



Configuração eletrónica

Distribuição eletrónica

A **configuração eletrónica** de um átomo demonstra como estão **distribuídos** os **elétrões** pelos vários **níveis e subníveis** de energia do átomo.

Esta distribuição segue as seguintes regras:

Princípio da Construção (ou Princípio de Aufbau);

Princípio de Exclusão de Pauli;

Regra de Hund.

Princípio da Construção

Um nível (ou subnível) de energia só começa a ser preenchido quando o anterior (de menor energia) já está completo.

Os elétrons distribuem-se pelas orbitais segundo o **Princípio da Construção**, dando ao átomo a **menor energia possível – estado fundamental do átomo**.

Uma distribuição eletrónica que esteja de acordo com o Princípio da Construção representa um átomo no seu estado fundamental, caso contrário o átomo encontra-se num **estado excitado**.

Princípio de Exclusão de Pauli

Wolfgang Pauli enunciou este princípio em 1924:

No mesmo átomo não pode haver dois elétrons com o mesmo conjunto de números quânticos.

O número quântico de *spin* é relativo ao próprio elétron, e este número quântico apenas tem duas possibilidades (α e β , ou $+1/2$ e $-1/2$)!

Consequências deste princípio:

Não podem estar mais do que dois elétrons em cada orbital.

No caso de **dois elétrons** ocuparem a **mesma orbital** estes terão que ter valores de ***spin* diferentes**, tendo um o valor α e o outro, obrigatoriamente, β .



Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958).

Regra de Hund

As orbitais de um mesmo subnível têm a mesma energia: são **orbitais degeneradas!**

Regra de Hund

Na distribuição de elétrons em orbitais degeneradas todas as orbitais terão de estar semipreenchidas antes de começarem a ser preenchidas com dois elétrons cada, e todos os elétrons desemparelhados apresentam o mesmo *spin*.

Isto permite que as **repulsões** entre os diversos **elétrons** no mesmo subnível sejam **menores**.



[Friedrich Hermann Hund](#) (1896-1997).

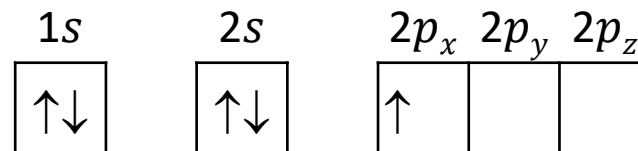
Regra de Hund

No caso do boro ($Z = 5$) a distribuição eletrónica é:



- 2 eletrões na orbital s do nível 1;
- 2 eletrões na orbital s do nível 2;
- 1 eletrão numa das orbitais p do nível 2.

e pode ser representada pelo seguinte diagrama:

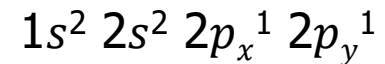


Cada **seta** representa um **eletrão**.

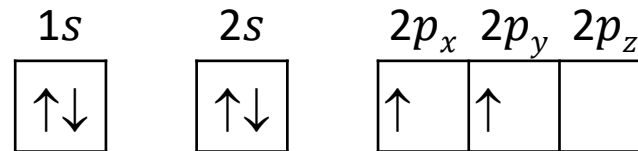
Os diferentes **sentidos das setas** os valores de **spin** α e β .
(o uso das duas setas – para cima e para baixo – é indiferente).

Regra de Hund

No átomo de carbono ($Z = 6$) já existem **dois elétrons a distribuir pelo subnível $2p$** , que, pela regra de Hund, são distribuídos por duas das três orbitais $2p$ ($2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$):

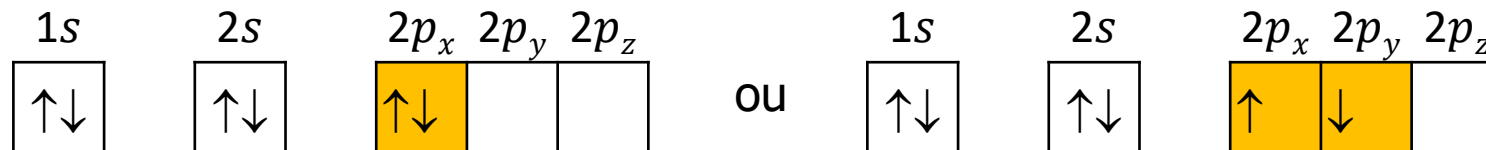


e pode ser representada pelo seguinte diagrama:



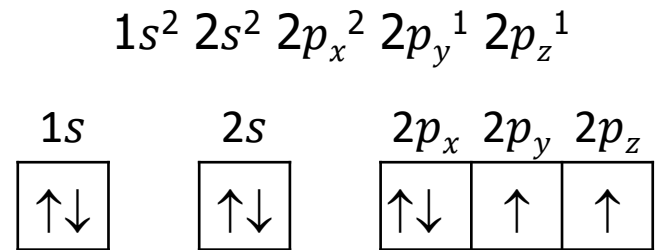
Elétrons desemparelhados em diferentes orbitais do **mesmo subnível** ($2p_x$ e $2p_z$, por exemplo) tem o **mesmo *spin***, pelo que o sentido das setas que os representam será igual.

