

39.8 O Modelo de Bohr para o Átomo de Hidrogênio

Agora vamos passar das armadilhas artificiais e fictícias para uma armadilha natural e real: o átomo de hidrogênio (formado por um próton e um elétron). Como a massa do próton é muito maior que a massa do elétron, podemos supor que o próton ocupa uma posição fixa e o elétron não pode afastar muito de suas vizinhanças. Em outras palavras, o próton cria uma armadilha para o elétron, mantendo-o confinado.

Como vimos nas seções anteriores deste capítulo, qualquer confinamento faz com que a energia E do elétron seja quantizada, o que também se aplica a qualquer variação ΔE de energia.

No início da década de 1900, os cientistas sabiam que um átomo de hidrogênio não emite e absorve todos os comprimentos de onda da luz visível. Na verdade, o átomo de hidrogênio emite e absorve apenas quatro comprimentos de onda na faixa da luz visível. Depois de várias tentativas, Johann Balmer chegou a uma expressão matemática que permitia calcular esses quatro comprimento de onda:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ para } n = 3, 4, 5 \text{ e } 6, \quad (39.23)$$

onde R é uma constante.



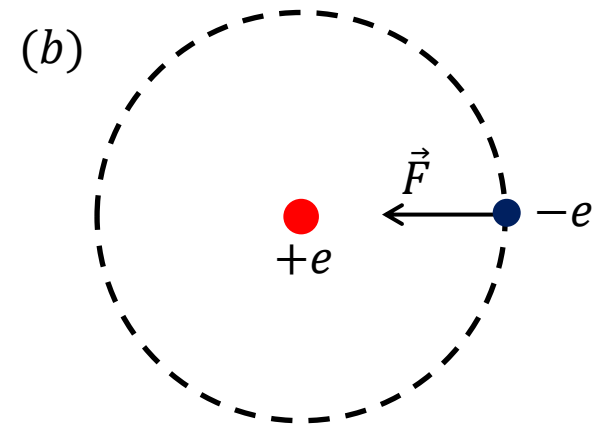
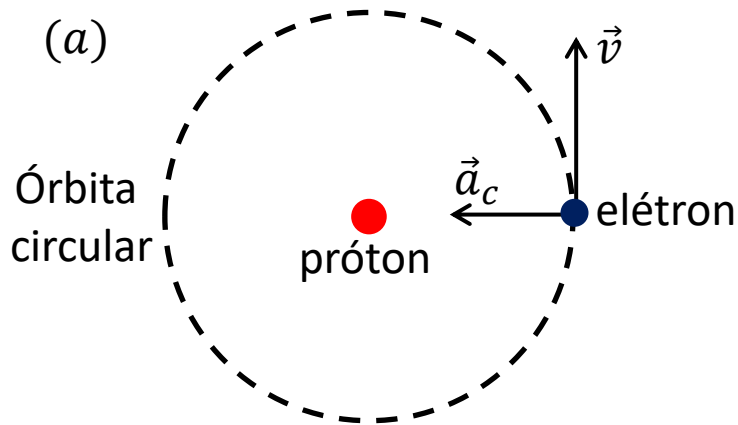
Por que um átomo de hidrogênio não emite e absorve luz com qualquer comprimento de onda?

Em 1913, Niels Bohr formulou uma explicação para a fórmula obtida por Balmer usando hipóteses ousadas: **(1)** o elétron de um átomo de hidrogênio gira em torno do próton em uma órbita circular, do mesmo modo como os planetas giram em torno do Sol. **(2)** O módulo do momento angular \vec{L} do elétron pode assumir apenas os valores

$$L = n\hbar, \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (39.24)$$

→ **Quantização do momento angular do elétron**

onde \hbar (h cortado) é igual a $h/2\pi$ e n é um número quântico.



(a) Órbita circular de um elétron no modelo de Bohr do átomo de hidrogênio. (b) A força eletrostática \vec{F} que atua sobre o elétron aponta na direção do próton (força de atração).

O Raio Orbital é Quantizado no Modelo de Bohr

Vamos examinar o movimento orbital do elétron no modelo de Bohr. A força que mantém o elétron em uma órbita de raio r é a força eletrostática:

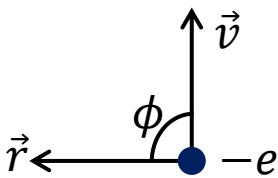
$$\vec{F} = k \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(+e)(-e)}{r^2} \hat{r} \quad \longrightarrow \quad \vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} (-\hat{r})$$

Assim, de acordo com a **Segunda Lei de Newton**,

$$\vec{F} = m\vec{a}_c \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} (-\hat{r}) = m \frac{v^2}{r} (-\hat{r}) \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = mv^2. \quad (39.25)$$

Agora vamos introduzir a **quantização do momento angular** do elétron usando a hipótese expressa pela equação (39.24) [$L = n\hbar$, para $n = 1, 2, 3, \dots$].

