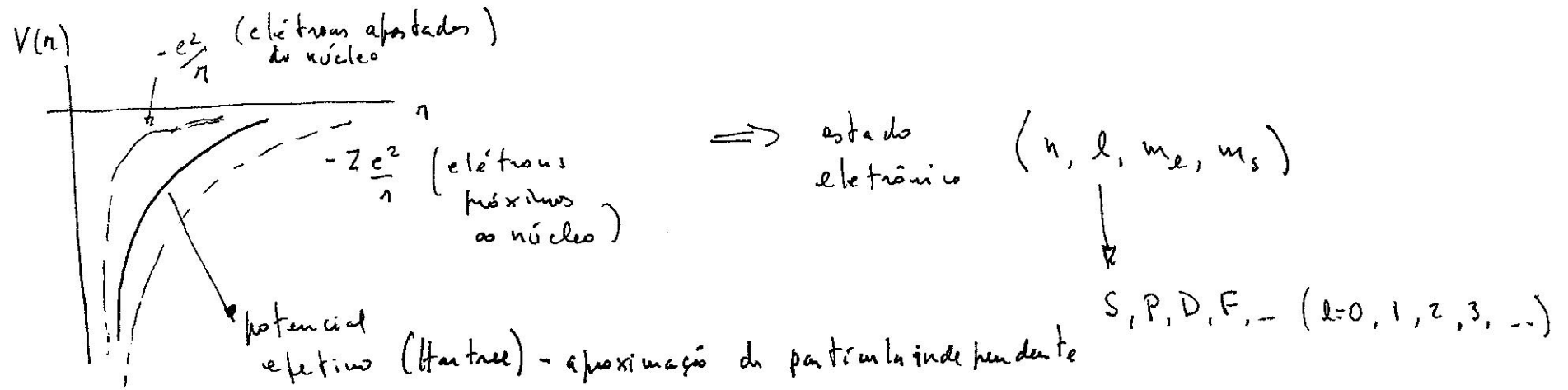


átomos multieletrônicos



hipótese principal p/ construção

dos estados de um átomo $\rightarrow$ Princípio de Exclusão de Pauli - os quânticos que caracterizam os elétrons de um átomo não podem ser todos iguais.

O princípio de exclusão só foi elucidado com os trabalhos de Fermi, Dirac, Bose e Einstein, como consequência da propriedade de que todas as partículas subatômicas são completamente indistinguíveis uma das outras.

- As partículas de um átomo multieletrônico são elétrons idênticos e indistinguíveis que obedecem ao princípio de Exclusão de Pauli

- Na aproximação de partícula independente, as funções de onda de cada elétron só diferem por seus n.ºs quânticos $\alpha (n, l, m, m_s)$

- Para um átomo com 2 elétrons (1 e 2), segundo o princípio de Pauli,

$$\Psi_{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{\alpha}(1) \Psi_{\beta}(2) - \Psi_{\alpha}(2) \Psi_{\beta}(1)]$$

α e β são os n.ºs quânticos que caracterizam o estado dos ~~dois~~ elétrons

- Para um átomo com n elétrons,

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\alpha}(1) & \Psi_{\alpha}(2) & \dots & \Psi_{\alpha}(n) \\ \Psi_{\beta}(1) & \Psi_{\beta}(2) & \dots & \Psi_{\beta}(n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Psi_n(1) & \Psi_n(2) & \dots & \Psi_n(n) \end{vmatrix}$$

(determinante de Slater)

Modelo de Camadas

no máximo de
elétrons no nível $n \rightarrow 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$

{ camada (shell) $\rightarrow$ elétrons c/ mesma energia (n)
sub-camada $\rightarrow$ elétrons c/ mesmo momento angular orbital (l)

ocupação máxima

$n=1$

n	l	m_l	m_s
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$

K shell $\rightarrow (1s)^2$
(2 elétrons)

$n=2$

2	0	0	$\frac{1}{2}$
2	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	1	$\frac{1}{2}$
2	1	1	$-\frac{1}{2}$
2	1	0	$\frac{1}{2}$
2	1	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	-1	$\frac{1}{2}$
2	1	-1	$-\frac{1}{2}$

L shell $\rightarrow (2s)^2 (2p)^6$
(8 elétrons)

$$n = 3 \Rightarrow 2 \times 9 = 18$$

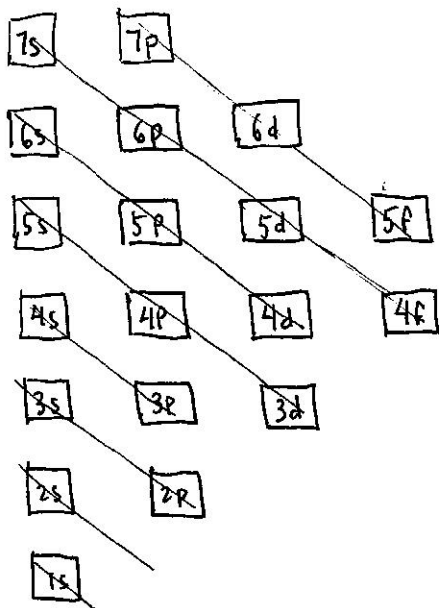
M shell — $(3s)^2 (3p)^6 (3d)^{10}$
(18 electrons)

$$n = 4 \Rightarrow 2 \times 16 = 32$$

N shell — $(4s)^2 (4p)^6 (4d)^{10} (4f)^{14}$
(32 electrons)

