O Átomo de BOHR

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL. Instituto de Física. Departamento de Física. Física do Século XXB (FIS1057). Prof. César Augusto Zen Vasconcellos. **Lista 1**

Tópicos. O Átomo de BOHR (NIELS HENRIK DAVID BOHR[1] (Dinamarca, 1885-1962)). O Espectro do Átomo de Hidrogênio. Teoria de NIELS BOHR do Átomo de Hidrogênio. Emissão de Radiação na Teoria Atômica de BOHR. Diagrama de Níveis de Energia. Átomos Hidrogenóides. Átomos com Múons e Píons Orbitais.

O Átomo de Bohr e o Espectro do 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 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

$$V = -\frac{kZe^2}{R} \tag{1}$$

é dada por

$$F = \frac{kZe^2}{R^2} \tag{2}$$

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

$$F = \frac{kZe^2}{R^2} = \frac{mv^2}{R}. \tag{3}$$

Nestas expressão, k é a constante de Coulomb, $k = 8,988 \times 10^9 Nm^2/C^2$, Ze representa a

[1] Bohr recebeu o Prêmio Nobel em 1922 em vista de suas contribuições fundamentais para o entendimento da estrutura atômica e da mecânica quântica.

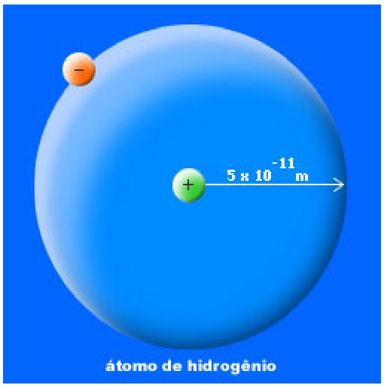

Figura 1: Modelo do átomo de Hidrogênio.

Créditos: http://educacao.uol.com.br/

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 predições 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 freqência, ν, é igual ao de um movimento periódico, que no caso presente corresponde à freqência de revolução:

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

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

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{kZe^2}{R} \tag{5}$$

A energia total do elétron, tendo em vista que

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{kZe^2}{2R} \tag{6}$$

pode ser escrita ainda na forma

$$E = \frac{kZe^2}{2R} - \frac{kZe^2}{R} \tag{7}$$

ou ainda como

$$E = -\frac{kZe^2}{2R} \tag{8}$$

As predições 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 continua, 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

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

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 predições 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.

Teoria de Bohr

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

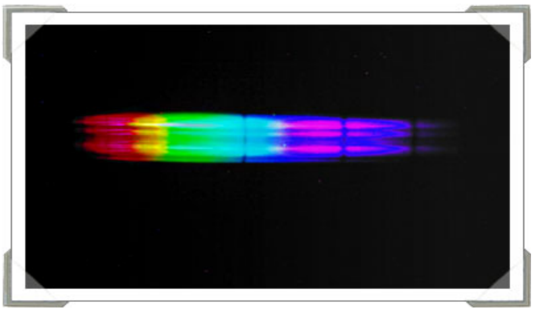

Figura 2: O espectro de emissão do átomo de Hidrogênio é descontínuo.

Créditos: http://radio-weblogs.com/

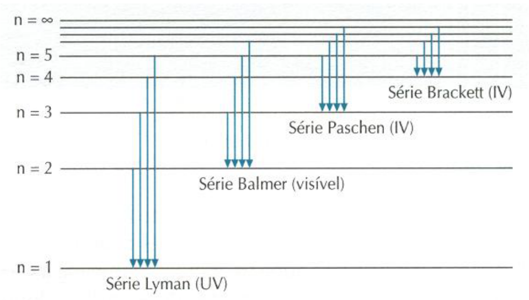

Figura 3: Series espectrais do átomo de Hidrogênio.

Créditos: http://profs.ccems.pt/

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, a fórmula de Rydberg:

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

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:

- $n_f = 1$, $n_i = 2, 3, 4...$, série de Lyman, região ultravioleta, $\lambda \sim 100nm$;
- $n_f = 2$, $n_i = 3, 4, 5...$, série de Balmer, região ótica, $\lambda \sim 500nm$;
- $n_f = 3$, $n_i = 4, 5, 6...$, série de Paschen, região do infravermelho, $\lambda \sim 1000nm$;
- $n_f = 4$, $n_i = 5, 6, 7...$, série de Brackett, região acima do infravermelho, $\lambda > 2000nm$, e assim por diante.

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 Freqüência: os átomos irradiam energia somente quando um elétron sofre uma transição de um estado estacionário para outro, sendo a freqência da radiação emitida, ν, 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.

