

Modelos Atômicos

Bohr e Schrödinger

O problema que ambos tentavam resolver

No início do século XX, os físicos sabiam que os átomos emitiam luz — mas não luz de qualquer cor. Cada elemento emite luz apenas em comprimentos de onda muito precisos, formando um conjunto de linhas coloridas chamado espectro de emissão. O hidrogénio, por ser o átomo mais simples, tinha um espectro particularmente limpo: umas poucas linhas bem definidas no ultravioleta, no visível e no infravermelho.

Ninguém conseguia explicar por que razão essas linhas apareciam exactamente onde apareciam. Era um dos grandes mistérios da física da época.

O Modelo de Bohr (1913)

A ideia central

Bohr propôs que o electrão do hidrogénio não pode orbitar o núcleo a qualquer distância — apenas a distâncias muito específicas, cada uma correspondendo a um nível de energia fixo. Fora dessas órbitas permitidas, o electrão simplesmente não pode existir.

Imagina uma escada. Um livro pode estar no primeiro degrau, no segundo, no terceiro — mas não entre degraus. O electrão de Bohr é assim: só pode estar nos degraus, nunca no espaço entre eles. A cada degrau corresponde um valor de n : $n = 1$ é o degrau mais baixo (o mais próximo do núcleo), $n = 2$ o seguinte, e assim por diante.

Por que razão o electrão não cai em espiral para o núcleo?

Este era um problema sério. Pela física clássica, um electrão em órbita circular está continuamente a acelerar (a mudar de direcção), e uma carga acelerada irradia energia electromagnética. Se o electrão irradiasse energia continuamente, perderia velocidade e cairia em espiral para o núcleo em fracções de segundo — o átomo seria instável.

Bohr simplesmente postulou que nas órbitas permitidas isso não acontece. O electrão orbita sem irradiar energia. Não havia justificação física profunda para isto — era uma regra imposta à força para que o modelo funcionasse. É uma das suas fragilidades fundamentais.

Por que razão explica o espectro do hidrogénio?

Quando o electrão salta de uma órbita para outra, a diferença de energia entre as duas órbitas não desaparece — é emitida sob a forma de um fóton. Como as órbitas têm energias fixas e bem determinadas, as diferenças entre elas também são fixas. Cada salto possível produz um fóton com uma energia muito precisa, que corresponde a um comprimento de onda muito preciso — ou seja, a uma linha muito precisa no espectro. Esta relação é expressa por $\Delta E = hf$, onde h é a constante de Planck e f é a frequência do fóton emitido ou absorvido.

Por exemplo: quando o electrão cai de $n = 3$ para $n = 2$, emite um fóton de luz vermelha (656 nm) — é a linha mais proeminente do espectro visível do hidrogénio, chamada linha H-alfa. Quando cai de $n = 4$ para $n = 2$, emite luz azul-esverdeada. Quando cai de $n = 5$ para $n = 2$, emite violeta. Estas linhas formam a série de Balmer — as linhas do hidrogénio no espectro visível, que os espectroscopistas já conheciam empiricamente há décadas mas não conseguiam explicar.

Bohr calculou os comprimentos de onda destas linhas a partir da sua hipótese e obteve valores que correspondiam exactamente às medições experimentais. Foi um triunfo extraordinário. O mesmo raciocínio aplica-se aos saltos para $n = 1$ (série de Lyman, no ultravioleta) e para $n = 3$ (série de Paschen, no infravermelho) (Fig. 1). Em todos os casos, as previsões de Bohr concordavam com a experiência.

A absorção e a emissão são também simétricas: se o electrão pode emitir um fóton de uma certa frequência ao descer de $n = 3$ para $n = 2$, então um fóton dessa mesma frequência pode ser absorvido para fazer o electrão subir de $n = 2$ para $n = 3$.