Como $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m\vec{v} \Rightarrow L = rmv \sin \phi = rmv \sin 90^\circ = rmv$



$$\longrightarrow \quad rmv = n\hbar \quad \longrightarrow \quad v = \frac{n\hbar}{mr}. \quad (39.26)$$

Substituindo a equação (39.26) na equação (39.25), ficamos com

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = m \left(\frac{n\hbar}{mr} \right)^2 \quad \longrightarrow \quad r \equiv r_n = \underbrace{\left(\frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \right)}_{= a \approx 5,292 \times 10^{-11} m} n^2, \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (39.27)$$

(raio de Bohr)

A Energia Orbital é Quantizada

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ para } n = 3, 4, 5 \text{ e } 6.$$

A energia total do átomo de hidrogênio é

$$E = K + U = \frac{1}{2}mv^2 + \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right). \quad (39.30)$$

Substituindo $v = \frac{n\hbar}{mr}$ e $r = \left(\frac{h^2\epsilon_0}{\pi me^2} \right) n^2$ na equação (39.30), ficamos com

$$E = E_n = - \left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \right) \frac{1}{n^2} \longrightarrow E_n = - \frac{13,61 \text{ eV}}{n^2}, \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (39.33)$$

Mudanças de Energia

Quando um átomo de hidrogênio emite ou absorve luz sua energia muda. A emissão ou absorção de um fóton de frequência f só é possível se

$$hf = \Delta E = E_{\text{alta}} - E_{\text{baixa}}. \quad (39.34)$$

Substituindo $f = \frac{c}{\lambda}$, $E_{\text{alta}} = - \left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \right) \frac{1}{n_{\text{alto}}^2}$ e $E_{\text{baixa}} = - \left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \right) \frac{1}{n_{\text{baixo}}^2}$ na equação acima,

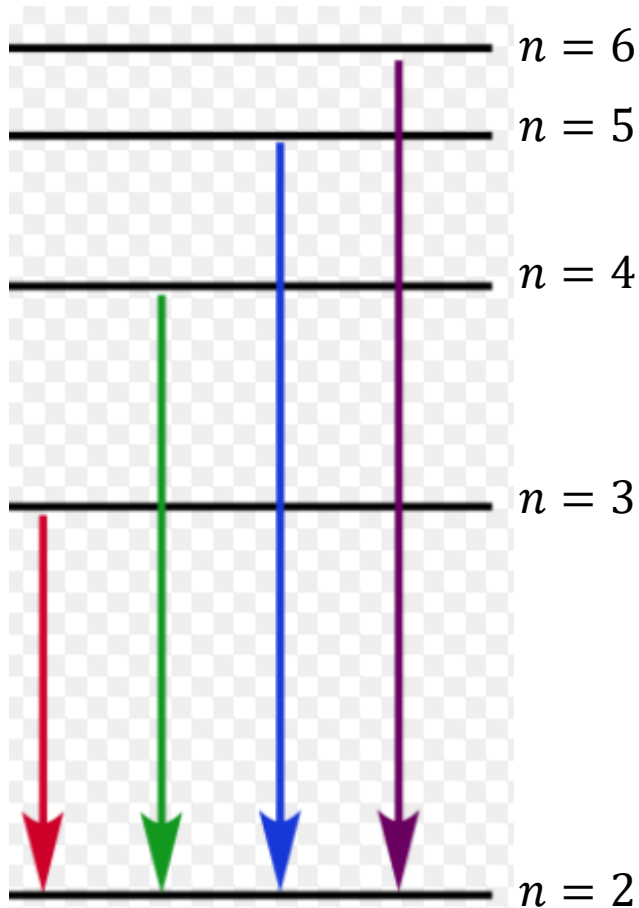
$$\longrightarrow \frac{hc}{\lambda} = - \left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \right) \left(\frac{1}{n_{\text{alto}}^2} - \frac{1}{n_{\text{baixo}}^2} \right) \longrightarrow \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_{\text{baixo}}^2} - \frac{1}{n_{\text{alto}}^2} \right), \quad (39.36)$$

onde

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1,097373 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (39.37)$$

**constante
de Rydberg**

Espectro de Emissão



$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ para } n = 3, 4, 5 \text{ e } 6.$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2} \right) \longrightarrow \lambda = 410 \text{ nm.}$$

