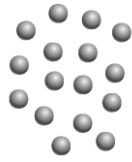


Estrutura Eletrônica dos Átomos

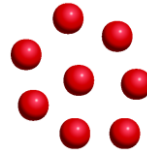
1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

Evolução do Modelo Atômico

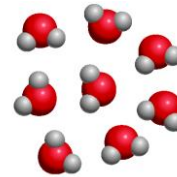
DALTON



Atoms of element X



Atoms of element Y



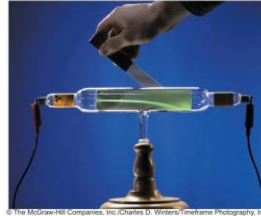
Compounds of elements X and Y

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

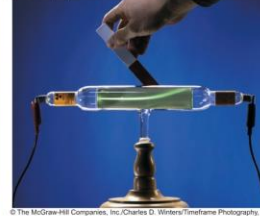
THOMSON



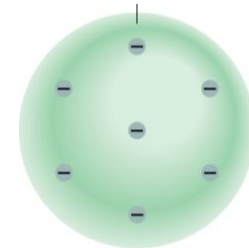
(a)



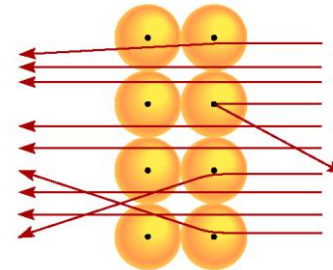
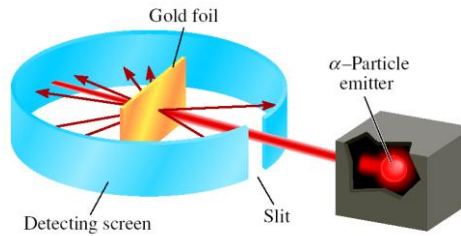
(b)



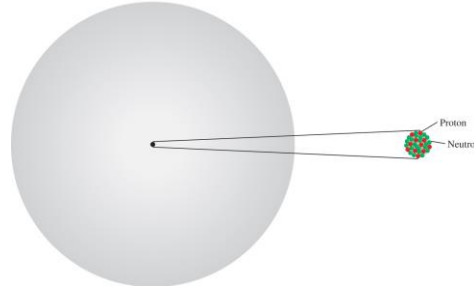
(c)



RUTHERFORD

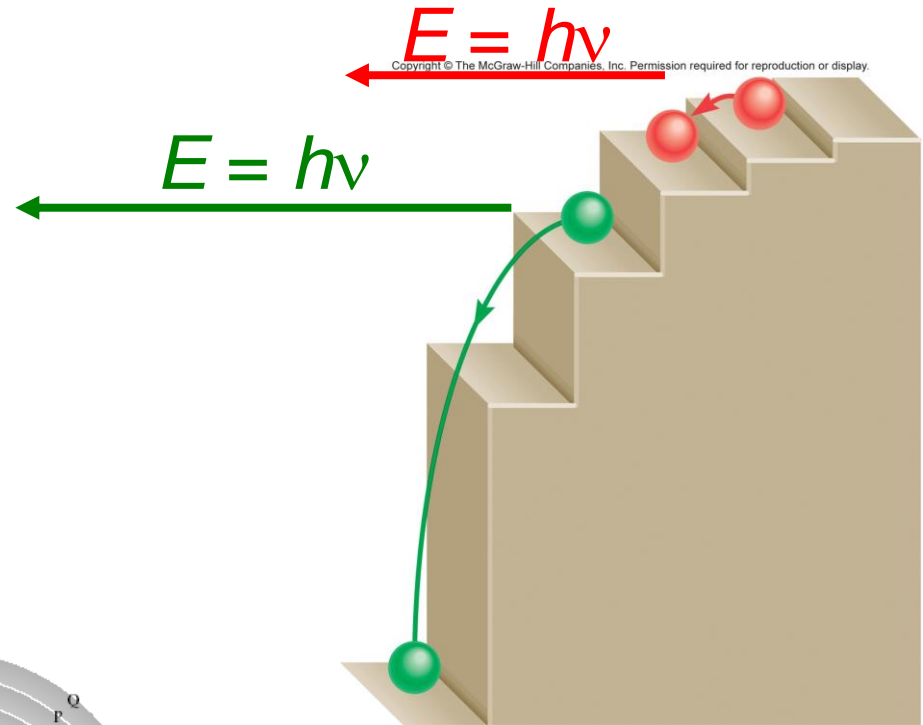
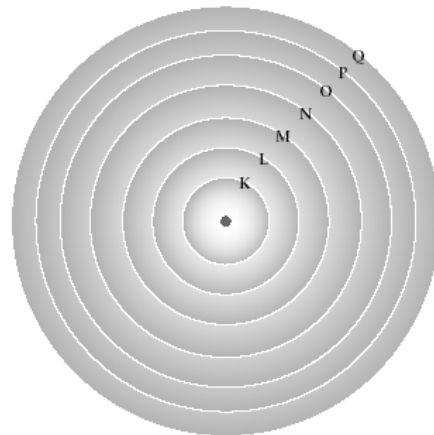
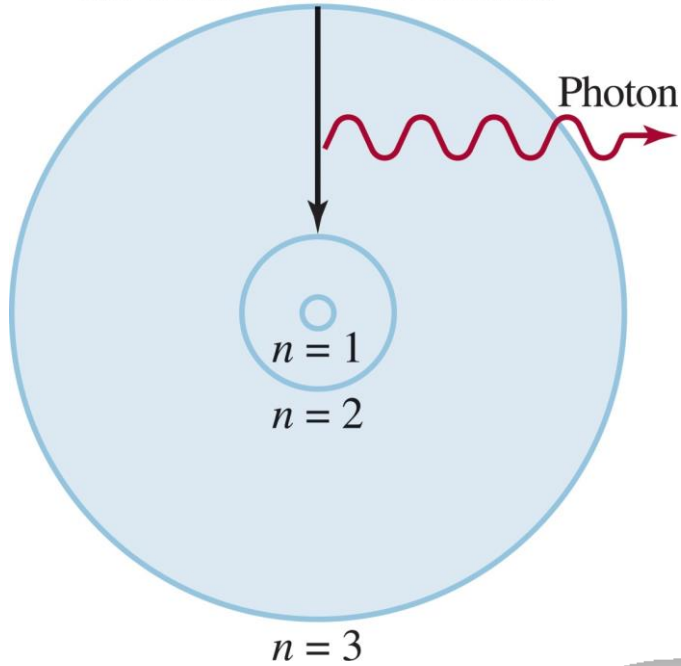


Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



BOHR

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Representação das camadas eletrônicas de átomos.

