



# Eixo Tecnológico

# Formações Complementares

## Números Quânticos

Jailson de Jesus



# Os Números Quânticos

Números Quânticos



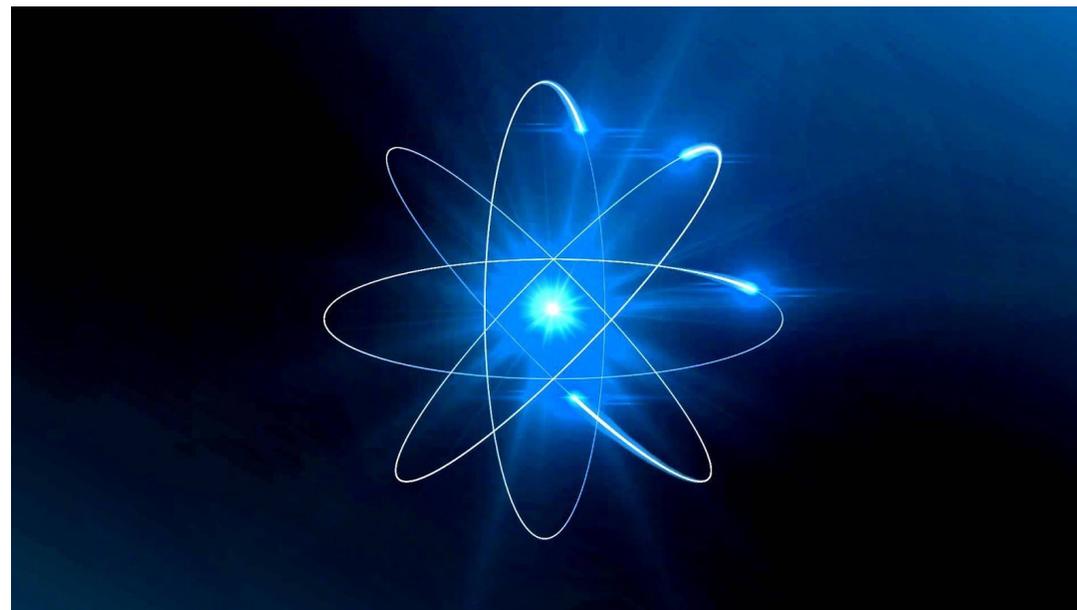
**INSTITUTO  
FEDERAL**  
Santa Catarina

# Os Números Quânticos

- ▶ Os números quânticos são códigos matemáticos relacionados com a energia do elétron. Existem quatro números quânticos:
  - ▶ número quântico principal ( $n$ ), número quântico secundário ou azimutal ( $l$ ), número quântico magnético ( $m$  ou  $m_l$ ) e número quântico spin ( $s$  ou  $m_s$ ).

# Os Números Quânticos

- ▶ Com o desenvolvimento da teoria quântica, o modelo atômico sofreu uma transformação significativa. A compreensão sobre a eletrosfera e a distribuição eletrônica foi desenvolvida em função da energia eletrônica.



# Os Números Quânticos

## ► O Princípio da Incerteza

(de Werner Heisenberg)

Criado em 1926, estabeleceu que não é possível calcular a **posição** e a **velocidade** de um elétron em um mesmo instante.

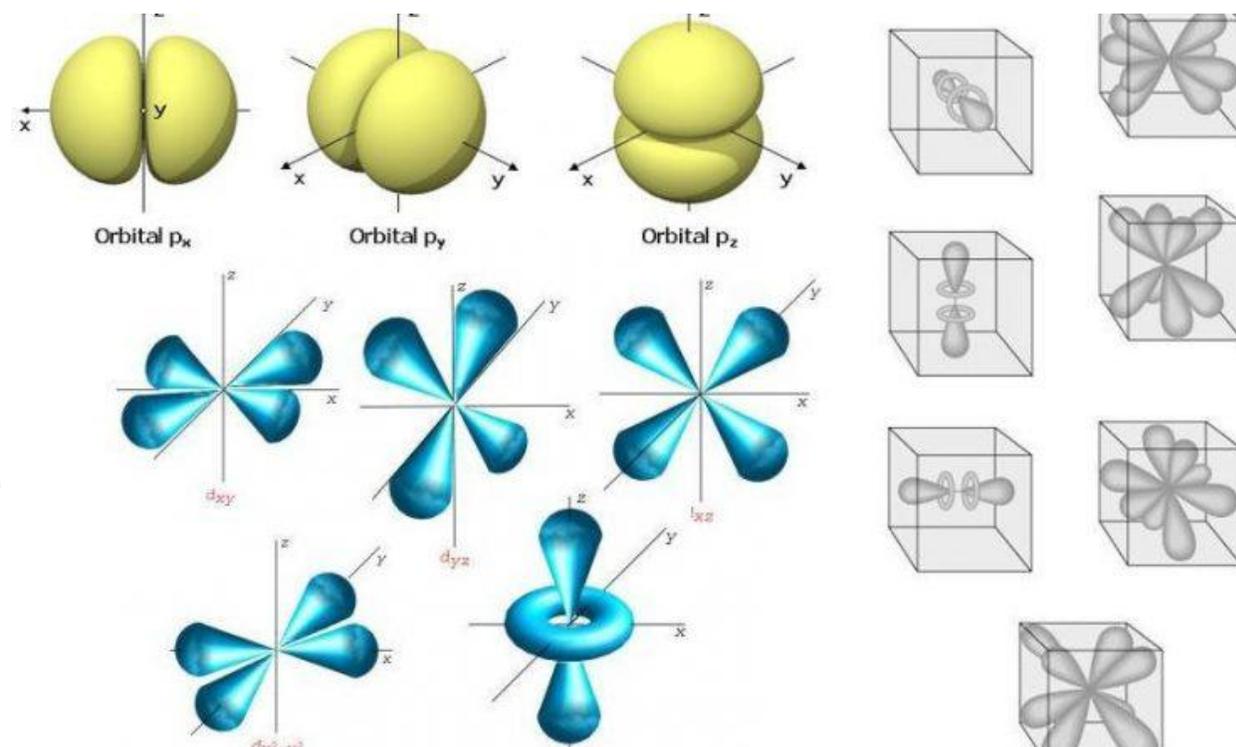
Quanto maior a precisão na medida da posição, menor será a precisão na medida da velocidade, e vice-versa.