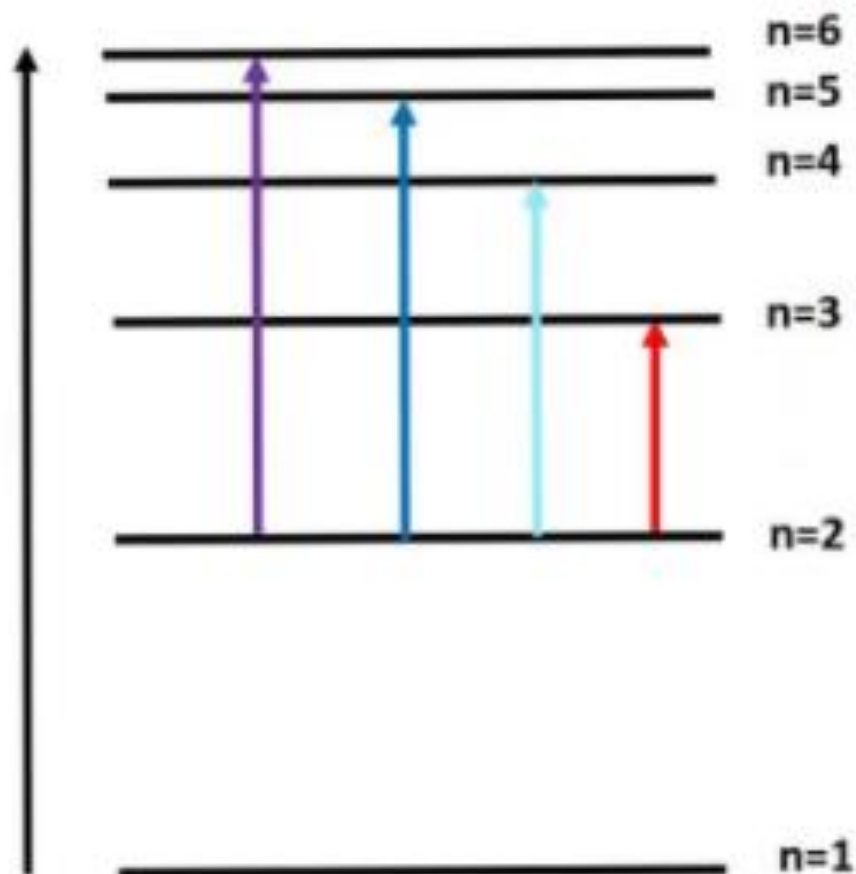
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) \longrightarrow \lambda = 434 \text{ nm.}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) \longrightarrow \lambda = 486 \text{ nm.}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \longrightarrow \lambda = 656 \text{ nm.}$$

$$E_n = -\frac{13,61 \text{ eV}}{n^2}, \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots (39.33)$$

