



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS – UNICAMP

FACULDADE DE TECNOLOGIA



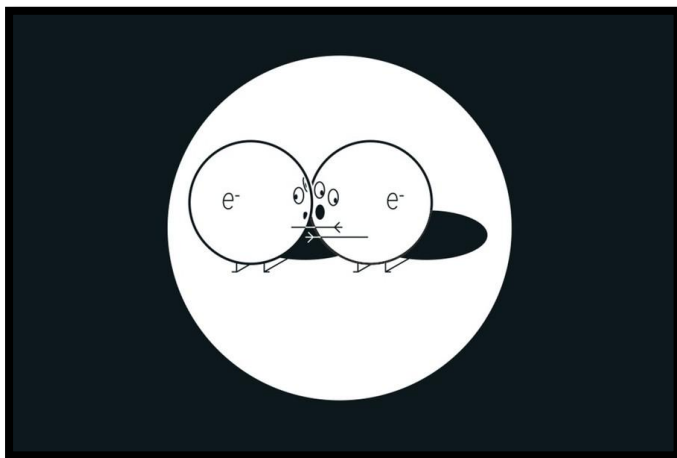
TEMA 2

Física Moderna: “Átomo de Bohr”

Prof. Dr. Yuri Alexandre Meyer

Nobel de Física 2023 vai para três cientistas com estudos que exploram o mundo dos elétrons

Pierre Agostini, Ferenc Krausz e Anne L'Huillier realizaram experimentos que deram à humanidade novas ferramentas para explorar o mundo dos elétrons dentro dos átomos e moléculas. L'Huillier recebeu a notícia enquanto dava aula. Após o anúncio, ela voltou para sala.

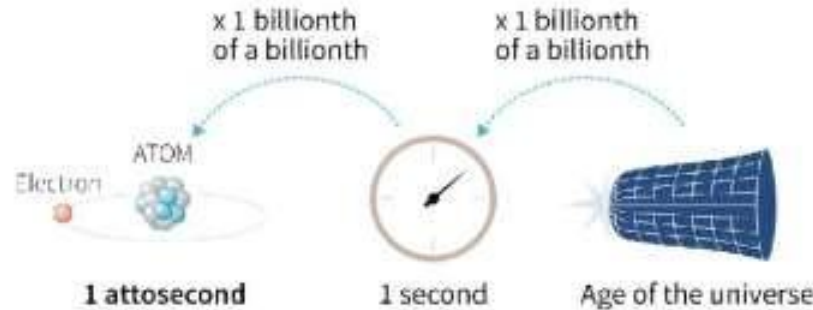




Nobel Prize for physics 2023



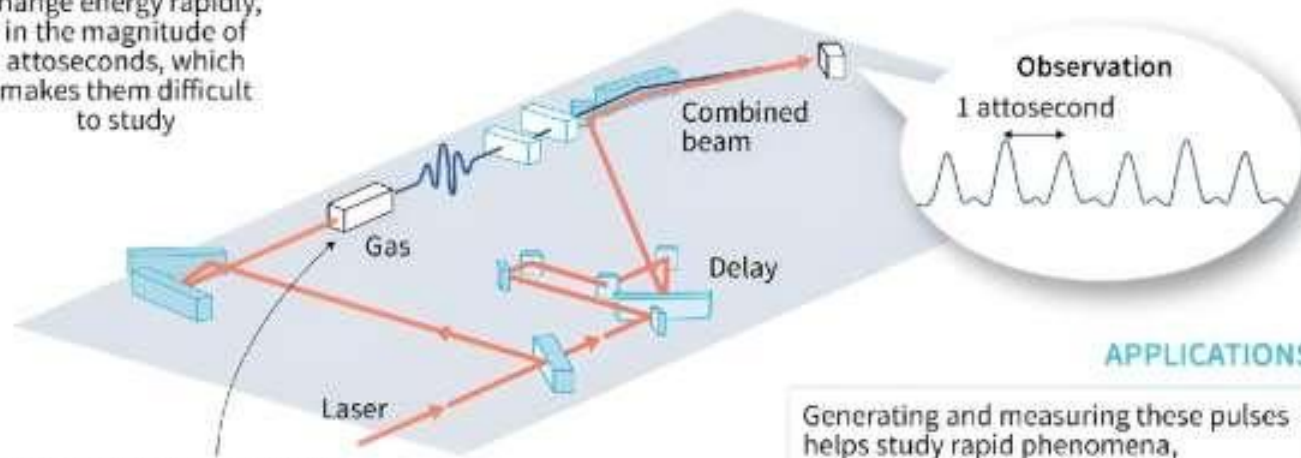
France's Pierre Agostini, Hungarian-Austrian Ferenc Krausz and French-Swedish Anne L'Huillier for research into tools for exploring electrons inside atoms and molecules



1 attosecond
Electrons move or change energy rapidly, in the magnitude of attoseconds, which makes them difficult to study

DISCOVERY

The three physicists recreated attosecond light pulses by shining laser light through a gas, making it possible to study such rapid movements

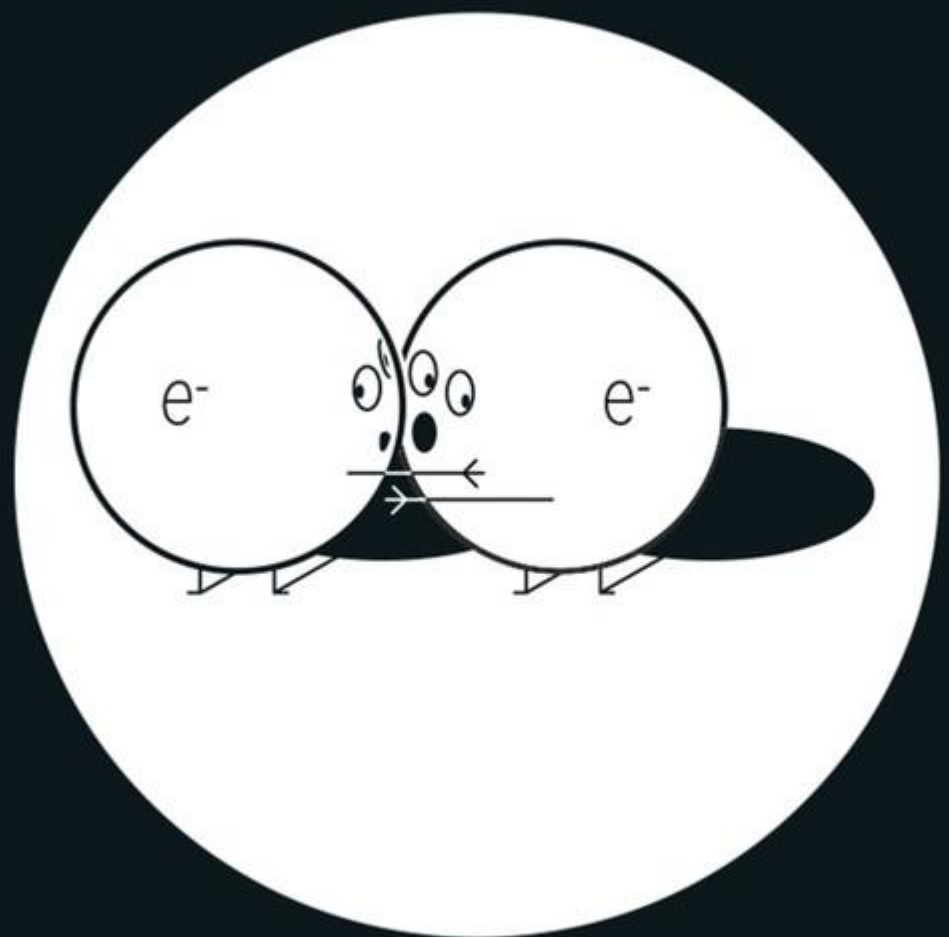


When laser light is transmitted through a gas, ultraviolet overtones arise from atoms in the gas. Under the right conditions their cycles coincide, forming concentrated attosecond pulses

APPLICATIONS

Generating and measuring these pulses helps study rapid phenomena, used for

- observing the movement of electrons
- rapidly transforming insulators into conductors
- identifying molecules, such as in medical diagnostics

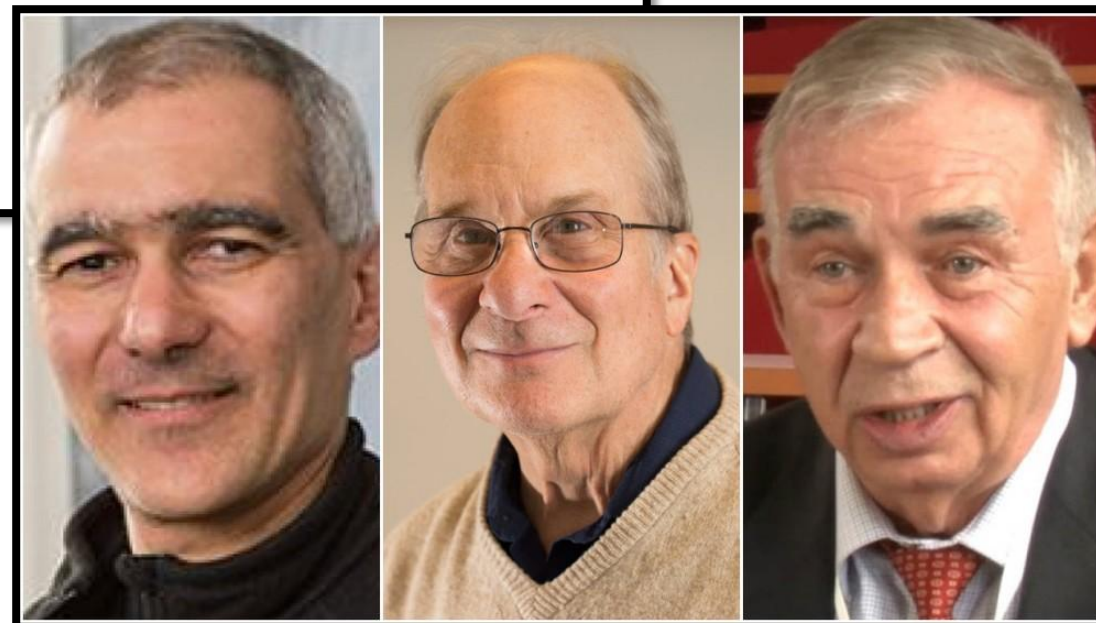


Trio leva Nobel por pesquisa sobre pontos quânticos; nomes de premiados vazaram

Moungi Bawendi, Louis Brus e Alexei Ekimov foram os ganhadores. Neste ano, comunicado à imprensa foi emitido antes do anúncio oficial com o nome dos vencedores. Ganhador negou ter sido avisado antes do anúncio.

Por g1

04/10/2023 06h49 · Atualizado há uma hora



ENTENDA O TRABALHO CIENTÍFICO QUE LEVOU AO NOBEL DE QUÍMICA

Tecnologia é usada em TVs de LED e exames médicos com imagens



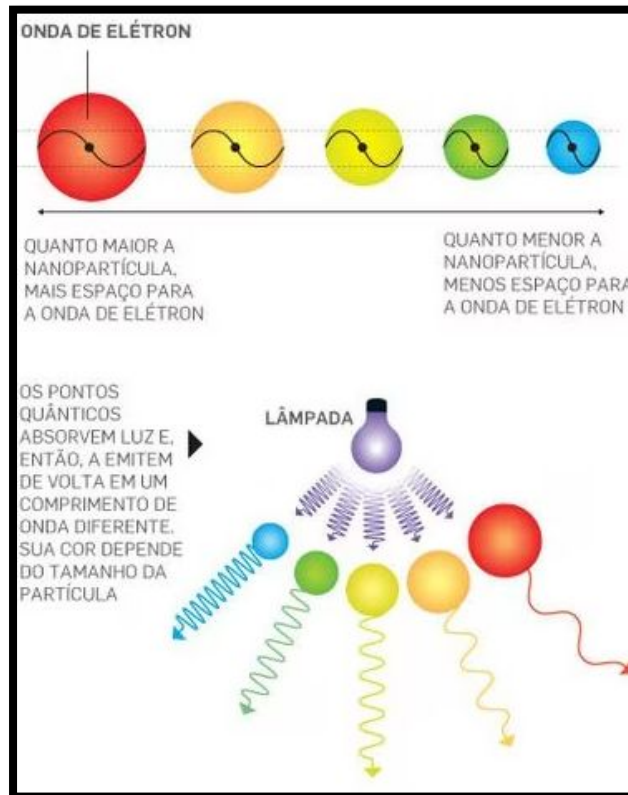
UM PONTO QUÂNTICO É UM CRISTAL FORMADO POR APENAS ALGUNS MILHARES DE ÁTOMOS. EM TERMOS DE TAMANHO, UM PONTO QUÂNTICO ESTÁ PARA UMA BOLA DE FUTEBOL ASSIM COMO UMA BOLA DE FUTEBOL ESTÁ PARA O PLANETA TERRA

O efeito quântico surge quando as partículas encolhem

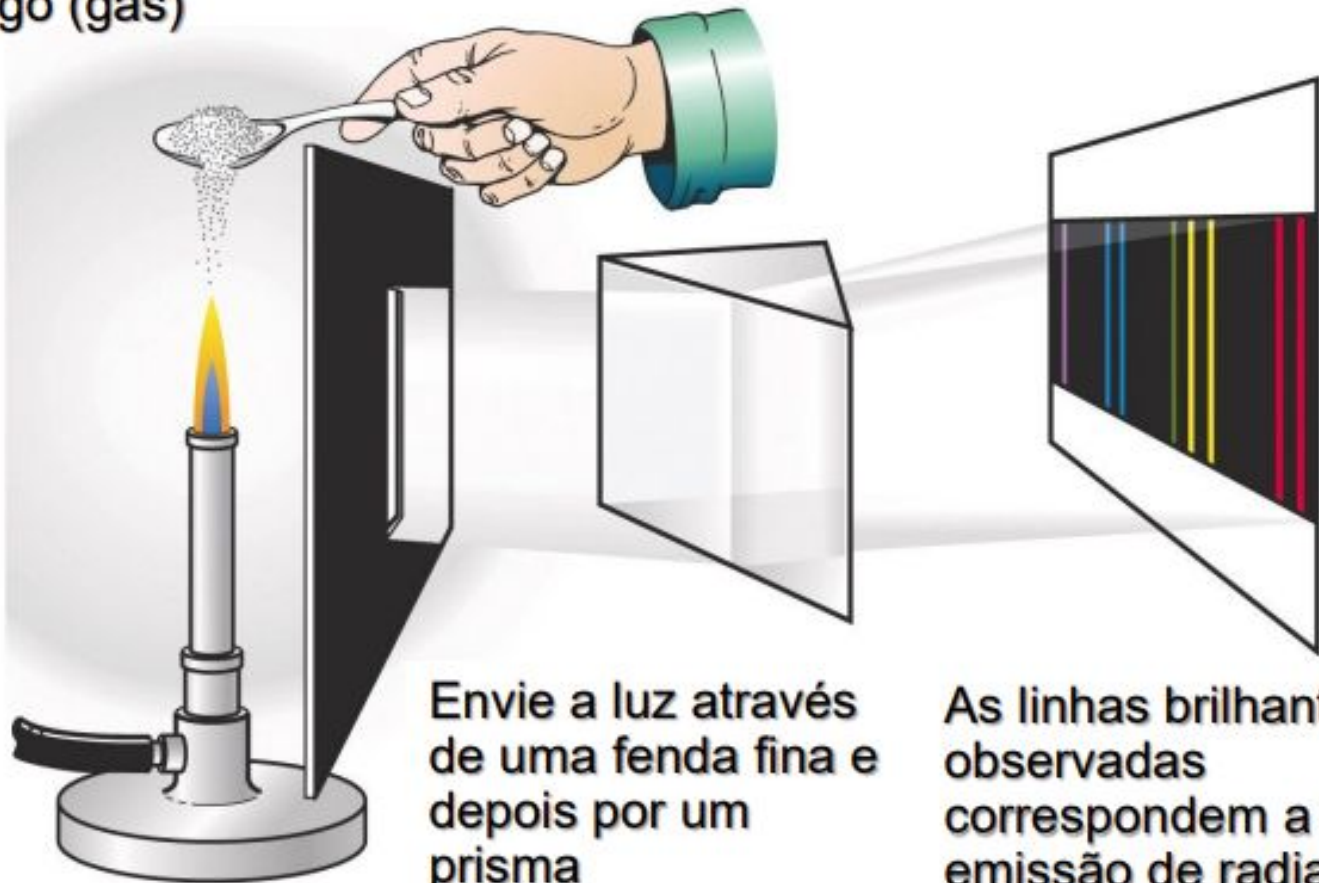
Quando as partículas têm apenas alguns nanômetros de diâmetro, o espaço disponível para os elétrons é bastante reduzido. Isso afeta as propriedades óticas da partícula

