

OS MODELOS ATÔMICOS 5

Vanderlei Salvador Bagnato
Sérgio Ricardo Muniz

- 5.1 Introdução
- 5.2 O modelo planetário induzido por Rutherford
- 5.3 O modelo atômico de Bohr
- 5.4 O modelo de Bohr justificado por ondas de matéria

5.1 Introdução

Após a descoberta dos ingredientes que fazem parte do átomo, a questão fundamental era:

Como tais constituintes estão distribuídos?

A resposta a esta questão levou à formulação de diversos modelos. Muitos deles não se sustentaram por não condizerem com a realidade da matéria. Quando se chegou a um modelo, que viria a se tornar o mais evidente, novamente se enfrentou uma questão crucial sobre a estabilidade dos elétrons coexistindo com o núcleo positivo. Esta talvez tenha sido uma das questões-chave no estudo da estrutura da matéria, pois sua resposta exigiu coragem para mudar por completo os conceitos existentes e introduzir uma nova ciência. Nesta aula, vamos passar um pouco nas questões-chave na determinação do modelo que explique a coexistência dos constituintes atômicos.

5.2 O modelo planetário induzido por Rutherford

O modelo estabelecido por Rutherford, no qual um núcleo massivo e positivo apresenta os elétrons ao seu redor, exige que tais elétrons descrevam trajetórias estáveis ao redor deste núcleo, semelhante ao modelo planetário vigente. Vamos examinar mais de perto os elétrons ao redor do núcleo em um dos átomos mais simples que é o átomo de hidrogênio. Esse átomo possui um próton em seu núcleo e um elétron girando em torno dele. Por simplicidade, a trajetória do elétron é circular de raio r e ele tem uma velocidade v . Para manter o elétron estável girando em torno do núcleo, o seguinte balanço de forças deve ser obedecido:

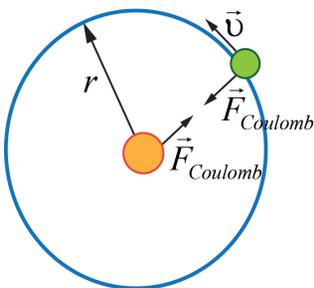


Figura 5.1: Modelo nucleado do átomo de Rutherford. Neste modelo, o elétron gira em torno do núcleo numa trajetória circular de raio r com velocidade v . Para manter a trajetória do elétron estável, a força elétrica entre próton e elétron e a força centrípeta deve ser igual.

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

5.1

ou seja, a força elétrica é igual à força centrípeta, como mostrado na **Figura 5.1**.

A velocidade do elétron está relacionada com o raio da órbita por:

$$v = \frac{e}{\sqrt{mr}} \quad 5.2$$

Da conservação de energia, a energia total E é a soma da energia cinética com a potencial elétrica, dada por:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} \quad 5.3$$

Ao combinar a equação 5.2 com a equação 5.3, a expressão para a energia total do elétron no átomo é reescrita como:

$$E = \frac{1}{2} \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r} \quad 5.4a$$

ou

$$E = -\frac{e^2}{2r} \quad 5.4b$$

Como esperado, a equação 5.4b é negativa, ou seja, a energia total do elétron é negativa, já que ele está ligado ao núcleo. Dessa forma, ele permanece localizado no espaço por todo o tempo. Caso a equação 5.4b fosse positiva, isto é, $E \geq 0$, isso significaria um elétron não ligado ao núcleo. Esta última é a situação a que normalmente nos referimos como “situação de espalhamento”, onde o elétron interage com o núcleo, mas veio do infinito e para lá deverá voltar. Utilizando-se dos resultados experimentais conhecidos, como a energia necessária para extrair o elétron do átomo de hidrogênio é de 13,6 eV, podemos escrever:

$$13,6 \times 1,6 \times 10^{-12} = \frac{(1,6 \times 10^{-19} \times 3 \times 10^9)^2}{2r} \quad 5.5$$

Multiplicamos o valor da energia E em **elétron-volts** para a energia E em **ergs**, valor da energia no sistema de unidade **CGS** (centímetro-grama-segundo). Para tanto utilizamos a seguinte relação: $1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J} = 1,603 \times 10^{-12} \text{ ergs}$. Para manter as unidades coerentes com o sistema CGS multiplicamos a carga do elétron $q_e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$ pelo valor de

2 997 924 580 statC (statcoulomb: que é a unidade física de carga elétrica no sistema CGS, $1\text{C} = 2,997924581 \times 10^9 \text{statC}$).

