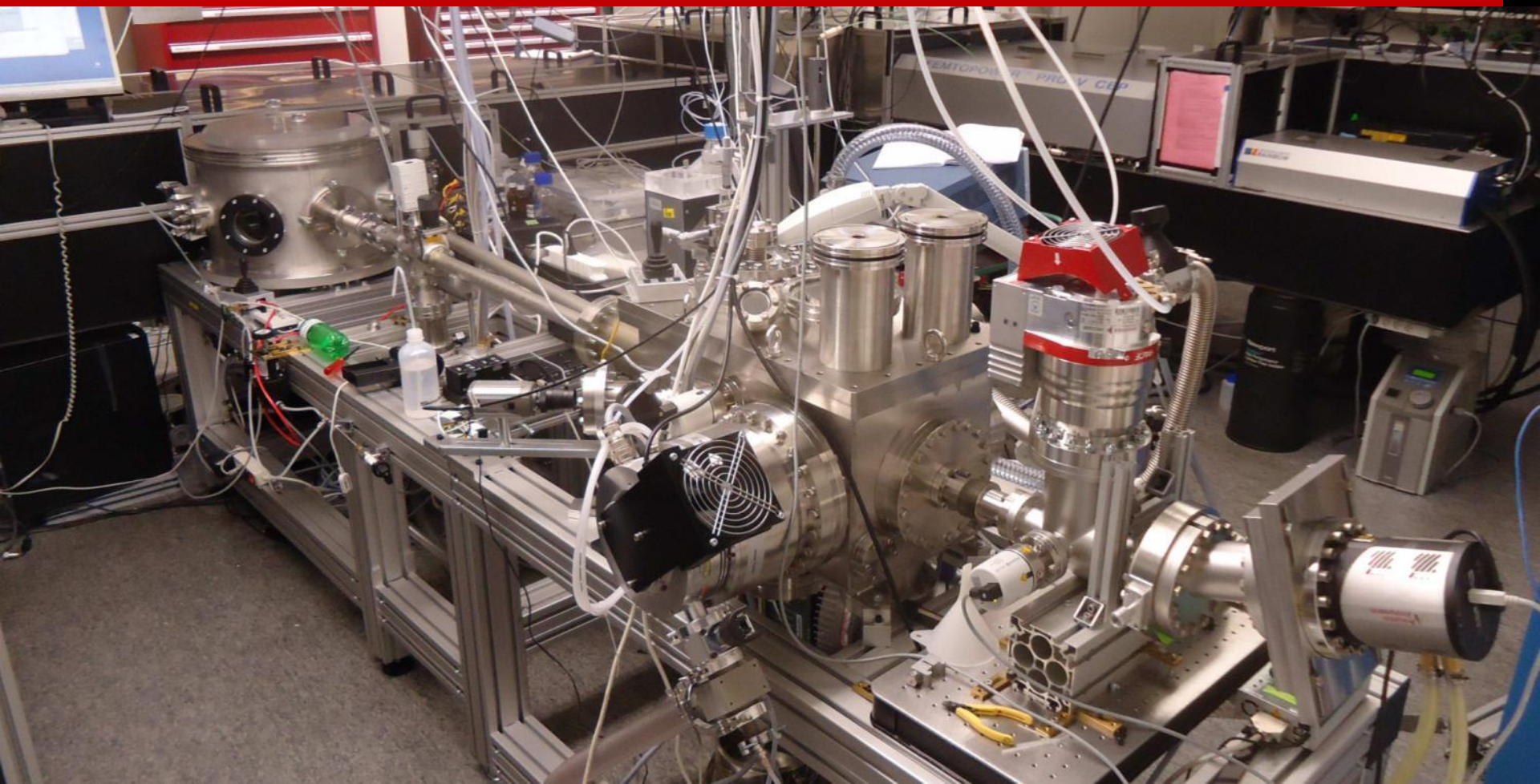


Configuração eletrônica



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 energia mínima;

Princípio de Exclusão de Pauli;

Regra de Hund.

Princípio da energia mínima

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

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

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 .

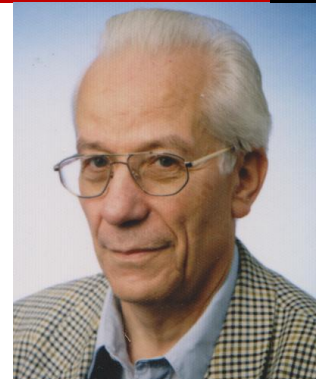


Wolfgang Ernst Pauli
(1900-1958)

Regra de Hund

Na ocupação dos **eletrões em orbitais do mesmo subnível** (por exemplo as orbitais p de um mesmo nível n) todas as orbitais terão de estar semi preenchidas antes de começarem a ser preenchidas com dois eletrões cada.

