

Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

Aula 5:

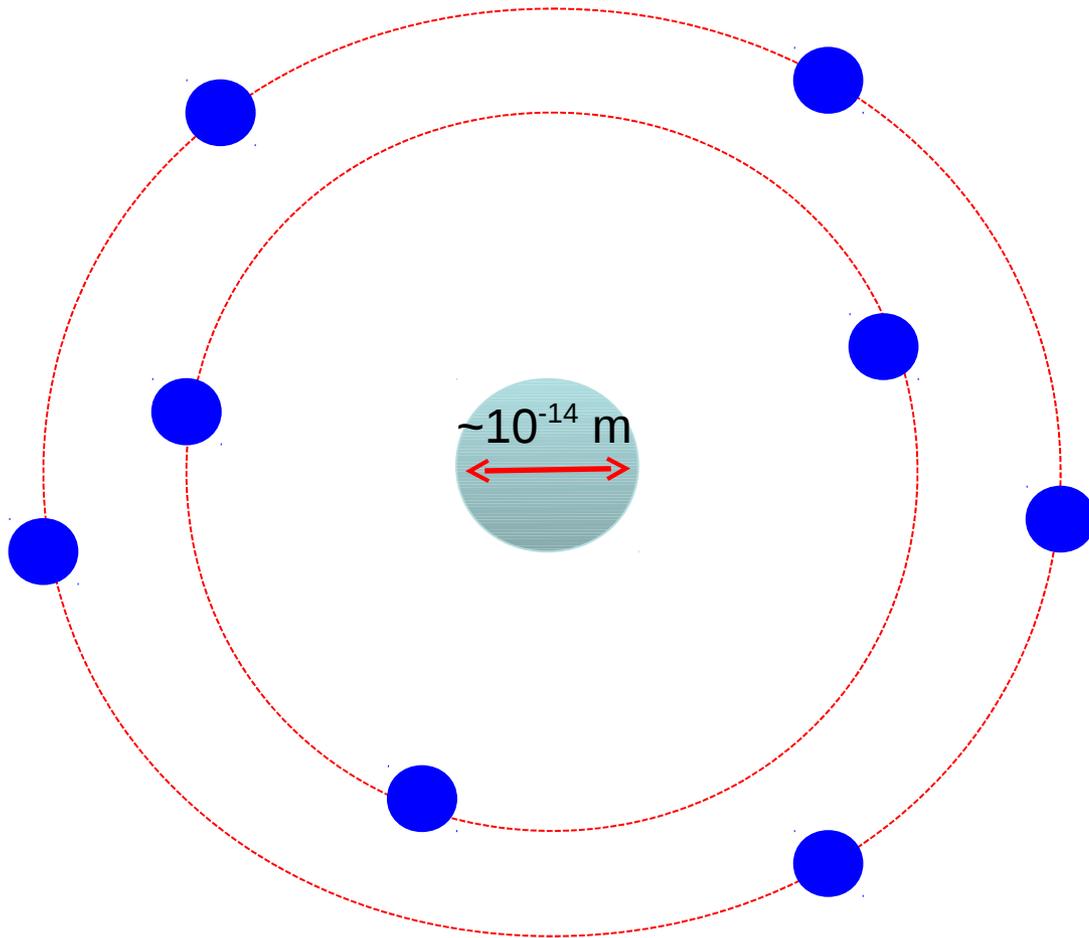
O átomo de Bohr (quantização)

E-mail da turma: emufabc@gmail.com

Senha: **ufabcsigma**

<https://sites.google.com/site/estruturabc0102/>

Lembrete: O átomo de Rutherford



- Núcleo de carga Ze rodeado por Z elétrons (modelo planetário).
 Z é chamado **número atômico** (H: $Z=1$, He: $Z=2$, etc.).
O número atômico determina as propriedades físicas do átomo.
- Quase toda a massa é concentrada no núcleo
- Tamanho do núcleo $\sim 10^{-14}$ m

Hoje vamos derrubar o modelo de Rutherford!

mas primeiro:

Radiação do Corpo Negro

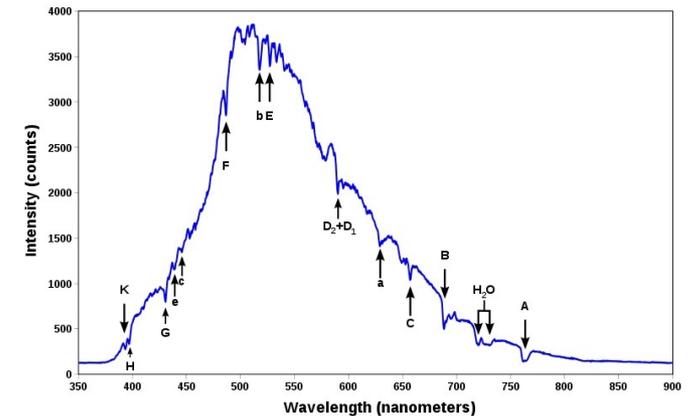
- Toda matéria emite radiação eletromagnética.
- A faixa espectral da maior intensidade desta radiação depende da temperatura.

Exemplos: seres humanos irradiam predominantemente no infravermelho, o Sol no ótico.

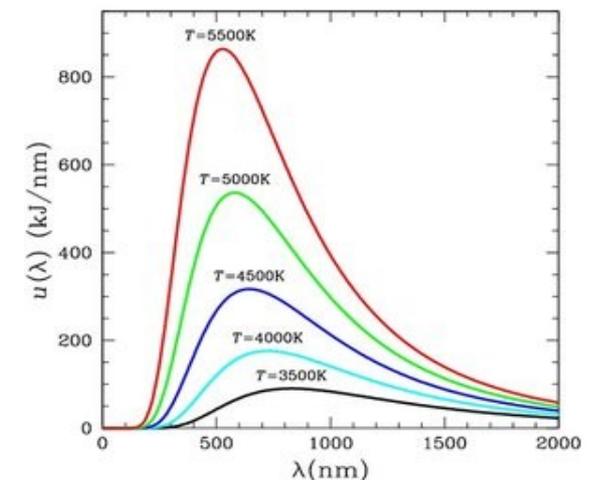
- Na física, um corpo negro é um corpo que absorve toda a radiação que nele incide: nenhuma luz o atravessa nem é refletida. Ele emite radiação térmica pura (ele não é negro!). Na prática, uma cavidade com uma pequena abertura na parede é uma boa aproximação para um corpo negro.

- Observa-se, que os espectros de corpos negros têm formas típicas.

corpo qualquer (Sol)



corpos negros



Radiação do Corpo Negro

- Em 1879, Stefan descobriu, que a potência por área de superfície de qualquer corpo depende apenas da sua temperatura:

$$P = \sigma T^4, \text{ onde } \sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$$

- Em 1884, Boltzmann forneceu uma explicação teórica para esta lei, que passou a ser chamada **Lei de Stefan-Boltzmann**.

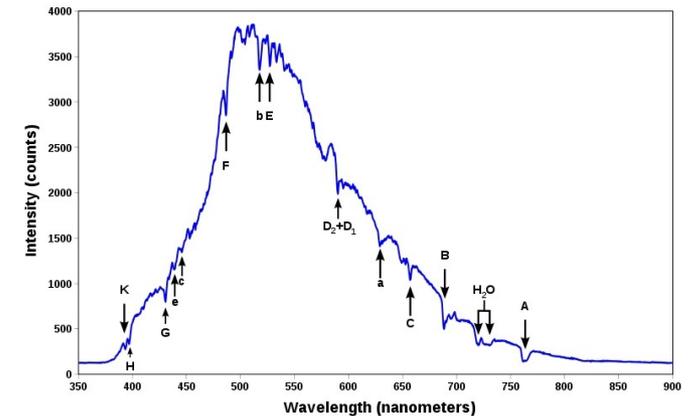
- Em 1893, Wien mostrou que o comprimento de onda do pico do espectro de um corpo negro é inversamente proporcional a sua temperatura:

Lei de deslocamento de Wien:

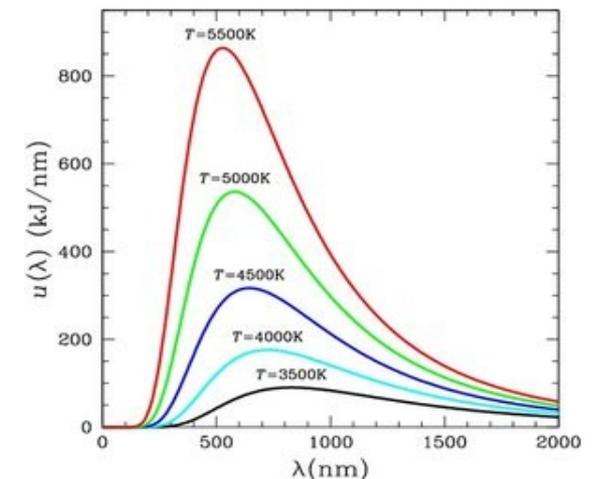
$$\lambda_{\text{max}} = \text{const} / T, \text{ onde } \text{const} = 2.89 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$$

Quanto maior a temperatura, tanto mais intensa e energética é a radiação térmica.

corpo qualquer (Sol)



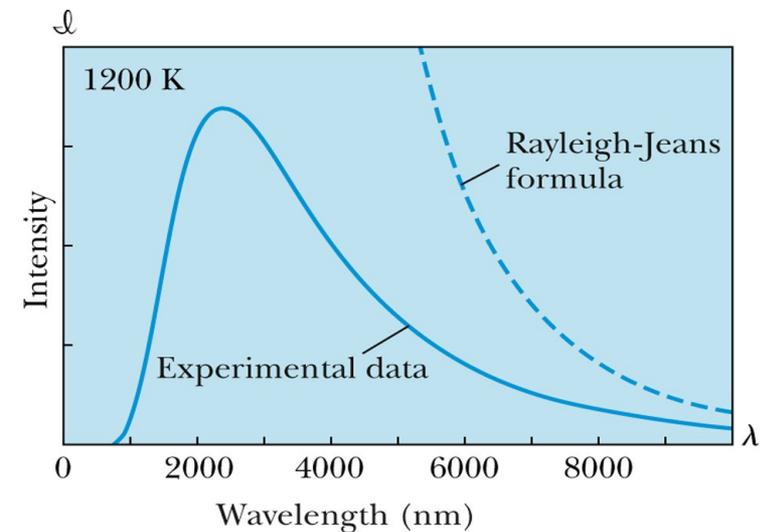
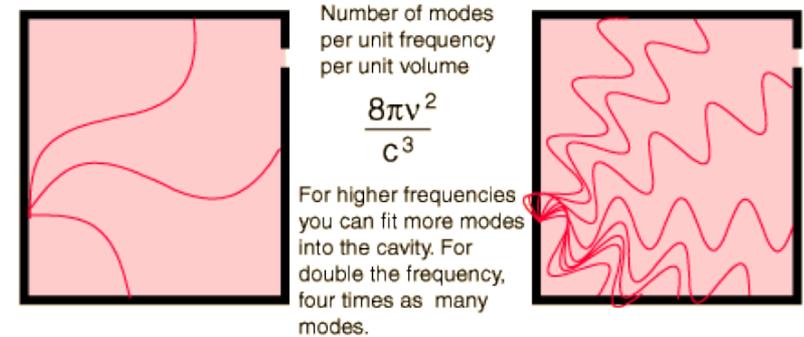
corpos negros



Radiação do Corpo Negro

1900 Rayleigh e Jeans

- Desenvolveram uma teoria para prever o espectro do corpo negro $P(\lambda)$.
 - Cabem mais ondas com curtos λ no corpo negro do que ondas com λ compridos.
 $\Rightarrow P(\lambda)$ tem que aumentar, quando λ diminui.
 - Obtem-se a **Lei de Rayleigh-Jeans**:
 $P(\lambda)$ prop. $1/\lambda^4$
 - Para grandes valores de λ , a lei prevê bem o espectro do corpo negro.
 - Porém para $\lambda \rightarrow 0$, $P(\lambda)$ tende a infinito, e a potência total vira $\int_0^\infty P(\lambda) d\lambda = \infty$
- Este resultado foi chamada de **catástrofe do ultravioleta** e estava em conflito com as observações.



Radiação do Corpo Negro

1900 Planck

Hipótese: **Quantização da energia dos átomos na parede:**

Planck sugeriu, que as ondas são emitidas por osciladores harmônicos (os átomos) nas paredes do corpo negro, e que as energias destes osciladores só podem assumir certos valores discretos

$$E_n = n\varepsilon = nhf,$$

onde f é a frequência, $n = 1, 2, 3, \dots$ um número quântico e $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s = constante de Planck

Quando uma grandeza física só pode assumir certos valores discretos, se diz que ela é **quantizada**.

Uma quantidade elementar de uma grandeza quantizada se chama um **quantum** (plural: quanta) da grandeza (neste caso ε).

Já conhecemos outras grandezas quantizadas: A matéria (quantum: 1 átomo) e a carga elétrica (quantum: 1 carga elementar e).

Radiação do Corpo Negro

1900 Planck

- Em um conjunto de objetos com energias quantizadas, os números de objetos por valor de energia segue a função de distribuição de Boltzman: $f(E) = A \cdot e^{-E/kT}$

No caso do corpo negro: Tem muito menos átomos com energias altas (os que emitem radiação com curtos λ) do que átomos com energias baixas, o que evita a catástrofe do ultravioleta.

