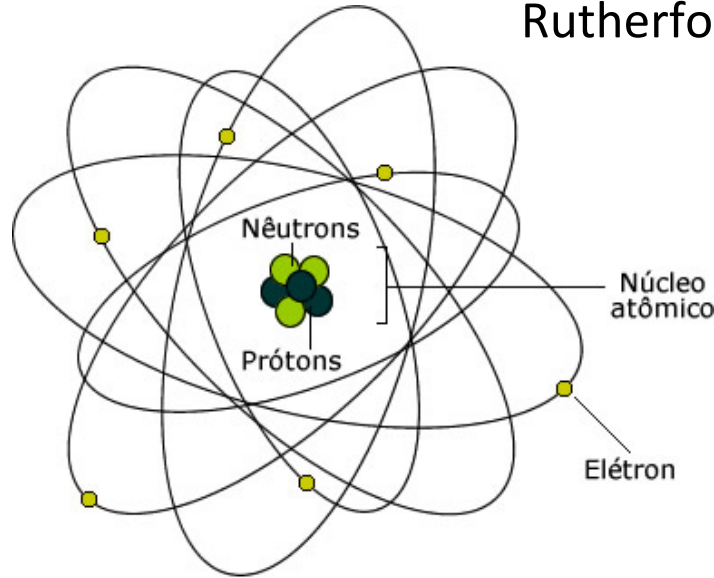


MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

Niels Bohr (1885-1961)– físico dinamarquês, trabalhou com Rutherford

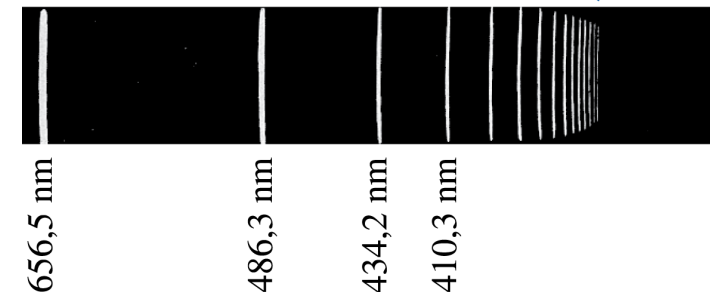
Modelo atômico de Rutherford



Lembre que: havia dificuldades para explicar:

- ◆ Como um átomo poderia ser estável (partículas aceleradas irradiam)
- ◆ Espectros discretos de emissão / absorção

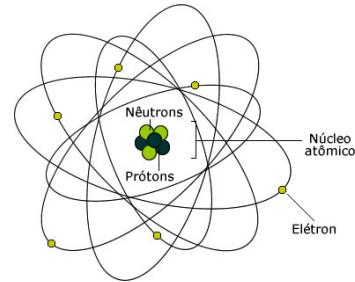
Espectro de emissão do hidrogênio.



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

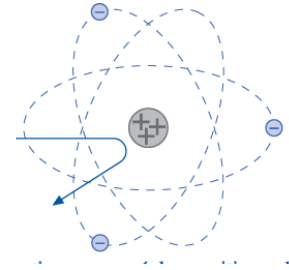
A PROPOSTA DE BOHR

1. Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno/Rutherford.

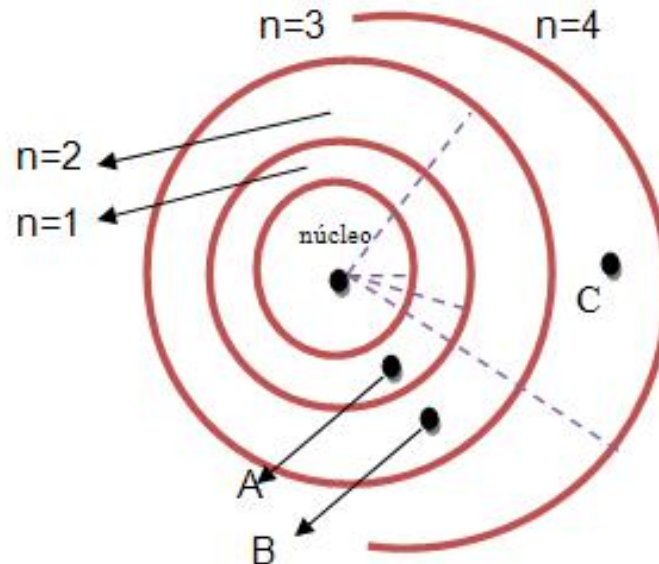


MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.

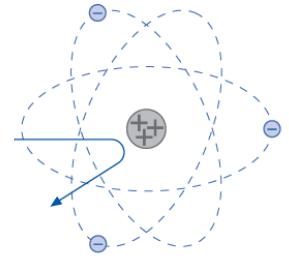


2. Os átomos existem apenas em certos **estados estacionários**. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas, indexadas por um número inteiro **$n = 1, 2, 3, 4 \dots$** (número quântico).



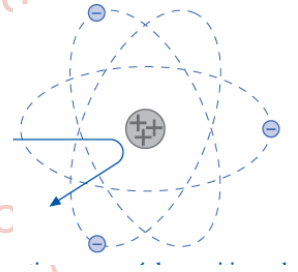
MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.
 - ✓ Os átomos existem apenas em certos **estados estacionários**. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas, indexadas por um número inteiro $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ (número quântico).
- 3.** Cada estado estacionário possui uma energia discreta e bem definida E_m , ou seja, as energias são quantizadas. $E_1, E_2, E_3, \dots$

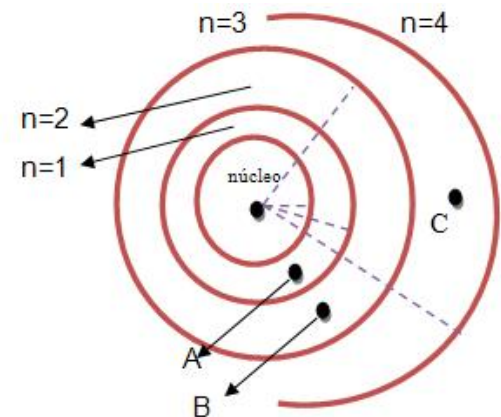
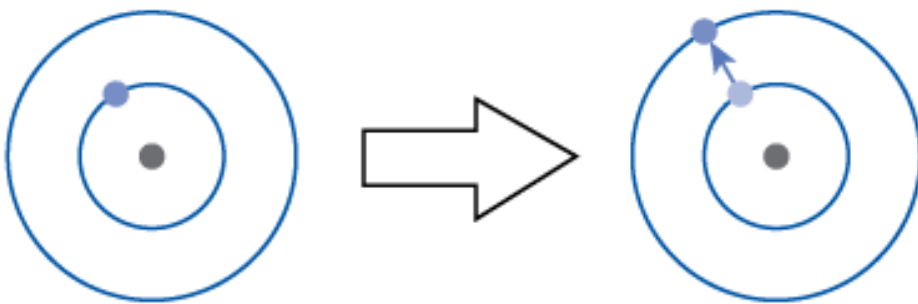


MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.
- ✓ Os átomos existem apenas em certos estados estacionários. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas ao redor do núcleo. $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ (número quântico).
- ✓ Cada estado estacionário possui uma energia discreta e bem definida E_n , ou seja, as energias são quantizadas. $E_1, E_2, E_3, \dots$

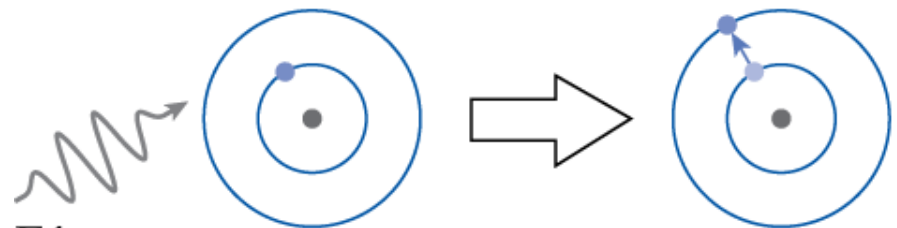
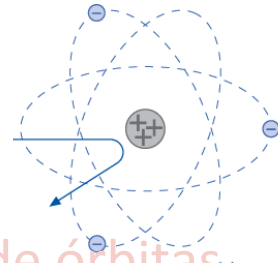


4. Existe um estado de energia mínima E_1 , denominado **ESTADO FUNDAMENTAL**. Os demais estados $E_2, E_3, E_4, \dots$ são os estados **EXCITADOS**.



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.
- ✓ Os átomos existem apenas em certos estados estacionários. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas ao redor do núcleo. $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ (número quântico).
- ✓ Cada estado estacionário possui uma energia discreta e bem definida E_m , ou seja, as energias são quantizadas. $E_1, E_2, E_3, \dots$
- ✓ Existe um estado de energia mínima E_1 , denominado ESTADO FUNDAMENTAL. Os demais estados $E_2, E_3, E_4, \dots$ são os estados EXCITADOS.
- ✓ **Transições:** um átomo pode “saltar” de um estado estacionário inicial para outro final absorvendo ou emitindo um fóton com a energia necessária.



Fóton
incidente

$$f_{\text{fóton}} = \frac{\Delta E_{\text{átomo}}}{h}$$

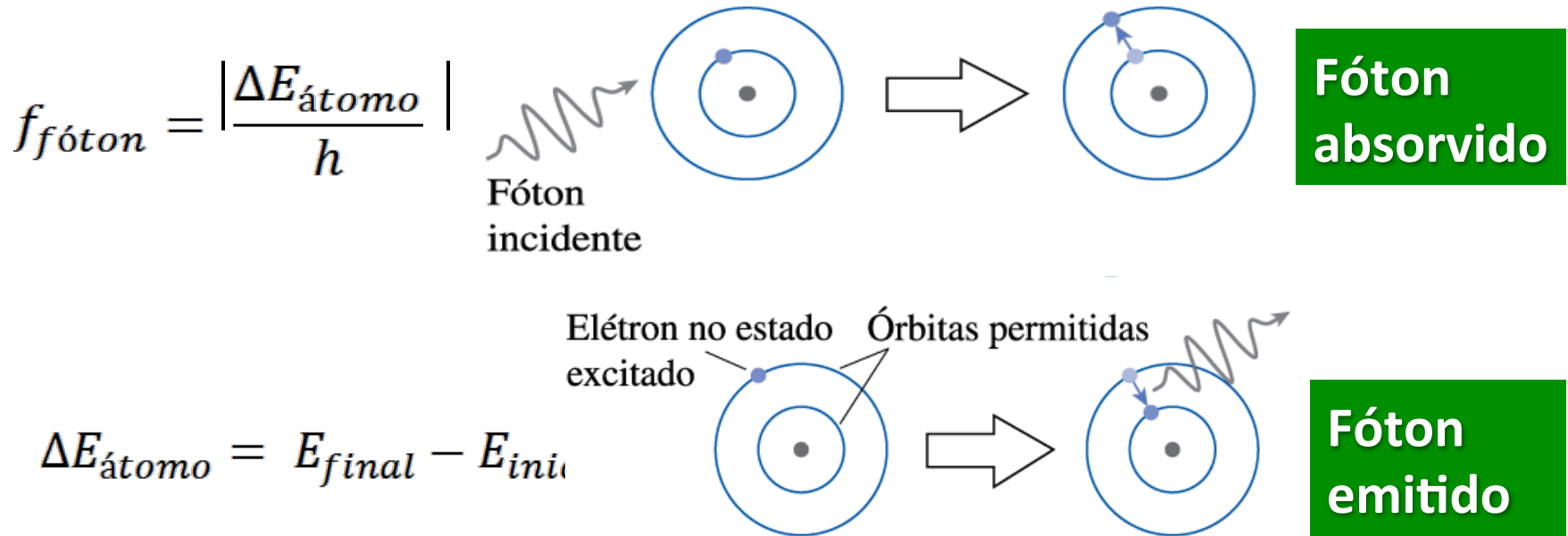


MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ **Transições:** um átomo pode “saltar” de um estado estacionário inicial para outro final absorvendo ou emitindo um fóton com a energia necessária.

