

CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA



CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DOS ÁTOMOS

- **Configuração eletrônica:** descreve a estrutura eletrônica de um átomo com todos os orbitais ocupados e o número de elétrons que cada orbital contém.
- No estado fundamental de átomos com muitos elétrons, os elétrons ocupam orbitais atômicos de modo que a energia total do átomo seja a mínima possível.
- Sendo assim, poderíamos pensar que um átomo tivesse sua menor energia quando todos os seus elétrons estivessem no orbital $1s$, mas isso nunca pode acontecer.

PRINCIPIO DA EXCLUSÃO DE PAULI

- Enunciado por Wolfgang Pauli (1900-1958) em 1925:

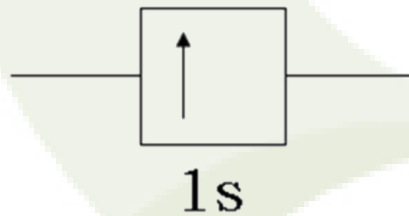
Dois elétrons em um mesmo átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos



Nenhum orbital pode conter mais de dois elétrons

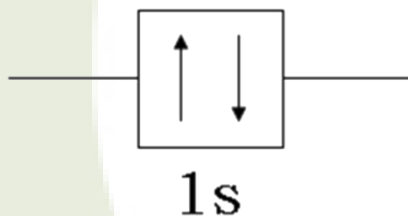
O PRINCÍPIO DA EXCLUSÃO DE PAULI E A CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS

- O átomo de hidrogênio em seu estado fundamental tem um elétron no orbital **1s**, portanto sua configuração eletrônica é **1s¹**.



Conjunto de números quânticos
 $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0, m_s = +1/2$

- No estado fundamental do átomo de hélio ($Z = 2$) os elétrons ocupam um orbital **1s**, portanto sua configuração eletrônica é **1s²**.



Conjunto de números quânticos
 $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0, m_s = +1/2$
 $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0, m_s = -1/2$

O PRINCÍPIO DA EXCLUSÃO DE PAULI E A CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS

- Sabendo que um orbital não pode acomodar mais do que dois elétrons, podemos prever o número máximo de elétrons em cada camada ou subcamada eletrônica.
 - Somente dois elétrons podem ser atribuídos a um orbital **s**.
 - Como cada um dos três orbitais em uma subcamada **p** pode acomodar dois elétrons, esta subcamada pode acomodar um máximo de seis elétrons.
 - Os cinco orbitais de uma subcamada **d** podem acomodar um total de dez elétrons.

NÚMERO DE ELÉTRONS ACOMODADOS NAS CAMADAS E SUBCAMADAS ELETRÔNICAS

Camada eletrônica (n)	Subcamadas disponíveis (ℓ)	Orbitais disponíveis ($2\ell + 1$)	Número possível de elétrons dentro da subcamada [$2(2\ell + 1)$]	Número possível de elétrons para a enésima camada ($2n^2$)
n = 1	s	1	2	2
n = 2	s	1	2	8
	p	3	6	
n = 3	s	1	2	18
	p	3	6	
	d	5	10	
n = 4	s	1	2	32
	p	3	6	
	d	5	10	
	f	7	14	

ORDEM DE ENERGIA DAS SUBCAMADAS E ATRIBUIÇÃO DOS ELÉTRONS

- A energia do átomo de hidrogênio, com um único elétron, depende apenas do valor de n .
- Para átomos com mais de um elétron, as energias das subcamadas dependem de n e l .
- O diagrama de *aufbau* mostra a ordem de energia das subcamadas que pode ser prevista a partir das seguintes regras:
 - Os elétrons são atribuídos as subcamadas em ordem crescente dos valores de ' $n + l$ '.
 - Para duas subcamadas com o mesmo valor de ' $n + l$ ' os elétrons são atribuídos primeiro a subcamada com n mais baixo.

