

A descoberta da estrutura atômica

Afonso Rodrigues Aquino

Quando Max Karl Ernst Ludwig Planck anunciou na Sociedade Berlinense de Física, no dia 14 de dezembro de 1900, que a energia radiante não é emitida nem absorvida continuamente, mas na forma de diminutas porções discretas chamadas *quantas* ou *fótons* e de grandeza proporcional à frequência da radiação, foi deflagrada a revolução quântica que dura até hoje. É neste contexto que o modelo atômico atualmente aceito foi concebido.

A energia de um quantum é dada por $E = h\nu$ (onde ν é a frequência da radiação e h a constante de Planck)

No final do século XIX, após os trabalhos de Wilhelm Konrad Röntgen, os cientistas tinham noção de que a radiação heterogênea emitida por uma fonte de raios-X origina um espectro contínuo ao qual se sobrepõe um outro, característico do material onde ele foi gerado.

Os raios - X podem ser formados pelo choque de raios catódicos contra objetos sólidos. O tubo inventado por William David Coolidge, era uma lâmpada termoiônica, em que os elétrons são emitidos por um filamento de tungstênio aquecido até a incandescência pela passagem de uma corrente elétrica. Os elétrons são acelerados com uma diferença de potencial que pode chegar a milhares de Volts, para serem lançados sobre um anteparo denominado anticátodo.

Foi Albert Einstein, em 1905, quem primeiro fez uso da hipótese de Planck no artigo sobre efeito fotoelétrico que lhe deu o Prêmio Nobel de Física em 1921.

O efeito fotoelétrico é obtido quando uma luz de frequência suficientemente alta atinge uma amostra metálica, arrancando elétrons superficiais, fazendo com que o metal adquira carga positiva.

O elétron partícula

Até o fim do século XIX não havia idéia definida sobre a estrutura atômica. A produção de elétrons, nos tubos de raios catódicos, mostrou serem aquelas partículas constituintes essenciais da matéria. Joseph John Thomson entendia que os elétrons se encontravam na massa global do átomo e que estavam acomodados dentro de uma esfera uniforme de eletricidade positiva, resultando em um conjunto eletricamente neutro.

O seu aluno Ernest Rutherford, em 1910, foi o primeiro a propor um modelo atômico coerente, partindo de observações sobre a deflexão de partículas α em alvos de ouro. A pequena quantidade de partículas α refletidas em grandes ângulos, fez Rutherford concluir que a carga positiva e a maior parte da massa de um átomo fica concentrada em um volume muito pequeno que ele chamou de núcleo.

O átomo seria constituído de um núcleo central positivo circundado por elétrons, tantos quantos necessários para neutralizar sua carga. Os elétrons girariam com velocidade suficiente para que a força centrífuga compensasse a atração eletrostática exercida pelo núcleo de cargas positivas. Esse modelo era inconsistente porque, segundo a teoria de James Clerk Maxwell, qualquer alteração de velocidade ou direção de movimento de uma partícula eletricamente carregada é acompanhada da emissão de energia radiante.

Em 1860 James Clerk Maxwell desenvolveu a teoria que todas as formas de radiação são propagadas no espaço vibrando um campo elétrico e outro magnético, perpendiculares entre si.

Com a irradiação contínua de energia os elétrons teriam suas órbitas diminuídas progressivamente, tendo que girar mais rápido para compensar a atração eletrostática do núcleo continuamente aumentada com a diminuição da distância entre as cargas.

Usando as equações de Maxwell, pode ser demonstrado que o átomo modelo de Rutherford duraria apenas 10^{-11} segundos. O mundo terminaria em um festival de cores com a emissão de uma série contínua de comprimentos de onda. O modelo capaz de interpretar muitas das propriedades da matéria estava em desacordo com a eletrodinâmica. Foi Niels Bohr, em 1913, que resolveu o impasse. Aplicou a teoria de Planck e acrescentou três postulados ao modelo atômico de Rutherford. O primeiro estabelece que um elétron, enquanto permanece em movimento em uma órbita fechada, não absorve nem emite radiação. Bohr admitiu que para cada elétron existe mais de uma órbita estável correspondente a um nível energético diferente. O segundo postulado estabelece que somente são permissíveis as órbitas eletrônicas para as quais o momento angular do elétron é um múltiplo inteiro de $h/2\pi$, em que h é a constante de Planck.

O momento angular de uma partícula movendo-se em órbita circular é dado por mvr , em que m é a massa, v a velocidade e r o raio do círculo. O segundo postulado requer que as órbitas estacionárias satisfaçam a condição $mvr = nh / 2\pi$

O último postulado estabelece que o elétron pode saltar de uma órbita para outra, desde que a passagem seja acompanhada da emissão ou absorção de um quantum de energia radiante, cuja frequência é determinada pela relação

$$h\nu = E_i - E_f$$

onde $E_i - E_f$ representam os valores da energia do átomo no estado inicial e final, respectivamente

A possibilidade de ocupar diferentes órbitas ou camadas acarretou o primeiro dos quatro números quânticos necessários para descrever um elétron em um átomo. Com este trabalho foi possível explicar as raias do espectro do átomo de

hidrogênio. O número quântico principal, n , pode apresentar valores inteiros de 1 até infinito.

