

# O Átomo de Bohr

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL. Instituto de Física. Departamento de Física. Física do Século XXB (FIS1056). Prof. César Augusto Zen Vasconcellos. **Lista 5** (*Site: www.cesarzen.com*)

**Tópicos.** O Átomo de Bohr (Niels Henrik David Bohr<sup>1</sup> (Dinamarca, 1885-1962)) e o Espectro do Átomo de Hidrogênio. Teoria de Bohr do Átomo de Hidrogênio. Postulados de Bohr. Séries Espectrais do Átomo de Hidrogênio na Teoria de Bohr. Crítica ao Modelo de Bohr. Experimento de Franck-Hertz (James Franck (Alemanha, 1882-1964) e Gustav Ludwig Hertz (Alemanha, 1887-1975)). Átomos Hidrogenóides. Átomos com Múons e Píons Orbitais.

## O Átomo de Bohr e o Espectro do Átomo Hidrogênio.

No fim do século XIX, os primeiros experimentos envolvendo o espectro de radiação atômica, emitido quando descargas elétricas atravessavam gases compostos pelo elemento hidrogênio, foram realizados. Buscava-se, com estes experimentos, responder a indagação: qual é a estrutura interna de um átomo? Para responder a esta questão buscavam os cientistas examinar a natureza da luz que os átomos emitem. O átomo de hidrogênio é o mais simples átomo da natureza, constituído por um

<sup>1</sup>Bohr recebeu o Prêmio Nobel em 1922 em vista de suas contribuições fundamentais para o entendimento da estrutura atômica e da mecânica quântica.

elétron orbital e um próton localizado em seu centro de forças. Com uma estrutura tão simples, não foi surpreendente para os cientistas que o átomo de hidrogênio apresentasse, como resultado de experiências espectroscópicas, o mais simples dos espectros de emissão dentre todos os elementos conhecidos. O espectro do hidrogênio sendo então bem conhecido, representava um elemento essencial na compreensão da estrutura atômica. Do ponto de vista da Mecânica Clássica, se esperava que o espectro da radiação atômica emitida fosse contínuo, i.é., que o átomo irradiasse energia de maneira contínua. Para entender o alcance desta previsão teórica, imaginemos o elétron, no átomo de hidrogênio, em órbita em torno do próton em uma trajetória circular de raio  $R$ , sob a ação de uma força (centrípeta) de natureza eletrostática. Lembrando que mesmo sob a ação de uma força centrípeta o elétron estará acelerado, então o movimento orbital do elétron é o de uma carga elétrica em movimento acelerado. A força eletrostática (Força Coulombiana ou centrípeta)  $F$ , que o elétron sofre, considerando-se o potencial de Coulomb

$$V = -\frac{kZe^2}{R} \quad (1)$$

é dada por

$$F = \frac{kZe^2}{R^2} \quad (2)$$

e é igual à força centrípeta sofrida pelo elétron em movimento orbital em torno do próton:

$$F = \frac{kZe^2}{R^2} = \frac{mv^2}{R}. \quad (3)$$

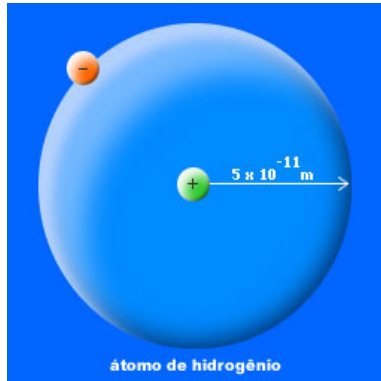


Figura 1: Modelo do átomo de Hidrogênio.