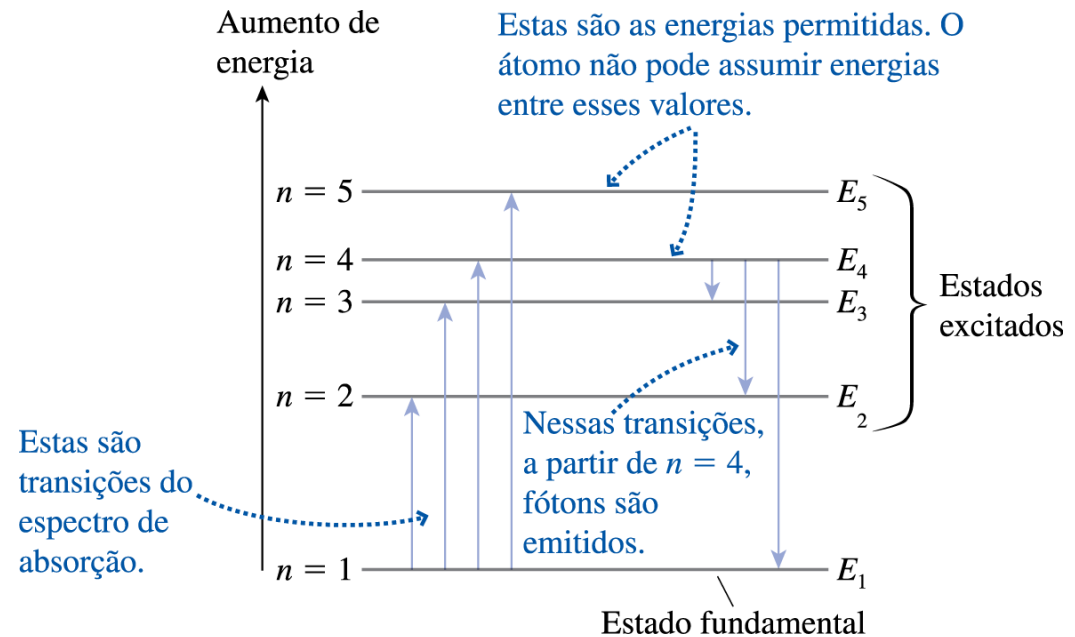
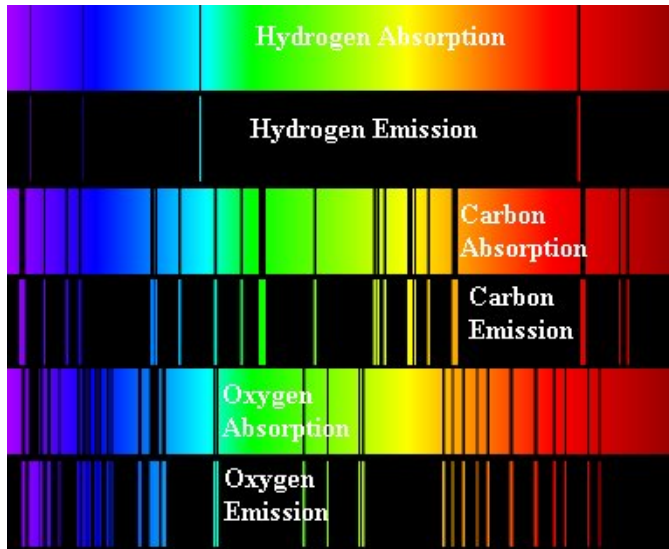
Absorção: sai do estado de menor energia para maior.

Emissão: sai do estado de maior energia para menor.



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

Espectro do átomo e diagrama de níveis de energia



$$f_{\text{fóton}} = \left| \frac{\Delta E_{\text{átomo}}}{h} \right| \quad \Delta E_{\text{átomo}} = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}}$$

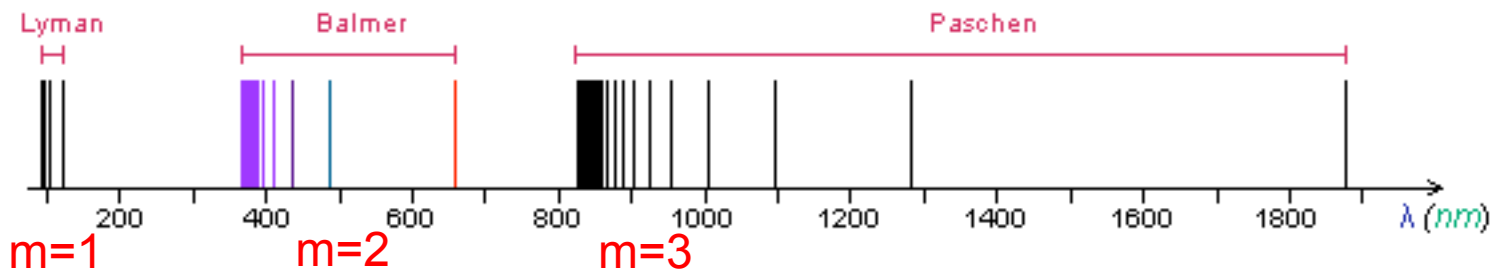
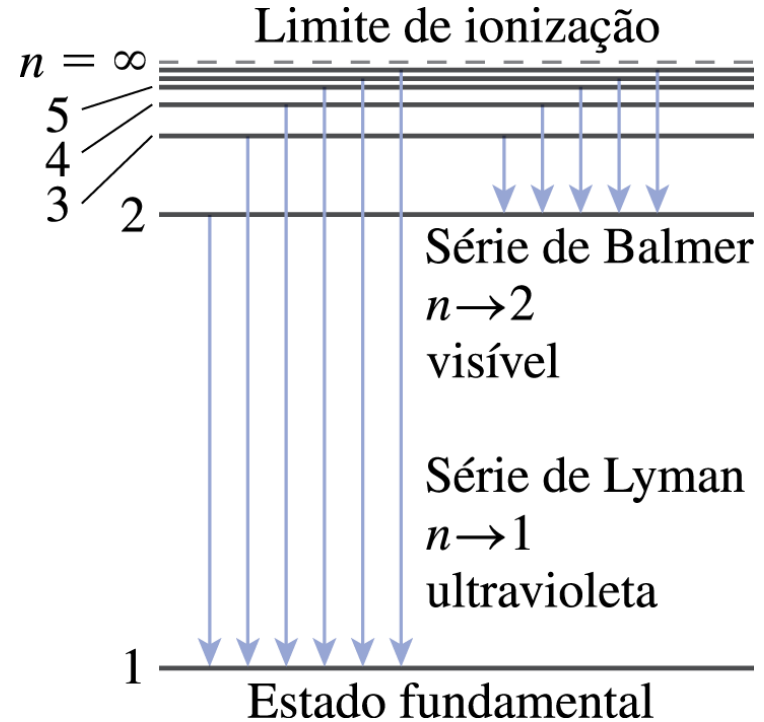