Da equação 5.5 determinamos o valor do raio da órbita do elétron em torno do núcleo.

$$r \cong 5,3 \times 10^{-9} \text{cm} \sim 0,53 \text{Å}$$

5.6

Apesar de utilizar relações tradicionais e verdadeiras do eletromagnetismo, esta análise clássica feita para avaliar o raio da órbita eletrônica, que evidentemente determina o raio do átomo, está completamente em **desacordo** com a teoria eletromagnética. Segundo tudo que conhecemos sobre eletromagnetismo, para que o elétron permaneça em órbita, é preciso que ele esteja acelerado (aceleração centrípeta) e um elétron acelerado deveria irradiar energia na forma de luz. Contudo, com esta radiação, o elétron em movimento circular deveria continuamente perder energia e assim, gradativamente, aproximar-se do núcleo numa trajetória espiralada, como mostrado na **Figura 5.2**, finalizando com o colapso do átomo, isto é, elétron e núcleo se aniquilando.

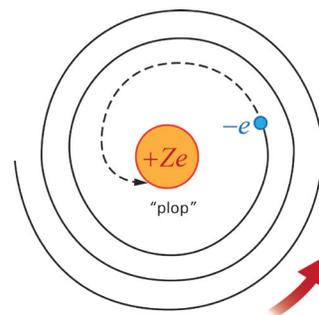


Figura 5.2: Movimento espiralado, esperado para um elétron irradiando energia.

Este colapso, evidentemente, está em contradição com as observações reais dos átomos. Afinal, a matéria existe (caso houvesse “colapso”, ela se aniquilaria). Essa contradição impôs a necessidade de modificar a forma como víamos o átomo até aquele momento; as medidas de Rutherford, portanto, não pareciam indicar que o modelo planetário fosse viável. A falha básica do modelo orbital está na estabilidade das órbitas. Além disso, ao se realizarem experimentos de descarga em gases, observava-se algo estranho, totalmente não intuitivo pelos modelos existentes até então. A solução para tal problema foi proposta inicialmente por **Niels Bohr** (1913), que foi muito bem-sucedido na explicação e predição do espectro atômico observado em vários experimentos.

Antes de discutirmos modelos mais sofisticados para o átomo, é necessário tecer alguns comentários sobre a observação da radiação emitida pelos átomos no que denominamos espectro atômico.

Uma das maneiras de determinar a composição da radiação emitida pelos átomos está mostrada na **Figura 5.3**. Aqui, uma ampola contendo um certo gás (Hidrogênio, por exemplo) é submetida a uma descarga, e a luz advinda da descarga, que certamente é originada nos átomos, é coletada e separada através da passagem por um prisma.

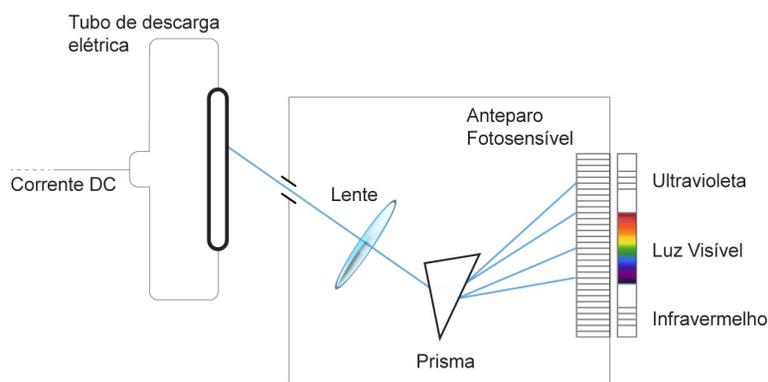


Figura 5.3: Descarga e coleta da luz de uma ampola gasosa.

