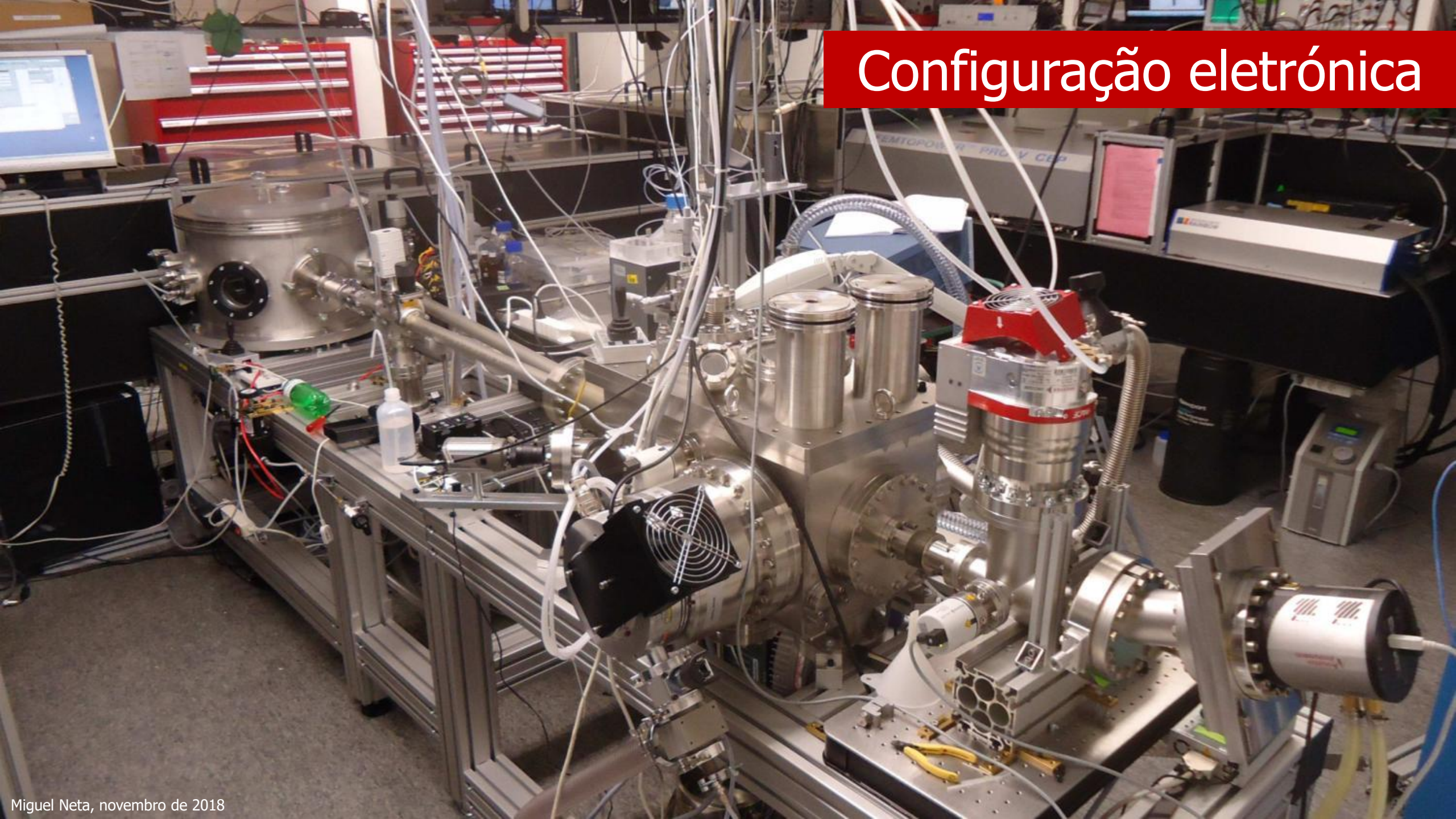


# Configuração eletrónica



## Distribuição eletrônica

A **configuração eletrônica** 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;**

**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 eletrônica 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 ( $\alpha$  e  $\beta$ , 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  $\alpha$  e o outro, obrigatoriamente,  $\beta$ .