Exemplo: espectro do Hidrogênio

Fórmula de Rydberg

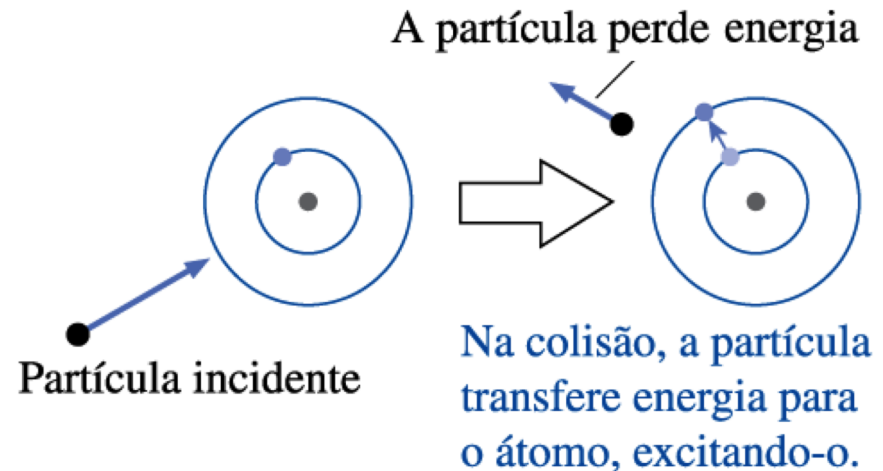
$$\lambda = \frac{91,8 \times 10^{-9} m}{\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)}$$
$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{13,6 \text{ eV}}{\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)}$$

Interpretação



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ também pode ocorrer **excitação por** colisão: o átomo pode absorver energia ao colidir de forma inelástica com um elétron ou outro átomo, por exemplo.

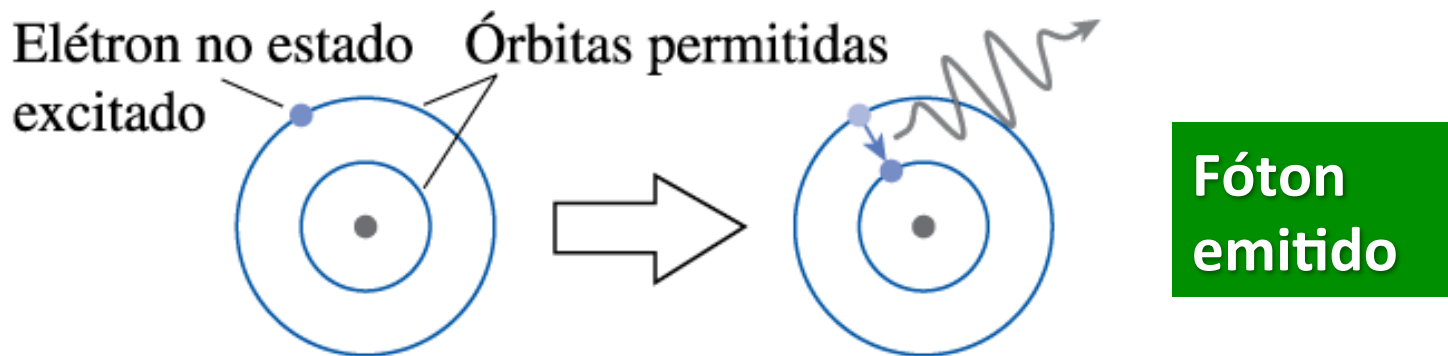


$$\Delta E_{\text{átomo}} = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}} = -\Delta E_{\text{partícula}}$$



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ Decaimento espontâneo: um átomo num estado excitado tende *naturalmente* a perder energia, emitindo fótons e decaindo para níveis menos energéticos, até chegar ao estado fundamental.



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

Observações empíricas - explicações segundo o Modelo de Bohr:

- 1) A matéria é estável pois não existe estado de energia mais baixo do que o fundamental
- 2) Os átomos **emitem e absorvem um espectro discreto de luz** pois só fótons com energias correspondendo às diferenças entre estados estacionários podem ser emitidos e absorvidos
- 3) Os espectros de emissão tb podem ser observados quando um feixe de elétrons atravessa gás num tubo de raios catódicos pois os elétrons colidem com os átomos do gás - são excitados para estados de maior energia e em seguida **sofrem decaimento espontâneo**.
- 4) As frequências tipicamente presentes nos **espectros de absorção** formam um **subconjunto** das que aparecem nos **espectros de emissão** corresp.



MODELO ATÔMICO DE BOHR 1913

- ✓ Como os átomos tendem a estar no **estado fundamental** (devido aos decaimentos espontâneos), apenas linhas de absorção a partir deste estado serão tipicamente observadas na Natureza