A radiação dos átomos pode ser obtida através de uma descarga elétrica no gás constituído pelos átomos em estudo. Durante a descarga, ocorrem colisões dos elétrons com os átomos e, nessas colisões, há transferência de energia fazendo com que seja emitida luz pelos átomos. Esta luz emitida é uma assinatura dos níveis de energia do átomo e revela toda informação da estrutura atômica.

Esta radiação emitida pelos átomos pode ser bloqueada de modo que seja permitido que somente um fino flash, que passa por uma fenda, incida sobre um prisma (ou rede de difração). Ao passar por esse prisma, a luz é dispersada, separando as várias porções de comprimento de onda diferentes que compõem essa radiação. Dessa forma, a placa colocada para mostrar a luz dispersa também mostra a composição espectral da luz proveniente dos átomos. Se a luz emitida pelos átomos tivesse um espectro contínuo, como a luz do sol, então, veríamos na decomposição uma transição contínua de cores, como no caso de quando olhamos os raios do sol por um prisma.

Ao realizar o experimento acima, notamos que a composição espectral da luz proveniente dos átomos não é um contínuo, mas é composta de somente **alguns comprimentos de onda discretos**, cada um denominado uma “linha espectral”. Observa-se que cada tipo de átomo apresenta um conjunto de linhas espectrais que o caracterizam totalmente. Isto permite, em muitos casos, a caracterização química de elementos desconhecidos, muito importante na determinação de composições de materiais, corpos celestes e outros.

Um dos espectros mais simples e, portanto, mais utilizado para estudos é o do átomo de hidrogênio. Na **Figura 5.4** mostramos este espectro impresso num filme fotográfico. Para comparação, mostramos as linhas espectrais de um átomo mais complexo.

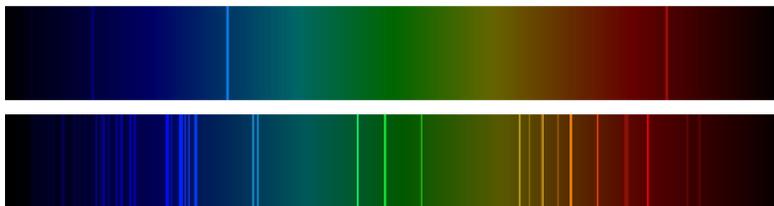


Figura 5.4: Linhas espectrais do hidrogênio e de um átomo mais complexo. O átomo mais complexo apresenta mais linhas na região visível do espectro.

Esta regularidade no espectro do hidrogênio fez com que vários autores procurassem uma fórmula empírica para descrevê-lo. Normalmente, os pesquisadores procuravam uma expressão matemática que permitisse prever a sequência de linhas observadas.

Em 1885, **Balmer** propôs a relação

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad 5.7$$

Essa relação explicava as 3 primeiras. Em 1890, Rydberg propôs a relação

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ onde } n = 3, 4, 5, \dots \quad 5.8$$

na qual R_H é a chamada **constante de Rydberg**. E, daí por diante, tivemos muitas outras sequências que acabaram por receber o nome de seus pesquisadores.

A observação do espectro atômico foi um dos mais importantes estímulos experimentais para o início das novas explicações, que não apenas justificariam os átomos, mas também permitiriam o nascimento de uma nova ciência: a mecânica quântica. A comunidade científica da época procurava um modelo que pudesse justificar todos esses resultados experimentais observados e ainda contivesse em seu corpo a precisão das linhas espectrais observadas. É nesse cenário que entra o físico Niels Bohr, propondo um modelo atômico que quebrava os conceitos até então existentes.