- Usando esta hipótese, Planck recalculou o espectro teórico do corpo negro em função da sua temperatura:

Lei de Planck

$$P_{\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{(hc/\lambda kT)} - 1)}$$

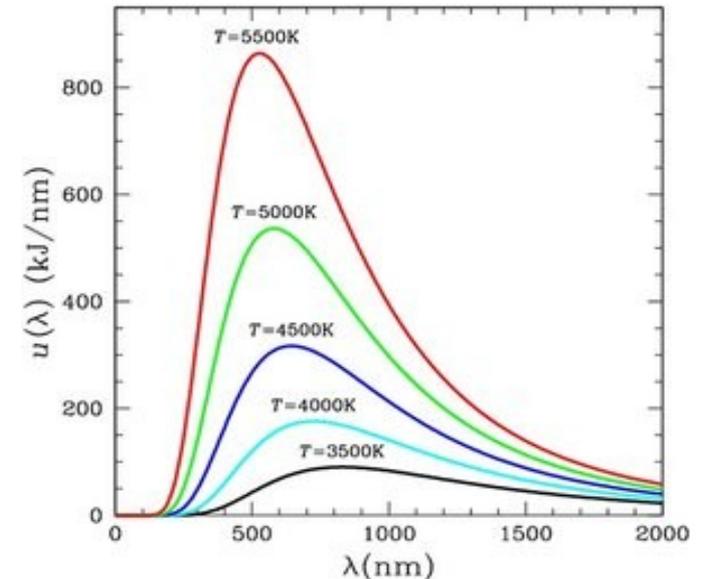
Radiação do Corpo Negro

1900 Planck

• Lei de Planck

$$P_{\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{(hc/\lambda kT)} - 1)}$$

- Reproduz bem os espectros medidos.
- Para λ grandes, ela se torna a Lei de Rayleigh-Jeans, $P(\lambda)$ prop. $1/\lambda^4$
- A partir da Lei de Planck é possível deduzir a Lei de Stefan-Boltzmann, $P = \sigma T^4$ e a Lei de deslocamento de Wien, $\lambda_{\max} = \text{const} / T$



=> A hipótese de átomos com energias quantizadas consegue explicar os espectros dos corpos negros.

Nascimento da mecânica quântica!

Mais um Lembrete: Fórmula de Rydberg para as linhas espectrais do hidrogênio

$$\frac{1}{\lambda_{\text{vac}}} = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{onde } n_2 > n_1,$$
$$R_{\text{H}} = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

| Nome | n_1 | n_2 | Região do espectro eletromagnético |
|-----------|-------|--------------|------------------------------------|
| Lyman | 1 | 2, 3, 4, ... | Ultravioleta |
| Balmer | 2 | 3, 4, 5, ... | Visível |
| Paschen | 3 | 4, 5, 6, ... | Infravermelho |
| Bracket | 4 | 5, 6, 7, ... | Infravermelho |
| Pfund | 5 | 6, 7, 8, ... | Infravermelho |
| Humphreys | 6 | 7, 8, 9, ... | Infravermelho |

Fótons

Para poder interpretar o espectro de hidrogênio, temos que saber um pouquinho mais sobre a natureza da radiação eletromagnética.

Apesar do que foi ensinado na aula anterior, hoje em dia se sabe que radiação EM é composto, sim, por partículas, ou quanta de luz, chamadas **fótons** (mas ao mesmo tempo é uma onda; mais sobre isso na próxima aula).

Na física das partículas é comum usar o símbolo γ (gama) para o fóton.

Tinhamos aprendido que radiação de frequência alta é mais “energética” do que radiação de frequência baixa.
O que quer dizer isso?

Fótons

Isto significa que os fótons de radiação de frequência alta têm mais energia do que aqueles de radiação de frequência baixa.

A energia de um fóton depende da sua frequência:

$E = h \cdot f$, onde $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s = constante de Planck

Atenção: A **intensidade** (energia por unidade de tempo e área) de uma onda eletromagnética não é necessariamente maior, quando ela é mais energética. A intensidade depende também do **número** de fótons por unidade de tempo e área.

Fórmula de Rydberg em termos de energia

Voltando ao hidrogênio, agora que sabemos que a frequência (e, então, o comprimento de onda) é uma medida da energia dos fótons, o espectro de linhas discretas significa, que o hidrogênio emite fótons com certos **valores discretos de energia**:

$$E = h \cdot f = hc/\lambda = hcR_H \cdot (1/n_1^2 - 1/n_2^2) = E_0 \cdot (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

onde $E_0 = hcR_H = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = \text{Energia de Bohr}$

Quantização da Energia do Átomo de Hidrogênio

Quando um átomo emite um fóton da energia $h \cdot f$, ele perde esta energia.

Como a energia que o átomo pode perder só pode ter certos valores discretos, faz sentido supor que o próprio átomo só pode ter certos valores de energia, e que as energias dos fótons emitidos representam as diferenças entre estes valores.

Já que as diferenças entre dois valores possíveis de energia do átomo de hidrogênio têm valores $E_0 \cdot (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$, é razoável supor que estas energias são da forma E_0/n^2 .

Melhor: da forma $-E_0/n^2$, já que os elétrons são ligados ao núcleo.

=> **Átomos de hidrogênio só podem ter energias de $-E_0/n^2$.**

A energia do átomo de hidrogênio (e de outros átomos) é **quantizada**.

Modelo Atômico de Bohr

Porém, o melhor modelo atômico que conhecemos até agora, o modelo de Rutherford, não consegue explicar esta quantização da energia dos átomos.

Outro problema do modelo de Rutherford: Elétrons em órbita circular deveriam irradiar continuamente ondas eletromagnéticas e perder energia até cair no núcleo, levando ao colapso atômico.

=> Precisamos de um novo modelo atômico, ou pelo menos modificar o modelo de Rutherford.

Em 1913 o físico dinamarquês [Niels Bohr](#) propôs um modelo atômico inspirado na hipótese de Planck dos átomos com energia quantizada (=> radiação do corpo negro).



Postulados de Bohr

1) O elétron move-se em torno do núcleo atômico sob a influência da força eletrostática (Coulombiana) entre o elétron e o núcleo e obedece as leis da mecânica clássica.

2) Ao contrário das infinitas órbitas do regime clássico, só é possível o elétron mover-se em órbitas no qual o momento angular orbital L é um múltiplo inteiro da constante reduzida de Planck

$$\hbar = h/2\pi = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}.$$

$$L = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$



Niels Bohr (1885-1962)

Postulados de Bohr

- 3) Um elétron em uma órbita definida não radia energia eletromagnética. Então a energia total E permanece constante.
- 4) Radiação eletromagnética é emitida se um elétron movendo-se inicialmente em uma órbita de energia E_i se move para uma órbita de energia E_f . A energia do fóton emitido é dada por:

$$h \cdot f = E_i - E_f$$

- 5) Princípio da correspondência: no limite de grande orbitas e grandes energias os cálculos tem de concordar com cálculos classicos.

Modelo Atômico de Bohr

A partir destes postulados e usando o que sabemos sobre a força eletrostática e movimentos circulares uniformes podemos calcular as propriedades do átomo de Bohr.

Consideremos um átomo com carga nuclear Ze (no caso de hidrogênio $Z=1$) rodeado por um elétron (carga $-e$)

Força de Coulomb entre o núcleo e o elétron:
$$F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$$

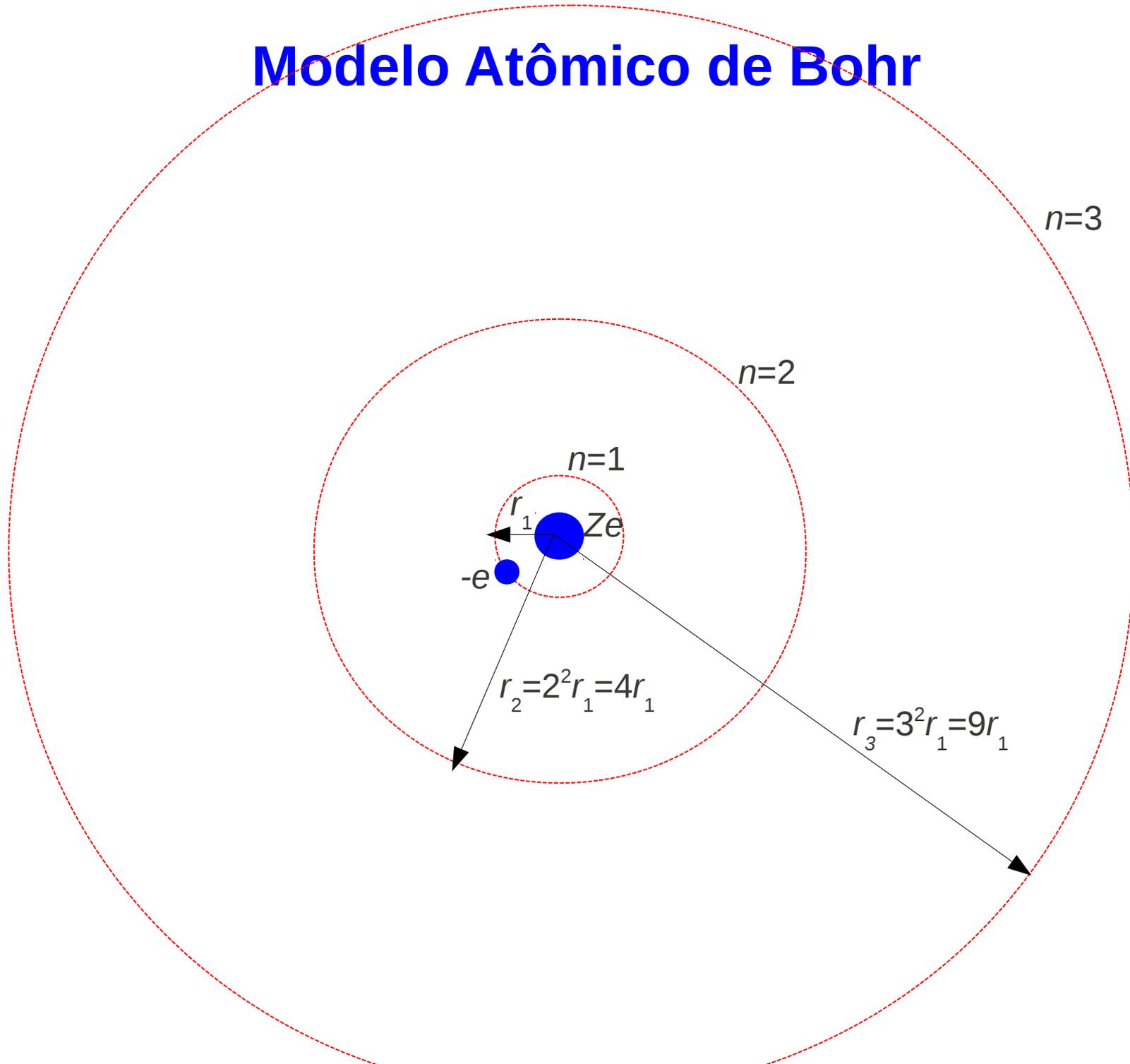
Segundo postulado 2, o momento angular é quantizado, o que causa que apenas certas órbitas são possíveis e leva à quantização das outras grandezas:

o raio da n -ésima órbita:
$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{Zk_e e^2 m_e} = n^2/Z \cdot r_1$$

onde $r_1 = \frac{\hbar^2}{k_e e^2 m_e} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} = \text{raio de Bohr}$

O raio de Bohr é o raio de um átomo de hidrogênio para $n = 1$ (estado fundamental) e é um valor típico para raios atômicos.

Modelo Atômico de Bohr



Modelo Atômico de Bohr

Energia do elétron
na n -ésima órbita:

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

também pode ser escrito como: $E_n = -(Z^2/n^2) \cdot E_0$

onde $E_0 = m_e e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = \text{Energia de Bohr}$

O valor obtido teoricamente para a energia de Bohr bate com o valor obtido empiricamente da fórmula de Rydberg!

Para hidrogênio ($Z = 1$) obtemos as energias esperadas pelo seu espectro de emissão ou absorção!

As energias E_n são negativas, o que significa que o elétron está ligado ao núcleo.

Modelo Atômico de Bohr

O estado com menor energia corresponde a $n = 1$ e é chamado **estado fundamental**.

Maior parte do tempo, o elétron encontra-se neste estado.

Estados com $n > 1$ são chamados de **estados excitados**:

$n = 2$: primeiro estado excitado, $n = 3$: segundo estado excitado, etc.

Para excitar um átomo (elevá-lo do estado fundamental para um estado excitado), ele tem que ganhar energia, por choques com outros átomos, pela absorção de um fóton, ...

Para grandes n , a Energia tende a 0 (e o raio tende a ∞)

=> os elétrons são só fracamente ligados aos núcleos.

=> Átomos em estados com grandes n não são muito estáveis.

