

Modelo atômico de Sommerfeld

Francisco das Chagas de Sousa RA 22202310155

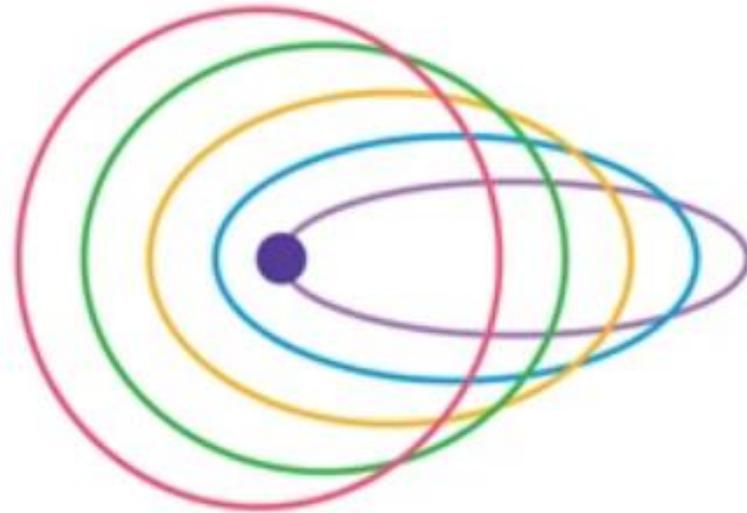
Universidade Federal do ABC- UFABC

Mestrado Nacional Profissional em Ensino de Física – MNPEF

francisco.chagas@ufabc.edu.br

Santo André-SP

Março/2025

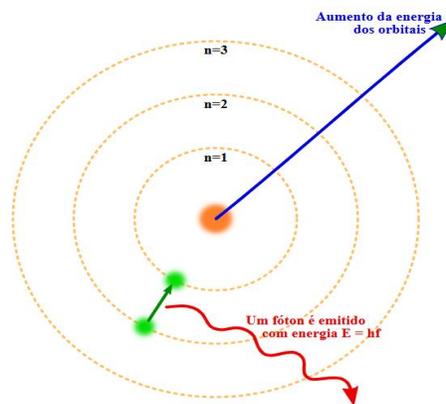


Trabalho apresentado ao Profº Drº Pieter Westera e Profª Drª Laura Paulucci, para critérios de avaliação na disciplina PEF 103 – Mecânica Quântica 2025.1

O modelo de Bohr foi um grande passo para a Mecânica Quântica

Resultado favorável do Modelo de Bohr

O elétron e o núcleo do átomo de hidrogênio realmente giram em torno do centro de massa comum. A massa do elétron é substituída pela massa reduzida do sistema.



Falhas do Modelo de Bohr

O modelo de Bohr foi um grande passo para Mecânica Quântica, mas tinha suas limitações:

- ✓ Funcionava somente para átomos com um elétron (“hidrogenóides”).
- ✓ Não conseguia calcular as intensidades ou estrutura fina das linhas espectrais (por exemplo, quando os átomos eram colocados em campos magnéticos).
- ✓ Não conseguia explicar a ligação dos átomos para formar moléculas

Essas falhas impulsionaram o desenvolvimento do modelo Sommerfeld.



Arnold Johannes
Wilhelm Sommerfeld
(1868–1951)

Modelo atômico de Sommerfeld

O físico alemão Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld, conhecido pela regra de Wilson-Sommerfeld, propôs em 1915 uma explicação para o fato de que o espectro de hidrogênio (e de outros elementos) apresenta uma estrutura fina. Essa estrutura fina é caracterizada pelo desdobramento das linhas espectrais previstas pelo modelo de Bohr em linhas com energias muito próximas — aproximadamente 10^{-4} vezes a separação entre linhas adjacentes. Sommerfeld sugeriu que, em cada camada eletrônica (n), existia uma órbita circular e $n - 1$ órbitas elípticas com diferentes excentricidades.

Sommerfeld propôs que, dentro de cada camada eletrônica (n), os elétrons poderiam ocupar subníveis diferentes, caracterizados por órbitas elípticas em vez de apenas circulares, como no modelo de Bohr. Ele introduziu o conceito de números quânticos adicionais, como o número quântico azimutal (l), que descreve a forma da órbita, e o número quântico magnético (m), que representa a orientação da órbita no espaço.

Essa ideia foi um avanço significativo, pois ajudou a explicar as pequenas variações observadas no espectro de hidrogênio (a chamada estrutura fina) e abriu caminho para o desenvolvimento da mecânica quântica. A abordagem de Sommerfeld foi fundamental para reconciliar o modelo atômico com os dados experimentais disponíveis na época.

Modelo atômico de Sommerfeld

O modelo de Sommerfeld foi de fato uma extensão importante do modelo de Bohr, introduzindo maior complexidade e precisão na descrição dos átomos. Para descrever o movimento dos elétrons nas órbitas elípticas, Sommerfeld aplicou as condições de quantização de Wilson-Sommerfeld. A introdução dos números quânticos (n_ϑ) e (n_r) permitiu a caracterização dos movimentos angular e radial, respectivamente.

