

Do modelo atômico de Bohr ao Atual

Luiza Lanza L. Temponi





1 Limitações do modelo atômico de Bohr

Em 1913, o cientista Niels Bohr publica seu trabalho propondo um novo modelo atômico, dando continuidade aos trabalhos de Ernest Rutherford. O modelo de Bohr é conhecido como semi-clássico, ou semi-quântico: uma transição para o que conhecemos como modelo atômico atual. Neste sentido, Bohr é considerado um dos fundadores da Mecânica Quântica. Partiremos do espetacular artigo do nosso amigo *João Pedro Siebra Vieira*, "*Descrição matemática do modelo de Bohr*".

Conforme o artigo, o modelo de Bohr permite prever a energia dos elétrons e momento angular em átomos hidrogenóides. Apesar disso, é possível medir energia dos elétrons de valência dos átomos de *Li*, *Na* e *K* através de técnicas de espectroscopia. Sabemos, do átomo de Bohr, que a diferença de energia entre dois níveis eletrônicos é igual à energia do fóton emitido/absorvido pelo elétron ao sofrer relaxação/excitação entre estes dois níveis. Dessa forma, a técnica permite aferir experimentalmente a frequência da onda emitida ou absorvida. Assim, a diferença de energia entre os dois níveis é calculada por:

$$E_1 - E_2 = hf$$

ou

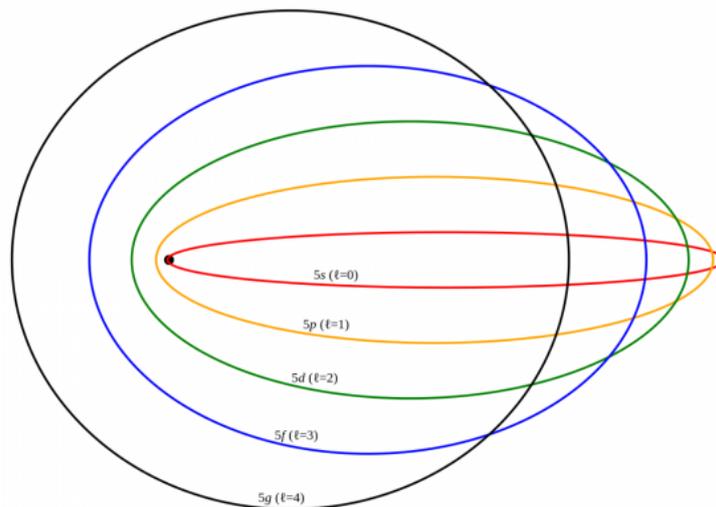
$$E_1 - E_2 = h \frac{c}{\lambda}$$

Montando o espectro de emissão do *Li*, *Na* e *K*, observou-se uma semelhança entre as séries de linhas de emissão com as do hidrogênio, que foram denominada *sharp*, *principal*, *diffuse* e *fine* - posteriormente, abreviadas para *s*, *p*, *d*, *f*.

1.1 Modelo de Sommerfeld

Após o estudo das linhas espectrais de emissão e absorção do hidrogênio, Arnold Sommerfeld observou que, aquilo que parecia ser uma linha contínua no modelo de Bohr, na verdade era composto por várias faixas espectrais discretas e devido a incidência de fótons de energia ligeiramente distintas. Assim, Sommerfeld propõe um novo modelo em que, cada nível atômico, representado por um número $n \in \mathbf{N}$, contém $[0, n - 1] \in \mathbf{N}$ subníveis (subníveis representados por números naturais, de 0 à $n - 1$). Os subníveis de um mesmo nível apresentam energias ligeiramente distintas entre si.

Sommerfeld propôs que o subnível mais externo de cada nível representa uma órbita circular, onde o elétron possui maior energia dentre os subníveis da camada. Para o nível 4, o subnível $f = 3$ é circular e demais subníveis $s = 1$, $p = 1$, $d = 2$ possuem formatos elípticos, com o núcleo atômico ocupando um dos focos da elipse.



Representação do Modelo de Sommerfeld para $n = 6$

Além disso, a energia dos átomos com mais de um elétron não pode ser calculada precisamente pelas equações de Bohr, pois ele desconsidera as interações dos demais elétrons sobre a carga nuclear total, o chamado *fator de blindagem*, que é a segunda limitação deste modelo.

1.2 Fator de blindagem

No átomo de *Li*, como $Z=3$, a atração que cada elétron sofre pelo núcleo não é a mesma e não é igual a força elétrica gerada por 3 cargas elementares positivas. Isso porque o núcleo atrai os 3 elétrons simultaneamente, então poderíamos aproximar dizendo que a força efetiva que atua sobre um elétron é equivalente à força elétrica gerada por uma carga elementar positiva, pois os demais elétrons *blindam* a força do núcleo.