ORDEM DE ENERGIA DAS SUBCAMADAS E ATRIBUIÇÃO DOS ELÉTRONS

Orbital	n	ℓ	$n + \ell$
4d	4	2	6
4p	4	1	5
4s	4	0	4
3d	3	2	5
3p	3	1	4
3s	3	0	3
2p	2	1	3
2s	2	0	2
1s	1	0	1

ORDEM DE ENERGIA DAS SUBCAMADAS E ATRIBUIÇÃO DOS ELÉTRONS

Orbital	n	ℓ	$n + \ell$
4d	4	2	6
4p	4	1	5
4s	4	0	4
3d	3	2	5
3p	3	1	4
3s	3	0	3
2p	2	1	3
2s	2	0	2
1s	1	0	1

⇒ Mesmo n , ℓ diferente

ORDEM DE ENERGIA DAS SUBCAMADAS E ATRIBUIÇÃO DOS ELÉTRONS

Orbital	n	ℓ	$n + \ell$
4d	4	2	6
4p	4	1	5
4s	4	0	4
3d	3	2	5
3p	3	1	4
3s	3	0	3
2p	2	1	3
2s	2	0	2
1s	1	0	1

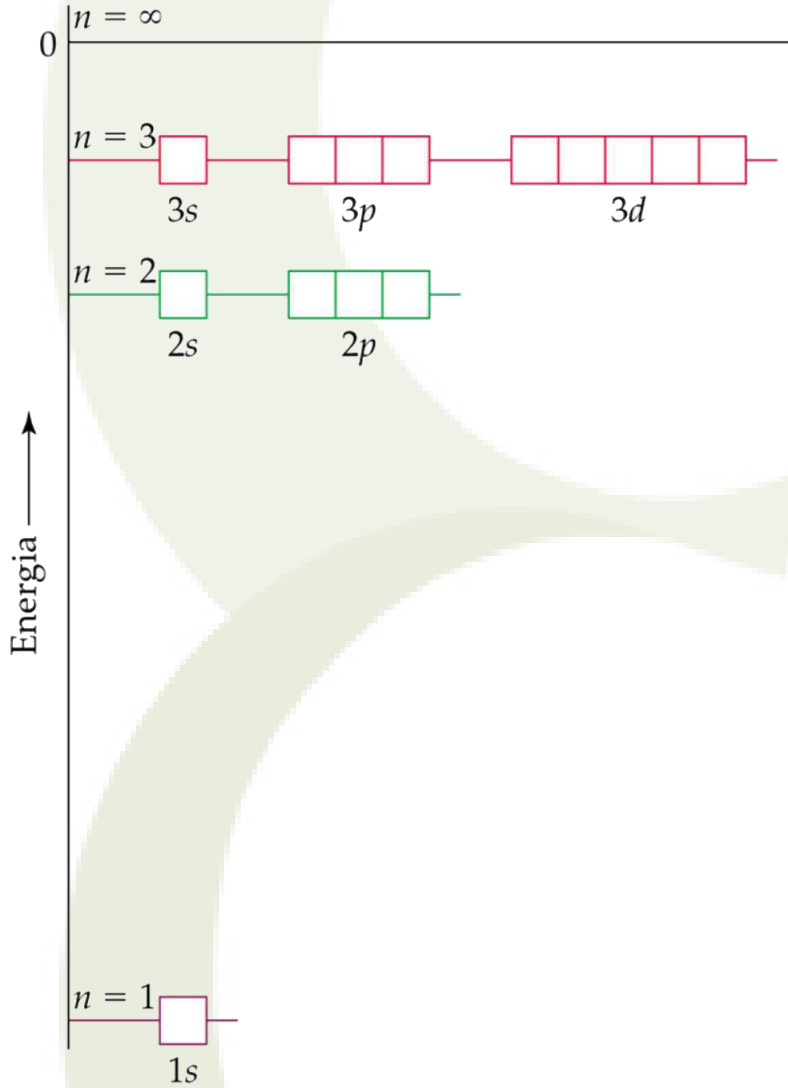
⇒ Mesmo ' $n + \ell$ ', n diferente

ORDEM DE ENERGIA DAS SUBCAMADAS E ATRIBUIÇÃO DOS ELÉTRONS

