

# **CAPÍTULO II**

## **O ÁTOMO E A TABELA PERIÓDICA**



## 2.1. O ÁTOMO

A idéia de átomo como a menor parte da matéria que guarda as propriedades específicas dos materiais não se impôs sem resistência. Somente após o tratamento que Einstein deu ao movimento Browniano, o conceito de átomo venceu as últimas resistências. Uma vez admitida a existência de átomos, restava descrevê-lo. Modelos atômicos foram elaborados, tais como os modelos de Thompson e de Rutherford, que pretendiam descrever o átomo sob as leis da física clássica. Todos esses modelos apresentavam falhas até que Niels Bohr elaborou um modelo que fundia elementos de física clássica com elementos do que seria então chamada teoria quântica. O modelo de Bohr conseguia explicar vários fenômenos que os modelos anteriores falhavam.

### 2.1.1 O Átomo de Bohr

Bohr elaborou certas hipóteses que contrariavam a física da época. Seu modelo atômico era descrito como:

- a) O átomo é composto por um núcleo, onde se concentram as cargas positivas, e uma eletrosfera, de volume muito maior que o volume do núcleo, onde estão localizados os elétrons. Os elétrons descrevem órbitas circulares em volta do núcleo.

Com esta premissa, Bohr manteve o modelo planetário de átomo que havia sido proposto anteriormente por Rutherford.

- b) Somente certos valores do momento angular orbital dos elétrons eram permitidos (quantização do momento angular). Uma consequência disso é que apenas certas órbitas são permitidas aos elétrons. Outra consequência é a quantização da energia dos elétrons, ou seja, os elétrons só poderiam ter determinadas energias. A cada órbita, estava relacionada uma energia. Quanto maior o raio da órbita maior seria a energia associada. O elétron que ocupasse uma dada órbita possuiria a energia daquela órbita

Com esta premissa, a física clássica, que não admitia tal possibilidade, foi violada.

- c) Aos elétrons era permitido saltar de uma órbita para outra, logo sua energia mudava. Para que um elétron pulasse de uma órbita para outra mais energética, ele deve absorver energia, de modo a ter a energia da órbita mais externa. Caso pulasse para uma órbita menos energética, o elétron deveria liberar o excesso de energia, passando a ter a energia da órbita mais interna correspondente. Se a absorção ou liberação de energia for na forma luminosa, então a frequência da radiação absorvida ou emitida está relacionada à energia absorvida ou liberada através da relação

$$E = h\nu = E_f - E_i$$

Onde  $h$  é uma constante fundamental da física, denominada constante de Planck.

As segunda e terceira premissas explicam os espectros de emissão de luz característicos de cada elemento químico.

### 2.1.2. A Teoria Quântica

Max Planck, ao explicar as radiações de corpo negro, propôs que átomos só poderiam emitir quantidades discretas de energia que se relacionariam à frequência da radiação emitida. Esta hipótese foi o embrião de uma nova teoria, a teoria quântica, que modificaria profundamente a forma de o homem entender o universo microscópico. Entretanto, esta teoria, ao contrário da teoria mecânica clássica, desenvolvida principalmente por Newton, teve seu desenvolvimento partilhado por diferentes pessoas em diferentes lugares, sempre com forte oposição de setores bastante respeitados da ciência física.



Planck foi o primeiro a usar conceitos quânticos. Einstein também usou ao descrever o efeito foto-elétrico. Bohr usou ao propor seu modelo atômico. Mas naquela época, conceitos quânticos eram usados em conjunto com conceitos clássicos. Somente algum tempo depois, uma teoria puramente quântica foi desenvolvida. A forma de ver os átomos foi então fortemente modificada por esta teoria.

Existem dois formalismos físico-matemáticos da teoria quântica em uso: a teoria ondulatória de Erwin Schrödinger e a teoria matricial de Werner Heisenberg. Ambas são totalmente equivalentes em termos de resultados produzidos.

A equação quântica de movimento para uma partícula em uma dimensão, proposta por Schrödinger é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

onde  $\psi$  é a solução da equação e  $\hbar = h/2\pi$ . O produto  $\psi^* \psi$  representa a probabilidade de se encontrar a partícula cujo movimento está sendo descrito em uma dada posição, em um certo instante de tempo.

A teoria quântica possui uma característica muitíssimo importante que é a impossibilidade de se determinar posição e velocidade, com precisão total, no mesmo instante. Este fato é expresso pelo princípio de incerteza que limita a precisão a que se pode chegar nas medições de posição e momento linear pela relação

$$\Delta P \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

onde  $\Delta P$  e  $\Delta x$  são os erros nas medidas de momento e posição, respectivamente.

### 2.1.3. O Modelo Atômico Atual

O átomo é constituído por três tipos de partículas fundamentais: o elétron, o próton e o nêutron.

Elétron:	massa $9,11 \times 10^{-31}$ Kg	carga elétrica $-1,6 \times 10^{-19}$ C
Próton:	massa $1,67 \times 10^{-27}$ Kg	carga elétrica $1,6 \times 10^{-19}$ C
Nêutron:	massa $1,68 \times 10^{-27}$ Kg	carga elétrica nula

O núcleo atômico é constituído por prótons e nêutrons. Em volta do núcleo estão os elétrons. A massa do átomo é aproximadamente igual a soma das massas dos prótons e nêutrons.

O número de prótons, chamado de número atômico, é o parâmetro que caracteriza o átomo. O próton é a carga positiva que atrai os elétrons. Devido ao volume reduzido do núcleo, a força repulsiva dos prótons é muito intensa. Isto faz do núcleo uma região de instabilidade intrínseca. Para que haja estabilidade, é necessário que exista uma outra força que balanceie a força eletrostática dos prótons. Esta força é chamada de força de interação forte e existe entre os prótons e nêutrons. Os nêutrons também agem como separadores de prótons, o que diminui a força eletrostática repulsiva entre eles. Os nêutrons são necessários, pois do contrário os núcleos seriam instáveis.

