O átomo de Bohr

Este é um trabalho de casa que deve ser entregue por escrito. Você deve seguir a sequência de questões apresentadas abaixo, mas preocupe-se em apresentar um texto contínuo, explicando cada passo de seu raciocínio **com suas próprias palavras** e interpretando os resultados. Mostre as etapas intermediárias de suas deduções algébricas. Pense cuidadosamente sobre as questões para se assegurar de uma perfeita compreensão dos conceitos físicos envolvidos. Preste atenção cuidadosa ao número de algarismos significativos apresentados em suas respostas.

Muitos raciocínios profundos e significativos são feitos em ciência através de um processo chamado de "análise dimensional" em que se examina combinações de quantidades físicas em termos das dimensões às quais estas combinações se reduzem. Combinações complexas que acabam por ter dimensão muito fundamental podem apontar (ou não) para conexões científicas subjacentes de grande profundidade. Bohr inicia seu artigo referencial de 1913 com uma análise dimensional que vai se mostrar de profundo significado.

1. Na introdução de seu artigo Bohr aponta que a combinação h^2/mke^2 tem dimensão de comprimento, e que o valor numérico desta combinação é 20 Angstroms. Confirme o acerto da afirmação de Bohr.

Note, como Bohr fez, que o valor numérico deste comprimento está próximo da ordem de grandeza de comprimentos atômicos - o que fica faltando é um fator numérico de $4\pi^2$ no denominador, como veremos mais tarde. Bohr argumenta que isto é evidência do fato de que a constante de Planck h tem provavelmente uma profunda conexão com a estrutura atômica e deveria aparecer em qualquer equação deduzida para esta estrutura.

2. Outros pesquisadores, e não apenas Bohr, também tinham notado que h sozinho tinha dimensão de momento angular. Verifique este fato. (Este fato estimulou a visão de que h poderia ter algo muito diretamente ligado ao momento angular dentro do domínio do átomo. Vamos retornar a esta possibilidade mais tarde em nossa análise)

Bohr atacou o problema de desenvolver um modelo para o átomo de hidrogênio que pudesse dar conta do espectro discreto observado (linhas brilhantes). Em primeiro lugar ele tinha que determinar os *elementos constituintes* do átomo de hidrogênio, e ele supos que este fosse composto de um proton, formando o núcleo, e de um eletron em órbita circular em torno do núcleo. Para justificar esta escolha de constituintes, Bohr citou trabalho experimental publicado por Thomson. Este havia investigado íons positivos formados em vários gases ionizados (tais como hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, dióxido de carbono, amônia, etc) e relatou ter observado átomos simplesmente ionizados e moléculas de todas as substâncias. Ele também relatou que, quando elevava o potencial acelerador do feixe catódico que ionizava os gases, começava a observar átomos duplamente ionizados de todeas as espécies, exceto do hidrogênio.

3. Interprete esta história com suas próprias palavras. Como você explica o fato de que átomos duplamente ionizados só eram produzidos quando o potencial acelerador era aumentado? Que observação sobre o hidrogênio foi particularmente sugestiva para os propósitos de Bohr, e como serviu de suporte á escolha dos constituintes feitas por ele? Que outras informações sobre os átomos também apoiam esta escolha?

Bohr então postulou que o eletron ocupava uma órbita circular em torno do núcleo formado pelo proton e não emitia radiação continuamente com frequência igual a sua frequência orbital, como previsto pela teoria eletromagnética clássica, quando em uma órbita na escala microscópica, isto é, com tamanho atômico. Ele postulou que um eletron podia ocupar uma órbita com um certo raio indefinidamente, no que chamou um "estado estacionário". Postulou ainda que o eletron ganhava ou perdia energia absorvendo ou emitindo um foton de frequência ν, e, ao fazê-lo, "saltava" de um estado estacionário (órbita de raio r_1) para outro estado estacionário (órbita de raio r_2). Já que em cada estado estacionário o sistema eletron-proton tem uma energia total bem definida $E(r)$ - vamos deduzir uma expressão para $E(r)$ em breve - Bohr estava dizendo supor que

$$h\nu = |E(r_2) - E(r_1)| \tag{1}$$

4. Explique com suas próprias palavras o conteúdo desta última equação: O que motivou sua introdução (isto é, qual sua conexão com a visão heurística de Einstein sobre o efeito fotoelétrico)? A energia emitida ou absorvida nos saltos tem alguma relação direta com a frequência orbital f do movimento orbital do eletron? Porque aparecem os sinais de módulo na equação? Em que circunstâncias seria o argumento do módulo positivo e em que circunstâncias seria negativo?

