

Unidade 2 – Aula 2

* Tradução e adaptação livre das aulas do Professor Rick Trebino em: www.physics.gatech.edu/frog

Estrutura do átomo*

- 2.1 Modelos atômicos de Thomson e Rutherford
- 2.2 Espalhamento de Rutherford
- 2.3 Modelo Atômico Clássico
- 2.4 Modelo de Bohr para o átomo de Hidrogênio
- 2.5 Sucessos & Falhas do Modelo de Bohr



Niels Bohr (1885-1962)

The opposite of a correct statement is a false statement. But the opposite of a profound truth may well be another profound truth.

An expert is a person who has made all the mistakes that can be made in a very narrow field.

Never express yourself more clearly than you are able to think.

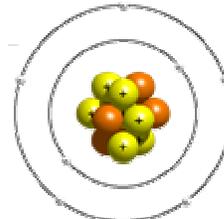
Prediction is very difficult, especially about the future.

- Niels Bohr

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Estrutura do Átomo

Evidências em 1900 indicaram que o átomo não era uma unidade fundamental:



- 1) Pareciam haver muitos tipos de átomos, cada um pertencendo a um elemento químico distinto.
- 2) Os átomos e os fenômenos eletromagnéticos estavam intimamente relacionados (materiais magnéticos; isolantes vs. condutores; espectros diferentes de emissão).
- 3) Os elementos se combinam com alguns elementos e não se combinam com outros, uma característica que sugeria uma estrutura atômica (valência).
- 4) O descobrimento da radioatividade, raios X, e elétrons (todos pareciam envolver átomos se “quebrando” de algum modo).

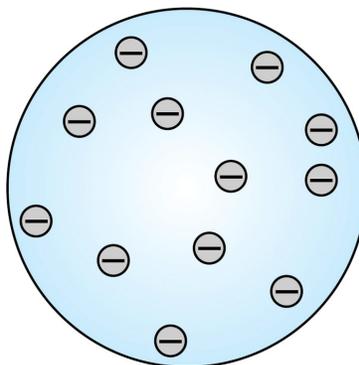
Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Conhecimento do átomo em 1900

Elétrons (descobertos em 1897) carregavam carga negativa.

Elétrons eram muito leves comparados com os átomos.

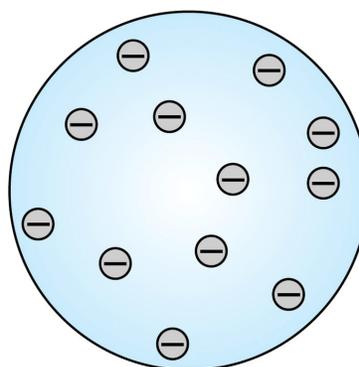
Prótons ainda não haviam sido descobertos, mas cargas positivas deviam estar presentes para atingir neutralidade de cargas.



Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

2.1: Modelo Atômico de Thomson

O modelo do “**pudim de ameixas**” de Thomson tinha cargas positivas espalhadas uniformemente numa esfera do tamanho do átomo com elétrons embebidos nesta matriz uniforme.



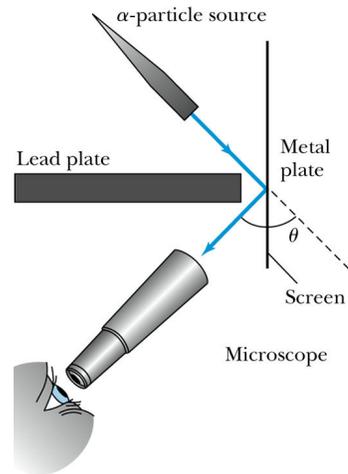
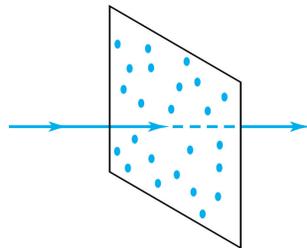
Do ponto de vista de Thomson, quando o átomo era aquecido, os elétrons podiam vibrar sobre suas posições de equilíbrio, produzindo então radiação eletromagnética.

