ÁTOMOS MULTIELETRÔNICOS

Ψ = Função de Onda → Equação Diferencial

↓

Série de Soluções

↓

Números Quânticos: ***n***, ***l***, $\mathbf{m_l}$ → **Orbital**

4º Número Quântico

Número Quântico de Spin (m_s)

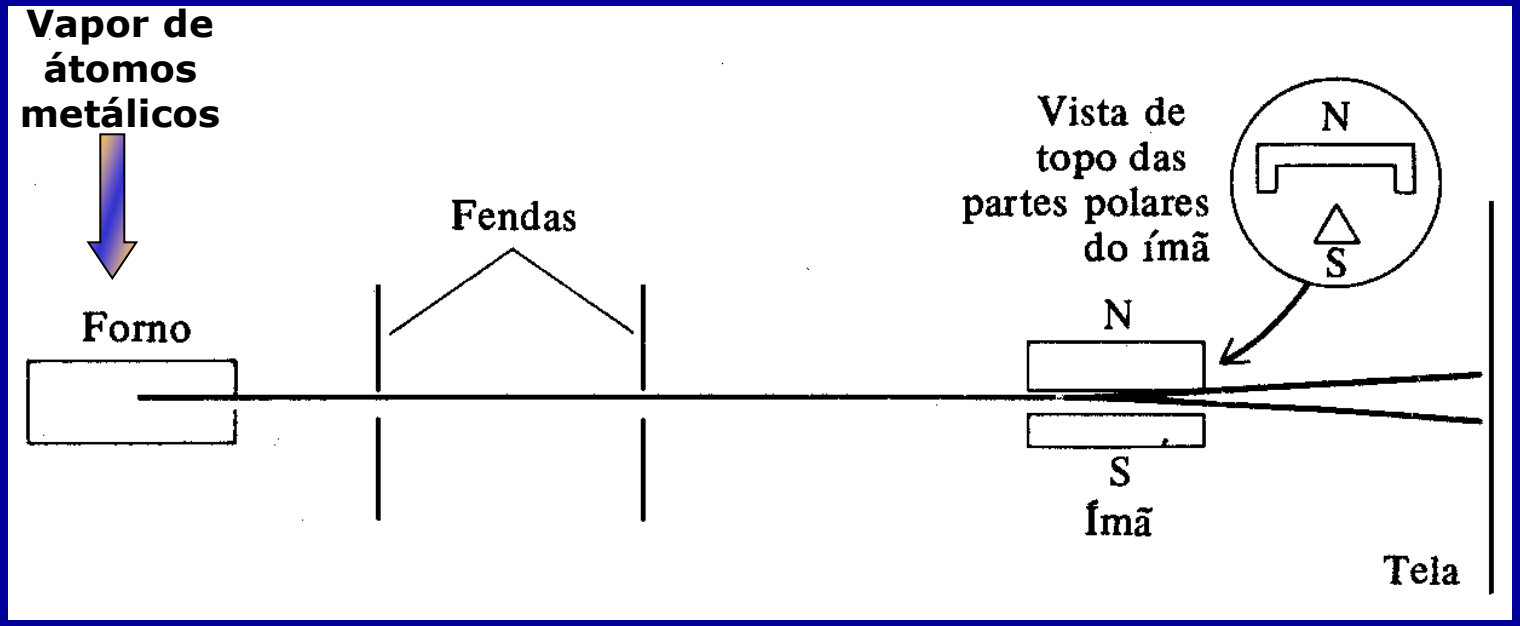
Número Quântico de Spin (m_s)

m_s= Representa o sentido de rotação do elétron no próprio eixo.

m_s= +1/2 e –1/2

↑ ↓

Experimento Stern-Gerlach



Números Quânticos

n --->	shell	1, 2, 3, 4, ...
l --->	subshell	0, 1, 2, ... n - 1
m_l --->	orbital	-l ... 0 ... +l
m_s --->	electron spin	+1/2 and -1/2

ÁTOMOS MULTIELETRÔNICOS

Wolfgang Pauli

Friedrich Hund

ÁTOMOS MULTIELETRÔNICOS

Príncípio da Exclusão de Pauli

↓

Em um átomo dois elétrons não podem apresentar o mesmo conjunto de números quânticos

Número total de elétrons nos níveis e sub-níveis

Electron Shell (n)	Subshells Available	Orbitals Available ($2\ell + 1$)	Number of Electrons Possible in Subshell [$2(2\ell + 1)$]	Maximum Electrons Possible for nth Shell ($2n^2$)
1	*s*	1	2	2
2	*s*	1	2	8
	p	3	6	
3	*s*	1	2	18
	p	3	6	
	d	5	10	
4	*s*	1	2	32
	p	3	6	
	d	5	10	
	f	7	14	
5	*s*	1	2	50
	p	3	6	
	d	5	10	
	f	7	14	
	*g**	9	18	
6	*s*	1	2	72
	p	3	6	
	d	5	10	
	*f**	7	14	
	*g**	9	18	
	*h**	11	22	

*These orbitals are not used in the ground state of any known element.

