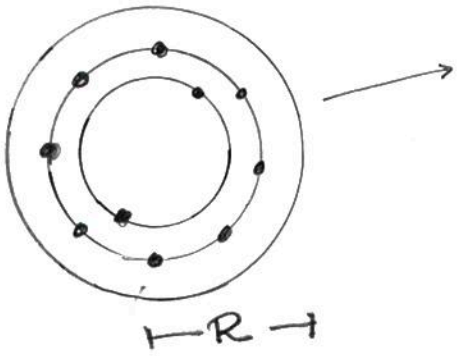
# 4. O MODELO DE BOHR PARA O ÁTOMO

## 4.1 O MODELO DE THOMSON




O átomo seria uma esfera de carga positiva com vários elétrons distribuídos em seu volume.
Thomson tentou explicar a regularidade da Tabela Periódica a partir da forma como os elétrons são distribuídos.

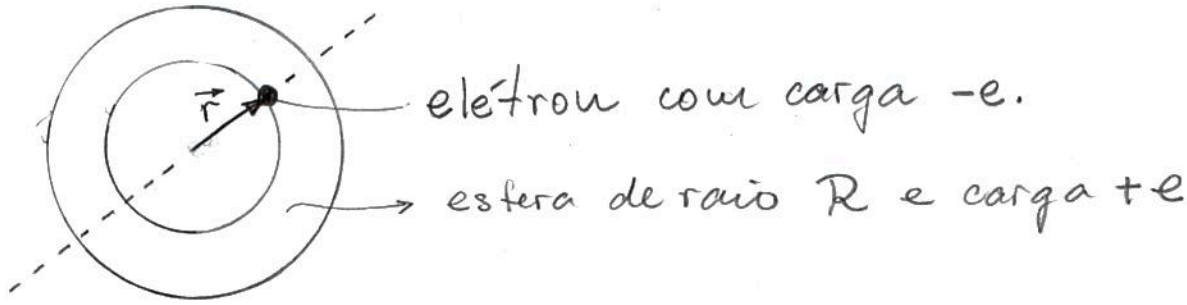
Argumentos baseados em densidade, massa atômica (típicos) e número de Avogadro sugeriam que $R \sim 10^{-10}$ m.

Inicialmente, Thomson supôs que a esfera positiva não tinha massa. Assim, o átomo deveria possuir milhares de elétrons para justificar a sua massa ($M_{at} \gg m_e$).

Depois ele supôs que quase toda massa estivesse na carga positiva, com o nº de elétrons da ordem de A/2, sendo A o nº de massa da Tabela Periódica.

Elétrons em mov. acelerado no átomo emitiriam radiação, de acordo com as observações.

Ex 4.1 Modelo de Thomson para o H: elétron vibrando em MHS.




De acordo com a Lei de Gauss, o campo elétrico no interior de uma esfera de carga +e, uniformente distribuída em seu volume, é

$$\vec{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 R^3}\vec{r}$$ → você viu isso na Física III

A força sobre o elétron $e^-$

$$\vec{F} = -e\vec{E} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}\vec{r}$$

Supondo que o elétron se move ao longo de uma linha reta,

$$F = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} r \quad \rightarrow \text{MHS.}$$

$$F = -kx \Rightarrow \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \Rightarrow \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3 m}}$$

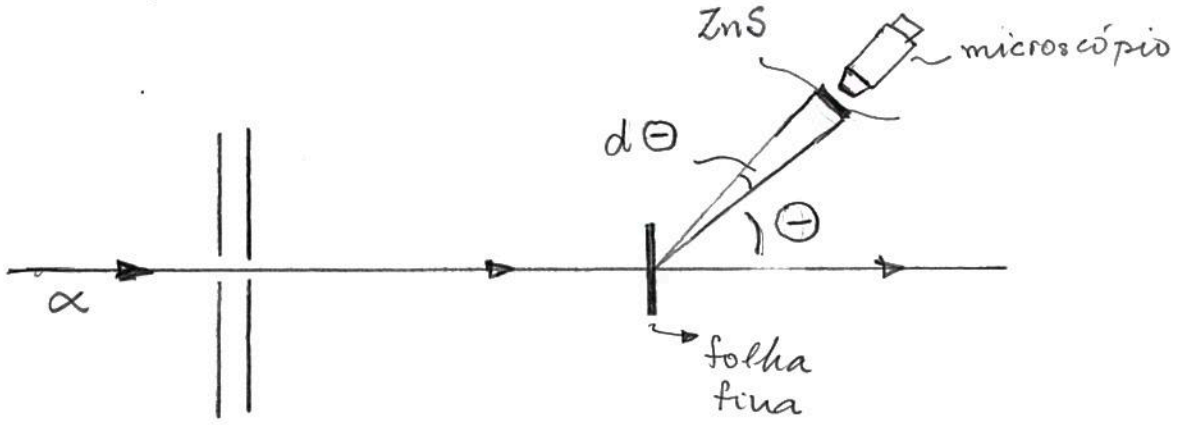
$$R = 10^{-10}\,m \Rightarrow \nu = 2{,}53 \times 10^{15}\,Hz$$

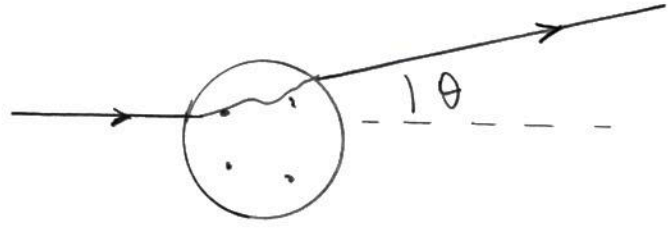
$\lambda = \frac{c}{\nu} = 1186\ \text{Å}$ → o átomo só emitiria radiação com esse $\lambda$.

* No problema 4.1 você mostrará que, se o elétron girasse em órbita circular dentro do átomo, ele emitiria radiação com a mesma freq. obtida aqui.

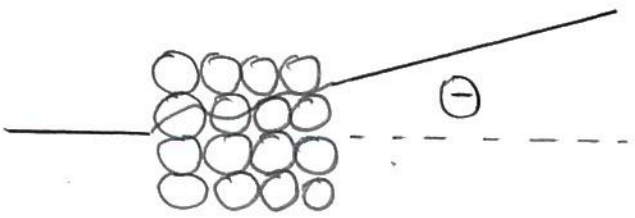
* Mas o Expt mostra que o H emite radiação com várias freq. diferentes!

* Espalhamento de partículas $\alpha$ (núcleo do átomo de He: $q_\alpha = 2e$, $M_\alpha = 6{,}65 \times 10^{-27}\ \text{kg}$): Geiger e Marsden (1909).




θ → deflexão por um único átomo




Θ → deflexão por vários átomos da folha.

* Relação entre $\Theta$ e $\theta$.

Para simplificar, pense em $\Theta$ e $\theta$ no plano (coord polares).

A média dos desvios de muitas partículas é zero pq $\theta$ positivo é tão provável quanto $\theta$ negativo. Assim as grandezas relevantes são as médias quadráticas: $(\overline{\theta^2})^{1/2}$ e $(\overline{\Theta^2})^{1/2}$.

$$\Theta = \sum_i \theta_i \quad \rightsquigarrow \text{ soma sobre os átomos espalhadores}$$

$$\Theta^2 = \sum_i \theta_i \sum_j \theta_j = \sum_i \theta_i^2 + \sum_i \theta_i \sum_{j \neq i} \theta_j$$

Considerando um número grande de átomos espalhadores,

$$\sum_{j \neq i} \theta_j = 0 \quad \rightarrow \text{ o desvio pode ser tanto positivo quanto negativo.}$$

Assim $\Theta^2 = \sum_i \theta_i^2 = N \overline{\theta_i^2}$ → média sobre os N átomos espalhadores.

$\overline{\Theta}^2 = N \overline{\theta^2}$ → média sobre os N átomos e sobre as partículas $\alpha$

média sobre as partículas $\alpha$ ←

$$(\overline{\Theta^2})^{1/2} = \sqrt{N}\,(\overline{\theta^2})^{1/2}$$

* Pode-se mostrar que o nº de partículas $\propto$ espalhadas de ângulos entre $\Theta$ e $\Theta + d\Theta$ é dado por

$$N(\Theta)\,d\Theta = \frac{2I\Theta}{\bar{\Theta}^2}\, e^{-\Theta^2/\bar{\Theta}^2}\, d\Theta \qquad \text{válido para } \bar{\Theta}^2 \ll 1\,\text{rad}$$

$I \rightarrow$ número de partículas incidentes.

