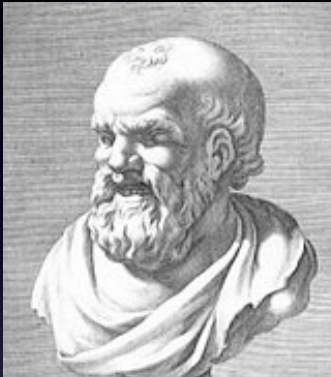


# O que é um átomo?



**Demócrito** (séc.V AC):  
a menor parcela indivisível da matéria



**Robert Boyle** (1661):  
toda a matéria resulta da combinação de  
diferentes corpúsculos



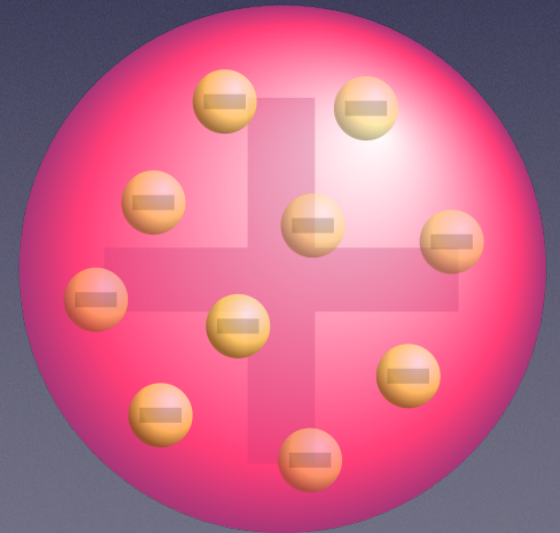
**John Dalton** (1805):  
os elementos são formados por átomos  
do mesmo tipo