Porém, como nem todos os elétrons estão equidistantes ao núcleo segundo o modelo de Bohr, a força de blindagem é mais intensa para os níveis externos, pois os elétrons internos blindam o núcleo. Dessa forma, a força nuclear efetiva pode ser calculada por:

$$Z_{ef} = Z - b \quad (i)$$

Onde b é a constante de blindagem, calculada experimentalmente. Como $E = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} | n \in \mathbf{N}^*$, já uma unidade atômica de energia é definida pela abreviação das constantes $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$. Ou seja:

$$E_{(a.u.)} = -\frac{Z^2}{2n^2} | n \in \mathbf{N}^* \quad (ii)$$

Substituindo (ii) em (i):

$$Z_{ef} = \sqrt{-2n^2 E_{(a.u.)}} - b$$

Da experiência, sabemos que para o átomo de Lítio $E = -0.198$ e -0.130 a.u. para os dois menores níveis de energia, além disso b é aproximadamente o número de elétrons na camada. Aplicando a equação, encontramos que $Z_{(ef)}(S) = 1.26$, $b = 1.74$ e $Z_{(ef)}(P) = 1.02$, $b = 1.98$. Dessa forma, a



energia de um nível atômico é diferente da prevista por Bohr:

$$E = \frac{-13,6eV}{n^2}$$

que funciona apenas para átomos hidrogenóides, devido ao fator de blindagem dos outros elétrons sobre o núcleo em átomos multieletrônicos.

1.3 Momento magnético

Em 1925 os cientistas G.Goudsmit e S. Ulenbeck, a partir das análises matemáticas do modelo de Bohr, propuseram que o momento magnético intrínseco do spin do elétron é dado por $\frac{h}{2\pi}$. Dessa forma, pelo modelo de Bohr, o elétron de valência do Lítio em seu estado fundamental possui $n = 2$, logo, seu momento angular é $\frac{2h}{2\pi}$. Porém, experimentalmente foi verificado que o momento magnético do Lítio é zero, assim como o do Hidrogênio, que apresenta apenas um elétron na camada de valência. Sem nos prolongarmos demais, este foi um dos motivos que culminou na reformulação do modelo de Bohr. A primeira tentativa, apresentada anteriormente, foi o modelo de Sommerfeld que propôs órbitas elípticas. Porém, uma nova área da física despontava no século XX e colocaria em cheque as concepções sobre a constituição da matéria até o momento: a Mecânica Quântica.

2 Mecânica Quântica

Se o Modelo de Bohr produziu uma explicação satisfatória no início, pouco tempo depois seria abandonado pela comunidade científica enquanto melhor modelo atômico. Isso porque não era capaz de explicar os novos fenômenos constatados pela física quântica - do contrário, Bohr se apropriou da mecânica Newtoniana para constituição de seu modelo, ao mesmo tempo que introduz a ideia de quantização, de forma quase antagônica à física clássica.

Se queremos entender, sob a óptica da física moderna, o que realmente explica as ligações covalentes existirem, é válido estudarmos alguns conceitos que deram início ao que conhecemos como modelo atômico atual.

2.1 Dualidade de De Broglie

Em 1924, Louis de Broglie apresenta em sua tese de doutorado o "Princípio da Dualidade Onda-Partícula", formulada à partir das equações de Einstein sobre o efeito fotoelétrico, que rompe a ideia vigente de onda e matéria como conceitos excludentes. O Princípio da Dualidade afirma que todo corpúsculo apresenta comportamento ondulatório e vice-versa, a depender dos parâmetros analisados é possível detectar fenômenos ondulatórios em elétrons, como difração e, principalmente, interferência.

"A todo elétron em movimento está associada uma onda característica."
Isso dará início aos nossos estudos sobre Mecânica Quântica.

De Broglie propõe que o comprimento de onda de uma partícula pode ser dada por:



$$\lambda = \frac{h}{mv} \text{ ou } \lambda = \frac{h}{p}$$

Demonstração para o fóton:

Equação da Equivalência de massa-energia de Einstein:

$$E = mc^2 \text{ (i)}$$

Energia do fóton segundo Einstein (efeito fotoelétrico):

$$E = hf \text{ (ii)}$$

Equação geral das ondas, para o fóton:

$$c = \lambda \cdot f \Rightarrow f = \frac{c}{\lambda} \text{ (iii)}$$

Igualando (i) e (ii) e substituindo (iii):

$$mc^2 = h \frac{c}{\lambda}$$

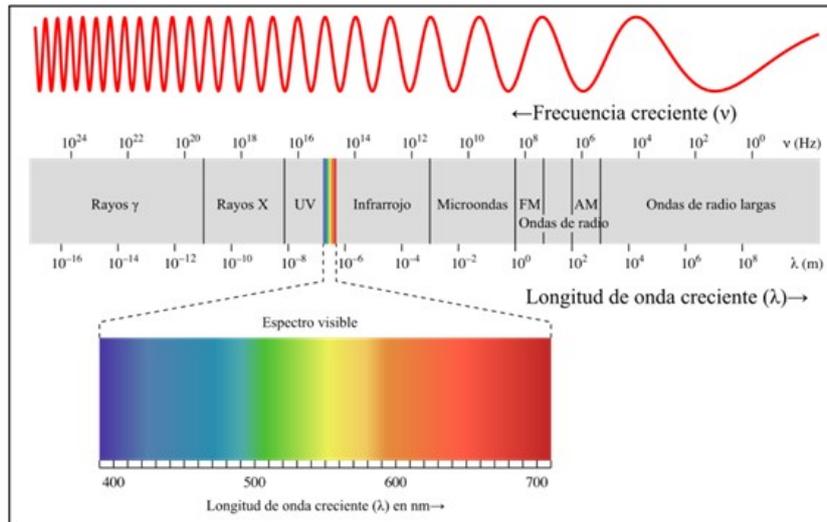
$$\lambda = \frac{h}{mc}$$

Para as demais partículas, troca-se o momento do fóton mc pelo momento da partícula mv .

