

- Átomos: neutros, contendo elétrons
 $\Rightarrow$ distribuição de cargas positivas e negativas
?

Sabia-se: $m_e \ll m_{\text{átomo}}$, $r_{\text{átomo}} \sim 10^{-10} \text{ m} = \text{\AA}$

- Radiação: $\left\{ \begin{array}{l} \alpha : \text{He}^{++} : \text{maior massa} \\ \beta : e^- \\ \gamma : \text{fótons} \end{array} \right\}$ altas energias

- Experimentos: acesso a distribuição de cargas: espalhamento!
↳ v. slides

$N(\Phi)d\Phi$: número de α 's espalhados entre Φ e $\Phi+d\Phi$.

↳ Modelo de Thomson:

- deflexão máxima $\phi_{\text{max}} \sim 10^{-4} \text{ rad}$

$$- \frac{N(\Phi > 90^\circ)}{N_{\text{total}}} \sim 10^{-3500} !$$

↳ Experimento de Geiger e Marsden (1909):

$$- \frac{N(\Phi > 90^\circ)}{N_{\text{total}}} \sim 10^{-4} !!$$

* estimativa para que se tenha $\phi_{\text{max}} \sim 1 \text{ rad}$:

$$r_{\text{átomo}} \sim 10^{-12} \text{ m} = 10^{-4} \text{\AA}.$$

• Rutherford :

$$r_{\text{núcleo}} < r_{\text{átomo}}$$

distribuição de cargas : elétrons orbitam núcleo positivo.

↳ Espalhamento:

$$N(\Phi) d\Phi = N \cdot \underbrace{\frac{\pi}{8}}_{\substack{\text{átomos} \\ \text{volume}}} \cdot \underbrace{\rho}_{\text{espessura}} \cdot t \cdot \underbrace{\left(\frac{zZe^2}{\frac{1}{2}Mv^2} \right)^2}_{\alpha} \cdot \frac{\sin \Phi d\Phi}{\sin^4(\Phi/2)}$$

distribuição angular de espalhamento,

com menor distância ao núcleo dada por

$$R(\phi) = \frac{zZe^2}{Mv^2} \left(1 + \frac{1}{\sin(\phi/2)} \right)$$

o que resulta em $R(180^\circ) \sim r_{\text{núcleo}} \sim 10^{-4} \text{ \AA} !$

↳ Porém:

e^- 's orbitando núcleo

$\Rightarrow e^-$'s acelerados

$\Rightarrow e^-$'s emitindo radiação e perdendo energia

↳ estimativa de tempo para um e^- colapsar

no núcleo : $t \sim 10^{-11} \text{ s}$

$\therefore$ átomos de Rutherford altamente instável !

- Enquanto isso, experimentos observando espectros atômicos,...
↳ v. slides

↳ Espectros atômicos
discretos
distintos para
diferentes elementos

$$+ E = h\nu \rightarrow \text{energia discretizada ??}$$

↑ Energia
↓ Momento angular ?
relação com
órbitas ?

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$\frac{\text{J} \cdot \text{s}}{\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}} = \frac{(\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2) \cdot \text{s}}{\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}} = \text{MOM. ANGULAR}$$

- Fórmulas empíricas:
↳ v. slides

$$\text{Balmer (1885): } \lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} (\text{\AA})$$

$$\text{Rydberg (~1890): } k = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) :$$

$$\left. \begin{aligned} R_H &= 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \\ &= 1,097 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1} \end{aligned} \right\} \text{ constante de Rydberg.}$$

• Modelo de Bohr:

- POSTULADOS:
- Elétron em órbitas circulares com atração coulombiana ao redor do núcleo.
 - Órbitas restritas às tais que $L = n\hbar : n \in \mathbb{N}^*$.
 - Elétrons não irradiam nessas órbitas, mantendo sua energia constante.
 - Transições (descontinuas) entre órbitas emitem radiação de frequência

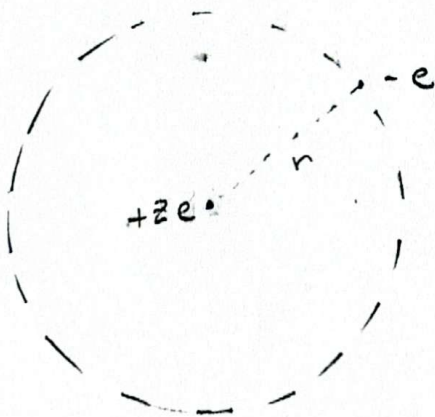
$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

↳ Nas transições:

$$E_i = E_f + h\nu$$

conservação de energia!

↳ Vamos analisar as consequências dos postulados de Bohr para um átomo de único elétron:



$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{F}_{\text{Coulomb}} = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r} \text{ ,} \\ E = \frac{mv^2}{2} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ ,} \\ \vec{L} = n\hbar \text{ .} \end{array} \right.$$

* Introdução: energia e momento angular em coordenadas esféricas.

$$\vec{r} = r \hat{r} : \begin{cases} \hat{r} = \sin\theta \cos\varphi \hat{i} + \sin\theta \sin\varphi \hat{j} + \cos\theta \hat{k} \\ \hat{\theta} = \cos\theta \cos\varphi \hat{i} + \cos\theta \sin\varphi \hat{j} - \sin\theta \hat{k} \\ \hat{\varphi} = -\sin\varphi \hat{i} + \cos\varphi \hat{j} \end{cases}$$

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r}$$

$$= \frac{m}{2} \dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} - \frac{Ze^2}{r} \quad , \quad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m \vec{r} \times \dot{\vec{r}}$$