Geralmente o número de nêutrons é igual ao número de prótons, mas também pode ser diferente. Pode acontecer que para o mesmo número de prótons, haja diferentes números de nêutrons. Este é o caso dos isótopos. A massa atômica, soma da massa dos prótons e nêutrons, no caso dos átomos que possuem isótopos, é igual à média ponderada da massa de cada isótopo, onde os pesos da média são a abundância de cada isótopo na natureza.

O modelo atômico aceito atualmente está em perfeita concordância com a mecânica quântica. Algumas características mais marcantes da mecânica quântica são comentadas a seguir:



a) **É impossível localizar os elétrons:** no modelo de Bohr, os elétrons se moviam em torno do núcleo em órbitas circulares. Havia uma precisão na localização do elétron. Na mecânica quântica, não há como obter tal precisão na medida da posição. Ao invés da posição exata, trabalha-se com a probabilidade de o elétron estar em certa posição. Cai o conceito de órbita circular.

b) **Estado dos elétrons. Orbitais possíveis:** O movimento do elétron é agora descrito por uma equação, a equação de Schrödinger, cuja solução  $\Psi$  é o estado do elétron, ou seja, o estado que descreve o movimento do elétron. Para o elétron em torno do núcleo, nem todas as soluções são possíveis, apenas algumas delas. Isto significa que somente certos estados são possíveis para os elétrons. A consequência disso é a introdução do conceito de orbital atômico que nada mais é do que a região onde se pode encontrar cada elétron.

Para cada estado permitido, existe um orbital associado. O orbital substitui a órbita circular do modelo de Bohr.

c) **A energia de cada estado:** a quantização da energia do elétron está presente nesse modelo, assim como estava presente no modelo de Bohr. Cada estado eletrônico permitido tem uma energia característica. Assim como os estados, nem todas as energias são permitidas.

Um elétron que está em um estado tem a energia daquele estado. Caso ele passe para outro estado, ele também mudará de energia. Caso a energia do estado de destino seja maior, o elétron só mudará de estado se receber uma quantidade de energia que seja igual à diferença de energia entre os dois estados. Caso a energia do estado de destino seja menor, a mudança de estado ocorrerá com o elétron emitindo um fóton (luz), cuja energia é igual à diferença de energia dos dois estados, o final e o inicial, respectivamente.

d) **Os números quânticos:** cada estado eletrônico permitido é caracterizado por um conjunto de 4 números, denominados números quânticos.

- **Número quântico principal:** é um número inteiro que varia desde  $n=1$ . Ele também é designado por letras do alfabeto

n=	1	2	3	4	5	6	7
	K	L	M	N	O	P	Q

- **Número quântico secundário ou azimutal:** esse número depende do valor de  $n$ . Ele pode variar, para um dado valor de  $n$ , de  $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, n - 1$ . Temos também a simbologia

l =	0	1	2	3	4	5	6
	s	p	d	f	g	h	i

- **Número quântico magnético:** para um dado valor de  $l$ , o número quântico magnético  $m_l$  pode variar de  $m_l = -l, -l+1, -l+2, \dots, 0, \dots, l+2, l+1, l$
- **Número quântico de spin  $m_s$ :** este número pode assumir apenas dois valores  $+1/2$  ou  $-1/2$ . O spin é um conceito puramente quântico. Alguns livros tentam apresentar o spin como estando associado à rotação do elétron em torno dele mesmo. Se isto fosse verdade, para provocar o efeito conhecido, o elétron deveria ser maior que o átomo. Esta interpretação, portanto, não tem sentido.

O número quântico principal determina o tamanho do átomo e é o principal determinante da energia do elétron. Quanto maior o valor de  $n$  maior será a distância média entre o elétron e o núcleo e maior será também a energia do elétron.

O número quântico secundário indica a forma do orbital. Ele dá a forma dos orbitais eletrônicos e está relacionado ao momento angular do elétron. O número quântico magnético



$m_l$  está relacionado à componente z do momento angular orbital do elétron. Esse número quântico influencia as propriedades magnéticas dos materiais.

O spin é também um momento, mas intrínseco do elétron. Ele também está fortemente relacionado às propriedades magnéticas dos materiais.

- e) **O princípio de exclusão de Pauli:** observando os resultados de medidas de espectroscopia de elétrons em átomos e em outros sistemas e combinando estes dados a outras informações, Wolfgang Pauli enunciou um princípio dos mais importantes para se entender os átomos e os elétrons: “*somente um elétron deve ocupar cada estado possível*”. Isto significa que para um determinado conjunto de 4 números quânticos ( $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ ) há somente um elétron. Outros elétrons devem ter seus próprios conjuntos de números quânticos.

#### 2.1.4. O Átomo de Hidrogênio e os Átomos Multi-Eletrônicos

O átomo de hidrogênio é o mais simples dos átomos. É formado por um próton, que é seu núcleo, e apenas um elétron em sua eletrosfera. O elétron está preso ao núcleo através da força coulombiana (proporcional a  $1/r^2$ ), ou pelo potencial coulombiano (proporcional a  $1/r$ ).

O elétron deste átomo preenche, em seu estado fundamental (o estado de menor energia), apenas o estado ( $n=1$ ,  $l=0$ ,  $m_l=0$  e  $m_s=\pm 1/2$ ) ou seja ( $1,0,0,\pm 1/2$ ), onde o spin pode ser  $1/2$  ou  $-1/2$ .

Este elétron pode ocupar outros estados com outras energias, desde que receba energia para tal. No caso do átomo de hidrogênio, a energia de cada estado é determinada por  $n$ . Isto significa que existem diversos estados com a mesma energia, para um dado valor de  $n$ . Chamamos esses estados diferentes com a mesma energia de estados degenerados.

Os átomos de muitos elétrons são muito mais difíceis de se resolver. Foi Hartree quem desenvolveu os trabalhos pioneiros para resolver este tipo de átomo.