As limitações

Apesar do sucesso com o hidrogénio, o modelo de Bohr falha em aspectos fundamentais:

- Para o hélio — o átomo mais simples depois do hidrogénio, com apenas dois electrões — o modelo já não funciona. Não há forma de aplicar as suas regras a dois electrões a orbitar simultaneamente o mesmo núcleo e obter resultados correctos.
- O modelo não explicava por que razão algumas linhas espectrais são mais brilhantes do que outras — ou seja, por que razão alguns saltos são mais prováveis do que outros.
- Não dava qualquer explicação para a estrutura fina dos espectros, que só se vê com instrumentos de alta resolução.
- Havia um problema conceptual profundo: Bohr não justificava por que razão apenas certas órbitas são permitidas. Simplesmente declarava que era assim. Era como dizer que a escada só tem certos degraus sem explicar por que razão os outros não existem.

O Modelo de Schrödinger (1926)

A ideia central

Em 1924, Louis de Broglie propôs que os electrões — até então considerados puramente partículas — têm também natureza ondulatória. Tal como a luz se comporta ora como onda ora como partícula, o electrão também o faz. A cada electrão com momento linear p está associado um comprimento de onda $\lambda = h/p$.

Schrödinger pegou nesta ideia e levou-a a sério: se o electrão é uma onda, então deve obedecer a uma equação de onda. Em 1926 escreveu essa equação — a equação de Schrödinger — e o que dela resulta transforma completamente a imagem do átomo.

O electrão deixa de ter uma trajectória

No modelo de Bohr, o electrão está num sítio preciso a cada instante — está na órbita $n = 2$, a tal distância do núcleo, a mover-se com tal velocidade. Tudo é determinado e calculável como na mecânica de Newton.

No modelo de Schrödinger, isto desaparece completamente. O electrão não tem uma posição definida nem uma trajectória. O que existe é uma função de onda — uma função matemática, designada Ψ , que se estende pelo espaço e descreve o estado do electrão. O quadrado desta função, $|\Psi|^2$, diz-nos a probabilidade de encontrar o electrão em cada ponto do espaço se fizermos uma medição.

O electrão existe, de certa forma, em todo o lado ao mesmo tempo — com probabilidades diferentes em sítios diferentes. Só quando é medido é que aparece numa posição concreta. Antes da medição, a pergunta «onde está o electrão?» não tem resposta. Não é que não saibamos — é que a própria natureza não determina isso.

Os orbitais em vez de órbitas

Em vez das órbitas circulares de Bohr, surgem os orbitais — regiões do espaço onde a probabilidade de encontrar o electrão é elevada. Convencionalmente, desenha-se a superfície que encerra 90% da probabilidade total.

Os orbitais têm *formas variadas*, determinadas pelos quatro números quânticos:

- n — o número quântico principal, herdado de Bohr — determina o nível de energia e a distância média ao núcleo.
- l — o número quântico azimutal — determina a forma do orbital. Para $l = 0$, o orbital é esférico (orbital s); para $l = 1$, tem dois lobos como um haltere (orbital p), existindo três destes orientados perpendicularmente no espaço; para $l = 2$, as formas tornam-se mais complexas (orbitais d); para $l = 3$, ainda mais (orbitais f).
- m_l — o número quântico magnético — determina a orientação espacial do orbital.
- m_s — o número quântico de *spin* — descreve uma propriedade intrínseca do electrão sem equivalente clássico.

Dois electrões com o mesmo n mas l diferente têm formas completamente distintas de ocupar o espaço — algo que o modelo de Bohr não contemplava, porque nele n era suficiente para descrever tudo.

Por que razão as órbitas de Bohr «funcionavam»?

Quando se resolve a equação de Schrödinger para o hidrogénio, os níveis de energia permitidos são exactamente os mesmos que Bohr tinha calculado com os seus postulados. A quantização não precisa de ser imposta à força — emerge naturalmente da matemática da equação de onda.

A razão profunda é esta: uma onda confinada num espaço fechado só pode existir com certas frequências — as *frequências de ressonância*. É o mesmo princípio que faz uma corda de guitarra vibrar apenas em certas frequências (a fundamental e os seus harmónicos). O electrão, sendo uma onda confinada à volta do núcleo, só pode ter certas energias. Bohr tinha chegado ao resultado certo, mas sem perceber a razão verdadeira.

