

Os cientistas verificaram que a análise dos espectros é uma ferramenta de grande valor para a identificação dos elementos e dos compostos. Por exemplo, analisando espectros, os astrônomos identificaram mais de 100 moléculas diferentes no espaço interestelar, inclusive algumas que não existem na natureza aqui na Terra.

Teoria dos Quanta. Ondas eletromagnéticas também apresentam um caráter corpuscular e são quantizadas (pode ter apenas *alguns valores de energia*) e os *quanta* recebem o nome de *fótons*. Planck descobriu que todos os fótons, associados a uma frequência particular f de luz (ou a um comprimento de onda λ da luz), possuem a mesma energia E , dada pela relação

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}, \quad (1)$$

onde h é uma constante universal, chamada constante de Planck.

Uma unidade de energia muito usada em física moderna é o *elétron-volt* (eV). A energia em J equivalente a 1 eV é

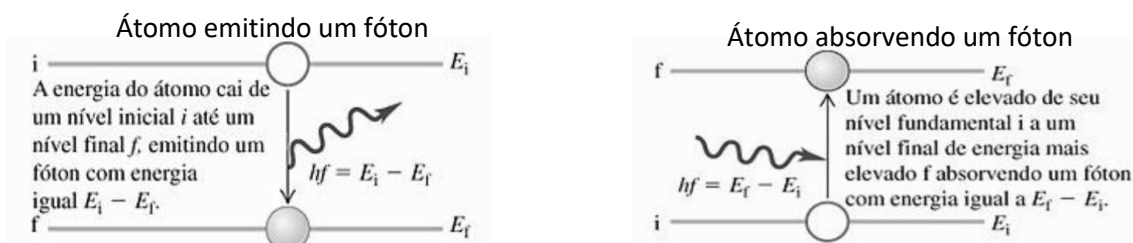
$$1 \text{ eV} = (1,6 \times 10^{-19} \text{ C})(1 \text{ V}) = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}. \quad (2)$$

Níveis de energia do átomo de hidrogênio. As várias órbitas permitidas envolvem diferentes energias do elétron. A energia do elétron no n -ésimo nível do átomo de hidrogênio é dada por:

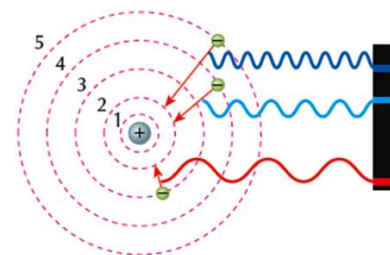
$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}, \quad (3)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$. Observe que E_1 é o nível de energia mais baixo; quando o elétron se encontra no nível $n = 1$, diz-se que o átomo está no **estado fundamental**. Quando o elétron se encontra em estados superiores E_2, E_3, E_n , etc., diz-se que o átomo está no **estado excitado**.

Espectros atômicos. A radiação eletromagnética é **emitida** ou **absorvida** quando o elétron faz uma transição de uma órbita estacionária a outra.