5.3 O modelo atômico de Bohr

Em 1913, **Niels Bohr** verificou que jamais seria possível explicar os átomos com os conceitos existentes. Era preciso introduzir novas idéias, ainda que chocantes. Dessa forma, ele desenvolveu um modelo dinâmico que preenchia os requisitos para explicar o espectro do átomo de hidrogênio, com a vantagem de ser escrito e desenvolvido de uma forma inteligível e matematicamente simples. O então chamado modelo atômico de Bohr tem seu desenvolvimento baseado em alguns postulados básicos. É importante lembrar, que por essa época, Planck, já tinha formulado a teoria da radiação e, portanto, o conceito de fóton já estava sendo estabelecido. Os postulados são:



Figura 5.5: Niels Bohr.

1. Um elétron no átomo move-se ao redor do núcleo em uma órbita circular sob influência da atração Coulombiana, obedecendo às leis clássicas da mecânica.
2. Ao contrário de ser possível ao elétron existir em qualquer trajetória ao redor do núcleo, somente serão permitidas as trajetórias cujo momento angular L é um múltiplo de $\frac{h}{2\pi} = \hbar$. O momento angular é dado por

$$L = n\hbar$$

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar \text{ onde } n = 1, 2, 3, \dots$$

5.9

3. Apesar de estarem numa órbita constantemente acelerada, elétrons nas órbitas permitidas no postulado anterior são estáveis, não irradiando energia eletromagnética e, portanto, mantendo constante a sua energia.
4. Toda vez que o elétron mudar de órbita passando de uma órbita de energia E_i para outra de energia E_f , haverá emissão de energia na forma de radiação eletromagnética, cuja frequência é:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

5.10

onde h é a constante de Planck.

Todos os postulados tentam, utilizando os conhecimentos gerados por outros modelos, justificar as observações experimentais de que existe um núcleo, que as órbitas de elétron são estáveis e que há emissão de radiação. O requisito da chamada **quantização** é introduzido no momento angular, exigindo que ele só possa assumir valores que dependem de um dado número inteiro. Como será mostrado adiante, este fato também se reflete na energia do elétron dentro do átomo.

Vamos, então, resolver (resolver os cálculos para) o átomo, utilizando os postulados acima, com o que geraremos o que será chamado de **modelo atômico de Bohr**. Se considerarmos um átomo monoelétrônico, cujo elétron tem massa m e efetua trajetórias circulares, temos que $\frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$, onde foi considerado que, sendo o núcleo muito mais massivo, tem seu movimento desprezível quando comparado com elétron.

Segundo o postulado 2, a condição de quantização de Bohr é dado por:

$$L = mvr = n\hbar \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{mr}$$

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m}{r} \frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2} \Rightarrow r = \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2}$$

ou seja,

$$v = \frac{n\hbar}{n^2\hbar^2} mZe^2 = \frac{Ze^2}{n^2\hbar^2} \quad 5.11$$

A energia total do elétron é :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2}m \frac{Z^2e^4}{n^2\hbar^2} - \frac{Ze^2}{n^2\hbar^2} mZe^2 \quad 5.12$$

$$E = -\frac{1}{2} \frac{mZ^2e^4}{n^2\hbar^2} \quad \text{onde } n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

A equação 5.12 mostra que a condição de quantização do momento angular leva diretamente a uma quantização na energia total do elétron, isto é, só algumas energias são “permitidas”. Um desenho das órbitas permitidas está mostrado na **Figura 5.6**.

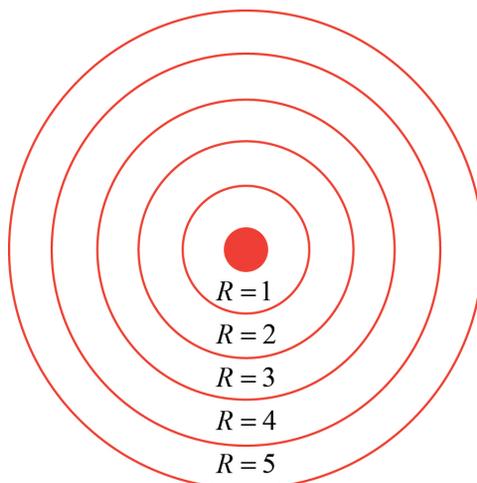


Figura 5.6: Cada número inteiro n da energia caracteriza uma órbita no átomo de Bohr.