Evolução do Modelo Atômico

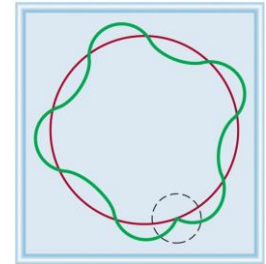
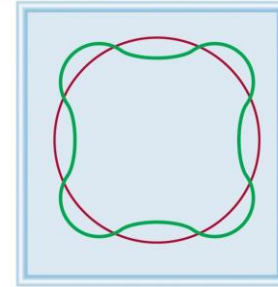
Propriedades Ondulatórias

Louis de Broglie: os elétrons teriam características de onda.

Heisenberg: *princípio da incerteza:*

“é impossível fixar a posição de um elétron em um átomo com qualquer grau de certeza se o elétron for descrito como uma onda”.

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



SCHRÖDINGER

**Resolução da Mecânica
quântica para o H
(números quânticos)**

Schrödinger: Devido a dificuldade de se prever a posição exata, calculou a região de maior probabilidade de se encontrar os elétrons (orbital).

ORBITAL: região do espaço onde é máxima a probabilidade de se encontrar um elétron.

Números quânticos

1. NÚMERO QUÂNTICO PRINCIPAL, n .

Mesmo n de Bohr. Dá informações a respeito do nível energético possível de encontrar os elétrons. Possui qualquer valor inteiro de 1 ao infinito.

Número Máximo Teórico de elétrons em cada camada e dado pela Equação de Rydberg: $x = 2n^2$

Nível (n)	1	2	3	4	5	6	7
camada	K	L	M	N	O	P	Q
Nº Max de e ⁻	2	8	18	32	32 (50)	18 (72)	8 (98)

Números quânticos

2. O NÚMERO QUÂNTICO SECUNDÁRIO l .

Esse número quântico depende do valor de n .

Os valores de l iniciam de 0 e aumentam até $n - 1$.

Normalmente utilizamos letras para l (s , p , d e f para $l = 0, 1, 2$, e 3).

O número máximo de elétrons em uma subcamada (subnível) pode ser calculado pela fórmula: **$[2 \cdot (2l + 1)]$**

Subnível	n° quântico (l)	Máximo de elétrons
s	0	2
p	1	6
d	2	10
f	3	14

Números quânticos

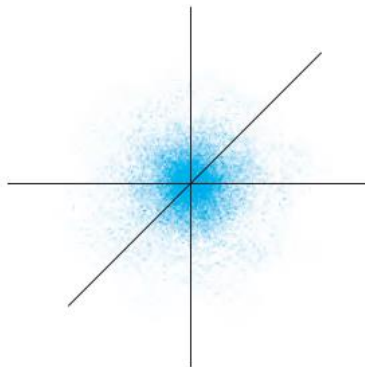
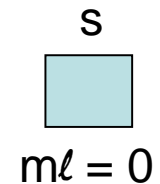
3. ORBITAL = NÚMERO QUÂNTICO TERCIÁRIO OU MAGNÉTICO, m_l

Esse número quântico depende de l . O número quântico magnético tem valores inteiros entre $-l$ e $+l$.

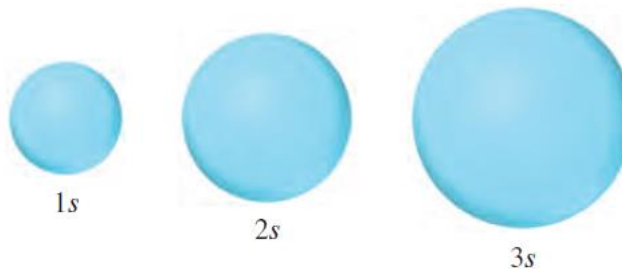
Caracteriza o orbital em que existe a probabilidade de se encontrar o elétrons.

O número quântico magnético assume valores positivos e negativos. Pode ser calculado pela fórmula **$(2l + 1)$**

$$l = 0 \longrightarrow (2 \cdot 0 + 1) = 1 - \text{corresponde ao subnível s}$$



(a) Um modelo de densidade eletrônica



(b) Modelos de superfícies limite

Orientação no espaço.

Números quânticos

3. ORBITAL = NÚMERO QUÂNTICO TERCIÁRIO OU MAGNÉTICO, m_l

$l = 1 \longrightarrow (2 \cdot 1 + 1) = 3$ - corresponde ao subnível p

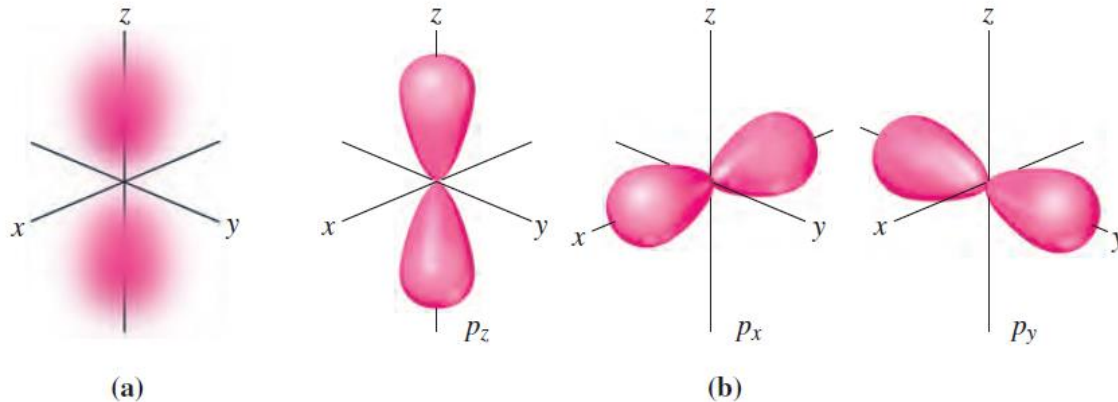
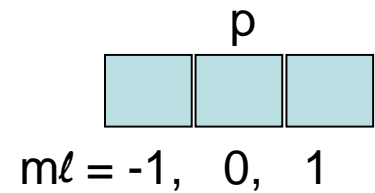


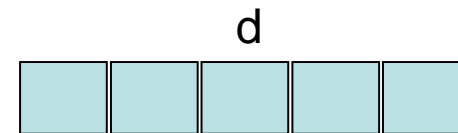
Figura 6.23 Os orbitais p. (a) Distribuição da densidade eletrônica de um orbital 2p. (b) Representações de superfícies limite dos três orbitais p. O subscrito na classificação do orbital indica o eixo ao longo do qual o orbital se encontram.