* A distribuição é normalizada:

$$\int_0^\pi N(\Theta)\,d\Theta = \frac{2I}{\bar{\Theta}^2}\int_0^\pi \Theta\, e^{-\Theta^2/\bar{\Theta}^2}\, d\Theta$$

→ faça $u = \Theta^2/\bar{\Theta}^2$ para resolver a integral.

$$= -I\, e^{-\Theta^2/\bar{\Theta}^2}\Big|_0^\pi = I$$

→ se $\bar{\Theta}^2 \ll \pi$ a exponencial se anula no limite superior

Ex. 4.2 Em um expt típico (Geiger e Marsden, 1909) com uma folha de ouro de espessura $10^{-6}$ m, obteve-se $\bar{\Theta}^2 \simeq 1^\circ \simeq 2\times 10^{-2}$ rad.

(a) calcular $\bar{\theta}^2$.

$$N \simeq \frac{10^{-6}\,\text{m}}{10^{-10}\,\text{m}} = 10^4$$

$$\bar{\theta}^2 = \frac{\bar{\Theta}^2}{\sqrt{N}} \simeq \frac{2\times 10^{-2}\,\text{rad}}{\sqrt{10^4}} \simeq 2\times 10^{-4}\,\text{rad}.$$

No prob. 3 você vai mostrar que o ângulo de espalhamento máximo por um «átomo de Thomson» é $\sim 10^{-4}$ rad, de acordo com o valor calculado aqui.

(b) Calcular a frasão de partículas espalhadas em ângulos maiores que 90°:

$$f = \frac{1}{I}\int_{\pi/2}^{\pi} N(\theta)\,d\theta = -e^{-\theta^2/\overline{\theta}^2}\Big/_{\pi/2}^{\pi} \simeq e^{-90^2} - e^{-180^2}$$

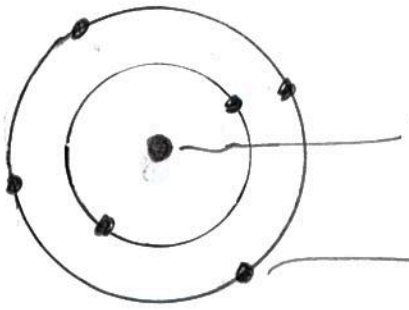
↳ fizemos $\overline{\theta}^2 = 1°$

$$f \sim e^{-3500} = 0$$

O expt mostra que $f \sim 10^{-4}$, um valor pequeno, mas que pode ser medido.

O expt está em desacordo com o modelo de Thomson!

## 4.2 O MODELO DE RUTHERFORD

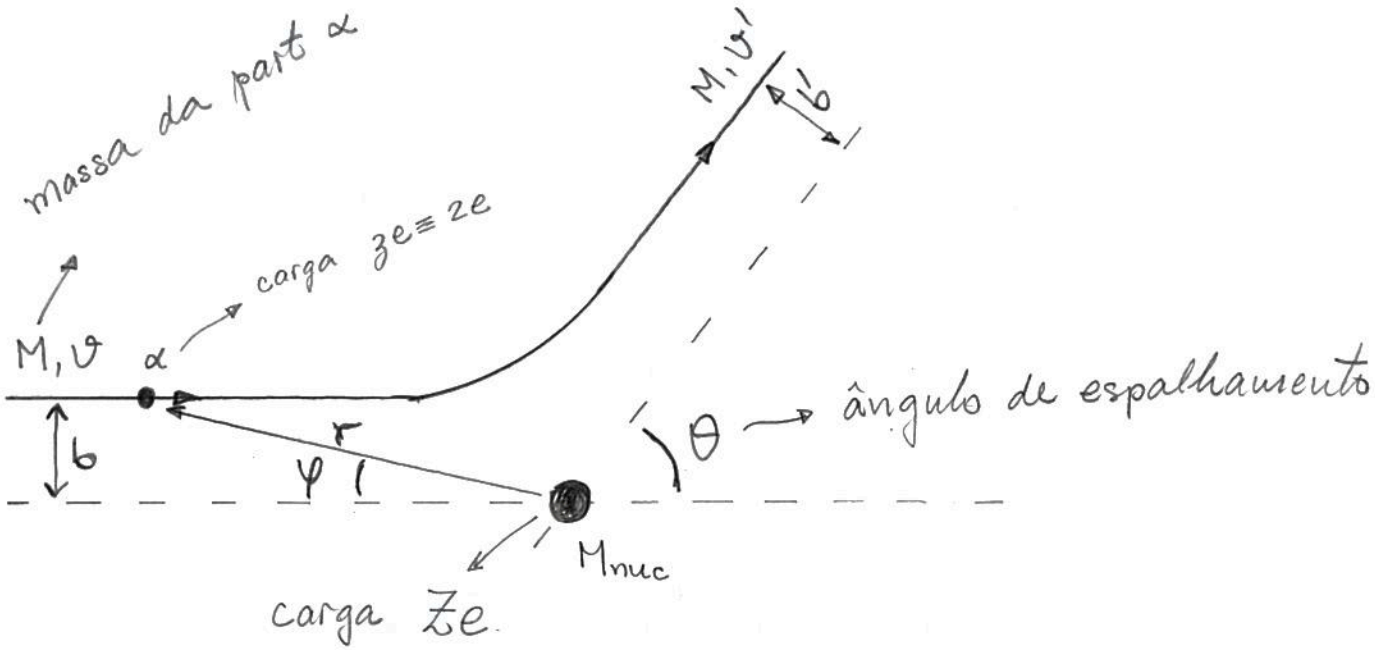



As partículas $\alpha$ seriam espalhadas pelo núcleo.

Vamos supor $M_{nuc} \gg M$, de forma que o recuo do núcleo pode ser desprezado.

Da cons. energia:

$$\frac{1}{2}Mv^2 = \frac{1}{2}Mv'^2 \quad \Rightarrow \quad \boxed{v' = v}$$




Da cons. momento angular:

$$Mvb = Mv'b' \Rightarrow \boxed{b' = b}$$

* Equação da trajetória: $r = r(\varphi)$

A aceleração em coord polares pode ser escrita como (pg 35)

$$\vec{a} = (\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2)\hat{r} + (2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi})\hat{\varphi}$$

Como só existe força atuando na direção radial,

$$F_r = Ma_r \Rightarrow \boxed{\frac{ze\,Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = M\left[\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2\right]} \quad (1)$$

($z = 2$)

Como a força é central, o momento angular é cte:

$$\ell = Mr^2\frac{d\varphi}{dt} = \text{cte.}$$

$\ell = M v b$ → vamos usar isso mais à frente

Então $\dfrac{d\varphi}{dt} = \dfrac{\ell}{Mr^2}$ (2)

Supondo $r \equiv r[\varphi(t)]$,

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\ell}{Mr^2}\frac{dr}{d\varphi}$$

Mudança de variáveis:

$r = \dfrac{1}{u} \Rightarrow$ $\boxed{\dfrac{d\varphi}{dt} = \dfrac{\ell}{M}u^2}$ (3)

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\ell}{M}u^2\frac{dr}{d\varphi} \quad (4)$$

$$r \equiv r[u(\varphi)] \Rightarrow \frac{dr}{d\varphi} = \frac{dr}{du}\frac{du}{d\varphi} = -\frac{1}{u^2}\frac{du}{d\varphi}$$

A eq. (4) torna-se $\boxed{\dfrac{dr}{dt} = -\dfrac{\ell}{M}\dfrac{du}{d\varphi}}$ (5)

Derivando de novo:

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{d}{dt}\frac{dr}{dt} = -\frac{\ell}{M}\frac{d}{dt}\frac{du}{d\varphi} = -\frac{\ell}{M}\frac{d^2u}{d\varphi^2}\frac{d\varphi}{dt}$$