As condições de quantização são expressas como:

$$\oint p_\vartheta d\vartheta = n_\vartheta h \quad \text{e} \quad \oint p_r dr = n_r h$$

A primeira condição leva à restrição já conhecida: $L = n_\vartheta \hbar$ onde (L) é o momento angular, (\hbar) é a constante reduzida de Planck, e (n) é um número inteiro.

A segunda condição, relacionada ao movimento radial, estabelece uma condição para a relação entre os semi-eixos maior (a) e menor (b) das órbitas elípticas: $L(a/b-1) = n_r \hbar$. Essas ideias explicaram observações como a estrutura fina nos espectros atômicos e foram passos fundamentais na construção da teoria quântica moderna.

Sommerfeld conseguiu explicar melhor as órbitas elípticas do elétron. Igualando a força de Coulomb à força centrípeta necessária para manter o elétron na órbita, ele derivou expressões fundamentais:

1 - Para o semi-eixo maior da órbita elíptica: $a = 4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2 / \mu Z e^2 = n^2 / Z \cdot a_0$, onde (a) é o raio de Bohr e representa o valor para o hidrogênio ($Z = 1$).

2 - Para o semi-eixo menor: $b = a \cdot n_\theta / n$

3 - A energia do elétron: $E = - (1/4\pi\epsilon_0)^2 \mu Z^2 e^4 / 2n^2 \hbar^2 = -Z^2 / n^2 \cdot E_0$, sendo (E) é a energia do estado fundamental do hidrogênio, onde:

- ✓ (n) é chamado o número quântico principal ($n = 1, 2, 3, 4, \dots$);
- ✓ (n_θ) como o número quântico azimutal (, $n_\theta = 1, 2, 3, \dots, n$);
- ✓ (n_r) é representando o número quântico radial ($n_r = 0, 1, 2, \dots, n-1$).

Essas relações matemáticas refinam o modelo de Bohr e explicam a estrutura fina do espectro de hidrogênio, proporcionando uma base para a mecânica quântica.

Casos particulares

Planck: $E = nh\nu$ **Bohr:** $L = n\hbar$

Regras de Wilson e Sommerfeld (1916)
Para todo sistema físico, cujas coordenadas sejam funções periódicas do tempo, a condição de quantização de cada coordenada será tal que:

$$\oint p_q dq = n_q h$$

Sendo q a coordenada em questão e p_q o momento associado a q .

Integração sobre um ciclo da coordenada.

Caso do OHS unidimensional

Partícula submetida a uma força tipo: $F = -kx$

Energia total: $E = K + V$

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{k \cdot x^2}{2} \therefore 1 = \frac{p_x^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k}$$

Neste caso: $\oint p_x dx = \frac{2\pi E}{\sqrt{k/m}} = nh$

e como $\sqrt{k/m} = 2\pi\nu$

Temos finalmente:

$$\frac{E}{\nu} = nh$$

Reproduzindo a Lei de quantização de Planck

Caso da partícula em órbita circular

Elétron atômico em órbita de raio r .

Momento angular: $L = mvr = cte.$

Neste caso: $\oint p_q dq = \oint L d\theta$

Assim: $L \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi L = nh$

Temos finalmente:

$$L = n \frac{h}{2\pi}$$

Reproduzindo a lei de quantização de Bohr.

Interpretação de de Broglie (1924)

Para a regra de quantização de Bohr.

$$L = mvr = pr = nh/2\pi$$

mas, $p = h/\lambda_B$

então: $2\pi r = n\lambda_B$ ($n = 1, 2, 3 \dots$)

As órbitas permitidas, aos elétrons atômicos, são aquelas para as quais a circunferência contém, exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de Broglie.

O Modelo de Sommerfeld

A estrutura fina do átomo de hidrogênio

Órbitas elípticas

- ✓ Semi-eixo maior: a
- ✓ Semi-eixo menor: b
- ✓ Distância entre focos: $F_1-F_2=2c$
- ✓ Excentricidade: $e=c/a$

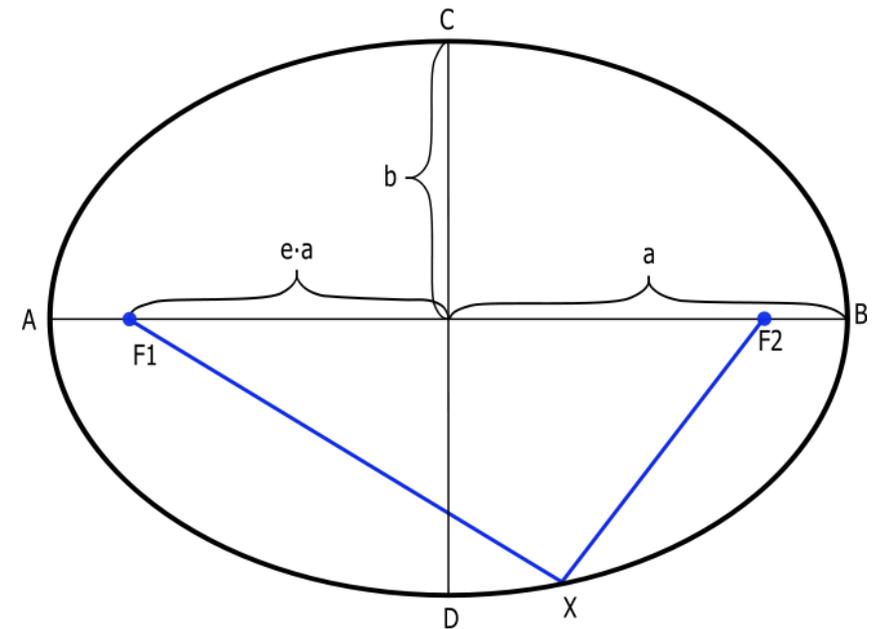
Regras de Quantização

$$\oint L d\theta = n_\theta h \rightarrow L = n_\theta \hbar \rightarrow (n_\theta = 1, 2, 3, \dots)$$

