

## A DUALIDADE DA NATUREZA DOS ELÉTRONS - PARTÍCULAS OU ONDAS

A teoria planetária da estrutura atômica proposta por Rutherford e Bohr descreve o átomo como um núcleo central circundado por elétrons situados em certas órbitas. O elétron é, pois, considerado como partícula. Na década de 1920, mostrou-se que partículas em movimento, como elétrons, comportavam-se em alguns aspectos como ondas. Esse é um conceito importante para explicar a estrutura eletrônica dos átomos.

Por algum tempo, a luz era tida ora como partícula ora como onda. Certos materiais, como exemplo o potássio, emitem elétrons quando irradiados com luz visível, ou, em alguns casos, com luz ultravioleta. Chama-se a isso efeito fotoelétrico. Ele é explicado imaginando a luz movendo-se na forma de partículas chamadas fótons. Se um fóton colidir com um elétron, ele pode transferir sua energia para o elétron. Se a energia do fóton for suficientemente elevada, ela pode remover o elétron da superfície do metal. Contudo, os fenômenos da difração e interferência da luz só podem ser explicados imaginando a luz comportando-se como uma onda. Em 1924, de Broglie afirmou que com os elétrons existe o mesmo duplo caráter - às vezes eles são considerados como partículas e em outras é mais conveniente considerá-los como ondas. Obteve-se uma evidência experimental da natureza ondulatória dos elétrons observando fotograficamente anéis de difração obtidos quando se conduz um fluxo de elétrons através de uma fina lâmina metálica. A difração de elétrons é hoje em dia uma ferramenta útil na elucidação da estrutura molecular, particularmente em gases. A mecânica ondulatória é um recurso para estudar a estrutura dos níveis eletrônicos nos átomos e a forma dos orbitais ocupados pelos elétrons.

### O Princípio da incerteza de Heisenberg

Em 1927, o físico alemão Werner Heisenberg desenvolveu uma relação importante que mostra a existência de uma limitação rígida e natural, em nossa capacidade de aprender e descrever o movimento de partículas extremamente pequenas. O princípio da incerteza de Heisenberg estabelece que *é impossível conhecer simultaneamente e com certeza a posição e o momento de uma pequena partícula, tal como um elétron.*