Regra de Preenchimento de Hund

1- Os elétrons ocupam os orbitais de "menor energia".

2- Os elétrons em uma subcamada tendem a preencher cada orbital *degenerado* individualmente com spins paralelos (mesmo m_s).

Energia no átomo → Energia Relativa

Energia de Estabilização do Elétron

Menor Energia

↓

Energia “mais” negativa ⟷ Maior em módulo

Seqüências de Energia para Átomos Multieletrônicos.

Para H:

$E = -C/n^2$

Para átomos multieletrônicos

⇩

$n + l$

Ordem energética:

n= define a energia do nível

l= define a energia do sub-nível

> *n* ⟶ “>” energia

> *l* ⟶ “>” energia

Energia total da subcamada: depende de *n* + *l*

Ordem de preenchimento: depende da energia total do átomo

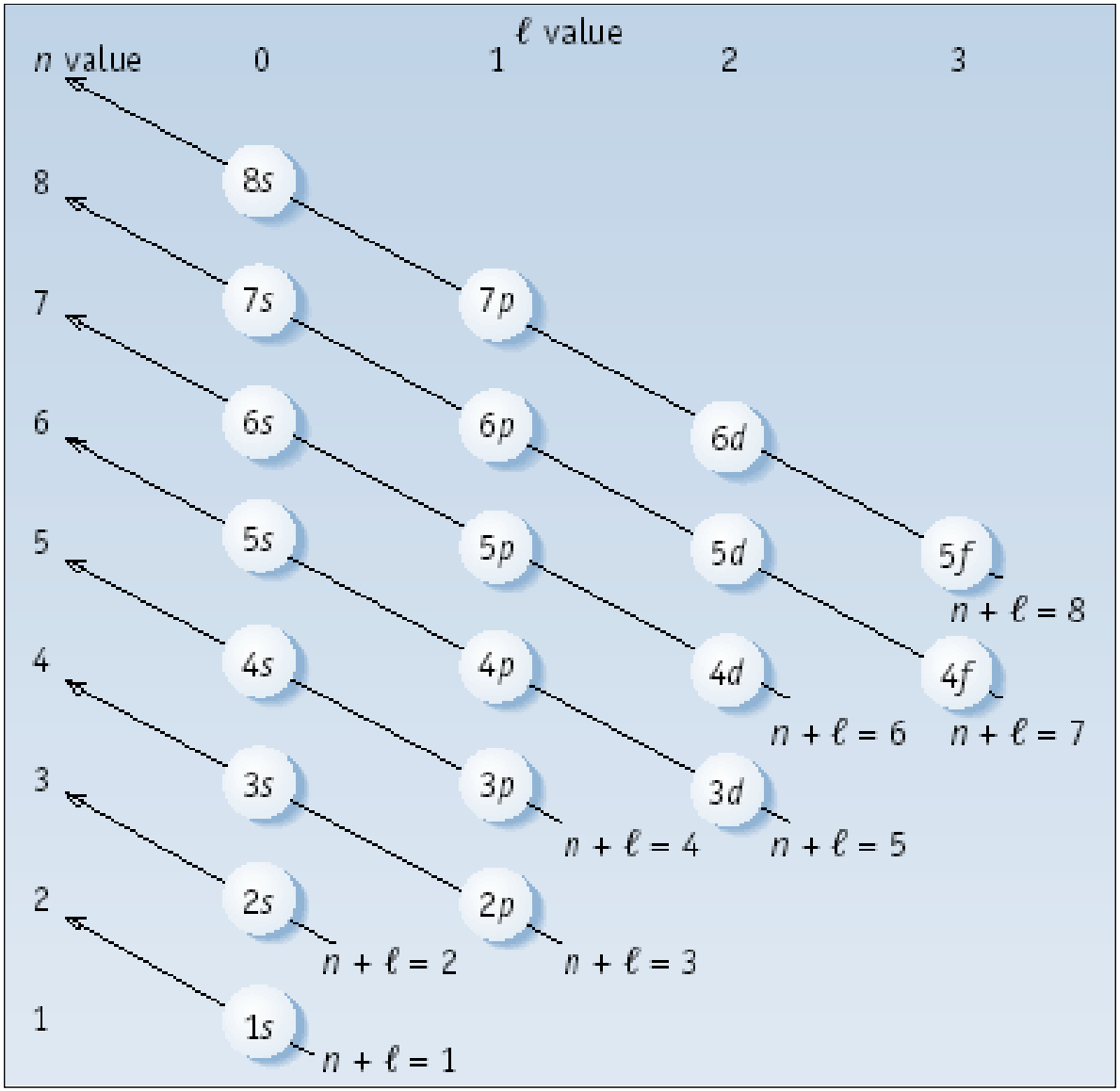
↓

Depende de interações múltiplas

Utilização de *n* + *l* para a seqüência de preenchimento

	n + *l*
1s	1
2s	2
2p	3
3s	3
3p	4
3d	5
4s	4
4p	5

Diagrama da Seqüência de Preenchimento



Segundo postulado de Hund:

2- Os elétrons em uma subcamada tendem a preencher cada orbital *degenerado* individualmente com spins paralelos (mesmo ms).

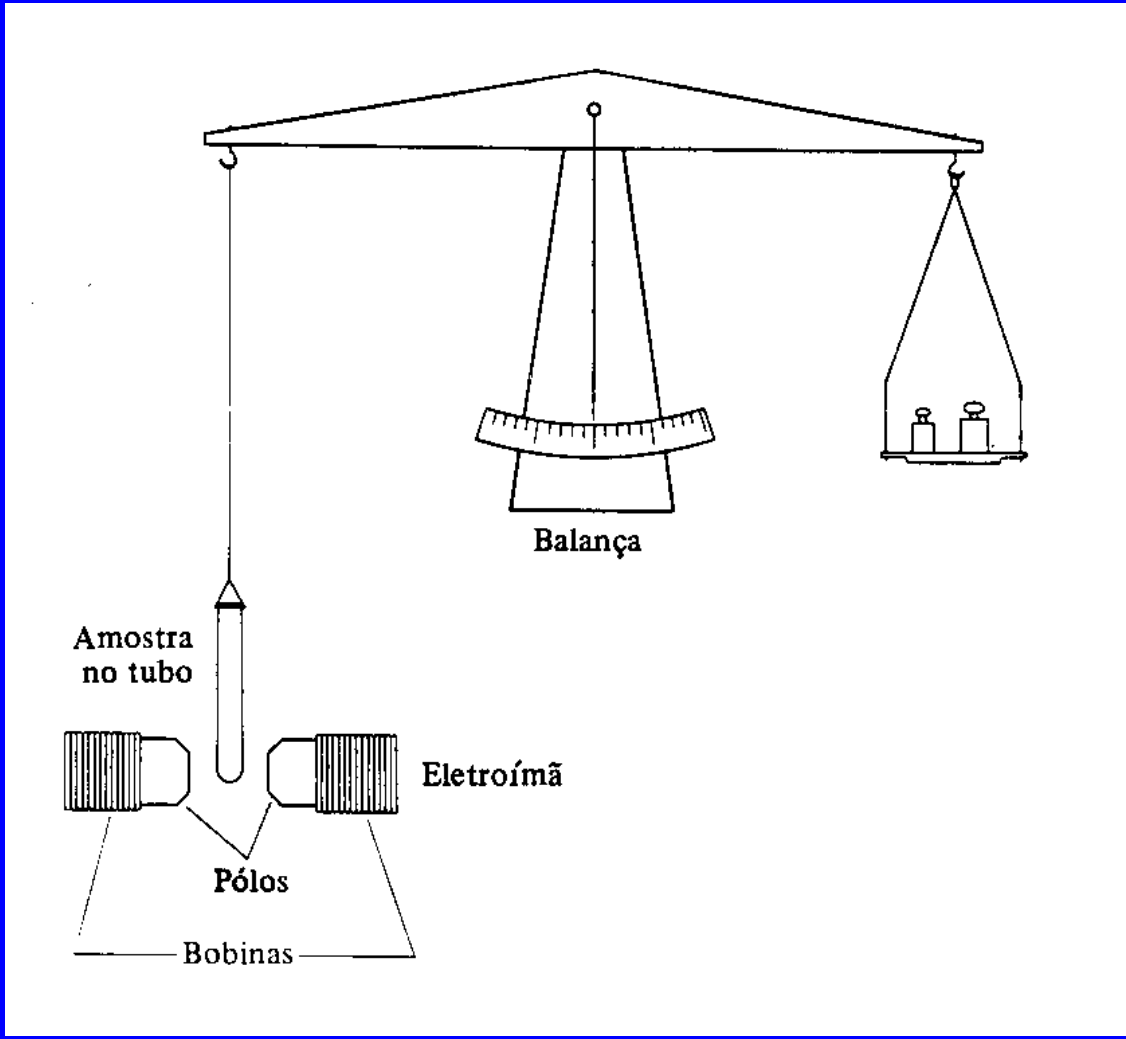
Na verdade não é bem assim, veja explicação!!