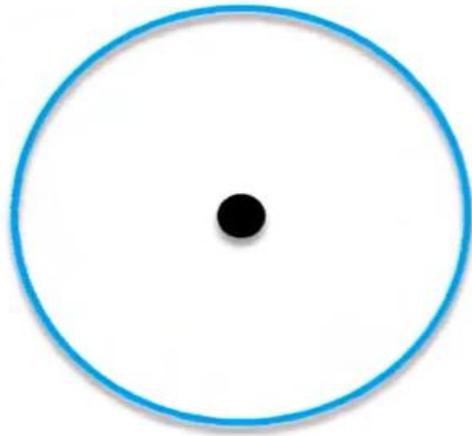
$$\oint p_r dr = n_r h \rightarrow L(a/b - 1) = n_r \hbar \rightarrow (n_r = 0, 1, 2, 3, \dots)$$



▲ Estrutura fina de um espectro atômico. (Esquema fora de proporção em cores fantasiosas.)



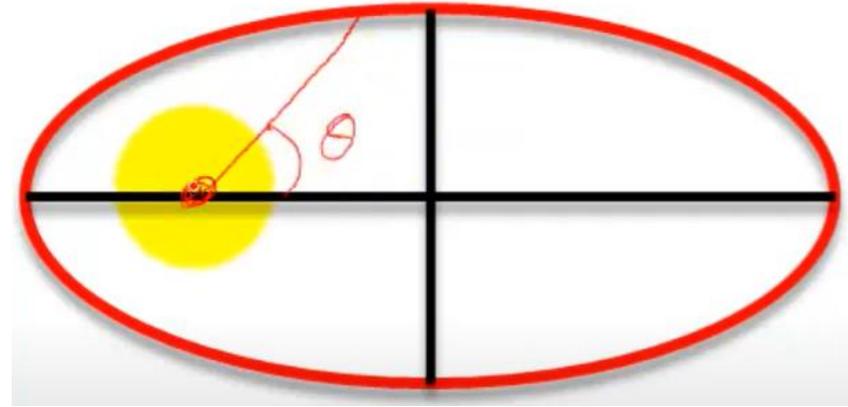
O Modelo de Sommerfeld



Bohr considerou a quantização do momento angular e a quantização do momento angular leva as restrições dos níveis de energia.

$$\left[\frac{1}{\underbrace{(n_1 + k_1)^2}_m} - \frac{1}{(n_2 + k_2)^2} \right]$$

$m = 2, k = 1, m' = 1 / k = 2, m' = 0$



Sommerfeld leva em consideração não só do momento angular mais também do momento linear, por que a distância percorrida pelo elétron o raio do elétron não é o mesmo na elipse ele varia ao longo de seu percurso então ele seria uma quantização nesse ponto.

n	k	l(k-1)	símbolo
1	1	0	s
2	2	1	p
	1	0	s
3	3	2	d
	2	1	p
	1	0	s

$$\left[\frac{1}{\underbrace{(n'_1 + k_1)^2}_m} - \frac{1}{(n'_2 + k_2)^2} \right]$$

$m = 2 \quad k = 1, m' = 1 / k = 2, m' = 0$

Com relação esta equação tem duas restrições quânticas, um referente a distância do elétron ao núcleo e outro refere-se ao movimento circular dos ângulos permitidos.

(n_1) é a restrição radial

(k_1) é a restrição do número quântico angular

(n) é o número quântico principal

A somatória de $(n_1$ com $k)$ tem que ser igual (n) número quântico principal, que estar presente no modelo de Bohr, sendo esse número (n) o nível de energia. Se $n=2$, $k=1$ e $n'=1$ ou também pode ser $k=2$ e $n'=0$ Sommerfeld mostra que o n' pode ser nulo o k não pode.

O modelo de Sommerfeld aprimora o modelo de Bohr ao explicar as transições eletrônicas não apenas entre níveis de energia principais, mas também entre subníveis. Diferente do modelo de Bohr, que tratava das transições entre níveis principais (por exemplo, do nível 1 para o nível 2), Sommerfeld incorpora restrições de transições entre subníveis.

No modelo atômico de Sommerfeld, as transições eletrônicas são restritas a uma diferença de (k) igual a ± 1 . Além disso, as bandas são classificadas de acordo com os níveis de (k) e (l):

Banda Sharp: Transições para (k = 1) e (l = 0).

Banda Difusa: Transições para (k = 3) e (l = 2).

Banda Principal: Transições para (k = 2) e (l = 1).