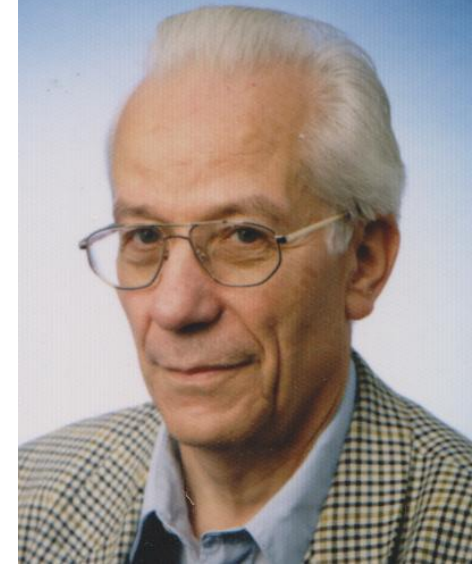
[Wolfgang Ernst Pauli](#) (1900-1958).

## Regra de Hund

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

**Na distribuição de elétrons em orbitais do mesmo subnível (orbitais  $p$  do mesmo nível  $n$ , por exemplo) todas as orbitais terão de estar semipreenchidas antes de começarem a ser preenchidas com dois elétrons cada.**

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



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

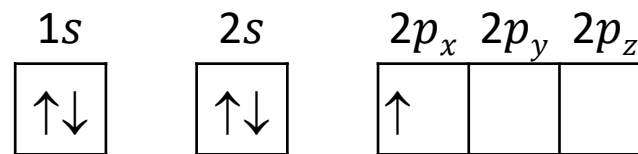
## Regra de Hund

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



- 2 elétrons na orbital  $s$  do nível 1;
- 2 elétrons na orbital  $s$  do nível 2;
- 1 elétron numa das orbitais  $p$  do nível 2.

e pode ser representada pelo seguinte diagrama:

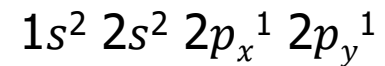


Cada **seta** representa um **elétron**.

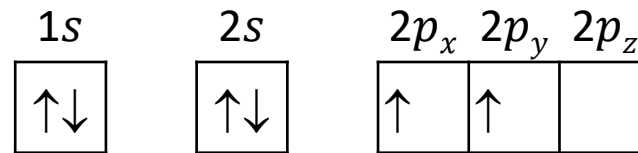
Os diferentes **sentidos das setas** os valores de **spin  $\alpha$  e  $\beta$** .  
(o uso das duas setas – para cima e para baixo – é indiferente).

## 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  $2p_z$ ):

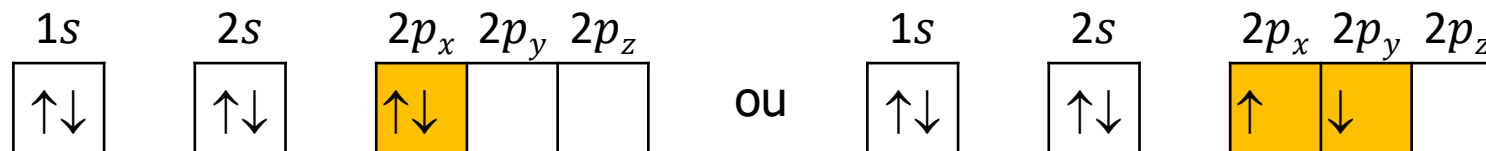


e pode ser representada pelo seguinte diagrama:



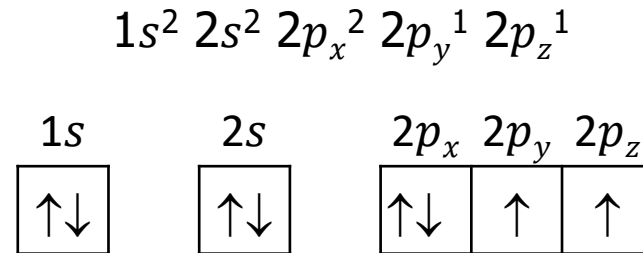
**Elétrons desemparelhados** em diferentes orbitais do **mesmo subnível** ( $2p_x$  e  $2p_z$ , por exemplo) tem o **mesmo *spin***, pelo que o sentido das setas que os representam será igual.

