

# Modelos atômicos

Cap. 4 livro I

# Modelos atômicos

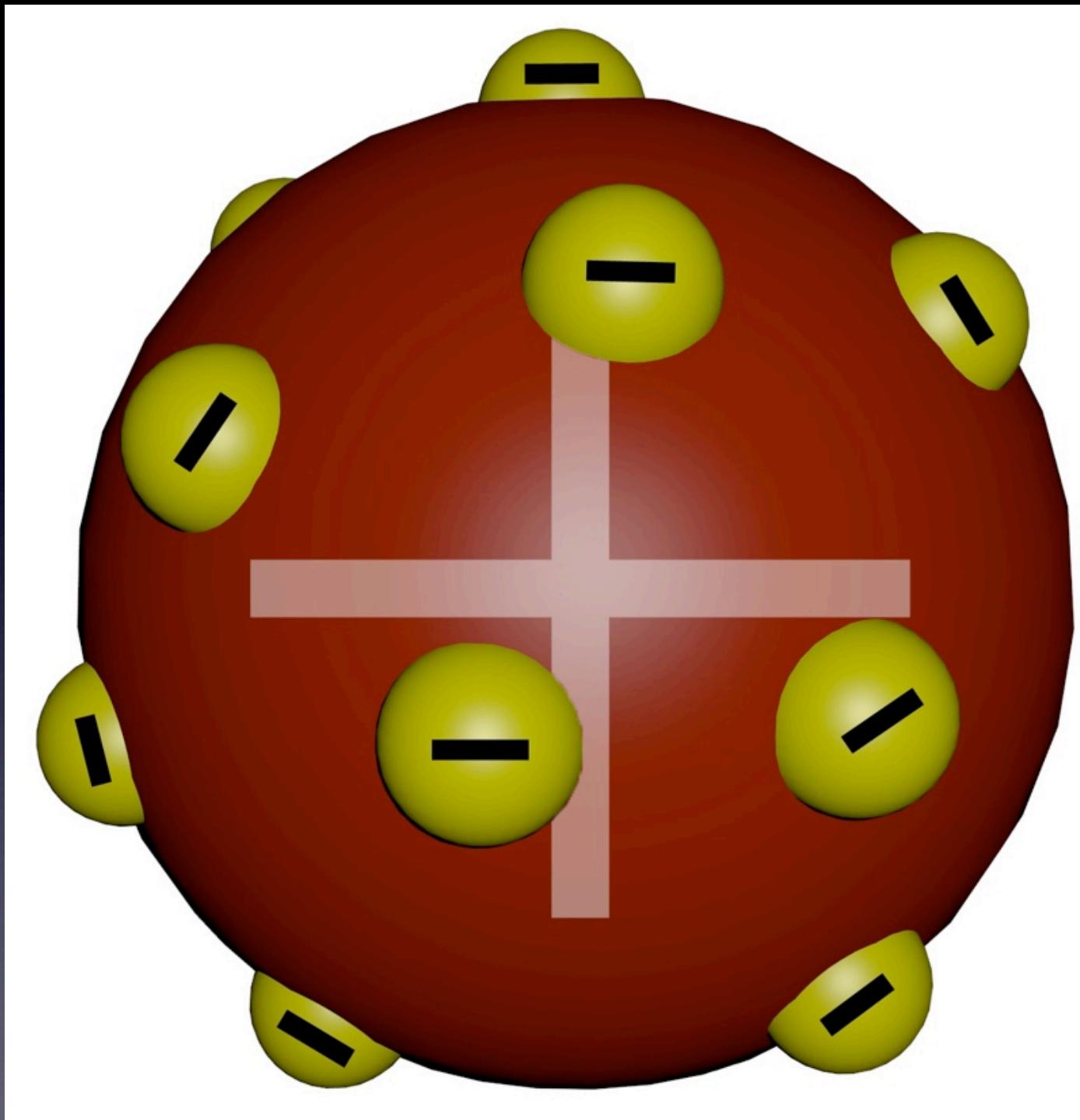
- Introdução
- Modelos de Thomson e Rutherford
- Modelo de Bohr
- Níveis de energia
- Espectros atômicos

# Introdução

- Espectroscopia de absorção em materiais: técnica muito utilizada em biomedicina
- Como entender? O que determina seus resultados?
- A estrutura atômica!
- Neste capítulo vamos estudar o átomo de hidrogênio (modelo mais simples)

# Modelo de Thomsom

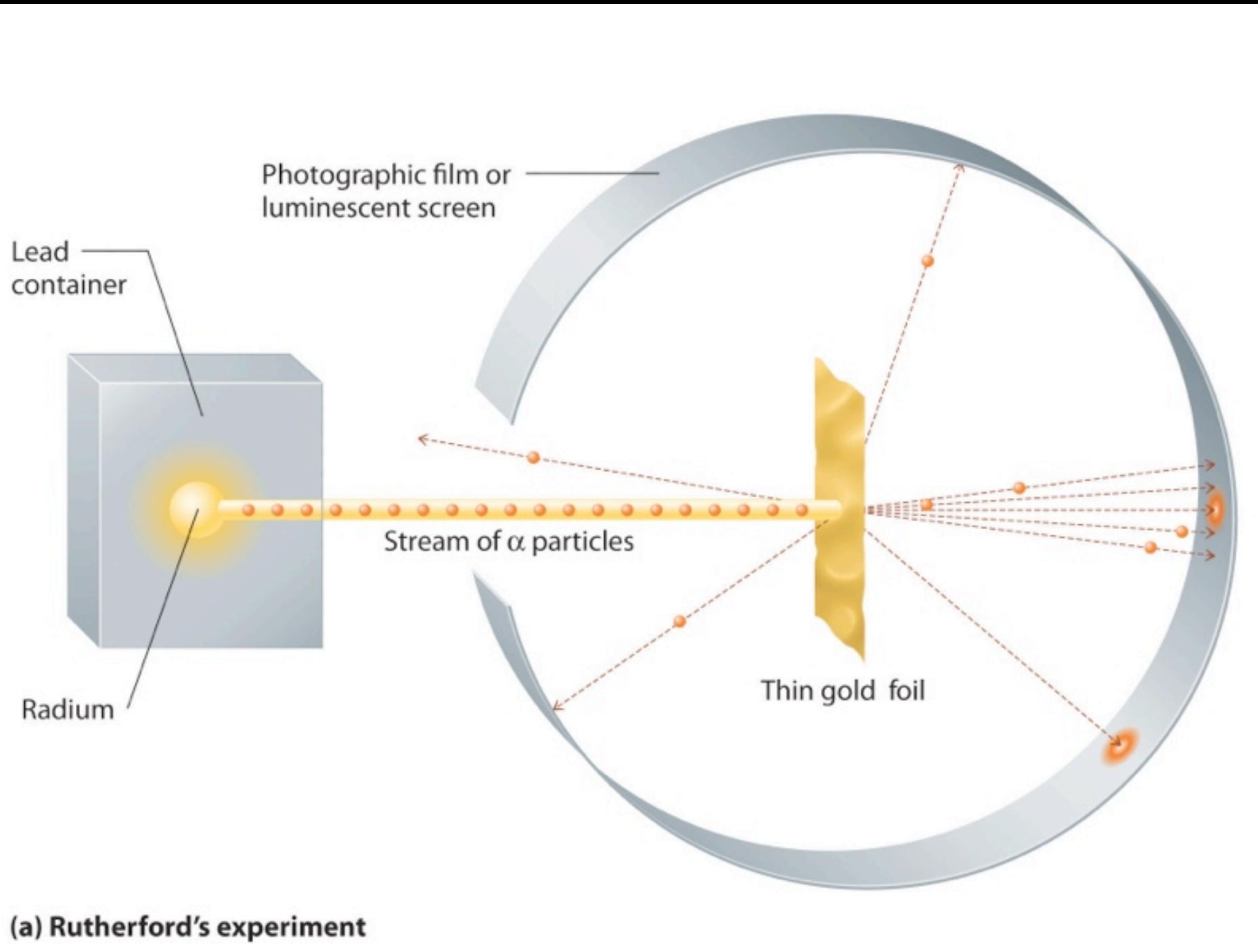
- JJ Thomsom descobriu o elétron em 1897
- Eletron: partículas com carga negativa que existiam dentro do átomo.
- Mas o átomo é nêutron!
- Modelo do pudim de passas



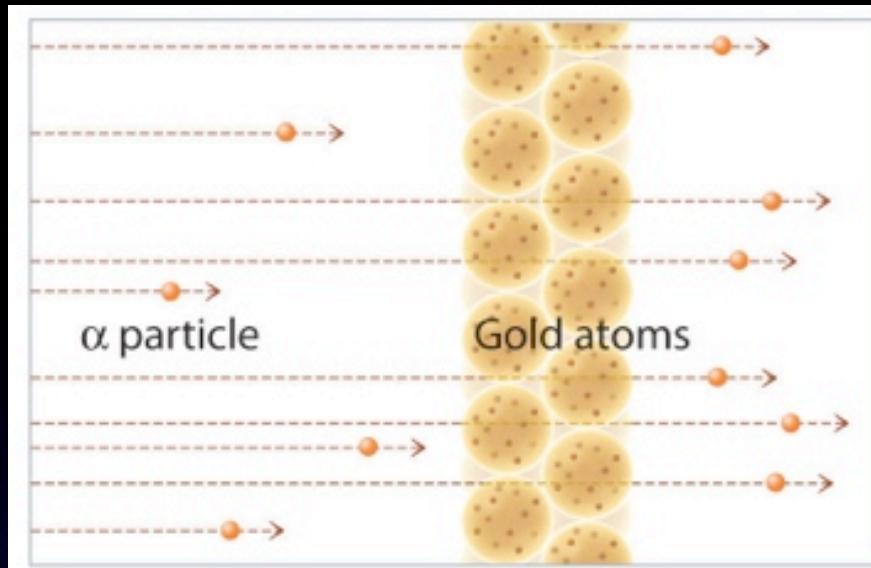
# Experimento de Rutherford



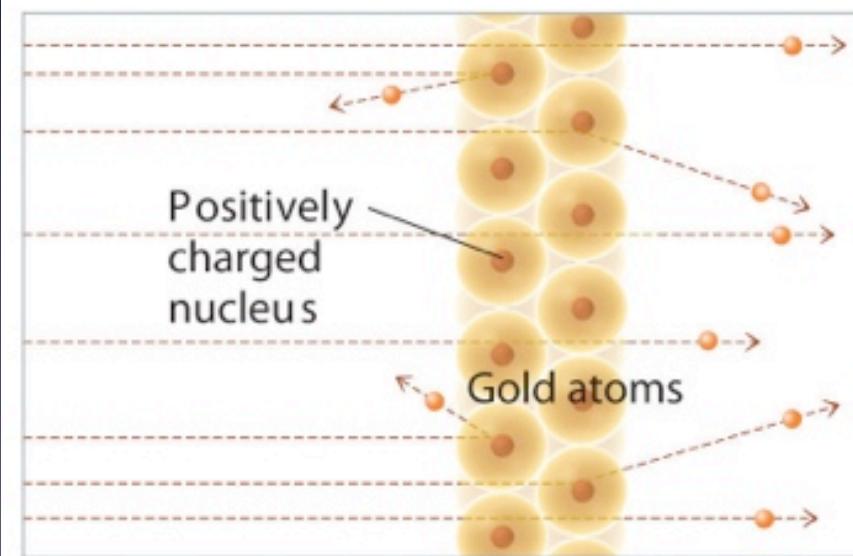
- Bombardamento de uma fina lâmina de ouro com núcleos de hélio (2 prótons e 2 nêutrons)
- A maioria das partículas passava direto
- Algumas poucas espalhavam com quase 180 graus



