposições corretas.

- A 1 e 2
- B 1 e 3
- **c** 2 e 3

- D 1, 2 e 3
- **E** 1, 2, 3 e 4

## PROBLEMA 9

Considere os parâmetros para um átomo de hidrogênio.

- 1. A energia do elétron.
- 2. O valor do número quântico n.
- 3. O valor do número quântico l.
- 4. O raio do átomo.

**Assinale** a alternativa que relaciona os parâmetros que aumentam quando o átomo faz a transição do orbital 1s para o 2p.

- A 1, 2 e 3
- B 1, 2 e 4
- c 1,3e4

- D 2, 3 e 4
- **E** 1, 2, 3 e 4

## **PROBLEMA 10**

Considere os parâmetros para um átomo de hidrogênio.

- 1. A energia do elétron.
- 2. O valor do número quântico n.
- 3. O valor do número quântico l.
- 4. O raio do átomo.

**Assinale** a alternativa que relaciona os parâmetros que aumentam quando o átomo faz a transição do orbital 2s para o 2p.

- A 2
- B 3
- **c** 1 e 3
- **D** 2 e 3
- **E** 3 e 4

#### **PROBLEMA 11**

Considere os parâmetros para um átomo de lítio.

- 1. A energia do elétron.
- 2. O valor do número quântico n.
- 3. O valor do número quântico l.
- 4. O raio do átomo.

**Assinale** a alternativa que relaciona os parâmetros que aumentam quando o átomo faz a transição do orbital 1s para o 2p.

- A 1, 2 e 3
- B 1, 2 e 4
- **c** 1, 3 e 4

- D 2,3e4
- **E** 1, 2, 3 e 4

#### **PROBLEMA 12**

Considere os parâmetros para um átomo de lítio.

- 1. A energia do elétron.
- 2. O valor do número quântico n.
- 3. O valor do número quântico l.
- 4. O raio do átomo.

**Assinale** a alternativa que relaciona os parâmetros que aumentam quando o átomo faz a transição do orbital 2s para o 2p.

- A 1 e 3
- B 1 e 4
- **C** 3 e 4

- **D** 1, 3 e 4
- **E** 1, 2, 3 e 4

#### **PROBLEMA 13**

Considere os átomos no estado fundamental Ge, Mn, Ba e Au.

**Assinale** a alternativa com o tipo de orbital do qual um elétron pode ser removido para formar um cátion para cada átomo, respectivamente.

- **A** 4s; 4s; 6s; 5d
- **B** 4s; 3d; 6s; 6s
- **c** 4p; 4s; 6s; 6s

- **D** 4p; 3d; 5s; 6s
- **E** 4p; 4s; 6s; 5d

#### **PROBLEMA 14**

Considere os átomos no estado fundamental Zn, Cl, Al e Cu.

**Assinale** a alternativa com o tipo de orbital do qual um elétron pode ser removido para formar um cátion para cada átomo, respectivamente.

- **A** 3d; 3p; 3p; 3d
- **B** 3d; 3s; 3s; 4s
- **c** 4s; 3p; 3s; 3d

- **D** 4s; 3p; 3p; 4s
- **E** 3d; 3s; 3p; 4s

#### **PROBLEMA 15**

Considere os átomos no estado fundamental N, Ag, Nb e W.

**Assinale** a alternativa com o número de elétrons de valência (incluindo os elétrons d e f mais externos) para cada átomo, respectivamente.

- **A** 5; 10; 5; 22
- **B** 5; 11; 5; 20
- **c** 5; 12; 4; 22

- **D** 6; 11; 4; 20
- **E** 6; 10; 5; 20

#### **PROBLEMA 16**

Considere os átomos no estado fundamental Ta, Tc, Te e Tl.

**Assinale** a alternativa com o número de elétrons de valência (incluindo os elétrons d e f mais externos) para cada átomo, respectivamente.

- **A** 18; 7; 16; 27
- **B** 18; 6; 15; 28
- **c** 19; 6; 15; 28

- **D** 19; 8; 16; 27
- **E** 19; 7; 16; 27

Considere os átomos no estado fundamental Bi, Si, Ta e Ni.

