Descrição matemática do modelo de Bohr

João Pedro Siebra Vieira

Junho de 2022

1 Introdução

1.1 Desvendando a anatomia do átomo

Em 1911, o físico neozelandês Rutherford bombardeou uma fina folha de ouro com partículas alfa provenientes de um núcleo radioativo. A trajetória de algumas partículas, ao entrar em contato com o ouro, sofria um pequeno desvio, que era observado por meio de um anteparo de sulfeto de zinco, um material fosforescente. Esse desvio era explicado devido à repulsão couloumbiana entre as cargas positivas da partícula alfa e do núcleo. No entanto, algumas partículas eram rebatidas de volta para a fonte emissora. Na descrição de Rutherford, isso era equivalente a uma bala atirada contra uma folha de papel voltar ricocheteada para o canhão. Esse resultado, embora estranho, foi fundamental para a descoberta do núcleo atômico: um centro denso de carga positiva capaz de ricochetear as partículas alfa. Como o átomo é neutro, os elétrons devem estar orbitando ao redor do núcleo em uma região chamada de eletrosfera. De forma simples, portanto, Rutherford foi capaz de determinar a "anatomia"do átomo. No entanto, muitos problemas relacionados ao funcionamento desse estranho corpo ainda surgiriam.

1.2 O apocalipse que não aconteceu

Embora o modelo de Rutherford fosse atraente, ele apresentava alguns problemas graves: um elétron negativamente carregado orbitando ao redor de um núcleo positivamente carregado não poderia ser estável, uma vez que [o elétron] espiralaria em direção ao centro de sua órbita, emitindo radiação em vários comprimentos de onda antes de colidir com o núcleo. Se isso acontecesse, o Universo não existiria. No entanto, caro leitor, como você pode constatar por estar lendo este texto, isso obviamente não aconteceu.

Ademais, um professor de ensino secundário chamado Balmer estabeleceu, empiricamente, uma fórmula para determinar os comprimentos de absorção do espectro [1] do hidrogênio, fórmula essa que deixa claro o fato de que esses comprimentos de onda não podem assumir qualquer valor. Segue a equação:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Na fórmula, R_H é uma constante e n é um número natural diferente de zero. Sim, usei o pleonasmo acima porque existem pessoas que consideram o zero um número natural. Mas isso é uma polêmica de outra área...

[1] Não se desespere, meu leitor padawan! Se você não sabe o que é um espectro, te explico: imagine que Newton está vivo novamente e refez o seu famoso experimento com o prisma de vidro (que, devo dizer, rendeu uma maravilhosa capa para o disco The Dark Side of the Moon, do Pink Floyd). No entanto, imagine que ele decidiu passar a luz do sol por um recipiente de vidro com hidrogênio. Ele veria, no arco-íris, umas linhas escuras. O arco-íris com essas linhas é chamado de espectro de absorção.

Posteriormente, a equação de Balmer foi generalizada para outros átomos, os átomos hidrogenoides[2] (aqueles que possuem apenas um elétron em sua eletrosfera) e passou a ser chamada de equação de Rydberg. Veja a generalização:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot z^2 \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \text{ onde } n_1 < n_2$$

A fórmula de Balmer foi, por muito tempo, um mistério. No entanto, o físico dinamarquês Niels Henrik David Bohr desobnubilou tudo isso ao dar o primeiro passo rumo à descrição quântica do átomo, em 1913.

2 Bohr, o Vingador rejeitado

As coisas começam a ficar estranhas aqui, embora consigamos chegar a resultados importantes usando apenas um pouco de físca e matemática de nível médio. O complicado é aceitar alguns postulados que Bohr utilizou para edificar o seu modelo. Vejamos eles:

1. Os elétrons descrevem órbitas circulares ao redor do núcleo, e essas diferentes órbitas são chamadas de níveis de energia.

2. O momento angular de um elétron é quantizado, ou seja, pode assumir apenas valores múltiplos de outro valor. Veja: $mvr = n\hbar$. Aqui, $\hbar$ é $\frac{h}{2\pi}$, onde h é a *constante de Planck*, m é a massa do elétron, v é a velocidade do elétron, r é o raio da órbita e n é um número natural qualquer.Esse postulado pode parecer estranho, mas explica o porquê de os níveis de energia de um átomo serem descontínuos, ou seja, darem " saltos "ao invés de preencherem todo o espaço circundante do núcleo.