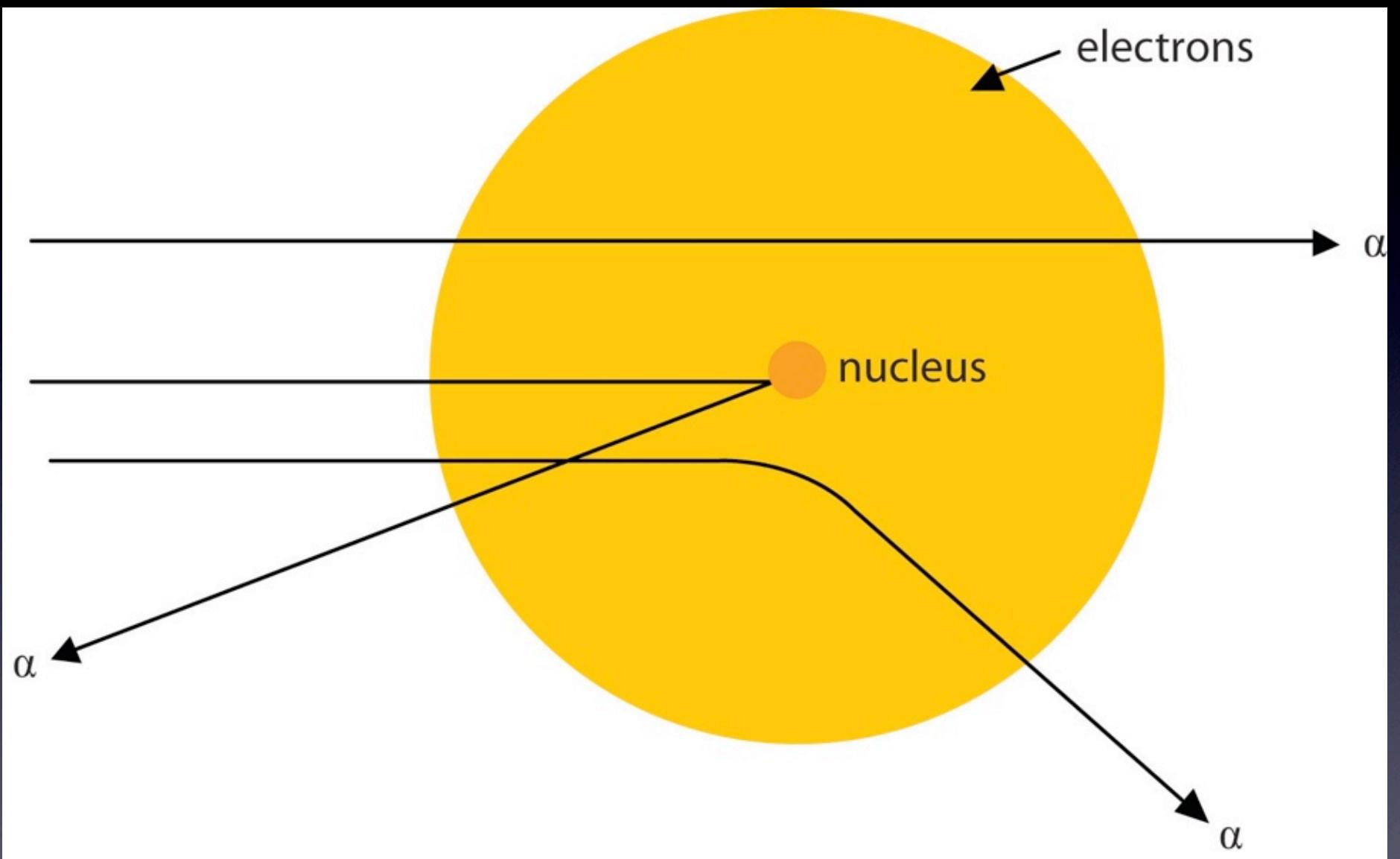
(a) Rutherford's experiment



(b) What Rutherford expected if Thomson's model were correct



(c) What Rutherford actually observed

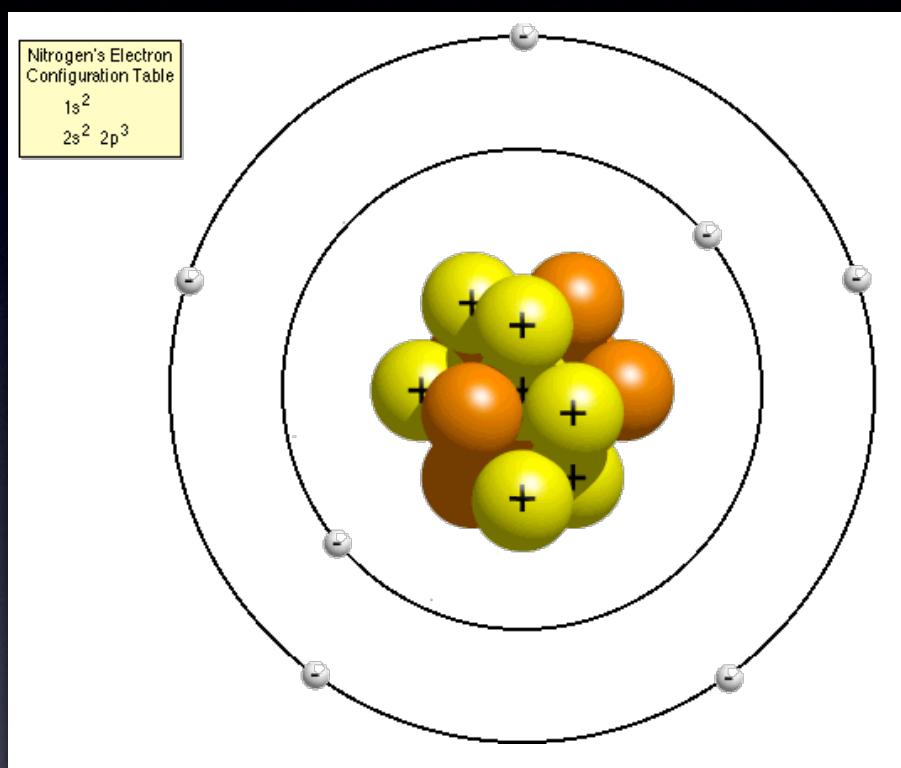
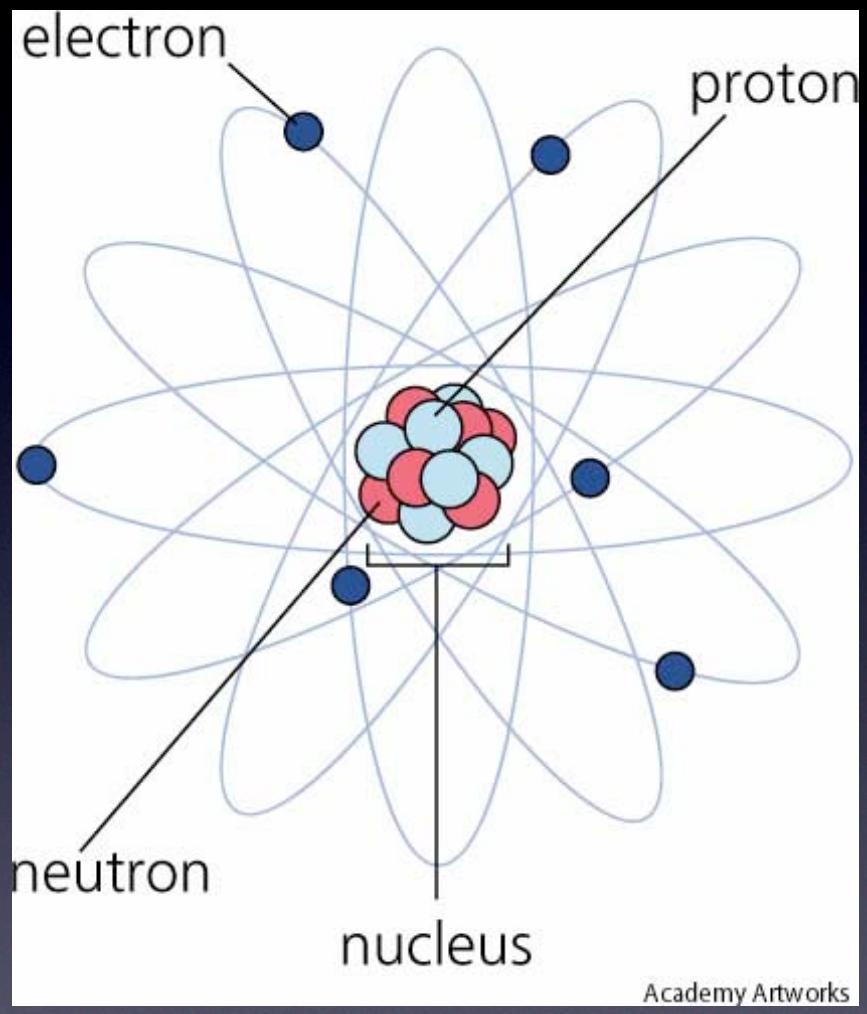