Porque não observamos os fenômenos ondulatórios da matéria em nível macroscópico? De fato, toda matéria possui uma onda associada. Porém, esse fenômeno é desprezível a nível macroscópico, devido a ordem de grandeza da constante de Plank (10^{-34}). Considere uma pessoa de 100kg que se move à 10m/s (ou 36km/h - uou, como o Usain Bolt!). O comprimento de onda dessa pessoa é estimado em:

$$\lambda = \frac{10^{-34}}{10^2 \cdot 10} = 10^{-37}$$

E o espectro de luz detectável começa na faixa dos Raios γ , com $\lambda_{\text{Raio}\gamma} = 10^{-16}$, o que é 10^{21} ou 1.000.000.000.000.000.000 vezes maior!



Porém, como os elétrons apresentam massa muito pequena, na ordem de 10^{-31} , a onda associada ao elétron possui comprimento de onda estimado em:

$$\lambda = \frac{10^{-34}}{10^{-31}} = 10^{-3}$$

Que pode ser detectada dentro do espectro infravermelho/ microondas.

Apesar de contrariar a concepção da época sobre onda e partícula, a proposta de De Broglie se mostrou muito consistente experimentalmente e para explicar fenômenos quânticos, fazendo com que o modelo atômico começasse a ser desenvolvido levando em consideração os efeitos ondulatórios do elétron.

2.1.1 Da aparente contradição do Princípio da Dualidade

Pela definição clássica de onda e partícula, é possível questionar-se se o princípio formulado por De Broglie não apresenta uma *contradição lógica*, já que a partícula é indivisível, possuindo uma posição bem definida, e descreve uma trajetória, enquanto a onda não se localiza em um ponto bem definido, é "espalhada", e não descreve uma trajetória. Sobre essa pergunta, daremos ênfase nas interpretações de dois cientistas citados neste artigo;

Interpretação Ondulatória- E. Schrödinger: o objeto propaga-se como uma onda, mas durante a detecção ele torna-se mais ou menos bem localizado, se assemelhando a uma partícula. Não há contradição, pois inicialmente há uma onda espalhada e depois uma partícula (ou um "pacote de onda bem estreito") sem que coexistam simultaneamente.

Interpretação Dualista Realista - L. De Broglie e redescoberta por D. Bohm: o objeto quântico se divide em duas partes: uma partícula com trajetória bem definida (mas desconhecida pelo Princípio da Incerteza) e uma onda associada. A probabilidade da partícula se propagar em determinada direção depende da amplitude da onda associada, já que a intensidade é:

$$I \propto \psi^2$$



e onde há interação destrutiva a chance de encontrar a partícula é zero. Não há contradição pois o objeto se divide em duas partes diferentes, uma sendo só partícula e a outra só onda.

2.2 Princípio da Incerteza de Heisenberg

O modelo de Bohr foi construído acima da física clássica, que é formulada partindo do princípio de que é possível medir a velocidade ou determinar a posição de uma partícula. Porém, em 1927 o físico Werner Heisenberg estabelece um limite para a precisão com a qual variáveis complementares de uma partícula, como posição e momento linear, podem ser medidas. A equação matemática que descreve o Princípio é:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Onde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (constante de Plank reduzida) e vale aproximadamente 1.05457 , então $\frac{\hbar}{2} \approx 0,52729 > 0$. Quando $\Delta = 0$, a posição ou velocidade final é igual a inicial, assim temos previsão total sobre a grandeza. Porém, isso é impossível pelo Princípio da Incerteza, já que o produto $\Delta x \cdot m\Delta v > 0$.

Dessa forma, podemos dizer que quando $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \Delta v = \infty$ e $\lim_{\Delta v \rightarrow 0} \Delta x = \infty$. Logo, quanto maior a precisão da posição da partícula menor a precisão sobre sua velocidade e quanto maior a precisão sobre a velocidade da partícula menor a precisão da sua posição. Além disso, é impossível ter precisão total em qualquer uma das duas grandezas.

2.3 Em busca do modelo atômico atual

Neste artigo não iremos nos aprofundar no "Problema da Caixa" ou nas deduções da Equação de Schrödinger, mas vale a pena citar a teoria quântica que reuniu todos os elementos anteriores no modelo atômico atual.

