

Átomos Polieletrônicos

Gabriel Braun



1C.1 Os números quânticos	1
1C.1a Os números quânticos, as camadas e as subcamadas	1
1C.1b O spin do elétron	1
1C.1c A estrutura eletrônica do hidrogênio	2
1C.2 Os átomos polieletrônicos	2
1C.2a A energia dos orbitais	2
1C.2b O princípio da construção	3
1C.3 A Tabela Periódica	5
1C.3a A organização dos elementos	5
1C.3b A estrutura geral da Tabela Periódica	6

1C.1 Os números quânticos

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.

1C.1a 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 quânticos para caracterizar cada função de onda. Os três números quânticos são chamados de n , l e m_l :

- n está associado ao *tamanho* e à energia do orbital
- l está associado a sua *forma*
- m_l 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. 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

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

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 $l = 2$ são chamados de orbitais *d* e os de $l = 3$ são chamados de orbitais *f*.

Embora valores maiores de l (correspondentes aos orbitais *g*, *h*, ...) sejam possíveis, os valores menores (0, 1, 2 e 3) são os únicos que os químicos precisam na prática. Um aspecto importante é:

- Para o átomo de hidrogênio (mas não de átomos com mais de um elétron) todos os orbitais de uma mesma camada têm a mesma energia, independentemente do valor do momento angular

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^+ e C^{5+}).

O terceiro número quântico necessário para especificar um orbital é m_l , o número quântico magnético, que distingue os orbitais de uma subcamada. Este número quântico pode assumir os seguintes valores

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

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. Assim, por exemplo, se $m_l = +1$, então o momento angular do orbital do elétron em torno do eixo arbitrário é $+\hbar$, ao passo que se $m_l = -1$, 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 $m_l = 0$, 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.

1C.1b 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, $m_s = \pm 1/2$.

1C.1c A estrutura 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 $1s$. 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:

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad m_s = +\frac{1}{2} \text{ ou } -\frac{1}{2}$$

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 $n = 2$, 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 $n = 2$ é maior do que quando ele ocupa a camada $n = 1$. 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.

1C.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.

1C.2a 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 $n = 3$, 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_{ef} , sentida pelo elétron, é sempre menor do que a carga nuclear real, Z , 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:

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

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 ψ^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 $s < p < d < f$.

1C.2b 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.*

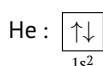
Diz-se que os spins de dois elétrons estão emparelhados se um é \uparrow e o outro, \downarrow . Os spins emparelhados são representados como $\uparrow\downarrow$, e os elétrons com spins emparelhados têm números quânticos magnéticos de spin de sinais opostos. Como um orbital atômico é determinado por 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”):



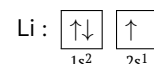
Como se pode ver, os dois elétrons estão emparelhados. Nessa situação, o orbital $1s$ e a camada $n = 1$ estão completamente

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

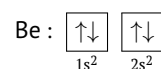
Quando um único elétron ocupa um orbital, escrevemos, por exemplo, $1s^1$ e não $1s$, de forma abreviada.

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 $\text{Li} : 1s^2 2s^1$:



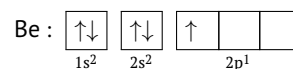
Imagine que a estrutura eletrônica deste átomo é formada pelo caroço, parte central que contém os elétrons de orbitais totalmente preenchidos, circundado pelos elétrons de valência (os da camada mais externa). No lítio, o caroço é formado por uma camada fechada semelhante ao caroço $1s^2$ do átomo de hélio, representado por $[\text{He}]$. Este caroço é rodeado por uma camada externa que contém um elétron $2s$, de energia mais alta. Assim, a configuração do lítio é $[\text{He}] 2s^1$. 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 Li^+ , e não íons Li^{2+} ou Li^{3+} .