No átomo multi-eletrônico, vários elétrons se encontram distribuídos ao redor do núcleo. Portanto, a força que cada elétron sente, logo sua energia potencial, depende dos outros elétrons.

Esta é a dificuldade. O elétron mais próximo do núcleo sente o potencial dado por  $V = -\frac{ze}{r}$ , pois sente apenas o efeito do núcleo. O efeito dos demais elétrons se anula. O elétron mais distante sente o potencial  $V = -\frac{e}{r}$ , pois ele vê o átomo como um ânion, isto é, a carga do núcleo parcialmente encoberta pelos demais elétrons. Os elétrons intermediários sentem um potencial mais difícil de se calcular.

Um importante resultado retirado dos cálculos de Hartree é a dependência que a energia do elétron tem do número quântico secundário, a qual não ocorre para o hidrogênio. Isto se deve ao fato que  $l$  determina a forma do orbital do elétron. Como será visto, existem orbitais alongados, fazendo que algumas regiões do orbital sejam mais próximas do núcleo de que outras regiões. Para um dado  $n$ , valores mais altos de  $l$  levam o elétron mais para longe do núcleo. O fato de existirem outros elétrons para “blindar” o potencial sentido pelo elétron leva a energia de cada elétron a depender de  $l$  também. Isto não ocorre para o hidrogênio, pois não há blindagem.

Este resultado produz dois fatos importantes. O primeiro é que agora devemos considerar as camadas eletrônicas  $n$  divididas em subcamadas  $l$ . O segundo é que para valores de  $n$  grandes, haverá valores de  $l$  que fazem com que a energia do estado supere a energia de estados pertencentes à camada superior, em que  $n'=n+1$ . Isto tem conseqüências importantes sobre as propriedades atômicas.



### 2.1.5. A Configuração Eletrônica dos Átomos

Usando o princípio de exclusão de Pauli e o princípio da mínima energia para o átomo, podemos distribuir os elétrons pelos estados eletrônicos dos respectivos átomos. Basta que coloquemos os estados em níveis crescentes de energia e preenchamos os estados da menor para a maior energia. Antes disso, vamos saber como se distribuem os elétrons com respeito aos números quânticos. Sabemos que:

- Para cada número quântico  $n$ , temos  $n$  valores permitidos de  $l$ . Por exemplo, para  $n=3$ , podemos ter  $l = 0, 1, 2$
- Para cada número quântico  $l$ , temos  $2l+1$  valores permitidos de  $m_l$ . Por exemplo, para  $l = 2$ , temos  $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$
- Para cada valor de  $m_l$ , podemos ter dois valores para  $m_s$ . Por exemplo, para  $m_l = 0$ , temos  $m_s = -1/2, +1/2$

Para  $n=2$  (camada 2) temos duas subcamadas ( $l = 0$  e  $l = 1$  ou **s** e **p**). Para a subcamada  $l = 0$  (s), temos 1 valor para  $m_l$  ( $m_l=0$ ) e dois valores para  $m_s$  ( $m_s=1/2$  e  $m_s=-1/2$ ), portanto esta subcamada pode alojar 2 elétrons. Para cada subcamada  $l = 1$  (p) temos 3 valores de  $m_l$  (-1, 0, 1) e dois  $m_s$  para cada  $m_l$ . Significa que podemos alojar 6 elétrons nesta subcamada. Logo, na camada  $n = 2$ , 8 elétrons podem ser acomodados. Na tabela 2.1 estão listadas diversas camadas e subcamadas, bem como a capacidade de cada uma em ordem crescente de energia.

Tabela 2.1: camadas e subcamadas eletrônicas em ordem crescente de energia

Número quânticos $n, l$	Nome da subcamada	Capacidade da Subcamada	Número acumulado de elétrons
6, 2	6d	10	112
5, 3	5f	14	102
7, 0	7s	2	88
6, 1	6p	6	86
5, 2	5d	10	80
4, 3	4f	14	70
6, 0	6s	2	56
5, 1	5p	6	54
4, 2	4d	10	48
5, 0	5s	2	38
4, 1	4p	6	36
3, 2	3d	10	30
4, 0	4s	2	20
3, 1	3p	6	18
3, 0	3s	2	12
2, 1	2p	6	10
2, 0	2s	2	4
1, 0	1s	2	2

↑  
Ordem crescente de energia (menos negativa)

Para preencher os estados eletrônicos, cada camada e subcamada do átomo vai sendo preenchida com elétrons em ordem crescente de energia.



**Estrutura e Propriedade de Materiais Cerâmicos**  
**Capítulo II: O Átomo e a Tabela Periódica**  
**Prof. Angelus G. P. da Silva**

Exemplo: o vanádio V tem 23 elétrons,  $^{23}\text{V}$ . Eles estão divididos da seguinte forma

$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$4s^2$	$4d^3$
2	4	10	12	18	20	23

Existem diversas exceções à sequência energética mostrada na tabela. Como já mencionado, a dependência que a energia dos estados tem de  $l$  faz com que a energia de certas subcamadas supere a energia de outras subcamadas de camadas superiores. Para certas espécies atômicas, as energias dos estados são tão próximas que podem inverter a ordem. Isto é verdade para as subcamadas  $4s$  e  $3d$ ,  $5s$  e  $4d$  e  $6s$  e  $5d$ . Também ocorre para alguns lantanídeos (terras raras), com as subcamadas  $5d$  e  $4f$  e com os actinídeos, com as subcamadas  $6d$  e  $5f$ . Por exemplo, no átomo de cromo  $^{24}\text{Cr}$ , deveríamos ter nas últimas subcamadas  $4s^2 3d^4$ , mas temos  $4s^1 3d^5$ . Isto ocorre porque as energias das subcamadas  $4s$  e  $3d$  são tão próximas que efeitos secundários, como o da estrutura fina magnética, pode ter provocado a inversão mencionada.