2.4 Ondas estacionárias

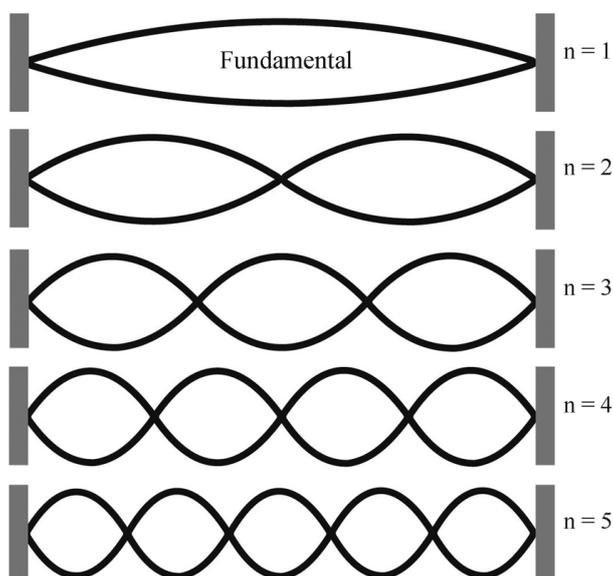
Os elétrons se comportam como ondas estacionárias tridimensionais. Antes de descrever isto melhor, vamos relembrar algo sobre ondas estacionárias:

Para uma dimensão: O caso clássico de ondas estacionárias unidimensionais é a onda na corda. Considerando uma corda com as extremidades fixadas, a frequência que produz ondas estacionárias é chamada **harmônica**. Chamamos ventre os pontos de interferência construtiva e nó os pontos de interferência destrutiva (a onda é refletiva sucessivas vezes nos pontos fixos, gerando os padrões de interferência conhecidos como harmônicos).

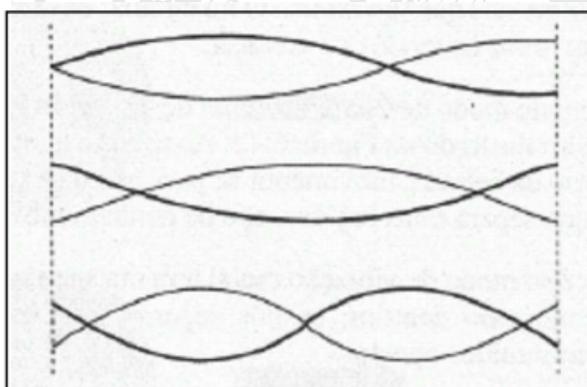
Primeiro harmônico: é produzido apenas um ventre e dois nós (extremidades), portanto, o comprimento da corda corresponde a $L = \frac{\lambda}{2}$.

Segundo harmônico: é produzido dois ventres e três nós, portanto, o comprimento da corda corresponde a $L = \frac{2\lambda}{2}$.

O n -ésimo harmônico possui n ventres e $n + 1$ nós, além disso o comprimento de onda do n -ésimo harmônico é $L = \frac{n\lambda}{2} \Rightarrow \lambda = \frac{2L}{n}$.



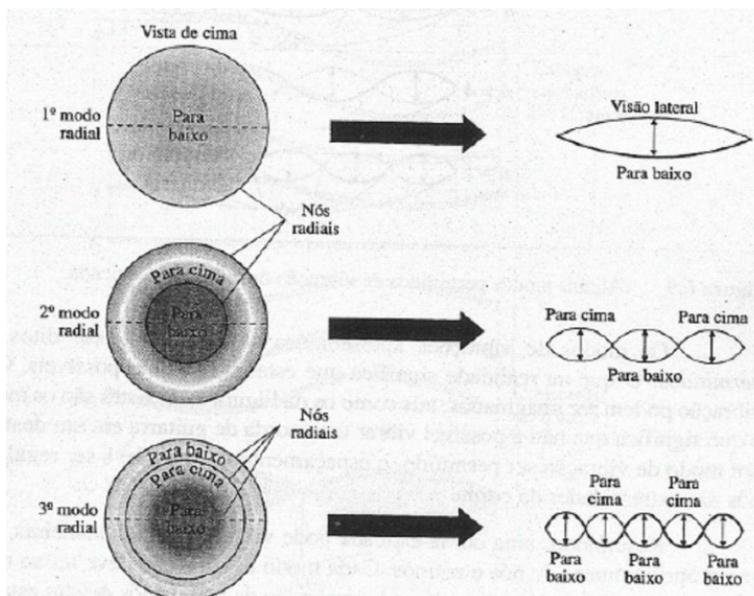
Em ondas harmônicas, nem todas as frequências e padrões de vibração são **permitidos**, alguns são **proibidos** neste modelo, conforme a imagem abaixo:



Química Geral - John B. Russel. Vol. 1

Dessa forma, podemos dizer que ondas estacionárias seguem um padrão de vibração **quantizado**, possuindo **energias quantizadas**.

O mesmo autor do livro anterior apresenta o padrão de ondas estacionárias para duas dimensões (ondas radiais) com exemplo do tambor:



Química Geral - John B. Russel. Vol. 1

De maneira análoga, as soluções para as equações de onda de Schrödinger descrevem o formato da onda tridimensional e estacionária do elétron para cada nível quantizado de energia. A quantização advém das propriedades ondulatórias da matéria, que torna algumas "vibrações" proibidas para o elétron devido aos planos nodais e ventrais formados.