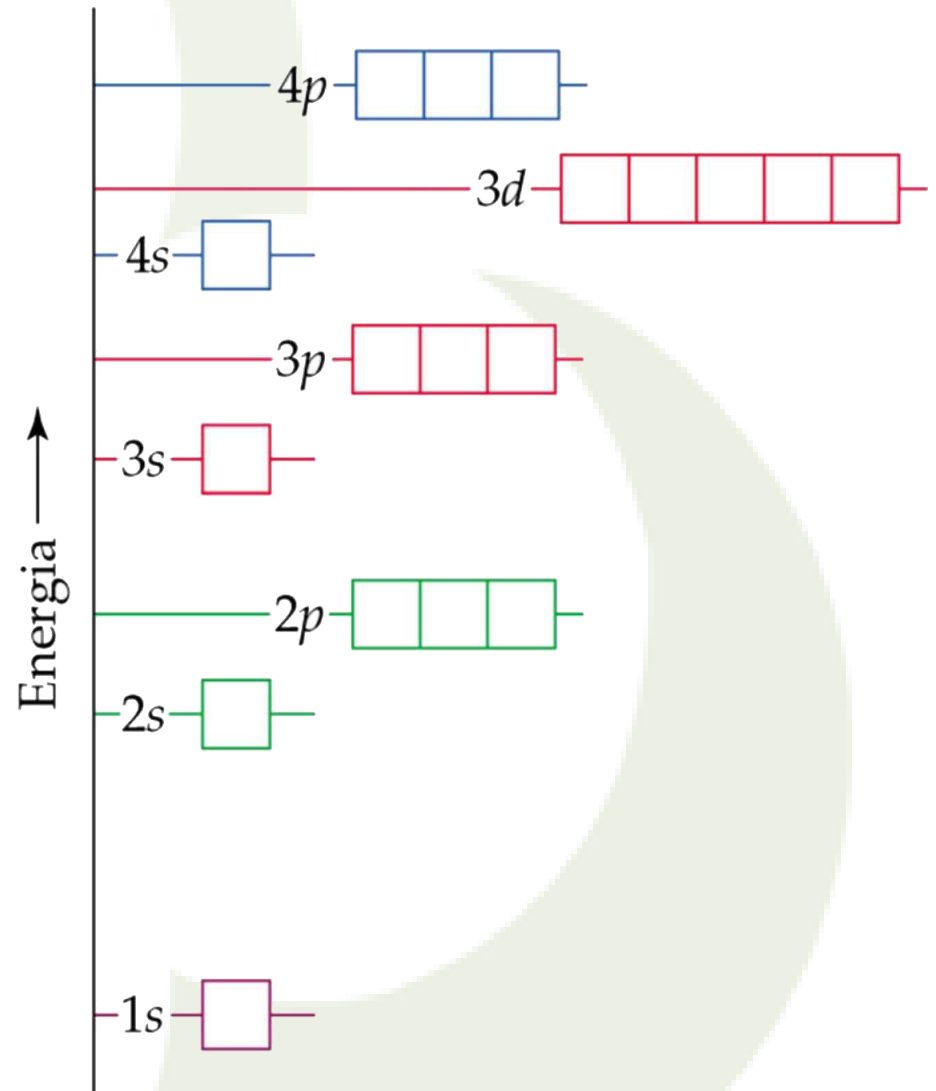
Orbital	n	ℓ	$n + \ell$
4d	4	2	6
4p	4	1	5
4s	4	0	4
3d	3	2	5
3p	3	1	4
3s	3	0	3
2p	2	1	3
2s	2	0	2
1s	1	0	1

⇒ Mesmo ' $n + \ell$ ', n diferente

DIAGRAMAS DE *AUFBAU*



Hidrogênio



Átomos Polieletrônicos

CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS: O PRINCÍPIO DA CONSTRUÇÃO

O lítio ($Z = 3$) tem três elétrons. Dois elétrons poderão ocupar o orbital **1s** e completar a camada $n=1$. O terceiro elétron deve ocupar o orbital disponível de mais baixa energia, que de acordo com o diagrama de *aufbau* é o orbital **2s**.

O estado fundamental de lítio é, então, $1s^2 2s^1$.