# Os Números Quânticos

## ▶ Orbitais

- ▶ Por isso, os cientistas passaram a adotar o conceito de “orbital”, que se refere à **região no espaço ao redor do núcleo do átomo onde é maior a probabilidade de se encontrar determinado elétron**.
- ▶ No modelo de orbitais, o elétron tem característica dual, isto é, como onda-partícula que se desloca no espaço, mas que está dentro de uma região (orbital) ao redor do núcleo, como uma nuvem eletrônica.



# Os Números Quânticos

## ▶ Função de Onda

- ▶ para localizar os elétrons no espaço, em 1926, Schrödinger escreveu uma equação que descrevia o comportamento partícula/onda do elétron no átomo de Hidrogênio:

$$H\Psi = E\Psi$$

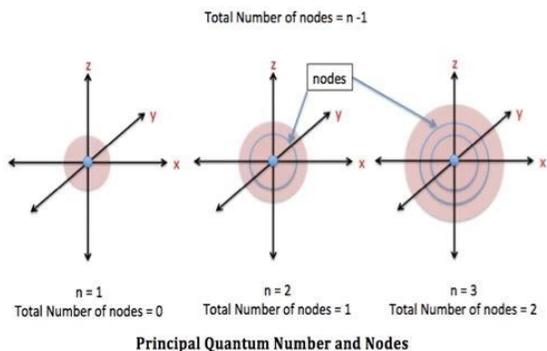
- ▶ Assim a resolução para  $\Psi^2$  é chamado de densidade de probabilidade



Daí a equação de Schrödinger necessita de quatro números quânticos:  $\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$

# Os Números Quânticos

## NÚMEROS QUÂNTICOS

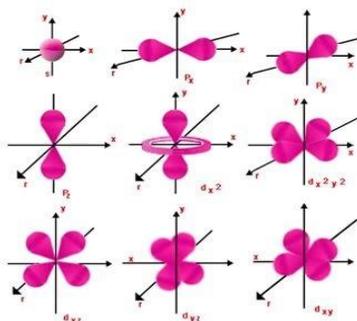


$n$

(principal)

distância do elétron  
ao núcleo

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$

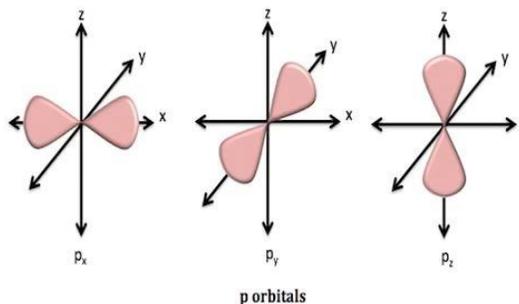


$l$

(momento angular)

tipo de orbital  
(número de nós)

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$

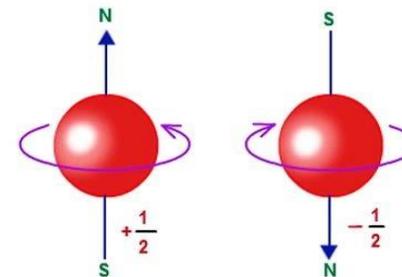


$m$

(momento magnético)

orientação do orbital  
no espaço

$m$  vai de  $-l$  até  $l$   
passando pelo zero



$s$

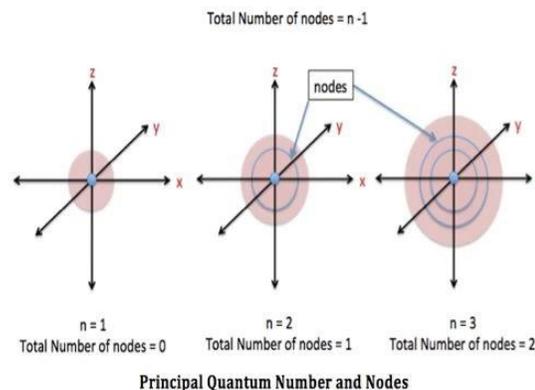
(spin)

spin do elétron  
 $s = +1/2$  ou  $-1/2$

# Os Números Quânticos

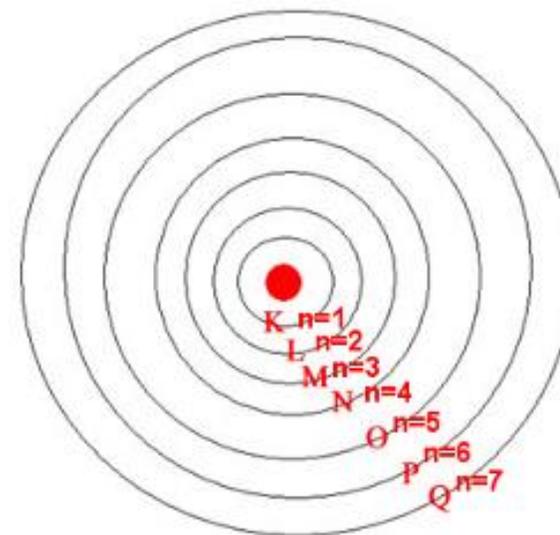
- ▶ Número Quântico Principal ( $n$ )
  - ▶ Indica a camada
  - ▶ A distância do elétron ao núcleo
  - ▶  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$

Na teoria os átomos podem ter infinitas camadas; na prática os átomos apresentam 7 camadas.



