

# SOBRE A TEORIA DE BOHR

Fernando M. S. Silva Fernandes  
Laboratório de Química  
Faculdade de Ciências de Lisboa  
1294 LISBOA Codex

## 1. INTRODUÇÃO

A teoria de Bohr desempenha um papel fundamental em qualquer introdução à estrutura electrónica dos átomos. Sendo a primeira teoria do átomo com indiscutível sucesso, e não exigindo o seu estudo conhecimentos profundos de matemática e física, torna-se extremamente importante para a iniciação dos estudantes no fenómeno da quantização.

Na maioria dos livros de texto a teoria de Bohr é apresentada de forma muito semelhante e dado que discordamos, em alguns pontos, dessa quase constante metodologia parece-nos importante fazer algumas considerações sobre o assunto. O nosso objectivo é chamar a atenção para certos aspectos da teoria que, em geral, não são focados e que parecem de muito interesse sob o ponto de vista pedagógico.

Grande parte do presente trabalho foi apresentado na secção de educação do 5.º Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química (Porto, Abril de 1982) e faz parte do curriculum do curso de reciclagem "Estrutura e Reacções Químicas"<sup>(1)</sup>, para professores do 10.º, 11.º e 12.º anos, organizado pela Faculdade de Ciências de Lisboa e pela Direcção-Geral do Ensino Secundário. O referido curso foi leccionado no Laboratório de Química da Faculdade de Ciências de Lisboa (Setembro de 1981) e na Casa dos Retiros do Bom-Pastor (Abril de 1982).

## 2. A METODOLOGIA USUAL

Após uma referência aos trabalhos de Max Planck, sobre a radiação do corpo negro, e de Einstein, sobre o fenómeno fotoeléctrico, apresenta-se, normalmente, a sistematização do espectro de hidrogénio feita pela expressão empírica de Balmer:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right) \quad (1)$$

em que  $1/\lambda$  é o número de ondas da radiação emitida,  $R$  é a constante de Rydberg (cujo valor experimental é  $\approx 109678 \text{ cm}^{-1}$ ) e  $n_1$  e  $n_2$  são números inteiros positivos tal que  $n_2 > n_1$ . Se na expressão (1) fizermos  $n_1 = 1$  e  $n_2 = 2, 3, 4, \dots$ , obteremos os números de ondas das riscas da série de Lyman; se  $n_1 = 2$  e  $n_2 = 3, 4, 5, \dots$ , obteremos os números de ondas da série de Balmer e, assim, sucessivamente.

Para explicar este espectro admite-se, tal como Bohr, o modelo de Rutherford para o átomo de hidrogénio e, aplicando-se os raciocínios da electrodinâmica clássica, conclui-se que, por um lado, o espectro de hidrogénio deveria ser contínuo e, por outro lado, que o átomo perderia a sua individualidade pelo facto de o electrão colidir com o núcleo. Tais factos, como é sabido, não se verificam experimentalmente. Por tal motivo, mantendo o modelo de Rutherford, estabelecem-se os seguintes postulados:

- 1.º O electrão, no átomo, descreve órbitas circulares de energia bem definida não havendo emissão de energia enquanto o electrão se mantiver numa determinada órbita (estando estacionário). Só haverá emissão de energia quando o electrão transitar de uma órbita para outra mais interna, sendo a energia emitida dada por:

$$h\nu = E_i - E_f \quad (2)$$

onde  $E_i$  e  $E_f$  são energias do átomo no estado inicial e final, respectivamente.

- 2.º Somente são permitidas as órbitas para as quais o módulo do momento angular do electrão em relação ao núcleo seja um múltiplo inteiro de  $h/2\pi$ , isto é:

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}; \quad n = 1, 2, \dots; \quad (3)$$

$h$  — constante de Planck

Com base nestes postulados e sabendo-se que, classicamente, a energia total do átomo de hidrogénio, quando o electrão de carga  $e$  se encontra numa órbita de raio  $r$ , é dada por:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r}, \quad (4)$$

é fácil deduzir, teoricamente, a fórmula de Balmer e obter o valor teórico  $109700 \text{ cm}^{-1}$  para  $R$ , o qual concorda razoavelmente com o valor experimental. Comprova-se, deste modo, a validade dos postulados.