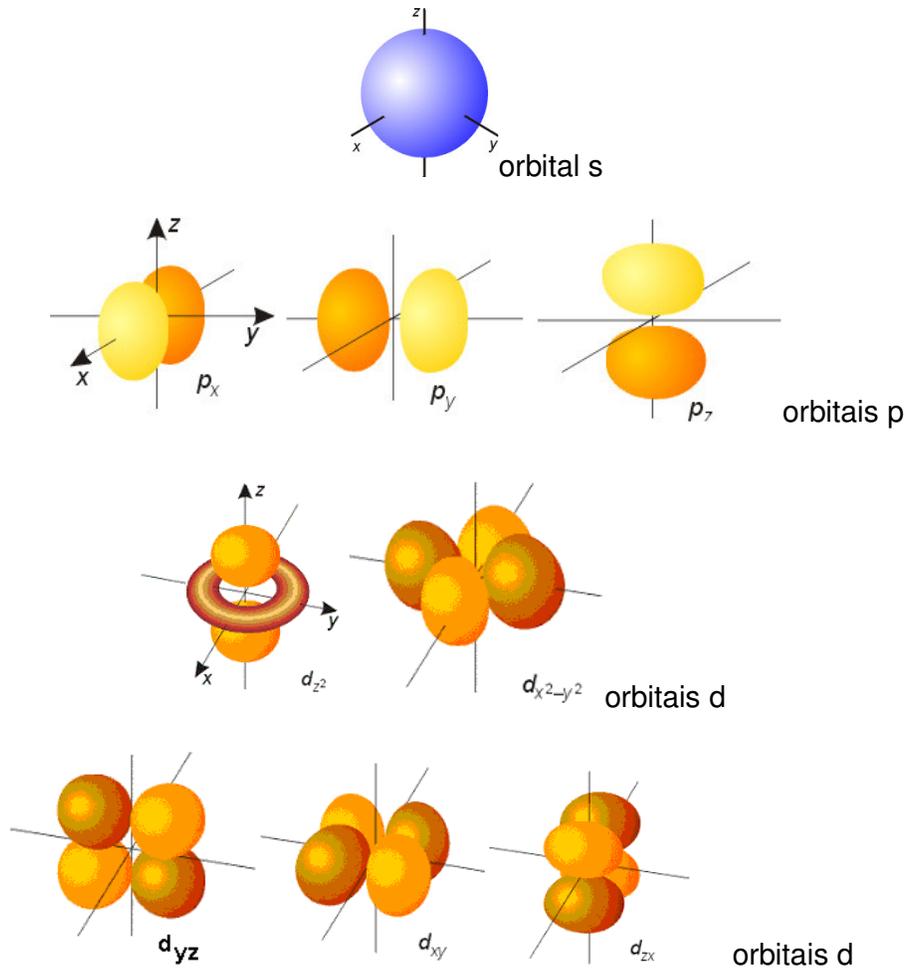
O ponto importante deste princípio é que, para se saber algo sobre a posição e o momento de uma partícula, temos de interagir com ela. Por exemplo: nenhum instrumento pode "sentir" ou "ver" um elétron sem influenciar intensamente o seu movimento. Se, por exemplo, construíssemos um "supermicroscópio" imaginário para localizar um elétron, teríamos de usar uma radiação com um comprimento de onda muito menor do que a luz. Mas a energia da radiação é tão grande que modificaria a velocidade e, conseqüentemente, o momento do elétron, numa quantidade grande e incerta. Para um elétron, entretanto, somos forçados a concluir que qualquer retrato físico ou qualquer modelo mental da estrutura eletrônica do átomo não poderá precisa e simultaneamente localizar o elétron e descrever o seu movimento. Heisenberg formulou que quanto mais exatamente pudermos determinar a posição de um elétron, tanto menor a certeza com que podemos definir sua velocidade, ou vice-versa. Se  $\Delta x \cdot \Delta v = h/2p$  onde  $h$ =constante de Planck= $6,6262 \times 10^{-34}$  Js. Isso significa que é impossível conhecer exatamente a posição e a velocidade de um elétron ao mesmo tempo. O conceito de um elétron percorrendo uma órbita

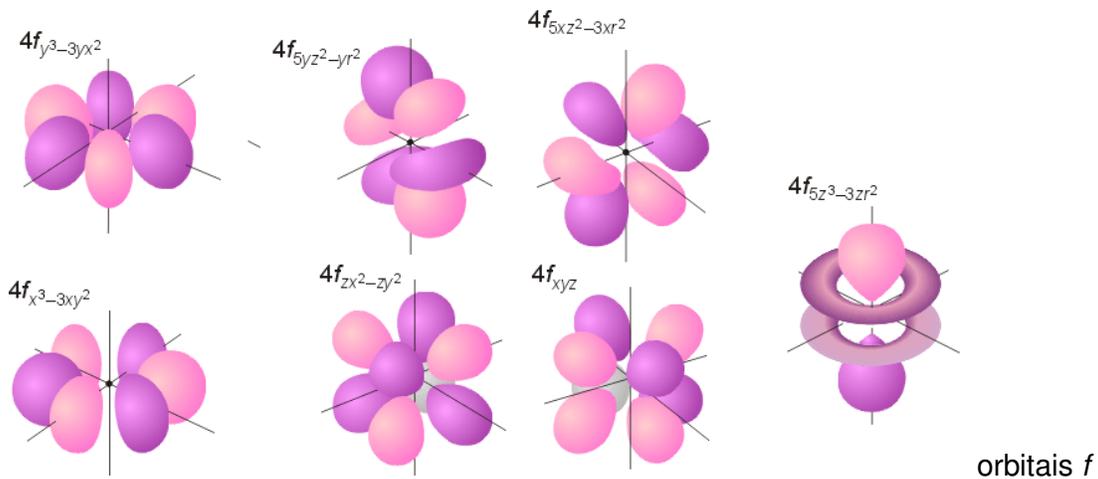
definida, na qual podem ser calculados com exatidão sua posição e velocidade, deve, portanto, ser substituído pela probabilidade de encontrar um elétron numa determinada posição, ou num determinado volume de espaço. A equação de onda de Schrödinger constitui uma descrição satisfatória do átomo. Soluções para a equação de onda são chamadas de funções de onda. Diversas funções de onda poderão satisfazer as condições da equação de onda, e cada uma das funções de onda terá uma energia correspondente. Cada uma das funções é chamada de orbital, em analogia com as órbitas da teoria de Bohr.