Orientação no espaço.

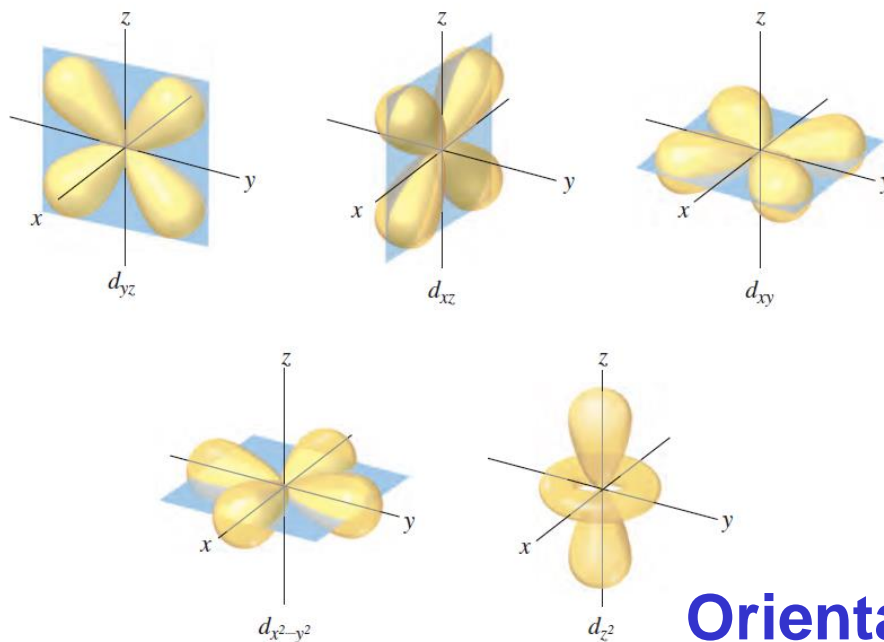
Números quânticos

3. ORBITAL = NÚMERO QUÂNTICO TERCIÁRIO OU MAGNÉTICO, m_l

$l = 2 \rightarrow (2 \cdot 2 + 1) = 5$ - corresponde ao subnível d



$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$



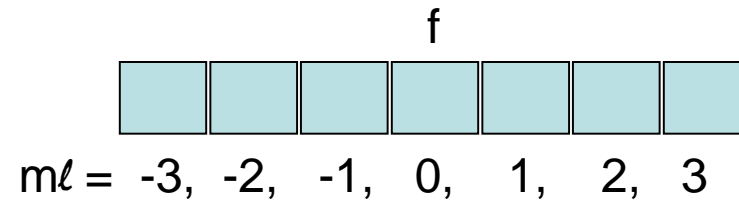
Orientação no espaço.

Figura 6.24 Representações de superfícies limite dos cinco orbitais d.

Números quânticos

3. ORBITAL = NÚMERO QUÂNTICO TERCIÁRIO OU MAGNÉTICO, m_l

$l = 3 \rightarrow (2 \cdot 3 + 1) = 7$ - corresponde ao subnível f



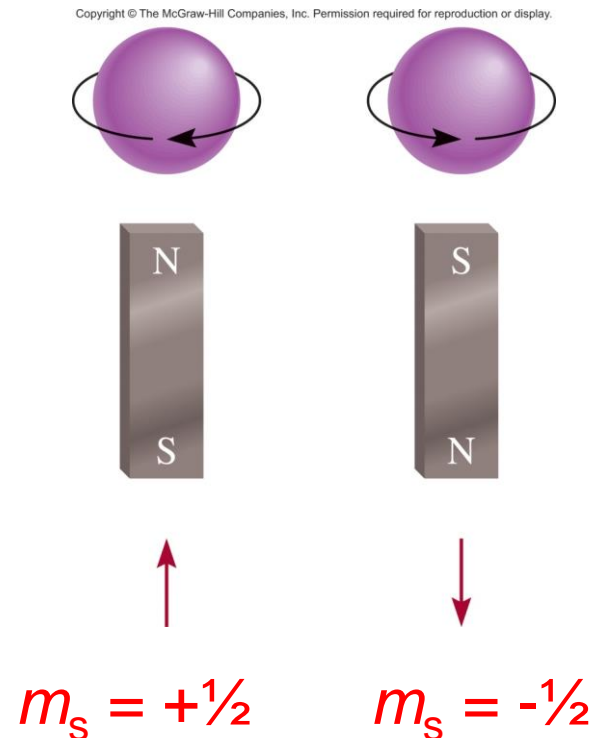
Números quânticos

4. O NÚMERO QUÂNTICO QUATERNÁRIO OU SPIN, m_s ou s .

Está relacionado à rotação do elétron.

É utilizado para distinguir os elétrons de um mesmo orbital.

À um deles atribui-se arbitrariamente o valor $+1/2$ e ao outro $-1/2$



Nos átomos polieletrônicos, como é que se distribuem os elétrons pelos orbitais?

A distribuição dos elétrons de átomos polieletrônicos pelos orbitais atômicos obedece a **regras e princípios**.

1. Princípio da Energia Mínima
2. Princípio de Exclusão de Pauli
3. Regra de Hund

1. Princípio da Energia Mínima

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6, 6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^6, 7s^2, 5f^{14}, 6d^{10}, 7p^6$