**Fóton
absorvido**

1 → 2
1 → 3
1 → 4
1 → 5

**Fóton
emitido**

2 → 1
3 → 2
4 → 3
3 → 1

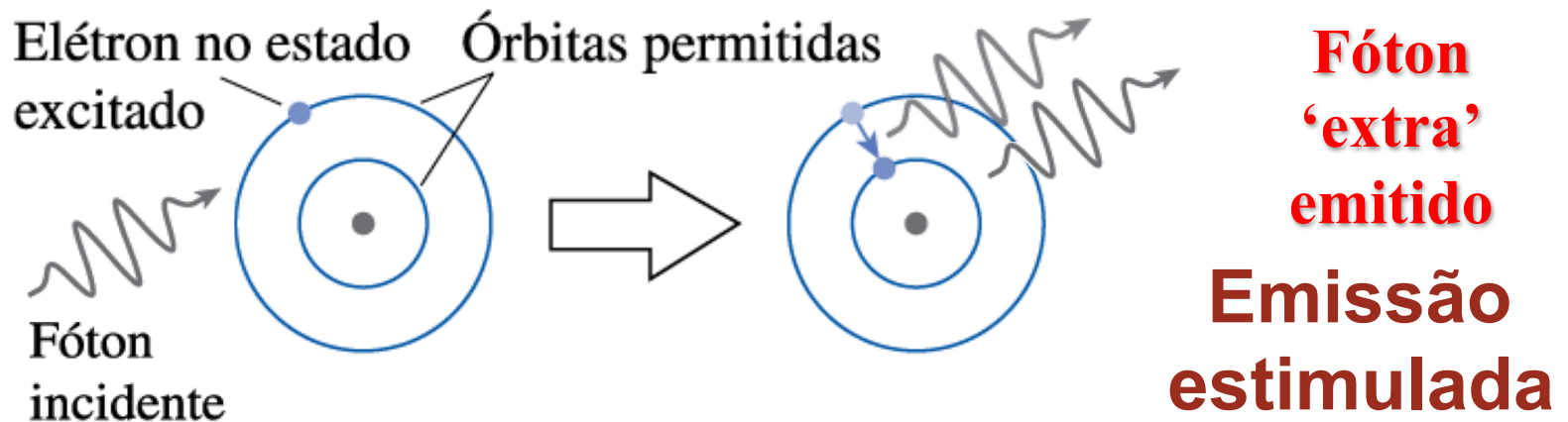
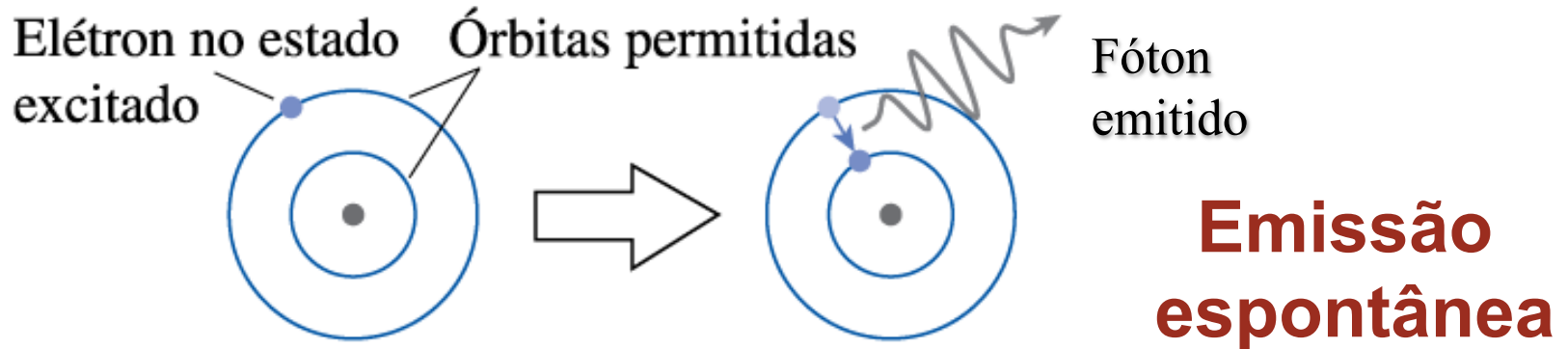
**Espectro de EMISSÃO
tem mais linhas**

(5) Cada elemento da tabela periódica possui um ESPECTRO PRÓPRIO.

**Não explicado: O que determina os
estados estacionários de cada elemento?**



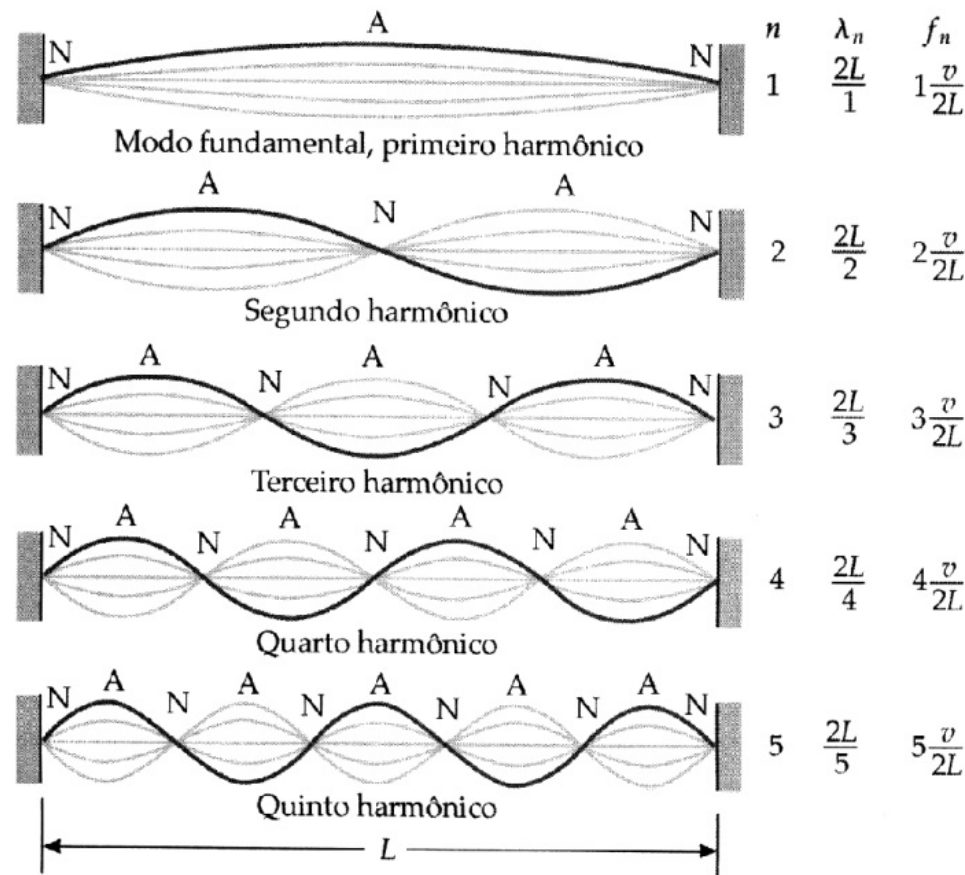
Emissão Estimulada



Aplicação: LASER- Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Recordando: condições de contorno determinam os comprimentos possíveis de uma onda estacionária:



$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$

nodos
&
antinodos



Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Partícula em uma “caixa” rígida

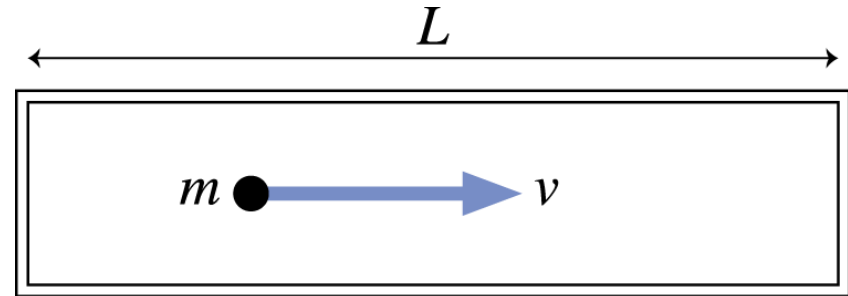
Partícula clássica:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2$$

pode ter qq valor >0

Partícula quântica (onda de matéria):

p/ formar uma **onda estacionária**, a energia só pode assumir certos valores discretos, ou **quantizados**:



$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$



Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Ex. 39.7 – Qual o menor valor de energia (nível fundamental) para uma gotícula de óleo como a usada por Millikan ($1,0 \mu\text{m}$ de diâmetro), quando confinada em uma caixa de comprimento $10 \mu\text{m}$? A densidade do óleo é de 900 kg/m^3 .