Os elétrons mais externos de um átomo, determinados principalmente pelo número quântico  $n$ , são os mais importantes para a determinação de suas características químicas, pois são eles que mais se aproximam dos átomos vizinhos e criam os campos elétrico e magnético que interagem com os elétrons externos dos átomos vizinhos. Nem sempre as subcamadas mais energéticas são também as mais externas. Isto é particularmente verdade para as subcamadas de  $f$ . Existem casos em que uma subcamada  $s$  de uma camada  $n$  é mais externa que uma subcamada  $d$  de uma camada  $n-1$ , embora esta última seja mais energética. Quando isto ocorre, os elétrons da subcamada  $s$  blindam os elétrons da subcamada  $d$ , mais energéticas, impedindo-as de interagirem com os elétrons dos átomos vizinhos.

Os elétrons da camada mais externa são chamados de elétrons de valência.

### 2.1.6. Os Orbitais

São os locais permitidos aos elétrons em seus respectivos estados. Como vimos, não é possível localizar os elétrons, mas apenas falar sobre a probabilidade dele se encontrar em determinada posição. Outra peculiaridade da mecânica quântica é que as posições possíveis para o elétron não estão restritas a pequenas regiões, mas se estendem por uma vasta região. Entretanto, a probabilidade de se encontrar o elétron varia de ponto a ponto dentro de um mesmo orbital. Isto dá uma forma especial ao orbital. Desenhando os orbitais com uma fronteira, dentro da qual a probabilidade de se encontrar o elétron é cerca de 0,9 podemos visualizar as formas dos orbitais.

As figuras 2.1-2.6 mostram as formas dos orbitais  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$  e  $g$ . Estes formatos são importantes para as reações e os efeitos de blindagem do núcleo ou das cargas externas. O site <http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/Mos/N2/2Px2Px-Pi/index> traz imagens de vários orbitais atômicos, híbridos e moleculares, assim como imagens animadas da formação de orbitais moleculares.

Vemos que apesar do elétron estar atraído por uma força esfericamente simétrica, eles podem ocupar regiões que não possuem tal simetria (apenas os orbitais  $s$  têm tal simetria). Isto se deve à conservação e à quantização do momento angular do elétron, relacionados ao número quântico  $l$ . Este número quântico governa a forma e o tamanho da subcamada. O número quântico  $m_l$  relaciona-se à quantização do componente  $z$  do momento angular. Ele determina a orientação espacial de cada subcamada.

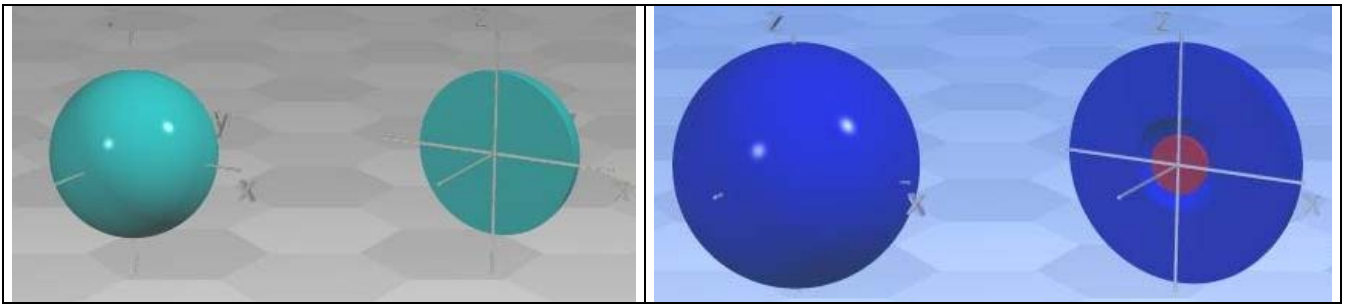


Figura 2.1: Comparação entre as superfícies de contorno para os orbitais 1s e 2s. A forma é esférica, apenas o tamanho muda. Fonte: The Orbitron.