Elétrons nas camadas mais externas são chamados **elétrons de valência**

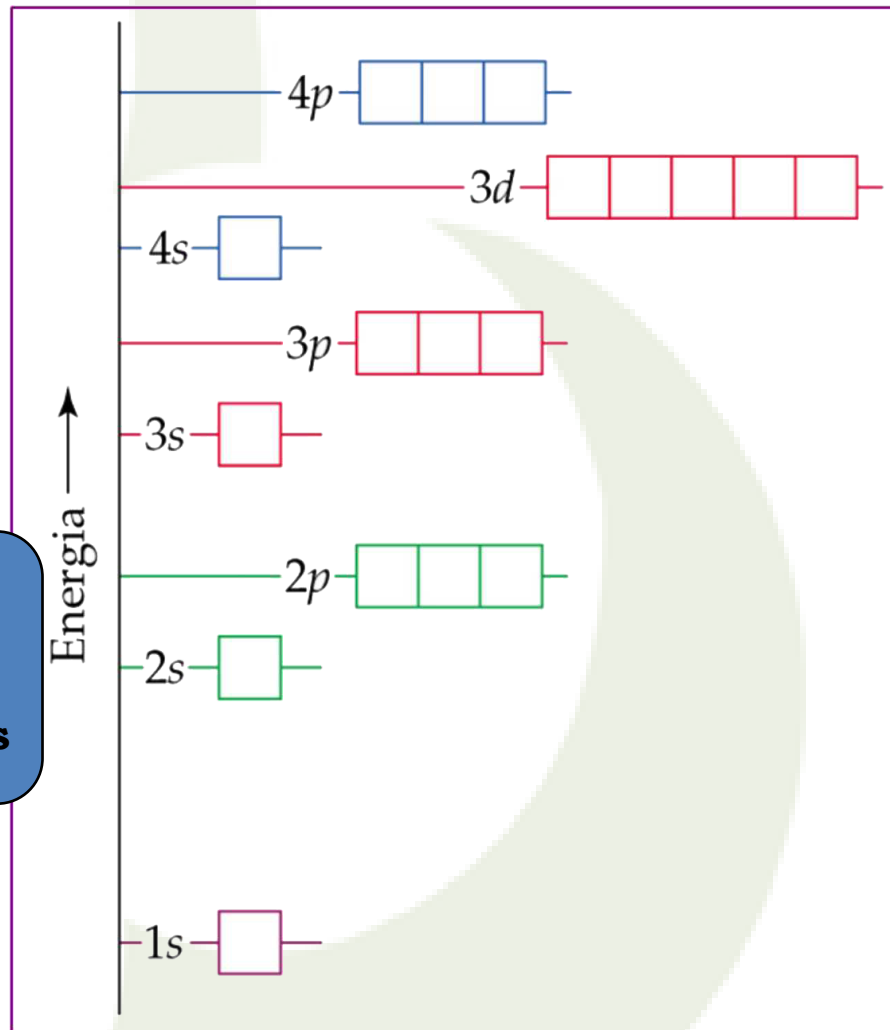
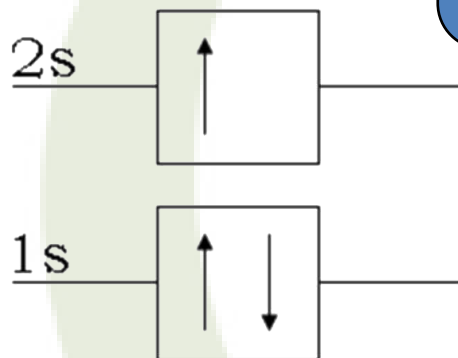
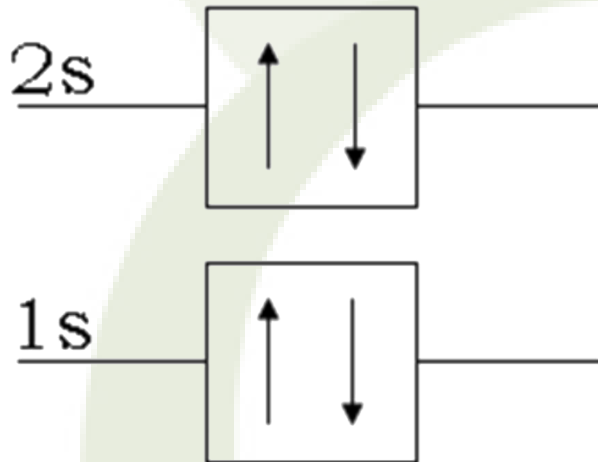