**Orbital:** correspondem aos estados individuais que podem ser ocupados por um elétron em um átomo. Cada orbital no átomo acomoda no máximo dois elétrons e, quando dois elétrons ocupam o mesmo orbital, são ditos *emparelhados*. Cada orbital é definido por uma função de onda tridimensional,  $\Psi_{x,y,z}$ , ou, em termos de coordenadas polares,  $\Psi_{r, \vartheta, \varphi}$ , que pode ser desdobrada em uma parte radial e uma parte angular:

$$\Psi_{r, \vartheta, \varphi} = R(r) \cdot A(\vartheta, \varphi)$$

As formas de algumas funções de onda (orbitais) encontram-se nas figuras abaixo:



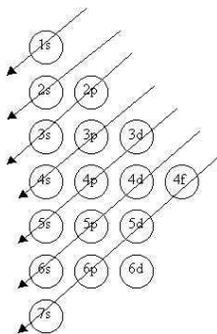


Obs.: O máximo de elétrons em cada orbital é:

Orbital  $s = 2$ ; orbital  $p = 6$ ; orbital  $d = 10$ ; orbital  $f = 14$

### Seqüência de níveis Energéticos

É importante conhecer a seqüência segundo a qual os níveis energéticos são preenchidos. A figura abaixo constitui um auxílio útil. Vêja-se pela figura que a seqüência de preenchimento dos níveis energéticos é:  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, etc.$



Faça a distribuição eletrônica conforme o sentido das setas mostradas na figura acima. Exemplo: Distribuição eletrônica para o oxigênio, o qual possui número atômico 8, portanto número de elétrons igual a 8.  $O = 1s^2 2s^2 2p^4$

### Número Quântico Principal ( $n$ )

Os níveis de energia num átomo estão arranjados em níveis principais, ou **camadas**, determinados pelo número quântico principal,  $n$ . Quanto maior o valor de  $n$  maior a energia média dos níveis pertencentes à camada. Veremos também que  $n$  determina o tamanho dos orbitais. Como na teoria de Bohr,  $n$  pode ter valores de 1, 2, 3, ... e assim por diante até infinito. Frequentemente, são também associadas letras com estas camadas, como é mostrado a seguir.

Número quântico principal	1	2	3	4	...
Designação por letra	K	L	M	N	...

## Número Quântico Azimutal ( $l$ )

A mecânica ondulatória prevê que cada camada principal é composta de uma ou mais **subcamadas**, ou subníveis, cada um dos quais é especificado por um número quântico secundário,  $l$ , chamado número quântico azimutal. Este número quântico determina a forma do orbital e, até um certo ponto, a sua energia. Para qualquer camada,  $l$  pode ter valores de 0, 1, 2 e assim por diante até um máximo igual a  $n - 1$  para aquela camada. Assim, quando  $n = 1$  o único valor permitido de  $l$  é  $l = 0$ . Portanto, a camada K consiste de apenas uma subcamada. Quando  $n = 2$ , ocorrem dois valores de  $l$ ,  $l = 0$  e  $l = 1$ ; assim, a camada L é composta de duas subcamadas. Os valores de  $l$  que ocorrem para cada valor de  $n$  estão mostrados a seguir.

Valores de $l$	0	1	2	3	4	5	6	...
Designação da subcamada	s	p	d	f	g	h	i	...