Dependência da energia c/ l ($E_{n,l}$)

p/ átomos multieletrônicos



$$E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$$

$$E_{2s} < E_{2p}$$

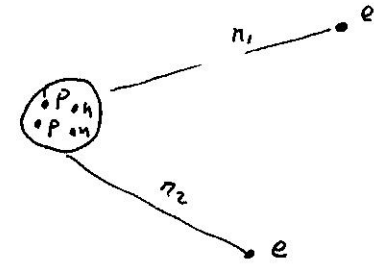
$$E_{1s}$$

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s

(c/ poucas exceções)

átomo de hélio

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \right) + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$



aproximação de partícula independente (desprezando interação)

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{n\ell m}(\vec{r}_1) \psi_{n'\ell'm'}(\vec{r}_2) \quad (\text{parte espacial})$$

estado fundamental : $\psi_0 = \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2)$ (simétrica) $\times \underbrace{[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)]}_{\text{antissimétrica}}$
(paralelo)

estados excitados : $\underbrace{\psi_{n\ell m}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2)}_{\text{antissimétrica ou simétrica}} \times \underbrace{[\chi_+(1)\chi_+(2)]}_{\text{combinação simétrica}} \quad (\text{orto hélio})$
simétrica $\times$ antissimétrica (paralelo)

TABLA 2

Distribución de los electrones en el sistema periódico de los elementos

Elemento	K	L		M			N		Término normal	Potencial de ionización (eV)
		1s	-2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p					
H 1	1	1	—	—	—	—	—	—	$^2S_{1/2}$	13,595
He 2	2	2	—	—	—	—	—	—	1S_0	24,58
Li 3	2	1	—	—	—	—	—	—	$^2S_{1/2}$	5,39
Be 4	2	2	—	—	—	—	—	—	1S_0	9,32
B 5	2	2	1	—	—	—	—	—	$^2P_{1/2}$	8,30
C 6	2	2	2	—	—	—	—	—	3P_0	11,26
N 7	2	2	3	—	—	—	—	—	$^4S_{3/2}$	14,53
O 8	2	2	4	—	—	—	—	—	3P_2	13,61
F 9	2	2	5	—	—	—	—	—	$^2P_{3/2}$	17,42
Ne 10	2	2	6	—	—	—	—	—	1S_0	21,56
Na 11	5. — Configuración del neón			1	—	—	—	—	$^2S_{1/2}$	5,14
Mg 12				2	—	—	—	—	1S_0	7,64
Al 13				2	1	—	—	—	$^2P_{1/2}$	5,98
Si 14				2	2	—	—	—	3P_0	8,15
P 15				2	3	—	—	—	$^4S_{3/2}$	10,48
S 16				2	4	—	—	—	3P_2	10,36
Cl 17				2	5	—	—	—	$^2P_{3/2}$	13,01
Ar 18				2	6	—	—	—	1S_0	15,76
K 19	6. — Configuración del argón			—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	4,34
Ca 20				—	2	—	—	—	1S_0	6,11
Sc 21				1	2	—	—	—	$^2D_{3/2}$	6,54
Ti 22				2	2	—	—	—	3F_2	6,82
V 23				3	2	—	—	—	$^4F_{3/2}$	6,74
Cr 24				5	1	—	—	—	7S_3	6,76
Mn 25				5	2	—	—	—	$^6S_{5/2}$	7,43
Fe 26				6	2	—	—	—	5D_4	7,90
Co 27	7. — Configuración del kriptón			7	2	—	—	—	$^4F_{9/2}$	7,86
Ni 28				8	2	—	—	—	3F_4	7,63
Cu 29				10	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	7,72
Zn 30				10	2	—	—	—	1S_0	9,39
Ga 31				10	2	1	—	—	$^2P_{1/2}$	6,00
Ge 32				10	2	2	—	—	3P_0	7,88
As 33				10	2	3	—	—	$^4S_{3/2}$	9,81
Se 34				10	2	4	—	—	3P_2	9,75
Br 35				10	2	5	—	—	$^2P_{3/2}$	11,84
Kr 36				10	2	6	—	—	1S_0	14,00

Tabla 2 (continuación)