De (3), obtemos

$$\boxed{\frac{d^2r}{dt^2} = -\frac{\ell^2}{M^2}u^2\frac{d^2u}{d\varphi^2}} \quad (6)$$

(3) e (6) → (1), leva a

$$\frac{ze\,Ze}{4\pi\varepsilon_0}u^2 = M\left[-\frac{\ell^2u^2}{M^2}\frac{d^2u}{d\varphi^2} - \frac{\ell^2}{M^2}u^3\right]$$

ou $$\frac{d^2u}{d\varphi^2} + u = -\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0\ell^2M} = -\frac{zZe^2M}{4\pi\varepsilon_0(Mvb)^2}$$

Definindo

$$\boxed{D = \frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0(Mv^2/2)}}$$ → tem dim de comprimento

podemos escrever

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2} + u = -\frac{D}{2b^2}$$

A solução é (mostre)

$$u = A\cos\varphi + B\,\text{sen}\,\varphi - \frac{D}{2b^2} \qquad (7)$$

* condições de contorno:

(1) $\varphi \to 0 \Rightarrow r \to \infty\ (u \to 0)$ → ver fig pg 7

$$0 = A\cos 0 + B\,\text{sen}\,0 - \frac{D}{2b^2}$$

$$A = \frac{D}{2b^2}$$

(2) $\varphi \to 0 \Rightarrow \frac{dr}{dt} = -v$ (ver fig pg 7)

De (5),

$$-v = -\frac{\ell}{M}\left(\frac{du}{d\varphi}\right)_{\varphi=0} = -\frac{Mvb}{M}\left(\frac{du}{d\varphi}\right)_{\varphi=0}$$

$$\left(\frac{du}{d\varphi}\right)_{\varphi=0} = \frac{1}{b}$$

como $\frac{du}{d\varphi} = -A\operatorname{sen}\varphi + B\cos\varphi$,

$$-A\operatorname{sen}0 + B\cos 0 = \frac{1}{b} \quad \Rightarrow \quad B = \frac{1}{b}$$

Assim ($u = 1/r$),

$$\boxed{\frac{1}{r} = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\varphi + \frac{D}{2b^2}(\cos\varphi - 1)}$$ → Eq. da trajetória.

* Colisão frontal:




Cons. energia:

$$K_\infty + V_\infty = K_{min} + U_{min}$$

$$\frac{Mv^2}{2} + 0 = 0 + \frac{3Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R_{min}}$$

$$R_{min} = \frac{3Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 (Mv^2/2)}$$

Note que $R_{min} \equiv D$.

D é a distância de máxima aproximação em uma colisão frontal.

* No prob 4.4 você vai mostrar que o ângulo de espalhamento (fig pg 7) é dado por

$$\boxed{\operatorname{cotg}\frac{\theta}{2} = \frac{2b}{D}} \qquad (8)$$

* Ex. 4.4 Distância de máxima aproximação para colisão não frontal.

Da fig (pg 7), $R_{min} \longrightarrow \varphi = \frac{\pi-\theta}{2}$

Da Eq. trajetória

$$\frac{1}{R_{min}} = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right) + \frac{D}{2b^2}\left[\cos\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right) - 1\right]$$

$$= \frac{1}{b}\cos\frac{\theta}{2} + \frac{D}{2b^2}\left[\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} - 1\right]$$

Usando o resultado do prob. 4.4,

$$\frac{1}{b} = \frac{2}{D}\operatorname{tg}\frac{\theta}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{R_{min}} = \frac{2}{D}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} + \frac{2}{D}\left[\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} - 1\right]\operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2}$$

$$= \frac{2}{D}\left[\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\left(1+\operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2}\right) - \operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2}\right]$$

$$= \frac{2}{D}\left[\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\cdot\sec^2\frac{\theta}{2} - \operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2}\right]$$

$$= \frac{2}{D}\,\frac{\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\left(1-\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\right)}{\cos^2\frac{\theta}{2}}$$

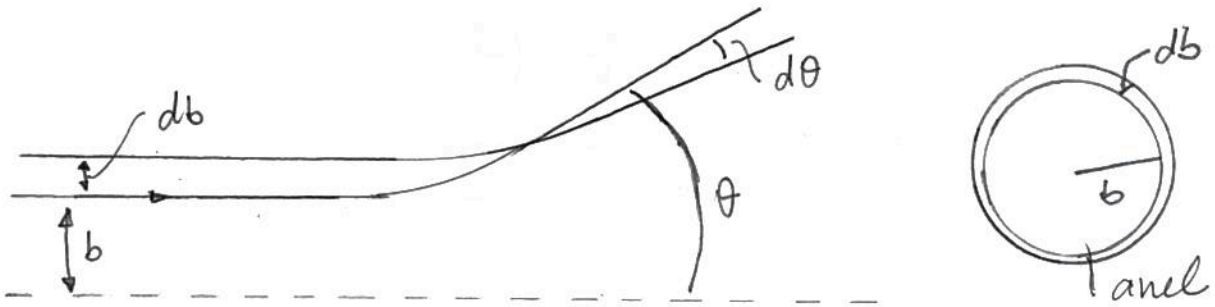
$$= \frac{2}{D}\,\frac{\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\left(1-\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\right)}{\left(1-\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\right)\left(1+\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\right)}$$

$$R_{min} = \frac{D}{2}\left[1 + \frac{1}{\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}}\right]$$

* Caso especial: $\theta = \pi$ (colisão frontal)

$$R_{min} = D.$$

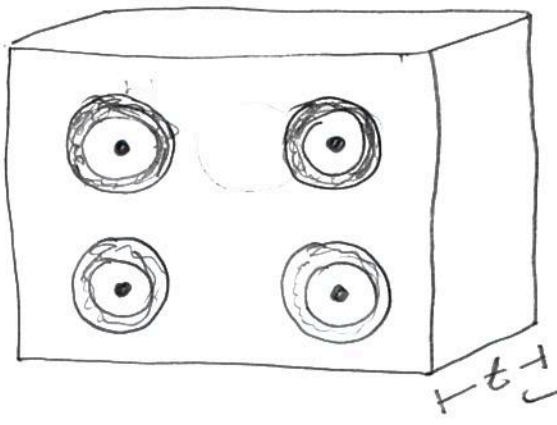
* Ex 4.5 Distribuição angular de part $\alpha$.




Part $\alpha$ incidentes com parâmetro de impacto entre $b$ e $b+db$ são espalhadas com ângulo entre $\theta$ e $\theta+d\theta$.

A probabilidade de que uma part $\alpha$ incida com parâmetro de impacto entre $b$ e $b+db$ sobre um átomo espalhador é

$$P(b)\,db = \eta\,\underbrace{2\pi b\,db}_{\text{área do anel contando todas as camadas.}}$$




$$\eta = \frac{\text{nº de átomos}}{\text{área}}$$

$$\rho = \frac{\text{nº átomos}}{\text{volume}}$$

$$n = \frac{\text{nº atm}}{\text{área}} = \frac{\text{nº atm} \times t}{\text{área} \times t} = \frac{\text{nº atm}}{\text{volume}}\, t$$

$n = \rho t$ → vamos supor que a folha é suficientemente fina para que os átomos não fiquem "escondidos" um atrás do outro.

Assim

$$P(b)\,db = \rho t\, 2\pi b\, db$$

O número de part $\alpha$ espalhadas com ângulo entre $\theta$ e $\theta + d\theta$ é

$$N(\theta)\,d\theta = -I\, P(b)\,db$$

(pq $\theta$ diminui quando $b$ cresce.)

($I$ → nº total de part $\alpha$ incidentes)

De (8),

$$b = \frac{D}{2}\cot\frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \quad db = -\frac{D}{2}\cdot\frac{1}{2}\,\text{cossec}^2\frac{\theta}{2}\,d\theta$$

$$db = -\frac{D}{4}\,\frac{d\theta}{\text{sen}^2\frac{\theta}{2}}$$

$$b\,db = -\frac{D^2}{8}\,\frac{\cos\frac{\theta}{2}\,d\theta}{\text{sen}^3\frac{\theta}{2}}$$

Multiplicando por $2\,\text{sen}\frac{\theta}{2}$ no numerador e denominador, e usando

$$2\,\text{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} = \text{sen}\,\theta,$$

temos

$$b\,db = -\frac{D^2}{16}\,\frac{\operatorname{sen}\theta\, d\theta}{\operatorname{sen}^4\frac{\theta}{2}}$$

Supondo que a folha é suficientemente fina para que não haja superposição de átomos, cada part $\alpha$ será espalhada por um único átomo. Assim $\Theta = \theta$

Substituindo D (pg 9),

$$N(\theta)\,d\theta = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \left(\frac{3ze^2}{2Mv^2}\right)^2 I\,pt\,\frac{2\pi\operatorname{sen}\theta\, d\theta}{\operatorname{sen}^4\frac{\theta}{2}}$$

* O resultado acima foi verificado expt por Geiger e Marsden em (1909).