3. A força centrípeta do elétron corresponde à força de atração eletrostática entre ele o núcleo.

Quando um elétron passa de um nível eletrônico para outro, ele abosrve ou emite luz, dando origem aos espectros de absorção ou emissão, respectivamente. A partir desses postulados, pode-se demonstrar as fórmulas do modelo de Bohr. À labuta, companheiros:

2.1 As sombrias terras de Mordor

Assim como Frodo, conseguimos chegar ao destino final da nossa missão, embora não tenhamos vindo até aqui para queimar O Anel (ops!), mas sim para descrever a matemática do átomo. De acordo com o segundo postulado de Bohr, listado acima, o momento angular é quantizado. Juntando essa fómula ao princípio da dualidade de De Broglie, temos:

[2]Esse termo irá aparecer diversas vezes ao longo desse artigo, uma vez que o modelo de Bohr só é válido para o hidrogênio e átomos e hidrogenoides.

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \tag{1}$$

$$mv = \frac{h}{\lambda} \tag{2}$$

Substituindo (1) em (2), tem-se:

$$\frac{hr}{\lambda} = \frac{nh}{2\pi} \Rightarrow 2\pi \cdot r = n\lambda \tag{3}$$

A equação (3) é importante porque indica que um elétron em uma órbita de raio constante não emite radição, uma vez que um número inteiro, também constante, de comprimentos de onda deve estar presente nessa órbita. Continuando, façamos a análise da força centrípeta do elétron.

O módulo da força couloumbiana que atua sobre o elétron é $F = \frac{Kze^2}{r^2}$, onde K é a constante eletrostática do meio, z é o número atômico do átomo hidrogenoide, e é a carga do elétron e o restante segue exatamente as definições dadas anteriormente.

Ademais, a força centrípeta que atua em quanquer corpo em movimento circular é dada por $F = \frac{mv^2}{r}$. Igualando as duas fórmulas, tem-se:

$$\frac{Kze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$\Rightarrow \frac{Kze^2}{r} = mv^2$$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{Kze^2}{mr}} \tag{4}$$

Agora que temos uma belíssima fórmula para a velocidade do elétron, achemos uma para o raio da órbita do mesmo. Como $mv = p_e$, onde p_e é o *momentum* linear, podemos substituir v pela expressão (4) e obter o que segue:

$$m\sqrt{\frac{Kze^2}{mr}} = p_e \Rightarrow \frac{m^2Kze^2}{mr} = p_e^2$$

$$\Rightarrow p_e = \sqrt{\frac{Kmze^2}{r}} \tag{5}$$

Utilizando a fórmula acima e a (3), chegamos à equação que descreve o raio. Veja:

$$2\pi \cdot r = n\lambda \Rightarrow 2\pi \cdot r = \frac{hn}{p_e} \Rightarrow 4\pi^2 \cdot r^2 \frac{Kmze^2}{r} = h^2n^2$$

$$\Rightarrow r = \frac{n^2h^2}{4\pi^2 mKze^2} \tag{6}$$

Substituindo os valores acima [3] para o átomo de hidrogênio, podemos chegar ao valor do raio para o nível de energia n=1, que é conhecido como *raio de Bohr*. Adiantando, o valor é 0,059nm.

Aqui, é interessante notar que, quando n cresce, o raio aumenta em uma relação exponencial, de modo que os níveis de enegias n e n+1 vão ficando cada vez mais distantes um do outro.

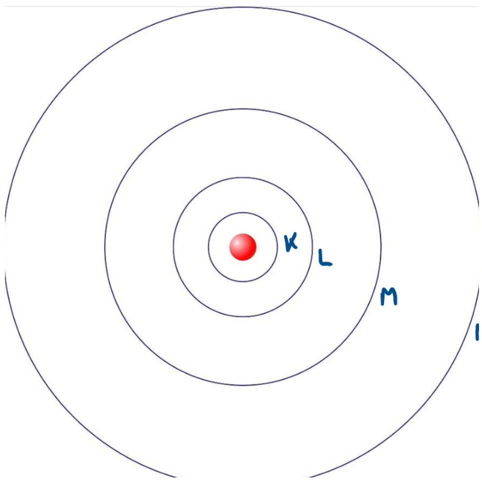

Figura 1: A figura acima ilustra o distanciamento entre os níveis n e n+1.