Créditos: <http://educacao.uol.com.br/>

Nestas expressões,  $k$  é a constante de Coulomb,  $k = 8,988 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$ ,  $Ze$  representa a carga do núcleo atômico, os símbolos  $e$  e  $m$  denotam respectivamente a carga e a massa do elétron,  $v$  é a sua velocidade e  $R$  o raio orbital. Segundo as previsões da física clássica (leis da eletrodinâmica clássica), o elétron deveria irradiar toda a sua energia emitindo um espectro contínuo de radiação ao espiralar para o centro do átomo. Isto porque, de acordo com as previsões clássicas, toda carga elétrica acelerada irradia uma onda eletromagnética cuja frequência,  $\nu$ , é igual ao de um movimento periódico, que no caso presente corresponde à frequência de revolução:

$$\nu = \frac{v}{2\pi R} = \frac{1}{2\pi R} \left( \frac{kZe^2}{mR} \right)^{1/2} = \frac{1}{R^{3/2}} \left( \frac{kZe^2}{4\pi^2 m} \right)^{1/2} \quad (4)$$

A energia total do elétron é a soma das suas energias cinética e potencial:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{kZe^2}{R} \quad (5)$$

A energia total do elétron, tendo em vista que

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{kZe^2}{2R} \quad (6)$$

pode ser escrita ainda na forma

$$E = \frac{kZe^2}{2R} - \frac{kZe^2}{R} \quad (7)$$

ou ainda como

$$E = -\frac{kZe^2}{2R} \quad (8)$$

As previsões clássicas, lembramos, afirmavam que o elétron perderia, em seu movimento orbital, energia por radiação, gerando um espectro contínuo, pois a energia dependeria, nesta formulação, de apenas uma variável contínua,  $R$ . Como podemos compreender o significado desta perda de energia? É importante salientar, em vista das equações acima apresentadas que ambos os termos (cinético e potencial) da equação que descreve a energia total são dependentes da mesma variável,  $R$  (a única variável presente nestas equações). E, portanto, a perda de energia em questão corresponde a variações do tipo

$$\Delta E(2,1) = E(2) - E(1) = \frac{kZe^2}{2R(1)} - \frac{kZe^2}{2R(2)} \quad (9)$$

sendo que consideramos, na obtenção desta expressão, duas orbitais distintas,  $R(1)$  e  $R(2)$ , tal que  $R(2) < R(1)$  e, portanto,  $E(2) > E(1)$ . Assim, a perda de energia por radiação implicaria em que o raio orbital se tornasse cada vez menor e a frequência de radiação cada vez maior, um processo que somente terminaria quando o elétron se chocasse com o núcleo atômico. As previsões da mecânica clássica indicavam ainda que o elétron levaria menos de 1 microssegundo para atingir o núcleo!

Os resultados experimentais corroboravam esta hipótese de radiação espectral contínua? A resposta é não.

### Séries Espectrais do Átomo de Hidrogênio: a fórmula de Rydberg

Os resultados experimentais obtidos com o hidrogênio indicavam um espectro discreto de

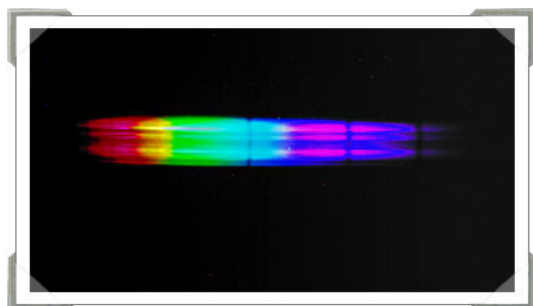


Figura 2: O espectro de emissão do átomo de Hidrogênio é descontínuo.

Créditos: <http://radio-weblogs.com/>

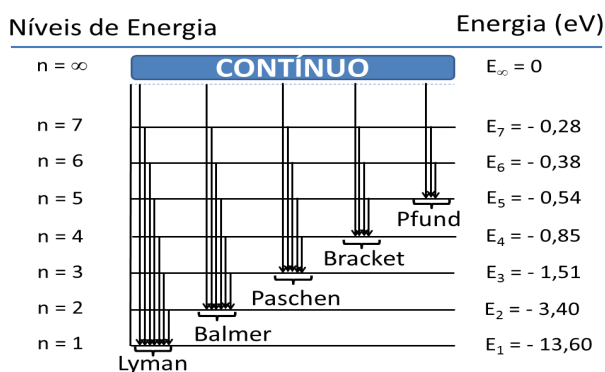


Figura 3: Series espectrais do átomo de Hidrogênio.