Propriedades Magnéticas

Diamagnética

Paramagnética

Medidas Magnéticas – compostos moleculares



Representação Esquemática da Balança de Gouy

Momento Magnético (μ_s)

$$\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$$

n= número total de elétrons desemparelhados

(μ_s) Para compostos moleculares

Compostos de coordenação dos metais de transição

Formas de representação da configuração eletrônica:

-espectroscópica (spdf)

-diagrama de caixas

-usando gás nobre precedente

-configuração eletrônica de íons

Ex: B Z=5

Exemplos: elétrons s/p/d

Preenchimento x Energia do Orbital

Carga Nuclear Efetiva (Número Atômico Efetivo) Z^*

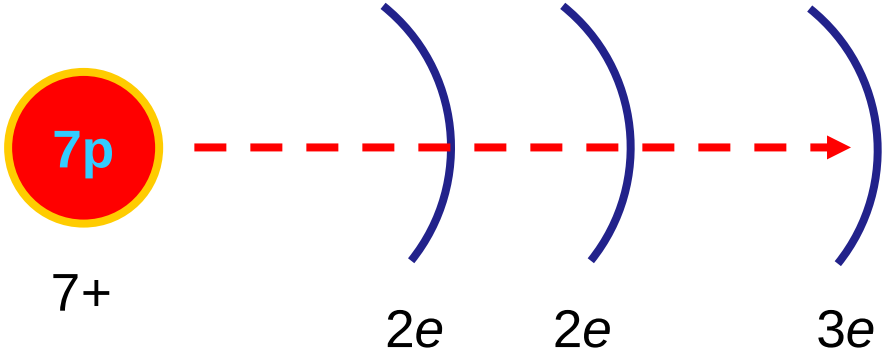
Energia elétrons

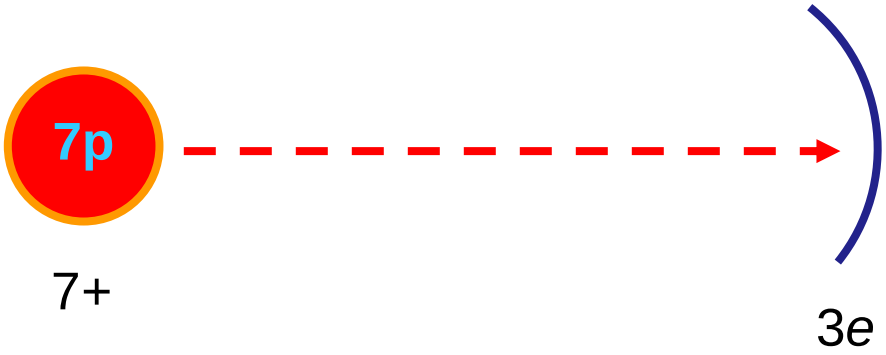
Interações prótons - elétrons

Interações elétrons - elétrons

N(Z=7): $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$

Carga Nuclear exercida sobre os elétrons 2p?