R: $E_1 = 1,2 \times 10^{-42} \text{ J} = 7,3 \times 10^{-24} \text{ eV}.$

Energia muito pequena para conseguirmos perceber que não é zero.

Qual o menor valor de energia que essa gotícula pode absorver?

R: $E_2 - E_1 = 3E_1 = 21,9 \times 10^{-24} \text{ eV}$

Novamente, muito pequeno para percebermos que E não assume um contínuo de valores.



Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Ex. 39.8 – Quais são as duas primeiras energias permitidas para um elétron confinado em uma caixa unidimensional de 0,1nm de comprimento, o tamanho aproximado de um átomo?

Qual a energia de transição do 1º nível excitado para o fundamental deste sistema?

R: $E_1 = 38 \text{ eV}$ $E_2 = 4E_1 = 152 \text{ eV}$ $\Delta E_{12} = 114 \text{ eV}$

Agora obtemos valores substanciais – mas numericamente incorretos qdo comparados com o observado em átomos.

(incorretos - átomos não são caixas rígidas! Modelo irreal)

Importante é a ideia: o confinamento de um partícula conduz diretamente à **quantização** de sua energia.

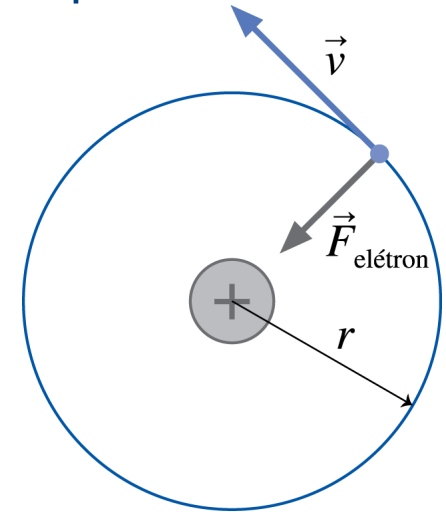


MODELO DE BOHR - de BROGLIE do H

- ✓ A energia para cada órbita continua sendo dada pela expressão clássica usando a Lei de Coulomb

$$E = K + U = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

(assumir o próton parado com boa aproximação, pois é muito mais pesado).



- 2) As órbitas são circulares, de modo que ***v*** e ***r*** estão ligados pela condição

$$F_{centripeta} = \frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$E(r) = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Energia para uma órbita de raio *r*.
Mas por que só certos valores de *r* são permitidos?



MODELO DE BOHR - de BROGLIE do H

3) Condição de quantização: as órbitas permitidas são aquelas nas quais o elétron forma uma **onda estacionária**

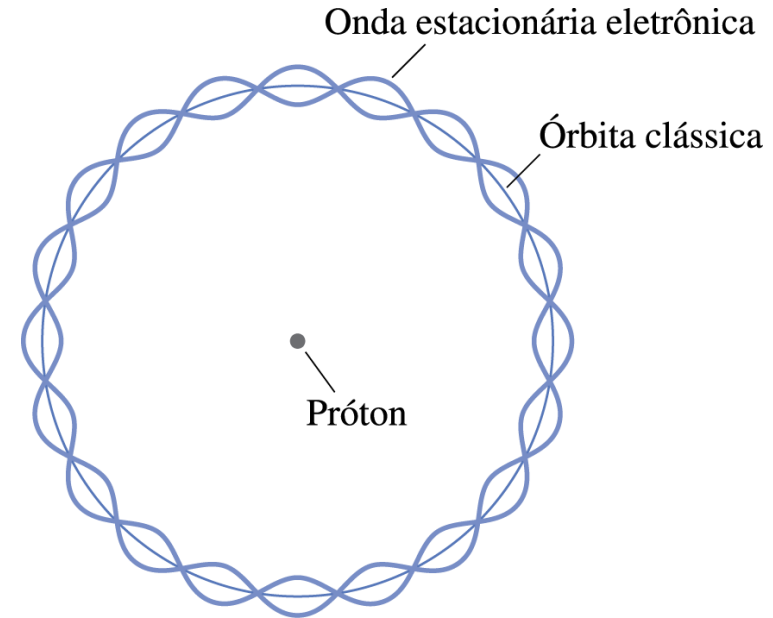
$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mv}$$

$$v_n = nh / 2\pi mr$$

Igualando os dois valores para a velocidade:
são permitidas órbitas com raios e energias dados por