Banda Fundamental: Transições para (k = 4) e (l = 3)

Essas bandas descrevem diferentes tipos de transições entre os subníveis, destacando a organização específica do modelo de Sommerfeld.

$$\nu = R \left[\frac{1}{\underbrace{(n_1' + k_1)^2}_m} - \frac{1}{(n_2' + k_2)^2} \right]$$

$m = 2, k = 1, m' = 1$ /

$$\nu_s = R \left[\frac{1}{(n_1' + k_p)^2} - \frac{1}{(n_2' + k_s)^2} \right] \quad \nu_d = R \left[\frac{1}{(n_1' + k_p)^2} - \frac{1}{(n_2' + k_d)^2} \right]$$

SHARP

$\Delta k = \pm 1$ DIFUSAS

$$\nu_p = R \left[\frac{1}{(n_1' + k_s)^2} - \frac{1}{(n_2' + k_p)^2} \right]$$

PRINCIPAL

$$\nu_f = R \left[\frac{1}{(n_1' + k_d)^2} - \frac{1}{(n_2' + k_f)^2} \right]$$

FUNDAMENTAL

O Modelo de Sommerfeld

A estrutura fina do átomo de hidrogênio

A solução de Sommerfeld

Para átomo de um elétron de massa reduzida μ .

Forma e tamanho das órbitas:

$$a = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2} \rightarrow b = a \frac{n_\theta}{n}$$

Números quânticos:

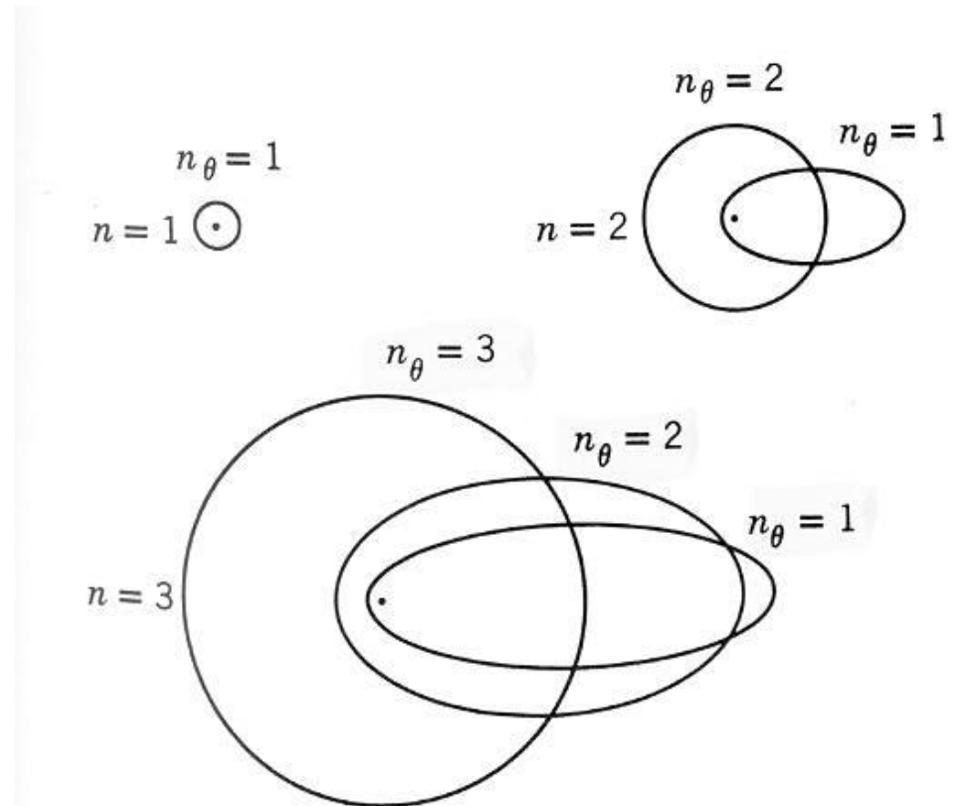
$$n = n_\theta + n_r \quad (\text{principal})$$

$$n_\theta = 1, 2, 3 \dots n \quad (\text{azimutal})$$

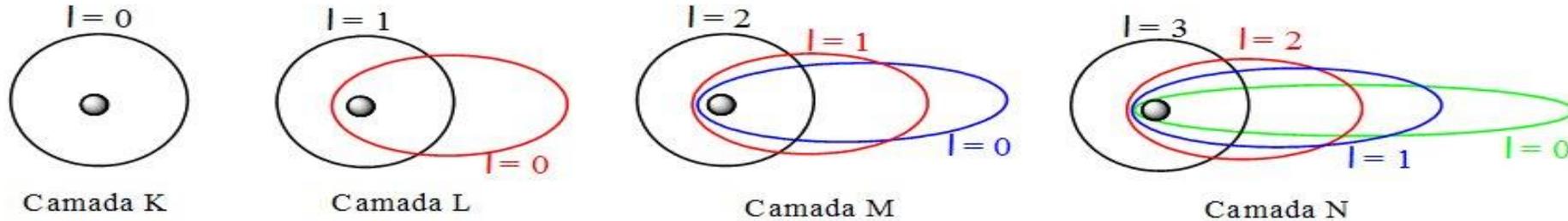
Energia total:

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

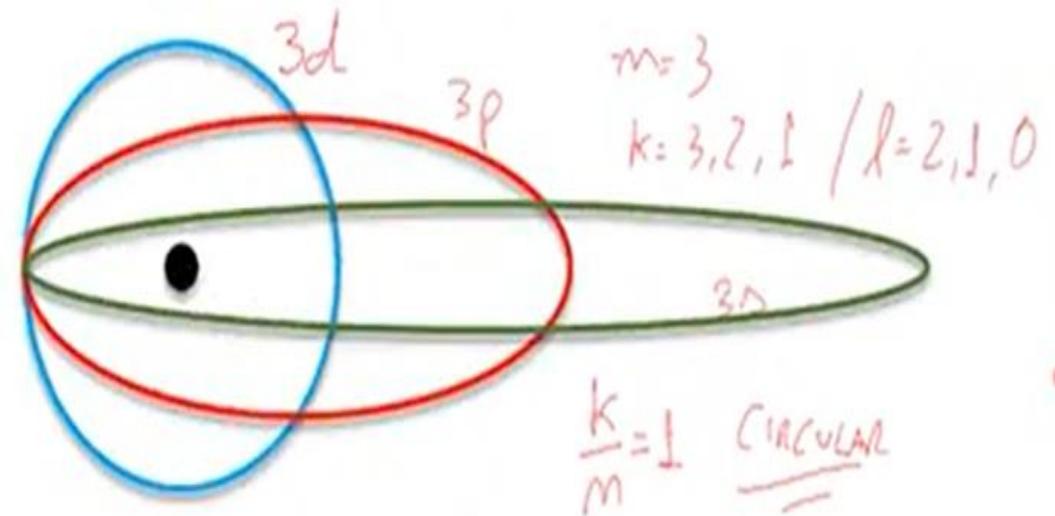
Estados degenerados de energia (mesmo n). Ou seja, mesma energia para diferentes órbitas com mesmo n° quântico principal.



Na camada M ($n = 3$), o número quântico secundário pode ter valores ($l = 0$), ($l = 1$) e ($l = 2$). Entre esses subníveis, o de maior valor ($l = 2$) corresponde à órbita mais arredondada e representa o maior nível de energia do elétron dentro dessa camada.



Perfeito! Resumidamente, a grande contribuição do modelo de Sommerfeld foi explicar as múltiplas linhas nos espectros de emissão ao introduzir o segundo número quântico. Esse avanço revelou que os níveis de energia são compostos por subníveis, representados pelas letras 's', 'p', 'd' e 'f', associadas a conceitos da espectroscopia. Isso trouxe maior precisão ao entendimento das estruturas atômicas e suas interações com a luz.



O Modelo de Sommerfeld

Removendo a degenerescência

Correção relativísticas da m_e

Cálculo de Bohr mostrou que: $v/c \approx 10^{-2}$

produz correções de $\approx (v/c)^2$ em m_e e E .

Que é da ordem (10^{-4}) de separação das linhas de estrutura fina, observadas no espectro do hidrogênio!

Velocidade média dos elétrons

Dependerá da elipcidade da órbita (n_θ)

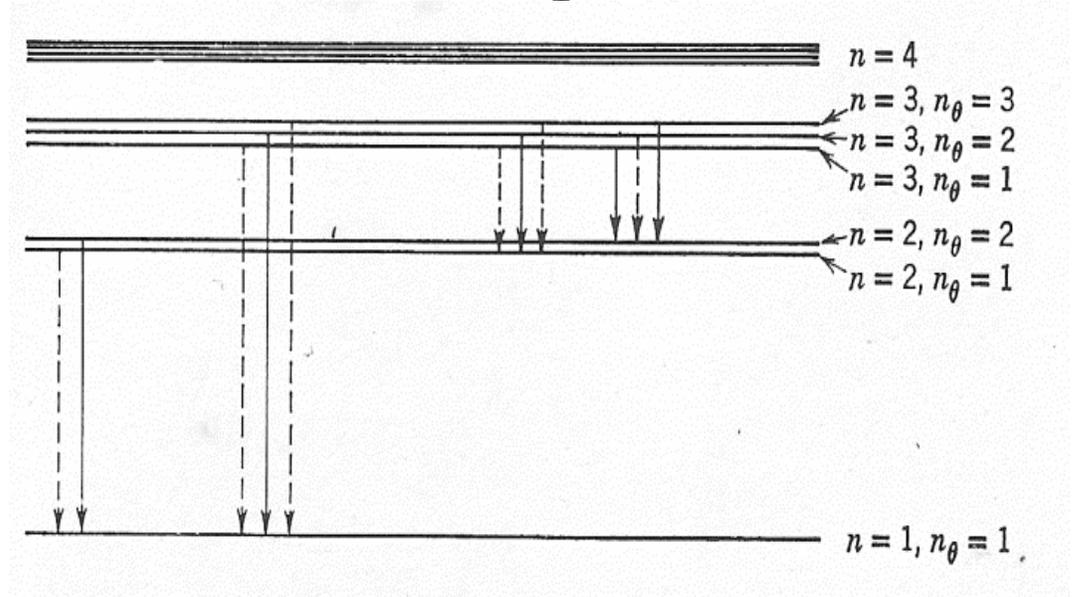
Recalculando a Energia total:

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

Onde, $\alpha \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} = 7,297 \times 10^{-3} \cong \frac{1}{137}$

É a *constante de estrutura fina*.