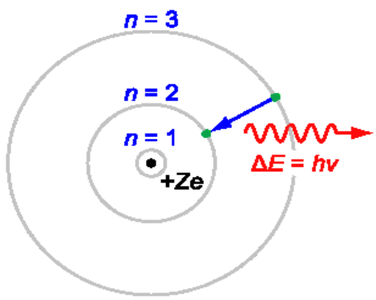

Figura 4: Modelo Quântico do átomo de Hidrogênio.

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 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

$$h\nu_{if} = E_i - E_f \tag{11}$$

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 freqüência 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[2], a discretização do momentum angular L do elétron orbital (fazendo $Z = 1$):

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

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

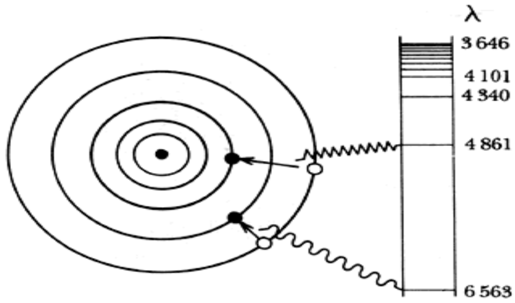

Figura 5: Duas linhas de emissão do átomo de hidrogênio.

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

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

$$R_n = \frac{n^2h^2}{4k\pi^2me^2} = n^2a_0 \tag{13}$$

onde

$$a_0 = \frac{h^2}{4k\pi^2me^2} = 0,0529nm \tag{14}$$

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

$$E_n = -\frac{2\pi^2mk^2e^4}{n^2h^2} = -\frac{E_0}{n^2} \tag{15}$$

onde $E_0 = 13,6eV$.

[2]E portanto como um meio de introduzir a constante de Planck, h, na teoria.

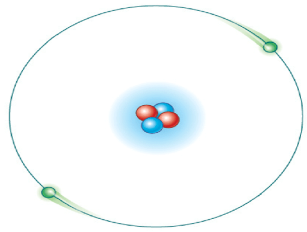

Figura 6: Modelo de Bohr para o átomo de hélio.

Créditos: http://www.kalipedia.com/

O modelo de Bohr foi baseado no modelo atômico de Rutherford (Ernest Rutherford (Nova Zelandia, 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.

Crítica ao modelo de Bohr

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. 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.

Modelo de Bohr e a Teoria de Louis de Broglie

Louis de Broglie observou que sua equação $\lambda = h/p$, leva a uma interpretação física da quantização do momentum angular do elétron orbital no átomo de hidrogênio, como postulado por Bohr. O que ele percebeu é que, dada uma onda estacionária se propagando ao longo de uma circunferência, o comprimento da órbita corresponde a um número inteiro de comprimentos de onda, ou seja $2\pi R = n\lambda$. Desta expressão e da relação de Louis de Broglie $\lambda = h/p$ resulta $2\pi R = n\lambda = nh/p = nh/mv$, onde m representa a msssa do elétron, ou então $mvR = L = nh/2\pi$. Assim, Louis de Broglie tornou possível explicarmos os estados discretos de energia postulados por Bohr em termos de ondas estacionárias bem como uma motivação para a quantização do momentum angular orbital do elétron que foi introduzida, na teoria de Bohr, de maneira *ad hoc*, portanto, sem uma explicação plausível.

Problemas

1. 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 *infinita-*

mente 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.

2. 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) $3646\AA$; b) $6563\AA$.

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) $1215\AA$ e $912\AA$; b) $12820\AA$.

5. O mais longo comprimento de onda na série de Lyman do hidrogênio é $1215\AA$. Determine o valor da constante de Rydberg. Solução: $\mathcal{R} = 1,097 \times 10^{-3}\AA^{-1}$.

6. Determine a energia de ionização do hidrogênio se o mais curto comprimento de onda da série de Balmer é $3650\AA$. Solução: $13,6eV$.

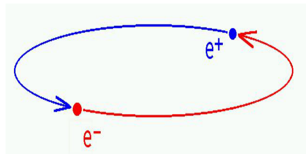

Figura 7: Modelo para o positronium.

Créditos: http://www.cs.cdu.edu.au/

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}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: $3,12fm$ e $-19,0MeV$.

9. Determine o valor da constante de Rydberg para o positronium[3]. Solução: $\mathcal{R} = 0,5485 \times 10^{-3}\AA^{-1}$.

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+}.

[3]Positronium é un sistema quasi-estável (com tempo de vida de $10^{-7}s$) formado por um elétron e sua antipartcula, o pósitron, unidos, formando un *átomo exótico*. A órbita de ambas as partíulas em torno de seu centro-de-massa e os níveis energéticos são similares ao do átomo de hidrogênio (formado como vimos por um protón e um elétron). Porém, devido à diferente massa reduzida do sistema, as freqüências associadas às lnhas espectrais correspondem a menos da metade do que as linhas do átomo de hidrogênio.