Diagrama de *aufbau* para átomos polieletrônicos

CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS: O PRINCÍPIO DA CONSTRUÇÃO

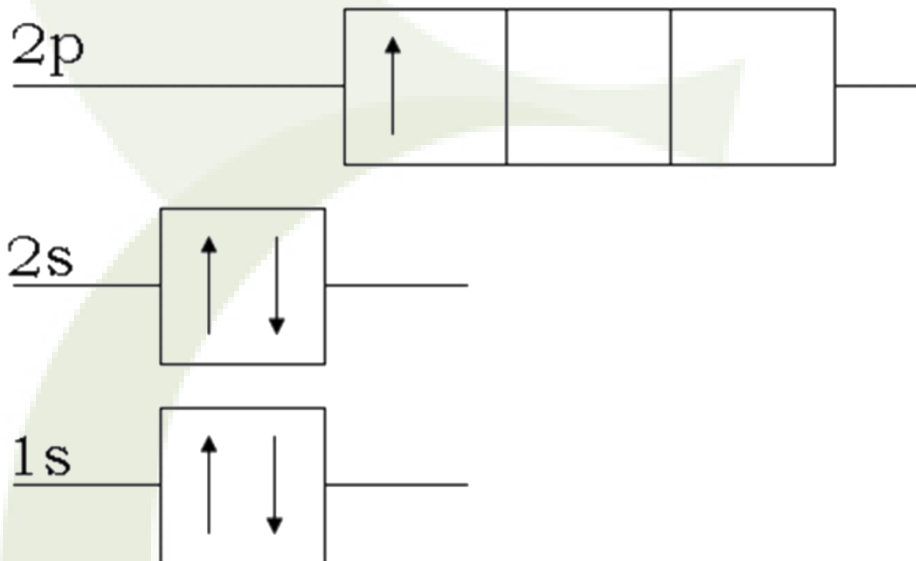
- O berilo ($Z = 4$) possui quatro elétrons. O quarto elétron emparelha-se com o elétron $2s$ do lítio dando uma configuração $1s^2 2s^2$.



O Be possui, portanto, dois elétrons de valência.

CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS: O PRINCÍPIO DA CONSTRUÇÃO

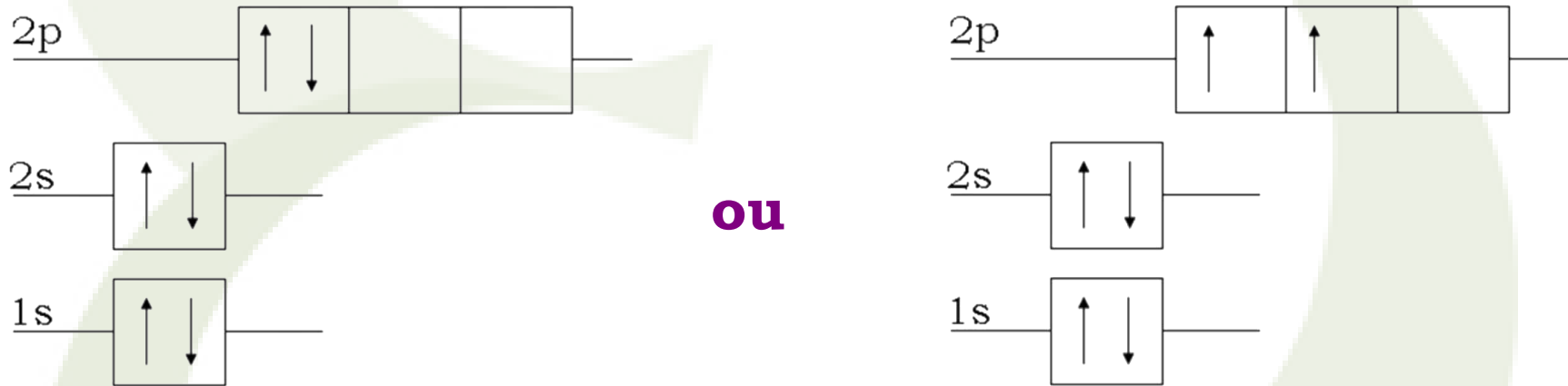
- Um átomo de boro tem cinco elétrons. Dois entram no orbital 1s e dois no orbital 2s. O quinto elétron deverá ocupar um orbital da próxima subcamada disponível, que o diagrama de Aufbau mostra que é o orbital 2p.