Créditos: <http://profs.ccems.pt/>

emissão atômica: as várias linhas de emissão nas regiões do *espectro ótico* e do *não-ótico* eram sistematicamente espaçadas em várias séries. Assim, quando excitados por um agente externo, átomos irradiam apenas em certas frequências bem definidas. Em caso contrário, átomos não irradiam. No caso do átomo de hidrogênio, todos os valores dos comprimentos de onda da radiação emitida eram descritos por uma única relação empírica, conhecida como

fórmula de Rydberg<sup>2</sup>:

$$\frac{1}{\lambda} = \mathcal{R} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (10)$$

com a constante de Rydberg dada por  $\mathcal{R} = 1,0967758 \times 10^{-3} A^{-1}$ . Esta expressão descreve, dentre outras, as seguintes séries de emissão:

- $n_f = 1, n_i = 2,3,4,\dots,\infty$ ; série de Lyman<sup>3</sup>, região ultravioleta,  $\lambda = 122nm - 91,2nm$ :

$n$	2	3	4	$\infty$
$\lambda(nm)$	122	103	97,3	91,2

- $n_f = 2, n_i = 3,4,5,\dots,\infty$ , série de Balmer<sup>4</sup>, região ótica,  $\lambda = 656nm - 365nm$ :

$n$	3	4	5	$\infty$
$\lambda(nm)$	656	486	434	365

- $n_f = 3, n_i = 4,5,6,\dots, \infty$ , série de Paschen<sup>5</sup>, região do infravermelho,  $\lambda = 1870nm - 820nm$ ;

$n$	4	5	6	$\infty$
$\lambda(nm)$	1870	1280	1090	820

- $n_f = 4, n_i = 5,6,7,\dots, \infty$ , série de Brackett<sup>6</sup>, região acima do infravermelho,  $\lambda = 4050nm - 1460nm$ :

$n$	5	6	7	$\infty$
$\lambda(nm)$	4050	2630	2170	1460

<sup>2</sup>Johannes Robert Rydberg (Suíça, 1854 - 1919), desenvolveu de maneira empírica esta fórmula em 1888.

<sup>3</sup>Theodore Lyman (EUA, 1874 - 1954) descobriu estas linhas espectrais entre 1906 e 1914.

<sup>4</sup>Johann Balmer (Suíça, 1825 - 1898) desenvolveu em 1885 uma fórmula que previa a presença destas linhas espectrais. Anders Jonas Ångström (Suíça, 1814 - 1874), Hermann Wilhelm Vogel (Alemanha, 1834 - 1898) e William Huggins (Inglaterra, 1824 - 1910) foram os primeiros a observarem estas linhas espectrais.

<sup>5</sup>Friedrich Paschen (Alemanha, 1865 - 1947) observou estas linhas espectrais em 1908.

<sup>6</sup>Frederick Sumner Brackett (EUA, 1896 - 1988) observou estas linhas espectrais em 1922.

- $n_f = 5$ ,  $n_i = 6, 7, 8, \dots, \infty$ , série de Pfund<sup>7</sup>,  
 $\lambda = 7460nm - 1460nm$ :

$n$	5	6	7	$\infty$
$\lambda(nm)$	4050	2630	2170	1460

e assim por diante.

### Postulados de Bohr

E para explicar as discrepâncias entre as predições teóricas clássicas e os correspondentes resultados experimentais, Niels Bohr introduziu em 1913 três postulados fundamentais:

1. O Postulado das Ondas ou Estados Estacionários: os elétrons se movem em um átomo somente em certas órbitas, sem irradiar energia.
2. O Postulado da Frequência: os átomos irradiam energia somente quando um elétron sofre uma transição de um estado estacionário para outro, sendo a frequência da radiação emitida,  $\nu$ , relacionada às energias das órbitas.
3. Princípio da Correspondência: no limite de grandes órbitas e altas energias, os resultados quânticos devem coincidir com os resultados clássicos.

O primeiro postulado estabelece que o átomo de hidrogênio pode existir, sem irradiar energia, em qualquer estado de um conjunto discreto de estados estacionários, com energias discretas (quantizadas). O segundo postulado estabelece que o átomo de hidrogênio pode absorver ou emitir energia somente quando passa de um estado estacionário para outro estado igualmente estacionário. Neste caso, o elétron

<sup>7</sup>August Herman Pfund (EUA, 1879 - 1949) descobriu esta série em 1924.