$n$

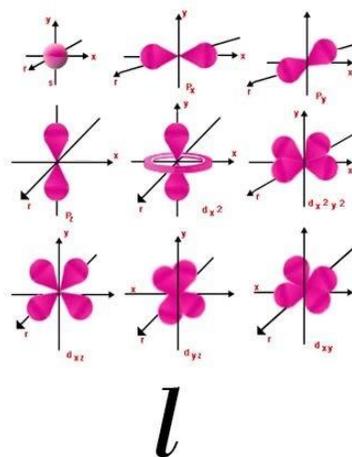
(principal)



# Os Números Quânticos

- ▶ Número Quântico Secundário ( $l$ )  
(momento angular)
  - ▶ Indica a subcamada (subnível)
  - ▶ Indica o tipo de orbital
  - ▶  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Os subníveis recebem letras indicativas, s, p, d, f, g, h, ...



$l$

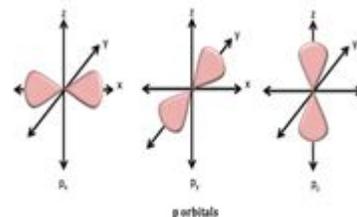
(momento angular)

Subnível de Energia	Número Quântico Secundário
s	$l = 0$
p	$l = 1$
d	$l = 2$
f	$l = 3$

# Os Números Quânticos

- ▶ Número Quântico Magnético (momento magnético -  $m$  ou  $m_l$ )
  - ▶ Indica os orbitais
  - ▶ Indica a orientação do orbital no espaço
  - ▶  $m_l$  vai de  $-l$  a  $+l$  passando pelo zero

Os Orbitais são regiões na eletrosfera do átomo em que é máxima a probabilidade de se encontrar o elétron, ou a função que descreve o movimento de um elétron. Segundo o Princípio da Exclusão de Pauli, em cada orbital cabem no máximo dois elétrons.



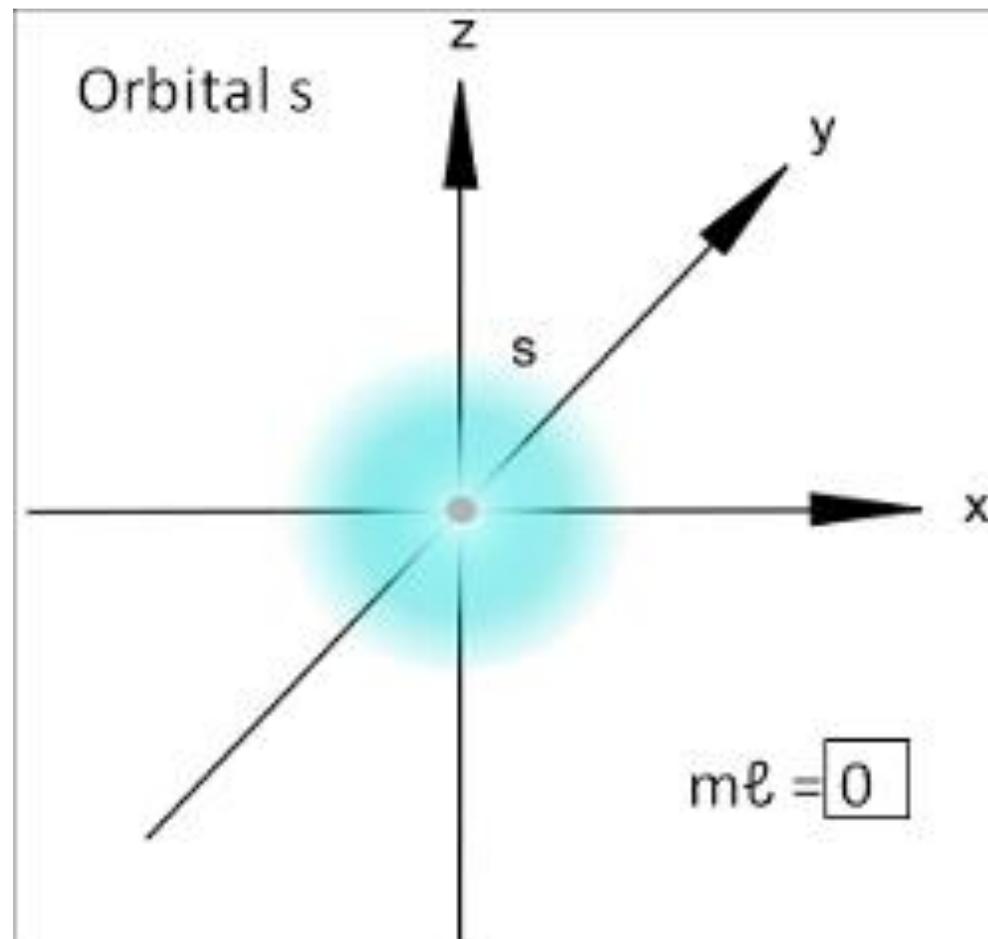
$m$

(momento magnético)