Entretanto, Thomson não podia explicar os espectros de raios com este modelo.

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Experimentos de Geiger and Marsden

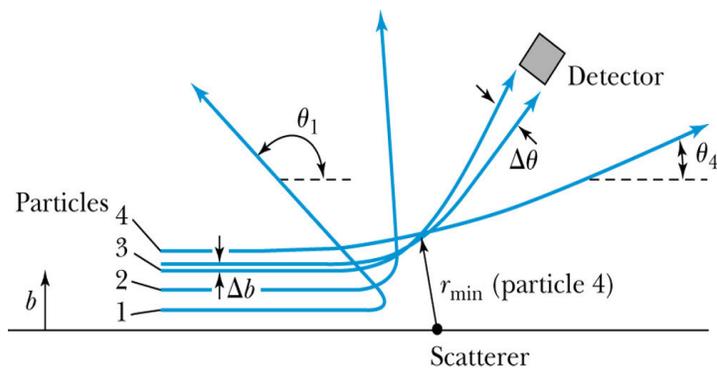
Rutherford, Geiger, e Marsden desenvolveram uma nova técnica para investigar a estrutura da matéria fazendo incidir partículas α nos átomos, e medindo o espalhamento destas partículas.



Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

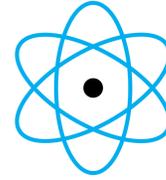
Experimento de Geiger e Marsden 2

Geiger mostrou que muitas partículas α eram espalhadas para trás (retro-espalhamento) por folhas de ouro muito finas em ângulos maiores que 90° .



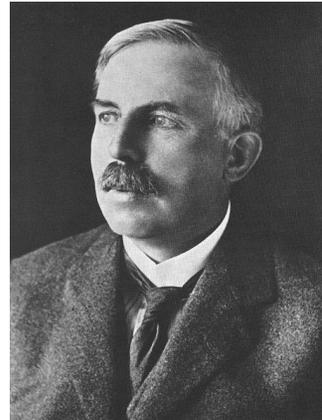
Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Modelo Atômico de Rutherford



$\langle \theta \rangle_{total} = 6.8^\circ$ mesmo se a partícula α partisse fosse espalhada por todos os 79 elétrons de cada átomo de Au.

Ernest Rutherford
(1871-1937)



Resultados experimentais não eram consistentes com o modelo de Thomson.

Rutherford propôs então que o átomo deveria ter um caroço positivamente carregado (**núcleo**) cercado pelos elétrons negativos.

Geiger and Marsden confirmaram esta idéia em 1913.

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

2.2: Espalhamento de Rutherford

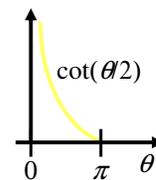
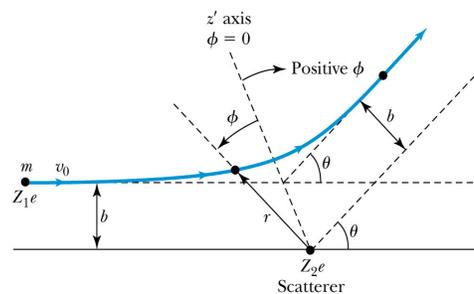
Experimentos de espalhamento nos ajudam a estudar a matéria em regiões muito pequenas, que não podem ser observadas diretamente.

Existe uma relação entre o **parâmetro de impacto** b e o **ângulo de espalhamento** θ .

Quando b é pequeno, r é pequeno e a força Coulombiana é grande. θ pode ser grande e a partícula pode ser repelida e voltar.

