Diferentes formas da Equação de Rydberg e os valores teóricos da Constante de Rydberg

Equação em energia:

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

$$R = \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2} = \frac{\mu Z^2 e^4}{8h^2\varepsilon_0^2} \qquad (2)$$

Onde μ é a massa reduzida do sistema, M é a massa do núcleo e m_e a massa do elétron:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m_e} \qquad (3) \qquad \text{ou} \qquad \mu = \frac{Mm_e}{M + m_e} \qquad (4)$$

Considerando-se o átomo de H,
$Z = 1$
massa do próton = 1,672621898 × 10^{-27} kg
massa do elétron = 9,10938356 × 10^{-31} kg
massa reduzida do átomo de H = 9,10442514 × 10^{-31} kg (menor que a massa do elétron)
R(H) = 2,178685776 × 10^{-18} J

Considerando-se a massa do núcleo como infinita, μ fica igual a m_e e R(H) passa a se chamar $R(\mathrm{H})_\infty$:

$$R(\mathrm{H})_\infty = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2} = \frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_0^2} = 2{,}179\ 872\ 325 \times 10^{-18}\ \mathrm{J} = 13{,}605\ 693\ 009\ \mathrm{eV} = \tfrac{1}{2}\ \mathrm{ua} \qquad (5)$$

Equação em número de onda:

Como $\Delta E = h\nu = \dfrac{hc}{\lambda} \qquad (6)$
dividindo-se a eq. (1) por hc, teremos,

$$\frac{1}{\lambda} = R^\lambda\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (7)$$

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

Considerando-se o átomo de H,
$Z = 1$
massa reduzida do átomo de H = 9,10442514 × 10^{-31} kg
$R(\mathrm{H})^\lambda$ = 10 967 758,344 208 m^{-1}

Novamente, considerando-se a massa do núcleo infinita, μ fica igual a m_e e $R(\mathrm{H})^\lambda$ passa a se chamar $R(\mathrm{H})_\infty^\lambda$:

$$R(\mathrm{H})_\infty^\lambda = \frac{R_\infty}{hc} = \frac{m_e e^4}{8h^3\varepsilon_0^2 c} = 10\,973\,731{,}568\,539\ m^{-1} = \frac{1}{4\pi c}\ \mathrm{ua}^{-1} \qquad (9)$$

Equação em frequência:

$$\nu = R_\infty^\nu \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \qquad (10)$$

$$R(\mathrm{H})_\infty^\nu = \frac{R_\infty}{h} = \frac{m_e e^4}{8h^3\varepsilon_0^2} = 3{,}289\,841\,960\,355 \times 10^{15}\ \mathrm{s}^{-1} = \frac{1}{4\pi}\ \mathrm{ua}^{-1} \qquad (11)$$

Referências:

1 - TEO, B. K.; LI, W.-L. The Scales of Time, Length, Mass, Energy, and Other Fundamental Physical Quantities in the Atomic World and the Use of Atomic Units in Quantum Mechanical Calculations, J. Chem. Educ. 88(7):921-928 (2011).

2- http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html (CODATA 2014, acessado em 15/11/21015)