Tela de Led, cirurgia e painéis solares: como a pesquisa do Nobel de Química está na nossa rotina

Honraria foi concedida a três cientistas que criaram os pontos quânticos, trazendo a nanotecnologia para o cotidiano da população



Adicione uma
substância química no
fogo (gás)

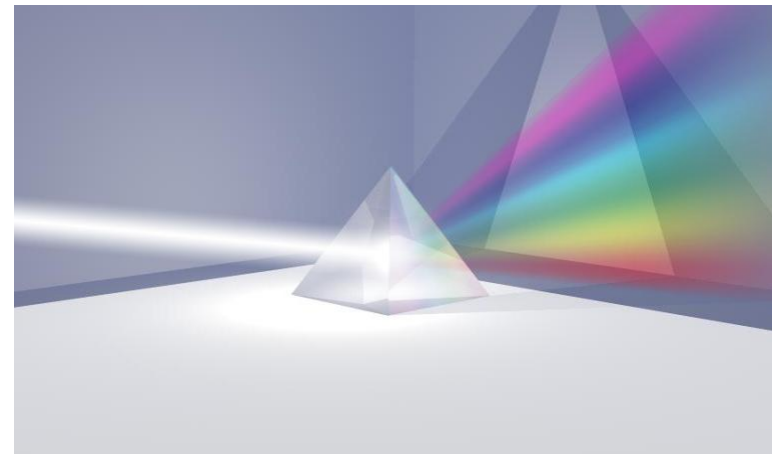


Envie a luz através
de uma fenda fina e
depois por um
prisma

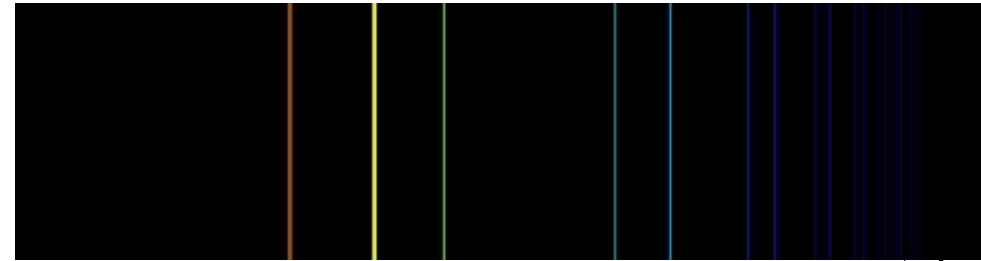
As linhas brilhantes
observadas
correspondem a
emissão de radiação
em comprimentos de
ondas específicos

De onde vem e porque aparecem as linhas brilhantes?
A mecânica clássica não podia responder.

A luz branca é uma mistura de ondas eletromagnéticas de todas as frequências no espectro visível.



Quando um gás é aquecido (ou atravessado por eletricidade) emite luz, porém essa luz passando por um prisma não produz um espectro contínuo...



sódio



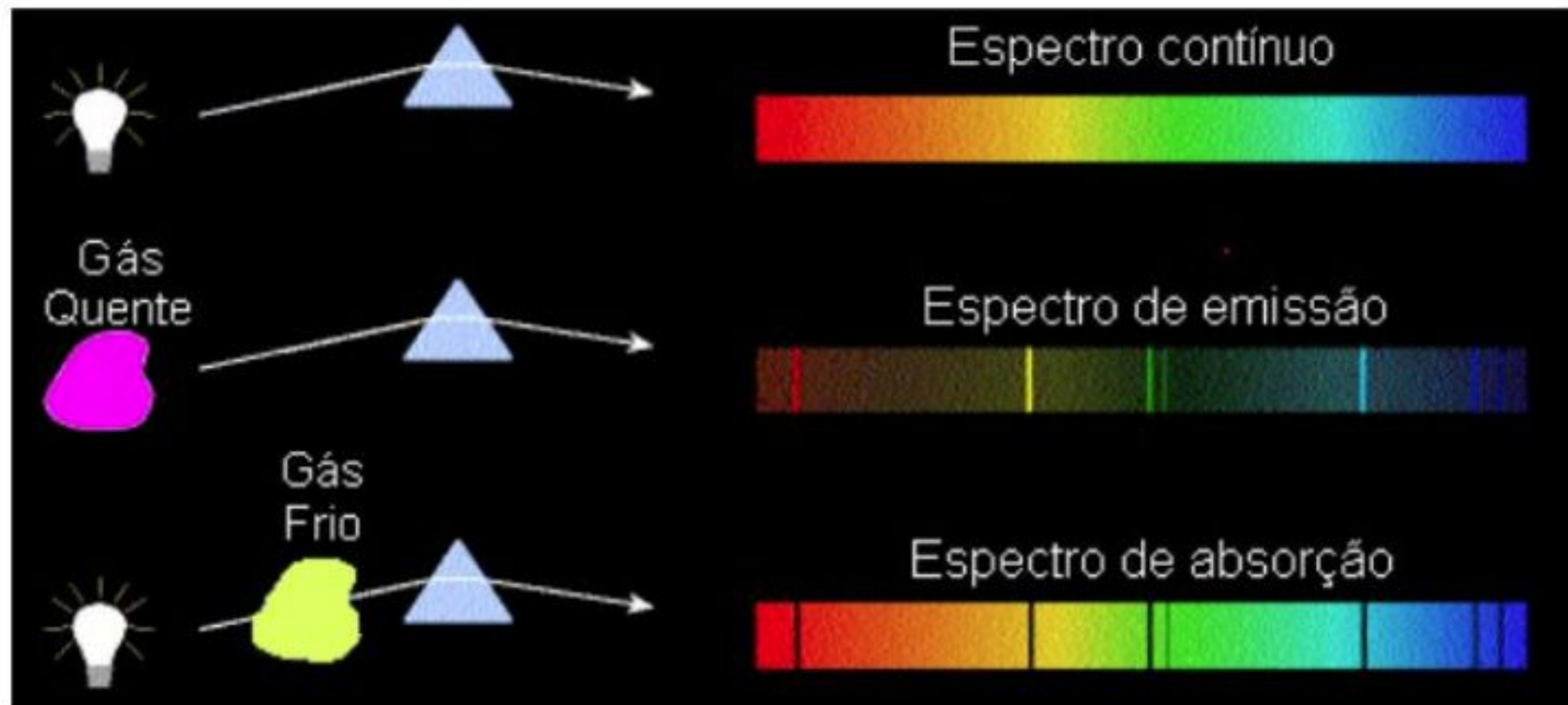
Luz branca.

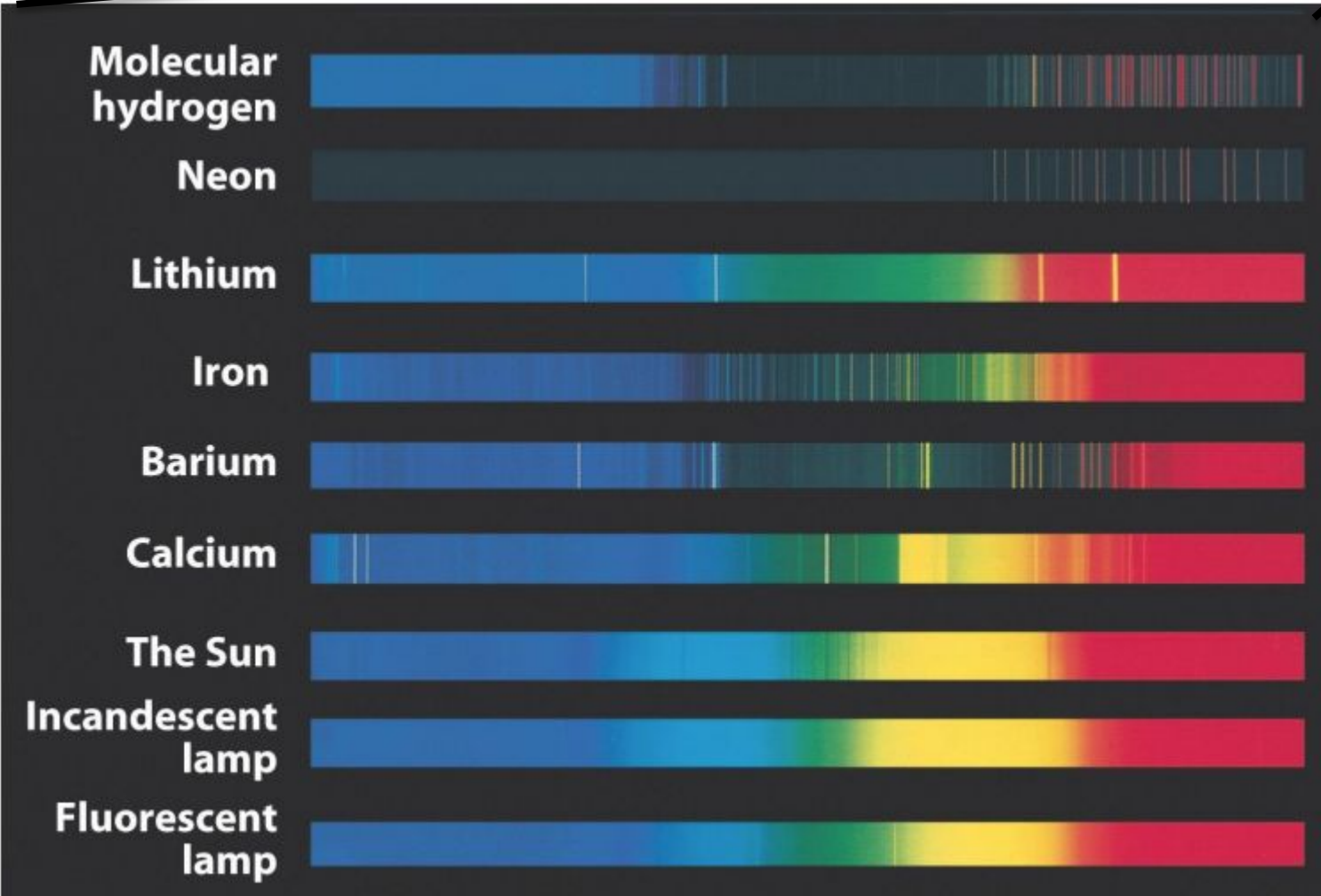
... mas um conjunto de “linhas espectrais”, em que cada uma é produzida por luz de um comprimento de onda particular.

Luz emitida pelo hidrogênio.



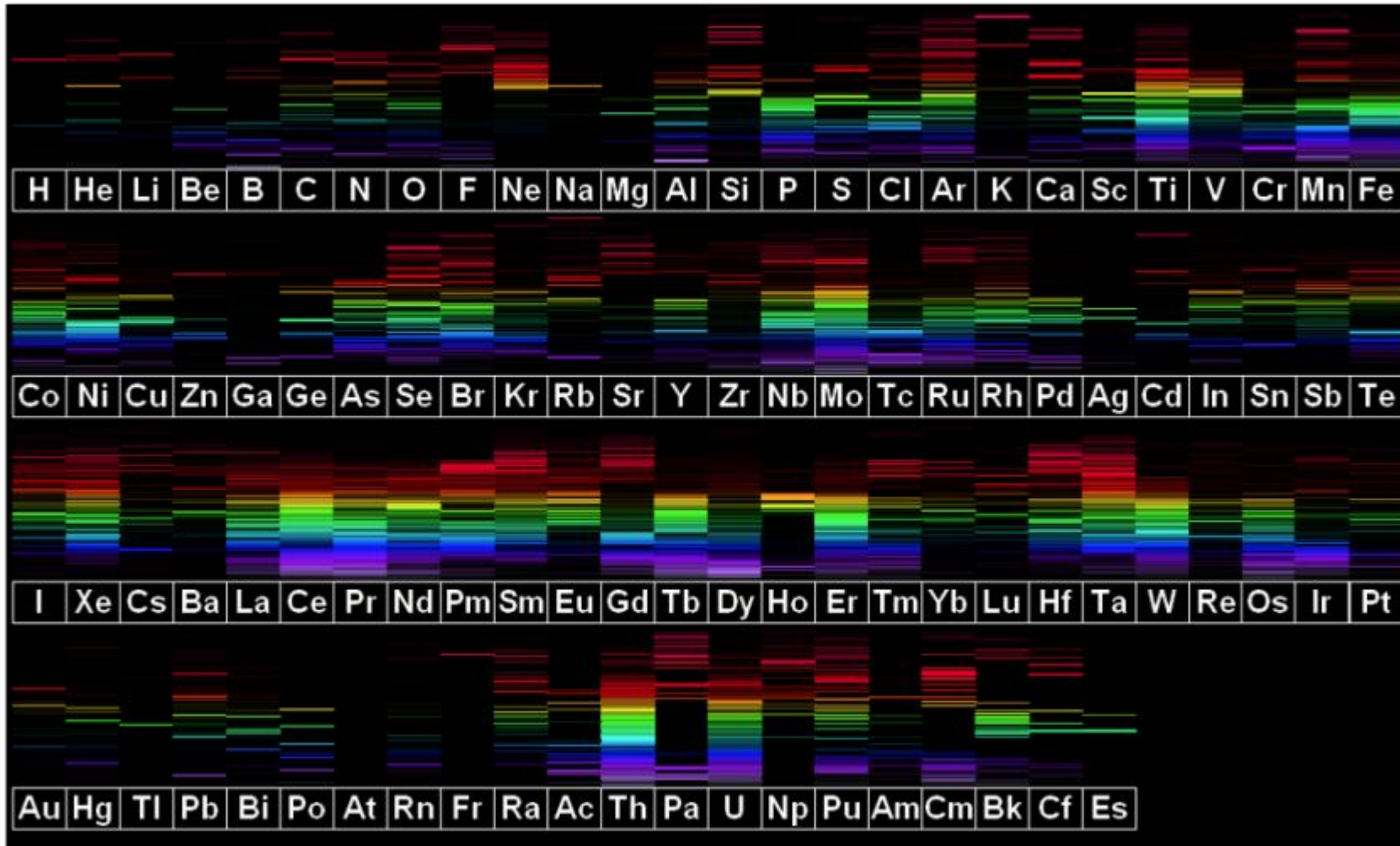
- ❑ Um gás **transparente** aquecido produz um espectro de **linhas** brilhantes (linhas de emissão).
- ❑ Se um espectro contínuo passar por um gás frio observamos a presença de linhas escuras (linhas de absorção).
- ❑ O número e a posição destas linhas depende dos elementos químicos





