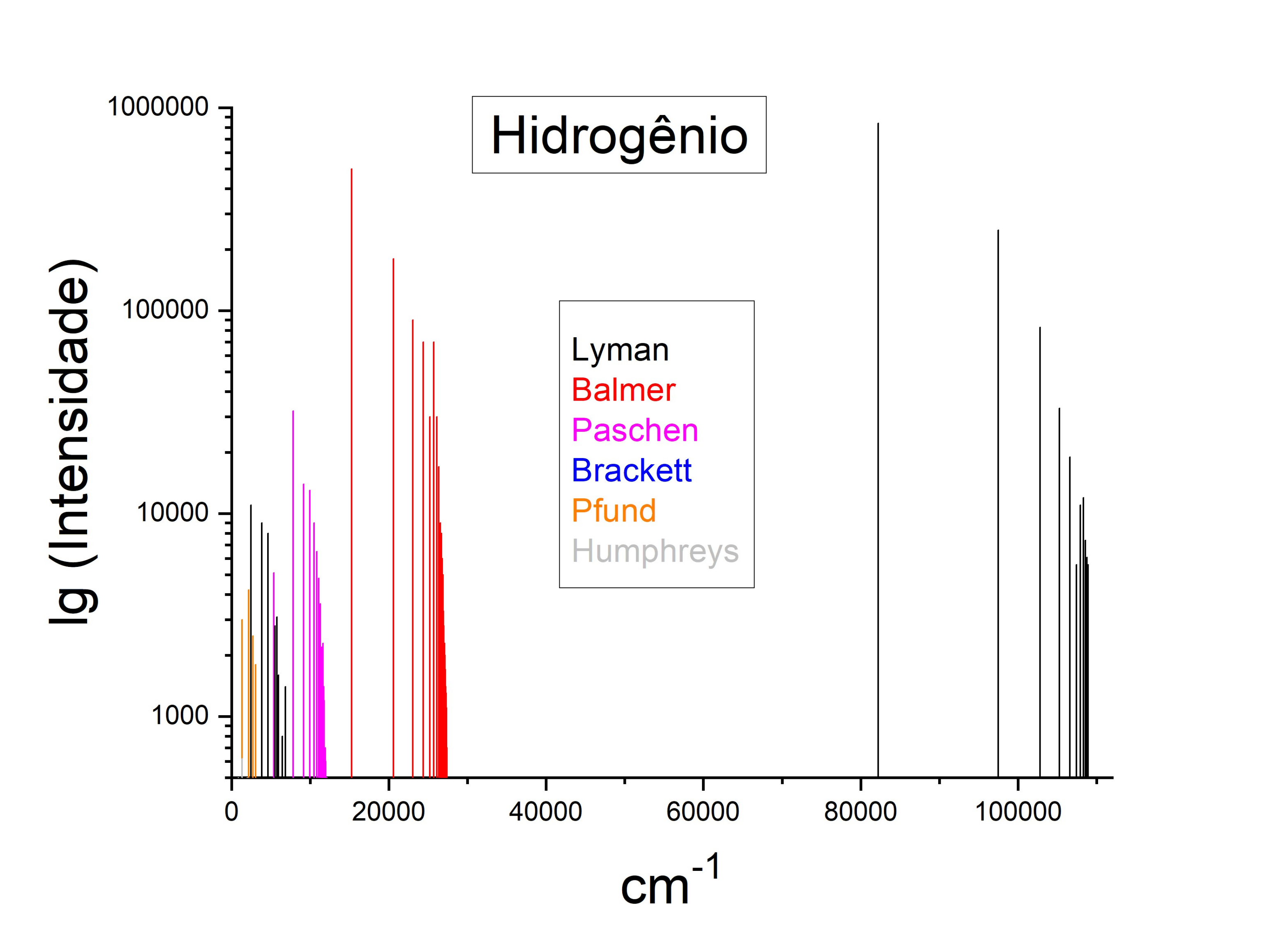
Teoria Atômica

Roberto B. Faria
faria@iq.ufrj.br
www.iq.ufrj.br/~faria
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Equação de Rydberg
e
Modelo Atômico de Bohr

20/03/2025

Espectro de emissão do H



Região do visível: 12.500 a 25.000 cm^{-1} (400 a 800 nm)

Equação de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R^{\lambda}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

λ = comprimento de onda da linha espectral

R^{λ} = constante de Rydberg (para a equação em comprimento de onda)

n_1, n_2 = números inteiros (1, 2, 3, ...); $n_2 > n_1$

Equação de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R^{\lambda}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

$n_1 = 1$ (Série de Lyman)

$n_1 = 2$ (Série de Balmer)

$n_1 = 3$ (Série de Paschen)

$n_1 = 4$ (Série de Brackett)

$n_1 = 5$ (Série de Pfund)

$n_1 = 6$ (Série de Humphreys)