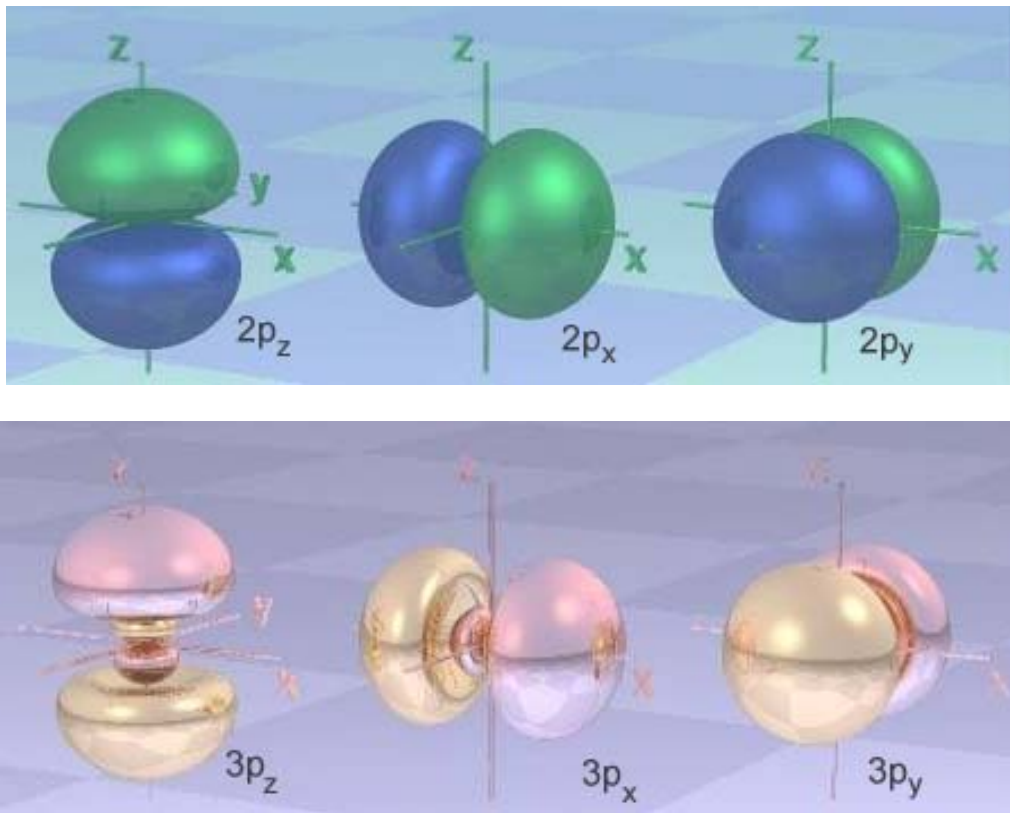


Figura 2.2: Os 3 orbitais 2p (acima) e 3p (abaixo). Fonte: The Orbitron.



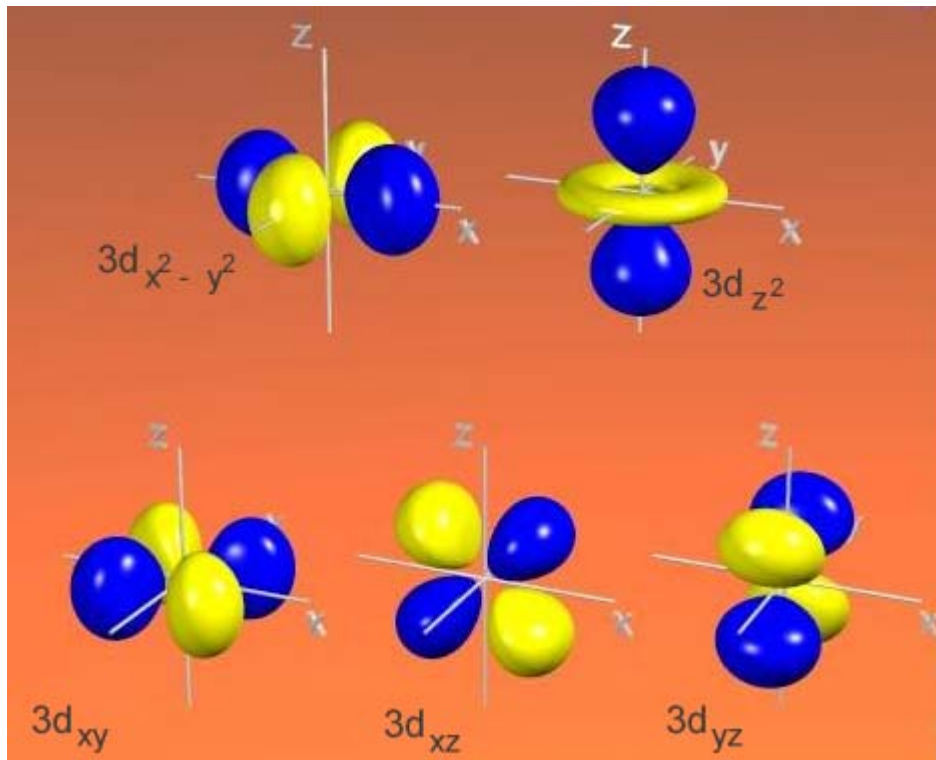


Figura 2.3: Os cinco orbitais 3d. Fonte: The Orbitron.

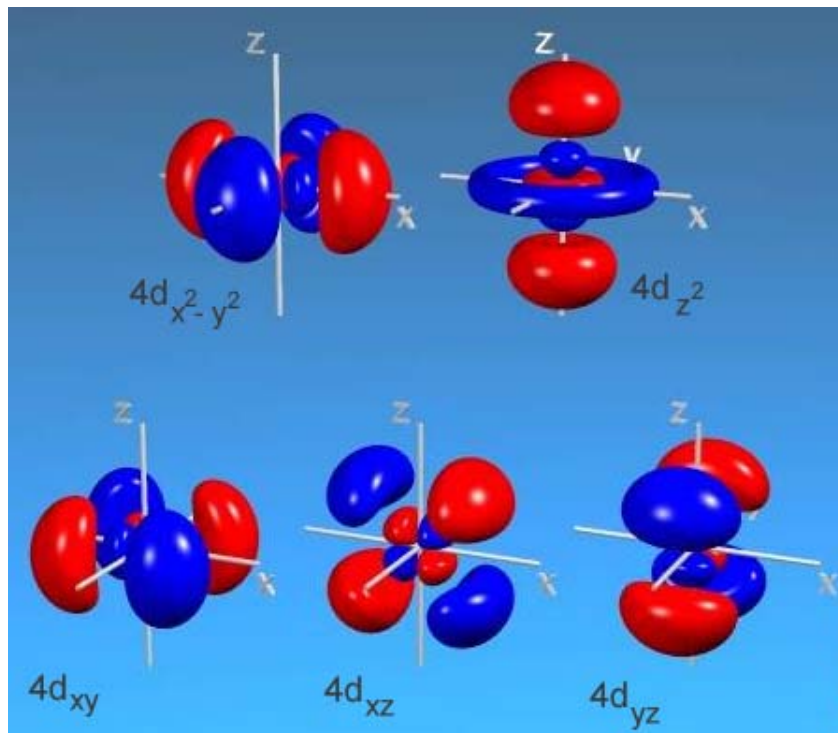


Figura 2.4: Os cinco orbitais 4d. Fonte: The Orbitron.