O que Schrödinger explica e Bohr não conseguia

O modelo de Schrödinger explica correctamente os espectros de todos os átomos, não apenas do hidrogénio. Explica por que razão algumas transições são mais prováveis do que outras — porque a probabilidade de uma transição depende da sobreposição das funções de onda dos dois estados, e isso é calculável. Explica a estrutura fina dos espectros, que resulta de efeitos subtils como o spin do electrão e as interações magnéticas internas do átomo.

Mas sobretudo, fornece a base para compreender como os átomos se ligam para formar moléculas — algo que o modelo de Bohr nunca poderia fazer, porque a geometria das ligações químicas depende directamente das formas dos orbitais.

Limitações do modelo de Schrödinger

- A interpretação probabilística é conceptualmente exigente e afasta-se radicalmente da intuição clássica.
- Para átomos com muitos electrões, a equação só se resolve por métodos aproximados.
- Não incorpora efeitos relativísticos — para isso é necessária a equação de Dirac.

A equação de Dirac

É a versão relativística da equação de Schrödinger, formulada por Paul Dirac em 1928. O problema era este: a equação de Schrödinger funciona muito bem para electrões lentos, mas quando os electrões se movem a velocidades próximas da da luz — o que acontece nos átomos

pesados, onde o campo eléctrico do núcleo é enorme — é necessário incorporar a relatividade especial de Einstein. A equação de Schrödinger não o faz.

Dirac conseguiu escrever uma equação que satisfazia simultaneamente os princípios da mecânica quântica e os da relatividade especial. Isso foi tecnicamente muito difícil, porque as duas hipóteses tinham estruturas matemáticas muito diferentes e aparentemente incompatíveis.

O resultado foi surpreendente por duas razões:

1. O spin saiu da equação. No modelo de Schrödinger, o spin do electrão — o quarto número quântico, m_s — tinha de ser introduzido manualmente, como um facto experimental sem justificação teórica profunda. Na equação de Dirac, o spin emerge naturalmente da matemática. Não é um postulado — é uma consequência inevitável de combinar a quântica com a relatividade.
2. Previu a antimatéria. A equação de Dirac tem duas famílias de soluções: uma para o electrão normal, e outra para uma partícula com a mesma massa mas carga oposta. Dirac inicialmente não sabia o que fazer com essas soluções negativas — eram matematicamente inevitáveis mas não correspondiam a nada conhecido. Em 1932, Carl Anderson descobriu experimentalmente essa partícula: o positrão, a antipartícula do electrão. Foi a primeira vez na história que uma entidade física foi prevista teoricamente antes de ser observada.

A equação de Dirac é, por isso, o ponto de partida da física de partículas moderna.

Quadro comparativo

Aspecto	Bohr (1913)	Schrödinger (1926)
Base teórica	Mecânica clássica + postulados <i>ad hoc</i>	Mecânica quântica rigorosa
Trajectória do electrão	Órbita circular definida	Inexistente — apenas probabilidades
Descrição matemática	Raios e energias discretos	Função de onda Ψ
Localização do electrão	Exacta (na órbita)	Probabilística (orbital)
Aplicabilidade	Só o hidrogénio	Todos os átomos
Números quânticos	Apenas n	n, l, m_l, m_s
Natureza do electrão	Partícula	Onda e partícula (dualidade)
Espectros explicados	Hidrogénio (linhas principais)	Todos, incluindo estrutura fina

Em síntese

Bohr fez algo notável: com raciocínio físico audacioso e alguns postulados sem justificação profunda, conseguiu explicar o espectro do hidrogénio com precisão extraordinária. Foi o primeiro modelo a introduzir a quantização no interior do átomo e abriu caminho para tudo o que se seguiu. Contudo, era fundamentalmente híbrido e inconsistente: misturava física clássica com postulados quânticos sem justificação profunda.

Schrödinger completou a revolução. Mostrou que a quantização não é uma regra arbitrária mas uma consequência inevitável da natureza ondulatória do electrão. Eliminou as trajectórias, substituiu a certeza pela probabilidade, e construiu uma hipótese que descreve correctamente não só o hidrogénio mas toda a tabela periódica — e com ela, em princípio, toda a química.

A diferença fundamental entre os dois é esta: Bohr perguntou onde está o electrão e respondeu com uma órbita. Schrödinger percebeu que essa pergunta, nos termos em que estava formulada, não tem resposta — e construiu uma hipótese para descrever não onde o electrão está, mas onde é provável encontrá-lo.