# Os Números Quânticos

## ▶ Orbital do tipo s

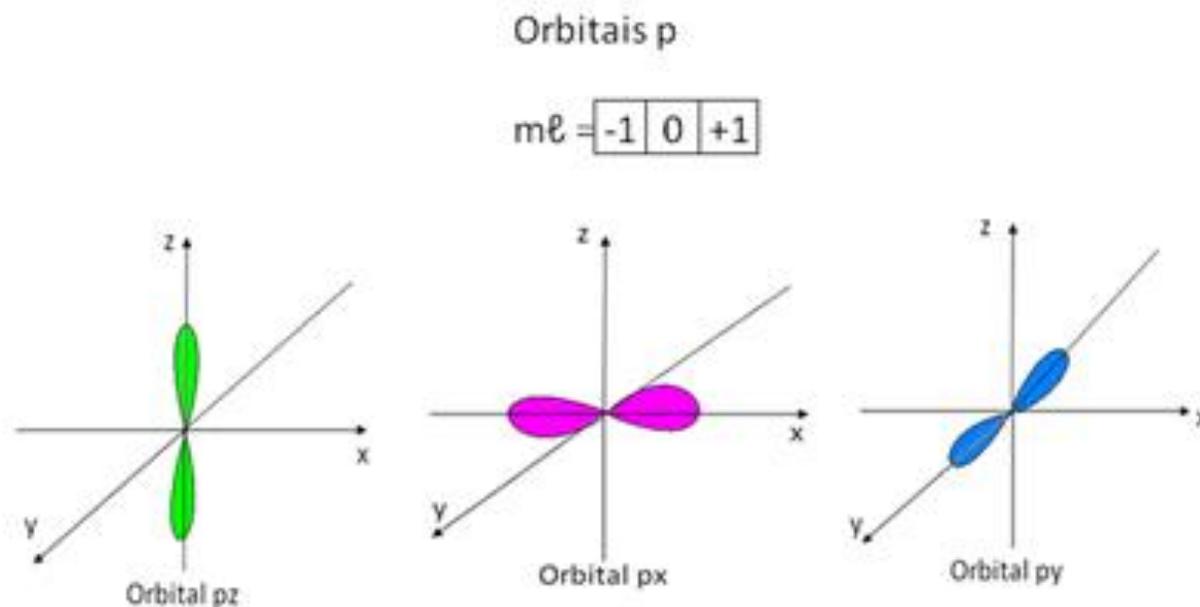
- ▶ Possui forma esférica
- ▶ O número quântico magnético, será igual a 0.



# Os Números Quânticos

## ▶ Orbital do tipo p

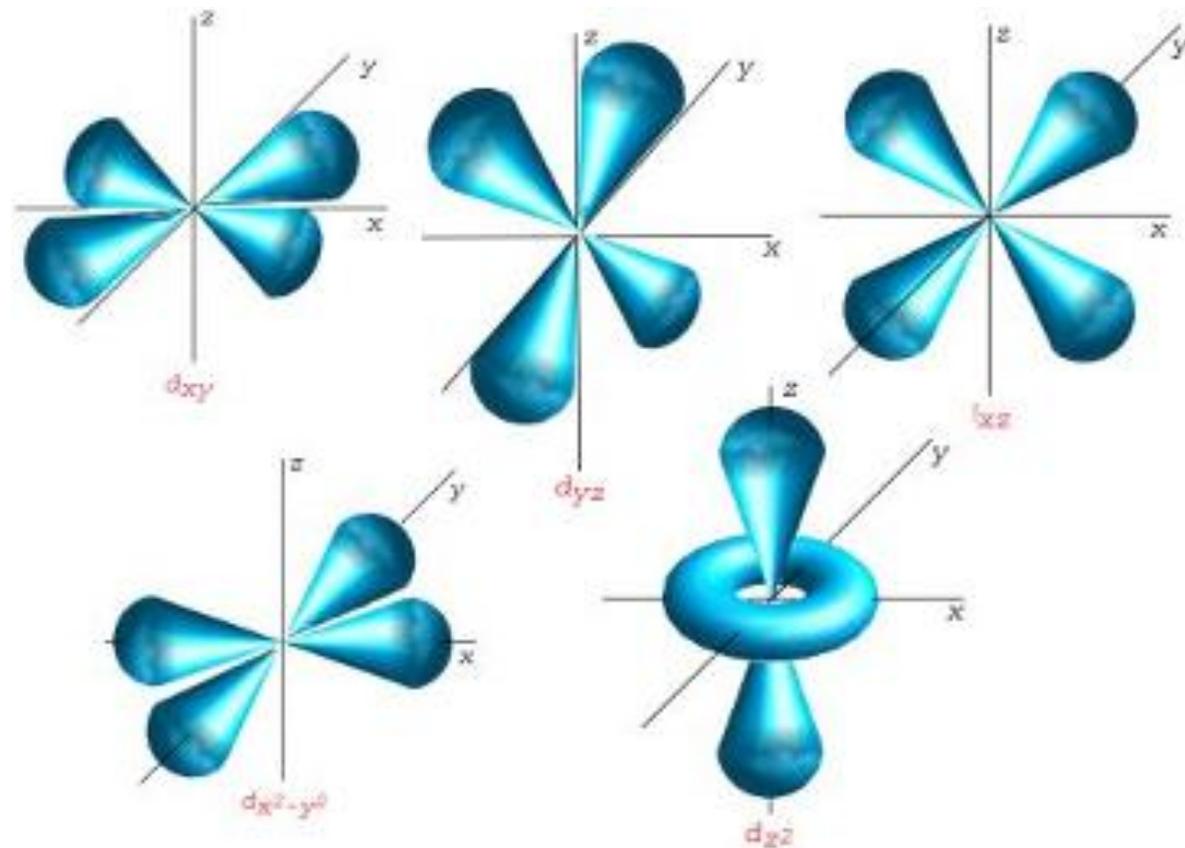
- ▶ Existem três orientações espaciais possíveis
- ▶ Apresenta-se na forma de um duplo ovoide.
- ▶ Há três números magnéticos possíveis, -1, 0, +1, que são representados por três quadradinhos