5. Agora vamos retornar à física clássica fundamental no que diz respeito a quantidades com dimensão de energia envolvidas em movimentos orbitais como o que estamos estudando. Mostre que a energia potencial U do sistema eletron-proton, quando o eletron estiver em um estado estacionário de raio r, é dada por $U = -\frac{ke^2}{r}$.

Isto envolve relembrar a definição de energia potencial, escrevê-la em termos de uma integral, escolher e justificar a escolha do nível zero de energia potencial, e calcular a integral entre limites apropriados com cuidado, tratando adequadamente os sinais algébricos envolvidos. Inclua um desenho da situação e um diagrama de forças. Explique com clareza seu raciocínio, em particular no que diz respeito à escolha do zero de energia, incluindo uma justificativa do porque não é possível escolher-se $r = 0$ como nível de referência.

Em seguida encontre uma expressão para a energia cinética K do eletron num estado estacionário de raio r em termos das mesmas quantidades que aparecem no lado direito da expressão para U.

Finalmente, mostre que a energia *total* $E(r)$ do sistema eletron-proton, relativa a um nível de referência na separação infinita entre as partículas, é dada por

$$E(r) = -\frac{1}{2}\frac{ke^2}{r}$$

Porque o lado direito desta equação é negativo? Como pode uma energia total ser negativa? Interprete esta equação: A energia total aumenta ou diminui quando o eletron é movido para uma órbita "mais alta" (maior valor de r)? Se um foton fosse emitido (de acordo com a visão de Bohr), o eletron depois da emissão estaria em uma órbita mais baixa ou mais alta? Explique seu raciocínio com cuidado e clareza.

Agora considere a fórmula de Balmer-Rydberg, que dá os comprimentos de onda observados nas várias séries em que se costuma dividir o espectro do hidrogênio atômico:

$$\frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}),$$

onde R representa o número $10.973.731, 2m^{-1}$. (O valor de R é obtido *empiricamente*, e não teoricamente, isto é, ele é calculado a partir de comprimentos de onda *medidos*. Note a precisão extraordinária alcançada pelas medidas espectroscópicas modernas!)

6. Mostre que a fórmula de Balmer pode ser reescrita na forma

$$h\nu = hcR(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2})$$

Bohr destacou que o lado direito desta equação contém dois termos separados e que, se adotarmos a ideia que gerou a equação 1, cada um destes termos pode ser interpretado como se relacionado com a energia total de um estado estacionário eletrônico.

Pondo juntos os fatos observados da existência de espectros de linhas brilhantes e os postulados do modelo que estamos desenvolvendo, chega-se à conclusão de que apenas certos estados estacionários discretos (isto é, apenas certas órbitas de raios especiais) têm existência permitida no sistema eletron-proton. Apresente com suas palavras o argumento que leva a esta conclusão. (Qual seria a natureza dos espectros observados se todos os valores de r fossem permitidos?)

Argumente que, já que apenas certos valores r_n de r são permitidos, apenas alguns níveis de energia E_n têm existência possível, e mostre que estes níveis de energia podem ser expressos em uma das duas formas seguintes:

$$E_n = -\frac{ke^2}{2r_n}$$

$$E_n = -\frac{hcR}{n^2}$$

7. Combinando estas duas equações, mostre que elas implicam em que o raio r_n de uma órbita associada ao número inteiro n seja dado por

$$r_n = n^2 \frac{ke^2}{2hcR}$$

Construa um argumento que mostre que o raio r_1 associado ao inteiro $n = 1$ tem que ser o menor valor permitido para o raio da órbita eletrônica, e que este deve ser o estado "normal", ou "não excitado", do átomo de hidrogênio, e que valores maiores de n e r_n devem ser associados com órbitas maiores e estados "excitados". O que significa o termo "excitado" neste contexto? (O estado com $n = 1$ é chamado o "estado fundamental" do átomo.)

O problema crucial agora se torna o de encontrar como a natureza seleciona ou define os valores "permitidos" de r_n dentre a infinidade de valores contínuos de r. Em seu primeiro artigo, Bohr atacou esta questão através do que ele chamou de "princípio de correspondência". Esta é a ideia que requer que qualquer comportamento numérico novo ou estranho, advindo de um novo nível de experiências, se mescle de forma suave com o que já estava previamente estabelecido como correto nos níveis mais bem explorados da experiência. (Em relatividade, por exemplo, aplicamos o princípio de correspondência quando requeremos que as transformações de Lorentz para posição, tempo e velocidade se reduzam às relações clássicas para velocidades baixas, e quando exigimos que as fórmulas para o momento e energia façam o mesmo.) Bohr aplicou o princípio de correspondência da seguinte maneira:

Sabemos que quando eletrons oscilam numa escala macroscópica (por exemplo, numa antena de rádio ou em órbitas circulares macroscópicas sob ação de campos magnéticos) eles emitem radiação eletromagnética, ondas com frequência igual à de seu movimento periódico. Bohr argumentou que, por isso, apesar de os eletrons não emitirem radiação para pequenos valores de r quando numa órbita fixa (este é o real significado de ”estado estacionário”) e apesar de que, quando transitam entre órbitas com estes raios, a frequência dos fotons emitidos ou absorvidos não terem nenhuma relação direta com as frequências de seus movimentos orbitais, no entano, quando as órbitas se tornam maiores (isto é, se aproximam da escala macroscópica), a frequência de um foton emitido entre órbitas adjacentes deveria se tornar mais e mais próxima da frequência do movimento orbital. Se este fosse o comportamento observado, o princípio de correspondência estaria sendo obedecido.

8. Retornando à dinâmica clássica do movimento circular, mostre que a frequência f_n do movimento orbital de um eletron numa órbita de raio r_0 seria dada por

$$f_n^2 = \frac{ke^2}{4\pi^2 m r_n^3}$$

onde m designa a massa do eletron.

Queremos que a frequência ν do foton emitido em um salto entre órbitas adjacentes se aproxime de f_n para valores grandes de n. Para obter este resultado, precisamos olhar o que ocorre com a frequência do foton ν quando n se torna muito grande. Desenvolva o raciocínio que se segue em detalhes:

Mostre que a frequência ν do foton emitido em saltos entre órbitas adjacentes é dada por

$$\nu = \frac{E_{n+1} - E_n}{h}$$

e que, usando a relação entre E_n e n,

$$\nu = cR[-\frac{1}{(n+1)^2} + \frac{1}{n^2}] = cR[\frac{(2n+1)}{(n+1)^2 n^2}$$

Agora, mostre que, quando n se torna muito grande,

$$\nu \to \frac{2cR}{n^3}$$

onde o símbolo $\to$ significa que o valor do lado esquerdo vai se aproximando mais e mais do valor do lado direito quando n cresce.

Use suas póprias palavras para mostrar que podemos satisfazer o princípio de correspondência se introduzirmos a exigência de que

$$f_n = \frac{2cR}{n^3} \qquad (2)$$

9. Junte agora as consequências algébricas do que foi feito até agora: Temos as equações obtidas nos itens 6, 7 e 8 e a equação 2. Use-as para encontrar as quantidades R, E_n e r_n em termos das constantes fundamentais, isto é, obtenha as seguintes relações:

$$R = \frac{2\pi^2 m(ke^2)^2}{ch^3}$$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m(ke^2)^2}{n^2 h^2}$$

$$r_n = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 mke^2}$$

Por fim, mostre que estes resultados podem ser combinados para dar a fórmula de Balmer-Rydberg para as linhas do espectro do hidrogênio atômico, só que agora a constante de Rydberg (R) já não é mais simplesmente um valor empírico, mas tem seu valor plenamente justificado por sua relação com constantes fundamentais da natureza.

Discuta e interprete estes resultados. Qual foi o mecanismo que fez com que os níveis de energia resultassem ser discretos? Calcule o tamanho do átomo de hidrogênio normal, ou não excitado. Há algum significado em considerar n igual a zero? Porque, ou porque não? Calcule a energia e o comprimento de onda do foton (de menor energia possível) cuja absorção provocaria a ionização do átomo de hidrogênio normal. Explique cuidadosamente seu raciocínio.

Represente a essência da equação que dá os raios das órbitas permitidas desenhando pelo menos 5 órbitas em escala. Dê conta das várias séries espectrais (Lyman, Balmer, etc) mostrando que transições correspondem às várias linhas observadas.

10. Relembre o significado de ”momento angular” e escreva uma expressão para o momento angular orbital do eletron L_n em termos de r_n e f_n. Faça a conexão com os resultados obtidos acima e mostre que tudo pode se reduzir à expressão

$$L_n = n\frac{h}{2\pi}$$

Dissemos anteriormente que pesquisadores haviam percebido que h tinha dimensão de momento angular e suspeitavam que pudesse ter alguma conexão com a quantidade momento angular associada à estrutura do átomo. A equação acima mostra que o momento angular é ”quantizado” na escala microscópica. O que significa isto?

Em seus artigos subsequentes, Bohr deixou de usar o princípio de correspondência para deduzir os resultados que você deduziu acima. Ele passou a usar a abordagem usada em muitos livros texto e introduziu a noção de ”quantização do momento angular” como um dos postulados básicos de seu modelo, ao invés de usar a equação 2. Obtém-se, é claro, os mesmos resultados ao final.

11. Prove que esta última afirmação está correta deduzindo outra vez as equações para R, E_n e r_n obtidas no item 9 usando a quantização de momento angular expressa pela equação do item 10 e sem usar o princípio de correspondência.