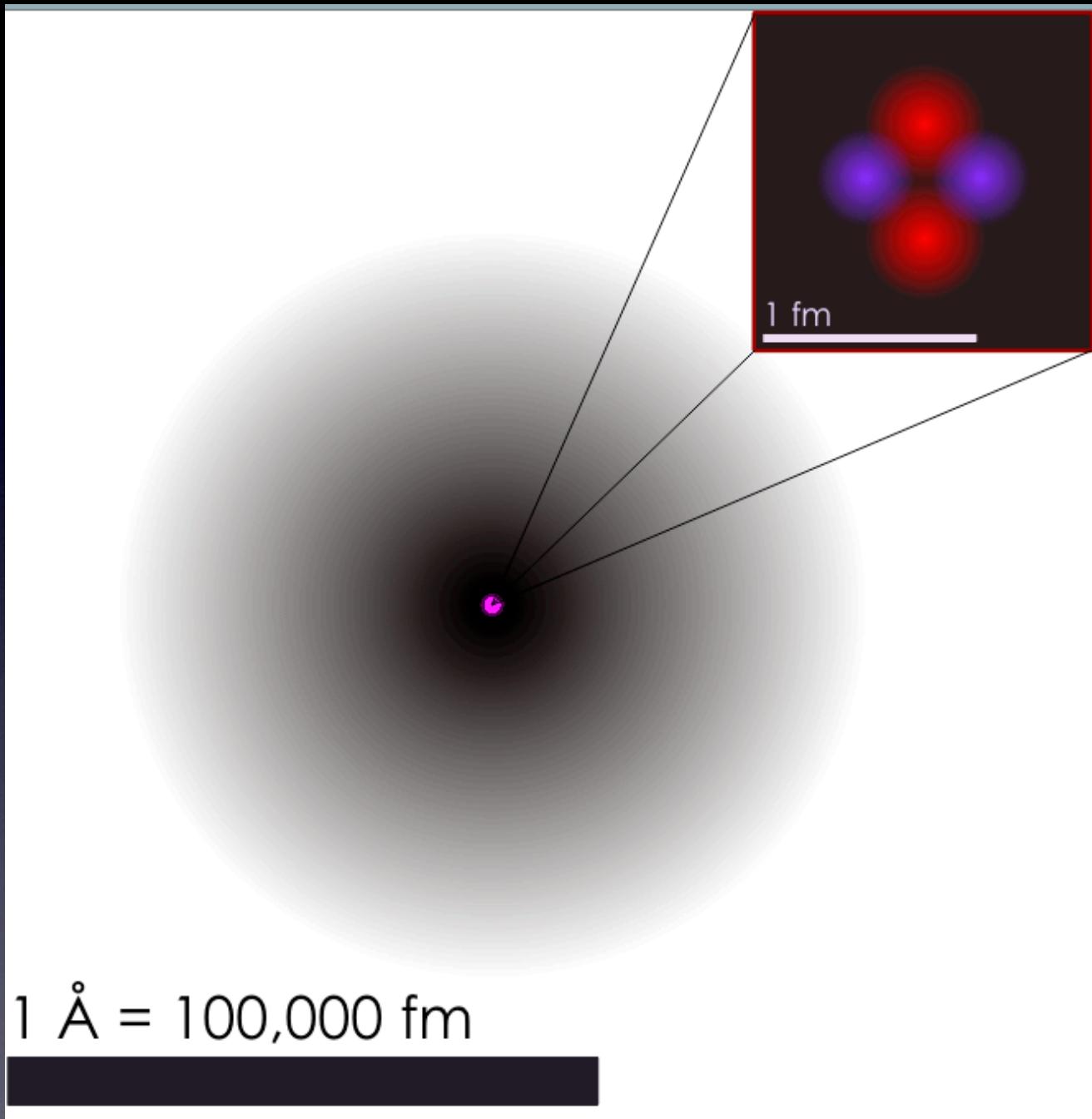
# Experimento de Rutherford

- Animação

# Modelo de Rutherford

- Núcleo massivo e com toda carga positiva
- Elétrons leves, girando em torno do núcleo
- Núcleo muito menor que o volume ocupado pelos elétrons

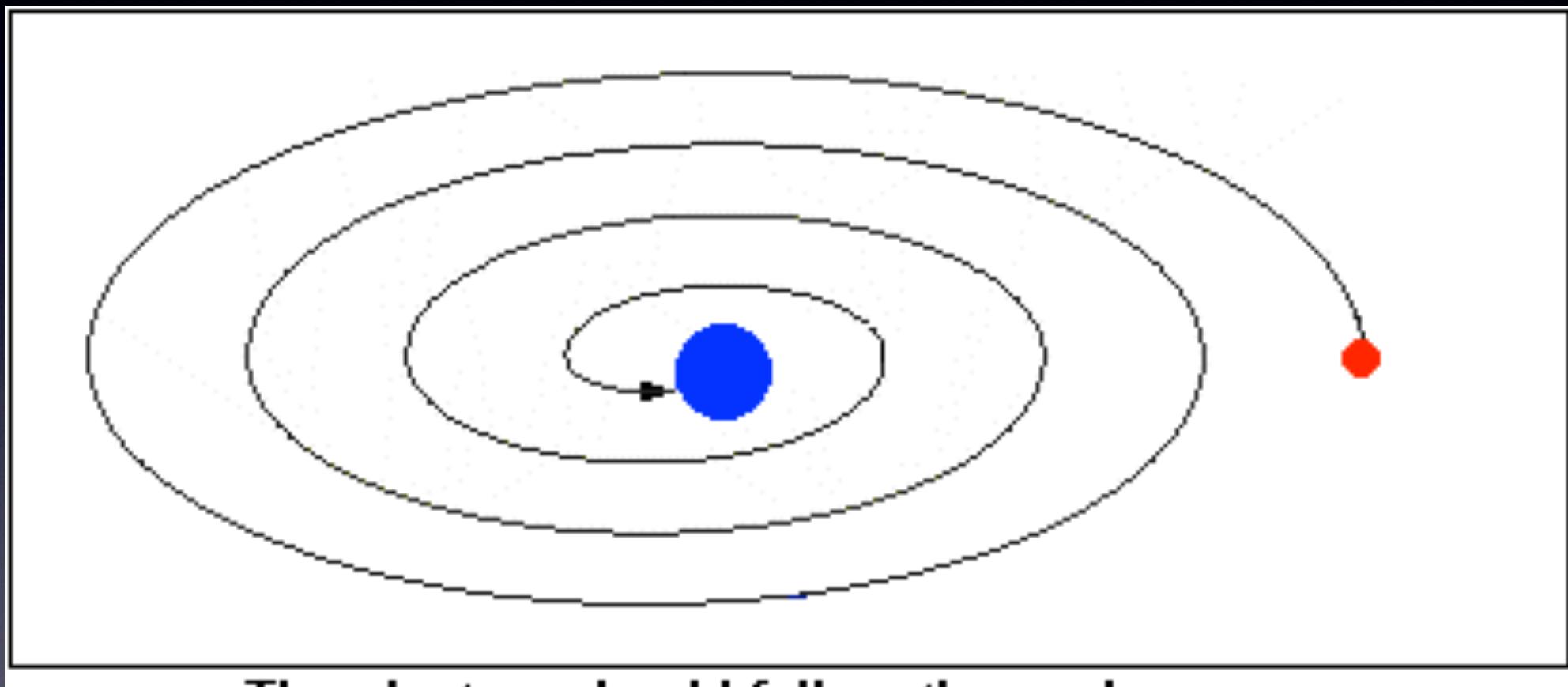




# Modelo de Rutherford

- Problema: elétrons fazendo movimento circular emitem radiação eletromagnética
- Ou seja, os elétrons perdem energia, o que diminui sua velocidade
- Logo, o raio da trajetória também diminui
- Em algum momento o elétron vai colidir com o núcleo!
- Resultado: o átomo não é estável

# Modelo de Rutherford



**The electron should fall on the nucleus.**

# Modelo de Bohr

- O átomo é estável, então a teoria está errada, ou incompleta!
- Além disso, havia inúmeros resultados experimentais de transmissão e absorção em gases
- Bohr adiciona algumas hipóteses no modelo de Bohr, objetivando prever esses resultados

# Modelo de Bohr

- Hipóteses
- 1) Os elétrons fazem órbitas circulares em torno do núcleo e obedecem a mecânica clássica
- 2) Apenas as órbitas nas quais  $L$  é quantizado são possíveis
- O elétron não emite energia na forma de radiação caso esteja em uma dessas energias
- Em transições entre órbitas, a diferença de energia é emitida na forma de radiação

# Modelo de Bohr

- Em equações
- Energia mecânica total:

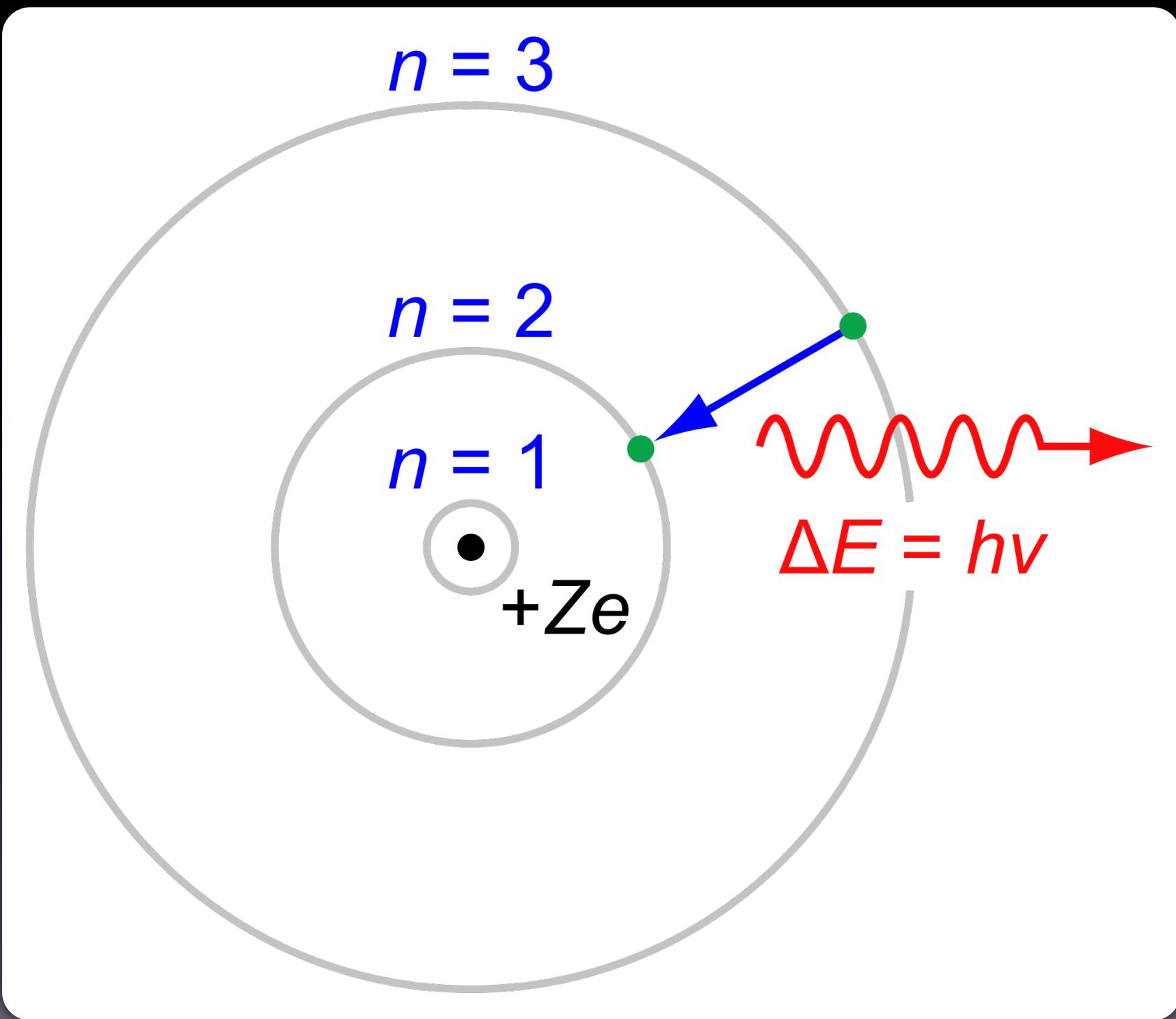
$$E_T = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{e^2}{r}$$