- A configuração eletrônica do átomo de boro no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^1$.

CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS: O PRINCÍPIO DA CONSTRUÇÃO

- Um átomo de carbono tem seis elétrons. O sexto elétron pode ficar junto com o anterior no orbital 2p ou deve ocupar um orbital 2p diferente?



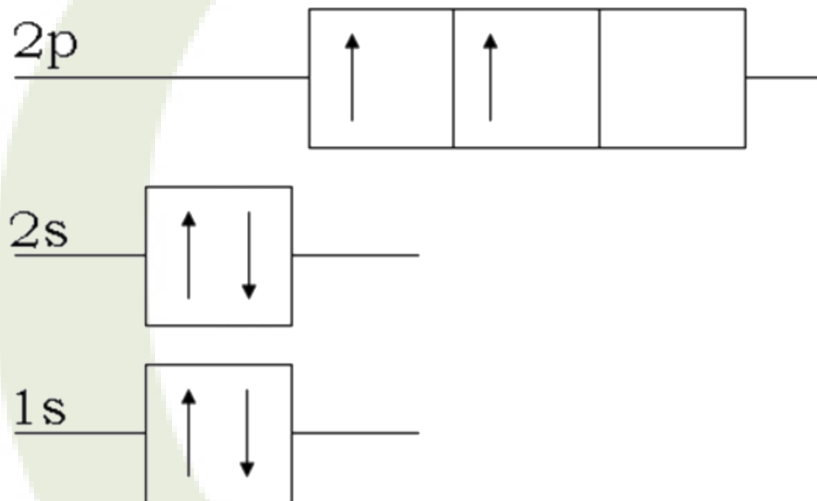
ou



REGRA DE HUND

REGRA DE HUND

- Segundo a regra de Hund, o arranjo mais estável dos elétrons é aquele com o número máximo de elétrons desemparelhados, com o mesmo sentido de spin. Esse arranjo torna a energia total de um átomo tão baixo quanto possível.
- Portanto, a melhor configuração para o átomo de carbono é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que pode também ser escrita na forma compacta como $1s^2 2s^2 2p^2$:

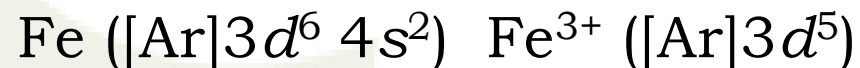
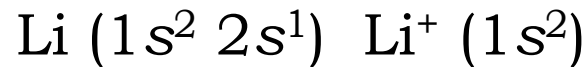


CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO

- Os **elementos de transição** possuem elétrons na subcamada *d*.
- De forma geral a configuração eletrônica dos elementos de transição é: [gás nobre] $ns^2(n-1)d^x$

CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DOS ÍONS

- **Cátions:** os elétrons são primeiramente removidos do orbital com o maior número quântico principal, n :