# O que é um átomo?

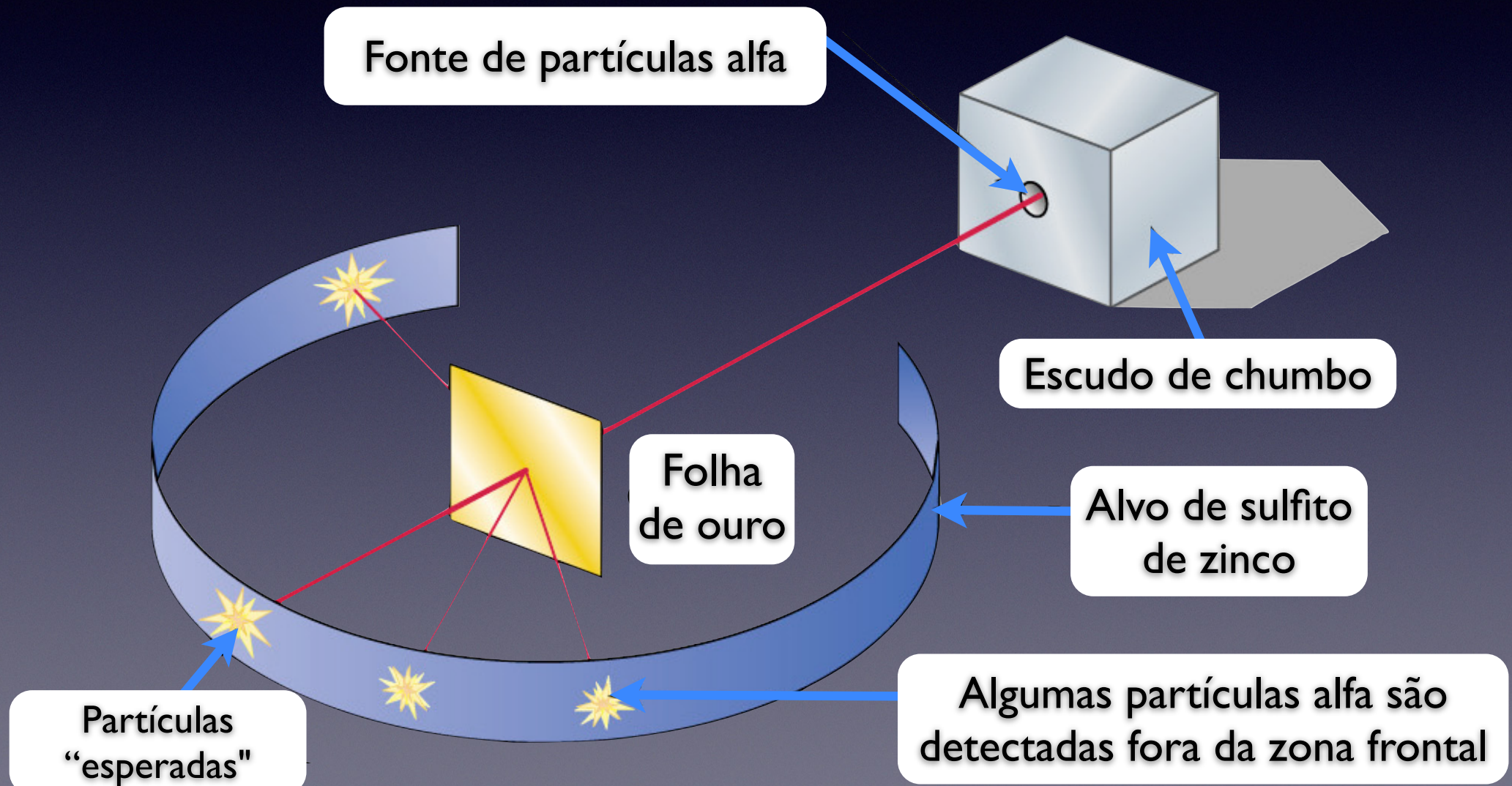


**J. J. Thomson (1897):**  
os átomos contêm elétrons...

Modelo do bolo de ameixas



# A experiência de Hans Geiger e Ernest Marsden (1909)

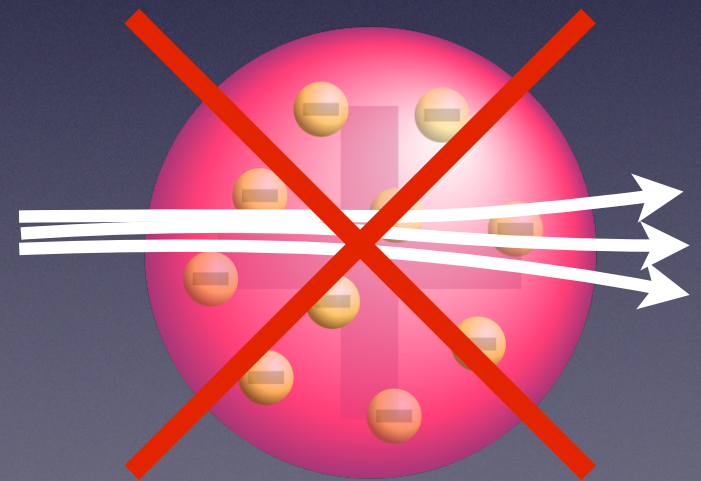
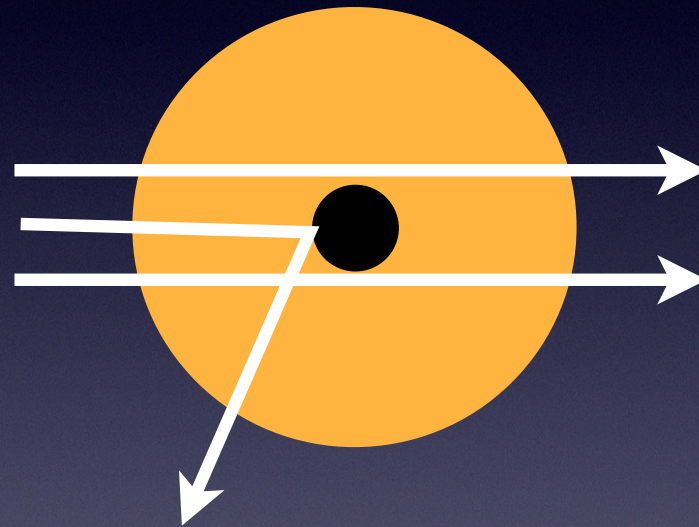


# A interpretação de Ernest Rutherford (1911)



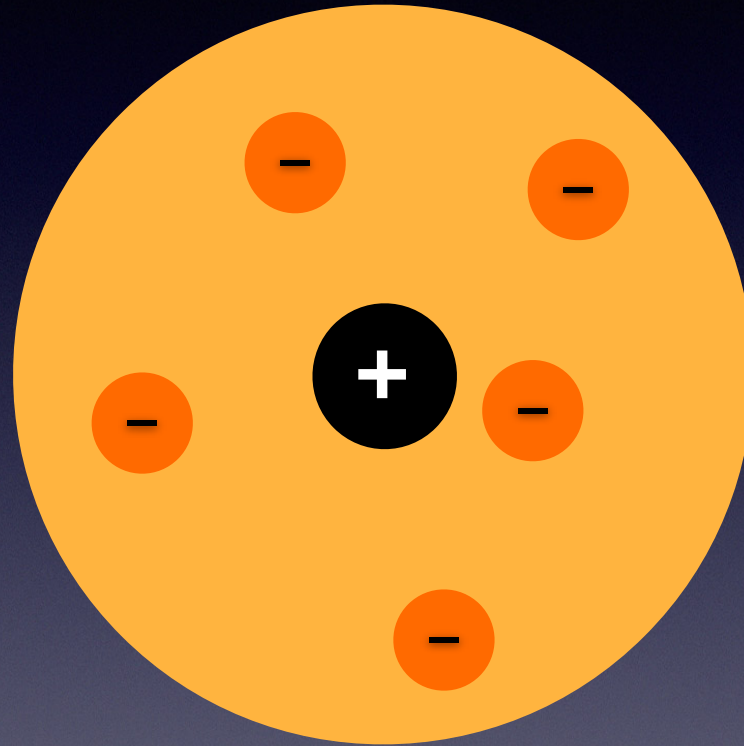
Ernest Rutherford  
1871-1937

Manchester / Cambridge



“Foi tão inesperado como ver uma bala de canhão fazer ricochete num lenço de papel...”

# Modelo de Rutherford



Com esta distribuição de carga positiva os electrões não podem estar estacionários

# Modelo de Rutherford

Os elétrons movem-se em torno do núcleo em órbitas “planetárias”

$$F_c = F_e$$

$$E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$$

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$$

Para o hidrogénio ( $q=e$ )...