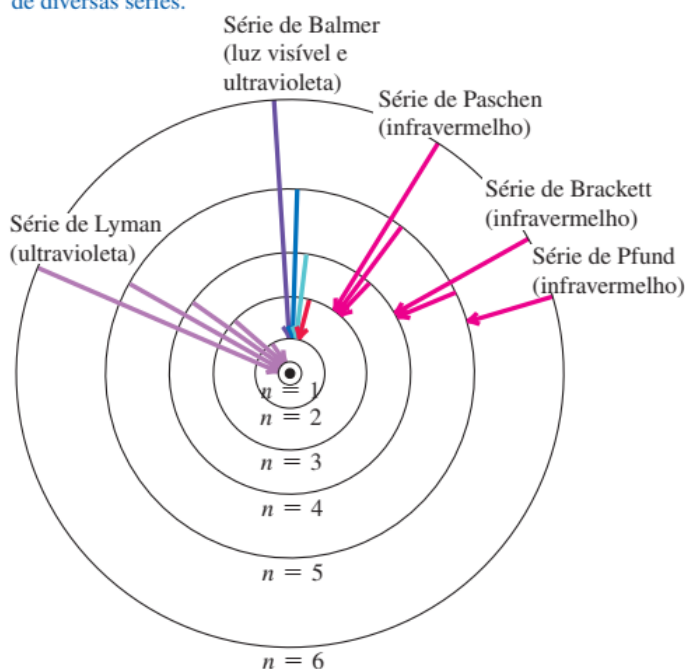
A luz emitida por um átomo é o resultado da transição feita pelo elétron entre dois níveis de energia. Essa transição pode ser compreendida através do modelo semiclássico de Bohr. Neste modelo, o elétron gira em torno do núcleo em órbitas bem definidas. Nem todas as órbitas são permitidas e o elétron pode mudar de órbita desde que ele vá para outras órbitas permitidas. Nesse processo de mudança de órbita, através de um **"salto quântico"**, o elétron absorve ou emite um fóton. Se o elétron vai para uma órbita mais próxima do núcleo sua energia diminui e o excedente da energia é liberada na forma de luz (emissão de fóton). Se conhecermos qual é a energia do fóton (ΔE) emitido na transição, podemos saber quais foram os níveis envolvidos na transição:



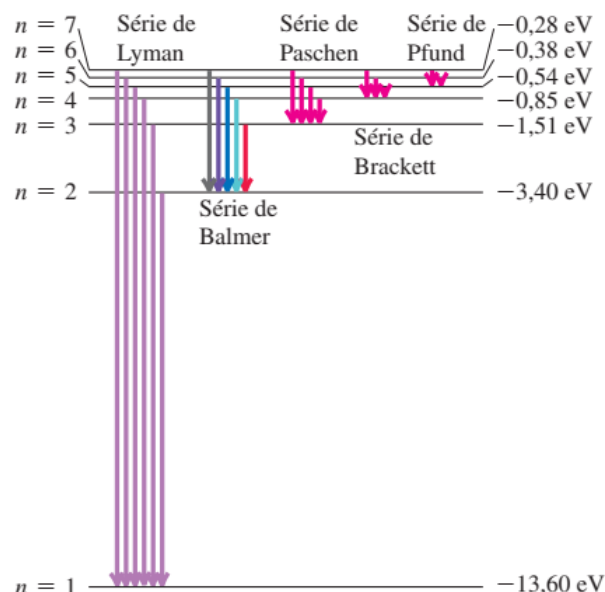
$$\Delta E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

Figura 39.24 Duas maneiras de representar os níveis de energia do átomo de hidrogênio e as transições entre eles. Note que o raio da órbita permitida de ordem n é, na realidade, n^2 vezes o raio da órbita $n = 1$.

(a) Órbitas permitidas de um elétron no modelo de Bohr de um átomo de hidrogênio (não está em escala). As setas indicam as transições responsáveis por algumas das linhas de diversas séries.



(b) Diagrama do nível de energia para o hidrogênio, mostrando algumas transições correspondentes às diversas séries.



Energia total para a órbita de ordem n no modelo de Bohr	Constante de Planck	Velocidade da luz no vácuo	Massa do elétron	Módulo da carga do elétron
	h	c	m	e
	hcR		me^4	
$E_n = -\frac{hcR}{n^2}$			$8\epsilon_0^2 h^3 c$	
Número quântico principal ($n = 1, 2, 3, \dots$)		Constante de Rydberg		Constante elétrica
		onde $R =$		

Espectro do átomo de hidrogênio. A figura acima mostra o diagrama de níveis de energia do hidrogênio. As séries espectrais são nomeadas de Lyman, Balmer, Paschen, Brackett e Pfund em

homenagem aos cientistas que as estudaram. Os comprimentos de onda de cada série podem ser determinados pelas fórmulas indicadas ao lado da figura. Outras informações relevantes para o átomo de hidrogênio são encontradas nos quadros abaixo.



Todas as linhas de Balmer além de H_δ estão no espectro ultravioleta.

H_α , H_β , H_γ e H_δ estão na região visível do espectro.