Algumas características importantes que foram testadas e verificadas:

(1) $N(\theta)$ descresce rapidamente quando $\theta$ cresce, mas não tão rápido quanto no modelo de Thomson.

A probabilidade de uma part $\alpha$ ser espalhada com $\theta > 90°$ pode ser medida no expt. (ver Ex 4.2).

(2) $N(\theta) \propto t \propto N \rightsquigarrow$ nº total de átomos espalhadores.

No modelo de Thomson era $\sqrt{N}$ (Ex. 4.2, pg 5)

(3) $N(\theta) \propto 1/K_\alpha^2$

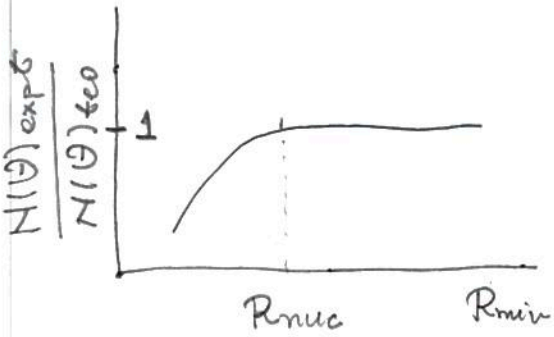
(4) $N(\theta) \propto Z^2$. Isso foi usado para medir $Z$ (os nºs atômicos dos átomos).

* Correção para massa nuclear finita. No caso de $M_{nuc}$ não ser muito maior que $M$ (das part $\alpha$), deve-se trocar $M$ pela massa reduzida na fórmula de espalhamento Rutherford.

* Toda a dedução feita supõe que as part $\alpha$ não penetram no núcleo. Pode-se imaginar que se isso ocorrer, outras forças estariam envolvidas e a fórmula obtida não reproduziria o experimento.
Essa idéia foi usada para estimar o raio do núcleo.
O grupo de Rutherford fez medidas com partículas incidentes com velocidades diferentes e gráficos de

$$\frac{N(\theta) \text{ medido}}{N(\theta) \text{ calculado}} \longrightarrow \text{para um ângulo fixo}$$

em função da distância de máxima aproximação para uma folha de Al.




Rnuc é a distância, a partir da qual os resultados teóricos não reproduzem os expt.

A conclusão obtida foi que $R_{nuc} \sim 10^{-14}$ m.

* A fórmula de Espalhamento Rutherford pode ser escrita em termos da seção de choque diferencial, definida por meio da expressão:

$$N(\theta)\, d\theta = I\, n\, \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega$$

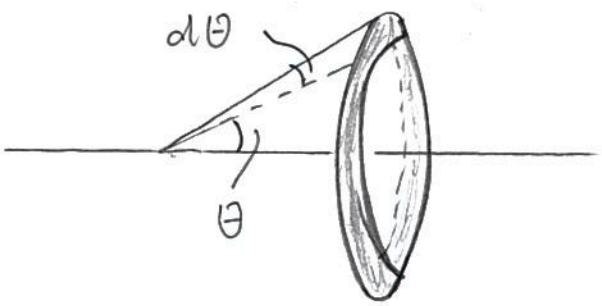
onde:

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ → seção de choque diferencial

$d\Omega = 2\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta$ → ângulo sólido

Assim,

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{1}{\operatorname{sen}^4\frac{\theta}{2}}}$$




$d\Omega = \frac{dA}{r^2}$ → área

$d\Omega = 2\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta$

A fórmula da pag 14 fornece o número total de partículas espelhadas de ângulos entre $\theta$ e $\theta + d\theta$ (ou seja na área em forma de anel da pag 16).

A seção de choque $d\sigma/d\Omega$ pode ser multiplicada por $I n$ e por qualquer ângulo sólido (por exemplo) aquele definido pelo detetor da pag 3) para fornecer o número de partículas espalhadas. Na prática, o que se conta é o número de partículas que chegam ao detetor.

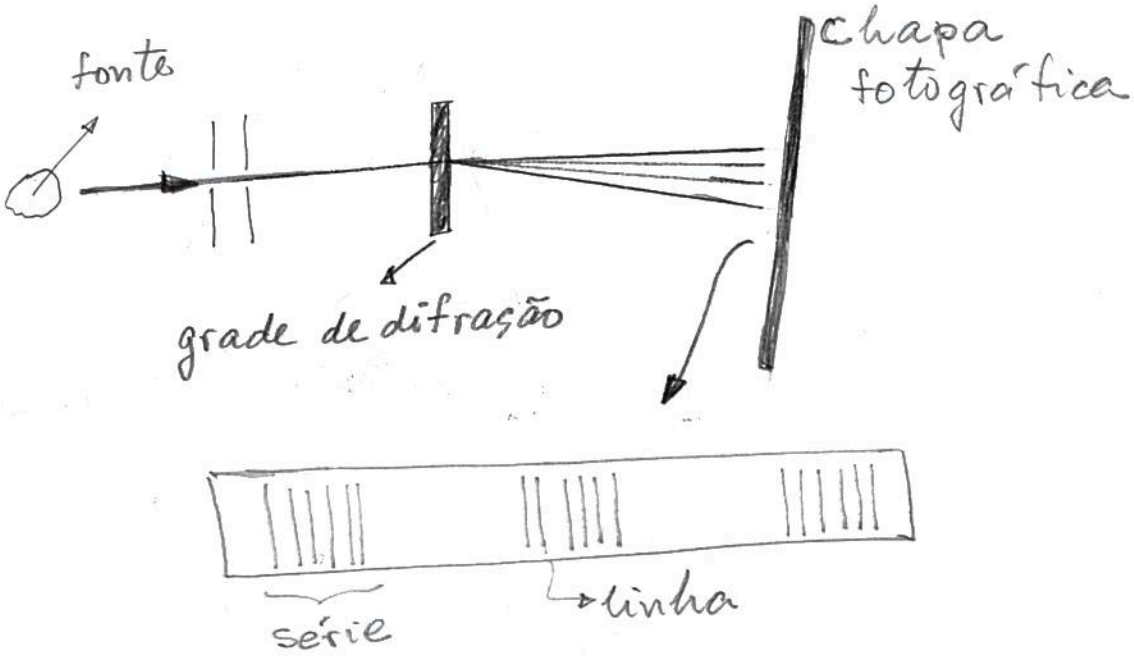
## 4.3 A ESTABILIDADE DO ÁTOMO NUCLEAR

Ao propor seu modelo atômico, Rutherford percebeu que os elétrons não poderiam estar parados, se não, cairiam no núcleo por causa da atração coulombiana. Então ele propôs um modelo similar ao modelo planetário, onde os elétros giriam em torno do núcleo.

Mas, eletrons girando possuem aceleração centrípeta. E a teoria eletromagnética clássica prevê que carga acelerada emite radiação. À medida que emitiria radiação o elétron perderia energia cinética e cairia no núcleo.

Além disso, a TEM clássica prevê que o átomo emitiria um espectro contínuo de radiação, o que não é verificado expt: os átomos emitem espectros discretos de radiação.

## 4.4 ESPECTROS ATÔMICOS




A fonte contém átomos excitados por meio de uma descarga elétrica.

Cada átomo emite um espectro característico (assinatura do átomo).

* Espectro do hidrogênio

A parte visível do espectro do H era conhecida desde 1859.