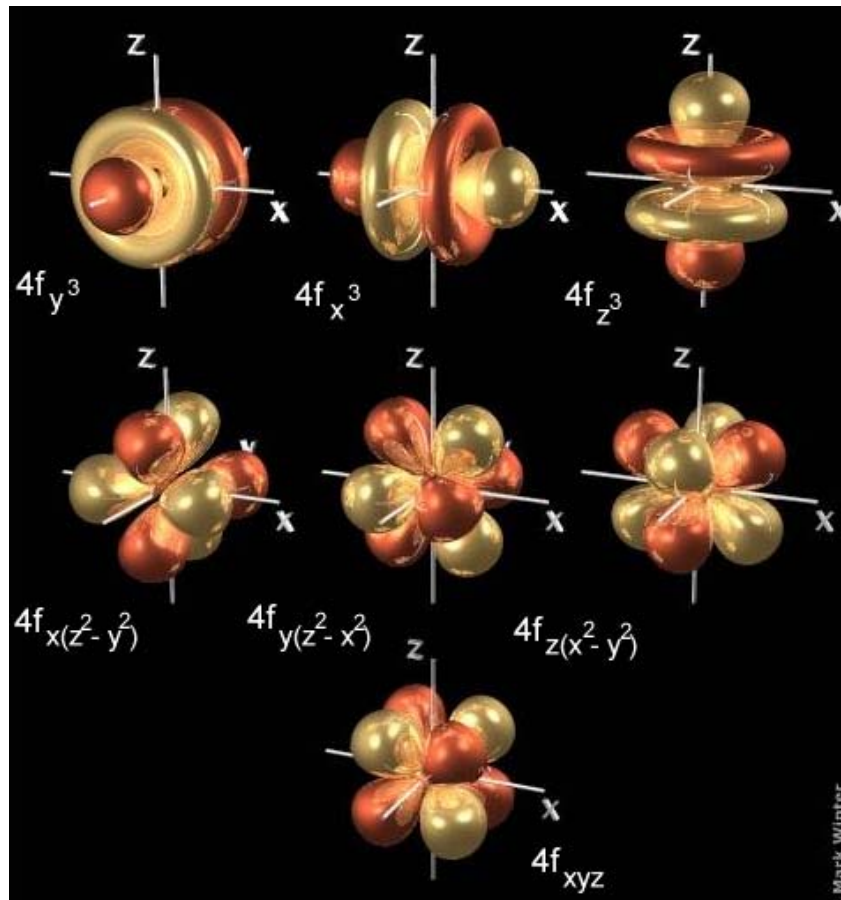


Figura 2.5: Os sete orbitais 4f. Fonte: The Orbitron.

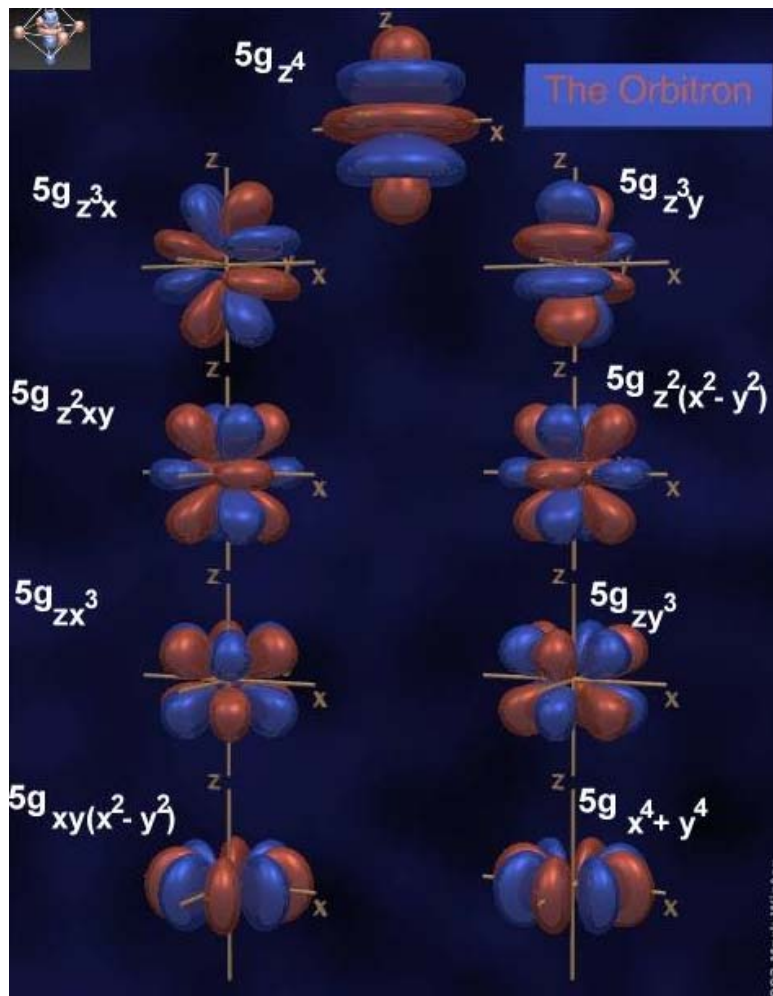


Figura 2.6: Os nove orbitais 5g. Nenhum orbital deste tipo é ocupado em nenhum átomo da tabela periódica em seu estado fundamental, embora possa ser ocupado em átomos excitados. Fonte: The Orbitron.

## 2.2. A Tabela Periódica

Foi Mendeleev, em 1869, o primeiro a perceber que as propriedades físicas e químicas dos elementos químicos variavam periodicamente com seu número atômico. Ele deu um jeito de agrupar os elementos em linhas e colunas, de modo que os elementos que ocupassem uma mesma coluna tivessem propriedades semelhantes. Nascia a tabela periódica dos elementos.

Muitas propriedades dos elementos são determinadas por suas configurações eletrônicas e não apenas por seus números atômicos. Veremos que as configurações eletrônicas se repetem ao longo de linhas e colunas.

A tabela periódica moderna é mostrada na figura 2.7. Os elementos estão organizados em linhas e colunas. Além disso, certos elementos estão organizados em grupos. Alguns grupos são compostos por diversas colunas.