Se a exposição da teoria de Bohr seguir a metodologia acabada de citar a qual é, em geral, a metodologia habitual, é compreensível que os alunos que pela primeira vez

a ouçam não se sintam particularmente atraídos nem fiquem com a percepção clara do valor do trabalho de Bohr. De facto, os postulados fazem afirmações estranhas aos raciocínios clássicos e o 2.º postulado, então, tem uma forma matemática que, manifestamente, ninguém se lembrará de propôr. No entanto, o 2.º postulado é usualmente apresentado aos alunos sem sugestões da sua origem. Além disso é de salientar que Bohr, no seu trabalho original, não considerou a quantização do momento angular como ponto de partida.

De facto, Bohr, postulou a existência de estados estacionários, a emissão de energia como um efeito de transições entre esses estados e a fórmula para as energias dos estados estacionários a qual foi estabelecida com base nos resultados de Planck. A quantização do momento angular foi deduzida a partir dos postulados anteriores<sup>(2)</sup>. Posteriormente, como a quantização da energia e do momento angular são equivalentes sob o ponto de vista axiomático, a quantização do momento angular foi considerada um dos postulados da teoria.

Ninguém contesta, certamente, o valor da interpretação do fenómeno fotoeléctrico feita por Einstein, a qual lhe foi sugerida por uma conjugação entre as ideias de Planck e os resultados experimentais. No entanto, essa interpretação é extremamente simples e não parece pretencioso afirmar-se que um aluno, quando devidamente orientado, pode redescobrir a mesma interpretação. De modo semelhante, os postulados de Bohr não surgiram espontaneamente. De facto, eles podem ser sugeridos naturalmente a partir da expressão empírica de Balmer (1) como mostraremos no que se segue. Antes, porém, devemos salientar que os argumentos que vamos apresentar não constituem, necessariamente, a reprodução fiel do raciocínio de Bohr. Na realidade, ele iniciou os seus trabalhos teóricos sobre a estrutura electrónica do átomo antes de conhecer a fórmula de Balmer. O início do seu trabalho fundamentou-se, principalmente, nos resultados de Planck. No entanto, foi Bohr a declarar o seguinte: «Logo que vi a fórmula de Balmer tudo se tornou inteiramente claro para mim». Foi esta fórmula que lhe deu o fôlego final para lançar a sua teoria. Por este motivo, o tipo de argumentos que se seguem aproximam-se, em muitos aspectos, do caminho seguido por Bohr.

### 3. UMA METODOLOGIA DIFERENTE

A origem do 1.º postulado é quase evidente. De facto, ao aceitar-se o modelo de Rutherford, é forçoso admitir-se que, enquanto o electrão descreve uma órbita, não deve haver emissão de energia pois que, de contrário, o espectro de hidrogénio seria contínuo e o átomo perderia a sua individualidade. Contudo, é certo que o átomo emite energia e, a partir da fórmula de Balmer (1) conclui-se (recordaremos que  $v = c/\lambda$ ) que a energia do fóton associada a cada risca do espectro é dada por:

$$h\nu = \frac{Rhc}{n_1^2} - \frac{Rhc}{n_2^2} \quad (5)$$

onde  $c$  é a velocidade da luz,  $h$  a constante de Planck e  $\nu$  a frequência da radiação emitida.

A expressão (5) põe em evidência que a energia do fóton emitido é igual à diferença de dois termos, os quais

têm as dimensões da energia. Este pormenor, associado à ideia de que o átomo não emite energia enquanto o electrão se mantiver numa determinada órbita, sugere que a emissão se dará quando o electrão transitar de uma órbita para outra mais interna. A energia do fóton emitido será igual à diferença das energias do sistema correspondentes às órbitas envolvidas, isto é:

$$h\nu = E_i - E_f \quad (6)$$

onde  $E_i$  e  $E_f$  são, respectivamente, as energias do sistema correspondentes às órbitas inicial e final. Esta é, obviamente, a forma do 1.º postulado que referimos anteriormente.

