

Modelo Atômico de Orbitais Geométricos – M.A.O.G

Autor: Ericsson Augusto de Matos

Introdução

Várias teorias explicativas dos modelos atômicos foram desenvolvidas no último século. Dentre elas, o modelo atômico de Niels Bohr¹ explica que o átomo é composto de camadas de elétrons organizadas em níveis de energia. Em cada nível de energia “n” o número de elétrons deve aumentar segundo uma equação $2n^2$, implicando em níveis com 2, 8, 18, 32, 50 elétrons, e assim por diante.

Outra teoria, de Arnold Sommerfeld², concluiu que as órbitas eletrônicas deveriam ser elípticas, e não circulares, como imaginou Niels Bohr, e que cada nível energético deveria comportar subníveis, os quais foram apresentados como s, p, d, f, g, h, i e assim por diante.

Uma teoria de distribuição dos elétrons foi proposta por Linus Pauling³, resultando num diagrama que apresenta sobre os níveis de energia propostos por Niels Bohr uma seqüência ordenada de distribuição segundo uma ordem crescente de energia dos elétrons.

Outra teoria, desenvolvida por Kossel e Lewis, a teoria do octeto, que diz que um átomo não pode apresentar mais do que 8 elétrons no seu último nível energético.

Todavia, deparamo-nos com compostos como o pentacloreto de fósforo, que foge da regra do octeto. Que reflexões são possíveis desenvolver para explicar a estruturação dessa molécula?

Dessa maneira, o presente artigo possui a pretensão de tecer reflexões a respeito de novas teorias referentes aos modelos atômicos.

Sobre os orbitais

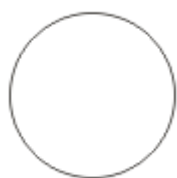
Cada orbital, também chamado de subnível de energia, possui quantidade definida de elétrons, os quais foram quantificados por estudos experimentais⁴. As respectivas quantidades conhecidas pelos cientistas são 2 para o subnível s, 6 para o p, 10 para o d, 14 para o f, 18 para o g, 22 para o h e 26 para o i e assim por diante.

Os elétrons distribuídos nos subníveis de energia ocupam regiões complexas quanto maior for a quantidade de elétrons. De forma simplista, foi definido que o subnível s possui um aspecto de uma região esférica com um eixo apenas; que os elétrons ocupam o subnível p em uma região em forma de halteres em três eixos; complicando-se ainda mais a visualização para os demais subníveis.

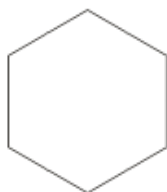
Sendo assim, uma simplificação plana pode ser usada para visualizar a ordem de distribuição dos elétrons.

Planificação dos orbitais

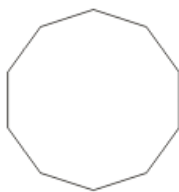
Considerando as quantidades de elétrons dos subníveis, ou seja, 2, 6, 10, 14, 18, 22 e 26, e as figuras abaixo representando a esfera o subnível s, o hexágono o subnível p, o decaedro o d e assim por diante, a idéia consiste sobrepor as figuras numa seqüência que será explicada adiante.



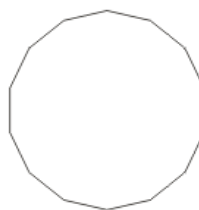
subnível “s”



subnível “p”



subnível “d”



subnível “f”

¹ VIEIRA, Ricardo Soares. Teoria das diagonais energéticas. Disponível em http://br.geocities.com/rickrsv/teorias_arquivos/quimica.pdf em 8/4/2008.

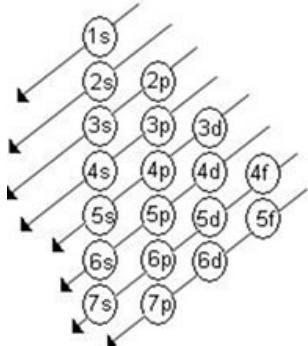
² VIEIRA, Ricardo Soares. Teoria das diagonais energéticas. Disponível em http://br.geocities.com/rickrsv/teorias_arquivos/quimica.pdf em 8/4/2008.

³ VIEIRA, Ricardo Soares. Teoria das diagonais energéticas. Disponível em http://br.geocities.com/rickrsv/teorias_arquivos/quimica.pdf em 8/4/2008.