# Os Números Quânticos

## ► Orbital do tipo d

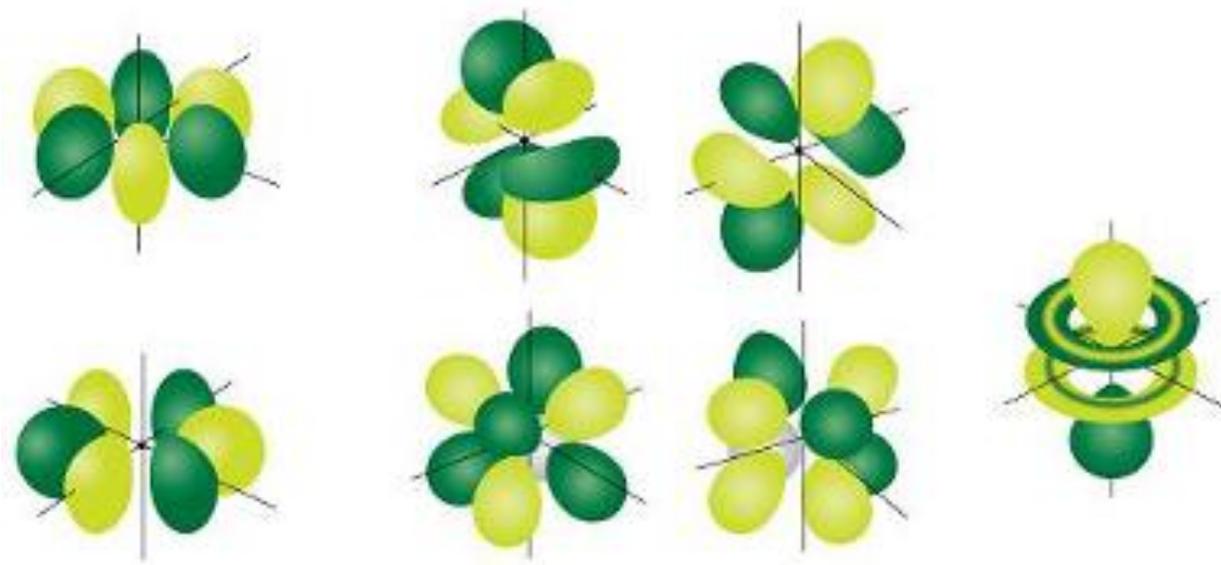
- Possui cinco orientações espaciais possíveis
- O número magnético pode apresentar os seguintes valores: -2, -1, 0, +1, +2



# Os Números Quânticos

## ▶ Orbital do tipo f

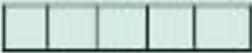
- ▶ Possui sete orientações espaciais possíveis
- ▶ O número magnético pode apresentar os seguintes valores: -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3