- Lei de Newton para o movimento circular:

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

- Quantização do momento angular:

$$L = rmv = n\hbar$$



# Modelo de Bohr

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{n^2} E_0,$$

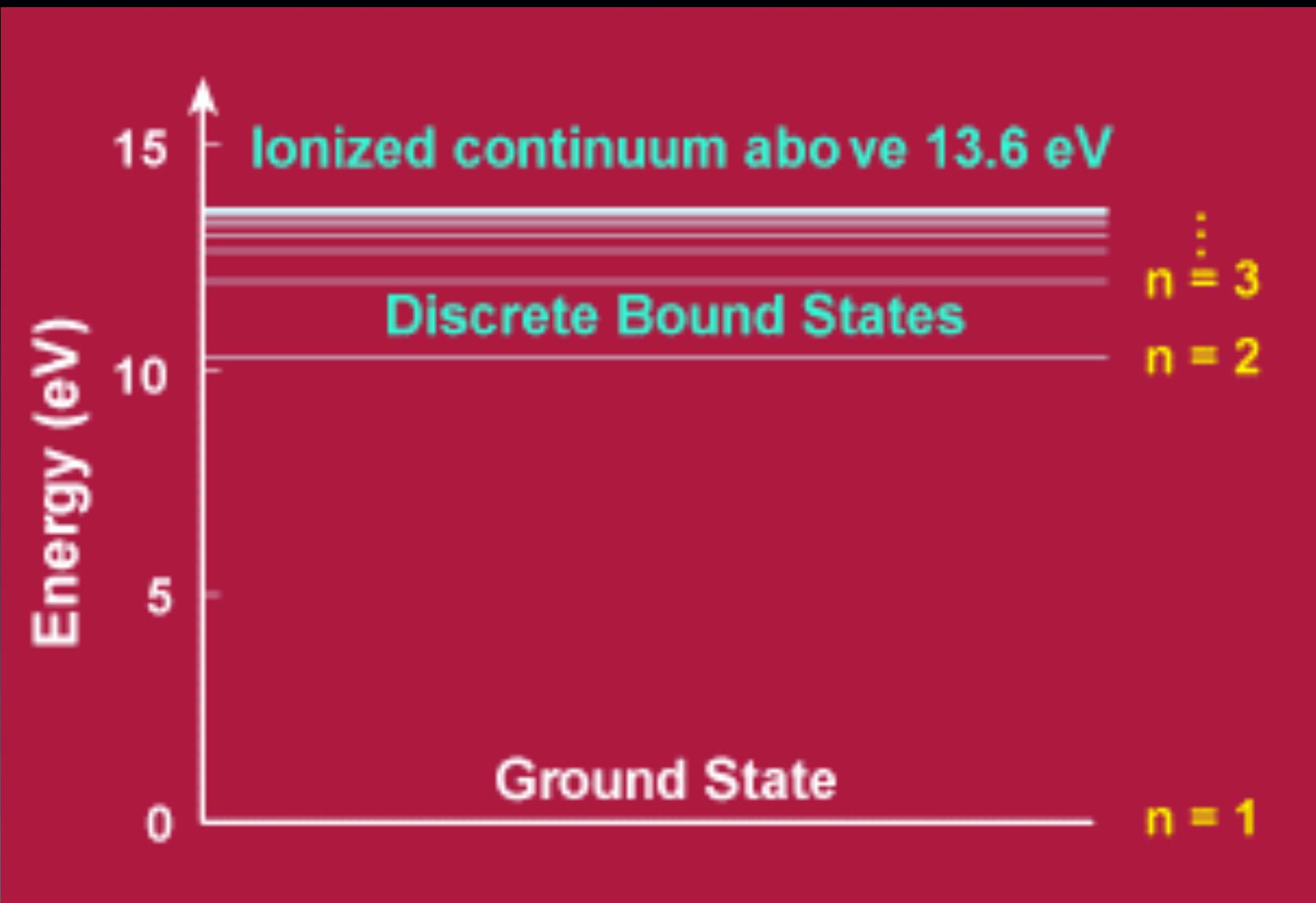
$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = n^2 a_B,$$

$$v_n = \frac{1}{n} v_0 = \frac{1}{n} \frac{e^2}{\hbar},$$

# Níveis de energia

- Energia do nível:  $E_n = -\frac{13,6}{n^2}$  eV
- Estado fundamental:  $E_1 = -13.6$  eV
- Ou seja, o elétron nunca tem energia igual a zero
- El é a energia de ionização: excelente concordância com o experimento

# Níveis de energia



# Níveis de energia

**Exemplo 4.1** — Seja o elétron do átomo de hidrogênio no estado com  $n = 10$ .

- Calcule a energia desse nível.
- Ela é maior ou menor que a energia do estado fundamental?
- Qual é a energia necessária para remover esse elétron do átomo?

**Solução**

a.  $E_{10} = -\frac{13,6}{10^2} = -\frac{13,6}{100} = -0,136 \text{ eV}$

b. Desde que  $E_1 = -13,6 \text{ eV}$   
 $E_{10} > E_1$

- c. Nesse caso é necessário fornecer ao átomo de hidrogênio uma energia de pelo menos  $+0,136 \text{ eV}$  para remover seu elétron.

# Níveis de energia

- Animação: átomo de hidrogênio

# Espectros atômicos

- Suponha que o elétron esteja na órbita  $n = i$

- Sua energia inicial é

$$E_i = - \frac{13,6}{n_i^2} \text{ eV}$$

- Em seguida, o elétron pula para a órbita  $n = f$

- Sua energia final é então

$$E_f = - \frac{13,6}{n_f^2} \text{ eV}$$

# Espectros atômicos

- Se  $E_f > E_i$ , o elétron ganhou energia
- Ele pode ter ganho por corrente elétrica, absorção de luz, calor, etc...
- Se  $E_f < E_i$ , o elétron perdeu energia.
- E ele sempre perde energia emitindo fóton!!

# Espectros atômicos

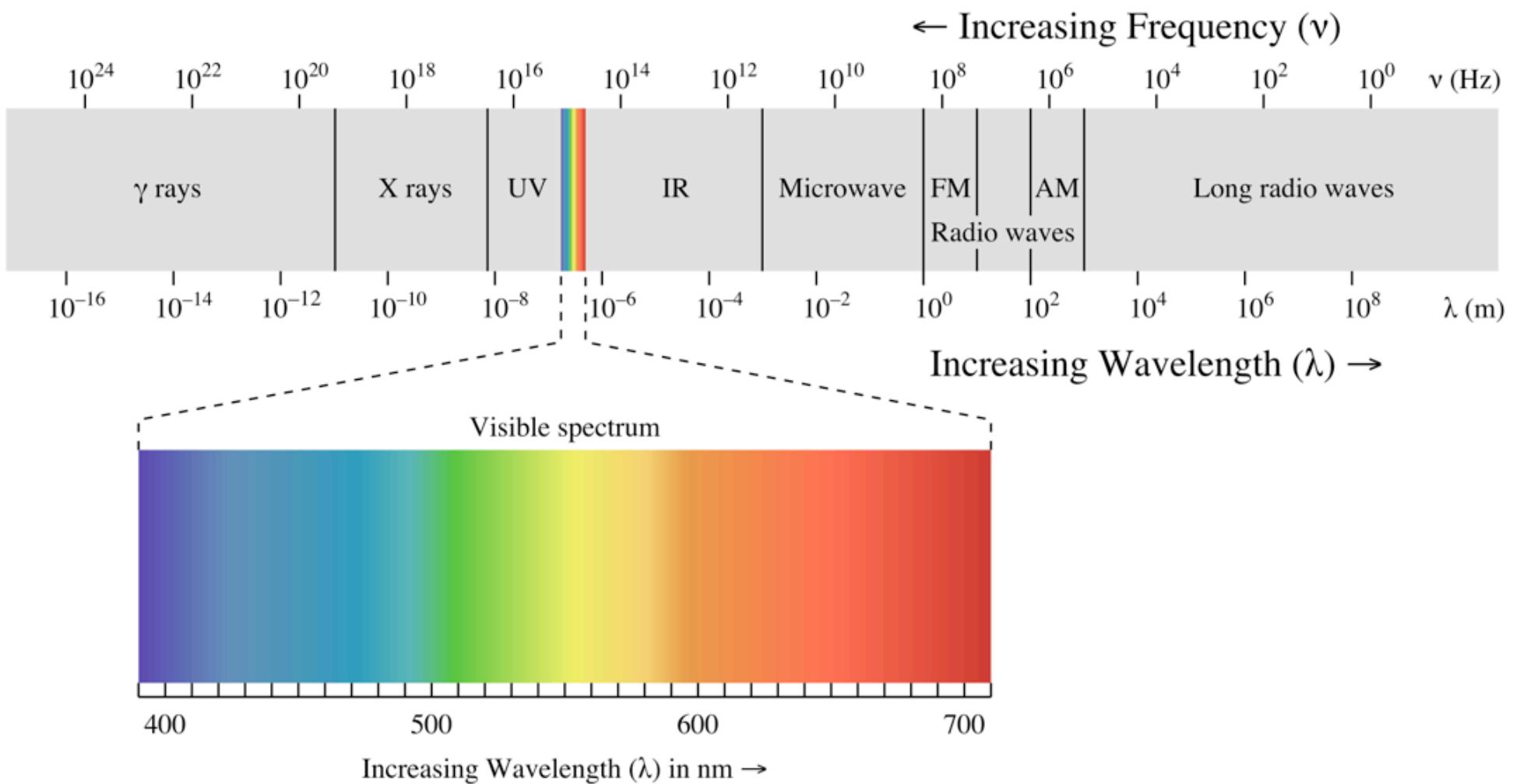
- Mas a energia de um fóton é  $E = hf$
- Logo a energia do fóton emitido é