Cada linha da tabela é chamada de período, pois ao longo destas linhas, as propriedades dos elementos variam. Estas propriedades se repetem na mesma posição das linhas, ou seja, nas colunas.

Os elementos são divididos em diversas categorias ou classes. De acordo com a tabela mostrada, os elementos que ocupam as células amarelas e laranjas são os metais. Aqueles que



**Estrutura e Propriedade de Materiais Cerâmicos**  
**Capítulo II: O Átomo e a Tabela Periódica**  
**Prof. Angelus G. P. da Silva**

ocupam as células azuis são os não-metais e aqueles que ocupam as células verdes são os semi-metais.

Podemos ainda apresentar outras classes. Os elementos do grupo 0 são os gases nobres. Os do grupo 1A são os metais alcalinos. Os do grupo 2A são os alcalinos terrosos. Os do grupo 7A são chamados halogênios. Os elementos que estão na série do lantânio são os lantanídeos (L) ou terras raras, também chamados de metais de transição interna. Aqueles da série do actínio (A) são os actinídeos, também de transição interna. Os metais pertencentes aos grupos intermediários 3A a 2B (em amarelo) são chamados metais de transição externa.

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	H															He		
2	Li	Be							B	C	N	O	F			Ne		
3	Na	Mg							Al	Si	P	S	Cl			Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	L	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	A															
	L	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
	A	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Figura 2.7: Tabela periódica dos elementos. Fonte: <http://www.ccinfo.ims.ac.jp/periodic>

A tabela é organizada de tal modo que o número atômico varia ao longo de cada período. Cada linha começa com um metal do grupo 1A e termina com um não-metal do grupo 0, dos gases nobres. Esta organização é feita de acordo com a configuração eletrônica dos elementos. O primeiro elemento do período inicia com o preenchimento de uma camada e termina com o preenchimento total dela. Todos os gases nobres têm as camadas cheias. Isso faz com que cada grupo tenha átomos no mesmo estado de preenchimento e, portanto, propriedades físico-químicas semelhantes. Os alcalinos, por exemplo, possuem sempre um elétron na última camada (valência +1). Estes metais são altamente reativos. Eles tendem a perder este elétron e voltar a ter a camada anterior cheia. Isto aumenta sua estabilidade química.

Os halogênios precisam todos de um elétron para completar a última camada, sua valência é -1. Eles também são muito reativos e tendem a capturar um elétron para preencher sua última camada.

Os gases nobres têm a última camada sempre completas. Para se excitar um elétron, deve-se fornecer uma grande quantidade de energia, pois o próximo estado vazio tem energia bem mais elevada, ou seja, está energeticamente distante. Além disso, a camada completa provoca uma blindagem dos elétrons, de modo que os campos elétrico e magnético externos criados por esses átomos são baixíssimos e isto faz com que eles dificilmente reajam com outros elementos.



Os semi-metais apresentam propriedades de metais e de não-metais. Ainda sobre os alcalinos, eles geralmente reagem com a água para formar hidróxidos MOH, que recebem o nome comum de álcali. O hidrogênio é um elemento à parte. Ele não é metal.

Os elementos do grupo 2A, os alcalinos terrosos, têm sempre dois elétrons na última camada. São também muito reativos e ocorrem na natureza como compostos. Em geral, reagem com cátions +2.

Os metais de transição localizam-se entre os grupos 2A e 3B. Os elementos do grupo 2A têm todos a subcamada s completa, enquanto que os do grupo 3B começam a preencher a subcamada p. Os metais de transição estão preenchendo a subcamada d, exceto para as terras raras que preenchem a subcamada f e os actínídeos que também preenchem a subcamada f.

Os metais de transição, que têm suas subcamadas d sendo preenchidas, já têm suas camadas s, da camada seguinte, totalmente preenchidas. Os elétrons da subcamada s externa blindam os elétrons da camada d que está sendo preenchida. Isto faz com que os metais de transição tenham todas propriedades químicas bastante semelhantes. O mesmo ocorre com os lantanídeos e os actínídeos, mas com esses é a subcamada f que está sendo preenchida e que é blindada.

Os metais de transição Fe, Ni e Co apresentam propriedades magnéticas interessantes, em parte devido às suas subcamadas d incompletas.

A seguir iremos comentar sobre algumas propriedades dos elementos que se repetem ao longo da tabela e discutir sobre este comportamento em termos do número atômico e de sua estrutura eletrônica.

- **O raio atômico:** o raio é justamente a distância média entre o núcleo e a última subcamada (a mais externa) do átomo. O raio atômico diminui ao longo de um período, ou seja, ele é grande para os alcalinos e diminui ao longo do período, sendo mínimo para os gases nobres. Entretanto, quando passamos para o próximo período, ou seja, caminhamos no mesmo grupo, de cima para baixo, o raio atômico cresce. Este comportamento é facilmente explicado. Quando caminhamos da esquerda para a direita em um período, o número atômico cresce, ou seja, aumenta o número de prótons no núcleo. Com isso, aumenta também a força com que o núcleo atrai os elétrons, puxando-os para si. Quando concluímos o período, preenchemos completamente uma camada. O raio da camada seguinte é sempre maior que o raio da camada anterior.
- **O tamanho dos íons:** se retiramos elétrons de um átomo, nós o fazemos da última camada. Isto por si diminui o tamanho do átomo. Portanto, o raio de um íon positivo é menor que o raio do átomo neutro. Uma outra razão para isso é o fato que a subcamada da qual o elétron foi retirado penetrava pelas outras subcamadas, ajudando na blindagem do núcleo para os elétrons vizinhos. Como ele foi retirado, aqueles elétrons sentirão mais fortemente a atração do núcleo. Íons negativos, com mais elétrons que o átomo neutro, são maiores, justamente porque deverão se alojar mais longe e sentirão menos a atração nuclear.
- **Energia de ionização:** quando fornecemos energia a um elétron, ele pode saltar para outro estado. Caso a energia seja muito grande, o elétron pode escapar do átomo, que se torna um ânion. A energia mínima para isto é chamada de energia de ionização. Existem as primeira, segunda, terceira, etc energias de ionização, referentes às energias para se arrancar um, dois, três, etc elétrons do átomo. A energia de ionização depende de alguns fatores, tais como o tamanho do átomo, a carga nuclear, a eficiência com que as camadas internas blindam o núcleo e do número quântico l. Por exemplo, quanto maior for o átomo mais fraca é a atração do núcleo sobre o elétron e, portanto, menor será sua energia de ionização. Quanto maior a carga do núcleo, maior a atração que ele exerce sobre os elétrons e maior será a energia de ionização.