ORDEM CRESCENTE DE ENERGIA 

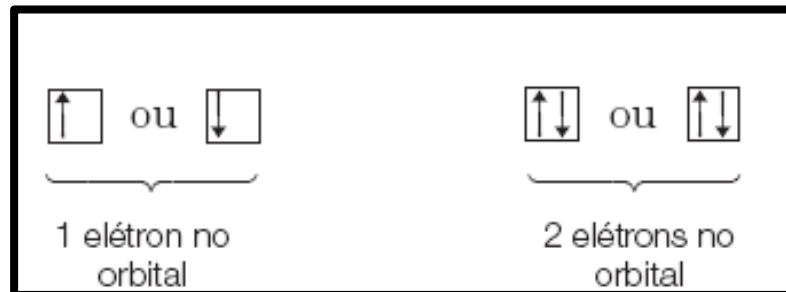
Átomos polieletrônicos

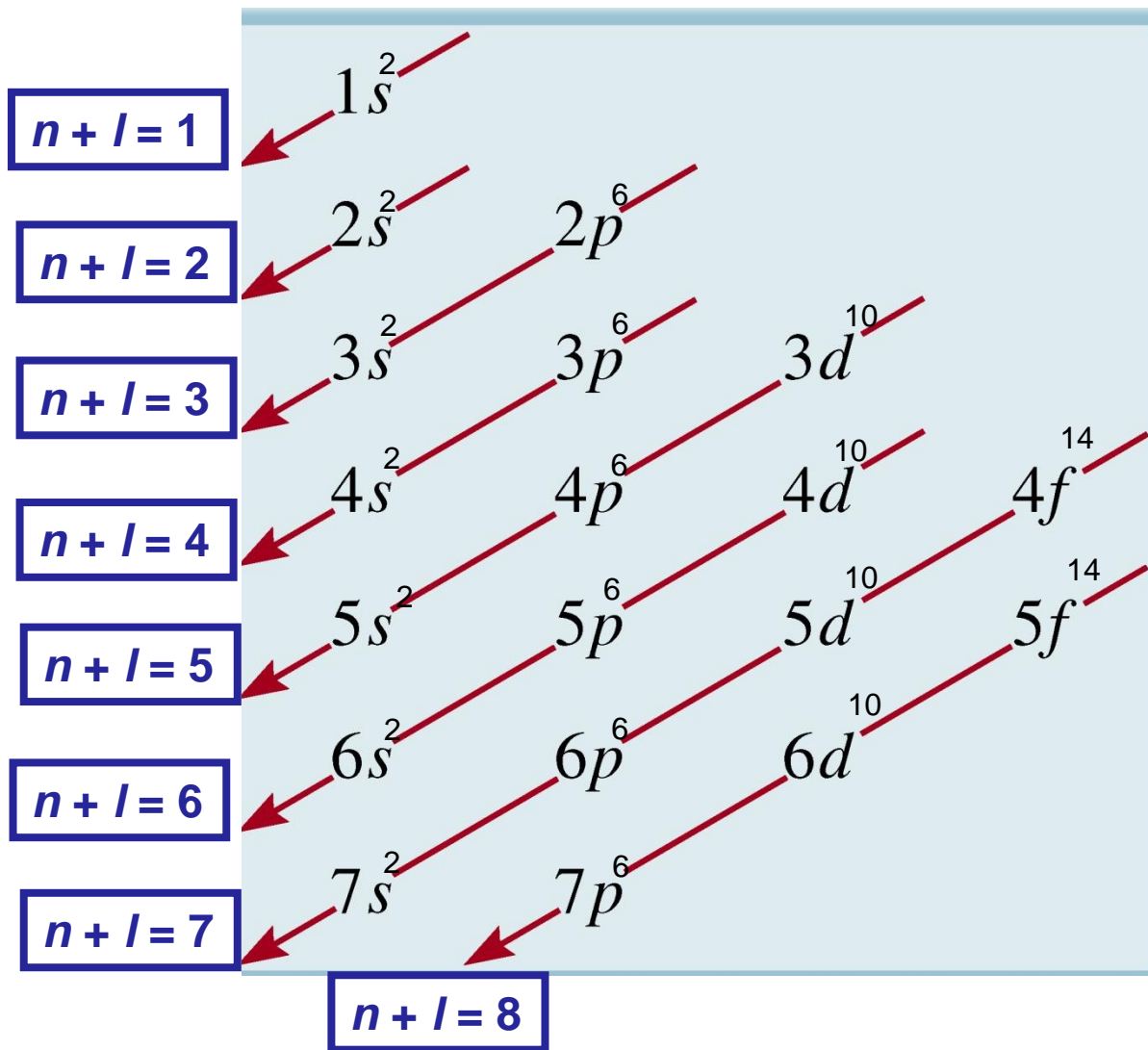
2. Princípio de exclusão de Pauli: estabelece que nenhum par de elétrons em um átomo pode ter o mesmo conjunto de quatro números quânticos n , l , m_l e m_s .

3. Regra de Hund: determina que, para orbitais degenerados, a menor energia é alcançada quando o número de elétrons que têm o mesmo spin é maximizado.

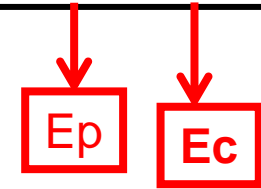
Átomos polieletrônicos

- Os orbitais são ocupados em ordem crescente de energia, com no máximo dois elétrons por orbital (um por vez).
- Cada orbital é indicado por uma linha na base ou uma caixinha e cada elétron por uma seta ou meia seta.
- A seta ou meia seta que aponta para cima (*spin-up*) representa um elétron com um número quântico de spin magnético positivo
- A seta ou meia seta que aponta para baixo (*spin-down*) representa um elétron com um número quântico de spin magnético negativo.





“Regra” do $n+l$



Subnível	<u>n° quântico (l)</u>
s	<u>0</u>
p	<u>1</u>
d	<u>2</u>
f	<u>3</u>

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6, 6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^6, 7s^2, 5f^{14}, 6d^{10}, 7p^6$

ORDEM CRESCENTE DE ENERGIA



ELEMENTO QUÍMICO

➤ é o conjunto formado por átomos de mesmo número atômico (Z).

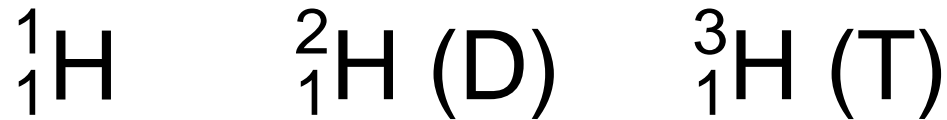
➤ Ou seja, cada elemento químico corresponde um Z.

Número Atômico (Z) = número de prótons (P) no núcleo

Número de Massa (A) = número de prótons + número de neutrons (N)

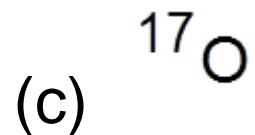
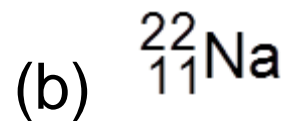
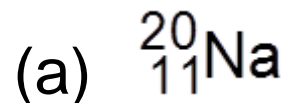
$$A = Z + N \quad \text{e} \quad A = P + N$$

Isótopos



Exemplo

Dê o número de prótons, neutrons e elétrons de cada um das seguintes espécies:



ÁTOMOS POLIELETRÔNICOS

- No hidrogênio, a energia de um orbital depende apenas do seu número quântico principal, n . Em um átomo polieletrônico, contudo, as energias das várias subcamadas em uma determinada camada são diferentes devido à repulsão entre os elétrons.
- Em um átomo polieletrônico, para um dado valor de n , a energia de um orbital aumenta com o aumento do valor de l .