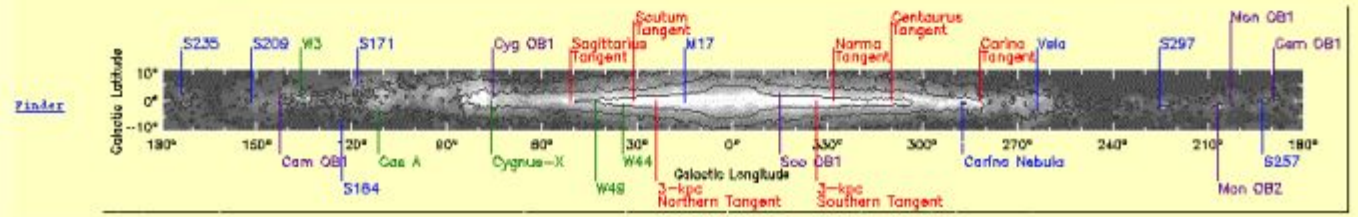
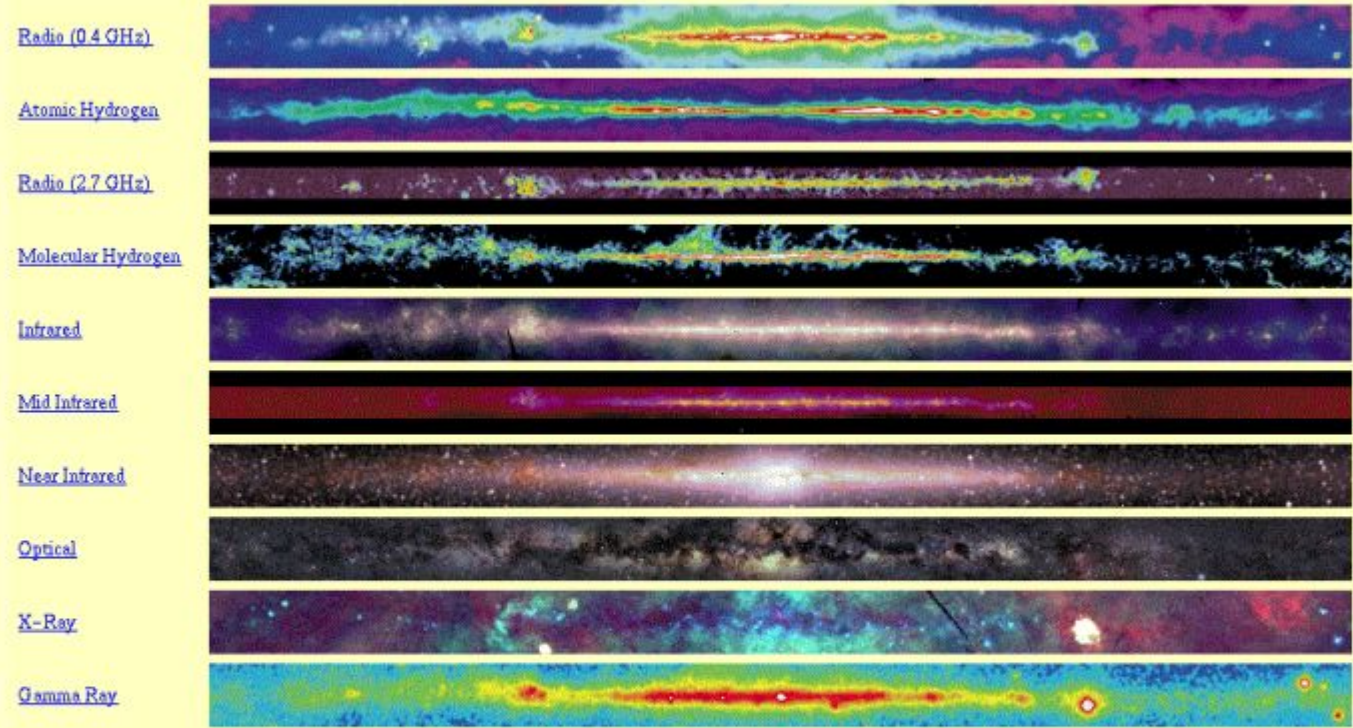
1	H	1.008	1.008	1	He	4.003	4.003	2
2	Li	6.941	6.941	3	Be	9.012	9.012	4
3	Na	22.990	22.990	11	Mg	24.305	24.305	12
4	K	39.098	39.098	19	Ca	40.078	40.078	20
5	Rb	85.468	85.468	37	Sr	87.62	87.62	38
6	Cs	132.91	132.91	55	Ba	137.33	137.33	56
7	Fr	223	223	87	Ra	226	226	88
8	La	138.905	138.905	57	Ce	140.12	140.12	58
9	Pr	140.908	140.908	59	Nd	144.24	144.24	60
10	Pm	145	145	61	Sm	150.36	150.36	62
11	Eu	151.964	151.964	63	Gd	157.25	157.25	64
12	Tb	158.925	158.925	65	Dy	162.50	162.50	66
13	Ho	164.930	164.930	67	Er	167.26	167.26	68
14	Tm	168.930	168.930	69	Yb	173.054	173.054	70
15	Lu	174.967	174.967	71				71

1 = número atômico
 2 = símbolo químico
 3 = nome
 4 = peso atômico (ou número de massa de isótopo mais estável)

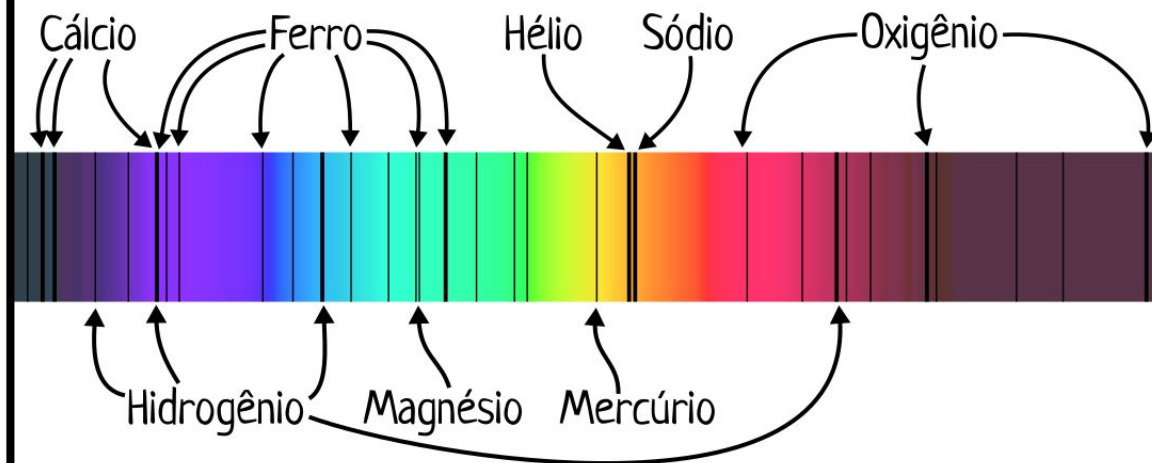


<https://www.tabelaperiodica.org/tabela-periodica-com-espectros-de-emissao-atmica-dos-elementos/>

Como cientistas veem o céu



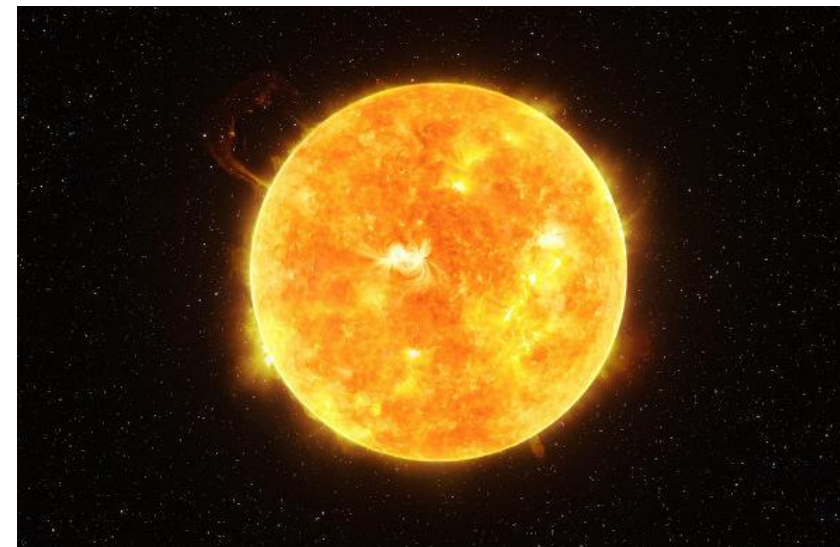
Em 1814, **Joseph von Fraunhofer** estudou e mediu as **linhas escuras** no espectro solar. 45 anos depois após isso, notou-se que as linhas coincidem com as **linhas de emissão** nos espectros dos elementos aquecidos. A descoberta nos permite determinar a **composição do sol**.



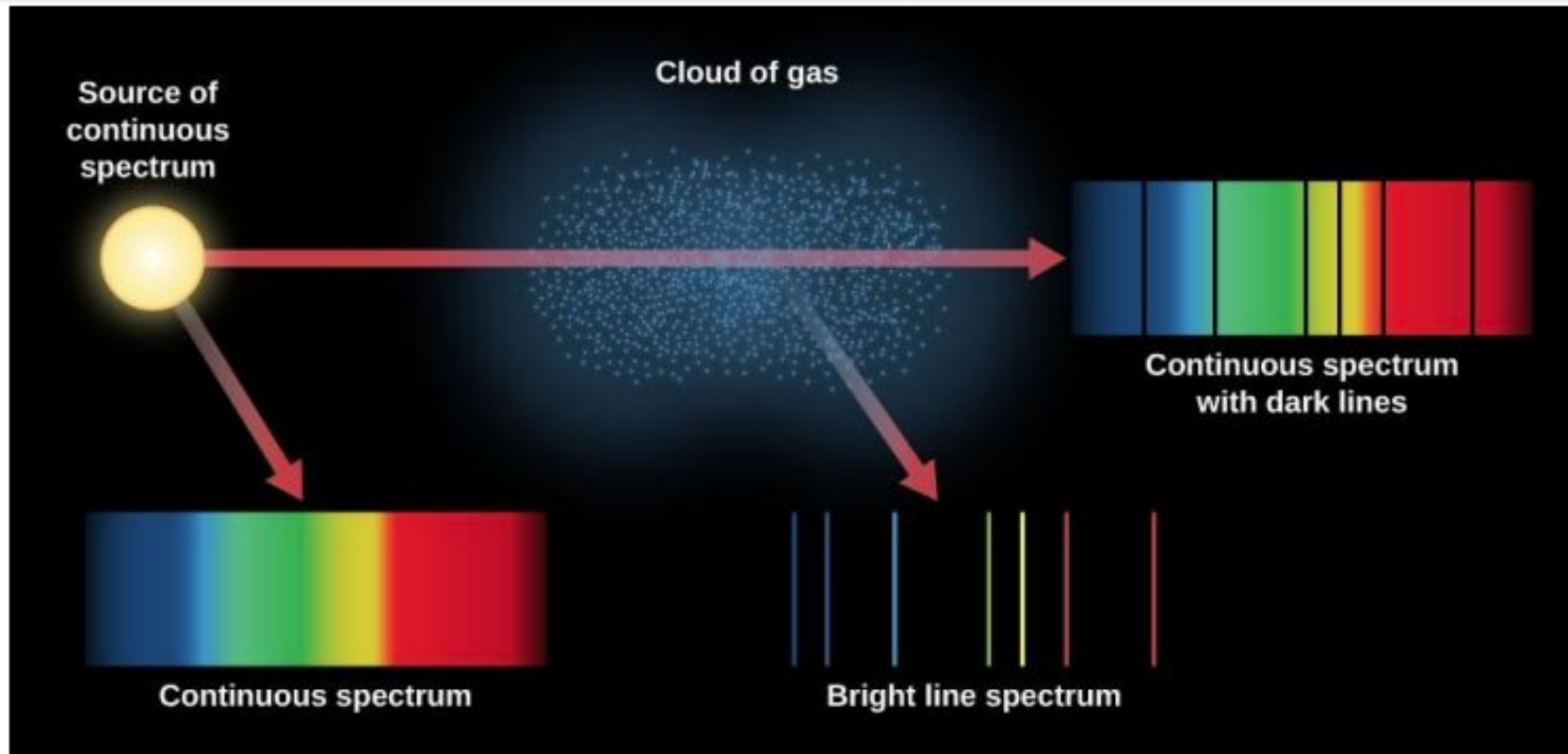
Os Terraplanistas frequentemente dizem que é impossível determinar a **composição do Sol** porque ninguém chegou próximo do Sol antes. Mas eles estão enganados. A **espectroscopia** nos permite estudar a **composição do Sol** e qualquer outro corpo celeste **sem ir lá fisicamente**.



TerraPlana.ws/espectro-de-fraunhofer
Desmistificando a Terra Plana



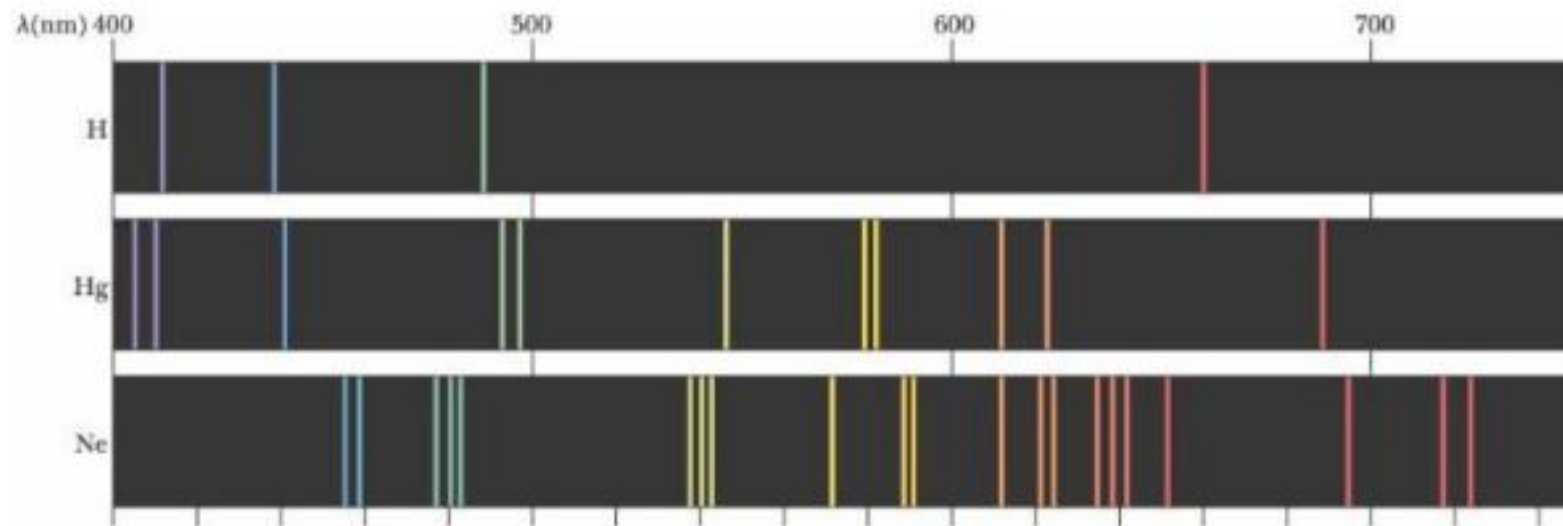
- ❑ Como explicar essas linhas ?
- ❑ A Mecânica clássica não tinha nenhuma explicação
- ❑ Tudo indicava que a explicação deveria estar relacionada com a estrutura interna dos átomos.
- ❑ Espectro discreto atômico



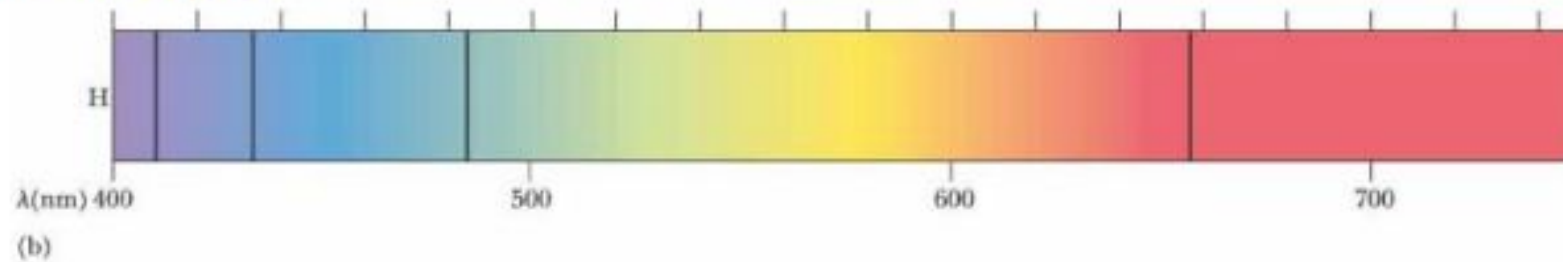
Voltando as linhas atômicas

O modelo de Rutherford não explica as linhas observadas para alguns elementos

Espectro emissão



Espectro^(a) absorção



Linhas do hidrogênio - serie de Balmer

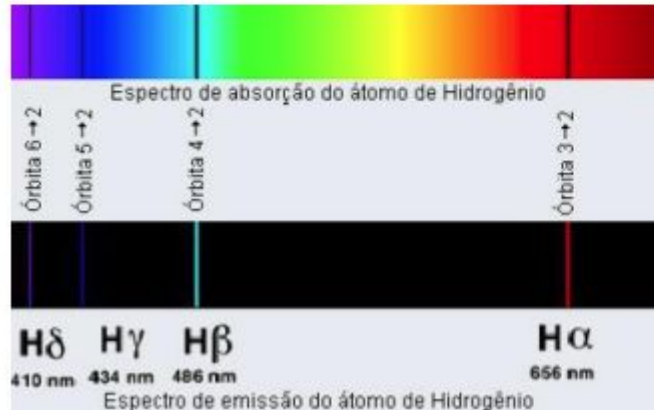
Em 1885 Joham Balmer apresentou uma fórmula que ele havia obtido empiricamente, e que fornecia com precisão os valores dos comprimentos de onda correspondentes as quatro raias visíveis do hidrogênio.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