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



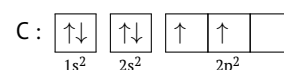
Um átomo de Be tem, então, um caroço semelhante ao do hélio, rodeado por uma camada de valência com dois elétrons emparelhados. Como o lítio — e pela mesma razão —, um átomo de Be só pode perder seus elétrons de valência em reações químicas. Assim, ele perde ambos os elétrons $2s$ para formar o íon Be^{2+}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

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 $1s^2 2s^2 2p^1$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^1$:



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 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$



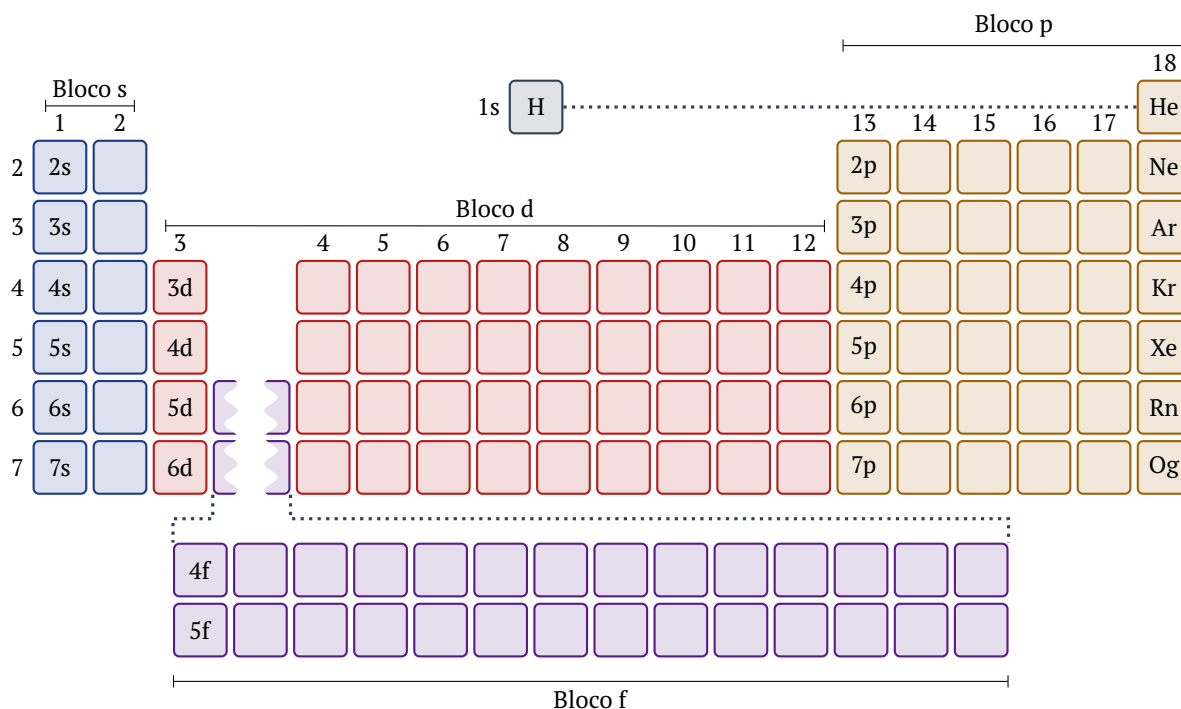


FIG. 1C.2 Periódica, com os nomes de algumas regiões e grupos. Os grupos são as colunas verticais, numeradas de 1 a 18. Os períodos são as linhas horizontais, numeradas de 1 a 7 (o Período 1 é a linha superior – hidrogênio e hélio). Os elementos do grupo principal são os que ocupam os blocos s e p, junto com o hidrogênio. Os Grupos 1 e 2 formam o bloco s; os Grupos 3-12, o bloco d; e os Grupos 13-18, o bloco p.

- Grupo 17: os **halogênios**.
- Grupo 18: os **gases nobres**.

No topo da Tabela Periódica, isolado, está o hidrogênio. Algumas versões da Tabela colocam o hidrogênio no Grupo 1; outras, no Grupo 17; e outras, ainda, em ambos os grupos.