**Assinale** a alternativa com o número de elétrons de desemparelhados previstos na configuração do estado fundamental para cada átomo, respectivamente.

- **A** 3; 2; 3; 2
- **B** 3; 3; 2; 1
- **c** 4; 3; 2; 1

- **D** 4; 1; 4; 3
- **E** 4; 2; 3; 2

#### **PROBLEMA 18**

Considere os átomos no estado fundamental Pb, Ir, Y e Cd.

**Assinale** a alternativa com o número de elétrons de desemparelhados previstos na configuração do estado fundamental para cada átomo, respectivamente.

- **A** 2; 3; 0; 0
- **B** 2; 3; 1; 0
- **c** 3; 2; 1; 1

- **D** 3; 2; 1; 1
- **E** 2; 2; 2; 0

#### **PROBLEMA 19**

Considere as configurações eletrônicas.

- $2. \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow \downarrow & \hline \uparrow \downarrow & \hline \uparrow & \hline \downarrow & \hline \uparrow \\ \hline 1s & 2s & 2p & \\ \hline \end{array}$

**Assinale** a alternativa que relaciona as configurações que correspondem ao estado fundamental de um átomo neutro.

- A 3
- B 4
- **C** 1 e 4
- D 2 e 4
- **E** 3 e 4

#### **PROBLEMA 20**

Considere as configurações eletrônicas da camada de valência.

- 3. \(\frac{1}{4s}\) \(\frac{1}{4p}\)

**Assinale** a alternativa que relaciona as configurações que correspondem ao estado fundamental de um átomo neutro.

- A 3
- B 4
- **C** 1 e 4
- **D** 2 e 4
- **E** 3 e 4

#### **PROBLEMA 21**

**Assinale** a alternativa com o conjunto de números quânticos  $\{n, l, m_l, m_s\}$  permitidos para um orbital atômico.

- **A**  $\{2, 2, +1, +1/2\}$
- **B**  $\{4, 2, -3, -1/2\}$
- $\{4,4,+2,-1/2\}$
- **D**  $\{5,0,0,+1\}$
- $\{6,4,+3,+1/2\}$

#### PROBLEMA 22

**Assinale** a alternativa com o conjunto de números quânticos  $\{n, l, m_l, m_s\}$  permitidos para um orbital atômico.

- **A**  $\{1, 1, 0, +1/2\}$
- **B**  $\{5, 3, -4, -1/2\}$
- c {5, 4, -4, -1/2}
- [5,5,+4,-1/2]
- $\{6,4,+5,+1/2\}$

#### **PROBLEMA 23**

Considere as distribuições de átomos no estado fundamental.

- 1.  $[Kr] 4d^{10}5s^25p^4$
- 2. [Ar]  $3d^34s^2$
- 3. [He]  $2s^22p^2$
- 4. [Rn] 7s<sup>2</sup>6d<sup>2</sup>

**Assinale** a alternativa com o número atômico do elemento referente a cada distribuição eletrônica, respectivamente.

- **A** 52; 22; 6; 89
- **B** 52; 23; 6; 90
- **c** 53; 24; 6; 90

- **D** 53; 24; 7; 92
- **E** 54; 24; 7; 93

#### **PROBLEMA 24**

Considere as distribuições de átomos no estado fundamental.

- 1. [Ar]  $3d^{10}4s^24p^1$
- 2. [Ne] 3s<sup>1</sup>
- 3. [Kr] 5s<sup>2</sup>
- 4. [Xe] 4f<sup>7</sup>3s<sup>2</sup>

**Assinale** a alternativa com o número atômico do elemento referente a cada distribuição eletrônica, respectivamente.

- **A** 28; 10; 38; 62
- **B** 28; 10; 37; 63
- 3 **c** 30; 11; 37; 63
- **D** 31; 11; 38; 63
- **E** 31; 12; 38; 64

# **Problemas cumulativos**

#### **PROBLEMA 25**

**Apresente** a configuração eletrônica do estado fundamental e os números quânticos do orbital atômico mais energético para cada um dos átomos.