R é uma constante

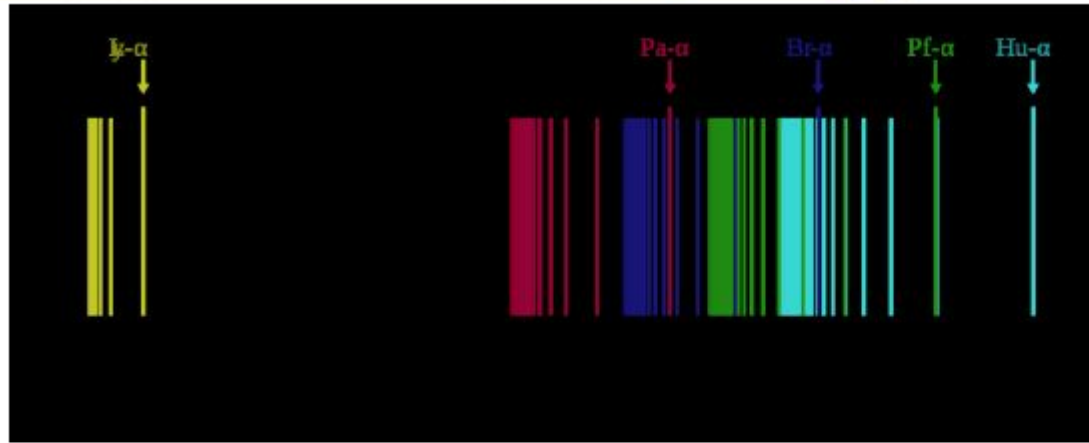


Johann Jacob Balmer
(1825 – 1898)



COR	NOME	λ (em Angstroms)	n
VERMELHO	H α	6563	3
VERDE	H β	4858	4
AZUL	H γ	4340	5
VIOLETA	H δ	4101	6

Mas existem outras linhas do hidrogênio



Em 1890, Rydberg generalizou esse estudo criando uma expressão mais geral para várias séries observadas

Lyman, na região do ultravioleta $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n=2,3,4,\dots$

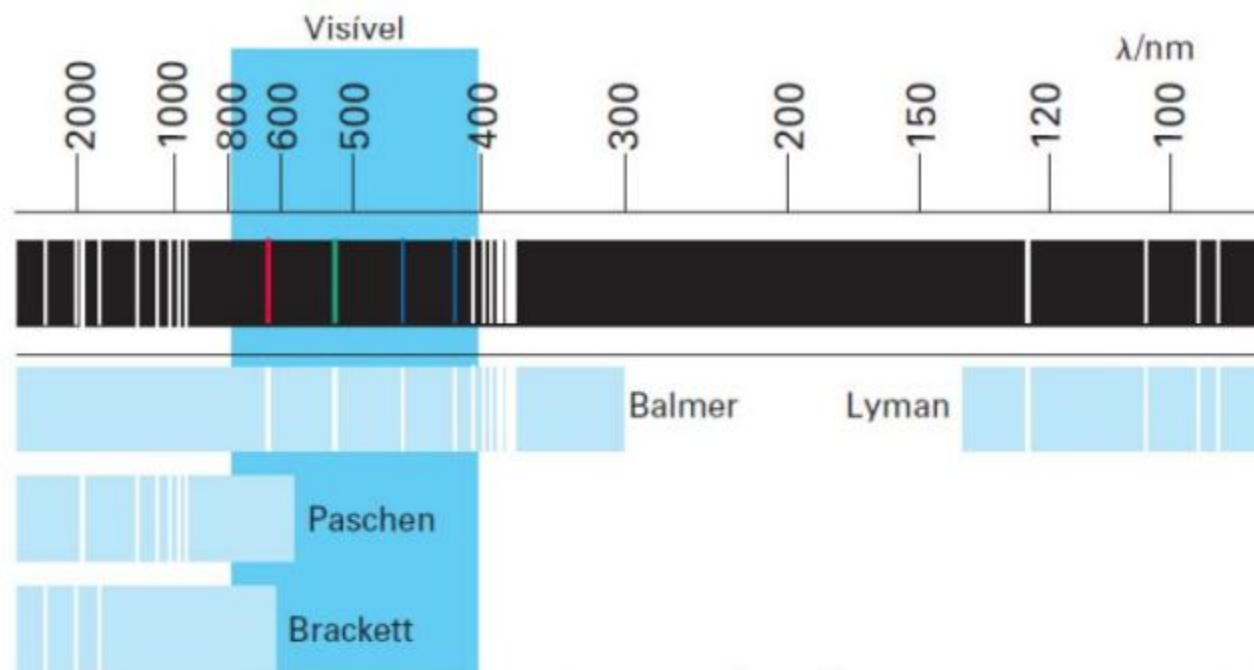
Paschen, na região do infravermelho $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n=4,5,6,\dots$

Brackett, na região do infravermelho $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n=5,6,7,\dots$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R_H = 109,677560 \text{ cm}^{-1}$$

Constante de Rydberg



Os n são números inteiros com $n_1 = 1, 2, \dots$ e $n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$. A série com $n_1 = 1$ é chamada de *série de Lyman* e encontra-se no ultravioleta. A série com $n_1 = 2$ situa-se na região do visível e é chamada de série de Balmer. As séries que se encontram no infravermelho incluem a *série de Paschen* ($n_1 = 3$) e a *Brackett* ($n_1 = 4$).

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

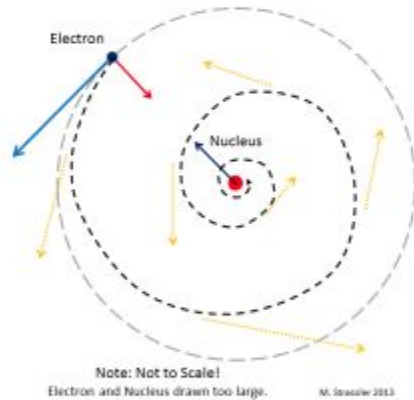
$$R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) cm^{-1}$$

Nome	n_1	n_2	Região do espectro eletromagnético
Lyman	1	$n = 2,3,4,\dots$	Ultravioleta
Balmer	2	$n = 3,4,5,\dots$	Visível
Paschen	3	$n = 4,5,6,\dots$	Infravermelho
Bracket	4	$n = 5,6,7,\dots$	Infravermelho
Pfund	5	$n = 6,7,8,\dots$	Infravermelho
Humphreys	6	$n = 7,8,9,\dots$	Infravermelho

Problema com o modelo de Rutherford

Da teoria clássica do eletromagnetismo, uma carga elétrica acelerada irradia energia. Sua energia total deve diminuir e com isso o raio da órbita deve diminuir.



- ❑ Planck já tinha proposto uma mudança radical para a estrutura do átomo com um comportamento quântico (energia discreta para explicar corpo negro).
- ❑ Bohr aperfeiçoou essa idéia

Um gás emite luz quando uma corrente elétrica passa através dele...

...porque os elétrons que compõem seus átomos primeiro absorvem energia da eletricidade...

Mas a radiação emitida é limitada para um certo comprimento de onda..

...e posteriormente a liberam sob a forma de luz.

...então um elétron em um átomo pode ter somente certas quantidades específicas de energia.

Ou seja, a energia de um elétron é quantizada!

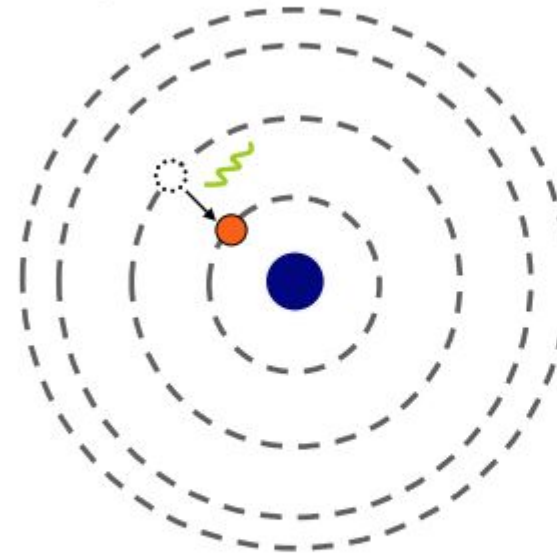


Dr. Niels Bohr

ORGANIZANDO AS IDÉIAS

Modelo Atômico de Bohr

- Níveis eletrônicos de energia discretos (quantizados)
- Momentos angulares (quantizados)



Niels Bohr
(1885-1962)

Nobel 1922

- Elétrons só ganham ou perdem energia transitando entre os níveis discretos de energia
- Emissão e absorção de fótons
- As orbitas seriam dadas por momentos angulares dos elétrons que seriam quantizados

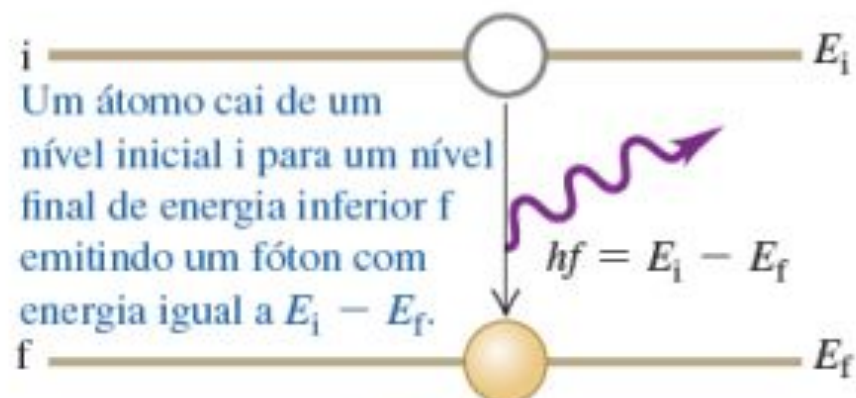
Energia dos fótons

$$h\nu = E_i - E_f$$

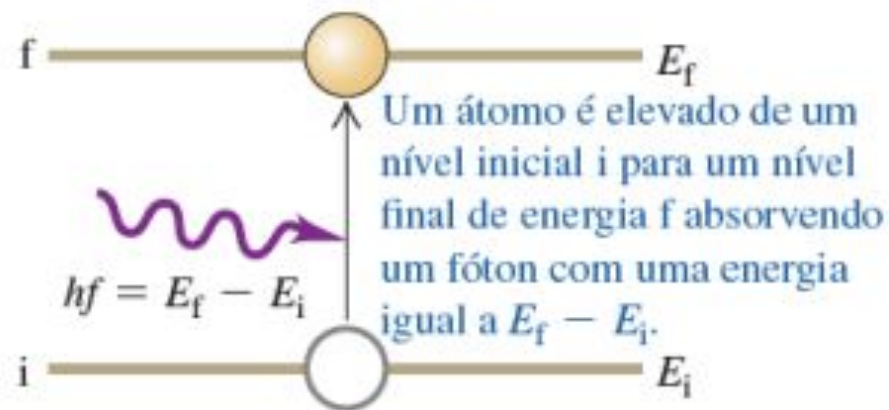
Momento angular

$$L = nh/2\pi = n\hbar$$

Emissão de fótons



Absorção de fótons

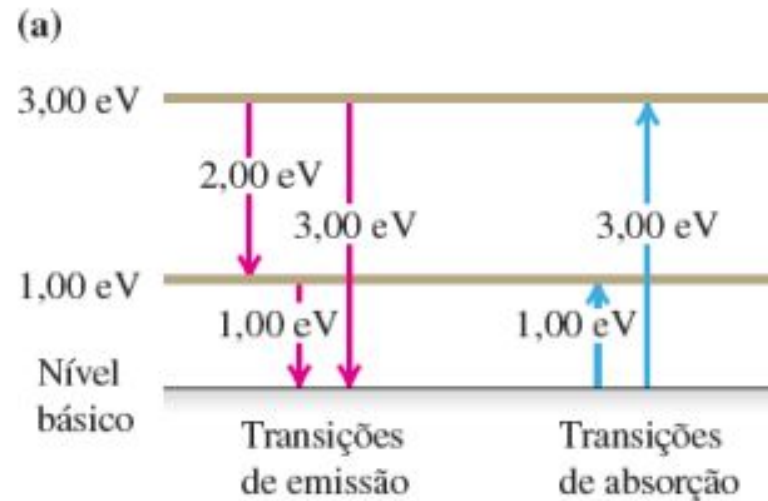


Por exemplo, um átomo de lítio excitado emite luz vermelha com comprimento de onda $\lambda = 671 \text{ nm}$. A energia do fóton correspondente é

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}) (3,00 \times 10^8 \text{ m/s})}{671 \times 10^{-9} \text{ m}}$$
$$= 2,96 \times 10^{-19} \text{ J} = 1,85 \text{ eV}$$

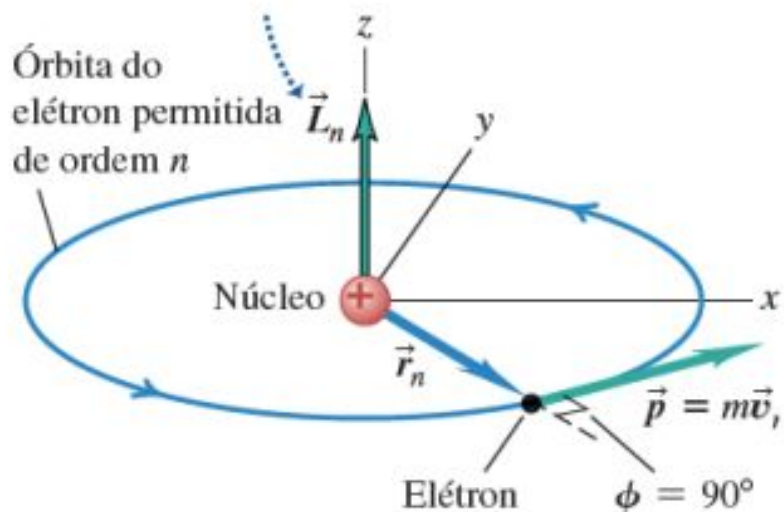
Diagrama de energia

- ❑ Diagrama de nível de energia para o átomo hipotético, mostrando as transições possíveis para emissão a partir dos níveis excitados e para absorção a partir do nível básico.
- ❑ Espectro de emissão desse átomo hipotético



Momento angular quantizado

- ❑ Como determinar os valores de energia a partir do modelo de Bohr
- ❑ A partir da quantização do momento angular

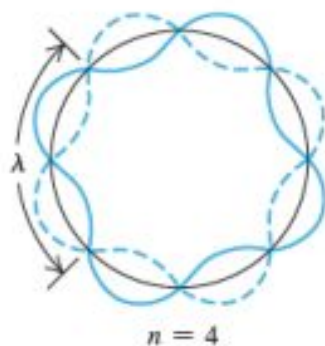
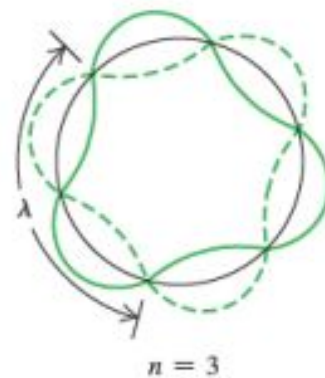
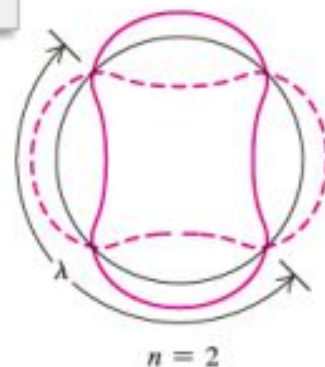


$$L_n = nh/2\pi = n\hbar$$

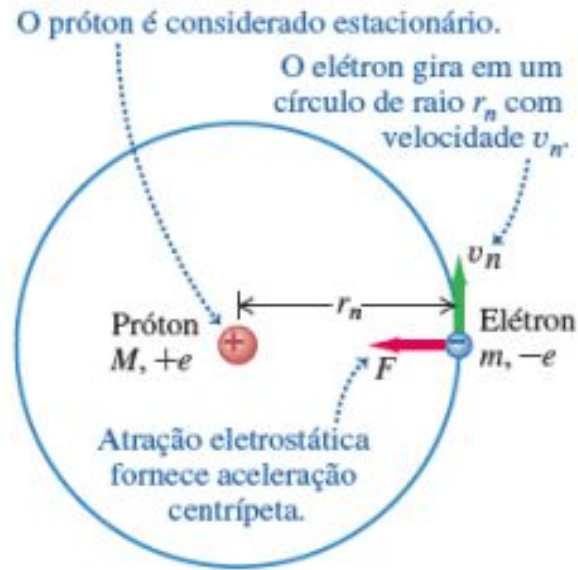
$$\vec{L} = \vec{r} \cdot m\vec{v}$$



$$L_n = mv_n r_n = n\hbar$$



Raio dos átomos de Bohr



$$F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = F_c = \frac{mv_n^2}{r_n}$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{mv_n^2}{r_n}$$

$$v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}$$

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

$$r_n = a_0 n^2$$

a_0

É chamado de raio de Bohr. É o raio do átomo de hidrogênio no seu estado de mais baixa energia, ou estado fundamental.