Os metais são, em sua maioria, sólidos. Somente dois elementos (mercúrio e bromo) são líquidos nas temperaturas comuns e somente 11 são gases. Os elementos são classificados como metais, não metais e metaloides:

- Um **metal** conduz eletricidade, tem brilho, é maleável e dúctil.
- Um **não metal** não conduz eletricidade e não é maleável nem dúctil.
- Um **metalóide** tem a aparência e algumas propriedades de metal, mas se comporta quimicamente como um não metal, dependendo das condições.

Uma substância *maleável* pode ser martelada até transformar-se em folhas finas, como o cobre. Uma substância *dúctil* pode ser alongada em fios. Muitos não metais são quebradiços e se partem quando são golpeados com um martelo. As distinções entre metais e metaloides e entre metaloides e não metais não são muito precisas (e nem sempre são feitas), mas os sete elementos mostrados na Fig. 2 (na diagonal entre os metais, à esquerda, e os não metais, à direita) são frequentemente considerados metaloides.

A Tabela Periódica é um arranjo dos elementos que reflete suas relações de família. Os membros do mesmo grupo normalmente mostram a mesma tendência nas propriedades.

1C.3b A estrutura geral da Tabela Periódica

Na época em que a Tabela Periódica foi formulada, a razão por trás da periodicidade dos elementos químicos era um mistério. Porém,

hoje conseguimos entender a organização da Tabela Periódica em termos da configuração eletrônica dos elementos. A Tabela é dividida em blocos, cujos nomes indicam a última subcamada ocupada de acordo com o princípio da construção (os blocos s, p, d e f). Dois elementos são exceções. Como tem dois elétrons 1s, o hélio deveria aparecer no bloco s, mas é colocado no bloco p devido a suas propriedades. Ele é um gás cujas características são semelhantes às dos gases nobres do Grupo 18, não às dos metais reativos do Grupo 2. Sua colocação no Grupo 18 justifica-se porque, assim como os demais elementos do Grupo 18, ele tem a camada de valência completa. O hidrogênio ocupa uma posição única na Tabela Periódica. Ele tem um elétron s, logo, pertence ao Grupo 1; mas tem um elétron a menos do que a configuração de um gás nobre e, assim, pode agir como um membro do Grupo 17. Como o hidrogênio tem esse caráter especial, não o colocamos em grupo algum. Você o encontrará frequentemente no Grupo 1 ou no Grupo 17, e, às vezes, em ambos.

Os blocos s e p formam os grupos principais da Tabela Periódica. As configurações eletrônicas semelhantes dos elementos do mesmo grupo principal são a causa das propriedades semelhantes desses elementos. O número do grupo informa quantos elétrons estão presentes na camada de valência. No bloco s, o número do grupo (1 ou 2) é igual ao número de elétrons de valência. Essa relação se mantém em todos os grupos principais quando se usa a antiga prática dos números romanos (I a VIII) para indicar os grupos. No entanto, ao usar números arábicos (1-18), é preciso subtrair, no bloco p, 10 unidades do número do grupo para encontrar o número de elétrons de valência. O flúor, por exemplo, do Grupo 17 (notação antiga: grupo VII), tem sete elétrons de valência.

Cada novo período corresponde à ocupação de uma camada com o número quântico principal mais alto do que o da anterior. Esta correspondência explica os diferentes comprimentos dos períodos:

- O Período 1 inclui somente dois elementos, H e He, nos quais o orbital 1s da camada $n = 1$ é preenchido com até dois elétrons.

- O Período 2 contém oito elementos, do Li ao Ne, nos quais um orbital 2s e três orbitais 2p são progressivamente preenchidos com mais oito elétrons.
- No Período 3 (do Na ao Ar), os orbitais 3s e 3p vão sendo ocupados por mais oito elétrons.
- No Período 4, os oito elétrons dos orbitais 4s e 4p são adicionados e, também, os 10 elétrons dos orbitais 3d. Existem, então, 18 elementos no Período 4.
- Os elementos do Período 5 adicionam outros 18 elétrons, com o preenchimento dos orbitais 5s, 4d e 5p.
- No Período 6, um total de 32 elétrons é adicionado, porque também é preciso incluir os 14 elétrons dos sete orbitais 4f.

