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

Equação de Rydberg em energia:

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

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

$$\frac{hc}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (3)$$

onde

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

Sendo M a massa do núcleo e m_e a massa do elétron, a massa reduzida do elétron, μ, será dada por

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m_e} \qquad (5)$$

$$\mu = \frac{M m_e}{M + m_e} \qquad (6)$$

Considerando-se:
$Z = 1$ (átomo de H)
massa do próton = $1{,}672621898 \times 10^{-27}$ kg
massa do elétron = $9{,}10938356 \times 10^{-31}$ kg
a massa reduzida do elétron no átomo de H será

$\mu_H = 9{,}10442514 \times 10^{-31}$ kg (menor que a massa do elétron)

Substituindo esse valor na Eq. (4), teremos

$R^H = 2{,}178685776 \times 10^{-18}$ J

Considerando-se a massa do núcleo como infinita, μ_H fica igual a m_e e R^H passa a se chamar R_∞^H:

$$R_\infty^H = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2} = \frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_0^2} = 2{,}179\,872\,325 \times 10^{-18}\ \text{J} = 13{,}605\,693\,009\ \text{eV} = ½\ \text{ua} \qquad (7)$$

Equação em número de onda:

Dividindo-se a Eq. (3) por hc, teremos,

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_\lambda \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \qquad (8)$$

onde

$$R_\lambda = \frac{R}{hc} = \frac{\mu Z^2 e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2 c} \qquad (9)$$

Considerando-se
$Z = 1$ (átomo de H)
massa reduzida do elétron no átomo de H, $\mu_H = 9{,}10442514 \times 10^{-31}$ kg
teremos

$$R_\lambda^{\mathrm{H}} = 10\,967\,758{,}344\,208 \ \mathrm{m}^{-1}$$

Novamente, considerando-se a massa do núcleo infinita, μ fica igual a m_e e R_λ^{H} passa a se chamar $R_{\infty\lambda}^{\mathrm{H}}$

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

Equação em frequência:

Dividindo-se a Eq. (2) por h, teremos,

$$\nu = R_\nu \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \qquad (11)$$

$$R_{\infty\nu}^{\mathrm{H}} = \frac{R_\infty^{\mathrm{H}}}{h} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2} = 3{,}289\,841\,960\,355 \times 10^{15} \ \mathrm{s}^{-1} = \frac{1}{4\pi} \ \mathrm{ua}^{-1} \qquad (12)$$

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)