Espectro de Absorção

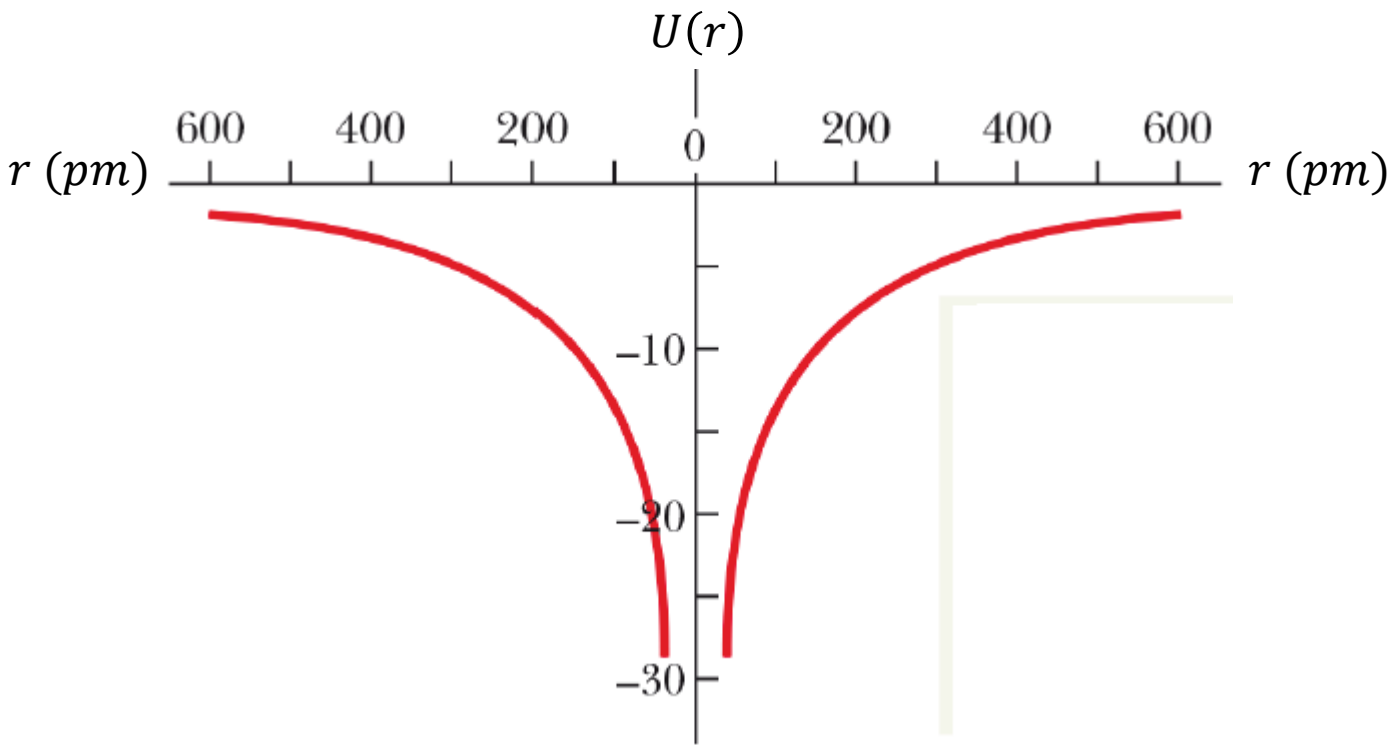


39.9 A Equação de Schrödinger e o Átomo de Hidrogênio

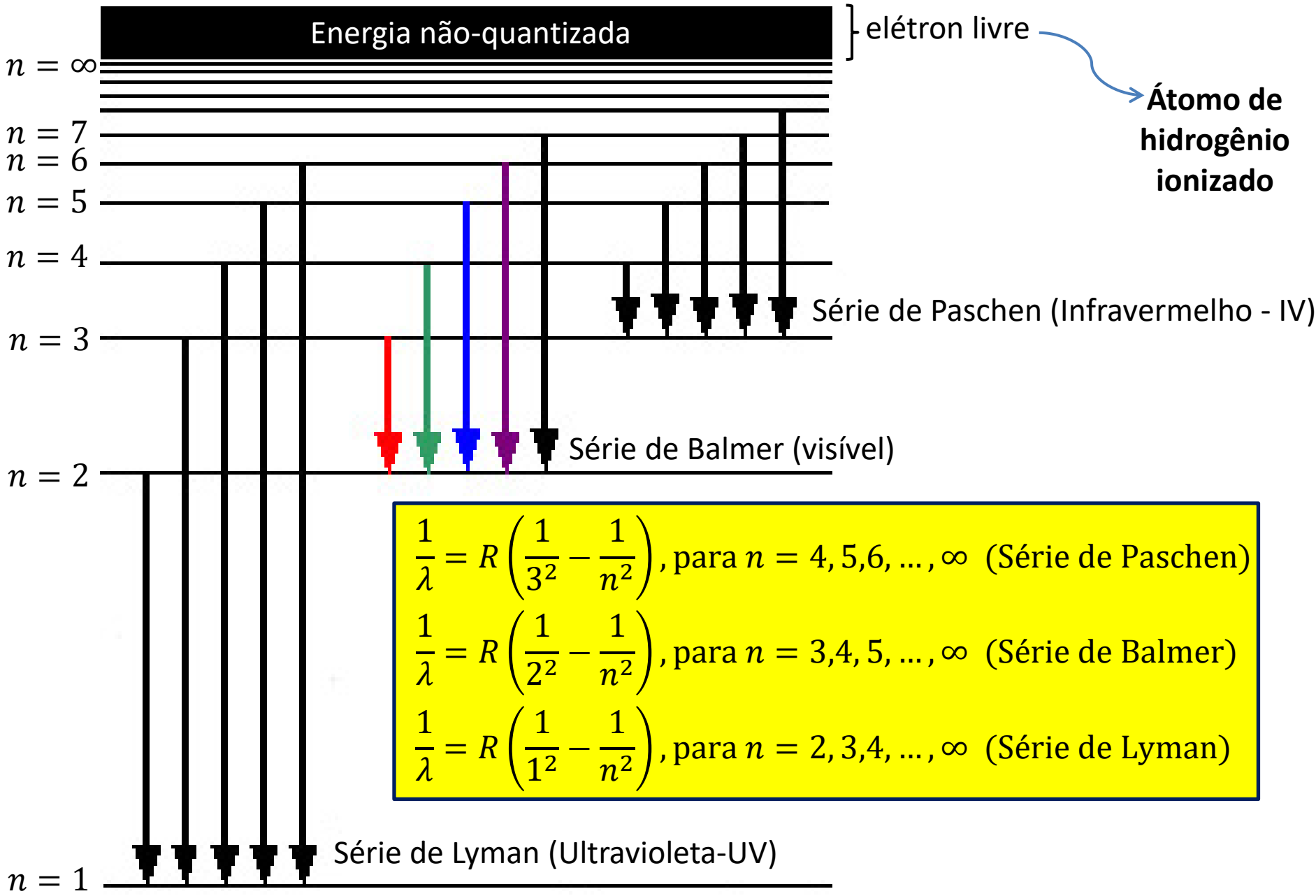
O poço de potencial de um átomo de hidrogênio está associado a uma energia potencial eletrostática dada por

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (39.38)$$

O gráfico abaixo representa a energia potencial $U(r)$ de um átomo de hidrogênio em função da distância r entre o elétron e o próton. O gráfico é reproduzido duas vezes (à esquerda e à direita) para dar ideia da armadilha tridimensional com simetria esférica na qual o elétron está confinado.



Níveis de Energia e o Espectro do Átomo de Hidrogênio



Números Quânticos do Átomo de Hidrogênio

Embora as energias dos estados do átomo de hidrogênio possam ser descritas por um único número quântico n , as funções de onda que descrevem esses estados exigem três números quânticos, correspondentes às três nas quais um elétron pode se mover. Os três números quânticos, juntamente com seus nomes e os valores que podem assumir, aparecem na tabela abaixo.

Símbolo	Nome	Valores Permitidos
n	Número quântico principal	1, 2, 3, ...
l	Número quântico orbital	0, 1, 2 ..., $n - 1$
m_l	Número quântico magnético orbital	$-l, -l + 1, ..., +l - 1, +l$

Cada conjunto de números quânticos (n, l, m_l) identifica a função de onda $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ de um estado quântico. O número n é usado para calcular a energia do estado (E_n). O número l é uma medida do módulo do momento angular orbital associado ao estado quântico. O número quântico m_l está relacionado à orientação espacial do vetor momento angular.

As restrições quanto aos valores dos números quânticos do átomo de hidrogênio, que aparecem na tabela acima, não são arbitrárias, mas surgem naturalmente da solução da equação de Schrödinger. Observe que no estado fundamental ($n = 1$) as restrições são tais que $l = 0$ e $m_l = 0$. Isso significa que o momento angular do átomo de hidrogênio no estado fundamental é zero, o que não é previsto pela equação (39.24) do modelo de Bohr.