# Os Números Quânticos

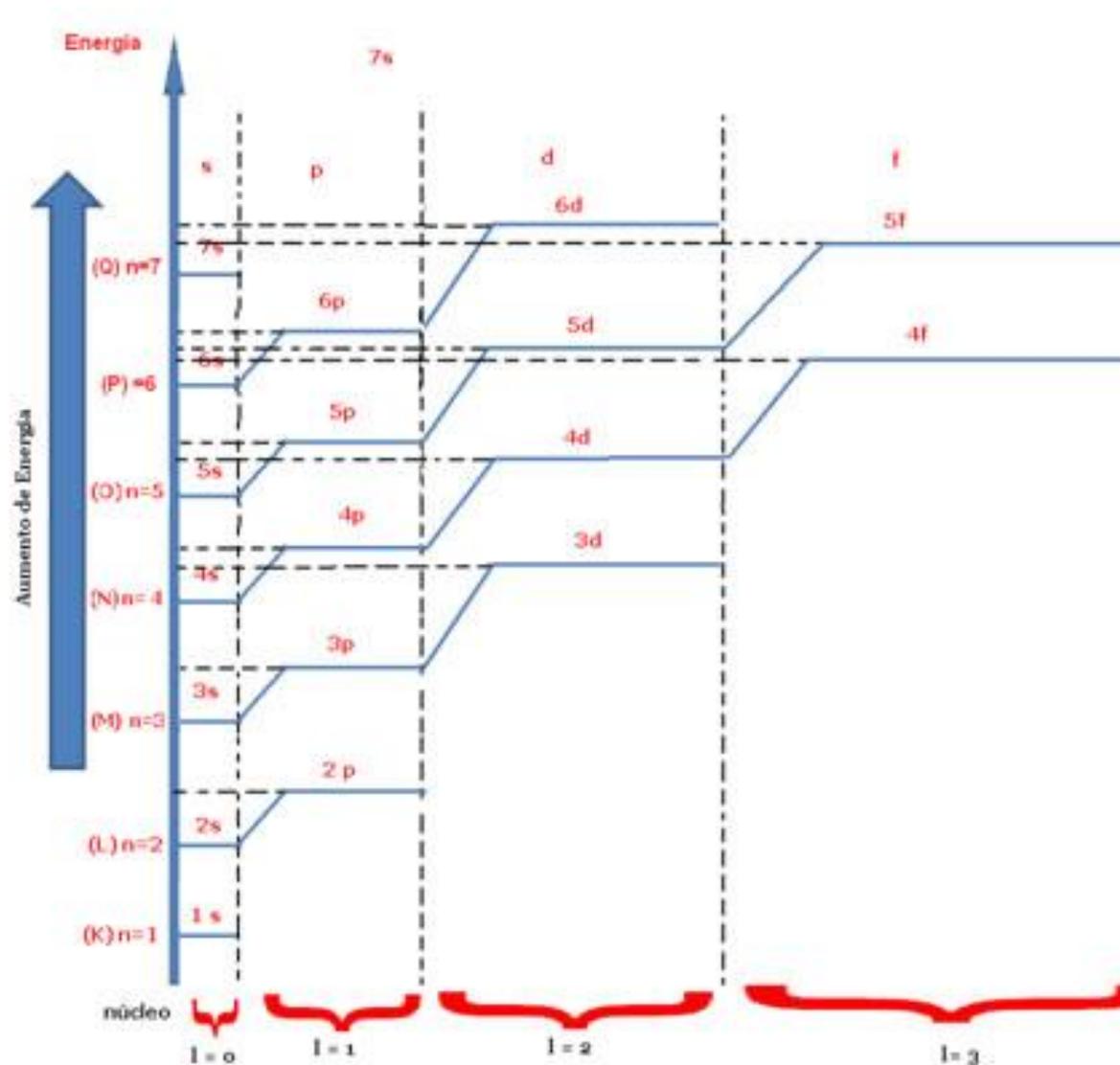
## ► Resumindo

- Temos as seguintes possibilidades:

Tipo de Subnível	Valores de $l$	Quantidade de orbitais	Valores para o número quântico magnético	Representação gráfica dos orbitais
s	0	1	0	
p	1	3	-1, 0, +1	
d	2	5	-2, -1, 0, +1, +2	
f	3	7	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	

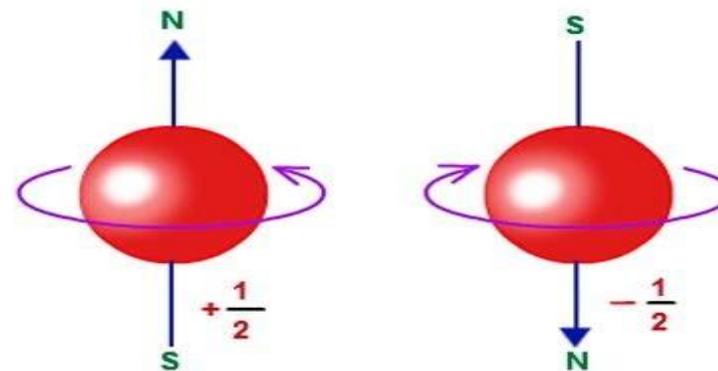
# Os Números Quânticos

- ▶ Esses orbitais costumam ser representados de acordo com um diagrama energético, como o mostrado a seguir, em que cada “escada” corresponde ao nível e cada “degral” corresponde ao subnível.



# Os Números Quânticos

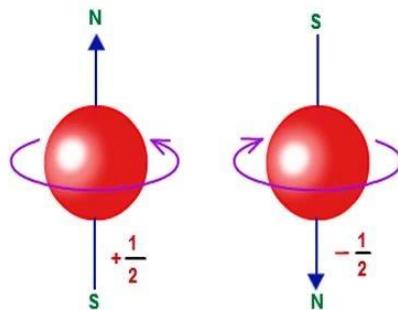
- ▶ Número Quântico do Spin
  - ▶ Indica o Spin eletrônico
  - ▶ Indica o movimento de rotação do elétron
  - ▶ Orientações de spin indicadas por  $m_s = -1/2$  ( $\uparrow$ ),  $+1/2$  ( $\downarrow$ )



**$s$**   
**(spin)**

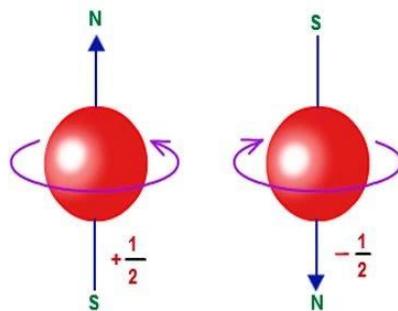
# Os Números Quânticos

- ▶ Dois elétrons conseguem ficar em um mesmo orbital e não se repelirem porque eles giram em sentidos opostos, o que causa uma força magnética de atração. Assim, o magnetismo em razão do spin de um elétron é anulado pelo magnetismo do spin oposto, ficando um sistema estável.



# Os Números Quânticos

- ▶ É por isso que cada orbital possui no máximo dois elétrons com spins opostos, que são simbolizados por setas. Isso é dito pelo Princípio da Exclusão de Pauli.
- ▶ Por convenção, adotamos o seguinte: a seta para cima corresponde a  $m_s = -1/2$ , e a seta para baixo corresponde a  $m_s = +1/2$ .