Agora, que parâmetros como o raio e a velocidade estão definidos, analisemos a energia do elétron. A energia mecânica de qualquer corpo é definida como a soma das energias potenciais e cinéticas. A energia potencial de um elétron é $E_p = -\frac{Kze^2}{r}$. Ademais, é fácil demonstrar que $E_p = -2E_c$, bastando substituir v pela fórmula (4) na equação da energia cinética. Deixamos essa etapa chata como exercício para o leitor. Assim, a energia total de um elétron é dada por:

$$E_m = E_p + E_c \Rightarrow E_m = -E_c \Rightarrow E_m = -\frac{mv^2}{2}$$

$$\Rightarrow E_m = -\frac{mKze^2}{mr} \Rightarrow E_m = -\frac{Kze^2}{r}$$

$$\Rightarrow E_m = -\frac{4\pi^2 mK^2 z^2 e^4}{n^2 h^2}$$

Substituindo os valores das constantes, no SI, temos que:

$$E_m = -2,16 \cdot 10^{-18} \frac{z^2}{n^2}$$

Convertendo para elétron-volt:

[3]Para o leitor difícil de ser convencido, a última seção desse artigo apresenta os valores das constantes físicas utilizadas.

$$E_m = -13,6\frac{z^2}{n^2}$$

Assim, a descrição matemática de Bohr chega ao fim. Agora, questões importantantes como *"Por que o elétron não espirala para o centro, afinal??"* podem ser respondidas. Os elétrons não espiralam para o núcleo porque assumem órbitas quantizadas e não emitem energia quando estão nessas órbitas.

Sim, embora Bohr tenha salvado o Universo do colapso, ele sequer é citado pela Marvel. A ciência deveria ser um pouco mais respeitada... Ademais, o modelo de Bohr pode explicar mais algumas outras coisas. Vejamos.

2.2 Elétrons Saltitantes

Um fato bem importante acerca de elétrons é que eles são capazes de *pular*. Quando excitados por alguma fonte de energia (fótons), eles pulam de um nível de menor energia para um de maior, e o contrário ocorre quando emitem fótons. Para calcular a energia dos fótons emitidos ou absorvidos durante esses saltos quânticos, ou transições eletrônicas, basta usar as fórmulas que determinam a energia de cada nível eletrônico. Assim, suponhamos que um elétron saia de um nível n_1 para um nível n_2, com $n_2 > n_1$. A diferença de energia entre esses dois níveis é:

$$\begin{aligned}
\Delta E &= -13,6\tfrac{z^2}{n_2^2} + 13,6\tfrac{z^2}{n_1^2} \\
&= 13,6z^2\left(\tfrac{1}{n_1^2} - \tfrac{1}{n_2^2}\right) eV \\
&= 2,16 \cdot 10^{-18} z^2 \left(\tfrac{1}{n_1^2} - \tfrac{1}{n_2^2}\right) J
\end{aligned}$$

Partindo desse resultado, pode-se facilmente demonstrar a equação de Rydberg e, consequentemente, a equação de Balmer. Vejamos:

$$\begin{cases} \Delta E &= \frac{hc}{\lambda} \\ \Delta E &= 2,16 \cdot 10^{-18} z^2 (\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}) \end{cases}$$

Perceba que a primeira equação no sistema acima é a **Lei de Planck**. Substituindo o valor de ΔE, tem-se:

$$\frac{hc}{\lambda} = 2,16 \cdot 10^{-18} \cdot z^2 (\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2})$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{2,16 \cdot 10^{-18}}{hc} \cdot z^2 (\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2})$$

Chamando $\frac{2,16 \cdot 10^{-18}}{hc}$ de R_H, temos exatamente a equação mostrada no tópico 1.2:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H z^2 \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

3 De volta ao Condado

Ao demonstrar a equação de Balmer, o modelo de Bohr mostrou-se confiável para a descrição de átomos hidrogenoides. Ademais, por introduzir na descrição do átomo conceitos como quantização de energia, tal modelo tem tremenda importância histórica. Assim, após sobreviver às sombrias terras de Sauron, nossa jornada chega ao fim. Espero que tenha aprendido muito, jovem hobbit!

4 Algumas constantes físicas

1. Constante de Planck: $h = 6,26 \cdot 10^{-34} m^2 \cdot kg/s$
2. Massa do elétron: $m = 9,11 \cdot 10^{-31} Kg$
3. Constante eletrostática do vácuo: $K = 9,00 \cdot 10^9 N \cdot m^2/C^2$
4. Velocidade da luz no vácuo: $c = 3,00 \cdot 10^8 m/s$
5. Carga elementar: $e = 1,69 \cdot 10^{-19} C$