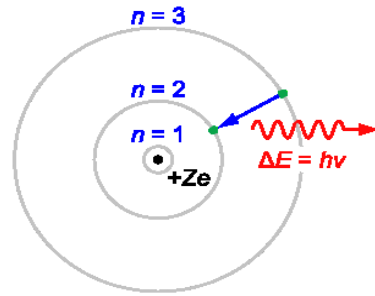


Figura 4: Modelo Quântico do átomo de Hidrogênio.

orbital absorve ou emite um quantum de radiação, ou seja, um fóton. A energia do fóton emitido é então, na teoria de Bohr, dada por

$$h\nu_{if} = E_i - E_f \quad (11)$$

onde  $E_i$  é a energia do estado inicial orbital atômico e  $E_f$  é a energia de seu estado final. Esta relação é conhecida como condição de frequência de Bohr.

Nestes postulados, três conceitos importantes são considerados: a quantização da energia das orbitais, a presença de fótons irradiados ou absorvidos e a lei de conservação de energia. E de acordo com o Princípio da Correspondência, quando os resultados em nível submicroscópico são estendidos ao mundo macroscópico, estes resultados devem estar de acordo com a física clássica. Na teoria de Bohr, aplicando-se a segunda lei de Newton ( $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ ) ao elétron orbital, considerando-se uma órbita de raio  $R$ , a lei de Coulomb e a definição de força centrípeta, obtemos, como vimos, para a energia total do elétron a expressão (8). Este é o limite formal da mecânica clássica para descrever o movimento de um elétron orbital no átomo de hidrogênio. O resultado indica que a energia total  $E$  de cada estado estacionário depende do raio da órbita, que não é, do ponto de vista clássico, quantizado, pois  $R$  representa uma variável contínua. Portanto este formalismo carece ainda de um

critério de quantização que envolva o raio orbital.

Bohr supôs, como critério de quantização<sup>8</sup>, a discretização do momentum angular  $L$  do elétron orbital (fazendo  $Z = 1$ ):

$$L = mvR = (mRke^2)^{1/2} = n\hbar \quad (12)$$

onde  $n$  representa um número inteiro e  $\hbar = h/2\pi$ .

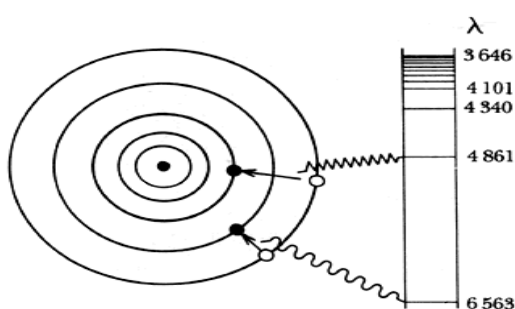


Figura 5: Duas linhas de emissão do átomo de hidrogênio.

Créditos: <https://intranet.matematicas.uady.mx/>

A combinação destas expressões resulta em uma fórmula de quantização do raio da orbital:

$$R_n = \frac{n^2 h^2}{4k\pi^2 m e^2} = n^2 a_0 \quad (13)$$

onde

$$a_0 = \frac{h^2}{4k\pi^2 m e^2} = 0,0529nm \quad (14)$$

define o raio de Bohr. Este é na realidade o raio do átomo de hidrogênio no seu estado fundamental (com  $n = 1$ ), pois este é o menor valor possível para o raio atômico. Assim, as órbitas associadas aos estados estacionários possuem raios quantizados dados por  $R_n$ .

A energia total do elétron é dada por

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m k^2 e^4}{n^2 h^2} = -\frac{E_0}{n^2} \quad (15)$$

<sup>8</sup>E portanto como um meio de introduzir a constante de Planck,  $h$ , na teoria.

onde  $E_0 = 13,6eV$ .