* Em 1885, Balmer propôs uma fórmula simples para os comprimentos de onda emitidos na faixa visível (série de Balmer). Em $\AA$,

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \qquad n = 3, 4, 5, 6.$$

* Em 1890, Rydberg reescreveu essa, e outras fórmulas existentes para outros átomos, em termos de $1/\lambda$. Para o hidrogênio

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \qquad n = 3, 4, 5, \cdots$$

$R_H = 10\,967\,757{,}6\ m^{-1}$ → constante de Rydberg

* Outras séries, fora da faixa visível, foram descobertas posteriormente

| Nome | Fórmula | Faixa |
|---|---|---|
| Lyman (1906 – 1914) (1ª linha) | $\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, $n = 2, 3, 4, \cdots$ | UV |
| Balmer (1859) | $\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, $n = 3, 4, 5, \cdots$ | UV e visível |
| Paschen (1908) | $\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, $n = 4, 5, 6 \cdots$ | IR |

Brackett (1922) $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ IR

$n = 5, 6, 7 \cdots$

Pfund (1924) $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ IR

$n = 6, 7, 8, \cdots$

## 4.5 OS POSTULADOS DE BOHR

Em 1913 Niels Bohr propôs um modelo atômico capaz de explicar o espectro do H Baseado em 4 postulados:

1) O elétron se move em órbita circular em torno do núcleo sob influência da força coulombiana, obedecendo as leis da mec. clássica.

2) As órbitas possíveis são aquelas onde

$$L = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

$L \rightarrow$ momento angular.

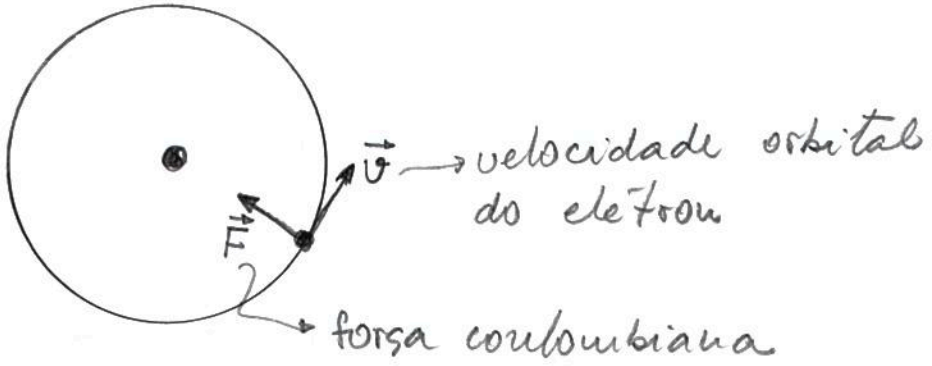
3) O elétron não emite radiação quando está em uma órbita permitida

4) Quando passa de uma órbita com energia $E_i$ para outra de energia $E_f$ ($E_i > E_f$), o elétron (ou o átomo) emite um fóton com energia

$$h\nu = E_i - E_f$$

* No caso em que $E_f > E_i$, o elétron poderia absorver um fóton com energia $h\nu = E_f - E_i$ e passar da órbita de menor energia para a de maior energia.

## 4.6 O MODELO DE BOHR




$$F = m a_c \Rightarrow \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m\frac{v^2}{r} \qquad (1)$$

$Z \rightarrow$ número atômico.

Para o H, $Z = 1$.

Da regra de quantização do momento angular

$$mvr = n\hbar \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{mr} \qquad (2)$$

$$(2) \rightarrow (1) \Rightarrow r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mZe^2} n^2 \qquad (3)$$

$$(3) \rightarrow (2) \Rightarrow v = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar}\frac{1}{n} \qquad (4)$$

Fazendo $n=1$, obtemos

$$r = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{mZe^2} = 0{,}529\,\text{Å} \rightarrow \text{raio de Bohr}$$

$Z=1$

Os outros raios são dados por

$$\boxed{r_n = n^2 a_0} \quad \rightsquigarrow \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

* A eq. (1) pode ser reescrita como

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = 2\,\frac{mv^2}{2} \quad \Rightarrow V = -2K$$

($V$: energia potencial; $K$: energia cinética)

Este resultado é um caso particular do teorema do virial.

$$E = K + V = -K = -\frac{1}{2}mv^2$$

De (4),

$$\boxed{E_n = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}} \qquad (5)$$

* Em uma transição de uma órbita com $n_i$ para outra com $n_f$ ($n_i > n_f$), o átomo emite radiação com frequência

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{2mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

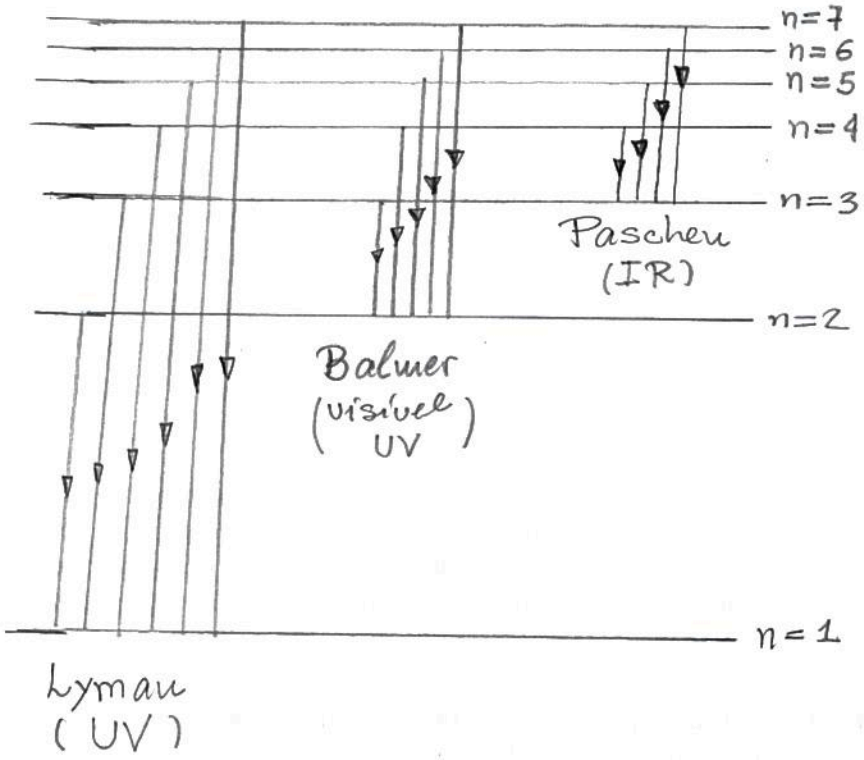
Definindo

$$R_\infty = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}$$

→ Fazendo as contas, $R_\infty = 10\,973\,732\ m^{-1}$ que é muito próximo da cte de Rydberg.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = Z^2 R_\infty \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Para o H, $Z = 1$.




$n_i > n_f$
→ emissão

$n_i < n_f$
→ absorção

Para o $H_1$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2}\ eV \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

* As séries de Lymau, Brackett e Pfund foram observadas após Bohr apresentar o seu modelo. Dessa forma, se constituiram em comprovação do modelo de Bohr.

Ex. 4.2 Estimar a temperatura de um gás contendo H para que sejam observadas linhas da série de Balmer no espectro de absorção.

sol. $n_i = 2$, $n_f = 3, 4, 5, \cdots$

Então deve existir um número significativo de átomos no estado $n_i = 2$.

$P_n \propto e^{-E_n/kT}$ → fator de Boltzmau

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-(E_2 - E_1)/kT}$$

$N_2 \rightarrow$ número de átomos na órbita $n=2$.

$E_1 = -13,6\ eV$

$E_2 = -13,6\ eV / 2^2 = -3,39\ eV$

$E_2 - E_1 = 10,21\ eV = 1,63 \times 10^{-18}\ J$

$$\frac{E_2 - E_1}{k} = \frac{1,63 \times 10^{-18} J}{1,38 \times 10^{-23} J/K} = 1,2 \times 10^5\ K$$

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-1,2 \times 10^5 K / T}$$

T deve ser maior ou da ordem de $10^5 K$ para que $N_2/N_1$ seja significativo.

Para T muito menor que esse valor, só as linhas da série de Lyman são observadas no espectro de absorção.