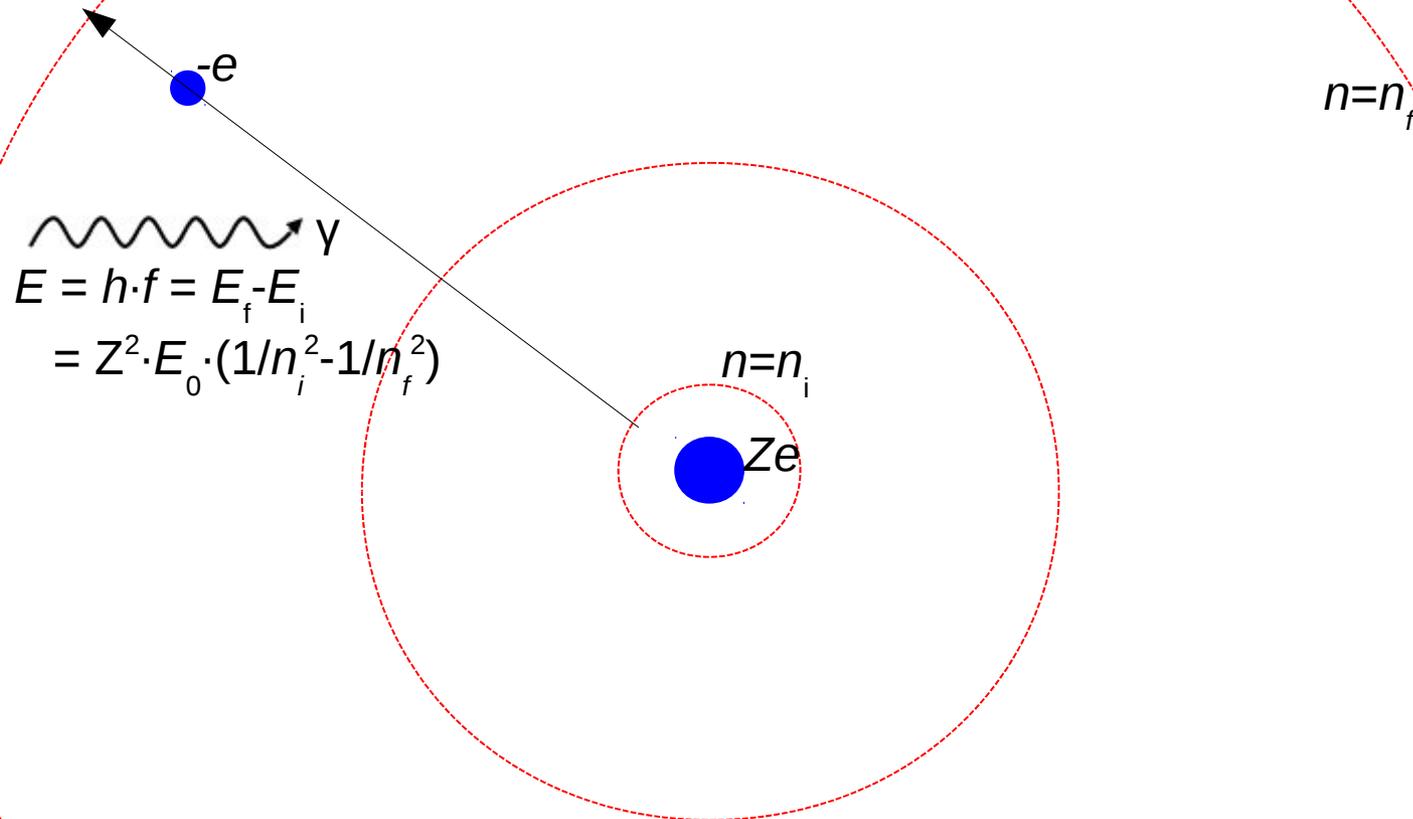
Átomos deste tipo (muito grande, instáveis) se chamam átomos de Rydberg.

Quando um elétron é excitado para uma **energia positiva**, ele é expulso do átomo. O átomo continua com um elétron a menos, então ele se torna um íon positivo. Este processo se chama **ionização** do átomo.

A energia necessária para isso (que é igual o módulo da energia do elétron antes do processo) é chamada **energia de ionização**.

Modelo Atômico de Bohr

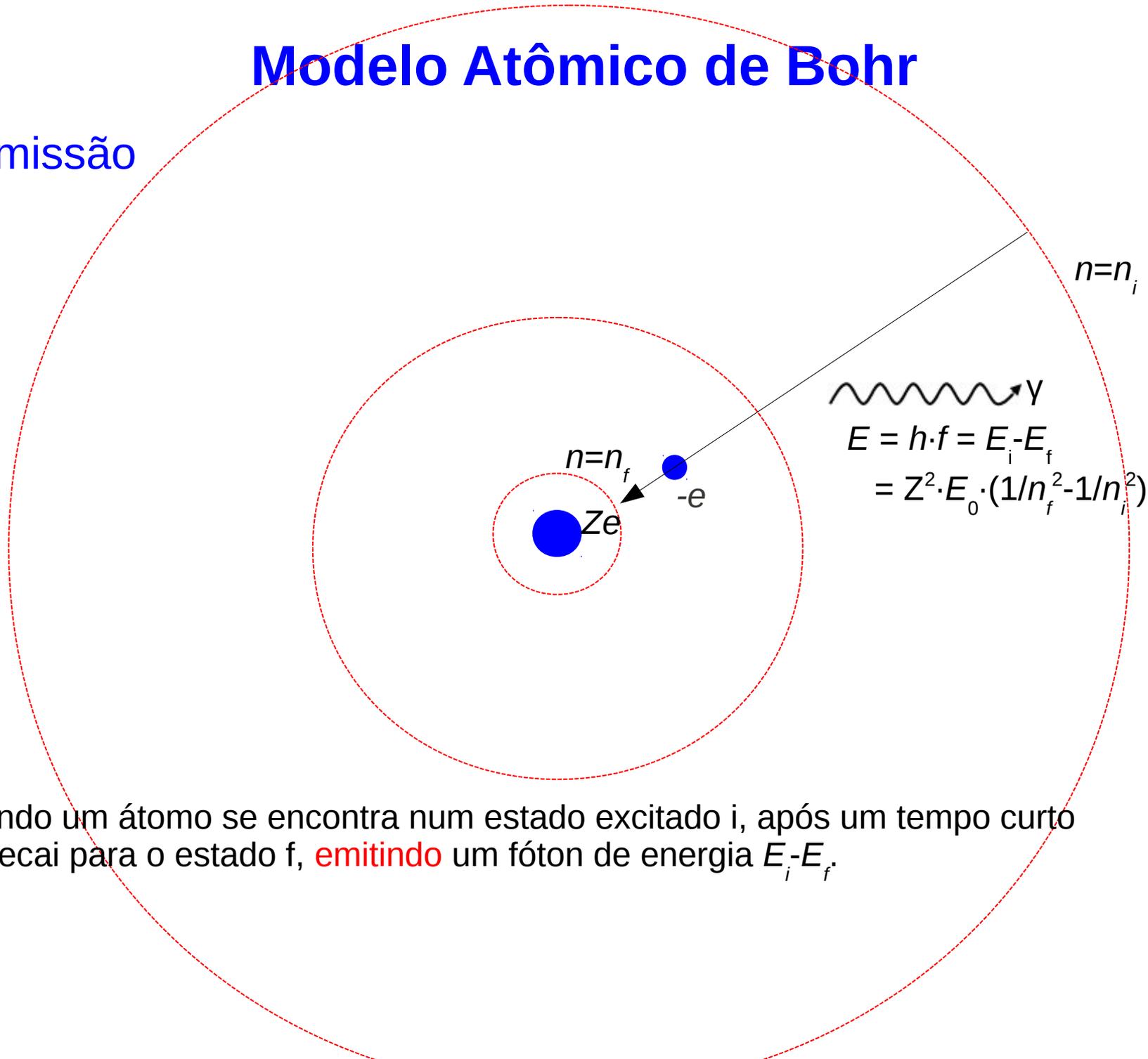
Absorção



Quando um fóton com energia $E_f - E_i$ passa por um átomo no estado i , pode acontecer que o átomo **absorve** o fóton e é excitado para o estado f .

Modelo Atômico de Bohr

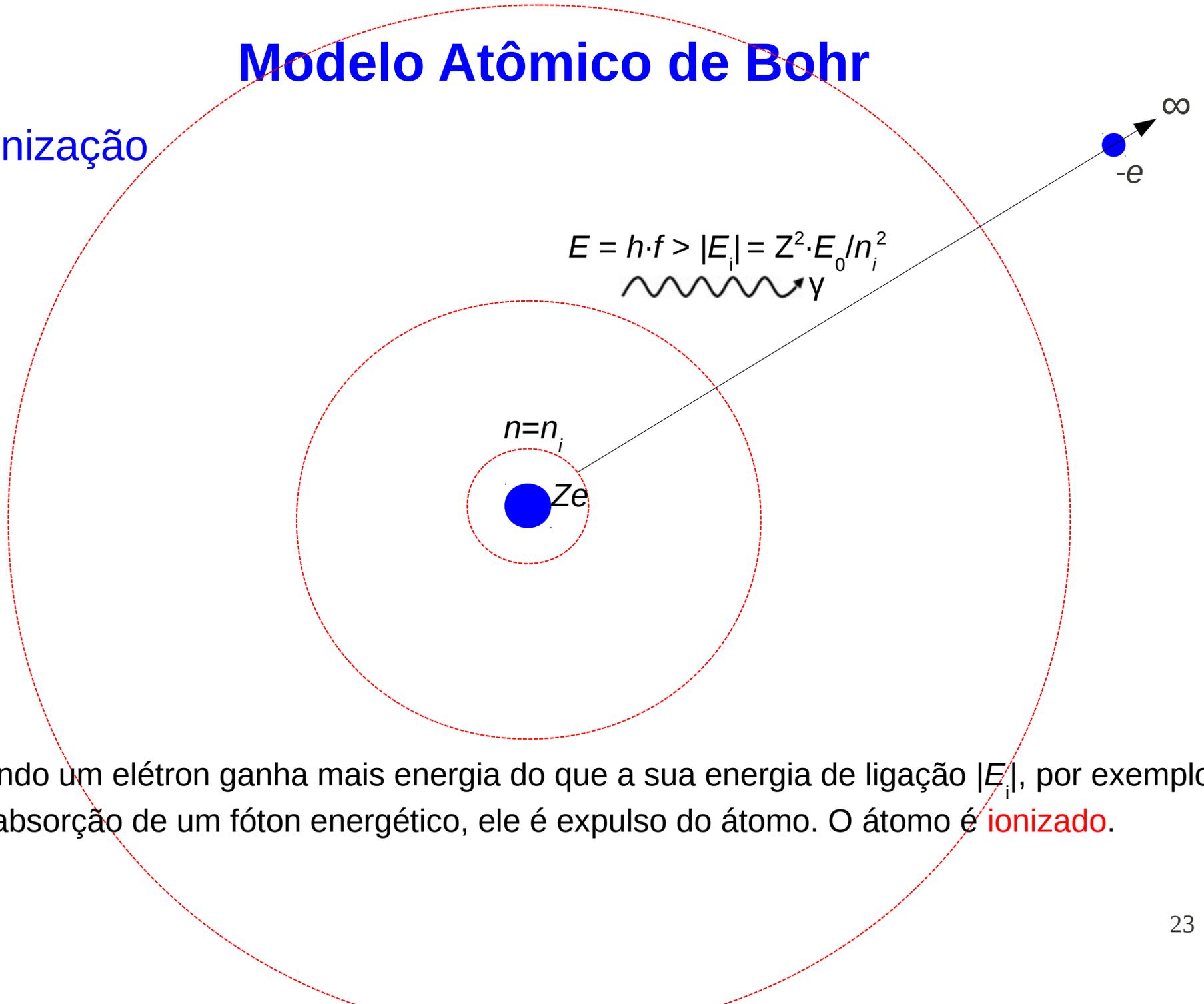
Emissão



Quando um átomo se encontra num estado excitado i , após um tempo curto ele recai para o estado f , **emitindo** um fóton de energia $E_i - E_f$.

Modelo Atômico de Bohr

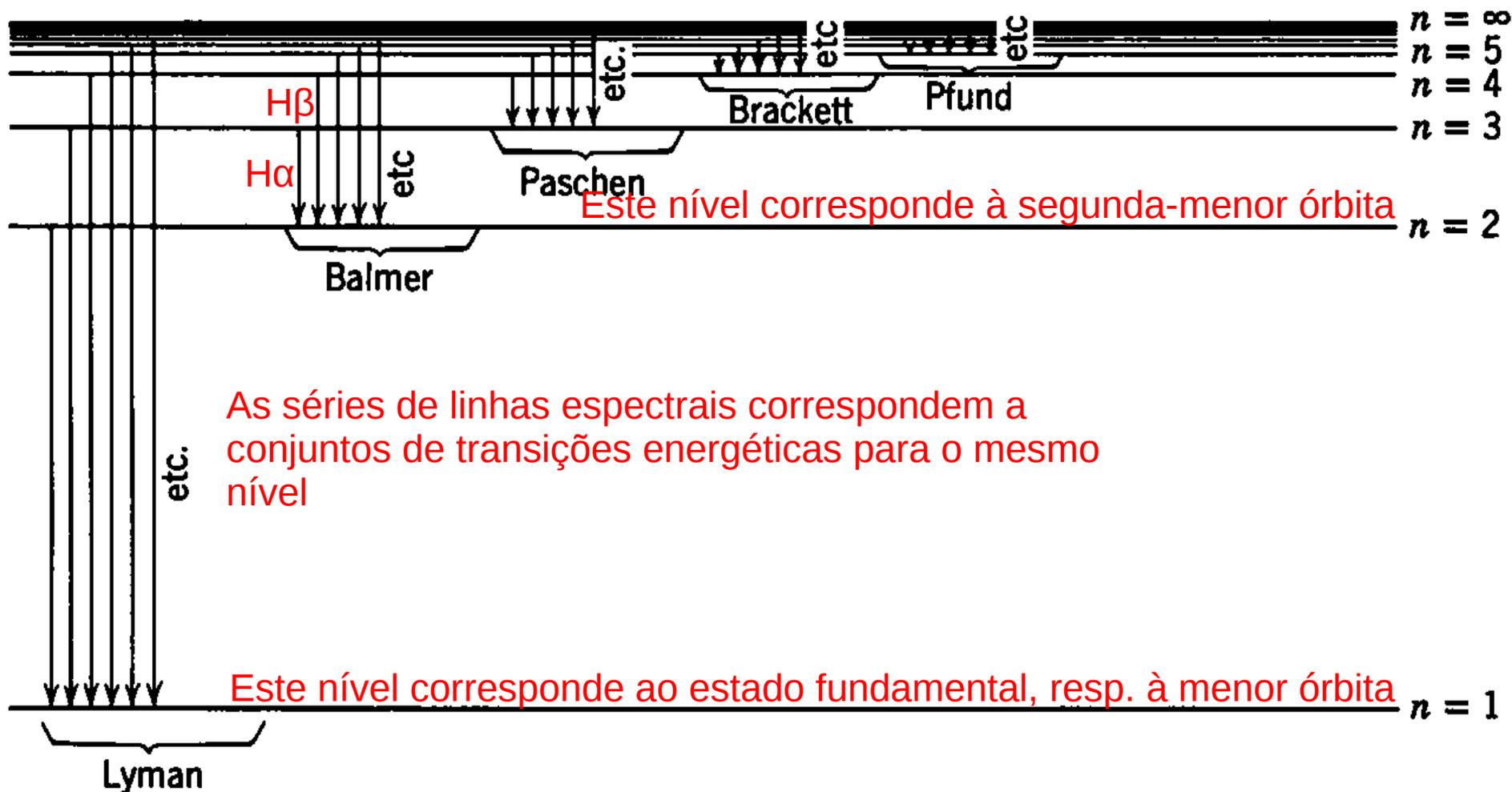
Ionização



Quando um elétron ganha mais energia do que a sua energia de ligação $|E_i|$, por exemplo por absorção de um fóton energético, ele é expulso do átomo. O átomo é **ionizado**.