Comparando a expressão (6) com a expressão (5) conclui-se que a energia total do sistema para uma determinada órbita deverá ser dada por:

$$E = -\frac{Rhc}{n^2} \text{ (termo de Balmer)} \quad (7)$$

Atendendo a que  $n$  é um número inteiro positivo, a expressão anterior significa que a energia do sistema não pode ser qualquer, isto é, a energia encontra-se quantizada por intermédio do número quântico  $n$ .

Referimos atrás que, classicamente, a energia total do átomo de hidrogénio, quando o electrão se encontra na órbita de raio  $r$ , é dada pela expressão (4):

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

A comparação desta expressão com o termo de Balmer (7) sugere que, se a energia do sistema não pode ser qualquer, as órbitas permitidas não podem também ser arbitrárias, devendo encontrar-se quantizadas pelo

número  $n$ . Quer dizer, deve haver uma relação entre o raio da órbita e o número quântico  $n$ .

A origem do 2.º postulado, ou seja, o postulado da quantização do momento angular não é de modo algum evidente, mas com algumas considerações e cálculos muito simples é possível entendê-la. Os argumentos que se seguem são uma adaptação dos de Max Born no seu livro “Física Atómica”<sup>3</sup>. Embora se trate de um livro cuja leitura não é muito fácil, parece-nos que apresenta algumas curiosidades com interesse pedagógico e histórico.

O modelo assumido por Bohr para o átomo de hidrogénio foi, como já referimos, o modelo de Rutherford e, classicamente, a força centrípeta de Coulomb é igual ao produto da massa do electrão pela aceleração centrípeta ( $w^2r$ ) isto é:

$$\frac{e^2}{r^2} = mw^2r \quad (8)$$

donde

$$w^2r^3 = \frac{e^2}{m} \quad (9)$$

em que  $w$  é a velocidade angular do electrão e  $m$  a sua massa.

A energia total do sistema, segundo a mecânica clássica, é:

$$E = \frac{1}{2} m w^2 r^2 - \frac{e^2}{r} \quad (10)$$

Considerando-se a expressão (8) e fazendo a substituição necessária na expressão (10) obtém-se:

$$E = -\frac{1}{2} m w^2 r^2 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r} \quad (11)$$

Elevando a expressão anterior ao cubo e a expressão (9) ao quadrado, e fazendo as respectivas substituições, elimina-se  $r$  da expressão da energia total, ou seja:

$$E^3 = -\frac{m e^4 w^2}{8} \quad (12)$$

donde se obtém a relação:

$$\frac{|E^3|}{w^2} = \frac{m e^4}{8} = \text{constante} \quad (13)$$

Pode afirmar-se, então, que segundo a mecânica clássica, a qualquer raio  $r$  ou a qualquer velocidade angular  $w$ , corresponde um valor definido de energia do sistema,  $E$ , a qual pode assumir qualquer valor pois que, sob o ponto de vista clássico, não existem quaisquer restrições para  $w$  ou  $r$ .

Sabemos, no entanto, a partir da experiência, que tal não é válido para o átomo de hidrogénio e que, para esse sistema, a energia se encontra quantizada, presumivelmente, de acordo com o termo de Balmer (7). Isto significa que a mecânica clássica não é válida para o átomo de hidrogénio sendo, por tal motivo, necessário estabelecer uma nova mecânica. Sabemos, contudo, que a mecânica clássica explica todos os processos dinâmicos macroscópicos e microscópicos incluindo, também, alguns processos ultra-microscópicos, nomeadamente o movimento dos átomos e das moléculas como um todo (teoria cinética da matéria). É perfeitamente plausível, então, que se estabeleça como princípio incondicional que a nova mecânica, actualmente designada por mecânica quântica,

deverá, em todos esses processos, chegar aos mesmos resultados que a mecânica clássica. Por outras palavras, deve exigir-se que para os casos de grandes massas e órbitas de grandes dimensões, a nova mecânica se confunde com a mecânica clássica. Este princípio, denominado como o *Princípio da Correspondência de Bohr*, é uma ideia chave que deve estar presente em qualquer generalização científica. É de notar, por exemplo, que entre a mecânica de Newton e a mecânica relativista de Einstein existe uma correspondência de tipo semelhante.