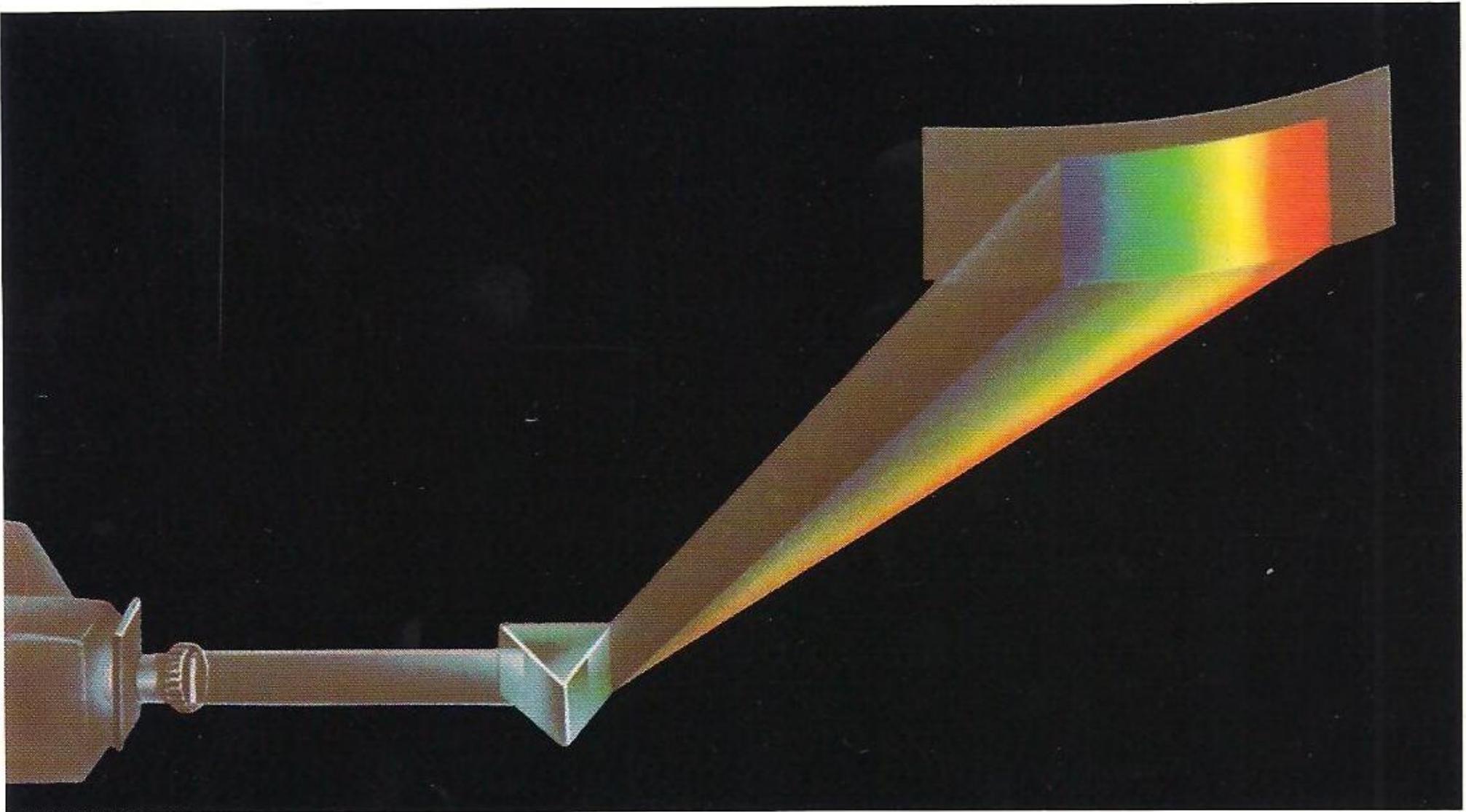
$$E_i - E_f = 13,6 \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = hf \text{ (eV)}$$

- Ou seja, pode-se calcular a frequência  $f$  desse fóton

# Espectros atômicos

- Níveis de energia: cria linhas de emissão e absorção com frequências definidas
- E que podem ser medidas!
- E comparadas com a previsão teórica

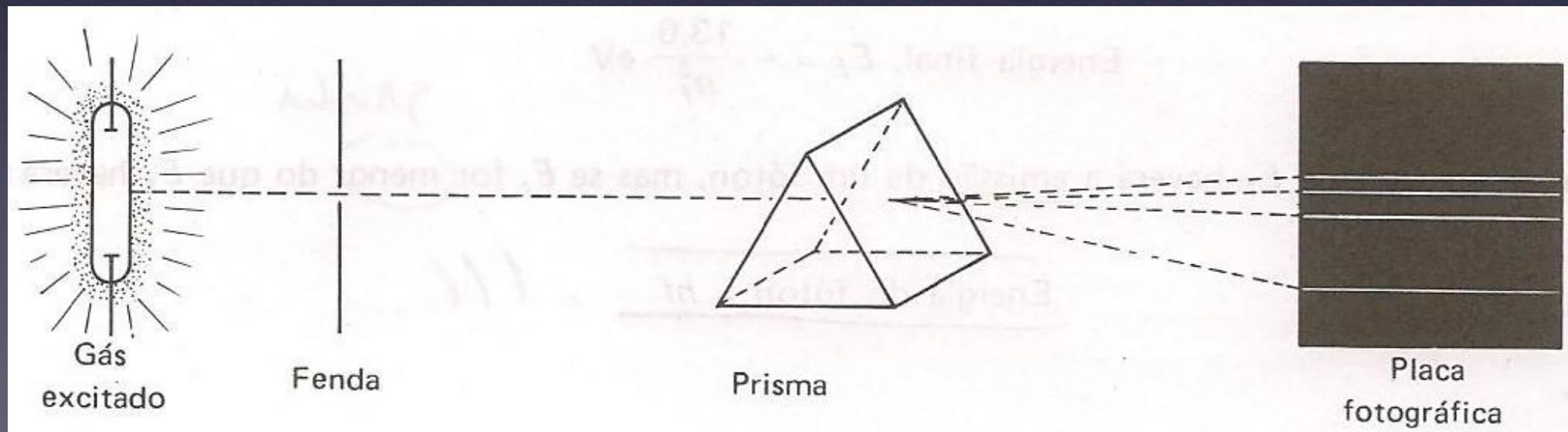


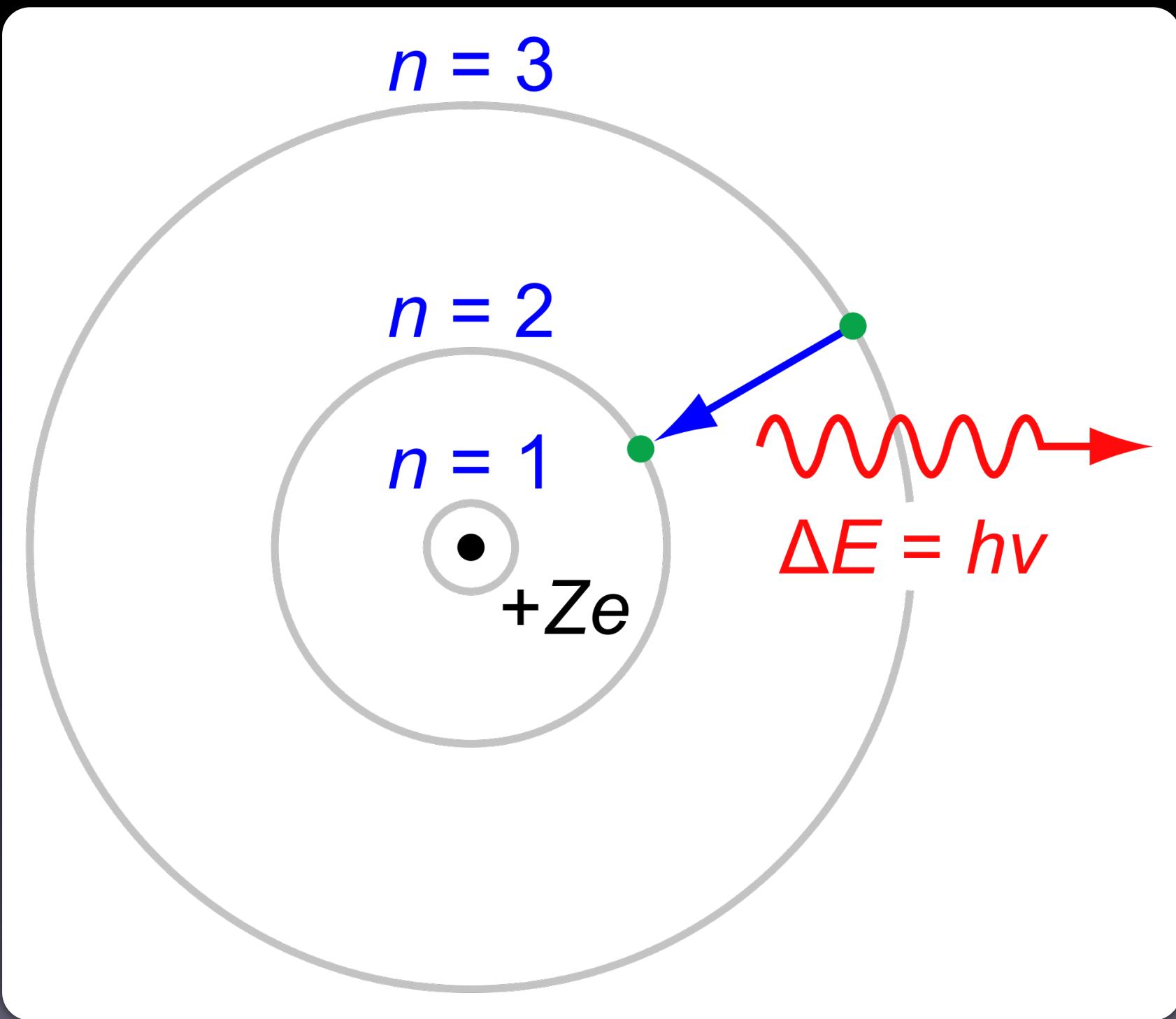


Espectro contínuo.