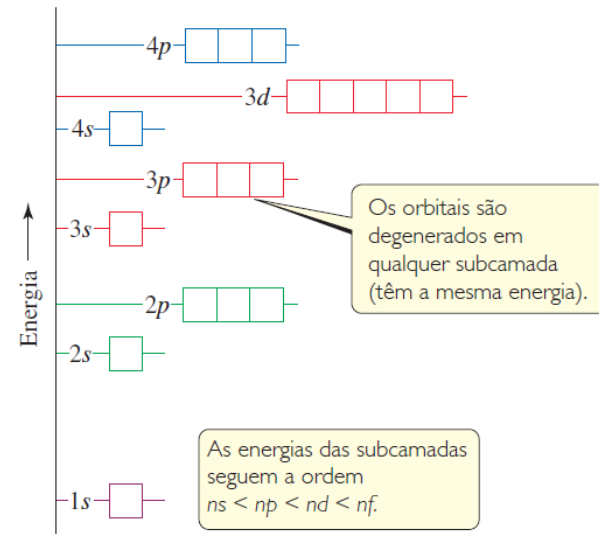


Figura 6.25 Ordenamento dos níveis de energia dos orbitais em um átomo polieletrônico.

Espécies mono e polieletrônicas

Átomo de Hidrogênio (${}_1\text{H}$)

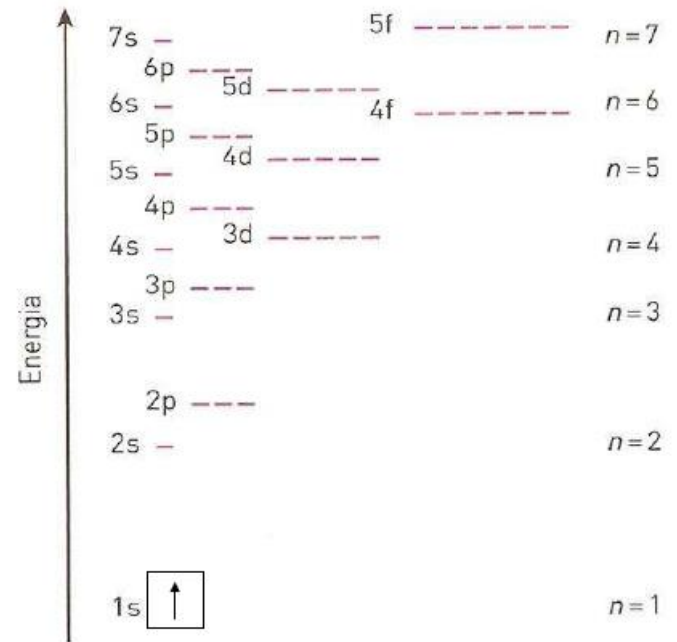
→ um elétron

Configuração eletrônica: $1s^1$

representa o número quântico principal, n

representa o número quântico secundário, l

representa o número de elétrons no orbital



${}_1\text{H}$

Átomo de Hélio (${}_{2}\text{He}$)

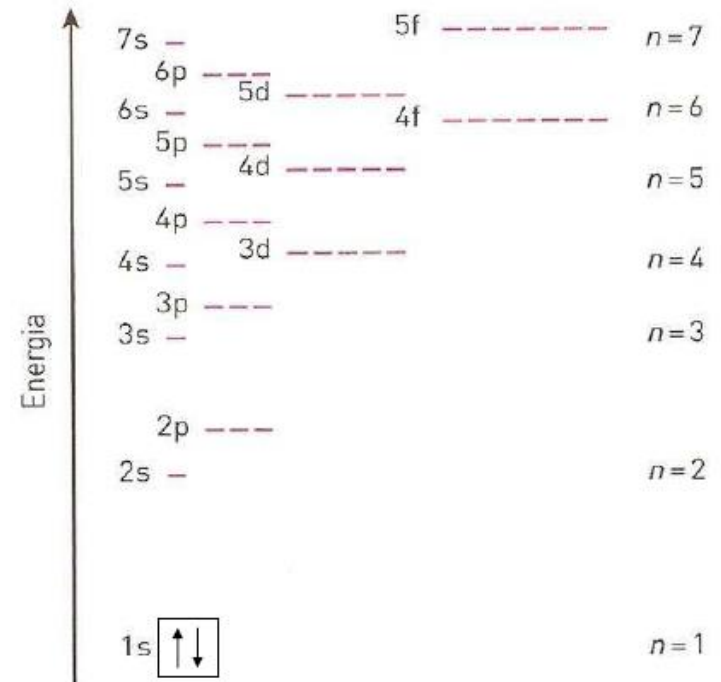
⇒ dois elétrons

Configuração eletrônica: **1s²**

representa o número quântico principal, n

representa o número quântico secundário, l

representa o número de elétrons no orbital

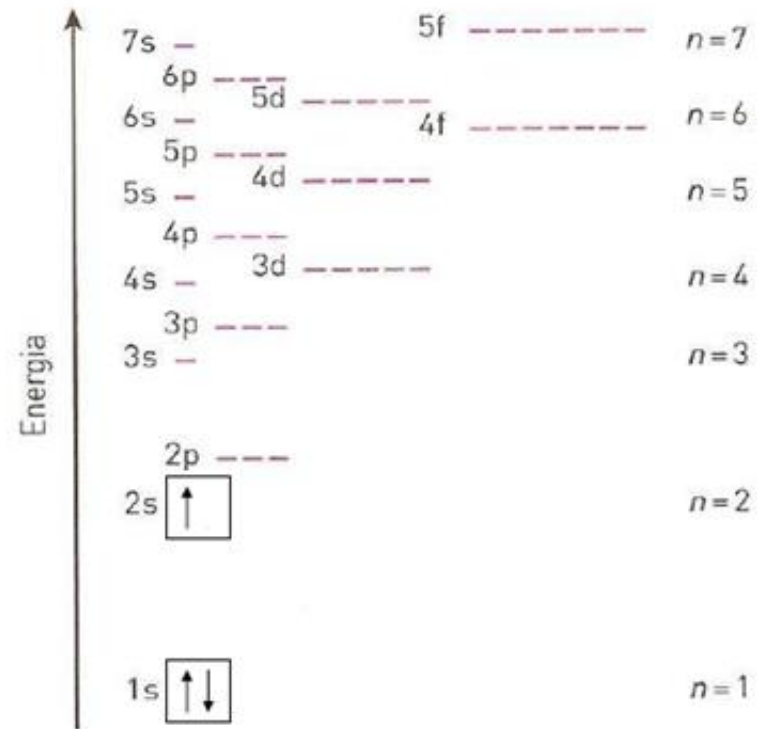


${}_{2}\text{He}$

Átomo de Lítio (${}_3\text{Li}$)