Com esta ideia vejamos se a partir da fórmula de Balmer, chegamos a resultados formalmente análogos aos da mecânica clássica para o átomo de hidrogénio. No átomo de Bohr às órbitas de grandes dimensões correspondem valores muito grandes do número quântico principal. A fórmula de Balmer (5) é facilmente modificada de modo a dar-nos a frequência de cada risca do espectro:

$$\nu = R c \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R c (n_2 - n_1) \frac{n_2 + n_1}{n_2^2 n_1^2} \quad (14)$$

Se calcularmos a frequência emitida para estados altamente excitados (órbitas de grandes dimensões) de modo que a diferença  $n_2 - n_1$  seja muito pequena em comparação com os valores  $n_2$  e  $n_1$ , a expressão anterior reduz-se aproximadamente a:

$$\nu \approx \frac{2 R c}{n_1^3} (n_2 - n_1) \quad (15)$$

A mais baixa frequência emitida obtém-se fazendo  $n_2 - n_1 = 1$ , isto é:

$$\nu_1 \approx \frac{2 R c}{n^3} \quad n \equiv n_1 \quad (16)$$

A correspondente frequência angular será:

$$w \approx \frac{4 \pi R c}{n^3} \quad (17)$$

A partir desta expressão obtém-se:

$$n^2 \approx \left( \frac{4 \pi R c}{w} \right)^{2/3} \quad (18)$$

Se substituirmos o valor de  $n^2$  dado por esta expressão na fórmula da energia (termo de Balmer) obtemos:

$$E = -R h c \left( \frac{w}{4 \pi R c} \right)^{2/3} = - \left( \frac{R h^3 c w^2}{16 \pi^2} \right)^{1/3} \quad (19)$$

Elevando ambos os membros ao cubo e tomando o módulo:

$$\frac{|E^3|}{w^2} \approx \frac{R h^3 c}{16 \pi^2} = \text{constante} \quad (20)$$

A expressão anterior, a qual é somente válida para órbitas de grandes dimensões, é formalmente análoga à expressão clássica (13) de acordo com o princípio da correspondência de Bohr. Daqui que seja plausível a sua identificação:

$$\frac{R h^3 c}{16 \pi^2} = \frac{m e^4}{8} \quad (21)$$

Consequentemente, obtemos para a constante de Rydberg o valor:

$$R = \frac{2 \pi^2 m e^4}{h^3 c} \quad (22)$$

Com fundamento no princípio da correspondência e supondo que os valores da energia são realmente dados pelo termo de Balmer, obtém-se um valor teórico para a constante de Rydberg e, por tal motivo, um meio possível de comprovar a teoria.

Substituindo na expressão (22) os valores das constantes que nela figuram, os quais são bem conhecidos, obtém-se  $R \approx 109700 \text{ cm}^{-1}$  valor que concorda, dentro



dos erros experimentais, com o valor obtido da experiência. Justifica-se, assim, que os valores da energia para o átomo de hidrogénio sejam dados pelo termo de Balmer e ficamos a conhecer o valor da constante de Rydberg em termos de constantes físicas fundamentais.

Da expressão (11) deduz-se que:

$$r = -\frac{e^2}{2E} = \frac{e^2 n^2}{2h c R} \quad (23)$$

se substituirmos no 2.º membro o valor  $E$  dado pelo termo de Balmer (7). Da expressão (11) obtém-se, também,

$$w^2 = -\frac{2E}{m r^2} \quad (24)$$

Fazendo as substituições de  $E$ ,  $r^2$  e tomando a raiz quadrada, resulta que:

$$w = \frac{(2h c R)^{3/2}}{m^{1/2} e^2 n^3} \quad (25)$$

Seguidamente, podemos calcular o módulo do momento angular do electrão em relação ao núcleo a partir das expressões (25), (23) e (22). Assim:

$$p = mvr = mwr^2 = n \frac{h}{2\pi} \quad (26)$$

Vemos, pois, que no modelo de Bohr para o átomo de hidrogénio, o módulo do momento angular é, de facto, um múltiplo de  $h/2\pi$ . Esta relação, designada por condição quântica para o momento angular, é, por conseguinte, um resultado deduzido e que não é de modo algum evidente.