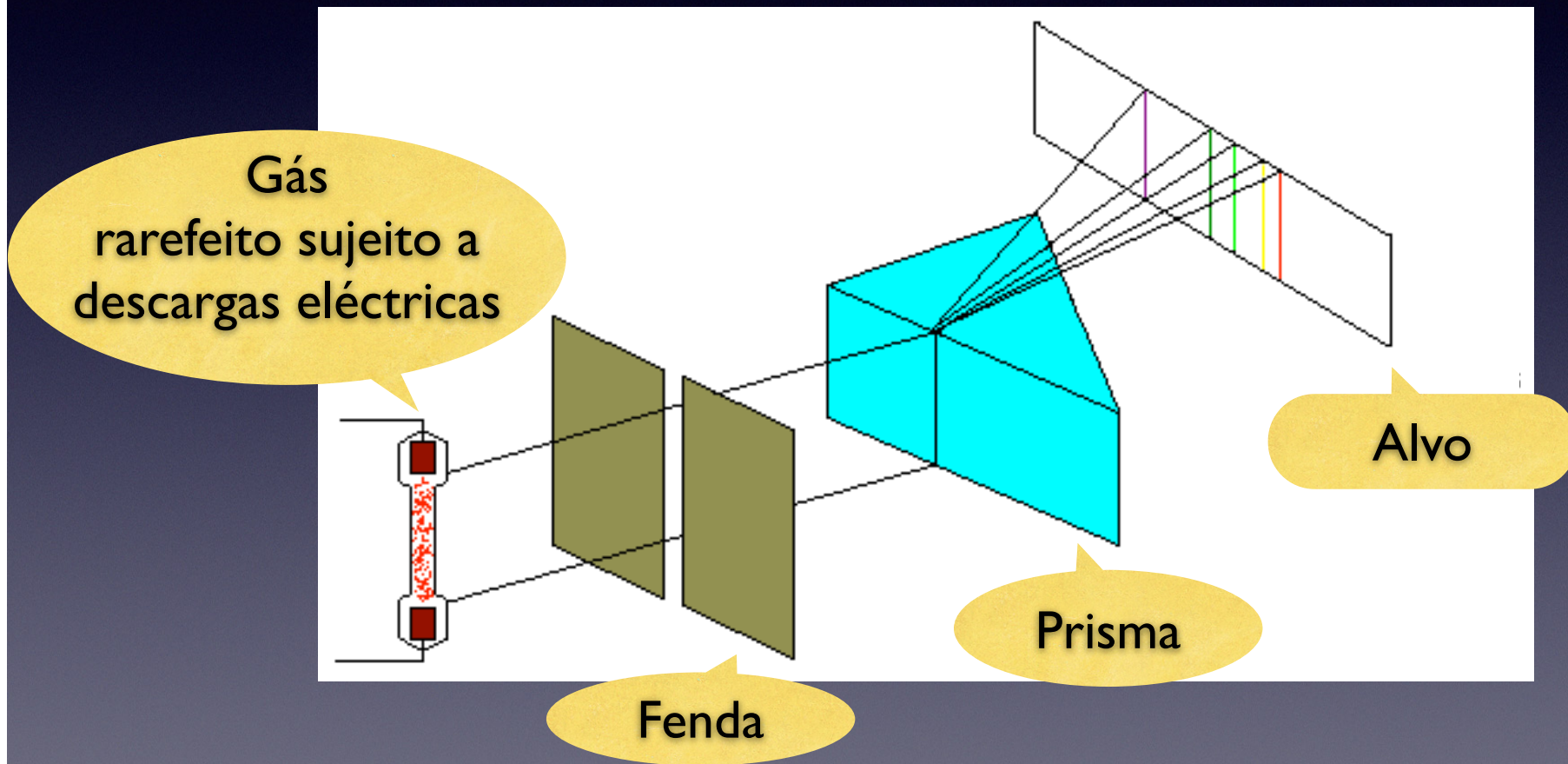
$$v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{mr}}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$$

# Modelo de Rutherford

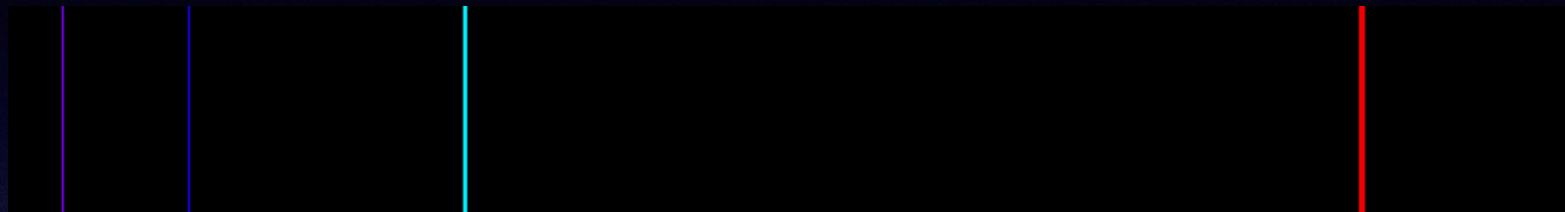
- De acordo com as leis de Maxwell, uma carga acelerada emite radiação, perdendo energia.
- Como os elétrons descrevem órbitas circulares/elípticas, deviam perder energia continuamente até “caírem” no núcleo...