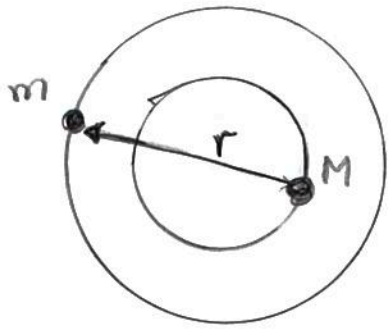
* Os resultados obtidos nesta seção são válidos para átomos hidrogenóides (de 1 elétron):

$He^+$ $(Z=2)$, $Li^{++}$ $(Z=3)$, ...

## 4.7 CORREÇÃO PARA MASSA NUCLEAR FINITA

Todo desenvolvimento feito na seção anterior pressupõe que o elétron gira em torno do núcleo. Na verdade, os dois

giram em torno do centro de massa comum.




Pode-se corrigir os resultados obtidos fazendo a troca

$$m \longrightarrow \mu = \frac{mM}{m+M}$$

r continua sendo a distância entre o elétron e o núcleo.

Para o H,

$$R_\infty \longrightarrow R_H = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c}$$

$$R_\infty = 10973732\ m^{-1}$$

$$R_H = 10967758\ m^{-1}$$

$M = 1836\, m$

$\mu = 0{,}999456\, m$

Ex. 4.8 Átomo de positrônio: $e^+$ e $e^-$.

$$\mu = \frac{m \cdot m}{m+m} = \frac{m}{2}$$

$$R_{pos} = \frac{R_\infty}{2}$$

De (3), pg 21, $r_{pos} = 2\, r_H$

De (5), pg 22, $E_{pos} = \frac{1}{2} E_H$

$$\frac{1}{\lambda_{pos}} = \frac{1}{2}\frac{1}{\lambda_H} \quad \Rightarrow \quad \lambda_{pos} = 2\lambda_H$$

Veja o Ex. 4.9 no livro.

Ex. 4.10 Deutério: $M_D = 2M$

$$R_H = \frac{\mu_H}{m} R_\infty = \frac{R_\infty}{1+\frac{m}{M}} = \frac{10973732}{1+\frac{1}{1836}} = 10\,967\,758\ m^{-1}$$

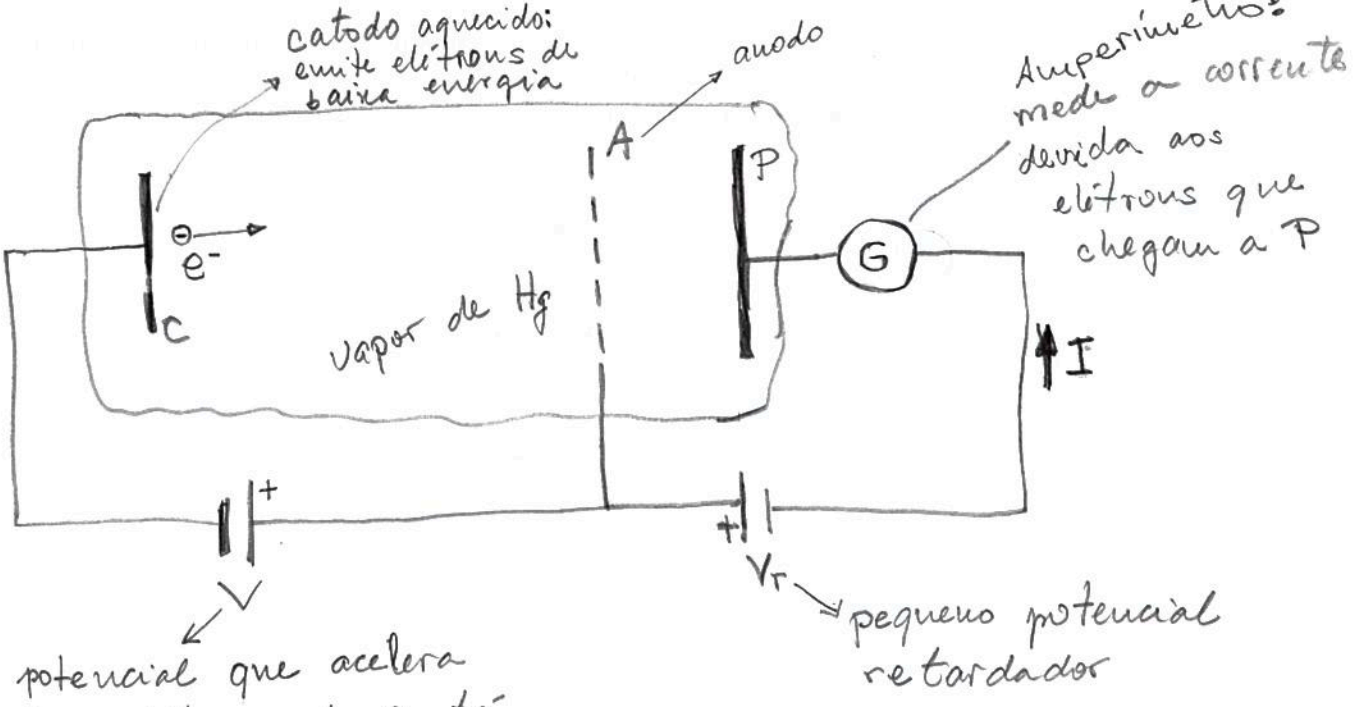
$$R_D = \frac{\mu_D}{m} R_\infty = \frac{R_\infty}{1+\frac{m}{2M}} = \frac{10973732}{1+\frac{1}{2\times 1836}} = 10\,970\,745\ m^{-1}$$

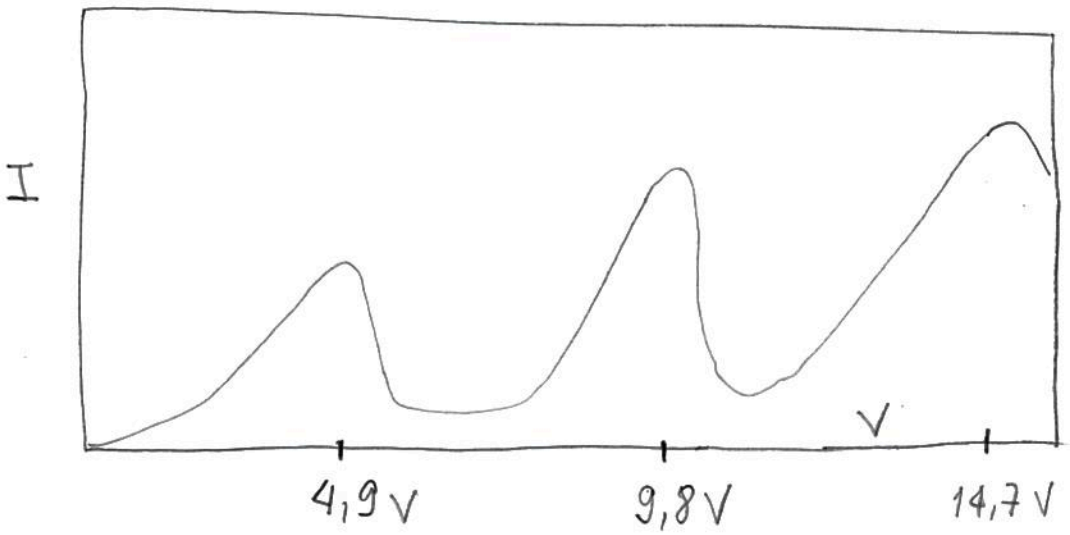
$R_D > R_H \Rightarrow \lambda_D < \lambda_H \rightsquigarrow$ as linhas são muito próximas.

A concentração típica do deutério é de 1 parte em 6000. É difícil identificar o deutério porque as suas linhas são muito fracas.

## 4-8 ESTADOS DE ENERGIA DO ÁTOMO

Uma comprovação experimental de que os átomos possuem níveis de energia discretos foi dada pelo experimento de Franck e Hertz (1914).





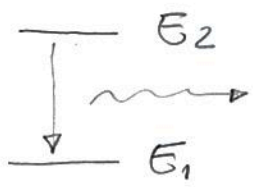

Os elétrons emitidos pelo catodo são acelerados pela ddp V até chegarem ao anodo A.

Os elétrons que passam através dos buracos em A, e conseguem vencer a ddp retardadora $V_r$, chegam a P produzindo a corrente que é lida no amperímetro.