# Espectros de emissão

- Frequências emitidas pelo gás quando o elétron relaxa para um estado menos energético
- Linhas claras sobre o fundo escuro





# Exemplo

**Exemplo 4.2** – Calcule o comprimento de onda da radiação emitida quando o elétron do átomo de hidrogênio efetua a transição de  $n_i = 3$  para  $n_f = 2$ .

**Solução**

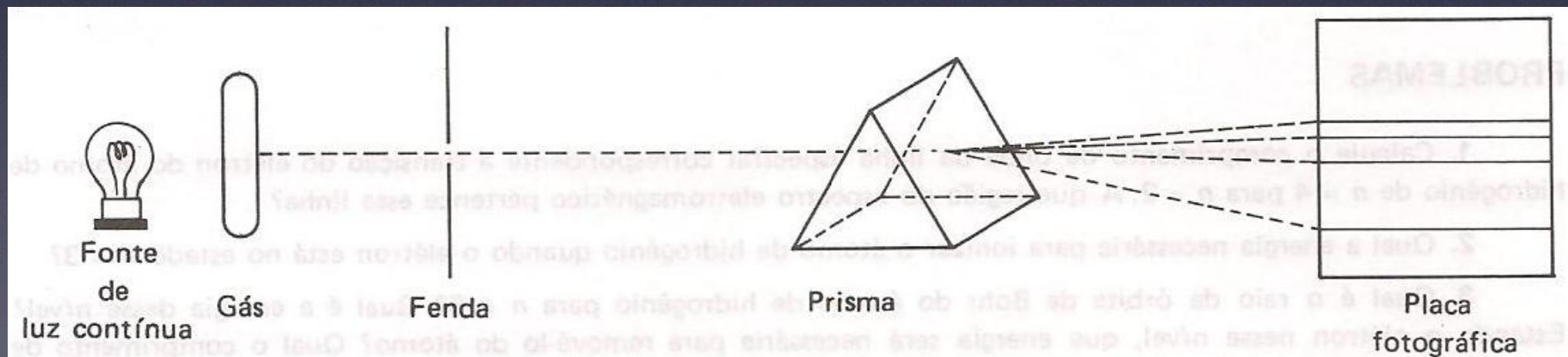
$$hf = \frac{hc}{\lambda} = E_3 - E_2$$

$$\lambda = \frac{hc}{E_3 - E_2} = \frac{hc}{-\frac{13,6}{9} + \frac{13,6}{4}} = \frac{(4,14 \times 10^{-15})(3 \times 10^8)}{-1,51 + 3,40}$$

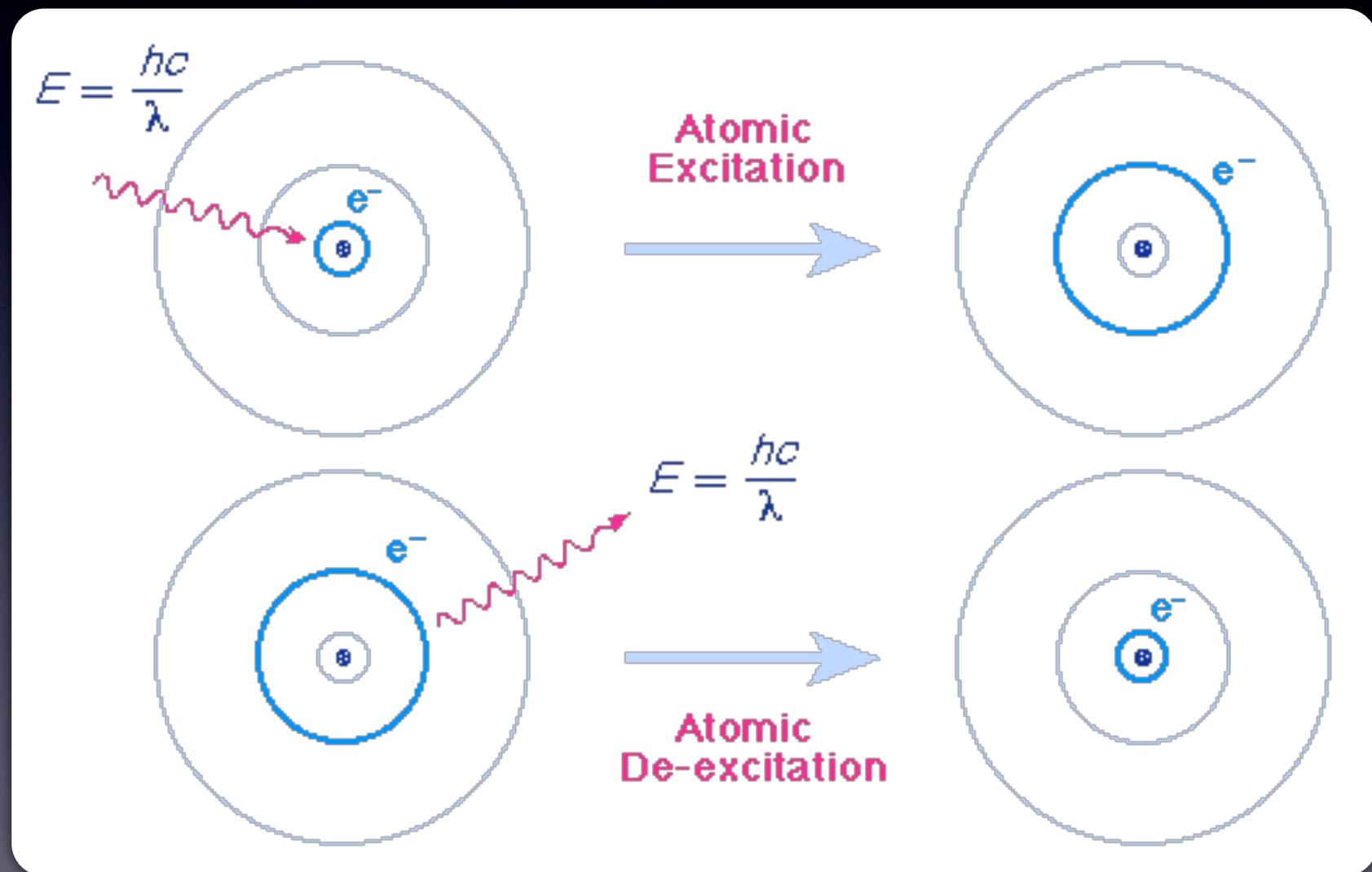
$$\lambda = 6,57 \times 10^{-7} \text{ m} = 6\,570 \text{ Å}$$

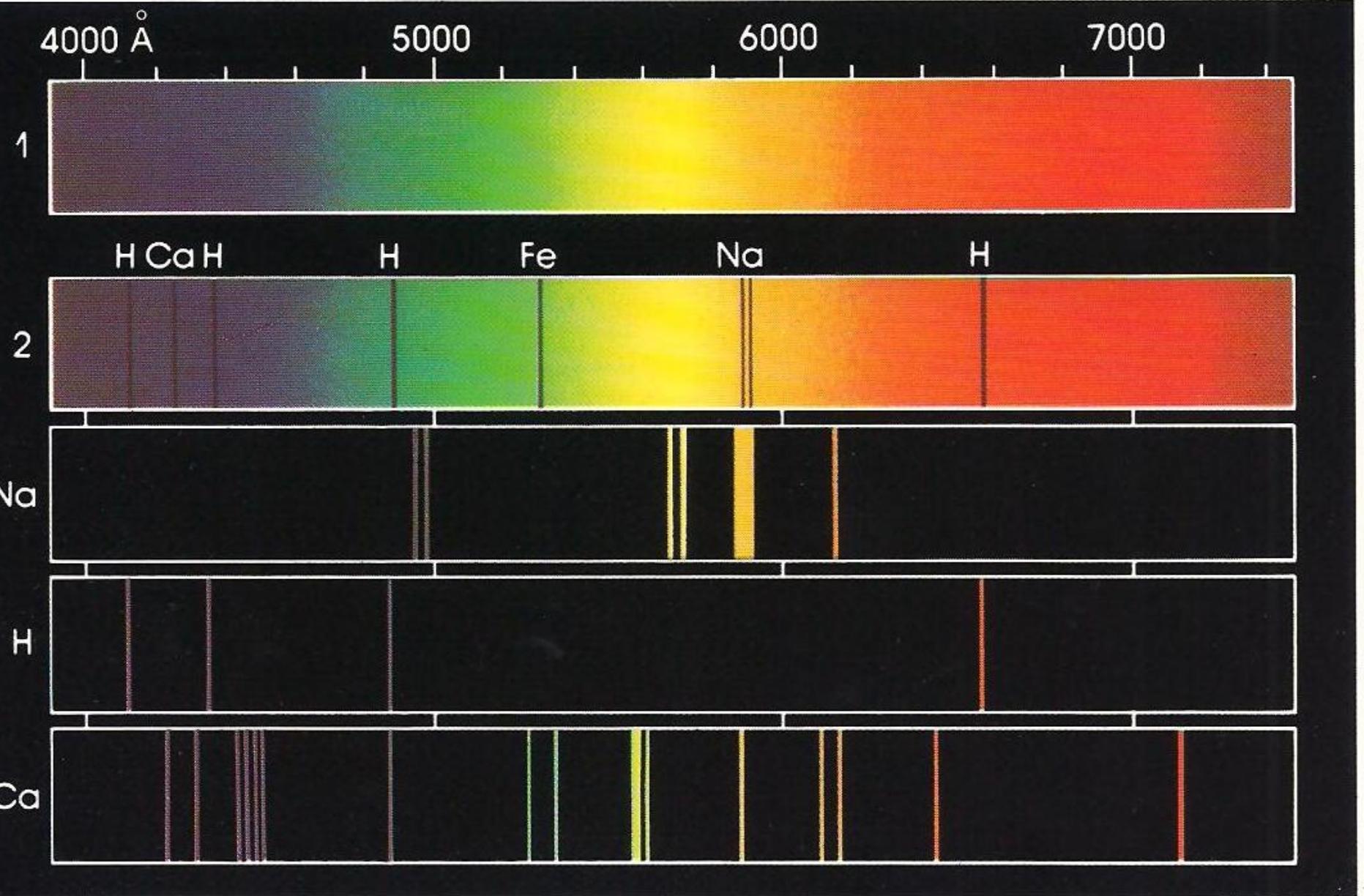
# Espectros de absorção

- Frequências absorvida pelo gás
- Elétron pula para uma órbita (nível) mais energética
- Linhas escuras sobre o fundo claro