# Espetros atómicos

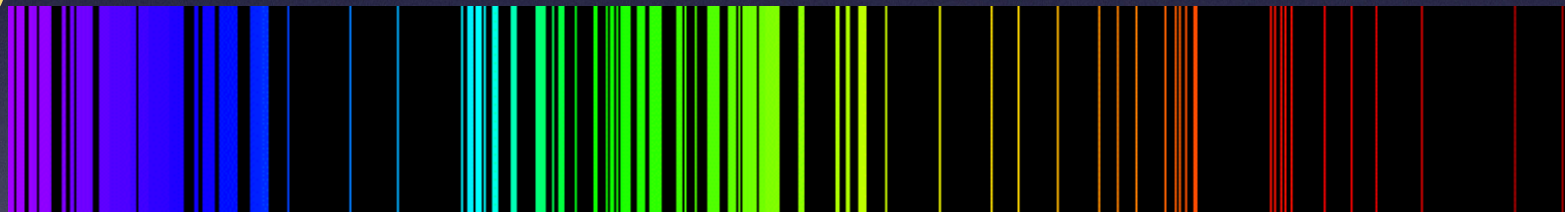


# Espetros atômicos

Emissão



Hidrogénio



Ferro

Absorção



Sol

# Série de Balmer



Hidrogénio

Parte **visível** do espectro de emissão:

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

Constante de Rydberg

$$R = 1,0973731568525 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

# Séries de Lyman, Paschen, Brackett e Pfund

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

Lyman **Ultravioleta**

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

Paschen **Infravermelho**

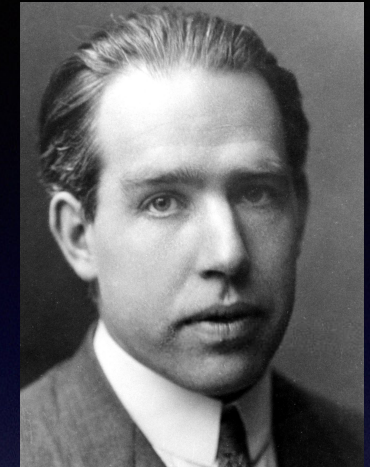
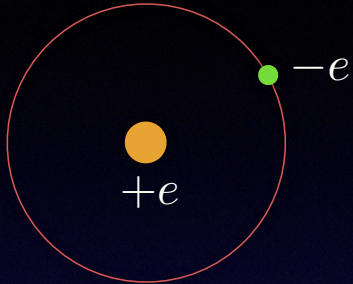
$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots$$

Brackett **Infravermelho**

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

Pfund **Infravermelho**

# Modelo de Bohr



Niels  
(1885-1962)

$$v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mr}}$$

$$E = E_c + E_p = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

## Postulados de Bohr:

1- No átomo existem “estados estacionários”, onde o elétron tem energia bem definida na sua órbita, sem degradação.

2- As órbitas permitidas são aquelas para as quais

$$l = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = mvr = m \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mr}} r = e \sqrt{\frac{mr}{4\pi\epsilon_0}}$$

# Modelo de Bohr

$$l = mvr = e\sqrt{\frac{mr}{4\pi\epsilon_0}} \Rightarrow r = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2m} l^2$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Ze^2m} n^2$$

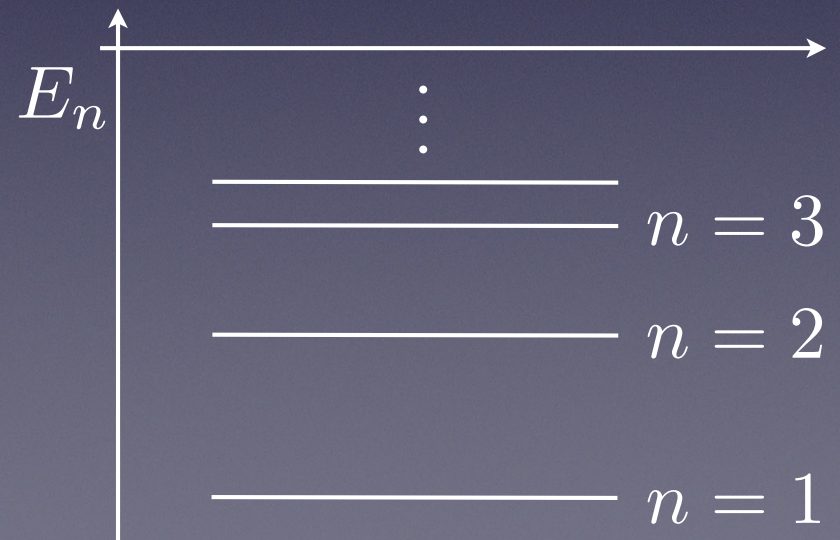
Se o núcleo tiver carga  $Ze$  e um electrão tiver carga  $e$ :

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0}{Ze^2m} l^2$$

$$l = n\hbar$$

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2l^2}$$

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$



# Modelo de Bohr

- A perda de radiação na órbita fica “proibida” nos estados estacionários, ditados pela regra de quantização do momento angular
- As séries de Lyman, Balmer, etc. são explicadas