A Função de Onda do Estado Fundamental do Átomo de Hidrogênio

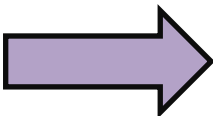
A função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio ($n = 1, 0, m_l = 0$), $\psi_{100}(r)$, obtida resolvendo a equação de Schrödinger tridimensional e normalizando o resultado, é a seguinte:

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad (39.39)$$

onde $a(\approx 5,292 \times 10^{-11}m)$ é o raio de Bohr.

➤ A função $\psi_{100}^2(r)$ representa a probabilidade por unidade de volume de que o elétron seja detectado na posição r .

Dessa forma, $\psi_{100}^2(r)dV$ representa a probabilidade de que o elétron seja detectado em um elemento de volume $dV = (4\pi r^2 dr)$ situado a uma distância r do centro do átomo.


$$\psi_{100}^2(r)dV = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}} e^{-r/a} \right)^2 4\pi r^2 dr = \left[\frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a} \right] dr. \quad (39.42)$$

A **densidade de probabilidade radial** para o estado fundamental do átomo de hidrogênio, $P_{100}(r)$, é definida como sendo o termo entre colchetes da equação acima:

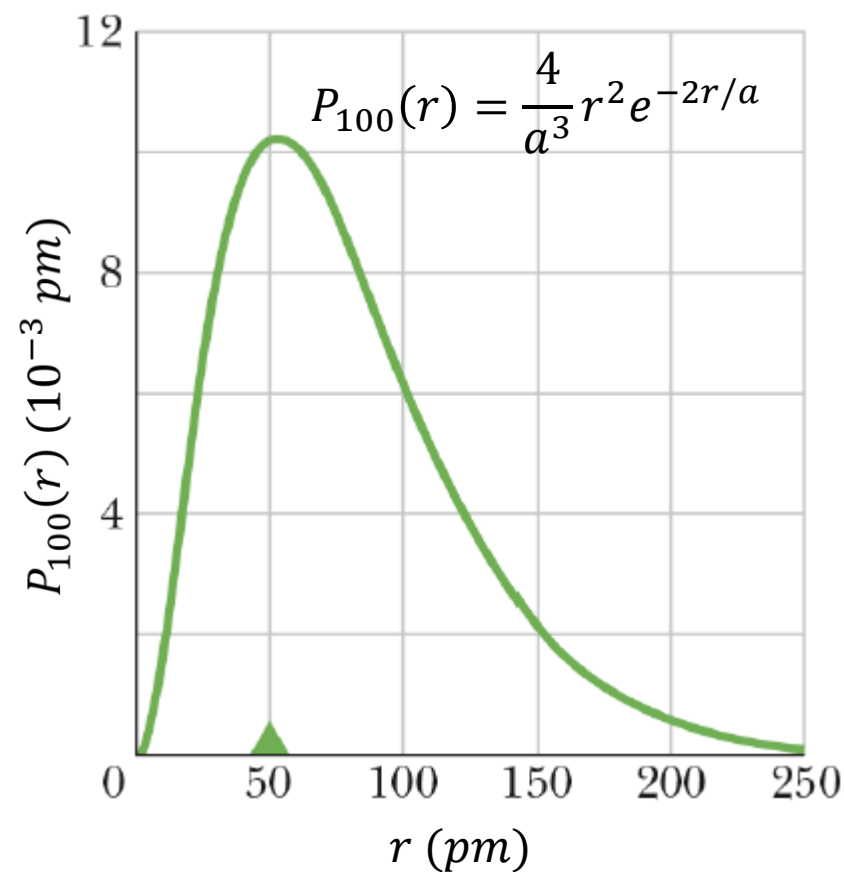
$$P_{100}(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}. \quad (39.44)$$

A figura ao lado mostra o gráfico de $P_{100}(r)$ em função de r .