## Número Quântico Magnético ( $m_l$ )

Cada subcamada é composta de um ou mais orbitais. Um orbital dentro de uma subcamada particular é caracterizado por seu valor de  $m_l$ , que serve para determinar sua orientação no espaço em relação aos outros orbitais. Ele tem valores inteiros que variam de  $-l$  a  $+l$ . Quando  $l = 0$ , existe apenas um valor de  $m_l$ ,  $m_l = 0$ ; portanto, uma subcamada  $s$  consiste apenas de um orbital (chamado de orbital  $s$ ). Uma subcamada  $p$  ( $l = 1$ ) contém três orbitais que correspondem a  $m_l$  igual a  $-1, 0$  e  $+1$ .

Valores de $m_l$	0	-1, 0 +1	-2, -1, 0, +1, +2	...
Designação da subcamada	s	p	d	...

## Número Quântico de Spin ( $m_s$ )

De acordo com a mecânica quântica, um elétron tem dois estados de spin, representados pelas setas  $\uparrow$  e  $\downarrow$  ou pelas letras gregas  $\alpha$  e  $\beta$ . Podemos imaginar um elétron girando no sentido anti-horário a uma certa velocidade (o estado  $\uparrow$ ) ou no sentido horário a exatamente a mesma velocidade (o estado  $\downarrow$ ). Estes dois estados de spin são distinguidos pelo quarto número quântico, o número quântico magnético de spin,  $m_s$ . Este número quântico pode ser somente dois valores:  $+ \frac{1}{2}$  indica um elétron  $\uparrow$ , e  $- \frac{1}{2}$  indica um elétron  $\downarrow$ .

## Sumário dos Números Quânticos

Nome	Símbolo	Valores	Significado	Indica
Principal	$n$	1, 2, 3 ...	a camada ou a energia	tamanho
Azimutal	$l$	0, 1, 2, ... $n - 1$	subcamada	forma
Magnético	$m_l$	$-l, 0, +l$	orbitais da subcamada	direção
Spin Magnético	$m_s$	$+ \frac{1}{2}, - \frac{1}{2}$	estado do spin	direção do spin

## O Princípio da Exclusão de Pauli

Para definir um orbital são necessários três números quânticos  $n$ ,  $l$  e  $m$ . Cada orbital pode conter dois elétrons, desde que eles tenham spins opostos. Um número quântico adicional é necessário para definir o spin de um elétron no orbital. Portanto, são necessários quatro números quânticos para definir a energia de um elétron num átomo. O Princípio da Exclusão de Pauli diz que os dois elétrons de um orbital não podem ter iguais os quatro números quânticos. Trocando os números quânticos, é possível calcular o número máximo de elétrons contidos em cada um dos níveis energéticos principais.

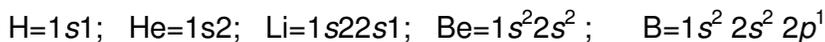
### A regra de Hund e a Construção dos Átomos

O elemento mais simples, o hidrogênio, possui um elétron, que ocupa o nível  $1s$ , este nível tem número quântico principal  $n=1$ , e número quântico secundário  $l=0$ .

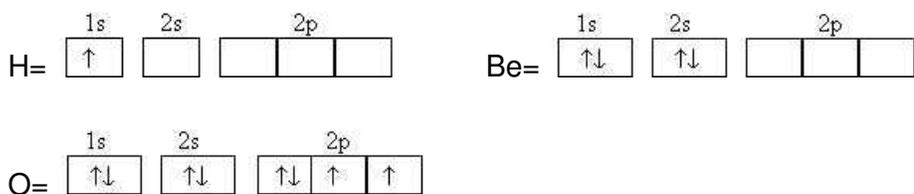
O hélio possui dois elétrons. O segundo elétron também ocupa o orbital  $1s$ . Isso é possível porque os dois elétrons apresentam spins opostos. O nível  $1s$  está assim completo.

O elemento seguinte, o lítio, apresenta três elétrons. O terceiro elétron ocupa o próximo nível energético, que é o nível  $2s$ , de número quântico principal  $n=2$  e número quântico secundário  $l=0$ . O quarto elétron do berílio também ocupa o nível  $2s$ . O boro deve ter seu quinto elétron no nível  $2p$ , pois o nível  $2s$  estará completamente preenchido. O sexto elétron do carbono estará também no nível  $2p$ . A regra de Hund estabelece que o número de elétrons não emparelhados num dado nível energético é o máximo. Assim, no estado fundamental, os dois elétrons  $p$  do carbono estão desemparelhados. Eles ocupam orbitais  $p$  separados e possuem spins paralelos.