Exemplos de distribuições **incorretas**:



Regra de Hund

A distribuição eletrónica do oxigénio ($Z = 8$) é:



O néon ($Z = 10$) terá a distribuição:

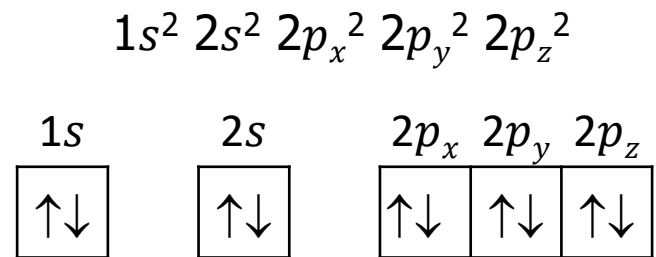
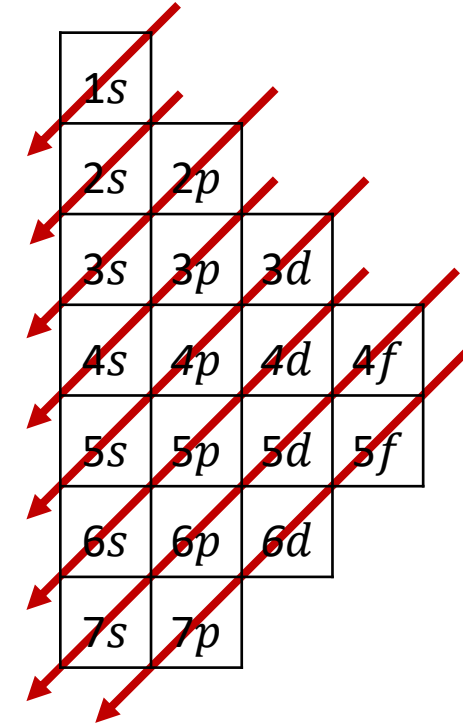


Diagrama de Pauling

O Diagrama de Pauling é um método fácil para estabelecer a **sequência de preenchimento dos elétrons pelas diferentes orbitais** em função das energias.



A ordem crescente de energia dos subníveis é:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d < 7p$$

Energias das orbitais

Quanto maior for n maior é a energia da orbital (energia do elétron que lá se encontra).

Se apenas houver um elétron (**átomo monoelectrónico**), a energia das orbitais de um determinado nível é igual:

$$E_{2s} = E_{2p}$$

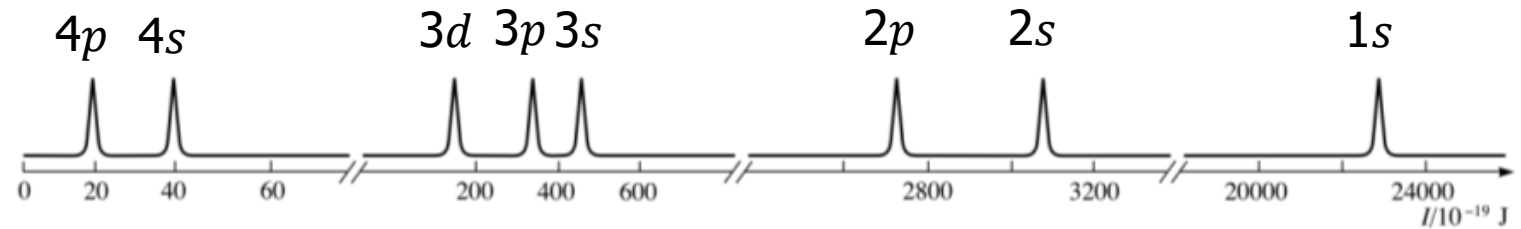
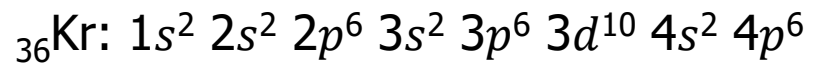
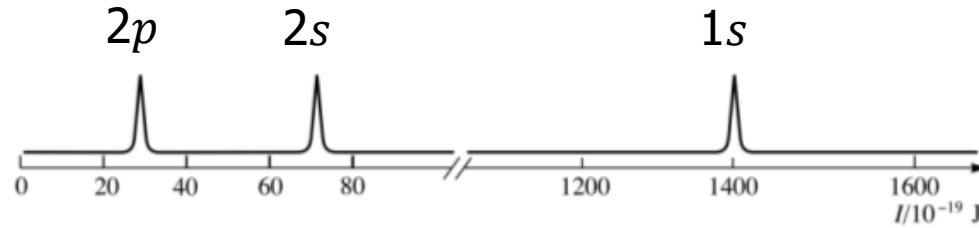
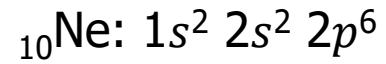
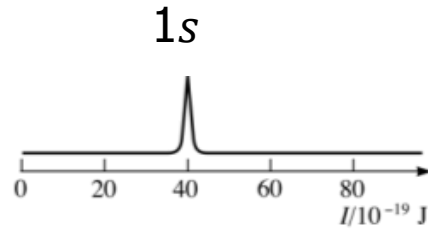
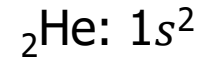
Para átomos **polielectrónicos**:

$$E_{2p} > E_{2s} \quad \text{e} \quad E_{2px} = E_{2py} = E_{2pz}$$

...

Espectroscopia fotoeletrónica

Resultados experimentais



Bibliografia

- D. Reger, S. Goode, E. Mercer, "Química: Princípios e Aplicações", Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2010.
- J. Paiva, A. J. Ferreira, C. Fiolhais, "Novo 10Q", Texto Editores, Lisboa, 2015.