2.5 O orbital atômico

Cada solução da Equação de Schrödinger é chamada **função de onda** representada pela letra grega ψ , acompanhada do índice que representa o orbital, como ψ_{2p_x} . O valor de ψ representa a amplitude de onda em cada ponto do espaço e, conseqüentemente, a *probabilidade de encontrar um elétron em cada unidade de volume do espaço*. ψ então é a probabilidade por unidade de volume, também chamada *densidade de probabilidade*. Isso acontece pois, como citado anteriormente, a intensidade da onda é

$$I \propto \psi^2$$

e, quanto maior a intensidade, maior a chance de encontrar o elétron nesta região do espaço.

Por nossos estudos até o momento, podemos concluir que não faz sentido, sob a óptica da Mecânica Quântica, tratar do conceito de órbita, já que o elétron não descreve uma trajetória bem definida, como a circular ou elíptica, mas sua posição é descrita por uma probabilidade calculada por meio da função de onda. Assim, chamamos **orbital atômico** a *região do espaço de máxima probabilidade de encontrar o elétron*, cujo o formato é dado pela resolução da Equação de Schrödinger.

2.6 Equação de Schrödinger

Equação Fundamental da Mecânica Quântica:

$$\mathcal{H} \psi_i = E_i \psi_i$$

Onde \mathcal{H} é o operador Hamiltoniano que pode ser escrito como a soma das energias cinética T e potencial V , $\mathcal{H} = T + V$.



A equação de Schrödinger é expressa por:

$$-\frac{h}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = E\psi$$

2.6.1 Resolvendo a Equação de Schrödinger para alguns valores

A resolução da Equação de Schrödinger para cada valor nos dá o formato de cada orbital atômico.

A tabela a seguir nos fornece a função de onda linear χ e radial R para cada solução da Equação de Schrödinger, em uma e duas dimensões. Assim, multiplicando os dois valores para o orbital correspondente, encontramos sua função de onda (onda estacionária tridimensional).

Parte angular $\chi(\theta, \phi)$	Parte radial* $R_{(n,\ell)}(r)$
$\chi(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$	$R(1s) = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\sigma}{2}}$
$\chi(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \phi$	$R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (2 - \sigma) e^{-\frac{\sigma}{2}}$
$\chi(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \sin \phi$	$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}$
$\chi(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta$	
$\chi(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (6 - 6\sigma + \sigma^2) e^{-\frac{\sigma}{2}}$
$\chi(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$	$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (4 - \sigma) \sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}$
$\chi(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$	$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sigma^2 e^{-\frac{\sigma}{2}}$
$\chi(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \cos 2\phi$	
$\chi(d_{xy}) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \sin 2\phi$	
	* $\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$; $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \approx 5.29 \times 10^{-12}$ metros.

Formato do orbital 1s:

Parte linear: $\chi(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$

Parte angular: $R(1s) = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\sigma}{2}}$

Função de onda:

$$\Psi_{(1s)} = \chi(s) \cdot R(1s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\sigma}{2}}$$

$$\Psi_{(1s)} = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad \sigma = \frac{2Zr}{na_0}$$

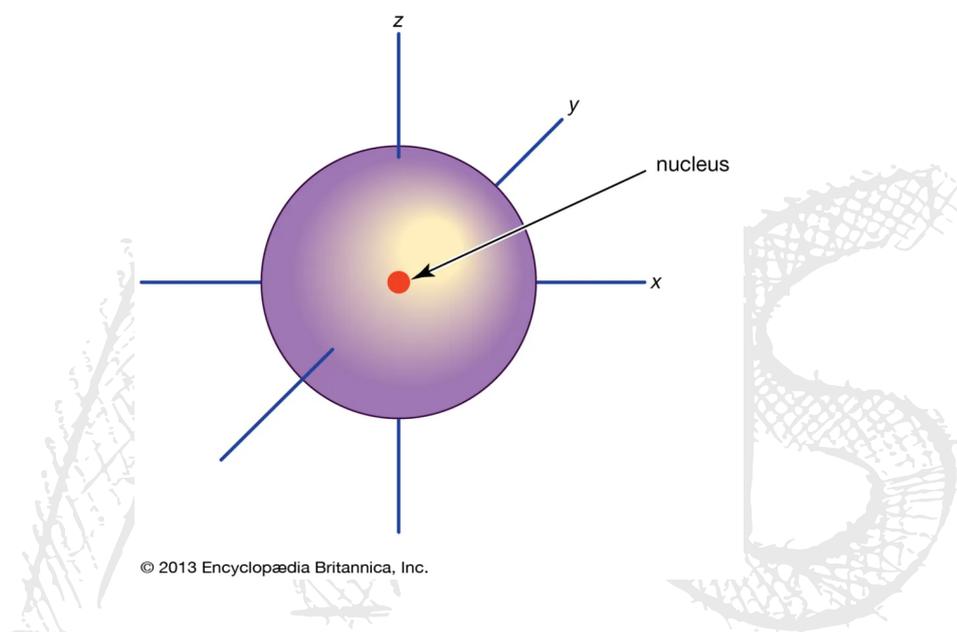
Elevando ψ ao quadrado, para obter a densidade de probabilidade do orbital 1s:

$$\psi_{(1s)}^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}}$$

π, Z, a_0 e e são constante, a única variável é o raio r , que aparece como expoente negativo. Simplifcando, podemos dizer que:

$$\psi_{(1s)}^2 \propto \left(\frac{1}{e^{\frac{2z}{a_0}}} \right)^r$$

Logo, a probabilidade de encontrar um elétron no orbital 1s independe das coordenadas esféricas e decresce à medida que o raio aumenta, em qualquer direção. Assim, o formato do orbital 1s é **esférico**.