→ três elétrons

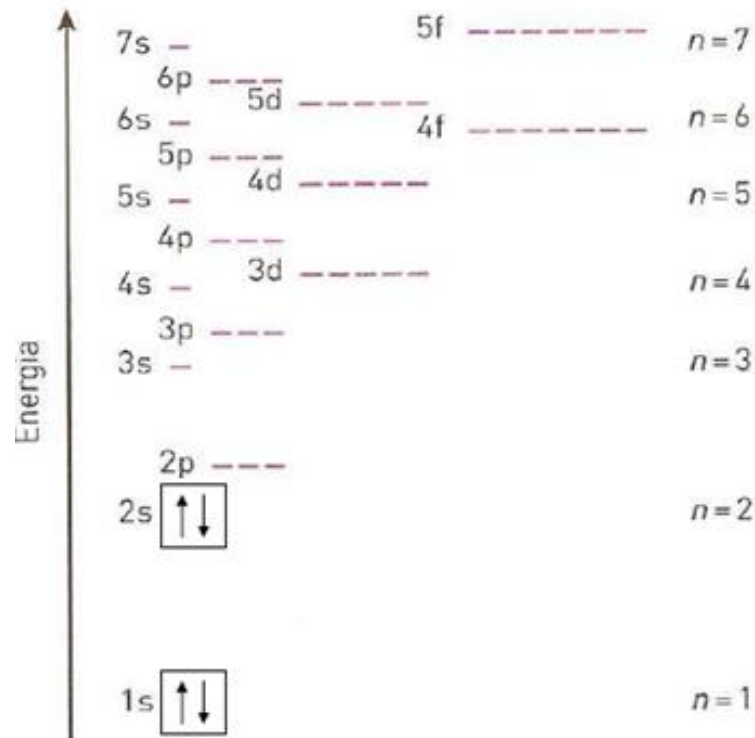
Configuração eletrônica: $1s^2 2s^1$



Átomo de Berílio (${}_4\text{Be}$)

→ quatro elétrons

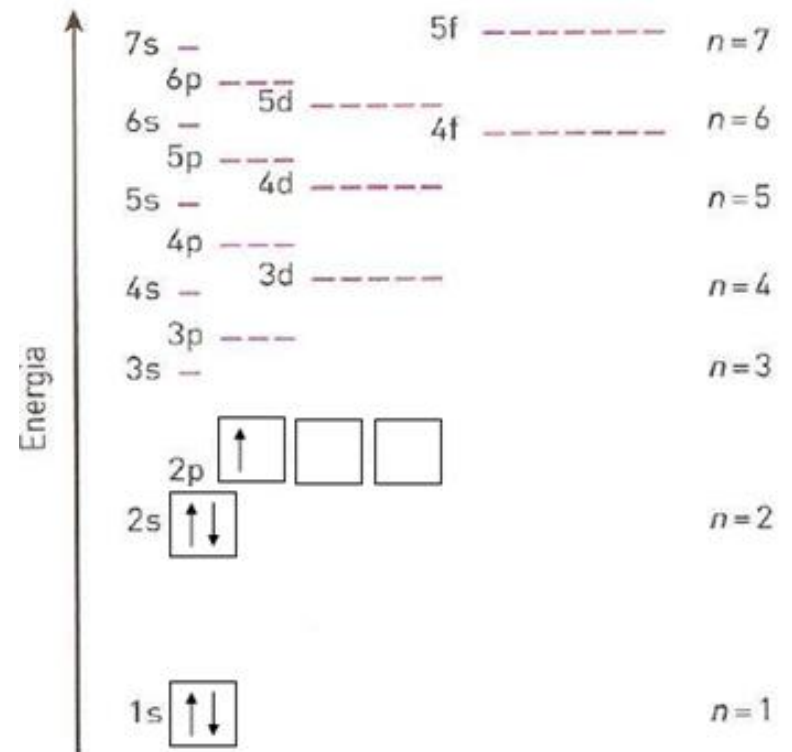
Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2$



Átomo de Boro (${}_5\text{B}$)

➔ cinco elétrons

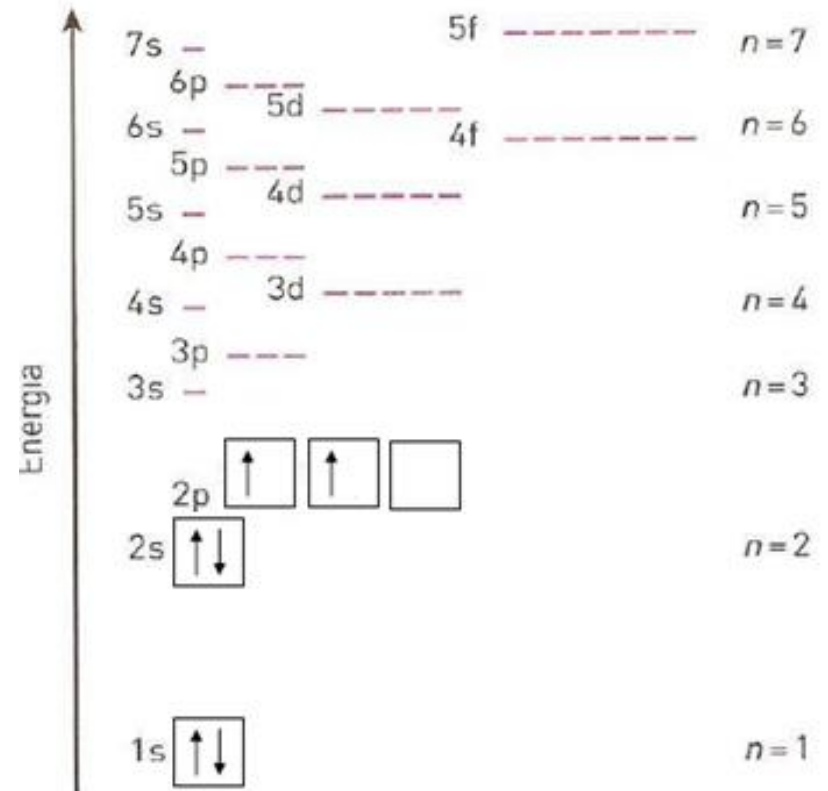
Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^1$