Elemento	Configuración de las capas internas	N		O			P	Término normal	Potencial de ionización (eV)
		4d 4f		5s 5p 5d					
Rb 37	Configuración del kriptón	—	—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	4,19
Sr 38		—	—	2	—	—	—	1S_0	5,69
Y 39		1	—	2	—	—	—	$^2D_{3/2}$	6,38
Zr 40		2	—	2	—	—	—	3F_2	6,84
Nb 41		4	—	1	—	—	—	$^6D_{1/2}$	6,88
Mo 42		5	—	1	—	—	—	7S_3	7,10
Tc 43		5	—	2	—	—	—	$^6S_{5/2}$	7,28
Ru 44		7	—	1	—	—	—	5F_5	7,36
Rh 45		8	—	1	—	—	—	$^4F_{9/2}$	7,46
Pd 46		10	—	—	—	—	—	1S_0	8,33
Ag 47	Configuración del paladio	—	—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	7,57
Cd 48		—	—	2	—	—	—	1S_0	8,99
In 49		—	—	2	1	—	—	$^2P_{1/2}$	5,78
Sn 50		—	—	2	2	—	—	3P_0	7,34
Sb 51		—	—	2	3	—	—	$^4S_{3/2}$	8,64
Te 52		—	—	2	4	—	—	3P_2	9,01
I 53		—	—	2	5	—	—	$^2P_{3/2}$	10,45
Xe 54		—	—	2	6	—	—	1S_0	12,13
Cs 55	Las subcapas 1s a 4d contienen 46 electrones	—	—	—	—	1	—	$^2S_{1/2}$	3,89
Ba 56		—	—	—	—	2	—	1S_0	5,21
La 57		—	—	—	1	2	—	$^2D_{3/2}$	5,61
Ce 58		2	—	—	—	2	—	3H_4	6,91
Pr 59		3	—	—	—	2	—	$^4I_{9/2}$	5,76
Nd 60		4	—	—	—	2	—	5I_4	6,31
Pm 61		5	—	—	—	2	—	$^6H_{5/2}$	6,30
Sm 62		6	—	—	—	2	—	7F_0	5,10
Eu 63		7	—	—	—	2	—	$^8S_{7/2}$	5,67
Gd 64		7	—	1	—	2	—	9D_2	11,40
Tb 65		8	—	1	—	2	—	$^8H_{17/2}$	6,74
Dy 66		10	—	—	—	2	—	5I_8	6,82
Ho 67		11	—	—	—	2	—	$^4I_{15/2}$	6,90
Er 68		12	—	—	—	2	—	3H_6	6,90
Tm 69		13	—	—	—	2	—	$^2F_{7/2}$	6,90
Yb 70		14	—	—	—	2	—	1S_0	6,20
Lu 71		14	—	1	—	2	—	$^2D_{3/2}$	5,00

Tabla 2 (continuación)

Elemento	Configuración de las capas internas	O		P			Q	Término normal	Potencial de ionización (eV)
		5d	5f	6s	6p	6d			
Hf 72	Las subcapas 1s a 5p contienen 68 electrones	2	—	2	—	—	—	3F_2	7,00
Ta 73		3	—	2	—	—	—	$^4F_{3/2}$	7,88
W 74		4	—	2	—	—	—	5D_0	7,98
Re 75		5	—	2	—	—	—	$^6S_{5/2}$	7,87
Os 76		6	—	2	—	—	—	5D_4	8,70
Ir 77		7	—	2	—	—	—	$^4F_{1/2}$	9,00
Pt 78		9	—	1	—	—	—	3D_3	9,00
Au 79	Las subcapas 1s a 5d contienen 78 electrones	—	—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	9,22
Hg 80		—	—	2	—	—	—	1S_0	10,44
Tl 81		—	—	2	1	—	—	$^2P_{1/2}$	6,11
Pb 82		—	—	2	2	—	—	3P_0	7,42
Bi 83		—	—	2	3	—	—	$^4S_{3/2}$	7,29
Po 84		—	—	2	4	—	—	3P_2	8,43
At 85		—	—	2	5	—	—	$^2P_{3/2}$	9,40
Rn 86		—	—	2	6	—	—	1S_0	10,75
Fr 87	Las subcapas 1s a 5d contienen 78 electrones	—	—	2	6	—	1	$^2S_{1/2}$	4,00
Ra 88		—	—	2	6	—	2	1S_0	5,28
Ac 89		—	—	2	6	1	2	$^2D_{3/2}$	5,5
Th 90		—	—	2	6	2	2	3F_2	5,7
Pa 91		2	—	2	6	1	2	$^4K_{11/2}$	5,7
U 92		3	—	2	6	1	2	5L_6	4,0
Np 93		4	—	2	6	1	2	$^6L_{11/2}$	
Pu 94		6	—	2	6	—	2	7F_0	
Am 95		7	—	2	6	—	2	$^8S_{7/2}$	
Cm 96		7	—	2	6	1	2	9D_2	
Bk 97		8	—	2	6	1	2	$^8H_{17/2}$	
Cf 98		10	—	2	6	—	2	6I_8	
Es 99		11	—	2	6	—	2	$^4I_{15/2}$	
Fm 100		12	—	2	6	—	2	3H_6	
Md 101		13	—	2	6	—	2	$^2F_{7/2}$	
No 102		14	—	2	6	—	2	1S_0	
Lw 103		14	—	2	6	1	2	$^2D_{1/2}$	
Ku 104		14	—	2	6	2	2	3F_2	