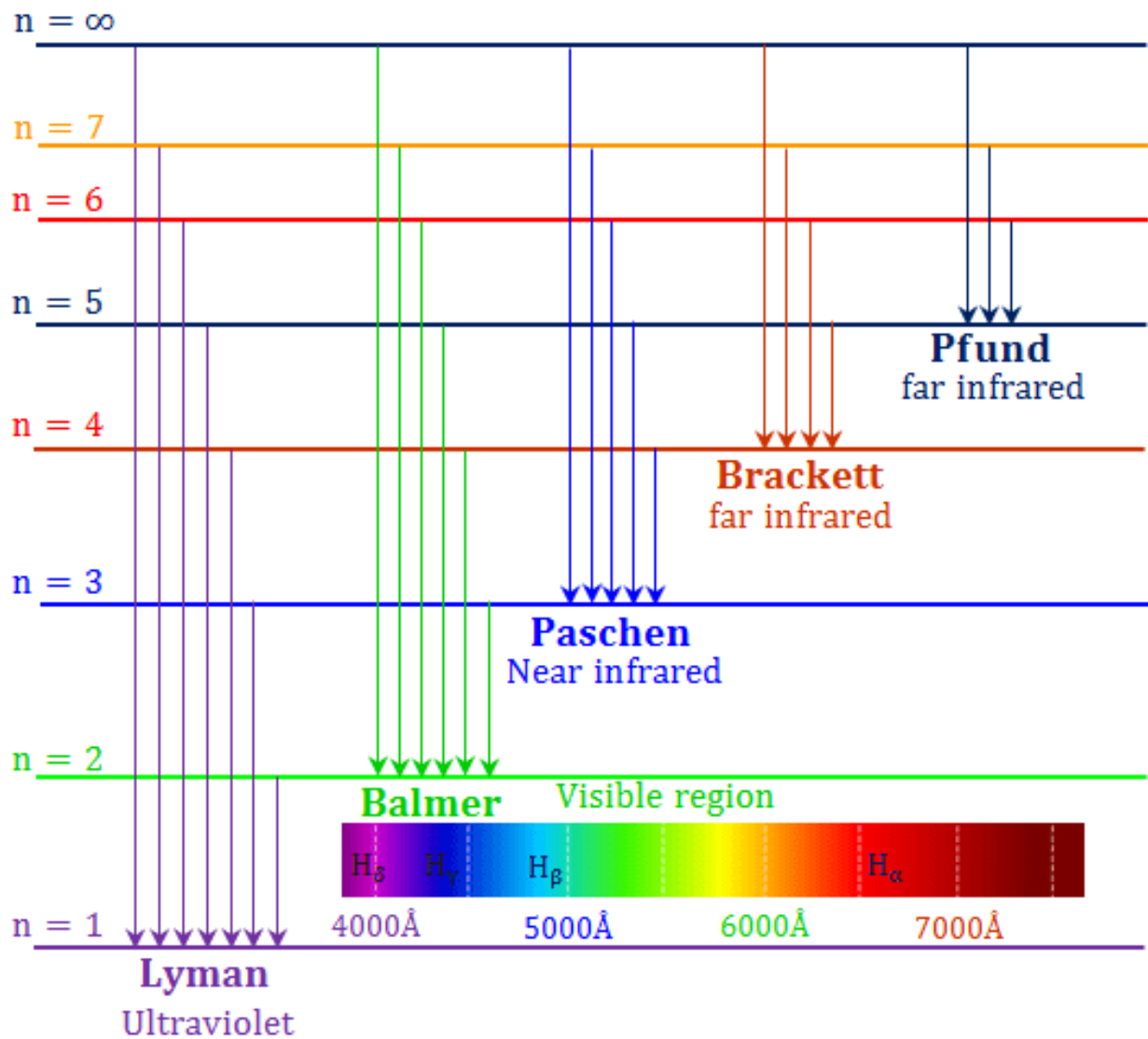


Figure 1 — Espectro de emissão do Hidrogénio com nomes das séries.