Como determinar as energias do espectro de hidrogênio

☐ Energia a partir do modelo de Bohr

Energia de transição
entre níveis

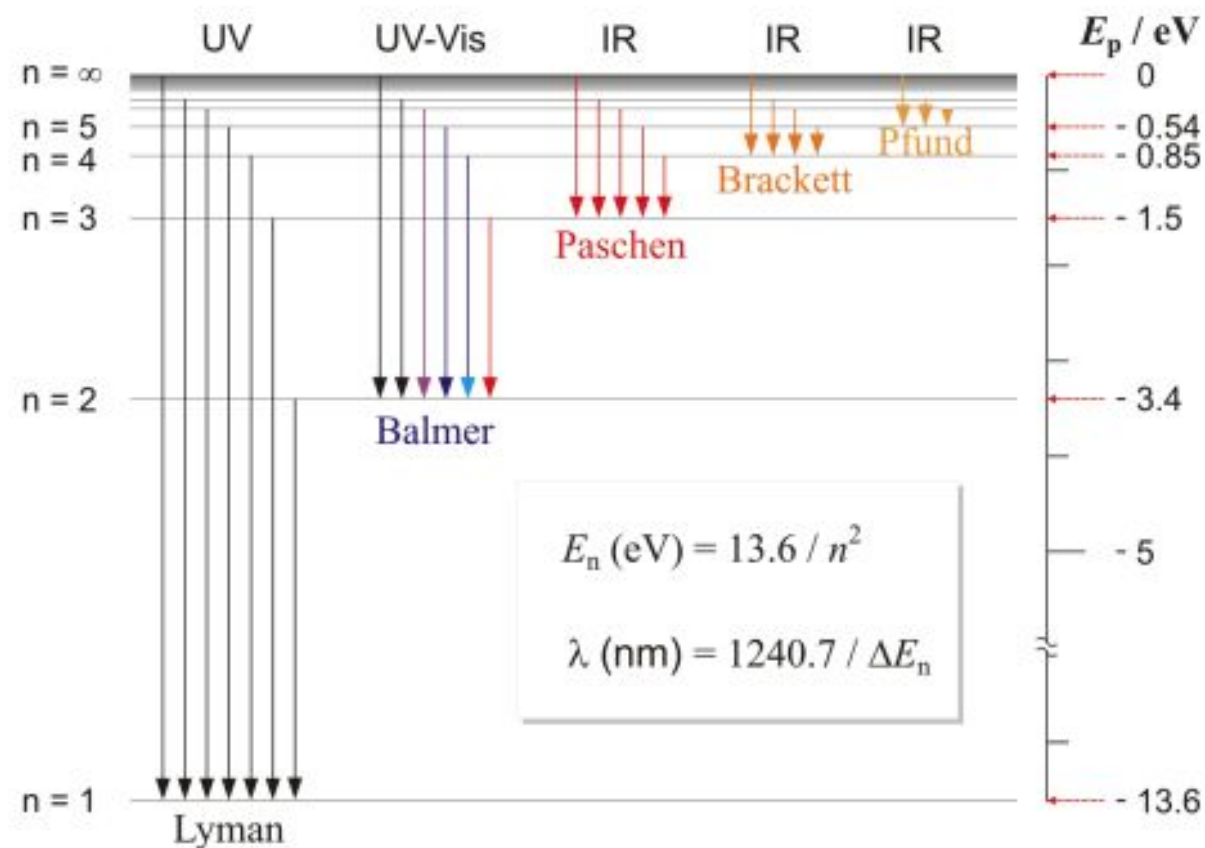
$$E = \frac{me^4}{4\pi\epsilon_0^2 2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Ionização $n_f = \text{infinito}$

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



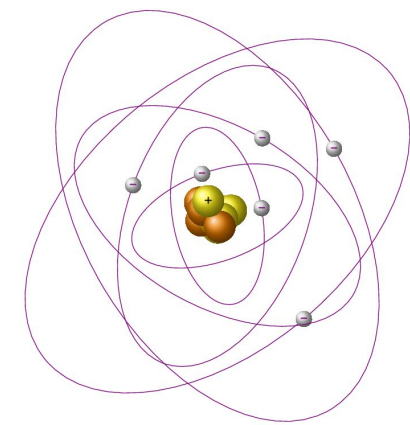
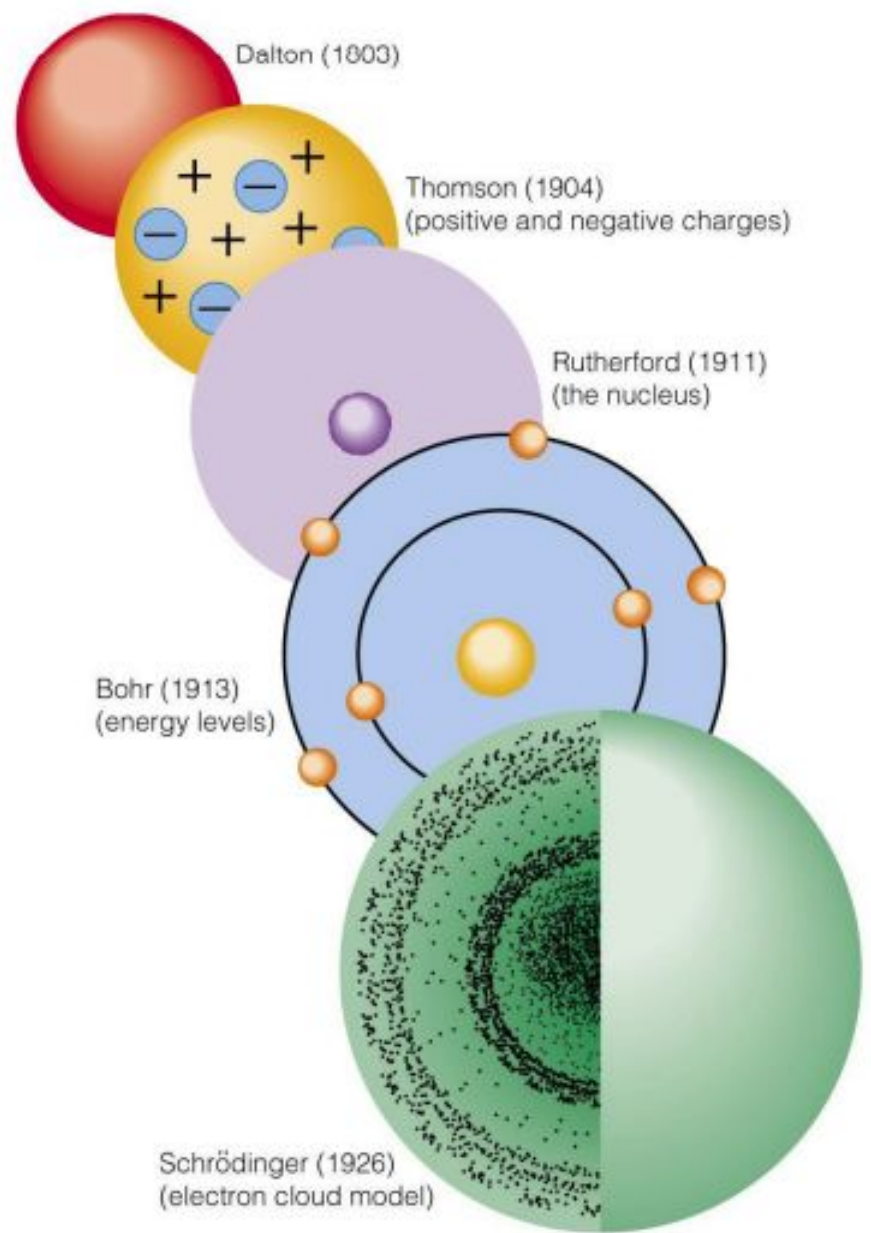
$$E_n = -13,60 \frac{1}{n^2}$$



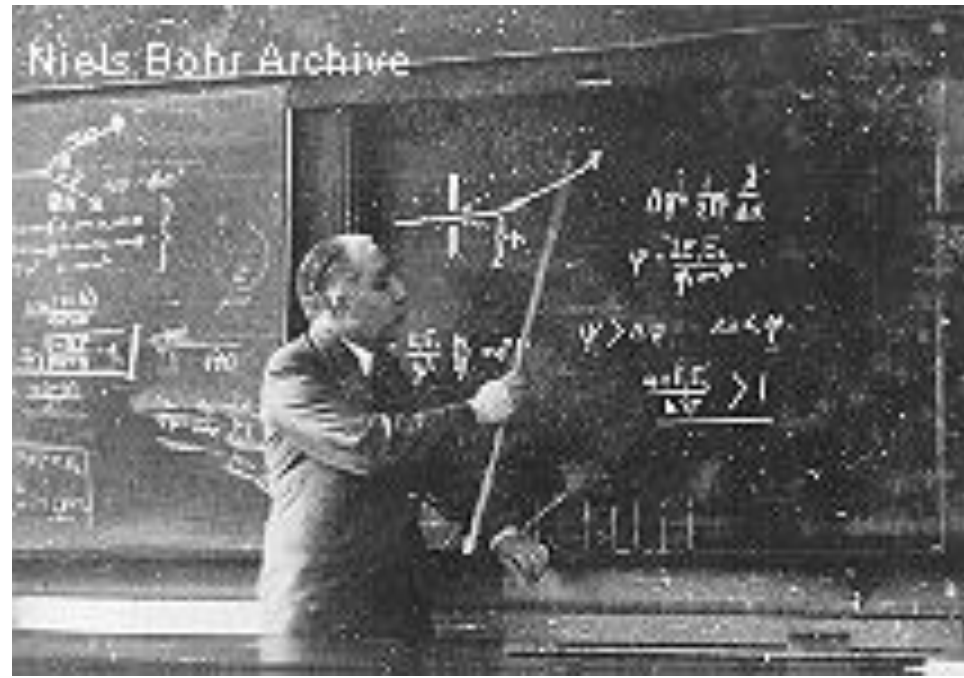
Considerações sobre modelo de Bohr

- ❑ A contribuição principal do modelo de Bohr são as equações de energia e do número de onda.
- ❑ O estado normal de um átomo é quando o elétron tem menor energia ou $n=1$ (estado fundamental).
- ❑ Em uma descarga elétrica, ou algum outro processo, o átomo recebe energia devido a colisões, etc. O elétron deve sofrer uma transição para um estado de maior energia, ou estado excitado $n>1$.
- ❑ Obedecendo a lei natural dos sistemas físicos, o átomo tenderá a voltar ao seu estado de menor energia (estado fundamental).
- ❑ Explicou os processos de excitação e desexcitação, e diagrama de nível de energia para os átomos.
- ❑ Sucesso para explicar as linhas do hidrogênio
- ❑ Teoria de Bohr não conseguia explicar as intensidades relativas das linhas espectrais, não conseguia explicar as linhas espectrais de átomos mais complexos.
- ❑ Dificuldades começaram a ser superadas na década de 20 do século passado com de Broglie, Schroedinger, Heisenberg, Pauli, Dirac e vários outros cientistas.

COMPLEMENTO HISTÓRICO E TEÓRICO



Um átomo tem um conjunto de “energias quantizadas” (ou “níveis de energia”) disponível para seus elétrons.



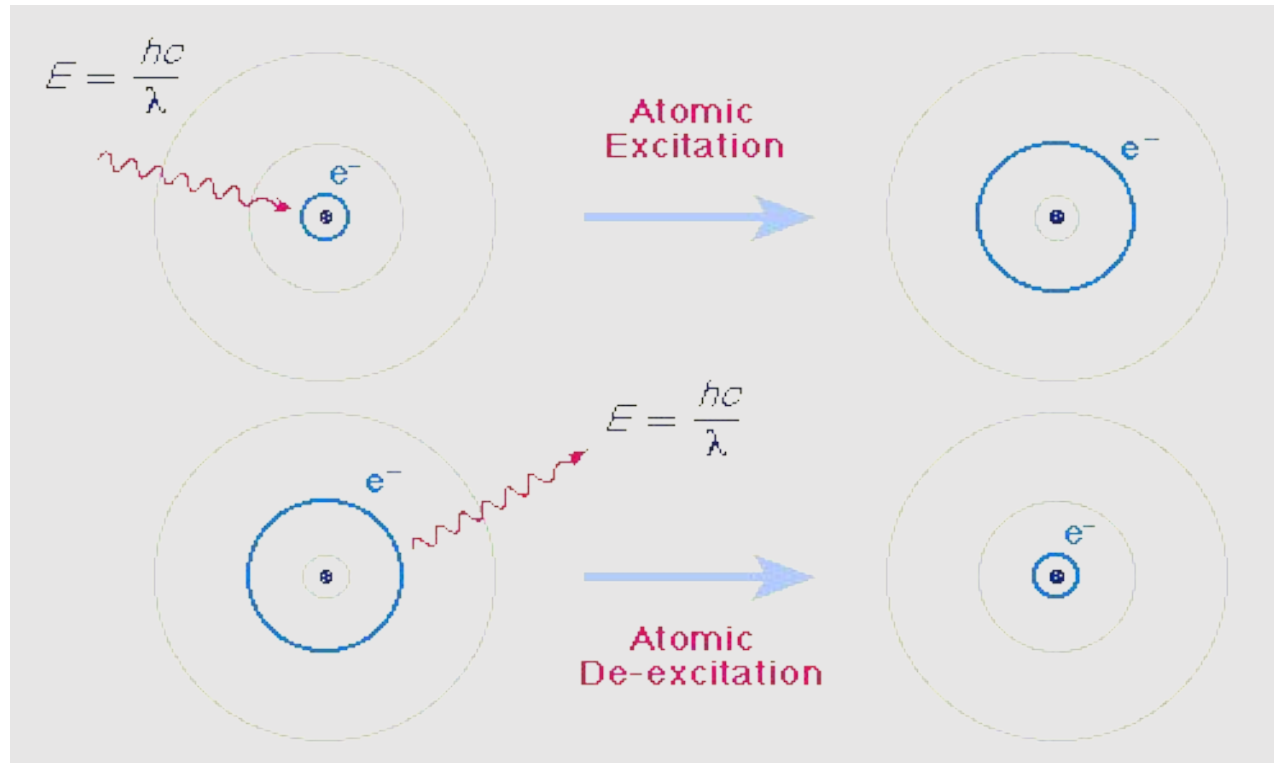
Um elétron em um átomo só pode ter um valor de energia.

Portanto, cada nível tem uma “população” máxima de elétrons.

Normalmente, os elétrons de um átomo estão no mais baixo nível energético disponível (mais estáveis).

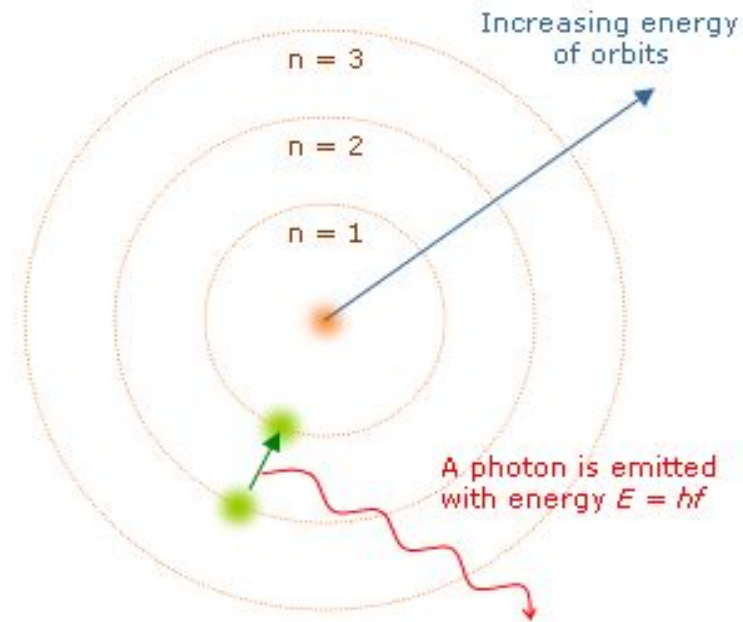
Ao receber energia (de uma descarga elétrica, por exemplo):

A isso chamamos “estado fundamental”.



