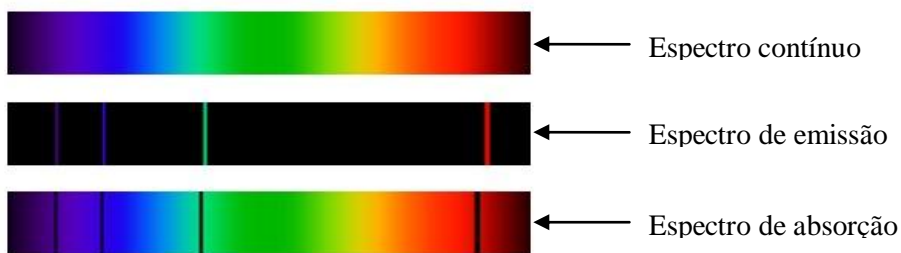


Na última aula vimos:

- Efeito Compton: $\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$ (*Lei de Compton*)
- Ou seja, um fóton (comportamento corpuscular), além de possuir **energia** $E = hf$, também transportar **momento linear**: $p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$; ou $p = \hbar K$: $\begin{cases} \hbar = h/2\pi \\ K = 2\pi/\lambda \end{cases}$

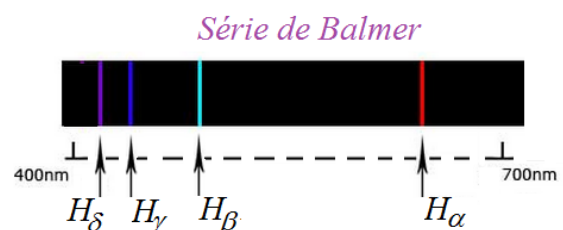
O Átomo de Hidrogênio

- Desde 1860 até aproximadamente 1885, uma grande quantidade de dados experimentais haviam sido acumulados, relacionados com a **análise espectroscópica** de gases aquecidos.
- O aquecimento se fazia através de descargas elétricas e, como resultado, raias luminosas (características de cada gás) eram observadas com frequências bem definidas.
- Inclusive, algumas vezes gases eram utilizados para absorver a radiação com certo comprimentos de onda específicos (dependia de cada gás), deixando passar as restantes (**espectros de absorção**).



- Em 1885, Johan Balmer apresentou uma fórmula que ele havia obtido empiricamente, e que fornecia com precisão os valores dos comprimentos de onda correspondentes às quatro raias visíveis do hidrogênio:

H_α (vermelho)	$\lambda_\alpha = 646,3 \text{ nm}$
H_β (verde)	$\lambda_\beta = 486,1 \text{ nm}$
H_γ (azul)	$\lambda_\gamma = 434,1 \text{ nm}$
H_δ (violeta)	$\lambda_\delta = 410,2 \text{ nm}$



$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)}; n = 3, 4, 5 \text{ e } 6$$

$$R_H = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \equiv \text{constante de Rydberg}$$

- Posteriormente, outras séries do hidrogênio puderam ser representadas por equações semelhantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\lambda} = R_H \left(1 - \frac{1}{n^2} \right); n = 2, 3, 4 \text{ e } 5 \quad \equiv \quad \text{Série de Lyman} \\ \hspace{15em} \text{(situada no ultra-violeta)} \\ \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right); n = 4, 5, 6 \text{ e } 7 \quad \equiv \quad \text{Série de Paschen} \\ \hspace{15em} \text{(situada no infra-vermelho)} \\ \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right); n = 5, 6, 7 \text{ e } 8 \quad \equiv \quad \text{Série de Brackett} \end{array} \right.$$

- Ninguém conseguia, no entanto, explicar os **mecanismos físicos** pelos quais estas raias (estas séries) se produziam.
- Até que, em 1913, **Niels Bohr** apresentou uma teoria revolucionária que explicava muito bem as observações experimentais com respeito ao átomo de hidrogênio.

1º) No átomo de hidrogênio, o elétron move-se em *órbitas circulares* bem definidas em torno do próton.

2º) Mantendo-se em uma dada órbita, *o elétron nada irradia*, apesar da sua velocidade angular.

3º) Radiação só se daria de forma quantizada (através da emissão de um fóton), quando o elétron “salta” de uma órbita, correspondente a um estado de energia, para outra órbita de energia mais baixa. A frequência relacionada com o fóton emitido independe da frequência angular orbital dos elétrons e é dada por: $hf = E_{\text{inicial}} - E_{\text{final}}$.