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \equiv n^2 a_B$$

→ *“raio de Bohr”*



MODELO DE BOHR - de BROGLIE do H

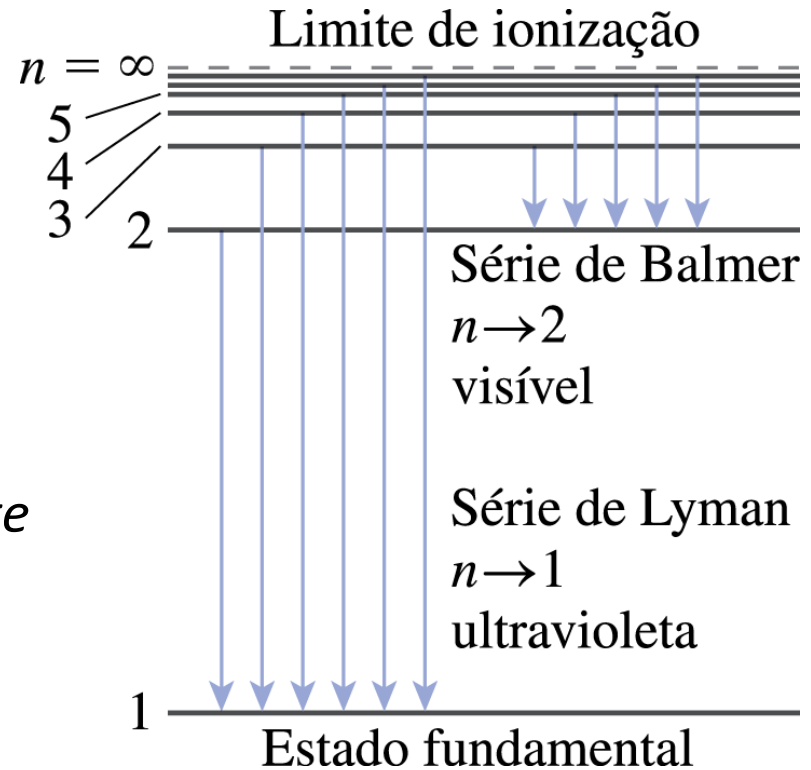
Calculando valores...

$$r_1 = a_B = 0.0529 \text{ nm}$$

$$E_1 = -13,6 \text{ eV !}$$

Como $E_n = E_1 / n^2$, deduzimos *exatamente* a fórmula de Rydberg!

$$E_n - E_m = \frac{13,6 \text{ eV}}{\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)}$$



MODELO DE BOHR - de BROGLIE do H

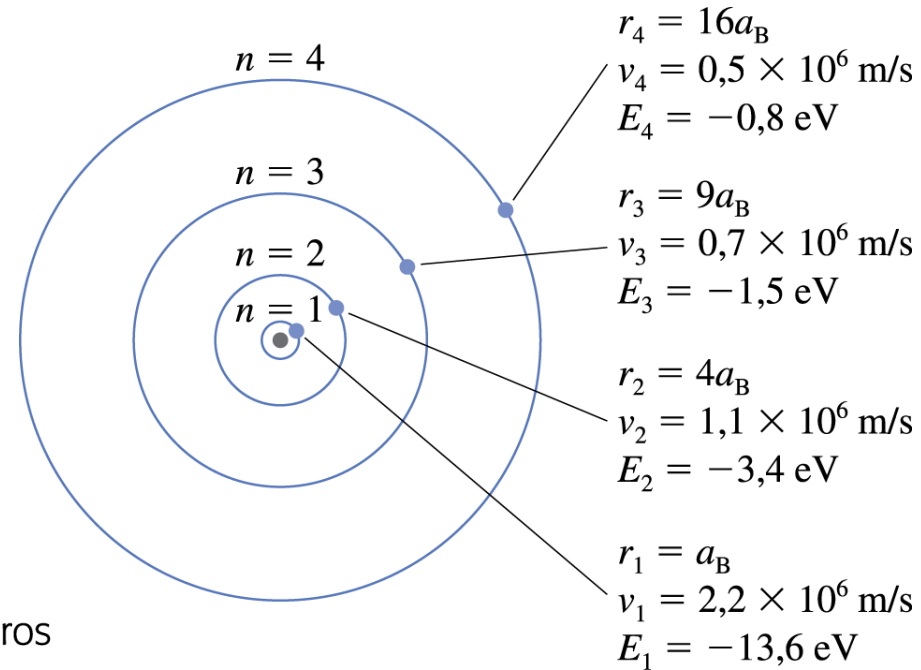
Calculando valores...

$$r_1 = a_B = 0.0529 \text{ nm}$$

$$E_1 = -13,6 \text{ eV !}$$

TABELA 39.2 Raios, velocidades e energias dos primeiros cinco estados do átomo de hidrogênio de Bohr

n	$r_n(\text{nm})$	$v_n(\text{m/s})$	$E_n(\text{eV})$
1	0,053	$2,19 \times 10^6$	-13,60
2	0,212	$1,09 \times 10^6$	-3,40
3	0,476	$0,73 \times 10^6$	-1,51
4	0,846	$0,55 \times 10^6$	-0,85
5	1,322	$0,44 \times 10^6$	-0,54

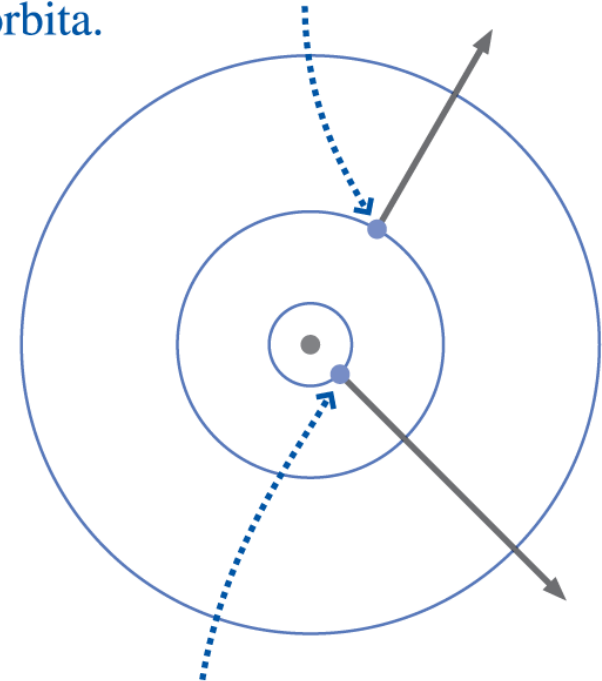
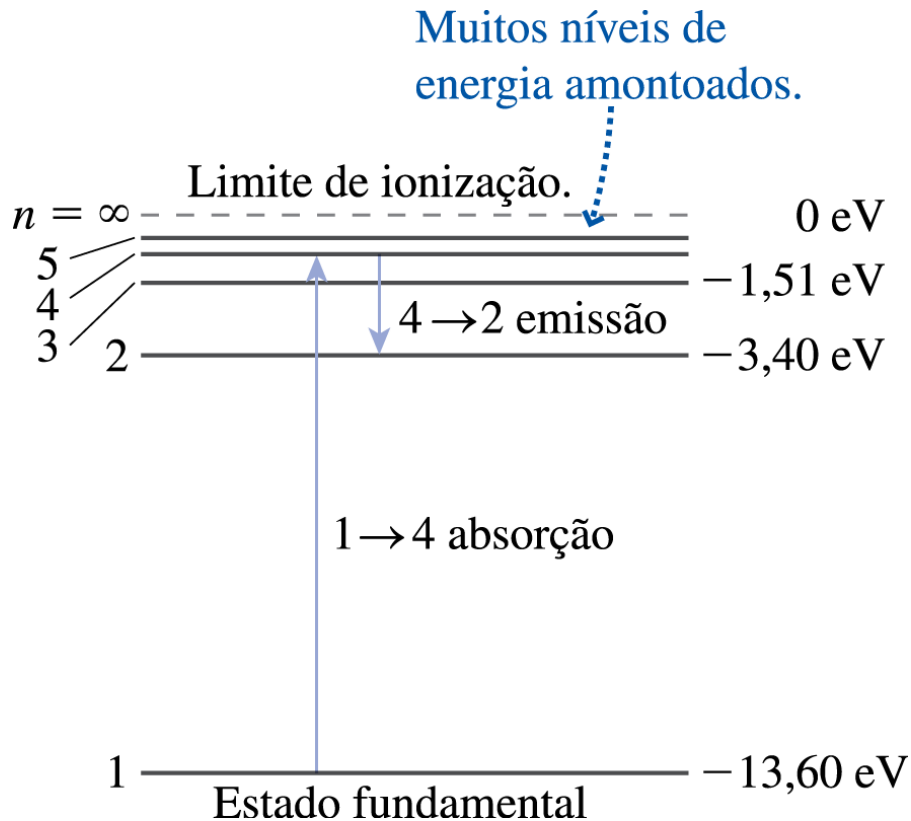


IONIZAÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO H

Previsão: Energia de ionização = 13,6 eV ($n = 1 \rightarrow n = \infty$)

verificado em experimento

A *energia de ligação* é a energia necessária para remover um elétron de sua órbita.



A *energia de ionização* é a energia necessária para gerar um íon através da remoção de um elétron do estado fundamental.



QUANTIZAÇÃO DO MOMENTUM

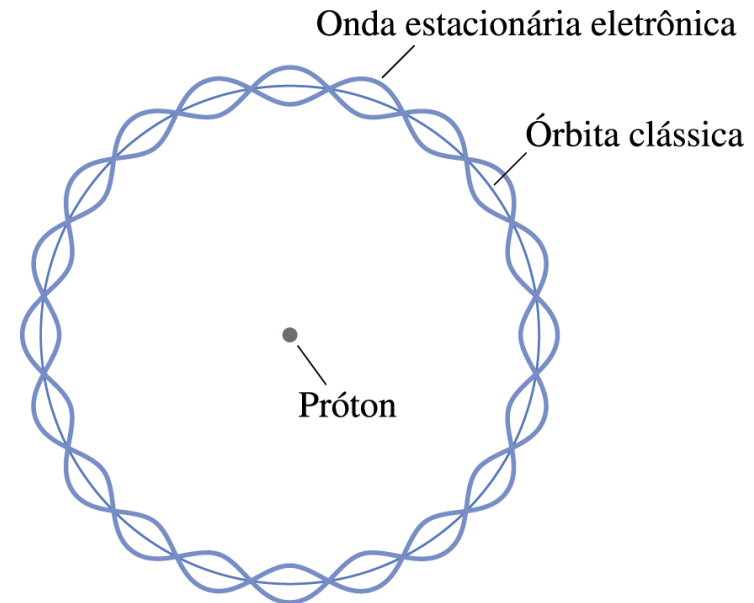
3) **Condição de quantização**: as órbitas permitidas são aquelas nas quais o elétron forma uma **onda estacionária**

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

Outra interpretação desta condição:

$$L \text{ (circled)} = n \frac{h}{2\pi} \equiv n\hbar$$

O momento angular orbital do elétron só pode ser um múltiplo inteiro de uma unidade básica, $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

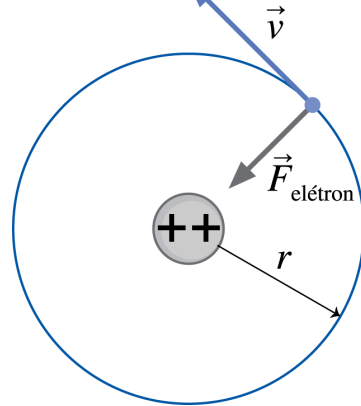


ÍONS HIDROGENÓIDES

Átomos ionizados de forma a ficarem com um único elétron

A única diferença é a carga do núcleo, que é agora $Z.e$

Ex: He^+ ($Z = 2$)



P: como o espectro, a energia de ionização e o diâmetro deste íon se comparam com os de um Hidrogênio comum?

$$E = K + U = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{2\pi m_e e^2} \equiv n^2 a_B / 2$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_B}$$



ÍONS HIDROGENÓIDES

Átomos ionizados de forma a ficarem com um único elétron

A única diferença é a carga do núcleo, que é agora $Z.e$

Ex: He^+ ($Z = 2$)

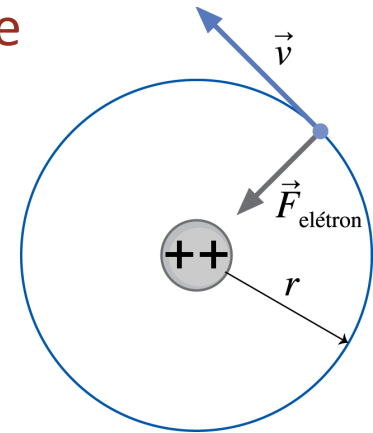


TABELA 39.3 Comparação entre íons hidrogenóides com $Z = 1, 2$, e 3

Íon	Diâmetro $2r_1$	Energia de ionização $ E_1 $	Comprimento de onda para $3 \rightarrow 2$
H ($Z = 1$)	0,106 nm	13,6 eV	656 nm
He^+ ($Z = 2$)	0,053 nm	54,4 eV	164 nm
Li^{++} ($Z = 3$)	0,035 nm	125,1 eV	73 nm



Mundo **microscópico da luz e dos átomos**– governado pela quantização e pela dualidade partícula – onda

Problemas: incapacidade de estender o modelo de Bohr do átomo de H para átomos + complexos

Modelo de Bohr: **Teoria semi-clássica** – mistura da mecânica clássica com os conceitos novos dos quanta.

Caminhos abertos para a formulação da **MECÂNICA QUÂNTICA**