Modelo Atômico de Bohr

Frequentemente, se usa **diagramas de níveis de energia** para mostrar transições energéticas em átomos (ou outros sistemas físicos).



Aspectos Principais do Modelo de Bohr

- 1) As previsões essenciais do modelo de Bohr estão contidas nas equações de energia e do número de onda.
- 2) O estado normal de um átomo é quando o elétron tem menor energia ou $n = 1$ (estado fundamental).
- 3) Em uma descarga elétrica, ou algum outro processo, o átomo recebe energia devido a colisões, etc. O elétron deve sofrer uma transição para um estado de maior energia, ou estado excitado $n > 1$.
- 4) Obedecendo a lei natural dos sistemas físicos, o átomo tenderá a voltar ao seu estado de menor energia (estado fundamental).
- 5) Em um grande número de processos de excitação e desexcitação, todas as possíveis transições ocorrem sendo emitido o espectro completo.

Crítica do Modelo de Bohr

Aspectos positivos

- Fácil de visualizar
- Sucesso na descrição das linhas espectroscópicas do átomo de hidrogênio.
- O raio da órbita do hidrogênio $0,53 \text{ \AA}$, concorda com o valor previsto para o diâmetro da molécula de hidrogênio $2,2 \text{ \AA}$.
- Várias grandezas medidas podem ser expressas em termos de constantes fundamentais (Energia e raio de Bohr, constante de Rydberg, ...).

Crítica do Modelo de Bohr

Falhas

- Não conseguia explicar as intensidades relativas das linhas espectrais
- Não conseguia explicar as linhas espectrais de átomos mais complexos
- Faz hipóteses aleatórias, p. e. órbitas estáveis
- Utilizou-se de uma mistura de conceitos clássicas (leis de Newton, Coulomb) e conceitos “não-clássicas” (quântização do momento angular) => velha mecânica quântica

Estas dificuldades começaram a ser superadas na década de 20 do século passado com de Broglie, Schrödinger, Heisenberg, Pauli, Dirac e vários outros cientistas. => Aulas mais pra frente

E os outros Átomos?

Para átomos mais complexos do que o do hidrogênio teria que se levar em conta a interação entre os elétrons.

O modelo de Bohr não consegue fazer previsões sobre estes átomos.

Porém, em átomos pesados pode se tratar os elétrons em órbitas **internas** como se os outros elétrons não existissem.

Como estes átomos têm altos números atômicos Z , e as energias previstas pelo modelo de Bohr dependem do quadrado de Z , as energias devem ser altas, causando espectros na faixa dos **raios-X**.

Mosley (1913) conseguiu medir os espectros raios-X de mais de 38 elementos, eliminar inconsistências na tabela periódica, e prever a existência de 92 elementos do H ao U.

Papel importante na consolidação e aceitação do modelo de Bohr

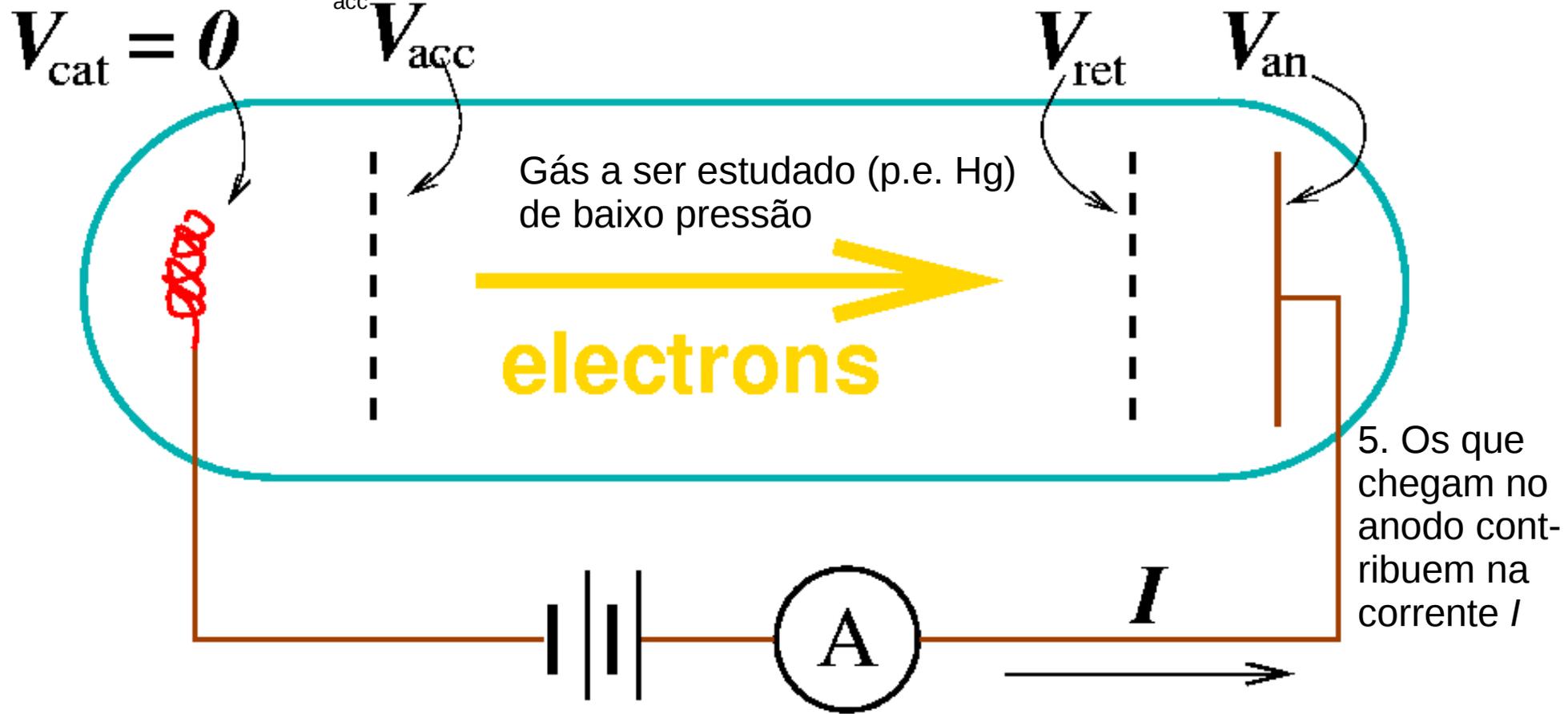
O Experimento de Franck-Hertz

1: elétrons saem do cátodo

2. são acelerados pelo potencial V_{acc}

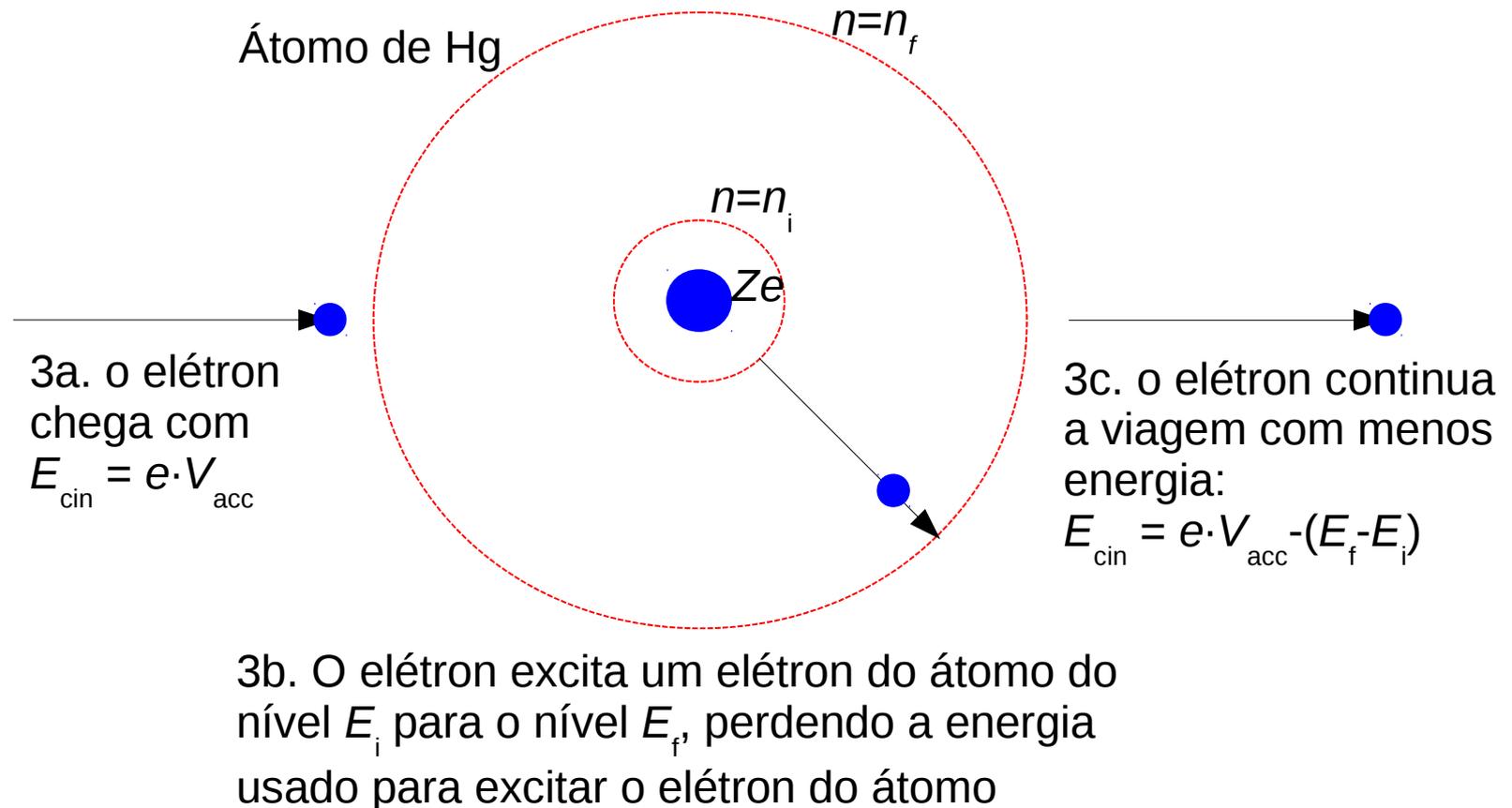
3. Interagem com o gás da amostra

4. superam (ou não) a diferença de potencial $V_{an} - V_{ret}$



O Experimento de Franck-Hertz

O que acontece no passo 3 (elétrons interagem com o gás da amostra)?

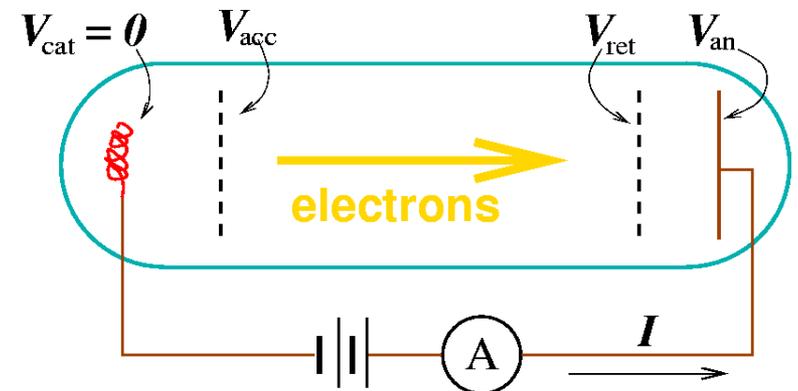
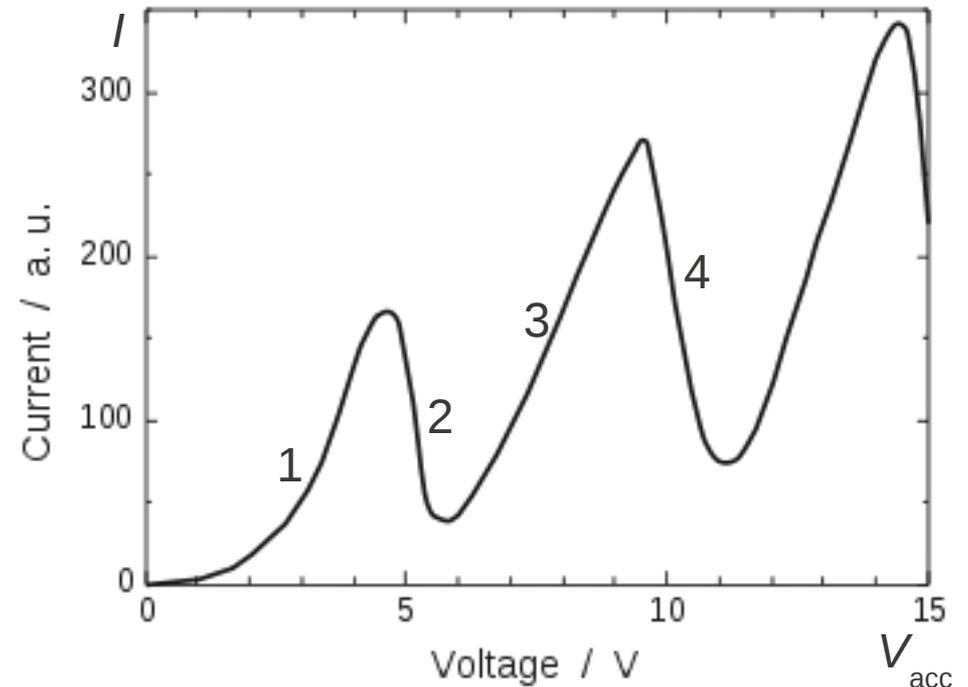


Isto só pode acontecer, se a energia inicial $e \cdot V_{\text{acc}}$ dá pra excitar o átomo: $e \cdot V_{\text{acc}} \geq E_f - E_i$.
Senão, o elétron não perde energia. E_{cin} continua sendo $e \cdot V_{\text{acc}}$.