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



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

Configuração eletrónica

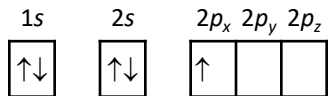
Regra de Hund

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:



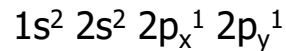
Cada **seta** representa um **eletrão**.

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

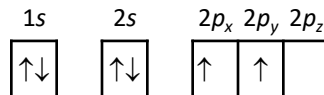
Configuração eletrônica

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 $2p_z$):

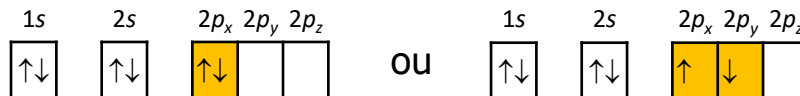


e pode ser representada pelo seguinte diagrama:



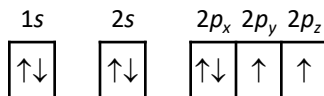
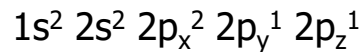
Elétrons desemparelhados em diferentes orbitais do **mesmo subnível** ($2p_x$ e $2p_z$, por exemplo) tem o **mesmo spin**, pelo que o sentido das setas que os representam será igual.

Exemplos de distribuições **incorretas**:

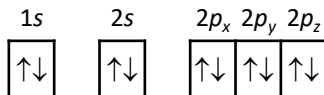
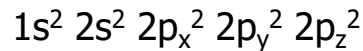


Regra de Hund

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



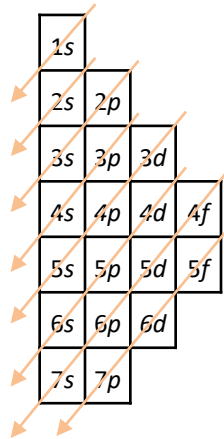
O néon ($Z = 10$) terá a distribuição:



Configuração eletrônica

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 (do eletrão que lá está).

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

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

Para átomos **polielectrónicos**:

$$E_{2p} > E_{2s}$$

e

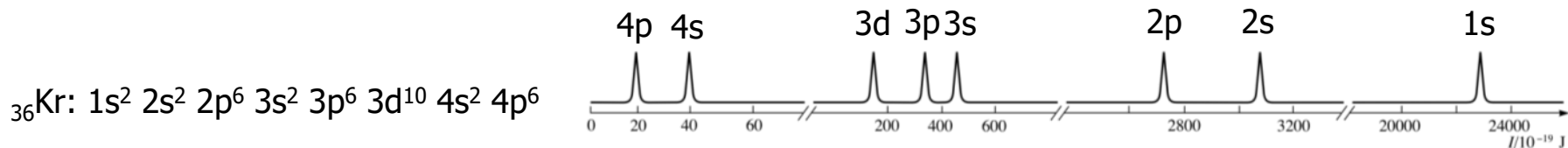
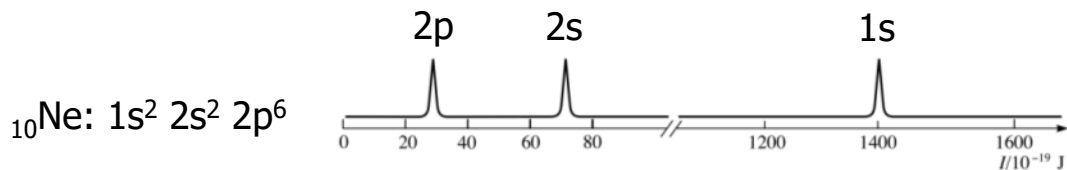
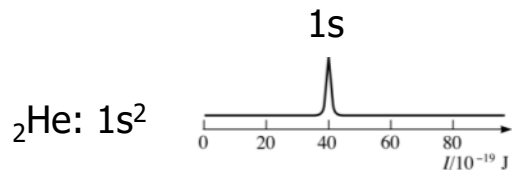
$$E_{2px} = E_{2py} = E_{2pz}$$

...

Configuração eletrónica

Espetroscopia fotoeletrónica

Resultados experimentais



Bibliografia

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