# Os Números Quânticos

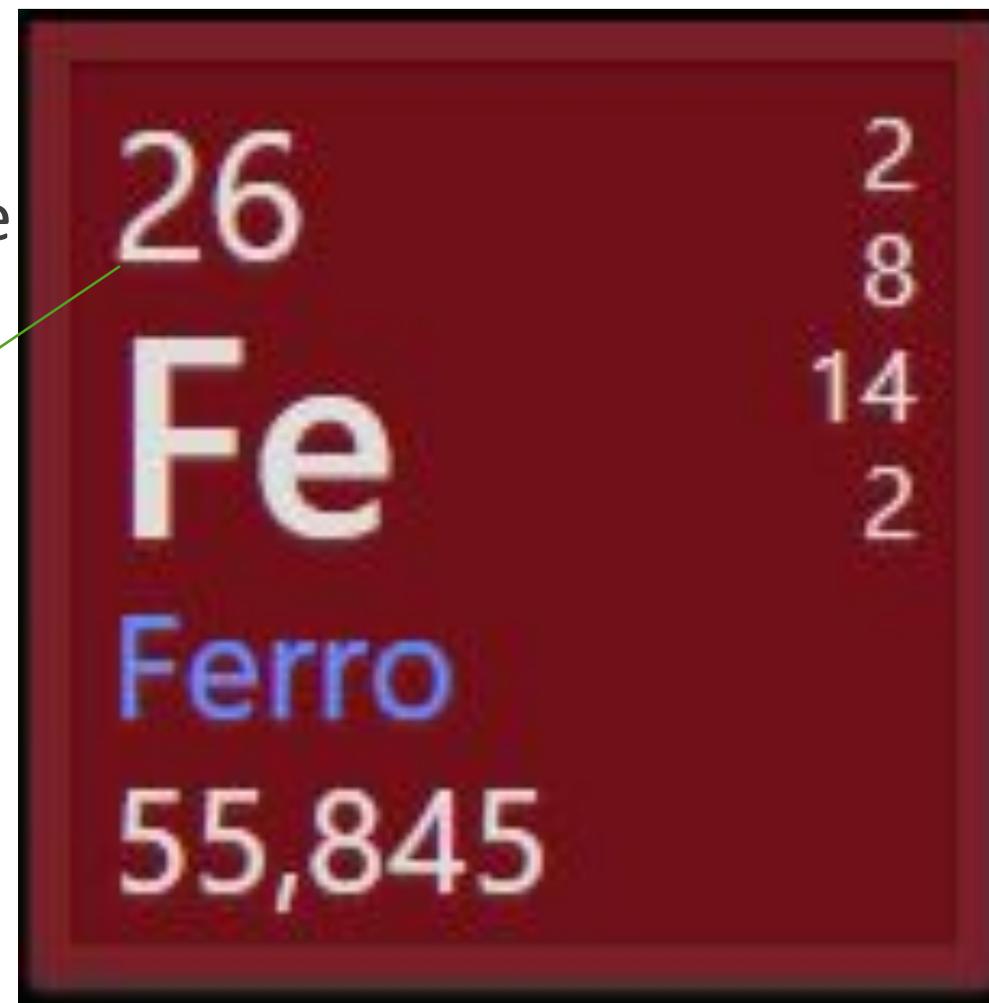
Mas você deve estar se perguntando: Como vou usar isso?

Vamos pegar um exemplo

Para átomos no estado fundamental o número de prótons é igual ao número de elétrons

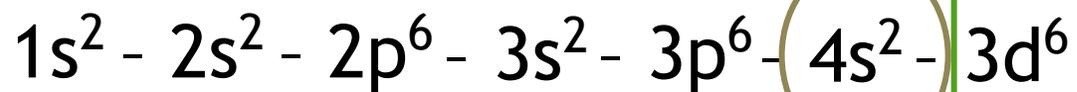
Número Atômico

Número de prótons



# Os Números Quânticos

Fazendo a sua distribuição eletrônica, temos:

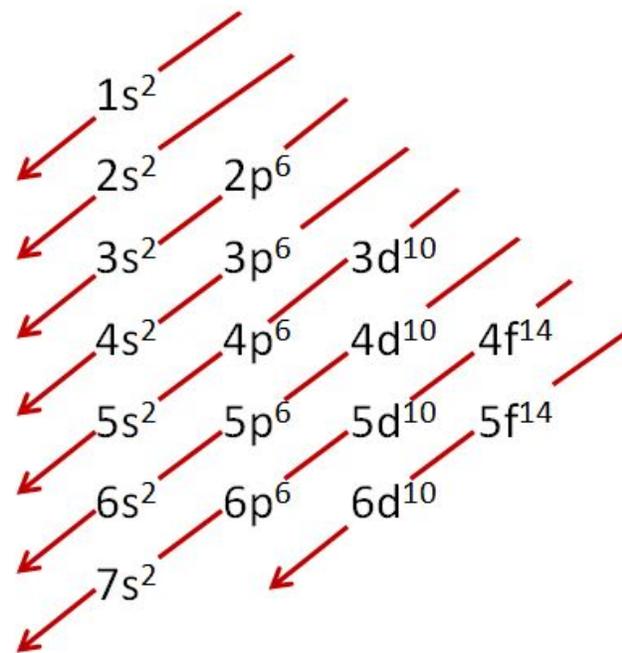


Você pode escolher qualquer elétron para encontrar seus números quânticos, mas os mais pedidos são: Camada de Valência e Subnível mais energético.

Camada de valência

Subnível mais energético

s Subníveis (s, p, d ou f)