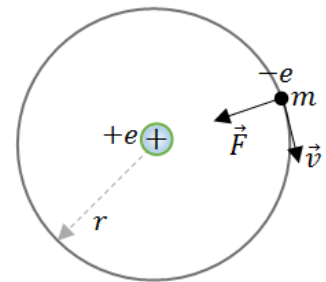
4º) As *órbitas permitidas* são as que correspondem a certos valores do momento angular do elétron, que deve ser um múltiplo inteiro de $\hbar = \frac{h}{2\pi}$:

$$L = |\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = mvr \Rightarrow \boxed{mvr = n\hbar}; n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

- Então, a partir destes postulados, e lembrando que a energia potencial do elétron no átomo de hidrogênio pode ser escrita:

$$E_{\text{pot}} = U_H = qV = (-e) \left(+ \frac{Ke}{r} \right); \text{ onde } K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

Potencial devido ao próton calculado na posição do elétron



- De forma que a **energia total** do sistema:

$$E = E_{cin} + E_{pot} = E_{cin} - \frac{Ke^2}{r} \quad (2)$$

- Quando à E_{cin} , como $\vec{F}_{cp} = \vec{F}_e$ (em módulo) \Rightarrow

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{mv^2}{r^2} \Rightarrow (\text{dividir tudo por } 2) \Rightarrow \frac{mv^2}{2} = E_{cin} = \frac{Ke^2}{2r} \quad (3)$$

- Substituindo (3) em (2), temos que a **energia total do sistema próton-elétron** que compõe o átomo de hidrogênio será:

$$E = -\frac{Ke^2}{2r} \quad (4)$$

- O sinal negativo, como esperado, indica **estado ligado** do sistema; ou seja, para remover o elétron do poço de potencial em que se encontra (criado pelo próton) é necessário que se forneça energia $E \geq \frac{Ke^2}{2r}$.

- Note, da equação (3): $\frac{mv^2}{2} = -\frac{Ke^2}{2r}$

- Enquanto que da equação (1): $mvr = n\hbar \Rightarrow v^2 = \frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2}$, que, substituindo no resultado acima:

$$\left(\frac{m}{2}\right)\left(\frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2}\right) = \frac{Ke^2}{2r} \Rightarrow r = r_n = \frac{n^2\hbar^2}{mKe^2} = n^2a_0; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Note que: $a_0 = r_{n=1} = \frac{\hbar^2}{mKe^2} = 0,53 \text{ \AA} \equiv \text{Raio de Bohr}$

Distância próton-elétron para o átomo de hidrogênio no estado fundamental

- Agora, substituindo este resultado na equação (4):

$$E = \left(-\frac{Ke^2}{2}\right)\left(\frac{mKe^2}{n^2\hbar^2}\right) \Rightarrow E_n(H) = -\frac{Ke^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$= 1/a_0$

quantização da energia do átomo de hidrogênio

- Substituindo os valores das constantes:

$$E_n(H) = -\frac{13,6}{n^2} (eV); \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Ou seja, os **níveis de energia** do átomo de hidrogênio serão:

n	E (eV)	Estado
∞	0	\vdots
4	-0,85	3 ^o excitado
3	-1,5	2 ^o excitado
2	-3,4	1 ^o excitado
1	-13,6	fundamental

➤ Note que o nível de energia mais elevado corresponde ao número quântico $n = \infty$, correspondente à energia total $E = 0$. Nesta situação o elétron encontra-se removido do sistema (sistema não está mais “ligado”), e o átomo de hidrogênio está agora **ionizado**.

➤ Ou seja, a energia mínima para se conseguir ionizar o átomo de hidrogênio é:

$$\underline{E_{\text{ioniz}} = 13,6 \text{ eV}}.$$

➤ De forma que, desses resultados podemos facilmente determinar as energias dos fótons emitidos, correspondentes às transições possíveis do sistema:

$$E_{\text{fóton}} = hf = E_i - E_f = -\frac{Ke^2}{2a_0} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \Rightarrow f = +\frac{Ke^2}{2ha_0} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left(\text{como } \lambda = \frac{c}{f} \right) \Rightarrow \frac{c}{\lambda} = \frac{Ke^2}{2ha_0} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \Rightarrow \boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{Ke^2}{2hca_0} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)}$$

$= R_H$

➤ Esta fórmula explica todas as séries empíricas de decaimento do átomo de hidrogênio obtidas anteriormente.