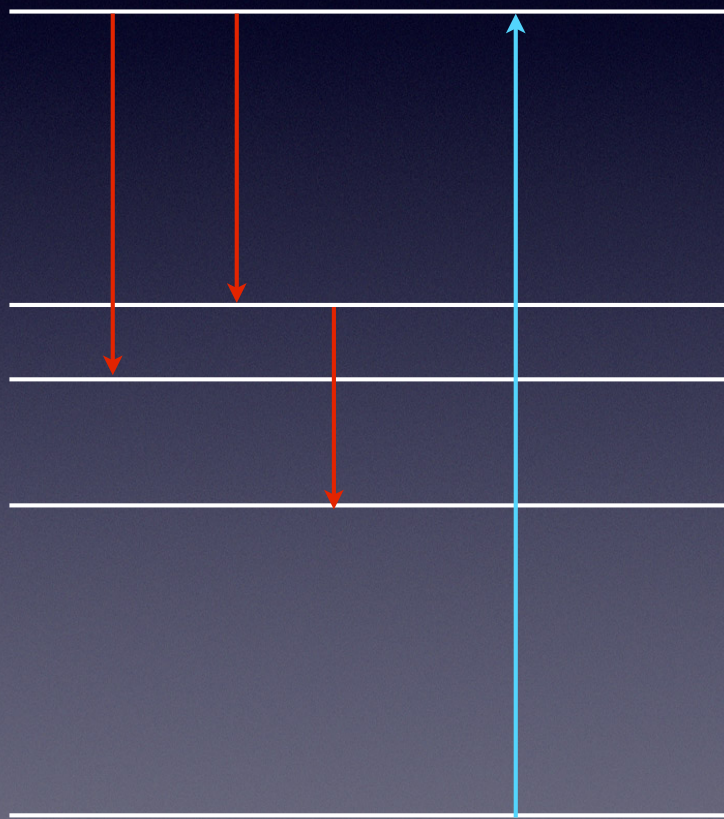
$$E_n - E_2 = \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2h^3c} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