Carga Nuclear Efetiva (Número Atômico Efetivo) Z^*

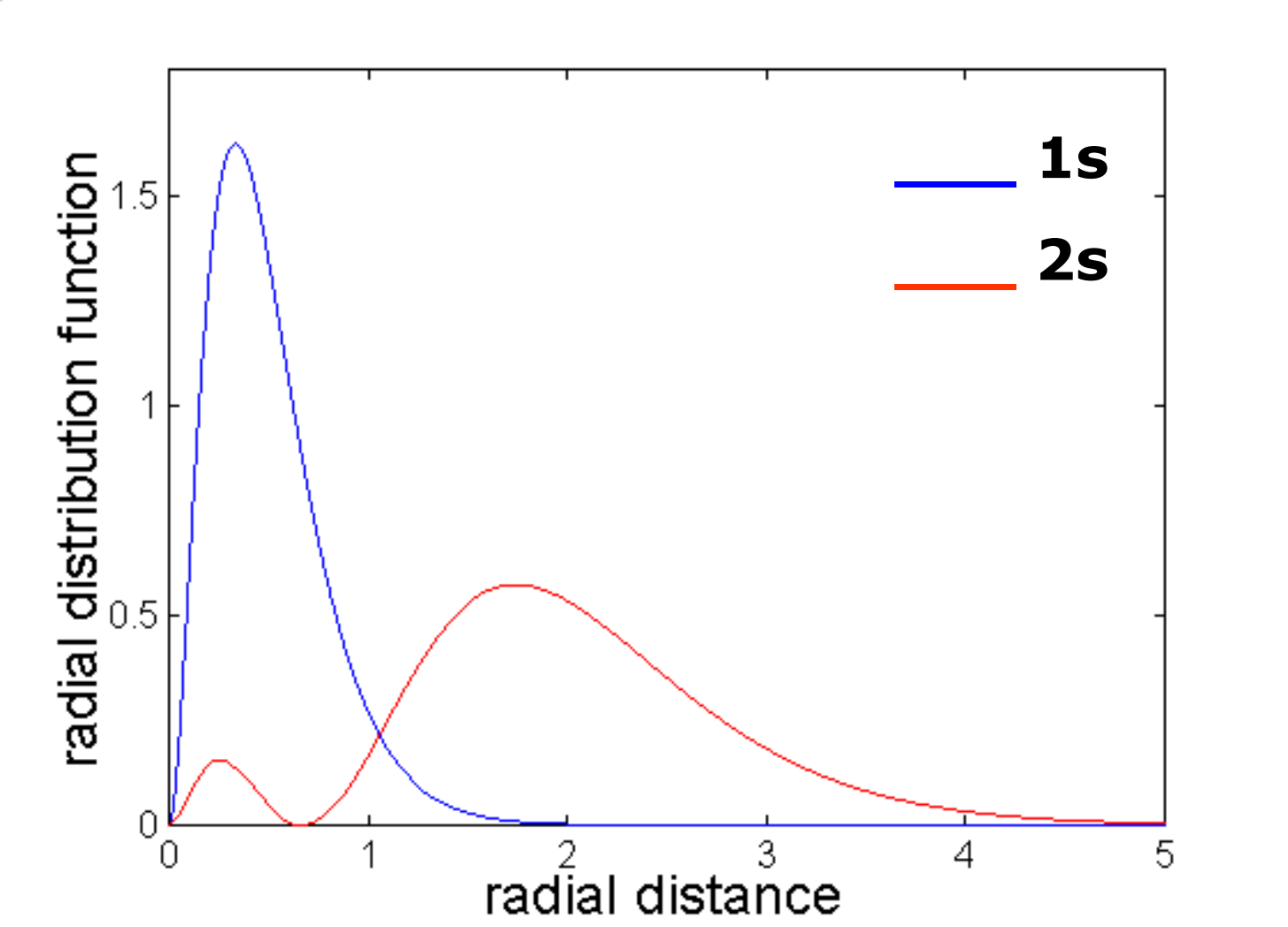
Energia de Ionização:

$$X(g) \longrightarrow X^+(g) + é$$

H: 1312 $kJ.mol^{-1}$

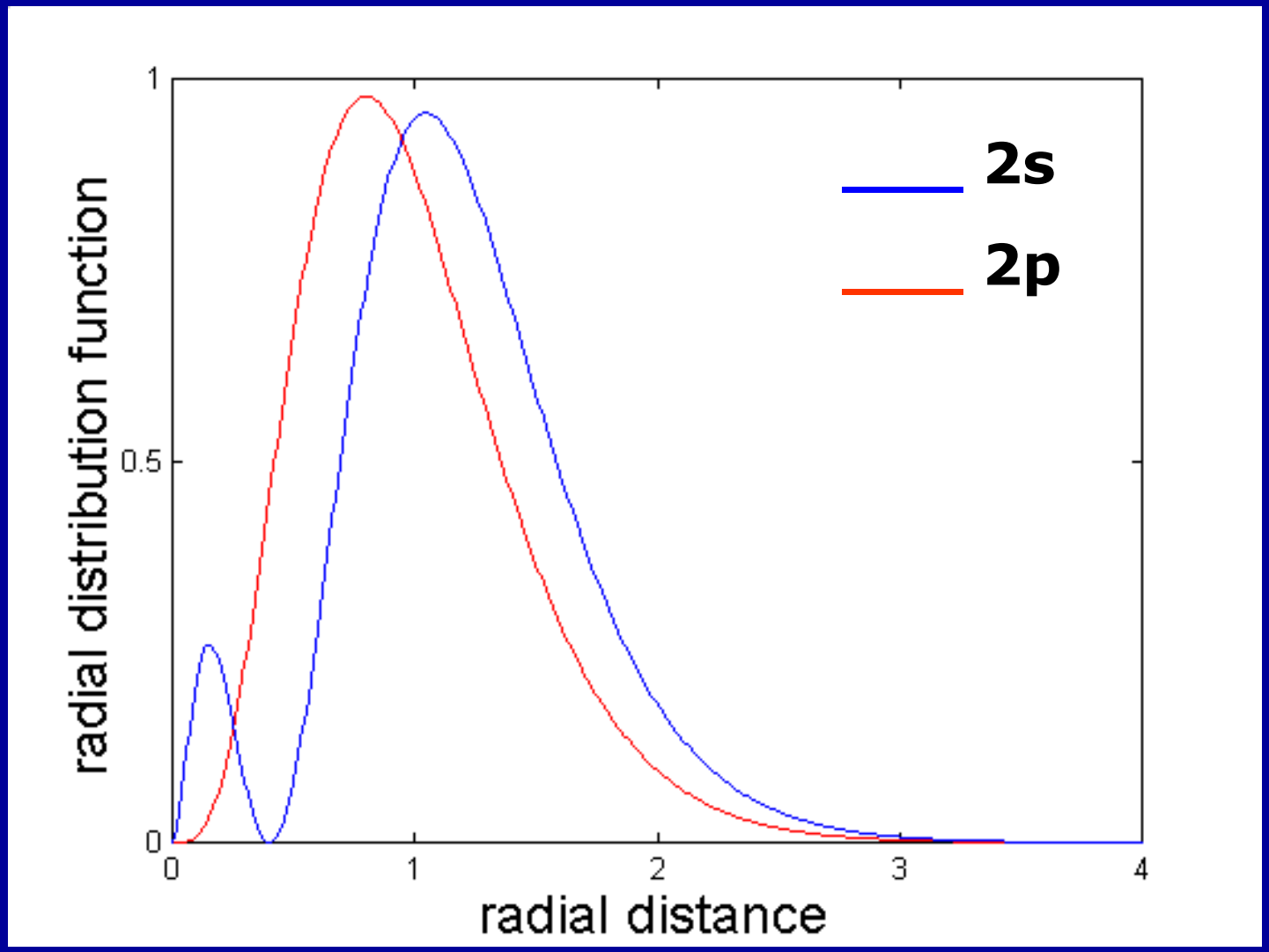
He: 2372 $kJ.mol^{-1}$

Li: 513 kJ.mol^{-1}



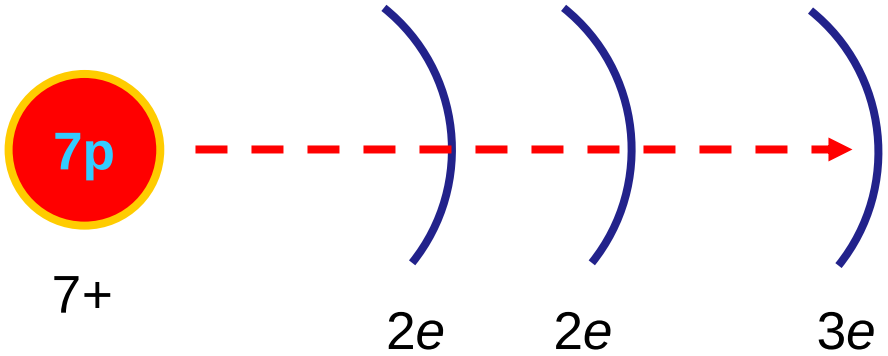
Be: 899 kJ.mol^{-1}

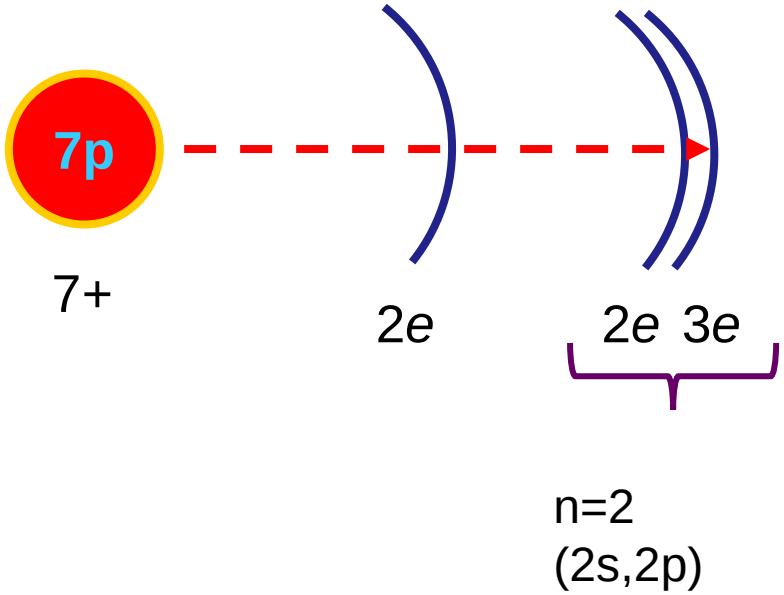
B: 800 kJ.mol^{-1}



N(Z=7): $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$

Carga Nuclear exercida sobre os elétrons 2p?