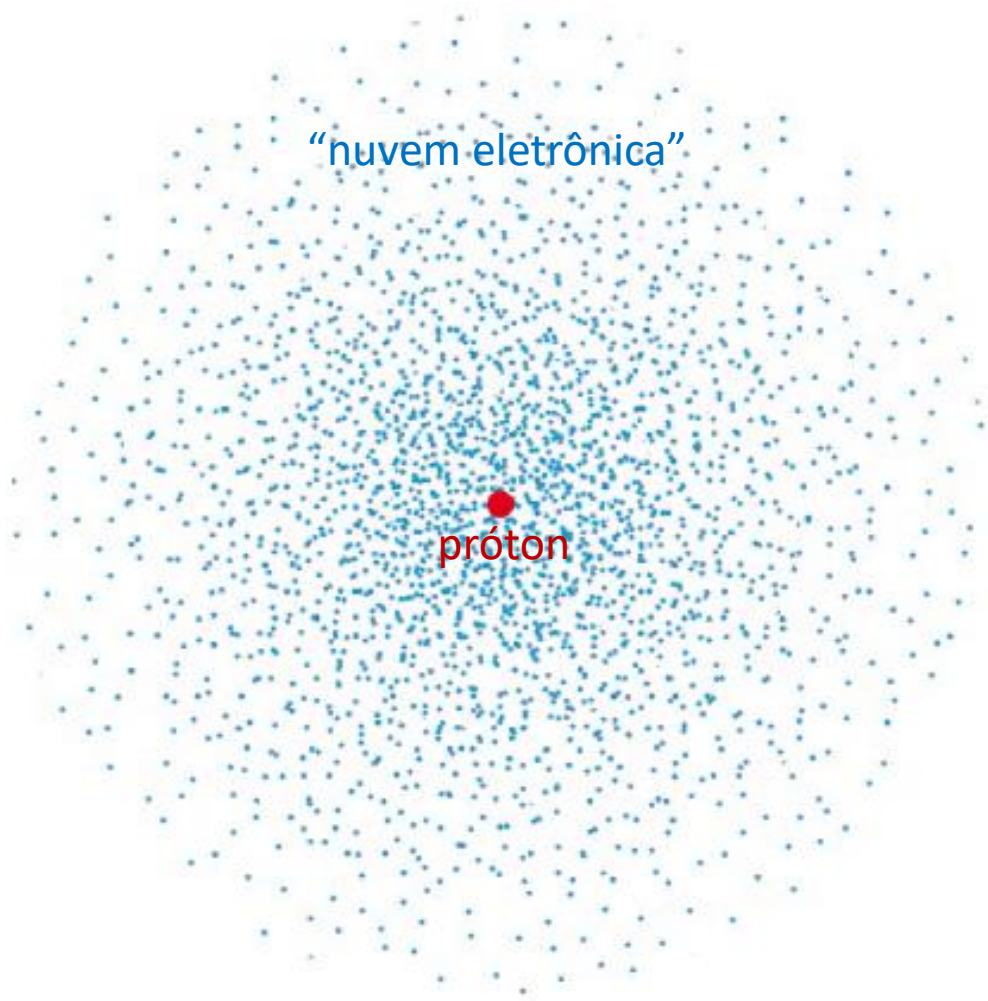
A área sob a curva é unitária, ou seja,

$$\int_0^{\infty} P_{100}(r) dr = 1. \quad (39.45)$$

Essa equação estabelece que em um átomo de hidrogênio o elétron deve ser encontrado em algum lugar do espaço em torno do núcleo.



- ❖ O pequeno triângulo verde no eixo horizontal do gráfico acima está situado a uma distância da origem igual ao raio de Bohr. De acordo com a figura, no estado fundamental do átomo de hidrogênio a localização mais provável do elétron é a uma distância do centro do átomo igual ao raio de Bohr.



$$\psi_{100}^2(r) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}$$

Gráfico de pontos mostrando a densidade de probabilidade $\psi_{100}^2(r)$ [e não a densidade de probabilidade radial $P_{100}(r)$] para o estado fundamental do átomo de hidrogênio. O número de pontos diminui exponencialmente com a distância do próton, que está representado pelo pequeno círculo vermelho no centro da figura. Gráficos como este são usados para representar a “nuvem eletrônica” que envolve o núcleo do átomo.

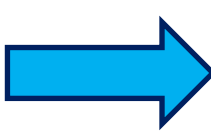
Estados do Átomo de Hidrogênio com n=2

Os quatro estados do átomo de hidrogênio com 2 aparecem na tabela abaixo.

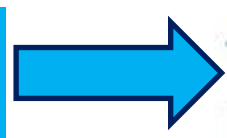
n	l	m_l
2	0	0
2	1	+1
2	1	0
2	1	-1

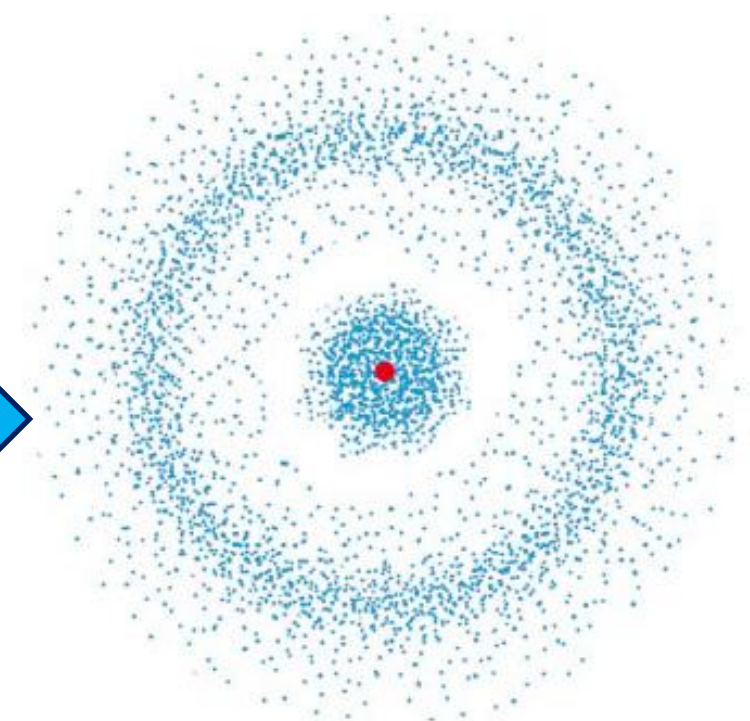
Considere primeiro o estado com $n = 2, l = 0$ e $m_l = 0$. A função de onda para esse estado é dada por

$$\psi_{200}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}a^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/a}$$