O modelo de Bohr foi baseado no modelo atômico de Rutherford (Ernest Rutherford (Nova Zelândia, 1871-1937), ganhador do Prêmio Nobel de Química de 1908, é conhecido como o *pai da física nuclear*). Por esta razão o modelo é também conhecido como modelo de Rutherford-Bohr. O modelo de Bohr foi muito bem sucedido em explicar a fórmula de Rydberg para as linhas do espectro de emissão do hidrogênio. A fórmula foi desenvolvida de maneira empírica, com base nos resultados experimentais e não tinha uma fundamentação teórica até o advento do modelo de Bohr. Seu modelo explicou não somente as razões para a estrutura da fórmula de Rydberg como também forneceu uma justificativa para seus resultados empíricos em termos de constantes físicas fundamentais.

### Experimento de Franck-Hertz

Em 1914, James Franck e Gustav Ludwig Hertz realizaram um experimento que demonstrou a existência de estados excitados em átomos de mercúrio, confirmando assim a teoria quântica de Niels Bohr, que previa que os elétrons ocupam, nos átomos, estados discretos (quantizados) de energia.

O aparato experimental de Franck-Hertz era constituído dos seguintes elementos (os símbolos abaixo são referidos na figura (6)):

- um tubo de vidro contendo vapor de mercúrio a baixa densidade em seu interior;
- uma fonte de emissão térmica de elétrons, o cátodo  $C$ ;
- uma região, limitada por duas grades,  $G_1$  e  $G_2$ ;
- uma placa coletora, o anodo  $A$ ;

- uma diferença de potencial,  $V_a$ , que acelera os elétrons antes de atingirem a grade  $G_1$ ; uma diferença de potencial,  $V_d$ , que desacelera os elétrons no percurso entre a grade  $G_2$  e a placa coletora  $A$ .

No experimento, as energias cinéticas dos elétrons que chegam à grade  $G_1$  e ao anodo  $A$  depois de passarem pela grade  $G_2$ , supondo que os elétrons não interagem com os átomos de mercúrio, são dadas respectivamente por

$$E_c = qV_a, \quad (16)$$

e

$$E_c^A = qV_a - qV_d. \quad (17)$$

No caso em que os elétrons que se dirigem à placa coletora percam uma quantidade de energia,  $\Delta E$ , devido a interações com os átomos de mercúrio que permeiam o invólucro de vidro, a expressão (17) toma a forma:

$$E_c^A = qV_a - qV_d - \Delta E. \quad (18)$$

Desta expressão, uma vez que energia cinética representa uma quantidade positiva definida, somente elétrons que obedecem à condição

$$qV_a \geq qV_d + \Delta E, \quad (19)$$

podem atingir a placa coletora e contribuir na composição da intensidade de corrente elétrica mensurada no experimento.

A figura (7) mostra resultados do experimento de Franck-Hertz para a intensidade da corrente elétrica,  $I$ , medida no anodo,  $A$ , em função da diferença de potencial  $V_a$ . Os resultados mostram, como esperado, que a corrente elétrica cresce com  $V_a$  pois o crescimento da energia cinética dos elétrons, que são acelerados entre o cátodo,  $C$ , e a grade  $G_1$ , acarreta aumento do número de elétrons que satisfazem a condição (19) e da probabilidade de um número maior de elétrons atingir o anodo.

Porém, para uma diferença de potencial em torno de  $4,9V$  entre o cátodo e a grade  $G_1$ , a

corrente diminui. A explicação para este resultado é dada pelo modelo atômico de Bohr pois, para esta diferença de potencial, a energia cinética dos elétrons incidentes é suficiente para arremessar elétrons de valência dos átomos de mercúrio para o primeiro nível excitado, por meio de uma colisão inelástica cada um dos elétrons incidentes com um átomo de mercúrio. Como o elétron incidente perde energia, ele não consegue mais atravessar a região entre a grade e o anodo, devido à diferença de potencial: ao perder energia o elétron incidente deixa de satisfazer a condição (19), não atinge a placa coletora, fazendo com isto que a intensidade de corrente medida decresça, atingindo um mínimo em torno de  $4,9V$ .