⁴ VIEIRA, Ricardo Soares. Teoria das diagonais energéticas. Disponível em http://br.geocities.com/rickrsv/teorias_arquivos/quimica.pdf em 8/4/2008.

a) o diagrama de Linus Pauling

Segundo Linus Pauling, um átomo em estado fundamental, isolado ou neutro, apresenta os seus elétrons em ordem crescente de energia, ou seja, os elétrons ocupam primeiramente os subníveis de menor energia. Dessa maneira, elaborou um dispositivo prático que permite colocar todos os subníveis de energia conhecidos em ordem crescente de energia. É o processo das diagonais, denominado diagrama de Pauling, representado a seguir. A ordem crescente de energia dos subníveis é a ordem na seqüência das diagonais⁵.



1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p.

b) reflexões sobre um diagrama geométrico

O Hélio é um gás nobre que adquire estabilidade com dois elétrons, os quais se distribuem nesse átomo sob a forma de uma esfera. Outros gases nobres, com mais elétrons, possuem em seu último subnível seis elétrons, os quais se dispõem nos vértices de octaedros.

Dessa maneira, pode-se dizer que um átomo adquire estabilidade quando, após ganhar ou perder elétrons, atinge uma forma geométrica estável de um gás nobre quando este dispuser em seu subnível de seis elétrons, segundo os vértices de um octaedro. Para os metais de transição, além da forma geométrica dos orbitais octaédricos, a estabilização também ocorre sob a forma geométrica de um hexaedro, com seus oito elétrons no último subnível.

Considerando a seqüência de distribuição oferecida por Linus Pauling, ou seja, 1s², 2s², 2p⁶, 3s²..., temos a seguinte seqüência de subníveis:

s s p s p s d p s d p s f d p s f d

Afere-se da tabela periódica que "cada período começa no subnível s e termina no p".

Então, tomei uma divisão periódica começando no subnível s e terminando no subnível p, conforme segue:

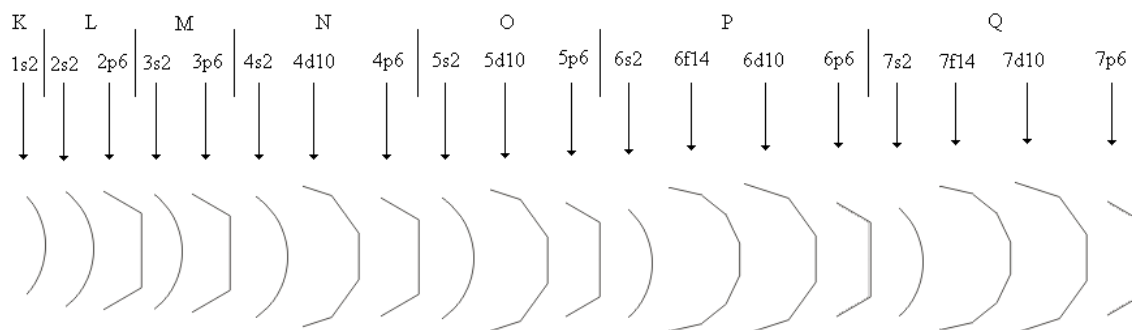
K	L	M	N	O	P	Q
s	s p	s p	s d p	s d p	s f d p	s f d p

Os elétrons foram então distribuídos, obedecendo-se a seqüência acima, o que resultou na seguinte distribuição seqüencial:

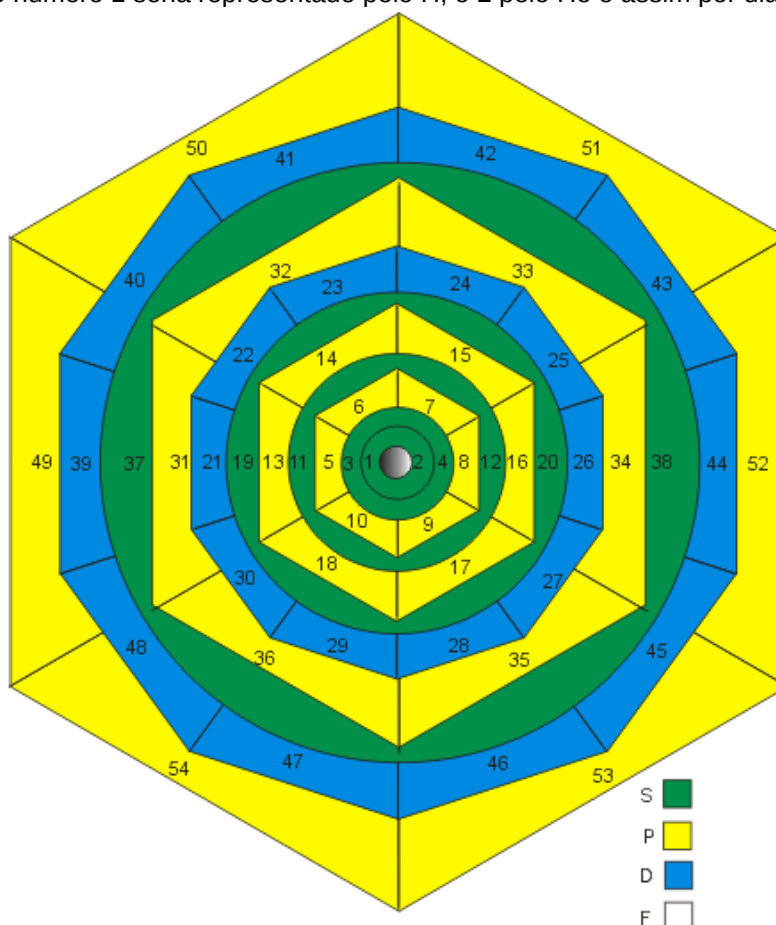
1s² / 2s² 2p⁶ / 3s² 3p⁶ / 4s² 4d¹⁰ 4p⁶ / 5s² 5d¹⁰ 5p⁶ / 6s² 6f¹⁴ 6d¹⁰ 6p⁶ / 7s² 7f¹⁴ 7d¹⁰ 7p⁶

Disso decorre com base na seqüência acima, que é possível planificar geometricamente a distribuição eletrônica.

⁵ Distribuição eletrônica de Linus Pauling ; disponível em www.tabela.oxigenio.com/paginas_diversas/distribuicao_eletronica_linus_pauling_tabela_periodica.htm em 24/04/08.



E, dessa forma, juntando-se geometricamente a composição acima, podemos apresentar um diagrama geométrico sobre o qual se pode inscrever os átomos de forma seqüenciada, segundo a ordem numérica apontada no diagrama abaixo, onde o número 1 seria representado pelo H, o 2 pelo He e assim por diante.



A distribuição eletrônica proposta no diagrama acima implica uma alteração da seqüência inicialmente proposta por Linus Pauling, sendo então apresentada na forma descrita abaixo:

S - 2	1 - K - 2	1s
p - 6	2 - L - 8	2s 2p
d - 10	3 - M - 8	3s 3p
f - 14	4 - N - 18	4s 4d 4p
g - 18	5 - O - 18	5s 5d 5p
h - 22	6 - P - 32	6s 6f 6d 6p
i - 26	7 - Q - 32	7s 7f 7d 7p

1s 2s 2p 3s 3p 4s 4d 4p 5s 5d 5p 6s 6f 6d 6p 7s 7f 7d 7p

c) Tabela de valência.

A apresentação da distribuição eletrônica desenvolvida no item b acima permite construir a seguinte tabela de valência:

elementos	Z	K (1)	L (2)	M (3)		
		2 s	8 s p	8 s p		
H	1	1			H•	-1 (ganha 1 para se igualar ao Hélio)
He	2	2			He:	0 estável
Li	3	2	1		Li•	+1 (perde 1 para se igualar ao Hélio)
Be	4	2	2		Be:	+2 (perde 2 para se igualar ao Hélio)
B	5	2	2 1		•B:	+3 ou -5 (+3 pra Hélio ou -5 pra Neônio)
C	6	2	2 2		:C:	+4 ou -4 (+4 pra Hélio ou -4 pra Neônio)
N	7	2	2 3		•N:	+5 ou -3 (+5 pra Hélio ou -3 pra Neônio)
O	8	2	2 4		:O:	-2 (ganha 2 para se igualar ao Neônio)
F	9	2	2 5		:F:	-1 (ganha 1 para se igualar ao Neônio)
Ne	10	2	2 6		:Ne:	0 estável
Na	11	2	2 6	1	Na•	+1 (perde 1 para se igualar ao Neônio)
Mg	12	2	2 6	2	Mg:	+2 (perde 2 para se igualar ao Neônio)
Al	13	2	2 6	2 1	•Al:	+3 ou -5 (+3 pra Neônio ou -5 pra Argônio)
Si	14	2	2 6	2 2	:Si:	+4 ou -4 (+4 pra Neônio ou -4 pra Argônio)
P	15	2	2 6	2 3	•P:	+5 ou -3 (+5 pra Neônio ou -3 pra Argônio)
S	16	2	2 6	2 4	:S:	+6 ou -2 (+6 pra Neônio ou -2 pra Argônio)
Cl	17	2	2 6	2 5	:Cl:	-1 (ganha 1 para se igualar ao Argônio)
Ar	18	2	2 6	2 6	:Ar:	0 estável