O Experimento de Franck-Hertz

Aumentando o potencial V_{acc}

1. A corrente aumenta, por que cada vez mais elétrons conseguem superar $V_{an} - V_{ret}$
2. Quando a energia $e \cdot V_{acc}$ alcança o valor $E_f - E_i$, boa parte dos elétrons perde energia para os átomos de Hg e não consegue mais superar $V_{an} - V_{ret}$.
3. A corrente aumenta de novo, por que até $E_{cin} = e \cdot V_{acc} - (E_f - E_i)$ dá pra superar $V_{an} - V_{ret}$.
4. Quando $e \cdot V_{acc}$ alcança $2 \cdot (E_f - E_i)$, muitos elétrons interagem duas vezes com os átomos de Hg, perdem $2 \cdot (E_f - E_i)$, etc.



O Experimento de Franck-Hertz

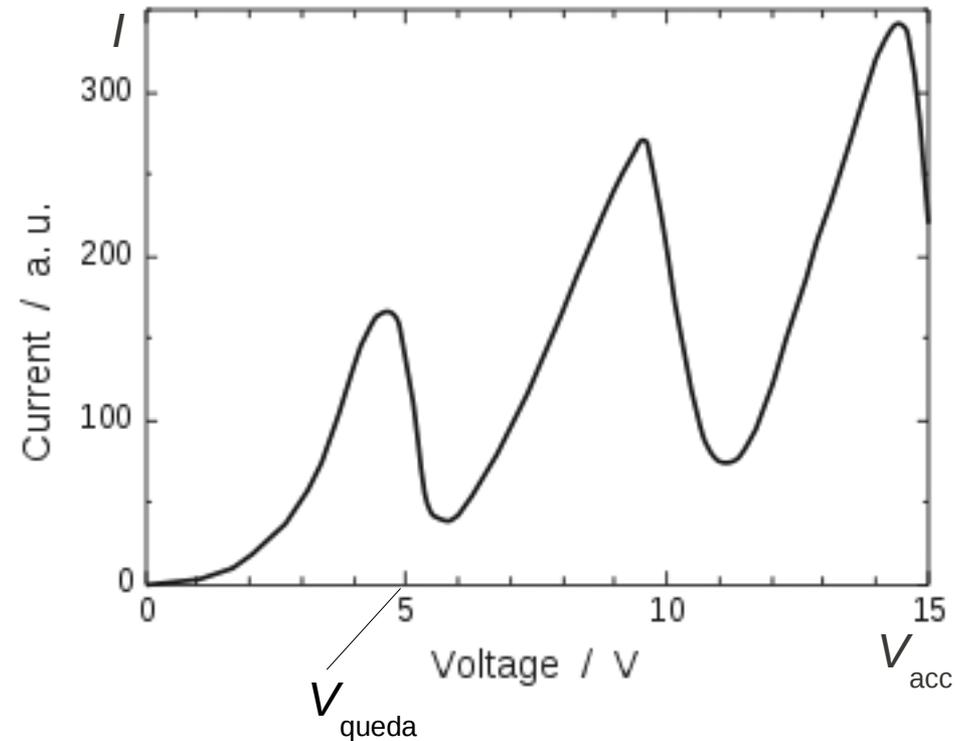
A partir dos valores de V_{acc} de queda de corrente, pode se determinar $E_f - E_i = e \cdot V_{\text{queda}}$.

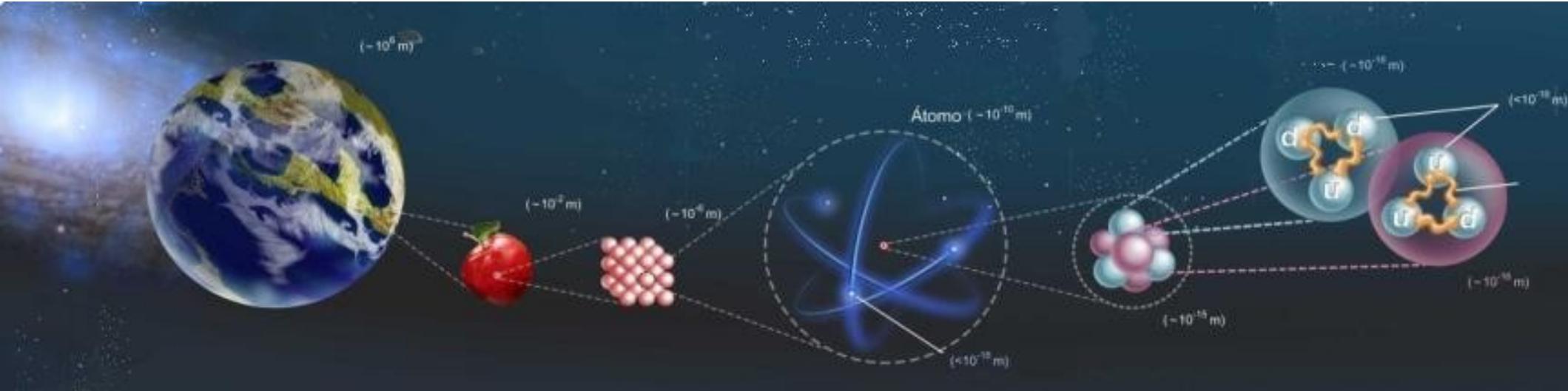
As energias obtidas correspondem realmente a linhas do espectro eletromagnético do elemento!

=> **Confirmação da existência dos níveis de energia quantizadas.**

=> Outro método para medir diferenças entre os níveis de energia dos elementos (além do espectro eletromagnético).

Espectroscopia por perda de energia de elétrons (EELS).



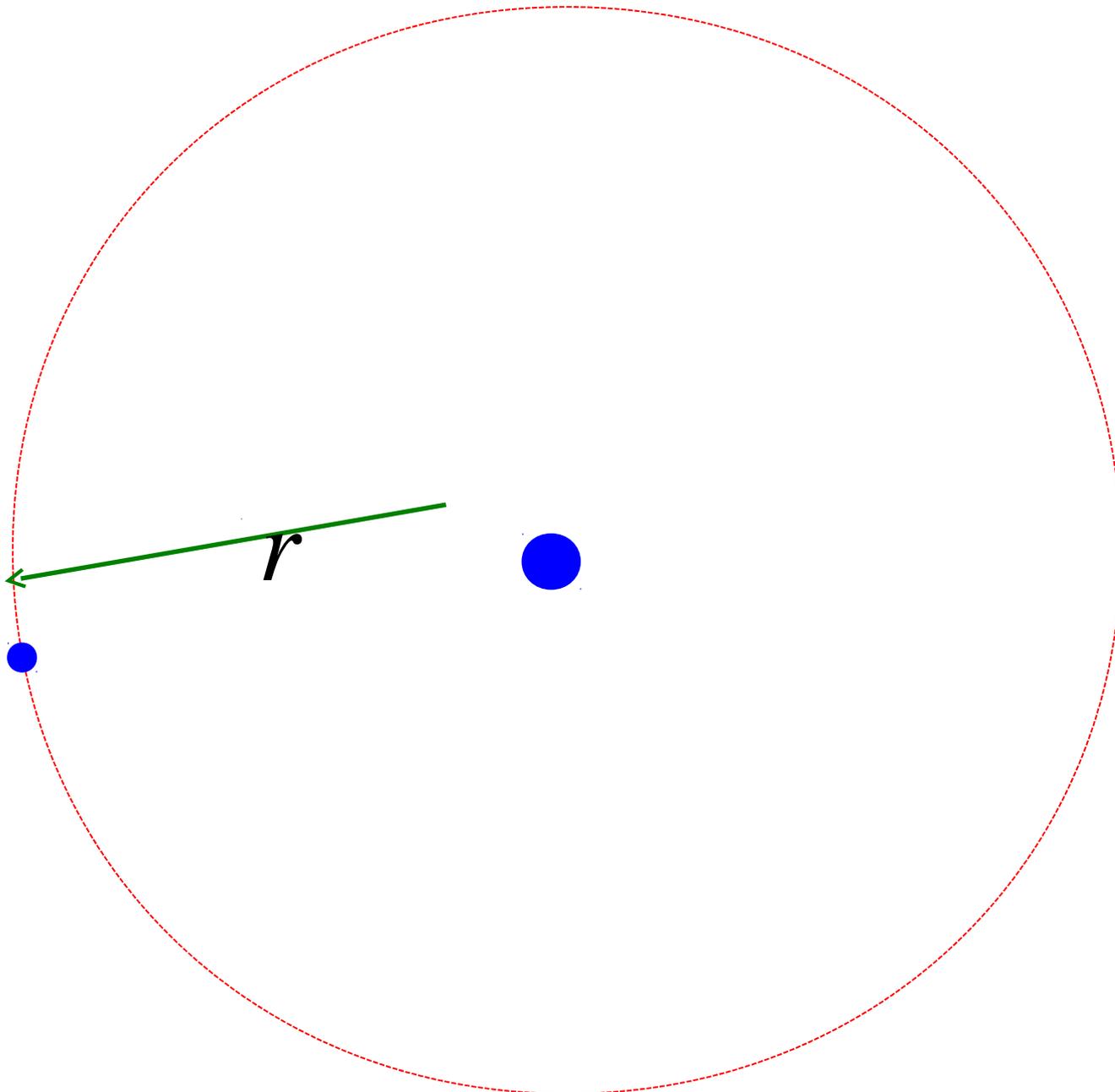


Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

FIM pra hoje

<https://sites.google.com/site/estruturabc0102/>



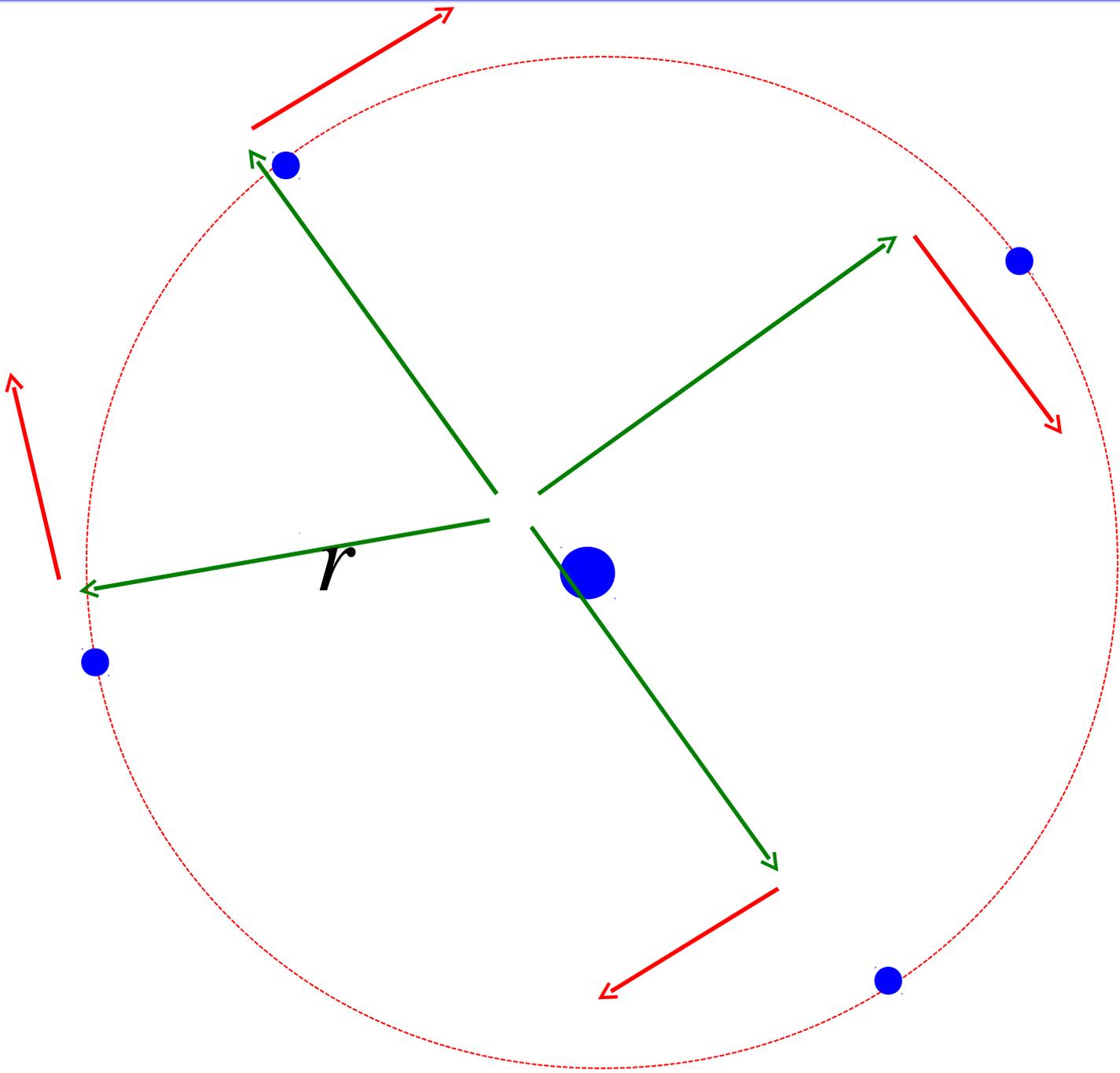
Movimento circular uniforme

Por que é uniforme?