Cálculo "Simplificado" da Carga Nuclear Efetiva

Z_{ef}= Z-B

Onde:

Z_{ef}= Carga nuclear efetiva

Z= Carga nuclear

B= Fator de Blindagem

B= número de elétrons que residem nas camadas anteriores ao do elétron que está sendo considerado.

Z_{ef} para os elétrons do Alumínio

Al (Z=13) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

Para elétrons 1s

Z_{ef}= Z-B

B(1s)=0

Z_{ef}(1s)= 13-0= 13

Para elétrons 2s

Z_{ef}= Z-B

B(2s)= 2 (2 é 1s (n-1))

Z_{ef}(2s)= 13-2= 11

Para elétrons 2p

Z_{ef}= Z-B

B(2p)= 2 (2 é 1s (n-1))

Z_{ef}(2s)= 13-2= 11

Para elétrons 3s (e 3p)

Z_{ef}= Z-B

B(3s)= 2 (1s) + 8 (2s + 2p) = 10

Z_{ef}(2s)= 13-10= 3

Fe

Fe^{2+}

Fe^{3+}

Z^* $3d$= ?

Z^* 4s= ?

Carga Nuclear Efetiva que leva em consideração contribuição relativa de cada tipo de elétron. Exemplo: regras de Slater, Clementi-Raimondi

Átomo	Z^* (2s)	Z^* (2p)
Li	1.28	
B	2.58	2.42
C	3.22	3.14
N	3.85	3.83
O	4.49	4.45
F	5.13	5.10

Carga Nuclear Efetiva

↓

Propriedades Periódicas

Henry Moseley

Fluorescência de Raios X

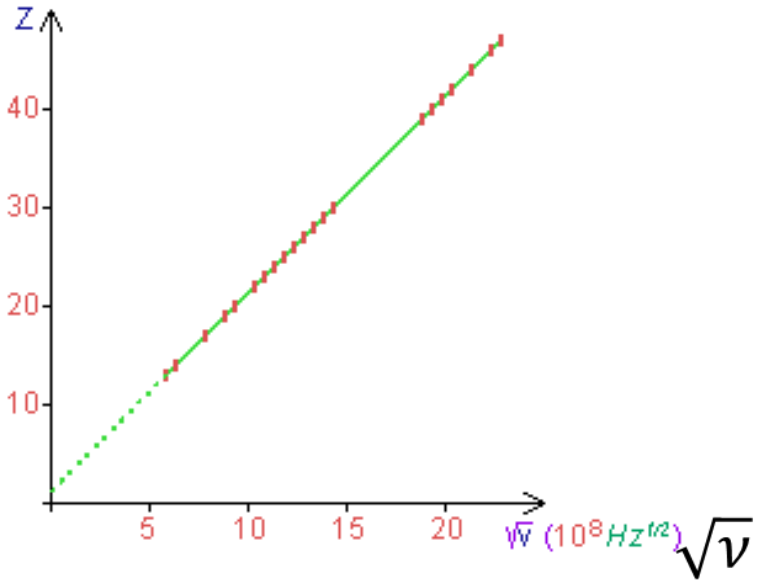
$$E_n = -\frac{Z^2 Rhc}{n^2}$$

$$E_n \propto Z^2$$

$$\Downarrow$$

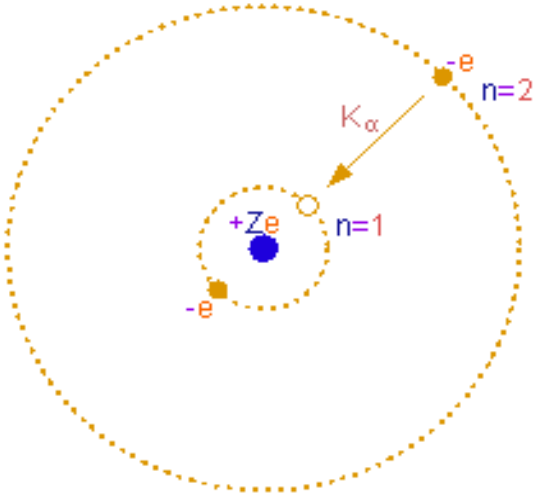
$$\nu \propto Z^2$$

$$\sqrt{\nu} \propto Z$$



$$\nu = A_n^2 (Z - b)^2$$

$$\sqrt{\nu} = A_n (Z - b)$$



Série K:
b=1
A_n depende da linha

Tabela Mendeleiev: Massas Atômicas

Tabela Mosley: Números Atômicos

Mosley: Redistribuiu Elementos na Tabela Periódica

Mosley: Previu elementos que ainda não haviam sido descobertos

2019: 150 anos da Tabela Periódica

Deveria ser Tabela Periódica de Mendeleiev - Mosley

O que vcs acham????