- a. Magnésio
- b. Alumínio
- c. Bismuto
- d. Arsênio
- e. Cobre

**Apresente** a configuração eletrônica do estado fundamental e os números quânticos do orbital atômico mais energético para cada um dos átomos.

- a. Silício
- b. Cloro
- c. Rubídio
- d. Titânio
- e. Cromo

#### **PROBLEMA 27**

**Apresente** a configuração eletrônica do estado fundamental e os números quânticos do orbital atômico mais energético para cada um dos átomos.

- a. Európio
- b. Criptônio
- c. Berílio
- d. Antimônio
- e. Prata

#### **PROBLEMA 28**

**Apresente** a configuração eletrônica do estado fundamental e os números quânticos do orbital atômico mais energético para cada um dos átomos.

- a. Gálio
- b. Tungstênio
- c. Iodo
- d. Germânio
- e. Molibdênio

#### **PROBLEMA 29**

Considere as proposições para os átomos com muitos elétrons.

- 1. A carga nuclear efetiva,  $Z_{\text{ef}}$ , é independente do número de elétrons presentes em um átomo.
- Os elétrons de um orbital s blindam mais efetivamente da carga nuclear do núcleo os elétrons de outros orbitais porque um elétron em um orbital s pode penetrar o núcleo de um átomo.
- 3. Elétrons com  $\mathfrak{l}=2$  são mais efetivos na blindagem do que elétrons com  $\mathfrak{l}=1.$
- 4. A  $Z_{\rm ef}$  de um elétron em um orbital p é menor do que o de um elétron em um orbital s da mesma camada.

**Assinale** a alternativa que relaciona as proposições *corretas*.

- A 2
- B 4
- **c** 2 e 4

- **D** 1, 2 e 4
- E 2,3e4

#### **PROBLEMA 30**

Considere as proposições para átomos de carbono no estado fundamental.

- 1. A carga nuclear efetiva,  $Z_{\rm ef}$ , de um elétron em um orbital 1s é igual à  $Z_{\rm ef}$  de um elétron em um orbital 2s.
- 2. Um elétron em um orbital 2s tem a mesma energia que um elétron em um orbital 2p.
- 3. Os elétrons nos orbitais 2p têm números quânticos  $\mathfrak{m}_s$  com spins de sinais contrários.
- 4. Os elétrons no orbital 2s têm o mesmo valor do número quântico  $\mathfrak{m}_s$ .

Assinale a alternativa que relaciona as proposições incorretas.

- A 1, 2 e 3
- **B** 1, 2 e 4
- **c** 1, 3 e 4

- D 2, 3 e 4
- **E** 1, 2, 3 e 4

#### **PROBLEMA 31**

No cromo e no cobre, ocorrem anomalias aparentes no preenchimento dos orbitais. Nesses elementos, um elétron que deveria ocupar um orbital s ocupa um orbital d. Anomalias semelhantes ocorrem nos elementos Mo, Pd, Ag e Au.

- a. Explique a origem dessas anomalias.
- Apresente a configuração eletrônica do estado fundamental do Cr, Cu, Mo, Pd, Ag e Au
- c. **Explique** por que não existem elementos cujos elétrons preenchem orbitais (n + 1)s em vez de orbitais np.

## PROBLEMA 32

No bloco f, exitem numerosas exceções no preenchimento regular previsto pelo princípio de construção.

**Explique** por que tantas exceções ocorrem nesses elementos.

#### **PROBLEMA 33**

Considere as configurações eletrônicas.

- 1.  $1s^22s^22p^1$
- 2.  $1s^22s^22p^3$
- 3.  $1s^22s^22p^4$
- 4.  $1s^22s^22p^5$

**Assinale** a alternativa com as configurações que podem representar estados excitados de átomos neutros.

- A 1
- B 3
- C 1 e 3

- **D** 1, 2 e 3
- **E** 1, 3 e 4

Considere as configurações eletrônicas.