Exemplos de distribuições **incorretas**:

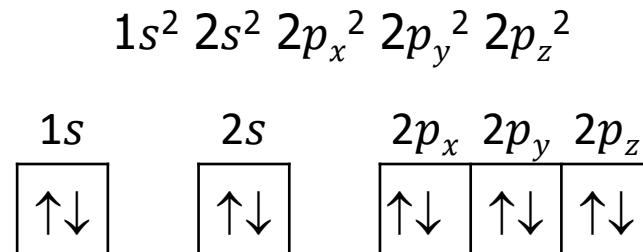


**Regra de Hund**

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



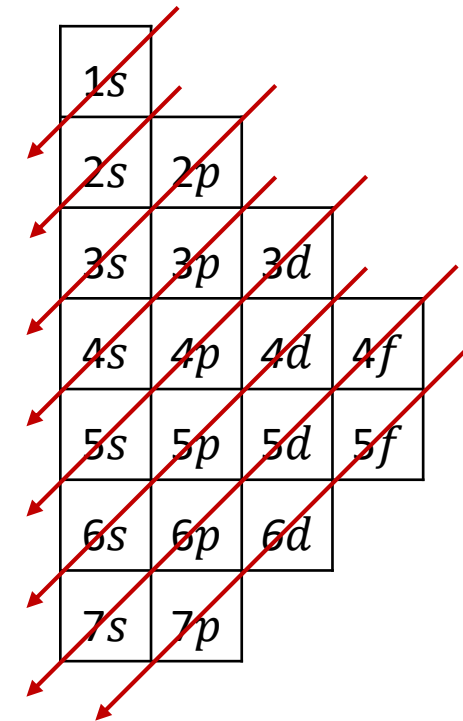
O néon ( $Z = 10$ ) terá a distribuição:





## 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:

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

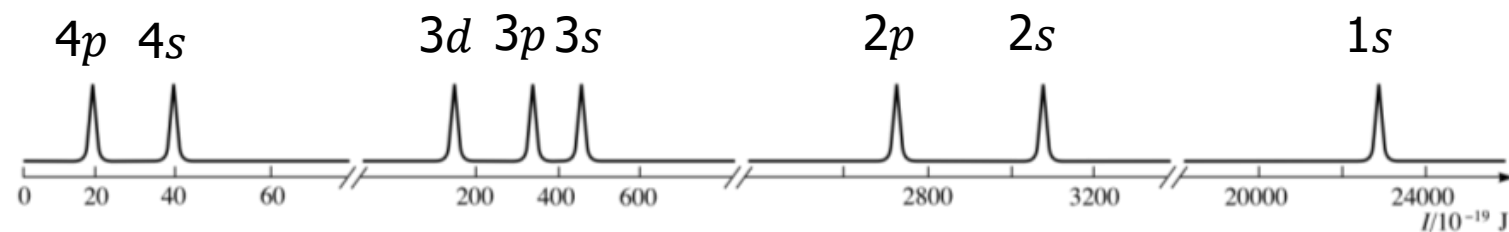
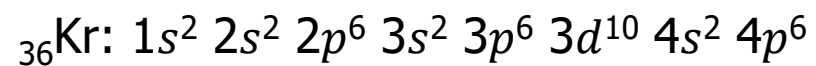
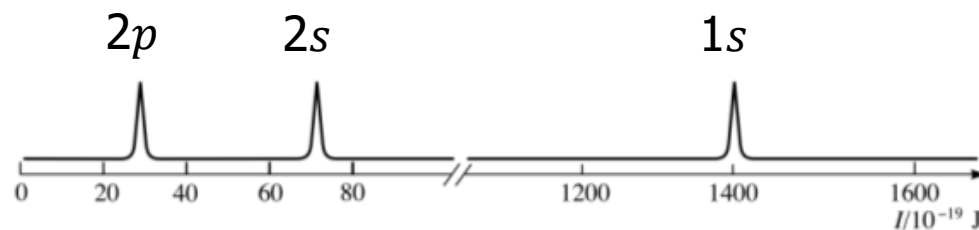
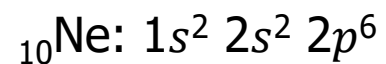
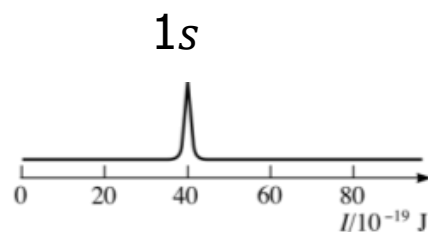
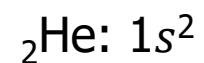
Para átomos **polielectrónicos**:

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

...

## Espectroscopia fotoeletrônica

## Resultados experimentais



## **Bibliografia**

- J. Paiva, A. J. Ferreira, C. Fiolhais, "Novo 10Q", Texto Editores, Lisboa, 2015.