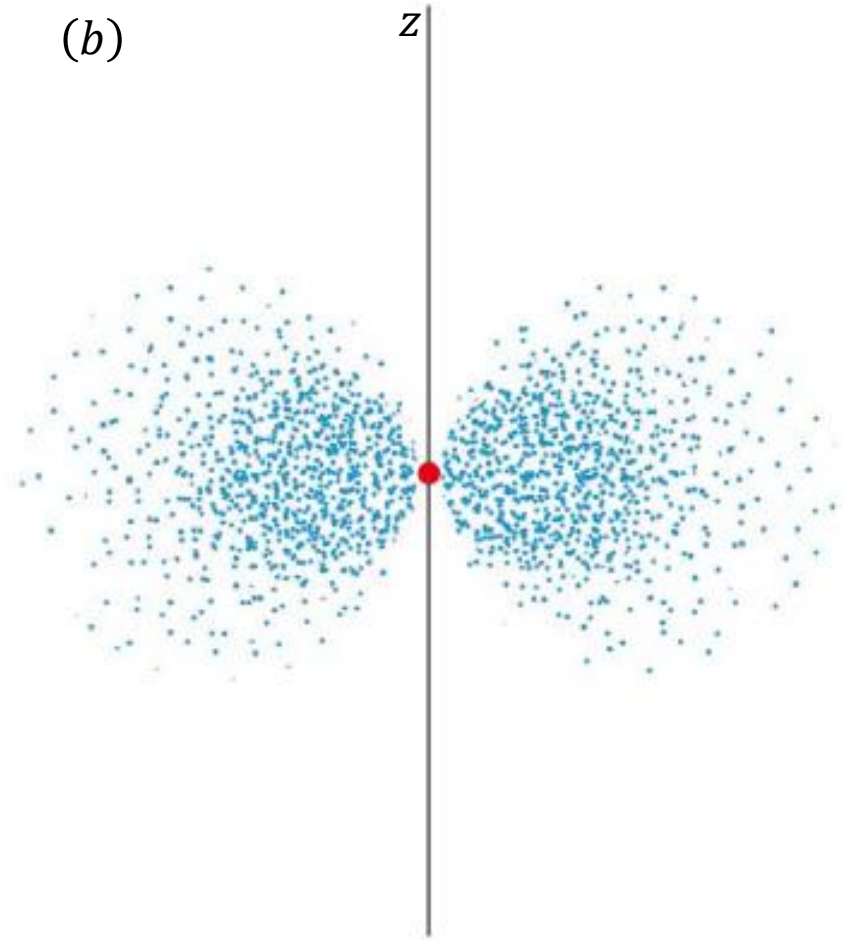
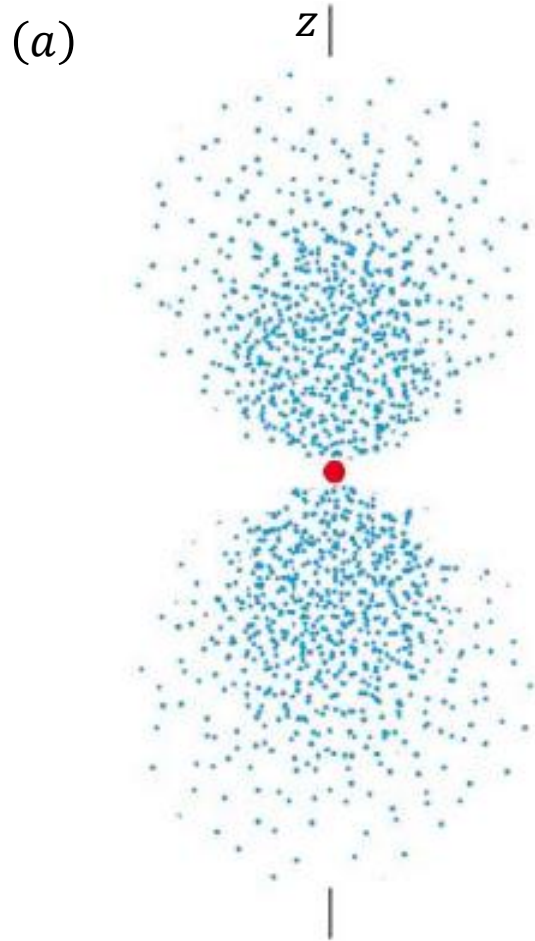


$$\psi_{200}^2(r) = \frac{1}{32\pi a^3} \left(2 - \frac{r}{a}\right)^2 e^{-2r/a}$$





Gráficos de pontos da densidade de probabilidade $\psi_{21m_l}^2(r, \theta)$ para o átomo de hidrogênio para estados com $n = 2$ e $l = 1$. (a) Gráfico para $\psi_{210}^2(r, \theta)$. (b) Gráficos para $\psi_{211}^2(r, \theta)$ e $\psi_{21-1}^2(r, \theta)$. (Note que $\psi_{211}^2(r, \theta) = \psi_{21-1}^2(r, \theta)$).



Para completar nossa imagem do átomo do hidrogênio, mostramos na figura ao lado um gráfico de pontos da densidade de probabilidade radial para um estado do átomo de hidrogênio com um número quântico principal relativamente grande ($n = 45$) e o maior número quântico orbital possível ($l = n - 1 = 44$).

