UFABC — Bases da Ciência Moderna — Prof. Valter
Explicação das séries espectrais pelo modelo atômico de Bohr (1913)

Explanandum:
A fórmula empírica conhecida para a série de Balmer: $\nu = Rc(1/4 - 1/n^2)$, onde R é a constante de Rydberg (valor atualmente conhecido $R = 10967757{,}6 \pm 1{,}2\ m^{-1}$).

Explanans:

(L0) Os sistemas atômicos são análogos a sistemas planetários. (Na verdade, a expressão "sistemas saturnianos" já havia sido empregada por H. Nagaoka em 1903-1904.)

(A) Postulados originais de Bohr:

(L1) A energia irradiada não é emitida (ou absorvida) da maneira contínua admitida pela eletrodinâmica clássica, mas apenas durante a passagem dos sistemas de um estado "estacionário" para outro diferente.
(L2) O equilíbrio dinâmico dos sistemas nos estados estacionários é governado pelas leis da mecânica clássica, não se verificando estas leis nas transições dos sistemas entre diferentes estados estacionários.
(L3) É homogênea a radiação emitida durante a transição do sistema de um estado estacionário para outro, e a relação entre a freqüência ν e a quantidade total de energia emitida é dada por $E = h\nu$, sendo h a constante de Planck.
(L4) Os diferentes estados estacionários de um sistema simples constituído por um elétron que gira ao redor de um núcleo positivo são determinados pela condição de ser igual a um múltiplo inteiro de $h/2$ a razão entre a energia total emitida durante a formação da configuração e a freqüência de revolução do elétron. Admitindo que a órbita do elétron seja circular, essa hipótese equivale a supor que o momento angular do elétron em torno do núcleo seja igual a um múltiplo inteiro de $h/2\pi$.
(L5) O estado "permanente" de um sistema atômico — isto é, o estado no qual a energia emitida é máxima — é determinado pela condição de ser igual a $h/2\pi$ o momento angular de cada elétron em torno do centro da sua órbita.

[Para os postulados LB1—LB5, ver N. Bohr, *Sobre a constituição de átomos e moléculas* (Lisboa: Gulbenkian, s/d), pp. 195-196 — Obra originalmente publicada em três partes em 1913.]

(B) Outras hipóteses necessárias:

(L6) As linhas espectrais são causadas pelas transições dos elétrons entre os diferentes níveis de energia.
(L7) Nos estados estacionários, vale a atração coulombiana entre o núcleo positivamente carregado e o elétron.
(L8) Nos estados estacionários, valem os princípios da mecânica clássica, como: **(a)** A energia total é dada pela soma das energias cinética e potencial: $E = E_C + E_P$ (neste caso, a energia potencial é $-eQ/r$). **(b)** A energia de ligação é a energia que precisa ser fornecida para remover o elétron para uma distância infinita do núcleo, $W = -E$ (neste caso, igual a $eQ/2r$). **(c)** O estado mais estável será aquele para o qual W for máximo, isto é, E for mínimo.

(C) Condições iniciais:

(C1) O átomo em questão é de apenas um elétron, p. ex. o Hidrogênio.
(C2) O elétron tem carga igual a $-e$ e massa m, e o núcleo tem carga igual a $+Q$.
(C3) O núcleo é suposto imóvel (i.e. $M_{núcleo} >> m$).
(C4) Valor da constante de Planck: $h = 6{,}626 \times 10^{-34}$ J-s.

Explanandum: Logo, $\nu = (2\pi^2 m\, e^4 / h^3)\,(1/n_f^2 - 1/n_i^2)$.

NOTA. Para a demonstração original de Bohr, e também para referências às demonstrações encontradas em livros-texto atuais, ver o Apêndice I de V. A. Bezerra, "*Schola quantorum*: Progresso, racionalidade e inconsistência na antiga teoria atômica. Parte I: desenvolvimento histórico, 1913-1925", em: *Scientiae Studia*, v. 1, n. 4, pp. 463-517, 2003, disponível em http://www.scientiaestudia.org.br .

***Explananda* adicionais obtidos:**

(a) Esta fórmula engloba **todas as séries espectrais** do Hidrogênio: as séries Balmer e de Paschen, já conhecidas então (descobertas resp. em 1885 e 1908), mais as séries de Lyman, Brackett e Pfund, que **só depois viriam a ser descobertas** (resp. em 1914, 1922 e 1924). Basta tomar $n_f = 1$ (Lyman), 2 (Balmer), 3 (Paschen), 4 (Brackett) ou 5 (Pfund), sempre com $n_i > n_f$.

Para simplificar a notação, chamemos n_f de p e n_i de n. A fórmula então fica: $\nu = (2\pi^2 me^4/h^3)\,(1/p^2 - 1/n^2)$. A série de Lyman (no ultravioleta) é obtida fazendo $p = 1$ e $n = 2, 3, 4, \ldots$ A série de Balmer (no ultravioleta próximo e no vísivel) é obtida fazendo $p = 2$ e $n = 3, 4, 5, \ldots$ A série de Paschen (no infravermelho) é obtida com $p = 3$ e $n = 4, 5, 6, \ldots$ A série de Brackett (infravermelho) é obtida com $p = 4$ e $n = 5, 6, 7, \ldots$ Finalmente, a série de Pfund (infravermelho) é obtida tomando $p = 5$ e $n = 6, 7, 8, \ldots$

(b) Expressão para o raio da órbita em função de n, a saber: $r = n^2h^2 / 4\pi^2 m\, e^2Q^2$.
(c) Expressão para a energia do elétron em um nível n dado, $E = -2\pi^2 m\, e^2Q^2 / n^2h^2$.
(d) O estado fundamental (mais estável) é o de $n = 1$, onde temos $E = -13{,}6$ eV.

(e) A explicação de Bohr **não se limita ao átomo de hidrogênio**, onde a carga do núcleo é $Q = e$, mas produz a fórmula mais geral $\nu = (2\pi^2 m\, Z^2e^4 / h^3)\,(1/n_f^2 - 1/n_i^2)$, que se aplica a outros átomos de um elétron, com cargas Q iguais a Ze (Z = número atômico). Dessa forma, a fórmula se aplica, por exemplo, às **séries espectrais de íons** como o He^+ e o Li^{++}.

(f) Acrescentando mais algumas considerações sobre a estabilidade eletrodinâmica de anéis eletrônicos com vários elétrons, Bohr chega a construir a **distribuição eletrônica** dos elementos Hélio, Lítio e Berílio (Bohr, *op. cit.*, pp. 148-157), e depois, também dos elementos 5 (Boro) a 24 (Cromo) (Bohr, *op. cit.*, pp. 160-162). Bohr consegue identificar "uma periodicidade marcada, com período igual a 8" (*op. cit.*, p. 162), e também mais uma periodicidade igual a 18 — as quais, como hoje se sabe, são típicas da tabela periódica.