Inversamente, podemos partir da expressão (26) e, seguindo um caminho em sentido oposto utilizando as expressões clássicas, deduzir o termo de Balmer. É este o caminho seguido, usualmente, na exposição da teoria de Bohr. Assim, das expressões (11) e (9) respectivamente:

$$E = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{e^2 r^3}{2r^4} \quad \text{e} \quad w^2 r^3 = \frac{e^2}{m}$$

deduz-se que

$$E = -\frac{e^4}{2m r^4 w^2} = -\frac{e^4 m}{2p^2} \quad (27)$$

onde  $p = m r^2 w$  é o módulo do momento angular. Substituindo  $p$  pelo seu valor quantizado obtém-se:

$$E = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2 n^2} = -\frac{R h c}{n^2} \quad (28)$$

que não é mais do que o termo de Balmer (7).

As considerações anteriores mostram, naturalmente, que a condição de quantização do momento angular deve ser a característica essencial da nova mecânica. Esta razão de se ter considerado essa condição como universalmente válida passando a constituir, por esse motivo, um postulado da nova mecânica.

#### 4. CONCLUSÕES

Parece-nos importante que os aspectos acabados de referir sejam apresentados aos estudantes numa introdução à estrutura electrónica dos átomos. É evidente que as expressões e deduções envolvidas, embora sejam matematicamente muito simples, se tornam maçadoras para serem apresentadas numa aula teórica. Por tal motivo, parece-nos que estes assuntos poderão ser explorados numa aula teórico-prática pressupondo um contacto prévio dos estudantes com alguns textos nomeadamente os trabalhos originais de Bohr<sup>(2)</sup>. Julgamos que, deste modo, os postulados de Bohr serão compreendidos numa perspectiva mais profunda, ao mesmo tempo que se exemplifica um tipo de raciocínio muito frequente, particularmente, em mecânica quântica. Por outro lado, torna-se fácil entender a razão porque a teoria de Bohr teve de ser modificada com a introdução do conceito ondulatório da matéria. De facto, mostrámos que a condição quântica para o momento angular foi deduzida para o átomo de hidrogénio pela identificação de expressões da mecânica clássica com expressões estranhas a essa mesma mecânica. Ora isso só é válido, de acordo com o princípio da correspondência, no limite de grandes massas e de órbitas de grandes dimensões. Não é de admirar, portanto, que a generalização dessa condição a outros átomos, e a condições não limites, conduza a resultados que não estejam de acordo com a experiência.

Finalmente, uma exposição deste tipo, temperada com alguns detalhes interessantes sobre a vida científica de Bohr<sup>(2, 4, 5)</sup>, não diminuirá o valor do seu trabalho, mas, pelo contrário, mostrará aos estudantes quão acesa e estimulante foi a luta de Niels Bohr no início dum século tão conturbado pelo desmoronar de ideias que se consideravam universalmente válidas.

#### 5. NOTA FINAL

Após a conclusão do presente trabalho para ser enviado ao Boletim tomámos conhecimento do artigo instituído "Presenting the Bohr Atom" publicado no número de Maio de 1982 (pág. 372) do Journal of Chemical Education, cuja leitura recomendamos. Na verdade, embora as deduções apresentadas sejam diferentes das deste trabalho, os pontos de vista do autor são muito semelhantes aos nossos e pensamos que ambos os trabalhos se complementam.

#### BIBLIOGRAFIA

1. "Estrutura Electrónica dos Átomos", Fernando M.S. Silva Fernandes; 1.ª Parte do Curso de Reciclagem "Estrutura e Reacções Químicas", a ser publicado pela Sociedade Portuguesa de Química.
2. "Sobre a Constituição de Átomos e Moléculas", Niels Bohr; Textos Fundamentais de Física Moderna, Fundação Calouste Gulbenkian, 1979.
3. "Física Atómica", Max Born; Edição da Fundação Calouste Gulbenkian, 1966.
4. "Niels Bohr", R. Moore; Alfred A. Knopf, New York, 1966.
5. "Niels Bohr: His Life and Work as Seen by His Friends and Colleagues", S. Rozental; John Wiley, New York, 1967.