➤ Frente ao sucesso espetacular de sua teoria, Bohr generalizou o modelo proposto para o átomo de hidrogênio, aplicando-o aos íons He^+ , Li^{++} , Be^{+++} (átomos hidrogenóides: têm apenas um elétron em órbita), com bons resultados experimentais.

➤ Nestes casos onde se tem um núcleo atômico com carga $+Ze$ e apenas **um elétron** em órbita, os cálculos dos raios e energias atômicos são dados por:

$$\boxed{r_n = \frac{a_0}{Z} n^2} \quad \text{e} \quad \boxed{E_n = -\frac{Ke^2}{2a_0} \left(\frac{Z^2}{n^2} \right)}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

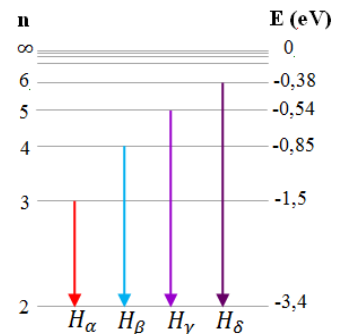
- Se o modelo de Bohr for aplicado a átomos que possuem mais do que um elétron ao redor do núcleo, no entanto, não se consegue bons resultados, devido principalmente às interações que surgem entre os próprios elétrons, como iremos discutir posteriormente.

- **Exercício 2 – capítulo 29:** A *série de Balmer* corresponde às transições eletrônicas que terminam no estado correspondente ao número quântico $n = 2$.

a) Determine a energia e o comprimento de onda do fóton de mais baixa frequência da série.

b) Calcule o mesmo para a raia espectral de menor comprimento de onda.

c) Estando o átomo no nível $n = 2$, qual a energia necessária para ionizá-lo (em eV)?



- **Resolução:**

a) $E = hf$; $\lambda = \frac{c}{f} \Rightarrow$ quero $\lambda_{máx}$ (para $E_{mín} = E_{\alpha}$)

$$\therefore \frac{1}{\lambda_{máx}} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = (1,1 \times 10^7) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 1,53 \times 10^6 \Rightarrow \underline{\lambda_{máx} = 655 \text{ nm}}$$

b) Igualmente: $\frac{1}{\lambda_{mín}} = (1,1 \times 10^7) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) \Rightarrow \underline{\lambda_{mín} = 433 \text{ nm}}$

c) Ionização: $\underline{E_{sistema} = 0 \leftrightarrow n = \infty}$

$$\therefore \frac{1}{\lambda_{ioniz}} = (1,1 \times 10^7) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) \Rightarrow \underline{\lambda_{ioniz} = 363,6 \text{ nm}}$$

- Como $\lambda = \frac{c}{f}$ e $E = hf$: $E_{ioniz} = \frac{hc}{\lambda_{ioniz}} = 5,45 \times 10^{-19} \text{ J} = 3,4 \text{ eV}$

- Observe que seria esta mesma a energia liberada pelo sistema caso o hidrogênio estivesse ionizado e capturasse um elétron de forma que o estado quântico final fosse o de $n = 2$:

$$E_{fóton} = \left(-\frac{13,6 \text{ eV}}{\infty^2} + \frac{13,6 \text{ eV}}{2^2} \right) = \underline{3,4 \text{ eV}}$$

- **Exemplo:** Em 1896, o cientista Pickering utilizou técnicas espectroscópicas para analisar a luz emitida pela estrela ξ da constelação de *Puppis* (*Popa*) e propôs uma fórmula empírica para as raiais espectrais que ele observou:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{(n_f/2)^2} - \frac{1}{(n_i/2)^2} \right)$$

Mostre que estas linhas espectrais podem ser explicadas em termos das transições ocorridas no He^+ .

- **Resolução:**

- Como o He^+ tem número atômico $Z = 2$, então segundo o *modelo de Bohr*:

$$E_n = \frac{-Ke^2}{2a_0} \left(\frac{4}{n^2} \right); \text{ e como } hf = E_i - E_f = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \left(\frac{1}{hc} \right) \left(-\frac{Ke^2}{2a_0} \right) \left(\frac{4}{n_i^2} - \frac{4}{n_f^2} \right) = + \frac{Ke^2}{2a_0 hc} \left(\frac{1}{(n_f/2)^2} - \frac{1}{(n_i/2)^2} \right)$$

= R_H