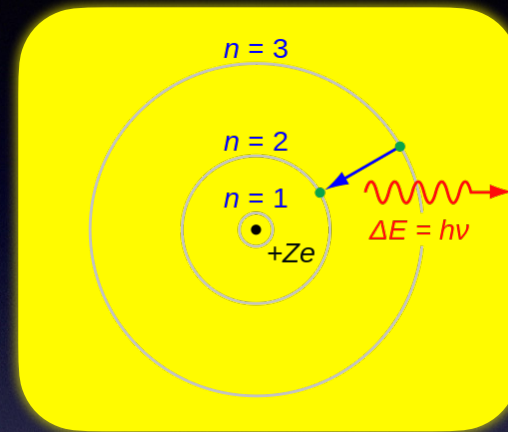
Constante de Rydberg

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

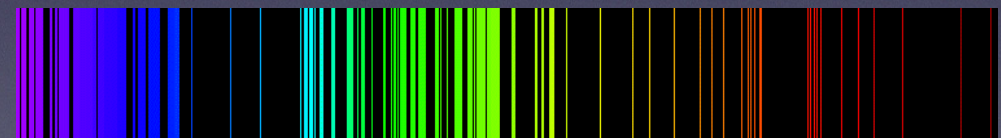
# Níveis discretos de energia



E



Hidrogénio



Ferro



Sol

# Regras de quantização de Bohr-Sommerfeld

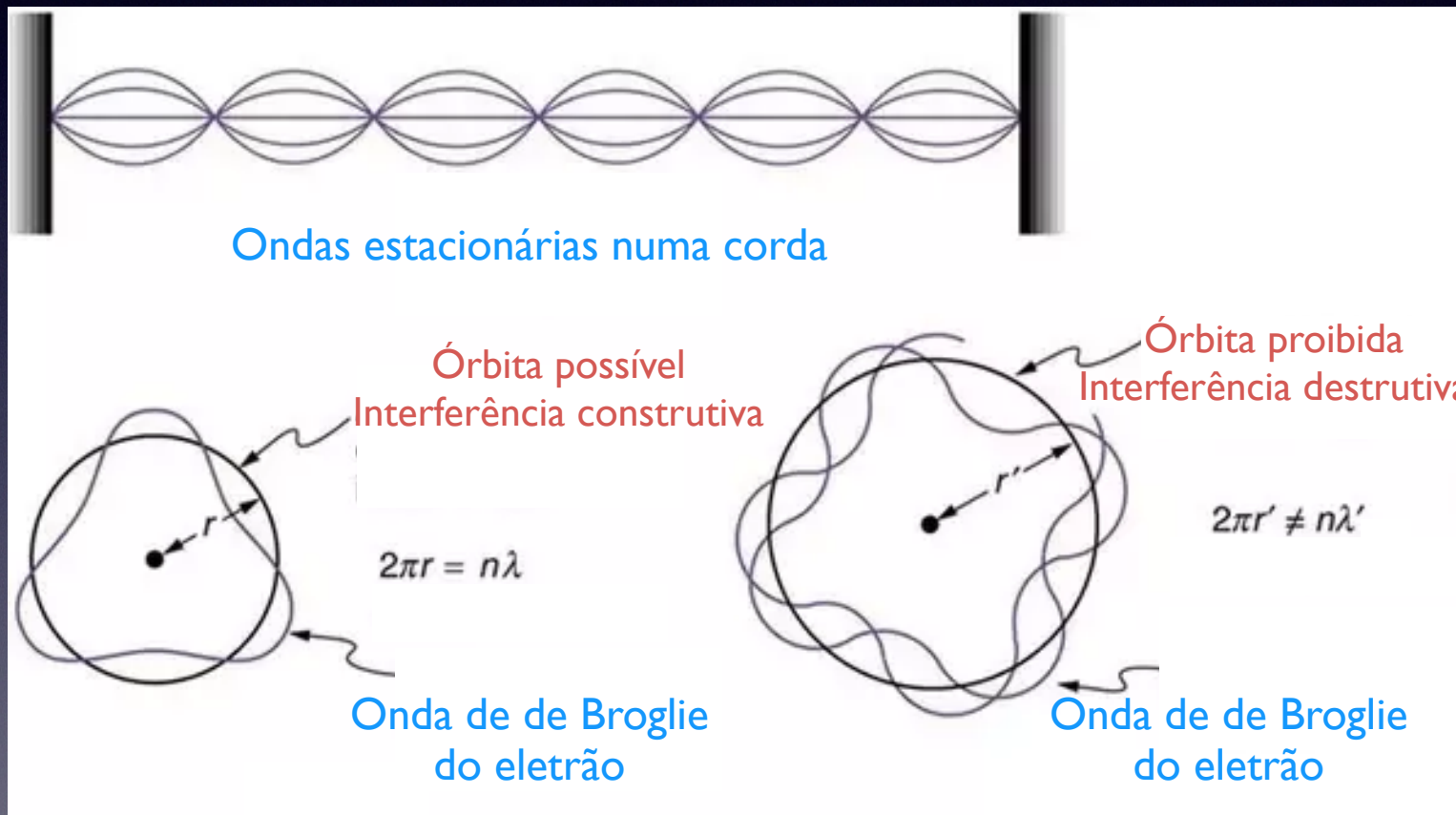
“Ação”  $\oint p dq = nh$

The diagram illustrates the derivation of the Bohr-Sommerfeld quantization rule. It starts with the action principle  $\oint p dq = nh$  and shows how it leads to the quantization of angular momentum  $l = n\hbar$ , which is equivalent to  $mvR = n\hbar$  and  $pR = n\frac{h}{2\pi}$ . Simultaneously, the de Broglie relation  $\lambda = \frac{h}{p}$  is used to express the action principle as  $p2\pi R = nh$ , which is equivalent to  $\frac{h}{\lambda}2\pi R = nh$  and  $2\pi R = n\lambda$ . Red arrows indicate the flow from the action principle to the angular momentum equations, and yellow arrows indicate the flow from the angular momentum equations to the de Broglie relation equations.

$$l = n\hbar \quad \longrightarrow \quad mvR = n\hbar \quad \longrightarrow \quad pR = n\frac{h}{2\pi}$$
$$p2\pi R = nh \quad \longrightarrow \quad \frac{h}{\lambda}2\pi R = nh \quad \longrightarrow \quad 2\pi R = n\lambda$$

Relação de “de Broglie”

# Estados estacionários e “onda de de Broglie”



# Princípio da correspondência

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Ze^2m}n^2$$

$$r_n = \frac{\epsilon_0\hbar^2}{\pi me^2}n^2$$

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0mr}}$$

$$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{\sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0mr_n}}}{2\pi r_n} = \sqrt{\frac{e^2}{16\pi^3\epsilon_0mr_n^3}} = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2\hbar^3n^3}$$

Frequência “orbital” do electrão



# Princípio da correspondência

Qual é a frequência da radiação emitida na transição entre dois níveis próximos com números quânticos “grandes”?