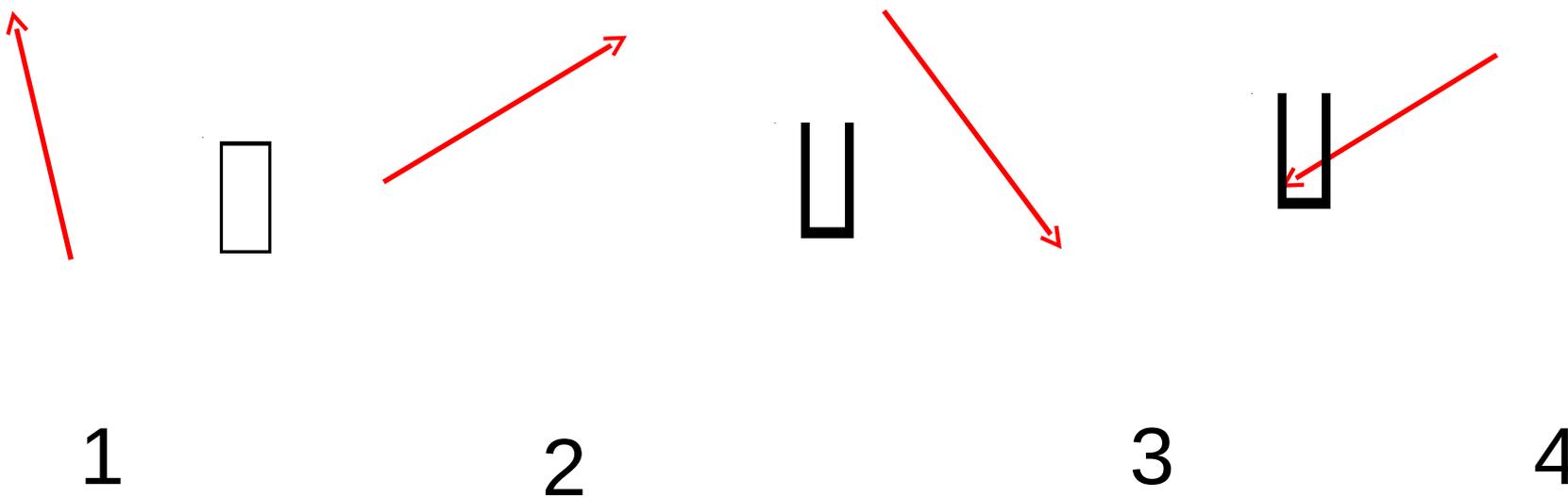
Movimento circular uniforme

1a. Lei de Newton:

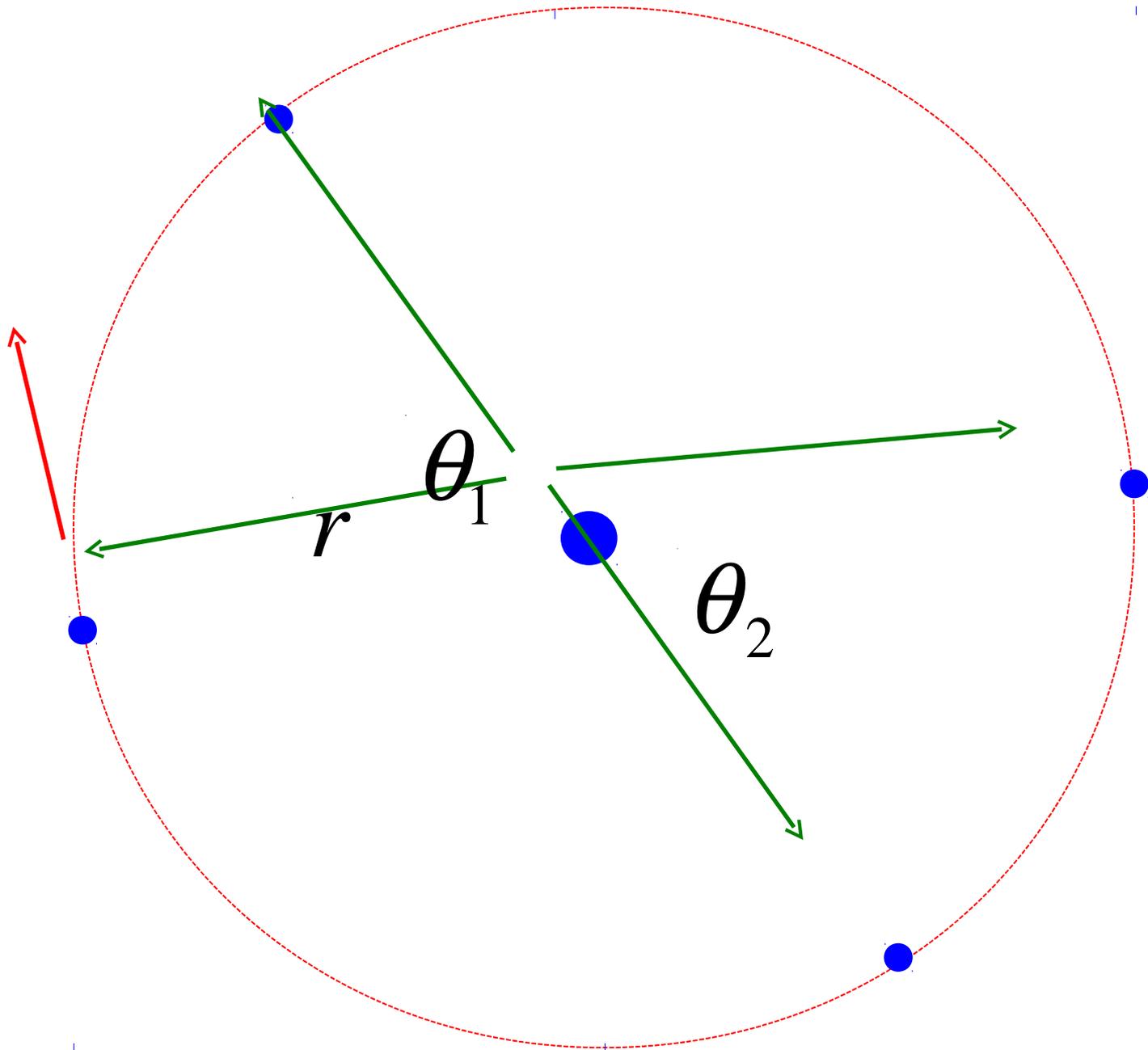
Um corpo em movimento retilíneo uniforme ou em repouso irá permanecer no mesmo estado (em movimento retilíneo uniforme ou em repouso) a não ser que haja sobre ele uma força externa.