Algumas subcamadas blindam a carga nuclear melhor que outras. Quando um elétron tem a subcamada precedente blindando o núcleo eficientemente, este elétron será mais fracamente ligado ao núcleo. As subcamadas s, p, d e f têm formato diferentes. Algumas delas estão, em





média, mais próximas do núcleo que outras, por exemplo, a subcamada s. Estas subcamadas estão mais fortemente ligadas.

Os gases nobres apresentam a maior energia de ionização de todo o período correspondente. Retirar um elétron de uma camada completa sempre requer muita energia. Por outro lado, os alcalinos têm somente um elétron em sua última camada (valência +1). Por isso, eles podem perder facilmente este elétron, tendo assim baixa energia de ionização.

- **Afinidade eletrônica:** a afinidade eletrônica mede a energia envolvida na introdução de um elétron em um átomo neutro. Para alguns átomos, a adição de um elétron envolve a absorção de energia e para outros envolve a liberação de energia. Os halogênios, por exemplo, que possuem a camada incompleta, faltando um átomo para completar, liberam bastante energia quando se tornam ânions, ganhando um elétron. Em alguns casos, como para o oxigênio, ocorre liberação de energia para a introdução de um elétron e absorção de grande quantidade de energia para a introdução do segundo elétron.
- **Eletronegatividade:** esta propriedade pode ser definida como a tendência de um átomo de atrair elétrons para si, quando fazendo parte de um composto.

Existem diversos modos de medir a eletronegatividade, mas quanto mais negativo for seu valor maior será a tendência do átomo de atrair os elétrons. Quando dois átomos reagem, os elétrons não necessariamente se distribuem uniformemente ao redor dos dois núcleos. Pode ocorrer que eles se desloquem mais para um dos núcleos. Neste caso, o átomo que atraiu mais é o mais eletronegativo. Quando os elétrons se distribuem uniformemente entre os átomos, a ligação será covalente. Quando um dos átomos atrai completamente os elétrons, a ligação é iônica. Nos casos intermediários, falamos em caráter iônico e covalente da ligação. Se as eletronegatividades são aproximadas, o caráter covalente será maior. Quanto maior a diferença das eletronegatividades, maior será o caráter iônico.

O inverso da eletronegatividade é a eletropositividade. Ela mede a tendência do átomo a perder elétrons. Os metais têm forte eletropositividade, pois tendem a perder elétrons. Quanto maior o raio do elemento mais facilmente ele pode perder o elétron e portanto maior sua eletropositividade.

O termo valência é muito usado, embora o termo estado de oxidação seja preferível. Nos elementos do bloco s, o estado de oxidação é sempre igual ao número do grupo. Nos elementos do bloco p também, exceto para alguns casos que apresentam estados de oxidação variável. Neste caso o número de oxidação varia de duas unidades, como no  $TiCl_3$  e  $TiCl$ , onde temos +3 e +1 para o Ti. Isto se deve a um par de elétrons que não participa da ligação. Para elementos do bloco d, o estado de oxidação varia porque o número de elétrons d que participam da ligação varia.



### 2.3. Exercícios

- 1- A teoria quântica introduziu novos conceitos à física. Explique: a) o que é quantização da energia? b) de que trata o princípio da incerteza e que consequência ele tem sobre a forma de descrever o átomo?
- 2- Descreva o átomo segundo a visão atual, tocando nos seguintes pontos: o que é um estado eletrônico, a energia associada a cada estado, quantos elétrons estão associados a cada estado eletrônico, quais números quânticos estão associados a cada estado, é possível para um elétron mudar de estado eletrônico e o qual deve ser a condição para isto, qual a associação existente entre os números quânticos, as camadas, subcamadas e orbitais.
- 3- O tamanho de um átomo está relacionado a seu número atômico e sua configuração eletrônica. Como varia o tamanho de um átomo quando percorremos um período da tabela periódica da esquerda para a direita e como varia se percorremos um grupo de cima para baixo? Justifique sua resposta.
- 4- Determine a configuração eletrônica dos elementos a seguir:  $^{40}\text{Zr}$ ,  $^{13}\text{Al}$ ,  $^{19}\text{K}$ ,  $^{83}\text{Bi}$ .
- 5- Escreva a configuração da camada mais energética de um certo átomo cuja posição na tabela periódica seja imediatamente abaixo de outro cuja configuração eletrônica seja: a)  $3s^2 3p^1$  b)  $3s^2$ .
- 6- Os elementos que estão entre os grupos IIIB e IIB, inclusive, são chamados elementos de transição externa porque a subcamada mais energética sendo preenchida é a subcamada d. Demonstre isto para o período 4 da tabela periódica.



## **2.4. Referências**

R. EISBERG, R. RESNICK, *Física Quântica*, Seg. Edição, Editora Campus, 1983

J.D. LEE, *Química Inorgânica (não tão) Concisa*, Tradução das quarta edição inglesa, Editora Edgard Blücher.

W.D. CALLISTER Jr., *Materials Science & Engineering. An Introduction*. Third Edition. Editora John Wiley & Sons, 1994.

<http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/Mos/N2/2Px2Px-Pi/index> The Orbitron