1A	2A	3B	4B	5B	6B	7B	8B			1B	2B	3A	4A	5A	6A	7A	8A
1 H																1 H	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac**	104 Rf	105 Ha	106 Sg	107 Ns	108 Hs	109 Mt	110	111							

Lanthanide* Series	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
Actinide** Series	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Photoelectron Spectroscopy

Espectroscopia de Fotoeletróns

Efeito fotoelétrico:

$$h\nu = h\nu_o + \frac{1}{2} mv^2$$

$$h\nu = E_i + E_c$$

$$E_i = h\nu - E_c$$

$$E_i = h\nu - E_c$$

Para um determinado experimento:

$$\mathbf{E_i = k - E_c}$$

$$\mathbf{E_{i1} = k - E_{c1}}$$

$$\mathbf{E_{i2} = k - E_{c2}}$$

$$\mathbf{E_{i3} = k - E_{c3}}$$

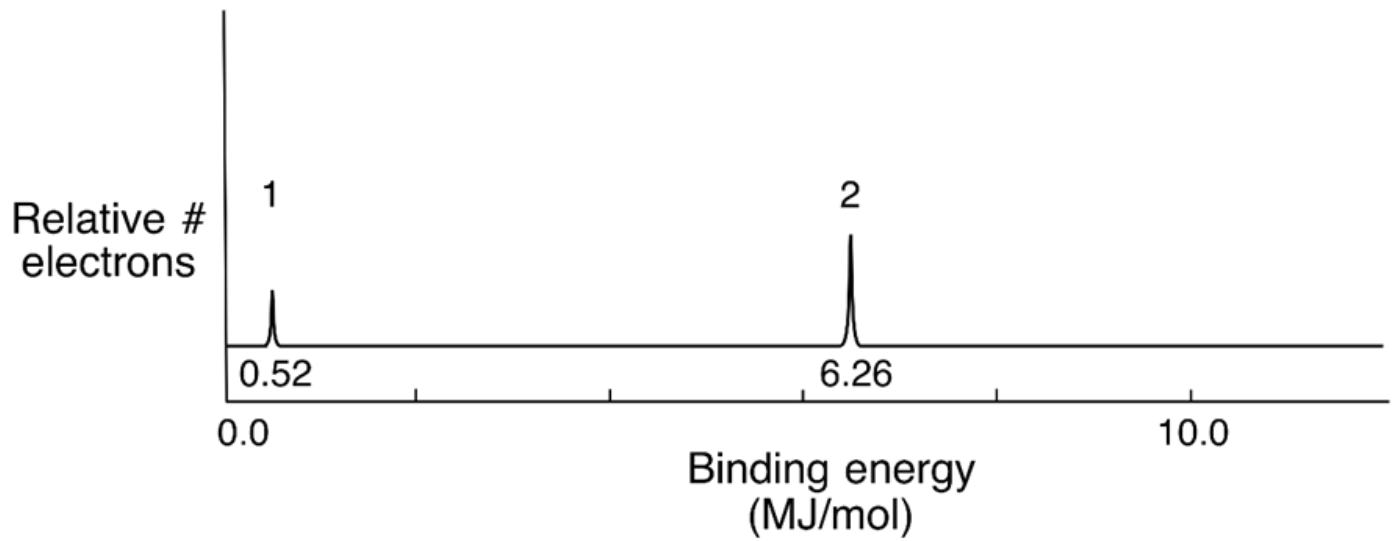
XPS: X Ray Photoelectron Spectroscopy

→ Core electrons

UPS: Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy

→ Valence electrons

Photoelectron Spectrum: Li



Atomic Ionization Energies:

2s : 520 kJ mol^{-1}

1s : 5596 kJ mol^{-1}

Successive Ionization Energies:

$Li \rightarrow Li^{+}$: 513.3 kJ mol^{-1}

$Li^{+1} \rightarrow Li^{+2}$: 7298 kJ mol^{-1}

$Li^{+2} \rightarrow Li^{+3}$: 11814.8 kJ mol^{-1}