Modelo Atômico de Bohr

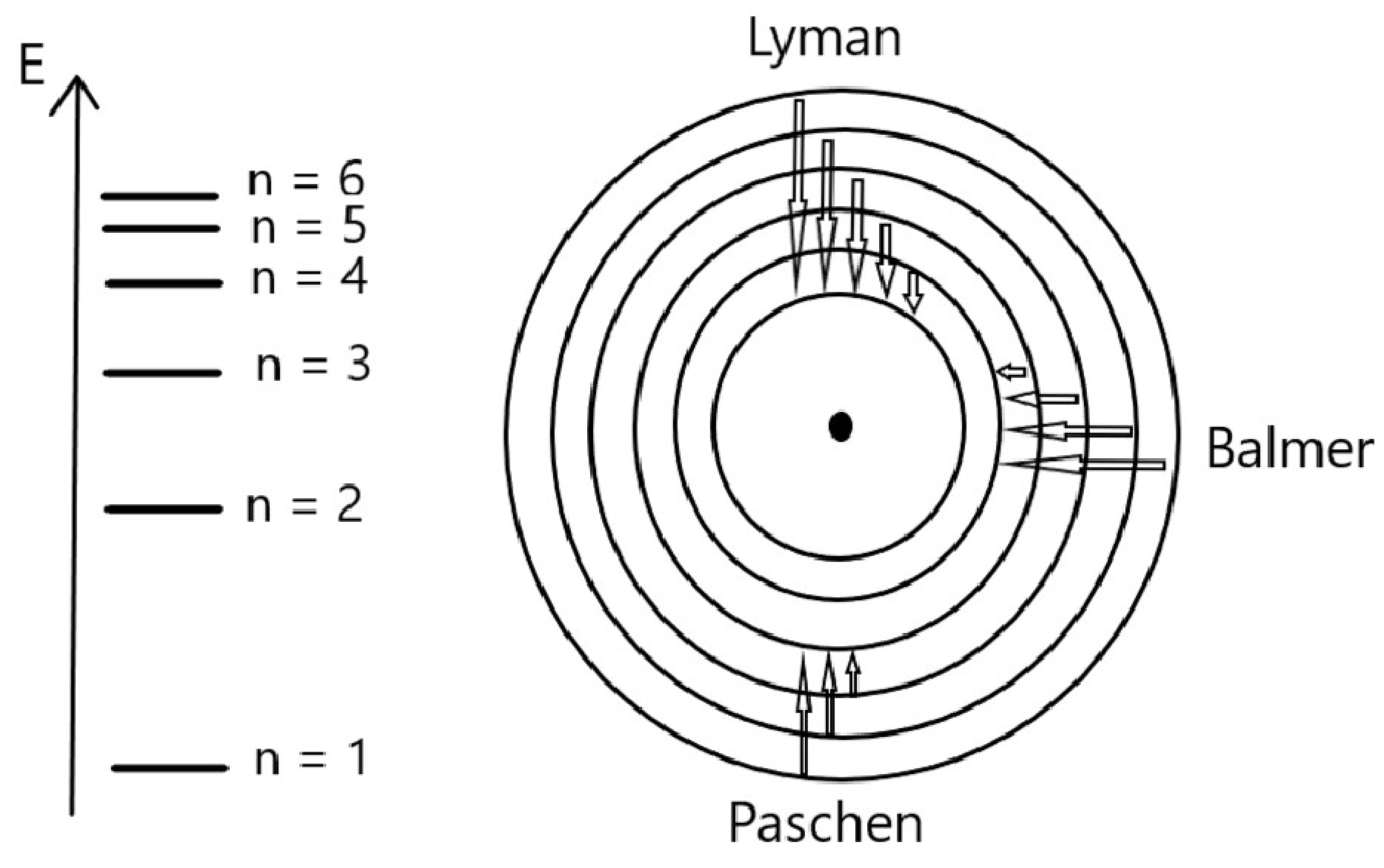
- Considera um modelo planetário para o átomo de hidrogênio, onde o elétron gira em torno do núcleo sem perder energia.
- Considera a Lei de Coulomb para a atração entre o elétron e o núcleo (próton)
- Considera que há um equilíbrio entre a força de atração (Lei de Coulomb) e a força de escape (força centrífuga/centrípeta)
- Considera que as órbitas estáveis são aquelas para as quais o **momento angular** (mvr) é um múltiplo inteiro de $h/2\pi$.

Modelo Atômico de Bohr

- Considera que o átomo ganha energia quando o eletron absorve luz e se move para uma órbita mais externa.
- Considera que o átom emite luz quando o elétron sai de uma órbita mais externa para uma órbita mais interna.
- A energia do fóton emitido ou absorvido é a diferença de energia entre as órbitas.