Movimento circular uniforme



Ângulos iguais em tempos iguais



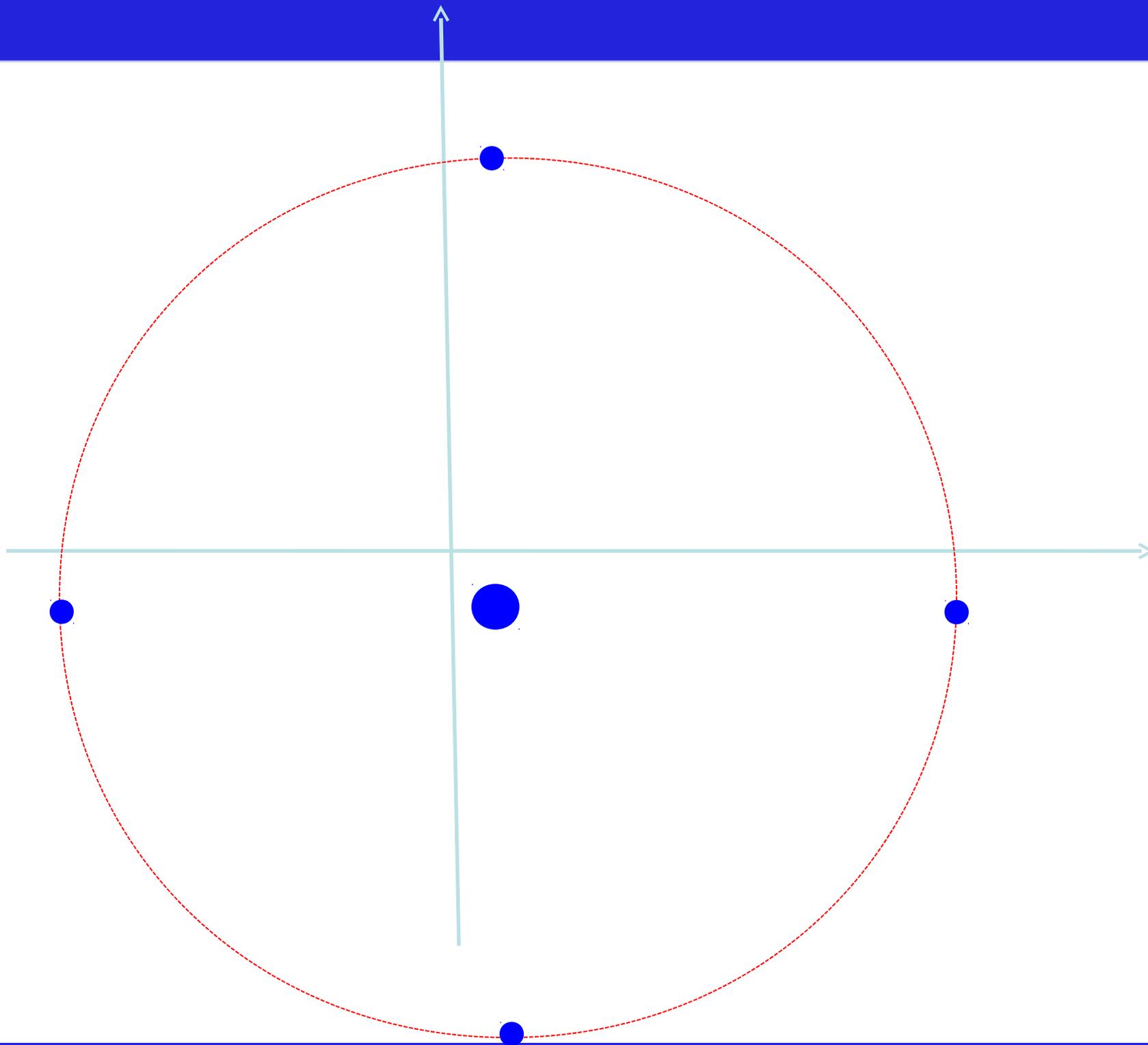
$$\theta_1 = \theta_2$$

$$t_1 = t_2$$

Tempo para uma revolução completa

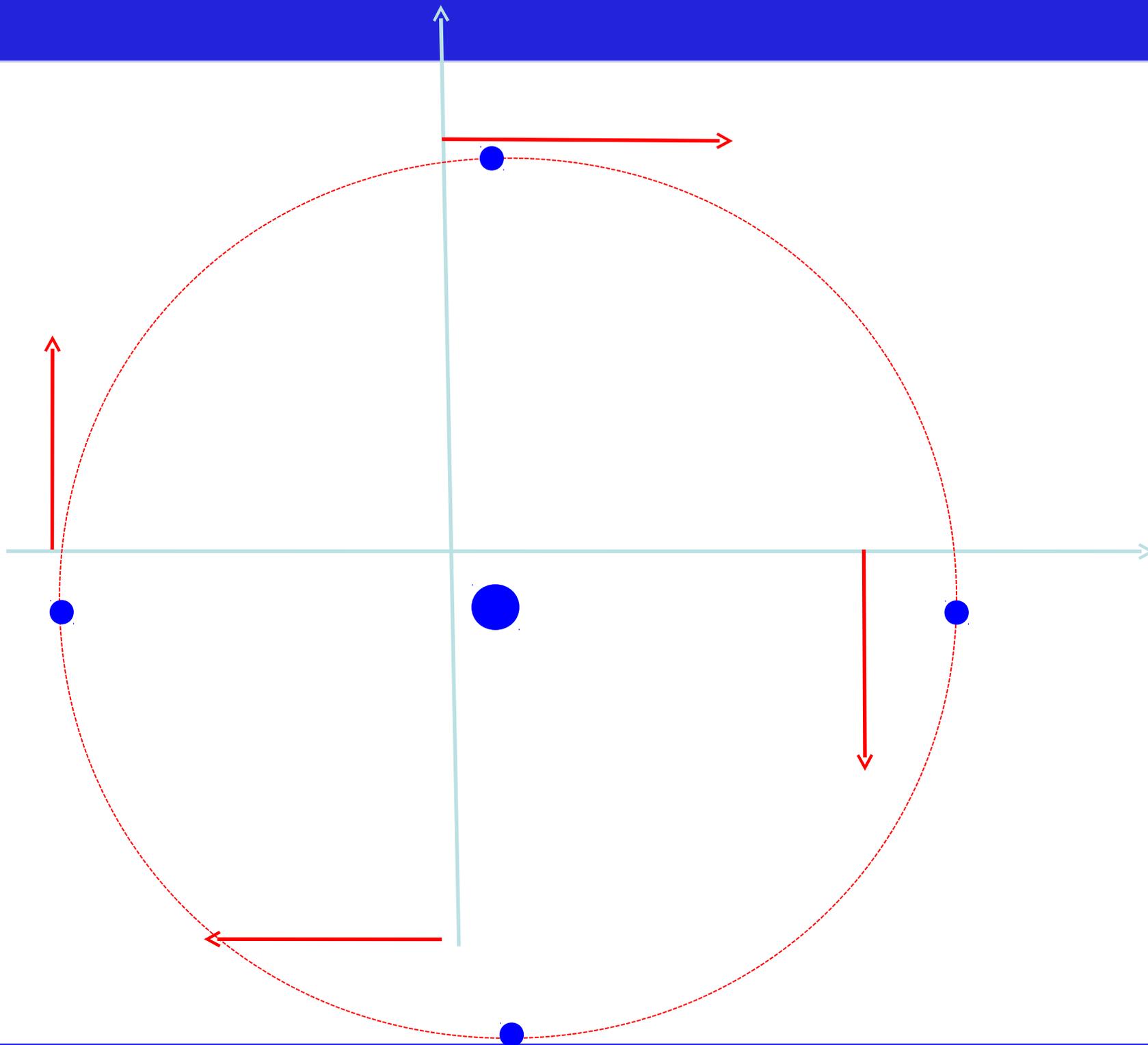
Período

$$T = \frac{1}{f} = \frac{2p}{v}$$



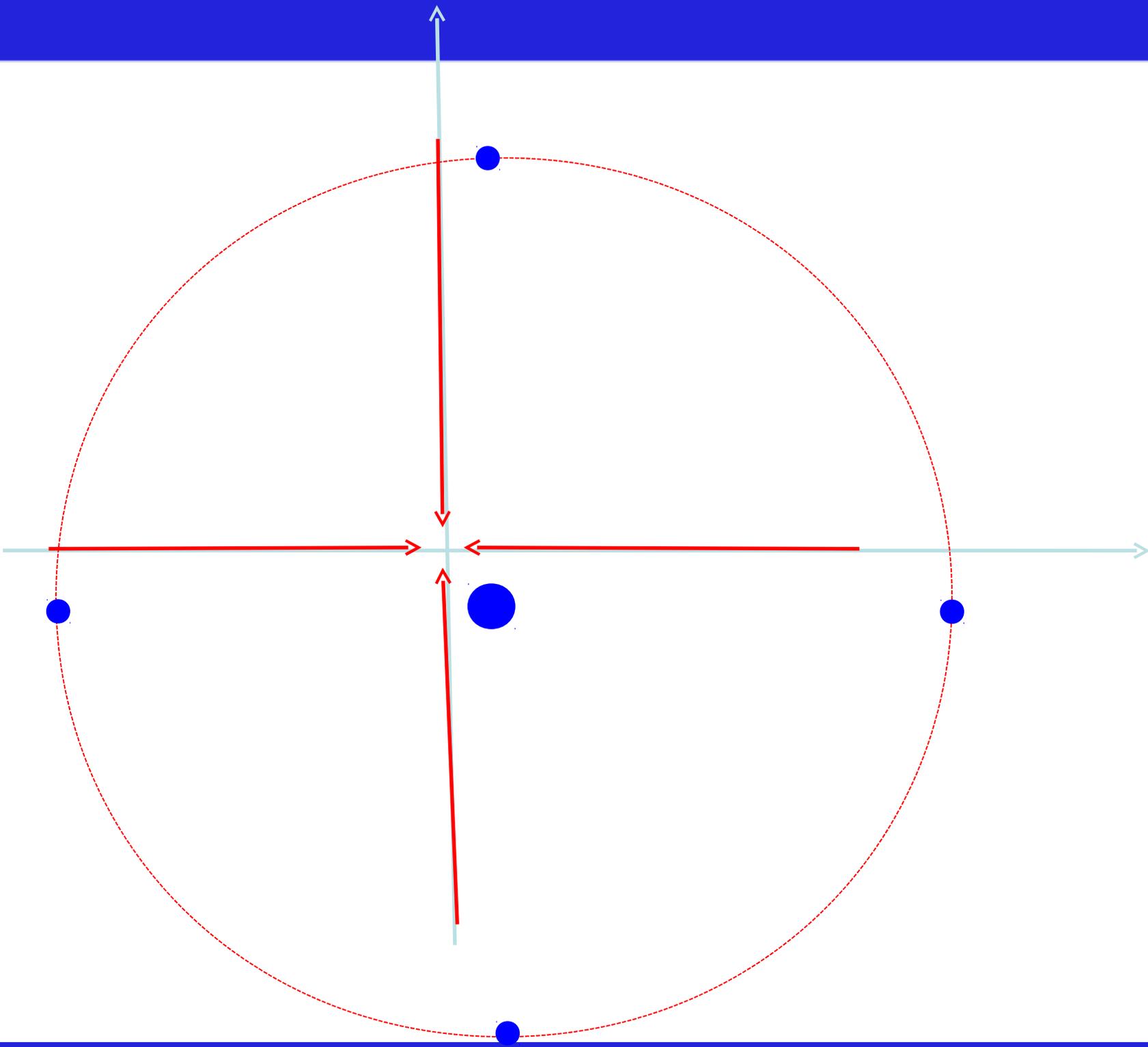
$$x(t) = r \cos \nu t$$

$$y(t) = r \sin \nu t$$



$$v_x(t) = -rv \sin v t$$

$$v_y(t) = rv \cos v t$$



A aceleração

$$a_x(t) = -rv^2 \cos vt = -v^2 x(t)$$

$$a_y(t) = -rv^2 \sin vt = -v^2 y(t)$$

A força

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

$$\vec{F} = -mv^2 \frac{\vec{r}}{r}$$

$$|\vec{F}| = mv^2 \frac{r}{r} = m \frac{v^2}{r}$$

Forças que apontam para o centro...

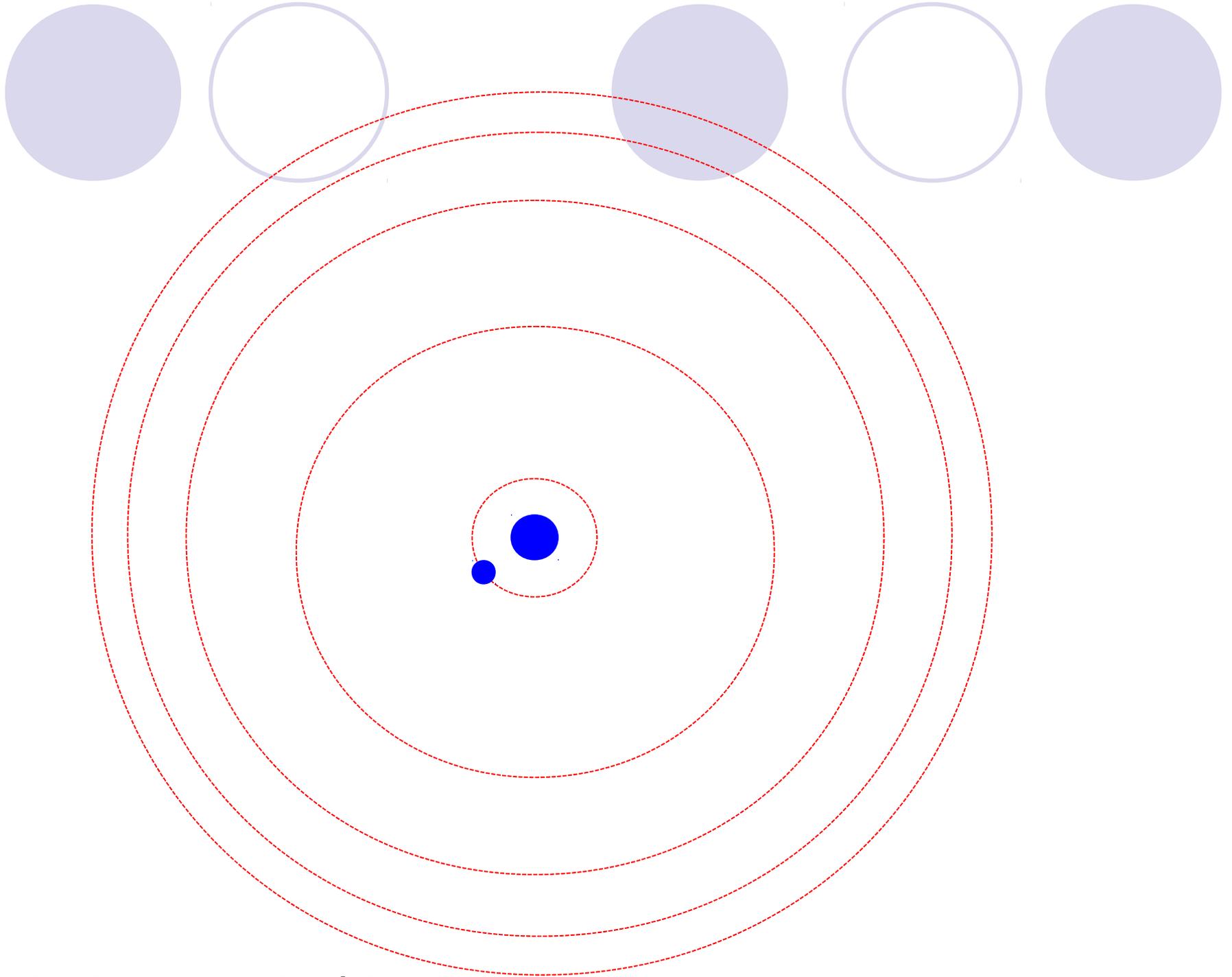
$$\vec{F}_G = G \frac{Mm}{r^2}$$

$$\vec{F}_E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qq}{r^2}$$

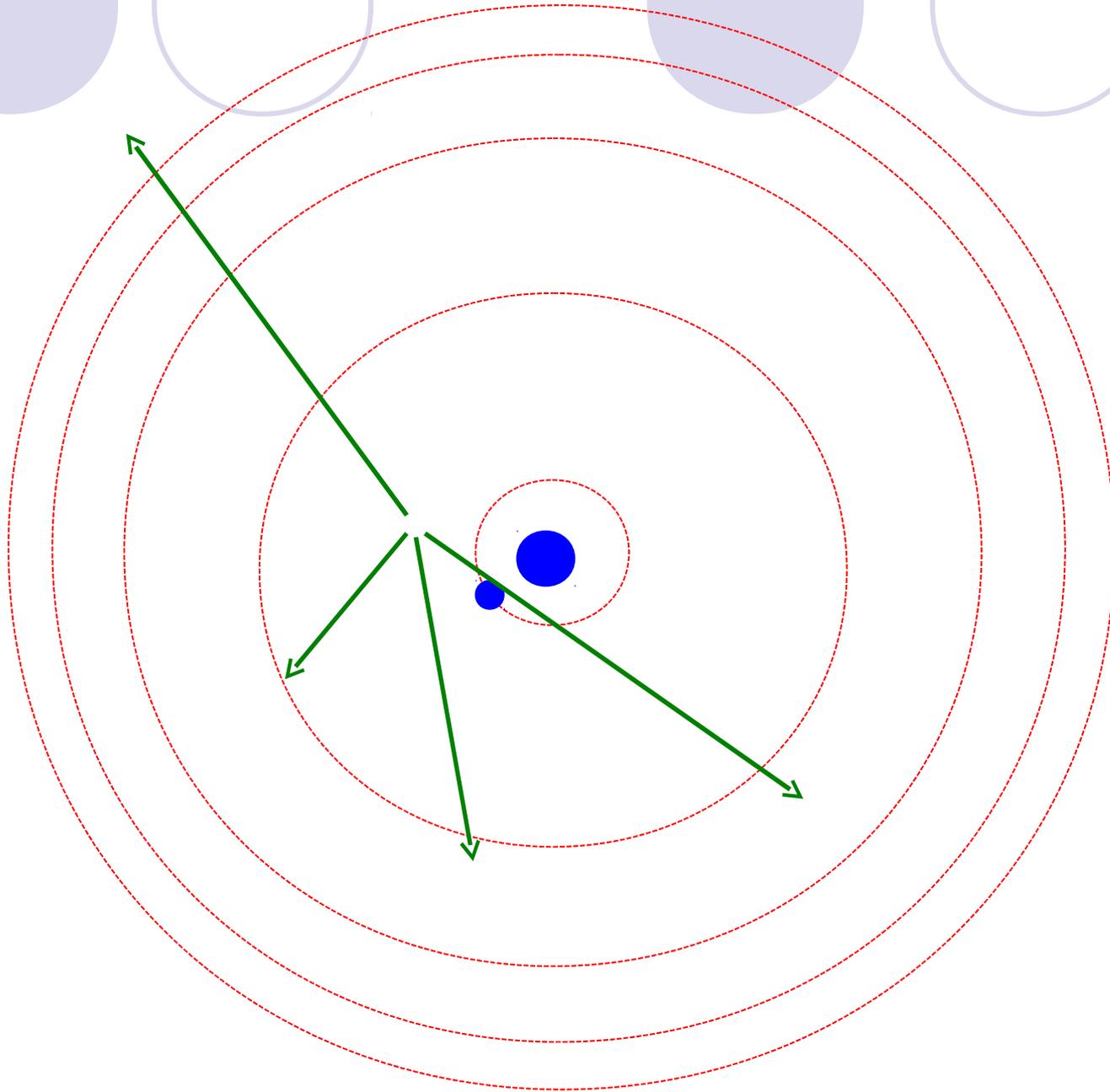
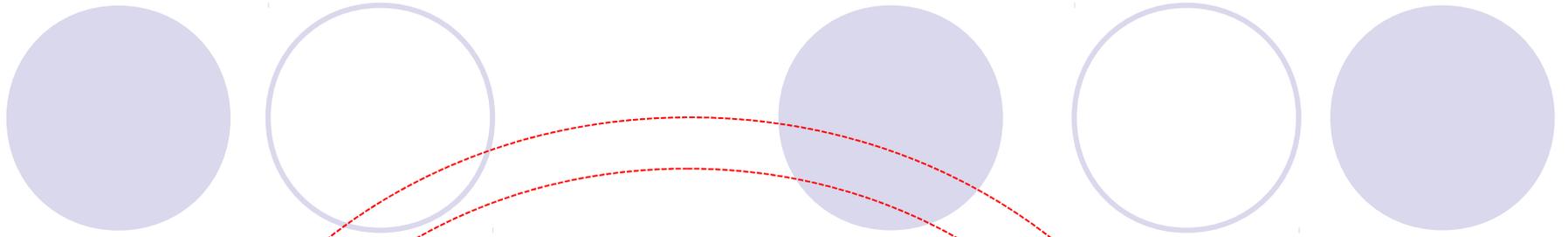
Qual é a grandeza constante?