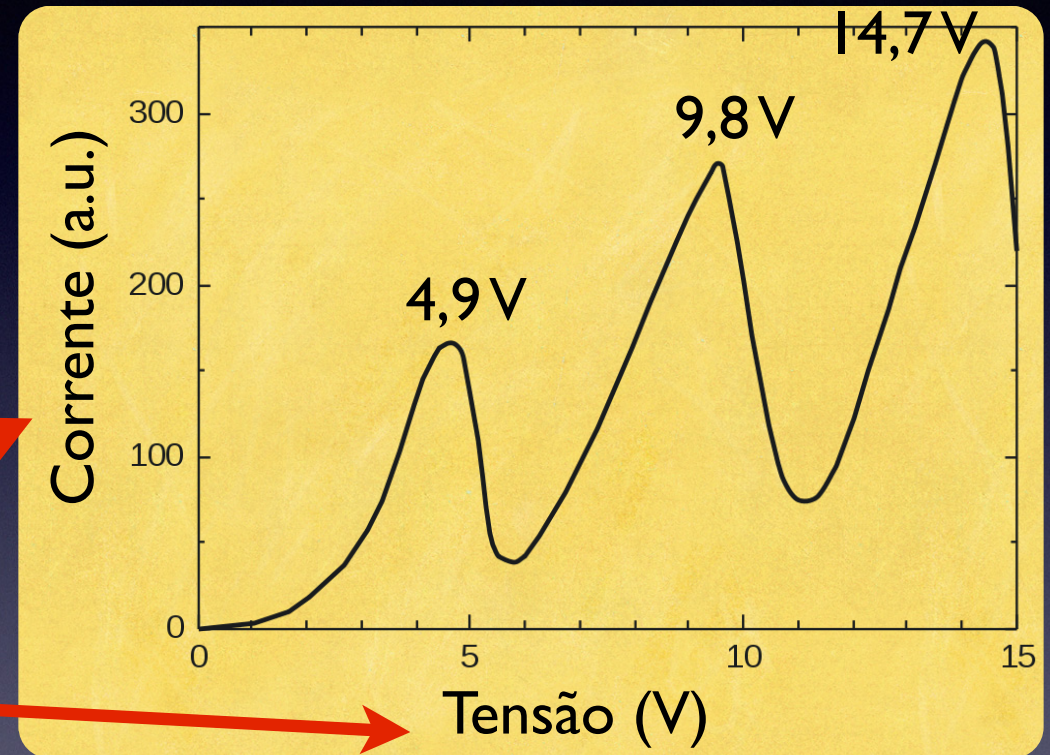
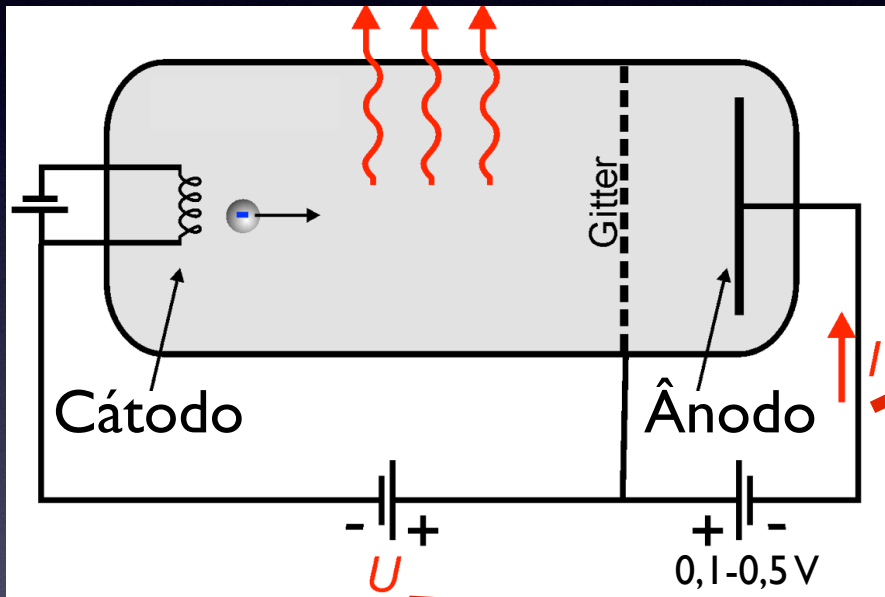
$$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^3 n^3} \quad \leftarrow \quad \text{eletromagnetismo clássico}$$

$$\text{Bohr: } \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n'} - \frac{1}{n} \right) \quad \nu = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

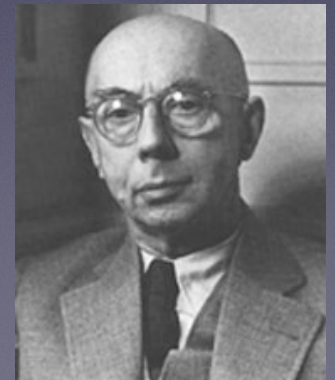
$$\nu \approx \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^3 n^3} \quad \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} = \frac{2n-1}{(n-1)^2 n^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n^3}$$