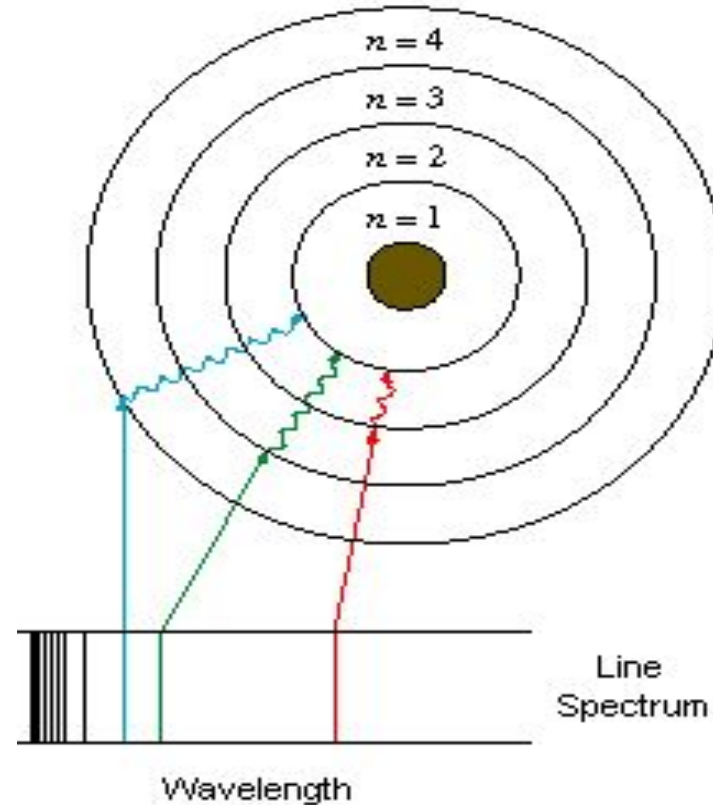
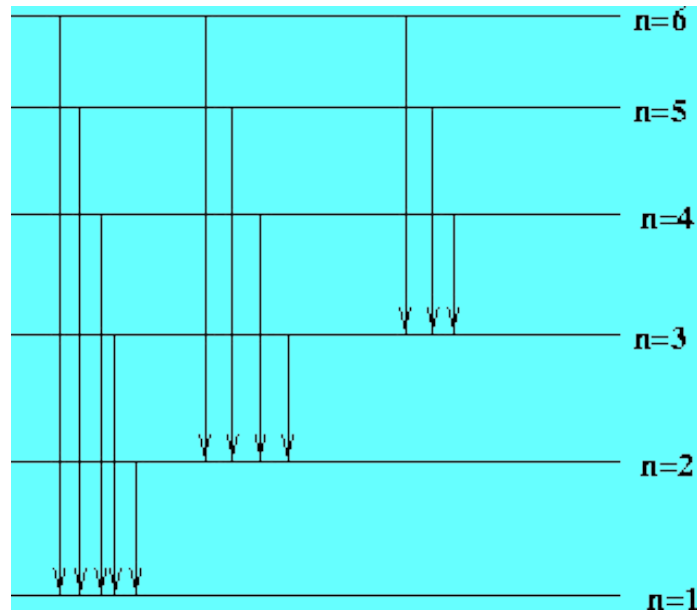
“estado excitado”.

A diferença de energia dos níveis é a própria energia do fóton.



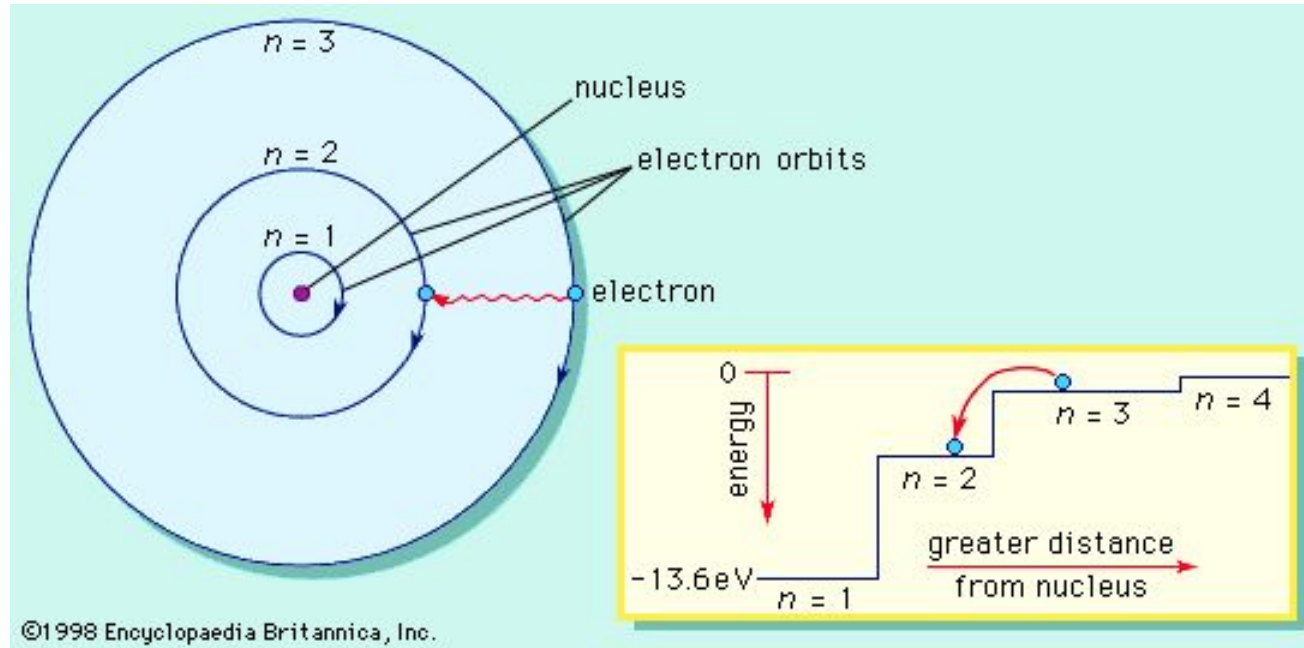
Desse modo, o comprimento de onda da radiação emitida também tem um valor único.

São várias “transições” possíveis:



Isso explicaria as diferentes linhas espectrais observadas.

Bohr foi capaz de obter a equação de Rydberg (série de Balmer), bem como o valor numérico da constante usada naquela expressão (R).



Infelizmente sua teoria apresentou falhas, mas o uso do conceito de energia quantizada para o elétron tem sobrevivido até hoje.

Estudando o espectro de emissão do átomo de hidrogênio com técnicas mais avançadas:

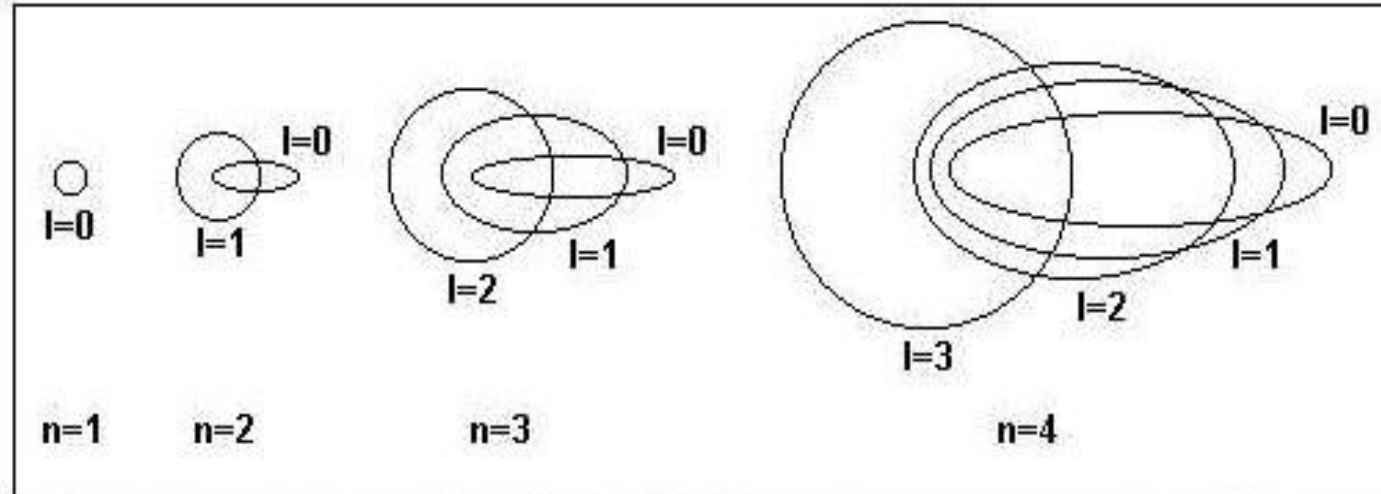


Isso ajudou a corrigir problemas apresentados pelo modelo proposto por Niels Bohr.

Arnold Sommerfeld percebeu que as linhas espectrais não eram únicas, mas formadas por conjuntos de linhas muito próximas umas das outras.

Para várias linhas espectrais, várias órbitas...

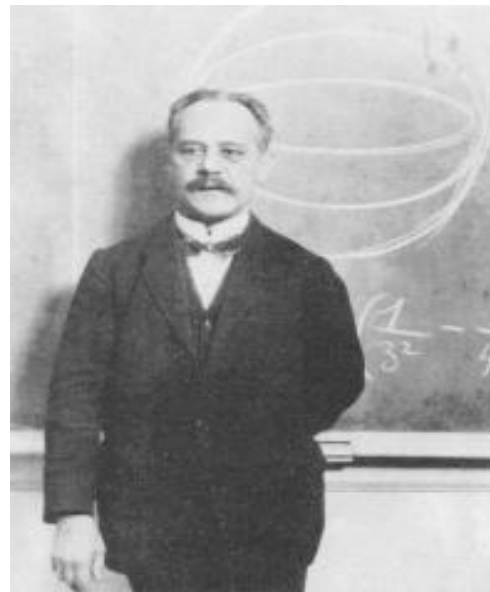
Para cada “n”,
n possíveis
valores de “l”.



The allowed electronic orbits for the four main quantum numbers by the Bohr-Sommerfeld model.

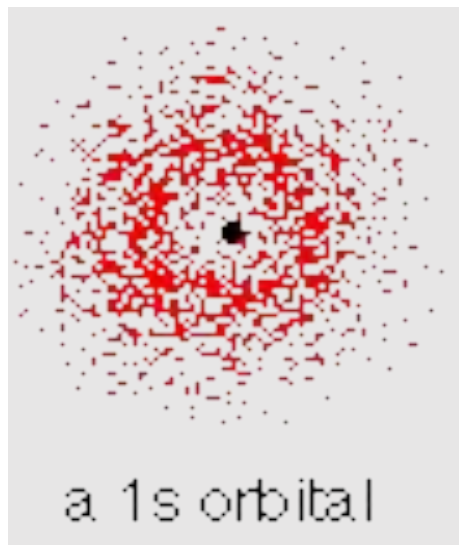
Sommerfeld utilizou um número, chamado de “número quântico secundário ou azimutal” (l) para representá-las.

Subníveis
de energia.



Foi determinado que o número máximo de elétrons num subnível é dado por: $2(2l + 1)$.

*Aos subníveis
foram dados
nomes:*



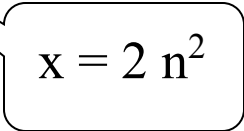
Nome	Valor de "l"	Capacidade: $2(2l + 1)$
"s" (sharp)	0	2
"p" (principal)	1	6
"d" (diffuse)	2	10
"f" (fundamental)	3	14
"g"	4	18
"h"	5	22
"i"	6	26

Esses nomes são relativos aos orbitais correspondentes (falaremos neles daqui a pouco).

Se, em cada nível de número quântico principal “n” existem “n” subníveis:

O nível mais próximo do núcleo tem a letra “K” de *kernel* (caroço); os demais seguem ordem alfabética.

NÍVEIS	Subníveis	Capacidade máxima
K : 1	1s	2
L : 2	2s 2p	8
M : 3	3s 3p 3d	18
N : 4	4s 4p 4d 4f	32
O : 5	5s 5p 5d 5f 5g	50
P : 6	6s 6p 6d 6f 6g 6h	72
Q : 7	7s 7p 7d 7f 7g 7h 7i	98
R : 8	8s 8p ...	128



$x = 2 n^2$

Como “ordenar” os subníveis de energia?

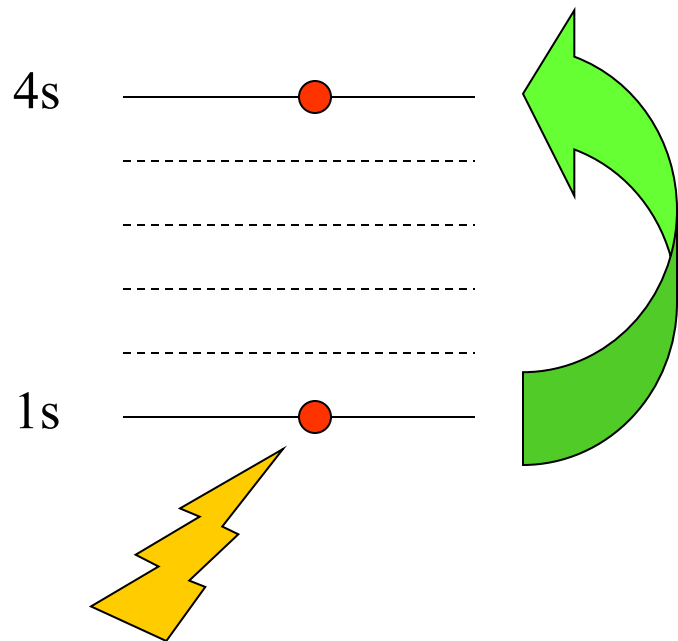
ESTABILIDADE



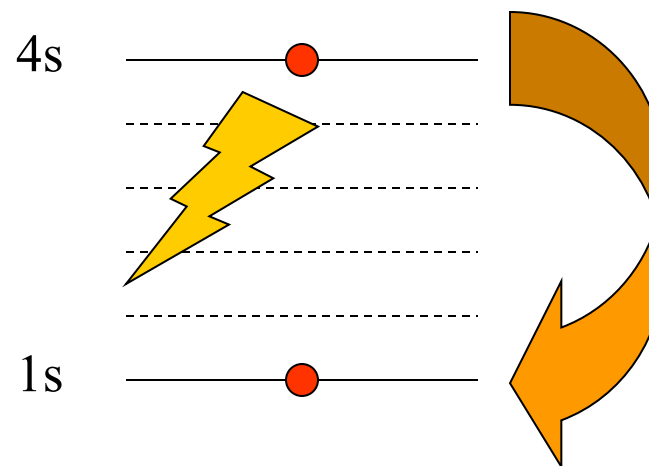
ENERGIA



Suponha que, num átomo de hidrogênio, um elétron receba energia e “salte” para o subnível 4s:



Ao retornar à posição original, o elétron libera energia na forma de onda eletromagnética...



...cujo comprimento de onda (λ) é de 97,2 nm.

A frequência correspondente (ν) é calculada por:

$$\nu = c / \lambda$$

Mas a energia do fóton é dada por:

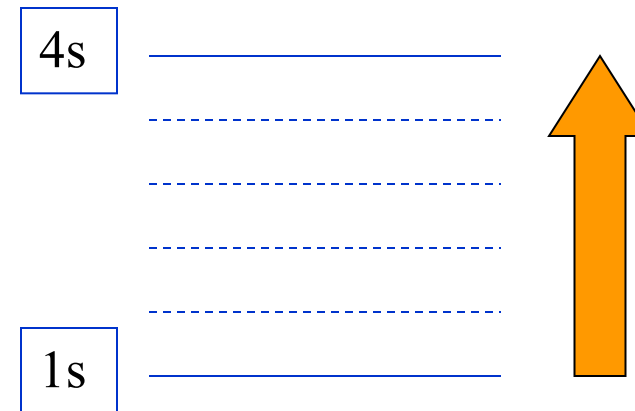
$$E = h \times \nu$$

$$\nu = 3,00 \times 10^9 \text{ m/s} / 97,2 \times 10^{-9} \text{ m.}$$
$$\nu = 3,09 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \text{ ou } 3,09 \times 10^{15} \text{ Hz.}$$

Então:

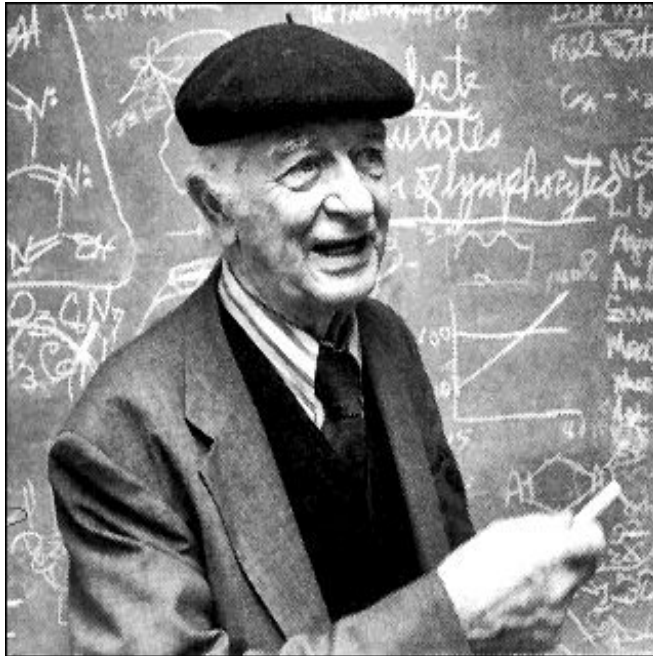
$$E = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s} \times 3,09 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}.$$

$$E = 2,05 \times 10^{-18} \text{ J} \text{ ou } 12,8 \text{ eV.}$$



Fazendo o mesmo para os demais subníveis, é possível colocá-los em ordem crescente de energia.