Com base na tabela acima, é possível fazer observações quanto aos compostos indicados abaixo:

O pentacloreto de fósforo

Da tabela de valência do tópico anterior percebe-se que o átomo de fósforo possui na camada M 5 elétrons, sendo 2 no subnível s e 3 no p.

Dessa maneira, o fósforo possui 5 elétrons na camada de valência M, o que o permite fazer a ligação com 5 átomos de cloro, doando os seus cinco elétrons, um para cada Cloro. Assim o Fósforo atinge a configuração eletrônica do gás nobre **Neônio** e os átomos de Cloro atingem a configuração eletrônica do gás nobre Argônio.

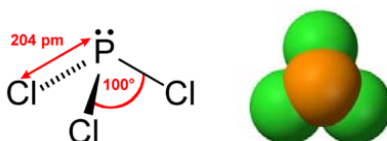


(imagens obtidas do site http://pt.wikipedia.org/wiki/Pentacloreto_de_f%C3%B3sforo)

O tricloreto de fósforo

Da mesma tabela de valência percebe-se que o átomo de fósforo possui no subnível p 3 elétrons.

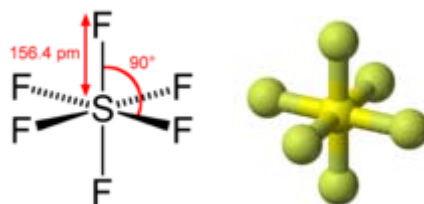
Dessa maneira, o fósforo possui 3 elétrons no subnível p, o que o permite fazer a ligação com 3 átomos de cloro, compartilhando os seus três elétrons, um com cada Cloro. Assim o Fósforo atinge a configuração do gás nobre **Argônio**, e os átomos de Cloro também atingem a configuração eletrônica do gás nobre Argônio.



(imagens obtidas do site http://pt.wikipedia.org/wiki/Tricloreto_de_f%C3%B3sforo)

Hexafluoreto de enxofre

O Enxofre ao doar seus seis elétrons, ou seja, 4 do subnível p e 2 do subnível s, um para cada átomo de flúor, assim ambos atingirão a configuração eletrônica do Neônio.



(imagens obtidas do site http://pt.wikipedia.org/wiki/Hexafluoreto_de_enxofre)

Sulfeto de hidrogênio

No caso do sulfeto de hidrogênio O Enxofre compartilha dois dos seus 4 elétrons do subnível p, um para cada Hidrogênio, Assim o hidrogênio atinge a configuração do gás nobre Helio e o Enxofre atinge a configuração do Argônio.



(imagens obtidas do site http://pt.wikipedia.org/wiki/Sulfeto_de_hidrog%C3%AAnio)

Conclusão

O presente texto explorou a possibilidade de uma nova sequência de distribuição eletrônica, que chamei de Modelo Atômico de Orbitais Geométricos – M.A.O.G, o qual permite organizar a distribuição eletrônica sobre uma nova configuração de diagrama.

A idéia de distribuição conforme uma sequência geométrica definida permite explicar a estabilidade de alguns compostos até então mal compreendidos, como o pentacloreto de fósforo e o tricloreto de fósforo.

Assim, a idéia do Modelo Atômico de Orbitais Geométricos demanda uma confrontação ao princípio da incerteza apresentado por Heisenberger, o qual será desenvolvido num próximo texto.

Por fim, este trabalho lança a discussão sobre o tema do Modelo Atômico de Orbitais Geométricos aqui apresentado, e o autor se disponibiliza em discuti-lo com os interessados, pelo e-mail informado abaixo.