Uma das vantagens do modelo atômico de Bohr foi a possibilidade de explicar porque somente certas frequências de luz eram irradiadas por átomos e, em alguns casos, predizer estes valores. A emissão de luz, ou espectro do átomo, era obtida com uma descarga elétrica através da amostra gasosa investigada. O gás excitado emitia radiação sob a forma de luz visível, ultravioleta e infravermelha. A luz atravessava uma fenda ou prisma, que a separava em suas diferentes frequências. Estes dispositivos chamados espectrógrafos eram conhecidos desde 1859 e foram usados para investigar as raias do hidrogênio.

Para definir a localização de um objeto no espaço são precisos três números, assim surgiram mais outros dois números quânticos.

O número quântico de momento angular l , também chamado de azimutal, é decorrente do trabalho de Arnold Sommerfeld, em 1916, que considerou as órbitas circulares como um caso particular de órbitas elípticas, em que o semi-eixo maior e menor são iguais.

O movimento do elétron em órbitas elípticas obedece às leis de Kepler. A construção de um círculo requer apenas um parâmetro, o movimento circular tem apenas um grau de liberdade, o ângulo θ que faz o raio vetor com o eixo dos x . O movimento elíptico apresenta dois graus de liberdade, nele variam o ângulo θ e o raio vetor r , sendo resultante de um movimento radial, devido às variações de r , e outro azimutal, que corresponde às variações de θ .

O elétron de uma dada camada é agrupado em subcamadas, caracterizada por diferentes valores do número quântico l e por uma forma característica. Cada valor de l corresponde a uma diferente forma de orbital, ou tipo de orbital. Os valores de l são codificados por letras de acordo com o seguinte esquema:

Valor de l	subcamada correspondente
0	s
1	p
2	d
3	f

Os primeiros estudos dos espectros de outros elementos além do hidrogênio apresentavam mais linhas do que a teoria de Bohr podia explicar. Cientistas analisando o espectro de átomos de sódio encontraram quatro diferentes tipos de linha que chamaram de *sharp*, *principal*, *diffuse* e *fundamental*. A letra inicial de cada uma delas foi usada para designar as subcamadas.

O número quântico magnético m_l especifica em qual orbital (região relacionada à órbita), dentro da subcamada o elétron se encontra. Os orbitais em uma dada subcamada diferem unicamente na sua orientação espacial e não na sua forma.

Existe um quarto número quântico, chamado magnético de spin, representado por m_s , que diz respeito à rotação do elétron. Um elétron em um átomo possui as propriedades magnéticas decorrentes da rotação de uma partícula carregada. Experimentos mostraram que colocado um átomo com um elétron desemparelhado em um campo eletromagnético, somente duas orientações são possíveis para a sua rotação. A rotação do elétron é quantizada e uma orientação é associada com o valor $+ \frac{1}{2}$ e outra com o valor $- \frac{1}{2}$.

Cada elétron fica definido pela combinação dos seus quatro números quânticos, que é diferente para todos os outros elétrons no átomo. Esta é a regra geral criada em 1925 por Wolfgang Pauli, que ficou conhecida como Princípio da Exclusão de Pauli, cuja importante consequência é que nenhum orbital atômico pode abrigar mais de dois elétrons.

O elétron onda

Foi o francês Louis-Victor de Broglie em 1925 que adaptando as equações de Maxwell e usando o mesmo raciocínio de Einstein no seu trabalho sobre efeito fotoelétrico, propôs que qualquer partícula em movimento fosse tratada como uma onda eletromagnética. A tese de De Broglie possibilitou somar as propriedades de partículas com possíveis propriedades de onda. No início de 1926, atendendo a um pedido de Peter Debye durante um seminário no seu laboratório na Suíça, Erwin Schrödinger demonstrou que a expressão de De Broglie podia ser generalizada para abranger partículas ligadas, tais como os elétrons nos átomos. A relação que a dualidade partícula-onda tem com os elétrons nos átomos, coube a Werner Heisenberg e Max Born responder em 1927. Assumindo que os elétrons tinham propriedades de onda, Heisenberg concluiu ser impossível fixar ao mesmo tempo a sua posição e a sua energia. Baseado na idéia de Heisenberg, que hoje chamamos de Princípio da Incerteza, Born propôs que os resultados fossem interpretados como: *se escolhermos conhecer com pouca incerteza a energia de um elétron em um átomo, então, temos que aceitar a correspondente grande incerteza sobre a sua posição no espaço em relação ao núcleo do átomo.* A contribuição da estatística pode ser melhor compreendida no conceito formulado para orbital como sendo: *a região do espaço onde pode ser encontrado o elétron.*

A mecânica clássica dispunha das leis formuladas por Charles Augustin de Coulomb, em que a atração eletrostática variava em função do valor das cargas e do quadrado das distâncias, com elas era possível explicar as ligações iônicas. A introdução dos conceitos de orbitais e emparelhamento de elétrons pela mecânica quântica, possibilitou a explicação das ligações covalentes.

Muitos átomos apresentavam massas maiores do que poderia explicar um modelo contendo apenas elétrons e prótons, indicando a existência de um terceiro tipo de partícula sem carga, e com massa aproximadamente igual a do próton. Em 1932, James Chadwick anunciou a descoberta do nêutron, partícula eletricamente neutra. O modelo próton-elétron cedeu lugar ao modelo próton-nêutron-elétron que é usado até hoje. Neste modelo o átomo é considerado como possuindo um certo número de prótons, igual ao número atômico (Z), elétrons suficientes para neutralizar sua carga, e tantos nêutrons ($A-Z$) quantos necessários para completar o número de massa (A).

Afonso Rodrigues Aquino é pesquisador do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.