Formato do orbital $2p_x$:

Parte linear: $\chi(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \phi$

Parte angular: $R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}$

Função de onda:

$$\psi(2p_x) = \chi(p_x) \cdot R(2p) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \phi \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}$$

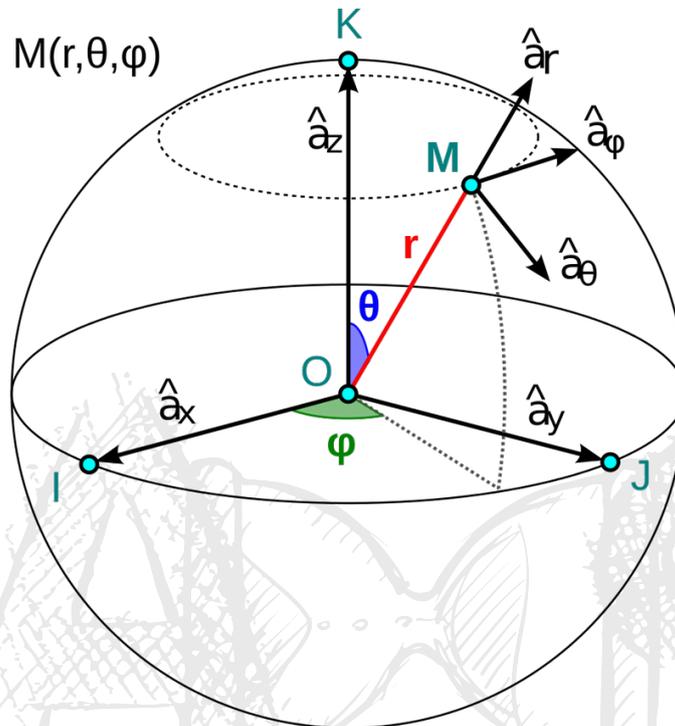
$$\psi^2(2p_x) = \sqrt{\left(\frac{3Z^3}{4\pi a_0} \right)} \sin \theta \cos \phi \frac{2Zr}{na_0} e^{-\frac{Zr}{na_0}}$$

Novamente, podemos argumentar que a densidade de probabilidade decresce com o raio em todas

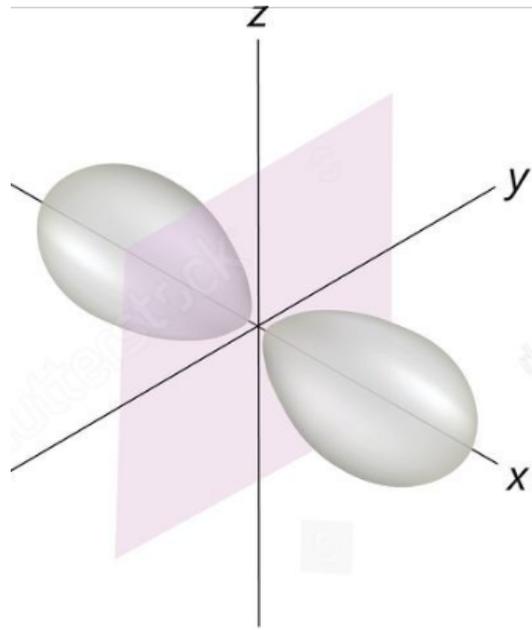


as dimensões, pois $\psi \propto e^{-\frac{Zr}{na_0}}$ ou $\psi_{(1s)}^2 \propto \left(\frac{1}{e^{a_0}}\right)^r$.

Porém, na equação o raio também aparece multiplicando as variáveis $\sin \theta$, que é a coordenada esférica vertical (plano xz e yz), medida com relação ao eixo vertical z , e $\cos \phi$, que é a coordenada esférica horizontal (plano xy), medida com relação ao eixo horizontal x , conforme a imagem:

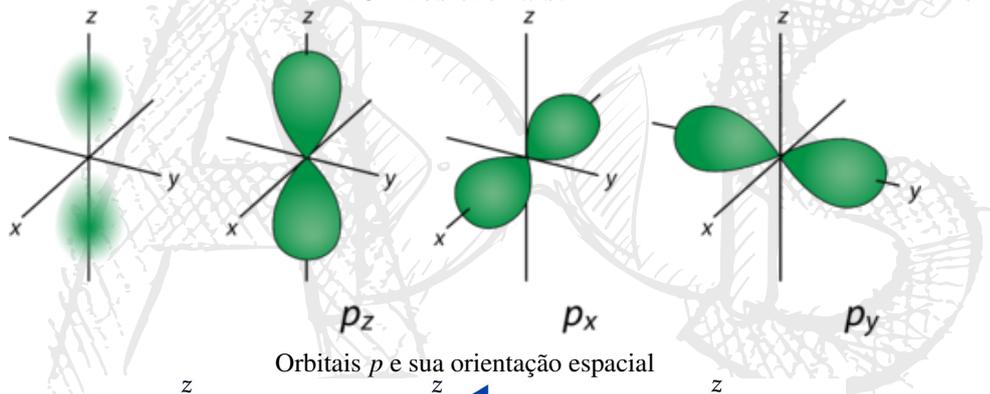


Assim, quanto maior o valor de θ maior a probabilidade de encontrar o elétron e, para $\theta = \{0, 180^\circ\} \Rightarrow \psi = 0$ (eixo z). Além disso, quanto menor o valor de ϕ maior a probabilidade de encontrar o elétron, e para $\phi = \{90^\circ, 270^\circ\} \Rightarrow \psi = 0$. A intercessão dessas duas variáveis cria um plano nodal no eixo yz , onde $\phi = \{90^\circ, 270^\circ\}$, pois para qualquer ponto contido no plano $xy \Rightarrow \cos \phi = 0$, sendo a probabilidade de encontrar o elétron igual a 0. A probabilidade aumenta à medida que nos afastamos do plano yz , mas não linearmente em todas as direções: quanto maior o valor de $\sin \theta$ maior a probabilidade descrita por ψ . Quando a coordenada θ aumenta no intervalo $[0, 90^\circ]$ ou diminui do intervalo $[90^\circ, 180^\circ]$ maior a probabilidade de encontrar o elétron, aproximando do eixo x . Logo, o formato do orbital $2p_x$ é um **duplo-halter** com o eixo sobre o eixo x :

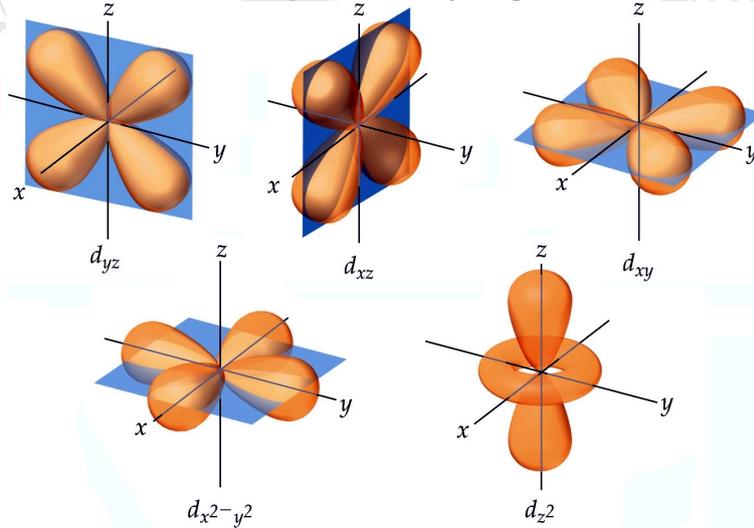


p_x orbital

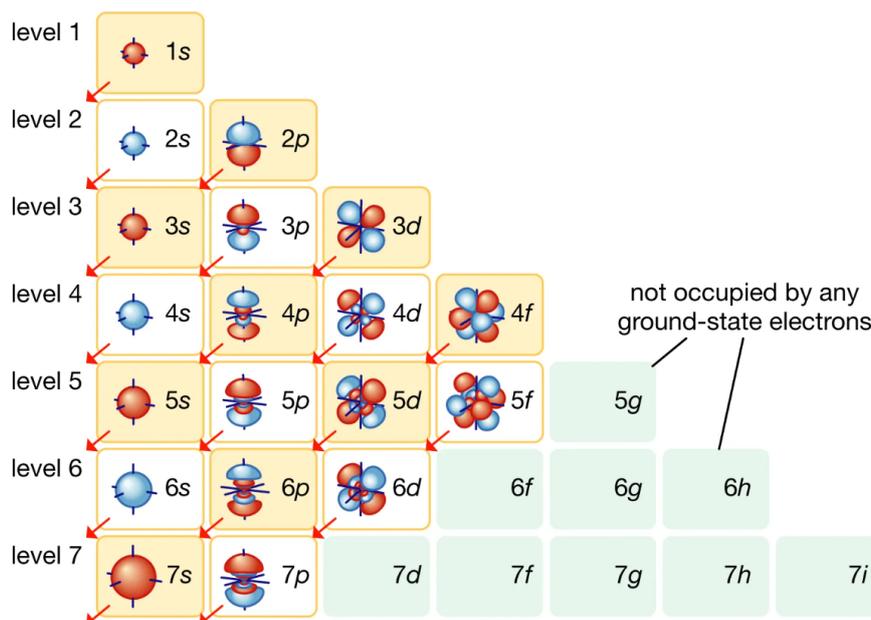
Outros orbitais:



Orbitais p e sua orientação espacial



Orbitais d e sua orientação espacial



© 2012 Encyclopædia Britannica, Inc.

Todos os orbitais ocupados por elétrons em seu estado fundamental

2.7 Distribuição eletrônica

Dadas as reformulações sobre o modelo de Bohr, também foi necessário repensar a maneira como os elétrons estão distribuídos no átomo.

Definimos:

Número quântico principal (n): indica o nível eletrônico, representado por $n \in \mathbf{N}$.