$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda = E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}$$

Modelo Atômico de Bohr



Modelo Atômico de Bohr

$$mvr = n\frac{h}{2\pi} \qquad (1)$$

São estáveis apenas as órbitas cujo momento angular é um múltiplo inteiro de $h/2\pi$

n = número inteiro (1, 2, 3, ...)

m = massa do elétron

v = velocidade tangencial

r = raio da órbita

h = constante de Planck ($6{,}626\ 070\ 15 \times 10^{-34}$ J Hz^{-1})

Modelo Atômico de Bohr

$$mvr = n\frac{h}{2\pi} \qquad (1)$$

v = velocidade tangencial

$$v = \frac{nh}{2\pi mr} \qquad (2)$$

Modelo Atômico de Bohr

Força centrífuga ou centrípeta ou força de escape (F_{esc})

$$F_{esc} = \frac{mv^2}{r} \qquad (3)$$

$$v = \frac{nh}{2\pi mr} \qquad (2)$$

$$F_{esc} = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m r^3} \qquad (4)$$

Modelo Atômico de Bohr

Força de atração pela Lei de Coulomb (F_{coul})

$$F_{coul} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad (5)$$

Z = carga nuclear (Z = 1 para o H)
e = carga do elétron
ε = permissividade elétrica do vácuo
r = distância entre o elétron e o núcleo

Modelo Atômico de Bohr

Igualando as forças F_{esc} (Eq. 4) = F_{coul} (Eq. 5)

$$\frac{n^2h^2}{4\pi^2 mr^3} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad (6)$$

$$\frac{n^2h^2}{\pi mr} = \frac{Ze^2}{\varepsilon_0} \qquad (7)$$

$$r = \frac{n^2h^2\varepsilon_0}{\pi mZe^2} \qquad (8)$$

Modelo Atômico de Bohr

$$r = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m Z e^2} \qquad (8)$$

Para um elétron na primeira órbita (n =1) do H (Z = 1)

r = a_0 = 0,529 × 10^{-10} m = 0,529 Å (raio de Bohr)

Modelo Atômico de Bohr

Para calcular a energia do elétron (E_n) em cada órbita, podemos somar as energia cinética (E_c) e potencial (E_p).

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 \qquad (9)$$

Notar que a Energia Potencial (E_p):

i) é negativa em função do produto de cargas opostas

ii) depende de r e não de r^2 como na Eq. (5).

$$E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (10)$$

Modelo Atômico de Bohr

$$E_{\mathrm{n}} = E_{\mathrm{c}} + E_{\mathrm{p}} \qquad (11)$$

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (12)$$

Modelo Atômico de Bohr

Utilizando a Eq. (3) para igualar a Força de escape (F_{esc}) com a Força de atração pela Lei de Coulomb (F_{coul})

$$F_{esc} = \frac{mv^2}{r} \quad (3) \qquad F_{coul} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \quad (5)$$

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \quad (13)$$

Modelo Atômico de Bohr

Manipulando a Eq. (13) obtemos a expressão da Energia cinética para substituir na Eq. (12)

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad (13)$$

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad (14)$$

Modelo Atômico de Bohr

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (12)$$

$$E_n = \frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad (15)$$

Modelo Atômico de Bohr

Substituindo na Eq. (15) a expressão para r (Eq. 8)

$$E_n = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad (15)$$

$$r = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m Z e^2} \qquad (8)$$

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{8n^2 h^2 \varepsilon_0{}^2} \qquad (16)$$

Modelo Atômico de Bohr

Calculando-se a energia do fóton emitido

$\Delta E = h\nu = hc/\lambda = E_f - E_i$

$$\Delta E = -\frac{mZ^2e^4}{8{n_2}^2h^2{\varepsilon_0}^2} - \left(-\frac{mZ^2e^4}{8{n_1}^2h^2{\varepsilon_0}^2}\right) \qquad (17)$$

$$\Delta E = \frac{mZ^2e^4}{8h^2{\varepsilon_0}^2}\left(\frac{1}{{n_1}^2} - \frac{1}{{n_1}^2}\right) = R\left(\frac{1}{{n_1}^2} - \frac{1}{{n_1}^2}\right) \qquad (18)$$

Que é idêntica à Equação de Rydberg

Modelo Atômico de Bohr

$$R = \frac{mZ^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^{\,2}} \qquad (19)$$

Como $\Delta E = h\nu = hc/\lambda$
dividindo-se a Eq. (16) por *hc*, teremos a Equação de Rydberg em $1/\lambda$ e a Constante de Rydberg, R^λ

$$R^\lambda = \frac{mZ^2 e^4}{8h^3 c \varepsilon_0^{\,2}} \qquad (20)$$

Modelo Atômico de Bohr

A Eq. (20), implicitamente, considera a massa do núcleo infinita. Uma correção que melhora a concordância com os resultados experimentais é considerar a massa reduzida do elétron, μ.

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m_e} \qquad \mu = \frac{M m_e}{M + m_e}$$

$$R^{\lambda} = \frac{\mu Z^2 e^4}{8 h^3 c \varepsilon_0^{\,2}} \qquad (21)$$

Para o H ($Z = 1$), R^{λ} = 10 967 758,344 208 m^{-1}

FIM