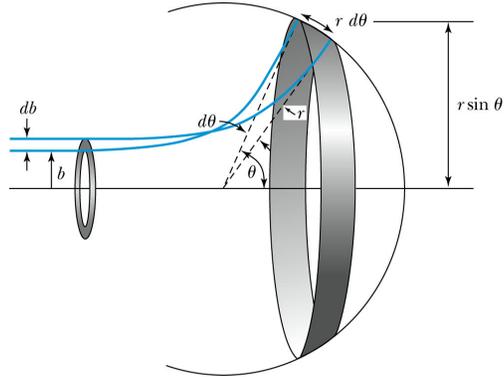
$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 K} \cot \frac{\theta}{2}$$

where $K = \frac{1}{2} m v_0^2$



Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Equação para o Espalhamento de Rutherford



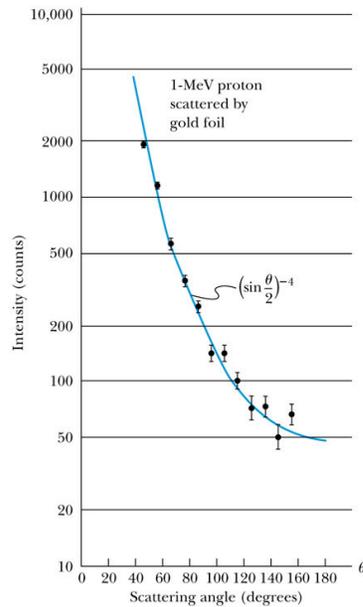
O número de partículas espalhadas por unidade de área é:

$$N(\theta) = \frac{N_i n t}{16} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{Z_1^2 Z_2^2}{r^2 K^2 \sin^4(\theta/2)}$$

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Experimento do espalhamento de Rutherford

Prótons de 1 MeV espalhados por uma folha de Au.



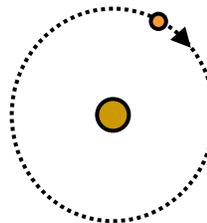
Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

2.3: Modelo Atômico Clássico

Considere um átomo como um sistema planetário.

A força de atração entre elétron e núcleo é dada por:

$$F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$



onde v é a velocidade tangencial do elétron:

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}} \Rightarrow K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

A energia total é então:

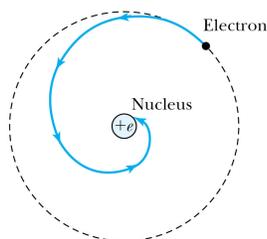
$$E = K + V = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

A energia total é negativa, assim o sistema é ligado, o que é bom!

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

O Modelo Planetário é Condenado

Da teoria clássica do eletromagnetismo, uma carga elétrica acelerada irradia energia (radiação eletromagnética), o que significa que sua energia total deveria diminuir. Com isto **o raio r deveria diminuir!!**



**Elétron
cairia no
núcleo!?**

A Física tinha feito uma importante mudança de rumos em 1900 com a hipótese de Planck sobre o comportamento quântico da radiação, portanto uma solução radical para a estrutura do átomo poderia ser considerada possível, neste época.

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

2.4: O Modelo de Bohr para o átomo de Hidrogênio

Suposição geral de Bohr:

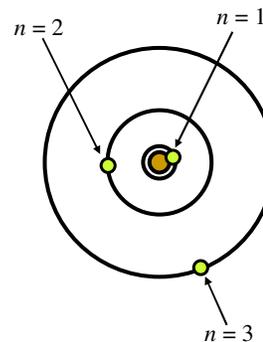
1. **Estados estacionários**, nos quais os elétrons orbitam **não** irradiam energia, existem em átomos e tem energias bem definidas, E_n . Transições podem ocorrer entre estes estados, produzindo luz com energia:

$$E = E_n - E_{n'} = h\nu$$

2. Leis Clássicas da física não se aplicam a transições entre estados estacionários, mas elas se aplicam em outros casos.

3. O momento angular de um estado n é: $n\hbar$
onde n é chamado de Número Quântico Principal.

Momento Angular é quantizado!



Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Conseqüências do Modelo de Bohr

O momento angular é dado por:

$$L = mvr = n\hbar$$

Assim a velocidade será: $v = n\hbar / mr$

mas: $v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}}$ Assim: $\frac{n^2\hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mr}$

Resolvendo para r_n :

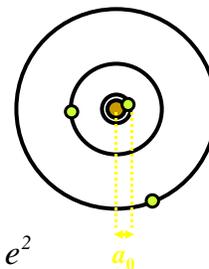
$$r_n = n^2 a_0$$

onde:

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

a_0 é chamado de raio de Bohr. É o diâmetro do átomo de Hidrogênio (no seu estado de mais baixa energia, ou estado fundamental).

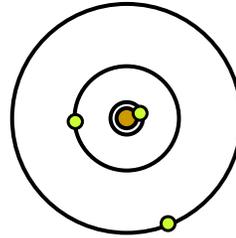
Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS



Raio de Bohr

O raio de Bohr,

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$$



é o raio do átomo de hidrogênio não excitado e é igual a :

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{(1.055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-16} \text{ C})^2} \left(8.99 \times 10^9 \frac{\text{N}\cdot\text{m}^2}{\text{C}^2} \right) = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

O estado fundamental do átomo de Hidrogênio tem um diâmetro de :

$$2r_1 = 2a_0 \approx 10^{-10} \text{ m}$$

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

As Energias do Átomo de Hidrogênio

Usando o resultado clássico para a energia:

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

$$e: \quad r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{me^2}$$

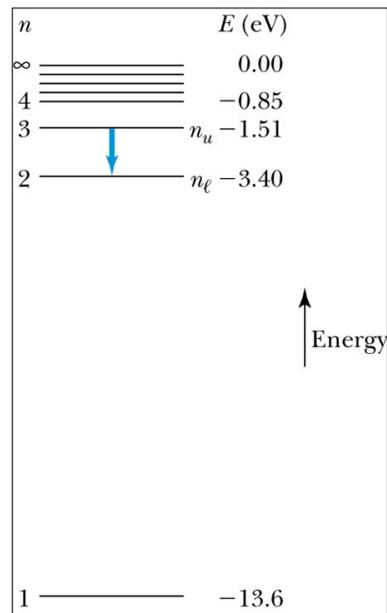
As energias para os estados estacionários ficam:

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0 n^2}$$

ou: $E_n = -E_0/n^2$

onde $E_0 = 13.6 \text{ eV}$.

$$E_n = -13,6/n^2$$



Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

O Átomo de Hidrogênio

Emissão de luz ocorre quando o átomo está num estado excitado e decai para um estado com energia mais baixa ($n_u \rightarrow n_l$).

$$h\nu = E_u - E_l$$

onde ν é a frequência do fóton.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{h\nu}{hc} = \frac{E_u - E_l}{hc} = R_\infty \left(\frac{1}{n_l^2} - \frac{1}{n_u^2} \right)$$

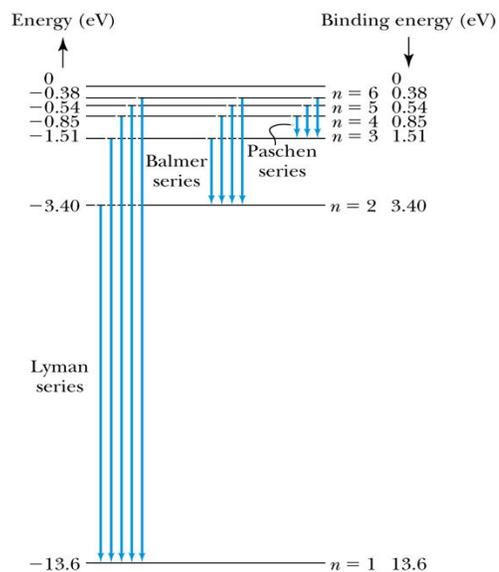
R_∞ é a **constante de Rydberg**

$$R_\infty \equiv \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3 c \epsilon_0^2}$$