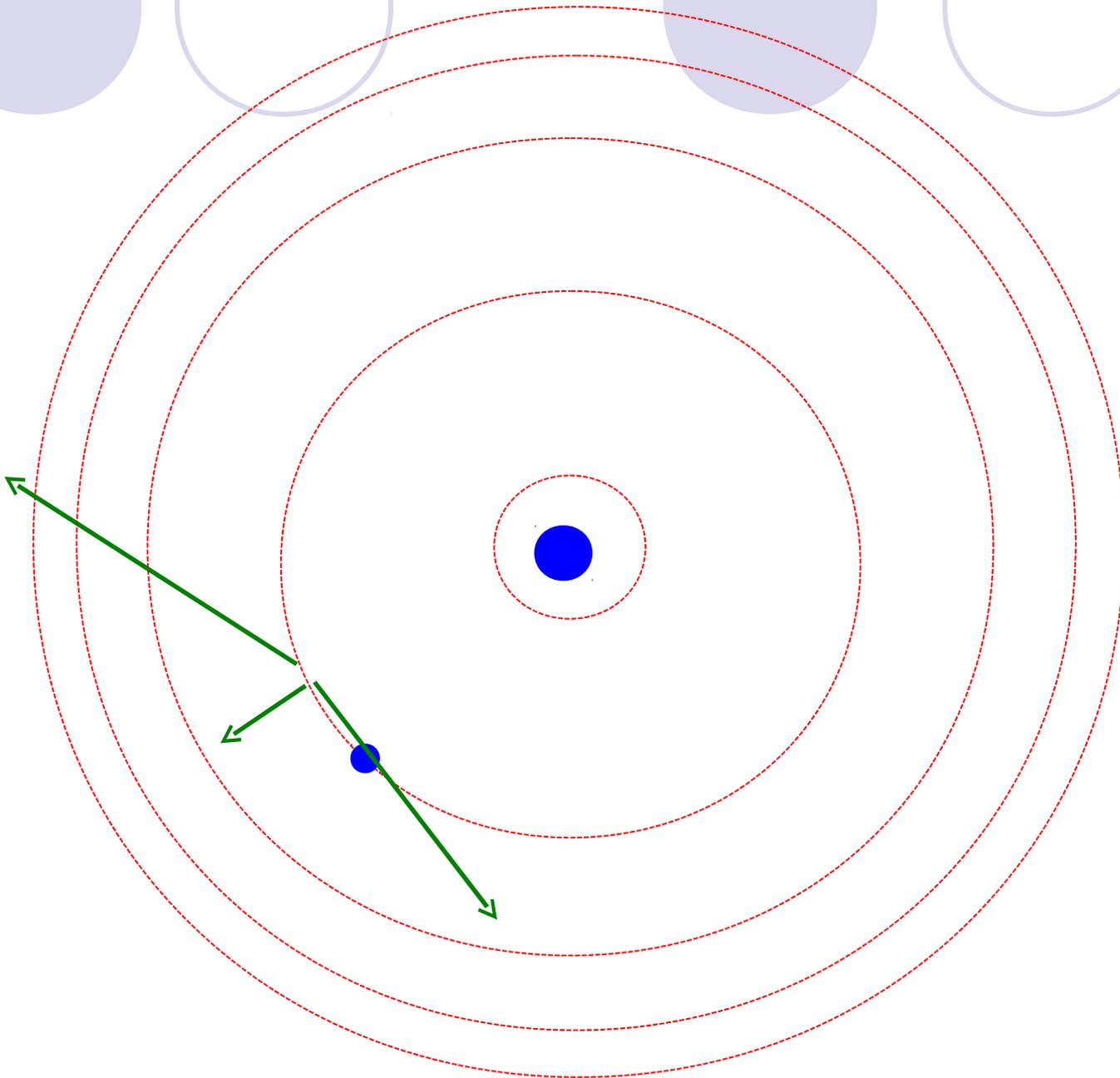
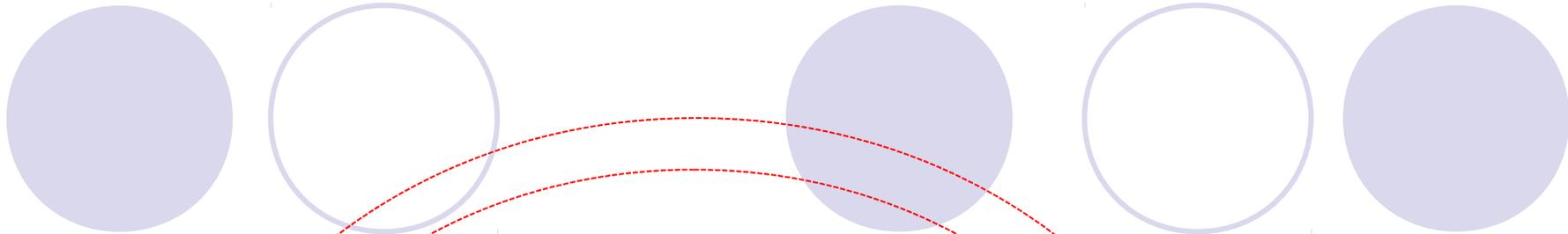
$$\vec{p} = m\vec{v}$$

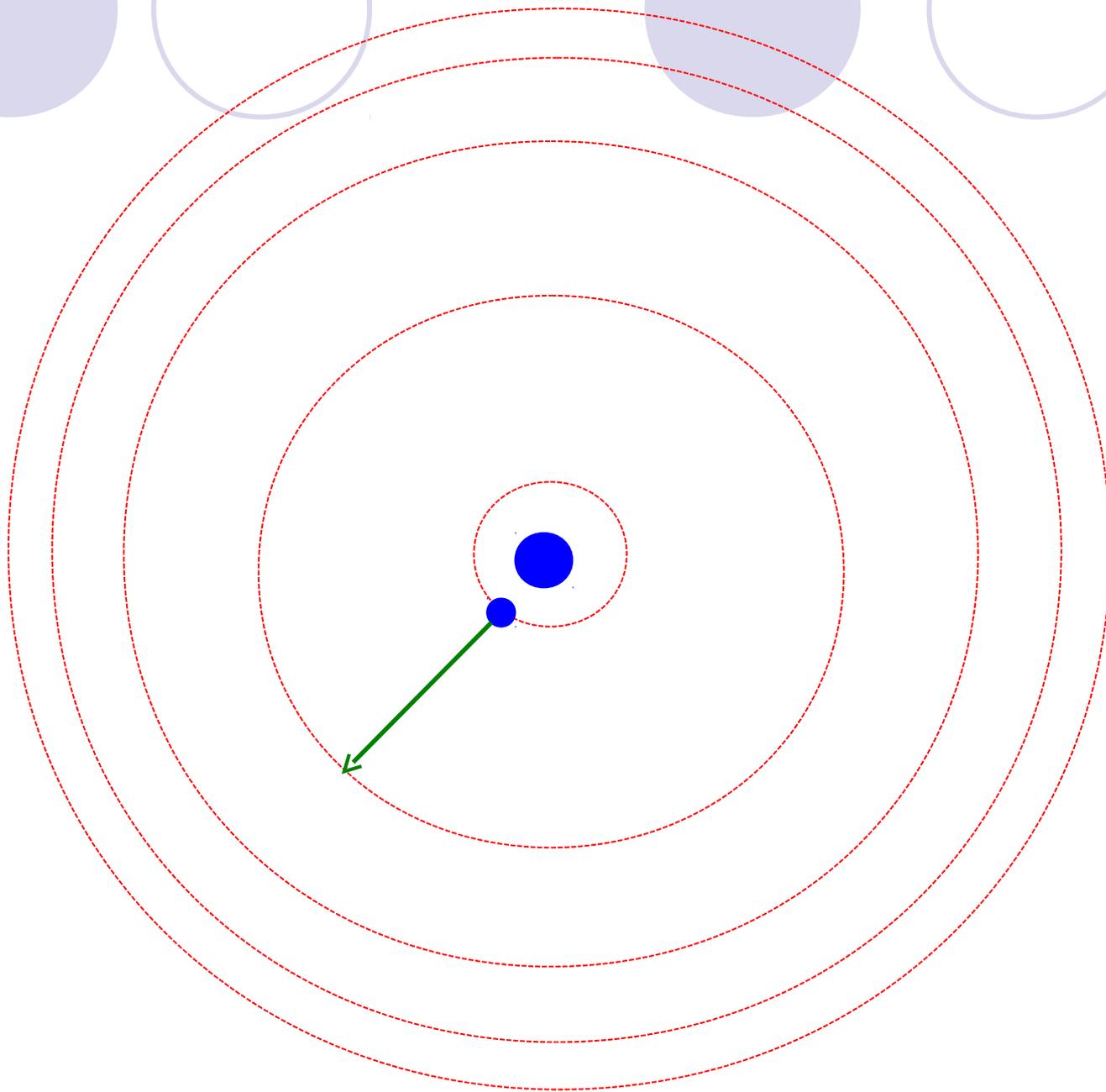
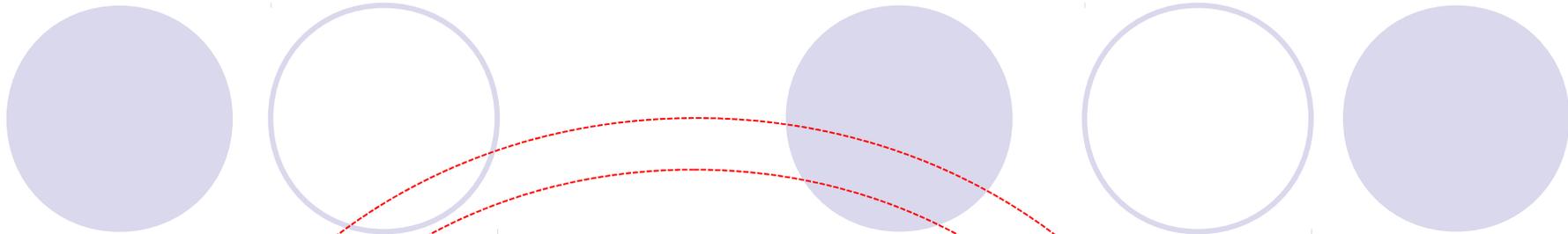
$$\vec{L} = m\vec{r} \times \vec{v}$$



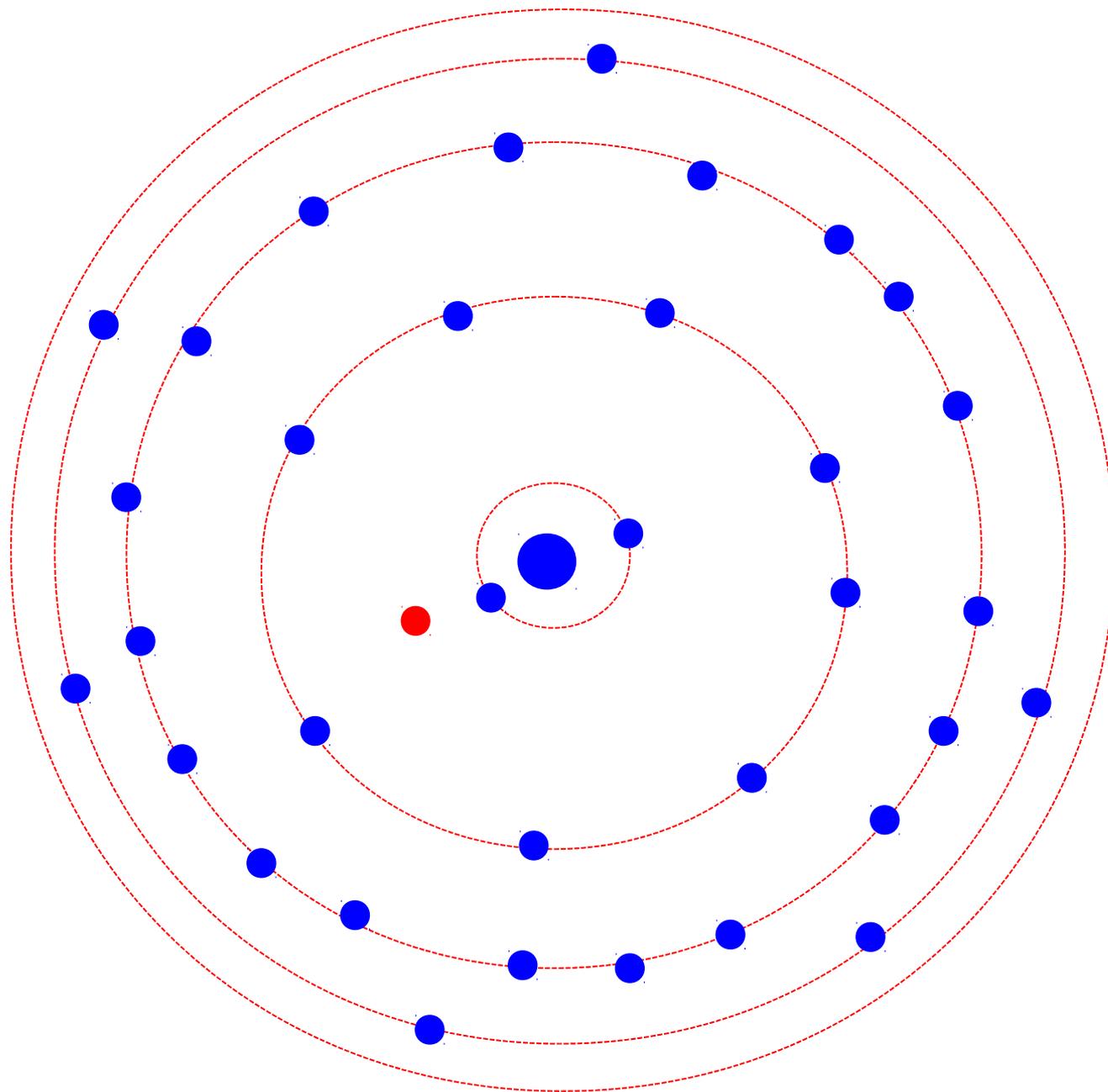
Elétron girando em torno do núcleo







Átomo de muitos elétrons



Fórmulas não usadas e quebradas

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

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

$$\bar{\nu} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m e^4}{4\pi\hbar^3 c} Z^2 \left(\frac{1}{\mu_f^2} - \frac{1}{\alpha_i^2} \right) + \frac{\beta P_H}{2\alpha\beta P_H} - \frac{R_H}{2\alpha\beta P_H} + \dots$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = P_H \frac{1}{v_i^2} - \frac{1}{v_{\phi}^2} P(Z - \sigma) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, 6, \dots$$

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad R_{\infty} \approx 1,09680 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$(m, a, b) = \frac{R_H}{[m + a + b(A - u)]^2}$$