Inicialmente I cresce quando V cresce: os elétrons adquirem maior energia cinética para vencer a ddp $V_r$.

Quando V atinge 4,9 V, I cai abruptamente pq os átomos de Hg podem absorver as energias de muitos elétrons: 4,9 eV é a diferença de energia entre o primeiro nível de energia excitado do Hg e o nível fundamental. Após V passar de 4,9 V, o vapor de Hg passa a emitir uma linha com $\lambda = 2536\ A^{\circ}$:

$$E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda}$$




$\lambda = 2536\,A^\circ \Rightarrow E_2 - E_1 = 7{,}84 \times 10^{-19}\,J$

$= 4{,}9\ eV$

Se $V > 4{,}9\ V$, após perder as suas energias para átomos de Hg, os electrons continuam sendo acelerados. Assim I volta a crescer quando V cresce.

Quando V atinge 9,8 V I cai abruptamente de novo. Vários electrons perdem suas energias para átomos de Hg duas vezes e não ficam com energia suficiente para vencer $V_r$.

I cai de novo quando os electrons perdem as suas energias três vezes, ....

## 4.9 INTERPRETAÇÃO DAS REGRAS DE QUANTIZAÇÃO

Em 1916 Wilson e Sommerfeld enunciaram uma regra mais geral de quantização que contempla as quantizações de Planck e de Bohr como casos particulares.

Regra: Para qualquer sistema físico cujas coordenadas são funções periódicas do tempo

$$\oint p\,dq = n\,h$$

$q \rightarrow$ coordenada

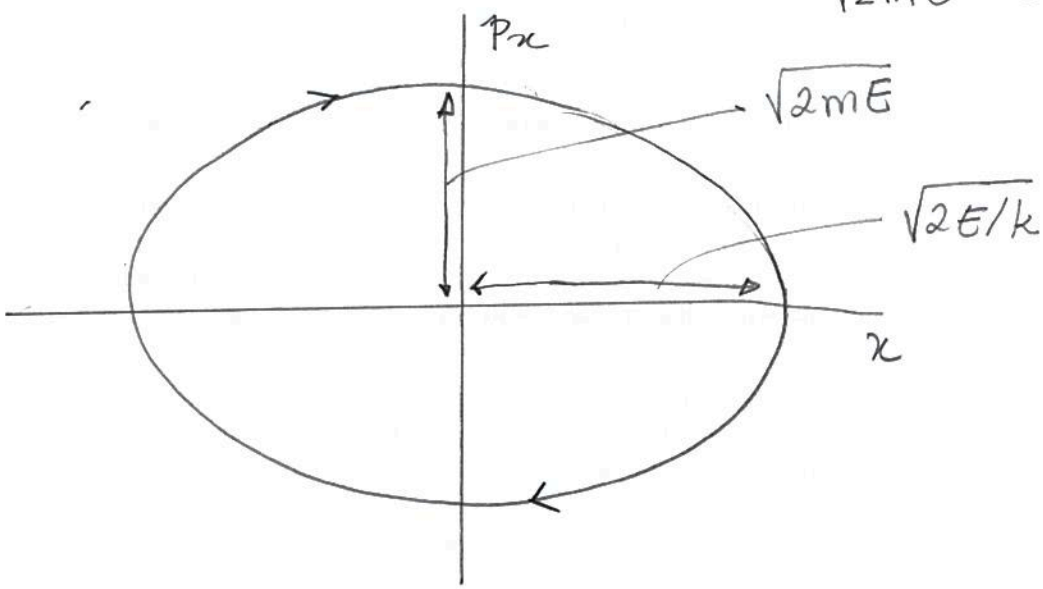
$p \rightarrow$ momento conjugado

$n \rightarrow$ número inteiro (número quântico)

* Oscilador harmônico

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

$$\frac{p_x^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k} = 1 \quad \rightsquigarrow \text{elipse com semi-eixos } \sqrt{2mE} \text{ e } \sqrt{2E/k}$$




$$\oint p\,dq = \text{área} = \pi \sqrt{2mE} \times \sqrt{\frac{2E}{k}} = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}}$$

$$2\pi\sqrt{\frac{m}{k}} = T = \frac{1}{\nu}$$

$$\frac{E}{\nu} = nh \Rightarrow \boxed{E = nh\nu}$$ → quantização de Planck

* Átomo de hidrogênio.

$$\oint L\, d\theta = nh$$

$L$ = cte pq a força é central

$$\oint L\, d\theta = L \oint d\theta = L\, 2\pi$$

$$L\, 2\pi = nh \Rightarrow \boxed{L = n\frac{h}{2\pi}}$$ → quantização de Bohr

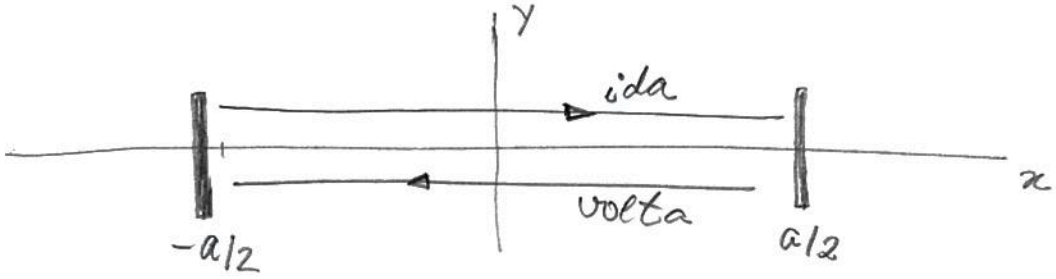
* A regra de quantização de Bohr também pode ser interpretada em termos das ondas de de Broglie: as órbitas possíveis são aquelas cujos comprimentos são múltiplos do comp. de onda do elétron:

$$2\pi r = n\lambda$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \Rightarrow 2\pi r = \frac{nh}{mv}$$

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \Rightarrow \boxed{L = n\frac{h}{2\pi}}$$

* Partícula em uma caixa 1D




$$\oint p_x dx = pa + (-p)(-a) = 2pa$$

(ida: $pa$; volta: $(-p)(-a)$)

$$\oint p_x dx = nh \Rightarrow 2pa = nh \Rightarrow 2a = n\frac{h}{p}$$

$$\boxed{a = n\frac{\lambda}{2}}$$ → ondas estacionárias com nós em $x = -\frac{a}{2}$ e $x = \frac{a}{2}$.

## 4.10 O MODELO DE SOMMERFELD

Átomo de H com órbitas elípticas: $\theta$ e $r$ são funções periódicas do tempo.

(1) $\oint L\, d\theta = n_\theta h$

$L \oint d\theta = n_\theta h \Rightarrow L\, 2\pi = n_\theta h$

$$\boxed{L = n_\theta \hbar}$$ → aparece no modelo de Bohr

$n_\theta = 1, 2, 3, \ldots$

(2) $\oint p_r dr = n_r h$

leva a

$$\boxed{L\left(\frac{a}{b} - 1\right) = n_r \hbar}$$

→ não vamos mostrar $n_r = 0$ corresponde a órbitas circulares.

$n_r = 0, 1, 2, \ldots$

$a \rightarrow$ semi-eixo maior da elipse

$b \rightarrow$ " menor da "

Essas regras de quantização impõem restrições sobre as formas das órbitas: nem todos os valores de $a$ e $b$ são permitidos. Na mecânica clássica, $a$ e $b$ podem assumir qqer valor.