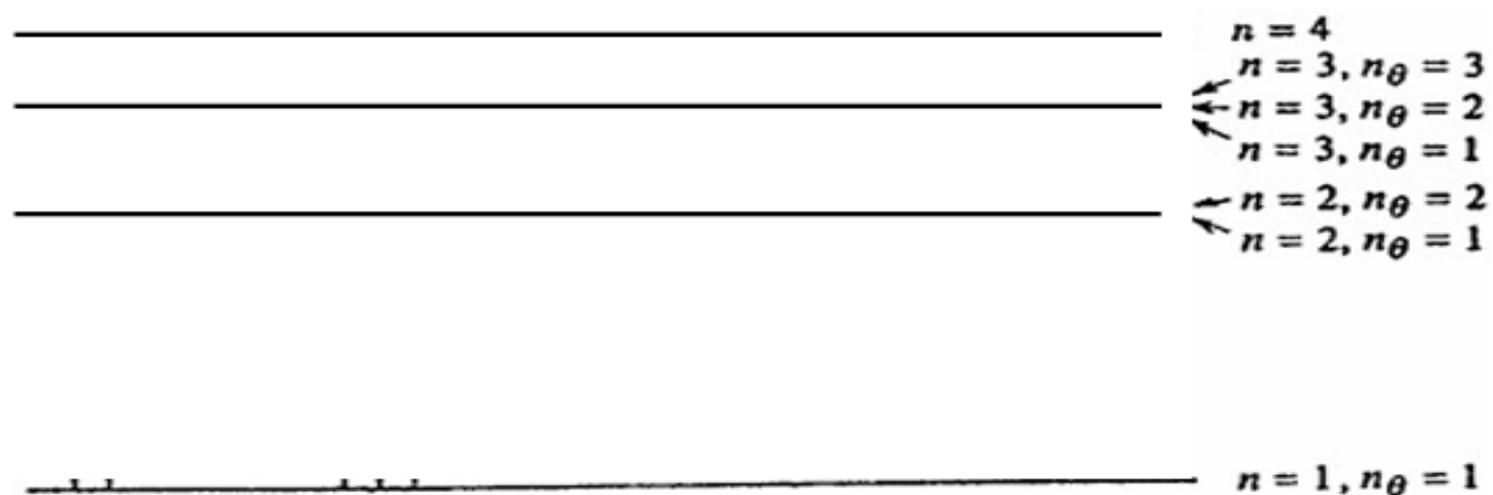
A estrutura fina do hidrogênio



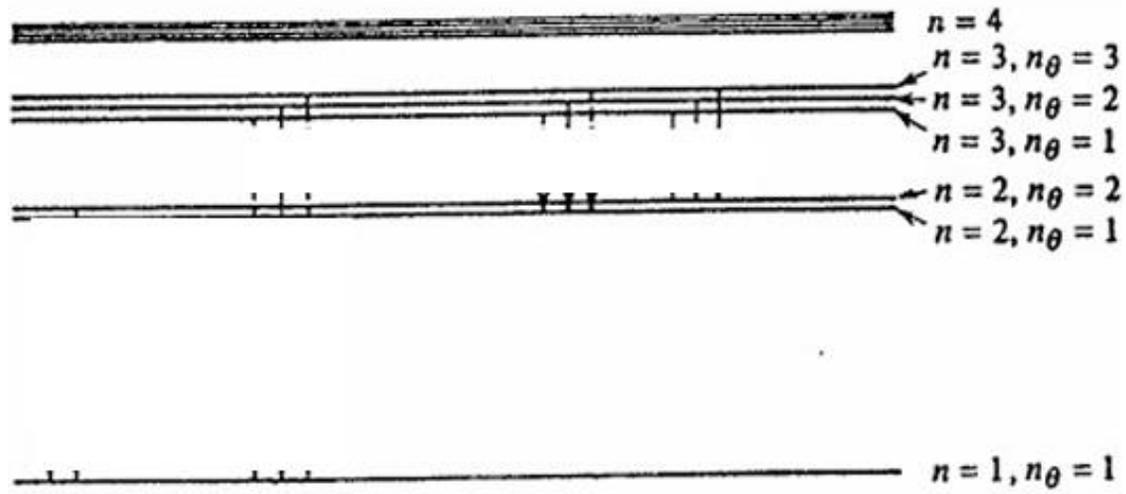
As transições observadas são representadas pelas setas de linha cheia.

Transições permitidas são definidas pela seguinte regra de seleção:

$$n_{\theta i} - n_{\theta f} = \pm 1$$



O modelo de Sommerfeld foi um avanço significativo em relação ao modelo de Bohr, mas ainda estava enraizado na física clássica (newtoniana). Ele introduziu subníveis e números quânticos adicionais para descrever as órbitas elípticas, mas não conseguiu romper totalmente com as limitações da física clássica. Assim, o modelo de Sommerfeld não foi capaz de explicar a estrutura fina no espectro de hidrogênio completamente. A degenerescência das energias para subníveis com o mesmo número quântico principal (n) permaneceu, já que as energias calculadas eram as mesmas do modelo de Bohr. Isso ocorreu porque Sommerfeld não incorporou efeitos relativísticos ou os conceitos de spin e interação spin-órbita, que só foram compreendidos mais tarde com a mecânica quântica relativística.