26	2
Fe	8
Ferro	14
55,845	2

# Os Números Quânticos

Vamos encontrar os números quânticos do elétron mais energético

Subnível mais energético

26	2
<b>Fe</b>	8
Ferro	14
55,845	2



$3d^6$

Nº. de e-

Camada

Subnível

Com essa representação já conseguimos 2 números quânticos

$n = 3$

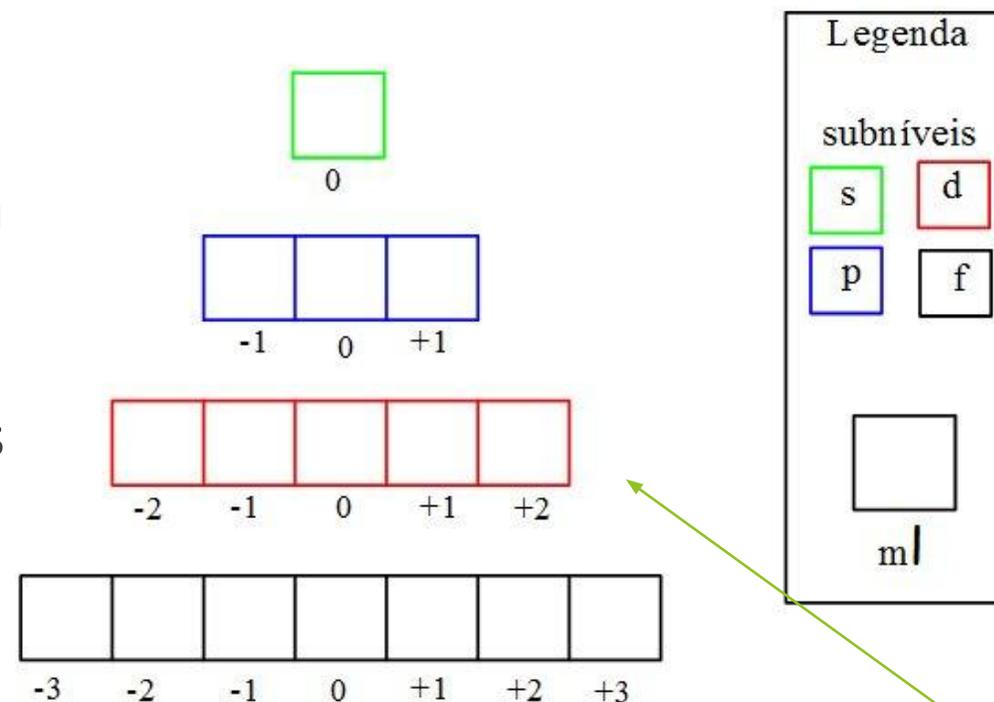
Camada

$l = 2$

Subnível

# Os Números Quânticos

- ▶ Segundo a **Regra de Hund** ou **Regra de máxima multiplicidade**, o preenchimento dos orbitais de um subnível deve ser feito de uma forma que contenha o maior número possível de elétrons desemparelhados (isolados).

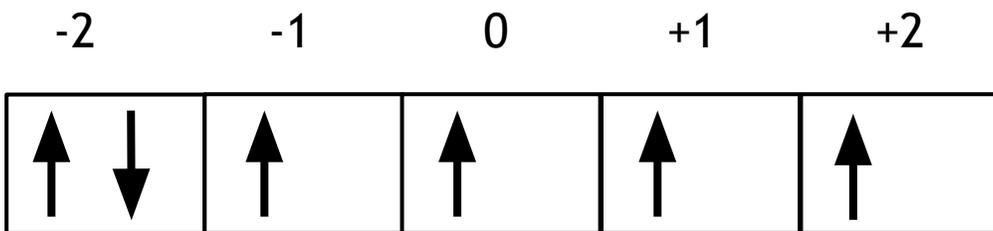


O subnível d apresenta 5 orbitais

$3d^6$

# Os Números Quânticos

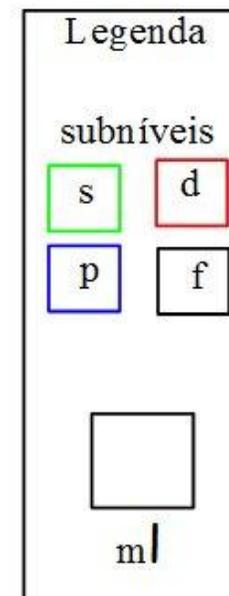
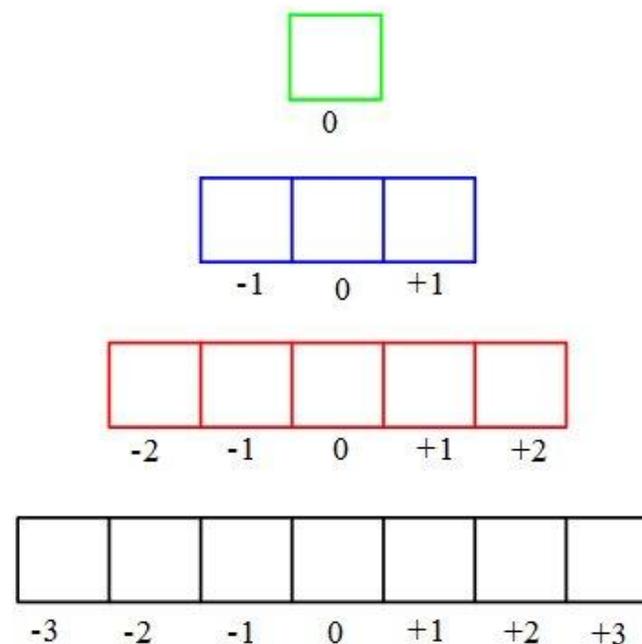
- Por isso, temos que preencher primeiro os orbitais (quadrinhos), colocando somente as setas para cima, e depois voltamos preenchendo as setas para baixo.



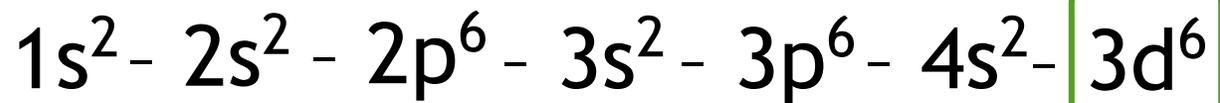
Aqui encontramos os outros dois números quânticos que faltavam:

$$m \text{ ou } m_l = -2$$

$$s \text{ ou } m_s = +1/2$$



# Os Números Quânticos



Então os números quânticos do elétron mais energético do Ferro são:

Subnível mais energético

26	2
<b>Fe</b>	8
Ferro	14
55,845	2

$$n = 3$$

$$l = 2$$

$$m \text{ ou } m_l = -2$$

$$s \text{ ou } m_s = +1/2$$

# Os Números Quânticos

## Referências

CHANG, Raymond; GOLDSBY, Kenneth A. **Química**. Porto Alegre: AMGH, 2013.

Chang, Raymond. **Química geral**. Porto Alegre: AMGH, 2010.

RUSSELL, J. B. **Química geral**. Vol.1, 2ª. Edição São Paulo: : Pearson Makron Books, 1994.

BROWN, T. L.; LEMAY, H. E. Jr.; BURSTEN, B. E. **Química: a ciência central**. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.