Os possíveis valores de $a$, $b$ e da energia são:

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu Z e^2} n^2 \qquad n = n_\theta + n_r$$

$$b = a \frac{n_\theta}{n} \qquad n_\theta = 1, 2, 3, \cdots \rightarrow \text{nº quântico azimutal.}$$

$$E_n = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

onde $\mu = \frac{mM}{m+M}$ $\rightarrow$ $m \rightarrow$ massa do elétron; $M \rightarrow$ massa do núcleo

$n_\theta = 1, 2, 3, \cdots$

$n_r = 0, 1, 2, \cdots$

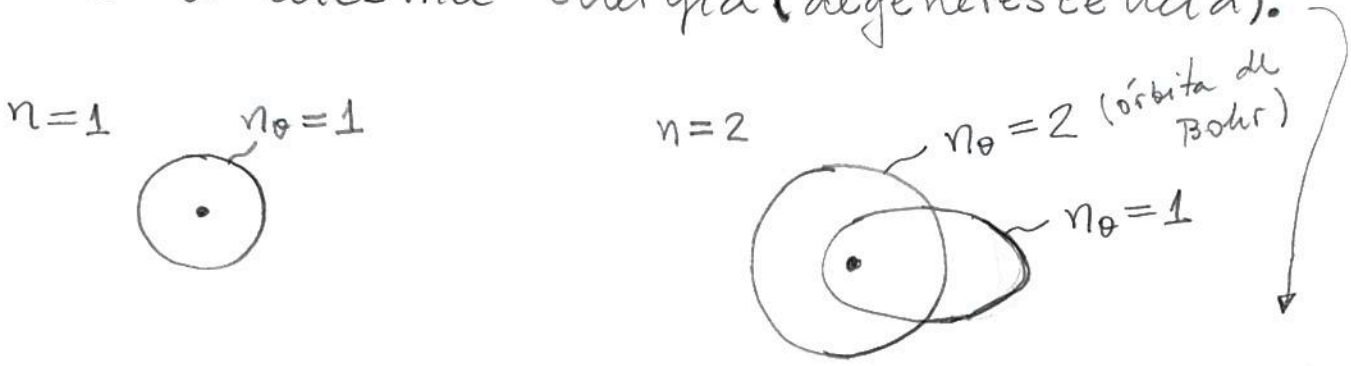
$\Rightarrow n = 1, 2, 3, \cdots \rightarrow$ nº quântico principal

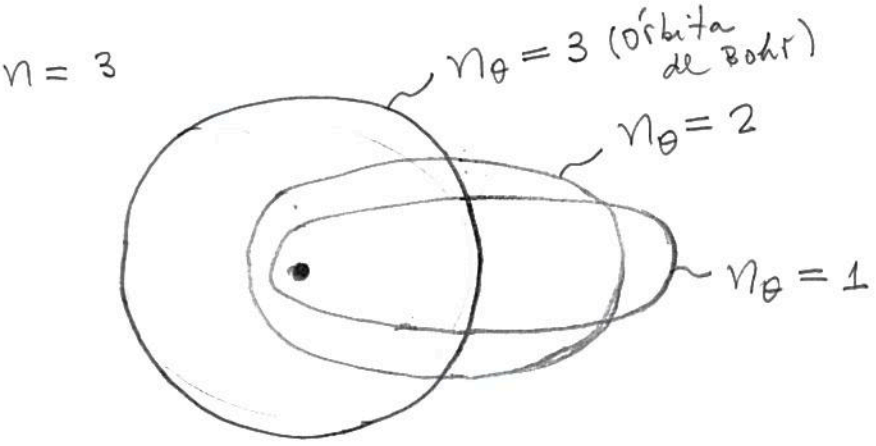
Para um dado $n$,

$$n_\theta = 1, 2, \cdots n$$

Como a energia e o raio maior ($a$) só

dependem de $n$, podem existir várias órbitas diferentes (com $n_\theta$ e $b$ diferentes) com a mesma energia (degenerescência).




No mov. planetário (mec clássica) órbitas com o mesmo semi-eixo maior também possuem a mesma energia.

* Sommerfeld incluiu correções relativísticas e removeu a degenerescência:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2 Z^2}{n}\left(\frac{1}{n_\theta}-\frac{3}{4n}\right)\right]$$

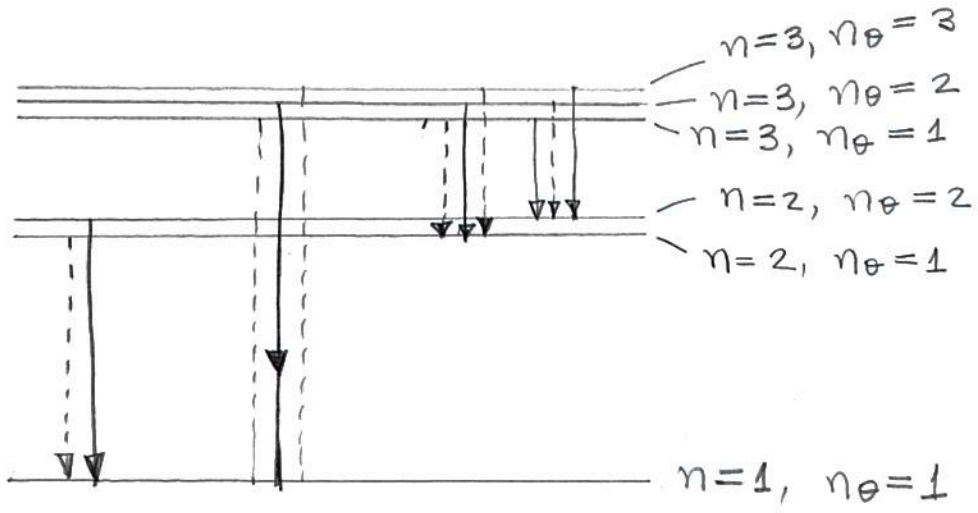
$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \rightarrow \text{constante de estrutura fina.}$$

* Quanto menor $n_\theta$, mais negativa é a energia.

* Em geral, as separações entre os níveis com um mesmo $n$ são muito pequenas.

* somente as linhas (sólidas) onde

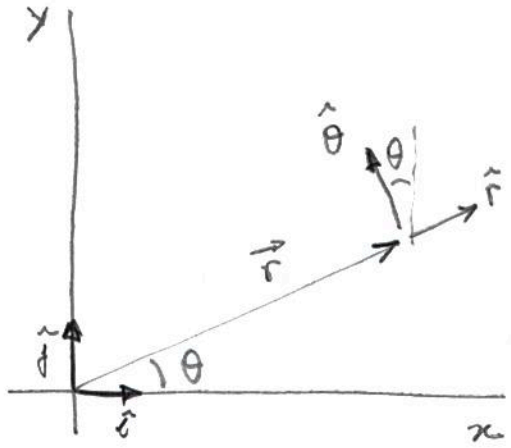
$n_{\theta i} - n_{\theta f} = \pm 1$ ⇝ regra de seleção são observadas experimentalmente.




* Leia as seções 4.11 e 4.12.

* Lista de exercícios: 1, 2, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 16, 19, 20, 21, 23, 24, 27, 32, 34, 35.

* Velocidade e aceleração em coord polares.




$$\vec{r} = r\hat{r}$$

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{dr}{dt}\hat{r} + r\frac{d\hat{r}}{dt}$$

$$\hat{r} = \cos\theta\,\hat{i} + \operatorname{sen}\theta\,\hat{j}$$

$$\hat{\theta} = -\operatorname{sen}\theta\,\hat{i} + \cos\theta\,\hat{j}$$

$$\frac{d\hat{r}}{dt} = -\dot{\theta}\operatorname{sen}\theta\,\hat{i} + \dot{\theta}\cos\theta\,\hat{j} = \dot{\theta}\,\hat{\theta} \equiv \frac{d\theta}{dt}\hat{\theta}$$

$$\frac{d\hat{\theta}}{dt} = -\dot{\theta}\cos\theta\,\hat{i} - \dot{\theta}\operatorname{sen}\theta\,\hat{j} = -\dot{\theta}\,\hat{r} \equiv \frac{d\theta}{dt}\hat{r}$$

Portanto, $\boxed{\vec{v} = \frac{dr}{dt}\hat{r} + r\frac{d\theta}{dt}\hat{\theta}}$

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}\hat{r} + \frac{dr}{dt}\frac{d\hat{r}}{dt} + \frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt}\hat{\theta} + r\frac{d^2\theta}{dt^2}\hat{\theta} + r\frac{d\theta}{dt}\frac{d\hat{\theta}}{dt}$$

$$= \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}\hat{r} + \frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt}\hat{\theta} + \frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt}\hat{\theta} + r\frac{d^2\theta}{dt^2}\hat{\theta} - r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\hat{r}$$

$$\vec{a} = \left[\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} - r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\right]\hat{r} + \left[2\frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt} + r\frac{d^2\theta}{dt^2}\right]\hat{\theta}$$