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

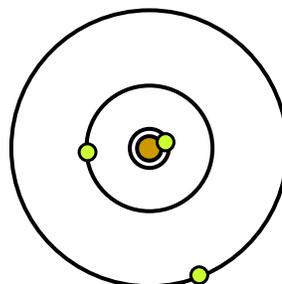
Transições no átomo de Hidrogênio

O átomo permanece num estado excitado por um período curto de tempo antes de emitir um fóton e retornar a um estado estacionário mais baixo. No equilíbrio, todos os átomos de hidrogênio existem no estado $n = 1$.



Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Princípio de Correspondência



O princípio de correspondência de Bohr é bastante óbvio:

No limite onde as teorias quântica e clássica deveriam concordar, a teoria quântica deve se reduzir ao resultado clássico.

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Princípio de Correspondência

A frequência da radiação emitida $\nu_{classical}$ é igual a frequência da órbita do elétron à volta do núcleo, ν_{orb} .

$$\nu_{classical} = \nu_{orb} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{v/r}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^3} \right)^{1/2} = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 \hbar^3 n^3}$$

Isto deve concordar com a frequência de transição de um estado de $n + 1$ para n (quando n é muito grande):

$$\begin{aligned} \nu_{Bohr} &= \frac{E_0}{h} \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \\ &= \frac{E_0}{h} \left[\frac{n^2 + 2n + 1 - n^2}{n^2(n+1)^2} \right] = \frac{E_0}{h} \left[\frac{2n + 1}{n^2(n+1)^2} \right] \end{aligned}$$

Para n grande: $\nu_{Bohr} \approx \frac{2nE_0}{hn^4} = \frac{2E_0}{hn^3}$

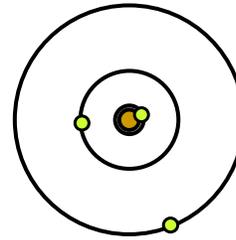
Substituindo E_0 : $\nu_{Bohr} = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 \hbar^3 n^3} = \nu_{classical}$

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Constante de Estrutura Fina

A velocidade dos elétrons no modelo de Bohr :

$$v_n = \frac{n\hbar}{mr_n} = \frac{1}{n} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}$$



No estado fundamental,

$$v_1 = 2.2 \times 10^6 \text{ m/s} \sim 1\% \text{ da velocidade da luz.}$$

A razão de v_1 para c é chamada de **constante de estrutura fina**.

$$\alpha = \frac{v_1}{c} = \frac{\hbar}{ma_0c} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

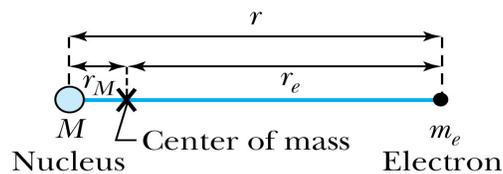
Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

2.5: Sucessos e Falhas do Modelo de Bohr

Sucesso:

O elétron e o núcleo do átomo de hidrogênio giram de fato em torno de seu centro de massa.

A massa do elétron é substituída pela **massa reduzida do sistema**:



$$\mu_e = \frac{m_e M}{m_e + M} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{M}}$$

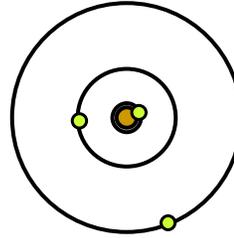
A constante de Rydberg para uma massa nuclear infinita, R_∞ , é substituída por R .

$$R = \frac{\mu_e}{m_e} R_\infty = \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} R_\infty = \frac{\mu_e e^4}{4\pi c h^3 (4\pi\epsilon_0)^2}$$

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS

Limitações do Modelo de Bohr

O modelo de Bohr foi um grande passo na nova teoria quântica, mas tinha suas limitações.



Falhas:

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.

Márcia R. Gallas (FIS01184) – IF-UFRGS