

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.*

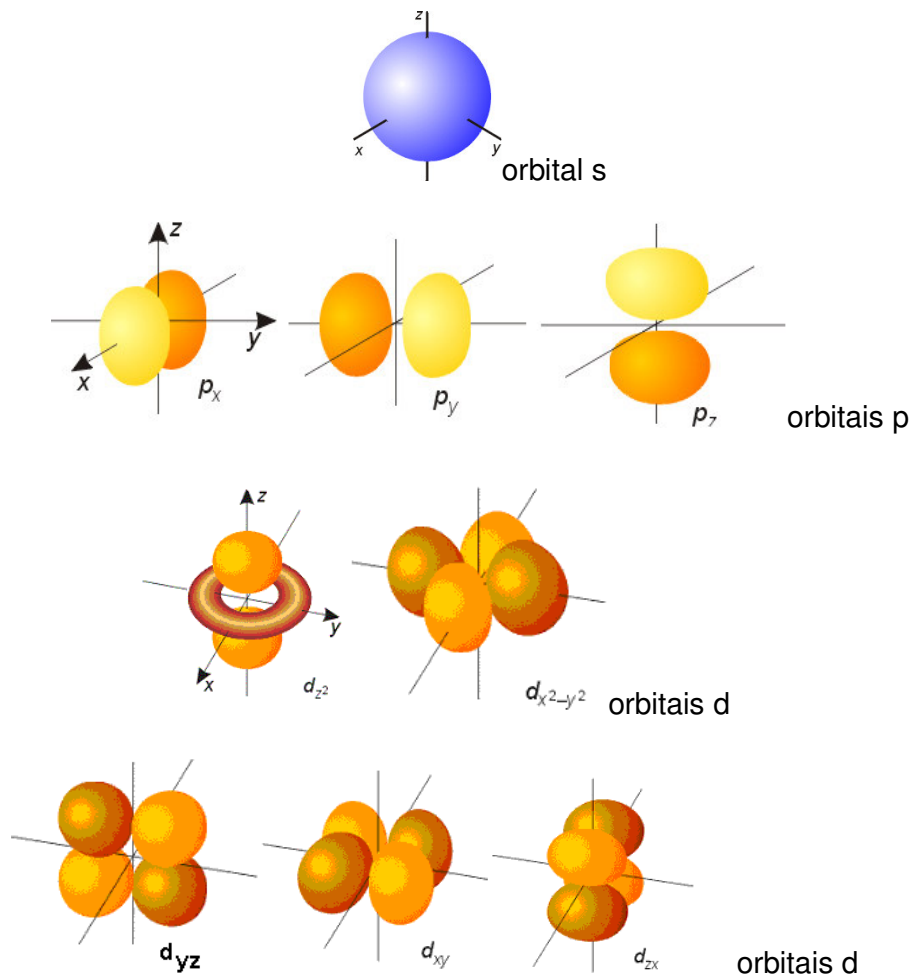
O ponto importante deste princípio é que, para se saber algo sobre a posição e o momento de uma partícula, temos de interagir com ela. Por exemplo: nenhum instrumento pode "sentir" ou "ver" um elétron sem influenciar intensamente o seu movimento. Se, por exemplo, construíssemos um "supermicroscópio" 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

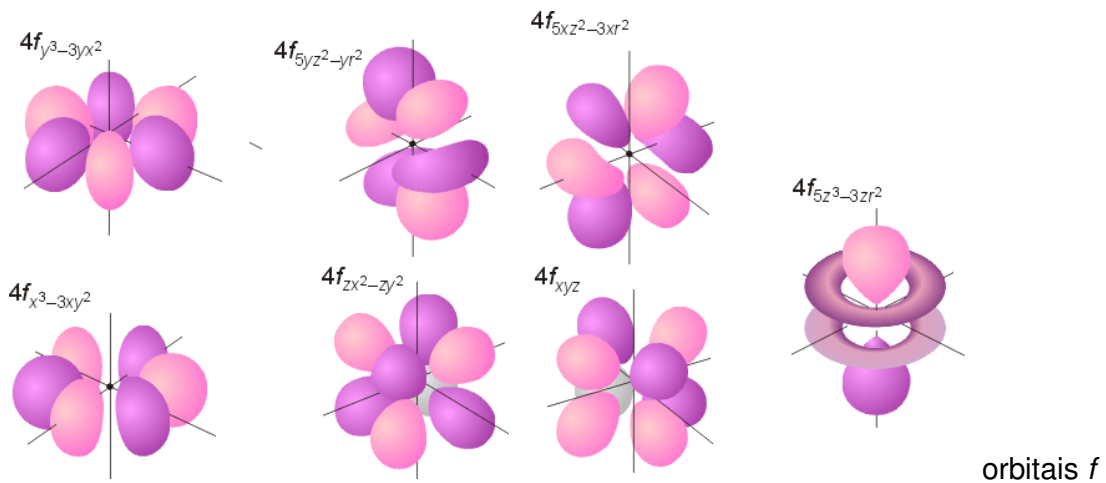
definida, na qual podem ser calculados com exatidão sua posição e velocidade, deve, portanto, ser substituído pela probabilidade de encontrar um elétron numa determinada posição, ou num determinado volume de espaço. A equação de onda de Schrödinger constitui uma descrição satisfatória do átomo. Soluções 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:



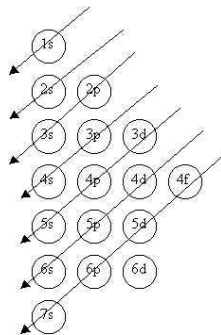


Obs.: O máximo de elétrons em cada orbital é:

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 α e β . 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.

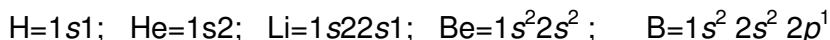
A regra de Hund e a Construção dos Átomos

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 $l=0$.

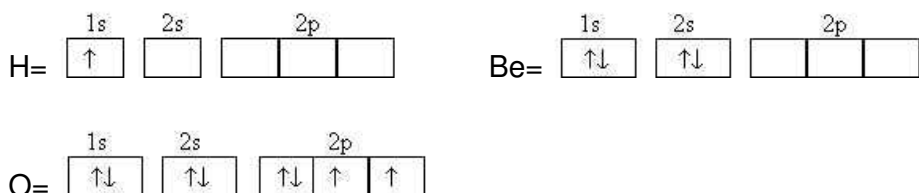
O hélio possui dois elétrons. O segundo elétron também ocupa o orbital $1s$. Isso é possível porque os dois elétrons apresentam spins opostos. O nível $1s$ está assim completo.

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) $5d$?