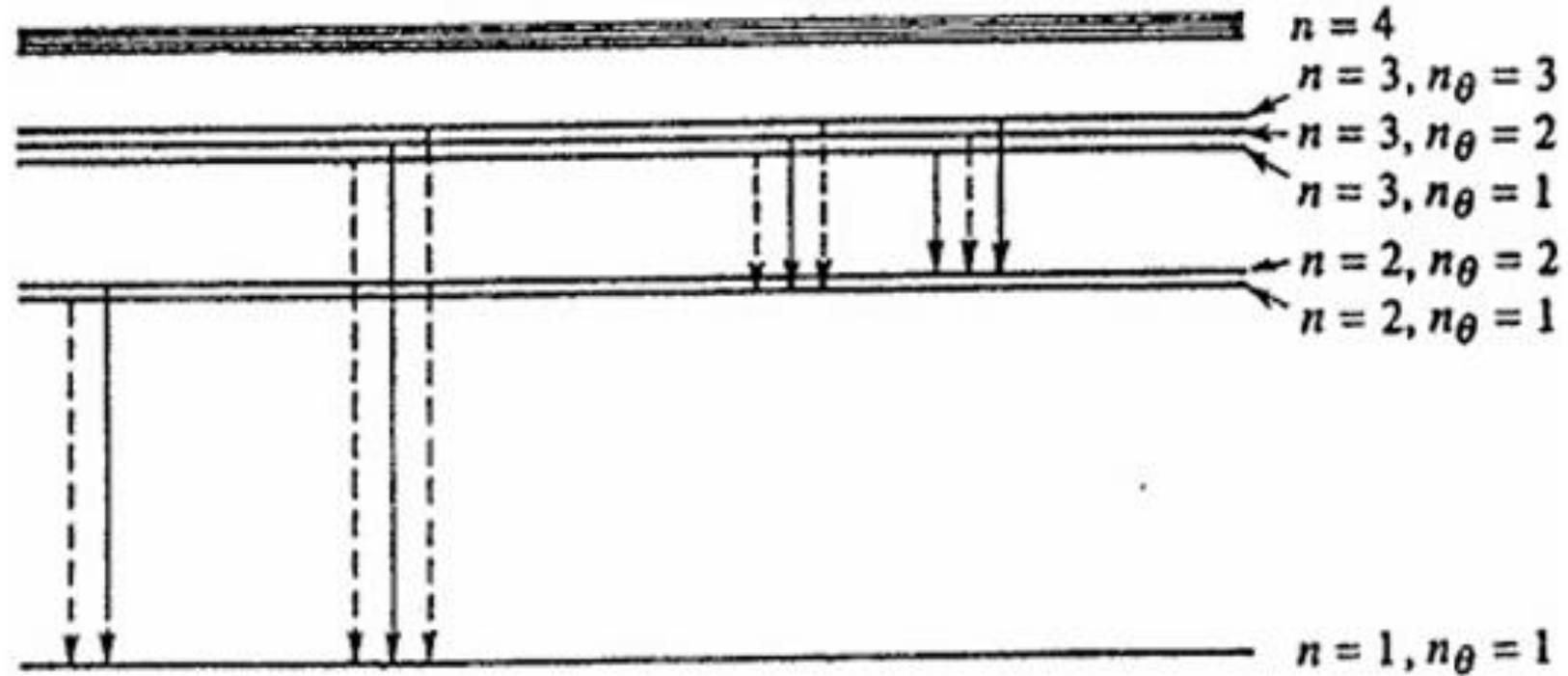
Sommerfeld refinou o modelo de Bohr ao considerar órbitas elípticas e introduzir correções relativísticas devido às altas velocidades dos elétrons ($0,01c$). Essas correções permitiram "desdobrar" as energias de níveis com o mesmo número quântico principal (n), mas diferentes valores de (n_θ) (número quântico azimutal).

$$\alpha \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = 7,297 \times 10^{-3} \simeq \frac{1}{137}$$

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

Ele utilizou a constante de estrutura fina que conecta a intensidade da interação eletromagnética, e derivou novas equações que explicavam a estrutura fina no espectro do hidrogênio.