Série de Lyman: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, 4, \dots)$

Série de Balmer: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots)$

Série de Paschen: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots)$

Série de Brackett: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots)$

Série de Pfund: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, 8, \dots)$

Raio da órbita de ordem n no modelo de Bohr $r_n = \epsilon_0 \frac{n^2 h^2}{\pi m e^2}$

Número quântico principal ($n = 1, 2, 3, \dots$)
Constante de Planck
Módulo da carga do elétron
Constante elétrica
Massa do elétron

Velocidade orbital na órbita de ordem n no modelo de Bohr $v_n = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{e^2}{2nh}$

Módulo da carga do elétron
Constante de Planck
Constante elétrica
Número quântico principal ($n = 1, 2, 3, \dots$)

Raio da órbita de ordem n no modelo de Bohr $r_n = n^2 a_0$

Raio de Bohr
Número quântico principal ($n = 1, 2, 3, \dots$)

$K_n = \frac{1}{2} m v_n^2 = \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m e^4}{8 n^2 h^2}$ (energias cinéticas no modelo de Bohr)

$U_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} = -\frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m e^4}{4 n^2 h^2}$ (energias potenciais no modelo de Bohr)

$E_n = K_n + U_n = -\frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m e^4}{8 n^2 h^2}$ (energias totais no modelo de Bohr)

$K_n = \frac{13,60 \text{ eV}}{n^2} \quad U_n = \frac{-27,20 \text{ eV}}{n^2} \quad E_n = \frac{-13,60 \text{ eV}}{n^2}$

Ondas de elétrons. Se uma partícula se comporta como onda, ela deve ter um comprimento de onda e uma frequência. De Broglie postulou que uma partícula livre com massa de repouso m , deslocando-se com velocidade não relativística v , deve ter um comprimento de onda λ associado a seu momento linear $p = mv$ do mesmo modo que um fóton, $\lambda = h/p$. O **comprimento de onda de De Broglie** de uma partícula é, então,

Diagrama da equação de De Broglie com rótulos explicativos:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

- Comprimento de onda de De Broglie de uma partícula**: aponta para λ
- Constante de Planck**: aponta para h (em ambos os termos)
- Momento linear da partícula**: aponta para p
- Velocidade da partícula**: aponta para v
- Massa da partícula**: aponta para m

Projeto 2

Estudar o modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio. Inicialmente, o programa deve mostrar ao usuário para qual nível final n ocorre a transição das séries de Lyman, Balmer, Paschen, Brackett e Pfund. O programa deve:

- 1) Calcular a energia de um fóton com frequência e comprimento de onda definidos pelo usuário.
- 2) Para um dado valor de n , calcular a energia cinética, energia potencial e energia total em unidade de [eV] do átomo de hidrogênio. Calcular também o raio da órbita do elétron em [nm], a velocidade do elétron na órbita [m/s] e o comprimento de onda de De Broglie. Atenção aos sinais das energias e n deve ser um número inteiro. Retornar uma mensagem de erro, caso o usuário digite um número não inteiro.
- 3) Calcular o comprimento de onda e frequência emitido/absorvido pelo átomo de hidrogênio na transição de um nível inicial n_i para outro nível n_f . Como n_i poder maior ou menor que n_f , deve-se tomar cuidado para não retornar valores negativos. Na saída, também especificar se o fóton foi emitido ou absorvido.
- 4) Estudo do espectro de emissão do átomo de hidrogênio através das séries de Lyman, Balmer, Paschen, Brackett e Pfund. Informar ao usuário qual é o número quântico ($n_{série}$) final para cada uma destas séries. O programa retorna o comprimento de onda, a frequência e a cor, se visível ou outra classificação no espectro eletromagnético, do fóton emitido.
- 5) Calcular o nível n final após o átomo de hidrogênio no estado fundamental absorver um fóton com um determinado comprimento de onda digitado pelo usuário. Note que: i) o átomo de hidrogênio irá absorver apenas comprimentos de onda específicos; ii) o valor de n deve ser inteiro. Retornar uma mensagem de erro se o átomo de hidrogênio não absorver o comprimento de onda dado. Isso pode ser feito estabelecendo uma margem de erro, por exemplo, se estiver na faixa de $(n - 0,1)$ a $(n + 0,1)$, retornar o número inteiro, caso contrário, retornar a mensagem "O átomo de hidrogênio não absorve um fóton com esse comprimento de onda". iii) Coloque uma restrição para comprimentos de onda muito curtos, pois poderá ionizar o átomo. Retorne uma mensagem de erro: "Digite um comprimento de onda maior, esse fóton irá ionizar o átomo de hidrogênio."
- 6) Retornar os valores com 3 algarismos significativos. Use notação científica para números muito grandes ou muito pequenos. Isso não se aplica para o número quântico, que deve ser um número inteiro.