Cada um dos valores de n representa a energia de uma possível órbita estável para o elétron, as quais normalmente são denominadas **estados do elétron**. Segundo o postulado de Bohr, a mudança de órbita exige emissão ou absorção de radiação, como indicado na **Figura 5.7**.

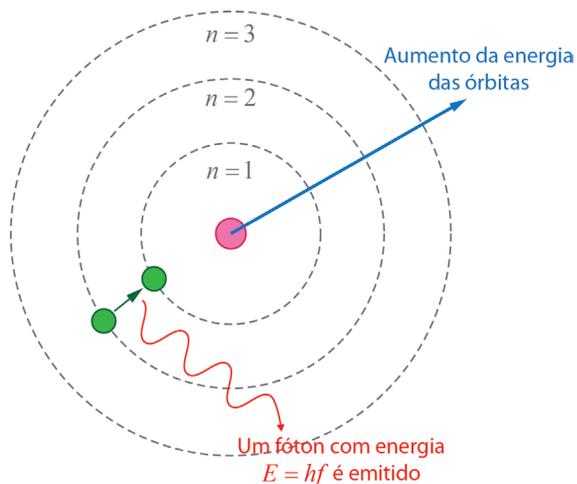


Figura 5.7: Processo de mudança de órbitas permitidas. A seta azul indica o aumento da energia das órbitas e a seta ondulada vermelha representa a emissão de um fóton com energia $E = hf$.

Representando os vários estados numa escala energética, teríamos um diagrama como mostrado na **Figura 5.8**.

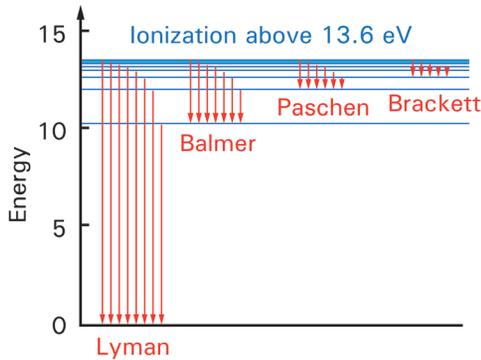


Figura 5.8: Diagrama com níveis de energia do átomo de Hidrogênio e suas possíveis mudanças de órbita, aqui representadas como mudanças de energia. Acima de 13,6 eV, o elétron é arrancado de sua órbita e o átomo de hidrogênio é ionizado.

Usando os postulados de Bohr, podemos determinar a frequência da radiação emitida quando o elétron passa de um determinado estado E_i para outro E_f , caracterizados pelos números N_i e N_f . Assim, temos que:

$$\nu = \frac{E_f - E_i}{h} = \frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left[-\frac{1}{N_f^2} + \frac{1}{N_i^2} \right] \quad 5.13$$

ou seja,

$$\nu_{i-r} = \frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left[\frac{1}{N_i^2} - \frac{1}{N_f^2} \right] \quad 5.14$$

Assim, as luzes provenientes de uma descarga eletrônica em hidrogênio correspondem aos vários agrupamentos de linhas de frequências diferentes, provenientes de emissões distintas de elétrons em diferentes estados.

- As **linhas de Lyman**, entre 1.000 – 13.000 Å, provêm de transições eletrônicas de todos os estados excitados para o estado $n = 1$.
- As **linhas de Balmer**, entre 4.000 – 7.000 Å, são transições cujo estado final é o estado $n = 2$.
- As **linhas Paschen** são transições entre 10.000 – 20.000 Å, que correspondem às transições que têm como estado final o estado $n = 3$.

Estas linhas, perfeitamente em concordância com o modelo de Bohr, foram fundamentais no desenvolvimento dos conceitos básicos da estrutura atômica.