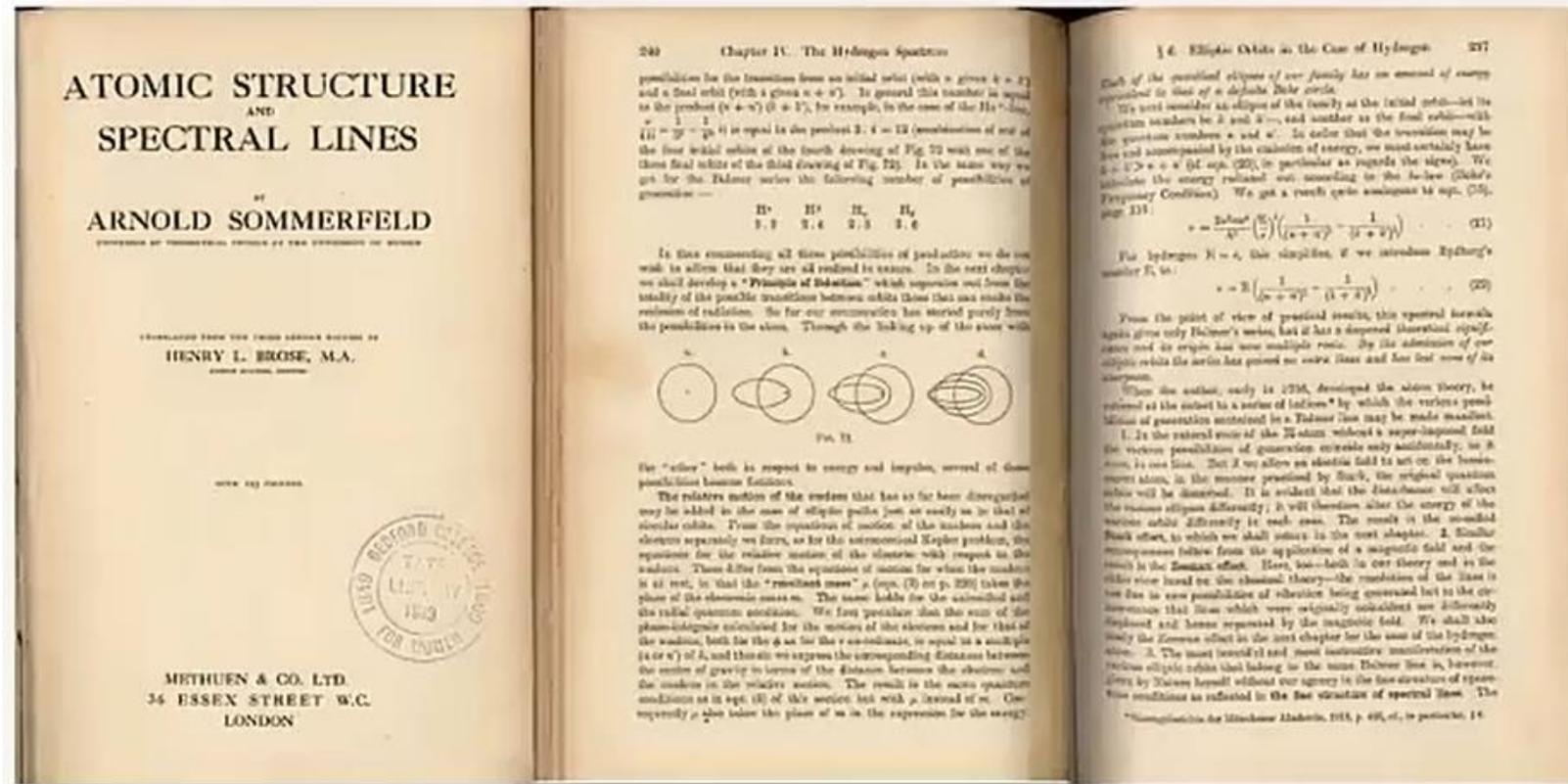
Apesar disso, o modelo ainda era limitado por conceitos da física clássica, sendo posteriormente superado pela mecânica quântica moderna.



Com estes valores de energia, a estrutura fina no espectro de hidrogênio pode ser explicada, desde que ocorram apenas transições, naquelas n_θ muda por uma unidade, isto é (sendo n_θ_i e n_θ_f os estados inicial e final da transição): $n_\theta_i - n_\theta_f = \pm 1$ Uma restrição destas para transições quânticas se chama regra de seleção.

Analogia comparativa comparativa entre os modelos atômicos de Bohr e Sommerfeld

<i>Aspecto</i>	<i>Modelo de Bohr</i>	<i>Modelo de Sommerfeld</i>
Órbitas dos elétrons	Elétrons movem-se em órbitas circulares ao redor do núcleo.	Elétrons movem-se em órbitas elípticas e circulares.
Níveis de energia	Apenas níveis de energia principais são considerados.	Introduz subníveis de energia dentro dos níveis principais.
Velocidade dos elétrons	Não considera efeitos relativísticos.	Considera velocidades relativísticas para elétrons em átomos mais pesados.
Números quânticos	Apenas o número quântico principal (n).	Introduz o número quântico azimutal (l) para descrever a forma das órbitas.
Aplicabilidade	Explica bem o espectro do átomo de hidrogênio.	Expande a explicação para átomos mais complexos, mas ainda possui limitações.



BIBLIOGRAFIA

- NOVAES, M., STUDART, N. Mecânica Quântica Básica, MNPEF-LF, 2016;
 Fundamentos da Física. Halliday, Resnik, Krane, Denneth. Vol. 01. LTC. 04ª Ed. RJ. 1996
 PERES, S. Mecânica Quântica: Um curso para professores da educação básica, MNPEF-LF, 2016;
 FELTRE, R; YOSHINAGA, S. Atomística – 1ª Ed. – São Paulo: Moderna, 1970. p. 146 – 175.
 FELTRE, R. Química Geral – 5ª Ed. – São Paulo: Moderna, 2000. p.110 – 115.