Os elementos do bloco f têm propriedades químicas muito semelhantes, porque sua configuração eletrônica difere somente na população dos orbitais f internos, e esses elétrons participam pouco da formação de ligações.

PONTO PARA PENSAR

Em que valor aproximado de número atômico pode aparecer um período extralongo, correspondente aos orbitais g, e qual seria o seu tamanho?

Os blocos da Tabela Periódica são nomeados segundo o último orbital ocupado de acordo com o princípio da construção. Os períodos são numerados de acordo com o número quântico principal da camada de valência.

Nível I

1C.01 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

1C.02 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

1C.03 Considere as proposições

1. Para o orbital 6p, $n = 6$, $l = 1$ e os valores permitidos para m_l 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

1C.04 **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

1C.05 Considere as proposições

1. São permitidos 7 valores para o número quântico l quando $n = 7$.
2. São permitidos 5 valores para o número quântico m_l para a subcamada 6d.
3. São permitidos 3 valores para o número quântico m_l para a subcamada 3p.
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

1C.06 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, 3 e 4
D 2, 3 e 4 **E** 1, 2, 3 e 4

1C.07 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** 3 **B** 4 **C** 1 e 3 **D** 2 e 3 **E** 3 e 4

1C.08 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

1C.09 Considere os átomos no estado fundamental:

1. Ge
2. Mn
3. Ba
4. 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

1C.10 Considere os átomos no estado fundamental:

1. Zn
2. Cl
3. Al
4. 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

1C.11 Considere os átomos no estado fundamental:

1. Bi
2. Si
3. Ta
4. 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

1C.12 Considere as configurações eletrônicas.

1. $1s \uparrow\downarrow \quad 2s \uparrow\downarrow \quad 2p \uparrow \quad \square \quad \square$
2. $1s \uparrow\downarrow \quad 2s \uparrow\downarrow \quad 2p \uparrow \downarrow \uparrow$
3. $1s \uparrow\downarrow \quad 2s \uparrow \quad 2p \uparrow \quad \square \quad \square$
4. $1s \uparrow\downarrow \quad 2s \uparrow\downarrow \quad 2p \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$

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

1C.13 Considere as configurações eletrônicas da camada de valência.

1. $4s \uparrow\downarrow \quad 4p \uparrow \downarrow \square$
2. $4s \uparrow\downarrow \quad 4p \uparrow\downarrow \square \square$
3. $4s \uparrow \quad 4p \uparrow \uparrow \uparrow$
4. $4s \uparrow\downarrow \quad 4p \uparrow \uparrow \square$

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

1C.14 **Assinale** a alternativa com o conjunto de números quânticos (n, l, m_l, m_s) que pode representar um orbital atômico.

- A** (2, 2, +1, +1/2) **B** (4, 2, -3, -1/2)
C (4, 4, +2, -1/2) **D** (5, 0, 0, +1)
E (6, 4, +3, +1/2)

1C.15 **Assinale** a alternativa com o conjunto de números quânticos (n, l, m_l, m_s) que pode representar um orbital atômico.

- A** (1, 1, 0, +1/2) **B** (5, 3, -3, -1/2)
C (5, 4, -4, -1/2) **D** (5, 5, +4, -1/2)
E (6, 4, +5, +1/2)

1C.16 **Assinale** a alternativa com o conjunto de números quânticos (n, l, m_l, m_s) que não pode representar um orbital atômico.

- A** (2, 1, +1, -1/2) **B** (3, 3, +2, +1/2)
C (4, 2, 0, +1/2) **D** (5, 0, 0, -1)
E (6, 4, +3, +1/2)

Nível II

1C.17 **Assinale** a alternativa com a configuração eletrônica correta para os orbitais 3d e 4s do estado fundamental do átomo de cromo.