Se a diferença de potencial aumentar acima de  $4,9V$  elétrons incidentes adquirem novamente energia cinética suficiente para atingirem a placa coletora fazendo com que a corrente volte a aumentar. Porém, quando esta diferença de potencial atinge  $2 \times 4,9V$ , novamente, a intensidade de corrente medida atinge um segundo mínimo. Isto porque a energia cinética dos elétrons incidentes é tão alta que um mesmo elétron pode excitar dois átomos de mercúrio em colisões sequenciais. Novamente, se a diferença de potencial aumentar mais uma vez, um terceiro mínimo será encontrado e assim por diante, todos eles com o mesmo espaçamento de  $4,9V$  a demonstrar a validade do modelo de Bohr.

A experiência demonstra que não é qualquer quantidade de energia que permite a excitação dos átomos de mercúrio. Somente quando os elétrons incidente tem energia exatamente igual à energia da orbital de valência é que o processo de excitação atômica ocorre. Ou seja, a experiência demonstra a existência de níveis atômicos quantizados de energia. O átomo excitado de mercúrio decai com a emissão de um fóton de energia igual a  $4,9eV$ , cujo comprimento de onda é igual a  $253nm$ ,

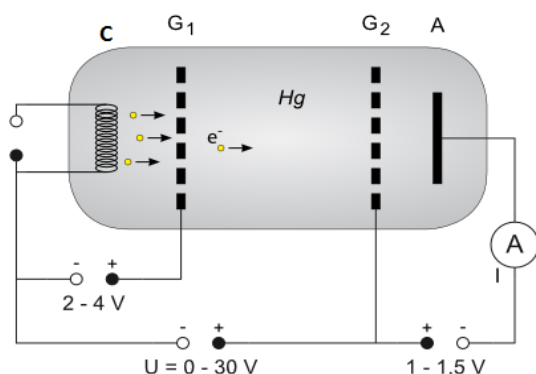


Figura 6: Experimento de Franck-Hertz.

Créditos: <https://lp.uni-goettingen.de/>

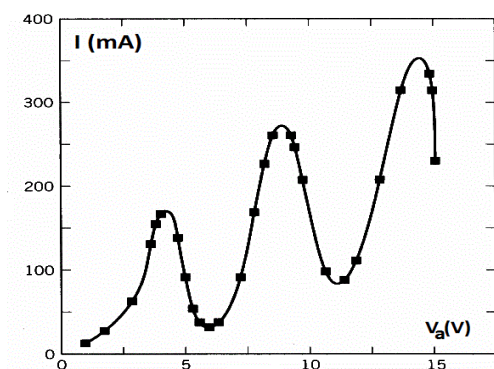


Figura 7: Experimento de Franck-Hertz.

Créditos: <http://www.ufv.br/dpf/320/Franck-Hertz.pdf/>

### Crítica ao Modelo de Bohr

O espectro do átomo de hidrogênio, na forma descrita pelo modelo de Bohr, apresenta linhas de emissões características, como vimos. Há porém, linhas de emissão em átomos de muitos elétrons que apresentam como veremos futuramente, maior grau de complexidade, como, por exemplo, no caso de transições atômicas de raios-X quando se considera a estrutura fina atômica (que está relacionada ao chamado acoplamento spin-órbita atômico). O modelo de Bohr é considerado um modelo semi-clássico do átomo, porque ele agregou ao tratamento convencional do átomo, baseado na mecânica

clássica, a condição de quantização do momentum angular orbital atômico, de maneira *ad hoc* (portanto, sem uma argumentação plausível para tal), não representando portanto, uma descrição quantum-mecânica completa. O modelo considerava ademais que a física clássica não tinha validade somente quando do *salto orbital quântico* do elétron. O modelo de Bohr é considerado hoje como uma aproximação de primeira ordem do átomo de hidrogênio, sendo deste ponto de vista, obsoleto. Sua importância histórica está porém assegurada bem como a importância de Bohr para o desenvolvimento da física atômica. Ademais, devido à sua simplicidade e correção de suas predições para estados físicos específicos, é usualmente considerado nos cursos de física como uma primeira etapa de tratamento de sistemas atômicos, seguida por outras mais complexas e acuradas.