- 1.  $[Ar] 4s^2 3d^1$
- 2.  $[Ar] 4s^2 3d^5$
- 3.  $[Ar] 4s^2 3d^8$
- 4.  $[Ar] 4s^2 3d^{10}$

**Assinale** a alternativa com as configurações que podem representar estados excitados de átomos neutros.

- A 2
- B 3
- **c** 2 e 3

24. D

- **D** 1, 2 e 3
- **E** 2, 3 e 4

# **Gabarito**

# **Problemas**

19. B

- 1.
   D
   2.
   A
   3.
   C
   4.
   D
   5.
   E
   6.
   C

   7.
   E
   8.
   D
   9.
   E
   10.
   B
   11.
   E
   12.
   D

   13.
   C
   14.
   D
   15.
   B
   16.
   E
   17.
   A
   18.
   B
- Problemas cumulativos

20. B

- **25.** a. [Ne]  $3s^2$ , n = 3, l = 0, m = 0.
  - b. [Ne]  $3s^23p^1$ , n = 3, l = 1, m = -1.
  - c. [Xe]  $6s^24f^{14}5d^{10}6p^3$ , n = 6, l = 1, m = +1.
  - d. [Ar]  $4s^23d^{10}4p^3$ , n = 4, l = 1, m = +1.
  - e. [Ar]  $4s^13d^{10}$ , n = 3, l = 2, m = +2.
- **26.** a. [Ne]  $3s^23p^2$ , n = 3, l = 1, m = 0.
  - b. [Ne]  $3s^23p^5$ , n = 3, l = 1, m = 0.
  - c. [Kr]  $5s^1$ , n = 5, l = 0, m = 0.
  - d. [Ar]  $4s^23d^2$ , n = 3, l = 2, m = -1.
  - e.  $[Ar] 4s^1 3d^5$ , n = 3, l = 2, m = +2.
- **27.** a. [Xe]  $6s^24f^7$ , n = 4, l = 3, m = +3.
- 27. d. [Ae] 05 41, 11 4, 1 3, 111 + 3.
  - b. [Ar]  $4s^23d^{10}4p^6$ , n = 4, l = 1, m = +1.
  - c. [He]  $2s^2$ , n = 2, l = 0, m = 0.
  - d. [Kr]  $5s^24d^{10}5p^3$ , n = 5, l = 1, m = +1.
  - e. [Kr]  $5s^14d^{10}$ , n = 4, l = 2, m = +2.
- **28.** a. [Ar]  $4s^23d^{10}4p^1$ , n = 4, l = 1, m = -1.
  - b. [Xe]  $6s^24f^{14}5d^4$ , n = 5, l = 2, m = +1.
  - c.  $[Kr] 5s^2 4d^{10}5p^5$ , n = 5, l = 1, m = 0.
  - d. [Ar]  $4s^23d^{10}4p^2$ , n = 4, l = 1, m = 0.
  - e.  $[Kr] 5s^14d^5$ , n = 4, l = 2, m = +2.
- 29. C
- 30. E
- 31. a. No cobre, as condições são energeticamente favoráveis para que um elétron seja promovido do orbital 4s para um orbital 3d, gerando uma camada 3d totalmente preenchida. No caso do crono, as condições energeticamente favoráveis para que um elétron seja promovido do orbital 4s para um orbital 3d, gerando uma camada 3d semi-preenchida.
  - b. Cromo,  $[Ar]4s^1 3d^5$ ; cobre  $[Ar]4s^1 3d^{10}$ ; molibdênio,  $[Kr]5s^1 4d^5$ ; paládio,  $Pd[Kr]4d^{10}$ ; prata,  $[Kr]5s^1 4d^{10}$ ; ouro,  $[Xe]6s^1 4f^{14}5d^{10}$
  - c. Os orbitais np têm energia muito menor do que os orbitais (n+1)s.

- 32. No geral, quando o número quântico principal aumenta, a diferença de energia entre os orbitais fica cada vez menor. Essa tendência indica que não é necessária uma grande quantidade de energia para rearranjar a estrutura eletrônica.
- 33. C
- 34. C