- A** $4s \uparrow\downarrow \quad 3d \uparrow\uparrow \uparrow\uparrow \square \square$
- B** $4s \uparrow \quad 3d \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$
- C** $4s \uparrow\downarrow \quad 3d \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \square \square$
- D** $4s \uparrow\downarrow \quad 3d \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \square$
- E** $4s \uparrow\downarrow \quad 3d \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \square$

1C.18 Assinale a alternativa com a distribuição eletrônica em subníveis para o Au ($Z = 79$).

- A $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 5d^9$
 B $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 6s^2 5d^9$
 C $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s 14f^{14} 5d^{10}$
 D $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s 14f^{14} 5d^{10}$

1C.19 A regra de Hund, como o próprio nome indica, foi formulada pela primeira vez, em 1927, pelo físico alemão Friedrich Hund. Ele partiu diretamente da estrutura nuclear, já conhecida e medida, das moléculas e tentou calcular as orbitais moleculares adequadas por via direta, resultando na regra de Hund. Essa regra afirma que a energia de um orbital incompleto é menor quando nela existe o maior número possível de elétrons com spins paralelos.

Assinale a alternativa com a aplicação correta da regra de Hund para o átomo de enxofre ($Z = 16$) em seu estado fundamental.

- A $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^0$ B $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$
 C $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^0 3p_z^2$ D $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^0 3p_y^2 3p_z^2$

1C.20 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

1C.21 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

1C.22 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

1C.23 Considere as proposições para os átomos com muitos elétrons.

- A carga nuclear efetiva, Z_{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.
- Elétrons com $l = 2$ são mais efetivos na blindagem do que elétrons com $l = 1$.
- A Z_{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, 3 e 4

1C.24 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.

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

1C.25 A regra de Hund, ou regra da máxima multiplicidade, afirma que há condições específicas para que a o preenchimento dos elétrons em orbitais ocorra para que o átomo esteja em seu estado fundamental. A seguir, são apresentadas cinco configurações para a distribuição eletrônica em orbitais do subnível 3p do enxofre ($Z = 16$), feitas por um aluno de química, considerando que todos os subníveis anteriores à distribuição estão completamente preenchidos.

Indique, para cada uma delas, se temos uma configuração eletrônica em estado fundamental ou excitado, e justifique.

- a. $\uparrow \uparrow \downarrow \uparrow$ b. $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$ c. $\downarrow \downarrow \uparrow \downarrow$
 d. $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$ e. $\uparrow \uparrow \uparrow$

1C.26 Considere as configurações eletrônicas.

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

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

1C.27 Considere as configurações eletrônicas.

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

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

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

1C.28 A Regra de Hund estabelece que os elétrons de um mesmo subnível tendem a ficar em orbitais distintos (diferente número quântico magnético) e com spins paralelos.

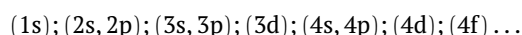
Assinale a alternativa que pode corresponder a uma configuração eletrônica no estado excitado.

- A Na : $[\text{Ne}] 3s^1$ B Ca : $[\text{Ne}] 3s^2$ C Al : $[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
 D Si : $[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$ E Cl : $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$

1C.29 O molibdênio, elemento de número atômico 42, trata-se de um caso de exceção a distribuição eletrônica dos elementos. Sobre este importante metal, responda aos questionamentos a seguir:

- Apresente** a distribuição eletrônica teórica e prática deste metal, em cerne de gás nobre.
- Justifique** de forma sucinta a distribuição prática em vez da teórica.
- Apresente** os quatro números quânticos para o seu elétron diferenciador, considerando a distribuição teórica.