Para mostrar a posição dos elétrons num átomo, usam-se os símbolos  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ , etc. para indicar o nível energético principal e o subnível. Um índice indica o número de elétrons em cada série de orbitais. Por exemplo, o hidrogênio contém 1 elétron, o que se indica por  $1s^1$ . No hélio, o nível  $1s$  contém 2 elétrons, o que se indica por  $1s^2$ . As estruturas eletrônicas podem ser escritas como abaixo:



Uma maneira alternativa de representar a estrutura eletrônica de um átomo é representar os orbitais por quadrados e os elétrons por pequenas setas:



**Exercícios:**

01. Complete a tabela abaixo, com um sumário dos números quânticos:

Nº Quântico Principal ( $n$ )	Nº Quântico Azimutal ( $l$ )	Designação da subcamada	Nº Quântico Magnético ( $m_l$ )	Nº de Orbitais na camada

02. Quais os valores permitidos ao número quântico  $n$ ? Quais as restrições existentes nos valores permitidos de  $l$ ? Quais os valores que o número quântico magnético  $m$  pode ter?

03. Quantos elétrons podem ser encontrados em cada um dos seguintes subcamadas:  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$ ,  $g$ ,  $h$ ? Qual é o mais baixo valor de  $n$  para uma camada que tem uma subcamada  $h$ ? Quais são os valores de  $l$  permitidos para  $h$ ?

04. Quantas subcamadas existem para: a)  $n=2$ . b)  $n=3$ ? c) Quais são os valores permitidos para  $l$  quando  $n=3$ ?

05. Quantas subcamadas existem para  $n=5$ ? b) Identifique as subcamadas dando o nome associado a elas (por exemplo,  $5s$ , etc.). c) Quantos orbitais há em uma camada com  $n=5$ ?

06. Dê os valores de  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$  para cada elétron de uma camada  $L$  completa.

07. Calcule o número total de orbitais em uma camada com  $n=6$ ?

08. Os quatro números quânticos de um elétron em um átomo em um determinado estado são  $n=4$ ,  $l=2$ ,  $m_l = -1$  e  $m_s = +1/2$ . Qual a configuração eletrônica deste átomo?

09. Os quatro números quânticos de um elétron em um átomo em um determinado estado são  $n=3$ ,  $l=1$ ,  $m_l = -1$ , e  $m_s = -1/2$ . Qual a configuração eletrônica deste átomo?

10. Prediga as configurações eletrônicas dos átomos de sódio, magnésio, silício, estanho, bismuto e níquel no estado fundamental?

11. Quantos orbitais há em uma subcamada com: a)  $l=0$ ; b)  $l=2$ ; c)  $l=1$ ; d)  $l=3$ ?

12. Quais são os quatro números quânticos para cada um dos seguintes átomos (elétron mais energético):

a)  $5s^1$ ; b)  $5f^{14}$ ; c)  $2p^3$ ; d)  $3d^5$ ; e)  $6p^3$ ; f)  $4s^1$ ; g)  $1s^2$ ; h)  $7p^5$ ; i)  $4f^{14}$ .

13. Quantos elétrons podem ter os seguintes números quânticos em um átomo?

a)  $n=2$ ,  $l=1$ ,  $m_l = -1$ ; b)  $n=4$ ,  $l=2$ ,  $m_l = -2$ ; c)  $n=2$ ;  $l=0$ ,  $m_l = 0$  d)  $n=3$ ,  $l=2$ ,  $m_l = +1$ .

14. Quais são as seguintes subcamadas que não podem existir em um átomo?

a)  $2d$ ; b)  $4d$ ; c)  $4g$ ; d)  $6f$ ; e)  $1p$ ; f)  $3f$ ; g)  $7p$ ; h)  $5d$ ?