**Para grandes números quânticos, a mecânica quântica prediz o mesmo que a mecânica clássica**

# Experiência de Franck-Hertz



James Franck  
1882-1964

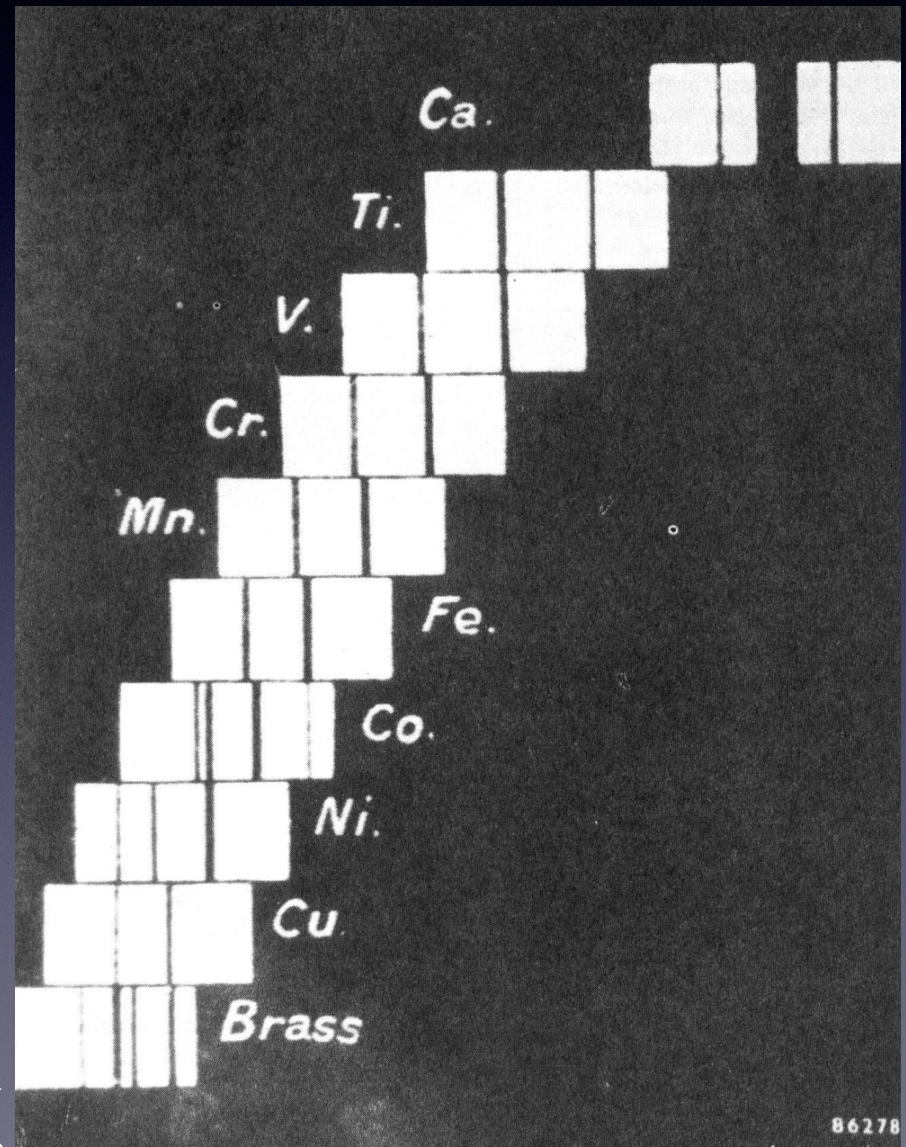


Gustav L. Hertz  
1887-1975

# Lei de Moseley

$Z$  = número atômico, define a posição do elemento na tabela periódica

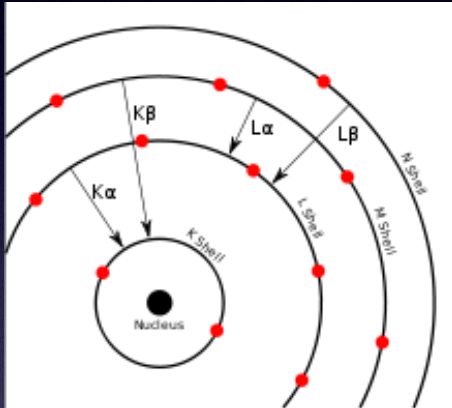
Há alguma relação simples entre número atômico e massa atômica?



Linhas de emissão de raios X

# Lei de Moseley

Frequências de emissão de RX:  $\sqrt{f} \propto Z$



$$f = \alpha(Z - \beta)^2$$

$$\alpha = \frac{3}{4}Rc = 2.47 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

$$\beta \sim 1$$

para as riscas  $K\alpha$

$$n = 2 \rightarrow n = 1$$

constant	$c$	299 792 458 m s <sup>-1</sup>	(exact)
	$h$	6.626 01 × 10 <sup>-34</sup> J s	( $h = h/2\pi$ )
	$e$	1.602 2 × 10 <sup>-19</sup> C	
	$m_p$	1.672 6 × 10 <sup>-27</sup> kg	
	$m_e$	9.109 4 × 10 <sup>-31</sup> kg	
	$m_p c^2$	0.5110 MeV	
	$m_e c^2$	0.5110 MeV	
	$\alpha$	1/137.036	
	$R_\infty$	10 973 732 m <sup>-1</sup>	
	$R_\infty c$	3.289 84 × 10 <sup>15</sup> Hz	
	$R_\infty hc$	13.6057 eV	
	$k$	1.3807 × 10 <sup>-23</sup> J K <sup>-1</sup>	

VIA	VIIA	VIIIA	IB	IIB
24 <sup>52</sup> Cr	25 <sup>55</sup> Mn	26 <sup>56</sup> Fe	27 <sup>59</sup> Co	28 <sup>58</sup> Ni
Chromium	Manganese	Iron	Cobalt	Nickel
51.9961	54.93805	55.845	58.93320	58.6934
[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>
6.7665	7.4340	7.9024	7.8810	7.6398
2 <sup>98</sup> Mo	43 <sup>98</sup> Tc	44 <sup>101</sup> Ru	45 <sup>101</sup> Rh	46 <sup>106</sup> Pd
Molybdenum	Technetium	Ruthenium	Rhodium	Palladium
95.94	(98)	101.07	102.90550	106.42
[Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	[Kr]4d <sup>6</sup> 5s <sup>2</sup>	[Kr]4d <sup>7</sup> 5s <sup>1</sup>	[Kr]4d <sup>8</sup> 5s <sup>2</sup>
7.0204	7.28	7.3605	7.4589	8.3369

$$m_{Co} = 58,93320 \text{ u}$$

$$m_{Ni} = 58,6934 \text{ u}$$



Henry Moseley  
1887-1915

Rutherford (1919): protão