- 7) Tudo deve ser disponível em um único programa com menus bem organizados. Todos os cálculos devem ser facilmente acessíveis. Para uma sequência de cálculos feita pelo usuário, mostrar saídas bem organizadas.

Aula 1:

- I) Inserir as constantes com 4 algarismos significativos no programa: constante de Planck, carga elementar, massa do elétron e constante de Rydberg.
- II) Escrever um programa em que o usuário entra com o comprimento de onda ou com a frequência e o programa retorna o valor da energia do fóton com duas unidades diferentes: [eV] e [J].
- III) Escrever um programa em que o usuário entra com o valor do número quântico (n) do átomo de hidrogênio:

O programa deve retornar os valores: 1) do raio da órbita do elétron no átomo de hidrogênio; 2) a velocidade do elétron na órbita n ; 3) a energia cinética do elétron; 4) a energia potencial do elétron e 5) a energia total do átomo de hidrogênio quando o elétron está no estado n ; 6) o comprimento de onda de De Broglie. As unidades do raio e λ devem ser mostradas em [nm] e da energia em [eV]. Retornar os valores com 3 algarismos significativos. Use notação científica para números muito grandes ou muito pequenos. Veja o item (1) para outros detalhes.

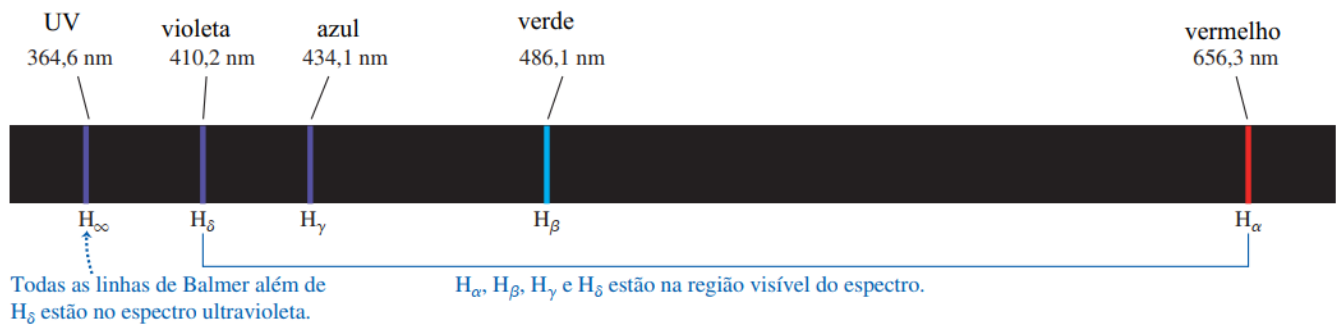
Aula 2:

- I) Estudo da absorção e emissão de fótons. Escrever um programa em que o usuário entra com os números quânticos inicial e final da transição do elétron no átomo de hidrogênio. O A saída é o comprimento de onda e a frequência do fóton emitido ou absorvido. Informar também o tipo do fóton, se absorvido ou emitido.
- II) Estudo do espectro de emissão do átomo de hidrogênio através das séries de Lyman, Balmer, Paschen, Brackett e Pfund. Informar ao usuário qual é o número quântico ($n_{\text{série}}$) final para cada uma destas séries.
 - i) O usuário deve digitar o número quântico n_i inicial. Note que $n_i > n_{\text{série}}$.
 - ii) Retornar o comprimento de onda e frequência emitido na transição do elétron no átomo de hidrogênio do nível inicial n na série escolhida. Informar também a cor do fóton emitido ou se trata de um fóton infravermelho ou ultravioleta.