5.4 O modelo de Bohr justificado por ondas de matéria

Simultaneamente ao desenvolvimento do modelo atômico, nascia uma nova ideia ondulatória para explicar efeitos que ocorriam com feixes de elétrons. Como sabemos, há certos efeitos que ocorrem apenas com ondas, como é o caso da difração e da interferência. Tais efeitos não ocorrem em porções de massa localizadas, caracterizando as partículas massivas da mecânica. Estas partículas obedecem muito bem às leis de Newton, e têm todo o seu comportamento descrito pelo conhecimento das grandezas velocidade, posição e aceleração. Acontece que experimentos realizados com feixes de elétrons revelaram efeitos que eram inerentes a ondas. Com isso, verificou-se a possibilidade, nunca antes imaginada, de que partículas também se comportam como ondas. Sendo também ondas, tais partículas precisariam ter um comprimento de onda e uma frequência a elas associadas. Um esquema do experimento de difração de elétrons em cristais está mostrado na **Figura 5.9**. Pode-se observar que o resultado do experimento são anéis de difração típicos de uma onda interagindo com estruturas periódicas (no caso, o próprio cristal).

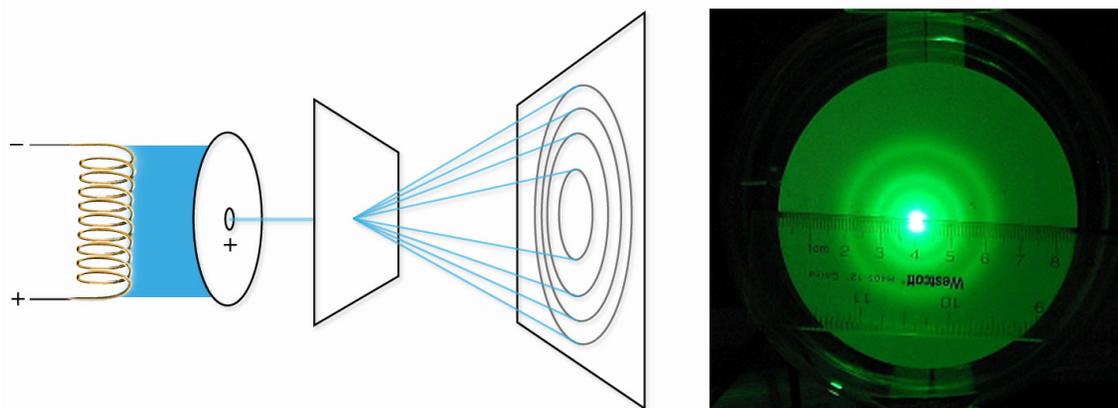


Figura 5.9: Difração de elétrons em cristais.

A caracterização de “ondas de matéria” começou a ser feita pelo cientista francês Louis de Broglie. Através de uma analogia entre luz e grandezas típicas de partículas como momento, ele chegou à expressão:

$$\lambda = \frac{h}{m\nu}$$

5.15

A equação 5.15 caracteriza o comprimento de onda associado a uma partícula de momento $m\upsilon$ (massa m e velocidade υ). Esta onda de matéria é normalmente chamada **onda de De Broglie**. A constante h é a constante de Planck ($h = 6,626068 \times 10^{-34} \text{ J s}$). Com esta expressão, e o fato de que a energia está associada com a frequência por $E = hf$, (onde E é a energia e f , a frequência), De Broglie conseguiu explicar de forma perfeita os experimentos de difração de elétrons. A conceituação de onda para a matéria foi uma grande mudança na forma de ver a matéria massiva, e constitui as bases da chamada mecânica ondulatória ou Mecânica Quântica. Em vez de analisar o comportamento da matéria através das equações de Newton, é preciso considerar a natureza ondulatória da matéria, e isso muda tudo. Devido à pequenez da constante de Planck, nem sempre é possível ver com clareza os efeitos ondulatórios dos elétrons. Como sempre acontecem com ondas, os efeitos ondulatórios são marcantes quando a onda interage com estruturas de sistemas físicos de tamanhos semelhantes ao do seu comprimento de onda. A questão que surgiu foi:

Se o elétron dentro do átomo se comportar como onda, o quanto isto explica as observações e os postulados de Bohr?