“Se adicionarmos 1 elétron a um átomo com número atômico Z , teremos a configuração do elemento com número atômico $(Z + 1)$.”



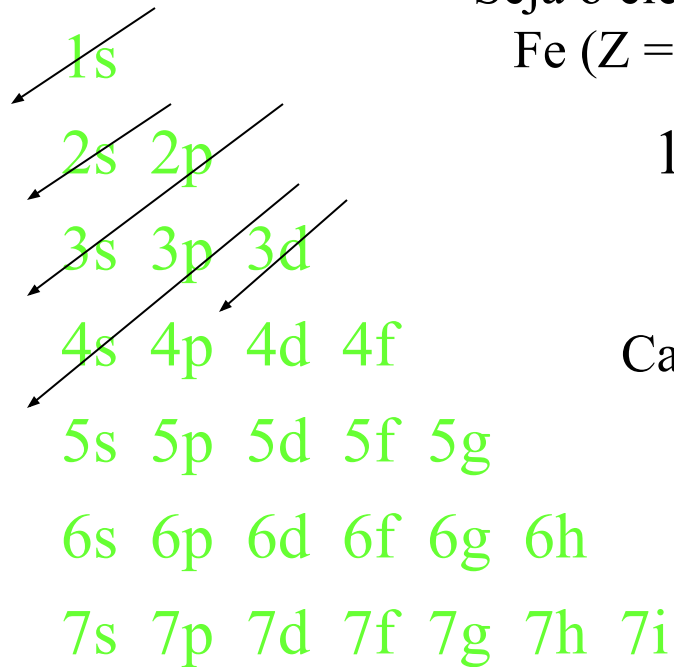
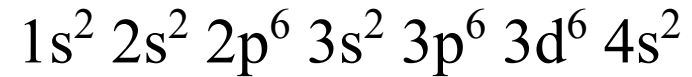
Linus C. Pauling
(1901 – 1994)

NÍVEIS	Subníveis
K : 1	1s
L : 2	2s 2p
M : 3	3s 3p 3d
N : 4	4s 4p 4d 4f
O : 5	5s 5p 5d 5f 5g
P : 6	6s 6p 6d 6f 6g 6h
Q : 7	7s 7p 7d 7f 7g 7h 7i

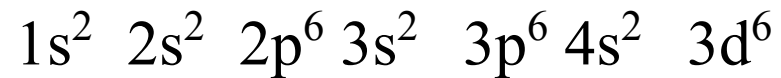
Observe um exemplo de distribuição eletrônica por subníveis (*Princípio Aufbau*):

Em ordem de camadas:

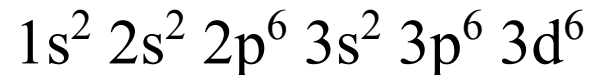
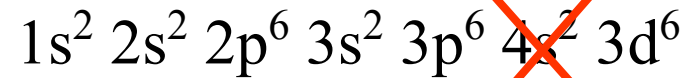
Subníveis



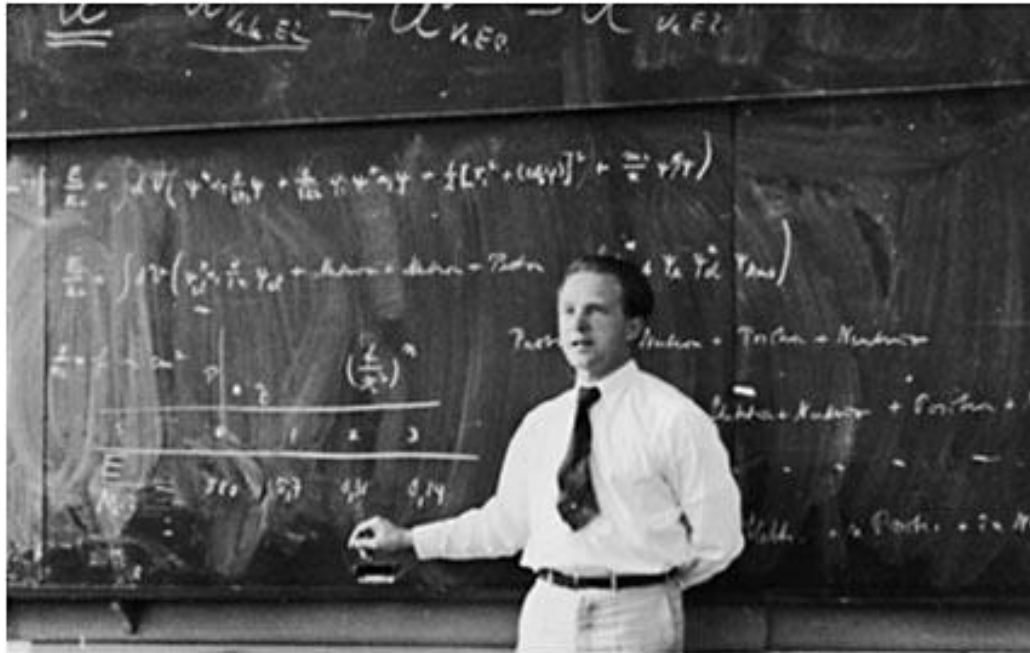
Seja o elemento
Fe ($Z = 26$):



Caso fosse o cátion Fe^{2+} :

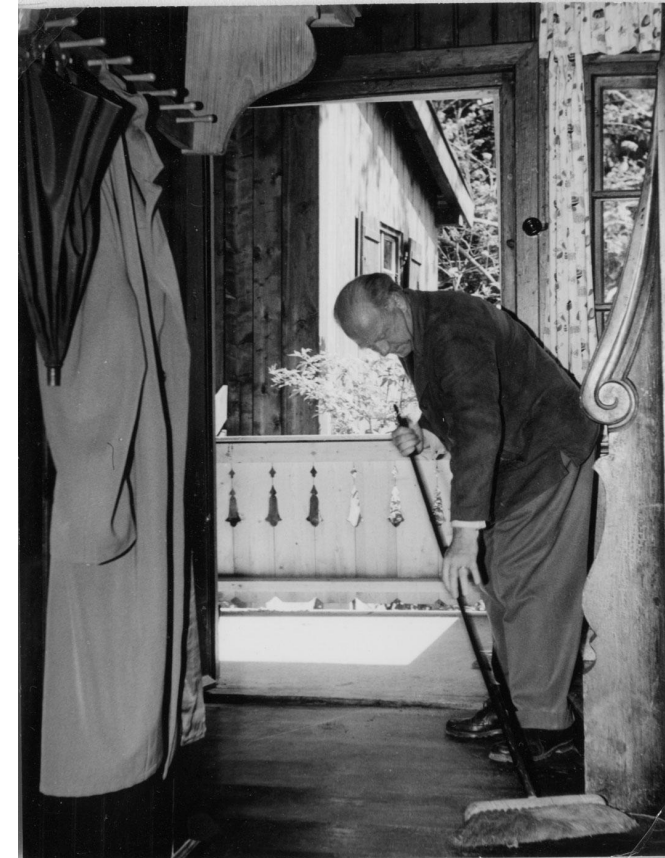


*A idéia de órbita
é questionada...*



Werner Heisenberg
(1901 – 1976)

“É impossível determinar
simultaneamente a posição e
a velocidade de um elétron”
(*Princípio da Incerteza*).



E também o comportamento do elétron...

“Se ondas eletromagnéticas comportam-se como partículas, uma partícula em movimento deve ter características ondulatórias”.



Louis de Broglie
(1892 – 1987)

$E = m \times c^2.$ Então:

$E = h \times \nu.$

$m \times c^2 = h \times \nu.$

Mas, $c = \nu \times \lambda:$



$\lambda = \frac{h}{m \times \nu}$

*Então, se não
há órbita...*

Usando equações
de onda...



Erwin Schrödinger
(1887 – 1961)

“Existe uma região em torno do núcleo na qual a probabilidade de se encontrar um elétron é máxima”.

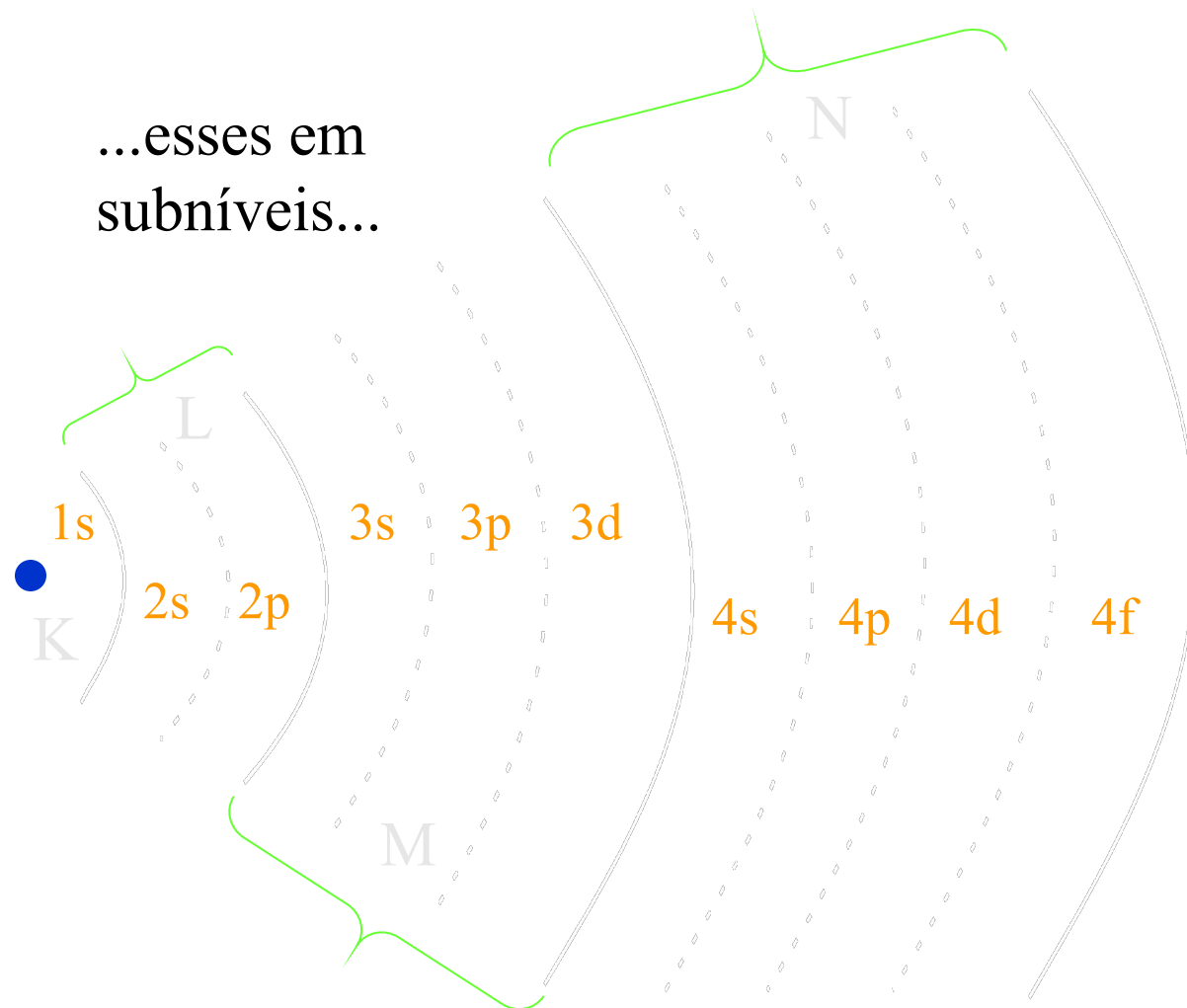
Esse é o conceito de orbital.

Schrödinger consegue descrever o elétron num átomo de hidrogênio...

...e, juntamente com Heisenberg, é considerado fundador da mecânica quântica.

*Se a eletrosfera está
“dividida” em níveis...*

*...esses em
subníveis...*



*... e os subníveis
em orbitais...*

*... quantos elétrons
“caberiam” num
orbital?*

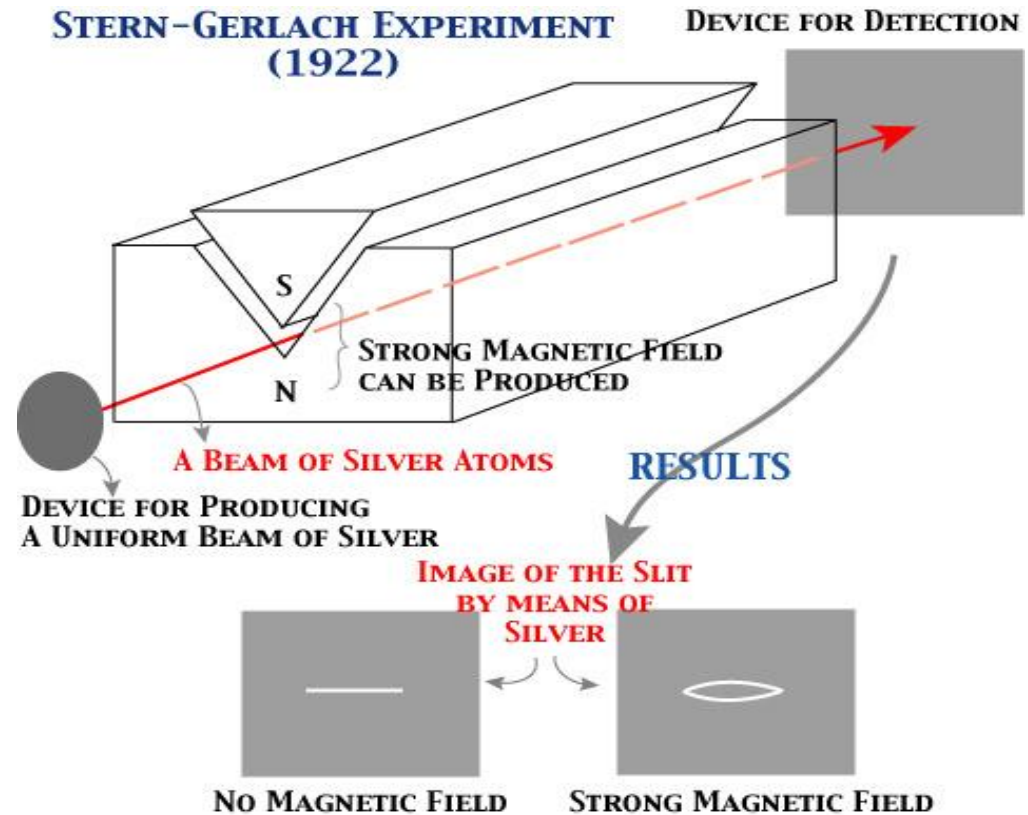
Átomos de prata têm um elétron desemparelhado (isolado, pelo Princípio de Aufbau):

O fato de eles sofrerem desvio ao passar em um campo magnético significa que são dotados de “*spin*”.