Espectro visível da série de Balmer		
linha	λ (nm)	Cor
$H\alpha$	656,3	Vermelho
$H\beta$	486,1	Verde
$H\gamma$	434,1	Azul
$H\delta$	410,2	violeta

Atenção: Não use tabelas de cores disponíveis na internet. Use o quadro acima para classificar o

espectro visível do átomo de hidrogênio. Veja também a figura abaixo:



Aula 3:

Informe ao usuário que o átomo de hidrogênio se encontra no estado fundamental.

Um fóton de comprimento de onda digitado pelo usuário se aproxima do átomo de hidrogênio. Nessa situação, o programa deve informar se o fóton poderá ou não ser absorvido pelo átomo.

Se o fóton for absorvido pelo átomo de hidrogênio, informar qual é o nível n final do elétron.

Veja o item (4) para outros detalhes para completar o programa.

Checklist das funções do programa:

1. Entrada de f ou λ :

- Retornar valor de E em [eV] e em [J]

(Saída com notação científica para valores muito grandes ou muito pequenos.)

2. Entrada do número quântico (n) do átomo de hidrogênio:

- Retornar K_n
- Retornar U_n
- Retornar E_n
- Retornar r_n
- Retornar v_n
- Retornar λ de De Broglie

(Saída com notação científica para valores muito grandes ou muito pequenos.)

3. Entrada do estado n_i inicial e estado final n_f : (n_i pode ser maior ou menor que n_f , portanto, cuidado para não retornar valores negativos).

- Retornar λ absorvido ou emitido (Especifique: por ex., Um fóton de 656 nm é emitido na transição.)
- Retornar f absorvido ou emitido (Especifique se é fóton emitido ou absorvido.)

(Saída com notação científica para valores muito grandes ou muito pequenos.)

4. Entrada de uma das 5 séries do hidrogênio. Em seguida, a entrada do número quântico inicial (n_i)

- Retornar f do fóton emitido

- b. Retornar λ do fóton emitido
- c. Retornar cor do fóton emitido se for visível. Senão retornar sua classificação no espectro eletromagnético.

(Saída com notação científica para valores muito grandes ou muito pequenos.)

5. Entrada de λ de um fóton que incide no átomo de hidrogênio no estado fundamental.

- a. Retorna se o átomo vai absorver ou não o fóton incidente
- b. Se absorver, retorna o valor de n_f do elétron.
- c. Alerta se o átomo será ionizado.

(Saída com notação científica para valores muito grandes ou muito pequenos.)

Constantes físicas fundamentais*

Nome	Símbolo	Valor
Velocidade da luz no vácuo	c	$2,99792458 \times 10^8$ m/s
Módulo da carga do elétron	e	$1,60217653(35) \times 10^{-19}$ C
Constante gravitacional	G	$6,67384(80) \times 10^{-11}$ N · m ² /kg ²
Constante de Planck	h	$6,62606957(29) \times 10^{-34}$ J · s
Constante de Boltzmann	k	$1,3806488(13) \times 10^{-23}$ J/K
Número de Avogadro	N_A	$6,02214129(27) \times 10^{23}$ moléculas/mol
Constante dos gases	R	8,3144621(75) J/mol · K
Massa do elétron	m_e	$9,10938291(40) \times 10^{-31}$ kg
Massa do próton	m_p	$1,672621777(74) \times 10^{-27}$ kg
Massa do nêutron	m_n	$1,674927351(74) \times 10^{-27}$ kg
Constante magnética	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ Wb/A · m
Constante elétrica	$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	$8,854187817 \dots \times 10^{-12}$ C ² /N · m ²
	$1/4\pi\epsilon_0$	$8,987551787 \dots \times 10^9$ N · m ² /C ²

d.