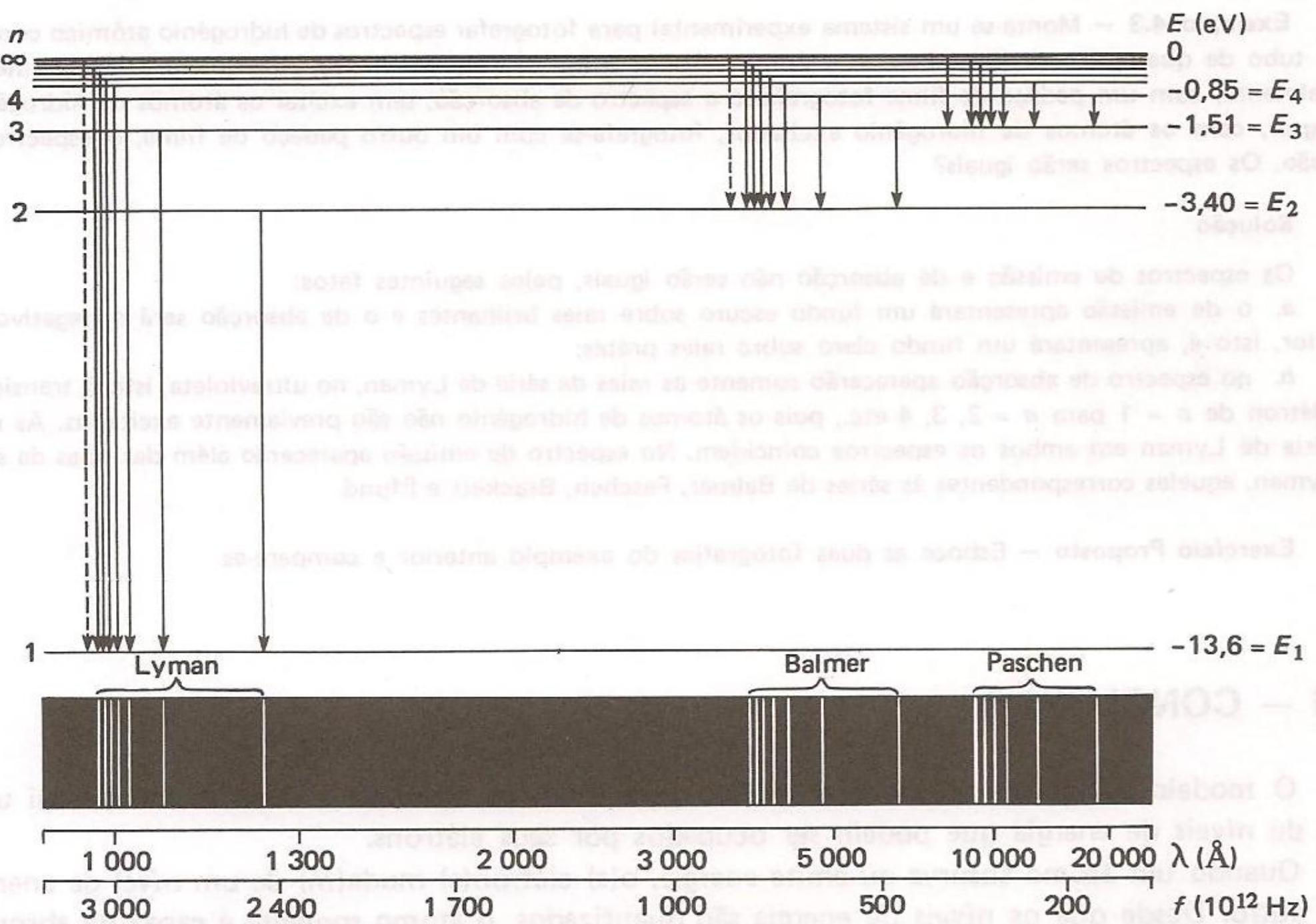


# Emissão e Absorção





(1) Espectro contínuo de um sólido incandescente. (2) Espectro solar, mostrando linhas de absorção (Fraunhofer).  
 (3-5) Espectros de emissão descontínuos de sódio, hidrogênio, cálcio.

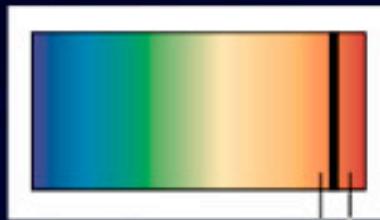




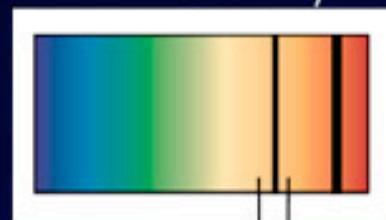
# A STIS absorption spectrum

A beam of light coming to Earth from a distant quasar passes through numerous intervening gas clouds in galaxies and in intergalactic space. These clouds of primeval hydrogen subtract specific colors from the beam. The resulting ‘absorption spectrum,’ recorded by Hubble’s Space Telescope Imaging Spectrograph (STIS), is used to determine the distances and chemical composition of the invisible clouds.