A densidade de probabilidade radial forma um anel simétrico em relação ao eixo z , que está muito próximo do plano xy . O raio médio do anel é $n^2 a = 2025a$, onde a é o raio de Bohr.

O gráfico ao lado lembra a órbita dos elétrons na Física Clássica, semelhante à órbita dos planetas em torno do Sol. Temos aqui mais uma ilustração do **Princípio de correspondência** de Bohr, segundo o qual os resultados da Mecânica Quântica tendem para os resultados da Física Clássica quando os números quânticos tendem para infinito.

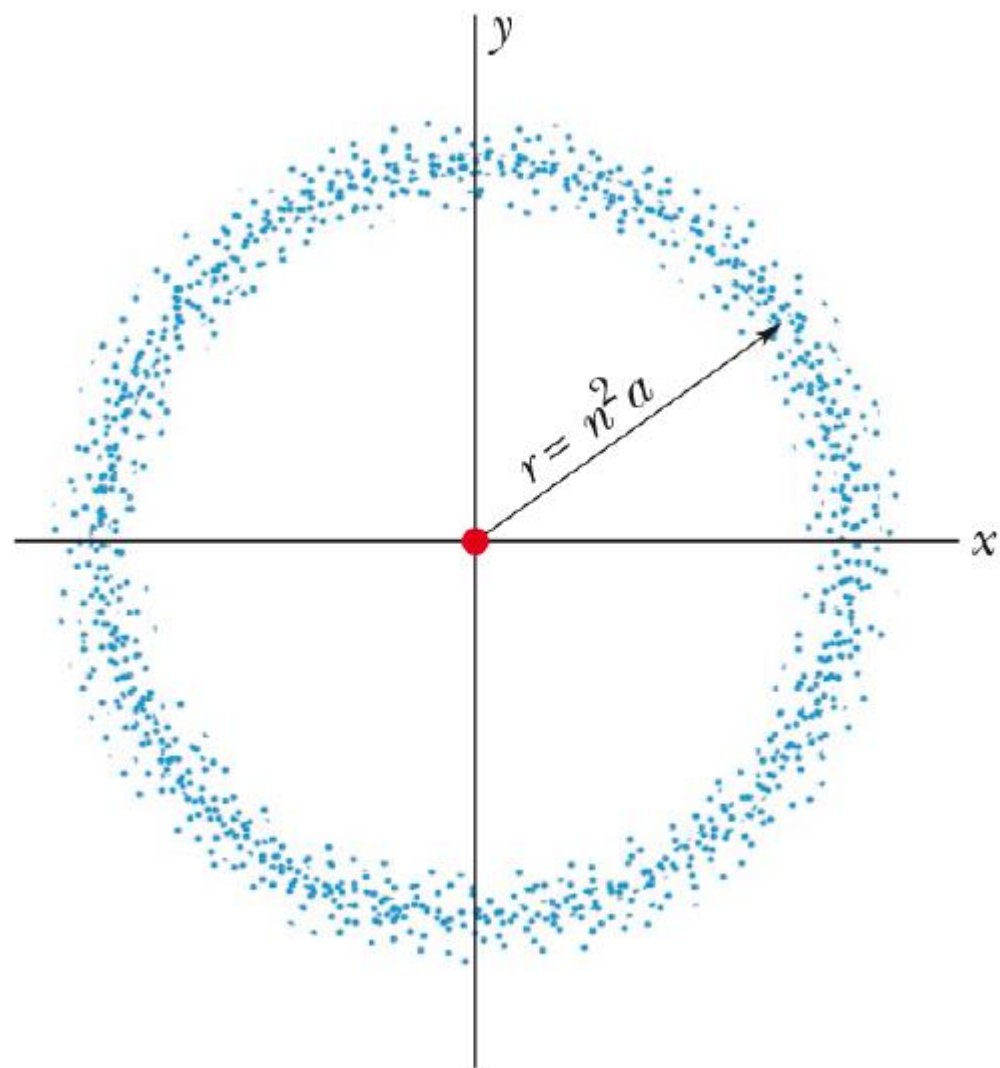


Gráfico de pontos da densidade de probabilidade radial para o átomo de hidrogênio em um estado com um número quântico principal relativamente grande ($n = 45$) e o maior número quântico orbital possível ($l = n - 1 = 44$).

Exercícios sugeridos das Seção 39.9: 31, 32, 33, 34, 35, 36, 39, 40, 41, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 53, 54 e 55.

35) Quais são (a) a energia, (b) o módulo do momento e (c) o comprimento de onda do fóton emitido quando um átomo de hidrogênio sofre uma transição de um estado com $n = 3$ para um estado com $n = 1$?

Dicas:

(a) $E_n = -\frac{13,61 \text{ eV}}{n^2}$, para $n = 1$ e 3 . $\Delta E_{3,1} = E_3 - E_1$. $1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$.

(b) $\Delta E_{3,1} = pc$.

(c) $\lambda = \frac{h}{p}$.

Respostas: (a) $\Delta E_{3,1} = 12,10 \text{ eV}$. (b) $p = 6,45 \times 10^{-27} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$. (c) $\lambda = 103 \text{ nm}$.