Os postulados de Bohr não dão indicativos da necessidade de ondas de matéria para serem explicados, mas são resultados claros do comportamento ondulatório do elétron, ou seja, são implicações diretas do conceito quântico ou ondulatório para o elétron. Assim, no átomo de hidrogênio, consideremos um elétron em órbita ao redor do núcleo; através do balanço de forças, o elétron apresenta uma velocidade descrita por

$$m \frac{\upsilon^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \rightarrow \upsilon = \frac{e}{\sqrt{mr}} \quad 5.16$$

Com essa velocidade, seu comprimento de onda de De Broglie é:

$$\lambda_D = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{h}{m\sqrt{\frac{e^2}{mr}}} \quad 5.17$$

Ao colocarmos os valores numéricos, teremos:

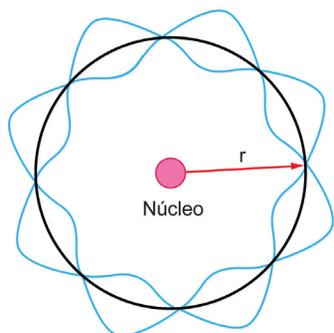
$$\lambda_D = 3,310^{-8} \text{ cm} = 33 \text{ \AA}$$

o que corresponde exatamente ao perímetro da órbita clássica do elétron,

$$2\pi r = 2\pi 0,53 \text{ \AA} = 3,3 \text{ \AA}$$

Nesse caso, a região na qual o elétron está confinado é da ordem do comprimento de onda e, portanto, o tratamento ondulatório é mais apropriado. Não é coincidência que, para o estado de mais baixa energia, tenhamos o perímetro igual a λ_D , pois este é o mínimo valor que podemos obter.

De modo geral, o perímetro é um número inteiro de λ . Não podemos ter um número fracionário de λ_D , pois nesse caso teríamos uma rápida aniquilação da onda ao considerarmos algumas voltas.



Dessa forma,

$$n\lambda_D = 2\pi r_n \quad 5.18$$

e substituindo o valor λ

$$n \frac{h}{\sqrt{\frac{e^2 m}{r}}} = 2\pi r_n \quad 5.19$$

Figura 5.10: Esquema representativo da onda de De Broglie para o elétron numa órbita de Bohr. É essencial a continuidade da onda para sua existência ao redor do núcleo.

ou seja, $L = n\hbar$, que é o postulado básico de Bohr. Uma visão desta onda de matéria na órbita de Bohr está mostrada na **Figura 5.10**.

Assim, através da mecânica ondulatória, as interpretações das órbitas estáveis de Bohr nada mais são do que a situação que representa interferência construtiva entre as várias partes da onda, que constitui o elétron considerado.

Como outras trajetórias produzirão necessariamente interferências destrutivas da onda, elas não podem existir.

O grande sucesso da teoria de Bohr para explicar o átomo de hidrogênio e a sua surpreendente concordância com os resultados experimentais criaram uma grande expectativa ao

redor dos fundamentos envolvidos no modelo. Procuravase obter resultados mais gerais, que descrevessem também outros sistemas físicos diferentes do átomo de hidrogênio.

Os primeiros passos no sentido de estabelecer uma **nova teoria**, que fosse sempre válida e que se tornasse mais evidente no micromundo, foram dados por **Wilson e Sommerfeld** em 1916, os quais anunciaram determinadas regras que permitiam a **quantização** ou a determinação dos estados energéticos de qualquer sistema físico, cujas coordenadas **fossem funções periódicas no tempo**. Após esses passos iniciais, houve uma grande avalanche de resultados, que culminaram com aquilo que seria a maior revolução na ciência: o estabelecimento da teoria quântica como explicação para os elementos que formam a base de toda a matéria do Universo.



Finalizada a leitura do texto, participe e realize as atividades on-line propostas, assista à videoaula e não deixe de explorar os recursos disponibilizados como materiais complementares.