### Problemas

- a) Usando os princípios apresentados neste texto, deduza a Fórmula de Rydberg. Mostre que a constante de Rydberg é dada por  $\mathcal{R} = E(0)/hc$ , onde  $c$  representa a velocidade da luz. Suponha, nesta análise, que a carga nuclear é *infinitamente massiva* em comparação à massa do elétron.

b) Considere agora que a massa nuclear é finita. Deduza neste caso o valor da constante de Rydberg.
- a) Deduza a expressão do momentum angular orbital quantizado de um elétron em torno de um núcleo com carga positiva  $Ze$ .

b) Deduza a expressão do raio orbital quantizado que descreve a trajetória de um elétron em torno de um núcleo de carga positiva  $Ze$  e expresse o resultado em função do raio de Bohr (o raio de Bohr é o raio da camada eletrônica mais próxima do núcleo atômico).

c) Deduza a

expressão da energia total quantizada de um elétron orbital em torno de um núcleo de carga positiva  $Ze$ . Solução: a)  $L = mvR = n\hbar$ , onde  $v = (kZe^2/mR_n)^{1/2}$ ; b)  $R_n = (n^2\hbar^2)/(mkZe^2)$ ; c)  $E_n = -(mk^2Z^2e^4)/(2n^2\hbar^2)$ .

3. a) Qual é o comprimento de onda do fóton de menor energia na série de Balmer? b) Qual é o comprimento de onda limite da série de Balmer? c) Repita o cálculo para a série de Paschen. Solução: a)  $3646\text{Å}$ ; b)  $6563\text{Å}$ .
4. a) Determine respectivamente o comprimento de onda mais longo e o comprimento de onda mais curto na série de Lyman do hidrogênio. b) Determine o comprimento de onda da segunda linha da série de Paschen para o hidrogênio. Solução: a)  $1215\text{Å}$  e  $912\text{Å}$ ; b)  $12820\text{Å}$ .
5. O mais longo comprimento de onda na série de Lyman do hidrogênio é  $1215\text{Å}$ . Determine o valor da constante de Rydberg. Solução:  $\mathcal{R} = 1,097 \times 10^{-3}\text{Å}^{-1}$ .
6. Determine a energia de ionização do hidrogênio se o mais curto comprimento de onda da série de Balmer é  $3650\text{Å}$ . Solução:  $13,6\text{eV}$ .
7. Um elétron realiza movimento circular em torno de um núcleo com carga positiva  $Ze$ . Qual é a relação entre a velocidade do elétron e o raio quantizado de sua órbita? Solução:  $v = (kZe^2/mR_n)^{1/2}$  e  $R_n = (n^2\hbar^2)/(mkZe^2)$ .
8. Calcule o raio da primeira órbita de Bohr no átomo  $^{208}\text{Pb}$  ( $Z = 82$ ) considerando um múon orbital em lugar de um elétron (átomo muônico). Determine, neste caso, a energia quantizada da primeira órbita de Bohr. Solução:  $3,12\text{fm}$  e  $-19,0\text{MeV}$ .

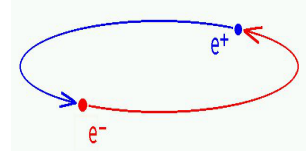


Figura 8: Modelo para o positronium.

Créditos: <http://www.cs.cdu.edu.au/>

9. Determine o valor da constante de Rydberg para o positronium<sup>9</sup>. Solução:  $\mathcal{R} = 0,5485 \times 10^{-3}\text{Å}^{-1}$ .
10. Átomos hidrogenóides são átomos formados por um núcleo e um só elétron e são assim denominados porque seu comportamento químico é similar ao do hidrogênio. Deduza a estrutura de níveis dos seguintes átomos hidrogenóides:  $H$ ,  $He^+$  e  $Li^{2+}$ .

<sup>9</sup>Positronium é um sistema quasi-estável (com tempo de vida de  $10^{-7}\text{s}$ ) formado por um elétron e sua antipartícula, o pósitron, unidos, formando um *átomo exótico*. A órbita de ambas as partículas em torno de seu centro-de-massa e os níveis energéticos são similares ao do átomo de hidrogênio (formado como vimos por um próton e um elétron). Porém, devido à diferente massa reduzida do sistema, as frequências associadas às linhas espectrais correspondem a menos da metade do que as linhas do átomo de hidrogênio.