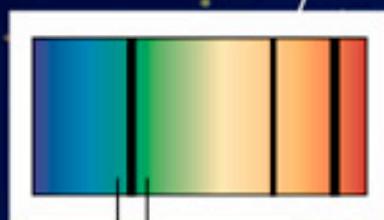
Cumulative  
absorption  
spectra



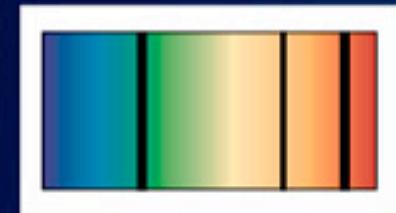
Subtracted  
by cloud 1



Subtracted  
by cloud 2



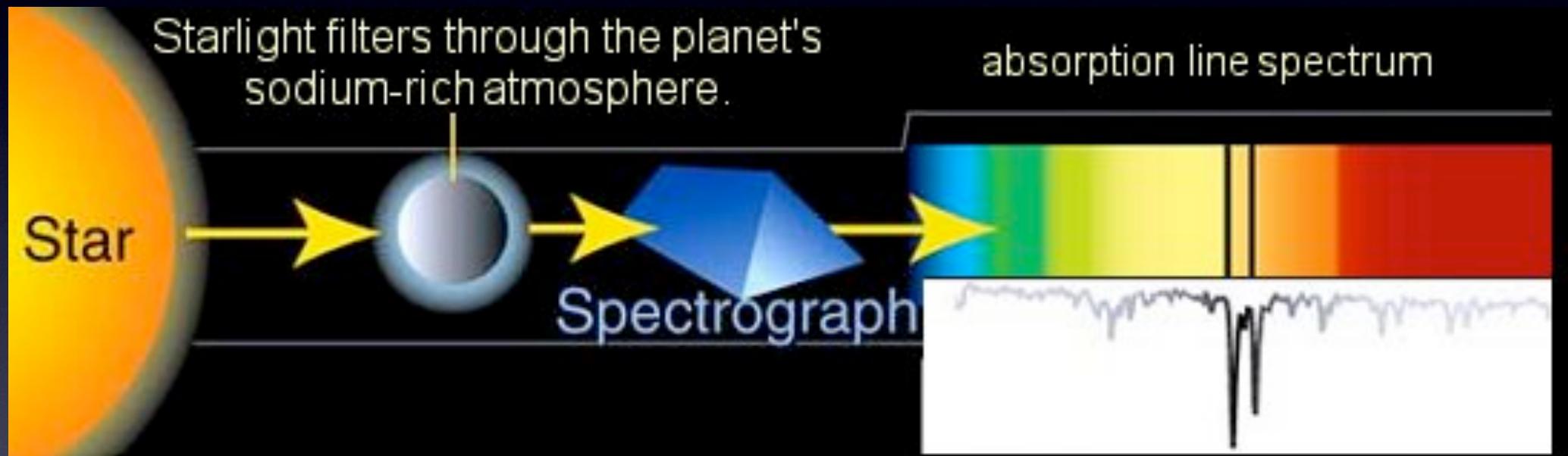
Subtracted  
by cloud 3

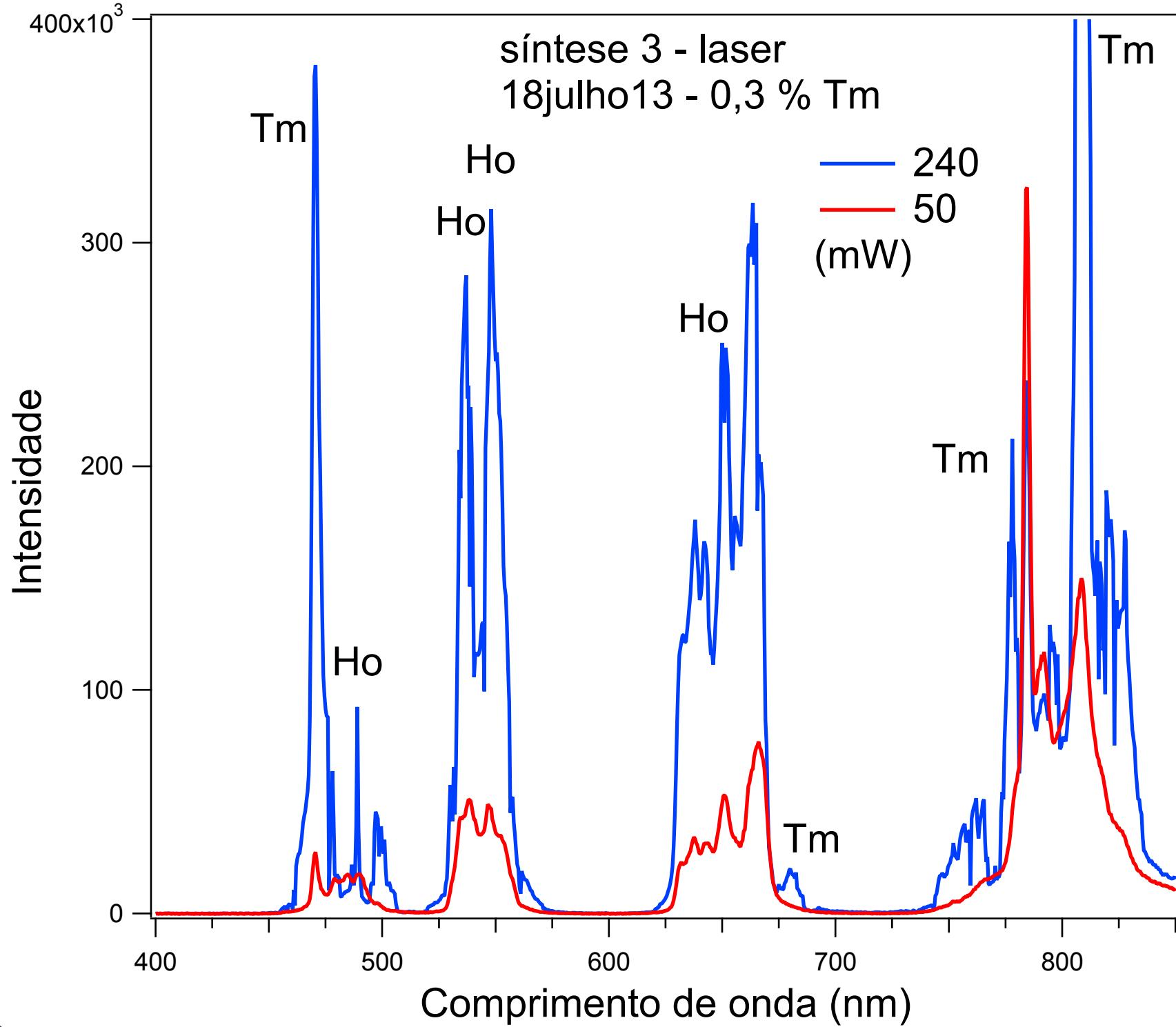


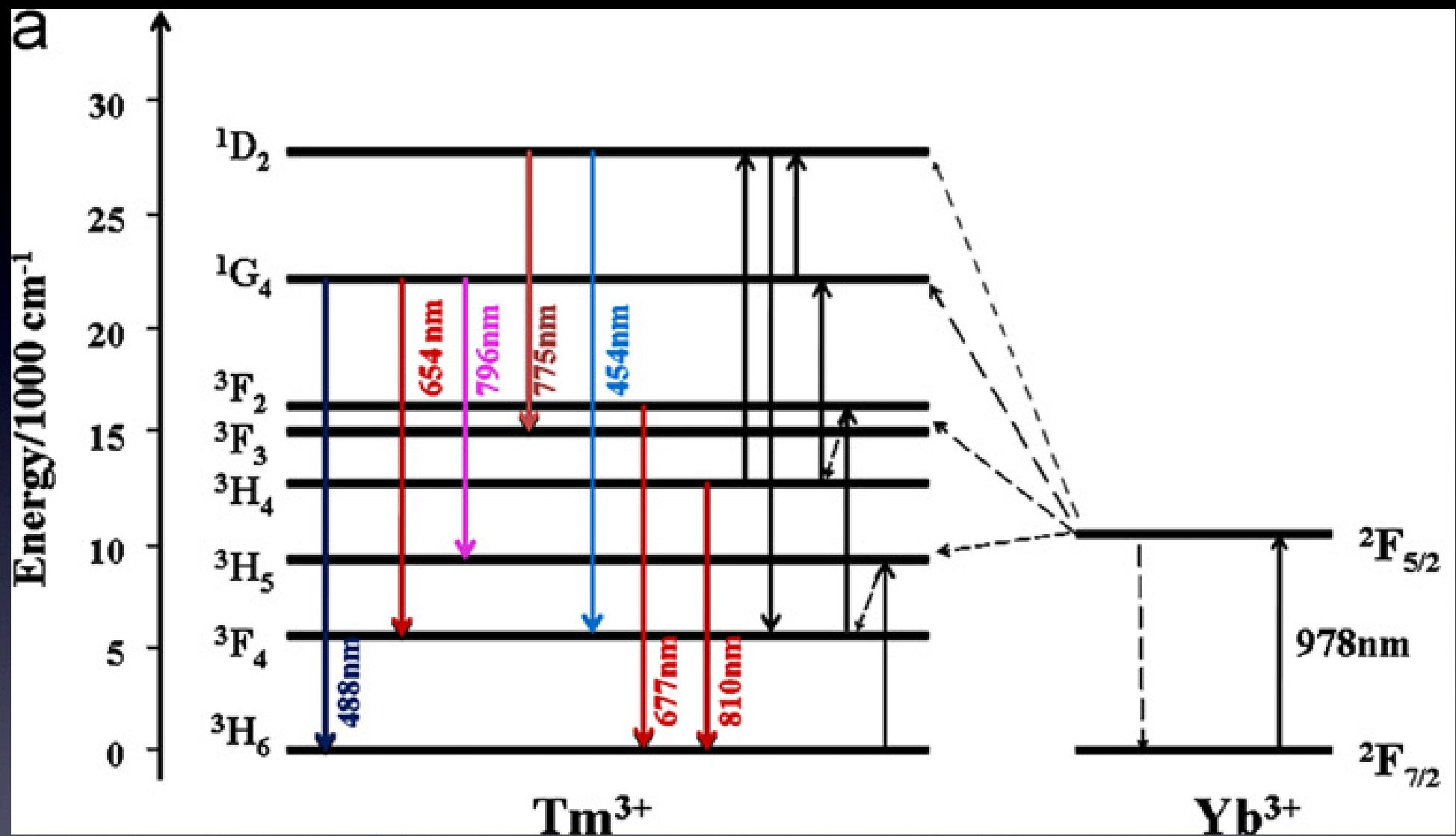
Final absorption  
spectrum  
recorded by STIS

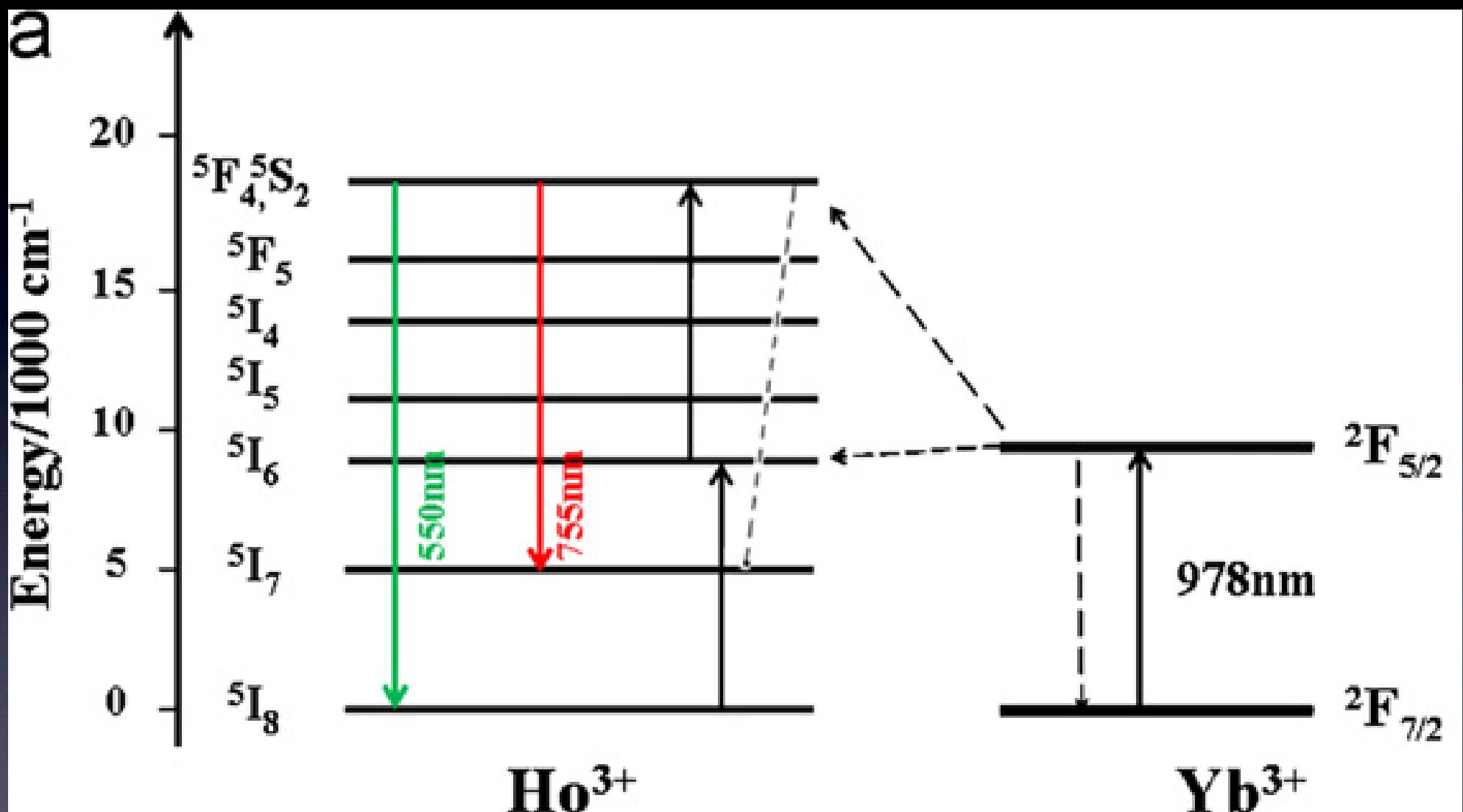


# Emissão e Absorção









# Conclusão

- Modelo do átomo de hidrogênio: é o mesmo utilizado para todos os outros átomos
- Pois, não conseguimos até hoje resolver analiticamente o problema para átomos com mais de um elétron
- Níveis quantizados de energia: energias absorvidas e emitidas também quantizadas
- Ocupação dos níveis: característica de cada átomo

# Conclusão

- Para reduzir a interação entre os átomos, estuda-se os materiais na forma gasosa
- Moléculas também apresentam energias características de absorção e emissão
- Porém, com maior complexidade
- Para sistemas biológicos, absorção é mais utilizada, pois pode ser feita em temperatura ambiente.