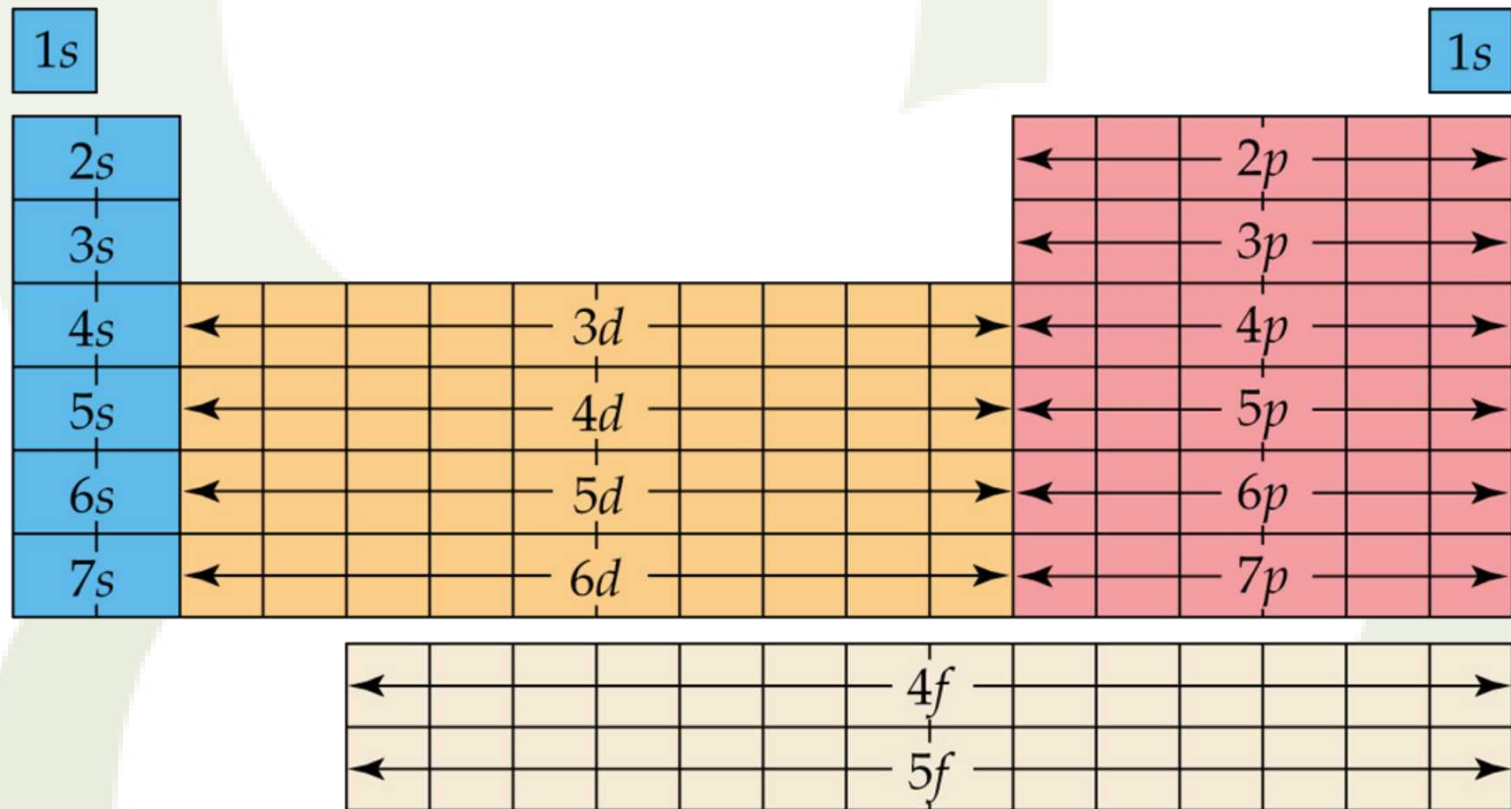
- **Ânions:** os elétrons são adicionados ao orbital com o mais baixo valor de n disponível:




CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA E A TABELA PERIÓDICA


- A tabela periódica pode ser utilizada como um guia para as configurações eletrônicas.
 - O número do período é o valor de n .
 - Os grupos 1A e 2A têm o orbital **s** preenchido.
 - Os grupos 3A -8A têm o orbital **p** preenchido.
 - Os grupos 3B -2B têm o orbital **d** preenchido.
 - Os lantanídeos e os actinídeos têm o orbital **f** preenchido.


CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA E A TABELA PERIÓDICA



 Elementos representativos do bloco s

 Metais de transição

 Elementos representativos do bloco p

 Metais do bloco f