Átomo de Carbono (${}_6\text{C}$)

⇒ seis elétrons

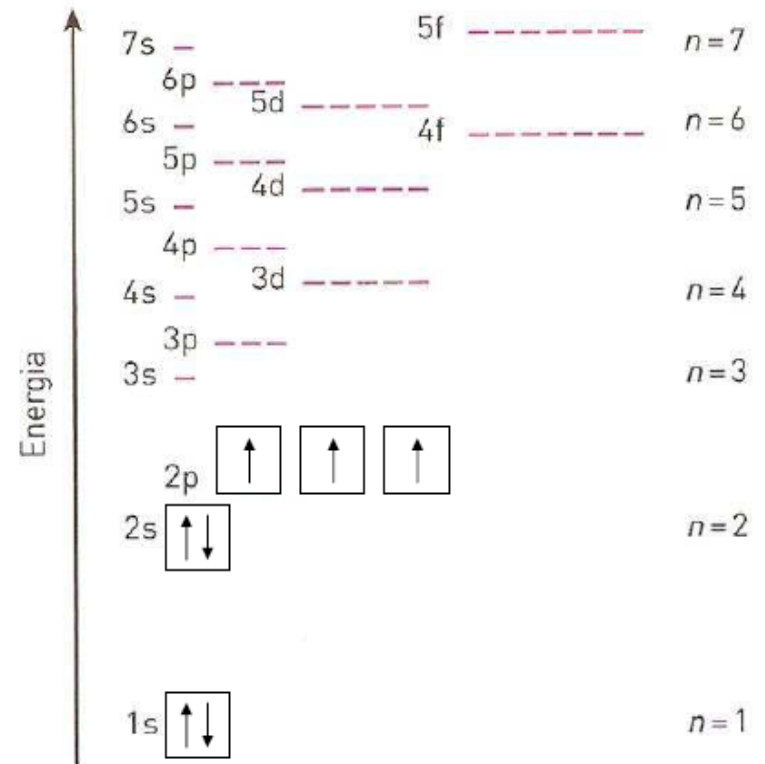
Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^2$



Átomo de Nitrogênio(${}_7\text{N}$)

➔ sete elétrons

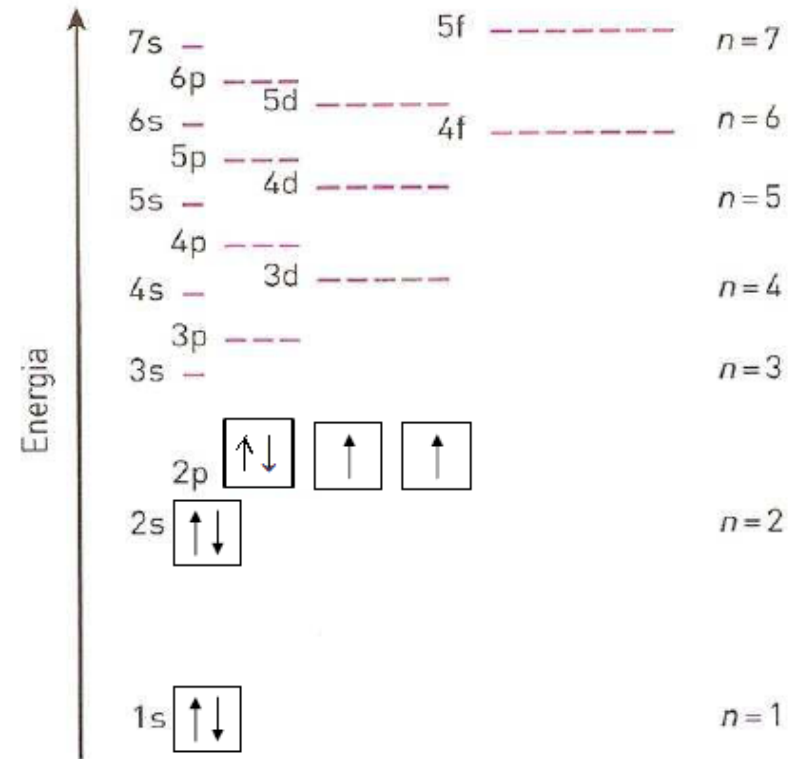
Configuração eletrônica:



Átomo de Oxigênio (${}_8\text{O}$)

➡ oito elétrons

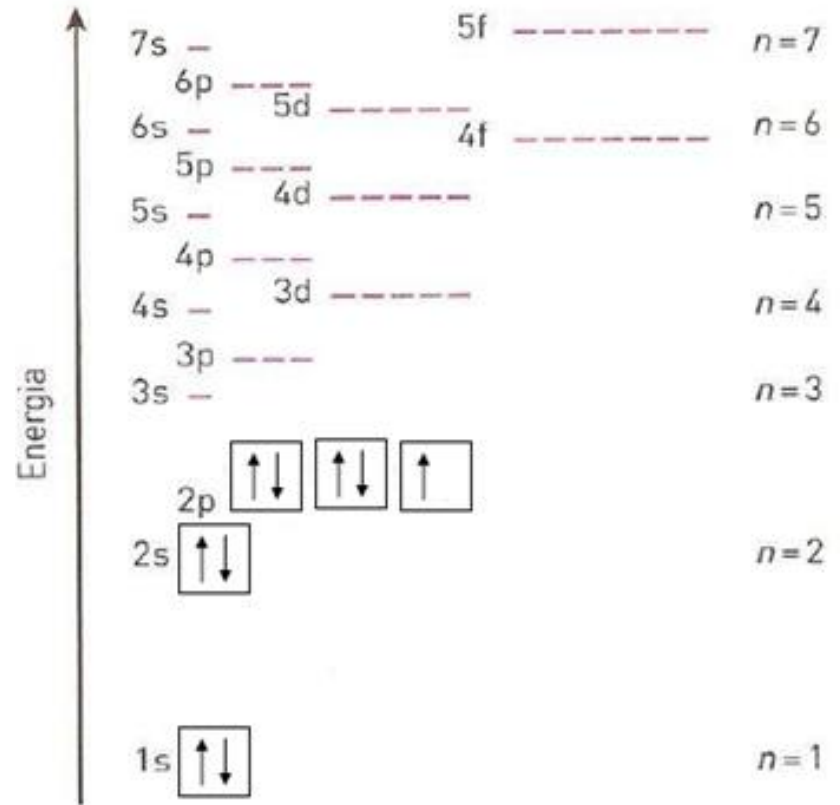
Configuração eletrônica:



Átomo de Flúor (${}_9\text{F}$)

➔ nove elétrons

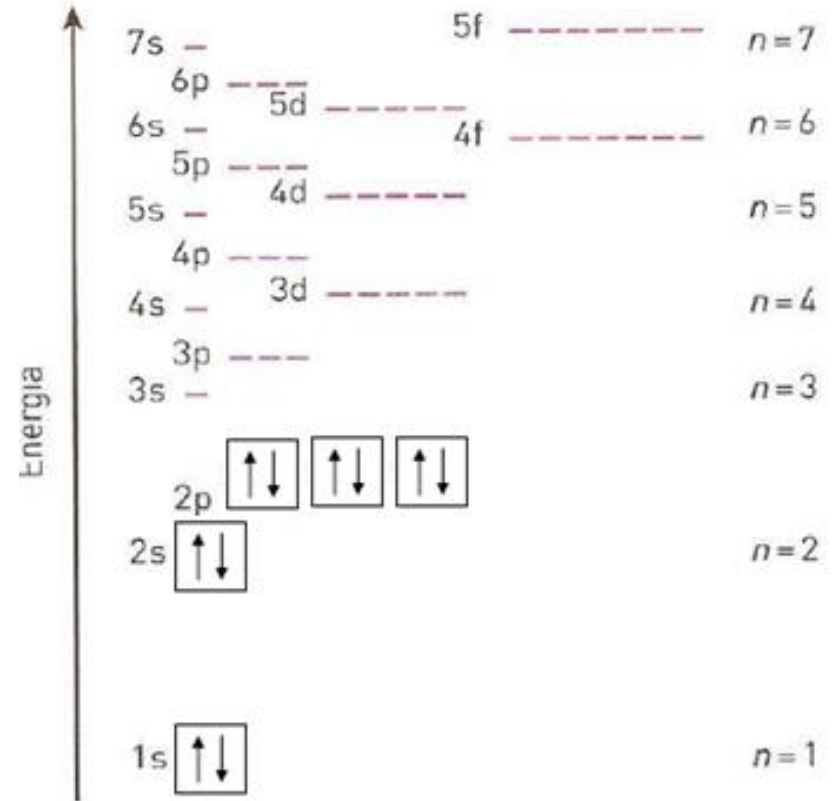
Configuração eletrônica:



Átomo de Neonio ($_{10}\text{Ne}$)

➔ dez elétrons

Configuração eletrônica:



- ❖ Os elétrons que ocupam a última camada/nível de energia são designados ***elétrons de valência***.

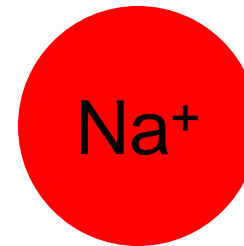
- ❖ Os elétrons mais internos são designados ***elétrons do cerne do átomo***.

Íons: Cátions e Ânions

Cátion – íon com carga positiva

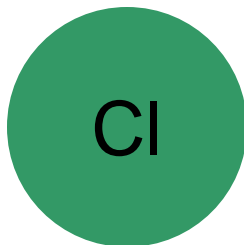


11 p
11 e

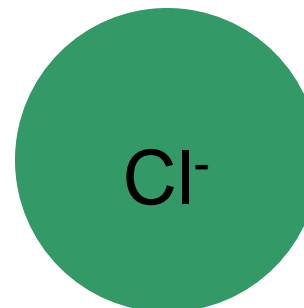


11 p
10 e

Ânion - íon com carga negativa

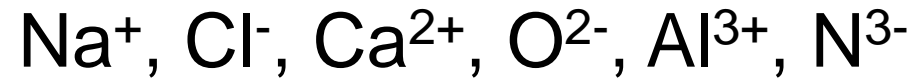


17 p
17 e



17 p
18 e

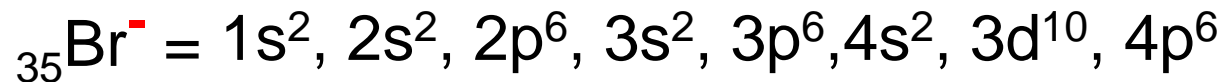
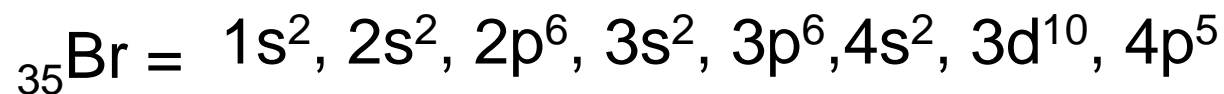
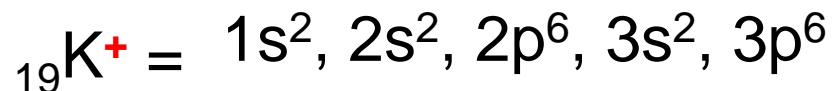
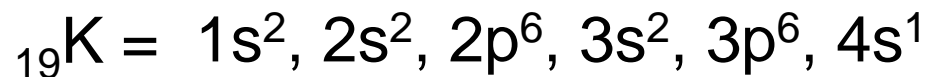
Íons ***monatômicos***:



Íons ***poliatômicos***:



Cátions e Ânions



Bibliografia:

BROWN, Theodore L.; LEMAY JR., H. Eugene; BURSTEN, Bruce E.; BURDGE, Julia R. Química: A Ciência Central. 9 ed. São Paulo: Editora Pearson Prentice Hall Inc., 2005.

BROWN, Theodore L. et al. **Química: a ciência central.** 13. ed. São Paulo, SP: Pearson, 2016.

Chang R. Goldsby K. Química 11ª edição, Porto Alegre, AMGH, 2013.

MAIA, Daltamir Justino e BIANCHI, J. C. de A. Química geral. 1 ed. São Paulo: Pearson, 2007.

KOTZ, John C.; TREICHEL JR., Paul M.; WEAVER, Gabriela C. **Química Geral e Reações Químicas - Vol. 1.** 6 ed. São Paulo: Editora Cengage Learning, 2009.

ATKINS, Peter; JONES, Loretta. **Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente.** 5 ed. Porto Alegre: Editora Bookman, 2012.

BROWN, L.S. e HOLME, T.A.; **Química geral aplicada à engenharia.** Tradução: Maria Lucia Godinho de Oliveira. Revisão técnica: Robson Mendes Matos. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

Raymond Chang, Trad. 4.ed. Maria J. F. Rebelo, et. All. **Química Geral - Conceitos Essenciais,** Porto Alegre, AMGH, 2010.