Em coordenadas esféricas, temos:

$$\begin{aligned} \dot{\vec{r}} &= \dot{r} \hat{r} + r \left(\frac{d\hat{r}}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} + \frac{d\hat{r}}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} \right) \\ &= \dot{r} \hat{r} + r \dot{\theta} \hat{\theta} + r \sin\theta \dot{\varphi} \hat{\varphi}, \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} = \dot{r}^2 + r^2 (\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta \dot{\varphi}^2)$$

$$\begin{aligned} \vec{r} \times \dot{\vec{r}} &= (r \hat{r}) \times (\dot{r} \hat{r} + r \dot{\theta} \hat{\theta} + r \sin\theta \dot{\varphi} \hat{\varphi}) \\ &= r^2 (\dot{\theta} \hat{\varphi} - \sin\theta \dot{\varphi} \hat{\theta}), \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \vec{L} = m r^2 (\dot{\theta} \hat{\varphi} - \sin\theta \dot{\varphi} \hat{\theta}),$$

$$\Rightarrow L^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = m^2 r^4 (\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta \dot{\varphi}^2).$$

$$\therefore \frac{m}{2} \dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \cdot \frac{L^2}{m^2 r^4} \right),$$

$$\Rightarrow E = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Para órbitas esféricas, $\dot{r} = 0$, logo

$$E = \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (*)$$

enquanto

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r} = m \ddot{\vec{r}} \quad (\text{eq. de mov.})$$

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{d}{dt} (\dot{r} \hat{r} + r \dot{\theta} \hat{\theta} + r \sin\theta \dot{\phi} \hat{\phi})$$

$$= \ddot{r} \hat{r} + \dot{r} \left(\frac{d\hat{r}}{d\theta} \dot{\theta} + \frac{d\hat{r}}{d\phi} \dot{\phi} \right) + \dot{r} \dot{\theta} \hat{\theta} + r \ddot{\theta} \hat{\theta} + r \dot{\theta} \left(\frac{d\hat{\theta}}{d\theta} \dot{\theta} + \frac{d\hat{\theta}}{d\phi} \dot{\phi} \right)$$

$$+ \dot{r} \sin\theta \dot{\phi} \hat{\phi} + r \cos\theta \dot{\theta} \dot{\phi} \hat{\phi} + r \sin\theta \ddot{\phi} \hat{\phi} + r \sin\theta \dot{\phi} \left(\frac{d\hat{\phi}}{d\theta} \dot{\theta} + \frac{d\hat{\phi}}{d\phi} \dot{\phi} \right)$$

$$= \ddot{r} \hat{r} + \dot{r} \dot{\theta} \hat{\theta} + \dot{r} \dot{\phi} \sin\theta \hat{\phi} + \dot{r} \dot{\theta} \hat{\theta} + r \ddot{\theta} \hat{\theta} + r \dot{\theta}^2 (-\hat{r}) + r \dot{\theta} \dot{\phi} \cos\theta \hat{\phi}$$

$$+ \dot{r} \sin\theta \dot{\phi} \hat{\phi} + r \cos\theta \dot{\theta} \dot{\phi} \hat{\phi} + r \sin\theta \ddot{\phi} \hat{\phi} + r \sin\theta \dot{\phi}^2 \underbrace{(-\cos\theta \hat{r} - \sin\theta \hat{\theta})}_{= -\hat{r} \sin\theta - \hat{\theta} \cos\theta}$$

$$\Rightarrow \ddot{\vec{r}} = \ddot{r} (\hat{r}) + \dot{r} (2\dot{\theta} \hat{\theta} + 2\sin\theta \dot{\phi} \hat{\phi})$$

$$+ r (\ddot{\theta} \hat{\theta} - r \dot{\theta}^2 \hat{r} + 2\cos\theta \dot{\theta} \dot{\phi} \hat{\phi} + \sin\theta \ddot{\phi} \hat{\phi} - \sin^2\theta \dot{\phi}^2 \hat{r} - \sin\theta \cos\theta \dot{\phi}^2 \hat{\theta})$$

portanto para órbitas esféricas ($\ddot{r} = 0$ e $\dot{r} = 0$) as equações de movimento são:

$$\begin{cases} \ddot{\theta} - \sin\theta \cos\theta \dot{\varphi}^2 = 0 \\ \ddot{\varphi} + 2\cot\theta \dot{\theta} \dot{\varphi} = 0 \\ r(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta \dot{\varphi}^2) = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}, \end{cases}$$

$$\Rightarrow r \cdot \frac{L^2}{m^2 r^4} = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2} = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot \frac{1}{m r},$$

e aplicando em (*):

$$E = \frac{L^2}{2mr^2} = m r \cdot \frac{L^2}{m^2 r^3} = \frac{L^2}{mr^2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right),$$

$$\Rightarrow \underline{E = -\frac{1}{2} \frac{L^2}{mr^2}} \quad \forall \text{ órbita esférica!}$$

enquanto $L^2 = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} m r$ e, aplicando a quantização do

momento angular, $L = n\hbar$, temos:

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0}{ze^2} \cdot \frac{L^2}{m} \Rightarrow r_n = \underbrace{\left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} \right)}_{a_0: \text{raio de Bohr!}} \cdot \frac{n^2}{z}$$

para os
raios das
órbitas!

Aplicando esta expressão, temos para o valor da energia correspondente a cada órbita:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{L^2}{m r^2} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{z e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{m r}{m r^2}$$

$$= -\frac{1}{2} \cdot \frac{z e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{z}{n^2},$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{m}{2} \left(\frac{z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \cdot \frac{1}{n^2} \quad ; \quad \text{níveis de energia !!}$$

↓
 $E_n < 0 \quad \forall n$:
 energia de ligação!