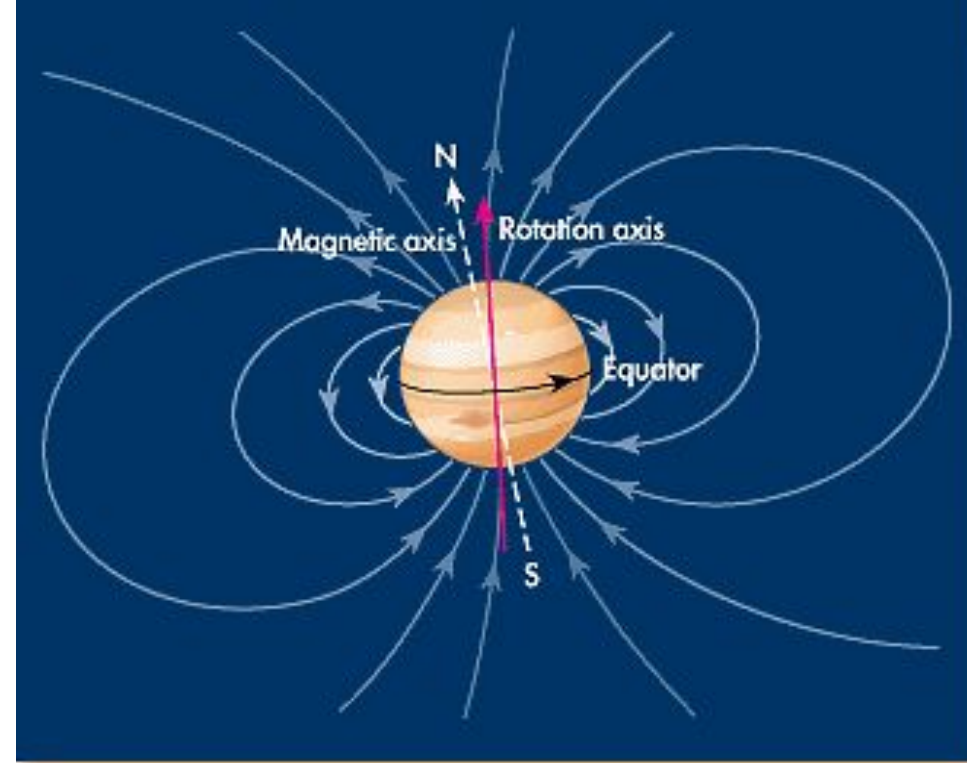
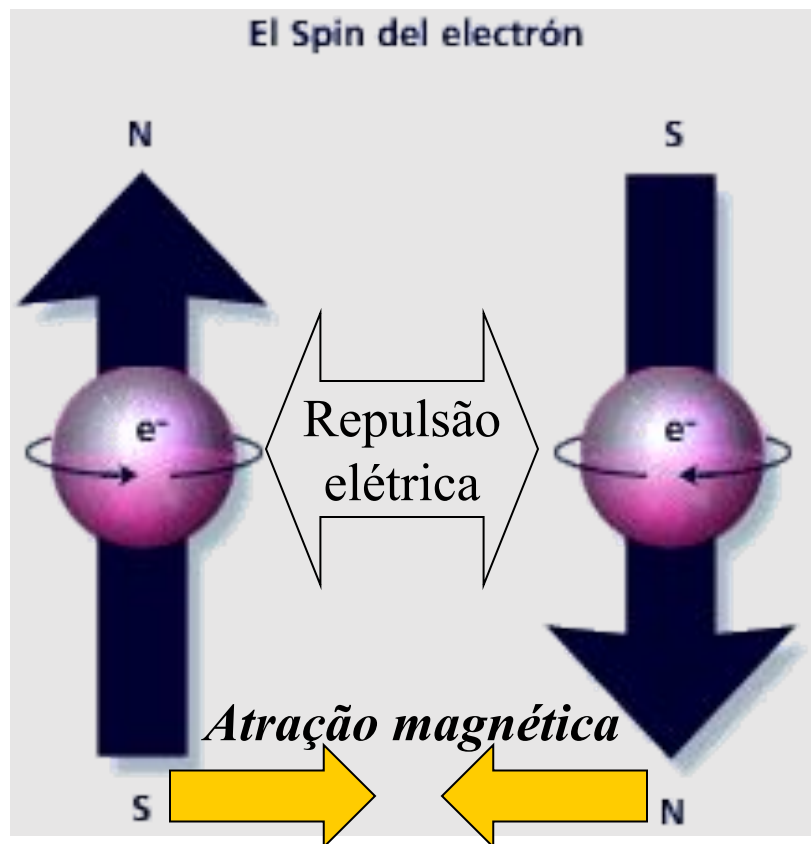


Wolfgang Pauli
(1900 – 1958)

“Um orbital comporta no máximo **dois elétrons**, desde que tenham *spins* contrários (antiparalelos)”.



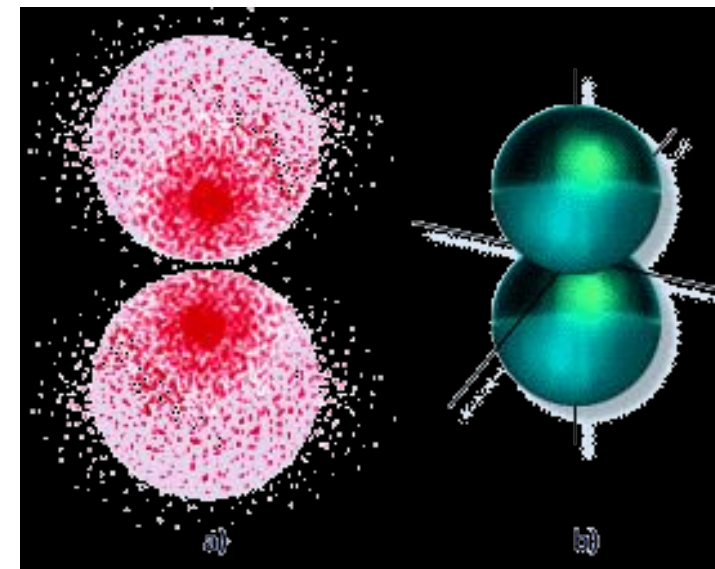
*Isso é explicado
porque...*

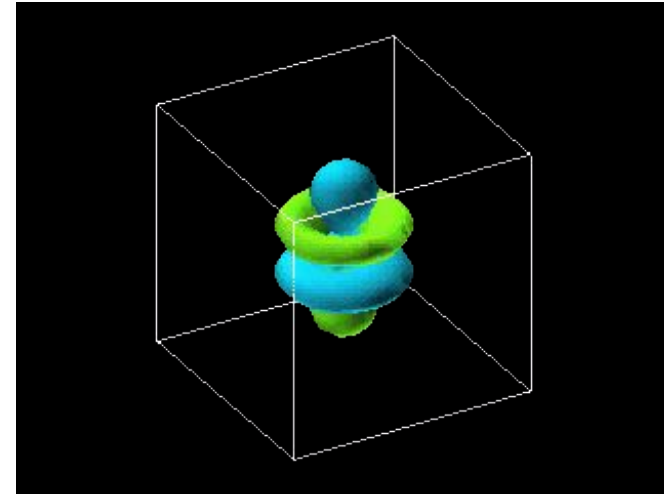
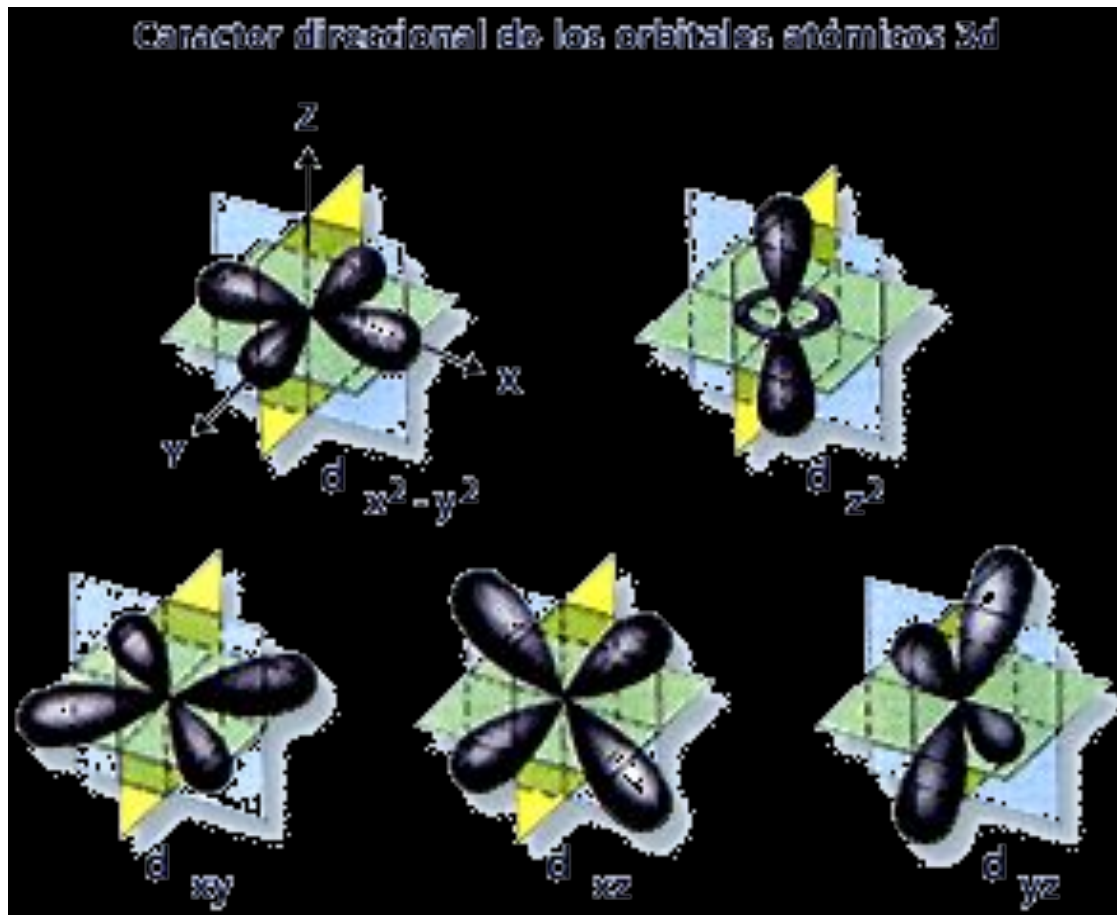


Portanto, não importa o formato do orbital, sua capacidade máxima é sempre a mesma.

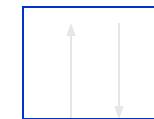


*Falando em
formatos...*





Representação esquemática de um orbital qualquer:



Elétrons com spins contrários.

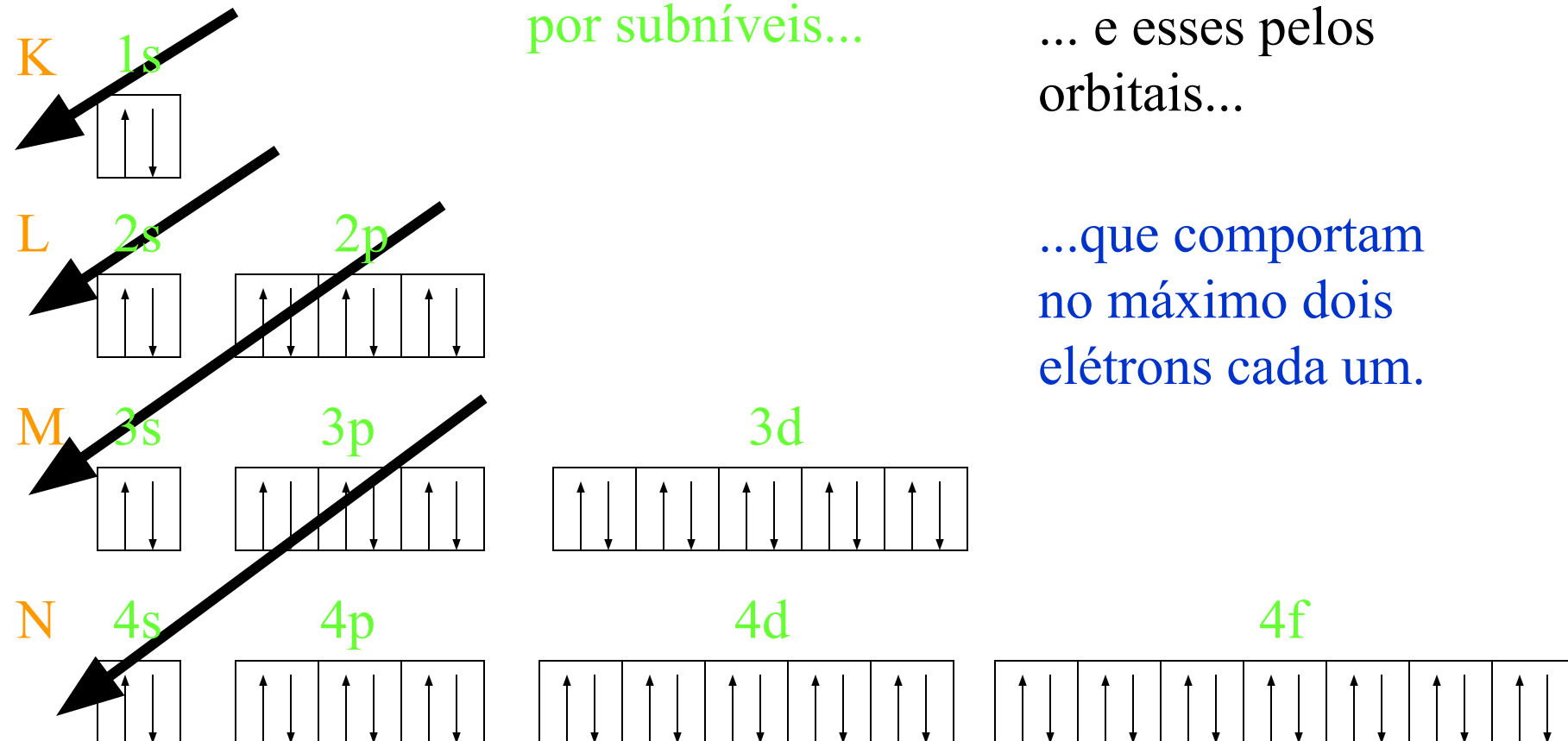
Temos, então, um “panorama”
da eletrosfera de um átomo:

Existem os níveis...

... que são formados
por subníveis...

... e esses pelos
orbitais...

...que comportam
no máximo dois
elétrons cada um.

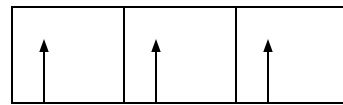
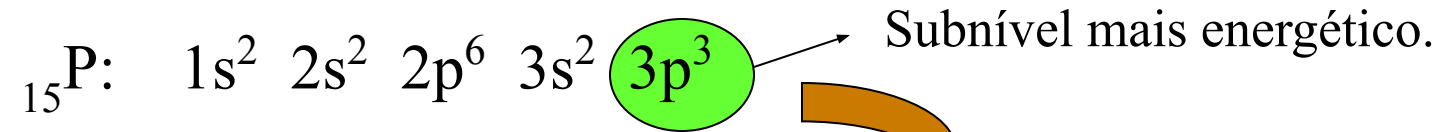


*Cada elétron num átomo é “identificado”
por um conjunto de números quânticos:*

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Característica especificada</i>	<i>Informação fornecida</i>	<i>Valores possíveis</i>
Principal	n	Nível	Distância em relação ao núcleo	1, 2, 3, 4, 5, 6, ...
Azimutal (secun-dário)	l	Subnível	Forma do orbital	0, 1, 2, 3, ... (n-1)
Magnético	m_l	Orbital	Orientação do orbital	- l, ..., 0, ..., +l
Spin	m_s	Spin	Spin	+ 1/2, - 1/2

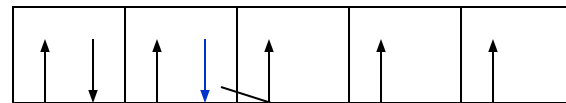
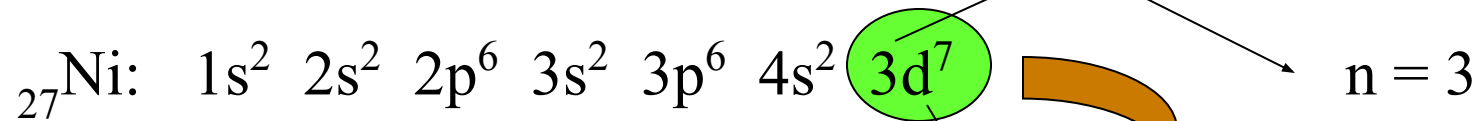
“Não existem dois elétrons num átomo com o mesmo conjunto de números quânticos (Princípio da Exclusão de Pauli)”.

Finalmente, vejamos a distribuição de elétrons por orbitais:



“REGRA DE HUND”

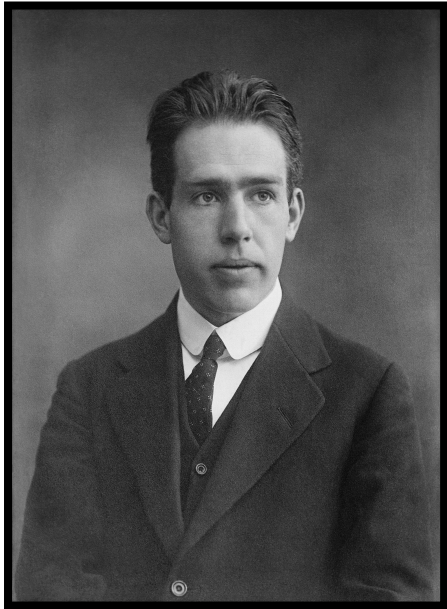
“Os elétrons num mesmo subnível tendem a permanecer em orbitais separados com *spins* paralelos”.



$m = -1$

$s = + 1/2$ ou $- 1/2$

$l = 2$




Dr. Niels Bohr – Nobel de Física em 1922



Dr. Aage Bohr – Nobel de Física em 1975



	Tomas Bohr Professor, Department of Physics Biophysics and Fluids https://orcid.org/0000-0003-3620-7276		
	Phone 45253310	Email Tomas.Bohr@fysik.dtu.dk	Website http://www.dtu.dk/centre/BioComplex/English.aspx
 View Scopus Profile	Fysikvej, 309, 106 2800 Kgs. Lyngby Denmark		

*God does not play dice
with the universe...*

*Don't tell god what he can and
can't do...*