1C.30 Regras de Slater: $Z_{ef} = Z - b$. Para determinar a carga nuclear efetiva, os elétrons são divididos em grupos:



Para qualquer elétron de um dado grupo, a constante de blindagem, b , é a soma das seguintes parcelas:

- zero para qualquer grupo exterior ao grupo do elétron considerado;
- 0,35 para cada um dos outros elétrons do mesmo grupo que o elétron considerado, exceto no grupo (1s), onde o valor de contribuição é de 0,30;
- se o elétron considerado pertencer a um grupo ns ou np , cada elétron do nível $(n - 1)$ contribui com 0,85 e cada elétron dos níveis mais internos contribui com 1,00;
- se o elétron considerado pertencer a um grupo nd ou nf , cada elétron dos grupos mais internos contribui com 1,00.

Calcule a carga nuclear efetiva para cada elemento:

- $B(Z = 5)$
- $N(Z = 7)$
- $F(Z = 9)$
- $Ge(Z = 32)$
- $Ba(Z = 56)$

Gabarito: Nível I

- 1C.01 **D** 1C.02 **C** 1C.03 **E** 1C.04 **C** 1C.05 **D** 1C.06 **E**
 1C.07 **A** 1C.08 **D** 1C.09 **C** 1C.10 **D** 1C.11 **A** 1C.12 **B**
 1C.13 **B** 1C.14 **E** 1C.15 **C** 1C.16 **B**

Gabarito: Nível II

- 1C.17 **B** 1C.18 **C** 1C.19 **B** 1C.23 **C** 1C.26 **C** 1C.27 **C**
 1C.28 **D**

- 1C.20 $[Ne] 3s^2$, $n = 3$, $l = 0$, $m = 0$.
 $[Ne] 3s^2 3p^1$, $n = 3$, $l = 1$, $m = -1$.
 $[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$, $n = 6$, $l = 1$, $m = +1$.
 $[Ar] 4s^2 3d^{10} 4p^3$, $n = 4$, $l = 1$, $m = +1$.
 $[Ar] 4s^1 3d^{10}$, $n = 3$, $l = 2$, $m = +2$.
- 1C.21 $[Ne] 3s^2 3p^2$, $n = 3$, $l = 1$, $m = 0$.
 $[Ne] 3s^2 3p^3$, $n = 3$, $l = 1$, $m = 0$.
 $[Kr] 5s^1$, $n = 5$, $l = 0$, $m = 0$.
 $[Ar] 4s^2 3d^2$, $n = 3$, $l = 2$, $m = -1$.
 $[Ar] 4s^1 3d^5$, $n = 3$, $l = 2$, $m = +2$.

- 1C.22 $[Xe] 6s^2 4f^7$, $n = 4$, $l = 3$, $m = +3$.
 $[Ar] 4s^2 3d^{10} 4p^6$, $n = 4$, $l = 1$, $m = +1$.
 $[He] 2s^2$, $n = 2$, $l = 0$, $m = 0$.
 $[Kr] 5s^2 4d^{10} 5p^3$, $n = 5$, $l = 1$, $m = +1$.
 $[Kr] 5s^1 4d^{10}$, $n = 4$, $l = 2$, $m = +2$.

1C.24 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 cromo, as condições energeticamente favoráveis para que um elétron seja promovido do orbital 4s para um orbital 3d, gerando uma camada 3d semi-preenchida. 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, $[Xe] 6s^1 4f^{14} 5d^{10}$. Os orbitais np têm energia muito menor do que os orbitais $(n + 1)s$.

- 1C.25 a. Fundamental.
 b. Excitado.
 c. Fundamental.
 d. Excitado.
 e. Excitado.

1C.29 a. $[Kr] 5s^2 4d^4$ (teórica) e $[Kr] 5s^1 4d^5$ (real)
 b. A exceção se caracteriza pois para o molibdênio, os orbitais 5s e 4d apresentam praticamente a mesma energia, fazendo com que a distribuição ocorresse em 6 orbitais de igual energia.
 c. $n = 4$; $l = 2$; $m_l = +1$; $m_s = \pm 1/2$

- 1C.30 a. 2,60
 b. 3,90
 c. 5,20
 d. 5,65
 e. 2,85