Número quântico secundário ou azimutal (ℓ): indica o subnível eletrônico. Cada nível possui subníveis no intervalo $[0, n - 1] | n \in \mathbf{N}$. Ex.: o nível 2 possui 2 subníveis: 0 e 1. O nível 1 possui apenas o subnível 0.

Número quântico magnético (m ou m_ℓ): indica a orientação espacial do orbital do elétron, no intervalo de $[-\ell, +\ell] | \ell \in \mathbf{N}$. Ex.: o subnível 2 apresenta 5 orbitais: -2, -1, 0, +1, +2.

Número quântico de spin (m_s): Determina o momento magnético do elétron, que pode ser $+\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$, já que o elétron, por ser um férmion, possui spin semi-inteiro.

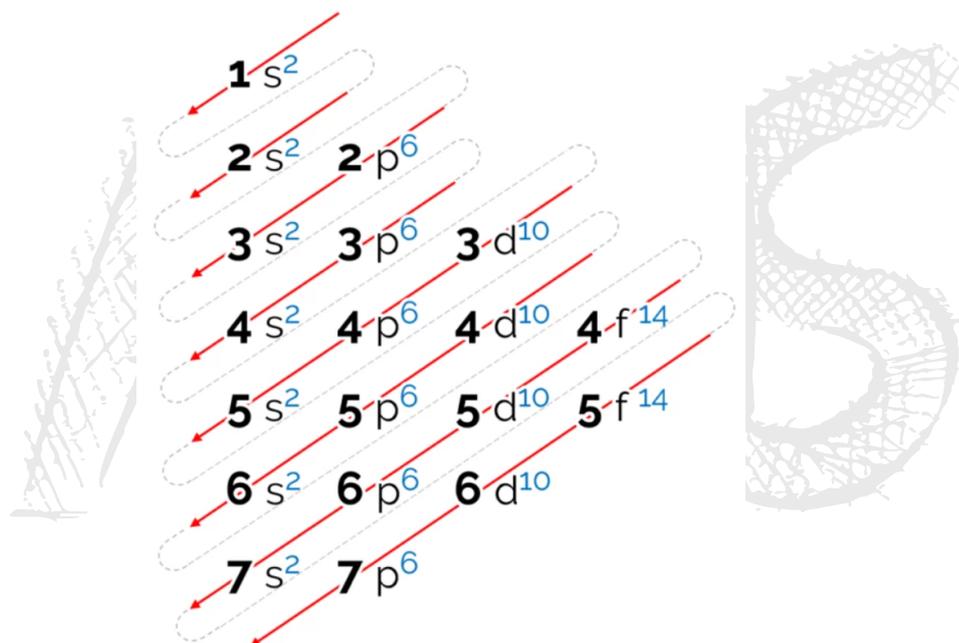
2.7.1 Princípio da Exclusão de Pauli

Elaborado pelo físico Wolfgang Pauli em 1925, o Princípio da Exclusão de Pauli afirma que dois elétrons de um mesmo átomo não podem ocupar o mesmo estado quântico *simultaneamente*, i.e., possuir os mesmos quatro números quânticos.

Isso nos leva a conclusão de que, um mesmo orbital (mesmo subnível e nível, conseqüentemente) suporta, no máximo, dois elétrons, que obrigatoriamente devem ter spins opostos. Assim, podemos montar uma tabela como a abaixo para estudar o número de elétrons em cada nível eletrônico:

Nível (n)	Subnível (l) 0 - n-1	Orbital (ml) - [-l, +l]	Spin (ms) [+1/2, -1/2]	Total de elétrons
1	0	0	+1/2, -1/2	2
2	0 1	0 -1, 0, +1	+1/2, -1/2	8
3	0 1 2	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2	+1/2, -1/2	18
4	0 1 2 3	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	+1/2, -1/2	32

Note a relação matemática de que o número de orbitais de um nível n é dado por n^2 . Assim, a quantidade máxima de elétrons de um nível n é $2n^2$ (pois cada orbital suporta até dois elétrons). Por fim, é válido dizer que os níveis, subníveis e orbitais teóricos são infinitos, porém para distribuição no estado fundamental de todos os elementos que conhecemos, usamos apenas os subníveis de energia entre o 1s e o 7p, conforme a tabela de Linus Pauling:



Fontes Bibliográficas

- MAHAN, Bruce M. **Química: um curso universitário**. São Paulo: Blucher, 1995.
- PESSOA, Osvaldo. **Conceitos de Física Quântica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2003.
- RUSSEL, John B. **Química Geral. Volume 1**. São Paulo: Pearson, 1994.
- https://pt.wikipedia.org/wiki/Princ%C3%ADpio_da_incerteza_de_Heisenberg
- https://pt.wikipedia.org/wiki/Princ%C3%ADpio_de_exclus%C3%A3o_de_pauli
- https://pt.wikipedia.org/wiki/Princ%C3%ADpio_de_exclus%C3%A3o_de_pauli
- <https://ampulhetadosaber.com/wp-content/uploads/2022/06/Ampulheta-do-Saber-Descricao-matematica-do-modelo-de-Bohr.pdf>